19/02/2018

CHIMICA ORGANICA = CHIMICA DEL CARBONIO

IL CARBONIO (C) È POSSIBILE TROVARLO LEGATO A: H, N, O, S, P, F, Cl, Br, I (alogeni)

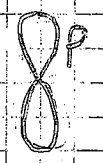
$Z_C = 6$ configurazione elettronica: $(1s^2)\ 2s^2\ 2p^2$ → importante per il legame

LA CONFIGURAZIONE DEL GUSCIO ESTERNO / ELETTRONI DI VALENZA ($2s^2\ 2p^2$) DETERMINANO: PROPRIETÀ E CAPACITÀ DELL'ELEMENTO

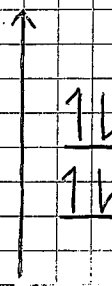
$1s$: NUMERO QUANTICO PRINCIPALE

$2s$: NUMERO QUANTICO MOMENTO ANGOLARE DETERMINANDO FORMA ORBITALE





CONFIGURAZIONE ELETTRONICA DEL CARBONIO

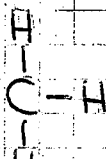


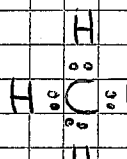
REGOLE DI RIEMPIMENTO:
- REGOLA DI HUND completamento per spin in parallelo
- PRINCIPIO DI AUFBAU inserimento ordine crescente energia
- PRINCIPIO ESCLUSIONE PAULI spin opposti insieme

STATI DI IBRIDAZIONE

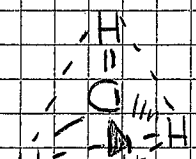


MESCOLAMENTO sp^3 → SINGOLO LEGAME



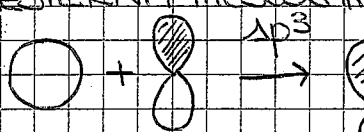


Struttura Lewis

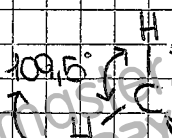


STRUTTURA TETRAEDRICA REGOLARE

LA STRUTTURA VENNE IDENTIFICATA GIÀ 1870 MA SI EBBE LA CONFERMA SOLO CON LA TEORIA VSEPR (per struttura tetraedrica regolare)
LINUS PAULING (Nobel) PROPOSE IL LEGAME PER IBRIDAZIONE, CIOÈ TRA I MESCOLAMENTO DEGLI ORBITALI DALLA CONFIGURAZIONE ELETTRONICA ESTERNA MESCOLAMENTO

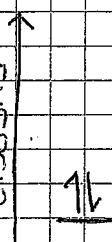


mescolamento come via di mezzo tra gli orbitali
NODO (probabilità = 0) MESCOLAMENTO



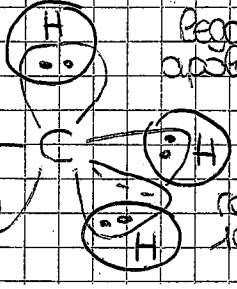
Struttura carbonio
Max distanza con minima energia
Saturo

p 75%
s 25%



ORBITALI IBRIDI = LIVELLO ENERGETICO

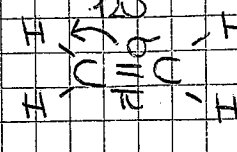
ORBITALI LIBERI SPIEGA LA STRUTTURA CHE POSSIEDE IL CH_4



legame covalente apolare σ
+ stabile

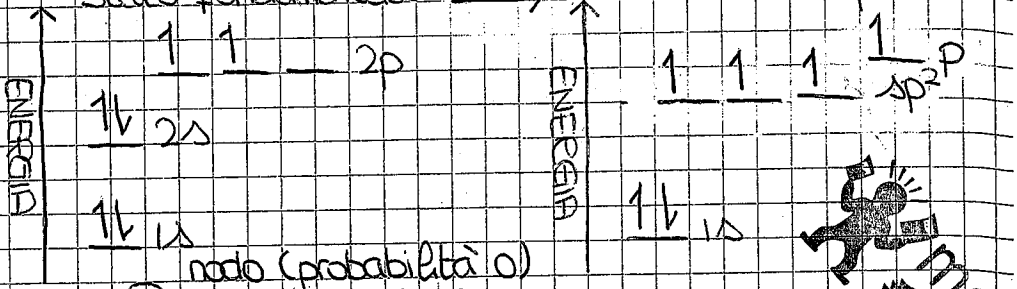
rottura legame 100 $\frac{kcal}{mol}$

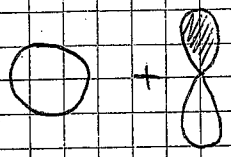
MESCOLAMENTO sp^2 → DOPPIO LEGAME



ETILENE / ETENE

Stato fondamentale → Ibridazione sp^2

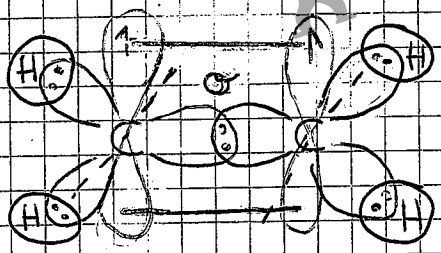






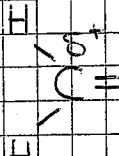
nodo (probabilità 0) via di mezzo tra gli orbitali dal mescolamento di cui { 67% p / 33% s }

LA FORMA IBRIDA SPIEGA LA STRUTTURA DEL CH_2CH_2

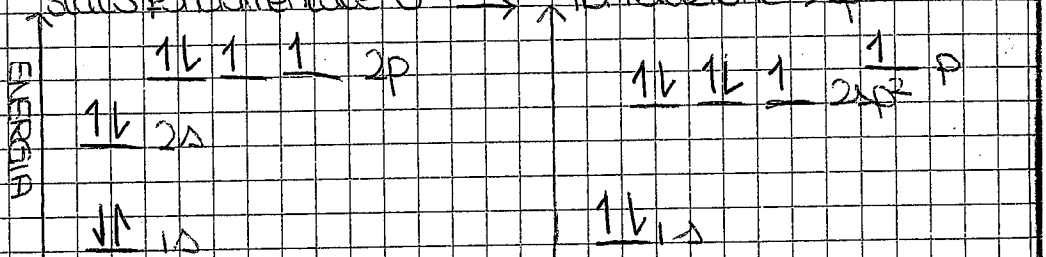


l'orbitale p (solo) è ortogonale che provoca la formazione di un legame π - facilmente da rompere rispetto al σ

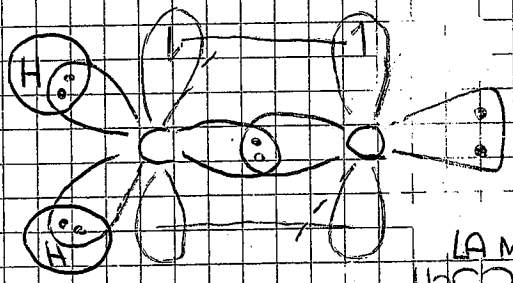
QUESTA SITUAZIONE È VALIDA PER QUALUNQUE ETEROATOMO:



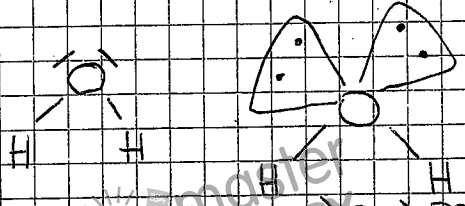
Stato fondamentale O → Ibridazione sp^2



Il carbonio è ibridizzato sp^2

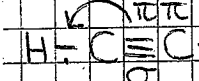


L'IBRIDAZIONE DELL'H_2O



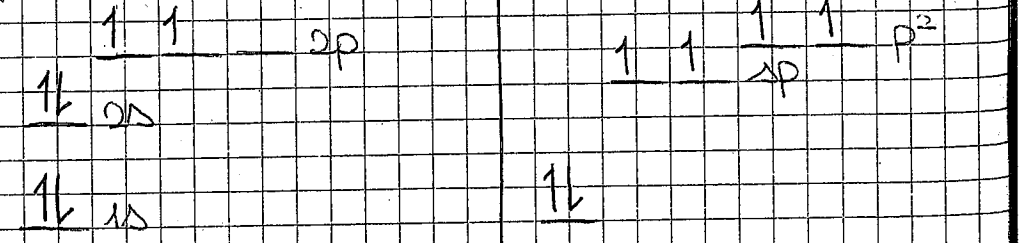
LA MOLECOLA DELL'H_2O È PIÙ BASICA DEL H_2CO

MESCOLAMENTO sp → LEGAME TRIPLO



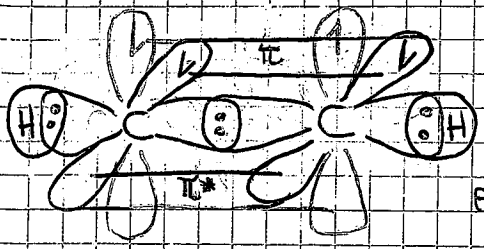
ALCHINO / ACETILENE

Stato fondamentale → Ibridazione sp



per via del mescolamento degli orbitali la struttura ibrida sp è costituita dal { 50% p / 50% s (più vicino) }

gli orbitali p^2 vanno a costituire legami π deboli



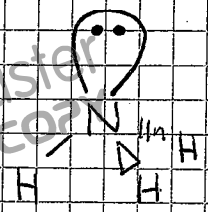
I due orbitali non ibridi vanno a costituire i doppi legami sono ortogonali tra loro

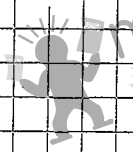
QUESTA SITUAZIONE È VALIDA PER QUALUNQUE ETEROATOMO:

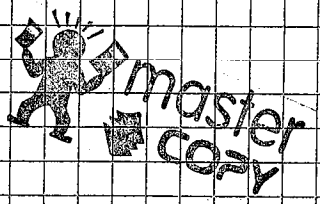
H-C≡N: NITRILE (il C e il N sono ibridizzati sp)

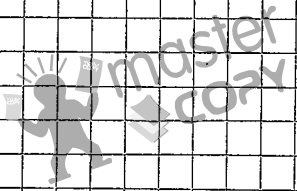


AMMONIACA









22/02/2018

CARICA FORMALE

È LA CARICA PRESENTE SU UNO IONE POLIATOMICO O IN UNA MOLECOLA (carica elettroni di legame se ripartiti equamente fra atomi legati) PER DETERMINARE CARICA FORMALE BISOGNA

1. SCRIVERE STRUTTURA CORRETTA MOLECOLA O IONE SECONDO LEWIS
2. ASSEGNARE CIASCUN ATOMO TUTTI ELETTRONI NON CONDIVISI (di non legame) E' METÀ ELETTRONI CONDIVISI (di legame)
3. CONFRONTO / SOTTRAZIONE NUMERO ELETTRONI DI VALENZA CON VALORI OTTENUTI PUNTO 2.

CH_3COO^-

$$\text{carica formale} = \text{elettroni di valenza} - \left(\text{elettroni non condivisi} - \frac{\text{elettroni condivisi}}{2}\right)$$

$$CF_O = 6 - \left(6 + \frac{2}{2}\right) = 6 - 7 = -1$$

$\leq$ elettroni di valenza $<$ elettroni in gioco carica negativa

$$CF_N = 5 - \left(0 + \frac{8}{2}\right) = 5 - 4 = +1$$

$\geq$ elettroni di valenza $>$ elettroni in gioco carica positiva

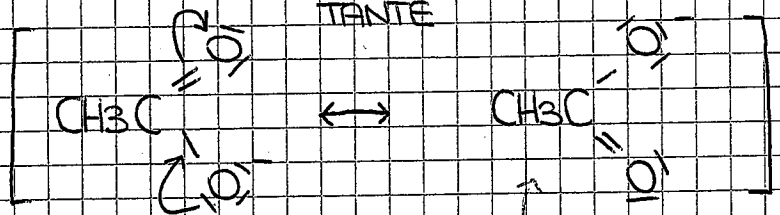
NH^+

↶ SPOSTAMENTO / MOVIMENTO 2 ELETTRONI

↷ MOVIMENTO / SPOSTAMENTO 1 ELETTRONE + RADICALE

RISONANZA

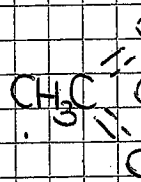
→ ANNI '30 LINUS PAULING TEORIA PER IONI / MOLECOLE CHE NON POSSONO ESSERE SPIEGATI CON STRUTTURA DI LEWIS. LA REALE STRUTTURA È UN IBRIDO TRA LE TANTE



IONE ACETATO

la struttura reale è

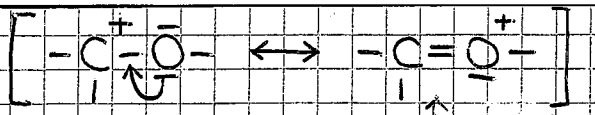
STRUTTURA LIMITE DI RISONANZA



STRUTTURA EQUIPRESENTE TRA LE DIVERSE RISONANZE (comprende le due forme)

GLI IBRIDI DI RISONANZA NON HANNO SEMPRE LA STESSA PREVALENZA ESISTONO REGOLE PER DEFINIRE QUALE IBRIDO HA CONTRIBUTO MAGGIORE:

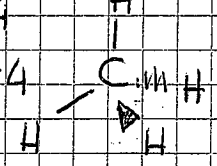
1. GUSCI DI VALENZA COMPLETI (ottetti completi) ↶
2. NUMERO LEGAMI COVALENTI (maggiore) ↶
3. PRESENZA DI SEPARAZIONI DI CARICHE
4. SEPARAZIONE ACCETTO CON X ATOMI COINVOLTI ↷



↑ CONTRIBUISCE MAGGIORMENTE { OTTETTO COMPLETO; MAGGIORE PRESENZA DI LEGAMI

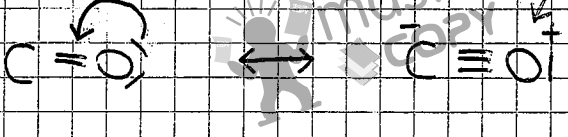
NUMERO OSSIDAZIONE ≠ CARICA FORMALE

CH_4 $n_{ox} = -4$



CO_2 $O=C=O$ $n_{ox} = +4$

CO MONOSSIDO DI CARBONIO — MAGGIOR CONTRIBUTO OTTETTO COMPLETO E MAGGIOR NUMERO LEGAMI



GRUPPI FUNZIONALI

ALCANI C_nH_{2n+2} IDROCARBURI (solo elementi C, H) SATURI (solo legame σ)

PROPRIETÀ CHIMICO-FISICHE

COSTITUITI DA LEGAMI COVALENTI APOLARI, FINO A 4 CARBONI SONO CARATTERIZZATI DALL'ESSERE GASSOSI CON BASSE FORZE INTERMOLECOLARI
C_1 a C_4 GAS
C_5 a C_{17} LIQUIDO (Tebollizione BASSA)
C_{17} su SOLIDO (= PARAFFINE $T_{fusione}$ BASSO)

LE PARAFINE SONO POCO REATTIVI (Solo reazioni di combustione), I LEGAMI C-C E C-H HANNO SCARSA POLARIZZAZIONE, LIBRERIA, LIQUIDO SOLVENTI O COMBUSTIBILI

NOMENCLATURA IUPAC

C_1	MET-
C_2	ET-
C_3	PROP-
C_4	BUT-
C_5	PENT-
...	

} - ANO (prefisso alcano)

CH_4 METANO
C_2H_6 ETANO
C_3H_8 PROPANO
C_4H_{10} BUTANO (inizio diverse isomerie di strutture)

da C_4H_{10} → $CH_3CH_2CH_2CH_3$ N-BUTANO

↘ $CH_3CH(CH_3)CH_3$ ISOBUTANO
2-METILPROPANO

CATENA PIÙ LUNGA - PROPANO ←

(CH_3) → RADICALE - metile

ISOMERI DI STRUTTURE ⇓ STESSA COMPOSIZIONE BRUTTA MA DIVERSA FORMULA DI STRUTTURA

SI PROCEDE DANNO IL NOME CON:
1. CATENA PIÙ LUNGA
2. RAMIFICAZIONE COL NUMERO PIÙ PICCOLO