

Ibridazione degli orbitali (1)

Il carbonio ha numero atomico $Z = 6$, corrispondente al numero di protoni presenti nel nucleo. In un atomo neutro, Z è pari anche al numero di elettroni.

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

Ibridazione degli orbitali (2)

Z^X

X = simbolo dell'elemento chimico

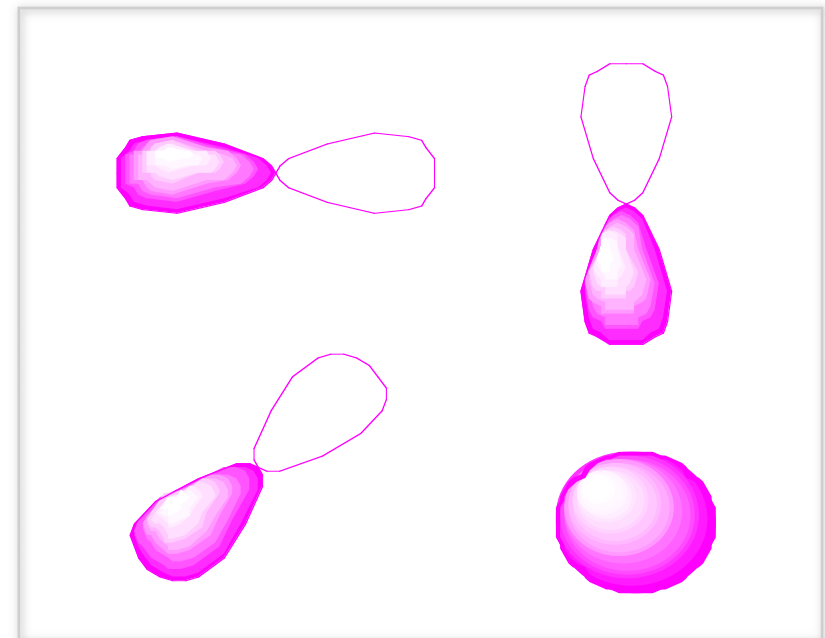
Z = numero atomico (numero di protoni)

6^C

$1s^2 \quad 2s^2 \quad 2p^2$

1^H

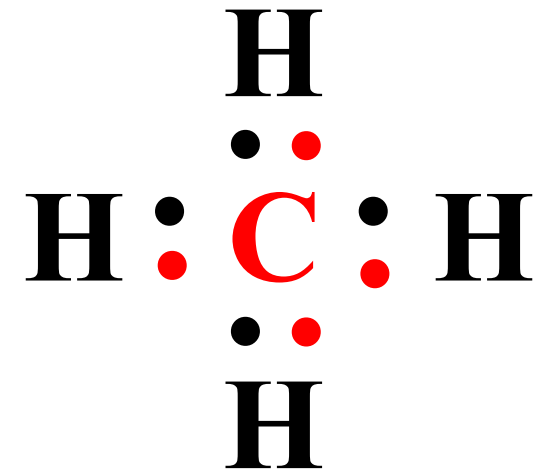
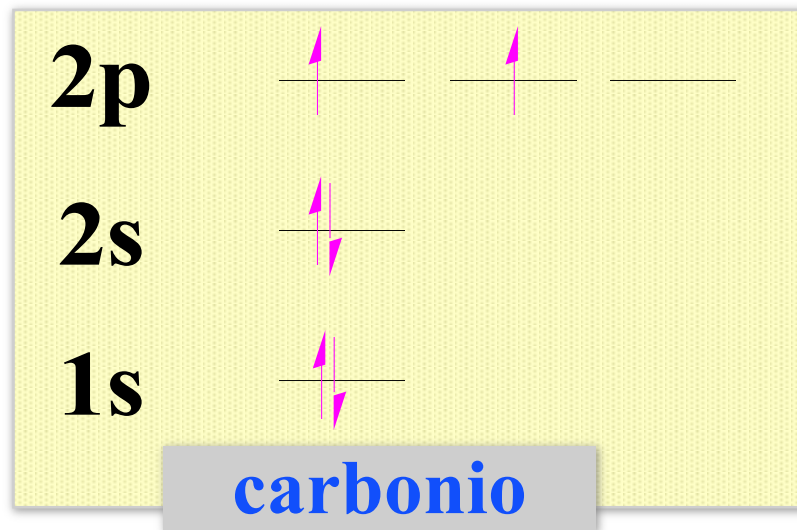
$1s^1$



$2s + 2p + 2p + 2p$

Ibridazione degli orbitali (3)

Con numero atomico 6, la configurazione elettronica dell'atomo di carbonio allo stato fondamentale presenta due elettroni spaiati...

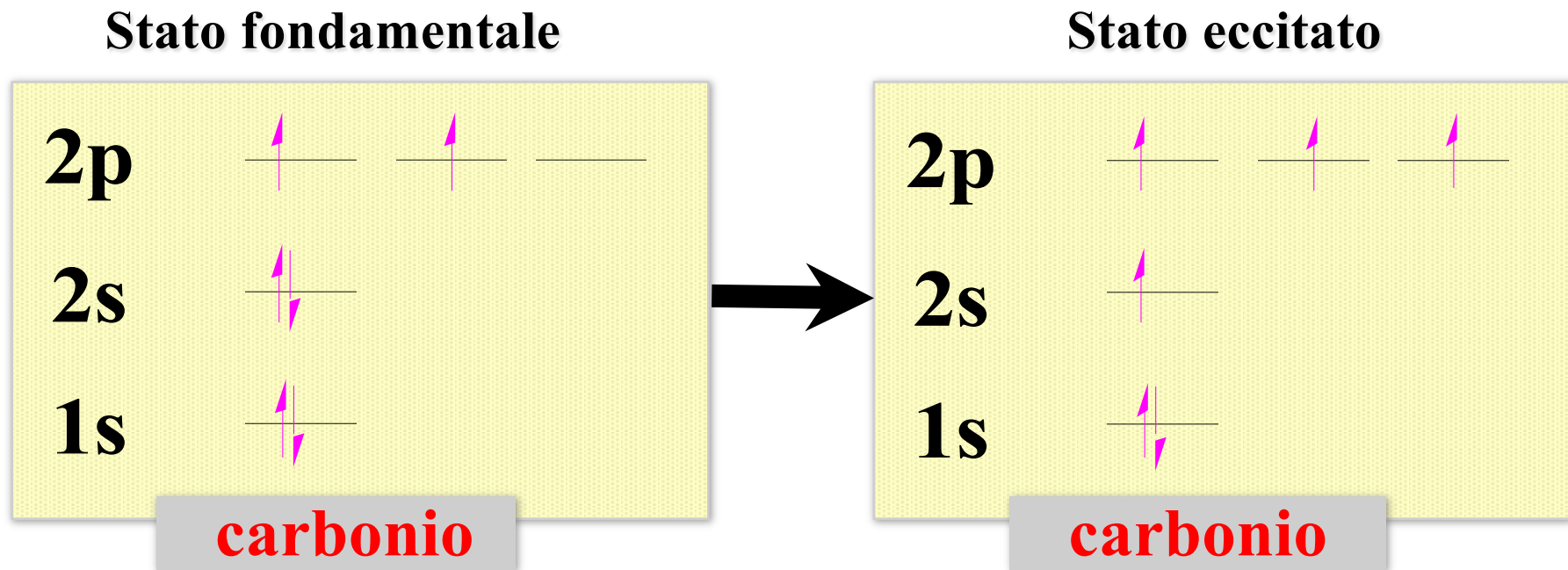


Metano CH₄

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

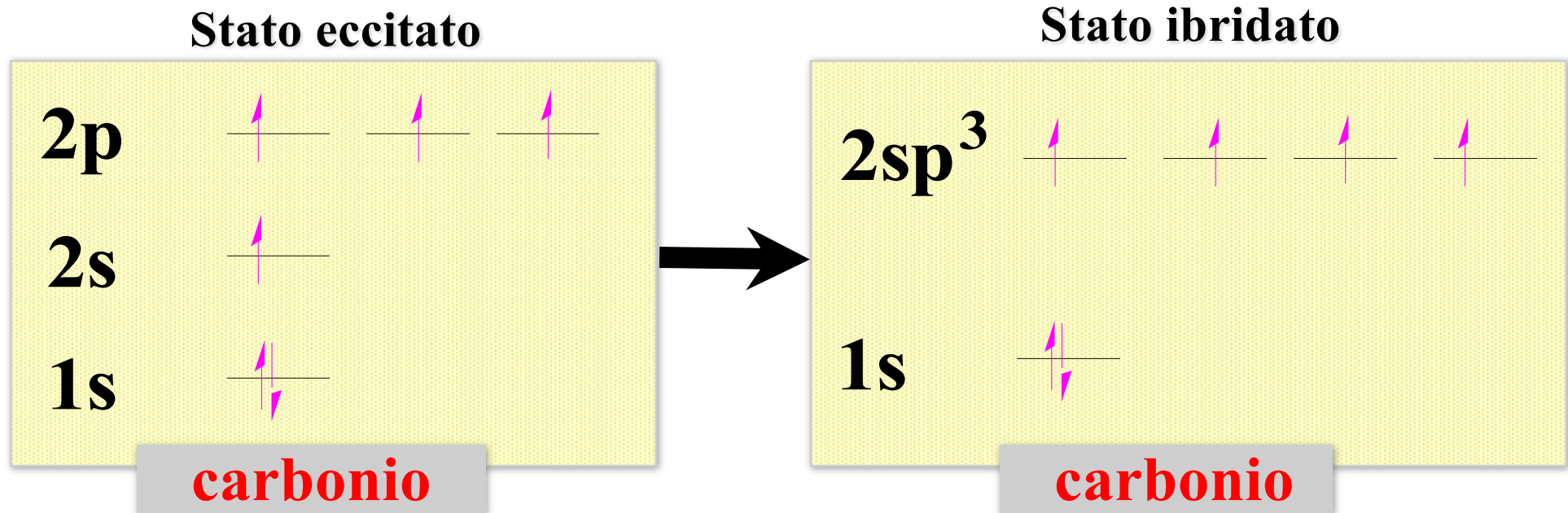
Stato eccitato della configurazione elettronica dell'atomo di carbonio

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



Configurazione elettronica dell'atomo di carbonio ibridato

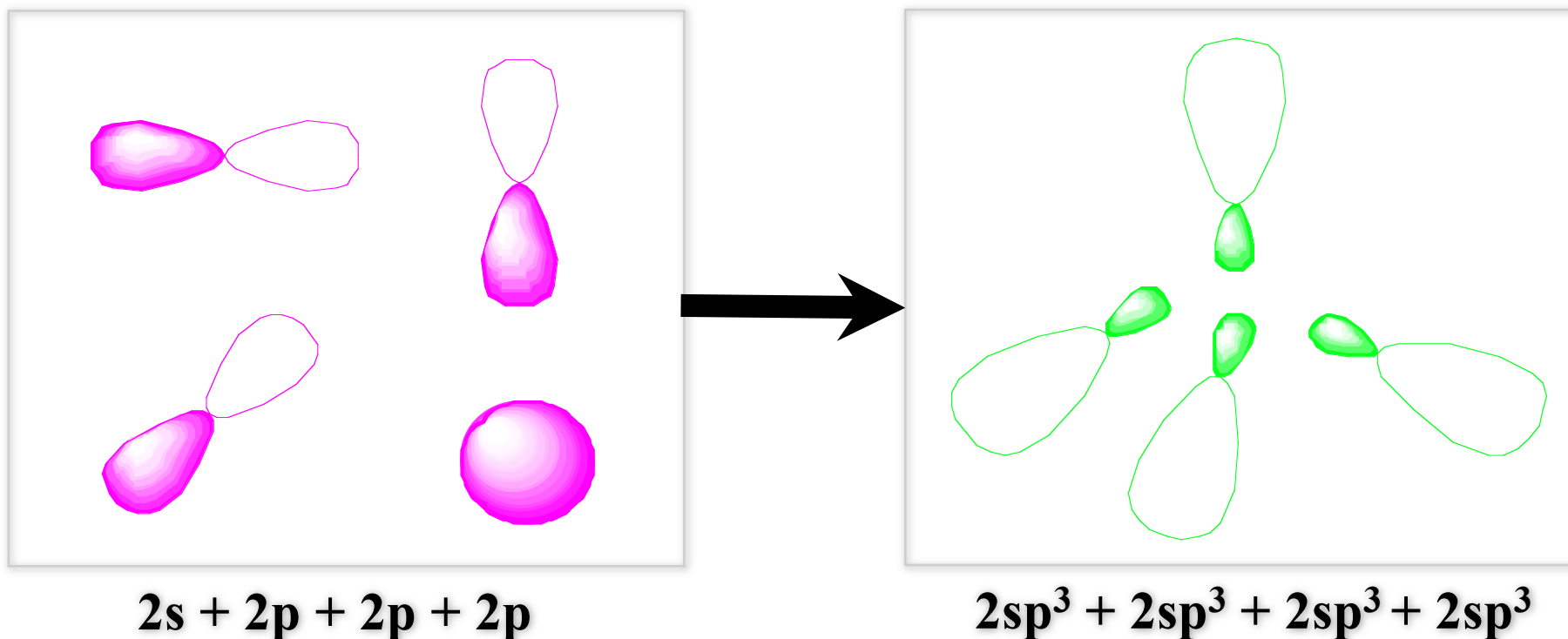
L'assenza di differenze nei quattro legami che si formano si può spiegare con l'ibridazione.



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.**



Geometria molecolare

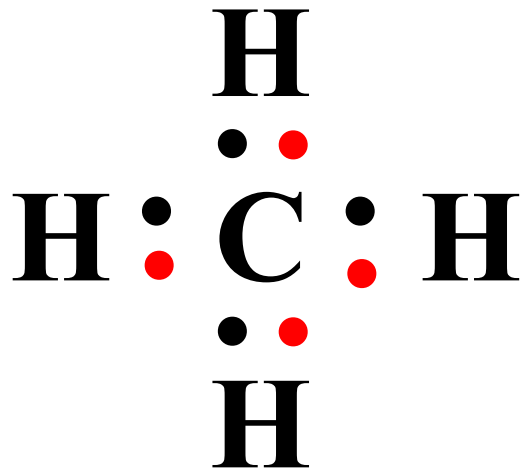
Per geometria molecolare si intende la struttura tridimensionale della molecola, che dipende da:

- la posizione dei nuclei atomici,
- il tipo di legame (semplice, doppio, triplo)
- dalle coppie di elettroni impegnati nel legame e quelle libere
- dalla distanza di legame
- dai caratteristici angoli di legame.

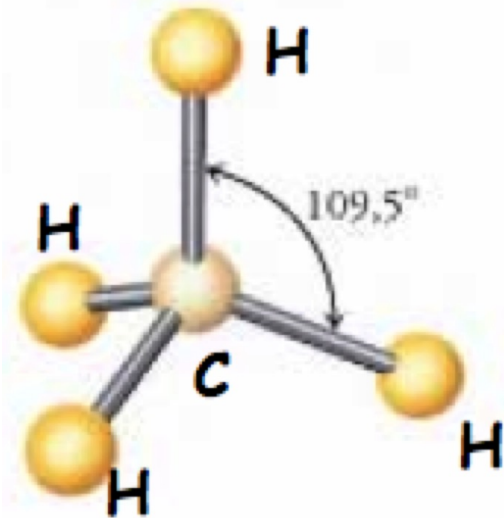
Si osserva una disposizione geometrica di atomi e coppie di elettroni tale da rendere minima la repulsione elettrostatica tra loro (il più distante possibile).



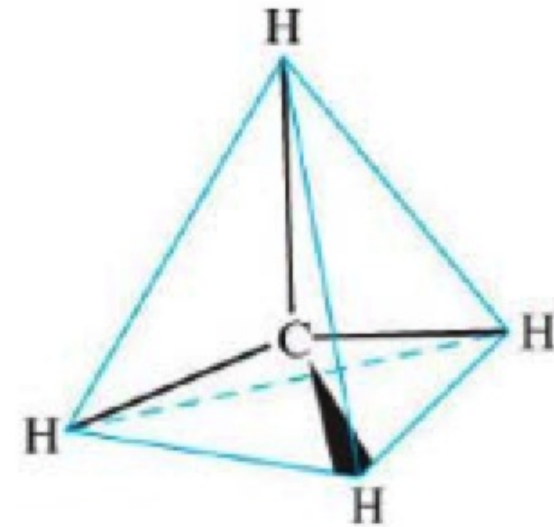
Geometria molecolare del metano



Quattro coppie leganti: geometria tetraedrica. Gli atomi di H si dispongono ai vertici del tetraedro.



$$\hat{\text{HCH}} = 109,5^\circ$$

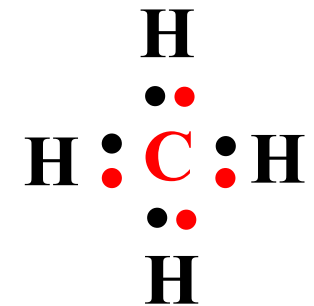


Rappresentazione delle molecole (1)

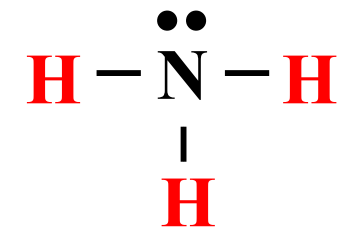
Formula bruta o molecolare: si rappresentano gli atomi ed il loro numero in pedice. *NON FORNISCE INDICAZIONI SU COME GLI ATOMI SONO LEGATI TRA LORO.*



Formula di Lewis: tutti gli elettroni di valenza (impegnati in legame o coppie non condivise) sono rappresentati con dei punti.



Formula di Kekulé: le coppie di elettroni impegnate nei legami covalenti sono indicate con un trattino; le coppie non condivise sono rappresentati con dei punti.



Formula razionale o condensata: riporta una sequenza di atomi di C seguito dagli atomi a cui è legato ed i rispettivo numero in pedice.



Rappresentazione delle molecole (2)

Formule a linea di legame:

- i legami C-C si indicano con un segmento
- gli atomi di H legati al C si omettono mentre quelli diversi dall'H vanno indicati.
- gli atomi diversi da H si indicano con un trattino
- una linea doppia rappresenta il doppio legame

eptano



*1-propanolo o
alcol n-propilico*



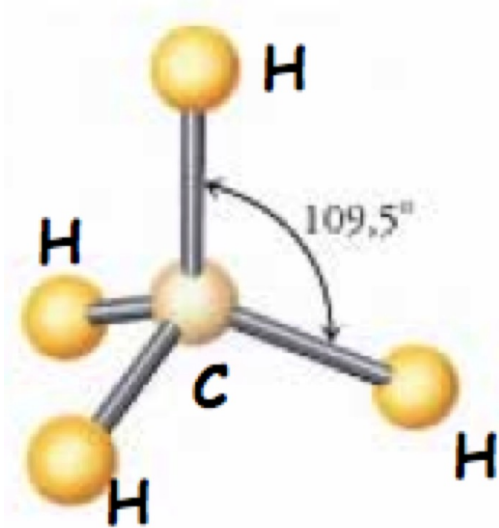
Acido palmitico



acido grasso saturo a 16 atomi di C

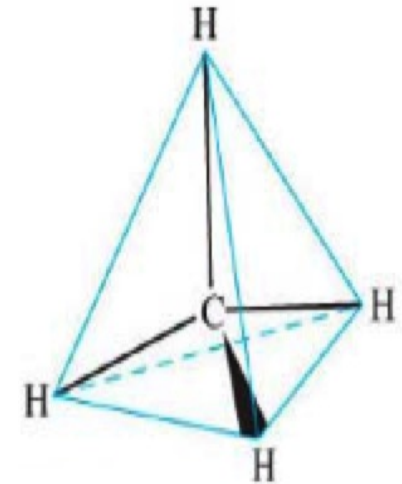
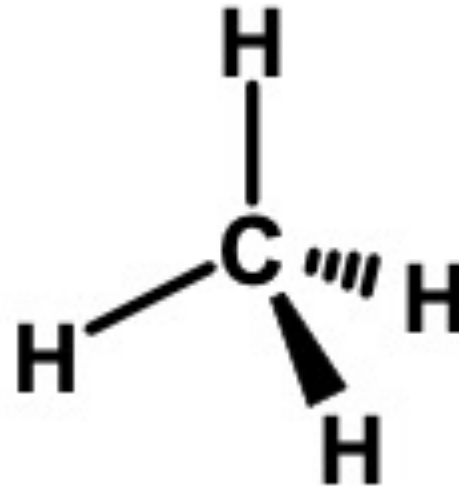


Modelli molecolari



Modello a sfere e bastoncino: fornisce informazioni sulla disposizione spaziale degli atomi.

$$\hat{\text{HCH}} = 109,5^\circ$$

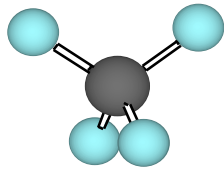


Rappresentazione tridimensionale:

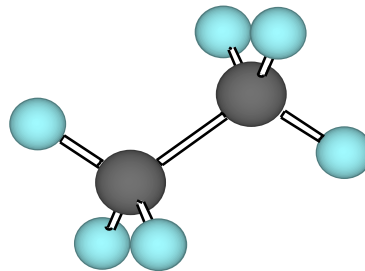
1. I legami che uniscono atomi appartenenti al piano del foglio si indicano con un trattino;
2. i legami che si proiettano verso l'osservatore, si rappresentano con cunei pieni;
3. i legami che si proiettano dietro il piano del foglio si indicano con un cuneo tratteggiato

Alcani: idrocarburi saturi

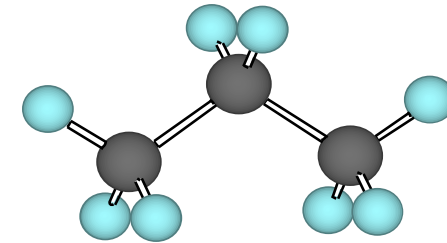
Negli alcani gli atomi di carbonio sono tutti ibridati sp^3 con gli idrogeni diretti verso i vertici di un tetraedro



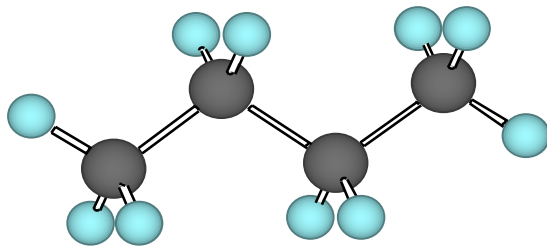
metano CH_4



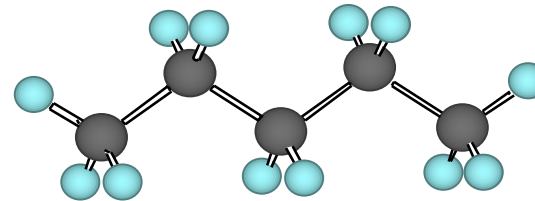
etano C_2H_6



propano C_3H_8



butano C_4H_{10}



pentano C_5H_{12}

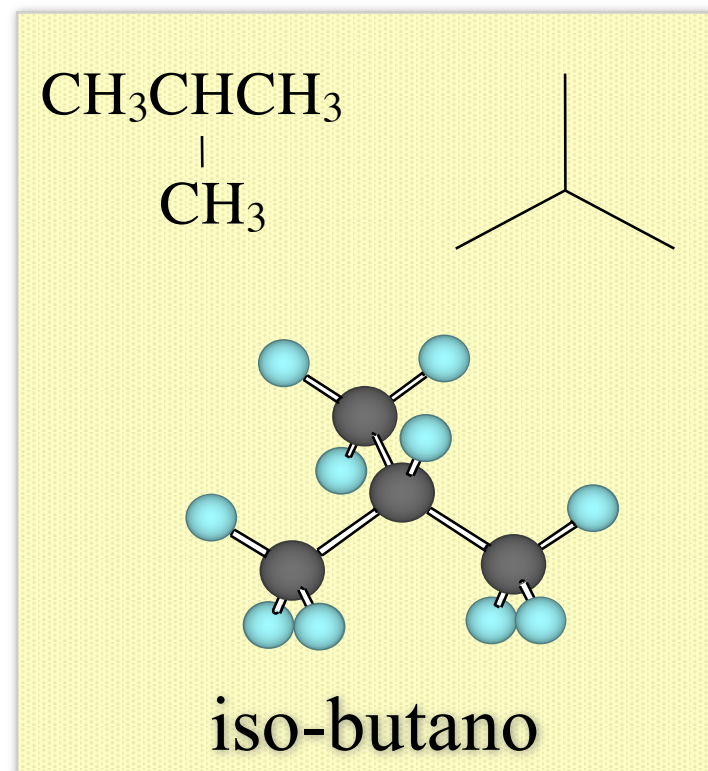
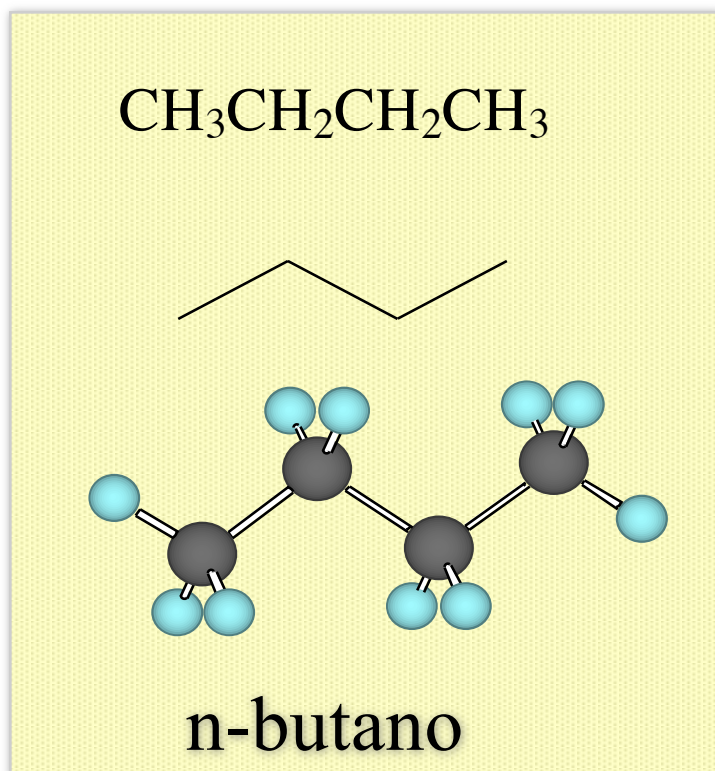
Isomeri strutturali

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)

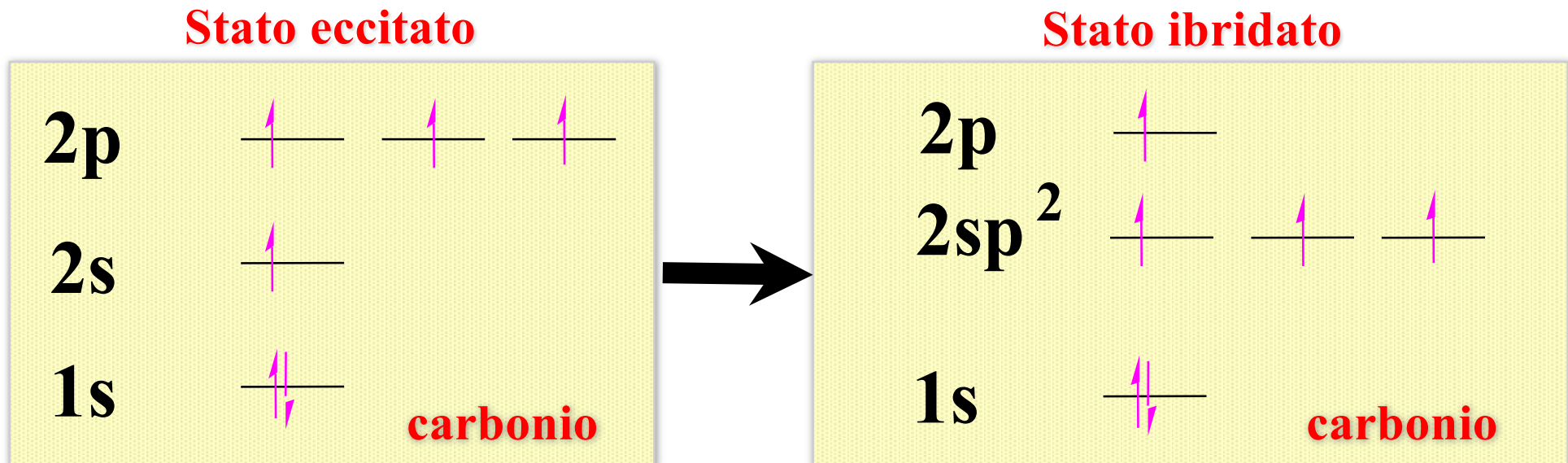


Alcheni

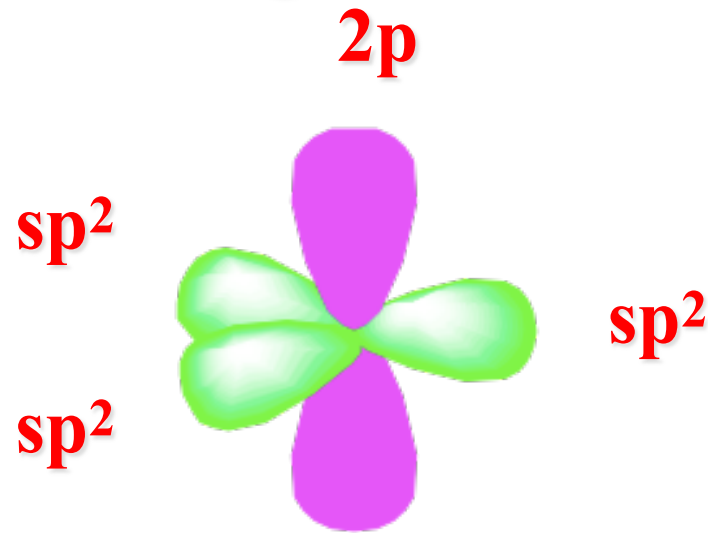
Gli alcheni sono idrocarburi che contengono almeno un doppio legame carbonio-carbonio.

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



Geometria degli orbitali ibridi sp^2

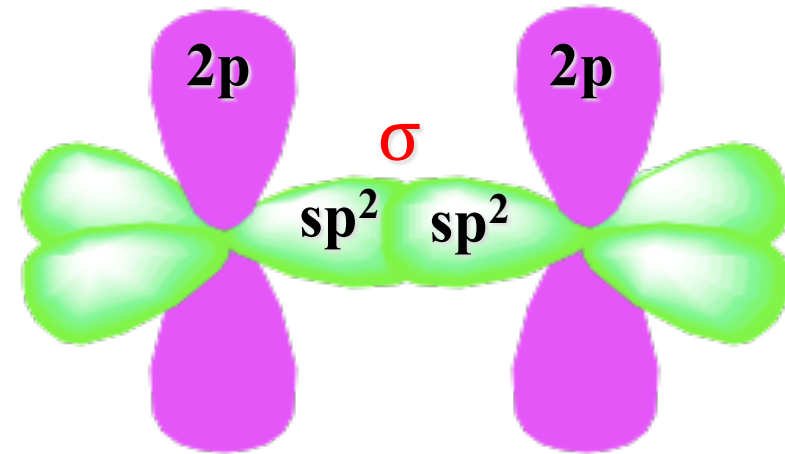


Gli orbitali ibridi sp^2 giacciono in un unico piano e si dispongono a 120° l'uno rispetto all'altro.

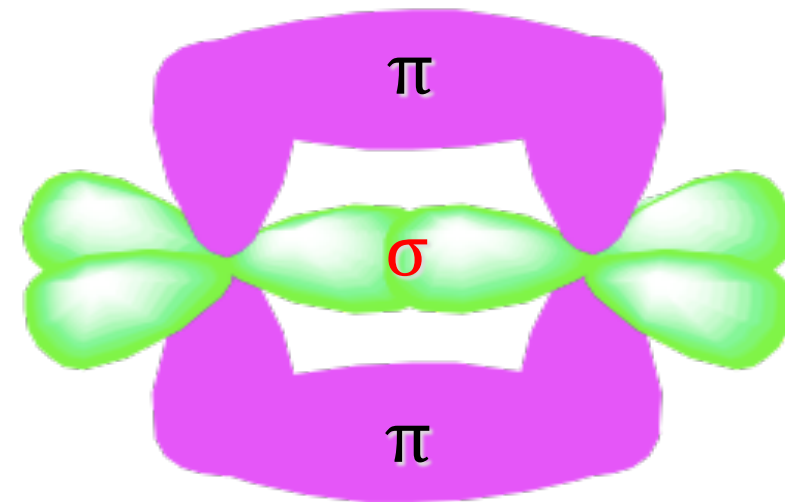
L'asse dell'orbitale $2p$ non ibridato è perpendicolare al piano identificato dagli orbitali ibridi sp^2 .

Ibridazione degli orbitali atomici

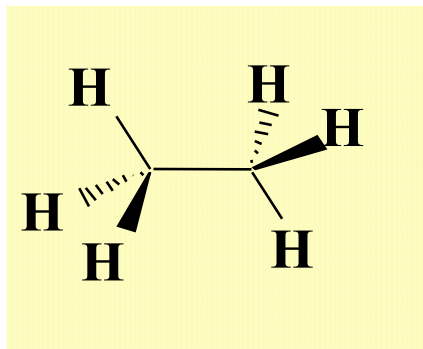
Dalla sovrapposizione di **due orbitali sp^2** lungo lo stesso asse si forma un **orbitale molecolare σ** .



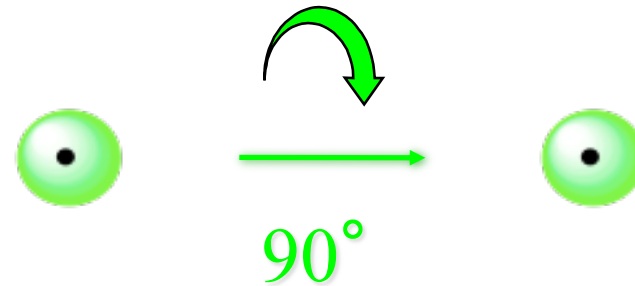
Dalla sovrapposizione laterale dei due orbitali $2p$ non ibridati si forma un **orbitale molecolare π** .



Rotazione intorno al legame σ



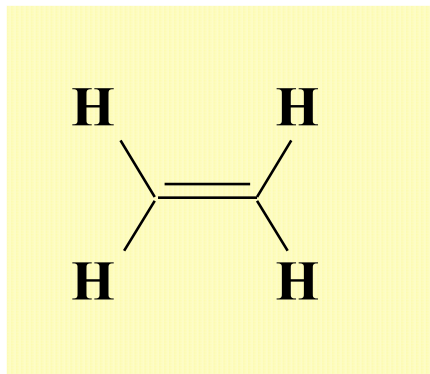
Etano



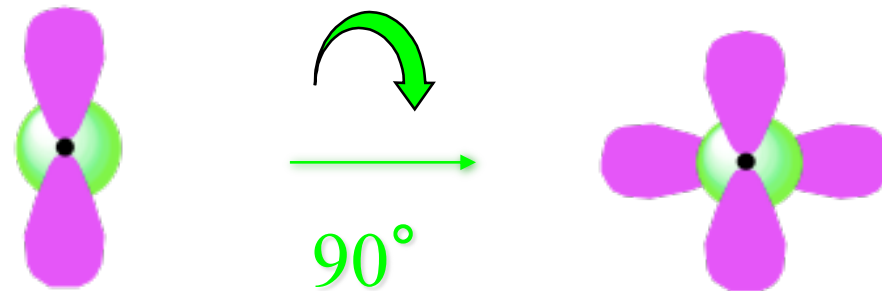
I conformeri rotazionali non alterano il grado di sovrapposizione tra gli orbitali e quindi la forza di legame resta invariata.

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

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



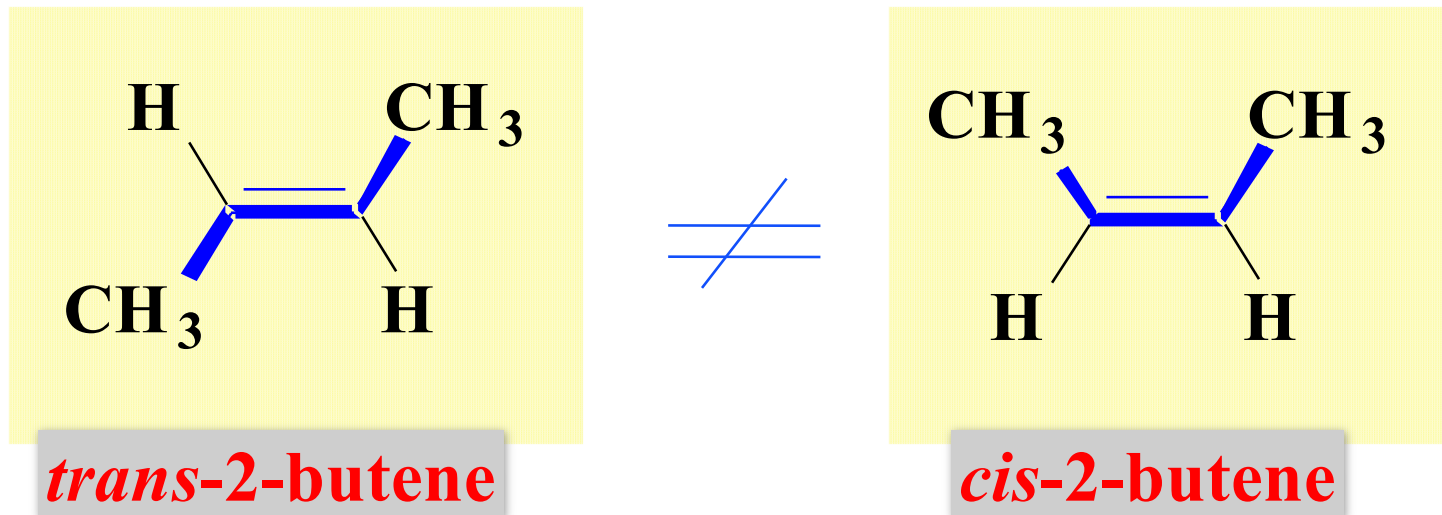
Etene o etilene



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.



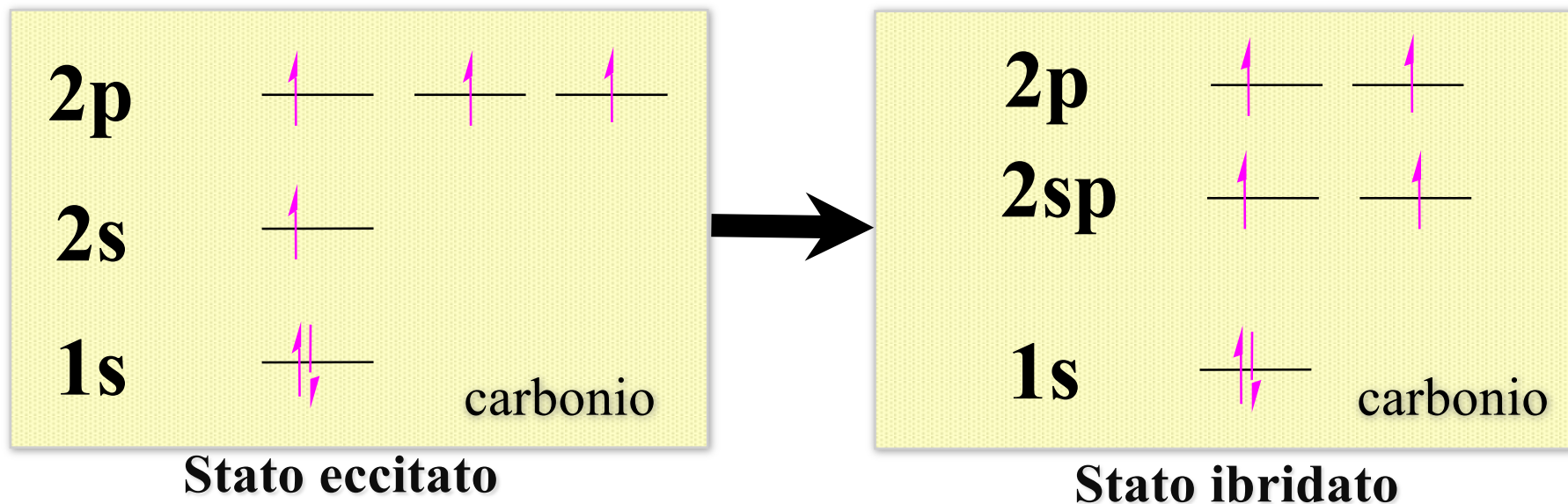
Si verifica quando due sostituenti identici (diversi dagli altri due) sono legati ai due atomi di carbonio.

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 .

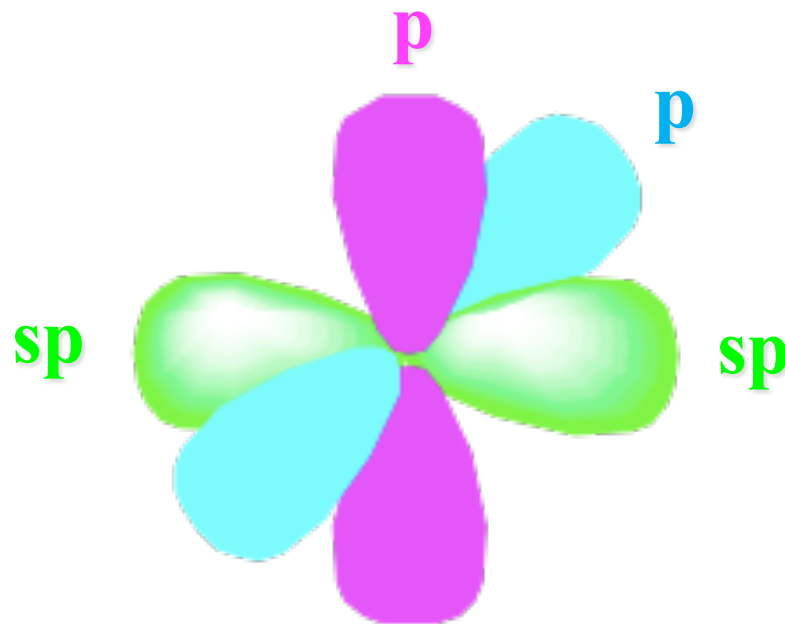
Nell'ibridazione sp , il carbonio impegna l'orbitale $2s$ e uno degli orbitali $2p$, lasciando un elettrone ciascuno negli orbitali $2p$ che non partecipano all'ibridazione



Geometria degli orbitali ibridi sp

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

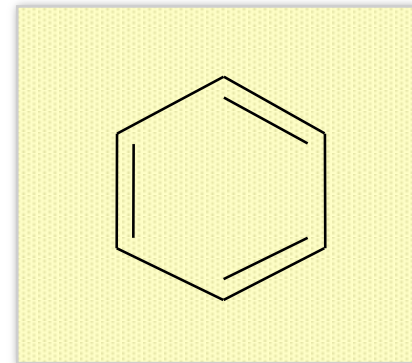
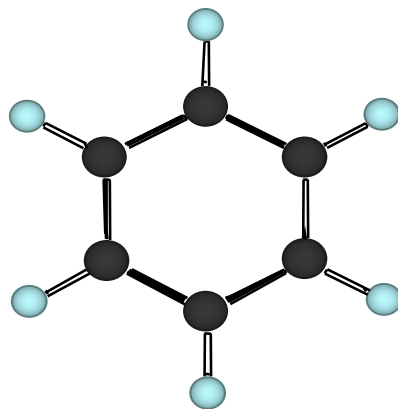
Gli assi degli orbitali 2p non ibridati sono perpendicolari all'asse identificato dagli orbitali ibridi sp



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.

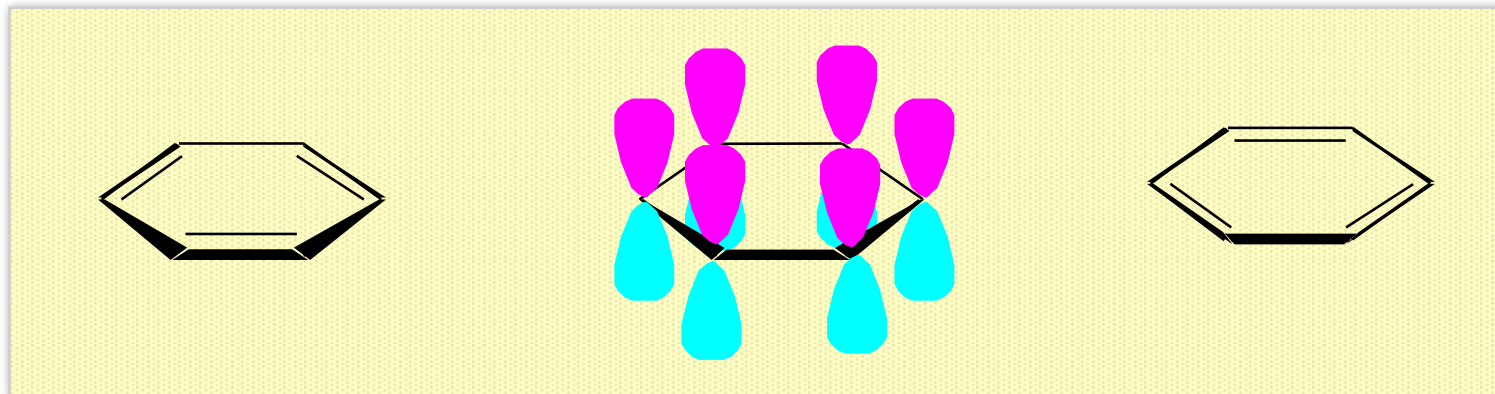
Il composto di riferimento è il benzene (C_6H_6).



Risonanza

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 .



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

La risonanza coinvolge solo il movimento di elettroni per descrivere formule di struttura diverse

Tipi di reazioni organiche

Rottura e formazione di legami chimici nei composti organici.

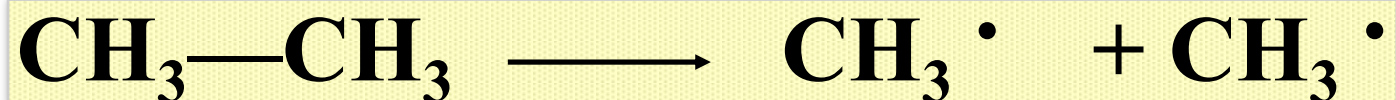
Si possono avere reazioni di:



Rottura omolitica

Rottura di un legame con divisione dei due elettroni ognuno sui due atomi impegnati nel legame.

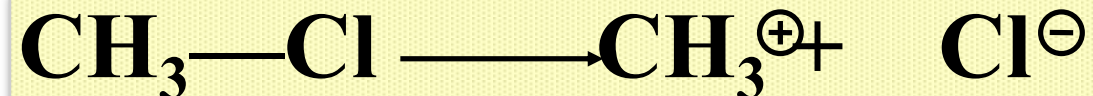
In questo modo si ottengono due specie chiamate “radicali”



Rottura eterolitica

Rottura di un legame con uno degli atomi che riceve entrambi gli elettroni di legame.

In questo modo si ottiene un catione ed un anione.



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.**