

MODELLO A ORBITALI

Energia e proprietà di un elettrone sono stabiliti da **4 NUMERI QUANTICI** (cioè la funzione d'onda che è la soluzione dell'equazione di Schröedinger dipende da quattro numeri)

Numero quantico principale (n)	1..... $+\infty$
Numero quantico secondario (l)	0..... $n-1$
Numero quantico magnetico (m_l)	$-l$0.... $+l$
Numero quantico di spin (m_s)	$+1/2$ $-1/2$

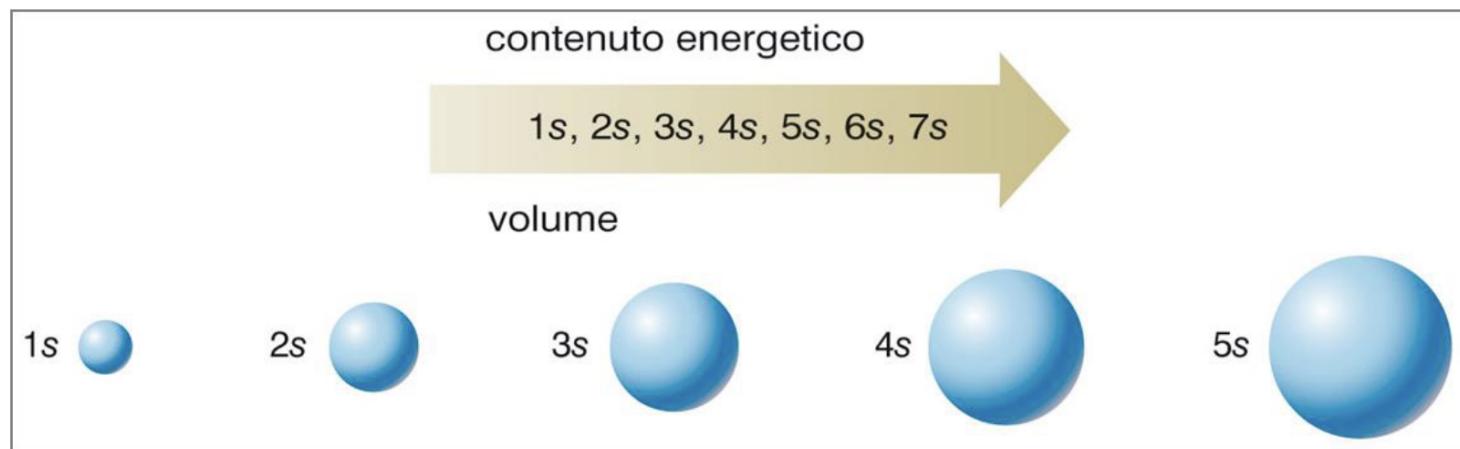
I numeri quantici descrivono il comportamento dell'elettrone

L'orbitale è una funzione d'onda elettronica caratterizzata da una particolare terna di valori dei numeri quantici n , l e m ; a ciascuna terna corrisponde un particolare stato quantico dell'elettrone.

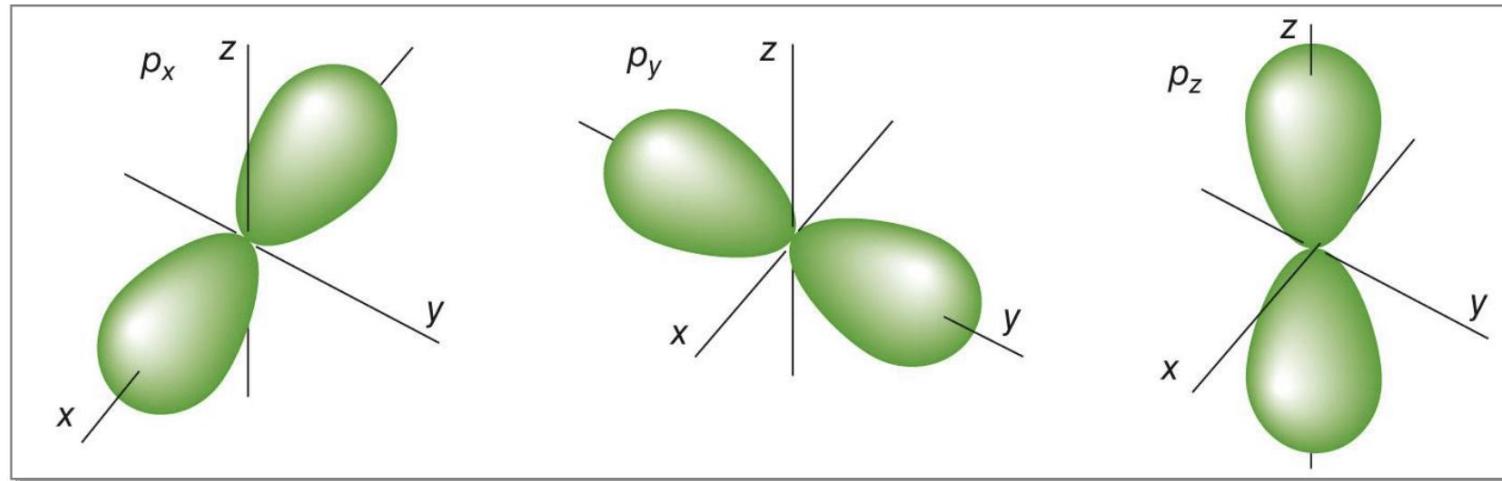
- Il **numero quantico principale n** ($n = 1, 2, 3 \dots, 7$) definisce il livello energetico dell'elettrone che è proporzionale alla distanza dal nucleo.
- Il **numero quantico secondario l** ($l = 0, 1, \dots, n-1$) determina le caratteristiche geometriche dell'orbitale (sottolivello energetico).

valori di l	0	1	2	3
orbitale:	s	p	d	f

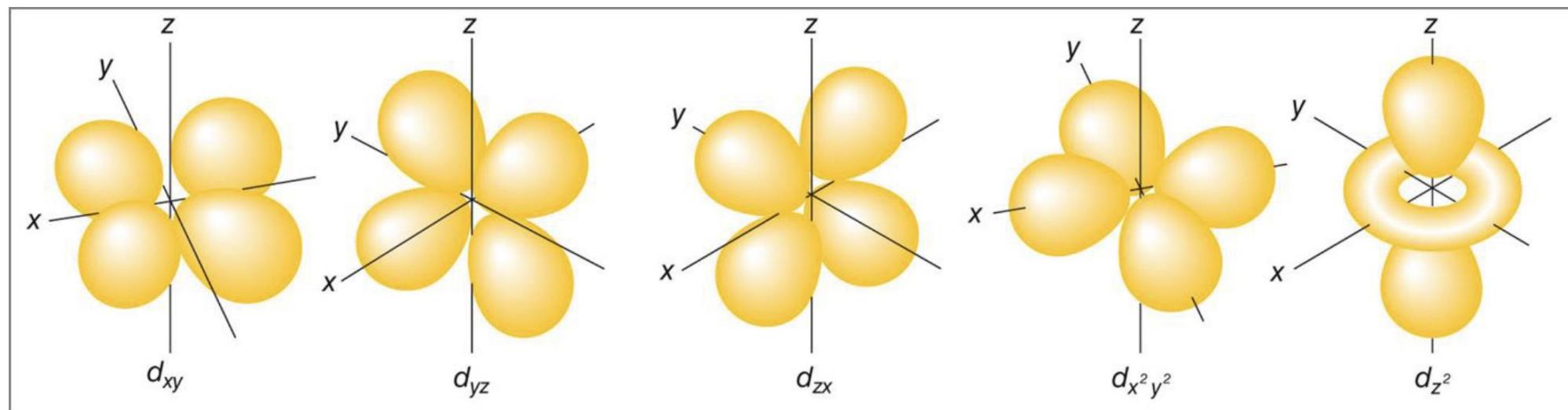
La superficie di contorno degli orbitali s è una sfera il cui volume aumenta all'aumentare del numero quantico principale n .



La superficie di contorno degli orbitali p è un doppio lobo che si espande lungo gli assi x, y e z.



La superficie di contorno degli orbitali d è a quattro lobi



Numeri quantici e orbitali

Perché gli orbitali sferici sono 1, i p sono 3, i d sono 5 e gli f sono 7?

Guardo il n. q. **magnetico** che ci dice quanti orbitali di quel tipo esistono

il Numero quantico **magnetico** (m_l) $-l, \dots, 0, \dots, +l$

se $l=0, m=0 \rightarrow 1s$

se $l=1, m= -1, 0, +1 \rightarrow 3p$

se $l=2, m=-2, -1, 0, 1, 2 \rightarrow 5d$

valori di l 0 1 2 3

sottolivello energetico $s \ p \ d \ f$

numero di orbitali 1 3 5 7

➤ l'energia di un orbitale dipende da l e da n ma non da m

➤ gli orbitali p e d hanno tutti la stessa energia sono «degeneri»

Numeri quantici e orbitali

Numero quantico **di spin** (m_s) o spin dell'elettrone è $+1/2$ $-1/2$

Spin = rotazione ma attenzione m_s **non è il verso di rotazione** dell'elettrone bensì è una proprietà intrinseca dell'elettrone che si manifesta quando l'elettrone, sottoposto all'azione di un campo magnetico esterno disomogeneo, assume due diversi stati energetici.

**perché così importante descrivere gli elettroni?
per capire la reattività chimica degli elementi**

COME UTILIZZO I NUMERI QUANTICI?

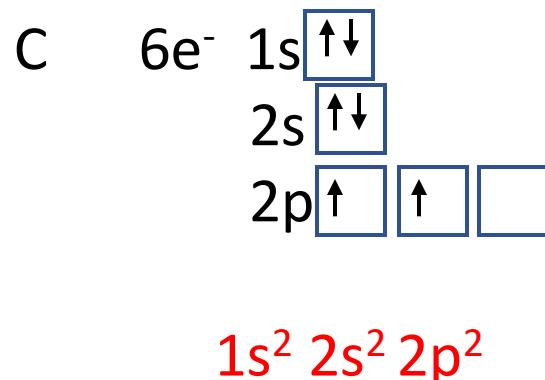
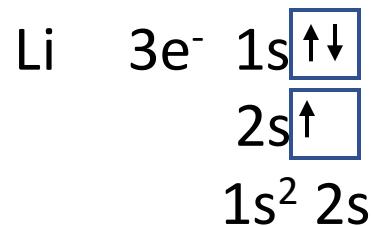
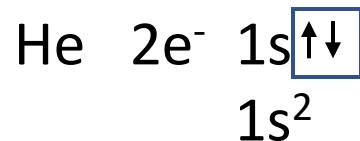
Numero quantico principale (n)	1.....+∞
Numero quantico secondario (l)	0.....n-1
Numero quantico magnetico (m_l)	-l.....0....+l
Numero quantico di spin (m_s)	+1/2 -1/2

Se $n=1$ $l=0$ $m=0$ 1s

Se $n=2$ $l=0$ $m=0$ 2s
 $l=1$ $m=-1$ 0 $+1$ 2p

Se $n=3$ $l=0$ $m=0$ 3s
 $l=1$ $m=-1$ 0 $+1$ 3p
 $l=2$ $m=-2$ -1 0 1 2 3d

Se $n=4$



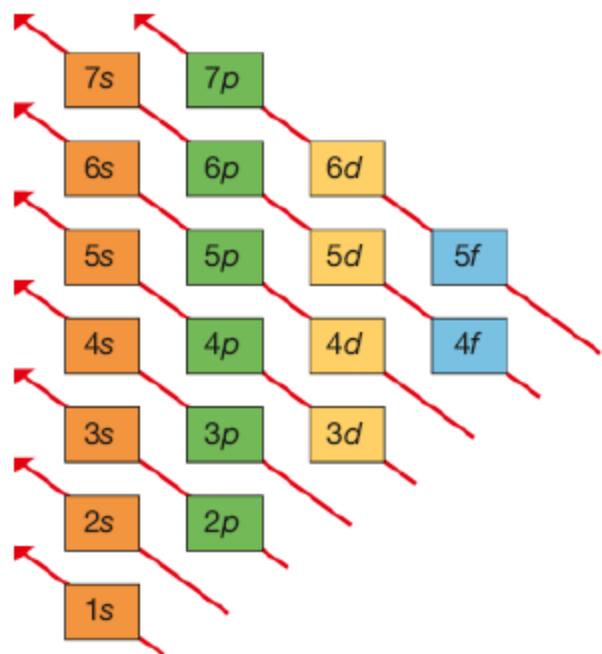
Principio di esclusione di Pauli: due elettroni non possono avere tutti numeri quantici uguali. Quindi avranno spin opposti

Regola di Hund: quando ho orbitali degeneri cerco di occuparli tutti prima di formare coppie di elettroni e gli elettroni appartenenti a un medesimo sottolivello tendono ad assumere lo stesso spin.

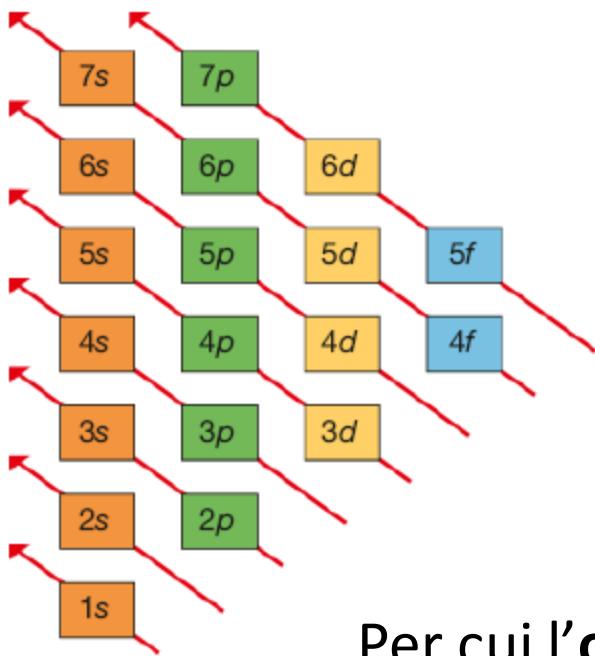
Perché? Per attenuare le forze repulsive date dalla carica negativa

La configurazione elettronica

La successione degli orbitali in ordine di energia crescente si ricava seguendo l'andamento delle frecce.



ATTENZIONE:
dopo i 4s si riempiono i 3d!!



il **principio di Aufbau** o principio della costruzione progressiva, secondo cui vanno occupati prima gli orbitali a bassa energia e a seguire, in ordine crescente, tutti gli altri

Per cui l'**ordine di riempimento degli orbitali** è:

$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s, 5f, 6d$

Provate a scrivere la configurazione elettronica di:

O

Mg

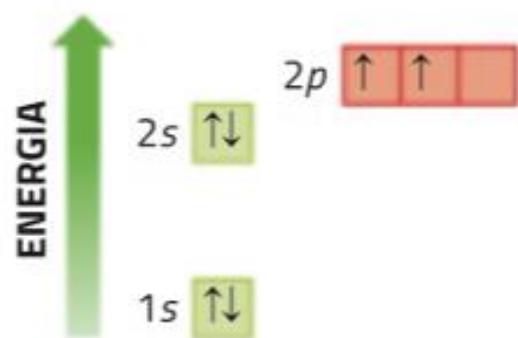
Ca

Si

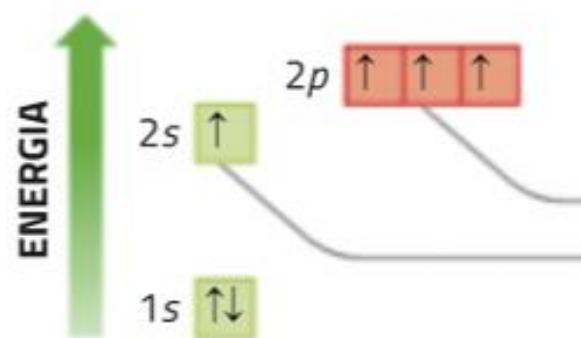
Cl

Tutti gli elementi del gruppo I sono	s^1
II	s^2
III	p^1
IV	p^2
V	p^3
VI	p^4
VII	p^5
VIII	p^6

stato fondamentale del carbonio: **configurazione esterna $2s^2 2p^2$**



stato fondamentale: $1s^2 2s^2 2p^2$



stato eccitato: $1s^2 2s^1 2p^3$

Gli elettroni
spaiati nella
configurazione
eccitata sono
quattro.

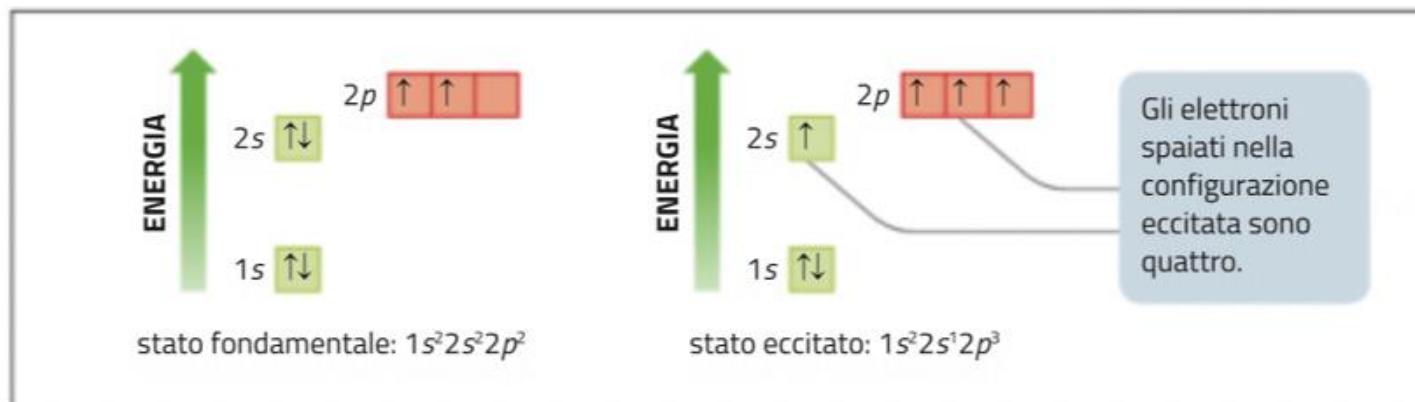
Le proprietà dell'atomo di carbonio

- 1) Versatilità: il carbonio può formare un gran numero di composti organici
- 2) Capacità di **ibridarsi** sp , sp^2 e sp^3 e di formare sempre quattro legami covalenti

COME????

stato fondamentale del carbonio: **configurazione esterna** $2s^2$ $2p^2$

per combinarsi con altri atomi assorbe energia dall'esterno e trasferisce un elettrone della coppia dell'orbitale $2s$ a un orbitale $2p$ vuoto (questo processo si definisce **promozione elettronica**) modificando la **configurazione elettronica esterna**.



Il carbonio ora ha 4 orbitali semipieni e può formare 4 legami

Ibridazione sp^3 - singolo legame -

Tuttavia, siccome l'orbitale atomico 2s sferico ha energia inferiore e forma diversa da quella dei tre orbitali 2px, 2py, 2pz, dovremmo aspettarci tre legami uguali ed uno diverso.

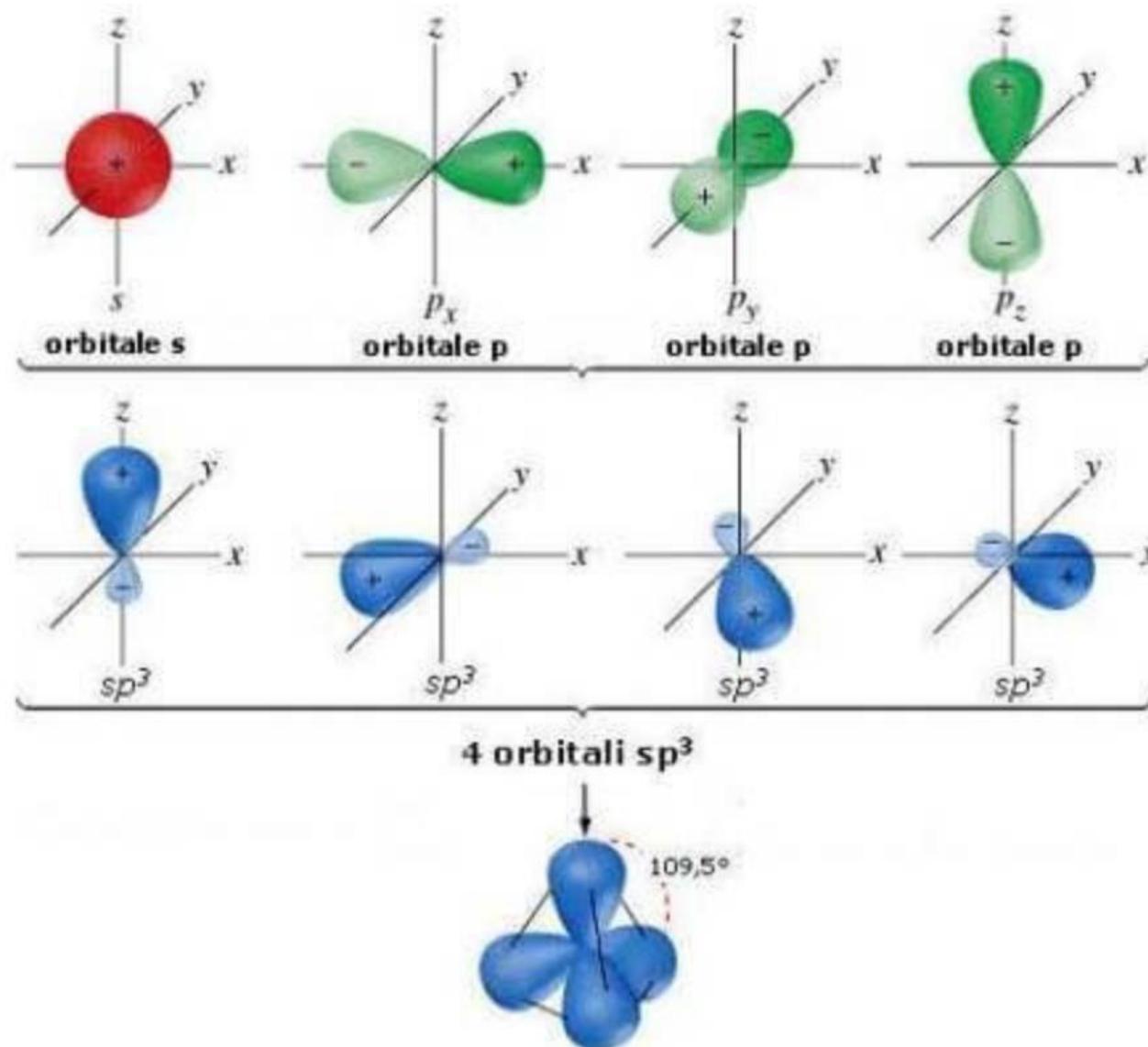
Tutto ciò è in contrasto con i fatti sperimentali che accertano la presenza nel metano (CH_4) di 4 legami covalenti identici.

La teoria suggerisce il "mescolamento" dell'orbitale 2s con i tre orbitali 2p.

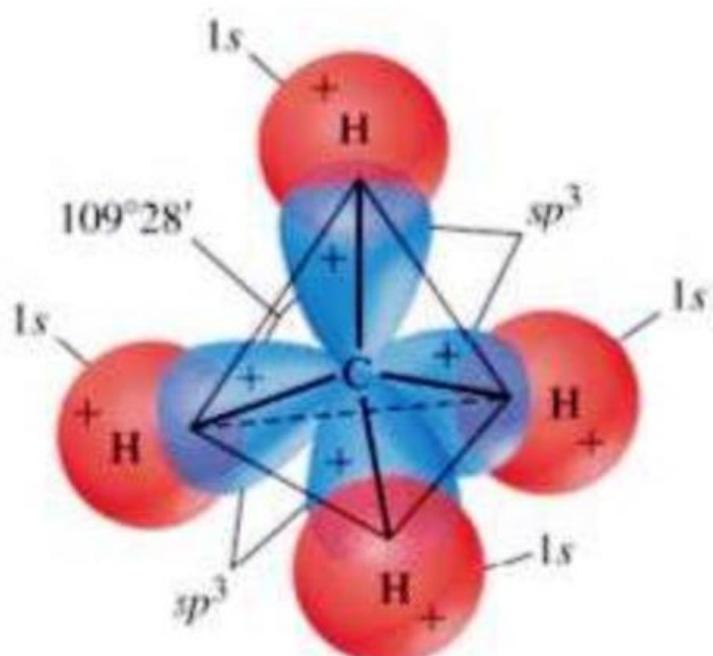
Come risultato si ottengono 4 nuovi orbitali identici tra loro, di forma, energia e disposizione nello spazio del tutto diverse da quelle originarie. Questa operazione matematica prende il nome di **ibridazione**.

I nuovi 4 orbitali ibridi, chiamati sp^3 , hanno per 1/4 le caratteristiche dell'orbitale s di partenza e per 3/4 le caratteristiche degli orbitali 2p. Il 3 esponente di p indica il numero di orbitali p che partecipano alla formazione dell'ibrido.

I quattro orbitali ibridi sp^3 puntano verso i vertici di un tetraedro, disponendosi a $109,5^\circ$ l'uno dall'altro:

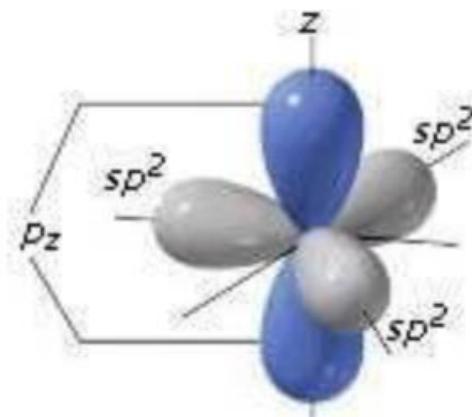
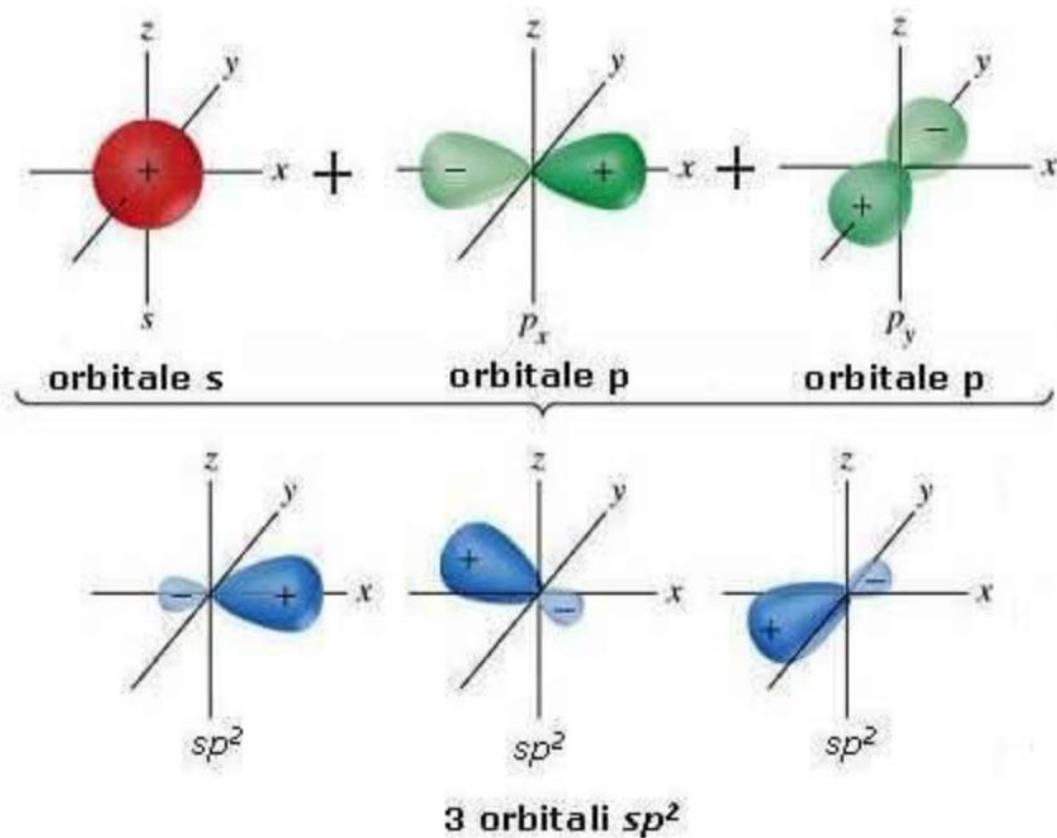


Nella formazione della molecola del metano, si ha una sovrapposizione tra i 4 orbitali ibridi sp^3 e 4 orbitali 1s appartenenti a 4 atomi di idrogeno diversi:



Ibridazione sp^2 - doppio legame -

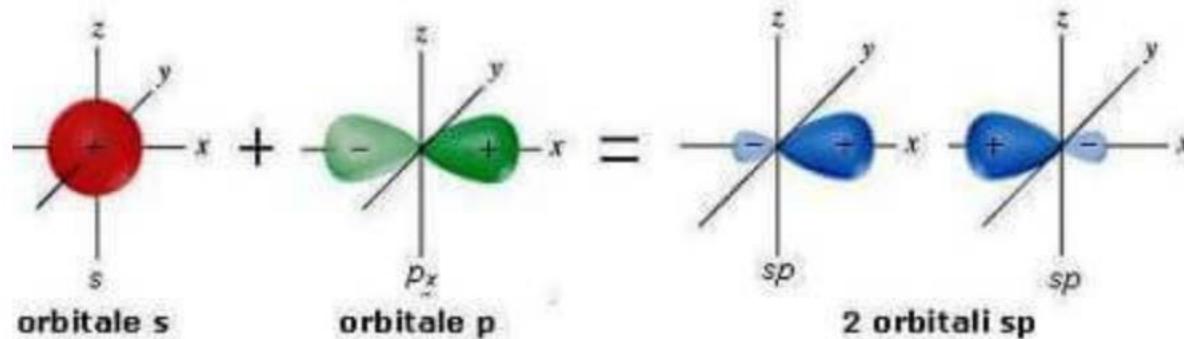
Oltre all'ibridazione sp^3 esistono anche altre ibridazioni. Dal mescolamento di un orbitale s con due orbitali di tipo p si ottengono 3 orbitali ibridi detti orbitali sp^2 che si dispongono su di un piano formando angoli di 120° l'uno dall'altro



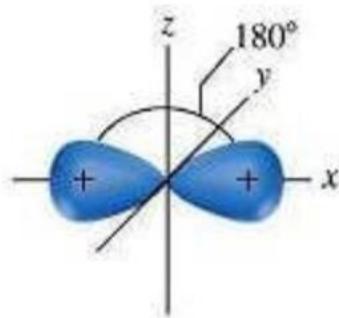
L'orbitale p non coinvolto nell'ibridazione si dispone perpendicolarmente al piano dei 3 orbitali ibridi sp^2

Ibridazione sp - triplo legame -

La combinazione di un orbitale di tipo s e uno di tipo p dà origine a 2 orbitali ibridi sp. Ogni orbitale ibrido sp ha il 50% di carattere s e il 50% di carattere p.

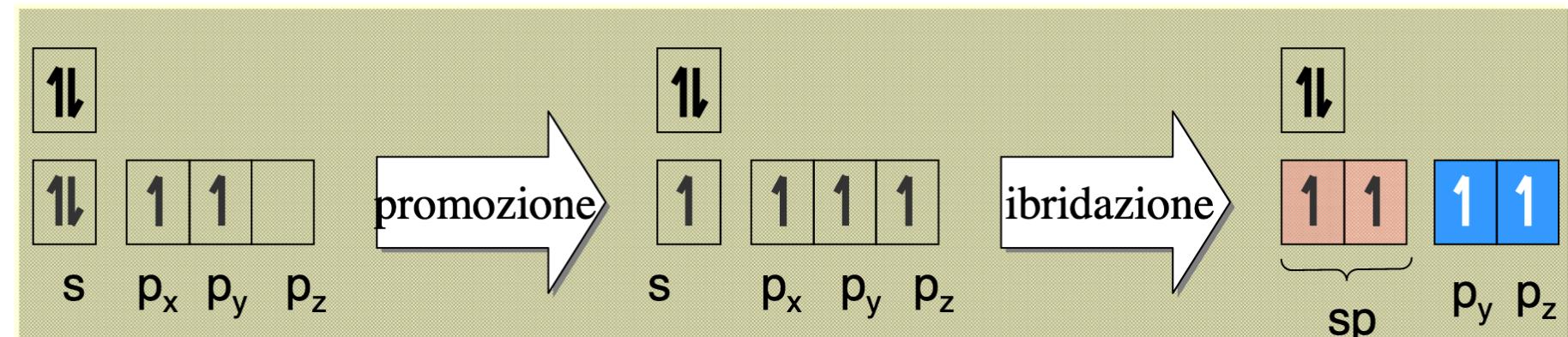
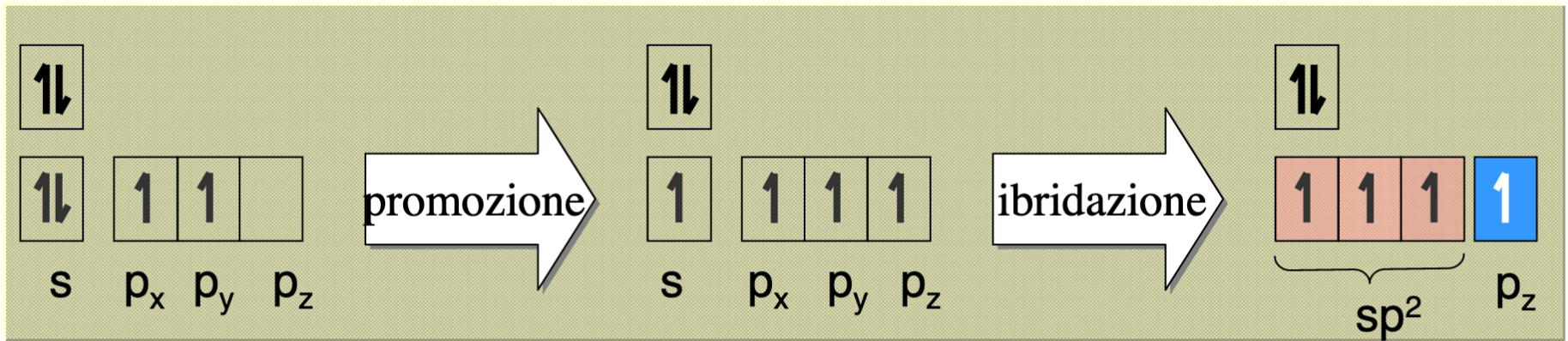
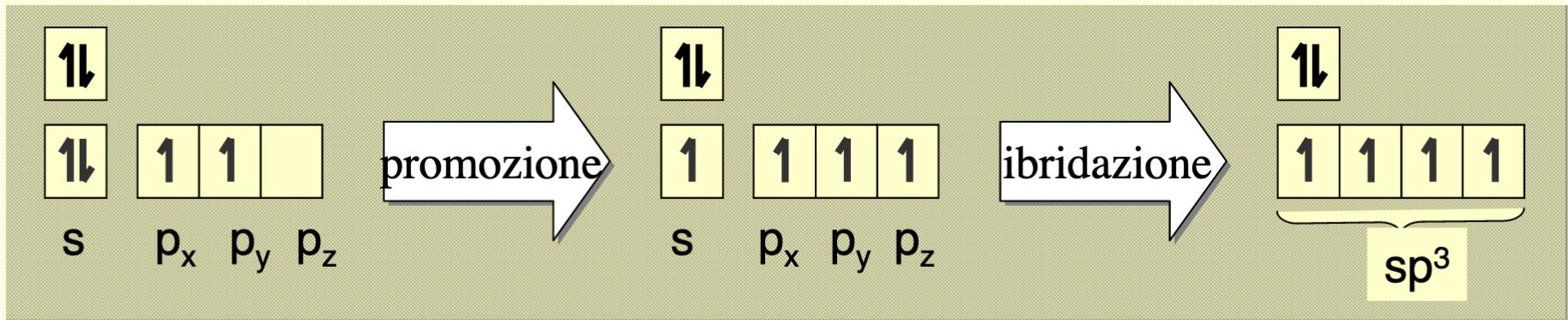


si dispongono a 180°



Presentano ibridazione sp gli atomi di carbonio uniti da un legame covalente triplo ($-C\equiv C-$), come ad esempio nella molecola dell'etino $HC\equiv CH$.

Riassumendo sull'ibridazione:

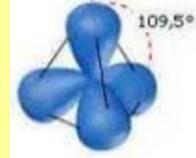


Il carbonio può formare legami covalenti

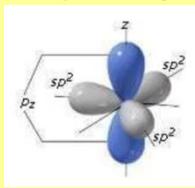
carbonio-carbonio semplici, doppi o tripli:

- semplici: $\text{C}-\text{C}$ (atomi di carbonio ibridati sp^3)**
- doppi: $\text{C}=\text{C}$ (atomi di carbonio ibridati sp^2)**
- tripli: $\text{C}\equiv\text{C}$ (atomi di carbonio ibridati sp)**

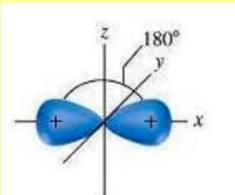
- Ibridazione sp^3 → se l'atomo di carbonio è legato a 4 atomi; i 4 orbitali ibridi degeneri sp^3 sono orientati verso i vertici di un tetraedro regolare con angoli di $109,5^\circ$



- Ibridazione sp^2 → se l'atomo di carbonio è legato a 3 atomi; i tre orbitali ibridi degeneri sp^2 si dispongono su un piano passante per il nucleo dell'atomo e sono orientati verso i vertici di un triangolo equilatero con angoli di 120°



- Ibridazione sp → se l'atomo di carbonio è legato a due atomi; i due orbitali ibridi degeneri sp sono disposti lungo una retta passante per il nucleo dell'atomo, a 180° l'uno dall'altro



Le proprietà dell'atomo di carbonio

4) valore medio di elettronegatività (2,5) per cui può formare legami covalenti poco polari, quindi stabili;

il Carbonio CONDIVIDE gli elettroni!

Elettronegatività= potere di attrazione di un atomo nei confronti degli elettroni del legame con un altro atomo

Nella tavola periodica l'elettronegatività aumenta dal basso verso l'alto e da sinistra a destra nei gruppi.

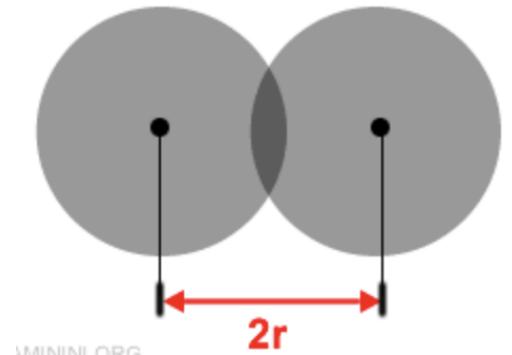
Covenzionalmente va da 0.7 del francio a 4 del fluoro

Le proprietà dell'atomo di carbonio

5) piccolo raggio atomico (77 pm)

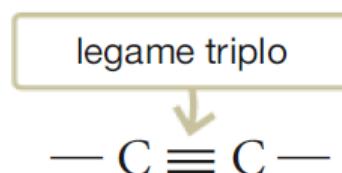
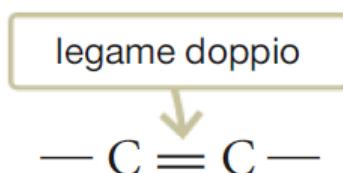
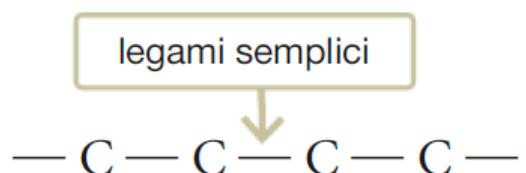


la metà della distanza fra i nuclei di due atomi legati fra loro



quindi il carbonio è poco ingombrante

E la *presenza di quattro elettroni nello strato di valenza* permette di formare catene di atomi di carbonio uniti da legami semplici, doppi o tripli.



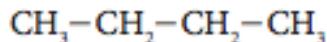
Ciò consente al C la specificità di formare più molecole costituite dagli stessi atomi ma disposti diversamente nello spazio

Le proprietà dell'atomo di carbonio

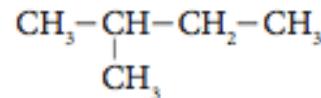
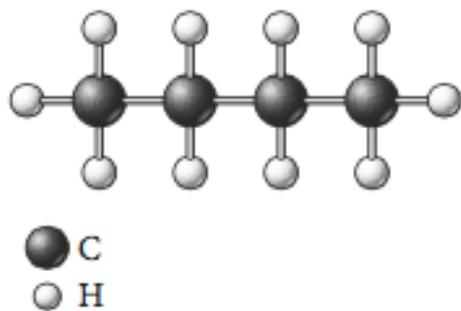
6) grande tendenza alla concatenazione:

l'energia spesa per la promozione elettronica è compensata dalla formazione di 4 legami covalenti, stabili se formati con altri C, poco ingombranti e identica elettronegatività.

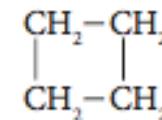
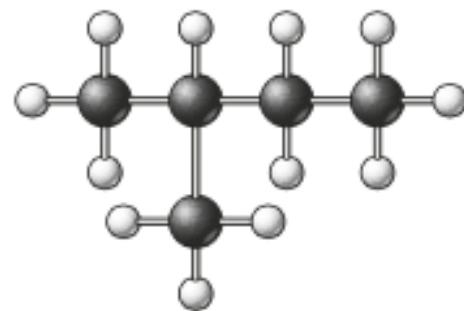
Le catene formate da atomi di carbonio possono essere:



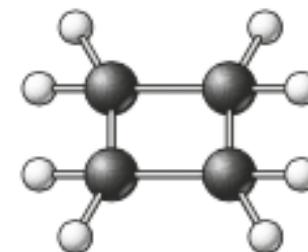
catena lineare



catena ramificata



catena chiusa



3) numero di ossidazione con tutti i valori compresi tra +4 e -4;

n.o. è la carica che un atomo assume in un composto attribuendo le coppie di elettroni di legame all'atomo più elettronegativo.

Per il calcolo: rappresentare la formula di struttura di Lewis e attribuire
0 x ogni legame con altri C
-1 x ogni legame con H e metalli
+1 x ogni legame con I non metalli (O, N, S, alogenii)

la somma algebrica di tutti questi valori è il n.o. di quell particolare atomo di C.

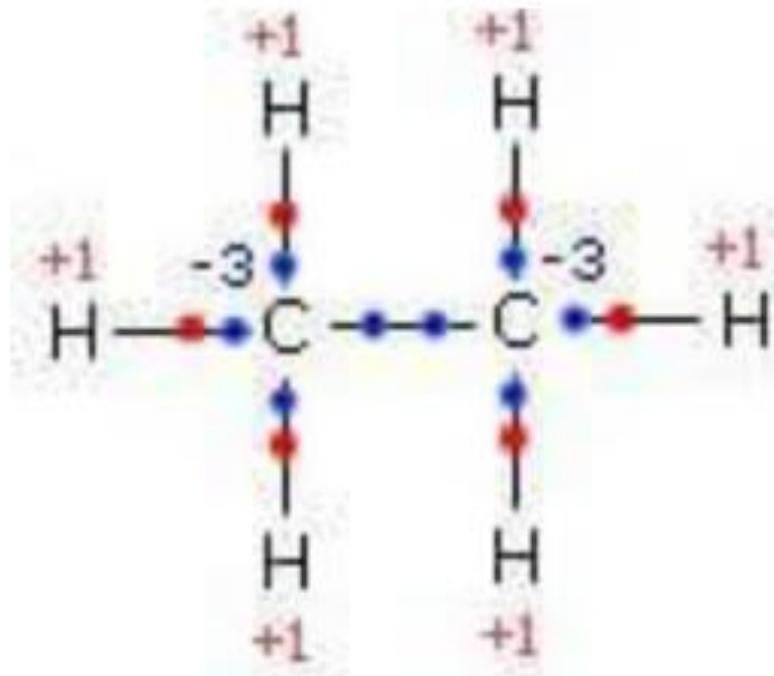
Es: etano CH_3CH_3

ciascun C riceve 3e da 3 atomi
di H quindi il suo n.o. è -3
ciascun H assume n.o. +1

Le proprietà dell'atomo di carbonio

3) numero di ossidazione con tutti i valori compresi tra +4 e -4;

n.o. è la carica che un atomo assume in un composto attribuendo le coppie di elettroni di legame all'atomo più elettronegativo.



ciascun C riceve 3e da 3 atomi di H quindi il suo n.o. è -3
ciascun H assume n.o. +1

Le proprietà dell'atomo di carbonio

3) numero di ossidazione con tutti i valori compresi tra +4 e -4;

n.o. è la carica che un atomo assume in un composto attribuendo le coppie di elettroni di legame all'atomo più elettronegativo.

Quindi x attribuire un n.o. per ogni atomo di C:

Per il calcolo: rappresentare la formula di struttura di Lewis e attribuire

0 x ogni legame con altri C

-1 x ogni legame con H e metalli

+1 x ogni legame con I non metalli (O, N, S, alogenri)

la somma algebrica di tutti questi valori è il n.o. di quell particolare atomo di C.

Es: etano CH_3CH_3

- Risolvi: CH_3CHO $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$ $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COH}$

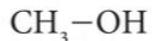
Riassumendo:

Le proprietà dell'atomo di carbonio

- 1) Versatilità:** il carbonio può formare un gran numero di composti organici
- 2) capacità di ibridarsi sp , sp^2 e sp^3 e di formare sempre quattro legami covalenti;**
- 3) numero di ossidazione che assume tutti i valori compresi tra +4 e -4;**
- 4) valore medio di elettronegatività (2,5) per cui può formare legami covalenti poco polari, quindi stabili;**
- 5) piccolo raggio atomico (77 pm) per cui può formare legami covalenti singoli, doppi o tripli;**
- 6) grande tendenza alla concatenazione.**

ESERCIZI

4 Qual è il n.o. del carbonio nel seguente composto?



(A) +2 (B) 0 (C) +4 (D) -2

5 Il carbonio ha n.o. uguale a -2 nel composto

(A) CH_3Cl (B) CH_2F_2
(C) HCOOH (D) HCN

7 Il composto $\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_3$ è rappresentato con la formula

(A) di Lewis
(B) razionale
(C) condensata
(D) topologica

8 La formula condensata corrispondente alla formula razionale $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ è

(A) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHCH}_2\text{CH}_3$
(B) $\text{NH}(\text{CH}_2)_2(\text{CH}_3)_2$
(C) $\text{NH}(\text{CH}_2-\text{CH}_3)_2$
(D) $(\text{CH}_3\text{CH}_2)\text{NH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)$

18 Qual è l'ibridazione dell'atomo di carbonio evidenziato in rosso nei seguenti composti?

a. $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{C}\text{HO}$ b. $\text{C}\text{H}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_3$
c. $\text{CH}_3-\text{C}\text{OO}-\text{CH}_3$ d. $\text{CH}\equiv\text{C}-\text{CH}_3$

19 Qual è il n.o. degli atomi di carbonio nei seguenti composti?

a. $\text{CH}\equiv\text{CH}$ b. $\text{H}-\text{COOH}$
c. CH_3-OH d. $\text{CH}_3-\text{CO}-\text{CH}_3$

20 Qual è il n.o. degli atomi di carbonio nei seguenti composti?

a. $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ b. $\text{CH}_3-\text{C}\equiv\text{CH}$
c. $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_3$ d. $\text{CH}_2\text{Cl}-\text{CHBr}-\text{CH}_3$

21 Rappresenta le catene carboniose dei composti con formula molecolare C_5H_{12} (3 catene aperte) e C_5H_{10} (3 catene chiuse).

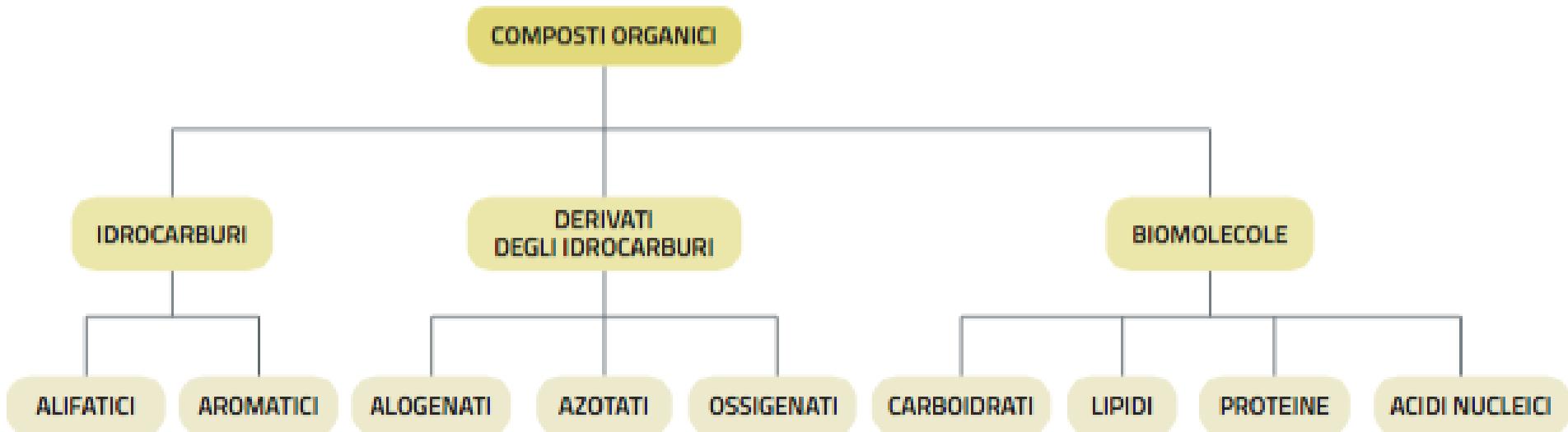
22 Rappresenta la formula razionale, razionale e topologica corrispondente ai seguenti composti.

a. $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_3$ b. $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$
c. $(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CH}_3$ d. $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_3$

I composti organici

I composti organici si distinguono in:

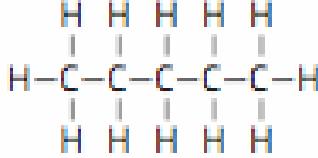
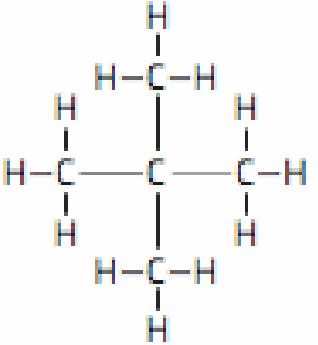
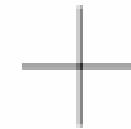
- **idrocarburi** composti solo da C e H
- **derivati degli idrocarburi** C,H,O,N,S e alogenzi (F, Cl, Br, I, At)
- **biomolecole** C,H,O,N



Le formule dei composti organici

I composti organici si possono rappresentare con le **formule DIVERSE**:

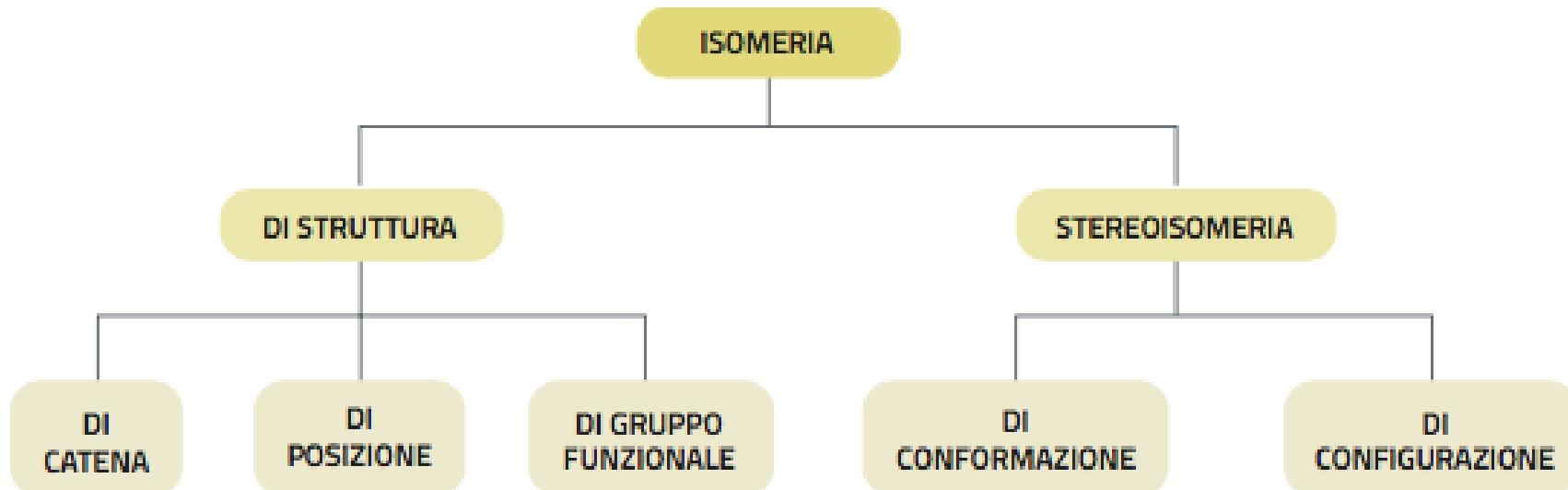
- **di Lewis**, che mettono in evidenza tutti i legami chimici;
- **razionali**, che evidenziano solo i legami carbonio-carbonio;
- **condensate**, che mettono in evidenza solo gli atomi e i gruppi atomici;
- **topologiche**, che evidenziano solo la catena carboniosa.

Composto	Lewis	Razionale	Condensata	Topologica
<i>n</i> -pentano		$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	
<i>neo</i> -pentano		$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	$(\text{CH}_3)_4\text{C}$	

Gli isomeri rendono conto dell'elevato numero di composti organici

Si dicono **isomeri** i composti che hanno la stessa formula bruta, ma che differiscono per:

- il modo in cui gli atomi si legano tra loro (*isomeri di struttura*);
- la disposizione spaziale (*stereoisomeri*).



Gli isomeri di struttura

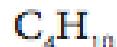
L'isomeria di struttura è un fenomeno per cui gli atomi di due o più composti sono legati tra loro in sequenze differenti oppure una diversa posizione di un legame multiplo/gruppo atomico.

L'isomeria di struttura si distingue in:

- isomeria di catena;
- isomeria di posizione;
- isomeria di gruppo funzionale.

Isomeria di catena

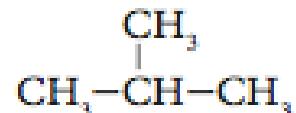
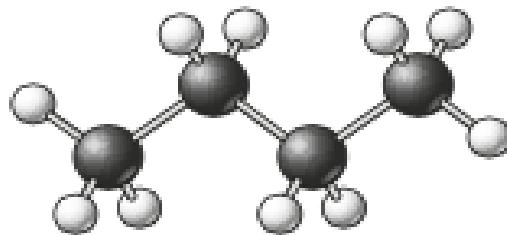
Gli isomeri **di catena** sono composti che differiscono per il modo diverso con cui gli atomi di carbonio sono legati nella catena carboniosa.



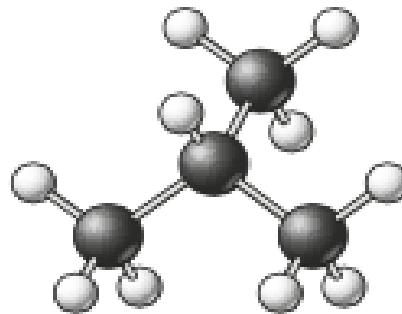
butano



n-butano



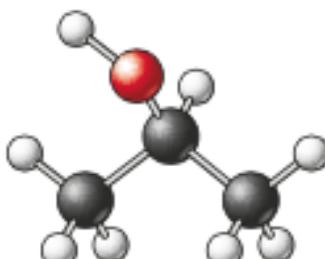
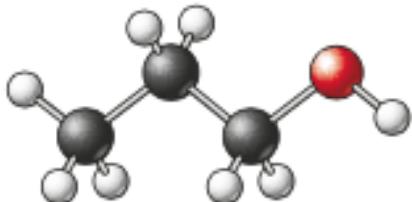
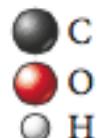
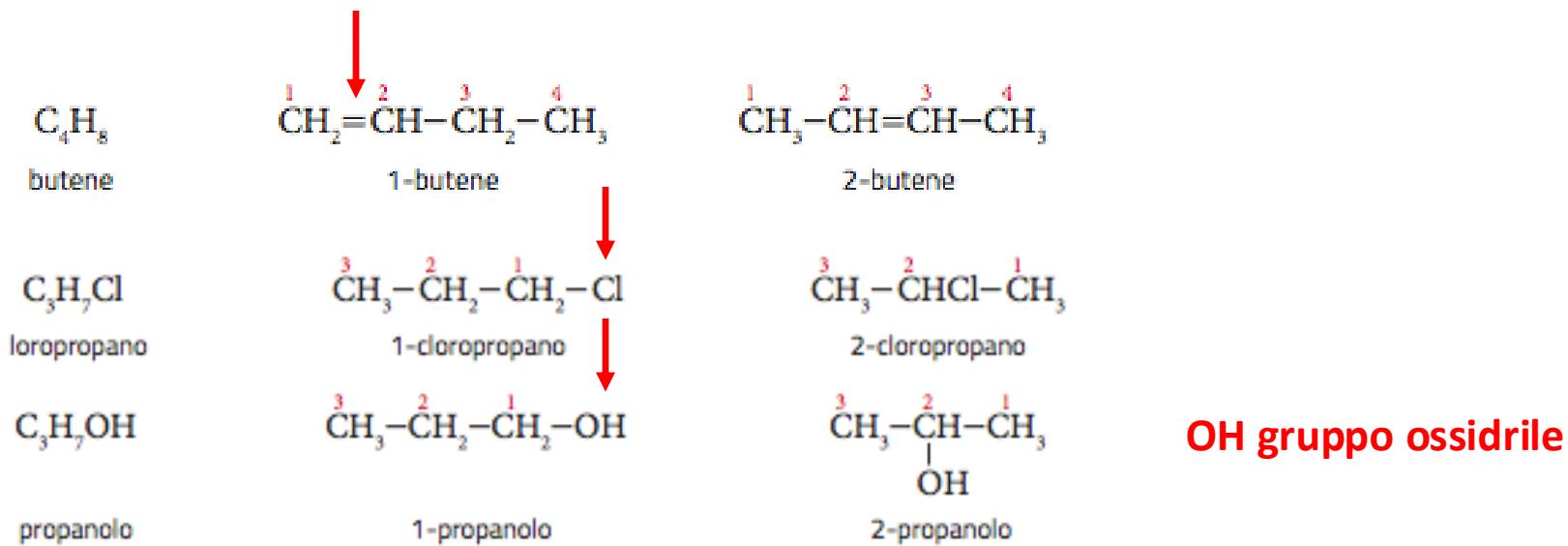
isobutano



n=normal si usa in riferimento ad un isomero con catena lineare

Isomeria di posizione

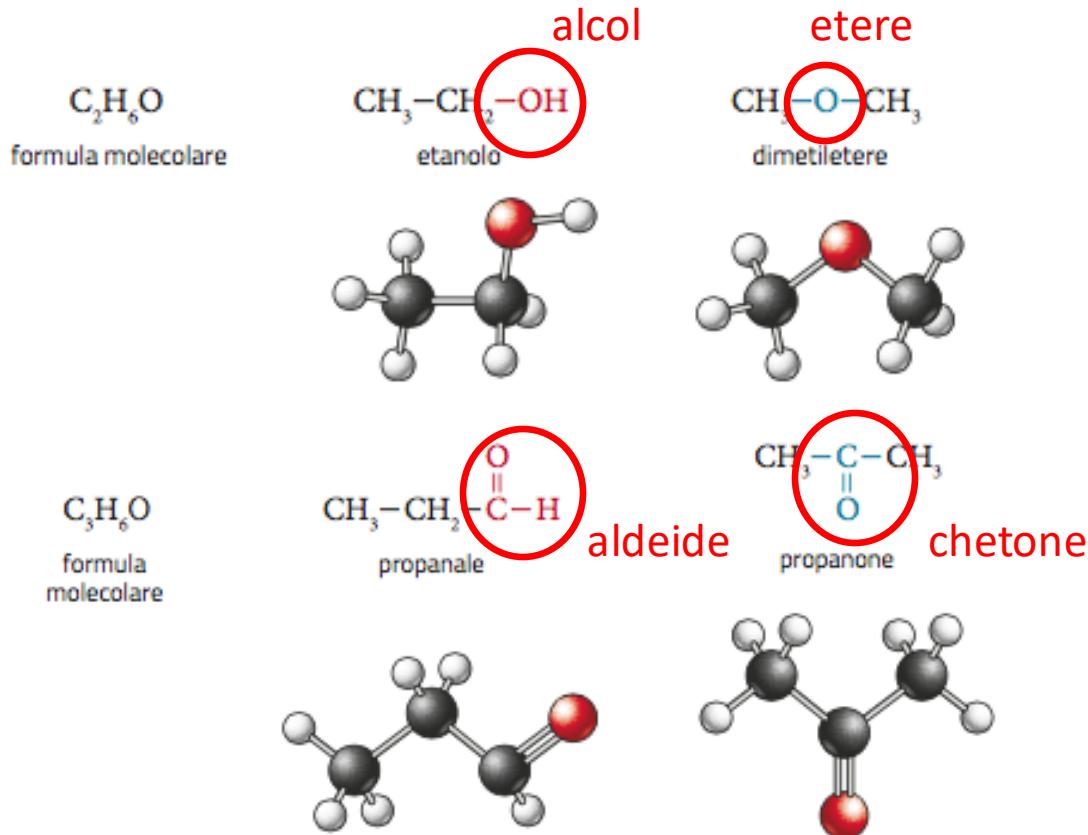
Gli isomeri **di posizione** sono composti che hanno la stessa catena carboniosa, ma che differiscono per la posizione di legami multipli, atomi o gruppi funzionali.



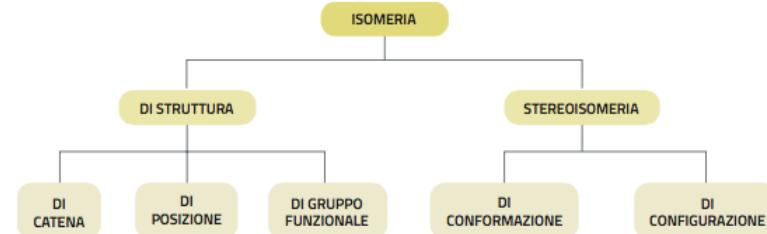
Isomeria di gruppo funzionale

Gli isomeri **di gruppo funzionale** sono composti che presentano gruppi funzionali diversi nella catena carboniosa.

Un gruppo funzionale è un legame multiplo, uno specifico atomo o un gruppo atomico presente nella catena carboniosa.

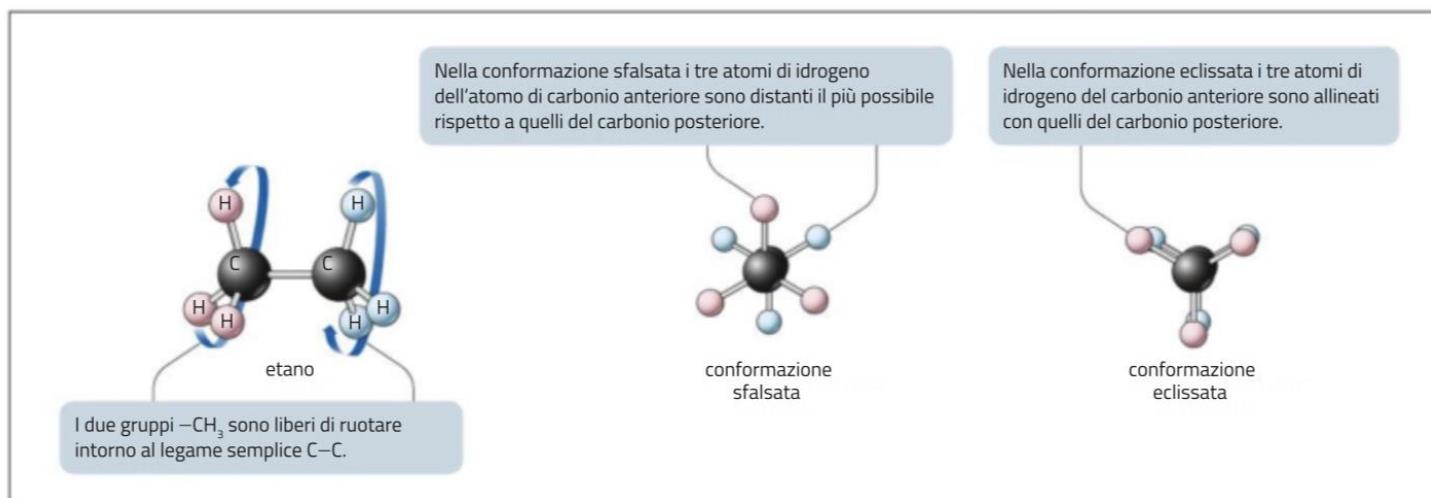


Gli stereoisomeri

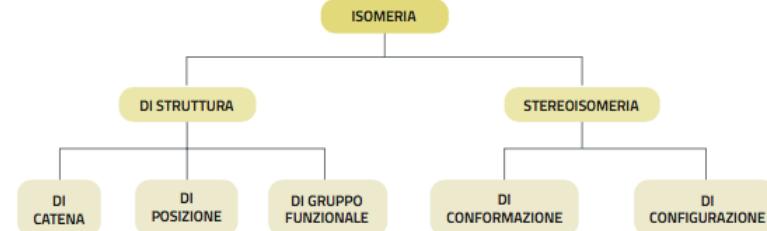


La **stereoisomeria** è il fenomeno per cui atomi, o gruppi atomici di due o più composti, sono legati tra loro nella stessa sequenza ma con differente disposizione spaziale.

- **isomeria di conformazione:** i composti differiscono a seguito della libera rotazione intorno ad un legame semplice C-C. Si possono interconvertire.



Gli stereoisomeri



- **isomeria di configurazione:**

composti che differiscono per l'orientazione nello spazio ma che **NON si possono interconvertire** per rotazione intorno ad un legame

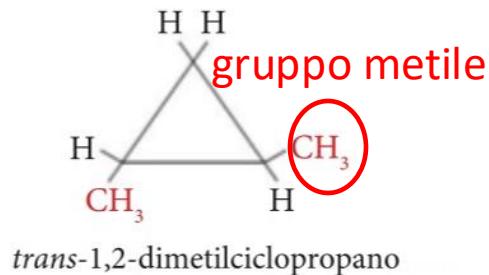
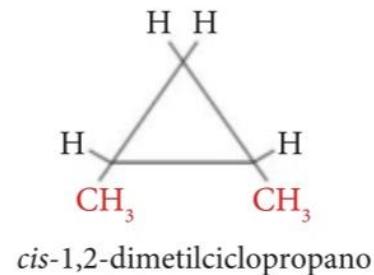
- è distinta in

isomeria geometrica

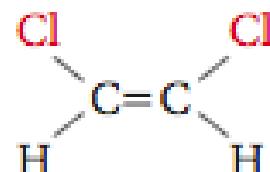
enantiomeria (o *isomeria ottica*).

Isomeria geometrica

Gli **isomeri geometrici** sono composti che differiscono per la disposizione spaziale degli atomi o di gruppi atomici (diversi da H) **legati a due atomi di carbonio** uniti da un legame semplice (*cicloalcani*) o da un doppio legame (*alcheni*).

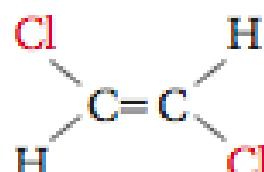


Non c'è' interconversione tra le due molecole perché non avviene rotazione attorno al legame C-C



formula molecolare

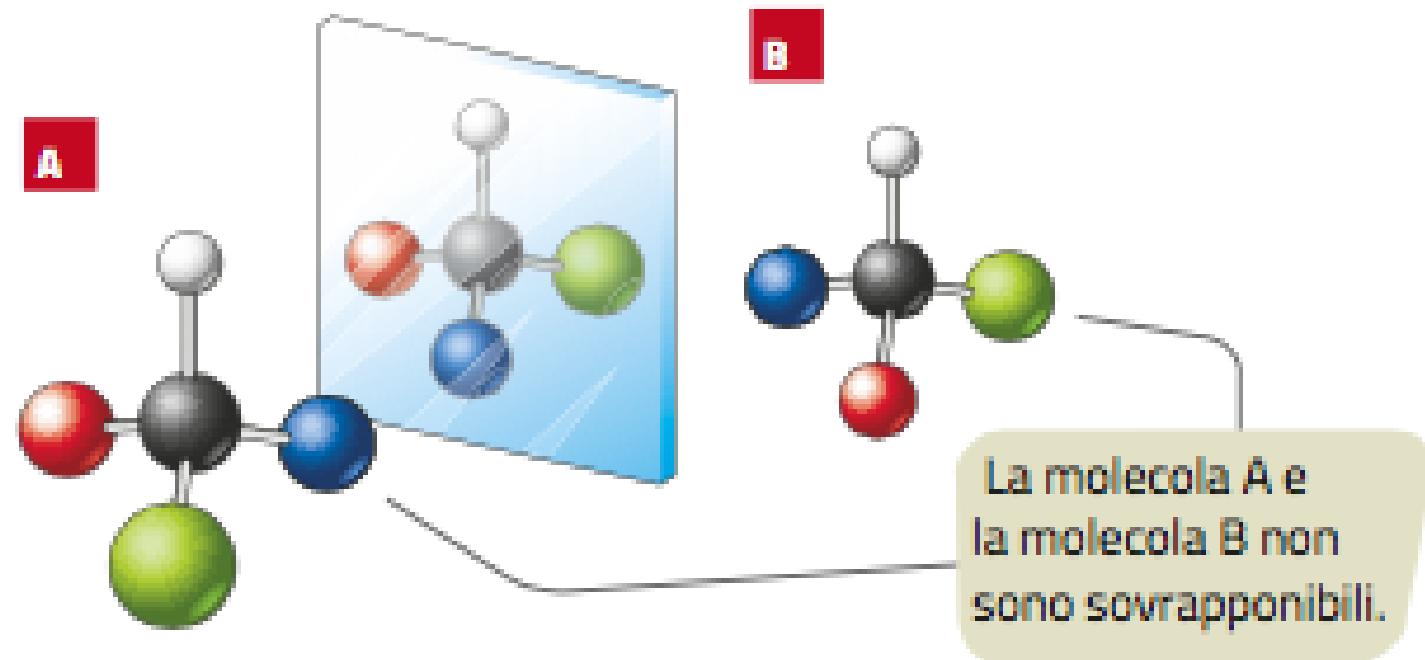
cis-1,2-dichloroetene



trans-1,2-dichloroetene

Enantiomeria o isomeria ottica

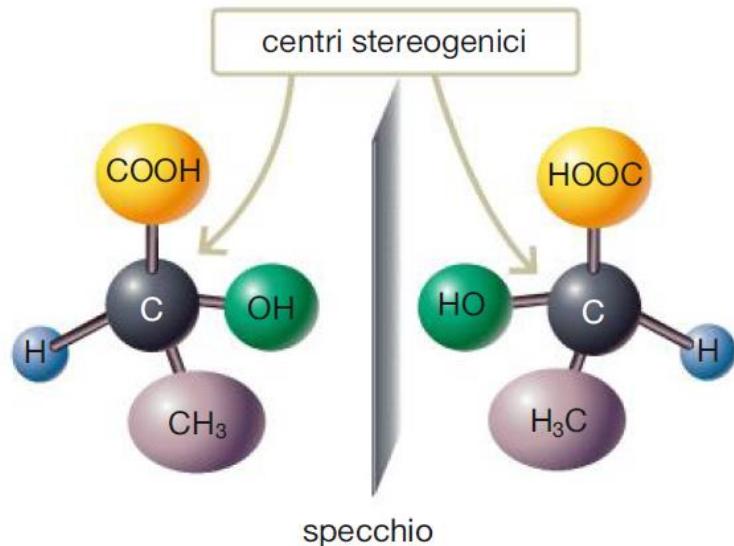
Gli **enantiomeri** o **isomeri ottici** sono due molecole con diversa disposizione spaziale, l'una l'immagine speculare dell'altra ma non sovrapponibili.



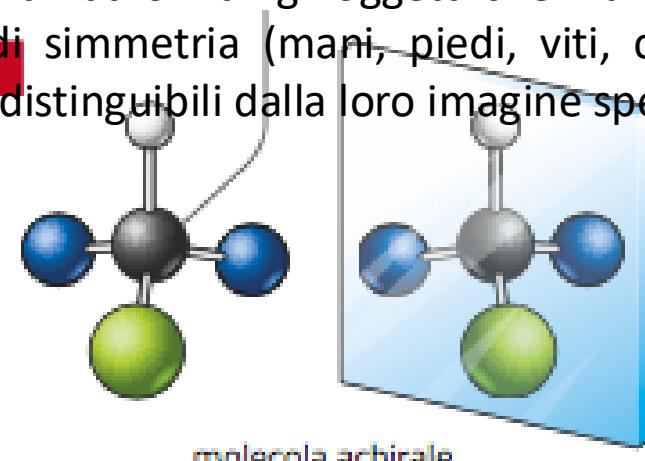
La chiralità

Una molecola esiste sotto forma di due enantiomeri se presenta un atomo di *carbonio* legato a quattro atomi o gruppi atomici diversi detto stereocentro o stereogenico ed è vassente un piano di simmetria.

Una molecola che contiene uno stereocentro si chiama **chirale**. Il requisito più importante affinché una molecola sia chirale è l'assenza di un piano di simmetria.



Sono chiamati **chirali** gli oggetti che mancano di un piano di simmetria (mani, piedi, viti, conchiglie), ovvero distinguibili dalla loro **imagine speculare**.

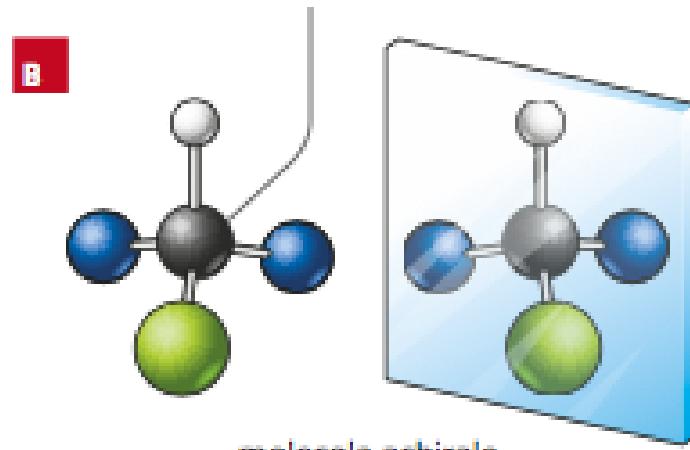
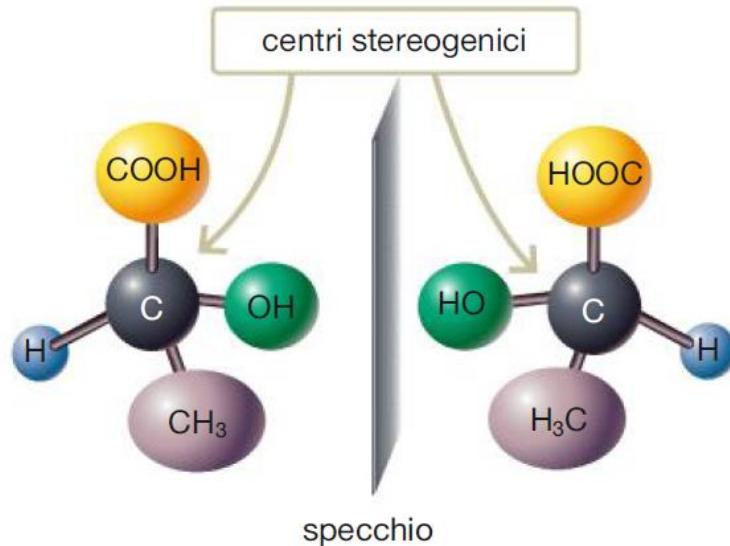


La chiralità

Una molecola esiste sotto forma di due enantiomeri se presenta un atomo di **carbonio** legato a quattro atomi o gruppi atomici diversi detto stereocentro o stereogenico ed è assente un piano di simmetria.

Una molecola che contiene uno stereocentro si chiama **chirale**.

Il requisito più importante affinché una molecola sia chirale è l'assenza di un piano di simmetria.



Sono chiamati **chirali** gli oggetti che mancano di un piano di simmetria (mani, piedi, viti, conchiglie), ovvero distinguibili dalla loro **imagine speculare**.