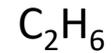
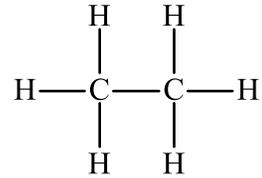


# Chimica Organica – Concetti generali

Scrittura

Formula di struttura

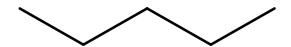
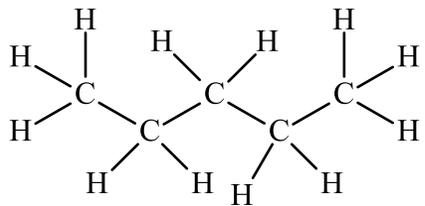
Formula molecolare



Formula di struttura

Scrittura condensata

Scrittura a scheletro



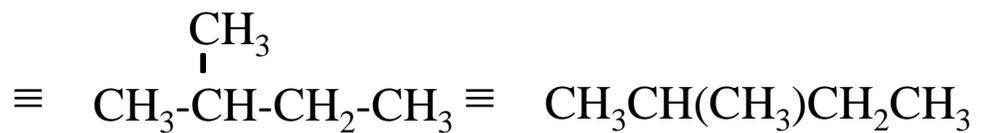
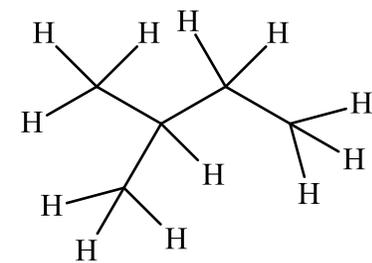
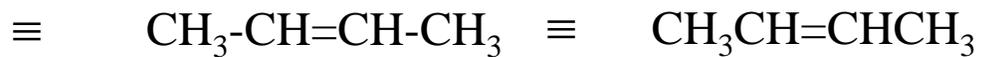
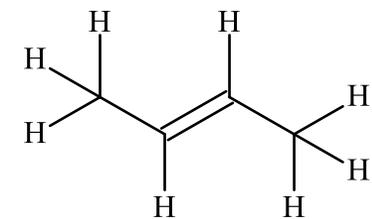
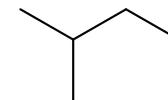
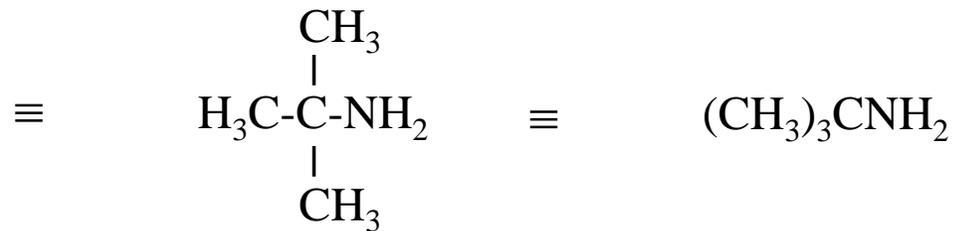
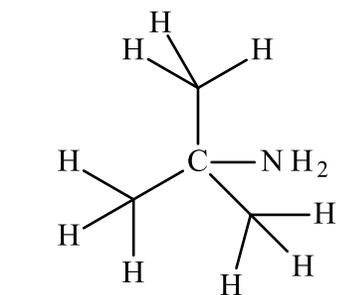
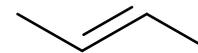
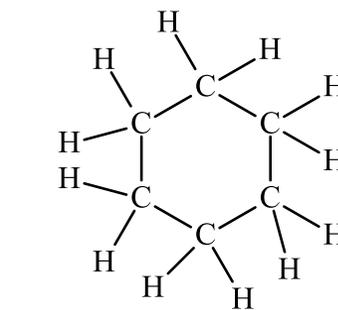
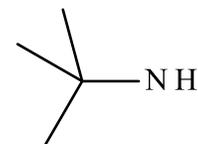
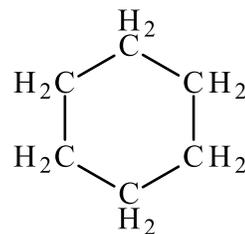
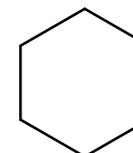
Scrittura a scheletro

Minima informazione ma non ambigua. I carboni non sono mostrati, sia assume che siano all'intersezione di due o più linee e al termine di ogni linea. Gli idrogeni non sono mostrati. Tutti gli atomi diversi da C e H sono sempre mostrati.

### Formula di struttura

### Scrittura condensata

### Scrittura a scheletro


 $\equiv$ 

 $\equiv$ 

 $\equiv$ 

 $\equiv$ 

 $\equiv$ 


# Composti organici

I composti organici presentano:

Nome Generico. Questo identifica un'intera classe di composti con caratteristiche simili.. Quindi dal punto di vista generale parliamo di alcoli, aldeidi, ammine ecc...

Nome specifico: identifica un singolo composto all'interno di una classe, ad esempio, etanolo, metanolo, propanolo (sempre della classe degli alcoli ma con nomi specifici diversi, diversi atomi di carbonio...)

In generale possiamo rappresentare la struttura di un composto organico in questa maniera

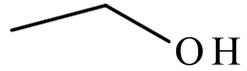


R, R' rappresenta(no) la struttura dello scheletro carbonioso. Questa determina parte delle proprietà fisiche della molecola (influenza la solubilità, equilibrio idrofilico/idrofobico). Determina il nome specifico della molecola. R viene generalmente chiamato gruppo alchilico (non aromatico) o arilico (aromatico).

Y rappresenta il gruppo funzionale che determina le principali proprietà chimiche e parte delle proprietà fisiche della molecola. Il gruppo funzionale determina la reattività e il nome generico.

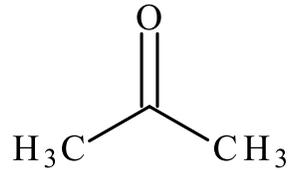
## Esempi di classi di composti organici

# R-Y



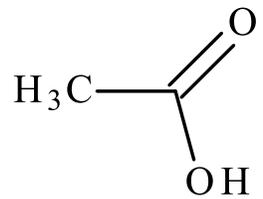
Y = -OH; alcol

R = CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>-; etanolo



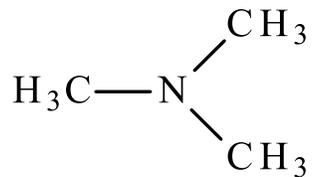
Y = -C=O; chetone

R, R' = CH<sub>3</sub>-; propanone (acetone)



Y = -COOH; acido carbossilico

R = CH<sub>3</sub>-; acido etanoico (acido acetico)



Y = -N; ammina

R = CH<sub>3</sub>-; N,N-dimetil-metanammina (trimetilammina)

## Gruppo funzionale

Il gruppo funzionale definisce una classe di composti. Composti che hanno lo stesso gruppo funzionale hanno proprietà simili e reattività simile.

Il gruppo funzionale determina la reattività della molecola e la sua chimica, anche alcune delle proprietà fisiche (solubilità, tipologia di interazioni intermolecolari, ...).

Definisce il suffisso del nome specifico del composto.

Quando il gruppo funzionale è solo H, abbiamo gli alcani (si dice che non ci sia gruppo funzionale).

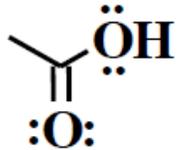
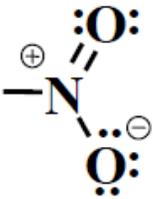
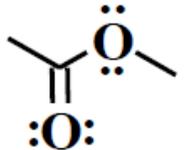
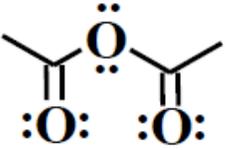
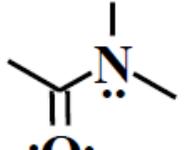
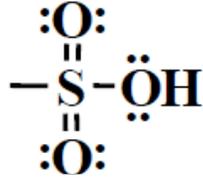
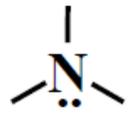
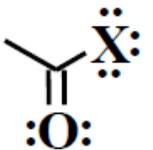
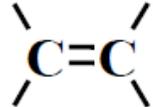
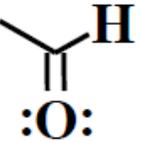
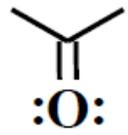
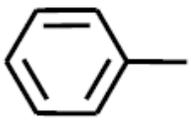
Il doppio legame, il triplo legame e l'anello aromatico sono considerati gruppi funzionali anche se hanno solo carboni e idrogeni perché sono siti di reattività della molecola.

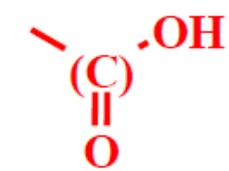
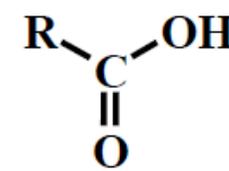
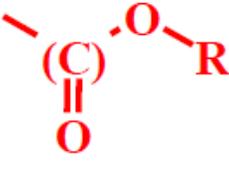
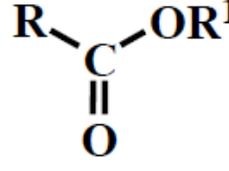
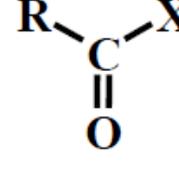
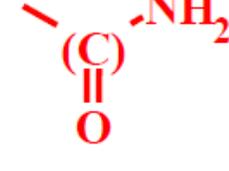
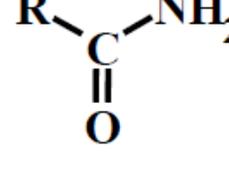
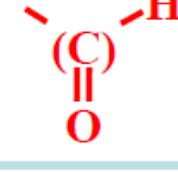
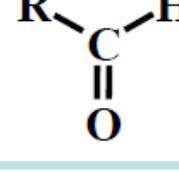
Alcuni gruppi funzionali sono strutture parziali con una valenza libera che può essere saturata con un residuo R. Altri gruppi funzionali hanno più valenze libere e ciò comporta la presenza di più residui R e quindi di più gruppi alchilici.

Una molecola può possedere un solo gruppo funzionale (molecola monofunzionale) o più gruppi funzionali (molecola polifunzionale).

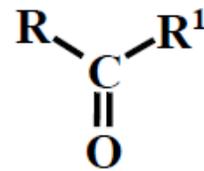
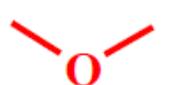
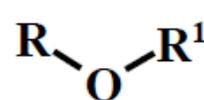
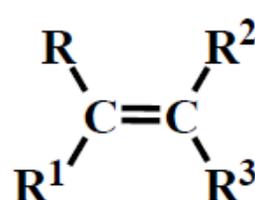
Se ho più gruppi funzionali, uno è il principale che definisce il nome specifico del composto, gli altri sono secondari. La desinenza dello stesso gruppo funzionale cambia se è il gruppo principale o secondario.

Vedremo le basi della nomenclatura degli alifatici (non degli aromatici).

GF	Classe	GF	Classe	GF	Classe
$-\ddot{X}:$	Alogenuri (X = F, Cl, Br, I)		Acidi carbossilici		Nitro composti
$-\ddot{O}H$	Alcoli		Esteri carbossilici	$-\ddot{N}=\ddot{O}$	Nitroso composti
$-\ddot{S}H$	Tioli		Anidridi	$-\ddot{N}=\ddot{N}-$	Azo composti
$-\ddot{O}-$	Eteri		Ammidi		Acidi solfonici
	Ammine		Acil alogenuri (X = Cl, Br)		Alcheni
	Aldeidi	$-\text{C}\equiv\text{N}:$	Nitrili	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	Alchini
	Chetoni				Aromatici
				$-\text{H}$	Alcani

Priorità	Gruppo	Classe		Nome del gruppo come sostituyente (quando non è principale)
1		acido alcanoico		carbossi
2	$-\text{SO}_3\text{H}$	acido alcansolfonico	$\text{R}-\text{SO}_3\text{H}$	solfo
3		alchil alcanoato		alcossicarbonil
4		alcanoil alogenuro		aloformil
5		alcanammide		carbamoil
6		alcanale		formil

il C tra parentesi deve portare nella numerazione della catena il numero 1

Priorità	Gruppo	Classe		Nome del gruppo come sostituito (quando non è principale)
7	$-(C)\equiv N$	alcanonitrile	$R-C\equiv N$	ciano
8		alcanone		osso
9	$-OH$	alcanolo	$R-OH$	idrossi
10	$-NH_2$	alchilammina	$R-NH_2$	ammino
11		alchil alchil etere		alcossi
12	$-(C)\equiv(C)-$	alchino	$R-C\equiv C-R^1$	ino
13		alchene		ene
14	$-X$	alogenoalcano	$R-X$	alo
15	$-NO_2$	nitroalcano	$R-NO_2$	nitro

# Nomenclatura degli alifatici

1. Identificare la **classe** di appartenenza (gruppo principale)
2. Identificare la **catena principale** di atomi di **carbonio contigui**, seguendo le seguenti regole di **priorità**:
  - la catena principale deve contenere:
    - a. il **gruppo principale**
    - b. il massimo numero possibile di legami  $C=C$  e  $C\equiv C$
    - c. il massimo numero possibile di atomi di C
    - d. il massimo numero possibile di **sostituenti**
3. Assegnare il nome alla **catena principale** in base al numero di carboni da cui è formata.

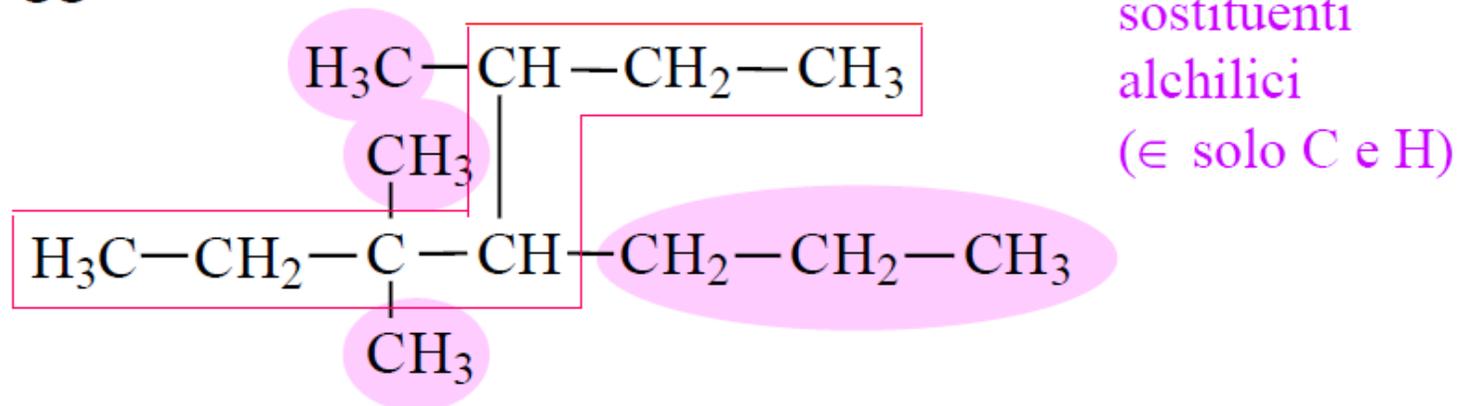
4. Numerare la catena in modo tale che:
  - al gruppo **principale** spetti il numero più basso possibile
  - ai gruppi **secondari** spetti il numero più basso possibile (C=C precede C≡C)
5. Nel nome indicare il **numero** che spetta al gruppo principale (tranne che per COOH, CHO, CN, etc. che hanno il n° 1).
6. Includere nel nome il gruppo **C=C** (ene) (o **C≡C**, ino).
7. Aggiungere il nome dei sostituenti **davanti** al nome in ordine alfabetico con la posizione relativa.

# Procedura

1. Identificare la classe: **alcanale**, acido **alcanoico**, **alchene**...
2. Identificare la più lunga catena di atomi di carbonio
3. Assegnare il nome della catena in base al numero di atomi di C:

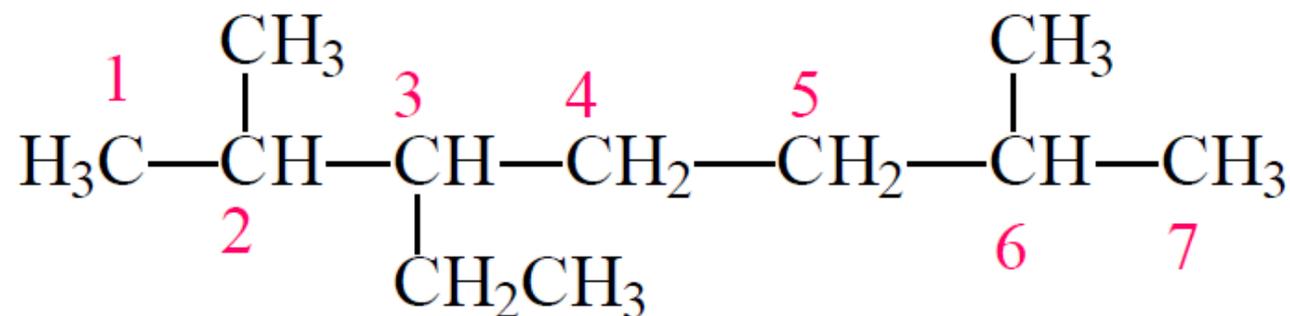
$\text{CH}_4$	C1	metano	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3$	C7	eptano	$n\text{-C}_{13}\text{H}_{28}$	C13	tridecano
$\text{CH}_3\text{CH}_3$	C2	etano	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3$	C8	ottano	$n\text{-C}_{14}\text{H}_{30}$	C14	tetradecano
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$	C3	propano	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3$	C9	nonano	$n\text{-C}_{20}\text{H}_{42}$	C20	icosano
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	C4	butano	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_8\text{CH}_3$	C10	decano	$n\text{-C}_{30}\text{H}_{62}$	C30	triacontano
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	C5	pentano	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_9\text{CH}_3$	C11	undecano	$n\text{-C}_{40}\text{H}_{82}$	C40	tetracontano
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	C6	esano	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{10}\text{CH}_3$	C12	dodecano			etc.

- Se le catene possibili sono due, scegliere quella con il maggior numero di sostituenti.



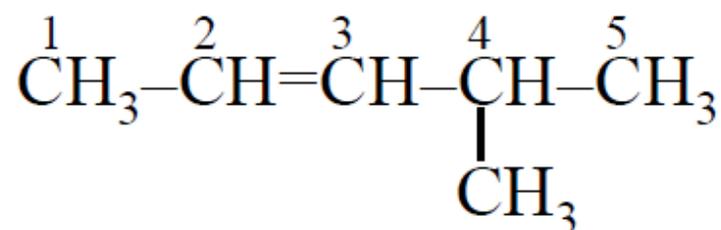
#### 4. Numerare i carboni

- Partire dal lato più vicino al primo sostituito.
- Se vi sono due sostituenti equidistanti cercare il sostituito successivo.

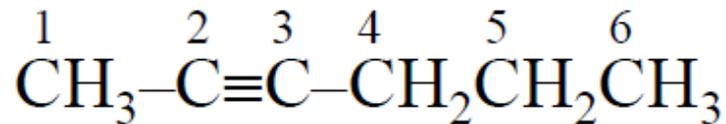


## 6. Includere nel nome il gruppo C=C e/o C≡C

- Cambiare il suffisso da **alcano** in **alchene** o **alchino**
- Assegnare al legame C=C e C≡C un numero di posizione (il più basso possibile)



4-metil-2-pentene



2-esino

*Nella numerazione, il doppio legame ha la precedenza sui **sostituenti***

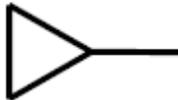
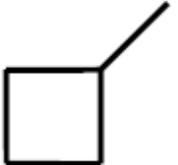
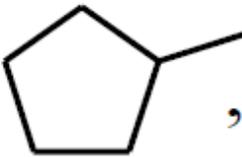
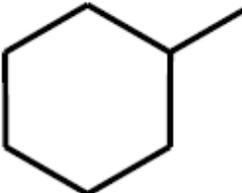
# 7. Nome dei sostituenti

## a. Sostituenti alchilici (alcano $\rightarrow$ alchile)

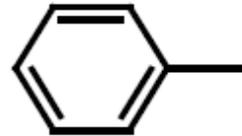
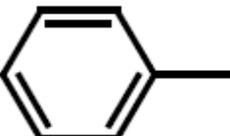
- **C1**:  $\text{CH}_3-$ , metile
- **C2**:  $\text{CH}_3\text{CH}_2-$ , etile
- **C3**:  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2-$ , *n*-propile;  $\begin{array}{c} -\text{CH}-\text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_3 \end{array}$ , isopropile
- **C4**:  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ , *n*-butile;  $\begin{array}{c} -\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_3 \end{array}$ , isobutile
- $\begin{array}{c} -\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_3 \end{array}$ , *sec*-butile;  $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ | \\ -\text{C}-\text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_3 \end{array}$ , *tert*-butile
- etc.

# 7. Nome dei sostituenti

## b. Sostituenti cicloalchilici

-  , ciclopropile;  , ciclobutile;
-  , ciclopentile;  , cicloesile

## c. Sostituenti Alchenilici

- ♦  $\text{CH}_2=\text{CH}-$ , etenile o vinile;
- ♦  $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-$ , 2-propenile o allile
- ♦  , fenile;   $\text{CH}_2-$  , benzile

## 7. Nome dei sostituenti

d. Sostituenti diversi da alchili: vedi Tabella dei Gruppi Funzionali.

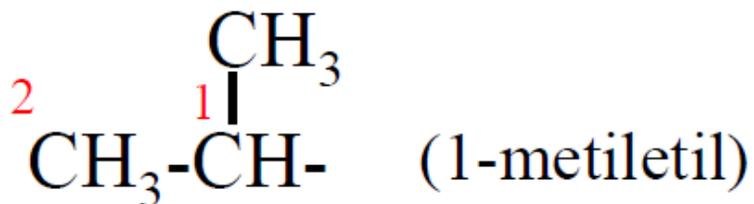
- ♦  $-F$ , fluoro;  $-Cl$ , cloro;  $-Br$ , bromo;  $-I$ , iodo
- ♦  $-NO_2$ , nitro;  $-NH_2$ , ammino;  $-CN$ , ciano;
- ♦  $-SO_3H$ , solfo;  $-CO-$ , oxo
- ♦  $-OH$ , idrossi;  $-OR$ , alcossi;  $-COOH$ , carbossi
- ♦ etc.

# Alfabetizzazione

- I sostituenti vanno fatti precedere al nome in ordine alfabetico.
- Il corsivo viene ignorato: *sec-*, *tert-*
- Se uno stesso sostituente è presente più volte, usare di-, tri-, tetra-, etc.. Tali prefissi vengono ignorati nella alfabetizzazione.

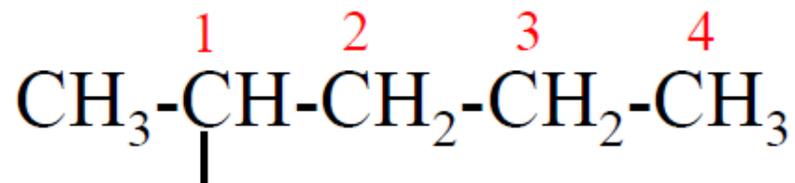
# Sostituenti complessi

1. Assegnare il numero 1 al carbonio del sostituente legato alla catena principale.
2. Numerare la catena di atomi di carbonio verso l'esterno prendendo la catena più lunga. Dare il nome alla catena alchilica con suffisso **-ile**
3. (Se c'è un doppio legame alchile diventa **alchenile**)
4. Aggiungere i sostituenti con i loro numeri.

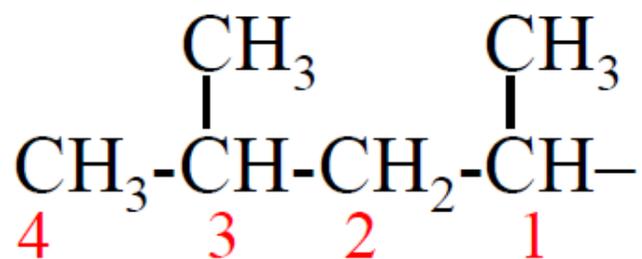


I gruppi complessi sono posti in parentesi.

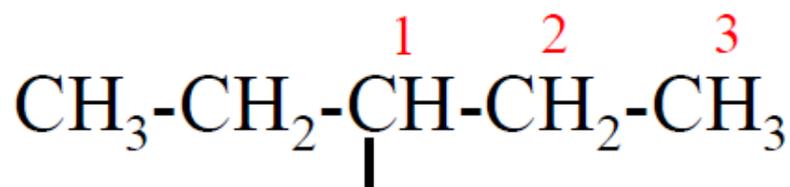
## Esempi



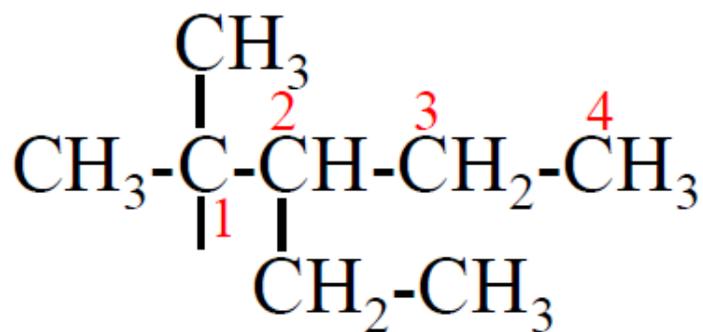
(1-metilbutil)



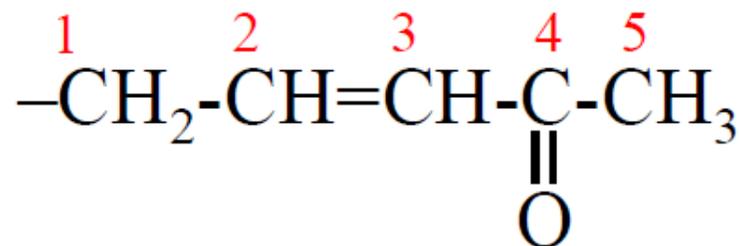
(1,3-dimetilbutil)



(1-etilpropil)



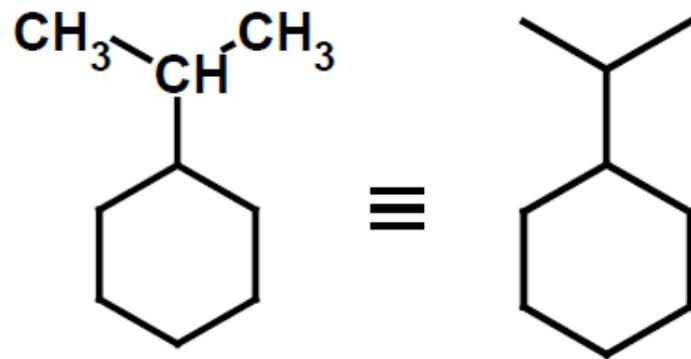
(2-etil-1,1-dimetilbutil)



(4-oxo-2-pentenil)

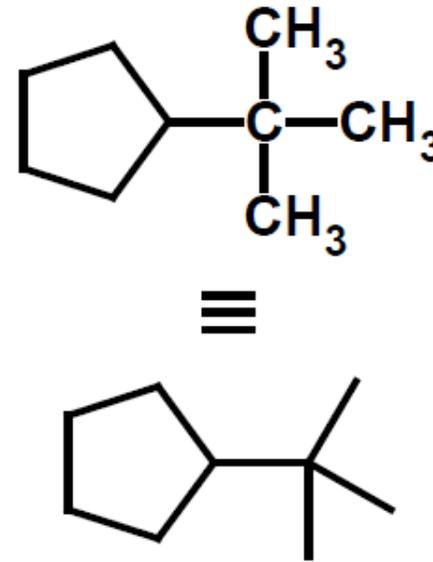
# Composti ciclici sostituiti

- Ci si può basare o sull'anello o sulla catena più lunga



isopropilcicloesano

2-cicloesilpropano

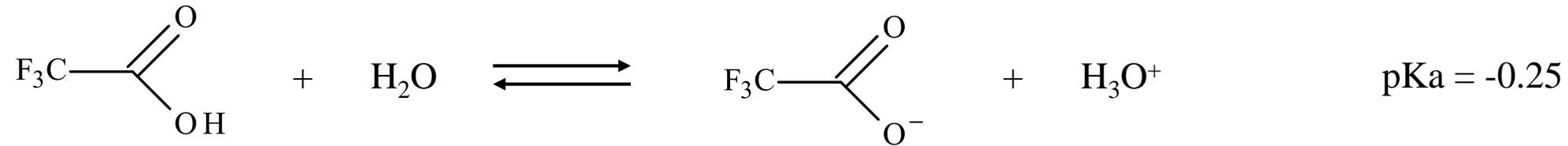
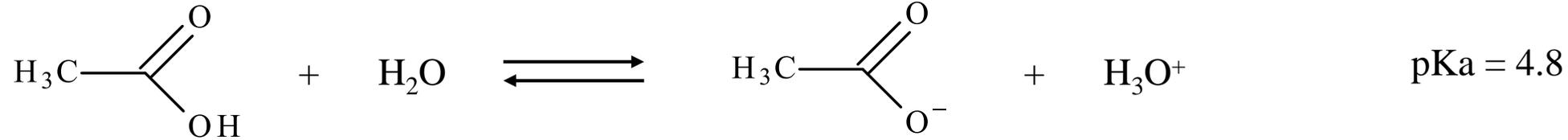


*tert*-butilciclopentano

2-ciclopentil-2-metilpropano

## Acidità/basicità dei composti organici. Effetto induttivo

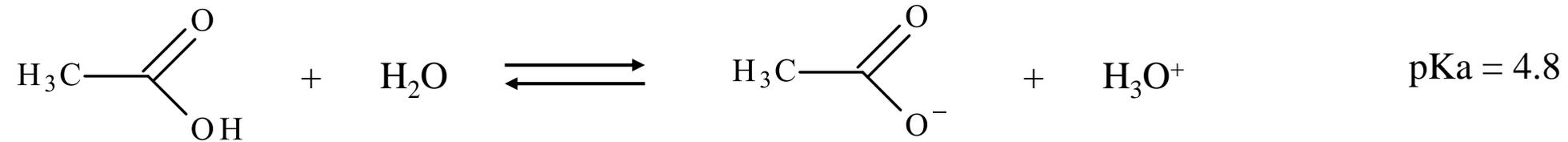
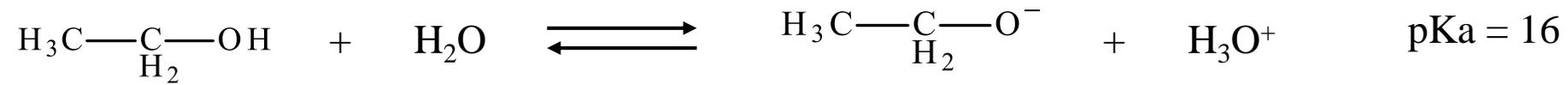
Confrontiamo l'acidità dei due seguenti composti nella loro dissociazione in acqua



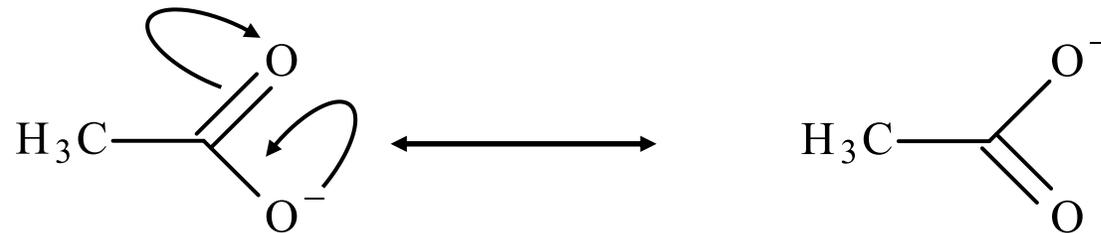
Il secondo composto (acido trifluoroacetico) è più acido del primo (acido acetico). Questo perché il legame F-C è un legame covalente polare. Questo fa sì che ci sia una parziale carica positiva sul carbonio vicinale al gruppo funzionale che presenta, nella forma deprotonata, una carica negativa. In questo modo la carica negativa può essere distribuita su una superficie più ampia (la densità di carica negativa dello ione carbossilato è attratta dal carbonio con carica parziale positiva), questo stabilizza lo ione carbossilato che è uno dei prodotti della dissociazione e quindi sposta l'equilibrio verso i prodotti. Nel secondo composto il legame C-H è un legame covalente non-polare.

## Acidità/basicità dei composti organici. Effetto mesomerico

Confrontiamo l'acidità dei due seguenti composti nella loro dissociazione in acqua



L'acido acetico è più acido dell'etanolo. Questo perché nell'acido dissociato (ione carbossilato) posso avere delle forme di risonanza (effetto mesomerico). Questo stabilizza lo ione carbossilato che è un prodotto e quindi l'equilibrio di dissociazione è spostato a destra (più acido).



# Rottura di legami in chimica organica

Per quanto riguarda la rottura di legami, possiamo avere due tipologie: rottura omolitica e rottura eterolitica

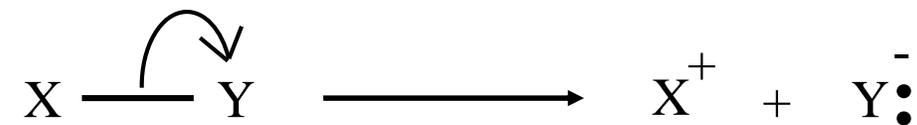
## Rottura omolitica

In questo caso il legame chimico (sempre formato da due elettroni) si rompe portando un elettrone su ciascun atomo interessato dal legame. Lo spostamento di un elettrone si indica con una freccia con una sola punta. La rottura omolitica porta alla formazione di specie con elettroni spaiati (radicali) che sono molto reattivi.



## Rottura eterolitica

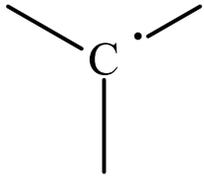
In questo caso il legame chimico si rompe spostando entrambi gli elettroni su uno degli atomi interessati dal legame (quello più elettronegativo). Lo spostamento di due elettroni si indica con una freccia con due punte. Si forma una specie anionica ed una specie cationica.



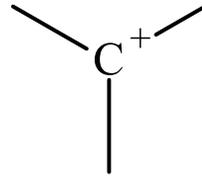
Se la specie positiva è un atomo di carbonio si chiama carbocatione (è circondato da 6 elettroni), se la specie negativa è un atomo di carbonio si chiama carbanione. Entrambi sono instabili e molto reattivi.

Radicali e carbocationi sono elettrofili perché contengono un carbonio con carenza elettronica. In questo caso l'atomo di carbonio non raggiunge l'ottetto.

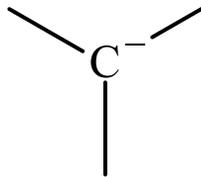
I carbanioni sono nucleofili perché contengono un carbonio con un doppietto elettronico non condiviso.



Carbonio radicalico



Carbonio carbocationico (carbocatione)



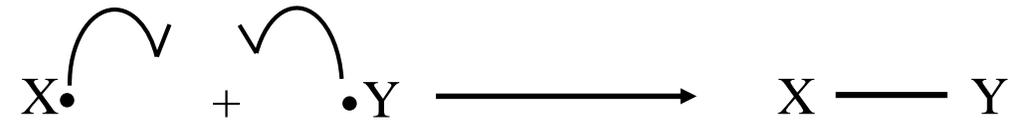
Carbonio carbanionico (carbanione)

## Formazione di legami

La formazione di legami in chimica organica può avvenire in due modi

### Formazione di un legame a partire da due radicali

Due specie radicaliche condividono un elettrone ciascuno e questo porta alla formazione di un legame (sempre formato da due elettroni).



### Formazione di un legame per cessione di una coppia di elettroni

La formazione di un legame avviene per condivisione di una coppia di elettroni che proviene da un atomo/gruppo.

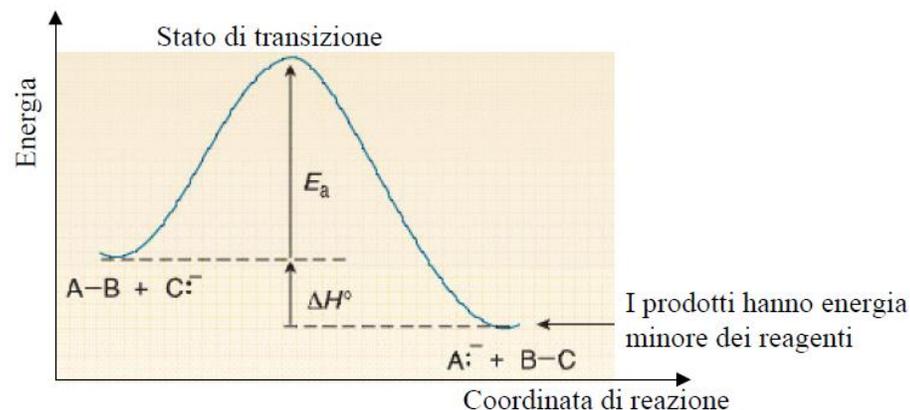


## Diagrammi energetici

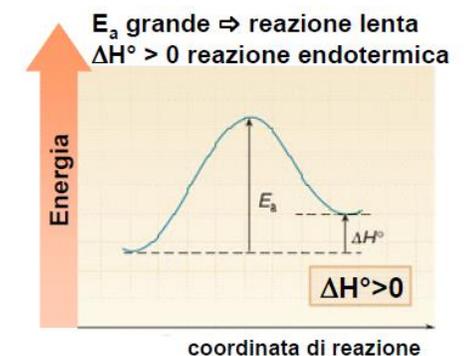
Un diagramma energetico riporta le variazioni di energia che avvengono nella conversione dei reagenti nei prodotti. Nel diagramma energetico si riporta l'energia sull'asse y (cioè la variazione entalpica) mentre sull'asse x si riporta la coordinata di reazione ( $\xi$ ), cioè una coordinata fittizia che misura come i reagenti si trasformano nei prodotti.

Il grafico energetico presenta un massimo che corrisponde allo stato di transizione. Questo non è un composto reale o un intermedio (isolabile), rappresenta il punto energetico più alto in cui i reagenti stanno per trasformarsi nei prodotti. Lo stato di transizione ha caratteristiche sia del reagente che del prodotto (i legami sono parzialmente rotti o parzialmente formati, ho la presenza eventuale di cariche parziali), è più vicino alla specie che gli è più vicina in energia. La differenza di energia tra lo stato di transizione e i reagenti è definita energia di attivazione.

## Esempi di diagrammi energetici

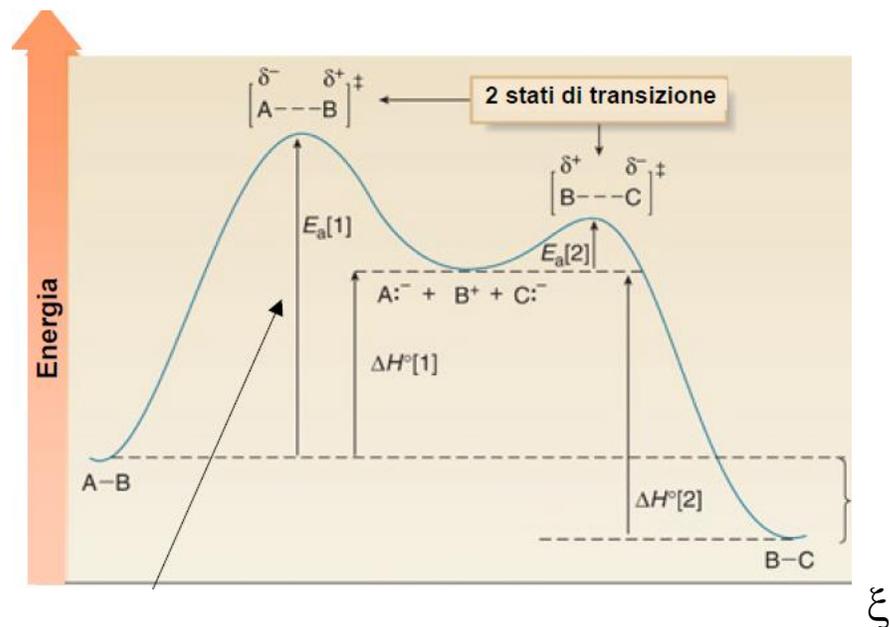
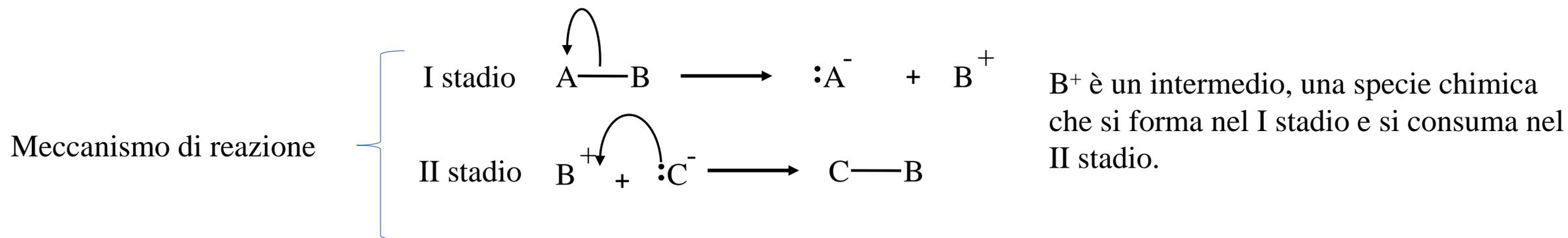


Questo diagramma energetico indica che la reazione avviene in un unico stadio. L'energia dei prodotti è inferiore a quella dei reagenti. La reazione è quindi esotermica ( $\Delta H = H_{\text{prod}} - H_{\text{reag}}$ ).



Reazione in uno stadio. La reazione è endotermica

Se abbiamo un meccanismo di reazione a due stadi con formazione di un intermedio di reazione, il diagramma energetico presenta due massimi corrispondenti a due stati di transizione.



Il diagramma energetico presenta due stati di transizione e un intermedio di reazione ( $B^+$ ). Il primo stadio è quello più lento, è associato ad una energia di attivazione più elevata.