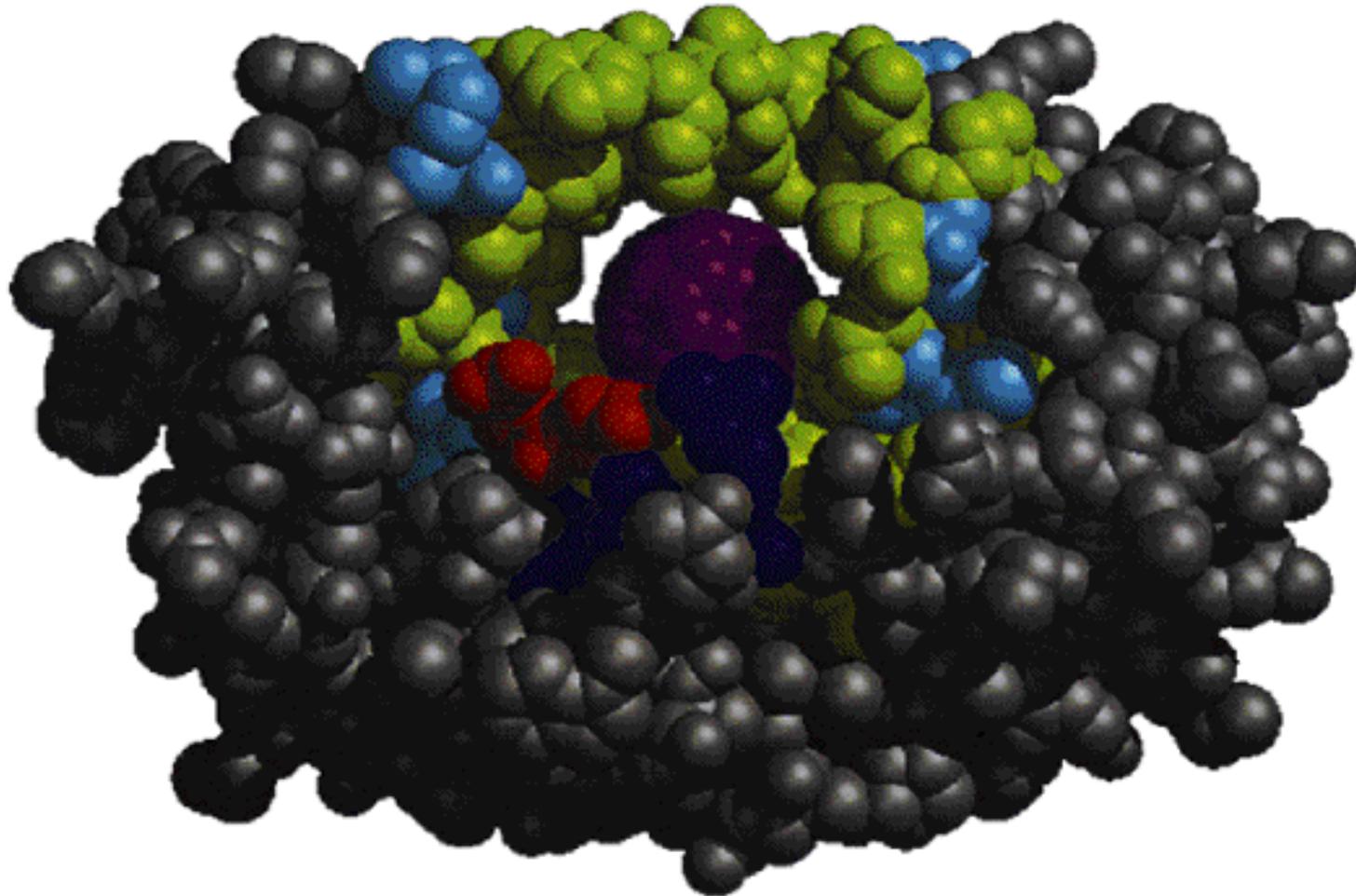


**Il legame chimico II:  
la geometria molecolare  
e l'ibridizzazione  
degli orbitali atomici**

*Capitolo 10*

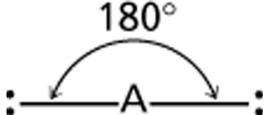


## Legame tra un derivato del Buckyball e il sito dell'HIV-Protease



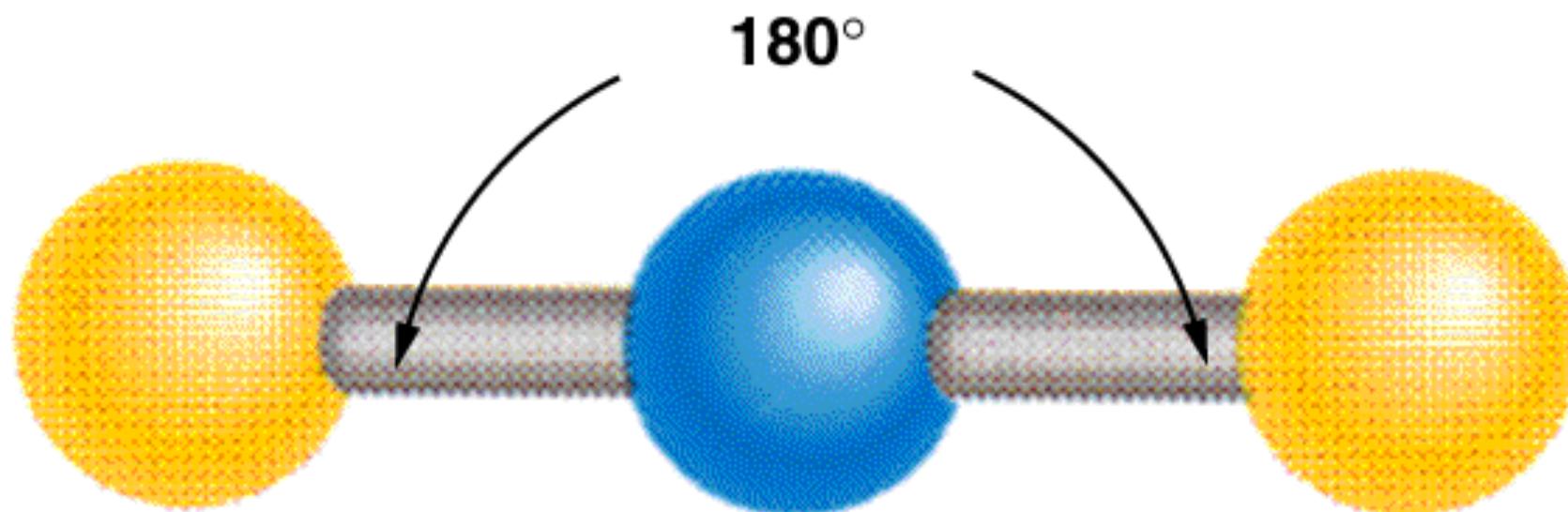
# ***Repulsione delle coppie di elettroni nel livello di valenza: modello (VSEPR)***

Prevede la geometria della molecole basandosi sulle repulsioni elettrostatiche tra coppie di elettroni (leganti e non leganti).

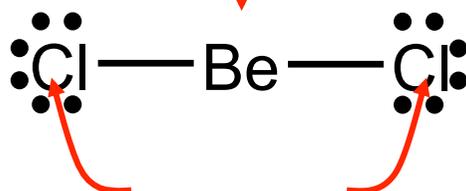
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria molecolare</u>
$AB_2$	2	0	lineare 	lineare 

# Beryllium Chloride

Cloruro di Berillio



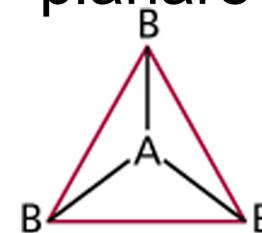
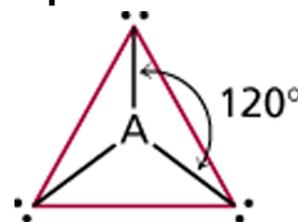
0 coppie solitarie sull' atomo centrale



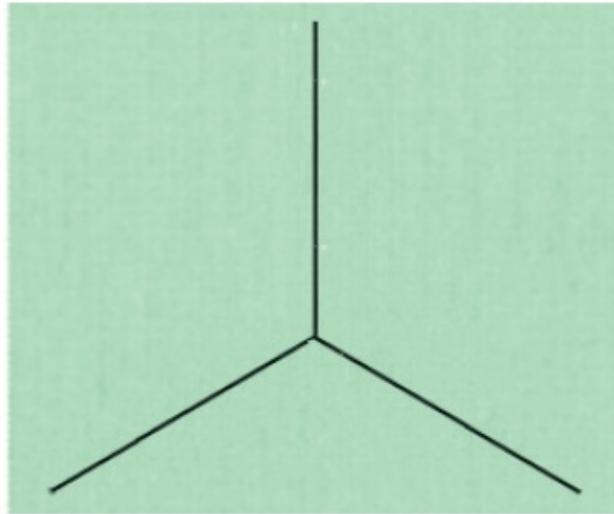
2 atomi legati all' atomo centrale

# VSEPR

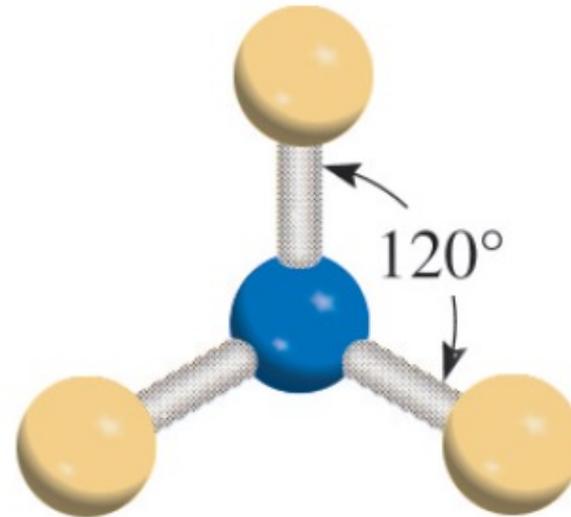
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
$AB_2$	2	0	lineare	lineare
$AB_3$	3	0	trigonale planare	trigonale planare



# Trifluoruro di Boro

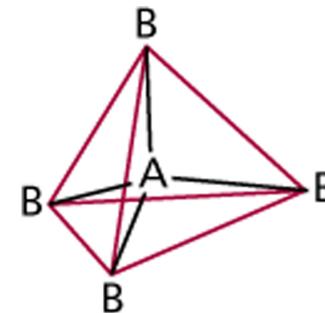
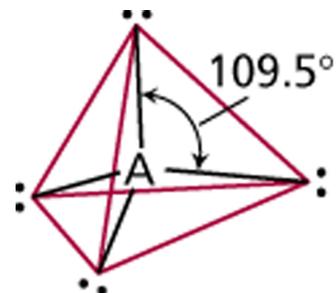


Planare



# VSEPR

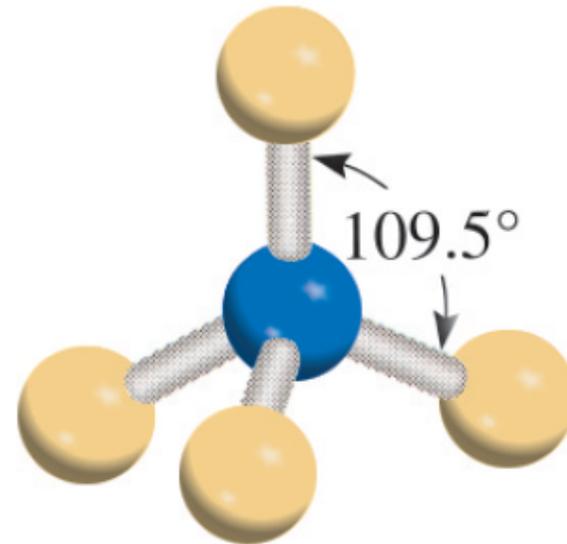
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
$AB_2$	2	0	lineare	lineare
$AB_3$	3	0	trigonale planare	trigonale planare
$AB_4$	4	0	tetraedrica	tetraedrica



# Metano

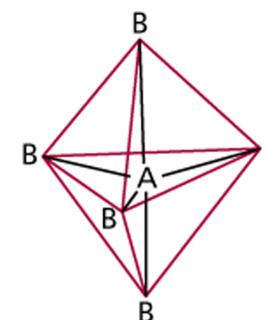
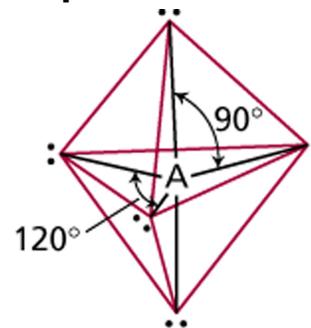


Tetraedrico

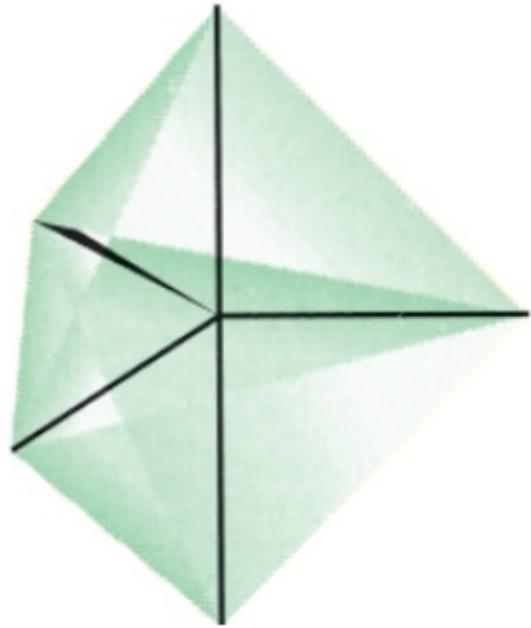


# VSEPR

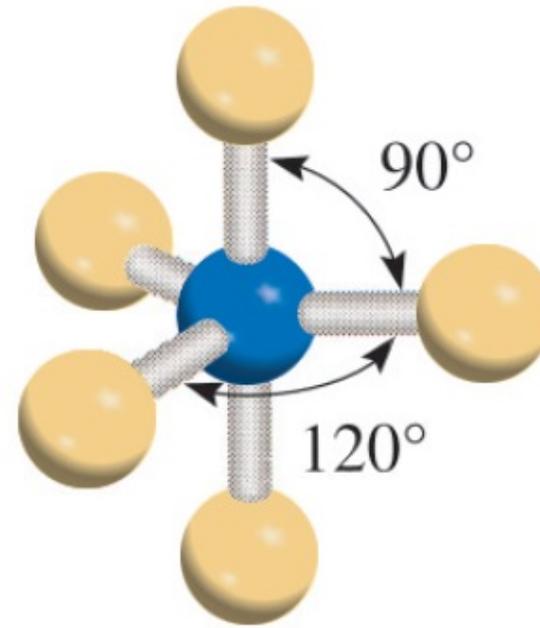
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
$AB_2$	2	0	lineare	lineare
$AB_3$	3	0	trigonale planare	trigonale planare
$AB_4$	4	0	tetraedrica	Tetraedrica
$AB_5$	5	0	trigonale bipiramidale	trigonale bipiramidale



# Pentacloruro di Fosforo

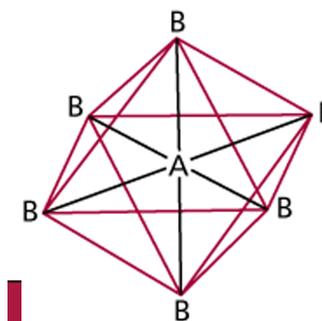
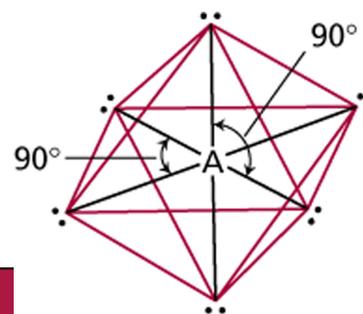


Bipiramide  
trigonale

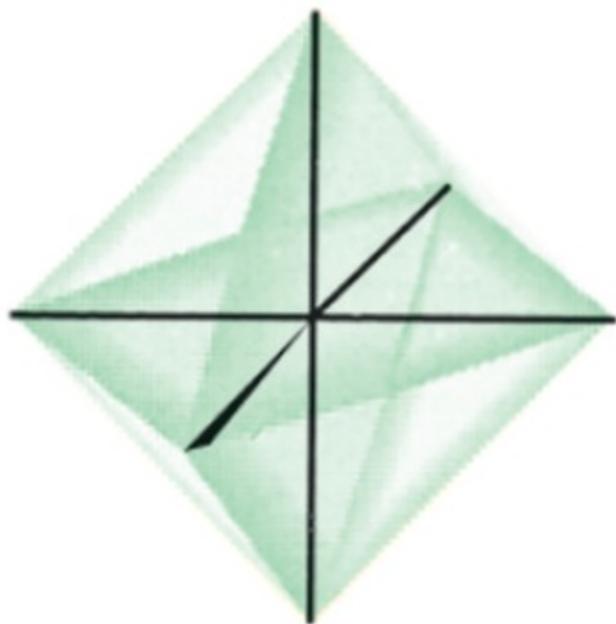


# VSEPR

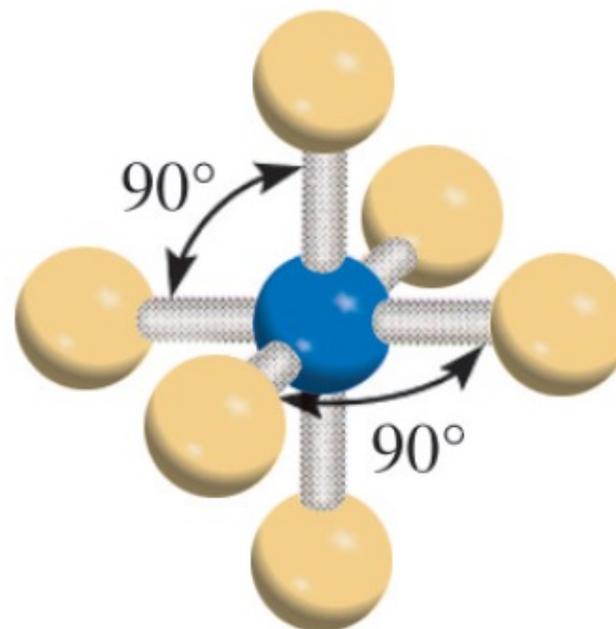
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
$AB_2$	2	0	lineare	lineare
$AB_3$	3	0	trigonale planare	trigonale planare
$AB_4$	4	0	tetraedrica	tetraedrica
$AB_5$	5	0	trigonale bipiramidale	trigonale bipiramidale
$AB_6$	6	0	ottaedrica	ottaedrica



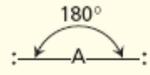
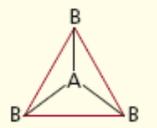
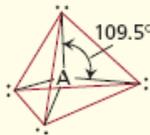
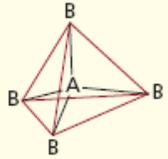
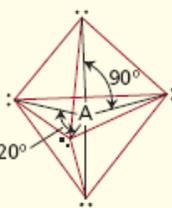
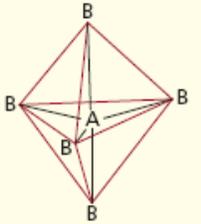
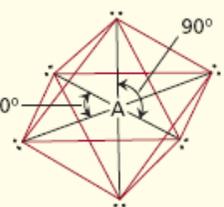
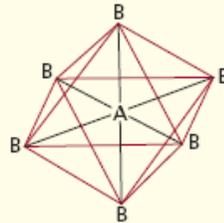
## Esafluoruro di Zolfo



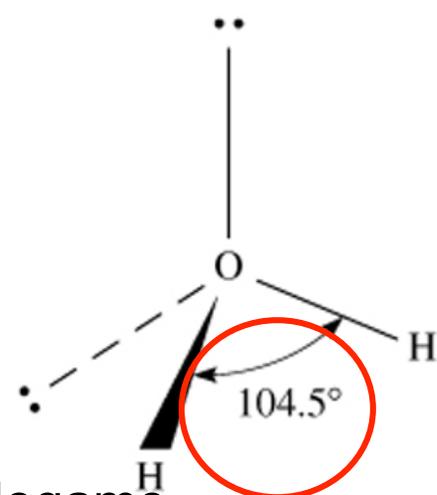
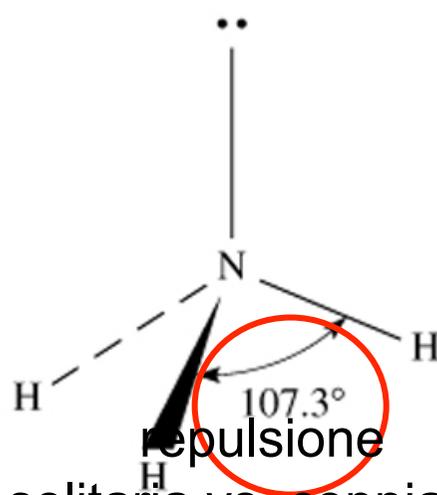
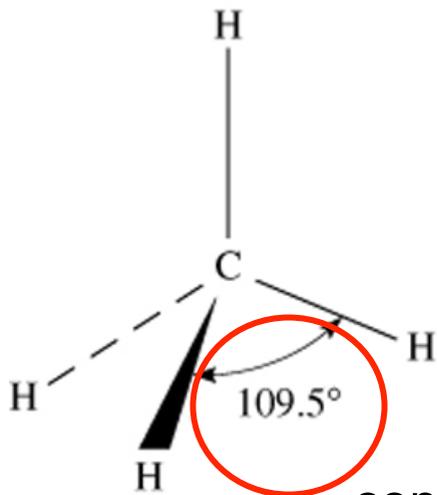
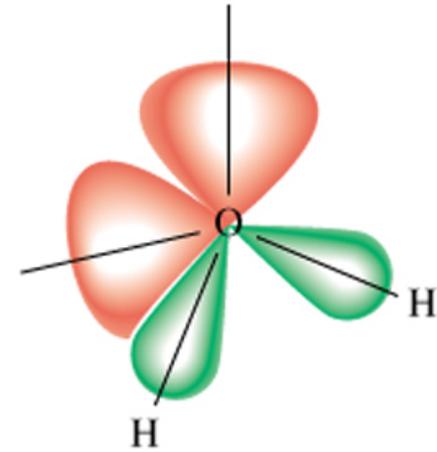
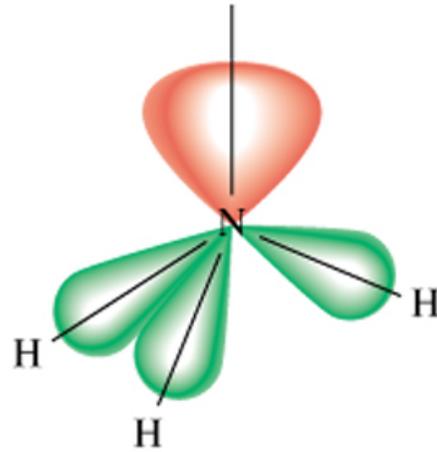
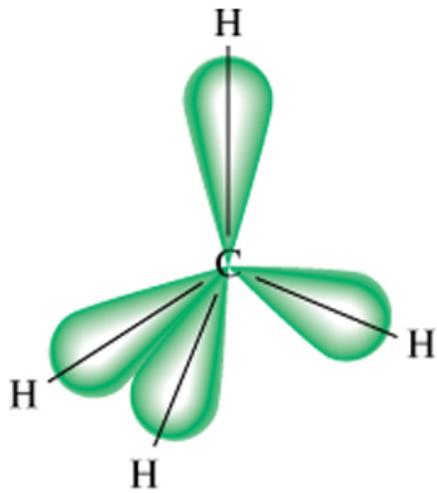
Ottaedro



**TABELLA 10.1** Disposizione delle coppie di elettroni attorno all'atomo centrale (A) in una molecola e geometria di alcune semplici molecole e ioni in cui l'atomo centrale è privo di coppie solitarie

Numero di coppie di elettroni	Disposizione delle coppie di elettroni*	Geometria molecolare*	Esempi
2	 <p>Lineare</p>	$B-A-B$ Lineare	$BeCl_2, HgCl_2$
3	 <p>Trigonale planare</p>	 <p>Trigonale planare</p>	$BF_3$
4	 <p>Tetraedrica</p>	 <p>Tetraedrica</p>	$CH_4, NH_4^+$
5	 <p>Trigonale bipyramidale</p>	 <p>Trigonale bipyramidale</p>	$PCl_5$
6	 <p>Ottaedrica</p>	 <p>Ottaedrica</p>	$SF_6$

\* Le linee colorate sono usate solo per mostrare le forme geometriche; non rappresentano legami.



coppia solitaria vs. coppia di legame

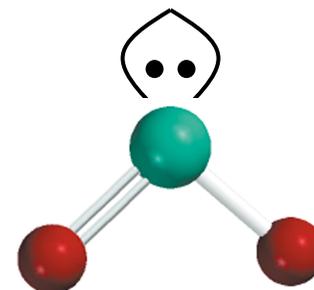
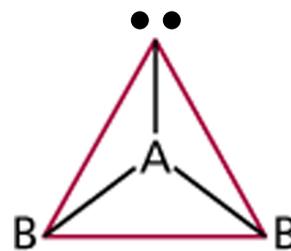
repulsione >  
coppia solitaria vs. coppia solitaria

>

repulsione >  
coppia di legame vs.  
coppia di legame

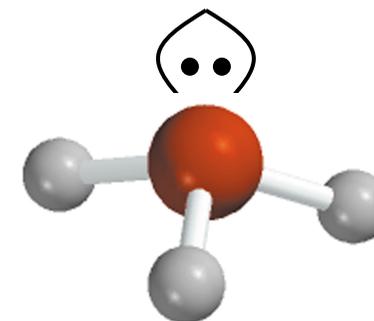
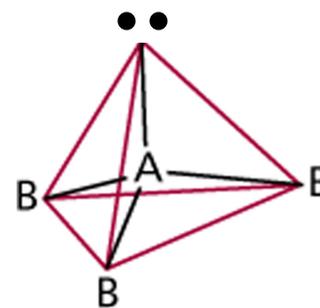
# VSEPR

<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
$AB_3$	3	0	trigonale planare	trigonale planare
$AB_2E$	2	1	trigonale planare	angolare



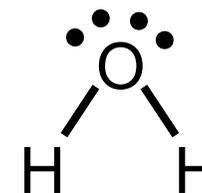
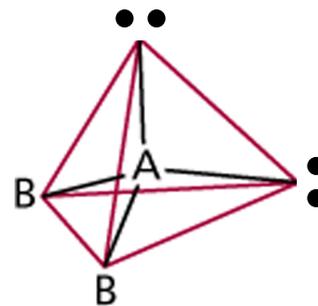
# VSEPR

<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
$AB_4$	4	0	tetraedrica	tetraedrica
$AB_3E$	3	1	tetraedrica	trigonale piramidale



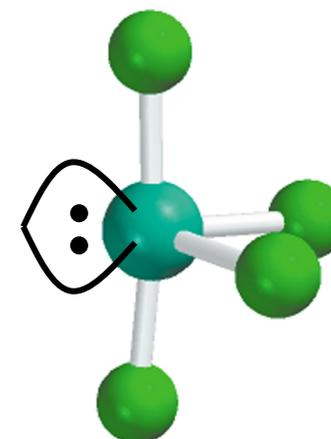
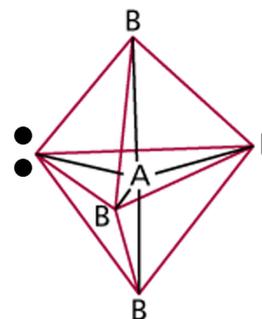
# VSEPR

<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
$AB_4$	4	0	tetraedrica	tetraedrica
$AB_3E$	3	1	tetraedrica	trigonale pyramidale
$AB_2E_2$	2	2	tetraedrica	angolare



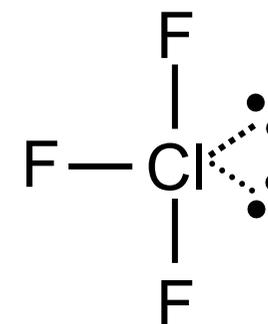
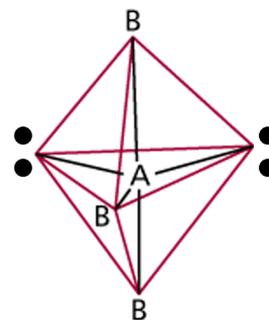
# VSEPR

<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
$AB_5$	5	0	trigonale bipyramidale	trigonale bipyramidale
$AB_4E$	4	1	trigonale bipyramidale	<b>tetraedro distorto</b>



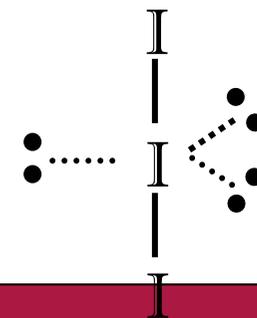
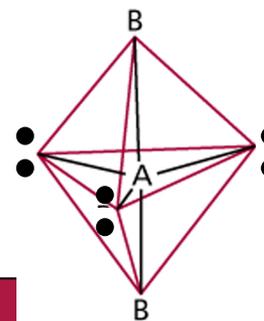
# VSEPR

<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
$AB_5$	5	0	trigonale bipiramidale	trigonale bipiramidale
$AB_4E$	4	1	trigonale bipiramidale	tetraedro distorto
$AB_3E_2$	3	2	trigonale bipiramidale	Forma a T



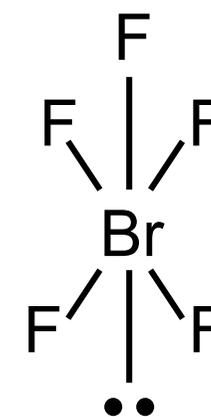
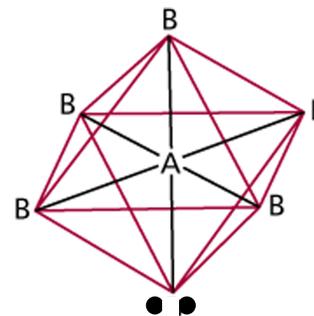
# VSEPR

<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
$AB_5$	5	0	trigonale bipiramidale	trigonale bipiramidale
$AB_4E$	4	1	trigonale bipiramidale	tetraedro distorto
$AB_3E_2$	3	2	trigonale bipiramidale	Forma a T
$AB_2E_3$	2	3	trigonale bipiramidale	<b>lineare</b>



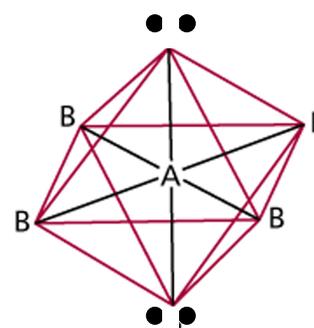
# VSEPR

<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
$AB_6$	6	0	ottaedrica	ottaedrica
$AB_5E$	5	1	ottaedrica	quadrato piramidale

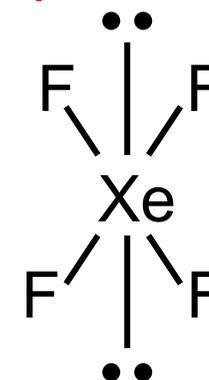


# VSEPR

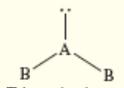
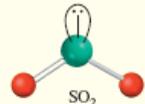
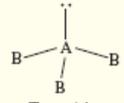
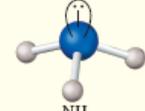
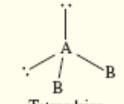
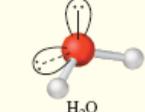
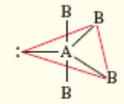
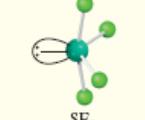
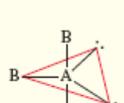
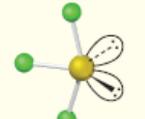
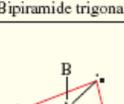
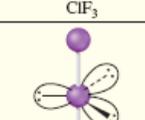
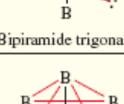
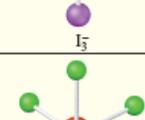
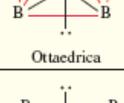
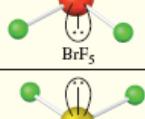
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all' atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull' atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
$AB_6$	6	0	ottaedrica	ottaedrica
$AB_5E$	5	1	ottaedrica	quadrato piramidale
$AB_4E_2$	4	2	ottaedrica	quadrato planare



quadrato  
planare



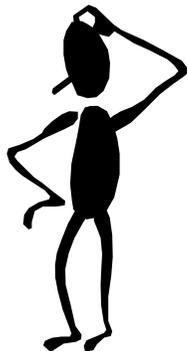
**TABELLA 10.2 Geometria di molecole e ioni semplici in cui l'atomo centrale presenta una o più coppie solitarie**

Classe di molecola	Numero totale di coppie di elettroni	Numero di coppie di legame	Numero di coppie solitarie	Disposizione delle coppie di elettroni*	Geometria	Esempi
$AB_2E$	3	2	1	 <p>Trigonale planare</p>	Angolare	 <p><math>SO_2</math></p>
$AB_3E$	4	3	1	 <p>Tetraedrica</p>	Trigonale piramidale	 <p><math>NH_3</math></p>
$AB_2E_2$	4	2	2	 <p>Tetraedrica</p>	Angolare	 <p><math>H_2O</math></p>
$AB_4E$	5	4	1	 <p>Bipiramide trigonale</p>	Tetraedro distorto (o cavalletto)	 <p><math>SF_4</math></p>
$AB_3E_2$	5	3	2	 <p>Bipiramide trigonale</p>	A forma di T	 <p><math>ClF_3</math></p>
$AB_2E_3$	5	2	3	 <p>Bipiramide trigonale</p>	Lineare	 <p><math>I_3^-</math></p>
$AB_5E$	6	5	1	 <p>Ottaedrica</p>	Piramidale quadrata	 <p><math>BrF_5</math></p>
$AB_4E_2$	6	4	2	 <p>Ottaedrica</p>	Quadrato planare	 <p><math>XeF_4</math></p>

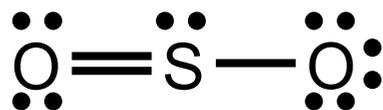
\* Le linee colorate sono utilizzate per mostrare la forma d'insieme della molecola ma non i legami.

# Determinare la Geometria Molecolare

1. Scrivi la struttura di Lewis della molecola.
2. Conta il numero di coppie solitarie sull'atomo centrale e il numero di atomi legati all'atomo centrale.
3. Usa il modello VSEPR per determinare la geometria della molecola

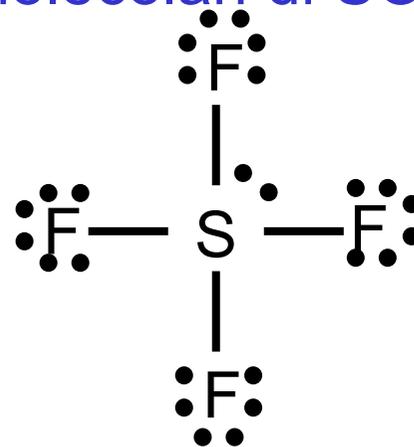


Quali sono le geometrie molecolari di  $\text{SO}_2$  e  $\text{SF}_4$ ?



$\text{AB}_2\text{E}$

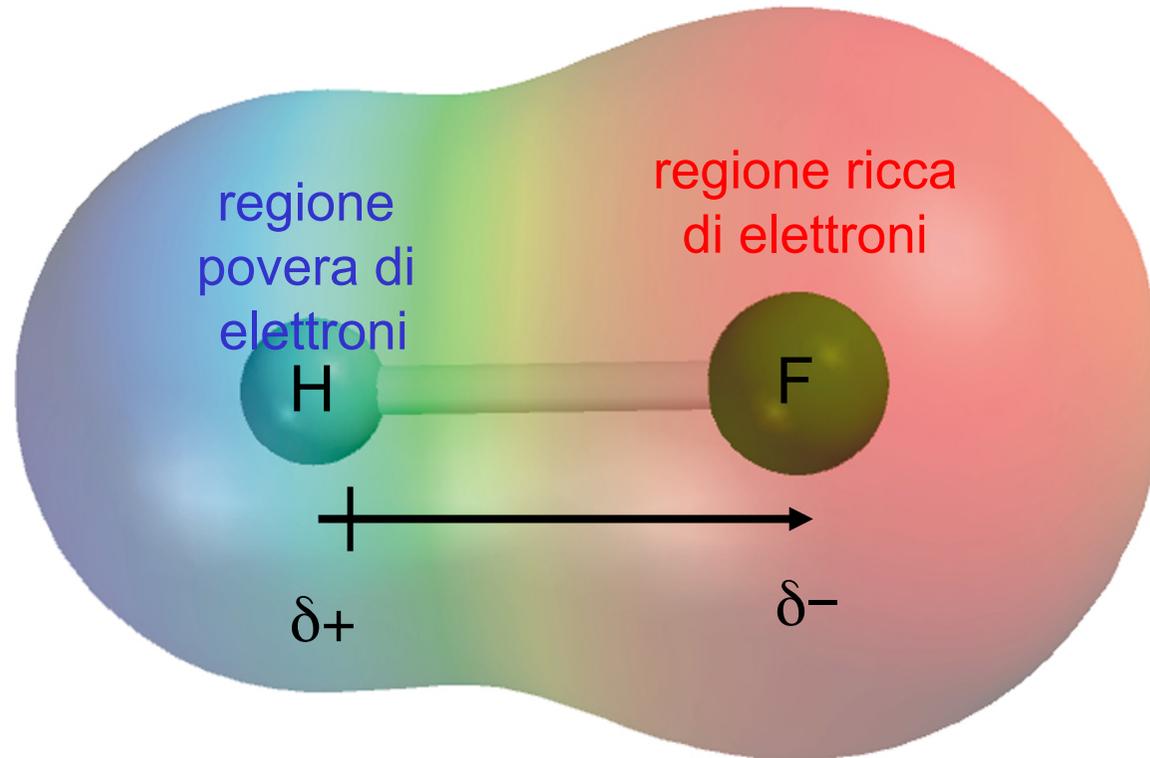
Angolare



$\text{AB}_4\text{E}$

tetraedro  
distorto

# Momenti di dipolo e molecole polari



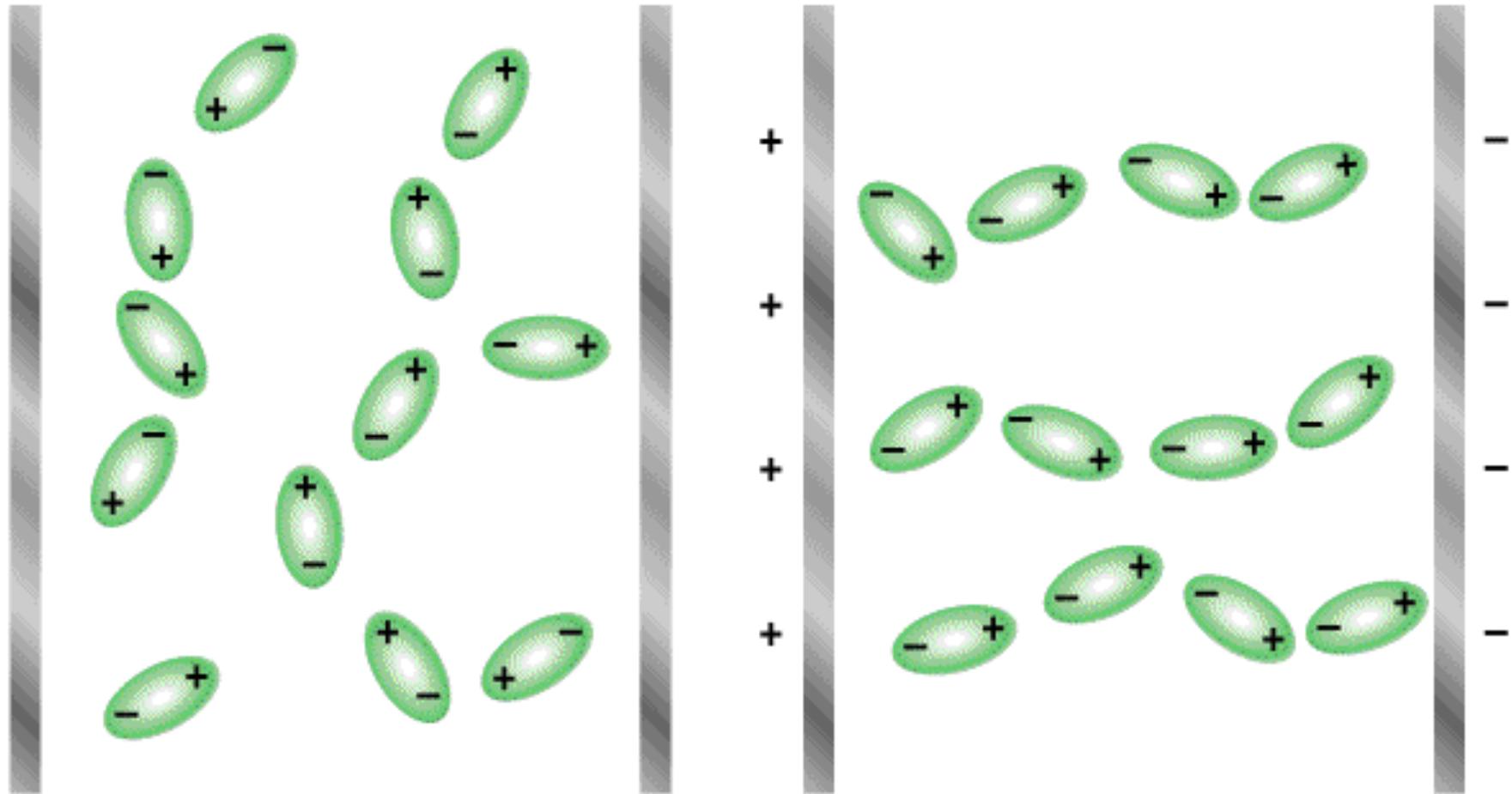
$$\mu = Q \times r$$

Q è la carica

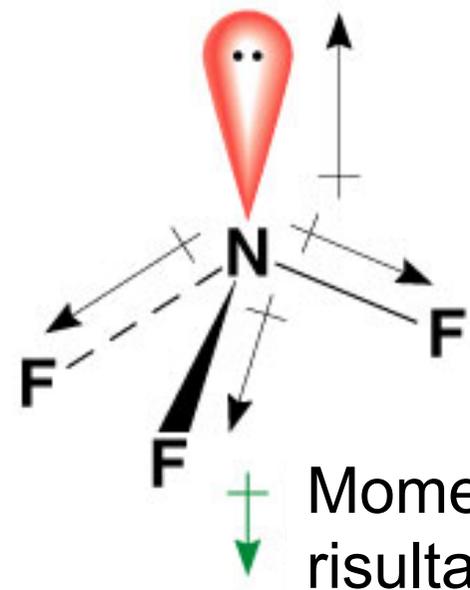
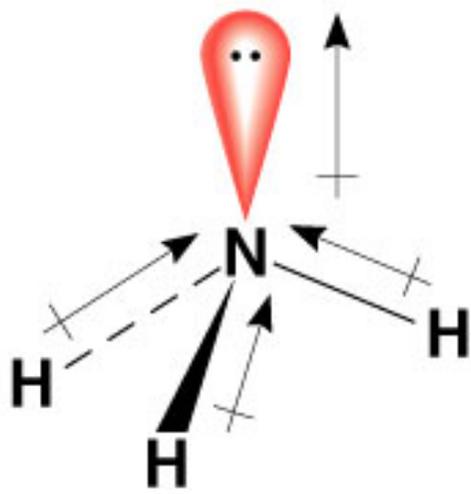
r è la distanza tra le cariche

$$1 \text{ D} = 3.36 \times 10^{-30} \text{ C m}$$

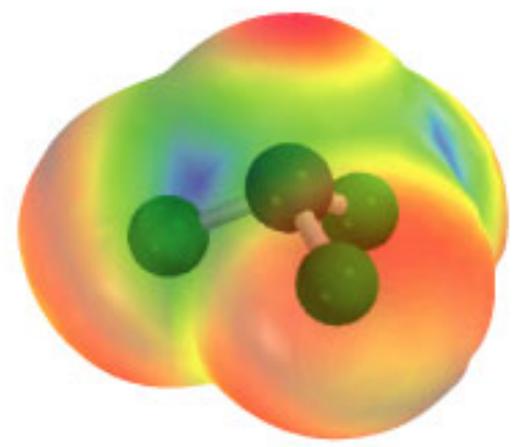
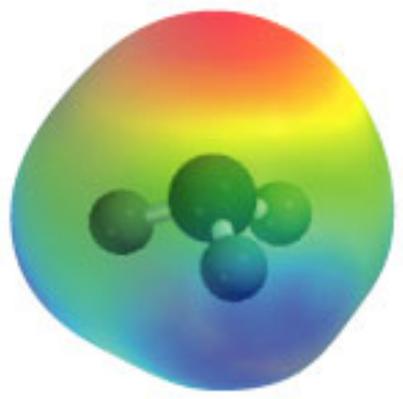
# Comportamento delle molecole polari



Momento di dipolo  
risultante = 1.46 D

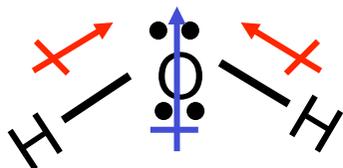


Momento di dipolo  
risultante = 0.24 D

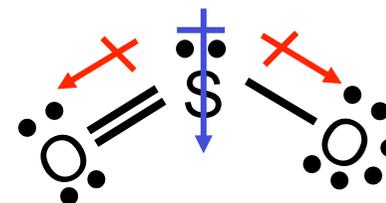




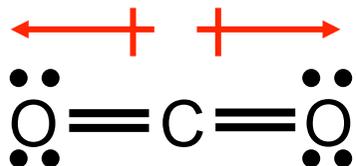
Quali delle seguenti molecole ha un momento dipolare?  
 $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_2$ , e  $\text{CH}_4$



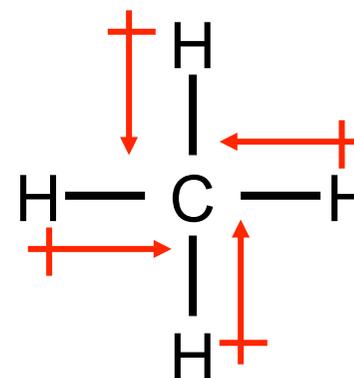
momento di dipolo  
molecola polare



momento di dipolo  
molecola polare



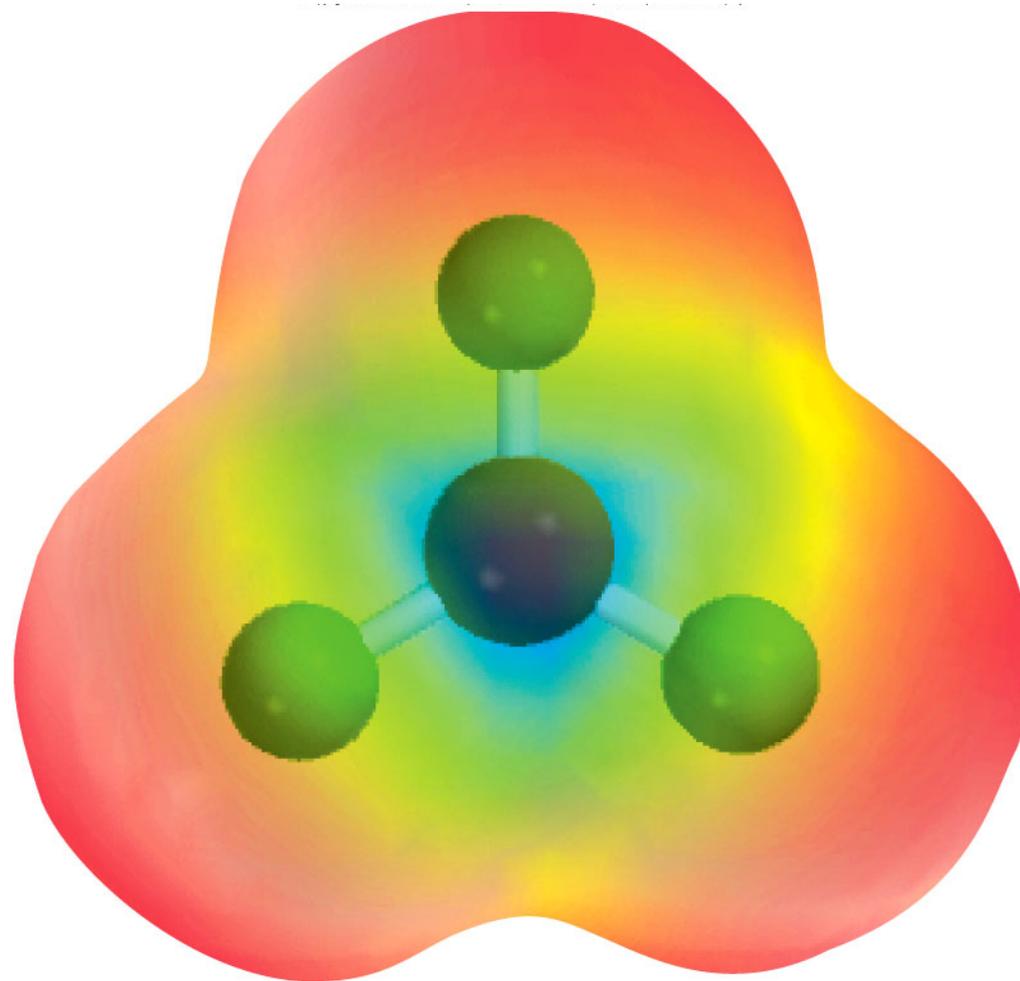
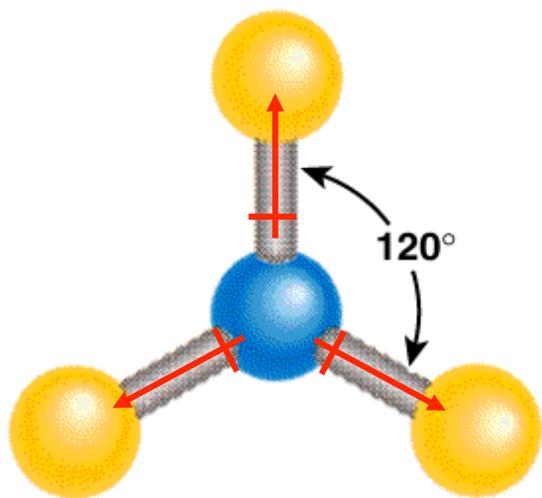
nessun momento  
di dipolo  
molecola apolare

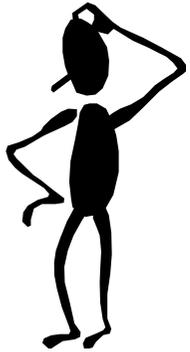


nessun momento  
di dipolo  
molecola apolare

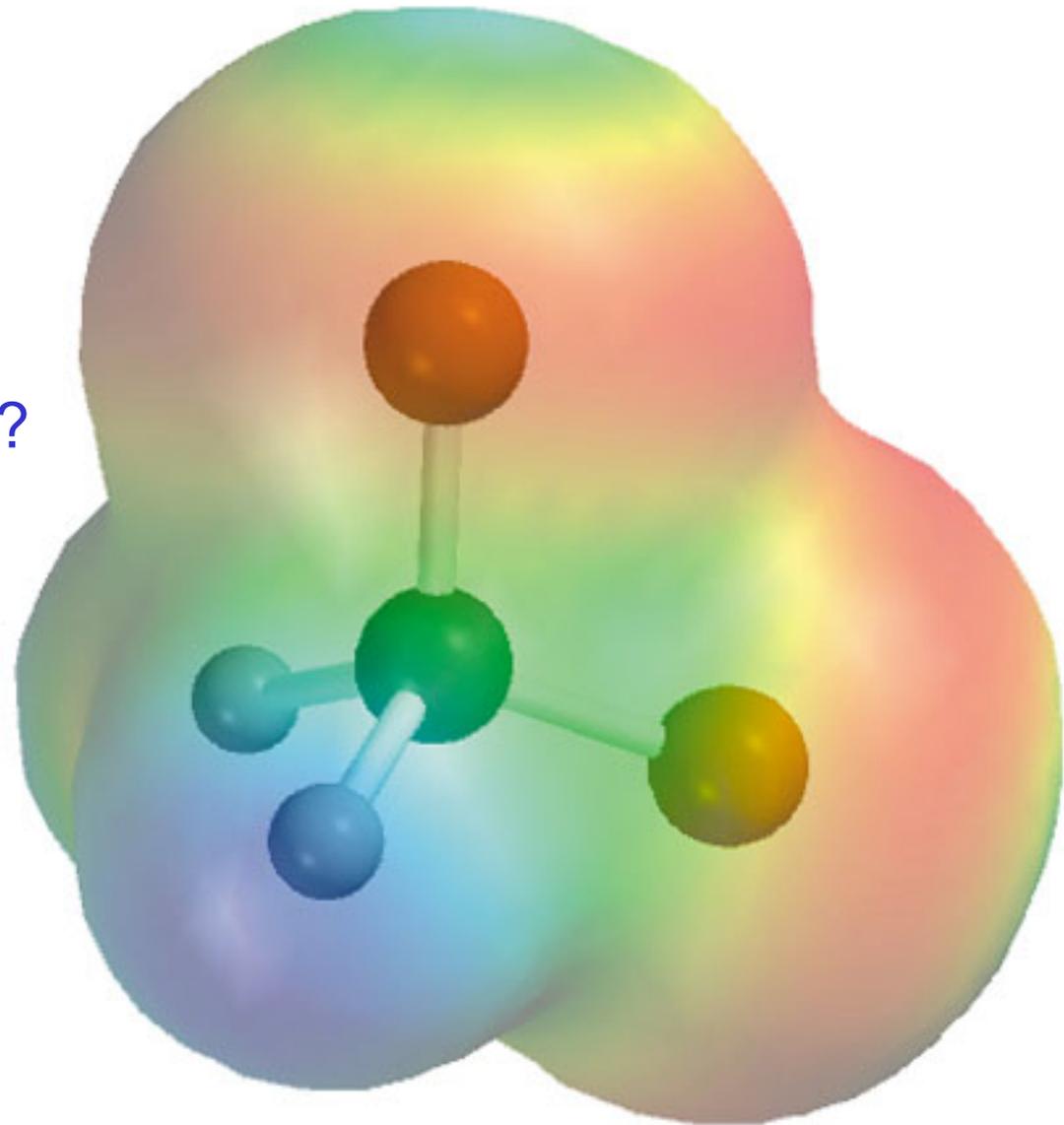


Il  $\text{BF}_3$  ha un momento di dipolo?





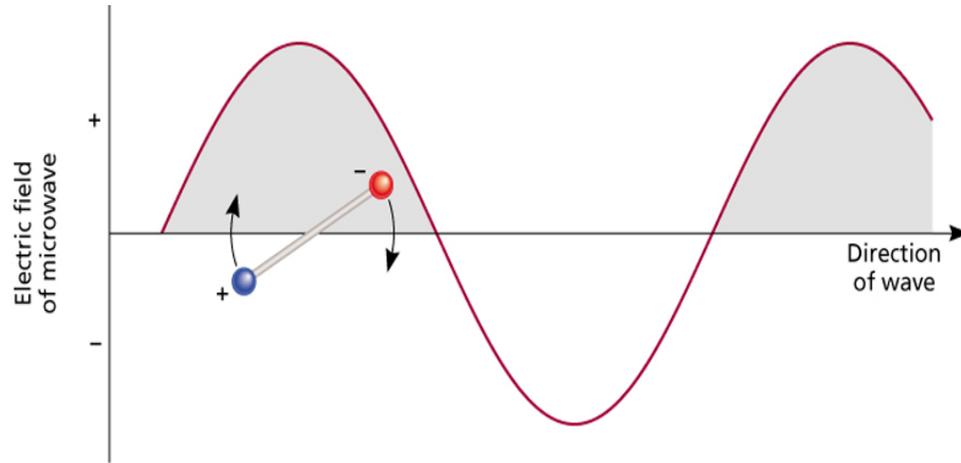
Il  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  ha un momento di dipolo?



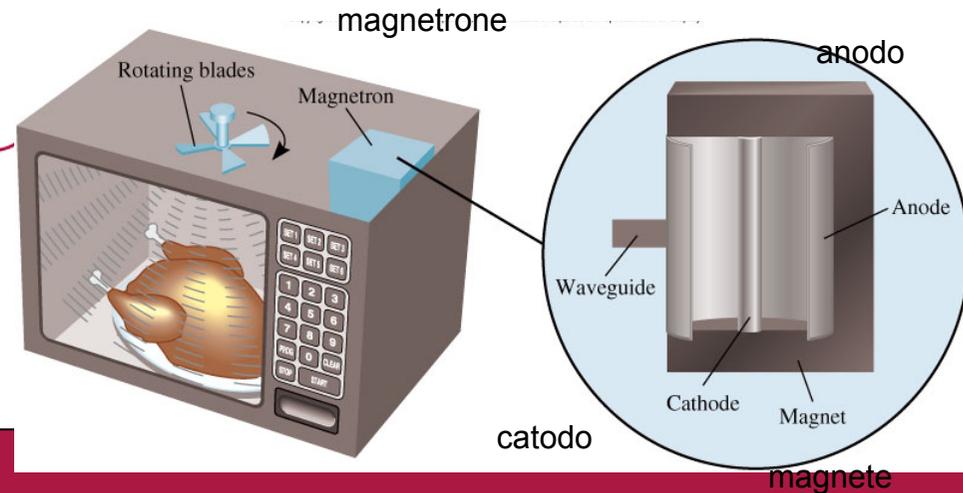
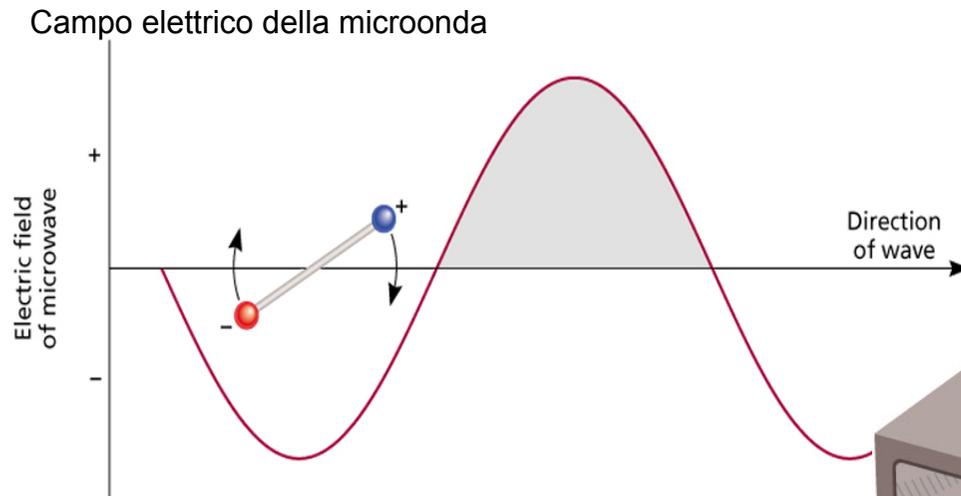
**TABELLA 10.3****Momenti di dipolo di alcune molecole polari**

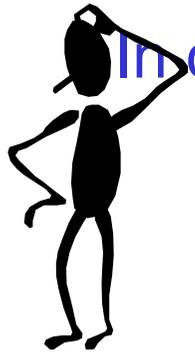
Molecola	Geometria	Momento di dipolo (D)
HF	Lineare	1.92
HCl	Lineare	1.08
HBr	Lineare	0.78
HI	Lineare	0.38
H <sub>2</sub> O	Angolare	1.87
H <sub>2</sub> S	Angolare	1.10
NH <sub>3</sub>	Trigonale piramidale	1.46
SO <sub>2</sub>	Angolare	1.60

# Chimica in Azione: Forni a microonde



direzione dell'onda





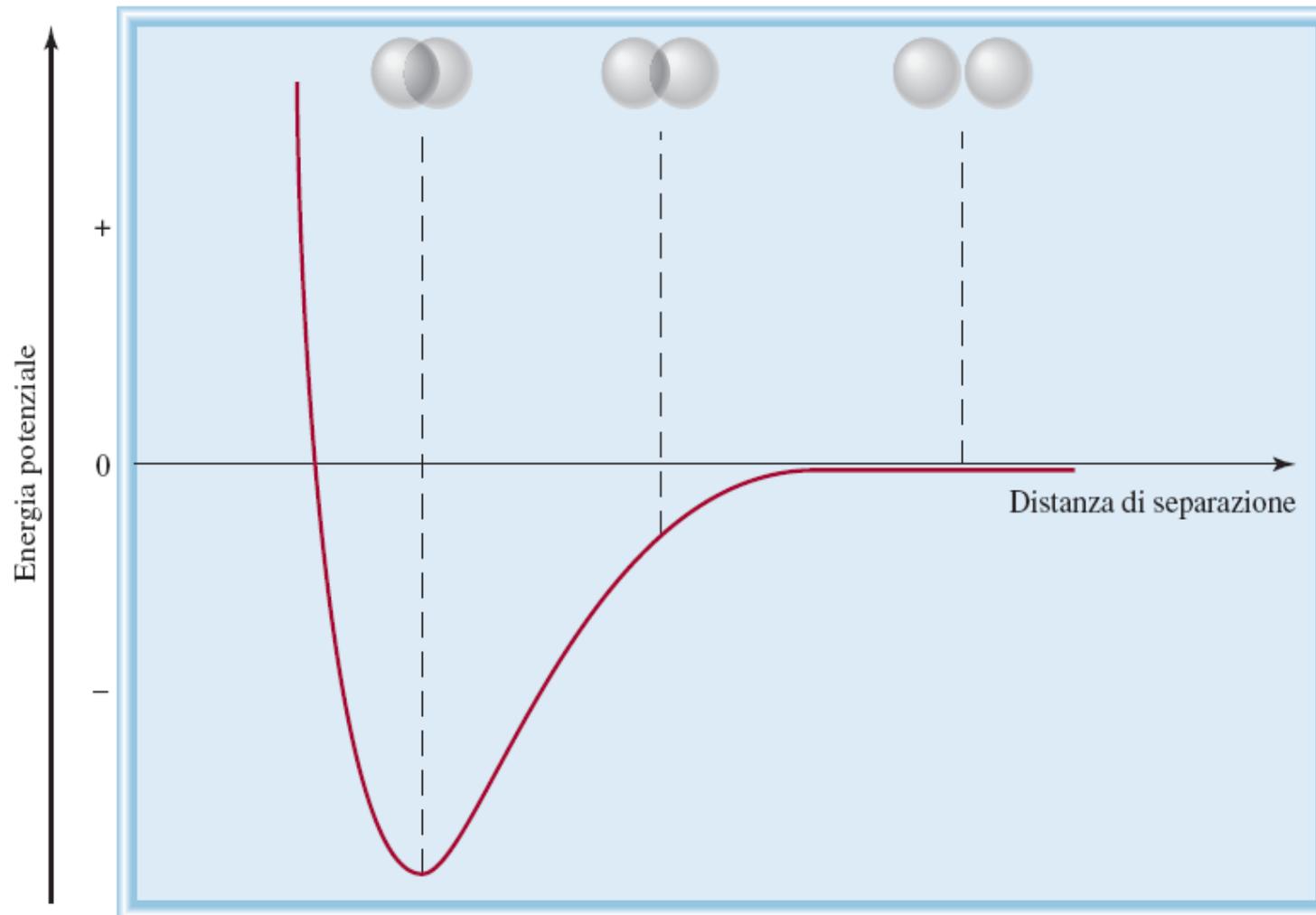
In che modo la teoria di Lewis spiega i legami in  $H_2$  e  $F_2$ ?

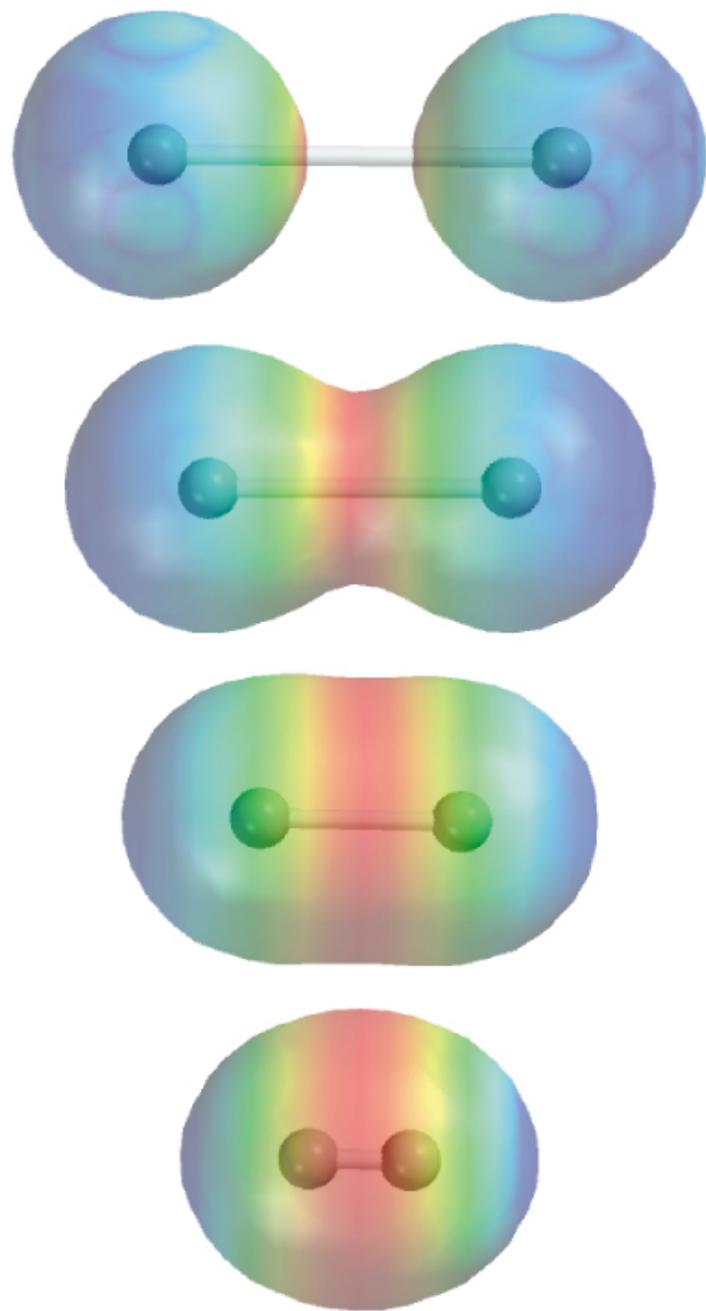
Condivisione di due elettroni tra due atomi.

<u>Energia di dissociazione di legame</u>	<u>Lunghezza di legame</u>	<u>Sovrapposizione</u>
$H_2$ 436.4 kJ/mole	74 pm	2 1s
$F_2$ 150.6 kJ/mole	142 pm	2 2p

Teoria del legame di valenza – I legami sono formati dalla condivisione di  $e^-$  ottenuta mediante sovrapposizione di orbitali **atomici**.

# Variazione dell' Energia Potenziale di due atomi di idrogeno in funzione della distanza di separazione

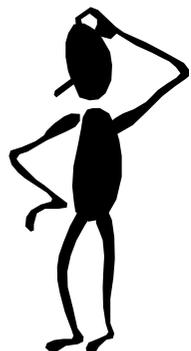
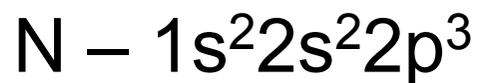




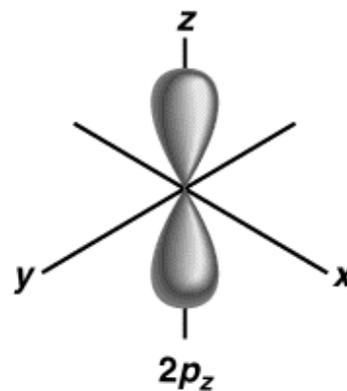
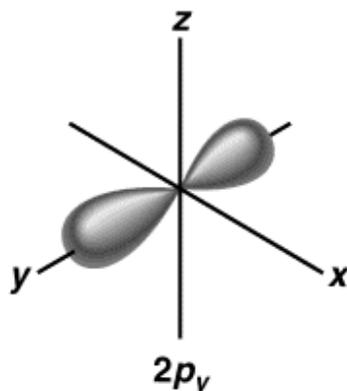
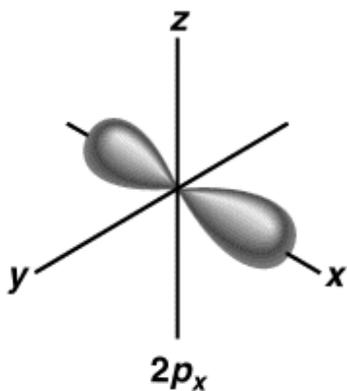
Variazione della densità elettronica durante l'avvicinamento di due atomi di idrogeno.



# Teoria del legame di valenza e $\text{NH}_3$



Se il legame si forma dalla sovrapposizione di 3 orbitali 2p dell'azoto con l'orbitale 1s di ciascun atomo di idrogeno, quale dovrebbe essere la geometria di  $\text{NH}_3$ ?

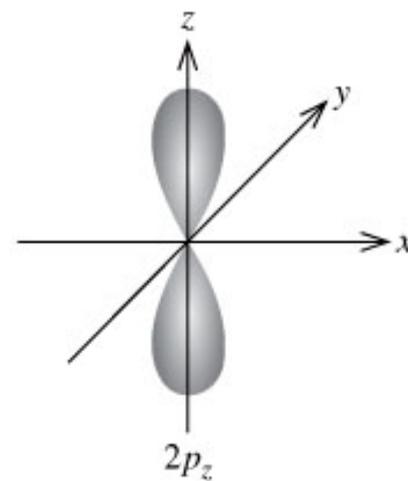
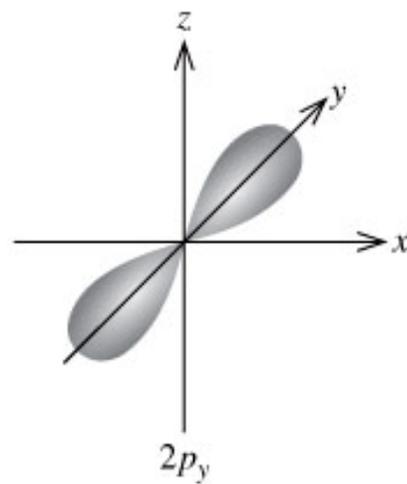
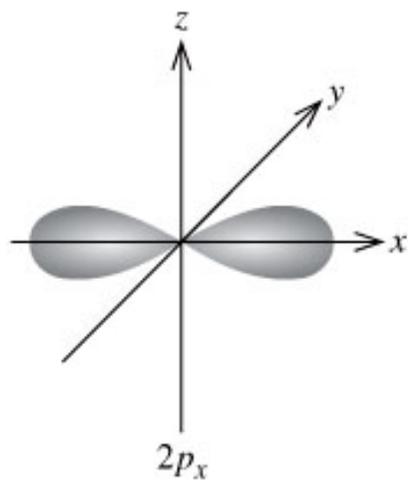
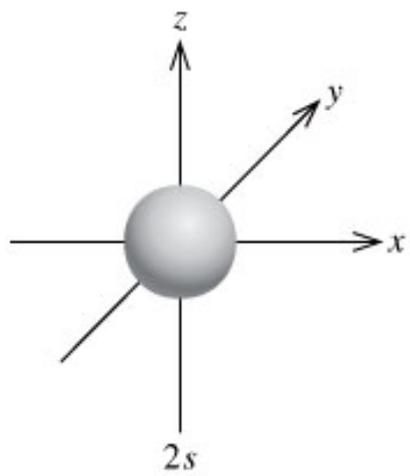


se uso i  
3 orbitali 2p  
prevedo  $90^\circ$   
Effettivamente  
l'angolo di legame  
H-N-H  
è  
 $107.3^\circ$

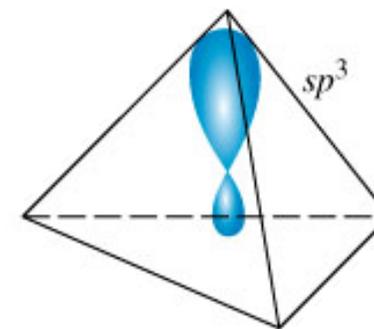
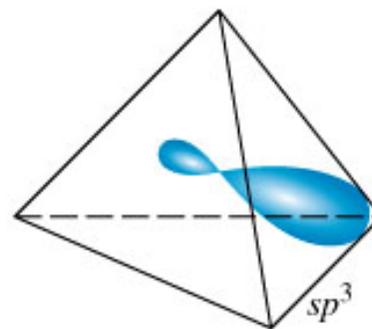
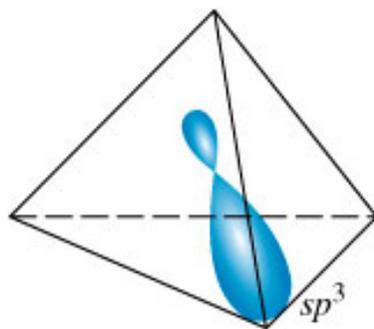
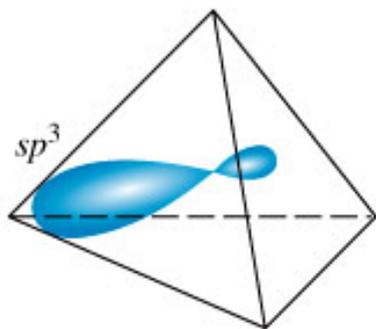
# Ibridizzazione – mescolamento di due o più orbitali atomici a formare un nuovo set di orbitali ibridi.

1. Mescolare almeno 2 orbitali atomici nonequivalenti (e.g. s and p). Gli orbitali ibridi hanno delle forme molto diverse dagli orbitali atomici originari.
2. Il numero degli orbitali ibridi è uguale al numero degli orbitali atomici utilizzati nel processo di ibridizzazione.
3. I legami covalensti sono formati dalla:
  - a. Sovrapposizione di orbitali ibridi con orbitali atomici
  - b. Sovrapposizione di orbitali ibridi con altri orbitali ibridi

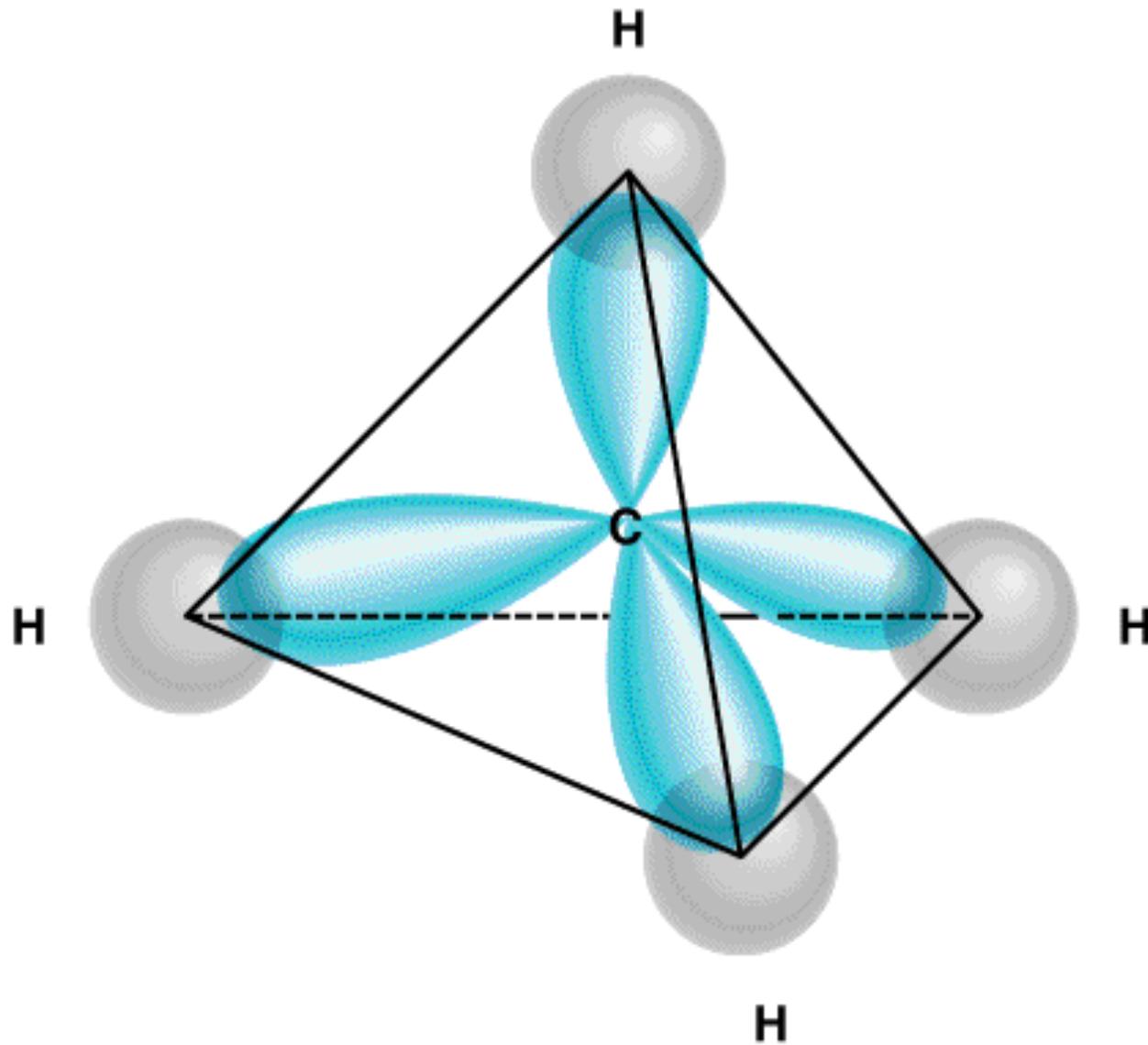
# Formazione di orbitali ibridi $sp^3$



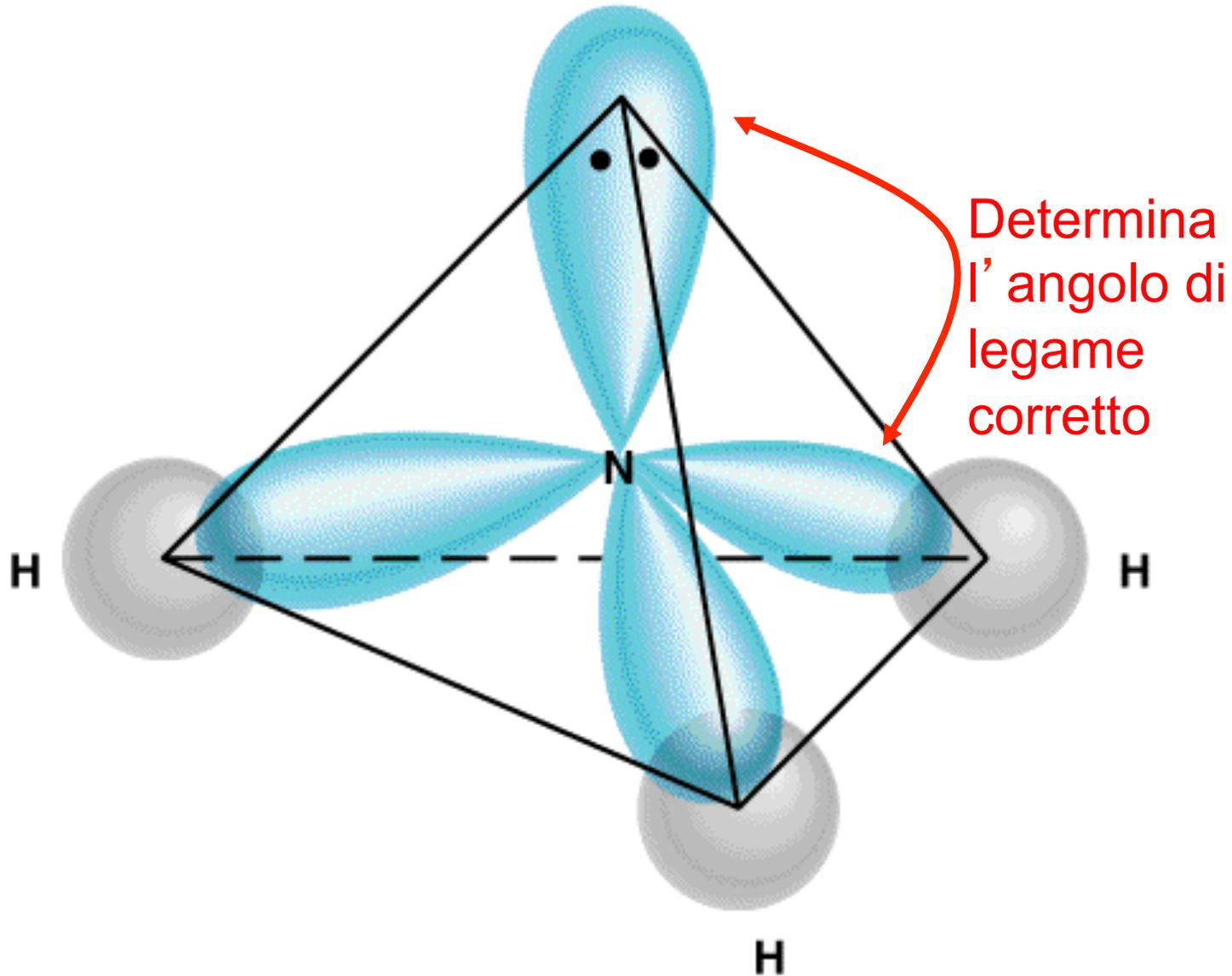
Ibridizzazione



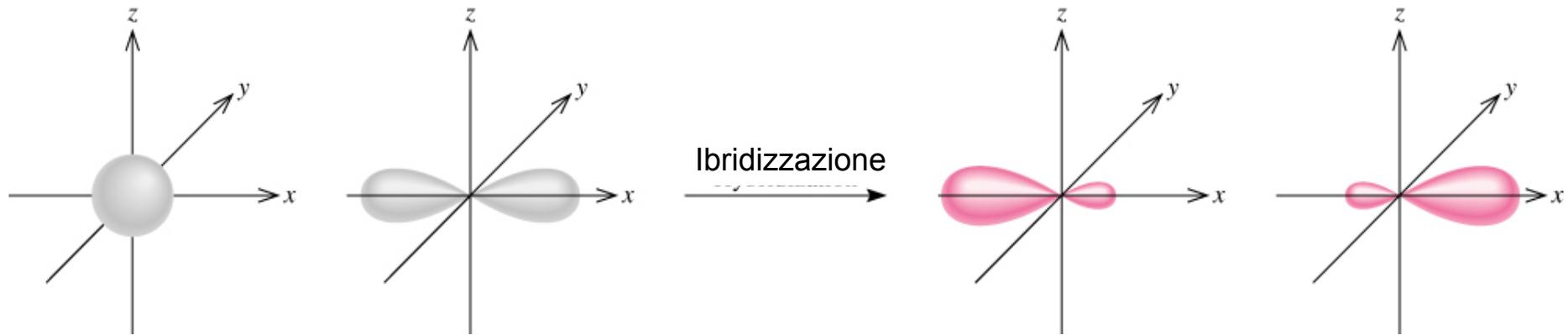
# Formazione di legami covalenti



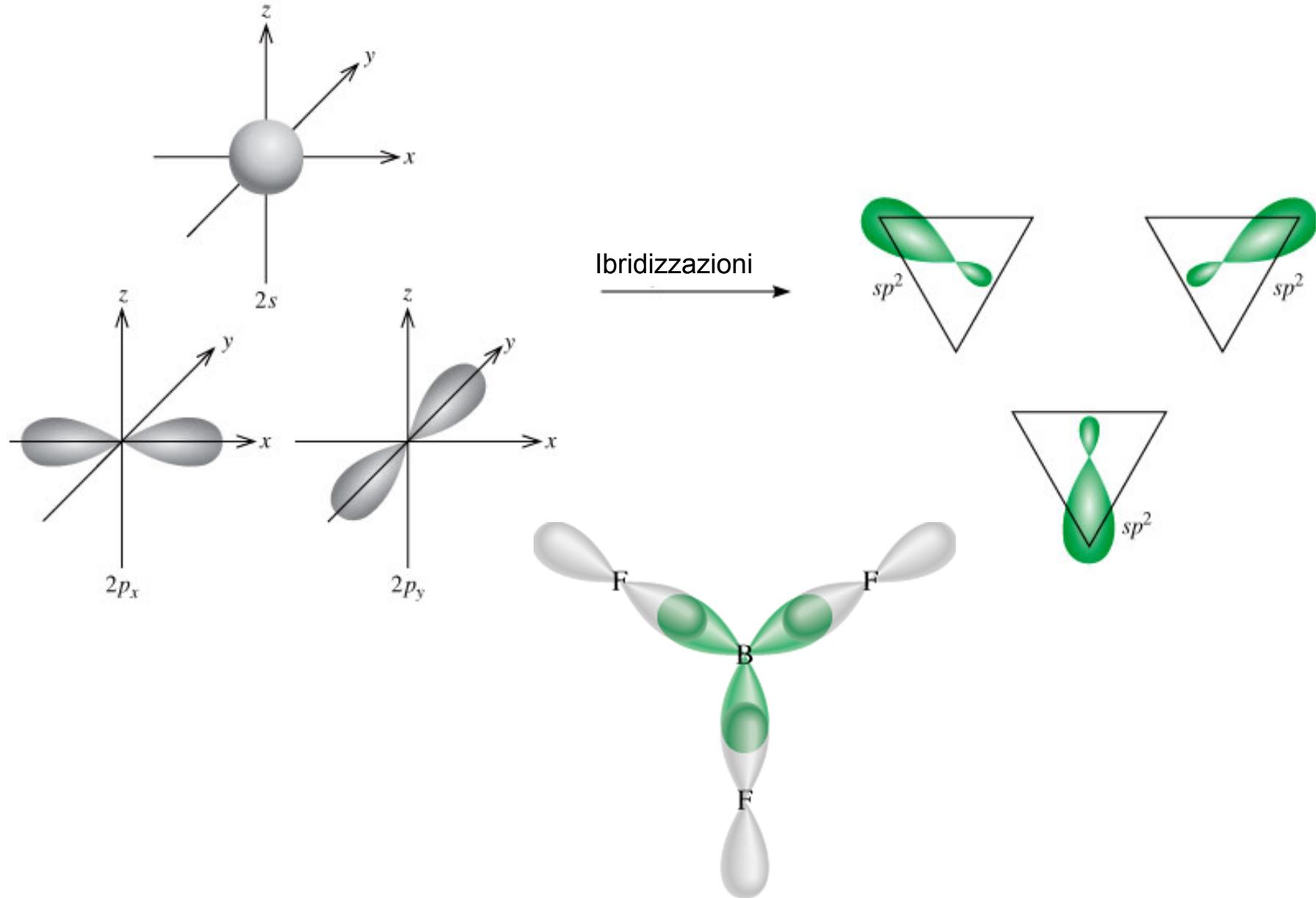
# Atomo di N ibridizzato $sp^3$ in $NH_3$



# Formazione di orbitali ibridi $sp$



# Formazione di Orbitali Ibridi $sp^2$



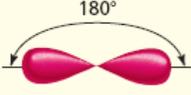
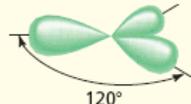
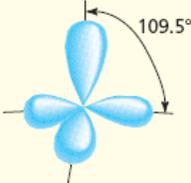
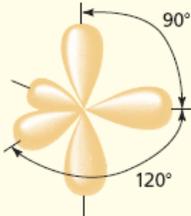
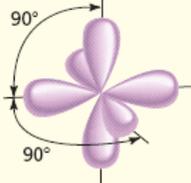


Come posso determinare l'ibridizzazione dell'atomo centrale?

1. Scrivi la struttura di Lewis della molecola.
2. Conta il numero di coppie solitarie e il numero di atomi legati all'atomo centrale

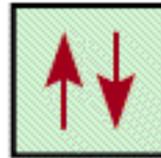
$\frac{\# \text{ di Coppie Solitarie} + \# \text{ di Atomi Legati}}{\text{}}$	<u>Ibridizzazione</u>	<u>Esempi</u>
2	sp	BeCl <sub>2</sub>
3	sp <sup>2</sup>	BF <sub>3</sub>
4	sp <sup>3</sup>	CH <sub>4</sub> , NH <sub>3</sub> , H <sub>2</sub> O
5	sp <sup>3</sup> d	PCl <sub>5</sub>
6	sp <sup>3</sup> d <sup>2</sup>	SF <sub>6</sub>

**TABELLA 10.4** Orbitali ibridi principali e loro forme

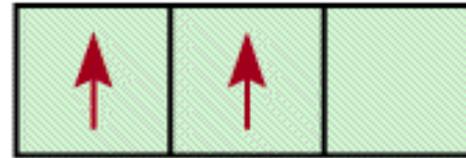
Orbitali atomici puri dell'atomo centrale	Ibridizzazione dell'atomo centrale	Numero di orbitali ibridi	Forma degli orbitali ibridi	Esempi
$s, p$	$sp$	2	 Lineare	$\text{BeCl}_2$
$s, p, p$	$sp^2$	3	 Trigonale planare	$\text{BF}_3$
$s, p, p, p$	$sp^3$	4	 Tetraedrica	$\text{CH}_4, \text{NH}_4^+$
$s, p, p, p, d$	$sp^3d$	5	 Trigonale bipyramidale	$\text{PCl}_5$
$s, p, p, p, d, d$	$sp^3d^2$	6	 Ottaedrica	$\text{SF}_6$

# Ibridizzazione $sp^2$ dell'atomo di carbonio

Stato  
fondamentale

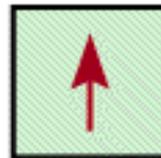


$2s$

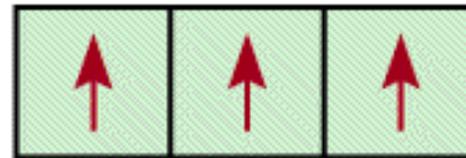


$2p$

Promozione di  
elettroni

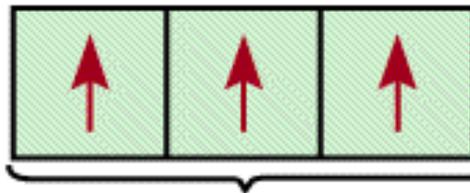


$2s$

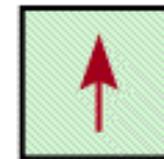


$2p$

Stato  
ibridizzato  $sp^2$

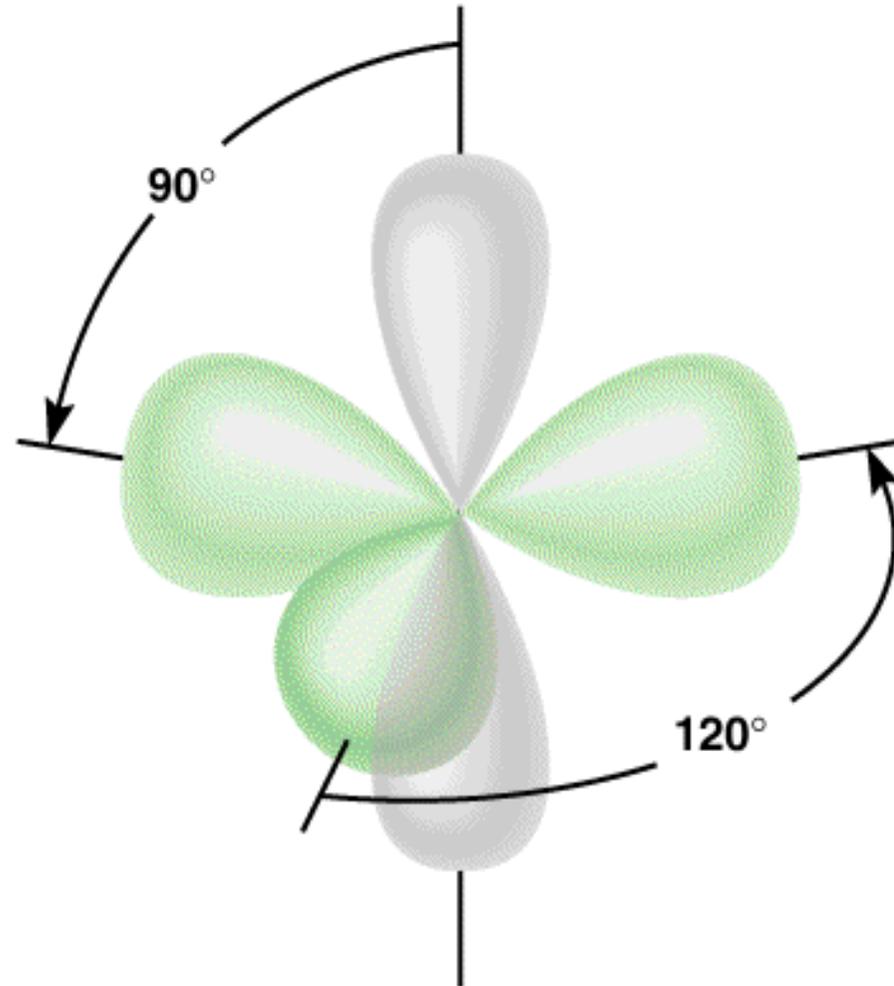


orbitali  $sp^2$

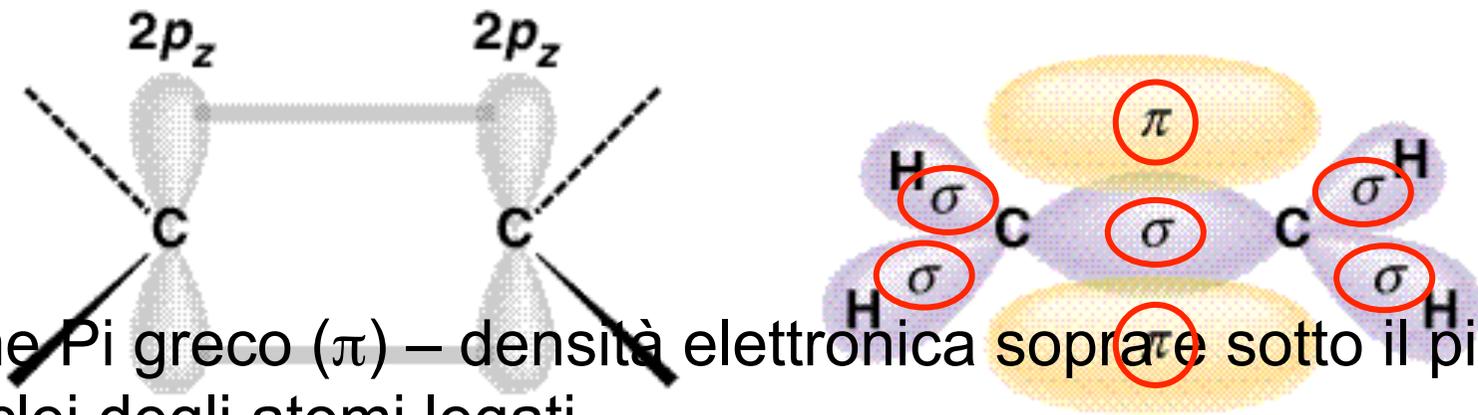
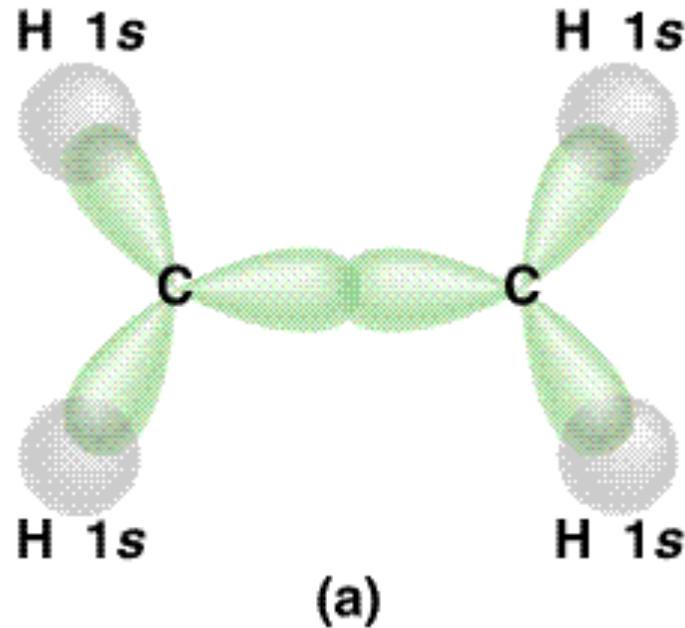


$2p_z$

**L'orbitale  $2p_z$  è perpendicolare al piano degli orbitali ibridi**

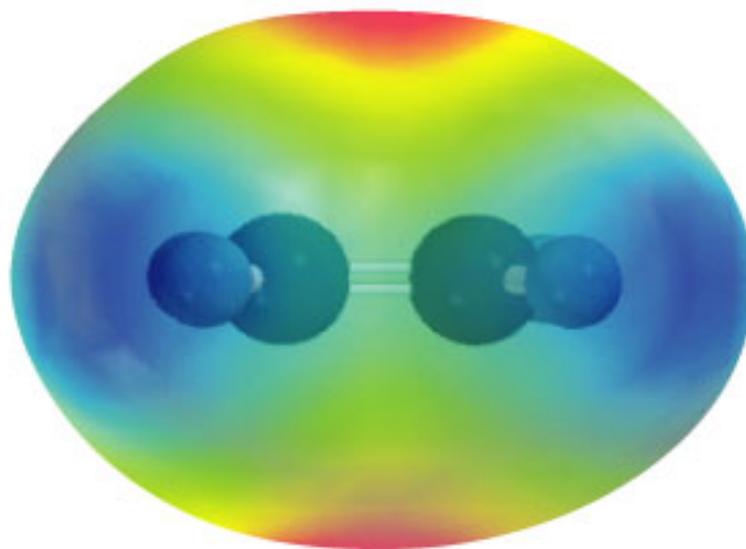
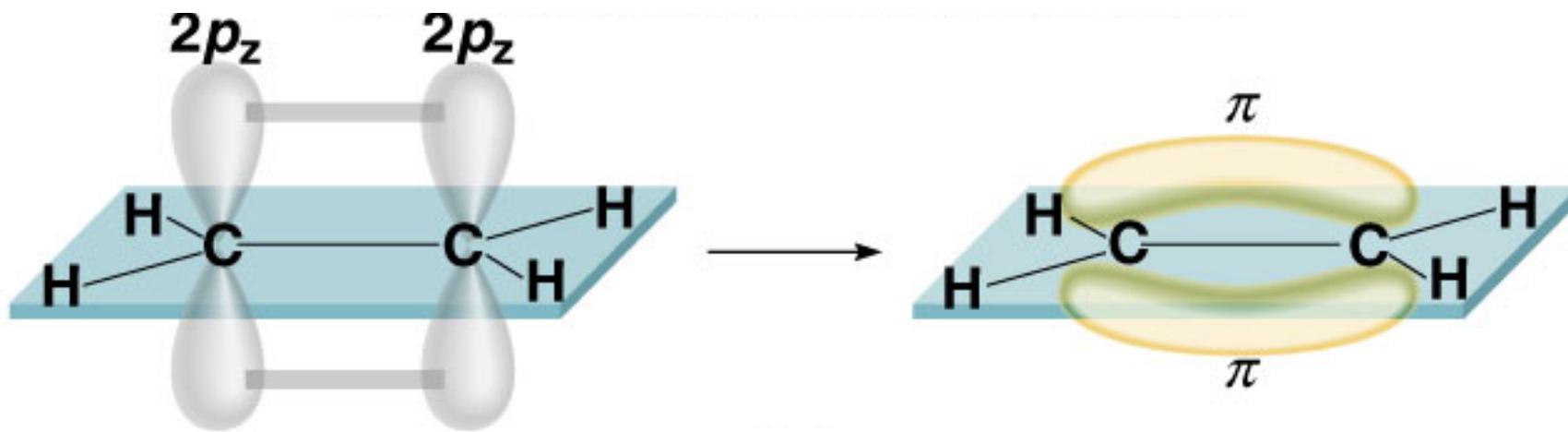


# Legami nell'etilene



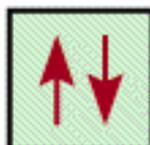
Legame Pi greco ( $\pi$ ) – densità elettronica sopra e sotto il piano dei nuclei degli atomi legati

Legame sigma ( $\sigma$ ) – densità elettronica tra 2 atomi

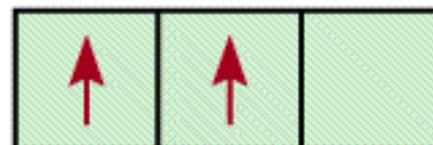


# Ibridizzazione sp dell'atomo di carbonio

Stato  
fondamentale

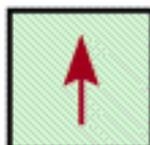


2s

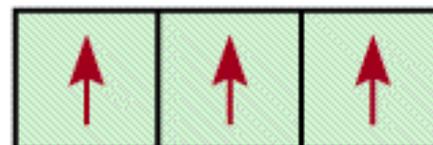


2p

Promozione di  
elettroni

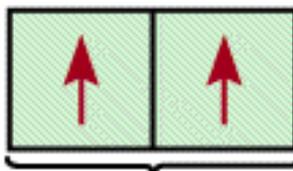


2s



2p

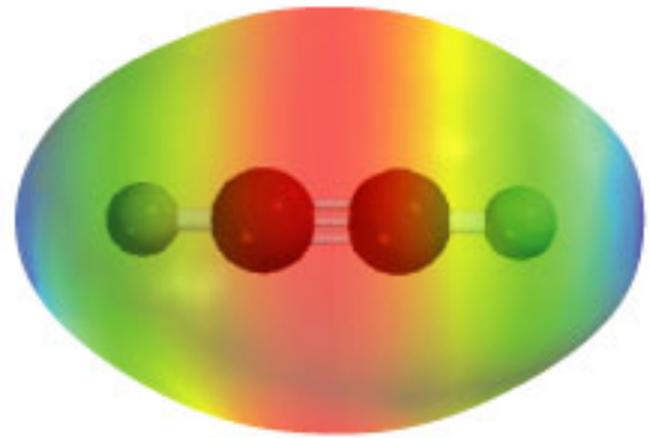
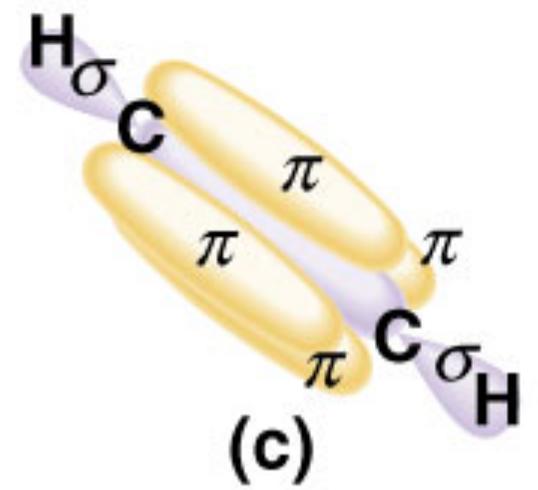
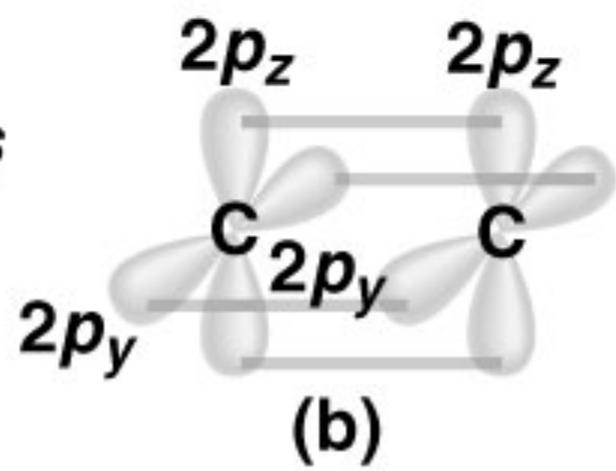
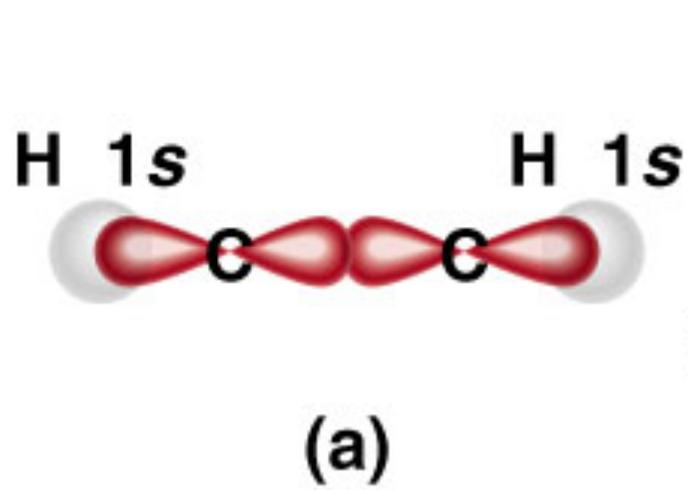
Stato  
ibridizzato  $sp^2$

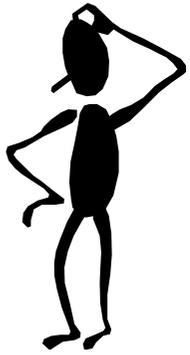


orbitali sp

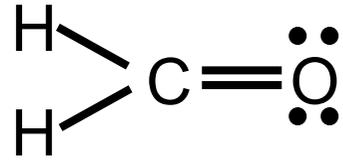


$2p_y$   $2p_z$



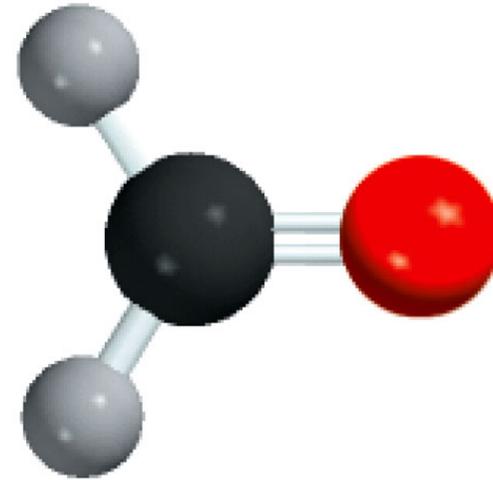


Descrivi il legame in  $\text{CH}_2\text{O}$ .

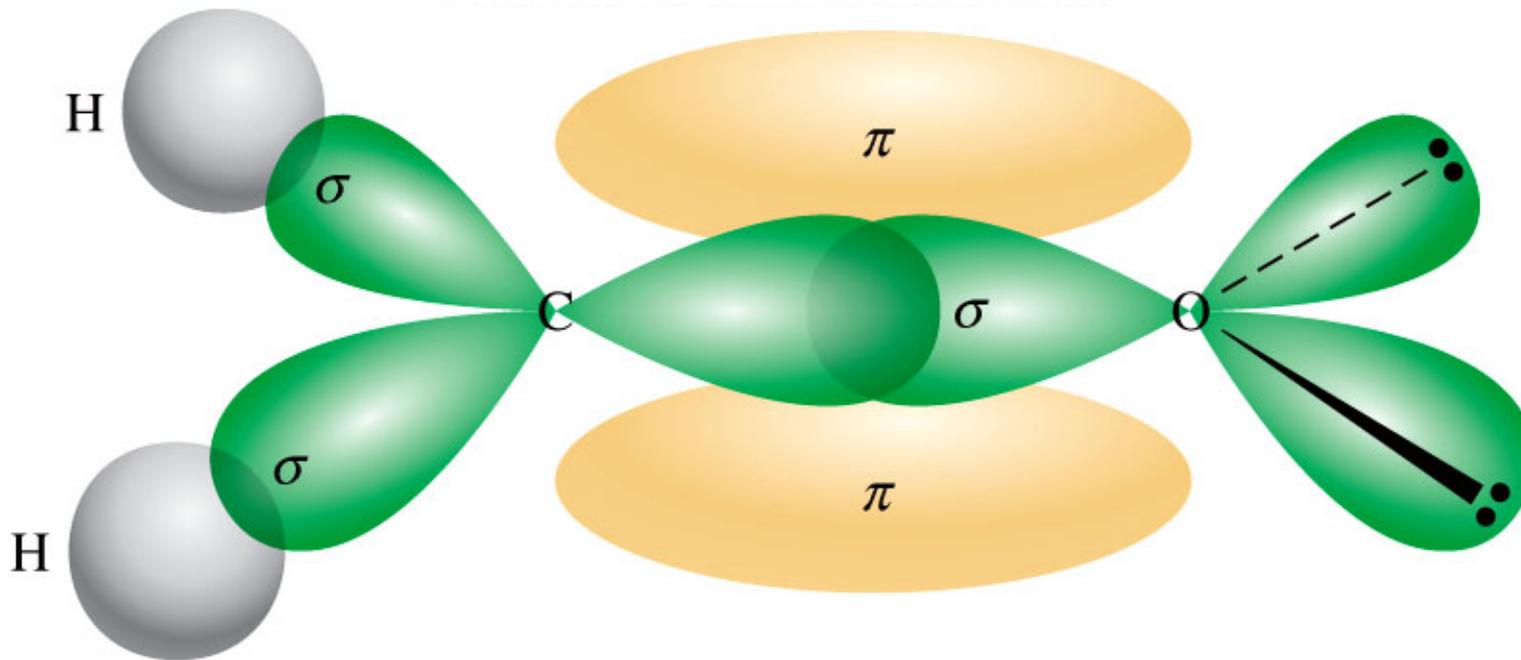


C – 3 atomi legati, 0 lone pairs

C –  $\text{sp}^2$



$\text{CH}_2\text{O}$



# Legami Sigma ( $\sigma$ ) and Pi greco ( $\pi$ )

Legame singolo

1 legame sigma

Legame doppio

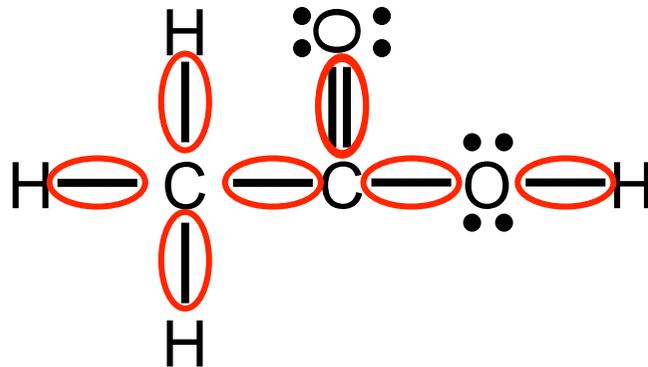
1 legame sigma e 1 legame pi greco

Legame triplo

1 legame sigma e 2 legami pi greco



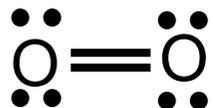
Quanti legami  $\sigma$  e  $\pi$  sono presenti nella molecola di acido acetico (aceto)  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ?



legami  $\sigma = 6 + 1 = 7$

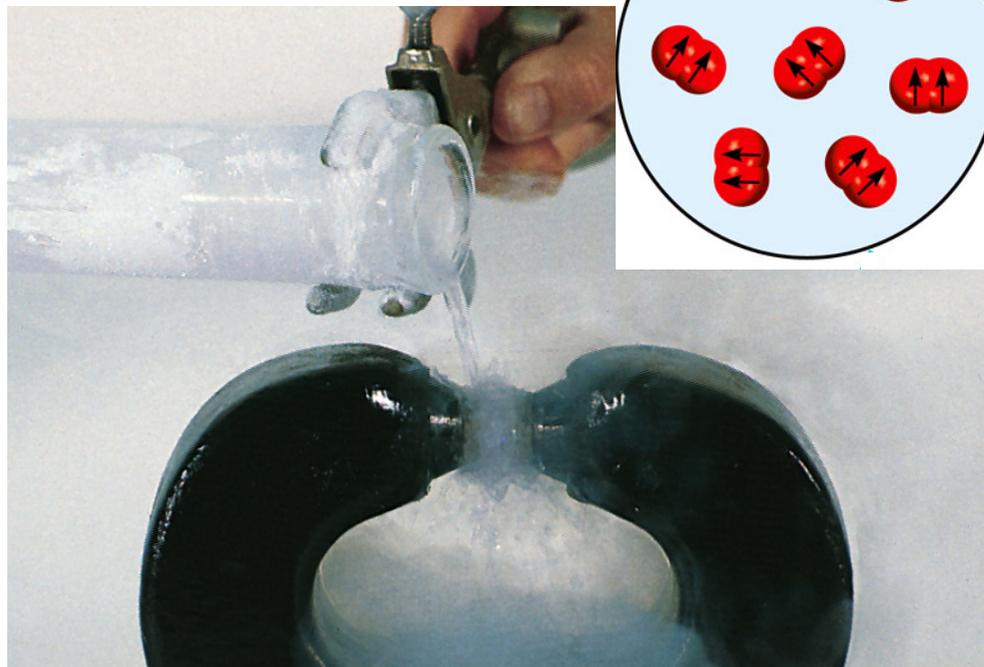
legami  $\pi = 1$

Gli esperimenti mostrano che  $O_2$  è paramagnetico



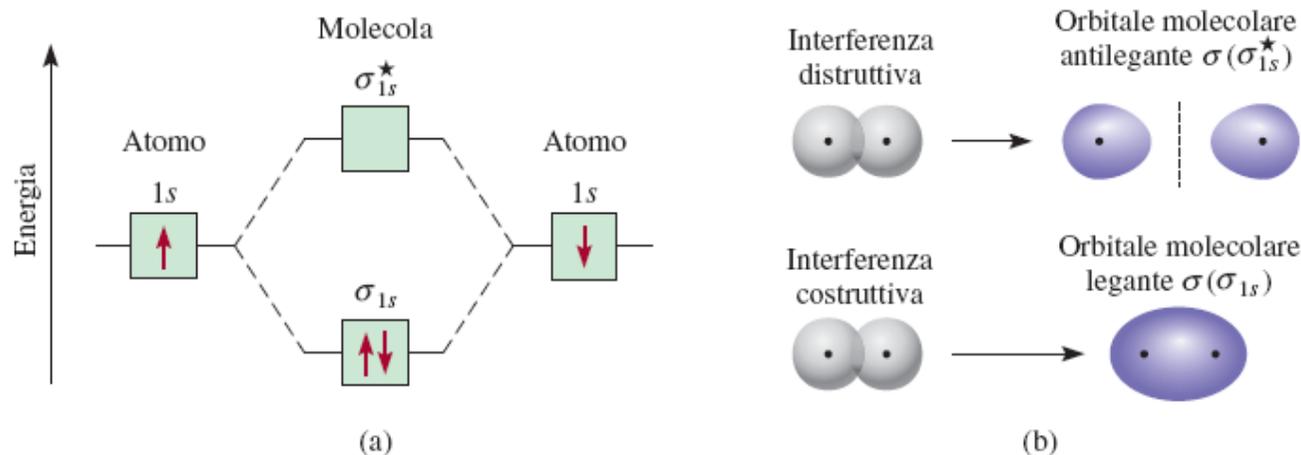
Nessun  $e^-$  spaiato

Dovrebbe essere  
diamagnetico



Teoria degli orbitali Molecolari – I legami sono formati dall'interazione di orbitali atomici a formare orbitali **molecolari**.

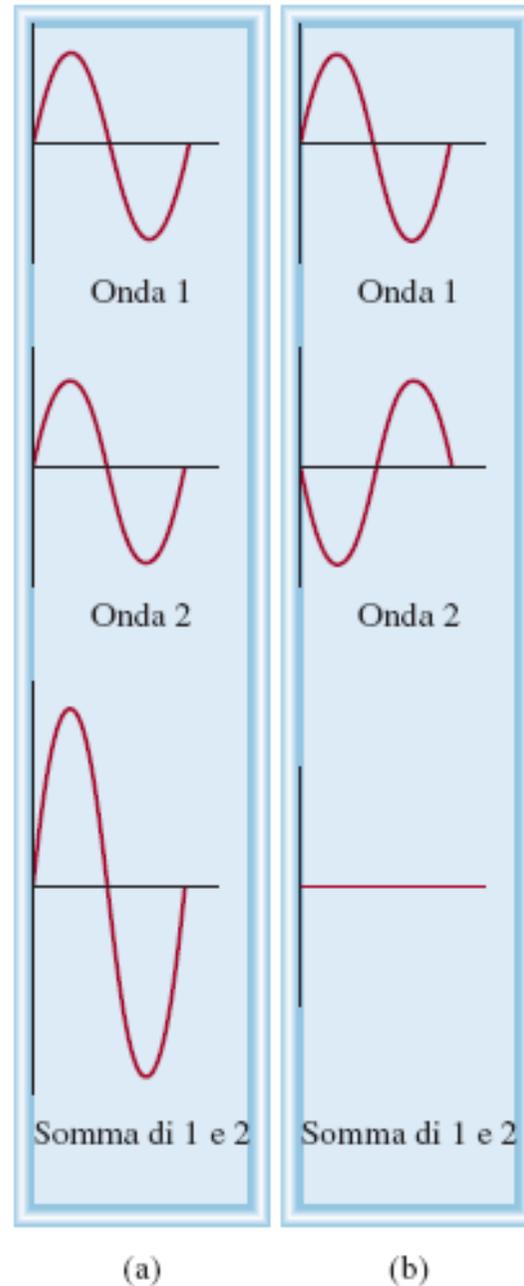
# Livelli energetici degli orbitali molecolari leganti e antileganti nella molecola di idrogeno ( $H_2$ ).

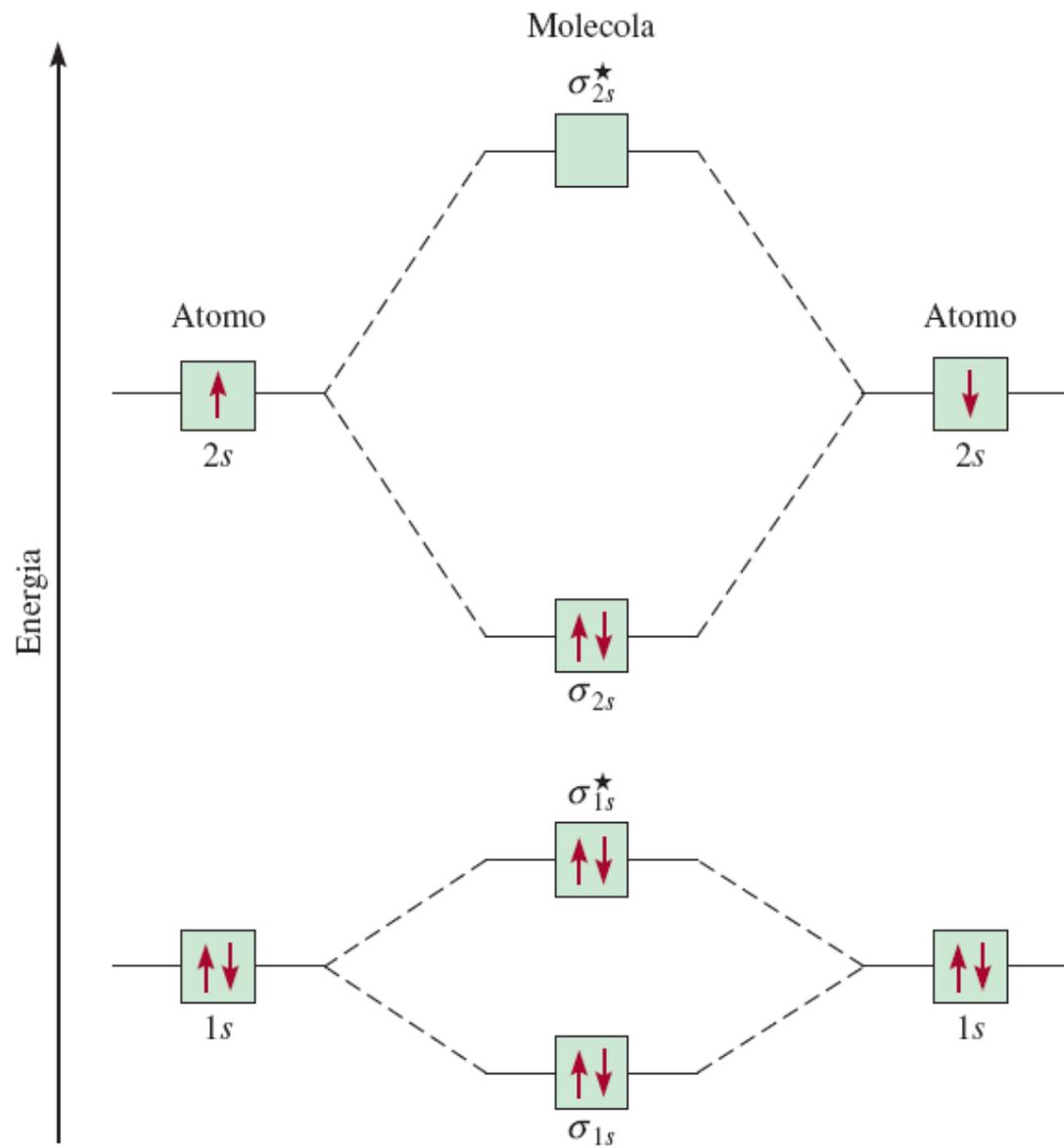


Un **orbitale molecolare legante** ha energia più bassa e maggiore stabilità degli orbitali atomici di provenienza.

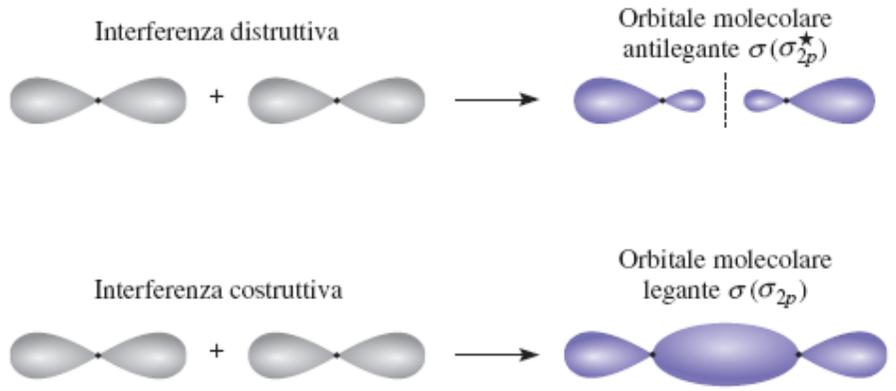
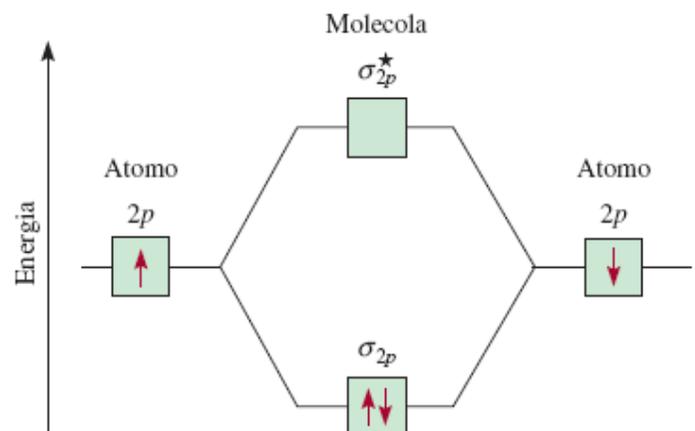
Un **orbitale molecolare antilegante** ha energia più alta ed è meno stabile degli orbitali atomici da cui è formato.

Interferenze costruttive e distruttive tra due onde della stessa lunghezza d'onda e ampiezza

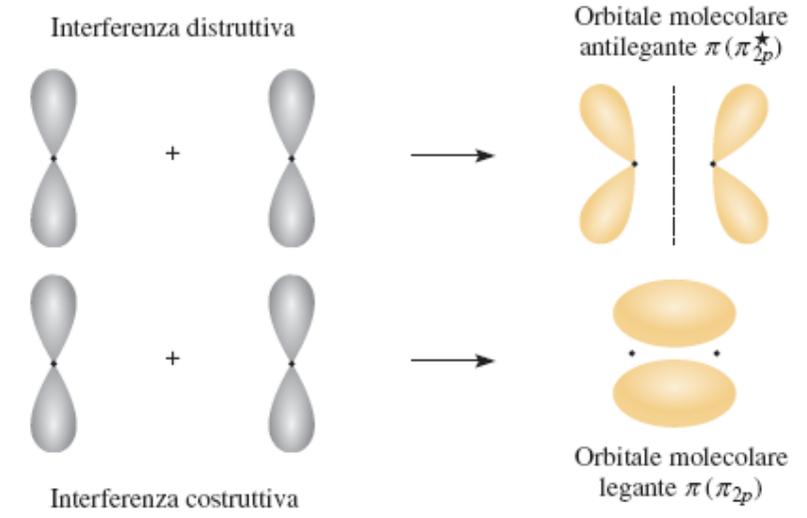
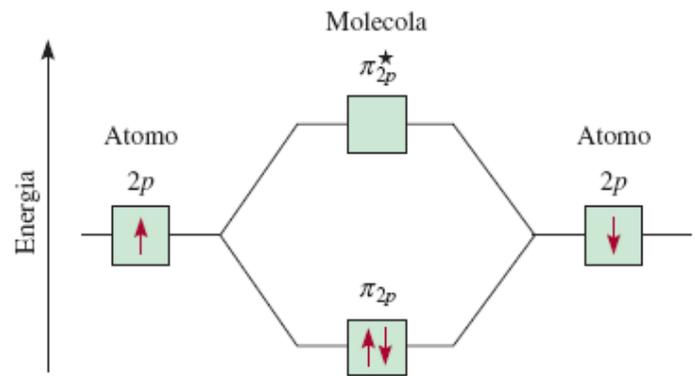




# Due possibili interazioni tra due orbitali p equivalenti

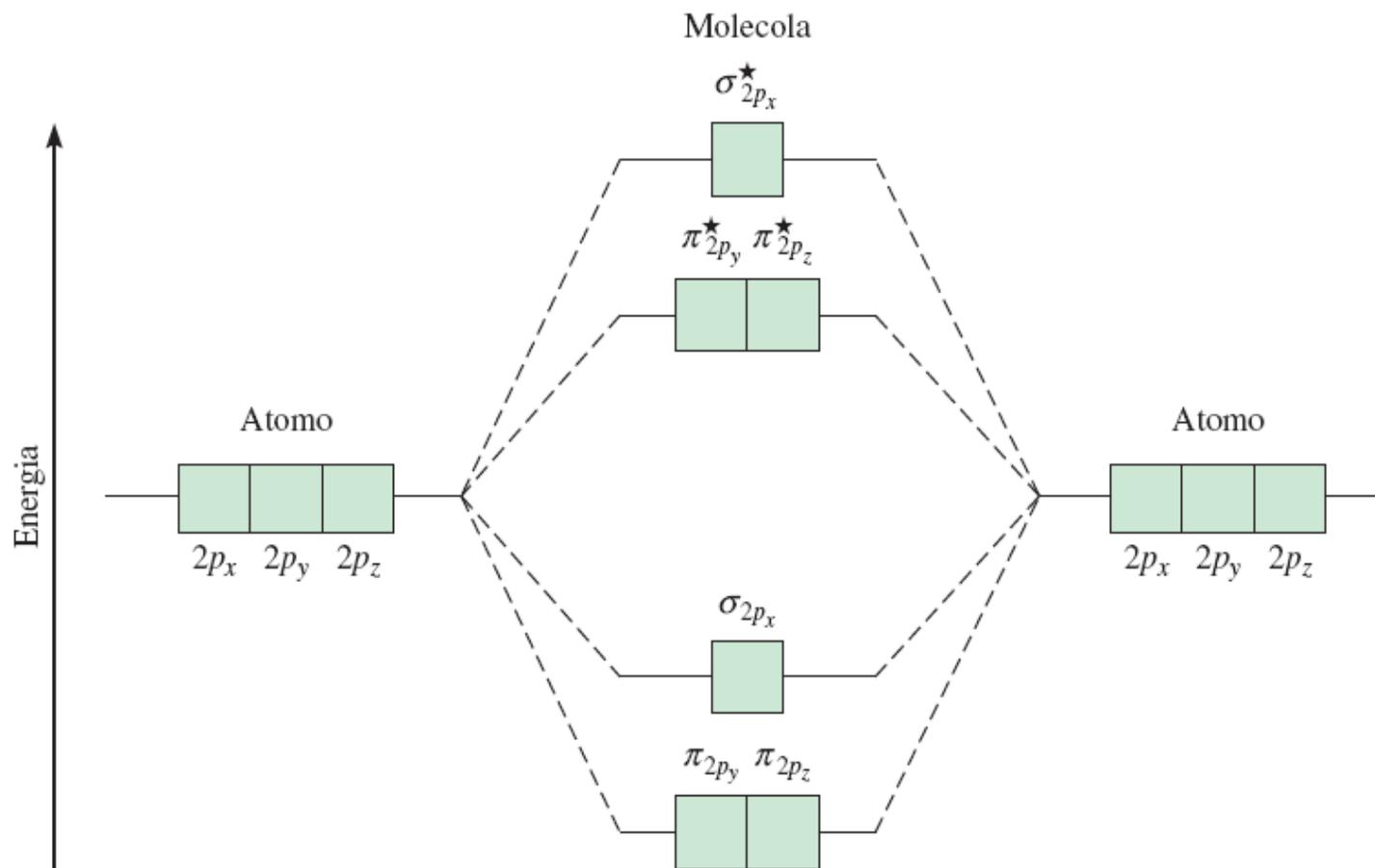


(a)



(b)



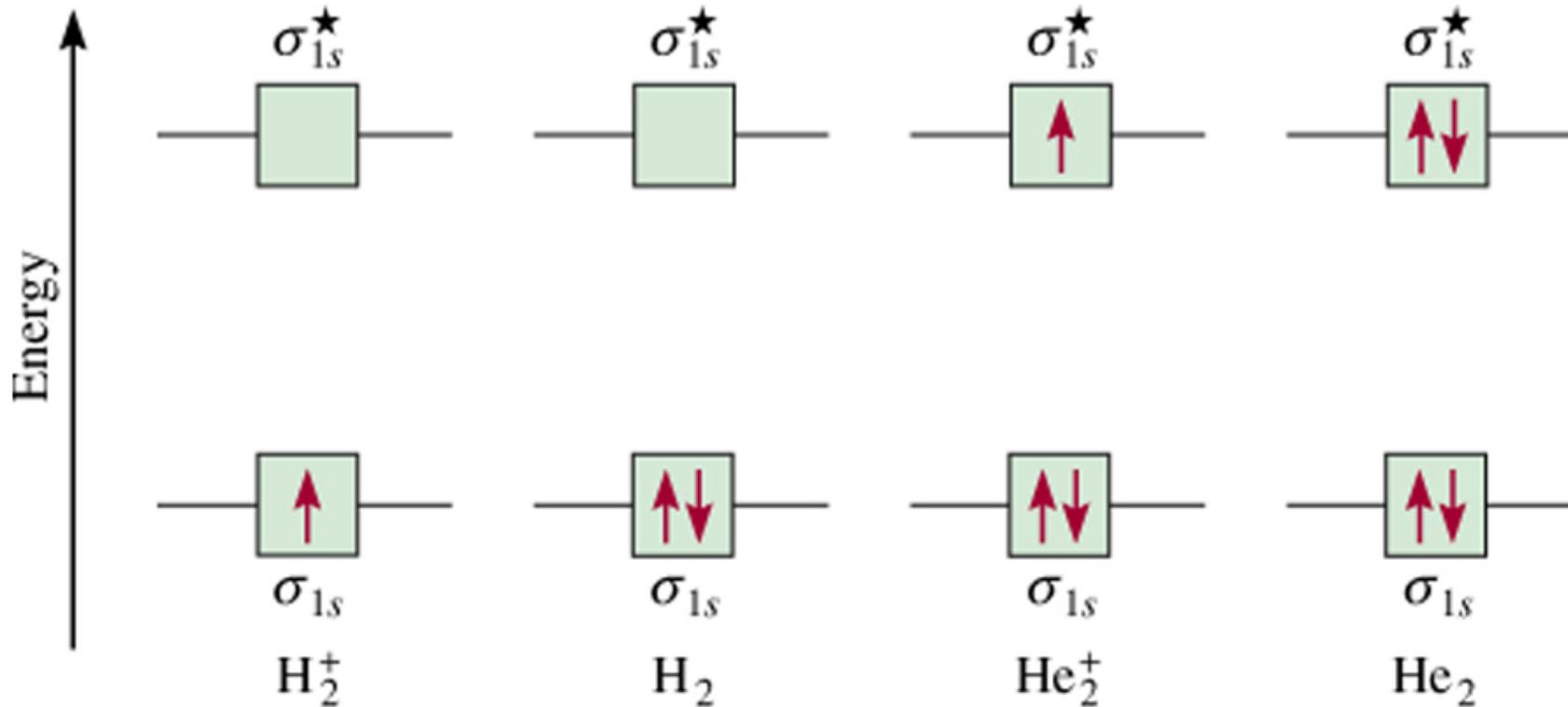


# Configurazioni di Orbitali Molecolari (MO)

1. Il numero di orbitali molecolari formato è sempre uguale al numero di orbitali atomici combinati.
2. Tanto più è stabile un MO legante tanto più sarà poco stabile il suo corrispondente MO antilegante.
3. Il riempimento degli MO procede da quelli a più bassa energia a quelli a energia più alta.
4. Ogni MO può ospitare fino a due elettroni.
5. Quando si aggiungono elettroni a MO della stessa energia si segue la regola di Hund.
6. Il numero di elettroni negli MO è uguale alla somma di tutti gli elettroni degli atomi leganti.



$$\text{ordine di legame} = \frac{1}{2} \left( \begin{array}{l} \text{Numero di} \\ \text{elettroni in} \\ \text{MO leganti} \end{array} - \begin{array}{l} \text{numero di} \\ \text{elettroni in} \\ \text{MO} \\ \text{antileganti} \end{array} \right)$$



ordine				
di legame	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$	0

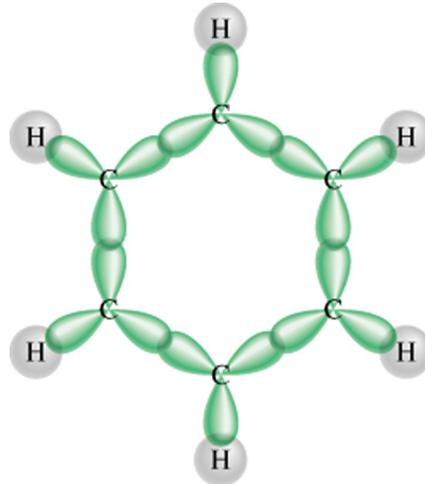
TABELLA 10.5

## Proprietà delle molecole diatomiche omonucleari degli elementi del secondo periodo\*

	Li <sub>2</sub>	B <sub>2</sub>	C <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	F <sub>2</sub>	
$\sigma_{2p_x}^*$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	$\sigma_{2p_x}^*$
$\pi_{2p_y}^*, \pi_{2p_z}^*$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> ↑↑	<input type="checkbox"/> ↑↓↑↓	$\pi_{2p_y}^*, \pi_{2p_z}^*$
$\sigma_{2p_x}$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> ↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓↑↓	$\pi_{2p_y}, \pi_{2p_z}$
$\pi_{2p_y}, \pi_{2p_z}$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> ↑↑	<input type="checkbox"/> ↑↓↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓	$\sigma_{2p_x}$
$\sigma_{2s}^*$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> ↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓	$\sigma_{2s}^*$
$\sigma_{2s}$	<input type="checkbox"/> ↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓	<input type="checkbox"/> ↑↓	$\sigma_{2s}$
Ordine di legame	1	1	2	3	2	1	
Lunghezza di legame (pm)	267	159	131	110	121	142	
Entalpia di legame (kJ/mol)	104.6	288.7	627.6	941.4	498.7	156.9	
Proprietà magnetiche	Diamagnetico	Paramagnetico	Diamagnetico	Diamagnetico	Paramagnetico	Diamagnetico	

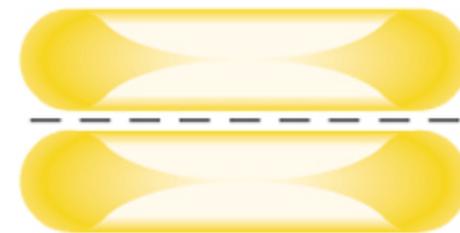
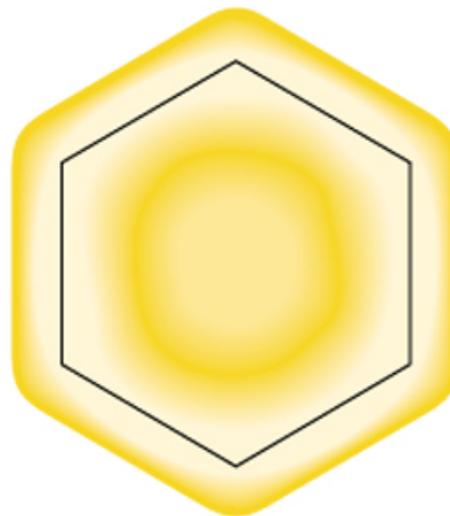
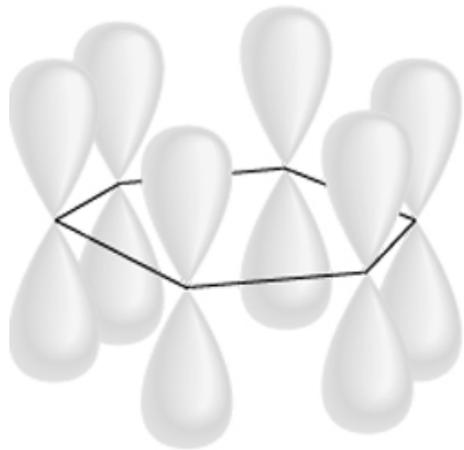
\*Per semplicità gli orbitali  $\sigma_{1s}$ ,  $\sigma_{1s}^*$  sono stati omissi. Questi due orbitali ospitano un totale di quattro elettroni. Ricorda che per O<sub>2</sub> e F<sub>2</sub>  $\sigma_{2p_x}$  è più basso in energia rispetto a  $\pi_{2p_x}$  e  $\pi_{2p_z}$ .

***Gli orbitali molecolari delocalizzati*** non sono confinati tra due atomi adiacenti legati ma si estendono tra tre o più atomi.

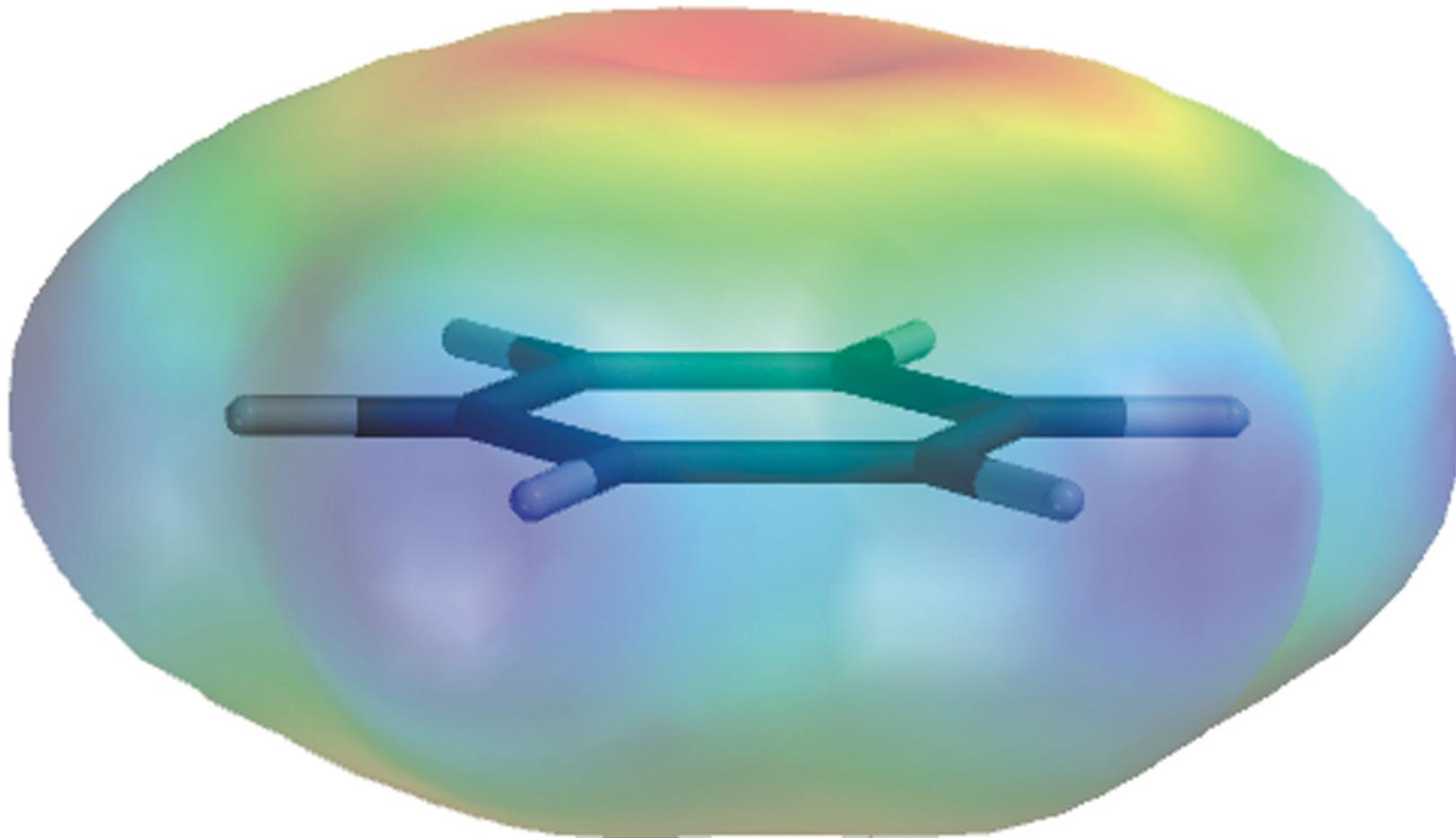


Top view

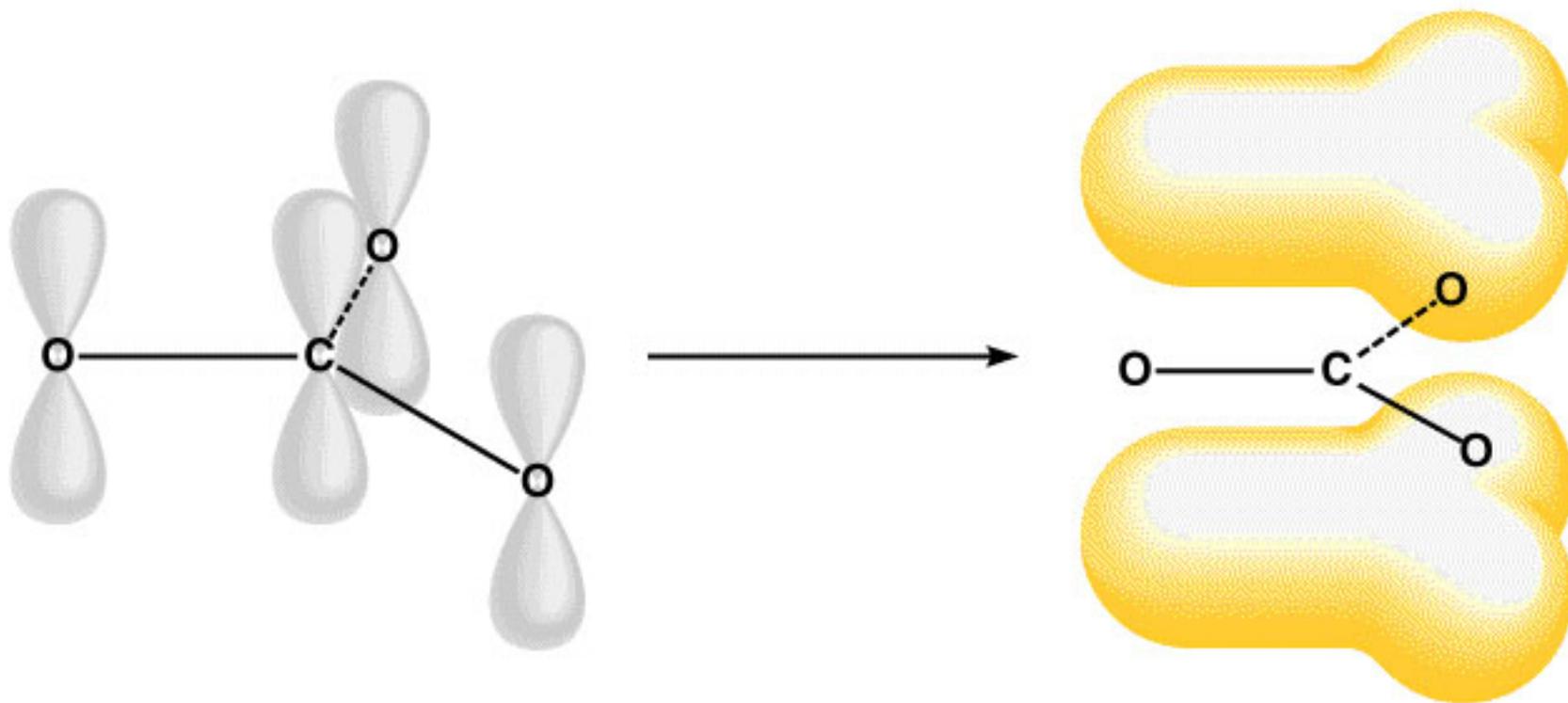
Side view



Densità elettronica sopra e sotto il piano della molecola di benzene.



# Legame nello ione carbonato



# Chimica in Azione: Buckyball?

