



Corso Luigi Einaudi, 55 - Torino

Appunti universitari

Tesi di laurea

Cartoleria e cancelleria

Stampa file e fotocopie

Print on demand

Rilegature

NUMERO : 301

DATA : 08/06/2012

A P P U N T I

STUDENTE : Ruggeri

MATERIA : Chimica

Prof. Francia

Il presente lavoro nasce dall'impegno dell'autore ed è distribuito in accordo con il Centro Appunti.

Tutti i diritti sono riservati. È vietata qualsiasi riproduzione, copia totale o parziale, dei contenuti inseriti nel presente volume, ivi inclusa la memorizzazione, rielaborazione, diffusione o distribuzione dei contenuti stessi mediante qualunque supporto magnetico o cartaceo, piattaforma tecnologica o rete telematica, senza previa autorizzazione scritta dell'autore.

**ATTENZIONE: QUESTI APPUNTI SONO FATTI DA STUDENTIE NON SONO STATI VISIONATI DAL DOCENTE.
IL NOME DEL PROFESSORE, SERVE SOLO PER IDENTIFICARE IL CORSO.**

I lezione di Chimica CHIMICA 37 PAGINE 5/10/2010

Materia: tutto ciò che ha una massa e un volume.

Ogni sostanza è definita con una composizione chimica fissa e definita.
Ogni nome è dato seguendo delle regole fisse.

Proprietà fisiche = sono quelle che una sostanza presenta di per sé come il passaggio da ghiaccio ad acqua, non cambia la composizione della materia.

Proprietà chimiche = quando una sostanza interagisce con un'altra.
Ad esempio la ruggine sui metalli.

Il rame ha diverse proprietà fisiche: conducibilità elevata, lucentezza, alta temperatura di fusione e di ebollizione.

L'ottone è l'unione di rame e zinco.

Le proprietà intensive non dipendono dall'entità del campione, temperatura e densità.
Le proprietà estensive, invece, dipendono dalla massa del campione.

Una sostanza subisce una trasformazione fisica quando modifica la propria forma fisica (AGGREGAZIONE) e nella maggior parte dei casi reversibile.

Una trasformazione chimica non è sempre reversibile. La reversibilità è dovuta all'equilibrio.

I 3 stati di aggregazione della materia dipendono dalla loro capacità di riempimento di un contenitore.

Solido \rightarrow Liquido Fusione Solido \rightarrow Gas Sublimazione

Liquido \rightarrow Gas Evaporazione Gas \rightarrow Liquido Liquefazione

L'Energia totale di un corpo è data dall' E_{pot} e E_{cin} . L'energia non viene distrutta, ma viene convertita.

Tutte le trasformazioni fisiche-chimiche sono accompagnate da variazioni di E.

Le sostanze più ricche di energia sono meno stabili e tramite una trasformazione chimica e fisica ottengono una forma più stabile.

miscela \rightarrow si divide fisicamente
composto \rightarrow si divide chimicamente

esempio = Zolfo + Ferro divisibile con la calamita

miscele omogenee



tutte le proprietà dei
costituenti sono uguali
in ogni punto di
dimensioni superiori
a 10^{-6} cm

miscele eterogenee



tutte le proprietà dei
costituenti non hanno
proprietà fisiche e
chimiche uguali in
ogni punto di dimensioni
inferiori di 10^{-6} cm.

II lezione di Chimica

7/10/2010

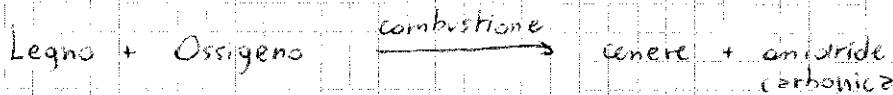
Atomo

- legge della conservazione della massa - di Lavoisier
- Legge della composizione definita e costante - di Proust
- legge delle proporzioni multiple - di Dalton

② il numero di sostanze può variare, le loro proprietà devono variare, ma la quantità totale di materia rimane costante.

Il Flogisto, qualcosa di imponderabile, non può esistere tale cosa fu scoperta da Lavoisier.

Dopo una qualsiasi tipo di reazione la massa non cambia; non subisce variazioni. Perciò si inizia a parlare di bilanciamenti chimici.



② Indipendentemente dalla sua fonte, un particolare composto chimico è costituito dagli stessi elementi nelle stesse frazioni di massa.

$$\text{Frazione in Massa} = \frac{\text{massa elemento}}{\text{massa composto}}$$

$$\text{percentuale} = \text{Frazione in Massa} \cdot 100 = \%$$

Gli elementi hanno una stechiometria fissa.

- Esperimento di Thomson

Il tubo catodico è formato da un tubo, da un anodo e un catodo.

Se magnetizzo esternamente il raggio catodico devia verso l'anodo (+)

hanno dedotto che i raggi erano particelle cariche negativamente.

Thomson, allora, provò a cambiare il metallo del catodo, ma il raggio non cambiò quindi si ipotizzò che c'erano gli atomi e li chiamò elettroni.

Usando sia un campo magnetico che uno elettrico è riuscito a calcolare il rapporto massa/carica dell'elettrone. = $-9,109 \times 10^{-31} \text{ Kg/C}$

- Millikan

Millikan riuscì a calcolare anche la carica utilizzando un tubo con un condensatore nella quale spruzzava dell'olio che passando attraverso una fessura presente nella piastra Paraflex positivamente finiva in un altro luogo. Qui viene ionizzato (cattura gli elettroni) tramite dei raggi X.

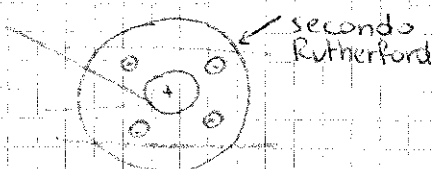
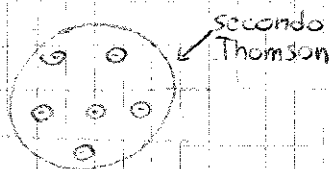
La carica risultante è stata $-1,602 \times 10^{-19} \text{ C} \left[\frac{\text{A}}{\text{s}} \right]$ che differiva dell'1% dal valore noto di $-1,602 \times 10^{-19} \text{ C} \left[\frac{\text{A}}{\text{s}} \right]$

Insieme riuscirono a calcolare il peso di $9,109 \times 10^{-31} \text{ g}$.

Dopo ciò si scoprì che l'atomo era possibile dividerlo ulteriormente in particelle. Ci fu l'esperimento di Rutherford in parallelo alla scoperta della radioattività.

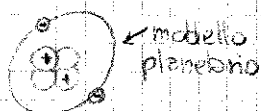
Usò la radioattività per bombardare le particelle e ha notato che la maggior parte del fascio non devia. 1/20.000 delle particelle α (presenti nell'oro e irradiati) facevano deviare il raggio di oltre 90°.

Avevano pensato, quindi, che nell'atomo ci fosse una grossa cosa grossa in grado di deviare il raggio.



La scoperta dei neutroni avvenne subito dopo.

L'atomo è sostanzialmente vuoto, ma all'interno c'è una regione positiva e neutra dove è concentrata la massa dell'atomo.



- Tavola periodica

- I metalli sono sulla sinistra, sono più solidi, liquidi e gas.

Il potassio è un metallo simile al Sodio.

Valenza → capacità di un elemento nel legarsi con un'altro.

Ha un andamento periodico. Utili per le proprietà (i metalli)

- Metalli alcalini perché in acqua hanno proprietà alcaline, morbidi. Sbrigionano idrogeno nell'acqua e vengono tenuti in olio e paraffina. Si fondono a basse temperature.
- Metalli Alcalini-Terrosi, buoni conduttori, fusione più alta rispetto ai metalli alcalini.
- Metalli di transizione si riescono a trovare ovunque in natura.
- Il Boro è un semi-metallo, mentre l'Alluminio è un metallo.
- Il carbonio si trova ovunque, anch'esso, si presenta in 2 forme in natura, grafite e diamante. La grafite è un buon conduttore mentre il diamante non conduce, si forma con una grande pressione dalla grafite.
- Il Fulvene è una forma data al carbonio C_6 , simile ad un pallone.
- Il silicio e il germanio sono molto usati nei circuiti.
- Gli Alogeni sono tutti gas, esistono come molecole, il Bromo è l'unico liquido, non conducono e sono antiteci.
- I Gas nobili non reagiscono e esistono pochi legami con gli altri elementi.
- L'elio allo stato liquido si forma a $-272^{\circ}K$.

- Ipotesi di Planck

Gli atomi e le molecole possono emettere e assorbire solo quantità discrete di energia, i quanti. Prima si pensava che si potesse emettere e assorbire qualsiasi quantità.

$h = 6,626 \times 10^{-34}$ - n quantic (1, 2, 3) = Energia Radiazione Emessa.

$E = n h \nu$ quadrato modello di Bohr nella quantizzazione
 ↑
 ipotesi di Bohr.

Se prendiamo idrogeno gassoso e lo mettiamo in un tubo e diamo corrente all'idrogeno, questo uscendo da una fenditura, finisce su un prisma e lo spettro non è continuo, al contrario di un raggio di elettroni diretti verso un prisma. Il suo spettro sarebbe costante.

- Modello atomico di Bohr.

Ipotesi la presenza di certi livelli di energia permessi "stazionari" e l'elettrone ai orbita. (orbita circolare).

Quando l'atomo assorbe energia, dei fotoni sull'atomo, l'elettrone, che è stazionario, può saltare su un livello più esterno (eccitato) e quando torna in "stato fondamentale" emette un fotone che sarà uguale alla differenza tra l'energia che ha quando eccitato e quella in stato fondamentale.

Energia fotone = energia eccitato - stato fondamentale.

Si genera così una riga spettrale

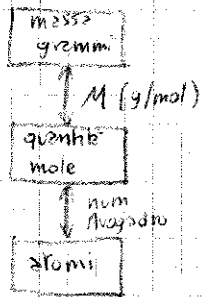
Il numero quantico è associato al raggio dell'orbita, i numeri quantici più grandi caratterizzano gli elettroni più lontani mentre quelli più piccoli sono quelli più vicini al nucleo.

Funzionano solo con elementi di un solo elettrone = H, He⁺, Li²⁺

$r_{\text{bohr}} = 53 \text{ pm} = 53 \cdot 10^{-12} \text{ m}$

Elementi monoatomici = difficile trovarli in natura, sono gli elementi base. (H, O)

Elementi molecolari = sono l'unione degli elementi monoatomici tra loro (H₂, O₂, C₂, ...)



Problemi:

1) Quanti g di Ag sono contenuti in 0,0342 mol di Ag?

$$\text{massa molare di Ag} = 107,9 \text{ g/mol}$$

$$\text{massa Ag} = 0,0342 \text{ mol} \times (107,9 \text{ g/mol}) = 3,69 \text{ g di Ag}$$

2) Quanti atomi di Fe sono presenti in 95,8 g di Fe.

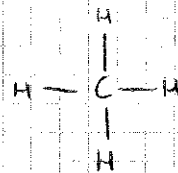
$$\text{mole di Fe} = 95,8 \text{ g} / 55,85 \text{ g/mol} = 1,72 \text{ mol}$$

$$\text{num. atomi} = 1,72 \text{ mol} \times 6,022 \times 10^{23}$$

Formule brute



Semi-strutturata



il metano è di forma tetraedica $\text{H}-\text{C}-\text{H} = 109,5^\circ$

dice in che modo
gli atomi sono
legati tra loro

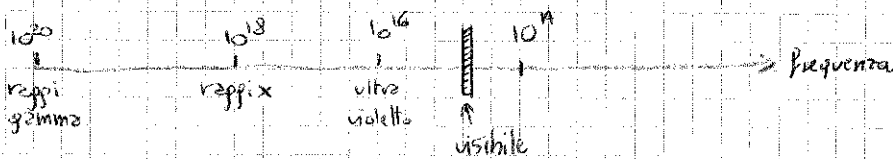
Chimica IV Lezione

12/10/2010

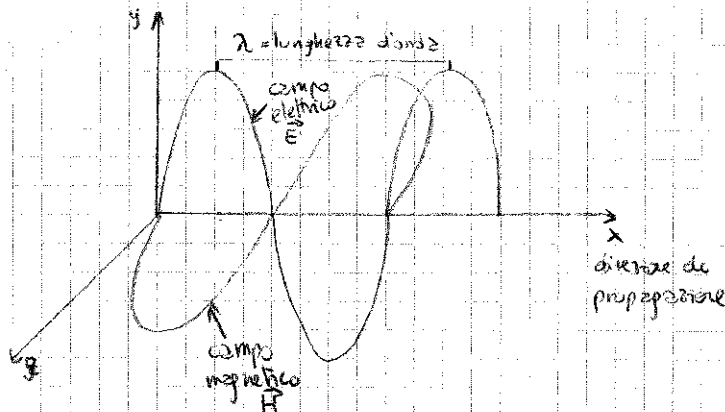
L'utilità del bilanciamento è quella di bilanciamento delle masse

Argomenti:

- spettro di assorbimento e emissione
- ipotesi di De Broglie
- Heisenberg
- equazione di Schrödinger
- orbitali atomici



La luce emessa dal sole contiene tutte le radiazioni visibili che vanno dal rosso, arancio, giallo, azzurro indaco e violetto



- onda
- lunghezza d'onda λ (m)
- frequenza ν (1/s)
- velocità (m/s) = $\nu \lambda$
- velocità della luce $c = 3 \cdot 10^8$ m/s
- $\nu = c/\lambda$

La luce visibile è un tipo di radiazione elettromagnetica, energia che si propaga mediante campi elettrici e magnetici di intensità variabile durante la propagazione dello spazio. Modello ondulatorio classico.

spettro di emissione a righe → Gli ELEMENTI, portati allo stato gassoso e miscelati ad altre T, emettono luce. Questa luce da uno spettro costituito da righe di un colore caratteristico dell'elemento su fondo nero.

spettro di assorbimento a righe → Se la luce bianca viene analizzata dopo aver attraversato un elemento allo stato gassoso, lo spettro colorato continuo della luce bianca presenta delle righe nere, queste segnalano il mancato arrivo di radiazioni che sono state assorbite dall'elemento

De Broglie

TEORIA CLASSICA

Materia = particelle, massive

Energia = continua, ondulatoria

TEORIA QUANTISTICA

Poiché la materia è discontinua e particellare, forse è discontinua e particellare anche l'energia.

- l'energia è quantizzata, solo certi valori sono permessi.
- l'energia è discontinua e particellare (fotone)
- l'energia degli atomi è quantizzata, l'elettrone emette un fotone quando cambia orbita.
- Poiché l'energia è di natura ondulatoria, forse è di natura ondulatoria anche la materia.

De Broglie:

Tutta la materia si muove di moto ondulatorio: l'energia degli atomi è quantizzata a causa del moto ondulatorio degli elettroni.

Ad una particella di massa m che viaggia alla velocità v (quantità di moto mv) può essere associata una lunghezza d'onda (di De Broglie) $\lambda = h/mv$.

ONDA STAZIONARIA: in alcuni punti l'ampiezza della vibrazione è indipendente dal tempo.

Se λ è il doppio della lunghezza della corda, d , il massimo spostamento della corda avviene al centro (modo fondamentale)

Altri modi di vibrazione possibili si ottengono bloccando la corda in posizioni intermedie: poiché le vibrazioni devono iniziare e finire in certi punti fissi

- onde stazionarie - allora non tutte le lunghezze d'onda saranno permesse:

le vibrazioni sono quantizzate!

L'interatomicità dell'elemento è uguale alla lunghezza d'onda del raggio, quindi si crea una fenditura (diffrazione).

Se l'elettrone si comporta come un'onda deve dare diffrazione se la distanza tra le fenditure del reticolo è dell'ordine della sua λ . Infatti l'elettrone si comporta come un'onda!.

$$r_{\text{Bohr}} = 0,53 \text{ \AA}$$

- ↓
- raggio della prima orbita di Bohr.
- raggio della superficie sferica a cui corrisponde la massima probabilità di trovare l'elettrone intorno al nucleo.

Orbitali

Li orbitali sono soluzioni dell'equazione d'onda che descrive il moto dell'elettrone

$\Psi(x, y, z)$ funzione d'onda \Leftrightarrow orbitale

$|\Psi|^2$ dà la probabilità di trovare l'elettrone in un certo volume dello spazio.

numeri quantici (quaterna)

n → n. quantico principale → da 0 a ∞ (si usano solo fino a 7)

l → n. quantico secondario → $0 < l < n-1$

m → n. quantico magnetico → $-l < m < l$, 0 compreso

Ogni orbitale può descrivere il comportamento di due elettroni che sono identicizzati dai numeri quantici descritti da:

s → n. quantico di spin → vale $+\frac{1}{2}$ o $-\frac{1}{2}$

n → individua i livelli energetici

l → " i sottolivelli energetici

m → indica l'orientamento degli orbitali

$l=0$ è un sottolivello s

$l=1$ è un sottolivello p

$l=2$ è un sottolivello d

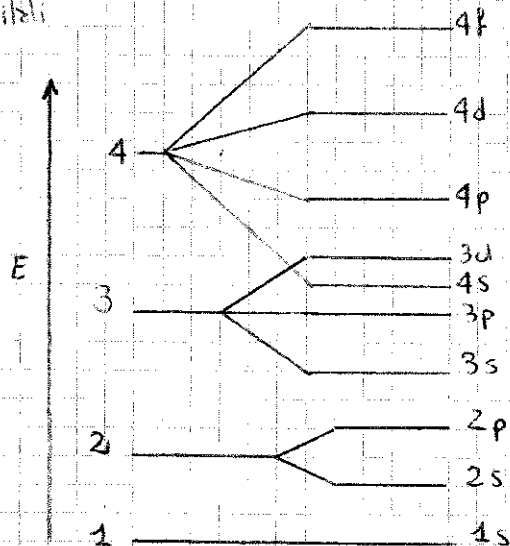
$l=3$ è un sottolivello f

un sottolivello s contiene 1 orbitale

" p " 3 orbitali

" d " 5 orbitali

" f " 7 orbitali



Chimica ▽ lezione 14/10/2010

Equazione di Schrodinger $\lambda = h/mv$

il moto di un'onda ^{elettronica} è descrivibile con un'equazione d'onda differenziale che descrive la sua ampiezza in funzione dello spazio e del tempo.

Nel caso dell'elettrone, che si comporta da onda stazionaria, l'ampiezza è solo data da spazio e tempo.

Le soluzioni saranno coppie di valori di E, ψ, n, m, l gli orbitali limitano gli elettroni (teoricamente)

1s è l'orbitale più vicino al nucleo.

La probabilità di trovare elettroni è data sulla sezione aumentando il raggio dell'orbitale possono diminuire gli elettroni.

Probabilità che l'elettrone sia in uno strato, in funzione della distanza del nucleo.

La prob. massima è di 0,53 Å.

gli orbitali di tipo f li hanno i metalli di transizione.

ns np nd nf → indica il livello

n=1	n ² =1	1s → (1 orbitale)
n=2	n ² =4	2s 2p → (3 orbitali)
n=3	n ² =9	3s 3p 3d → (5 orbitali)
n=4	n ² =16	4s 4p 4d 4f → (7 orbitali)

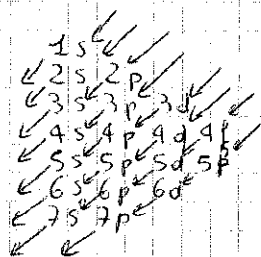
per ogni n si possono fare 2ⁿ forme di numeri quantici

2s ha energia più bassa di 2p

Litio → Li 3e⁻ $\begin{matrix} 1s \\ \uparrow\downarrow \\ 2e^- \end{matrix} \begin{matrix} 2s \\ \uparrow \\ 1e^- \end{matrix}$ → risente della schermatura di 1s² perché completamente pieno.

1s, (2s, 2p), (3s, 3p), (4s, 3d, 4p), (5s, 4d, 5p), (6s, 4f, 5d, 6p), (7s, 5f, 6d, 7p)

2s avrà attrazione minore a 1s rispetto al nucleo, perché più distante.



VII lezione di Chimica

19/10/2010

I numeri di ossidazione si usano, i numeri di valenze non si usano (nel corso).
 Gli elementi e i composti con carica elettrica si chiamano IONI (Li^+ , H^+ , O_2^-)

CATIONI → quelli con carica positiva (Li^+ , H^+)

ANIONI → quelli con carica negativa (O_2^-)

Gli elementi si combinano tra loro trasferendo e condividendo elettroni e dando origine a composti e molecole

legame ionico → trasferisce e^- (elettroni)

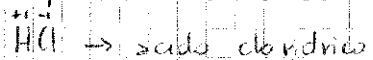
legame covalente → condivide e^- (elettroni)



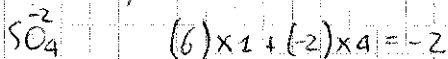
↑
 prima il catione poi l'anione.

La nomenclatura STOCKS è semplice, ma meno utilizzata

- Nei composti neutri la somma delle cariche $\bar{e} = 0$



- In uno ione, la somma delle cariche \bar{e} pari alla carica dello ione.



- Gli elementi allo stato elementare hanno num. ossidazione = 0



Numeri di ossidazione:

Gruppo IA = +1

IIA = +2

IIIA e IIIB = +3

ALOEENI (Li, Br) = -1, +1, +3, +5, +7

I = -1, +5, +7

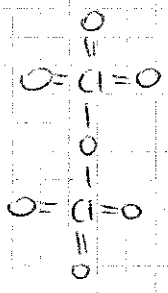
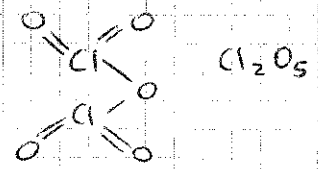
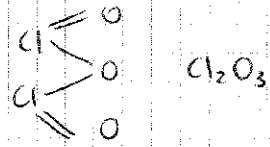
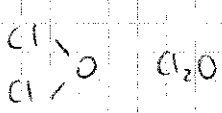
F = -1 → biazione

CARBONIO (C) = +2, +4

AZOTO (N) = +1, +2, +3, +4, +5

CROMO (Cr) = +2, +3, +6

MANGANESE (Mn) = +2, +3, +4, +6, +7



Cl_2O_3

$\text{N} = \text{O} \quad \text{NO}$

$\text{N}_2\text{O} \quad \text{N}_2\text{O}$

B_2O_3 anidride borica

→ triossido di Boro

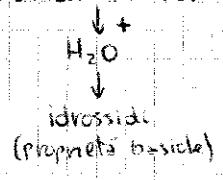
Al_2O_3 allumina

→ triossido di alluminio

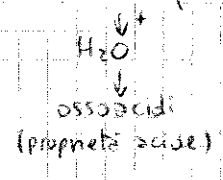
SiO_2 anidride silicea / silice

→ diossido di silicio

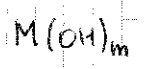
ossidi basici



ossidi acidi (>anidridi)



Idrossidi

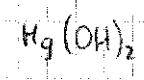
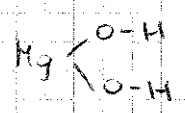
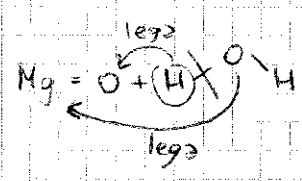


m = num. ossidazione metallo

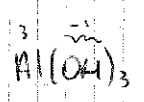
M = metallo

O = ossigeno

H = idrogeno

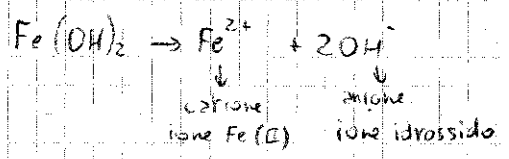


idrossido di magnesio

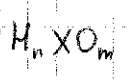


- dissociazione degli idrossidi

In acqua gli idrossidi si dissociano.



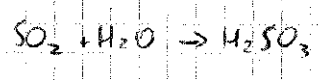
Ossiacidi



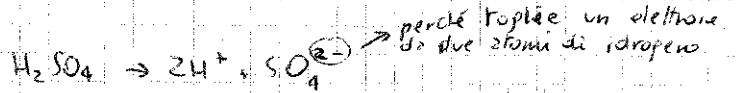
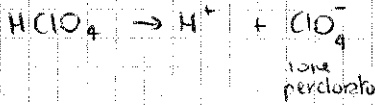
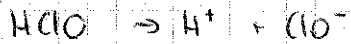
X = non metallo

O = Ossigeno

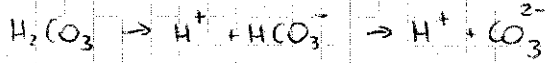
H = idrogeno



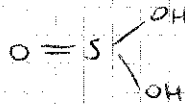
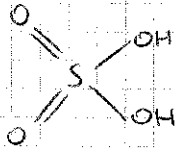
Dissociazione degli ossiacidi



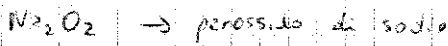
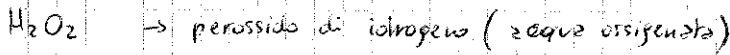
stacca sempre l'idrogeno



Struttura ossiacidi



Perossidi



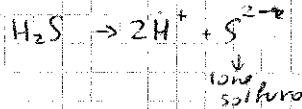
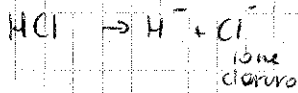
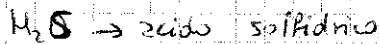
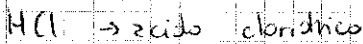
l'ossigeno ha num. ossidazione -1 , ma la valenza non cambia, $(+2)$

$D_2O \rightarrow$ acqua pesante, più densa del normale. (isotopo con un neutrone in più)

Idracidi



X = non metallo
H = idrogeno
m = oss. metallo non metallo (I: Cl, Br, F; II: S)
n = oss. idrogeno



Idruri

Metallo + Idrogeno \rightarrow idruro salino

Non metallo + Idrogeno \rightarrow idruro covalente



M = metallo
H = idrogeno
n = n.o. idrogeno (I)
m = n.o. del metallo

Ioni negativi

Si ottengono degli zidi togliendo gli atomi di idrogeno e ponendo tante cariche negative quanti sono gli idrogeni che sono stati tolti

IONE + ~~nesso~~ -uro, -ito e -ato

acidi



Acido cloridrico idrico → -uro

ione

Cl⁻ Ione cloruro



Acido solfidrico

S²⁻ Ione solfuro



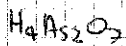
Acido nitroso -oso → -ito

NO₂⁻ Ione nitrito



Acido nitrico -ico → -ato

NO₃⁻ Ione nitrato

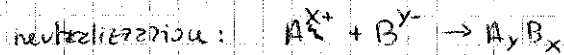
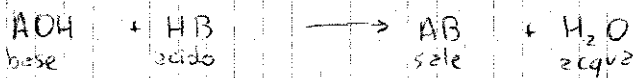


Acido piroarsenico

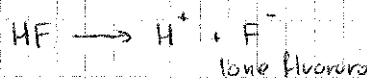
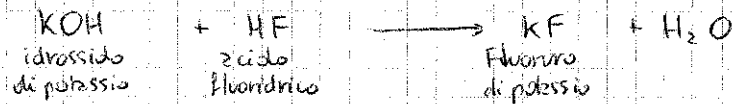
As₂O₇⁴⁻ Ione piroarsenico

Sali

Composto con metallo + composto con non metallo
(ossido basico, idrossido o metallo stesso) (anidride, acido o lo stesso non metallo)



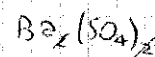
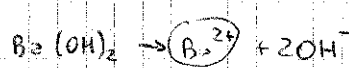
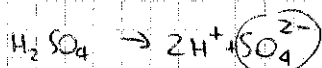
Il nome si ricava dal nome dell'anione seguito dal nome del catione, ottenuti dalla dissociazione dei composti del non metallo e metallo



es. ANIONE TORRE	CATIONE ANIONE	SALE
Cl ⁻	Ca ²⁺	CaCl ₂
NO ₂ ⁻	Al ³⁺	Al(NO ₂) ₃
BO ₃ ³⁻	K ⁺	K ₃ (BO ₃) ₂

num. oss. metallo

sale = ~~oss~~ catione con dissociazione idrossido + anione con dissociazione ossoacido



BaSO₄ solfato di bario

Arrotondamenti: la misura meno certa impone il limite di certezza all'intero calcolo e determina il numero di cifre.

es.

$$m = 3,8056 \text{ g} \rightarrow 5 \text{ cifre}$$

$$V = 2,5 \text{ ml} \rightarrow 2 \text{ cifre}$$

$$d = m/V = 3,8056 / 2,5 = 1,5222 \text{ g/ml} \rightarrow 1,5 \text{ g/ml}$$

Moltiplicazione e divisione: il risultato contiene lo stesso numero di cifre significative che è presente nella misura con il minimo numero di cifre significative.

es.

$$\text{Lunghezza} = 9,2 \text{ cm} \leftarrow 2 \text{ cifre}$$

$$\text{Larghezza} = 6,8 \text{ cm}$$

$$\text{Spessore} = 0,3744 \text{ cm} \leftarrow 5 \text{ cifre}$$

$$V = 9,2 \times 6,8 \times 0,3744 = 23,9225 = 23 \text{ cm}^3$$

Addizione e sottrazione: il risultato ha lo stesso numero di cifre decimali della misura che ha il minimo numero di cifre decimali.

es.

$$V_1 = 83,5 \text{ ml}$$

$$V_2 = 23,28 \text{ ml}$$

$$V_{\text{TOT}} = 83,5 + 23,28 = 106,78 = 106,8 \text{ ml}$$

- Arrotondamento: se la cifra rimossa è ≥ 5 si aumenta di 1 quella precedente.

es.

$$5,373 = 5,38$$

- Arrotondamento: se la cifra rimossa è < 5 lascio invariato.

es.

$$0,2413 = 0,241$$

- Arrotondamento: se la cifra rimossa è $= 5$, lascio invariato, se però, aumento di 1, se è dispari.

$$\text{es. } 17,65 = 17,6 \rightarrow 17,75 = 17,8$$

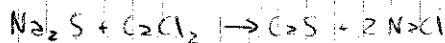
N.B. = Conservare sempre una o due cifre significative addizionali nel calcolo e arrotondare il risultato finale.

Rendimento di una reazione

Durante il decorso di molti processi chimici una parte dei reagenti e dei prodotti va dispersa o si trasforma, mediante reazioni secondarie, in prodotti diversi da quelli desiderati. Si definisce resa o rendimento di una reazione, il rapporto (moltiplicato $\times 100$), tra la quantità ottenuta sperimentalmente e quella calcolata.

$$\eta = \frac{\text{quantità ottenute}}{\text{quantità calcolate}} \times 100$$

esercizio:



partendo da 12 g di Na_2S si ha una resa del 97,5%. Calcolare la quantità di C_2S ottenuta.

• calcolo peso di Na_2S : $\text{PM} = 78 \text{ g/mol}$

• " " peso di C_2S : $\text{PM} = 72 \text{ g/mol}$

$$78 : 72 = 12 : x$$

$$x = 11,077 \text{ g di } \text{C}_2\text{S}$$

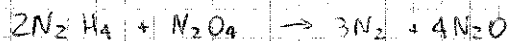
$$(97,5/100) \times 11,077 = 10,8 \text{ g}$$

Reagente limitante

Nei problemi precedenti, la quantità di un reagente era data e si supposeva che la quantità di ogni altro reagente fosse sufficiente per consumare completamente il primo reagente. Se è presente un reagente in difetto, questo limita la quantità di prodotto che si può formare e l'eccesso dell'altro reagente non viene utilizzato e resta allo stato non combinato.

esercizio:

una miscela combustibile per la missilistica è costituita da due liquidi, idrazina (N_2H_4) e il tetrossido di diazoto (N_2O_4), che si accendono per contatto, per formare azoto gassoso e vapor d'acqua. Quanti g di azoto si formano quando si miscelano $1,00 \times 10^2 \text{ g}$ di N_2H_4 e $2,00 \times 10^2 \text{ g}$ di N_2O_4 ?



• calcolo il peso di N_2H_4 : $\text{PM} = 32,05 \text{ g/mol}$

calcolo le moli di N_2 che si formano a partire da N_2H_4 :

$$(1,00 \times 10^2 \text{ g}) / 32,05 = 3,12 \text{ moli di } \text{N}_2\text{H}_4$$

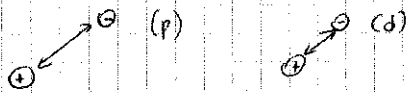
$$2 : 3 = 3,12 : x$$

$$x = 3,12 \times 3/2 = 4,68 \text{ moli di } \text{N}_2$$

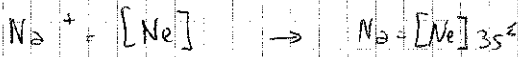
• calcolo il peso di N_2O_4 : $\text{PM} = 92,02 \text{ g/mol}$

calcolo le moli di N_2 che si formano a partire da N_2O_4 :

es. passando da Calcio = Calcio il raggio atomico diminuisce perché si riempiono orbitali di tipo d, aumentando l'attrazione al nucleo.

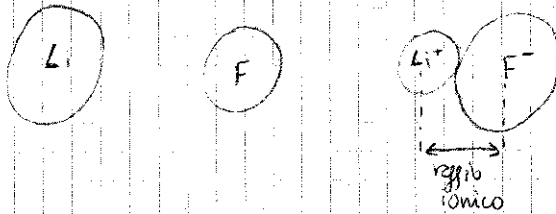
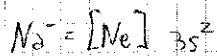


- raggio ionico



Il raggio ionico = il raggio cationico e il raggio anionico costituiscono ciascuno una parte della distanza totale tra i nuclei di ioni adiacenti in un composto ionico cristallino.

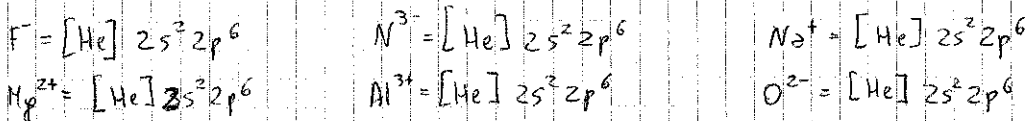
N.B. = I cationi sono più piccoli dei rispettivi atomi, mentre gli anioni sono l'opposto.



N.B. = il raggio ionico aumenta dall'alto in basso lungo il gruppo

esempi:

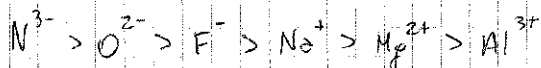
$z=8$	$N = [He] 2s^2 2p^3$	$z=9$	$F = [He] 2s^2 2p^5$
$z=10$	$Ne = [He] 2s^2 2p^6$	$z=8$	$O = [He] 2s^2 2p^4$
$z=11$	$Na = [Ne] 3s$	$z=12$	$Mg = [Ne] 3s^2$
$z=13$	$Al = [Ne] 3s^2 3p$		



I cationi si formano per perdita di uno o più elettroni dagli atomi da cui derivano, sono più piccoli dei rispettivi atomi.

Gli anioni sono più grandi degli atomi progenitori: si aggiungono elettroni negli strati di valenza. Aumenta la repulsione tra elettroni.

Tutti gli ioni hanno lo stesso numero di elettroni, ma un numero diverso di protoni.



perché la carica è uguale, ma i protoni sono di più con la conseguente di un aumento dell'attrazione da parte del nucleo agli e⁻ e una riduzione del raggio ionico.

XI lezione di Chimica 28/10/2010

Energia di ionizzazione aumenta in base all'affinità con gli elettroni (tutti esterni).
 CATIONI → bassa ionizzazione.

ANIONI → alta ionizzazione.

↓
 perdono facilmente elettroni degli altri atomi.

- comportamento metallico: aumentano dall'alto verso il basso e diminuisce dai gas nobili ai metalli.

per i metalli alcalini - terrosi - gas nobili - alogeni, guardando i gruppi avranno le stesse proprietà, negli altri gruppi dipende da energia di ionizzazione.

Esistono 11 elementi gassosi, di cui 6 sono gas nobili, gli altri, azoto, cloro, fluoro, idrogeno, Bromo è liquido, sodio (forse) è ^{solido} ~~liquido~~, mercurio è liquido.

Alluminio può comportarsi anche come non metallo.

Bi → si comporta come i metalli alcalini.

metalli formano cationi, non metalli hanno alta affinità elettronica e creano anioni.

I gas nobili hanno ns e np completo, quindi molto stabili, poco reattivi.

I metalli alcalini perdono 1 e⁻ per portare la loro conf. elettronica come i gas nobili, si chiama regola dell'ottetto.

es. se l'aptesissimo al sodio un'altro e⁻ si rischierebbe di toccare e⁻ interni.

Li 3e⁻ 1s² 1s² Li⁺ quindi è più facile.



I metalli di transizione non hanno la regola dell'ottetto.

Sr: z = 38

Kr: z = 36 è il gas nobile corrispondente.

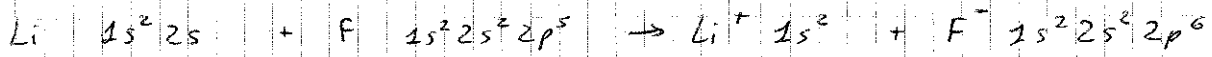
↓
 non si buttano via 4 elettroni. Troppa energia da usare e poca stabilità.

Sr = [Kr] 5s² 4d¹⁰ 5p²

Sr²⁺ = [Kr] 5s² 4d¹⁰ perde 2e⁻ } configurazione pseudo gas-nobile

Sr⁴⁺ = [Kr] 4d¹⁰ // 4e⁻ } mezzo-ottetto.

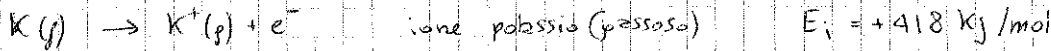
Si chiama crossover. Escono quelli con la n più alta (es. S come sopra) raggio ionico, raggio atomico.



↓
 equivale al gas nobile
 il composto sarà molto
 stabile.

- Principio di Born-Haber.

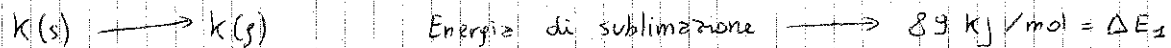
energia di ionizzazione:



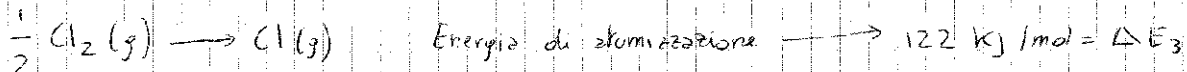
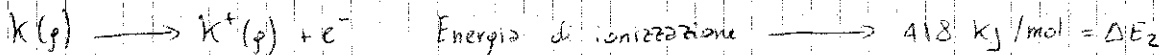
affinità elettronica



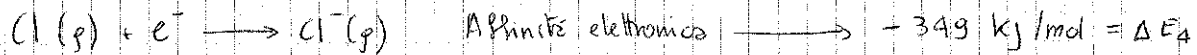
Bisogna tener conto anche delle tappe intermedie:



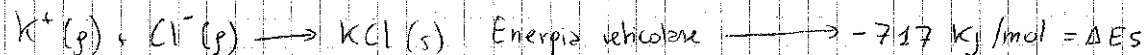
↑
 "entalpia" calore da
 utilizzare per divenire
 gas da solido.



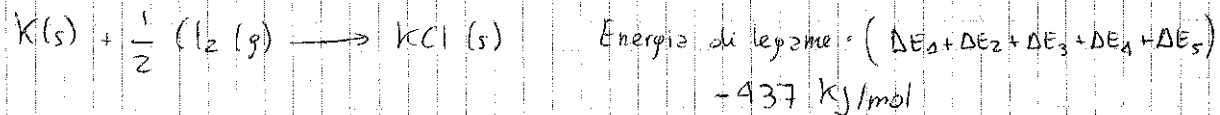
n.b.: Metto $\frac{1}{2}$ perché ho bisogno di rompere il legame (in Cl_2), perché Cl non esiste in natura.



n.b.: È negativa perché deve dare energia, il sistema, per poter avere più elettroni (e^-).



n.b.: da gas passa a solido perché avere un sale che è gas non avrebbe senso alcuno.



l'energia reticolare è data dalla legge di Coulomb.

$$A_x = \frac{q^+ \cdot q^-}{4\pi \epsilon_0 d}$$

↳ permittività elettrica costante dielettrica.

$$E_f = -M \frac{N_A z^2}{4\pi \epsilon_0 d}$$



$$d = r^+ + r^-$$

$M_0 A =$ costante di Madelung

n.b.: l'energia reticolare risulta essere inversamente proporzionale alla distanza dei due nuclei.

legame covalente: si forma prevalentemente tra atomi di non metalli e determina comunemente la formazione di molecole.

l'80% dei composti chimici presenta un legame covalente.

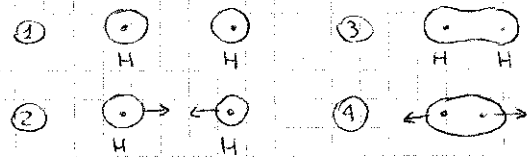
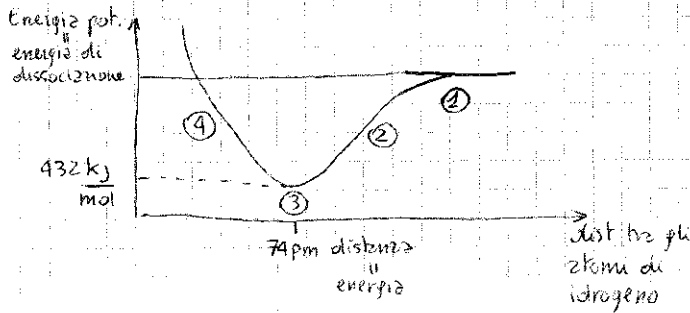
Avviene con la condivisione di una coppia di e^- tra 2 atomi.

- Biotomiche mononucleari \rightarrow 2O e 2Cl

- Molecole biatomiche eteronucleari \rightarrow formati da 2/3 elementi diversi.

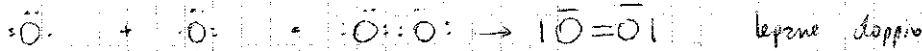
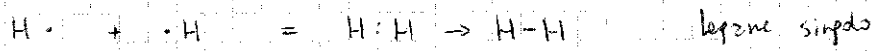
Legame omopolare

H_2 è più stabile di altri.



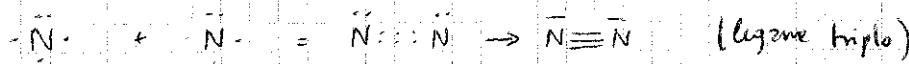
432 kJ/mol per spaccare H_2 in H

Avvicinandoli di più aumenta la repulsione. Ogni H una volta formato il legame non percepisce più e^- .



coppie solitarie = gli e^- che rimangono da soli fuori del legame.

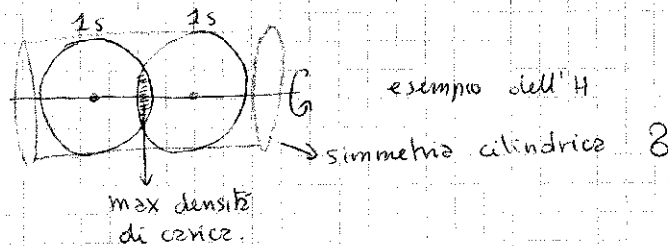
Azoto $5 e^- \rightarrow$ 5 elettroni esterni (gruppo V)



perché 3 sono le solite.

Il modello di Lewis non tiene conto della lunghezza.

Legame covalente = sovrapposizione di orbitali.



N.B.: mezzione serve la sovrapposizione, maggiore sarà il legame.

H_2 \uparrow perché altrimenti si respingerebbero, serve la legge di Pauli.

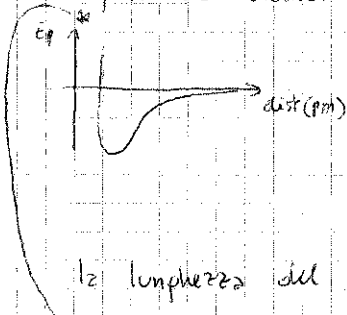
XIII lezione di Chimica

2/11/2010

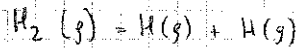
Proprietà del legame covalente

La forza del legame aumenta con la molteplicità, diminuisce con il n° di coppie solitarie e diminuisce all'aumentare del raggio atomico.

energia di legame (BE) \rightarrow binding energy, D₀: Energia meccanica per vincere le forze attrattive tra nuclei legati ed elettroni condivisi.

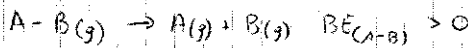


energia di legame = dissociazione (nel rompere un legame)

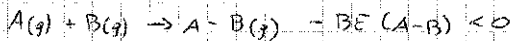


La lunghezza del legame è indice di una forza di legame

è sempre positiva (processo endotermico); è definita per una mole di molecole in forma gassosa; è la differenza di energia potenziale tra gli atomi isolati e quelli legati, nel diagramma dell'energia potenziale.



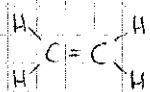
La formazione del legame è invece un processo esotermico ($-BE < 0$)



La forza del legame aumenta con il numero di legami, ma diminuisce ~~la lunghezza~~ all'aumentare del raggio atomico.



Un ordine di legame più alto dà origine a una lunghezza di legame più corta ed a un'energia di legame più alta. Un legame più corto è un legame più forte.



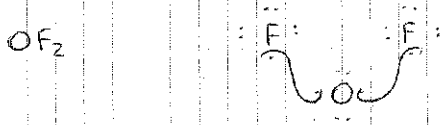
Più è piccolo il raggio atomico, stesso legame, più grande è l'energia di legame, avendo il nucleo che attrae di più.

I legami covalenti sono forti. Le coppie solitarie (e⁻ che non vengono condivisi) sono localizzate sull'atomo stesso.



legami molto forti.

Palle alla stessa temperatura dell'acqua, non rompe i legami con la bollitura, ma sono le molecole d'acqua che sono più facili da rompere, mentre i C-H e i C-C rimangono intoccati.



$X_F = 4$ $X_O = 3,5$ → si prende e^- di O perché più elettronegativo.

$n.ox_F = 7 - [2 + 6] = -1$

$n.ox_O = 6 - [2 + 4] = 2$ → non si ha più dato che se li è preso F.

F₂O è l'unico caso in cui O ha +2 perché il Fluoro ha più elettronegatività, Fluoruro di Ossigeno.

Cl₂O → anidride iperclorosa → note.

$X = \frac{(E_1 + E_2)}{2}$

ionizzazione elettronica
coefficiente

elettronegatività → prende elettroni

ionizzazione → perde elettroni

H-H F-F sono apolari perché uguali e nessun e^- spostato.

non esiste un elemento più covalente, non esiste un legame completamente covalente, ci sono solo misti.

Si passa da covalente a ionico all'aumentare della differenza di X (elettronegatività) si suppone che 60% della caratteristica ionica è a circa 2 della differenza di elettronegatività, un legame è da considerare tipicamente ionico.

$I\% = 100(1 - e^{(-0,25(X_A - X_B)^2)})$ $I\% > 60\%$ legame = ionico.

es. KCl → $I\% = 100(1 - e^{(-0,25(3,00 - 0,8)^2)}) = 70,18\%$ → legame ionico

n.B. Mentre alcune molecole come Cl₂ hanno lo 0% di carattere ionico, nessuna ha il 100% di carattere ionico. Perciò in ogni legame è presente un certo grado di condivisione degli elettroni.

- Legame covalente polare.

Elettronegatività: tendenza di uno atomo ad attrarre gli elettroni che partecipano al legame (covalente) con un altro atomo.

Caratteristica: rafforza il legame, simile a un parziale legame ionico.

IV lezione di Chimica

4/11/2010

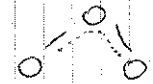
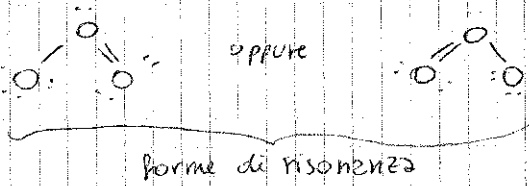
N.A. = + affinità elettronica + elettronegatività
 - energia di ionizzazione - elettropositività.

il Fluoro è l'elemento + elettronegativo

la polarità del legame si riflette sull'orientamento della molecola, con più di 3 atomi dovrà tenere conto della geometria.

- Risonanza = possibilità di scrivere in diversi modi la formula di strutture di una molecola.

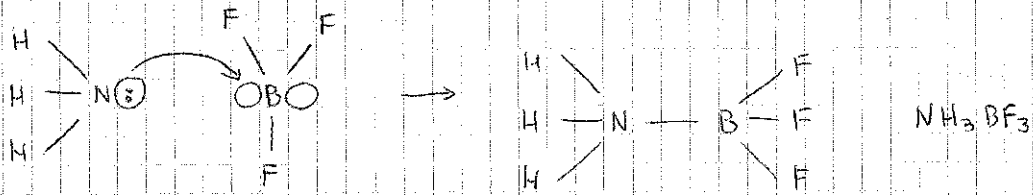
es.



- legame debole

Il legame covalente è dato dalla messa in comune di due elettroni avendo questi provenienza dallo stesso atomo (doppetto) e sono donati ad un atomo che possiede un orbitale vuoto, insieme un legame debole.

es.



Costruzione strutture di molecole e ioni.

1) Formule molecolari:

• mettere al centro l'atomo con la X più bassa

2) Collocazione degli atomi:

• appiunghere i numeri dei propri A.

3) Somma degli e⁻ di valenza.

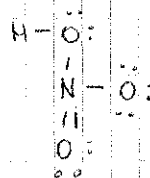
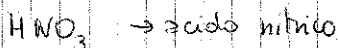
• assegnare i legami singoli sottrarre 2e⁻ per ciascun legame.

4) e⁻ di valenza rimasti

• assegnare a ogni atomo 8e⁻ per giungere all'ottetto, 2e⁻ per H.

Struttura di Lewis.

es.



N = 5e⁻
 H = 1e⁻
 O = 6e⁻
 24 e⁻ totali

$24e^- - 8e^- = 16e^-$

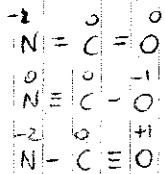
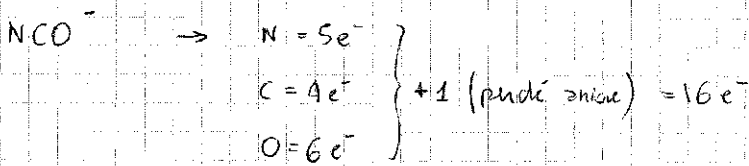
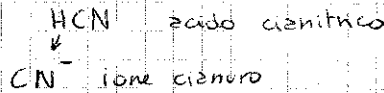
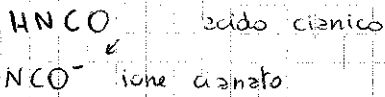
XV lezione di Chimica

5/11/2010

uno ione ha la somma delle cariche formali eguali allo ione.

un elemento neutro, invece, ha come somma delle cariche formali, zero.

Se si hanno due strutture con la somma delle cariche uguali si prende quella che ha meno ~~cariche~~ cariche formali negative, più bassa, sull'elemento più elettronegativo.



summe cariche form = da tenere in considerazione

= è quello più importante perché il O ha cariche formale più negative ed è anche l'elemento più elettronegativo.
 = da escludere perché la somma è più alta delle altre.

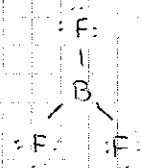


- eccezioni alla regola di Lewis.

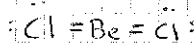
① eccezione: molecole elettronedeficienti

molecole gassose che contengono Be o B (Berillio, Boro) hanno MENO di $8e^-$ attorno all'atomo centrale.

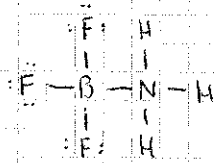
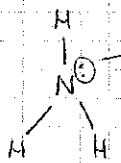
es.



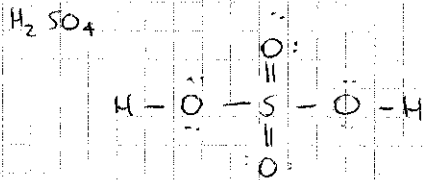
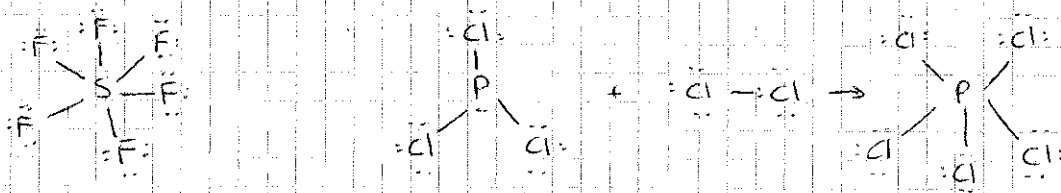
Dato la forte elettronegatività di F e Cl, rispetto a Be e B, non si formano strutture del tipo:



Per raggiungere l'ottetto il B nel BF_3 deve reagire con un'altra molecola (es. NH_3)



Un esempio è l'esaffluoruro di zolfo, SF_6 un gas notevolmente denso e inerte impiegato come isolante negli apparecchi elettrici. L'atomo di zolfo centrale è circondato da sei legami covalenti, uno con ciascun atomo di fluoro, per un totale di 12 e⁻.

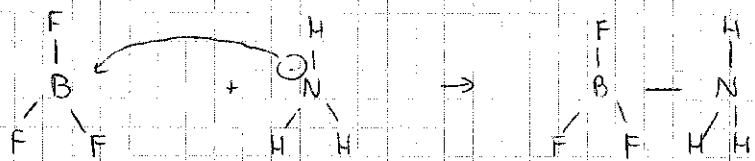


Quando l'acido solfonico cede 2 atomi di idrogeno si crea SO_4^{2-} (ione solfato).

N.B. = gli ossoacidi (formati da ossigeno + acidi) sono i più difficili da scrivere.

Legame covalente dativo

è una reazione acido-base di Lewis, dove una specie dona una coppia di elettroni a un'altra specie per formare un legame covalente.



Principio fondamentale della VSEPR: ciascun gruppo di elettroni di valenza, attorno ad un atomo centrale è situato il più lontano possibile dagli altri gruppi per minimizzare le repulsioni.

Gruppo di elettroni: può essere un legame singolo, doppio, triplo, un doppietto solitario, un elettrone spaiato.

VSEPR: ci serve per dare una forma alle molecole, si basa sul fatto che esiste una repulsione elettrostatica tra gruppi di elettroni tale per cui in ogni gruppo di elettroni si sistema il più lontano possibile dagli altri.

Forma molecolare: è definita dalle posizioni relative dei nuclei degli atomi.

N.B. = con gli ottetti di Lewis scriviamo le strutture, ma non in 3D, quindi non teniamo conto delle lunghezze. Il modello di ~~VSEPR~~ VSEPR serve a dare una ~~forma~~ forma alle molecole. Le coppie del legame vengono considerate sempre come uno. I doppietti solitari vanno conteggiati a parte.

- Tetraedrale

angolo del legame: $109,5^\circ$

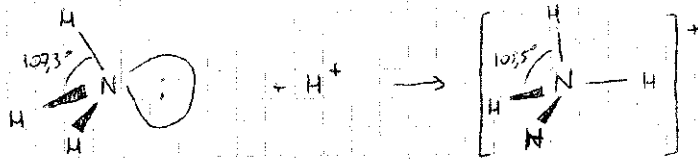
classe: AX_4

es: $CH_4, SiCl_4$

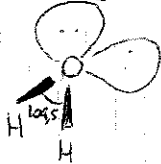
Tutte le molecole e tutti gli ioni con 4 gruppi di elettroni intorno a un atomo centrale adottano una disposizione tetraedrica.

quando l'atomo centrale è circondato da 3 atomi e una coppia solitaria ($AX_3E: NH_3, etc$) la forma è piramide trigonale. Nell'ammoniacco l'angolo è di $107,3^\circ$

N.B. = Reazione dell'ammoniacco per dare lo ione ammonio: la coppia solitaria si trasforma in una coppia di legame e cambia l'angolo.

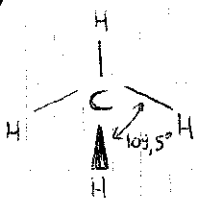


classe: AX_2E_2

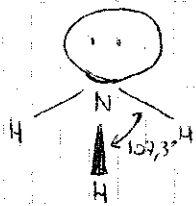


coppie solitarie - coppie solitarie è maggiore di
coppie solitarie - coppie di legame etc > sua volta è
maggiore di coppie di legame - coppie di legame.

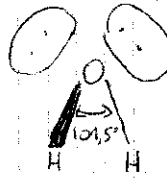
esempio:



metano (tetraedrico)



ammoniacco (piramidale)



acqua (piegata)

- Trigonale bipiramidale

angolo del legame: 90°
 120°
 180°

classe: AX_5

es: PF_5, AsF_5

Atomo centrale del periodo 3 o maggiore, perché solo questi hanno degli orbitali d liberi per cui si può espandere il guscio di valenza a più di $8e^-$. Le repulsioni equatoriale - equatoriale (120°) sono più deboli delle repulsioni assiale - equatoriale (90°).

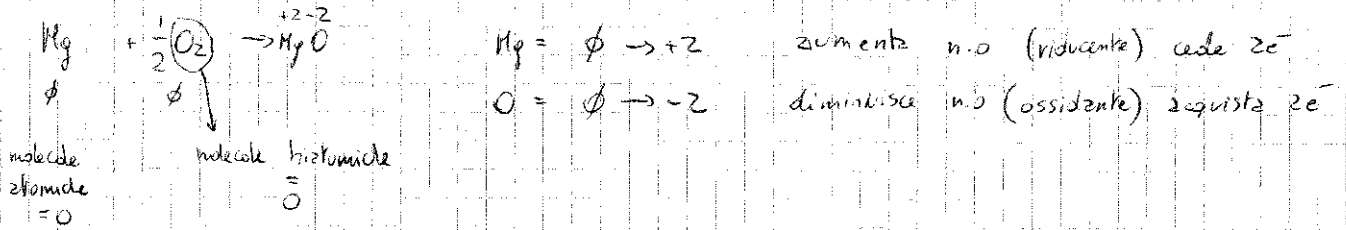
- Ottaedrale

angolo del legame: 90°
 180°

classe = AX_6

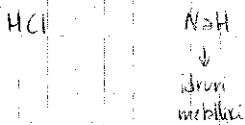
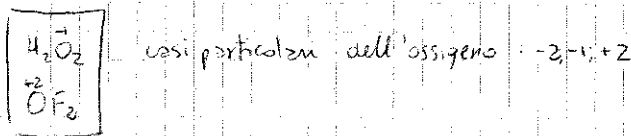
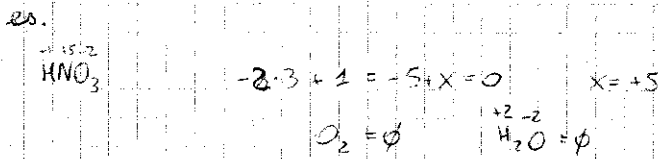
esempi: SF_6

Vedrà il num. ossidazione degli atomi in considerazione

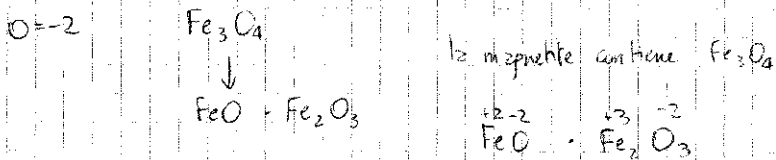


Il num. numero di ossidazione si calcola =

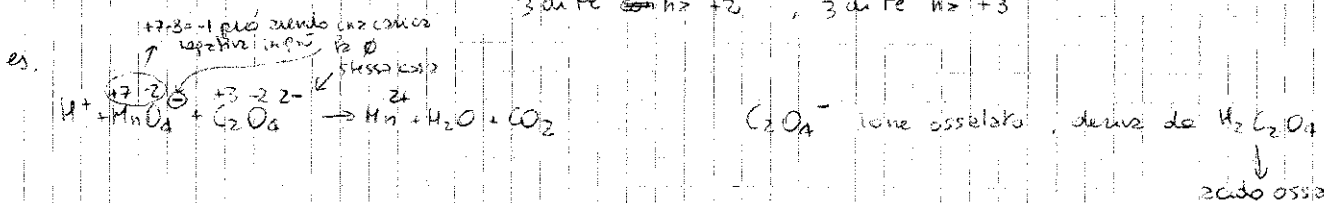
$\text{N} = 5A \quad \rightarrow \quad 5 - 8 = -3$ $\text{O} = 6A \quad \rightarrow \quad 6 - 8 = -2$



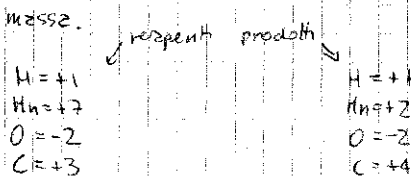
- problemi di esane: metallo - ossigeno = ossido



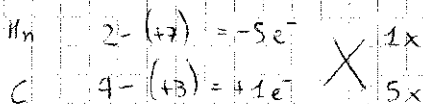
$\frac{1}{3}$ di Fe $\rightarrow +2$ $\frac{2}{3}$ di Fe $\rightarrow +3$

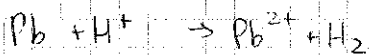


è da guardare il bilancio ionico, se non fossero ioni si guarderebbe subito il bilancio di



$\text{Mn} \quad +7 \rightarrow +2$ diminuisce il n.o. acquista $5e^-$, si riduce e MnO_4^- è un ossidante.
 $\text{C} \quad +3 \rightarrow +4$ aumenta n.o. perde $1e^-$, si ossida ed è $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ è un riducante.

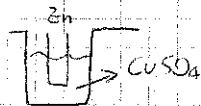




Argento e Oro non riescono a spostare H_2 e vengono chiamati metalli nobili.
Potere riducente aumenta dal basso verso l'alto.



il rame diventa nichelato.



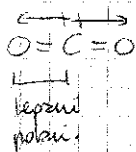
il rame deposita zinco e lo zinco si ossida e diventa ione, la soluzione si colora.

Elettrochimica

XVII lezione di Chimica

11/11/2010

5 geometrie possibili, distanti le molecole per le repulsioni e per rendere stabile il legame. La geometria è importante da lì si sa se ha un momento polare o no.

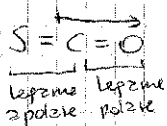


O più elettronegativo di C

se c'è differenza di elettronegatività ha legame polare.

$$\text{dipolo} = \frac{\text{carica}}{\text{distanza}}$$

ha 2 vettori puntati, essendo uguali in CO_2 ha un dipolo = 0

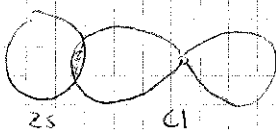


ha un momento dipolare $\neq 0$

l'acqua ha geometria piegata perché ha due doppietti, l'acqua ha un dipolo di 1,85 D (bebye) perché è piegata.

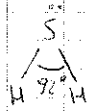


il berillio non è spazializzato, quindi si fa eccitare \rightarrow



il Berillio condivide l'e con l'orbitale p del cloro

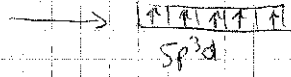
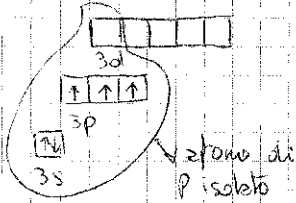
Così nasce l'ibridazione \rightarrow nasce perché il Berillio non ha e spazializzati e quelli che spazializza in eccitamento non hanno la stessa energia degli altri con cui deve fare il legame.



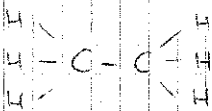
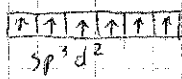
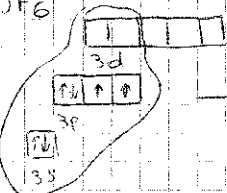
si spiega anche senza l'ibridazione, sovrapposizione degli orbitali atomici, formazione orbite ibridi.



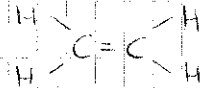
essendo che si formano 5 legami, ne prendo 5 e spaziali.



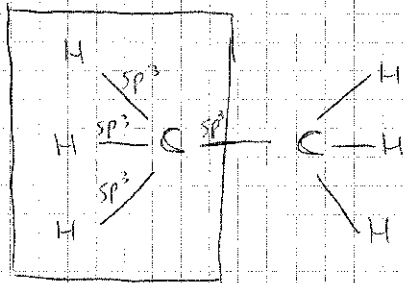
così potrà avere 5 legami.



etano



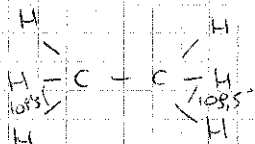
etilene



tetrahedro

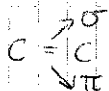
3 legami sp^3 formano C-H
1 legame sp^3 forma C-C

una domanda all'esame: Com'è ibridato il carbonio nell'elemento X?



è un legame σ (sigma) perché se si ruota non cambia i legami.

l'etilene è provato che ha doppio legame, quindi si dovrà spiegare.



in C_2H_4 non si può ruotare perché c'è π che lo uete.

$C \rightarrow$ \rightarrow otterremo creare un p che non è ibridato per poter formare un legame π , quindi avremo $sp^2 + 2p$

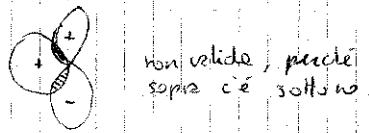
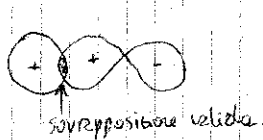
XVIII lezione di Chimica

12/11/2010

Orbitali molecolari

Teoria del legame di valenza: si ha la ~~condizione~~ ^{sovrapposizione} di orbitali atomici, più è grande la sovrapposizione, maggiore è la forza del legame, questa sovrapposizione avviene in certe direzioni specifiche, perché gli orbitali atomici degli atomi hanno direzioni specifiche.

MS = orbitale s + orbitale p, la sovrapposizione avviene $\sigma \rightarrow \sigma$, considerando l'asse in comune.



legame localizzato direzionale = un atomo ha un e^- , l'altro ha un altro e^- quindi non è permesso la condizione.

Non spiega perché certe molecole hanno una certa geometria.

Quindi si parla di ibridazione: un atomo meschia i suoi orbitali con quelli dell'altro atomo creando degli orbitali di diversa energia.

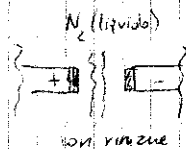
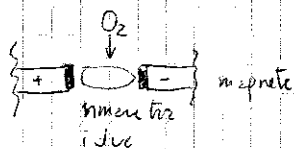
Il carbonio in pratica è sempre legato ibridato.

-Orbitali molecolari

è una teoria esistente rispetto a quella del legame di valenza e alla regola di Lewis.

nella valenza la teoria vede gli e^- localizzati all'interno dei due nuclei che formano il legame, in questo modo gli e^- sono delocalizzati in tutta la molecola, e parte dal presupposto che quando si forma un legame, gli atomi non usano più gli orbitali atomici di partenza, ma degli orbitali diversi che fanno parte di tutta la molecola invece che del singolo atomo e tutti gli e^- sono condivisi da tutta la molecola.

esempio pratico:



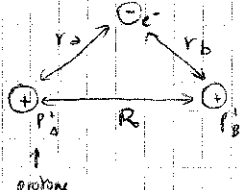
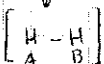
non c'è attrazione, mentre per l'O2 si

O₂ è paramagnetico

N₂ è diamagnetico, non viene "calcolato" dal magnete.

H₂⁺ → perché contiene un solo e^- quindi è la probabilità

Schrodinger è più facile e così si può calcolare la funzione d'onda

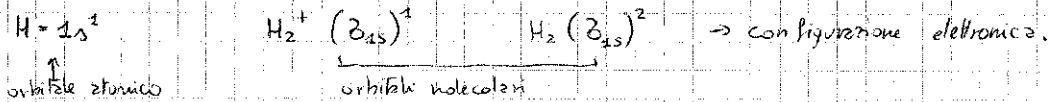


l'energia potenziale sarà in funzione della legge di Coulomb

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_A} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

somma delle attrazioni fra protoni ed elettrone sia A e B e la repulsione fra A e B.

gli orbitali molecolari non vengono mai descritti come vengono descritti quelli atomici, si rappresentano con diagrammi di energia (come fatto prima)



$n=3$ se ho orbitali deperiti (come l'idrogeno), riempio tutti gli orbitali con e^- paralleli e li completo dopo (regole di Hund).

Posso solo sommare orbitali atomici con stessa energia: $1s-1s$, $2s-2s$, $2p-2p$, ...

Per la teoria degli orbitali molecolari noi guarderemo solo gli elementi del I° e II° periodo perché quando il n di e^- diventa troppo grande diventa troppo difficile scrivere le configurazioni elettroniche si guardano solo la formazione di molecole biatomiche mononucleari come l'idrogeno: H_2 , F_2 , O_2 oppure la formazione di molecole biatomiche eteronucleari ma piuttosto semplici come NO , composti in cui si può scrivere un diagramma di come è composto (come fatto prima con l'idrogeno).

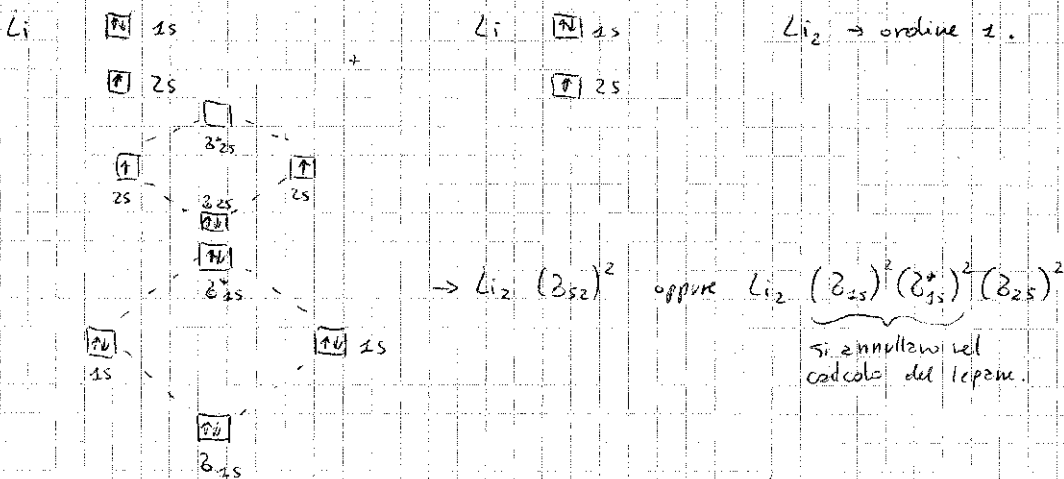
- Ordine di legame: ci dice che tipo di legame si viene a formare: singolo - doppio - triplo.

Si calcola: $O.L. = \frac{1}{2} \left[n \cdot \sum_{\text{di legame}} - n \cdot \sum_{\text{anti-legame}} \right]$

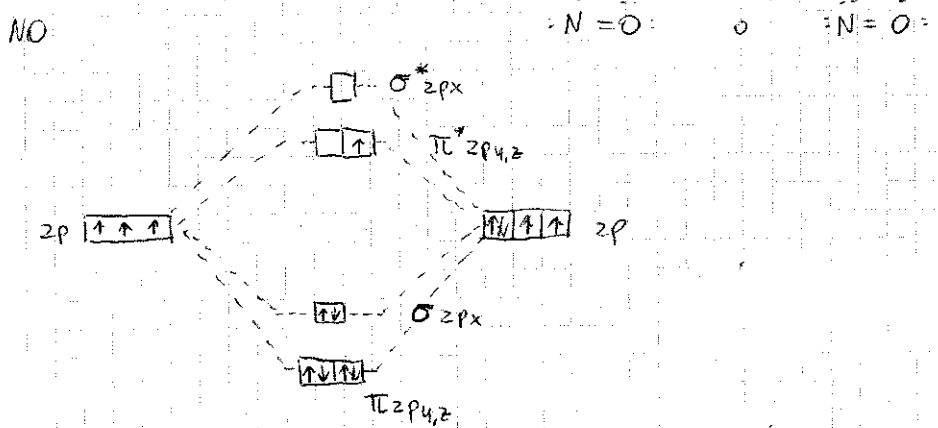
$H_2^+ = \frac{1}{2} [1 - 0] = \frac{1}{2}$ esiste $H_2 = \frac{1}{2} [2 - 0] = 1$ esiste se $O.L. > 0$ esiste
 se $O.L. = 0$ non esiste

$He_2^+ = \frac{1}{2}$ $He_2 = 0 \rightarrow$ non esiste.

più l'ordine è alto più saldo è lo stesso.



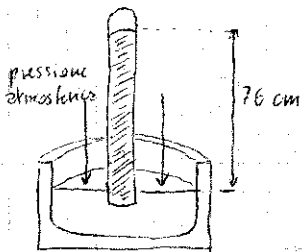
legame covalente con la compartecipazione di $2e^-$, uno che deriva da un atomo e uno che deriva dall'altro, anche nei molecolari li accoppio ma li accoppio su un orbitale a più alta energia. legame covalente non si forma per accoppiamento di elettroni, ma si forma quando ho più e^- sugli orbitali di legame che non di quelli di non legame. Non meno che si appioppiano e^- gli orbitali più bassi di energia si elidono e vengono



Riepilogo: il sistema NO tratta una molecola come un insieme di nuclei con orbitali molecolari delocalizzati.

Gli orbitali atomici di energia confrontabili possono essere:

- sottratti \rightarrow antilepanti
- addizionali \rightarrow lepanti
- OM lepanti hanno: densità elettronica concentrata nei nuclei, Energia minore rispetto agli orbitali atomici.
- OM antilepanti hanno: densità elettronica fuori dai nuclei, hanno Energia superiore.



Barometro (2 mercurio)

Unità di pressione:

$$1 \text{ Pascal (Pa)} = 1 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$$

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ mmHg} = 760 \text{ Torr}$$

↳ millimetri mercurio.

$$1 \text{ atm} = 101325 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ mmHg} = \frac{1}{760} \text{ atm} = 1,3 \times 10^{-3} \text{ atm} = \frac{101,325}{760} \text{ kPa}$$

$$J = \text{N} \cdot \text{m} \quad \rightarrow \quad \text{Pa} = \text{N}/\text{m}^2 \quad \rightarrow \quad \text{Pa} = \text{J}/\text{m}^3$$

- Temperatura

È la grandezza che controlla il flusso di energia tra i due sistemi.

$$T(^{\circ}\text{K}) = 273,15 + T(^{\circ}\text{C})$$

$$0^{\circ}\text{C} = 273,15^{\circ}\text{K} = 32^{\circ}\text{F}$$

$$100^{\circ}\text{C} = 373,15^{\circ}\text{K} = 212^{\circ}\text{F}$$

$$0^{\circ}\text{K} = -273,15^{\circ}\text{C} = -459,67^{\circ}\text{F}$$

- Lo stato dei gas

Lo stato fisico di un gas può essere descritto completamente da 4 variabili P, V, T e n (numero di moli).

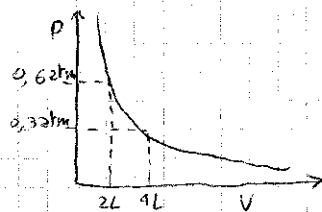
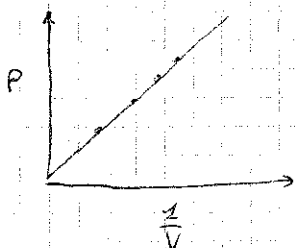
Sulla base di osservazioni sperimentali, è possibile enunciare delle leggi limite che si applicano ai gas perfetti (modelli ideali). I gas reali obbediscono a tali leggi quanto più si avvicinano ai gas ideali (alte T e basse P).

Si tratta quindi di un modello dei gas perfetti, che ha dei limiti: in alcuni casi, si dovrà quindi applicare il modello dei gas reali.

1) Legge di Boyle o isoterma:

T e n costanti, Ad una certa T , il volume occupato da una quantità fissa di gas è inversamente proporzionale alla pressione applicata.

$$P \cdot V = \text{costante}$$



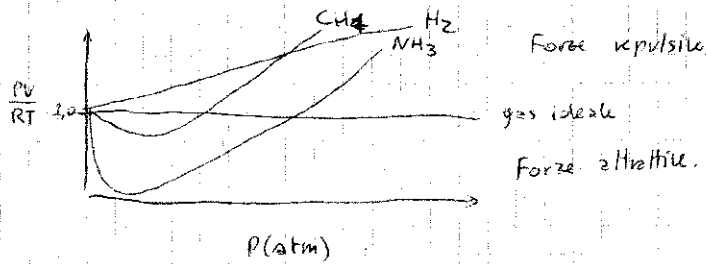
$$P \propto \frac{1}{V} \quad P \text{ inversamente proporzionale a } V.$$

$$P \cdot V = \text{costante}$$

$$P_1 \cdot V_1 = P_2 \cdot V_2$$

Temperatura costante, quantità di gas costante.

$$Z = \frac{PV}{nRT} = \text{Fattore di compressione}$$



$$\bar{V} = \frac{V}{n} = \text{Volume molare} \quad \text{quando } T = 273,15^\circ\text{K} \quad P = 1\text{atm} \quad (\text{condizioni normali}) \quad n=1$$

$$V = nRT/P = 0,0820 \times 273,15 = 22,414 \text{ L} \quad \text{per ogni elemento gassoso.}$$

$n_B =$ In condizioni normali [NTP]: 0°C ($273,15^\circ\text{K}$), 1atm (760mmHg) una mole di gas perfetto occupa un volume di $22,414\text{L}$ (volume molare normale).

Calcoli di densità

$$\frac{n}{V} = \frac{P}{RT}$$

m è la massa del gas in g

M è la massa molare del gas.

$$n = \frac{m}{M}$$

$$\frac{m}{mV} = \frac{P}{RT}$$

$$d = \frac{m}{V} = \frac{PM}{RT}$$

a) d è inversamente proporzionale alla T (aria calda vs. verso l'alto), perché scaldando un gas $\rightarrow P$ cost. il volume aumenta (Charles) e d diminuisce.

b) d è direttamente proporzionale alla massa molare di un gas (legge di Avogadro): una mole di un gas più pesante occupa lo stesso volume di una mole di gas "leggero".

- Massa molare (M) di una sostanza gassosa

$$M = \frac{dRT}{P}$$

d è la densità del gas in g/L

Legge delle pressioni parziali di Dalton

Ogni gas presente in una miscela ESERCITA UNA PRESSIONE PARZIALE, cioè una parte della pressione totale della miscela, uguale alla pressione che eserciterebbe se il gas fosse presente da solo nel recipiente.

Quindi, per una miscela di gas non reagenti, la pressione totale è uguale alla somma delle pressioni parziali dei singoli gas:

$$P_{\text{TOTALE}} = P_1 + P_2 + P_3 \dots$$

es.

60g di N_2O_3 (sodiozite)

$P = 823 \text{ Torr}$

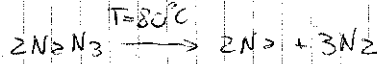
$T = 80^\circ C$

$PM(N_2O_3) = 64,28 \text{ g/mol}$

$P = \frac{823}{760} = 1,082 \text{ atm}$

$T = 80 + 273,15 = 353,15^\circ K$

$n_{N_2O_3} = \frac{60}{64,28} = 0,923 \text{ mol}$



$2:3 = 0,923 \cdot x$

$x = 1,38 \text{ moli di } N_2$

$V = \frac{nRT}{P} = \frac{1,38 \cdot 0,082 \cdot 353,15}{1,08} = 37,02 \text{ l}$

V_{N_2}

Il palloncino (airbag) quando si gonfia si gonfia con un volume di 37L.

- Peso molecolare medio \bar{M}

► m è la massa della miscela

► $n_1, n_2, n_3, n_4 = n$ dei moli dei componenti

► $M_1, M_2, M_3, M_4 =$ peso molecolare dei componenti.

► $m = n_1 M_1 + n_2 M_2 + n_3 M_3 + n_4 M_4$

$\bar{M} = \frac{n_1 M_1 + n_2 M_2 + \dots + n_n M_n}{n_1 + n_2 + \dots + n_n}$

$m = \bar{M} \cdot n$

densità $\rho = m/V$

$PV = nRT \quad N = m/M \quad \rightarrow \quad PV = (m/M)RT$

$\rho = m/V = PM/RT$

$\rho = m/V = \bar{M}/RT$ (per una miscela)

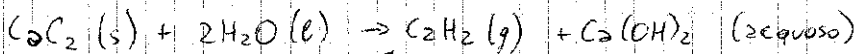
Raccolta di gas in acqua.

"pressione di vapore dell'acqua"

La pressione è data dalla somma: $P_{ossigeno} + P_{acqua}$.

$P_{TOT} = P_{O_2} + P_{H_2O}$

La pressione di gas saturo è data dalla T.

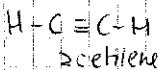


$P_{TOT} = 738 \text{ mmHg}$

$V = 523 \text{ ml}$

$T = 23^\circ C$

$P_{H_2O} = 21 \text{ mmHg}$



$P_{TOT} - P_{H_2O} = P_{C_2H_2} = 717 \text{ mmHg}$

chiede le moli di acetilene: C_2H_2

$V = \frac{523}{1000} = 0,523 \text{ l}$

$P_{C_2H_2} = \frac{717}{760} = 0,943 \text{ atm}$

$n = 0,0203 \text{ moli di } C_2H_2$

$C_2C_2 =$ carburo di calcio

Le molecole dei gas sono molto distanti tra loro e si muovono continuamente e in modo caotico. La temperatura dei gas misura la velocità media delle molecole del gas: quanto maggiore è la temperatura, tanto più velocemente si muovono le sue molecole (in media).

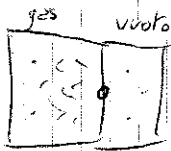
Velocità quadratiche media:

$$\overline{E_c} = \frac{1}{2} m \overline{v^2} \quad \overline{v^2} = \frac{v_1^2 + v_2^2 + \dots + v_N^2}{N}$$

$\overline{v^2}$ = velocità quadratiche media, la media del quadrato delle velocità di tutte le molecole.

Legge della EFFUSIONE di Graham

L'effusione dei gas è il processo per cui un gas sotto pressione si sposta da un compartimento di un contenitore ad un altro passando attraverso una piccola apertura.



$$\frac{v_1}{v_2} = \frac{t_2}{t_1} = \sqrt{\frac{M_2}{M_1}}$$

È constatato che un gas leggero si muove più velocemente di un gas pesante, quindi nella stessa costante di tempo, ci saranno un numero di molecole di gas leggero, maggiore di quelle di gas pesante.

Legge della DIFFUSIONE di Graham

La diffusione dei gas è il graduale mescolamento delle molecole di un gas con le molecole di un altro in virtù delle loro proprietà cinetiche.

$$\frac{v_1}{v_2} = \sqrt{\frac{M_2}{M_1}}$$

v_1 e v_2 = velocità di diffusione.

GAS REALI

Il fattore di comprimibilità è definito come $z = PV/RT$ (per una mole di gas)

Un gas ideale ha $z=1$ in tutto il range di P , mentre i gas reali deviano da questo valore. A pressioni elevate, $z > 1$, prevale l'effetto del volume delle particelle (non più trascurabile) e quindi delle forze repulsive.

A pressioni moderate, $z < 1$, predominano l'effetto delle attrazioni intermolecolari e quindi, delle forze attrattive.

1. a e b sono numeri positivi determinati sperimentalmente, tipici di ogni gas: COSTANTI DI VAN DER WAALS.
2. a dipende dalla struttura elettronica delle particelle di gas, che quindi determina il tipo di attrazioni intermolecolari. Per un gas perfetto $a=0$.
 aB = costante proporzionale alle interazioni attrattive tra molecole.
3. b è in relazione con il volume molecolare. Per un gas perfetto $b=0$.
 aB = volume occupato da 1 mole di gas (covolume).
4. in condizioni normali ($a=b=0$), l'equazione di van der Waals diventa quella dei gas perfetti: $PV = nRT$

più è alta la densità molecolare, minore sarà l'impulso con le pareti del recipiente, con il conseguente aumento della pressione.

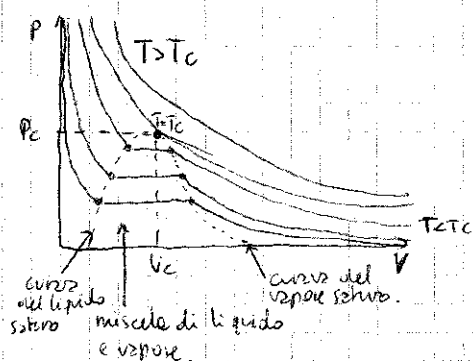
Una molecola non può avvicinarsi ad un'altra con una distanza inferiore al diametro di una data molecola (covolume).

Lezione di Chimica

19/11/2010

Liquefazione dei gas

1. Quando un gas si trova a basse T_c, P_c elevate non si possono trascurare le forze intermolecolari, quindi si può avere la liquefazione, dal gas a liquido.
2. Ogni sistema gassoso è caratterizzato da una temperatura critica $T_c =$ se $T > T_c$ il gas non può essere liquefatto aumentando di P .
3. Vapore è un aeriforme che si trova al di sotto della sua T_c (può essere liquefatto a quella T aumentando la pressione: ad esempio, vapore acqueo).
4. GAS: è un aeriforme che si trova al di sopra della sua T_c (non può essere liquefatto a quella T , anche aumentando la pressione).

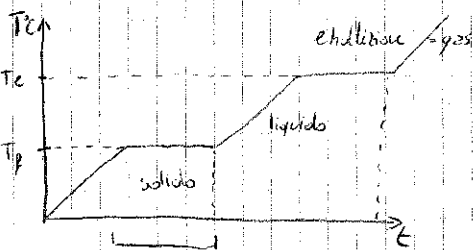


(V_c, P_c) Punto critico, isoterme.

$PV = \text{cost.}$ (isoterme di Boyle: si comporta da gas, non fa vapore $T > T_c$)

$T = T_c$ Isoterma critica: esiste un punto critico (V_c, P_c) a cui il vapore inizia a liquefare.

$T < T_c$ = liquefazione per compressione.



Transizioni di fase, passaggio da uno stato all'altro. Le temperature non variano nel tempo.

Al passare da uno stato all'altro c'è una variazione dell'energia cinetica e dell'energia potenziale.

All'aumentare dell'energia cinetica, diminuisce quella potenziale e viceversa.

Al passaggio da gas \rightarrow liquido \rightarrow solido c'è una diminuzione dell'energia cinetica, con il conseguente aumento dell'energia potenziale.

$$q = n \cdot C_{H_2O(vapore)} \cdot \Delta T$$
 numero di moli
 calore
 passaggio da 130° a 100°

 \rightarrow c'è la diminuzione dell' E_c , il gas si raffredda, velocità molecolare diminuisce.

\rightarrow 100°C inizia a diventare liquido (da 130°) la temperatura non cambia durante lo stadio.

E_p aumenta, le attrazioni aumentano e fanno variare l' E_p .

$$q = n \cdot \Delta H_{vap}$$
 dove
 dello stato

 $T = 100^\circ C$

\rightarrow 0°C E_c diminuisce ancora e lo stato passa da liquido a solido.

$$q = n \cdot C_{H_2O(liquido)} \cdot \Delta T$$
 la temperatura rimane costante (mescolazione liquido solido)

in fine al diminuire della T rimane solo lo stato solido.

Tensione di vapore

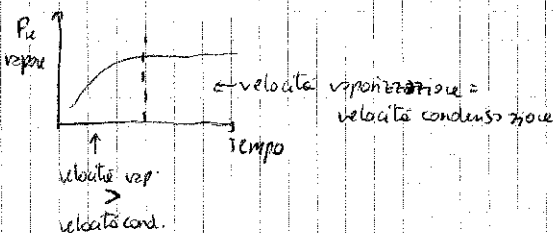
È la pressione delle molecole di gas in un recipiente dove coesistono ~~solido~~ ~~liquido~~ e gas.

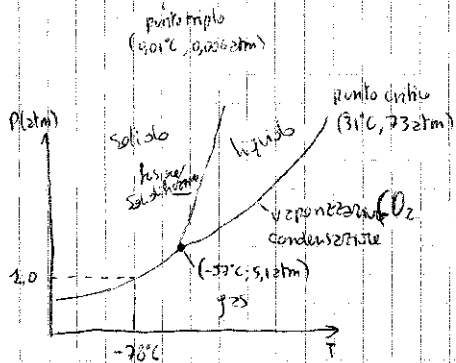
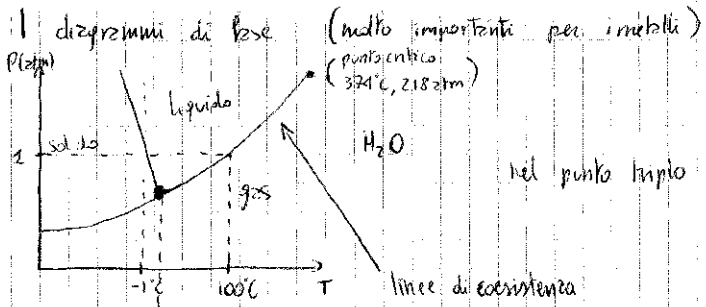
La ~~pressione~~ il numero di molecole di uno e dell'altro (gas e liquido) sono equilibrate (stesso numero).

Questo perché c'è un'alta probabilità che le molecole, nel vuoto d'aria, si "staccino" dal liquido e che, le molecole che prima erano solo nel liquido, si dividano in gas e liquido.

NB: Nel solito vaso non si nota differenza di livello.

Si crea un certo grafico:





nel punto critico si ha un equilibrio tra gas e liquido

densità liquido + densità gas.

oltre tale punto si ha il super critico.

ha le stesse proprietà del gas (oltre il critico) ed ha buone capacità solventi. es. usato per rimovere il grasso dalla carne. L'espansione compressa.

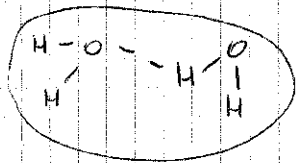
Interazioni intermolecolari.

- particelle ad energia (cinetica) minore del gas e maggiore dei cristalli.
- piccola distanza tra le particelle.
- forze di legame tra le particelle maggiore del gas e minore dei cristalli.

• Interazione tra molecole (Van der Waals)

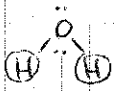
• Interazione per forze di dispersione (London)

dipoli istantanei	→	N ₂ - - N ₂
dipolo indotto	→	N ₂ - - HBr
dipolo - dipolo	→	HBr - - HBr
legame idrogeno	→	H ₂ O - - H ₂ O , HF - - HF , NH ₃ - - NH ₃



HB = principalmente elettrostatico. Un atomo più elettronegativo attrae se gli atomi più elettropositivi.

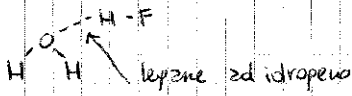
Nell'acqua, ad esempio, l'O è legato a 2 H, e l'H diventa più elettropositivo di quello che dovrebbe essere.



H diventa più elettropositivo!

Allo stesso modo il Fluoro ha 7 doppietti e nell'osso con un doppietto.

Se meschiamo una soluzione di HF in H₂O, HF creerà un legame con l'H₂O.



Il legame ad idrogeno è più basso rispetto al legame ionico e covalente.

Il legame ad idrogeno è importante perché se si vede, si può notare che all'aumentare del pK, la temperatura di ebollizione del composto, ma nel caso del HCl, NH₃ e H₂O c'è una variazione, l'acqua, ad esempio, bolle a 100°C, mentre se se ne separasse la stessa straghe doppi altri bollirebbe a -100°C.

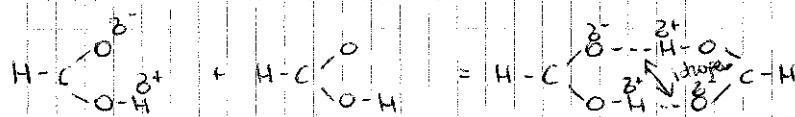
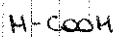
Sono 100°C perché l'acqua (formata da 5 molecole di H₂O) ha legami ad idrogeno, e per il suo separare le molecole si avrà bisogno di più energia e quindi il calore aumenterà.

Quindi il legame ad idrogeno varia le proprietà fisiche.

NB: Nel DNA sono presenti due strisce formate da legami covalenti, ma all'interno di queste catene ci sono legami ad idrogeno che uniscono le catene.

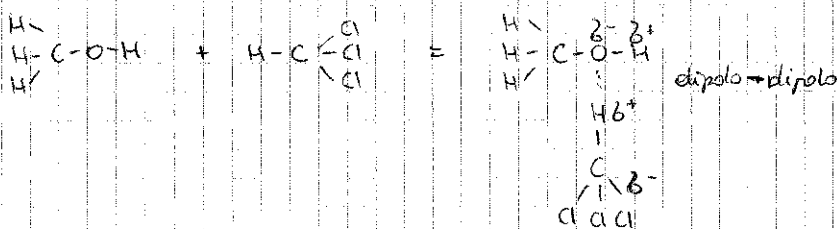
~~Questo~~ Quando il DNA viene lavorato si spezzano questi legami.

es. ACIDO FORMICO



spiega perché se prendiamo alcool e acqua insieme, sono solubili.

metanolo è polare quindi creerà un legame dipolo-dipolo con il cloroformio che non ha O, F, N.



Le Soluzioni!

Vn = soluzione: è una miscela omogenea di atomi, molecole o ioni provenienti da sostanze diverse che si distribuiscono in tutto il volume e disposizione. Il componente principale di una soluzione si dice solvente; le sostanze disciolte si dicono soluti.

Esistono: miscele di gas: le miscele gassose sono sempre omogenee - formano sempre una soluzione.

soluzioni liquide: scioglio nel solvente, un gas, un solido o un altro liquido.

soluzioni solide: esempio, le leghe.

Quantità maggiore = solvente

quantità minore = soluto.

La quantità di soluto che si trova solubilizzato in una certa quantità di solvente si chiama concentrazione.

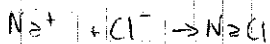
Solubilità: MB = il simile scioglie il simile.

- Insolubile = si dice quando un cristallo (per esempio) si scioglie subito al contatto con il solvente.

- Soversaturazione = si dice quando, una volta aggiunto un cristallo, questo porta alla formazione di altri cristalli.

+ Saturazione = la quantità di solido aggiunto non cambia nel tempo.

esempi:



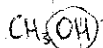
mettendo il sale da cucina in una soluzione di acqua si spezza il legame NaCl e le molecole d'acqua si riorganizzano i singoli ioni, provocando la miscela.

burro + acqua = non si scioglie

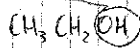
burro + olio = si scioglie

↓
acqua
↓
acqua

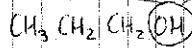
MB = olio e acqua anche non sono compatibili



metanolo



etanolo



molto polare

si fondono bene con l'acqua

$CH_3CH_2CH_2CH_2OH$ non si fonde, ed è più solubile in solventi organici (olio)

MB = più si aumenta il carbonio, meno si solubilizzano in acqua.

- Legge di Raoult (generale): $P_i = P_i^0 X_i$

Secondo Raoult, la tensione di vapore di un solvente è proporzionale alla sua frazione molare nella soluzione.

legge di Raoult (soluto solido, solvente liquido):

$$(P^0 - P) / P^0 = n / (n + N)$$

La tensione di vapore di una soluzione è, nelle stesse condizioni sperimentali, minore di quella del solvente puro.

Questa espressione vale solo per le soluzioni ideali, anche dette di Raoult.

P = tensione di vapore totale P^0 = tensione vapore solvente

n = numero moli soluto N = numero moli solvente.

$$P = X_{\text{solvente}} \cdot P^0_{\text{solvente}}$$



$$X_{\text{solvente}} + X_{\text{soluto}} = 1$$

$$\rightarrow P = (1 - X_{\text{soluto}}) P^0_{\text{solvente}}$$

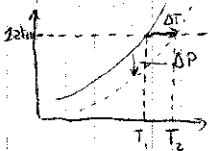
~~XIV~~ lezione di Chimica

26/11/2010

- Proprietà colligative

Abbassamento della tensione di vapore

tramite la legge di Raoult si può calcolare.



$$P^0 - P = X_{\text{soluto}} \cdot P^0 \rightarrow \text{legge di Raoult, si applica a soluzioni ideali}$$



n_3 = Soluzione debole:

Soluzione molto diluita, dove la quantità di solvente è molto elevata rispetto alla quantità di soluto.

La legge di Raoult è molto semplice e aiuta a capire il comportamento delle soluzioni, rispetto al solvente puro.

La legge di Raoult dice che la pressione del solvente è uguale alla frazione molare del solvente per la tensione di vapore del solvente puro (P^0).

Il fatto che ci sia il soluto dentro al solvente sta a significare che la frazione molare del solvente è minore di 1. Se fosse = 1 avremmo $P_{\text{solu}} = P^0$ quindi sarebbe il caso in cui sia tutto solvente puro. È minore di 1 perché ha anche il soluto.

Si ha sempre una diminuzione della tensione di vapore del solvente se considero la soluzione rispetto al solvente puro.

Dato che la somma delle frazioni molari = 1 ($X_{\text{solvente}} + X_{\text{soluto}}$)

no) Molto utile in biologia; cellule in "isotonicità" (in salute).

Se mettiamo intorno alla cellula una soluzione che ha una concentrazione minore rispetto a quella interna alla cellula, la cellula si troverà in situazione di "ipotonicità", tende a perdere acqua, uscendo la cellula si stampe e muore, se fosse il contrario si allargherebbe.

La pressione osmotica dipende dalla concentrazione del soluto: $\pi = \frac{n}{V} RT$
 dove $n = \frac{\text{moli soluto}}{\text{volume (l)}}$

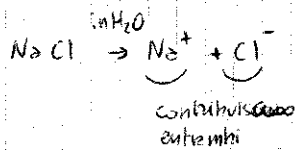
$$\pi V = nRT \quad \rightarrow \quad \pi = n \frac{RT}{V} \quad \rightarrow \quad \pi = \left(\frac{m}{M}\right) \frac{RT}{V}$$

$\frac{m}{V} = \text{densità}$

Che succede con elettroliti e due sostanze volatili?

Per gli elettroliti valgono le precedenti proprietà colligative, però se io ho un elettrolita, dissociandosi:

es.



dovrà prendere 0,5 di concentrazione molare di entrambi, e si introduce il coefficiente di Van't Hoff (i)

Se ho un sale che si dissocia in acqua e dà 2 ioni, ci sarà questo sale con un certo grado di dissociazione, in un sale forte il grado di dissociazione sarà 1, cioè tutto il sale si dissocia in Na^+ e Cl^- . Però ci sono dei sali, doppi zudi e delle basi che non sono forti, che non sono completamente dissociate, allora:

$$\alpha = \frac{\text{numero molecole dissociate}}{\text{numero totale molecole}} \quad \text{quindi le moli dissociate saranno: } \alpha \cdot n$$

quelle dissociate saranno date da: numero totale molecole - molecole che si dissociano = $\alpha \cdot n$

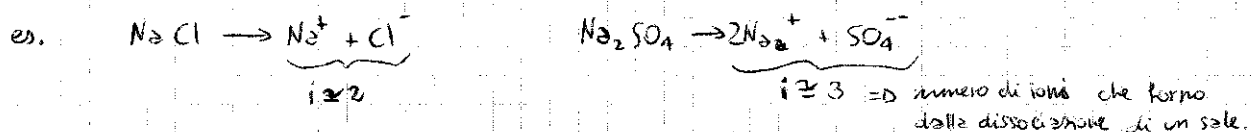
$$\text{Il numero di ioni prodotti saranno dati: } z - \text{numero moli dissociate} \rightarrow z - (\alpha \cdot n)$$

\downarrow
ione

Il numero di particelle in soluzione: somma delle moli che si dissociano + ioni prodotti dalla dissociazione.

$$\begin{aligned} &\downarrow \\ &\text{corrisponde al coefficiente di Van't Hoff} \end{aligned} \quad \begin{aligned} &1 + (z - 1) = i \\ &\alpha = \frac{i - 1}{z - 1} \end{aligned}$$

Tutte le proprietà colligative saranno uscite tenendo conto del coefficiente di Van't Hoff.



- reticolo cristallino:

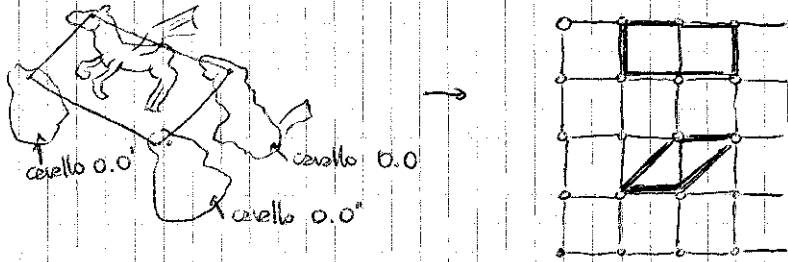
È una serie di punti geometrici su due dimensioni in cui si considera un punto, si guardano quelli intorno e si ripete questo passaggio n volte, creando una struttura.

La ripetizione nella tre dimensioni spaziali genera un cristallo (cella elementare)

Ad ogni punto che io vedo associa una particella (uno ione, una molecola, dipende dal tipo di cristallo)

- Modello di Mescher

es.



Grande al modello di Mescher possiamo ottenere un'unità di base che se ripetuto nello spazio dare la stessa figura. Quello che viene fuori sarà chiamato reticolo cristallino.

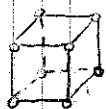
Ci sono 7 reticoli cristallini, 3 cui corrispondono 14 celle elementari (di Bravais Bravais) reticoli.

I più importanti sono il cubico e l'esagonale perché la maggior parte delle sostanze cristallizzano in quei due nodi.

Metalli → cubico o esagonale

NaCl → cubico ossidi, solfuri → cubico o esagonale

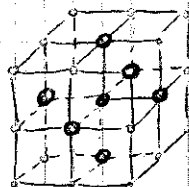
- Cubico:



cella elementare semplice cubica

← ci sono solo un atomo all'interno ogni atomo contribuisce ad $\frac{1}{8}$ per cui avendo 8 vertici, $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ atomo.

NaCl
Na⁺ + Cl⁻

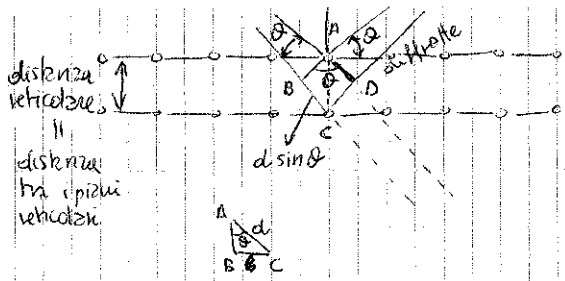


• Cl⁻
○ Na⁺

Cl⁻ ha 6 Na⁺ intorno quindi si chiama numero di coordinazione numero di coordinazione = 6

Numero di ioni, atomi, molecole che sta più vicino allo ione (atomi o molecole) di ioni o sodio, in questo esempio, il numero di ioni di Na⁺ vicino a Cl⁻.

Ogni atomo ione di Cl⁻ avrà 6 ioni di Na⁺ vicino dato che si ripete nello spazio.



$BC = d \sin \theta$ $CD = d \sin \theta$ quindi $BC + CD = 2d \sin \theta$

Se le due onde diffratte sono in fase tra di loro, quando si va a colpire una lastra fotografica, si vedrà una macchia scura. Perciò onde in fase tra di loro e diffratte creano una macchia scura su una lastra fotografica.

Le due onde saranno in fase quando viene soddisfatta la legge di Bragg:

$2d \sin \theta = n \lambda \rightarrow$ lunghezza d'onda del raggio incidente (raggio di Bragg)
multiplo intero

Se si fa ruotare l'angolo il cristallo ad un certo angolo 2θ , da lì si riuscirà a calcolare la lunghezza d , perché θ è l'angolo dell'onda incidente, λ la lunghezza d'onda dei raggi x e n sarà data:

$$d = \frac{1}{2} \frac{n \lambda}{\sin \theta}$$

quello che si ottiene sarà una serie di macchie, perché non si può fare una sola posizione, il cristallo viene ruotato dallo strumento automaticamente per valori definiti 2θ , per cui si ottengono delle macchie scure che sono delle frange delle onde di diffrazione.

Ogni sostanza che si va a colpire con i raggi x ha uno spettro di diffrazione caratteristico e da questo si possono calcolare le distanze reticolari (di solito in automatico tramite la macchina) si calcola la cella elementare e la distanza tra ^{gli} atomi.

-Tipi di solidi cristallini

METALLICI: nei solidi metallici si può pensare ad una struttura costituita da cationi metallici circondati da un mare di elettroni.

IONICI: nei solidi ionici, vi sono forze elettrostatiche attrattive tra ioni di carica opposta e repulsive tra ioni con la stessa carica (es. NaCl). Si tratta di attrazioni di tipo Coulombiano (inversamente proporzionali al quadrato della distanza). Il numero di coordinazione di uno ione in un cristallo è dato dal numero di ioni vicini (es. Na^+ è circondato da 6 ioni Cl^- e viceversa). Allo stato solido sono isolanti, conducono corrente allo stato liquido.

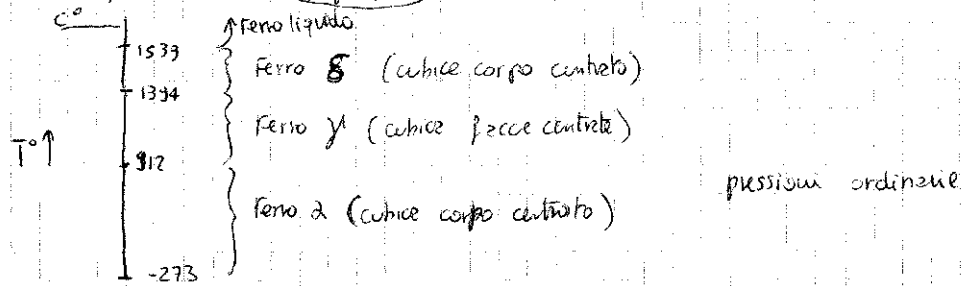
RETICOLARI: ^{provenienti} gli atomi sono congiunti a quelli adiacenti da legami covalenti (es. diamante $C sp^3$ e grafite $C sp^2$). Questi solidi sono caratterizzati da durezza e rigidità ed hanno elevati punti di fusione ed ebollizione.

MOLECOLARI: aggregati di molecole tenute insieme da forze intermolecolari (es. ghiaccio). Minor durezza, punti di fusione più bassi. In maggior parte si solidificano in maniera compatta, al contrario del ghiaccio.

invece è Z -

Alcuni metalli, anche covalenti e ionici che presentano allotropia o polimorfismo, dove possono cristallizzare in diverse strutture a seconda della temperatura o a seconda della pressione (allotropia).

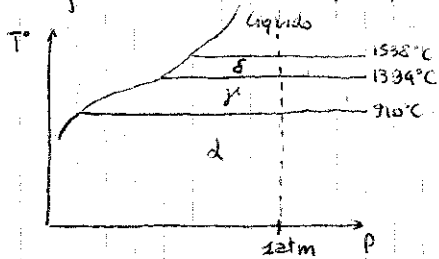
Ad esempio il ferro α, γ, δ → allotropiche



Salendo di temperatura c'è un cambio di forma reticolare.

min 46:00

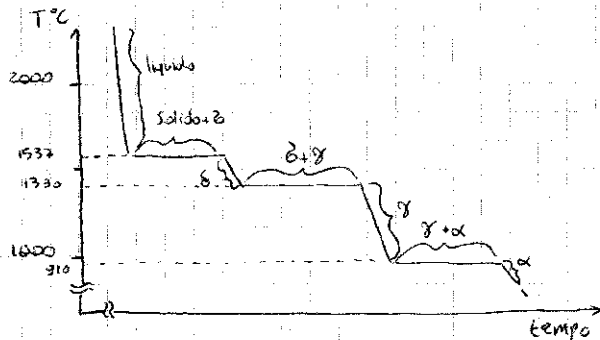
Diagramme di stato del ferro puro.



Fe α → ferrite α

Fe γ → austenite

Fe δ



Curve di raffreddamento schematico per il ferro puro alla pressione atmosferica (1 atm). Gli arresti della temperatura si hanno in corrispondenza dei confini di fase.

Questo fenomeno si chiama allotropia.

La temperatura di fusione e la densità vengono date rispetto alla fase che è più stabile a temperatura ambiente, perché per noi è sempre metallo, sempre freddo.

Cambia la densità, le cubiche a corpo centrato e le cubiche a faccia centrata portano sono quelle che portano ad avere una alta densità del metallo, poi è data anche da premi su volume quindi è correlato al peso.

Il fenomeno dell'allotropia lo ritroviamo anche nei solidi covalenti oppure ionici.

Ad esempio il Solfuro di zinco (ZnS) è a forma esagonale se si tratta di wurtzite e cubica se si parla di blenda. Sono due minerali diversi dove il solfuro di zinco è presente

in due forme cristalline diverse. Lo zolfo decora dei cristalli S_8 , degli aggregati molecolari, può cristallizzare nel sistema monoclino e rombico che a livello macroscopico creerà due cristalli con una struttura molto diverse tra di loro. Il fosforo P_4 può cristallizzare in due

forme allotropiche diverse, rossa e bianca, la bianca è un reticolo cubico e formato da

Altri solidi covalenti sono i silicati, hanno una struttura SiO_4 e si formano delle catene per l'unione di molte di queste strutture, sono catene che formano pi. amianti, molto fibrosa quindi si staccavano e venivano respirati, la struttura a livello molecolare è formata da tante catene: Pirosseno, Wollastonite, Rodonite, Amphibolo, Xenotite.

Una struttura a catene ripetute invece sul piano formano fillosilicati, rocce "micce" sono trasparenti e se sostituiamo Al e Si, otteniamo Alluminio silicati che sono le argille, hanno strutture non a catena e si ~~creano~~ uniscono in piani e sono facilmente sfaldabili. I vetri sono fillosilicati con una struttura amorfa e il punto di fusione non è ben definito.

Cristalli liquidi

Sono presenti negli apparecchi digitali, grosse molecole organiche che hanno una struttura cristallina, ma hanno una viscosità pari a quella dei liquidi. Sono molecole polari e con un campo elettrico si orientano a seconda del campo e tendono ad appiattirsi. In tre tipi di strutture diverse:

Fase nematica, Fase colesterica e Fase smettica.

↓
tutti orientati
però sfaldati

↓
ha una struttura
elicoidale, in cui
subisce una
distorsione, i haston
cni.

↓
tutti orientati
allo stesso modo,
più ordinati.

→ vengono usati nei display, si mettono fra due vetri, si mette un filtro davanti, che lascia passare solo determinate onde luminose, e dirige la luce. Sotto ci sarà uno specchio.

Ci sono anche elettrodi collegati alla batteria e quando arriva corrente tutti i cristalli si orientano in fase nematica e non lasciano passare la luce, va all'interno del cristallo liquido. Quando non c'è corrente le molecole si orientano in maniera che la luce passi e che venga riflessa dallo specchio che c'è in fondo. Quando non c'è corrente vediamo tutta la luce, quando c'è corrente vediamo il segnale scuro. 1:08:20

Il legame metallico non viene spiegato soltanto con la teoria del mare di elettroni, ma viene spiegato anche dalla teoria del legame covalente, come modello a bande.

Mettiamo insieme 2 atomi di Litio si formano 2 orbitali molecolari tra i 2s e altri 6 orbitali molecolari tra i 2p. I 2s sono occupati, i 6 orbitali 2p sono vuoti, si formano 8 orbitali molecolari da 2 atomi di Litio, in cui solo l'orbitale più basso è occupato, se prendo 4 atomi di Litio se ne formerebbero 16 gli orbitali molecolari. Se ho un n (di avogadro) numero di atomi di Litio avrò 4n numero di orbitali molecolari, siccome gli orbitali sono uguali, le energie degli orbitali sono identiche, quindi potrà