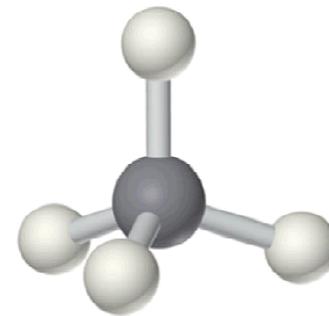


La forma delle molecole e gli orbitali "ibridi".

Se nel metano i quattro atomi di idrogeno fossero legati
Con 3 orbitali p ed un orbitale s, la geometria sarebbe:
 $90^\circ, 90^\circ, 90^\circ, 135^\circ$.

Il modello VESPR (valence electron-shell pair repulsion)
spiega che per avere la massima distanza tra coppie di e^- , gli
orbitali si ricombinano con una nuova geometria raggiungendo un
minimo energetico.

Metano (CH_4)

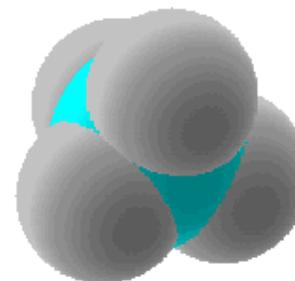
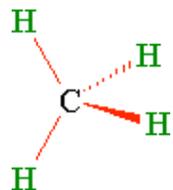


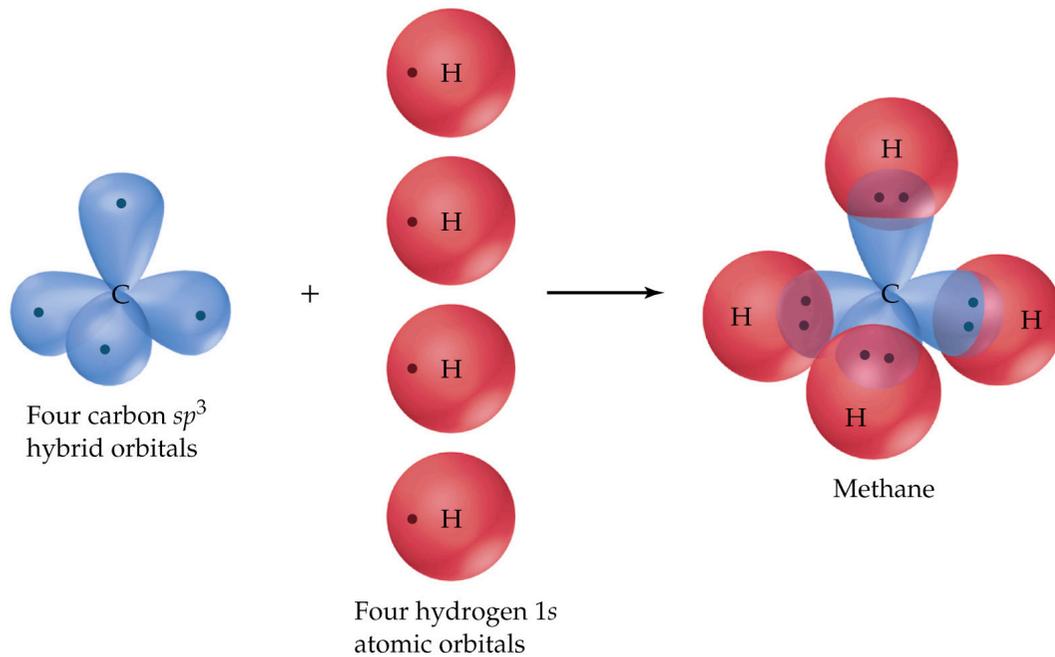
Methane, CH_4

Ricombinando 1 orbitale s e 3 orbitali p: sp^3

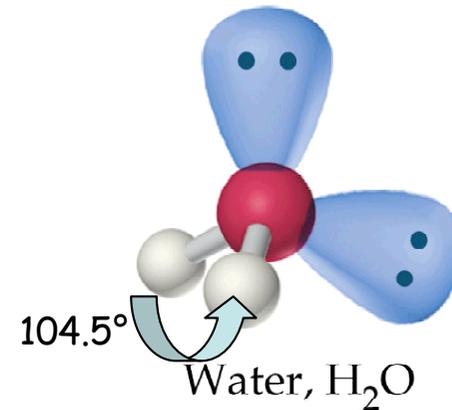
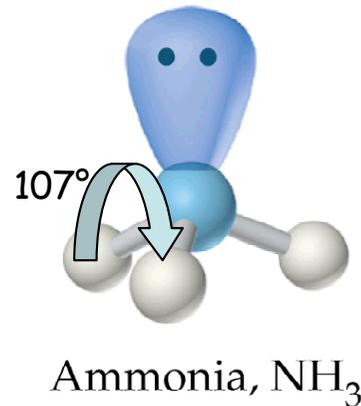
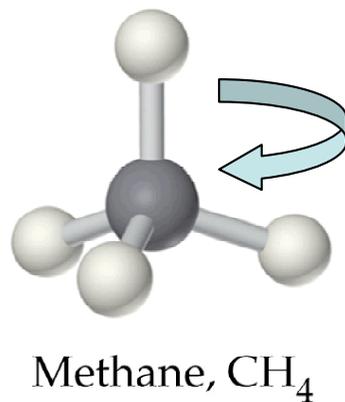


4 orbitali di uguale energia a geometria tetraedrica





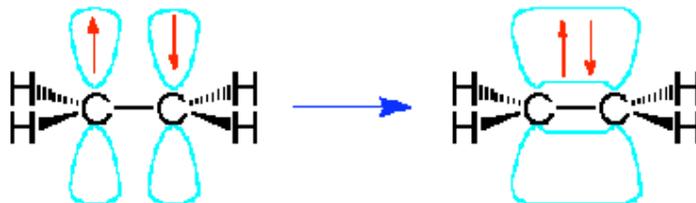
Gli orbitali che contengono un "lone pair" distorcono la geometria (e sono disponibili per legami dativi).



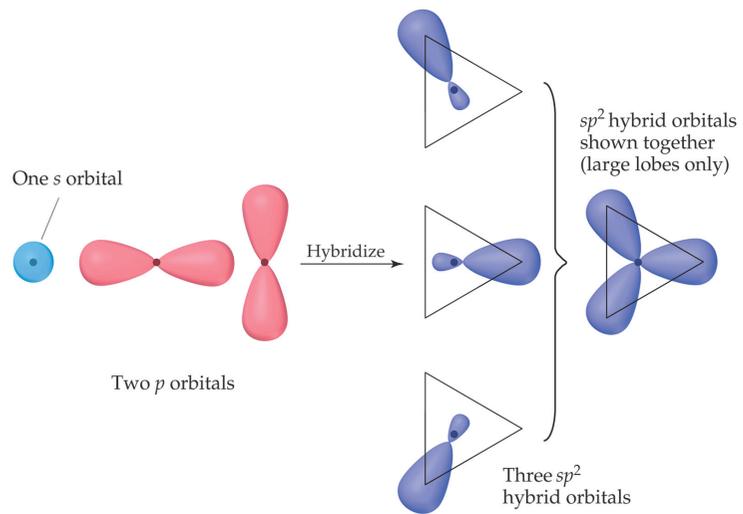
Ricombinando 1 orbitale s e 2 orbitali p: sp^2



3 orbitali di uguale energia a geometria trigonale + 1 orbitale p.

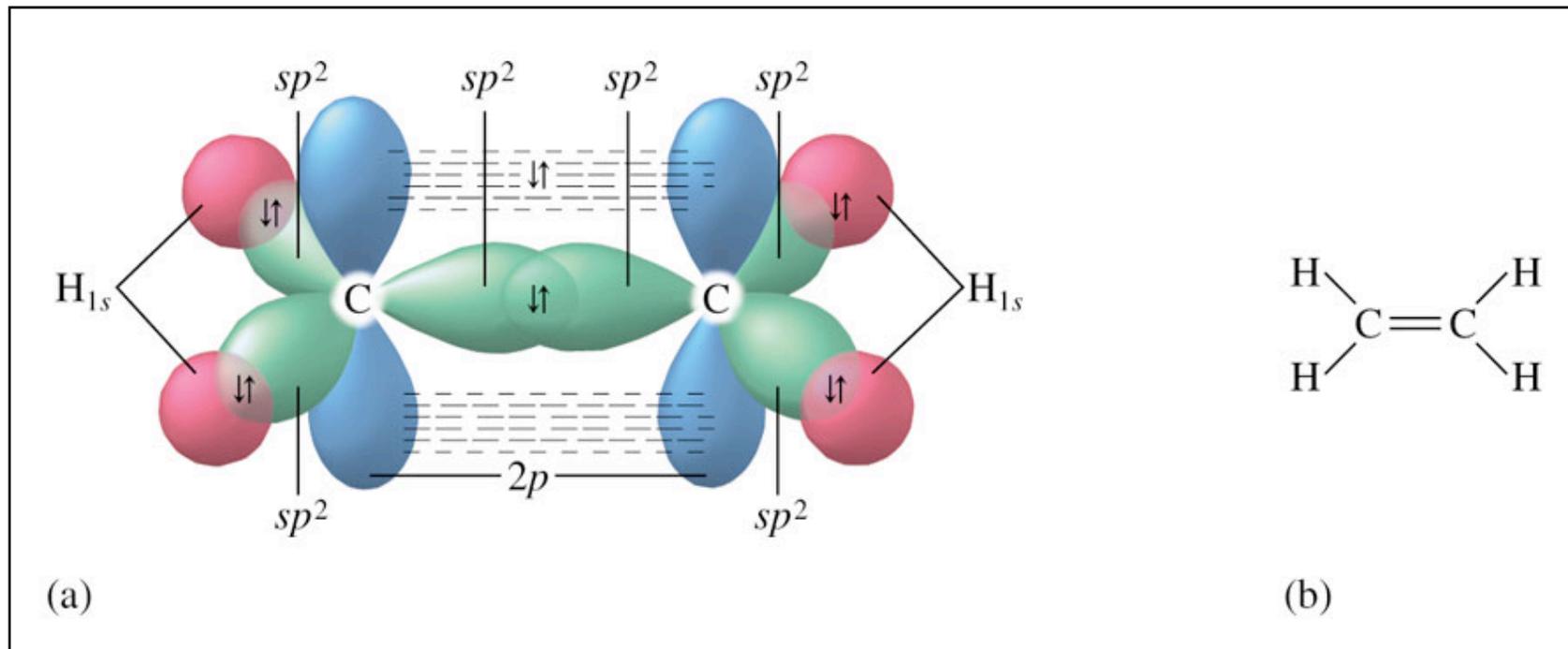


Esempio: etene



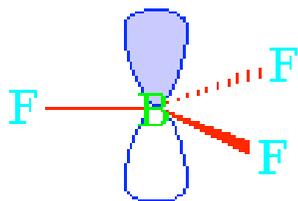
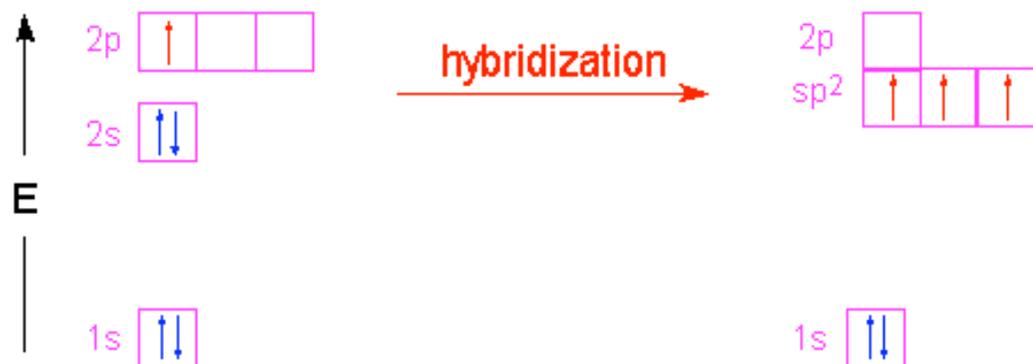
Sp^2 : geometria trigonale planare
(120°)

Copyright © 2006 Pearson Prentice Hall, Inc.

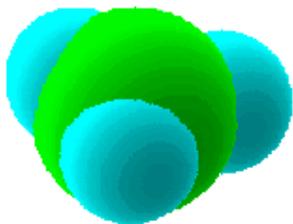


Il doppio legame non può ruotare

Nel BF_3 (apparente eccezione alla regola dell'ottetto):



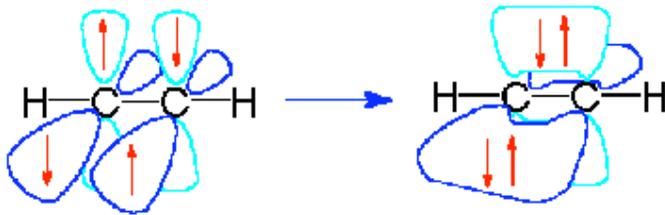
Rimane un orbitale vuoto p + 3 orbitali sp^2 .



Ricombinando 1 orbitale s e 1 orbitale p: sp

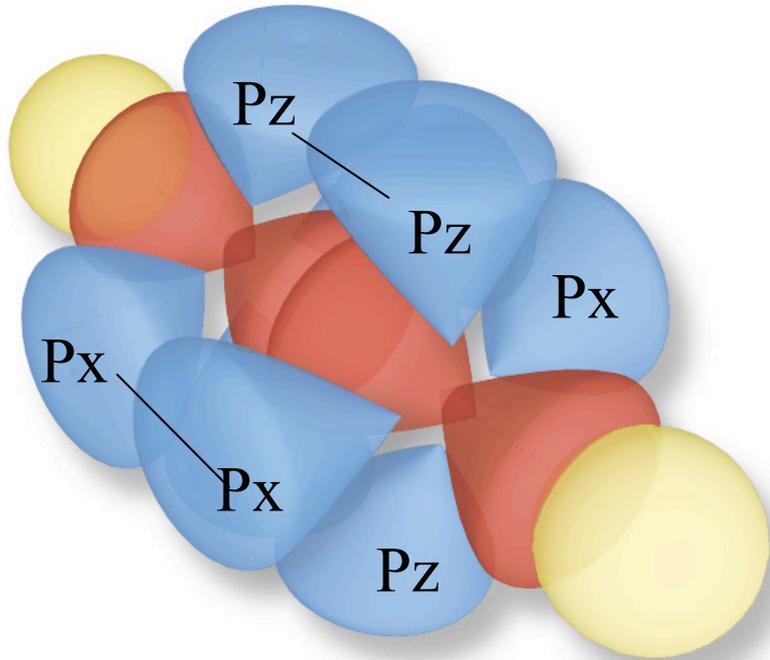


2 orbitali di uguale energia a geometria lineare + 2 orbitali p.



Esempio: etino

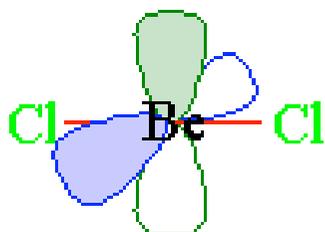
Sp: geometria lineare
(180°)



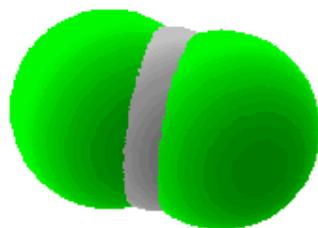
Etino

Il triplo legame non può ruotare

Nel BeCl_2 (apparente eccezione alla regola dell'ottetto):

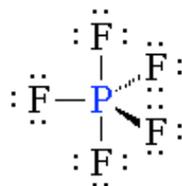
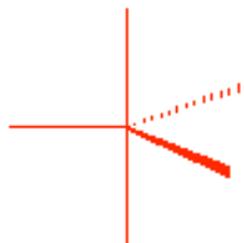


Rimangono 2 orbitali vuoti p + 2 orbitali sp.



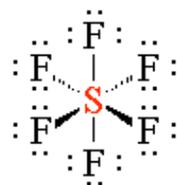
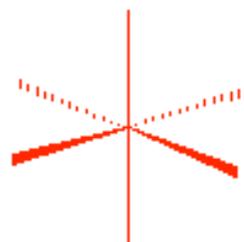
Altre eccezioni alla regola dell'ottetto: sp^3d e sp^3d^2

sp^3d

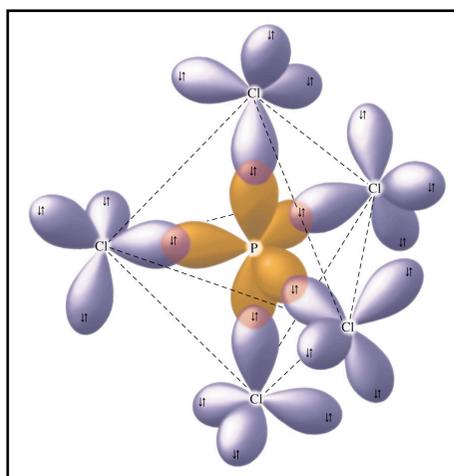


3 Angoli 120° + 2 ortogonali

sp^3d^2

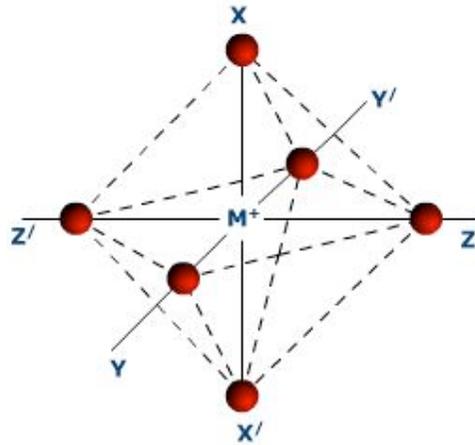


4 Angoli 90° + 2 ortogonali

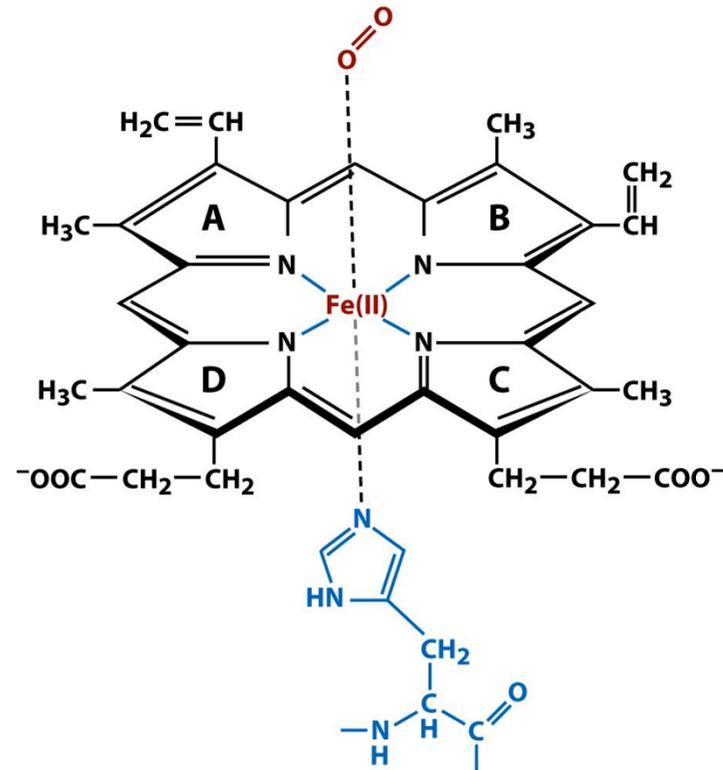


PCl_5

Coordinazione ottaedrica di metalli



L'eme nella mioglobina e nell'emoglobina.



Orbitali vuoti disponibili per legami di coordinazione: Metalli di Transizione

Ibridi di risonanza

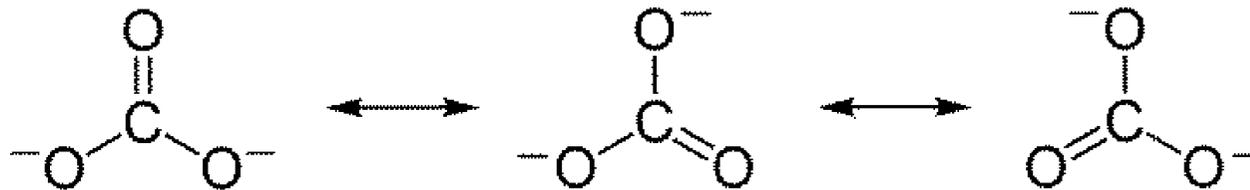


Lo ione carbonato: $\text{H}_2\text{CO}_3 \rightleftharpoons 2 \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-}$

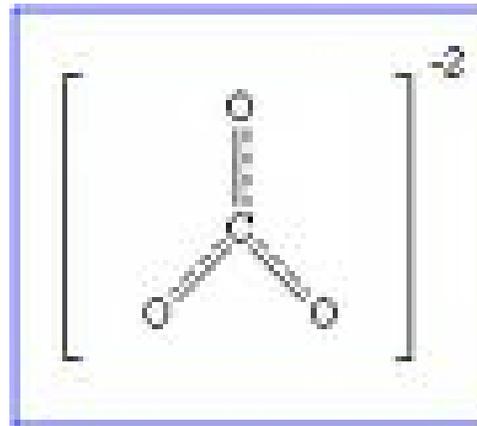
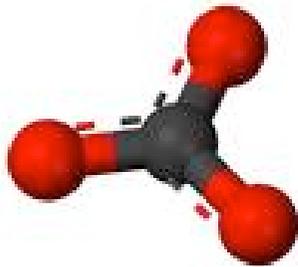
Dovrebbe avere un legame doppio e due singoli, ma

- hanno lunghezza uguale
- inoltre lo ione è più stabile di quanto dovrebbe.

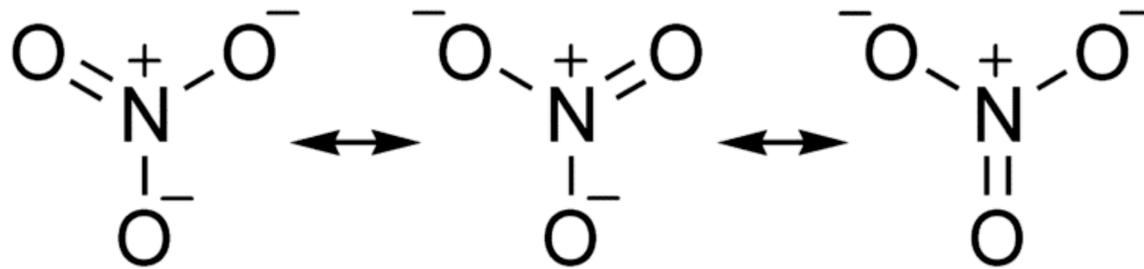
Sono presenti strutture di risonanza.



Ovvero la struttura non è rappresentabile con delle strutture di Lewis, ma gli elettroni del **doppio legame** sono **delocalizzati** sulla molecola.



Questo avviene anche in altri casi, es.:



Ione nitrato