CHIMICA

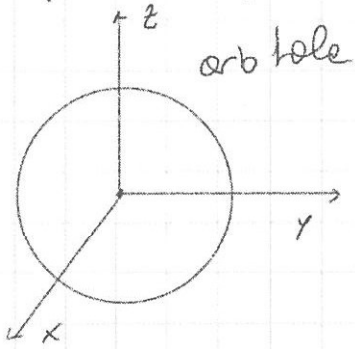
Chimica organica: chimica dei composti del carbonio
C, H, N, O (P, S) → elementi principali

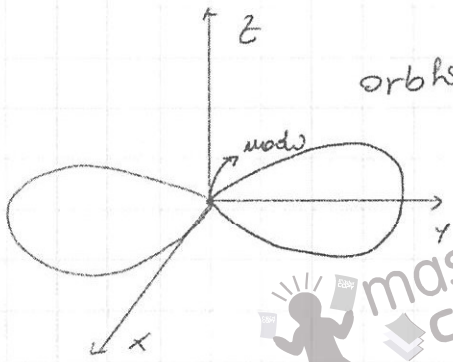
Recupero conoscenze di base

- Struttura dell'atomo: Nucleo costituito da protoni e neutroni e elettroni organizzati in gusci, definiti dai numeri
  - n → numero quantico principale, individua il guscio. ∈ ℕ
  - l → numero quantico secondario, individua il sottoguscio ∈ ℕ (0; n-1)
  - m → numero quantico magnetico, individua gli orbitali degenerati nel guscio ∈ ℤ (-l; l)
  - S → numero di spin, individua il verso di movimento dell'elettrone $\left(-\frac{1}{2} \text{ o } \frac{1}{2}\right)$

Ogni terna n l e m individua una funzione d'onda che definisce un livello di energia. Ogni terna definisce una porzione di spazio all'interno della quale c'è il 95% di probabilità di trovare un elettrone

Importanti per la chimica organica sono gli orbitali s e p





un orbitale ha più energia tanto più sono i suoi nodi
$E_{s} < E_{p}$

Gli orbitali sono utili per descrivere: legami covalenti

- Aufbau: Configurazione elettronica del carbonio

E

$C \rightarrow 6e^-$

↑↓ 2s
↑↓ 1s

↑ $2p_x$ ↑ $2p_y$ — $2p_z$

- principio di Pauli
- Regola di Hund

• Polarità di legame:
la polarità del legame è determinata dall'elettronegatività χ

$\chi_H = 2,1$ $\chi_B = 2,0$ $\chi_O = 3,5$
$\chi_{Li} = 1,0$ $\chi_C = 2,5$ $\chi_F = 4,0$ } elementi II gruppo
$\chi_{Be} = 1,5$ $\chi_N = 3,0$

se $\Delta\chi < 0,5$ ⇒ legame apolare ⇒ C-H $\Delta\chi = 0,4$
se $0,5 < \Delta\chi < 2,1$ ⇒ legame polarizzato ⇒ $^{\delta+}C-F^{\delta-}$ $\Delta\chi = 1,5$
se $\Delta\chi > 2,1$ ⇒ legame ionico ⇒ $^{+}Li-F^{-}$ $\Delta\chi = 3$

• Energia di legame: energia necessaria per produrre una rissione omolitica (un elettrone per atomo).



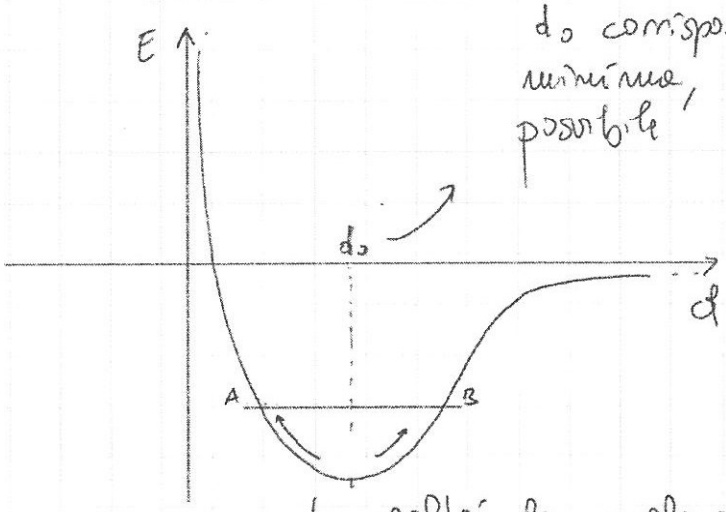
$\Delta H_f^\circ = -435$ kJ/mol



⟶ → freccia ad amo: condivisione di 1 elettrone
⟶ → freccia doppia: condivisione di una coppia di elettroni.

In chimica organica le frecce indicano il movimento di elettroni

• Curva di Morse
• attrazione nucleo-elettrone
• Repulsione tra nuclei
• Repulsione tra elettroni



d_0 corrisponde al valore di energia minima, la molecola è il più stabile possibile

In realtà la molecola oscilla tra i valori A e B

amino

comportamento schematizzabile come due masse unite da una molla.

- Strutture di Lewis: si scrive il simbolo dell'elemento e si rappresentano gli elettroni di valenza come dei puntini

C → 4 e⁻ valenza ⇒ ·Ċ· o ·C̄·

la prima mostra come C forma 4 legami, la seconda evidenzia gli elettroni "compagni" dell'orbitale 2s

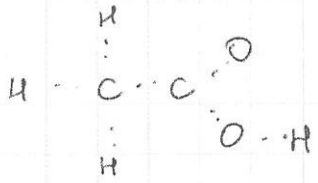
⇒ formula razionale: struttura di Lewis di una molecola

A-A → legame covalente

B-A → legame covalente o polare

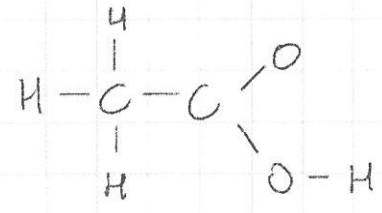
Per disegnare le formule di Lewis
- connettività (formula, chiave della molecola ...)
- elettroni totali: legami covalenti tra gli atomi connessi e gli altri a completare l'ottetto partendo dagli atomi più elettronegativi.
- Controllo la carica formale $\left(Q_f = e_v - eV_{n.e} - \frac{e_v e}{2}\right)$

Esempio: Acido acetico: CH_3COOH → formula condensata (evidenziare la connettività)

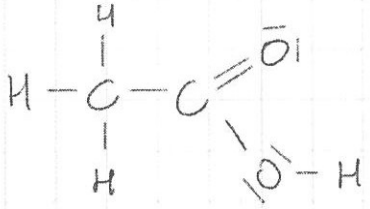


→ connettività

elettroni totali: 24 e⁻ → sistemo gli elettroni

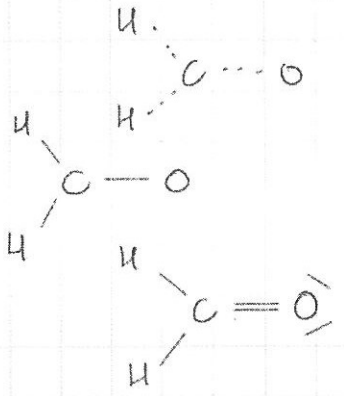


⇒ legami covalenti: 14 e⁻



⇒ sistemo gli altri elettroni

Formaldeide : CH_2O



12 e⁻ valenza

6 e⁻ da aggiungere → porgo e legami

completo l'ottetto

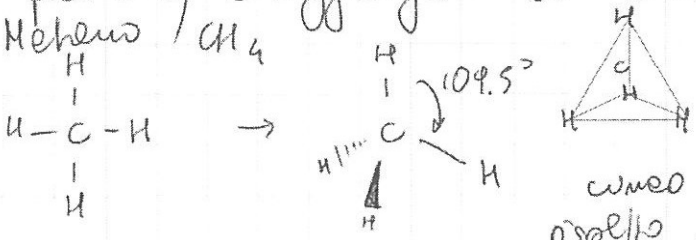
molecola neutra

master COPY

• Teoria VSEPR

Individuato l'atomo che sta al centro della molecola, ogni legame, ogni elettrone o coppia di elettroni spaiato viene rappresentato da regioni di carica negativa, che si dispongono su una sfera, nel cui centro troviamo l'atomo centrale, in modo da avere la minor repulsione (il più lontano possibile) e raggiungere lo stato a minor energia

Esempi: • Metano CH_4



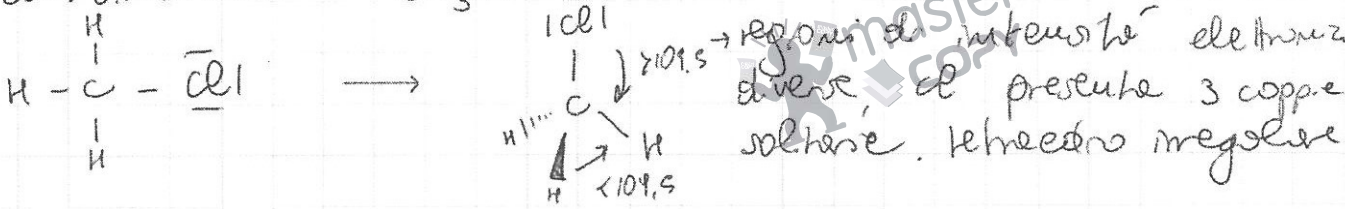
cuneo pieno: l'atomo è rivolto rispetto al piano del foglio

cuneo vuoto: l'atomo è incassato nel foglio

Gli angoli di legame del metano sono tutti uguali: la molecola di metano è un tetraedro perfetto.

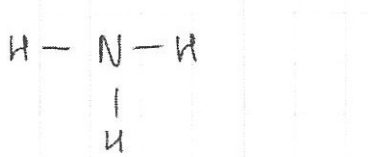
Altri tetraedri perfetti sono: CCl_2, BF_4^-

• Clorometano CH_3Cl



regioni di intensità elettronica diverse, ci presento 3 coppie solitarie. tetraedro irregolare

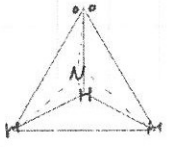
• Ammoniaca NH_3

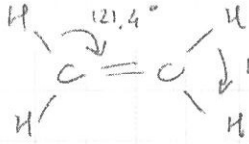


tetraedro con un vertice occupato da una coppia di elettroni

la piramide irregolare

Nell'ammoniaca troviamo il tetraedro



• Etene C_2H_4  (molecola planare)

• Etino  C_2H_2 (molecola lineare)

Polarità delle molecole

Se in una molecola si hanno legami polari questa potrebbe avere un dipolo di carica permanente. Questo può influenzare anche la sua polarità

Esempio • CO_2  $\chi_O = 3,5$ $\chi_C = 2,5$
$\Delta\chi = 1,0 > 0,5$

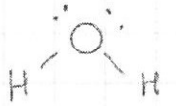
legame $C-O$ polarizzato.
Sull'ossigeno si forma una parziale carica negativa (indicata qualitativamente con $+\delta$ e $-\delta$). La notazione vale che si indichi una freccia dalla parte positiva a quella negativa del dipolo:

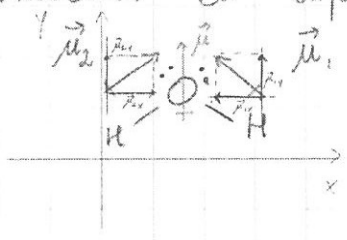

Quindi per CO_2:


$\begin{cases} \vec{\mu}_1 = -\vec{\mu}_2 \\ |\mu_1| = |\mu_2| \end{cases}$ (momenti di dipolo)

$\vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2 = 0$ (non polare)

Per avere una molecola polare non basta avere legami polari ma la somma dei momenti di dipolo deve essere diversa da 0. CO_2 non è una molecola polare

• H_2O  $\chi_O = 3,5$ $\Delta\chi = 1,4 > 0,5$
$\chi_H = 2,1$ legame $H-O$ polarizzato

momenti di dipolo


$|\mu_1| = |\mu_2|$

→ Scompongo i momenti di dipolo rispetto a un sistema di assi.

$\vec{\mu}_{2x} + \vec{\mu}_{1x} = 0$ le proiezioni su x si elidono
$\vec{\mu}_{2y} + \vec{\mu}_{1y} = 2\,\vec{\mu}_{1y} = 2\,\vec{\mu}_{2y}$ le proiezioni su y si sommano