

Ibridazione del Carbonio

Per ibrido si intende un incrocio tra due specie diverse, che determina la formazione di una specie con alcune nuove caratteristiche, diverse da entrambe le specie da cui deriva. Anche gli orbitali atomici possono formare ibridi; questi sono stati ipotizzati per spiegare la forma assunta da alcune molecole, non corrispondente a quanto prevedibile in base alla configurazione elettronica degli atomi. Ipotizzando un incrocio tra orbitali s e p a formare orbitali ibridi, con caratteristiche ed energie intermedie tra s e p , è possibile giustificare geometrie molecolari altrimenti non comprensibili.

Configurazione elettronica di C nello stato fondamentale

Ci sono due elettroni spaiati nell'ultimo livello. Ci si aspetterebbe che C formi solo due legami, invece, ne forma quattro. L'ibridazione rende possibile la formazione di quattro legami, che possono risultare anche diversi:

- alcani (legami semplici C-C)
- alcheni (legame doppio C=C)
- alchini (legame triplo C≡C)

Tipi di ibridazione del carbonio

Esistono tre tipi di ibridazione del carbonio: sp^3 , sp^2 e sp . Il primo passaggio è comune a tutti i tipi di ibridazione: partendo dallo stato fondamentale, si ha il "salto quantico" di un elettrone s nell'orbitale p vuoto; ciò genera uno stato eccitato. La spesa energetica necessaria per avere il salto quantico è compensata dalla possibilità di avere 4 elettroni spaiati disponibili per la formazione di altrettanti legami; ne risulta che C è tetravalente. Solitamente, esso forma quattro legami covalenti.

Configurazione elettronica di C nello stato eccitato

Con poca spesa di energia il carbonio può disaccoppiare gli elettroni dell'orbitale $2s$ e promuovere uno di essi nell'orbitale vuoto $2p$, assumendo una configurazione elettronica di tipo $1s^2 2s^1 2p^3$ in tal modo esso diventa «capace» di formare quattro legami covalenti anziché soltanto due

Ibridazione sp^3

Tutti gli studi sui composti saturi indicano che i quattro legami sono tutti equivalenti. Per spiegare questa osservazione si ipotizza che i 4 orbitali atomici del carbonio vengano «rimescolati», o ibridati, per dare 4 orbitali equivalenti, detti sp^3 , in quanto derivanti dal «rimescolamento» di un orbitale s e dei tre orbitali p .

La combinazione di un orbitale di tipo s e di tre orbitali di tipo p , dà origine a quattro orbitali ibridi detti orbitali sp^3 (geometria tetraedrica).

I quattro orbitali ibridi sp^3 si dispongono nello spazio in modo da risultare il più lontano possibile tra loro e risultano, pertanto, orientati verso i vertici di un tetraedro regolare con angoli di legame di $109,5^\circ$. L'atomo di carbonio nel metano (CH_4 , l'alcano più semplice) è ibridato sp^3 ; anche in tutti i casi in cui esso forma 4 legami covalenti semplici (legami sigma, σ) si ha ibridazione sp^3 .

Ibridazione sp^2

Nell'ibridazione sp^2 sono coinvolti l'orbitale s e due orbitali p (p_x e p_y) del carbonio eccitato; si formano 3 orbitali ibridi sp^2 equivalenti e resta un orbitale p inalterato. Si ha, quindi, una geometria trigonale-planare (angoli di 120°).

La combinazione di un orbitale di tipo s e di due orbitali di tipo p , dà origine a tre orbitali ibridi detti orbitali sp^2 .

L'orbitale p non coinvolto nell'ibridazione si dispone perpendicolarmente al piano formato dai tre orbitali ibridi sp^2 .



I tre orbitali ibridi (formati da un s e due p) si dirigono verso i vertici di un triangolo equilatero (l'assetto più stabile, cioè la massima distanza di questa struttura), mentre il p non ibridato è perpendicolare al piano definito dal triangolo. I tre orbitali complanari formano legami σ , mentre l'orbitale pz forma un legame π .

Il legame π si forma quando due orbitali di tipo p (ibridati o meno) si sovrappongono lateralmente; tale sovrapposizione risulta meno efficiente di quella presente in un legame σ , per cui il legame π è più debole di un legame σ . Nell'etene e in tutti gli alcheni non si può avere libera rotazione intorno al legame C=C, che è invece possibile attorno al legame semplice σ . L'ibridazione sp^2 è tipica anche dei composti aromatici: gli orbitali p non ibridati si sovrappongono a formare due anelli sopra e sotto il piano della molecola. L'anello aromatico forma un legame π che dà grande stabilità alla molecola.

Ciò che differenzia principalmente il legame σ dal legame π è che la sovrapposizione degli orbitali nel caso del legame σ avviene lungo la congiungente dei due nuclei degli atomi interessati nel legame, con una simmetria di tipo cilindrico; di conseguenza il legame σ è più forte del legame π . In un legame σ (Sigma) la distribuzione elettronica è concentrata lungo l'asse di legame ed è disposta in modo simmetrico intorno ad esso. In un legame π (Pi greco) la distribuzione elettronica è concentrata in due zone situate da parti opposte rispetto all'asse di legame e non è disposta simmetricamente intorno ad esso.

Ibridazione sp

Nell'ibridazione sp vengono rimescolati solo due orbitali, un s e un p (ibridi sp), mentre gli altri due p restano inalterati.

Gli orbitali ibridi sp si dispongono secondo l'assetto più stabile (massima distanza) a 180° (geometria lineare), cioè sulla stessa retta ma in direzione opposta. La combinazione di un orbitale di tipo s e un orbitale di tipo p dà origine a due orbitali ibridi detti orbitali sp.

I due orbitali p puri (py e pz, di cui si omette la rappresentazione del lobo minore) rimangono perpendicolari tra loro e alla retta che passa per i due nuclei di C.

L'ibridazione sp si trova nei composti che contengono un triplo legame $C\equiv C$ (alchini).

Il triplo legame è formato da un legame forte σ tra i 2 orbitali sp dei due atomi di carbonio e da due legami più deboli π , dovuti alla sovrapposizione parziale dei due orbitali puri py e dei due orbitali puri pz.