

Chimica a.s. 2020-2021

Federico Bellaveglia, Ludovica Guidi, Tommaso Merli, Leonardo Mignini

31 luglio 2022

Indice

1	Dal modello di Bohr al modello a orbitali	4
1.1	La teoria ondulatoria della luce	4
1.2	Planck	4
1.3	Bohr	5
1.4	Louis de Broglie	6
1.5	Heisenberg	6
1.6	Meccanica quantistica	6
1.7	I numeri quantici	7
1.8	Rappresentare gli orbitali	7
1.9	Il numero quantico magnetico di spin	8
1.10	La configurazione elettronica degli atomi	8
2	Le proprietà periodiche degli elementi	9
2.1	La struttura elettronica degli atomi e la tavola periodica	9
2.2	Le proprietà periodiche	10
2.3	Andamento periodico e proprietà degli elementi	11
3	Il legame chimico e la teoria del legame	11
3.1	Perché si formano i composti	11
3.2	I simboli di Lewis e la regola dell'ottetto	12
3.3	Il legame ionico	12
3.4	Il legame covalente	13
3.5	Il legame metallico	15
3.6	La geometria molecolare	15
3.7	La teoria del legame di valenza	17
3.8	La teoria degli orbitali molecolari	17
4	Le forze intermolecolari e gli stati fisici della materia	17
4.1	Le forze intermolecolari	17
4.2	Le proprietà dello stato gassoso	18
4.3	Le proprietà dei liquidi	19
4.4	Le proprietà e la classificazione dei solidi	20
4.5	I diagrammi di fase	22

5	Il nome e la classificazione dei composti	23
5.1	Le formule chimiche e il numero di ossidazione	23
5.2	La formula dei composti binari	24
5.3	I composti binari dell'ossigeno	24
5.4	I composti binari senza ossigeno	24
5.5	Gli Ioni	25
5.6	I composti ternari	25
5.7	I sali	25

Sezione A

1 Dal modello di Bohr al modello a orbitali

1.1 La teoria ondulatoria della luce

Nel 1864 James Maxwell propose una teoria secondo la quale la luce visibile è una forma di energia radiante che si propaga sotto forma di onde o radiazioni elettromagnetiche come anche i segnali radio, le microonde e i raggi X. Ogni radiazione elettromagnetica è caratterizzata da alcune grandezze:

- Lunghezza d'onda = Distanza tra due successive creste o due successivi ventri (SI in m ma generalmente si usano i nm) e si indica con λ
- Frequenza = Numero di oscillazioni complete che passano in un punto in un secondo (SI in $\text{Hz} = \frac{1}{s}$) ed è inversamente proporzionale alla lunghezza d'onda e si indica con ν

Nel vuoto tutte le forme di radiazioni elettromagnetiche si propagano con la stessa velocità, che è uguale a $2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ e viene indicata con il simbolo c .

La relazione tra frequenza e lunghezza d'onda è $\nu = \frac{c}{\lambda}$

Le radiazioni elettromagnetiche si estendono su un intervallo continuo di frequenze, lo spettro elettromagnetico.

1.2 Planck

- Ogni atomo ha una sua frequenza fondamentale di oscillazione, di conseguenza può emettere solo quantità discrete di energia
- L'energia consiste di quanti, ovvero "pacchetti" indivisibili di energia con una ben specifica frequenza, che possono essere assorbiti o emessi dalla materia
- Un quanto di energia è direttamente proporzionale alla frequenza della radiazione emessa:

$$E = h\nu \quad (1)$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \quad (2)$$

- Einstein utilizza la teoria di Planck per spiegare l'effetto fotoelettrico
- Modello in cui la luce è formata da "pacchetti" discreti di energia, chiamati **fotoni** che si comportano come particelle
- Corrispondendo ad un "quanto di luce", è utilizzabile la legge di Planck ($E = h\nu$)
- Una radiazione luminosa può essere pensata come un fascio di fotoni, ciascuno con energia $h\nu$

1.3 Bohr

- Gli atomi di un elemento, allo stato gassoso e a bassa pressione, assorbono energia quando vengono attraversati da una scarica elettrica. Gli atomi "eccitati" emettono radiazioni luminose con un colore caratteristico per ogni elemento
- La luce emessa non è formata da uno spettro continuo di radiazioni, ma da poche righe a specifiche lunghezze d'onda. Si ottiene quindi uno **spettro di emissione a righe**
- Ipotesi di Bohr:
 1. L'elettrone percorre orbite circolari intorno al nucleo
 2. Sono permesse solo determinate orbite, che si trovano a una distanza determinata dal nucleo
 3. Quando l'elettrone si trova su una delle orbite permesse, non viene emessa alcuna radiazione
 4. Quando l'elettrone passa da un'orbita permessa ad un'altra, viene emessa o assorbita radiazione elettromagnetica. L'energia della radiazione emessa è pari alla differenza di energia (ΔE) tra le due orbite: $\Delta E = h\nu$

Sulla base di queste ipotesi, Bohr arrivò a determinare una formula generale per il calcolo del raggio dell'elettrone quando si trova su un'orbita generica:

$$r_n = \left(\frac{h^2}{4\pi^2 m k e^2}\right) n^2 \quad (3)$$

Nel caso dell'orbita più piccola ($n = 1$) il raggio vale $r_1 = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$. Per calcolare l'energia dell'elettrone sull'orbita n -esima si utilizza la formula:

$$E_n = \frac{-2,179 \cdot 10^{-18}}{n^2} \quad (4)$$

Le orbite permesse sono dunque quantizzate e il loro raggio è direttamente proporzionale a n^2 , mentre la loro energia è inversamente proporzionale a n^2 . Il numero n , che può variare da 1 a infinito è chiamato **numero quantico principale**.

Quando l'elettrone si trova sull'orbita più vicina al nucleo ($n = 1$), l'energia è minima; si dice che l'atomo è nel suo **stato fondamentale**.

Le orbite di energia più alta corrispondono a diversi **stati eccitati** dell'atomo di idrogeno.

Quando un atomo assorbe energia, l'elettrone può "saltare" da un livello di minore energia ad un livello di maggiore energia. L'atomo eccitato non è però stabile e tende a ritornare nello stato fondamentale emettendo una radiazione di frequenza $\nu = \Delta E/h$

- Serie di Lyman (UV) $n = 3, n = 4$
- Serie di Balmer (Visibile) $n = 2$
- Serie di Paschen (IR) $n = 1$

1.4 Louis de Broglie

- Teoria della duplice natura della luce sviluppata negli anni successivi alla proposta del modello atomico di Bohr
- In alcune situazioni la luce si comporta come un'onda elettromagnetica e in altre come un fotone
- Secondo De Broglie una particella di materia può esibire un comportamento ondulatorio e quindi essere associata ad una lunghezza d'onda, calcolata con la formula:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (5)$$

1.5 Heisenberg

Dato che non è possibile osservare una particella che si comporta contemporaneamente come onda e come particella, di conseguenza è impossibile misurare nello stesso momento la sua velocità e la sua posizione.

Da qui nasce il principio di indeterminazione di Heisenberg:

$$m\Delta v \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{h}{2\pi}\right) \quad (6)$$

Δv = Incertezza sulla quantità di moto

Δx = Incertezza sulla posizione sull'asse x

Se conosciamo con precisione la posizione della particella (Δx piccolo), di conseguenza l'incertezza sulla velocità (Δv grande).

Non è possibile conoscere contemporaneamente con accuratezza la posizione e la velocità di una particella.

1.6 Meccanica quantistica

Si può descrivere il comportamento di un elettrone con le equazioni per descrivere le onde in quanto l'elettrone è anche un onda.

Nel 1926 Schrödinger propose un'equazione d'onda chiamata "Equazione d'onda di Schrödinger" che descrive precisamente l'energia degli elettroni e la loro probabile posizione.

Questa equazione costituisce la relazione fondamentale del modello a orbitali.

La risoluzione dell'equazione fornisce delle funzioni d'onda (Ψ) che descrive ogni elettrone in un atomo in termini di orbitale, la regione dello spazio intorno al nucleo nel quale è più probabile trovare un elettrone.

Questa fornisce anche i livelli di energia permessi per gli elettroni che nel caso dell'atomo di idrogeno sono d'accordo con quelle dell'atomo di Bohr

1.7 I numeri quantici

Ogni orbitale atomico è individuato da tre **numeri quantici** che possono assumere valori interi:

- Il numero quantico principale (n) determina l'energia dell'orbitale. Può assumere valori come 1, 2, 3... e al crescere di questi l'orbitale diventa più grande e l'elettrone passa più tempo lontano dal nucleo, di conseguenza l'energia aumenta perché risente meno della trazione del nucleo
- Il numero quantico secondario o angolare (l) che determina la forma dell'orbitale. Può assumere valori interi con valore compreso $0 \leq l \leq n - 1$. Ad ogni valore di l corrisponde un particolare orbitale indicato con le lettere s, p, d, f che corrispondono rispettivamente ai valori 0, 1, 2, 3
- Il numero quantico magnetico (m) che descrive l'orientazione nello spazio dell'orbitale. Può assumere valori compresi tra $-l \leq m \leq l$

La combinazione dei tre numeri quantici specifica un orbitale, che descrive la probabilità di trovare l'elettrone in un determinato punto dello spazio.

- Gli orbitali con lo stesso valore di n si trovano nello stesso **livello** o **strato**
- Ogni livello contiene un numero n^2 di orbitali atomici
- Ogni livello è suddiviso in **sottolivelli** o **sottostrati** a cui corrisponde un valore di l e un tipo di orbitale
- Ogni sottolivello è indicato con un numero seguito da una lettera scritta in corsivo
- Ogni sottolivello contiene uno specifico numero di orbitali

Tutti gli orbitali di uno stesso livello hanno la stessa energia e si dicono **degeneri**.

1.8 Rappresentare gli orbitali

Gli orbitali atomici possono essere rappresentati con delle superfici che racchiudono un volume in cui c'è un'elevata probabilità di trovare un elettrone con una data energia.

- Negli orbitali di tipo s la distribuzione della densità elettronica per l'orbitale $1s$ ha una simmetria sferica, cioè è la stessa in tutti i punti a una data distanza dal nucleo. Tutti gli orbitali di tipo s hanno forma sferica, che diventa più grande al crescere di s

- La densità elettronica degli orbitali di tipo $2p$ non ha densità sferica, ma è concentrata in due regioni (lobi) che stanno da parti opposte rispetto al nucleo, dove la densità si azzera. Per ogni orbitale p è conveniente orientare i due lobi lungo uno dei tre assi x, y, z . Così si ottengono gli orbitali p_x, p_y, p_z . Gli orbitali $3p, 4p$ ecc. hanno la stessa forma, ma sono via via più grandi
- Gli orbitali $3d$ sono cinque: 4 con la forma di un quadrifoglio (ognuno ha 4 lobi di densità elettrica) e uno con una ciambella di densità elettronica nel piano xy
- La forma degli orbitali f è ancora più complessa

1.9 Il numero quantico magnetico di spin

Nel 1922 un esperimento di Stern e Gerlach dimostrò che l'elettrone ha una proprietà detta **spin**, alla quale è associato un piccolissimo campo magnetico. Quando l'atomo si trova in presenza di un campo magnetico esterno l'elettrone può assumere due orientazioni: una parallela al campo (energia minima), l'altra antiparallela al campo.

Il numero quantico di spin (m_s) può assumere solo due valori opposti: $+\frac{1}{2}$ o $-\frac{1}{2}$

Ogni elettrone è caratterizzato da quattro numeri quantici n, l, m, m_s . Per rappresentare i due stati dello spin si utilizza una freccia in su per $m_s = +\frac{1}{2}$ o una freccia in giù per $m_s = -\frac{1}{2}$

1.10 La configurazione elettronica degli atomi

L'equazione di Schrödinger nell'atomo di idrogeno fornisce soluzioni esatte in quanto ha solo un elettrone, mentre per gli atomi con più elettroni si possono ottenere soluzioni approssimate. Fortunatamente si possono usare gli stessi orbitali dell'atomo di idrogeno, infatti la forma rimane la stessa ma cambia la loro energia. Dunque, per descrivere gli atomi, bisogna sapere in che modo gli elettroni riempiono gli orbitali disponibili, questa distribuzione si chiama **configurazione elettronica**

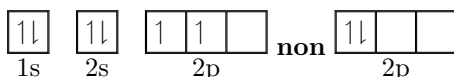
Prendiamo l'esempio dell'idrogeno che si può rappresentare con due modi diversi di configurazione elettronica:

H $1s^1$ oppure $\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2s \end{array}$

L'apice nella prima e la freccia nella seconda rappresentazione ci indicano il numero di elettroni nell'orbitale, la lettera. Il riempimento degli orbitali non è casuale ma segue alcune regole:

- Il principio di Aufbau dice che gli elettroni devono occupare per primi gli orbitali di prima energia, cioè quelli più vicini al nucleo

- Il principio di esclusione di Pauli stabilisce che in un atomo non ci possono essere elettroni con lo stesso set di numeri quantici, dato che il numero quantico di spin ha solo 2 valori possibili.
Di conseguenza ogni orbitale può essere occupato al massimo da due elettroni con spin opposto
- La regola di Hund, o di massima molteplicità, stabilisce che la configurazione di minima energia è quella in cui è massimo il numero di elettroni spaiati, con spin paralleli



La rappresentazione della configurazione elettronica può essere scritta in due modi, estesa e compatta. Estesa in cui troviamo tutti i livelli energetici, mentre nella compatta troviamo solo l'elettrone di valenza, ovvero quelli che occupano il livello più esterno di un atomo.

2 Le proprietà periodiche degli elementi

2.1 La struttura elettronica degli atomi e la tavola periodica

La versione attuale della tavola periodica è stata elaborata dopo il 1930 sulla base del lavoro di Mendeleev in cui gli elementi sono ordinati secondo il numero atomico (Z), crescente e non secondo il peso atomico (come aveva proposto Mendeleev).

Ogni periodo della tavola periodica corrisponde al riempimento di un livello energetico; per esempio il secondo periodo corrisponde al riempimento del secondo livello ($n = 2$).

Gli elementi di un gruppo formano una famiglia; hanno lo stesso numero di elettroni di valenza e perciò hanno proprietà chimiche simili (metalli alcalini, un solo elettrone esterno).

Per gli elementi dei gruppi principali (i gruppi A della tavola periodica), con l'eccezione dell'elio il numero degli elettroni di valenza è uguale al numero romano del gruppo (IVA = 4 elettroni di valenza).

Per gli elementi dei gruppi principali il numero del periodo indica il livello di energia principale più esterno, che è occupato dagli elettroni di valenza.

L'intera tavola periodica può essere divisa in blocchi:

- Il blocco s comprende il gruppo IA (ns^1) e il gruppo IIA (ns^2)
- Il blocco p comprende sei gruppi (Da ns^2np^1 a ns^2np^6)
- Il blocco d comprende gli elementi di transizione
- Il blocco f (esterno alla tavola periodica) comprende i **lantanidi** e **attinidi**

2.2 Le proprietà periodiche

Le proprietà periodiche sono proprietà degli atomi che variano in modo abbastanza prevedibile quando ci si sposta lungo i periodi o i gruppi della tavola periodica.

- **La carica nucleare effettiva:**

Il valore medio della carica che un elettrone esterno risente a causa dell'effetto di schermatura degli elettroni più interni, ossia all'attenuare dell'effetto attrattivo delle cariche nucleari. Possiamo dunque dire che è l'attrazione che il nucleo esercita sugli elettroni di valenza.

Possiamo calcolare questa carica in modo approssimativo facendo la differenza tra il numero atomico e il numero degli elettroni del nucleo:

$$Z_{eff} = Z - S \quad (7)$$

La carica nucleare effettiva aumenta da sinistra verso destra e dal basso verso l'alto.

- **Il raggio atomico:**

Sappiamo che un atomo è per lo più spazio vuoto e che non ha un contorno ben definito.

Per calcolare il raggio atomico esistono diversi modi; per esempio si può calcolare facendo riferimento alla distanza fra due atomi legati tra loro. Pertanto il raggio dell'atomo sarà uguale alla metà di tale distanza (indicata in pm (picometri) e $1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$).

Per la maggior parte dei casi nella tavola periodica il raggio atomico aumenta da destra verso sinistra e dall'alto verso il basso.

- **L'energia di ionizzazione:**

L'energia necessaria per rimuovere un elettrone da un atomo allo stato gassoso (misurato in kJ/mol).

L'energia di ionizzazione aumenta dal basso verso l'alto e da sinistra verso destra.

Questa energia viene chiamata di prima, di seconda, o di terza ionizzazione in base al numero di elettroni da rimuovere.

- **L'affinità elettronica:**

L'energia che si libera quando un atomo neutro acquista un elettrone (kJ/mol).

Aumenta da sinistra verso destra, mentre per lo spostamento tra gruppi l'andamento non è regolare, sappiamo però che diminuisce scendendo nel gruppo dei metalli alcalini.

- **L'elettronegatività:**

È la grandezza che misura la capacità di un atomo di attrarre gli elettroni in un legame chimico.

Aumenta dal basso verso l'alto e da sinistra verso destra.

2.3 Andamento periodico e proprietà degli elementi

Tutti gli elementi del gruppo IA hanno la stessa configurazione esterna, cioè ns . L'unico elettrone che occupa l'orbitale s del livello n più esterno può essere rimosso facilmente (bassa energia di ionizzazione). Gli elementi di questo gruppo sono metalli: gli atomi perdono facilmente un elettrone formando ioni positivi, ottenendo la configurazione elettronica esterna del gas nobile che li precede alla fine del periodo precedente.

Nel gruppo VIIA gli elementi hanno configurazione esterna ns^2np^5 ; manca un elettrone per raggiungere la configurazione dei gas nobili. Questi elementi acquistano facilmente un elettrone (alta affinità elettronica): sono non metalli.

I gas nobili (gruppo VIIIA) hanno il livello esterno completo e perciò sono poco reattivi.

- **Proprietà dei metalli alcalini:**

I metalli alcalini si trovano in natura in forma di ioni a causa della loro bassa energia di ionizzazione. Reagiscono rapidamente con l'ossigeno nell'aria e con il cloro e scendendo nel gruppo la reazione con quest'ultimo è sempre più vigorosa (l'energia di ionizzazione diminuisce e il metallo perde più facilmente l'elettrone esterno, stesso comportamento per l'acqua)

- **Proprietà degli alogeni:**

In natura sono presenti come molecole biatomiche e a causa della loro elevata affinità elettronica reagiscono facilmente con altri atomi a cui sottraggono elettroni. Gli alogeni reagiscono con i metalli e con l'idrogeno formando idracidi

- **Proprietà dei gas nobili:**

La reattività aumenta scendendo nel gruppo

3 Il legame chimico e la teoria del legame

3.1 Perché si formano i composti

I legami chimici sono le forze che tengono insieme gli atomi nelle molecole. Il principio base che spiega la formazione dei legami è quello della minima energia, per cui ogni aggregato di atomi tende allo stato minimo di energia e quindi alla massima stabilità.

L'energia coinvolta nella formazione è l'**energia di legame**, l'energia necessaria per rompere un dato legame quando la sostanza si trova in fase gassosa, o l'energia liberata quando il legame si forma (kJ/mol).

Possiamo classificare i legami in tre tipi principali:

- **Legame ionico** (metallo + non metallo), acquisto o perdita di elettroni
- **Legame covalente** (non metallo + non metallo), condivisione di elettroni
- **Legame metallico** (metallo + metallo), delocalizzazione degli elettroni (condivisione tra più nuclei)

La differenza di elettronegatività determina i tipi di legami:

- **Legame ionico** $\Delta E > 1,9$
- **Legame covalente polare** $0 < \Delta E < 1,9$
- **Legame covalente puro** $\Delta E = 0$

3.2 I simboli di Lewis e la regola dell'ottetto

Lewis propose di rappresentare gli elettroni di valenza con altrettanti puntini attorno al simbolo dell'atomo.

Notò inoltre che gli elementi del gruppo 18, i gas nobili, hanno tutti 8 elettroni eccetto l'elio e sono poco reattivi, conclude quindi che la presenza di otto elettroni esterni rappresenta una particolare stabilità. Questa configurazione è detta ottetto. La regola dell'ottetto enuncia che quando un atomo forma un legame, tende a cedere, acquistare o condividere elettroni in modo da raggiungere la configurazione esterna dell'ottetto completo.

Il legame è ionico se gli elettroni sono trasferiti da un atomo ad un altro, mentre se condivisi il legame è covalente. Questa regola non è valida per gli elementi dei blocchi *d* ed *f*.

Idrogeno $\text{H} - \text{H}$

Ossigeno $\text{:}\ddot{\text{O}} = \ddot{\text{O}}\text{:}$

Azoto $\text{:}\text{N} \equiv \text{N}\text{:}$

Anidride Carbonica $\text{:}\ddot{\text{O}} = \text{C} = \ddot{\text{O}}\text{:}$

Acqua $\begin{array}{cc} \text{H} & \text{H} \\ \backslash & / \\ & \text{O} \\ & \cdot\cdot \end{array}$

3.3 Il legame ionico

La forza di attrazione che si esercita tra ioni con cariche di segno opposto si chiama legame ionico, e il composto che si formerà è detto composto ionico.

Il più piccolo composto di ioni, complessivamente neutro, presente in tale composto è detto unità formula.

3.4 Il legame covalente

Nel legame covalente due atomi mettono in comune una o più coppie di elettroni di valenza. Il composto che si forma è detto composto molecolare.

In generale, due elementi che hanno elettronegatività uguale o simile tendono a formare tra loro uno o più legami covalenti.

Un legame tra due atomi in cui gli elettroni di legame sono equamente condivisi è un legame covalente puro.

Nel caso dell'idrogeno i due elettroni condivisi dagli atomi formano una coppia di elettroni di legame e vengono rappresentati con un trattino. (H–H)

In generale, il legame chimico dà luogo ad un sistema più stabile rispetto ai due atomi isolati.

A una certa distanza, le nuvole elettroniche dei due atomi cominciano a sovrapporsi e ogni elettrone comincia a risentire dell'attrazione dell'altro nucleo e della repulsione da parte dell'altro elettrone. Ad una certa distanza r_0 l'energia del sistema raggiunge il suo valore minimo. A distanze minori di r_0 la repulsione tra i due nuclei diventa preponderante e l'energia del sistema aumenta rapidamente.

La maggior parte delle volte gli atomi hanno dei doppietti solitari che non vengono condivisi nel legame e sono detti **elettroni di non legame**. Due atomi possono condividere una coppia o più coppie di elettroni:

- **Legame singolo:** Condivisione di una coppia di elettroni
- **Legame doppio:** Condivisione di due coppie di elettroni, in generale più corto e più forte del legame singolo
- **Legame triplo:** Condivisione di tre coppie di elettroni, uno dei legami più forti che conosciamo

Un legame covalente in cui gli elettroni non sono equamente condivisi si chiama **legame covalente polare**. La polarità di un legame dipende dalla differenza di elettronegatività (ΔE) tra i due atomi.

Il legame dativo, o coordinativo, è un legame covalente in cui una coppia di elettroni di legame viene fornita da un solo atomo (donatore) e condivisa con l'altro atomo (accettore). Avviene soprattutto nei metalli di non transizione.

Stabilire le formule di Lewis:

1. **Stabilire gli elettroni di valenza**
2. **Identificare l'atomo centrale**, che è quello con minore elettronegatività (H e O posizionati sempre all'esterno)
3. **Unire gli atomi esterni a quello centrale tramite un legame singolo e disporre i restanti elettroni di valenza attorno agli atomi periferici** (escluso l'idrogeno) e se avanzano elettroni di valenza disporli intorno all'atomo centrale
4. **Se l'atomo centrale non ha completato l'ottetto, formare i doppi legami**
5. **Calcolare la carica formale con la formula:**
$$CF = e_{val} - e_{nonlegame} - \frac{e_{legame}}{2}$$
6. Se la carica di ogni elemento non tende allo 0, **creare degli altri legami doppi fino a raggiungere la CF totale uguale a 0**

Eccezioni alla regola dell'ottetto:

- **Molecole con l'ottetto incompleto** come ad esempio il diidruro di berillio BeH_2 in cui il berillio è circondato solo da 4 elettroni
- **La molecola supera l'ottetto** come ad esempio il pentacloruro di fosforo (V) PCl_5 in cui il fosforo è circondato da 10 elettroni
- **Molecola con elettroni spaiati** (radicaliche) come ad esempio il monossido di azoto NO in cui l'azoto è circondato da un numero dispari di elettroni



































3.5 Il legame metallico

Per spiegare questo comportamento si usa il modello del "mare di elettroni", liberi di muoversi in una struttura ordinata. I cationi (ioni carichi positivamente) formano un reticolo tridimensionale e gli elettroni di valenza sono delocalizzati su tutto il reticolo, cioè non appartengono a uno specifico atomo o coppia di atomi, ma a tutto il reticolo. Gli elettroni delocalizzati possono muoversi liberamente sotto l'azione di un campo elettrico, ed è per questo che i metalli sono buoni conduttori della corrente elettrica. Questi elettroni, condivisi da tutti gli atomi, costituiscono una specie di "collante" che tiene insieme i cationi del metallo e dà luogo al **legame metallico**.

Il **legame metallico** si forma per attrazione elettrostatica tra i cationi del metallo e gli elettroni delocalizzati, liberi di muoversi in tutto il metallo.

3.6 La geometria molecolare

La teoria VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion), che permette di prevedere la disposizione degli atomi nelle molecole, si basa sul principio che le coppie di elettroni nel livello di valenza tendono a respingersi a vicenda, disponendosi quindi il più lontano possibile le une dalle altre, in modo da minimizzare la repulsione reciproca. Una molecola è detta polare quando ha un momento di dipolo diverso da zero.

Tipo di molecola	Forma	disposizione degli elettroni†	Geometria‡	Esempi
AX_1E_n	Diatomica			HF, O ₂
AX_2E_0	Lineare			BeCl ₂ , HgCl ₂ , CO ₂
AX_2E_1	Angolare			NO ₂ ⁻ , SO ₂ , O ₃
AX_2E_2	Angolare			H ₂ O, OF ₂
AX_2E_3	Lineare			XeF ₂ , I ₃ ⁻
AX_3E_0	Trigonale planare			BF ₃ , CO ₃ ²⁻ , NO ₃ ⁻ , SO ₃
AX_3E_1	Piramide trigonale			NH ₃ , PCl ₃
AX_3E_2	a forma di T			ClF ₃ , BrF ₃
AX_4E_0	Tetraedrica			CH ₄ , PO ₄ ³⁻ , SO ₄ ²⁻ , ClO ₄ ⁻
AX_4E_1	Ad altalena (Sesaw)			SF ₄
AX_4E_2	Quadrato (piana)			XeF ₄
AX_5E_0	Bipiramidale trigonale			PCl ₅
AX_5E_1	Piramide a base quadrata			ClF ₅ , BrF ₅
AX_5E_2	Pentagonale			XeF ₅ ⁻
AX_6E_0	Ottadrica			SF ₆
AX_6E_1	Piramide a base pentagonale			XeF ₆
AX_7E_0	Bipiramide a base pentagonale			IF ₇

3.7 La teoria del legame di valenza

Secondo la teoria VB, il legame covalente fra due atomi si forma quando due orbitali del livello di valenza si sovrappongono, mettendo in comune una coppia di elettroni che si dispongono con spin antiparallelo.

- Dalla sovrapposizione si forma un orbitale di legame, con legame di tipo σ (sigma)
- Se la nuvola di elettroni di legame sta in due regioni dello spazio opposte rispetto all'asse di legame si parla di legame π (pi)

La combinazione lineare delle funzioni d'onda che rappresentano gli orbitali atomici (Pauling) è detta ibridazione degli orbitali:

- Ibridazione sp^3 : combinazione tra l'orbitale s e i tre orbitali p
- Ibridazione sp^2 : combinazione tra l'orbitale s e i due orbitali p
- Ibridazione sp : combinazione tra l'orbitale s e un orbitale p

3.8 La teoria degli orbitali molecolari

La teoria prende in considerazione tutti gli elettroni, non solo quelli di valenza. Un orbitale molecolare è una combinazione lineare degli orbitali degli atomi che formano la molecola, simili per contenuto energetico.

- L'OM di legame ha un'energia più bassa della media delle energie degli orbitali di partenza e una densità di carica distribuita in modo simmetrico, è un orbitale di tipo σ (sigma)
- L'OM di non legame ha un'energia più alta della media delle energie degli orbitali di partenza e una densità di carica minima, è un orbitale di tipo σ^* (sigma star)

Si definisce ordine di legame la semidifferenza tra il numero di elettroni che occupano gli OM di legame e il numero di elettroni che occupano gli OM di antilegame.

4 Le forze intermolecolari e gli stati fisici della materia

4.1 Le forze intermolecolari

Forze che si formano tra le particelle in continuo movimento di alcune sostanze impedendo di allontanarsi le une dalle altre:

- Le forze di dispersione di London sono forze intermolecolari causate da fluttuazioni momentanee nella distribuzione degli elettroni all'interno degli atomi e delle molecole

- Le forze dipolo-dipolo sono legami intermolecolari che agiscono tra i poli opposti di molecole polari
- Il legame a idrogeno è il legame intermolecolare che si stabilisce tra molecole in cui è presente un atomo di idrogeno legato a un atomo piccolo e molto elettronegativo (ossigeno, fluoro e azoto) e con almeno un doppietto elettronico libero

4.2 Le proprietà dello stato gassoso

Un gas ideale, o perfetto, è un gas costituito da particelle puntiformi, con volume trascurabile rispetto a quello del contenitore e tra le quali non sono presenti forze di attrazione o di repulsione.

L'equazione dei gas ideali è:

$$pV = nRT \quad (8)$$

Dove:

- $R = 0,0821 \text{ L atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

La legge di Graham afferma che a temperatura costante, la velocità di effusione di un gas è inversamente proporzionale alla radice quadrata della sua massa molare:

$$v_{effusione} = \frac{k}{\sqrt{M_{g/mol}}} \quad (9)$$

o

$$\frac{v_1}{v_2} = \sqrt{\frac{M_2}{M_1}} \quad (10)$$

Dove:

- v_1 = Velocità primo gas
- v_2 = Velocità secondo gas
- M_1 = Massa molare primo gas
- M_2 = Massa molare secondo gas

La legge di Dalton afferma che la pressione totale di un miscuglio gassoso è uguale alla somma delle pressioni parziali dei suoi componenti:

$$p_{tot} = p_a + p_b + p_c + \dots \quad (11)$$

La frazione molare è:

$$\chi_a = \frac{n_A}{n_{tot}} \quad (12)$$

Di conseguenza, la pressione del singolo componente è:

$$p_i = \chi_i \cdot p_{tot} \quad (13)$$

Temperatura critica: temperatura sopra la quale un gas non può diventare liquido

- Gas: aeriforme ad una temperatura superiore a quella critica
- Vapore: ad una temperatura inferiore a quella critica

4.3 Le proprietà dei liquidi

- Forma del recipiente
- Volume proprio
- Maggiore densità dei gas
- Difficilmente comprimibili
- Fluidi
- Diffondono con velocità minore rispetto ai gas

Proprietà in relazione con le caratteristiche delle loro particelle

- Viscosità: resistenza che le particelle manifestano allo sfregamento delle une sulle altre, dipende dalla grandezza delle particelle e dalle forze di coesione che le tengono unite. Diminuisce all'aumentare della temperatura
- Capillarità: l'insieme dei fenomeni che si osservano quando un liquido è all'interno di un tubo capillare. Dipende dall'entità delle forze di coesione nel liquido rispetto alle forze di adesione tra il liquido e le pareti del capillare
- Tensione superficiale: la forza che agisce all'interfaccia tra un liquido e il mezzo con cui è in contatto
- Evaporazione: passaggio dallo stato liquido allo stato aeriforme che interessa solo le particelle che si trovano alla superficie del liquido. I liquidi che evaporano facilmente a temperatura ambiente sono detti **volatili**, quelli che non evaporano facilmente **non volatili** (processo endotermico)
- Condensazione: passaggio dallo stato aeriforme allo stato liquido di una sostanza (processo esotermico). **Equilibrio dinamico**: velocità di condensazione uguale alla velocità di evaporazione. **Tensione** (o **pressione di vapore**): pressione che il vapore esercita quando è in equilibrio con il suo liquido (**saturo**). **Calore molare di evaporazione**: energia necessaria per portare allo stato gassoso una mole di una sostanza allo stato liquido

- Ebollizione: si ha quando la tensione di vapore risulta uguale alla pressione atmosferica. La **temperatura d'ebollizione** è la temperatura alla quale la tensione di vapore del liquido diventa uguale alla pressione che agisce sulla sua superficie.

4.4 Le proprietà e la classificazione dei solidi

- Forma e volume definiti
- Densità elevata
- Incomprimibili

Suddivisione in base alla disposizione delle particelle che li costituiscono

- Solido cristallino: particelle con disposizione ordinata, sempre uguale nelle tre direzioni dello spazio. Presentano esternamente delle facce che formano angoli ben precisi tra di loro.
- Solido amorfo: particelle distribuite in modo casuale. Passa gradualmente dalla rigidità iniziale fino allo stato liquido in un intervallo di temperature.

Le proprietà dei solidi

- Proprietà chimiche: descrivono come un solido modifica la propria composizione in presenza di altre sostanze o in seguito a un aumento di temperatura.
- Proprietà fisiche: caratteristiche rilevabili e misurabili senza modificarne la composizione.
- Proprietà meccaniche: descrivono il comportamento di un solido in seguito all'applicazione di una forza.
- Proprietà tecnologiche: dipendono dalle proprietà chimico-fisiche e meccaniche, mostrano se un solido è adatto o meno ad una determinata lavorazione.

I solidi cristallini sono **anisotropi**, le loro proprietà possono variare a seconda della direzione lungo la quale vengono misurate. I solidi amorfi sono **isotropi**, le loro proprietà non dipendono dalla particolare direzione in cui vengono misurate.

La classificazione dei solidi cristallini

- Solidi ionici: costituiti da ioni tenuti insieme da legami ionici. Per esempio NaCl è formato da un reticolo tridimensionale esteso (reticolo cristallino). NaCl è l'**unità formula**, il più piccolo insieme di ioni complessivamente neutro. **Cella elementare**: la più piccola unità che si ripete nel reticolo e che ha in sé tutte le caratteristiche di simmetria delle particelle nel cristallo.

- Solidi molecolari: costituiti da molecole tenute insieme da deboli forze di van der Waals. Solidi teneri e fragili, con un basso punto di fusione e non conducono la corrente
- Solidi covalenti reticolari: insolubili in acqua e in altri solventi, deboli conduttori di corrente elettrica, sia allo stato solido sia quando sono fusi
- Solidi metallici: formati da un reticolo di ioni positivi tra i quali si muovono liberamente gli elettroni di valenza. Spesso i metalli sono **solidi policristallini**, cioè si presentano come agglomerati costituiti da un enorme numero di cristalli microscopici. Eccetto il mercurio, tutti i metalli sono solidi a temperatura ambiente, opachi e di colore grigio eccetto alcune eccezioni. Temperatura di fusione, proprietà meccaniche e chimiche variano da metallo a metallo. Metalli con uguale reticolo cristallino e simile raggio atomico possono essere fusi insieme e poi risolidificati a formare delle **leghe**:
 - Leghe di sostituzione: gli atomi del soluto sostituiscono quelli del solvente nel reticolo
 - Leghe di inserzione: gli atomi del soluto prendono posto negli spazi che la struttura del cristallo lascia liberi

4.5 I diagrammi di fase

Sono utilizzati per rappresentare i cambiamenti di stato di aggregazione a seconda di temperatura (asse x) e pressione (asse y):

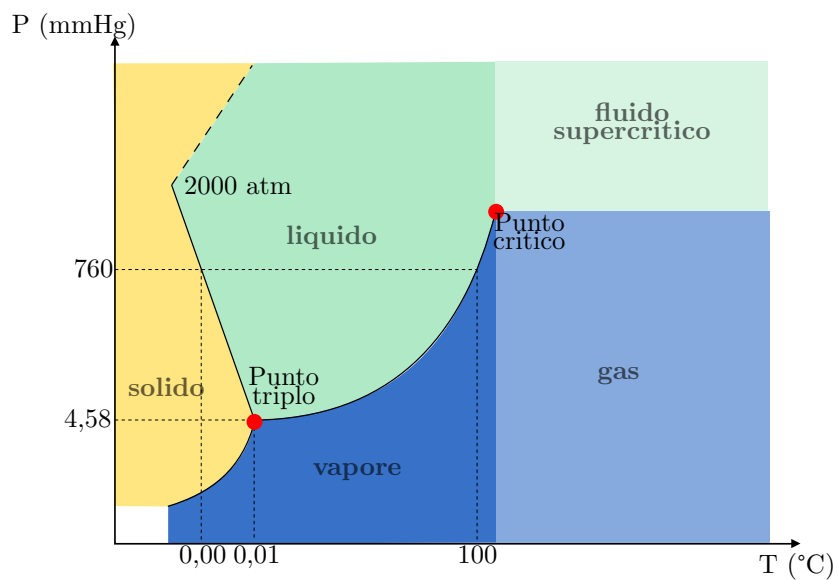


Diagramma di fase dell'acqua

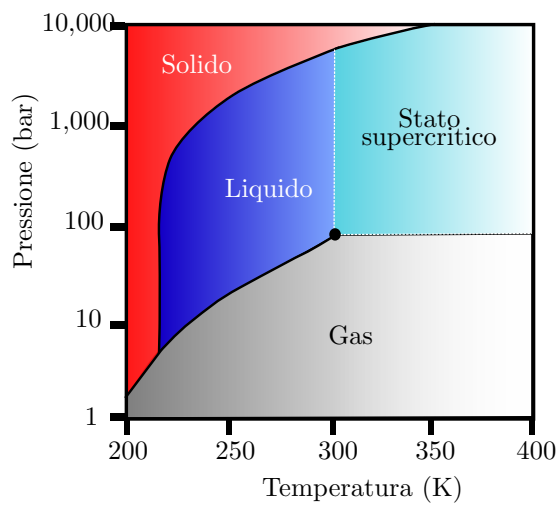


Diagramma di fase dell'anidride carbonica

5 Il nome e la classificazione dei composti

5.1 Le formule chimiche e il numero di ossidazione

Nella moderna nomenclatura si utilizza il numero di ossidazione **n.o.** cioè la carica che ogni atomo assumerebbe se gli elettroni di legame fossero assegnati all'atomo più elettronegativo.

Regole utili per l'assegnazione dei numeri di ossidazione:

1. In un legame covalente gli elettroni condivisi sono formalmente attribuiti all'atomo più elettronegativo
2. Gli atomi nelle sostanze elementari hanno sempre numero di ossidazione 0
3. Gli ioni monoatomici hanno numero di ossidazione coincidente con la carica elettrica dello ione
4. Il numero di ossidazione dell'ossigeno nei composti è -2. Nei perossidi vale -1 e quando è legato al fluoro vale +2
5. Il numero di ossidazione dell'idrogeno nei composti è +1. Fanno eccezione i casi in cui H è combinato con un metallo dove ha numero di ossidazione -1
6. In una molecola o in un composto ionico la somma dei numeri di ossidazione di tutti gli atomi presenti deve essere 0
7. In uno ione poliatomico la somma dei numeri di ossidazione di tutti gli atomi presenti deve equivalere alla carica dello ione
8. Il numero di ossidazione dei metalli alcalini è +1
9. Il numero di ossidazione dei metalli alcalino-terrosi è +2

La classificazione dei composti

- Composti inorganici: composti che presentano tutti gli elementi eccetto il carbonio ad eccezione di CO, CO₂, carbonati e cianuri
- Composti organici: composti che presentano il carbonio

I **composti inorganici** si dividono in:

- **Binari:** ossidi (basici e acidi), idracidi (HCl, HBr), idruri (NaH) e sali degli idracidi (NaCl)
- **Ternari:** idrossidi (Ca(OH)₂) e ossoacidi (H₂SO₄)
- **Quaternari:** sali degli ossoacidi e sali idrogenati degli ossoacidi

5.2 La formula dei composti binari

Per scrivere la formula di un composto binario si procede in questo modo:

1. Se composto da un metallo e un non metallo si scrive prima il metallo, in caso di due non metalli si segue un ordine specifico
2. Si aggiunge ad ogni elemento un indice in modo da far tornare il numero di ossidazione del composto uguale a 0

5.3 I composti binari dell'ossigeno

- Gli ossidi: composti binari costituiti da ossigeno e un altro elemento. Nella **nomenclatura tradizionale** si dividono gli ossidi in due categorie principali:
 - Ossidi basici: composti da un metallo e ossigeno. Nella nomenclatura tradizionale nel caso in cui il metallo forma solo un ossido (un solo n.o. possibile) il composto prende il nome di **ossido di + nome del metallo**. Se il metallo crea due ossidi il nome è **ossido + prefisso del metallo + -oso** (n.o. più basso) o **-ico** (n.o. più alto)
 - Ossidi acidi o anidridi: composti da un non metallo e ossigeno. Nella nomenclatura tradizionale nel caso in cui il non metallo forma un solo ossido acido si chiama **anidride + radice del nome dell'elemento + -ica**. Nel caso in cui forma due o più anidridi si usano i suffissi **-osa, -ica** e i prefissi **ipo-** e **per-** a seconda del numero di ossidazione
- I perossidi: composti binari nei quali il n.o. dell'ossigeno è -1 e contiene due atomi di ossigeno uniti tra loro nel gruppo perossido
- I superossidi: composti a carattere ionico che contengono lo ione superossido (O_2^-), in cui ogni atomo di ossigeno ha n.o. $-1/2$

5.4 I composti binari senza ossigeno

- Gli idruri: composti binari dell'idrogeno. Nella nomenclatura tradizionale si seguono le stesse regole degli ossidi basici, con il termine idruro al posto di ossido. Gli idruri del carbonio sono detti **idrocarburi**, mentre l'idruro del silicio è detto **silano**
- Gli idracidi: composti binari dell'idrogeno con elementi del gruppo VIIA e alcuni del gruppo VIA. Nella nomenclatura tradizionale si chiama **acido + prefisso del non metallo + suffisso -idrico**

5.5 Gli Ioni

- Assegnare il nome ai cationi
 - Nella nomenclatura tradizionale i cationi monoatomici sono denominati **ione + nome del metallo + la sua carica tra parentesi**. Prevede inoltre l'uso dei suffissi **-oso** e **-ico** per gli ioni con due stati di ossidazione e **-ico** per un solo stato di ossidazione
 - Nel caso dei cationi poliatomici valgono le stesse regole, ma occorre aggiungere prima del nome del metallo il **prefisso numerale** che corrisponde al **numero di atomi dell'elemento**
- Assegnare il nome agli anioni
 - Nel caso degli anioni monoatomici si usa solo la nomenclatura IUPAC e si indica come **ione + radice dell'elemento + -uro**
 - Nel caso degli anioni poliatomici, nella nomenclatura tradizionale si utilizzano i suffissi **-oso** (o **-ito**), **-ico** e i prefissi **ipo-** e **per-** in ordine di numero di ossidazione crescente

5.6 I composti ternari

- Gli idrossidi: composti ternari formati da idrogeno, ossigeno e un metallo. Nella nomenclatura tradizionale il nome si costruisce con **idrossido di + nome del metallo**
- Gli ossoacidi: composti ternari formati da idrogeno, ossigeno e un non metallo. Nella nomenclatura tradizionale il composto prende il nome di **acido + nome del non metallo + -ico** se ha un solo n.o., mentre se ha due numeri di ossidazione il nome viene composto da **acido + nome del non metallo + il suffisso -ico** (n.o. più alto) o **-oso** (n.o. più basso)

5.7 I sali

I sali sono composti che si ottengono a partire da un acido, sostituendo i suoi atomi d'idrogeno con atomi di un metallo. Si dividono in:

- Sali binari: sono formati da un metallo, che si scrive per primo nella formula, e da un non metallo. Nella nomenclatura tradizionale il nome si compone di **radice del non metallo + suffisso -uro + "di" + nome del metallo**. Se il metallo ha due numeri di ossidazione si usa il suffisso **-oso** (n.o. più basso) o **-ico** (n.o. più alto)

- Sali ternari: sono formati da un metallo, un non metallo e ossigeno. Sono composti ionici, formati da uno o più cationi del metallo e da uno o più anioni derivati da un ossoacido. Per scrivere la formula si scrive il catione del metallo con la sua carica, partendo dall'ossoacido si scrive l'anione ottenuto eliminando gli idrogeni dall'acido, questo numero è uguale alla carica dell'anione. Si scambiano poi le cariche dei due ioni, se il metallo ha carica maggiore di +1 si racchiude l'anione tra parentesi e si scrive l'indice in basso. Infine se gli indici ottenuti hanno divisore comune si semplificano. Nella nomenclatura tradizionale, partendo dal nome dell'acido **si elimina la parola acido, e il suffisso -oso diventa -ito**, mentre **il suffisso -ico diventa -ato**, si aggiunge **"di"** + **il nome tradizionale del catione**. Se il metallo può assumere due numero di ossidazione, si usa il suffisso **-oso** (n.o. più basso) oppure **-ico** (n.o. più alto)
- Sali quaternari: sono formati da un metallo, un non metallo e ossigeno. Nella nomenclatura tradizionale si adottano le stesse regole dei sali ternari con l'unica differenza che consiste nello scrivere i **prefissi** (mono-, bi-, tri- ecc.) **prima della preposizione "di"** a indicare il numero di atomi d'idrogeno che fanno parte del sale
- Sali basici: sali che contengono un gruppo (OH). Nella nomenclatura tradizionale il nome si ottiene indicando il **numero dei gruppi (OH) con idrossidi oppure osso preceduto dai prefissi** mono-, di-, tri ecc.
- Sali idrati: Sali che contengono una quantità definita di acqua, l'acqua di cristallizzazione. La nomenclatura segue le regole precedenti **aggiungendo** alla fine **la parola idrato con un prefisso numerale** che indica il **numero di molecole di acqua**
- Sali doppi: si formano per reazione tra due sali semplici aventi anione o catione in comune. La nomenclatura, che non fa differenze tra IUPAC, Stock e tradizionale, prevede che per i casi **con l'anione in comune si specifica la parola doppio**, mentre nei casi **con il catione in comune, ogni anione mantiene il suo suffisso** e per indicare il **numero di volte in cui si ripete l'anione si usano i prefissi bis-, tris- ecc.**