

CHIMICA GENERALE CON LABORATORIO ED **ELEMENTI DI ORGANICA** - [226SM]

- Prof. Paolo Tecilla (Edificio C11, terzo piano, via Giorgieri1; 040 558 3919, ptecilla@units.it)
- Modulo di 3 CFU (24 ore lezione)
- Esame orale, il voto fa media pesata sui CFU con il modulo di Chimica Generale e quello di Laboratorio
- Nel caso di difficoltà a svolgere l'esame in presenza per motivi legati alla pandemia l'esame scritto verrà sostituito da un esame orale a distanza
- Per sostenere l'esame bisogna aver superato l'esame di Chimica Generale
- Libro consigliato: William Brown, Thomas Poon «Introduzione alla Chimica Organica», EdiSES

Programma del modulo di Chimica Organica:

- Concetti di chimica organica, il legame chimico. Orbitali atomici e orbitali molecolari, orbitali ibridi sp^3 , sp^2 e sp ; concetto di risonanza.
- Nomenclatura dei composti organici. Nomenclatura dei composti aromatici.
- Struttura e proprietà degli alcani. Cicloalcani. Reazioni degli alcani.
- Stereochimica. Enantiomeri e diastereoisomeri. Chiralità. Carbonio chirale. Proiezioni di Fischer di molecole chirali. Potere ottico rotatorio.
- Alcheni. Struttura e proprietà. Reazioni degli alcheni: addizione elettrofila. Reazione di idrogenazione degli alcheni.
- Alogenuri alchilici. Struttura e reattività. Reazioni di sostituzione e reazioni di eliminazione.
- Alcoli, eteri e tioli. Struttura e reattività. Nomenclatura. Acidità degli alcoli. Ioni alcolato. Reattività degli alcoli. Reazione di disidratazione.
- Benzene e derivati. Concetto di aromaticità. Eterocicli aromatici. Reazioni dei composti aromatici. Sostituzione elettrofila aromatica.
- Aldeidi e chetoni. Nomenclatura, struttura e reattività del gruppo carbonilico. Addizione nucleofila.
- Acidi carbossilici. Nomenclatura, struttura e reattività e acidità.
- Acidi carbossilici e derivati. Reazioni dei derivati acidi carbossilici.
- Ammine: nomenclatura, struttura e reattività. Basicità delle ammine.

CHIMICA ORGANICA = Chimica dei composti del carbonio

Entità non viventi: inorganiche

Entità viventi: organiche → Scintilla vitale (Vitalismo)

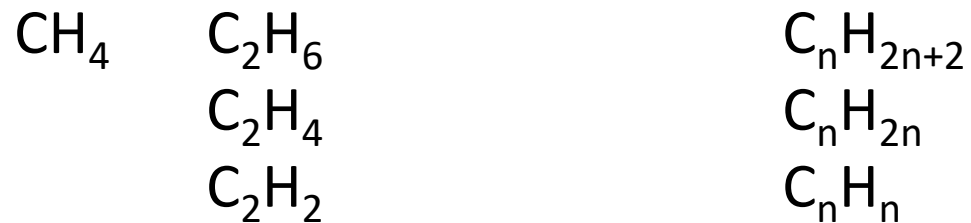
Composti Chimici Inorganici

Legge delle proporzioni definite: quando due o più elementi reagiscono, per formare un determinato composto, si combinano sempre secondo proporzioni in massa definite e costanti.

pirite, FeS_2 acqua, H_2O cloruro di sodio, NaCl

Composti Chimici Organici

Si pensava fossero prodotti solo da organismi viventi

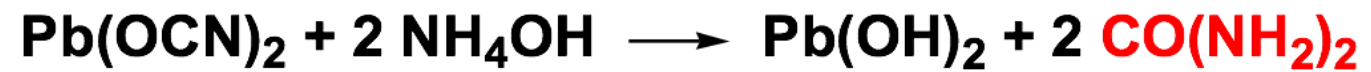
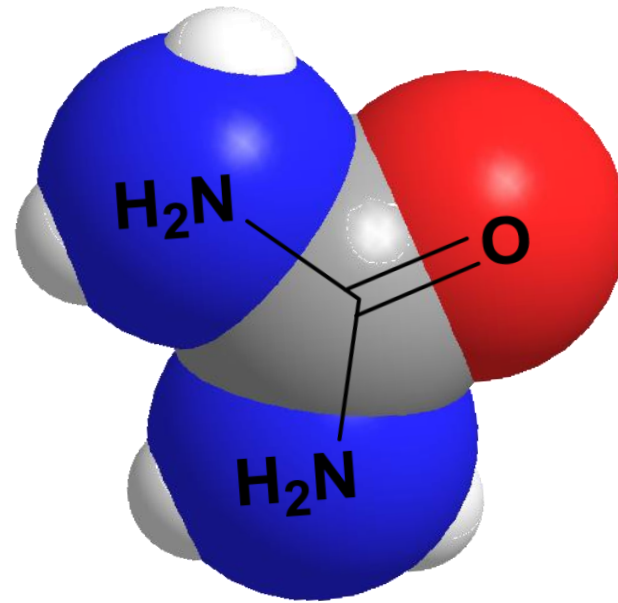


Joseph Proust 1754-1826

1828: La fine del vitalismo



Friedrich Woehler
1800-1882



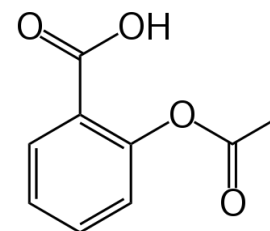
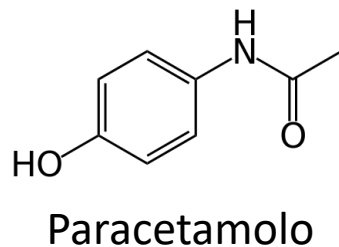
I COMPOSTI ORGANICI SONO DAPPERTUTTO

Esistono approssimativamente 60.000.000 di composti organici, naturali e di sintesi, e ogni anno ne vengono preparati sempre di più.

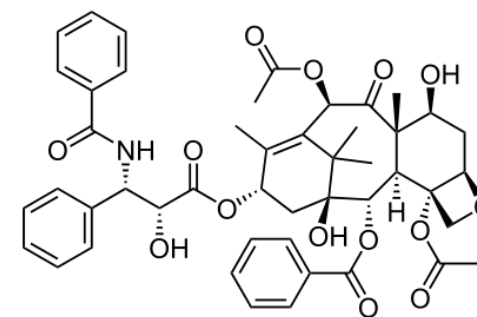
- *Carboidrati, lipidi, proteine e acidi nucleici* sono composti organici prodotti da organismi viventi.
- Facciamo ampio uso di prodotti naturali derivati, dalle piante (cotone, carta, legno), dagli animali (pelle, seta, lana), dall'olio fossile (benzina, oli).
- Modificando i composti naturali (principalmente derivati dal petrolio) produciamo anche un'ampia varietà di prodotti sintetici, come farmaci, materie plastiche, vernici, coloranti, fibre artificiali, fertilizzanti, aromi, cosmetici, detergenti, profumi, dolcificanti, ecc.

Molti farmaci sono composti organici

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$
etanolo

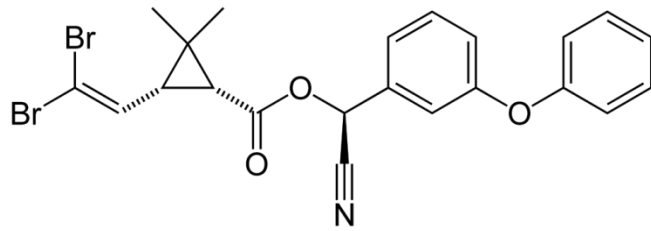


Aspirina

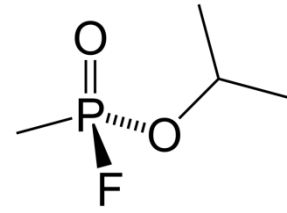


Taxolo (chemioterapico)

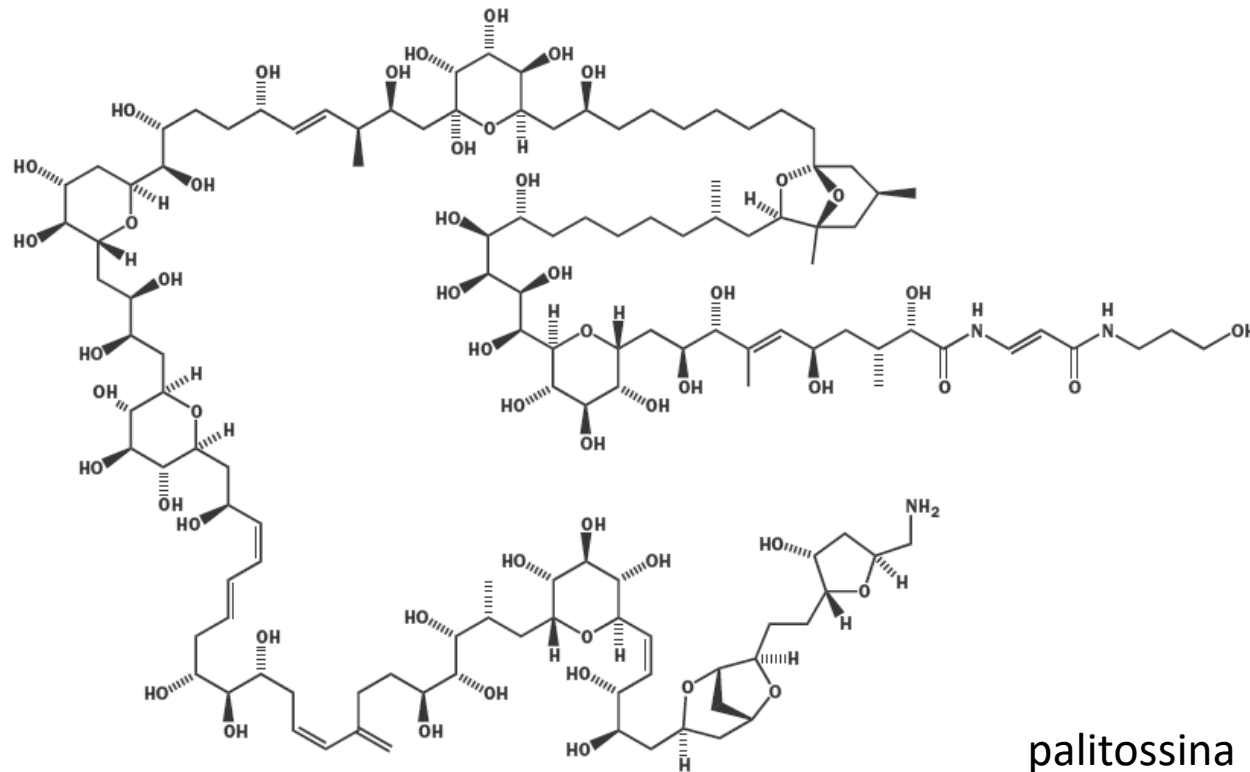
Molte sostanze tossiche sono composti organici



Piretro sintetico
(insetticida)

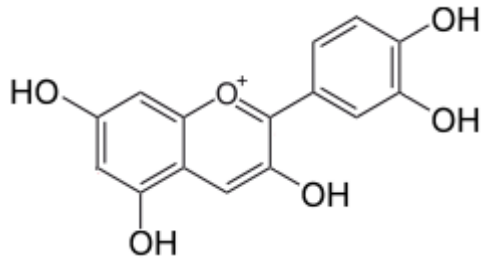


Sarin
(gas nervino)



palitossina

Molti coloranti sono composti organici

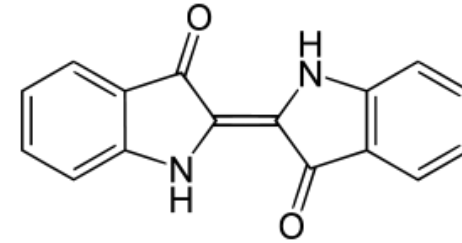


Rosa
(pH acido)

Antocianine
(cambiamo colore con il pH)



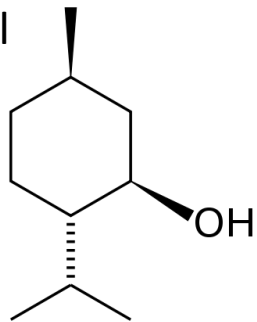
Fiordaliso
(pH basico)



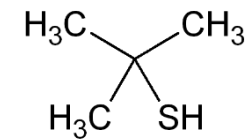
Indaco
(da *Indigofera tinctoria*)

Molte sostanze odorose (piacevoli o spiacevoli) sono composti organici

Mentolol



menta



Ter-Butilmercaptano
(aggiunto al metano)

La chimica organica è la chimica del CARBONIO

Numero atomico: 6 (numero di protoni)

Peso atomico: 12.01 (peso mediato sul peso degli isotopi)

2 isotopi + 1 isotopo radioattivo

^{12}C (99,98%): 6 protoni, 6 neutroni

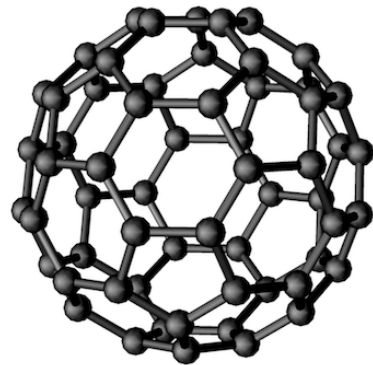
^{13}C (1,11%): 6 protoni, 7 neutroni

^{14}C (tracce): 6 protoni, 8 neutroni

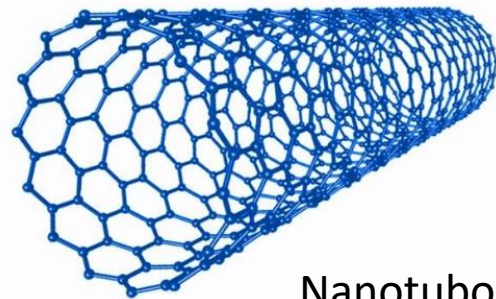
Configurazione elettronica: $1s^2$
 $2s^2 2p^2$



Carbone



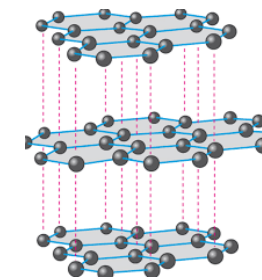
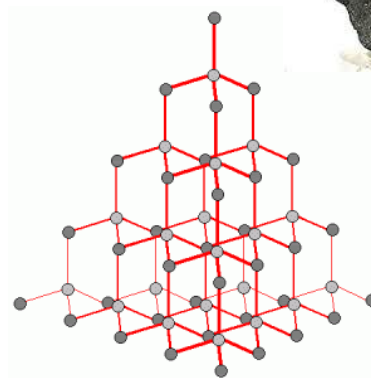
Fullerene



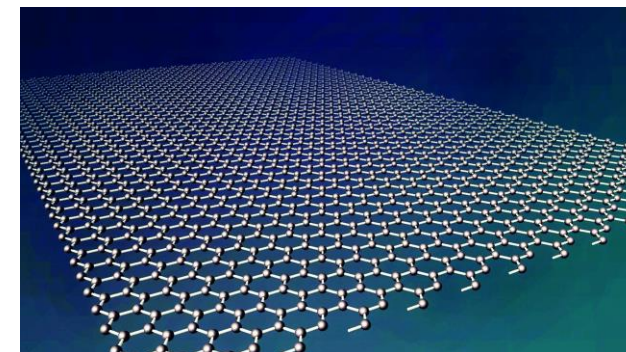
Nanotubo



Diamante (tetraedrico)

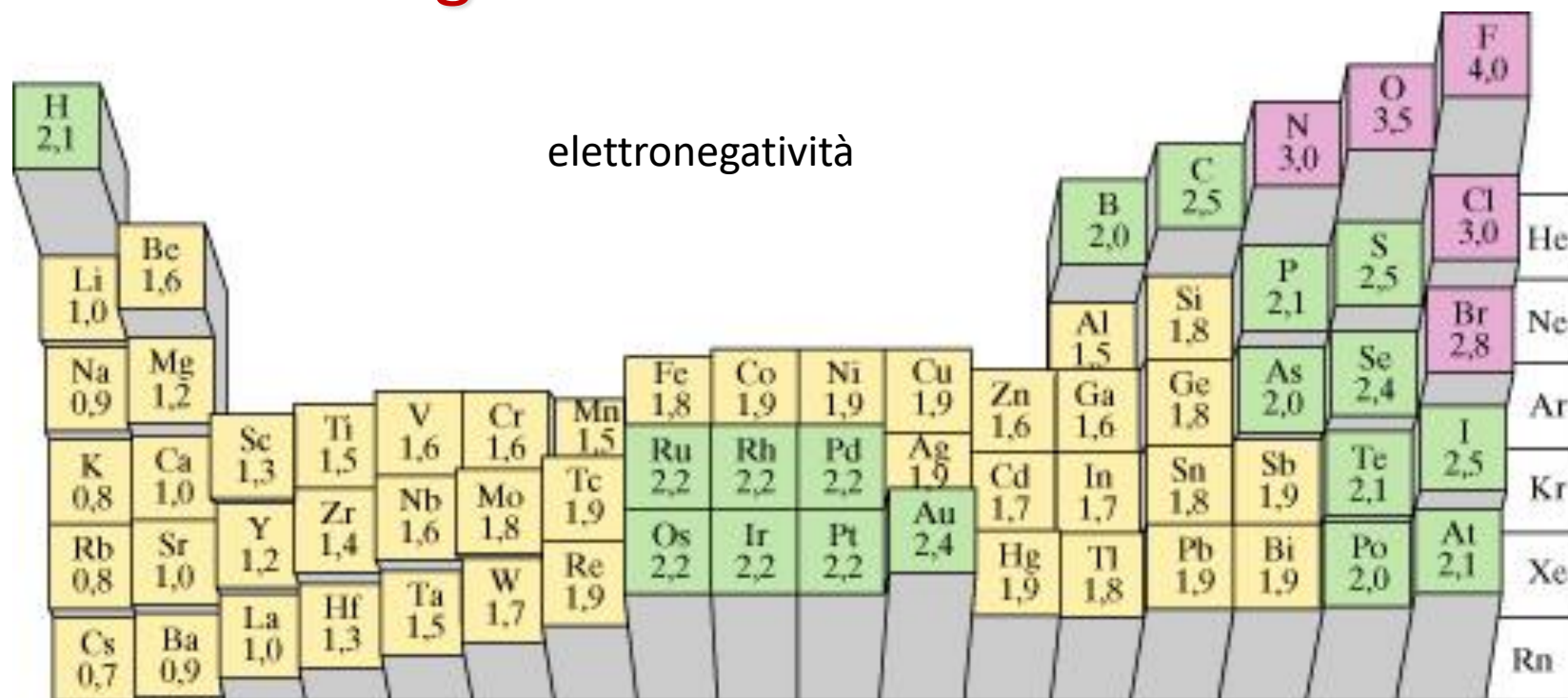


Grafite (esagonale)



grafene

Il carbonio forma legami covalenti forti con molti altri elementi



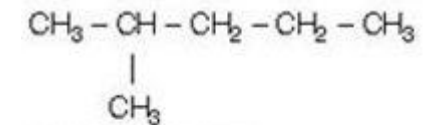
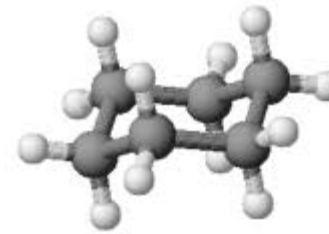
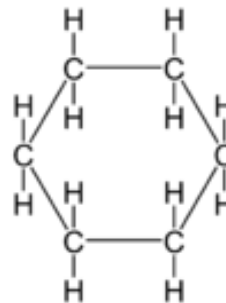
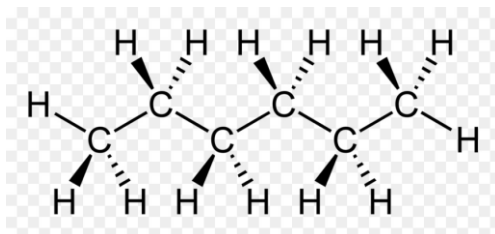
Legame	Energia di dissociazione (KJmol ⁻¹)	Legame	Energia di dissociazione (KJmol ⁻¹)
C—C	360	C=C	700
C—H	400-550	C≡C	950
C—O	350-400	C=O	750
C—N	360	C≡N	950
N—N	250		
O—O	180		

Il carbonio è tetravalente e forma catene

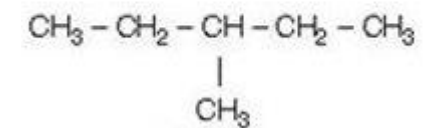
1

1 H Hydrogen 1.0																	2 He Helium 4.0
3 Li Lithium 6.9	4 Be Beryllium 9.0											5 B Boron 10.8	6 C Carbon 12.0	7 N Nitrogen 14.0	8 O Oxygen 16.0	9 F Fluorine 19.0	10 Ne Neon 20.2
11 Na Sodium 23.0	12 Mg Magnesium 24.3											13 Al Aluminum 27.0	14 Si Silicon 28.1	15 P Phosphorus 31.0	16 S Sulfur 32.1	17 Cl Chlorine 35.5	18 Ar Argon 40.0
19 K Potassium 39.1	20 Ca Calcium 40.2	21 Sc Scandium 45.0	22 Ti Titanium 47.9	23 V Vanadium 50.9	24 Cr Chromium 52.0	25 Mn Manganese 54.9	26 Fe Iron 55.9	27 Co Cobalt 58.9	28 Ni Nickel 58.7	29 Cu Copper 63.5	30 Zn Zinc 65.4	31 Ga Gallium 69.7	32 Ge Germanium 72.6	33 As Arsenic 74.9	34 Se Selenium 79.0	35 Br Bromine 79.9	36 Kr Krypton 83.8
37 Rb Rubidium 85.5	38 Sr Strontium 87.6	39 Y Yttrium 88.9	40 Zr Zirconium 91.2	41 Nb Niobium 92.9	42 Mo Molybdenum 95.9	43 Tc Technetium 99	44 Ru Ruthenium 101.0	45 Rh Rhodium 102.9	46 Pd Palladium 106.4	47 Ag Silver 107.9	48 Cd Cadmium 112.4	49 In Indium 114.8	50 Sn Tin 118.7	51 Sb Antimony 121.8	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.9	54 Xe Xenon 131.3
55 Cs Caesium 132.9	56 Ba Barium 137.4	57-71	72 Hf Hafnium 178.5	73 Ta Tantalum 181.0	74 W Tungsten 183.9	75 Re Rhenium 186.2	76 Os Osmium 190.2	77 Ir Iridium 192.2	78 Pt Platinum 195.1	79 Au Gold 197.0	80 Hg Mercury 200.6	81 Tl Thallium 204.4	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 209.0	84 Po Polonium 210.0	85 At Astatine 210.0	86 Rn Radon 222.0
87 Fr Francium 223.0	88 Ra Radium 226.0	89-103	104 Rf Rutherfordium 261	105 Db Dubnium 262	106 Sg Seaborgium 263	107 Bh Bohrium 262	108 Hs Hassium 265	109 Mt Meitnerium 266	110 Uun Ununnilium 272								

57 La Lanthanum 138.9	58 Ce Cerium 140.1	59 Pr Praseodymium 140.9	60 Nd Neodymium 144.2	61 Pm Promethium 147.0	62 Sm Samarium 150.4	63 Eu Europium 152.0	64 Gd Gadolinium 157.3	65 Tb Terbium 158.9	66 Dy Dysprosium 162.5	67 Ho Holmium 164.9	68 Er Erbium 167.3	69 Tm Thulium 168.9	70 Yb Ytterbium 173.0	71 Lu Lutetium 175.0
89 Ac Actinium 132.9	90 Th Thorium 232.0	91 Pa Protactinium 231.0	92 U Uranium 238.0	93 Np Neptunium 237.0	94 Pu Plutonium 242.0	95 Am Americium 243.0	96 Cm Curium 247.0	97 Bk Berkelium 247.0	98 Cf Californium 251.0	99 Es Einsteinium 254.0	100 Fm Fermium 253.0	101 Md Mendelevium 256.0	102 No Nobelium 254.0	103 Lr Lawrencium 257.0

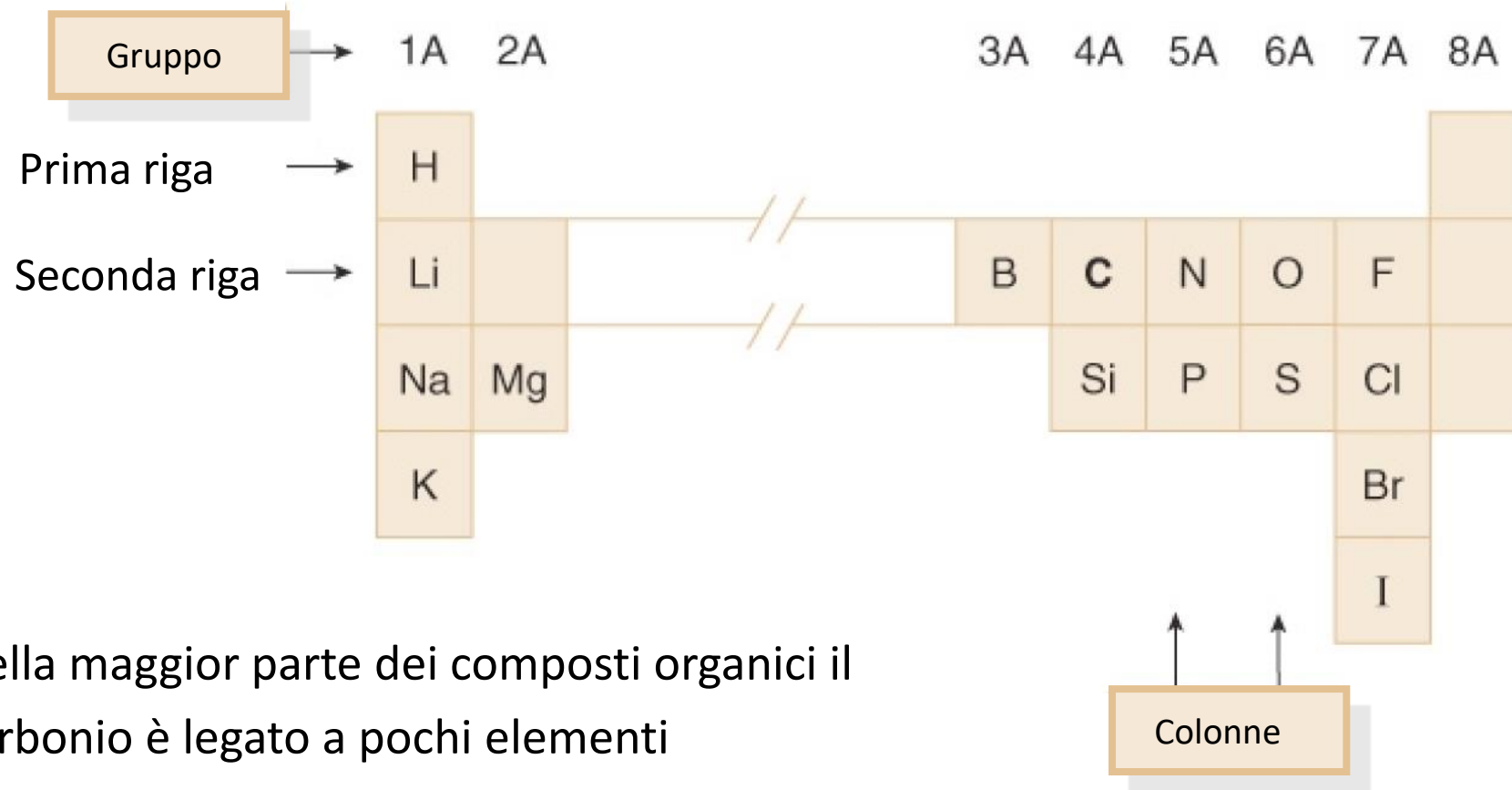


2 - METIL PENTANO



3 - METIL PENTANO

Struttura atomica e legami



Nella maggior parte dei composti organici il carbonio è legato a pochi elementi

Struttura atomica e legami

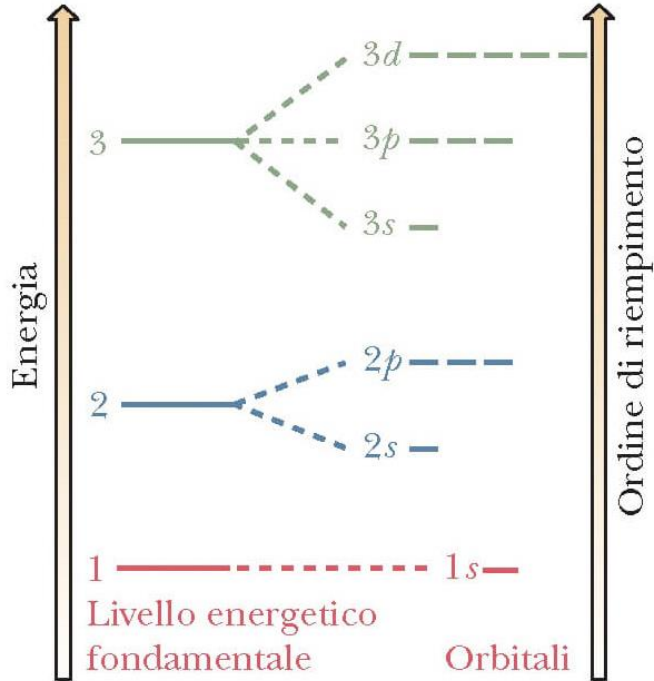


TABELLA 1.2 Configurazione elettronica fondamentale per gli elementi 1-18*

Primo periodo	H	1	$1s^1$	
	He	2	$1s^2$	
Secondo periodo	Li	3	$1s^2 2s^1$	[He] $2s^1$
	Be	4	$1s^2 2s^2$	[He] $2s^2$
	B	5	$1s^2 2s^2 2p_x^1$	[He] $2s^2 2p_x^1$
	C	6	$1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$	[He] $2s^2 2p_x^1 2p_y^1$
	N	7	$1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$	[He] $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$
	O	8	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$	[He] $2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$
	F	9	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$	[He] $2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$
	Ne	10	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2$	[He] $2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2$
Terzo periodo	Na	11	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 3s^1$	[Ne] $3s^1$
	Mg	12	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 3s^2$	[Ne] $3s^2$
	Al	13	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 3s^2 3p_x^1$	[Ne] $3s^2 3p_x^1$
	Si	14	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 3s^2 3p_x^1 3p_y^1$	[Ne] $3s^2 3p_x^1 3p_y^1$
	P	15	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 3s^2 3p_x^1 3p_y^1 3p_z^1$	[Ne] $3s^2 3p_x^1 3p_y^1 3p_z^1$
	S	16	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 3s^2 3p_x^2 3p_y^1 3p_z^1$	[Ne] $3s^2 3p_x^2 3p_y^1 3p_z^1$
	Cl	17	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^1$	[Ne] $3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^1$
	Ar	18	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^2$	[Ne] $3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^2$

Regola 1. Gli orbitali di questi elementi si riempiono nell'ordine $1s, 2s, 2p, 3s, 3p$.

Regola 2. Nota che ciascun orbitale contiene al massimo due elettroni. Nel neon, oltre agli elettroni che riempiono gli orbitali $1s$ e $2s$, sono presenti altri sei elettroni, che riempiono gli orbitali $2p$; si scrive $2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2$. Alternativamente, i tre orbitali $2p$ pieni possono essere raggruppati e scritti in forma condensata come $2p^6$.

Regola 3. Poiché gli orbitali p_x, p_y e p_z hanno la stessa energia, si colloca un singolo elettrone in ciascuno di essi prima di aggiungere un secondo elettrone. Quindi, solo dopo aver collocato in ciascun orbitale $3p$ un singolo elettrone, si aggiunge un secondo elettrone all'orbitale $3p_x$.

* Gli elementi sono elencati nel seguente ordine: simbolo, numero atomico, configurazione elettronica dello stato fondamentale e notazione abbreviata per la configurazione elettronica dello stato fondamentale.

Modello di Lewis

il guscio di valenza degli elementi del 1° periodo contiene solo orbitali *s*

il guscio di valenza degli elementi del 2° periodo contiene orbitali *s* e *p*

TABELLA 1.3 Strutture di Lewis degli elementi 1-18 della Tavola Periodica

1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A
H·							He·
Li·	Be·	B·	·C·	·N·	·O·	·F·	·Ne·
Na·	Mg·	Al·	·Si·	·P·	·S·	·Cl·	·Ar·

il guscio di valenza degli elementi del 3° periodo contiene orbitali *s*, *p* e *d*. Gli orbitali *d* consentono di espandere il numero di legami covalenti per gli elementi del 3° periodo



W. H. Brown, T. Poon
Introduzione alla Chimica Organica, VI ed,
EdISES Università

il sodio (numero atomico 11) perde un elettrone e raggiunge il guscio di valenza completo identico a quello del neon (numero atomico 10)



Legame ionico

il cloro (numero atomico 17) acquista un elettrone e raggiunge il guscio di valenza completo identico a quello dell'argon (numero atomico 18)

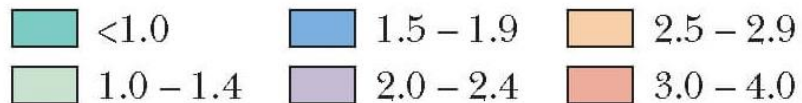
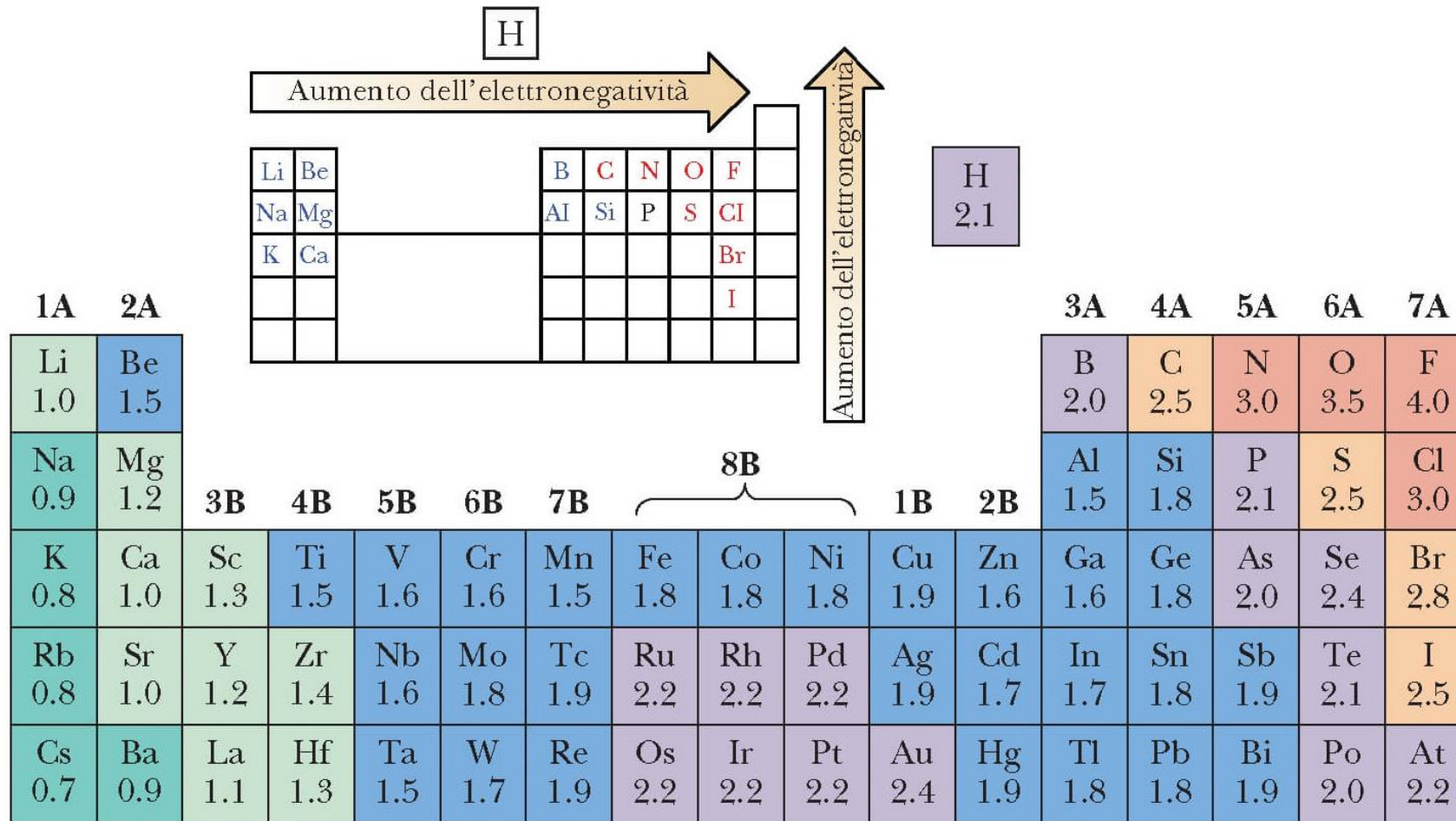


Legame covalente

ogni atomo di cloro (numero atomico 17) condivide un elettrone con un altro atomo di cloro in modo che ogni cloro abbia un guscio di valenza completo

Nella formazione del legame ogni atomo cerca di raggiungere la configurazione elettronica del gas nobile più vicino (regola dell'ottetto)

Legami covalenti e ionici



Legami covalenti e ionici

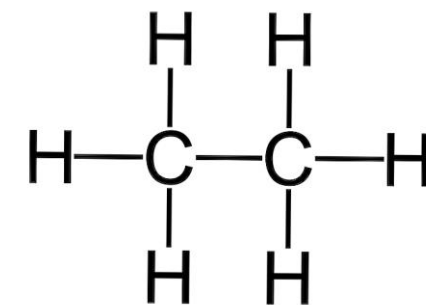
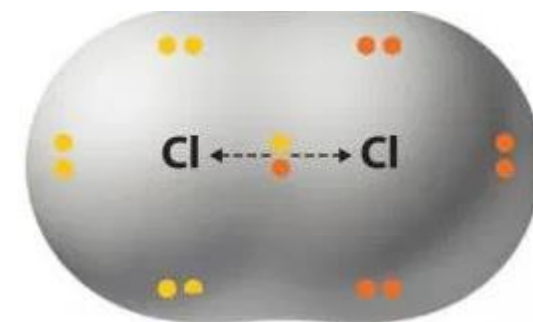
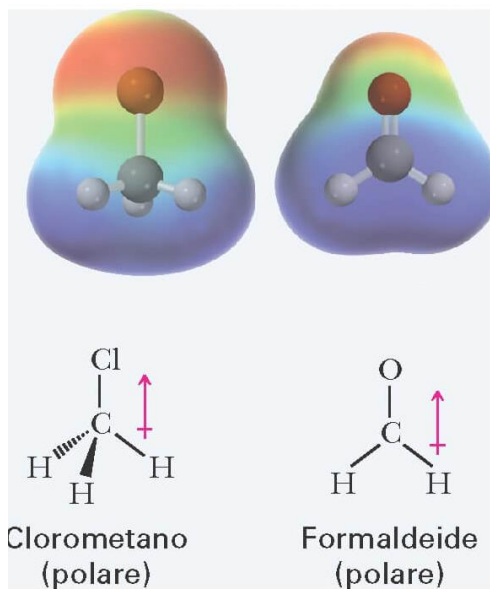
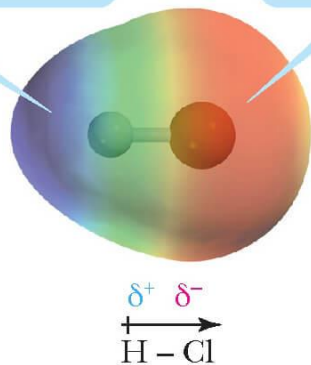
ΔX = differenza di elettronegatività

- $\Delta X > 1.9$ legame ionico
- $\Delta X < 0.5$ legame covalente
- $\Delta X = 0.5 - 1.9$ legame covalente polare

Legame	Differenza di elettronegatività	Tipo di legame
(a) O – H	$3.5 - 2.1 = 1.4$	Covalente polare
(b) N – H	$3.0 - 2.1 = 0.9$	Covalente polare
(c) Na – F	$4.0 - 0.9 = 3.1$	Ionico
(d) C – Mg	$2.5 - 1.2 = 1.3$	Covalente polare

il blu indica una regione a bassa densità elettronica

il rosso indica una regione ad alta densità elettronica



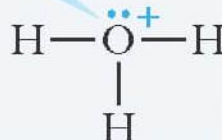
Legami covalenti e ionici

TABELLA 1.6 Strutture di Lewis di diverse molecole. Il numero degli elettroni di valenza in ciascuna molecola è indicato in parentesi dopo la formula molecolare

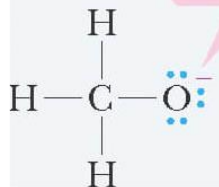
$\text{H}-\ddot{\text{O}}-\text{H}$ <p>H₂O (8) Acqua</p>	$\begin{array}{c} \text{H}-\ddot{\text{N}}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$ <p>NH₃ (8) Ammoniaca</p>	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$ <p>CH₄ (8) Metano</p>	$\text{H}-\ddot{\text{Cl}}:$ <p>HCl (8) Acido cloridrico</p>
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \diagdown \quad / \\ \text{C}=\text{C} \\ / \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$ <p>C₂H₄ (12) Etilene</p>	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ <p>C₂H₂ (10) Acetilene</p>	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \diagdown \\ \text{C}=\ddot{\text{O}} \\ / \\ \text{H} \end{array}$ <p>CH₂O (12) Formaldeide</p>	$\begin{array}{c} \text{:O:} \\ \\ \text{H}-\ddot{\text{O}}-\text{C}-\ddot{\text{O}}-\text{H} \\ \quad \\ \text{:O:} \quad \text{:O:} \end{array}$ <p>H₂CO₃ (24) Acido carbonico</p>

$$\text{Carica formale} = \text{Numero di elettroni di valenza nell'atomo neutro non legato} - \left(\text{Tutti gli elettroni non condivisi} + \text{Metà degli elettroni condivisi} \right)$$

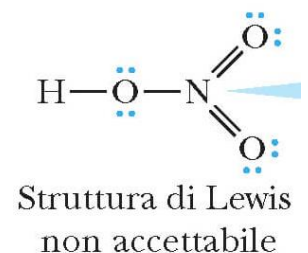
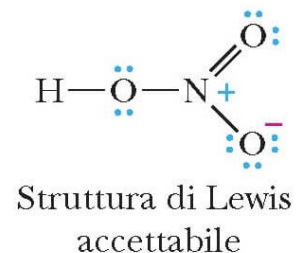
5 elettroni di valenza:
carica formale +1



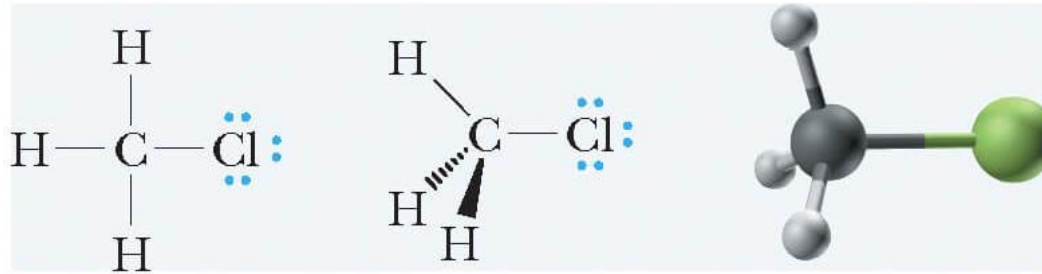
7 elettroni di valenza:
carica formale -1



HNO₃

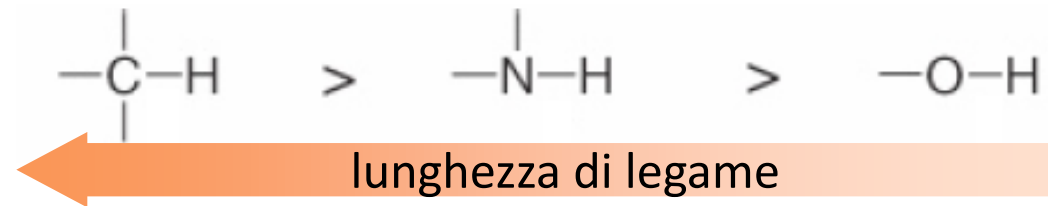


Geometria delle molecole

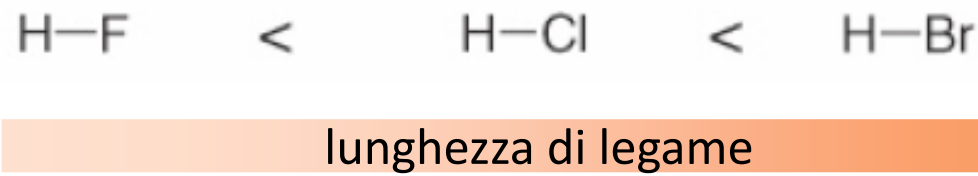


- La geometria della molecola è definita da:
 - Lunghezza del legame
 - Angolo di legame

La lunghezza del legame decresce nel periodo



La lunghezza del legame cresce scendendo nel gruppo



Lunghezze di legame

legame	lunghezza (Å)	legame	lunghezza (Å)	legame	lunghezza (Å)
H-H	0.74	H-F	0.92	C-F	1.33
C-H	1.09	H-Cl	1.27	C-Cl	1.77
N-H	1.01	H-Br	1.41	C-Br	1.94
O-H	0.96	H-I	1.61	C-I	2.13

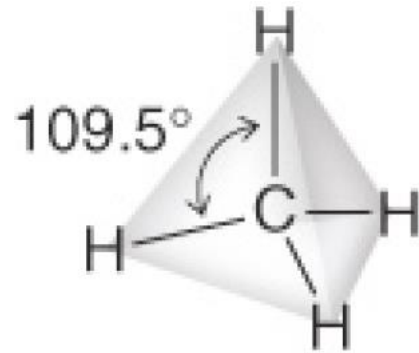
Geometria – Teoria VSEPR (*Valence Shell Electron Pairs*)

- Il numero degli *Valence Shell Electron Pairs* (gruppi) attorno ad un atomo definisce la sua geometria.
- Un gruppo è un legame con un altro atomo o una coppia di elettroni non condivisi.
- I gruppi cercano di mettersi più lontano possibile per la repulsione tra gli elettroni.

Number of groups	Geometry	Angle
2	lineare	180°
3	trigonale planare	120°
4	tetraedrica	109.5°

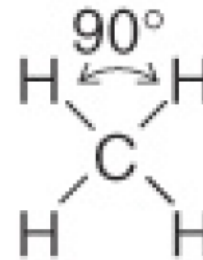
4 gruppi: CH₄ (metano)

Tetraedrica



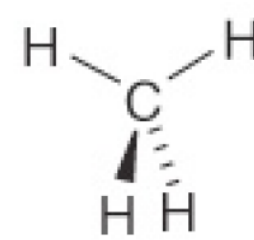
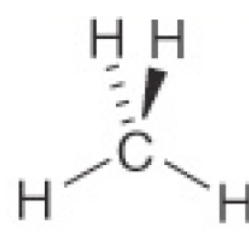
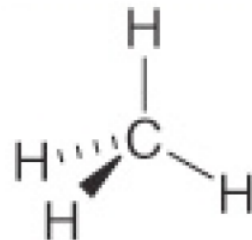
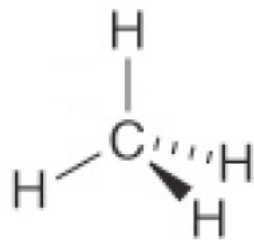
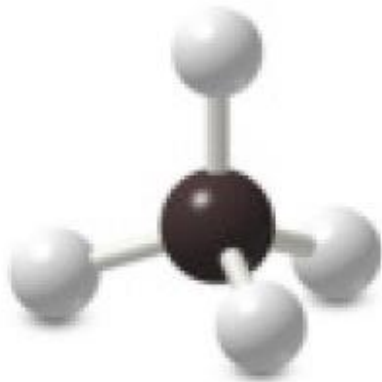
Preferita

Planare quadrata



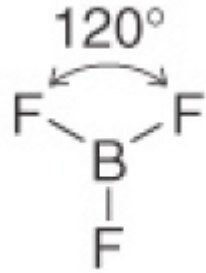
Non osservata

Rappresentazione tridimensionale del metano



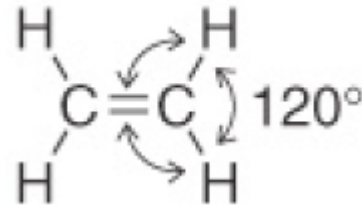
3 gruppi: BF_3 e C_2H_4 (etilene)

2 molecole trigonali



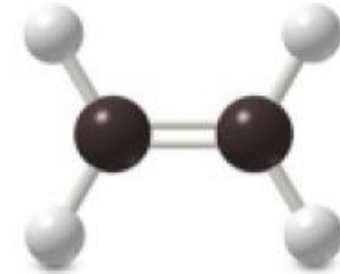
3 atomi attorno al B

Tutti i quattro atomi sono sul piano



3 atomi attorno ogni C

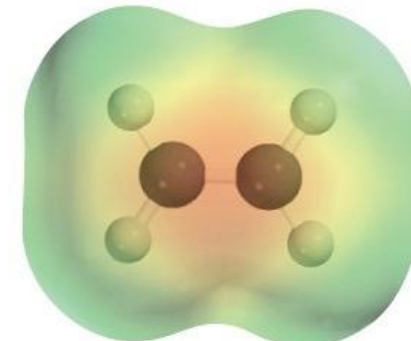
Tutti i 6 atomi sono sul piano



Modello ball-and-stick

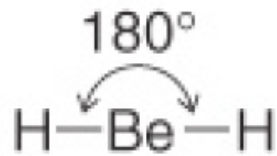


Modello space-filling

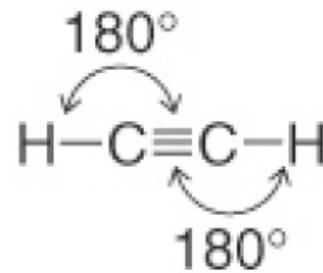


2 gruppi: BeH_2 and C_2H_2 (acetilene)

2 molecole lineari



2 atomi attorno al Be



2 atomi attorno ogni C

≡



Energie dei legami multipli

Legame	Energia di dissociazione del legame (kJ/M)
C—C	360
C=C	700
C≡C	950
C—O	400
C=O	750
C—N	360
C=N	700
C≡N	950

Il modello di Lewis non è adeguato

Teoria dell'orbitale di valenza

- I legami sono formati dalla sovrapposizione in fase di due orbitali atomici che contribuiscono ciascuno con un elettrone.
- La coppia di elettroni è localizzata tra due atomi ed è condivisa da entrambi gli atomi.
- L'idrogeno usa l'orbitale 1s per formare legami σ . Gli atomi del 2° periodo usano gli orbitali ibridi (sp^3 , sp^2 , sp) per formare legami σ .
- Gli atomi del 2° periodo usano gli orbitali p per formare legami π .
- Gli orbitali atomici si sovrappongono meglio nei legami σ (co-lineare) che nei legami π (paralleli).

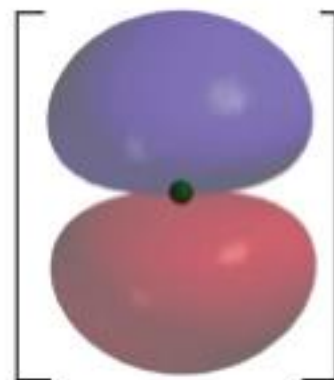
Orbitali atomici del carbonio



s



p

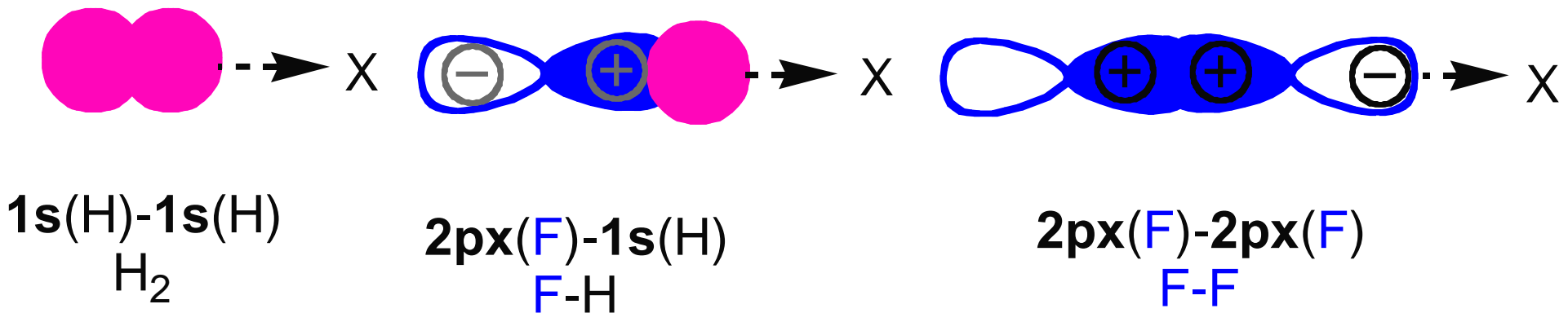


2p

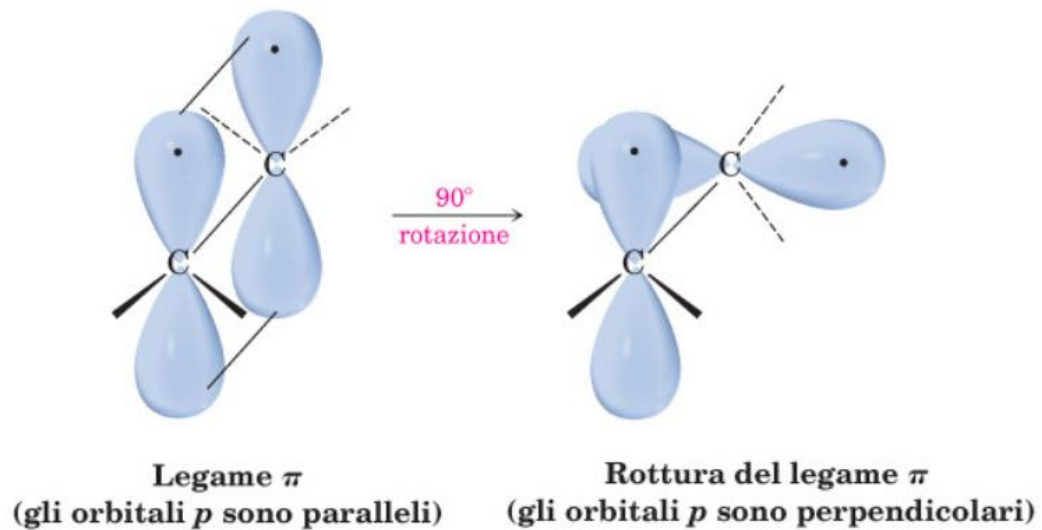


3 x 2p orbitals

Sovrapposizione lungo l'asse del legame: **legame σ**

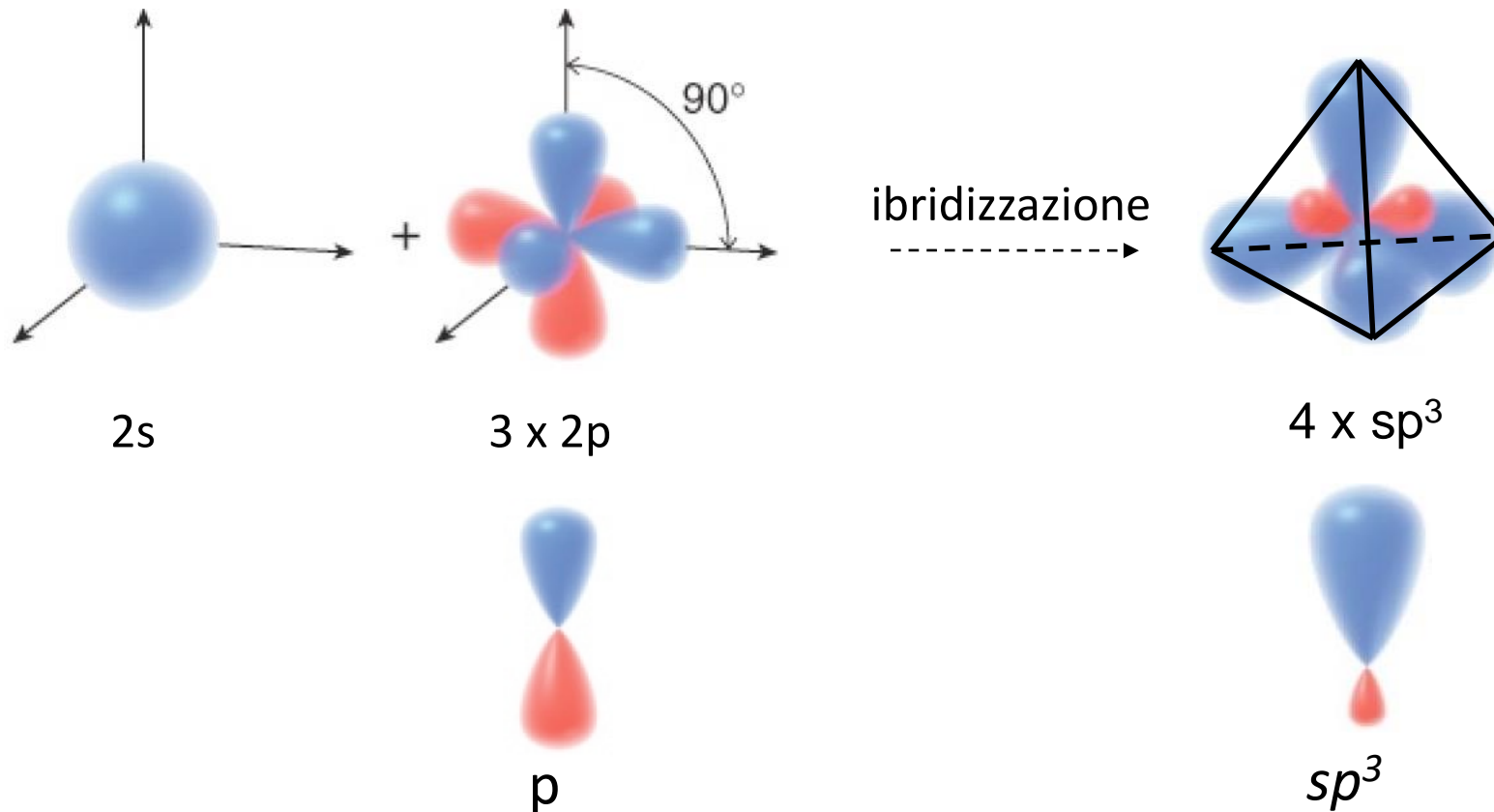


Sovrapposizione attraverso lo spazio: **legame π**



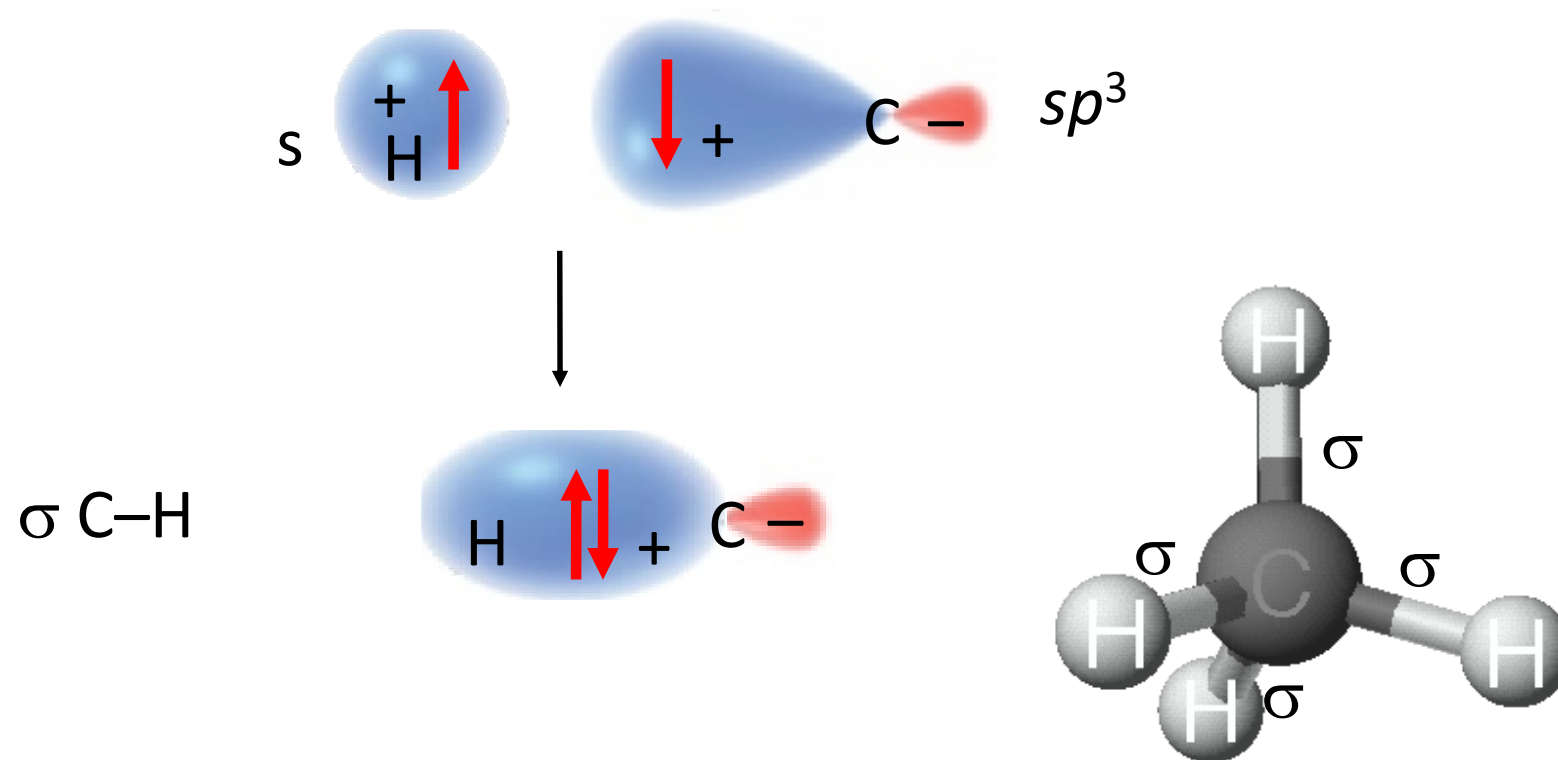
Orbitali ibridi sp^3

- Il mescolamento di un orbitale $2s$ con tre orbitali $2p$ genera quattro orbitali sp^3 , ognuno con un lobo grande e uno piccolo.

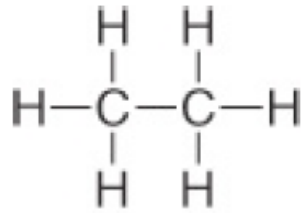


Metano

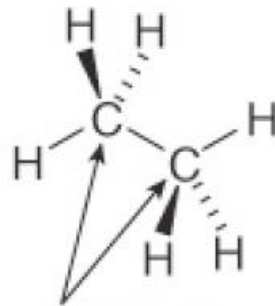
La sovrapposizione di un orbitale $1s$ contenente un elettrone dell'idrogeno con un orbitale sp^3 contenente un elettrone del carbonio genera un legame σ .



Etano

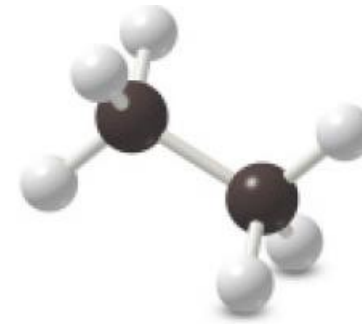


etano

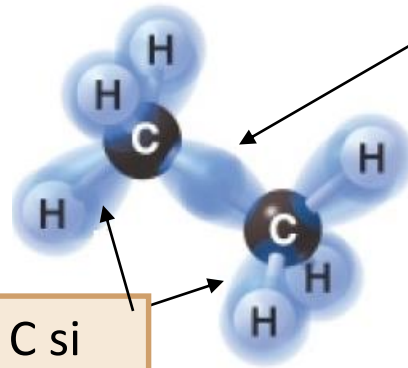


$C sp^3$ tetraedrici

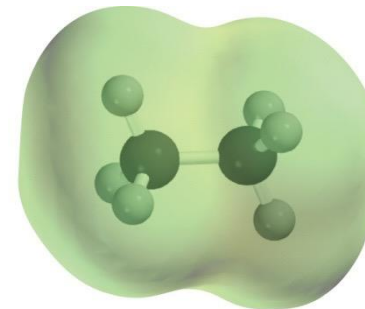
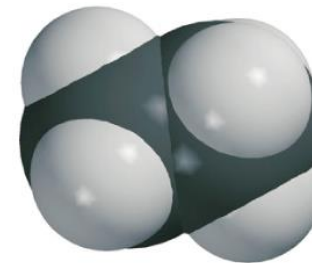
=



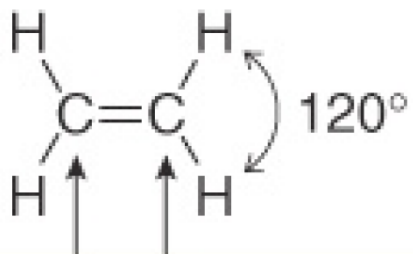
Due ibridi sp^3 si sovrappongono a dare un legame C-C σ



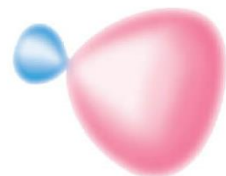
Un orbitale ibrido sp^3 del C si sovrappone con un orbitale $1s$ del H a dare un legame C-H σ



Etilene C_2H_4 - Ibrido sp^2

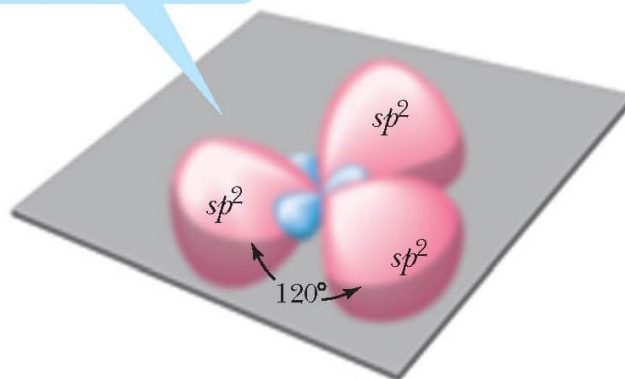


3 gruppi attorno al C
Gli atomi di C sono sp^2

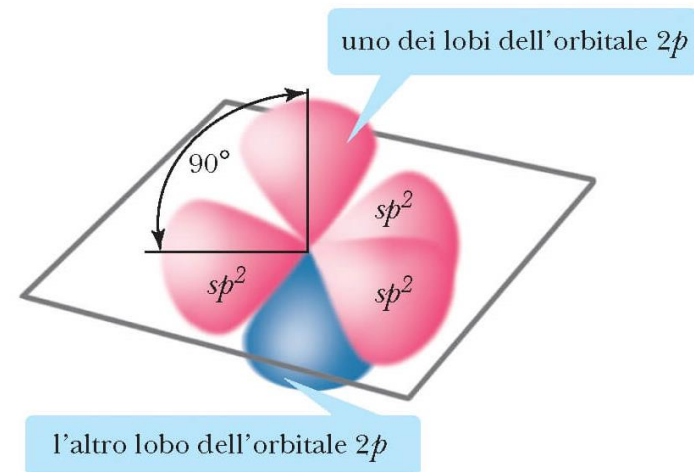


(a) Un orbitale sp^2

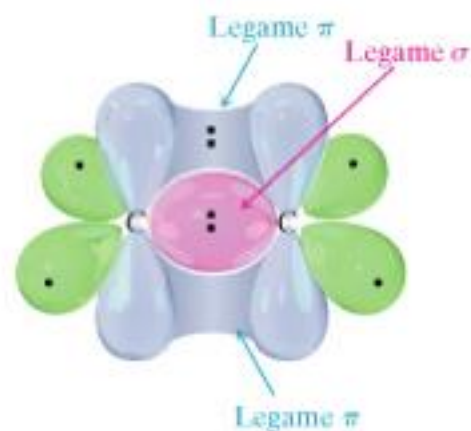
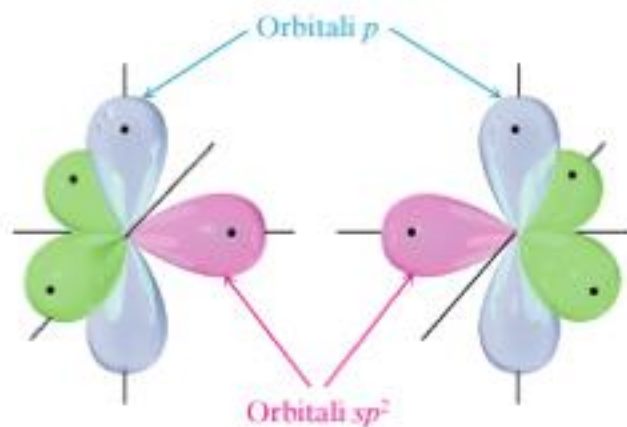
tutti i tre orbitali sp^2
giacciono sullo stesso piano



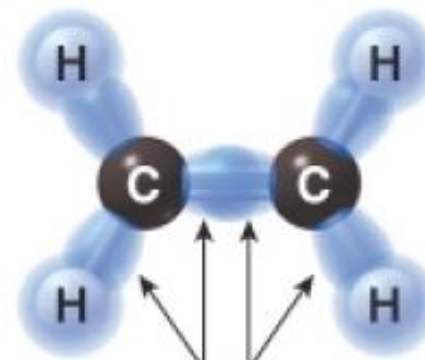
(b) Tre orbitali sp^2



(c)

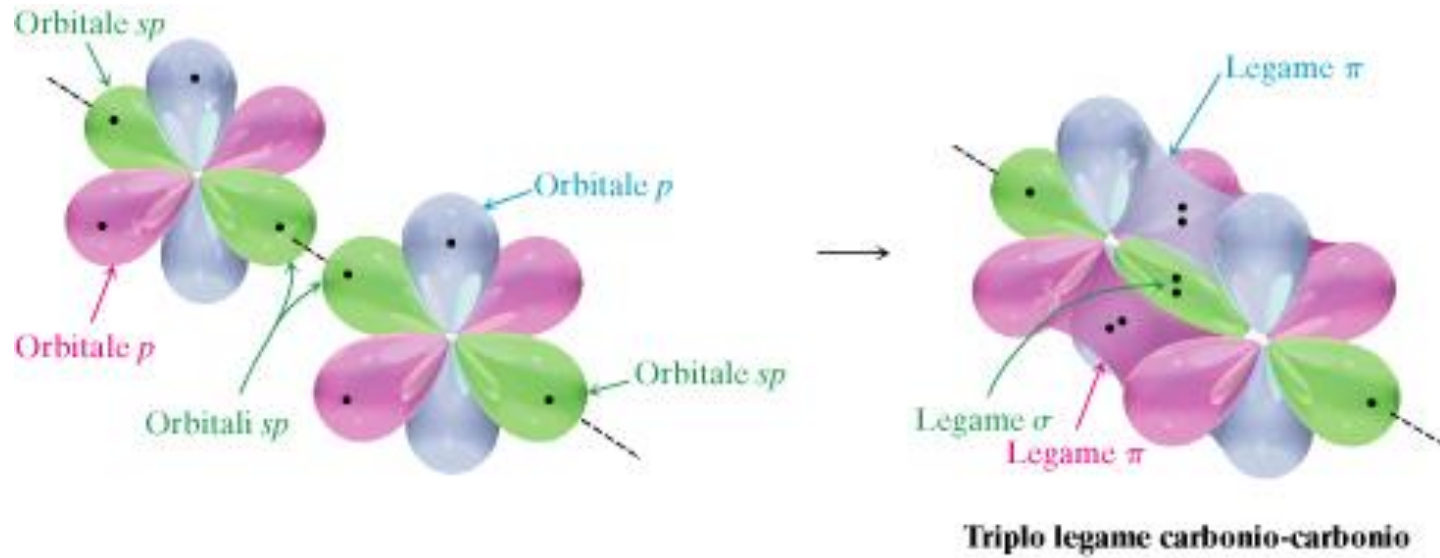
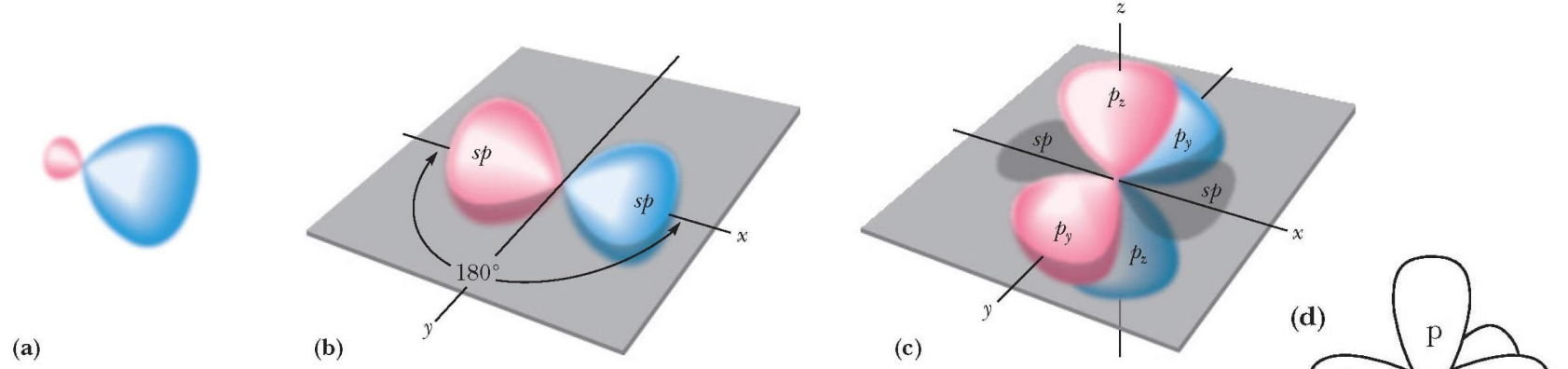


Doppio legame C-C

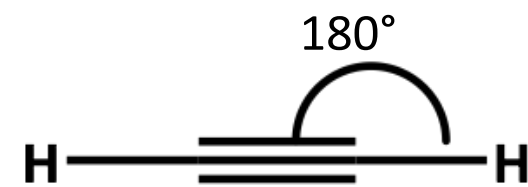
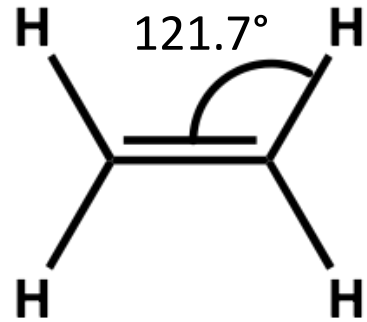
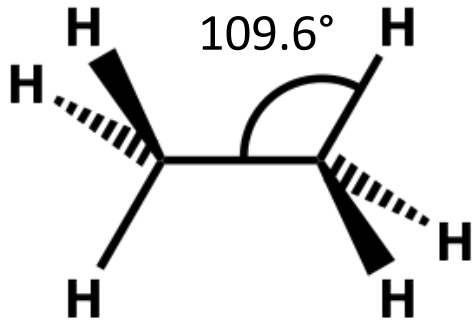


Ibridi Sp^2

Acetilene C_2H_2 - Ibrido sp



Strutture di C_2H_6 , C_2H_4 , C_2H_2

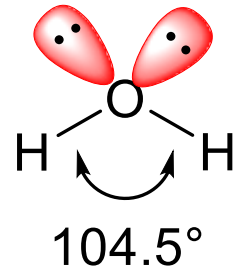


d_{C-C} (pm): 154
 d_{C-H} (pm): 110
 E_{C-C} (kJ/M): 376

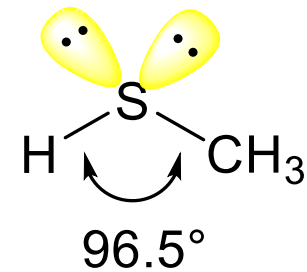
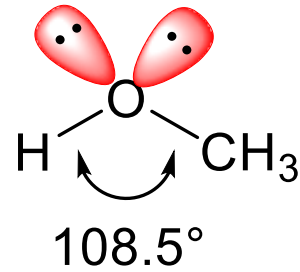
133
107.6
611

120
106
835

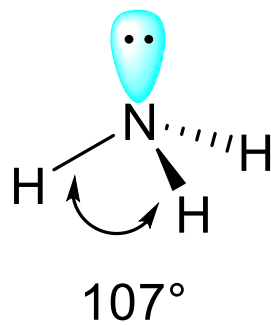
Ibridizzazione di O, S, N



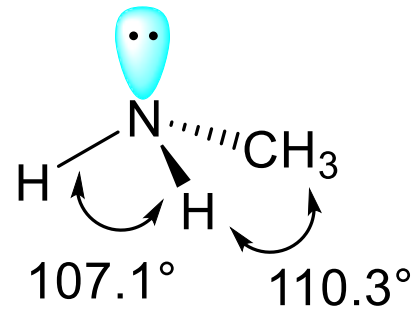
[He]2s²2p⁴



[Ne]3s²3p⁴

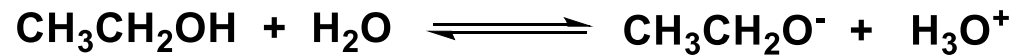


[He]2s²2p³



Delocalizzazione di legami ed elettroni: Risonanza

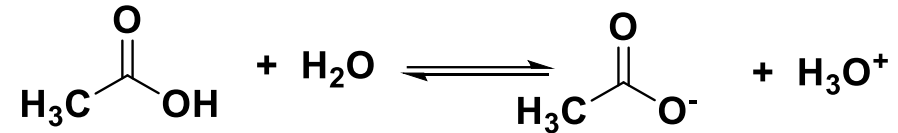
- La struttura e le proprietà di alcune molecole non possono essere spiegate dal semplice modello dell'orbitale di valenza con gli elettroni localizzati.
- In questo caso, una singola struttura di Lewis viene sostituita da un insieme di strutture di Lewis: **si dice che la molecola risuoni tra queste strutture e questo fenomeno è chiamato risonanza.**



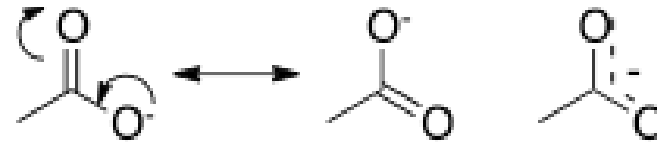
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$: pK_a 16



Carica localizzata
meno stabile



CH_3COOH : pK_a 4.75



Strutture di risonanza

Ibrido di risonanza

Carica delocalizzata
più stabile

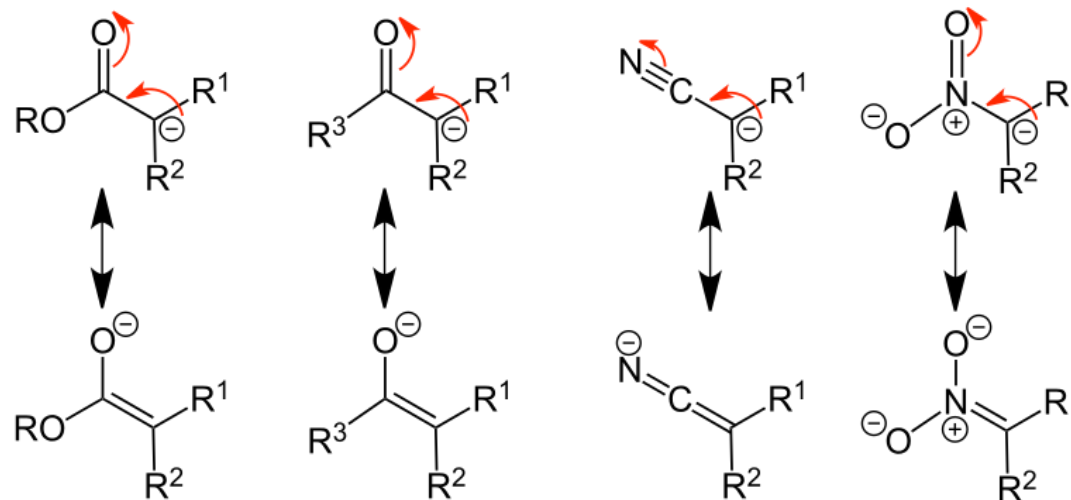
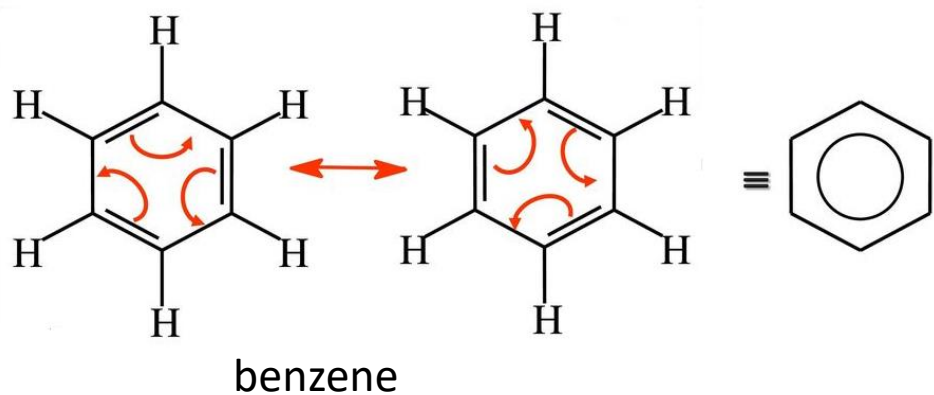
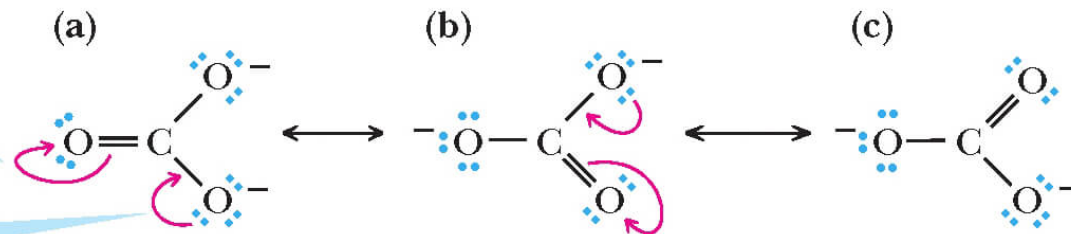
RISONANZA

- Le strutture di risonanza hanno la stessa disposizione degli atomi ma una diversa disposizione degli elettroni (elettroni π e coppie solitarie).
- Le lunghezze e gli angoli dei legami non cambiano nelle strutture di risonanza.
- Le strutture di risonanza devono rispettare le regole di Lewis (ottetto)
- La risonanza è una semplice teoria per adattare le strutture convenzionali di Lewis alla rappresentazione di molecole con elettroni e legami delocalizzati.
- **Le strutture di risonanza non sono reali.** Nessuna singola struttura di risonanza può rappresentare adeguatamente la struttura reale di una specie con elettroni delocalizzati.
- Le strutture di risonanza **non sono isomeri.** Esse differiscono solo nella distribuzione degli elettroni e non nella disposizione dei nuclei.
- Le strutture di risonanza **non sono in equilibrio.**

Risonanza

le frecce curve partono sempre dagli elettroni, che siano quelli che formano legami...

...o quelli che costituiscono coppie elettroniche non condivise



Legami polari e interazioni intramolecolari

- Le interazioni intramolecolari (tra due o più molecole) sono interazioni non covalenti
- Il tipo di interazione dipende dai gruppi presenti e dalla geometria della molecola
- Nelle molecole neutre le interazioni più importanti sono di natura elettrostatica e si dividono in:

Interazioni di Van der Waals (forze di dispersione di London dispersion forces) – VDW

Interazioni dipolo-dipolo – DD

Legami ad idrogeno – HB

- Nelle molecole cariche sono anche presenti interazioni elettrostatiche ione-ione o ione-dipolo

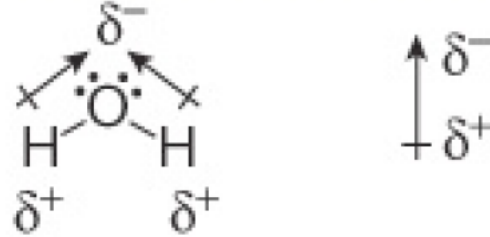


forza

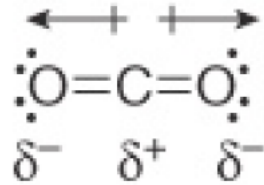
Momento di dipolo

- Molecole polari hanno uno o più legami covalenti polari.

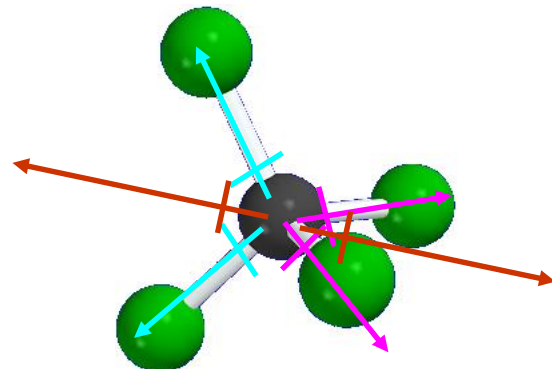
Es. H₂O



- Molecole non polari o non hanno legami covalenti polari o i momenti di dipolo si cancellano. ES. CO₂

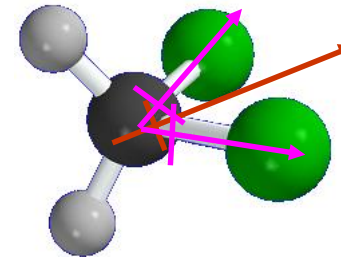


CCl₄ $\delta = 0$ D



I dipoli si cancellano

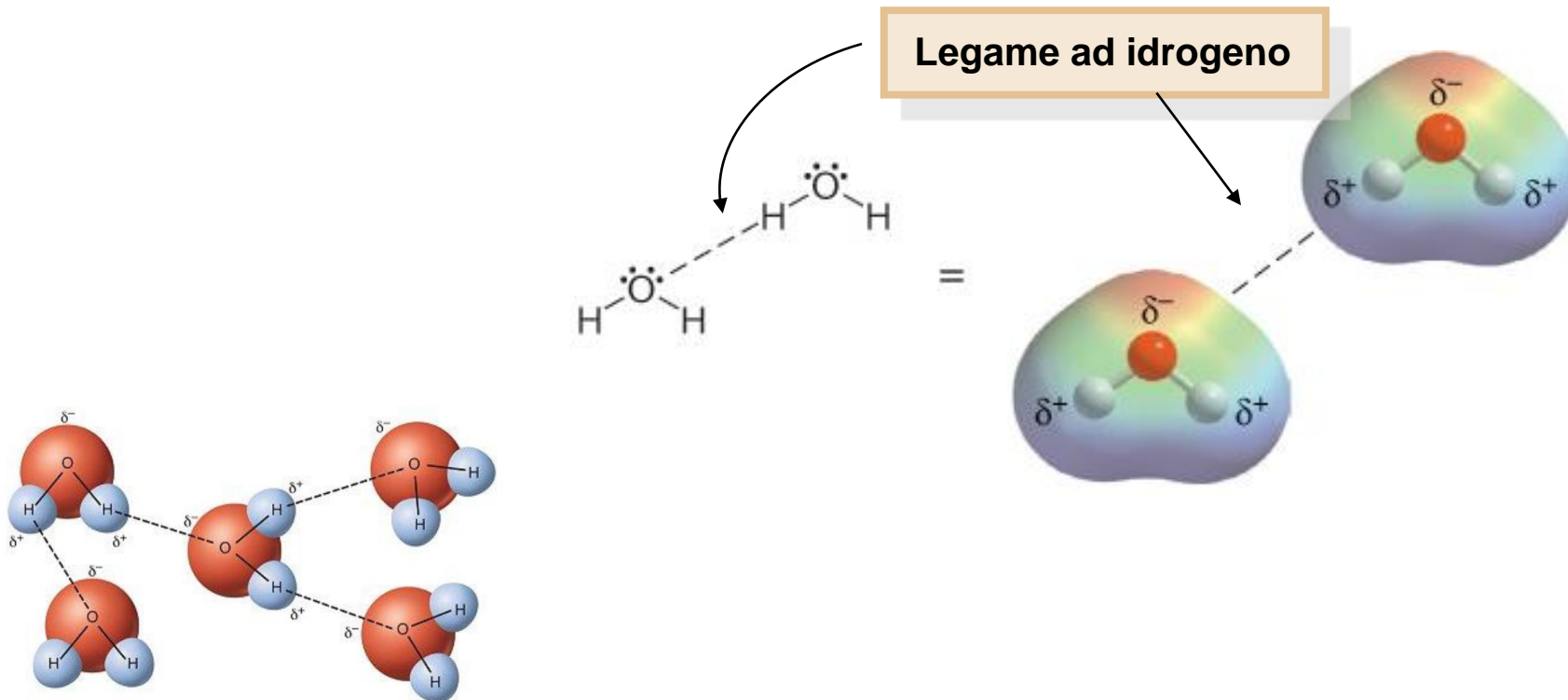
CH₂Cl₂ $\delta = 1.62$ D



I dipoli si sommano

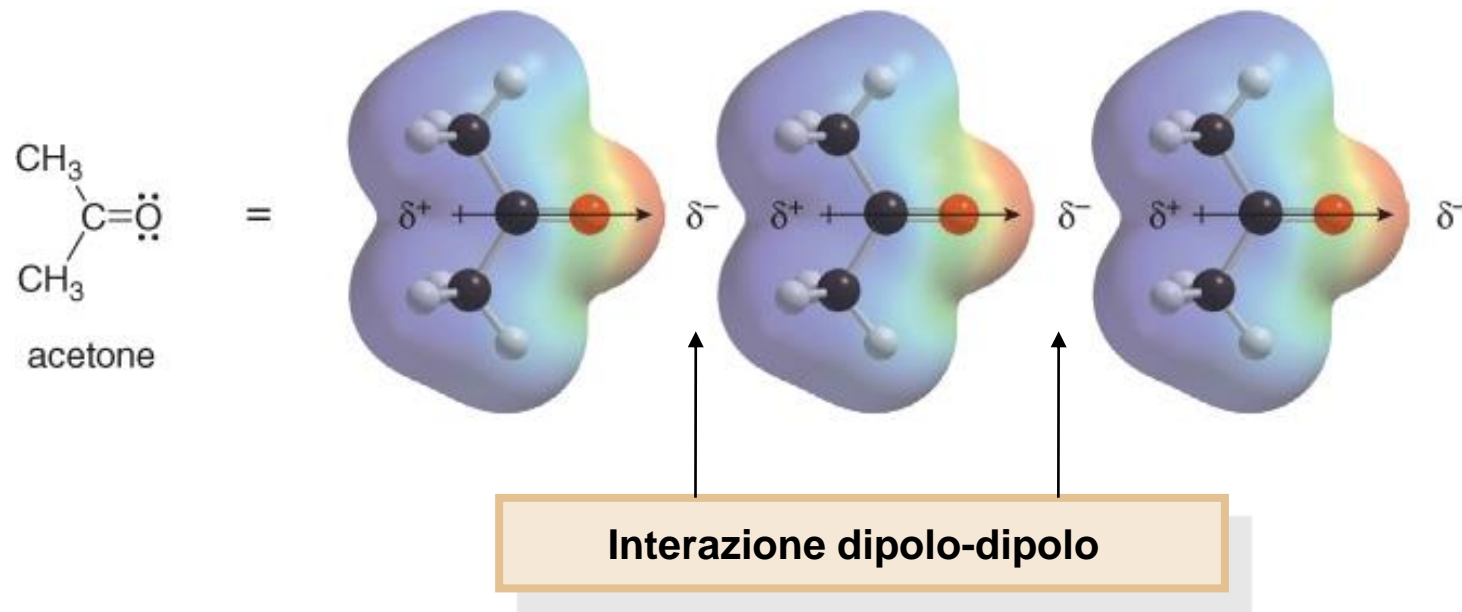
Il legame ad idrogeno

Il legame ad idrogeno è una interazione tra un idrogeno di un gruppo O-H o N-H e un doppietto solitario di un O o un N.



Interazione Dipolo-Dipolo

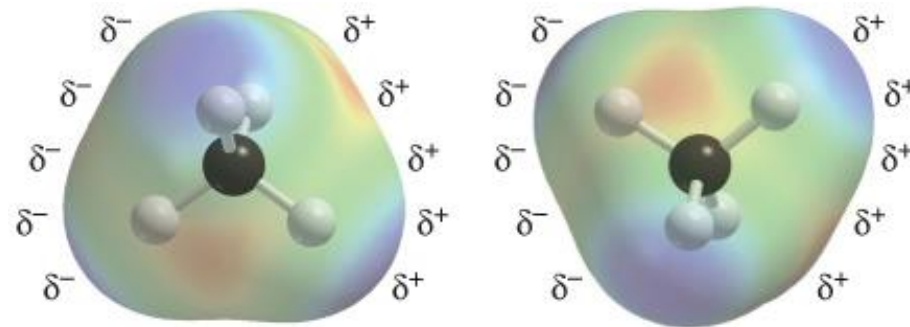
Le interazioni dipolo-dipolo sono interazioni elettrostatiche tra dipoli permanenti (legami polari)



Forze di Van der Waals (London)

- Le forze di VdW sono interazioni deboli tra dipoli indotti non permanenti.
- Sono le uniche forze di interazione tra molecole non polari.

Interazioni di VdW tra due molecole di metano

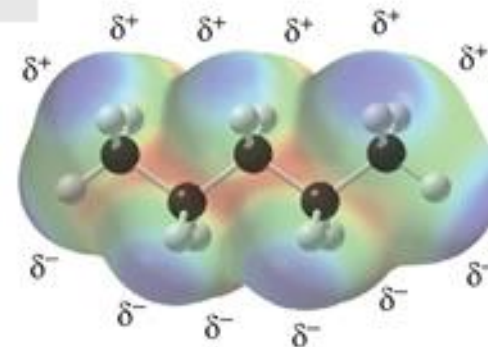
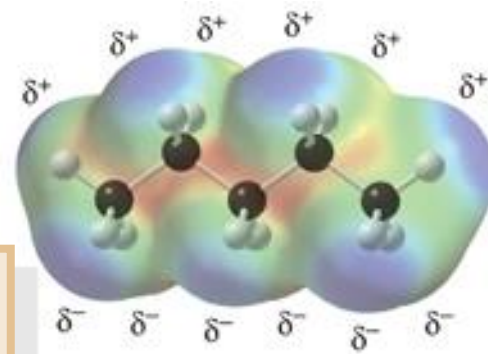
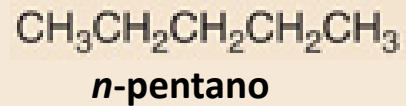


I dipoli si generano da un temporanea asimmetria nella distribuzione elettronica

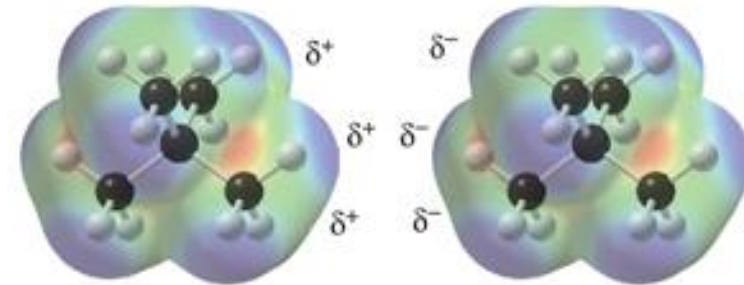
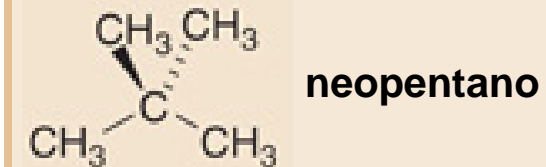
Forze di Van der Waals (London)

- Le interazioni di Van der Waals sono presenti in tutte le molecole
- Più grande è l'area di contatto tra le molecole più forti sono le interazioni

Molecole lunghe e cilindriche:
Interazioni più forti



Molecole compatte e sferiche:
Interazioni più deboli



Forze di Van der Waals (London)

- Le forze di VdW dipendono dalla polarizzabilità degli atomi.
- Atomi più grandi come lo Iodio trattengono meno fortemente gli elettroni e sono più polarizzabili rispetto ad atomi più piccoli come il Fluoro.

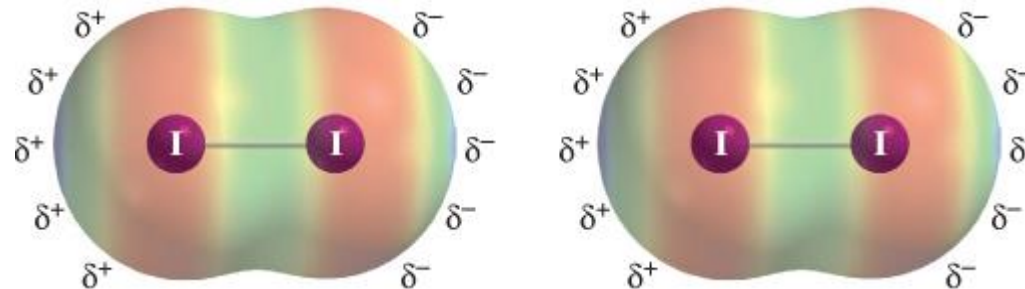
Atomi piccoli sono poco polarizzabili

Interazione più debole



Atomi grandi sono più polarizzabili

Interazione più forte



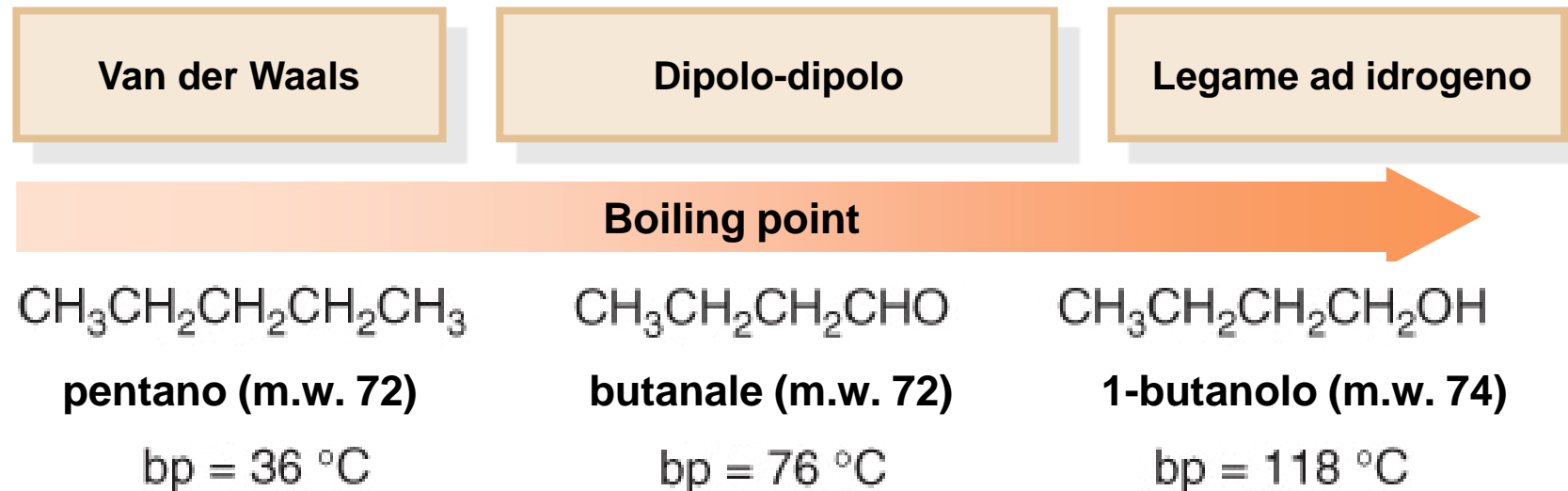
Riassunto

Interazione	Forza relativa	Presente in	Esempi
Van der Waals VDW	Molto debole	Tutte le molecole	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$ $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$
Dipolo-dipolo DD	Debole	Dipoli permanenti	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$ $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$
Legame ad idrogeno HB	forte	Molecole con OH, NH, etc.	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$
ioniche	Molto forti	Composti ionici	NaCl, LiF

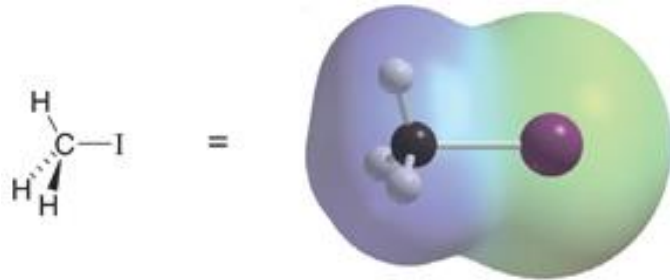
Le molecole polari interagiscono più fortemente di quelle apolari

Punto di ebollizione

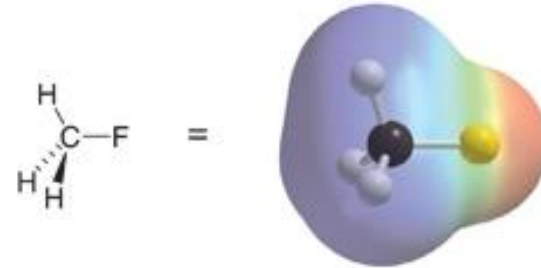
- Il punto di ebollizione è la temperatura a cui la tensione di vapore di un liquido eguaglia la pressione esterna
- Il punto di ebollizione riflette l'energia richiesta a far passare una molecola dallo stato liquido allo stato gassoso rompendo le interazioni intramolecolari
- Tra molecole di peso simile più grandi sono le interazioni molecolari più alto è il punto di ebollizione



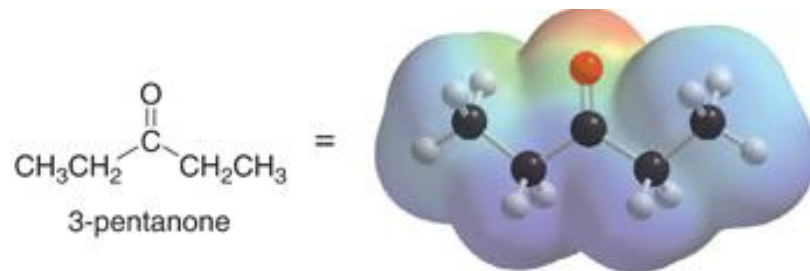
Punto di ebollizione



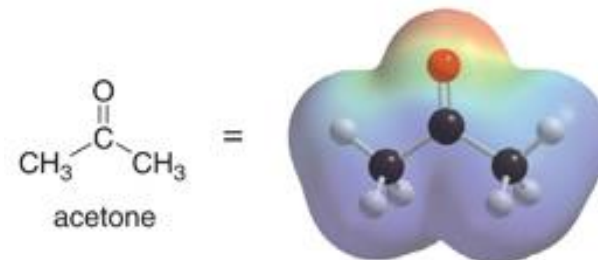
b.p. = 42 °C
I è più polarizzabile



b.p. = -78 °C
F è meno polarizzabile



b.p. = 102 °C
Area superficiale più grande



b.p. = 56 °C
Area superficiale più piccola

Punto di fusione

➤ M.p. and b.p. seguono lo stesso andamento



pentano

mp = $-130\text{ }^\circ\text{C}$



butanale

mp = $-96\text{ }^\circ\text{C}$



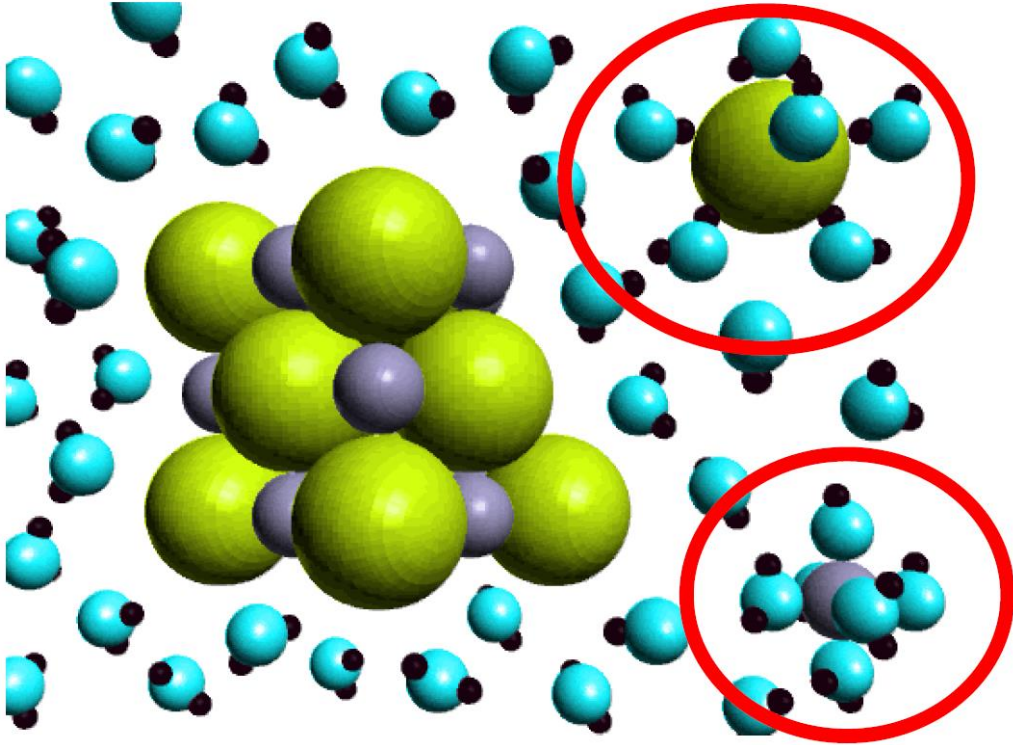
1-butanolo

mp = $-90\text{ }^\circ\text{C}$

Punto di fusione

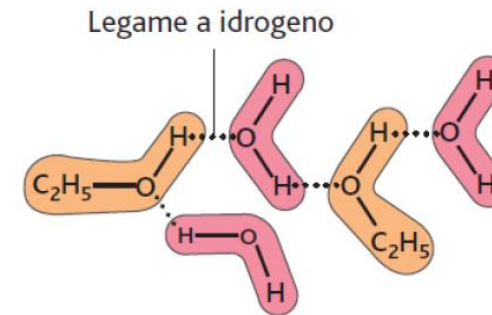


Solubilità

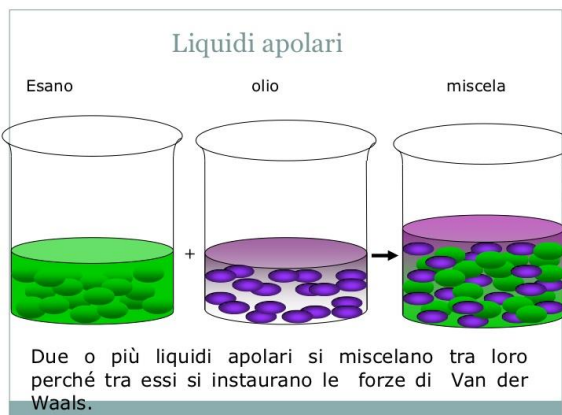
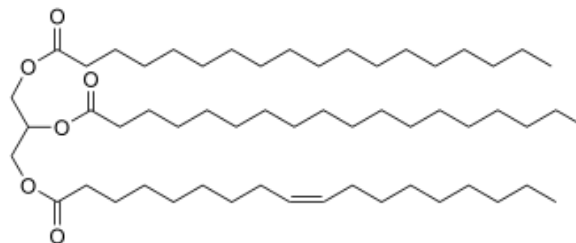
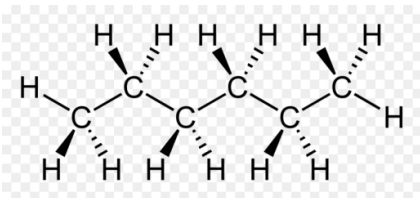
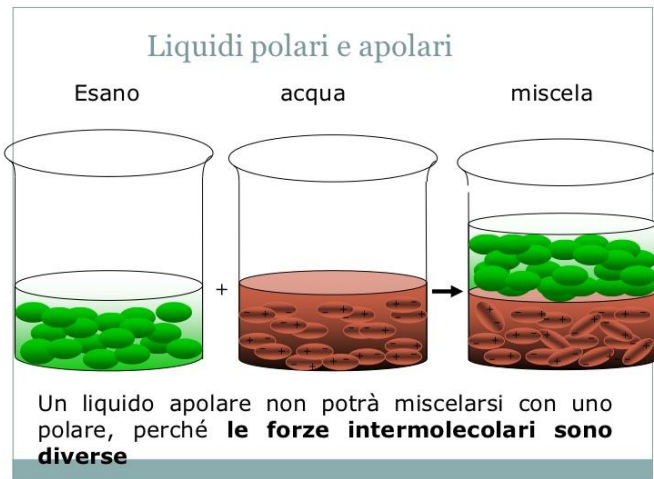


L'immagine mostra un cristallo di Cloruro di sodio che viene dissolto da molecole d'acqua. Il polo negativo delle molecole d'acqua circonda gli ioni Na^+ , mentre il polo positivo gli ioni Cl^- .

Per solubilizzare un composto il solvente deve interagire mediante interazioni non covalenti con il soluto compensando le interazioni tra molecole di soluto che sono presenti allo stato solido (**solvatazione**).

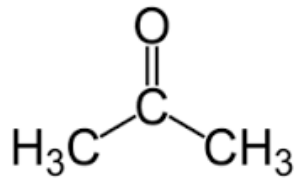


Solubilità

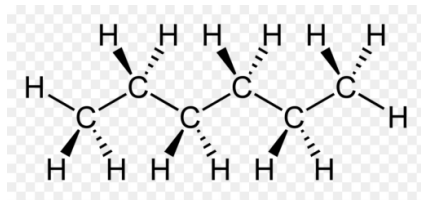


Solubilità: il simile scioglie il simile

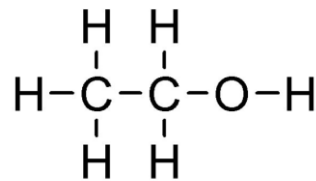
	NaCl (ionico)	Alcol etilico (HB)	Etere etilico (dipolo)	Benzene (apolare)
Acqua (HB)	SI	SI	poco	NO
Acetone (dipolo)	NO	SI	SI	SI
Esano (apolare)	NO	NO	SI	SI



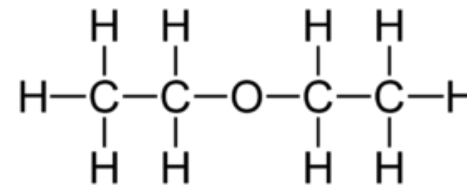
acetone



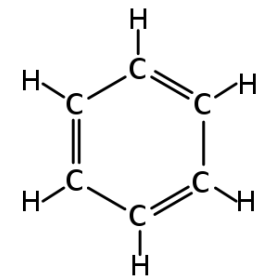
esano



etanolo



dietiletere



benzene