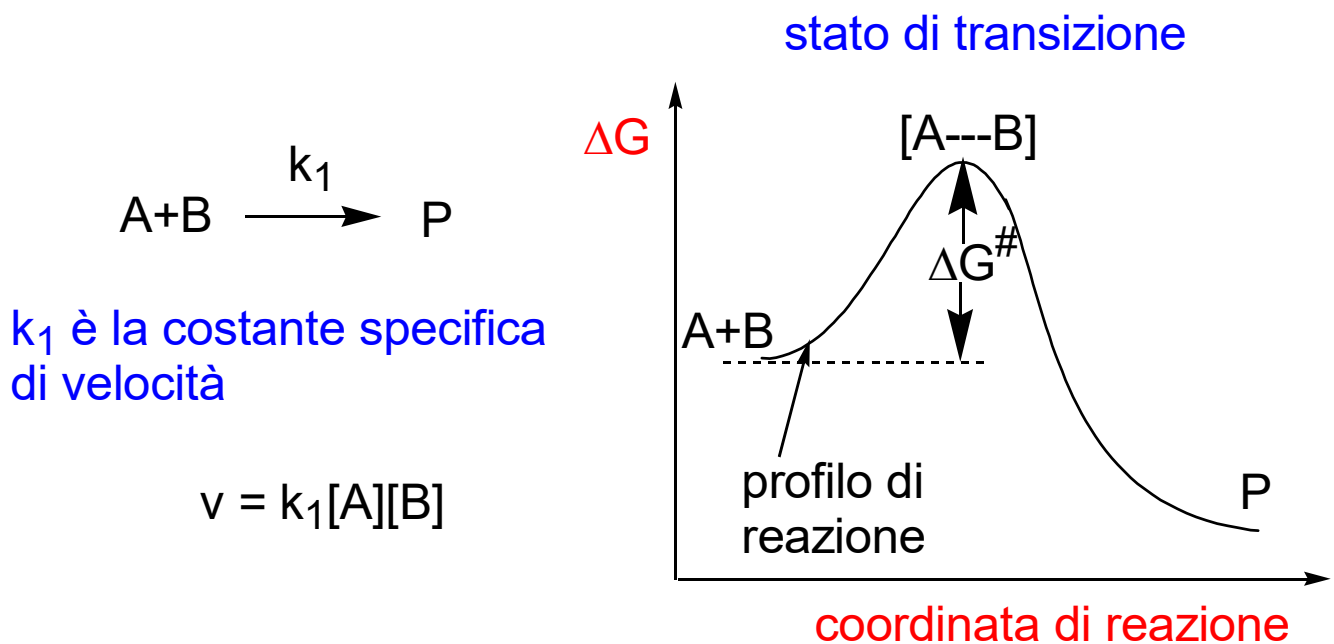


Cinetica e Meccanismo di reazione

Una reazione termodinamicamente favorita, cioè che ha $\Delta G^\circ < 0$, non è detto che effettivamente avvenga, perchè dipende anche dalla sua velocità, cioè dalla sua **cinetica**

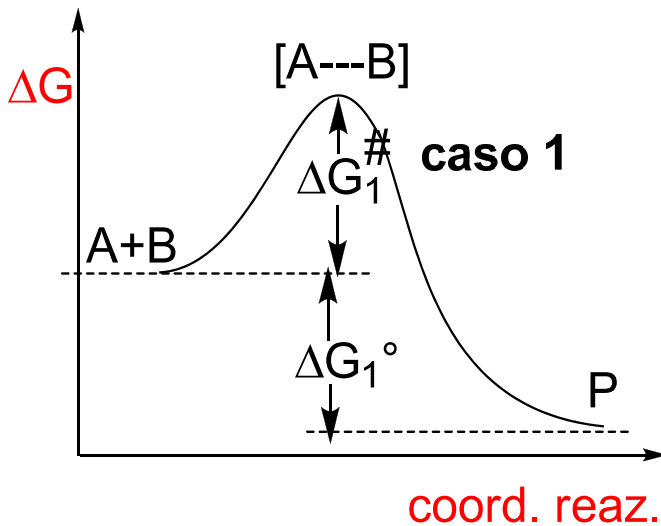
La cinetica di una reazione dipende dalle energie implicate nei processi di formazione e rottura dei legami durante l'evolversi della reazione stessa, cioè dipende **dal meccanismo di reazione**

Le molecole per reagire devono venire a contatto tra loro e quindi vincere la repulsione delle loro atmosfere elettroniche, cioè devono superare una barriera di energia, l'**energia libera di attivazione** ΔG^\ddagger , al cui massimo corrisponde lo **stato di transizione**

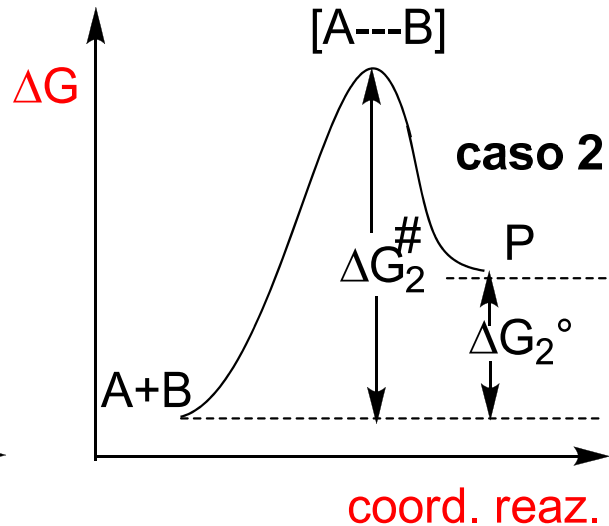


Più alta è ΔG^\ddagger più è bassa k_1 , cioè più è lenta la reazione

Differenza tra K_{eq} e k



$\Delta G_1^\circ = \Delta G^\circ_P - \Delta G^\circ_{(A+B)} < 0$
 per cui la reazione è
 favorita e la $K_{eq} > 1$



$\Delta G_2^\circ = \Delta G^\circ_P - \Delta G^\circ_{(A+B)} > 0$
 per cui la reazione è
 sfavorita e la $K_{eq} < 1$

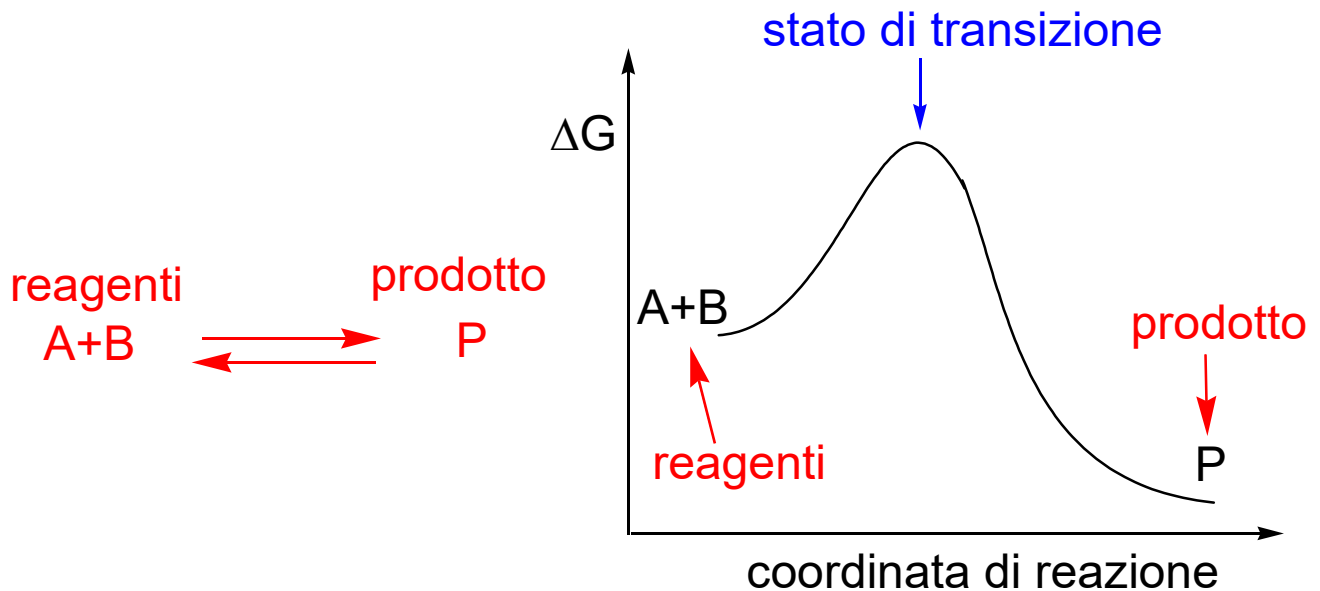
il valore della costante di equilibrio dipende solo dal ΔG° cioè dalla differenza di energia tra prodotti e reagenti

La costante specifica di velocità, k , invece, dipende dall'energia libera di attivazione $\Delta G^\#$, cioè dalla differenza di energia tra stato di transizione e reagenti

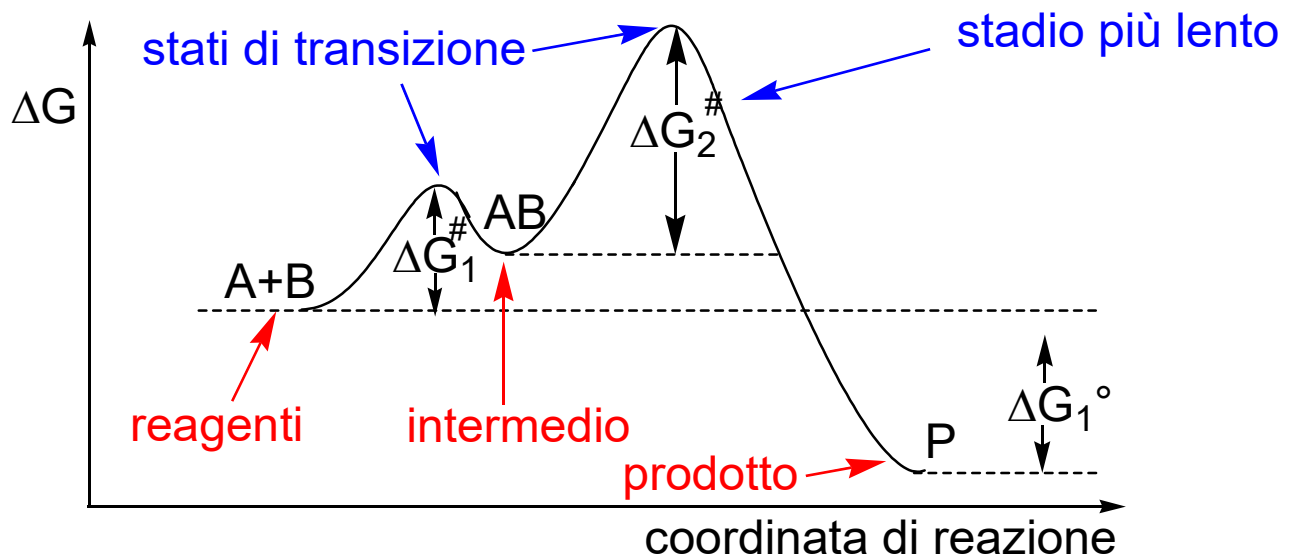
$\Delta G_1^\# < \Delta G_2^\#$ quindi la reazione del **caso 1** è più veloce di quella del **caso 2**

Reazioni ad uno o a più stadi

La reazione ad un solo stadio attraversa un unico stato di transizione



La reazione a più stadi attraversa due o più stati di transizione



$\Delta G_2^\# > \Delta G_1^\#$ cioè la velocità di reazione è limitata dallo stadio 2 che è quello che passa attraverso lo stato di transizione ad energia più alta

Classificazione delle reazioni organiche

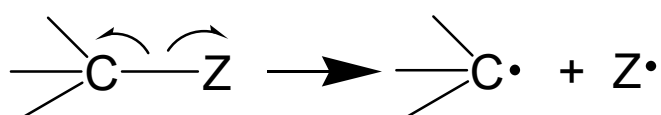
1) in base al tipo di meccanismo

concertata { **senza** la formazione di **intermedi**, in un unico stadio quindi con un **solo** stato di transizione

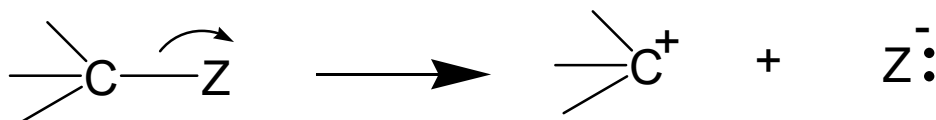
a stadi { **con** formazione di **intermedi** e **più** stati di transizione

Intermedi più comuni

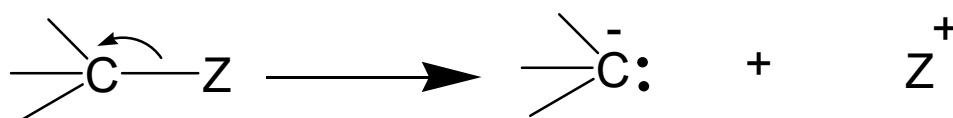
radicali specie aventi elettroni spaiati ottenute da scissioni **omolitiche** del legame



ionici ottenuti per scissione **eterolitica** del legame



carbocatione



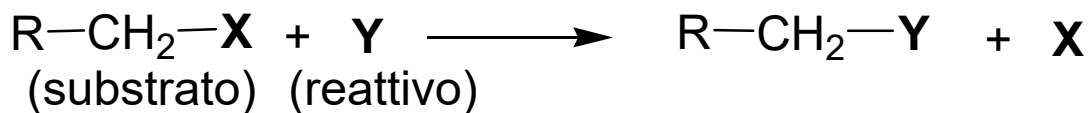
carbanione

Classificazioni delle reazioni chimiche

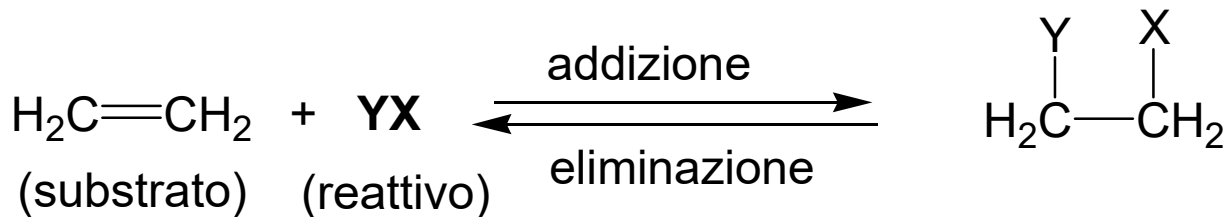
2) In base al tipo di trasformazione del substrato

In una reazione di solito si distingue, per convenzione, tra **substrato**, composto della cui trasformazione siamo interessati, e **reattivo**, composto necessario per indurre la trasformazione

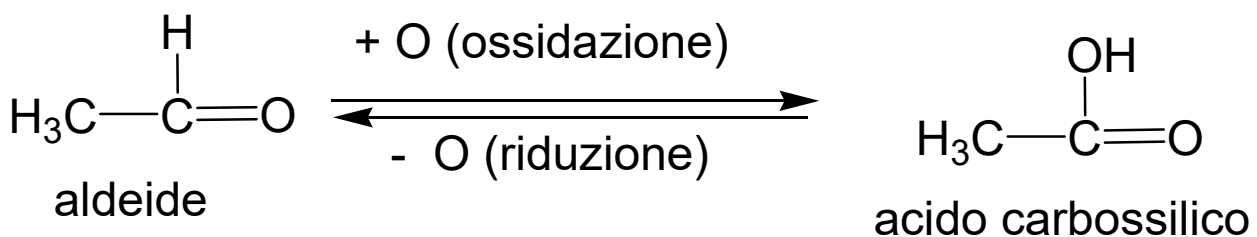
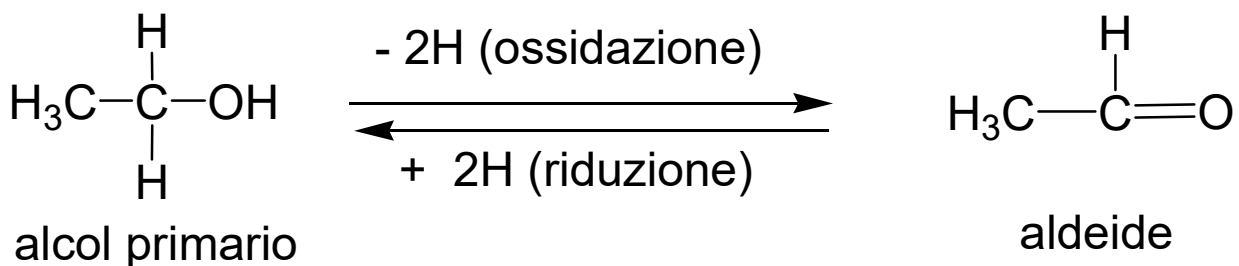
a) sostituzione



b) addizione, eliminazione



c) ossidazione, riduzione

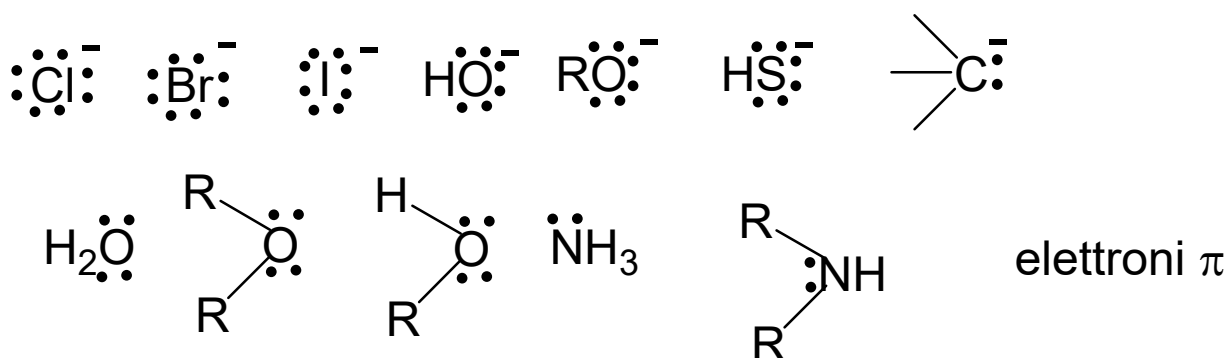


Classificazione delle reazioni

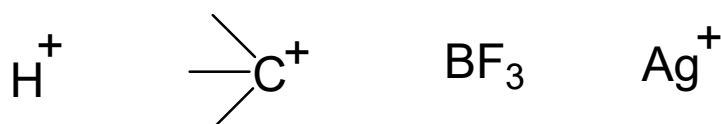
3) in base alla natura del reattivo

nucleofila { quando il reattivo porta l'attacco sul substrato con un doppietto elettronico isolato o di legame ad alta energia. Di fatto è anche una **base di Lewis**

nucleofili più comuni:



elettrofila { quando il reattivo va alla ricerca di doppietti. Di fatto è anche un **acido di Lewis**



Come una base reagirà con una specie che si comporta da acido e viceversa, così:

reattivo nucleofilo $\xrightarrow{\text{reagirà con}}$ **substrato elettrofilo**

reattivo elettrofilo $\xrightarrow{\text{reagirà con}}$ **substrato nucleofilo**

Quindi anche per i substrati si può identificare una natura nucleofila o elettrofila, in particolare gli atomi che nel substrato esplicano questa azione saranno il bersaglio del reattivo di natura opposta

La tendenza di un nucleofilo a reagire con un elettrofilo, e viceversa, è la principale forza motrice delle reazioni in chimica organica