

Teoria degli orbitali e l'atomo di carbonio

Il carbonio ha numero atomico $Z = 6$, corrispondente al numero di protoni presenti nel nucleo.

Poiché il valore di Z è uguale a quello del numero di elettroni, l'atomo è neutro (privo di carica netta).

In caso contrario, l'atomo è detto ione.

Si usa scrivere questo numero come pedice sinistro del simbolo dell'elemento chimico in questione: per esempio ${}_6\text{C}$, poiché il carbonio ha sei protoni.

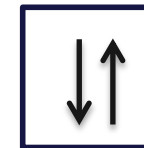
La configurazione elettronica si riferisce alla disposizione degli elettroni legati, ossia al loro comportamento attorno ai nuclei di uno o più atomi.

La configurazione elettronica (1)

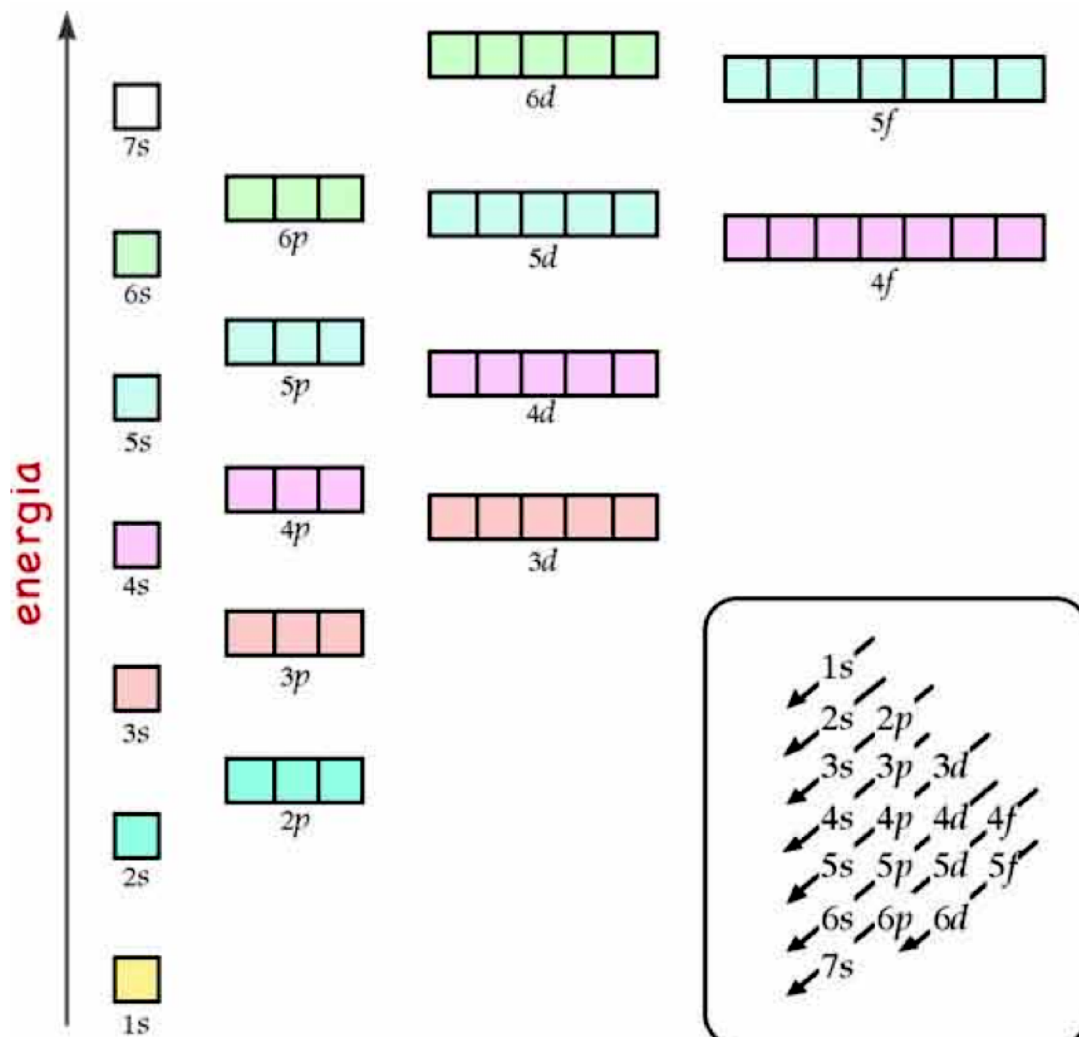
La configurazione elettronica degli orbitali atomici viene descritta dai livelli energetici, rappresentati da una cella, dentro la quale vengono indicati gli elettroni con delle frecce.



Nel caso di doppietti elettronici, tali frecce hanno verso opposto, in modo da sottolineare che gli elettroni di uno stesso livello energetico presentano spin opposti.



La configurazione elettronica (2)



Successione degli orbitali in ordine di energia crescente

I livello: orbitale s (sferico)
 può contenere 2 e⁻

II livello: 1 orbitale s e 3 orbitali p (forma bilobata); ogni orbitale può contenere 2 e⁻, per un totale di 8 e⁻

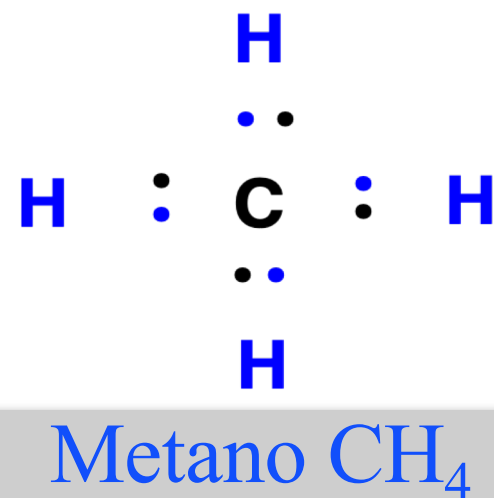
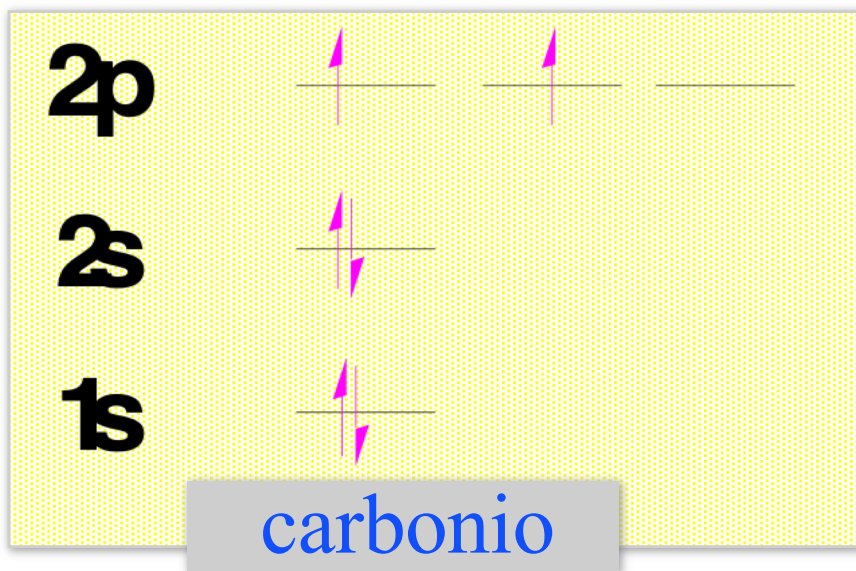
III livello: 1 orbitale s, 3 orbitali p, 5 orbitali d, per un totale di 18 e⁻

IV livello: 1 orbitale s, 3 orbitali p, 5 orbitali d, 7 orbitali f, per un totale di 32 e⁻

Teoria degli orbitali e l'atomo di carbonio

Il carbonio ha numero atomico $Z = 6$

La configurazione elettronica dell'atomo di carbonio allo stato fondamentale presenta due elettroni spaiati...



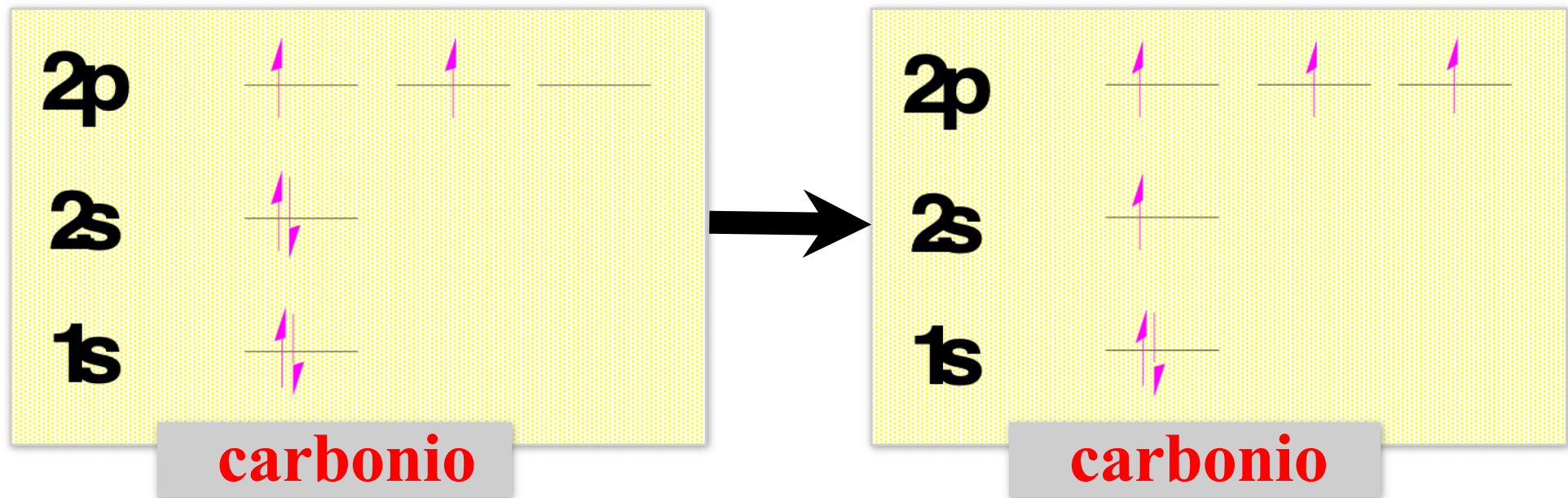
...ma l'atomo di carbonio forma 4 legami covalenti e non 2 !!

Stato eccitato della configurazione elettronica dell'atomo di carbonio

La tetravalenza del carbonio si può spiegare se un elettrone dell'orbitale 2s passa a quello 2p

Stato fondamentale

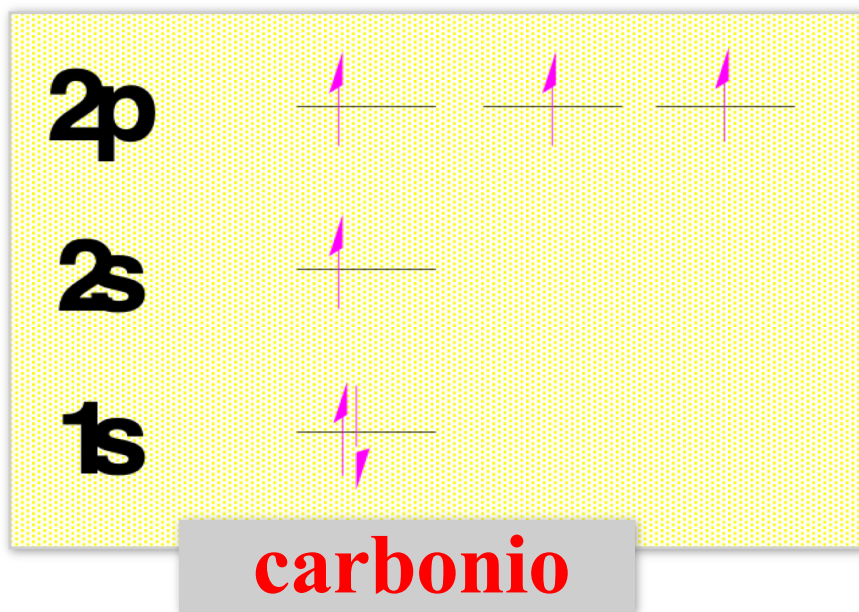
Stato eccitato



Configurazione elettronica dell'atomo di carbonio ibridato

L'assenza di differenze nei quattro legami che si formano si può spiegare con l'ibridazione.

Stato eccitato



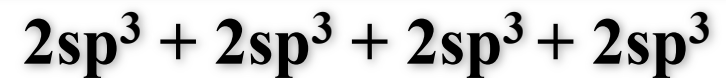
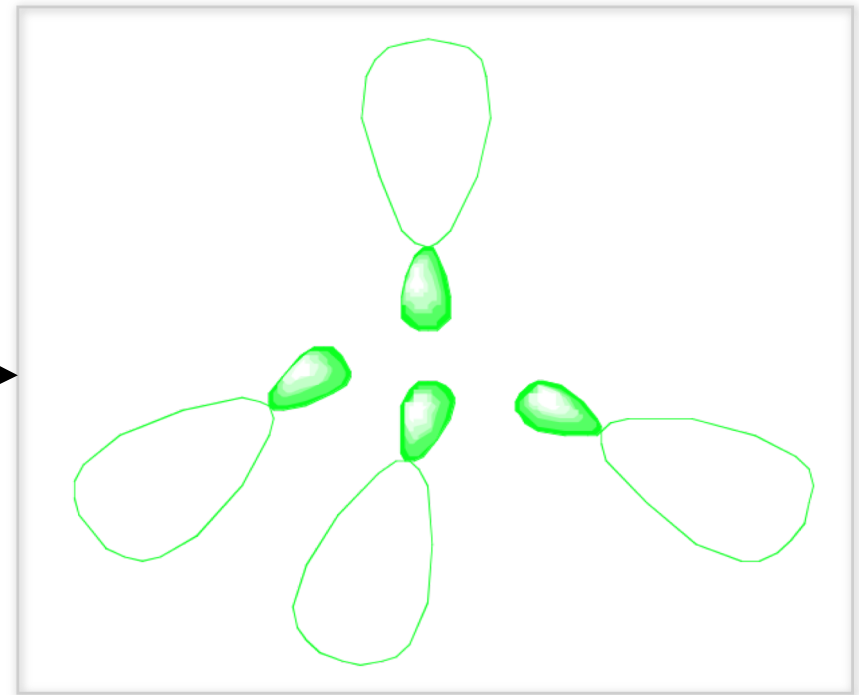
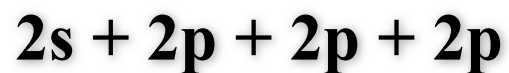
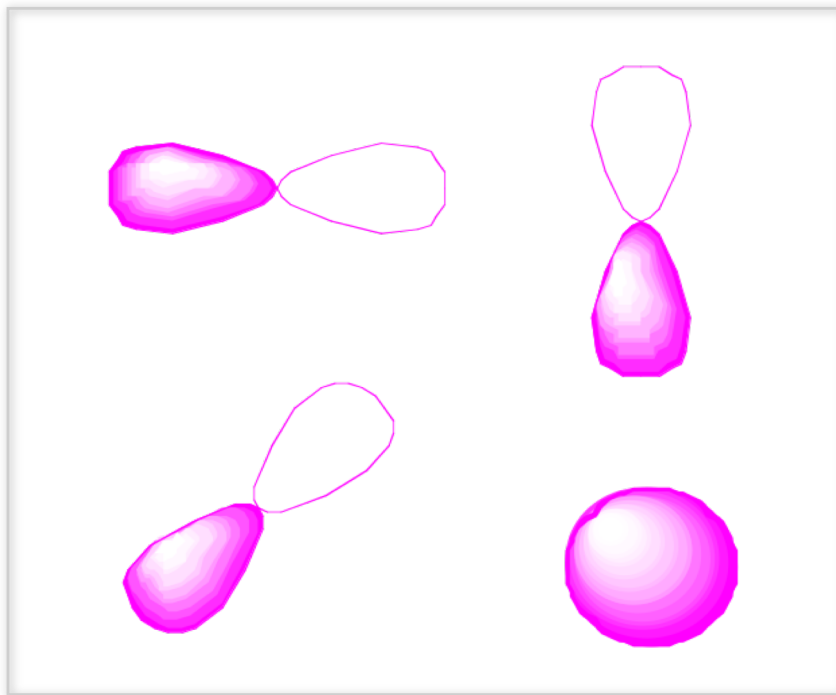
Stato ibridato



N.B.: l'ibridazione degli orbitali atomici si verifica solo se l'atomo interessato si impegna nella formazione di legami. Questo fenomeno interessa la quasi totalità delle molecole.

Ibridazione degli orbitali atomici

La struttura del metano può essere spiegata ammettendo che gli orbitali atomici dello stato eccitato del carbonio (2s e 2p) **si mescolano generando quindi quattro orbitali ibridi sp^3 di identica energia e forma.**

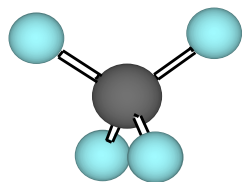


Idrocarburi ALIFATICI

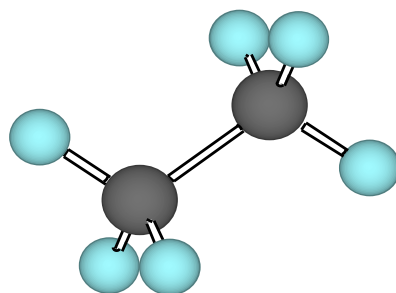
- SATURI
 - ✓ Alcani
 - ✓ Cicloalcani
- INSATURI
 - ✓ Alcheni
 - ✓ Alchini

Negli alcani gli atomi di carbonio sono tutti ibridati sp^3 con gli idrogeni diretti verso i vertici di un tetraedro

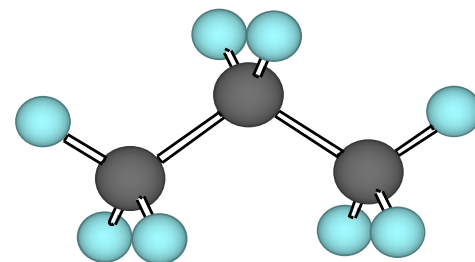
Alcuni esempi: i primi termini della serie



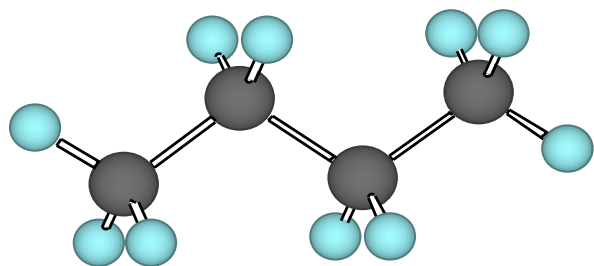
□ metano CH_4



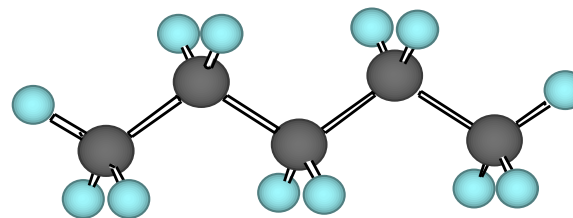
□ Etano C_2H_6



□ propano C_3H_8



□ butano C_4H_{10}



□ pentano C_5H_{12}

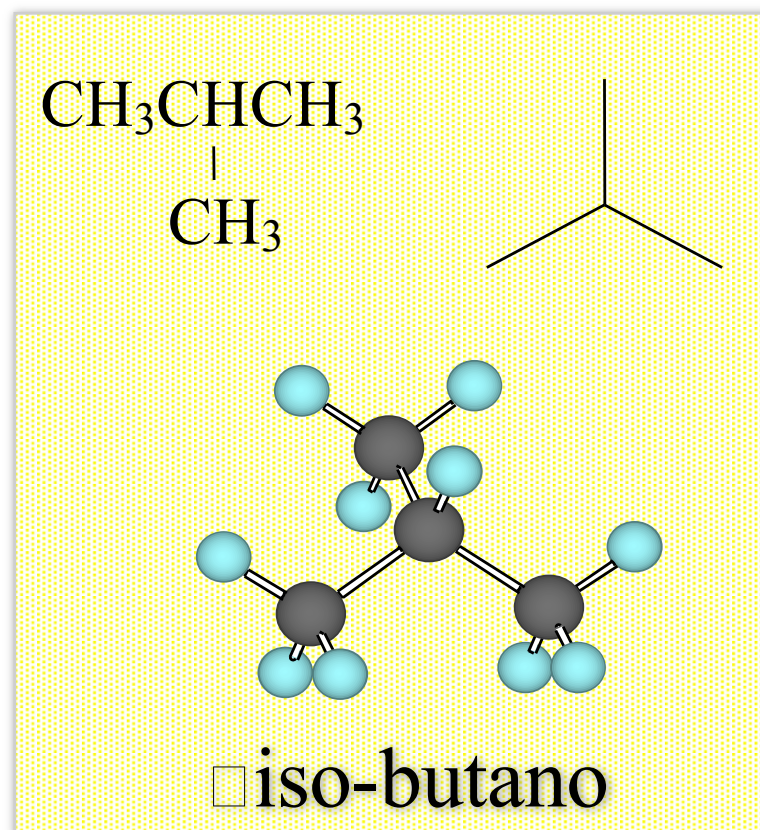
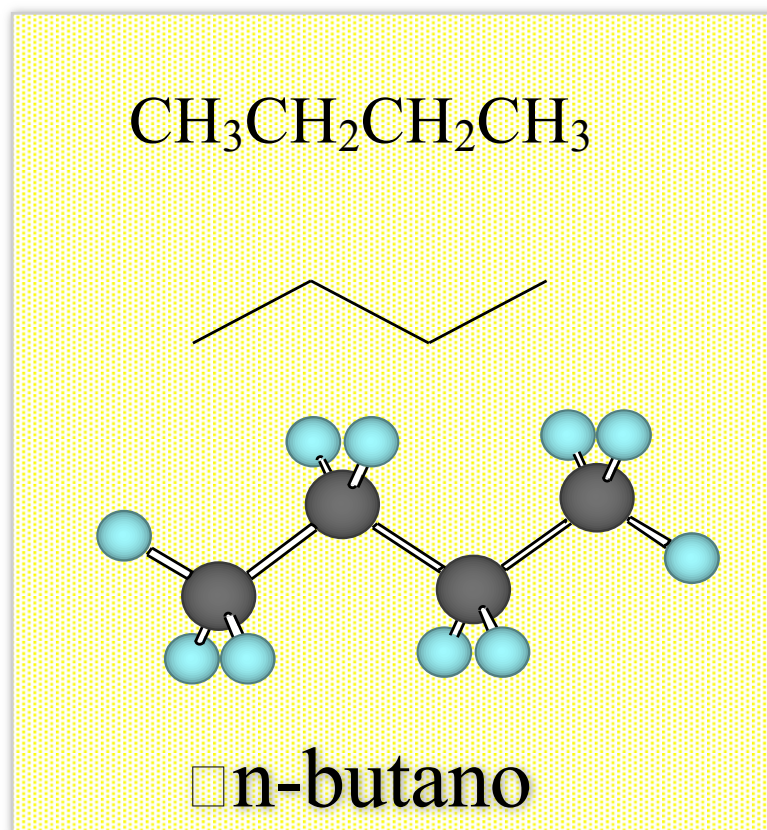
Isomeri strutturali

Gli alcani con un numero di atomi di carbonio uguale o superiore a quattro possono dare luogo ad isomeria strutturale.

Gli isomeri strutturali hanno la stessa formula molecolare ma gli atomi sono legati in maniera diversa, cioè hanno diversa formula di struttura.

Gli isomeri strutturali differiscono per le proprietà fisiche, chimiche e spettroscopiche

Isomeri strutturali del butano (C₄H₁₀)



Alcheni

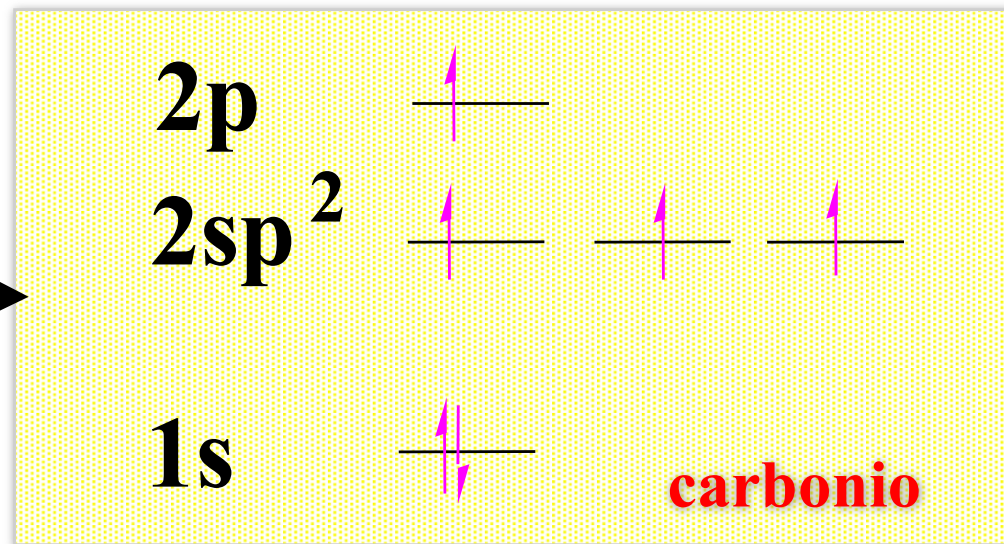
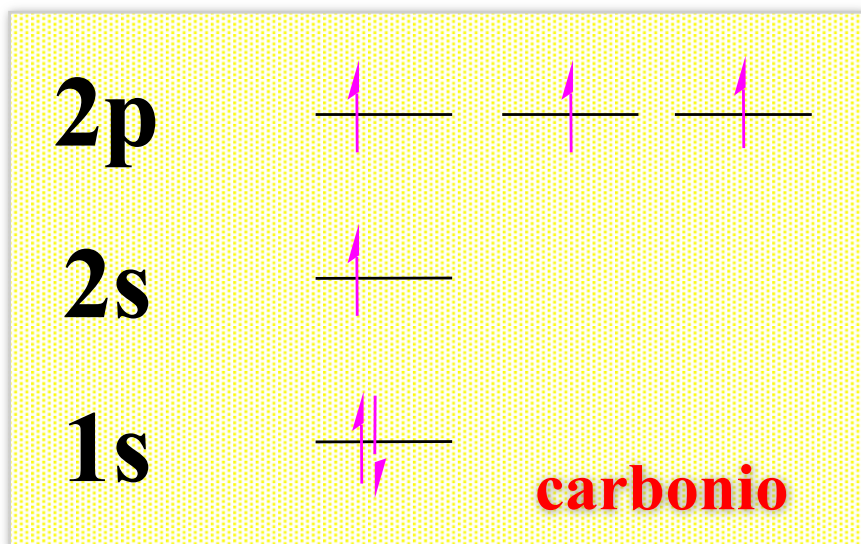
Gli alcheni sono idrocarburi che contengono almeno un doppio legame carbonio-carbonio.

Negli alcheni gli atomi di carbonio impegnati nel *doppio legame sono ibridati sp^2* .

Nell'ibridazione sp^2 il carbonio impegna l'orbitale 2s e due degli orbitali 2p, lasciando un elettrone in un orbitale 2p che non partecipa all'ibridazione

Stato eccitato

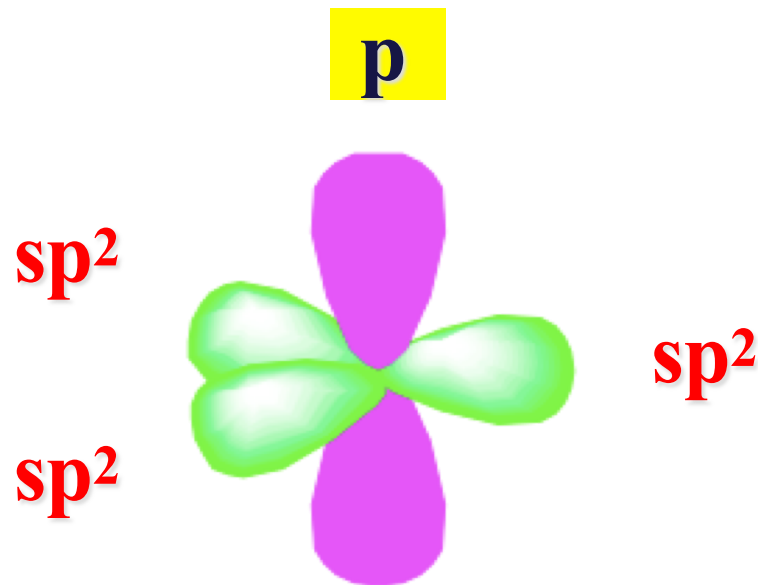
Stato ibridato



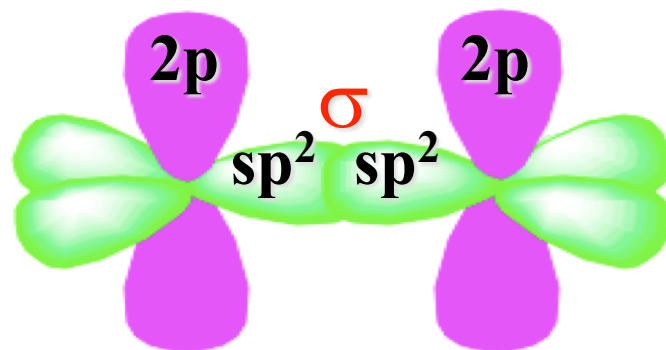
Geometria degli orbitali ibridi sp^2

Gli orbitali ibridi sp^2 giacciono in un unico piano e si dispongono a 120° l'uno rispetto all'altro.

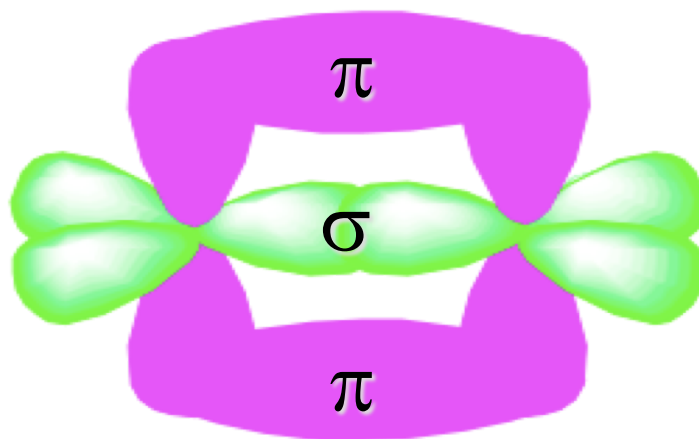
L'asse dell'orbitale 2p non ibridato è perpendicolare al piano identificato dagli orbitali ibridi sp^2 .



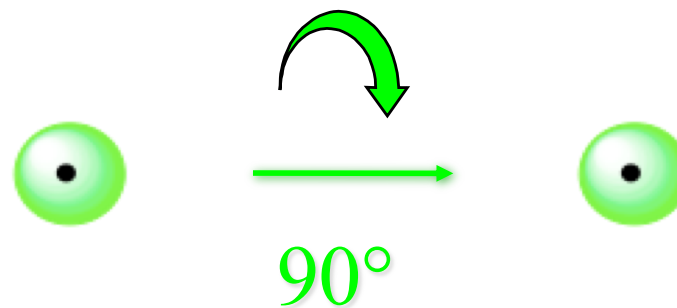
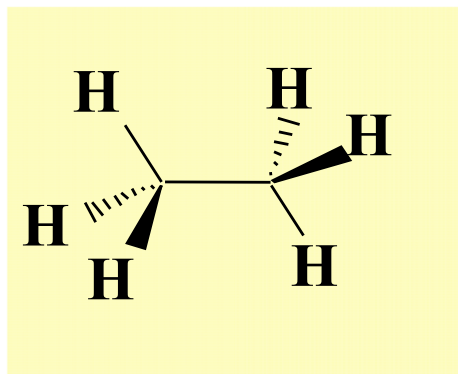
Dalla sovrapposizione lungo lo stesso asse di due orbitali sp^2 si forma un **orbitale molecolare σ** .



Dalla sovrapposizione laterale dei due orbitali $2p$ non ibridati si forma un **orbitale molecolare π** .



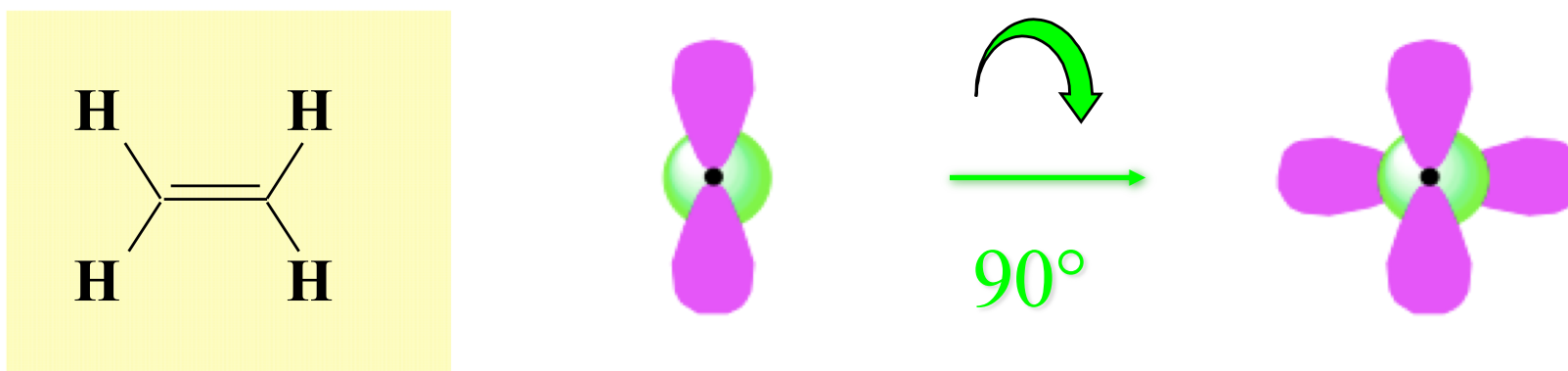
Rotazione intorno al legame σ



I conformeri rotazionali non alterano il grado di sovrapposizione tra gli orbitali e quindi la forza di legame resta invariata.

Rotazione intorno al legame doppio ($\sigma + \pi$)

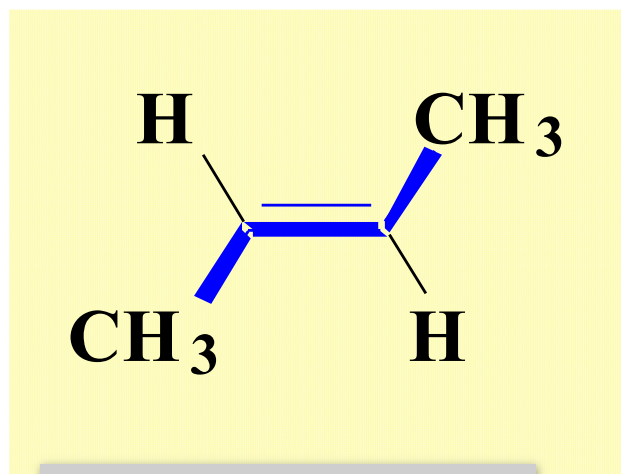
La rotazione **NON** è permessa a causa della asimmetria dell'orbitale molecolare geometricamente bloccato.



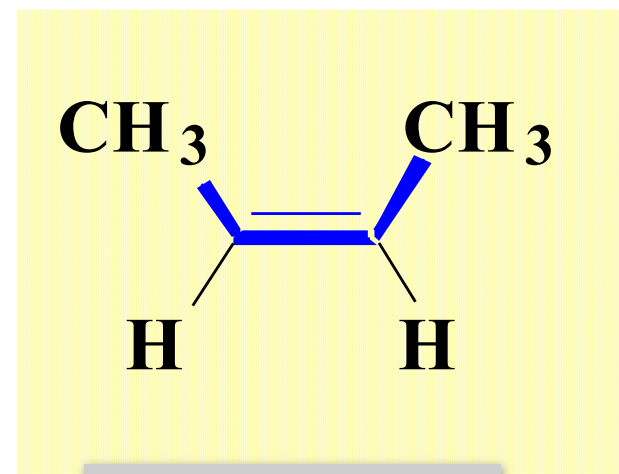
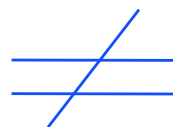
Se tale rotazione si dovesse verificare, la sovrapposizione laterale verrebbe distrutta.

Isomeri geometrici

Gli alcheni possono dar luogo a isomeri geometrici che sono dovuti alla mancanza della libera rotazione intorno al doppio legame C-C.



trans-2-butene



cis-2-butene

Si verifica quando due sostituenti identici (diversi dagli altri due) sono legati ai due atomi di carbonio.

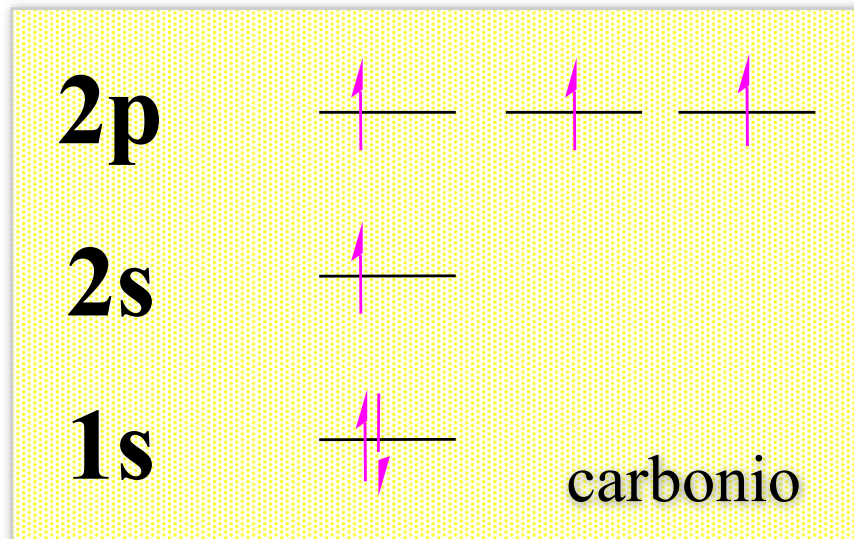
Alchini

Gli alchini sono idrocarburi che contengono almeno un triplo legame carbonio-carbonio.

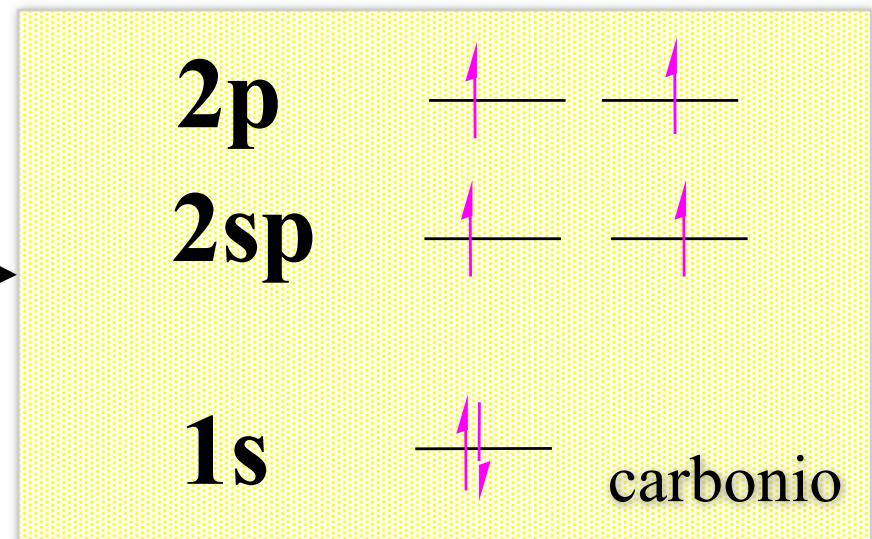
Negli alchini gli atomi di carbonio impegnati nel triplo legame sono ibridati sp .

Nell'ibridazione sp , il carbonio impegna l'orbitale $2s$ e uno degli orbitali $2p$, lasciando un elettrone ciascuno negli orbitali $2p$ che non partecipano all'ibridazione

Stato eccitato



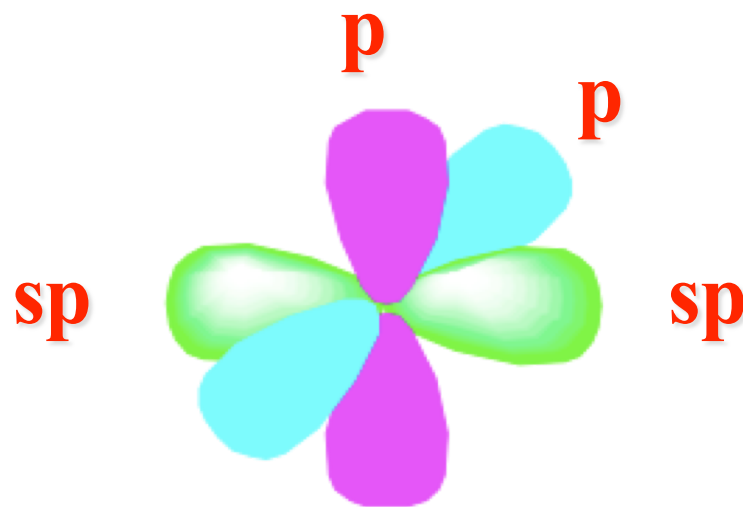
Stato ibridato



Geometria degli orbitali ibridi sp

Gli orbitali ibridi sp si dispongono a 180° l'uno rispetto all'altro.

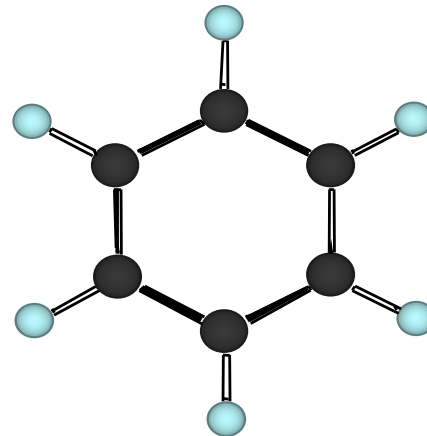
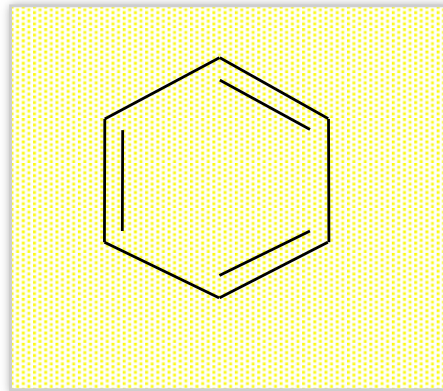
Gli assi degli orbitali 2p non ibridati sono perpendicolari all'asse identificato dagli orbitali ibridi sp



Idrocarburi aromatici

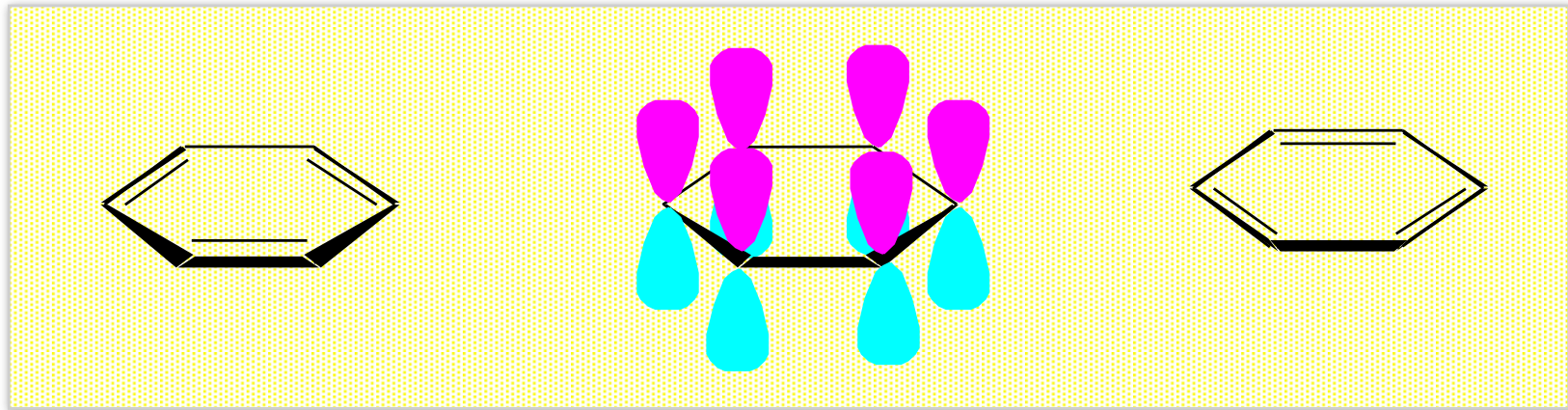
Originariamente definiti tali per il loro caratteristico odore, gli idrocarburi aromatici sono una classe di composti che presentano un elevato livello di insaturazione.

Il composto di riferimento è il benzene (C_6H_6).



Risonanza

I tre doppi legami del benzene sono coniugati per cui le due formule possibili per il benzene sono identiche e si definiscono risonanti.



Gli atomi di carbonio sono tutti ibridati $2sp^2$. I tre orbitali ibridi sono impegnati nei legami C-C e C-H. Gli elettroni degli orbitali 2p non ibridati formano un unico orbitale π .

NOTE: la risonanza coinvolge solo il movimento di elettroni per descrivere formule di struttura diverse

Tipi di reazioni organiche

Reagenti nucleofili ed elettrofili

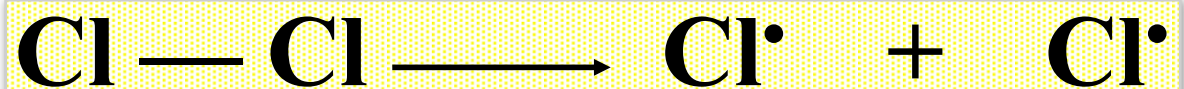
Un **nucleofilo** è una specie chimica che possiede un **eccesso di elettroni** disponibile alla cessione ad un altro **atomo carente di elettroni** definito **elettrofilo**.

Nu:	E
(nucleofilo)	(elettrofilo)

Tutti le sostanze negative (anioni) sono nucleofile mentre quelle positive (cationi) sono elettrofile.

Rottura omolitica

Rottura di un legame con divisione dei due elettroni ognuno sui due atomi impegnati nel legame, con formazione di due specie chiamate “radicali”.



Rottura eterolitica

Rottura di un legame, in cui uno degli atomi riceve entrambi gli elettroni di legame, con formazione di un catione ed un anione.

