

Chimica generale con laboratorio ed
elementi di organica (12 CFU)

Elementi di Chimica Organica

Organizzazione

3 CFU / 24 ore

Docente:

- Prof.ssa Fulvia Felluga
 - stanza 349, III piano Edificio C11
 - E-mail: ffelluga@units.it
 - Ricevimento: per appuntamento (e-mail)

Orario (eventualmente da rivedere)
martedì 9-10
venerdì 14-16

Aula Zucchi Stolfa

Lezioni frontali
Slides su Moodle

Libri di testo

Janice Gorzynski Smith

Fondamenti di Chimica Organica

McGraw-Hill

Brown W.H.; Foote, C.S.; Iverson, B.L.

Introduzione alla Chimica Organica

EdiSES

Obiettivi del corso

- Acquisire le conoscenze di base sulla **struttura** e le **proprietà** delle molecole organiche.

Modalità di esame

Prerequisiti

- Aver superato l'esame di Chimica Generale ed Inorganica.

Esame:

- Prova scritta in appello ufficiale ed eventualmente orale a richiesta.

Programma del corso

- 1) 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.
- 2) Acidi e basi in chimica organica
- 3) Struttura, nomenclatura e proprietà degli alcani. Cicloalcani. La reazione di combustione. Il Petrolio.
- 4) Stereochimica. Enantiomeri e diastereoisomeri. Chiralità. Carbonio chirale. Potere ottico rotatorio.
- 5) Alcheni e alchini. Struttura, nomenclatura e proprietà.
- 6) Gruppi funzionali e reazioni in chimica organica
- 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.
- 9) Composti naturali: aminoacidi, peptidi e proteine, carboidrati.

CHIMICA ORGANICA fino al 1800



Mondo inorganico
Entità inanimate
Leggi Razionali

Mondo organico
Entità viventi
Forza Vitale

Joseph Proust 1754-1826

Composti Inorganici:
Es. NH_3 , H_2O
Proporzioni Definite

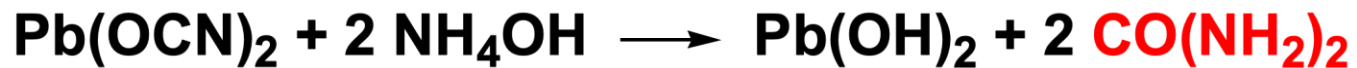
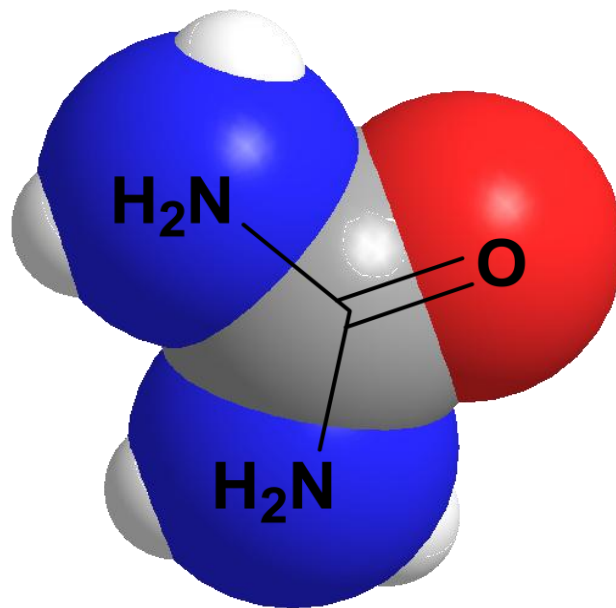
Mondo organico: Es. CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 ,
 C_2H_4
 C_2H_2

Proprietà simili ma diverse proporzioni:
Vitalismo!

1828: La fine del vitalismo

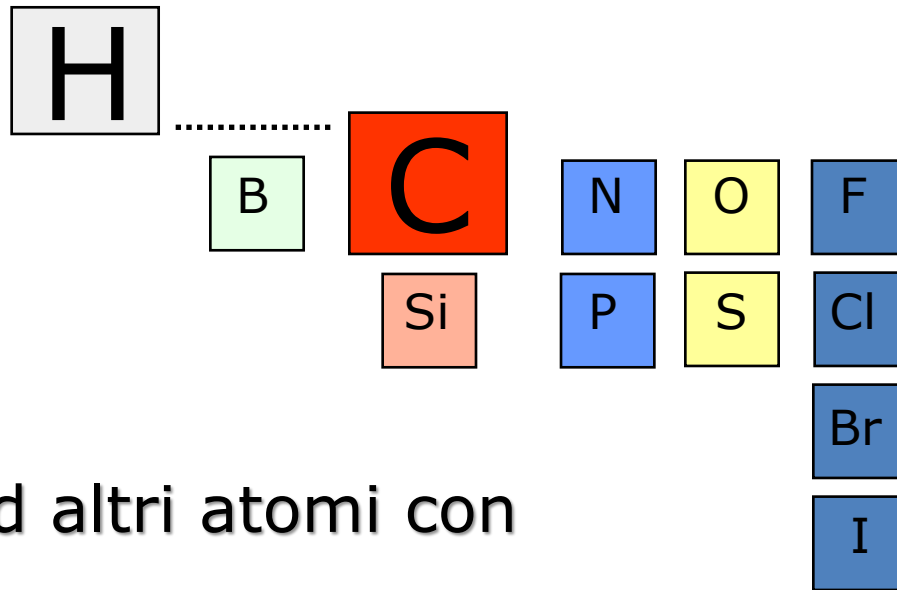


Friedrich Woehler
1800-1882



CHIMICA ORGANICA oggi

E' la chimica dei composti **COVALENTI** del carbonio



•Il Carbonio si lega ad altri atomi con legami **covalenti**.

H

B N O Si P S F Cl Br I Eteroatomi

I composti organici sono ubiquitari

- Biomolecole: *carboidrati, lipidi, proteine e acidi nucleici.*
- Materiali naturali: *cotone, carta, legno, pelle, seta, lana, benzina, oli minerali.*
- Molecole e materiali sintetici *farmaci, plastiche, vernici, coloranti, fibre artificiali, fertilizzanti, aromi, cosmetici, detergenti, profumi, dolcificanti, etc.*

Esistono più di 60.000.000 di molecole organiche e il loro numero è in costante aumento.

L'atomo di carbonio

- Numero Atomico: 6
- 2 Isotopi
 - ^{12}C (98,9%): 6 protoni, 6 neutroni
 - ^{13}C (1,1%): 6 protoni, 7 neutroni
- Configurazione elettronica: $1s^2 2s^2 2p^2$
4 elettroni nel guscio più esterno

1. Il Carbonio forma legami covalenti con altri elementi

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

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

Nella maggior parte delle molecole organiche il carbonio è combinato con relativamente pochi elementi.

2. Il Carbonio è tetravalente

C: $1s^2 2s^2 2p^2$ 4 elettroni di valenza che vengono condivisi per completare l'ottetto

1

2

Valenze

3

4

3

2

1

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

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

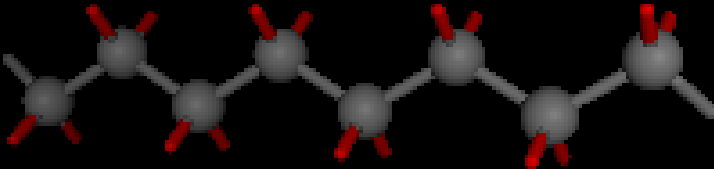
Valenze: numero di elettroni necessari per il completamento del "doppietto" (H) e dell'ottetto (C, N, O, Hal, ..) nel caso di atomi neutri

3. Il Carbonio forma legami molto forti

Legame	Energia di dissociazione (kJ/M)
C—C	360
C—H	400-550
C—O	350-400
C—N	360
N—N	250
O—O	180

4 Il Carbonio forma catene

Energia (kJ/mol)

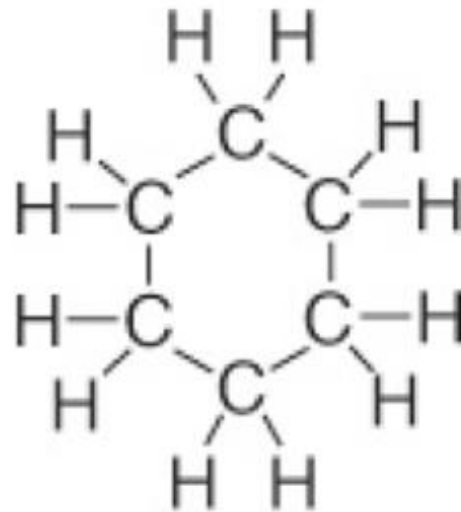
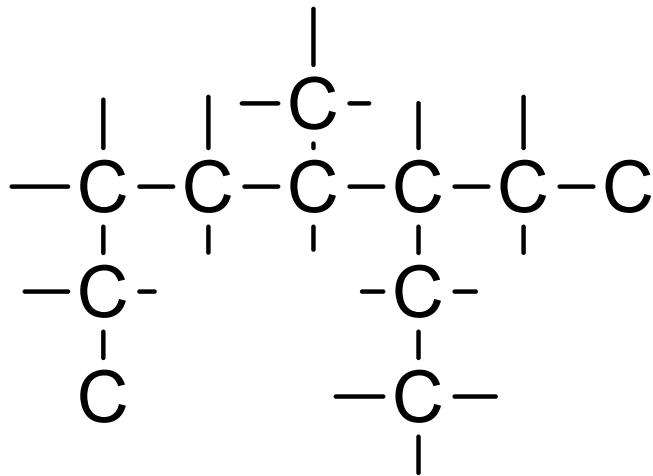


C-C	360
N-N	230-280
O-O	160-200

																		1	2						
3	4																	5	6	7	8	9	10	11	12
Li Lithium 6.9	Be Beryllium 9.0																	B Boron 10.8	C Carbon 12.0	N Nitrogen 14.0	O Oxygen 16.0	F Fluorine 19.0	Ne Neon 20.2		
11	12																	13	14	15	16	17	18		
Na Sodium 23.0	Mg Magnesium 24.3																	Al Aluminum 27.0	Si Silicon 28.1	P Phosphorus 31.0	S Sulfur 32.1	Cl Chlorine 35.5	Ar Argon 39.9		
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36								
K Potassium 39.1	Ca Calcium 40.0	Sc Scandium 44.9	Ti Titanium 47.9	V Vanadium 50.9	Cr Chromium 52.0	Mn Manganese 54.9	Fe Iron 55.8	Co Cobalt 58.9	Ni Nickel 58.7	Cu Copper 63.5	Zn Zinc 65.4	Ga Gallium 69.7	Ge Germanium 72.6	As Arsenic 74.9	Se Selenium 79.0	Br Bromine 79.9	Kr Krypton 83.8								
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54								
Rb Rubidium 85.5	Sr Strontium 87.6	Y Yttrium 88.9	Zr Zirconium 91.2	Nb Niobium 92.9	Mo Molybdenum 95.9	Tc Technetium 98.9	Ru Ruthenium 101.1	Rh Rhodium 106.4	Pd Palladium 107.9	Ag Silver 107.9	Cd Cadmium 112.4	In Indium 114.8	Sn Tin 118.7	Sb Antimony 121.8	Te Tellurium 127.6	I Iodine 126.9	Xe Xenon 131.3								
55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72								
Cs Cesium 132.9	Ba Barium 137.4	La Lanthanum 138.9	Hf Hafnium 168.9	Ta Tantalum 180.9	W Tungsten 183.8	Re Rhenium 186.2	Os Osmium 190.2	Ir Iridium 192.2	Pt Platinum 195.1	Au Gold 197.0	Hg Mercury 200.6	Tl Thallium 204.4	Pb Lead 207.2	Bi Bismuth 209.0	Po Polonium 210.0	At Astatine 210.0	Rn Radon 222.0								
87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104								
Fr Francium 223.0	Ra Radium 226.0	Ac Actinium 227.0	Th Thorium 232.0	Pa Protactinium 231.0	U Uranium 238.0	Np Neptunium 237.0	Pu Plutonium 244.0	Am Americium 243.0	Cm Curium 247.0	Bk Berkelium 247.0	Cf Californium 251.0	Es Einsteinium 252.0	Fm Fermium 257.0	Md Mendelevium 258.0	No Nobelium 259.0	Lr Lawrencium 260.0									
105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	119	120	121	122								
La Lanthanum 138.9	Ce Cerium 140.1	Pr Praseodymium 140.9	Nd Neodymium 144.2	Pm Promethium 144.9	Sm Samarium 150.4	Eu Europium 151.9	Gd Gadolinium 157.3	Tb Terbium 158.9	Dy Dysprosium 162.5	Ho Holmium 164.9	Er Erbium 167.3	Tm Thulium 168.9	Yb Ytterbium 173.0	Lu Lutetium 175.0											
Ac Actinium 138.9	Th Thorium 232.0	Pa Protactinium 231.0	U Uranium 238.0	Np Neptunium 237.0	Pu Plutonium 244.0	Am Americium 243.0	Cm Curium 247.0	Bk Berkelium 247.0	Cf Californium 251.0	Es Einsteinium 252.0	Fm Fermium 257.0	Md Mendelevium 258.0	No Nobelium 259.0	Lr Lawrencium 260.0											

$$2s^2 2p^2$$
 $3s^2 3p^4$

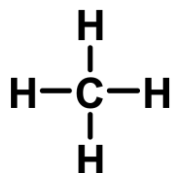
5. Il carbonio forma catene ramificate e cicli



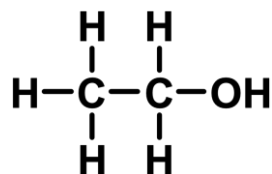
6. Il carbonio forma legami multipli

Legame	Energia di dissociazione (kJ/M)
$\text{C} \text{---} \text{C}$	360
$\text{C} = \text{C}$	700
$\text{C} \equiv \text{C}$	950
$\text{C} \text{---} \text{O}$	400
$\text{C} = \text{O}$	750
$\text{C} \text{---} \text{N}$	360
$\text{C} = \text{N}$	700
$\text{C} \equiv \text{N}$	950

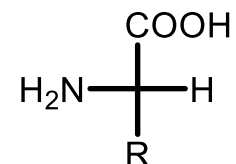
Composti Organici



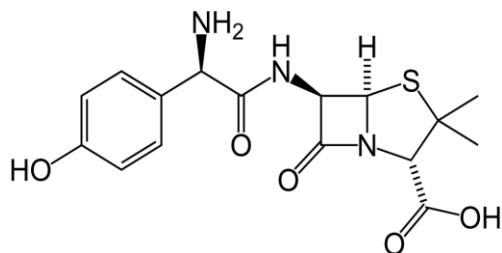
Metano



Etanolo

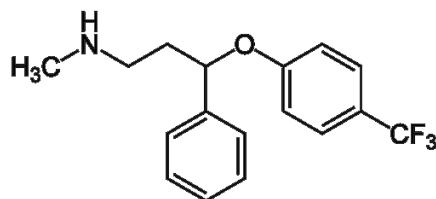


α -aminoacidi



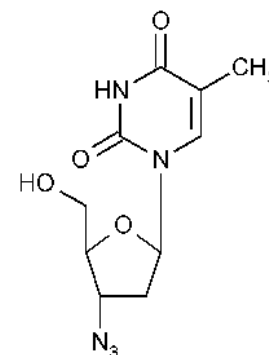
Amoxicillina

(2*S*,5*R*,6*R*)-6-(2-amino-2-(4-idroxyphenyl)acetamido)-3,3-dimehil-7-oss-4-tia-1-azabiclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid



Fluoxetina
Prozac

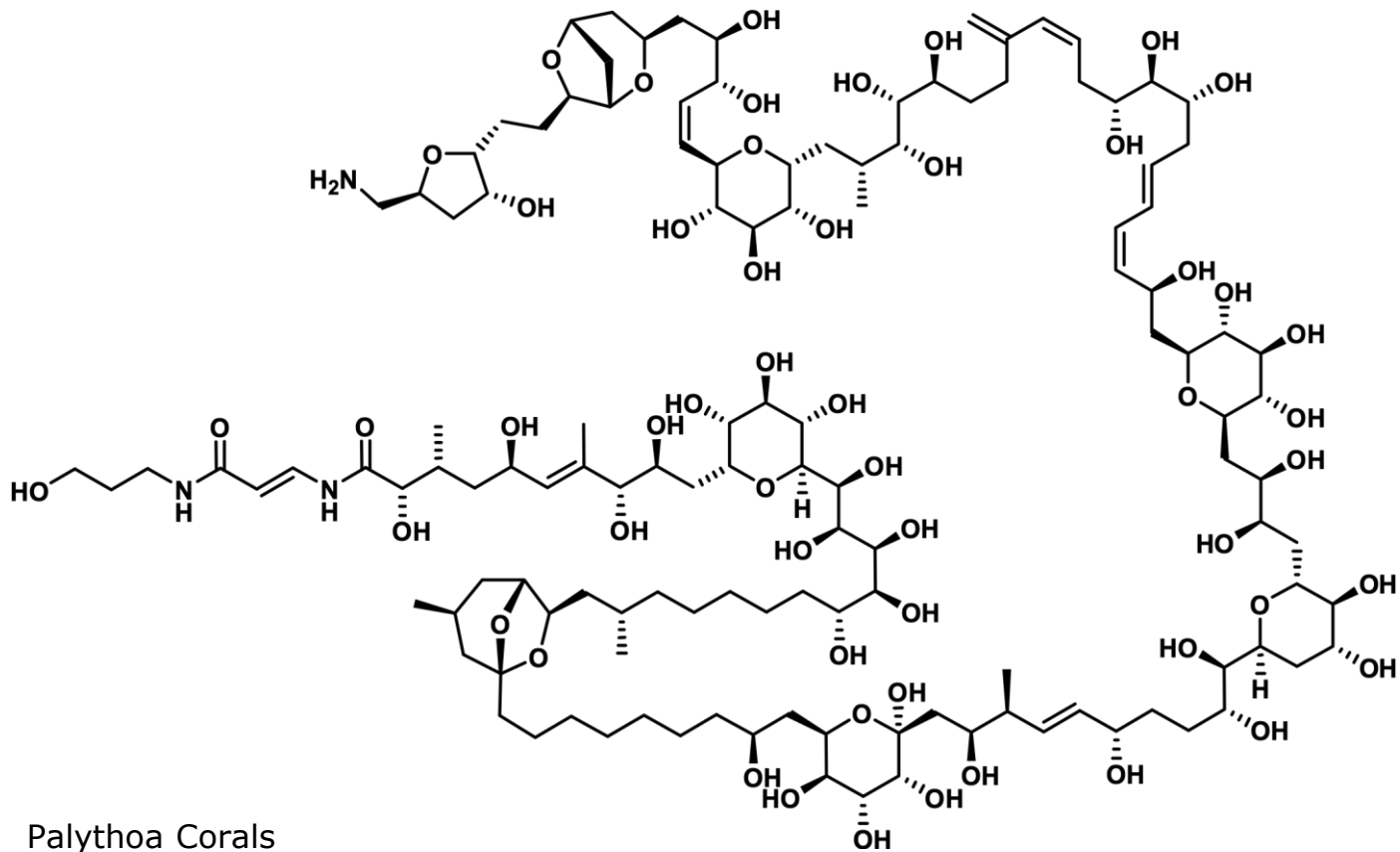
N-metil-3-fenil-3-[4-(trifluorometil)fenoss]propan-1-amina



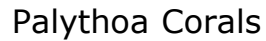
AZT

3'-azido-3'-deossitimidina

Composti organici



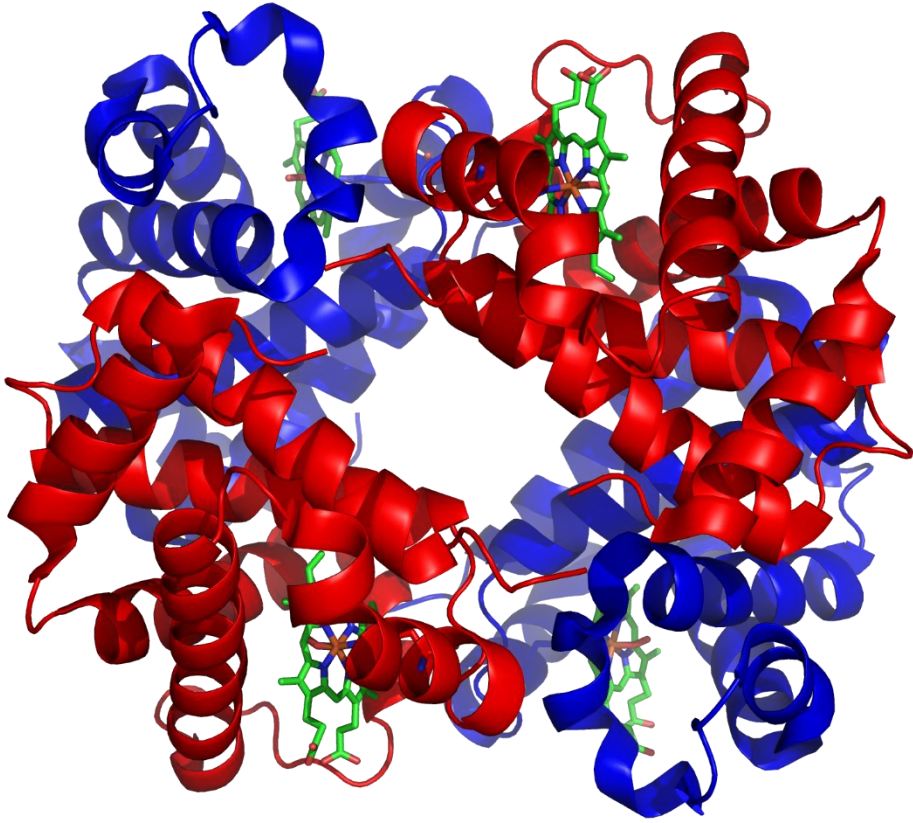
Palitossina



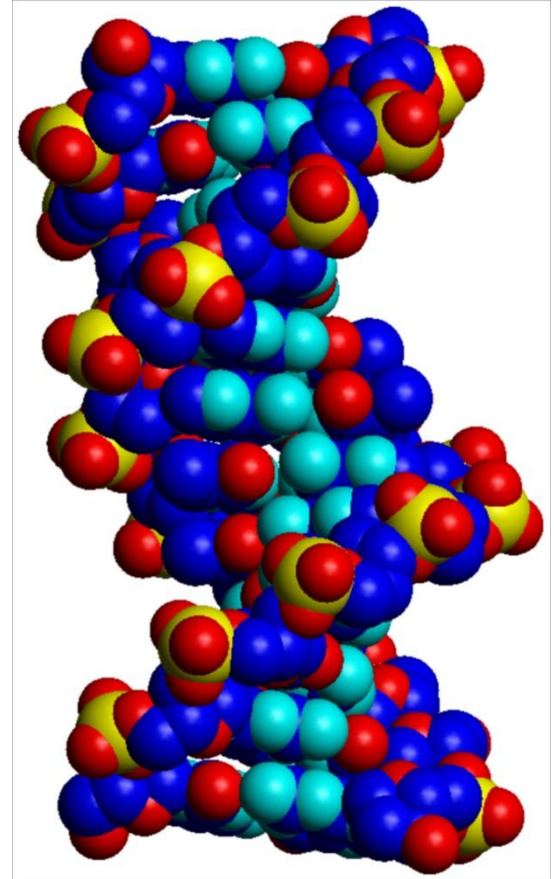
Lophozozymus pictor



Composti organici

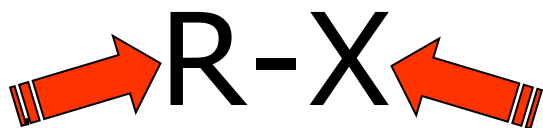


Proteine



DNA

Come è fatta una molecola organica



Residuo Organico
(Catena idrocarbonica)

(da un idrocarburo)

Gruppo Funzionale

(eteroatomo o gruppo di atomi che
contiene uno o più eteroatomi)

Un gruppo funzionale è un atomo o un gruppo di atomi in parte o interamente diversi dal C che hanno specifiche e ben definite proprietà chimico-fisiche.

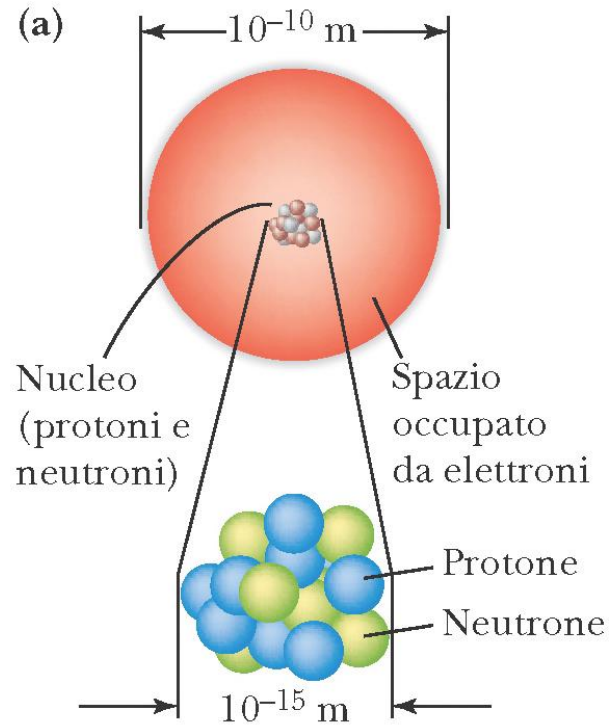
Struttura atomica e legami

1. L'atomo

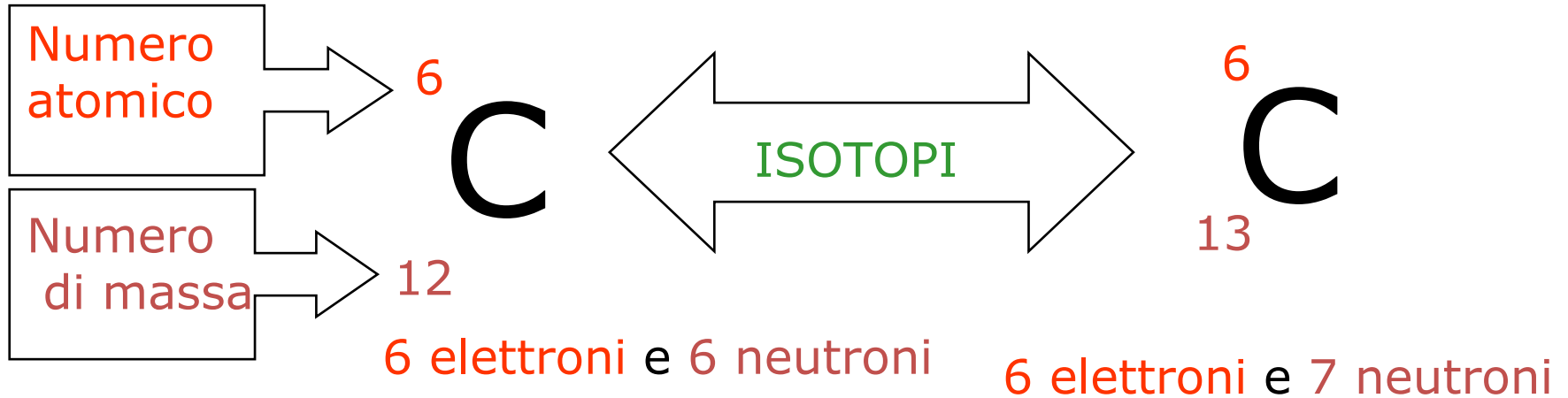
L' Atomo

Nucleo: neutroni e protoni

Spazio extranucleare: elettroni



L' Atomo



Numero atomico: numero di protoni (coincide con il numero di elettroni nell'atomo elettricamente neutro)

Massa atomica: media pesata dei numeri di massa su tutti gli isotopi

Numero di massa: numero di protoni + numero di neutroni

Struttura elettronica degli atomi

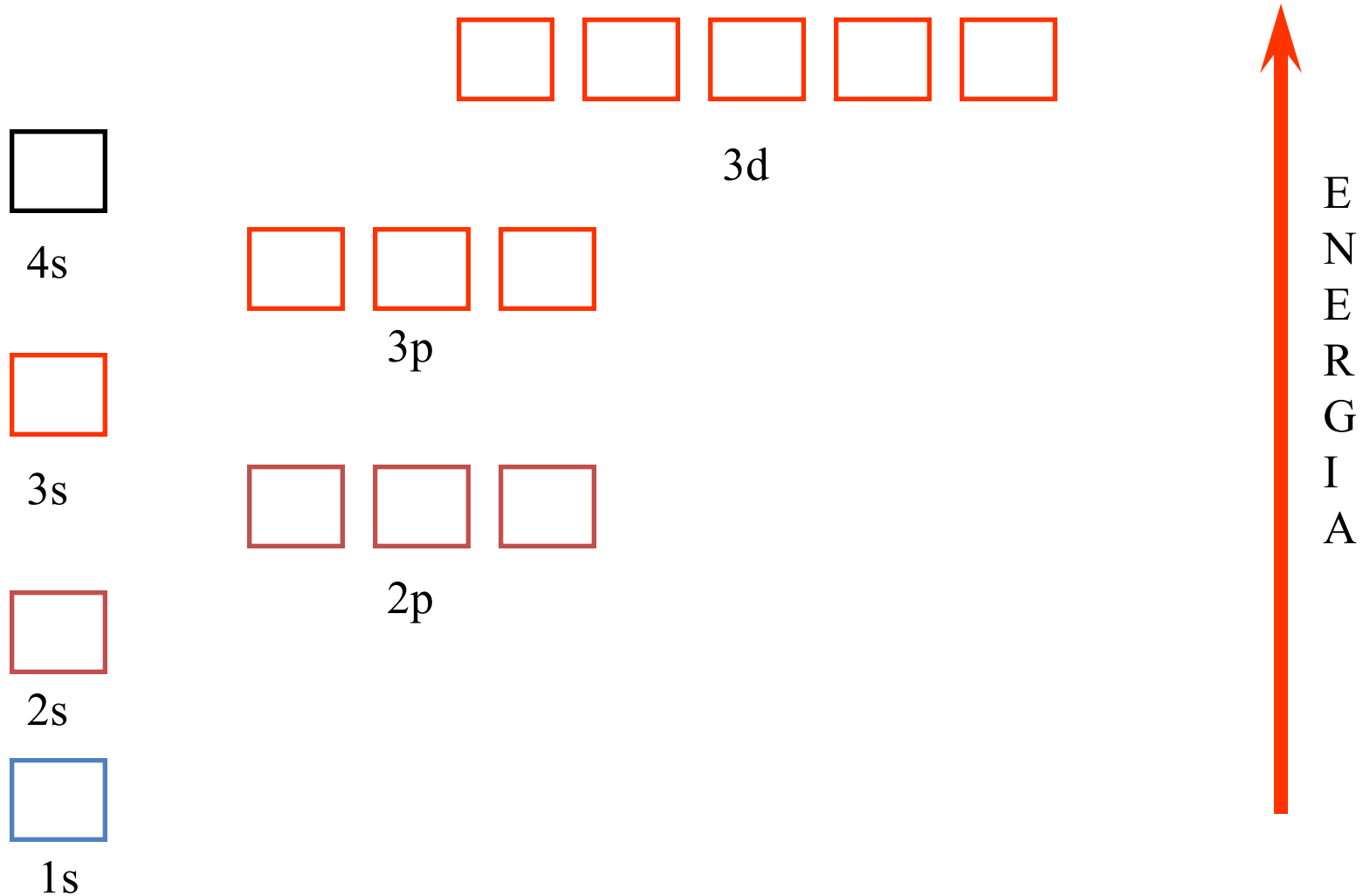
La configurazione elettronica di un atomo è la descrizione di come gli elettroni di un atomo sono distribuiti in livelli e sottolivelli energetici (orbitali) attorno al nucleo.

Descrizione della struttura elettronica di un elemento

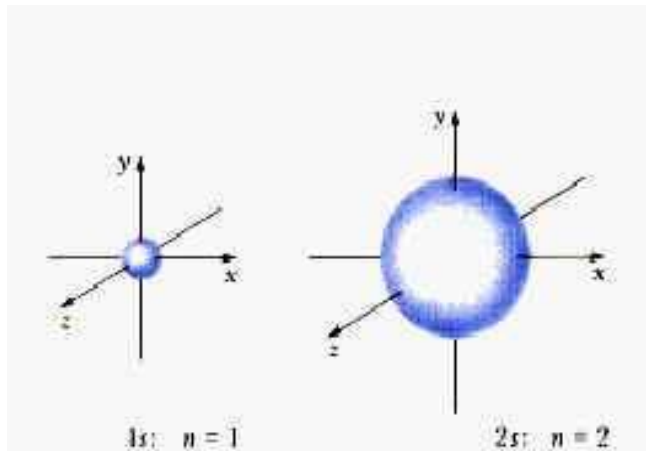
Principio dell'AUFBAU: Gli elettroni occupano prima gli orbitali a energia più bassa

- Regola di Hund:** massimo 2 elettroni per orbitale con spin opposto)
- Principio di Esclusione di Pauli:** regola della massima molteplicità nel riempimento di orbitali degeneri

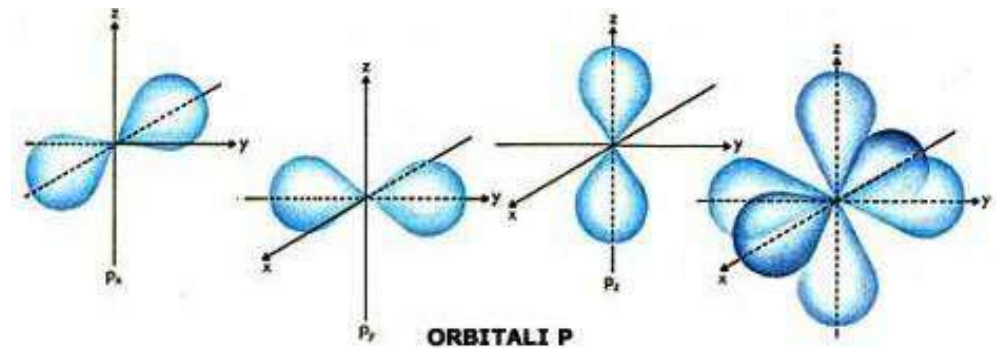
Ordine corretto di riempimento dei primi 30 atomi



Orbitali atomici s e p



Orbitali s
Simmetria sferica

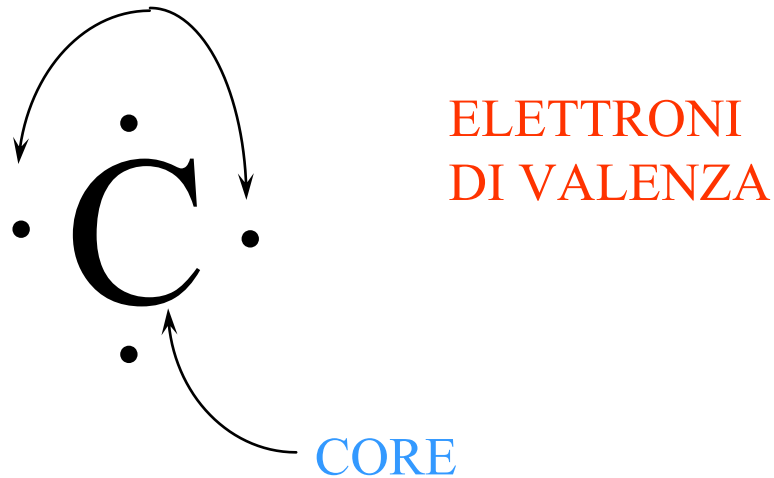


Orbitali p_x p_y p_z
Doppio lobo

Configurazione Elettronica fondamentale

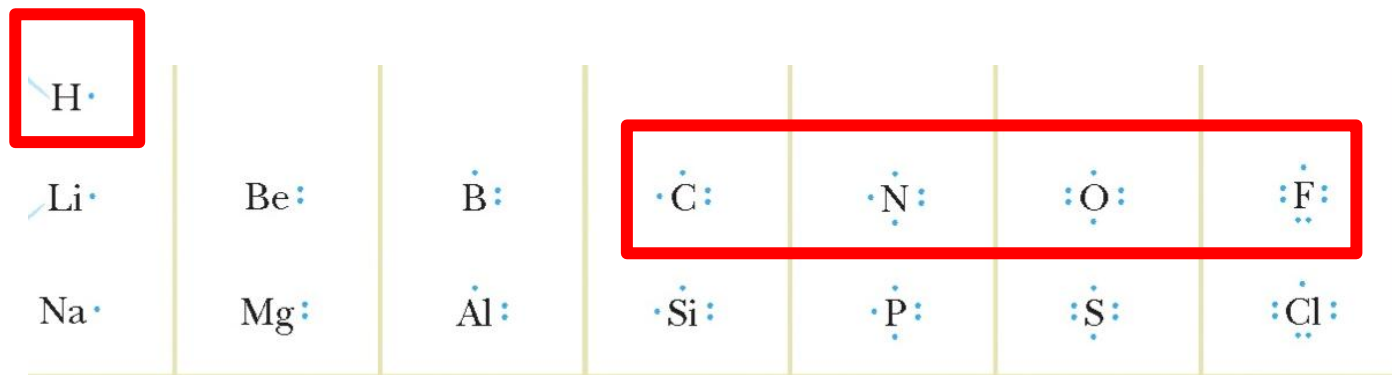
Prima riga	H	1	$1s^1$	
	He	2	$1s^2$	
Seconda riga	Li	3	$[1s^2] 2s^1$	[CORE] VALENCE SHELL 4e- nel guscio più esterno 5e- nel guscio più esterno 6e- nel guscio più esterno 7e- nel guscio più esterno configurazione dell'ottetto
	Be	4	$[1s^2] 2s^2$	
	B	5	$[1s^2] 2s^2 2p_x^1$	
	C	6	$[1s^2] 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$	
	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	$[1s^2] 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$	
	Ne	10	$[1s^2] 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2$	
Terza riga	Na	11	$[1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2] 3s^1$	
	.	.	.	
	Cl	17	$[1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^2] 3s^2 3p_x^2 3p_y^2 3p_z^1$	7e- nel guscio più esterno

Simboli di Lewis di elementi comuni



[CORE] ELETTRONI DI VALENZA

Simboli di Lewis di elementi comuni



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

Elettroni di valenza:
elettroni del guscio più esterno

Simboli di Lewis di elementi comuni

I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
H ·							He ··
Li ·	· Be ·	· B ·	· C ·	· N ·	· O ·	· F ·	· Ne ·
Na ·	· Mg ·	· Al ·	· Si ·	· P ·	· S ·	· Cl ·	· Ar ·
K ·	· Ca ·		· Ge ·	· As ·	· Se ·	· Br ·	· Kr ·
			· Sn ·	· Sb ·	· Te ·	· I ·	· Xe ·

Struttura atomica e legami

2. Formazione dei legami

Regola dell'ottetto

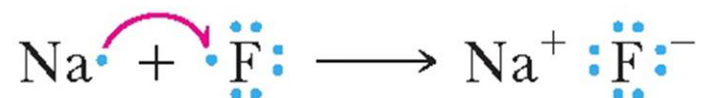
- Gli atomi del II periodo si combinano in modo da raggiungere un guscio esterno con otto elettroni di valenza (due nel caso di H)
- Due modi per completare l'ottetto:

1. L'atomo 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 in comune gli elettroni (**legame covalente**)

Legame ionico



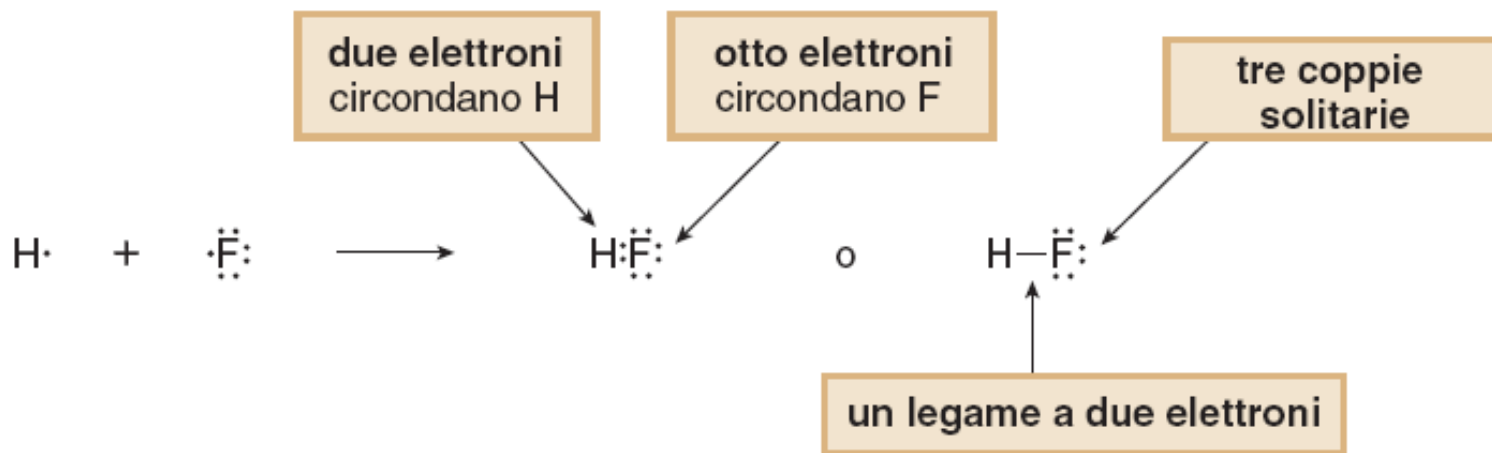
Legame covalente

1. Modelli di Lewis del legame covalente
2. Teoria VSEPR
3. Teoria del legame di valenza

Strutture di Lewis

Ci sono tre regole generali per disegnare strutture di Lewis di molecole neutre:

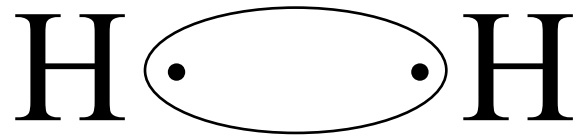
1. Disegnare solo gli elettroni di valenza.
2. Assegnare ad ogni elemento della seconda riga un ottetto di elettroni, se possibile.
3. Assegnare ad ogni idrogeno due elettroni.



In una struttura di Lewis, **una linea piena** indica un legame covalente a due elettroni.

Un legame covalente semplice

Una coppia di elettroni è condivisa fra due atomi legati.



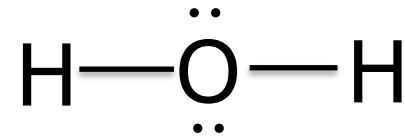
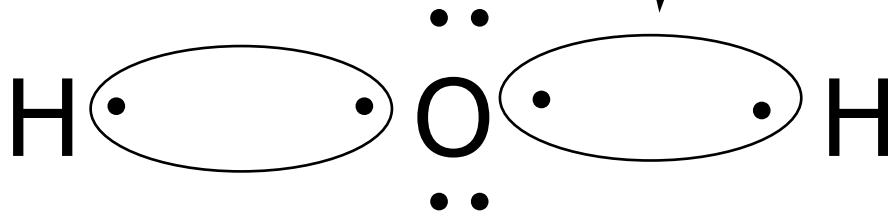
Coppia di legame



Diagramma di Lewis dell'H₂O



LEGAMI COVALENTI



Struttura di Lewis dell'acqua

Diagramma di Lewis del metano

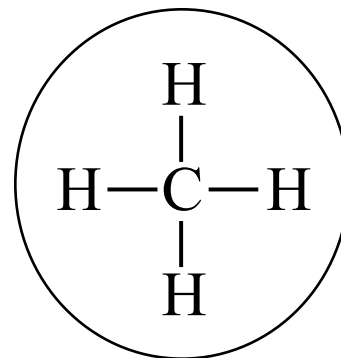
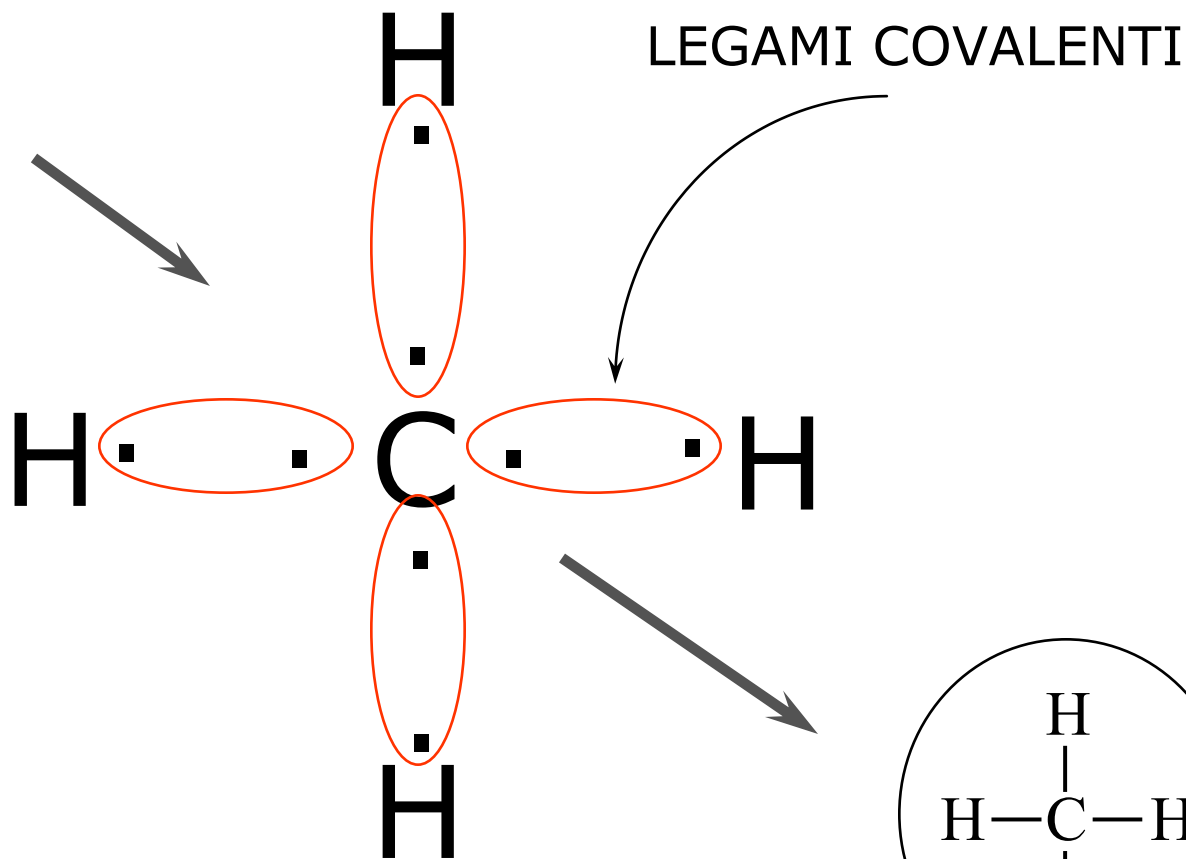
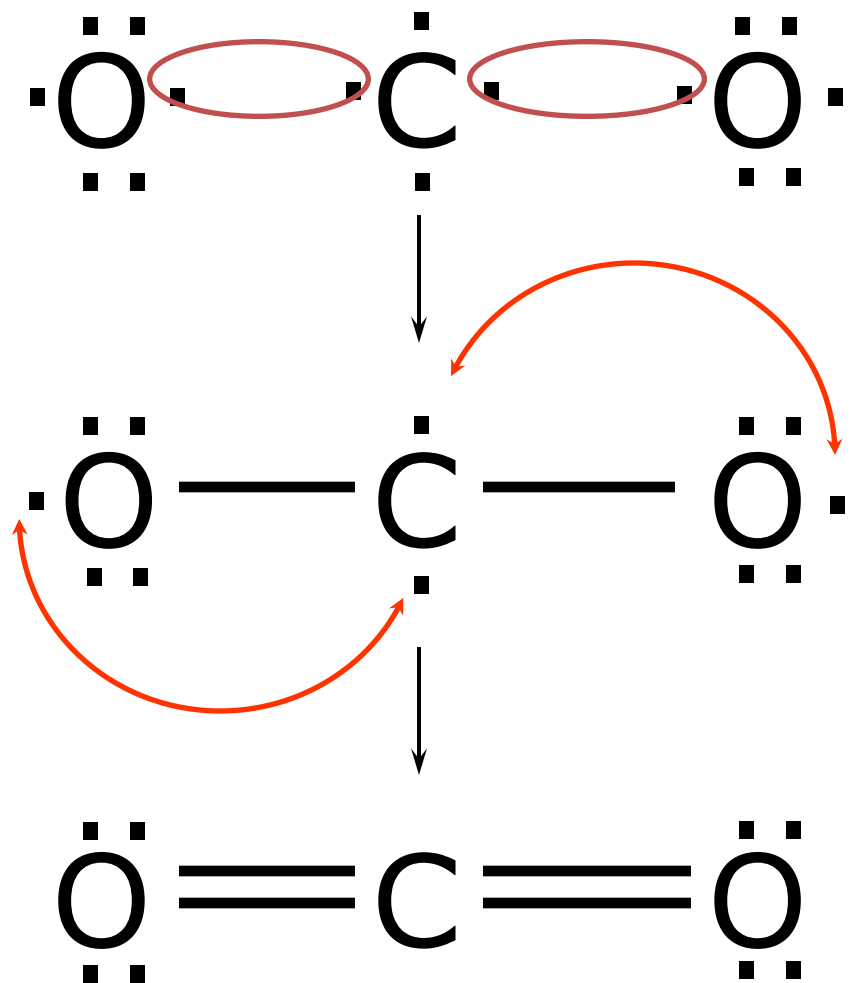


Diagramma di Lewis del diossido di carbonio



Rappresentazioni grafiche convenzionali

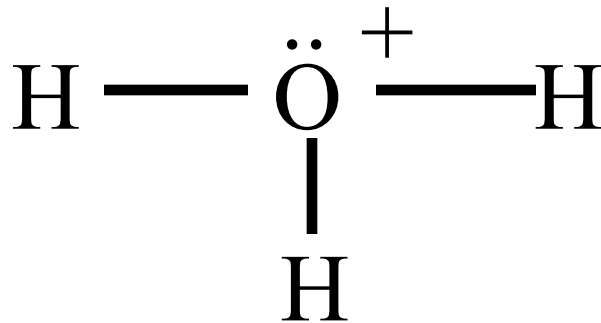
1. Un doppietto elettronico condiviso (coppia di legame) viene rappresentato da una linea



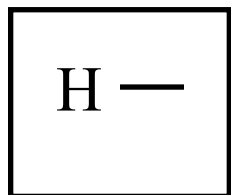
2. Un doppietto elettronico non condiviso (coppia di non legame) viene rappresentata da una coppia di punti



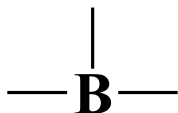
3. Il disegno include le eventuali **cariche formali**.



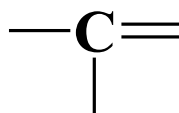
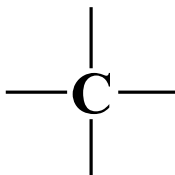
Patterns di legame per elementi comuni neutri



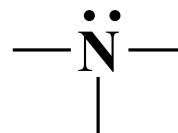
Monovalente
senza coppie



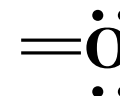
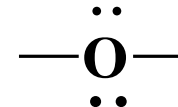
Trivalente
senza coppie



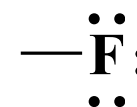
Tetravalente
senza coppie



Trivalente
una coppia



Bivalente
due coppie



Monovalente
tre coppie

Numero di legami covalenti degli atomi in molecole organiche neutre

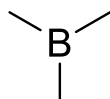
idrogeno $\text{H}—$ 1 legame

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

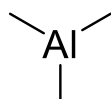
azoto $\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ —\text{N} \diagup \diagdown \end{array}$ $—\ddot{\text{N}}=$ $\ddot{\text{N}}\equiv$ 3 legami e un doppietto non condiviso

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

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



boro

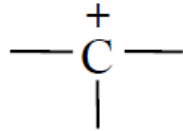


alluminio

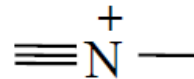
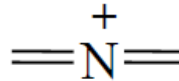
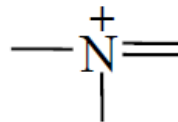
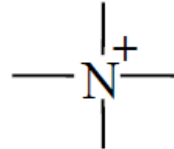
3 legami, non rispettano la regola dell'ottetto

Patterns di legame per elementi comuni carichi

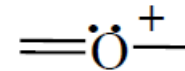
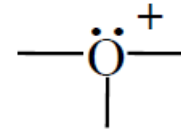
CATIONI



Trivalente
senza coppie

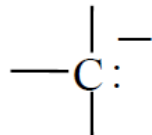


Tetravalente
senza coppie

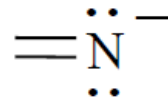
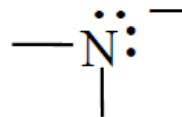


Trivalente
una coppia

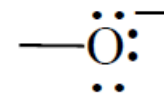
ANIONI



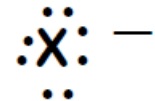
Trivalente
una coppia



Bivalente due
coppie



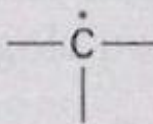
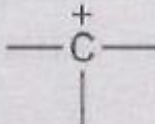
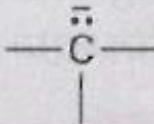
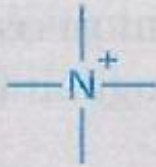
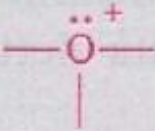
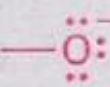
Monovalente
tre coppie



Quattro
coppie

Cariche formali più comuni

Tabella 2.2 Un sommario delle cariche formali più comuni

Atomo	C			N	O		
Struttura							

C radicalico : $4 - 1 - 3 = 0$

Carbocatione : $4 - 0 - 3 = +1$

Carbanione : $4 - 2 - 3 = -1$

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

Esercizi

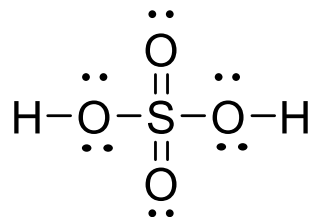
Scrivere le strutture di Lewis
delle seguenti molecole

- 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

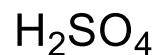
Disegnare molecole organiche

Formule Molecolari

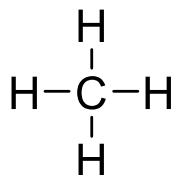
Strutturali (di Lewis)



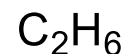
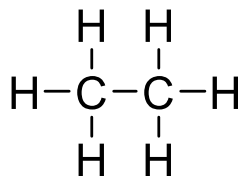
Empiriche



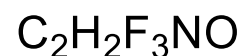
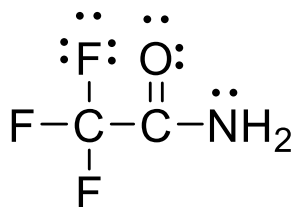
Acido solforico



Metano



Etano

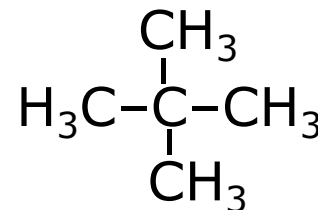
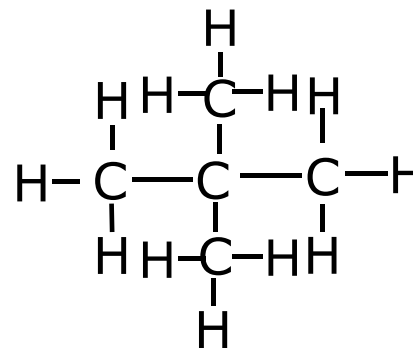
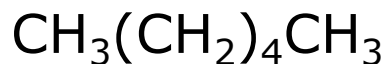
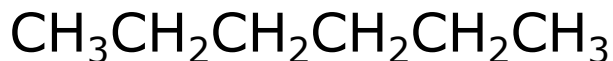
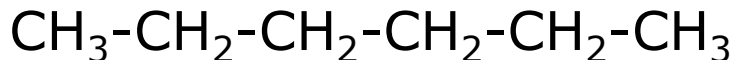
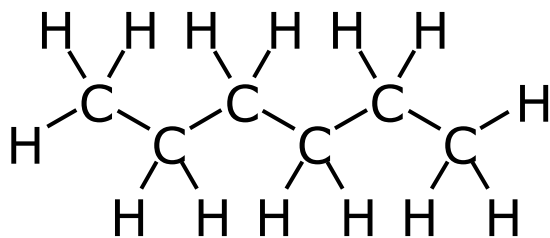


Trifluoroacetamide

Generica formula empirica di composti organici: $\text{C}_\text{C}\text{H}_\text{H}\text{Br}_\text{Br}\text{Cl}_\text{Cl}\text{F}_\text{F}\text{I}_\text{I}\text{N}_\text{N}\text{O}_\text{O}$

Formule condensate

- Diversi gradi di condensazione

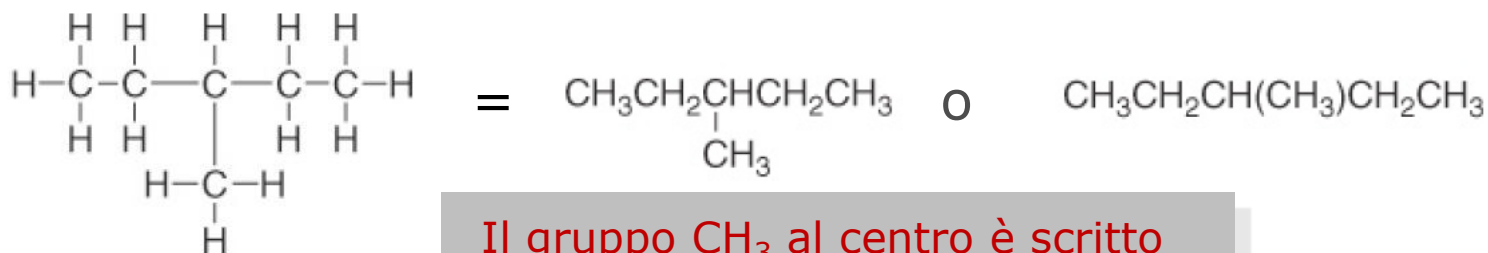


Alcuni
legami
sono
mantenuti

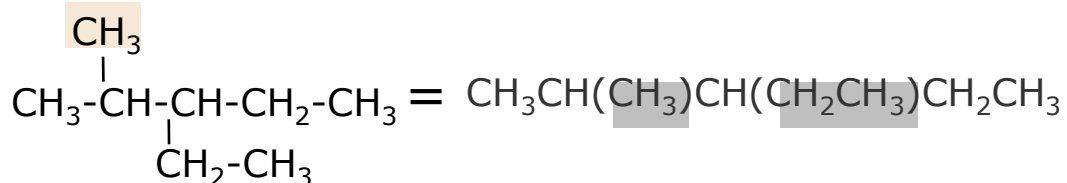


Formule condensate

- Strutture di alcani ramificati possono essere scritte su una sola linea usando le parentesi.



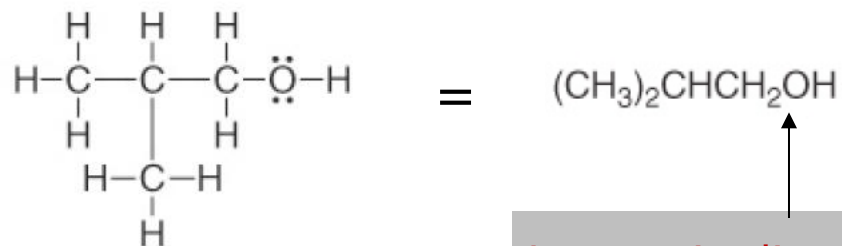
Il gruppo CH₃ al centro è scritto al di fuori della catena evidenziando un legame



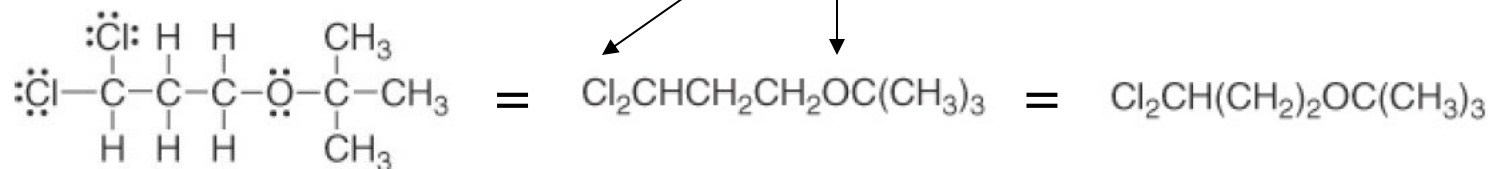
Formule condensate



Il doppio legame è mantenuto



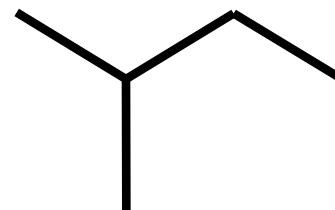
Le coppie di non legame sono omesse



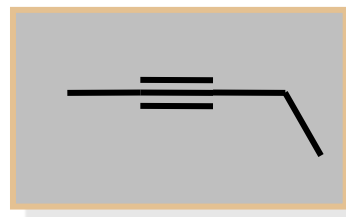
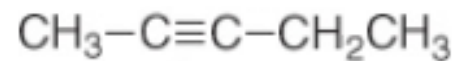
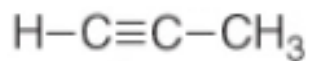
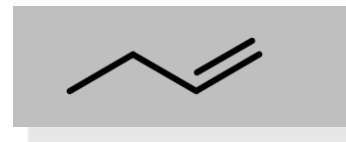
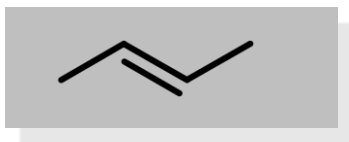
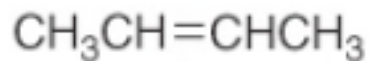
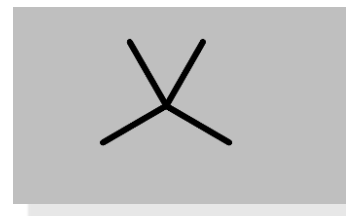
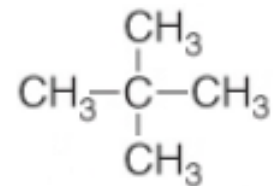
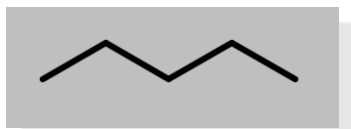
Formule lineari (a zig-zag)

Informazioni minimali, non ambigue.

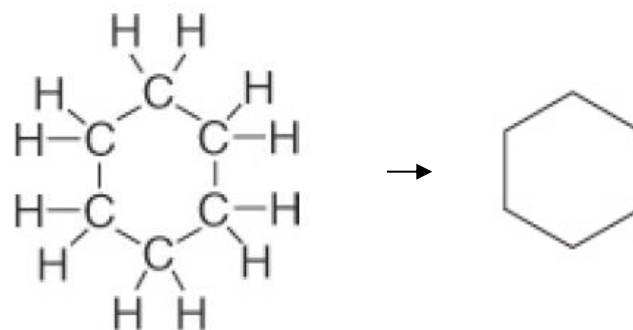
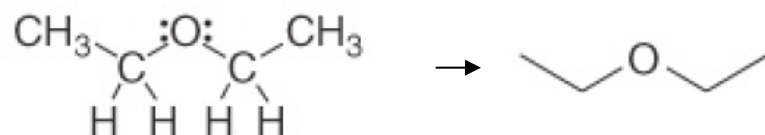
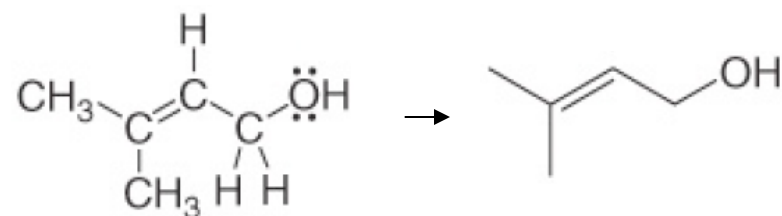
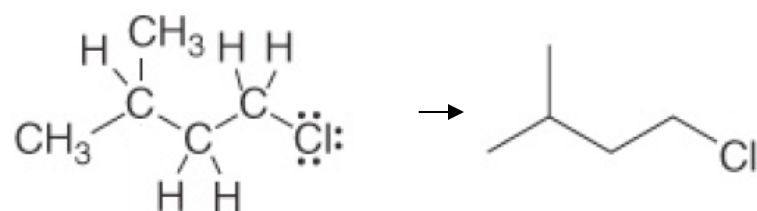
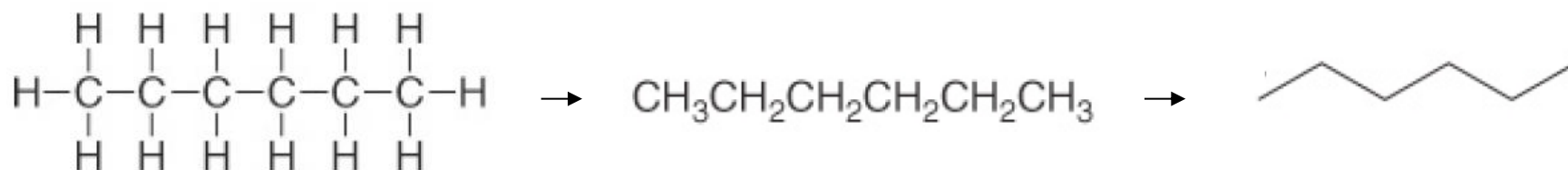
- Gli atomi di carbonio sono omessi. Essi si trovano ai punti di incontro di segmenti e alla fine delle catene.
- Gli atomi di idrogeno sono omessi. Ogni valenza libera del C è saturata da idrogeni.
- Eteroatomi non vengono omessi.



Formule lineari (a zig-zag)



Esempi



Limiti del modello di Lewis

Il modello di Lewis si basa solo su una conta di elettroni.
Non è in grado di spiegare geometria e proprietà chimiche

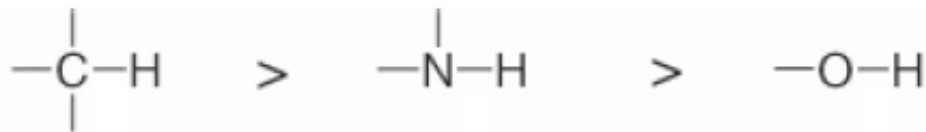
Struttura molecolare

La struttura di una molecola è definita da:

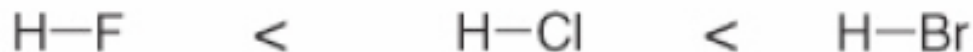
Lunghezze di legame: distanze tra i due nuclei che partecipano a un legame covalente (si misura in angstrom Å) $1 \text{ Å} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$

Angoli di legame: angoli formati dagli assi congiungenti i nuclei degli atomi legati

Lunghezze di legame *diminuiscono* lungo un periodo.



Lunghezze di legame *aumentano* lungo un gruppo



Lunghezze di legame

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		

Geometria – Teoria VSEPR

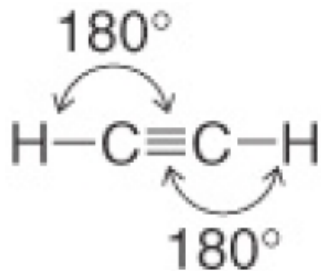
- Il numero di GRUPPI (*Valence Shell Electron Pairs*) intorno ad un atomo definisce la sua geometria
- Un **Gruppo** è un atomo o una coppia elettronica di non legame
- I gruppi tendono ad allontanarsi il più possibile

Numero di gruppi	Geometria	Angoli
2	lineare	180°
3	trigonale planare	120°
4	tetraedrica	109.5°

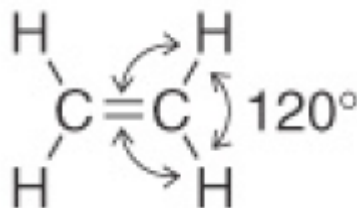
Geometria – Teoria VSEPR

Valence Shell Electron Pairs Repulsion

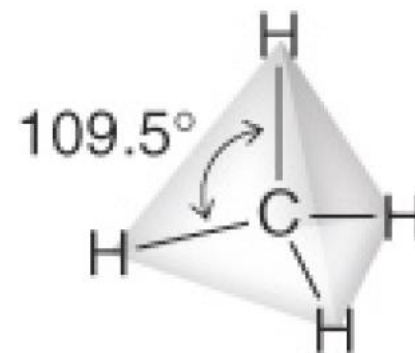
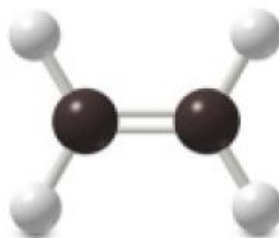
Numero di gruppi	Geometria	Angoli
2	lineare	180°
3	trigonale planare	120°
4	tetraedrica	109.5°



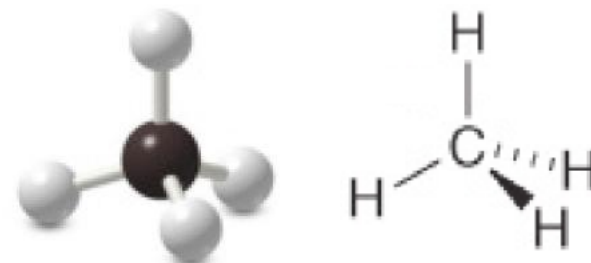
acetilene



etilene

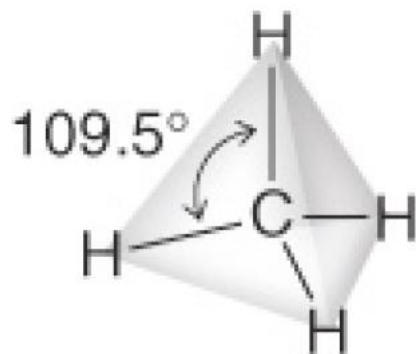


metano



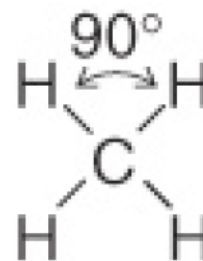
4 gruppi: CH₄

Tetraedrico



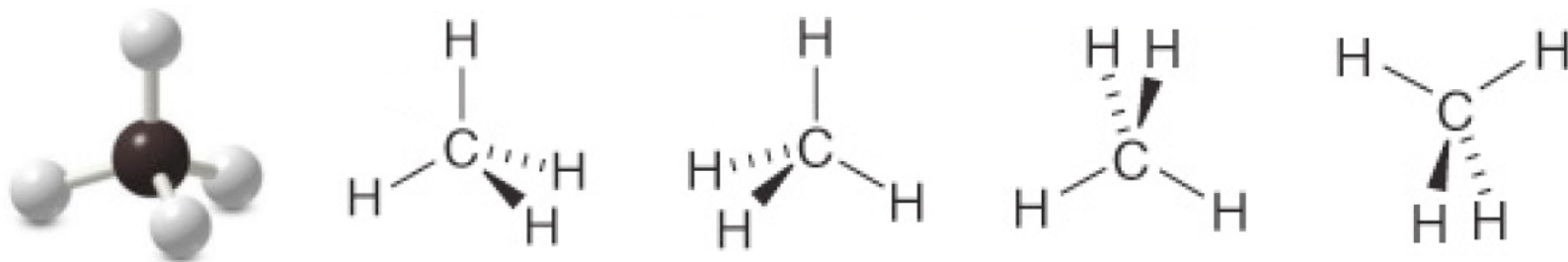
Preferred

Planare quadrato



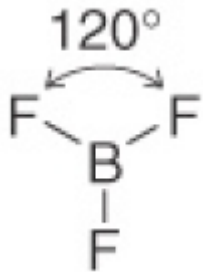
Not observed

Rappresentazione tridimensionale del metano



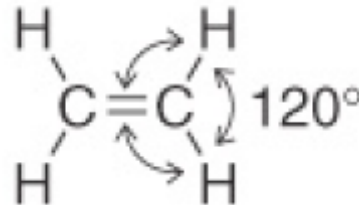
3 gruppi: BF_3 e C_2H_4

2 molecole trigonali



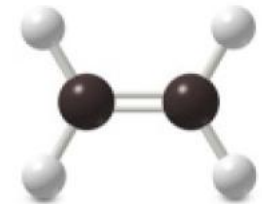
3 atomi intorno al B

Tutti 3 gli atomi sono
nel piano



3 atomi intorno ogni C

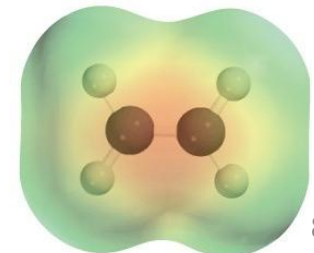
Tutti 6 gli atomi sono
nel piano



ball-and-stick model



space-filling model

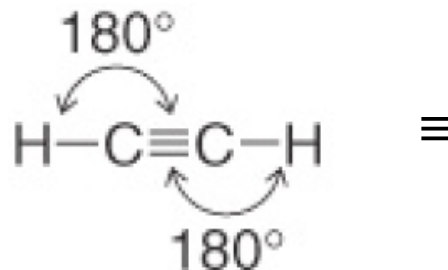


2 gruppi: BeH_2 e C_2H_2

2 molecole lineari



2 atomi intorno al Be



2 atomi intorno a ogni C



Energie di legami multipli

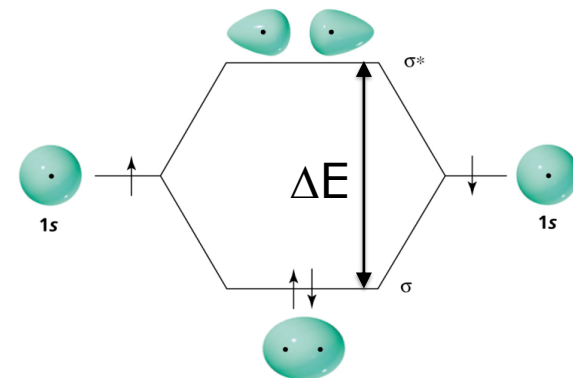
Legame	Energia di dissociazione (kJ/M)
$\text{C} \text{---} \text{C}$	360
$\text{C} = \text{C}$	700
$\text{C} \equiv \text{C}$	950
$\text{C} \text{---} \text{O}$	400
$\text{C} = \text{O}$	750
$\text{C} \text{---} \text{N}$	360
$\text{C} = \text{N}$	700
$\text{C} \equiv \text{N}$	950

Il modello di Lewis e VSEPR non sono adeguati

Modelli di legame chimico

- Teoria del legame di valenza
 - Un legame covalente è formato dalla sovrapposizione di due orbitali atomici e la coppia di elettroni è condivisa fra i due atomi.
 - Un legame di valenza è localizzato fra due atomi.
- Teoria degli orbitali molecolari.
 - **n orbitali atomici** si combinano per dare un nuovo set di **n orbitali molecolari** (leganti e non leganti).
 - Gli orbitali molecolari sono delocalizzati su tutta la molecola.

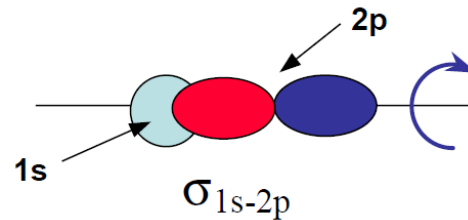
Molecola di H₂



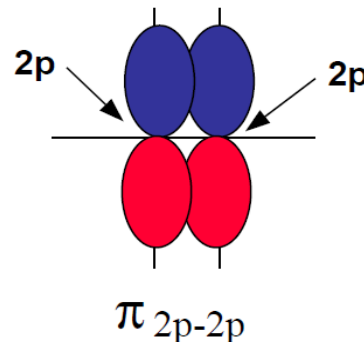
orbitali molecolari

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

- L'idrogeno H usa l'orbitale atomico 1s per formare legami σ
- Gli orbitali 1s sovrappongono lungo l'asse di legame.
- Sovrapposizione diretta = sovrapposizione massima



Orbitali atomici del carbonio

^{12}C $1s^2, 2s^2, 2p^2$



s



2p



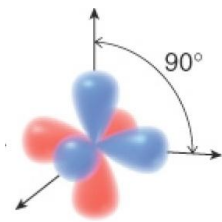
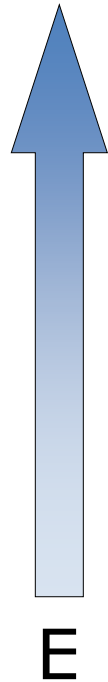
3 x 2p orbitals

Legame covalente secondo il modello del legame di valenza

- Il carbonio e gli atomi della 2^a riga usano **orbitali atomici ibridi** (sp^3 , sp^2 , sp) per formare legami σ con altri atomi.
- Il carbonio e gli atomi della 2^a riga usano orbitali atomici p (non ibridati) per formare legami π che hanno un piano nodale.
- Gli orbitali atomici sovrappongono meglio nei legami σ (sovrapposizione co-lineare, lungo l'asse di legame, come nella molecola di H-H) che nei legami π (sovrapposizione in parallelo).
- 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

Ibridi sp^3

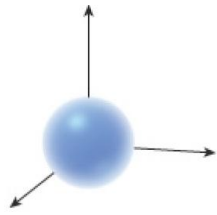
^{12}C $1s^2, 2s^2, 2p^2$



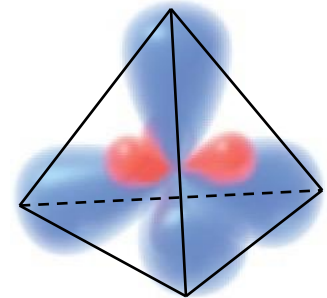
$3 \times 2p$

Degeneri!

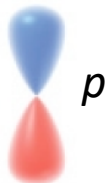
$4 \times sp^3$



$2s$



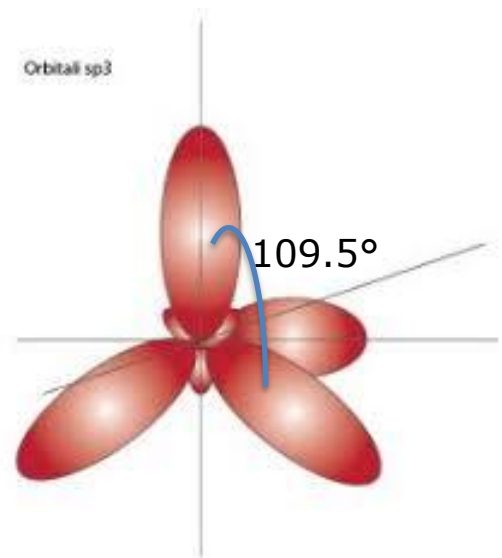
Geometria tetraedrica (come VSEPR)
Angoli di 109.5°



p

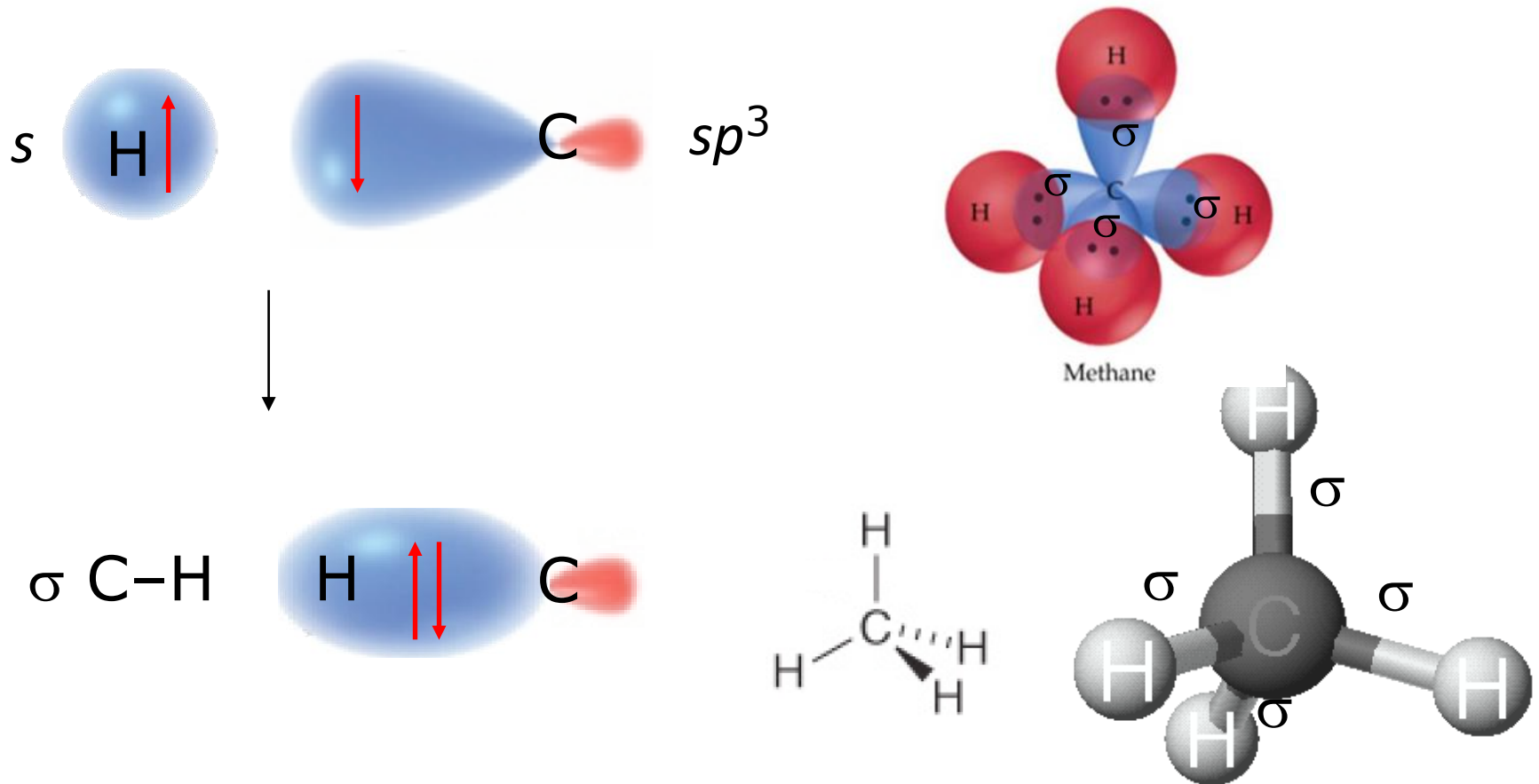


sp^3

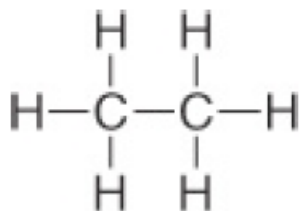


Metano

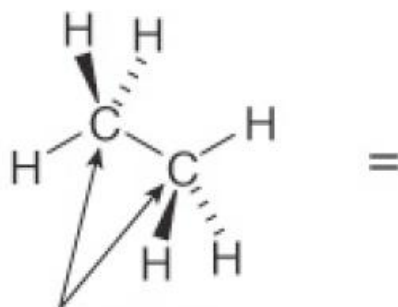
La sovrapposizione di un orbitale $1s$ dell'idrogeno ($1 e^-$) con un orbitale sp^3 del carbonio ($1 e^-$) forma un orbitale σ



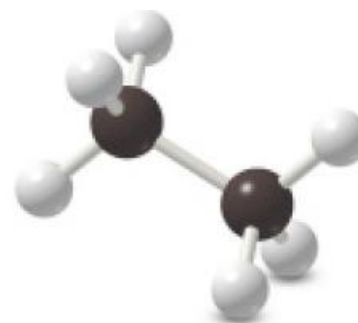
Etano



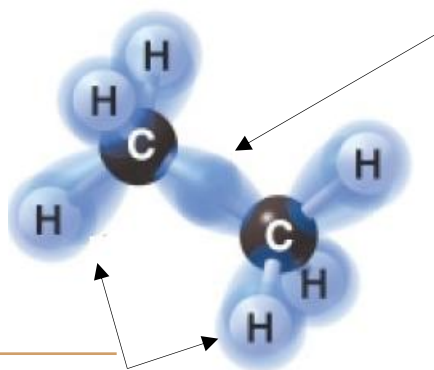
etano



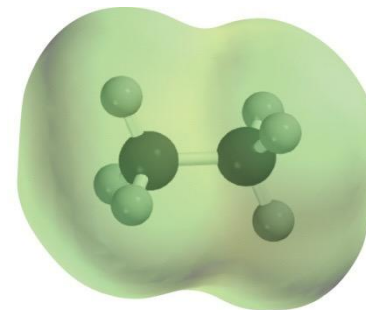
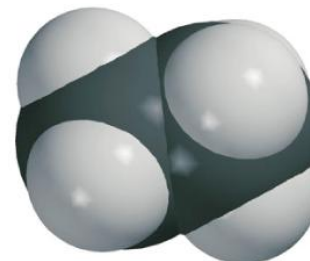
Orbitali sp^3 C
Geometria tetraedrica



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

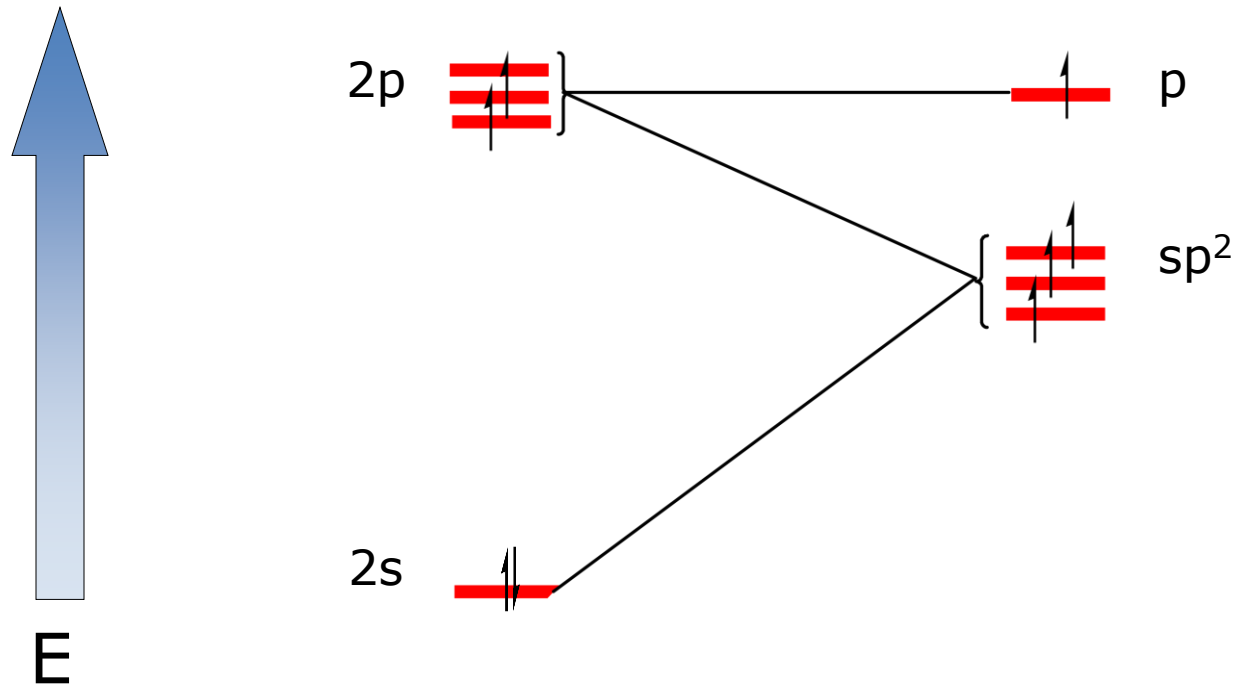


Gli ibridi sp^3 del C
sovrappongono con gli
orbitali atomici $1s$ dell' H
per dare i legami σ C-H.

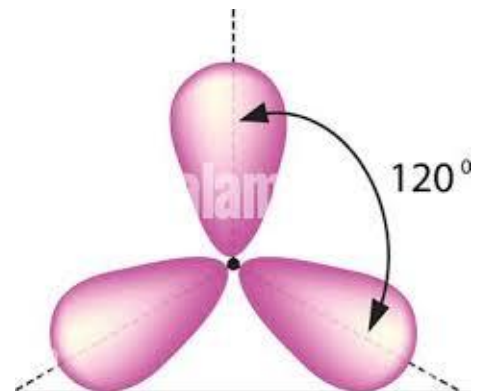


Ibridi sp^2

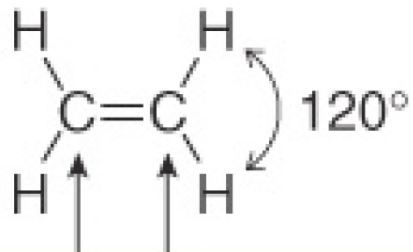
^{12}C $1s^2, 2s^2, 2p^2$



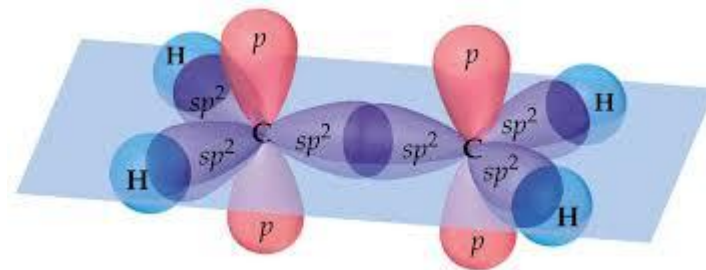
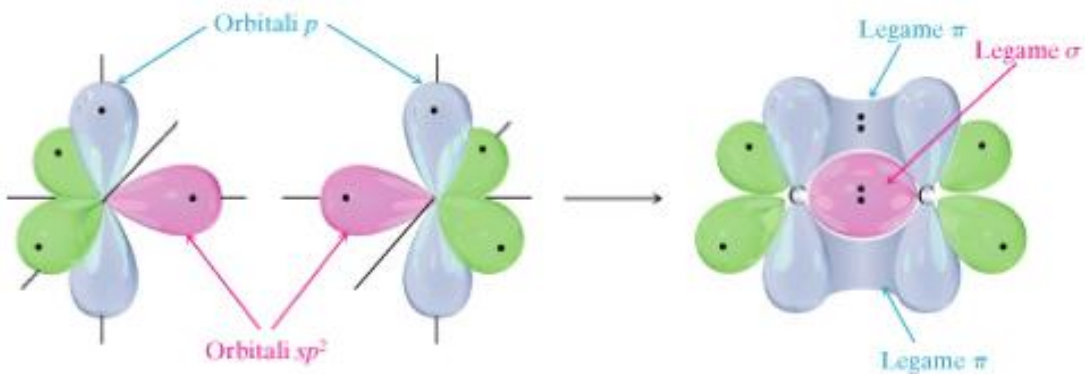
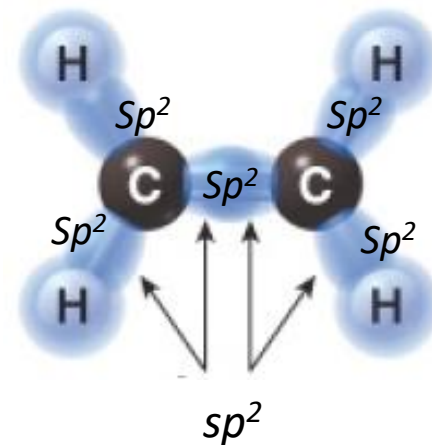
Geometria trigonale planare (come VSEPR)
angoli di 120°



Etilene C_2H_4

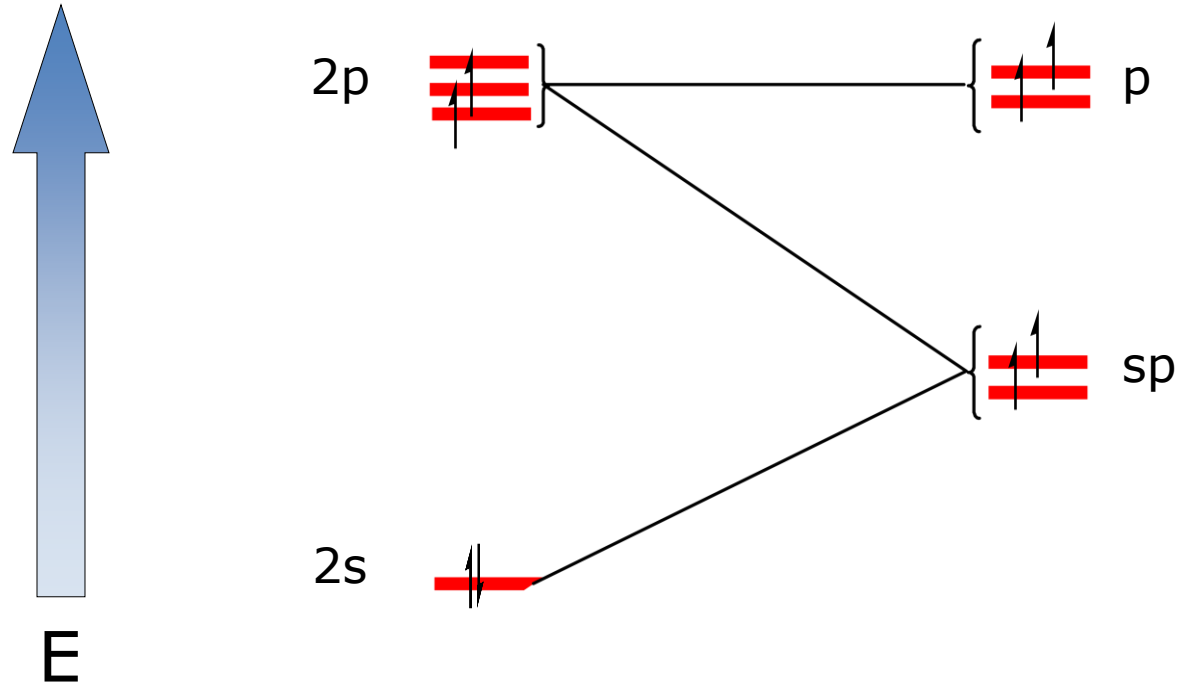


3 gruppi intorno al C
Gli atomi di C sono ibridati sp^2

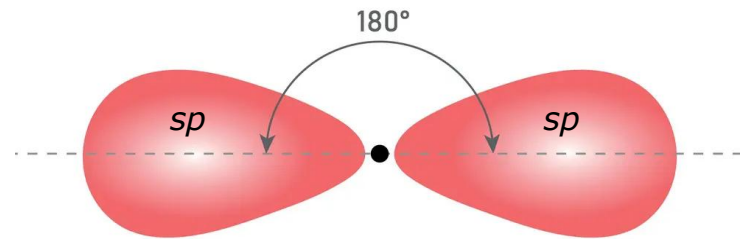


Doppio legame $C=C$
1 legame σ
1 legame π

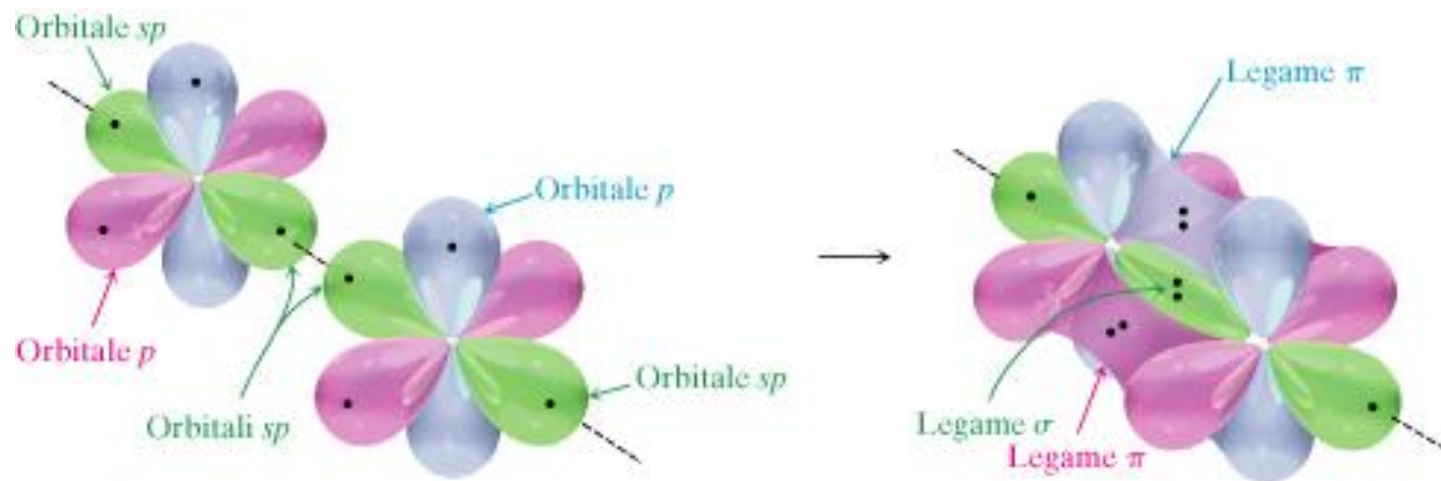
Ibridi sp



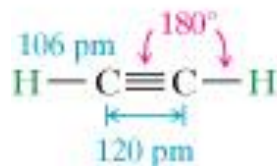
Geometria lineare (come VSEPR)
angoli di 180°



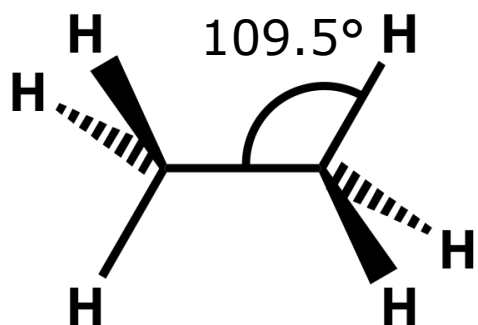
Acetilene C_2H_2



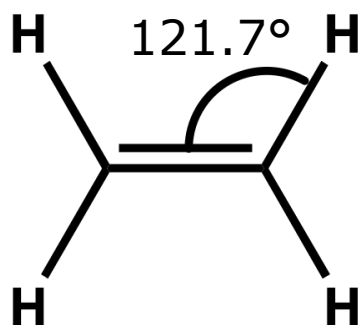
legame triplo $C \equiv C$



Strutture di C₂H₆, C₂H₄, C₂H₂

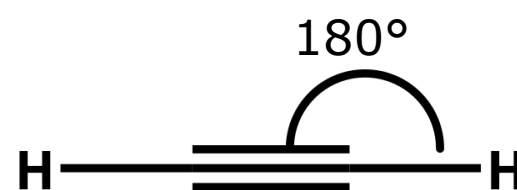


$d_{\text{C-C}} (\text{\AA}):$ 1.54
 $d_{\text{C-H}} (\text{\AA}):$ 1.10
 $E_{\text{C-C}} (\text{kJ/M}):$



1.33
 1.08

611



1.20
 1.06

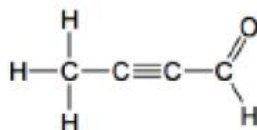
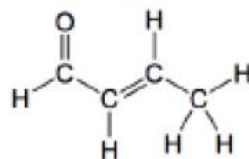
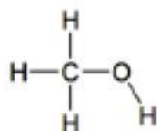
835

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)
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	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.

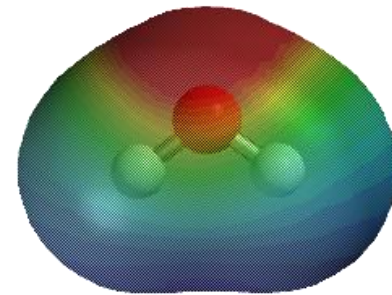
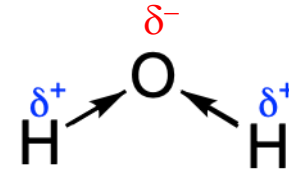
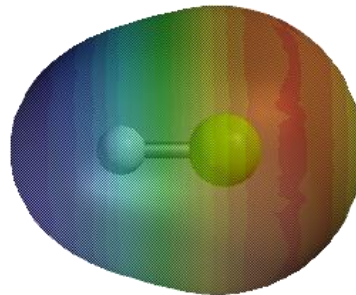
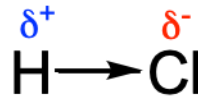
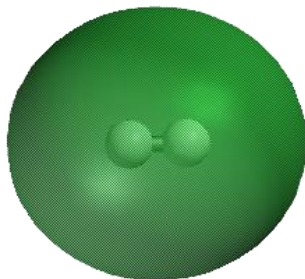
5. Completate le seguenti strutture di Lewis (disegnando i lone pair). Indicate poi l'ibridizzazione di ogni atomi (che non sia idrogeno)



Legami Polari
Interazioni Intermolecolari
Legami Delocalizzati

Legami covalenti polari

- Nei legami polari, gli elettroni di legame sono attratti dall'atomo più elettronegativo.



- Maggiore è la differenza di elettronegatività ΔX , maggiore è la polarità del legame covalente
 - $\Delta X > 1.9 \Rightarrow$ legame ionico
 - $\Delta X < 0.5 \Rightarrow$ legame covalente apolare (es.: C-H, C-C)
 - $\Delta X = 0.5 - 1.9 \Rightarrow$ legame covalente polare (O-H, N-H, C-O, C-F..)

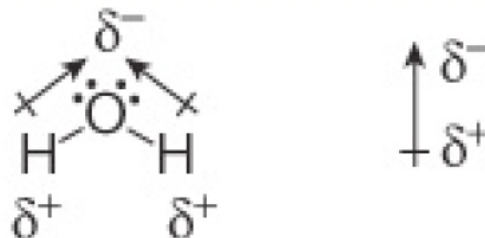
Molecole polari e non polari

- E' importante conoscere la geometria delle molecole
- La geometria 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

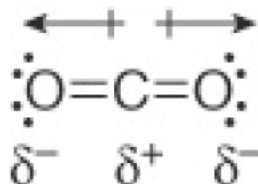
Polarità delle molecole

- Molecole polari hanno uno o più legami polari.

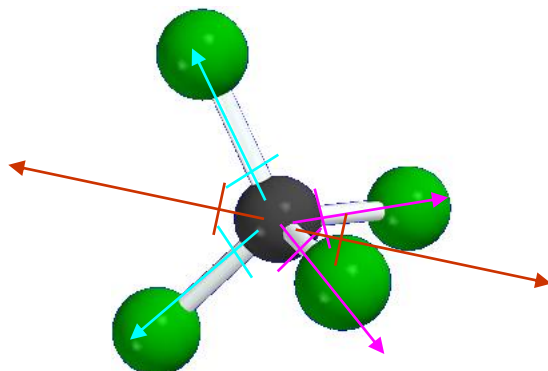
Es. H_2O



- Molecole apolari o non hanno legami polari o hanno legami polari i cui dipoli si annullano
- ES.: CO_2

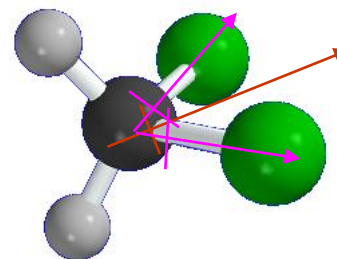


$\text{CCl}_4 \mu = 0 \text{ D}$



I dipoli si annullano

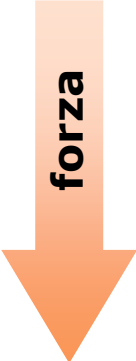
$\text{CH}_2\text{Cl}_2 \mu = 1.62 \text{ D}$



I dipoli si sommano

Interazioni Intermolecolari

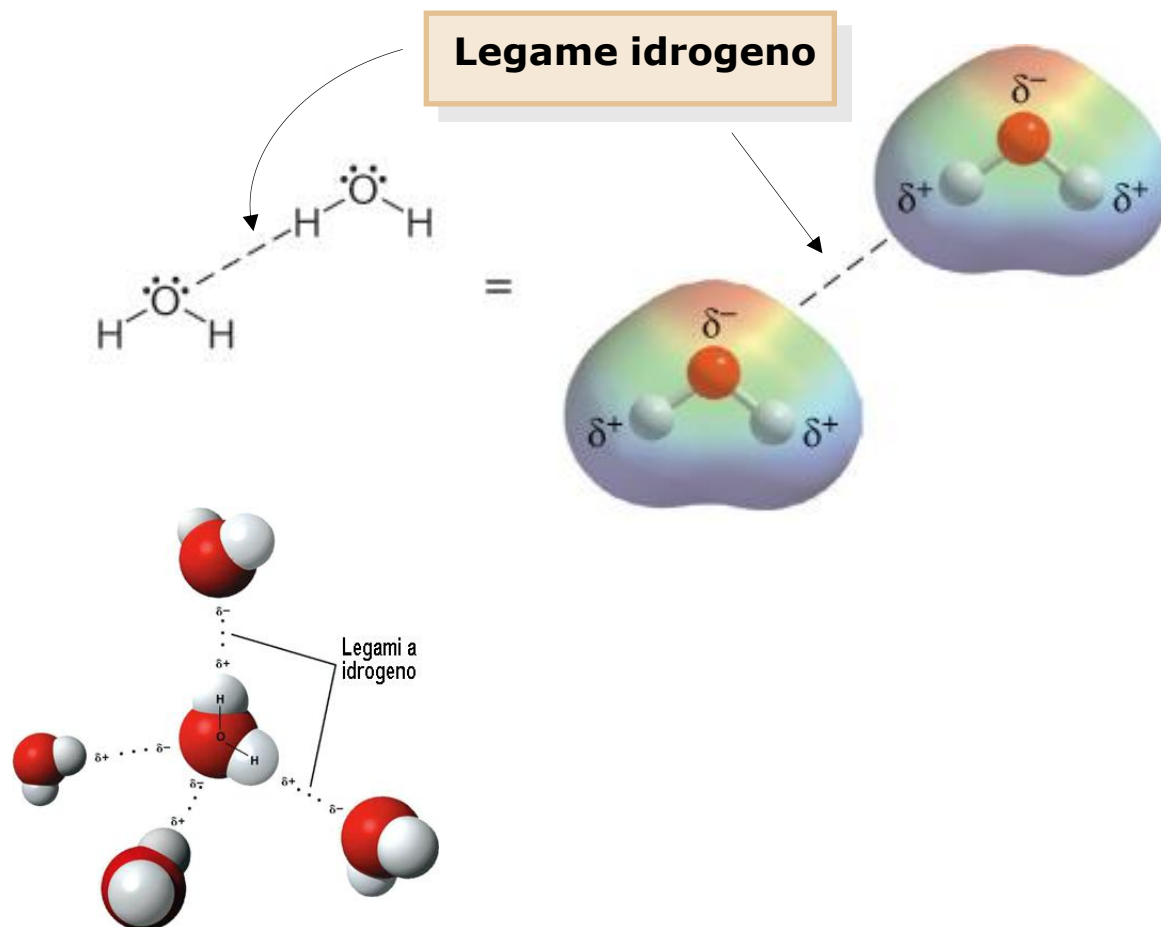
- ❑ Interazioni intermolecolari sono anche chiamate interazioni non-covalenti o di non-legame
- ❑ Interazioni intermolecolari dipendono dal tipo e dal numero di gruppi funzionali
- ❑ Nelle molecole neutre ci sono tre tipi principali di interazioni intermolecolari.
 - Interazioni di Van der Waals (Forze di London) – VDW
 - Interazioni dipolo-dipolo – DD
 - Legami idrogeno – HB



forza

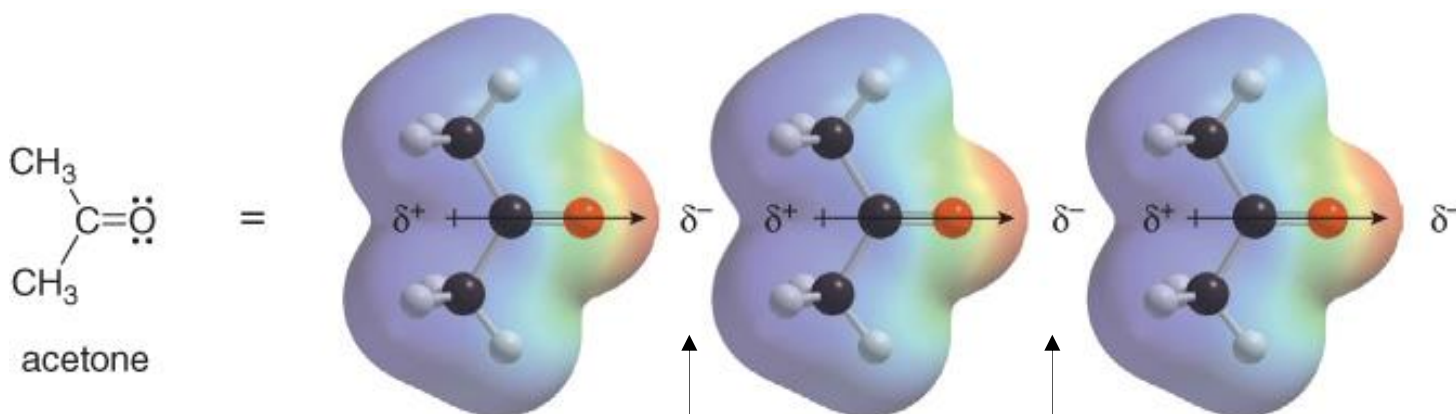
Il Legame Idrogeno

- Il legame idrogeno è un'interazione elettrostatica fra un gruppo O-H o N-H e un lone pair su un O o su un N.



Interazioni Dipolo-Dipolo

- Interazioni dipolo-dipolo sono forze di attrazione fra i dipoli permanenti di due molecole.

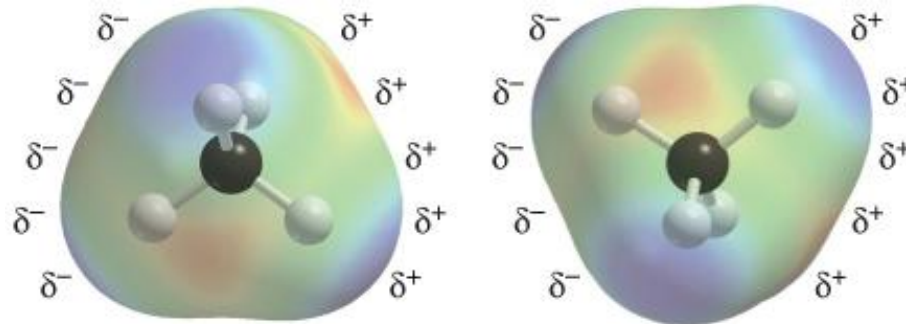


Interazioni dipolo-dipolo		
	<i>MW</i>	<i>b.p.</i> (°C)
	56	-5
	58	56

Forze di Van der Waals (London)

- ❑ Forze di VdW sono interazioni deboli che si originano da variazioni momentanee della distribuzione di densità elettronica.
- ❑ Sono le uniche forze di attrazione in molecole apolari.

Interazioni di Van der Waals fra due molecole di CH₄



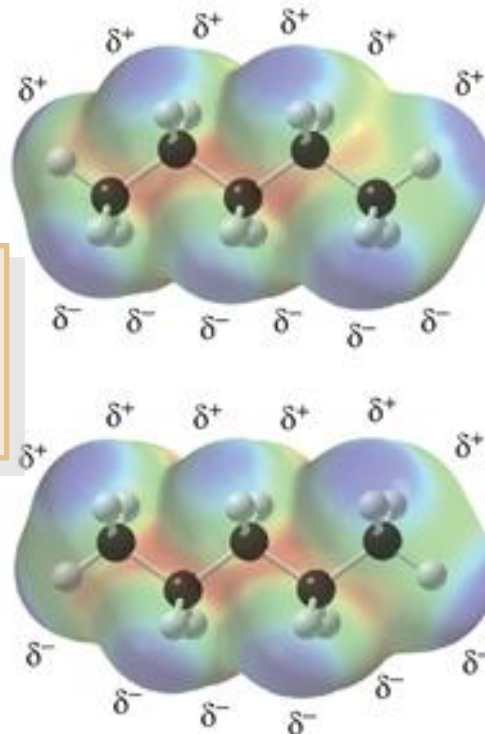
I dipoli si generano da una asimmetria istantanea della densità elettronica

Forze di Van der Waals (London)

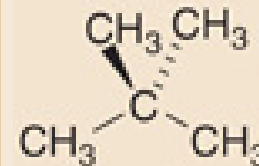
- Le interazioni di Van der Waals sono presenti in tutte le molecole.
- Più grande è l'area superficiale, più numerose sono le interazioni fra due molecole e più forti sono le forze intermolecolari.

Molecole lineari, cilindriche:
Interazioni più forti

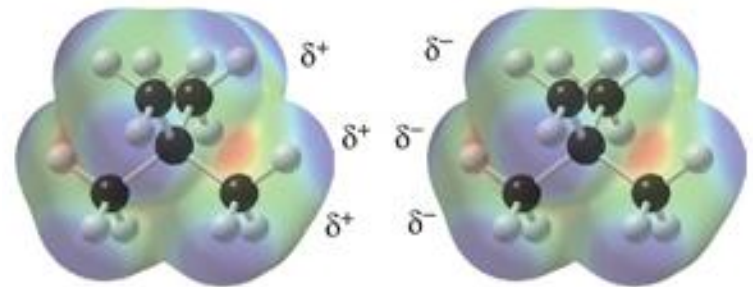
CH3CH2CH2CH2CH3
n-pentano
***b.p.* 36 °C**



Molecole sferiche, compatte:
Interazioni più deboli



neopentano
***b.p.* 10 °C**



Sommario

Interazioni	Forza relativa	Presenti in	Esempi
Van der Waals VDW	Molto deboli	Tutte le molecole	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$ $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$
Dipole-dipole DD	Deboli	Dipoli Permanenti	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$ $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$
Hydrogen bond HB	Forti	Molecole con OH, NH, gruppi funzionali	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$
ionic	Molto forti	Composti ionici	NaCl, LiF

Molecole polari interagiscono più fortemente di quelle apolari

Punti di ebollizione e di fusione (B.p. e M.p.)

- ❑ Il punto di ebollizione è la temperatura a cui la pressione di vapore di un liquido è uguale alla pressione esterna.
- ❑ Il punto di fusione è la temperatura a cui si ha il passaggio da solido a liquido
- ❑ E' richiesta energia per rompere le interazioni intermolecolari.
- ❑ Più intense le interazioni intermolecolari, più elevati i b.p.
- ❑ Composti con M.W. simili:

Van der Waals	Dipolo-dipolo	Legame idrogeno
Punto di ebollizione e di fusione 		
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$
pentano (m.w. 72)	butanale (m.w. 72)	1-butanolo (m.w. 74)
bp = 36 °C	bp = 76 °C	bp = 118 °C
mp = -130 °C	mp = -96 °C	mp = -90 °C

Il Legame Idrogeno

	<i>MW</i>	<i>b.p. (°C)</i>	<i>H-bond</i>
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$	<i>30</i>	<i>-89</i>	<i>none</i>
$\text{H}_3\text{C}-\text{NH}_2$	<i>31</i>	<i>-6</i>	<i>weak</i>
$\text{H}_3\text{C}-\text{OH}$	<i>32</i>	<i>65</i>	<i>strong</i>

Elettroni e legami π delocalizzati.

Risonanza

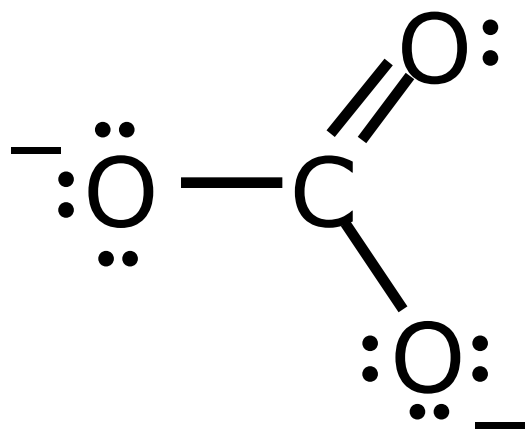
- Ci sono alcune molecole la cui struttura e proprietà non possono essere spiegate dal modello degli orbitali di valenza con elettroni localizzati (= da una singola struttura di Lewis)
- In questo caso, una singola struttura di Lewis è sostituita da un set di strutture di Lewis chiamate STRUTTURE LIMITE DI RISONANZA, nessuna delle quali rappresenta la molecola reale.
- Le strutture limite di risonanza hanno la stessa disposizione dei atomi ma una diversa distribuzione di elettroni (elettroni π e coppie di non legame).
- La molecola reale è un IBRIDO DI RISONANZA di queste strutture, cioè una struttura che ha le caratteristiche di tutte le forme limite.

Risonanza

- Alcune molecole non possono essere rappresentate da una singola struttura di Lewis. Ad es. ione carbonato CO_3^{--} :

Struttura dello ione carbonato (CO_3^{2-})

Le caratteristiche di uno ione carbonato non vengono spiegate da una sola struttura di Lewis



Questo è un sistema non simmetrico

Tipiche lunghezze di legame

$\text{C}=\text{O}$	$1.22 \text{ \AA}$	corto
$\text{C}-\text{O}$	$1.43 \text{ \AA}$	lungo

ma

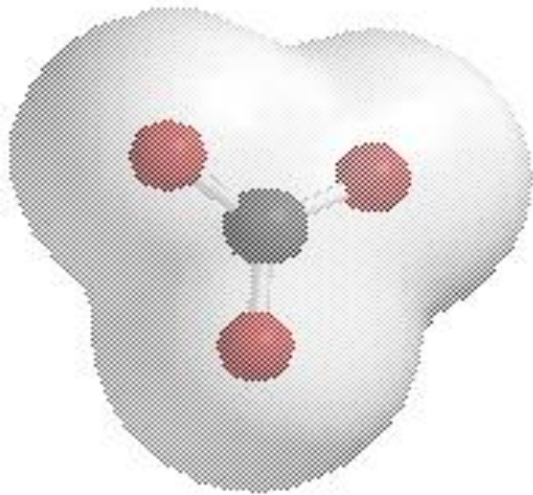
Tutte le lunghezze di legame sono uguali nello ione carbonato ($1.30 \text{ \AA}$)

determinate dalla cristallografia raggi-X di cristalli di CaCO_3

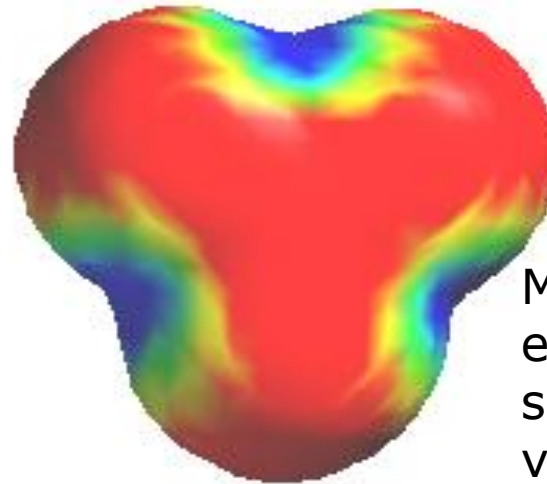
Mappa di densità elettronica dello Ione carbonato

INOLTRE: La carica negativa è equidistribuita sui 3 ossigeni

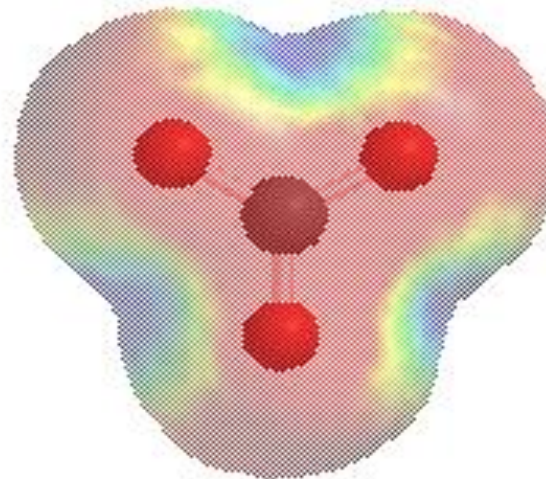
rosso = negativo
blu = positivo



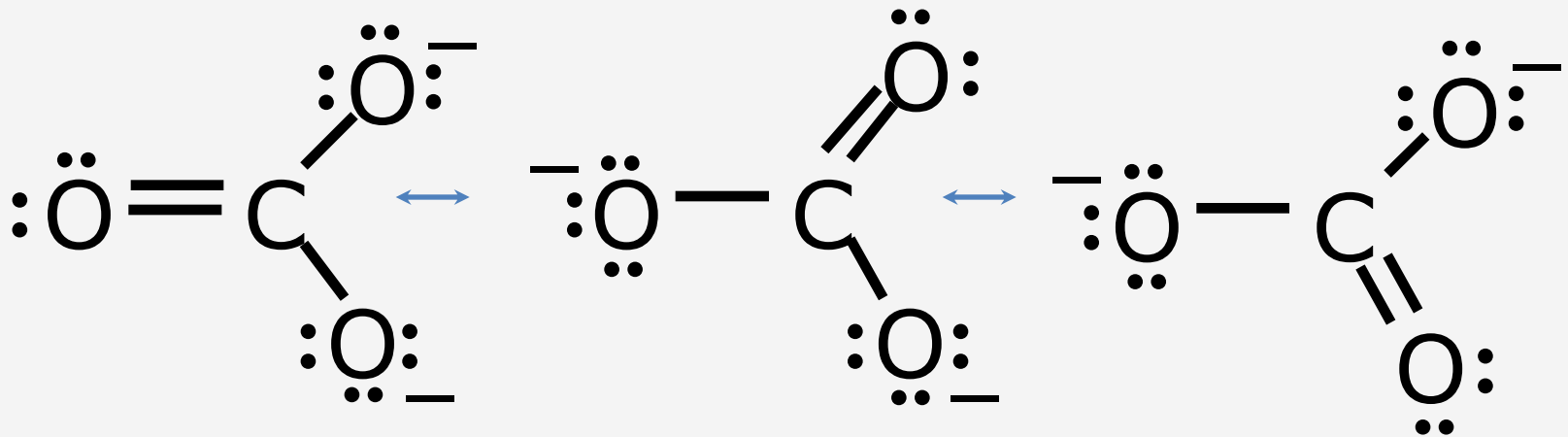
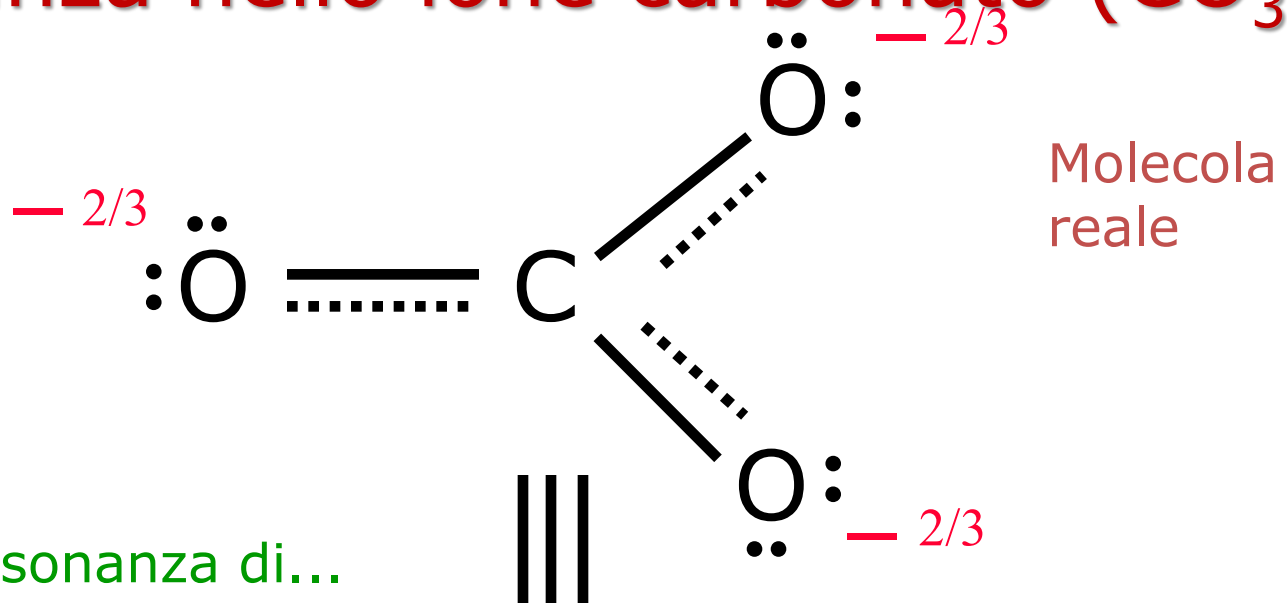
Superficie di
van der Waal's



Mappa di potenziale
elettrostatico
sulla superficie di
van der Waal's

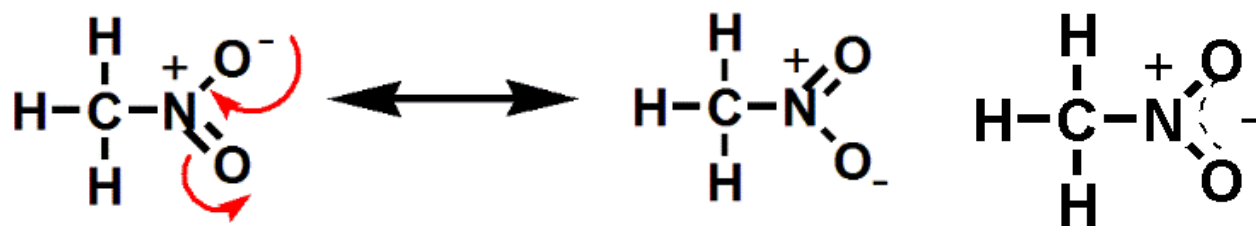
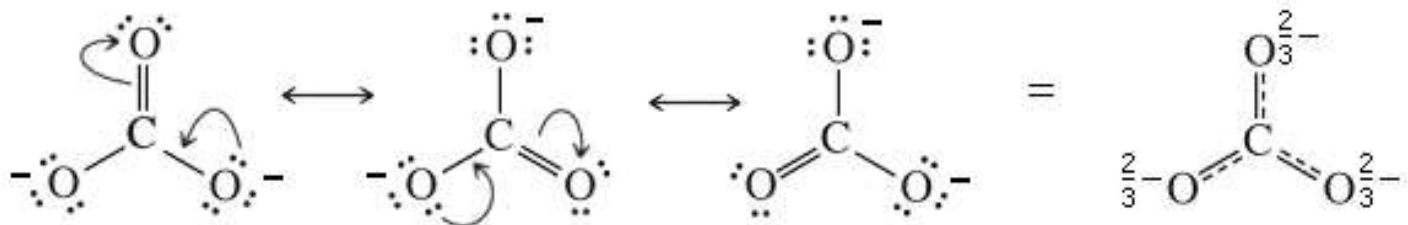


Risonanza nello ione carbonato (CO_3^{2-})



... strutture immaginarie

Forme limite di risonanza e ibrido di risonanza

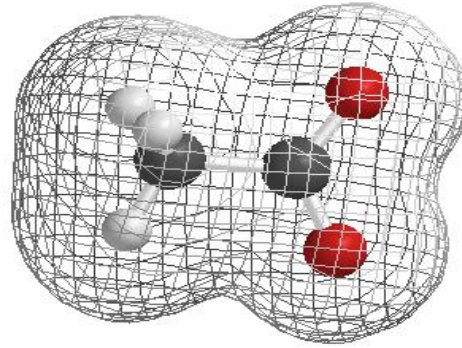
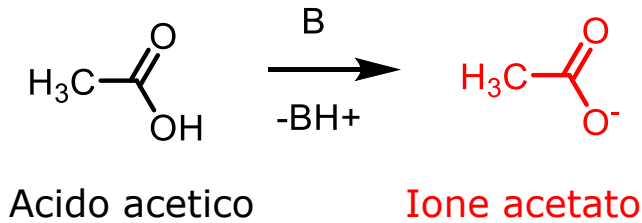


Il movimento di elettroni si rappresenta con una freccia ricurva.
La risonanza si indica con una freccia a doppia punta.

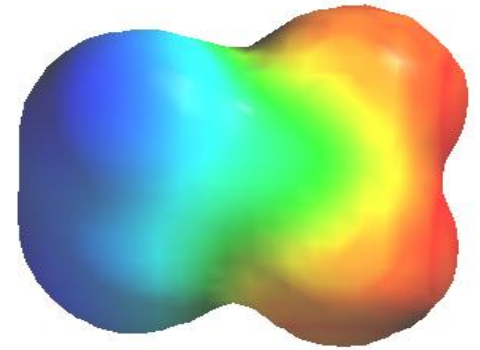
Risonanza

- 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

Esempio: ione acetato

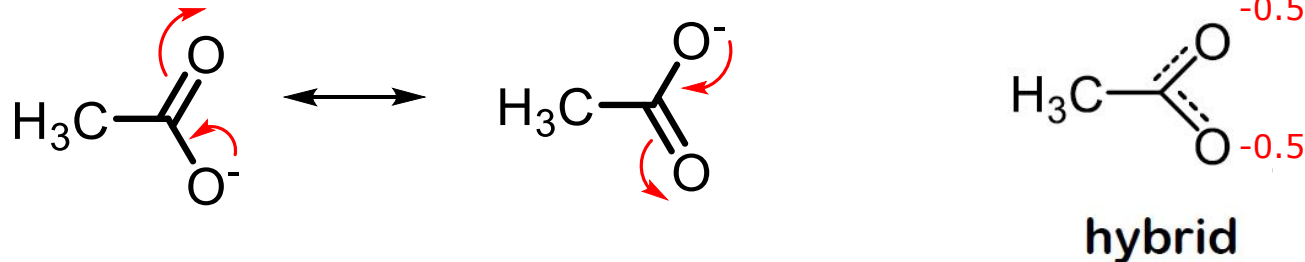


Superficie di van der Waals



Mappa di densità elettronica

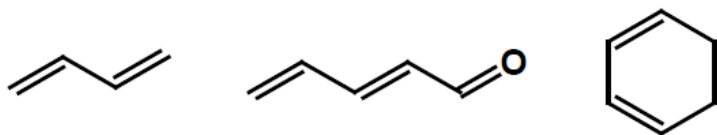
I due legami C-O sono identici, di lunghezza intermedia fra singolo e doppio
La carica negativa è ugualmente distribuita sui due atomi di ossigeno
La molecola è completamente SIMMETRICA
E' rappresentata compiutamente dall'ibrido di risonanza fra due forme limite:



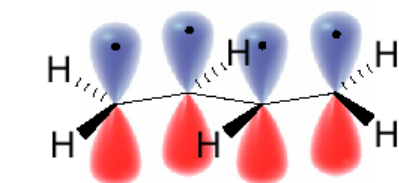
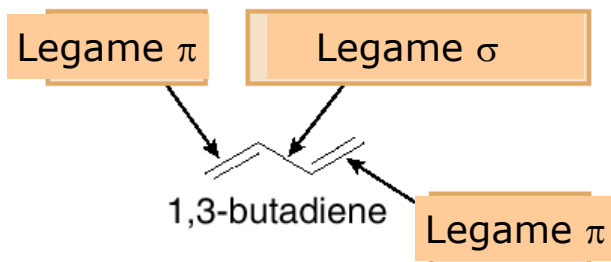
Coniugazione e risonanza

La delocalizzazione degli elettroni è tipica dei sistemi CONIUGATI
I sistemi coniugati hanno almeno tre orbitali p adiacenti paralleli

1. Sistemi con doppi legami coniugati



Vedi il capitolo:
Dieni coniugati

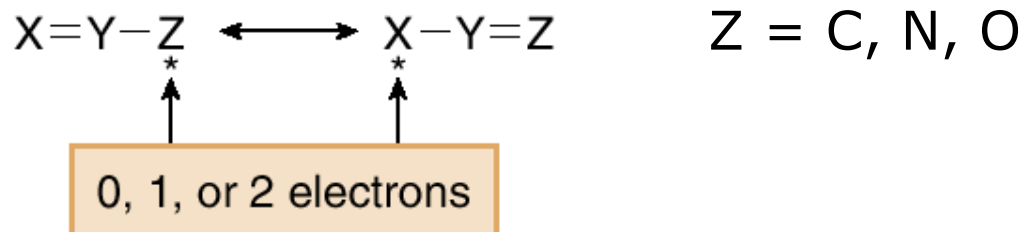


4 orbitali p adiacenti

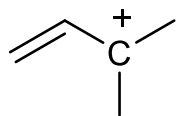
Ogni C è ibridato sp^2
e ha un orbitale p con 1 e-

Coniugazione e risonanza

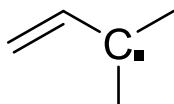
2. Sistemi allilici



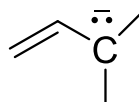
Esempi



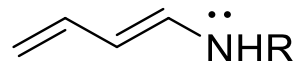
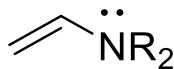
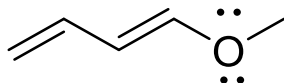
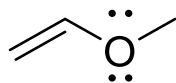
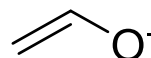
0 elettroni
(catione)



1 elettrone
(radicale)



2 elettroni
(anioni)

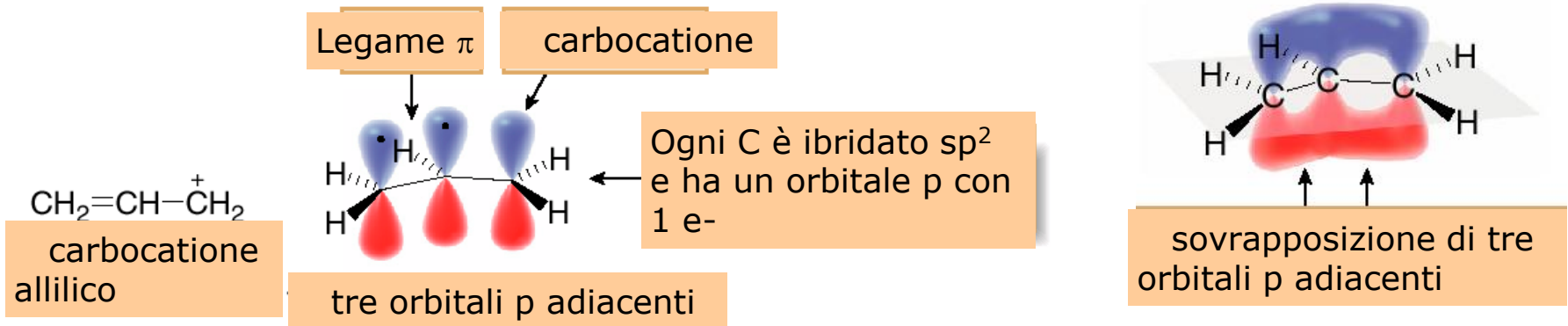


2 elettroni (Speci neutre)

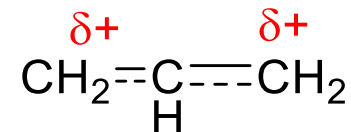
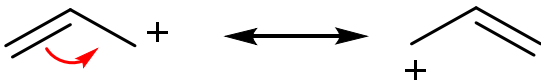
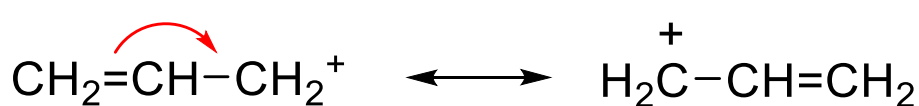
Coniugazione e risonanza

1. Cationi adiacenti a un legame π

- Il carbocatione allilico è un esempio di **sistema coniugato**



Come si rappresenta?



IBRIDO DI RISONANZA

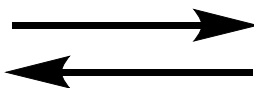
- La coniugazione stabilizza il carbocatione allilico
- Il carbocatione allilico è stabilizzato per risonanza

Freccia di risonanza

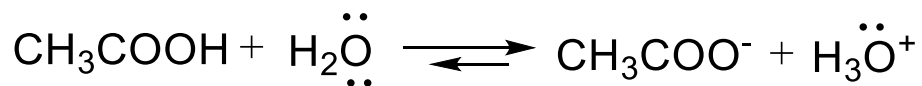
Per correlare le strutture limite di risonanza si usa il simbolo della freccia a doppia punta



Da non confondere con la doppia freccia delle reazioni di equilibrio:

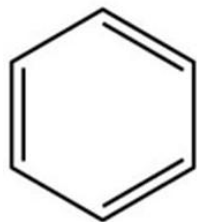


risonanza

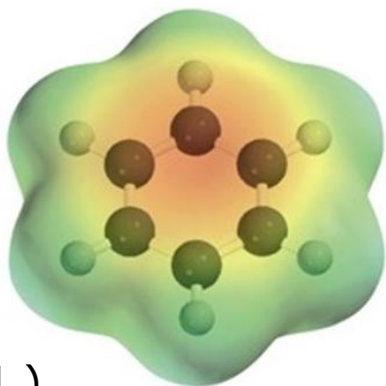


equilibrio

Risonanza – Legami delocalizzati



Benzene (C_6H_6)



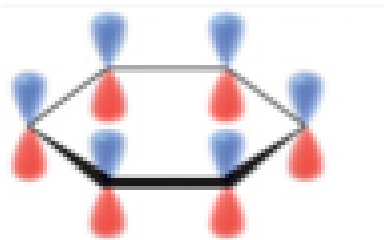
Caratteristiche:

Stabilità

Struttura simmetrica

6 legami C-C identici

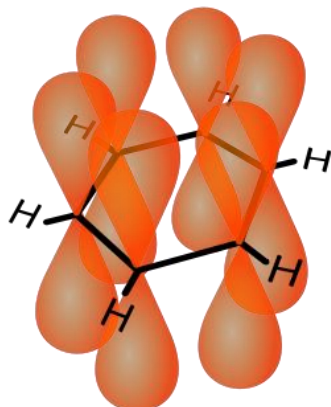
Equidistribuzione della densità elettronica



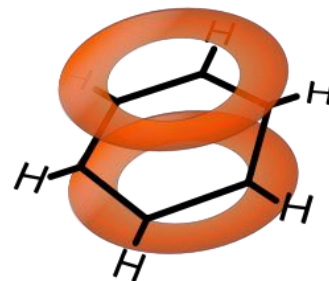
Benzene

E' un composto ciclico

Ogni atomo di C è ibridato sp^2



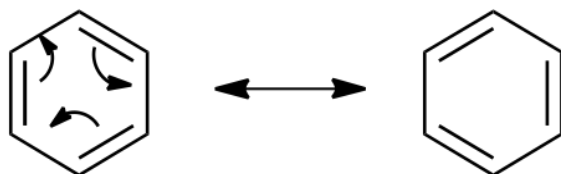
6 orbitali p non ibridati paralleli
Ogni orbitale p sovrappone con
i due p adiacenti



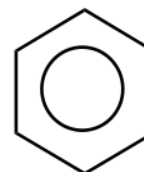
Nube π delocalizzata

Risonanza del benzene

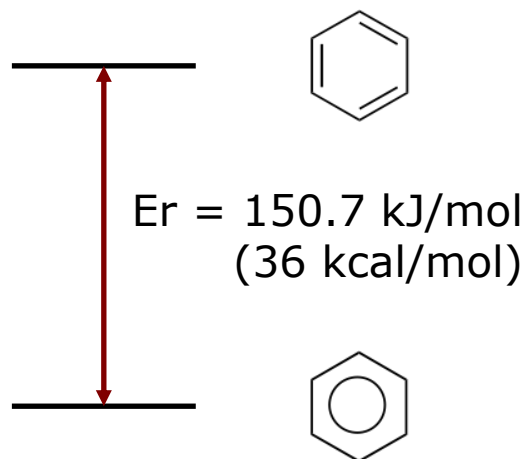
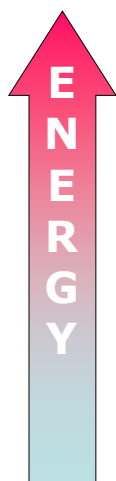
Strutture di risonanza
di Kekulé



Ibrido di
risonanza



Stabilità:



6 elettroni
 π localizzati

6 elettroni
 π delocalizzati

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

