master COPY

• La CHIMICA ORGANICA è la chimica dei composti organici cioè i composti organici:
↳ I composti organici contengono quindi sicuramente carbonio e idrogeno, ma possiamo anche avere presenza di ETEROATOMI (atomi diversi da C e H come, ad esempio N, O, S ...)

La chimica organica si occupa e organizza in vari settori:

1) SINTESI di composti organici → Questi processi normalmente portano alla formazione di miscele contenenti sottoprodotti e reagenti che non hanno preso parte alla reazione.
2) SEPARAZIONE (Tecniche cromatografiche, distillazione ...)
3) CARATTERIZZAZIONE → Inizialmente si deve determinare la STRUTTURA PRIMARIA (concatenamento degli atomi)
In una reazione non si ha la sicurezza della struttura finale
La caratterizzazione è molto importante quando si usano sostanze estratte.
Vengono utilizzate tecniche spettroscopiche:
4) STEREOCHIMICA → È importante per determinare la conformazione (disposizione nello spazio) delle molecole ⇒ Questo influisce sul modo con cui le molecole interagiscono con matrici biologiche (es. enzimi che sono compatibili solo con certi isomeri).
5) INTERAZIONE → Cioè lo studio di come una molecola organica agisce e interagisce nei confronti di un bersaglio
(Es. interazione farmaco - proteina)
↳ Anche in questo caso è importante la CHIRALITÀ (presenza di centri stereogenici) ⇒ influenza le proprietà del principio attivo

• Un GRUPPO FUNZIONALE è un insieme di atomi con caratteristiche proprietà chimico-fisiche che determina la reattività del composto organico
↳ La più semplice classificazione dei composti organici è quella che si basa sui gruppi funzionali.

La maggior parte dei composti organici contiene legami C–C e C–H ma possiamo anche avere anche:
- eteroatomi (atomi diversi da C e H);
- legami π (i più comuni sono quelli C=C e C=O).

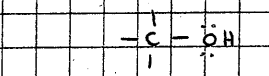
Questi conferiscono una reattività particolare alla molecola:
~ Gli eteroatomi possiedono doppietti elettronici non condivisi e generano sul carbonio a cui sono legati sito elettron-deficiente.
~ I legami π possono essere facilmente rotti.
↳ Un legame π rende una molecola una base e un nucleofilo.

In base al gruppo funzionale i composti organici vengono distinti in:

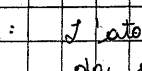
o IDROCARBURI (contengono solo C e H). Si distinguono in:
↳ Saturi: contengono solo legami semplici C–C e C–H
Appartengono a questa categoria: ALCANI e CICLOALCANI
↳ Insaturi: contengono legami multipli (doppi o tripli) fra atomi di carbonio. Appartengono a questa classe:
ALCHENI (C=C) e CICLOALCHENI
ALCHINI (C≡C) e CICLOALCHINI
↳ Aromatici: contengono anch'essi legami doppi C=C in grande numero → Tuttavia la reattività è diversa rispetto a quella degli alcheni (poiché nei sistemi aromatici non si ha la rottura dei legami π bensì reazioni di sostituzione di atomi di idrogeno).
La struttura base è quella del benzene.
I composti aromatici possono essere:
- Monociclici
- Policiclici (più anelli condensati)

© COMPOSTI OSSIGENATI (Contengono C, H e O):

- Alcoli: l'atomo di idrogeno di un alcano è sostituito da un gruppo ossidrile (–ÖH)



- Fenoli: L'atomo di idrogeno di un'unità benzenica è sostituito da un gruppo ossidrilico (Hanno una reattività diversa rispetto a quella degli alcoli poiché sono composti aromatici).

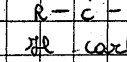


NB, Quando si ha la presenza di eteroatomi bisogna specificare la presenza di doppietti non condivisi.

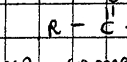
- ETeri: Sono formalmente derivati degli alcoli in cui l'atomo di idrogeno è stato sostituito da un'altra catena carboniosa.



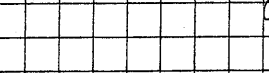
- Composti carbonilici: Contengono come gruppo funzionale il gruppo carbonilico (C=O). Il carbonile può essere legato a atomo di idrogeno o ad altri atomi di carbonio.
  Sulla base di questo vengono distinti in:
  → ALDEIDI → Il carbonile è legato ad almeno un atomo di H; (R(CH=O))



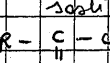
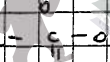
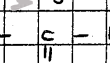
  → CHETONI → Il carbonile è legato a 2 atomi di carbonio (RCOR')



- Composti carbossilici: Contengono come gruppo funzionale il gruppo CARBOSSILICO (–COOH) formato da un gruppo carbonile legato ad un ossidrile (–ÖH)



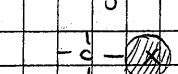
La presenza di questo eteroatomo ne influenza la reattività: i composti carbonilici danno reazioni di addizione nucleofila, mentre gli acidi carbossilici danno reazioni di sostituzione.

- Derivati degli acidi carbossilici: → Cloruri acilici 
  → Esteri 
  → Anidridi 
  → Ammidi 

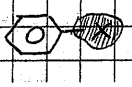
In questi derivati il gruppo carbonile è legato ad un eteroatomo

© COMPOSTI ALOGENATI (Contengono oltre ad altri eteroatomi anche Alogeni)

- Alogenuri alchilici → L'alogeno va a sostituire l'atomo di idrogeno di una catena alifatica (alcano)



- Alogenuri arilici → L'alogeno va a sostituire l'atomo di H di un'unità benzenica



- alogenuri acidi → Sono derivati degli acidi carbossilici in cui il gruppo carbonile è legato ad un alogeno

$$R-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-X$$

O COMPOSTI AZOTATI

- Ammine : contengono atomi di azoto legati ad atomi di carbonio con legami semplici. Le ammine si distinguono in:
  - ~ Primarie $-NH_2$
  - ~ Secondarie $-NHR$
  - ~ Terziarie $-NRR'$

  } Sull'atomo di azoto delle ammine vi è la presenza di un doppietto elettronico non condiviso.
- Ammidi : Sono derivati degli acidi carbossilici. Il gruppo NH_2 ($-NHR$ o $-NRR'$) è legato al carbonile

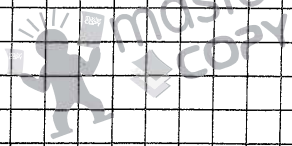
$$R-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-NH_2 \qquad R-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-NHR' \qquad R-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-NR'R''$$

- Immine → L'atomo di azoto è legato all'atomo di carbonio tramite un doppio legame $=NR$ $=NH$
- Nitrili → Contengono tutti il legame triplo $R-C\equiv N$
- Nitrocomposti : Hanno come gruppo funzionale $-NO_2$
- Azocomposti : Hanno come gruppo funzionale il gruppo -azo- $-N=N-$
- Isocianati : Hanno come gruppo funzionale il gruppo isocianato $-N=C=O$
- Tiocianati : Hanno come gruppo funzionale il gruppo tiocianato $-N=C=S$

O COMPOSTI SOLFORATI (Contengono C, H e S)

- Mercaptani (tioli) : Sono gli analoghi solforati degli alcoli. Hanno come gruppo funzionale $-SH$.
- Solfuri : Sono gli analoghi solforati degli eteri. Hanno come gruppo funzionale $-SR$
- Solfoni : contengono il gruppo $-SO_2-$
- acidi solfonici : contengono il gruppo $-SO_3H$





ORBITALI IBRIDI Gli orbitali ibridi sono un'astrazione che consente di prevedere correttamente la forma della molecola

Per il carbonio ci sono 3 tipi di ibridazione possibile:

- sp^3 ($1s + 3p$) — 25% 75% — Questi orbitali hanno caratteristiche intermedie fra orbitali s e orbitali p → andando verso il basso aumenta la prevalenza del carattere s: è un orbitale più compatto e questo influenza le caratteristiche di acidità/basicità.
- sp^2 ($1s + 2p$) — 33% 66%
- sp ($1s + 1p$) — 50% 50%

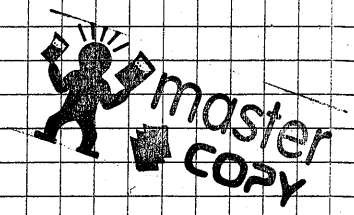
Per determinare l'ibridazione di un atomo in una molecola si utilizza il CRITERIO DEL NUMERO DI REGIONI DI DENSITÀ ELETTRONICA:

↳ Le regioni di densità elettronica sono:

- Legami (anche legami multipli vengono considerati come un'unica regione di densità elettronica);
- doppietti non condivisi.

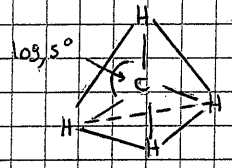
↓

Queste regioni per la Teoria VSEPR si dispongono in modo da essere più distanti possibile (minimizzazione della repulsione)



- Ibridazione sp^3 → 4 regioni di densità elettronica

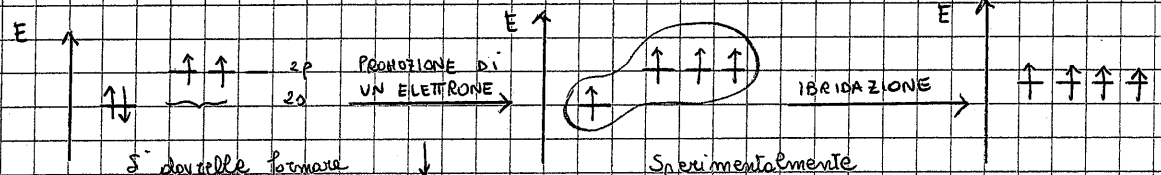
Questa ibridazione la troviamo nel metano (CH_4)



Sperimentalmente contiene 4 legami σ C–H a 109,5° (ai vertici di un Tetraedro)

Per formare 4 legami C–H bisogna utilizzare i 4 orbitali atomici di C (s, p_x, p_y, p_z) e costruire 4 nuovi orbitali che puntino nella stessa direzione

↳ ORBITALI IBRIDI sp^3



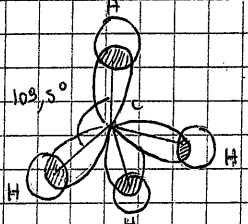
Si dovrebbe formare un composto con formula CH_2

↓

Per spiegare la tetravalenza del C si fa promozione di un elettrone da s a p

Sperimentalmente questi 4 legami sono equivalenti → Entra in gioco l'ibridazione. (vengono mescolate le funzioni d'onda)

Si ottengono 3 orbitali sp^3 equivalenti

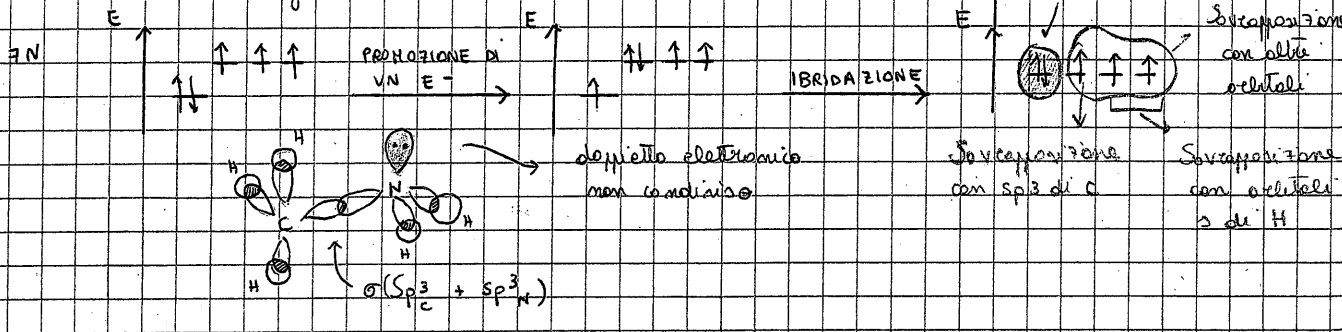


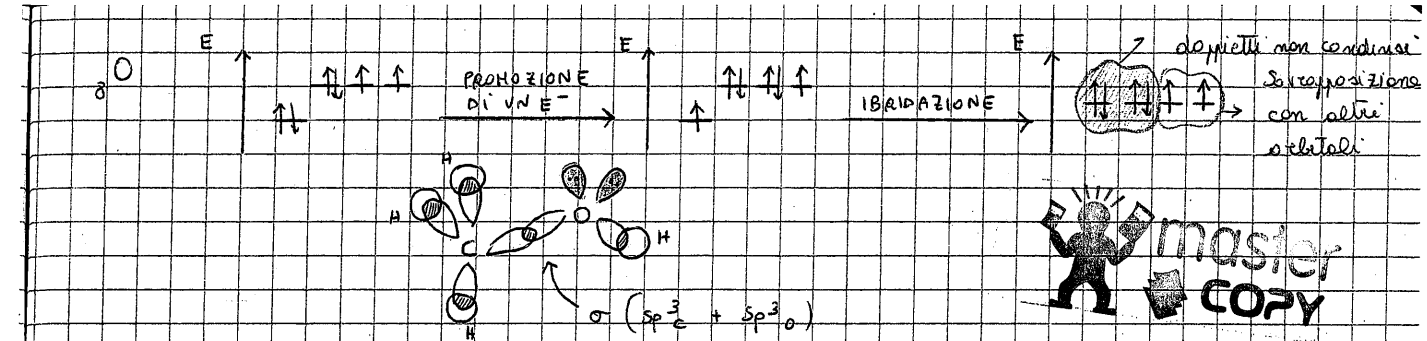
Gli orbitali sp^3 si dispongono ai vertici di un Tetraedro regolare.

↳ Si fa ibridazione sp^3 quando sull'atomo si hanno 4 REGIONI DI DENSITÀ ELETTRONICA

NB: Il carbonio con tutti legami semplici fa sempre ibridazione sp^3

L'ibridazione riguarda anche atomi diversi dal carbonio

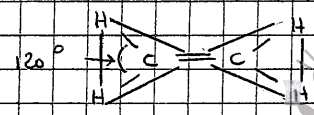




- **Ibridazione sp^2** → 3 regioni di densità elettronica

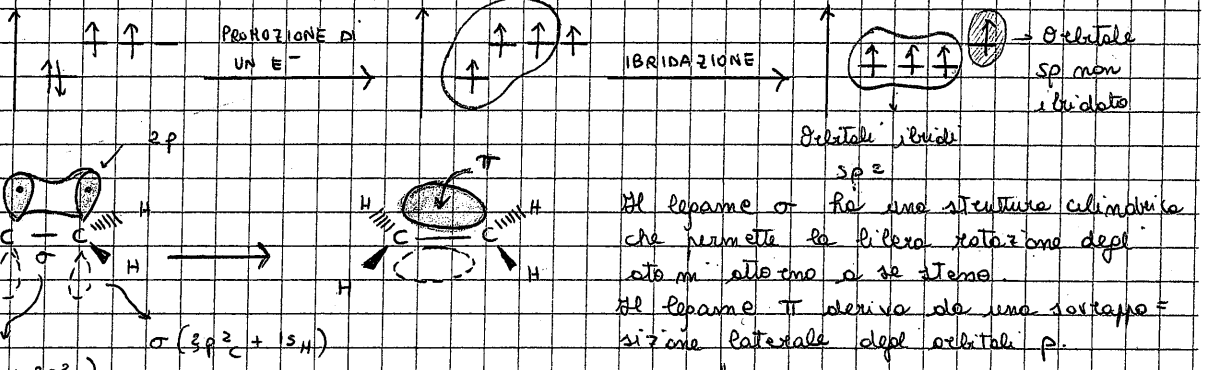
Questa ibridazione di C si ritrova nell'etilene (CH_2CH_2)

Sperimentalmente si osserva che tutti e 6 gli atomi si trovano su un piano con angoli di legame di 120°



→ Per formare 3 legami σ C-H a 120° bisogna usare 3 dei 4 OA (s, p_x, p_y) e costruire 3 orbitali equivalenti → ORBITALI IBRIDI sp^2

NB il orbitale 2p non ibridizzato è perpendicolare al piano degli orbitali sp^2



Il legame σ ha una struttura cilindrica che permette la libera rotazione degli atomi attorno a se stesso.

Il legame π deriva da una sovrapposizione laterale degli orbitali p.

↓

Impedisce quindi la rotazione degli atomi attorno al legame

Gli orbitali sp^2 si dispongono con geometria trigonale planare (ai vertici di un triangolo equilatero) con angoli di legame di 120°.

