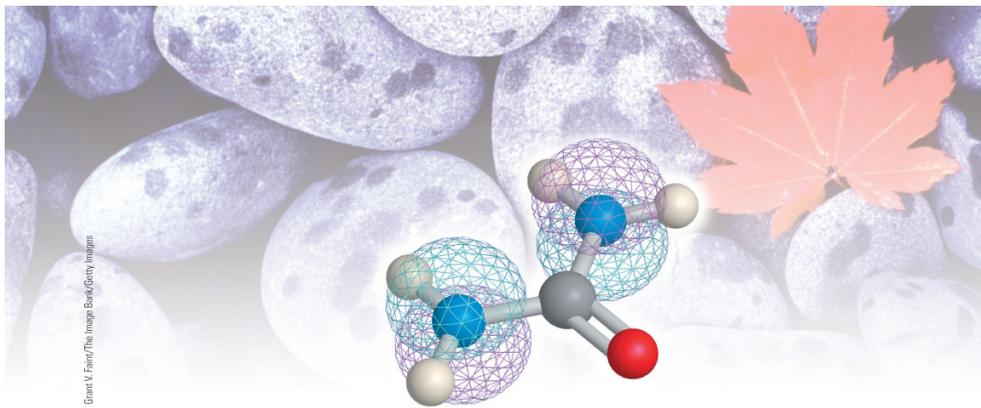
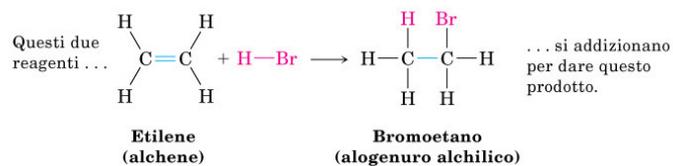


Reazioni in chimica organica

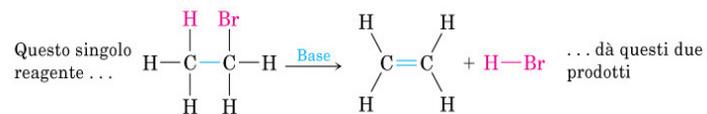


Reazioni chimiche

addizione

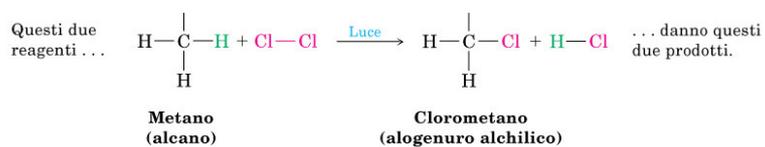


eliminazione



Reazioni chimiche

sostituzione



trasposizione

Reazioni chimiche

Reazioni radicaliche e polari

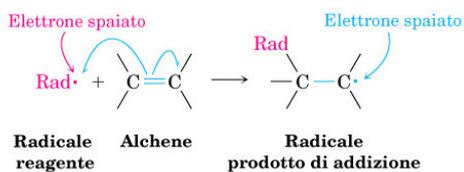


Reazioni chimiche radicaliche

Sostituzione radicalica

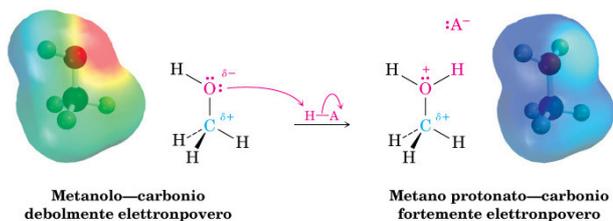


addizione radicalica

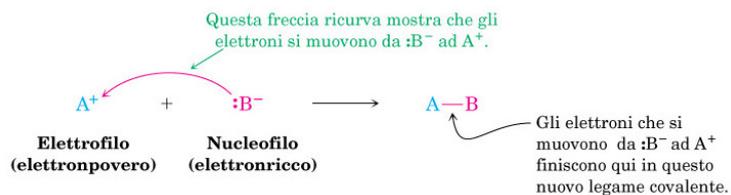


Reazioni chimiche polari

Reazioni polari

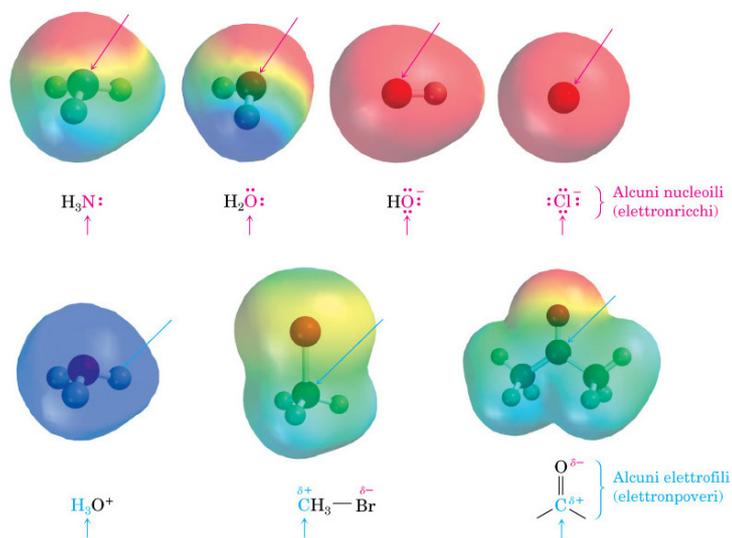


Una generica reazione polare:



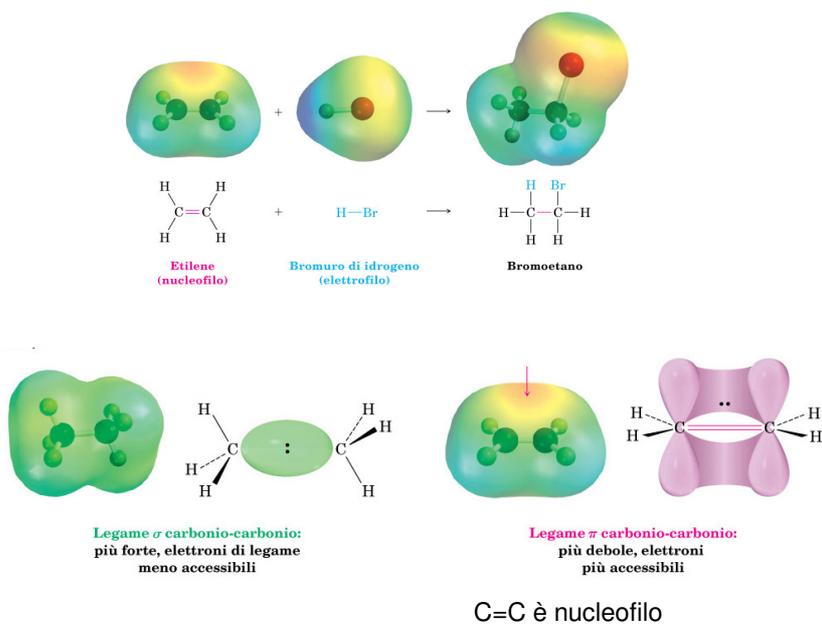
Reazioni chimiche polari

Alcuni nucleofili ed elettrofili. Le mappe di potenziale elettrostatico identificano gli atomi nucleofili (rosso; negativo) e gli atomi elettrofili (blu; positivo).



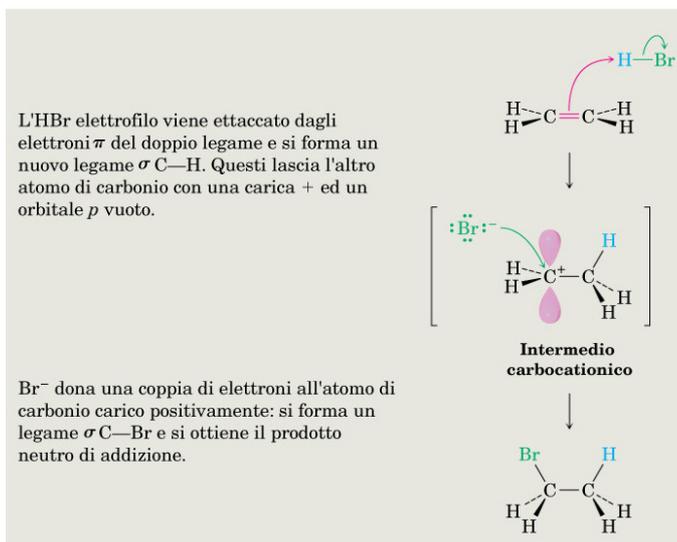
Reazioni chimiche polari

Addizione elettrofila



Reazioni chimiche polari

MECCANISMO: Reazione di addizione elettrofila di HBr all'etilene. La reazione avviene in due stadi che coinvolgono entrambi interazioni elettrofilo-nucleofilo.



Reazioni chimiche polari

Gli elettroni si muovono da una sorgente nucleofila (Nu:) ad una destinazione elettrofila (E)

Di solito gli elettroni fluiscono *da* uno di questi nucleofili:

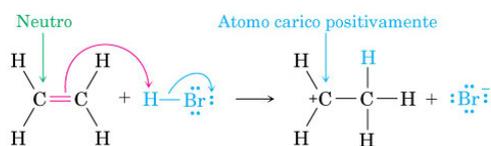
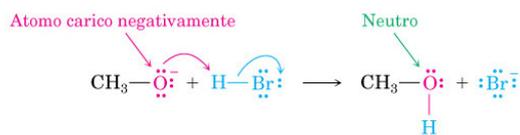


Di solito gli elettroni fluiscono *verso* uno di questi elettrofili :



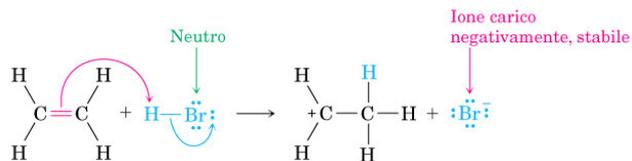
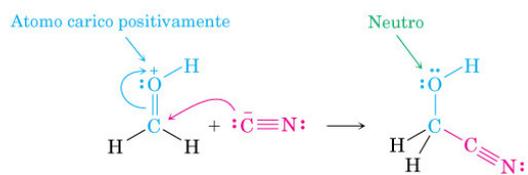
Reazioni chimiche polari

Il nucleofilo può essere carico negativamente o neutro



Reazioni chimiche polari

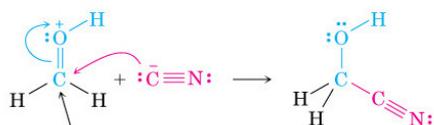
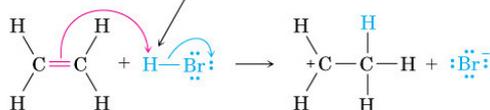
L'elettrofilo può essere carico positivamente o neutro



Reazioni chimiche polari

Deve essere rispettata la regola dell'ottetto

Questo atomo di idrogeno possiede già due elettroni. Quando un'altra coppia di elettroni si sposta dal doppio legame verso questo idrogeno, deve partirne la coppia di elettroni del legame H—Br



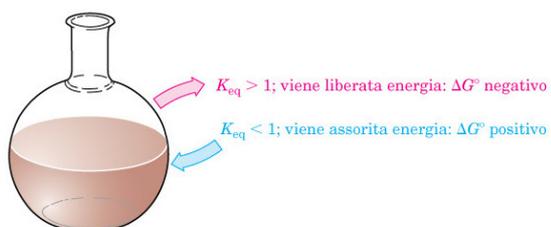
Questo atomo di carbonio possiede otto elettroni. Quando un'altra coppia di elettroni si muove dal CN⁻ verso questo atomo di carbonio, deve partire una coppia di elettroni del legame C=O.

Reazioni chimiche: equilibrio ed energia



$$K_{\text{eq}} = \frac{[\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}]}{[\text{HBr}][\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2]} = 7.5 \times 10^7$$

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_{\text{eq}}$$



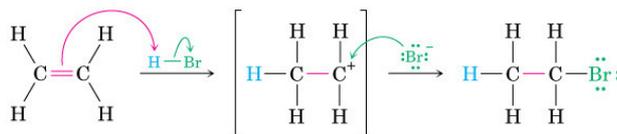
Reazioni chimiche: dissociazione



TABELLA 5.3 Alcuni valori di energia di dissociazione di legame

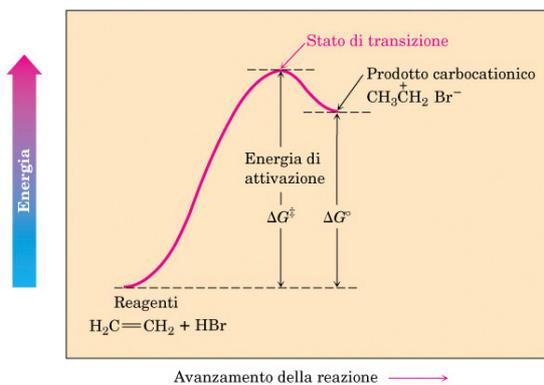
Legame	D (kJ/mol)	Legame	D (kJ/mol)	Legame	D (kJ/mol)
H-H	436	(CH ₃) ₂ C-Br	263	CH ₃ -CH ₃	376
H-F	570	(CH ₃) ₂ C-I	209	C ₂ H ₅ -CH ₃	355
H-Cl	432	H ₂ C=CH-H	444	(CH ₃) ₂ CH-CH ₃	351
H-Br	366	H ₂ C=CH-Cl	368	(CH ₃) ₂ C-CH ₃	339
H-I	298	H ₂ C=CHCH ₂ -H	361	H ₂ C=CH-CH ₃	406
Cl-Cl	243	H ₂ C=CHCH ₂ -Cl	289	H ₂ C=CHCH ₂ -CH ₃	310
Br-Br	193		464		611
I-I	151		405		427
CH ₃ -H	438		368		332
CH ₃ -Cl	351		293		368
CH ₃ -Br	293		337	HO-H	498
CH ₃ -I	234		469	HO-OH	213
CH ₃ -OH	380	HC≡C-H	552	CH ₃ O-H	437
CH ₃ -NH ₂	335			CH ₃ S-H	371
C ₂ H ₅ -H	420			C ₂ H ₅ O-H	436
C ₂ H ₅ -Cl	338				322
C ₂ H ₅ -Br	285			CH ₃ CH ₂ O-CH ₃	339
C ₂ H ₅ -I	222			NH ₂ -H	449
C ₂ H ₅ -OH	380			H-CN	518
(CH ₃) ₂ CH-H	401				
(CH ₃) ₂ CH-Cl	339				
(CH ₃) ₂ CH-Br	274				
(CH ₃) ₂ C-H	390				
(CH ₃) ₂ C-Cl	330				

Reazioni chimiche: profilo di reazione



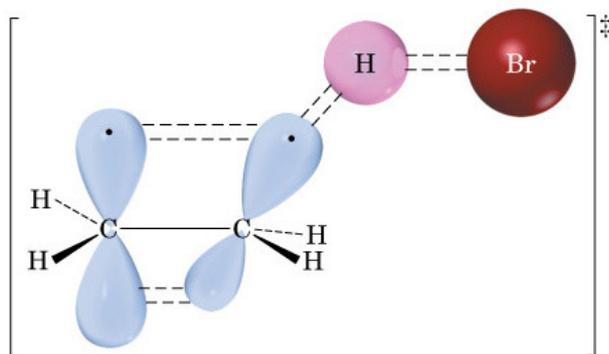
Carbocatione

Diagramma di energia di reazione per il primo stadio della reazione tra etilene ed HBr. La differenza di energia tra reagenti e stato di transizione, ΔG^\ddagger , controlla la velocità della reazione. La differenza di energia tra reagenti e stato di transizione, ΔG° , controlla la posizione dell'equilibrio.



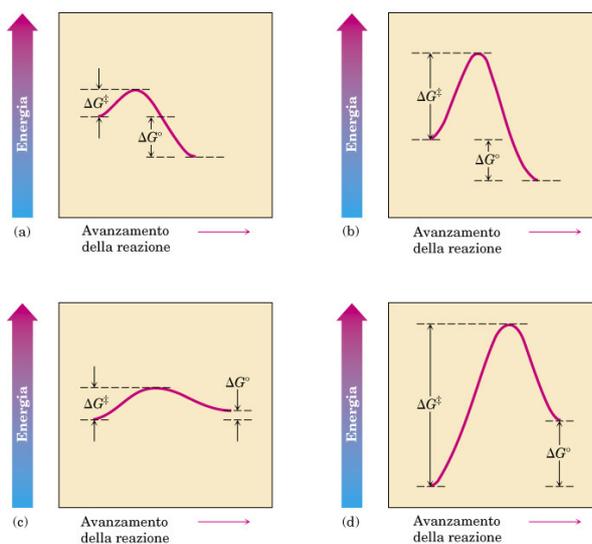
Reazioni chimiche: stato di transizione

Struttura di un ipotetico stato di transizione per il primo stadio della reazione dell'etilene con HBr. Il legame p carbonio-carbonio sta appena iniziando a rompersi, il legame C-H sta appena iniziando a formarsi e il legame H-Br sta appena iniziando a rompersi.



Reazioni chimiche

Alcuni diagrammi energetici: (a) una reazione veloce esoergonica (ΔG^\ddagger piccolo, ΔG° negativo); (b) una reazione lenta esoergonica (ΔG^\ddagger grande, ΔG° negativo); (c) una reazione veloce endoergonica (ΔG^\ddagger piccolo, ΔG° piccolo e positivo); (d) una reazione lenta endoergonica (ΔG^\ddagger grande, ΔG° positivo).



Reazioni chimiche: intermedio

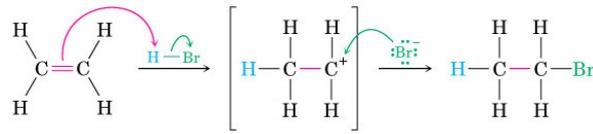
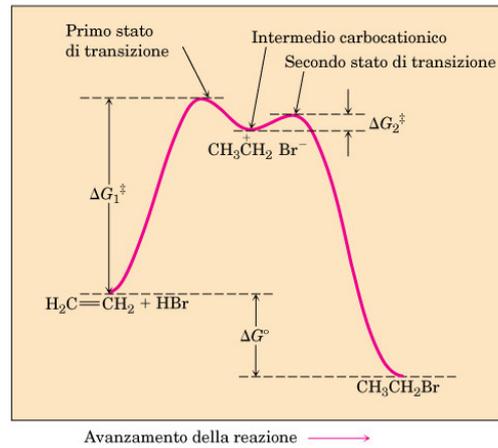


Diagramma di energia per la reazione complessiva dell'etilene con HBr. Sono implicati due stadi separati, ciascuno col suo stato di transizione. Il minimo di energia tra i due stadi rappresenta l'intermedio carbocationico della reazione.



Reazioni chimiche: catalisi

Diagramma energetico per una tipica reazione biologica catalizzata da enzimi (curva blu) a confronto con una reazione da laboratorio non catalizzata (curva rossa). La reazione biologica consiste di molti stadi, ciascuno con piccola energia di attivazione e con piccola variazione di energia. Tuttavia, il risultato è identico.

