

ZANICHELLI

Valitutti, Falasca, Tifi, Gentile

Chimica

concetti e modelli.blu

ZANICHELLI

Capitolo 14

Le nuove teorie di legame

ZANICHELLI

Sommario

1. I limiti della teoria di Lewis
2. Il legame chimico secondo la meccanica quantistica
3. Le molecole biatomiche secondo la teoria del legame di valenza
4. L'ibridazione degli orbitali atomici
5. La teoria degli orbitali molecolari e i suoi vantaggi

I limiti della teoria di Lewis (I)

I dati sperimentali hanno messo in luce i limiti della teoria di Lewis: in particolare essa non dà ragione della geometria delle molecole e di quali e quanti elettroni siano effettivamente presenti nella zona compresa fra i nuclei dei due atomi.



I limiti della teoria di Lewis (II)

Quando una molecola presenta legami semplici e legami doppi, un'unica formula può non descriverla in modo corretto.



La rappresentazione corretta della molecola si ha utilizzando due **forme limite**.



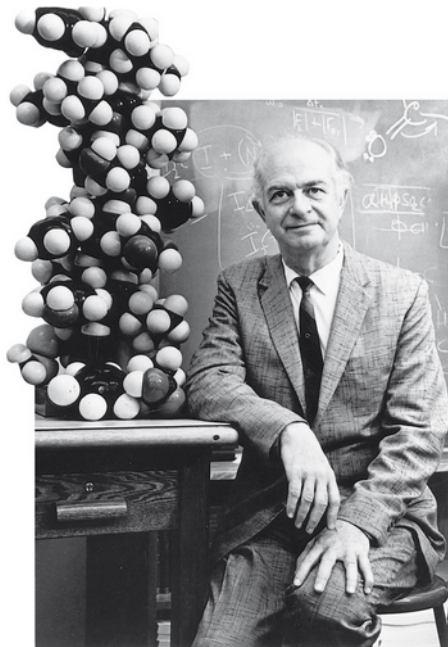
I limiti della teoria di Lewis (III)

Un **ibrido di risonanza** è una molecola la cui struttura reale è intermedia tra due o più possibili strutture di Lewis.

Il legame chimico secondo la meccanica quantistica

Dalla meccanica quantistica si sono sviluppate:

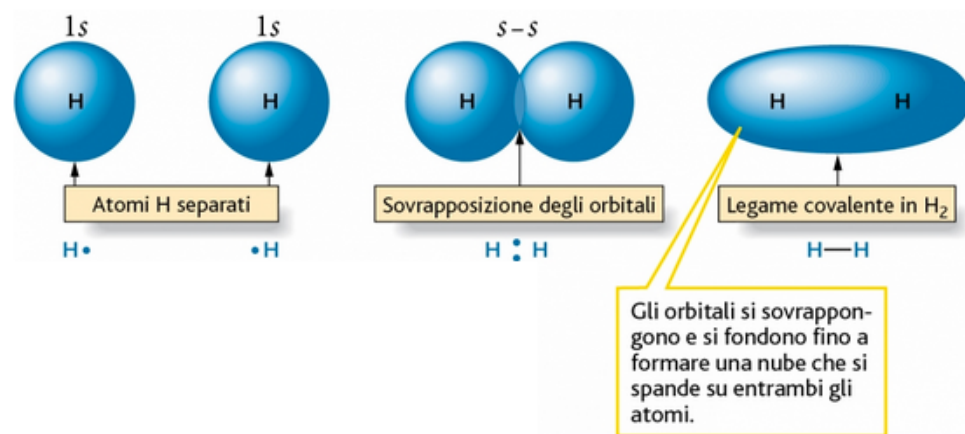
- la teoria del legame di valenza (VB)
- la teoria degli orbitali molecolari (MO)



ZANICHELLI

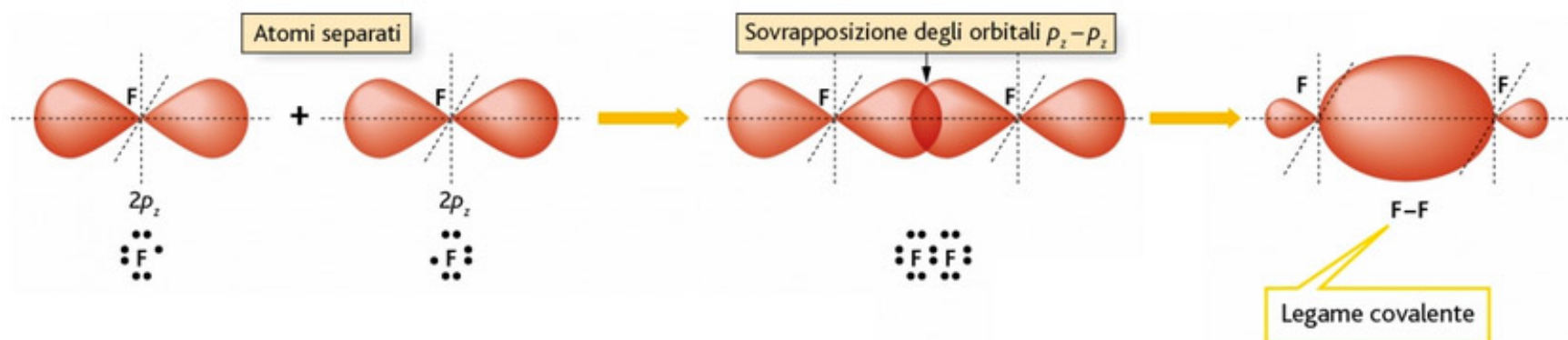
Le molecole biatomiche secondo la teoria del legame di valenza (I)

Secondo la **teoria del legame di valenza**, il legame covalente si forma quando gli orbitali semipieni di due atomi danno origine a un nuovo orbitale che permette loro di condividere gli elettroni di legame, l'orbitale molecolare.



Le molecole biatomiche secondo la teoria del legame di valenza (II)

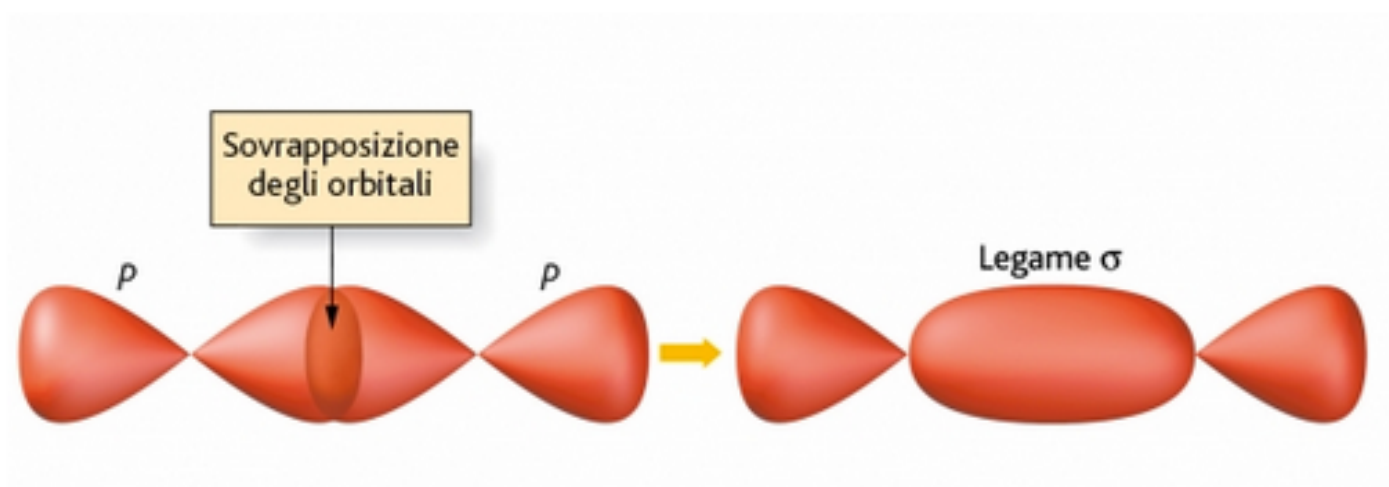
Il legame covalente si forma quando orbitali atomici di energia e simmetria simili si combinano per formare un orbitale molecolare di energia inferiore a quella degli orbitali atomici di partenza.



ZANICHELLI

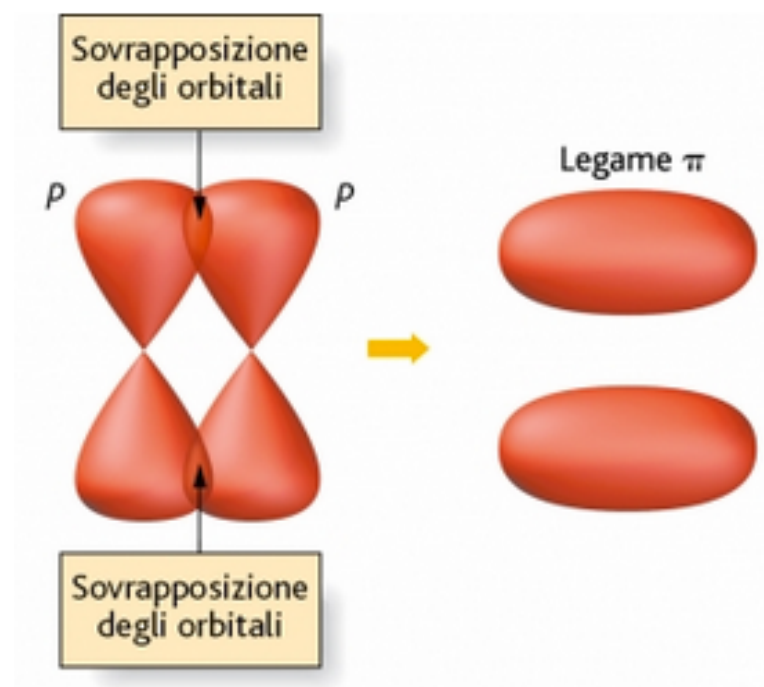
Le molecole biatomiche secondo la teoria del legame di valenza (III)

In un **legame σ** la distribuzione elettronica è concentrata lungo l'asse di legame ed è disposta in modo simmetrico intorno a esso.



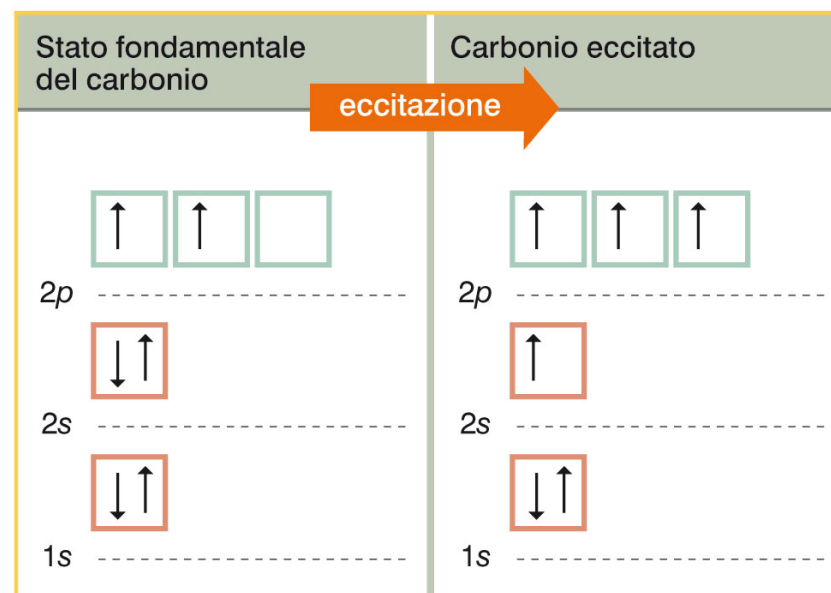
Le molecole biatomiche secondo la teoria del legame di valenza (IV)

In un **legame π** la distribuzione elettronica è concentrata in due zone situate da parti opposte rispetto all'asse di legame e non è disposta simmetricamente intorno a esso.



L'ibridazione degli orbitali ibridi (I)

Gli elettroni possono passare da un orbitale a più bassa energia a un orbitale dello stesso livello n che presenti una maggiore energia e che non sia occupato.


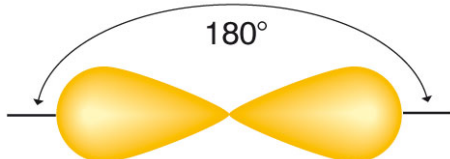
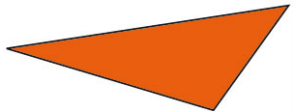
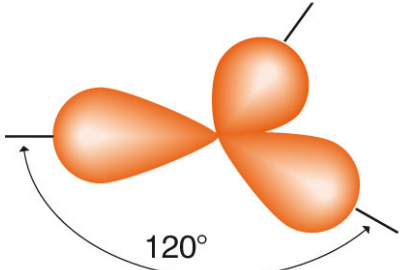
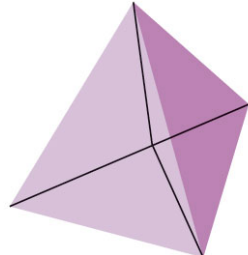
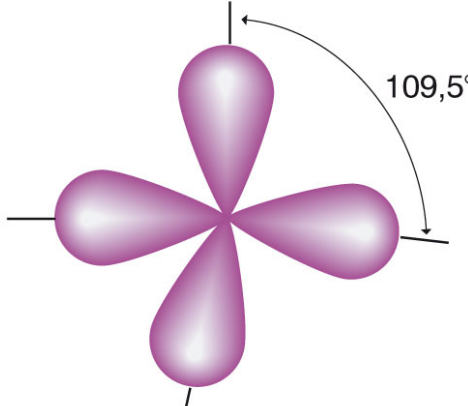


L'ibridazione degli orbitali ibridi (II)

La promozione degli elettroni produce la formazione di nuovi orbitali ibridi che l'atomo può utilizzare per fare legami.

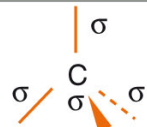
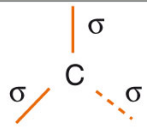

Gli **orbitali atomici ibridi** sono funzioni matematiche che derivano dalla somma algebrica di un certo numero di orbitali atomici aventi energia simile.

L'ibridazione degli orbitali ibridi (III)

Ibrido	Numero di orbitali ibridi	Geometria della molecola	Angoli di legame
sp	2 	lineare	
sp^2	3 	triangolare piana	
sp^3	4 	tetraedrica	

L'ibridazione degli orbitali ibridi (IV)

L'atomo di carbonio presenta diversi stati di ibridazione a seconda del tipo di molecola che va a formare.

	Ibrido sp^3	Ibrido sp^2	Ibrido sp
geometria	 tetraedrica	 triangolare planare	 lineare
natura dei legami	4 legami σ 0 legami π	3 legami σ 1 legame π	2 legami σ 2 legami π
numero orbitali p non ibridati	0	1	2
esempio	metano	etilene	acetilene

La teoria degli orbitali molecolari e i suoi vantaggi (I)

Secondo la **teoria degli orbitali molecolari**, il numero di orbitali molecolari che si formano è sempre pari al numero di orbitali atomici che si combinano.

Dalla combinazione di due orbitali atomici si ottengono un orbitale molecolare di legame e un orbitale molecolare di antilegame.

La teoria degli orbitali molecolari e i suoi vantaggi (II)

L'**orbitale molecolare di legame** è una funzione d'onda che può essere espressa come somma delle funzioni degli atomi che costituiscono la molecola.

L'**orbitale di antilegame** è un orbitale molecolare con energia superiore rispetto agli orbitali atomici di partenza; se viene occupato da elettroni, destabilizza la molecola.

La teoria degli orbitali molecolari e i suoi vantaggi (III)

Una molecola si forma soltanto se il numero di elettroni negli orbitali di legame è superiore a quello negli orbitali di antilegame.

