

CORSO DI LAUREA IN BIOTECNOLOGIE

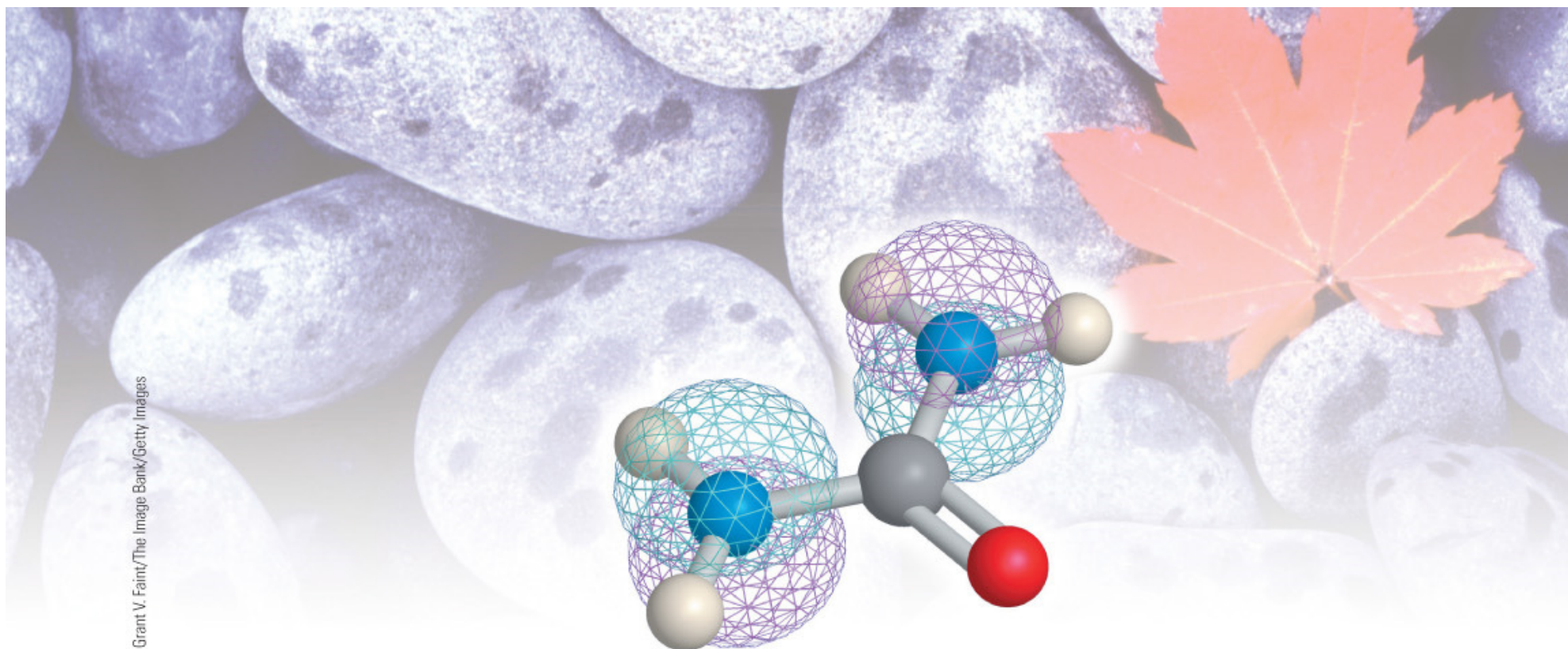
CHIMICA ORGANICA

TESTI:

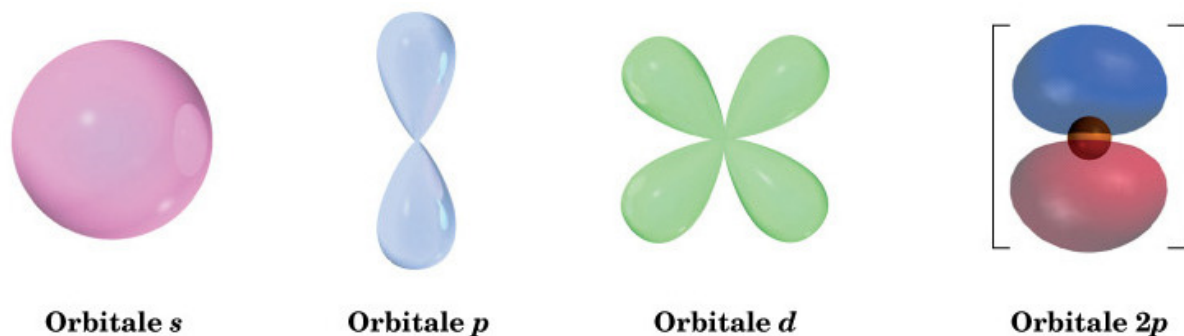
- **John McMurry, CHIMICA ORGANICA, PICCIN**
- **Brown, Poon, INTRODUZIONE ALLA CHIMICA ORGANICA, EdiSES**
- **Janice Gorzynski Smith, FONDAMENTI DI CHIMICA ORGANICA, McGraw-Hill**

PROVA FINALE: SCRITTO

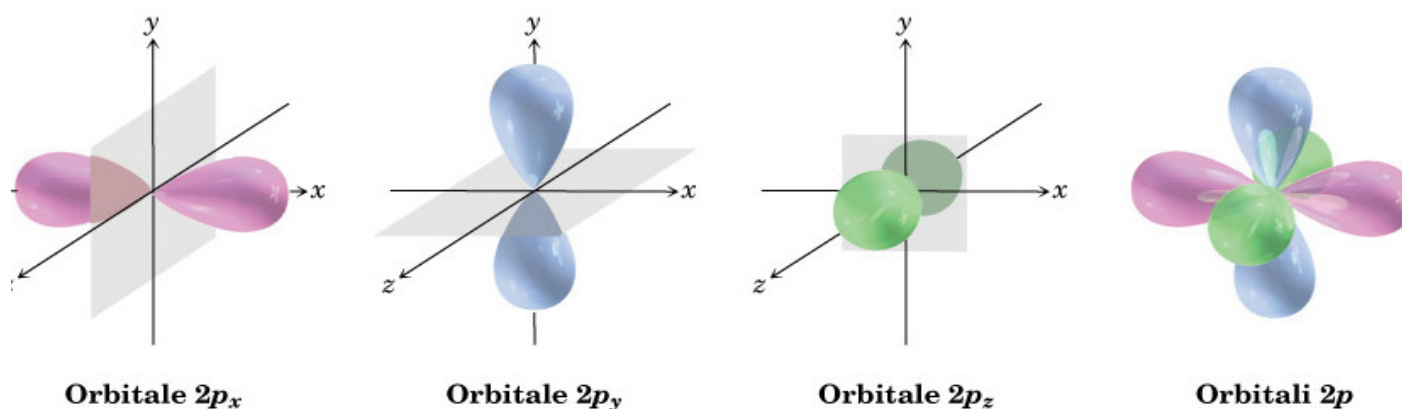
Struttura e legame chimico



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

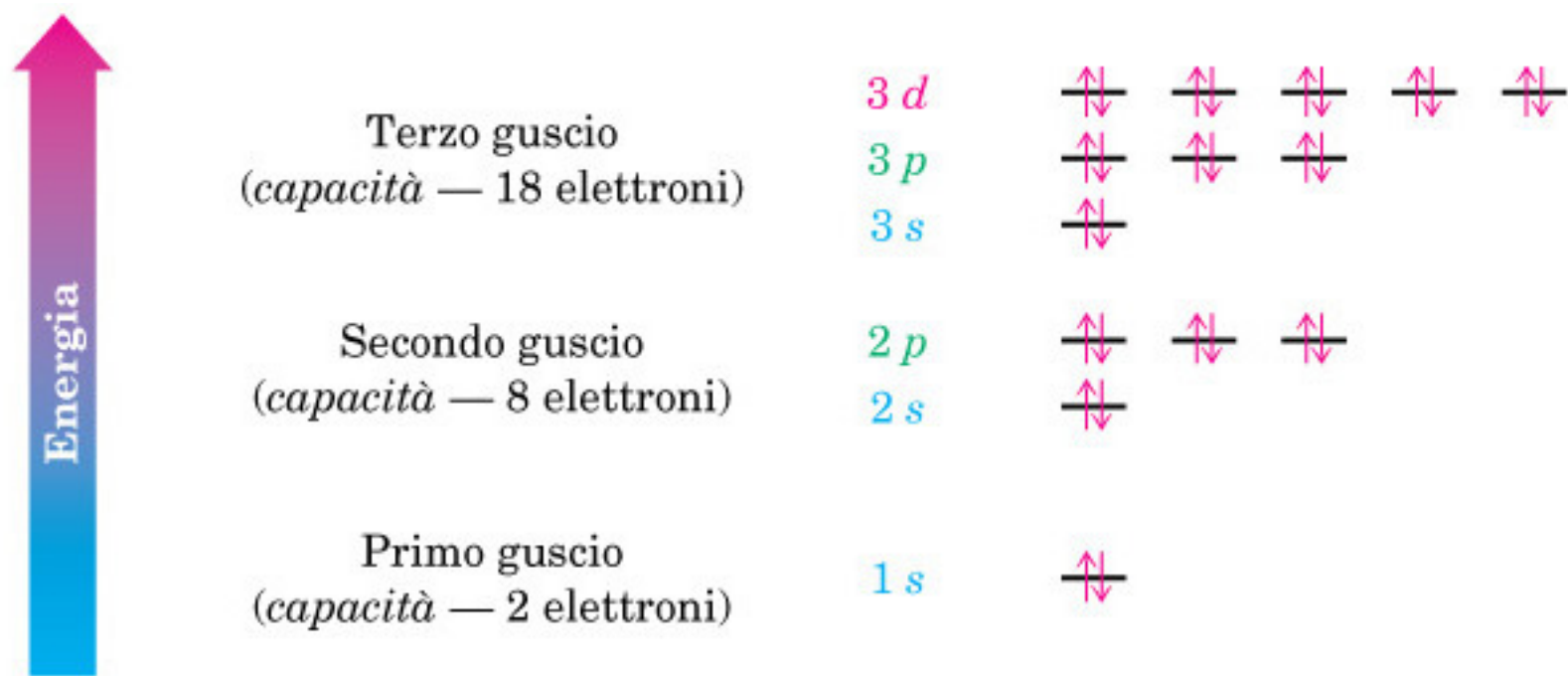


Forma degli orbitali 2p. Ciascuno dei tre orbitali a forma di manubrio ha un nodo tra i due lobi.

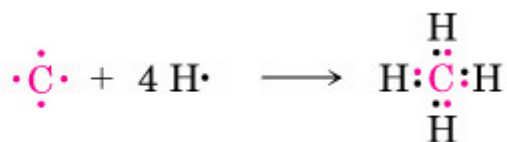


Proprietà atomiche

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



Il legame covalente



Metano (CH₄)



Ammoniaca (NH₃)



Acqua (H₂O)



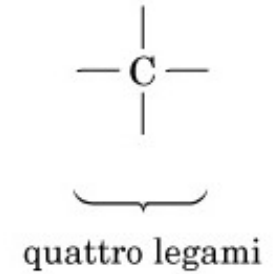
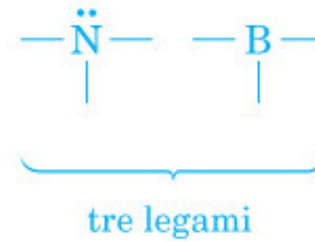
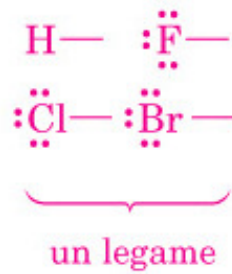
Metanolo (CH₃OH)

Strutture di Lewis e Kekulé di alcune molecole semplici

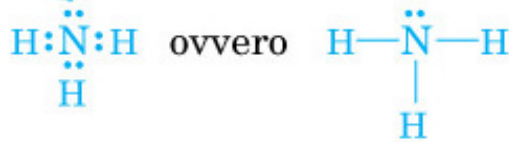
Nome	Struttura di Lewis	Struttura di Kekulé	Nome	Struttura di Lewis	Struttura di Kekulé
Acqua (H ₂ O)	$\text{H}:\overset{\cdot\cdot}{\text{O}}:\text{H}$	$\text{H}-\text{O}-\text{H}$	Metano (CH ₄)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \vdots \\ \text{H}:\overset{\cdot}{\text{C}}:\text{H} \\ \vdots \\ \text{H}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

Legame chimico

Numero di legami



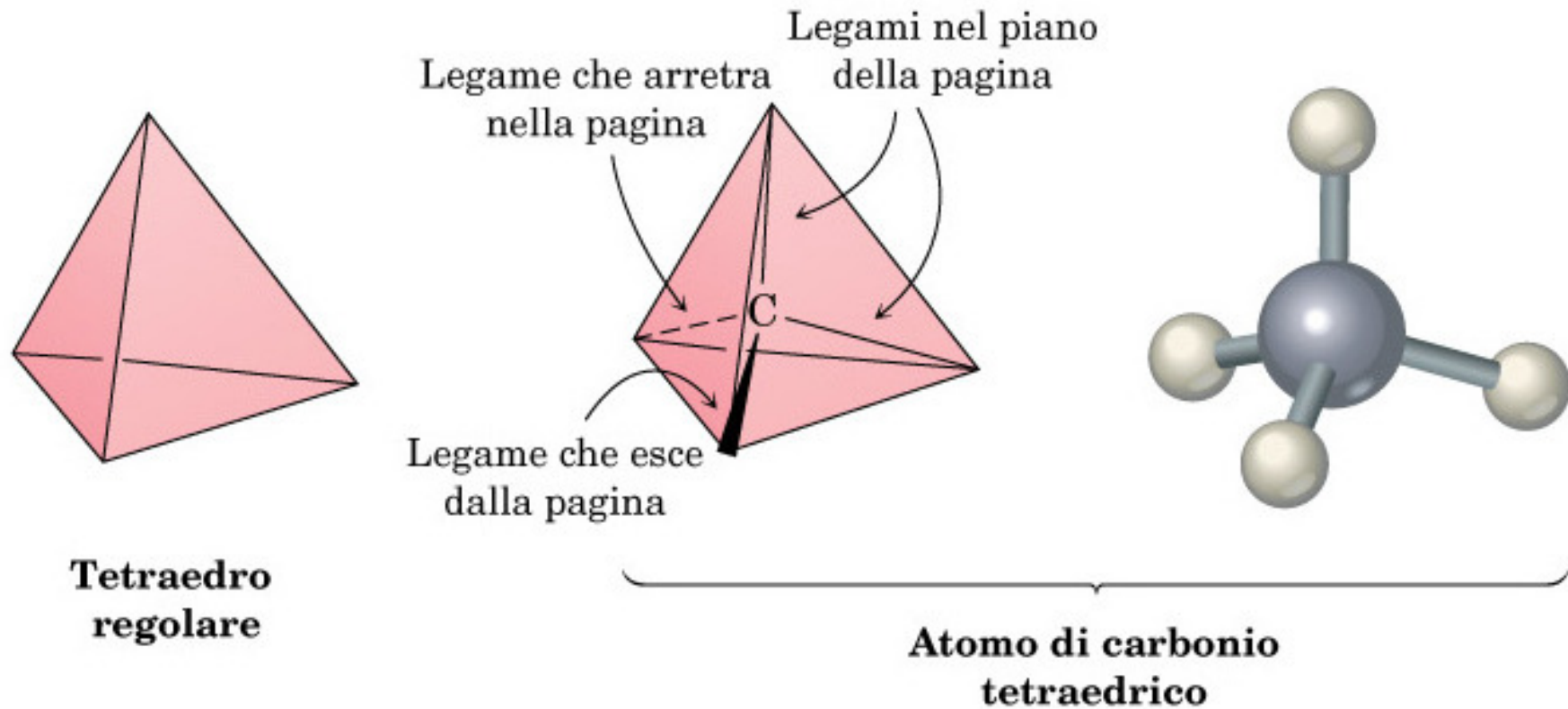
Elettroni di non legame,
coppia solitaria



Coppie solitarie
Elettroni di non legame

Ammoniaca

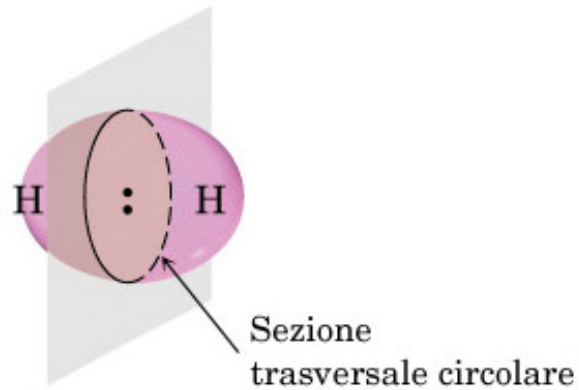
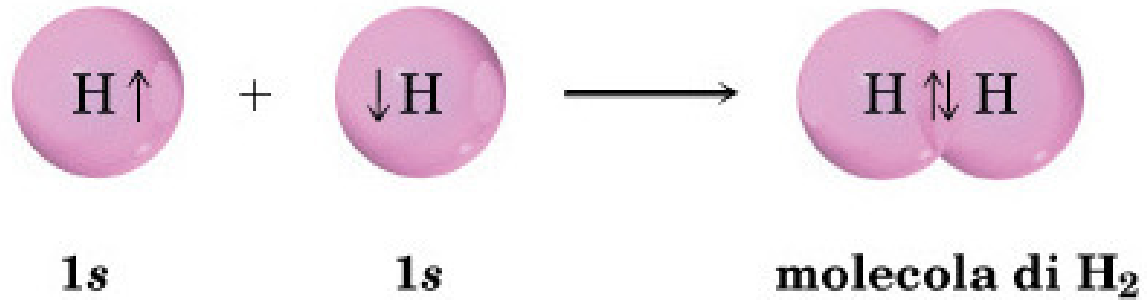
L'atomo di carbonio tetraedrico secondo van't Hoff. Le linee continue giacciono nel piano della pagina, la linea a cuneo pieno esce dal piano della pagina, e la linea tratteggiata va all'interno della pagina.



L'atomo di carbonio per raggiungere la configurazione ad otetto mette in compartecipazione i suoi elettroni – legame covalente

Teoria del legame di valenza

Orbitali singolarmente occupati si sovrappongono.

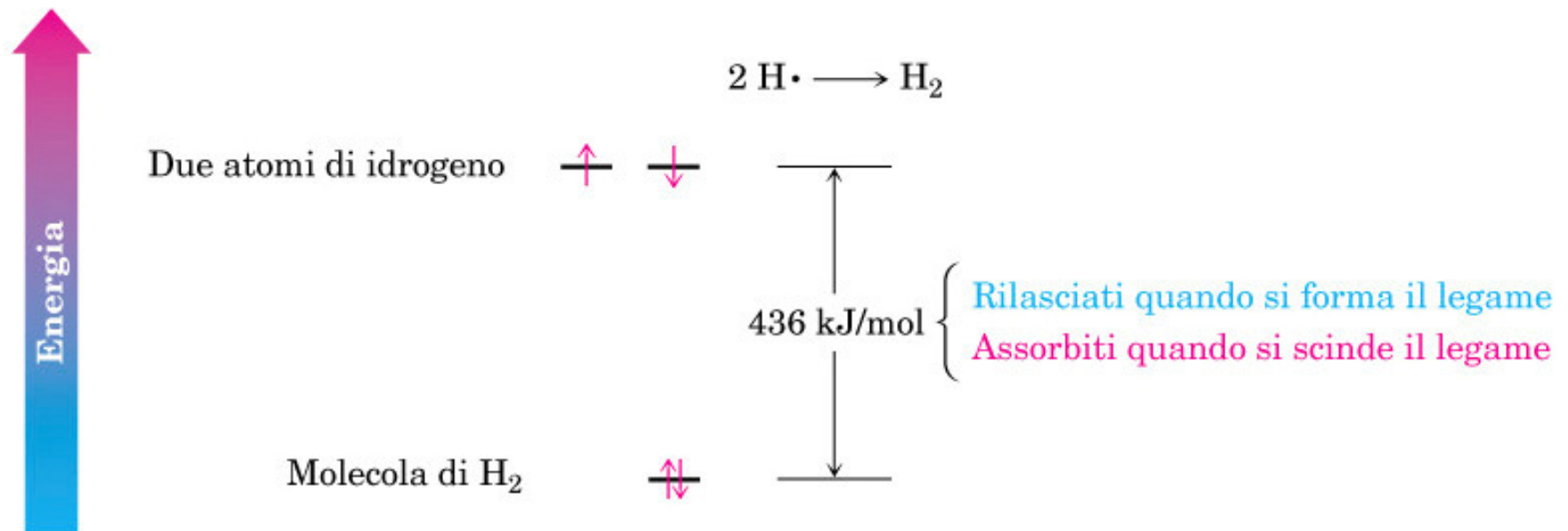


Legame σ

Simmetria cilindrica del legame H–H. L'intersezione di un piano che passa attraverso l'orbitale è un cerchio.

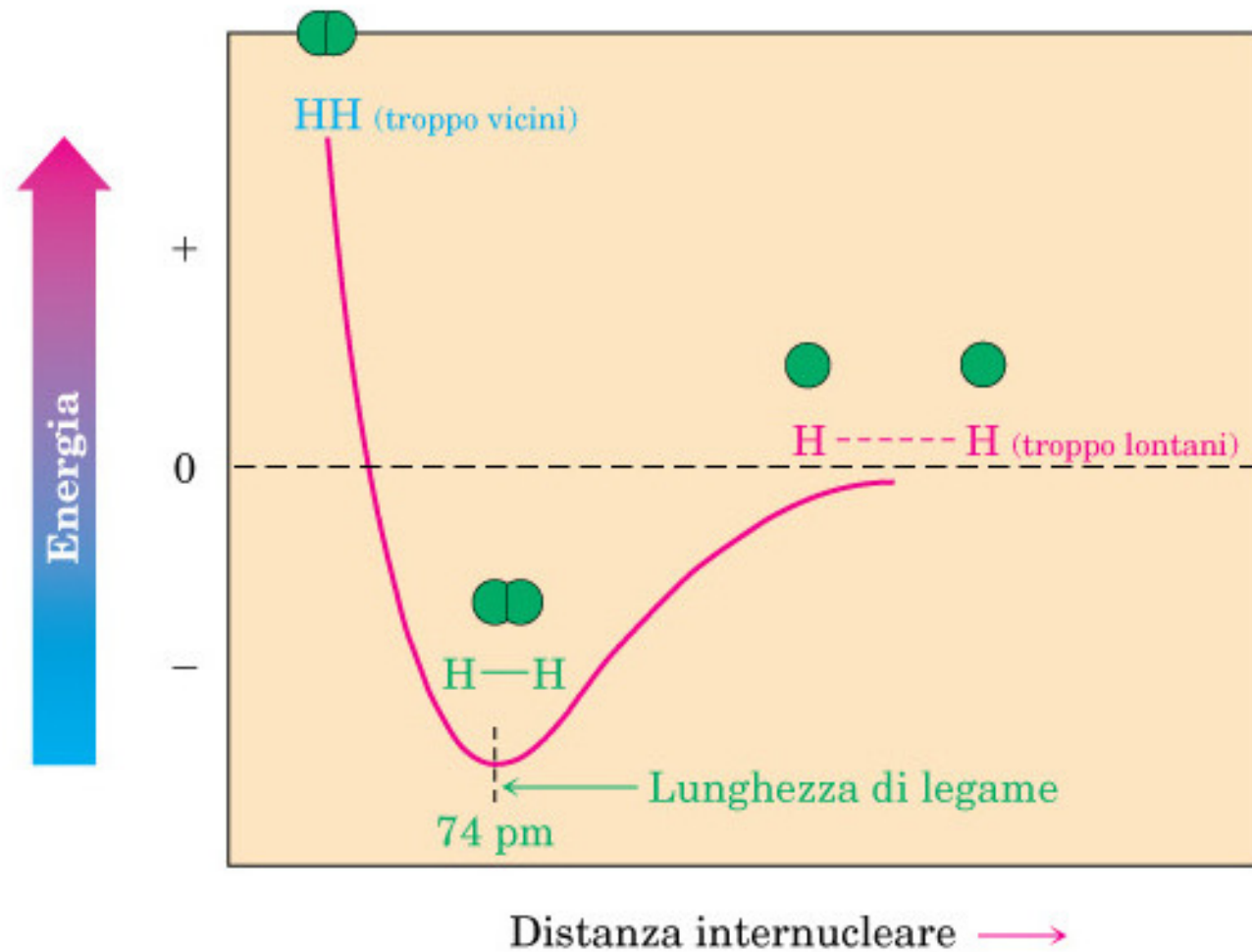
Energia di legame

Livelli energetici degli atomi di H e della molecola H₂. Dato che la molecola H₂ è più bassa in energia dei due atomi di H per 436 kJ/mol (104 kcal/mol), una energia pari a 436 kJ/mol viene rilasciata quando si forma il legame H–H. Per contro, si dovrebbero fornire 436 kJ/mol alla molecola H₂ per scindere il legame H–H.



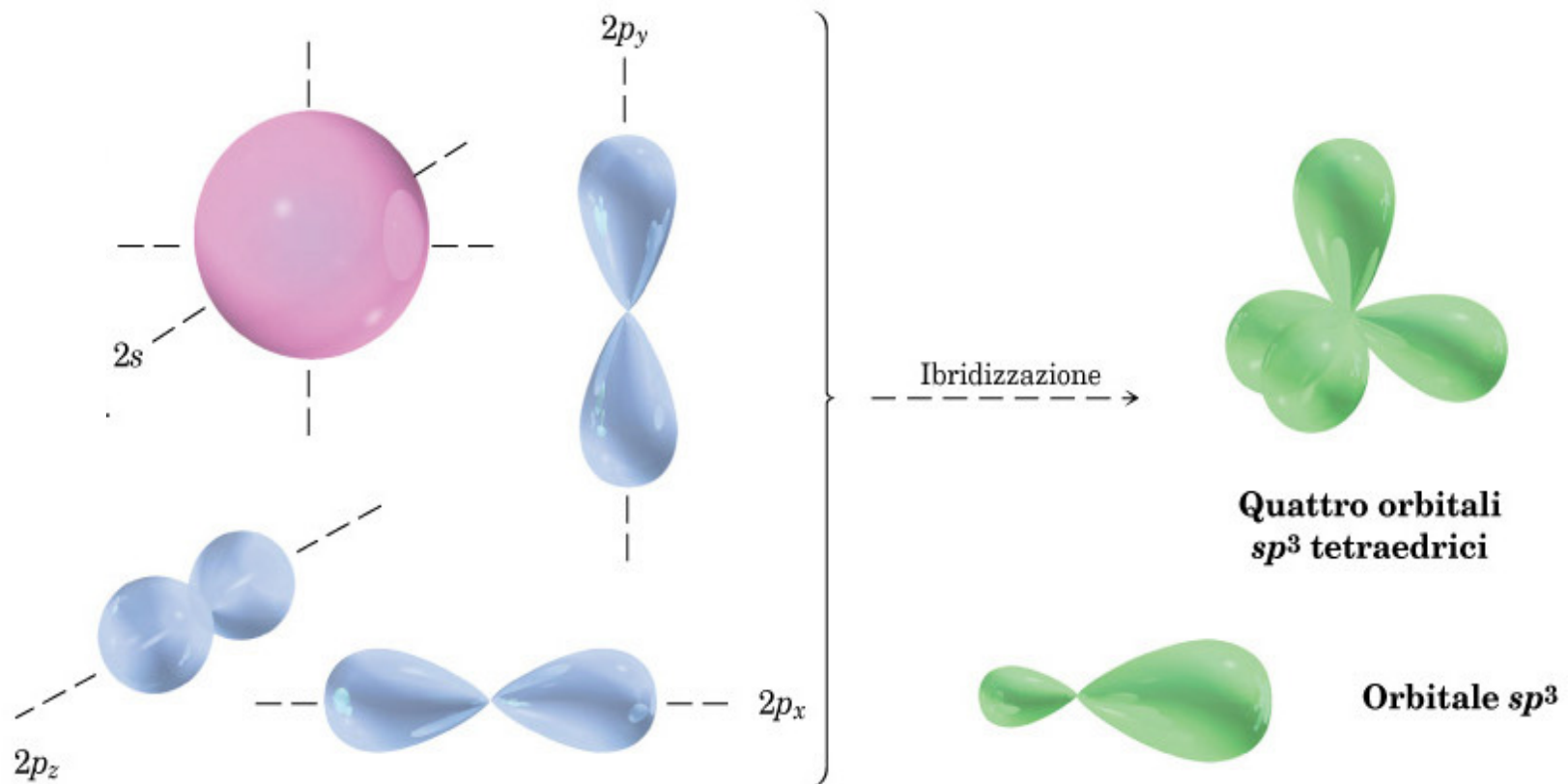
Distanza di legame

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



Ibridizzazione

Quattro orbitali ibridi sp^3 (verde), orientati verso gli angoli di un tetraedro regolare, sono formati per combinazione di un orbitale atomico s (rosso) e tre orbitali atomici p (blu). Gli ibridi sp^3 sono asimmetrici rispetto al nucleo, conferendo loro una direzionalità e consentendogli di formare legami più forti quando si legano ad altri atomi.

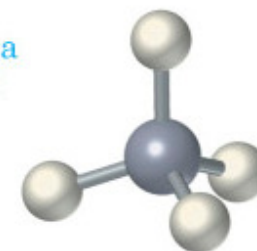
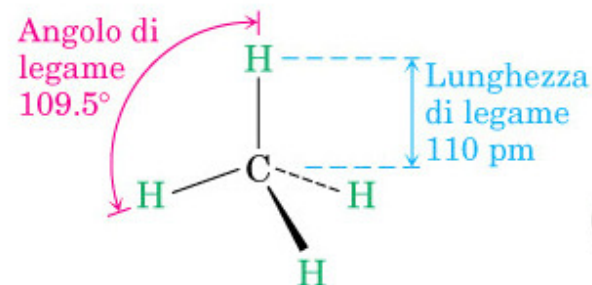
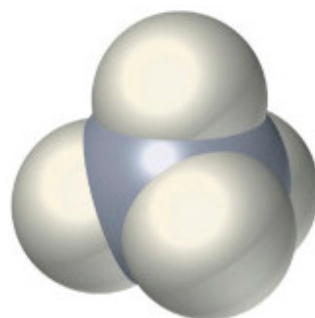


Legame chimico: ibridizzazione

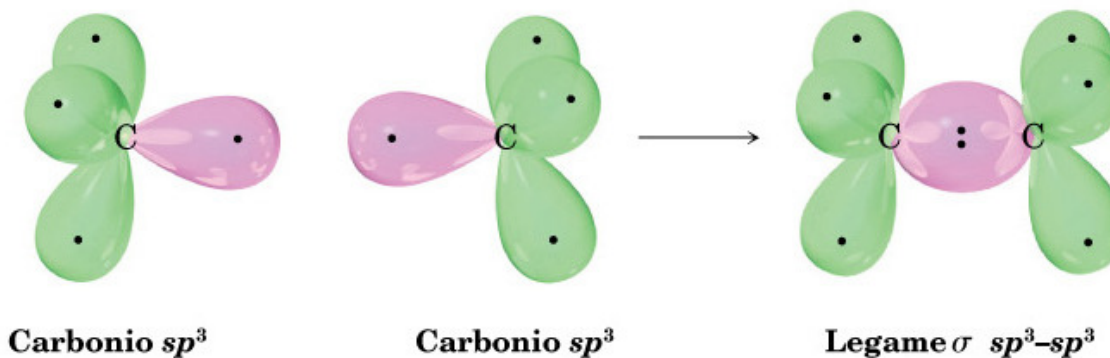
Esempi di molecole con ibridazione sp^3

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

$E_{C-H} = 438 \text{ kJ/mol}$ (105 kcal/mol)

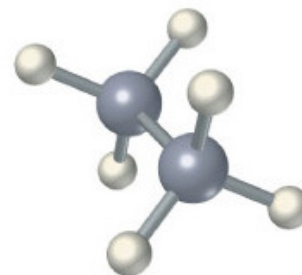
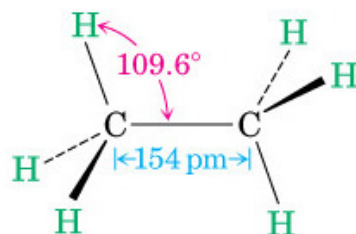


Struttura dell'etano. Il legame carbonio-carbonio viene formato per sovrapposizione s di due orbitali ibridi sp^3 . (Per chiarezza, i lobi più piccoli degli orbitali ibridi sp^3 non vengono mostrati).



C-C 376 kJ/mol

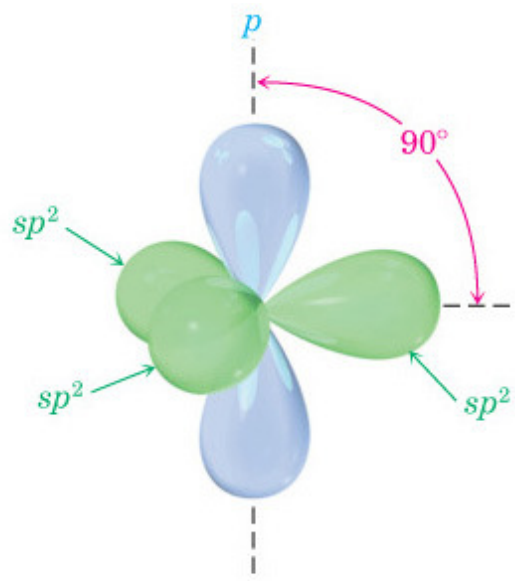
C-H 420 kJ/mol



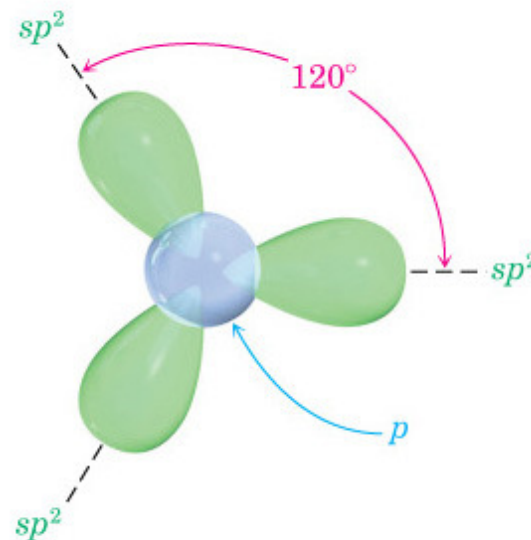
Legame chimico: ibridizzazione

Un carbonio ibridizzato sp^2 .

I tre orbitali ibridi sp^2 equivalenti (verde) giacciono in un piano ad un angolo di 120° l'uno rispetto all'altro, ed un singolo orbitale p non ibridizzato (blu) è perpendicolare al piano sp^2 .



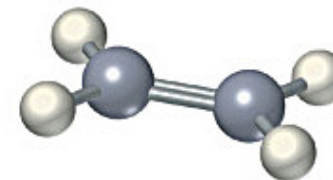
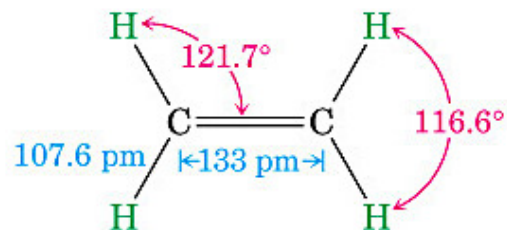
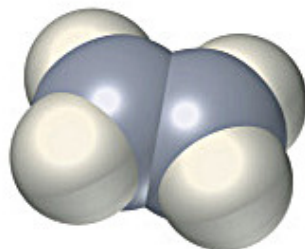
Vista laterale



Vista dall'alto

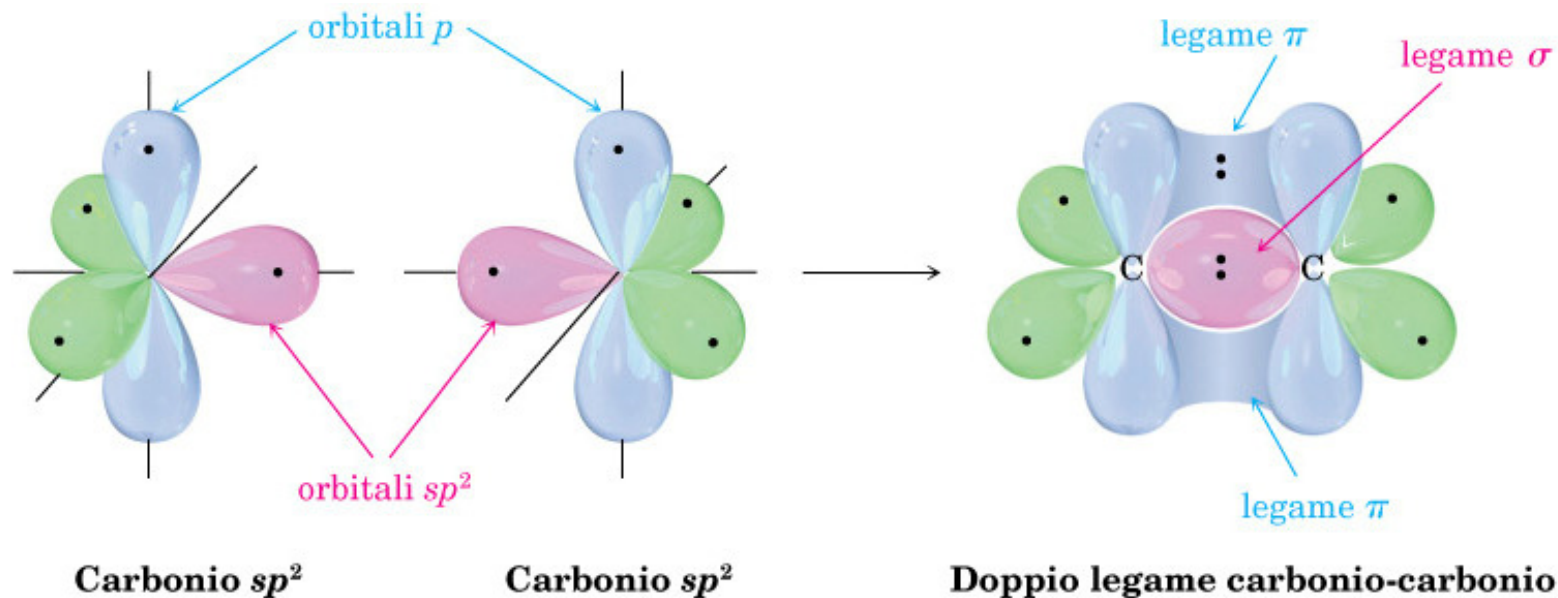
Struttura dell'etilene

C-C 611 kJ/mol
C-H 444 kJ/mol



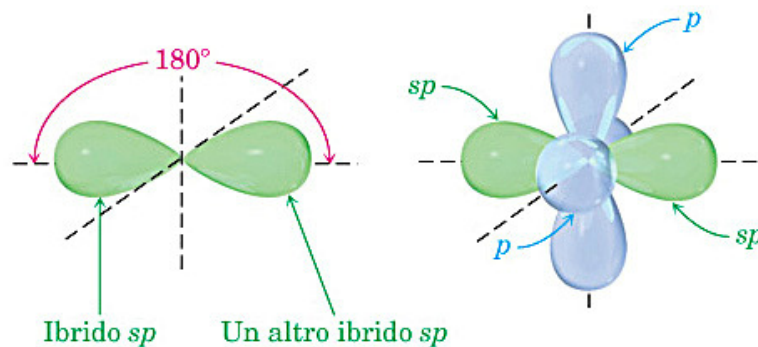
Legame chimico: ibridizzazione

Sovrapposizione orbitalica di due atomi di carbonio ibridizzati sp^2 a formare un doppio legame carbonio-carbonio. Una parte del doppio legame deriva dalla sovrapposizione σ (testa-testa) degli orbitali sp^2 (rosso), e l'altra parte deriva dalla sovrapposizione π (laterale) degli orbitali p non ibridizzati (blu). Il legame π ha regioni di densità elettronica su ciascun lato di una linea tracciata tra i nuclei.

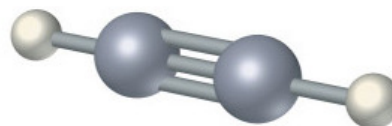
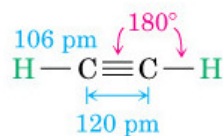
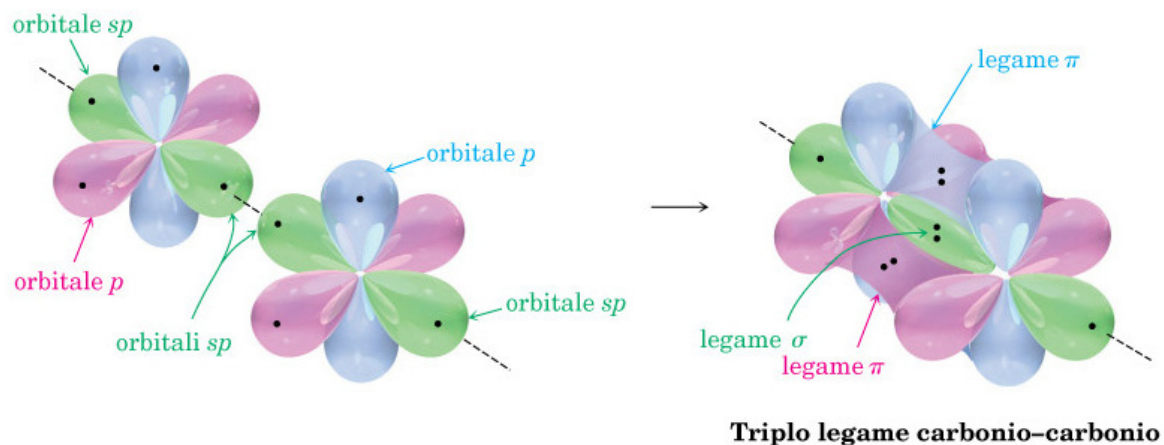


Legame chimico: ibridizzazione

Un atomo di carbonio ibridizzato sp . I due orbitali ibridi sp (verde) sono orientati a 180° l'uno dall'altro, e sono perpendicolari ai due orbitali p rimanenti (blu).

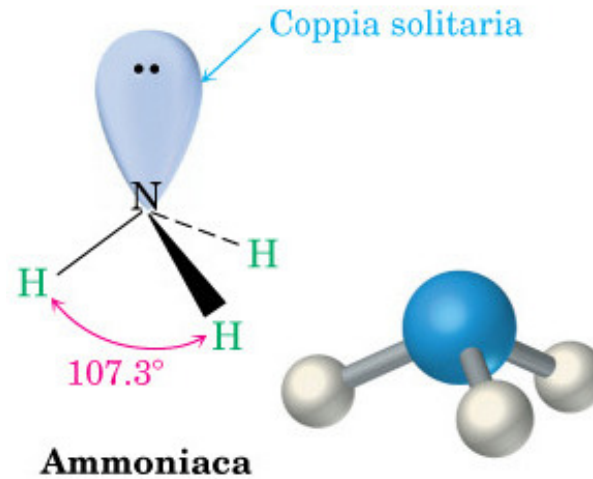


Struttura dell'acetilene. I due atomi di carbonio ibridizzati sp sono uniti da un legame σ $sp-sp$ e da due legami π $p-p$.

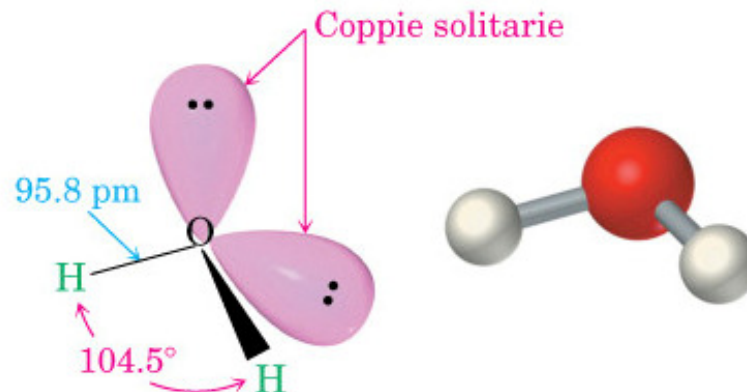


Legame chimico: ibridizzazione

Ibridizzazione dell'azoto nell'ammoniaca. L'atomo di azoto è ibridizzato sp^3 , dando angoli di legame H–N–H di 107.3° .

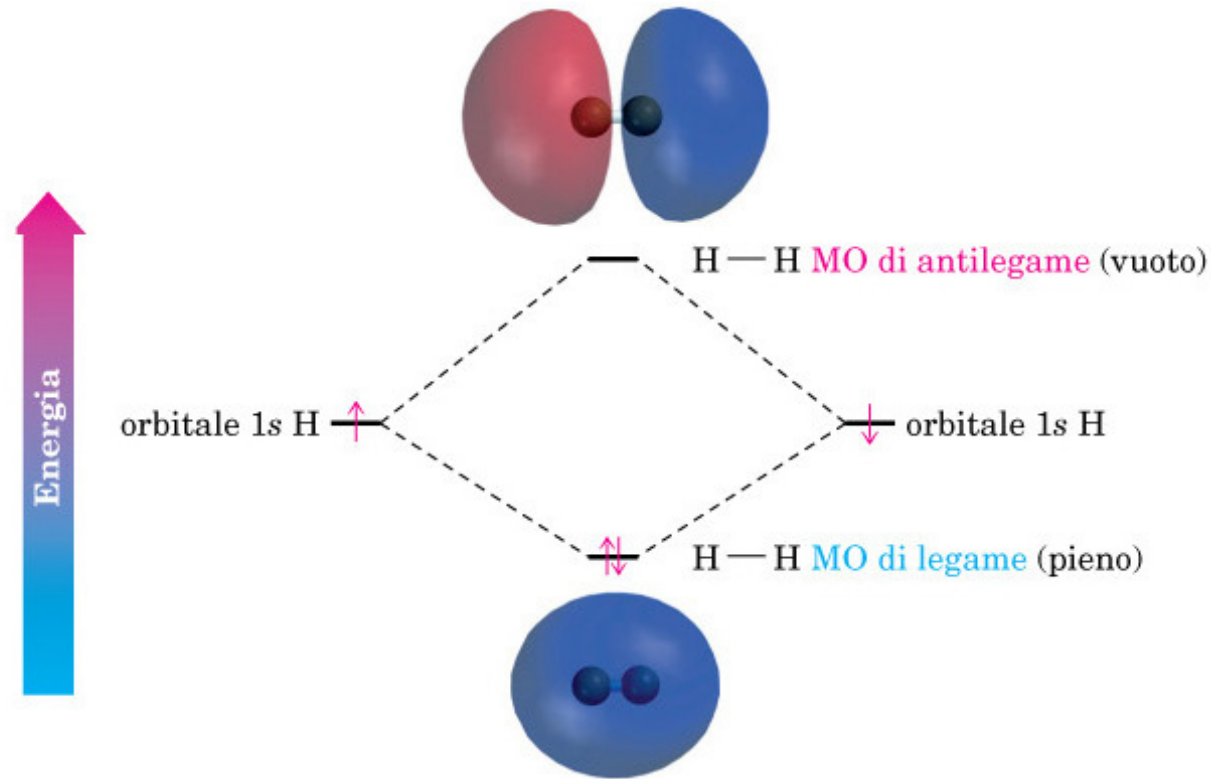


Struttura dell'acqua. L'atomo di ossigeno è ibridizzato sp^3 e possiede due coppie elettroniche solitarie. L'angolo di legame H–O–H è di 104.5° .



Legame chimico: orbitale molecolare

Orbitali molecolari di H_2 . La combinazione dei due orbitali atomici 1s dell'idrogeno porta a due orbitali molecolari per H_2 . Il MO a più bassa energia, di legame, è pieno, mentre il MO a più alta energia, di antilegame, è vuoto.



Legame chimico: orbitale molecolare

Descrizione tramite orbitali molecolari del legame π C=C nell'etilene. Il MO π di legame deriva dalla combinazione addittiva degli orbitali atomici ed è occupato. Il MO π di antilegame deriva dalla combinazione sottrattiva degli orbitali atomici ed è vuoto.

