

# Lezione 1. 28-09-21

martedì 28 settembre 2021 09:08

**CHIMICA:** la chimica studia la materia ovvero la sua composizione, le proprietà, le trasformazioni. La materia è composta da **ATOMI** che a loro volta sono formate da particelle subatomiche cioè protoni neutroni ed elettroni, le proprietà dipendono dal tipo di atomo della materia, le proprietà dipendono anche dal modo in cui gli atomi sono legati tra di loro, quindi dai legami. Ci sono sostanze che anche se sono formate dallo stesso tipo di atomi e dallo stesso numero di atomi sono una sostanza diversa, quindi il tipo di legame è fondamentale.

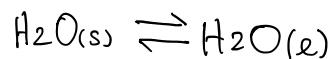
La materia può esistere in 3 stati di aggregazione: gassoso, liquido e solido, dipendono da temperatura e pressione, le sostanze allo stato solido sono quelle che hanno una forma propria e un volume proprio ben definiti, sono incompressibili cioè il volume non varia al variare della pressione, i liquidi non hanno una forma propria ma hanno un volume proprio e sono anch'essi incompressibili, i gas sono sostanze che non hanno una forma propria né un volume proprio, sono altamente compressibili.

**PROPRIETÀ FISICHE** sono intrinseche della sostanza, la sostanza le possiede in quanto tale, es il colore l'odore sapore temperatura di fusione ecc.

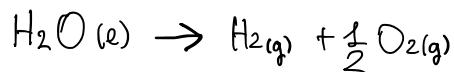
**PROPRIETÀ CHIMICHE** sono proprietà che la sostanza manifesta quando viene messa a contatto con altro, reattività con i metalli, reattività con gli acidi, infiammabilità ecc.

**TRASFORMAZIONI SPONTANEE** o **PROVOCATE DALL'UOMO** cioè le reazioni chimiche da laboratorio

**TRASFORMAZIONI FISICHE** modificano lo stato di aggregazione della sostanza, ma la sostanza non cambia es. acqua allo stato solido che passa allo stato liquido. Sono processi reversibili, avvengono in una variazione della temperatura



**TRASFORMAZIONE CHIMICHE** partono da una sostanza e arrivano ad un'altra sostanza, es. l'acqua si decomponendo in idrogeno gassoso e ossigeno gassoso. Molte trasformazioni chimiche avvengono con la temperatura, ma solitamente non sono reversibili.



Tutte le trasformazioni sono accompagnate da una variazione del contenuto di energia del sistema.

**ENERGIA** capacità di compiere lavoro.

**LAVORO** capacità di mettere in movimento un oggetto.

$$E = E_p + E_c$$

$\downarrow$   $\downarrow$   
potenziale       $\rightarrow$   $\rightarrow$   
                        energetica  
 $\downarrow$   $\downarrow$   
legato alla      legata al  
materia            movimento

legato alla  
posizione

legata al  
movimento

L'obiettivo è il minimo contenuto di energia, più basso è il contenuto di energia, tanto più il sistema è stabile.

**MATERIA:** costituita da

**MISCUGLI** sono dei sistemi che possono essere di tipo

- eterogenei (miscele) es. sabbia e limatura di ferro che sono ancora distinguibili e posso separarli senza subire alterazioni.
- omogenei (soluzioni) i componenti uniti non riesco ad identificarli separatamente es. acqua e sale, però ho dei limiti cioè la saturazione, se metto troppo sale questo non si scoglie e diventa un miscuglio eterogeneo.

**SOSTANZE PURE:** costituiti da

- **ELEMENTI** sono sostanze pure che non possono essere scomposte in sostanze più semplici, attualmente sono 118 elementi conosciuti Hg, Li, Na
- **COMPOSTI** sostanze pure che possono essere scomposte in sostanze più semplici es. acqua.

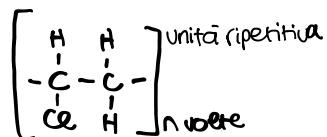
**ELEMENTI:**

- Singoli atomi (gas nobili, He, Ne ecc.) hanno una configurazione elettronica per cui non hanno alcun interesse a legarsi, sono alla massima stabilità già da soli
- Molecole biameriche ( $H_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $Cl_2$  ecc.) sono molecole fatte da due atomi nel loro stato elementare
- Aggregati di atomi tenuti insieme da legami di tipo metallico (Na, K, Ca, Mg ecc.)
- Aggregati di atomi tenuti insieme da legami di tipo covalente: Carbonio che esiste tramite dei legami (es grafite e diamante)

Elementi sono di 3 tipi : **METALLI**(duttili, malleabili, buoni conduttori di calore e di elettricità, solidi a temperatura ambiente tranne il mercurio), **NON METALLI**(non sono duttili, non sono malleabili, sono cattivi conduttori di calore e di elettricità, il bromo è liquido gli altri sono solidi e gassosi), **SEMIMETALLI** (sono una via di mezzo).

**COMPOSTI** li rappresentiamo tramite formule chimiche e sono:

- Molecolari ( $H_2O$ ,  $NH_3$ ,  $CH_4$  ecc.) aggregato di due o più atomi, stabilisco il numero di elementi solo guardando la formula, es.  $H_2O$  ha 2 molecole di idrogeno e 1 di ossigeno
- Ionici ( $NaCl$ ,  $CaCl_2$  ecc.) aggregati di ioni, ad es. cloruro di sodio che è formato in rapporto 1:1, Cloruro di calcio fatto da calcio e cloro con rapporto 1:2
- Polimerici sono molecole grandissime caratterizzate da aggregato di atomi (unità di ripetitiva) che viene ripetuta a formale una catena lunga (PVC polivinilcloruro)



Gli atomi sono neutri.

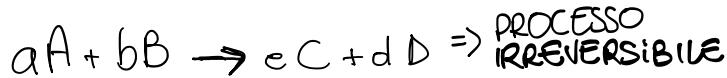
Ioni sono atomi che hanno acquistato o perso un elettrone, ad es. catione  $Na^+$  ha perso elettrone (ione sodio) , se l'atomo acquista un elettrone diventa uno ione negativo detto anione  $Cl^-$  ha acquistato un elettrone (ione cloruro).

$Na$  perde un elettrone  $\rightarrow Na^+$  (ione sodio)

Cl acquista un elettrone  $\rightarrow \text{Cl}^-$  (ione cloruro)

### LEGGE DI CONSERVAZIONE DELLA MASSA (LAVOISIER)

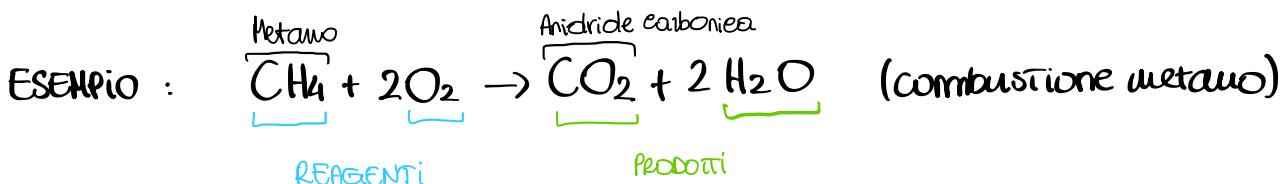
Ci dice che in una qualunque reazione chimica la massa totale dei prodotti deve essere uguale alla massa totale dei reagenti.



$\left\{ \begin{array}{l} A, B = \text{Reagenti} \\ C, D = \text{Prodotti} \\ a, b, c, d = \text{coefficienti stoichiometrici} \end{array} \right.$

$\rightarrow$  DIRETTA

$\leftarrow$  INVERSA



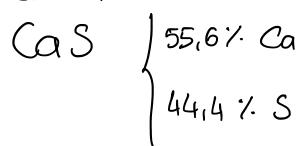
Legge esatta ma non rigorosa perché la variazione di massa è piccolissima ma non è uguale a 0, quindi non è rigorosa perché abbiamo una variazione di massa infinitesima.

$$E = mc^2 \quad \Delta E = \Delta m c^2 \Rightarrow \Delta m = \frac{\Delta E}{c^2}, \quad \Delta E \neq 0, \quad \Delta m \neq 0 \rightarrow \text{piccolissimo ma} \neq 0$$

### LEGGE DI COMPOSIZIONE COSTANTE

Ci dice che qualunque sostanza considerata, in qualunque modo ottenuta, ha sempre la stessa composizione.

(zolfo di calcio)



$$\frac{\text{massa Ca}}{\text{massa S}} = \frac{55,6}{44,4} = 1,25 \quad \text{La massa dell'atomo di calcio è 1,25 più pesante dell'atomo di zolfo.}$$

$$\frac{\text{massa Ca}}{\text{massa S}} = \frac{55,6}{44,4} = 1,25 \quad \text{La massa dell'atomo di calcio è 1,25 più pesante dell'atomo di zolfo.}$$

**PESO ATOMICO** ogni atomo è caratterizzato dal suo peso atomico

È il numero che mi dice quante volte il mio atomo pesa di più rispetto all'atomo di riferimento, non è quindi un valore assoluto, ma relativo.

Il riferimento è l'isotopo 12 del carbonio

,  $\frac{1}{12}$  della massa del  $^{12}\text{C}$

- Peso atomico: (relativo)

$$\text{PA(O)} = 16 \text{ unità di massa atomica (riferimento)}$$

$$\text{PA(Na)} = 23$$

$$\text{PA(H)} = 1,00079 \approx 1$$

- Peso Formula: (composti ionici)

$$\text{NaCl} \rightarrow 23 + 35,45 = 58,45$$

- Peso moleolare:

$$\text{H}_2\text{O} \rightarrow 1(2) + 16 = 18 \quad \text{PM(H}_2\text{O)} = 18$$

$$\text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow 1(2) + 32 + 16(4) = 98 \quad \text{PM(H}_2\text{SO}_4) = 98$$

**MOLE** è la quantità in grammi di sostanza pari a PA (se atomo) PM (se molecola)

$$\text{Na} \quad 1 \text{ mole Na} = 23 \text{ g Na}$$

$$\text{PA(Na)} = 23$$

$$\text{H}_2\text{O} \quad 1 \text{ mole H}_2\text{O} = 18 \text{ g H}_2\text{O}$$

$$\text{PM(H}_2\text{O)} = 18$$

$$\text{N}_2 \rightarrow 1 \text{ mole N}_2 = 28 \text{ g N}_2 \\ \text{PM(N}_2) = 28$$

Mole = quantità di atomi o molecole pari a

$$6,023 \cdot 10^{23} \text{ atomi o molecole}$$

**NUMERO DI AVOGADRO**

**SPETTROMETRO DI MASSA** strumento che determina il peso assoluto degli atomi, ovvero il loro peso effettivo. Il primo atomo misurato fu l'idrogeno che pesava  $1,67 \cdot 10^{-24}$  g

- Peso 1 atomo di H =  $1,67 \cdot 10^{-24}$  g

$$1 \text{ mole di H} = 1 \text{ g}, \text{ PA(H)} = 1$$

$$\frac{1 \text{ g}}{1,67 \cdot 10^{-24}} = 6,023 \cdot 10^{23} \text{ atomi di H}$$

- $\text{PA(O)} = 16$

$$1 \text{ mole O} = 16 \text{ g}$$

$$\frac{16 \text{ g}}{\underbrace{16}_{\downarrow} (1,67 \cdot 10^{-24})} = 6,023 \cdot 10^{23} \text{ atomi di O}$$

perché 16 volte più pesante di H

### PARTICELLE SUBATOMICHE:

- Protoni
- Neutroni, particelle instabili se isolate che si dissociano in p+ ed e-
- Elettroni

Big bang t=0

Dopo t=10^-6 sec compaiono i quark con una temperatura T=10^10 K

### BIG-BANG

- $t = 0$  ? (Non si sa cosa c'era)
- $t = 10^{-6}$  sec  $\rightarrow$  QUARK ( $2 \cdot 10^{-6}$ ) ,  $T = 10^{10}$  K
  - QUARK UP = +2/3 (carica)
  - QUARK DOWN = -1/3 (carica)
- $t = 0,1$  sec  $\rightarrow$  PROTONI  $\xrightarrow{1,672 \cdot 10^{-27}}$ , NEUTRONI  $\xrightarrow{1,675 \cdot 10^{-27}}$ ,  $T = 10^{10}$  K
- $t = 4$  min  $\rightarrow$  Materia Primordiale
  - Elio 25%
  - Idrogeno 75%

- 100 miliardi di anni fa  $\rightarrow$  Sistema solare

- 15 miliardi di anni fa  $\rightarrow$  1° uomo sulla terra

di anni fa

- 15 miliardi di anni fa  $\rightarrow$  1° uomo sulla terra

	MASSA	CARICA
PROTONE	$1,672 \cdot 10^{-27}$	$+1,6 \cdot 10^{-19}$
NEUTRONE	$1,675 \cdot 10^{-27}$	$\emptyset$
ELETTRONE	$9,11 \cdot 10^{-31}$	$-1,6 \cdot 10^{-19}$

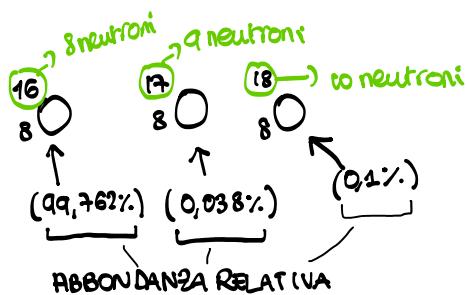
$$\text{Massa } e^- = \frac{1}{1836} \text{ massa } p^+$$

$$\text{Atomo neutro } n^o p^+ = n^o e^-$$

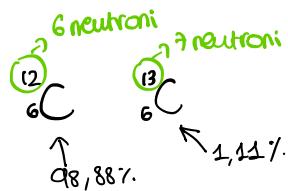
(A) numero massa ( $n^o$  protoni +  $n^o$  neutroni)  
 (2) ~~X~~ numero atomico ( $n^o$  protoni)

**ISOTOPI** atomi dello stesso elemento che hanno stesso numero atomico ma diverso numero di massa, differiscono per il numero di neutroni. (hanno le stesse proprietà chimiche)

- ISOTOPI OSSIGENO

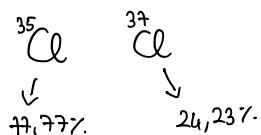


- ISOTOPI CARBONIO



- ISOTOPI CLORO

$$PA(\alpha) = 35,45$$



$$PA(^{35}\text{Cl}) = 34,968$$

$$PA(^{37}\text{Cl}) = 36,969$$

$$\left[ (34,968 \cdot 75,77) + (36,969 \cdot 24,23) \right] / 100 = 35,45 \text{ PA(Cl)}$$

# Lezione 2. 29-09-21

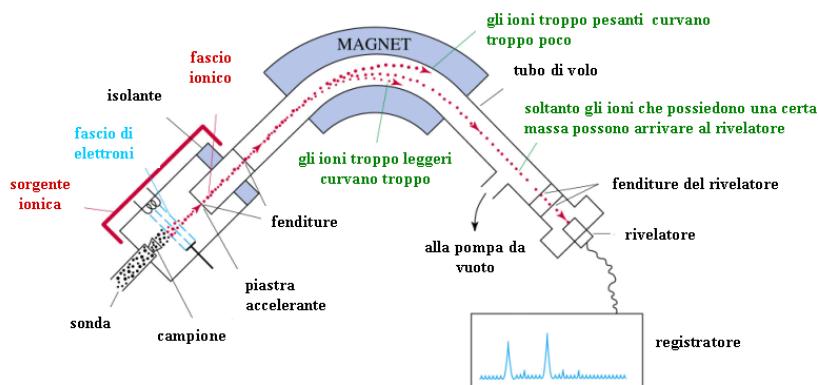
martedì 28 settembre 2021 12:25

**ISOTIPI IDROGENO:** atomi dello stesso elemento chimico che differiscono per il numero di neutroni (numero di massa).

(1 protone)	(1p + 1n)	(1p + 2n)
$^1_1 H$	$^2_1 H$	$^3_1 H$
Protio	Deuterio	Trizio
(99,985%)	(0,015%)	(tracce)

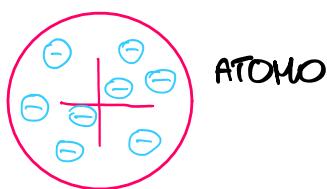
**SPETTROMETRO DI MASSA:** strumento che produce ioni (allo stato gassoso) e li separa in fase gassosa in base al loro rapporto massa/carica ( $m/z$ )

Composto da compartimenti sotto vuoto, ad esempio partiamo da un campione di idrogeno si introduce il campione e da un filo metallico incandescente si ha l'emissione di elettroni (fascio di elettroni), il fascio di elettroni colpisce il mio campione, gli atomi diventano ioni (ioni positivi per quanto riguarda l'idrogeno), passano attraverso una fenditura in modo da creare un fascio di ioni, subiscono un accelerazione (perché viene posto un campo elettrico), il fascio di ioni viene sottoposto all'azione di un campo magnetico, fa un tratto curvilineo e in base alla massa gli ioni curvano diversamente, rilevo i tre isotopi (che appunto hanno massa diversa) gli ioni raggiungono il rivelatore e mi danno un picco, nel caso dell'idrogeno avrò 3 picchi relativi ai 3 isotopi, il picco è proporzionale alla massa (più alta la massa più alto è il picco).

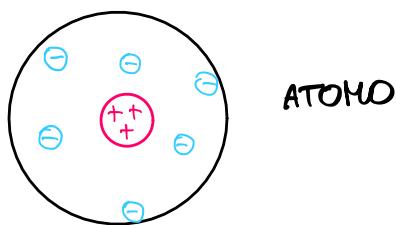


Le prime particelle subatomiche scoperte sono gli elettroni, da Thomson, vede che i raggi catodici sono dotati di particelle di carica negativa.

**MODELLO ATOMICO DI THOMSON** (modello a panettone)  
Ipotizza che l'atomo sia una sfera caricata positivamente in cui sono distribuite le particelle negative cioè gli elettroni.



**MODELLO ATOMICO DI RUTHERFORD** (modello planetario)  
Fece un esperimento ovvero viene presa una lamina di oro sottilissima che viene sottoposta a bombardamento con particelle dotate di carica elettrica positiva (particelle alpha, cioè nuclei di elio), succede che la maggior parte delle particelle attraversano la lamina come se attraversassero il vuoto (non incontrano ostacoli), alcune particelle subiscono una deviazione della traiettoria, una piccolissima quantità invece rimbalza indietro, la conclusione è che l'atomo è una struttura vuota, la massa è concentrata in un piccolo volume al centro caricato positivamente ovvero il NUCLEO, gli elettroni ruotano intorno al nucleo nella periferia dell'atomo.



Questo modello viene però criticato perché gli elettroni ruotando dovrebbero irraggiare (emettere energia) e ricadere sul nucleo.

Il quindi

#### MODELLO ATOMICO DI BOHR

Prende a riferimento l'atomo di idrogeno (1 solo elettrone)

##### 1° POSTULATO DI BOHR:

Parte dal modello planetario, dice che fra tutti i possibili stati in cui l'elettrone si può trovare, ne esistono alcuni definiti STATI STAZIONARI in corrispondenza dei quali l'elettrone può ruotare mantenendo la sua energia costante (mantiene l'atomo stabile).

##### 2° POSTULATO DI BOHR:

Riguarda la quantizzazione (quantizzare una grandezza significa imporre specifici valori a questa grandezza) di:

- Momento angolare: il momento angolare è quantizzato a determinati valori dipendenti da n.

$$m \cdot \omega \cdot r = n \frac{h}{2\pi}$$

costante di Planck

mou.  
ang.

numero quantico  
principale  $\rightarrow n = 1, 2, \dots +\infty$   
(inti positivi)

**numero quantico principale**  $\rightarrow n = 1, 2, \dots +\infty$   
(inti positivi)

$$n=1 \rightarrow (m\cup r)_1$$

$m\cup r$  dipende da  $n$

$$n=2 \rightarrow (m\cup r)_2$$

:

- Raggio dell'orbita:** il raggio è quantizzato cioè non può assumere qualsiasi valore, ma solo dei valori ben definiti.

$$r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m e^2}$$

massa carica elettrone

$$n=1 \rightarrow r_1$$

$$n=2 \rightarrow r_2$$

:

$r_1$   $\rightarrow$  orbita più vicina al nucleo  
(Nell'idrogeno)

$r_2$   $\rightarrow$  STATO FONDAMENTALE

$\rightarrow$  STATI STAZIONARI

(stati eccitati)

(+ Energia  
- vicini al nucleo)

$\downarrow$   
dove l'elettrone preferisce stare  
(+ vicino al nucleo  
- energia  
+ stabile)

- Energia:** l'energia è quantizzata cioè ha determinati valori dipendenti da  $n$ .

$$E = -\frac{1}{n^2} \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2}$$

$$n=1 \rightarrow E_1$$

$$n=2 \rightarrow E_2$$

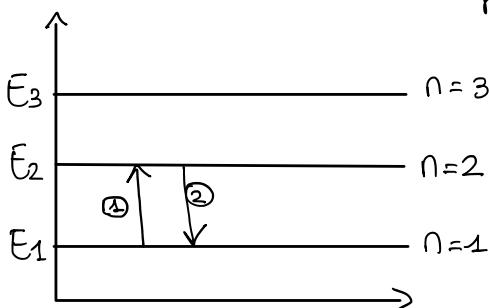
:

### 3° POSTULATO DI BOHR:

L'atomo e quindi l'elettrone ha la possibilità di assorbire ed emettere energia sotto forma di radiazione solo se il contenuto di energia della radiazione incidente (energia che fornisce sotto forma di radiazione) è tale da consentire all'elettrone di saltare dallo stato stazionario allo stato di energia superiore, poiché in questo stato è instabile l'elettrone ritorna nello stato

radiazione solo se il contenuto di energia della radiazione incidente (energia che fornisco sottoforma di radiazione) è tale da consentire all'elettrone di saltare dallo stato stazionario allo stato di energia superiore, poiché in questo stato è instabile l'elettrone ritorna nello stato stazionario e restituisce l'energia sottoforma di radiazione con frequenza (questo perché l'energia è quantizzata)

$$E = h\nu \rightarrow \nu = \frac{E}{h}$$



$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

frequenza [Hz]

$$\bar{\nu} = \frac{\nu}{c} \quad \begin{array}{l} \text{(frequenza espressa} \\ \text{in numeri d'onda)} \end{array}$$

$$\bar{\nu} = \frac{E_2 - E_1}{h \cdot c}$$

$$E_1 = -\frac{1}{n_1^2} \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2}, \quad E_2 = -\frac{1}{n_2^2} \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2}$$

$$\bar{\nu} = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3 c} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$\Rightarrow R = \text{numero di Rydberg}$

Conoscendo i valori di  $n_1$  e  $n_2$  possiamo ricavare la frequenza della radiazione emessa per effetto di radiazione.

Però per altri atomi, atomi più complessi, sorgono dei problemi..

Studiando gli spettri di emissione si osserva che questo modello per atomi più complessi non va bene.

Ricapitolando:

**SPECILO ATOMI IDROGENO (spettro a righe)**

↓  
spettro di emissione

**CAMPIONE DI IDROGENO GASSOSO (atomi di H nello stato fondamentale)**

↓  
ECCITAZIONE (radiazione a diversa frequenza)

↓

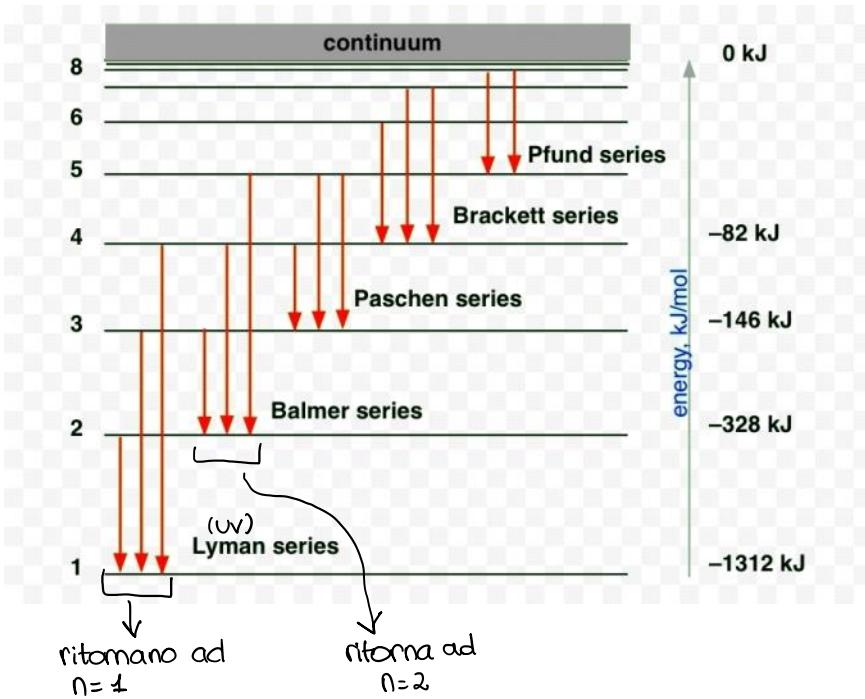
RITORNO ALLO STATO FONDAMENTALE

↓

EMISSIONE CONTEMPORANEA DI RADIAZIONI A DIVERSA FREQUENZA

**SPETTROSCOPIO:** le radiazioni colpiscono una lastra fotografica e si formano delle righe (spettro a righe)

ATOMI di H  $\Rightarrow$  { Lyman (uv)  
Balmer (Visible)  
Paschen (infrarossi)  
Brackett  
Pfund



# Lezione 3. 05-10-21

martedì 5 ottobre 2021 09:21

SPETTRI DI EMISSIONE (serie di righe) → spettri a righe  
RAGGRUPPAMENTI DI RIGHE sono i MULTIPLETTI

SOMMERFELD introduce il concetto di ORBITA ELLITTICA, ovvero a differenza di Bohr dice che gli elettroni orbitano su orbite ellittiche

Introduce il secondo numero quantico  $l$  che definisce principalmente la forma dell'orbita, ma in misura minore definisce anche l'energia

$l = \text{n}^{\circ}$  quantico secondario(angolare)

$$0 \leq l \leq n-1$$

- $n=1 \Rightarrow l=0 \rightarrow m=0$  Per il livello energetico caratterizzato da  $n=1$  abbiamo un'unica orbita

- $n=2 \Rightarrow \begin{cases} l=0 & E_{20} \rightarrow m=0 \\ l=1 & E_{21} \rightarrow \begin{cases} m=-1 \\ m=0 \\ m=1 \end{cases} \end{cases}$  Per  $n=2$  corrispondono due valori di  $l$ , quindi abbiamo due orbite che hanno forme diverse e contenuti di energia leggermente diversi

- $n=3 \Rightarrow \begin{cases} l=0 & E_{30} \rightarrow m=0 \\ l=1 & E_{31} \rightarrow \begin{cases} m=-1 \\ m=0 \\ m=1 \end{cases} \\ l=2 & E_{32} \rightarrow \begin{cases} m=-2 \\ m=-1 \\ m=0 \\ m=1 \\ m=2 \end{cases} \end{cases}$  Qui abbiamo 3 orbite (con Bohr avevano un'unica orbita). Quindi mentre con Bohr l'elettrone poteva passare da un livello 1 a un livello 3, ora l'elettrone ha la possibilità di andare su 3 orbite diverse, quando l'elettrone rientra nello stato fondamentale restituendo così energia avremo 3 radiazioni che hanno contenuti di energia diversi ma molto simili, quindi formeranno 3 righe molto vicine tra loro ovvero il MULTIPLETTO.

Ci sono anche degli SDOPPIAMENTI DI RIGHE: quando l'atomo sottoposto ad eccitazione e ad un campo magnetico esterno, si osservano nello spettro di emissione degli sdoppiamenti di righe. L'elettrone durante la sua rotazione intorno al nucleo genera lui stesso un campo magnetico, quindi per tenere conto di questo campo magnetico si introduce un altro numero quantico:

$m = \text{n}^{\circ}$  quantico magnetico  
 ↓ definisce  
 l'orientamento dell'orbita

$$-l \leq m \leq l$$

(incluso zero)

ESEMPIO form. energia orientamento  
 $l=0 \rightarrow E_{2p}, m=0$

$n=2$  ↙  $l=1 \rightarrow E_{2,1} \rightarrow \begin{cases} m=-1 \\ m=0 \\ m=1 \end{cases}$

Abbiamo in totale 4 orbite.

Si osservano delle righe che hanno uno spessore maggiore rispetto alle altre che sono la combinazione di due righe diverse (molto vicine), quindi si comincia a parlare della possibilità dell'elettrone di esistere in due diversi stati, cioè l'elettrone ruotando intorno al nucleo ruota anche intorno al proprio asse (in

senso orario o antiorario), si introduce un altro numero quantico:  
 $M_s$  = n° quantico di spin che indica il senso di rotazione dell'elettrone intorno al proprio asse.

$M_s$  = numero quantico di spin

$M_s = \pm \frac{1}{2}$  Può assumere solo questi due valori.

Due elettroni che differiscono unicamente per il numero quantico di spin (per il segno dello spin) sono due elettroni con spin antiparallelo.

Abbiamo ottenuto così 4 NUMERI QUANTICI: n caratterizza l'energia, l la forma e in parte l'energia, m l'orientamento e ms il senso di rotazione dell'elettrone intorno al proprio asse.

La teoria di BOHR entra in crisi poiché va in contrapposizione con il:

**PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE DI HEISENBERG:**

Afferma che data una particella di massa m che si muove con velocità v non è possibile determinare con esattezza, nello stesso momento, la posizione e la quantità di moto.

Minore è l'incertezza sulla posizione, maggiore sarà l'incertezza sulla quantità di moto e viceversa (questo va in contrasto con quanto detto da Bohr poiché lui dice che l'elettrone è una particella di massa m che si muove con velocità v su un'orbita ben definita e quindi istante per istante conosco la posizione)

Si sviluppa così una nuova teoria chiamata:

**TEORIA ONDULATORIA (meccanica ondulatoria)**

De Broglie: dice che per le radiazioni elettromagnetiche era stato dimostrata una duplice natura:

- natura ondulatoria (Ovvero la radiazione può essere descritta come un'onda che si propaga, con una certa lunghezza d'onda, frequenza ampiezza)
- natura corpuscolare (la radiazione può essere vista come un'insieme di pacchetti di energia ovvero fotoni)

Quindi De Broglie dice che se questo vale per la luce allora vale anche per la materia :

- Natura ondulatoria (particella di massa m che si muove con una velocità v, possiamo associargli un'onda con lunghezza d'onda  $\lambda = \frac{h}{mv}$ )
- Natura corpuscolare

L'elettrone non più visto come particella ma come carica elettrica negativa delocalizzata su un'onda detta ONDA DI PROBABILITÀ (def. facendo il quadrato dell'ampiezza dell'onda in ogni punto ho un valore che è direttamente proporzionale al valore della probabilità di trovare l'elettrone in quel punto)  
La teoria ondulatoria ci dice quindi che non vedo più l'atomo come un nucleo e particelle che ruotano, ma come uno spazio intorno al nucleo con elevata densità di carica elettrica negativa (carica dovuta agli elettroni).

La formazione dei legami (chimici) si basa sulla sovrapposizione di zone ad elevata densità di carica elettrica negativa.

Riuscire ad identificare queste zone è importante.

Conoscere queste zone è possibile con la risoluzione di un'equazione chiamata:

**EQUAZIONE DI SCHROEDINGER**

Describe il comportamento dell'elettrone visto come onda e risolvendo l'equazione si identificano le zone ad elevata densità di carica elettrica negativa (dovuta agli elettroni)

Parte dalle ipotesi di De Broglie, ovvero parte dallo studio della natura ondulatoria dell'elettrone allora esso deve soddisfare un'equazione di propagazione. (l'equazione è così complessa che è stato possibile risolverla solo per l'idrogeno).

Le soluzioni dell'equazione sono funzioni matematiche chiamate **funzioni d'onda o orbitali** =  $\Psi$   
Ognuna di queste funzioni matematiche identifica uno stato elettronico.

$\Psi^2_{(x,y,z)}$  = densità di probabilità

Indica qual è la probabilità di trovare l'elettrone in ciascun punto dello spazio di coordinate x,y,z intorno al nucleo.

È caratterizzata da 3 parametri:

$\Psi$  = n° quantico principale (energia orbitale)

al nucleo.

È caratterizzata da 3 parametri:

$$\Psi_{n,l,m}$$

$n = n^{\circ}$  quantico principale (energia orbitale)

$l = n^{\circ}$  quantico secondario (forma orbitale)

$m = n^{\circ}$  quantico magnetico (orientamento orbitale)

Per convenzione:

$$\left\{ \begin{array}{ll} l=0 & \rightarrow \text{orbitale } s \\ l=1 & \rightarrow \quad " \quad p \\ l=2 & \rightarrow \quad " \quad d \\ l=3 & \rightarrow \quad " \quad f \end{array} \right.$$

esempi:

$$\Psi_{1,0,0} = \text{orbitale } 1s$$

numero quantico principale

numero quantico secondario

$$\Psi_{2,0,0} = \text{orbitale } 2s$$

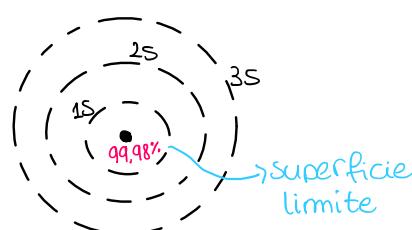
ORBITALI DI TIPO S: sono a simmetria sferica

$1s \rightarrow \text{orbitale a simmetria sferica}$

Cioè il valore dell'orbita dipende esclusivamente dal raggio, cioè dalla distanza dal nucleo, quindi per tutti i punti che si trovano alla stessa distanza dal nucleo, il valore della funzione è lo stesso.

Se ho una superficie sferica di raggio=inf questa mi racchiude la zona dello spazio intorno al nucleo all'interno della quale ho 100% della probabilità di trovare l'elettrone, ma questo implicherebbe che l'atomo abbia dimensione infinita e così non è.

Però troviamo una zona dove abbiamo il 99,98% di probabilità di trovare l'elettrone, questa zona è detta SUPERFICIE LIMITE DELL'ORBITALE.

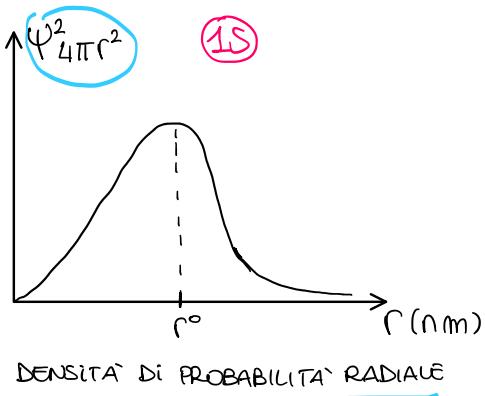
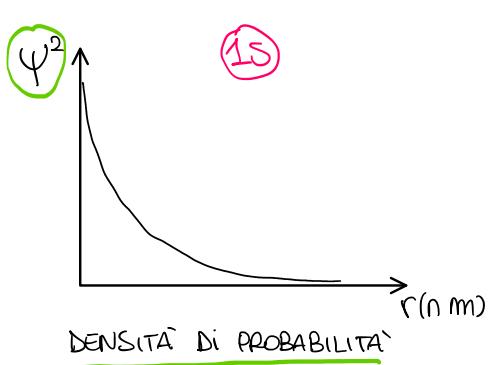


Tutti gli orbitali di tipo s hanno una superficie limite che è sferica.

Simmetria sferica: significa che il valore della funzione dipende solo da  $r$

Superficie limite: superficie dentro la quale ho quasi il 100% di probabilità di trovare l'elettrone.

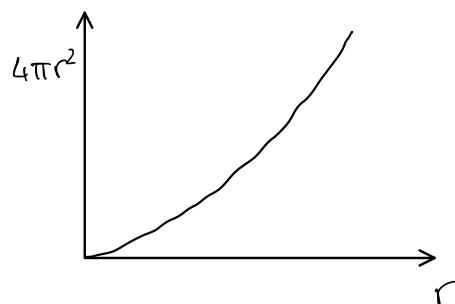
Guardiamo i grafici relativi agli orbitali dell'idrogeno:



Partendo dal nucleo dove ho massima probabilità di trovare l'elettrone, questa probabilità diminuisce man mano che mi allontano dal nucleo.

Densità di probabilità: mi dice qual è la probabilità di trovare un elettrone in un punto ad una certa distanza  $r$  dal nucleo.

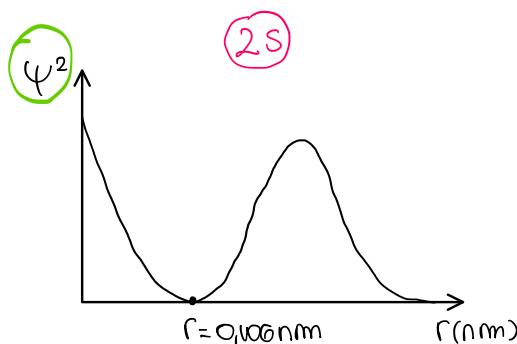
Densità di probabilità radiale: mi dice qual è la probabilità di trovare l'elettrone su un'intera superficie sferica di raggio  $r$ . (è ottenuta dal prodotto dei grafici di  $\Psi^2$  e  $4\pi r^2$ )



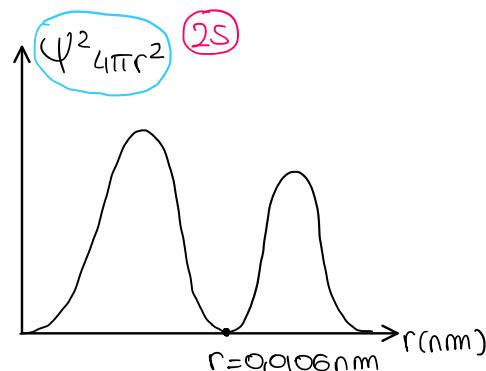
Atomo di Idrogeno  $r^{\circ} = 0,053 \text{ nm}$

Nell'atomo di idrogeno  $r^{\circ}$  è un punto di massimo del grafico, è il raggio di una superficie sferica, è il raggio della prima orbita di Bohr (stato fondamentale). Quindi la teoria ondulatoria mi dice che c'è una superficie di raggio  $r^{\circ}$  dove è massima la probabilità di trovare un elettrone.

Andamento dell'orbitale 2s:



Qui il grafico della densità di probabilità ha un minimo, cioè un punto dove la probabilità di trovare un elettrone è nulla.



#### SUPERFICIE NODALE

Anche qui abbiamo un minimo che indica una superficie sferica di raggio  $r$  in ogni punto della quale la probabilità di trovare l'elettrone è nulla, questa superficie è detta:

**SUPERFICIE NODALE:** è una superficie in ogni punto della quale la probabilità di trovare un elettrone è 0

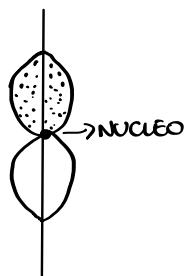
Gli orbitali con  $l=1$  sono chiamati:

**ORBITALI DI TIPO P:** sono a simmetria cilindrica, hanno un carattere meno penetrante di quelli di tipo s, cioè la densità di carica in prossimità del nucleo è minore rispetto a quella che ho per un orbitale di tipo s.

$$n=1, l=0, m=0$$

$$n=2 \left\{ \begin{array}{l} l=0, m=0 \\ l=1, m=-1 \\ l=1, m=0 \\ l=1, m=1 \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{array}{l} n=2, l=1, m=-1 \\ n=2, l=1, m=0 \\ n=2, l=1, m=1 \end{array} \right\} \quad \text{3P}$$



$$\begin{aligned} \Psi_{2,1,-1} \\ \Psi_{2,1,0} \\ \Psi_{2,1,1} \end{aligned}$$

3 orbitali di tipo p

$$p_x, p_y, p_z$$

→ ORBITALI DEGENERI

Hanno lo stesso contenuto di energia e stessa forma.

Il livello p è 3 volte degenero, cioè esistono 3 orbitali p con lo stesso contenuto di energia, stessa forma e diverso orientamento

STessa energia  
STessa forma  
diversa orientazione

Gli orbitali con  $l=2$  sono chiamati:

ORBITALI DI TIPO D:

$$n=3 \rightarrow l=2 \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} m=-2 \\ m=-1 \\ m=0 \\ m=1 \\ m=2 \end{array} \right.$$

Ci sono 5 orbitali d, hanno stessa forma, stessa energia e 5 diversi orientamenti cioè il livello d è 5 volte degenero.

#### ATOMI PLURIELETTRONICI

Per gli altri atomi si è cercato di risolvere l'equazione di Schroedinger facendo delle approssimazioni  
Anche qui le soluzioni dell'eq. sono:

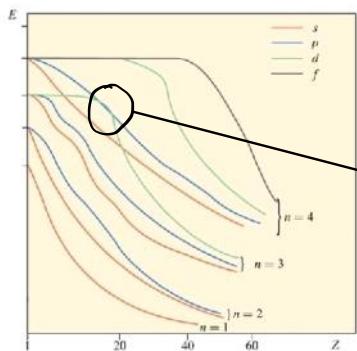
$\Psi_{n,l,m}$  = funzione d'onda o orbitali

Negli atomi con più elettroni il contenuto di energia degli orbitali diminuisce all'aumentare del valore di  $z$ , cioè l'orbitale 2s di un atomo con 20 elettroni ( $z=20$ ) ha un certo contenuto di energia, in un atomo con  $z=40$  ha un contenuto di energia più basso, cioè si parla di **contrazione della superficie limite degli orbitali**.

Man mano che elettroni aumentano il contenuto di energie degli orbitali diminuisce, poiché la contrazione porta ad un abbassamento del contenuto di energia, perché gli elettroni più sono vicini al nucleo più risentono dell'attrazione, maggiore è la stabilità quindi più bassa l'energia.

## Riempimento degli orbitali

Variazione di energia in funzione del numero atomico



Il 3d ha un andamento anomalo per cui il suo contenuto di energia è maggiore del 4s, quindi il primo a riempirsi sarà prima il 4s e poi il 3d

AUFBAU (costruzione dell'atomo) dobbiamo conoscere il numero atomico, dobbiamo ricordare che l'idrogeno l'energia dipende solo da  $n$  quindi a parità di  $n$  un 2s o un 2p hanno lo stesso contenuto di

energia (negli atomi plurieletronici non è così)

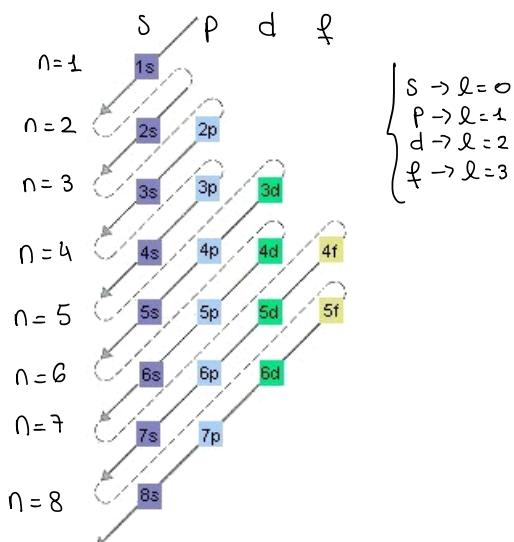
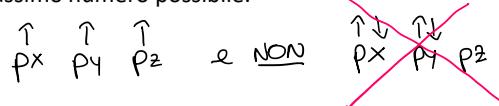
Dobbiamo anche conoscere due importanti regole:

- PRINCIPIO DI ESCLUSIONE DI PAULI: in un atomo non possono esserci 2 o più elettroni con tutti e quattro i numeri quantici uguali (almeno per uno devono differire).

$$2s \rightarrow n=2, l=0, m=0, ms=\frac{1}{2}$$

$$n=2, l=0, M=0, ms=-\frac{1}{2}$$

- REGOLA DI HUND: la sistemazione degli elettroni negli orbitali degeneri deve avvenire in modo da riempirne il massimo numero possibile.



Esempi:

#### CONFIGURAZIONE ELETTRONICA OSSIGENO:

$$\text{O} \quad \tau = 8$$

$$n=1 \quad 1s \uparrow \downarrow$$

$$n=2 \quad 2s \uparrow \downarrow \quad 2p_x \uparrow \downarrow \quad 2p_y \uparrow \quad 2p_z \uparrow$$

$$1s^2 \ 2s^2 \ 2p^4 \quad \text{2 elettroni nell' } 1s, \text{ 2 elettroni del } 2s, \text{ 4 elettroni nel } 2p$$

#### CONFIGURAZIONE ELETTRONICA CLORO

$$\text{Cl} \quad \tau = 17$$

$$n=1 \quad 1s \uparrow \downarrow$$

$$n=2 \quad 2s \uparrow \downarrow \quad 2p_x \uparrow \downarrow \quad 2p_y \uparrow \downarrow \quad 2p_z \uparrow \downarrow$$

$$n=3 \quad 3s \uparrow \downarrow \quad 3p_x \uparrow \downarrow \quad 3p_y \uparrow \downarrow \quad 3p_z \uparrow$$

$$1s^2 \ 2s^2 \ 2p^6 \ 3s^2 \ 3p^5$$

#### TAVOLA PERIODICA:

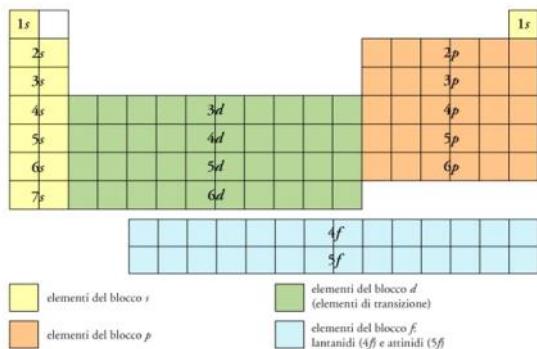
Ideata da Mendeleev nel 1869 e successivamente perfezionata, raccoglie tutti gli elementi noti e li ordina in base al loro numero atomico in modo crescente.

Composta da 7 righe orizzontali chiamate periodi e 18 colonne verticali chiamate gruppi.

Gli elementi sulla stessa riga vanno da un elemento metallico fino a un gas nobile, sono caratterizzati dal fatto di aver i loro elettroni più esterni in orbitali caratterizzati dallo stesso numero quantico  $n =$  periodo. Nei gruppi si distinguono 8 gruppi principali che hanno la stessa configurazione elettronica esterna, hanno lo stesso numero di elettroni nel livello più esterno, gli elettroni nel livello più esterno (elettroni di valenza) sono importanti in quanto da loro dipendono le proprietà (gli elementi di uno stesso gruppo che hanno la stessa configurazione elettronica esterna hanno le stesse proprietà).

Abbiamo 7 righe quanto i livelli di energia:

## Tavola periodica



Il numero di elementi contenuti in ogni riga corrisponde al numero massimo di elettroni che possono essere collocati nel livello energetico corrispondente.

Es. nella 6° riga ci sono 32 elementi perché nel 6° livello energetico c'è posto per 32 elettroni.

L'idrogeno fa parte del primo gruppo solo perché ha la stessa configurazione elettronica degli elementi del primo gruppo, stesso vale per l'elio che fa parte dell'ottavo gruppo ovvero i gas nobili (elementi che esistono come singoli atomi perché hanno già una configurazione elettronica che è quella di massima stabilità cioè hanno otto elettroni nel livello più esterno, ovvero l'OTTETTO) l'elio è un gas nobile ma non ha 8 elettroni nel livello più esterno ma ne ha solo 2.

Nella tavola periodica gli elementi possono essere suddivisi in 3 classi : metalli, non metalli, semimetalli (o metalloidi). Alcuni elementi sono solidi, altri allo stato gassoso e altri allo stato liquido.

Metalli tutti solidi tranne il mercurio, sono buoni conduttori di calore ed elettricità, duttili (riducibili in fili) e malleabili (riducibili in lame-fogli), tendono a cedere elettroni e a formare ioni positivi.

Non metalli, sono cattivi conduttori di calore ed elettricità, né duttili, né malleabili, tendono ad acquistare elettroni e a formare ioni negativi.

Semimetalli, sono in tutto 7, a temperatura ambiente sono solidi, né conduttori né isolanti (sono una via di mezzo).

Elementi di uno stesso gruppo sono elementi con caratteristiche simili, sono riuniti in famiglie:

Metalli alcalini, metalli alcalino-terrosi, alogenzi, gas nobili, metalli di transizione, lantanidi e attinidi.

Gli elementi che chiudono i periodi sono i **gas nobili**, così chiamati per la scarsissima reattività dovuta alla loro configurazione elettronica stabile.

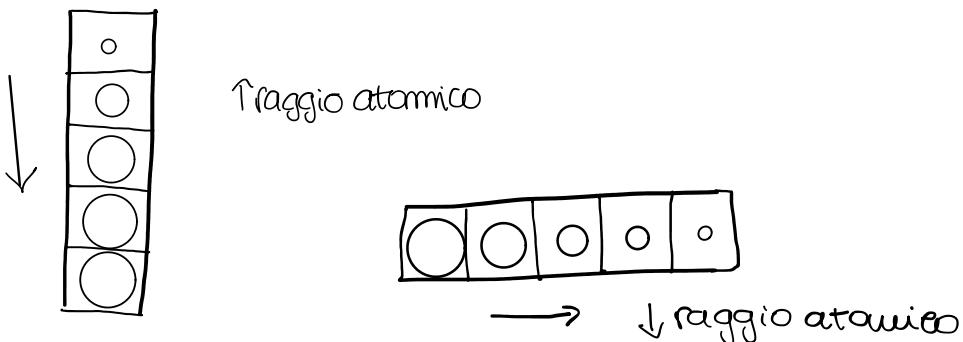
He 2	
Ne 10	$1s^2 2s^2 2p^6$
Ar 18	$1s^2 2s^2 2p^6; 3s^2 3p^6$
Kr 36	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$
Xe 54	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6$
Rn 86	$Xe 4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$
Uuo 118	

## Regola dell'ottetto

Nel settimo periodo ci sono dei buchi (113-115-117) perché sono elementi che sono stati scoperti ma che hanno una vita brevissima.

Spostandoci verticalmente, scendendo dal gruppo 1 verso il basso, succede che le dimensioni atomiche aumentano, perché il numero di elettroni nel livello più esterno è lo stesso ma man mano che scendiamo gli elettroni sono situati più lontani dal nucleo quindi risentono meno dell'attrazione del nucleo, quindi c'è espansione.

Spostandoci orizzontalmente, dai metalli ai non metalli, le dimensioni atomiche diminuiscono perché: su una stessa riga gli elementi hanno lo stesso numero di n, quindi la distanza degli elettroni è la stessa, però man mano che mi sposto verso destra il valore di z aumenta (cioè aumenta il numero di elettroni) e quindi aumenta il numero dei protoni cioè la carica positiva del nucleo, quindi l'azione attrattiva del nucleo diventa più forte quindi c'è una contrazione.



**RAGGIO ATOMICO:** distinguiamo

**RAGGIO METALLICO:** si riferisce agli elementi di tipo metallico, ed è 1/2 della distanza che c'è tra i nuclei di due atomi all'interno del metallo.

es. nello zinco la distanza fra due atomi è 266 pm

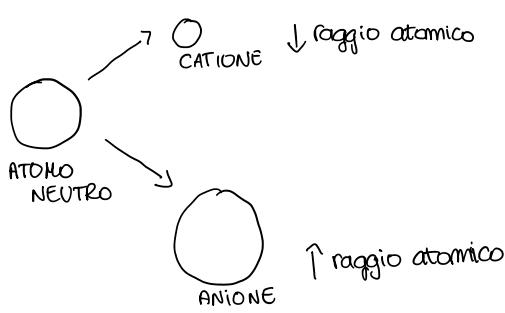
$$\Rightarrow r_{Zn} = \frac{1}{2}(266) = 133 \text{ pm}$$

**RAGGIO COVALENTE:** lo calcolo come 1/2 della distanza che c'è tra nuclei di due atomi uniti da un legame di tipo covalente

es. H<sub>2</sub>    H-H    distanza tra nuclei = 0,074 nm

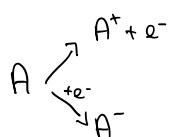
$$r_H = \frac{1}{2}(0,074) = 0,037 \text{ nm}$$

L'ATOMO è una struttura neutra che se perde o acquista elettroni diventa uno ione (ioni positivi chiamati cationi e ioni negativi chiamati anioni)



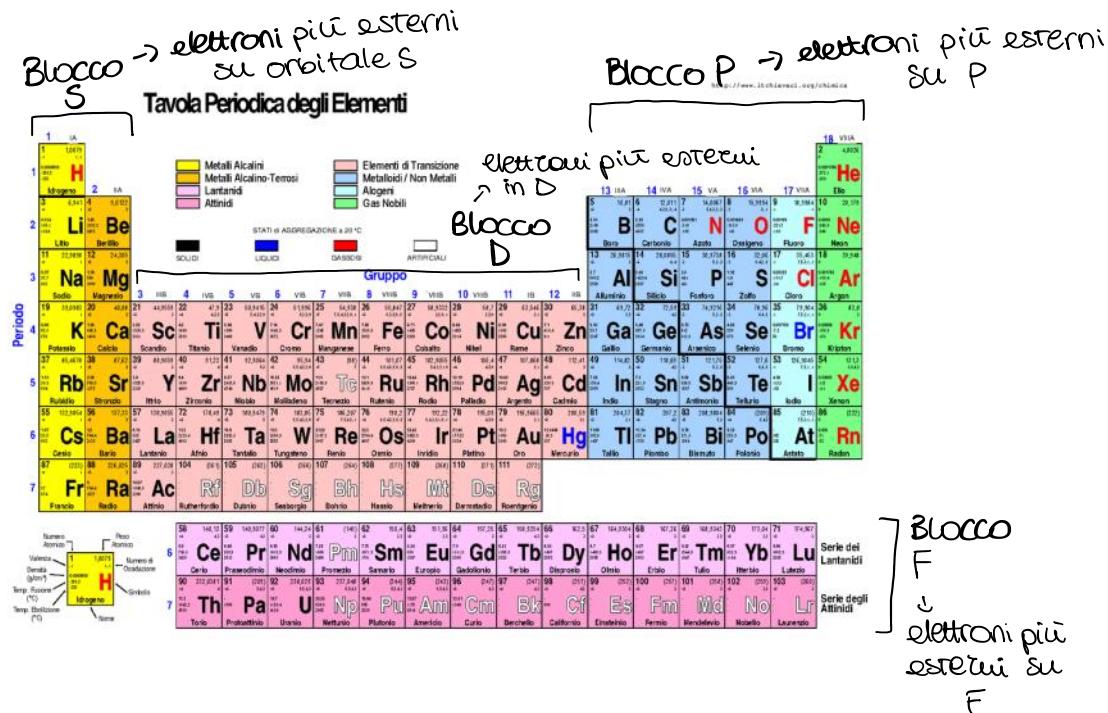
Il raggio atomico diminuisce perché c'è una prevalenza di protoni, quindi l'azione attrattiva del nucleo verso gli elettroni rimasti è più forte quindi si ha una contrazione

L'anione acquista un elettrone quindi abbiamo un eccesso di carica negativa, quindi l'azione attrattiva del nucleo diminuisce e quindi c'è espansione.



Lezione 4. 06-10-21

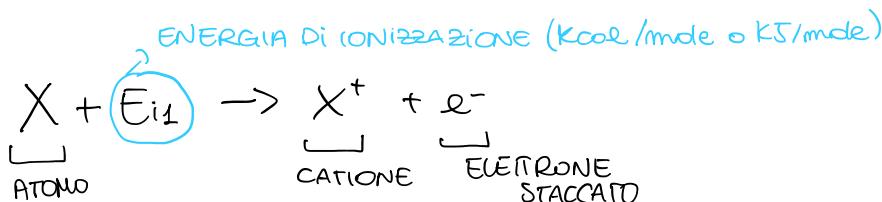
mercoledì 6 ottobre 2021 13:33



## ENERGIA DI IONIZZAZIONE

È quota di energia che deve essere spesa per strappare un elettrone ad un atomo gassoso isolato e nel suo stato fondamentale e portare l'elettrone a distanza infinita.

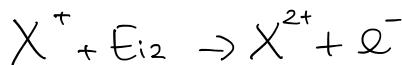
La sottrazione dell'atomo comporta la trasformazione dell'atomo in uno one positivo



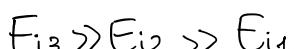
L'energia in entrata che io fornisco è una quantità positiva.

$E_{i1}$ : Energia di prima ionizzazione che serve per strappare un primo elettrone

Se volessi strappare un altro elettrone:



$E_{i2}$ : Energia di seconda ionizzazione



Perché quando vado a sottrarre il secondo elettrone io ho un catione (dove ci sono più protoni che elettroni) quindi c'è una forza attrattiva del nucleo sugli elettroni e quindi l'energia deve essere maggiore.

Elementi con più bassi valori di energia di ionizzazione sono i metalli alcalini, perché gli elementi del primo gruppo hanno un solo elettrone nel livello più esterno e quindi perdere l'elettrone è un vantaggio perché cercano di raggiungere una configurazione più stabile.

#### Andamento energia di ionizzazione:

Spostandoci dai metalli ai non metalli l'energia di ionizzazione aumenta perché la tendenza a perdere l'elettrone diventa sempre minore, infatti arrivando agli alogeni (7 gruppo) che hanno 7 elettroni nel livello più esterno hanno più interesse ad acquisire un elettrone che a perderlo, i gas nobili (8 gruppo) sono già stabili.

Andando dall'alto verso il basso l'energia di ionizzazione diminuisce perché aumentano le dimensioni atomiche quindi aumenta la distanza nucleo-elettroni esterni e quindi la forza attrattiva diminuisce quindi meno energia da spendere.

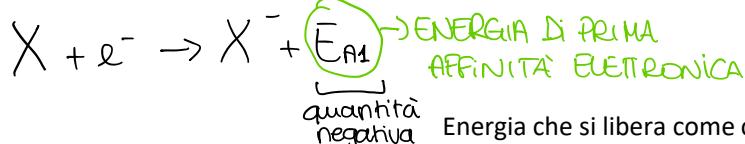
Quali sono gli elementi con il più basso valore di energia di seconda ionizzazione?

Gli elementi del secondo gruppo che hanno 2 elettroni nel livello più esterno, per i quali perdere il secondo è vantaggioso, e così via..

#### AFFINITÀ ELETTRONICA:

Energia in gioco nel processo di acquisto di un elettrone da parte di un atomo gassoso isolato e nel suo stato fondamentale. Diciamo "energia in gioco" perché l'acquisto di un primo elettrone comporta per tutti gli atomi (tranne per i gas nobili) liberazione di energia.

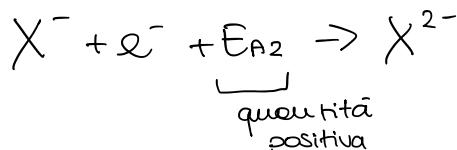
~~ACQUISTO DI UN ELETTRONE → ENERGIA LIBERATA DAL SISTEMA~~



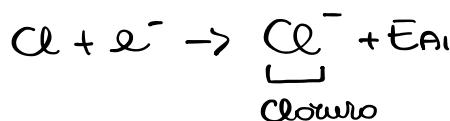
quantità negativa

Energia che si libera come conseguenza dell'acquisto del primo elettrone da parte dell'atomo neutro, quindi è energia in uscita dal sistema quindi una quantità negativa.

ACQUISTO DI UN SECONDO ELETTRONE → FORNISCO ENERGIA



#### Esempio



Quali sono gli elementi con maggiore affinità elettronica? (cioè liberano la maggiore quota di energia quando acquistano un elettrone) Sono quelli del settimo gruppo, cioè quelli che hanno 7 elettroni nel livello più esterno e quindi hanno interesse ad acquistare l'elettrone per arrivare all'ottetto.

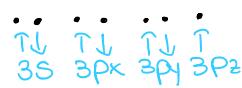
#### Andamento affinità elettronica:

Spostandoci dai metalli ai non metalli l'affinità elettronica aumenta (per lo stesso motivo di prima), infatti le dimensioni atomiche diminuiscono quindi l'azione attrattiva del nucleo è maggiore quindi più affinità.

Scendendo nel gruppo dall'alto verso il basso l'affinità elettronica diminuisce, le dimensioni atomiche aumentano quindi l'azione attrattiva diminuisce quindi minor affinità.

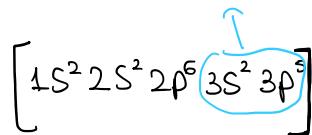
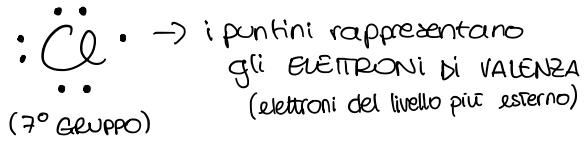
#### ATOMI NELLA FORMA DI LEWIS:

$\cdot \ddot{\text{O}} \cdot \rightarrow$  i puntini rappresentano



## ATOMI NELLA FORMA DI LEWIS:

3S 3Px 3Py 3Pz



(6° GRUPPO)



(1º GRUPO)

Questa regola va bene per gli elementi del gruppo S e P, mentre per quelli del gruppo D e F la configurazione elettronica esterna può variare (ad esempio per ossidazione).

#### **LEGAME CHIMICO:**

Le proprietà della materia dipendono dal tipo di atomi e anche dal legame.

Possiamo parlare dell'esistenza di un legame chimico solo se le forze che tengono insieme questi atomi sono tali da consentire la formazione di un sistema così stabile che se ne può identificare l'esistenza.



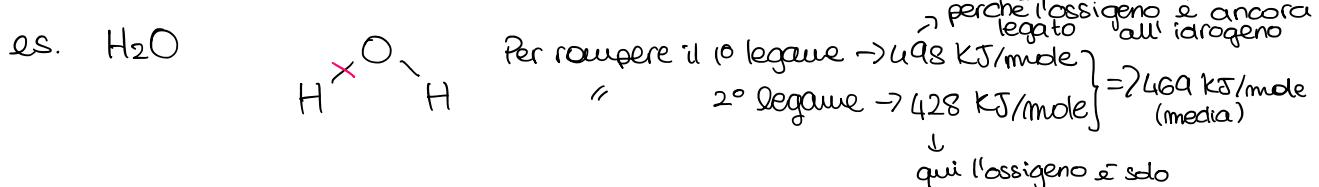
La tendenza degli atomi a forare legami deriva dalla necessità di trovare una configurazione elettronica più stabile.

Quando due atomi si legano si ha liberazione di energia perché il sistema è più stabile, quindi se vogliamo rompere il legame dobbiamo fornire energia

**ENERGIA DI LEGAME** quota di energia che deve essere fornita per rompere il legame fra i due atomi.

Ogni legame ha una sua energia di legame.

L'energia dipende dal tipo di atomi e dal contesto in cui i due atomi si trovano.



**Legami di tipo covalente atomico:** legame covalente omeopolare, legame covalente eteropolare, legame covalente dativo : legame basato sulla condivisione di elettroni

**Legami di tipo elettrostatico:** legame ionico, legame a idrogeno (a ponte di idrogeno), interazioni dipolari (perché non sono dei veri e propri legami stabili, ma legami temporanei molto deboli); legame che si basa sulla attrazione tra cariche di segno opposto.

### **Legame metallico**

### LEGAME COVALENTE O ATOMICO:

**LEGAME COVALENTE O ATOMICO.**

Teoria VB (teoria del legame di valenza)

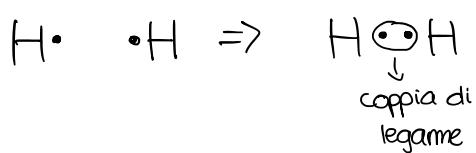
Teoria VB (teoria del legame di valenza)      j  
Teoria degli orbitali molecolari (è diversa dalle prime due)

**Teoria di Lewis**: la formazione di un legame covalente tra due atomi si basa sulla condivisione di una o più coppie elettroniche che sono chiamate coppie di legame.

Se la coppia elettronica condivisa è 1 parliamo di legame singolo, se le coppie condivise sono 2 parliamo di legame doppio, se le coppie condivise sono 3 parliamo di legame triplo. Affinchè un atomo possa fare un legame covalente con un altro atomo deve possedere almeno un elettrone spaiato.

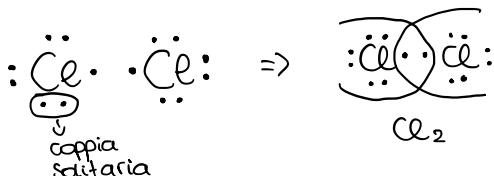


ai legame doppio, se le coppie condivise sono 3 parliamo di legame triplo. Attinche un atomo possa rare un legame covalente con un altro atomo deve possedere almeno un elettrone spaiato



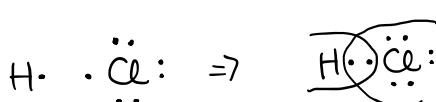
LEGAME SINGOLO  $\rightarrow$  l'atomo di idrogeno ottiene così 2 elettroni raggiunge la configurazione elettronica dell'elio

Questo avviene perché così ogni atomo avrà raggiunto una configurazione elettronica più stabile

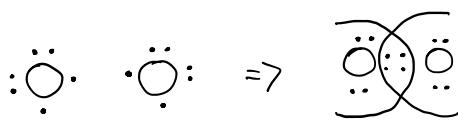


LEGAME SINGOLO

Così il cloro raggiunge l'ottetto

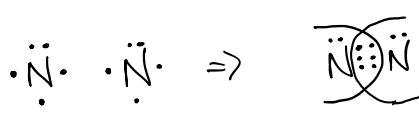


LEGAME SINGOLO



LEGAME DOPPIO

$\text{O}_2$



LEGAME TRIPLO

$\text{N} \equiv \text{N}$

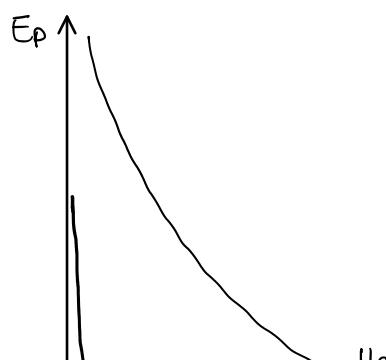
$\text{N}_2$

raggiunge l'ottetto

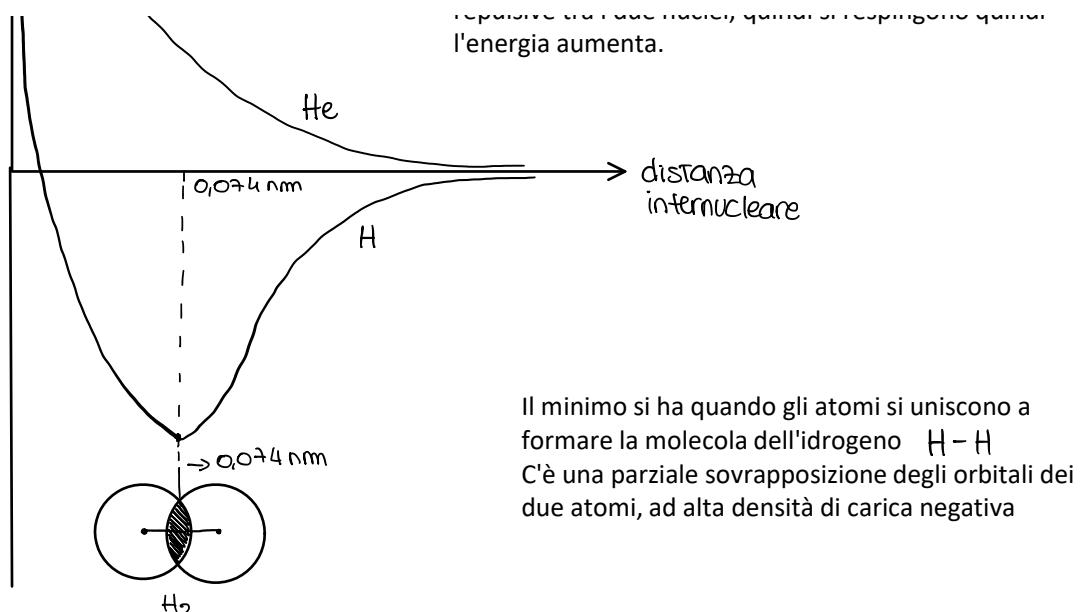
Il legame covalente singolo è più lungo del doppio che è più lungo del triplo.  
L'energia di legame aumenta, cioè è maggiore in un legame triplo.

**Teoria VB** (Valence Bond): è un'evoluzione della teoria di Lewis

Un legame covalente si forma quando gli orbitali di due atomi si sovrappongono. La zona di sovrapposizione ad alta densità di carica negativa costituisce l'elemento legante.



Man mano che la distanza internucleare diminuisce l'energia potenziale diminuisce fino ad arrivare ad un minimo, superato il minimo prevalgono le forze repulsive tra i due nuclei, quindi si respingono quindi l'energia aumenta.



Questo vale per tutti gli atomi tranne che per i gas nobili, poiché ad esempio i due atomi di elio non vogliono stare insieme, l'avvicinamento destabilizza il sistema e quindi aumenta l'energia.

#### Teoria degli orbitali molecolari:

Nasce per spiegare l'esistenza di molecole avente un numero dispari di elettroni.

È una teoria che possiamo applicare ad un numero ristretto di molecole ovvero molecole biatomiche omnucleari di elementi del secondo periodo.

Nelle altre teorie si suppone che gli elettroni che vengono condivisi rimangano ciascuno nel proprio orbitale atomico.

Questa teoria dice che quando due atomi si legano attraverso un legame covalente i loro orbitali atomici si combinano a formare degli orbitali molecolari, gli elettroni dei due atomi si devono sistemare in questi orbitali molecolari.

Gli orbitali atomici devono avere equivalente contenuto di energia per formare gli orbitali molecolari (es. 1s con 1s)

Per gli orbitali molecolari valgono le stesse regole degli orbitali atomici.

Dalla combinazione di due orbitali atomici si formano 2 orbitali molecolari:

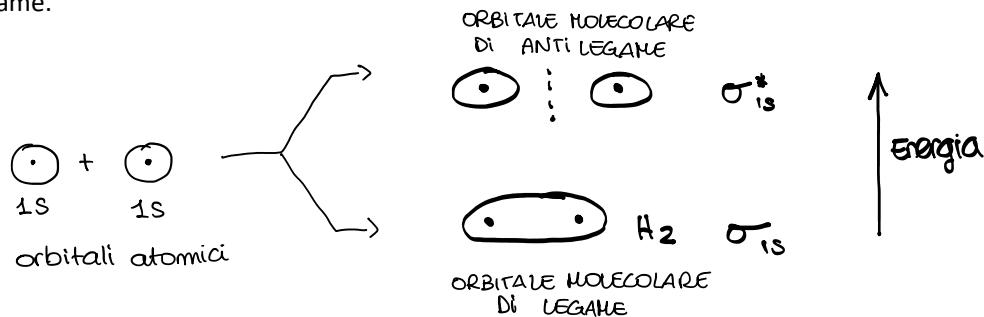
- uno di legame (o legante), il suo contenuto di energia è più basso degli orbitali atomici da cui deriva; la sua formazione deriva dalla combinazione dei due orbitali atomici con le onde associate agli elettroni in fase; il legame è favorito



- uno di antilegame (antilegante), il suo contenuto di energia è più alto rispetto agli orbitali atomici da cui deriva; la sua formazione deriva dalla combinazione dei due orbitali atomici con le onde associate agli elettroni in opposizione di fase; il legame è ostacolato



L'azione destabilizzante è più forte dell'azione stabilizzante, quindi negli orbitali molecolari di legame il numero di elettroni deve essere maggiore del numero di elettroni presenti negli orbitali molecolari di antilegame.



$$\text{ORDINE DI LEGAME} = \frac{1}{2} (\text{nº e}^- \text{ O.M. di legame} - \text{nº e}^- \text{ O.M. di antilegame})$$

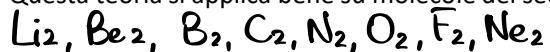
Se il valore che troviamo è maggiore di 0 allora la molecola esiste, se è  $\leq 0$  la molecola non esiste.



Se gli orbitali atomici si combinano lungo l'asse che congiunge i due nuclei  $\rightarrow \begin{cases} \sigma \text{ legante} \\ \sigma^* \text{ antilegante} \end{cases}$

Se gli orbitali atomici si combinano all'esterno rispetto all'asse che congiunge i due nuclei  $\rightarrow \begin{cases} \pi \text{ legante} \\ \pi^* \text{ antilegante} \end{cases}$

Questa teoria si applica bene su molecole del secondo gruppo:



$\downarrow$   
NON  
ESISTE

$\downarrow$   
NON  
ESISTE

Applicando la teoria degli orbitali molecolari vedremo l'esistenza o non esistenza delle molecole.

Gli orbitali molecolari come gli orbitali atomici sono delle funzioni matematiche, cioè derivano dalla combinazione lineare di altre funzioni matematiche

indicano il peso esercitato dall'atomo

$A + B$  (molecole)

$$\Psi_{\text{mol}} = C_A \Psi_{1s}^A + C_B \Psi_{1s}^B$$

(orbitale  
molecolare)

se  $A = B \Rightarrow C_A = C_B$

Cioè la probabilità di trovare l'elettrone vicino al nucleo di un atomo è uguale alla probabilità di trovare l'elettrone vicino al nucleo dell'altro atomo

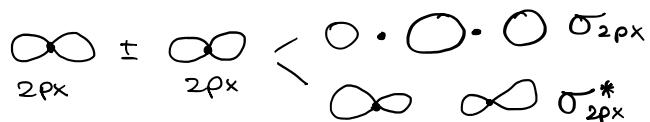
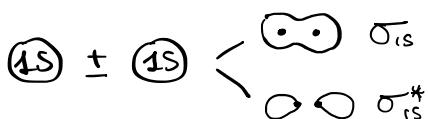
$$[\Psi_{1s}^A + \Psi_{1s}^B] = \sigma_{1s}, \quad [\Psi_{1s}^A - \Psi_{1s}^B] = \sigma_{1s}^*$$

LEGANTE ANTILEGANTE

combinazione lineare

se  $C_A > C_B \rightarrow$  cioè  $\Psi_{1s}^A$  ha un peso maggiore

Cioè è più probabile trovare l'elettrone vicino al nucleo dell'atomo A





$\pi_{2p_y}$



$\pi^*_{2p_y}$

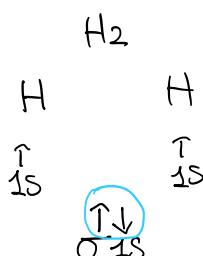
# Lezione 5. 12-10-21

martedì 12 ottobre 2021 09:18

## ESERCIZI AUFBAU

Si applica bene a molecole biameriche o ioniche  
del 2° periodo.

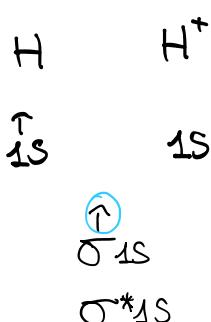
- Teoria orbitale molecolare: quando due atomi si legano con un legame di tipo covalente i loro orbitali atomici si combinano (combinazione lineare, somma, sottrazione, gli orbitali sono funzioni matematiche) e vengono fuori nuove funzioni che sono gli orbitali molecolari. Perché possano formarsi questi orbitali molecolari gli orbitali atomici devono avere uguale o equivalente contenuto di energia (uguale se gli atomi sono gli stessi, equivalente se gli atomi sono diversi ma hanno z molto vicini)



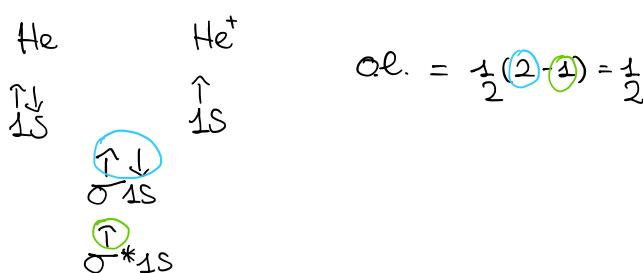
elettroni in orbitali molecolari di legame

$$\text{ordine legame} = \frac{1}{2} (2 - 0) = 1$$

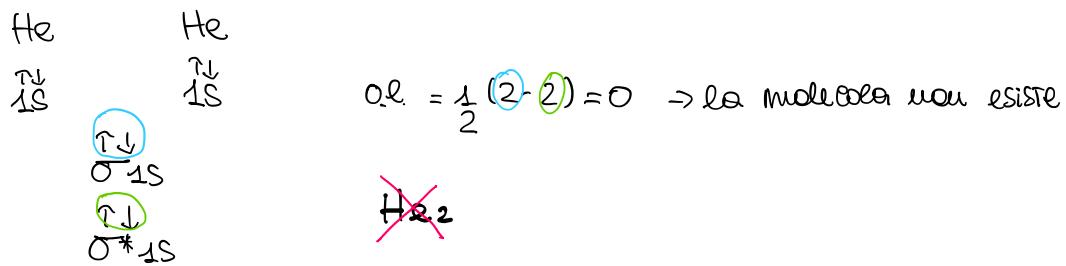
elettroni in orbitali molecolari di non legame



$$\text{O.l.} = \frac{1}{2} (1 - 0) = \frac{1}{2}$$



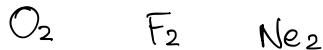
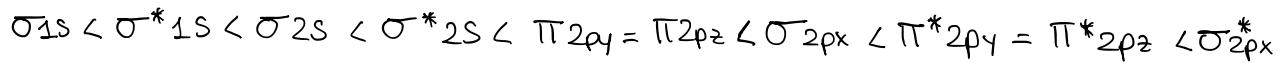
$$\text{O.l.} = \frac{1}{2} (2 - 1) = \frac{1}{2}$$



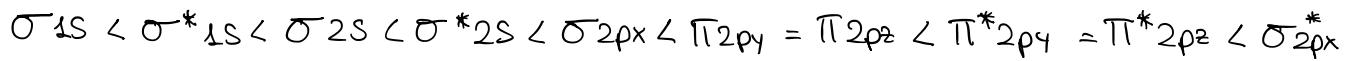
Molecole biatomiche omonucleari del 2° periodo:



sequenza di riempimento:



sequenza di riempimento:



ESEMPI:



Notiamo che non ci sono elettroni spaiati  $\rightarrow$  non puo' fare legami

