

Le molecole organiche

Molecole che contengono atomi di C.

Eccezione: ossidi di carbonio e loro sali,
cianuri metallici

Il C è l'unico elemento in grado di legarsi fortemente a se stesso e formare lunghe catene o anelli e allo stesso tempo legarsi a elementi non metallici: **H, O, N e alogeni**

 Diversi milioni di composti, 98% dei composti noti

Un po' di «ricordi» della chimica generale....

Orbitali e configurazione elettronica

- Un orbitale è una regione di spazio che può contenere due elettroni
- Nella configurazione elettronica fondamentale di un atomo sono occupati solo gli orbitali a minore energia

FIGURA 1.3 Rappresentazione degli orbitali s , p e d . Gli orbitali s sono sferici, gli orbitali p hanno una forma a manubrio, e quattro dei cinque orbitali d hanno una forma a quadrifoglio. I differenti lobi degli orbitali p vengono spesso raffigurati per convenienza a forma di lacrima, ma la loro vera forma rassomiglia piuttosto ad una maniglia, come indicato nella rappresentazione generata al computer di un orbitale $2p$ dell'idrogeno sulla destra.

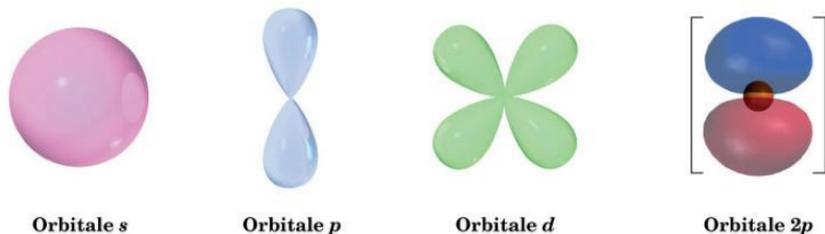


FIGURA 1.5 Forma degli orbitali $2p$. Ciascuno dei tre orbitali a forma di manubrio ha un nodo tra i due lobi.

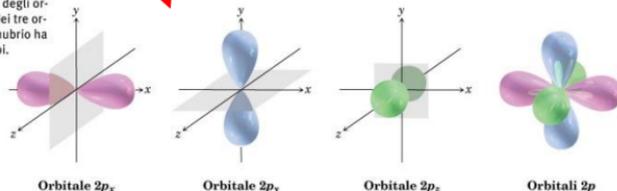


FIGURA 1.4 Livelli energetici degli elettroni in un atomo. Il primo guscio contiene un solo orbitale $1s$; il secondo guscio contiene un massimo di otto elettroni in un orbitale $2s$ e tre orbitali $2p$; il terzo guscio contiene un massimo di diciotto elettroni in un orbitale $3s$, tre orbitali $3p$ e cinque orbitali $3d$, e così via. I due elettroni in ciascun orbitale sono rappresentati da frecce in su e in giù, $\uparrow\downarrow$. Anche se non viene mostrato, il livello energetico dell'orbitale $4s$ cade tra il $3p$ ed il $3d$.



Ogni guscio può contenere massimo $2n^2$ elettroni
 $n =$ numero del guscio

Un po' di «ricordi» della chimica generale....

Orbitali e configurazione elettronica

- In accordo con il modello di Lewis, gli atomi si legano in modo tale che ciascun atomo coinvolto nel legame acquisti una configurazione elettronica del guscio di valenza uguale a quella dei gas nobili.
- Atomi che perdono elettroni per ottenere un guscio di valenza completo diventano cationi e formano legami ionici

Tabella 1.3 Configurazione elettronica dello stato fondamentale degli elementi 1–18

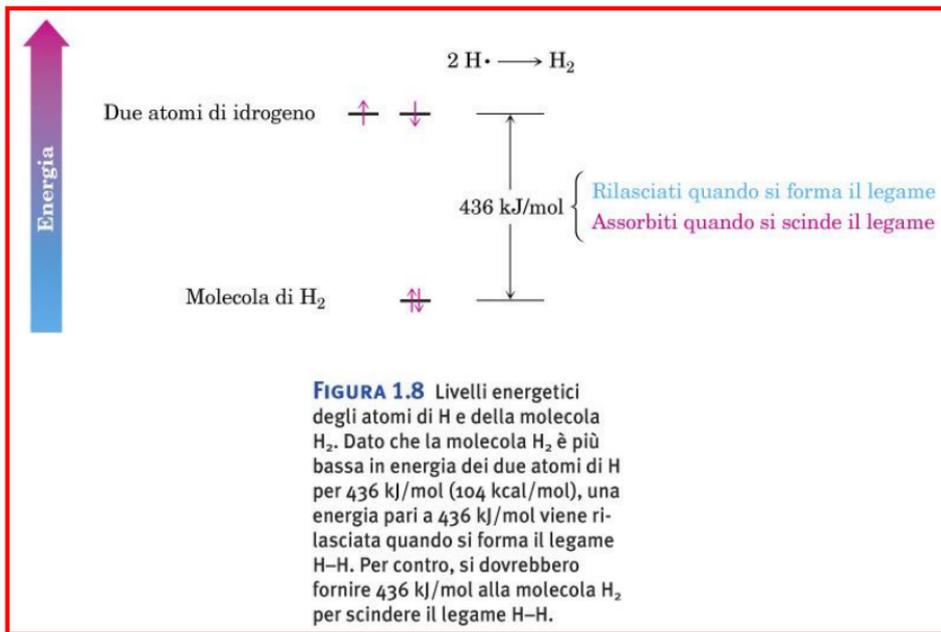
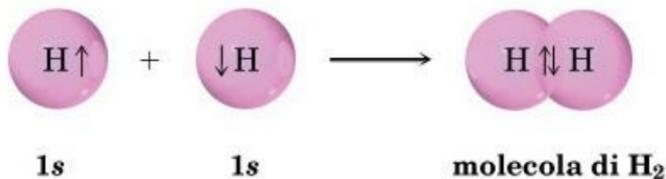
Primo Periodo*			Secondo Periodo			Terzo Periodo		
H	1	$1s^1$	Li	3	$[\text{He}] 2s^1$	Na	11	$[\text{Ne}] 3s^1$
He	2	$1s^2$	Be	4	$[\text{He}] 2s^2$	Mg	12	$[\text{Ne}] 3s^2$
			B	5	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$	Al	13	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^1$
			C	6	$[\text{He}] 2s^2 2p^2$	Si	14	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^2$
			N	7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

*Gli elementi sono indicati con il loro simbolo, numero atomico e configurazione elettronica semplificata dello stato fondamentale.

Gli atomi si legano tra loro in modo da acquisire una configurazione elettronica del guscio elettronico esterno uguale a quella del gas nobile più simile come configurazione elettronica.

Il C è l'unico elemento in grado di legarsi fortemente a se stesso e formare lunghe catene o anelli e allo stesso tempo legarsi a elementi non metallici: H, O, N e alogeni. **Perchè?**

Perchè esistono le molecole? Ci deve essere un vantaggio energetico rispetto alla condizione di atomo isolato



Perché due atomi si legano attraverso legami e la condivisione di elettroni? Che vantaggio ne consegue?

Prova a vedere il video

<https://www.youtube.com/watch?v=9G2MtdI1bLk>

Un po' di «ricordi» dalla chimica generale....

(vero/falso)

Elettronegatività

1. L'elettronegatività generalmente aumenta all'aumentare del numero atomico
2. L'elettronegatività è una misura dell'attrazione di un atomo per gli elettroni che esso condivide in un legame chimico con un altro atomo
3. L'elettronegatività generalmente aumenta dall'alto verso il basso lungo un gruppo della tabella periodica
4. I seguenti legami sono disposti in ordine di polarità crescente:
C-H N-H O-H

Tabella 1.5 Valori di elettronegatività di alcuni atomi (scala di Pauling)

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

 <1.0	 1.5 – 1.9	 2.5 – 2.9
 1.0 – 1.4	 2.0 – 2.4	 3.0 – 4.0

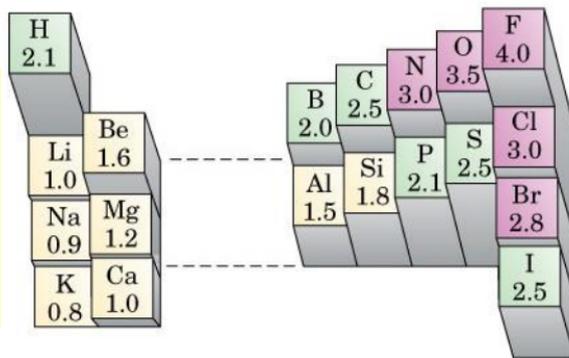
Un po' di «ricordi» dalla chimica generale....

(vero/falso)

Elettronegatività

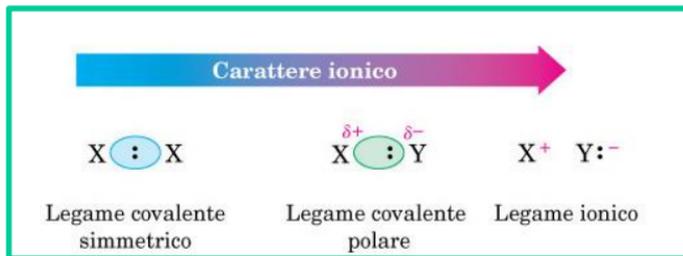
- ~~1. L'elettronegatività generalmente aumenta all'aumentare del numero atomico~~
2. L'elettronegatività è una misura dell'attrazione di un atomo per gli elettroni che esso condivide in un legame chimico con un altro atomo
- ~~3. L'elettronegatività generalmente aumenta dall'alto verso il basso lungo un gruppo della tabella periodica~~
4. I seguenti legami sono disposti in ordine di polarità crescente:
C-H N-H O-H

FIGURA 5.1 Elettronegatività di alcuni comuni elementi.

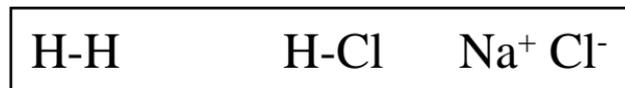


L'elettronegatività è una misura della forza di attrazione di un atomo per gli elettroni che esso condivide in un legame chimico con un altro atomo

FIGURA 2.1 Il passaggio dal legame covalente al legame ionico è il risultato di una distribuzione elettronica non simmetrica. Il simbolo δ (lettera greca delta minuscola) indica una carica parziale, sia positiva (δ^+) per gli atomi poveri di elettroni sia negativa (δ^-) per gli atomi ricchi di elettroni.

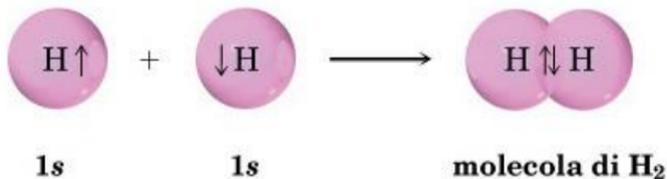


Il carbonio ha elettronegatività (2.5) inferiore rispetto a N, O e alogeni, ma superiore all'H



$$\Delta EN = \quad 0 \quad \quad 0.9 \quad \quad 2.1$$

0.5 ÷ 1.9

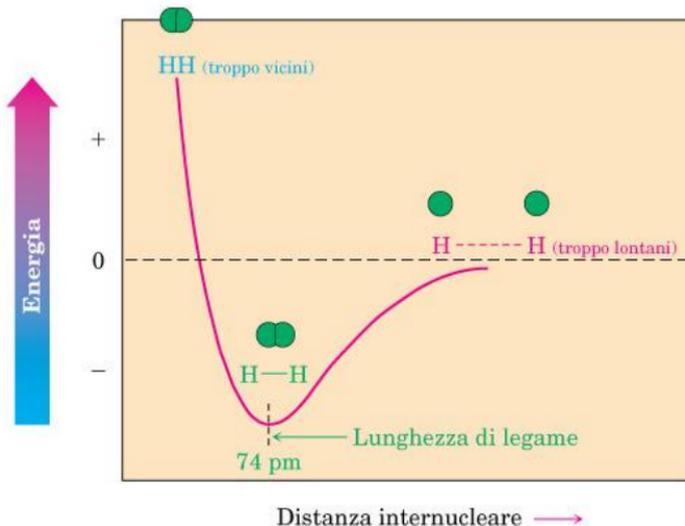


Bond	Length	Energy
H--H	74 pm	436 kJ/mol)

0.74 Å

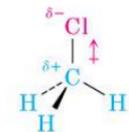
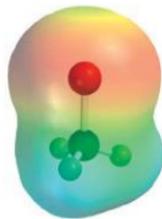
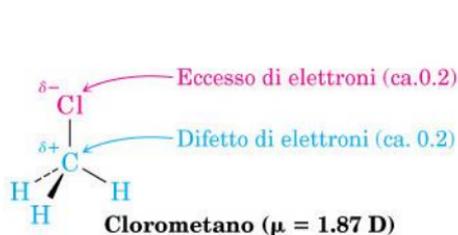
FIGURA 1.9 Grafico dell'energia contro la distanza internucleare per due atomi di idrogeno. La distanza tra i nuclei al punto di minima energia è la lunghezza di legame.

Å 10^{-10} m
 pm 10^{-12} m



Legami polari

Mappe di potenziale elettrostatico:



Clorometano

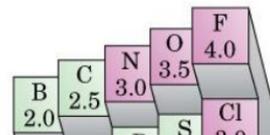
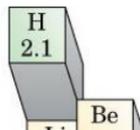
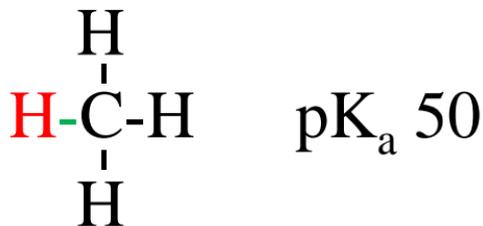
$$\begin{array}{l} \text{Cloro: EN} = 3.0 \\ \text{Carbonio: EN} = 2.5 \\ \hline \text{Differenza} = 0.5 \end{array}$$

Rosso δ^-
Blu δ^+

Il carbonio ha elettronegatività (2.5) inferiore rispetto a N, O e alogeni, ma superiore all'H

Conseguenza della
condivisione
diseguale degli
elettroni

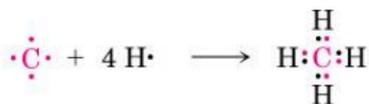
La polarità dei legami influisce sulla loro reattività: per esempio reattività acida



Rappresentazione delle molecole organiche

- Determinare il numero degli elettroni di valenza della molecola o dello ione
- Determinare la disposizione degli atomi
- Sistemare gli elettroni residui in coppie in modo che ciascun atomo abbia un guscio di valenza completo (legami o doppietti solitari/spaiati)
- Inserire dove necessario legami multipli

Rappresentazione degli elettroni di valenza: strutture di Lewis



Metano (CH₄)



Ammoniaca (NH₃)



Acqua (H₂O)

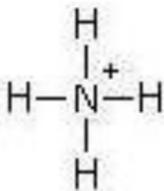


Metanolo (CH₃OH)

TABELLA 1.2 Strutture di Lewis e Kekulé di alcune molecole semplici

Nome	Struttura di Lewis	Struttura di Kekulé	Nome	Struttura di Lewis	Struttura di Kekulé
Acqua (H ₂ O)	$\text{H}:\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{O}}}\cdot:\text{H}$	$\text{H}-\text{O}-\text{H}$	Metano (CH ₄)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}:\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{C}}}\cdot:\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Ammoniaca (NH ₃)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}:\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{N}}}\cdot:\text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{N}-\text{H} \end{array}$	Metanolo (CH ₃ OH)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}:\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{C}}}\cdot:\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{O}}}\cdot:\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$

Carica formale



Ione ammonio

		1s	2s	2px	2py	2pz
H	1	1				
He	2	2				
Li	3	2	1			
Be	4	2	2			
B	5	2	2	1		
C	6	2	2	1	1	
N	7	2	2	1	1	1
O	8	2	2	2	1	1
F	9	2	2	2	2	1
Ne	10	2	2	2	2	2

Elettroni di valenza nell'atomo neutro non legato: **5**

meno il numero totale di **elettroni non condivisi** (cioè di non legame o solitari): **0**

e la **metà degli elettroni condivisi**: **$8/2=4$**

Carica formale:

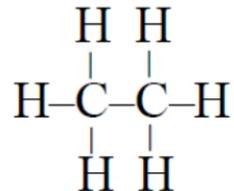
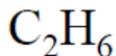
TABELLA 2.2 Cariche formali su atomi di carbonio, azoto e ossigeno

Atomo	C			N			O		
Struttura	—C^+ 	—C— 	$\text{—}\ddot{\text{C}}^-$ 	—N^+ 	$\text{—}\ddot{\text{N}}^-$ 	$\text{—}\ddot{\ddot{\text{N}}}^-$ 	$\text{—}\ddot{\text{O}}^+$ 	$\text{—}\ddot{\text{O}}^-$ 	$\text{—}\ddot{\ddot{\text{O}}}^-$
Numero di legami	3	4	3	4	3	2	3	2	1
Coppie elettroniche non condivise	0	0	1	0	1	2	1	2	3
Carica formale	+1	0	-1	+1	0	-1	+1	0	-1

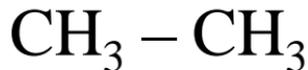
Rappresentazione e scrittura delle molecole organiche: esempio ETANO

Formula strutturale molecolare

Formula molecolare

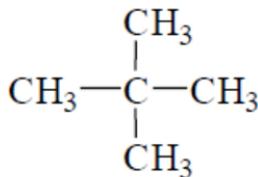


Struttura condensata

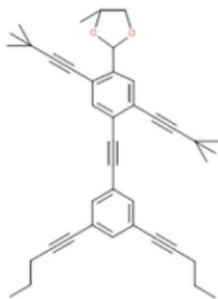


Scrittura a scheletro

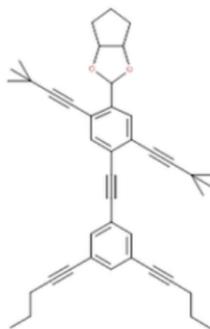
- Minima informazione ma non ambigua
- I carboni non sono mostrati, si assume che siano all'intersezione di due o più linee e al termine di ogni linea
- Gli idrogeni non sono mostrati
- Tutti gli atomi diversi da C e H sono mostrati



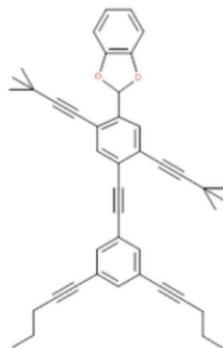
NanoPutians – Human-Like Molecules



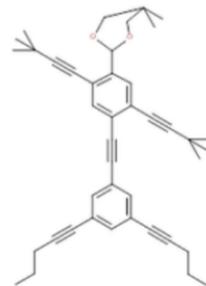
NanoGreenBeret



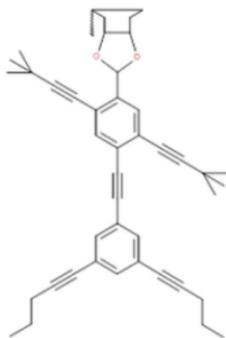
NanoJester



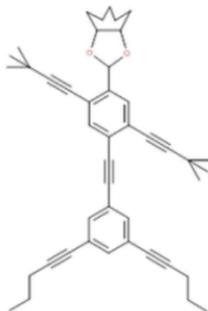
NanoChef



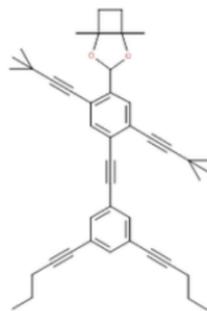
NanoAthlete



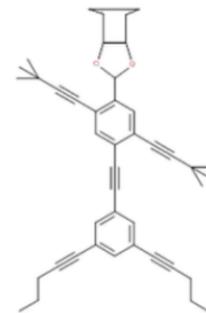
NanoScholar



NanoMonarch



NanoPilgrim



NanoBaker

(J. M. Tour et al. JOC 2003, 68, 8750)

Angoli di legame e geometria molecolare



Angoli di legame e geometria molecolare

Con quale geometria il C forma i legami ?

		1s	2s	2px	2py	2pz
H	1	1				
He	2	2				
Li	3	2	1			
Be	4	2	2			
B	5	2	2	1		
C	6	2	2	1	1	
N	7	2	2	1	1	1
O	8	2	2	2	1	1
F	9	2	2	2	2	1
Ne	10	2	2	2	2	2

Angoli di legame e geometria molecolare

I doppietti elettronici si sistemano nello spazio in maniera da minimizzare gli effetti repulsivi

FIGURA 1.6 L'atomo di carbonio tetraedrico secondo van't Hoff. Le linee continue giacciono nel piano della pagina, la linea a cuneo pieno esce dal piano della pagina, e la linea tratteggiata va all'interno della pagina.

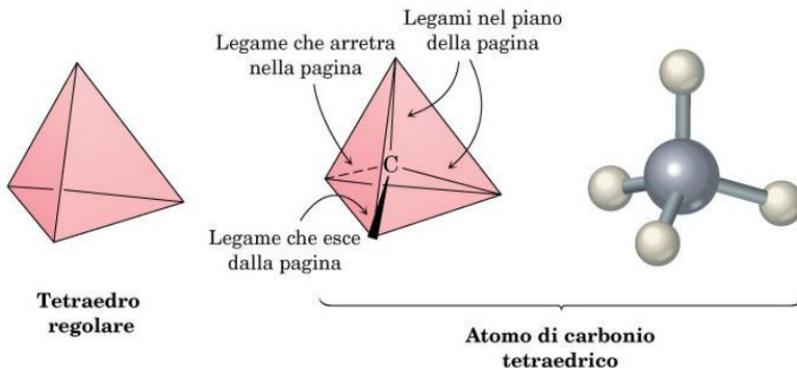
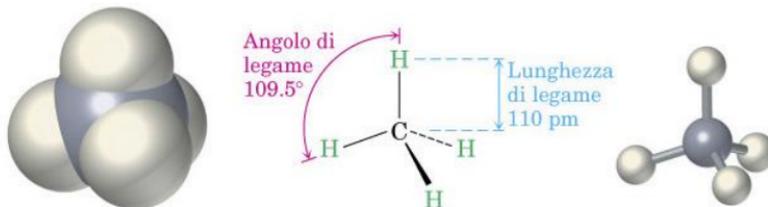


FIGURA 1.11 Struttura del metano che mostra gli angoli di legame di 109.5° .



Valence Shell Electron Pair Repulsion

Modello molecolare (in silico) del nanopuziano!

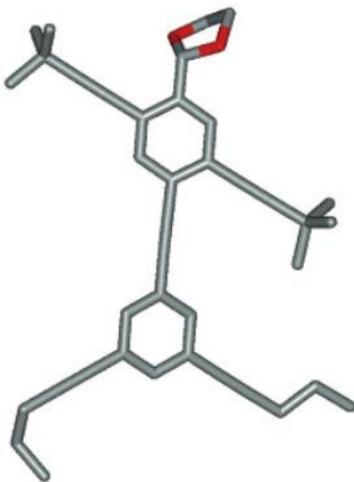
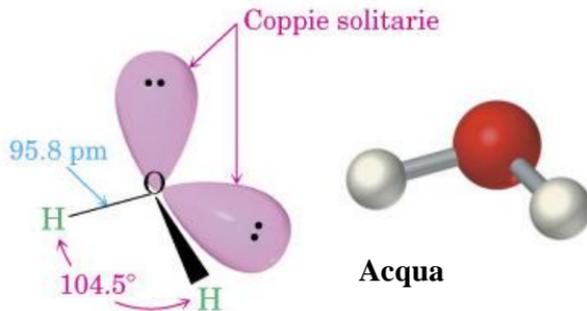
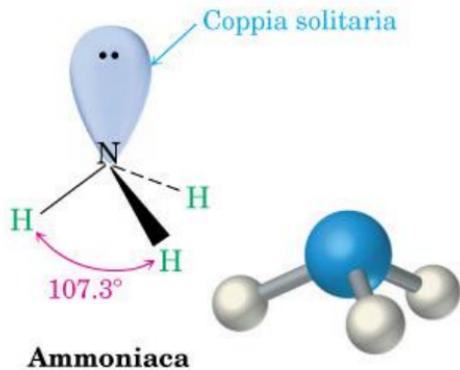
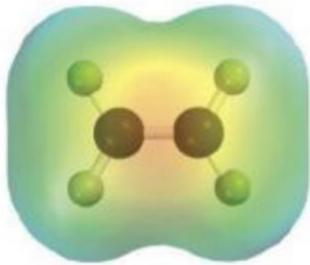


FIGURE 2. NanoKid (13) in its energy-minimized conformation that was determined using molecular mechanics (Spartan).

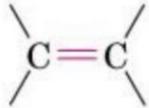
(J. M. Tour et al. JOC 2003, 68, 8750)

I doppietti elettronici si sistemano nello spazio in maniera da minimizzare gli effetti repulsivi

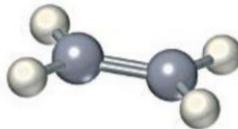
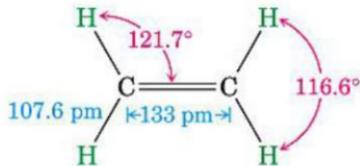




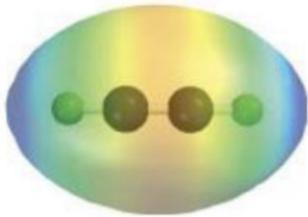
Geometria trigonale planare



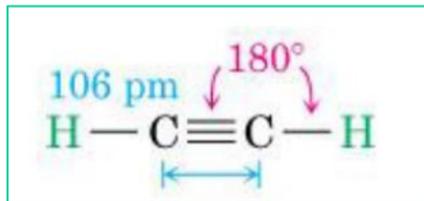
Alchene

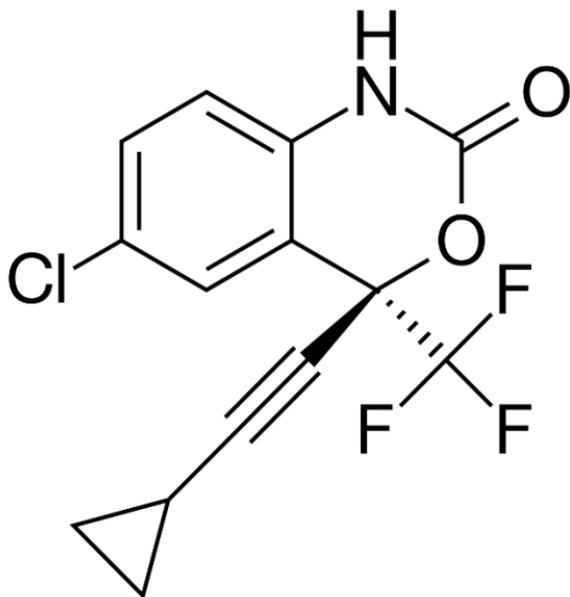


Geometria lineare



Alchino





EFAVIRENZ

Farmaco antivirale
Per HIV/AIDS