DETERMINARE LA POSIZIONE DI EQUILIBR. DI UNA REAZIONE ACIDO-BASE. E FORZA

• IN CASO DI ACIDO FORTE O DI UNA BASE FORTE, QUESTE DUE SPECIE messe IN SOLUZIONI ACQUOSE SONO COMPLETAMENTE IONIZZATE.

HCl messo IN ACQUA SI DISSOCIA COMPLETAMENTE:

$$HCl + H_2O \longrightarrow H_3O^+ + Cl^-$$

LA REAZIONE INVERSA, DI RETROSPOSTAMENTO DI PROTONE, NON HA ALCUNA TENDENZA AD AVVENIRE.

LE BASI E ACIDI DEBOLI IN ACQUA SONO PARZIALMENTE IONIZZATI

L'ACIDITÀ DEI COMPOSTI ORGANICI È RELATIVA ALLA STABILITÀ DELL'ANIONE (A^-) CHE SI FORMA QUANDO L'ACIDO HA TRASFERITO UN PROTONE AD UNA BASE. NE È DIRETTAMENTE PROPORZIONALE

ESSA SI DETERMINA PRENDENDO IN CONSIDERAZIONE:

• ELETTRONEGATIVITÀ =

TENDENZA DI UN ATOMO AD ATTRARRE A SÉ GLI ELETTRONI CONDIVISI NEL LEGAME COVALENTE

→ PIÙ QUEST'ULTIMA SUL LEGAME RISPETTO È LA CARICA DELL'ATOMO DI STABILIZZARE LA CARICA SU DI ESSO

$$CH_3 < NH_2 < OH < F$$

ACIDITÀ CRESCENTE.

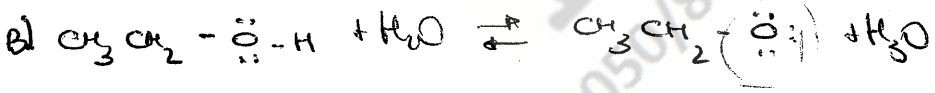
MASTER COPY Tel. 050 8312126 Cell. 338 9837745

• RISONANZA E DELOCALIZZAZIONE DELLA CARICA DI A^-

PIÙ STABILE L'ANIONE DOVE È POSSIBILE STABILIZZARE TRAMITE LA CARICA CON PIÙ STRUTTURE DI RISONANZA, PIÙ È STABILE PIÙ AUMENTA IL SUO CARATTERE ACIDO

A) 

IL DOPPIETTO NON-LEGANTE STABILIZZATO CON DUE STRUTTURE

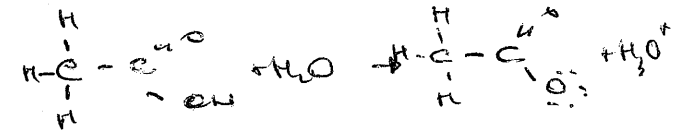
B) 

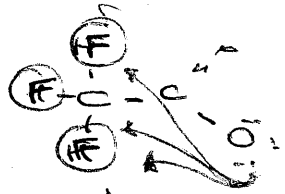
LA CARICA È MENO ADDENSATA ALL'OSSIGENO (DELOCALIZZATA)

LA DELOCALIZZAZIONE DELLE DUE STRUTTURE LO RENDE PIÙ STABILE RISPETTO DELLO IONE ALCOSSIDO: (A) PIÙ ACIDO DI (B)

• EFFETTO INDUTTIVO:

POLARIZZAZIONE DELLA DENSITÀ ELETTRONICA CENTRATA DA UN ATOMO PIÙ ELETTRONEGATIVO ADIACENTE.





IL FLUORO ATTRAE A SÉ LA CARICA DISTRIBUENDOLA.

MASTER COPY Tel. 050 8312126 Cell. 338 9837745

ACIDI / BASI SECONDO BRØNSTED E LOWRY

HI	ACIDO IODIDRICO	−9
HCl	CLORIDRICO	−7
H_2SO_4	SOLFORICO	−5.2
HNO_3	NITRICO	
H_3O^+	IDRONIO	−1.74
HSO_4^-	IONE BISOLFATO	
H_3PO_4	FOSFORICO	2.1
CH_3COOH	ACETICO	4.76
H_2CO_3	CARBONICO	6.36
H_2S	SOLFIDRICO	
$H_2PO_4^-$	IONE FOSFATO BIACIDO	
NH_4^+	IONE AMMONIO	9.24
HCN	ACIDO CIANIDRICO	
C_6H_5OH	FENOLO	9.95
HCO_3^-	IONE BICARBONATO	10.33
HPO_4^{2-}	IONE FOSFATO MONOACIDO	
H_2O	ACQUA	15.7
C_2H_5OH	ETANOLO	

ACIDITÀ CRESCENTE ↑

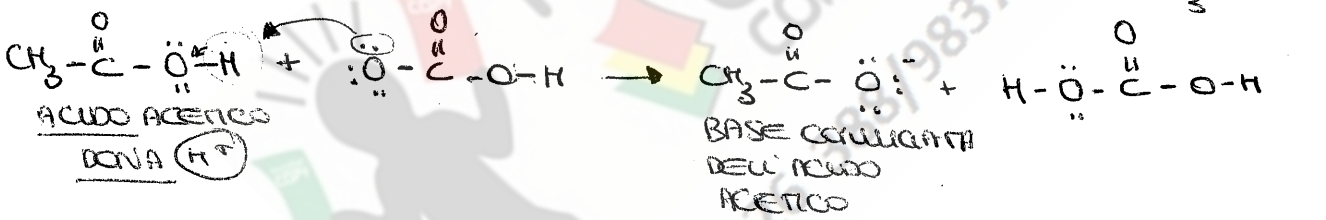
LE LORO BASI CONIUGATE VANNO CON ORDINE OPPOSTO

- BASE CONIUGATA = LA SPECIE CHE SI FORMA QUANDO UN ACIDO DONA UN PROTONE (ACIDO PERDE UN H^+)

MASTER COPY
Tel. 050 8312126
Cell. 388 9837745

BASE: ACCETTA

ACIDO CONIUGATO DI HCO_3^-



ACIDO ACETICO DONA H^+

BASE CONIUGATA DELL'ACIDO ACETICO

- UN ACIDO È UNA SOSTANZA CHE DONA UN PROTONE AD UNA BASE CHE ACCETTA UN PROTONE

→ DONARE UN PROTONE = DONARE H^+

- BASE CONIUGATA = SPECIE CHE SI FORMA QUANDO UN ACIDO DONA UN PROTONE.
- ACIDO CONIUGATO = SPECIE CHE SI FORMA QUANDO UNA BASE ACCETTA UN PROTONE.

↕

DELOCALIZZAZIONE DI A^- NELLO SPAZIO ESTERNO:

LA CARICA È DISTRIBUITA LUNGO TUTTA LA SUPERFICIE ESTERNA DELLA MOLECOLA E IL RAGGIO MOLECOLARE È LA STABILITÀ DELL'ANIONE È QUINDI LA SUA BASICITÀ (SE SI CONSIDERA UNA FAMIGLIA)

RICORDA!
- IL RAGGIO IONICO > RAGGIO ATOMICO (ANIONE DI REPULSIONE DI UN e^- IN PIÙ)
- IL RAGGIO PERIODICO AUMENTA LUNGO UN GRUPPO.

REAZIONE DI EQUILIBRIO

COME DETERMINARE VERSO PREVALE?

- IDENTIFICARE I DUE ACIDI E LE DUE BASI UNA SUL LATO DX E UNO SUL LATO SX CONFRONTANDOLI IDENTIFICANDO QUELLO PIÙ FORTE E IL PIÙ DEBOLE.
- IDENTIFICARE LA FORZA ANCHE DELLE DUE BASI
- L'ACIDO FORTE DI CUI SOPRA CON LA BASE FORTE GENERANO ACIDO DEBOLE E BASE DEBOLE; L'EQUILIBRIO È SPOSTATO DEL TUTTO VERSO L'ACIDO E LA BASE PIÙ DEBOLI.

* CON ACIDO FORTE / BASE FORTE NON C'È REAZIONE REVERSIBILE L'EQUILIBRIO È TUTTO SPOSTATO VERSO LA COMPONENTE DISSOCIATA.
* SE L'ACIDO È DEBOLE IN PRESENZA DI H_2O LA REAZIONE È IN EQUILIBRIO.

NELLE REAZIONI ACIDO BASE CALCOLO DELLA K_a

$K_e = \frac{K_a \cdot \cancel{[H_2O]}}{K_{eP}} = (>)1$ PER ESSERE SPOSTATO VERSO I PRODOTTI E VICEVERSA SE È PIÙ È SPOSTATO VERSO I REAGENTI

NELLE REAZIONI DI SOSTITUZIONE CALCOLO LA BASICITÀ DEI NUCLEOFILI QUELLO + BASICO + DEBOLE SARÀ SPOSTATO VERSO IL + DEBOLE

PIÙ È STABILE LA BASE CORRISPONDENTE CHE SI VIENE A FORMARE, PIÙ L'ACIDO DA CUI DERIVA È FORTE UN ACIDO FORTE SI DISSOCIA COMPLETAMENTE IN SOLV. AL CONTRARIO PIÙ È INSTABILE È BASICO

- ELETTRONEGATIVITÀ (>)
- DELOCALIZZAZIONE (>) (STABILITÀ X RISONANZA)
- EFFETTO INDUTTIVO
- RAGGIO DIMENSIONE LONE.

RICORDA: $pK_a = -\log K_a$

$K_a = \frac{1}{10^{pK_a}}$

$\downarrow$

$\boxed{K_a = 10^{-pK_a}}$

MASTER COPY
Tel. 050 8312126
Cell. 338 9837745

CALCOLO DELLA K. EQUILIBRIO E VERSO DELLA REAZIONE:

- RICAVARE DALLE TABELLE DELLE pKa I VALORI DEGLI ACIDI / BASI E DI ENTRAMBI RICAVARE LE Ka

$$\boxed{Ka = 10^{-pKa}}$$

LA Ke È DEFINITA COME $Ke = \frac{Ka\ R}{Ka\ P} = (Keq) = \frac{10^{-pKa\ (R)}}{10^{-pKa\ (P)}}$

$$\hookrightarrow Ke = 10^{(-pKa(R) + pKa(P))} = 10^{(N)}$$

SE 10^N È INTORNO ALL'ORDINE DI 10^3 LA REAZIONE È IN EQUILIBRIO

ALL'INCIRCA 10^3 EQUILIBRIO PERFETTO $\rightleftharpoons$

ALTRIMENTI SARÀ UN EQUILIBRIO CON UNA FRECCETTA LEGGERMENTE + SPOSTATA A VERSO DX / SX

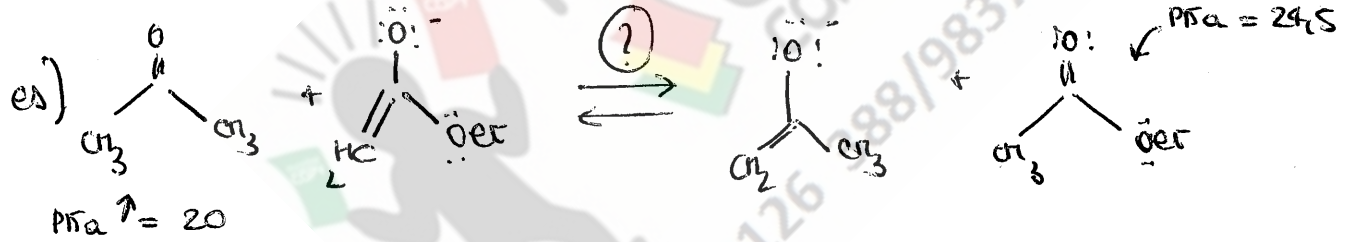
SE $10^N \ll 1$ L'EQUILIBRIO È TUTTO SPOSTATO VERSO I REAGENTI.

REAGENTI $\longleftarrow$ PRODOTTI

SE $10^N \gg 1$ L'EQUILIBRIO È TUTTO SPOSTATO VERSO I PRODOTTI

REAGENTI $\longrightarrow$ PRODOTTI

es)



pKa ↑ = 20

$$Keq = \frac{10^{-20}}{10^{-24,5}} = 10^{(-20+24,5)} = 10^{4,5}$$

$10^{4,5} \gg 1$ DUNQUE L'EQUILIBRIO È SPOSTATO VERSO I PRODOTTI

MASTER COPY
Tel. 050 8312126
Cell. 388 9837745

TEORIA DEL LEGAME DI VALENZA: PRENDE IN CONSIDERAZIONE ORBITALI DEGLI ELETTRONI ESTERNI E METTE LA LOCALIZZAZIONE DI CIASCUNO DI ESSI ad UNA COPPIA DI ATOMI CONTIGUI

- TEORIA ORBITALI MOLECOLARI
-

COME SI FORMANO QUESTO LEGAME FRA 2 ATOMI ?

LA FORMA FONDENDO 2 ORBITALI SEMIPIENI DI ATOMI:
PRENDO UN ORBITALE SEMIPIENO DELL'ATOMO (A) E UNO DELL'ATOMO (B) ACCOPPIANDO 2 ATOMI CREANDO UN FENOMENO ELETTRONICO/MATEMATICO CHIAMATO 2 ELETTRONI E FORMO IL LEGAME

- SOVRAPPONENDO DI ORBITALI SEMI-PIENI

I LEGAMI — SIGMA / PIGRECO / DELTA

CHE DIPENDONO DA NUMERO DEI PIANI NODALI

LEGAME SIGMA (σ)

CARATTERIZZATO DA UNA NUBE ELETTRONICA CHE SI CONCENTRA SULLA CONGIUNGENTE NUCLEARE
L'ASSE NUCLEARE È UNA LINEA IMMAGINARIA CHE UNISCE NUCLEO (A) CON IL NUCLEO (B)

IL LEGAME SIGMA NON HA PIANI NODALI
IN ASSENZA DI LEGAME ~~ELETTRONICO~~ ~~ESISTE UNA ZONA A DENSITÀ NULLA~~
IL CASO DEL LEGAME SIGMA PERMETTE LA ROTAZIONE INTORNO ALL'ASSE DI LEGAME.
SE È PERMESSA LA ROTAZIONE ATTORNO A LEGAME, MA DATO CHE NON VI È ROTTURA DEL LEGAME IN QUANTO LA DENSITÀ ELETTRONICA RIMANE COSTANTE.

IL LEGAME SIGMA NON SI FORMA SOLO TRA 2 LEGAMI (A),
MA ANCHE:
- Sp
- ORBITALI IBRIDI
- S+IBRIDO
- pp
- d

SOLO CON ORBITALI AVENTI $L \neq 0$ IN QUANTO CI DEVE ESSERE SOVRAPP. LATERALE

- LA ROTAZIONE PER ESEMPIO NON AVVIENE CON IL LEGAME (π) (POSSIBILE TRA ORBITALI CON $N \neq 0$) CON PIANO NODALE SUL NUCLEO
2 ORBITALI (P) SE INSIEME POSSIEDONO SI FONDONO FINO A CREARE UNO SOPRA IL PIANO E UNO SOTTO L'ASSE DI LEGAME CHIAMATO DEL PIANO NODALE
MA C'È UNA ROTAZIONE PERCHÉ SE LO FACCIO I DUE ORBITALI P NON AVVERTONO UN $\perp$ ALL'ATTO E LA SOVRAPPOSIZIONE È UGUALE A 0 E QUINDI IL LEGAME SI ROMPE

MASTER COPY
Tel. 050 8312126
Cell. 388 9837745