

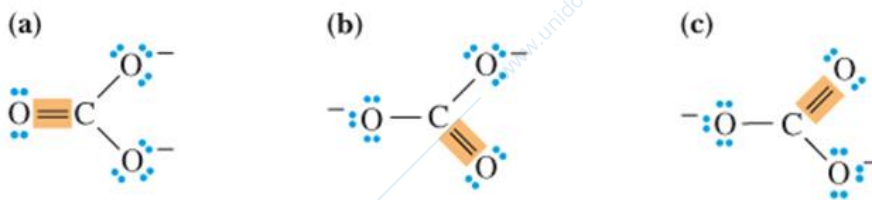
CHIMICA ORGANICA- LEZIONE 2

FORMULE DI RISONANZA: In chimica, si ha **risonanza** (o mesomeria) quando più **formule**, dette **formule** limite, concorrono a definire la vera struttura **di** una molecola.

La teoria della risonanza fu sviluppata da Pauling negli '30. Secondo questa teoria, molte molecole e molti ioni sono meglio descritti mediante due o più strutture di Lewis, considerando la reale molecola o ione come una composizione di tali strutture. Le singole strutture di Lewis sono chiamate **STRUTTURE LIMITE DI RISONANZA**. Per mostrare che la reale molecola o ione è un **IBRIDO DI RISONANZA** delle varie strutture limite di risonanza, queste vengono interconnesse da una freccia a doppia punta.

Es. ione carbonato

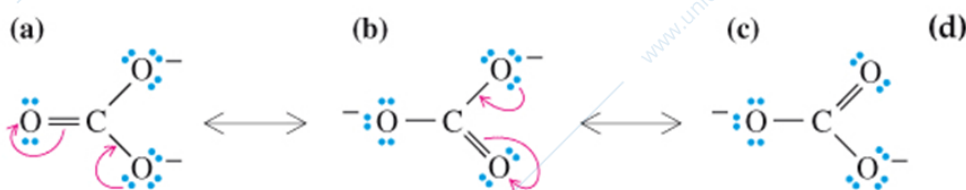
Sperimentalmente non si trovano distanze di legame diverse (un doppio e due singoli) ma una distanza intermedia tra doppio e singolo dei tre legami uguali.



Lo ione carbonato è quindi un ibrido di risonanza descritto da tre formule limite.

Nella rappresentazione delle formule di risonanza:

- Le frecce curve indicano lo spostamento di una coppia di elettroni
- Soltanto elettroni p e doppietti si spostano
- Se si sanno spostare gli elettroni si scrivono tutte le formule limite di risonanza, si possono prevedere tutte le formule (e anche l'andamento delle reazioni chimiche che vedremo nel corso)

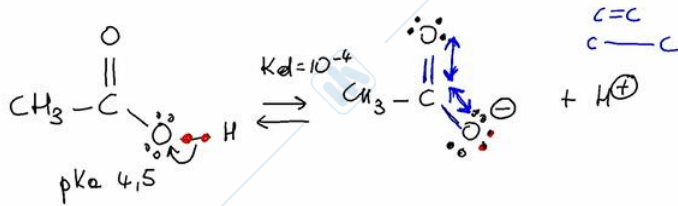


REGOLE PER SCRIVERE LE STRUTTURE DI RISONANZA

- Le frecce partono da una coppia di elettroni ed arrivano su un atomo che può ospitare una coppia elettronica
- Per rispettare l'ottetto, dall'atomo ricevente parte una coppia di elettroni che arriva su un terzo atomo
- Meccanismo push-pull (a catena) che si ferma sulla formula di risonanza successiva
- Tutte le formule limite devono avere lo stesso numero di elettroni di valenza
- Gli atomi devono rispettare la regola dell'ottetto
- Gli atomi (nuclei) restano al loro posto
- Tutte le strutture limite devono avere lo stesso numero di coppie elettroniche p e doppietti su atomi

ES. equilibrio di dissociazione acida dell'acido acetico.

In rosso sono indicati i doppietti di elettroni spaiati, che si spostano nella risonanza. In blu son indicati i legami spostati.

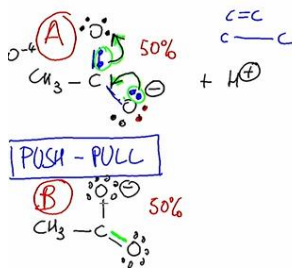


Si ricorda che il legame singolo è più lungo del legame doppio, che è più corto perché la molecola si contrae.

Si ha quindi che teoricamente il legame singolo con l'ossigeno e quello doppio col secondo ossigeno, avendo

lunghezza diversa, rendono la molecola asimmetrica. Nella realtà si ha però che la molecola risulta essere simmetrica.

Questo si spiega per la risonanza. Il doppio legame si alterna al legame singolo con l'ossigeno con velocità elevatissima. Il sistema di spostamento del doppio legame è detto PUSH-PULL. Il meccanismo è indicato graficamente con delle frecce che partono dal legame/elettrone che viene spostato e che arriva al punto di spostamento.

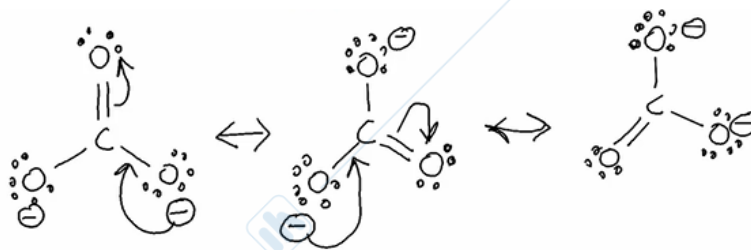


In verde sull'acetato sono indicate le frecce della isomeria. Le due mesomerie rappresentano entrambe l'acido.

In rosso sono indicate le percentuali di tempo nel quale la molecola è in quello stadio.

Per indicare che sono due formule equivalenti si pone una freccia con punta ad entrambi gli estremi.

Si ricorda che a spostarsi sono solo i doppietti elettronici e i legami pigrco. I sigma non sono MAI coinvolti nella risonanza. Il carbonato ha 3 mesomeri che tutti rappresentano la stessa molecola. Sono tre foto dello stesso soggetto. Facendo scorrere le tre figure, si osserva che il doppio legame cambia continuamente posizione e di conseguenza si sposterà anche la carica negativa. Per il meccanismo push-pull si ha che oltre al doppio legame si sposta un doppietto elettronico.

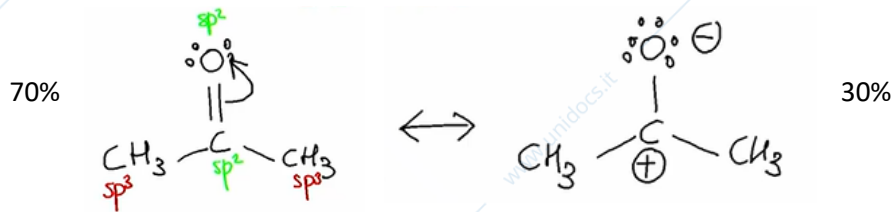


L'isomeria inoltre spiega anche la rappresentazione simmetrica del benzene. È un esagono equilatero su cui i 3 legami doppi girano intorno alla molecola, cambiando costantemente posizione.

REGOLE DI RISONANZA

1. NELLA RISONANZA SONO COINVOLTI SOLO SP², mai sp³.
2. NELLA RISONANZA SI MUOVONO SOLO I LEGAMI PI GRECO E I DOPPIETTI ELETTRONICO SPAIATI, mai i legami sigma.
3. VALE PUSH-PULL
4. VA RISPETTATA LA VALENZA DEGLI ATOMI (regola dell'ottetto)
5. GLI ATOMI NON SI SPOSTANO. A spostarsi sono gli elettroni e i legami pi greco
6. IL NUMERO DI DOPPIETTI LIBERI E LEGAMI PI GRECO DEVE RIMANERE COSTANTE PER TUTTE LE FORME DI RISONANZA.

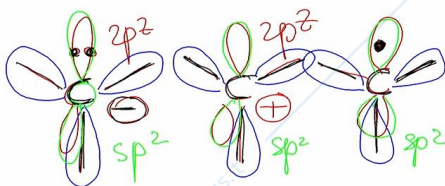
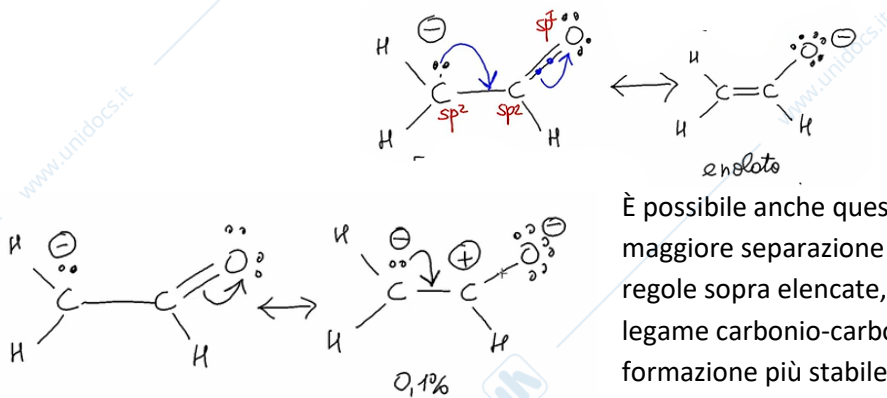
Es. risonanza dell'acetone



La prima forma è quella in cui l'acetone si presenta più frequentemente. Per stabilire quale formula è la più presente si seguono le seguenti regole:

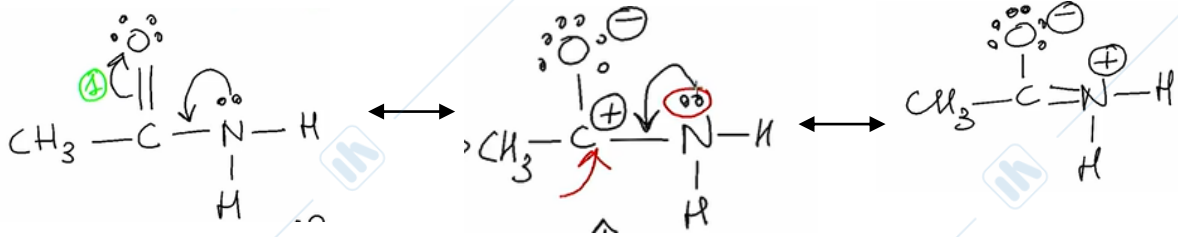
- Minore separazione di carica
- Massimo numero di legami covalenti
- I gusci di valenza pieni (ottetto esterno completo)
- Carica negativa sull'atomo più elettronegativo

Es. risonanza dell'acetaldeide

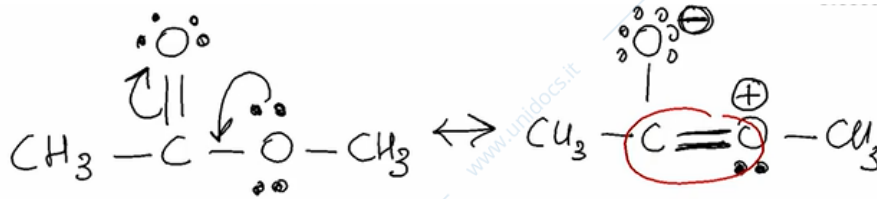


i carboanioni e i carbocationi partecipano molto spesso nelle risonanze perché sono ibridati sp² e presentano una carica parziale.

Es. risonanza acetammide

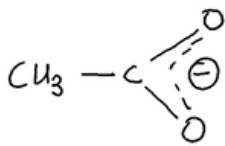


Es. risonanza dell'acetato di metile

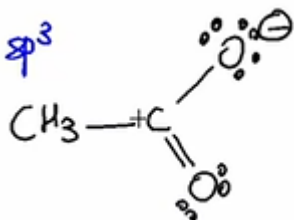


Es. ione acetato

(formula contratta)



Scriviamo una formula di risonanza per capire quali elettroni sono coinvolti. Ci sono 3 atomi da disporre, ma 4 elettroni vengono spostati.



Per la teoria degli orbitali atomici, 3AO danno 3OM

