

NOMENCLATURA (tradizionale)**Composti BINARI:**

Generale

Se c'è 1 N.O.

- Si legge da DX a SX (perché si parte dall'elemento più elettronegativo che è a destra)
- Si aggiunge la desinenza *-uro* all'elemento di DX

Se ci sono 2 N.O.

- Si legge da DX a SX (perché si parte dall'elemento più elettronegativo che è a destra)
- Si aggiunge la desinenza *-uro* all'elemento di DX
- Si aggiunge la desinenza *-oso* (se ha N.O. min) oppure *-ico* (se ha N.O. max), all'elemento di SX

Ossidi basici (metalli - ossigeno)

Se c'è 1 N.O.

- Si legge "*ossido di..*" e il nome del metallo

Se ci sono 2 N.O.

- Si legge "*ossido..*" poi il nome del metallo seguito da *-oso* (N.O. min) o *-ico* (N.O. max)

Ossidi acidi (non metalli - ossigeno)

Se c'è 1 N.O.

- Si legge "*anidride..*" poi il nome del non metallo con desinenza *-ica*

Se ci sono 2 N.O.

- Si legge "*anidride..*" poi il nome del non metallo con desinenza *-osa* o *-ica*

Se ci sono 3 o 4 N.O.

- Si legge "*anidride ipo...osa*" per il N.O. min
- Si legge "*anidrideosa*" per il 2° N.O.
- Si legge "*anidrideica*" per il 3° N.O.
- Si legge "*anidride per...ica*" per il N.O. max

Idruri metallici (metalli - idrogeno)

Se c'è 1 N.O.

- Si legge "*idruro di..*" poi il nome del metallo

Se ci sono 2 N.O.

- Si legge "*idruro..*" nome del metallo con desinenza *-oso* o *-ico*

Idruri covalenti (non/semi metalli - idrogeno)

NH₃ idruro di azoto (ammoniaca) o NaH idruro di sodio

Idracidi (idrogeno - F, S, Cl, Br e i)

Allo stato puro sono composti molecolari mentre sciolti in acqua si comportano come *acidi*Forma acquosa: "*acido..*" nome del non metallo con desinenza *-idrico*Forma gassosa: nome del non metallo con desinenza *-uro* "*..di idrogeno*"

Composti TERNARI:Idrossidi (metalli - OH⁻)Formati da: ossidi basici + H₂OFormula: M(OH)_x (dove "x" rappresenta la carica del catione metallico "M")Se c'è 1 N.O.

- Si legge "idrossido di.." e il nome del metallo

Se ci sono 2 N.O.

- Si legge "idrossido.." poi il nome del metallo seguito da -oso o -ico

Ossiacidi (H - non metalli - O)

Formati da: ossidi acidi + H₂OFormula: H_xNMO_ySe c'è 1 N.O.

- Si legge "acido.." poi il nome del non metallo con desinenza -ico

Se ci sono 2 N.O.

- Si legge "acido.." poi il nome del non metallo con desinenza -oso o -ico

Se ci sono 3 o 4 N.O.

- Si legge "acido ipo...oso" per il N.O. min
- Si legge "acidooso" per il 2° N.O.
- Si legge "acidoico" per il 3° N.O.
- Si legge "acido per...ico" per il N.O. max

Una particolarità degli ossiacidi è che sciolti in acqua si ionizzano e si dissociano liberando ioni H⁺ e anioni poliatomici NMO_y^{x-}. Gli acidi possono essere: *monotropici* perché dissociandosi possono cedere un solo ione H⁺, oppure *politropici* quelli che possono cedere più di uno ione H⁺.

Acido monoprotico:HClO → acido ipo-clor-oso → ClO⁻ → ione ipo-clor-itoHClO₂ → acido clor-oso → ClO₂⁻ → ione clor-itoHClO₃ → acido clor-ico → ClO₃⁻ → ione clor-atoHClO₄ → acido per-clor-ico → ClO₄⁻ → ione per-clor-atoMentre per gli idracidi basta sostituire la desinenza -idrico con -uro: HCl → acido clor-idrico → Cl⁻ → ione clor-uroAcido poliprotico:

Se sono presenti uno o più atomi di H allora basterà anteporre i prefissi idrogeno- o diidrogeno in base al numero di atomi di H

CO₃²⁻ → ione carbon-atoHCO₃ → ione idrogenocarbonato (bicarbonato)PO₄³⁻ → ione fosfatoHPO₄²⁻ → ione idrogenofosfatoH₂PO₄⁻ → ione diidrogenofosfato

COMPOSIZIONE DELL'ATOMO E NUMERO DI OSSIDAZIONE

Elettrone:	$9.10938 \cdot 10^{-28} \text{ g}$	$-1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	C	-1
Protone:	$1.67262 \cdot 10^{-24} \text{ g}$	$+1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	C	+1
Neutrone:	$1.67262 \cdot 10^{-24} \text{ g}$	0	C	0

Atomo di ossigeno: $\frac{n \text{ di massa (neutroni+protoni)}}{n \text{ atomico (protoni=elettroni)}} \rightarrow \frac{16}{8} \text{ O}$

$$K = ^\circ\text{C} + 273.15 \text{ } ^\circ\text{C} \quad ^\circ\text{C} = K - 273.15 \text{ } ^\circ\text{C} \quad ^\circ\text{F} = \frac{9}{5} * ^\circ\text{C} + 32 \quad ^\circ\text{C} = \frac{5}{9} * (^\circ\text{F} - 32)$$

Composti molecolari: sono formati da gruppi di molecole cioè da atomi uniti da legami covalenti (Es.: nella molecola di metano ci sono 4 atomi di idrogeno legati ad un atomo di carbonio).

Composti ionici: non è individuabile una vera e propria molecola. Sono formati dall'unione di cationi e anioni, la formula ionica coincide sempre con quella empirica e la somma delle cariche del catione(i) e anione(i) in ogni unità formula deve essere uguale a zero (Es.: il sale cloruro di litio, formato da ioni Li positivi e ioni Cl negativi).

Isotopi: atomi aventi lo stesso n° atomico ma diverso n° di massa perché contenenti un diverso n° di neutroni (hanno le stesse proprietà chimiche). $^{16}_8\text{O}$ e $^{18}_8\text{O}$ sono due isotopi dell'ossigeno.

Numero di ossidazione

Composto Binario: Fe_2O_3 , conoscendo il N.O. di uno dei due elementi (l'ossigeno) si può ricavare il N.O. dell'altro (il ferro). Si comincia col moltiplicare il N.O. dell'ossigeno per il numero di atomi dello stesso ($-2 \cdot 3 = -6$) e dividendo il risultato cambiato di segno per il numero di atomi del ferro ($6/2 = 3$).

Composto Ternario: HMnO_4 , per ricavare il N.O. del Mn (manganese) è necessario impostare l'equazione.

$$\text{NO}_H + \text{NO}_{Mn} + (4 * \text{NO}_O) = 0 \rightarrow 1 + \text{NO}_{Mn} - 8 = 0 \rightarrow \text{NO}_{Mn} = 7$$

Il numero di ossidazione dell'ossigeno è sempre -2 mentre quello dell'idrogeno è +1 (a parte quando nei composti binari si lega a un metallo per esempio NaH).

Es.: IF_7 (fluoruro di iodio) \rightarrow so che F=-1 (sempre) quindi $\rightarrow 7 * (-1) + ? = 0 \rightarrow \underline{I=+7}$
 $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ (bicromato di potassio) $\rightarrow K=+1$ e $O=-2 \rightarrow 7 * (-2) + 2 * (+1) + 2 * ? = 0 \rightarrow \underline{Cr=+6}$
 HCO_3^- (ione idrogeno carbonato) $\rightarrow H=+1$ e $O=-2 \rightarrow 1 * (+1) + 3 * (-2) + ? = -1 \rightarrow \underline{C=+4}$
 NaIO_3 (ione iodato di sodio) $\rightarrow Na=+1$ e $O=-2 \rightarrow 3 * (-2) + 1 * (+1) + ? = 0 \rightarrow \underline{I=+5}$

Regole per i numeri di ossidazione:

1. Gli elementi liberi (stato non combinato) hanno un numero di ossidazione pari a zero (Es.: Pb, H₂, P₄ = 0).
2. Negli ioni monoatomici, il numero di ossidazione è uguale alla carica dello ione (Es.: Fe³⁺, Fe = +3; O²⁻, O = -2).
3. L'N.O. dell'ossigeno è generalmente -2. Nell' H₂O₂ (perossido di idrogeno) e O₂²⁻ è -1; per lo ione O₂⁻ (superossidi) è -1/2.
4. L'N.O. dell'idrogeno è +1 tranne quando è legato ad un metallo in un composto binario. In questi casi è -1 (Es.: CaH₂ idruro di calcio)
5. I metalli del Gruppo IA sono +1, i metalli IIA sono +2 e il fluoruro è sempre -1.
6. La somma dei numeri di ossidazione di tutti gli atomi in una molecola o in uno ione è uguale alla carica sulla molecola o sullo ione.

STECIOMETRIA

$$\text{Numero di moli: } n = \frac{m \text{ (g)}}{PA/PM \text{ (g/mol)}}$$

Es.: Quanti atomi di idrogeno sono presenti in 25.6 g di urea $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$?

$$n = \frac{25.6 \text{ g}}{60.06 \text{ g/mol}} = 0.426 \text{ mol} \quad 1 \text{ mol } (\text{NH}_2)_2\text{CO} : 4 \text{ mol di H} = 0.426 \text{ mol} : ? \rightarrow \text{ci sono } 1.704 \text{ moli di H in } (\text{NH}_2)_2\text{CO}$$

$$1 \text{ mol} : 6.022 \cdot 10^{23} = 1.704 \text{ mol} : ? \rightarrow \text{ci sono } 1.03 \cdot 10^{24} \text{ atomi di H in } (\text{NH}_2)_2\text{CO}$$

$$\text{Composizione percentuale elemento: } \% \text{ Elemento} = \frac{n \cdot PA(\text{elemento})}{PM(\text{composto})} \cdot 100$$

Es.: Qual è la percentuale in massa di H in H_3PO_4 ?

$$\% \text{H} = \frac{3 \cdot (1.008 \text{ g/mol})}{97.99 \text{ g/mol}} \cdot 100 \rightarrow \text{la percentuale di H è del } 3.086\%$$

Es.: L'acido ascorbico è composto dal 40.92% di C, 4.58% di H e dal 54.50% di O. Determinare la formula empirica!

C = 40.92g su 100g di acido ascorbico H = 4.58g su 100g di acido ascorbico O = 54.50g su 100g di acido ascorbico

$$n_{\text{C}} = \frac{40.92 \text{ g}}{12.01 \text{ g/mol}} = 3.407 \text{ mol di C}$$

$$n_{\text{H}} = \frac{4.58 \text{ g}}{1.008 \text{ g/mol}} = 4.54 \text{ mol di H}$$

$$n_{\text{O}} = \frac{54.50 \text{ g}}{16.00 \text{ g/mol}} = 3.406 \text{ mol di O}$$

$$\text{C} : \frac{3.407}{3.406} \approx 1 \cdot 3 = 3$$

$$\text{H} : \frac{4.54}{3.406} \approx 1.33 \cdot 3 = 3.99 \approx 4$$

$$\text{O} : \frac{3.406}{3.406} = 1 \cdot 3 = 3$$

La formula empirica corrisponde a: $\text{C}_3\text{H}_4\text{O}_3$

Per verificare se la formula empirica (FE) corrisponde alla formula molecolare (FM):

Es.: PM del composto ricavato: 46.01 g/mol PM del composto dato: $90 - 95 \text{ g/mol}$ $\frac{\text{PM dato}}{\text{PM ricavato}} = \frac{90 \text{ g/mol}}{46.01 \text{ g/mol}} \approx 2$

Formula empirica ricavata: NO_2 Formula molecolare: $\text{NO}_2 \cdot 2 \rightarrow \text{N}_2\text{O}_4$

Reagente limitante: **RL**

Es.: $2\text{NH}_3 \text{ (g)} + \text{CO}_2 \text{ (g)} \rightarrow (\text{NH}_2)_2\text{CO} \text{ (aq)} + \text{H}_2\text{O} \text{ (l)}$ In una reazione, 637.2 g di NH_3 vengono trattati con 1142 g di CO_2
Quale dei due è il reagente limitante? Calcola la massa di $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$ che si forma? Quanto reagente in eccesso (in grammi) rimane al termine della reazione?

$$n_{\text{NH}_3} = \frac{637.2 \text{ g}}{17.03 \text{ g/mol}} = 37.41 \text{ moli di NH}_3 \quad 1 \text{ mol } (\text{NH}_2)_2\text{CO} : 2 \text{ mol NH}_3 = ? : 37.41 \text{ mol} \rightarrow \text{ci sono } 18.75 \text{ mol di } (\text{NH}_2)_2\text{CO}$$

$$n_{\text{CO}_2} = \frac{1142 \text{ g}}{44.01 \text{ g/mol}} = 25.95 \text{ moli di CO}_2 \quad 1 \text{ mol } (\text{NH}_2)_2\text{CO} : 1 \text{ mol CO}_2 = ? : 25.95 \text{ mol} \rightarrow \text{ci sono } 25.95 \text{ mol di } (\text{NH}_2)_2\text{CO}$$

Quindi NH_3 è il reagente limitante visto che produce una minore quantità di $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$.

$$m(\text{g})_{(\text{NH}_2)_2\text{CO}} = n_{(\text{NH}_2)_2\text{CO}} \cdot PM_{(\text{NH}_2)_2\text{CO}} \rightarrow 18.75 \text{ mol} \cdot 60.06 \text{ g/mol} = 1126.13 \text{ grammi di } (\text{NH}_2)_2\text{CO} \text{ utilizzando tutti e } 637.2 \text{ g di NH}_3$$

$$m(\text{g})_{(\text{NH}_2)_2\text{CO}} \text{ (in eccesso)} = (25.95 \text{ mol} \cdot 60.06 \text{ g/mol}) - 1126.13 \text{ g} = 432.43 \text{ g} \quad n_{(\text{NH}_2)_2\text{CO}} \text{ (in eccesso)} = \frac{432.43 \text{ g}}{60.06 \text{ g/mol}} = 7.2 \text{ moli}$$

$$1 \text{ mol } (\text{NH}_2)_2\text{CO} : 1 \text{ mol CO}_2 = 7.2 \text{ mol} : ? \rightarrow n_{\text{CO}_2} \text{ (in eccesso)} = 7.2 \text{ mol} \quad m(\text{g})_{\text{CO}_2} = 7.2 \text{ mol} \cdot 44.01 = 316.89 \text{ g}$$

$$\text{Resa percentuale: } \text{RP} = \frac{\text{resa effettiva}}{\text{resa teorica}} \cdot 100\%$$

Es.: $\text{TiCl}_4 \text{ (g)} + 2\text{Mg} \text{ (l)} \rightarrow \text{Ti} \text{ (s)} + 2\text{MgCl}_2 \text{ (l)}$ vengono fatti reagire $3.54 \cdot 10^7 \text{ g}$ TiCl_4 con $1.13 \cdot 10^7 \text{ g}$ di Mg
Calcola la resa teorica del Ti in grammi? Calcola la resa % se si ottenessero realmente $7.91 \cdot 10^6 \text{ g}$ di Ti?

$$n_{\text{TiCl}_4} = \frac{3.54 \cdot 10^7 \text{ g}}{189.68 \text{ g/mol}} = 1.87 \cdot 10^5 \text{ moli di TiCl}_4 \quad 1 \text{ mol TiCl}_4 : 1 \text{ mol Ti} = 1.87 \cdot 10^5 : ? \rightarrow \text{ci sono } 1.87 \cdot 10^5 \text{ mol di Ti}$$

$$n_{\text{Mg}} = \frac{1.13 \cdot 10^7 \text{ g}}{24.31 \text{ g/mol}} = 4.65 \cdot 10^5 \text{ moli di Mg} \quad 2 \text{ mol Mg} : 1 \text{ mol Ti} = 4.65 \cdot 10^5 : ? \rightarrow \text{ci sono } 2.32 \cdot 10^5 \text{ mol di Ti}$$

$$\text{TiCl}_4 \text{ è il reagente limitante. Resa teorica} = (1.87 \cdot 10^5) \cdot 47.88 = 8.95 \cdot 10^6 \text{ g di Ti} \quad \text{Resa effettiva} = \frac{7.91 \cdot 10^6}{8.95 \cdot 10^6} \cdot 100 = 88.38\%$$

SOLUZIONI

Processo di dissoluzione: il processo di dispersione delle particelle di soluto tra le molecole del solvente prende il nome di *dissoluzione* (o *solvatazione*). Un caso di solvatazione è l'*idratazione* cioè quando il solvente è l'acqua.

Solubilità: max quantità di soluto che si può sciogliere in una data quantità di solvente

COMPOSTI SOLUBILI

Composti contenenti ioni di metalli alcalini (Li^+ , Na^+ , K^+ , Rb^+ , Cs^+) e NH_4^+

Nitrati (NO_3^-), bicarbonati (HCO_3^-) e clorati (ClO_3^-)

Alogenuri (Cl^- , Br^- , I^-)

Solfati (SO_4^{2-})

ECCEZIONI

Alogenuri di Ag^+ , Hg_2^{2+} e Pb^{2+}

Solfati di Ag^+ , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , Hg_2^{2+} e Pb^{2+}

COMPOSTI INSOLUBILI

Carbonati (CO_3^{2-}), fosfati (PO_4^{3-}), cromati (CrO_4^{2-}), solfuri (S^{2-})

Idrossidi (OH^-)

ECCEZIONI

Composti che contengono ioni di metalli alcalini e NH_4^+

Composti che contengono ioni di metalli alcalini e Ba^{2+}

Equazioni molecolari, equazioni ioniche ed equazioni ioniche nette:

1. Scrivere, per la reazione in questione, un'equazione molecolare bilanciata. Fare riferimento alla tabella sovrastante per decidere quale dei prodotti è insolubile e che quindi apparirà come precipitato.
2. Scrivere l'equazione ionica per la reazione. Il composto che non compare come precipitato dovrebbe essere presente come ioni liberi.
3. Identificare ed eliminare gli ioni spettatori da entrambi i lati dell'equazione. Scrivere l'equazione ionica netta per la reazione.
4. Verificare che le cariche e il numero di atomi siano bilanciati nell'equazione ionica netta.

Es.: $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2 (\text{aq}) + 2\text{KI} (\text{aq}) \rightarrow \text{PbI}_2 (\text{s}) + 2\text{KNO}_3 (\text{aq})$ PbI_2 (ioduro di piombo) è insolubile, 2KNO_3 (nitrato di potassio) è solubile
 $\text{Pb}^{2+} (\text{aq}) + 2\text{NO}_3^- (\text{aq}) + 2\text{K}^+ (\text{aq}) + 2\text{I}^- (\text{aq}) \rightarrow \text{PbI}_2 (\text{s}) + 2\text{K}^+ (\text{aq}) + 2\text{NO}_3^- (\text{aq})$ equazione ionica: mostra le specie disciolte
 $\text{Pb}^{2+} (\text{aq}) + 2\text{I}^- (\text{aq}) \rightarrow \text{PbI}_2 (\text{s})$ equazione ionica netta: mostra solo le specie che prendono parte alla reazione

Es.: $\text{K}_3\text{PO}_4 (\text{aq}) + \text{Ca}(\text{NO}_3)_2 (\text{aq}) \rightarrow ?$
 $\text{K}_3\text{PO}_4 (\text{aq}) + \text{Ca}(\text{NO}_3)_2 (\text{aq}) \rightarrow \text{K}(\text{NO}_3) (\text{aq}) + \text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 (\text{s})$ equazione molecolare (non bilanciata)
 $2\text{K}_3\text{PO}_4 (\text{aq}) + 3\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 (\text{aq}) \rightarrow 6\text{K}(\text{NO}_3) (\text{aq}) + \text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 (\text{s})$ equazione molecolare (bilanciata)
 $6\text{K}^+ (\text{aq}) + 2\text{PO}_4^{3-} (\text{aq}) + 3\text{Ca}^{2+} (\text{aq}) + 6\text{NO}_3^- (\text{aq}) \rightarrow 6\text{K}^+ (\text{aq}) + 6\text{NO}_3^- (\text{aq}) + \text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 (\text{s})$ equazione ionica
 $2\text{PO}_4^{3-} (\text{aq}) + 3\text{Ca}^{2+} (\text{aq}) \rightarrow \text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 (\text{s})$ equazione ionica netta

Elettrolita: sostanza che sciolta in acqua da luogo ad una soluzione che può condurre elettricità

Elettrolita forte: più forte è un elettrolita, più verrà dissociato in acqua Es.: $\text{NaCl} (\text{s}) \xrightarrow{\text{H}_2\text{O}} \text{Na}^+ (\text{aq}) + \text{Cl}^- (\text{aq})$

Elettrolita debole: più debole è un elettrolita, meno verrà dissociato in acqua Es.: $\text{CH}_3\text{COOH} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{COOH}^- (\text{aq}) + \text{H}^+ (\text{aq})$

ELETTROLITA FORTE	ELETTROLITA DEBOLE	NON ELETTROLITA
HCl	CH_3COOH	$(\text{NH}_2)_2\text{CO}$ (urea)
HNO_3	HF	CH_3OH (metanolo)
HClO_4	HNO_2	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ (etanolo)
H_2SO_4 (due ioni H^+ ionizzabili)	NH_3	$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ (glucosio)
NaOH	H_2O (acqua pura elettr. debolissimo)	$\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$ (saccarosio)

Neutralizzazione acido-base:

La prima cosa da fare è identificare gli acidi e le basi forti e deboli: HBr acido forte e H_2SO_4 acido forte alla prima ionizzazione e debole alla seconda (quindi non si ionizzerà completamente in acqua); $\text{Ba}(\text{OH})_2$ e KOH sono basi forti.

Es.: acido bromidrico (aq) + idrossido di bario (aq) $\rightarrow ?$ scrivere l'equazione molecolare, ionica e ionica netta:
 $\text{HBr} (\text{aq}) + \text{Ba}(\text{OH})_2 (\text{aq}) \rightarrow \text{BaBr}_2 (\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} (\text{l})$ equazione molecolare (non bilanciata)
 $2\text{HBr} (\text{aq}) + \text{Ba}(\text{OH})_2 (\text{aq}) \rightarrow \text{BaBr}_2 (\text{aq}) + 2\text{H}_2\text{O} (\text{l})$ equazione molecolare (bilanciata)
 $2\text{H}^+ (\text{aq}) + 2\text{Br}^- (\text{aq}) + \text{Ba}^{2+} (\text{aq}) + 2\text{OH}^- (\text{aq}) \rightarrow \text{Ba}^{2+} (\text{aq}) + 2\text{Br}^- (\text{aq}) + 2\text{H}_2\text{O} (\text{l})$ equazione ionica
 $2\text{H}^+ (\text{aq}) + 2\text{OH}^- (\text{aq}) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} (\text{l})$ \rightarrow $\text{H}^+ (\text{aq}) + \text{OH}^- (\text{aq}) \rightarrow \text{H}_2\text{O} (\text{l})$ equazione ionica netta

Es.: acido solforico (aq) + idrossido di potassio (aq) $\rightarrow ?$ scrivere l'equazione molecolare, ionica e ionica netta:
 $\text{H}_2\text{SO}_4 (\text{aq}) + \text{KOH} (\text{aq}) \rightarrow \text{K}_2\text{SO}_4 (\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} (\text{l})$ equazione molecolare (non bilanciata)
 $\text{H}_2\text{SO}_4 (\text{aq}) + 2\text{KOH} (\text{aq}) \rightarrow \text{K}_2\text{SO}_4 (\text{aq}) + 2\text{H}_2\text{O} (\text{l})$ equazione molecolare (bilanciata)
 $\text{H}^+ (\text{aq}) + \text{HSO}_4^- (\text{aq}) + 2\text{K}^+ (\text{aq}) + 2\text{OH}^- (\text{aq}) \rightarrow 2\text{K}^+ (\text{aq}) + \text{SO}_4^{2-} (\text{aq}) + 2\text{H}_2\text{O} (\text{l})$ equazione ionica
 $\text{H}^+ (\text{aq}) + \text{HSO}_4^- (\text{aq}) + 2\text{OH}^- (\text{aq}) \rightarrow \text{SO}_4^{2-} (\text{aq}) + 2\text{H}_2\text{O} (\text{l})$ equazione ionica netta

Reazioni di ossido-riduzione (redox)

Ossidazione: una specie chimica si ossida quando cede elettroni e aumenta quindi il suo N.O.

Riduzione: una specie chimica si riduce quando acquista elettroni e diminuisce quindi il suo N.O.

Ossidazione:

$\text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + e^-$ il sodio ha perso un e^- e il suo N.O. è passato da 0 a +1 \Rightarrow si è ossidato. Na si ossida e riduce Cl \rightarrow è il riducente

Riduzione:

$\text{Cl} + e^- \rightarrow \text{Cl}^-$ il cloro ha acquistato un e^- e il suo N.O. è passato da 0 a -1 \Rightarrow si è ridotto. Cl si riduce e ossida Na \rightarrow è l'ossidante

Regole per bilanciare un'eq redox (ossidazione):

1. Calcolare i N.O. di tutti gli elementi che compaiono nell'eq chimica
2. Identificare la specie che si ossida (aumenta il N.O.) e la specie che si riduce (diminuisce il N.O.)
3. Scrivere le due semireazioni
4. Bilanciare le cariche elettriche moltiplicando ogni semireazione per un coefficiente stechiometrico
5. Trascrivere i coefficienti nell'eq di reazione e verificare che sia completamente bilanciata
6. Se necessario completare il bilanciamento delle masse

Es.: Bilanciare l'equazione redox

- $\text{CuO} + \text{NH}_3 \rightarrow \text{Cu} + \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$
- Cu si riduce perché il suo N.O. diminuisce passando da +2 a 0
- N si ossida perché il suo N.O. aumenta passando da -3 a 0
- Le due semireazioni sono: $\text{Cu} + 2e^- \rightarrow \text{Cu}$ riduzione e $\text{N} - 3e^- \rightarrow \text{N}$ ossidazione
- $3*(\text{Cu} + 2e^- \rightarrow \text{Cu})$ e $2*(\text{N} - 3e^- \rightarrow \text{N})$
- $3\text{CuO} + 2\text{NH}_3 \rightarrow 3\text{Cu} + \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$
- $3\text{CuO} + 2\text{NH}_3 \rightarrow 3\text{Cu} + \text{N}_2 + 3\text{H}_2\text{O}$

Alcune reazioni di ossido-riduzione più comuni

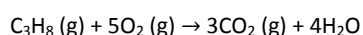
Reazioni di combinazione: reazione in cui due o più sostanze si combinano per formare un solo prodotto



Reazioni di decomposizione: è la scissione di un composto in uno o più componenti



Reazioni di combustione: reazione in cui una sostanza reagisce con l'ossigeno



Reazioni di spostamento: uno ione (o atomo) di un composto viene rimpiazzato da uno ione (o atomo) di un altro elemento

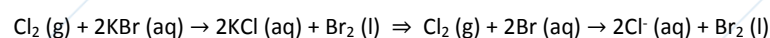
- spostamento di idrogeno: tutti i metalli alcalini e qualche alcalino-terroso (Ca, Sr e Ba) sono in grado di spostare l'idrogeno dall'acqua fredda. $2\text{Na}(\text{s}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow 2\text{NaOH}(\text{aq}) + \text{H}_2(\text{g})$

Certi metalli invece reagiscono con gli acidi. $\text{Zn}(\text{s}) + 2\text{HCl}(\text{aq}) \rightarrow \text{ZnCl}_2(\text{aq}) + \text{H}_2(\text{g})$

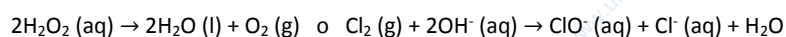
- spostamento del metallo: un metallo in un composto può essere spostato da un altro metallo che si trovi non combinato con altre specie. $\text{Zn}(\text{s}) + \text{CuSO}_4(\text{aq}) \rightarrow \text{ZnSO}_4(\text{aq}) + \text{Cu}(\text{s})$

I metalli che possono spostare altri metalli sono legati dalla tabella \rightarrow

- spostamento di un alogeno: questa serie di attività riassume il comportamento degli alogeni nelle reazioni di spostamento degli stessi. $\text{F}_2 > \text{Cl}_2 > \text{Br}_2 > \text{I}_2$



Reazioni di disproporzione: un elemento in uno stato di ossidazione viene contemporaneamente ossidato e ridotto. Un reagente in una reazione di disproporzione contiene *sempre* un elemento che può avere almeno tre stati di ossidazione.



↑ potere riducente	Li	possono spostare H ₂ dall'acqua
	K	
	Ba	
	Ca	
	Na	possono spostare H ₂ dal vapore acqueo
	Mg	
	Al	
	Mn	
	Zn	possono spostare H ₂ dagli acidi
	Cr	
	Fe	
	Cd	
	Co	non possono spostare H ₂ da qualsiasi fonte
	Ni	
	Sn	
	Pb	
H ₂	non possono spostare H ₂ da qualsiasi fonte	
Cu		
Hg		
Ag		
Au		

Bilanciamento reazioni redox

Bilanciare la reazione di ossidazione di Fe^{2+} a Fe^{3+} ad opera di $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ in soluzione acida.

1. Scrivere l'equazione non bilanciata della reazione nella forma ionica. $\text{Fe}^{2+} + \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} \rightarrow \text{Fe}^{3+} + \text{Cr}^{3+}$
2. Separare l'equazione in due semireazioni. Ossidazione: $\text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{Fe}^{3+}$ Riduzione: $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} \rightarrow \text{Cr}^{3+}$
3. Bilanciare gli atomi diversi da O e H nelle semireazioni. Il ferro è già bilanciato quindi guardiamo il cromo $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} \rightarrow 2\text{Cr}^{3+}$
4. Per le reazioni in acido, aggiungere H_2O per bilanciare gli atomi di O e H^+ per bilanciare gli atomi di H.
Riduzione: $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} \rightarrow 2\text{Cr}^{3+} + 7\text{H}_2\text{O}$ ci sono 7 atomi di ossigeno quindi aggiungo 7 molecole d'acqua
Riduzione: $14\text{H}^+ + \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} \rightarrow 2\text{Cr}^{3+} + 7\text{H}_2\text{O}$ ci sono 14 atomi di idrogeno quindi aggiungo 14 atomi di H^+
5. Aggiungere elettroni su ambo i lati di ognuna delle semireazioni per bilanciare le cariche delle semireazioni.
 $\text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{Fe}^{3+} + 1\text{e}^-$ visto che ci sono 2 cariche positive a sx e 3 cariche positive a dx, aggiungo 1 e^- a dx
 $6\text{e}^- + 14\text{H}^+ + \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} \rightarrow 2\text{Cr}^{3+} + 7\text{H}_2\text{O}$ visto che ci sono $14 - 2 = 12$ cariche positive a sx e $3 \cdot 2 = 6$ cariche positive a dx, aggiungo 6 e^- a sx
6. Se necessario, uguagliare il numero di elettroni nelle due semireazioni moltiplicandole per un appropriato coefficiente.
Ossidazione: $6\text{Fe}^{2+} \rightarrow 6\text{Fe}^{3+} + 6\text{e}^-$ questo perchè il numero di e^- perso dal ferro deve essere uguale al numero di e^- acquistati dal Cr
Riduzione: $6\text{e}^- + 14\text{H}^+ + \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} \rightarrow 2\text{Cr}^{3+} + 7\text{H}_2\text{O}$ perciò moltiplicherò il numero di e^- del ferro per 6
7. Unire le due semireazioni e bilanciare la reazione finale mediante verifica. Gli e^- presenti su ambo i lati devono elidersi.

Ossidazione:	$6\text{Fe}^{2+} \rightarrow 6\text{Fe}^{3+} + 6\text{e}^-$
Riduzione:	$6\text{e}^- + 14\text{H}^+ + \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} \rightarrow 2\text{Cr}^{3+} + 7\text{H}_2\text{O}$
$14\text{H}^+ + \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + 6\text{Fe}^{2+} \rightarrow 6\text{Fe}^{3+} + 2\text{Cr}^{3+} + 7\text{H}_2\text{O}$	
8. Verificare che il numero degli atomi e le cariche siano bilanciati. $(14 \cdot 1) - (2) + (6 \cdot 2) = 24 = (6 \cdot 3) + (2 \cdot 3)$
9. Per le reazioni in soluzioni basiche, si procede come per le reazioni in ambiente acido e dopo che la reazione è stata bilanciata si aggiunge OH^- a entrambi i lati dell'equazione per ogni H^+ che compare nell'equazione finale. Sostanzialmente così facendo impongo l'ambiente basico neutralizzando così gli H^+ .

Bilanciare la reazione di ossidazione $\text{Ag}(\text{s}) + \text{CN}^-(\text{aq}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{Ag}(\text{CN})_2^-(\text{aq})$ in soluzione basica. In questa reazione l'argento viene ossidato dall'ossigeno per formare argento più che poi a sua volta viene complessato dallo ione cianuro. Si bilancia come se fossero presenti ioni H^+ .

Per la semireazione di ossidazione:

$\text{CN}^-(\text{aq}) + \text{Ag}(\text{s}) \rightarrow \text{Ag}(\text{CN})_2^-(\text{aq})$ basti aggiungere 2 allo ione cianuro per bilanciare la reazione: $2\text{CN}^-(\text{aq}) + \text{Ag}(\text{s}) \rightarrow \text{Ag}(\text{CN})_2^-(\text{aq})$
Bilancio le cariche: $2\text{CN}^-(\text{aq}) + \text{Ag}(\text{s}) \rightarrow \text{Ag}(\text{CN})_2^-(\text{aq}) + \text{e}^-$ ci sono 2 cariche negative a sx e 1 a dx, quindi aggiungo un 1 e^- a dx

Per la semireazione di riduzione:

$\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{l})$ basti aggiungere 2 all'acqua e dopo 4 ioni idrogeno a sx per bilanciare la reazione: $\text{O}_2(\text{g}) + 4\text{H}^+(\text{aq}) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$
 $4\text{e}^- + \text{O}_2(\text{g}) + 4\text{H}^+(\text{aq}) \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$ ci sono 4 cariche positive a sx e 0 a destra, quindi aggiungo 4 e^- a sx

Uguaglio il numero di e^- nelle due semireazioni

$8\text{CN}^-(\text{aq}) + 4\text{Ag}(\text{s}) \rightarrow 4\text{Ag}(\text{CN})_2^-(\text{aq}) + 4\text{e}^-$ moltiplico per 4 le cariche nella semireazione di ossidazione

$8\text{CN}^-(\text{aq}) + 4\text{Ag}(\text{s}) + \text{O}_2(\text{g}) + 4\text{H}^+(\text{aq}) \rightarrow 4\text{Ag}(\text{CN})_2^-(\text{aq}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$ sommo le due semireazioni

$8\text{CN}^-(\text{aq}) + 4\text{Ag}(\text{s}) + \text{O}_2(\text{g}) + 4\text{H}^+(\text{aq}) + 4\text{OH}^-(\text{aq}) \rightarrow 4\text{Ag}(\text{CN})_2^-(\text{aq}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l}) + 4\text{OH}^-(\text{aq})$ siccome ho bilanciato in ambiente acido, devo ora neutralizzare gli ioni H^+ presenti, e per fare ciò sommo tanti OH^- quanti sono gli H^+ , sia a sx che dx

$8\text{CN}^-(\text{aq}) + 4\text{Ag}(\text{s}) + \text{O}_2(\text{g}) + 4\text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow 4\text{Ag}(\text{CN})_2^-(\text{aq}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l}) + 4\text{OH}^-(\text{aq})$ sommando $4\text{H}^+(\text{aq})$ e $4\text{OH}^-(\text{aq})$ ottengo $4\text{H}_2\text{O}(\text{aq})$

$8\text{CN}^-(\text{aq}) + 4\text{Ag}(\text{s}) + \text{O}_2(\text{g}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow 4\text{Ag}(\text{CN})_2^-(\text{aq}) + 4\text{OH}^-(\text{aq})$ che semplificati con i $2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$ che erano a dx diventa così

Stechiometria delle soluzioni

$$\text{Molarità: } M = \frac{n(\text{mol})}{V_{\text{soluz}}(\text{l})} \quad \text{Molalità: } m = \frac{n(\text{mol})}{\text{massa solv}(1\text{kg})} \quad \text{Normalità: } N = \frac{n_{\text{eq}}}{V_{\text{soluz}}(\text{l})} \quad N = M * \frac{n_{\text{eq}}}{n} \quad (N > M)$$

1. Preparare 1.5 Kg di soluzione al 40% (g/g) di HCl?

$$\frac{1500 \text{ g} * 40}{100} = 600 \text{ g. La soluzione dovrà contenere 600 g di HCl e 900 g di acqua}$$

2. Quanti grammi di NaOH sono presenti in 400 mL di una soluzione 1.5 M ?

$$\text{Moli in 400 mL: } \frac{400 * 1.5}{1000} = 0.6 \text{ moli. } 0.6 * PM_{\text{NaOH}} = 0.6 \text{ mol} * 40 \text{ g} = 24 \text{ g}$$

3. Calcolare la molarità di una soluzione di HNO₃ (PM=63) al 20% (g/g) la cui densità è 1.50 g/mL.

$$\text{Consideriamo 1L di soluzione: } 1000 \text{ mL} * 1.50 \text{ g/mL} = 1500 \text{ g} \quad \text{moli di HNO}_3: 1500 * \frac{20}{100} = 300 \text{ g} \rightarrow \frac{300}{63} = 4.762 \text{ mol}$$

La molarità è quindi 4.76.

$$\text{La formula generale è: } M = 1000 * \frac{\%}{PM} * d(\text{g/ml})$$

4. Calcolare la molalità di una soluzione al 20% in peso di NaOH (MM=40).

$$100 \text{ g di soluzione contengono 80g di solvente. Moli di NaOH per 20 g: } \frac{20}{40} = 0.5 \text{ mol} \quad \frac{0.5 * 1000}{80} \rightarrow \text{La molalità è quindi 6.25}$$

5. Calcolare la molarità di una soluzione di HCl 3 moli avente densità 1.05 g/mL.

La massa di HCl in 1000g di solvente è: $3 * 36.45 = 109.35 \text{ g}$. La massa totale (solvent + soluto) è: 1109.35 g, mentre

$$\text{il volume è: } \frac{1109.35}{1.05} = 1056.52 \text{ mL. La molarità è } \frac{3 * 1000}{1056.52} = 2.84 \text{ moli/L}$$

$$\text{In generale la formula è: } M = \frac{n * 100 * d(\text{g/ml})}{1000 + (n * PM)}$$

6. Un campione di acqua inquinata contiene 5 ppm di fenolo. Quanti grammi contiene 1 m³ d'acqua ?

$$5 \text{ ppm corrispondono a } 5 \text{ mg in } 1000 \text{ g; infatti: } \frac{0.005 * 10^6}{1000} = 5. \quad 1 \text{ m}^3 \text{ sono } 10^6 \text{ g che quindi contengono } 5000 \text{ mg} = 5 \text{ g di fenolo.}$$

Il numero di moli di soluto nella *soluzione concentrata* sarà sempre uguale al numero di moli di soluto nella *soluzione diluita*:

$$M_{\text{con}} * V_{\text{conc}} = M_{\text{dil}} * V_{\text{dil}} \quad \text{e analogamente} \quad N_{\text{con}} * V_{\text{conc}} = N_{\text{dil}} * V_{\text{dil}} \quad M_1V_1 + M_2V_2 = M_3V_3$$

1. 0.1L di H₂SO₄ al 10% (d=1.0611 g/mL) vengono diluiti con H₂O fino a 0.5L. Calcolare la molarità della soluz. dopo la diluizione.

$$\text{Calcoliamo la molarità dell'H}_2\text{SO}_4: M = \frac{10/98.08}{100\text{g}/1.0611\text{g mL}^{-1}/1000\text{mL} * \text{L}^{-1}} = 1.082 \quad 1.082 * 0.1 = 0.5 * M_2 \rightarrow M_2 = \frac{1.082 * 0.1}{0.5} = 0.2164$$

2. A 50 mL di HCl 0.3M vengono aggiunti 40 mL di HCl 2M e 60 mL di HCl 1.4M. Calcolare la molarità dopo il mescolamento.

$$0.05 * 0.3 + 0.04 * 2 + 0.06 * 1.4 = M_4 * (0.05 + 0.04 + 0.06) \rightarrow M_4 = 1.1933$$

3. Come prepareresti 60 mL di HNO₃ 0.2 M da una soluzione standard di HNO₃ 4 M ?

$$M_i = 4 \quad M_f = 0.2 \quad V_f = 0.06 \text{ L} \quad V_i = ? \quad V_i = \frac{0.2 * 0.06}{4} = 0.003 \text{ L} = 3 \text{ mL} \quad 3 \text{ mL di acido} + 57 \text{ mL di acqua} = 60 \text{ mL di soluzione}$$

Titolazioni: Quale volume di una soluzione 1.420 M di NaOH è necessario per titolare 25 mL di una soluzione 4.50 M di H₂SO₄ ?



$$n_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 4.5 * 0.025 = 0.1125 \text{ moli che corrispondono a } 0.225 \text{ moli di NaOH} \quad V = \frac{0.225}{1.42} = 0.158 \text{ L di soluzione di NaOH}$$

I GAS

1 atm = 760 mmHg = 101325 Pa

Legge di Boyle: $P = nRT * \frac{1}{V}$ nRT costante $P_1V_1 = P_2V_2$ relazione tra Pressione e Volume a T e n costanti

Legge di Charles: $V = \frac{nR}{P} * T$ $\frac{nR}{P}$ costante $\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$ relazione tra Volume e Temperatura a P e n costanti

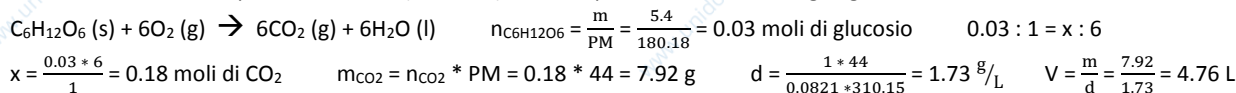
Legge di Gay-Lussac: $P = \frac{nR}{V} * T$ $\frac{nR}{V}$ costante $\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$ relazione tra Pressione e Temperatura a V e n costanti

Legge di Avogadro: $V = \frac{RT}{P} * n$ $\frac{RT}{P}$ costante $V = k_n n$ relazione tra Volume e moli a P e T costanti

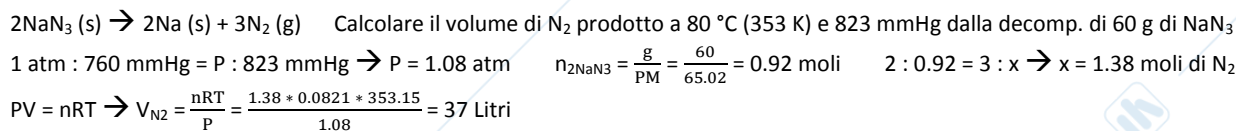
Legge dei gas ideali: **PV = nRT** $\frac{P_1 V_1}{T_1} = \frac{P_2 V_2}{T_2}$ $n = n^\circ$ di moli, $R = \text{cost. dei gas} = 0.0821$ in litri e atm / 8.1314 in m³ e pascal
c.n. = condizioni normali: V = 22.4 L, T = 0° = 273.15 K, P = 1 atm

Densità: $d = \frac{m}{V} = \frac{P * PM}{R * T}$

Es.: Qual è il volume di CO₂ prodotto a 37 °C (310.15 K) e 1 atm quando sono usati 5.6 g di glucosio nella reazione?



Es.: L'azoturo di sodio è usato negli airbag che all'impatto viene innescata la decomposizione di NaN₃ come segue:



Legge di Dalton: la pressione di una miscela di gas è data dalla somma delle pressioni parziali di ogni gas presente al suo interno

$P_{TOT} = P_A + P_B = \frac{n_A RT}{V} + \frac{n_B RT}{V}$ Frazione molare: $x_i = \frac{n^\circ \text{ moli di un componente}}{n^\circ \text{ di moli totali}}$ con $0 < x_i < 1$

Es.: Un campione di gas naturale contiene 8.24 mol di CH₄, 0.42 moli di C₂H₆ e 0.12 di C₃H₈. Se la P_{TOT} dei gas è 1.37 atm, qual è la press. parz di C₃H₈ ?

$x_{C_3H_8} = \frac{0.12}{8.24 + 0.42 + 0.12} = 0.014$ $P_{C_3H_8} = x_3 * P_{TOT} = 0.014 * 1.37 = 0.019$ atm

Velocità quadratica media: $v_{RMS} = \sqrt{\frac{3RT}{PM}}$ $1 J = 1 \frac{Kg * m^2}{s^2}$

Diffusione dei gas: E' il graduale mescolamento delle molecole di un gas con le molecole di un altro in virtù delle loro proprietà

cinetiche. $\frac{r_1}{r_2} = \sqrt{\frac{PM_2}{PM_1}}$

Effusione dei gas: E' il processo per cui un gas sotto pressione si sposta da un compartimento di un contenitore ad un altro

passando attraverso una piccola apertura. $\frac{r_1}{r_2} = \sqrt{\frac{PM_2}{PM_1}}$

Es.: Il nickel forma un composto gassoso dalla formula Ni(CO)_x. Qual è il valore di x dato che, sotto le stesse condizioni, il metano (CH₄) effonde 3.3 volte più velocemente del composto? (r₁ o r₂ sono le velocità di effusione dei gas)

$r_1 = 3.3 * r_2$ $PM_2 = \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^2 * PM_1 = \left(\frac{3.3 * r_2}{r_2}\right)^2 * 16 = 174.2$ $58.7 + x * (12+16) = 174.2 \rightarrow x = 4.1 \sim 4$

Gas non ideali: $P_{ideale} = P_{reale} + \frac{a * n^2}{V^2}$ $V_{ideale} = V_{osservato} - (n * b)$

Eq. van der waals: $(P + \frac{a * n^2}{V^2})(V - nb) = nRT$ a e b corrispondono alla seguente tabella \rightarrow

Gas	a (atm L ² mol ⁻²)	b (L mol ⁻¹)
He	0,034	0,0237
Ne	0,211	0,0171
Ar	1,345	0,0322
Kr	2,318	0,0398
H ₂	0,244	0,0266
N ₂	1,390	0,0391
O ₂	1,360	0,0318
CO ₂	3,600	0,0430
Cl ₂	6,490	0,0560
H ₂ O	5,464	0,0305
NH ₃	4,170	0,0371
CH ₄	2,253	0,0418

TERMOCHIMICA

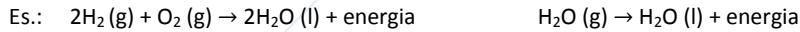
Energia: capacità di compiere lavoro.

Energia termica: energia associata al moto casuale degli atomi e delle molecole.

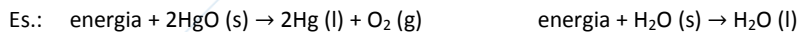
Calore: trasferimento di energia termica fra due corpi che si trovano a differenti temperature.

Temperatura: misura dell'energia termica.

Processo esotermico: processo che *libera* calore e *trasferisce* calore dal sistema all'ambiente.



Processo endotermico: processo nel quale il calore deve *essere fornito* al sistema dall'ambiente.



Funzioni di stato: proprietà che sono determinate dallo stato del sistema, indipendentemente da come questo viene raggiunto.

1° principio della termodinamica: l'energia può essere convertita da una forma all'altra ma non può essere né creata né distrutta.

$$\Delta E_{\text{sistema}} + \Delta E_{\text{ambiente}} = 0$$

$\Delta E_{\text{sistema}} = \Delta E = q + w$ ΔE è la variazione dell'energia interna di un sistema, q è lo scambio di calore fra il sistema e l'ambiente, w è il lavoro compiuto sul (o dal) sistema

Segni positivi o negativi per q e w : q positivo per un processo endotermico w positivo per un lavoro compiuto sul sistema
 q negativo per un processo esotermico w negativo per un lavoro compiuto sull'ambiente

Lavoro (non è una funzione di stato perché dipende dal tipo di processo)

$w = -P \cdot \Delta V$ espansione del gas in un cilindro che spinge il pistone verso l'alto con $P_{\text{atmosferica}}$ cost. che si oppone al movimento.

$$w = P \cdot V = \frac{F}{d^2} \cdot d^3 = F \cdot d \quad 1 \text{ L} \cdot \text{atm} = 101.3 \text{ J}$$

Es.: un certo gas si espande in volume da 2L a 6L a T° costante. Calcolare il w compiuto dal gas in espansione:

a) contro il vuoto; b) contro una pressione costante di 1.2 atm.

a) se la P_{esterna} è zero, allora non si compie lavoro nell'espansione: $w = -P \cdot \Delta V = -(0) \cdot (6-2) = 0 \text{ L} \cdot \text{atm}$

b) se la P_{esterna} è 1.2 atm il lavoro: $w = -P_{\text{esterna}} \cdot \Delta V = -(1.2) \cdot (6-2) = -4.8 \text{ L} \cdot \text{atm} \rightarrow 1 \text{ L} \cdot \text{atm} : 101.3 \text{ J} = x : -4.8 \text{ L} \cdot \text{atm} \rightarrow -486 \text{ J}$

Processo isocoro: cioè un sistema che non cambia volume e quindi non verrà compiuto nessun lavoro.

Calore (come il lavoro non è una funzione di stato perché dipende dal tipo di processo)

$$q = \Delta E - w$$

Es.: il lavoro compiuto quando un gas è compresso in un cilindro è 462 J. Durante questo processo c'è un trasferimento di calore di 128 J dal gas all'ambiente. Calcolare la variazione di energia per questo processo?

Siccome il lavoro è compiuto sul sistema il segno sarà positivo: "+" $\rightarrow w = +462 \text{ J}$

Siccome il calore viene rilasciato dal sistema all'ambiente (esotermico) il segno sarà negativo: "-" $\rightarrow q = -128 \text{ J}$

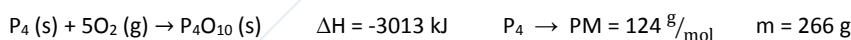
$$\Delta E = q + w = -128 + 462 = 334 \text{ J}$$

Entalpia: è il calore scambiato a pressione costante ed è una *funzione di stato* $\rightarrow H = E + PV \quad \Delta H = \Delta E + P\Delta V \rightarrow \Delta H = q_p$

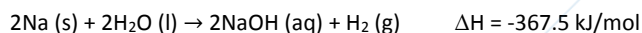
Entalpia di reazione: è il calore liberato o assorbito in una reazione a pressione costante $\Delta H = H(\text{prodotti}) - H(\text{reagenti})$

processo endotermico $\rightarrow \Delta H > 0$ processo esotermico $\rightarrow \Delta H < 0$

Es.: Quanto calore si sviluppa quando 266 g di fosforo bianco (P_4) bruciano all'aria?



$$n = \frac{266}{124} = 2.15 \text{ moli di } P_4 \quad q = n \cdot \Delta H = 2.15 \cdot (-3013) = -6470 \text{ kJ}$$

Confronto tra ΔH e ΔE (esempio di reazione fra sodio metallico e acqua)

Quando 2 moli di sodio reagiscono con un eccesso di acqua, vengono prodotti 367,5 kJ di calore. Da notare che uno dei prodotti è idrogeno gassoso che, per entrare nell'atmosfera, deve respingere l'aria e quindi compiere un lavoro.

$$\Delta E = \Delta H - P\Delta V \rightarrow \text{una mole di H}_2 \text{ (g) a 1 atm e 298 K (25}^\circ\text{C) occupa un volume di 24.5 L} \rightarrow -P\Delta V = -24.5 \text{ L} \cdot \text{atm} \rightarrow -2.48 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta E = (-367.5) + (-2.48) \approx -370 \text{ kJ/mol}$$

Questo calcolo mostra che ΔH e ΔE sono approssimativamente uguali. La ragione per cui $\Delta H < \Delta E$ è perché parte dell'energia interna è usata per il lavoro di espansione del gas, e quindi si sviluppa meno calore.

Un altro modo per calcolare l'energia interna di un gas ideale a T cost. è: $\Delta E = \Delta H - RT\Delta n$ ($\Delta n = n^\circ$ moli gas prodotti - n° moli gas reagenti)

Es.: Calcolare la variazione di energia interna (ΔE) quando 2 moli di CO sono convertite in 2 moli di CO₂ a 1 atm e 25°C (298.2 K)



$$\Delta V = V_{\text{prodotti}} - V_{\text{reagenti}} \rightarrow V_{\text{prodotti}} = n * \frac{RT}{P} = 2 * 0.0821 * 298.15 = 48.96 \text{ L} \quad V_{\text{reagenti}} = n * \frac{RT}{P} = 3 * 0.0821 * 298.15 = 73.43 \text{ L}$$

$$\Delta V = 48.96 - 73.43 = -24.47 \text{ L} \rightarrow -24.47 \text{ L} \cdot \text{atm} \rightarrow -24.47 * 101.3 = -2.48 \text{ kJ}$$

$$\Delta E = \Delta H - P\Delta V = (-566 \text{ kJ/mol}) - (1 * -2.48 \text{ kJ/mol}) = -563.5 \text{ kJ/mol}$$

Calorimetria

Calore specifico: è la quantità di calore (q) richiesto per aumentare la T di 1 grammo della sostanza di un grado Celsius. $s = \frac{C}{m}$

Capacità termica: è data dalla quantità di calore (q) richiesta per aumentare la T di una data quantità (m) della sostanza di 1 grado Celsius. $C = m * s$

Calore (q) assorbito o liberato: $q = m * s * \Delta t \rightarrow q = C * \Delta T$ con $\Delta T = T_{\text{finale}} - T_{\text{iniziale}}$

Calorimetria a volume costante

Poiché non c'è calore che entra o esce dal calorimetro durante il processo, la variazione di calore nel sistema è zero: $q_{\text{sistema}} = q_{\text{calorimetro}} + q_{\text{reazione}} = 0 \quad q_{\text{calorimetro}} = C_{\text{calorimetro}} * \Delta T$

Es.: una quantità di 1.435 g di naftalene (C₁₀H₈) è stata bruciata in un calorimetro a bomba a volume costante. La T è salita da 20.28 °C a 25.95 °C. Sapendo che la capacità termica della bomba più quella dell'acqua era di 10.17 kJ/°C, calcolare il q molare di combustione del C₁₀H₈

$$q_{\text{calorimetro}} = C_{\text{cal}} * \Delta T = (10.17 \text{ kJ/}^\circ\text{C}) * (25.95 \text{ }^\circ\text{C} - 20.28 \text{ }^\circ\text{C}) = 57.66 \text{ kJ}$$

$$q_{\text{calorimetro}} + q_{\text{reazione}} = 0 \rightarrow q_{\text{reazione}} = -q_{\text{calorimetro}} = -57.66 \text{ kJ} \quad \text{questo è il q rilasciato dalla combustione di 1.435 g di C}_{10}\text{H}_8$$

$$q_{\text{molare di combustione}} = q_{\text{reazione}} * \frac{PM}{m} = -57.66 * \frac{128.2}{1.435} = -5151 \text{ kJ/mol}$$

Calorimetria a pressione costante

Poiché la pressione è costante, la variazione di calore nel processo è uguale alla variazione di entalpia. $q_{\text{reazione}} = \Delta H$

Es.: un pezzo di piombo con una m = 26.47 g a 89.98 °C, è stato posto in un calorimetro a pressione costante di capacità termica trascurabile contenente 100 mL di H₂O. La T dell'acqua è aumentata da 22.5 °C a 23.17 °C. Qual'è il calore specifico (s) del pezzo di Pb?

$$q_{\text{Pb}} + q_{\text{H}_2\text{O}} = 0 \rightarrow q_{\text{Pb}} = -q_{\text{H}_2\text{O}} \quad q_{\text{H}_2\text{O}} = m * s * \Delta T = (100 \text{ g}) * (4.186 \text{ J/g} \cdot \text{ }^\circ\text{C}) * (23.17 \text{ }^\circ\text{C} - 22.5 \text{ }^\circ\text{C}) = 280.46 \text{ J}$$

$$q_{\text{Pb}} = -280.46 \text{ J} \quad q_{\text{Pb}} = m * s * \Delta T \rightarrow -280.46 \text{ J} = (26.47 \text{ g}) * (s) * (23.17 \text{ }^\circ\text{C} - 89.98 \text{ }^\circ\text{C}) \rightarrow s = 0.158 \text{ J/g} \cdot \text{ }^\circ\text{C}$$

Es.: 100 mL di HCl 0.5 M si mischiano con 100 mL di NaOH 0.5 M in un calorimetro a pressione costante di capacità termica trascurabile. La T iniziale di HCl e di NaOH era la stessa a 22.5 °C, mentre quella finale della soluzione era 25.86 °C. Calcolare la variazione di calore per la reazione di neutralizzazione su base molare: $\text{NaOH (aq)} + \text{HCl (aq)} \rightarrow \text{NaCl (aq)} + \text{H}_2\text{O (l)}$

$$q_{\text{sist}} = q_{\text{soluz}} + q_{\text{reaz}} \rightarrow q_{\text{reaz}} = -q_{\text{soluz}} \quad \text{dove } q_{\text{soluz}} \text{ è il calore assorbito dalle soluzioni miscelate. } q_{\text{soluz}} = mc\Delta T = 2.81 \text{ kJ}$$

$$\text{dove le masse in grammi delle soluzioni sono pari a 100 g (densità 1 g/mL e 4.186 J/g} \cdot \text{ }^\circ\text{C)} \quad q_{\text{reaz}} = -q_{\text{soluz}} \rightarrow q_{\text{reaz}} = -2.81 \text{ kJ}$$

$$\text{num moli delle due soluz} = (0.5 \text{ M}) * (0.1 \text{ L}) = 0.05 \text{ moli di HCl e 0.05 moli di NaOH. } q_{\text{neutralizz}} = \frac{-2.81}{0.05} = -56.2 \text{ kJ/mol}$$

Substance	Specific Heat (J/g · °C)
Al	0.900
Au	0.129
C (graphite)	0.720
C (diamond)	0.502
Cu	0.385
Fe	0.444
Hg	0.139
H ₂ O	4.184
C ₂ H ₅ OH (ethanol)	2.46

Entalpia standard di formazione e di reazione

Entalpia standard di formazione (ΔH_f^0)

E' la variazione di calore che si verifica quando una mole di un composto è formato dai suoi elementi ad una pressione di 1 atm. L'entalpia standard di formazione di qualsiasi elemento nella sua forma più stabile è zero.

$$\Delta H_f^0(\text{O}_2) = 0$$

$$\Delta H_f^0(\text{C, grafite}) = 0$$

$$\Delta H_f^0(\text{O}_3) = 142 \text{ kJ/mol}$$

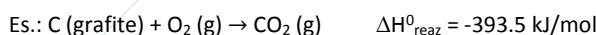
$$\Delta H_f^0(\text{C, diamante}) = 1.90 \text{ kJ/mol}$$

Entalpia standard di reazione (ΔH_{reaz}^0)

E' l'entalpia di una reazione ad 1 atm. È data dalla somma delle entalpie di formaz. dei prod. meno quelle dei reag.

$$a\text{A} + b\text{B} \rightarrow c\text{C} + d\text{D} \quad \Delta H_{\text{reaz}}^0 = [c\Delta H_f^0(\text{C}) + d\Delta H_f^0(\text{D})] - [a\Delta H_f^0(\text{A}) + b\Delta H_f^0(\text{B})]$$

Il metodo diretto (per misurare ΔH_{reaz}^0)

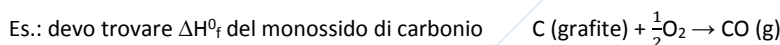


$$\Delta H_{\text{reaz}}^0 = [\Delta H_f^0(\text{CO}_2, \text{g})] - [\Delta H_f^0(\text{C, grafite}) + \Delta H_f^0(\text{O}_2, \text{g})] = [-393.5] - [0 + 0] = -393.5 \text{ kJ/mol}$$

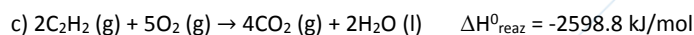
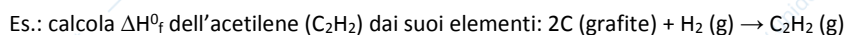
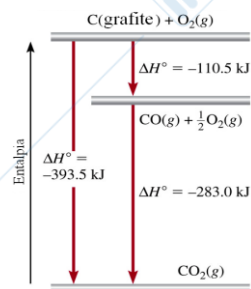
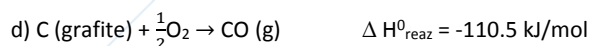
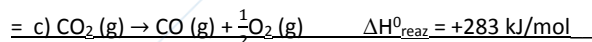
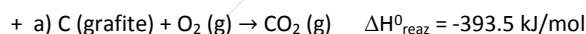
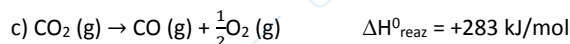
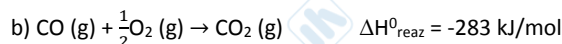
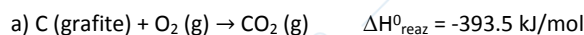
Siccome sia la grafite che O_2 sono forme allotropiche stabili degli elementi ne segue che le loro ΔH_f^0 sono uguali a zero.

Il metodo indiretto (per misurare ΔH_{reaz}^0)

Basato sulla legge di Hess: quando i reagenti sono convertiti in prodotti la variazione di entalpia è la stessa indipendentemente dalla serie di passaggi in cui avviene.



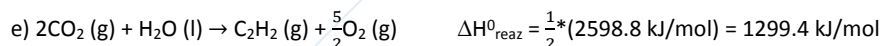
Siccome bruciando la grafite si produce anche il biossido di carbonio (CO_2) e così non si riesce a misurare le variazioni di entalpia in maniera diretta per CO, bisogna utilizzare una via indiretta basata sulla legge di Hess:



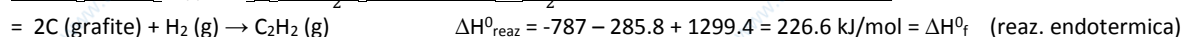
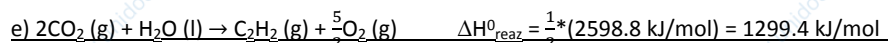
Guardando la sintesi di C_2H_2 abbiamo bisogno di 2 moli di grafite come reagente:



Poi abbiamo bisogno di 1 mole di H_2 sempre come reagente, e questa reazione è fornita dal punto b). Infine abbiamo bisogno di una mole di C_2H_2 come prodotto e la reazione c) ha 2 moli di C_2H_2 come reagente però; quindi è necessario fare la reazione inversa e dividerla per 2.



Sommando le equazioni d), b) ed e) ottengo:



Entalpia di soluzione (ΔH_{soluz})

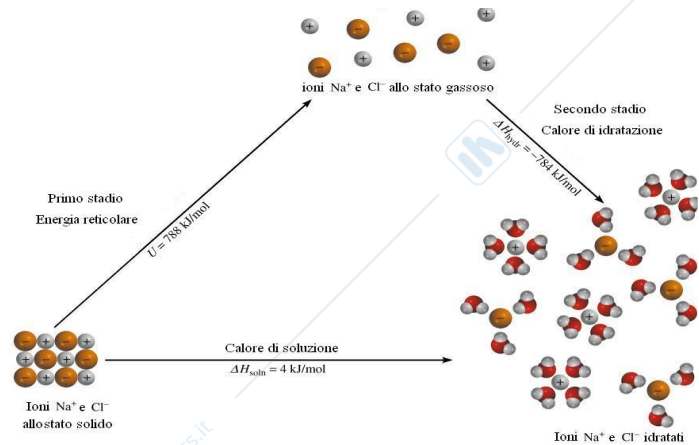
E' il calore generato o assorbito quando una certa quantità di soluto si discioglie in una certa quantità di solvente. (Es.: il nitrato d'ammonio NH_4NO_3 , quando si spacca la bustina si scioglie in acqua e assorbe calore raffredda la sacca).

$$\Delta H_{soluz} = H_{soluz} - H_{componenti}$$

Compound	ΔH_{soln} (kJ/mol)
LiCl	-37.1
CaCl ₂	-82.8
NaCl	4.0
KCl	17.2
NH ₄ Cl	15.2
NH ₄ NO ₃	26.2

$$\Delta H_{soluz} = \text{Stadio 1} + \text{Stadio 2} = 788 - 784 = 4 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_{hydr} = -\text{Stadio 1} + \Delta H_{soluz} = -788 + 4 = -784 \text{ kJ/mol}$$



Calore specifico molare: $C_p = s * PM = J/mol * K$

Es.: A 298 K l'entalpia standard di reazione $N_2(g) + 3H_2(g) \rightarrow 2NH_3(g)$ è -92.22 kJ/mol. La sintesi industriale viene fatta a 450°C. Qual è l'entalpia standard di reazione a tale temperatura?

$$\Delta H^0(T_2) = \Delta H^0(T_1) + \Delta C_p(T_2 - T_1)$$

$$C_{pN_2} = (1.04 * 14.01) * 2 = 29.12 \text{ J/Kmol} \quad C_{pH_2} = (14.30 * 1.01) * 2 = 28.82 \text{ J/Kmol} \quad C_{pNH_3} = 35.06 \text{ J/Kmol}$$

$$\Delta C_p = (2 \text{ mol}) * C_p(NH_3) - [(1 \text{ mol}) * C_p(N_2) + (3 \text{ mol}) * C_p(H_2)] = -45.46 \text{ J/K}$$

$$\Delta H^0(723 \text{ K}) = (-92220) + (-45.46) * (425 \text{ K}) = -111.54 \text{ kJ}$$

C_v (calore specifico molare a volume costante) e C_p (calore specifico molare a pressione costante) di un gas ideale:

$$\Delta E = C_v * \Delta T = \frac{3}{2} R \Delta T \rightarrow C_v = \frac{3}{2} R \quad \Delta H = \Delta E + P \Delta V = \frac{3}{2} R \Delta T + R \Delta T \rightarrow C_p = \frac{5}{2} R$$

Contributi alla capacità termica valutati attraverso il teorema di equipartizione

Molecola	Gradi di libertà				Valori di equipartizione (R)		Valori di c_p ($J \text{ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$)	
	f_{tot}	f_{trasl}	f_{rot}	f_{vib}	C_v	C_p	Calcolati	Misurati
Ar	3	3	0	0	3/2	5/2	20,79	20,79
H ₂	6	3	2	1	7/2	9/2	37,41	28,81
N ₂	6	3	2	1	7/2	9/2	37,41	29,12
O ₂	6	3	2	1	7/2	9/2	37,41	29,36
F ₂	6	3	2	1	7/2	9/2	37,41	31,30
Cl ₂	6	3	2	1	7/2	9/2	37,41	33,91
Br ₂	6	3	2	1	7/2	9/2	37,41	36,02
CO	6	3	2	1	7/2	9/2	37,41	29,12
CO ₂	9	3	2	4	13/2	15/2	62,37	37,13
H ₂ O	9	3	3	3	12/2	14/2	58,18	33,54
CH ₄	15	3	3	9	24/2	26/2	108,08	35,31
C ₂ H ₄	18	3	3	12	30/2	32/2	133,02	43,56
Si	3	0	0	3	6/2	-6/2	24,94	20,0
Al	3	0	0	3	6/2	-6/2	24,94	24,35

Espansione adiabatica di un gas ideale (q=0):

$$\ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) = \ln\left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{\frac{R}{C_{v,m}}}$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{\frac{R}{C_{v,m}}}$$

Se $V_2 > V_1$ allora $T_1 > T_2$.

Es.: Calcolare la temperatura finale per un gas ideale che si espande in modo adiabatico fino a triplicare il suo volume sapendo che la temperatura iniziale è 85°C.

$$\frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{V_1}{V_2}\right)^{\frac{R}{C_{v,m}}} \quad T_2 = (273.15 + 85) * \left(\frac{V_1}{3V_1}\right)^{\frac{R}{C_{v,m}}} = 358.15 * \left(\frac{1}{3}\right)^{\frac{2}{3}} = 172.2 \text{ K}$$

STRUTTURA ELETTRONICA DEGLI ATOMI

Lunghezza d'onda (λ): E' la distanza tra due punti identici su due onde successive

Ampiezza: E' la distanza verticale esistente tra la linea mediana dell'onda ed il suo punto di picco

Frequenza (f): E' il numero di onde che passano attraverso un particolare punto in 1 secondo

Radiazione Elettromagnetica: consiste nell'emissione e nella trasmissione di energia sotto forma di onde elettromagnetiche

Velocità della luce (c): 3.00×10^8 m/s (nel vuoto). Per tutte le radiazioni elettromagnetiche: $c = \lambda * f = m/s$

Problema del corpo nero

$$E = h * f \quad \text{Costante di Planck (h) = } 6.63 \times 10^{-34} \text{ J*s}$$

La radiazione del corpo nero si riferisce ad un oggetto che assorbe tutta la radiazione incidente e riemette energia (come radiazione) in un modo caratteristico solo di quel sistema, che non dipende dal tipo di radiazione che è stata assorbita. La radiazione emessa può essere considerata come emessa da onde stazionarie che si trovano all'interno della cavità emettitrice, generate dagli atomi della superficie e che l'energia di tali onde potesse assumere solo dei particolari valori multipli di hf. hf = quanto di energia

$$\Delta E = h * f \quad \text{quando } n = 1$$

Effetto fotoelettrico

Si verifica quando determinati metalli vengono esposti a una luce di frequenza maggiore o uguale a un valore minimo detto frequenza di soglia. Tale esposizione comporta l'emissione di elettroni dalla superficie del metallo.

$$hf = KE + BE \quad \text{con KE energia cinetica e BE lavoro}$$

Teoria di Bohr dell'atomo d'idrogeno

L'energia radiante assorbita da un atomo farà muovere l'elettrone da uno stato a più bassa energia (caratterizzato da un piccolo valore di n) a uno stato a più alta energia (caratterizzato da un grande valore di n). Al contrario, l'energia radiante (sotto forma di un fotone) verrà emessa quando l'elettrone passa da uno stato ad alta energia a uno a bassa energia.

$$E_n = -R_H * \frac{1}{n^2} \quad n \text{ (numero quantico principale) = } 1,2,3,\dots \quad R_H \text{ (costante di Rydberg) = } 2.18 * 10^{-18} \text{ J}$$

La quantità di energia necessaria per spostare un elettrone in un atomo di Bohr dipende dalla differenza di energia tra il livello iniziale e quello finale.

$$\Delta E = hf = R_H * \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad E_{\text{fotone}} = \Delta E = E_f - E_i$$

Quando viene emesso un fotone si ha $n_i > n_f$; di conseguenza, il termine in parentesi è negativo e ΔE è negativo (l'energia viene ceduta all'ambiente). Quando l'energia viene assorbita si ha $n_i < n_f$; il termine in parentesi è positivo, così ΔE è positivo.

Es.: qual è la lunghezza d'onda di un fotone (nm) emesso durante una transizione dallo stato $n_i = 5$ allo stato $n_f = 2$ nell'atomo d'idrogeno?

$$\Delta E = hf = R_H * \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \Rightarrow \Delta E = hf = -4.58 * 10^{-19} \quad \text{il segno negativo indica che questa energia è associata a un processo di emissione. Per calcolare la } \lambda \text{ ometteremo il segno "-" per } \Delta E.$$

$$f = \frac{-4.58 * 10^{-19}}{6.63 * 10^{-34}} = 6.91 * 10^{14} \quad c = \lambda * f \Rightarrow \lambda = \frac{3 * 10^8}{6.91 * 10^{14}} = 434 \text{ nm}$$

La natura dualistica dell'elettrone (ipotesi di De Broglie)

Perchè un elettrone nell'atomo di Bohr è costretto a orbitare attorno al nucleo a certe distanze prefissate?

Un elettrone legato a un nucleo si comporta come un'onda stazionaria. Le onde stazionarie possono essere generate pizzicando una corda di chitarra. Queste onde vengono definite tali perchè non viaggiano lungo la corda. Maggiore sarà la frequenza di vibrazione, più corta sarà la λ dell'onda stazionaria e maggiore sarà il n° dei nodi. e' è sia particella che onda

$$\text{Relaz. tra circonferenza e l'unghezza d'onda: } 2\pi r = n\lambda \quad \text{Relaz. tra l'unghezza d'onda e la massa e velocità dell'e' : } \lambda = \frac{h}{mv}$$

$$h = \text{costante di Planck in j*s} \quad m = \text{massa in kg} \quad v = \text{velocità in m/s}$$

Principio di indeterminazione di Heisenberg

È impossibile conoscere simultaneamente e con esattezza la quantità di moto (il prodotto tra massa e velocità) e la posizione di una particella. $(\Delta x) \cdot (\Delta mv) \geq \frac{h}{4\pi}$

Es.: Sebbene non sia possibile sapere esattamente il raggio di un atomo si supponga che il raggio dell'atomo di idrogeno sia circa 0.05 nm. Si conosce la posizione di un elettrone con l'accuratezza dell'1% del raggio dell'idrogeno. Calcolare l'incertezza sulla velocità applicando il principio di indeterminazione?

$$\Delta x \cdot (\Delta mv) = \Delta x \cdot m \cdot \Delta v = \frac{h}{4\pi} \quad \Delta x = \text{accuratezza dell'1\%} = \frac{0.05 \cdot 10^{-9} \text{ m}}{100} = 0.5 \cdot 10^{-12} \text{ m} \quad \Delta v = \frac{h}{4\pi \cdot m \cdot \Delta x} = 1 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

Es.: Calcolare ora l'incertezza sulla velocità di una palla con massa di 0.2 Kg e raggio di 0.05 m. Si conosce la posizione con un'incertezza pari all'1% del valore del raggio.

$$\Delta v = \frac{h}{4\pi \cdot m \cdot \Delta x} = \frac{6.63 \cdot 10^{-34}}{(4\pi) \cdot (0.2) \cdot (5 \cdot 10^{-13})} = 5 \cdot 10^{-31} \text{ m/s}$$

Equazione d'onda di Schrodinger

L'equazione di Schrodinger definisce i possibili stati energetici che l'elettrone può assumere in un atomo di idrogeno e identifica le corrispondenti funzioni d'onda (Ψ).

La Funzione d'onda (Ψ) descrive: 1. l'energia dell'e⁻ con una data Ψ
2. la probabilità di trovare l'e⁻ in un determinato volume di spazio

La probabilità di trovare l'elettrone in una certa regione dello spazio è proporzionale al quadrato della funzione d'onda (Ψ^2). L'equazione di Schrodinger può essere risolta esattamente solo per l'atomo di idrogeno. Per i sistemi multi elettronici si hanno solo soluzioni approssimate.

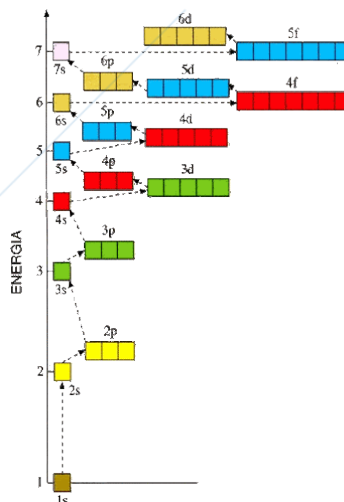
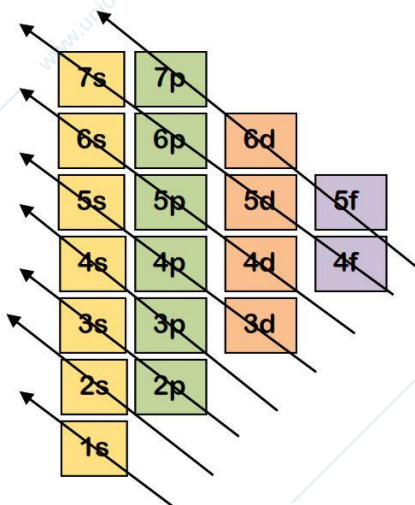
Una particella non è più descritta da posizione e velocità, ma da una densità di probabilità.

L'orbitale atomico lo si può pensare come la funzione d'onda di un elettrone in un atomo. Quando affermiamo che un elettrone si trova in un certo orbitale, intendiamo che la distribuzione della densità elettronica è descritta dal quadrato della funzione d'onda associata a quell'orbitale.

Quattro numeri quantici per descrivere la distribuzione degli e⁻ nell'atomo di idrogeno e negli altri atomi: $\Psi = f(n, l, m_l, m_s)$

1. n = distanza dell'e⁻ dal nucleo ($n = 1, 2, 3, \dots$)
2. l = forma del "volume" di spazio occupato dall'e⁻ ($l = 1, 2, 3, \dots, n-1$) per $l=0 \rightarrow s$, $l=1 \rightarrow p$, $l=2 \rightarrow d$, $l=3 \rightarrow f$
3. m_l = orientamento degli orbitali nello spazio (se $l=1(p) \rightarrow m_l = -1, 0$ o 1 ; se $l=2(d) \rightarrow m_l = -2, -1, 0, 1$ o 2)
4. m_s = spin dell'e⁻ ($+1/2$; $-1/2$)

Livelli energetici:



Livello: elettroni con lo stesso valore di n

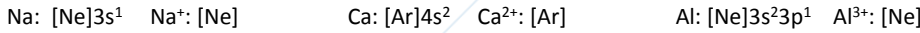
Sottolivello: elettroni con lo stesso valore di n e l

Orbitali: elettroni con lo stesso valore di n , l , e m_l

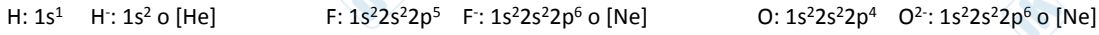
LA TAVOLA PERIODICA

Ioni derivati dagli elementi rappresentativi

Gli atomi perdono elettroni così il catione ha una configurazione elettronica esterna di gas nobile:

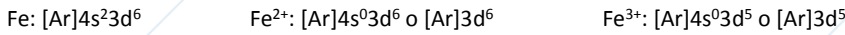


Gli atomi acquistano elettroni in modo che l'anione abbia una configurazione elettronica esterna di gas nobile:



Cationi derivati da metalli di transizione

Quando un catione è formato da un atomo di un metallo di transizione, gli elettroni sono sempre rimossi prima dagli orbitali ns e poi dagli orbitali (n - 1)d questo perchè l'orbitale 3d è più stabile del 4s.



Carica nucleare effettiva (Z_{eff})

È la "carica positiva" effettivamente sentita da un elettrone.

Z_{eff} = Z - σ 0 < σ < Z (σ = costante di schermo) Z_{eff} ≈ Z - numero degli elettroni interni

Regole di Slater

1. Gli elettroni alla destra di un e⁻ in un gruppo [nsnp] non contribuiscono a σ
2. Gli elettroni in uno stesso gruppo [nsnp] contribuiscono a σ per 0.35 (in [1s] contribuiscono per 0.30)
3. Per gli elettroni in un gruppo [nsnp], ciascun e⁻ in un gruppo n - 1 contribuisce per 0.85 (per 1.0 per un gruppo n-2)
4. Per gli elettroni nei gruppi [nd] o [nf] valgono le regole 1 e 2 e tutti gli e⁻ nei gruppi a sinistra contribuiscono per 1.0

Es.: [1s²][2s²2p⁶][3s²3p⁶][3d¹] σ = (18 x 1) = 18 → Z_{eff} = 19 - 18 = 1

Es.: [1s²][2s²2p⁶][3s²3p⁶][3d⁰][4s¹] σ = (8 x 0.85) + (10 x 1) = 16.8 → Z_{eff} = 19 - 16.8 = 2.2

Il raggio atomico

Normalmente consideriamo le dimensioni atomiche come il volume attorno al nucleo che contiene all'incirca il 90% della densità elettronica totale.

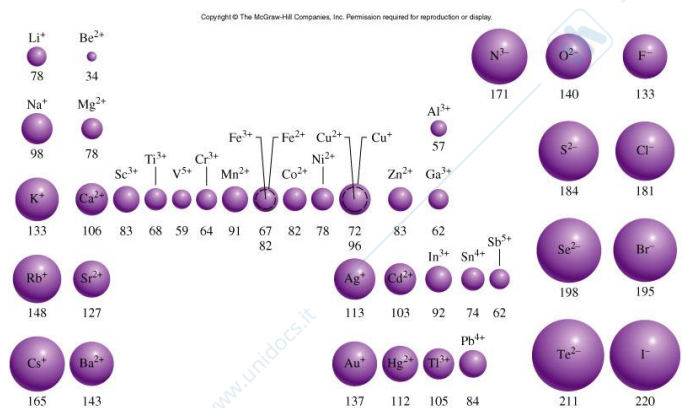
Il raggio atomico è la semidistanza tra i nuclei di due atomi adiacenti

Per esempio, l'elettrone esterno 2s del Litio è schermato dal nucleo (che ha tre protoni) dai due elettroni 1s. Assumiamo che l'effetto di schermo dei due elettroni 1s sia tale da cancellare due cariche positive del nucleo. Così, l'elettrone 2s risentirà soltanto dell'attrazione di un protone dal nucleo; la carica nucleare effettiva è +1.

Il raggio ionico è il raggio di un catione o di un anione.

Il catione è sempre più piccolo dell'atomo di provenienza.

L'anione è sempre più grande dell'atomo da cui deriva.



L'energia di ionizzazione (Ei)

È l'energia minima richiesta per rimuovere un e⁻ da un atomo gassoso nel suo stato fondamentale. Più alta sarà l'energia di ionizzazione, più difficile sarà rimuovere l'elettrone.



Quando un e⁻ è rimosso da un atomo, la repulsione tra gli elettroni restanti decresce. Dato che la carica nucleare rimane costante, sarà necessaria più energia per rimuovere un altro e⁻ da uno ione carico positivamente.

Le Ei dei metalli sono relativamente basse soprattutto se comparate a quelle dei non metalli.

All'aumentare del num. quantico n , aumenta la distanza media tra gli e⁻ di valenza e il nucleo. Significa che più distanti sono gli e⁻ di valenza dal nucleo più facile sarà rimuovere il 1° e⁻ man mano che scendiamo, da elemento a elemento, lungo il gruppo.

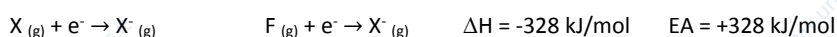
Ci sono 2 eccezioni:

1. Gli elementi del Gruppo 3A hanno energie di 1° ionizzazione più basse di quelle degli elementi del Gruppo 2A perchè hanno un singolo e⁻ nel sottolivello p più esterno (ns^2np^2), che è ben schermato dagli e⁻ interni e dagli e⁻ ns^2 . Quindi occorrerà meno energia per rimuovere dallo stesso livello energetico principale un singolo e⁻ p piuttosto che un e⁻ s appaiato.
2. Negli elementi del Gruppo 5A (ns^2np^3) gli e⁻ sono in tre orbitali separati. Nel Gruppo 6A (ns^2np^4) l'e⁻ addizionale deve appaiarsi con uno dei tre e⁻ p . La vicinanza di due elettroni nello stesso orbitale si traduce in una maggiore repulsione elettrostatica, che rende più facile ionizzare un atomo di un elemento del Gruppo 6A che un elemento del Gruppo 5A.

Z	Elemento	Prima	Seconda	Terza	Quarta	Quinta	Sesta
1	H	1312					
2	He	2373	5251				
3	Li	520	7300	11815			
4	Be	899	1757	14850	21005		
5	B	801	2430	3660	25000	32820	
6	C	1086	2350	4620	6220	38000	47261
7	N	1400	2860	4580	7500	9400	53000
8	O	1314	3390	5300	7470	11000	13000
9	F	1680	3370	6050	8400	11000	15200
10	Ne	2080	3950	6120	9370	12200	15000

Affinità elettronica

L'affinità elettronica è l'inverso della variazione di energia che avviene quando un elettrone è ceduto a un atomo, allo stato gassoso, per formare un anione. (energia che si libera quando un atomo neutro acquista un elettrone)



Più positivo sarà il valore dell'affinità elettronica, maggiore sarà la capacità di accettare un e⁻.

Quindi, un valore positivo ed elevato dell'affinità elettronica sta a significare che lo ione negativo è molto stabile (cioè che l'atomo ha una spiccata tendenza ad accettare un e⁻), così come un'elevata energia di ionizzazione per un atomo indica che l'e⁻ nell'atomo è molto stabile.

$O(g) + e^- \rightarrow O^-(g)$ è spontaneo invece $O^-(g) + e^- \rightarrow O^{2-}(g)$ non è spontaneo
Questo perchè il risultante aumento nella repulsione elettrone-elettrone supera la stabilità dell'otteto.

1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8A
H							He
73							< 0
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
60	≤ 0	27	122	0	141	328	< 0
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
53	≤ 0	44	134	72	200	349	< 0
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
48	2.4	29	118	77	195	325	< 0
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
47	4.7	29	121	101	190	295	< 0
Cs	Ba	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
45	14	30	110	110	?	?	< 0

Gli elementi del Gruppo 1A ($ns^1, n \geq 2$)

- Grande tendenza a perdere il loro unico e^- di valenza
- Reattività violenta nei confronti con H_2O
- Formano ossidi all'aria

Gli elementi del Gruppo 2A ($ns^2, n \geq 2$)

- Tendono a perdere i due e^- di valenza
- Reattività con H_2O e O_2 che aumenta all'aumentare del periodo (il Be non reagisce, Mn lentamente e gli altri 3 tanto)

Gli elementi del Gruppo 3A ($ns^2np^1, n \geq 2$)

- Il Boro è inerte all' O_2 e H_2O
- L'alluminio reagisce velocemente con O_2 formando l'ossido di alluminio (Al_2O_3)
- Altri elementi formano ioni monopositivi e ioni tripositivi. Scendendo lungo il gruppo i primi sono più stabili dei secondi

Gli elementi del Gruppo 4A ($ns^2np^2, n \geq 2$)

- Carbonio e Silicio hanno N.O. +4 ed è più stabile di +2
- Per lo stagno il N.O. +4 è leggermente più stabile di +2
- Per il piombo invece il N.O. +2 è più stabile di +4

Gli elementi del Gruppo 5A ($ns^2np^3, n \geq 2$)

- La forma elementare dell'azoto è N_2 , mentre quella del fosforo è P_4
- L'azoto ha tendenza ad accettare 3 e^- per formare lo ione nitruro (N^{3-})
- L'azoto forma molti ossidi dei quali solo N_2O_5 è solido, mentre il fosforo forma due ossidi solidi (P_4O_6 e P_4O_{10})
- Quando N_2O_5 reagisce con H_2O forma l'acido HNO_3 , mentre quando P_4O_{10} reagisce con H_2O forma l'acido H_3PO_4

Gli elementi del Gruppo 6A ($ns^2np^4, n \geq 2$)

- L'ossigeno tende ad accettare 2 e^- (O^{2-})
- SO_3 in H_2O forma l'acido solforico (H_2SO_4)

Gli elementi del Gruppo 7A ($ns^2np^5, n \geq 2$)

- Si trovano sempre in molecole biatomiche (F_2, Cl_2 , ecc..)
- Il fluoro è molto reattivo con H_2O
- Hanno elevate energie di ionizzazione e elevati valori positivi di affinità elettronica

Gli elementi del Gruppo 8A ($ns^2np^6, n \geq 2$)

- Tutti gli elementi si trovano come elementi monoatomici
- Sono molto stabili
- Hanno tra le energie di ionizzazione più alte

Proprietà acido base degli ossidi

Ossido Basico	+ $H_2O \rightarrow + OH^-$ + acido \rightarrow sale (catione di E) + H_2O
Ossido Anfotero	+ acido \rightarrow sale (catione di E) + H_2O + base \rightarrow sale + (ossoanione di E) + H_2O
Ossido Acido	+ base \rightarrow sale (ossoanione di E) + H_2O + $H_2O \rightarrow + H^+$

Proprietà degli ossidi attraverso un periodo

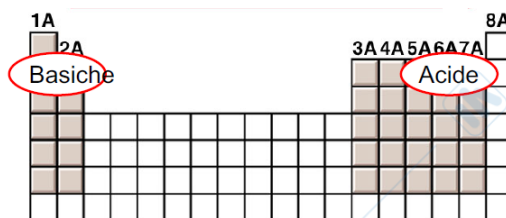


TABELLA 8.4 Alcune proprietà degli ossidi degli elementi del terzo periodo

	Na_2O	MgO	Al_2O_3	SiO_2	P_4O_{10}	SO_3	Cl_2O_7
Tipo di composto	← Ionico →			← Molecolare →			
Struttura	← Tridimensionale estesa →			← Unità molecolari discrete →			
P. to di fusione ($^{\circ}C$)	1275	2800	2045	1610	580	16.8	-91.5
P. to di ebollizione ($^{\circ}C$)	?	3600	2980	2230	?	44.8	82
Natura acido-basica	Basico	Basico	Anfotero	← Acido →			

LEGAME CHIMICO I

Legame ionico

Costituito principalmente dalla forza elettrostatica che tiene insieme gli ioni in un composto ionico.

Energia reticolare nei composti ionici

È una misura quantitativa della stabilità di un composto ionico definita come l'energia necessaria per separare completamente una mole di un composto ionico solido nei suoi ioni allo stato gassoso.

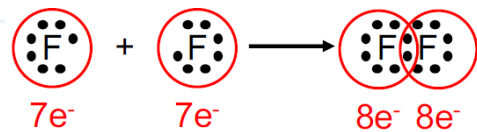
Possiamo calcolare l'energia reticolare del composto utilizzando la legge di Coulomb: $E = k \cdot \frac{Q_{Na^+} Q_{Cl^-}}{r}$ dove $k = 1$ nel vuoto

La formazione di un reticolo ionico è un processo che avviene con il rilascio di energia; cioè gli ioni legati nel reticolo ionico si trovano in una situazione più stabile rispetto agli ioni separati. Per invertire il processo e separare gli ioni deve invece essere fornita energia (in altre parole l'energia reticolare è positiva).

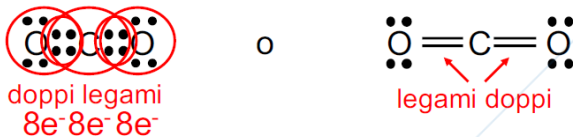
Legame covalente

È un legame in cui due o più elettroni sono condivisi da due atomi.

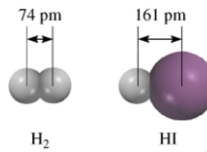
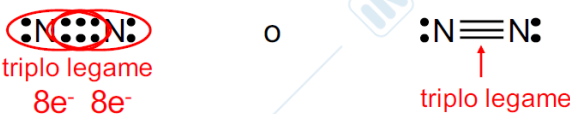
I composti covalenti sono composti che contengono solo legami covalenti.



Legame doppio: due atomi condividono due coppie di elettroni



Legame triplo: due atomi condividono 3 paia di elettroni



Tipo di legame	Lunghezza di legame (pm)
C-H	107
C-O	143
C=O	121
C-C	154
C=C	133
C≡C	120
C-N	143
C=N	138
C≡N	116
N-O	136
N=O	122
O-H	96

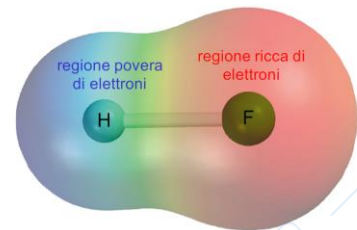
Lunghezza di legame: è la distanza tra i nuclei dei due atomi legati covalentemente in una molecola
 Triplo Legame < Doppio Legame < Legame Singolo

Legame covalente polare (legame polare)

Avviene quando due atomi diversi non condividono gli elettroni nello stesso modo, cioè gli elettroni passano più tempo vicino a un atomo rispetto all'altro spostando così la densità elettronica.

Un esempio è il legame HF: la densità elettronica si sposta da H a F

I legami polari possono essere immaginati come legami intermedi tra il legame covalente (non polare), in cui la condivisione degli elettroni è esattamente uguale per i due atomi, e il legame ionico, in cui il trasferimento dell'elettrone è esattamente uguale per i due atomi.



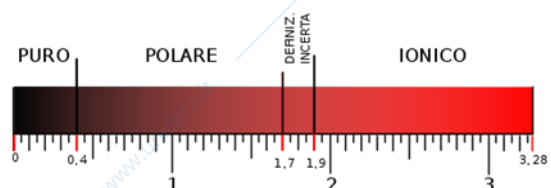
Elettronegatività

È la capacità di un atomo di attrarre verso di sé gli elettroni. Elementi con alta elettronegatività hanno grande tendenza ad attrarre a sé e⁻ rispetto ad elementi con bassa elettronegatività.

L'elettronegatività è legata all'affinità elettronica e all'energia di ionizzazione.

Un esempio è il fluoro che ha un'elevata affinità elettronica (tende ad acquisire e⁻ facilmente) e un'elevata energia di ionizzazione (non perde e⁻ facilmente) ha quindi un'alta elettronegatività.

formazione di un *legame cov. apolare* (elettronegatività: $0 < E < 0.3$)
 formazione di un *legame cov. polare* (elettronegatività: $0.4 < E < 1,9$)
 formazione di un *legame ionico* (elettronegatività: $2 < E < 3,28$)



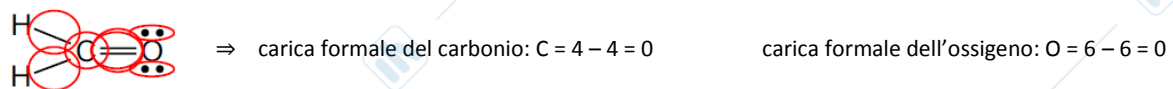
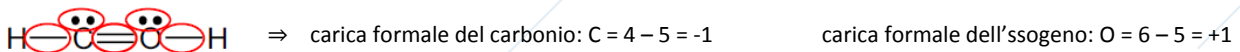
Strutture di Lewis

1. Calcolare il n° totale degli e⁻ di valenza disponibili (A), nel caso di anioni sommo il n° di e⁻ o nel caso di cationi li sottraggo
2. Calcolare il n° totale di e⁻ richiesti (N) per completare i vari otteti degli atomi
3. Sottrarre il numero calcolato al punto 1 da quello calcolato al punto 2. Il risultato corrisponde al n° di e⁻ condivisi (S = N - A)
4. Dividere per due il n° di e⁻ condivisi (S) così da trovare il n° di coppie di legame
5. Disporre al centro l'elemento meno elettronegativo
6. Attribuire tante coppie di legame quante se ne sono trovate nel punto 4 che legnino gli atomi tra loro
7. Se avanzano degli e⁻ di legame, attribuirli in coppie rendendo doppi o tripli alcuni dei legami presenti. I legami doppi o tripli si formano generalmente tra atomi dei seguenti elementi: ossigeno, carbonio, zolfo (tripli solo per C e N)
8. Attribuire gli elettroni rimanenti per il completamento dell'otteto dei vari atomi come doppietti solitari
9. Determinare per ogni atomo la carica formale e scriverla accanto

Es.: CO ⇒ e⁻ di valenza: 4 + 6 = 10 e⁻ totali : 8 * 2 = 16 S = 16 - 10 = 6 → 6/2 = 3 coppie di legame

Carica formale

La carica formale di un atomo è la differenza tra il numero degli e⁻ di valenza in un atomo isolato e il numero di e⁻ assegnati a quell'atomo nella struttura di Lewis. (i legami si rompono e si assegnano metà elettroni all'atomo interessato)

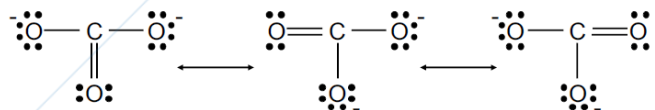


- Per molecole neutre, una struttura di Lewis in cui non ci sono cariche formali è preferibile ad una in cui sono presenti.
- Le strutture di Lewis con cariche formali grandi sono meno plausibili di quelle con cariche formali piccole.
- Tra le varie strutture di Lewis con distribuzione simile di carica formale, la più plausibile è quella in cui le cariche formali negative sono poste sugli atomi più elettronegativi.

Risonanza

Una struttura di risonanza è una delle due o più strutture di Lewis per una singola molecola che non può essere rappresentata accuratamente da una sola struttura di Lewis.

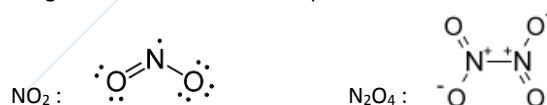
Es.: strutture di risonanza dello ione carbonato (CO₃²⁻)



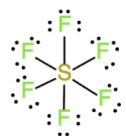
Eccezioni alla regola dell'otteto

Otteto incompleto: per la struttura di Lewis certi atomi non formano l'otteto (Es.: BeH₂ H - Be - H, in questo caso solo 4 e⁻ circondano l'atomo di Be; lo stesso accade quando il boro reagisce con 3 alogeni nella formula BX₃).

Molecole con e⁻ dispari: alcune molecole contengono un numero dispari di e⁻. Tra queste abbiamo l'ossido di azoto (NO) e il diossido di azoto (NO₂). Siccome abbiamo bisogno di un numero pari di e⁻ per completare l'otteto ciò non sarà possibile. Queste molecole vengono chiamate radicali e sono molto reattive perchè tendono a legarsi con altre molecole dispari.



Otteto espanso: questo avviene quando attorno all'atomo centrale ci sono più di 8 e⁻ (Es.: esafluoruro di zolfo SF₆)



LEGAME CHIMICO II**Teoria VSEPR**

Stabilisce che i doppietti elettronici del livello di valenza si dispongano alla massima distanza possibile gli uni dagli altri, in modo da minimizzare la repulsione elettrostatica tra di essi.

1. I doppi e i tripli legami possono essere trattati come legami singoli
2. Se una molecola ha due o più strutture di risonanza, possiamo applicare il modello VSEPR solo a una di esse

$NS (n^\circ \text{sterico}) = (n + m) = n^\circ \text{ tot di doppietti solitari} + n^\circ \text{ di atomi intorno all'atomo centrale}$

Formula generica: AX_mE_n A=atomo centr., X= n° di atomi legati all'atomo centr., E=coppie di elettroni solitarie sull'atomo centr.

Le forze repulsive decrescono secondo quest'ordine: 2 coppie solitarie \rightarrow coppia solitaria e di legame \rightarrow 2 coppie di legame

Per i metalli di transizione la teoria VSEPR funziona nei casi di configurazioni d^0 , d^5 , d^{10} .

Atomo centrale privo di coppie solitarie:

Numero coppie di elettroni	Disposizione delle coppie di elettroni*	Geometria molecolare*	Esempi
2	180 Lineare	B—A—B Lineare	BeCl ₂ , HgCl ₂
3	120 Trigonale planare	Trigonale planare	BF ₃
4	109.5 Tetraedrica	Tetraedrica	CH ₄ , NH ₄ ⁺
5	90, 120 Trigonale bipyramidale	Trigonale bipyramidale	PCl ₅
6	90 Ottaedrica	Ottaedrica	SF ₆

Atomo centrale con una o più coppie solitarie:

Classe di molecola	Numero totale di coppie di elettroni	Numero di coppie di legame	Numero di coppie solitarie	Disposizione delle coppie di elettroni*	Geometria	Esempi
AB ₂ E	3	2	1	Trigonale planare	Angolare	SO ₂
AB ₃ E	4	3	1	Tetraedrica	Trigonale piramidale	NH ₃
AB ₂ E ₂	4	2	2	Tetraedrica	Angolare	H ₂ O
AB ₄ E	5	4	1	Bipiramide trigonale	Tetraedro distorto (o cavalletto)	SF ₄
AB ₃ E ₂	5	3	2	Bipiramide trigonale	A forma di T	ClF ₃
AB ₂ E ₃	5	2	3	Bipiramide trigonale	Lineare	I ₃
AB ₅ E	6	5	1	Ottaedrica	Piramidale quadrata	BrF ₅
AB ₄ E ₂	6	4	2	Ottaedrica	Quadrato planare	XeF ₄

Es.: Usa il modello VSEPR per prevedere la geometria delle seguenti molecole e dei seguenti ioni (AlCl₄⁻, I₃⁻, C₂H₄)

Struttura di Lewis \rightarrow n° coppie solitarie sull'atomo centrale \rightarrow n° coppie di legame sull'atomo centrale \rightarrow ricava la geometria

AlCl₄⁻: Ci sono 4 coppie di e⁻ attorno all'atomo centrale, quindi la disposizione delle coppie di elettroni sarà tetraedrica. Poiché non ci sono coppie solitarie presenti, la disposizione delle coppie di legame sarà uguale alla disposizione delle coppie di e⁻. Quindi AlCl₄⁻ ha una geometria tetraedrica con angoli CIAICI tutti di 109.5°.

I₃⁻: Ci sono 5 coppie di e⁻ attorno all'atomo centrale, quindi la disposizione delle coppie di e⁻ sarà trigonale bipyramidale. Delle 5 coppie di e⁻, 3 sono coppie solitarie e 2 di legame. Ricorda che le coppie solitarie occupano preferenzialmente la posizione equatoriale in una bipyramidale trigonale. Quindi la rimozione delle coppie solitarie ci lascia con una geometria lineare per I₃⁻, cioè tutti e 3 gli atomi di iodio si trovano su una retta.

C₂H₄: Il doppio legame C=C è trattato, nel modello VSEPR, come se fosse un legame singolo. Poiché ci sono 3 coppie di e⁻ attorno a ciascun atomo C e non ci sono coppie solitarie presenti, la disposizione attorno a ogni atomo di carbonio ha una forma trigonale planare. Quindi, gli angoli di legame previsti in C₂H₄ sono tutti di 120°.

Momento di dipolo

È dato dal prodotto della carica Q per la distanza r esistente tra le cariche: $\mu = Q \cdot r$

Il momento di dipolo è solitamente indicato in debye (D) e il fattore di conversione è: $1D = 3.336 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$

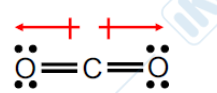
Molecole polari: se è presente un momento di dipolo

Molecole apolari: se non è presente un momento di dipolo

Il simbolo "→" indica lo spostamento della densità elettronica dall'atomo meno elettronegativo a quello più elettronegativo

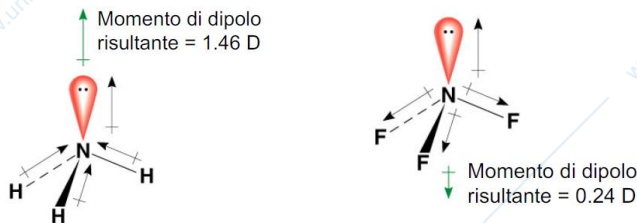
Polarità delle molecole: momento dipolare netto (μ). Il suo vettore ha:

- *direzione*: quella data dal legame in questione
- *verso*: va dall'atomo meno elettronegativo all'atomo più elettronegativo
- *modulo*: differenza di elettronegatività



La polarità di una molecola varia a seconda:

- molecole contenenti solo legami covalenti puri sono sempre apolari
- molecole contenenti legami covalenti polari possono essere polari o apolari
- una molecola formata da 2 atomi legati da un legame covalente polare è sempre polare
- una molecola formata da più di 2 atomi legati da legami polari è polare solo se i singoli dipoli non si annullano a vicenda.



Regola semplificata per determ. la polarità di una molecola: (bisogna prima trovare la geometria della molecola con la VSEPR)

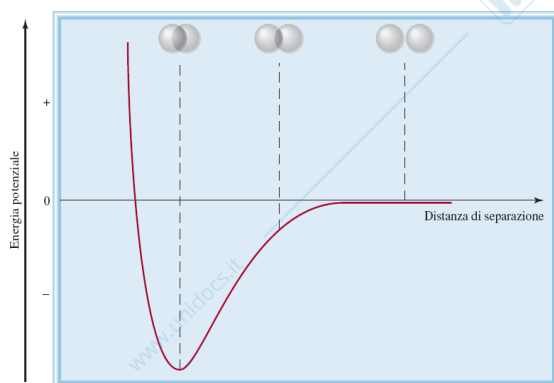
- se la molecola è lineare ($NS = 2$) e l'atomo centrale della molecola è legato a 2 atomi uguali, la molecola è apolare. In tutti gli altri casi è polare (es.: CO_2 è apolare, HCN è polare).
- se la molecola è trigonale ($NS = 3$) e l'atomo centrale della molecola è legato a 3 atomi uguali, la molecola è apolare. In tutti gli altri casi è polare (es.: SO_3 è apolare, SO_2 è polare).
- se la molecola è tetraedrica ($NS = 4$) e l'atomo centrale della molecola è legato a 4 atomi uguali, la molecola è apolare. In tutti gli altri casi è polare.

La teoria del legame di valenza (VB)

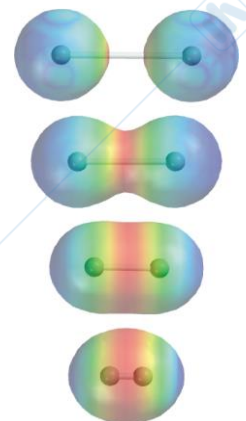
Mentre la teoria di Lewis tratta tutti i legami covalenti allo stesso modo e non offre spiegazioni per le differenze tra i diversi legami covalenti; la teoria VB ci permette di capire meglio il quadro generale dei singoli atomi che prendono parte alla formazione del legame.

La VB si basa sul fatto che in una molecola gli e^- occupano gli orbitali atomici degli atomi di provenienza. I legami sono formati dalla condivisione di e^- ottenuta mediante *sovrapposizione* di orbitali atomici.

La VB afferma anche che una molecola stabile si forma dalla reazione fra atomi quando l'energia potenziale del sistema decresce fino a raggiungere un minimo. Essa tiene conto della variazione dell'energia potenziale in funzione della variazione della distanza tra gli atomi reagenti.



Variazione della densità elettronica durante l'avvicinamento di due atomi di idrogeno (H-H).



Ibridazione

Orbitali ibridi: sono orbitali atomici ottenuti quando due o più orbitali non equivalenti dello stesso atomo si combinano tra loro prima della formazione del legame covalente.

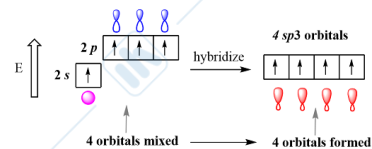
Ibridazione: il termine utilizzato per indicare il mescolamento di orbitali atomici in un atomo per generare degli orbitali ibridi

Ibridazione sp^3

1 orbitale s e 3 orbitali p si combinano formando 4 orbitali ibridi isoenergetici sp^3 .

Esempi sono le molecole CH_4 (metano) e NH_3 (ammoniaca).

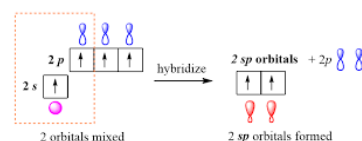
Se il modello VSEPR prevede una disposizione tetraedica delle coppie di e^- , allora assumiamo che solo 1 orbitale s e 3 orbitali p sono ibridizzati per formare 4 orbitali ibridi sp^3 .



Ibridazione sp

1 orbitale s e 1 orbitali p si combinano formando 2 orbitali ibridi isoenergetici sp .

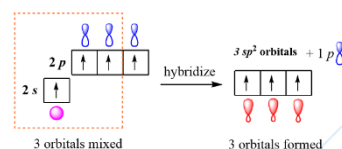
Un esempio è la molecola $BeCl_2$ (cloruro di berilio).



Ibridazione sp^2

1 orbitale s e 2 orbitali p si combinano formando 3 orbitali ibridi isoenergetici sp^2 .

Un esempio è la molecola BF_3 (trifluoruro di boro).



Procedimento per l'ibridazione degli orbitali atomici

1. Scrivere la struttura di Lewis della molecola
2. Prevedere la disposizione complessiva delle coppie di e^- (sia di legame che solitarie) utilizzando il modello VSEPR
3. Dedurre l'ibridazione dell'atomo centrale facendo coincidere la disposizione delle coppie di e^- con quella degli orbit. ibridi

Es.: Determinare lo stato di ibridazione dell'atomo centrale in ognuna delle seguenti molecole (BeH_2 , AlI_3 , PF_3)

BeH_2 :

Ci sono 2 coppie di legame attorno al Be; quindi la disposizione della coppia di e^- è lineare. Concludiamo che Be utilizza orbitali ibridi sp nella formazione dei legami con H, perchè gli orbitali sp hanno una disposizione lineare. I due legami Be – H sono formati dalla sovrapposizione degli orbitali sp di Be con gli orbitali $1s$ degli atomi di idrogeno. Quindi BeH_2 è una molecola lineare.

AlI_3 :

Ci sono 3 coppie di e^- attorno ad Al; quindi la disposizione della coppia di e^- è trigonale planare. Concludiamo che Al usa gli orbitali ibridi sp^2 nella formazione di legami con I perchè gli orbitali sp^2 hanno una disposizione trigonale planare. Gli orbitali ibridi sp^2 si sovrappongono con gli orbitali $5p$ di I per formare 3 legami covalenti Al – I. Prevediamo che la molecola di AlI_3 sia trigonale planare e tutti gli angoli \angle siano 120° .

PF_3 :

Ci sono 4 coppie di e^- attorno a P; quindi la disposizione delle coppie di e^- è tetraedica. Concludiamo che P utilizza orbitali ibridi sp^3 nella formazine di legami con F, poichè gli orbitali sp^3 hanno una disposizione tetraedica. Come nel caso NH_3 , uno degli orbitali ibridi sp^3 è utilizzato per ospitare la coppia solitaria di P. Gli altri 3 orbitali ibridi sp^3 formano legami covalenti P – F con gli orbitali $2p$ del fluoro. Prevediamo che la geometria della molecola sia trigonale piramidale e che l'angolo di legame FPF dovrebbe essere leggermente minore di 109.5° .

Orbitali atomici puri dell'atomo centrale	Ibridizzazione dell'atomo centrale	Numero di orbitali ibridi	Forma degli orbitali ibridi	Esempi
s, p	sp	2	180° Lineare	$BeCl_2$
s, p, p	sp^2	3	120° Trigonale planare	BF_3
s, p, p, p	sp^3	4	109.5° Tetraedica	CH_4, NH_3
s, p, p, p, d	sp^3d	5	90° 120° Trigonale bipyramidale	PCl_5
s, p, p, p, d, d	sp^3d^2	6	90° 90° Ottocentrica	SF_6

Ibridazione nelle molecole contenenti doppi e tripli legami

Legami σ : legami covalenti *formati per sovrapp. assiale*, con la densità elettronica concentrata tra i nuclei dei 2 atomi legati

Legami π : legami covalenti *formati per sovrapp. laterale*, con la densità elettronica concentrata sopra e sotto il piano dei nuclei degli atomi legati insieme

Legame singolo \rightarrow 1 legame σ

Legame doppio \rightarrow 1 legame σ e 1 legame π

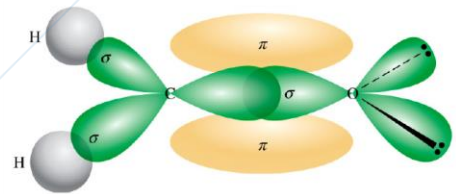
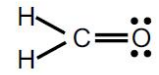
Legame triplo \rightarrow 1 legame σ e 2 legami π

1. Se l'atomo centrale forma 1 doppio legame, è ibridizzato sp^2

2. Se l'atomo centrale forma 2 legami doppi o 1 triplo, è ibridizzato sp

Es.: descrivere i legami nella formaldeide (CH_2O)

Ci sono 3 coppie di e^- attorno all'atomo di C; quindi la disposizione delle coppie di e^- è trigonale planare (nel modello VSEPR il legame doppio è trattato come singolo). Perciò C usa gli orbitali ibridi sp^2 nella formazione di legami, questo perché gli orbitali ibridi sp^2 hanno una disposizione trigonale planare.



Il carbonio ha un e^- in ognuno dei suoi 3 orbitali sp^2 , che sono usati per formare legami σ con gli atomi di H e l'atomo di O. C'è anche un e^- nell'orbitale $2p_z$, che forma un legame π con l'O. L'O ha 2 e^- in 2 dei suoi orbitali ibridi sp^2 . Ci sono delle coppie solitarie sull'O. il suo 3° orbitale ibrido sp^2 con un e^- è usato per formare un legame σ con il C. L'orbitale $2p_z$ (con un e^-) si sovrappone all'orbitale $2p_z$ del C per formare un legame π .

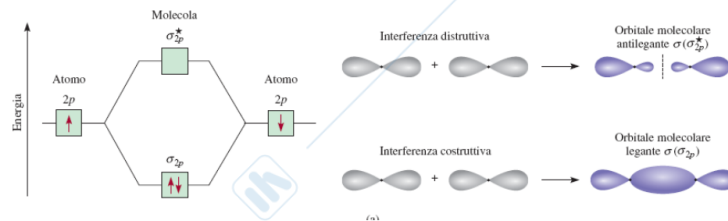
Teoria degli orbitali molecolari (MO)

Considera la formazione di n orbitali molecolari a partire da n orbitali atomici.

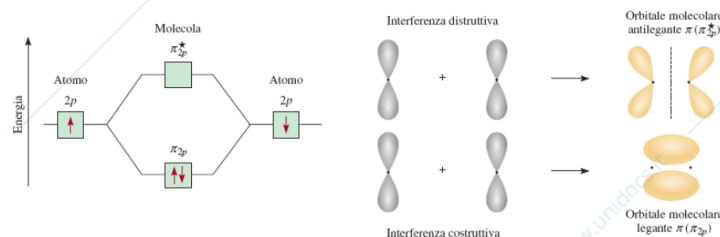
Orbitale molecolare legante: legame covalente stabile, ha energia più bassa e maggiore stabilità rispetto gli orbitali atomici da cui è stato generato. La densità elettronica è maggiore tra i nuclei degli atomi leganti. La formazione degli orbitali molecolari leganti corrisponde a un'interferenza costruttiva (l'incremento in ampiezza è analogo all'aumento della densità elettronica tra i 2 nuclei).

Orbitale molecolare antilegante: legame covalente instabile, ha energia più alta e minore stabilità rispetto gli orbitali atomici da cui è stato generato. La densità elettronica decresce a zero tra i nuclei degli atomi leganti. La formazione degli orbitali molecolari antileganti corrisponde a un'interferenza distruttiva (il decremento in ampiezza è analogo alla diminuzione della densità elettronica tra i 2 nuclei).

Orbitale molecolare σ (legante e antilegante): la densità elettronica è concentrata simmetricamente attorno a una linea posta tra i 2 nuclei degli atomi leganti.



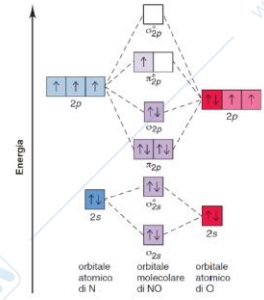
Orbitale molecolare π (legante e antilegante): la densità elettronica è concentrata sopra e sotto la linea congiungente i 2 nuclei degli atomi leganti.



Configurazione elettronica negli orbitali molecolari

Per prima cosa è necessario disporre gli orbitali molecolari in ordine di energia crescente.

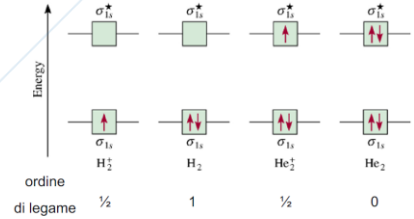
1. Il numero di orbitali molecolari formato è sempre uguale al numero di orbitali atomici combinati
2. Tanto più è stabile un MO legante tanto più sarà poco stabile il suo corrispondente MO antilegante
3. Il riempimento degli MO procede da quelli a più bassa energia a quelli a energia più alta
4. Ogni MO può ospitare fino a due elettroni
5. Quando si aggiungono elettroni a MO della stessa energia si segue la regola di Hund
6. Il numero di elettroni negli MO è uguale alla somma di tutti gli elettroni degli atomi leganti



Ordine di legame definisce la forza di legame ed è: $\text{Ordine di legame} = \frac{1}{2} (\text{n}^\circ \text{ di e}^- \text{ in OM leganti} - \text{n}^\circ \text{ di e}^- \text{ in OM antileganti})$
 L'ordine di legame può essere una frazione, ma se fosse zero (o negativo) indicherebbe che il legame non è stabile, pertanto la molecola non potrebbe esistere.

H_2^+ ha un solo e⁻ nell'orbitale σ_{1s} . Ha un'ordine di legame pari a $1/2$, quindi la nostra previsione è che sia stabile. La configurazione elettronica è $(\sigma_{1s})^1$.

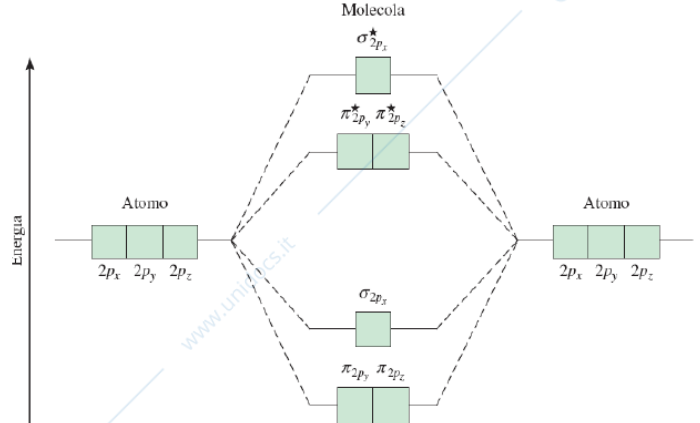
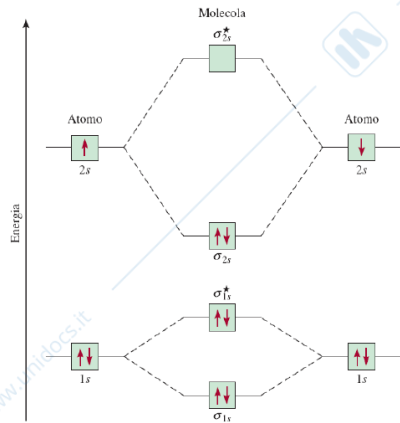
H_2 ha 2 e⁻, entrambi nell'orbitale σ_{1s} . Ha un'ordine di legame pari a 1 ovvero un legame covalente intero. La conf. elett. è $(\sigma_{1s})^2$.



He_2^+ ha 2 e⁻ nell'orbitale σ_{1s} e 1 e⁻ nell'orbitale σ_{1s}^* . Poichè l'orbitale molecolare antilegante è destabilizzante, ci aspettiamo che He_2^+ sia meno stabile di H_2 . L'instabilità risultante dall'e⁻ nell'orbitale σ_{1s}^* è bilanciata da uno degli e⁻ sull'orbitale σ_{1s} . Ha un'ordine di legame pari a $1/2$ e la stabilità complessiva di He_2^+ è simile a quella di H_2^+ . La conf. elett. è $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^1$.

He_2 ha 2 e⁻ nell'orbitale σ_{1s} e 2 e⁻ nell'orbitale σ_{1s}^* . la molecola dovrebbe avere un ordine di legame pari a 0 e nessuna stabilità. La conf. elett. dovrebbe essere $(\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^2$.

Molecole diatomiche omonucleari del 2° periodo (Es.: O₂, H₂,...)



Le energie degli orbitali molecolari sono disposte nel seguente ordine (crescente):

$\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \pi_{2py} = \pi_{2pz} < \sigma_{2px} < \pi_{2py}^* = \pi_{2pz}^* < \sigma_{2px}^*$ verificata per le molecole leggere B₂, C₂, N₂
 $\sigma_{1s} < \sigma_{1s}^* < \sigma_{2s} < \sigma_{2s}^* < \sigma_{2px} < \pi_{2py} = \pi_{2pz} < \pi_{2py}^* = \pi_{2pz}^* < \sigma_{2px}^*$ verificata per le molecole pesanti O₂, F₂

	Li ₂	B ₂	C ₂	N ₂	O ₂	F ₂
$\sigma_{2p_x}^*$						
$\pi_{2p_y}^*, \pi_{2p_z}^*$					↑↑	↑↓↑↓
σ_{2p_x}				↑↓	↑↓↑↓	↑↓↑↓
π_{2p_y}, π_{2p_z}		↑↑	↑↓↑↓	↑↓↑↓	↑↓	↑↓
σ_{2s}^*		↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
σ_{2s}	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
Ordine di legame	1	1	2	3	2	1
Lunghezza di legame (pm)	267	159	131	110	121	142
Entalpia di legame (kJ/mol)	104.6	288.7	627.6	941.4	498.7	156.9
Proprietà magnetiche	Diamagnetico	Paramagnetico	Diamagnetico	Diamagnetico	Paramagnetico	Diamagnetico

Configurazioni elettroniche:

$\text{Li}_2 = (\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^2(\sigma_{2s})^2$ con OL = 1

$\text{C}_2 = (\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^2(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\pi_{2py})^2(\pi_{2pz})^2$ con OL = 2

$\text{O}_2 = (\sigma_{1s})^2(\sigma_{1s}^*)^2(\sigma_{2s})^2(\sigma_{2s}^*)^2(\sigma_{2px})^2(\pi_{2py})^2(\pi_{2pz})^2(\pi_{2py}^*)^1(\pi_{2pz}^*)^1$ con OL = 2

Gli orbitali molecolari delocalizzati

Gli orbitali molecolari delocalizzati, in cui gli e^- sono liberi di muoversi sull'intera molecola o gruppo di atomi, sono formati da orbitali p (più precisamente $2p_z$ su orbitali ibridizzati sp^2 del carbonio) di atomi adiacenti. Gli orbitali molecolari delocalizzati sono alternativi alle strutture di risonanza per spiegare le proprietà molecolari osservate.



Il legame metallico

Per spiegare la formazione dei legami metallici negli elementi metallici ci sono due modelli:

Mare di elettroni

Gli e^- di valenza sono completamente condivisi tra tutti gli atomi e formano una sorta di "mare" in cui gli e^- sono immersi e da cui sono uniti.

Teoria delle bande

Se si avvicinano 2 atomi di litio si formano due orbitali molecolari separati da una certa energia E . La combinazione di 3 atomi di litio darà luogo alla formazione di tre orbitali molecolari separati da un'energia E' minore della precedente. Se estendiamo questo modello a un n° N molto grande di atomi, otterremo un n° molto elevato di OM con energie molto simili tra loro; formando così la banda continua di energia (o semplicemente "banda").

Se le energie degli orbitali atomici di partenza sono abbastanza vicine (per esempio $2s$ e $2p$ oppure $3s$ e $3p$) le bande possono essere contigue o sovrapposte e quindi in grado di condurre elettroni (conducibilità elettrica).

Banda di valenza: è quella corrispondente alla sovrapposizione degli orbitali atomici più esterni tra quelli contenenti e^-

Banda di conduzione: è quella corrispondente alla sovrapposizione degli orb. atomici più interni tra quelli vuoti o non saturi di e^-

Nel caso dei metalli la banda di conduzione è contigua o sovrapposta a quella di valenza, così da permettere agli e^- di valenza di scorrere in essa. Nel caso degli isolanti invece la banda di conduzione è separata da quella di valenza da un *gap* (intervallo proibito di energia).

L'aumento di temperatura migliora la conducibilità dei semiconduttori perchè fornisce agli e^- l'energia necessaria a spostarsi nella banda di conduzione. Nel caso dei materiali conduttori invece, l'aumento della temperatura diminuisce la conducibilità in quanto in essi prevale l'effetto per cui il moto dei nuclei ostacola il moto degli e^- .