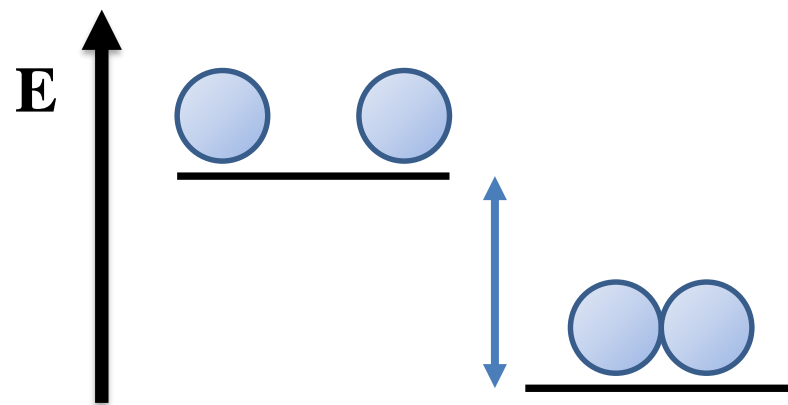
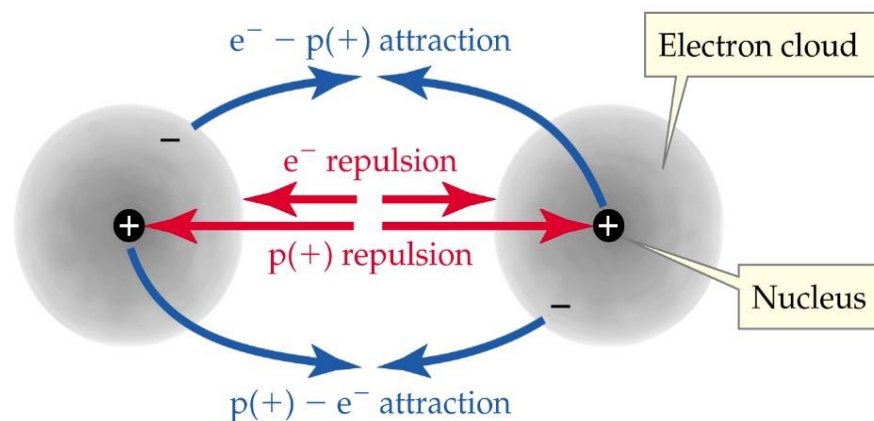


Il legame Chimico

Tutti gli atomi tendono a raggiungere una **configurazione stabile a minore energia**: il cosiddetto «**ottetto**» completo (8 elettroni nel guscio di valenza esterno).

Per fare questo, **gli atomi interagiscono tra loro formando molecole** tramite un **legame chimico**.

Legame chimico: interazione tra due atomi che porta ad uno stato di minore energia. E' la forza risultante tra forze attrattive elettroni-nucleo e repulsive tra nucleo-nucleo.



La maggior parte delle sostanze che ci circondano sono fatte da molecole

Che cos'è una molecola?

**una molecola è un' aggregato
distinto di atomi, uniti da legami
chimici, che è dotato di proprietà
caratteristiche che lo rendono
riconoscibile**

Classificazione dei legami chimici (SCHEMA importante)

1. LEGAME ATOMICO

Quando due atomi legati condividono degli elettroni

- a. legame covalente (Omopolare e Eteropolare)/La condivisione può avvenire in ugual misura o in misura parziale (un atomo di più e l'altro di meno)
- b. legame dativo

2. LEGAME ELETTROSTATICO

Quando due atomi sono legati NON da elettroni ma da una FORZA ELETTROSTATICA

- a. Legame ionico
- b. Legame idrogeno
- c. Legami dipolo vari (Legame ione dipolo e legami di Wan der Waals)

3. LEGAME METALLICO

Avviene nei metalli , quando un elettrone lega i cationi circostanti con questo tipo di legame (NON HA INTERESSE biologico)

4. Legame (INTERAZIONE) idrofobico

Ø LEGAME SIGMA

E' un legame covalente che si forma tra due atomi in cui l'orbitale molecolare che si forma occuperà lo spazio tra i due atomi , o meglio se la nuvola elettronica avvolge omogeneamente la retta ideale che unisce i due nuclei

Ø **LEGAME PI GRECO** E' un legame addizionale che avviene dopo che è avvenuto un legame sigma in cui la nuvola elettronica si trova ai lati (sopra e sotto)della retta ideale che congiunge i due nuclei

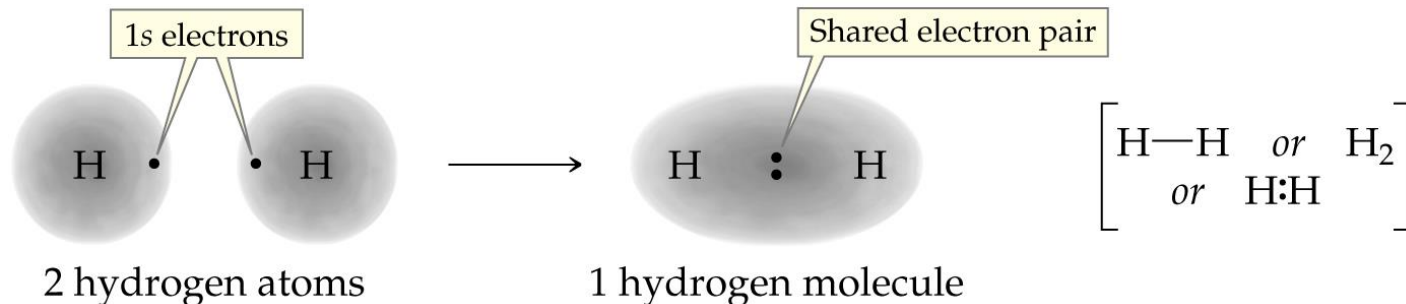
1) Legame covalente

Legame che avviene tra due atomi che **condividono** alcuni elettroni (con la formazione di un orbitale molecolare).

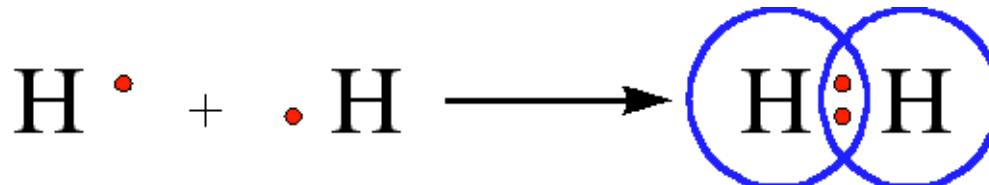
Il gruppo di atomi tenuti assieme da legami covalenti si chiama molecola.

Esempio. Legame covalente nella molecola di idrogeno H_2 (con 1 elettrone).

La configurazione stabile del gas nobile che lo segue è l'elio (He, 2 elettroni).

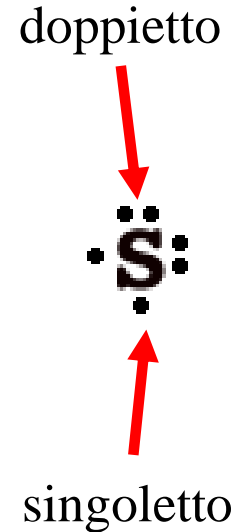


Tratto da Fondamenti di chimica generale ed organica, 8° ed., Ed. Pearson



Nella configurazione elettronica si definisce:

- **Singoletto** o elettrone spaiato
- **Doppietto**, una coppia di elettroni

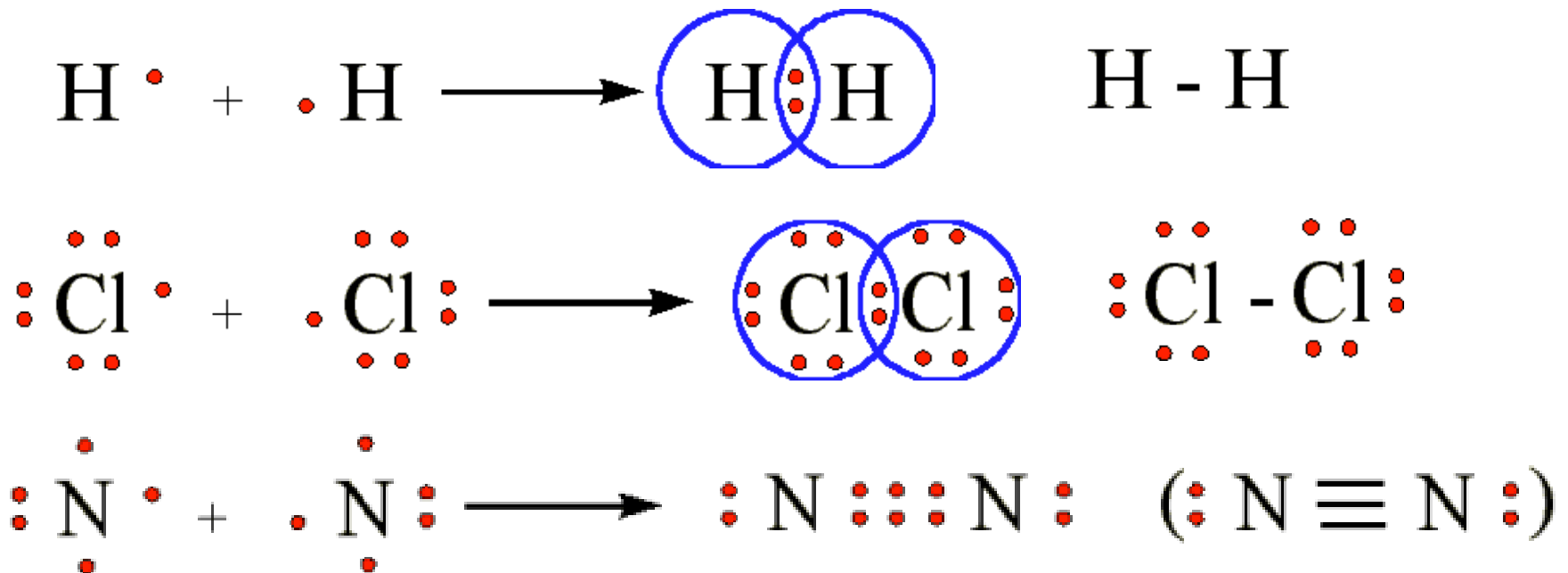


Il legame covalente avviene quanto è presente, negli atomi che interagiscono, **almeno 1 elettrone spaiato** nell'orbitale dell'ultimo livello energetico (**teoria del legame di valenza**).

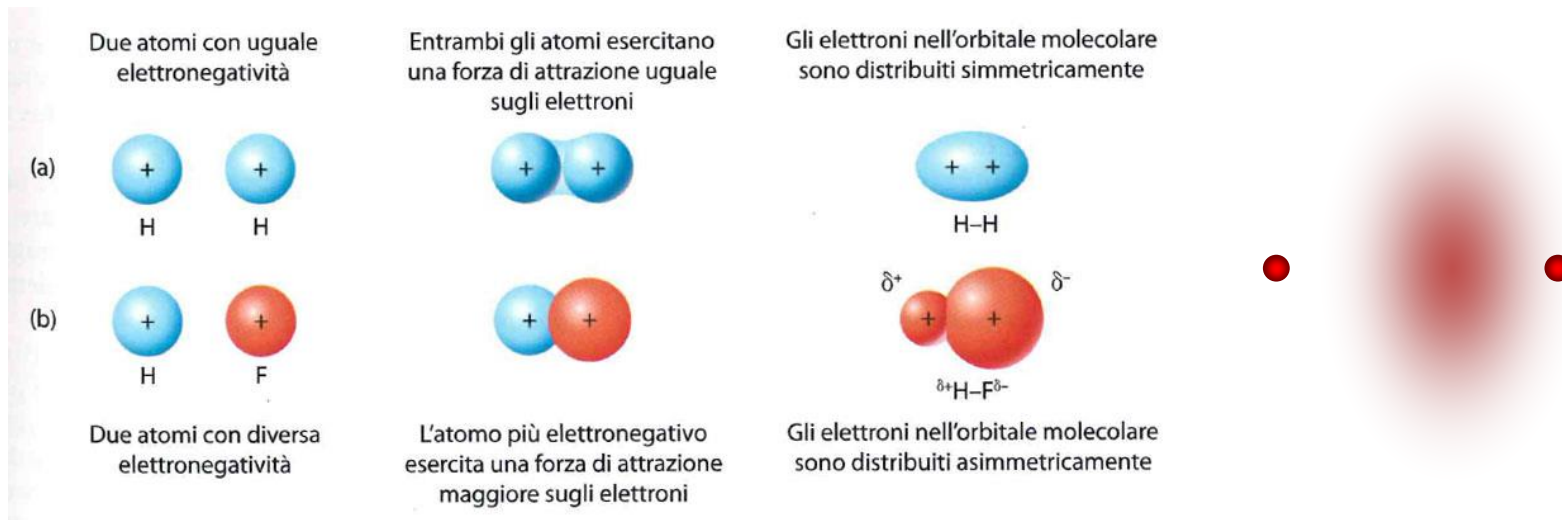
Il legame covalente si forma tra **due atomi con nulla o bassa differenza di elettronegatività**.

Elettronegatività: tendenza di un atomo ad attrarre a se gli elettroni di legame (valore presente nella tavola periodica).

Se gli atomi hanno la **stessa elettronegatività** o con poca differenza, il legame si dice **covalente omopolare**.



Cosa succede quando gli **atomi** hanno una **diversa elettronegatività**?

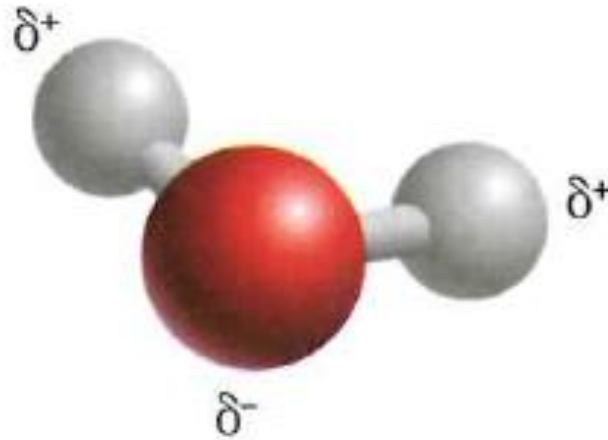


Tratto da Chimica medica e propedeutica biochimica, ed. Zanichelli

L'atomo più elettronegativo attrae a se gli elettroni.

Questo è un **legame covalente eteropolare** ed il **legame** viene definito **polarizzato**.

Anche per l'acqua, i legami tra ossigeno ed idrogeno sono polarizzati con una **parziale carica negativa (δ^-)** sull'ossigeno, ed una **parziale carica positiva (δ^+)** sugli idrogeni.



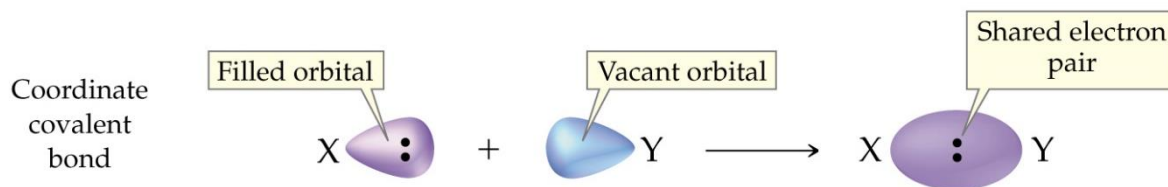
Tratto da Chimica medica e propedeutica biochimica, ed. Zanichelli

Questo tipo di polarizzazione genera un **dipolo**, ed è responsabile delle proprietà fondamentali, fisiche e chimiche, dell'acqua.

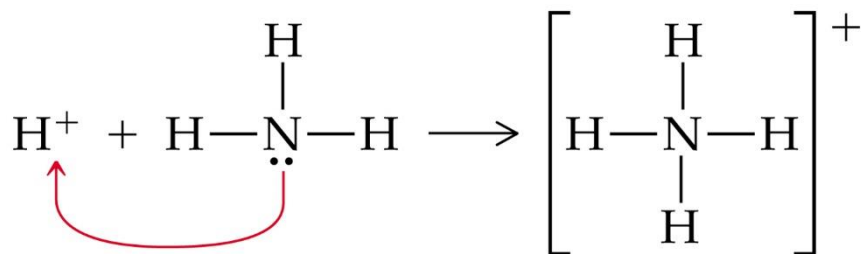
Legame di coordinazione o dativo

Un atomo che possiede un doppietto disponibile lo condivide con un altro atomo a cui mancano 2 elettroni per raggiungere la configurazione stabile (ottetto). **Gli elettroni provengono da un solo atomo.**

Il **legame** risultante si chiama **dativo** o *di coordinazione*.



Tratto da *Fondamenti di chimica generale ed organica*, 8° ed., Ed. Pearson



Esempio: nello ione ammonio l'azoto fornisce un doppietto libero per fare un legame di coordinazione con un idrogeno (protone)

Il legame dativo che si forma ha le stesse proprietà di un legame covalente normale!

2) Legame elettrostatico

a. Legame ionico

b. Legami dipolo:

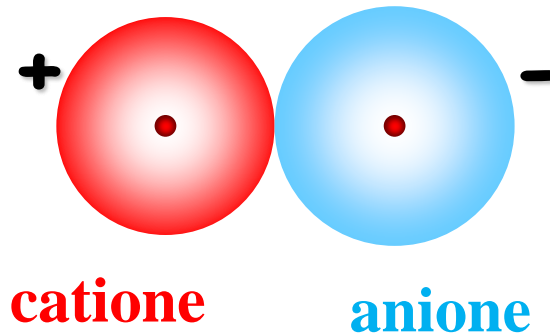
b1) Interazione ione-dipolo

b2) Legame idrogeno

b3) Forze di Wan der Waals)

Legame ionico

Si ha quanto un atomo o molecola carica positivamente, che ha perso un elettrone, interagisce con un atomo o molecola carica negativamente (che ha almeno «un elettrone in più»).



La forza di attrazione tra i due ioni di carica opposta crea un legame puramente elettrostatico, detto **legame ionico.**

Non intervengono orbitali molecolari!!!

INTERAZIONI TRA MOLECOLE E TRA IONI E MOLECOLE (dipolo)

Sono attrazioni più deboli dei legami veri e propri, poiché si instaurano fra specie che già possiedono legami capaci di esistere in forma stabile.

Sono importanti nel determinare le proprietà fisiche delle sostanze (stati di aggregazione, temperature di fusione, ebollizione,...).

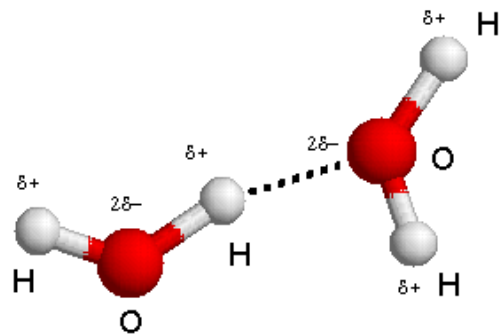
Sono di natura elettrostatica e si dividono in:

1. **Interazioni tra molecole polari** (ione-dipolo).
2. **Legami a idrogeno** (o a ponte di idrogeno)
3. **Forze di van der Waals**

2. Il **LEGAME A IDROGENO**: attrazione che si esercita fra una atomo di idrogeno, legato covalentemente ad una atomo N, O, F (**fortemente elettronegativi**) di una molecola e un atomo di N, O, F, (**fortemente elettronegativo**) di un'altra molecola.

Esempi: fra molecole d'acqua, fra molecole di ammoniaca, fra molecole di alcoli e nei legami intramolecolari di proteine, polisaccaridi o acidi nucleici.

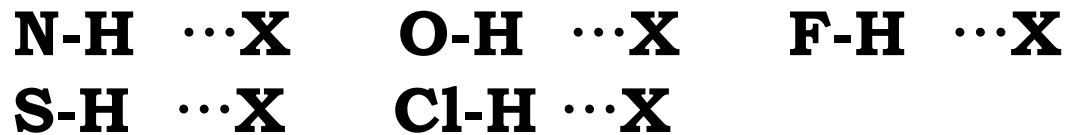
A causa della presenza del legame idrogeno, l'acqua ha un punto di ebollizione maggiore rispetto a composti aventi lo stesso peso molecolare o poco maggiore (H_2S).



d O-O = 2.8 Å E = 5 kcal/mole

Legame a idrogeno

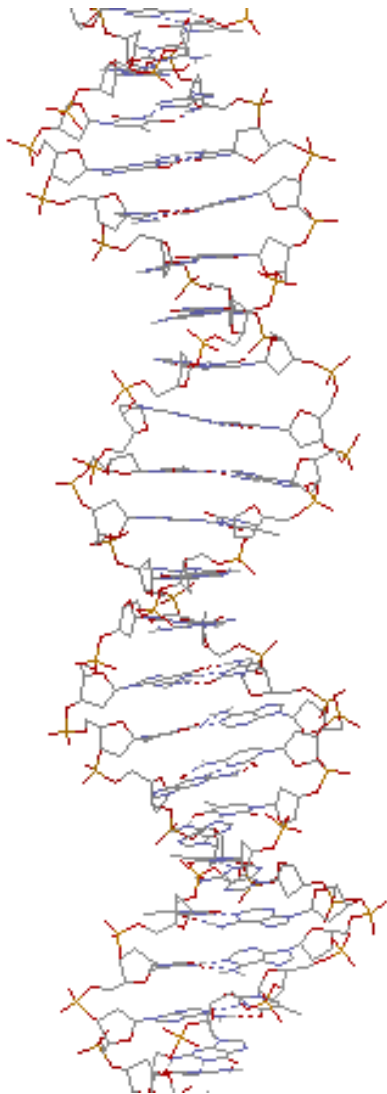
Si hanno legami a idrogeno nei seguenti casi:



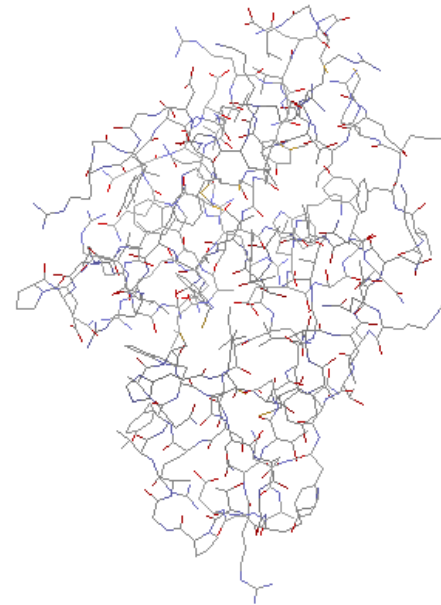
dove X può essere N, O, F, Cl, talvolta anche P, S
Si osservano comunque deboli legami a idrogeno
anche con C-H, P-H, Se-H, Br-H, I-H etc.

❖ **Legame a idrogeno:** è un legame dipolo-dipolo particolarmente forte che si stabilisce tra molecole in cui il polo positivo è sull'H e quello negativo su uno dei seguenti atomi: F, O, N, Cl caratterizzati da una elevata elettronegatività.

Il legame ad idrogeno è alla base del codice genetico



La struttura secondaria delle proteine viene definita sulla base del network di legami ad idrogeno



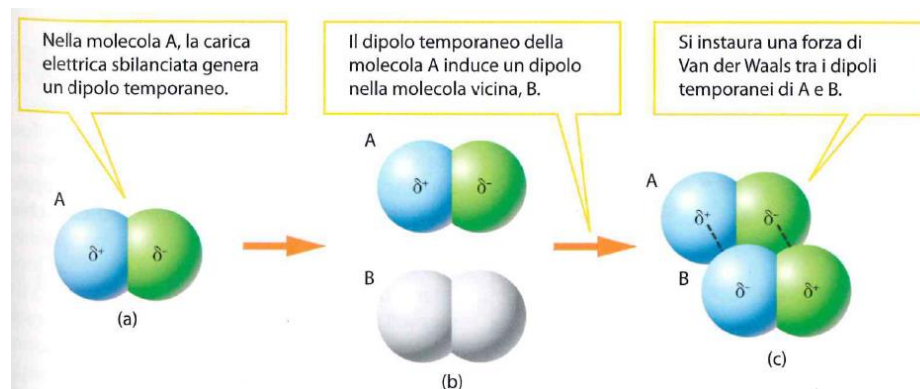
Forze di Van der Waals

Sono **legami deboli di natura elettrostatica** tra molecole polari e non polari.

Sono a corto raggio (esistono solo se le particelle sono vicine) e sono sempre presenti nella materia (determinano lo stato fisico solido-liquido-gassoso).

Si distinguono diversi tipi:

- Interazioni **dipolo-dipolo**, tra 2 molecole polari.
- Interazioni **dipolo-dipolo indotto**, una molecola polare induce un dipolo momentaneo in una apolare.
- Interazioni **dipolo istantaneo-dipolo indotto**, in una molecola apolare si genera uno sbilanciamento di cariche generando un dipolo temporaneo che induce un dipolo in un'altra molecola.



Tratto da *Chimica medica e propedeutica biochimica*, ed. Zanichelli

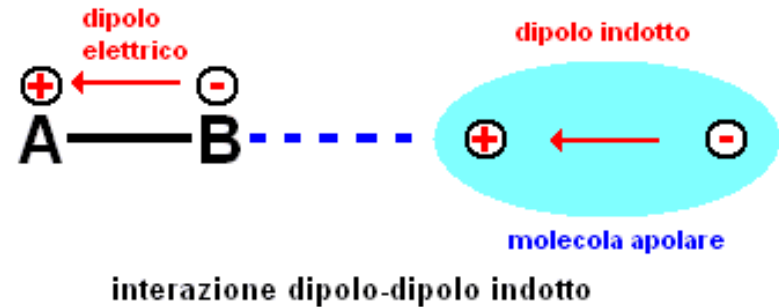
Dr. Alessandro Trentini

Schema riassuntivo Van der Waals

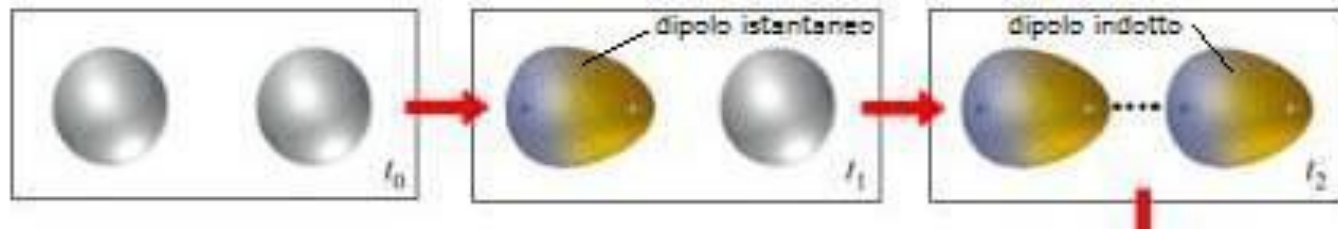
Interazione dipolo-dipolo



Interazione dipolo-dipolo indotto



Interazione dipolo istantaneo-dipolo indotto



Legame (interazione) idrofobico

Si chiama legame idrofobico, o meglio **interazione idrofobica**, la **forza che tiene legate più molecole non polari**, senza che si instauri un tipico legame chimico.

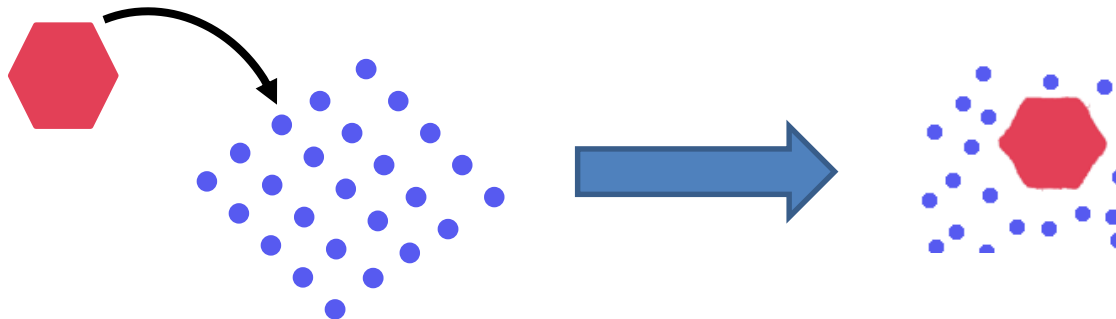
Esempio: 3 molecole di benzene in acqua.



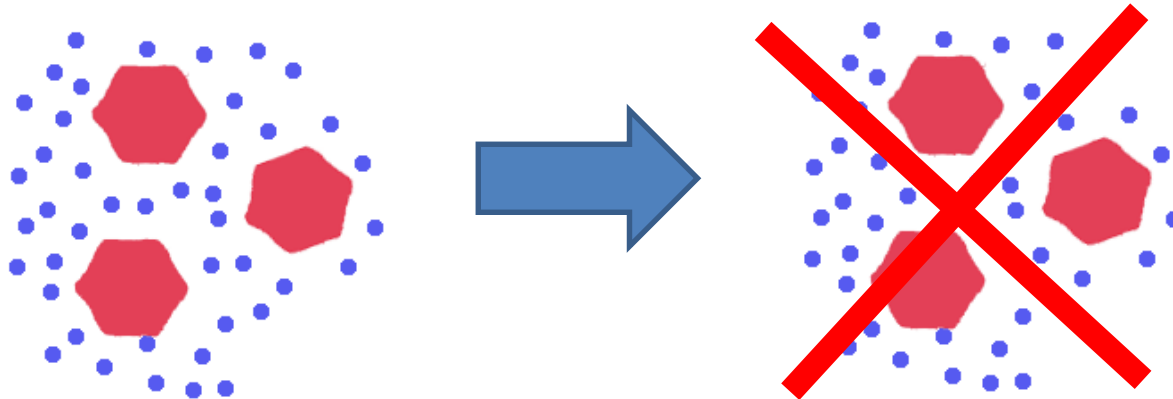
benzene

Molecola apolare che non può formare legami con l'acqua.

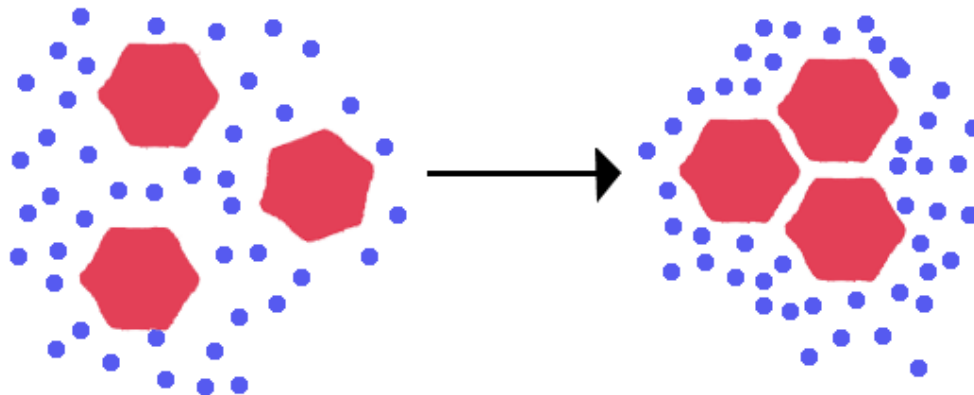
Quando una molecola di benzene viene messa in acqua, rompe i legami ad idrogeno presenti tra le molecole di acqua.



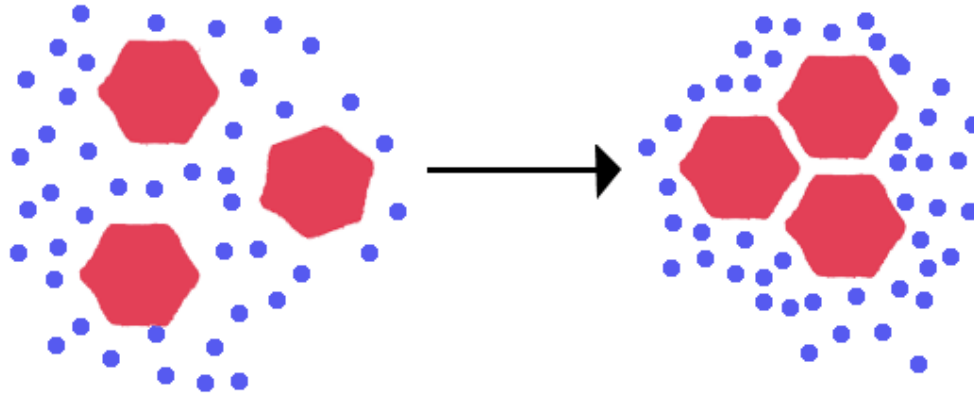
Se aggiungiamo altre molecole senza che si formino altri tipi di legame, queste molecole romperebbero altri legami idrogeno, un **processo energeticamente sfavorito**.



Se, però, **le molecole di benzene si posizionano vicine tra loro** interagendo con legami deboli senza molecole d'acqua tra loro, il numero di legami ad idrogeno rotti è minore!



Perciò, per evitare di rompere molti legami acqua-acqua, le 3 molecole rimangono attaccate tra loro come se fossero legate, come se vi fosse un legame chimico → **interazione idrofobica**.



Le molecole rimangono attaccate perché non riescono a formare legami con le molecole del solvente, che le respingono.

Lo stesso capita, per esempio, con le sostanze grasse (es. olio) che non formano legami con l'acqua.

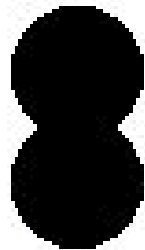
Le interazioni idrofobiche sono molto importanti in biologia perché stabilizzano la struttura di proteine, acidi nucleici e membrane.

Alcuni esempi di Legami in biologia

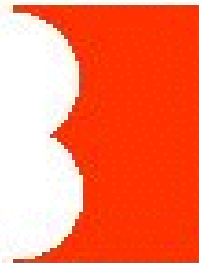
Riconoscimento molecolare

E' il punto di partenza per quasi tutti i processi biologici.

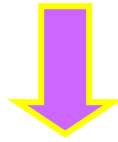
Le molecole interagiscono in una maniera altamente specifica:
modello **CHIAVE-SERRATURA** (Fisher e Ehrilch)



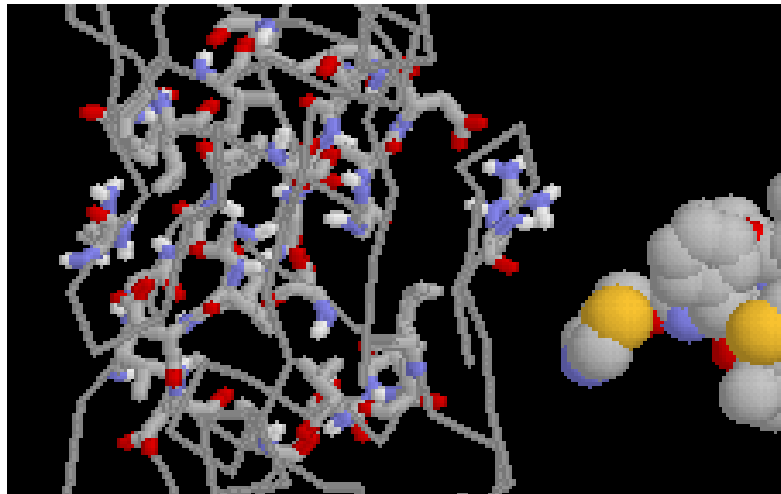
Substrate

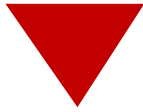


Enzyme



La complementarità geometrica e chimica fra piccole molecole biologiche (LIGANDI) e le strutture dei loro bersagli macromolecolari (RECETTORI) gioca un ruolo molto importante all'interno dei processi biologici.





Ligando e recettore

Legame covalente:

è di gran lunga il più forte dei legami ligando-recettore.

Forma un legame irreversibile. Raramente viene cercato nell'azione di un farmaco (eccezione: chemioterapici nel trattamento del cancro)

Legame ionico o elettrostatico:

è molto importante nelle interazioni ligando-recettore in quanto molti gruppi funzionali dei recettori sono ionizzati a pH fisiologico.

Si formano interazioni reversibili.

Interazioni elettrostatiche:

in forma di forze attrattive ione-dipolo, interazioni dipolo-dipolo e legame H.

Formano legami più deboli del legame ionico.

Sono le interazioni ligando-recettore più diffuse.

La doppia elica ha una larghezza costante

