

# Chimica organica

Patrizia Nitti [pnitti@units.it](mailto:pnitti@units.it)

Sara Drioli, [sdrioli@units.it](mailto:sdrioli@units.it)

DSCF via Licio Giorgieri 1, Ed.C11, III piano, stanza 339

# CdL SM51 anno 1

## SCIENZE E TECNOLOGIE BIOLOGICHE

II semestre: dal 7/03/2022 al 10/06/2022

	Lunedì	Martedì	Mercoledì	Giovedì	Venerdì
8:00-9:00					
9:00-10:00	Corso : 181SM Aula: Aula 3B Edificio H3	Corso : 181SM Aula: Aula 3B Edificio H3			
10:00-11:00	Corso : 181SM Aula: Aula 3B Edificio H3	Corso : 181SM Aula: Aula 3B Edificio H3		Corso : 181SM Aula: Aula 3B Edificio H3	
11:00-12:00	Corso : 011SM Aula: Aula Magna - Ciamician Edificio B	Corso : 011SM Aula: Aula Magna - Ciamician Edificio B		Corso : 181SM Aula: Aula 3B Edificio H3	Corso : 018SV Aula: 0_A Edificio D
12:00-13:00	Corso : 011SM Aula: Aula Magna - Ciamician Edificio B	Corso : 011SM Aula: Aula Magna - Ciamician Edificio B			Corso : 018SV Aula: 0_A Edificio D
13:00-14:00			Corso : 639SM Aula: Aula Magna - Ciamician Edificio B	Corso : 639SM Aula: Aula Magna - Ciamician Edificio B	
14:00-15:00	Corso : 014SM Aula: Aula Magna - Ciamician Edificio B	Corso : 014SM Aula: Aula Magna - Ciamician Edificio B	Corso : 639SM Aula: Aula Magna - Ciamician Edificio B	Corso : 639SM Aula: Aula Magna - Ciamician Edificio B	
15:00-16:00	Corso : 014SM Aula: Aula Magna - Ciamician Edificio B	Corso : 014SM Aula: Aula Magna - Ciamician Edificio B			
16:00-17:00	<i>Esercitazioni BIOCHIMICA I – Aula Magna -Ciamician edificio B</i>	<i>Esercitazioni FISICA – Aula Magna -Ciamician edificio B</i>			
17:00-18:00	<i>Esercitazioni BIOCHIMICA I – Aula Magna -Ciamician edificio B</i>	<i>Esercitazioni FISICA – Aula Magna -Ciamician edificio B</i>			
18:00-19:00					
19:00-20:00					

Codice corso	Nome del corso
639SM	BIOCHIMICA I
181SM	BIOLOGIA VEGETALE
014SM	CHIMICA ORGANICA
011SM	FISICA
018SV	LINGUA INGLESE (LIVELLO B1)

Per prime due settimane Chimica organica nell'orario della Biochimica I

Codice teams

xmtk0k2

# Modalità d'esame

- Bisogna aver superato l'esame di Chimica Generale
- Prova scritta: 10 domande, ogni domanda vale 1 punto (prove parziali su esse3)
- Prova orale:
  1. Errori dello scritto
  2. Argomenti trattati nel corso

# Obiettivi del corso

- Acquisire le conoscenze di base sulla struttura delle molecole organiche, sulla loro reattività e la loro sintesi.
- Comprendere i principali meccanismi che stanno alla base delle reazioni in chimica organica.
- Comprendere le proprietà stereochimiche delle molecole organiche e la chiralità.

# Libri di testo

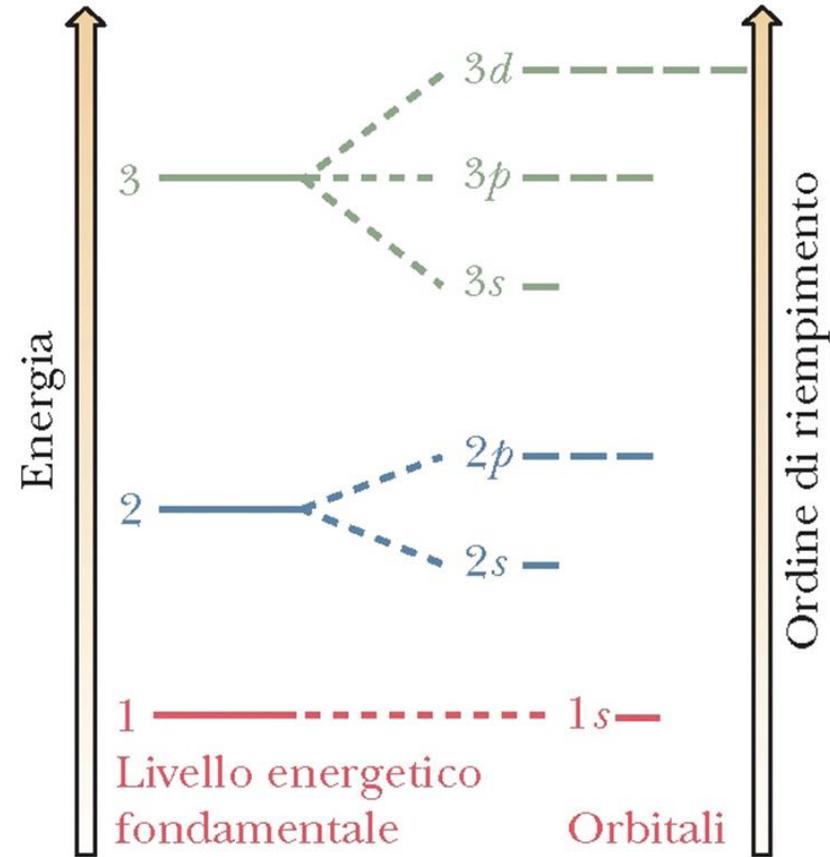
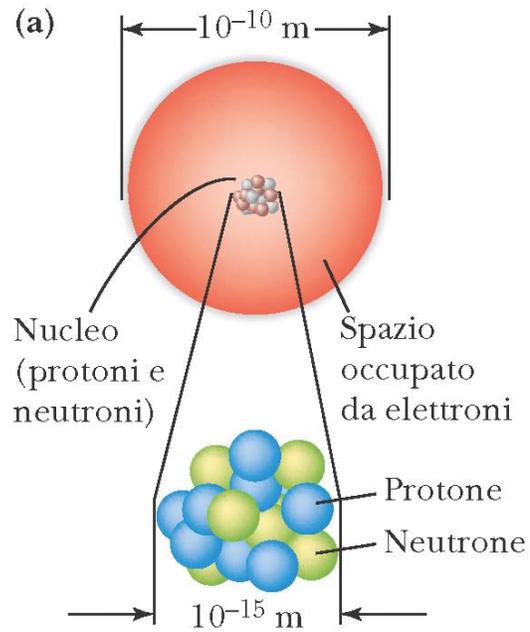
**Introduzione alla chimica organica - W. H. Brown e T. Poon – EdiSES editore**



Fondamenti di chimica organica – J. Gorzynski Smith – Mc Grow Hill Education



# Struttura elettronica degli atomi



# Struttura elettronica degli atomi

il primo guscio contiene un singolo orbitale, denominato orbitale 1s. Il secondo guscio contiene un orbitale 2s e tre orbitali 2p. Tutti gli orbitali di tipo *p* sono tre e, quindi, possono ospitare fino a 6 elettroni. Il terzo guscio contiene un orbitale 3s, tre orbitali 3p e cinque orbitali 3d. Tutti gli orbitali di tipo *d* sono cinque e, quindi, possono ospitare fino a 10 elettroni. Tutti gli orbitali di tipo *f* sono sette e, quindi, possono ospitare fino a 14 elettroni

**TABELLA 1.1** Distribuzione degli orbitali nei gusci

Guscio	Orbitali contenuti nel guscio	Numero massimo di elettroni che il guscio può contenere	Energia relativa degli elettroni in ciascun guscio
4	Un orbitale 4s, tre orbitali 4p, cinque orbitali 4d e sette orbitali 4f	$2 + 6 + 10 + 14 = 32$	Maggiore
3	Un orbitale 3s, tre orbitali 3p e cinque orbitali 3d	$2 + 6 + 10 = 18$	
2	Un orbitale 2s e tre orbitali 2p	$2 + 6 = 8$	
1	Un orbitale 1s	2	

# PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

## Table of Selected Radioactive Isotopes

GROUP IA		IIA		IIIA		IVA		VA		VIA		VIIA		VIIIA		IB		IIB		III B		IV B		VB		VIB		VIIB		VIII																													
1 1.00794 <b>H</b> Hydrogen	2 4.00260 <b>He</b> Helium	3 6.941 <b>Li</b> Lithium	4 9.01218 <b>Be</b> Beryllium	11 22.98977 <b>Na</b> Sodium	12 24.305 <b>Mg</b> Magnesium	19 39.0983 <b>K</b> Potassium	20 40.078 <b>Ca</b> Calcium	21 44.9559 <b>Sc</b> Scandium	22 47.87 <b>Ti</b> Titanium	23 50.9415 <b>V</b> Vanadium	24 51.996 <b>Cr</b> Chromium	25 54.9380 <b>Mn</b> Manganese	26 55.845 <b>Fe</b> Iron	27 58.9332 <b>Co</b> Cobalt	28 58.9332 <b>Ni</b> Nickel	29 63.546 <b>Cu</b> Copper	30 65.39 <b>Zn</b> Zinc	31 69.723 <b>Ga</b> Gallium	32 72.61 <b>Ge</b> Germanium	33 74.9216 <b>As</b> Arsenic	34 78.96 <b>Se</b> Selenium	35 79.904 <b>Br</b> Bromine	36 83.80 <b>Kr</b> Krypton	37 85.4678 <b>Rb</b> Rubidium	38 87.62 <b>Sr</b> Strontium	39 88.9059 <b>Y</b> Yttrium	40 91.224 <b>Zr</b> Zirconium	41 92.9064 <b>Nb</b> Niobium	42 95.94 <b>Mo</b> Molybdenum	43 98 <b>Tc</b> Technetium	44 101.07 <b>Ru</b> Ruthenium	45 102.9055 <b>Rh</b> Rhodium	46 106.42 <b>Pd</b> Palladium	47 107.868 <b>Ag</b> Silver	48 112.41 <b>Cd</b> Cadmium	49 114.82 <b>In</b> Indium	50 118.710 <b>Sn</b> Tin	51 121.760 <b>Sb</b> Antimony	52 127.60 <b>Te</b> Tellurium	53 126.9045 <b>I</b> Iodine	54 131.29 <b>Xe</b> Xenon	55 132.9054 <b>Cs</b> Cesium	56 137.33 <b>Ba</b> Barium	57 138.9055 <b>La</b> Lanthanum	72 178.49 <b>Hf</b> Hafnium	73 180.9479 <b>Ta</b> Tantalum	74 183.84 <b>W</b> Tungsten	75 186.207 <b>Re</b> Rhenium	76 190.23 <b>Os</b> Osmium	77 192.22 <b>Ir</b> Iridium	78 195.08 <b>Pt</b> Platinum	79 196.9665 <b>Au</b> Gold	80 200.59 <b>Hg</b> Mercury	81 204.383 <b>Tl</b> Thallium	82 207.2 <b>Pb</b> Lead	83 208.9804 <b>Bi</b> Bismuth	84 209 <b>Po</b> Polonium	85 210 <b>At</b> Astatine	86 222 <b>Rn</b> Radon

**KEY**

ATOMIC NUMBER: 30

ATOMIC WEIGHT (2): 65.39

OXIDATION STATES (Bold most stable): +2

SYMBOL: Zn

NAME: Zinc

ELECTRON CONFIGURATION: [Ar]3d<sup>10</sup>4s<sup>2</sup>

DENSITY at 300 K (3): 7.13 g/cm<sup>3</sup>

MELTING POINT, K: 692.73

BOILING POINT, K: 1180

58 140.12 3.2 <b>Ce</b> Cerium	59 140.9077 3.4 <b>Pr</b> Praseodymium	60 144.24 3 <b>Nd</b> Neodymium	61 145 3 <b>Pm</b> Promethium	62 150.36 3.2 <b>Sm</b> Samarium	63 151.964 3.2 <b>Eu</b> Europium	64 157.25 3 <b>Gd</b> Gadolinium	65 158.9253 3 <b>Tb</b> Terbium	66 162.50 3 <b>Dy</b> Dysprosium	67 164.9303 3 <b>Ho</b> Holmium	68 167.26 3 <b>Er</b> Erbium	69 168.9342 3 <b>Tm</b> Thulium	70 173.04 3.2 <b>Yb</b> Ytterbium	71 174.967 3 <b>Lu</b> Lutetium
90 232.0381 4 <b>Th</b> Thorium	91 232.0359 3.4 <b>Pa</b> Protactinium	92 238.029 6.5, 4.3 <b>U</b> Uranium	93 237 2.0, 2.3 <b>Np</b> Neptunium	94 244 6.5, 4.3 <b>Pu</b> Plutonium	95 243 6.5, 4.3 <b>Am</b> Americium	96 247 3 <b>Cm</b> Curium	97 247 3 <b>Bk</b> Berkelium	98 251 3 <b>Cf</b> Californium	99 252 3 <b>Es</b> Einsteinium	100 257 3 <b>Fm</b> Fermium	101 258 3 <b>Md</b> Mendelevium	102 259 2.3 <b>No</b> Nobelium	103 262 3 <b>Lr</b> Lawrencium

NOTES:

(1) Black — solid.

(2) Based upon carbon-12. ( ) indicates most stable or best known isotope.

(3) Entries marked with daggers refer to the gaseous state at 273 K and 1 atm and are

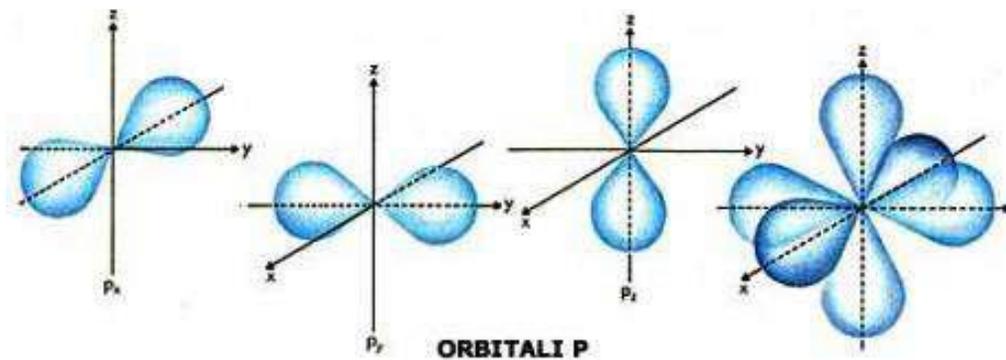
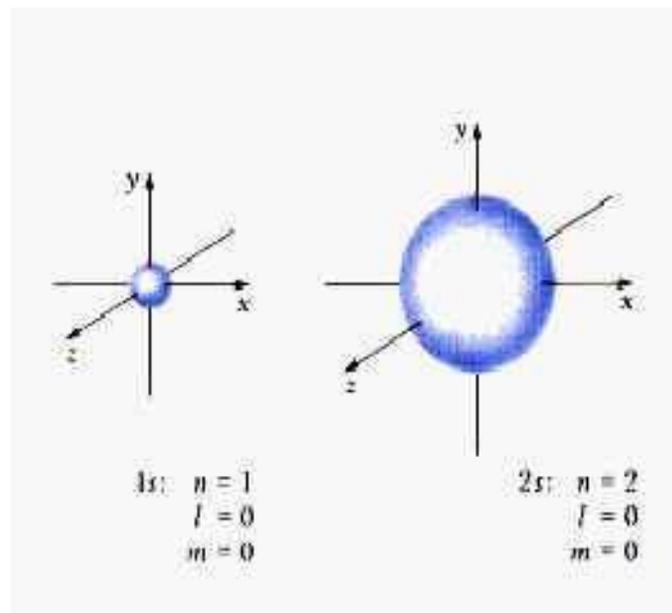
The A & B subgroup designations, applicable to elements in rows 4, 5, 6 and 7, are those recommended by the International Union of Pure and Applied Chemistry.

REDMI NOTE 8T  
AI QUAD CAMERA  
Side 1

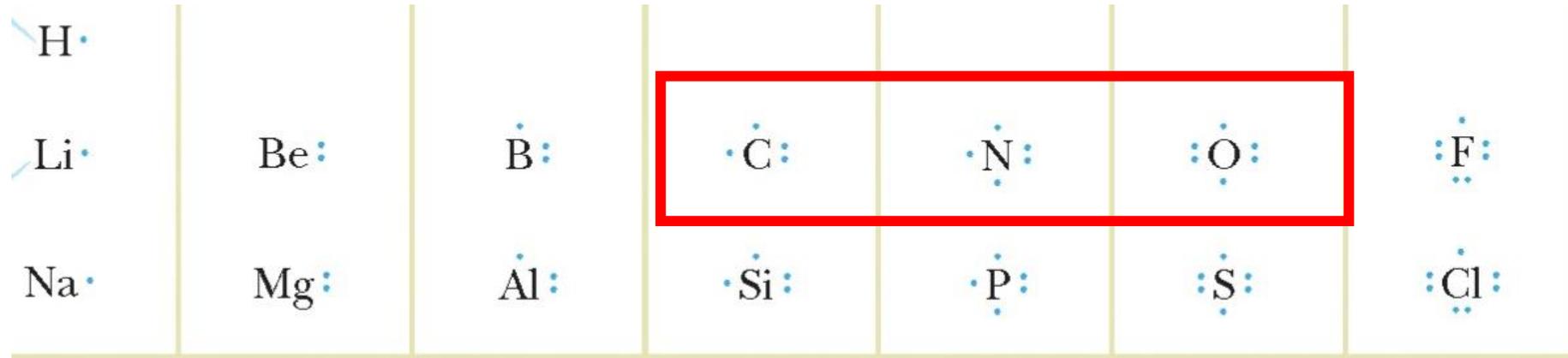
# Configurazione elettronica fondamentale

	Numero atomico	
H	1	$1s^1$
C	6	$1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$
N	7	$1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$
O	8	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$
F	9	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$
Cl	17	$1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^1$

# Orbitali atomici



# Strutture di Lewis



Si considerano solo gli elettroni del livello più esterno: 2s e 2p

Gas nobile	Notazione gas nobile
He	$1s^2$
Ne	$[\text{He}] 2s^2 2p^6$

# Regola dell'ottetto

- Gli atomi del II periodo (C, N, O, F) reagiscono in modo da raggiungere un guscio esterno con otto elettroni di valenza
- La regola non vale per Si, P, S, Cl
- Due modi per completare l'ottetto:
  1. Perde o acquista elettroni (legame ionico)
    - L'atomo perde uno o più elettroni
      - **diventa positivo, catione**
    - L'atomo acquista elettroni
      - **diventa negativo, anione**
  2. Mette a comune gli elettroni (legame covalente)

# Elettronegatività dell'atomo

- Misura la tendenza di un atomo ad attrarre gli elettroni che condivide (in un legame chimico) con un altro atomo
- Scala di Pauling
  - Il fluoro è l'atomo più elettronegativo 4.0
  - Nella tavola periodica
    - l'elettronegatività aumenta da sinistra a destra in un periodo
    - L'elettronegatività diminuisce dall'alto in basso in un gruppo

**TABELLA 1.4** Valori ed andamento dell'elettronegatività per alcuni atomi (scala di Pauling)

1A	2A											3A	4A	5A	6A	7A	
Li 1.0	Be 1.5											B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	
Na 0.9	Mg 1.2	3B	4B	5B	6B	7B	8B				1B	2B	Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0
K 0.8	Ca 1.0	Sc 1.3	Ti 1.5	V 1.6	Cr 1.6	Mn 1.5	Fe 1.8	Co 1.8	Ni 1.8	Cu 1.9	Zn 1.6	Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8	
Rb 0.8	Sr 1.0	Y 1.2	Zr 1.4	Nb 1.6	Mo 1.8	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.2	Pd 2.2	Ag 1.9	Cd 1.7	In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5	
Cs 0.7	Ba 0.9	La 1.1	Hf 1.3	Ta 1.5	W 1.7	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.2	Pt 2.2	Au 2.4	Hg 1.9	Tl 1.8	Pb 1.8	Bi 1.9	Po 2.0	At 2.2	

<span style="background-color: #e0f2f1; border: 1px solid black; display: inline-block; width: 15px; height: 10px;"></span> <1.0	<span style="background-color: #bbdefb; border: 1px solid black; display: inline-block; width: 15px; height: 10px;"></span> 1.5 – 1.9	<span style="background-color: #ffe0b2; border: 1px solid black; display: inline-block; width: 15px; height: 10px;"></span> 2.5 – 2.9
<span style="background-color: #e2efda; border: 1px solid black; display: inline-block; width: 15px; height: 10px;"></span> 1.0 – 1.4	<span style="background-color: #d1c4e9; border: 1px solid black; display: inline-block; width: 15px; height: 10px;"></span> 2.0 – 2.4	<span style="background-color: #ffb74d; border: 1px solid black; display: inline-block; width: 15px; height: 10px;"></span> 3.0 – 4.0

**TABELLA 1.5** Classificazione dei legami chimici

Differenza di elettronegatività tra gli atomi legati	Tipo di legame
< 0.5	Covalente non polare } Covalente polare }
da 0.5 a 1.9	
> 1.9	Ionico

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



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

Na (11 elettroni)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Na<sup>+</sup> (10 elettroni)  $1s^2 2s^2 2p^6$

Ne (10 elettroni)  $1s^2 2s^2 2p^6$

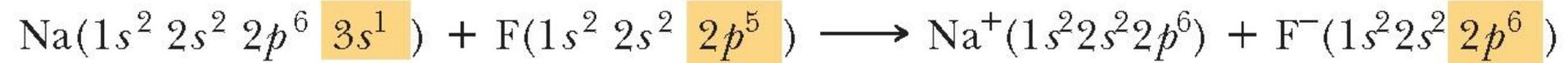
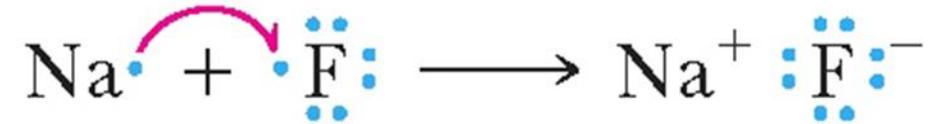
Elettronegatività del sodio = 0.9

Elettronegatività del cloro = 3.0

Differenza di elettronegatività tra i due atomi = 2.1

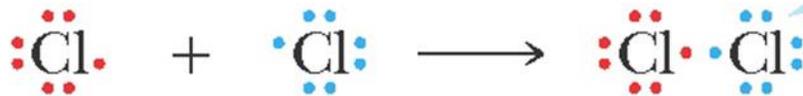
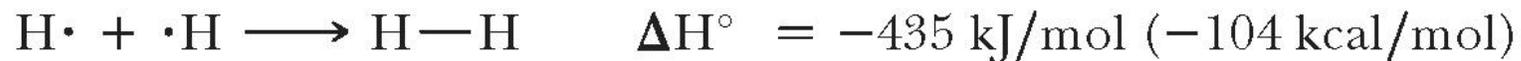
Legame ionico

# Legame ionico



# Legame covalente

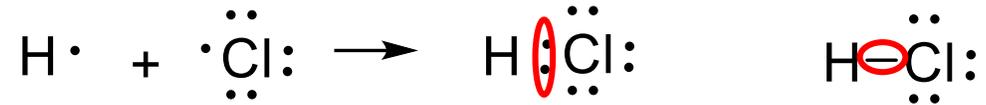
- Secondo il modello di Lewis una coppia di elettroni di un legame covalente:
  - È condivisa tra i due atomi
  - Completa il guscio di valenza di ciascun atomo



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

# Acido cloridrico

Elettroni di legame, condivisi



Elettronegatività

H = 2.1 Cl = 3.0

Differenza = 0.9

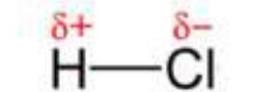
**Legame covalente polare**

Il cloro possiede:

tre **coppie di non legame** dette

anche: **doppietti non condivisi**

**lone pair**



# Esercizi

- $\text{H}_2\text{O}$  acqua
- $\text{CH}_4$  metano
- $\text{NH}_3$  ammoniaca
- $\text{C}_2\text{H}_4$  etilene
- $\text{C}_2\text{H}_2$  acetilene
- $\text{CH}_2\text{O}$  formaldeide
- $\text{H}_2\text{CO}_3$  acido carbonico



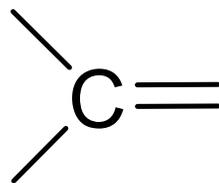
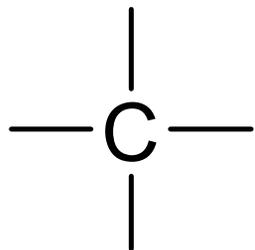
# Numero di legami covalenti degli atomi in molecole organiche neutre

idrogeno



1 legame

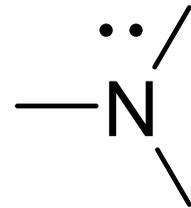
carbonio



4 legami

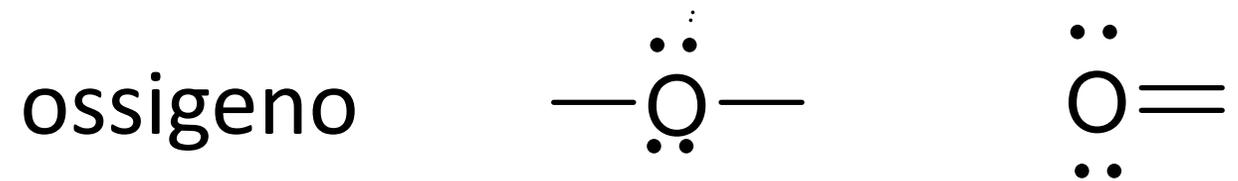
# Numero di legami covalenti degli atomi in molecole organiche neutre

azoto



3 legami e un doppietto non condiviso

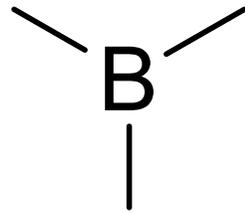
# Numero di legami covalenti degli atomi in molecole organiche neutre



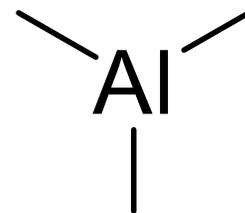
2 legami e due doppietti non condivisi



Numero di legami covalenti degli atomi in molecole organiche  
**neutre**



boro



alluminio

3 legami, non rispettano la regola dell'ottetto

# Numero di legami covalenti degli atomi in molecole organiche neutre

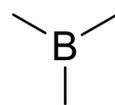
idrogeno H— 1 legame

carbonio  $\begin{array}{c} | \\ -C- \\ | \end{array}$   $\begin{array}{c} \diagup \\ C= \\ \diagdown \end{array}$   $-C\equiv$   $=C=$  4 legami

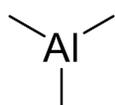
azoto  $\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ | \\ -N \\ | \end{array}$   $-N=$   $N\equiv$  3 legami e un doppietto non condiviso

ossigeno  $\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ | \\ -O- \\ | \end{array}$   $\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ O= \\ \cdot\cdot \end{array}$  2 legami e due doppietti non condivisi

alogeni  $\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ | \\ :X- \\ | \end{array}$  X = F, Cl, Br, I un legame e 3 doppietti non condivisi



boro



alluminio

3 legami, non rispettano la regola dell'ottetto

# Carica formale esercizi ed esempi

La carica formale è la carica assegnata a un singolo atomo in una struttura di Lewis.

- H
- OH
- H<sub>2</sub>O
- H<sub>3</sub>O
- H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>
- HCO<sub>3</sub>
- NH<sub>3</sub>
- NH<sub>4</sub>
- CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>
- CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>
- HNO<sub>3</sub>

# Carica formale

La carica formale è la carica assegnata a un singolo atomo in una struttura di Lewis.

carica formale = [elettroni di valenza] - [elettroni di non legame] - [legami]

[elettroni di valenza] = dato dalla tavola periodica

[elettroni di non legame] = n. di puntini presenti sull'atomo considerato

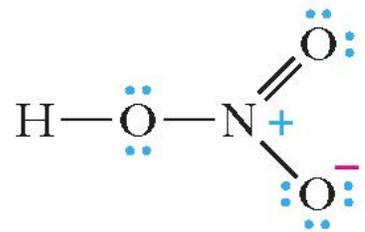
[legami] = n. di trattini che partono dall'atomo considerato

La somma delle cariche formali su ogni singolo atomo è uguale alla carica netta sulla molecola o ione.

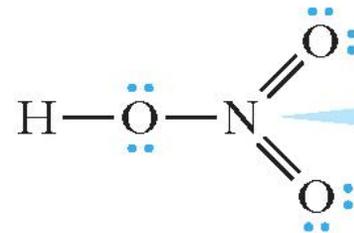


Acido nitrico

# Acido nitrico $\text{HNO}_3$



Struttura di Lewis  
accettabile

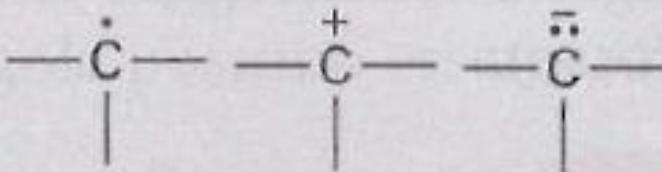
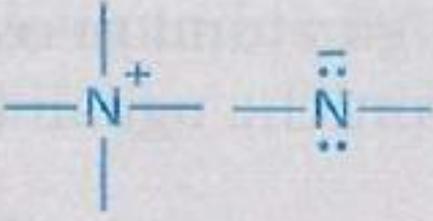
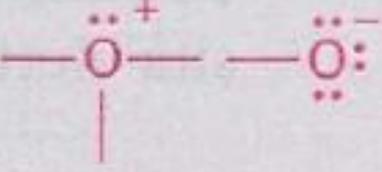


Struttura di Lewis  
non accettabile

violazione della regola dell'ottetto,  
10 elettroni nel guscio  
di valenza dell'azoto

# Cariche formali più comuni

**Tabella 2.2** Un sommario delle cariche formali più comuni

Atomo	C	N	O
Struttura			

# Lunghezze, angoli di legame e forma delle molecole

- La struttura di una molecola è definita dalla lunghezza di legame e dagli angoli di legame
- Lunghezza di legame: distanza tra i due nuclei che partecipano a un legame covalente (si misura in angstrom Å)  $1 \text{ \AA} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$
- Angolo di legame: è l'angolo formato dagli assi congiungenti i nuclei degli atomi legati

**Average Bond Lengths for Some Single, Double, and Triple Bonds**

<b>Bond</b>	<b>Bond Length (Å)</b>	<b>Bond</b>	<b>Bond Length (Å)</b>
C—C	1.54	N—N	1.47
C=C	1.34	N=N	1.24
C≡C	1.20	N≡N	1.10
C—N	1.43	N—O	1.36
C=N	1.38	N=O	1.22
C≡N	1.16	O—O	1.48
C—O	1.43	O=O	1.21
C=O	1.23		
C≡O	1.13		

# Modello VSEPR

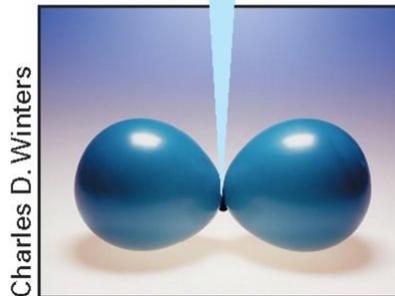
## Valence Shell Electron Pair Repulsion

repulsione tra le coppie di elettroni del guscio di valenza

il punto in cui i palloncini sono legati insieme rappresenta l'atomo di cui si vogliono prevedere gli angoli di legame

ogni palloncino rappresenta una regione di densità elettronica, che può consistere in un legame semplice, doppio o triplo o in una coppia solitaria di elettroni

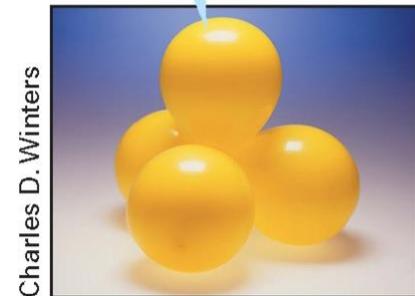
**FIGURA 1.5** Modelli a palloncino utilizzati per predire gli angoli di legame. (a) Due palloncini assumono una forma lineare con un angolo di legame di  $180^\circ$  intorno al punto di legame. (b) Tre palloncini assumono una forma trigonale planare con angoli di legame di  $120^\circ$ . (c) Quattro palloncini assumono una forma tetraedrica con angoli di legame di  $109.5^\circ$ .



(a) Lineare



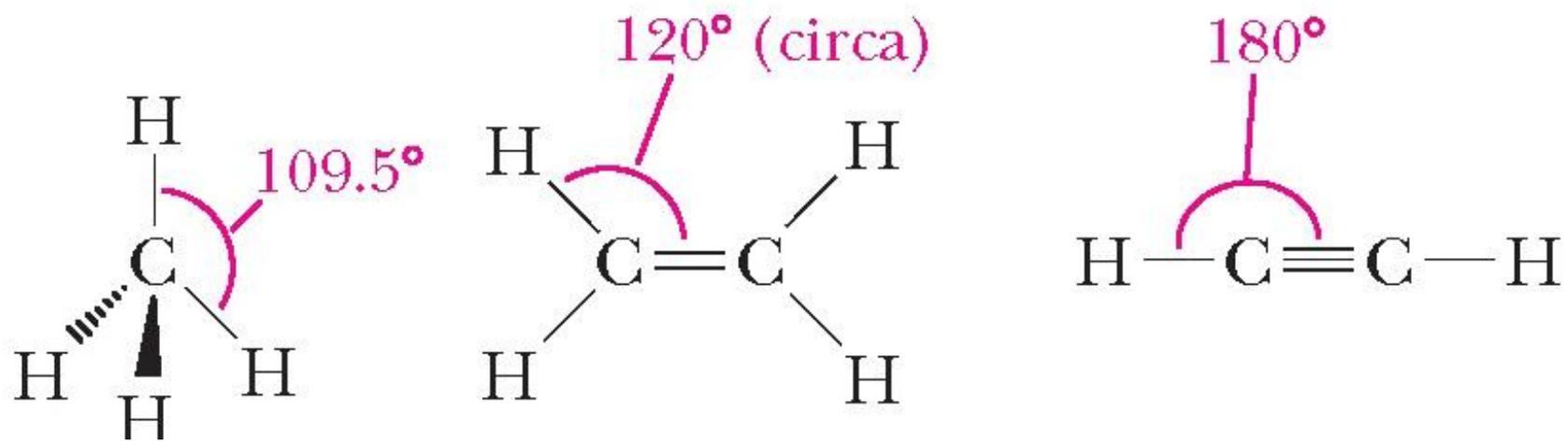
(b) Trigonale planare



(c) Tetraedro

# Esempi

- Struttura di metano, ammoniaca, acqua, aldeide formica, etilene, anidride carbonica, acetilene



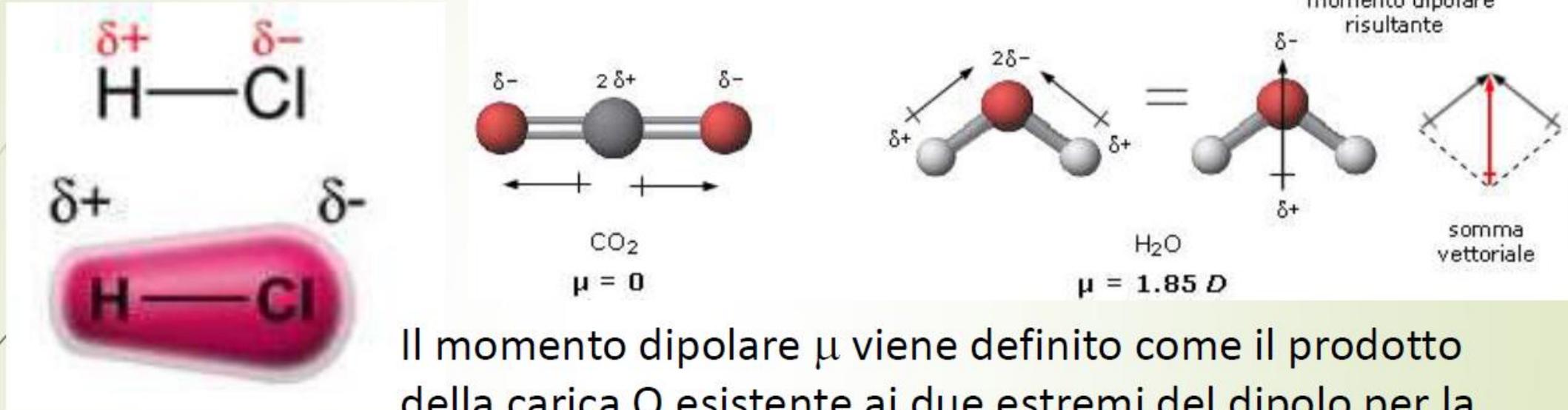
Perché è importante conoscere la forma di una molecola?

# Molecole polari e non polari

- La forma di una molecola determina le sue proprietà chimico-fisiche come ad esempio la sua polarità
- La polarità delle molecole è il risultato della somma di tutti i vettori relativi alla polarità dei singoli legami e del contributo delle coppie di elettroni non condivisi

# Momento dipolare

La polarità delle molecole è il risultato della somma di tutti i vettori relativi alla polarità dei singoli legami e del contributo delle coppie di elettroni non condivisi.



$$\mu = Q \cdot r$$

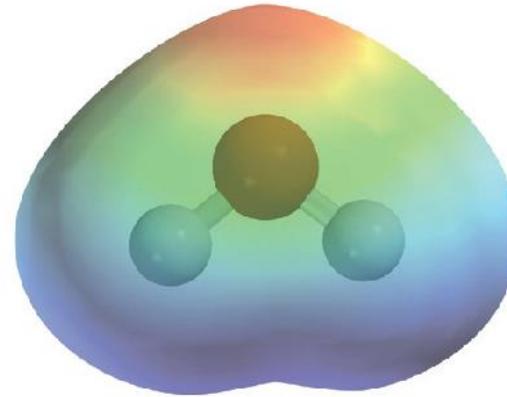
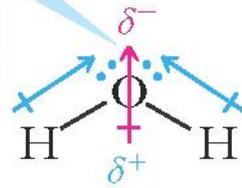
Il momento dipolare  $\mu$  viene definito come il prodotto della carica  $Q$  esistente ai due estremi del dipolo per la distanza  $r$  tra le cariche.

L'unità SI del momento dipolare è il *coulomb*•*metro* ma spesso si misura *debye (D)* che è un'unità più piccola, più utile quando si studiano i deboli dipoli delle molecole.

$$1 \text{ C} \cdot \text{m} = 2,9979 \cdot 10^{29} \text{ D}$$

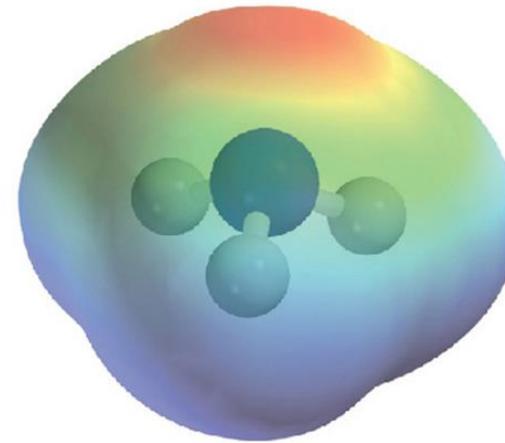
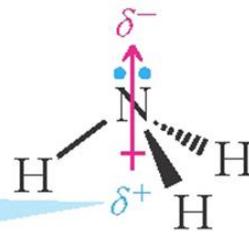
Si mette quel segno + per indicare che il vettore è nella direzione contraria a quella convenzionale.

il vettore somma (rosso) dei dipoli di legame (blu) colloca il centro della carica parziale positiva ( $\delta^+$ ) tra i due atomi di idrogeno



Acqua  
(una molecola polare)

il centro della parziale carica positiva ( $\delta^+$ ) è a metà strada tra i tre atomi di idrogeno



Ammoniaca  
(una molecola polare)

# Chimica organica

- Struttura
- Reattività
- La struttura e la reattività sono correlate

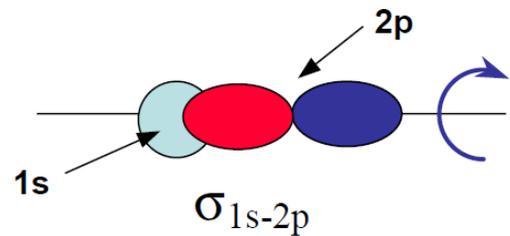
**STRUTTURA**  **REATTIVITA'**

# Legame covalente secondo il modello del legame di valenza

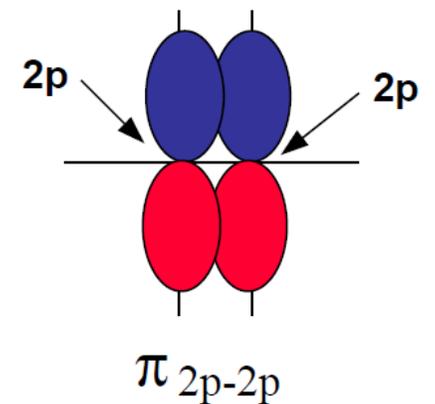
- I legami si formano per sovrapposizione degli orbitali atomici
- Gli elettroni sono localizzati e condivisi
- Maggiore è la sovrapposizione, più forte è il legame
- Legame sigma ( $\sigma$ ) deriva dalla sovrapposizione di orbitali atomici che ha luogo lungo l'asse che unisce i due nuclei
- Legame pi greco ( $\pi$ ) deriva dalla sovrapposizione di 2 orbitali p paralleli fra loro e perpendicolari al legame  $\sigma$

# Legame covalente secondo il modello del legame di valenza

- Legame sigma ( $\sigma$ ) deriva dalla sovrapposizione di orbitali atomici che ha luogo lungo l'asse che unisce i due nuclei

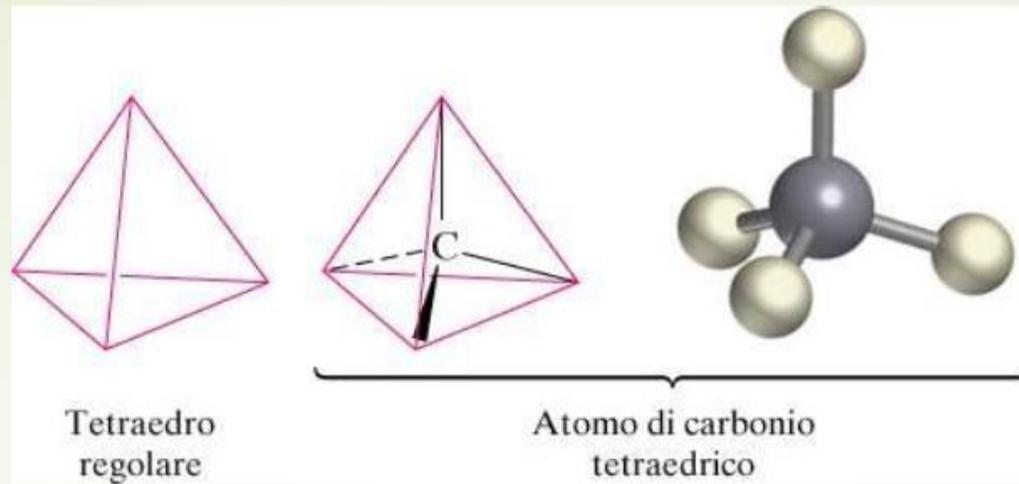


- Legame pi greco ( $\pi$ ) deriva dalla sovrapposizione di 2 orbitali p paralleli fra loro e perpendicolari al legame  $\sigma$



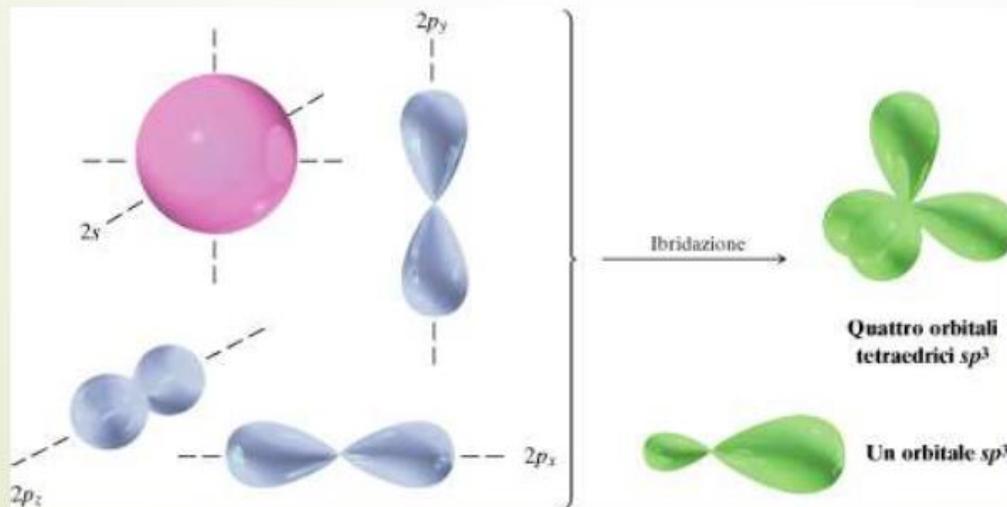
# Teoria degli Orbitali ibridi

- Atomi, come il carbonio, non usano orbitali puri s o p per formare legami, ma degli orbitali chiamati **orbitali ibridi**
- Per formare dei legami covalenti con altri atomi il carbonio userà orbitali ibridi contenenti un solo elettrone
- Per formare il legame l'altro elettrone verrà messo dall'altro atomo



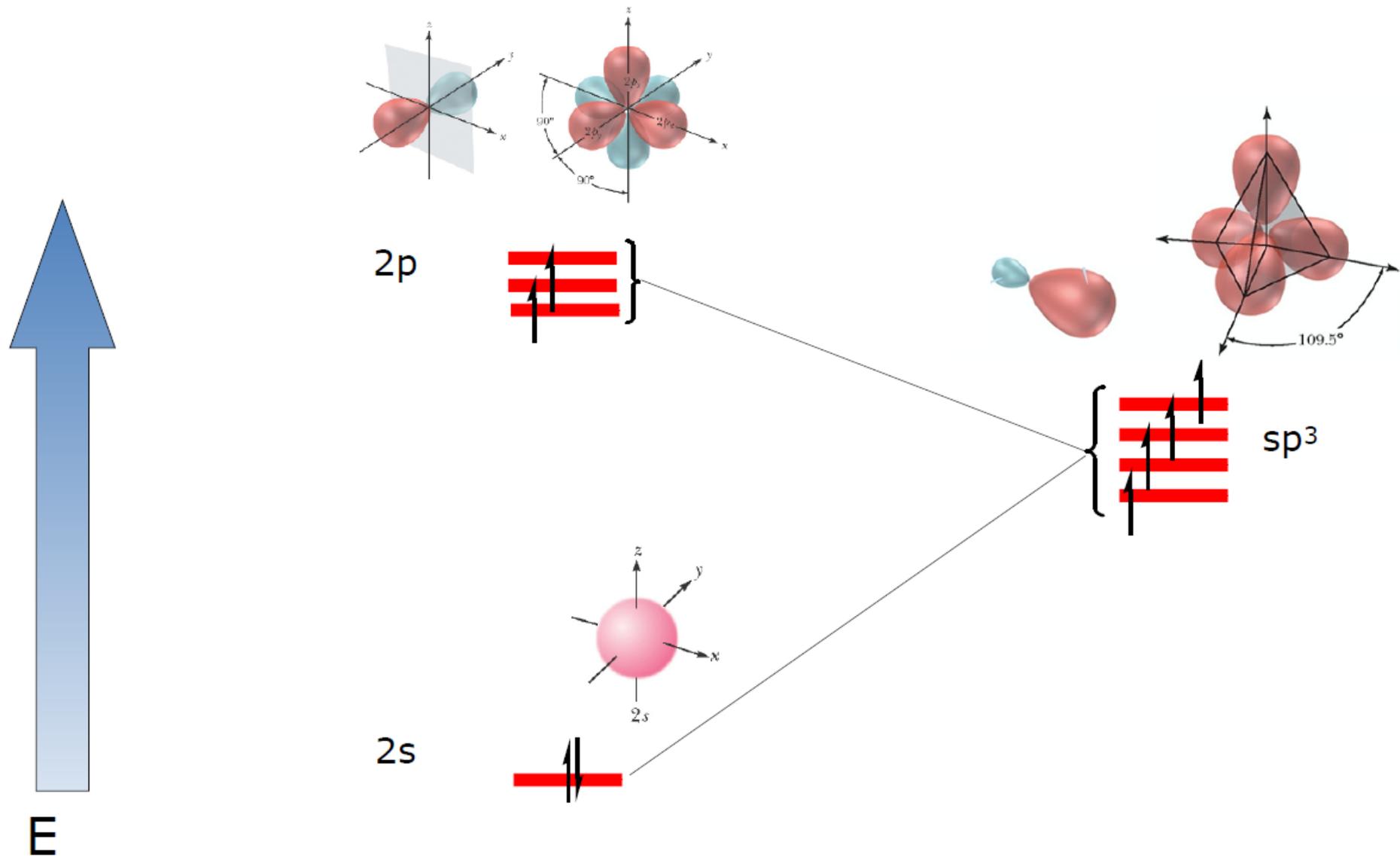
CH<sub>4</sub>  
metano

**Ibridazione:** combinazione di due o più orbitali atomici per formare un numero uguale di orbitali ibridi.

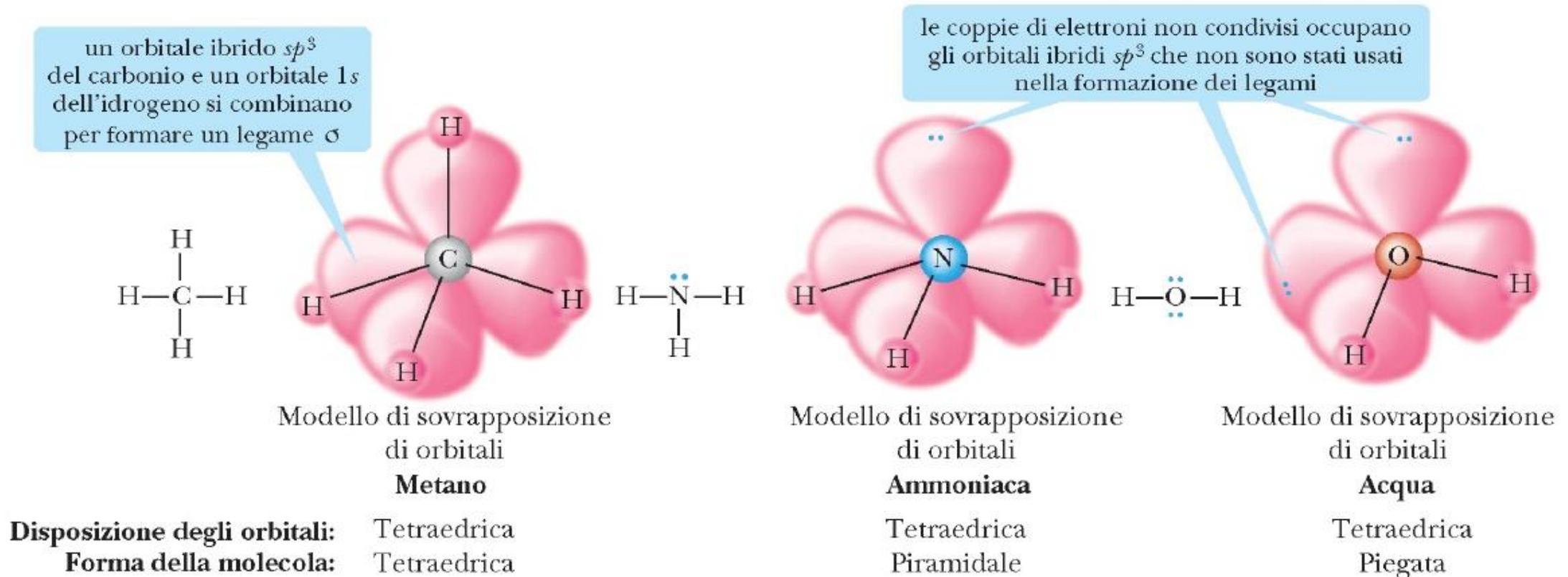


sp<sup>3</sup> angoli di 109,5°

# 4 single bonds: $sp^3$ hybridization

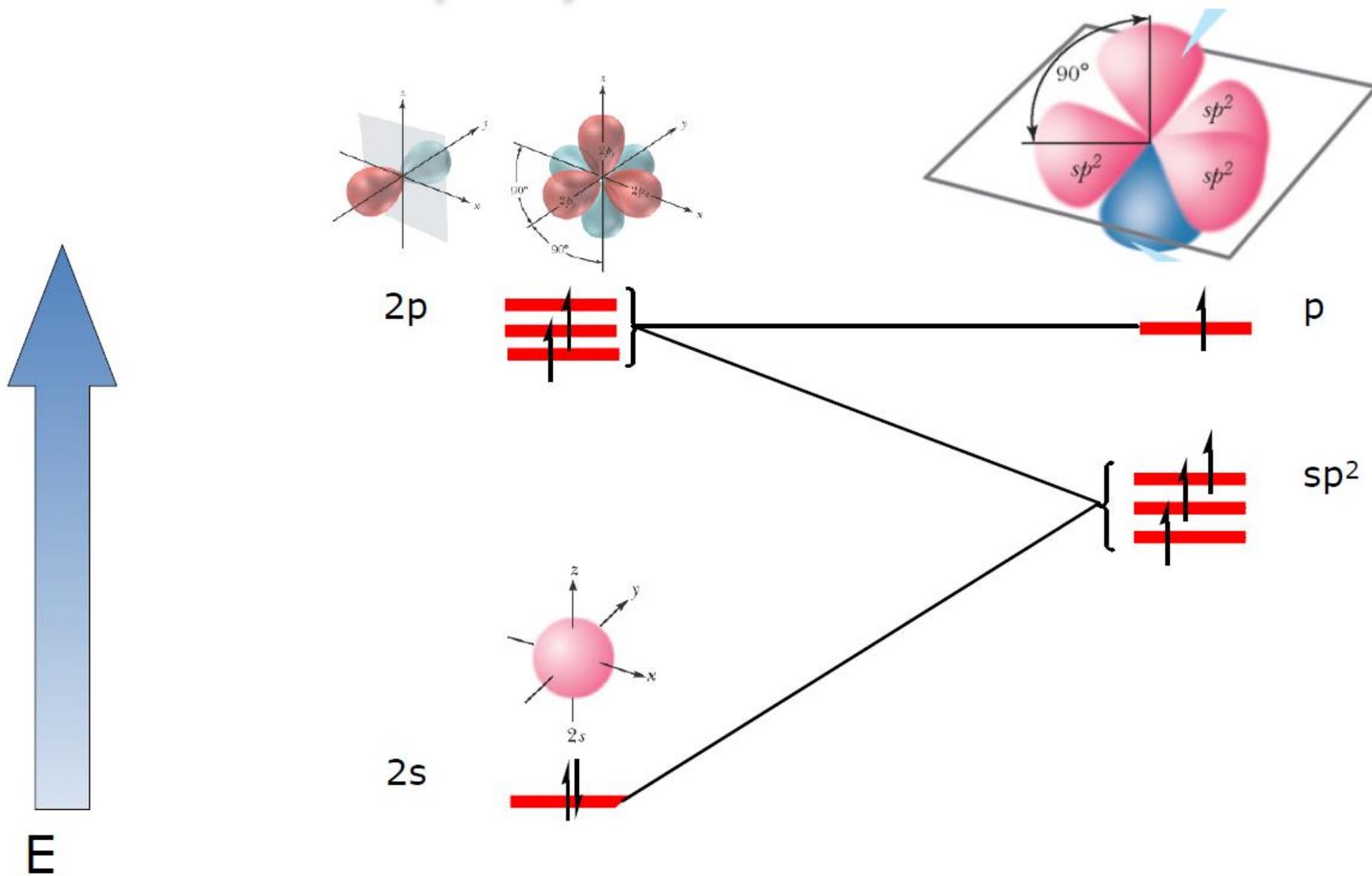


# 4 single bonds: $sp^3$ hybridization

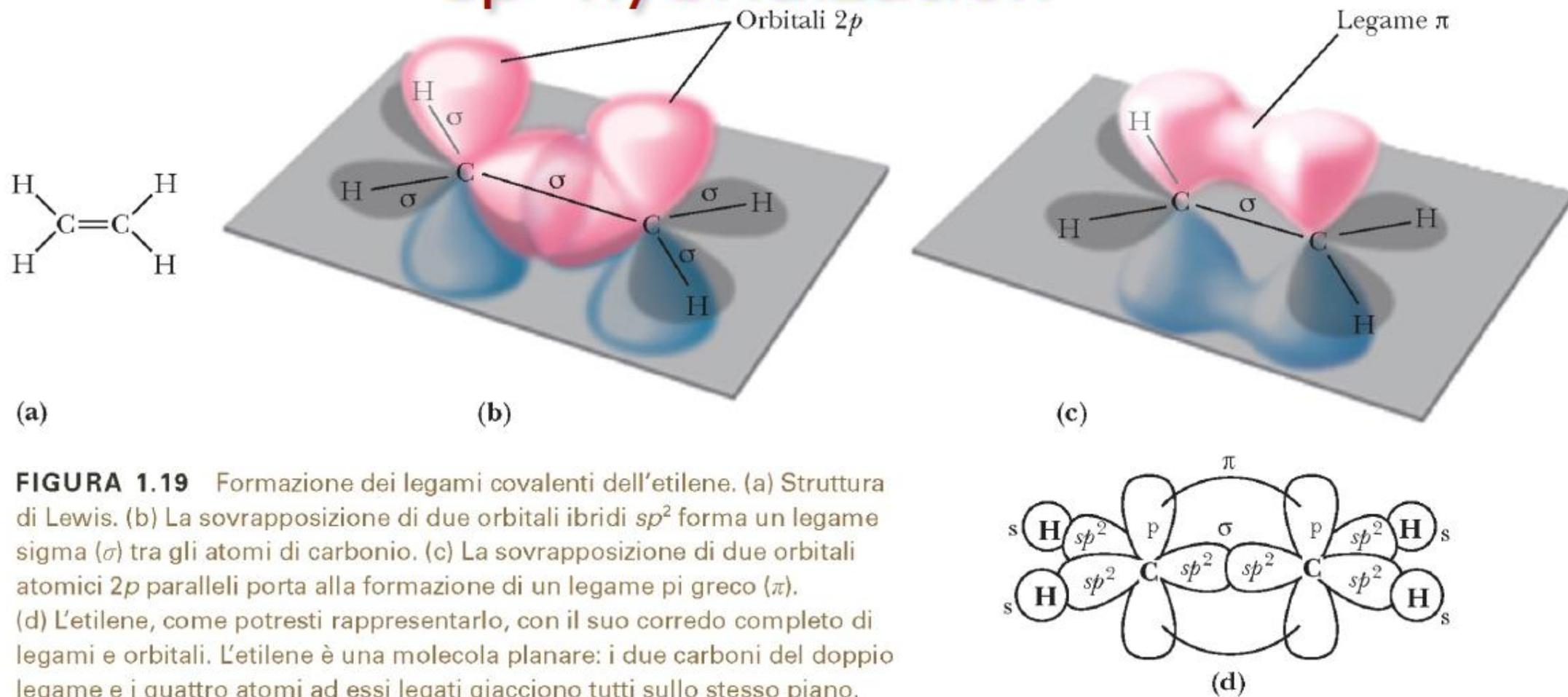


**FIGURA 1.17** Modelli di sovrapposizione degli orbitali del metano, dell'ammoniaca e dell'acqua.

# 1 double bond and 2 single bonds: $sp^2$ hybridization

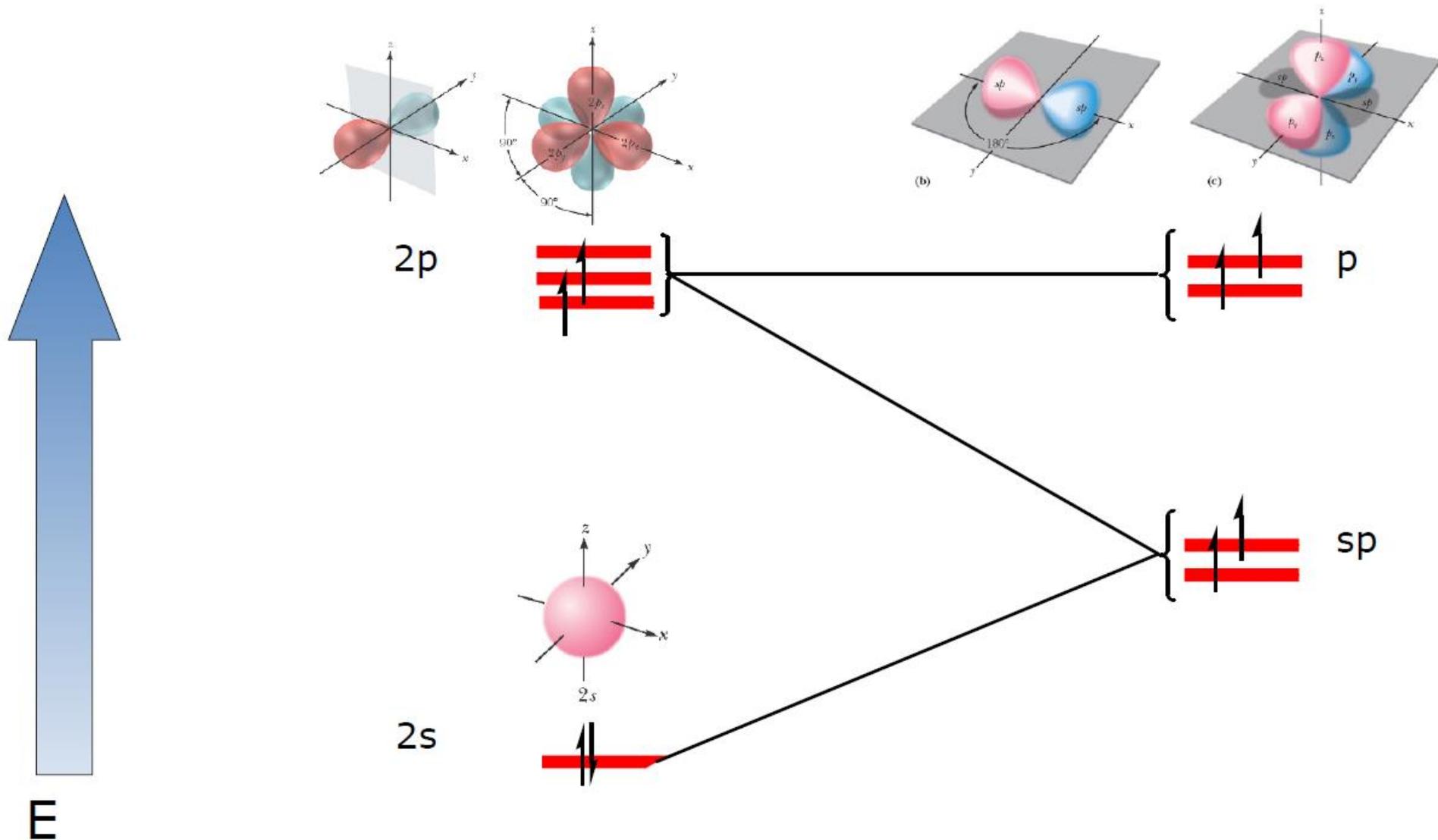


# 1 double bond and 2 single bonds: $sp^2$ hybridization

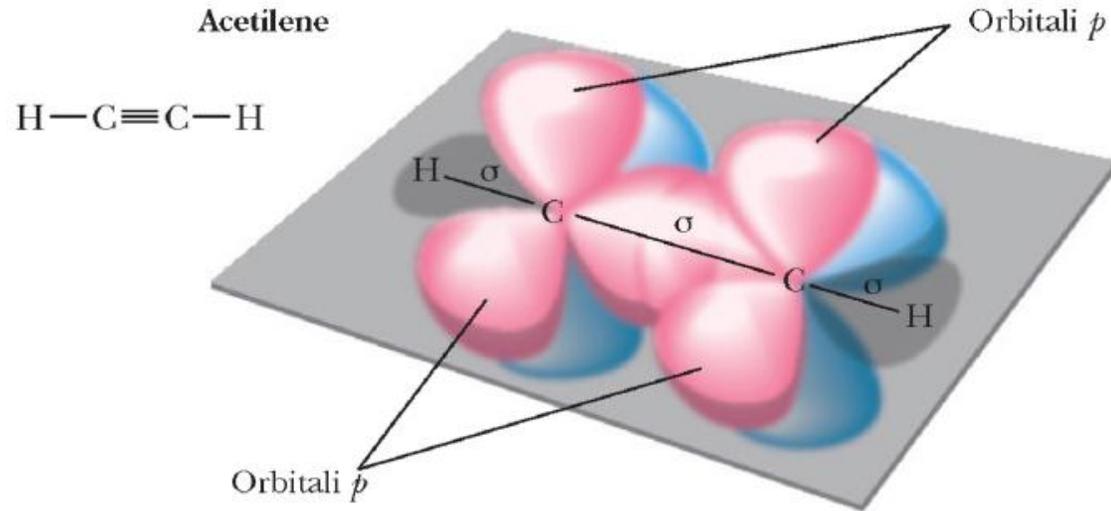


**FIGURA 1.19** Formazione dei legami covalenti dell'etilene. (a) Struttura di Lewis. (b) La sovrapposizione di due orbitali ibridi  $sp^2$  forma un legame sigma ( $\sigma$ ) tra gli atomi di carbonio. (c) La sovrapposizione di due orbitali atomici 2p paralleli porta alla formazione di un legame pi greco ( $\pi$ ). (d) L'etilene, come potresti rappresentarlo, con il suo corredo completo di legami e orbitali. L'etilene è una molecola planare: i due carboni del doppio legame e i quattro atomi ad essi legati giacciono tutti sullo stesso piano.

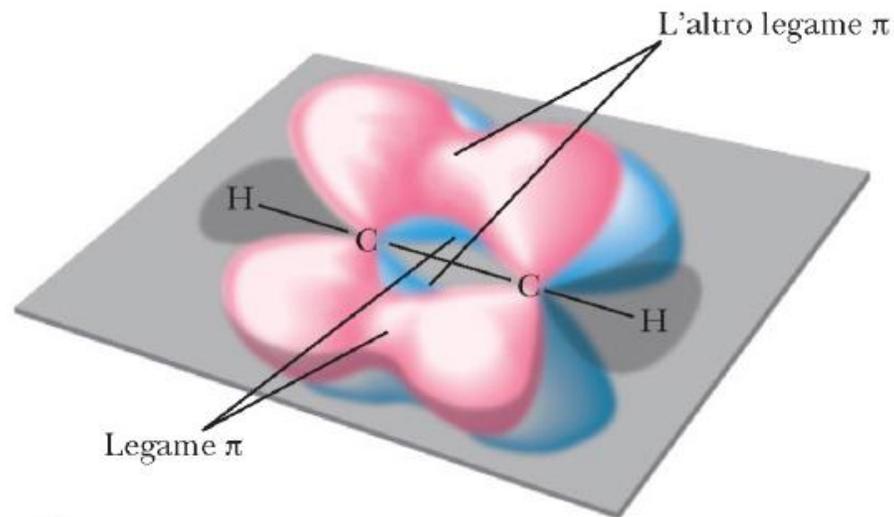
# 1 triple bond and 1 single bonds: sp hybridization



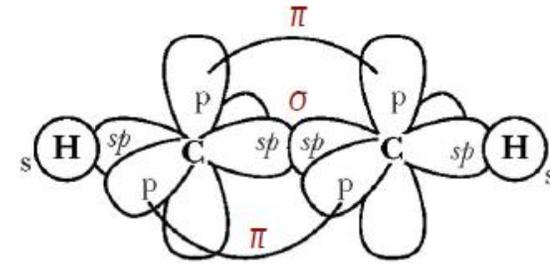
# 1 triple bond and 1 single bonds: sp hybridization



(a)



(b)



(c)

**FIGURA 1.22** Legami covalenti dell'acetilene. (a) Struttura dello scheletro dei legami sigma insieme ai due orbitali atomici  $2p$  non ancora sovrapposti. (b) Formazione di due legami  $\pi$  per sovrapposizione di due set di orbitali atomici  $2p$  paralleli. (c) L'acetilene, come potresti rappresentarla, con il suo corredo completo di legami e orbitali.

TABELLA 5.1 LUNGHEZZE DI LEGAME ED ENERGIE DI DISSOCIAZIONE DI LEGAME PER ETANO, ETILENE E ACETILENE

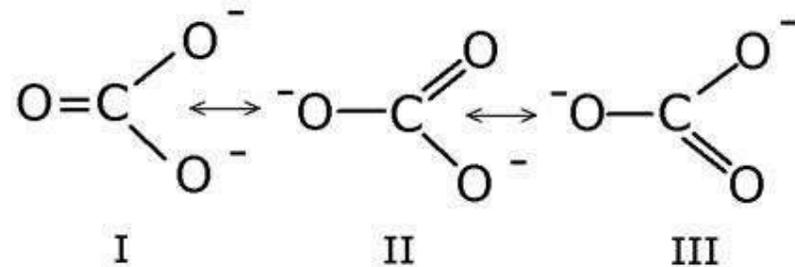
Molecola	Legame	Sovrapposizione degli orbitali di legame	Lunghezza dei legami (Å)	Forza del legame [kcal/mole(kJ/mole)]
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\   \quad   \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\   \quad   \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	C—C	$sp^3-sp^3$	1.54	90 (377)
	C—H	$sp^3-1s$	1.11	98 (410)
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \diagdown \quad / \\ \text{C}=\text{C} \\ / \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	C=C	$sp^2-sp^2, 2p-2p$	1.34	172 (720)
	C—H	$sp^2-1s$	1.10	104 (435)
$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	C—C	$sp-sp, \text{due } 2p-2p$	1.21	230 (962)
	C—H	$sp-1s$	1.08	125 (523)

La lunghezza del legame C-H è correlata alla percentuale di carattere s dell'orbitale ibrido che, per  $sp$  è il 50%, per  $sp^2$  il 33,3% , per  $sp^3$  il 25%.

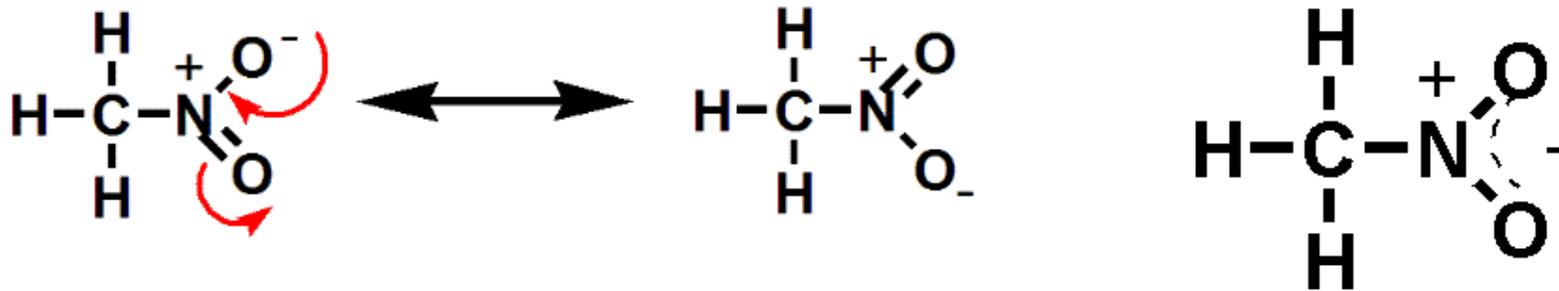
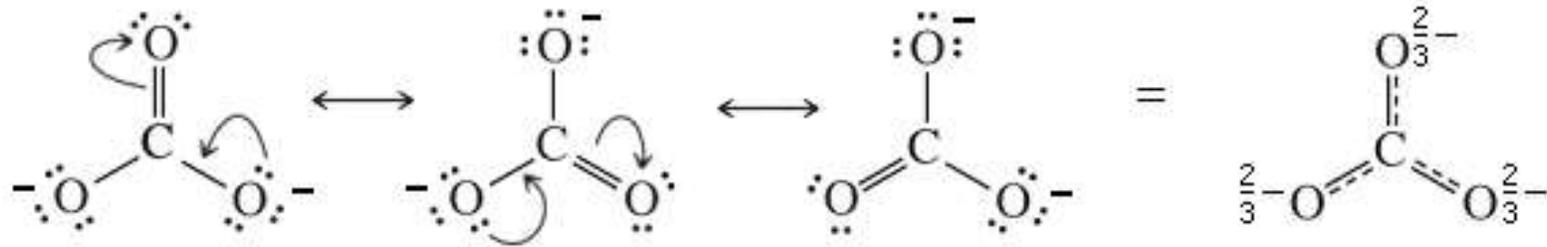
Tanto più corto è il legame tanto più forte è.

# Risonanza

- Alcune molecole non possono essere rappresentate da una singola struttura di Lewis. Ad es. ione carbonato  $\text{CO}_3^{2-}$ :



# Forme limite di risonanza e ibrido di risonanza



Il movimento di elettroni si rappresenta con una freccia ricurva.  
La risonanza si indica con una freccia a doppia punta.

# Risonanza

- Le strutture di risonanza (forme limite di risonanza) non sono reali
- Nessuna singola struttura di risonanza può adeguatamente rappresentare la reale struttura di una specie con elettroni delocalizzati
- Le strutture di risonanza differiscono solo per la distribuzione degli elettroni, non dei nuclei (non sono isomeri)
- Le strutture di risonanza non sono in equilibrio