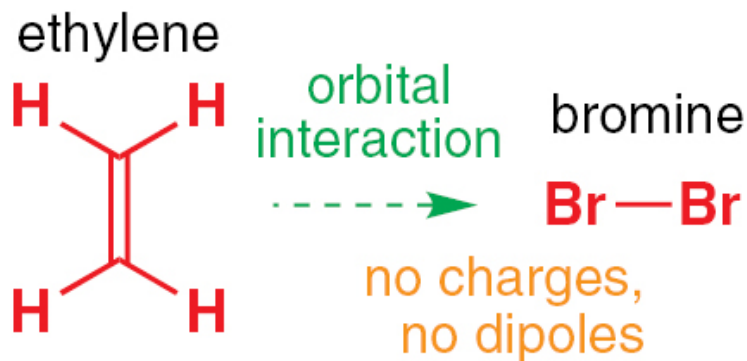
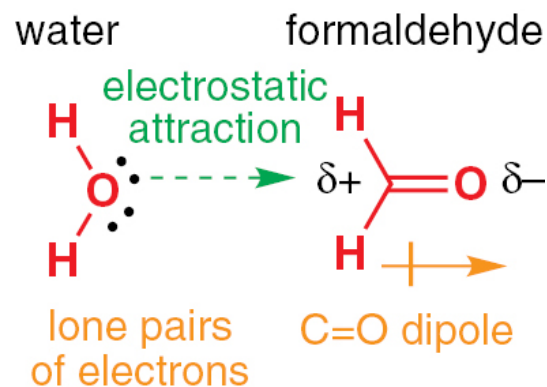
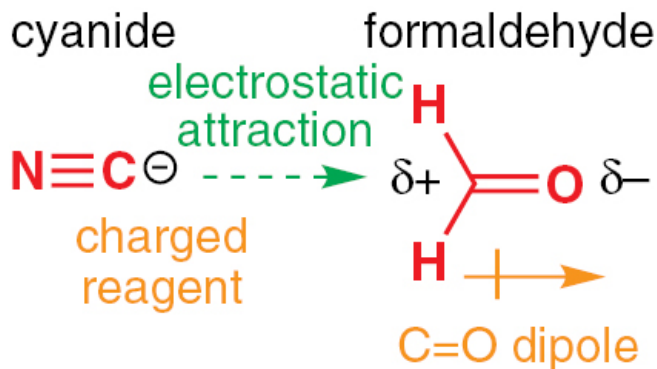
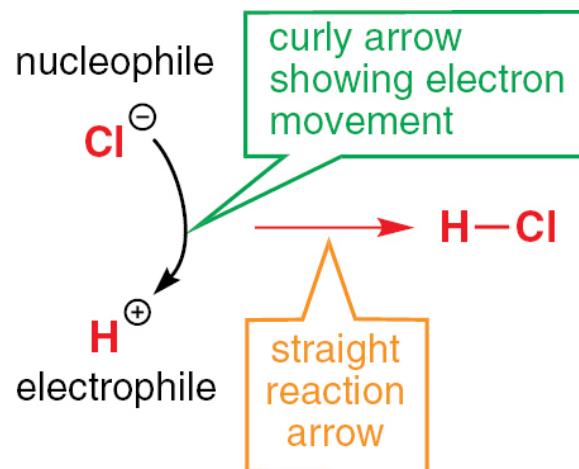
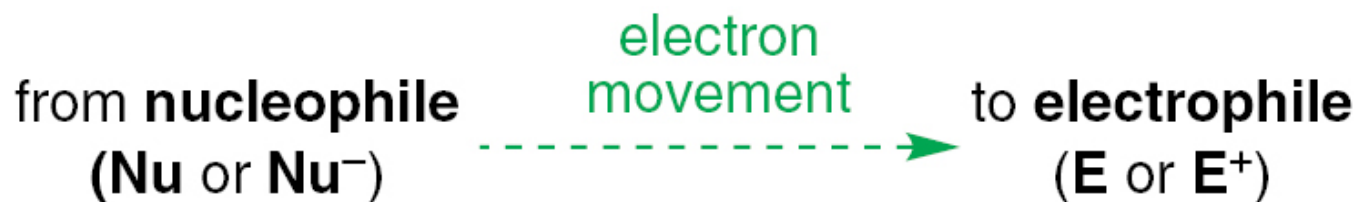


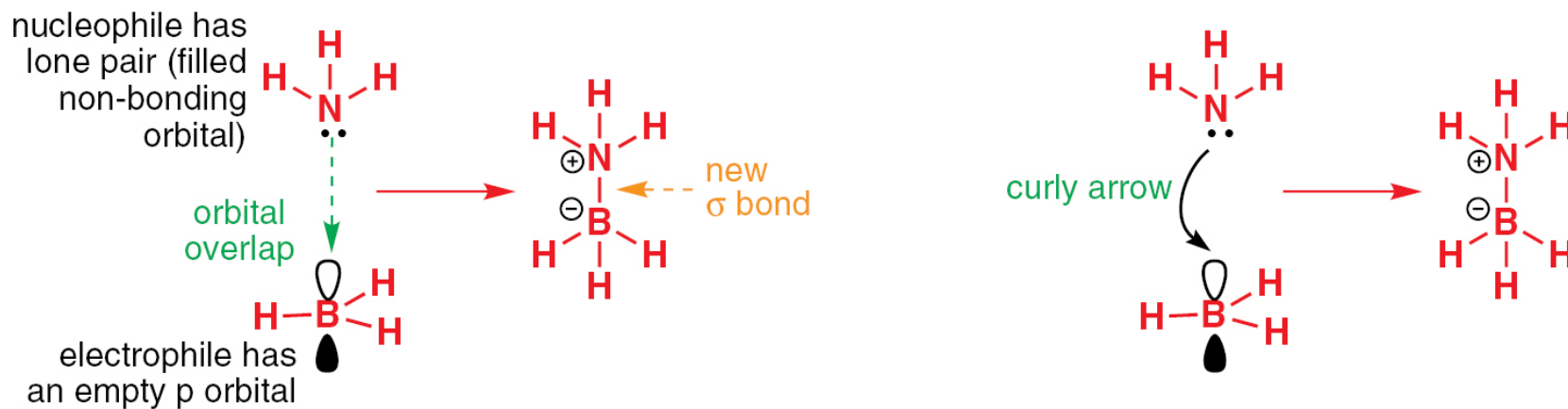
reazioni chimiche



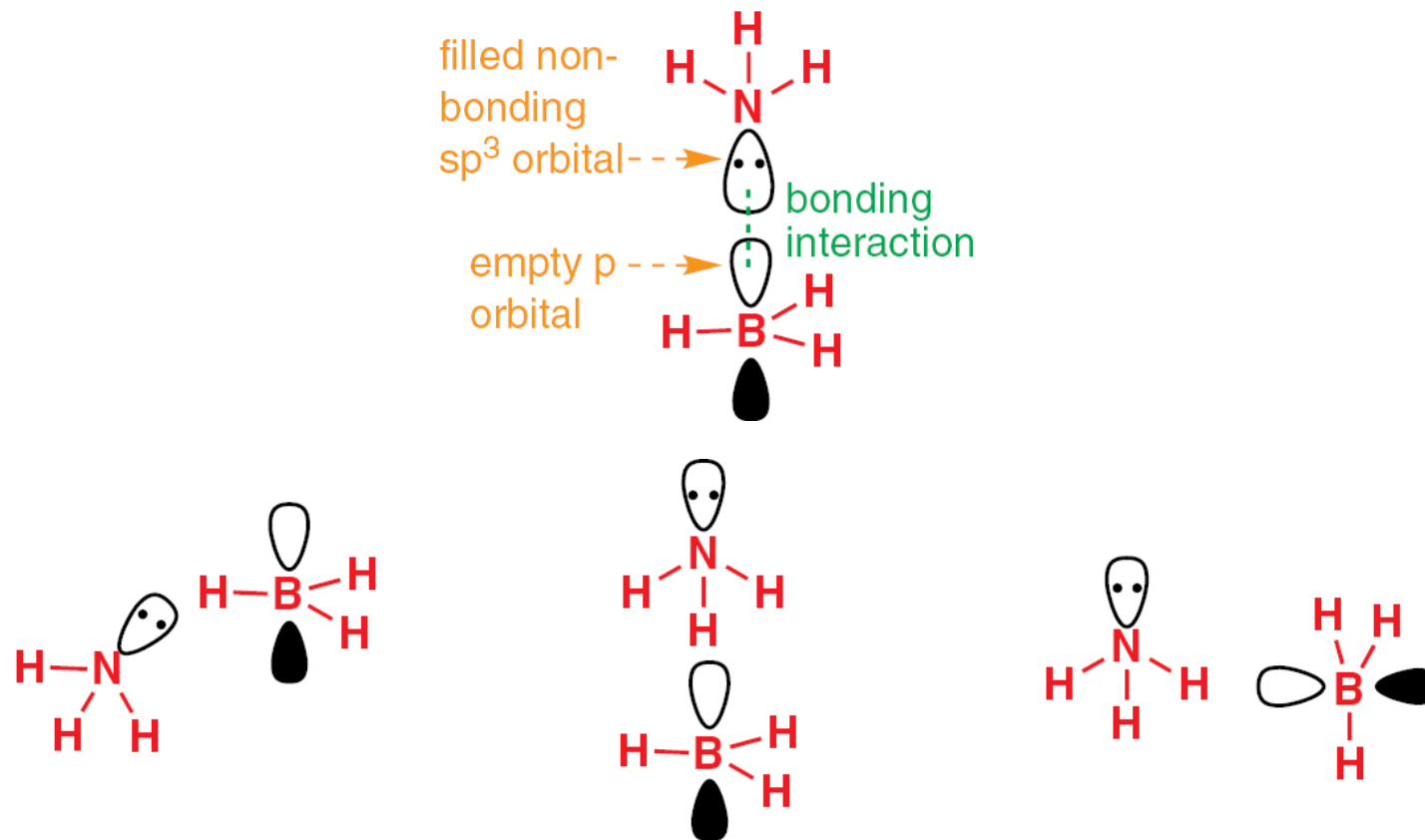
un legame si forma quando gli elettroni
si muovono dal nucleofilo all'elettrofilo



base di Lewis-acido di Lewis: interazione nucleofilo-elettrofilo

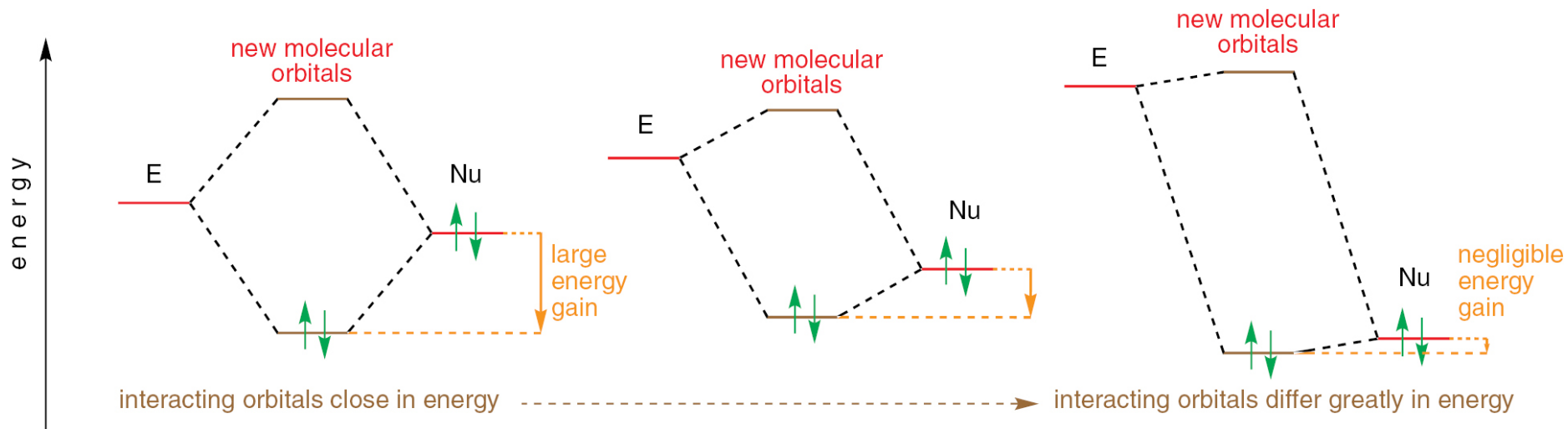


le collisioni molecolari devono avvenire con gli orbitali allineati correttamente

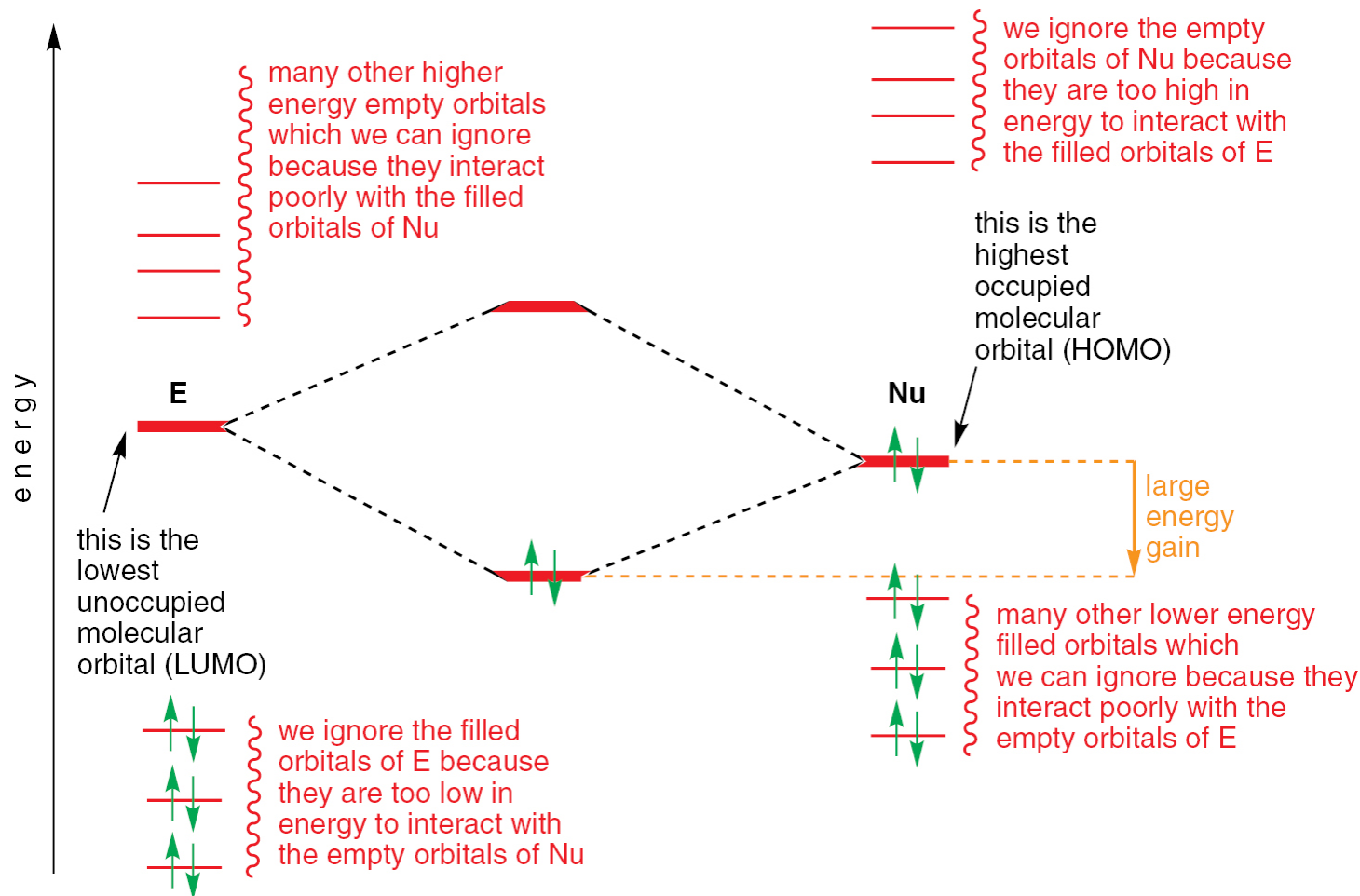


allineamento non corretto

gli orbitali di Nu ed E devono avere energia appropriata



le interazioni HOMO nucleofilo – LUMO elettrofilo sono quelle da considerare quando si analizza una reazione

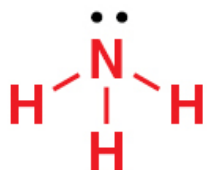


energia HOMO-LUMO

- il miglior nucleofilo ha un HOMO ad alta energia
- il miglior elettrofilo ha un LUMO a bassa energia

identificazione di nucleofili

nucleophiles with a
lone pair



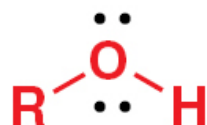
ammonia



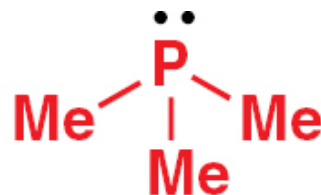
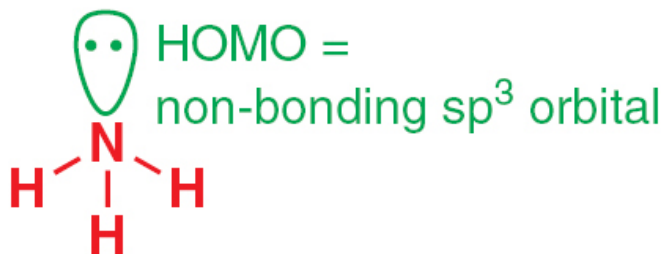
an amine



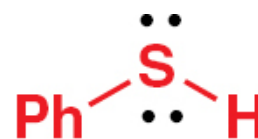
water



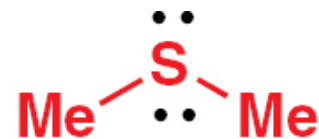
an alcohol



trimethylphosphine



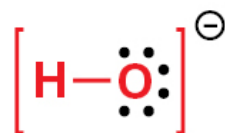
thiophenol



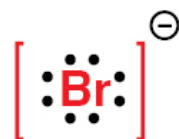
dimethylsulfide

identificazione di nucleofili

nucleophiles with a
negative charge

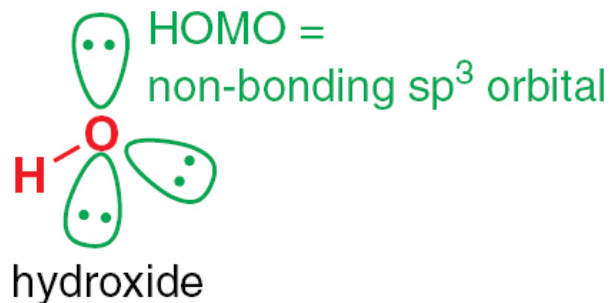


hydroxide

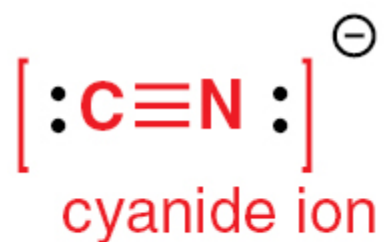


bromide

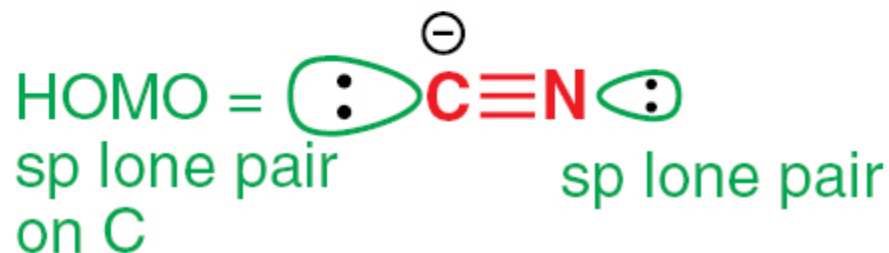
usually drawn simply as:



identificazione di nucleofili

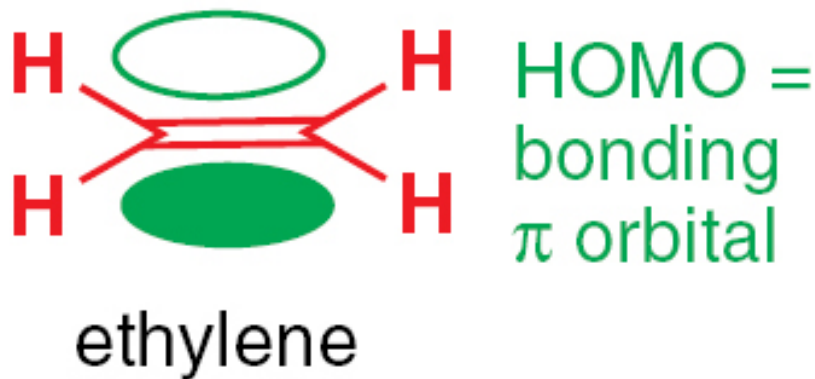


usually drawn
simply as:



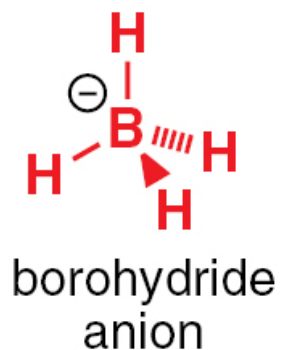
identificazione di nucleofili

a nucleophile with a
C=C double bond

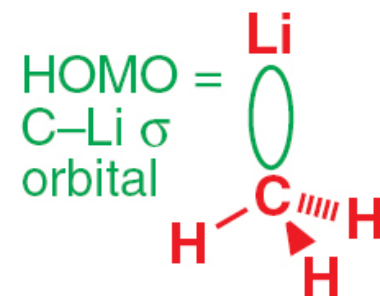
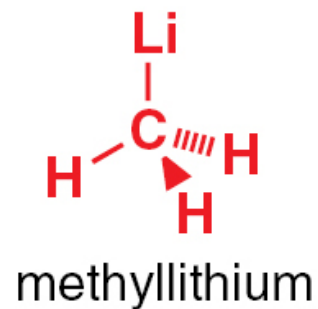
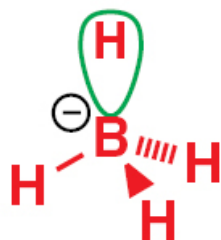


identificazione di nucleofili

nucleophiles with a σ bond
between electropositive atoms



HOMO =
B-H σ orbital



identificazione di nucleofili

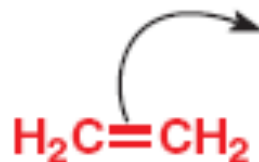
i nucleofili donano elettroni da orbitali disponibili ad alta energia



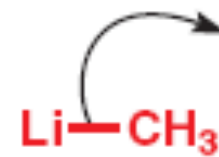
a lone pair



a negative charge



a double bond

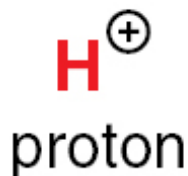


a σ bond to an
electropositive atom

identificazione di elettrofili

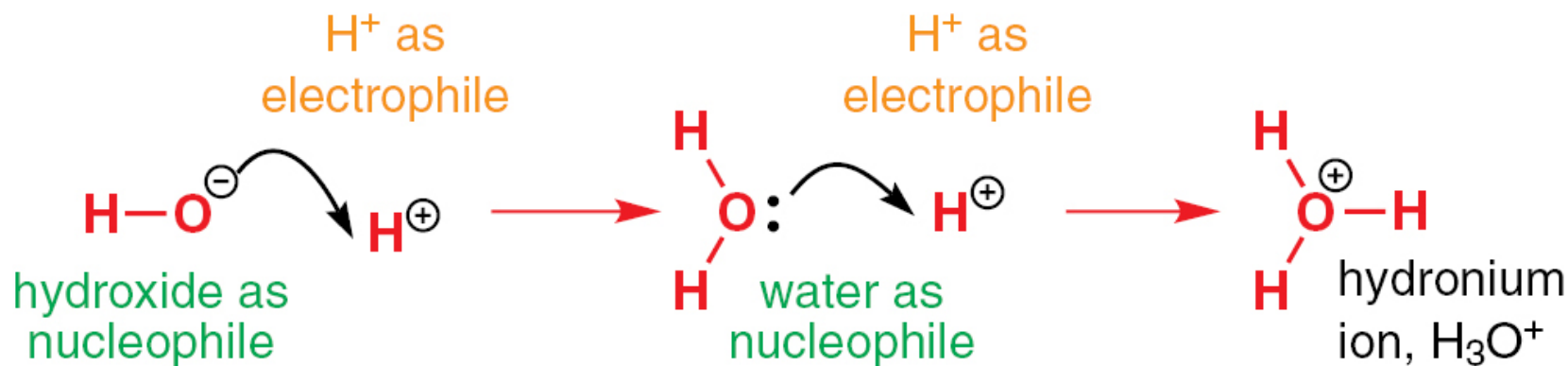
Gli elettrofili sono specie neutre o cariche positivamente con un orbitale atomico vuoto o con un orbitale di antilegame a bassa energia (LUMO) in grado di accettare elettroni

electrophiles with an
empty atomic orbital

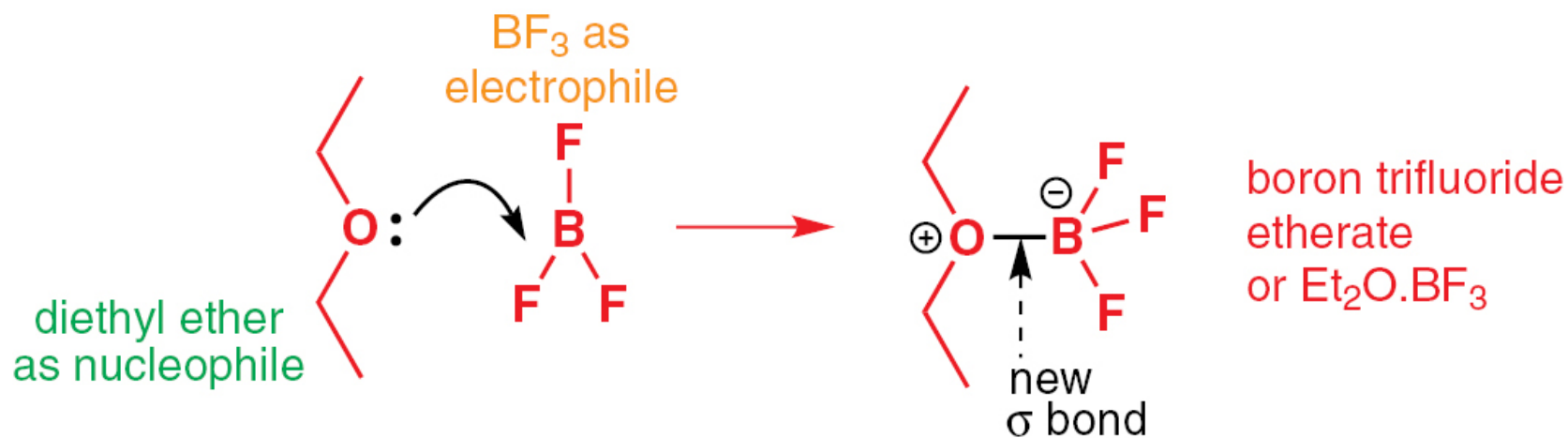
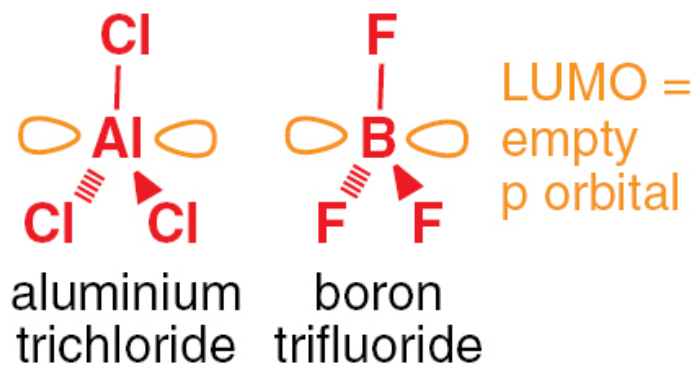


LUMO =
empty
1s orbital

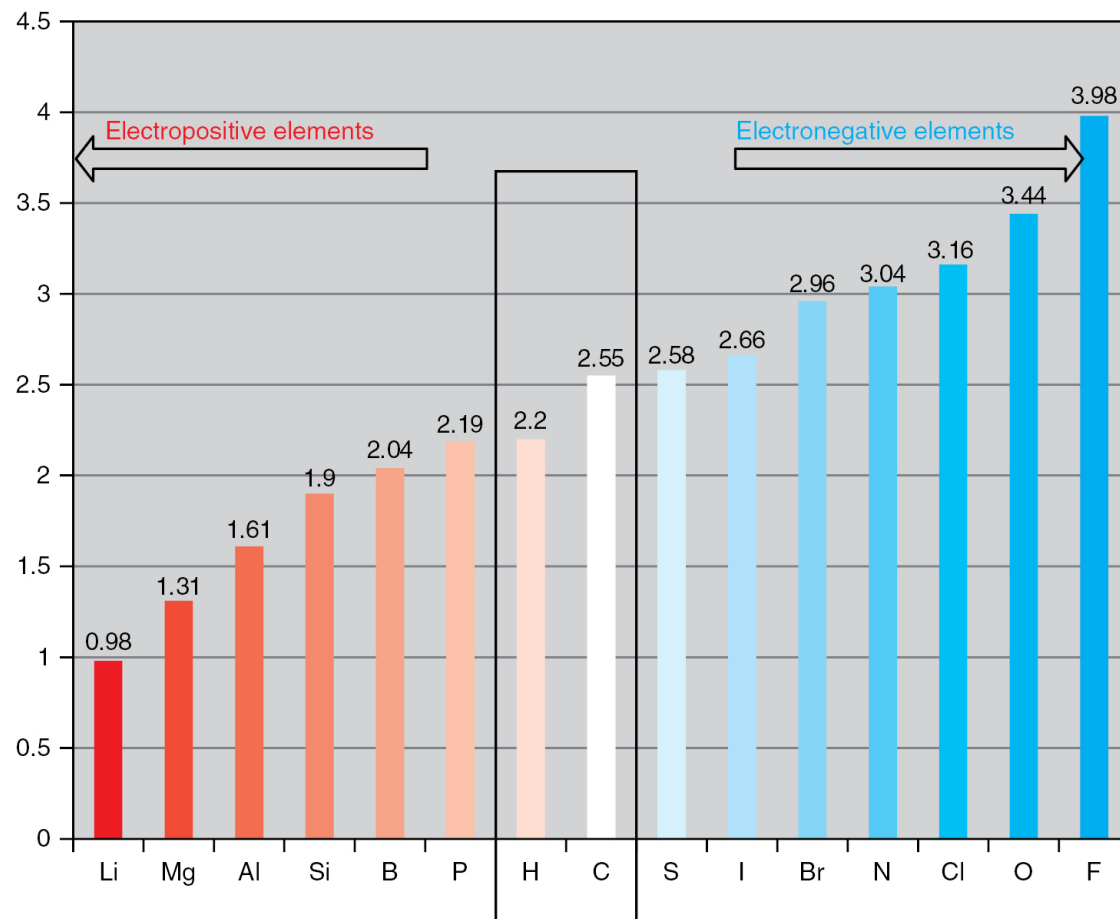
l'elettrofilo più semplice è il catione idrogeno



identificazione di elettrofili



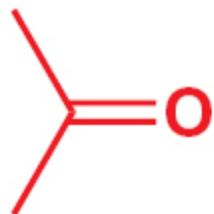
il carbonio è speciale



Il C può essere **Nu** oppure **E** a seconda dell'elemento a cui è legato

identificazione di elettrofili

electrophiles with a
**double-bonded
electronegative atom**



carbonyl compound
LUMO is π^* orbital
of C=O bond

identificazione di elettrofili

electrophiles with a
**single bond to an
electronegative atom**



hydrogen
chloride



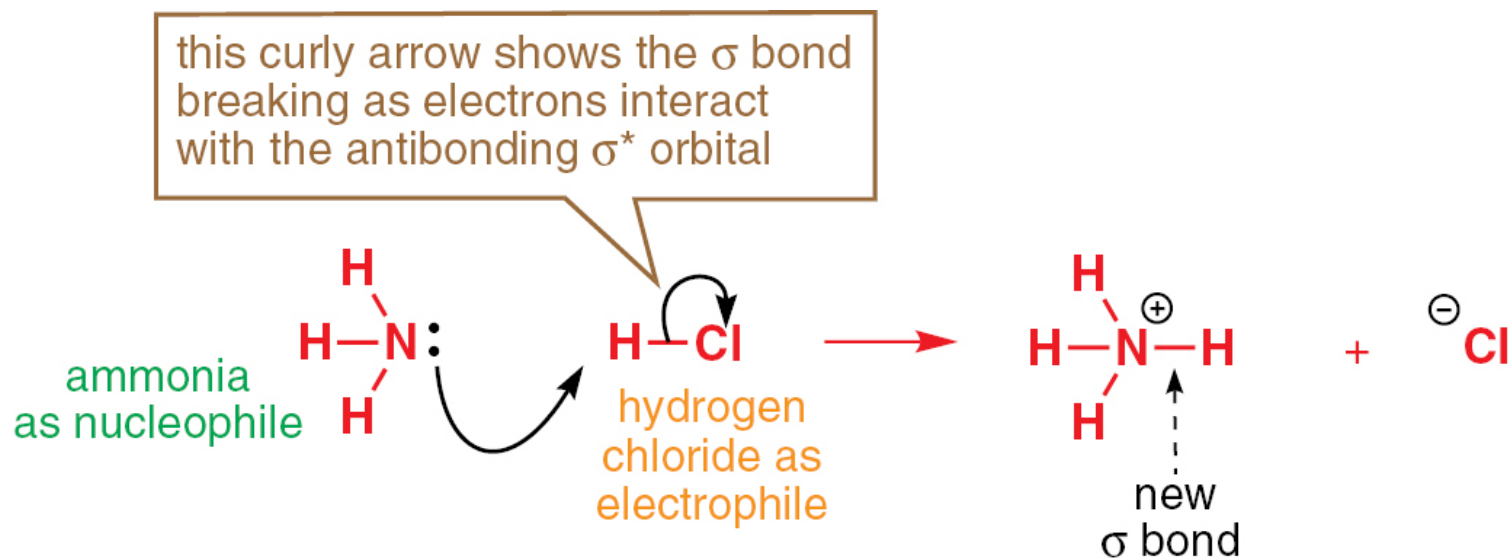
methyl
bromide



bromine



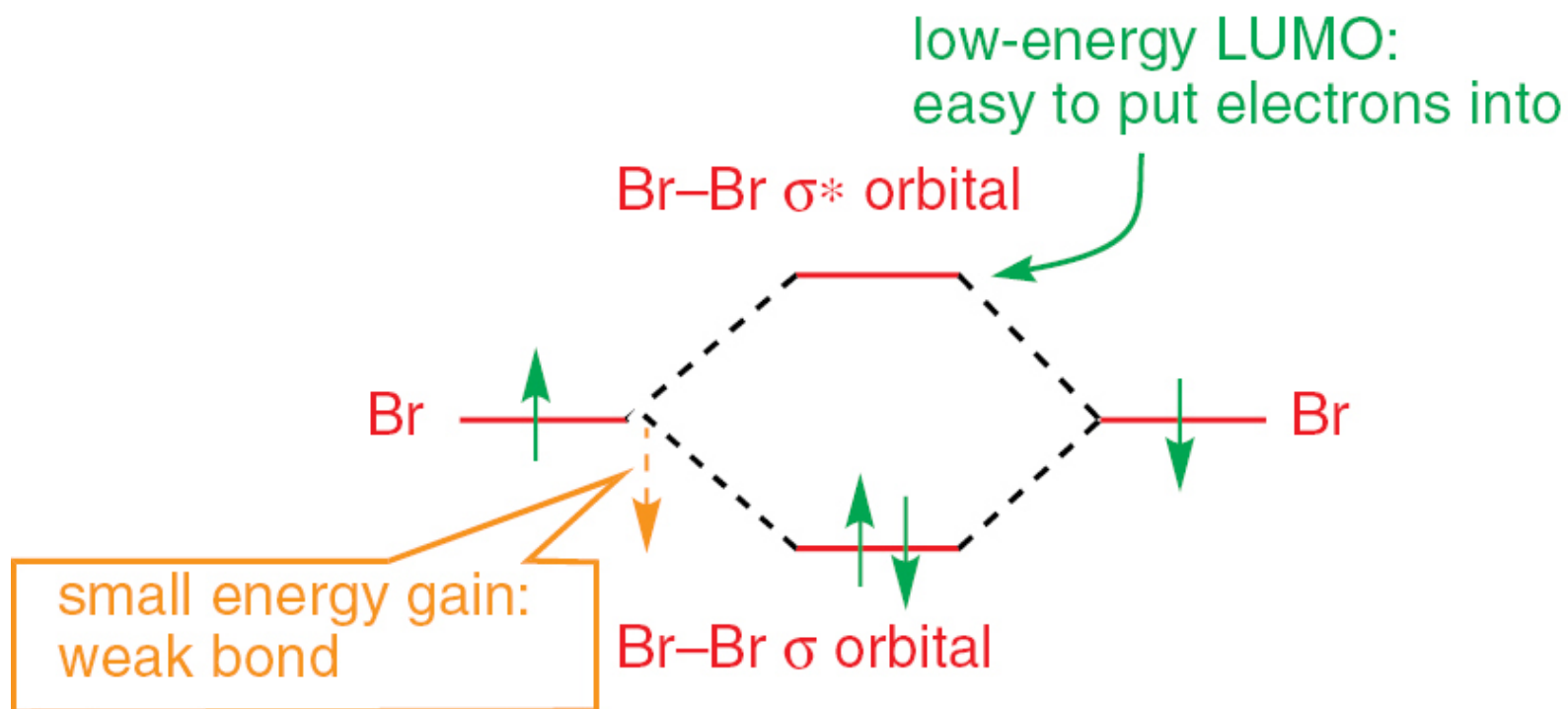
interazioni Nu-E



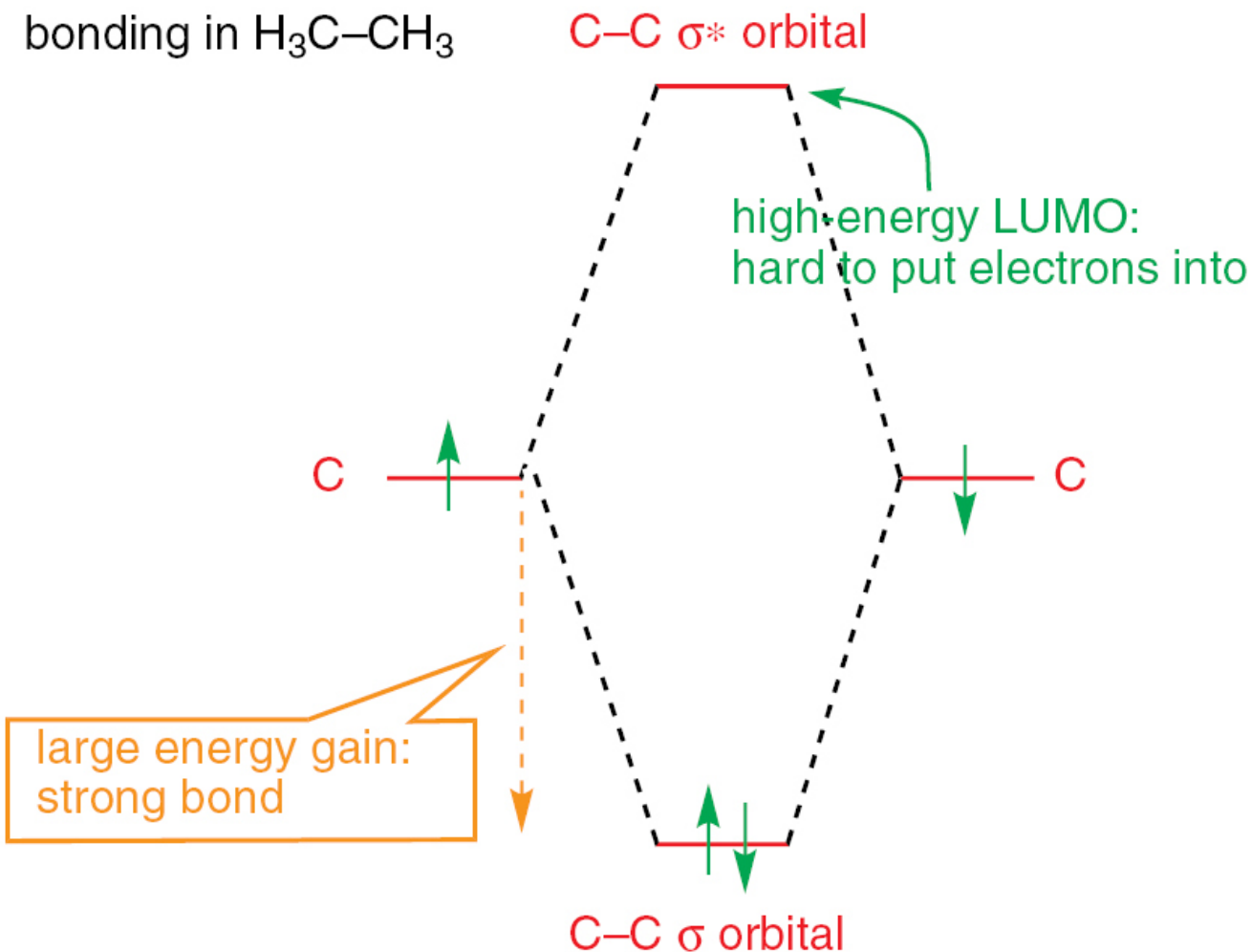
si tratta di una interazione acido-base. Tutte le reazioni acido-base sono reazioni tra un Nu (la base) e un E (l'acido).

perché il bromo (Br_2) è un elettrofilo

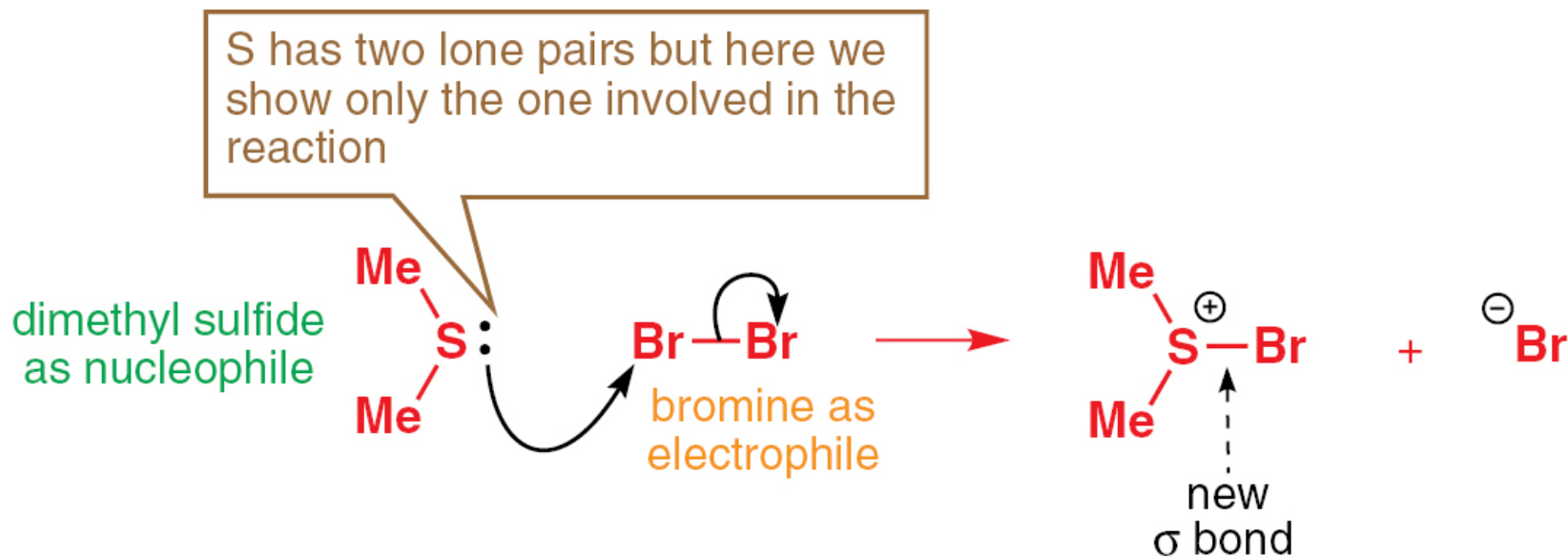
bonding in Br–Br



perché i legami C-C non sono elettrofilici



Br₂ come elettrofilo: un sale di solfonio



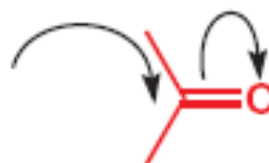
gli elettrofili accettano elettroni in orbitali vuoti a bassa energia (LUMO)



a positive charge representing an empty orbital



a neutral molecule with an empty p orbital



a double bond to an electronegative element

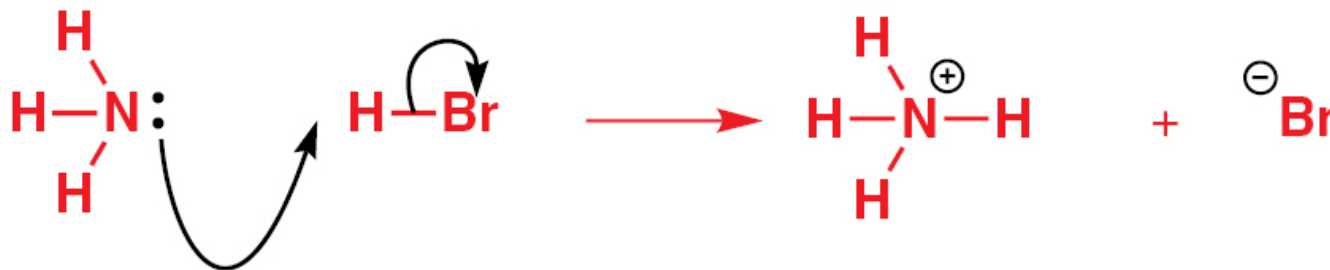
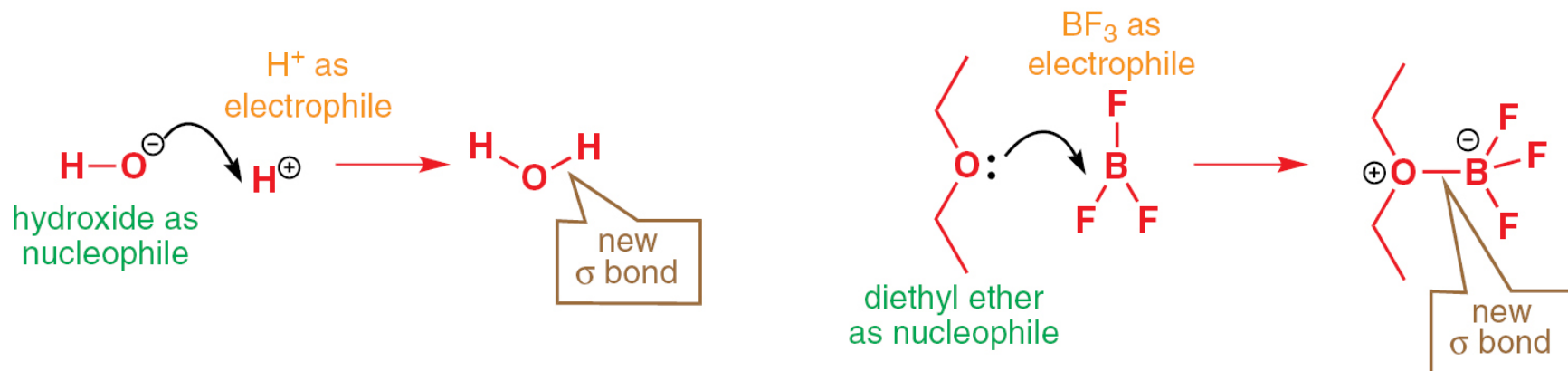


a single bond to an electronegative element

frecce curve

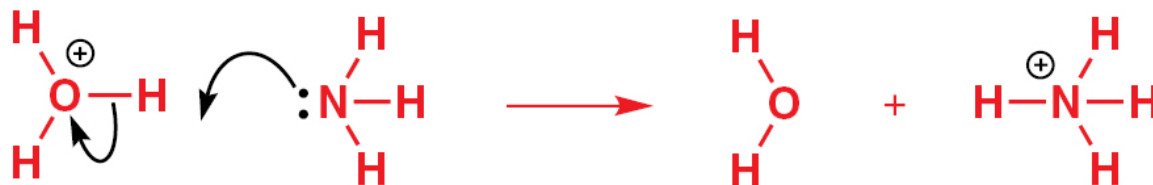
- le frecce curve rappresentano meccanismi di reazione
- le frecce curve esprimono un movimento di elettroni
- le frecce curve partono sempre da una coppia di elettroni: una **carica negativa**, una coppia di elettroni **lone pair**, un **legame chimico**

movimento di elettroni



la carica si conserva

starting materials have one positive charge between them

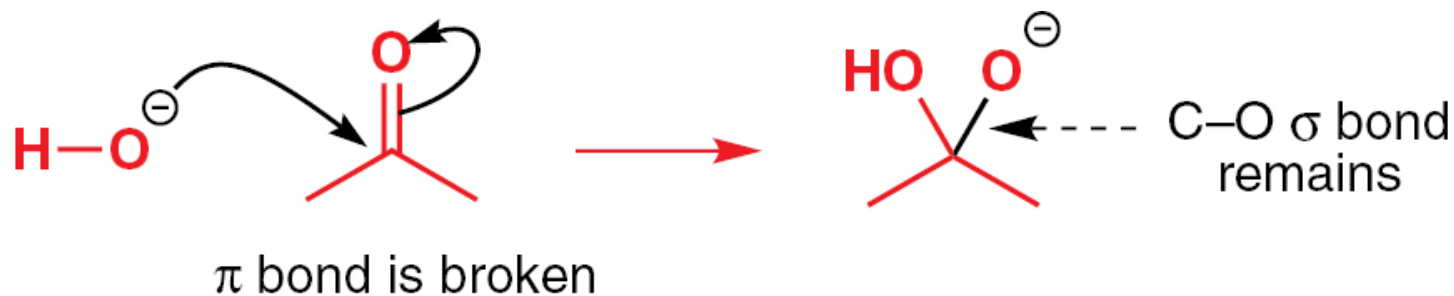


products must also have one positive charge overall

H_3O^+ è elettrofilico all'idrogeno e non all'ossigeno (quest'ultimo ha già 8 elettroni).

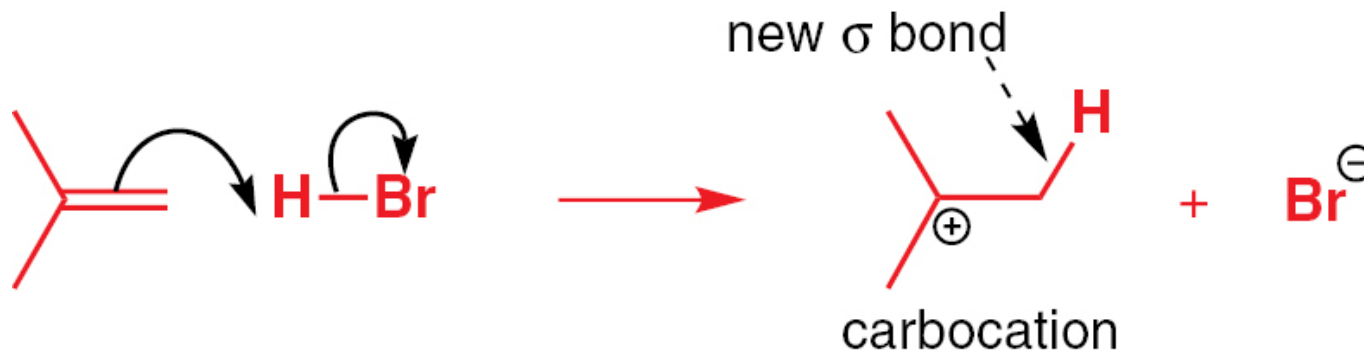
Affinchè lo ione idronio possa espletare il ruolo di elettrofilo deve rompersi un legame O-H, generando H^+ con un orbitale vuoto.

la carica si conserva



in questo caso si rompe un legame π (carbonilico)

legami π come nucleofili

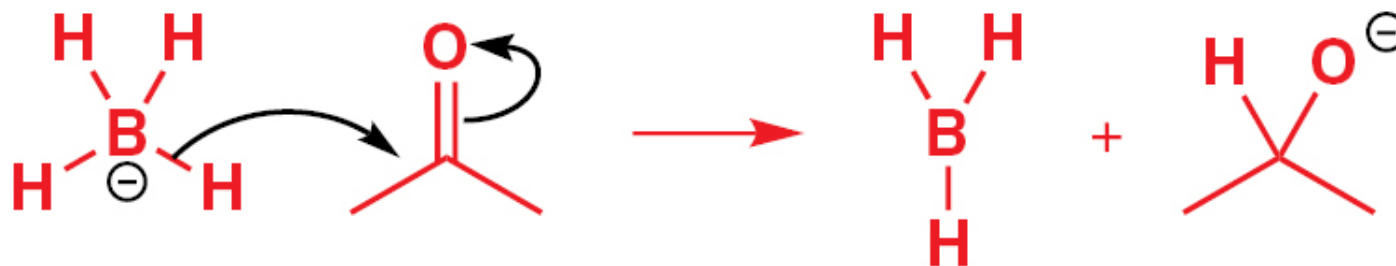


la reazione continua

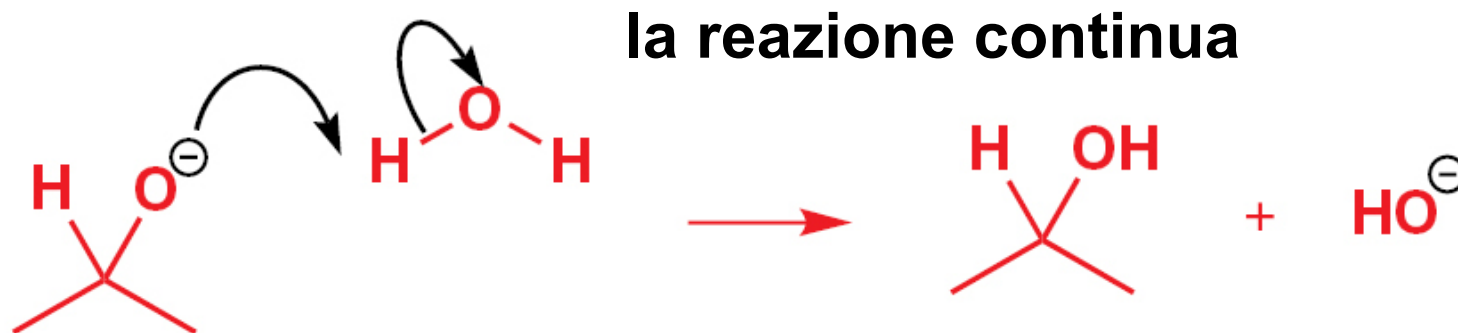


il carbocatione ha 6 elettroni e quindi può accettarne altri due

legami σ come nucleofili



il LUMO dell'elettrofilo è l'orbitale π^*
del doppio legame $\text{C}=\text{O}$



frecce curve health check

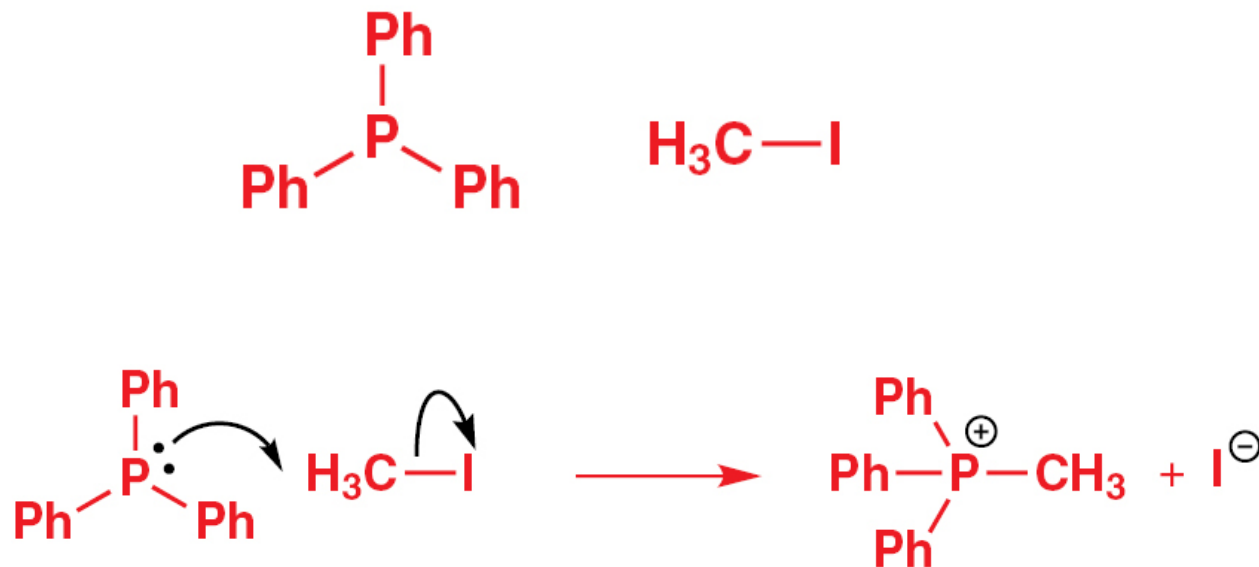
- una freccia curva mostra un movimento di elettroni
- la coda della freccia curva indica la sorgente di una coppia elettronica in un orbitale pieno (LUMO). Tale coppia può essere: un **lone pair**, una **carica negativa**, un **legame π** , un **legame σ** .
- la testa della freccia curva rappresenta la destinazione della coppia elettronica che può essere: un **orbitale atomico vuoto** dove un nuovo legame si forma, un **orbitale π^* o σ^*** di antilegame dove un nuovo legame si forma in concomitanza alla rottura di un vecchio legame.

frecce curve health check

- la testa della freccia curva può avere come destinazione un atomo elettronegativo che può sopportare la carica negativa
- la carica totale è sempre mantenuta in una reazione

disegnare i meccanismi delle reazioni

- identificare quali sono i legami che si rompono e quelli che si formano
- identificare NU ed E



frecce curve e meccanismi

- le frecce curve sono fondamentali per rappresentare i meccanismi delle reazioni
 - moltissime reazioni pochi meccanismi
 - imparare a disegnare i meccanismi aiuta a capire gruppi di reazioni correlate evitando di dover imparare ciascuna reazione individualmente
1. disegnare reagenti e prodotti in modo chiaro
 2. individuare cosa è avvenuto nella reazione in esame: legami rotti, formati, è stato aggiunto/tolto qualcosa?

frecce curve e meccanismi

3. identificare i centri nucleofilici ed elettrofilici (decidere quale è il più nucleofilico e quale più elettrofilico)
4. sistemare Nu ed E in modo tale che sia chiaro come si arriva ai prodotti
5. disegnare le frecce curve da Nu ad E
6. controllare la valenza degli atomi coinvolti
7. disegnare la struttura del prodotto che deriva dalla formazione/rottura di legami nella maniera specificata dalle frecce curve

esercizio: disegnare il meccanismo della reazione sottostante

