

Chimica organica

Patrizia Nitti pnitti@units.it

Sara Drioli, 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

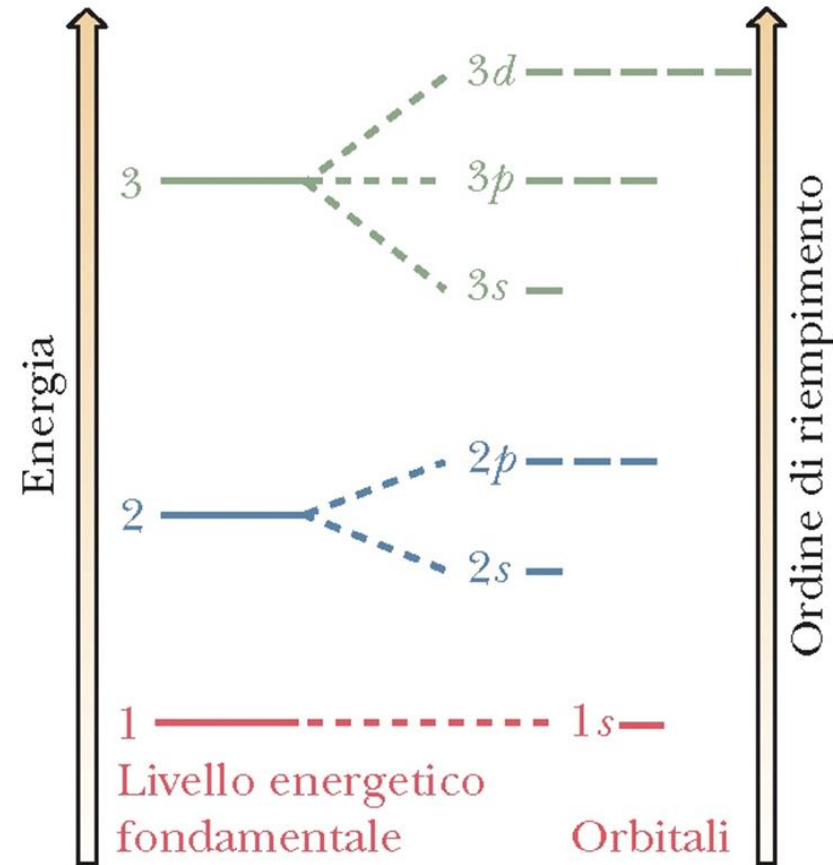
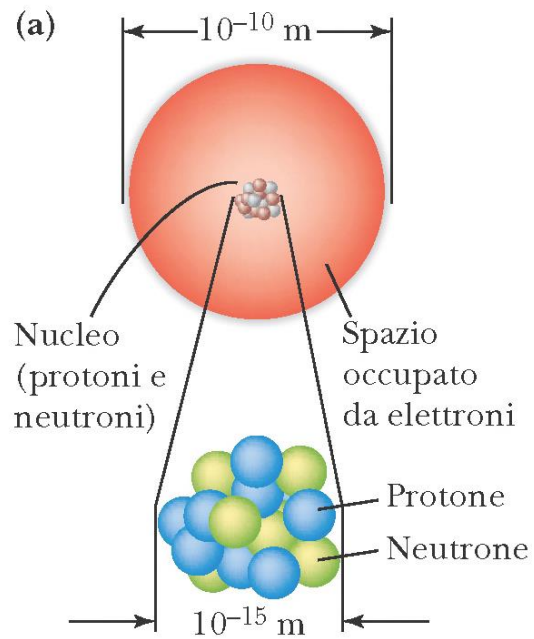
Introduzione alla chimica organica - W. H. Brown e T. Poon – EdiSES editore



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

1 1.00794
20.28
13.81
0.0899 †
H
1s
Hydrogen

IIA

3 6.941
1815
453.7
0.53
Li
1s²2s¹
Lithium

4 9.01218
3243
1560
1.85
Be
1s²2s²
Beryllium

11 22.98977
1156
371.0
0.97
Na
[Ne]3s¹
Sodium

12 24.305
1380
922
1.74
Mg
[Ne]3s²
Magnesium

IIIA

19 39.0983
1033
336.8
0.86
K
[Ar]4s¹
Potassium

20 40.078
1757
1112
1.55
Ca
[Ar]4s²
Calcium

IIIA

21 44.9559
3109
1814
2.99
Sc
[Ar]3d¹4s²
Scandium

IVA

22 47.87
2108
1935
4.54
Ti
[Ar]3d²4s²
Titanium

VA

23 50.9415
3560
1935
6.11
V
[Ar]3d³4s²
Vanadium

VIA

24 51.996
3603
1935
7.84
Cr
[Ar]3d⁵4s¹
Chromium

VIIA

25 54.9380
2235
1548
7.42
Mn
[Ar]3d⁵4s²
Manganese

VIIIA

26 55.845
3023
1768
8.90
Fe
[Ar]3d⁶4s²
Iron

VIIIA

27 58.9332
3143
1768
8.96
Co
[Ar]3d⁷4s²
Cobalt

IB

28 58.9332
3005
1726
8.90
Ni
[Ar]3d⁸4s²
Nickel

IB

29 63.546
3840
1956.6
7.13
Cu
[Ar]3d¹⁰4s¹
Copper

IIB

30 65.39
3907
302.9
5.32
Zn
[Ar]3d¹⁰4s²
Zinc

IIB

31 69.723
2478
309.9
5.32
Ga
[Ar]3d¹⁰4s²4p¹
Gallium

IIB

32 72.61
3107
1211.5
5.78
Ge
[Ar]3d¹⁰4s²4p²
Germanium

IIB

33 74.9216
2072
1090
5.78
As
[Ar]3d¹⁰4s²4p³
Arsenic

IIB

34 78.96
2089
494
5.78
Se
[Ar]3d¹⁰4s²4p⁴
Selenium

IIB

35 79.904
2089
265.9
3.12
Br
[Ar]3d¹⁰4s²4p⁵
Bromine

IIB

36 83.80
2089
116
3.75 †
Kr
[Ar]3d¹⁰4s²4p⁶
Krypton

37 85.4678
961
312.83
1.532
Rb
[Kr]5s¹
Rubidium

38 87.62
1655
1042
2.54
Sr
[Kr]5s²
Strontium

39 88.9059
3611
2128
4.47
Y
[Kr]4d¹5s²
Yttrium

40 91.224
4682
2128
6.51
Zr
[Kr]4d²5s²
Zirconium

41 92.9064
5015
2742
8.57
Nb
[Kr]4d⁴5s¹
Niobium

42 95.94
4912
2696
10.22
Mo
[Kr]4d⁵5s¹
Molybdenum

43 (98)
4538
2477
11.5
Tc
[Kr]4d⁵5s²
Technetium

44 101.07
4425
2610
12.37
Ru
[Kr]4d⁷5s¹
Ruthenium

45 102.9055
3970
2236
12.41
Rh
[Kr]4d⁸5s¹
Rhodium

46 106.42
3240
1825
12.0
Pd
[Kr]4d¹⁰
Palladium

47 107.868
2436
1235.06
10.50
Ag
[Kr]4d¹⁰5s¹
Silver

48 112.41
1040
594.26
8.65
Cd
[Kr]4d¹⁰5s²
Cadmium

49 114.82
2350
429.7
7.31
In
[Kr]4d¹⁰5s²5p¹
Indium

50 118.710
2876
505.12
7.31
Sn
[Kr]4d¹⁰5s²5p²
Tin

51 121.760
1860
903.91
6.69
Sb
[Kr]4d¹⁰5s²5p³
Antimony

52 127.60
1261
722.72
6.24
Te
[Kr]4d¹⁰5s²5p⁴
Tellurium

53 126.9045
1661
497.5
4.93
I
[Kr]4d¹⁰5s²5p⁵
Iodine

54 131.29
1681
386.7
5.90 †
Xe
[Kr]4d¹⁰5s²5p⁶
Xenon

55 132.9054
844
301.54
1.87
Cs
[Xe]6s¹
Cesium

56 137.33
2078
1092
3.59
Ba
[Xe]6s²
Barium

57 138.9055
3737
1191
6.15
La
[Xe]5d¹6s²
Lanthanum

72 178.49
4875
2504
13.31
Hf
[Xe]4f¹⁴5d²6s²
Hafnium

73 180.9479
5730
3293
16.65
Ta
[Xe]4f¹⁴5d³6s²
Tantalum

74 183.84
5825
3693
16.65
W
[Xe]4f¹⁴5d⁴6s²
Tungsten

75 186.207
5870
3455
22.6
Re
[Xe]4f¹⁴5d⁵6s²
Rhenium

76 190.23
5300
2720
22.6
Os
[Xe]4f¹⁴5d⁶6s²
Osmium

77 192.22
4700
2042.1
21.45
Ir
[Xe]4f¹⁴5d⁷6s²
Iridium

78 195.08
4100
2341.3
19.3
Pt
[Xe]4f¹⁴5d⁹6s¹
Platinum

79 196.9665
3130
2341.3
13.55
Au
[Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s¹
Gold

80 200.59
629.8
254.31
11.85
Hg
[Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²
Mercury

81 204.383
1746
577
11.35
Tl
[Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p¹
Thallium

82 207.2
2025
600.65
11.35
Pb
[Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p²
Lead

83 208.9804
1937
544.59
9.75
Bi
[Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p³
Bismuth

84 (209)
1837
544.59
4.2
Po
[Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p⁴
Polonium

85 (210)
610 †
527
9.75
At
[Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p⁵
Astatine

86 (222)
211.4
202
9.73
Rn
[Xe]4f¹⁴5d¹⁰6s²6p⁶
Radon

87 (223)
950
300
—
Fr
[Rn]7s¹
Francium

88 (226)
1413
973
5.0
Ra
[Rn]7s²
Radium

89 (227)
3470 †
1324
10.07
Ac
[Rn]6d¹7s²
Actinium

104 (261)
—
—
—
Rf
[Rn]5f¹⁴6d²7s²
(Rutherfordium)

105 (262)
—
—
—
Db
[Rn]5f¹⁴6d³7s²
(Dubnium)

106 (263)
—
—
—
Sg
[Rn]5f¹⁴6d⁴7s²
(Seaborgium)

107 (262)
—
—
—
Bh
[Rn]5f¹⁴6d⁵7s²
(Bohrium)

108 (265)
—
—
—
Hs
[Rn]5f¹⁴6d⁶7s²
(Hassium)

109 (266)
—
—
—
Mt
[Rn]5f¹⁴6d⁷7s²
(Meitnerium)

110 (269)
—
—
—
Uun
[Rn]5f¹⁴6d⁸7s¹
(Ununnilium)

111 (272)
—
—
—
Uuu
[Rn]5f¹⁴6d⁹7s¹
(Unununium)

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.

Estimated Values

KEY

ATOMIC NUMBER

ATOMIC WEIGHT (2)

OXIDATION STATES (Bold most stable)

SYMBOL

ELECTRON CONFIGURATION

NAME

DENSITY at 300 K (3) (g/cm³)

BOILING POINT, K

MELTING POINT, K

Example: **30** 65.39
1180 692.73
7.13
[Ar]3d¹⁰4s¹
Zn
Zinc

58 140.12 3715 1071 6.77 Ce [Xe]4f ¹ 5d ¹ 6s ² Cerium	59 140.9077 3773 1204 7.01 Pr [Xe]4f ³ 6s ² Praseodymium	60 144.24 3347 1294 7.01 Nd [Xe]4f ⁴ 6s ² Neodymium	61 (145) 3273 1315 7.22 Pm [Xe]4f ⁵ 6s ² Promethium	62 150.36 1800 1095 7.52 Sm [Xe]4f ⁶ 6s ² Samarium	63 151.964 3245 1585 8.23 Eu [Xe]4f ⁷ 6s ² Europium	64 157.25 3500 1629 8.23 Gd [Xe]4f ⁷ 5d ¹ 6s ² Gadolinium	65 158.9253 3240 1629 8.23 Tb [Xe]4f ⁹ 6s ² Terbium	66 162.50 2840 1685 9.07 Dy [Xe]4f ¹⁰ 6s ² Dysprosium	67 164.9303 2968 1747 9.07 Ho [Xe]4f ¹¹ 6s ² Holmium	68 167.26 3140 1802 9.32 Er [Xe]4f ¹² 6s ² Erbium	69 168.9342 2223 1818 9.32 Tm [Xe]4f ¹³ 6s ² Thulium	70 173.04 1469 1092 6.97 Yb [Xe]4f ¹⁴ 6s ² Ytterbium	71 174.967 3268 1936 9.84 Lu [Xe]4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ² Lutetium
90 232.0381 5060 7038 11.72 Th [Rn]6d ² 7s ² Thorium	91 232.0359 4300 † 1845 15.4 Pa [Rn]5f ² 6d ¹ 7s ² Protactinium	92 238.029 4407 † 1845 18.95 U [Rn]5f ³ 6d ¹ 7s ² Uranium	93 (237) 4175 † 1912 20.2 Np [Rn]5f ⁴ 6d ¹ 7s ² Neptunium	94 (244) 2880 1408 19.84 Pu [Rn]5f ⁶ 7s ² Plutonium	95 (243) 2449 137 13.7 Am [Rn]5f ⁷ 7s ² Americium	96 (247) 1620 13.5 13.5 Cm [Rn]5f ⁸ 7s ² Curium	97 (247) 1170 † 14 14 Bk [Rn]5f ⁹ 7s ² Berkelium	98 (251) 237 1130 † 11.30 † Cf [Rn]5f ¹⁰ 7s ² Californium	99 (252) 287 1130 † 11.30 † Es [Rn]5f ¹¹ 7s ² Einsteinium	100 (257) 287 1130 † 11.30 † Fm [Rn]5f ¹² 7s ² Fermium	101 (258) 287 1130 † 11.30 † Md [Rn]5f ¹³ 7s ² Mendelevium	102 (259) 287 1130 † 11.30 † No [Rn]5f ¹⁴ 7s ² Nobelium	103 (262) 287 1130 † 11.30 † Lr [Rn]5f ¹⁴ 6d ¹ 7p ¹ Lawrencium

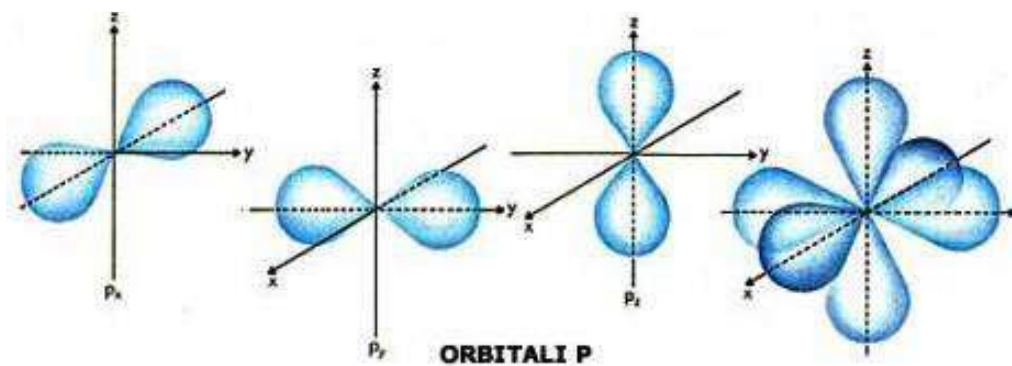
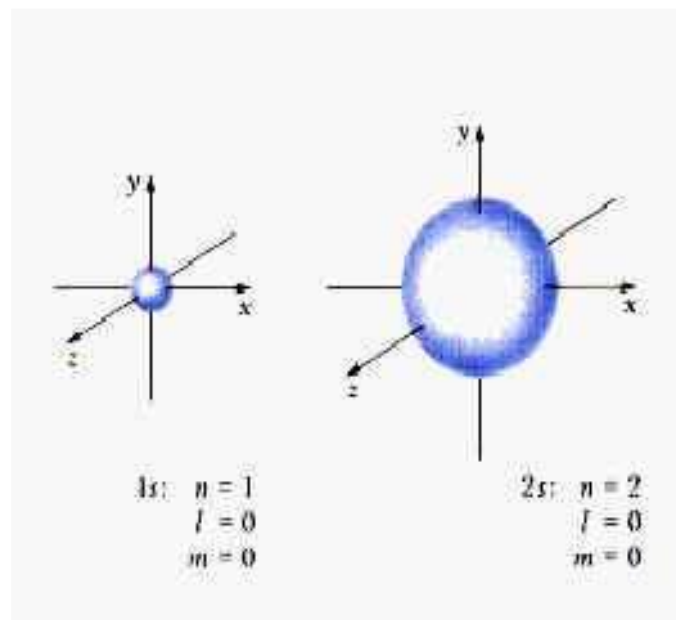
NOTES:
(1) Black — solid.
(2) Based upon carbon-12. () indicates most stable or best known isotope.
(3) Entries marked with daggers refer to the gaseous state at 273 K and 1 atm and are estimated values.

REDMI NOTE 8T
AI QUAD CAMERA
Side 1

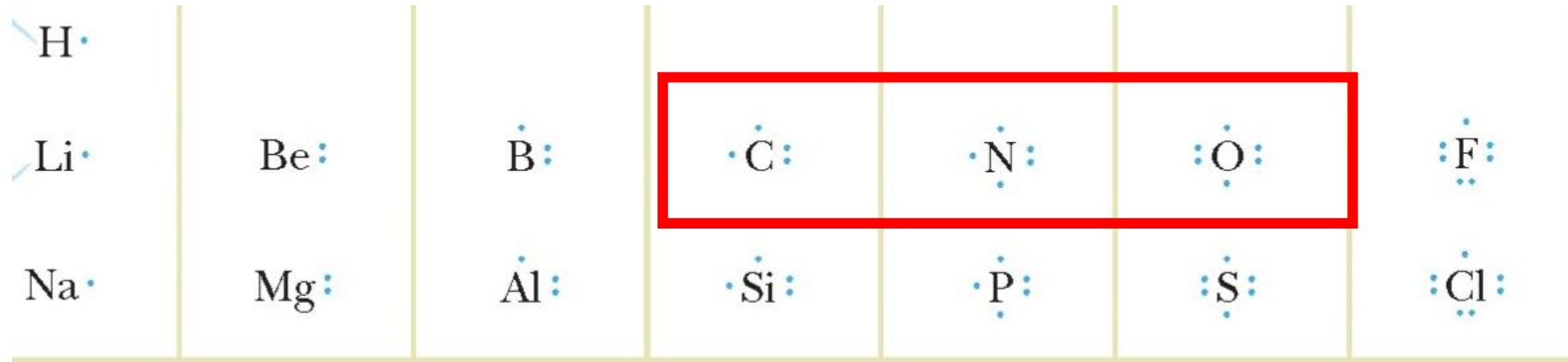
Configurazione elettronica fondamentale

	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)

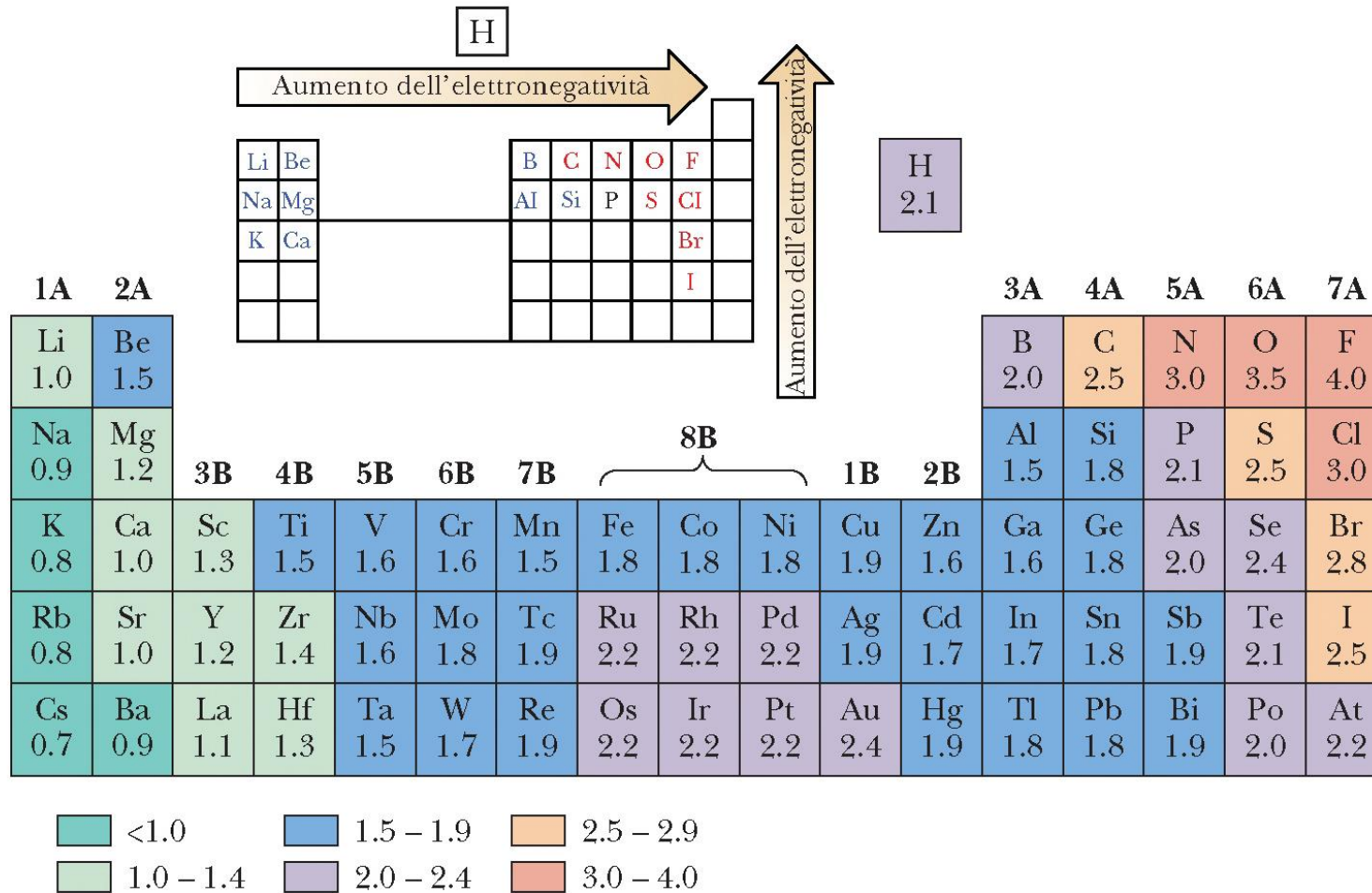


TABELLA 1.5 Classificazione dei legami chimici

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⁺ (10 elettroni) $1s^2 2s^2 2p^6$

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

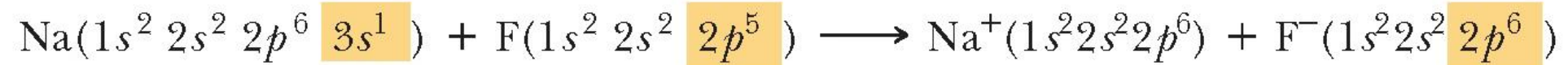
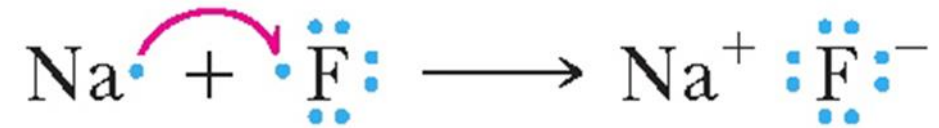
Elettronegatività del sodio = 0.9

Elettronegatività del cloro = 3.0

Differenza di elettronegatività tra i due atomi = 2.1

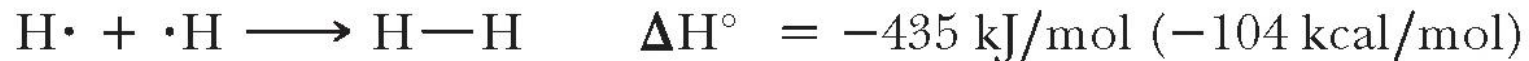
Legame ionico

Legame ionico



Legame covalente

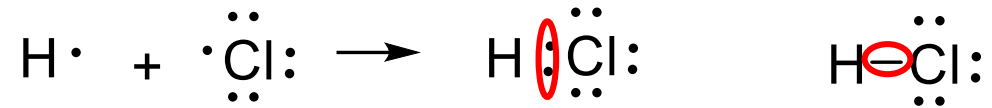
- Secondo il modello di Lewis una coppia di elettroni di un legame covalente:
 - È condivisa tra i due atomi
 - Completa il guscio di valenza di ciascun atomo



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

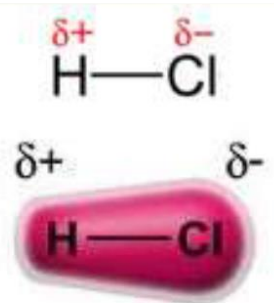
Legame covalente polare

Il cloro possiede:

tre **coppie di non legame** dette

anche: **doppietti non condivisi**

lone pair

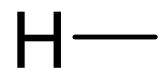


Esercizi

- H_2O acqua
- CH_4 metano
- NH_3 ammoniaca
- C_2H_4 etilene
- C_2H_2 acetilene
- CH_2O formaldeide
- H_2CO_3 acido carbonico

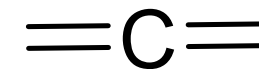
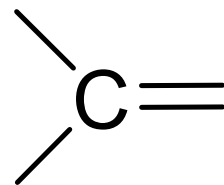
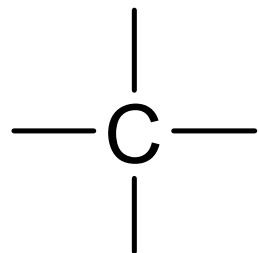
Numero di legami covalenti degli atomi in molecole organiche neutre

idrogeno



1 legame

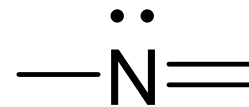
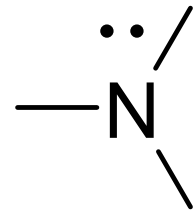
carbonio



4 legami

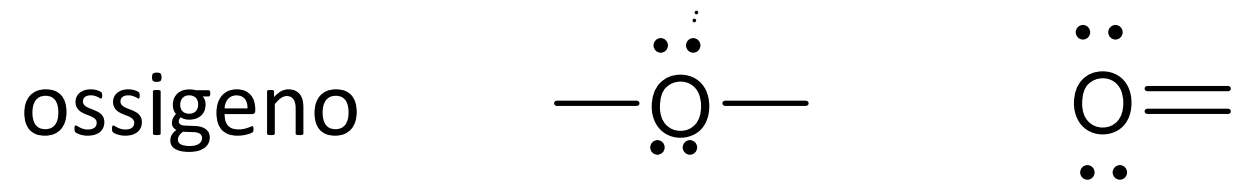
Numero di legami covalenti degli atomi in molecole organiche neutre

azoto



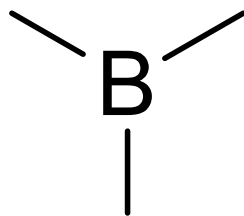
3 legami e un doppietto non condiviso

Numero di legami covalenti degli atomi in molecole organiche neutre

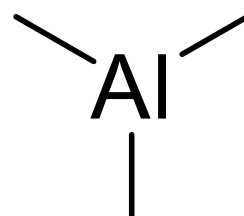


2 legami e due doppietti non condivisi

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

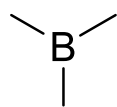
idrogeno H— 1 legame

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

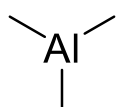
azoto $\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \diagup \\ -\text{N} \\ \diagdown \end{array}$ $-\ddot{\text{N}}=$ $\ddot{\text{N}}\equiv$ 3 legami e un doppietto non condiviso

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

alogeni $\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ \diagup \\ :\text{X}- \\ \diagdown \end{array}$ 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
- H₂O
- H₃O
- H₂CO₃
- HCO₃
- NH₃
- NH₄
- CH₃NH₂
- CH₃NH₃
- HNO₃

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

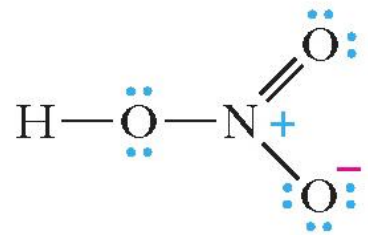
[legami] = n. di trattini che partono dall'atomo considerato

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

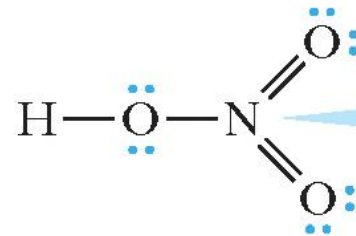


Acido nitrico

Acido nitrico HNO_3



Struttura di Lewis
accettabile

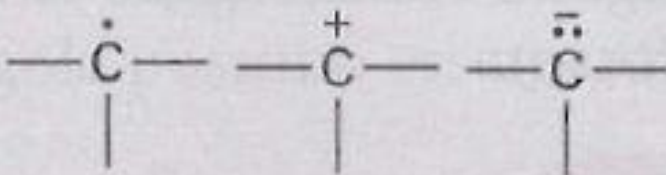
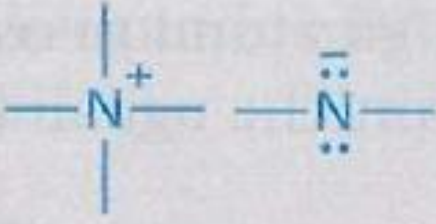
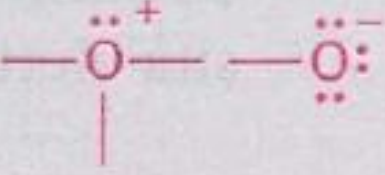


Struttura di Lewis
non accettabile

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

Bond	Bond Length (Å)	Bond	Bond Length (Å)
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

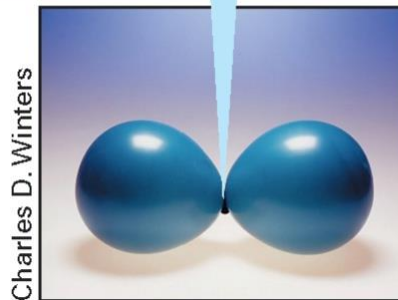
Valence Shell Electron Pair Repulsion

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

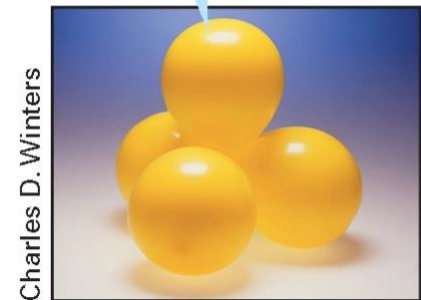
FIGURA 1.5 Modelli a palloncino utilizzati per predire gli angoli di legame. (a) Due palloncini assumono una forma lineare con un angolo di legame di 180° intorno al punto di legame. (b) Tre palloncini assumono una forma trigonale planare con angoli di legame di 120° . (c) Quattro palloncini assumono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



(a) Lineare



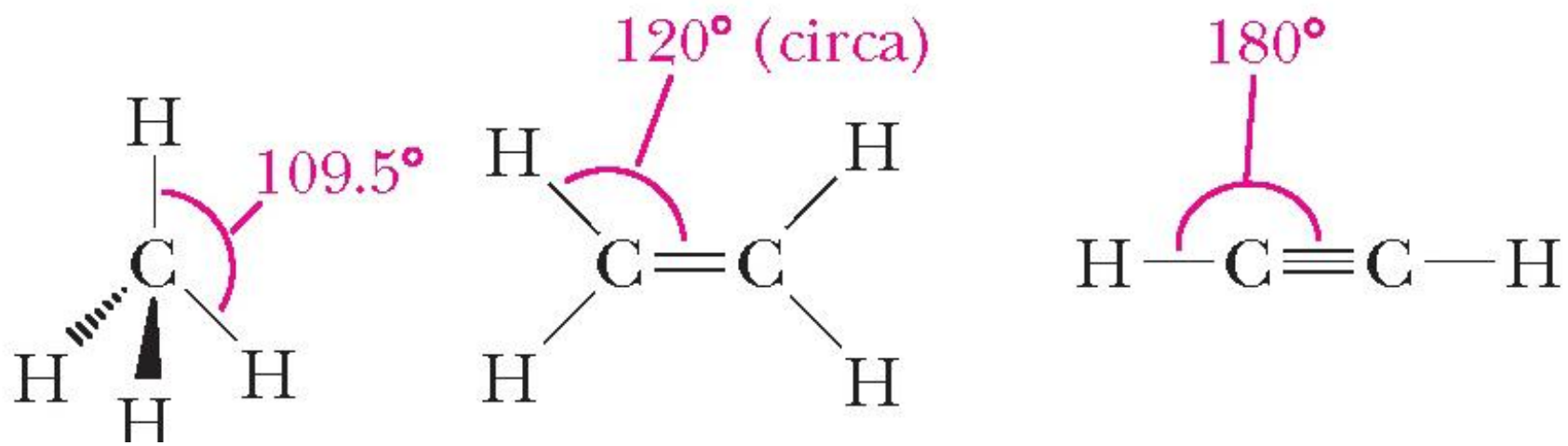
(b) Trigonale planare



(c) Tetraedro

Esempi

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



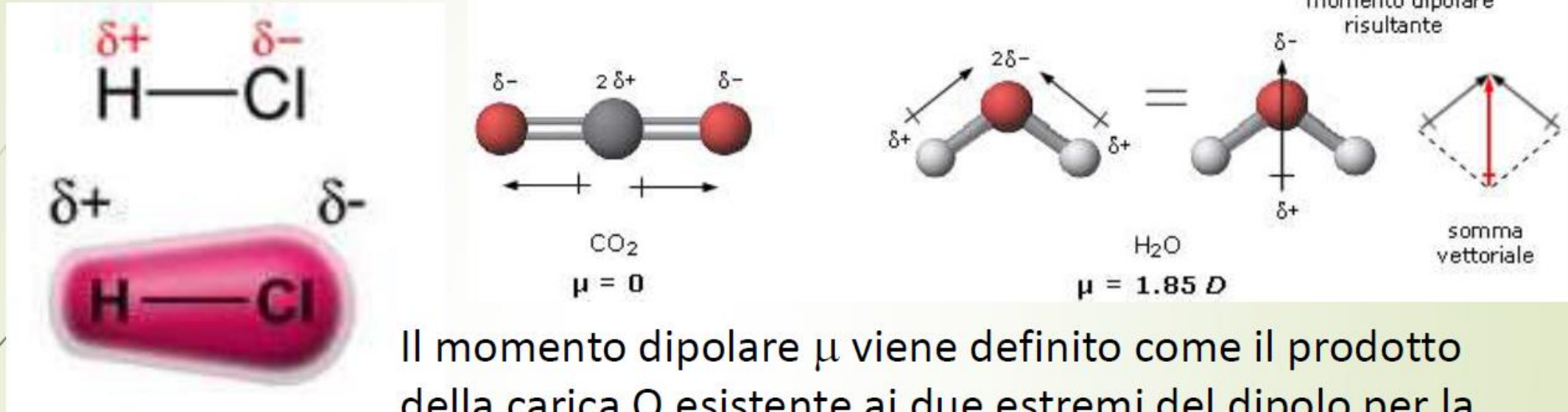
Perché è importante conoscere la forma di una molecola?

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.



$$\mu = Q \cdot r$$

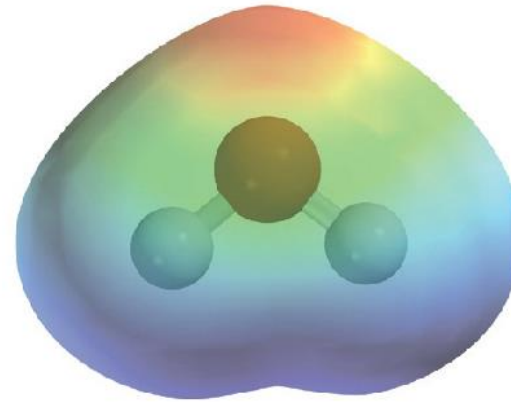
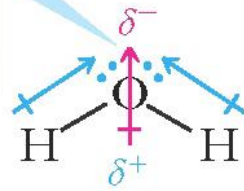
Il momento dipolare μ viene definito come il prodotto della carica Q esistente ai due estremi del dipolo per la distanza r tra le cariche.

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.

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

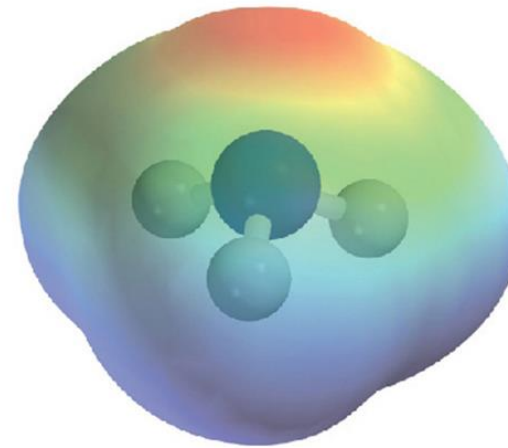
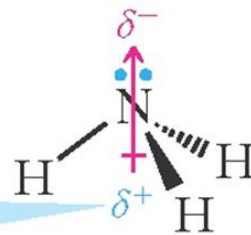
Si mette quel segno + per indicare che il vettore è nella direzione contraria a quella convenzionale.

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



Acqua
(una molecola polare)

il centro della parziale carica positiva (δ^+) 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

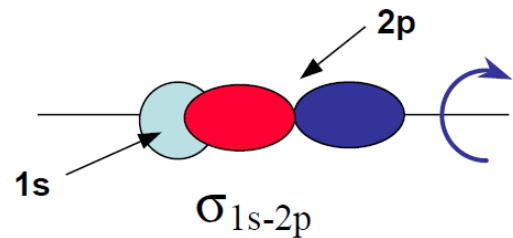
STRUTTURA  **REATTIVITA'**

Legame covalente secondo il modello del legame di valenza

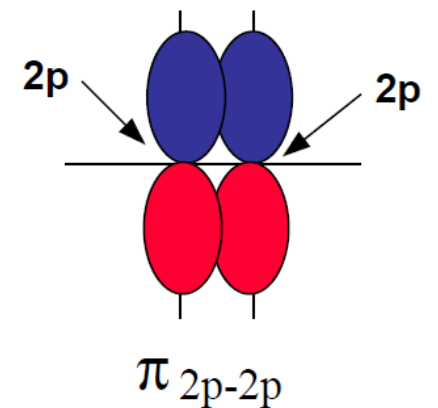
- I legami si formano per sovrapposizione degli orbitali atomici
- Gli elettroni sono localizzati e condivisi
- Maggiore è la sovrapposizione, più forte è il legame
- Legame sigma (σ) deriva dalla sovrapposizione di orbitali atomici che ha luogo lungo l'asse che unisce i due nuclei
- Legame pi greco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

Legame covalente secondo il modello del legame di valenza

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

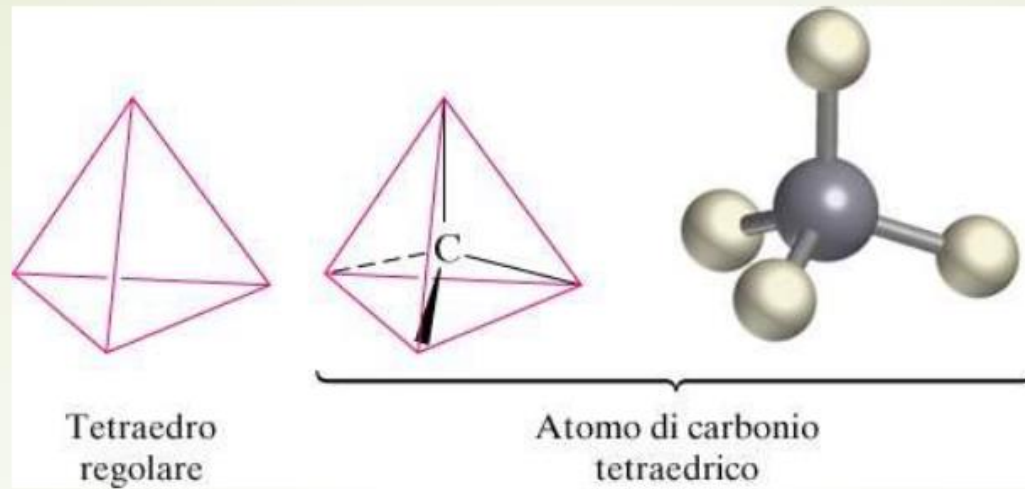


- Legame pi greco (π) deriva dalla sovrapposizione di 2 orbitali p paralleli fra loro e perpendicolari al legame σ



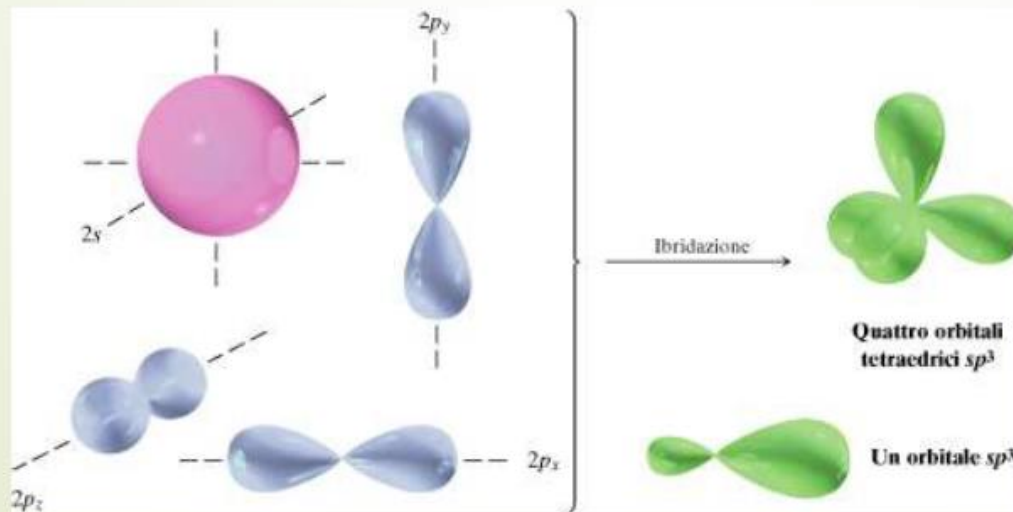
Teoria degli Orbitali ibridi

- 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



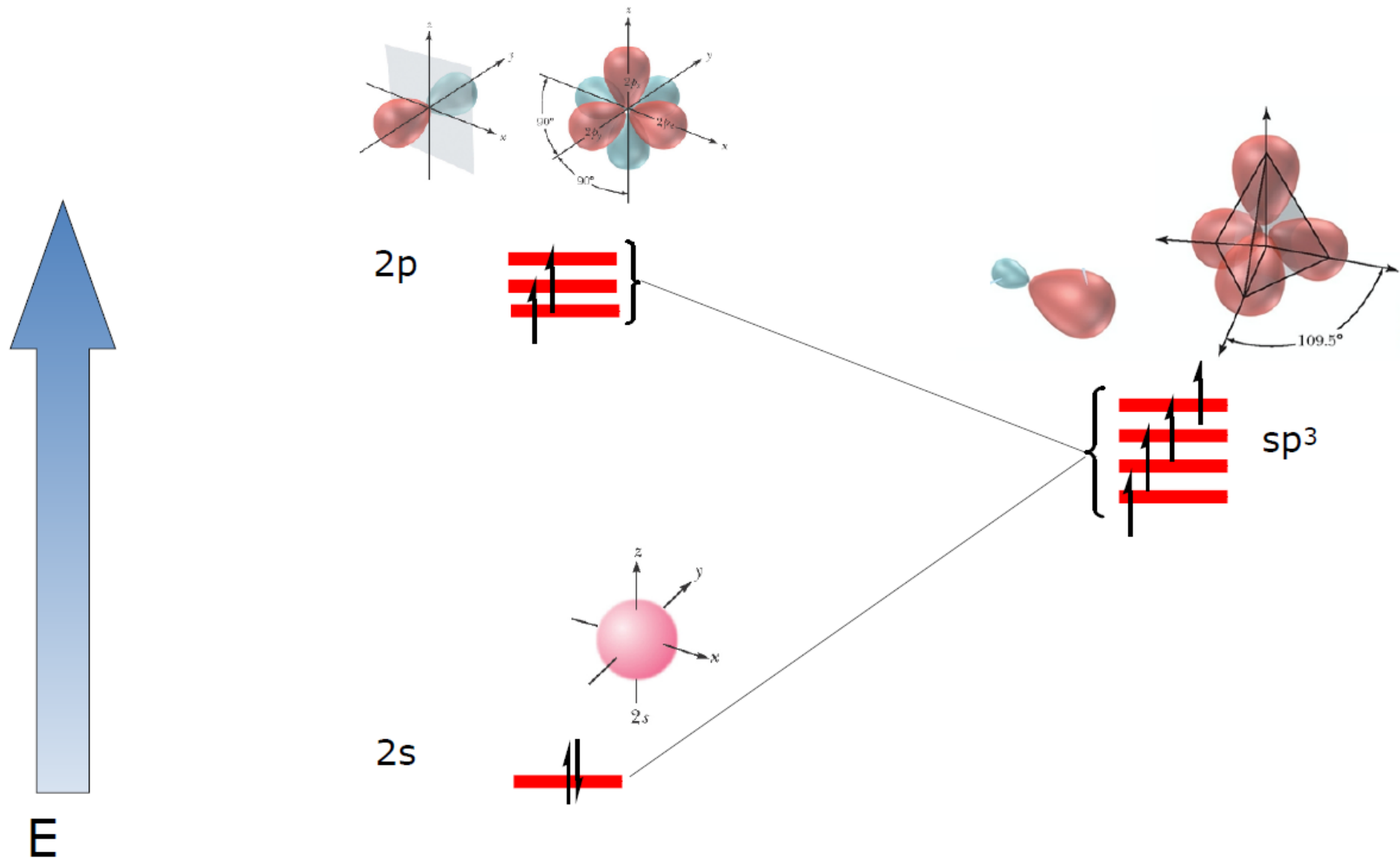
CH₄
metano

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



sp³ angoli di 109,5°

4 single bonds: sp^3 hybridization



4 single bonds: sp^3 hybridization

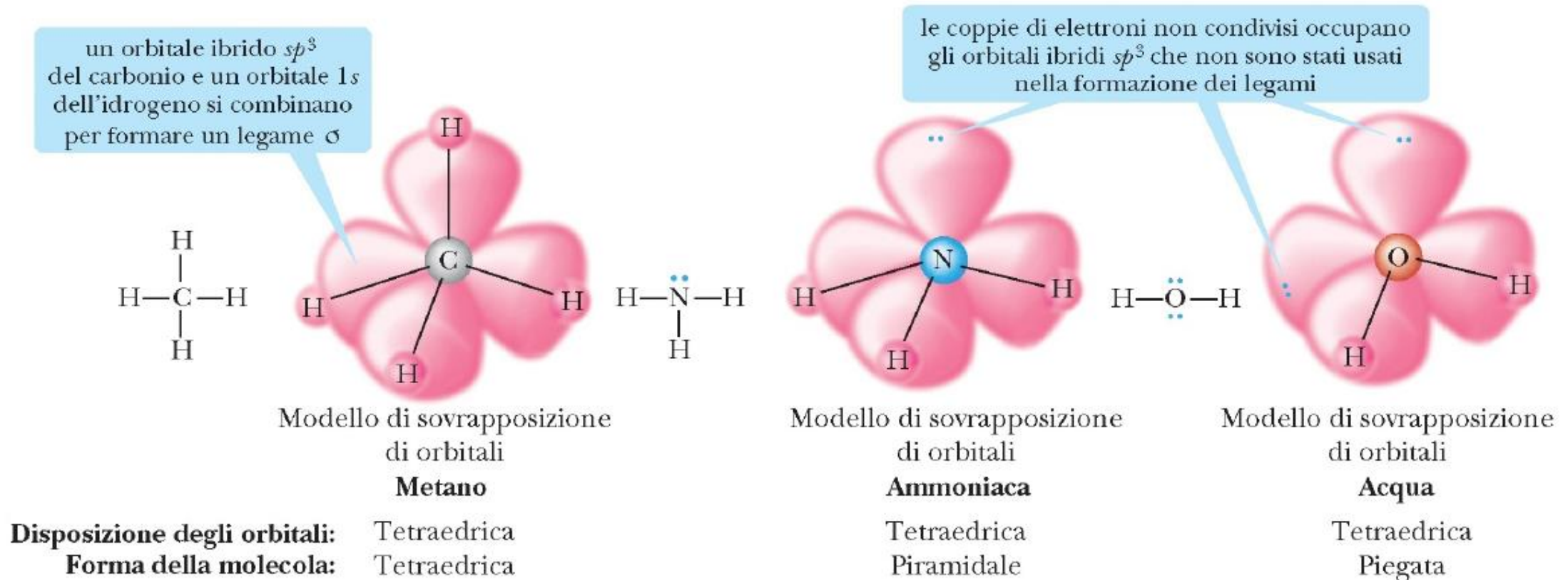
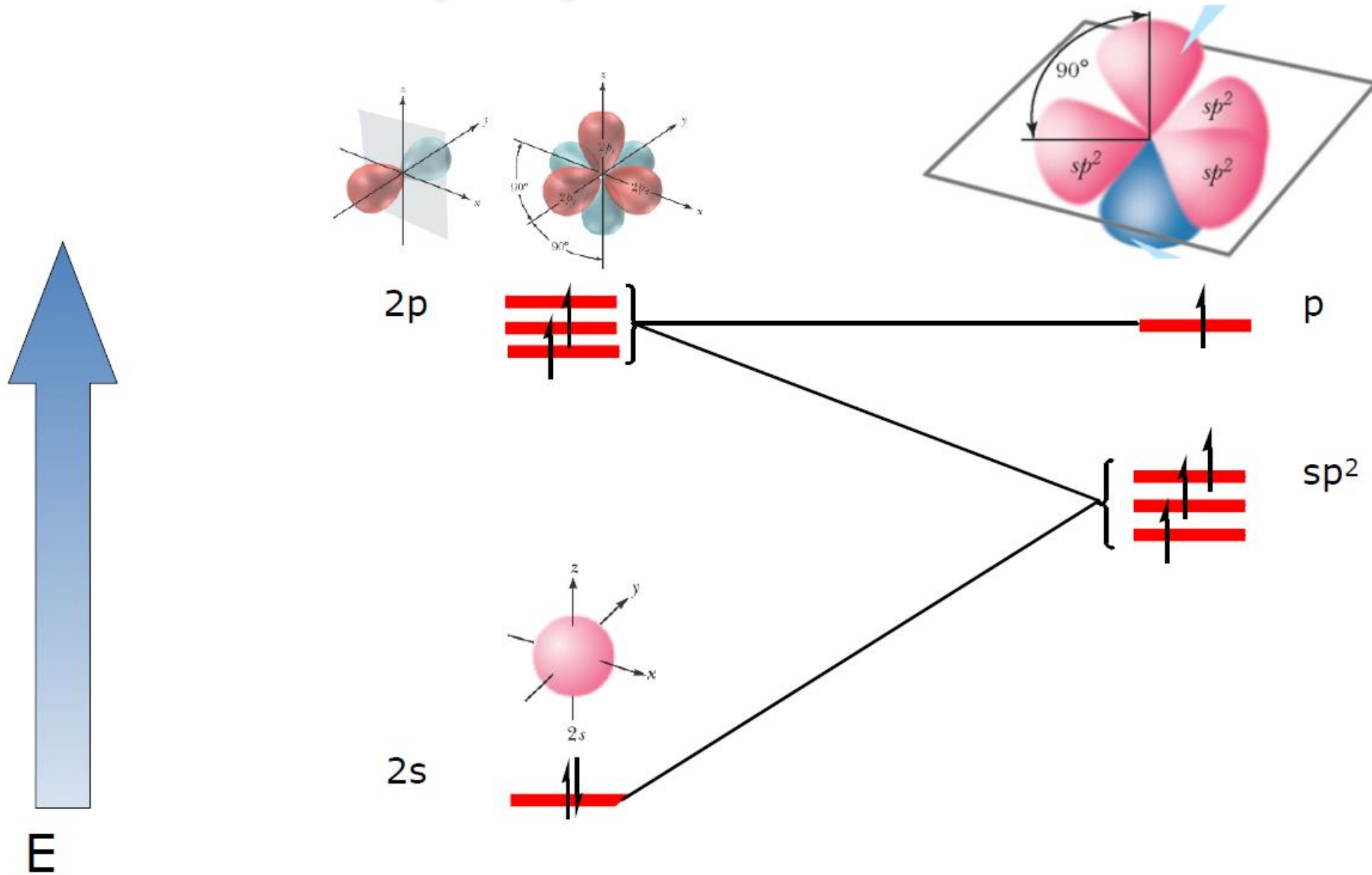


FIGURA 1.17 Modelli di sovrapposizione degli orbitali del metano, dell'ammoniaca e dell'acqua.

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



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

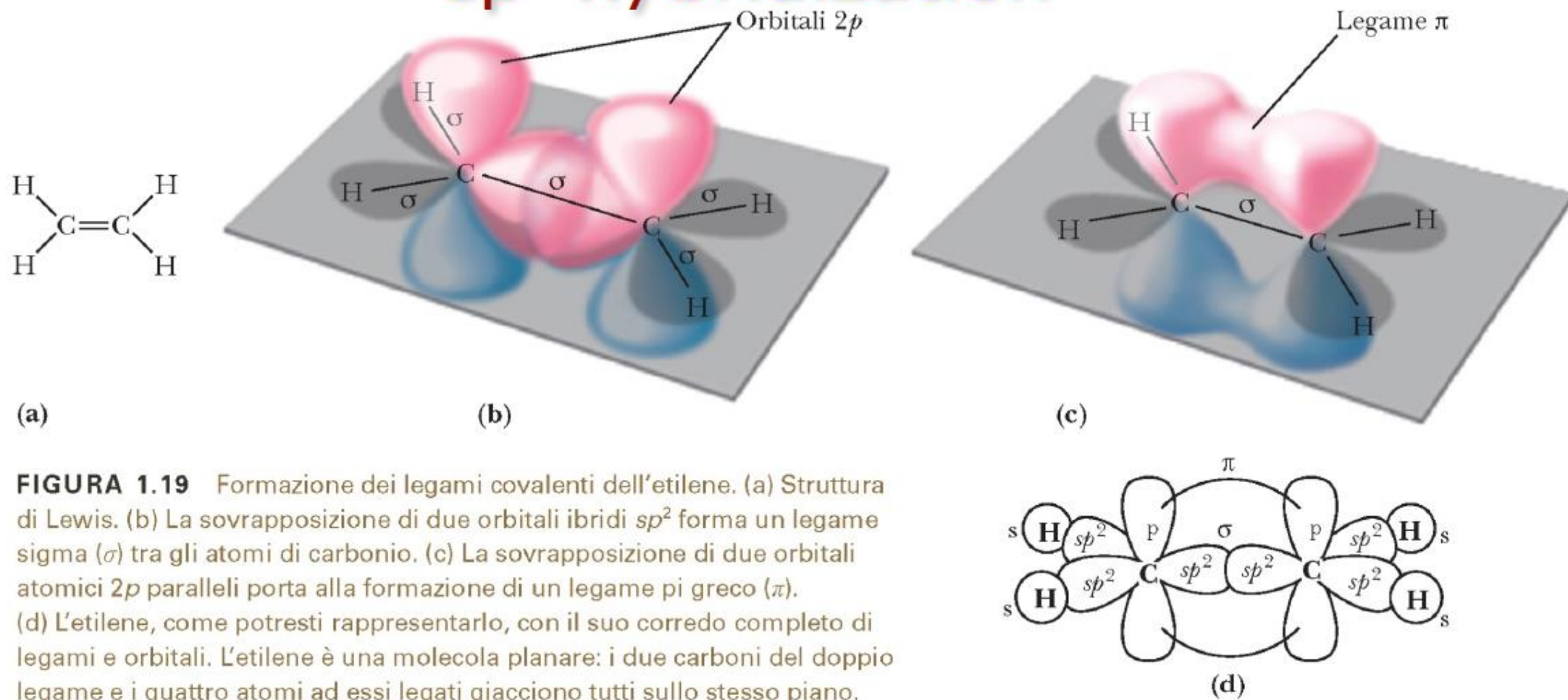
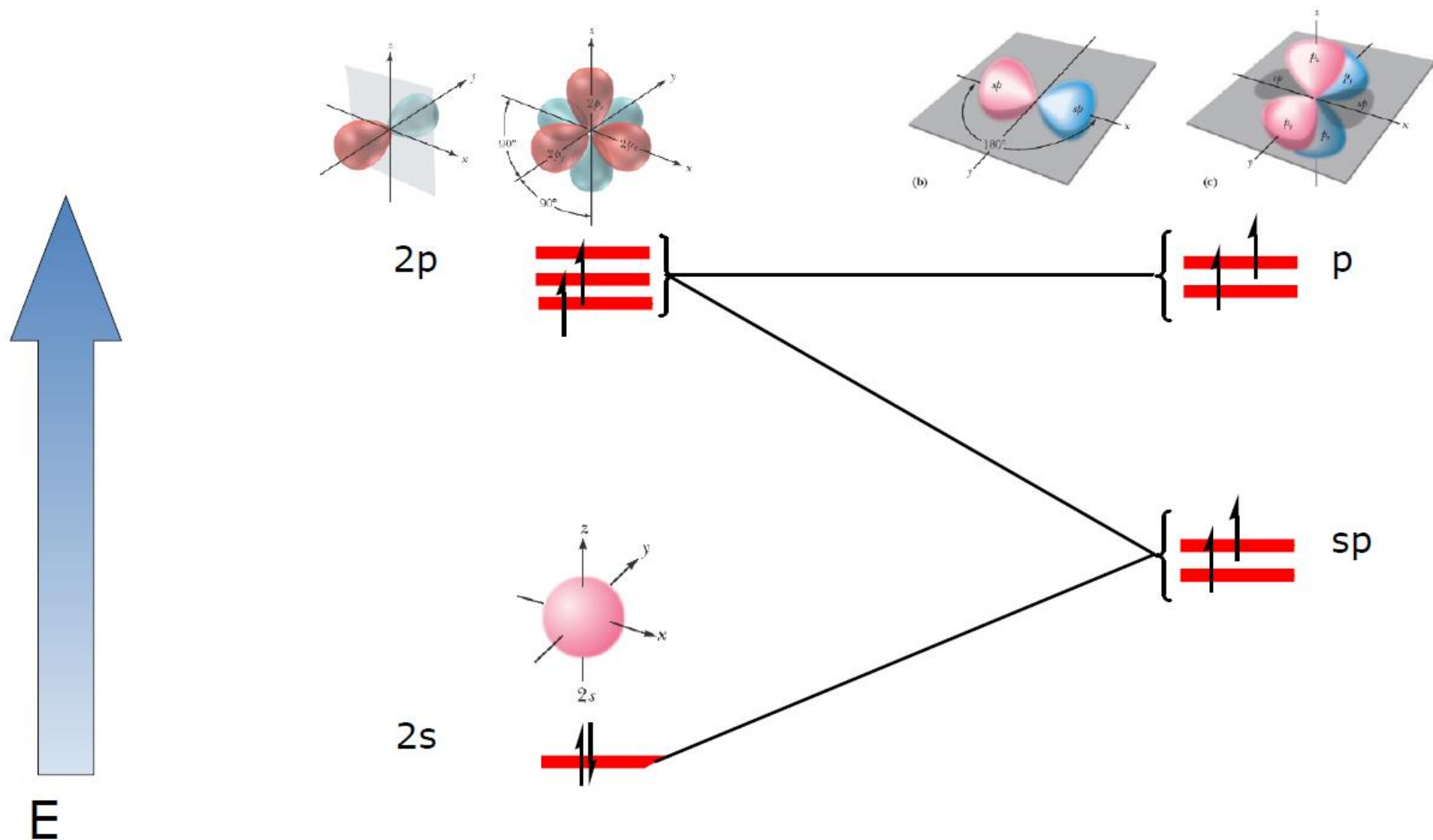
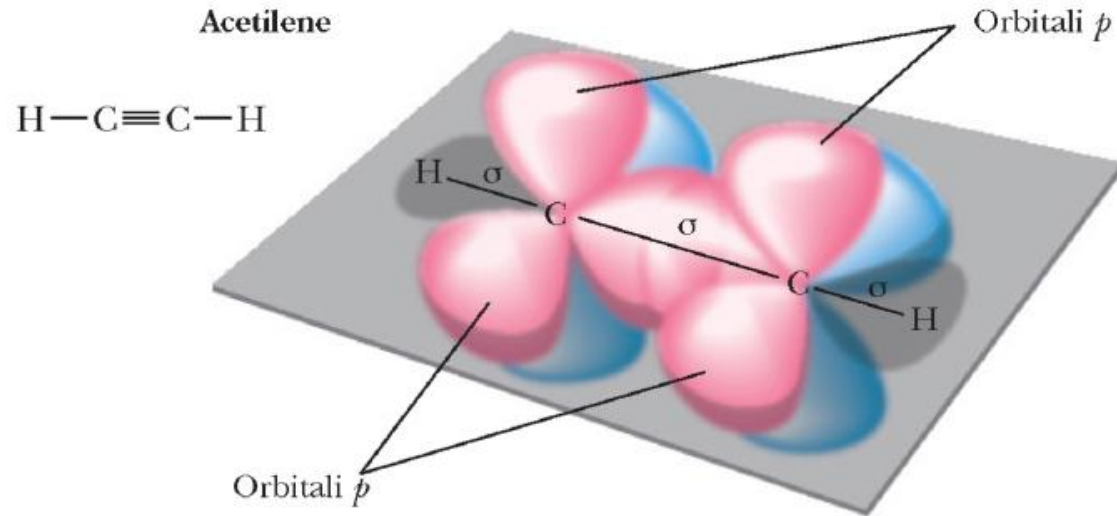


FIGURA 1.19 Formazione dei legami covalenti dell'etilene. (a) Struttura di Lewis. (b) La sovrapposizione di due orbitali ibridi sp^2 forma un legame sigma (σ) tra gli atomi di carbonio. (c) La sovrapposizione di due orbitali atomici 2p paralleli porta alla formazione di un legame pi greco (π). (d) L'etilene, 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.

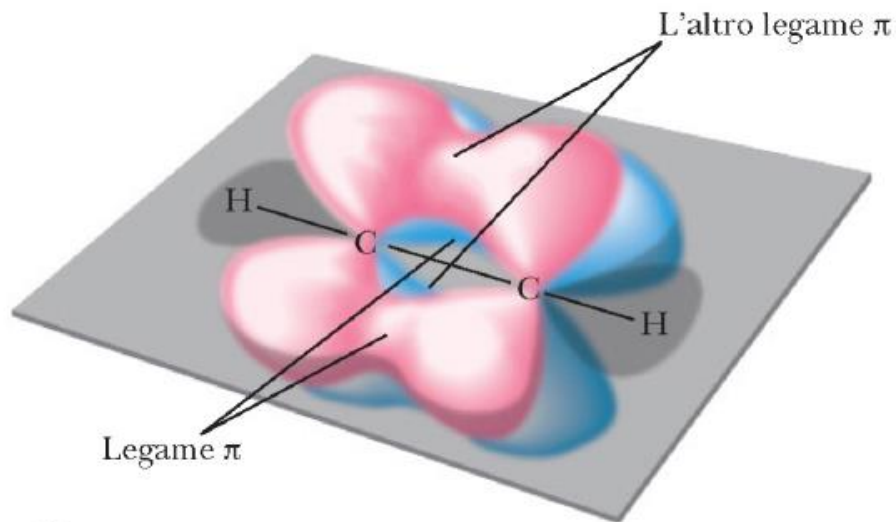
1 triple bond and 1 single bonds: sp hybridization



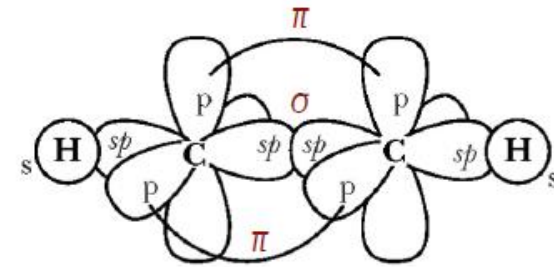
1 triple bond and 1 single bonds: sp hybridization



(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 π 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

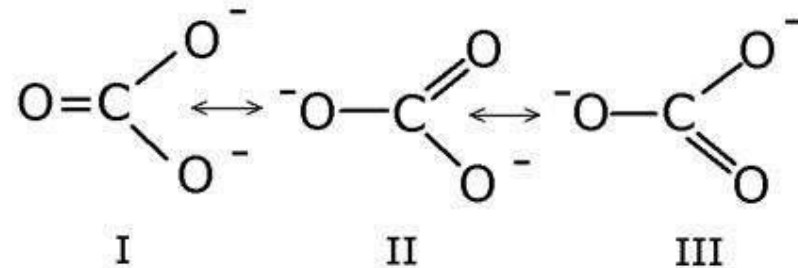
Molecola	Legame	Sovrapposizione degli orbitali di legame	Lunghezza dei legami (Å)	Forza del legame [kcal/mole(kJ/mole)]
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	C—C	sp^3-sp^3	1.54	90 (377)
	C—H	sp^3-1s	1.11	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%.

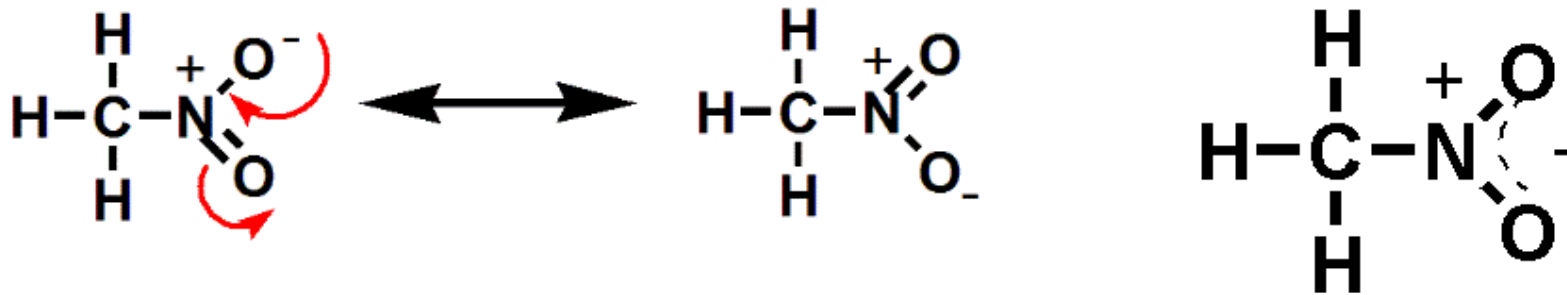
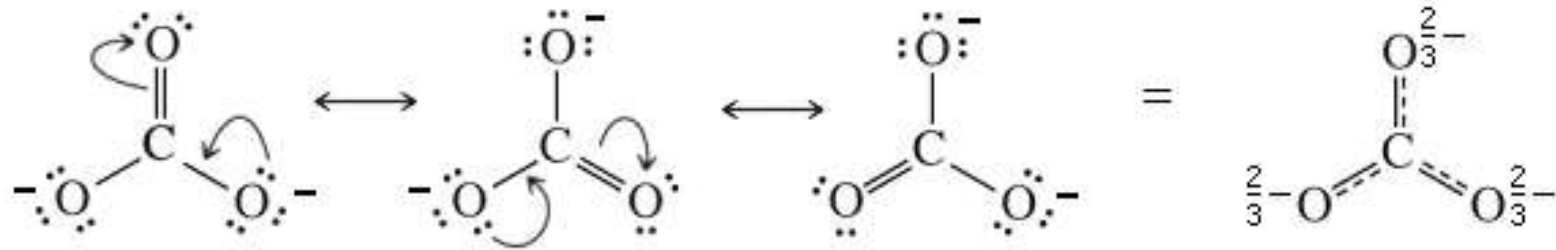
Tanto più corto è il legame tanto più forte è.

Risonanza

- Alcune molecole non possono essere rappresentate da una singola struttura di Lewis. Ad es. ione carbonato 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