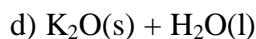
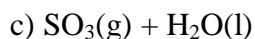
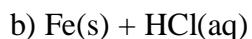
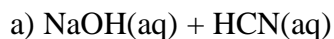
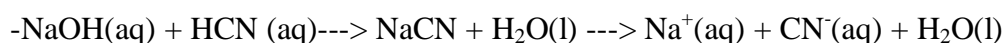


## Esercitazione CHIMICA E MATERIALI 02/10/2020

1) Prevedere cosa si formerà dalle seguenti reazioni, identificando il tipo di processo e bilanciandole:

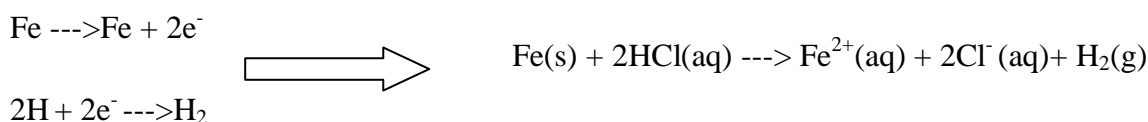


R: a) La prima è una reazione tra un acido (HCN) ed una base (NaOH), entrambi in soluzione acquosa. Dalla reazione si formerà acqua ( $\text{H}_2\text{O}$ ) ed NaCN (sale) il quale risulterà, in realtà, dissociato negli ioni  $\text{Na}^+$  e  $\text{CN}^-$ , che saranno anch'essi solvatati dall'acqua.

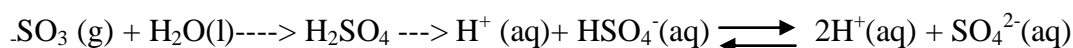


b) Il Fe metallico viene ossidato dall'acido cloridrico (HCl). Si tratta quindi di una reazione di ossido-riduzione in cui la specie ossidante è  $\text{H}^+$ , mentre la specie riducente è il Fe(s).

$\text{Fe(s)} + \text{HCl(aq)} \longrightarrow \text{Fe}^{2+}(\text{aq}) + \text{Cl}^-(\text{aq}) + \text{H}_2(\text{g})$ -----> Bilanciamo la reazione come spiegato in precedenza



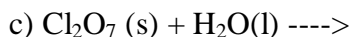
c) Si tratta di una reazione tra un ossido di un non metallo ( $\text{SO}_3$ , nota come anidride solforica secondo la nomenclatura tradizionale) e l'acqua, che porta alla formazione di un ossiacido (acido solforico,  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ). L'acido solforico è un acido FORTE in prima dissociazione, quindi risulta dissociato completamente in  $\text{H}^+ + \text{HSO}_4^-$ . Anche  $\text{HSO}_4^-$  è un acido, ma più debole. La dissociazione in  $\text{H}^+(\text{aq})$  ed  $\text{SO}_4^{2-}(\text{aq})$  risulterà quindi essere un equilibrio.



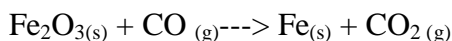
d) Si tratta di una reazione tra un ossido di un metallo ( $\text{K}_2\text{O}$  ossido di potassio) ed  $\text{H}_2\text{O}$ , che porta alla formazione di un idrossido (KOH, idrossido di potassio, base forte). L'idrossido di potassio, in acqua, è dissociato in  $\text{K}^+(\text{aq})$  ed  $\text{OH}^-(\text{aq})$



1bis) Prevedere cosa si formerà dalle seguenti reazioni, identificando il tipo di processo e bilanciandole: **(PROVATE A SVOLGERLI VOI, SE AVETE PROBLEMI NE PARLIAMO)**



2) L'ossido di ferro(III) reagisce con il monossido di carbonio a dare ferro metallico e diossido di carbonio secondo la reazione



Facendo reagire 16 g di ossido di ferro(III) con 18 g di monossido di carbonio quanti grammi di ferro metallico si possono ottenere? Quante moli di diossido di carbonio vengono prodotte?

R: Per prima cosa dobbiamo identificare il tipo di reazione, determinando tutti i numeri di ossidazione delle specie in gioco.

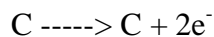
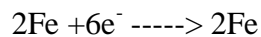
A sinistra della reazione:

	Fe	O	C
n.ox	+3	-2	+2

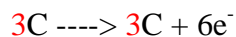
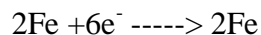
A destra della reazione:

	Fe	O	C
n.ox	0	-2	+4

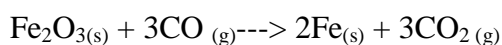
Ci sono due specie che cambiano stato di ossidazione, quindi si tratta di una reazione di ossido-riduzione. Nello specifico, il ferro (Fe) passa dallo stato di ossidazione + 3 in  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  allo stato di ossidazione 0 in  $\text{Fe}(\text{s})$ , mentre il carbonio (C), passa dallo stato di ossidazione +2 nel monossido di carbonio ( $\text{CO}$ ) allo stato di ossidazione +4 nel diossido di carbonio ( $\text{CO}_2$ ). Il Ferro va, quindi, incontro a RIDUZIONE, mentre il Carbonio va incontro ad OSSIDAZIONE.



MOLTIPLICHIAMO x3 LA SECONDA "SEMIREAZIONE" PER UGUAGLIARE GLI ELETTRONI SCAMBIATI



Riportando i coefficienti stechiometrici nella reazione principale otteniamo la reazione bilanciata.



Calcoliamo poi il n di moli di entrambi i reagenti

$$n \text{Fe}_2\text{O}_3 = 16,00/159.69 = 0.10 \text{ mol}$$

$$n\text{CO} = 18/28.04 = 0.64 \text{ mol}$$

Avendo a disposizione due quantità "finite" di reagenti, bisogna identificare il REAGENTE LIMITANTE, quello la cui quantità limita l'effettiva riuscita della reazione. Consideriamo, per esempio, di voler consumare tutto  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ . Per far ciò ci serviranno un  $n_{\text{teorico}}\text{CO}$ , determinabile dalla stechiometria della reazione.

$$n \text{Fe}_2\text{O}_3 : n_{\text{teorico}} \text{CO} = 1 : 3$$

$$n_{\text{teorico}} \text{CO} = n \text{Fe}_2\text{O}_3 \times 3/1 = 0.10 \times 3 = 0.30 \text{ mol}$$

Confrontando il numero di moli teorico di CO con quelle realmente presenti in reazione, possiamo dedurre che il reagente limitante della reazione sia  $\text{Fe}_2\text{O}_3$

$$n_{\text{teoriche}} \text{CO} < n_{\text{reali}} \text{CO} \quad \Rightarrow \quad \text{Reagente Lim. Fe}_2\text{O}_3$$

La quantità di prodotti che si forma dipende dalle moli di reagente limitante, secondo la stechiometria della reazione.

Per  $\text{Fe}_{(s)}$

$$n\text{Fe} : n \text{Fe}_2\text{O}_3 = 2 : 1$$

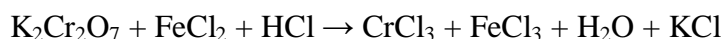
$$n\text{Fe} = n\text{Fe}_2\text{O}_3 \times 2 = 0.10 \times 2 = 0.20 \text{ mol} \text{-----} \times 55,85 \text{ g/mol (MM Fe)} = 11.17 \text{ g}$$

Per  $\text{CO}_2$

$$n \text{ CO}_2 : n \text{ Fe}_2\text{O}_3 = 3:1$$

$$n \text{ CO}_2 = n \text{ Fe}_2\text{O}_3 \times 3 = 0.30 \text{ mol}$$

3) Si miscelano 0,78 g di dicromato di potassio con 5 g di cloruro di ferro(II). Calcolare quanti grammi di cloruro di cromo(III) si ottengono facendo la reazione in ambiente acido. La reazione in forma molecolare è:



[0.839 g]

4) Calcolare lunghezze d'onda, frequenze ed energia per le transizioni 3 → 2 e 4 → 2 nel modello di Bohr dell'atomo di idrogeno, indicando inoltre in quale regione dello spettro elettromagnetico si trovano. Le transizioni saranno in assorbimento o in emissione?

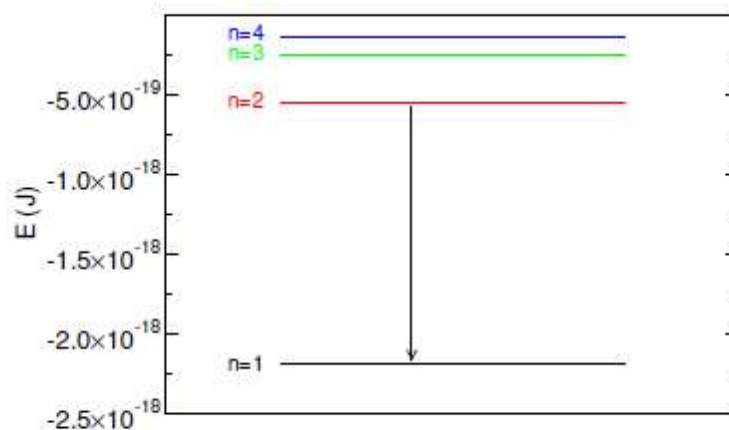


Figura. Energia delle "orbite elettroniche" secondo il modello di Bohr, per n=1, 2, 3 e 4.

R: Secondo il modello di Bohr, ad ogni orbita percorribile dall'elettrone corrisponde un determinato valore di energia che dipende da Z e dal numero quantico principale n.

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{8 \epsilon_0^2 n^2 h^2} = -(2.18 \times 10^{-18} \text{ J}) \frac{Z^2}{n^2}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Il problema ci chiede di determinare la differenza di energia, la frequenza e la lunghezza d'onda associate alle transizioni dai livelli 3 → 2 e 4 → 2.

La differenza di energia sarà calcolabile come segue:

$$\Delta E_H = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{8 \varepsilon_0^2 h^2} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = -(2.18 \times 10^{-18} \text{ J}) \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Essendo transizioni da livelli energetici superiori verso livelli energetici più bassi, si tratta in entrambi i casi di transizioni di EMISSIONE.

Per la transizione 3-->2

$$E_{3 \rightarrow 2} = -(2.18 \times 10^{-18} \text{ J}) (1/4 - 1/9) = -2.18 \times 10^{-18} \times 5/36 = -3.03 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Calcolata l'energia, l'equazione di Plank ci permette di ricavare la frequenza associata alla radiazione elettromagnetica rilasciata a seguito della transizione 3-->2

$$E = h\nu \rightarrow E/h = \nu \quad 3.03 \times 10^{-19} \text{ J} / 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \times \text{s} = 4.57 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

Sfruttando la relazione

$$\lambda = c/\nu$$

possiamo infine calcolare la lunghezza d'onda della radiazione elettromagnetica

$$\lambda = 3.0 \times 10^8 \text{ m/s} / 4.57 \times 10^{14} \text{ s}^{-1} = 6.56 \times 10^{-7} \text{ m} = 656 \text{ nm}$$

L'energia associata alla transizione in emissione tra i livelli energetici 3 e 2 corrisponde, quindi, ad un valore di lunghezza d'onda che cade nello spettro visibile.

Discorso analogo può essere fatto per la transizione 4-->2

$$E_{4 \rightarrow 2} = -(2.18 \times 10^{-18} \text{ J}) (1/4 - 1/16) = -2.18 \times 10^{-18} \times 3/16 = -4.09 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\nu = E/h = 4.09 \times 10^{-19} / 6.626 \times 10^{-34} = 6.17 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

$$\lambda = c/\nu = 3 \times 10^8 / 6.17 \times 10^{14} = 4.86 \times 10^{-7} \text{ m} = 484 \text{ nm (VISIBILE)}$$

7) Sapendo che il rame ha densità  $d = 8.96 \text{ g/cm}^3$  e che cristallizza in una struttura cubica a facce centrate (FCC) (vedi Figure), stimare il raggio atomico (confrontarsi con il dato della letteratura:  $r = 1.28 \text{ Å}$ ).

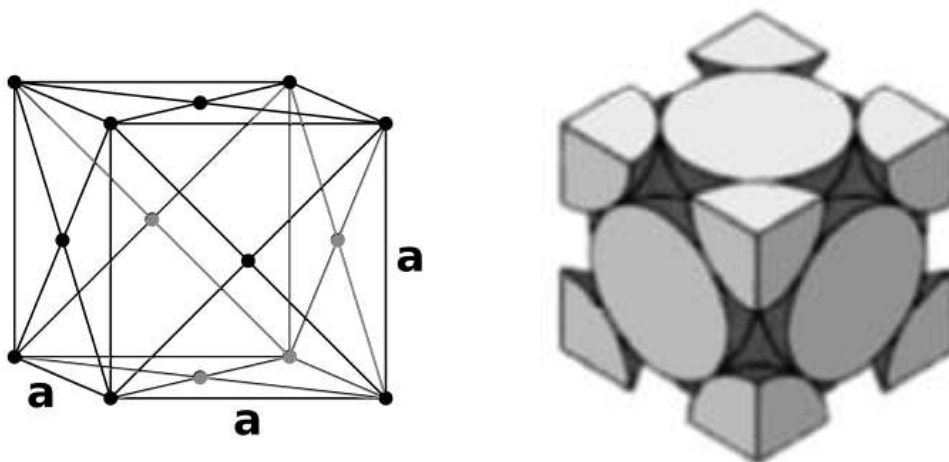


Figura. Struttura cubica a facce centrate

R: Il problema ci chiede di stimare il raggio atomico del rame, noto il suo valore di densità.

Dalla densità, nota la MM del rame (riportata sulla tavola periodica), possiamo calcolare il volume molare, cioè il volume occupato da una mole di atomi di rame.

$$V_{\text{molare}} = MM(\text{g/mol}) / d(\text{g/cm}^3) = 63.55(\text{g/mol}) / 8.96(\text{g/cm}^3) = 7.09 \text{cm}^3/\text{mol}$$

Dal volume molare possiamo ricavare il volume di un singolo atomo di rame, ricordandoci che una mole di sostanza contiene un Numero di Avogadro di particelle ( $6.022 \times 10^{23}$ )

$$V_{\text{Cu}} = 7.09 / 6.022 \times 10^{23} = 1.18 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$$

### I IPOTESI:

Se supponessimo che la cella elementare fosse occupata interamente da un atomo di rame di forma sferica, potremmo calcolare una buona approssimazione del raggio dall'inverso della formula del volume di una sfera.

$$V = (4/3)\pi r^3 \implies r = (3V_{\text{Cu}}/(4\pi))^{1/3} = 1.41 \times 10^{-8} \text{ cm} = 1.41 \text{ \AA}$$

Il raggio, in questo, caso risulta sovrastimato, in quanto è impossibile che una sfera occupi l'intero volume di un cubo.

### II IPOTESI:

Se supponessimo che il rame occupi il volume di una sfera inscritta in un cubo, potremmo calcolare il raggio come segue:

$$V = s^3 = (2r)^3 \implies r = (V)^{1/3} / 2 = 1.14 \times 10^{-8} \text{ cm} = 1.14 \text{ \AA}$$

In questo caso, però, il raggio risulta sottostimato.

### III IPOTESI:

Considerando l'impaccamento FCC, possiamo calcolare il numero di atomi di rame che occupa una cella elementare FCC

$$n_{\text{(Cu/Cella)}} = 1/8 \times 8(\text{VERTICI}) + 1/2 \times 6(\text{FACCE}) = 4 \text{ atomi/cella}$$

Il volume della cella elementare risulterà quindi essere pari a 4 volte il  $V_{\text{Cu}}$

$$V_{\text{cella}} = 4 \times V_{\text{Cu}} = 4 \times 1.18 \times 10^{-23} = 4.72 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$$

Osservando la Figura (destra) si può facilmente intuire che il raggio dell'atomo di rame sia un sottomultiplo della diagonale di faccia del cubo, nello specifico la diagonale di faccia ( $d$ ) è pari a 4 volte il raggio dell'atomo di rame. Calcoliamo quindi il valore della diagonale di faccia:

$$s = (V_{\text{cella}})^{1/3} = (4.72 \times 10^{-23})^{1/3} = 3.61 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$d = s \times (2)^{1/2} = 5.11 \times 10^{-8} \text{ cm} = 5.11 \text{ \AA}$$

Il raggio dell'atomo di rame sarà 1/4 di questo valore

$$r_{\text{Cu}} = 5.11/4 = 1.28 \text{ \AA}$$

Considerando l'impaccamento FCC, la determinazione del raggio dell'atomo di rame risulta corrispondente al valore tabulato.