



**Corso Luigi Einaudi, 55 - Torino**

**Appunti universitari**

**Tesi di laurea**

**Cartoleria e cancelleria**

**Stampa file e fotocopie**

**Print on demand**

**Rilegature**

NUMERO: 1750A -

ANNO: 2015

# **A P P U N T I**

STUDENTE: Venezia Angela

MATERIA: Chimica I - prof. Bonelli

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.**

Gruppi → 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

Periodi ↓  
IA  
IIA

### Tavola periodica degli elementi

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1 H 1,01 (2,1)	2 He 4,00	3 Li 6,94 (1,0)	4 Be 9,01 (1,5)	5 B 10,81 (2,0)	6 C 12,01 (2,5)	7 N 14,00 (3,0)	8 O 16,00 (3,5)	9 F 19,00 (4,0)	10 Ne 20,18 (4,0)	11 Na 22,99 (0,9)	12 Mg 24,31 (1,2)	13 Al 26,98 (1,5)	14 Si 28,09 (1,8)	15 P 30,97 (2,1)	16 S 32,06 (2,5)	17 Cl 35,45 (3,0)	18 Ar 39,95 (3,0)	
19 K 39,10 (0,8)	20 Ca 40,08 (1,0)	21 Sc 44,96 (1,3)	22 Ti 47,90 (1,5)	23 V 50,94 (1,6)	24 Cr 52,00 (1,6)	25 Mn 54,94 (1,5)	26 Fe 55,85 (1,8)	27 Co 58,93 (1,8)	28 Ni 58,71 (1,9)	29 Cu 63,54 (1,9)	30 Zn 65,37 (1,6)	31 Ga 69,72 (1,6)	32 Ge 72,59 (1,8)	33 As 74,92 (2,0)	34 Se 78,96 (2,4)	35 Br 79,91 (2,8)	36 Kr 83,80 (2,8)	
37 Rb 85,47 (0,8)	38 Sr 87,62 (1,0)	39 Y 88,91 (1,2)	40 Zr 91,22 (1,4)	41 Nb 92,91 (1,5)	42 Mo 95,94 (1,8)	43 Tc 98,9 (1,9)	44 Ru 101,07 (2,2)	45 Rh 102,91 (2,2)	46 Pd 106,42 (2,2)	47 Ag 107,87 (1,9)	48 Cd 112,4 (1,7)	49 In 114,82 (1,7)	50 Sn 118,89 (1,8)	51 Sb 121,75 (1,9)	52 Te 127,68 (2,1)	53 I 126,90 (2,5)	54 Xe 131,30 (2,5)	
55 Cs 132,91 (0,7)	56 Ba 137,34 (0,9)	*57 La 138,91 (1,1)	72 Hf 178,49 (1,3)	73 Ta 180,95 (1,5)	74 W 183,85 (1,7)	75 Re 186,21 (1,9)	76 Os 190,23 (2,2)	77 Ir 192,22 (2,2)	78 Pt 195,09 (2,2)	79 Au 196,97 (2,4)	80 Hg 200,59 (1,9)	81 Tl 204,37 (1,8)	82 Pb 207,19 (1,8)	83 Bi 208,91 (1,9)	84 Po 210	85 At 210	86 Rn (222)	
87 Fr 223	88 Ra 226	**89 Ac 227	104 Rf 261	105 Db 262	106 Sg 266	107 Bh 266	108 Hs 265	109 Mt 266	109 Mt 266	109 Mt 266	109 Mt 266	109 Mt 266	109 Mt 266	109 Mt 266	109 Mt 266	109 Mt 266	109 Mt 266	109 Mt 266

\*Lantanidi

58 Ce 140,12	59 Pr 140,907	60 Nd 144,24	61 Pm	62 Sm 150,35	63 Eu 151,36	64 Gd 157,25	65 Tb 158,924	66 Dy 162,50	67 Ho 164,930	68 Er 167,26	69 Tm 168,934	70 Yb 173,04	71 Lu 174,97
--------------------	---------------------	--------------------	----------	--------------------	--------------------	--------------------	---------------------	--------------------	---------------------	--------------------	---------------------	--------------------	--------------------

\*\*Attinidi

90 Th 232,038	91 Pa 231,06	92 U 238,03	93 Np 237	94 Pu 242	95 Am 243	96 Cm 247	97 Bk 247	98 Cf 249	99 Es 254	100 Fm 253	101 Md 256	102 No 256	103 Lr 257
---------------------	--------------------	-------------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------	------------------	------------------	------------------	------------------

Numero atomico z

Simbolo

Massa atomica (peso atomico)

Elettronegatività (secondo Pauling)

30  
**Zn**  
65,37  
(1,6)

## Entalpie di formazione standard (kJ/mol)

Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-1676	CO(g)	-110,5
B <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (g)	35,61	CO <sub>2</sub> (g)	-393,5
B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-1272	COCl <sub>2</sub> , fosgene(g)	-220,1
Ba(OH) <sub>2</sub> (s)	-946,3	CS <sub>2</sub> (g)	280,3
BaCO <sub>3</sub> (s)	-1216	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (s)	-824,2
BaO(s)	-553,4	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (s)	-1118
CH <sub>4</sub> , metano(g)	-74,87	FeO(s)	-266,7
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> , etino(g)	226,7	H <sub>2</sub> O(g)	-241,8
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , etene(g)	52,47	H <sub>2</sub> O(l)	-285,8
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> , etano(g)	-84,68	H <sub>2</sub> S(g)	-20,50
C <sub>2</sub> N <sub>2</sub> , cianogeno(g)	309,1	HBr(g)	-35,38
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> , propene(g)	20,42	HCHO(g)	-115,9
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> , propano(g)	-103,8	HCl(g)	-93,31
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> , butano(g)	-126,1	HCN (g)	135,1
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> , benzene(l)	49,04	HCOOH(l)	-424,8
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> , cicloesano(l)	-156,2	HF(g)	-272,5
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> , esano(l)	-198,8	HI(g)	26,36
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> , benzene(l)	49,04	Li <sub>2</sub> O(s)	-598,7
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> , ottano(l)	-250,2	LiOH(s)	-484,9
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> , dodecano(l)	-352,4	MgO(s)	-601,2
Ca(OH) <sub>2</sub> (s)	-986,1	N <sub>2</sub> H <sub>4</sub> (g)	95,19
CaCO <sub>3</sub> (s)	-1207	N <sub>2</sub> O(g)	82,05
CaO(s)	-635,1	Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)	-1131
CCl <sub>4</sub> (g)	-100,4	Na <sub>2</sub> O(s)	-418,0
CF <sub>4</sub> (g)	-933,2	NaCl(s)	-181,4
CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> (g)	-95,52	NaOH(s)	-425,9
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH(l)	-277,0	NH <sub>3</sub> (g)	-45,94
CH <sub>3</sub> CHO(g)	-166,4	NO(g)	90,29
CH <sub>3</sub> Cl(g)	-86,32	NO <sub>2</sub> (g)	33,09
CH <sub>3</sub> OH(l)	-238,6	SiO <sub>2</sub> (s)	-910,9
CHCl <sub>3</sub> (g)	-101,25	ZnO(s)	-348,3

## ② AROMATICI o ARENI (benzene e derivati)

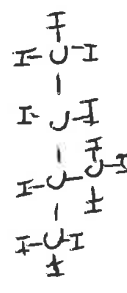
ALCANI ...  
 - isomeria conformazionale  
 rotazionale (microonde)  
 intorno a C-C

etano - "spallato" + stabile  
 intorno "refulsioni"  
 "eclissato"  
 la barriera energetica  
 fra le due forme limite  
 è detta "tensione torsionale"  
 butano - "anti" } minimo di  
 "gauche" } energia  
 "eclissato" } dispendiosa per la  
 rotazione

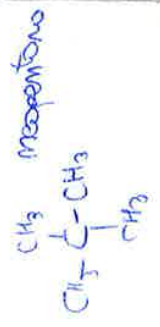
### NOMENCLATURA

- catena + lunga  
 - il composto deriva da  
 questa catena  
 - numerato in modo  
 che i sostituenti abbiano  
 il n° + basso  
 - se compare + di una  
 volta "di- tri-"  
 - se ci sono + gruppi  
 vanno mess. in  
 ordine alfabetico

es. pentano C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>  
 CH<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>



isopentano  
 2-metil-butano



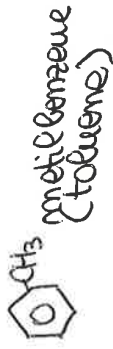
- benzene C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> planare (120°)  
 sp<sup>2</sup> 6e<sup>-</sup> delocalizzati in un  
 unico orbitale π; da reazione  
 di sostituzione



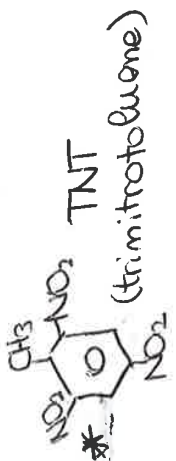
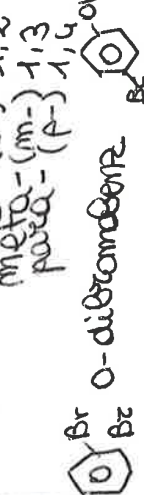
(si pensava potesse  
 avvenire reazioni di addizione  
 perché si presentava  
 come insaturo)

Condizioni aromaticità (Hückel)  
 ① ciclico ② planare  
 ③ 4n + 2 e<sup>-</sup> delocalizzati

NOMENCLATURA: si aggiunge il  
 suffisso -benzene al nome del  
 sostituito



Per derivati di sostituiti  
 orto- (o-) 1,2  
 meta- (m-) 1,3  
 para- (p-) 1,4



Quando l'anello di  
 benzene è ~~un~~ sostituito  
 si chiama fenile  
 (benzene meno 1H)

- fenile deriva dal toluene  
 per rimozione di un  
 idrogeno dal metile



### Gli idrocarburi

Si ottengono dalla distillazione  
 del petrolio

- grezzo in gergo, si separano  
 varie frazioni → distillazione  
 frazionata

C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> gas

C<sub>4</sub>-C<sub>10</sub> benzina

C<sub>9</sub>-C<sub>16</sub> kerosene

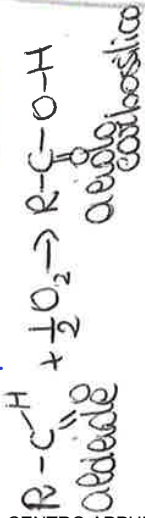
C<sub>15</sub>-C<sub>22</sub> gasolio

C<sub>20</sub>-C<sub>30</sub> olio lubrificante

> C<sub>25</sub> residuo per  
 asfalti.

### 3 Acidi carbossilici

$R-COOH$   
 Il gruppo carbossile  
 -COOH si trova in  
 posizione terminale  
 ed è costituito dal  
 gruppo ossidabile -OH e da  
 un carbonile C=O  
 - acidi deboli  
 - fino a 3 atomi sono  
 solubili in  $H_2O \rightarrow +C$   
 liquidi oleosi  $\rightarrow +C$   
 solidi cristallini  
 Si possono ottenere da  
 ossidazione di idrocarburi,  
 alcool primari e aldeidi



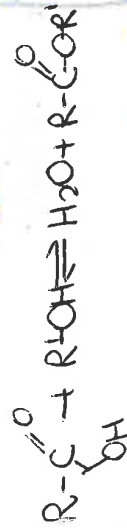
NOVENNATURA  
 (tradizionale: fonte naturale, biologica)  
 - dal gruppo COOH (m°)  
 - nome della catena principale  
 si ottiene da

- ACIDI + nome idrocarb. corrispondente + O + ICO
- HCOOH acido metanoico
  - CH<sub>3</sub>COOH acido etanoico
  - CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>COOH acido propanoico
  - CH<sub>3</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>COOH acido butanoico
  - CH<sub>3</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>COOH acido pentanoico

HCOO- metanoato  
 CH<sub>3</sub>COO- etanoato

### 4 Esteri

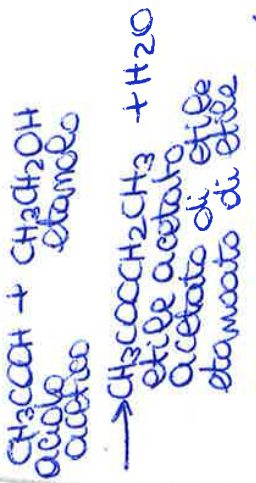
$R-COO-R'$   
 si ottengono dalla reazione  
 tra un acido carbossilico  
 e un alcool (esterificazione)  
 $\rightarrow$  estere +  $H_2O$



la reazione opposta è  
 l'idrolisi dell'estere

NOVENNATURA

nome del radicale  
 alchilico dell'alcol seguito  
 dallo nome corrispondente  
 dell'acido o viceversa



- gli esteri leggeri  
 sono presenti nelle  
 essenze di frutta


- acido formico  
 acido acetico  
 acido propanoico  
 acido butanoico  
 acido valeroico

### 8 Ammine

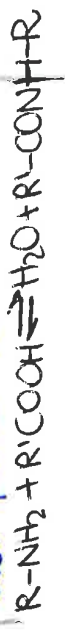
- composti organici derivati  
 dall'ammoniaco per sostituzione  
 di uno (ammina  
 primaria), due (ammina  
 secondaria) o tre (ammina  
 terziaria) atomi di H con  
 gruppi alchilici (ammine  
 alifatiche) o arilici (ammine  
 aromatiche) o miste  
 - basi deboli

NOVENNATURA

- se viene considerato  
 il gruppo sostituente simmette  
 il prefisso ammino-  
 - se è il gruppo principale  
 il suffisso -ammina

- CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> metilammina
- (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NH dimetilammina
- (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>N trimetilammina
-  (ammina) anilina
- amminobenzene

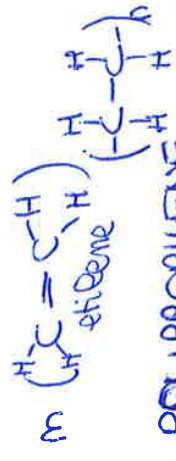
- solubili fino a 5-6  
 atomi di C (legami H)  
 - metilammina ed etilammina  
 sono gas  
 - le ammine primarie con 3  
 o 4 atomi di C sono liquidi  
 - hanno punti di fusione +  
 alti degli alcoli ma +  
 bassi degli eteri perché i  
 ponti N-H...N sono + deboli  
 dei ponti OH...O



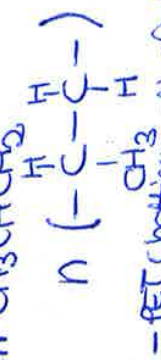
### 9 Polimeri

si formano quando  
 reagiscono molecole  
 organiche (monomeri) tra  
 loro  
 le reazioni di polimeriza-  
 zione si propagano  
 per meccanismo  
 radicalico o ionico

- POLIETILENE



- POLIPROPILENE



- PET (bottiglie di plastica)  
 - TEFLON



- POLISTIRENE (caucciù per pneumatici)

- Polimeri naturali: amido, glicogeno, DNA

## UNITA DERIVATE DEL SI

Grandezza	Unità	Simbolo	Definizione
Energia	Joule	J	$\text{kg m}^2 \text{s}^{-2}$
Forza	Newton	N	$\text{kg m s}^{-2} = \text{J m}^{-1}$
Potenza	Watt	W	$\text{kg m}^2 \text{s}^{-3} = \text{J s}^{-1}$
Pressione	Pascal	Pa	$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2} = \text{Nm}^{-2}$

\* Europa atmosfera  
 America bar  
 sotto l'atmosfera si usa  
 il millimetro di mercurio mmHg  
 o Torr

- \*  $1 \text{ atm} = 101325 \text{ Pa}$
- \*  $1 \text{ atm} = 760 \text{ mmHg}$
- \*  $1 \text{ mmHg} = 0,00131 \text{ atm}$
- \*  $1 \text{ bar} = 100000 \text{ Pa}$
- \*  $1 \text{ Torr} = 133,32 \text{ Pa}$

Carica elettrica	Coulomb	C	A s
Differenza di potenziale elettrico	Volt	V	$\text{kg m}^2 \text{s}^{-3} \text{A}^{-1} = \text{J C}^{-1}$

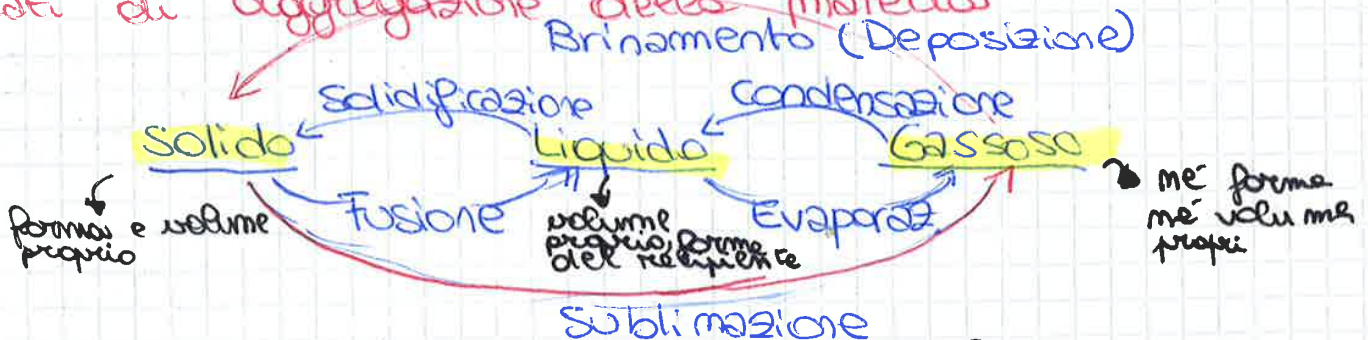
## Il tema centrale della chimica

- le proprietà e le trasformazioni delle sostanze (comportamenti macroscopici osservabili) sono le conseguenze delle proprietà e del comportamento microscopici.
- da ragione del comportamento macroscopico va cercato in quello microscopico. Partiamo dal micro per passare al macro. Il comportamento macroscopico dipende dal comportamento atomico e subatomico.

es.  $\text{H}_2\text{O}$  liquida/gassosa la differenza è la vicinanza delle molecole

Il comportamento macroscopico della materia dipende dalla sua composizione a livello particellare

## Stati di aggregazione della materia



La materia si presenta comunemente in tre forme finite o STATI di AGGREGAZIONE: solido, liquido, gassoso

\* Lantanidi e Attinidi sono metalli di transizione interni

**SEMIMETALLI e METALLOIDI**

**NON METALLI**

**ALOGENI (VII gruppo)**

**GAS NOBILI e RARI**: Essi loro struttura atomica è stabile, non si legano per formare leghe e cause della loro struttura atomica. Tutti gli altri elementi della tavola periodica si legano per raggiungere la stabilità di un gas nobile.

S = 20<sup>es</sup>

Lo 20<sup>es</sup> non si trova isolato, molecola Se

**Elementi vs Composti**

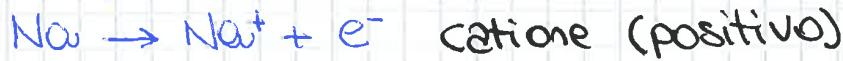
proprietà fisiche/chimiche <sup>esclusive</sup> una sola specie di atomo

Un elemento è formato da un elemento, un composto da più elementi. <sup>macroscopiche</sup> ~~un elemento~~ ha caratteristiche prop. chimiche e fisiche (microscopiche) uniche.

NaCl ha proprietà molto diverse dai metalli da cui deriva; contiene ioni.

Un composto ha prop. diverse da quelle degli elementi che lo compongono

Atomo: è un'entità elettricamente neutra  
Ione: è un'entità che si forma dall'atomo cedendo o acquistando elettroni



NaCl è una sostanza cristallina ordinata  
Na è un metallo abbastanza tenero (coltello)  
Cl è un gas giallino

Gli elementi esistono per la > parte come atomi. <sup>Alcuni</sup> elementi esistono in natura in forma molecolare. Una molecola è un'unità strutturale indipendente costituita da 2 o + atomi legati chimicamente.

Proprietà fisiche diverse anche la reattività:  
NaCl in H<sub>2</sub>O si scioglie  
Na in H<sub>2</sub>O esplosivo

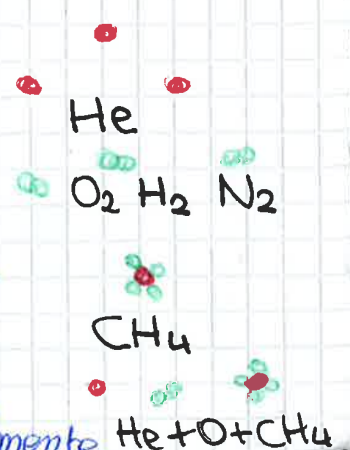
**Elementi, Composti, Miscele**

La > parte degli elementi sono costituiti da un grande insieme di atomi identici

Alcuni elementi esistono come molecole

Una molecola di un composto è costituita da numeri caratteristici di atomi di due o + elementi legati chimicamente tra loro

Una miscela contiene le unità individuali di 2 o + elementi e/o composti mescolati fisicamente.





# Sistemi Omogenei, Eterogenei, Fasi

Sistema: la porzione di universo che intendiamo studiare

Sistema omogeneo: porzione di materia caratterizzata in ogni suo punto dalla stessa composizione in massa e dalla presenza di una sola fase. Una soluzione è per definizione una miscela omogenea.

Sistema eterogeneo: porzione di materia caratterizzata dalla presenza di più fasi e/o da diversa composizione chimica. È caratterizzato dalla presenza di superfici di separazione tra le sue fasi.

2 Fasi: Acqua e Ghiaccio, H<sub>2</sub>O e olio

Una fase è una porzione di materia caratterizzata in ogni suo punto da proprietà costanti: una goccia d'olio è un esempio di fase liquida con composizione chimica costante.

## Separazione dei componenti di un sistema

\* le impurità solubili restano in soluzione, il resto può formare maglie cristalline

Filtrazione: liquido e solido non miscibili

Cristallizzazione: solido sciolto in un liquido

Tecnica di purificazione di sostanze solide. Sfruttando il fatto che la solubilità di un soluto in un determinato solvente dipende dalla temperatura si può separare il soluto dalle impurità solubili.

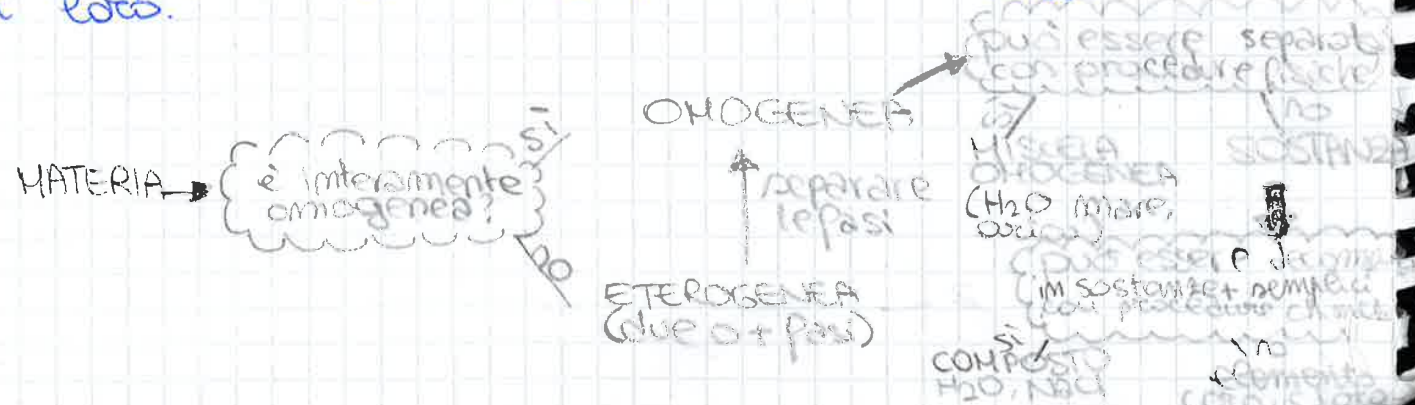
Distillazione: due liquidi con volatilità diverse o un liquido e un solido in soluzione. T. ebollizione < liquido 1 evapora; nel tubo il vapore si condensa grazie a H<sub>2</sub>O presente nella camicia esterna del tubo, raccogli liquido

Estrazione: due liquidi non miscibili. Si aggiunge una sostanza che ha maggiore affinità per uno dei liquidi. Si agita e si separa in due strati.

Cromatografia: separazione di miscele di sostanze in un tubo capillare. Si agita e si separa in due strati.

Se miscelato alifatico è esano (C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>) galleggia su H<sub>2</sub>O  
 C<sub>n</sub>H<sub>2n+2</sub> → formula degli alcani, fanno parte degli idrocarburi

Il metodo di separazione dei componenti di un sistema deve sfruttare quella particolare proprietà fisica per cui i componenti del sistema differiscono tra di loro.



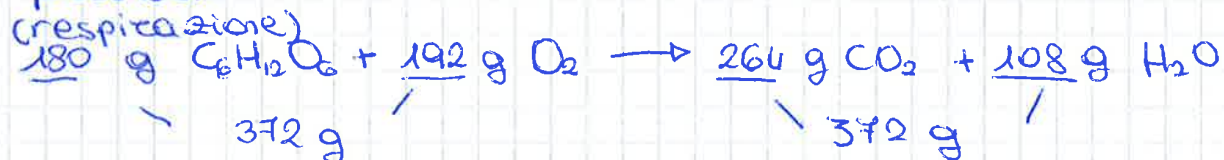
## Lezione 2 Modelli atomici

### Osservazioni della composizione della materia (Proust)

- 1 legge di conservazione della massa
- 2 legge della composizione definita e costante
- 3 legge delle proporzioni multiple

1 legge di conservazione della massa (Lavoisier)  
"nulla si crea, nulla si distrugge, tutto si trasforma"

Lavoisier non usa i coefficienti stechiometrici, lavora con le masse  
In una reazione chimica (rappresentata da un'equazione chimica) la massa dei reagenti è = alla massa dei prodotti



La massa totale delle sostanze rimane invariata durante una reazione chimica.  
Il numero di sostanze può variare, ma la quantità totale di materia rimane costante!

2 legge della composizione definita e costante (Proust)

Indipendentemente dalla sua fonte, ogni composto chimico è costituito dagli stessi elementi nelle stesse frazioni in massa

Frazione in massa: massa dell'elemento / massa del composto

Es  $H_2O$ : 16 "parti" di O e 2 di H  
 $CH_4$ : 12 "parti" di C e 4 di H

Massa peso molecolare

Contributo di O

Ossigeno ( $O_2$ )	32 u		32
Acqua Ossigenata ( $H_2O_2$ )	34 u	→ unità di massa atomica	32
Ossido di Carbonio (CO)	28 u		16
Diossido di Carbonio ( $CO_2$ )	44 u		32

$H_2O_2$  perossido di idrogeno



↓  
non è stabile

3. Gli atomi di un elemento sono identici nella massa e nelle proprietà e sono diversi dagli atomi di ogni altro elemento. (non conosce isotopi: → atomi dello stesso elemento con lo stesso numero di protoni (stesso numero atomico) ma con diverso numero di neutroni). I protoni sono gli stessi, cambiamo i neutroni (stabilizziamo il nucleo)

4. I composti sono formati dalla combinazione chimica di uno specifico rapporto di atomi di diversi elementi.

Postulati 1,2,3 (conservazione della massa)  
 3,4 (composizione definita e costante)  
 1,3 (proporzioni multiple)

### Limiti

- Perché gli elementi si combinano nei composti in certe proporzioni e non in altre?
- Non prevede la formula delle molecole
- Non prevede l'esistenza degli isotopi
- Il modello dell'atomo indivisibile non era in grado di spiegare l'esistenza di particelle subatomiche cariche elettricamente, come messo in evidenza dagli esperimenti successivi di THOMSON, MILLIKAN e RUTHERFORD che condussero al modello nucleare dell'atomo

### L'esperimento di Thomson

Misura il rapporto massa/carica dell'elettrone

Ho scoperto dell'elettrone e delle sue proprietà: i raggi catodici

non assoluto ( $10^{-3}$  atm)  
 Consideriamo un tubo di vetro in cui sia stato fatto il vuoto e in cui siano inseriti degli elettrodi metallici collegati ad un generatore di differenza di potenziale. Quando il generatore è acceso, si genera un raggio dal catodo (-) all'anodo (+) (→ raggio catodico) che va ad incidere sulla superficie terminale del tubo rivestita di un materiale in grado di emettere luce se colpito dal raggio (fosforo)

Se aggiungo un magnete o una placca (+ e -) i raggi sono deviati, elettroni verso l'alto

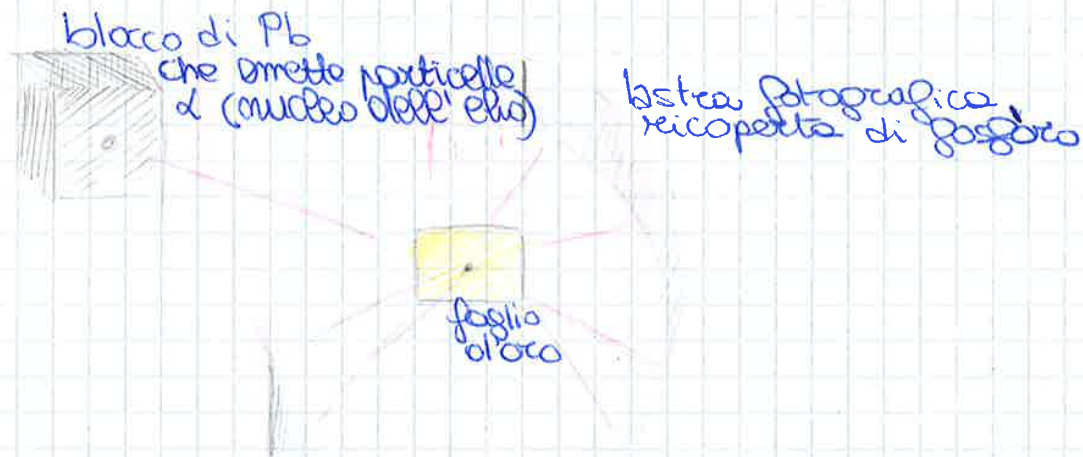
Anche se cambio il catodo (diverse particelle) si osserva lo stesso comportamento. Bilanciando gli effetti del campo magnetico e di quello elettrico si può determinare il rapporto massa/carica dell'elettrone.

Thomson misurò il rapporto massa/carica delle particelle costituenti i raggi catodici (elettroni) e trovò che era circa  $1/1000$  dell'elemento + leggero (H)

Dimostrò che non è vero che l'atomo è indivisibile (I° postulato di Dalton)

## L' esperimento di Rutherford

### Scoperta del nucleo atomico



Secondo l'ipotesi basata sul modello del "plum pudding", gli atomi sono costituiti da elettroni inclusi in materia di uguale carica positivamente, e quindi le particelle α in moto ad alta velocità dovrebbero attraversare il foglio d'oro subendo, al massimo, piccole deviazioni.

Nell'esperimento, le particelle α dirette contro il foglio d'oro determinano l'emissione di un lampo di luce quando attraversano gli atomi d'oro e vanno a colpire uno schermo rivestito di fosforo.

I risultati reali mostrano piccole deviazioni sporadiche e grandi deviazioni molto infrequenti. (una su 20000)  
Questo comportamento delle particelle α potrebbe aver luogo soltanto se una massa molto grande e una carica positiva fossero concentrate in una piccola regione entro l'atomo, il nucleo.

Rutherford, considerando massa, carica, velocità delle particelle α, la frequenza di deviazione e le proprietà degli elettroni, calcolò che un atomo è costituito prevalentemente da spazio occupato da elettroni, ma al centro c'è una piccola regione che contiene tutta la carica positiva ed essenzialmente tutta la massa dell'atomo.

Egli formulò l'ipotesi che nel nucleo fossero presenti particelle positive, i **protoni**.  
Il suo modello atomico spiegava tutto: tranne il neutrone, scoperto da Chadwick.

Gli elettroni si muovono in traiettorie permesse → porterebbe l'annichilimento

$^{238}\text{U}$  è trascurabile perché è difficile da trovare  
 Un isotopo è + abbondante  
 La massa degli elementi della tavola periodica tiene conto delle abbondanze relative degli isotopi:

H { Prozio  $^1_1\text{H}$       Abbondanza → 99,985 %  
 Deuterio  $^2_1\text{H}$  o D ( $\text{D}_2\text{O}$  → acqua pesante) 0,015 %  
 Trizio  $^3_1\text{H}$  o T      -

Il comportamento chimico di un elemento dipende essenzialmente dal numero degli elettroni e quindi gli isotopi di un elemento hanno un comportamento chimico praticamente identico.

Dei nuclei non instabili, formano nuclei + stabili emettendo radiazioni  $\alpha, \beta, \gamma$   
 $\alpha$  → radiaz. elettrica a elevata energia  
 elio emette un  $e^-$

$^{14}\text{C}$  abbondanza minima, datazione reperti

### Massa atomica

La massa di un atomo è misurata non in grammi ma relativamente alla massa dell'atomo di Carbonio-12. Essa, per definizione, è pari esattamente a 12 unità di massa atomica.

L'unità di massa atomica u (o Da) è 1/12 della massa dell'atomo del Carbonio-12

$$1 \text{ u} = 1,66054 \cdot 10^{-24} \text{ g}$$

$$\text{Massa atomica C} = 12,01115$$

### Abbondanze relative e masse atomiche

Il silicio (Si) ha 3 isotopi presenti in natura in diverse quantità:

$$^{28}_{14}\text{Si} \quad (92,23\%)$$

$$^{29}_{14}\text{Si} \quad (4,67\%)$$

$$^{30}_{14}\text{Si} \quad (3,10\%)$$

La massa atomica del Si riportata nella Tavola periodica è pari a 28,0855 u. Essa si può calcolare sommando i contributi delle masse atomiche dei 3 diversi isotopi del Si, "pesati" per le diverse abbondanze relative.

$$\begin{aligned} ^{28}\text{Si} &\rightarrow 27,9 \cdot 0,9233 = 25,8031 \text{ u} & ^{30}\text{Si} &= 29,9 \cdot 0,0310 = 0,9292 \text{ u} \\ ^{29}\text{Si} &\rightarrow 28,9 \cdot 0,0467 = 1,3532 \text{ u} & & 25,8031 + 1,3532 + 0,9292 = 28,0855 \text{ u} \end{aligned}$$

## Masses atomiche e masse molecolari

Se ho un composto devo sommare le diverse masse atomiche dei componenti del composto

Es  $\text{NaNO}_3 = 23 + 14 + 16 \cdot 3 = 85 \text{ u}$  (84,99 u)

$84,99 \text{ u} \cdot 1,6605 \cdot 10^{-24} \text{ g/u} = 141 \cdot 10^{-24} \text{ g}$   
peso di 1 atomo

$85 \text{ g} = 1 \text{ mol}$

$\frac{85 \text{ g}}{6,023 \cdot 10^{23}} = 141 \cdot 10^{-24} \text{ g}$

Im laboratorio si pesano masse dell'ordine del grammo, milligrammo...  
 Quante entità (atomi, ioni...) si saranno contenute?

→ Mole, unità di misura del SI

La mole è la quantità di sostanza di un sistema che contiene tante entità elementari quanti sono gli atomi in 0,012 kg di  $^{12}\text{C}$  (12 g).  
 Questo numero è il numero di Avogadro ( $N_A$ )

1 mol contiene  $6,022 \cdot 10^{23}$  atomi  
molecole  
ioni  
elettroni

Quantità in grammi di una sostanza pari al suo peso atomico e molecolare  
 La mole indica non solo il numero di entità, ma anche la loro massa, infatti la massa atomica di un elemento, espressa in unità di massa atomica, è numericamente uguale alla massa di 1 mol di atomi dell'elemento espresso in grammi.

Es 1 atomo di Fe ha massa 55,85 u (massa atomica)

1 mol di Fe pesa 55,85 g

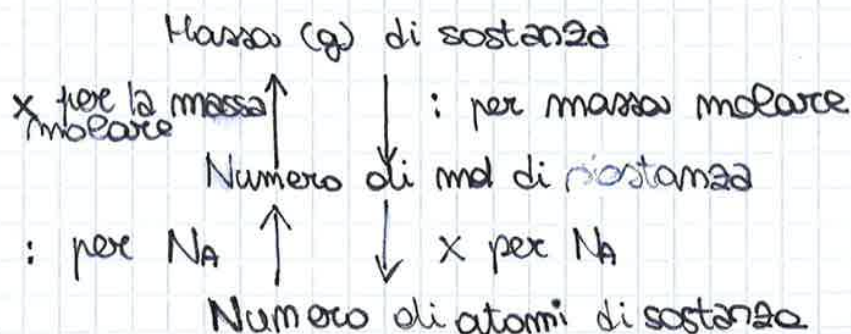
$55,85 \text{ g di Fe} = 1 \text{ mol} = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ atomi di Fe}$   
 $1 \text{ g?} \rightarrow \frac{1 \text{ (g)}}{55,85 \text{ (g/mol)}} \cdot N_A = 1,07842435 \cdot 10^{22} \text{ particelle}$   
 $\frac{55,85 \cdot 1,6605 \cdot 10^{-24}}{1} \rightarrow 1$

$M = \text{massa molare} \left( \frac{\text{g}}{\text{mol}} \right)$

$m = \text{massa di una sostanza}$

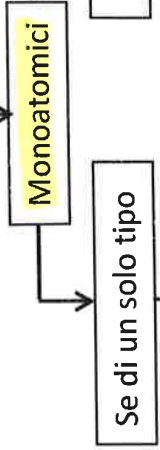
$(\text{mol})n = \frac{m \text{ (g)}}{M \text{ (g/mol)}}$

$n = \text{numero di moli}$



# CATIONI (ioni con carica positiva) $M^{p+}$

8 metalli tendono a formare cationi.



**REGOLA:**  
Ione + Nome dell'elemento

**ESEMPI:**  
 $Na^+$  ione sodio  
 $Mg^{2+}$  ione magnesio  
 $H^+$  ione idrogeno e **PROTONE**  
 $K^+$  ione potassio  
 $Sr^{2+}$  ione stronzio  
 $Cs^+$  ione cesio  
 $Ca^{2+}$  ione calcio (esiste solo  $2+$ )  
 $Al^{3+}$  ione alluminio  
 $Zn^{2+}$  ione zinco

$Li^+$  ione litio  
 (I° gruppo sempre  $+1$   
 → stabilità energetica)  
 $II^o$  gruppo ioni  $2+$   
 $III^o$  gruppo ioni  $3+$

**REGOLA a):**  
Radice del nome dell'elemento + oso (carica più bassa) o + ico (carica più alta)

**ESEMPI:** metalli di transizione  
 $Fe^{2+}$  ione ferr-oso  
 $Fe^{3+}$  ione ferr-ico  
 $Cu^+$  ione rame-oso  
 $Cu^{2+}$  ione rame-ico  
 $Sn^{2+}$  ione stann-oso } non è di transizione  
 $Sn^{4+}$  ione stann-ico } ma ha + cationi.

**REGOLA b):**  
Ione + Nome dell'elemento + carica in numero romano tra parentesi

**ESEMPI:**  
 $Fe^{2+}$  ione ferro (II) [si dice: ione ferro 2]  
 $Fe^{3+}$  ione ferro (III) (idem)  
 $Cu^+$  ione rame (I)  
 $Cu^{2+}$  ione rame (II)  
 $Sn^{2+}$  ione stagno (II)  
 $Sn^{4+}$  ione stagno (IV)

## Poliatomici (rari)

**ESEMPI:**  
 $NH_4^+$  ione ammonio  
 $H_3O^+$  ione idronio (ione ossonio) -  
 $Hg_2^{2+}$  ione mercurioso o ione mercurio (I)

**N.B.**  
 $Hg_2^{2+}$  è un dimero formato da due ioni  $Hg^+$  uniti come in  $Hg^+ - Hg^+$  poiché  $Hg^+$  come tale non esiste.

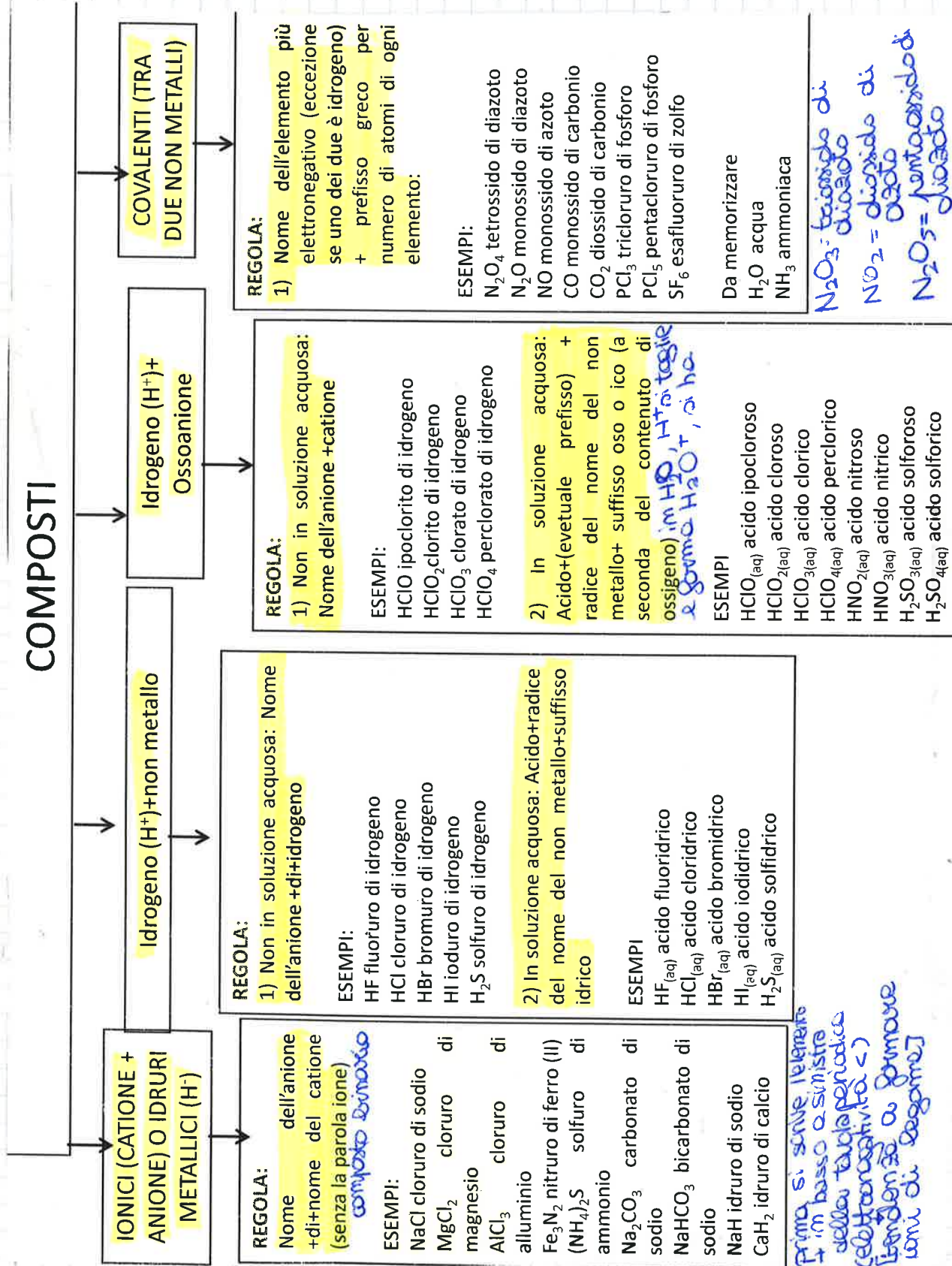
Esiste invece uno ione  $Hg^{2+}$ , ma è **MONOATOMICO** [ione mercurico o ione mercurio (II)]

\*  $NH_3 + H_2O \rightleftharpoons NH_4^+ + OH^-$   
 (ammoniac)      reversibile  
 2 composti neutri      ione ammonio idrossido  
 2 ioni

$NH_3 + H^+ \rightleftharpoons NH_4^+$   
 protone

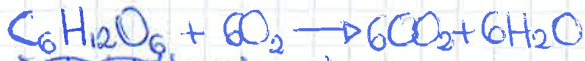
-  $H_2O + H^+ \rightarrow H_3O^+$   
 $Hg_2^{2+}$  pedice (2 ioni)      DIEMERO (TRIMERO... POLIMERO)  
 oggetto formato da 2 pezzi

# COMPOSTI



Due tipi di esercizi all'esame: da nome a formula o da formula a nome  
 Na<sup>+</sup> CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> → Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>





carboidrato, glucosio

Prima bilanciò i prodotti (fiumetto H, ultimo O), una volta bilanciato non li tocco + e penso ai reagenti

1 molecola di glucosio + 6 molecole di O → 6 molecole di CO<sub>2</sub> e 6 molecole d'acqua

$$(1 \text{ Na} = 6,022 \cdot 10^{23} + 6 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} \rightarrow 6 \cdot 6,022 \cdot 10^{23} + 6 \cdot 6,022 \cdot 10^{23})$$

1 mole di glucosio  $6 \cdot 12 + 12 + 6 = 180 \text{ u} = 180 \text{ g/mol}$   
 ossigeno  $16 \cdot 6 = 96 \text{ u} = 96 \text{ g/mol}$

$$\underbrace{180 + 96}_{372 \text{ g}} \rightarrow \underbrace{264 + 108}_{372 \text{ g}}$$

3 limiti della meccanica classica nello studio della struttura atomica:

→ la struttura atomica si spiega con le leggi della meccanica quantistica

Atomo: entità sferica con al centro nucleo +



Ci serve la fisica quantistica perché spiega come mai e- si trova solo in determinati orbitali (livelli energetici consentiti)

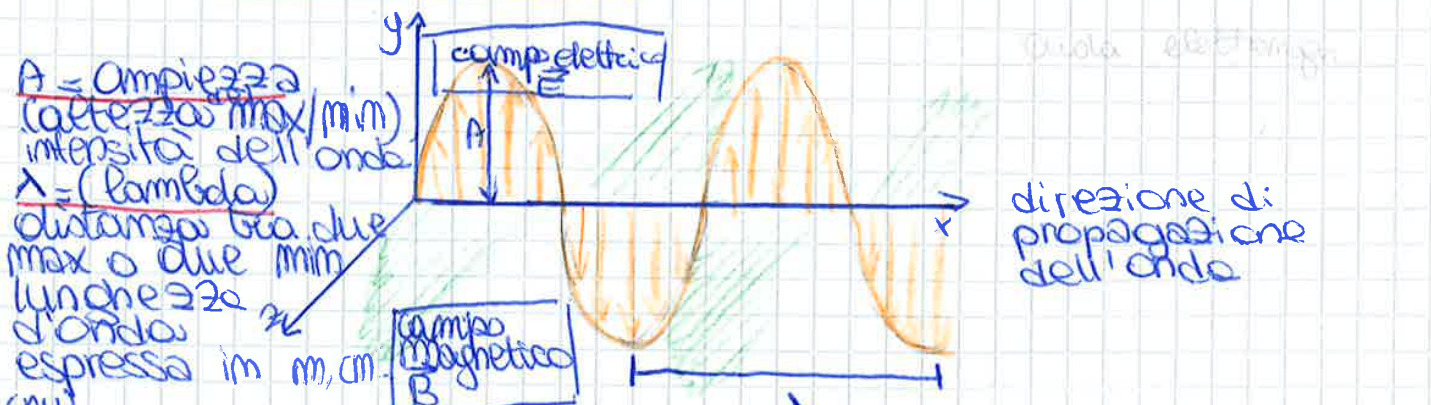
La chimica si interessa + di e-, la fisica del nucleo.

Si scopre che l'elettrone ha una duplice natura: particella e onda

Il comportamento della materia a livello sub-atomico non può essere spiegato con le leggi della meccanica classica, ma bisogna tener conto della natura particellare della materia e della natura ondulatoria dell'energia: la maggior parte delle nostre conoscenze sulla struttura degli atomi e delle molecole proviene da esperimenti in cui ci sono interazioni tra la materia e la luce. (esperimenti)

La luce infatti ha proprietà simili a quelle della materia. Può descrivere la luce come: ① massa nulla ② onda ③ particella perché interagisce con e-

Natura ondulatoria della luce



$A =$  Ampiezza (altezza max/min) intensità dell'onda  
 $\lambda = (\text{lambda})$  distanza tra due max o due min lunghezza d'onda espressa in m, cm, nm

$\nu$  frequenza → numero di onde che passano per un punto in un secondo o il numero di vibrazioni in unità di tempo di un'onda di lunghezza espressa in unità di tempo (ohertz, Hz)

## lo spettro elettromagnetico

È l'insieme delle frequenze delle onde elettromagnetiche

onde radio: bassa frequenza ( $10^5$  Hz), lunghezza d'onda compresa tra 10 km e 10 cm. Le onde radio (300 m) sono formate dalle montagne → ripetitori (o satellite) ricevono e amplificano il segnale. Per trasmissioni a lunga distanza onde radio con  $\lambda$  compresi tra 10 km e 10 m riflesse dagli strati ionizzati dell'atmosfera.

microonde tra  $10^{10}$  -  $10^8$  Hz; 10 cm - 1 mm  
 telefoni cellulari, radar, forni a microonde

radiazione infrarossa tra  $10^{14}$  -  $4 \cdot 10^{14}$  Hz; 1 mm - 0,4  $\mu$ m  
 fotografia infrarossa → temperatura, corpi celesti



il sole emette parte dell'energia sotto forma di radiazione infrarossa, assorbita dai gas dell'atmosfera → effetto serra

radiazione visibile: tra  $4 \cdot 10^{14}$  -  $7,5 \cdot 10^{14}$  Hz; 0,4  $\mu$ m - 0,7  $\mu$ m  
 onde elettromagnetiche che percepiamo sotto forma di luce

radiazione ultravioletta: tra  $7,5 \cdot 10^{14}$  -  $3 \cdot 10^{16}$  Hz; 0,4  $\mu$ m - 10 nm  
 favorisce reazioni chimiche (fa aumentare la melanina). Permettono di studiare alcune caratteristiche del sole e di galassie in formazione

raggi X: tra  $3 \cdot 10^{16}$  Hz e  $3 \cdot 10^{19}$  Hz; tra 10 nm e 0,01 nm  
 sono molto penetranti, radiografie, struttura doppia elica del DNA

raggi gamma: tra  $3 \cdot 10^{19}$  -  $3 \cdot 10^{23}$  Hz; 0,01 nm -  $10^{-5}$  nm  
 emessi dai nuclei, accompagnano le trasformazioni radioattive e le reazioni nucleari (tumori, sterilizzazione). Bloccati da diversi centimetri di piombo

## Luce monocromatica

monocromatica = 1 lunghezza d'onda ( $\lambda$ )

luce di un laser, specchi: modifichiamo la traiettoria (rifrazione)

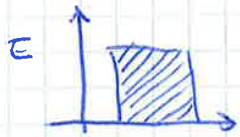
## Luce policromatica (+ $\lambda$ )

Quando la luce bianca passa attraverso un prisma, viene rifratta nei raggi dei vari colori che la compongono, perché ogni lunghezza d'onda è rifratta di un angolo diverso.

Atomi diversi fai passare la luce → comportamenti diversi

→ validità della teoria di Planck

Leccitare l'atomo per fare cambiare livello



Classica

Un oscillatore che segue la meccanica classica presenta valori continui di energia e può acquistare o perdere energia in quantità arbitrarie.



Quantistica

non tutti i livelli di energia sono permessi

Un oscillatore descritto dal postulo di Planck presenta livelli discreti di energia e può acquistare o perdere energia solo in quantità corrispondenti alla differenza tra due livelli energetici.

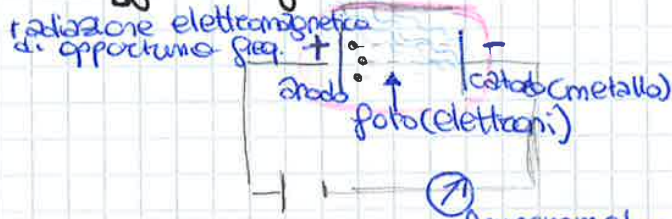


**Gli atomi oscillano emettendo quanti di energia!**

Solo determinati valori di energia, calcolati con  $h$ , d'energia nell'atomo e quantizzate

**2) effetto fotoelettrico**

(elettroni come particelle (Einstein))



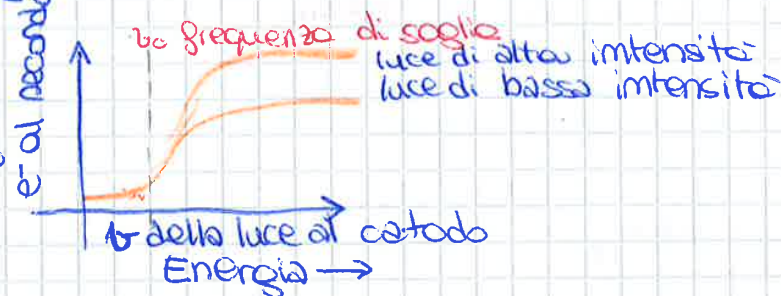
Amperometro: misura la corrente fotoelettrica generata che cessa quando cessa l'irradiazione!

luce monocromatica

Il catodo è colpito da luce con particolare frequenza ( $\nu$ ), le particelle sono eccitate → emissione di fotoelettroni del metallo

Se apengo la fonte  $i$  (corrente fotoelettrica) non passa + Per avere fotoemissione, non conta l'intensità della radiazione, come prevede la teoria classica, ma la sua frequenza, cioè la sua energia.

strappare e dalla forza del nucleo.  $\phi_0$  - lavoro o seconda del nucleo

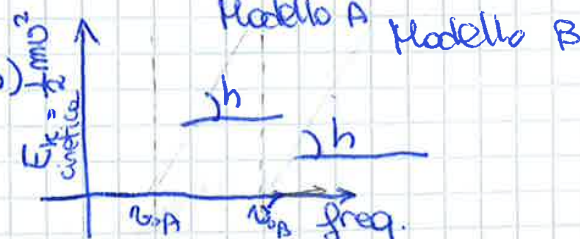


Gli elettroni sono fotomessi: quando ricevono dalla luce l'energia minima necessaria per strapparli alla superficie del metallo (**FREQUENZA DI SOGLIA**)

↳ legata al livello energetico dell'elemento

La frequenza di soglia cambia a seconda dell'elemento ma la curva è identica, è traslato

intercetta (p. di soglia) pendenze (cost. di Planck,  $h$ )



possono emettere solo radiazioni di frequenza definita che dipendono dal tipo di elemento che le emette.

\* Se campione rarefatto è eccitato e la luce viene fatta passare attraverso un prisma. Dopo il prisma c'è un rivelatore (lastra fotografica) che è impressionato. Troviamo delle righe non uno spettro continuo. Righe → livelli o scalmi:

Si studia bene lo spettro di H perché ha un solo e-

Lo spettro (o righe) dell'H... l'equazione di Rydberg

$$\frac{1}{\lambda_{vac}} = R_H \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{non imparare!}$$

$\lambda_{vac}$  → vuoto (nucleo piccolissimo). Lunghezza d'onda di una riga nel vuoto  
 H = idrogeno  
 inverso della lunghezza d'onda

$n_1 < n_2$   
 $R_H =$  costante di Rydberg =  $1,096776 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$

Rydberg trova questa formula da esperimenti. Questa formula ci permette di identificare le righe dello spettro dell'H.

Ogni riga = 1 transizione elettronica  
 le righe si originano da tutte le transizioni possibili dell'elettrone nell'atomo.

Energia dell'elettrone nell'idrogeno  
 $\Delta E$  è grande tra livelli ma abbiamo anche transizioni intermedie,  $\Delta E$  + piccolo nel visibile

### Il modello atomico di Bohr

Il modello atomico di Bohr tiene conto della quantizzazione dell'energia e lo applica al modello nucleare dell'atomo di Rutherford.

Il modello vale per H e per gli idrogenoidi, cioè con un solo e- cioè He<sup>+</sup>, Li<sup>2+</sup>. Atomi con un solo e-

Per spiegare le righe degli spettri atomici, Bohr ipotizza che un atomo abbia soltanto alcuni livelli energetici permessi.

Bohr trova lo stesso valore R di Rydberg teoricamente.

### 3 postulati di Bohr

- ① l'elettrone descrive orbite circolari intorno al nucleo
- ② all'elettrone che si muove intorno al nucleo sono permesse solo alcuni stati stazionari (immutabili nel tempo) cioè orbite a cui corrisponde un valore definito di energia

→ da circonferenza  
 $E = nh/2\pi \quad (n=1,2,3,4...)$   
 Stato fondamentale  $n=1$ ,  $n>1$  stati eccitati.

Bohr  
 $n =$  primo numero quantico, **PRINCIPALE**.  $n$  è un numero intero positivo che è associato al raggio e all'energia delle orbite.

Calcoliamo l'energia dell'elettrone

Energia totale =  $E_{cin} + E_{POTENZIALE}$

Attrazione nucleare stabilizza l'elettrone

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r}$$

Dall'uguaglianza tra forze elettrostatiche e forza centrifuga

$$m v^2 = \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r} \rightarrow \frac{1}{2} m v^2 = \frac{Z e^2}{8 \pi \epsilon_0 r}$$

$$E = \frac{Z e^2}{8 \pi \epsilon_0 r} - \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r} = -\frac{1}{8} \frac{Z e^2}{\pi \epsilon_0 r} \rightarrow \text{L'energia dell'e- dipende solo dal raggio dell'orbita!}$$

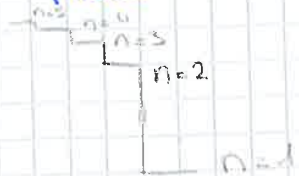
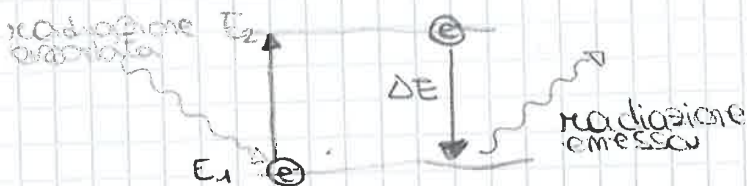
Poiché:  $r = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{\pi m Z e^2}$

Allora:  $E = -\frac{1}{8 \pi \epsilon_0} Z e^2 \frac{\pi m Z e^2}{\epsilon_0 n^2 h^2} = -\frac{m Z^2 e^4}{8 \epsilon_0^2 n^2 h^2}$

L'energia dipende (è funzione) da  $n$ , numero quantico principale

$n = 1, 2, 3, \dots$  in teoria da 1 a  $+\infty$ , in realtà fino a 7 (numero gruppi). Se fosse  $>$ , la velocità dell'e- + vicino al nucleo sarebbe come la velocità della luce  $c \rightarrow$  impossibile!

Si genera una riga spettrale quando avviene la transizione da un'orbita di energia  $E_2$  ad una di energia  $E_1$  con emissione di energia quantizzata secondo l'equazione di Planck  $\Delta E = h \nu$



Calcoliamo la posizione delle righe spettrali da  $\Delta E = h \nu$

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{E_2 - E_1}{h} = \left( -\frac{m Z^2 e^4}{8 \epsilon_0^2 n_2^2 h^2} + \frac{m Z^2 e^4}{8 \epsilon_0^2 n_1^2 h^2} \right) \cdot \frac{1}{h}$$

$$\nu = \frac{m Z^2 e^4}{8 \epsilon_0^2 h^3} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{"Simile" all'equazione di Rydberg!}$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{8 \epsilon_0^2 h^3}{m Z^2 e^4} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \rightarrow R_H Z^2 \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

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)

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

Es lunghezza d'onda di una massa di  $1g = 7 \cdot 10^{29} m$   
 // della Terra =  $4 \cdot 10^{63} m$   
 // di un  $e^-$  lento =  $7 \cdot 10^{-4} m$

gli corpi macroscopici hanno  $\lambda$  piccolissime, non misurabili. sperimentalmente: non si possono considerare come onde!

Es  $e^-$  ( $m = 9,1 \cdot 10^{-28} g$ ,  $v = 3 \cdot 10^8 cm/s$ )

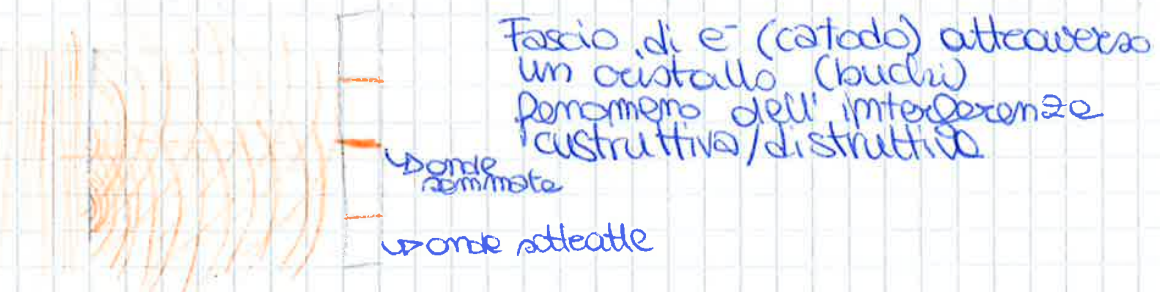
$$\lambda = \frac{h}{mv} = 2,4 \cdot 10^8 cm^{-1}$$

l' $e^-$  si comporta come un'onda. Quale esperimento confermerà questa ipotesi?

Se l'elettrone è un'onda deve dare fenomeni di **DIFRAZIONE**



### Esperimento di Davisson e Germer



Diffrattione di elettroni da cristalli metallici  $\rightarrow$  anche la materia ha duplice natura, ondulatoria e particellare!

Un fotone, che ha un'influenza trascurabile sulla traiettoria di una palla da baseball, perturba in modo consistente la traiettoria di una particella molto leggera come l' $e^-$



è indipendente dal tempo (nel caso della corda di una chitarra, gli estremi sono vincolati e la corda non può muoversi).  
 Se  $\lambda$  è il doppio della lunghezza della corda,  $\psi$  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 debbono iniziare e finire in certi punti fissi - onde stazionarie - allora non tutte le lunghezze d'onda saranno permesse: **le vibrazioni sono quantizzate!**

**l'equazione di Schrödinger** solo con  $e^-$  il calcolo è giusto. Con  $2e^-$  bisogna aggiungere 5° termine nell'equazione che tiene conto della repulsione

Il moto di un'onda ( $e^-$ ) è descrivibile con una equazione d'onda che descrive la sua ampiezza in funzione dello spazio e del tempo. (E' percettibile solo alcune regioni)

Nel caso dell' $e^-$ , che si comporta da **onda stazionaria**, l'ampiezza è solo funzione dello spazio. Il suo moto intorno al nucleo è descrivibile come un'equazione differenziale, dove  $\psi$  (psi) è la **funzione d'onda** che descrive l'ampiezza in funzione dello spazio e  $\lambda$  la lunghezza d'onda di de Broglie  $\lambda = h/mv$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi = 0 \quad (1 \text{ Dimensione})$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi = 0 \quad \text{atomo in 3D (3 Dimensionali)}$$

Se  $\lambda = h/mv$ , allora  $\lambda^2 = h^2/m^2v^2$  e quindi

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{4\pi^2 m^2 v^2}{h^2} \psi = 0$$

La soluzione dell'equazione permette di calcolare i livelli energetici dell'atomo di H.

Le prime 3 equazioni indicano lo spazio, l'ultimo termine è legato a  $E_k$

Da  $E_k = \frac{1}{2}mv^2 = E - V$ , da cui si ricava  $v^2 = (E - V) \cdot 2/m$  da cui

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

perché  $\lambda = \frac{h}{mv} \rightarrow v = \frac{h}{m\lambda}$

**NON È LA SFERA** della formula

### Soluzioni dell'equazione di Schrödinger

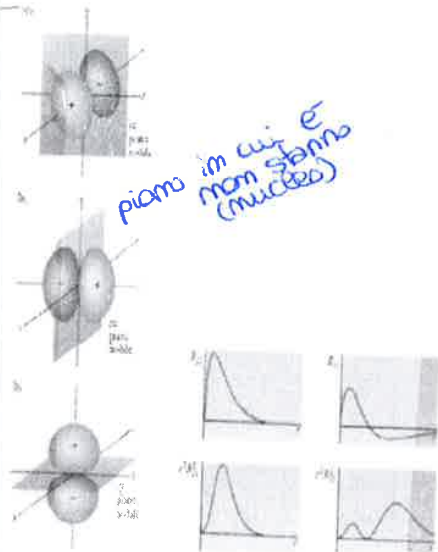
Sono accettabili solo le soluzioni che rispettano queste condizioni:

- $\psi$  è continua, finita: ad un solo valore in ogni punto dello spazio e all' $\infty$  tende a zero
- condizione di normalizzazione: la probabilità di trovare l' $e^-$  in uno spazio attorno al nucleo (delle orbite) deve essere unitaria.

da sapere!

L'equazione si può scrivere anche come  $H\psi = E\psi$   
 Dove  $E$  è l'energia, la funzione d'onda è una decisione matematica delle materia - onda associata all' $e^-$  in termini di tempo e posizione.

# Orbitali 2p



*piano in cui e non stanno (nucleo)*

FIGURA 15.24 Distribuzione della densità elettronica dei tre orbitali 2p. Sono mostrate le fasi e i piani nodali.

FIGURA 15.25 Elementi di densità  $\Psi_{2p}$  degli orbitali 2p e corrispondenti distribuzioni di probabilità  $\Psi_{2p}^2$ .

OGNI ORBITALE ATOMICO E' DEFINITO DA 3 NUMERI QUANTICI (dall'eq. di SCHRÖDINGER)

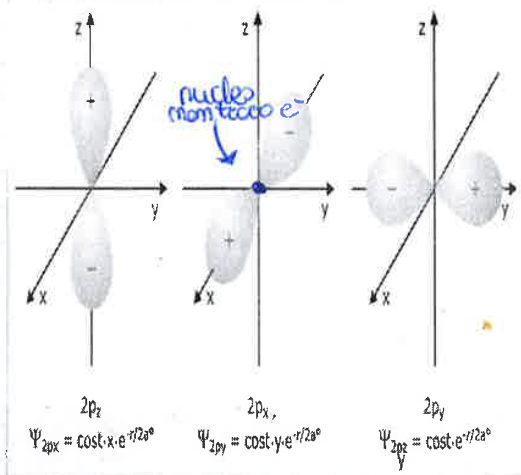
Tabella 7.2 La gerarchia di numeri quantici per gli orbitali atomici

Nome, simbolo (proprietà)	Valori permessi	Quantum Numbers
numero quantico principale, $n$ (dimensione energia)	numeri interi positivi (1, 2, 3, ...)	1, 2, 3
numero quantico del momento angolare, $l$ (forma)	da 0 a $n-1$	0, 1, 2
numero quantico magnetico, $m_l$ (orientamento)	-l, ..., 0, ..., +l	0, ±1, ±2

## LA GERARCHIA DEI NUMERI QUANTICI DEGLI ORBITALI ATOMICI

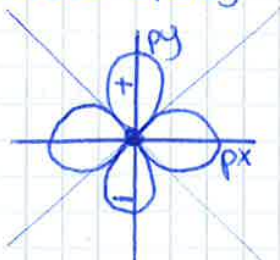
Nome, Simbolo (Proprietà)	Valori ammessi	Quantum Numbers
Numero Quantico Principale, $n$ (dimensioni, energia dell'orbitale)	Interi positivi (1, 2, 3, ...)	1, 2, 3
Numero Quantico del Momento angolare, $l$ (forma dell'orbitale)	da 0 a $n-1$	0, 1, 2
Numero Quantico Magnetico $m_l$ (orientamento)	-l, ..., 0, ..., +l	-2, -1, 0, +1, +2

## Orbitali 2p



Orbitale(2) sferico. Ha diversi punti (nodi) in cui e non può stare ( $\Psi=0$ )

orbitale p



non passa per il nucleo

non esiste p-1  
p forma di lobo  
 $2p_x, 2p_y, 2p_z$



$\psi_{1s}$	1s	$n=1$	$l=0$	$m_l=0$	} la s ha una sola orientazione
	2s	$n=2$	$l=0$	$m_l=0$	
	$2p_{x, y, z}$	$n=2$	$l=1$	$m_l = -1, 0, +1$	} 3 orientazioni

numero di orbitali nel livello  $n^2$

- $n=4$  16 → forma + complicata graficamente
- 1 orbitale 4s
- 3 " 4p
- 5 " 4d
- 7 " 4f

- Scrivere numeri quantici dell'orbitale 3p  
 $n=3$        $l=1$        $m_l = -1, 0, +1$

- Quali orbitali hanno  $n=4$   $l=2$ ? → 4d

orbitali degeneri = orbitali isoenergetici (es. 2p, 2s)

- Quali sono i numeri quantici che caratterizzano il 4d?

$n=4$   $l=2$   $m_l = +2, +1, 0, -1, -2$

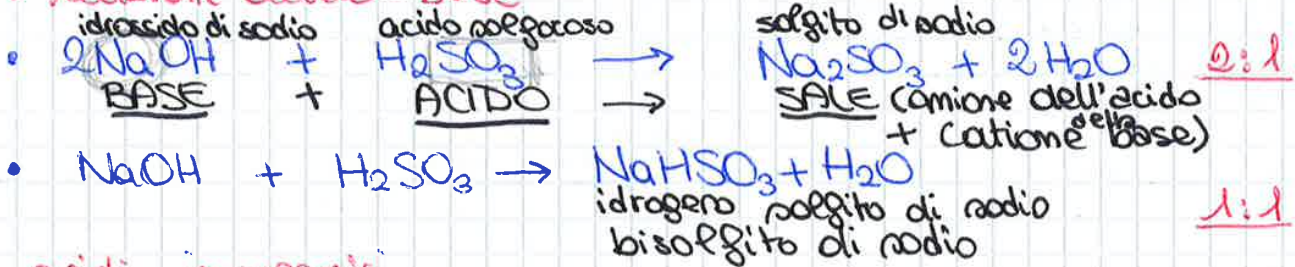
2e<sup>-</sup> per ogni orbitale → 10 e<sup>-</sup>

**Idroacidi** (acidi che non contengono O)



- non in  $H_2O$   $HCl(g) \rightarrow$  cloruro di idrogeno
- in  $H_2O$   $HCl(aq) \rightarrow$  acido cloridrico
- $H_2S(g) \rightarrow$  solfuro di idrogeno
- $H_2SO_3(aq) \rightarrow$  acido solfidrico
- $HCN(g) \rightarrow$  cianuro di idrogeno
- $HCN(aq) \rightarrow$  acido cianidrico

**reazione acido-base**



**acidi inorganici**



**Numero di ossidazione**

Il numero di ossidazione di un elemento è un numero convenzionale che può essere positivo, negativo, nullo, intero e non intero. Corrisponde alla carica ipotetica che ogni atomo presenta in una formula di un composto neutro o di uno ione avrebbe se gli e<sup>-</sup> di legame fossero attribuiti come segue:

- gli e<sup>-</sup> di legame tra elementi diversi sono attribuiti all'elemento che si trova in alto a sinistra nella tavola periodica (+ elettronegativo)
- gli e<sup>-</sup> di legame tra atomi dello stesso elemento o due elementi con la stessa elettronegatività sono equispartiti tra i due atomi.

- Regole per dare n.o.:
1. la somma dei numeri di ossidazione degli atomi presenti in un composto neutro è pari a zero
  2. la somma dei numeri di ossidazione degli atomi presenti in uno ione è pari alla carica dello ione. Ione monoatomico: carica e n.o. =
  3. il n.o. degli elementi allo stato libero è zero
  4. H ha n.o. = +1 in tutti i suoi composti, eccetto idruri dei metalli I° e II° gruppo
  5. O ha n.o. = -2 in tutti i suoi composti, tranne nei perossidi (-1) e superossidi (-1/2)

idruri $\rightarrow H +$ elettronegativo (-1)	ed. in $O_2 \rightarrow$ n.o. +2	6. Zn nei composti +2
$H_2(g) = 0$		7. F " -1
tutte sostanze allo stato elementare 0		8. Al " +3
$O^{2-}$ ione ossido (-2 n.o.)		9. composti elementi I° e II° gruppo
$H_2O_2$ perossido		10. " II° e III° gruppo
$CsO_2$ superossido		
$O_2$ ossigeno		
$O_3$ ozono		
$OF_2$ fluossido di ossigeno		
$O_2$ forme allotropiche		
$OF_2 (+2)$	$O_2/O_3 (0)$	$S O_2 (-2)$
	$H_2O_2 (-1)$	$O^{2-} (-2)$

## 2<sup>a</sup> Equazione di Schrödinger

da configurazione elettronica (come sono disposti gli e-) → dipende la reattività di un e- (2 domande nel compito)

L'eq. di Schrödinger si può risolvere in modo esatto solo per l'atomo di H e gli atomi idrogenoidi (ATOMI IDROGENOIDI  $Z > 1$ , ma con un solo e- ( $He^+$ ,  $Li^{2+}$ ))

Gli orbitali degli atomi idrogenoidi hanno la forma di quelli dell'H, ma distribuzione di carica elettronica più vicina al nucleo ( $Z > 1$ ) → maggior attrazione

## ATOMI PLURIELETRONICI

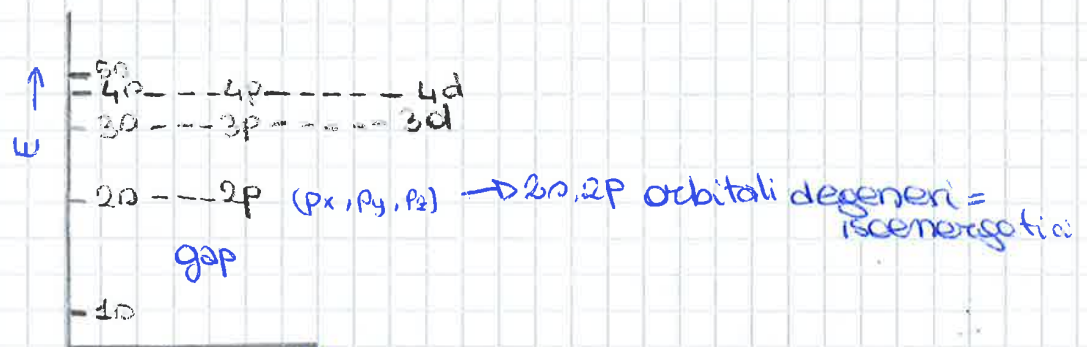
Con un e- in + si complica l'eq. di Schrödinger perché ci sono interazioni repulsive elettrone-elettrone

↓ non è possibile una soluzione esatta

↓ approssimazioni successive

$$\Psi(n, l, m)$$

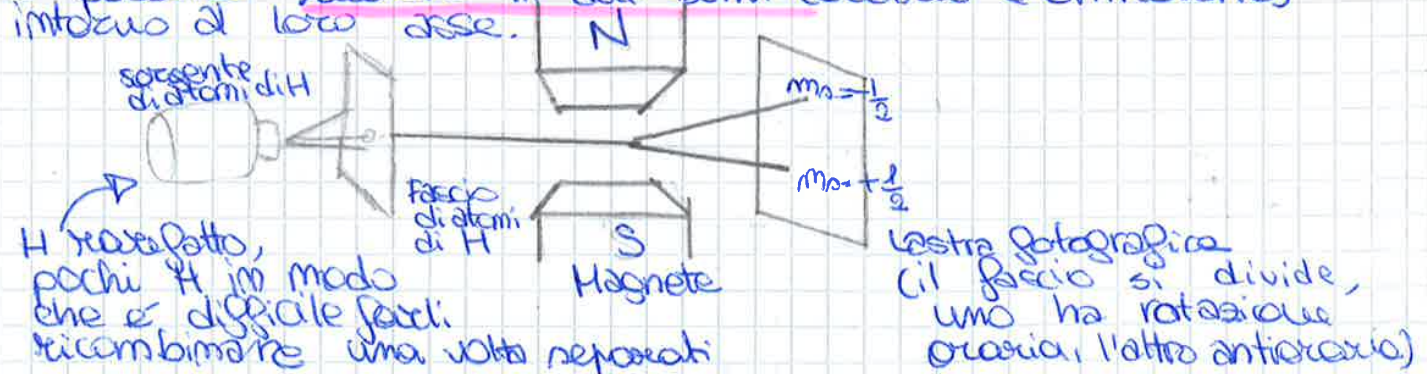
L'energia degli orbitali dipende solo da  $n!$



Schema dei livelli energetici dell'atomo di H. Ce ne sono anche di + oltre 5s ma H ha un solo e- nell'orbitale 1s. Quando passa a uno stato eccitato (transizione) passa negli altri

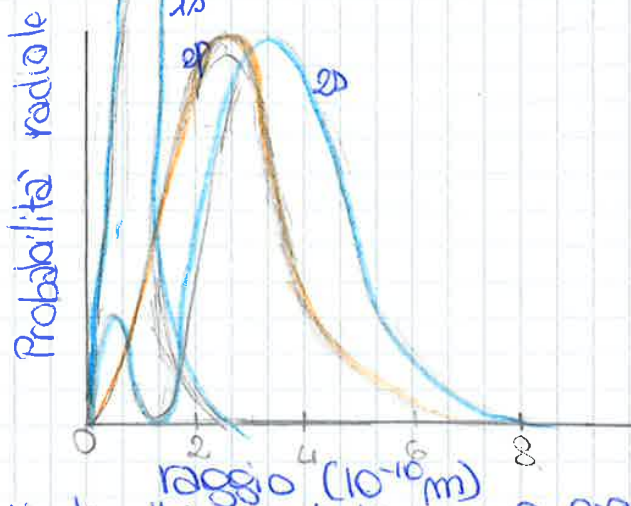
## ATOMI PLURIELETRONICI

$n, l, m$  numeri quantici che indicano proprietà degli orbitali. Esiste un quarto numero quantico ( $m_s$ ) che definisce una proprietà dell'e- e può assumere due valori,  $+1/2$  o  $-1/2$  (è dovuta alla proprietà) al fatto che gli e- hanno una carica e possono ruotare in due sensi (orario e antiorario) intorno al loro asse.



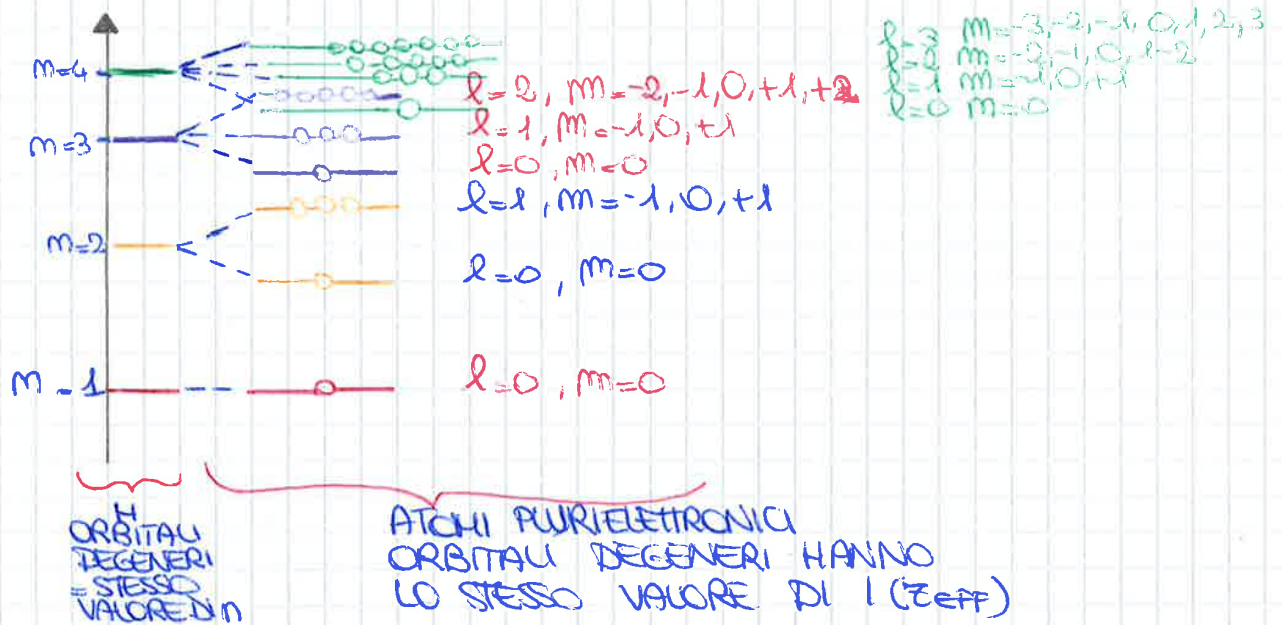
Gli orbitali con  $l$  uguale hanno stessa forma → numero quantico di spin  $m_s$   $+1/2$  o  $-1/2$  direzione orientata dello spin dell'e-

## Penetrazione e energia degli orbitali



Probabilità di densità radiale, probabilità di trovare e- (53 p.m.). Nota che gli orbitali s hanno una penetrazione nel nucleo > perché sono + vicini al nucleo.  
4s si riempie prima di 3d

## Livelli energetici degli atomi polielettronici



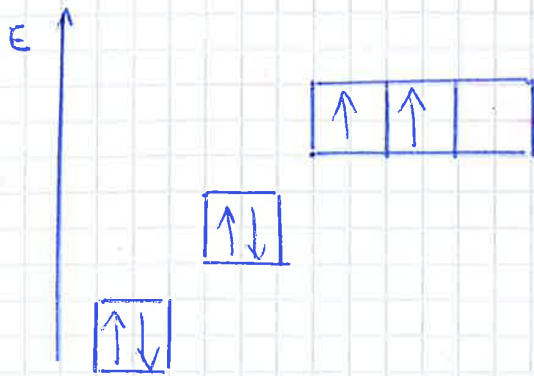
## Principio dell'Aufbau (costruzione progressiva)

La configurazione elettronica fondamentale di un elemento può essere "costruita" inserendo a uno a uno gli e- negli orbitali di energia via via crescente, nel rispetto del principio di esclusione, ovvero aggiungendo un altro e- alla configurazione dell'elemento che lo precede, seguendo questo ordine di riempimento: 1s 2s 2p 3s 3p 4s 3d 4p 5s 4d 5p 6s 4f 5d 6p 7s 5f 6d

1s	2s	2p	3s	3p	3d
4s	4p	4d	4f	5s	5p
5s	5p	5d	5f	6s	6p
6s	6p	6d	6f	7s	7p

s	→	n° e-	=	2
p	→	"	=	6
d	→	"	=	10
f	→	"	=	14

# Regola di Hund (principio di massima molteplicità)



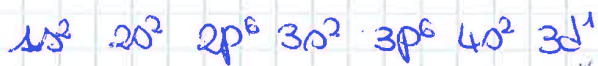
Per gli elementi successivi al Boro (B) nella Tabella Periodica quando vengono occupati orbitali degeneri, gli e<sup>-</sup> si dispongono in modo da occupare il massimo numero di orbitali, per minimizzare la repulsione elettrone-elettrone

La configurazione di minima energia di un atomo è quella che presenta il maggior numero di e<sup>-</sup> a spin paralleli

N	Z=7	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	[He]	2s <sup>2</sup> 2p <sup>3</sup>	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow$
O	Z=8	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	[He]	2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow$
F	Z=9	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	[He]	2s <sup>2</sup> 2p <sup>5</sup>	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow$
Ne	Z=10	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	[He]	2s <sup>2</sup> 2p <sup>6</sup>	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow$

- 1) Principio Aufbau (orbitali da energia + bassa)
- 2) Quando sistema e<sup>-</sup> principio di Pauli
- 3) Principio di Hund da C in poi

Dallo Scandio (Sc) in poi il 3d scende di energie



un metallo di transizione ha

- orbitale d parzialmente occupato
- + stati di ossidazione possibile

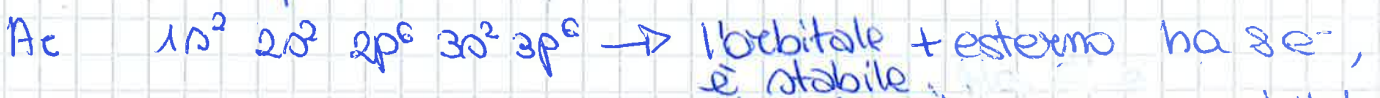


forma contratta a partire dalla configurazione elettronica del gas nobile che lo precede



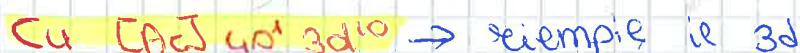
prevale il principio dell' Aufbau

gli orbitali 4s e 3d hanno energia vicina, con questa configurazione l'atomo è + stabile energeticamente. è stabile quasi come Ar



Ha riempito tutti gli orbitali esterni

Cr ha solo 6 e<sup>-</sup> nel livello + esterno ma sono tutti a spin // quindi è stabile.



## Relazione tra configurazioni elettroniche e tavola periodica

1s					1s
2s					2p
3s					3p
4s			3d		4p
5s			4d		5p
6s	4f		5d		6p
7s	5f		6d		7p

- Possiamo dividere la tavola periodica in blocchi
- metalli alcalini e alcalino-terrosi blocco s
  - non metalli blocco p
  - metalli di transizione blocco d
  - lantanidi / attinidi blocco f

Tra gli elementi del blocco p e s le configurazioni elettroniche esterne in un gruppo sono identiche. Esistono alcune varianti negli elementi di transizione e negli elementi di transizione interna.

1 e esterno → I gruppo  
2 e esterni → II gruppo

He fa eccezione ha 2 e esterni ma è stabile → VIII gruppo  
 negli elementi del gruppo p, n, s, d il numero del gruppo è uguale al numero degli e- esterni. Il numero del periodo è il numero del livello energetico.

**Configurazioni elettroniche di atomi monoatomici**

Anioni monoatomici (es.  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{O}^{2-}$ ) si utilizza il principio di Aufbau come per gli atomi neutri.  $n^2 = m^2$  di quel livello energetico.

Cationi monoatomici (es.  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ) non sempre l'atomo perde l'e- aggiunto per ultimo secondo il principio di Aufbau. Infatti, a causa della differente costante di schermo dello ione rispetto all'atomo, può succedere che l'ordine energetico degli orbitali del catione non sia più uguale a quello dell'atomo neutro. Quindi → dalla configurazione elettronica fondamentale dell'atomo neutro si tolgono gli e- necessari, incominciando con quelli che hanno n maggiore e, a parità di n, quelli che hanno l maggiore.

$\text{O}^{2-}$   $10e^-$   $1s^2 2s^2 2p^6 [\text{Ne}]$

NUMERI QUANTICI			SOTTO LIVELLO	NUMERO DI ORBITALI PER SOTTO LIVELLO	NUMERO DI ORBITALI PER LIVELLO
n	l	m			
1	0	0	1s	1	1
2	0	0	2s	1	4
	1	-1, 0, +1	2p	3	
3	0	0	3s	1	9
	1	-1, 0, +1	3p	3	
	2	-2, -1, 0, +1, +2	3d	5	
4	0	0	4s	1	16
	1	-1, 0, +1	4p	3	
	2	-2, -1, 0, +1, +2	4d	5	
	3	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	4f	7	

### 3. Raggio ionico

In uno stesso periodo da sinistra verso destra diminuisce, nello stesso gruppo aumenta dall'alto verso il basso

Catione: più piccolo del rispettivo atomo di partenza (meno e-)  
 Anione: più grandi // (più e-)



es  $r_{Fe^{2+}} > r_{Fe^{3+}}$  perché  $Fe^{3+}$  ha un e- in meno rispetto a  $Fe^{2+}$

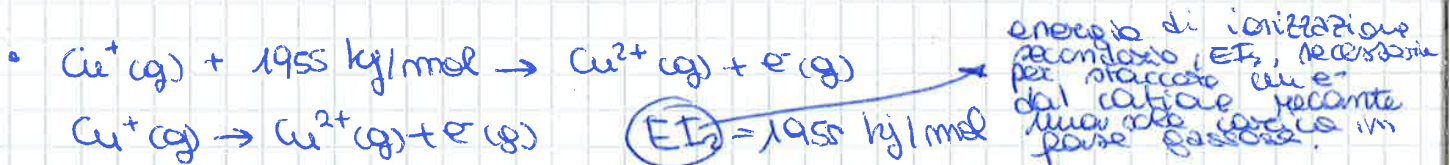
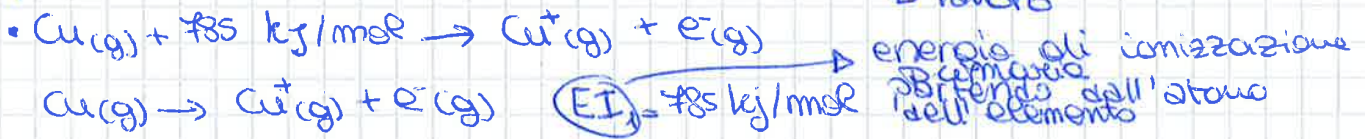
Raggio ionico: è la quota della distanza che separa due ioni contigui in un solido ionico.

In pratica, si assume il raggio dello ione ossido  $O^{2-}$  uguale a 140 pm e si calcola il raggio degli altri ioni in base a questo valore

Es  $HgO \rightarrow$  distanza  $Hg^{2+}$  e  $O^{2-} = 212$  pm  
 raggio  $Hg^{2+} = 212 - 140 = 72$  pm

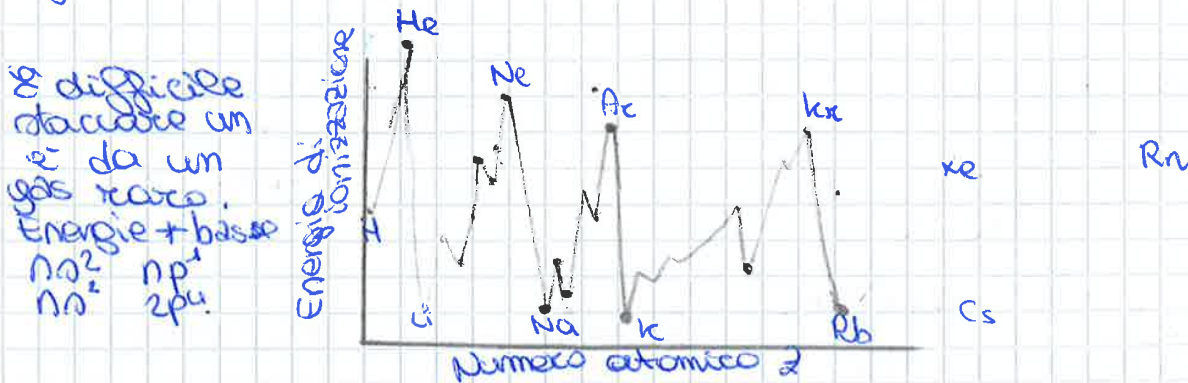
### 4. Energia (potenziale) di ionizzazione

è l'energia necessaria per staccare un e- da un atomo in fase gassosa (riferita ad un mol di e- e atomi; è sempre positiva poiché è necessario fornire energia al sistema).  
 ↳ lavoro



Per uno stesso elemento:  $EI_1 < EI_2$

Varia in modo inverso al raggio atomico  
 Aumento nello stesso periodo, diminuisce in uno stesso gruppo dall'alto verso il basso



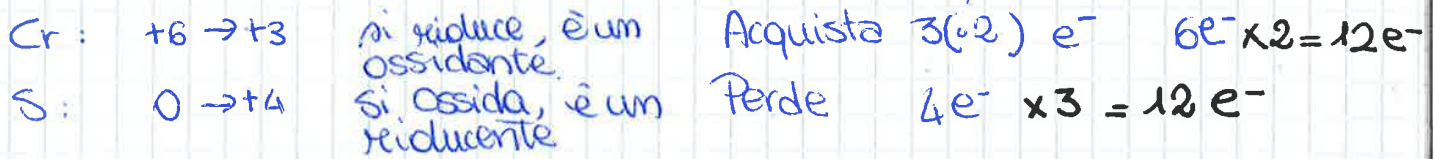
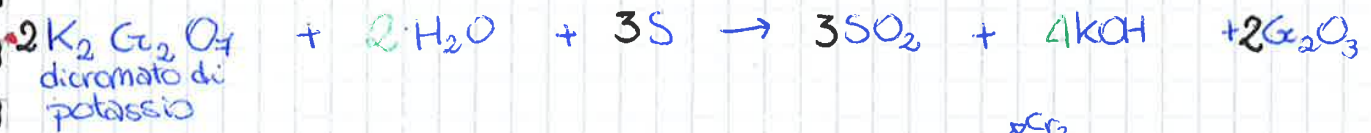
è difficile staccare un e- da un gas raro. Energie + basse  
 $ns^2$   $np^4$   
 $ns^2$   $2p^4$

B e O fanno eccezione

B =  $2s^2 2p^1$  è + facile staccare 1 e- perché sotto livello semi pieno (anche per O)

## Reazioni redox

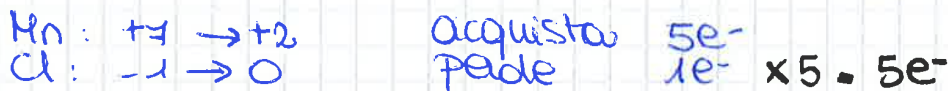
Ricorda: esiste anche la somma



Indico la sequenza dei coefficienti stechiometrici: 223 → 342



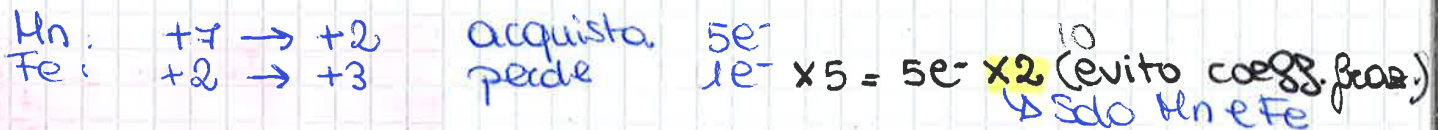
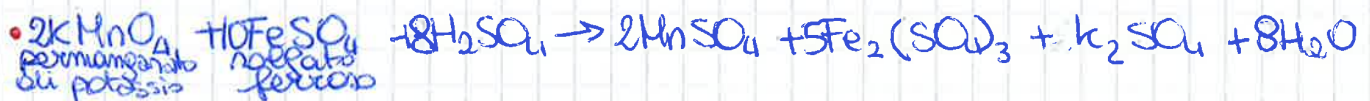
Sequenza: 1 14 → 2237



$\frac{5}{2}$  → evitare coeff. frazionari, multiplico (tutto) per due



Sequenza: 2 16 → 2258

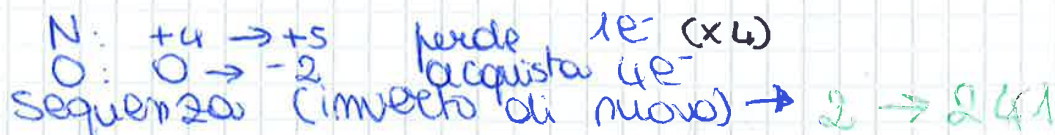


Sequenza: 2 10 8 → 2 5 1 8

**[DISMUTAZIONE o DISPROPORZIONAMENTO: lo stesso elemento si]**  
ossida e si riduce



1) Inverte l'ordine





## Perché si formano i legami? ②

Gli elementi non esistono isolati eccetto i gas nobili che hanno come configurazione esterna  $ns^2$  ed hanno alta stabilità per cui non si legano.

Gli atomi più stabili sono quelli dei gas nobili (E.I. elevata).  
Tutti i gas nobili (tranne He  $1s^2$ ), hanno una configurazione elettronica con  $8e^-$  nel livello più esterno ( $ns^2 np^6$ )

**REGOLA DELL'OTTETTO (LEWIS)**: gli atomi danno legami in modo da raggiungere nei composti la configurazione elettronica del gas nobile mediante trasferimento o condivisione di  $e^-$ .

Chi partecipa al legame?

- elettroni esterni si trovano nel livello più esterno (con il massimo valore di  $n$ )
- elettroni interni si trovano nei livelli interni

→ nella formazione di legami intervengono  $e^-$  esterni

## Simboli di Lewis per gli elementi dei gruppi principali

Si scrive il simbolo dell'elemento e intorno a questo uno o più pallini a seconda del numero di  $e^-$  esterni



Il numero del gruppo è uguale al numero di  $e^-$  esterni

## Quando si forma legame ionico?

→ Trasferimento di  $e^-$  da un elemento con bassa energia di ionizzazione che forma facilmente cationi (METALLO) ad un elemento che accetta facilmente  $e^-$  (elevata affinità elettronica, Gruppo VI e VII), quindi un NON METALLO, formando un composto ionico **solido**

configurazioni elettroniche



diagrammi degli orbitali:



simboli di Lewis



LiF = fluoruro di litio

Come si spiega la formazione di solidi ionici dal punto di vista energetico?

In fatti il reticolo finale è più stabile (= - energia) mentre teoricamente dovrebbe arrivare a un livello energetico più elevato.

Si spiega con un ciclo termodinamico, quello di Born-Haber. Un ciclo termodinamico è un ciclo che parte dal punto di partenza a quello finale attraverso vari passaggi anche solo teorici. Bisogna però avere delle funzioni di

l'energia reticolare si calcola con la legge di Coulomb (attrazione) repulsione). se considero la geometria del reticolo cubico lo stesso si può fare. lo posso calcolare con metodo geometrico

$$E_r = -\frac{6z^2}{4\pi\epsilon_0 d} + \frac{12z^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{2}d} - \frac{8z^2}{4\pi\epsilon_0 \sqrt{3}d} + \dots = -\frac{z^2}{4\pi\epsilon_0 d} (6 - 12\sqrt{2} + 8\sqrt{3} + \dots)$$

$z$  = carica assoluta dello ione ma è grande in valore assoluto reticolo cristallino e + stabile

Per  $N$  anioni e  $N$  cationi:  $E_r = -Nz^2 / 4\pi\epsilon_0 d (6 - 12\sqrt{2} + 8\sqrt{3} + \dots)$

Costante di Madelung (M)

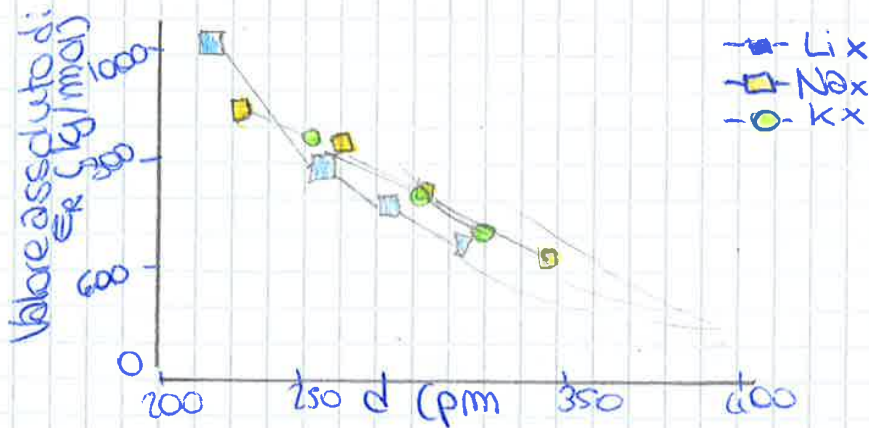
Costante di Madelung (M): dipende dalla geometria del reticolo cristallino e dal numero di coordinazione degli ioni.  $M$  è sempre  $> 1$

$E_r = -MNz^2 / 4\pi\epsilon_0 d$  → la distanza varia periodicamente  $r_{anione} + r_{catione}$

$E_r$  = Ciclo di Born-Haber  
metodo geometrico

- ↳ forza elettrostatica  $\propto$  (carica A per carica B) /  $d^2$
- ↳ energia elettrostatica  $\propto$  (carica A per carica B) /  $d$
- ↳ energia elettrostatica  $\propto$  (carica A per carica B) / (raggio A + raggio B)

$E_r$  è una proprietà periodica? Considero idrogenuri dei metalli; nel grafico si vede che  $E_r$  diminuisce all'aumentare della distanza tra ioni



$E_r$  varia in modo periodico nella tavola periodica

inverso alla  $d$ .  
l'energia reticolare dipende anche da  $z^2$


$LiF \Rightarrow E_r = -1050 \text{ kJ/mol}$        $d = 209 \text{ pm}$

$MgO \Rightarrow E_r = -3923 \text{ kJ/mol}$        $d = 212 \text{ pm}$

Raggio ionico  $\begin{cases} Li^+ = 76 \text{ pm} \\ Mg^{2+} = 72 \text{ pm} \end{cases}$       Raggio ionico  $\begin{cases} F^- = 133 \text{ pm} \\ O^{2-} = 140 \text{ pm} \end{cases}$


$Li^+ F^- \quad z^2 = 1$        $Mg^{2+} O^{2-} \quad z^2 = 4$        $\Rightarrow E_r MgO = 4 E_r LiF$

→ dipende dalle interazioni coulombiane

→ Ioni solvatati (IDRATI) 

dissociato perché su O c'è una parziale carica negativa che va verso il catione del composto mentre su H c'è una parziale carica + che attira l'anione  
→ riesce a vincere  $E_R$

legame ionico → tipo elettrostatico

$E_0 = -\frac{MNz^2}{4\pi\epsilon_0 r}$   energia che si sviluppa (viene rilasciata) quando si forma un solido ionico

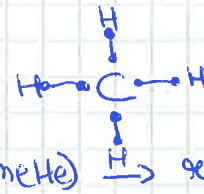
Solido ionico: nel NaCl il rapporto è 1:1 ma non devo pensare all'unità formato da due ioni perché è solo in fase gas (coppie ioniche)

**Il legame covalente**

si forma tra <sup>atomi di</sup> elementi non-metallici dando luogo a:  
- Molecole ( $CH_4$ )  
- Solidi covalenti (es. diamante)

$CH_4$  (metano) → tetraedro regolare C al centro e H ai vertici  
Solido covalente ripetizione in 3 dimensioni dei tetraedri (unità) ma il diamante è costituito solo da C. Nello spazio il diamante ha simmetria cubica (cella cubica), la grafite cella esagonale

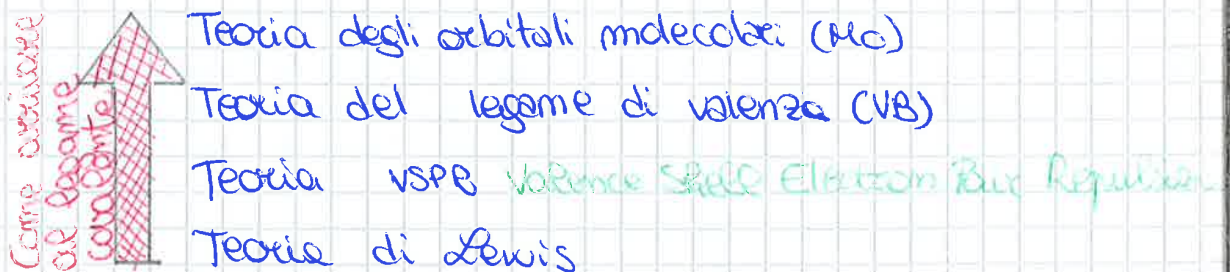
Il legame covalente è una condivisione di  $e^-$  che appartengono ad entrambi gli atomi. Gli  $e^-$  sono di entrambi, se esterni per il C, 2e<sup>-</sup> esterni per H (come H) → rispettano la regola dell'ottetto



Caratteristiche del legame covalente

- 1) ordine di legame
- 2) energia di legame
- 3) lunghezza di legame
- 4) angolo di legame (Lewis non basta → VSEPR, Legame di valenza)
- 5) polarità del legame

Definiscono il tipo di legame che si forma nella molecola o nel solido:



Si parte dalla teoria di Lewis che ha dei limiti perché <sup>sul piano</sup> con i simboli e i pallini sembra che tra gli  $e^-$  ci siano angoli di 90°

Per tutte le molecole [eccetto  $CO$ ] il C forma 4 legami  
{  $1s^2$   $2s^2$   $2p^2$   
(piegare  $O_2$ )

Quando forma un legame covalente, ogni atomo conta gli e<sup>-</sup> condivisi come appartenenti completamente a se stesso quindi nell'ammidale l'atomo di azoto forma tre legami ed ha un doppietto non condiviso



6e<sup>-</sup> condivisi + 2e<sup>-</sup> = 8e<sup>-</sup> esterni  
Ogni atomo di H legato all'azoto ha 2e<sup>-</sup> esterni [H<sub>2</sub>]

**Le strutture di Lewis**

mostrano la disposizione degli e<sup>-</sup> mediante trattini (coppie leganti) e puntini (coppie solitarie).  
Raramente, si rappresentano anche puntini gli e<sup>-</sup> condivisi e come trattini i doppietti non condivisi.  
E' possibile utilizzare i simboli di Lewis per rappresentare il legame covalente con un trattino



La molecola F<sub>2</sub> possiede anche 3 coppie solitarie di e<sup>-</sup>, che non impegnati in legami. Tali doppietti elettronici si respingono a vicenda a tal punto che tali repulsioni sono quasi in grado di vincere l'attrazione della coppia impegnata nel legame: il gas F<sub>2</sub> è estremamente reattivo.  
H<sub>2</sub> è l'unica molecola biatomica a non possedere coppie solitarie → stabile

**\* ordine di legame**

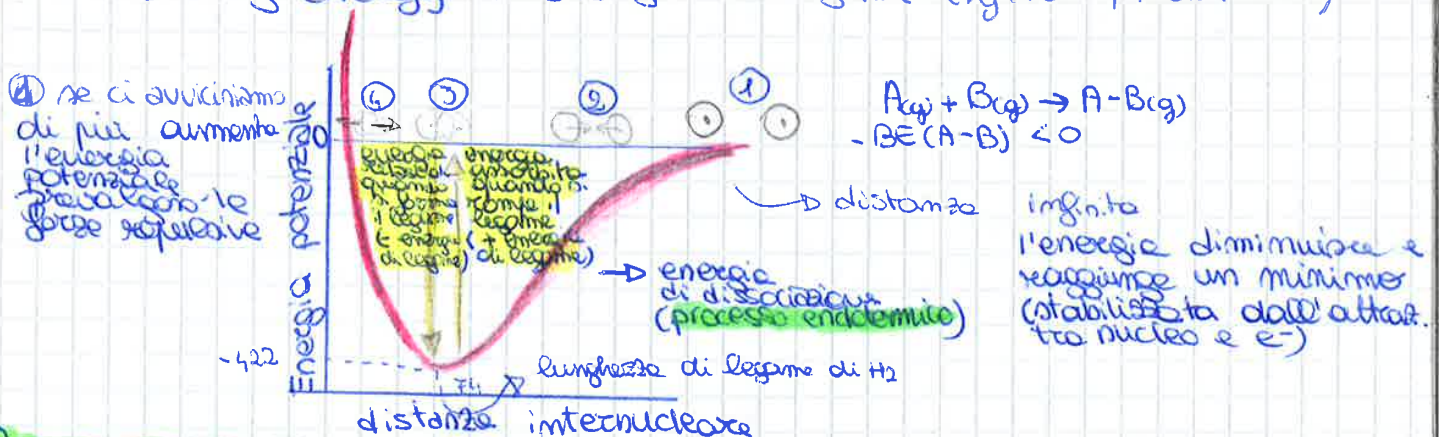
- a) H:H    H:F    F:F    legame singolo → ordine di legame = 1
  - b)  $\cdot\ddot{\text{O}} \cdot + \cdot\ddot{\text{O}} \cdot = \text{O}=\text{O}$      $\text{O}=\text{O}$     legame doppio →    "    = 2
  - c)  $\cdot\ddot{\text{N}} \cdot + \cdot\ddot{\text{N}} \cdot \rightarrow \text{N}\equiv\text{N}$      $\text{N}\equiv\text{N}$     legame triplo →    "    = 3
- ↳ molto stabile

con O non si può → teoria orbitale molecolari

**Formazione della molecola H<sub>2</sub>**

La formazione di un legame è un processo esotermico (-BE < 0)

BE = Binding energy → energia di legame (kJ mol<sup>-1</sup> / kcal mol<sup>-1</sup>)



Processo esotermico → il sistema produce calore nell'ambiente (prima legame)

Il legame ionico e il legame covalente sono due modelli limite del legame chimico. In realtà, certi legami possono essere considerati "parzialmente ionici" o "parzialmente covalenti".  
 Ciò dipende da un'altra proprietà periodica, detta **ELETTRONEGATIVITÀ** ( $\chi$  e  $X$ )

6. **Elettronegatività** ( $\chi$ )  $\rightarrow$  proprietà periodica  
 tutte eccezioni

È la capacità relativa di un atomo legato di attrarre verso di sé gli e di legame. (senza diventare anione)  
**IMPORTANTE:** si riferisce sempre ad un atomo legato  
 Nella tavola periodica varia in modo inverso ai raggi atomici (come EI, AE)

↳ L'elemento + elettronegativo è il F (poi O)  
 ,, elettropositivo è il Fr (instabile) (poi Cs)

Dipende dalla configurazione elettronica e dalle dimensioni atomiche dell'elemento. Maggiore è la densità elettronica (carica negativa/volume atomico), maggiore è l'elettronegatività dell'elemento. In atomi con raggio minimo, il nucleo attrae maggiormente gli e di legame.

**N.B.** l'affinità elettronica invece è l'energia che si libera quando un atomo isolato in fase gassosa forma un anione

∴ **Elettronegatività** ( $\chi$ ) e polarità dei legami: scala **MULLIKEN** / **PAULING**

L'elettronegatività di un elemento esprime il suo potere di attrarre gli e quando fa parte di un composto. Un atomo a elevata elettronegatività esercita un forte potere di attrazione sugli e, specialmente per la coppia di e che condivide con il proprio vicino. Il risultato di questo tiro alla fune è che l'atomo maggiormente elettronegativo gode di una quota superiore della coppia elettronica condivisa nel legame covalente.



F $\delta^-$  parziale carica negativa  
 H $\delta^+$   
 somme cariche parziali =  
 Due cariche separate da una distanza  $\rightarrow$  dipolo

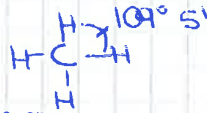
L'elettronegatività non può essere misurata sperimentalmente, ma può essere calcolata sulla base della definizione operativa che ne viene data

a) **MULLIKEN**  $\chi_A$  di  $\frac{EI + AE}{2}$  limite: ① molte AE sono difficili da determinare sperimentalmente, ② considera prop. dell'atomo isolato per trovare prop. dell'atomo legato

b) **L. PAULING** costruisce una scala relativa di elettronegatività, attribuendo il valore massimo di elettronegatività al F (4,0).  
 Le due scale presentano comunque lo stesso andamento.

Secondo Pauling, se un legame A-B è apolare, l'energia di legame ( $E_{AB}$ ) è la media tra le energie di legame A-A ( $E_{A-A}$ ) e B-B ( $E_{B-B}$ ). Se invece il legame è polare, l'energia di legame è maggiore in seguito all'attrazione elettrostatica dovuta alla disposizione asimmetrica degli e di legame. L'eccesso di energia del legame A-B rispetto alla media tra le energie di legami A-A e B-B è una misura della differenza di elettro-

## Angolo di legame



→ limite  $\alpha$  sempre di  $90^\circ$

## Struttura e polarità della molecola

Ogni atomo ha una massa ma anche un volume (contabilizzano gli e<sup>-</sup>)  
 È molto importante la struttura tridimensionale (geometria) della molecola. Ad esempio medicinali / profumi hanno molecole di una tal geometria che si inseriscono in determinati recettori.  
 IBUPROFENE (mal di testa - D-Moment) si inserisce nell'enzima CICLO-OSSIGENASI e lo blocca.

## Formule minima, molecolare, di struttura

① Formula minima (empirica, bruta) indica il numero relativo di atomi dei diversi elementi contenuti in quella sostanza. Si determina con metodi di analisi quantitativa. [Indica il rapporto]

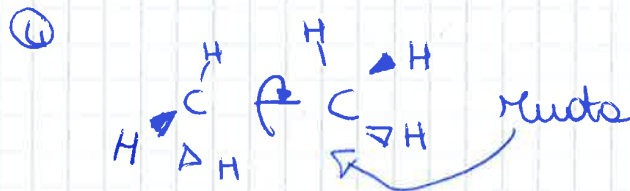
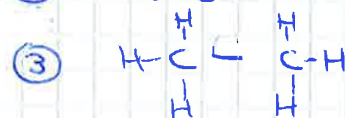
② Formula molecolare: tipo e numero effettivo di atomi di un dato elemento nel composto

③ Formula di struttura di Lewis: mostra come gli atomi sono legati (numero di legami) e se vi sono doppietti solitari. È bidimensionale ma (non rivela la forma complessiva della molecola).

④ FORMULA DI STRUTTURA: definisce la disposizione tridimensionale degli atomi nella molecola, quindi dà più informazioni rispetto alla struttura di Lewis

C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>: idrocarburo (C e H), etano

① C:H = 1:3  
 ② C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>



La polarità di una molecola dipende dal tipo di legami in essa contenuti e dalla sua formula di struttura

## Polarità del legame covalente

Il legame covalente implica la condivisione di una coppia di e<sup>-</sup>:

1) LEGAME A-A: se gli atomi sono uguali il baricentro delle cariche positive coincide con quello delle cariche negative e si trova tra i due atomi. Il legame è **APOLARE**

2) LEGAME A-B: se gli atomi sono diversi, il baricentro è spostato verso l'atomo più elettronegativo. Il legame è **POLARE**

## Dipoli elettrici e momento dipolare

$\overset{\delta+}{\text{H}}-\overset{\delta-}{\text{F}}$  oppure  $\overset{\delta+}{\text{H}}-\overset{\delta-}{\text{F}} \rightarrow$  **DIPLO ELETTRICO**: due cariche elettriche separate da una distanza  $d$ . **MOMENTO DIPOLOARE**:  $\mu = q \cdot d$  (C·m)  
 Il momento dipolare è una grandezza vettoriale di modulo  $\mu$

aggiungere legami doppi e tripli.

### 3. Eventuali doppietti non condivisi?

Disporre gli e<sup>-</sup> restanti come coppie solitarie, in modo da soddisfare la regola dell'ottetto

H<sub>2</sub>CN acido cianidrico

- ①  $1_H + 4_C + 5_N = 10$
- ②  $2_H + 8_C + 8_N = 18$
- ③  $18 - 10 = 8 \quad 8 : 2 = 4 \text{ legami}$



N<sub>2</sub>H<sub>4</sub> idrazina

- ①  $4 \cdot 1_H + 2 \cdot 5_N = 14$
- ②  $4 \cdot 2_H + 2 \cdot 8_N = 24$
- ③  $24 - 14 = 10 \quad 10 : 2 = 5 \text{ legami}$



### CO

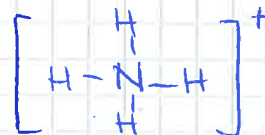
- ①  $4_C + 6_O = 10$
- ②  $8 + 8 = 16$
- ③  $16 - 10 = 6 \quad 6 : 2 = 3 \text{ legami}$

$:\text{C} \equiv \text{O}:$   
 legame + forte che può essere in un dipolo  
 O si orienta → polare  
 (CO<sub>2</sub> non è polare)

### La struttura di Lewis dello ione ammonio

NH<sub>4</sub><sup>+</sup>

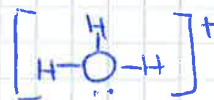
- ①  $5_N + 4 \cdot 1_H - 1e^- = 8$
- ②  $8 + 4 \cdot 2 = 16$
- ③  $16 - 8 = 8 \quad 8 : 2 = 4 \text{ legami}$



### dello ione ossonio

H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>

- ①  $6_O + 3 \cdot 1_H - 1e^- = 8$
- ②  $8 + 2 \cdot 3_H = 14$
- ③  $(14 - 8) : 2 = 3 \text{ legami}$



Chi dona doppietto elettronico è la base  
 " accetta " " acido

Addotto acido-base di Lewis



(posso rappresentare un legame con una freccia  
 Una volta che si è formato un doppio + chi ha donato)

### Esercitazione 3, calcoli stechiometrici (mi fanno in lab)

La chimica si occupa dell'analisi qualitative e quantitativa.

Problema 1: vengono date le percentuali in peso

C → 55,81% ; H → 7,02% ; O → 37,17% (massa molecolare = 86,1 u)



calcolo il numero di moli

55,81%	significa	che su 100 g	55,81 g	sono di	C
7,02%	"	"	7,02 g	"	H
37,17%	"	"	37,17 g	"	O

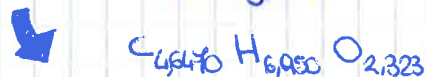
Visto che  $n = \frac{m}{M} \rightarrow n = \frac{m}{M}$

$$n_C = \frac{55,81 \text{ g}}{12,01 \text{ g/mol}} = 4,6470 \text{ mol}$$

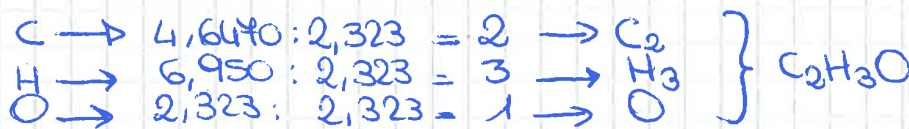
$$n_H = \frac{7,02 \text{ g}}{1,01 \text{ g/mol}} = 6,950 \text{ mol}$$

$$n_O = \frac{37,17 \text{ g}}{16,00 \text{ g/mol}} = 2,323 \text{ mol}$$

Il dato 55,81 significa che ci sono 4 cifre significative, 3 dati certi e il 4° dato incerto.  
Cifre significative = cifra certa + prima cifra incerta.  
Nei passaggi intermedi scrivere il dato con una cifra in più poi si corregge alla fine.



divido per il più piccolo per trovare la formula minima



3. trovare formula molecolare

la formula molecolare è un multiplo della formula minima  
→ formula molecolare = (formula minima) × coefficiente

$$C_2H_3O = 24,02 + 3,03 + 16 = 43,05 \text{ u}$$

$$\frac{86,01 \text{ u}}{43,05 \text{ u}} = 2 \rightarrow C_4H_6O_2 \text{ composto organico}$$

calcoli stechiometrici:

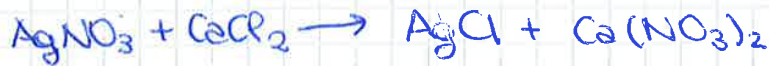
- ① requisito fondamentale è partire dalla reazione bilanciata che dà: reagenti molari, tra reagenti e prodotti
- ② calcolo numero di moli
- ③ valutare se è un reagente in eccesso / limitante (eventuale purezza reagenti < 100%)
- ④ calcolare moli di prodotto in eccesso / limitante
- ⑤ calcolo massa prodotto

Purezza del composto: se nel testo del problema viene indicata una purezza inferiore al 100% bisogna calcolare la quantità reale di composto nel campione, prima di svolgere i calcoli stechiometrici.

Se un reagente è utilizzato in eccesso, i calcoli stechiometrici vanno eseguiti in base alle moli del reagente presente in difetto, detto anche reagente limitante.

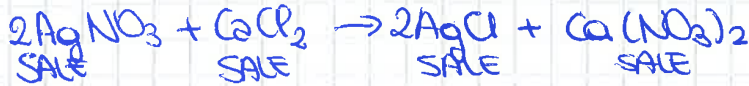


• 220 g di nitrato d'argento (1) e 980 g di  $\text{CaCl}_2$  reagiscono secondo la reazione



Calcolare i g di nitrato di calcio che si formano

1) bilanciare



→ due sali nei reagenti e due nei prodotti: reazione di doppio scambio

2. moli

$$n_{\text{AgNO}_3} = \frac{220}{107,87 + 14,00 + 3 \cdot 16,00} = \frac{220}{169,87} = 1,295 \text{ mol}$$

$$n_{\text{CaCl}_2} = \frac{98}{110,98} = 0,8830 \text{ mol}$$

3) fare proporzione

$$2\text{AgNO}_3 : 1\text{CaCl}_2 = 1,295_{\text{AgNO}_3} : X_{\text{CaCl}_2} \rightarrow 0,6475$$

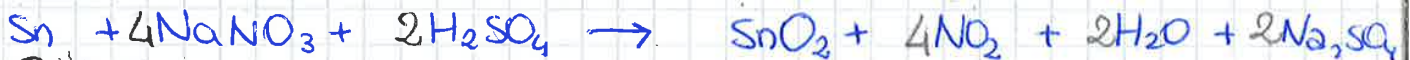
→ reagente limitante

(Divido n. moli per coeff. stechiometrico, il risultato quello limitante)

$\text{CaCl}_2$  e  $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$  stesso rapporto  
 ↓ stessi coeff. stechiometrici

4) grammi  $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \rightarrow 0,6475 \cdot 164,08 \text{ g/mol} = 106 \text{ g}$

• Calcolare i g di  $\text{NO}_2$  che si formano facendo reagire 163 g di Sn con 242 g di  $\text{NaNO}_3$  e 429 g di  $\text{H}_2\text{SO}_4$  secondo la reazione:



1) Bilancio



2) moli reagenti

$$m_{\text{Sn}} = \frac{163}{118,89} = 1,371 \text{ mol}$$

$$n_{\text{NaNO}_3} = \frac{242}{86,99} = 2,847 \text{ mol}$$

$$m_{\text{H}_2\text{SO}_4} = \frac{429}{98,08} = 4,374 \text{ mol}$$

2') limitante/riducente

$\text{Sn} = \frac{1,371}{1} = 1,371$ 

 $\text{NaNO}_3 = \frac{2,847}{4} = 0,7117$ 

 $\text{H}_2\text{SO}_4 = \frac{4,374}{2} = 2,187$

↑ limitante

3) calcolo moli prodotto ( $\text{NO}_2$ )

$$4\text{NaNO}_3 : 4\text{NO}_2 = 2,847_{\text{NaNO}_3} : n_{\text{NO}_2} \rightarrow n_{\text{NO}_2} = \frac{4 \cdot 2,847}{4} = 2,847 \text{ mol}$$

$4\text{H} = 32 + 4 = 46 \text{ u}$ 

 $m_{\text{NO}_2} = 2,847 \cdot 46 = 131 \text{ g}$

da **risonanza** (ovvero quando una struttura di Lewis non basta...) si verifica quando molecole (IONI POLIATOMICI) contengono doppi legami adiacenti a legami singoli:



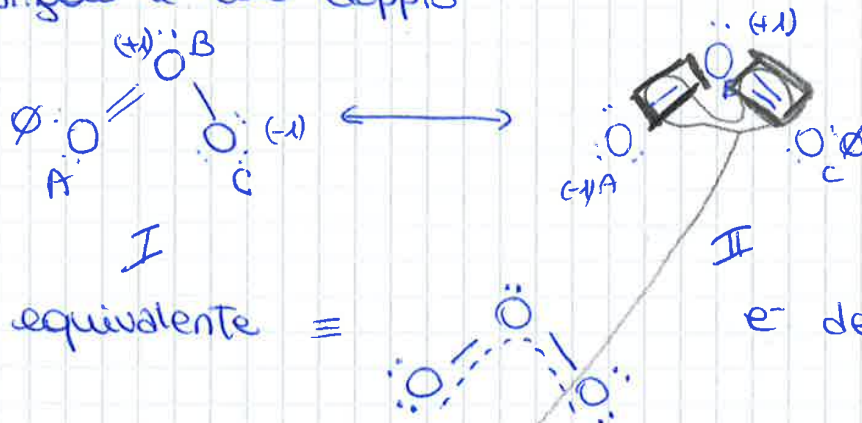
Strutture di risonanza sono strutture di Lewis in cui gli atomi hanno la stessa posizione relativa, ma diverse numero di coppie di e- di legame e di e- non condivisi. Si "spostano" gli e- del doppio legame.

freccie di risonanza.

Come si arriva

ozono (O<sub>3</sub>) è un gas blu chiaro, dall'odore pungente, che condensa in un liquido blu scuro a T < -112 C. Si tratta di un pericoloso inquinante atmosferico, a livello del suolo, ma è anche un assorbitore delle radiazioni UV dannose nella stratosfera (protegge la vita terrestre). Ha 3 legami.

Misure sperimentali mostrano però che nell'ozono, la lunghezza di legame O-O è intermedia tra un legame singolo e uno doppio.



sono due strutture limite

le due strutture non perfettamente simmetriche e contribuiscono in modo uguale alla risonanza di e- delocalizzati

**Ordine di legame (O.d.l) =  $\frac{n^\circ \text{ coppie di legame}}{n^\circ \text{ di legami}}$**

O.d.l. (O<sub>3</sub>) =  $\frac{3}{2} = 1,5 \rightarrow$  lunghezza intermedia tra uno singolo e uno doppio

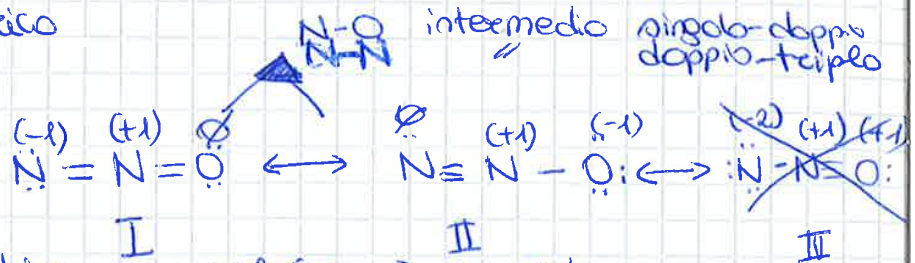
Il fatto che il legame sia più stabile è dovuto al fatto che gli e- del secondo legame non sono localizzati tra due nuclei bensì sono "delocalizzati" tra tre nuclei, risentendo gli un'attrazione positiva maggiore, che li stabilizza. L'entità di tale stabilizzazione si chiama **energia di risonanza**.

anziche reazioni di addizione, in cui reagiscono gli e- delocalizzati, cio' e dovuto alla elevata energia di risonanza della molecola ( $E = -151 \text{ kJ/mol}$ ), derivante dalla delocalizzazione degli e- che favoriscono dell'attrazione di ben 6 nuclei di C.

Ci sono casi in cui non e vero che vanno tutti bene, un caso e preferibile

$\text{N}_2\text{O}$  non e simmetrico

- 1)  $16e^-$
- 2)  $24e^-$
- 3) 4 legami

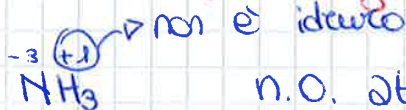


Le cariche formali cambiano perche' non e simmetrico. Bisogna calcolare e.g. quando non e simmetrico su ogni atomo per stabilire quale struttura contribuisca maggiormente all'ibrido di risonanza.

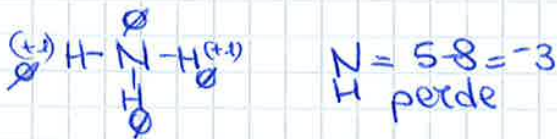
La scelta della migliore struttura di risonanza basata sulla carica formale tiene conto dei seguenti criteri:

- 1) C.F. piu piccolo (in modulo) sono preferibili a piu grandi (in modulo)
- 2) non sono preferibili C.F. simili su atomi adiacenti (respingono + -)
- 3) Una C.F. piu negativa dovrebbe risiedere sugli elementi piu elettronegativi

### Differenza tra carica formale e numero di ossidazione



n.o. attribuisco e all'elemento + elettronegativo



La C.F. viene calcolata per un atomo in una struttura di risonanza e puo' variare da una struttura ad un'altra per lo stesso atomo nello stesso composto

Se n.o. e invece un numero convenzionale, positivo, negativo, intero o frazionario o nullo, che corrisponde alla carica ipotetica che un atomo acquisterebbe in una formula attribuendo gli e- di legame nel seguente modo:

- 1) per il legame A-B, con  $A \neq B$ , gli e- di legame vanno attribuiti all'atomo + elettronegativo
- 2) per il legame A-A, gli e- di legame vanno equi-partiti

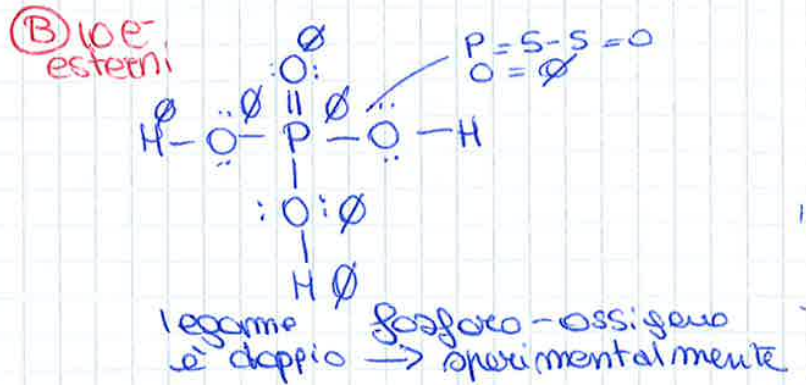
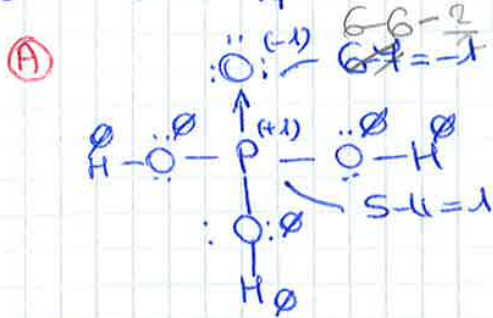
Isocianati  $\text{CNO}^-$

- 1)  $4C + 5N + 6O + 1e^- = 16e^-$
- 2)  $8C + 8N + 8O = 24e^-$
- 3)  $(24-16) : 2 = 4$  legami



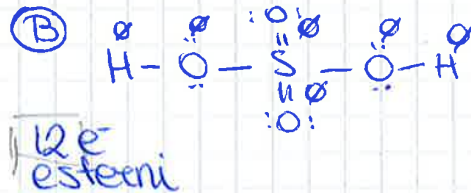
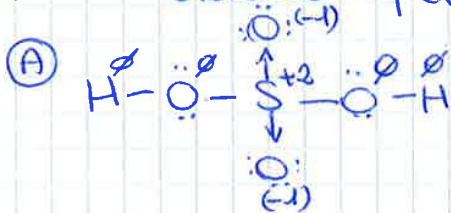
Si noti che i n.o. non variano da una forma di risonanza a un'altra (perche' le elettronegativ. non variano), mentre le cariche

La struttura di Lewis dell'acido fosforico ( $H_3PO_4$ ) è la (A), in cui P rispetta l'ottetto. Prove sperimentali mostrano, però, che il legame  $P=O$  è doppio: la vera struttura è di fatto (B), il cui P ha 10e<sup>-</sup> esterni. Notare le cariche formali nelle due strutture, che indicano chiaramente che la B è la struttura più plausibile, in accordo con i dati sperimentali:

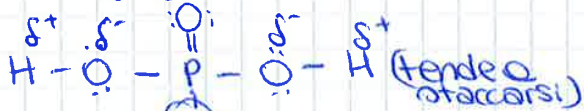


- ① 32 e<sup>-</sup>
- ② 46 e<sup>-</sup>
- ③ (46-32): 2 = 14

Stesso discorso per l'acido solforico ( $H_2SO_4$ )



Acido fosforoso

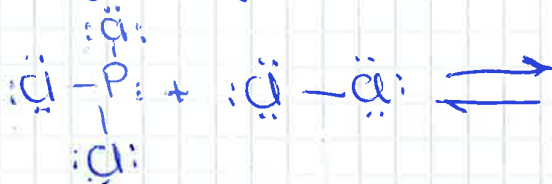
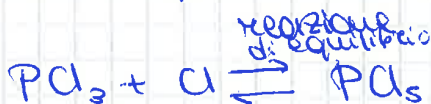


10 e<sup>-</sup> esterni, espansione dell'ottetto

Non è acido, non si stacca il terzo, solo due si staccano per altri due sono acidi. P non è elettronegativo come l'O quindi H non si stacca, è meno acido.

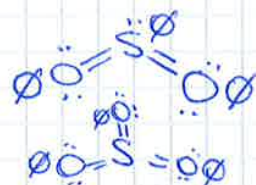
$H_3PO_3$  è un acido diprotico  
 $H_3PO_4$  " " triprotico due protici acidi

Non sempre c'è espansione dell'ottetto



Questa reazione a temperatura ambiente  $\text{Cl} \rightarrow$  gas  
 $\text{PCl}_3 \rightarrow$  liquido  
 $\text{PCl}_5 \rightarrow$  solido, precipita

$\text{SO}_2$  anidride solforosa



10 e<sup>-</sup> esterni

$\text{SO}_3$  anidride solforica



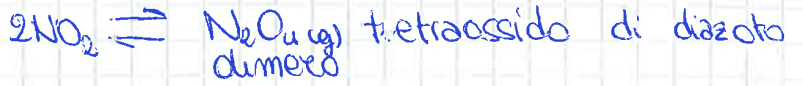
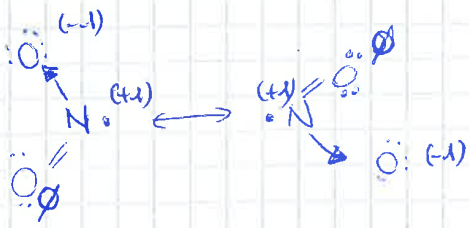
12 e<sup>-</sup> esterni

$\text{H}_2\text{S}$  acido solfidrico

- ① 2+6=8
- ② 4+8=12
- ③ 2 legami



non da espansione dell'ottetto



$NO_x$  molecole inquinanti - alcune radicali - alcune piogge acide ( $N_2O_5 + H_2O \rightarrow 2HNO_3$ )

La rottura OMOULTICA (legame che si rompe, atomi simili) di un legame genera due radicali:  $2e^-$  di legame equi partiti  
 $A - B \rightarrow A \cdot + \cdot B$

La rottura ETEROLITICA di un legame genera due ioni:  
 $A - B \rightarrow A^+ + B^-$

Alogeno fino a 7 e- estere  
 esercizi fine lezione 8

Struttura e polarità delle molecole (PARTE 2)

- Teoria degli orbitali molecolari (MO)
- Teoria del legame di valenze (VB)
- Teoria VSEPR
- Teoria di Lewis

Struttura di Lewis:

- Basate sulla regola dell'ottetto
- numero di legami e doppietti non condivisi
- bidimensionali
- angoli di legame non reali



Teoria VSEPR (Valence Shell Electron-pair Repulsion)

Dai informazioni sulla forma delle molecole, basandosi sulla repulsione elettrostatica tra gruppi di  $e^-$

Minimizzare le repulsioni tra gruppi di  $e^-$  che circondano l'atomo  $\rightarrow$  sono possibili 5 geometrie intorno a un atomo centrale

- lineare ( $CO_2, CS_2, HCN, BeCl_2$ )  
 due gruppi di  $e^-$



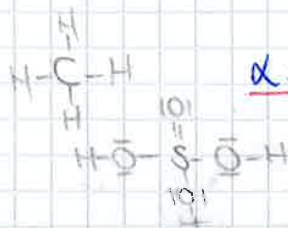
nuclei sulla stessa retta  
 $\alpha = 180^\circ$

- planare triangolare ( $BF_3, CO_3^{2-}, NO_3^-$ )  
 tre gruppi di  $e^-$



Sullo stesso piano  
 $\alpha = 120^\circ$

- tetraedico ( $CH_4, NH_4^+$ )  
 quattro gruppi di  $e^-$



$\alpha = 109,5^\circ$

tetraedico non regolare  $B-A-B$

ES  $NH_3$  anziché avere geometria tetraedica, ha geometria di piramide triangolare, mentre  $NH_4^+$  è tetraedico

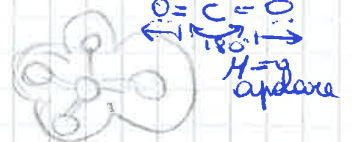
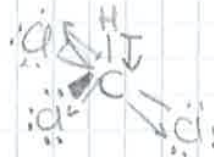
ES  $H_2O$  che ha due doppietti elettronici sull'ossigeno ha geometria piegata (angolare)

Per definire la geometria di molecole con più di un atomo centrale, alla teoria VSEPR si preferiscono altri metodi, basati essenzialmente sulla teoria del legame di valenza.

\* Anche gli ioni poliatomici sono descritti con VSEPR (tetraedro...)

La struttura di una molecola ci serve per ricavare la polarità della molecola

$\mu = q \cdot d$  dipolo molecolare, due cariche uguali in modulo, di molto piccola (distanza interatomica).  $H-F$   $\mu \neq 0$  polare



forma molecolare



dipoli di legame



dipolo molecolare



forma molecolare



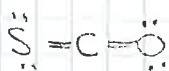
dipoli di legame



nessun dipolo molecolare



forma molecolare



dipoli di legame



dipolo molecolare



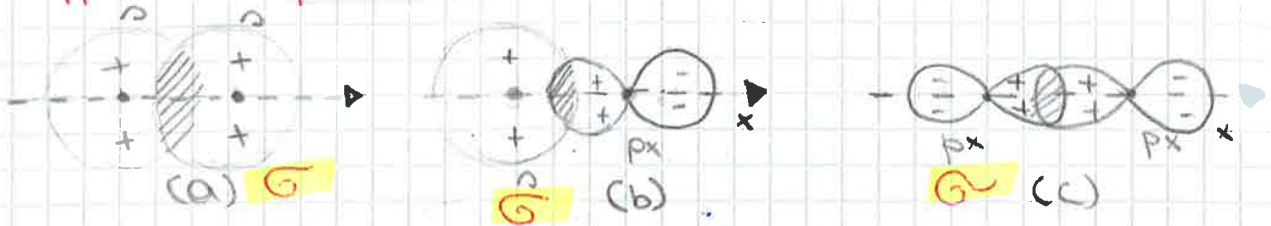
Però il solfuro di carbonile è polare

La teoria VS (Valence Bond) Teoria del legame di valenza

La teoria VSEPR è un modello e come tutti i modelli scientifici ha dei limiti, dovuti al fatto che si basano su assunzioni semplificate, ad esempio non va bene per spiegare la forma di molecole con più di due atomi centrali, non dice nulla sulle interazioni tra gli orbitali atomici coinvolti nella formazione del legame covalente; non spiega alcune proprietà magnetiche e spettroscopiche. Bisogna quindi adottare oltre due teorie tra loro complementari per spiegare il legame covalente, la teoria del legame di valenza e la teoria degli orbitali molecolari. La prima si basa sulle interazioni tra gli orbitali atomici che

Oltrezione giusta

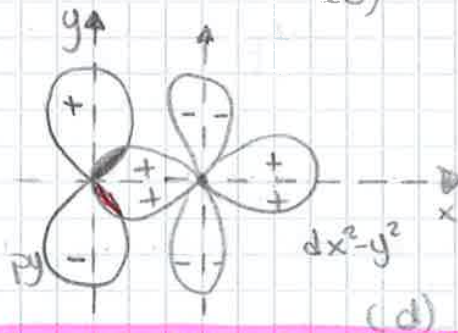
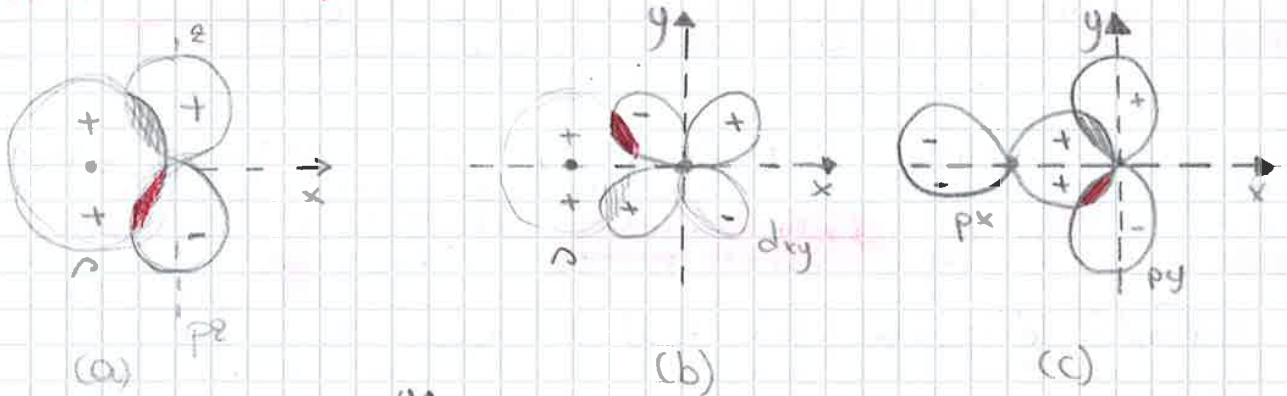
Sovrapposizioni possibili tra orbitali atomici



legame sigma o legame pi-greco

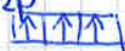
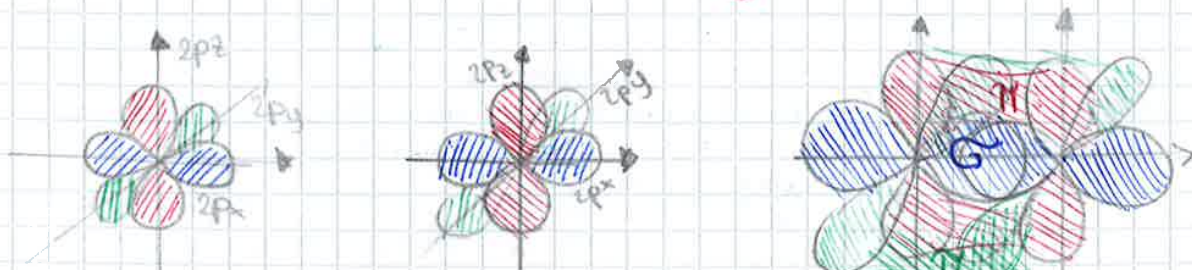


Sovrapposizioni proibite tra orbitali atomici

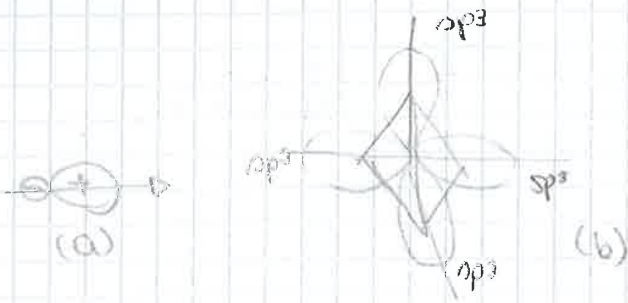


La probabilità di trovare un e- è il quadrato del modulo  
 es  $(-2 + -2)^2 = 16$

Teoria del legame di valenza: legami multipli:



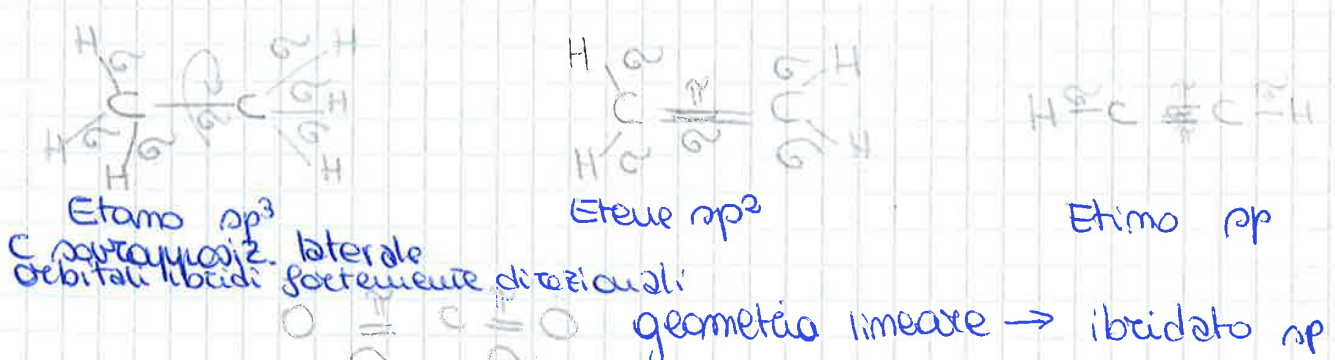
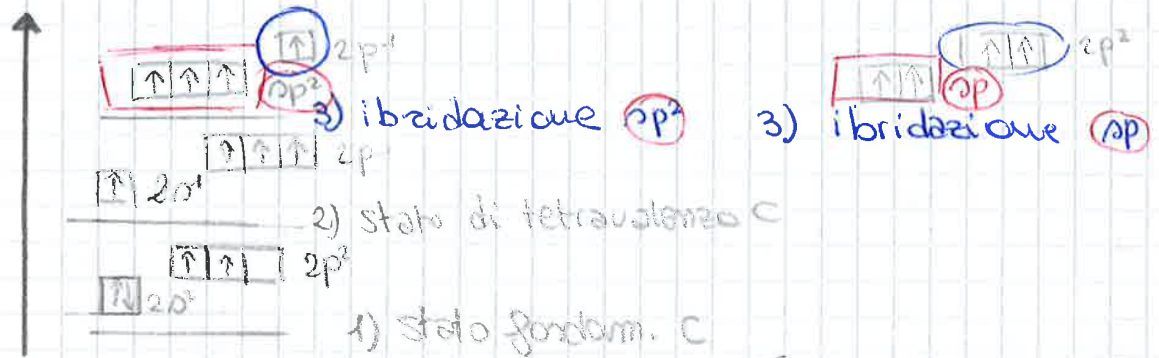
lungo l'asse interatomico  
 legame pi + debole, laterale



vediamo C ma vale per  
altri elementi

$\text{NH}_4^+$   
Lewis  $[\text{H}-\text{N}-\text{H}]^+$   
VSEPR tetraedrico  
VB N ibridato  $sp^3$

Altri tipi ibridazione



- a) si formano tanti orbitali ibridi quanti sono gli orbitali atomici di partenza
- b) E' possibile l'ibridazione di orbitali con energia simile
- c) il tipo di orbitali ibridi ottenuti dipende dagli orbitali di partenza
- d)  $sp^3$  geometria tetraedrica
- e)  $sp^2$  // planare ( $120^\circ$  angoli di legame)
- f)  $sp^3$   $d^1$  bipiramidale
- g)  $sp$  // lineare ( $180^\circ$ )
- h)  $sp^3$   $d^2$ ottaedrica
- i) gli orbitali ibridi si usano per fare legami o ospitare e non condurre



- aumentare di un'unità l'ultima cifra scritta nel caso in cui la prima cifra eliminata sia superiore a 5
- lasciare invariata o aumentare di un'unità l'ultima cifra scritta, quando la cifra eliminata è 5 e l'ultima cifra scritta è pari o dispari rispettivamente

$$\begin{aligned} 0,815 &\rightarrow 0,81 \\ 0,855 &\rightarrow 0,86 \\ 0,8451 &\rightarrow 0,85 \text{ (perché si è eliminato 5)} \end{aligned}$$

I risultati delle operazioni di  $X$  e: su grandezze sperimentali devono essere espressi con un numero di cifre significative uguale o al massimo superiore di uno rispetto al numero di cifre significative della grandezza usata nei calcoli che è stata misurata con la precisione minore

### Resa percentuale di reazione $R\%$

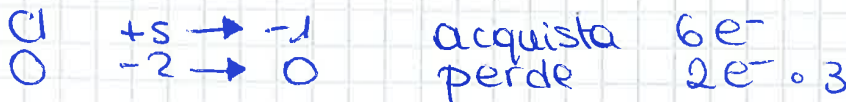
$$R\% = \left( \frac{\text{g di prodotto reali}}{\text{g di prodotto teorici}} \right) \cdot 100$$

Molto spesso la resa effettiva di una reazione è inferiore alla resa teorica del 100%. (cioè si formano meno prodotti di quelli previsti in base alla stechiometria della reazione) poiché ci possono essere reazioni parallele parassite (sottoprodotti). Quindi bisogna tener conto di ciò nei relativi calcoli.

- Ad esempio, nel problema precedente se la resa fosse del 90%, anziché 131 g di  $\text{NO}_2$  (resa teorica del 100%), se ne formerebbero

$$\frac{131 \cdot 90,0}{100} = 118 \text{ g}$$

Dato la reazione  $\text{KClO}_3 \rightarrow \text{KCl} + \text{O}_2$   
Calcola la resa percentuale, sapendo che da 780 g di clorato di potassio si sviluppano 8,12 moli di ossigeno



$$R\% = \frac{\text{g O}_2 \text{ reali}}{\text{g O}_2 \text{ teorici}} \cdot 100 \rightarrow \frac{m_{\text{O}_2}(\text{reali}) \cdot M_{\text{O}_2}}{m_{\text{O}_2}(\text{teorici}) \cdot M_{\text{O}_2}} \cdot 100$$

Quindi posso usare o le masse o le moli:

$$\frac{8,12}{m_{\text{O}_2} \text{ teorici}} \cdot 100$$

$m_{\text{O}_2} \text{ teorici} ?$

$$m_{\text{KClO}_3} = \frac{780}{122,55} = 6,365 \text{ mol}$$



proporzionale  $6,365 \cdot 3 = 9,548$  (+ di quelle reali)

$$\frac{8,12}{9,548} \cdot 100 = 85,0\% \text{ (3 cifre significative)}$$

## SISTEMA

- sistema isolato: non scambia energia né materia con l'ambiente
- sistema chiuso: scambia energia, non materia con l'ambiente
- sistema adiabatico: sistema chiuso, scambia solo lavoro (non calore) con l'ambiente
- sistema aperto: scambia sia energia sia materia con l'ambiente

Energia: è la capacità di compiere un lavoro e può manifestarsi come calore, lavoro meccanico, lavoro elettrico...

$$1 \text{ cal} = 4,184 \text{ cal} \quad 1 \text{ cal} = 4,184 \text{ J}$$

Alcune variazioni di entalpia ( $\Delta H$ , calore misurato a pressione costante)

Calore di combustione ( $\Delta H_{\text{comb}}$ )

variazioni di entalpia di combustione e pressione costante = pressione ambiente

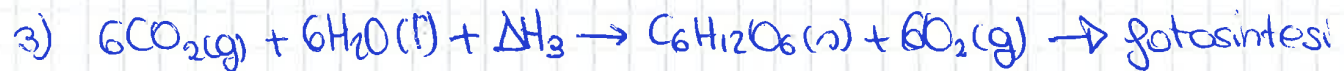
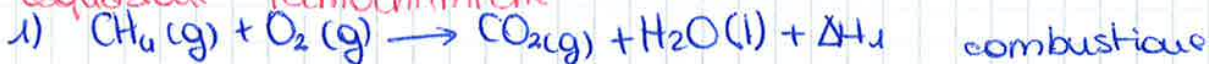


Calore di formazione dagli elementi ( $\Delta H_f$ )

## Termochimica

Si occupa degli scambi di calore che avvengono nel corso delle trasformazioni chimiche o fisiche

equazioni termochimiche



$$\Delta H_1 \neq \Delta H_2$$

Il  $\Delta H$  di una reazione dipende dalla T, dalla p, e dallo stato di aggregazione di reagenti e prodotti

1) e 2) sono reazioni esotermiche  $\Delta H < 0$  (c'è tra i prodotti <sup>molto</sup> calore <sub>rilascio</sub>)

3) reazione endotermica  $\Delta H > 0$  (c'è tra i reagenti)

Poiché l'entalpia è una funzione di stato, la sua variazione  $\Delta H$ , in una trasformazione dipende solo dai valori di entalpia <sup>finale</sup>  $H_f$  e di entalpia <sup>iniziale</sup>  $H_i$

Secondo la legge di Hess è possibile calcolare il  $\Delta H$  di una trasformazione come la somma dei  $\Delta H$  degli i-esimi stadi (anche solo teorici) in cui tale trasformazione può essere suddivisa (esempio: ciclo di Bore-Haber).

$$\Delta H = H_f - H_i = \sum \Delta H = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 \dots$$