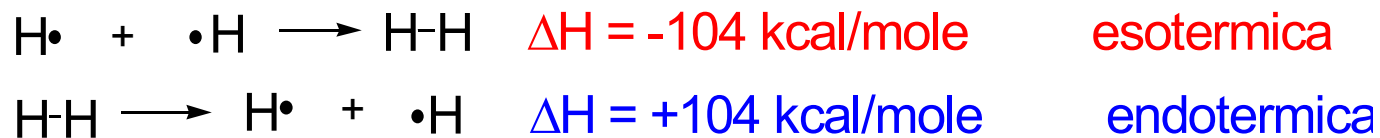
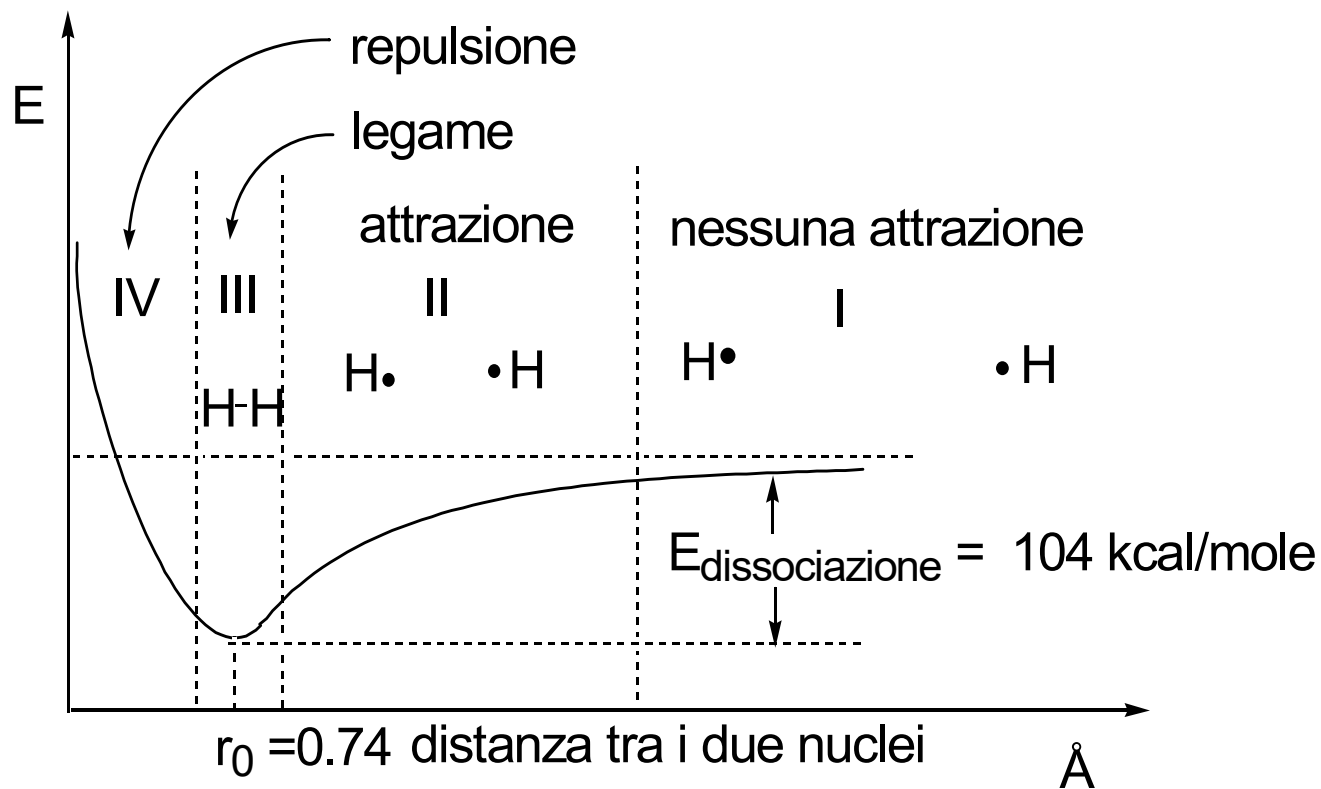


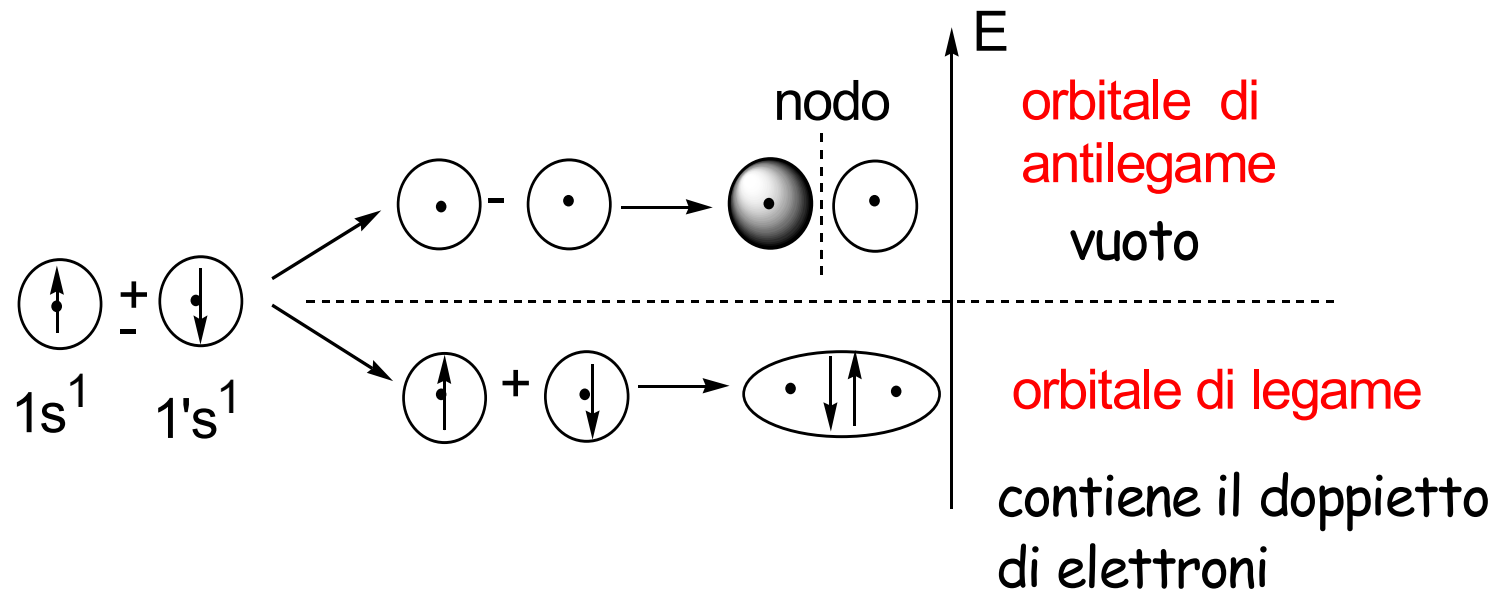
Orbitali Molecolari

formazione della molecola di idrogeno



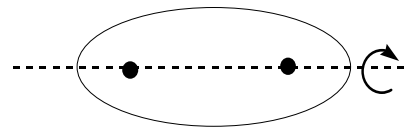
LCAO *combinazione lineare degli orbitali atomici*

$$\Psi_{\text{mol.}} = c_1 1s^1 + c_2 1's^1$$



Si ottengono tanti orbitali molecolari quanti sono gli orbitali atomici che si combinano

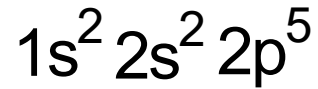
Orbitali Molecolari



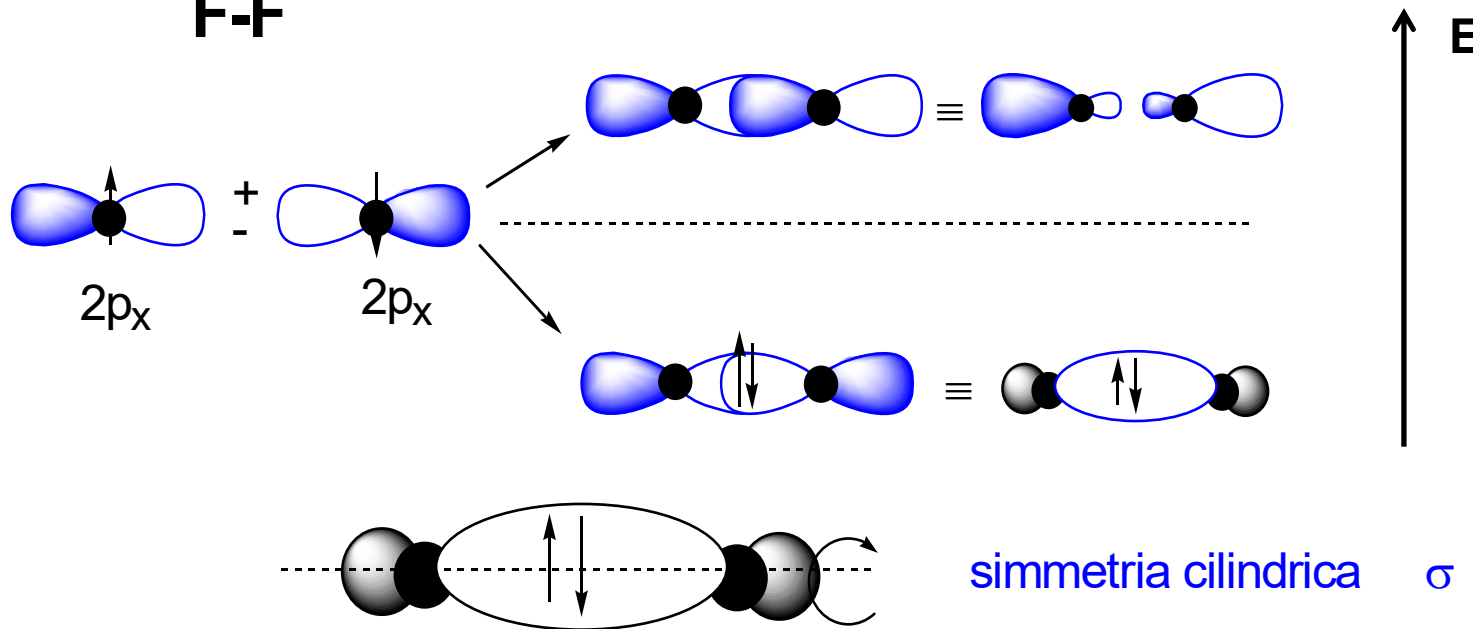
Orbitale molecolare σ dell' H_2

Gli orbitali molecolari σ sono ottenuti per sovrapposizione di orbitali atomici lungo la direzione dell'asse internucleare e sono caratterizzati da una **simmetria cilindrica** lungo tale asse, cioè per rotazione intorno all'asse internucleare non cambia il segno della funzione d'onda

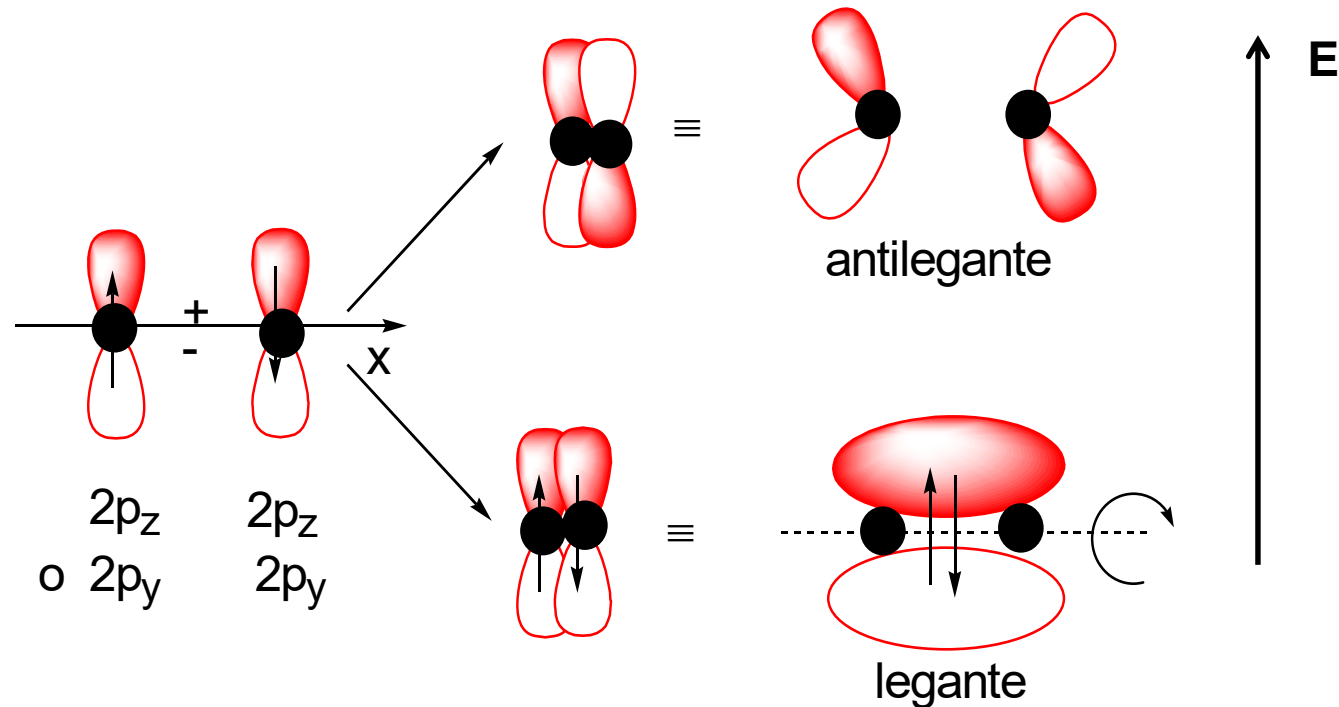
molecola di F_2



F-F



Orbitali Molecolari

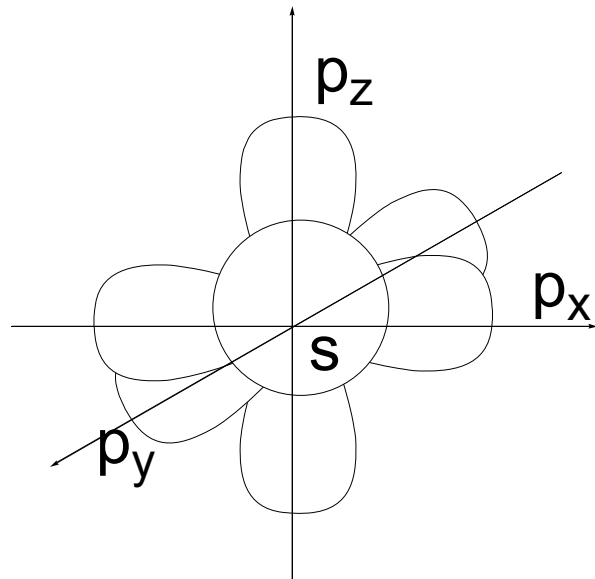
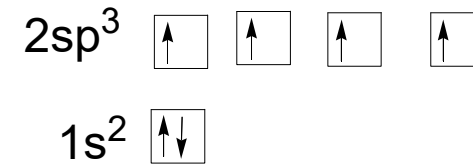
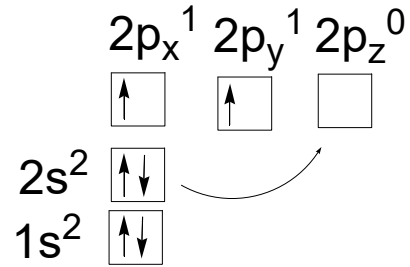


Gli orbitali molecolari π sono quelli ottenuti per **sovrapposizione laterale** degli orbitali p e non hanno simmetria cilindrica lungo l'asse internucleare, infatti per rotazione intorno a tale asse cambia il segno della funzione.

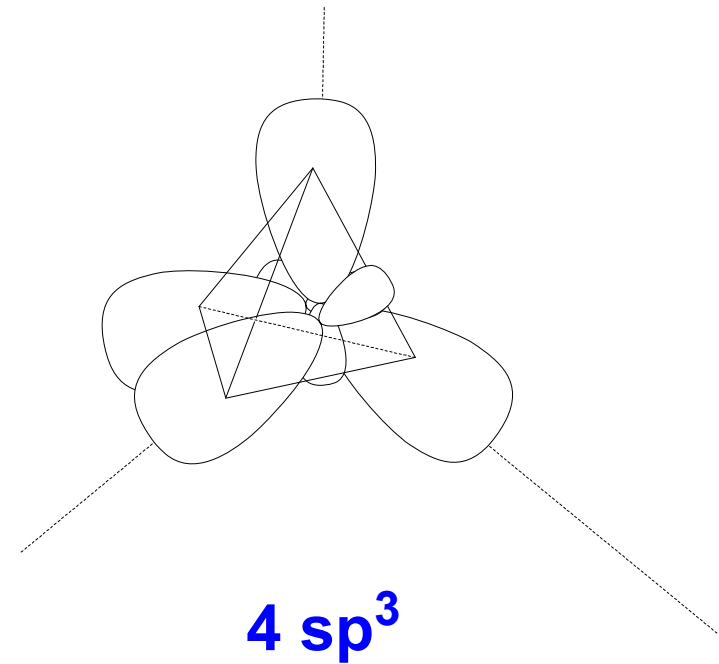
Gli orbitali molecolari π sono a più alta energia di quelli σ

Perchè il carbonio è tetravalente?

Stato fondamentale del carbonio



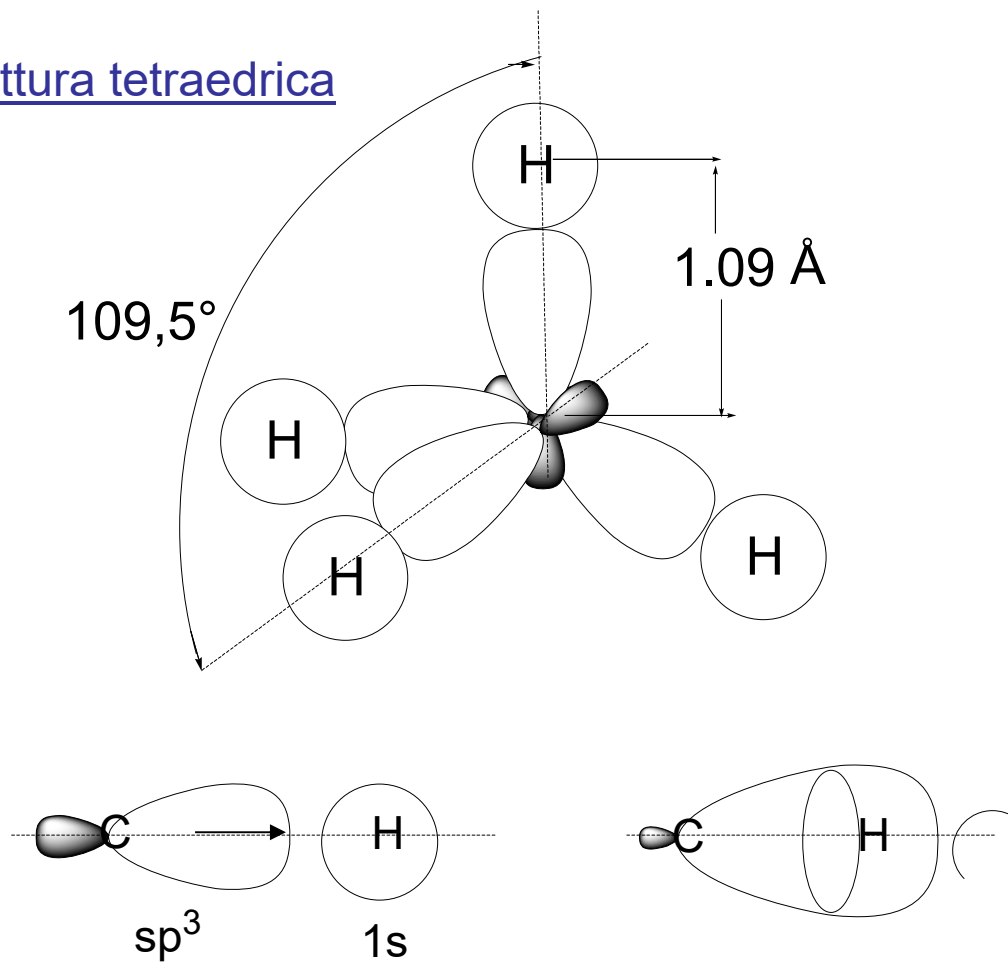
ibridazione



l'ibridazione (mescolamento degli orbitali) è un **artificio matematico** che permette di spiegare la tetravalenza del carbonio

Metano CH₄

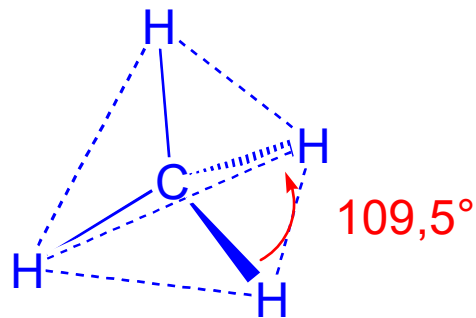
Struttura tetraedrica



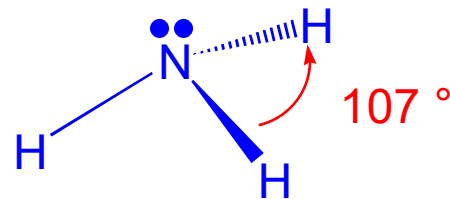
simmetria cilindrica del legame C-H σ

Perchè il metano è tetraedrico?

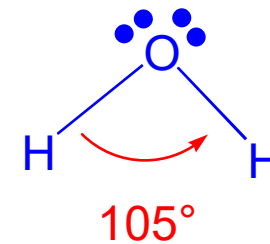
VSEPR valence shell electron-pair repulsion



C-H 1,09 Å



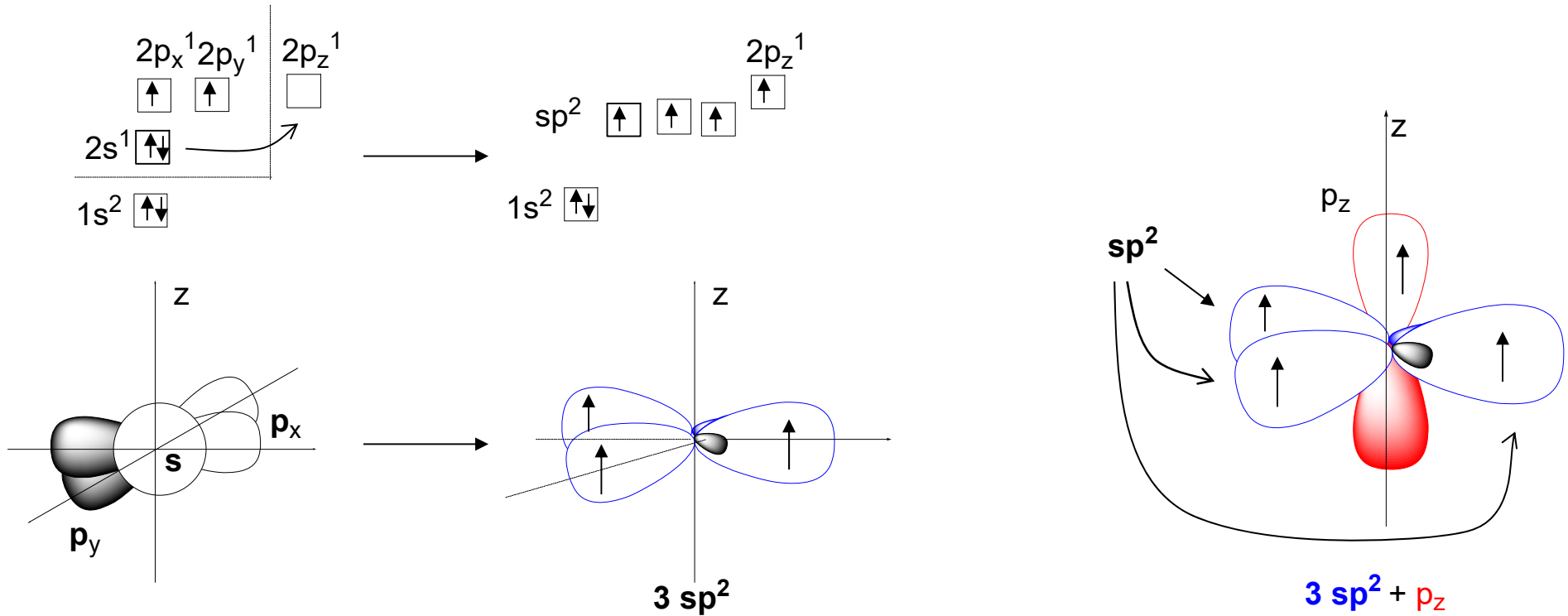
N-H 1,07 Å



O-H 0,96 Å

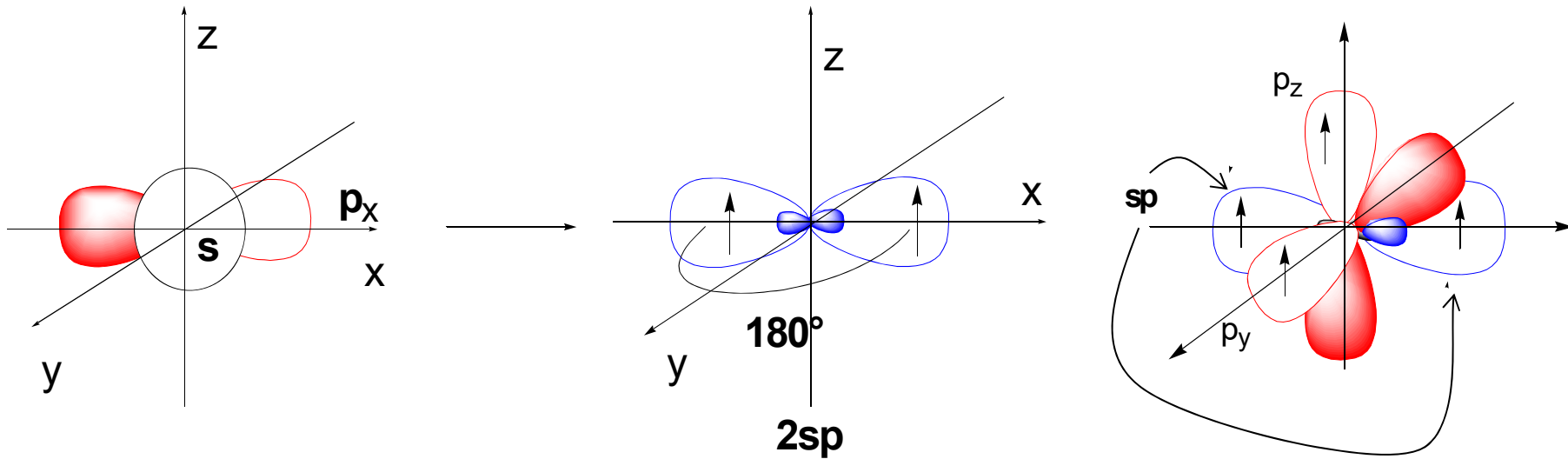
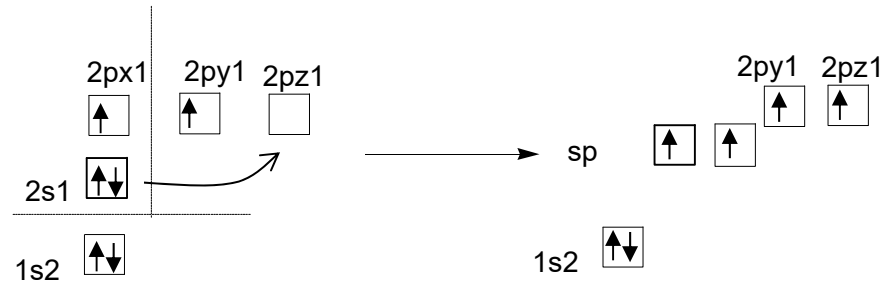
La geometria molecolare è determinata dalla repulsione dei doppietti elettronici sia quelli di legame che quelli isolati. Tali doppietti tendono a stare quanto più lontano possibile in modo da ridurre la repulsione

Ibridazione sp^2 del Carbonio



la geometria dei 3 sp^2 è **planare trigonale**. Dei quattro legami del carbonio, 3 sono ottenuti con i tre sp^2 , l'altro con l'orbitale p_z non ibridizzato che è perpendicolare al piano degli sp^2 . Tipico dei **C=C**

Ibridazione sp

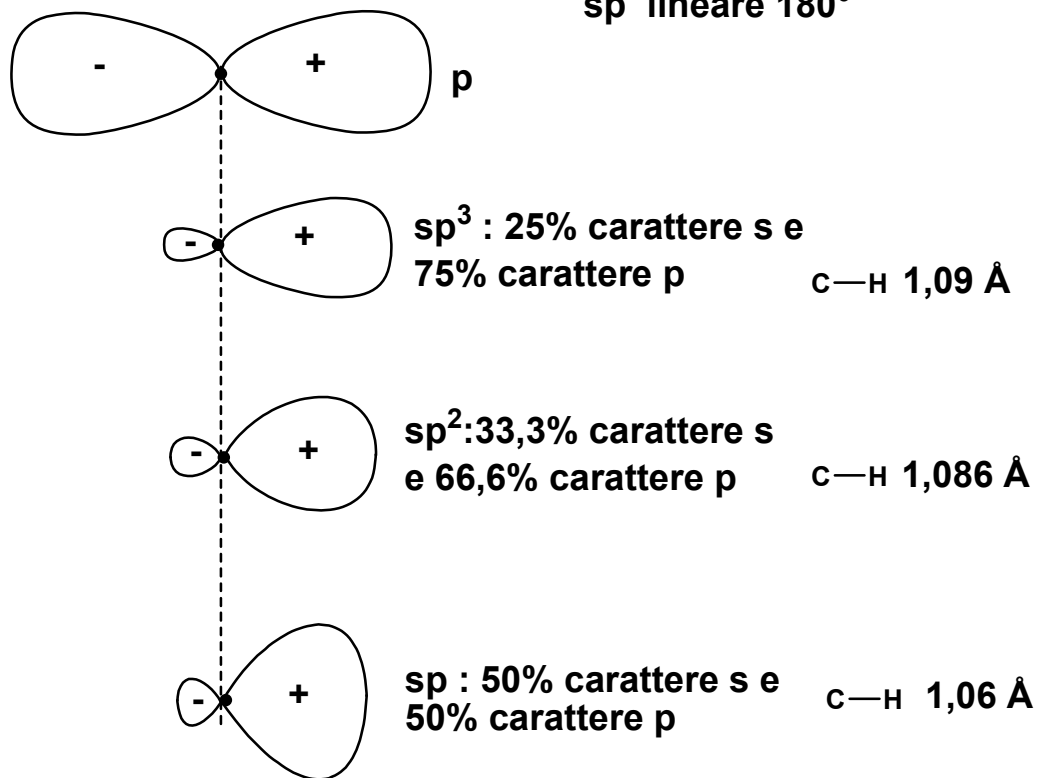


la geometria dei due sp è **lineare**, dei quattro legami del carbonio 2 sono ottenuti con i due sp , gli altri con gli orbitali p_y e p_z non ibridizzati che sono perpendicolari all'asse degli sp . Tipico di **$C\equiv C$**

Cosa spiega l'ibridazione?

geometria dell'intorno dell'atomo ibridato
lunghezza di legame
forza di legame
elettronegatività

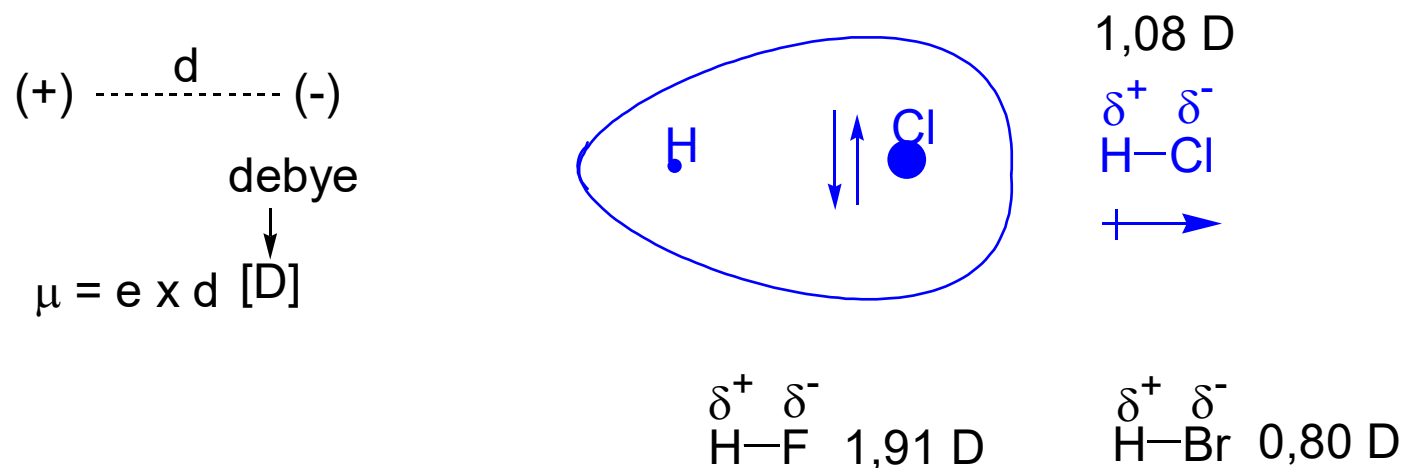
sp^3 tetraedica $109,5^\circ$
 sp^2 trigonale planare 120°
 sp lineare 180°



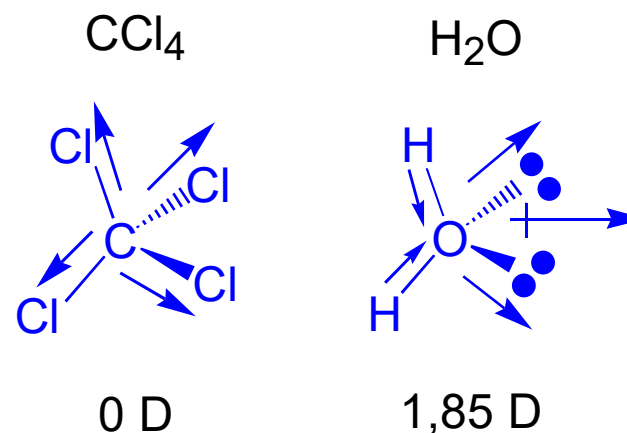
elettronegatività cresce nell'ordine $sp > sp^2 > sp^3$
quanto più è corto il legame tanto più esso è forte

Legame covalente polare

Il legame covalente tra due atomi di diversa elettronegatività determina una asimmetrica distribuzione elettronica del doppietto di legame, detta **polarizzazione**, che provoca la creazione di un dipolo con un δ negativo sull'atomo più elettronegativo ed una deficienza elettronica, δ positivo, sull'altro atomo

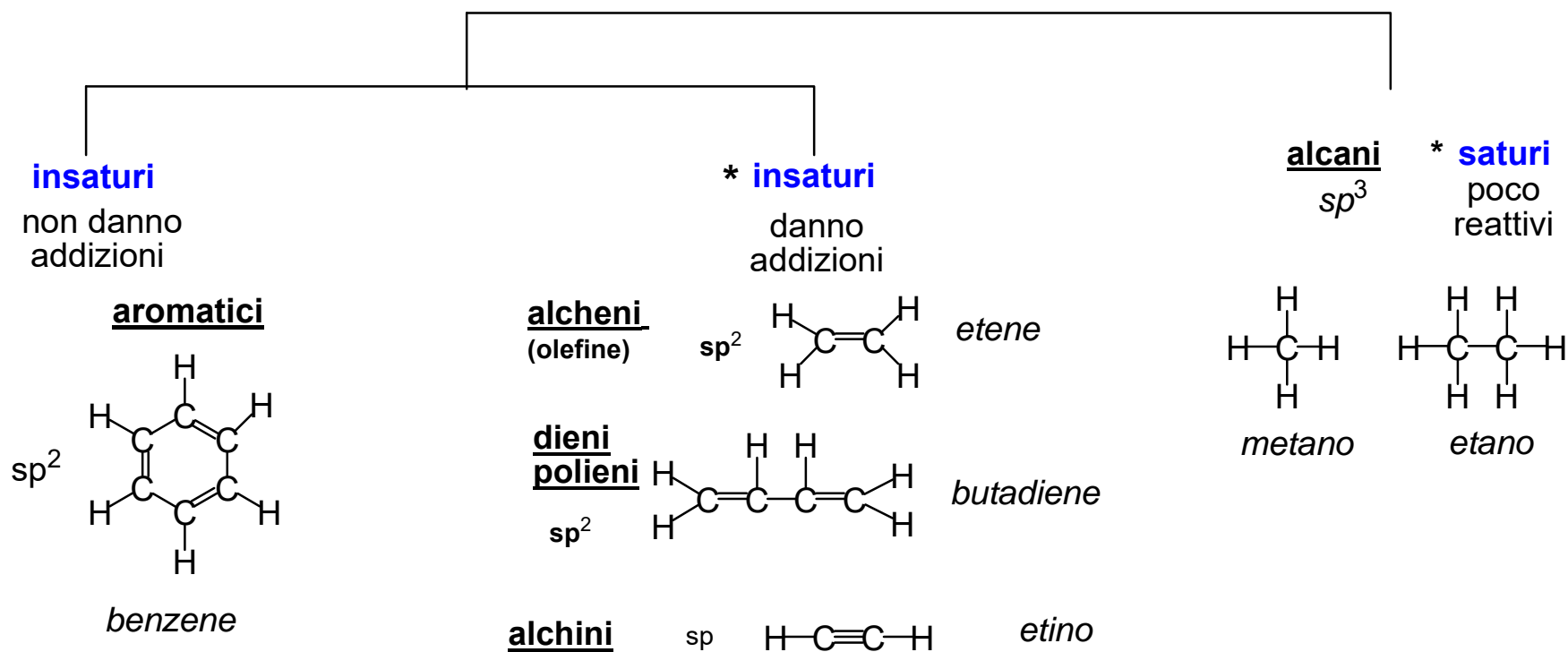


La polarità del legame può determinare una polarità dell'intera molecola se questa non ha una geometria simmetrica



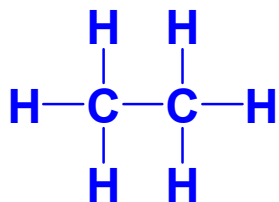
Gruppi Funzionali e Classi di Composti Organici

Idrocarburi costituiti solo da C e H



* possono essere lineari, ramificati o ciclici

Modi di scrittura delle formule



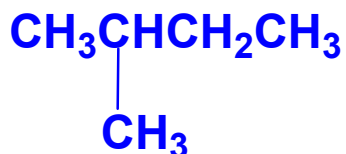
formula di struttura in cui tutti i legami sono esplicitati



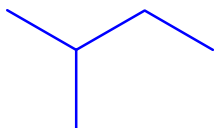
sono omessi i legami C-H



sono omessi anche i legami C-C



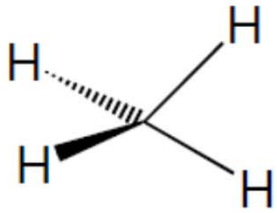
sono esplicitati solo i legami C-C delle ramificazioni



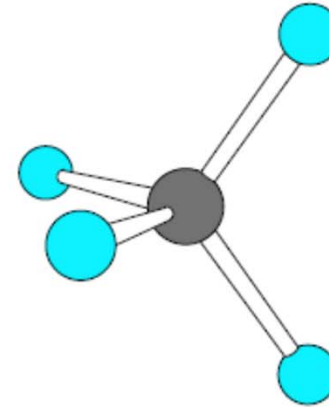
I terminali della spezzata e gli angoli sono C, il completamento della tetravalenza dei carboni è dato da H che sono omessi

Rappresentazione delle strutture

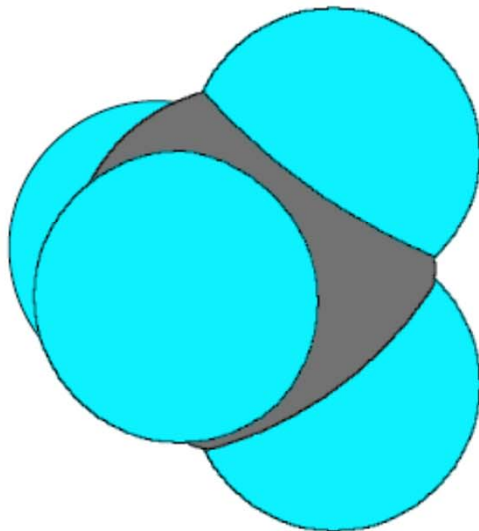
metano



modello a cuneo



modello ad aste e sfere



modello a spazio pieno