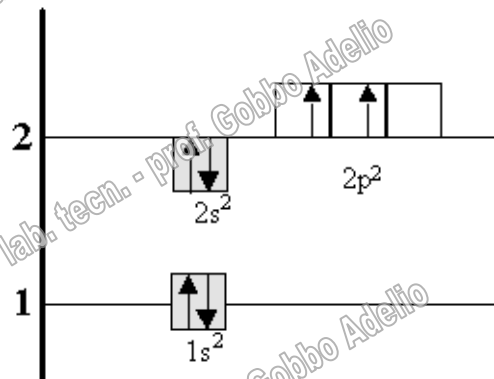


L'elemento carbonio e il suo più semplice composto con l'idrogeno

L'elemento carbonio è caratterizzato dal numero atomico $Z=6$, per cui la sua configurazione elettronica di base sarà: ${}_6\text{C} \Rightarrow 1s^2 2s^2 2p^2$

Figura 1 – Schema della configurazione di base del carbonio



Secondo tale configurazione ci si attende che il carbonio dia luogo alla formazione di due legami covalenti (avendo solo due elettroni spaiati nell'ultimo livello). Ad esempio con l'idrogeno ($Z=1$) il più semplice composto che si origina dalla combinazione dei due elementi dovrebbe avere formula CH_2 .

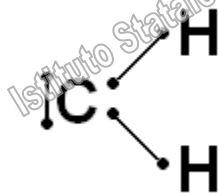
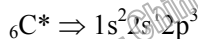


Figura 2 – Ipotetica formula del più semplice composto tra il carbonio e l'idrogeno.

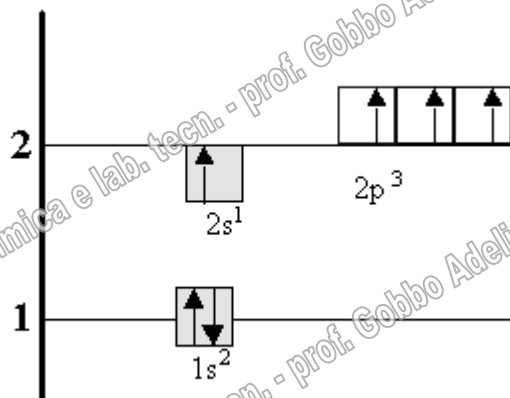
In realtà il più semplice composto idrogeno-carbonio ha formula CH_4 (metano) in cui un carbonio lega contemporaneamente quattro idrogeni, mediante altrettanti legami covalenti. Questo si può spiegare solo ammettendo che il carbonio disponga non di due, bensì di quattro elettroni spaiati. Ciò è ancora più vero se si riflette sul fatto che pressoché in tutti i suoi composti il carbonio si comporta sempre da tetravalente.

Per raggiungere questo risultato dovremo eccitare un elettrone dell'orbitale $2s$ (dando l'energia di promozione), mandandolo ad occupare un orbitale p vuoto.



Tutto sommato la cosa non è difficile essendo l'orbitale di partenza e quello di arrivo appartenenti al medesimo guscio 2. Questa momentanea destabilizzazione è comunque accettabile perché nelle fasi successive, che andremo a descrivere tra poco, il carbonio guadagnerà in stabilità, potendo raggiungere l'ottetto completo e soprattutto perché potrà ora formare quattro legami invece di due (ricordiamo che la formazione di un legame chimico è un processo esotermico: se il sistema forma quattro legami invece di due ovviamente si stabilizza di più).

Figura 3 – Schema elettronico del carbonio eccitato.



Ora è teoricamente possibile sfruttare i 4 elettroni spaiati per dare 4 legami covalenti.

Tuttavia poiché questi elettroni occupano orbitali di tipo diverso (s e p) per forma ed energia, il loro utilizzo dovrebbe generare due diversi tipi di legame: uno ottenuto dall'utilizzo dell'elettrone posto nel $2s$ e tre (tra loro uguali) ottenuti dall'utilizzo degli elettroni posti negli orbitali $2p$.

Poiché già van't Hoff nel secolo scorso aveva dimostrato che, almeno nel metano, i 4 legami del carbonio erano perfettamente equivalenti, DEVE avvenire un ulteriore processo che renda identici i "contenitori", cioè gli orbitali, in cui si trovano gli elettroni.

Questo processo viene detto di IBRIDAZIONE.

Tuttavia, ahimè, il carbonio, a seconda dei composti in cui si trova, è in grado di ibridarsi in modo differente. Prendiamo in considerazione per prima cosa il comportamento del carbonio negli alcani e, vista la nostra inesperienza, partiamo dall'alcano più semplice, il metano.

I quattro orbitali del C* eccitato, un orbitale s e tre orbitali p, si mescolano tra loro per formare quattro orbitali ibridi identici. Tali orbitali sono detti sp^3 perché formati da un orbitale s e da tre orbitali p.

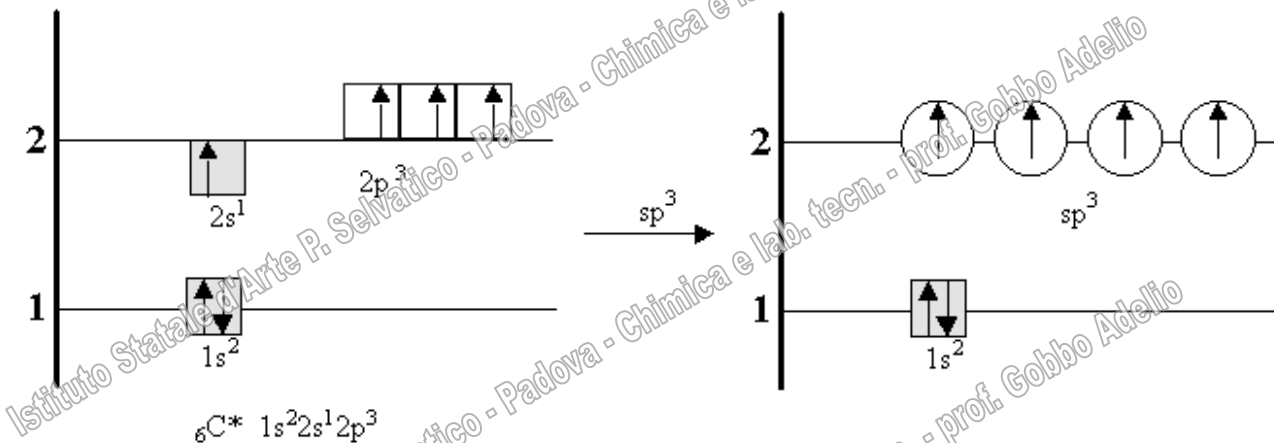


Figura 4 – Attraverso l'ibridazione da due tipi di orbitali si ottiene un unico tipo: in ogni caso il numero complessivo degli orbitali coinvolti nel processo di mescolamento non cambia.

La loro forma è intermedia tra quella sferica dell'orbitale s e quella a otto dei tre orbitali p. Essendo quest'ultimi predominanti (tre su quattro) è da prevedere che gli orbitali sp^3 siano più simili ai p che non al solo orbitale s.



Figura 5 – Forma di un singolo orbitale sp^3 , con il suo asse di simmetria.

Essi sono diretti verso i 4 angoli di un tetraedro regolare, con angoli di $\sim 109^\circ$, raggiungendo un assetto geometrico più stabile (cioè massima distanza l'uno dall'altro¹ ed equivalenti tra loro (cioè indistinguibili).

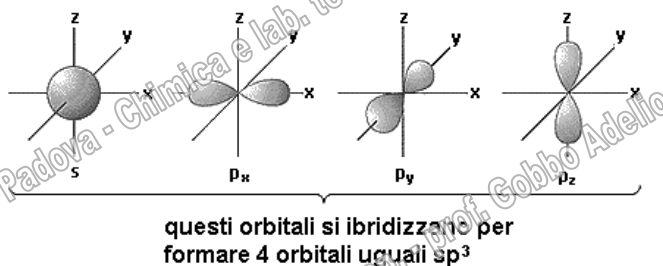
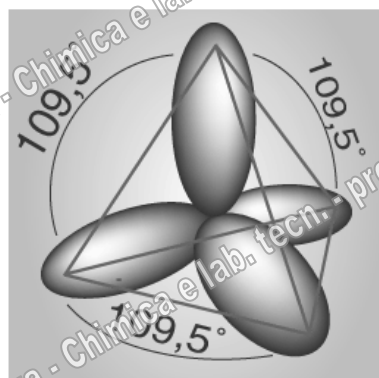


Figura 6 – Da quattro orbitali, uno di tipo s e tre di tipo p si ottengono quattro orbitali ibridi sp^3 , disposti a tetraedro, come in figura.



A questo punto siamo in dirittura di arrivo: il carbonio può legarsi con 4 atomi di idrogeno, sovrapprendo i suoi orbitali sp^3 con gli orbitali s degli idrogeni: si forma finalmente il metano!

¹ Non dimentichiamo che ciascuno degli orbitali sp^3 contiene un elettrone e che gli elettroni si respingono tra loro.

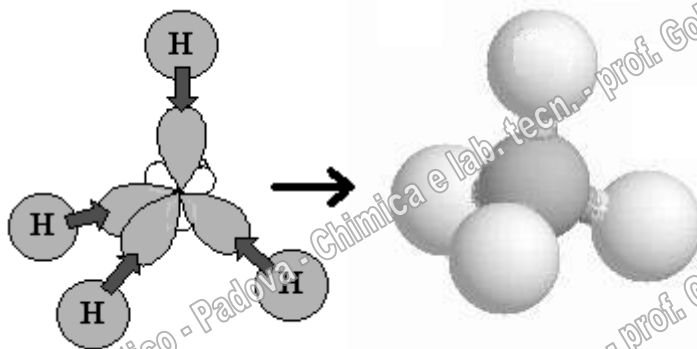


Figura 7 _ Formazione del metano CH_4 , a partire da un carbonio tetraedrico e quattro atomi di idrogeno, ciascuno con 1 elettrone in un orbitale s.

Cosa dovete ricordare alla fine di questo capitolo:

1. Il carbonio forma nei suoi composti quattro legami
2. Se è ibridato secondo uno schema sp^3 i quattro legami covalenti servono a unire quattro atomi ben distinti: in altre parole ogni atomo si “pappa” un legame covalente e così via
3. La disposizione spaziale degli atomi uniti al carbonio è quella di un tetraedro, con angoli di legame di circa 109° .

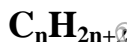
Gli alcani

I più semplici composti organici sono gli **IDROCARBURI**, composti che contengono esclusivamente **carbonio** e **idrogeno**. Nonostante ciò sono molto numerosi, grazie alla grande versatilità del carbonio che è in grado non solo di formare **quattro legami covalenti** ma anche di “giocarseli” in modo diversificato rispetto allo schema sp^3 finora affrontato²

Tradizionalmente lo studio degli idrocarburi inizia con gli **ALCANI**, composti le cui molecole presentano **tutti i carboni** con **ibridazione sp^3** con una geometria tetraedrica, dotate di uno **scheletro carbonioso** o **catena aperta**, che può essere **lineare** oppure **ramificata**³. Come conseguenza sono presenti esclusivamente **legami semplici di tipo σ** (sigma), formati da una coppia di elettroni, o tra carbonio e carbonio o tra carbonio e idrogeno.

Si suole anche affermare che gli alcani sono degli **idrocarburi saturi**, in quanto contengono nelle loro molecole il numero massimo consentito di atomi di idrogeno, rispetto ai carboni presenti.

La loro formula bruta generale è:



Sono dotati di un' elevata **inerzia chimica** e per questo vengono ancora oggi indicati con il termine **PARAFFINE**, che deriva dal latino **parum affinis**, cioè poco affine, poco reattivo.

Essendo saturi e non potendo aggiungere alcunché gli alcani, quando reagiscono danno principalmente **reazioni di sostituzione**.

La famiglia degli alcani costituisce una serie omologa, dove ogni membro differisce dal successivo di un termine costante CH_2 .

Il più semplice membro degli alcani è il metano (CH_4), formato da un solo carbonio legato a 4 idrogeni. Il suo nome è ottenuto mettendo insieme la radice relativa alla presenza di un solo carbonio (**met-**) a quella del suffisso caratterizzante la famiglia (**-ano**) in modo da ottenere il termine **metano**.

² Rimandiamo in ogni caso a una lezione successiva lo studio degli altri tipi di ibridazione.

³ Essi appartengono in realtà a un gruppo più ampio, quello degli **ALIFATICI** (il cui nome deriva dalla parola greca che sta ad indicare una sostanza grassa, oleosa): gli altri membri verranno studiati nel proseguo del programma.

Altri semplici membri della famiglia possono essere ottenuti legando tra loro più carboni in una **sequenza lineare** e poi completando con un numero adeguato di idrogeni, fino a soddisfare la tetravalenza dei carboni (e rispettando la monovalenza dell'idrogeno).

Le formule e i nomi di questi composti a struttura lineare (fino a 10 carboni) sono mostrati nella seguente tabella.

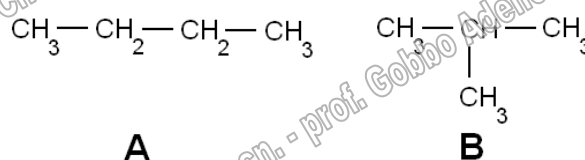
numero di atomi di carbonio formanti la catena	formule brute	formule razionali contratte	nome secondo le regole IUPAC
1	CH ₄	-	metano
2	C ₂ H ₆	CH ₃ -CH ₃	etano
3	C ₃ H ₈	CH ₃ -CH ₂ -CH ₃	propano
4	C ₄ H ₁₀	CH ₃ -(CH ₂) ₂ -CH ₃	butano
5	C ₅ H ₁₂	CH ₃ -(CH ₂) ₃ -CH ₃	pentano
6	C ₆ H ₁₄	CH ₃ -(CH ₂) ₄ -CH ₃	esano
7	C ₇ H ₁₆	CH ₃ -(CH ₂) ₅ -CH ₃	eptano
8	C ₈ H ₁₈	CH ₃ -(CH ₂) ₆ -CH ₃	ottano
9	C ₉ H ₂₀	CH ₃ -(CH ₂) ₇ -CH ₃	nonano
10	C ₁₀ H ₂₂	CH ₃ -(CH ₂) ₈ -CH ₃	decano

In realtà, a partire da alcani con quattro atomi di carbonio, è possibile il fenomeno dell'**isomeria**, per cui a una medesima formula bruta corrispondono più composti. Ad esempio, di composti a formula C₄H₁₀ non c'è ne uno solo, bensì 2.

Infatti con il butano inizia per gli alcani la possibilità di manifestarsi il fenomeno dell'**ISOMERIA DI CATENA**.

Esistono in pratica due alcani, rappresentati dalle formule scritte a fianco.

Per gli alcani la possibilità di isomeria cresce in modo esponenziale man mano che aumenta il numero di atomi di carbonio.



Numero di atomi di carbonio	Numero di isomeri
4	2
5	3
6	5
7	9
8	18
9	35
10	75
12	355
15	4.347
20	366.319

Classificazione dei carboni e degli idrogeni

Poiché il carbonio forma 4 legami è possibile che un singolo carbonio sia contemporaneamente legato fino a 4 altri atomi di carbonio. Si ricordi a questo proposito che:

- un carbonio viene definito **primario** se è legato solo ad un altro atomo di carbonio.
- un carbonio è detto **secondario** se è legato contemporaneamente ad altri due carboni.
- un carbonio è **terziario** quando è contemporaneamente legato a tre carboni
- un carbonio si dice **quaternario** quando si lega contemporaneamente ad altri quattro atomi di carbonio.

N.B. Gli atomi di idrogeno eventualmente legati ad un carbonio hanno la stessa classificazione di quel carbonio.

Cosa dovete ricordare alla fine di questo capitolo:

1. Gli alcani hanno tutti i loro carboni con ibridazione sp^3 con una geometria tetraedrica
2. Le loro molecole presentano uno scheletro carbonioso a catena aperta, che può essere lineare oppure ramificata
3. Nelle loro molecole sono presenti esclusivamente legami semplici di tipo σ (sigma), formati da una coppia di elettroni, o tra carbonio e carbonio o tra carbonio e idrogeno.
4. Gli alcani sono degli idrocarburi saturi, in quanto contengono nelle loro molecole il numero massimo consentito di atomi di idrogeno, rispetto ai carboni presenti.
5. La loro formula bruta generale è C_nH_{2n+2}
6. Sono dotati di un' elevata inerzia chimica e per questo vengono ancora oggi indicati con il termine PARAFFINE
7. Gli alcani, essendo saturi e non potendo aggiungere alcunché, quando reagiscono danno principalmente reazioni di sostituzione.
8. Ogni membro della serie omologa differisce dal successivo di un termine costante CH_2
9. I nomi e le formule brute e razionali dei primi dieci membri della serie omologa
10. Il significato di isomeria di catena negli alcani
11. La classificazione dei carboni (primario, secondario, terziario, quaternario) e dei relativi idrogeni nella molecola di un generico alcano

Le regole IUPAC, ossia come risparmiare tempo e fatica!

Come si è già compreso, il carbonio con l'idrogeno (e con pochi altri elementi) è in grado di formare numerosissimi composti.

Per poter assegnare e soprattutto ricordare il nome di così tanti composti è necessario memorizzare poche semplici regole, stabilite dalla **IUPAC** (International Union of Pure and Applied Chemistry).

Questo metodo è tuttavia relativamente recente per cui sono ancora in uso in chimica organica nomi tradizionali che possiamo definire di fantasia, i quali venivano assegnati in base all'origine o a certe proprietà dei composti.

C'è da dire che per molti composti (in particolare quelli di uso più comune) viene ancora utilizzato, anche in campo scientifico, il loro nome tradizionale.

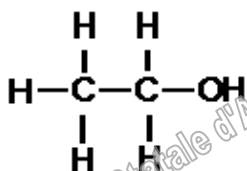
I due principi fondamentali su cui si basa la nomenclatura IUPAC

- Il **primo principio** su cui è basata la nomenclatura IUPAC dei composti organici è fondato sulla determinazione nel numero di atomi di carbonio legati assieme nella **catena principale**, catena che deve essere la **più lunga possibile**.
- Il **secondo principio** è basato sull'osservazione che un ristretto numero di atomi è in grado da solo di caratterizzare in maniera determinante le proprietà chimiche di una molecola, per cui molecole

"macroscopicamente" molto diverse tra loro possono avere in realtà un comportamento molto simile. Questi piccoli raggruppamenti, a volte formati anche da un solo atomo, vengono detti **gruppi funzionali**. Ciò permette di raggruppare i milioni di composti organici oggi noti in un gruppo piuttosto limitato di **famiglie**, basandosi proprio sul gruppo funzionale che le molecole presentano, sempre che ce l'abbiano. Ognuno di questi gruppi funzionali viene caratterizzato nella nomenclatura IUPAC da particolari suffissi e a volte anche da dei prefissi.

Nella sostanza il nome IUPAC di un composto organico è, nei casi più semplici, costituito da due parti:

1. una radice che indica quanti carboni sono presenti nella catena principale
2. un suffisso finale (a volte, raramente, accompagnato da un prefisso) che indica la famiglia a cui il composto organico appartiene.



Ad esempio il nome ETANOLO, l'alcol contenuto nel vino, birra, grappa, ecc. indica ad un chimico che la catena carboniosa è fatta di 2 atomi di carbonio (come nell'ET-ANO) e che è inoltre presente il gruppo funzionale -OH.

All'inizio comunque sarà opportuno che si affronti la nomenclatura IUPAC riferita ai soli idrocarburi, sicuramente più facile da studiare.

Applicazione delle regole IUPAC

Andiamo allora a verificare un'applicazione concreta delle regole IUPAC ai due alcani a formula C_4H_{10} dell'esempio fatto in precedenza.

L'isomero A presenta 4 carboni in sequenza lineare ed è quindi il butano o, se preferite il **n-butano** (si legge normal-butano).

L'isomero B ha invece nella catena principale solo tre carboni, mentre un quarto carbonio forma una ramificazione in posizione centrale.

Il suo nome, secondo le regole IUPAC, è così definito:

1. si determina la radice corrispondente al numero di carboni della catena principale che, come abbiamo già detto, deve contenere il maggior numero di atomi di carbonio: in questo caso la radice da utilizzarsi è **prop-**, avendo la catena principale solo 3 carboni; essendo il composto in questione appartenente alla famiglia degli alcani a questa radice si aggiunge il suffisso finale **-ano**; la catena principale sarà quindi definita dal termine **(prop-)(-ano)**, cioè **propano**
2. si determina adesso il nome della ramificazione: anche in questo caso si definisce la radice che come che caratterizzerà il nome della ramificazione (in questo caso **met-**, essendo presente un solo carbonio; ad essa si aggiunge la desinenza finale **-il** ad indicare che si tratta di una ramificazione, che sarà quindi definita dal termine **(met-)(-il)**, cioè **metil**
3. si mettono insieme le tre parti che definiranno il nome (ramificazione + radice catena principale + desinenza finale indicante la famiglia di appartenenza)

Alla fine avremo per il composto B il nome **metilpropano**.

Non dimentichiamo che questo composto ha un nome tradizionale, ancora molto usato, **isobutano**.

La ramificazione ora vista costituisce il caso più semplice di una catena laterale, rappresentata in generale da un **gruppo alchilico**, indicato con **R-** in cui manca sempre un idrogeno, rispetto al relativo alcano. Questo perché deve rimanere una valenza libera per saldare la catena laterale con quella principale. Ad esempio il **metano** è CH_4 mentre il gruppo alchilico da esso derivato è il **metile** con formula CH_3- . Ricordatevi che quando il nome del gruppo alchilico verrà assemblato nel nome finale dell'idrocarburo la lettera finale -e viene omissa, per cui si dirà metilbutano e non metilebutano.

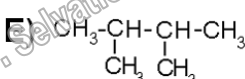
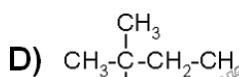
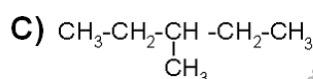
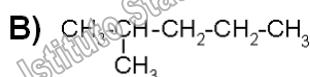
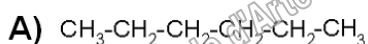
Di seguito si riportano i nomi dei gruppi alchilici che dovrete riconoscere ed utilizzare.

Nomi dei gruppi alchilici da CH_3- a C_4H_9-

n° di atomi di carbonio presenti	Nome	formula bruta	Formula di struttura
1	metile	CH_3-	CH_3-
2	etile	C_2H_5-	CH_3-CH_2-
3	propile	C_3H_7-	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$

3	isopropile		$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$
4	butile	C ₄ H ₉ -	$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$
4	isobutile		$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_2- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$
4	sec-butile		$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$
4	terz-butile		$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3-\text{C} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$

Ora che abbiamo imparato a riconoscere le ramificazioni laterali vediamo di assegnare i nomi agli isomeri dell'esano. Ci sono ben **cinque** isomeri dell'esano, C₆H₁₄, caratterizzati dal fatto di avere lo "scheletro molecolare" tra loro diverso (**ISOMERIA DI CATENA**).



REGOLE DI NOMENCLATURA

- Si individua la **catena principale** che deve essere una **catena carboniosa lineare la più lunga possibile**.
- Si individuano i **tipi di ramificazioni** presenti: se una data ramificazione si ripete più volte lungo la catena, si antepone al nome della ramificazione il prefisso di-, tri-, ecc. che indica quante volte essa si ripresenta lungo la catena principale
- Si numera la catena principale in modo da poter poi precisare la posizione delle ramificazioni. Il **verso di numerazione** della catena principale è condotta dal lato della catena che consente di individuare la posizione della ramificazione mediante il numero più basso possibile. Nel caso di più ramificazioni la numerazione della catena parte dal lato che permette di avere nel complesso i numeri più piccoli per indicare le ramificazioni: in pratica si fa la somma dei numeri e si sceglie il lato che dà la somma più bassa.
- Il numero che identifica la posizione della ramificazione è anteposto al nome della ramificazione, usando un trattino per separare il numero dal nome. Se una data ramificazione si ripete più volte lungo la catena, prima del prefisso di-, tri-, ecc. si premettono tanti numeri, ognuno per le varie posizioni, usando le virgole per separarli tra loro.
- Le ramificazioni precedono il nome della catena principale e fanno "corpo unico" con il nome di quest'ultima; in caso di più ramificazioni, l'ordine di chiamata preferibile è quello alfabetico (eventuali prefissi di- tri- ecc. vanno qui ignorati).

Applicando queste regole:

- il composto A) *n*-esano
 il composto B) 2-metilpentano e non 4-metilpentano
 il composto C) 3-metilpentano
 il composto D) 2,2-dimetilbutano e non 3,3-dimetilbutano
 il composto E) 2,3-dimetilbutano

Cosa dovete ricordare alla fine di questo capitolo:

- Le regole di nomenclatura, per filo e per segno!
 Può bastare??