

Chimica e Propedeutica Biochimica

Lezione 1 08/03/2022 Bidone Giacomo

introduzione

Nella lezione di oggi andremo ad introdurre il perché sia importante studiare chimica e biochimica, e nella seconda parte analizzeremo le strutture atomiche (atomi ed orbitali).

La chimica è utile a livello medico e biomedico al giorno d'oggi poiché molti processi biologici un tempo ignoti sono oggi spiegabili per mezzo di studi chimici.

Ad esempio, un semplice composto come il dentifricio comprende decine di composti chimici combinati (glicerofosfato di calcio, sostanze abrasive, fluoro, molecole antibatteriche ecc.)

È importante sapere riconoscere gli elementi chimici per comprendere e prevedere gli effetti delle sostanze sull'organismo.

Un altro esempio è il prontobarario, un composto in polvere di solfato di bario (principio attivo) a bassa viscosità che funge come mezzo liquido di contrasto nelle T.A.C, soprattutto per le analisi all'intestino, allo stomaco e al duodeno.

Un fenomeno biologico dovuto a cause chimiche sono i crampi, che essenzialmente consistono essenzialmente a variazioni di concentrazioni ioniche a livello tissutale muscolare.

La chimica è una disciplina molto ampia, trasversale, che ha in comune diversi aspetti con altre discipline scientifiche, e può essere divisa in diverse discipline: dall'analitica (analisi diretta delle molecole) alla generale (chimica diretta delle reazioni), all'inorganica (studio delle molecole prive di atomi di carbonio) e organica (studio delle molecole a base di carbonio); quest'ultima verrà affrontata nello specifico nella seconda parte del corso, in modo da creare una base di nozioni per corsi successivi.

Tutto ciò che concerne la chimica deriva dal metodo scientifico, che prevede di verificare le ipotesi di osservazione attraverso esperimenti. È possibile, in questo, tracciare un parallelismo con i metodi di analisi e diagnosi che saranno alla base della professione medica.

Nel corso introdurremo gli atomi, e alcune delle principali macromolecole biologiche, nei corsi successivi verranno aggiunte informazioni sempre più complesse avvicinandosi gradualmente alla complessità di un organismo.

In questa lezione cercheremo di descrivere il modello atomico attuale, e il metodo per costruirne una descrizione e una configurazione elettronica, a partire dal numero atomico e correlando tale configurazione alla posizione dell'elemento sulla tavola periodica (il "dizionario" della chimica). Infine, verranno introdotte le proprietà periodiche.

Modelli scientifici sperimentali

Sono utili a comprendere e schematizzare la realtà, sebbene non la descrivano in modo chiaro e tenendo conto di essa nel suo insieme. Le strutture dei modelli che utilizzeremo sono, ad esempio, le formule chimiche e le rappresentazioni degli atomi e delle molecole che essi possono formare.

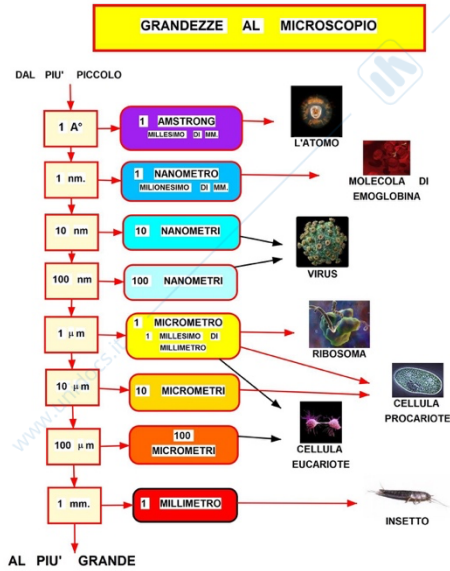
Dimensioni

Le molecole hanno dimensioni nell'ordine di grandezza degli 0,2 nanometri, mentre a livello atomico si arriva alla misura dell'atomo (dell'ordine di 10^{-10} m, unità di misura definita come

Amstrong). Le cellule e i batteri sono grandi circa 50 micron, cloroplasti o organelli cellulari sono dell'ordine dei 5 micron, i virus sono grandi qualche centinaio di nanometro le membrane sono spesse circa 2 nanometri e le macromolecole biologiche sono in media nell'ordine degli 0,5 nanometri.

In una goccia d'acqua ci sono circa 10^{21} molecole, una quantità enorme di molecole di microscopiche dimensioni. La chimica segue una logica naturale, e le "parole" che utilizza sono le molecole, per formare "frasi", ovvero complessi molecolari, in grado di comporre "testi" come organuli, fino alla complessità delle cellule e degli organismi. L'alfabeto della chimica è descritto nella tavola periodica, i cui elementi sono alla base di tutte le strutture della materia, sia biologica che inorganica.

Un nanometro corrisponde a 10^{-9} metri.



Gli elementi

Sulla tavola periodica sono presenti tutti gli elementi naturali e non, gli esseri viventi sono caratterizzati dalla presenza di molecole contenenti carbonio, in grado di svolgere funzioni biologiche anche molto complesse (come l'emoglobina). In ciascun uomo sono presenti circa 10^{27} atomi, che raggiungono una complessità chimica molto grande. Una singola molecola di emoglobina contiene circa 9000 atomi. Tutto ciò che è biologico lavora secondo le sue proprietà chimiche.

La punta di una matita contiene centinaia di milioni di atomi di carbonio.

L'atomo

Un atomo ha, come detto, una grandezza dell'ordine di 10^{-10} metri, ed è composto da un nucleo di protoni e neutroni (dell'ordine di 10^{-15} metri) ed elettroni in orbita intorno al nucleo, circa 2000 volte più piccoli di neutroni e protoni, tanto da avere massa irrilevante. Le dimensioni sopra descritte danno una misura del perché, nel tempo, si siano succeduti diversi modelli atomici, a partire dalla prima formulazione dell'idea di atomo ad opera di Democrito e Leucippo (420 a.C.)

L'atomo oggi e gli elementi sulla tavola periodica

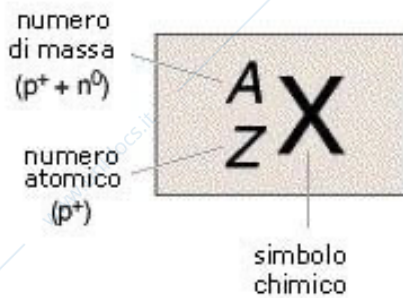
Nella rappresentazione odierna, l'atomo è raffigurato, per semplificazione, con un nucleo centrale compatto con carica positiva circondato da una nube elettronica con carica negativa, in un atomo elettricamente neutro, il numero di protoni è uguale a quello di neutroni. Le particelle atomiche sono protone (+) neutrone (carica neutra) ed elettrone (-). Ogni elemento ha un proprio numero di protoni, discriminante per esso. Sulla tavola periodica, il numero di protoni prende il nome di Numero Atomico, è indicato con Z, e si rappresenta a pedice, a

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

The periodic table shows elements color-coded by groups. Below the main table are the Lanthanide and Actinide series. A legend at the bottom identifies the colors for different element categories:

- Alkali (Red)
- Alkaline Earth (Orange)
- Transition (Yellow)
- Post-transition (Green)
- Nonmetal (Light Green)
- Halogen (Blue)
- Noble Gas (Purple)

sinistra del simbolo dell'elemento. Il numero di protoni è, invece, descritto dalla differenza tra A , ovvero il Numero di Massa di ciascun atomo (si rappresenta ad apice a sinistra del simbolo dell'elemento sulla tavola periodica), che corrisponde alla somma di neutroni e protoni contenuti in esso, e Z , ovvero il Numero Atomico. Ciascun elemento è, quindi, caratterizzato da un numero di massa e da un proprio numero atomico sulla tavola periodica. Sulla tavola si possono trovare anche i numeri di ossidazione, la densità, i punti di fusione ed ebollizione dell'elemento, la sua valenza.



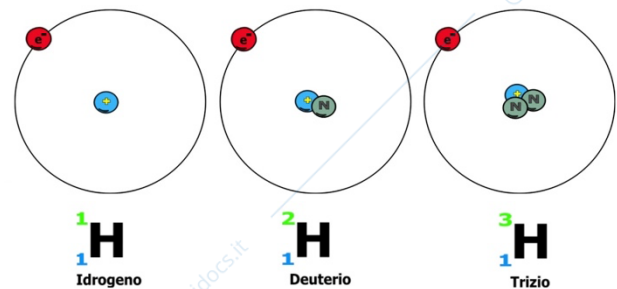
Ricavare i numeri delle componenti atomiche

Dalla consultazione della tavola si possono ricavare diverse informazioni, e si possono ricavare i numeri di protoni neutroni ed elettroni di ciascun atomo, importante per scrivere le formule delle molecole e permettere reazioni. Se, ad esempio, un atomo neutro possiede 7 elettroni e ha numero di massa 27, e l'esercizio richiede il numero dei neutroni nel nucleo, è possibile far valere la regola per la quale, in tale atomo, il numero di elettroni equivale a quello dei protoni (perché elettricamente neutro), e sottrarre il numero di protoni a quello di massa, per trovare il numero richiesto (20 neutroni).

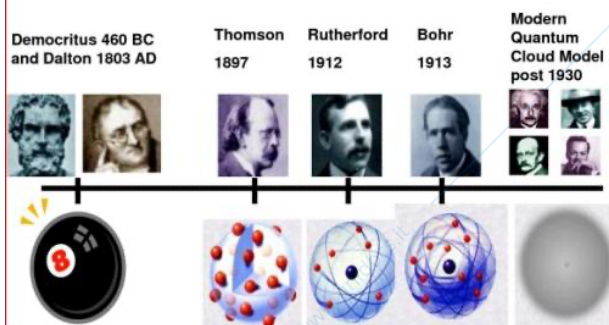
Gli isotopi

Diversi elementi possiedono isotopi, ovvero varianti dell'elemento con stesso numero atomico (se fosse diverso sarebbe un altro elemento) e diverso numero di massa rispetto a quello indicato sulla tavola periodica, ovvero diverso numero di neutroni. Alcuni esempi sono il deuterio e il trizio, isotopi dell'idrogeno con, rispettivamente, numeri di massa 2 e 3; oppure gli isotopi dell'ossigeno o del carbonio (Carbonio 14, utile per datare i reperti biologici grazie al suo decadimento). Molti isotopi sono instabili e vanno incontro a decadimento radioattivo per raggiungere conformazioni più stabili, una caratteristica utile a livello energetico, chimico e diagnostico, grazie alle radiazioni ionizzanti tipiche di ogni decadimento radioattivo.

Il Tecnezio, il fluoro 18, il cobalto e diversi radiofarmaci, e anche i raggi X sono esempi di come alcuni elementi radioattivi vengano utilizzati a livello medico.



History of the Atom Timeline

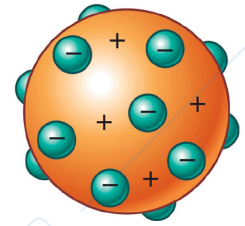


Il concetto di atomo

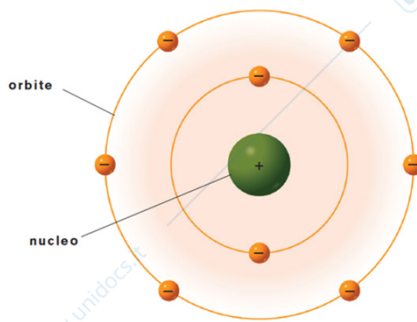
Già gli antichi greci introdussero, sebbene solo filosoficamente, il concetto di atomo come minima componente strutturale della materia, invisibile, senza forma e indivisibile ulteriormente. Nel tempo, le teorie sono state via via migliorate e corrette, fino ai modelli di Dalton (particelle elementari indivisibili e indistruttibili), a quello di Thomson (modello atomico a panettone), di Rutherford, di Bohr (che spiegò la presenza di orbite e livelli energetici degli elettroni), fino ad arrivare ai moderni modelli atomici relativistici di Schrodinger e Heisenberg.

Modello di Thomson

Confutando la precedente teoria di Dalton, Thomson spiegò la presenza di particelle ulteriori all'atomo, di cariche diverse, mescolate fra loro in rapporti coerenti con l'elettrostatica.

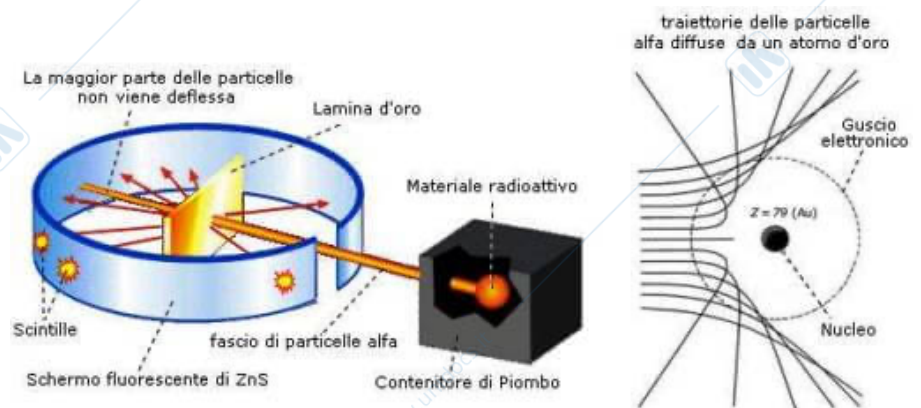


Modello di Rutherford

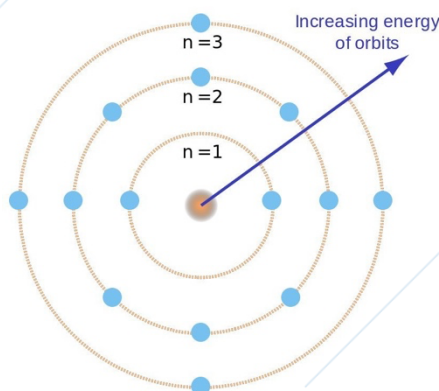


Il modello è di tipo planetario, con un nucleo fermo centrale ed elettroni in orbita nello spazio intorno ad esso. Rutherford, nel 1910, aveva eseguito un esperimento apparentemente semplice, bombardando un sottilissimo foglio d'oro, di circa un centesimo di millimetro, con. Particelle alfa (nuclei di elio). Il 99% delle particelle passava senza subire variazioni di rotta, ma circa l'1% veniva respinto o deviato. Per spiegare questo comportamento, lo scienziato strutturò un modello atomico essenzialmente vuoto, dove, però, le piccole componenti di

materia restavano solide e in grado di respingere o deviare corpi in urto con esse. A livello di proporzioni, il rapporto fra nucleo e spazio vuoto dell'atomo è quello fra una formica al centro di uno stadio (il nucleo) e lo stadio stesso), gli elettroni sono in orbita, quindi, molto distanti dal nucleo (ai margini dello stadio). I rapporti fra le dimensioni sono molto grandi a livello atomico. Il modello di Rutherford, sebbene fosse più preciso di quello di Thomson, non era in grado di dare una spiegazione alla posizione degli elettroni, i quali, per le leggi dell'elettromagnetismo, avrebbero dovuto collassare sul nucleo se l'unica forza a tenerli in orbita fosse stata quella centrifuga.



Modello di Bohr



Analizzando gli spettri di emissione energetici di diversi elementi nelle reazioni chimiche, Bohr si accorse che esistevano schemi di assorbimento ed emissione diversi in base al tipo di elemento, ed ipotizzò che le differenze riscontrate derivassero dagli elettroni. In base alle osservazioni, Bohr sviluppò l'idea di quantizzazione di energia dell'elettrone, che permetteva a ciascun elettrone di restare a distanza ben precisa dal nucleo nella sua orbita. Secondo la quantizzazione, quindi, gli elettroni non potevano assumere tutti i valori energetici possibili, ma solo determinati livelli, denominati livelli quantici, e descritti da Bohr con un numero

intero positivo (il numero quantico principale n , ancora utilizzato nelle moderne teorie atomiche). Proprio questi livelli di energia spiegavano il motivo per cui gli elettroni mantenessero la loro orbita e la loro distanza dal nucleo, completando la teoria di Rutherford. Per passare da un livello

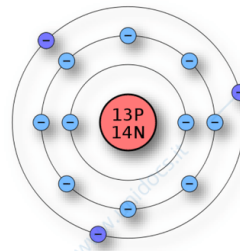
energetico ad un altro, ciascun elettrone deve assumere (per allontanarsi dal nucleo) o perdere (per avvicinarsi al nucleo) un determinato valore energetico. La teoria spiegava, inoltre, le proprietà spettroscopiche di emissione (o di radiazione) differenti negli elementi osservati. Riassumendo, Bohr introdusse il concetto di quantizzazione dell'energia cinetica dell'elettrone e costituì il numero quantico principale, che delimita tali livelli.

Modello atomico attuale

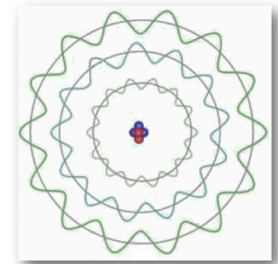
All'inizio del Novecento, De Broglie introdusse il concetto di associazione fra ogni particella e una sua determinata lunghezza d'onda, spiegando il modello di Bohr, riconducendo l'energia quantizzata dell'elettrone ad un'onda stazionaria. Il fenomeno di natura ondulatoria degli elettroni venne confermato da diversi esperimenti, fino ad arrivare al principio di indeterminazione di Heisenberg, il quale enuncia come non sia possibile

conoscere simultaneamente e in maniera precisa la posizione e la velocità di una determinata particella poiché, nel momento in cui la si osserva, il suo stato viene alterato. Il concetto legato all'indeterminazione ci porta al modello attuale, elaborato da Schrödinger, il quale dimostrò matematicamente, attraverso determinate funzioni d'onda, che gli elettroni non hanno un'orbita regolare e circolare, ma seguono movimenti anche molto complessi all'interno di "nube", dette orbitali, ovvero aree dello spazio ad alta probabilità (circa il 90%) di contenere l'elettrone. L'odierno modello atomico, per questo, viene detto probabilistico. Per comprendere questo concetto, si consideri la differenza di cammino nello spazio fra un treno elettrico, che si muove su binari predisposti, e che seguirà sempre lo stesso tracciato su di essi (modelli atomici planetari precedenti); e un'automobile radiocomandata, libera di spostarsi indipendente da tracciati prestabiliti, di compiere curve ed inversioni di marcia, e di viaggiare da un punto ad un altro nello spazio seguendo diverse possibilità di percorso, che non si può predire precisamente, ma solo per probabilità, sebbene si possa conoscere il raggio d'azione dell'automobile, che dipende dalla potenza del telecomando (modello atomico probabilistico ad orbitali). Gli elettroni hanno un doppio comportamento, sia ondulatorio che corpuscolare. Gli elettroni formano, dunque, una nube di carica negativa intorno al nucleo. All'interno di quella nube, che può essere approssimata ad una sfera immaginaria, c'è maggiore probabilità di trovare un elettrone. All'interno della sfera, ciascun elettrone segue una funzione d'onda, la quale determina un orbitale, che è il luogo dove la probabilità raggiunge il livello maggiore. In ogni caso, gli elettroni non si muovono secondo orbite prefissate. All'interno di un orbitale, un elettrone dovrebbe trascorrere circa il 90% del tempo.

Dalle orbite stazionarie...



...alle onde stazionarie!



Numeri quantici

Il modello atomico probabilistico, per la descrizione degli orbitali, si serve di determinati numeri, detti quantici, che definiscono le dimensioni, la forma e l'orientazione di ciascun orbitale. Il concetto di numero quantico, già introdotto da Bohr, è stato ampliato fino a raggiungere quattro serie di numeri quantici.

- Numero quantico principale: ha simbolo "n" e può assumere valori numerici positivi (maggiori di zero) da 1 a infinito, il significato di questo numero è lo stesso che gli era stato assegnato da Bohr, definisce le dimensioni e l'energia dell'orbitale, e descrive come la funzione d'onda varia secondo la distanza dal centro dell'atomo. Più n aumenta, più aumentano l'energia dell'orbitale e la sua distanza dal nucleo. Sebbene potenzialmente "n" possa assumere valori infiniti, ad oggi gli elementi della tavola periodica arrivano da un massimo valore di $n=7$
- Numero quantico secondario: ha simbolo "l" e può assumere valori che vanno da 0 a "n-1". Esso descrive essenzialmente la forma dell'orbitale. Diverse tipologie di orbitali hanno diverse forme. Si associano, ad "l", i vari tipi di orbitale, la cui nomenclatura è la stessa che aveva già proposto Bohr. L'orbitale "s", di forma sferica, corrisponde al valore 0 di l. L'orbitale "p", di forma polilobata (come quelli successivi), corrisponde al valore 1, l'orbitale "d" corrisponde a 2, l'orbitale "f" corrisponde a 3.
Le lettere seguono i simboli di Bohr: Sharp, Principal, Diffuse, Fundamental.
- Numero quantico magnetico: ha simbolo "m" (o m_l) e indica, essenzialmente, l'orientazione dell'orbitale nello spazio, può assumere tutti i valori interi compresi fra "-l e +l", quindi dipende direttamente dal numero quantico secondario.
- Numero quantico di spin: ha simbolo " m_s ", e identifica il moto di rotazione dell'elettrone intorno al proprio asse durante il suo moto intorno al nucleo. Può assumere solo due valori: $\frac{1}{2}$ nel caso in cui l'elettrone ruoti in senso antiorario, $-\frac{1}{2}$ nel caso in cui ruoti in senso orario.

Il numero di orbitali compresi in un livello è proporzionale al valore del numero quantico principale, elevato alla seconda. È dunque possibile conoscere il numero di orbitali presenti in un livello energetico, conoscendo il suo "n", attraverso la formula: *numero di orbitali* = n^2 .

Seguendo, invece, il valore del numero quantico secondario, si possono avere: 1 orbitale con $l=0$, 3 con $l=1$, 5 con $l=2$, 7 con $l=3$.

La distribuzione degli elettroni, al crescere del numero quantico principale, è sempre più complessa. Questo influisce sulle proprietà chimico fisiche degli elementi.

NUMERI QUANTICI (Riepilogo)

livello n	l $0 \div (n-1)$	m $-l, 0, +l$	Tipo di orbitale	Nome dell'orbitale	n° max di elettroni	m_s^*	
						$+\frac{1}{2}\uparrow$	$-\frac{1}{2}\downarrow$
4	3 f	-3 -2 -1 0 +1 +2 +3	f	4f	14	7↑	7↓
	2 d	-2 -1 0 +1 +2	d	4d	10	5↑	5↓
	1 p	-1 0 +1	p	4p	6	3↑	3↓
	0 s	0	s	4s	2	↑↓	
3	2 d	-2 -1 0 +1 +2	d	3d	10	5↑	5↓
	1 p	-1 0 +1	p	3p	6	3↑	3↓
	0 s	0	s	3s	2	↑↓	
2	1 p	-1 0 +1	p	2p	6	3↑	3↓
	0 s	0	s	2s	2	↑↓	
1	0 s	0	s	1s	2	↑↓	

Valori assunti dai quattro numeri quantici n, l, m, m_s nei primi quattro livelli energetici.

La sesta colonna riporta il numero massimo di e^- in ogni tipo di orbitale.

(*) La settima colonna riporta i valori di *spin* degli elettroni di ogni orbitale, in conformità al principio di esclusione di Pauli. Come si vede, ogni orbitale è stato simbolicamente rappresentato con un quadratino, a prescindere dalla forma reale.