

# Molecole in rotta di collisione

di Piero Tundo

**Come avvengono le reazioni chimiche? Spesso avete letto che una molecola reagisce,** un composto viene ossidato, avvengono delle trasformazioni chimiche, da una reazione si generano differenti molecole, due composti si combinano per darne un terzo eccetera.

Ma come reagiscono intimamente gli atomi e le molecole? Come fa un atomo a sostituire un altro in una molecola differente?

Sicuramente questa domanda ha suscitato delle fantasie in molti di voi e siete curiosi di sapere come effettivamente poi gli atomi si riconoscono fra loro e si combinano.

Innanzitutto bisogna dire che ci sono molti modi con cui gli atomi interagiscono fra di loro quando due gruppi o due molecole vengono in contatto reciproco. Quindi è necessario che le molecole si urtino fra loro; già certamente sapete che in un gas gli atomi o le molecole hanno dei moti di vibrazione, di rotazione e si spostano in maniera molto convulsa e frenetica e ciò dà origine a urti fra le particelle. Poiché la temperatura aumenta la velocità delle particelle, il numero di urti aumenta di conseguenza. Questo è il motivo per cui, fra l'altro, l'aumento della temperatura fa aumentare la velocità delle reazioni. Tuttavia non tutti gli urti sono efficaci e solo una minima parte di essi produce una reazione.

È stato calcolato che per un gas in condizioni normali di pressione e di temperatura, una particella ha un numero di collisioni pari a  $10^{10}$  al secondo. Inoltre due molecole A e B poste in ugual numero in un  $\text{cm}^3$  allo stato gassoso hanno un numero di collisioni reciproche di  $10^{28}$  al secondo. Se tutti gli urti fossero efficaci la reazione finirebbe in meno di un decimo di yoctosecondo (vedi "Green" n. 2 pag. 41). Questo non avviene; invece per le normali reazioni occorrono alcuni minuti. La velocità delle reazioni sperimentali di regola è più lenta di un fattore che varia da  $10^{-15}$  alla  $10^{-20}$ . Quindi il numero di urti efficaci è estremamente basso.



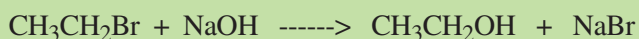
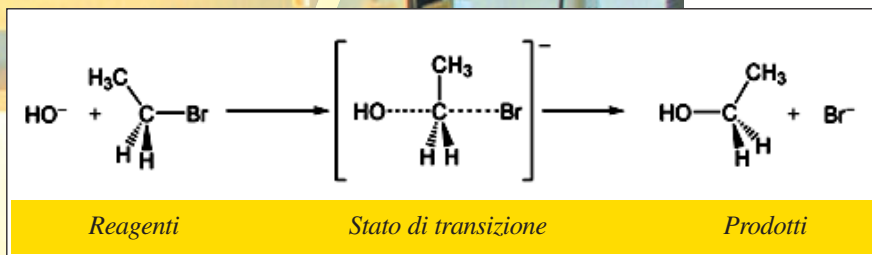
**Se ne deduce che, affinché una reazione abbia luogo e quindi l'urto sia produttivo** devono verificarsi alcune condizioni molto particolari: per esempio, le molecole devono essere orientate nel modo giusto, i legami che si formano o si rompono devono essere specifici, le parti delle molecole che reagiscono devono potersi attrarre e non respingersi eccetera.

Quando l'urto è efficace e quindi dà luogo a una trasformazione chimica, si possono avere diversi tipi di risultati noti come, per esempio, addizione, eliminazione, sostituzione, condensazione.

Vogliamo qui darvi un esempio di cosa si intende per meccanismo di reazione e l'ideale è partire da molecole piccole e semplici.

Mescolando bromoetano e idrossido di sodio in acetone si ottengono etanolo e bromuro di sodio:

# si riconoscono fra loro e si combinano



La reazione appartiene alla classe delle Sostituzioni Nucleofile Alifatiche: **Sostituzione** perché nella molecola di  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}$  lo ione  $\text{Br}^-$  viene sostituito dallo ione  $\text{OH}^-$ ; **Nucleofila** perché lo ione entrante ( $\text{OH}^-$ ) essendo carico negativamente è attratto (*filos* = amore) dal nucleo dell'atomo di carbonio (che ha carica positiva); **Alifatica** perché riguarda molecole alifatiche e non aromatiche.

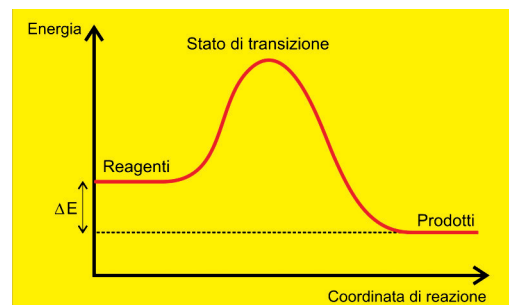
Il meccanismo di questa reazione può essere rappresentato graficamente immaginando di ingrandire le molecole fino a poterle disegnare sul foglio, come abbiamo fatto nel disegno in alto, sotto l'obiettivo della nostra telecamera.

Ha  
collaborato  
Alberto  
Procopio

Come mostrato nella figura accanto, le molecole organiche hanno una precisa disposizione spaziale e possono essere considerate come delle strutture rigide (anche se come abbiamo visto esse vibrano, ruotano e si muovono a una velocità pazzesca). Nel caso del nostro esempio del bromuro di etile il nucleo centrale (l'atomo di carbonio) è circondato da quattro sostituenti (due atomi di idrogeno, un atomo di bromo e un gruppo metile [ $\text{CH}_3$ ] che tendono a disporsi in modo che la distanza tra i sostituenti sia la massima possibile per minimizzare la loro interazione. In particolare questa può essere assimilata a una piramide equilatera a base triangolare (tetraedro) in cui l'atomo sta al centro della piramide mentre i sostituenti si posizionano ai quattro vertici.

Affinché l'attacco dello ione idrossido sia produttivo, questo deve necessariamente avvenire lungo la direzione elettronicamente preferita e cioè a  $180^\circ$  rispetto al gruppo uscente ( $\text{Br}^-$ ).

Lo stato di transizione nella figura non è una molecola ma rappresenta un punto massimo di energia che a tutti gli effetti è il muro che la reazione è obbligata a oltrepassare per dare i prodotti. Possiamo rappresentare questo stato di fatto in termini di energia associata alle singole specie chimiche.



Il diagramma qui sopra mostra ciò e come l'energia associata allo stato di transizione sia effettivamente una barriera che si oppone alla trasformazione dei reagenti nei prodotti.

È importante notare che la formazione del legame tra l'atomo di carbonio e il gruppo entrante ( $\text{OH}^-$ ) e la rottura tra lo stesso atomo di carbonio e il gruppo uscente ( $\text{Br}^-$ ) avvengono in contemporanea e che l'attacco di  $\text{OH}^-$  ha luogo esattamente dalla parte opposta da cui viene rilasciato lo  $\text{Br}^-$ . Se l'attacco avvenisse in direzione diversa questo avrebbe un'energia di attivazione maggiore (un muro più alto da superare). Ma in realtà ciò non avviene.

La molecola ottenuta (etanolo) ha una geometria uguale a quella di partenza (piramidale), ma si è invertita come un ombrello dopo un colpo di vento.

Un'ultima considerazione sul grafico energetico: in genere i prodotti di reazione hanno una energia più bassa dei reagenti; la differenza di energia  $\Delta E$  fra reagenti e prodotti è il calore che si sviluppa dalla reazione.