

ACIDI E BASI

1) secondo Arrhenius

ACIDO: sostanza che, sciolta in H_2O , libera H^+

BASE: sostanza che, sciolta in H_2O , libera OH^-

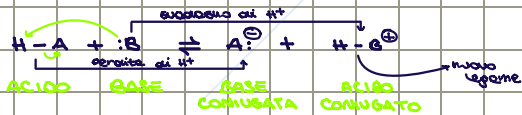
2) secondo Brønsted-Lowry

ACIDO: donatore di protoni

BASE: accettore di protoni

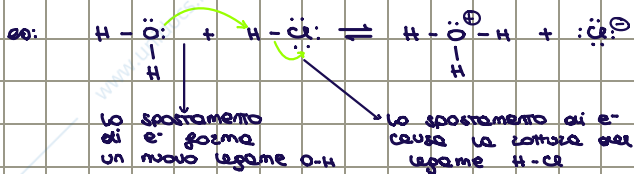
REAZIONI ACIDO-BASE \rightarrow consistono nel trasferimento di un H^+ da un acido ad una base

\hookrightarrow un legame si rompe e uno si forma



BASE CONIUGATA: specie che si forma da un acido quando cede un protone a una base

ACIDO CONIUGATO: specie che si forma da una base quando acquista un protone da un acido



IMP: la carica netta deve essere la stessa da entrambe le parti di ogni reazione

• la specie carica più stabile è quella in cui la carica è più delocalizzata

\hookrightarrow la delocalizzazione della carica ha un effetto stabilizzante

PIÙ STABILI

• le reazioni di trasferimento protonico avvengono anche per composti aventi elettroni π



\hookrightarrow si ha la formazione di un **CARBOCATIONE**

specie in cui uno dei C ha solo $6e^-$ e porta una carica positiva $+1$

• quanto + facilmente un composto dona un protone, tanto + questo composto è un acido forte

\hookrightarrow + è forte è l'acido, + è spostato a destra e + grande è la K_a

COSTANTE DI DISSOCIAZIONE ACIDA (K_a) = $K_{eq} \cdot [H_2O] = \frac{[H_3O^+][A^-]}{[HA]}$

\hookrightarrow si calcola la **pKa = $-\log K_a$**

\hookrightarrow tanto + è maggiore, + è debole l'acido



\hookrightarrow tanto è + debole l'acido, tanto + forte è la base coniugata

• l'equilibrio favorisce sempre la reazione dell'acido + forte con la base + forte per dare l'acido e la base più deboli

MECCANISMO DI REAZIONE: schema dettagliato (grado per grado) del modo in cui avviene una reazione

TERMODINAMICA: studio dell'energia del sistema in ogni momento della reazione

\downarrow reazioni che avvengono in virtù dell'energia cinetica dovuta alla T sono definite **reazioni termiche**

• molte reazioni avvengono attraverso collisioni molecolari

\hookrightarrow durante queste, l'en. cinetica dei reagenti è convertita in en. potenziale

↳ se un processo di collisione genera una reazione (i reagenti devono collidere con l'orientazione appropriata e una energia sufficiente) si forma una struttura che si definisce **STATO DI TRANSIZIONE (ST)**

è il punto a energia + alta in un diagramma di reazione

Struttura definita come

COMPLESSO ATTIVATO

che possiede una particolare geometria in cui alcuni legami sono parzialmente rotti e altri parzialmente formati

DIAGRAMMA DI REAZIONE: grafico che mostra i cambiamenti energetici durante una reazione chimica (y: energia (ΔS°) e x: avanzamento della reazione = coordinata di reaz.)

VARIATIONE DI ENERGIA LIBERA DI GIBBS $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$

↳ energia che determina la posizione di un equilibrio chimico e la velocità di reazione

↳ la posizione dell'equilibrio per la reazione favorisce i prodotti se $\Delta G^\circ < 0$ o i reagenti se $\Delta G^\circ > 0$

REAZIONE ESOTERMICA

REAZIONE ENDOTERMICA

ENTALPIA H° : energia che si correla ai legami e alla solvatazione

↳ $\Delta H^\circ = H^\circ_{\text{prod}} - H^\circ_{\text{reag}}$ → **CALORE DELLA REAZIONE**

se i legami che si sono formati in un prodotto sono + forti di quelli che si sono rotti nei reagenti, il sistema rilascia calore e la reazione è **ESOTERMICA**

se invece è il contrario, il sistema assorbe calore e la reazione è **ENDOTERMICA**

ENTROPIA S° : misura il grado di disordine del sistema

↳ il suo aumento favorisce la reazione

CINETICA: studio della velocità delle reazioni chimiche

ENERGIA LIBERA DI ATTIVAZIONE (ΔG^\ddagger): differenza di ΔG° tra lo stato di transizione e il livello iniziale (reagenti)

↳ è sempre positiva per $\Delta G^\circ(\text{ST}) > \Delta G^\circ(\text{reagenti})$

minore è ΔG^\ddagger , maggiore è la velocità della reazione

• perché avvenga una reazione acido-base, l'acido e la base devono collidere con una geometria che consenta al protone di essere trasferito dal donatore all'accettore

↳ penna è pressoché lineare

• l'acidità di un acido viene determinata dalla stabilità dell'anione che si forma in seguito alla sua dissociazione (deprotonazione): più stabile è l'anione che si forma, maggiore è l'acidità della molecola che si deprotona.

↓
i fattori che influenzano la stabilità di un'anione sono i seguenti:

1) l'elettronegatività dell'atomo che porta la carica negativa: più è elettronegativo l'atomo, più è stabile l'anione

2) la dimensione dell'atomo che porta la carica negativa: più è voluminoso l'atomo, più facilmente può essere accolta la carica negativa (che si distribuisce su una superficie più ampia)

l'acidità cresce con l'aumentare delle dimensioni

3) la delocalizzazione della carica dell'anione, descritta dalle strutture limite di risonanza: maggiore è la delocalizzazione, maggiore è la stabilizzazione della carica

4) l'effetto induttivo è l'attrazione della densità elettronica attraverso i legami causata dalle differenze di elettronegatività tra gli atomi: l'elettronegatività di atomi adiacenti stabilizza una carica negativa vicina

5) l'ibridazione dell'atomo che porta la carica negativa: maggiore è la percentuale di carattere s di un atomo, maggiore è la stabilizzazione dell'anione

- ↳ c. ibridato $sp = 50\%$ di carattere s
- ↳ c. ibridato $sp^2 = 33\%$ di carattere s
- ↳ c. ibridato $sp^3 = 25\%$ di carattere s

2) Secondo Lewis

ACIDO: molecola o ione che, accettando una coppia di e^- , può formare un nuovo legame

BASE: molecola o ione che, cedendo una coppia di e^- , può formare un nuovo legame

tutte le basi e tutti gli acidi di Brønsted-Lowry sono anche di Lewis, ma non il contrario

- ↳ tutti gli acidi di Brønsted-Lowry sono **acidi protici** (acido che agisce come donatore di H^+) mentre gli acidi di Lewis possono essere acidi protici o **acidi aprotici** (acido che agisce come accettore di coppie di e^-)

NUCLEOFILO: specie elettron-ricca, attratta da regioni a bassa densità elettronica (es. nucleo)

- ↳ analogo alle basi di Lewis (attratto dal nucleo)

ELETTROFILO: specie elettron-povera, attratta da regioni ad alta densità elettronica

- ↳ analogo agli acidi di Lewis (attratto dall'elettrone)

REAZIONE ACIDO-BASE DI LEWIS: prevede la condivisione di una coppia di e^- fra un donatore (base) e un accettore (acido)

