

**Serie completa di Modelli Molecolari
per la Chimica Organica**

allegati ai seguenti volumi:

- Chimica Organica - Paula Y. Bruice
- Elementi di Chimica Organica - Paula Y. Bruice
- Chimica Organica - W.H. Brown – B.L. Iverson – E.V. Anslyn – C.S. Foote
- Introduzione alla Chimica Organica - William H. Brown - Thomas Poon
- Elementi di chimica organica - W. H. Brown, M. K. Campbell, S. O. Farrell
- Chimica e Propedeutica Biochimica - F. A. Bettelheim, W. H. Brown, M. K. Campbell, S. O. Farrell, O. J. Torres

Note introduttive

La scala utilizzata è basata sul legame “-H” che è di **20 mm**, tutti gli altri usano legami di **30 mm**; i legami doppi/tripli usano tubicini bianchi da **50 mm**.

Le coppie solitarie sono rappresentate da un braccio non utilizzato di un atomo o dai lobi degli orbitali.

Geometria Base delle Molecole

Le forme delle molecole semplici sono determinate dal numero di legami e dal numero di coppie solitarie (se presenti) intorno all'atomo centrale.

Due legami + 2 coppie solitarie = Angolare

Tre legami = Trigonale

Quattro legami = Tetraedrica

Cinque legami = Trigonale-Bipiramidale

Sei legami = Ottaedrica

Legami Doppi-Tripli

Utilizzare due atomi di tipo “K” ed agganciare due tubicini da 50 mm bianchi sopra e sotto il piano degli atomi. Un legame triplo richiede tre legami.

Designazioni delle Lettere degli Atomi

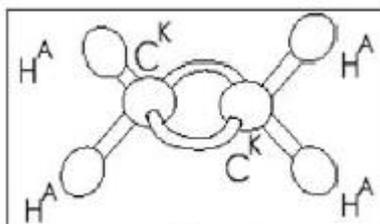
Le designazioni delle lettere come ad esempio “A”, “J”, “K” sono **arbitrarie** e vengono usate solo come abbreviazione per indicare le differenti geometrie.

Elemento		Colore	Tipo	Elemento		Colore	Tipo
H	1 braccio	Bianco	A-uni	Cl	1 braccio	Verde	A-uni
N	1 braccio	Blu	A-uni	C	2 braccia	Nero	B-180°
S	2 braccia	Giallo	C-105°	O	2 braccia	Rosso	D-110°
C	3 braccia	Nero	J-120/120/120°	C	4 braccia	Nero	K-tetraedrico
N	4 braccia	Blu	K-tetraedrico	O	4 braccia	Rosso	K-tetraedrico
P	4 braccia	Porpora	K-tetraedrico	S	4 braccia	Giallo	K-tetraedrico
C	5 braccia	Nero	L-tri-bipiramide	C	6 braccia	Nero	M-ottaedrico
Legami	20 mm	Grigio	Legame singolo (-H)	Legami	30 mm	Grigio	Legame singolo
Legami	35 mm	Grigio	Sedia-barca	Legami	50 mm	Bianco-Flessibile	Doppio/Triplo
Orbitale		Nero		Orbitale		Bianco	

Idrocarburi Insaturi

Definizione: Molecole organiche dove vi è la presenza di almeno un doppio o triplo legame.

Esempio: etene C_2H_4 . Costruisci l'etene usando due C^K , quattro H^A , quattro legami da 20 mm e due legami flessibili (i bianchi da 50 mm o i chiari da 35 mm).



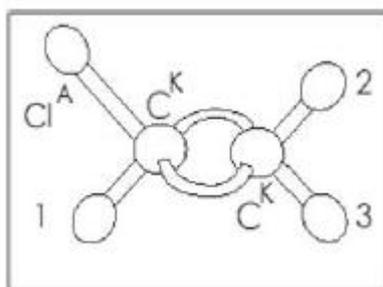
Nota che la molecola è **planare**, cioè tutti gli atomi si trovano nello stesso piano. Nota anche come è difficile torcere questa molecola in quanto non vi è libera rotazione del legame carbonio-carbonio. Se i legami del modello fossero perfettamente in scala, il legame carboniocarbonio nell'etene sarebbe evidentemente più piccolo rispetto a quello nell'etano.

Ora rimuovi uno degli atomi H^A dall'etene e sostituiscilo con un Cl^A usando un legame di 30 mm. Questa molecola è il **cloroetene C_2H_3Cl** . Se scambi la posizione di questo atomo con una qualsiasi delle tre posizioni degli idrogeni nella molecola, non vedrai nient'altro che la stessa molecola (vedi il diagramma 2a in basso).

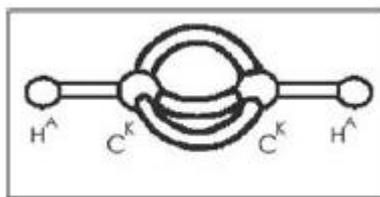
Costruisci due modelli del cloroetene come in figura 2(a) e ruota la seconda molecola dopo aver spostato il Cl in ognuna delle posizioni etichettate 1, 2 e 3 nel diagramma. Questo mostrerà come è possibile ottenere solo una molecola.

Ora costruisci tre modelli di cloroetene come in figura 2(a). Aggiungi un secondo atomo di Cl ad ognuno dei tre modelli nelle posizioni 1, 2 e 3. Otterrai tre modelli differenti di dicloroetene.

Comunque, essi non sono gli stessi. Il Modello #1 avrà entrambi gli atomi di Cl sullo stesso carbonio - e questo è l'1,1-dicloroetene. I Modelli #2 e #3 sono entrambi l'1,2-dicloroetene, tuttavia sono differenti. Prova a fare in modo che il Modello #2 si interconverta nel Modello #3 senza rompere il doppio legame.

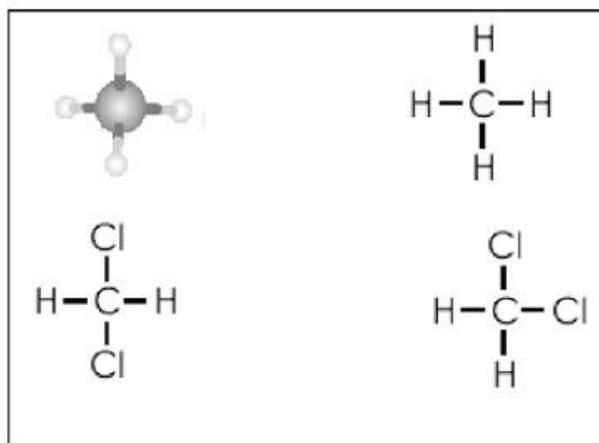


Queste due versioni dell'1,2-dicloroetene sono **isomeri geometrici**. I loro atomi sono legati in maniera simile, tuttavia sono diversi e ciò è dovuto alle limitazioni rotazionali imposte dal doppio legame. Se rimuovi uno dei doppi legami, sarai in grado di ruotare il legame carbonio-carbonio così da ottenere due 1,2-dicloroeteni identici.



L'etino- C_2H_2 è costituito da un triplo legame carbonio-carbonio e si possono utilizzare quindi due atomi C^K e tre legami flessibili (i bianchi da 50 mm o i **chiari da 35 mm**) insieme a due atomi H^A con legami da 20 mm. Nota la tensione dei legami flessibili tra i carboni. Questo mostra la reattività di un legame: un legame $C\equiv C$ è anche più corto di un legame $C=C$ ed è anche più reattivo.

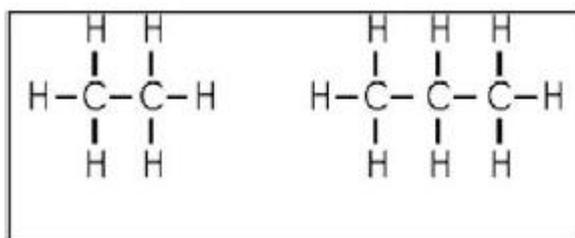
Idrocarburi Saturi-I



Definizione: Molecole organiche contenenti tutti legami semplici.

Esempio: costruisci il metano (CH_4) come mostrato in figura 1(a), usando un atomo di carbonio (C^K), 4 atomi di idrogeno (H^A) e legami da 20 mm. Ora costruisci due unità di diclorometano (CH_2Cl_2), sostituendo (H^A) con (Cl^A). Queste ultime sono mostrate nella figura seguente.

Domanda: *I due diclorometani sono diversi o sono gli stessi? Se non sei sicuro, prova a ruotarne uno in modo da renderlo uguale all'altro.*



Qui sono rappresentati l'etano e il propano, C_2H_6 e C_3H_8 rispettivamente. Costruiscili con gli stessi componenti di sopra; nota come il legame tra i carboni può essere ruotato.

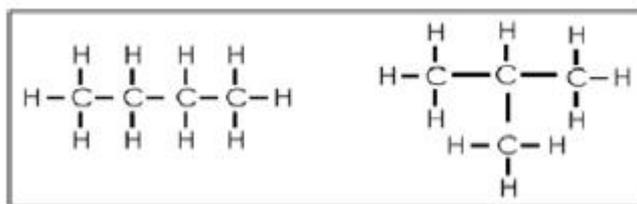
I legami singoli generalmente permettono la **libera rotazione**.

Idrocarburi Saturi-II

Ora che hai costruito l'etano e il propano, prepara il modello della figura di sinistra usando tubicini da 30/20 mm per tutti i legami di $C_2H_4Cl_2$ per creare il dicloroetano. Poiché i gruppi terminali possono essere ruotati relativamente gli uni rispetto agli altri, solo una versione della molecola è possibile in quanto gli atomi di cloro sono legati ad atomi di carbonio differenti.



Ora prova a costruire un'altra versione del dicloroetano, come mostrato nella figura a destra. Se i due atomi di cloro sono sullo stesso carbonio, è possibile solo una rappresentazione di questa molecola di dicloroetano, chiamata 1,1-dicloroetano. La versione nella figura a sinistra è l'1,2-dicloroetano. Queste due molecole sono **isomeri del dicloroetano**.



Il butano, C_4H_{10} , ha due isomeri: uno dove tutti gli atomi C^k sono allineati e l'altro dove un carbonio è legato ad altri tre. Vedi il diagramma sottostante.

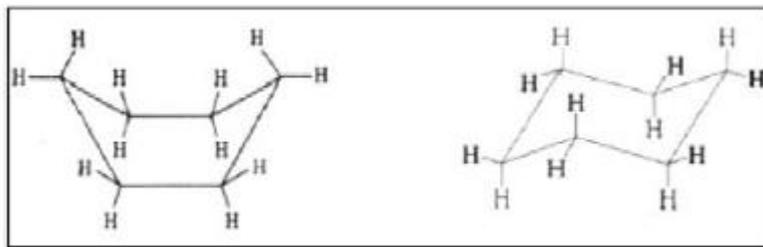
Idrocarburi Ciclici (interconversioni sedia-barca)

Gli idrocarburi visti precedentemente sono a "**catena lineare**" che in realtà però hanno una orientazione a *zig-zag* dovuta agli angoli tetraedrici di legame. Gli stessi angoli di legame permettono la formazione di anelli in modo da ottenere idrocarburi ciclici.

Prendi cinque atomi C^k e disponili a formare un pentagono con legami da 30 mm. Nota come l'anello è piatto e rigido e come il modello (incluse le posizioni degli atomi di idrogeno) è planare. Lega 10 atomi H^A ai siti rimanenti con legami da 20 mm. Costruisci due modelli dell'1,2-diclorociclopentano e osserva quando i due atomi di cloro sono in cis (dalla stessa parte) o in trans (da parti opposte) rispetto ai due atomi di carbonio adiacenti che portano gli alogeni.

Cicloesano- C_6H_{12}

Ora costruisci un anello a sei atomi di carbonio come sopra ma con legami da 35 mm. Nota come l'**anello** non sia più planare ma **corrugato**. L'anello a sei termini ha due forme chiamate **conformeri**: la forma a "*barca*" e la forma a "*sedia*". Vedi il diagramma 2c sotto e osserva le due conformazioni: prova ad "interconvertirle" fra di loro.

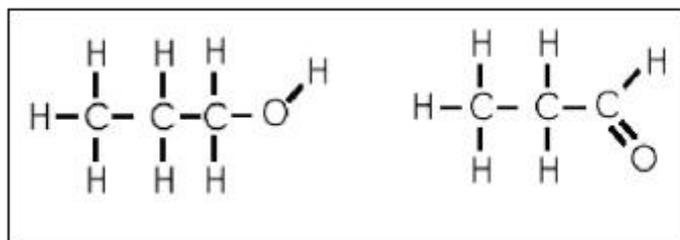


Anelli più Piccoli e più Grandi (prova con legami da 30 mm)

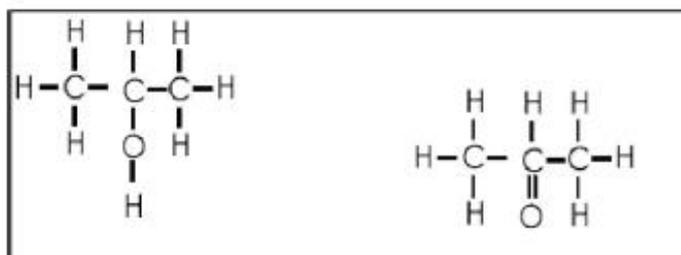
Costruisci un ciclobutano C_4H_8 ed un anello più grande costituito da dodici atomi di carbonio. Osserva la tensione sui legami carboniocarbonio nel ciclobutano, ciò dimostra che ogni anello con meno di cinque atomi è tensionato ed altamente reattivo. Gli anelli dagli otto atomi di carbonio in su sono difficili da sintetizzare chimicamente poiché i carboni che devono generare la connessione finale sono troppo lontani trovandosi inizialmente da parti opposte rispetto alla lunga catena.

Gruppi Funzionali I

Definizione: Gli alcoli (ROH), le Aldeidi (RCOH), i Chetoni ($R_2C=O$), dove R rappresenta un segmento idrocarburico. Gli alcoli primari sono prodotti quando avviene una sostituzione alla fine di un gruppo di un idrocarburo.



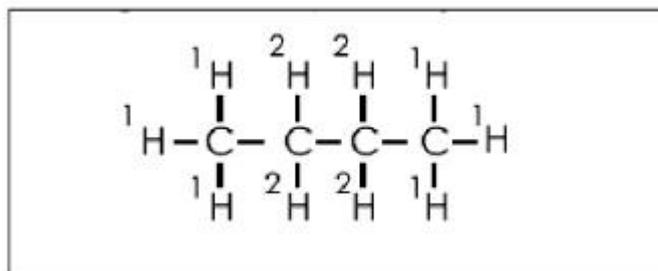
Per esempio, C_3H_8 , attraverso alcuni passaggi non mostrati qui, può essere convertito nel propan-1-olo C_3H_7OH , vedi figura a sinistra, dove un gruppo idrossi si trova sul carbonio terminale al posto di uno degli idrogeni del propano. Costruiscilo usando un atomo O^D e legami da 30 mm. Successive reazioni possono anche produrre anche una aldeide (vedi figura a destra).



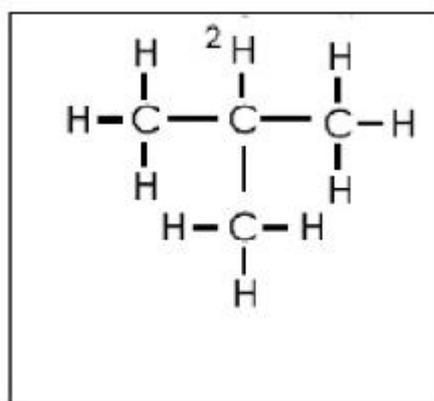
Se il carbonio centrale nel propano viene sottoposto ad una reazione invece di uno degli idrogeni sugli atomi di carbonio terminali, si ottiene un alcol differente.

Gruppi Funzionali II Esempio: Isomeri del Butanolo

Crea un modello della molecola genitore, il butano- C_4H_{10} .



Nota che ci sono due "tipi" diversi di atomi di idrogeno: quelli legati al carbonio terminale (parte di un gruppo $-CH_3$), e quelli legati al carbonio più interno lungo la catena (parte di un $-CH_2-$). Vedi il diagramma.

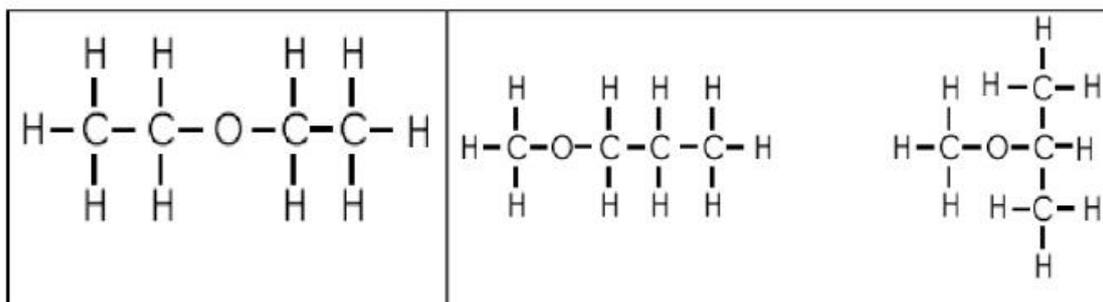


Esistono due isomeri differenti del butanolo: uno dove uno degli atomi di idrogeno identificati con 1 viene sostituito da un gruppo $-OH$ e l'altro dove uno degli atomi di idrogeno identificati con 2 viene sostituito. Questi vengono chiamati butan-1-olo e butan-2-olo rispettivamente. Esistono anche altri due alcoli di formula C_4H_9OH .

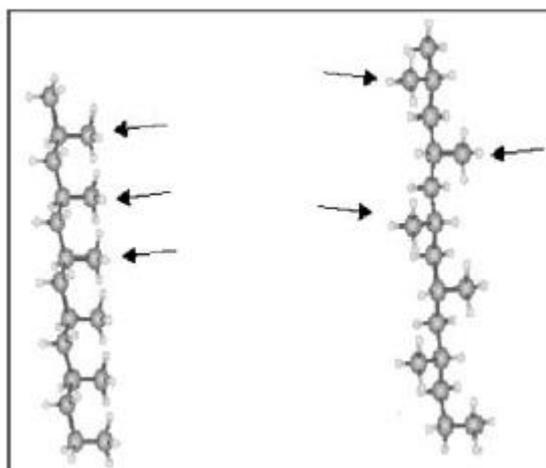
Ricordi l'altro butano della figura 1(i)? Esistono in totale quattro differenti isomeri del butanolo.

Gruppi Funzionali III

Ci sono altre molecole con la formula $C_4H_{10}O$. Accanto agli isomeri del butanolo, esistono tre eteri con la formula $C_4H_{10}O$. Gli eteri hanno il gruppo funzionale $-C-O-C-$.



Polimeri

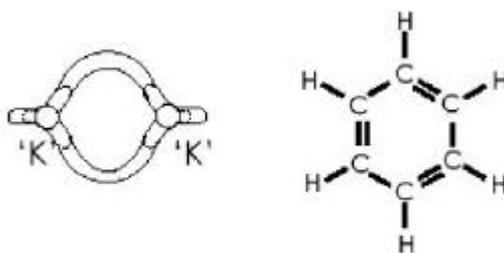


I polimeri sono “macromolecole” molto grandi formate dalla condensazione di unità monomeriche. Le unità monometriche possono essere tutte dello stesso tipo (esempio: polietilene), o di tipo diverso (esempio: nylon 6,6).

Costruisci due modelli di polipropilene usando atomi C^K e legami 30/20. Nota che, in dipendenza dal lato su cui leghi gli etili, si possono ottenere diversi polipropileni.

Il Benzene e i Suoi Derivati

Il benzene C_6H_6 ha una forma esagonale con angoli di 120 gradi tra tutti gli atomi di carbonio. Il miglior modo per rappresentare il benzene è usare atomi C^K con lo stile di doppio legame come mostrato in prima pagina.



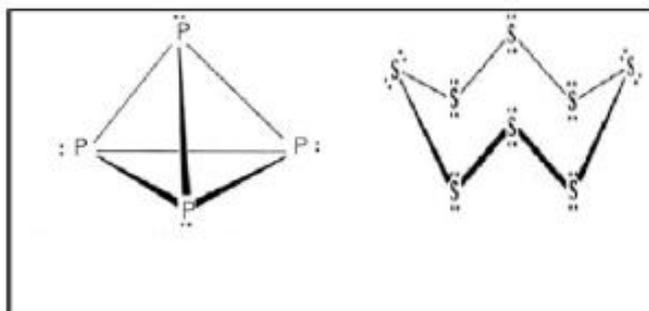
Il benzene ha tre doppi legami che possono essere mostrati associando coppie di atomi C^K come mostrato in precedenza. Alterna legami singoli e doppi usando i legami di 30 mm e quelli bianchi da 50 mm per i $C=C$ rispettivamente.

Sostituisci gli atomi H^A con gli atomi Cl^A . Nota che **è possibile un solo isomero**.

Successivamente, costruisci il diclorobenzene utilizzando due atomi Cl^A .

Troverai tre possibili modi per costruire le molecole $C_6H_4Cl_2$. Questi sono: atomi di cloro nelle posizioni; 1,2; 1,3; 1,4. Le versioni 1,5 e 1,6 sono uguali a 1,3 e 1,2 rispettivamente.

Composti Inorganici Semplici

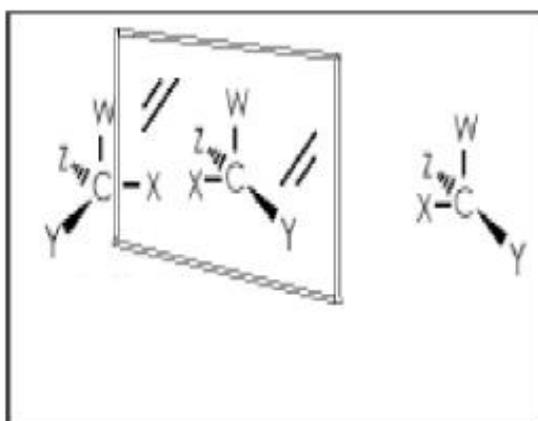


Esistono composti inorganici elementari che sono molto interessanti da un punto di vista geometrico. Tra questi ci sono il fosforo P₄ e una specie dello zolfo, S₈. Costruisci i modelli di queste due molecole usando gli atomi di tipo K e D, usando per ognuno un colore diverso per mostrare la forma.

Attività ottica

Le molecole otticamente attive sono quelle che non hanno nessuna simmetria interna intorno ad un atomo centrale o ad un piano immaginario che divide la molecola. Queste molecole sono classificate come asimmetriche e mostrano attività ottica. L'attività ottica si riferisce alla rotazione del piano della luce polarizzata che passa attraverso un campione di molecole. Il modello più semplice che dimostra l'isomeria ottica è un derivato del metano.

Costruisci un modello simile al metano legando quattro atomi di diverso colore invece di usare solo gli atomi di idrogeno al carbonio centrale. Ora costruisci una seconda molecola esattamente uguale, eccetto che per lo scambio di posizione di due dei colori. La seconda molecola risultante è la "immagine speculare non sovrapponibile" della prima.



La regola per l'attività ottica: affinché una molecola sia otticamente attiva (asimmetrica), il carbonio centrale DEVE avere quattro gruppi diversi legati attorno a sé. Perciò, una molecola CH₂XY non può mai essere otticamente attiva a meno che un atomo di H non sia sostituito da un atomo Z in modo da avere un sistema di questo tipo: CHXYZ.

Forme VSEPR Base

Le forme VSEPR sono create dal “perfetto allineamento degli elettroni e/o degli atomi di legame intorno ad un atomo centrale. I lobi bianchi e neri vengono utilizzati per rappresentare le coppie solitarie degli elettroni.

Questo può rinforzare il concetto di riempimento dello spazio ovvero che le coppie solitarie occupano più spazio contribuendo alla forma delle molecole semplici. Ad esempio, usa un lobo per NH_3 : dove “:” è una coppia solitaria. Costruiscila con un atomo N^{K} e con tre atomi H^{A} usando legami da 20 mm. Nota come la forma della molecola diventi più chiara. I lobi bianchi e neri rappresentano la funzione d’onda positiva e negativa delle coppie elettroniche solitarie.

Le funzioni d’onda positive/negative **non** rappresentano cariche elettriche.

Ibridazione Molecolare e Forme VSEPR

