



# 1. I limiti della teoria di Lewis

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.



### 3. Il legame chimico secondo la meccanica quantistica

Dalla meccanica quantistica si sono sviluppate:

- la teoria del legame di valenza (VB) - 1930

proposta da Pauling e Slater, spiega la formazione del legame covalente a partire dagli orbitali atomici degli elettroni esterni appartenenti a due atomi vicini

- la teoria degli orbitali molecolari (MO) - 1933

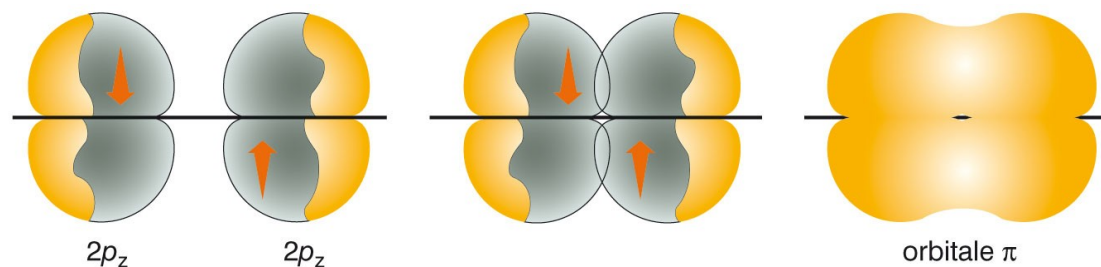
proposta da Mulliken e Hund, afferma che gli elettroni in una molecola sono associati a tutti i nuclei che essa contiene, indipendentemente dall'atomo di provenienza.

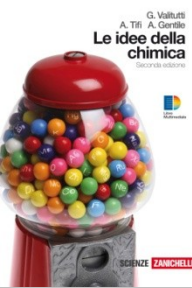




## 4. Gli orbitali molecolari $\sigma$ e $\pi$

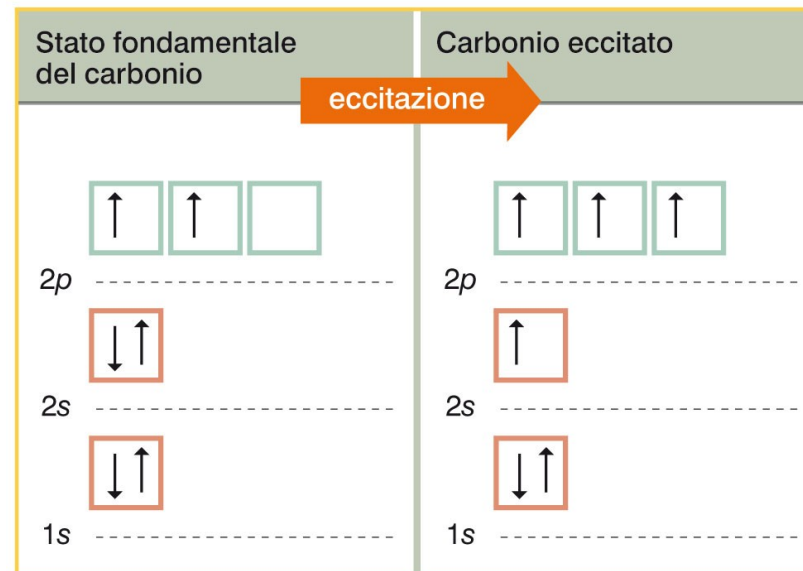
In un legame  $\pi$  la distribuzione elettronica è concentrata in due zone situate da parti opposte rispetto all'asse di legame e non è disposta simmetricamente intorno a esso.





## 5. L'ibridazione degli orbitali atomici

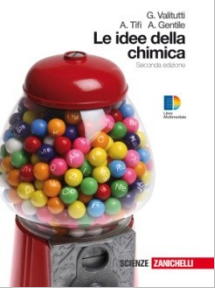
Gli elettroni possono passare da un orbitale a più bassa energia a un orbitale dello stesso livello  $n$  che presenti una maggiore energia e che non sia occupato. Il caso del carbonio.





## 5. L'ibridazione degli orbitali atomici

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


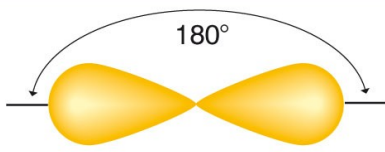
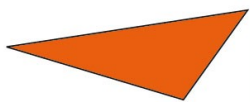
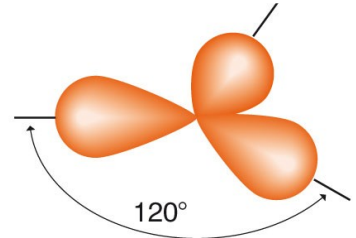
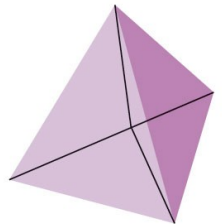
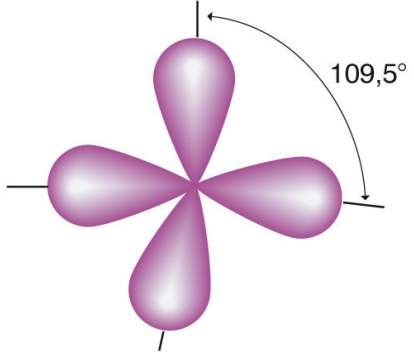


## 5. L'ibridazione degli orbitali atomici

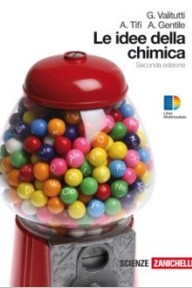
Gli **orbitali atomici ibridi** sono funzioni matematiche che derivano dalla somma algebrica di un certo numero di orbitali atomici aventi energia simile.



# 5. L'ibridazione degli orbitali atomici

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





## 5. L'ibridazione degli orbitali atomici

Per esempio, l'atomo di carbonio presenta diversi stati di ibridazione a seconda del tipo di molecola che va a formare.

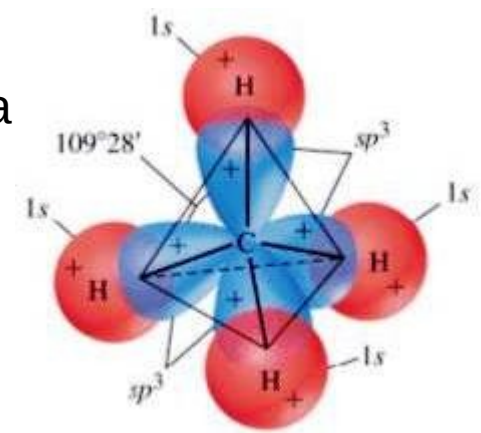
	Ibrido $sp^3$	Ibrido $sp^2$	Ibrido $sp$
geometria	<p>tetraedrica</p>	<p>triangolare planare</p>	<p>lineare</p>
natura dei legami	4 legami $\sigma$ 0 legami $\pi$	3 legami $\sigma$ 1 legame $\pi$	2 legami $\sigma$ 2 legami $\pi$
numero orbitali $p$ non ibridati	0	1	2
esempio	metano	etilene	acetilene

metano  $CH_4$ ; etilene  $CH_2=CH_2$ ; acetilene  $C_2H_2$

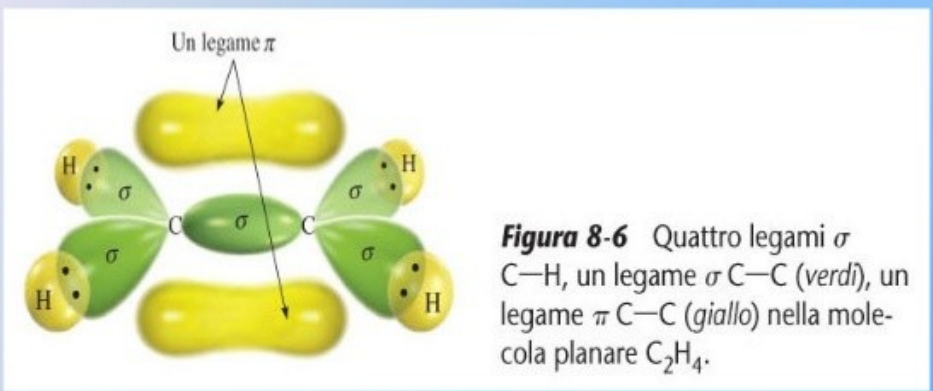
ibridazione  $sp^2$  anche per il gruppo carbonile (aldeidi e chetoni)

ibridazione  $sp$  anche per  $CO_2$

## Metano 4 legami sigma



Ibridazione  $sp^2$  dell'atomo di C. L'immagine mostra la molecola dell'alchene etilene (etene)  $C_2H_4$ .



## Acetilene 2 legami sigma 2 legami pi-greco

