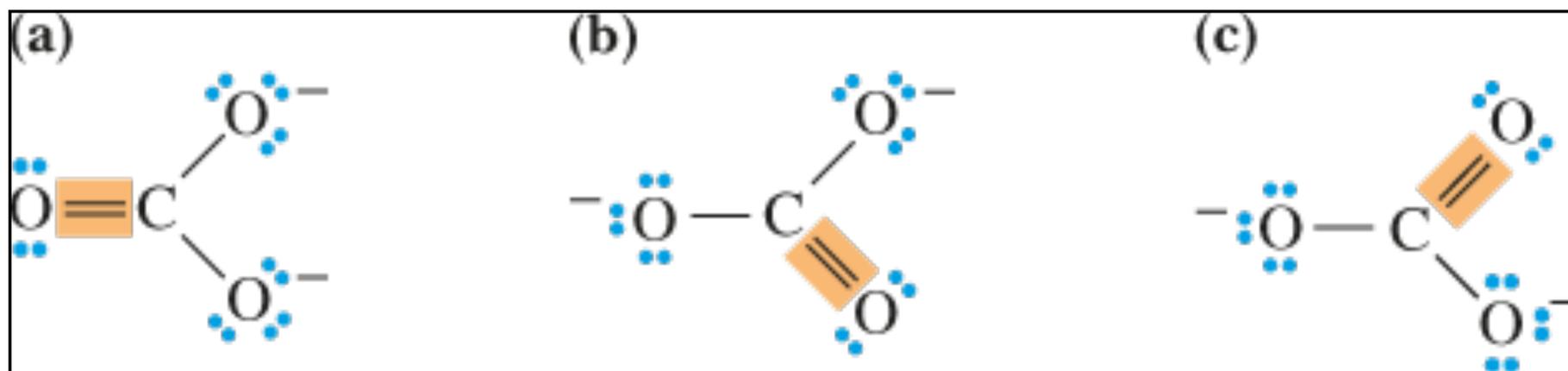
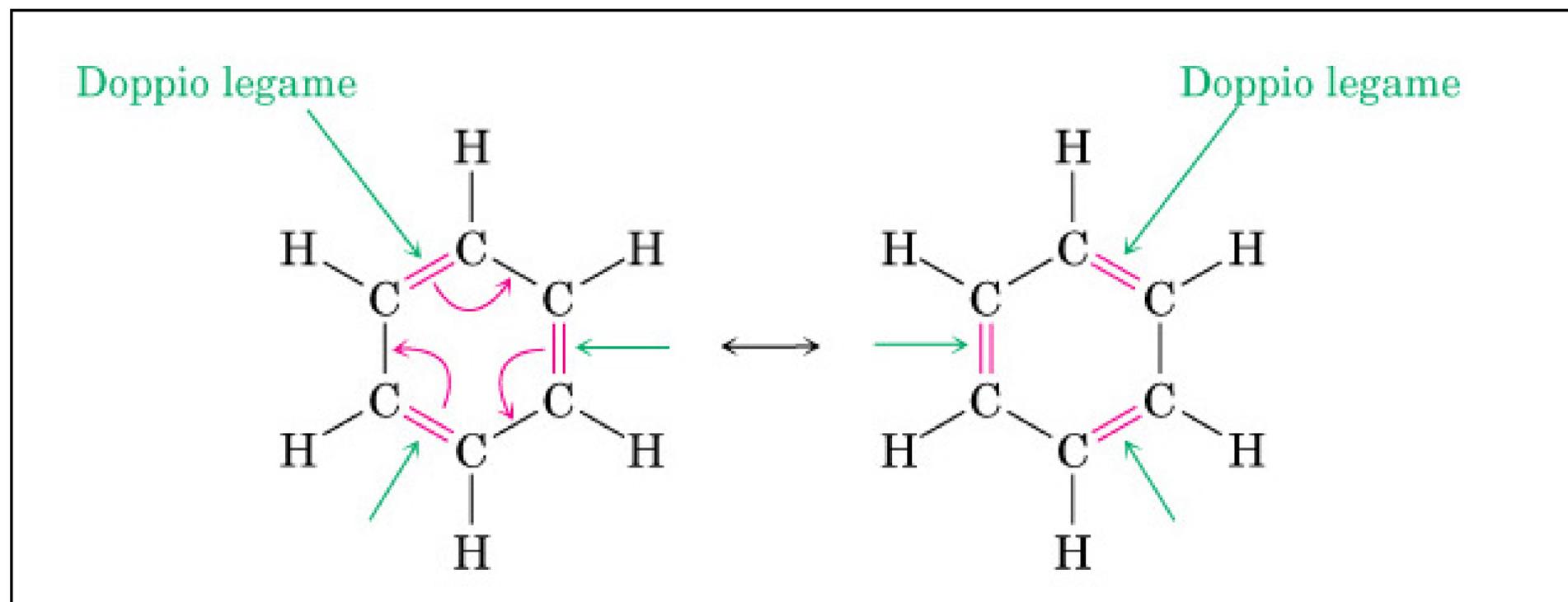
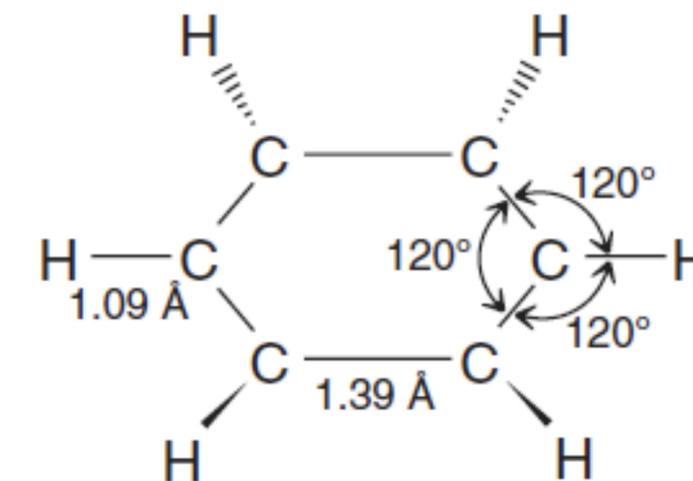
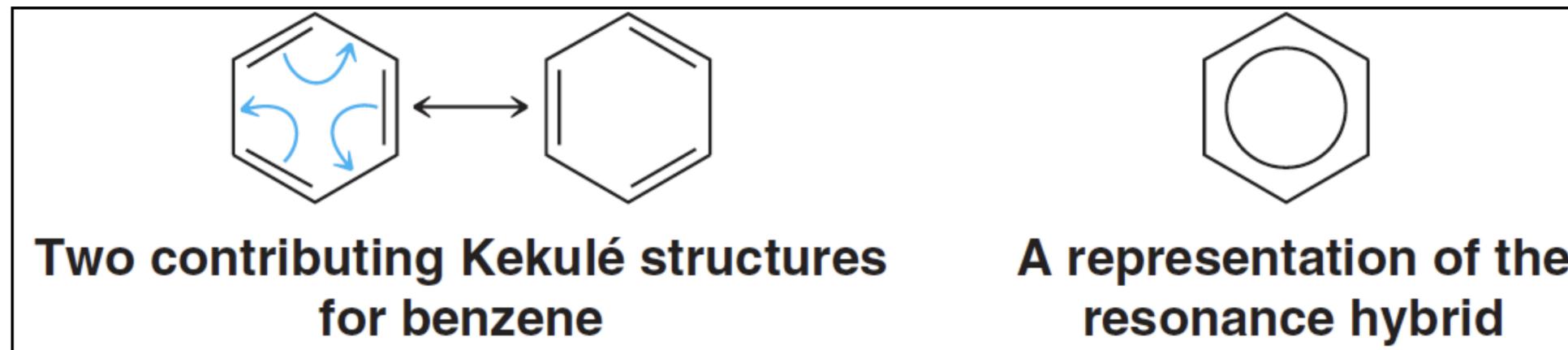


TEORIA della RISONANZA



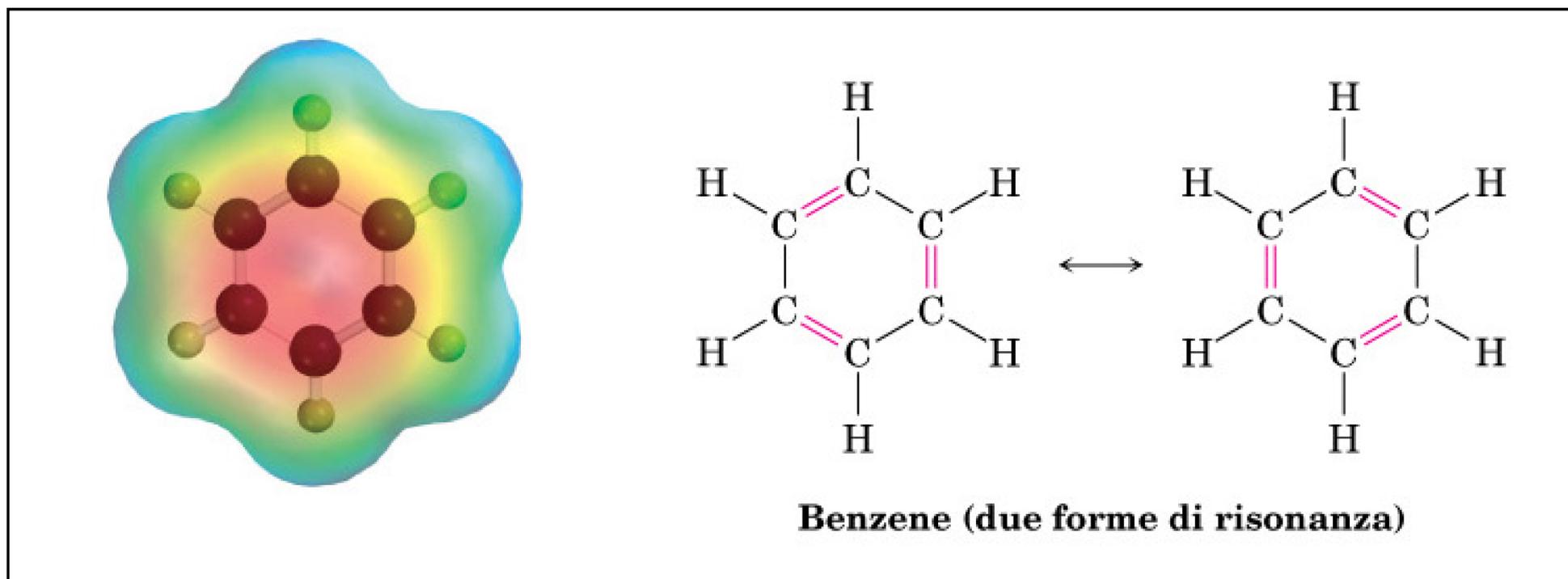
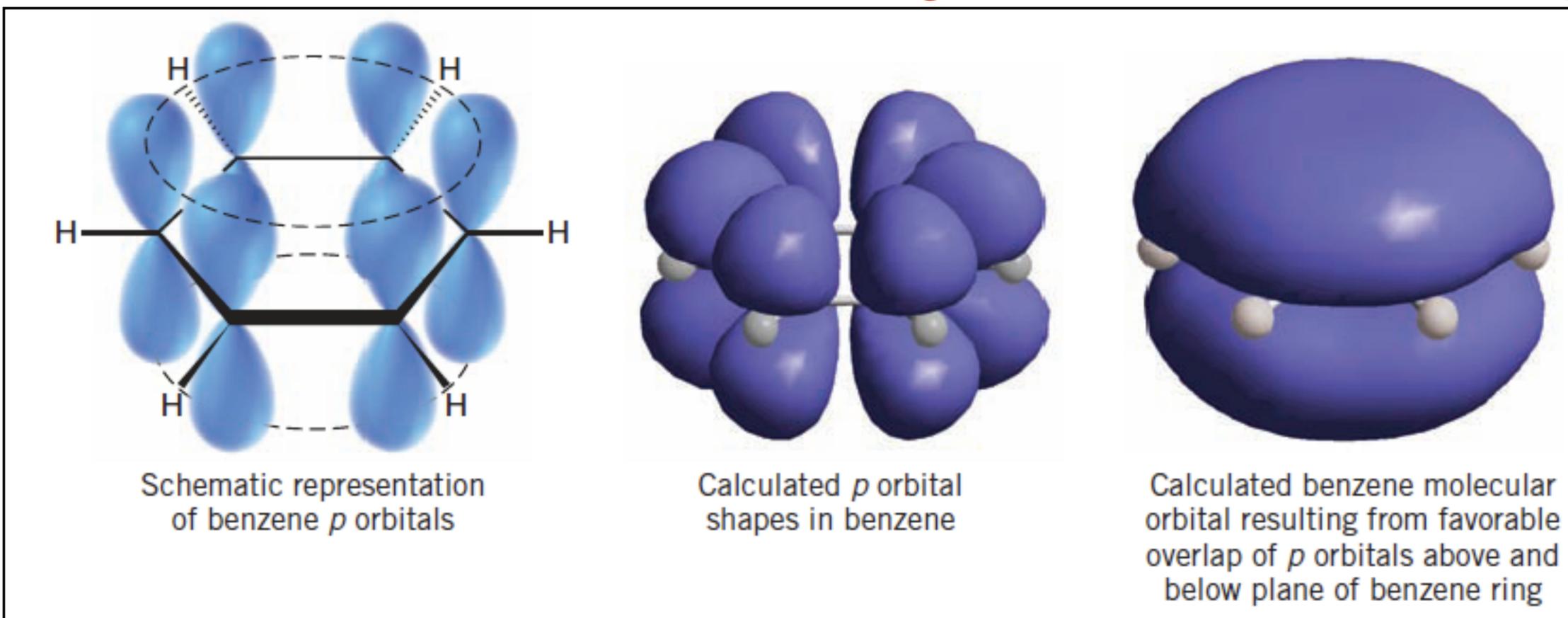
(a-c) Tre formule di Lewis per lo ione carbonato.

TEORIA della RISONANZA



I 6 e- associati negli orbitali p
Sono delocalizzati su tutti i 6
atomi di carbonio dell'anello.
Questo trasferimento spiega
come tutti Le connessioni c-c
Sono equivalenti e hanno la
stessa lunghezza.

TEORIA della RISONANZA / Teoria degli Orbitali Molecolari (TOM)



Risonanza

Teoria secondo la quale numerose molecole sono meglio descritte come ibridi di varie strutture di Lewis.

Strutture limite (o struttura di Risonanza)

Rappresentazioni di una molecola o ione che differiscono tra loro solo per la distribuzione degli elettroni di valenza.

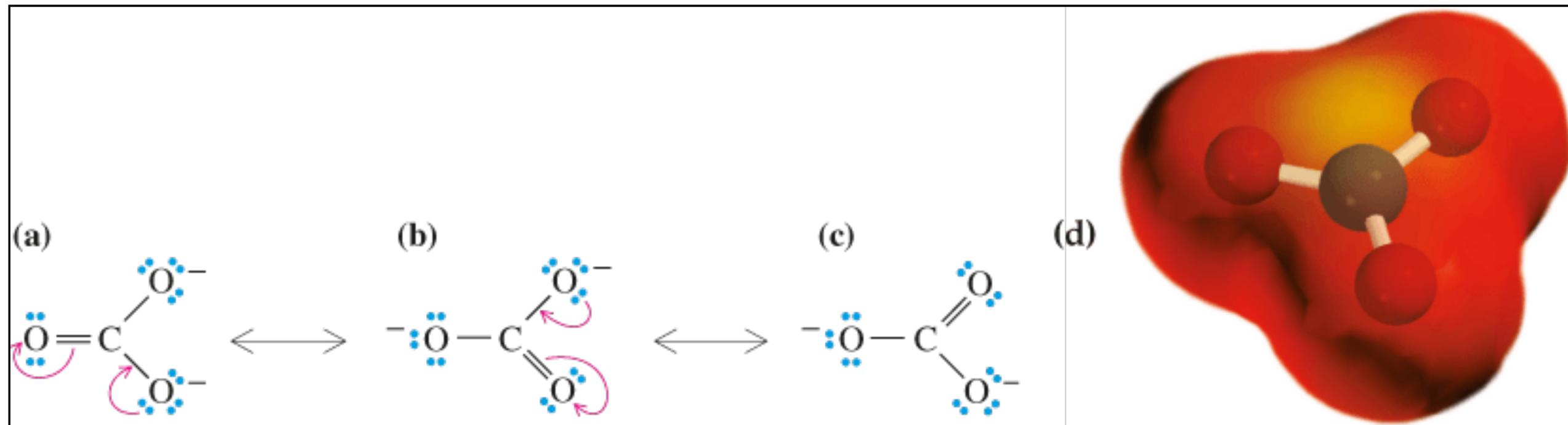
Ibrido di risonanza

Una molecola, uno ione o un radicale rappresentati da un insieme di più strutture limite di risonanza.

Freccia a doppia punta

Un simbolo usato per indicare che le strutture ai lati della freccia sono strutture limite di risonanza

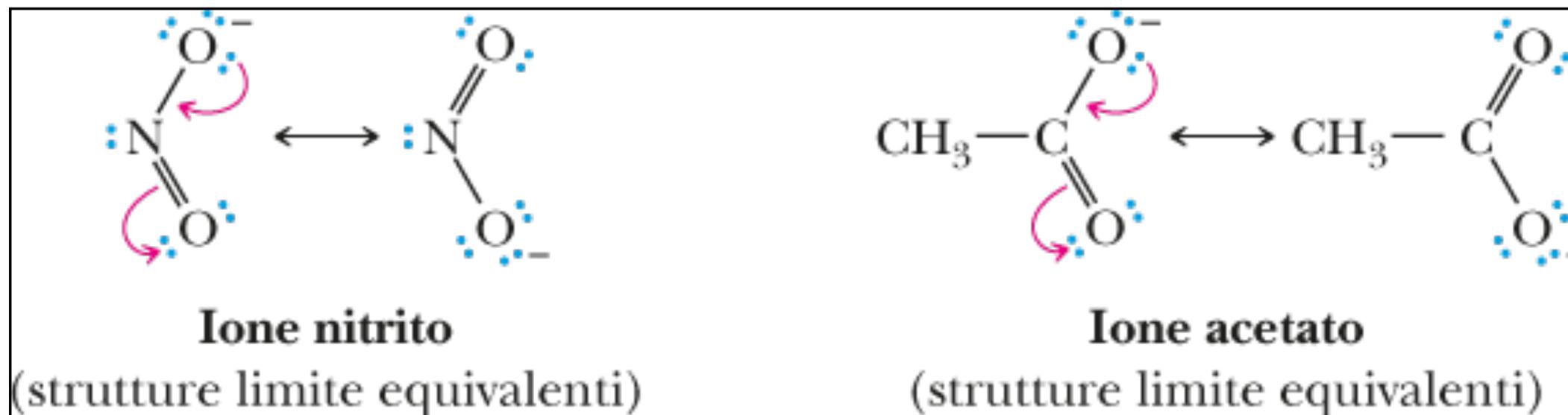
La teoria della risonanza fu sviluppata principalmente da Linus Pauling negli anni '30 del secolo scorso. Secondo questa teoria molte molecole e ioni non sono adeguatamente rappresentati da una singola struttura di Lewis, ma da due o più strutture di Lewis. La combinazione di tali strutture rappresenta la reale molecola o ione. Le singole strutture di Lewis sono comunemente chiamate strutture limite (o anche strutture di risonanza o contributi di risonanza). Tali strutture limite, collegate tra loro con frecce a doppia punta, definiscono nel loro complesso la molecola o lo ione reale, che viene perciò definito ibrido di risonanza delle varie strutture limite.



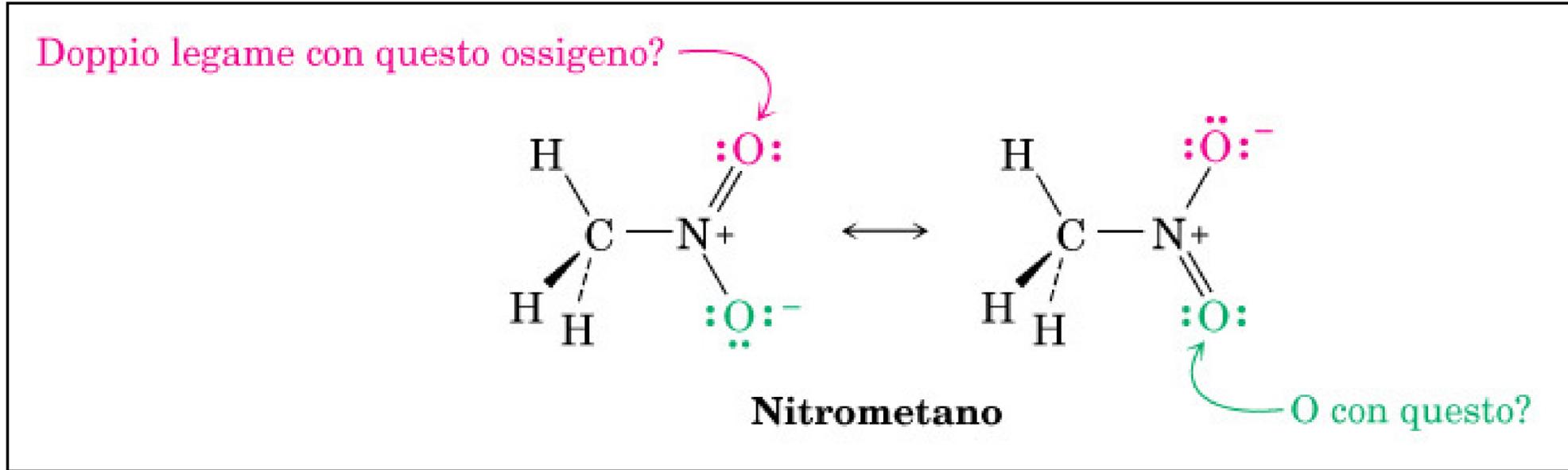
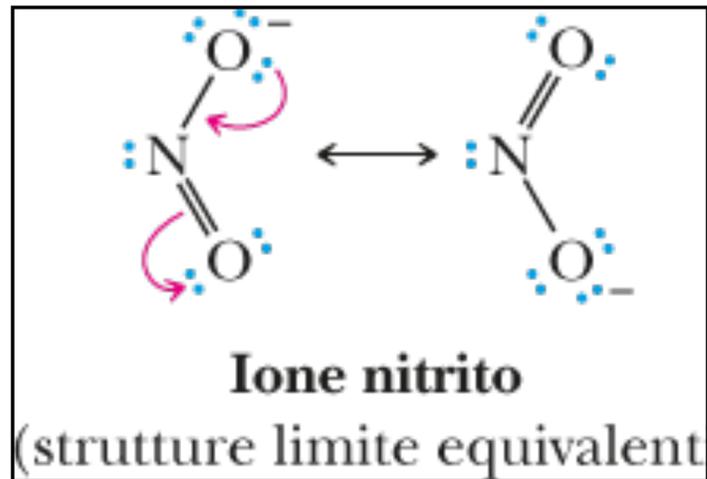
(a-c) Ione carbonato rappresentato come ibrido di risonanza di tre strutture limite di risonanza equivalenti. Le frecce curve indicano la redistribuzione degli elettroni di valenza tra una struttura limite e la successiva. (d) La mappa di potenziale elettrostatico dello ione carbonato indica che la carica negativa è equamente distribuita fra i tre atomi di ossigeno.

Disegnare le frecce curve e gli spostamenti di elettroni per ottenere le strutture limite

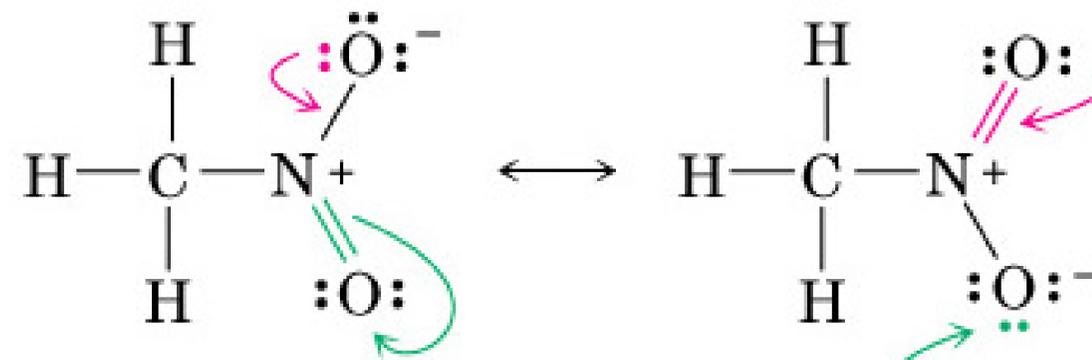
Per descrivere come avviene la redistribuzione degli elettroni di valenza, i chimici usano le frecce curve. Una freccia curva mostra lo spostamento di una coppia di elettroni dal suo punto di partenza (coda della freccia) al suo punto di arrivo (punta della freccia).



Disegnare le frecce curve e gli spostamenti di elettroni per ottenere le strutture limite



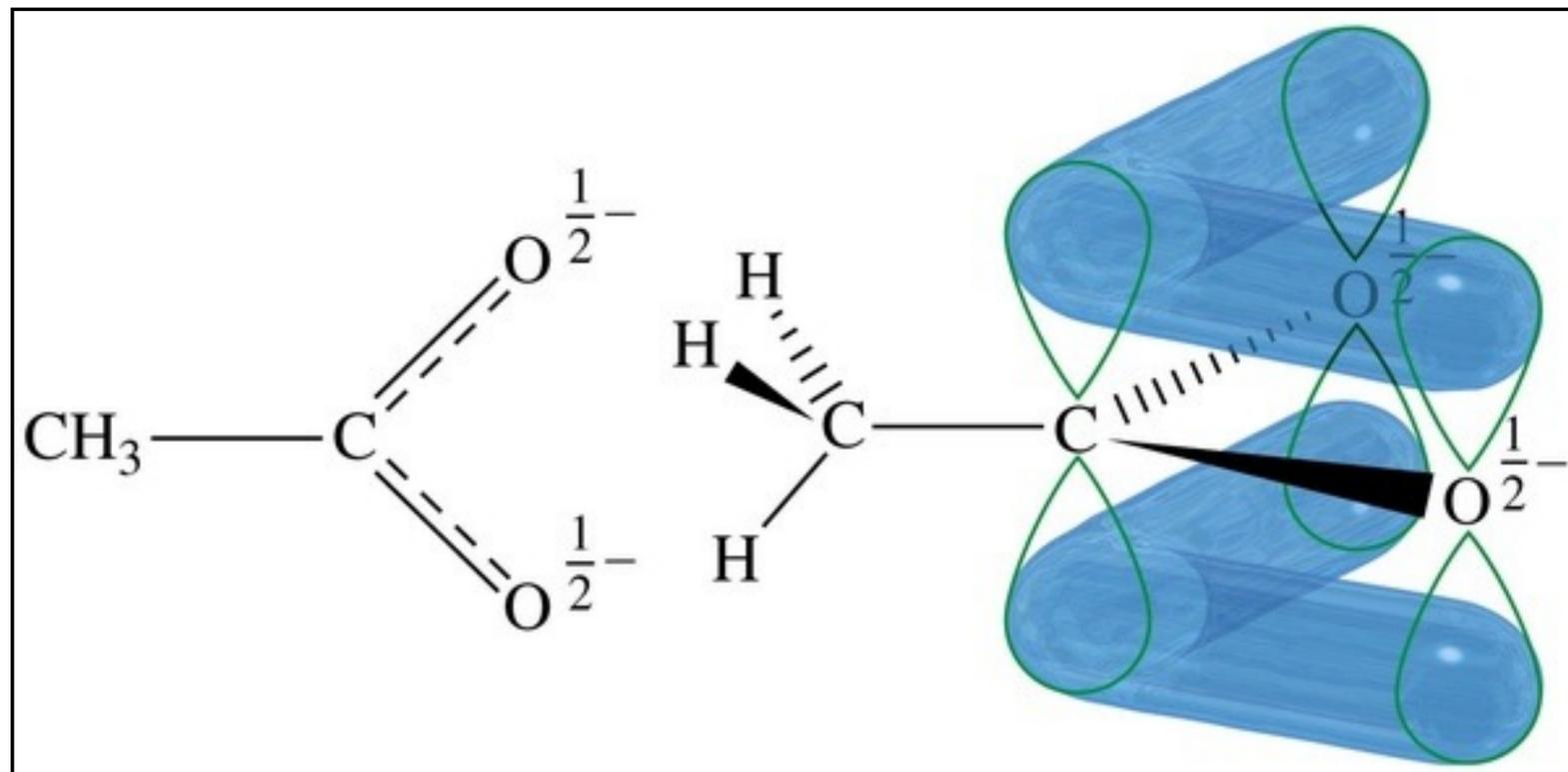
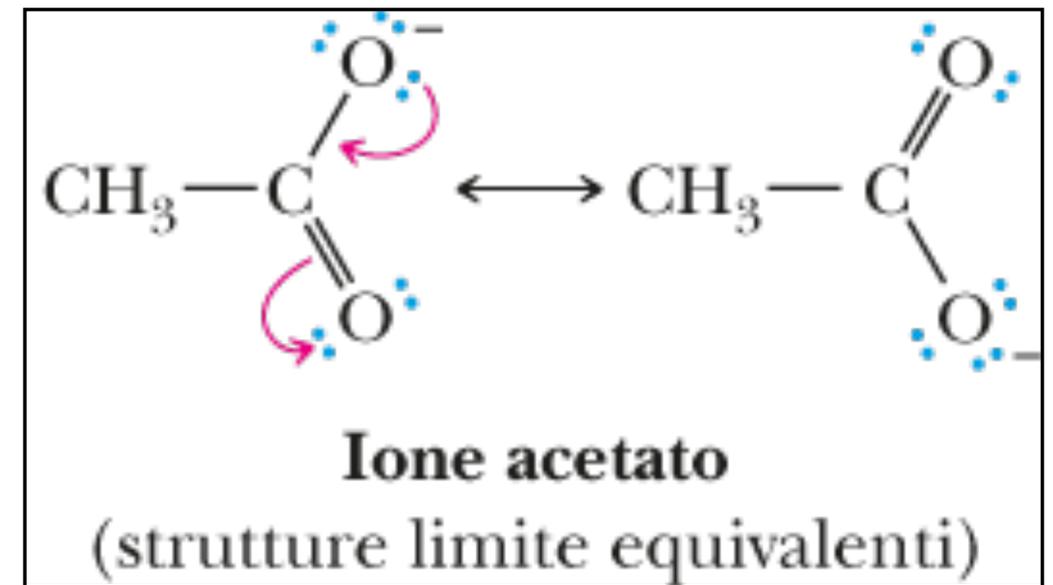
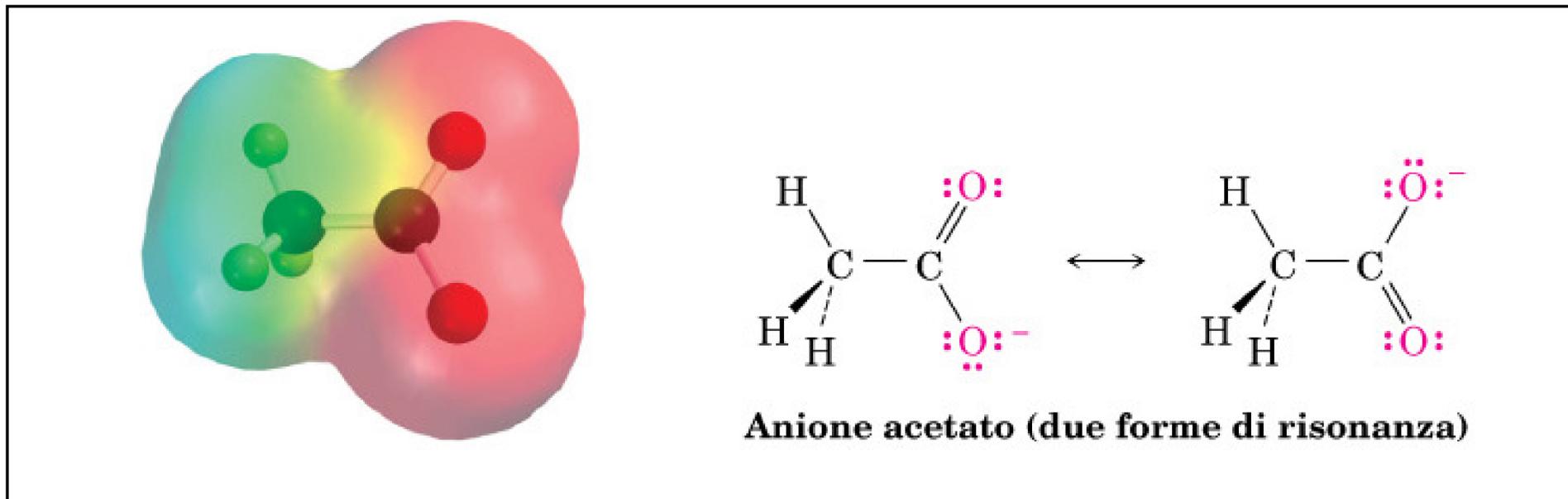
La freccia ricurva di colore rosso indica che una coppia di elettroni si sposta dall'atomo di ossigeno disegnato in alto per diventare parte del doppio legame N=O



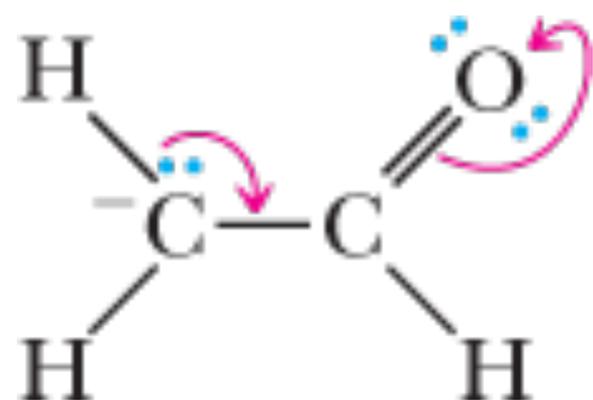
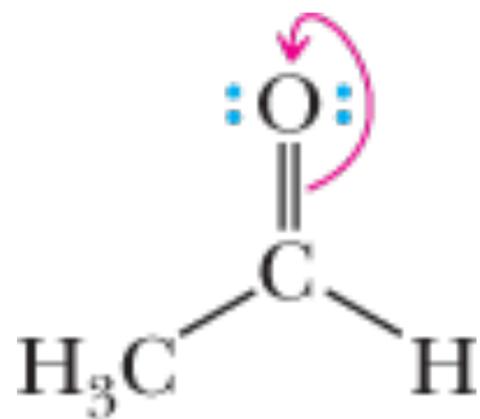
Contemporaneamente, due elettroni del doppio legame N=O si spostano verso l'atomo di ossigeno disegnato in basso per diventare una coppia di elettroni non condivisi.

Ibridi di risonanza

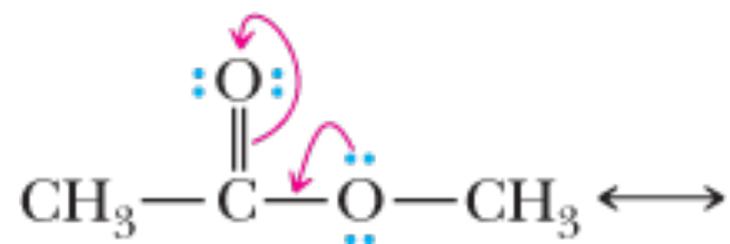
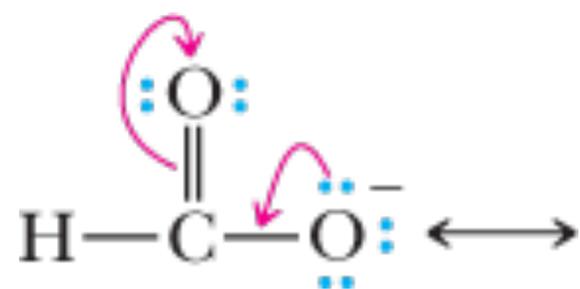
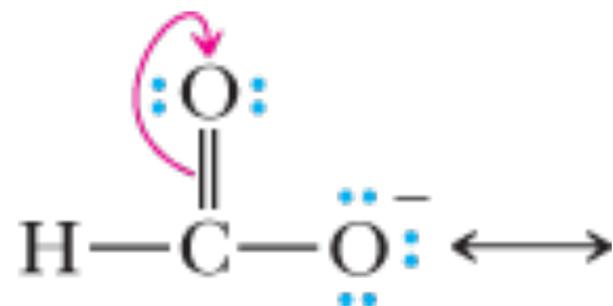
Due forme di risonanza dello ione acetato



ESERCIZIO: Disegnare le strutture limite di risonanza indicate dalle frecce curve. Fare attenzione a indicare tutti gli elettroni di valenza e tutte le cariche formali.



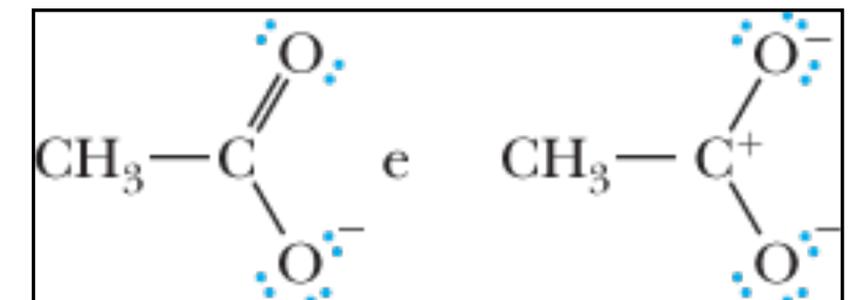
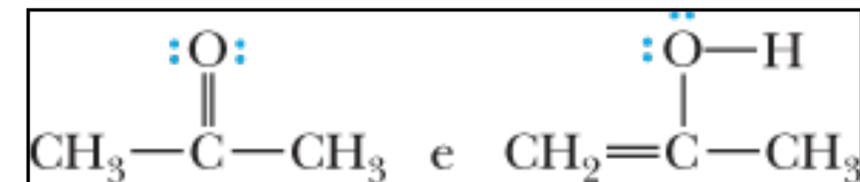
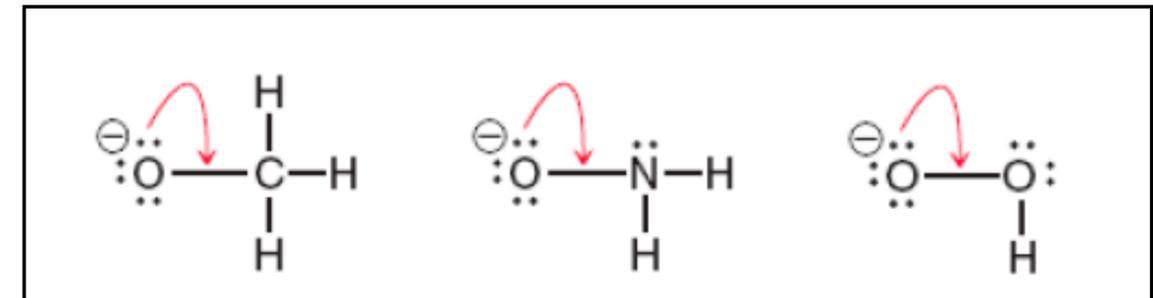
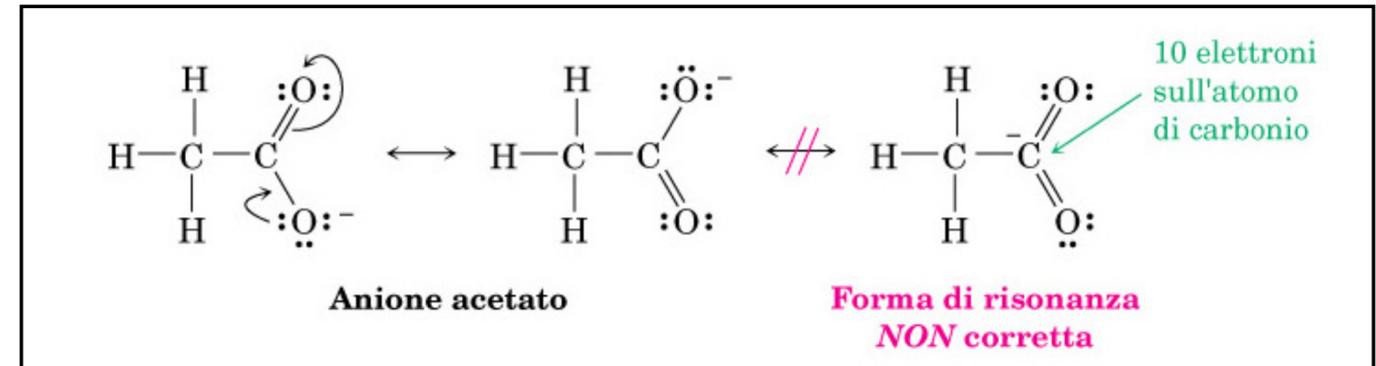
ESERCIZIO: Disegnare le strutture limite di risonanza indicate dalle frecce curve.
Fare attenzione a indicare tutti gli elettroni di valenza e tutte le cariche formali.



Regole per scrivere strutture limite accettabili

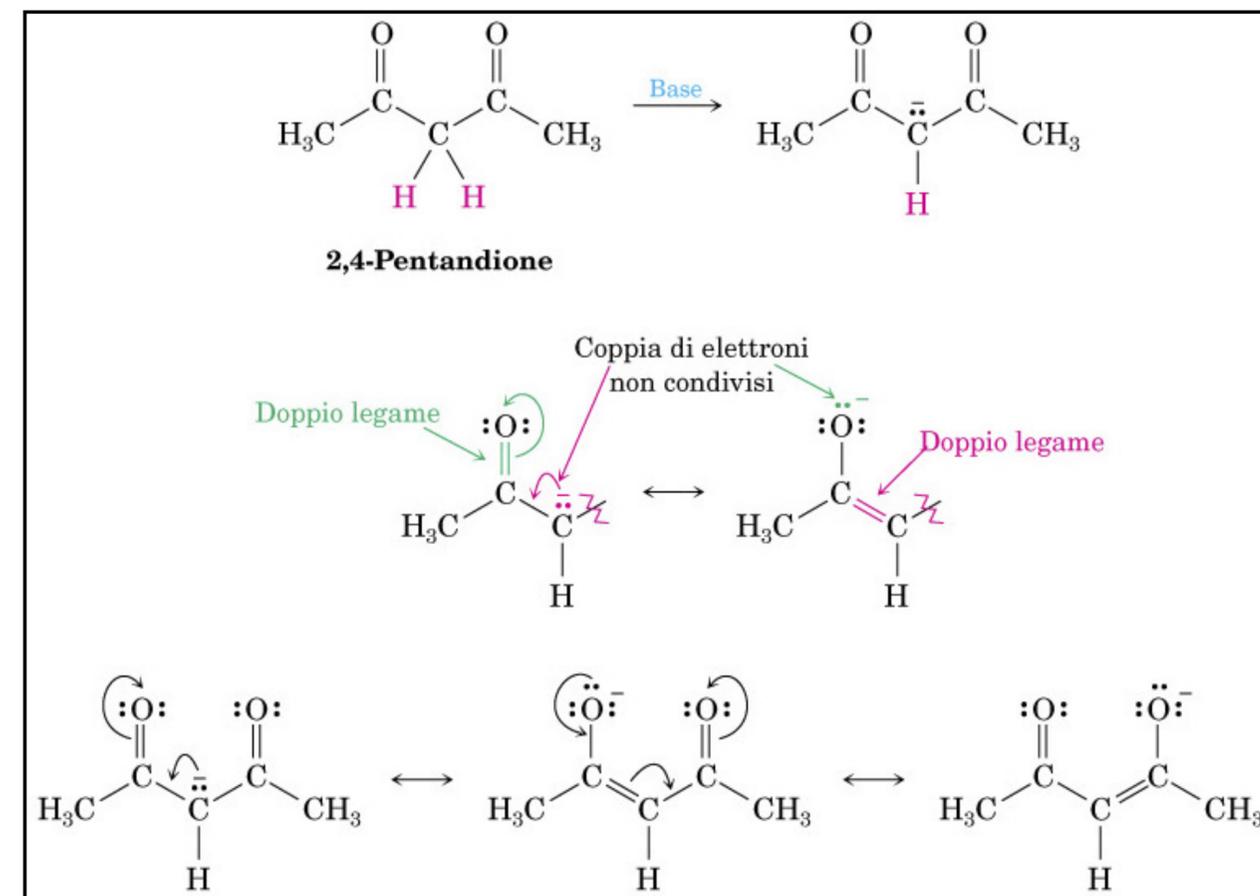
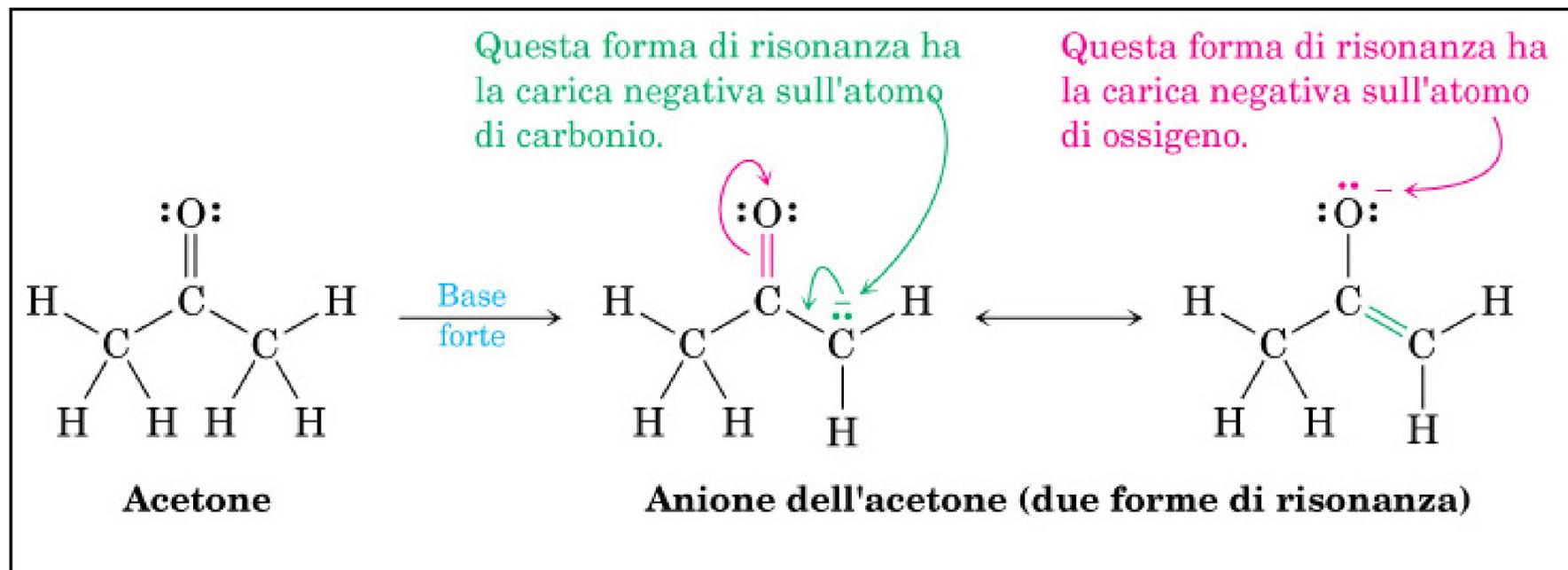
Per scrivere le strutture limite, è necessario seguire regole ben precise.

1. Tutte le strutture limite devono avere lo stesso numero di elettroni di valenza
2. Tutte le strutture limite devono seguire le regole su cui si basa il legame covalente. Nessuna struttura limite deve avere più di due elettroni nel guscio di valenza dell'idrogeno o più di otto in quello degli elementi del secondo periodo della tavola periodica. Gli elementi del terzo periodo, come il fosforo e lo zolfo, possono avere fino a un massimo di 12 elettroni nel loro guscio di valenza.
3. Nelle strutture limite la posizione di tutti i nuclei deve essere la stessa. In altre parole, le strutture limite devono differenziarsi solo per la distribuzione degli elettroni di valenza.
4. Tutte le strutture limite devono avere lo stesso numero di elettroni appaiati e spaiati.



Per scrivere le strutture limite, è necessario seguire regole ben precise.

5. Non tutte le strutture di risonanza devono essere equivalenti



6. Non si possono creare scissione dei legami



6. Maggiore è il numero di strutture di risonanza maggiore è la stabilità della molecola.

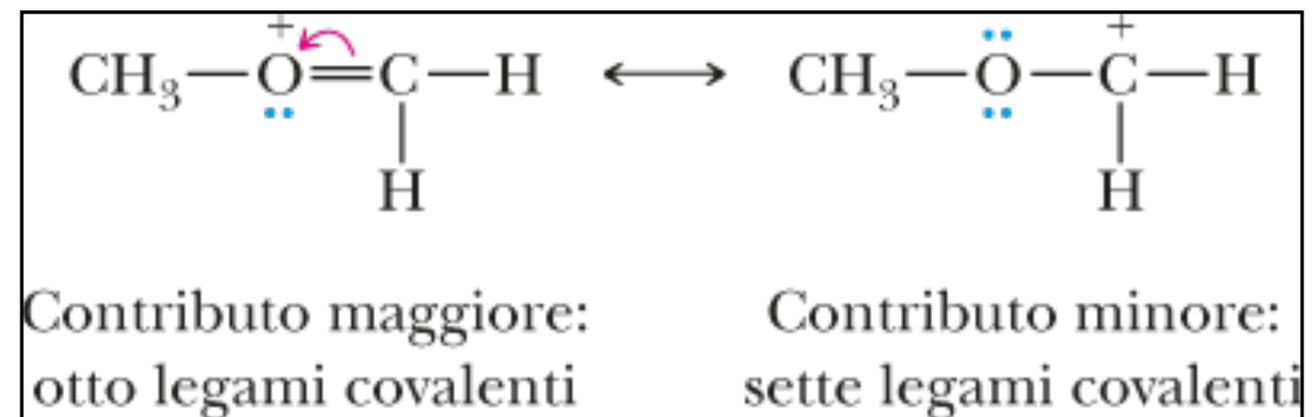
Come valutare l'importanza relativa delle strutture limite

Le strutture limite non hanno tutte lo stesso peso nel contribuire a un ibrido di risonanza.

Primo criterio: gusci di valenza pieni

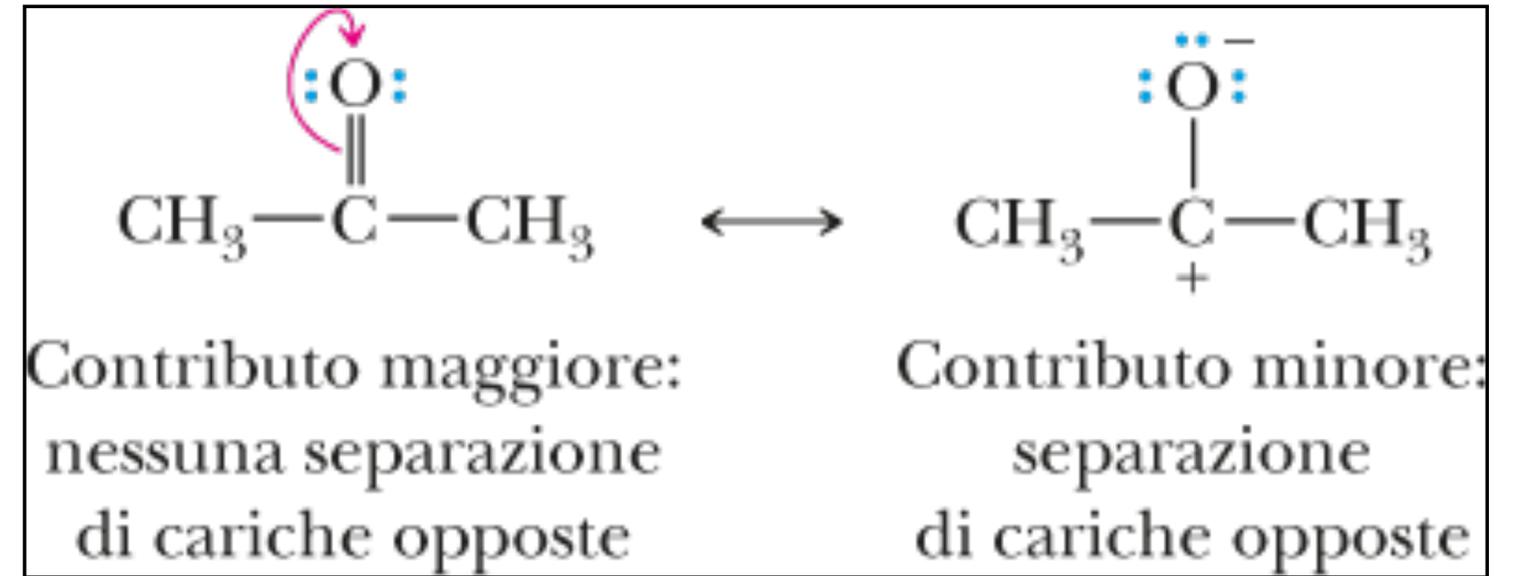


Secondo criterio: massimo numero di legami covalenti

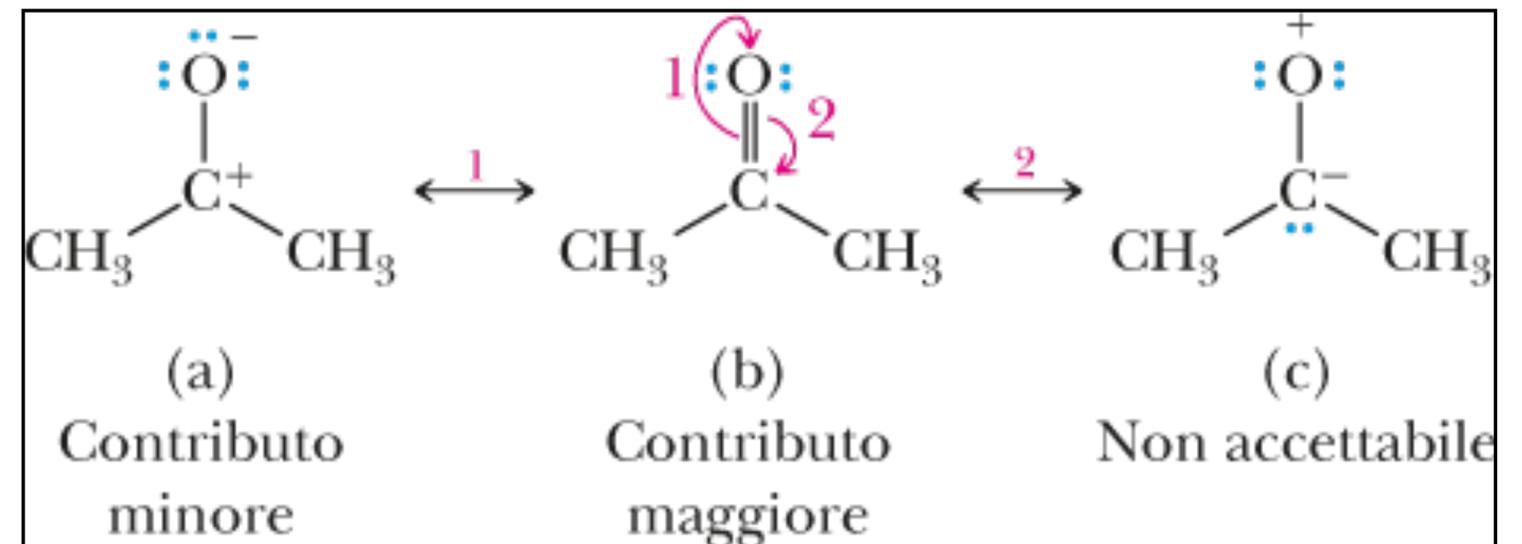
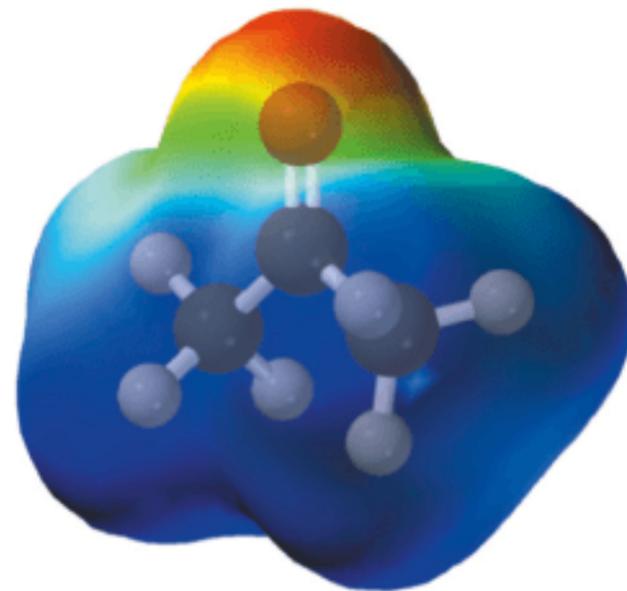


Come valutare l'importanza relativa delle strutture limite

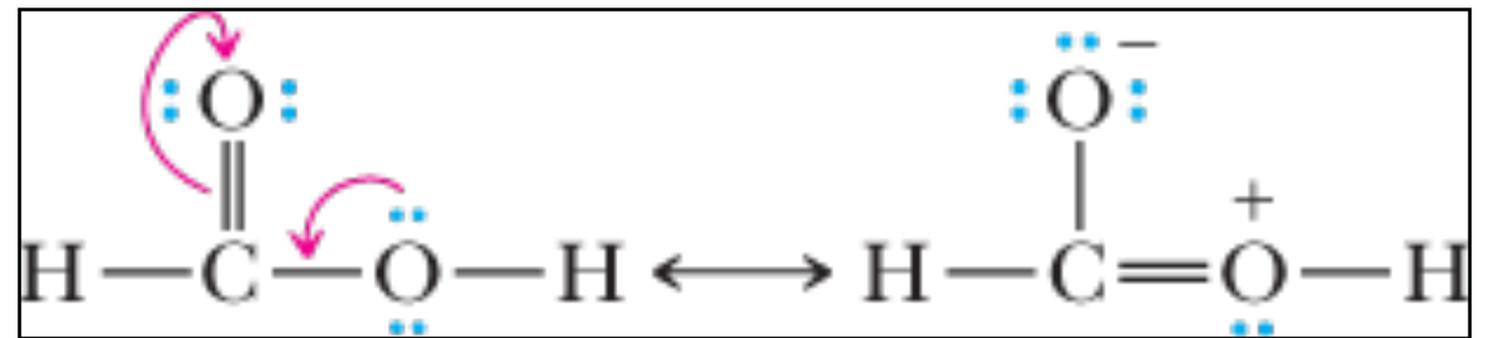
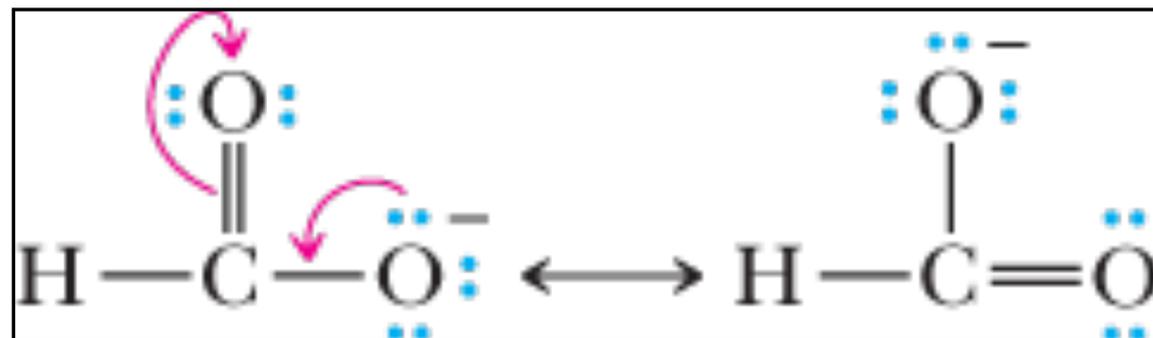
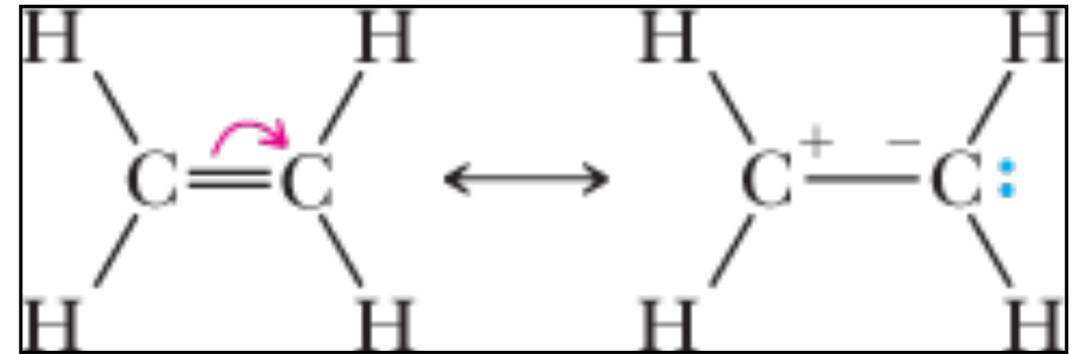
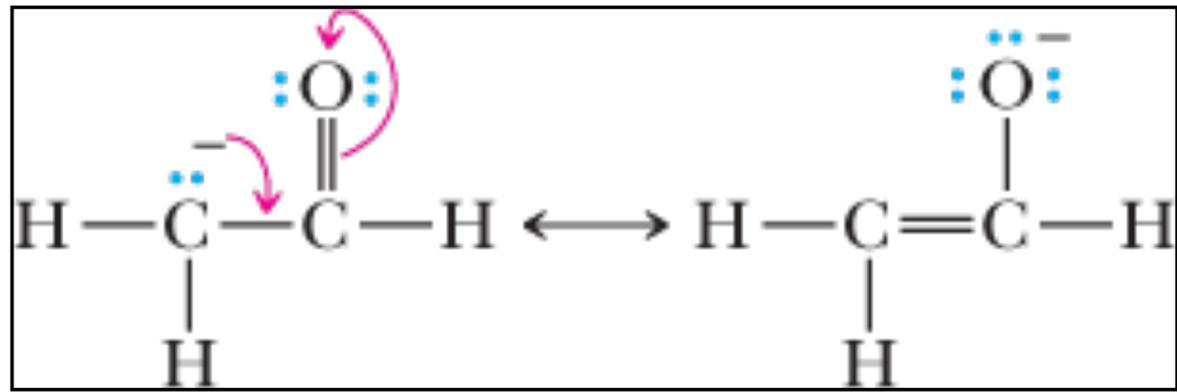
Terzo criterio: separazione di cariche ridotta al minimo



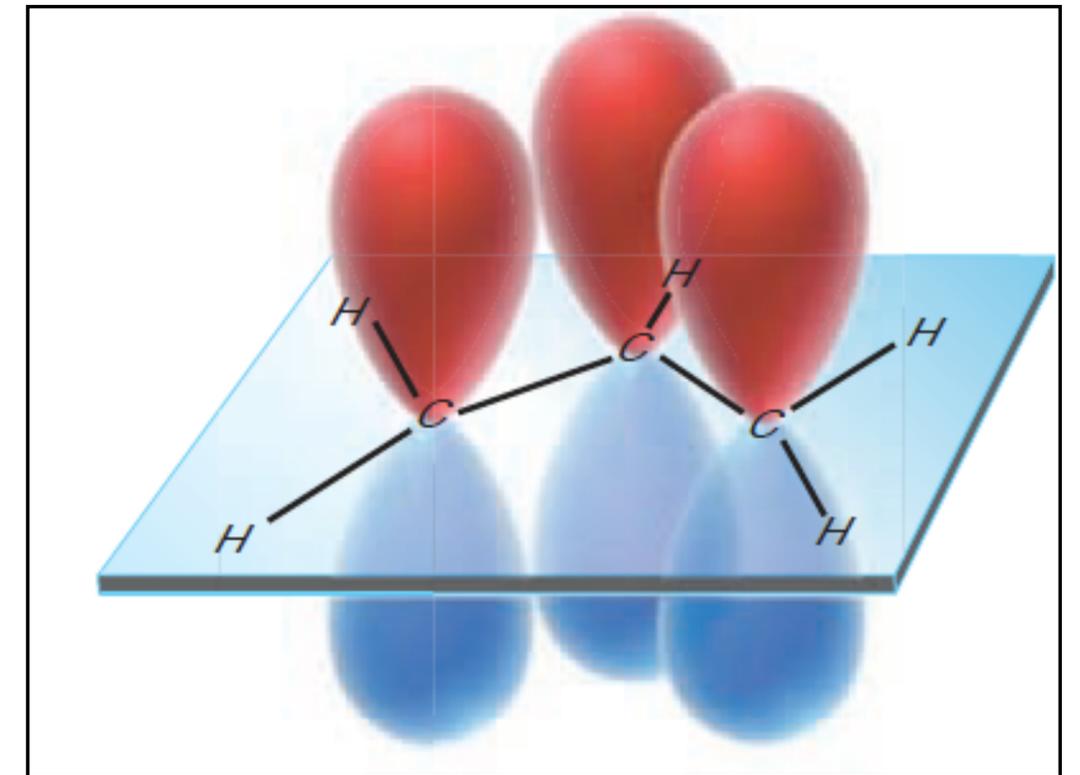
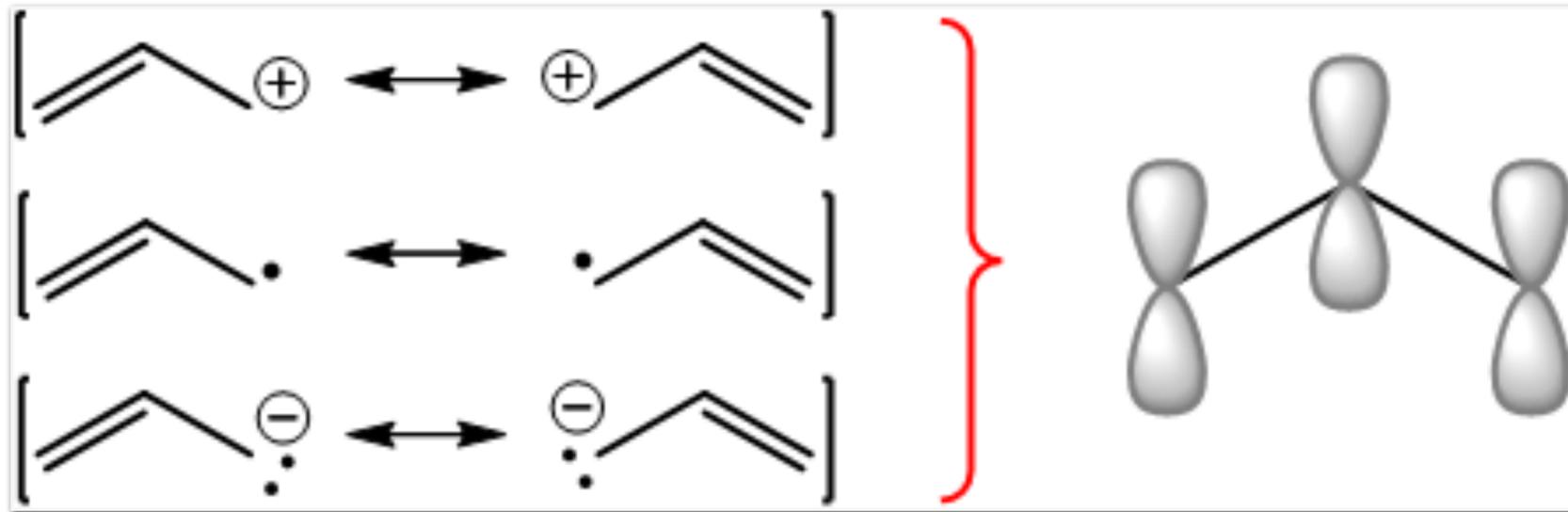
Quarto criterio: carica negativa sull'atomo più elettronegativo



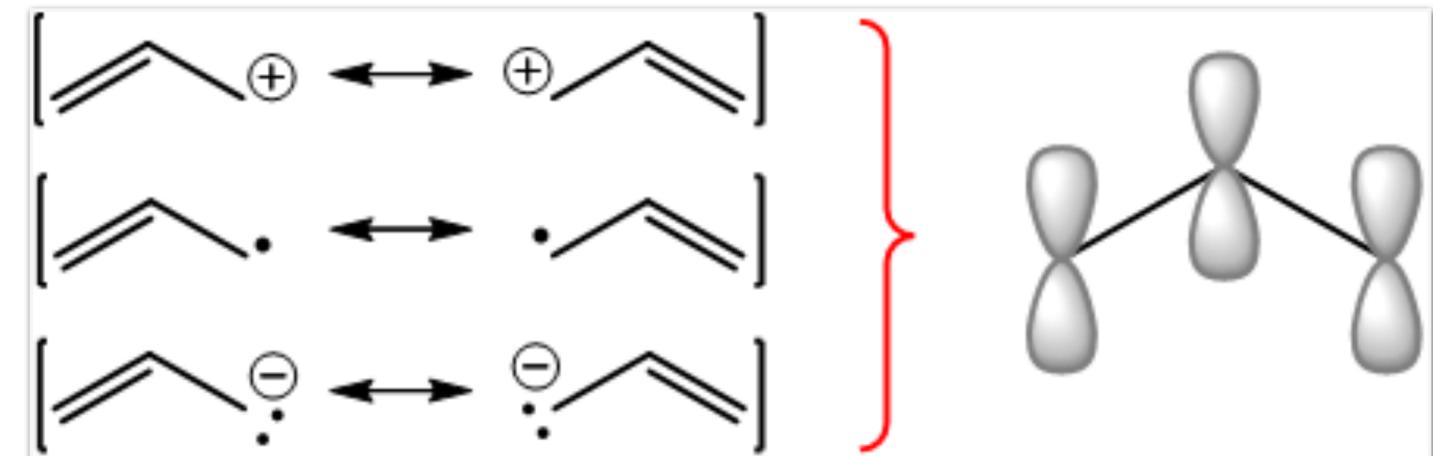
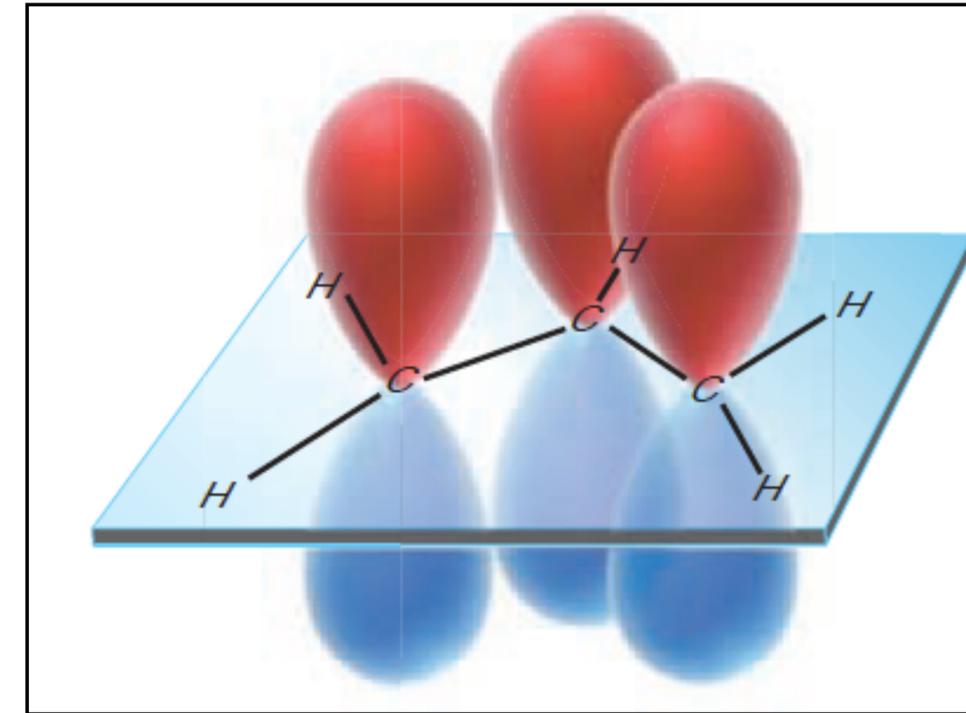
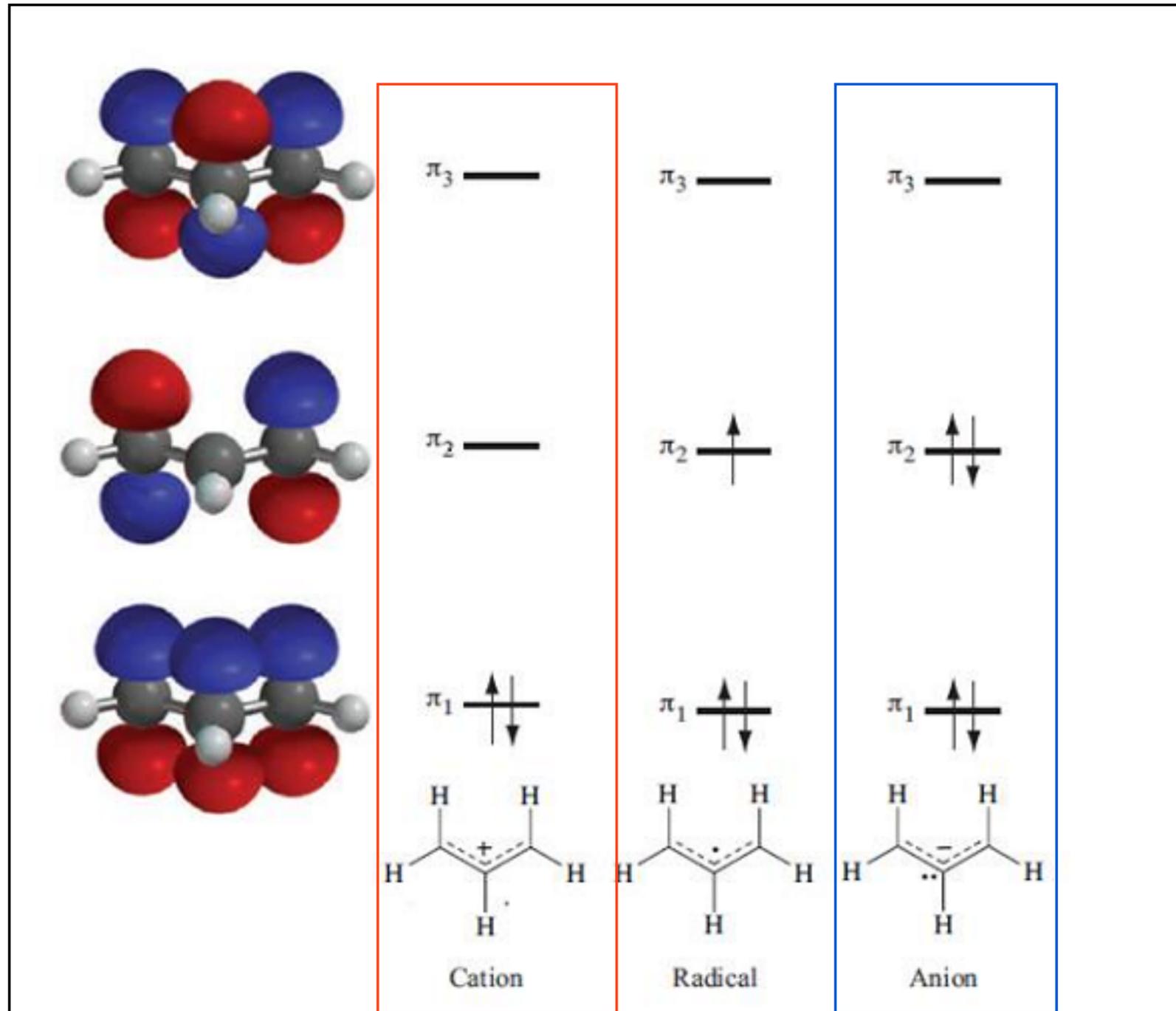
ESERCIZIO: Valutare il contributo relativo delle due strutture limite all'ibrido di risonanza in ogni coppia di strutture.



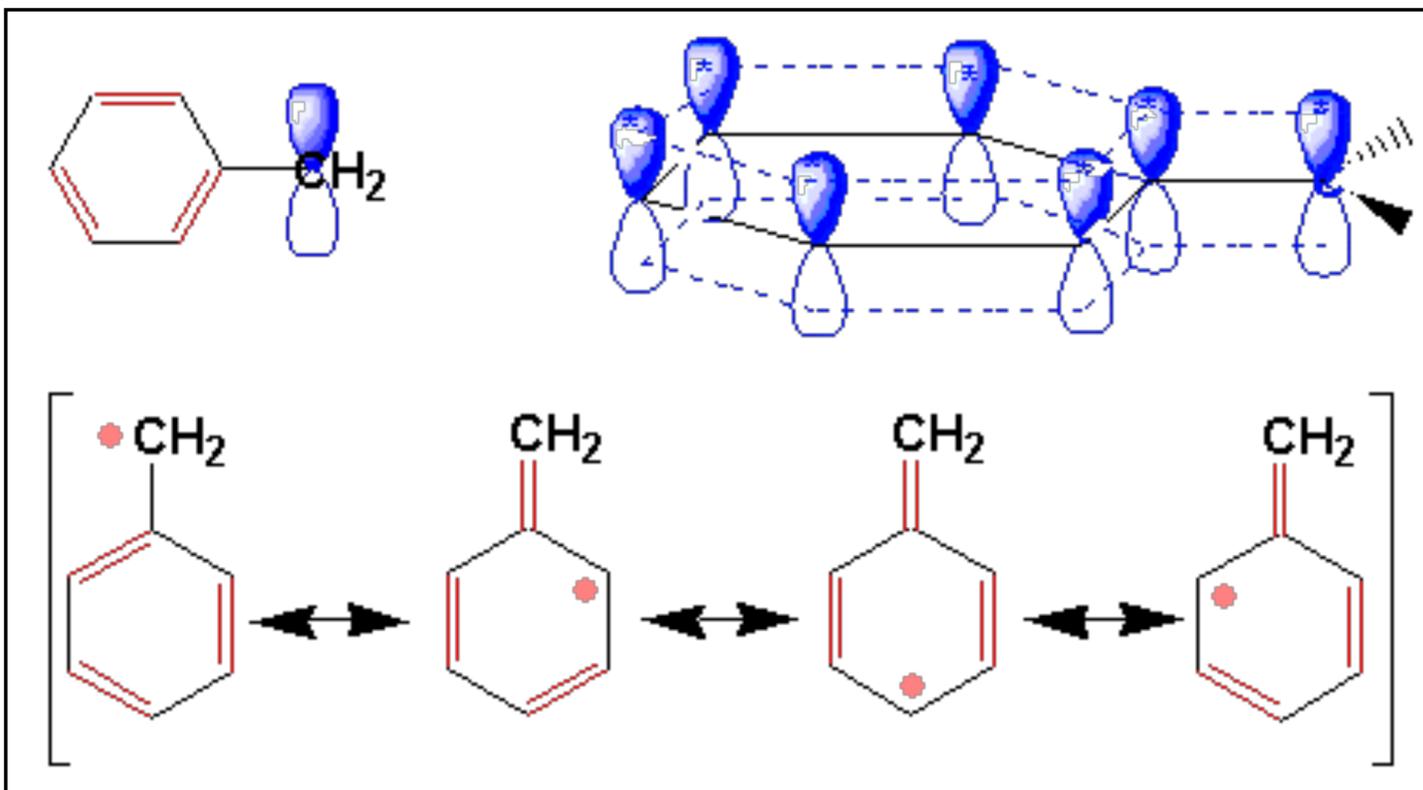
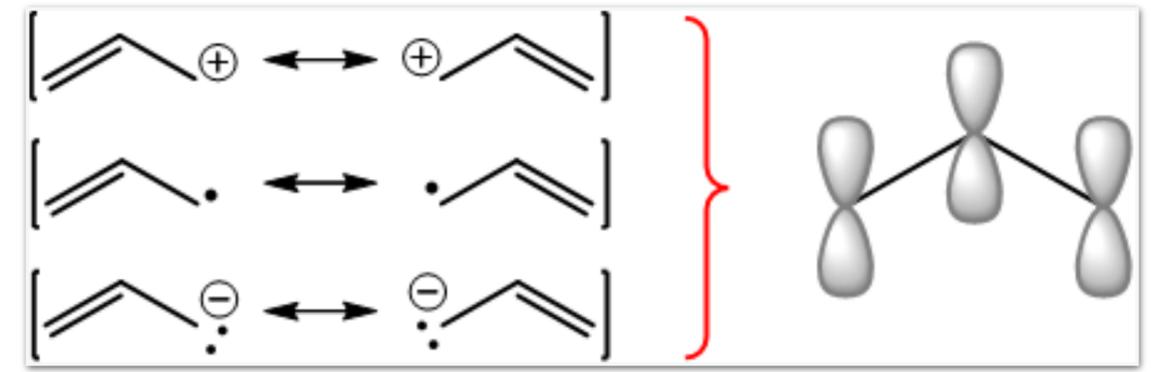
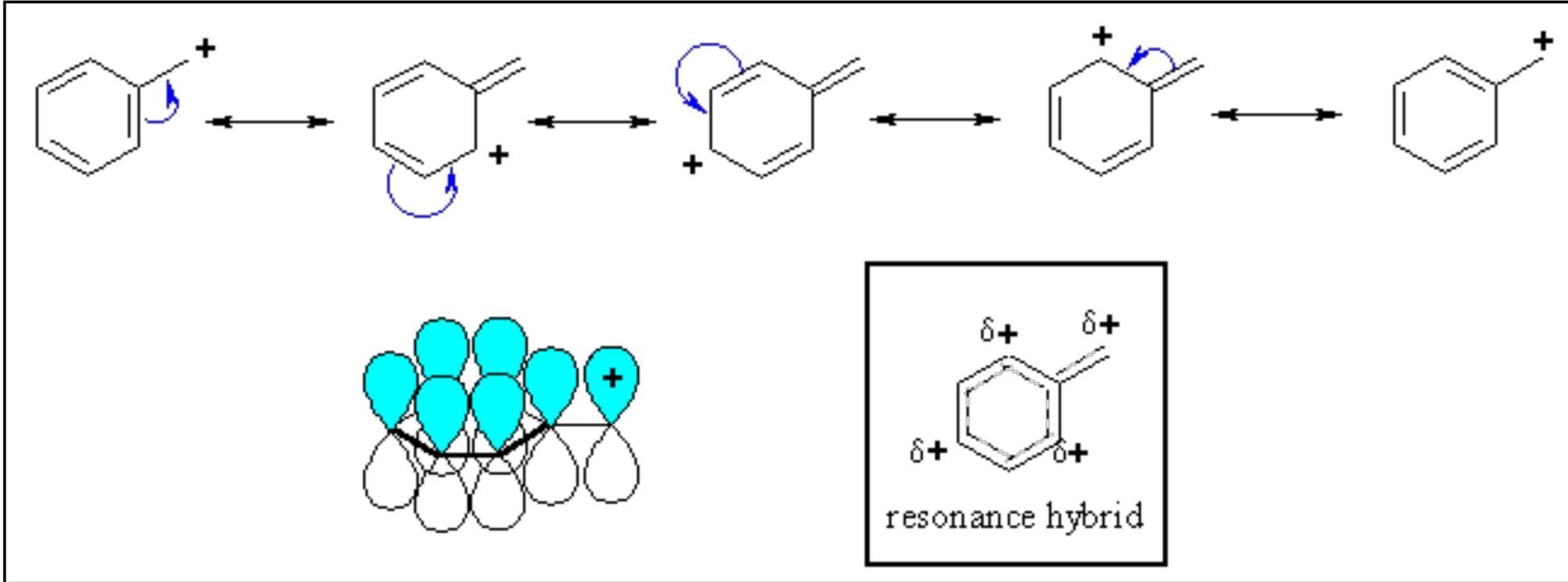
Orbitali "p" nel sistema allilico



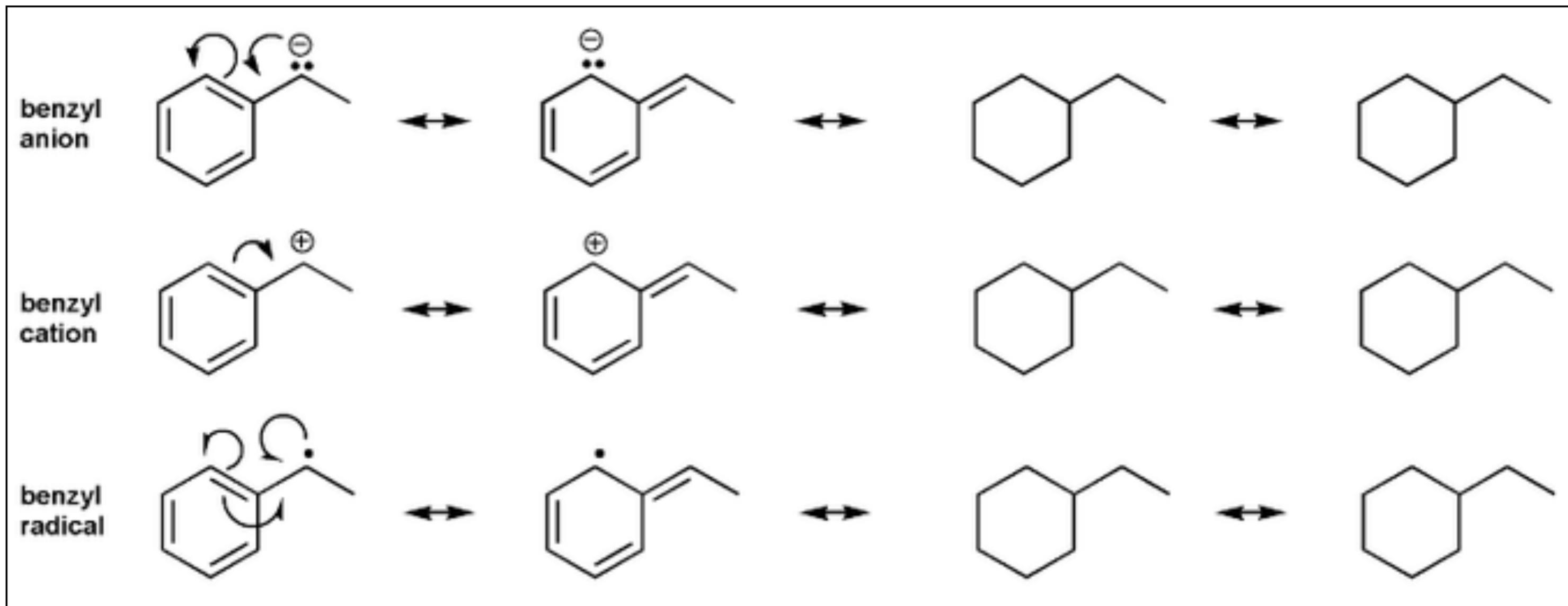
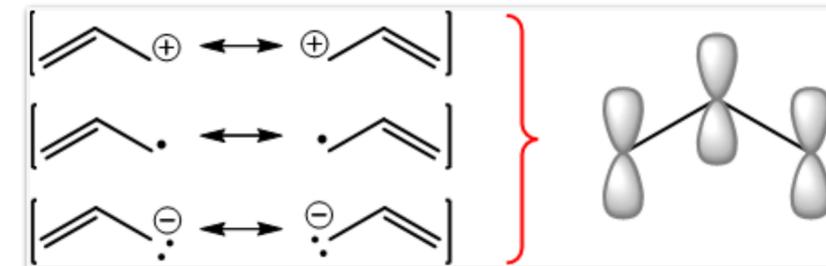
Orbitali molecolari nel sistema allilico



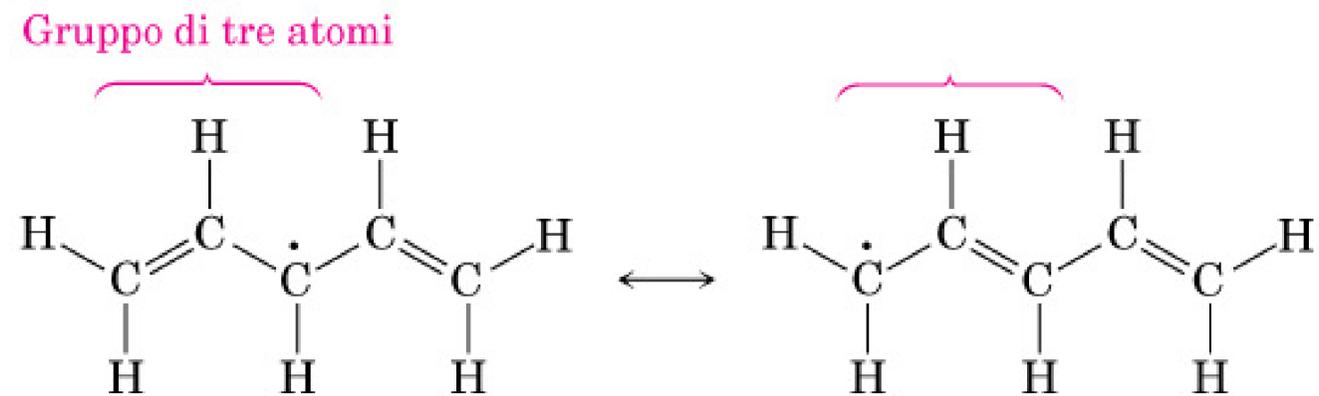
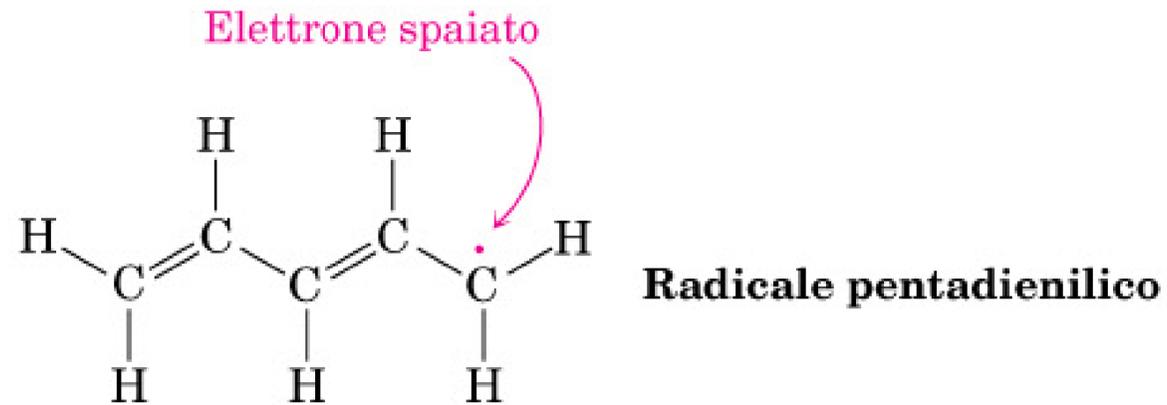
Delocalizzazione di sistemi allilici aromatici



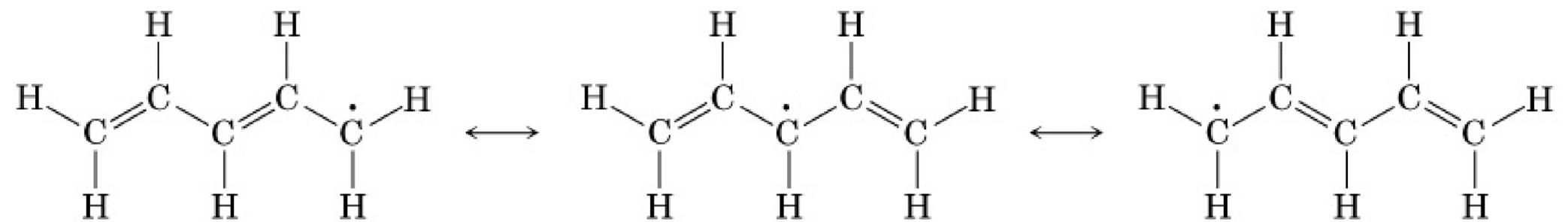
Delocalizzazione di sistemi allilici aromatici



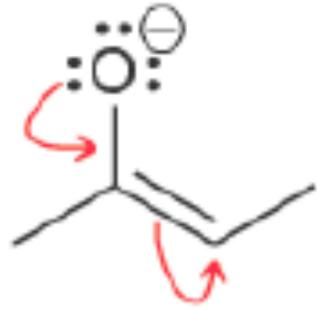
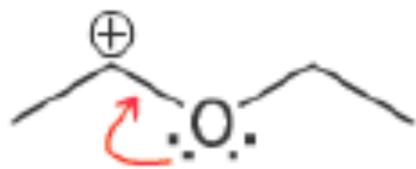
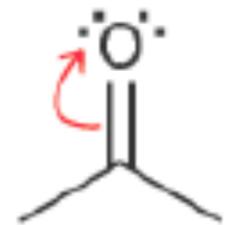
Sistema allilico radicalico



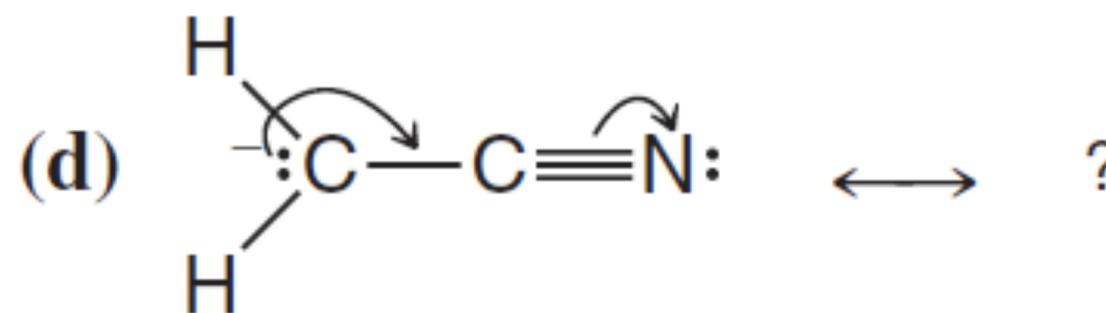
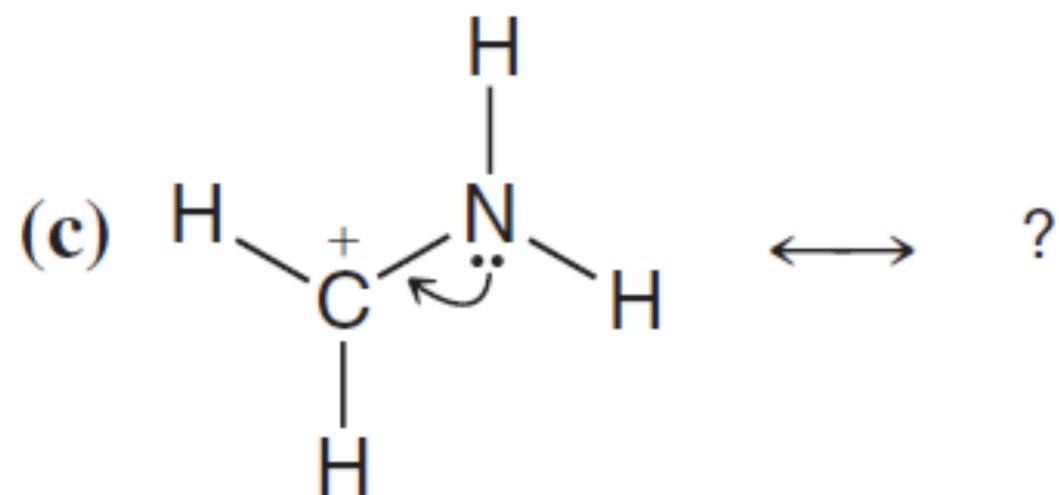
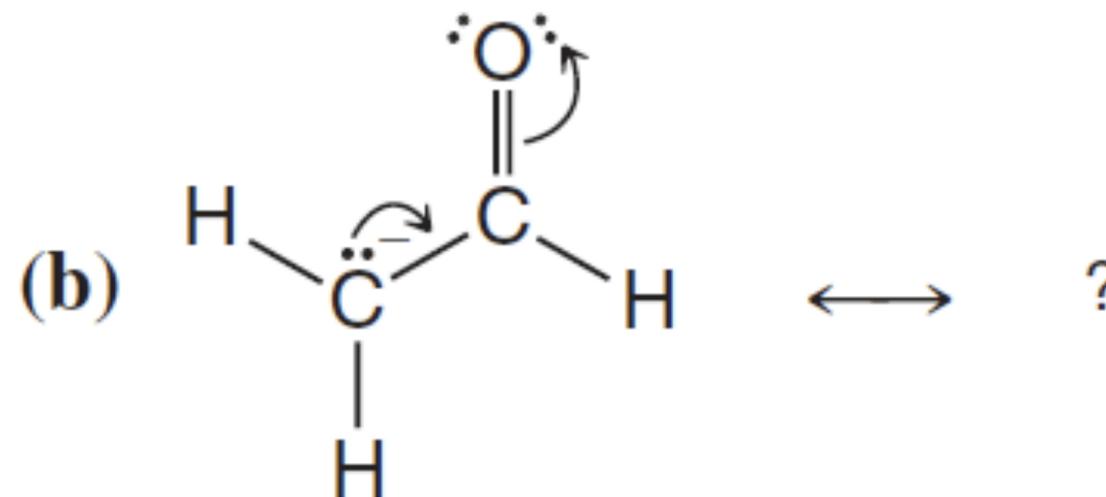
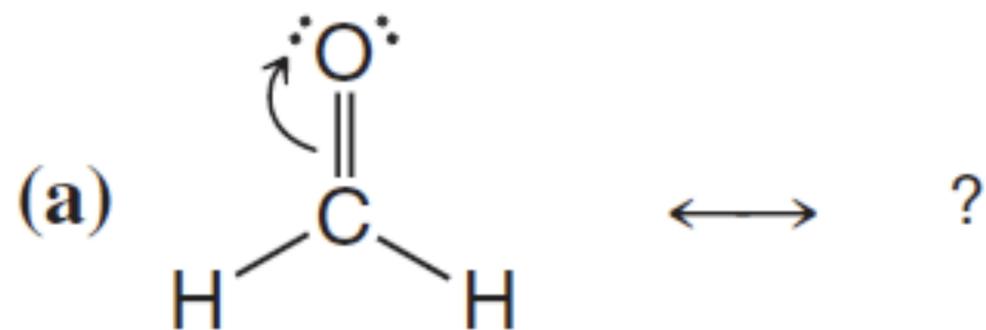
Le tre forme di risonanza per il radicale pentadienilico sono quindi le seguenti:



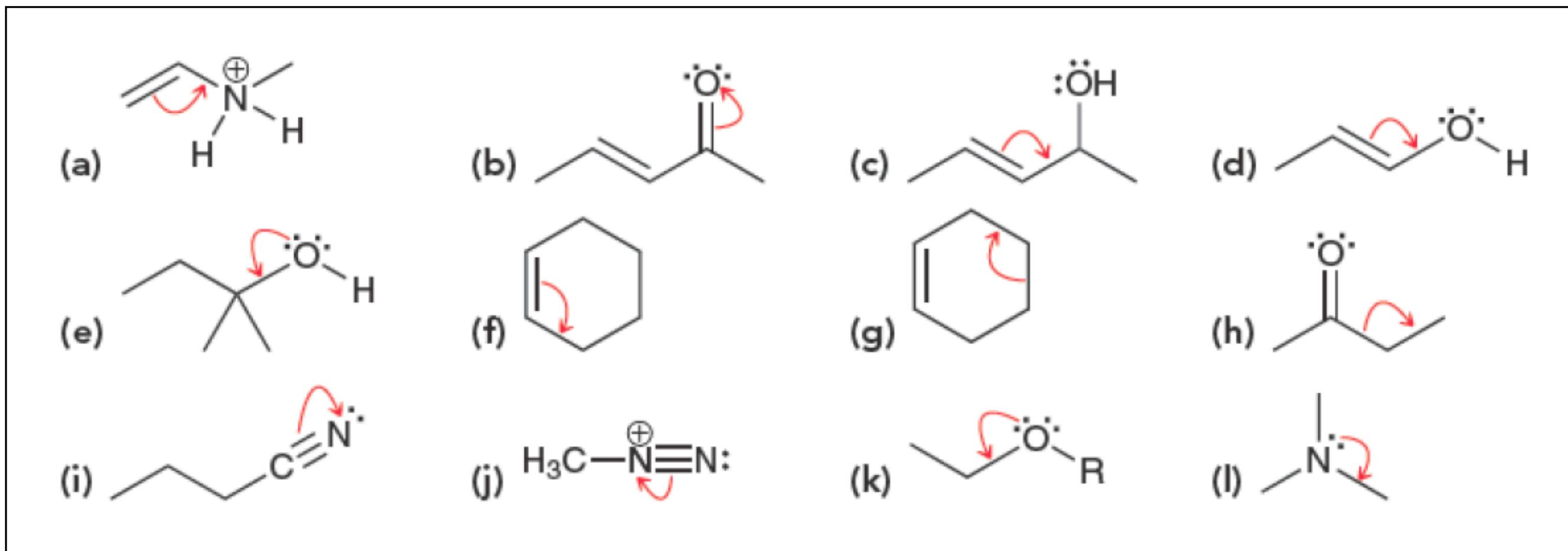
Riassunto dei cinque modelli per le rappresentazioni delle strutture di risonanza.

<p>Par isolado alílico</p>  <p>Duas setas curvas</p>	<p>Carga positiva alílica</p>  <p>Uma seta curva</p>	<p>Par isolado adjacente à carga positiva</p>  <p>Uma seta curva</p>	<p>Ligação π entre dois átomos com eletro-negatividades diferentes</p>  <p>Uma seta curva</p>	<p>Ligações π conjugadas em um anel</p>  <p>Três setas curvas</p>
---	--	---	---	---

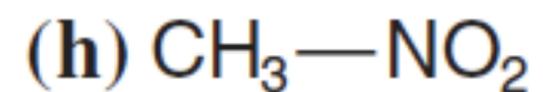
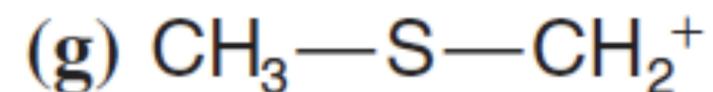
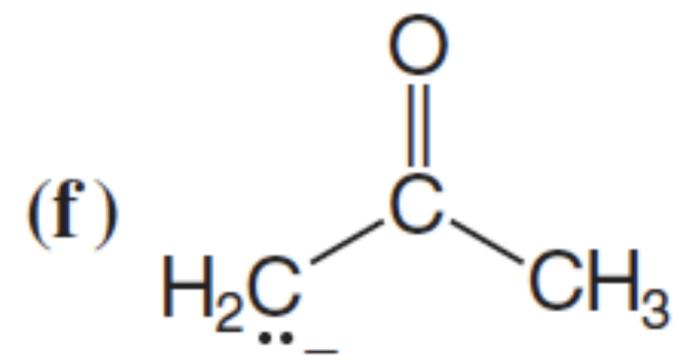
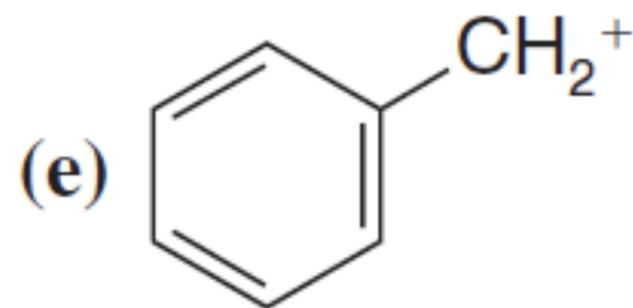
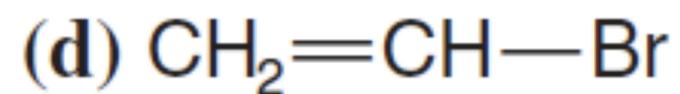
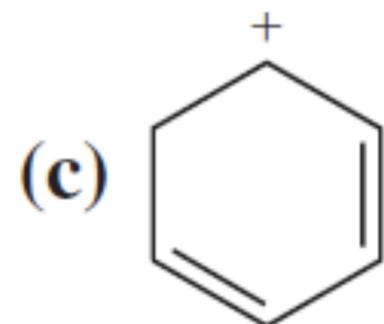
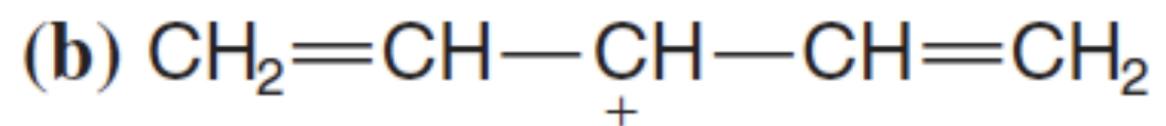
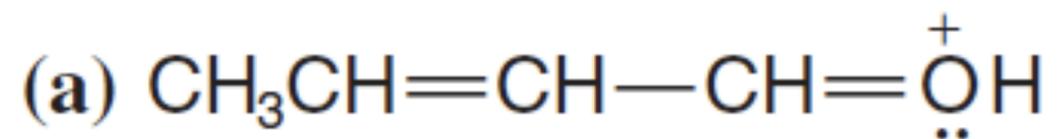
Problema: scrivi le strutture di risonanza risultano dallo spostamento degli elettroni indicato dalla freccia curva. Assicuratevi di includere carichi formali se necessario.



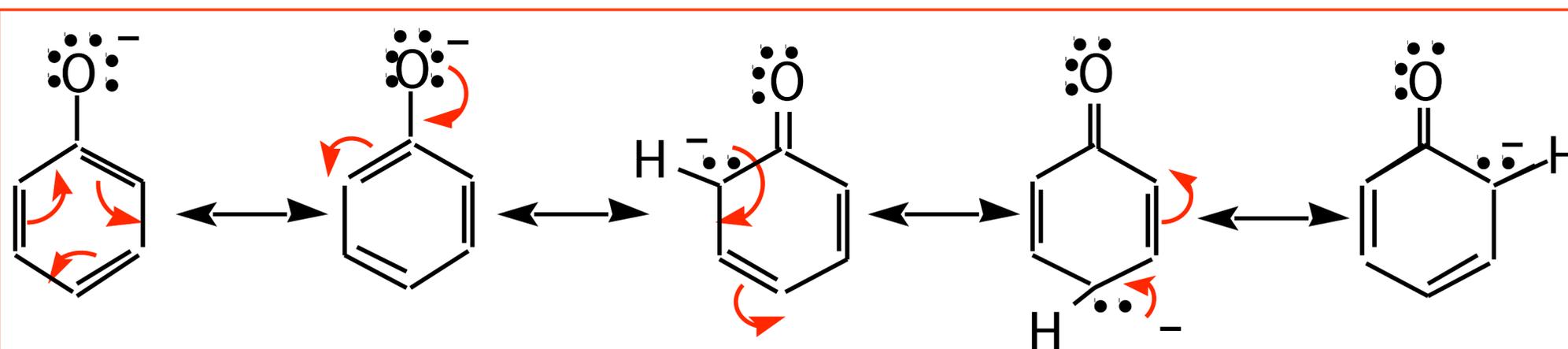
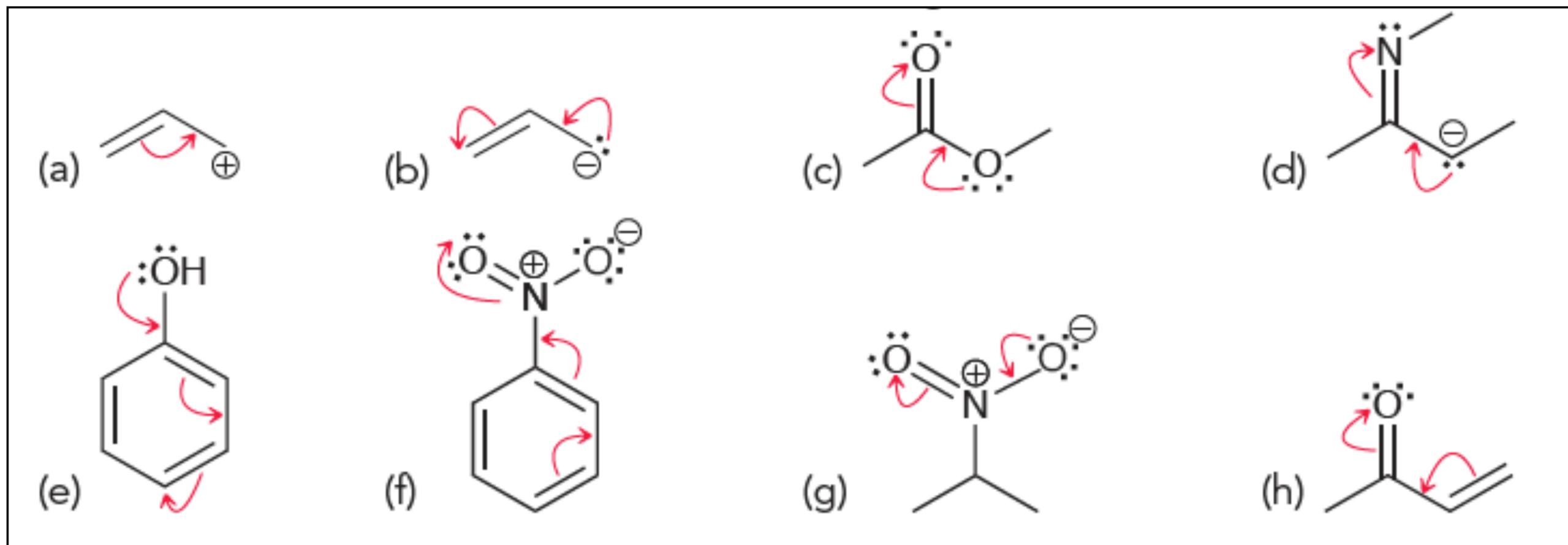
ESERCIZIO: Per ciascuno dei problemi visti di seguito, determinare se ciascuna delle frecce curve viola una delle due regole e descrivere la violazione se si verifica.
(Non dimenticare di contare tutti gli atomi di idrogeno e tutte le coppie isolate.)



Problema: scrivere le strutture di risonanza che contribuiscono a ciascuna delle seguenti specie.



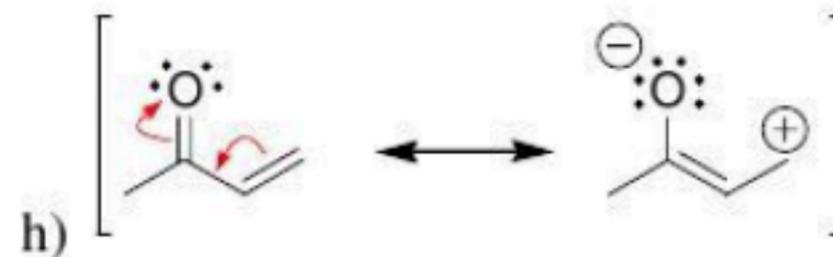
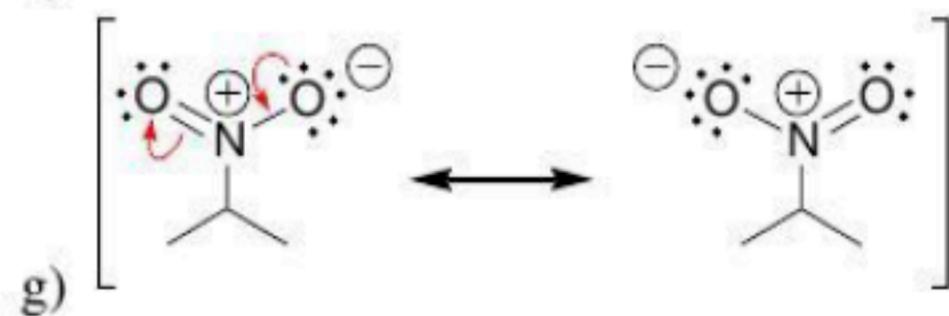
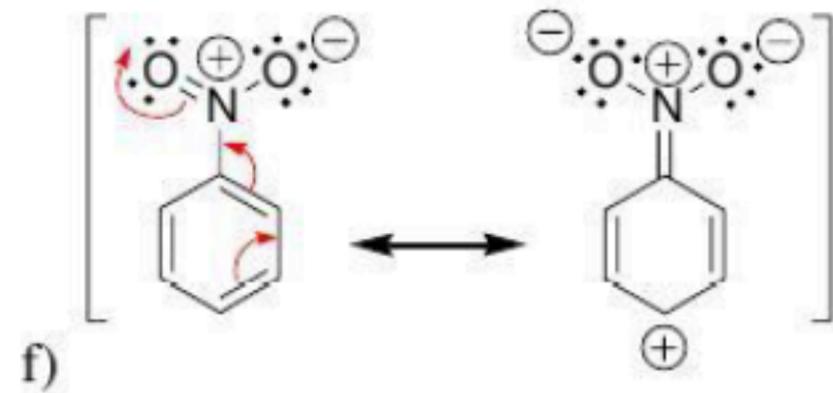
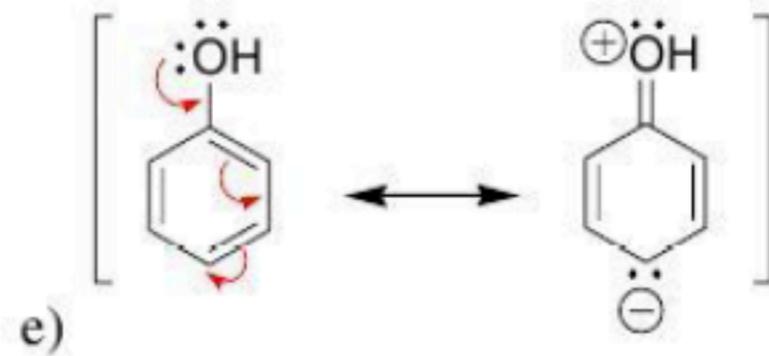
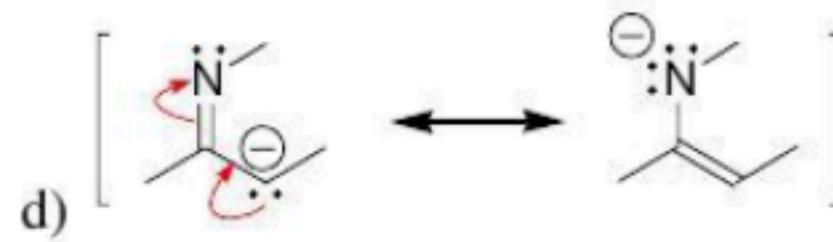
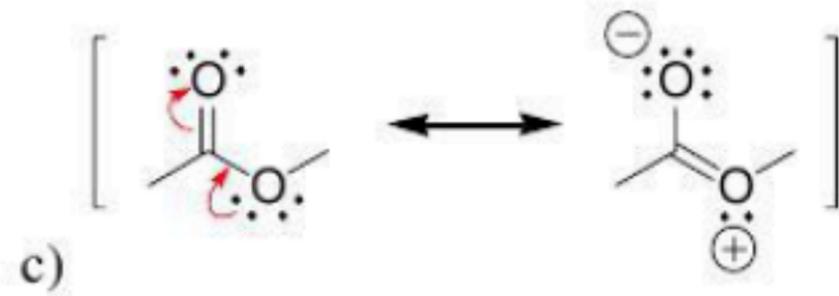
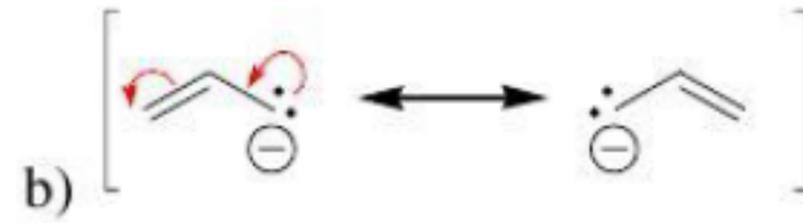
ESERCIZIO: Per ciascuna delle strutture viste di seguito, rappresenta la struttura di risonanza che è indicata dalle frecce curve. Assicuratevi di includere i carichi formali.



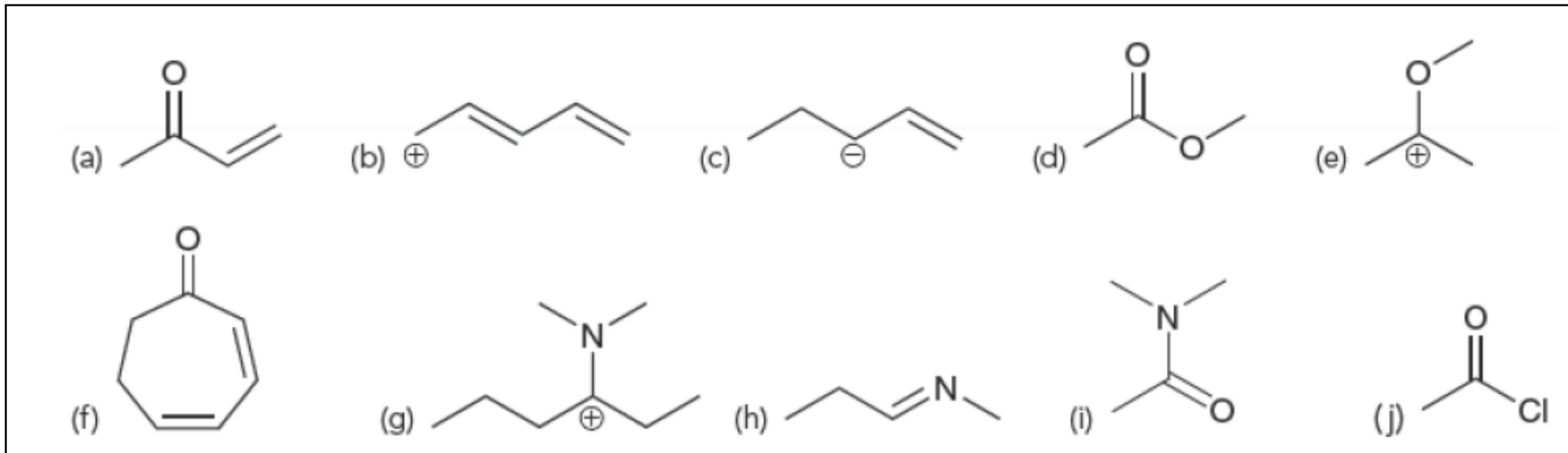
These 2 Kekulé structures are equivalent

These three contributing structures delocalize the negative charge onto carbon atoms of the ring

ESERCIZIO: Per ciascuna delle strutture viste di seguito, rappresenta la struttura di risonanza che è indicata dalle frecce curve. Assicuratevi di includere le cariche formali.

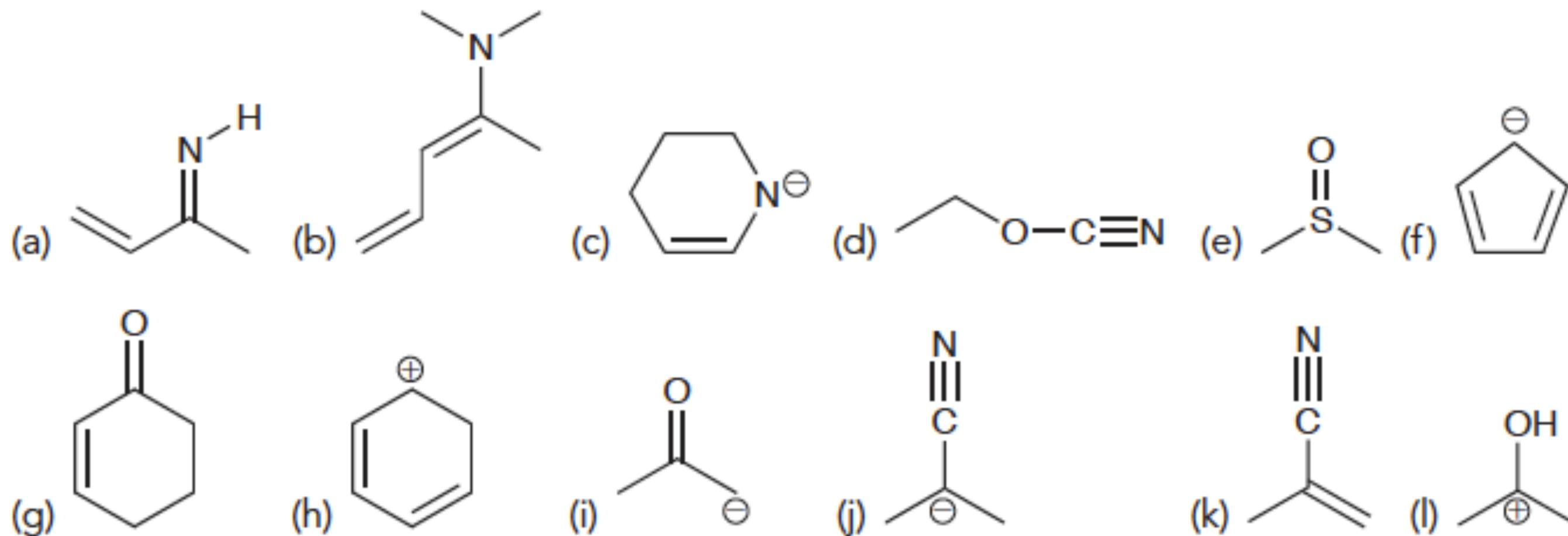


ESERCIZIO: Rappresentare le strutture di risonanza per ognuna delle sostanze viste di seguito comprese le frecce curve.

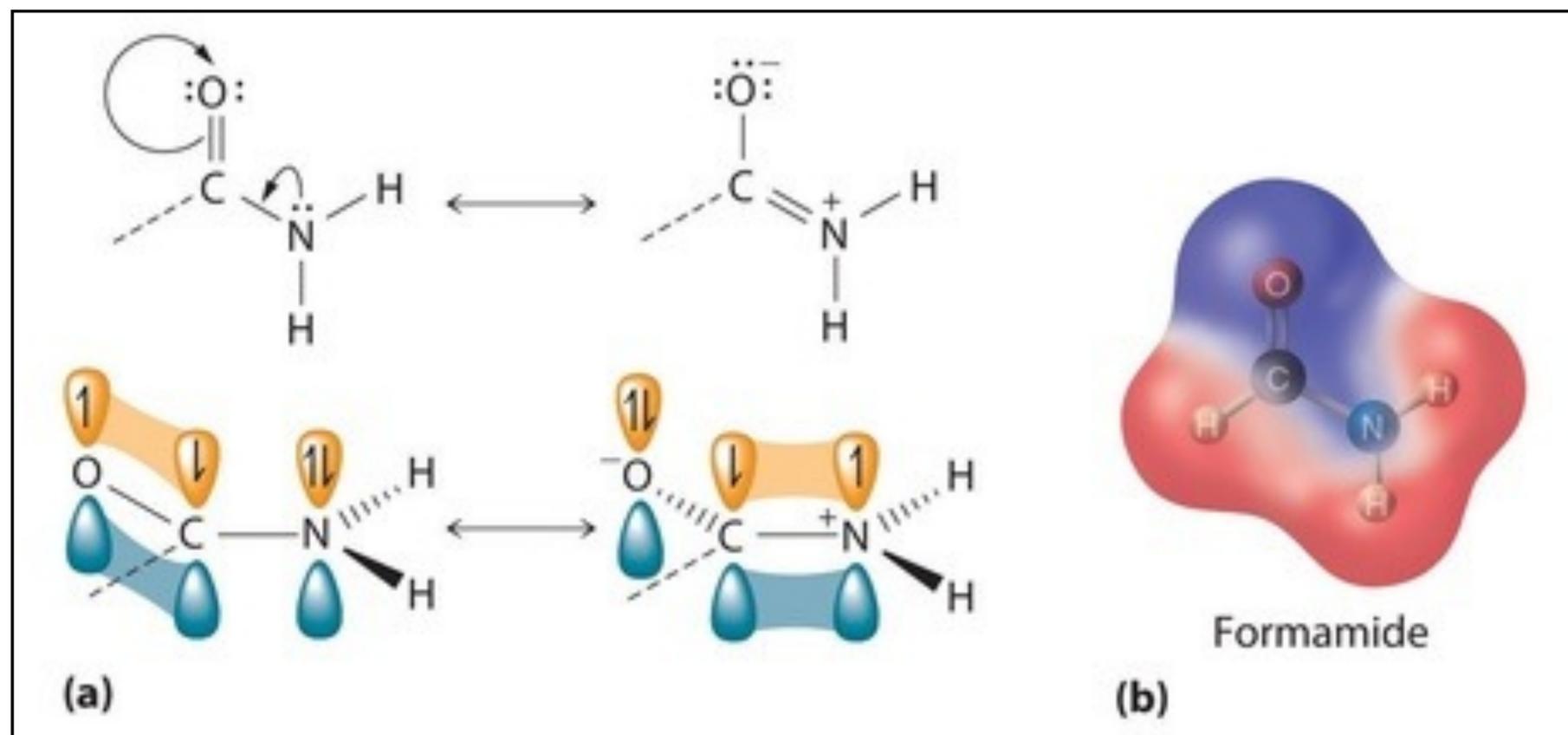
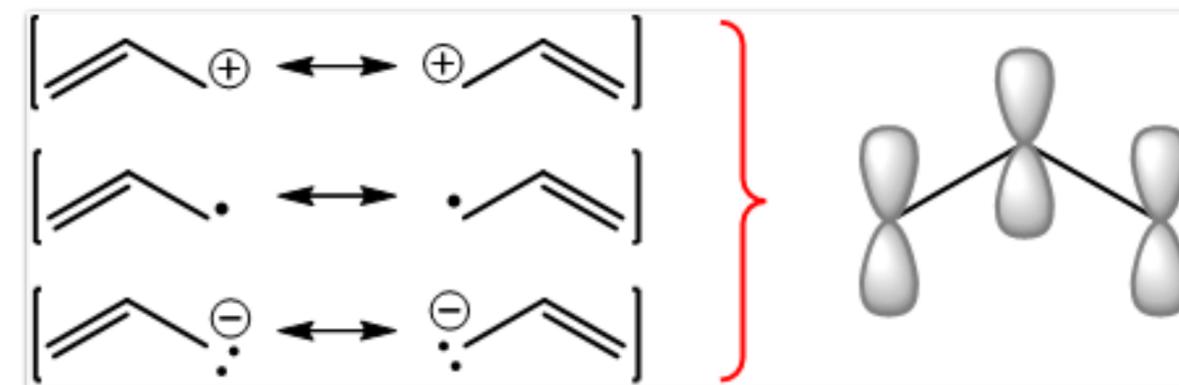
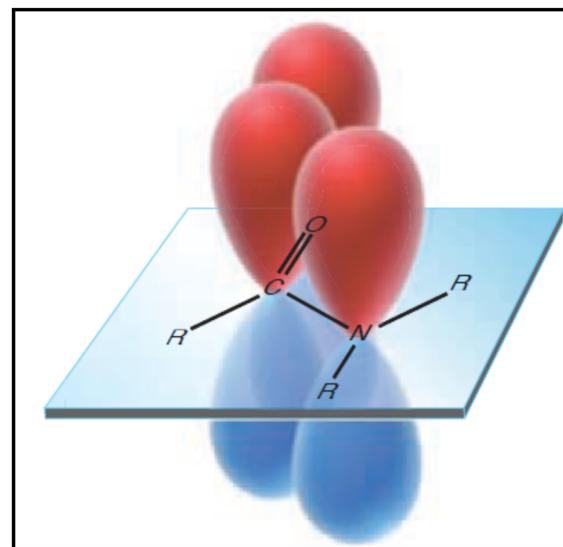
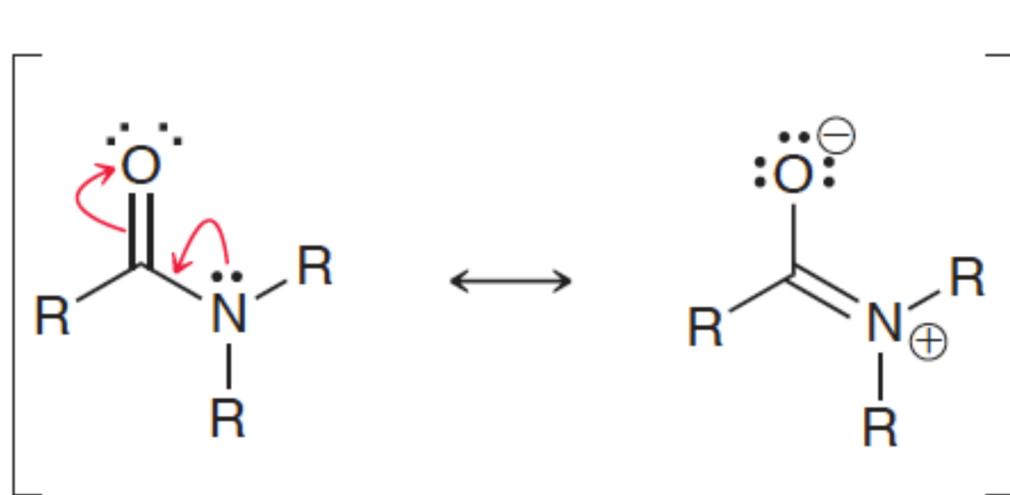


Per ciascuna delle strutture viste di seguito, rappresenta la struttura di risonanza.

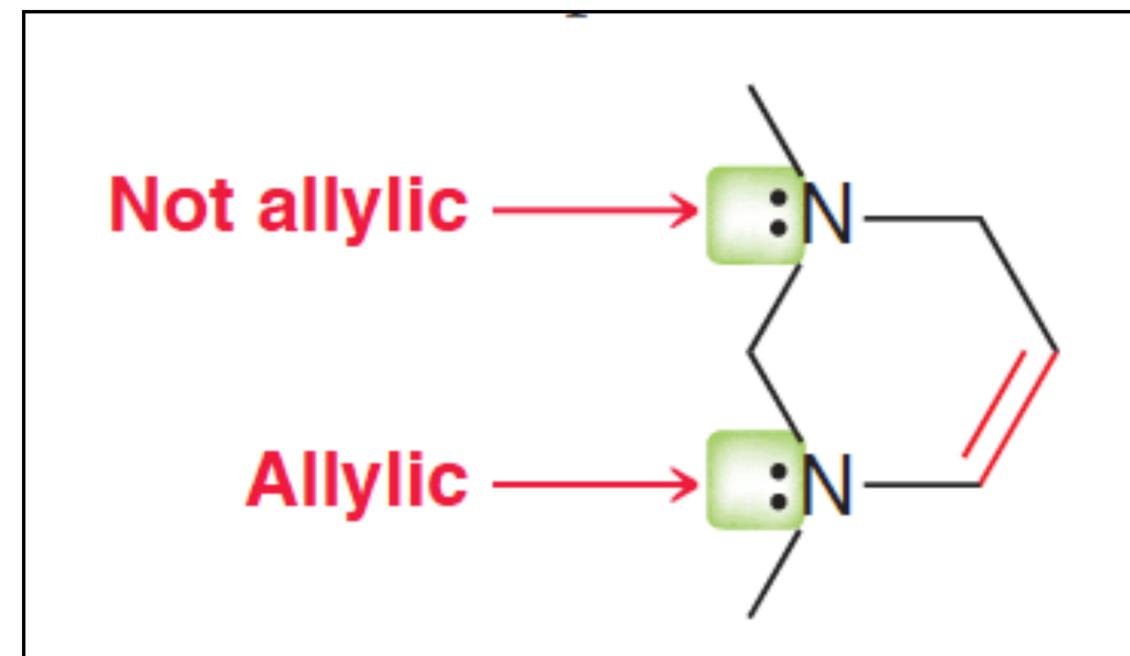
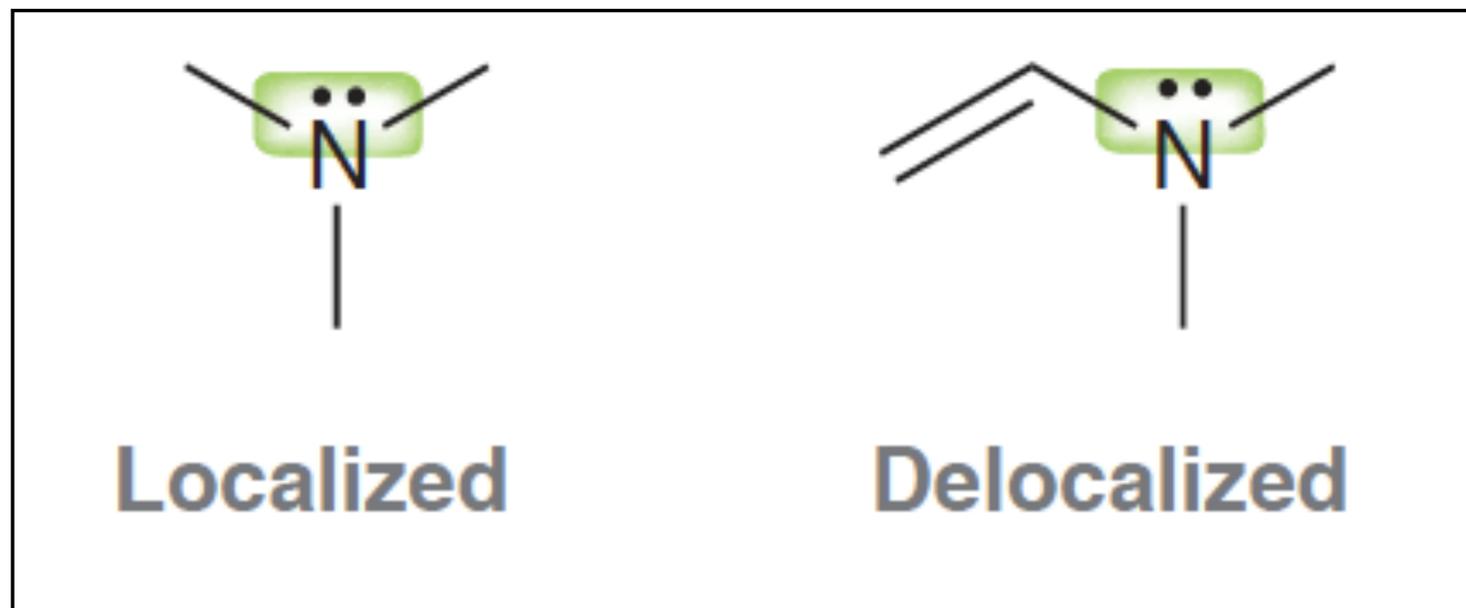
Assicurati di includere le cariche formali e la coppia di elettroni isolati.



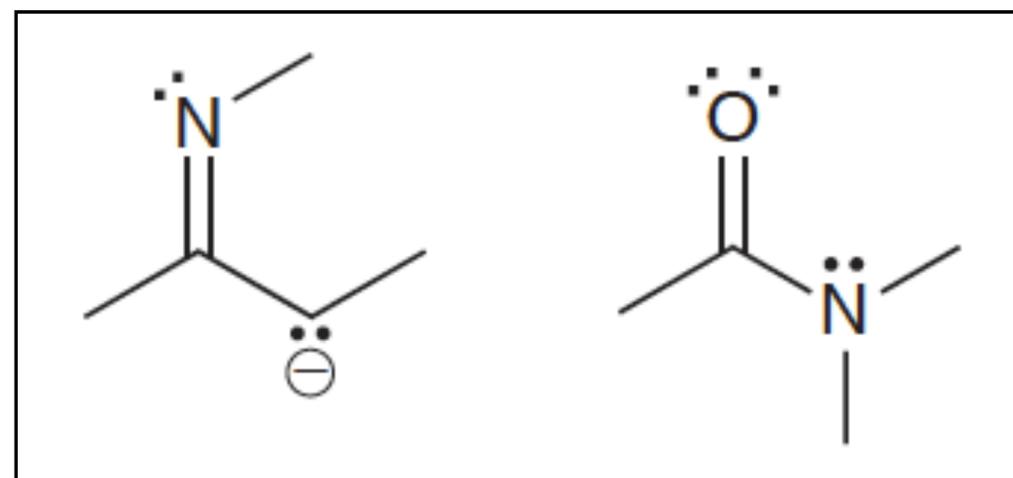
Coppie isolate delocalizzate e Coppie isolate localizzate



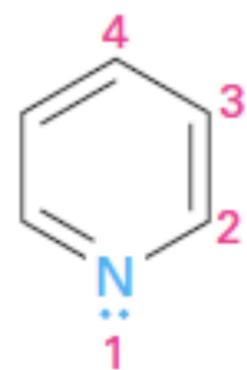
Coppie isolate delocalizzate e Coppie isolate localizzate



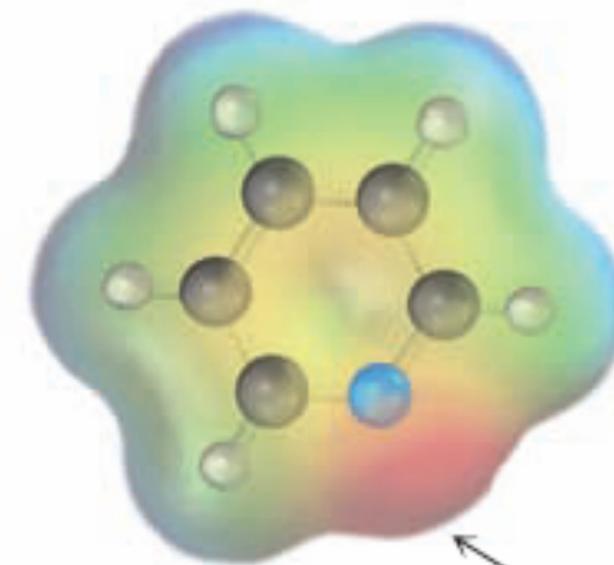
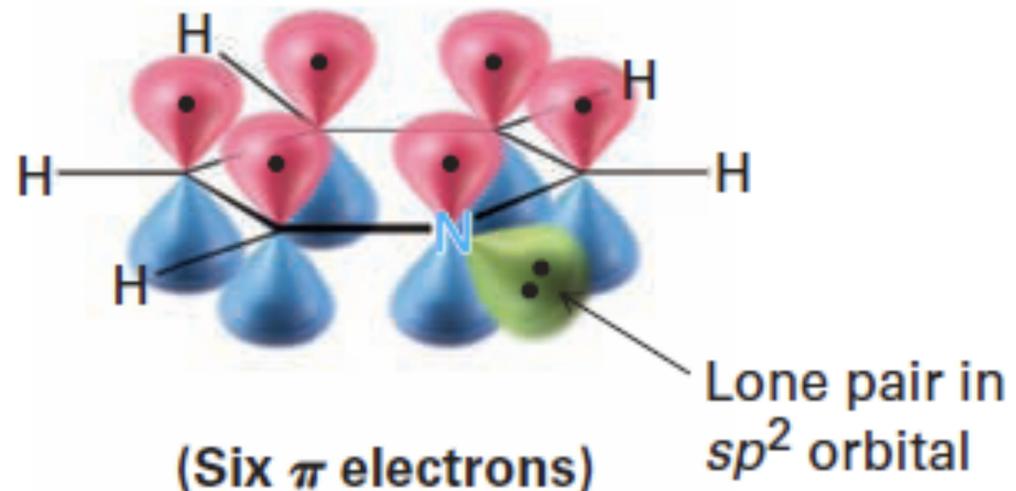
Identifica quali coppie di elettroni sono alliliche e quali no.



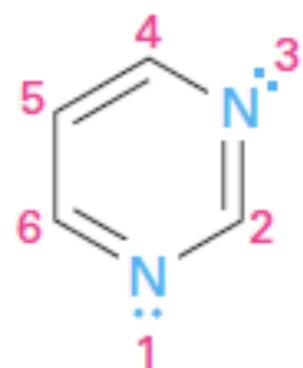
Eterociclici aromatici: piridina e pirrolo



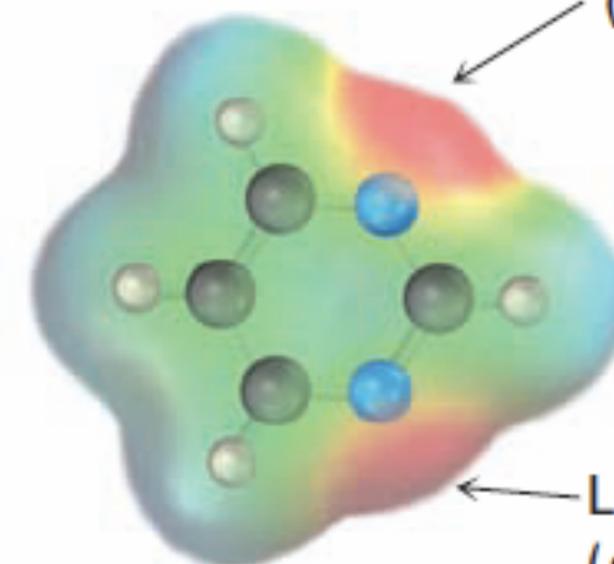
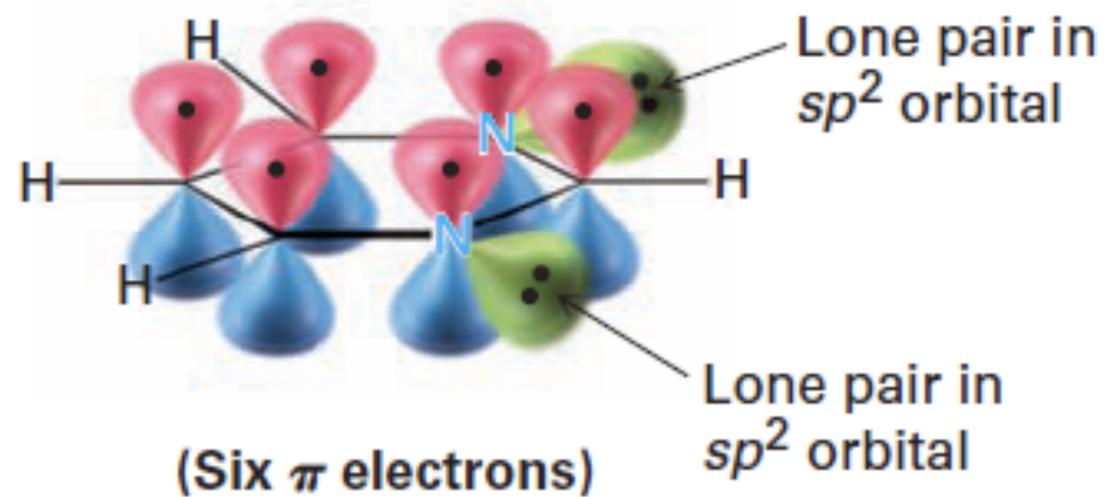
Pyridine



Lone pair (sp^2)



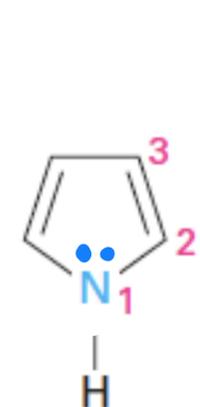
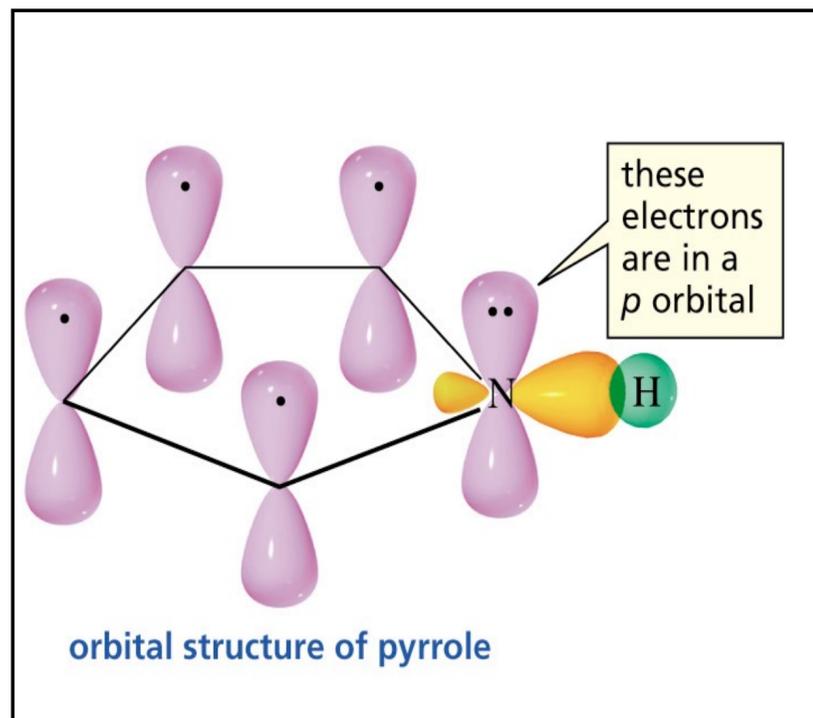
Pyrimidine



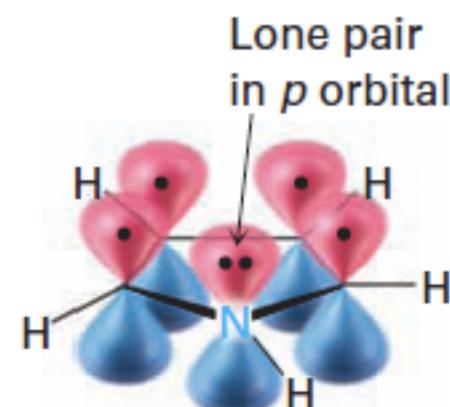
Lone pair (sp^2)

Figure 15.8 Pyridine and pyrimidine are nitrogen-containing aromatic heterocycles with π electron arrangements like that of benzene. Both have a lone pair of electrons on nitrogen in an sp^2 orbital in the plane of the ring.

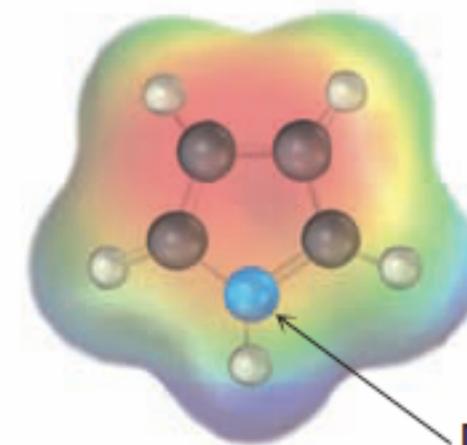
Eterociclici aromatici: pirrolo e imidazolo



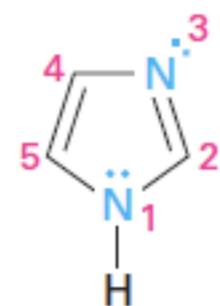
Pyrrole



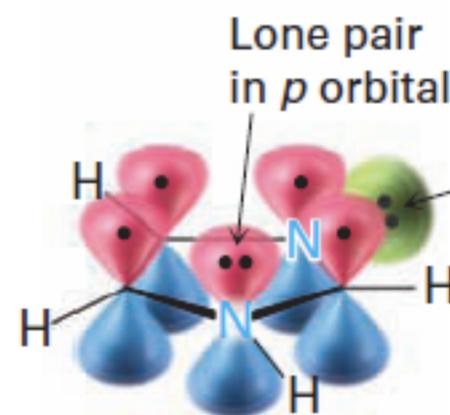
(Six π electrons)



Delocalized lone pair (p)

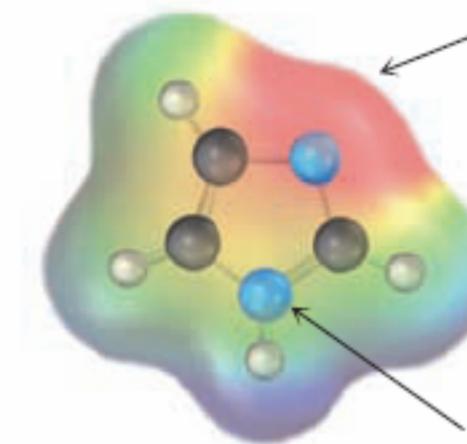


Imidazole



(Six π electrons)

Lone pair in sp^2 orbital

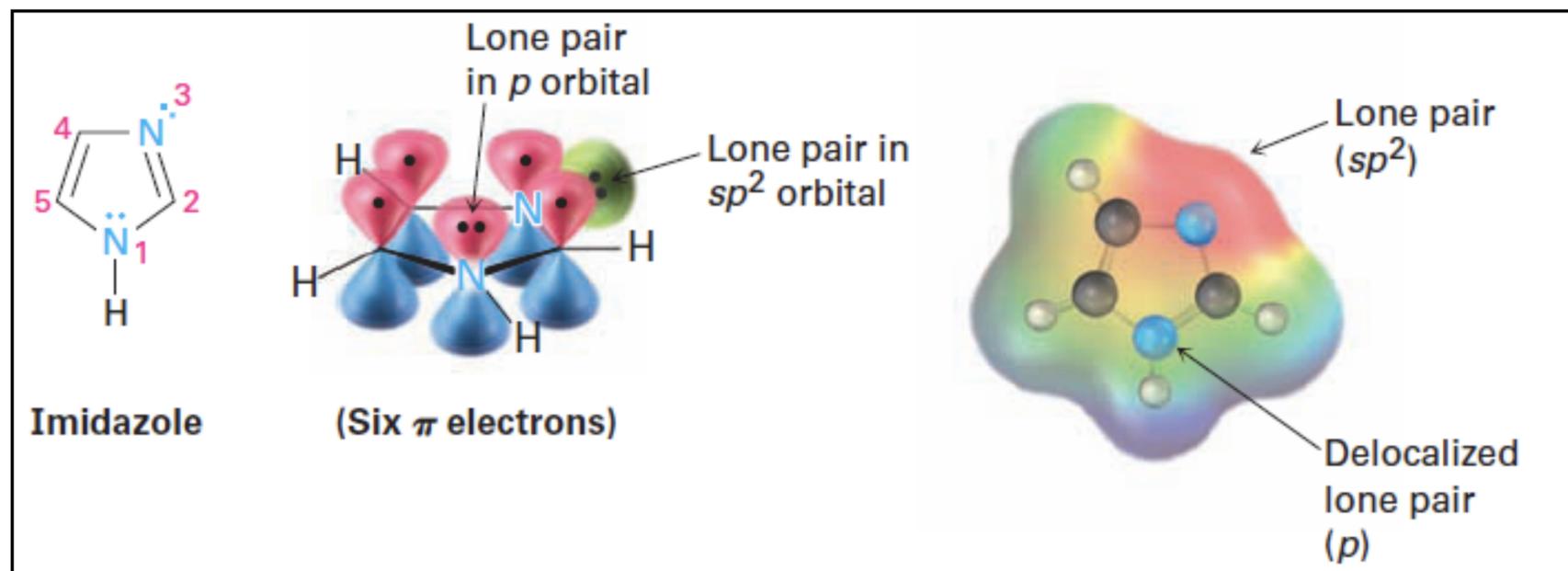
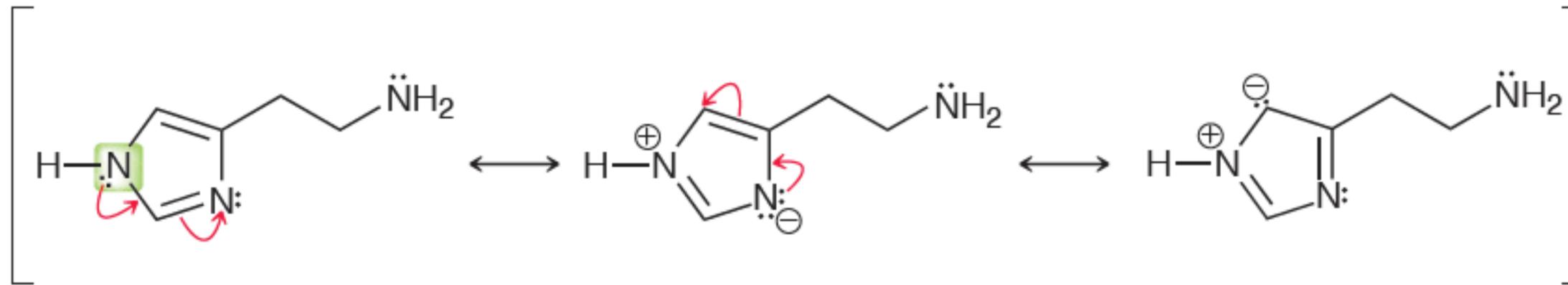
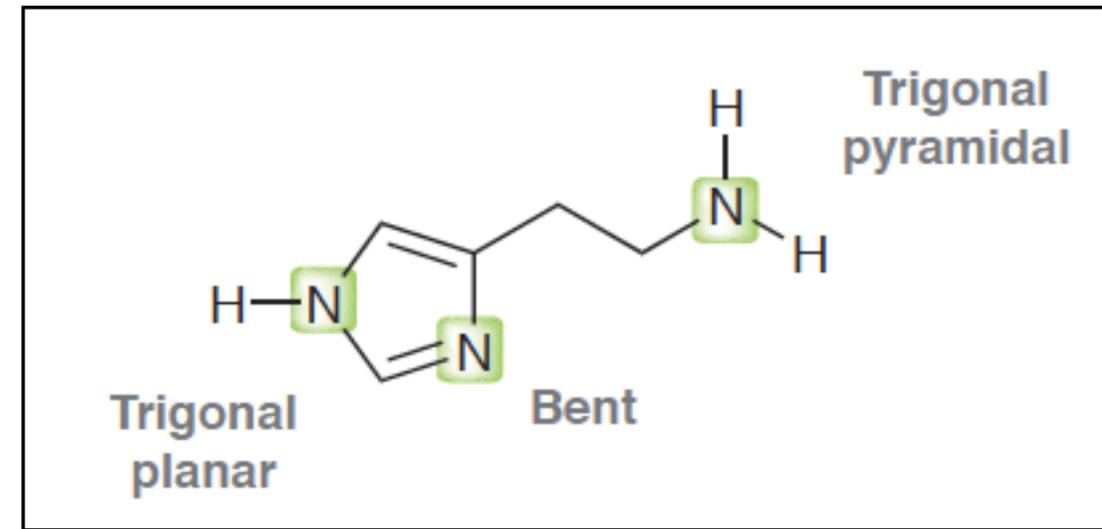
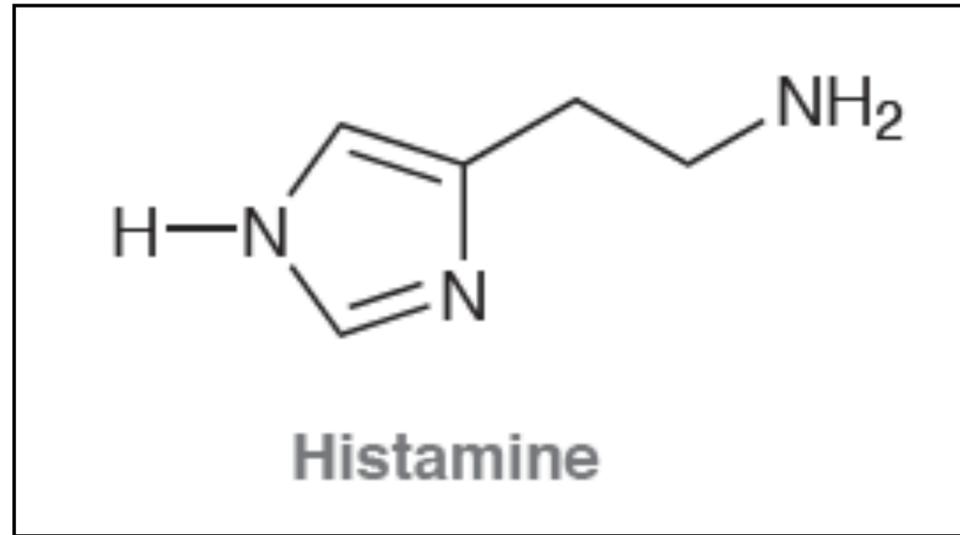


Lone pair (sp^2)

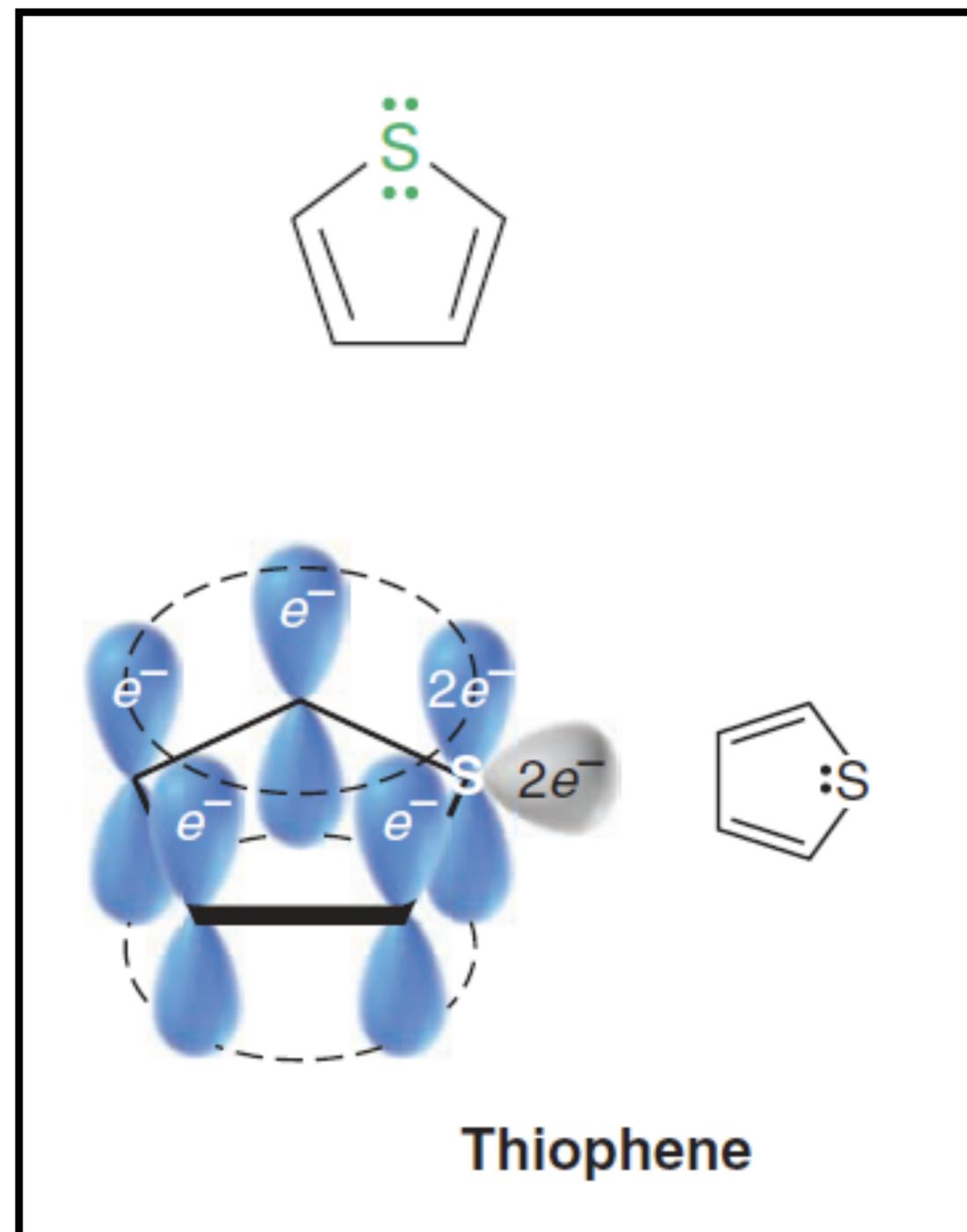
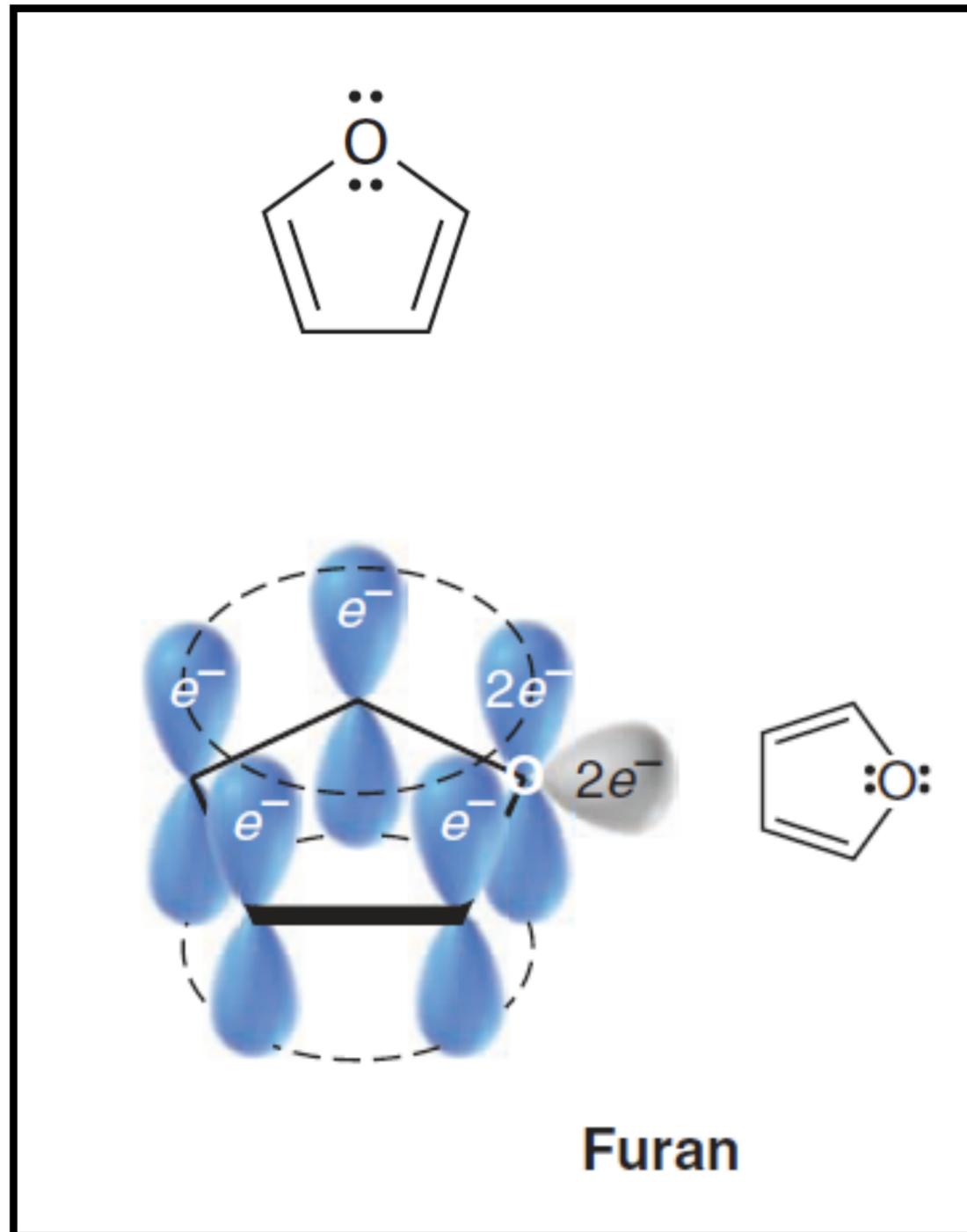
Delocalized lone pair (p)

Figure 15.9 Pyrrole and imidazole are five-membered, nitrogen-containing heterocycles but have six π electron arrangements like that of the cyclopentadienyl anion. Both have a lone pair of electrons on nitrogen in a p orbital perpendicular to the ring.

Coppie isolate delocalizzate e Coppie isolate localizzate



Eterociclici aromatici: Tiofene e Furano



- **Tiofene e Furano:**

