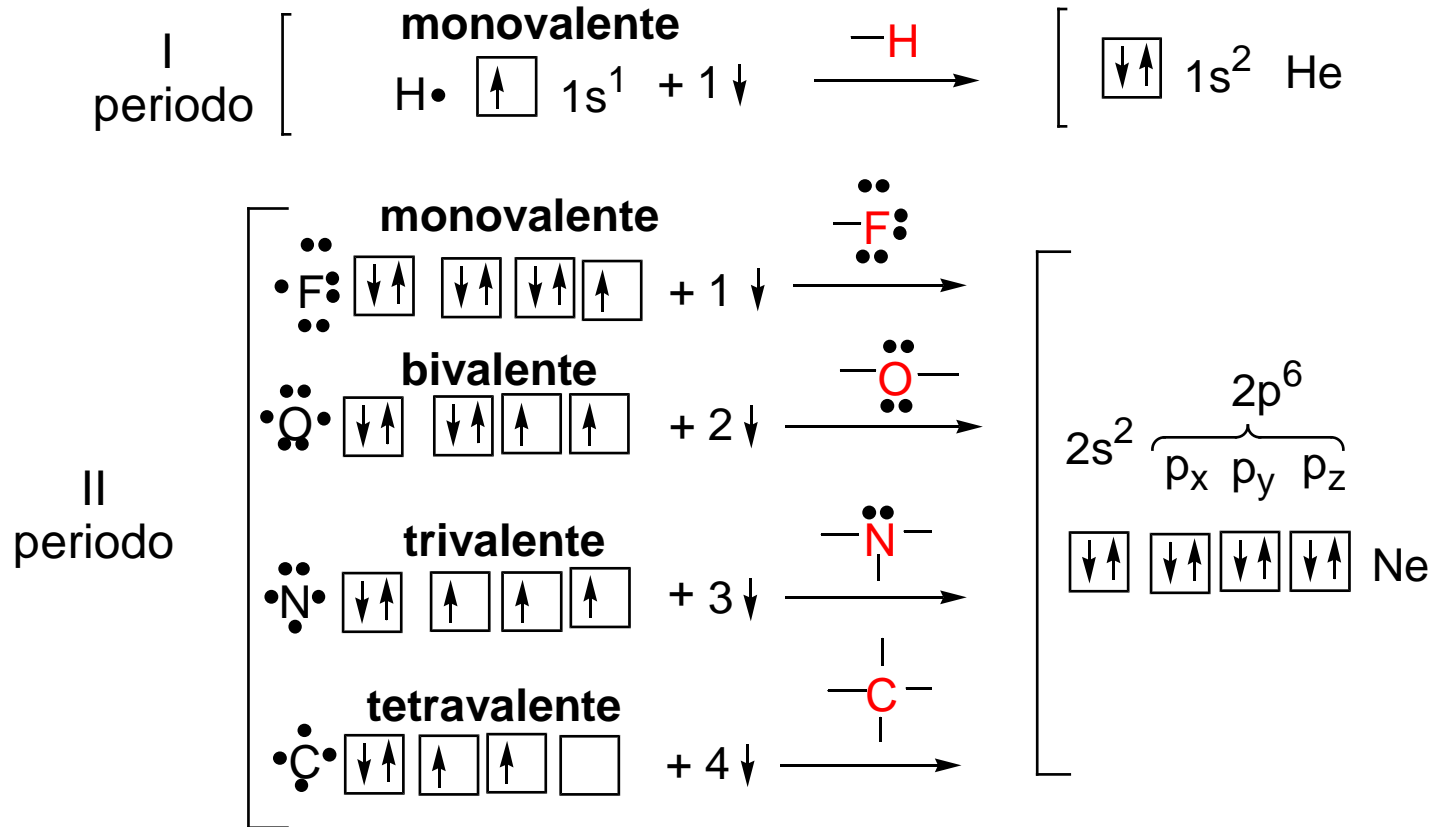


Valenza

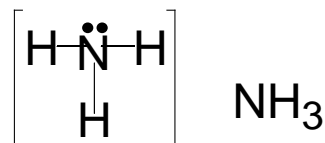
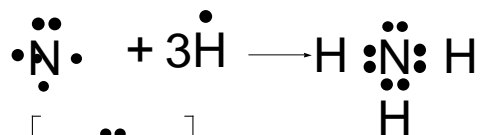
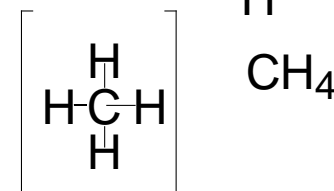
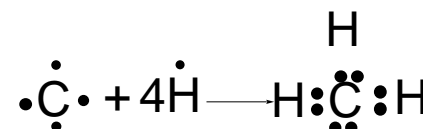
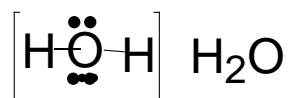
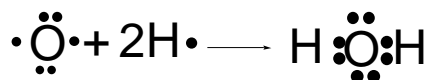
Il numero di legami covalenti che un certo atomo può formare dipende dal numero di elettroni che gli occorrono (per compartecipazione) per raggiungere la configurazione elettronica del gas nobile a lui più vicino nel sistema periodico



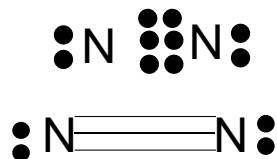
Regola dell'ottetto. La più comune configurazione elettronica stabile è quella che prevede otto elettroni nel guscio più esterno.

STRUTTURE DI LEWIS

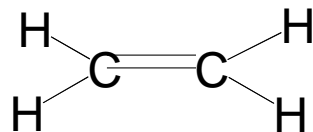
I legami covalenti sono indicati con le strutture di Lewis che mostrano tutti gli elettroni di valenza sia quelli non condivisi, indicati con punti, che quelli condivisi, cioè quelli di legame. Questi di solito sono indicati da un trattino che indica una coppia di elettroni con spin opposti.



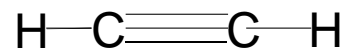
Le valenze di un atomo possono essere saturate, cioè soddisfatte, anche da legami multipli



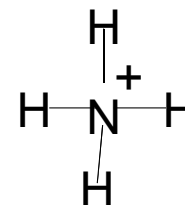
azoto



etene



etino

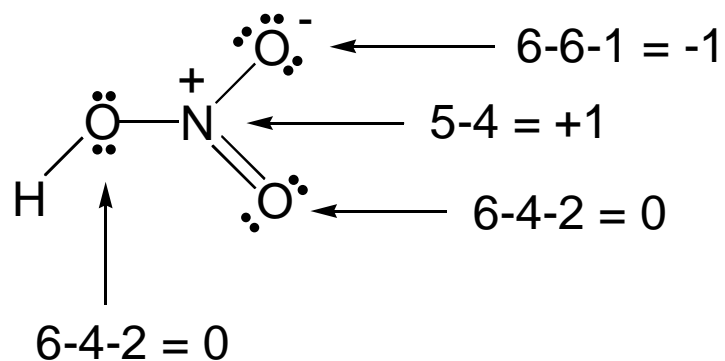


catione ammonio

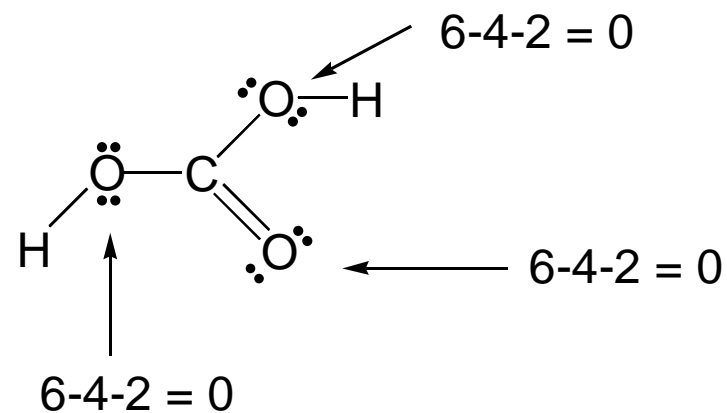
CARICA FORMALE

Elettroni di valenza dell'atomo neutro - elettroni non condivisi - 1/2 elettroni condivisi

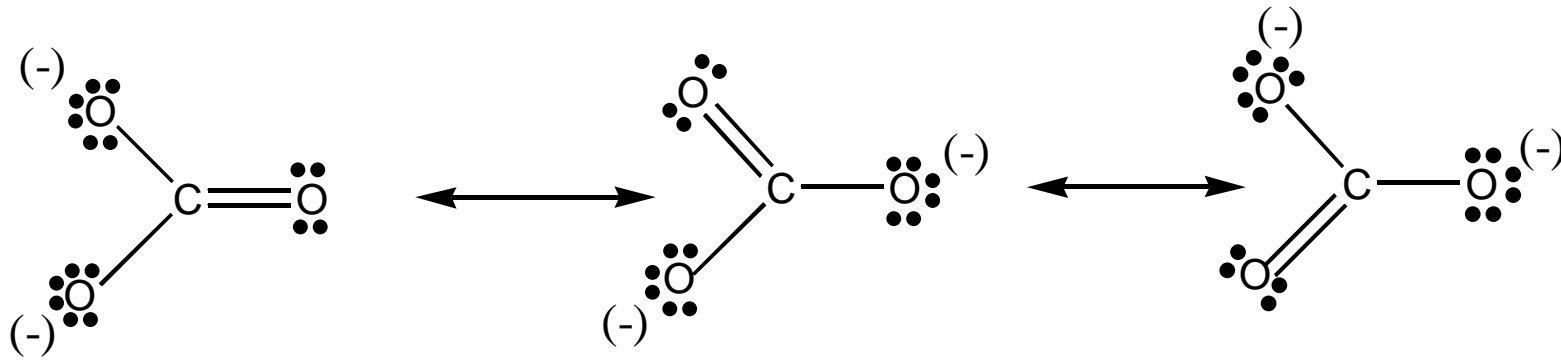
Acido nitrico



Acido carbonico

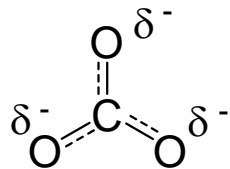


RISONANZA: LO IONE CARBONATO CO_3^{2-}



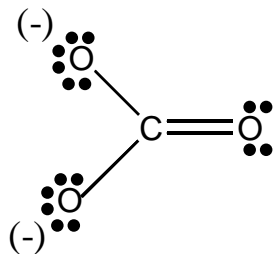
FORME CANONICHE DI RISONANZA O STRUTTURE LIMITE DI RISONANZA

• **L'ibrido di risonanza** esprime le caratteristiche di tutte le forme di risonanza. Esso può essere rappresentato o dalle forme canoniche stesse o attraverso la struttura con i legami tratteggiati.

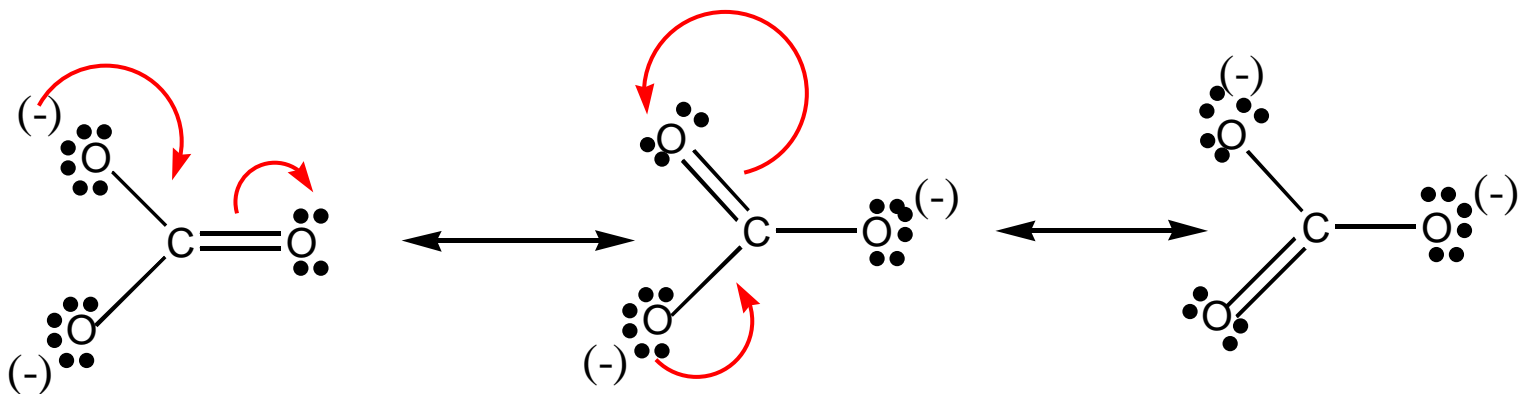


FORMALISMO DELLE FRECCE RICURVE

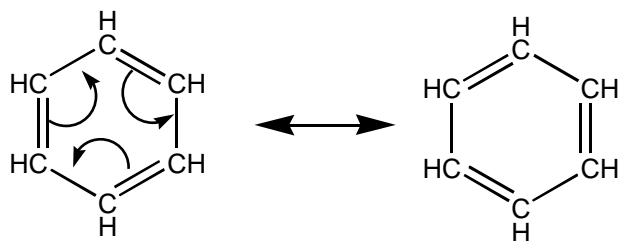
- Disegnare la struttura con gli elettroni del guscio di valenza



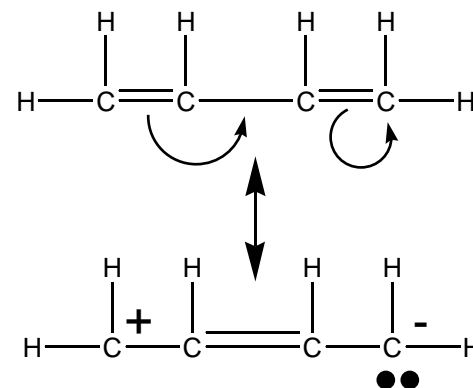
- Spostare a due a due gli elettroni
- La punta indica la destinazione, la coda il punto da cui gli elettroni partono



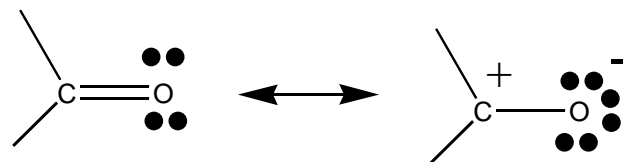
LA RISONANZA: UN FENOMENO DIFFUSO IN CHIMICA ORGANICA



benzene



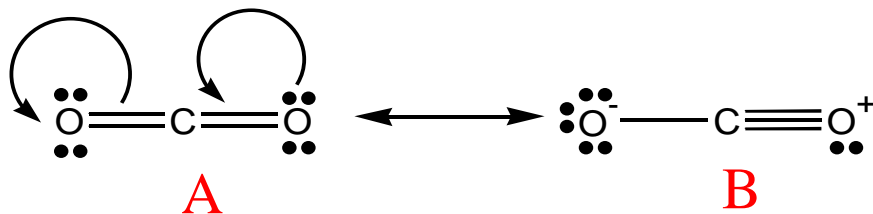
butadiene



il gruppo carbonilico

REGOLE DELLA RISONANZA

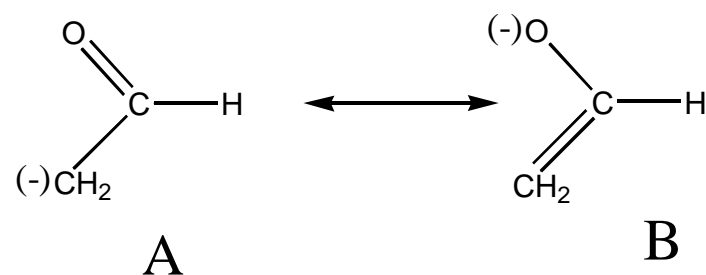
1. Due strutture di risonanza si differenziano solo per la **distribuzione degli elettroni**, ma hanno la stessa identica posizione dei nuclei
2. La molecola reale è un ibrido di due o più strutture di risonanza che **non hanno esistenza reale** ma servono per descrivere la situazione elettronica effettiva
3. Le diverse strutture di risonanza **non sono necessariamente equivalenti**. La struttura più stabile dà il maggior contributo.
4. Sono più stabili le strutture con più legami e quelle in cui non c'è separazione di carica
5. L'ibrido di risonanza è **più stabile** di ciascuna delle strutture che ad esso contribuiscono
6. La risonanza è importante quando le strutture che contribuiscono all'ibrido hanno un contenuto energetico simile



B molto meno stabile di **A**

6. Il contributo all'ibrido delle strutture limiti dipende dalla **natura dell'atomo** su cui si trovano le cariche

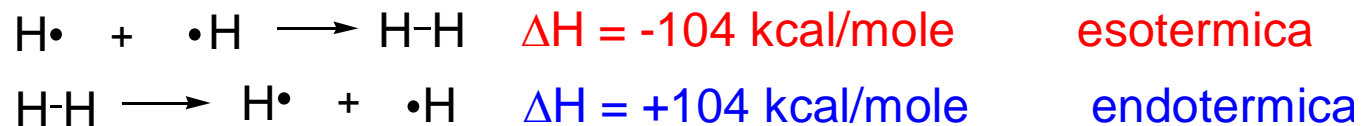
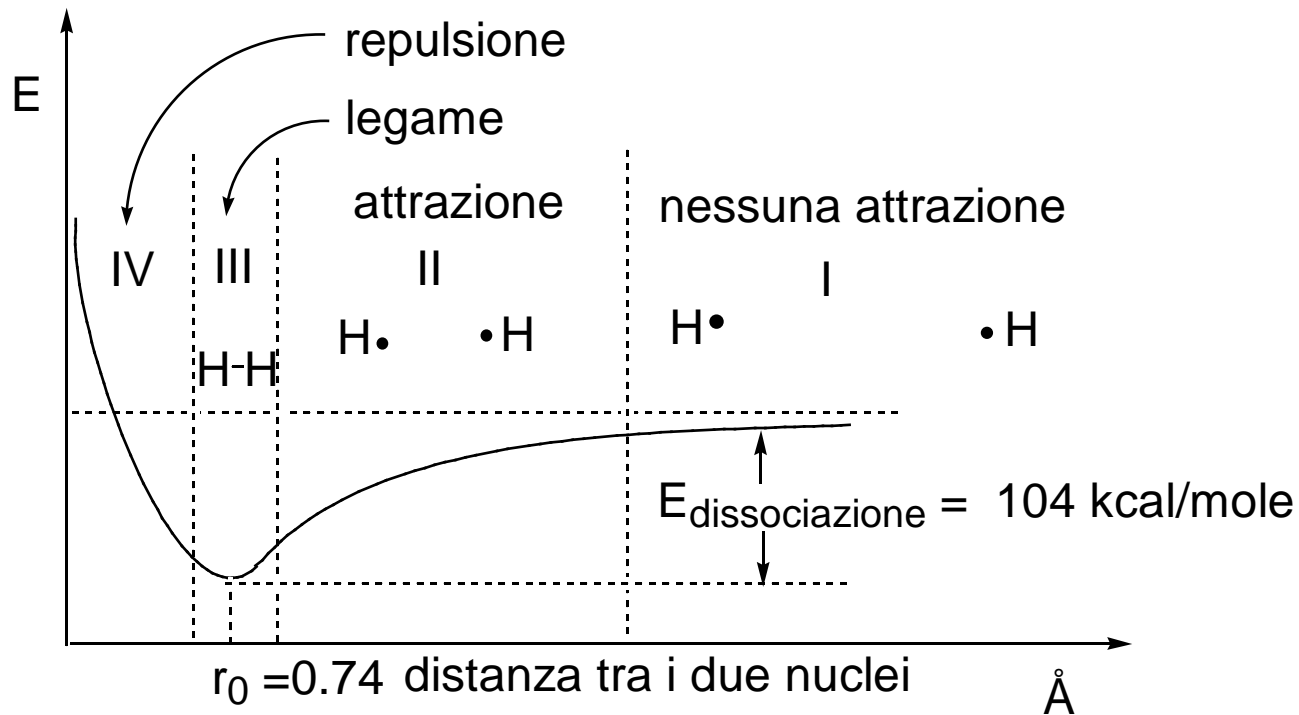
L'ossigeno porta molto meglio una carica negativa essendo più elettronegativo del carbonio, per cui A è molto meno stabile e contribuisce poco all'ibrido



7. Le forme di risonanza soggiacciono alle **normali regole della valenza** e quindi tutti gli atomi tendono ad avere la configurazione di un gas nobile (**regola dell'ottetto**)

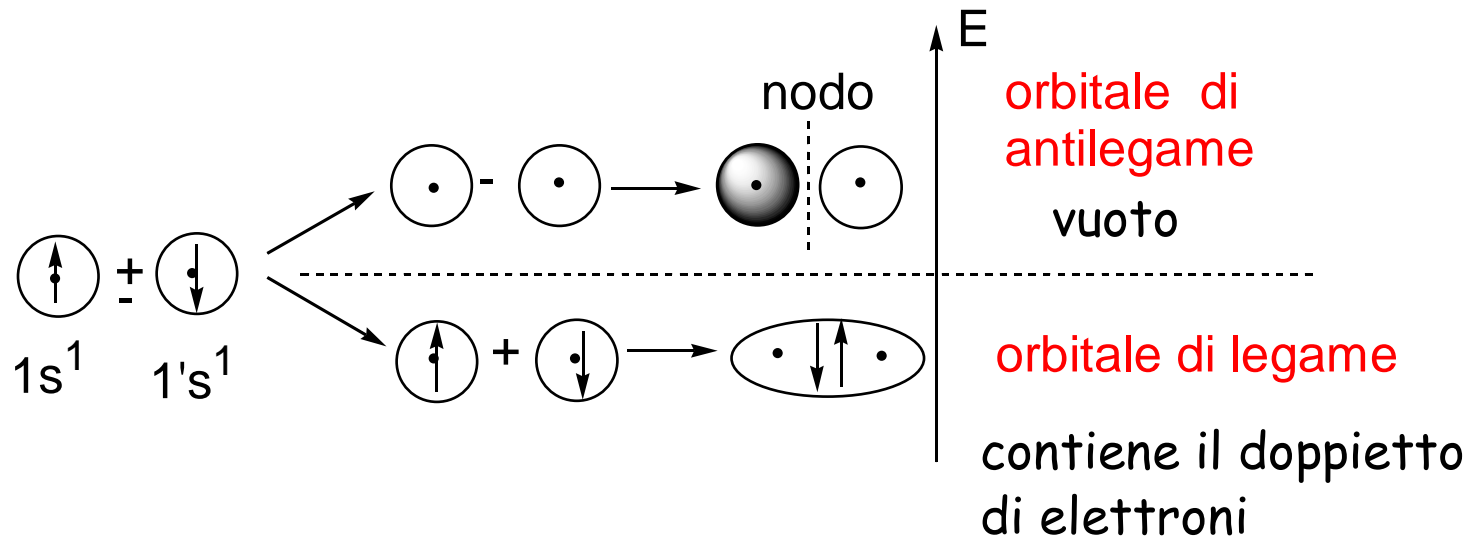
Orbitali Molecolari

formazione della molecola di idrogeno



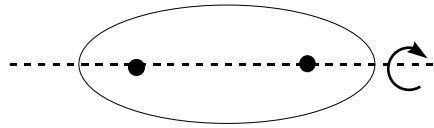
LCAO *combinazione lineare degli orbitali atomici*

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



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

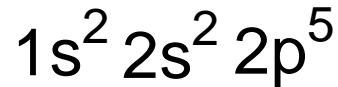
Orbitali Molecolari



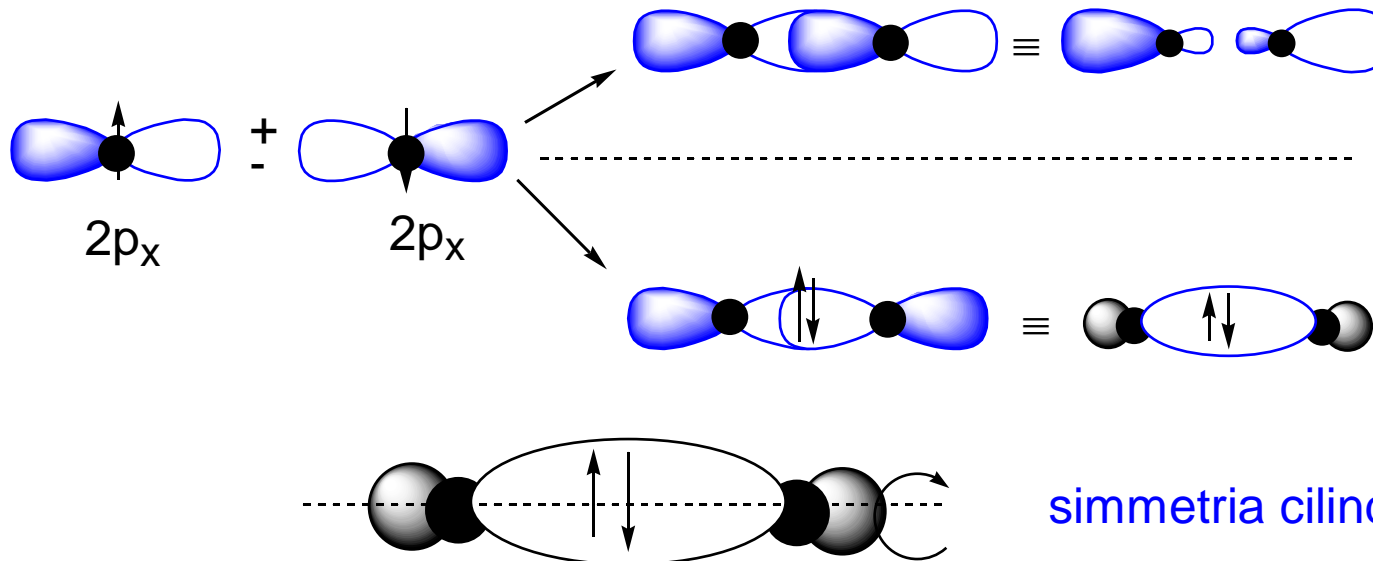
Orbitale molecolare σ dell' H_2

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

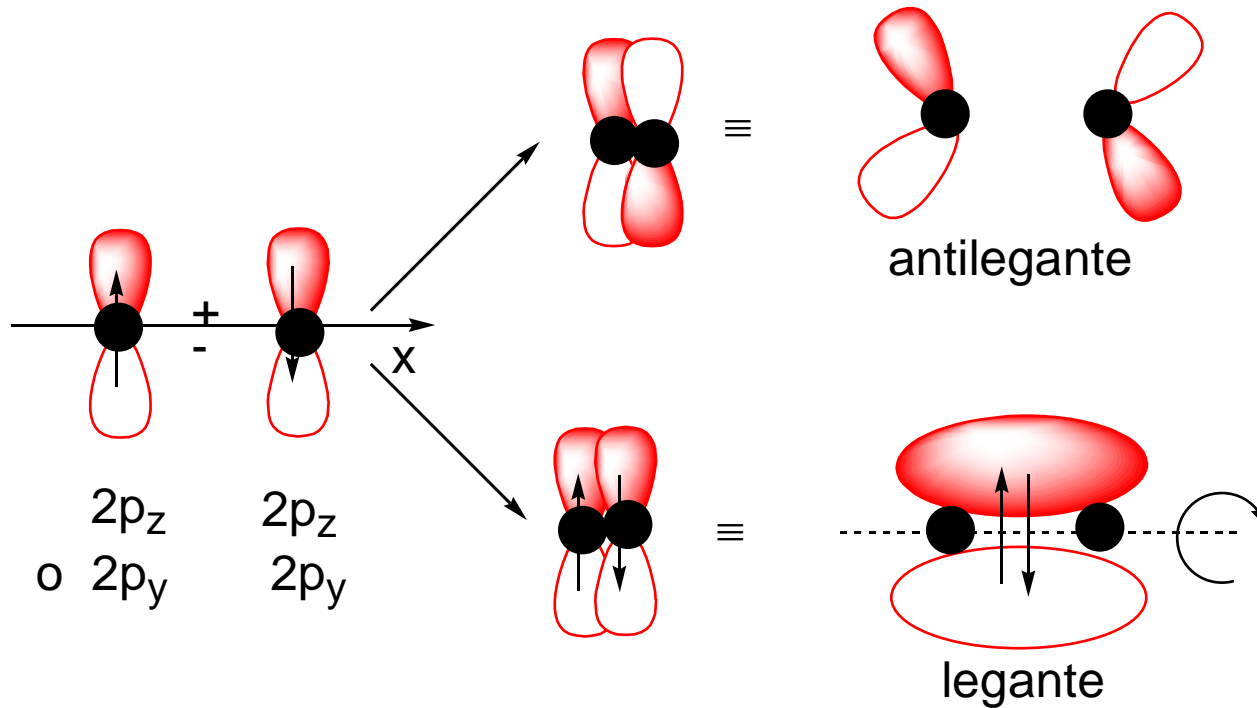
molecola di F_2



F-F



Orbitali Molecolari

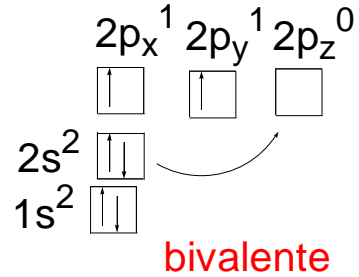


Gli orbitali molecolari π sono quelli ottenuti per **sovrapposizione laterale** degli orbitali p e non hanno simmetria cilindrica lungo l'asse internucleare, infatti per rotazione intorno a tale asse cambia il segno della funzione.

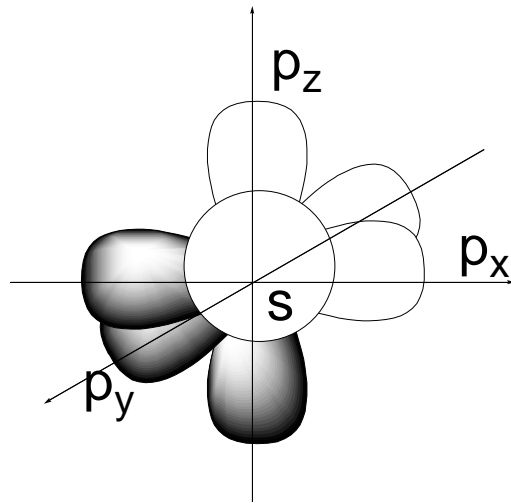
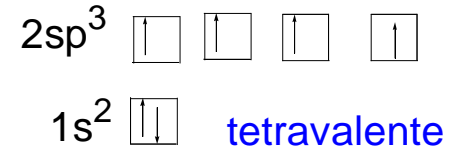
Gli orbitali molecolari π sono a più alta energia di quelli σ

Perchè il carbonio è tetravalente?

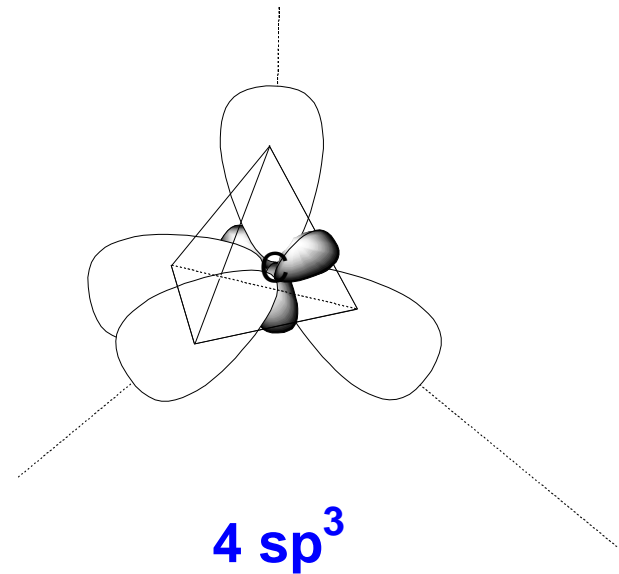
Stato fondamentale del carbonio



stato eccitato



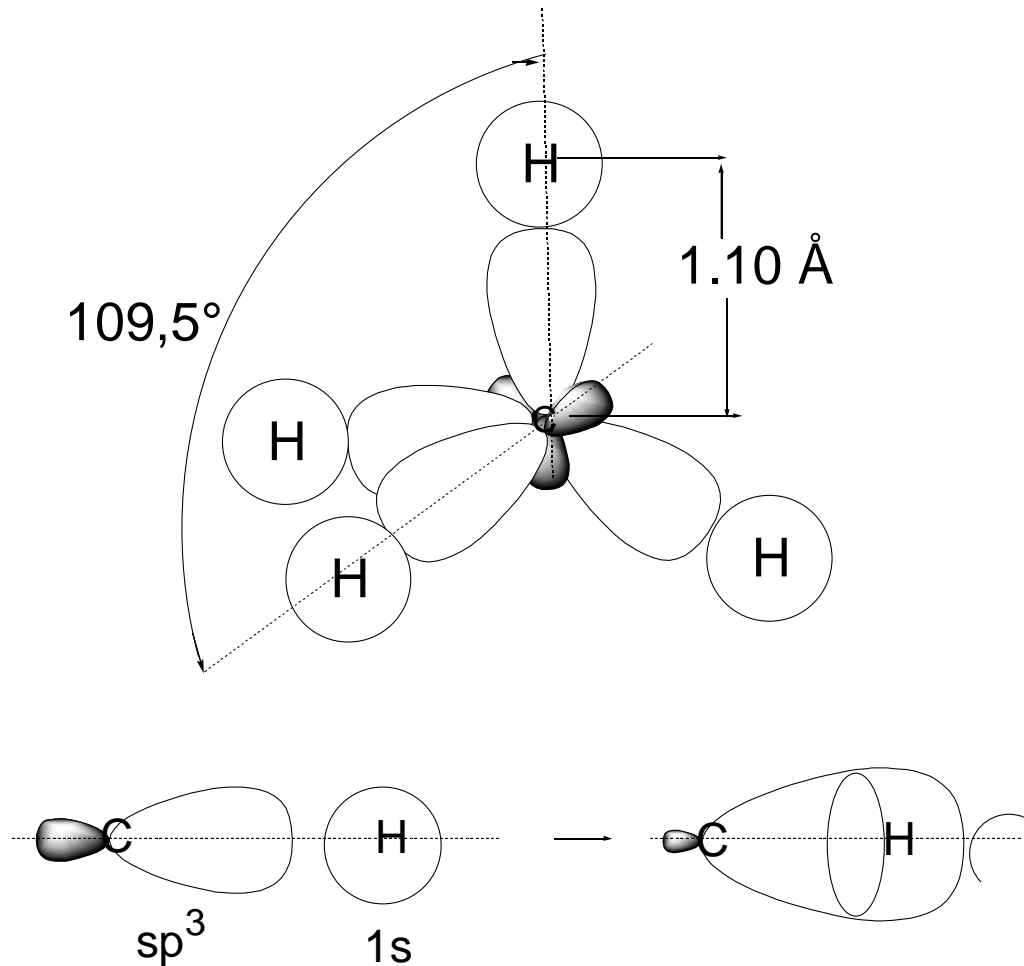
ibridazione



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

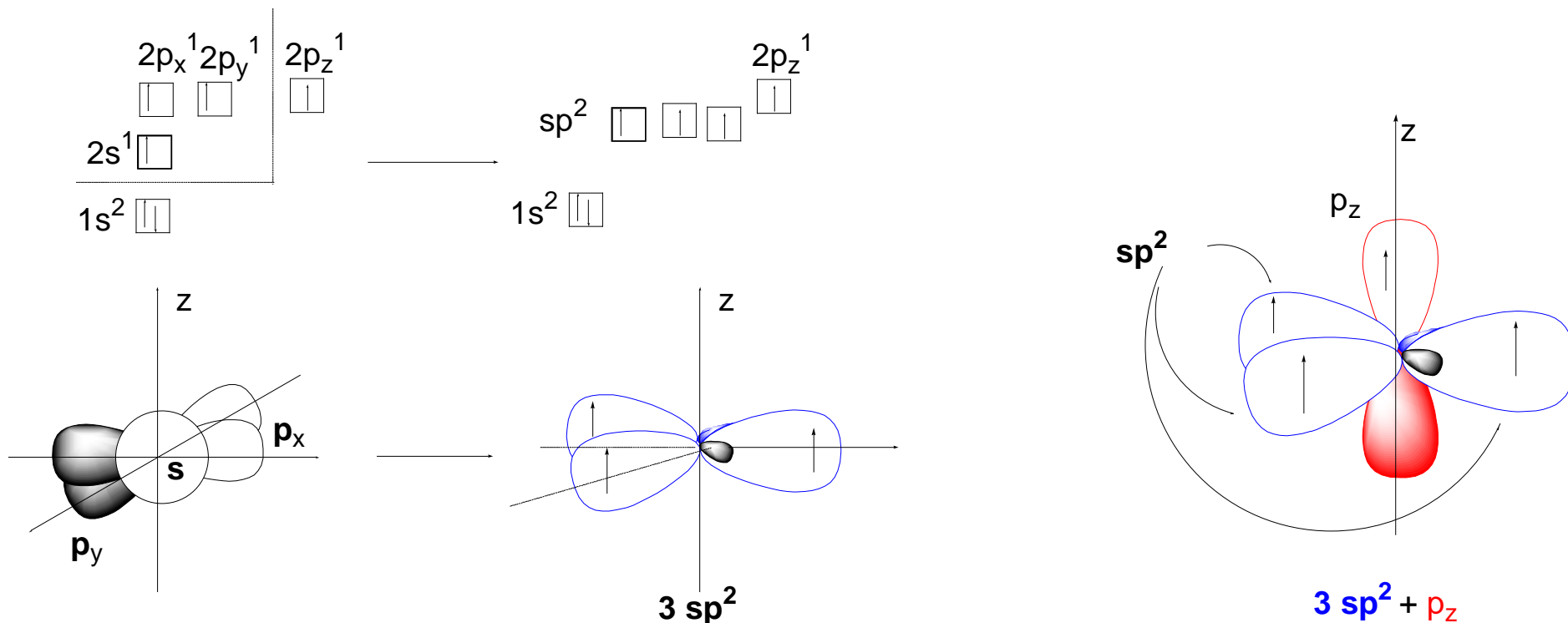
Metano CH₄

il carbonio, tranne nell'ossido di carbonio, forma sempre 4 legami



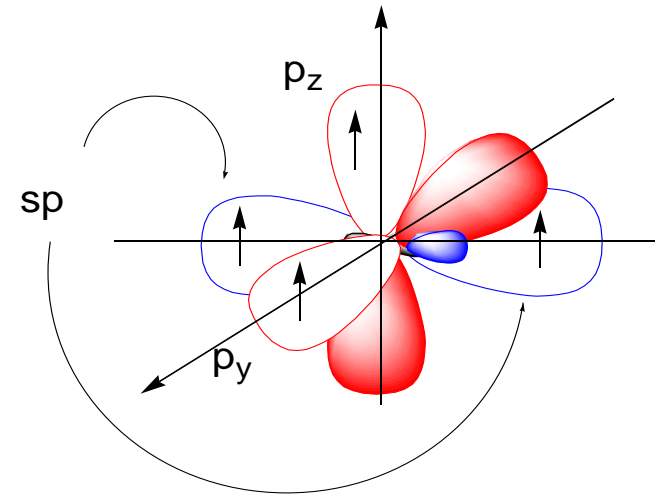
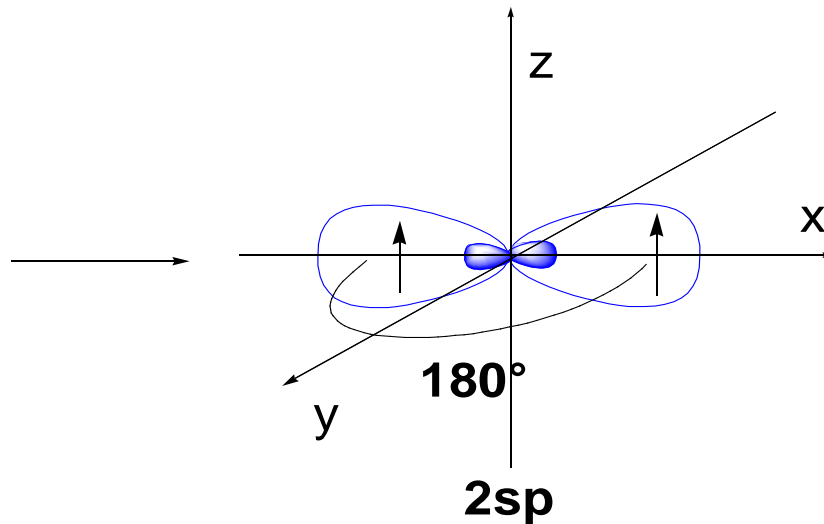
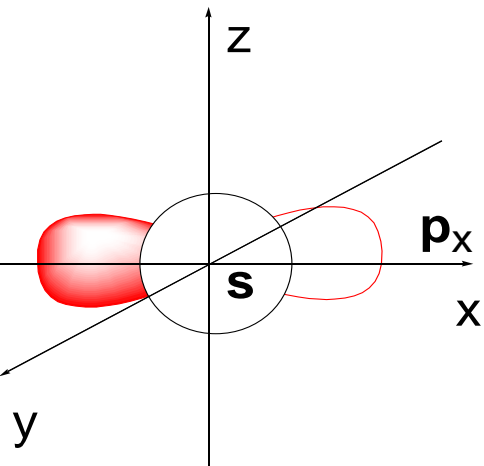
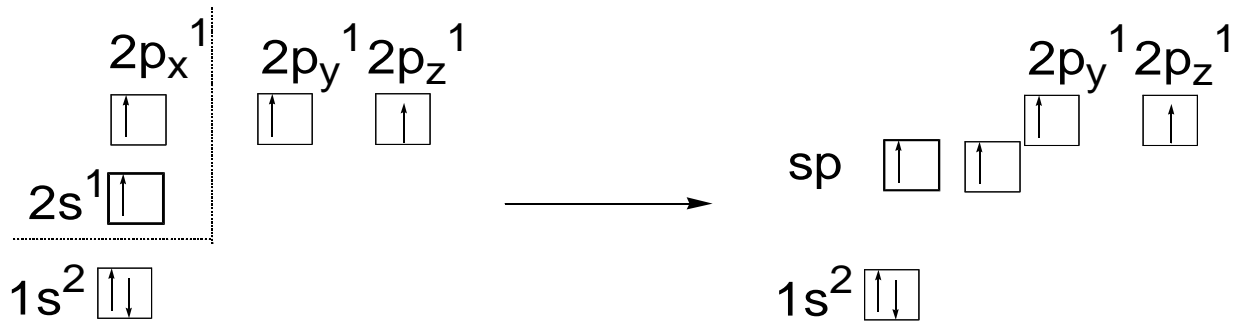
simmetria cilindrica del legame C-H σ

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 $C=C$

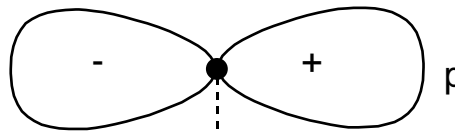
Ibridazione sp



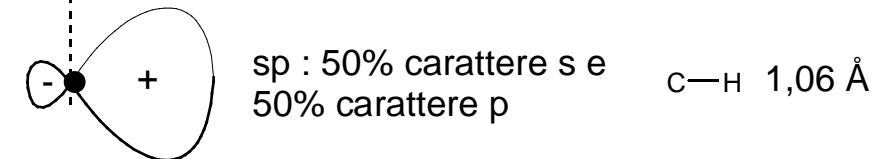
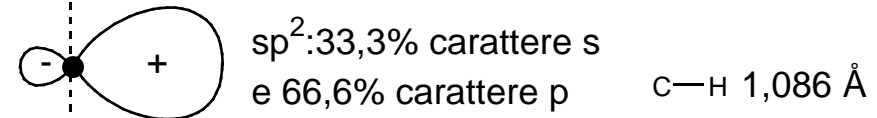
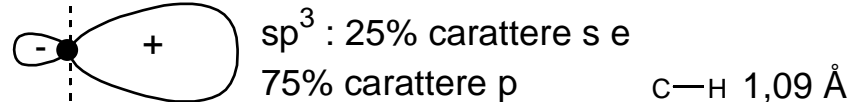
la geometria dei due sp è lineare, dei quattro legami del carbonio 2 sono ottenuti con i due sp, gli altri con gli orbitale p_y e p_z non ibridizzati che sono perpendicolari all'asse degli sp. Tipico di $C\equiv C$

Cosa spiega la 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