

CORSO DI LAUREA IN BIOINFORMATICA

Elementi di Chimica Organica

Mariapina D'Onofrio (mariapina.donofrio@univr.it)

Orario ricevimento: mar e giov 11:30-13:30

Corso: 6 CFU = 48 ORE

Lezioni: Mar 8:30-10:30, Giov 9:30-11:30

Modalità di esame: SCRITTO 6 esercizi, tempo a disposizione 1 ora e mezza, se scritto \geq 16 possibilità di fare l'orale

TESTI consigliati:

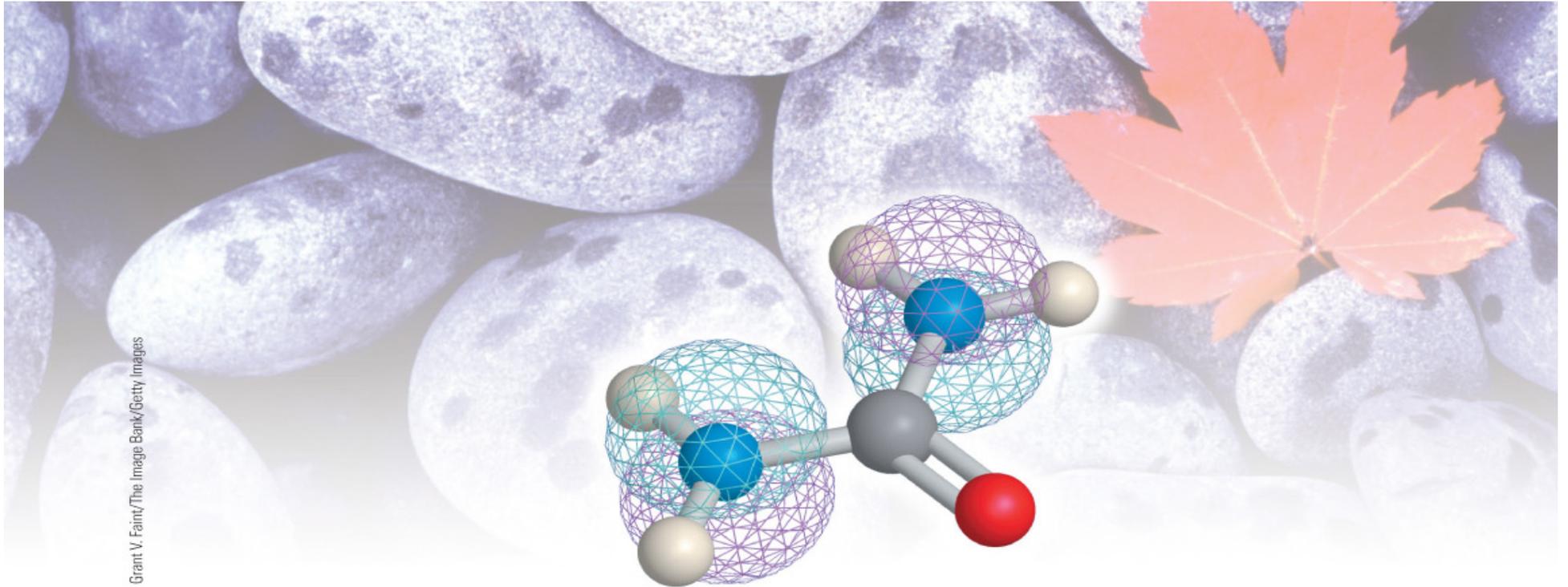
- Janice Gorzynski Smith, **FONDAMENTI DI CHIMICA ORGANICA**, McGraw-Hill
- Brown e Poon, **INTRODUZIONE ALLA CHIMICA ORGANICA**, EdiSES
- JOHN McMURRY, **CHIMICA ORGANICA**, PICCIN

**“I composti del carbonio
sono in numero gigante
e compongono gli organismi
delle bestie e delle piante.**

**Una volta erano creduti
dei composti assai speciali,
non potendo riprodursi
con sistemi artificiali.”**

**Chimica Organica in versi (rime bidistillate)
di Alberto Cavaliere
Anno 1929**

Struttura e legame chimico



Proprietà atomiche

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.



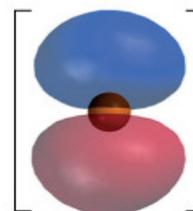
Orbitale s



Orbitale p

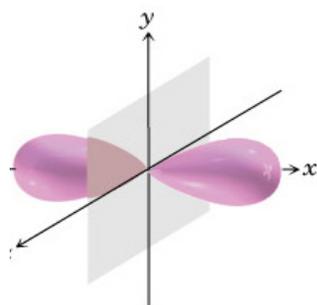


Orbitale d

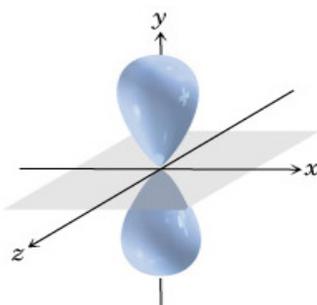


Orbitale 2p

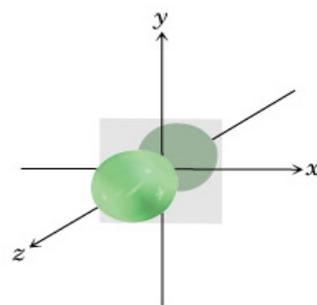
Forma degli orbitali 2p. Ciascuno dei tre orbitali a forma di manubrio ha un nodo tra i due lobi.



Orbitale 2p_x



Orbitale 2p_y



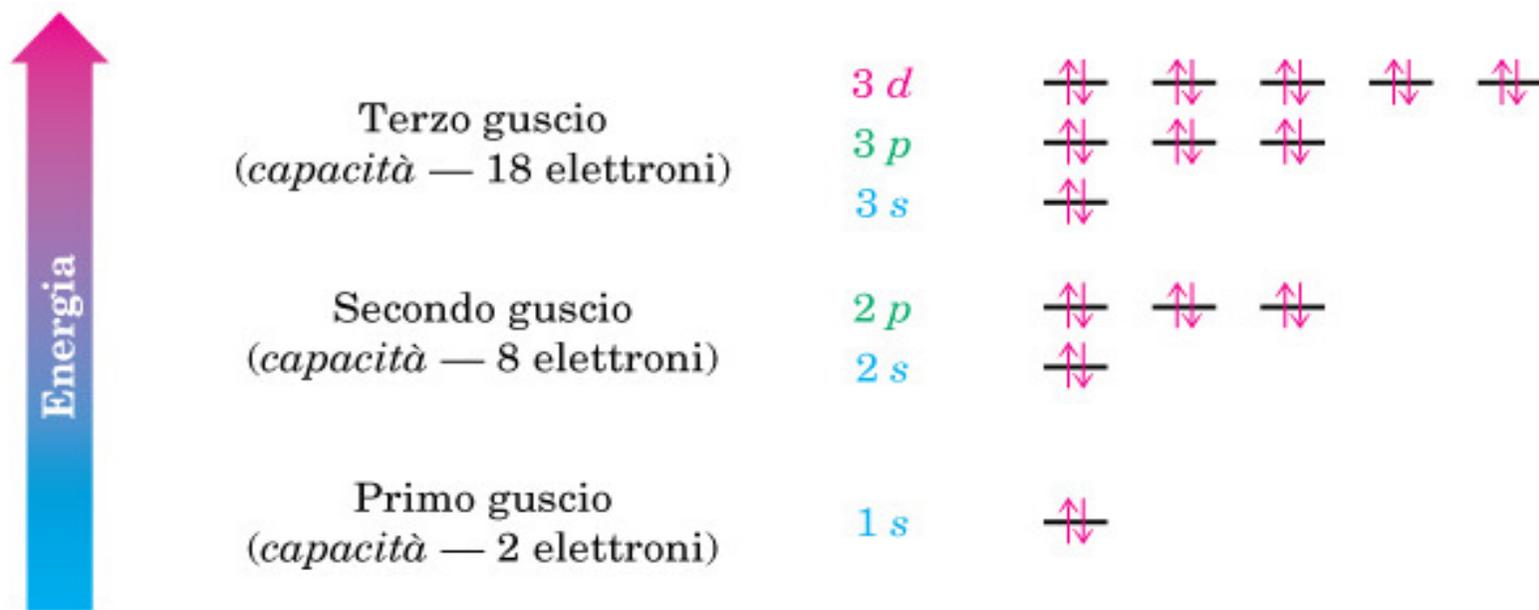
Orbitale 2p_z



Orbitali 2p

Proprietà atomiche

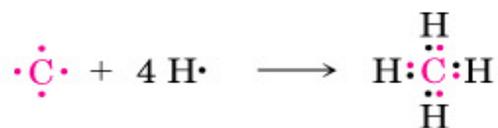
Livelli energetici degli elettroni in un atomo. Il primo guscio contiene un solo orbitale 1s; il secondo guscio contiene un massimo di otto elettroni in un orbitale 2s e tre orbitali 2p; il terzo guscio contiene un massimo di diciotto elettroni in un orbitale 3s, tre orbitali 3p e cinque orbitali 3d, 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.



Più che di singoli atomi ci occuperemo di due o più atomi uniti insieme

- Il legame è l'unione di due atomi in un arrangiamento stabile.
- Attraverso il legame, gli atomi completano il livello esterno di elettroni di valenza.
- Attraverso il legame, gli atomi raggiungono la configurazione stabile dei gas nobili.
- I legami ionici si originano dal trasferimento di elettroni da un elemento ad un altro.
- I legami covalenti si originano dalla compartecipazione di elettroni tra due nuclei.

Il legame covalente



Metano (CH₄)



Ammoniaca (NH₃)



Acqua (H₂O)



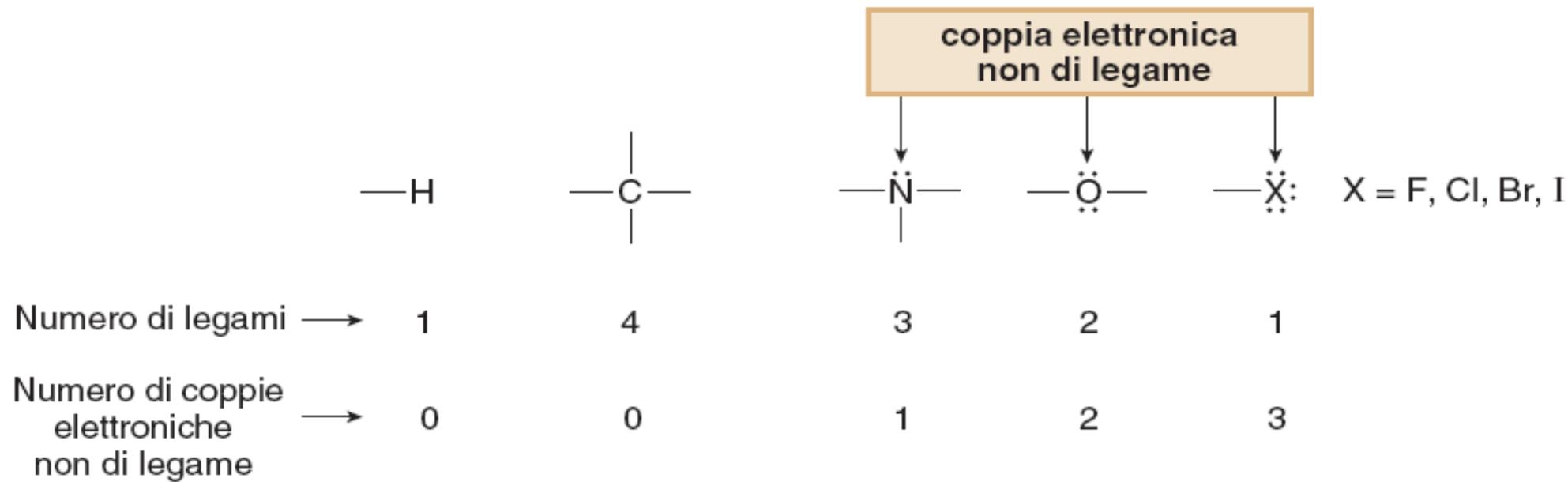
Metanolo (CH₃OH)

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)	$\text{H}:\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{O}}}\cdot:\text{H}$	$\text{H}-\text{O}-\text{H}$	Metano (CH ₄)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \vdots \\ \text{H}:\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{C}}}\cdot:\text{H} \\ \vdots \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Ammoniaca (NH ₃)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \vdots \\ \text{H}:\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{N}}}\cdot:\text{H} \\ \vdots \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{N}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	Metanolo (CH ₃ OH)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \vdots \\ \text{H}:\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{C}}}\cdot:\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{O}}}\cdot:\text{H} \\ \vdots \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$

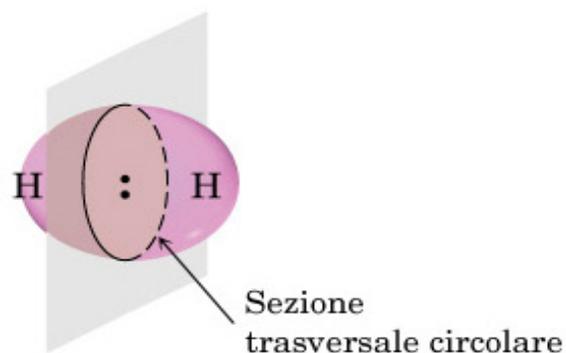
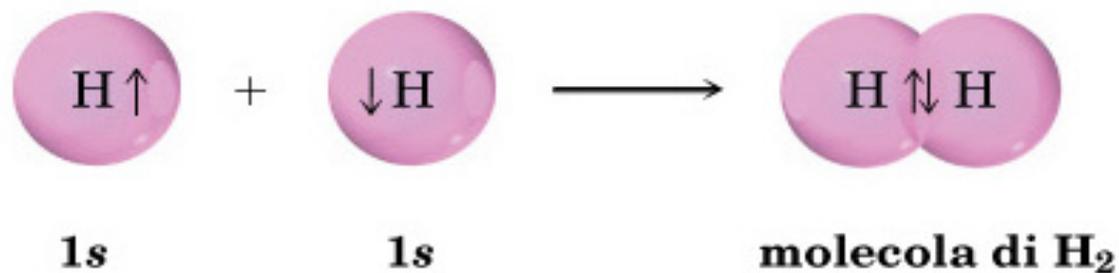
- **Gli elementi della seconda riga non possono avere più di otto elettroni intorno. Per le molecole neutre, questo ha due conseguenze:**
 - ❖ **Atomi con uno, due o tre elettroni di valenza formano uno, due o tre legami rispettivamente, in molecole neutre.**
 - ❖ **Atomi con quattro o più elettroni di valenza formano legami sufficienti per formare l'ottetto.**
 - ❖ **Quando elementi della seconda riga formano meno di quattro legami i loro ottetti consistono di elettroni sia di legame (condivisi) che di non legame (non condivisi). Gli elettroni non condivisi sono anche chiamati *coppie solitarie*.**

Legame chimico



Teoria del legame di valenza

Orbitali singolarmente occupati si sovrappongono.

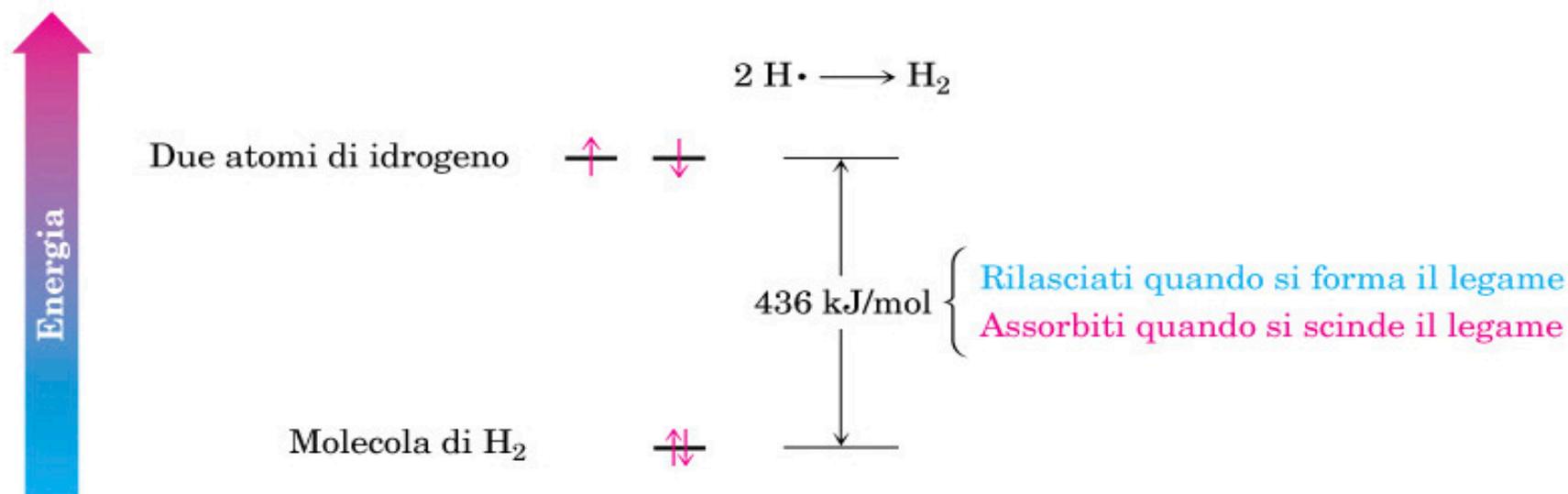


Legame σ

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

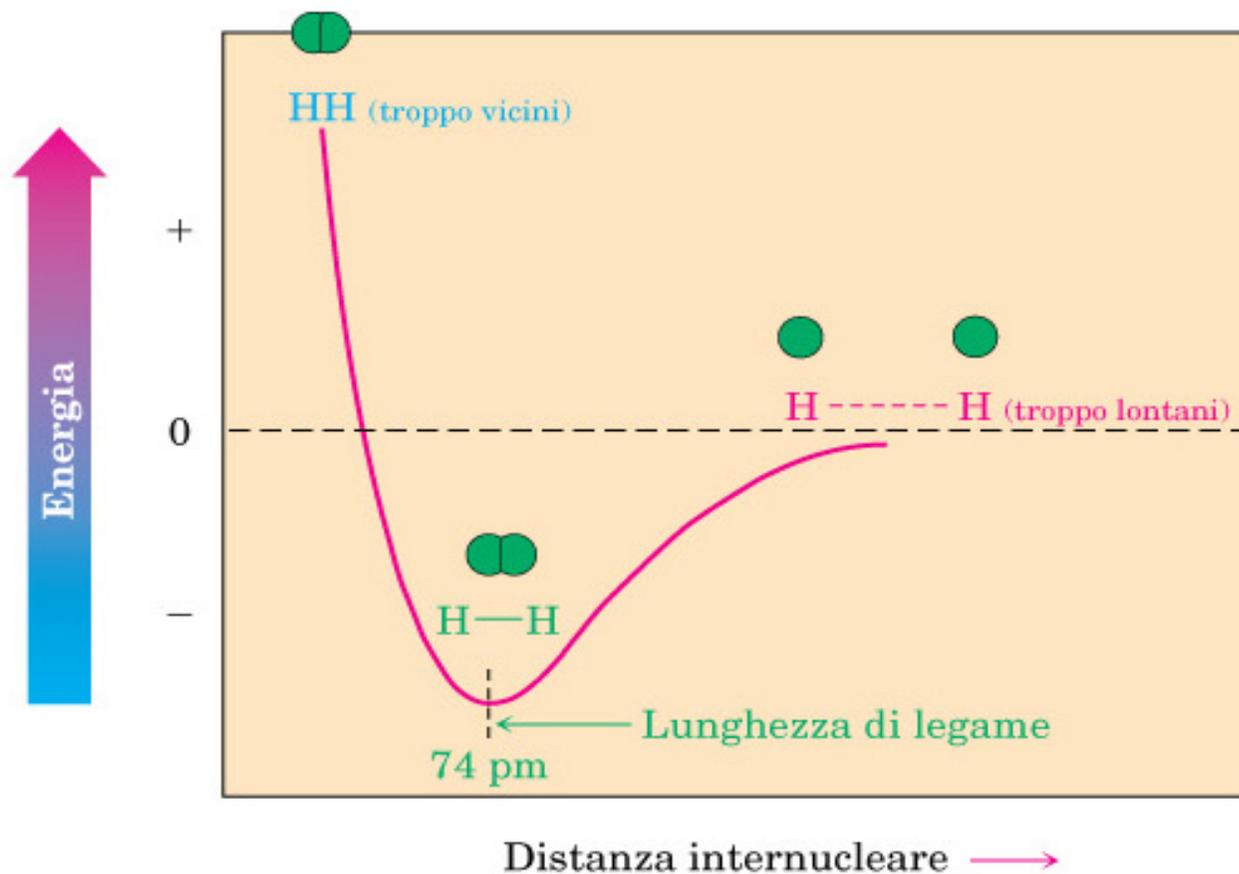
Energia di legame

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

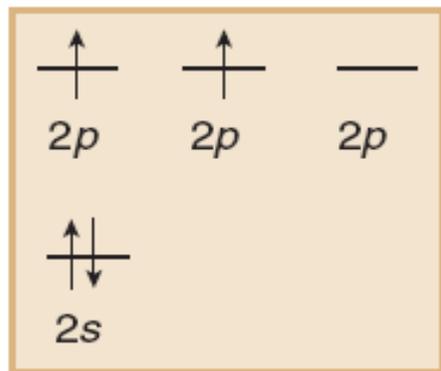
Grafico dell'energia contro la distanza internucleare per due atomi di idrogeno. La distanza tra i nuclei al punto di minima energia è la lunghezza di legame.



Ibridizzazione

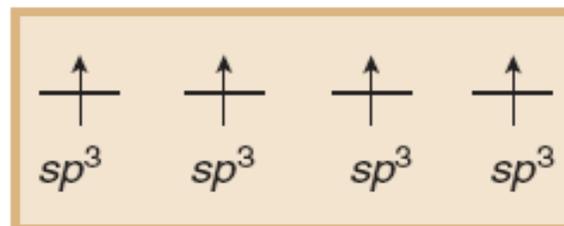
il caso del metano CH_4

Formazione di quattro orbitali ibridi sp^3 nel carbonio



quattro orbitali atomici

ibridazione
----->



quattro orbitali ibridi

← quattro elettroni spaiati

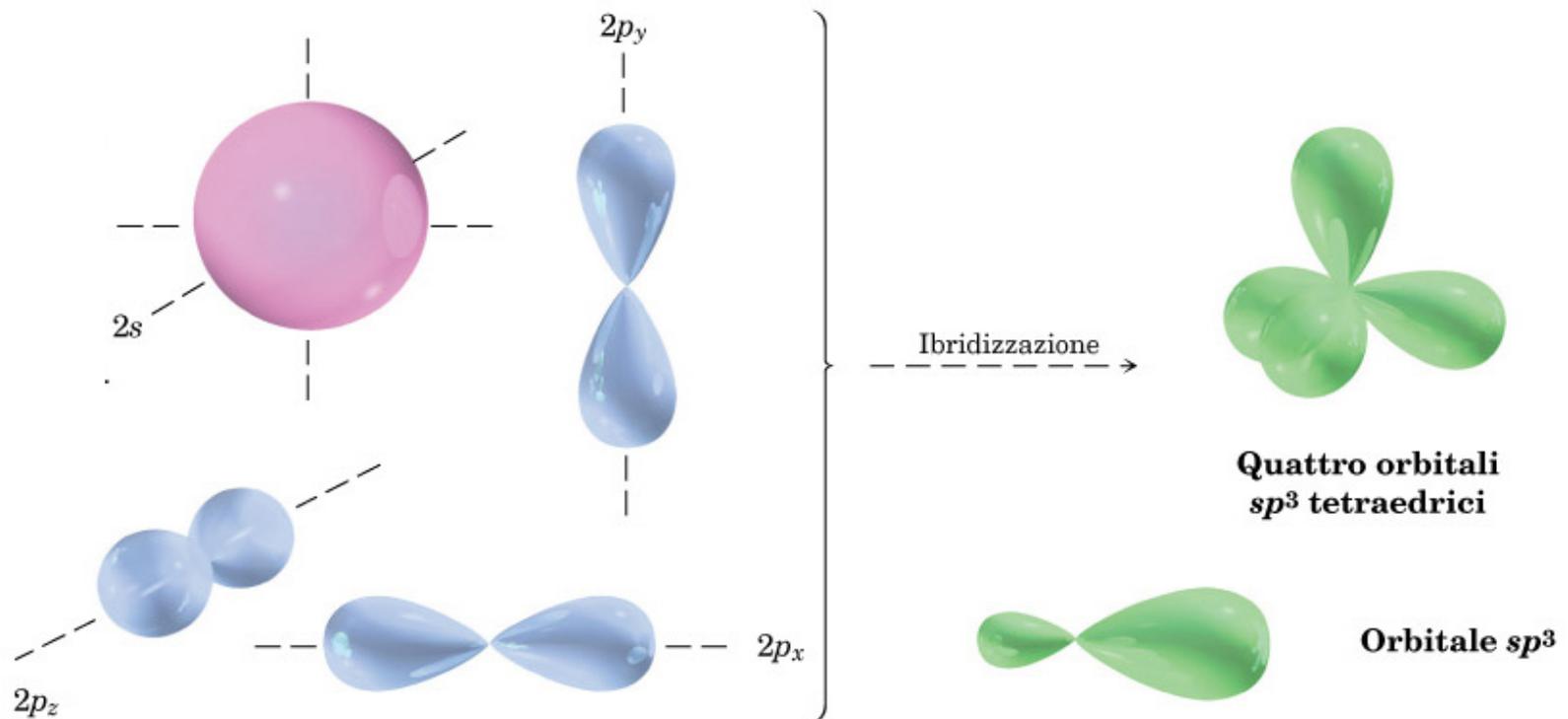
I chimici hanno postulato che atomi come il carbonio non usino orbitali puri s e p per formare i legami, bensì un insieme di nuovi orbitali chiamati orbitali ibridi.

L' ibridazione è la combinazione di due o più orbitali atomici per formare lo stesso numero di orbitali ibridi, ognuno dei quali ha la stessa forma ed energia.

Ibridizzazione

Quattro orbitali ibridi sp^3 (verde), orientati verso i vertici 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.

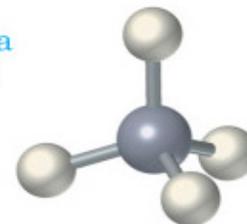
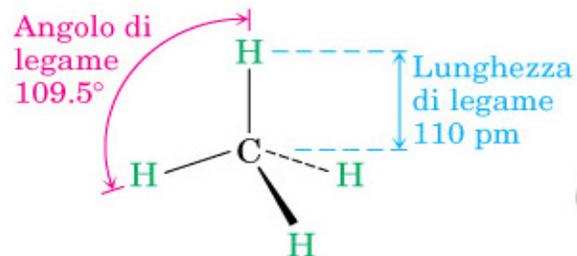
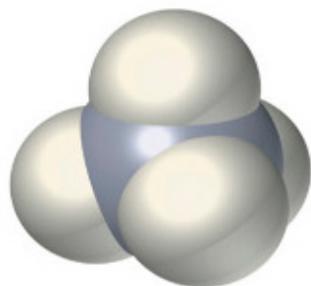


Legame chimico: ibridizzazione

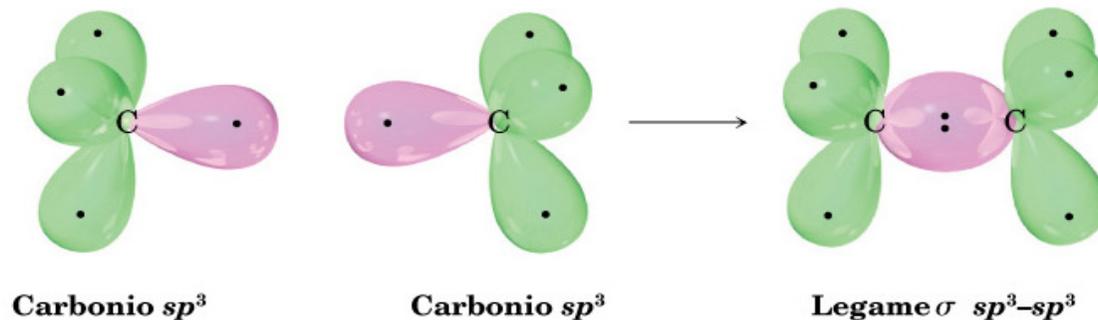
Esempi di molecole con ibridazione sp^3

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

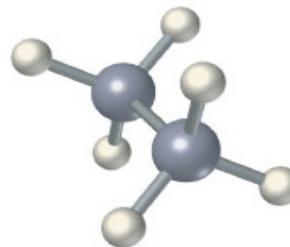
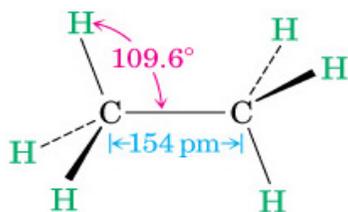
$E_{C-H} = 438 \text{ kJ/mol}$ (105 kcal/mol)



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).

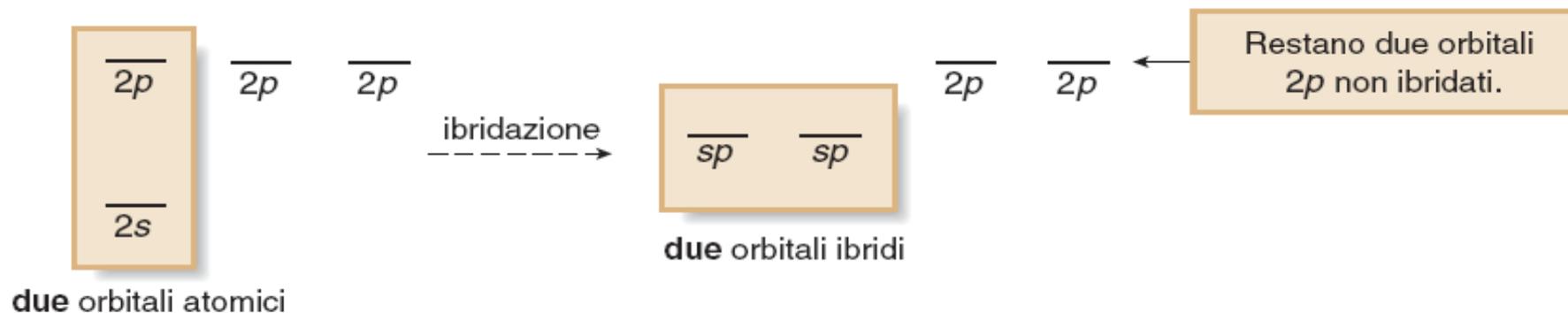


C-C 376 kJ/mol
C-H 420 kJ/mol

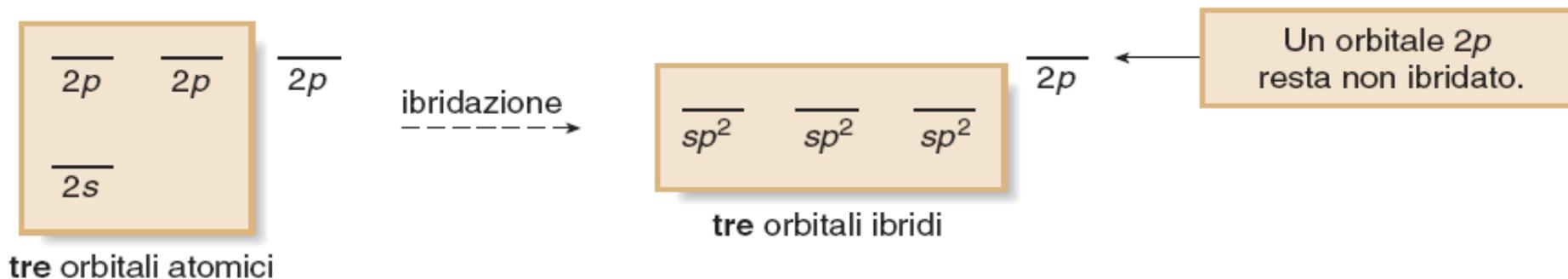


Legame chimico: ibridizzazione

- Un orbitale $2s$ e tre orbitali $2p$ formano quattro orbitali ibridi sp^3 .
- Un orbitale $2s$ e due orbitali $2p$ formano tre orbitali ibridi sp^2 .
- Un orbitale $2s$ e un orbitale $2p$ formano due orbitali ibridi sp .



- La formazione di due orbitali ibridi sp usa un orbitale $2s$ e un orbitale $2p$, lasciando due orbitali $2p$ non ibridati.

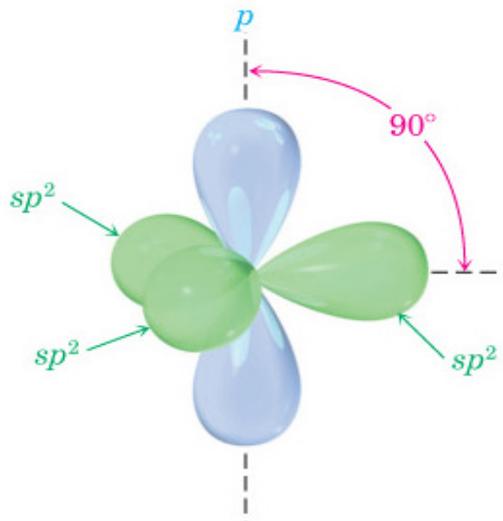


- La formazione di tre orbitali ibridi sp^2 usa un orbitale $2s$ e due orbitali $2p$, lasciando un orbitale $2p$ non ibridato.

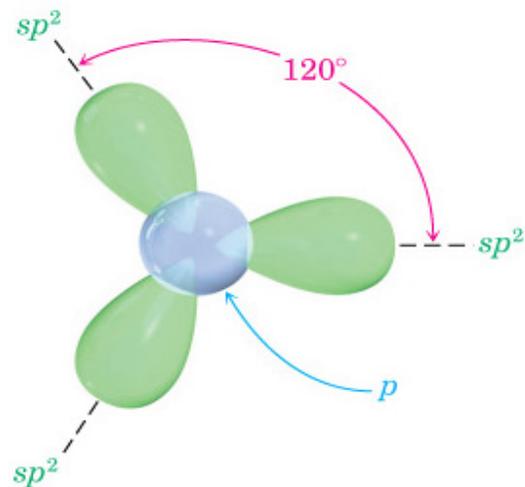
Legame chimico: ibridizzazione

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 .



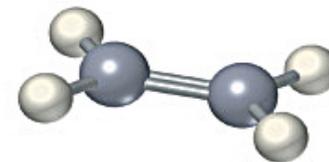
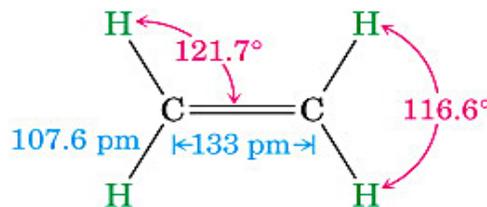
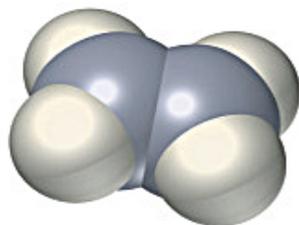
Vista laterale



Vista dall'alto

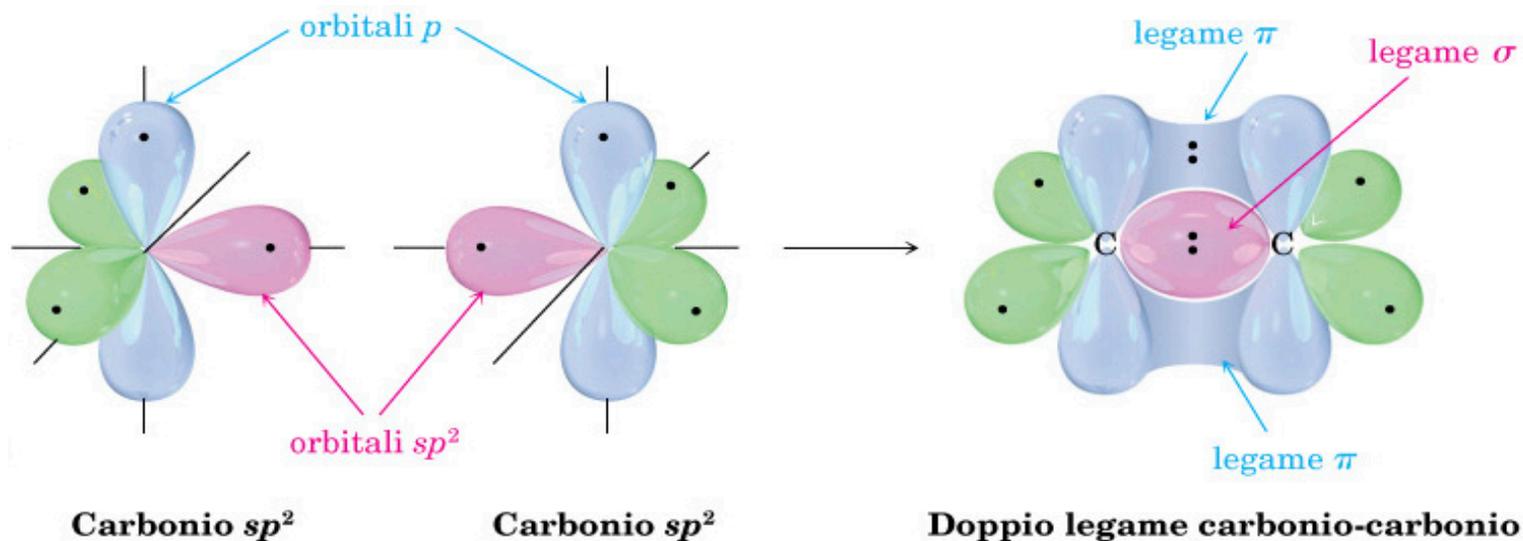
Struttura dell'etilene

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



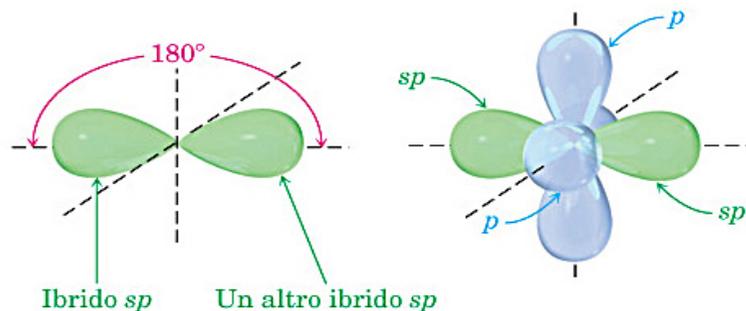
Legame chimico: ibridizzazione

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.

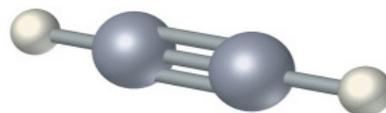
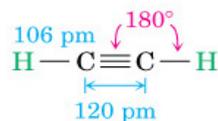
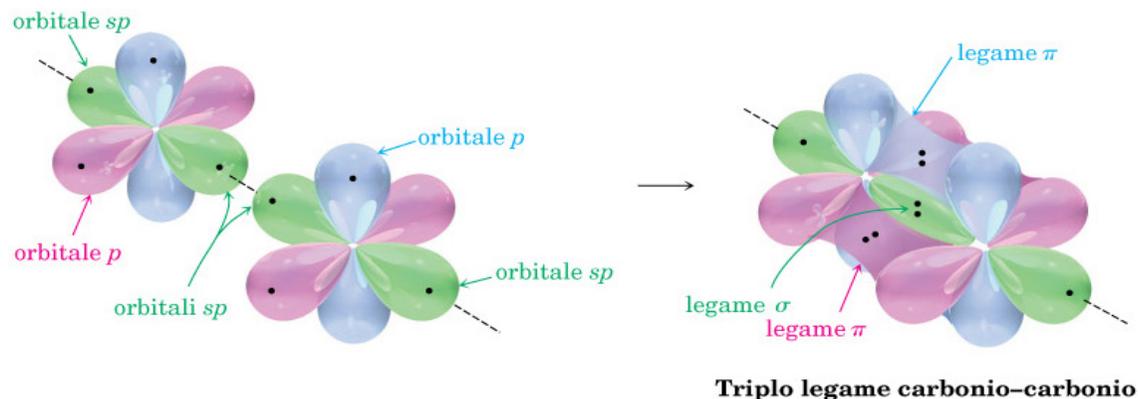


Legame chimico: ibridizzazione

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).

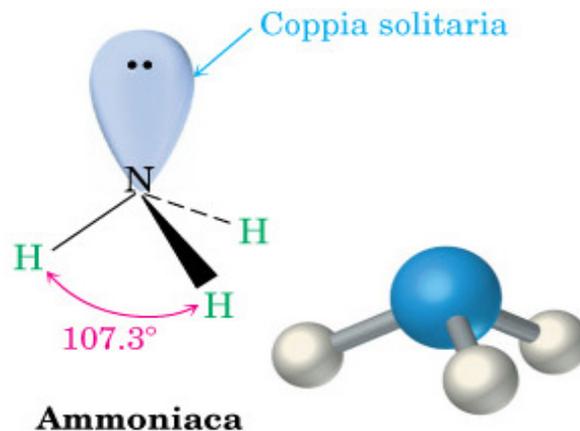


Struttura dell'acetilene. I due atomi di carbonio ibridizzati sp sono uniti da un legame σ $sp-sp$ e da due legami π $p-p$.



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° .

