

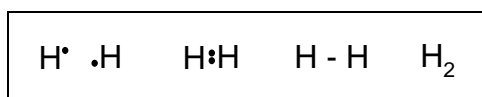
## Le molecole biatomiche con legami covalenti omopolari

### La molecola biatomica dell'idrogeno, H<sub>2</sub>

L'atomo di idrogeno (H) ha numero atomico  $Z = 1$ .

La sua configurazione elettronica è  $1s^2$ .

Appartenendo al gruppo I A del sistema periodico, secondo Lewis, l'idrogeno ha un solo elettrone di valenza e viene rappresentato così:



Applichiamo la teoria del legame di valenza, che prende in esame solo la distribuzione della carica elettrica associata agli elettroni di valenza degli atomi.

Se due atomi di idrogeno isolati si avvicinano reciprocamente, ad un certo momento si raggiungerà la distanza di legame. Gli atomi possono avvicinarsi secondo qualsiasi direzione, perché gli orbitali che contengono i singoletti elettronici sono di tipo s, cioè sferici, senza alcuna simmetria preferenziale di massima sovrapposizione.

Si avrà la massima sovrapposizione e la minima repulsione.

L'energia della molecola di H<sub>2</sub> è minore della somma delle energie dei due atomi di idrogeno isolati.

Secondo Lewis, i due atomi di idrogeno mettono in condivisione i loro singoletti elettronici, così da generare un doppietto elettronico di legame.

Entrambi gli atomi assumono la configurazione elettronica esterna  $1s^2$  del gas nobile immediatamente seguente, cioè il doppietto elettronico dell'elio, He.



Due atomi di idrogeno isolati

La molecola di idrogeno, H<sub>2</sub>

Secondo la teoria degli orbitali molecolari, alla formazione di un legame chimico fra atomi concorrono non solo gli elettroni di valenza, ma (generalmente) tutti gli elettroni degli atomi che formano la molecola.

Gli elettroni, dopo la formazione del legame, non fanno più parte dei singoli atomi, ma sono tutti redistribuiti su nuovi livelli energetici condivisi, detti orbitali molecolari.

Secondo la teoria degli orbitali molecolari, la molecola di H<sub>2</sub> viene spiegata nel modo seguente (fig. 1):

1. numero degli orbitali atomici di partenza, OA = 2;
2. numero degli orbitali molecolari ottenuti, OM = 2;
3. numero degli elettroni totali, n.e. = 2
4. orbitali leganti ottenuti, OL = (OM + OA - n.e.)/2 = 1
5. conclusione: tra i due atomi di idrogeno si forma un solo legame, di tipo  $\sigma_{1s}$ , covalente ed omopolare.

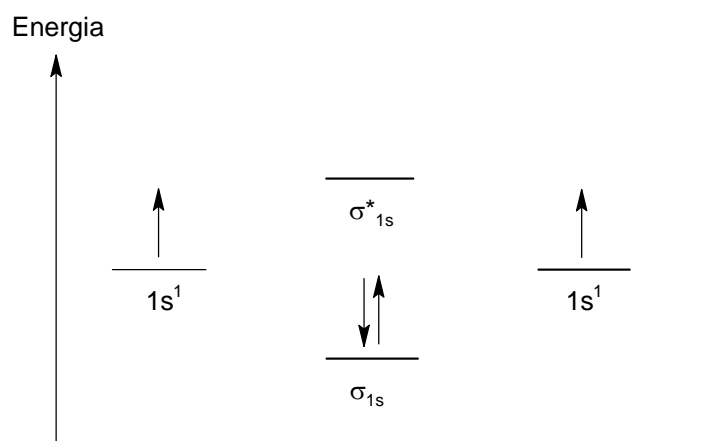


Fig. 1 – Formazione della molecola dell'idrogeno, H<sub>2</sub>.

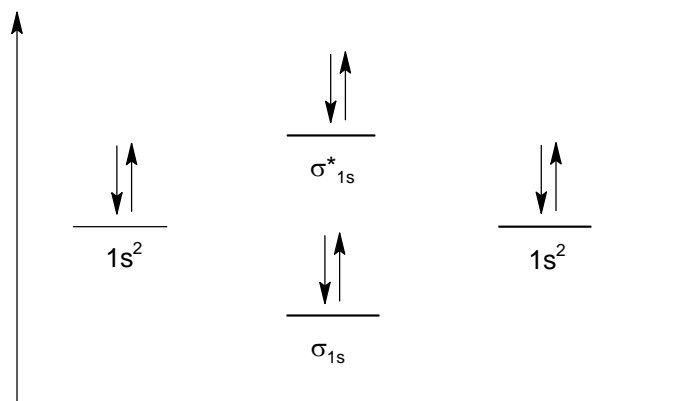


Fig. 2 – Disposizione elettronica che giustifica la non formazione della molecola di elio.

### **Perché non si forma la molecola biatomica di elio, He<sub>2</sub>**

L'atomo di elio (He) ha numero atomico  $Z = 2$ .

La sua configurazione elettronica è  $1s^2$ : quindi l'elio è il gas nobile più semplice, poiché con lui si completa il primo livello energetico ( $n = 1$ ).

Quando due atomi di elio si avvicinano, poiché è già presente su ogni atomo un doppietto elettronico completo (cioè: due elettroni con spin opposto, secondo quanto previsto dal principio di esclusione di Pauli), l'energia del sistema risultante per He<sub>2</sub> è maggiore dell'energia ottenuta sommando quella dei due atomi di elio isolati.

La teoria degli orbitali molecolari spiega in modo compiuto (fig. 2) perché non si può formare una molecola biatomica di elio (He<sub>2</sub>):

1. numero degli orbitali atomici di partenza, OA = 2;
2. numero degli orbitali molecolari ottenuti, OM = 2;
3. numero degli elettroni totali, n.e. = 4
4. orbitali leganti ottenuti, OL = (OM + OA - n.e.)/2 = 0
5. conclusione: tra i due atomi di elio non si forma alcun legame chimico.

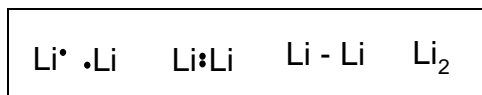
## La molecola biatomica del litio, $\text{Li}_2$

L'esistenza della molecola biatomica di litio ( $\text{Li}_2$ ) è stata accertata sperimentalmente e si trova in piccole percentuali, a temperature di circa 500 – 600 °K, nel litio allo stato di vapore.

L'atomo di litio (Li) ha numero atomico  $Z = 3$ .

La sua configurazione elettronica è  $1s^2 2s^1$ .

Appartendendo al gruppo I A del sistema periodico, secondo Lewis, il litio ha un solo elettrone di valenza e viene rappresentato nel modo seguente.



Come già esposto per l'idrogeno e con un ragionamento analogo, applicato però agli orbitali 2s, quando due atomi di litio si avvicinano fino alla distanza di legame, si avrà la massima attrazione e la minima repulsione.

L'energia della molecola di  $\text{Li}_2$  è minore della somma delle energie dei due atomi di litio isolati: questi mettono in condivisione i loro singoletti elettronici di valenza, così da generare un doppietto elettronico di legame.

Entrambi gli atomi raggiungono una completezza limitata, quella di un duetto elettronico, ma non quella dell'ottetto, tipica di un gas nobile: e non ci si può riferire all'elio, proprio perché quest'ultimo precede la posizione del litio nel sistema periodico degli elementi.

La formazione della molecola del litio  $\text{Li}_2$  può essere meglio spiegata con la teoria degli orbitali molecolari (fig. 3):

1. numero degli orbitali atomici di partenza,  $\text{OA} = 4$ ;
2. numero degli orbitali molecolari ottenuti,  $\text{OM} = 4$ ;
3. numero degli elettroni totali,  $\text{n.e.} = 6$
4. orbitali leganti ottenuti,  $\text{OL} = (\text{OM} + \text{OA} - \text{n.e.})/2 = 1$
5. conclusione: tra i due atomi di litio si forma un solo legame  $\sigma_{2s}$ , covalente ed omopolare.

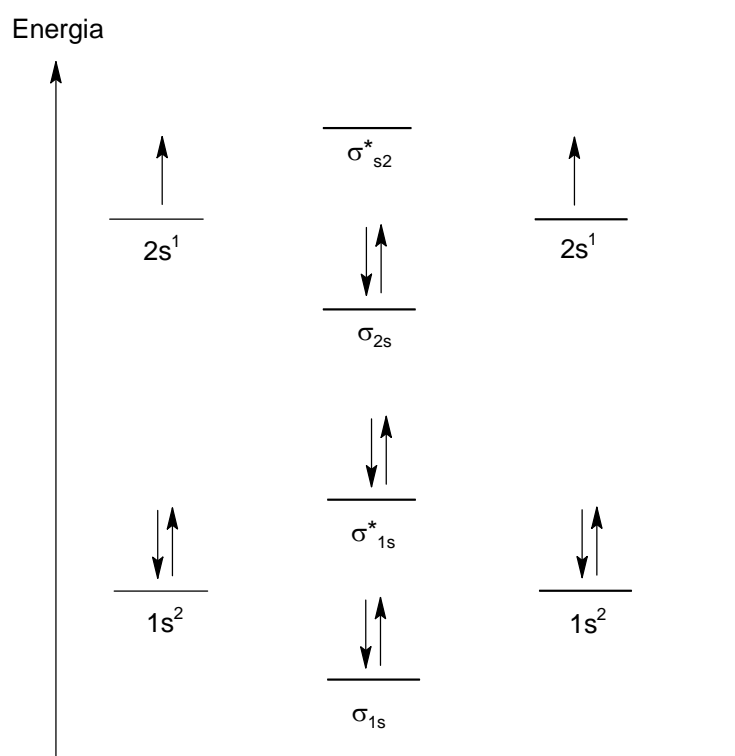


Fig. 3 - Formazione della molecola del litio,  $\text{Li}_2$ .

## Perché non si forma la molecola biatomica di berillio, $\text{Be}_2$

L'atomo di berillio (Be) ha numero atomico  $Z = 4$ .

La sua configurazione elettronica è  $1s^2 2s^2$ : quindi il berillio completa il primo sottolivello energetico ( $2s$ ) del secondo livello energetico ( $n = 2$ ).

Appartenendo al gruppo II A, il berillio, secondo Lewis, ha due elettroni di valenza e dovrebbe formare una molecola  $\text{Be}_2$ : si osserva però che sperimentalmente così non è.

Nota: vedere più avanti l'ibridazione  $sp$  del berillio per spiegare, ad esempio, l'esistenza di molecole come  $\text{BF}_2$  e  $\text{BeCl}_2$  che sono asimmetriche e apolari.

Quando due atomi di berillio si avvicinano reciprocamente (analogamente a quanto riscontrato per l'elio, nel primo livello energetico), l'energia del sistema risultante per  $\text{Be}_2$  è maggiore dell'energia ottenuta sommando quella dei due atomi di berillio isolati.

La teoria degli orbitali molecolari (fig. 4) spiega in modo compiuto perché non si può formare una molecola biatomica di berillio,  $\text{Be}_2$ :

1. numero degli orbitali atomici di partenza,  $OA = 4$ ;
2. numero degli orbitali molecolari ottenuti,  $OM = 4$ ;
3. numero degli elettroni totali,  $n.e. = 8$
4. orbitali leganti ottenuti,  $OL = (OM + OA - n.e.)/2 = 0$
5. conclusione: tra i due atomi di berillio non si forma alcun legame chimico.

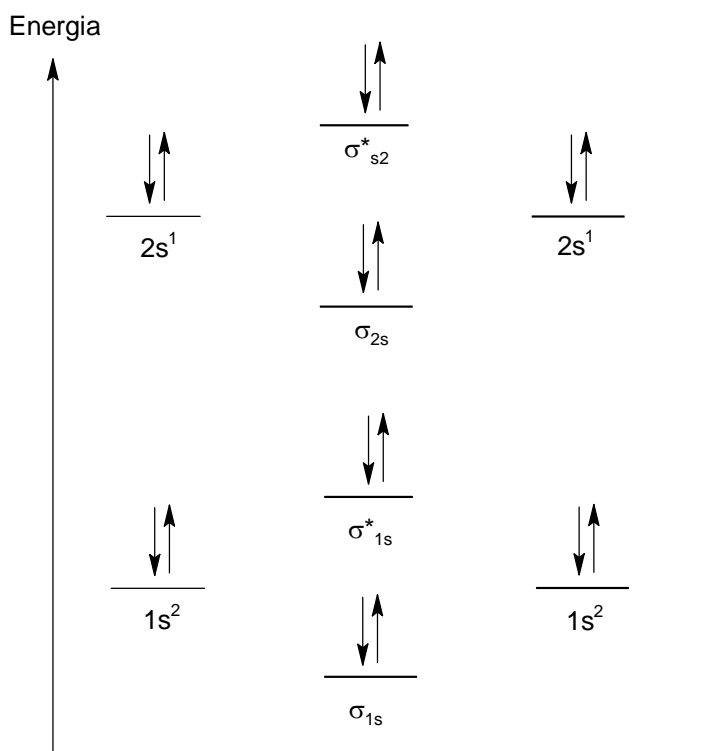


Fig. 4 – Disposizione elettronica che giustifica la non formazione della molecola di berillio.

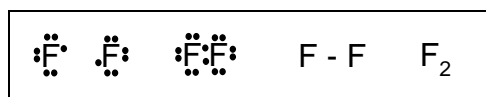
## La molecola biatomica del fluoro, F<sub>2</sub>

L'atomo di fluoro ha numero atomico  $Z = 9$ .

La sua configurazione elettronica è  $1s^2 2s^2 2p^5$ .

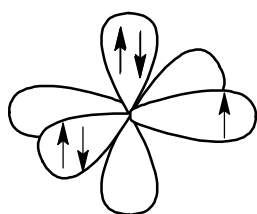
Il fluoro è un *alògeno* (= "generatore di sali") e appartiene al gruppo VII A: secondo Lewis, ha 7 elettroni di valenza e gli manca un solo elettrone per assumere l'ottetto periferico completo del gas nobile neon, che lo segue immediatamente nel sistema periodico degli elementi.

Viene rappresentato così:

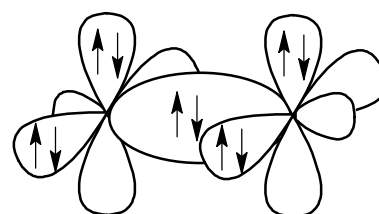
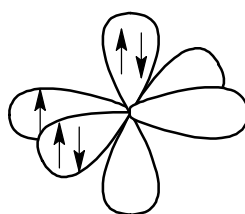


L'elettrone spaiato è disposto su un orbitale 2p; gli altri due orbitali 2p hanno un doppietto elettronico completo ciascuno e non partecipano alla formazione di alcun legame. Anche gli orbitali  $2s^2$  dei due atomi di fluoro non formano alcun legame.

Secondo Lewis, la molecola del fluoro viene rappresentata così:



Due atomi isolati di fluoro



La molecola di fluoro, F<sub>2</sub>

Ognuno dei due atomi di fluoro completa il proprio ottetto periferico.

Viene condiviso un solo doppietto elettronico di legame.

La formazione del legame  $\sigma_{2p}$  avviene perché i singoletti elettronici contenuti negli orbitali 2p appartengono ad orbitali degeneri che si sovrappongono in modo massimo, lungo la linea di maggiore allungamento. Si ottiene quindi la cosiddetta *simmetria cilindrica*.

Il legame  $\sigma_{2p}$  è di tipo covalente omopolare.

La teoria degli orbitali molecolari (fig. 5) spiega al meglio la formazione della molecola di fluoro, F<sub>2</sub>:

1. numero degli orbitali atomici di partenza, OA = 10;
2. numero degli orbitali molecolari ottenuti, OM = 10;
3. numero degli elettroni totali, n.e. = 18
4. orbitali leganti ottenuti, OL = (OM + OA - n.e.)/2 = 1
5. conclusione: tra i due atomi di fluoro si forma un solo legame chimico.

**Nota:** considerazioni analoghe valgono anche per gli altri alògeni: cloro (Cl<sub>2</sub>) gassoso, bromo (Br<sub>2</sub>) liquido e iodio (I<sub>2</sub>) solido.

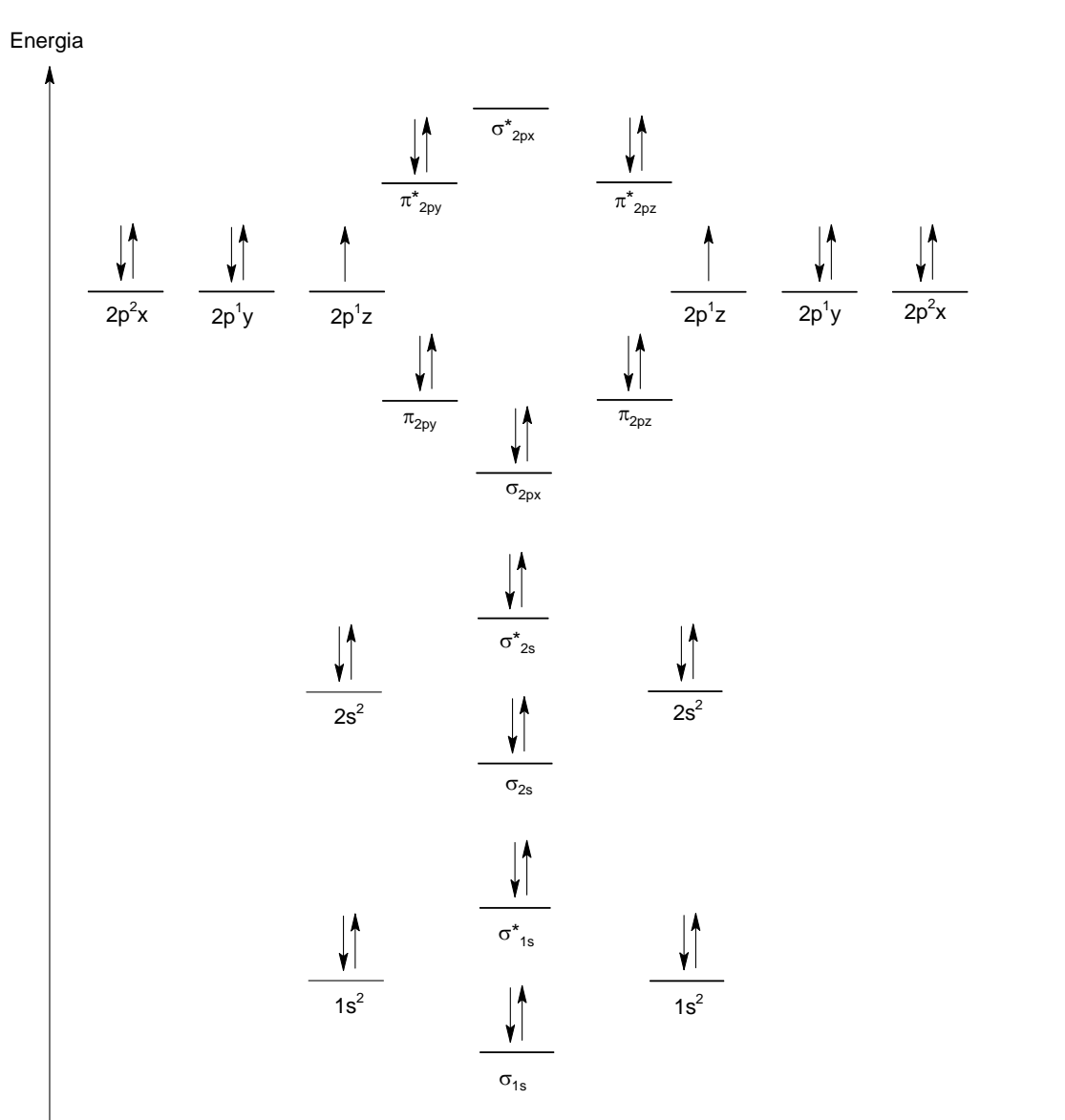


Fig. 5 – Formazione della molecola biatomica di fluoro,  $F_2$ .



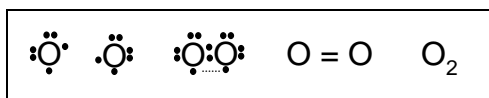
## La molecola biatomica dell'ossigeno, O<sub>2</sub>

L'atomo di ossigeno ha numero atomico  $Z = 8$ .

La sua configurazione elettronica è  $1s^2 2s^2 2p^4$ .

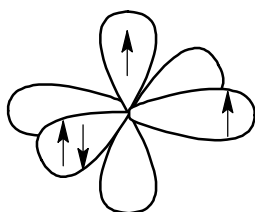
L'ossigeno appartiene al gruppo VI A: secondo Lewis, ha 6 elettroni di valenza e gli mancano due elettroni per assumere l'ottetto periferico del gas nobile neon, che lo segue immediatamente nel sistema periodico degli elementi.

Viene rappresentato così:

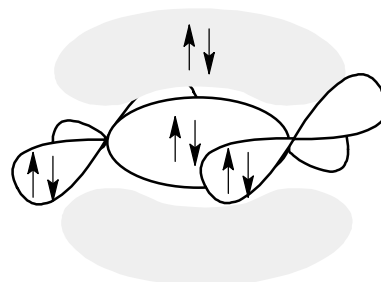


Gli elettroni spaiati sono disposti su due orbitali degeneri 2p, orientati tra loro perpendicolarmente. I due doppietti sono invece disposti: uno su un terzo orbitale 2p, perpendicolare ai due precedenti e l'altro sull'orbitale 2s.

Secondo Lewis, la molecola dell'ossigeno può essere descritta così:



Due atomi di ossigeno isolati



La molecola di ossigeno, O<sub>2</sub>

Tra i due atomi di ossigeno si forma un doppio legame, ma i due legami (pur descritti graficamente con due sbarrette) non sono tra loro equivalenti.

Infatti, per sovrapposizione massima dei due orbitali 2p con un singoletto ciascuno, si forma il legame  $\sigma_{2px}$  (come nel caso del fluoro).

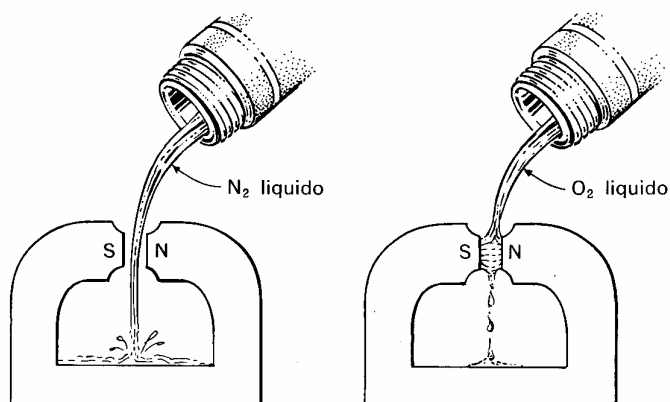
Si ottiene ancora la *simmetria cilindrica*.

Invece, per sovrapposizione intermedia e parallela, gli altri due orbitali 2p con singoletto formano un legame  $\pi_{2pz}$ .

I legami  $\sigma_{2px}$  e  $\pi_{2pz}$  sono di tipo covalente omopolare.

La teoria degli orbitali molecolari (fig. 6) spiega al meglio la formazione della molecola dell'ossigeno, O<sub>2</sub>:

1. numero degli orbitali atomici di partenza, OA = 10;
2. numero degli orbitali molecolari ottenuti, OM = 10;
3. numero degli elettroni totali, n.e. = 16
4. orbitali leganti ottenuti, OL =  $(OM + OA - n.e.)/2 = 2$
5. conclusione: tra i due atomi di ossigeno si formano due legami chimici: uno sigma ( $\sigma_{2px}$ ) ed uno pi greco ( $\pi_{2pz}$ ).



E' da notare che, solo applicando la teoria degli orbitali molecolari, è possibile spiegare il *paramagnetismo* della molecola dell'ossigeno (che ha punto di ebollizione a 90 °K), cioè la sua proprietà di essere debolmente attratta dai magneti per la presenza nella struttura molecolare di due elettroni spaiati, relativi agli orbitali molecolari antileganti di tipo  $\pi$ . Confrontare questo comportamento con quello dell'azoto liquido (che ha punto di ebollizione a 77 °K), che non ha elettroni spaiati.

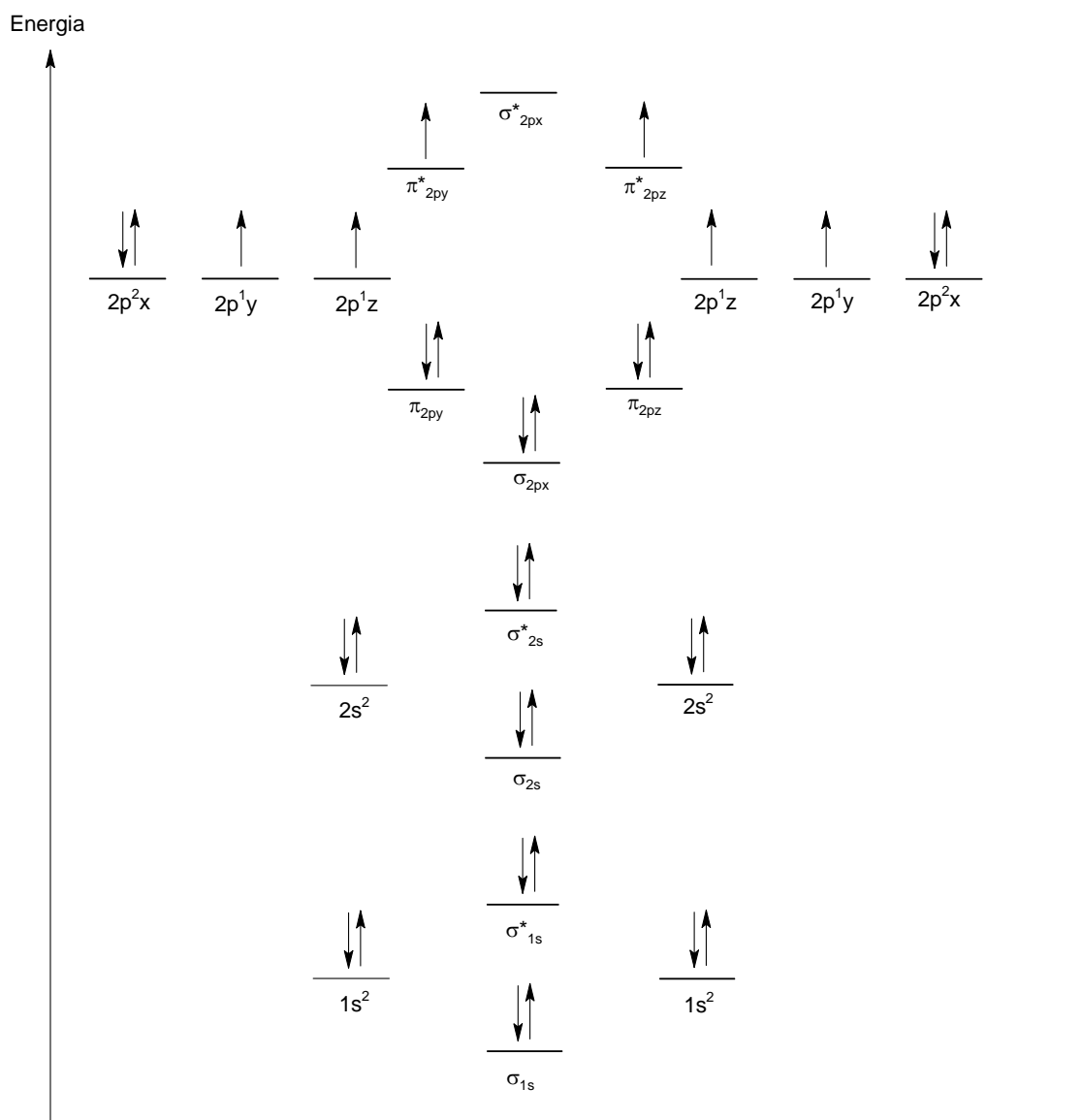


Fig. 6 – Formazione della molecola biatomica di ossigeno,  $O_2$ .

## La molecola biatomica dell'azoto, N<sub>2</sub>

L'atomo di azoto ha numero atomico  $Z = 7$ .

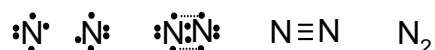
La sua configurazione elettronica è  $1s^2 2s^2 2p^3$ .

L'ossigeno appartiene al gruppo VA: secondo Lewis, ha 5 elettroni di valenza e gli mancano tre elettroni per assumere l'ottetto periferico del gas nobile neon, che lo segue immediatamente nel sistema periodico degli elementi.

Il doppietto elettronico è quello dell'orbitale  $2s^2$  e non partecipa alla formazione di alcun legame chimico.

I tre singoletti elettronici, per la regola della massima molteplicità dello spin elettronico formulata da Hund, si collocano separatamente in ognuno dei tre orbitali degeneri  $2p$ , che sono orientati reciprocamente a  $90^\circ$  tra loro:  $2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ .

Secondo Lewis, la molecola dell'azoto può essere descritta così:



Ognuno dei due atomi di azoto completa il proprio ottetto periferico.

Vengono condivisi tre doppietti elettronici di legame.

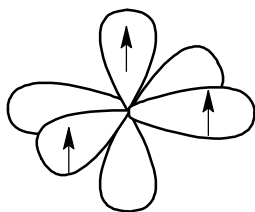
Quindi tra i due atomi di azoto si forma un triplo legame, ma i tre legami (pur descritti da tre sbarrette identiche) non sono tra loro equivalenti.

Infatti (come nei casi del fluoro e dell'ossigeno) per sovrapposizione massima di due orbitali  $2p$  con un singoletto ciascuno, si forma un legame  $\sigma_{2p_x}$ .

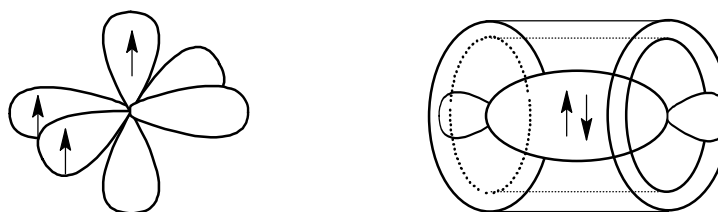
Invece, per sovrapposizione intermedia e parallela, gli altri quattro orbitali  $2p$ , con un singoletto elettronico ciascuno, formano i due legami  $\pi_{2p_y}$  e  $\pi_{2p_z}$ .

Questi due legami  $\pi$  formano una specie di tubo, il cui asse di allungamento coincide con l'asse di legame tra i due atomi di azoto (*simmetria cilindrica*).

I legami  $\sigma_{2p_x}$ ,  $\pi_{2p_y}$  e  $\pi_{2p_z}$  sono di tipo covalente omopolare.



Due atomi di azoto isolati



La molecola dell'azoto, N<sub>2</sub>

La teoria degli orbitali molecolari (fig. 7) spiega al meglio la formazione della molecola dell'azoto, N<sub>2</sub>:

1. numero degli orbitali atomici di partenza, OA = 10;
2. numero degli orbitali molecolari ottenuti, OM = 10;
3. numero degli elettroni totali, n.e. = 14
4. orbitali leganti ottenuti, OL = (OM + OA - n.e.)/2 = 3
5. conclusione: tra i due atomi di ossigeno si formano tre legami chimici: uno sigma ( $\sigma_{2p_x}$ ) e due pi greco ( $\pi_{2p_y}$  e  $\pi_{2p_z}$ ).

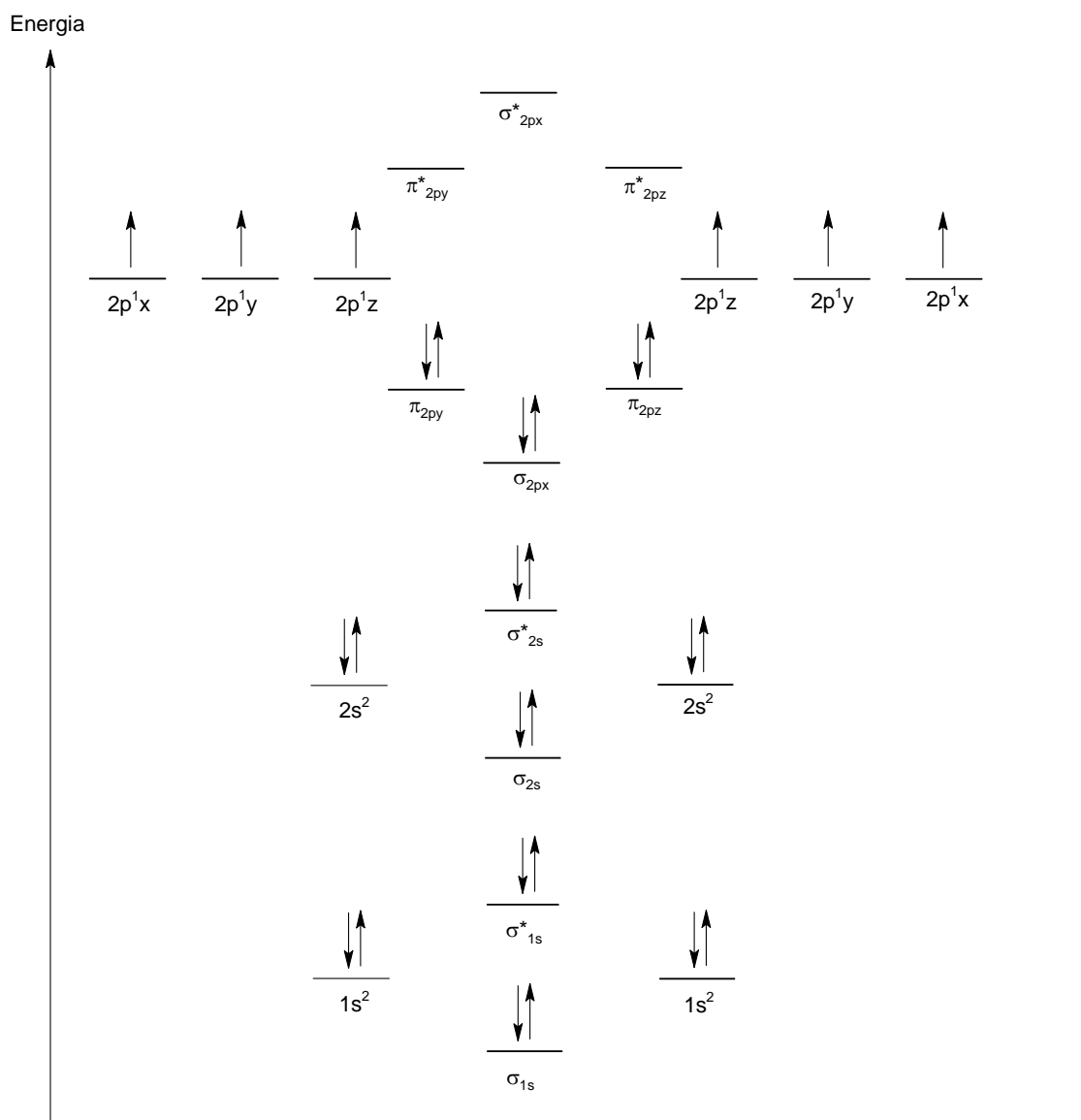


Fig. 7 – Formazione della molecola biatomica di azoto,  $N_2$ .

## Le molecole biatomiche con legami covalenti eteropolari

### La molecola dell'acido fluoridrico, HF

La molecola dell'acido fluoridrico (HF) è una molecola biatomica formata da idrogeno, avente elettronegatività 2,1 e da fluoro, avente elettronegatività 4,0.

La differenza di elettronegatività è piuttosto elevata:

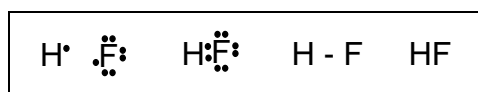
$$\delta = 4,0 - 2,1 = 1,9$$

Questo ci permette di dire che il legame tra i due atomi è fortemente polarizzato: la densità di carica della coppia di elettroni di legame è massima in prossimità dell'atomo di fluoro.

L'atomo di idrogeno ha numero atomico  $Z = 1$  e configurazione elettronica  $1s^1$ .

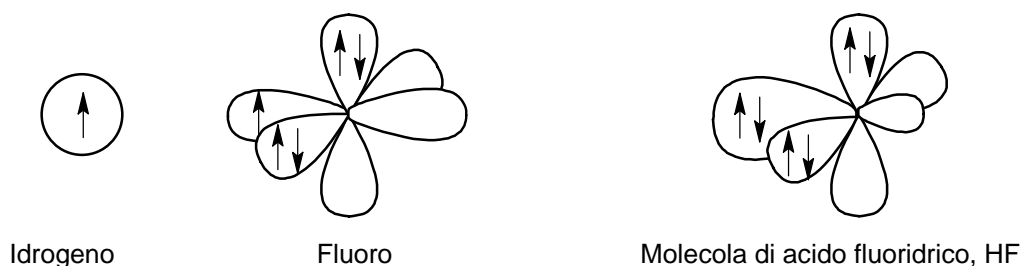
L'atomo di fluoro ha numero atomico  $Z = 9$  e configurazione elettronica  $1s^2 2s^2 2p^5$ .

Secondo Lewis, la molecola di acido fluoridrico si forma nel modo seguente:



Si ottiene che l'atomo di idrogeno completa il suo duetto elettronico (come il gas nobile elio) e il fluoro completa il suo otetto elettronico (come il gas nobile neon).

La formazione del legame  $\sigma$  covalente eteropolare avviene perché i singoletti elettronici appartengono ad un orbitale  $1s$  (idrogeno) e ad un orbitale  $2p$  (fluoro) che si sovrappongono in modo massimo, lungo la linea di maggiore allungamento dell'orbitale  $2p$ .



La teoria degli orbitali molecolari (fig. 8) spiega la formazione della molecola dell'acido fluoridrico (HF) nel modo seguente:

1. il numero degli orbitali atomici di partenza è:  $OA = 6$  (uno dell'idrogeno e cinque del fluoro);
2. gli orbitali  $1s^2$  e  $2s^2$  del fluoro, vista la loro bassa energia, non sono coinvolti nella formazione di legami;
3. gli elettroni che formano il doppietto di legame si collocano nell'orbitale molecolare  $\sigma_{2px}$ ;
4. rimangono, nell'atomo di fluoro, *due coppie di elettroni non leganti* ( $2p_y^2 2p_z^2$ );
5. conclusione: tra i due atomi di idrogeno e fluoro, per costituire la molecola dell'acido fluoridrico, si forma un solo legame chimico sigma ( $\sigma_{2px}$ ) covalente eteropolare.

**Nota 1**

L'energia degli orbitali molecolari è la seguente:

$$\sigma < \pi < \text{non legante} < \sigma^* < \pi^*$$

**Nota 2**

Nella analoga formazione della molecola dell'acido cloridrico (HCl), la polarizzazione del legame covalente tra idrogeno (H) e cloro (Cl) sarà minore, perché il valore di elettronegatività dell'idrogeno è 2,1 mentre quello del cloro è 3,0. Ne consegue che la differenza di elettronegatività tra i due atomi sarà:

$$\delta = 3,0 - 2,1 = 0,9$$

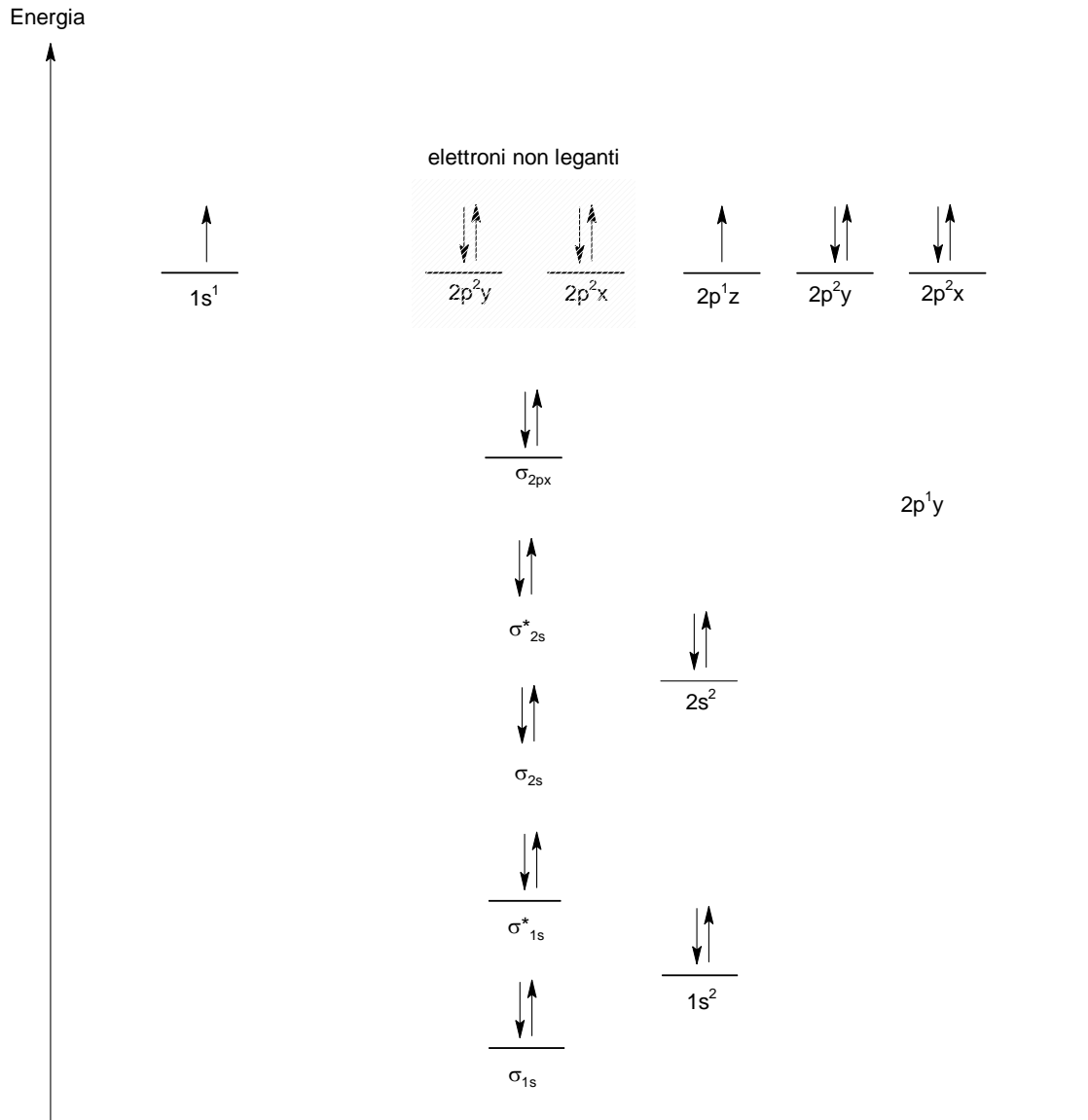


Fig. 8 – Formazione della molecola di acido fluoridrico, HF.

## La molecola del monossido di carbonio, CO

La molecola del monossido di carbonio (CO) è costituita da un atomo di carbonio e da un atomo di ossigeno. Sappiamo che CO esiste ed è un potentissimo veleno (spesso mortale) per gli esseri viventi.

L'atomo di carbonio ha numero atomico  $Z = 6$  e configurazione elettronica  $1s^2 2s^2 2p^2$ .

Per la regola della massima molteplicità dello spin elettronico formulata da Hund, i due elettroni sugli orbitali 2p sono disposti come singoletti con spin parallelo e su due orbitali degeneri distinti. Rimane quindi un orbitale 2p vuoto.

L'atomo di ossigeno ha numero atomico  $Z = 8$  e configurazione elettronica  $1s^2 2s^2 2p^4$ .

Per la regola di Hund, due dei quattro elettroni sugli orbitali 2p, sono disposti come singoletti con spin parallelo e su due orbitali degeneri distinti. Il terzo orbitale 2p è completo di doppietto elettronico e, per il principio di esclusione di Pauli, i due elettroni hanno spin opposti, antiparallelo.

L'ossigeno ha un'elettronegatività di 3,5 ed il carbonio un'elettronegatività di 2,5.

La differenza di elettronegatività:

$$\delta = 3,5 - 2,5 = 1,0$$

ci dice che il legame tra i due atomi è covalente eteropolare, con un maggior addensamento elettronico in prossimità dell'ossigeno.

Poiché carbonio ed ossigeno appartengono allo stesso periodo (numero quantico principale  $n = 2$ ) del sistema periodico degli elementi, le energie dei rispettivi orbitali atomici sono molto simili e la configurazione elettronica della molecola del monossido di carbonio è praticamente confrontabile con quella della molecola biatomica dell'azoto,  $N_2$ .

Come si vede, risulta un eccesso di elettroni leganti (6) e si ottiene un ordine di legame,  $OL = 6 : 2 = 3$ .

Quindi, secondo la teoria degli orbitali molecolari, nel monossido di carbonio si formano tre legami chimici tra il carbonio e l'ossigeno: un legame sigma ( $\sigma_{2px}$ ) e due legami pi greco ( $\pi_{2py}$  e  $\pi_{2pz}$ ).

### Nota

La scrittura di Lewis (vedi figura sottostante) non permette di rappresentare questo composto e i legami tra i suoi atomi: infatti, mentre l'ossigeno completa il suo ottetto periferico, il carbonio presenta sei elettroni e non otto nella regione periferica.



## Ibridazione degli orbitali atomici

### Metalli del gruppo II A: il berillio

#### Ibridazione sp dell'atomo di berillio nell'alogenuro di berillio, $\text{BeX}_2$

Le molecole  $\text{BeF}_2$  e  $\text{BeCl}_2$  esistono in natura e sono molecole asimmetriche e apolari.

La notazione elettrone-puntino di Lewis non riesce a giustificare la loro esistenza, né tanto meno la condizione di apolarità, riscontrata sperimentalmente.

Il berillio (Be) ha numero atomico  $Z = 4$  e appartiene al gruppo II A dei metalli alcalino-terrosi, che comprende anche magnesio (Mg), calcio (Ca), stronzio (Sr), bario (Ba) e radon (Ra).

Questi elementi hanno configurazione elettronica esterna  $ns^2$  e, ossidandosi, si trasformano facilmente in cationi bivalenti  $X^{+2}$ .

La configurazione elettronica del berillio è  $1s^2 2s^2$ .

La configurazione elettronica degli alogeni fluoro (F) e cloro (Cl) è  $ns^2 np^5$ , con  $n \geq 2$ .

E' da notare che il doppietto  $2s^2$  del berillio non può formare alcun legame con l'elettrone spaiato degli alogeni, che è collocato nel sottolivello  $np^5$ .

Infatti, per il principio di esclusione di Pauli, anche in un orbitale di legame (orbitale molecolare) possono coesistere al massimo due elettroni, purché dotati di spin opposti (o antiparalleli).

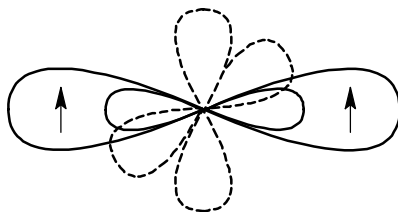
Bisogna quindi ricorrere ad un modello nuovo, che giustifichi l'esistente. Si tratta del modello di ibridazione (o ibridizzazione) degli orbitali atomici.

Nel caso del berillio, fornendo adeguatamente energia, si coinvolge il doppietto elettronico dell'orbitale  $2s^2$  ed un orbitale  $2p$  vuoto (che comunque esiste come soluzione matematica possibile).

Si ottengono quindi due orbitali degeneri (o isoenergetici), nuovi, che hanno la stessa forma (a clava, a mazza da baseball), le stesse dimensioni e – tra di loro – lo stesso contenuto energetico; hanno però una diversa disposizione nello spazio.

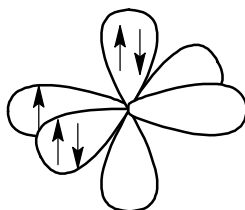
Questi orbitali ibridi sono definiti **orbitali sp**, perché nella loro formazione sono stati coinvolti un orbitale  $2s$  completo ed un orbitale  $2p$  vuoto.

L'atomo di berillio si presenta quindi nel seguente modo:



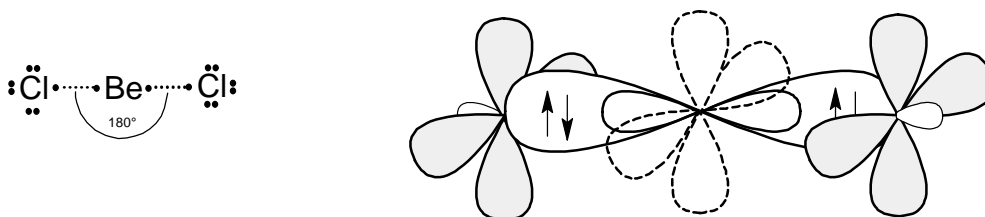
Struttura ibridata sp dell'atomo di berillio

Gli alogeni (fluoro e cloro, nel nostro esempio) si presentano invece così:



Configurazione elettronica di un alogeno

Se si sovrappongono un orbitale ibrido  $sp$  ed un orbitale  $2p^1$  lungo la linea di massimo allungamento, si ottiene la seguente rappresentazione dell'**alogenuro di berillio**,  $BeX_2$  (con  $X = F, Cl$ ):



La rappresentazione del cloruro di berillio,  $BeCl_2$

Gli assi di legame formano tra loro angoli di  $180^\circ$ ; l'**ibridazione  $sp$**  è detta anche **ibridazione lineare**.

## Non metalli del gruppo III A: il boro

### Ibridazione $sp^2$ dell'atomo di boro nell'alogenuro di boro, $BX_3$

Le molecole  $BF_3$  e  $BCl_3$  esistono in natura e sono molecole asimmetriche e apolari.

La notazione elettrone-puntino di Lewis non riesce a giustificare la loro esistenza, né tanto meno la condizione di apolarità, riscontrata sperimentalmente.

Il boro (B) ha numero atomico  $Z = 5$ ; appartiene al gruppo III A ed è un non metallo.

Gli elementi di questo gruppo hanno configurazione elettronica esterna  $ns^2 np^1$ .

La configurazione elettronica del boro è  $1s^2 2s^2 2p^1$ .

La configurazione elettronica degli alogeni fluoro (F) e cloro (Cl) è  $ns^2 np^5$ , con  $n \geq 2$ .

E' da notare che il doppietto  $2s^2$  del boro non può formare alcun legame con l'elettrone spaiato degli alogeni, che è collocato nel sottolivello  $np^5$ .

La porzione  $2s^2 2p^1$  non giustifica la formazione dei tre legami equivalenti del boro verso gli atomi degli alogeni e, in particolare, con l'elettrone spaiato collocato nel sottolivello  $np^5$ .

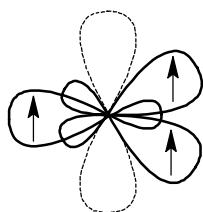
Infatti, per il principio di esclusione di Pauli, anche in un orbitale di legame (orbitale molecolare) possono coesistere al massimo due elettroni, purché dotati di spin opposti (o antiparalleli). Bisogna quindi ricorrere ad un modello nuovo, che giustifichi l'esistente. Si tratta del modello di ibridazione (o ibridizzazione) degli orbitali atomici.

Nel caso del boro, fornendo adeguatamente energia, si coinvolge il doppietto elettronico dell'orbitale  $2s^2$ , un orbitale  $2p$  vuoto (che comunque esiste come soluzione matematica possibile) e l'orbitale  $2p^1$  che contiene un singoletto elettronico.

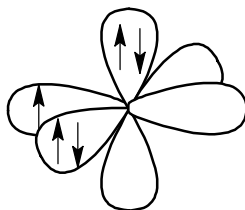
Si ottengono quindi tre orbitali degeneri (o isoenergetici), nuovi, che hanno la stessa forma (a clava, a mazza da baseball), le stesse dimensioni e – tra di loro – lo stesso contenuto energetico; hanno però una diversa disposizione nello spazio.

Questi orbitali ibridi sono definiti **orbitali  $sp^2$** , perché nella loro formazione sono stati coinvolti un orbitale  $2s$  completo, un orbitale  $2p$  vuoto ed un orbitale  $2p$  con un singoletto elettronico.

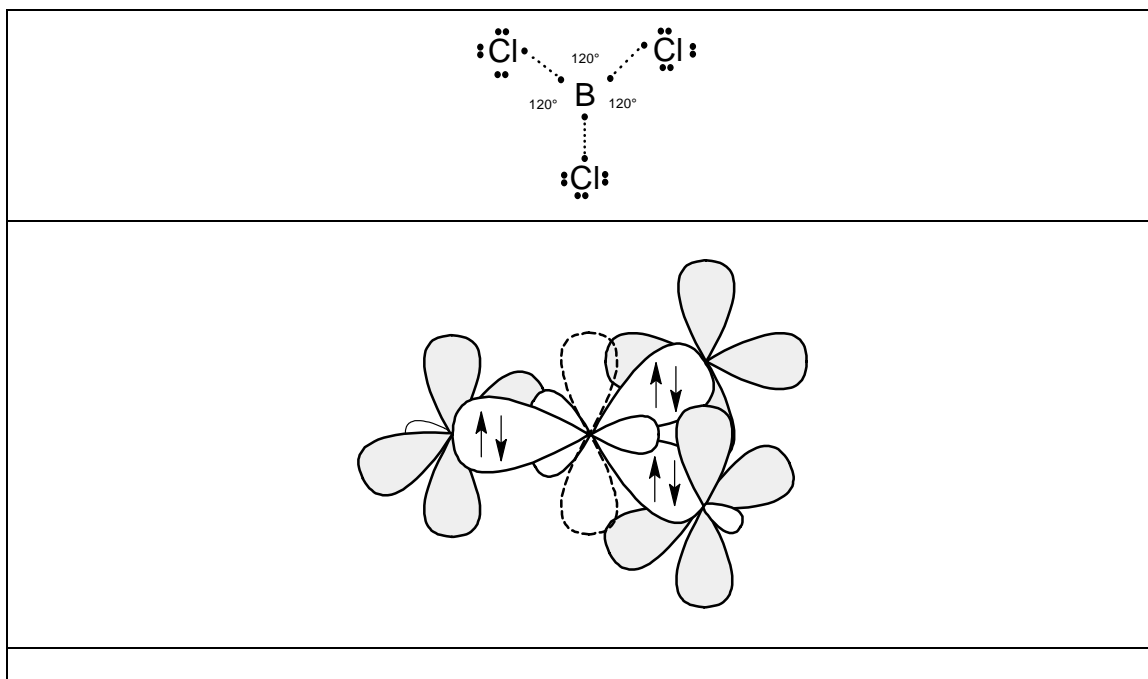
L'atomo di boro si presenta quindi nel seguente modo:



Gli alogeni (fluoro e cloro, nel nostro esempio) si presentano invece così:



Se si sovrappongono un orbitale ibrido  $sp^2$  ed un orbitale  $2p^1$  lungo la linea di massimo allungamento, si ottiene la seguente rappresentazione dell'**alogenuro di boro**,  $BX_3$  (con  $X = F, Cl$ ):



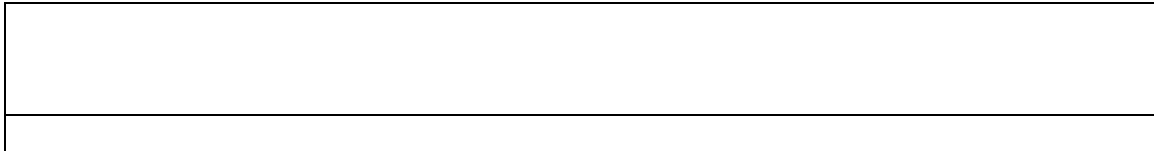
Gli assi di legame formano tra loro angoli di  $120^\circ$ ; l'ibridazione  $sp^2$  è detta anche ibridazione triangolare planare.

### La molecola di anidride carbonica, $\text{CO}_2$

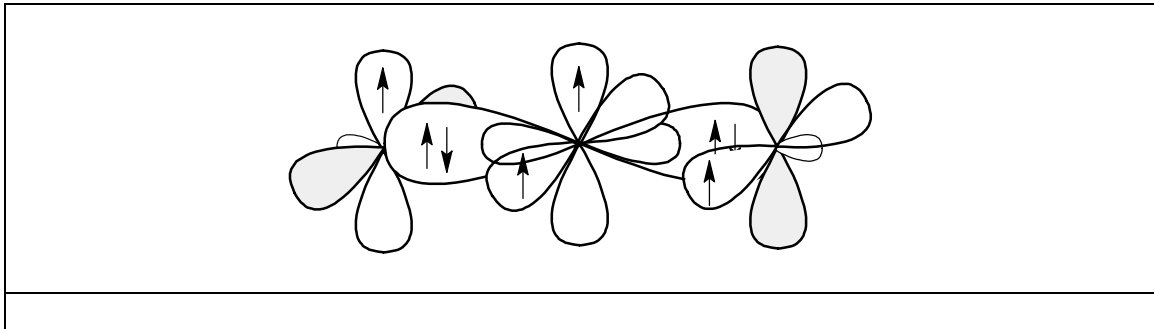
Un classico esempio di ibridazione di tipo  $sp$  per l'atomo di carbonio è quello che giustifica la formazione della molecola di anidride carbonica ( $\text{CO}_2$ ): questa molecola è asimmetrica e apolare; può anche passare attraverso la membrana biologica, costituita da un doppio strato fosfolipidico, per diffusione semplice, secondo il gradiente di concentrazione.

L'atomo di carbonio è ibridato  $sp$  ed ognuno dei due atomi di ossigeno è "normale".

Si ottiene la seguente struttura della molecola:



Che può essere rappresentata nel modo seguente:



Perpendicolarmente alla direzione di legame tra i due ossigeno e passando per la posizione del nucleo del carbonio ibridato  $sp$ , si può verificare facilmente che esiste un piano di simmetria speculare.