

Molecole polari

Una molecola è polare quando ha un momento dipolare non nullo.



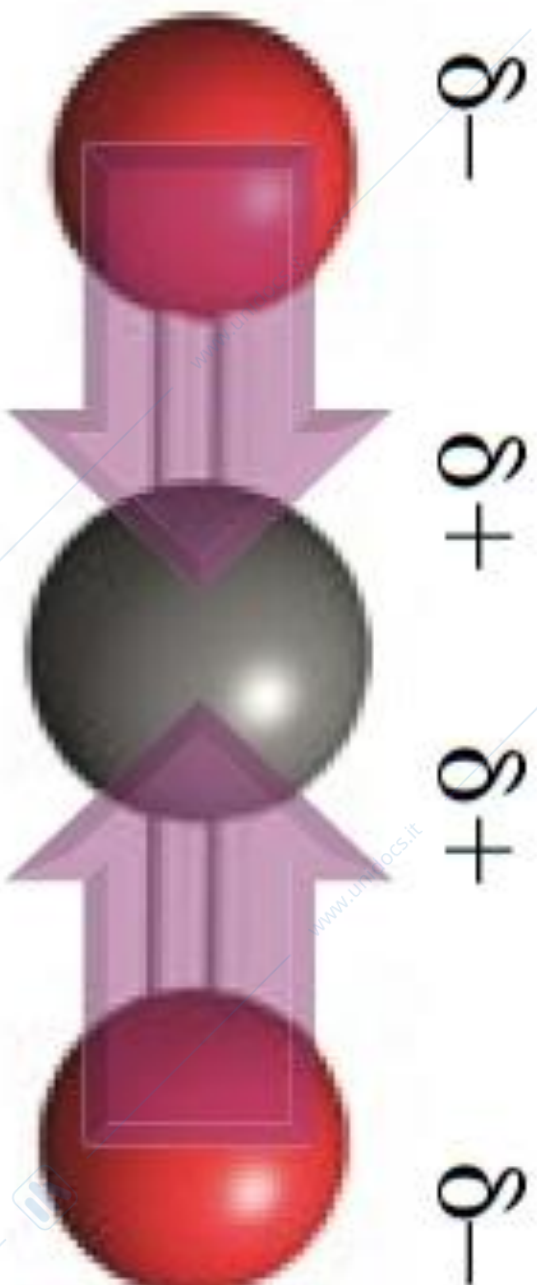
Una molecola apolare ha un momento dipolare nullo.

Le molecole biatomiche omonucleari sono apolari.



Una molecola poliatomiche può essere apolare nonostante i suoi legami siano polari.

Se il baricentro delle cariche positive coincide con il baricentro delle cariche negative, il momento dipolare è nullo.



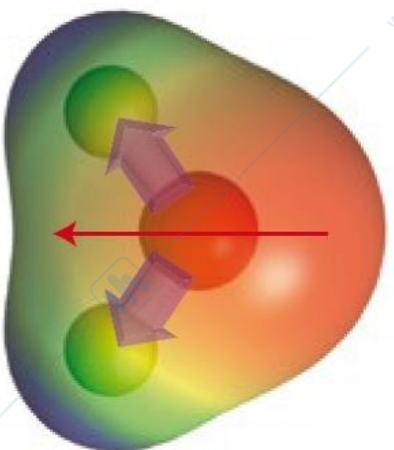
25 Diossido di carbonio, CO_2

Nell'anidride carbonica i due momenti di dipolo ($\delta^+ C = O\delta^-$) sono orientati in senso opposto



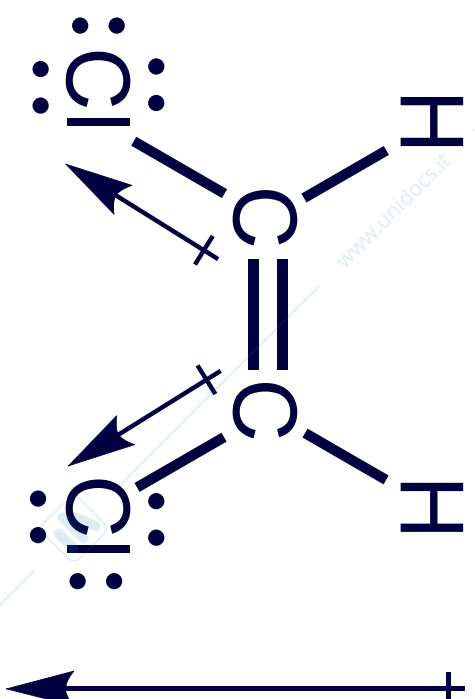
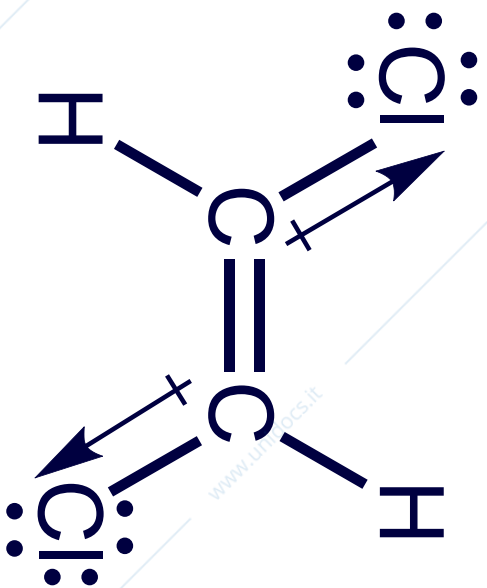
26 Diossido di carbonio, CO_2

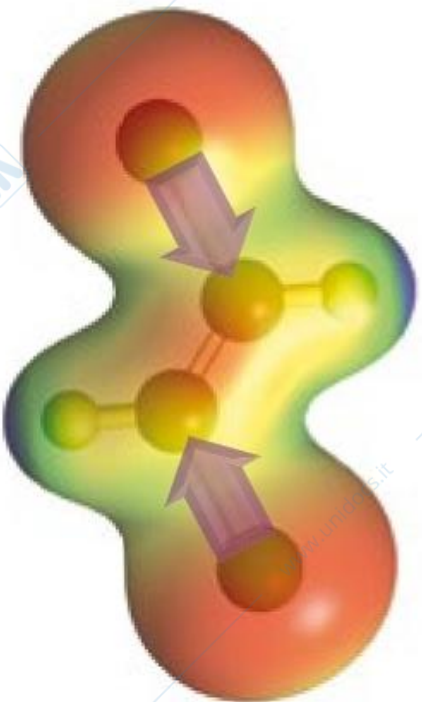
Nell'acqua i due momenti di dipolo ($\delta^+ H - O\delta^-$) sono orientati a $104,5^\circ$ l'uno rispetto all'altro e non si elidono. La molecola di acqua è polare.



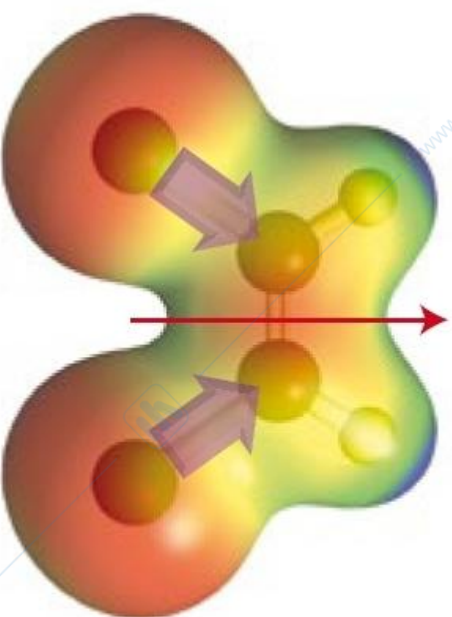
27 Acqua, H_2O

Dicloroetene



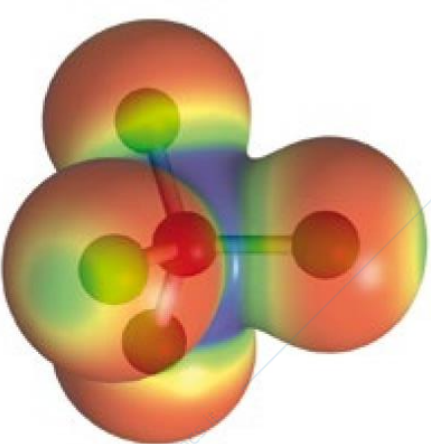


29 *trans*-Dicloroetene, $C_2H_2Cl_2$



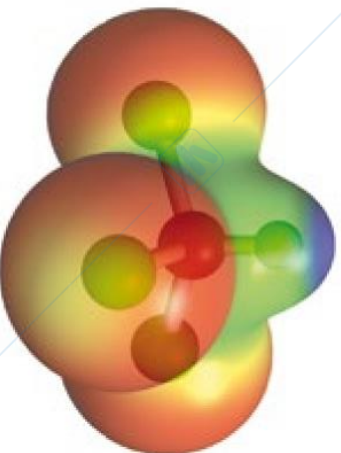
28 *cis*-Dicloroetene, $C_2H_2Cl_2$

Nel tetraclorometano (tetracloruro di carbonio) i quattro momenti di dipolo si annullano a causa della simmetria tetraedrica.


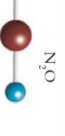
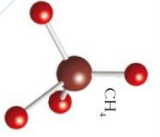
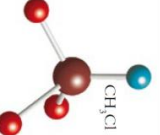

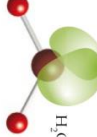
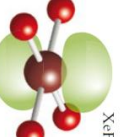
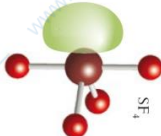
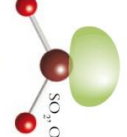
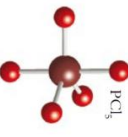
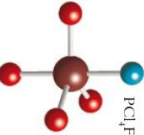

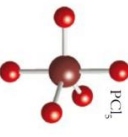
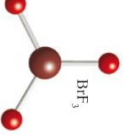
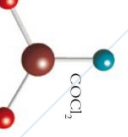
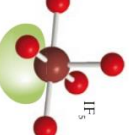
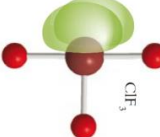
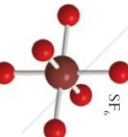
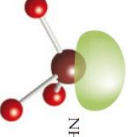


30 Tetraclorometano, CCl_4

Se nell'assetto tetraedrico si hanno atomi differenti come nel triclorometano (cloroformio) allora i momenti di dipolo non sono più uguali e quindi non si elidono completamente.

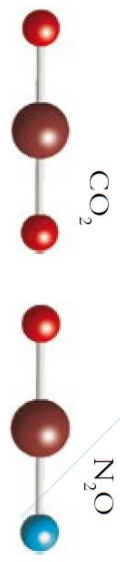


31 Triclorometano, CHCl_3

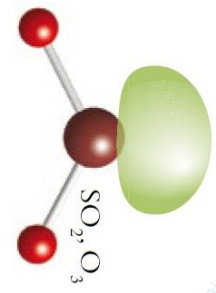
Formula VSEPR	Apolare	Polare	Formula VSEPR	Apolare	Polare
AX_2	 CO_2	 N_2O	AX_4	 CH_4	 CH_3Cl
AX_2E_2	 XeF_2, I_2^+	 H_2O	AX_4E	 XeF_4	 SF_4
AX_2E	 SO_2, O_3		AX_3E	 PCl_3	 PCl_2F
AX_3E_2	 XeF_3, I_3^-		AX_5	 PCl_5	
AX_3	 BCl_3	 $COCl_2$	AX_5E	 IF_5	
AX_2E_2	 ClF_3		AX_6	 SF_6	
AX_2E	 NH_3		AX_3E		

Formula	VSEPR	
	Apolare	Polare

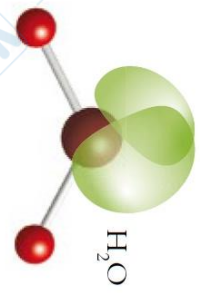
AX_2



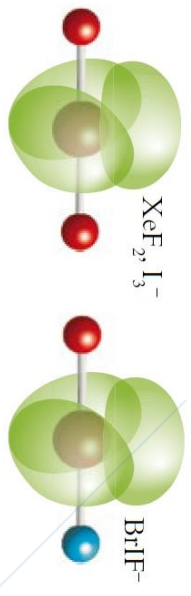
AX_2E



AX_2E_2



AX_2E_3



www.unidocs.it

www.unidocs.it

www.unidocs.it

www.unidocs.it - Appunti e dispense per superare i tuoi esami universitari

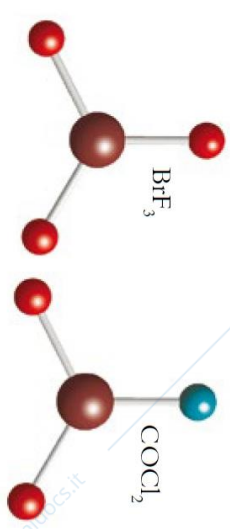
www.unidocs.it - Appunti e dispense per superare i tuoi esami universitari

Formula
VSEPR

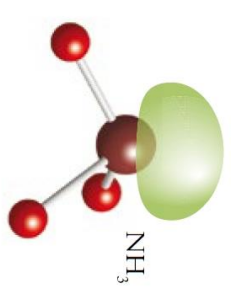
Apolare

Polare

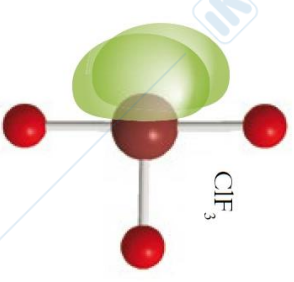
AX_3



AX_3E



AX_3E_2

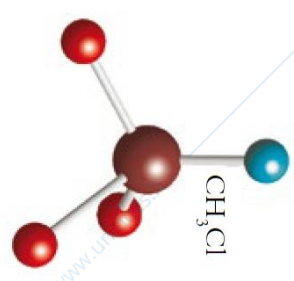
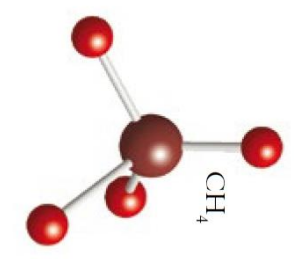


Formula
VSEPR

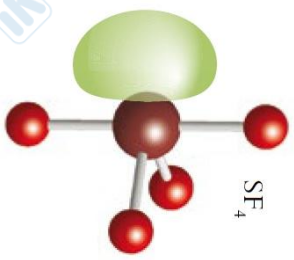
Apolare

Polare

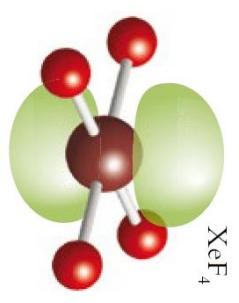
AX_4



AX_4E



AX_4E_2

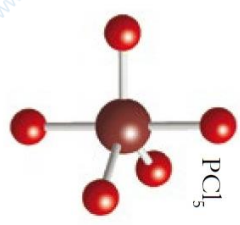


Formula
VSEPR

Apolare

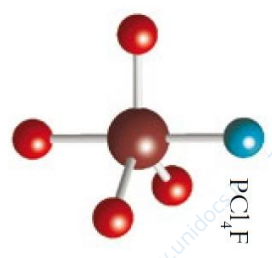
Polare

AX_5

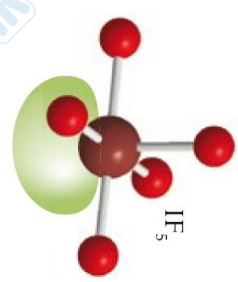


PCl_5

PCl_4F

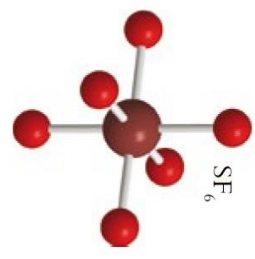


AX_5E



IF_5

AX_6



SF_6

Teoria del legame di valenza

La teoria del legame di valenza (VB) è una descrizione del legame covalente basata sugli orbitali atomici.

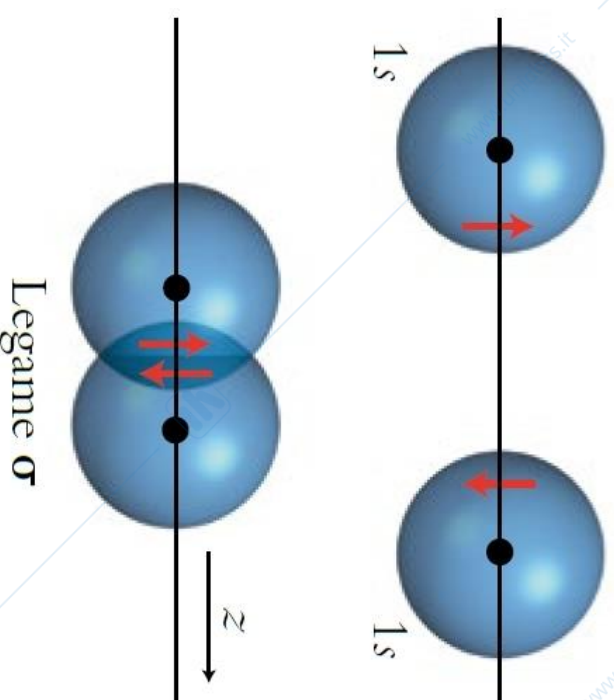
La teoria del legame di valenza fornisce una descrizione quantomeccanica della distribuzione degli elettroni nei legami.

A differenza della teoria di Lewis e del modello VSEPR, consente di **calcolare la lunghezza e gli angoli di legame**.

La teoria del legame di valenza considera la formazione un legame chimico mediante ***l'appaiamento degli elettroni di legame e la fusione (sovrapposizione) dei rispettivi orbitali atomici***.

Molecola di idrogeno - Legame σ

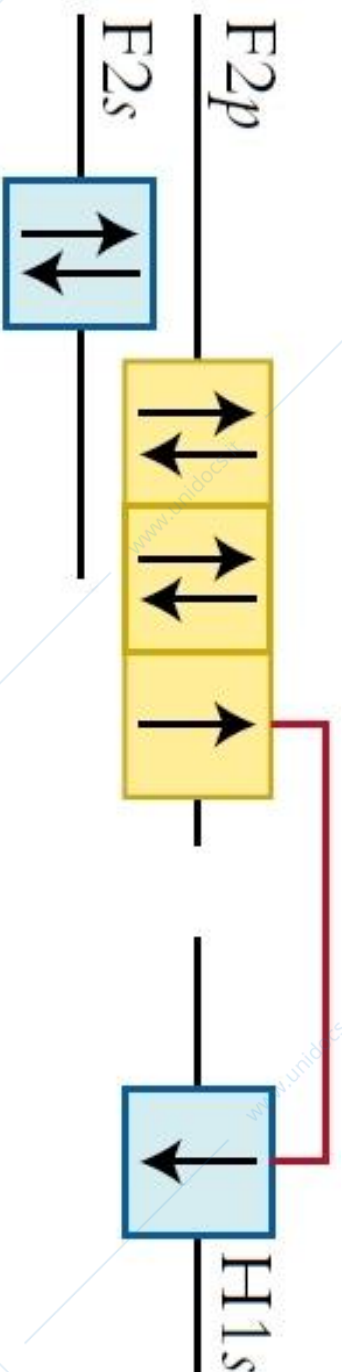
Gli elettroni di spin opposto in **due orbitali $1s$** si appaiano e gli orbitali si sovrappongono. La nube si espande su entrambi i nuclei. Si forma un legame σ .



Un **legame σ** ha simmetria cilindrica lungo l'asse internucleare e non prevede alcun piano nodale lungo l'asse internucleare.

Fluoruro d'idrogeno - Legame σ

Sovrapposizione di un orbitale $1s$ e un orbitale $2p_z$



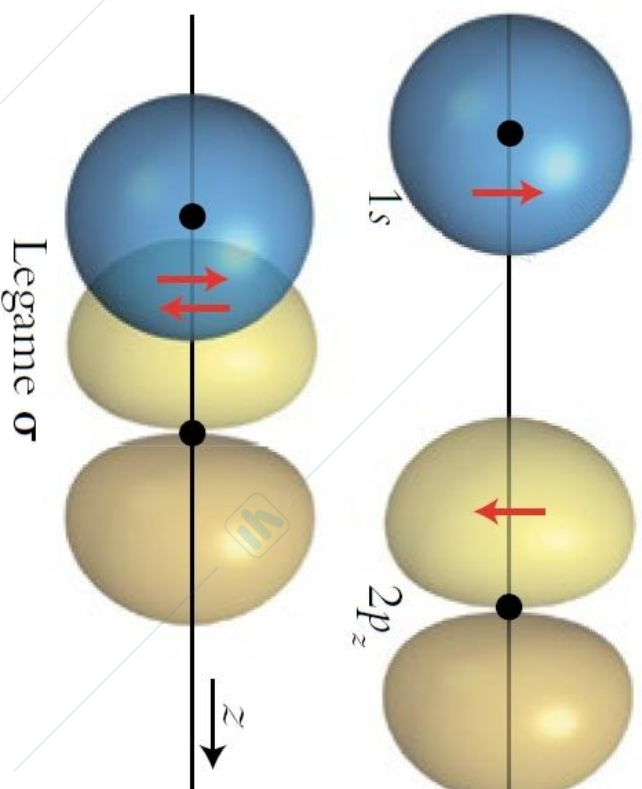
Il legame σ dell'HF è piú complesso del legame σ dell' H_2 .

Entrambi i legami sono **legami σ** , hanno simmetria cilindrica lungo l'asse internucleare e non prevede alcun piano nodale lungo l'asse internucleare.

Legame σ

Si forma un legame σ appaiando gli spin elettronici di un **orbitale $1s$** e un **orbitale $2p_z$** .

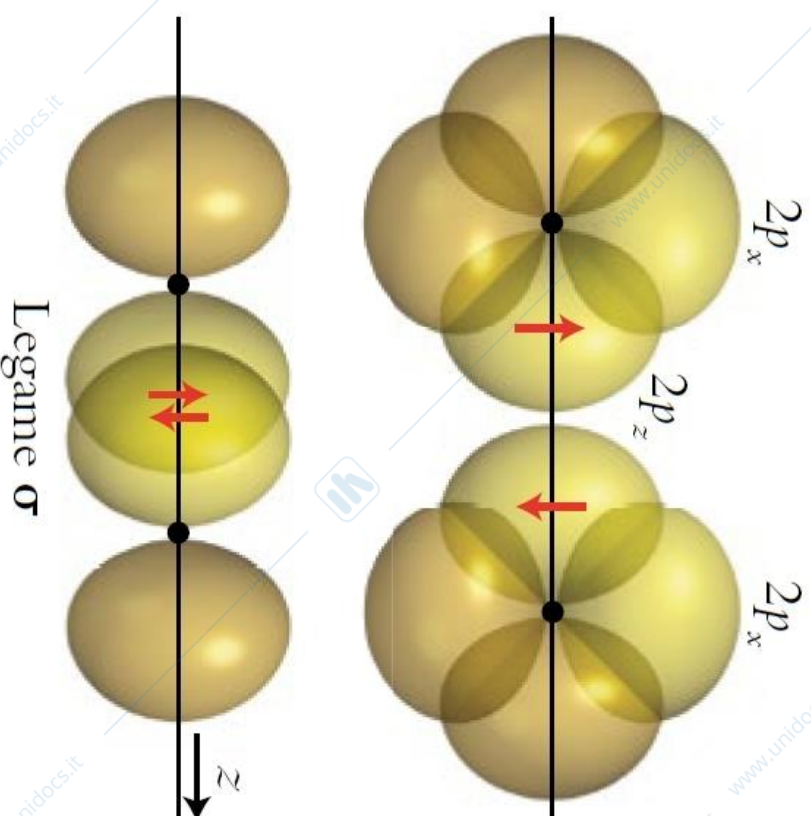
I due elettroni si espandono nell'intera regione delimitata dalla superficie di contorno.



Legame σ

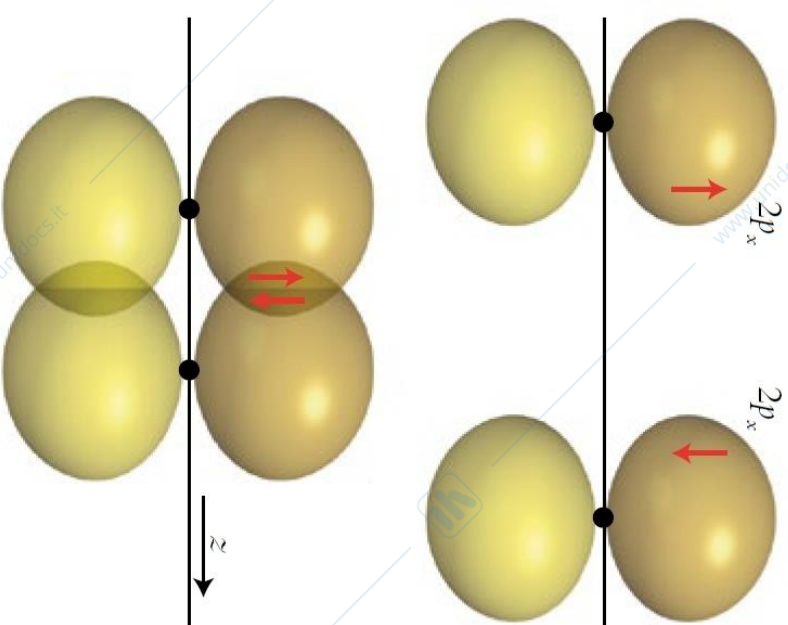
Si forma un legame σ appaiando gli spin elettronici di **due orbitali $2p_z$** di due atomi contigui.

Nel legame σ sopravvive il piano nodale di ciascun orbitale p_z .



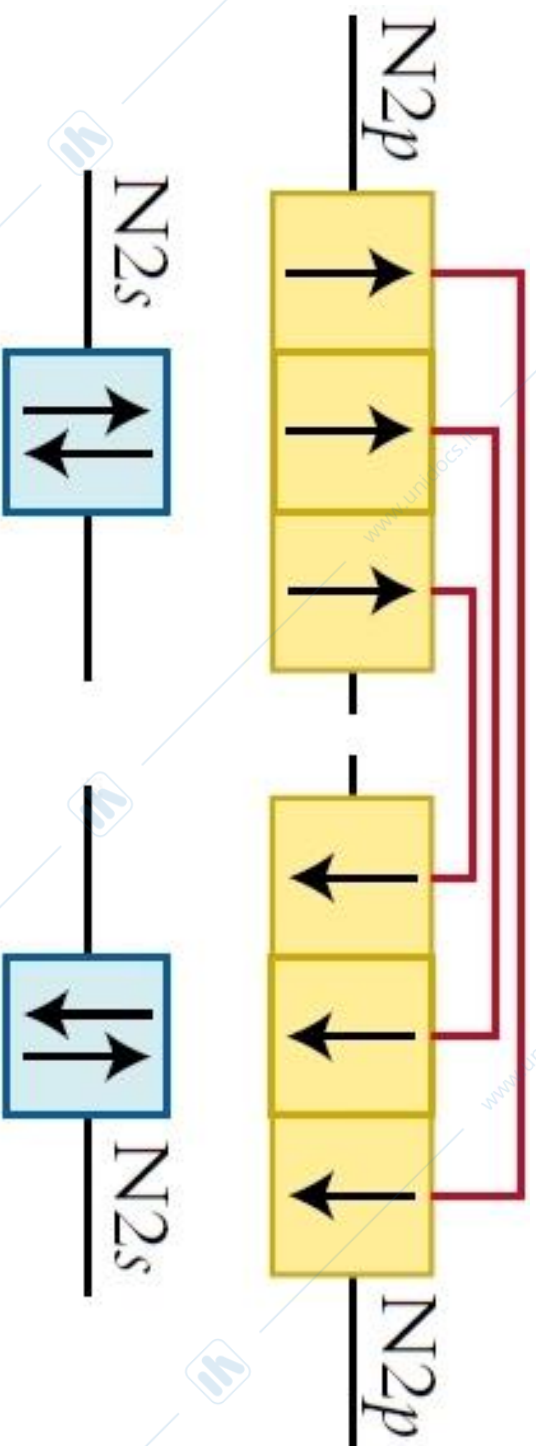
Legame π

Si forma un legame π gli elettroni posti in **due orbitali $2p$** di atomi contigui si appaiano e si **sovrappongono lateralmente**.
Il legame è caratterizzato da due lobi.



Legami della molecola di azoto

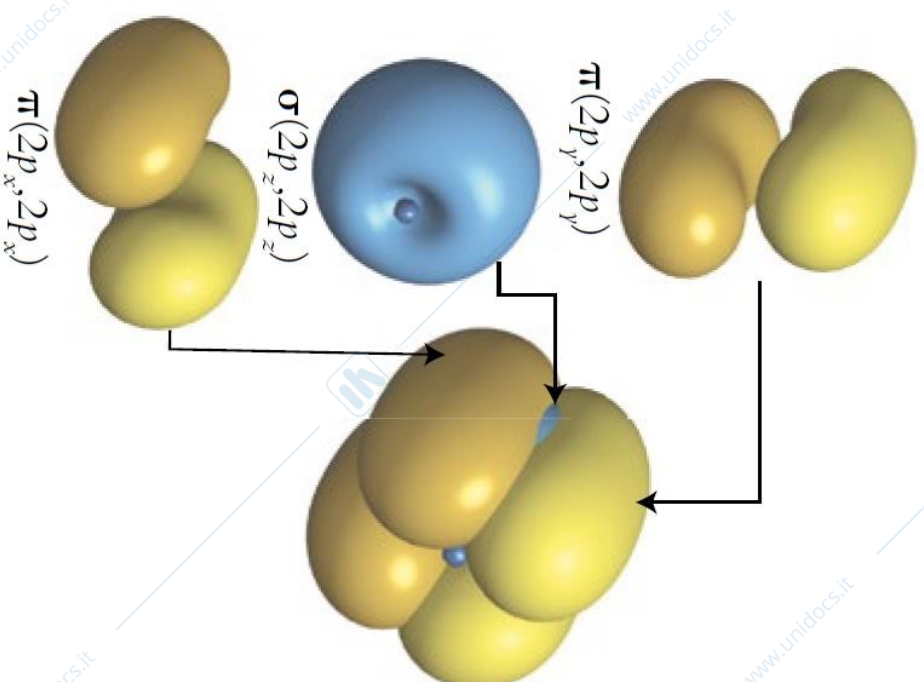
I due atomi sono uniti da **un legame σ** e **due legami π**

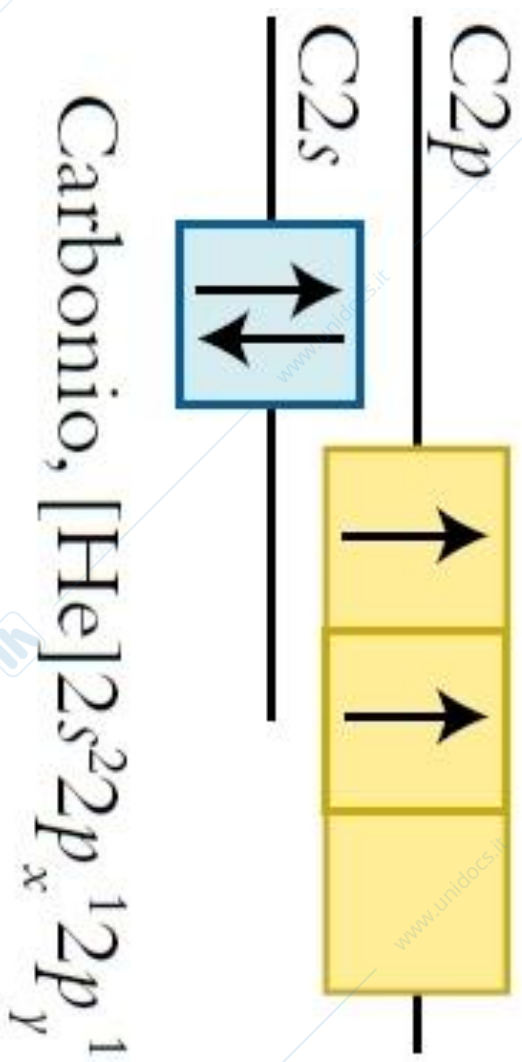


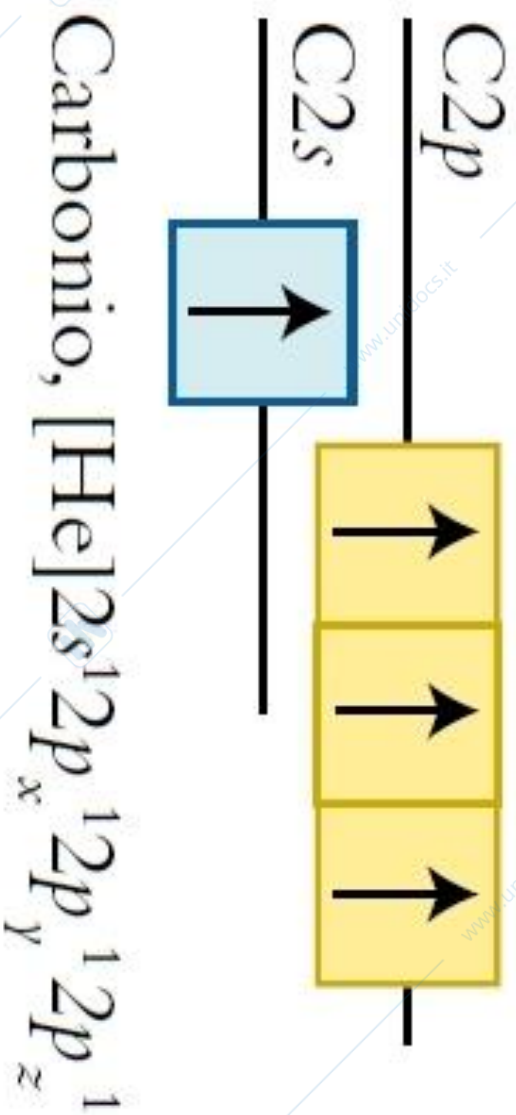
Legame della molecola di azoto

I due atomi sono uniti da **un legame σ** e **due legami π** .

I due legami π si fondono per dare una lunga nube a forma di ciambella.







Carbonio ibridizzato sp^3

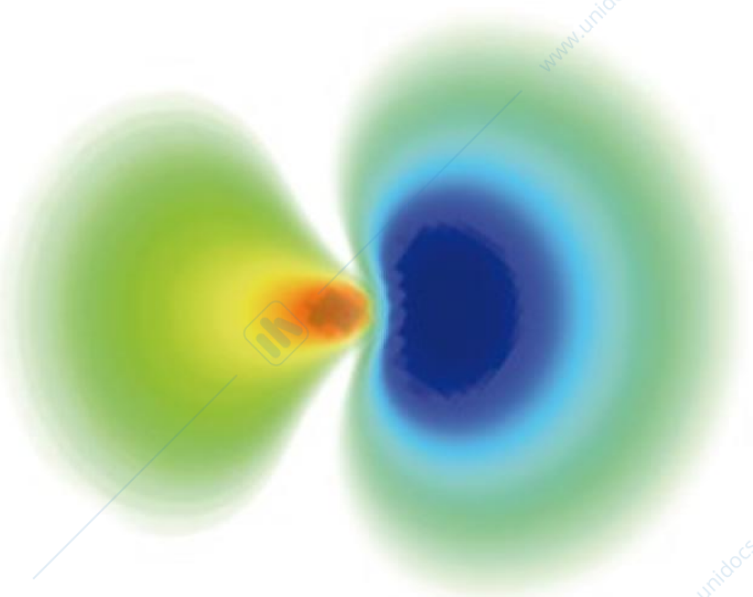


Gli orbitali ibridi sono una combinazione lineare dei quattro orbitali atomici:

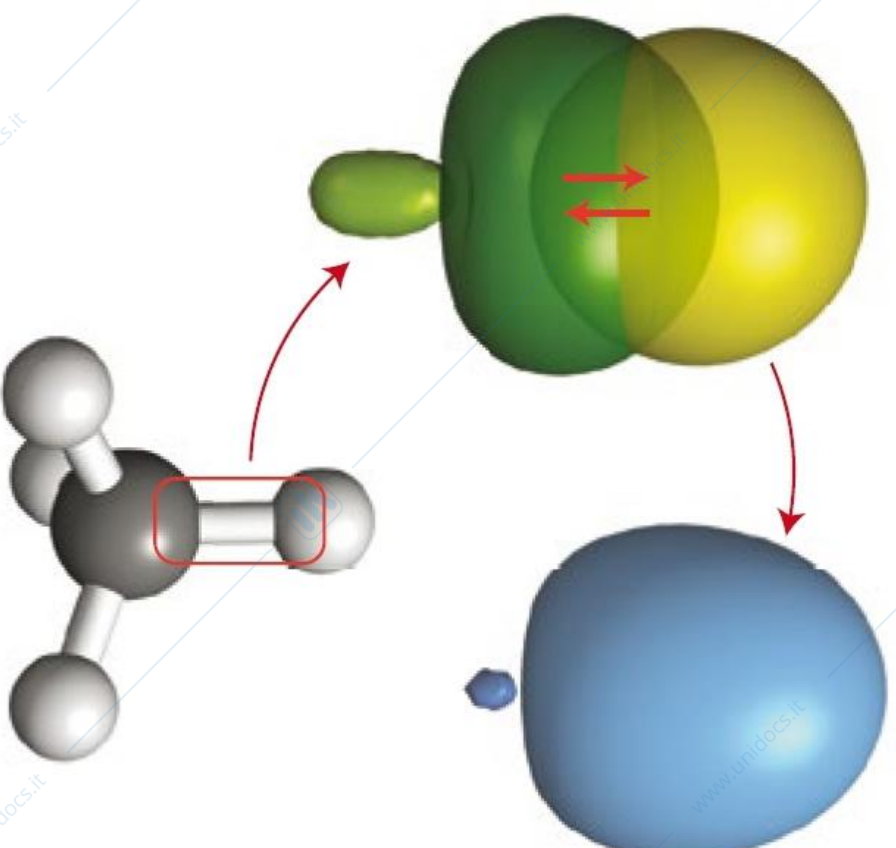
$$h_1 = s + p_x + p_y + p_z \quad h_2 = s - p_x - p_y + p_z$$

$$h_3 = s - p_x + p_y - p_z \quad h_4 = s + p_x - p_y - p_z$$

Orbitale ibrido sp^3 in un piano che lo biseca e passa per il nucleo
I colori indicano la variazione della densità elettronica nell'orbitale.
Rosso: alta densità elettronica. Blu: bassa densità elettronica.

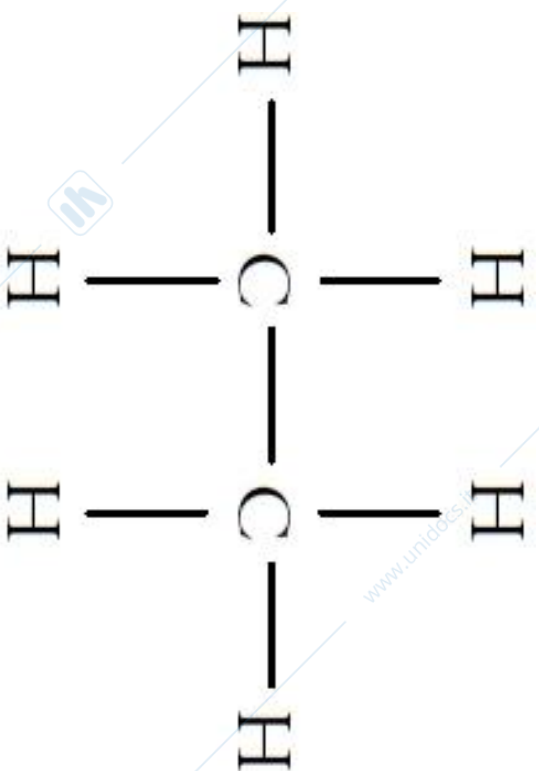


Metano – Ogni legame C-H si forma appaiando un elettrone $1s$ dell'atomo di idrogeno con un elettrone associato a uno dei quattro orbitali ibridi sp^3 .

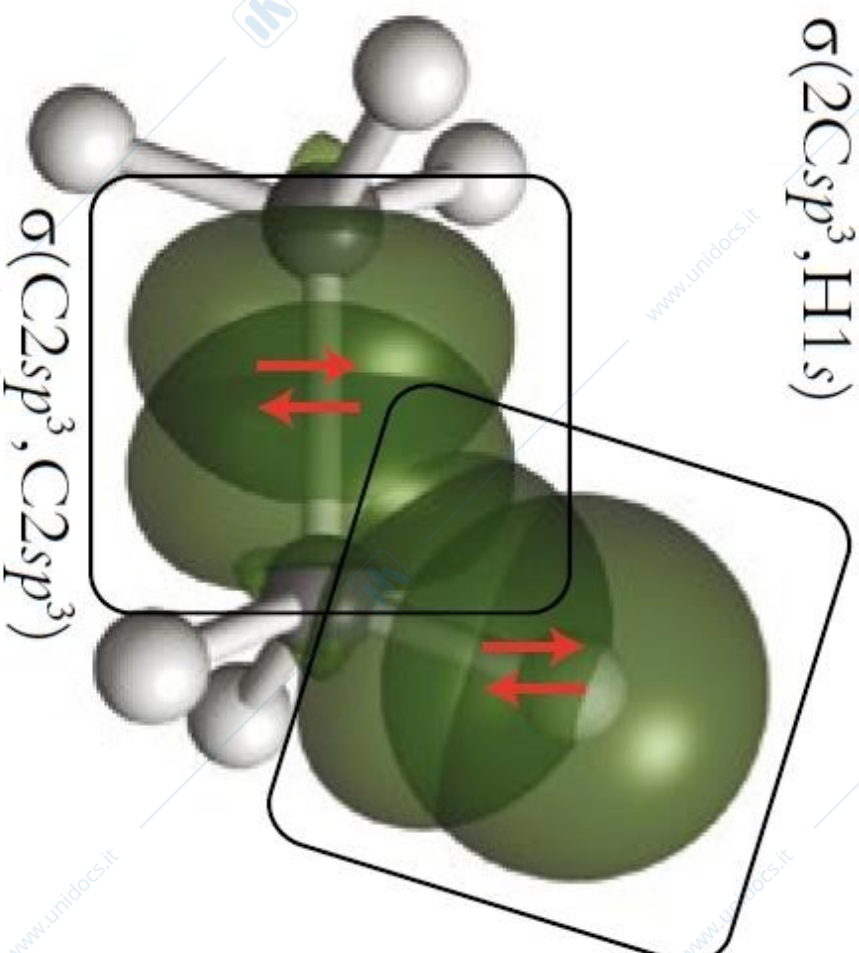


Etano

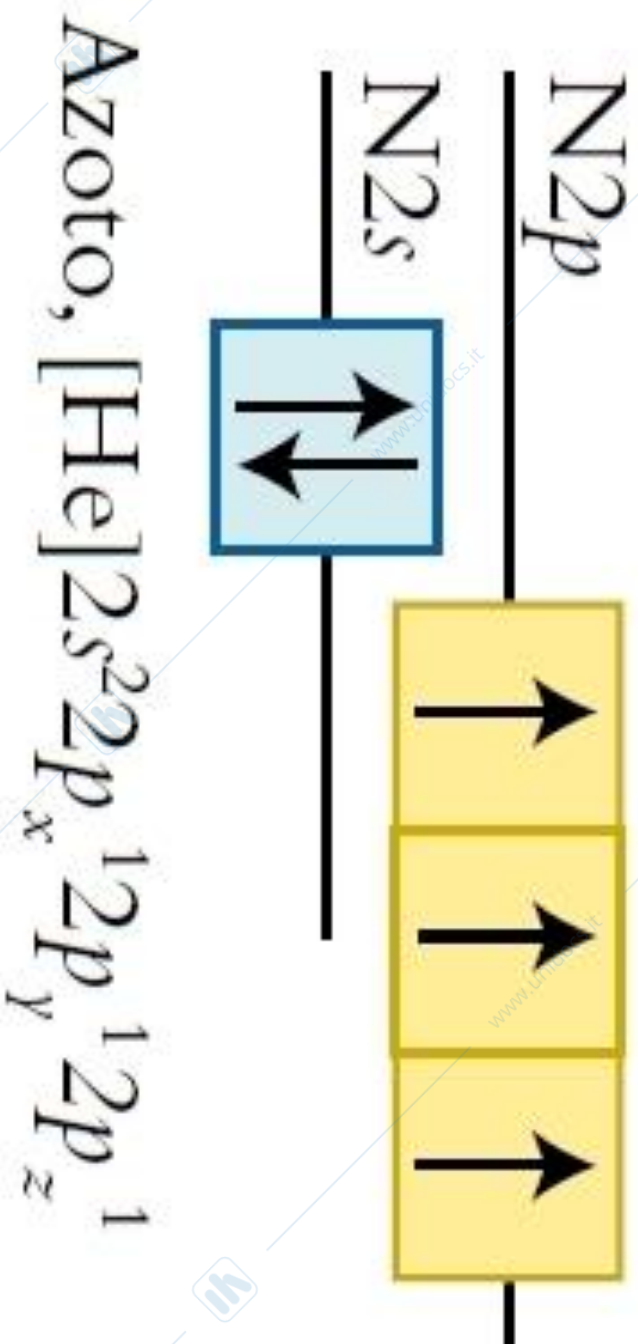
Gli angoli di legame sono tutti prossimi a $109,5^\circ$ (angolo tetraedrico)



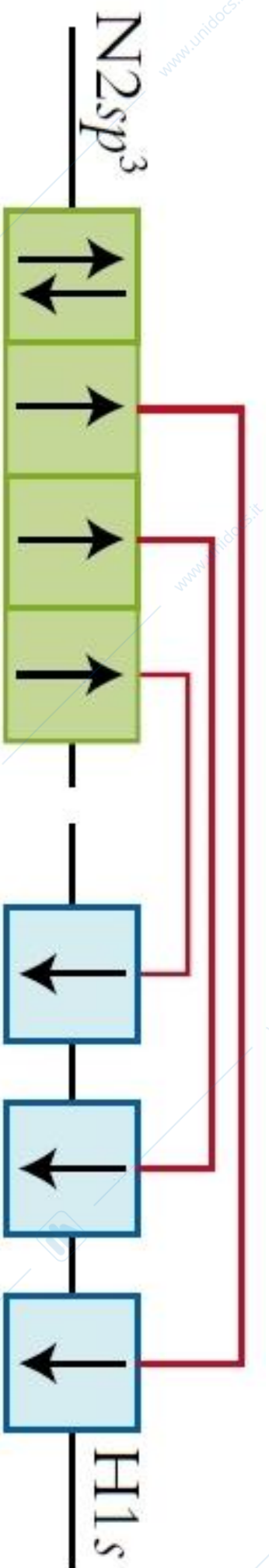
$\sigma(2\text{C}sp^3, \text{H}1s)$



$\sigma(\text{C}2sp^3, \text{C}2sp^3)$



Ammoniaca NH_3 orbitali ibridi sp^3



orbitali ibridi sp^2

$$h_1 = s + 2^{1/2}p_y$$

$$h_2 = s + \left(\frac{3}{2}\right)^{1/2} p_x - \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2} p_y$$

$$h_3 = s - \left(\frac{3}{2}\right)^{1/2} p_x - \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2} p_y$$

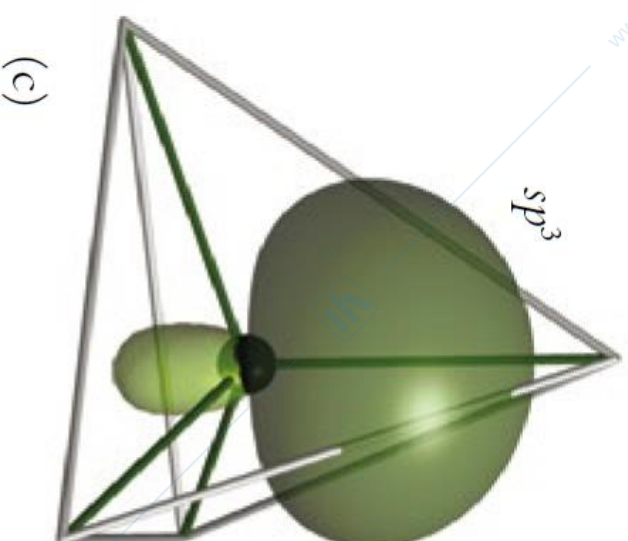
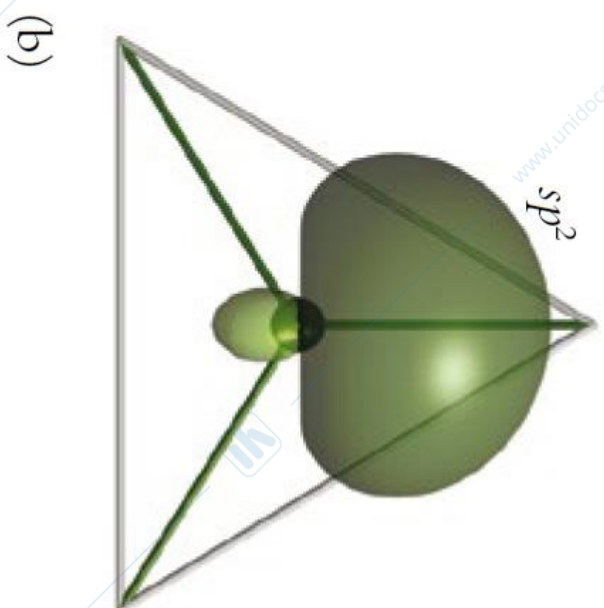
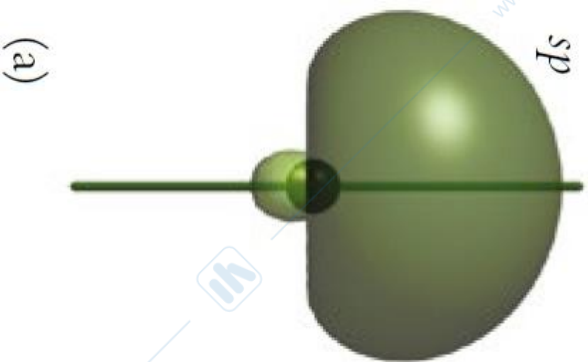
orbitali ibridi sp

$$h_1 = s + p$$

$$h_2 = s - p$$

Superficie di contorno di orbitali ibridi

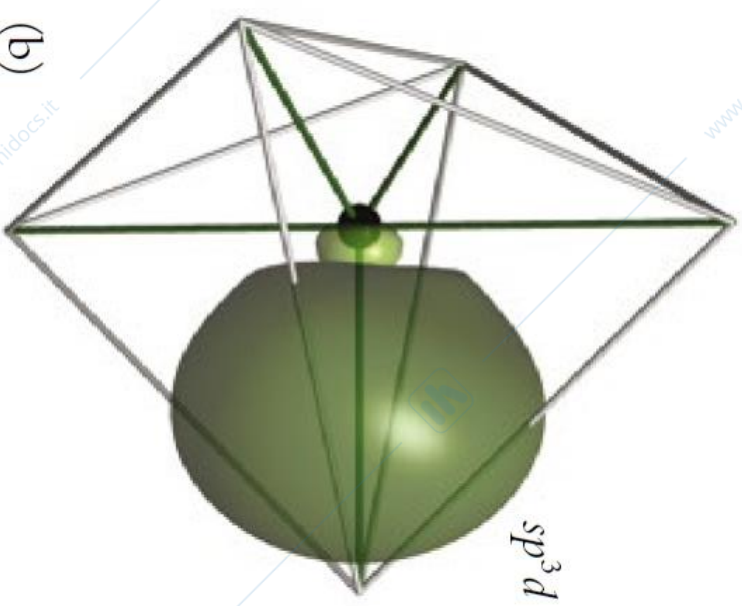
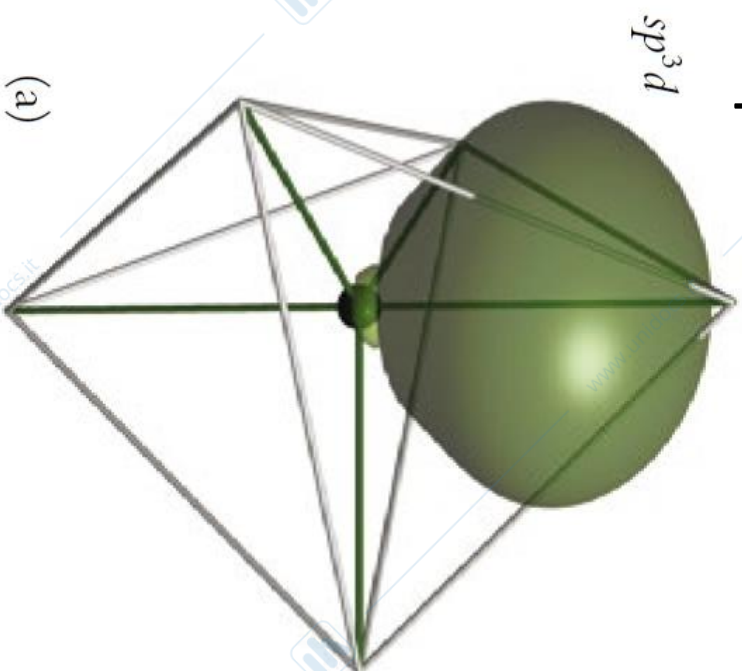
- Due orbitali sp orientati in verso opposto.
- Tre orbitali sp^2 orientati verso i vertici di un triangolo equilatero.
- Quattro orbitali sp^3 orientati secondo i vertici di un tetraedro regolare.



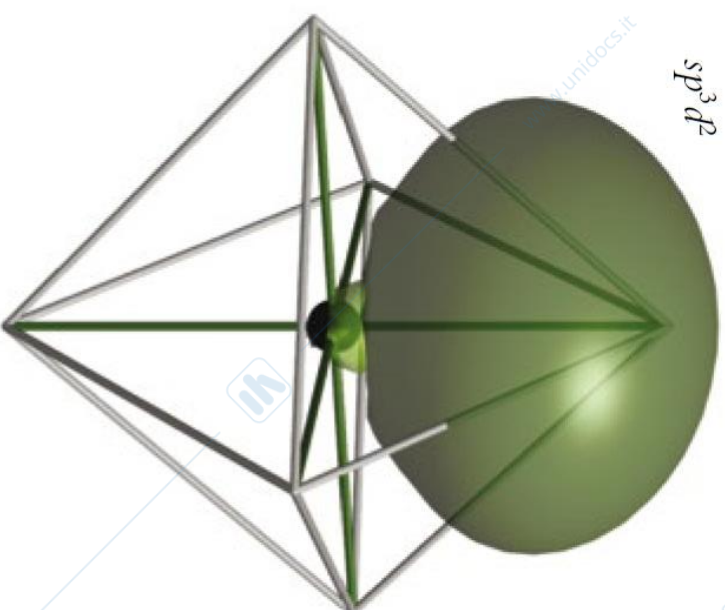
Assetto bipyramidale triangolare

5 orbitali sp^3d (atomo centrale con orbitali d)

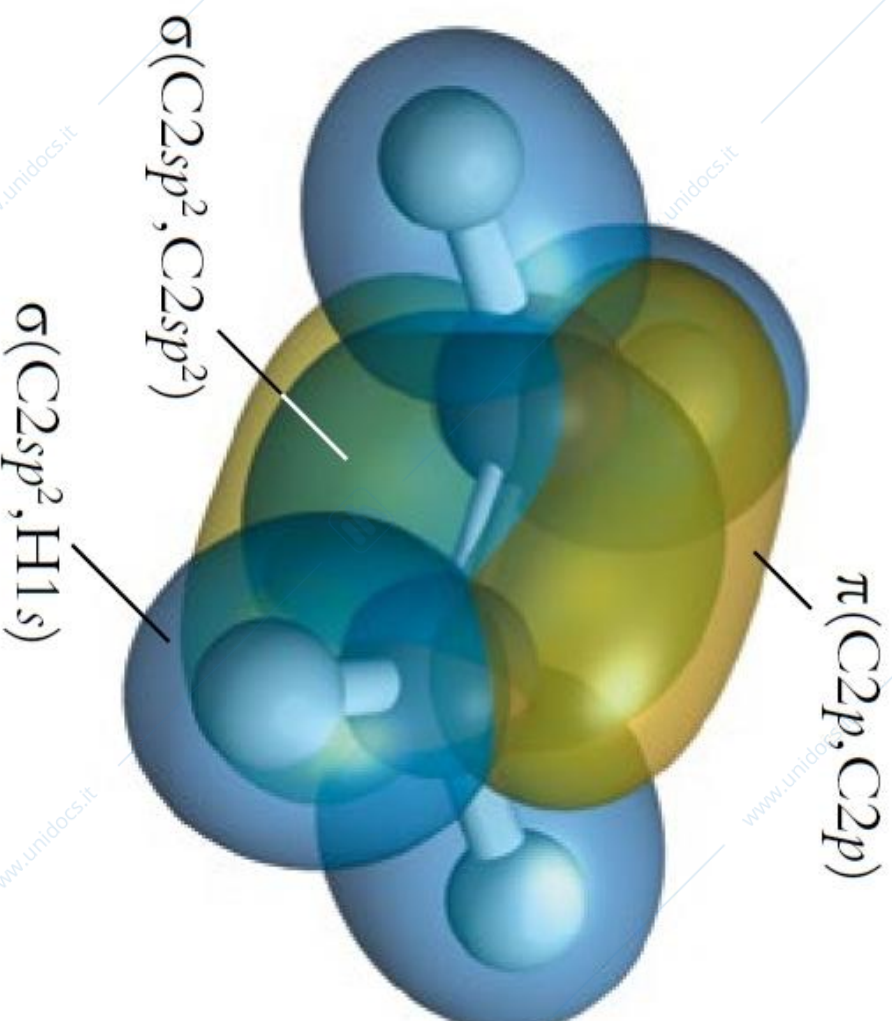
- a) Orbitale assiale
- b) Orbitale equatoriale



Assetto ottaedrico
6 orbitali sp^3d^2 (atomo centrale con orbitali d)
Necessario assetto ottaedrico delle coppie di elettroni

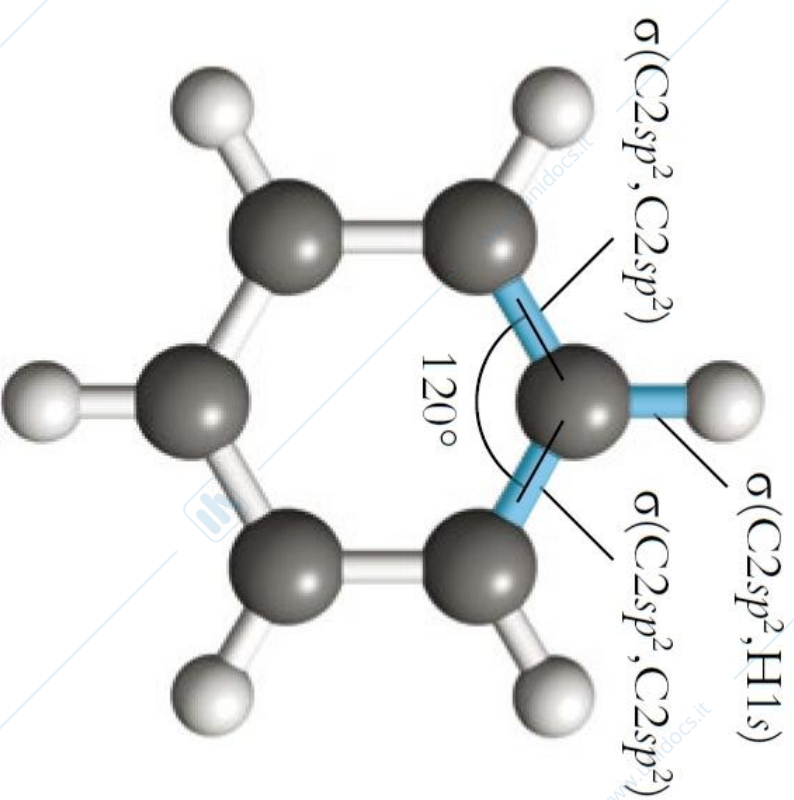


Schema di legame dell'etene (etilene)
Il doppio legame resiste alla torsione, poiché questa diminuirebbe la sovrapposizione tra i due orbitali C2p, indebolendo il legame π



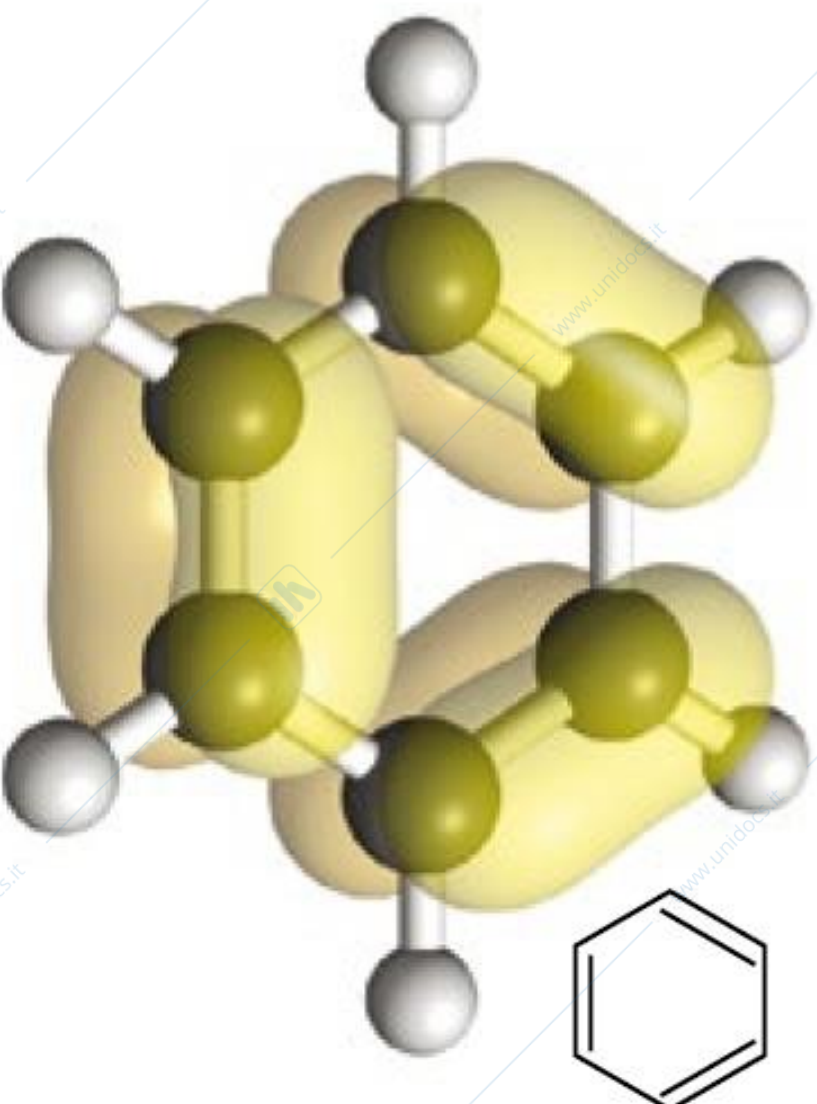
Legami σ del benzene

Ciascun atomo di carbonio è ibridizzato sp^2 (angoli di legame 120°)



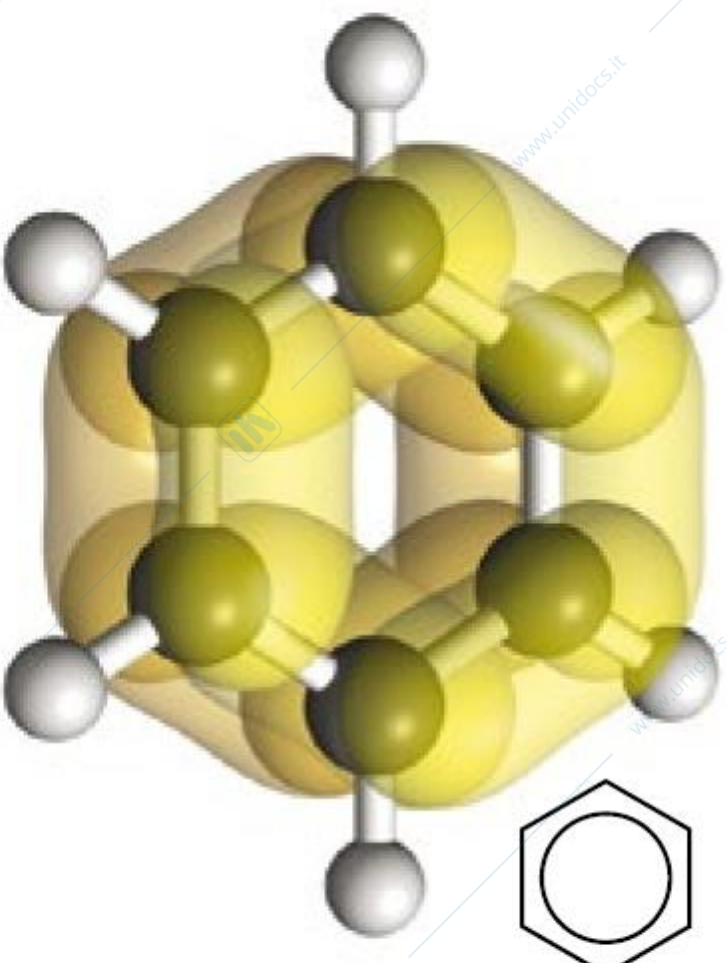
Benzene – Struttura di Kekulé

Orbitali 2p del carbonio non ibridizzati formano legami π .



Benzene

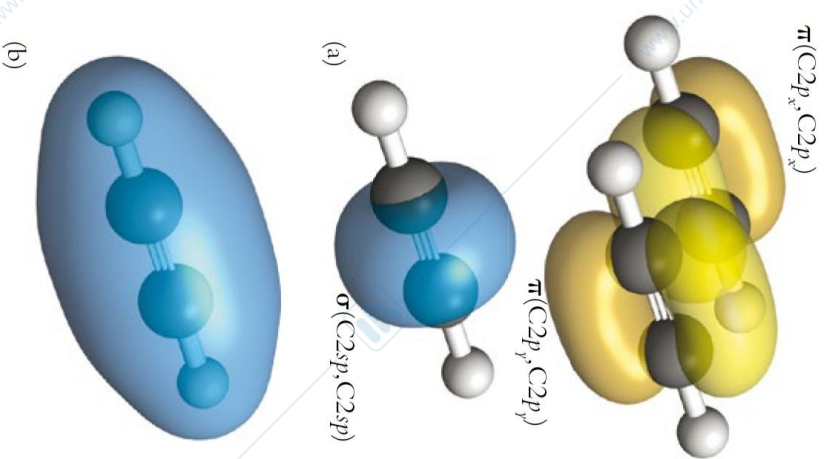
Gli elettroni π formano una nube a forma di doppia ciambella (sopra e sotto il piano dell'anello).



Etino (acetilene)

Gli atomi di carbonio sono ibridizzati sp.

I due orbitali p rimanenti su ciascun atomo di carbonio generano due legami π .



Teoria degli orbitali molecolari (teoria MO)

Gli elettroni sono descritti da funzioni d'onda dette **orbitali molecolari** che **si estendono sull'intera molecola**.

Gli **orbitali molecolari** si costruiscono a partire dagli **orbitali atomici** appartenenti ai gusci di valenza degli atomi presenti nella molecola.

Gli orbitali sono una **combinazione lineare di orbitali atomici** (LCAO-MO).

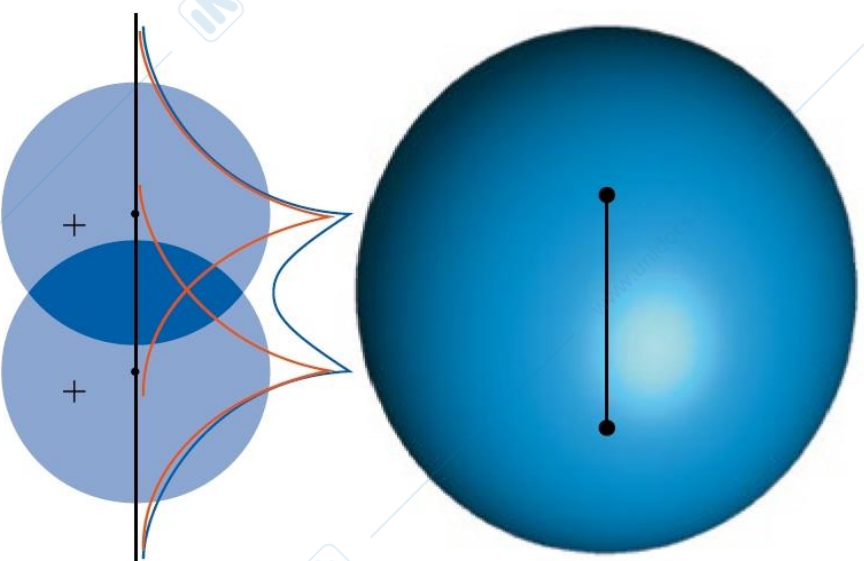
Quando gli orbitali **interferiscono costruttivamente** danno origine a **orbitali leganti**.

Quando gli orbitali **interferiscono distruttivamente** danno origine a **orbitali antilegante**.

N orbitali atomici generano N orbitali molecolari.

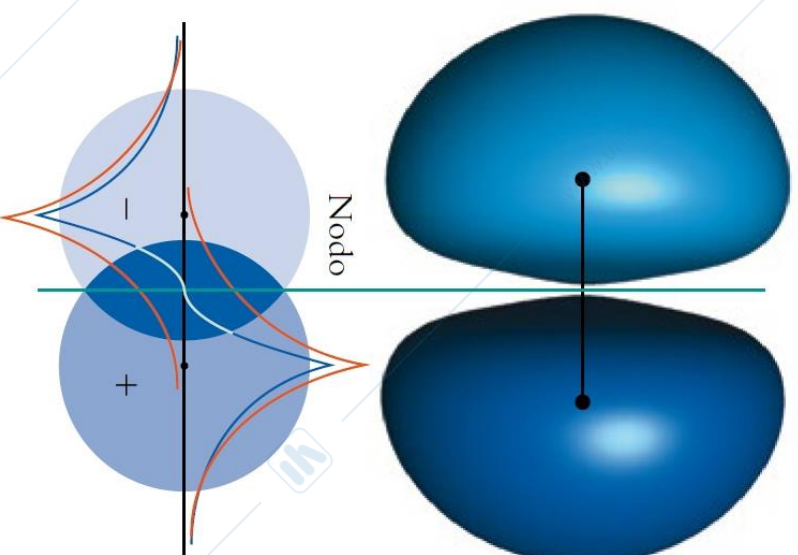
Orbitali 1s – Interferenza costruttiva delle funzioni onda.

$$\psi = \psi_{A1s} + \psi_{B1s}$$

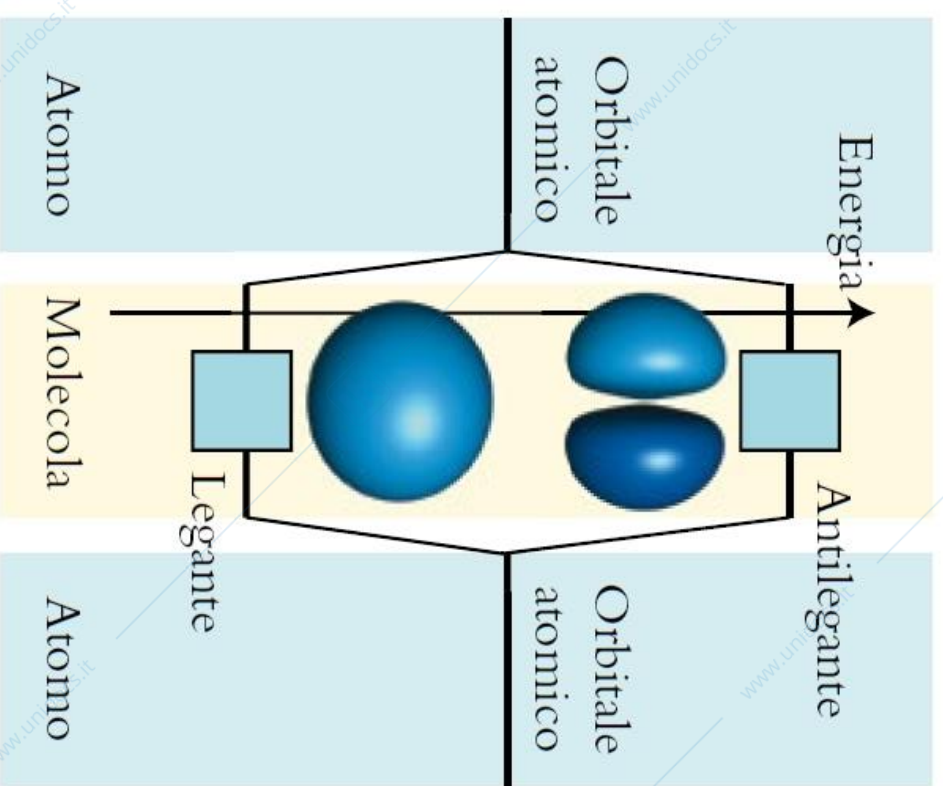


Orbitali 1s – Interferenza distruttiva delle funzioni onda e nodo

$$\psi = \psi_{A1s} - \psi_{B1s}$$



Livelli energetici di **orbitali molecolari leganti e non leganti** ottenibili da due orbitali s.



Molecola di idrogeno stabile

I due elettroni occupano l'orbitale molecolare a più bassa energia (legante).

