

Resursă didactică educațională gratuită pentru învățământul primar
Propusă de către Prof. Mihaela Militaru
Colegiul Național Pedagogic “Ștefan Velovan” Craiova

STRUCTURA COMPUȘILOR ORGANICI

Structura moleculelor organice se referă la modul de aranjare și unire a atomilor constituenți, în spațiul molecular.

Evoluția concepțiilor despre structura moleculelor organice este dependentă de cunoștințele acumulate de-a lungul timpului și poate fi încadrată în mai multe perioade.

Teoriile structurii compușilor organici nu pot fi separate de teoriile legăturilor chimice. Se cunosc mai multe teorii clasice, teoria electronică și teoria cuantică privind structura compușilor organici.

1. Teorii clasice ale structurii compușilor organici

Cele mai cunoscute teorii clasice sunt: *teoria electrochimică sau teoria dualistă* (Berzelius, 1819), *teoria unitară* (Laurent, Gerhard, 1848), *teoria tipurilor* (Gerhard, 1852), *teoria structurii* (Butlerov, 1861).

Teoria structurii a reprezentat un salt important în fundamentarea structurii compușilor organici deoarece, pentru prima dată, s-a stabilit că proprietățile unei substanțe sunt determinate de structura sa și invers, structura unei substanțe determină proprietățile acesteia. Așadar, structura chimică este determinată de modul de legare al atomilor între ei. Chiar dacă nu face referiri la natura legăturilor ce unesc atomii între ei, teoria structurii îi acordă o importanță egală cu cea a atomilor componenți.

Odată cu teoria structurii, a fost introdusă în chimia organică noțiunea de izomerie.

Descoperirea izomeriei optice, care nu putea fi explicată de teoria structurii în forma ei clasică, a stat la baza formulării modelului spațial al atomului de carbon.

Van't Hoff și Le Bel au demonstrat în 1874 că atomul de carbon tetravalent are valențele orientate în spațiu, asemănător unui tetraedru regulat, cu atomul de carbon în centrul său.

Modelul tetraedric al atomului de carbon stă la baza stereochemiei sau chimiei spațiale, adică acea parte a chimiei care studiază structura și reactivitatea compușilor organici, în funcție de aranjarea în spațiu a atomilor constituenți.

2. Teoria electronică a structurii atomilor și moleculelor

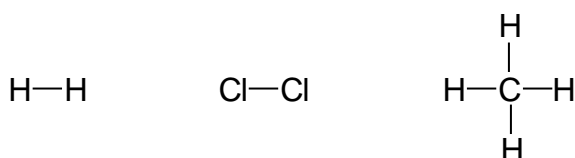
În primele decenii ale secolului XX au fost înregistrate mari descoperiri privind structura atomilor.

Teoria electronică a structurii atomilor a facilitat conturarea teoriei electronice asupra legăturilor chimice.

Potrivit teoriei electronice a valenței (Kossel, Lewis, 1916), în transformările chimice ale elementelor sunt implicați electroni din stratul exterior denumiți electroni de valență. În aceste transformări, atomii tind să-și modifice învelișul electronic, astfel încât să se ajungă la configurația electronică stabilă a gazului inert cel mai apropiat.

Configurația de gaz inert poate fi atinsă fie prin transferul de electroni, când un atom cedează electroni, iar celălalt primește (**electrovalență**, numită impropriu **legătură electrovalentă sau ionică**), fie prin punerea în comun a câte unui electron de la fiecare atom (**legătură covalentă sau covalență**).

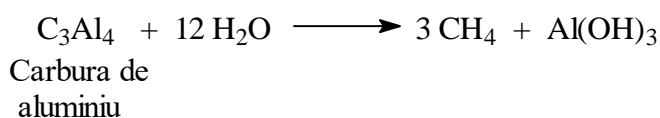
Legătura covalentă formată din doi electroni este o legătură adevărată, iar simbolul ei este liniuța de valență propusă de Couper:



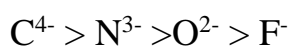
Carbonul și hidrogenul au tendință pronunțată de a forma covalențe și tendință redusă de a ceda sau accepta electroni, pentru a se transforma în ioni. Formarea de covalențe se poate explica prin razele atomice mici, care permit o apropiere avansată a atomilor unul față de altul.

În stratul de valență atomul de carbon are 4 electroni. Prin pierderea celor 4 electroni s-ar forma C^{+4} , cu volum mai mic decât al heliului (electronii sunt puternic atrași de nucleu) și deci nu poate exista.

Dacă ar accepta 4 electroni, atomul de C s-ar transforma în C^{4-} , cu mare afinitate pentru proton. Acest ion apare în unele carburi metalice (C_3Al_4), stabile în absența apei.



Afinitatea ionilor negativi pentru protoni variază astfel:

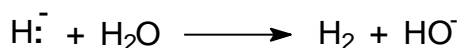


În timp ce acidul fluorhidric este un acid tare, metanul nu are caracter acid.

Un raționament asemănător poate fi aplicat atomului de hidrogen, caracterizat de posibilitatea formării a doi ioni, protonul (H^+) și ionul de hidrură (H^-), care nu pot exista în stare liberă.

În soluțiile apoase, protonul apare sub forma combinației sale covalente cu apa, ionul de hidroniu H_3O^+ , format printr-o reacție de transfer de proton de la acid (donor de protoni) la molecula de apă (acceptor de protoni).

Ionul de hidrură există numai în hidrurile ionice (LiH , NaH) stabile în stare solidă, în absența apei. În prezența apei smulge rapid un proton și se stabilizează sub formă de hidrogen molecular.



Ionul de hidrură apare în reacțiile organice de transfer de ioni de hidrură.

Acizi și baze Lewis. Legături coordinative

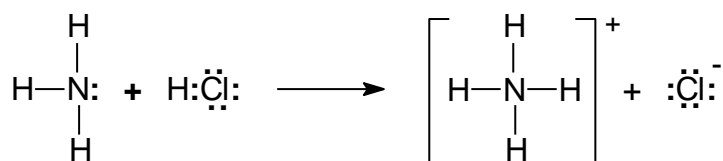
Electronii neparticipanți sunt perechile de electroni ce se găsesc la unii din atomii unei molecule și care nu sunt implicați în legături covalente.



Electronii neparticipanți dau naștere la legături covalente cu atomii caracterizați de deficit de electroni (H^+ , molecule cu octet incomplet BF_3 , $AlCl_3$, $FeCl_3$).

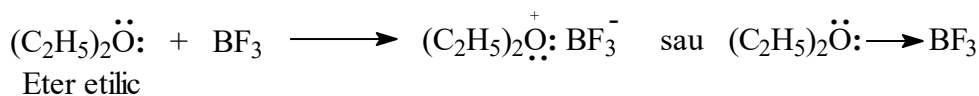
Teoria electronică (Lewis, 1923) dă o definiție mai largă noțiunilor de acid, respectiv bază. Un acid este un compus capabil să accepte o pereche de electroni, iar o bază un compus capabil să cedeze o pereche de electroni.

Legătura covalentă formată între un acid și o bază Lewis, numită **legătură coordinativă**, nu se deosebește fizic de alte covalențe.



În ionul NH_4^+ , legăturile dintre atomi sunt echivalente.

Legăturile coordinative din moleculele organice au caracter dipolar. Se notează cu sarcini întregi sau cu o săgeată cu vârful orientat spre atomul acceptor.



3. Teoria cuantică a structurii compușilor organici

La începutul secolului 20, a fost demonstrată dualitatea particulă-undă presupusă de teoria ondulatorie asupra naturii luminii, prin folosirea celebrei ecuații a lui de Broglie (1929):

$$\frac{h}{\lambda} = mc$$

Dualitatea undă-particulă poate fi extinsă și la particule cu masă de repaus (electroni, protoni), deoarece li se poate atribui o undă asociată, a cărei lungime de undă λ este dependentă de masa, respectiv viteza particulei.

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

La particule cu masă mare, lungimea de undă λ devine imperceptibilă și de aceea mecanica ondulatorie nu este interesantă pentru corpurile macroscopice.

Mecanica cuantică consideră electronii în mișcare ca unde, comparându-le cu undele mecanice din sistemele macroscopice.

În 1926, Schrödinger a stabilit o expresie matematică pentru unda tridimensională a mișcării unei particule elementare cu sarcina -1 (electron) în câmpul unei particule cu sarcina $+1$ (proton), cunoscută sub numele de ecuație de undă.

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \Psi = 0$$

unde m - masa electronului;

E - energia totală;

$V = -\frac{e^2}{r}$ energia potențială a electronului;

$E - V$ – energie cinetică;

Ψ – funcție (numită funcție de undă) a coordonatelor electronului în cursul mișcărilor sale, în raport cu nucleul presupus imobil și situat în originea sistemului de axe de coordonate x, y, z .

Teoretic, cu ajutorul acestei ecuații nu se poate stabili poziția exactă a electronului, la un moment dat. În schimb se poate determina elementul de volum al spațiului din apropierea nucleului, în care poate fi găsit electronul ($\Psi^2 dV$).

Pentru atomul de hidrogen, ecuația de undă stabilește o relație între energia totală a electronului E_n și funcția de undă Ψ , adică o funcție a coordonatelor electronului în cursul mișcărilor sale în raport cu nucleul, fixat în originea unui sistem de coordonate x, y, z .

Ψ^2 reprezintă amplitudinea undei electronice.

Rezolvarea, prin integrare, a ecuației lui Schrödinger conduce la soluții pentru Ψ , numai pentru anumite valori ale energiei electronului E_n , numite valori proprii și determinate de numerele cuantice principale n ($n = 1, 2, 3$, etc).

Soluțiile matematice ale ecuației Schrödinger se numesc funcții de undă orbitale sau orbitali.

3.1. Orbitali atomici. Orbitali moleculari

În sens fizic, orbitalii corespund la porțiuni din spațiu, caracterizate de o anumită energie și geometrie, în care probabilitatea de existență a electronului este cea mai mare.

Deci un *orbital definește o stare a electronului în atom.*

Numărul soluțiilor ecuației de undă, deci *numărul de orbitali este dat de n^2 , n fiind numărul cuantic principal.*

Orbitalii corespunzând aceluiași număr cuantic principal n formează un strat.

Pentru un strat cu număr cuantic principal n corespund $n-1$ substraturi caracterizate de numere cuantice azimutale l ($l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$).

Orbitalii cu același număr cuantic l formează un substrat și au aceeași energie.

Numărul de substraturi se calculează cu expresia $2l+1$.

Orbitalii se notează cu simbolurile s, p, d, f .

În același strat orbitalii s au energii mai mici decât orbitalii p , iar aceștia decât orbitalii d .

Orbitalii s au simetrie sferică, cu nucleul atomic în centrul sferei.

Orbitalii p sunt reprezentați de obicei ca două porțiuni din spațiu în formă de pară (cifra opt) ce se află de o parte și de alta a nucleului, prin care trece planul nodal.

În spațiu, orbitalii p sunt orientați în direcția celor trei axe de coordonate: p_x, p_y, p_z .

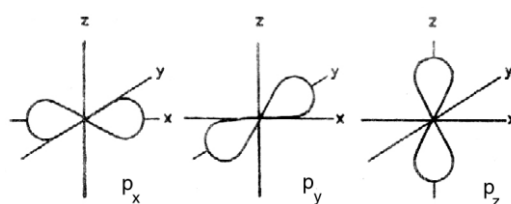


Fig. 2.1. Orbitali p

Orbitalii atomici de tip s, p, d , participă la formarea orbitalilor moleculari.

Atunci când doi atomi, cu câte un orbital ocupat de un electron, se apropie unul de celălalt, nucleele încep să exercite atracții asupra norului de electroni al celuilalt atom.

Orbitalii atomici se întrepătrund pe măsură ce nucleele se apropie, distanța minimă fiind înregistrată în momentul în care nucleele încep să se respingă.

Această distanță r , internucleară, corespunde lungimii legăturii covalente.

La întrepătrunderea a doi orbitali atomici (OA) rezultă doi orbitali moleculari (OM): un orbital molecular de legătură (σ), cu energie joasă, reprezentând starea de atracție între atomi și un orbital molecular de antilegătură (σ^*) cu energie mare, corespunzând respingerii dintre atomi.

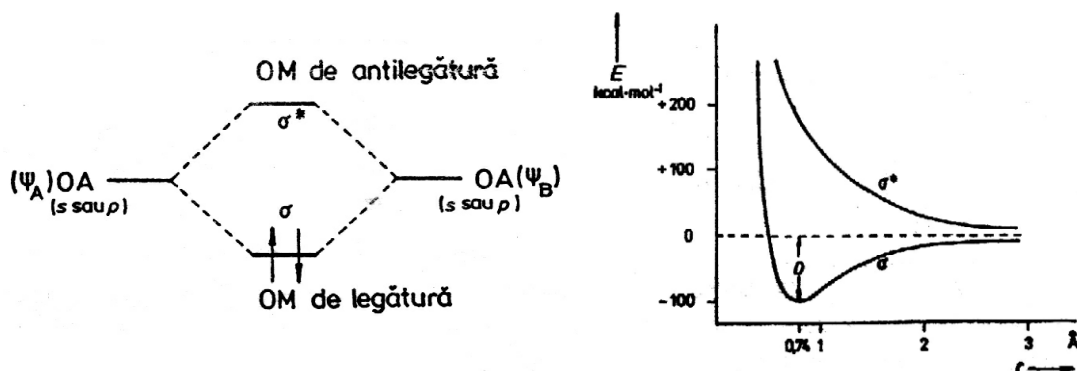


Fig. 2.2. Orbitali moleculari Fig. 2.3. Variația energiei în raport cu distanța interatomică în molecula de H₂ (D-energia de disociere)

Pentru cei doi atomi A și B se stabilesc funcțiile de undă Ψ_A , respectiv Ψ_B .

Însumarea celor două funcții Ψ_A și Ψ_B conduce la o stare de atracție, deci de legătură (orbital molecular de legătură), iar prin scăderea lor se ajunge la o stare de respingere, deci de antilegătură sau nod (orbital molecular de antilegătură).

Legăturile covalente σ se pot forma prin întrepătrunderea a doi orbitali atomici s (legături σ_{ss}), a unui orbital s cu un orbital p (legătură σ_{sp}), a doi orbitali p (legătură σ_{pp}).

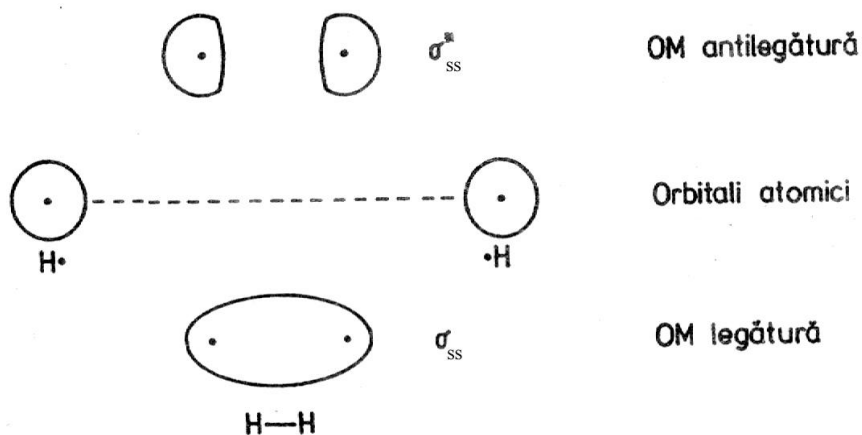


Fig. 2.4. Molecula de hidrogen

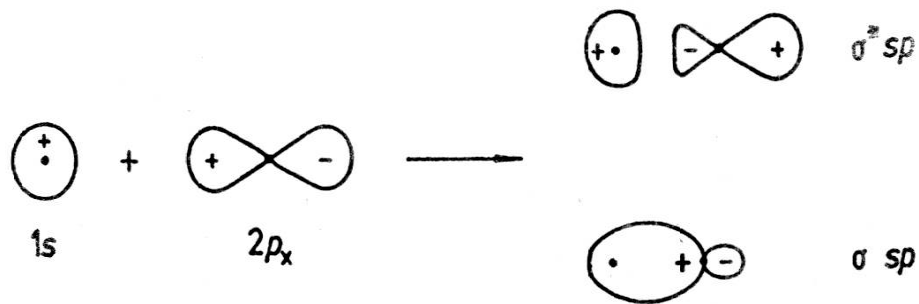


Fig. 2.5. Orbitali de legătură σ_{sp} și de antilegătură σ^*_{sp}

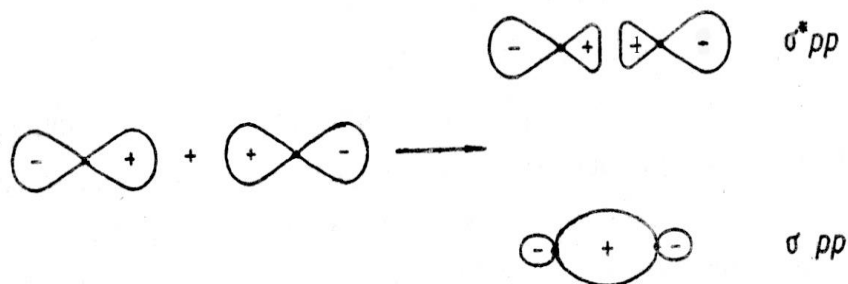


Fig. 2.6. Orbitali de legătură σ_{pp} și de antilegătură σ^*_{pp}

Orbitalii s sau p se întrepătrund de-a lungul axei de legătură, la formarea legăturilor σ .

Legăturile π se obțin prin întrepătrunderea laterală a orbitalilor p , dispuși paralel.

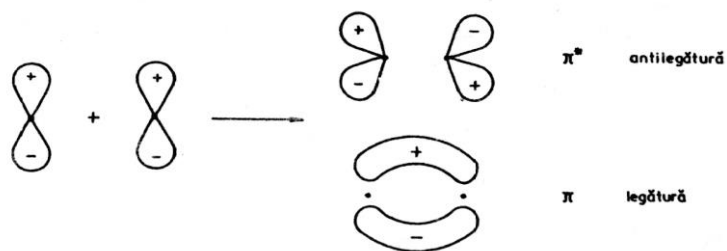


Fig. 2.7. Orbitali de legătură π și de antilegătură π^*

În starea fundamentală sunt ocupați cu electroni numai orbitalii de legătură σ sau π .

Orbitalii de antilegătură σ^* și π^* sunt zone (spații) de energie înaltă care pot fi ocupate cu electroni doar în stările excitate ale moleculei.

Orbitalii moleculari pot fi ocupați cu maximum doi electroni, cu spinii cuplați ($\uparrow\downarrow$) și care gravitează în jurul celor două nuclee. Densitatea electronică maximă este localizată în spațiul dintre două nuclee, scăzând treptat spre exterior.

3.2. Orbitali moleculari hibridizați

La formarea legăturilor covalente, un fenomen întâlnit frecvent este **hibridizarea**, adică *contopirea orbitalilor atomici de tip s, p, d* (Pauling, Slater, 1931).

În chimia organică este interesantă obținerea unor orbitali hibridizați prin contopirea orbitalilor s și p.

Hibridizarea este caracteristică mai ales elementelor din perioada a doua, cu volum mic și nu este pusă în evidență decât la formarea legăturilor covalente.

Nu există hibridizare în atomi liberi.

În starea fundamentală, cei patru electroni de valență ai carbonului sunt dispuși astfel: doi electroni în orbitalul 2s și doi electroni în orbitalii p (câte un electron în fiecare, cu spin paralel).

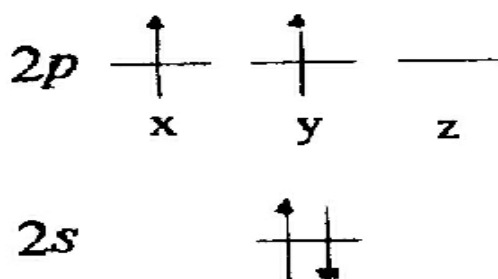


Fig. 2.8. Orbitalii carbonului în stare fundamentală

Sub influența atomilor cu care se combină, orbitalii s și p se pot contopi și formează orbitalii hibridizați sp^3 , sp^2 , sp .

• **Hibridizarea sp^3** (tetraedrică) este caracteristică compușilor saturați ai carbonului.

La formarea acestor combinații (de exemplu, CH_4 , C_2H_6 etc) orbitalul 2s cu energie joasă al atomului de carbon se contopește cu cei trei orbitali 2p caracterizați de energie mai mare. Se formează patru orbitali hibridizați sp^3 , cu energie mai mică decât a orbitalilor 2p, dar mai mare decât a orbitalilor 2s, din care provin.

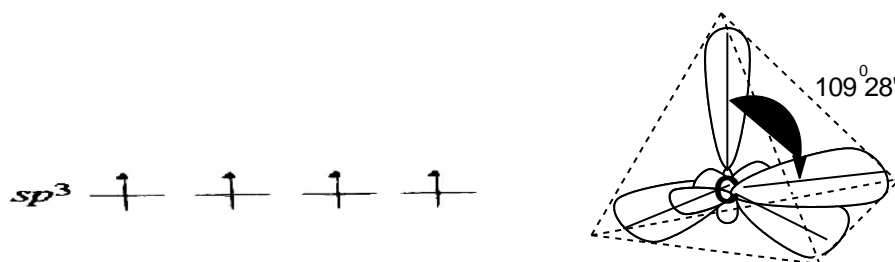


Fig. 2.9. Hibridizarea sp^3

Cei patru orbitali hibridizați ai carbonului sunt orientați în spațiu spre vârfurile unui tetraedru regulat, nucleul atomului de carbon găsindu-se în centrul acestuia.

În acest mod, teoria mecanic-cuantică fundamentează teoretic modelul tetraedric al atomului de carbon propus de Le Bel și van't Hoff încă din anul 1874.

Legăturile covalente σ (C-H, C-C), permit rotația liberă a atomilor, unul față de celălalt, datorită simetriei cilindrice a orbitalilor moleculari sp^3 -s, respectiv sp^3 - sp^3 .

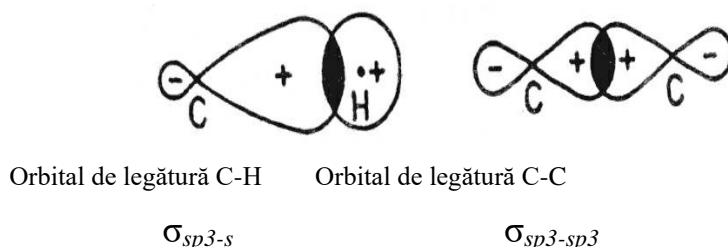


Fig. 2.10. Orbitali de legătură în hidrocarburi

Hibridizarea sp^3 este de asemenea caracteristică atomului de azot (în amoniac), respectiv atomului de oxigen (în apă).

• **Hibridizarea sp^2 (trigonală)** este caracteristică atomului de carbon implicat în legături duble.

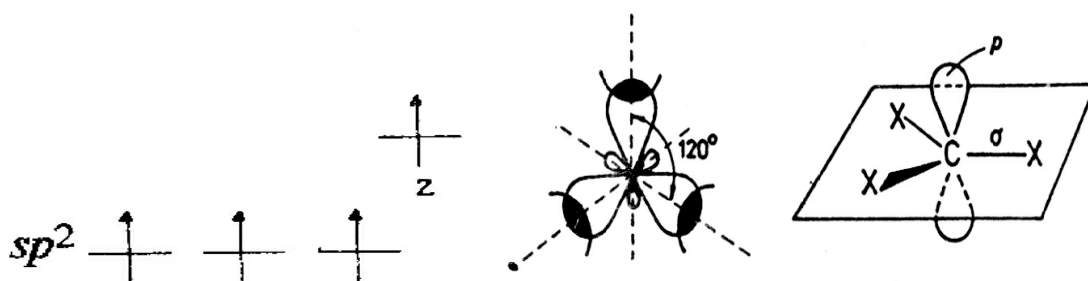


Fig. 2.11. Hibridizarea sp^2

Cei trei orbitali hibridizați sp^2 ai carbonului se formează prin contopirea orbitalului 2s cu doi orbitali 2p, orbitalul $2p_z$ al carbonului rămânând nehibridizat.

Orbitalii sp^2 sunt mai săraci în energie decât orbitalii sp^3 și sunt situați în același plan, unghiul dintre axele lor fiind de 120° .

Orbitalul nehibridizat p, mai bogat în energie, este dispus într-un plan perpendicular pe planul celor trei orbitali hibridizați sp^2 .

Un atom de C hibridizat sp^2 apare și în radicalul CH_3 .

• **Hibridizarea sp** (digonală) este întâlnită mai ales la atomii de carbon din constituția legăturilor triple.

Orbitalii hibridizați sp se formează prin cotopirea orbitalului $2s$ cu unul din orbitalii $2p$ ai carbonului.

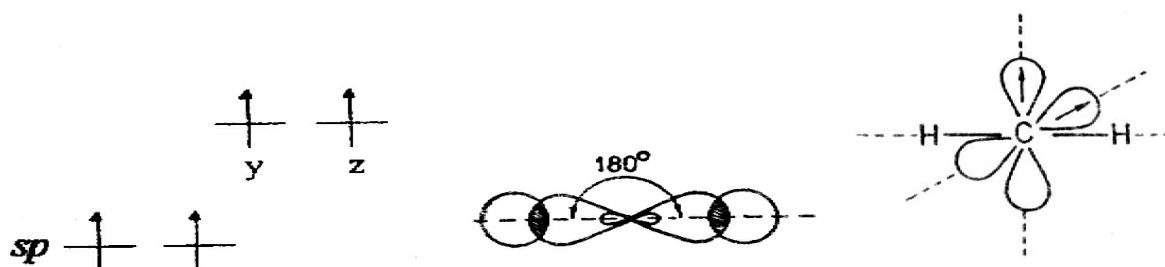


Fig. 2.12. Hibridizarea sp

Prin hibridizarea sp , la fiecare atom de carbon rămân doi orbitali, $2p_y$ și $2p_z$, nehibridizați.

Orbitalii sp sunt coliniari, iar orbitalii p , nehibridizați, sunt dispuși în planuri perpendiculare unul față de celălalt, dar perpendiculari și pe planul orbitalilor sp .

Un atom de carbon hibridizat sp apare în metilena triplet CH_2 .

3.3. Polaritatea legăturilor covalente

În moleculele compuse din atomi sau grupe de atomi identice ($H-H$, CH_3-CH_3 etc.), perechea de electroni a covalenței este repartizată uniform între cele două nuclee.

Legătura covalentă nu este deci polarizată, iar molecula este nepolară.

Dacă molecula este formată din atomi diferiți, electronii legăturii covalente sunt atrași spre unul din nuclee, deoarece electronegativitățile lor sunt diferite.

Legătura covalentă devine în acest caz polarizată, iar molecula este polară.



Polaritatea unei legături covalente se exprimă prin momentul electric sau dipolmomentul legăturii, măsurat în debye (D).

$$\mu = e \cdot d; 10^{-10} \text{ u.e.s.} \cdot 10^{-8} \text{ cm} = 10^{-18} \text{ u.e.s.} \cdot \text{cm} = 1D$$

Momentul electric este o mărime vectorială, caracterizată prin direcția sa și se reprezintă printr-o săgeată îndreptată de la polul pozitiv spre polul negativ.

● **Polaritatea moleculelor covalente**

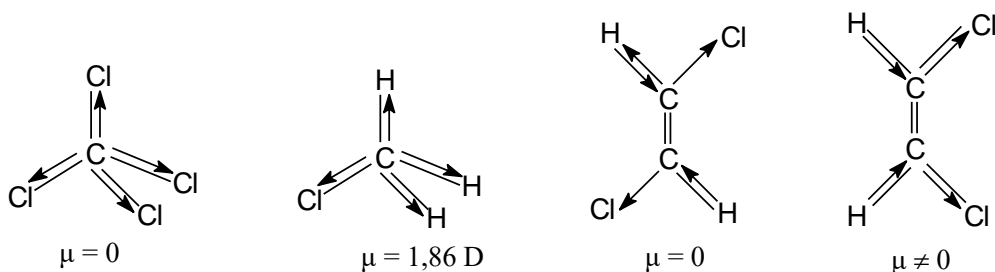
La *moleculele biatomice*, momentul de dipol este momentul legăturii.

În cazul moleculelor poliatomice, există un centru al sarcinilor pozitive și un centru al sarcinilor negative.

La *moleculele nepolare*, formate din atomi diferiți, centrul sarcinilor pozitive corespunde cu centrul sarcinilor negative.

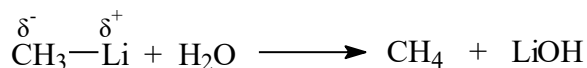
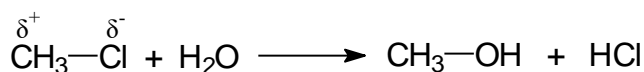
În *moleculele polare* aceste centre nu mai corespund, iar molecula prezintă un moment electric permanent.

Momentul electric (de dipol) molecular este dat de suma vectorială a momentelor electrice ale legăturilor din moleculă.



Valoarea momentelor de dipol dă indicații privind structura moleculei. De exemplu, prin valoarea momentului de dipol pot fi diferențiate izomerii cis de izomerii trans.

Polaritatea legăturilor covalente poate fi stabilită și pe baza comportării compușilor organici. Astfel, în reacția cu apă, atomii cu polaritate pozitivă vor fixa grupa HO⁻, iar cei cu polaritate negativă vor fixa H⁺.

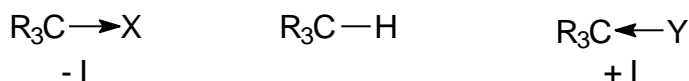


3.4. Deplasări de electroni în legături covalente

• Efectul inductiv

În compușii organici nu există legături total covalente. În moleculele formate din atomi diferiți, electronii sunt atrași spre atomii mai electronegativi. Potrivit teoriei electronice, *deplasarea electronilor unei legături covalente spre unul din atomi se numește efect inductiv și se notează cu I*. Dacă *deplasarea electronilor σ este permanentă, efectul inductiv este numit static (I_s), iar când este temporară, provocată de mediul extern, efectul inductiv este numit dinamic (I_d)*.

Evaluarea efectului inductiv se face în raport cu atomul de hidrogen, legat covalent de atomul de carbon.



Conform teoriei electronice, efectul inductiv se transmite prin legături C-C de-a lungul unei catene, până la 3-4 atomi de carbon.

În cazul atomilor sau grupelor de atomi atrăgătoare de electroni efectul $-I$, crește cu creșterea electronegativității $-\text{NH}_2 < -\text{OH} < -\text{F}$.

Pe de altă parte: $-\text{F} > -\text{Cl} > -\text{Br} > -\text{I}$.

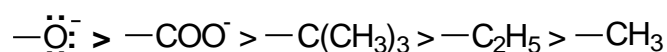
Se observă că odată cu mărirea volumului, atracția nucleului asupra electronilor de valență scade deoarece straturile intermediare ecranează efectul de atracție al nucleului.

Efectul $-I$ al grupelor cu sarcină pozitivă întregă este deosebit de puternic.

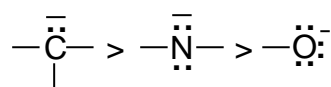


Efect respingător de electroni $+I$ prezintă grupele cu sarcini negative (de ex. RO^-) și grupele alchil.

Pentru grupele de mai jos, efectul $+I$ variază în ordinea:



La fel,



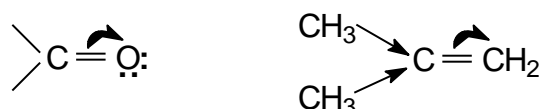
• Efectul electromer

Este rezultatul deplasărilor de electroni în legăturile multiple.

Teoria electronică prevede pentru legăturile multiple, în afara efectului inductiv, posibilitatea deplasării unei perechi de electroni spre unul din cei doi atomi ai legăturii (efect E).

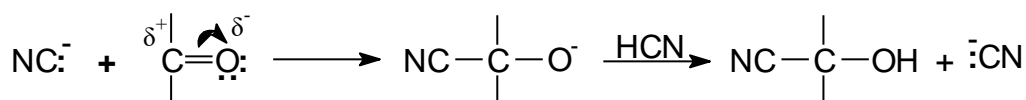
Deplasarea electronică parțială a electronilor spre unul din atomi este permanentă și există în moleculă în starea ei fundamentală, deci în absența unui reactant. Se numește deplasare de electroni statică sau efect electromer static și se notează cu E_s .

Deplasarea statică de electroni se reprezintă cu ajutorul unor săgeți curbe.



Deplasarea totală a unei perechi de electroni spre atomul cel mai electronegativ este o deplasare de electroni dinamică sau efect electromer dinamic și se notează cu E_d .

Deplasarea electromeră dinamică are loc numai în cursul unei reacții chimice, în prezența unui reactant care determină această deplasare totală.



În acest exemplu, fixarea ionului NC^- la atomul de carbon se face simultan cu deplasarea unei perechi de electroni ai legăturii duble $\text{C}=\text{O}$ spre atomul de oxigen mai electronegativ.

Deplasările electromere pot fi de asemenea rezultatul unor efecte de conjugare.

Conjugarea este caracteristică sistemelor cu mai multe legături duble și atomi cu electroni neparticipanți.

Deplasările de electroni în aceste sisteme sunt mai pronunțate, iar electronii ocupă poziții intermediare, care nu mai corespund cu formulele prin care se simbolizează moleculele.

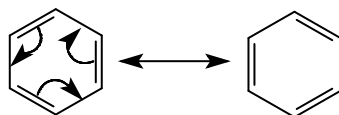
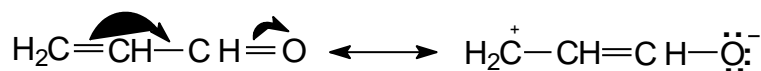
Acest efect este efectul de conjugare sau efectul mezomer și este reprezentat prin săgeți curbe sau prin scrierea formulelor cu sarcini despărțite, corespunzând deplasării totale a electronilor.

Structurile limită nu există în realitate, adevărata repartizare a electronilor fiind intermediară celor reprezentate prin formule. Molecula are așadar o structură mezomeră.

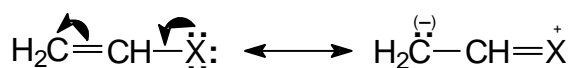
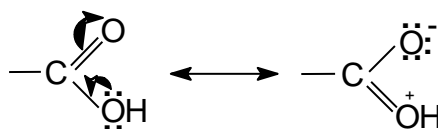
Mezomeria este reprezentată printr-o săgeată cu două capete (Arndt, 1929).

Există,

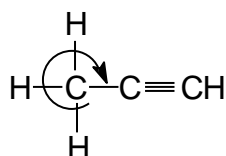
- *conjugări π-π;*



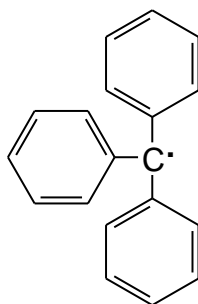
- *conjugări p-π* între electronii neparticipanți ai unui atom și electronii π ai unei duble legături vecine;



- *conjugări π-σ*, între electronii π ai unei legături duble sau triple și electronii σ ai unor legături simple (hiperconjugări);

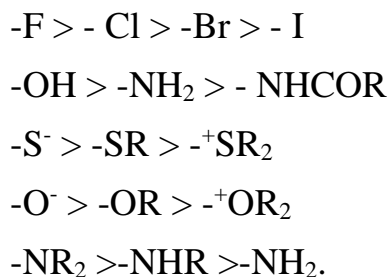


- *conjugări între electronii π și electronii neîmperecheați;*

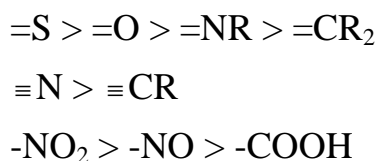


Efectul electromer dinamic are același sens cu cel static și accentuează polaritatea legăturilor π.

Efecte +Es exercită atomii sau grupele de atomi:



Efecte -Es, datorită conjugării π - π , prezintă următoarele legături multiple:



În cazul prezenței simultane a celor două efecte E și I, efectul electromer este predominant.

De exemplu, în clorura de vinil, clorul are efect +E și -I. Aceste efecte nu se produc la aceeași electroni. Efectul -I al clorului constă într-o atracție nediferențiată asupra electronilor din legăturile vecine, în timp ce efectul +E constă în interacția specifică dintre dubletul de $e^- \pi$ din dubla legătură și dubletele de electroni ale clorului. Efectul +E este mai puternic. Cele două efecte ar conduce la sarcini diferite, la aceeași atomi, însă cum efectul electromer este mai puternic, el hotărăște prezența sarcinii negative la grupa CH_2 .

3.5. Energia legăturilor covalente

Potrivit mecanicii cuantice, *la formarea unei legături covalente între doi atomi, se eliberează energie.*

Legătura formată este cu atât mai stabilă, deci mai săracă în energie, cu cât energia eliberată este mai mare.

Ruperea (disocierea) unei legături necesită o cantitate de energie identică cu cea eliberată la formarea ei.

Așadar, **energia de disociere D** este cantitatea de energie eliberată sau consumată la formarea, respectiv ruperea, unei legături covalente.

Energia de disociere este o constantă a legăturii.

În cazul moleculelor biatomice, energia de disociere a legăturii este aceeași cu energia de disociere a moleculei, iar în cazul celor poliatomice, energia unei legături depinde de tipul legăturii și nu depinde de natura moleculei.

Moleculele cu energii de disociere mai mici sunt, în general, mai reactive.

În tabelul de mai jos sunt prezentate câteva valori pentru energia de disociere a unor legături din compuși organici.

Tabelul 2.1

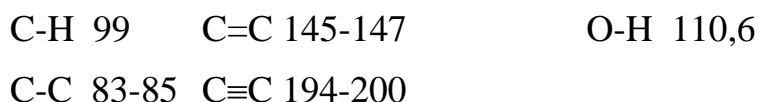
Energia de disociere a unor legături din compuși organici

Legătura	Kcal/mol	Legătura	Kcal/mol
C-H (metan)	112	CH ₂ =CH-CH ₂ -H	87
C-C (C ₂ H ₆)	88	C ₆ H ₅ -CH ₃	72
(CH ₃) ₃ C-H	91	C-H (C ₆ H ₆)	112

În chimia organică, compararea și evaluarea legăturilor chimice se face cu ajutorul energiei de legătură care reprezintă o valoare medie a energiilor de disociere ale legăturilor individuale.

Energia de legătură nu poate fi comparată cu energia de disociere, deoarece în timp ce energia de legătură este o valoare aproximativă, energia de disociere reprezintă valoarea exactă a tipului de legătură.

Energia de legătură este determinată prin metode termochimice. Iată câteva valori ale energiei de legătură E_1 (kcal/mol).



3.6. Forțe de atracție între molecule

• **Forțele van der Waals** sunt forțe slabe de atracție între molecule covalente nepolare. Se manifestă în stare lichidă și mai ales în stare solidă, când distanțele între molecule sunt mai mici. Forțele van der Waals sunt de natură electrostatică. *Energia forțelor van der Waals este comparabilă cu a căldurilor de vaporizare (câteva kcal/mol).*

Între moleculele hidrocarburilor se exercită forțe intermoleculare de tip van der Waals, a căror tărie crește cu mărirea suprafețelor de contact posibile între molecule. Este explicabil de ce temperaturile de fierbere ale hidrocarburilor cresc cu masa moleculară, deci cu mărirea acestora.



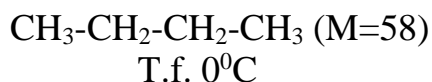
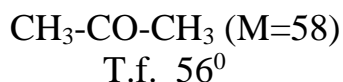
Forțele van der Waals mențin coeziunea moleculelor ce alcătuiesc o rețea cristalină moleculară. Energiile de rețea sunt mici, deoarece forțele de coeziune sunt slabe.



Majoritatea substanțelor organice fierb și topesc până la 360°C. Peste această temperatură se produce descompunerea acestor compuși.

• **Forțele de atracție de tip dipol-dipol** caracterizează moleculele polare, cu moment electric permanent. Sunt mai puternice decât legăturile van der Waals și sunt tot de natură electrostatică.

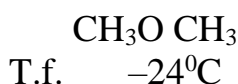
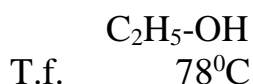
Moleculele ce se atrag prin astfel de forțe au temperaturi de fierbere mai ridicate decât ale hidrocarburilor cu aceeași masă moleculară.



• **Între moleculele cu grupe funcționale polare (-OH în alcooli, -COOH în acizi) apar interacții prin intermediul atomilor de hidrogen din aceste grupe funcționale, numite legături de hidrogen.**

Legăturile de hidrogen sunt mai puternice decât forțele van der Waals, respectiv dipol-dipol, descrise anterior.

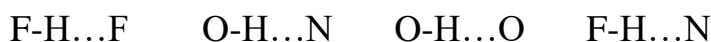
Prezența legăturilor de hidrogen determină o creștere accentuată a temperaturilor de fierbere ale alcoolilor și acizilor organici.



Energia legăturilor de hidrogen (aprox. 5 kcal/mol) este inferioară celei a legăturilor covalente (50-100 kcal/mol), dar superioară energiei forțelor van der Waals (0,05-0,5 kcal/mol, la gazele rare).

Cele mai puternice legături de hidrogen sunt acelea în care atomii electronegativi implicați sunt O, N, F, adică atomi mici cu densitate electronică mare.

Legături de hidrogen puternice:



Legături de hidrogen slabe:

