

CHIMICA ORGANICA

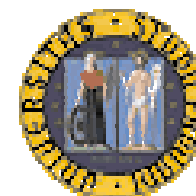
Fabrizio Mancin

Dipartimento di Scienze Chimiche

Edificio Chimica Organica, Il Piano, Stanza 5

tel. 049 8275666, e-mail: fabrizio.mancin@unipd.it,

<http://www.chimica.unipd.it/fabrizio.mancin>



Obiettivi formativi del corso:

Il corso si propone di fornire agli studenti una definizione degli aspetti generali che sono alla base della Chimica dei composti organici, di condurli all'apprendimento delle principali regole di nomenclatura e ad una conoscenza generale della struttura e reattività delle principali classi di composti organici.

- Classi di composti organici
- Proprietà chimico-fisiche dei composti organici
- Nomenclatura
- Struttura tridimensionale dei composti organici
- Reattività dei composti organici

Testo consigliato:



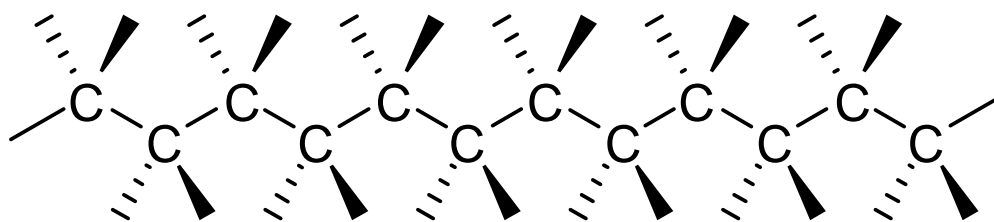
FONDAMENTI DI CHIMICA ORGANICA
John McMurry
Seconda Edizione Italiana, Zanichelli



CHIMICA ORGANICA: Un approccio biologico
John McMurry
Seconda Edizione Italiana, Zanichelli

Qualsiasi altro testo universitario di Chimica Organica

Chimica Organica: perché il carbonio?



- **Catenazione:** abilità di un elemento chimico di formare lunghe catene tramite legami covalenti
- Isomerie strutturali, spaziali e conformazionali.
- Presenza di eteroatomi

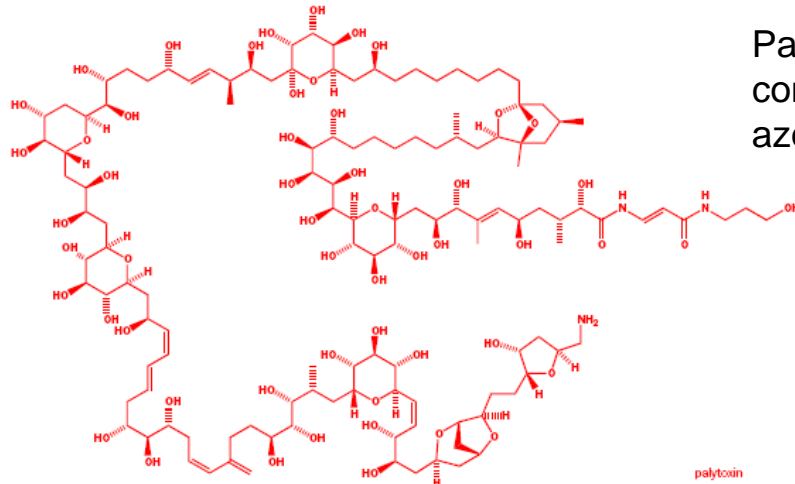
Miliardi di composti
possibili

La storia della Chimica Organica

- Agli inizi dell'800 la Chimica Organica (termine coniato da Berzelius nel 1807) studiava composti derivati da sorgenti biologiche (piante, animali) e le loro modificazioni.
- Tali composti erano ritenuti troppo complicati per poter essere preparati per sintesi. Si pensava che essi contenessero un qualche tipo di "forza vitale" e di conseguenza potessero formarsi solo all'interno di esseri viventi.
- Nel 1828 il chimico Friedrich Wöhler preparò l'urea dal cianato di ammonio.
- A tutt'oggi sono noti 18 milioni di composti organici, la maggior parte dei quali di origine sintetica.

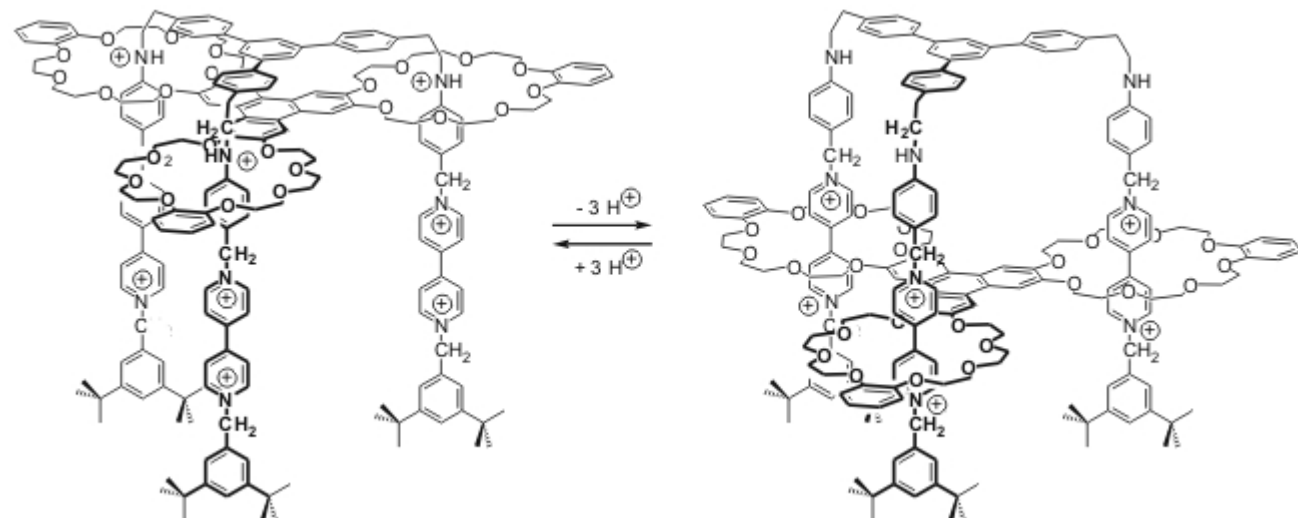


Chimica Organica:

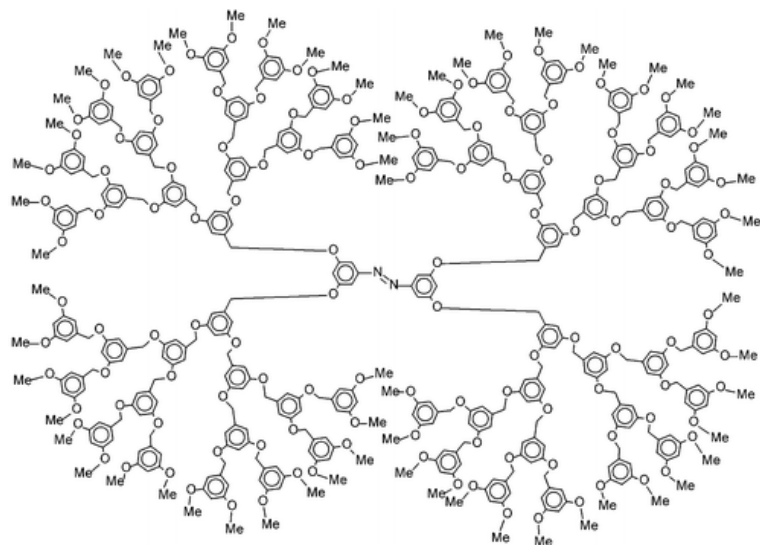


Palitossina: isolata da una conchiglia tropicale, contiene 129 atomi di carboni, 54 di ossigeno, 3 di azoto. E' uno dei composti più tossici noti (0.15 $\mu\text{g}/\text{kg}$)

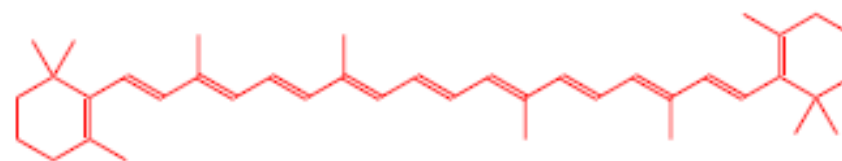
Ascensore molecolare
(Balzani, Stoddart)



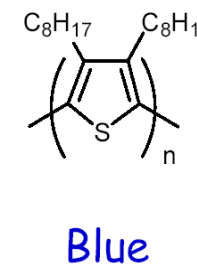
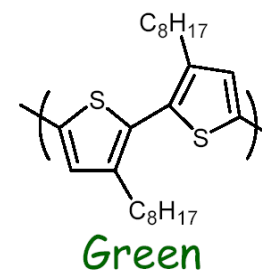
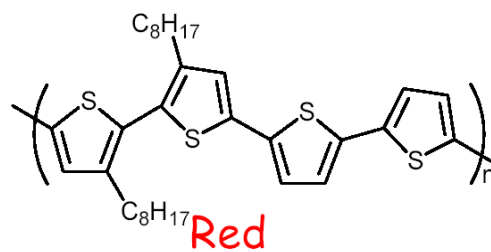
Chimica Organica:



Sistemi antenna:
conversione dell'energia
solare



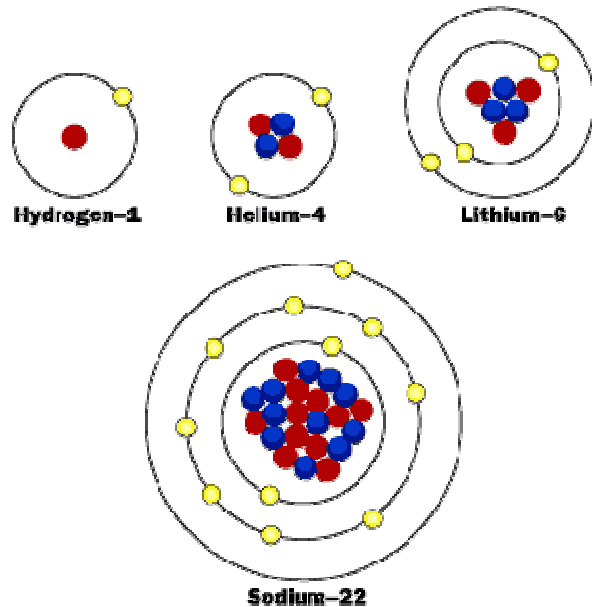
β -carotene



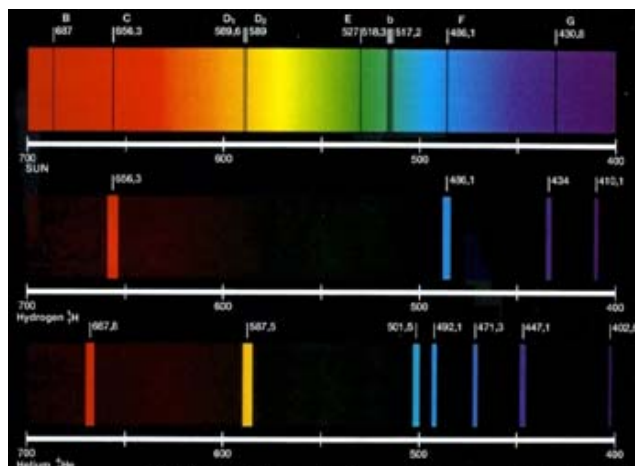
Polimeri coniugati

I composti chimici: la struttura dell'atomo

Isotopes of Hydrogen, Helium, Lithium and Sodium



● Neutron ● Proton ● Electron



L'atomo è costituito da un **nucleo** carico positivamente, formato da **neutroni** e **protoni** e circondato da **elettroni**, carichi negativamente.

Numero atomico (Z) = numero di protoni

Numero di massa (A) = numero di protoni + neutroni

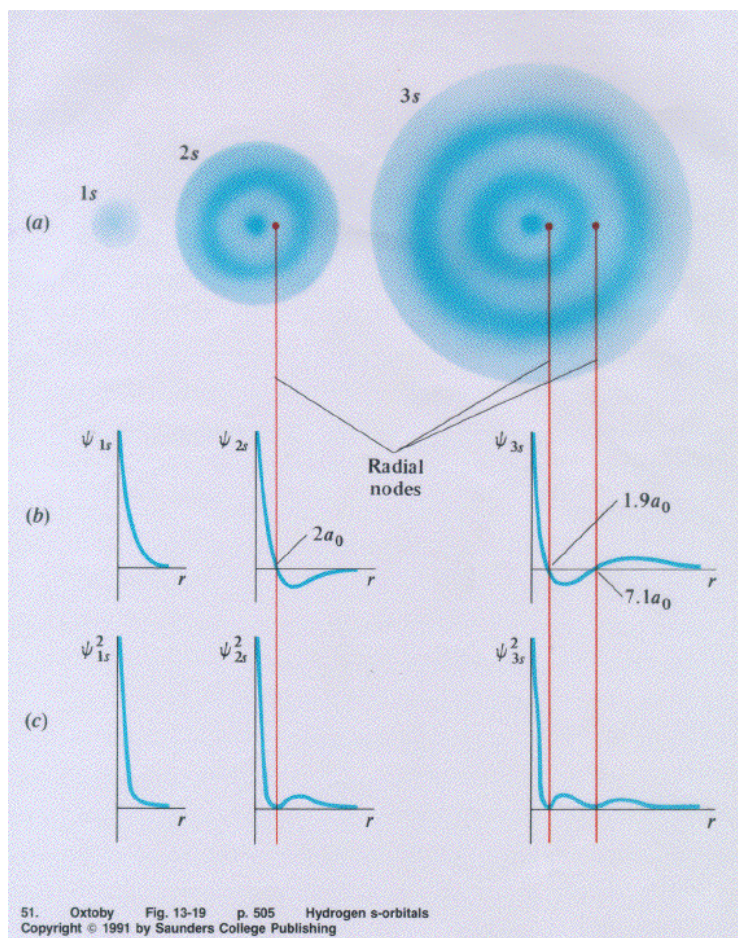
La massa è concentrata nel nucleo. Lo spazio occupato da un atomo (circa $2A$) è quasi interamente costituito dalla nuvola di elettroni.

Gli elettroni occupano delle “**orbite**” a distanze fisse dal nucleo: passare da un'orbita alla superiore richiede una **determinata quantità** di energia

Principio di indeterminazione: non è possibile conoscere contemporaneamente posizione e velocità di una particella

I composti chimici: la struttura dell'atomo

$$H\psi = E\psi \quad \text{Equazione di Schroedinger}$$



Orbitali, zone di alta probabilità di trovarvi l'elettrone

Gli orbitali si dispongono in gusci (n),
ciascun guscio contiene un numero
crescente di orbitali:

$n = 0$, 1 orbitale s

$n = 1$, 1 orbitale s , 3 orbitali p

$n = 2$, 1 orbitale s , 3 orbitali p , 5 orbitali f

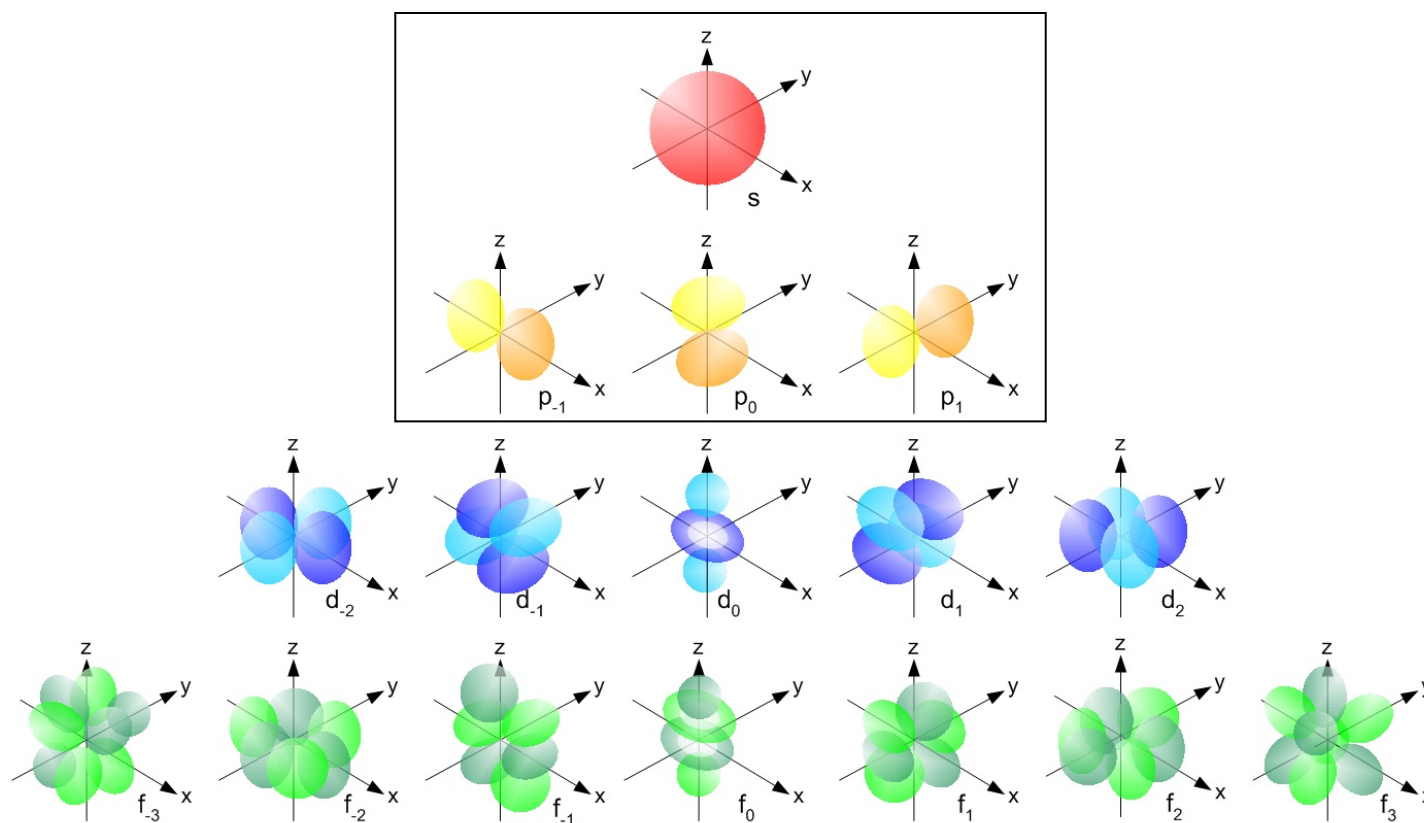
$n = 3$,

Al crescere di n aumenta l'energia
dell'orbitale (e un po' anche passando da s
a p , e da p a f ...)

La forma degli orbitali

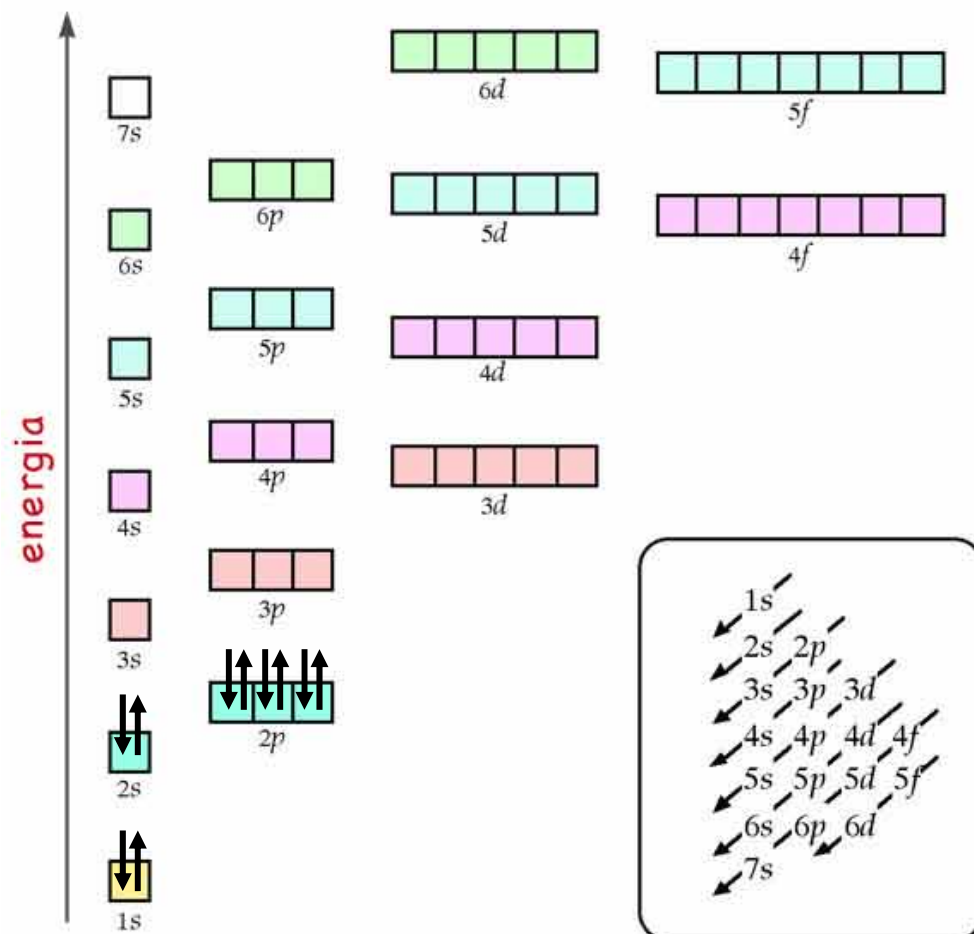
$$H\psi = E\psi$$

Equazione di Schroedinger



Ogni orbitale contiene massimo 2 elettroni!

Gli elettroni negli orbitali



H ($Z = 1$) : 1 elettrone

He ($Z = 2$) : 2 elettroni

Li ($Z = 3$) : 3 elettroni

Be ($Z = 4$) : 4 elettroni

B ($Z = 5$) : 5 elettroni

C ($Z = 6$) : 6 elettroni

N ($Z = 7$) : 7 elettroni

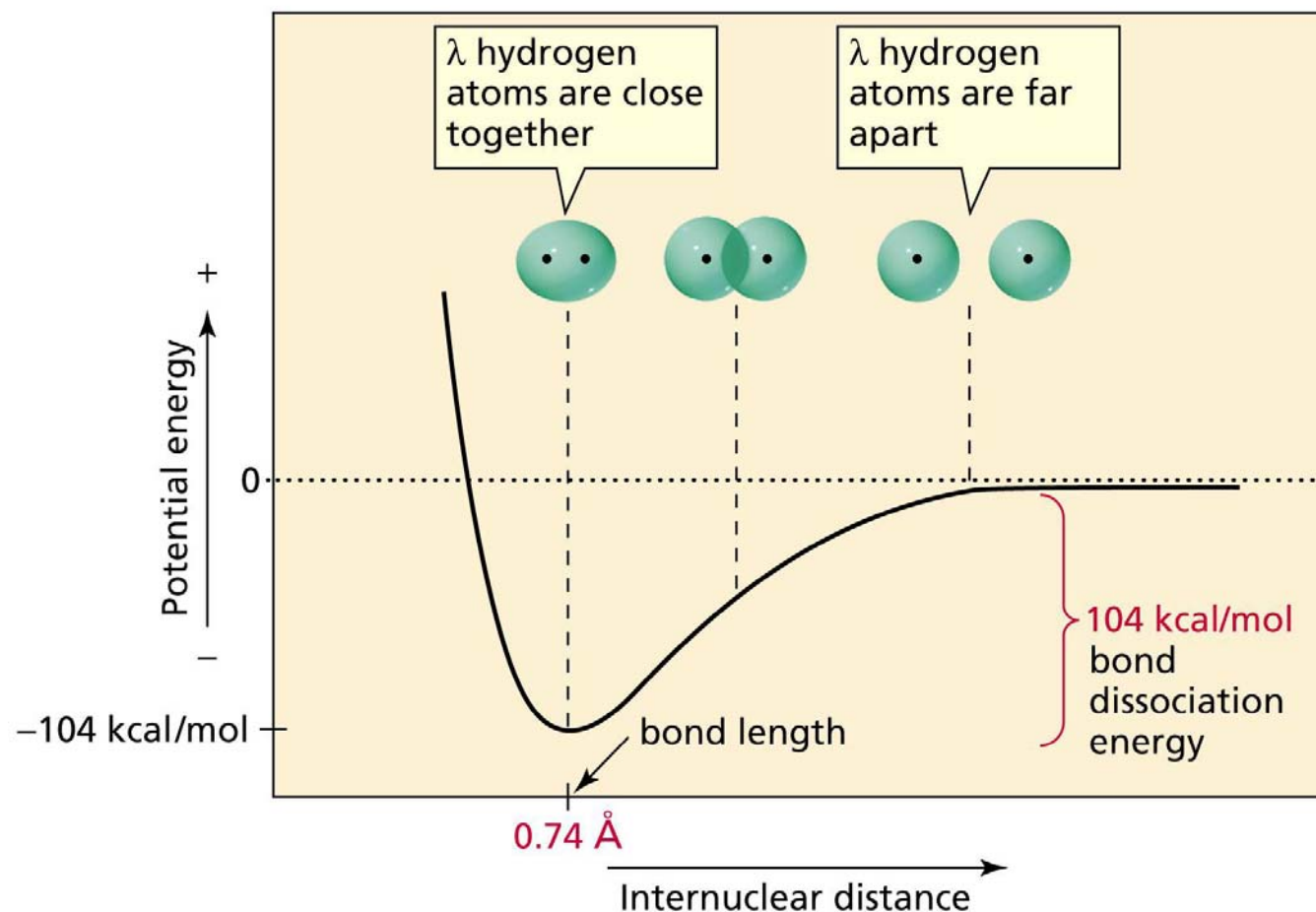
O ($Z = 8$) : 8 elettroni

F ($Z = 9$) : 9 elettroni

Ne ($Z = 10$) : 10 elettroni

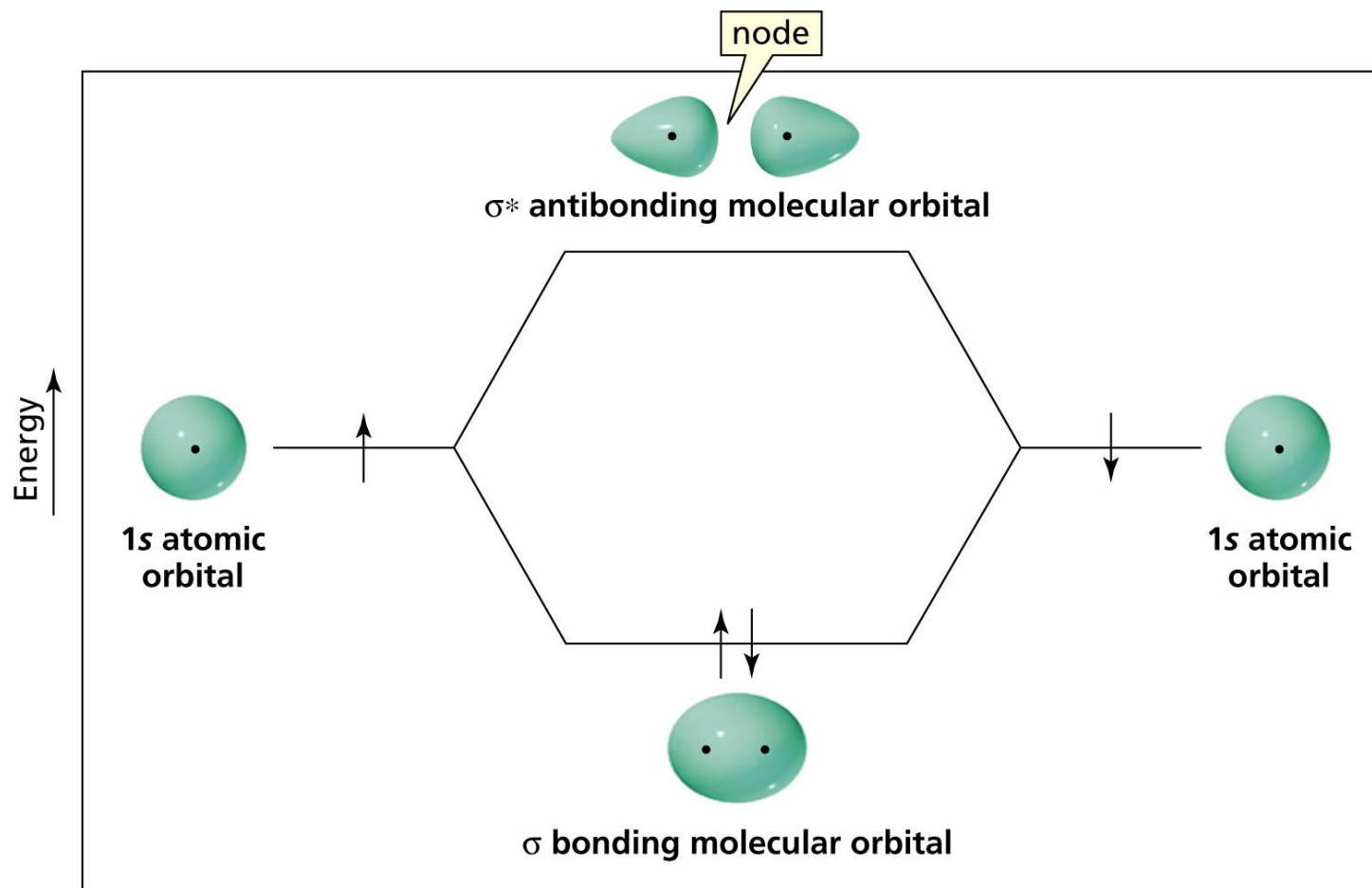
Ogni orbitale contiene massimo 2 elettroni!

Il legame chimico



Quando due orbitali (ciascuno con un elettrone) si avvicinano, si forma un nuovo orbitale (molecolare) più stabile (energia minore) degli orbitali atomici di partenza

Orbitali molecolari



Da due orbitali atomici in realtà si formano due orbitali molecolari (uno di legame e uno di antilegame). Gli elettroni si redistribuiscono secondo le regole di riempimento.

Quanti legami?

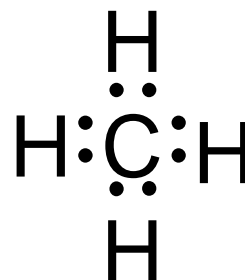
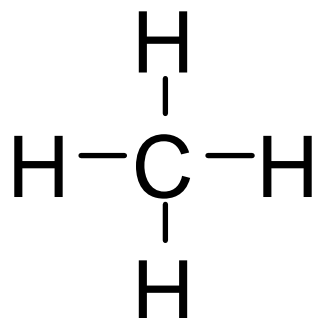
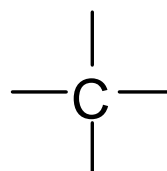
Solo la combinazione di due orbitali semipieni porta ad un legame.

- Si possono usare solo gli elettroni di valenza (ultimo guscio).
- E' possibile spostare un elettrone da un orbitale Ns a un Np .

C, $Z = 6 \Rightarrow 1s^2 1s^2 2p^2 \Rightarrow 2$ legami

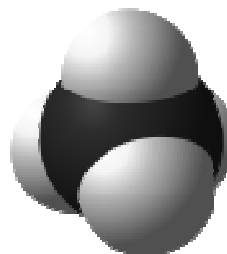
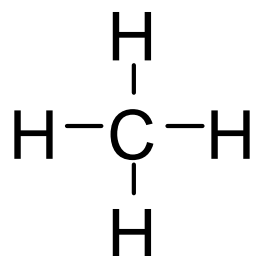


$\Rightarrow 1s^2 1s^1 2p^3 \Rightarrow 4$ legami

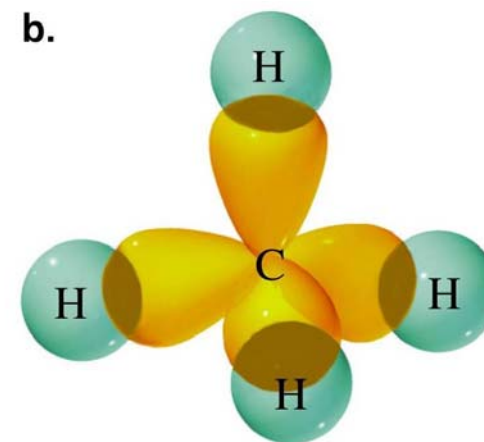
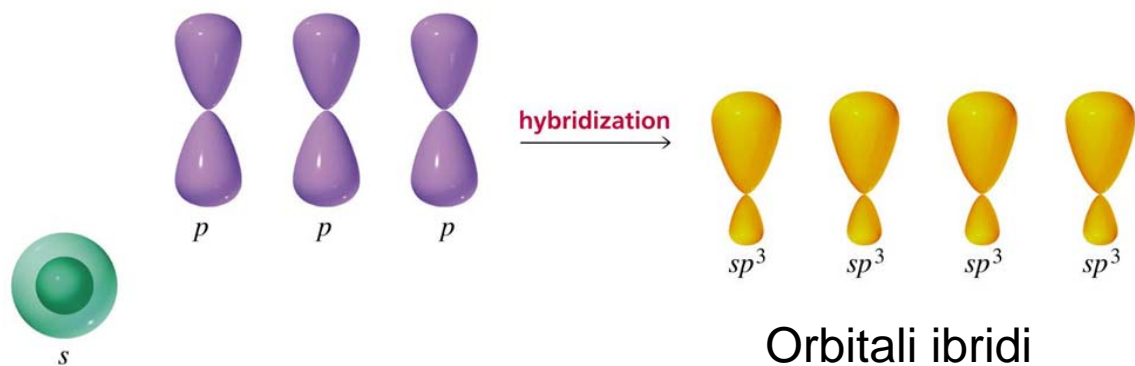
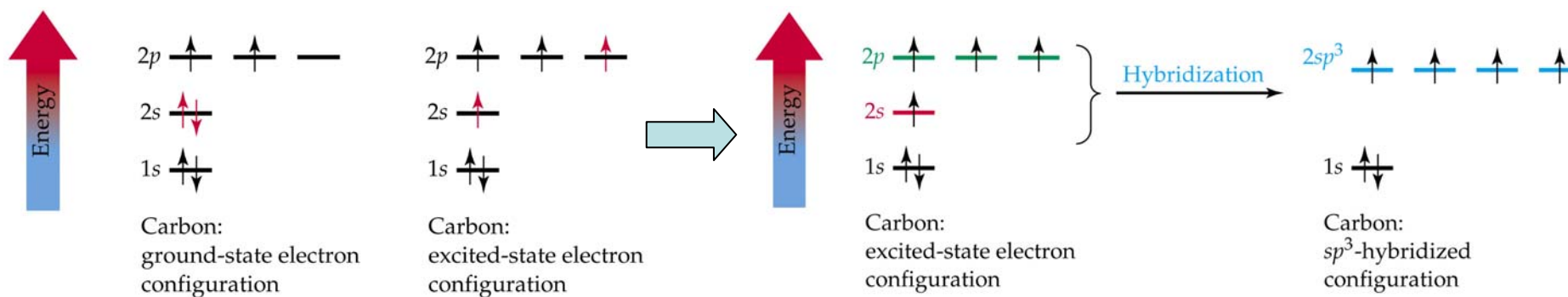


Un atomo del 1 periodo non può avere più di **un** legame, un atomo del secondo periodo non può avere più di **quattro** legami.

Orbitali ibridi

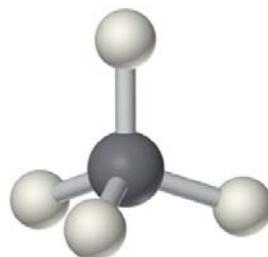
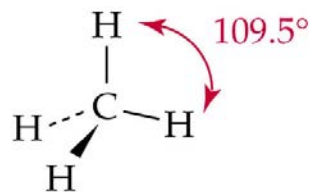


Metano



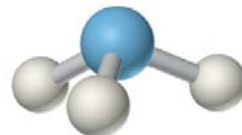
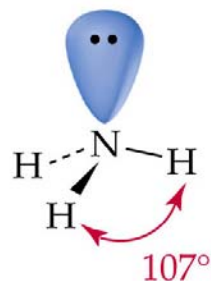
Orbitali ibridi

A methane molecule is tetrahedral, with bond angles of 109.5° .



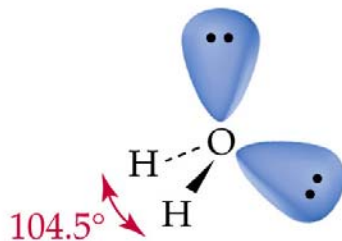
Un orbitale può essere occupato da un elettrone, e quindi formare un legame.

An ammonia molecule is trigonal pyramidal, with bond angles of 107° .

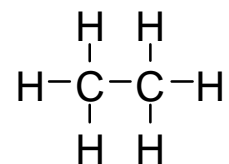


Oppure può essere occupato da due elettroni, e in questo caso si chiamerà “doppietto non condiviso”

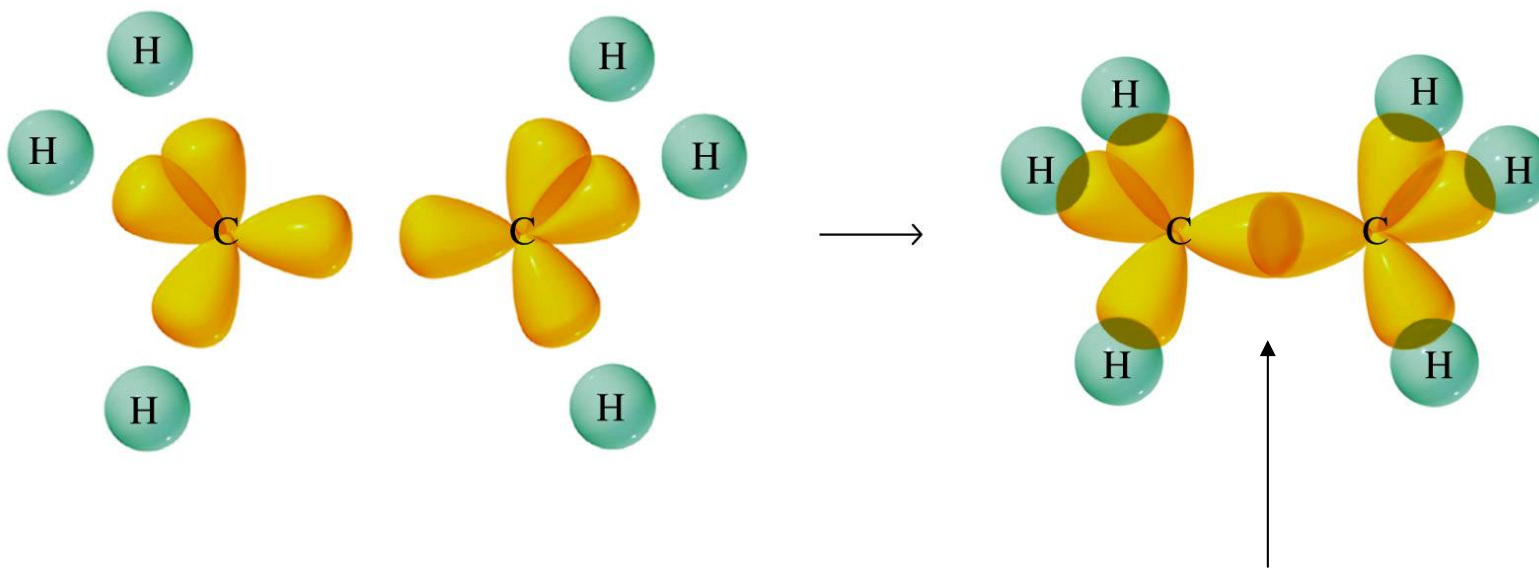
A water molecule is bent, with a bond angle of 104.5° .



Elettroni spaiati (radicali) sono molto rari in molecole organiche e spesso danno luogo a specie instabili.

Orbitali sp^3 

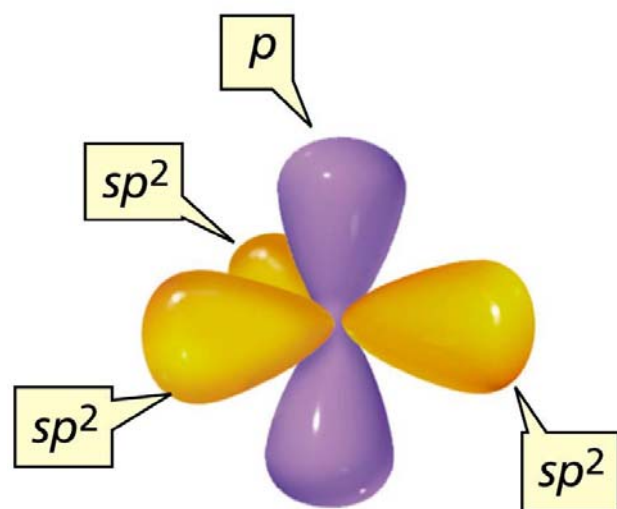
Etano



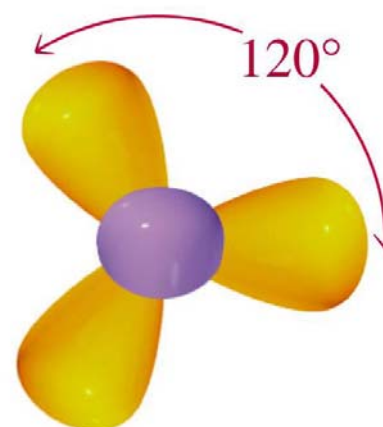
Questo legame può rotare

Orbitali sp^2

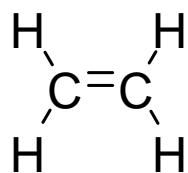
Si ottengono combinando due orbitali p con un s. Il terzo orbitale p rimane immutato.



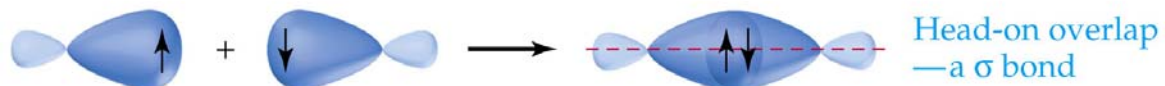
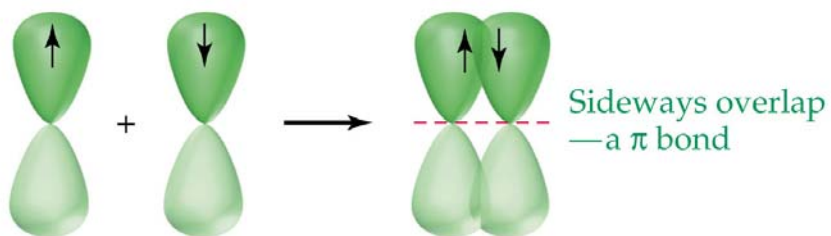
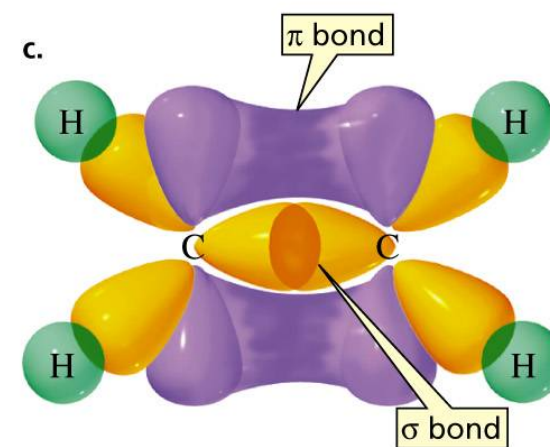
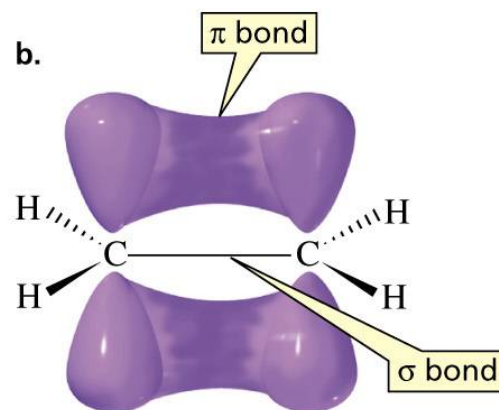
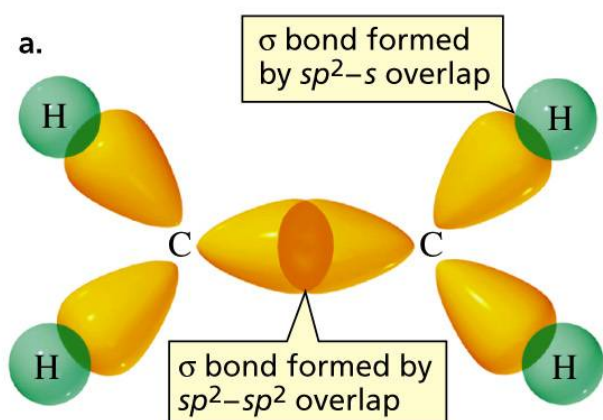
side view



top view

Orbitali sp^2 

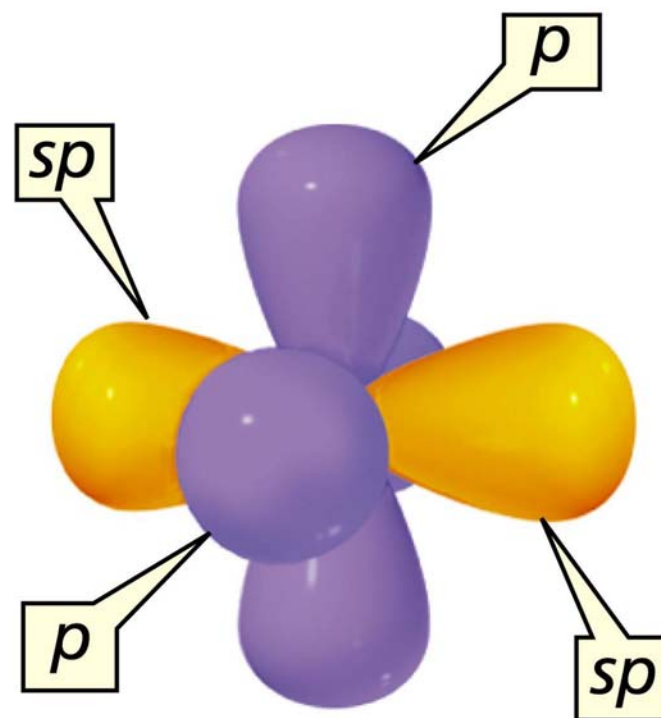
Etere

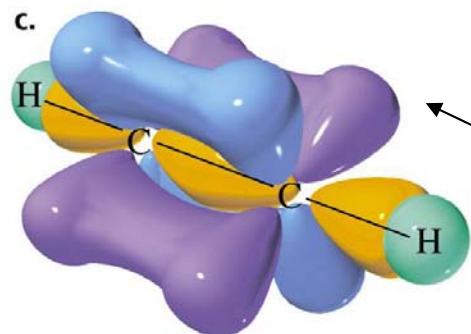
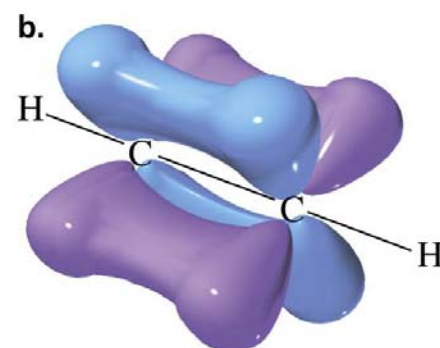
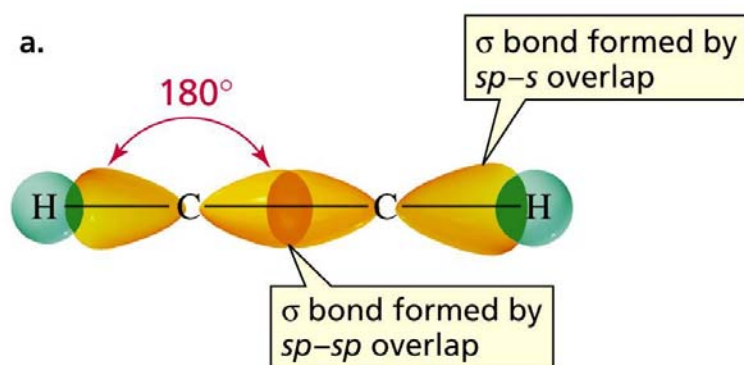
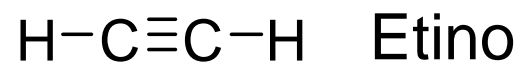


Questo legame non può rotare

Orbitali sp

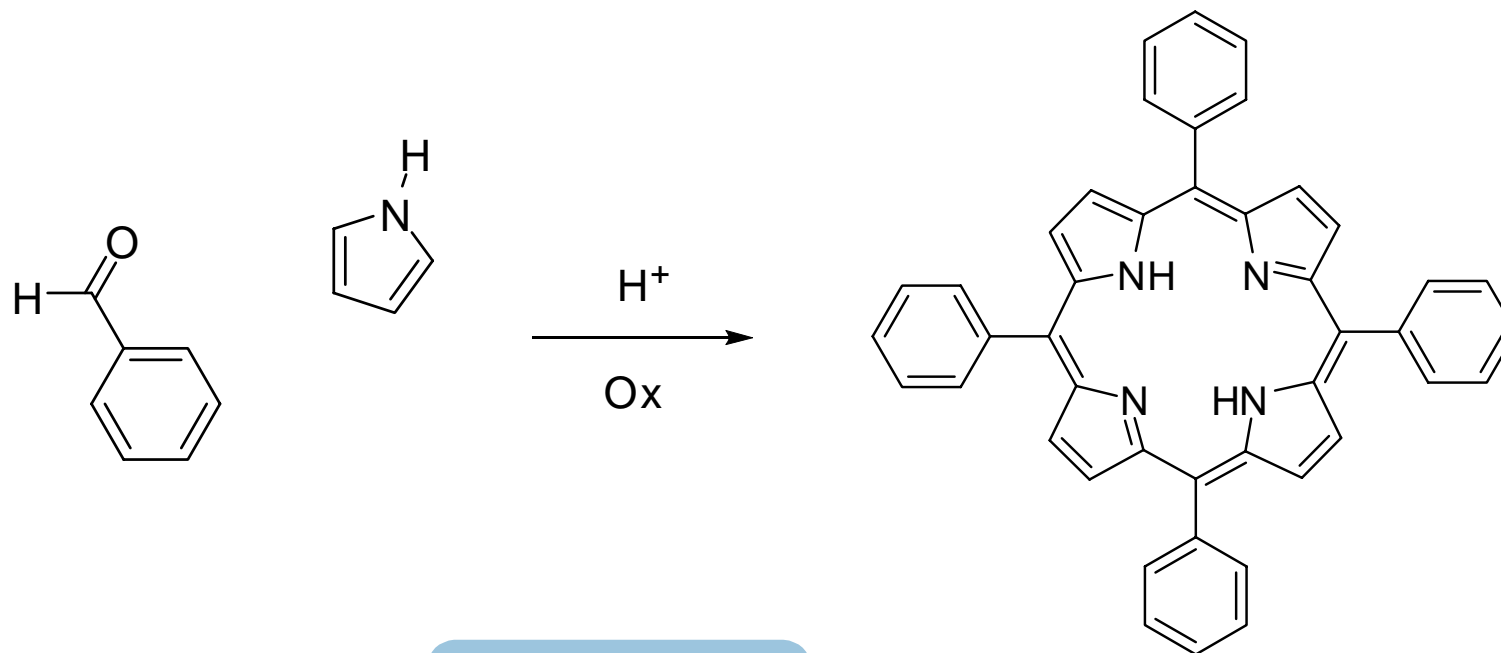
Si ottengono combinando un orbitale p con uno s . Gli altri orbitali p rimangono immutati.



Orbitali sp^2 

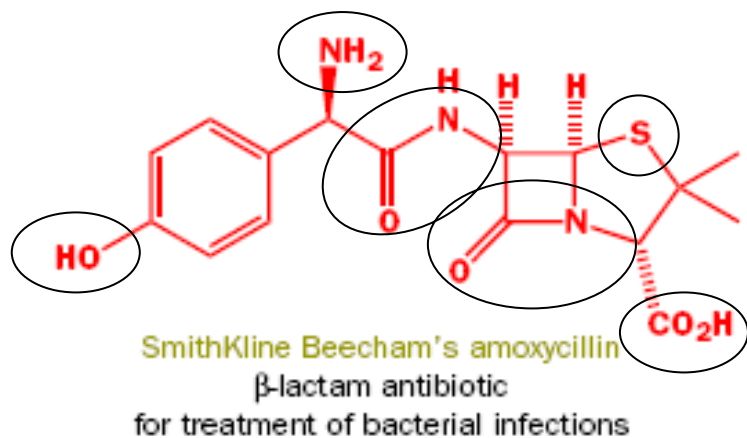
Questo legame non può rotare

Chimica Organica:



Conoscere le regole che governano la reattività dei composti organici è il segreto della costruzione di strutture complesse e funzionali

I gruppi funzionali

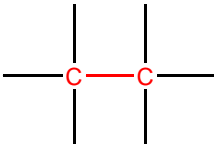
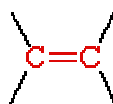

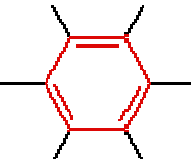


Le caratteristiche funzionali che consentono di classificare un composto in base alla sua reattività si chiamano gruppo funzionali.

Un gruppo funzionale è una porzione di molecola, un atomo o un raggruppamento di atomi, che presenta un comportamento chimico caratteristico.

Gruppi funzionali

Basati sul solo legame C-C

Gruppo Funzionale	Nome	Esempio	Nome IUPAC	Nome Comune
	Alcano	$\text{CH}_3\text{-CH}_3$	Etano	
	Alchene	$\text{H}_2\text{C=CH}_2$	Etene	Etilene
	Alchino	$\text{HC}\equiv\text{CH}$	Etino	Acetilene
	Arene	C_6H_6	Benzene	


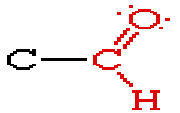
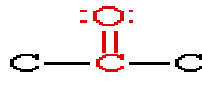
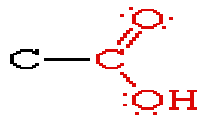
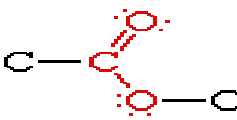
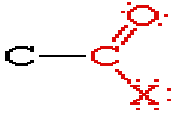

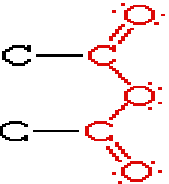
Gruppi funzionali

Basati sul legame singolo C-X

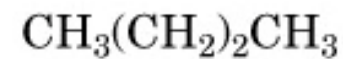
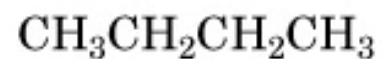
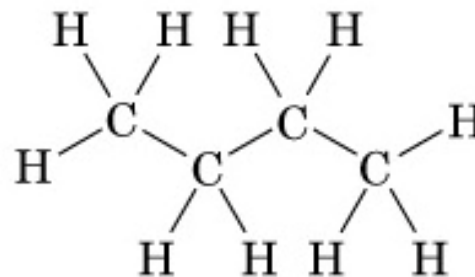
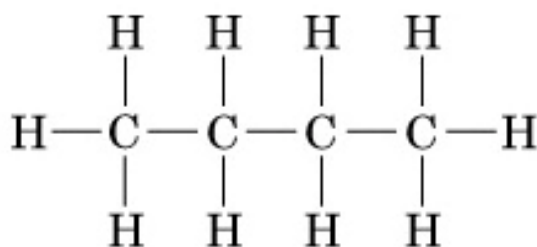
Gruppo Funzionale	Nome	Esempio	Nome IUPAC	Nome Comune
$\text{C}-\ddot{\text{X}}$	Alogenuro	$\text{H}_3\text{C}-\text{I}$	Iodometano	Ioduro di metile
$\text{C}-\ddot{\text{O}}\text{H}$	Alcol	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$	Etanolo	Alcol Etilico
$\text{C}-\ddot{\text{O}}-\text{C}$	Etere	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$	Dietil etere	Etere
$\text{C}-\ddot{\text{N}}\text{:}$	Ammina	$\text{H}_3\text{C}-\text{NH}_2$	Amminometano	Metilammina
$\text{C}-\overset{\oplus}{\text{N}}(\text{O}=\text{O})\text{O}^-$	Nitro Composto	$\text{H}_3\text{C}-\text{NO}_2$	Nitrometano	
$\text{C}-\ddot{\text{S}}\text{H}$	Tiolo	$\text{H}_3\text{C}-\text{SH}$	Metantiolo	Metil mercaptano
$\text{C}-\ddot{\text{S}}-\text{C}$	Solfuro	$\text{H}_3\text{C}-\text{S}-\text{CH}_3$	Dimetil solfuro	

Gruppi funzionali

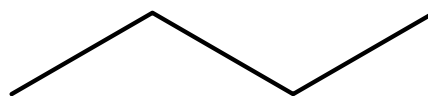
Basati sul legame multiplo C-X

Gruppo Funzionale	Nome	Esempio	Nome IUPAC	Nome Comune
	Nitrile	H ₃ C-CN	Etanonitrile	Acetonitrile
	Aldeide	H ₃ CCHO	Etanale	Aldeide acetica
	Chetone	H ₃ CCOCH ₃	Propanone	Acetone
	Acido carbossilico	H ₃ CCO ₂ H	Acido Etanoico	Acido acetico
	Etere	H ₃ CCO ₂ CH ₂ CH ₃	Etil etanoato	Acetato di etile
	Cloruro acilico	H ₃ CCOCl	Etanoil cloruro	Cloruro di acetile
	Ammide	H ₃ CCON(CH ₃) ₂	N,N-Dimetiletanammide	N,N-Dimetilacetammide
	Anidride acilica	(H ₃ CCO) ₂ O	Anidride Etanoica	Anidride acetica

Diversi modi per disegnare una molecola organica: il butano



struttura condensata



struttura dello scheletro