

CHIMICA GENERALE con LABORATORIO ed ELEMENTI di ORGANICA (12 CFU)

Patrizia Nitti, email: pnitti@units.it

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

Telefono 040 5582722

Orario lezioni frontali

Elementi di chimica organica

- Lezioni 24 ore lezioni frontali (3 CFU)
 - mercoledì 14-16, aula A, Pal. Q
 - giovedì 11-13, aula A, Pal. Q
 - Dal 1° marzo al 30 marzo 2023 (20 lezioni)
 - Pausa pasquale dal 3 aprile al 14 aprile 2023
 - Mercoledì 19 aprile e giovedì 20 aprile ultime due lezioni (24 ore)
- Preappello a maggio

Modalità d'esame

- Bisogna aver superato la parte di Chimica Generale con laboratorio
- Prova scritta: 5 domande, ogni domanda vale 2 punti

Obiettivi del corso

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

Programma del modulo di Chimica Organica 24h:

- 1) Concetti di chimica organica, il legame chimico. Orbitali atomici. Legame covalente secondo il modello del legame di valenza, orbitali ibridi sp^3 , sp^2 e sp ; concetto di risonanza. Acidi e basi.
- 2) Struttura, nomenclatura e proprietà degli alcani. Cicloalcani. Reazioni degli alcani.
- 3) Stereochimica. Enantiomeri e diastereoisomeri. Chiralità. Carbonio chirale. Potere ottico rotatorio.
- 4) Alcheni e alchini. Struttura, nomenclatura e proprietà.
- 5) Gruppi funzionali e reazioni in chimica organica
- 6) Reazioni degli alcheni: addizione elettrofila. Reazione di idrogenazione degli alcheni.
- 7) Benzene e derivati. Nomenclatura. Concetto di aromaticità. Eterocicli aromatici.
- 8) Struttura, nomenclatura e cenni sulla reattività di alogenuri alchilici, alcoli, eteri, tioli, ammine, aldeidi e chetoni, acidi carbossilici e derivati.

Libri di testo

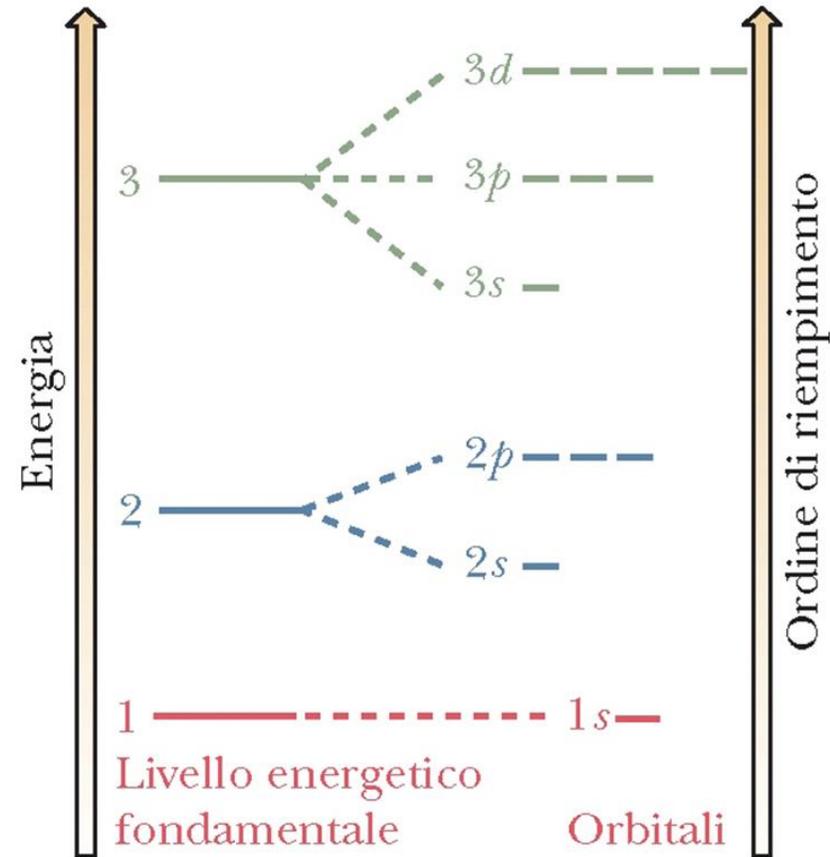
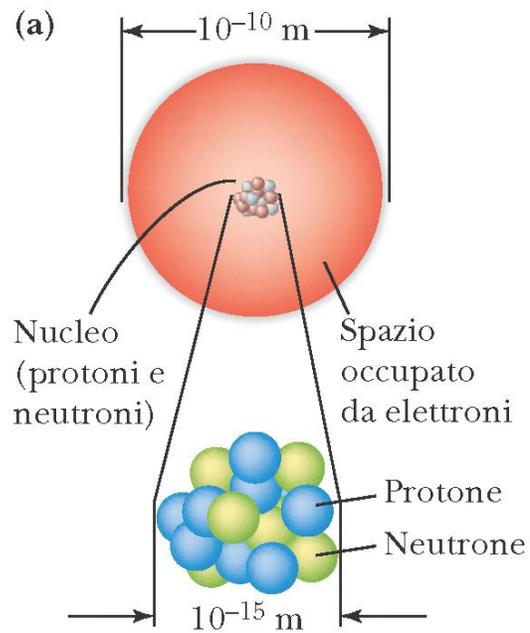
Introduzione alla chimica organica - W. H. Brown e T. Poon – EdiSES editore



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

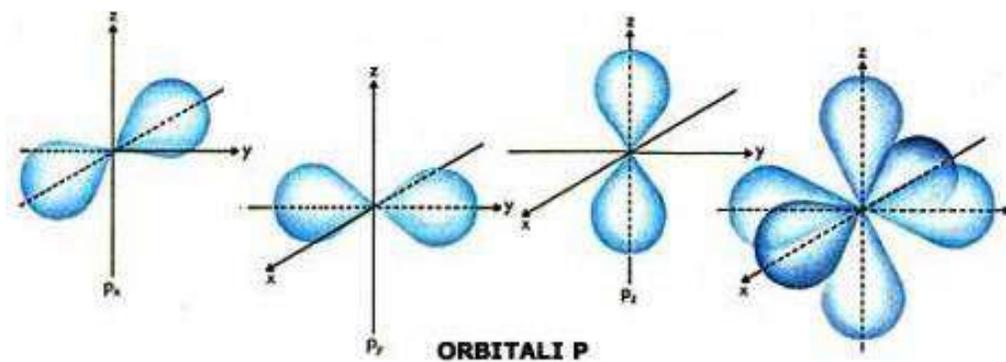
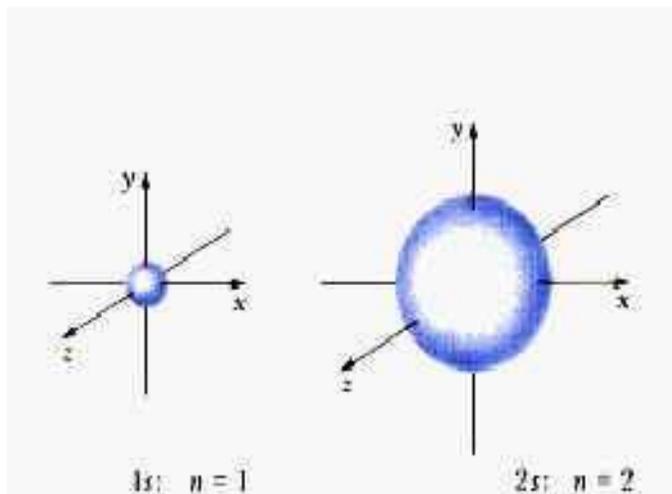
Table of Selected Radioactive Isotopes

GROUP IA		IIA		Selected Radioactive Isotopes										VIII																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
1 1.00794 H Hydrogen		3 6.941 Li Lithium	4 9.01218 Be Beryllium	11 22.98977 Na Sodium	12 24.305 Mg Magnesium	19 39.0983 K Potassium	20 40.078 Ca Calcium	21 44.9559 Sc Scandium	22 47.87 Ti Titanium	23 50.9415 V Vanadium	24 51.996 Cr Chromium	25 54.9380 Mn Manganese	26 55.845 Fe Iron	27 58.932 Co Cobalt	28 58.932 Ni Nickel	29 63.546 Cu Copper	30 65.39 Zn Zinc	31 69.723 Ga Gallium	32 72.61 Ge Germanium	33 74.9216 As Arsenic	34 78.96 Se Selenium	35 79.904 Br Bromine	36 83.80 Kr Krypton	37 85.4678 Rb Rubidium	38 87.62 Sr Strontium	39 88.9059 Y Yttrium	40 91.224 Zr Zirconium	41 92.9064 Nb Niobium	42 95.94 Mo Molybdenum	43 98 Tc Technetium	44 101.07 Ru Ruthenium	45 102.9055 Rh Rhodium	46 106.42 Pd Palladium	47 107.868 Ag Silver	48 112.41 Cd Cadmium	49 114.82 In Indium	50 118.710 Sn Tin	51 121.760 Sb Antimony	52 127.60 Te Tellurium	53 126.9045 I Iodine	54 131.29 Xe Xenon	55 132.9054 Cs Cesium	56 137.33 Ba Barium	57 138.9055 La Lanthanum	72 178.49 Hf Hafnium	73 180.9479 Ta Tantalum	74 183.84 W Tungsten	75 186.207 Re Rhenium	76 190.23 Os Osmium	77 192.22 Ir Iridium	78 195.08 Pt Platinum	79 196.9665 Au Gold	80 200.59 Hg Mercury	81 204.383 Tl Thallium	82 207.2 Pb Lead	83 208.9804 Bi Bismuth	84 209 Po Polonium	85 210 At Astatine	86 222 Rn Radon	103 228.073 Th Thorium	90 232.0381 U Uranium	91 232.0379 Pa Protactinium	92 238.0289 U Uranium	93 237 Np Neptunium	94 244 Pu Plutonium	95 243 Am Americium	96 247 Cm Curium	97 247 Bk Berkelium	98 251 Cf Californium	99 252 Es Einsteinium	100 257 Fm Fermium	101 258 Md Mendelevium	102 259 No Nobelium	103 262 Lr Lawrencium	104 261 Rf Rutherfordium	105 262 Db Dubnium	106 263 Sg Seaborgium	107 262 Bh Bohrium	108 265 Hs Hassium	109 266 Mt Meitnerium	110 269 Uun Ununnilium	111 272 Uuu Ununnilium	112 277 Uuq Ununquadium	113 284 Uup Ununpentium	114 289 Uuq Ununquadium	115 288 Uup Ununpentium	116 293 Uuh Ununhexium	117 294 Uuq Ununquadium	118 294 Uuo Ununoctium	119 293 Uuq Ununquadium	120 293 Uuo Ununoctium	121 293 Uuq Ununquadium	122 293 Uuo Ununoctium	123 293 Uuq Ununquadium	124 293 Uuo Ununoctium	125 293 Uuo Ununoctium	126 293 Uuo Ununoctium	127 293 Uuo Ununoctium	128 293 Uuo Ununoctium	129 293 Uuo Ununoctium	130 293 Uuo Ununoctium	131 293 Uuo Ununoctium	132 293 Uuo Ununoctium	133 293 Uuo Ununoctium	134 293 Uuo Ununoctium	135 293 Uuo Ununoctium	136 293 Uuo Ununoctium	137 293 Uuo Ununoctium	138 293 Uuo Ununoctium	139 293 Uuo Ununoctium	140 293 Uuo Ununoctium	141 293 Uuo Ununoctium	142 293 Uuo Ununoctium	143 293 Uuo Ununoctium	144 293 Uuo Ununoctium	145 293 Uuo Ununoctium	146 293 Uuo Ununoctium	147 293 Uuo Ununoctium	148 293 Uuo Ununoctium	149 293 Uuo Ununoctium	150 293 Uuo Ununoctium	151 293 Uuo Ununoctium	152 293 Uuo Ununoctium	153 293 Uuo Ununoctium	154 293 Uuo Ununoctium	155 293 Uuo Ununoctium	156 293 Uuo Ununoctium	157 293 Uuo Ununoctium	158 293 Uuo Ununoctium	159 293 Uuo Ununoctium	160 293 Uuo Ununoctium	161 293 Uuo Ununoctium	162 293 Uuo Ununoctium	163 293 Uuo Ununoctium	164 293 Uuo Ununoctium	165 293 Uuo Ununoctium	166 293 Uuo Ununoctium	167 293 Uuo Ununoctium	168 293 Uuo Ununoctium	169 293 Uuo Ununoctium	170 293 Uuo Ununoctium	171 293 Uuo Ununoctium	172 293 Uuo Ununoctium	173 293 Uuo Ununoctium	174 293 Uuo Ununoctium	175 293 Uuo Ununoctium	176 293 Uuo Ununoctium	177 293 Uuo Ununoctium	178 293 Uuo Ununoctium	179 293 Uuo Ununoctium	180 293 Uuo Ununoctium	181 293 Uuo Ununoctium	182 293 Uuo Ununoctium	183 293 Uuo Ununoctium	184 293 Uuo Ununoctium	185 293 Uuo Ununoctium	186 293 Uuo Ununoctium	187 293 Uuo Ununoctium	188 293 Uuo Ununoctium	189 293 Uuo Ununoctium	190 293 Uuo Ununoctium	191 293 Uuo Ununoctium	192 293 Uuo Ununoctium	193 293 Uuo Ununoctium	194 293 Uuo Ununoctium	195 293 Uuo Ununoctium	196 293 Uuo Ununoctium	197 293 Uuo Ununoctium	198 293 Uuo Ununoctium	199 293 Uuo Ununoctium	200 293 Uuo Ununoctium	201 293 Uuo Ununoctium	202 293 Uuo Ununoctium	203 293 Uuo Ununoctium	204 293 Uuo Ununoctium	205 293 Uuo Ununoctium	206 293 Uuo Ununoctium	207 293 Uuo Ununoctium	208 293 Uuo Ununoctium	209 293 Uuo Ununoctium	210 293 Uuo Ununoctium	211 293 Uuo Ununoctium	212 293 Uuo Ununoctium	213 293 Uuo Ununoctium	214 293 Uuo Ununoctium	215 293 Uuo Ununoctium	216 293 Uuo Ununoctium	217 293 Uuo Ununoctium	218 293 Uuo Ununoctium	219 293 Uuo Ununoctium	220 293 Uuo Ununoctium	221 293 Uuo Ununoctium	222 293 Uuo Ununoctium	223 293 Uuo Ununoctium	224 293 Uuo Ununoctium	225 293 Uuo Ununoctium	226 293 Uuo Ununoctium	227 293 Uuo Ununoctium	228 293 Uuo Ununoctium	229 293 Uuo Ununoctium	230 293 Uuo Ununoctium	231 293 Uuo Ununoctium	232 293 Uuo Ununoctium	233 293 Uuo Ununoctium	234 293 Uuo Ununoctium	235 293 Uuo Ununoctium	236 293 Uuo Ununoctium	237 293 Uuo Ununoctium	238 293 Uuo Ununoctium	239 293 Uuo Ununoctium	240 293 Uuo Ununoctium	241 293 Uuo Ununoctium	242 293 Uuo Ununoctium	243 293 Uuo Ununoctium	244 293 Uuo Ununoctium	245 293 Uuo Ununoctium	246 293 Uuo Ununoctium	247 293 Uuo Ununoctium	248 293 Uuo Ununoctium	249 293 Uuo Ununoctium	250 293 Uuo Ununoctium	251 293 Uuo Ununoctium	252 293 Uuo Ununoctium	253 293 Uuo Ununoctium	254 293 Uuo Ununoctium	255 293 Uuo Ununoctium	256 293 Uuo Ununoctium	257 293 Uuo Ununoctium	258 293 Uuo Ununoctium	259 293 Uuo Ununoctium	260 293 Uuo Ununoctium	261 293 Uuo Ununoctium	262 293 Uuo Ununoctium	263 293 Uuo Ununoctium	264 293 Uuo Ununoctium	265 293 Uuo Ununoctium	266 293 Uuo Ununoctium	267 293 Uuo Ununoctium	268 293 Uuo Ununoctium	269 293 Uuo Ununoctium	270 293 Uuo Ununoctium	271 293 Uuo Ununoctium	272 293 Uuo Ununoctium	273 293 Uuo Ununoctium	274 293 Uuo Ununoctium	275 293 Uuo Ununoctium	276 293 Uuo Ununoctium	277 293 Uuo Ununoctium	278 293 Uuo Ununoctium	279 293 Uuo Ununoctium	280 293 Uuo Ununoctium	281 293 Uuo Ununoctium	282 293 Uuo Ununoctium	283 293 Uuo Ununoctium	284 293 Uuo Ununoctium	285 293 Uuo Ununoctium	286 293 Uuo Ununoctium	287 293 Uuo Ununoctium	288 293 Uuo Ununoctium	289 293 Uuo Ununoctium	290 293 Uuo Ununoctium	291 293 Uuo Ununoctium	292 293 Uuo Ununoctium	293 293 Uuo Ununoctium	294 293 Uuo Ununoctium	295 293 Uuo Ununoctium	296 293 Uuo Ununoctium	297 293 Uuo Ununoctium	298 293 Uuo Ununoctium	299 293 Uuo Ununoctium	300 293 Uuo Ununoctium	301 293 Uuo Ununoctium	302 293 Uuo Ununoctium	303 293 Uuo Ununoctium	304 293 Uuo Ununoctium	305 293 Uuo Ununoctium	306 293 Uuo Ununoctium	307 293 Uuo Ununoctium	308 293 Uuo Ununoctium	309 293 Uuo Ununoctium	310 293 Uuo Ununoctium	311 293 Uuo Ununoctium	312 293 Uuo Ununoctium	313 293 Uuo Ununoctium	314 293 Uuo Ununoctium	315 293 Uuo Ununoctium	316 293 Uuo Ununoctium	317 293 Uuo Ununoctium	318 293 Uuo Ununoctium	319 293 Uuo Ununoctium	320 293 Uuo Ununoctium	321 293 Uuo Ununoctium	322 293 Uuo Ununoctium	323 293 Uuo Ununoctium	324 293 Uuo Ununoctium	325 293 Uuo Ununoctium	326 293 Uuo Ununoctium	327 293 Uuo Ununoctium	328 293 Uuo Ununoctium	329 293 Uuo Ununoctium	330 293 Uuo Ununoctium	331 293 Uuo Ununoctium	332 293 Uuo Ununoctium	333 293 Uuo Ununoctium	334 293 Uuo Ununoctium	335 293 Uuo Ununoctium	336 293 Uuo Ununoctium	337 293 Uuo Ununoctium	338 293 Uuo Ununoctium	339 293 Uuo Ununoctium	340 293 Uuo Ununoctium	341 293 Uuo Ununoctium	342 293 Uuo Ununoctium	343 293 Uuo Ununoctium	344 293 Uuo Ununoctium	345 293 Uuo Ununoctium	346 293 Uuo Ununoctium	347 293 Uuo Ununoctium	348 293 Uuo Ununoctium	349 293 Uuo Ununoctium	350 293 Uuo Ununoctium	351 293 Uuo Ununoctium	352 293 Uuo Ununoctium	353 293 Uuo Ununoctium	354 293 Uuo Ununoctium	355 293 Uuo Ununoctium	356 293 Uuo Ununoctium	357 293 Uuo Ununoctium	358 293 Uuo Ununoctium	359 293 Uuo Ununoctium	360 293 Uuo Ununoctium	361 293 Uuo Ununoctium	362 293 Uuo Ununoctium	363 293 Uuo Ununoctium	364 293 Uuo Ununoctium	365 293 Uuo Ununoctium	366 293 Uuo Ununoctium	367 293 Uuo Ununoctium	368 293 Uuo Ununoctium	369 293 Uuo Ununoctium	370 293 Uuo Ununoctium	371 293 Uuo Ununoctium	372 293 Uuo Ununoctium	373 293 Uuo Ununoctium	374 293 Uuo Ununoctium	375 293 Uuo Ununoctium	376 293 Uuo Ununoctium	377 293 Uuo Ununoctium	378 293 Uuo Ununoctium	379 293 Uuo Ununoctium	380 293 Uuo Ununoctium	381 293 Uuo Ununoctium	382 293 Uuo Ununoctium	383 293 Uuo Ununoctium	384 293 Uuo Ununoctium	385 293 Uuo Ununoctium	386 293 Uuo Ununoctium	387 293 Uuo Ununoctium	388 293 Uuo Ununoctium	389 293 Uuo Ununoctium	390 293 Uuo Ununoctium	391 293 Uuo Ununoctium	392 293 Uuo Ununoctium	393 293 Uuo Ununoctium	394 293 Uuo Ununoctium	395 293 Uuo Ununoctium	396 293 Uuo Ununoctium	397 293 Uuo Ununoctium	398 293 Uuo Ununoctium	399 293 Uuo Ununoctium	400 293 Uuo Ununoctium	401 293 Uuo Ununoctium	402 293 Uuo Ununoctium	403 293 Uuo Ununoctium	404 293 Uuo Ununoctium	405 293 Uuo Ununoctium	406 293 Uuo Ununoctium	407 293 Uuo Ununoctium	408 293 Uuo Ununoctium	409 293 Uuo Ununoctium	410 293 Uuo Ununoctium	411 293 Uuo Ununoctium	412 293 Uuo Ununoctium	413 293 Uuo Ununoctium	414 293 Uuo Ununoctium	415 293 Uuo Ununoctium	416 293 Uuo Ununoctium	417 293 Uuo Ununoctium	418 293 Uuo Ununoctium	419 293 Uuo Ununoctium	420 293 Uuo Ununoctium	421 293 Uuo Ununoctium	422 293 Uuo Ununoctium	423 293 Uuo Ununoctium	424 293 Uuo Ununoctium	425 293 Uuo Ununoctium	426 293 Uuo Ununoctium	427 293 Uuo Ununoctium	428 293 Uuo Ununoctium	429 293 Uuo Ununoctium	430 293 Uuo Ununoctium	431 293 Uuo Ununoctium	432 293 Uuo Ununoctium	433 293 Uuo Ununoctium	434 293 Uuo Ununoctium	435 293 Uuo Ununoctium	436 293 Uuo Ununoctium	437 293 Uuo Ununoctium	438 293 Uuo Ununoctium	439 293 Uuo Ununoctium	440 293 Uuo Ununoctium	441 293 Uuo Ununoctium	442 293 Uuo Ununoctium	443 293 Uuo Ununoctium	444 293 Uuo Ununoctium	445 293 Uuo Ununoctium	446 293 Uuo Ununoctium	447 293 Uuo Ununoctium	448 293 Uuo Ununoctium	449 293 Uuo Ununoctium	450 293 Uuo Ununoctium	451 293 Uuo Un

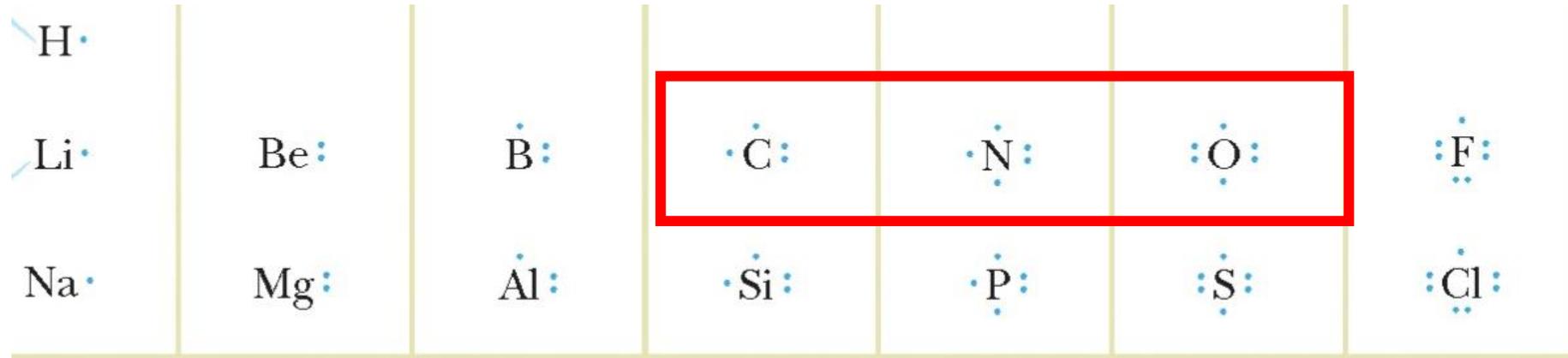
Configurazione elettronica fondamentale

	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	

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

Polarità dei legami covalenti

- 1.34** Quali delle seguenti affermazioni sono vere a proposito dell'elettronegatività?
- (a) L'elettronegatività aumenta da sinistra a destra in un periodo della Tavola Periodica.
 - (b) L'elettronegatività aumenta dall'alto al basso lungo un gruppo della Tavola Periodica.
 - (c) L'idrogeno, l'elemento col numero atomico più basso, ha il minimo valore di elettronegatività.
 - (d) Più alto è il numero atomico di un elemento, maggiore è la sua elettronegatività.
- 1.35** Perché il fluoro, l'elemento in alto a destra nella Tavola Periodica, ha l'elettronegatività più alta tra tutti gli elementi?

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) $1s^2 2s^2 2p^6$

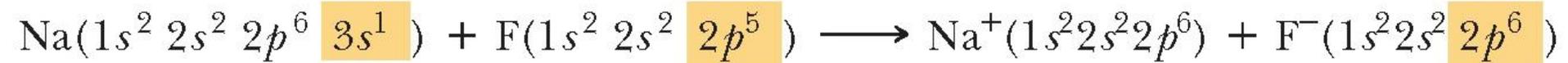
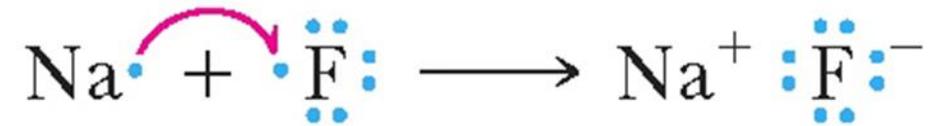
Elettronegatività del sodio = 0.9

Elettronegatività del cloro = 3.0

Differenza di elettronegatività tra i due atomi = 2.1

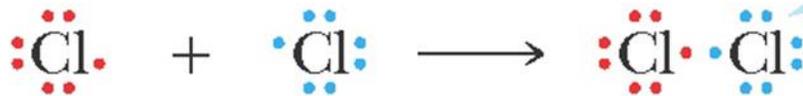
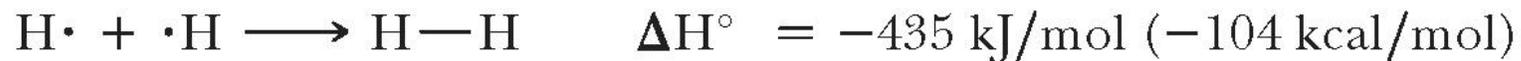
Legame ionico

Legame ionico



Legame covalente

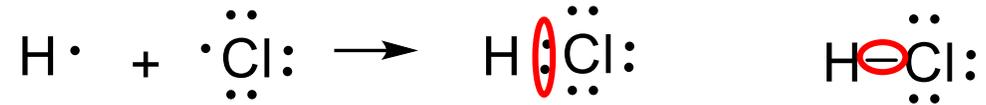
- Secondo il modello di Lewis una coppia di elettroni di un legame covalente:
 - È condivisa tra i due atomi
 - Completa il guscio di valenza di ciascun atomo



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

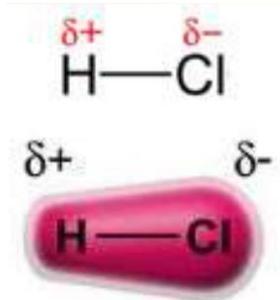
Legame covalente polare

Il cloro possiede:

tre **coppie di non legame** dette

anche: **doppietti non condivisi**

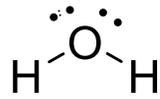
Lone pair



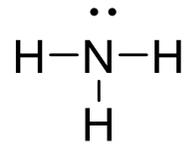
Esercizi

- 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

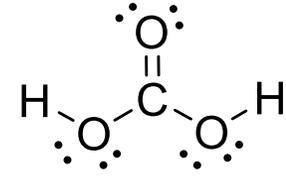
Esercizi



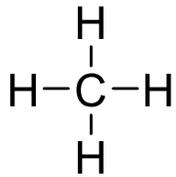
acqua



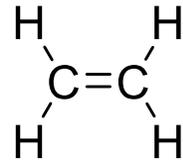
ammoniaca



Acido carbonico



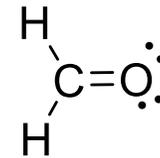
metano



etilene



acetilene



formaldeide

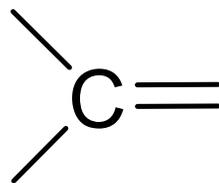
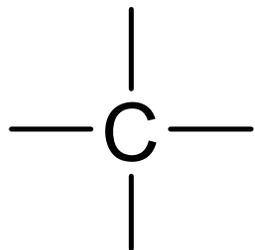
Numero di legami covalenti degli atomi in molecole organiche neutre

idrogeno



1 legame

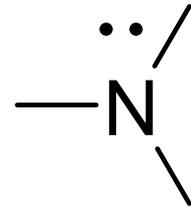
carbonio



4 legami

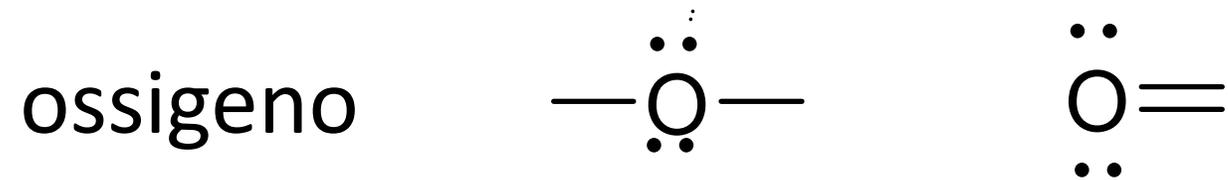
Numero di legami covalenti degli atomi in molecole organiche
neutre

azoto



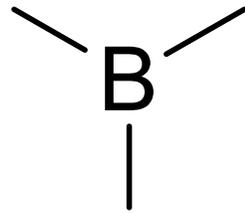
3 legami e un doppietto non condiviso

Numero di legami covalenti degli atomi in molecole organiche neutre

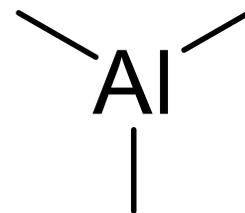


2 legami e due doppietti non condivisi

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

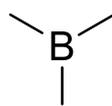
idrogeno H— 1 legame

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

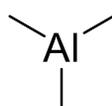
azoto $\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ | \\ -\text{N} \\ | \end{array}$ $-\ddot{\text{N}}=$ $\ddot{\text{N}}\equiv$ 3 legami e un doppietto non condiviso

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

alogeni $\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ | \\ :\text{X}- \\ | \end{array}$ 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
- 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

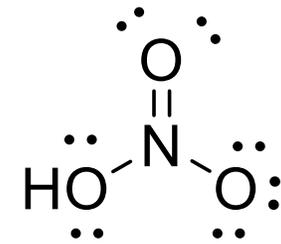
[elettroni di non legame] = n. di puntini presenti sull'atomo considerato

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

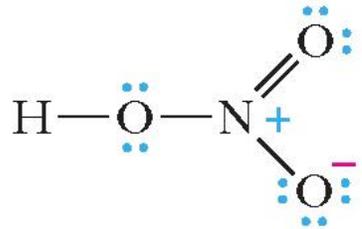
La somma delle cariche formali su ogni singolo atomo è uguale alla carica netta sulla molecola o ione.



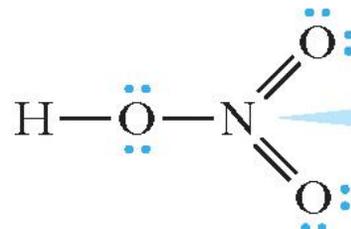
Acido nitrico



Acido nitrico HNO₃



Struttura di Lewis
accettabile



Struttura di Lewis
non accettabile

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

Carica formale N: (Numero e- di valenza N)- (numero di e- di non legame)-(numero di legami)

$$5-0-4 = +1$$

Carica formale O: $6-6-1 = -1$

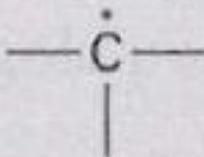
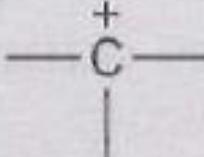
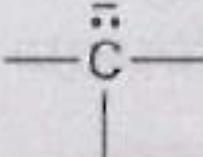
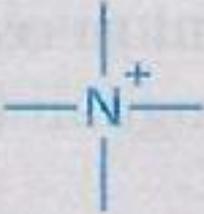
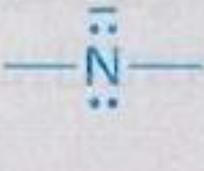
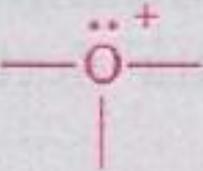
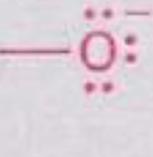
$$6-4-2 = 0$$

$$6-4-2 = 0$$

Carica formale H: $1-0-1 = 0$

Cariche formali più comuni

Tabella 2.2 Un sommario delle cariche formali più comuni

Atomo	C			N		O	
Struttura							

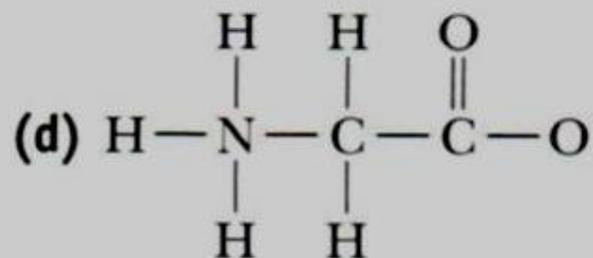
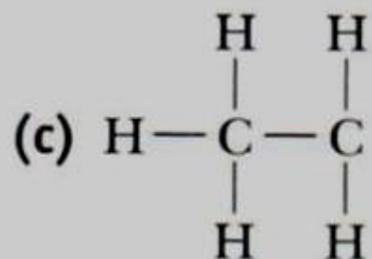
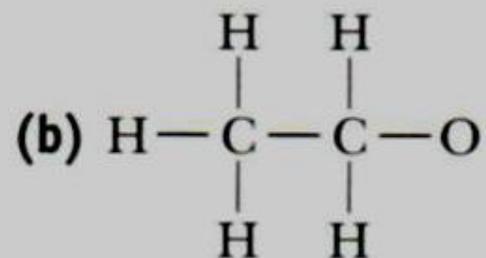
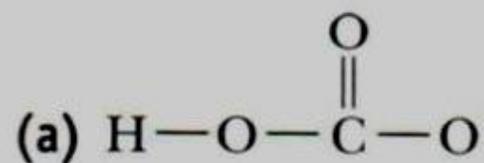
Carica formale : (Numero e- di valenza)- (numero di e- di non legame)-(numero di legami)

$$\text{C radicalico} : 4 - 1 - 3 = 0$$

$$\text{Carbocatione} : 4 - 0 - 3 = +1$$

$$\text{Carbanione} : 4 - 2 - 3 = -1$$

1.30 Seguendo la regola secondo cui ogni atomo di carbonio, ossigeno e azoto reagisce per raggiungere un guscio di elettroni esterno completo, aggiungi tante coppie di elettroni non condivise quante sono necessarie per completare il guscio di valenza di ciascun atomo in queste molecole e ioni. Quindi, assegna le relative cariche formali.



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

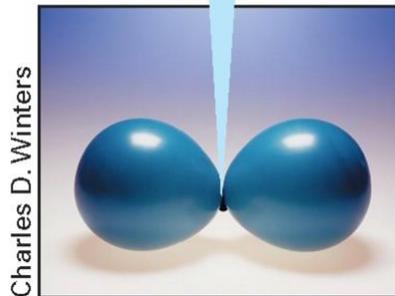
Valence Shell Electron Pair Repulsion

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

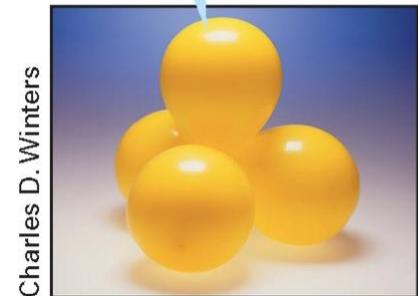
FIGURA 1.5 Modelli a palloncino utilizzati per predire gli angoli di legame. (a) Due palloncini assumono una forma lineare con un angolo di legame di 180° intorno al punto di legame. (b) Tre palloncini assumono una forma trigonale planare con angoli di legame di 120° . (c) Quattro palloncini assumono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



(a) Lineare



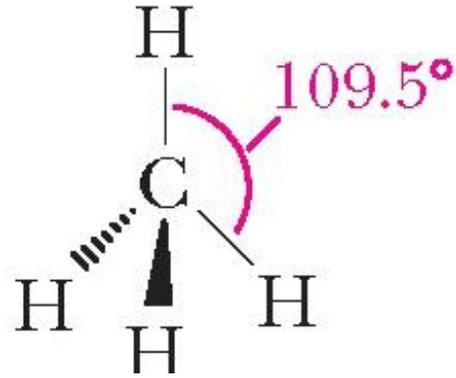
(b) Trigonale planare



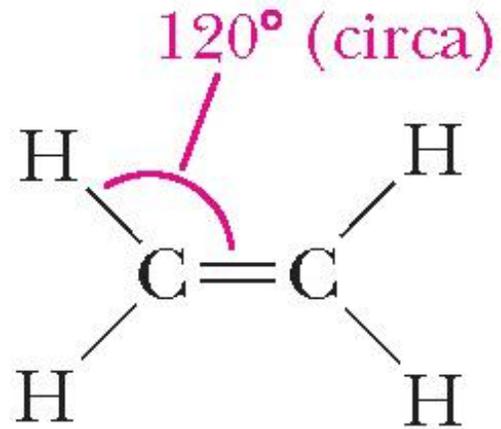
(c) Tetraedro

Esempi

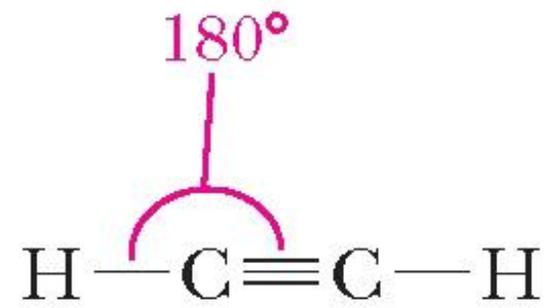
- Struttura di metano, ammoniaca, acqua, aldeide formica, etilene, anidride carbonica, acetilene
- Disposizione degli orbitali: lineare, trigonale planare, tetraedrica
- Forma della molecola: tetraedrica, piramidale, piegata, planare, lineare



metano



etilene



acetilene

Perché è importante conoscere la forma di una molecola?

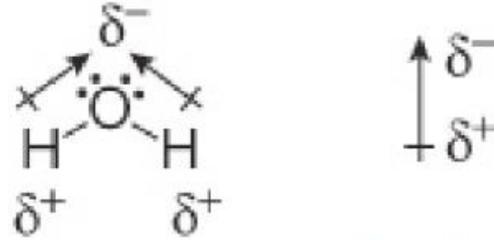
Molecole polari e non polari

- 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

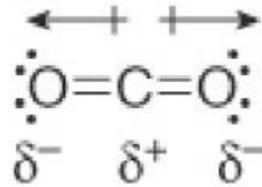
Momento di dipolo

- Molecole polari hanno uno o più legami covalenti polari.

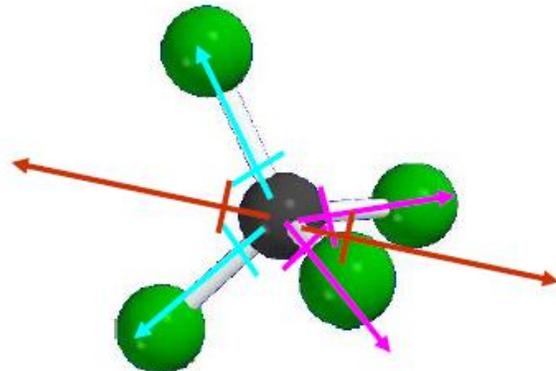
Es. H₂O



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

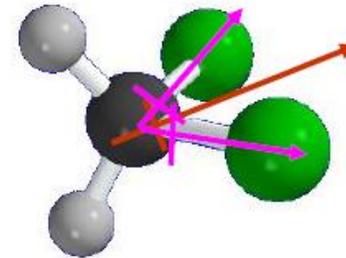


CCl₄ $\delta = 0$ D



I dipoli si cancellano

CH₂Cl₂ $\delta = 1.62$ D



I dipoli si sommano

Il tetrafluoroetilene, C_2F_4 , è il materiale di partenza per la sintesi del polimero poli(tetrafluoroetilene), comunemente chiamato Teflon. Le molecole del tetrafluoroetilene sono non polari. Proponi una formula di struttura per questo composto.

Chimica organica

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

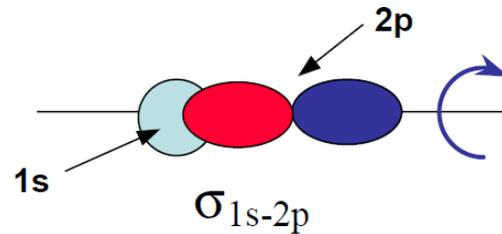
STRUTTURA  **REATTIVITA'**

Legame covalente secondo il modello del legame di valenza

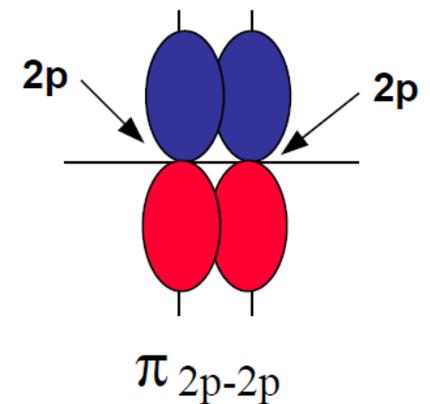
- I legami si formano per sovrapposizione degli orbitali atomici
- Gli elettroni sono localizzati e condivisi
- Maggiore è la sovrapposizione, più forte è il legame
- Legame sigma (σ) deriva dalla sovrapposizione di orbitali atomici che ha luogo lungo l'asse che unisce i due nuclei
- Legame pi greco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

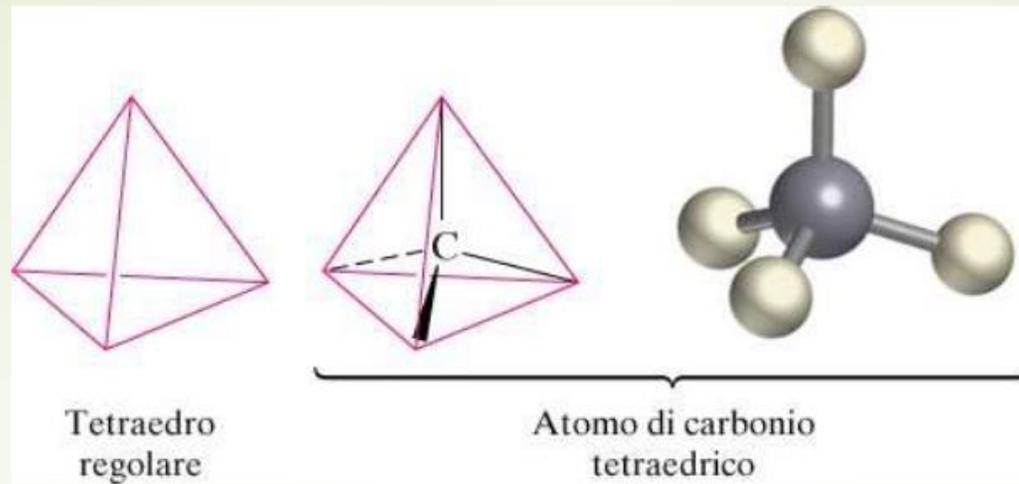


- Legame pi greco (π) deriva dalla sovrapposizione di 2 orbitali p paralleli fra loro e perpendicolari al legame σ



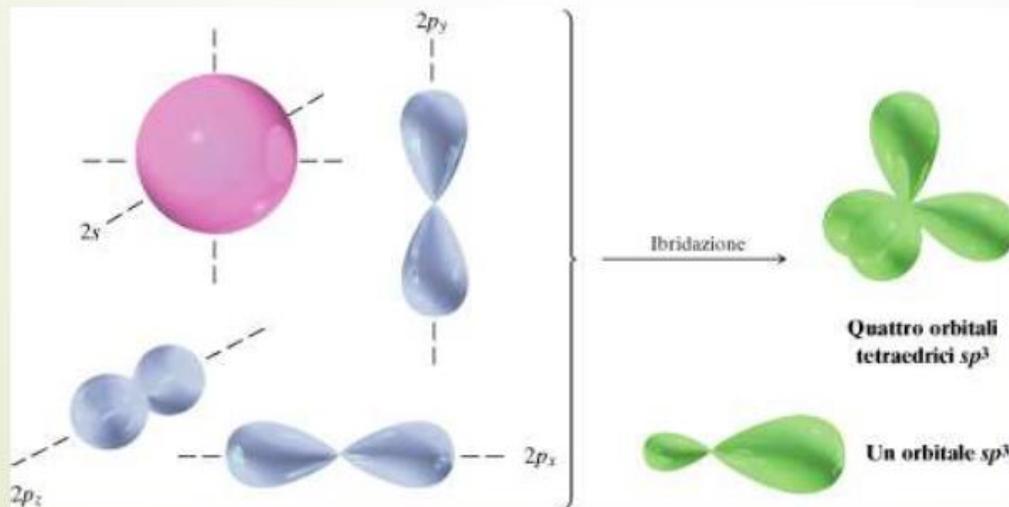
Teoria degli Orbitali ibridi

- 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



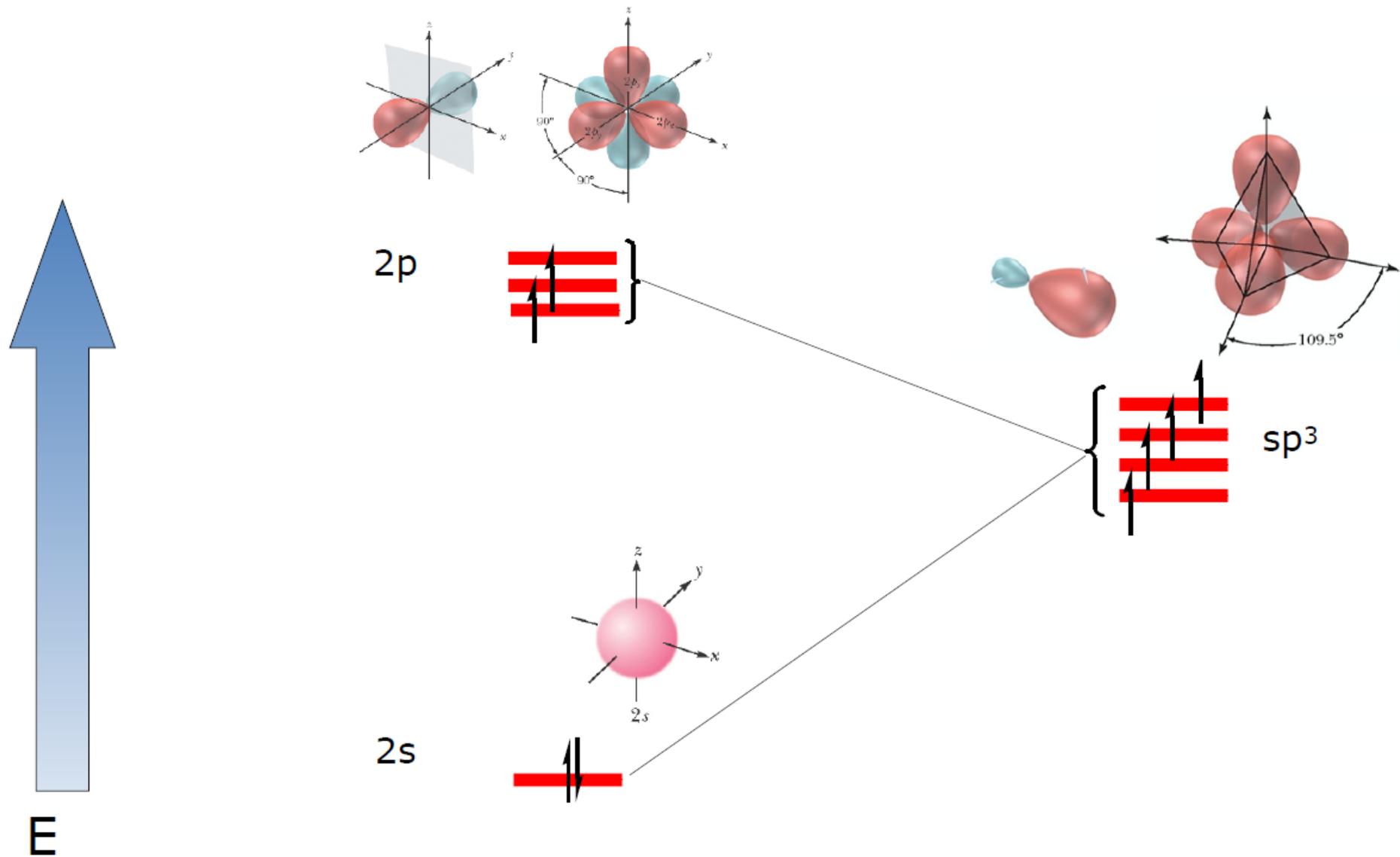
CH₄
metano

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

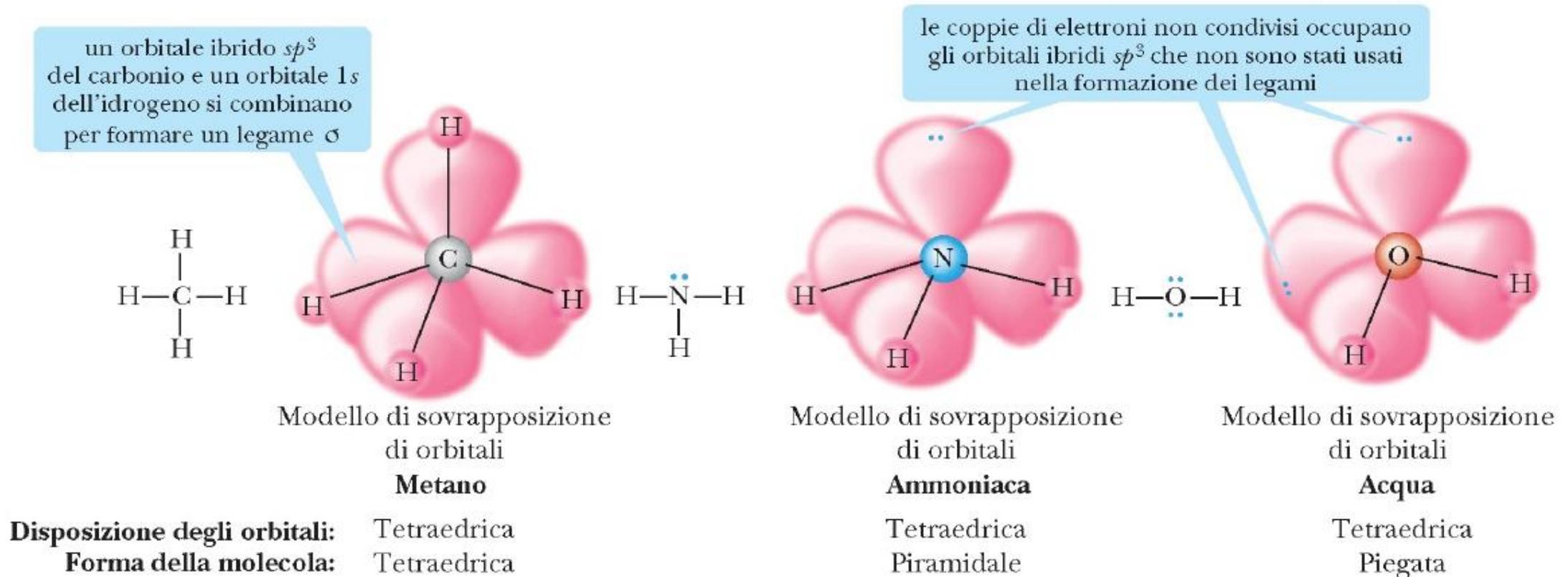
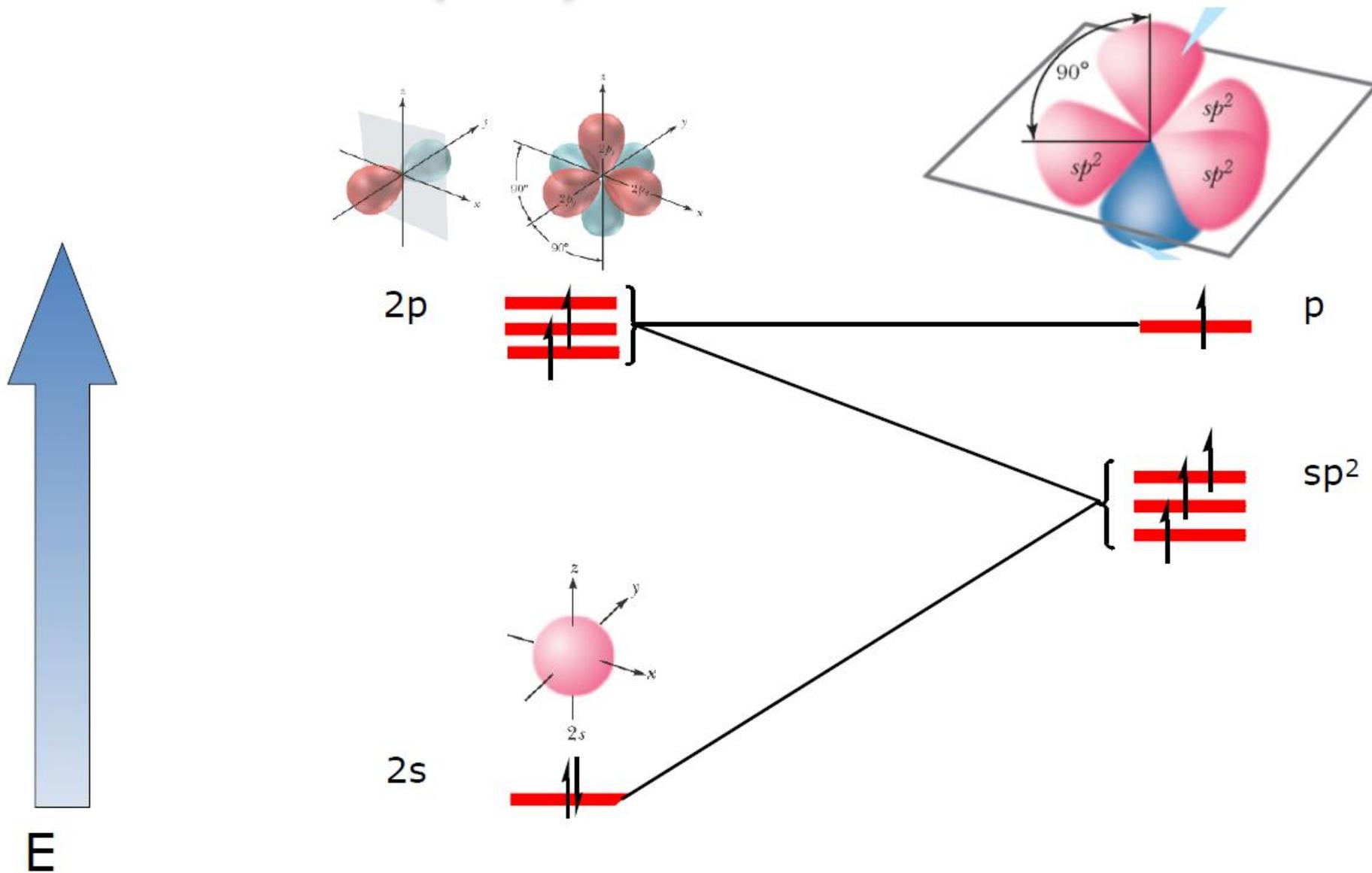


FIGURA 1.17 Modelli di sovrapposizione degli orbitali del metano, dell'ammoniaca e dell'acqua.

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



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

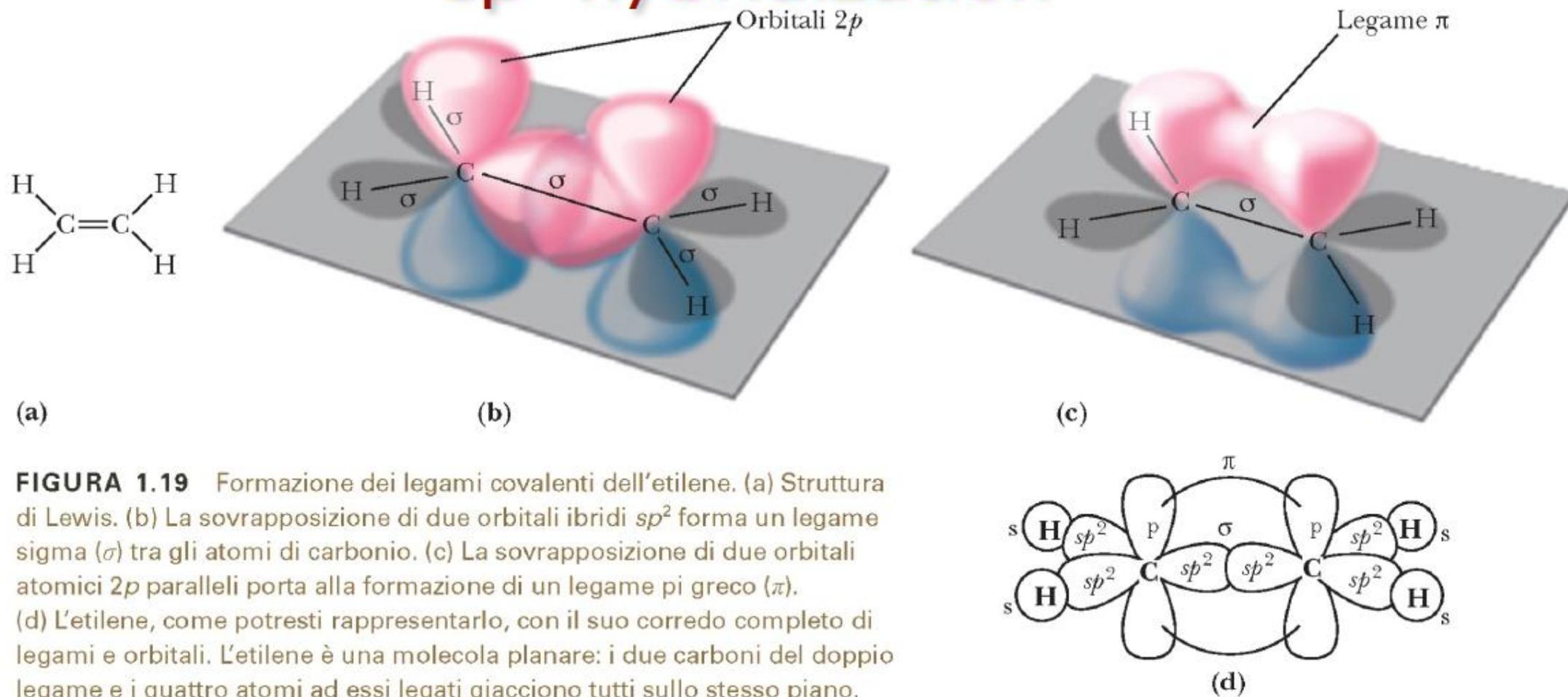
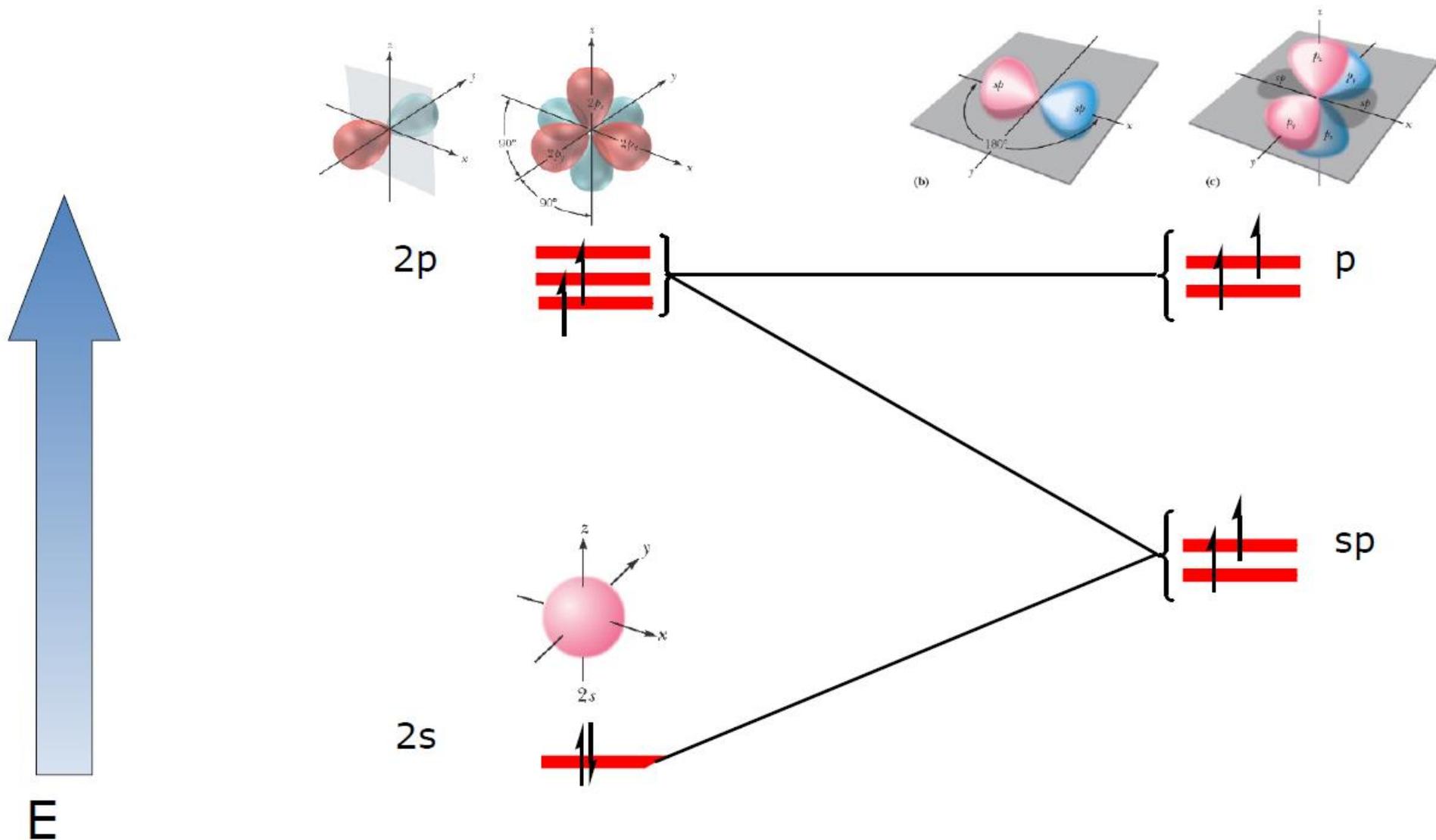
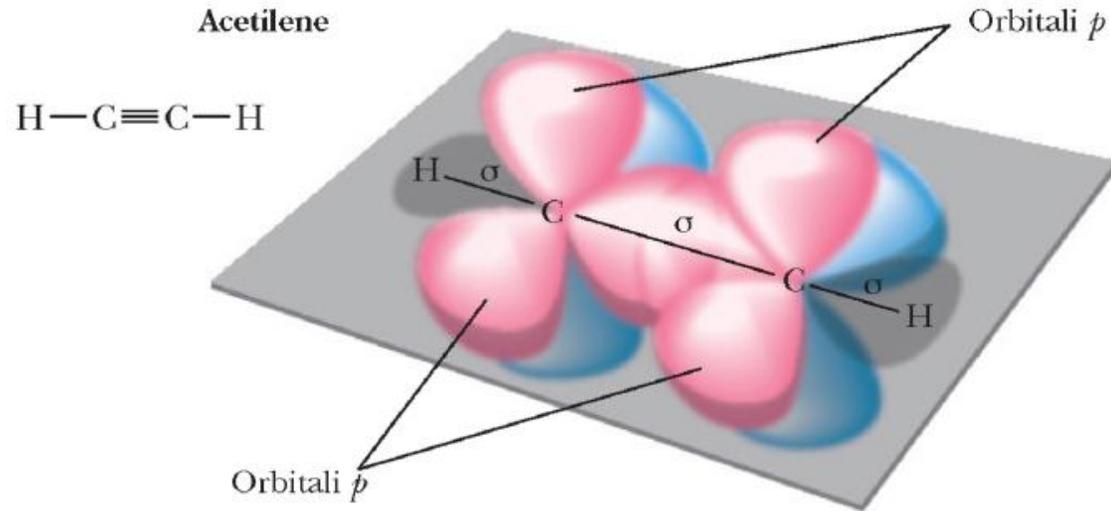


FIGURA 1.19 Formazione dei legami covalenti dell'etilene. (a) Struttura di Lewis. (b) La sovrapposizione di due orbitali ibridi sp^2 forma un legame sigma (σ) tra gli atomi di carbonio. (c) La sovrapposizione di due orbitali atomici 2p paralleli porta alla formazione di un legame pi greco (π). (d) L'etilene,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

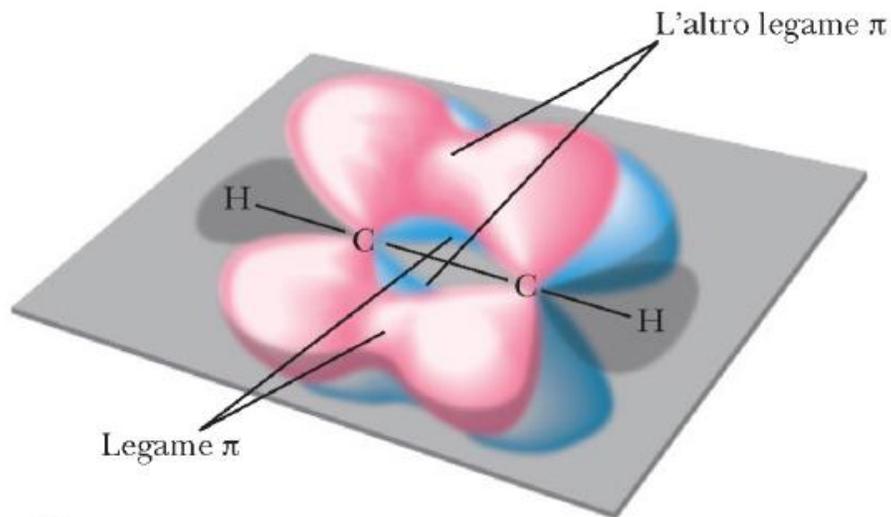
1 triple bond and 1 single bonds: sp hybridization



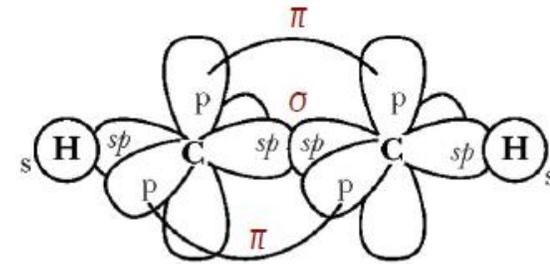
1 triple bond and 1 single bonds: sp hybridization



(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.

5. Completate le seguenti strutture di Lewis (disegnando i lone pair). Indicate poi l'ibridizzazione di ogni atomi (che non sia idrogeno)

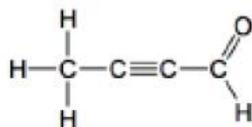
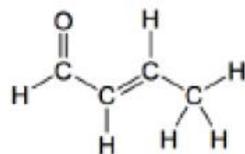
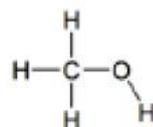


TABELLA 5.1 LUNGHEZZE DI LEGAME ED ENERGIE DI DISSOCIAZIONE DI LEGAME PER ETANO, ETILENE E ACETILENE

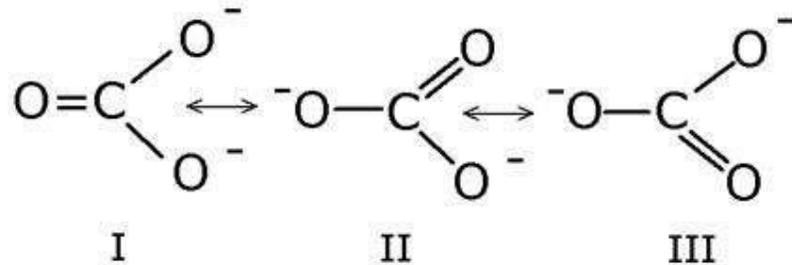
Molecola	Legame	Sovrapposizione degli orbitali di legame	Lunghezza dei legami (Å)	Forza del legame [kcal/mole(kJ/mole)]
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	C—C	sp^3-sp^3	1.54	90 (377)
	C—H	sp^3-1s	1.11	98 (410)
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \quad \text{H} \\ \diagdown \quad / \\ \text{C}=\text{C} \\ / \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \quad \text{H} \end{array}$	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%.

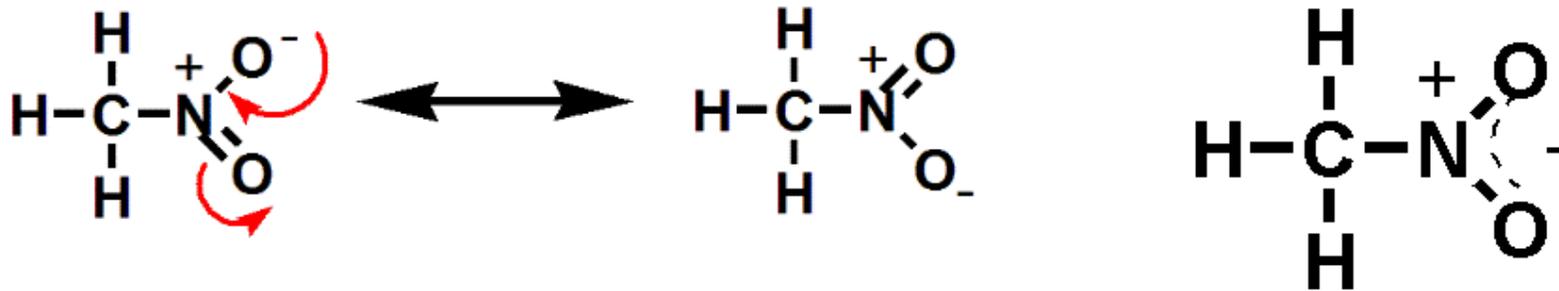
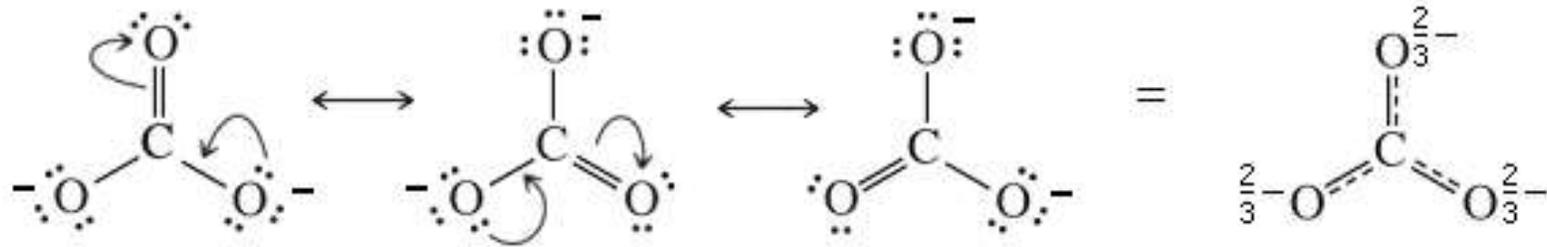
Tanto più corto è il legame, tanto più forte è.

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

Disegna, per le seguenti strutture, un'altra forma limite di risonanza

