CHIMICA & MATERIALI

ISOTOPO: stesso numero atomico ma diverso numero di massa
peso atomico di x: massa atomica di x pesata rispetto agli isotopi (uma) $\frac{1}{12}$ · (massa atomica ^{12}C)
peso molecolare di una sostanza è la somma dei pesi atomici di tutti gli elementi contenuti in una molecola di tale sostanza
mole: è la massa in grammi di un numero di Avogadro di atomi o molecole → $N = 6,02 \times 10^{23}$
massa molare: massa in gr di una mole di sostanza è numericamente uguale al peso atomico/molecolare della sostanza.
$M = \frac{gr}{mol}$ $mol. = \frac{gr}{M} = \frac{gr}{gr/mol}$ $gr = M \cdot mol = \frac{gr}{mol} \cdot mol$

ATOMO DI BOHR - esistenza di stati stazionari caratterizzati da orbite lungo le quali gli elettroni si muovono mantenendo energia costante; questi possiedono una quantità di energia definita detta livello energetico
quanto: quantità minima di energia che le particelle possono emettere o assorbire. → le particelle emettono o assorbono energia secondo multipli interi di un quanto. $E = h \cdot \nu$
condizione di quantizzazione le orbite permesse devono soddisfare la seguente relazione $mvr = n\frac{h}{2\pi}$ → costante di Plank
↳ numero quantico principale

per passare da stato fondamentale → stato eccitato l'elettrone deve assorbire tanta energia quanta la differenza di energia tra livello superiore e quello inferiore

dualismo onda-particella (di Broglie): un elettrone legato ad un nucleo si comporta come un'onda stazionaria e la lunghezza d'onda deve essere uguale all'orbita oppure a un suo multiplo intero.
principio di indeterminazione di Heisenberg le particelle hanno proprietà tipiche delle onde, e non essendo punti fermi, non è possibile stabilire una definita coppia posizione-momento
funzione d'onda: permette di stabilire qual è la probabilità di trovare un elettrone in una determinata posizione data una certa velocità

ciascun orbitale atomico è identificato da una ben precisa terna di 3 numeri quantici (n, l, m)
n = numero quantico principale, definisce la distanza ($n = 1, 2, 3 \ldots$)
l = numero quantico secondario definisce la forma degli orbitali ($l = 0, 1 \ldots n-1$)
m_l = numero quantico magnetico definisce dove sono posizionati gli orbitali ($m = l, l-1, \ldots 0$)
m_s = numero quantico magnetico di spin si riferisce alla proprietà detta "spin" che ha l'elettrone di ruotare intorno al proprio asse ($+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$)
Ogni elettrone possiede due stadi diversi di spin antiparalleli con rotazione oraria e antioraria

Gli atomi mettono prevalentemente gli elettroni di valenza per legarsi tra loro quindi per capire la reattività di un atomo è sufficiente conoscere la sua configurazione elettronica superficiale

Raggio atomico: distanza media tra i nuclei di due atomi dello stesso elemento
Raggio ionico: neutro → catione: dimensione dell'atomo diminuisce
neutro → anione: dimensione dell'atomo aumenta

MASTER COPY

Tel. 388/9837745

→ tanto più grande quanto più l'elettrone è legato all'atomo

energia di ionizzazione: energia necessaria per allontanare un elettrone dall'atomo
↑ misura della capacità dell'atomo di cedere elettroni (di ossidarsi)

affinità elettronica: energia che si libera quando un elettrone si addiziona a un atomo
↑ capacità dell'atomo di acquistare elettroni (di ridursi)

- metalli = elementi che hanno tendenza a perdere elettroni di valenza (I, II, III gruppo (no Be, B) bassa en. ionizzazione e bassa affinità elettronica)
- non metalli: elementi che tendono ad acquistare elettroni (calcogeni, alogeni hanno elevata en. ionizz. e elevata aff. elettr.)

elettronegatività: misura relativa alla capacità di un atomo di attrarre gli elettroni quando prende parte a un legame chimico
↑ (segue l'andamento dell'energia di ionizzazione)

LEGAME CHIMICO

(gli atomi si legano perché il composto che ne deriva è più stabile dei singoli)

energia di legame = energia che si guadagna quando si forma il legame = energia necessaria per rompere il legame

distanza di legame = distanza tra i due atomi covalenti

maggiore è l'energia di legame, minore è la distanza di legame

legame ionico: elevata affinità elettronica - bassa energia di ionizzazione
(non metalli) alogeni (metalli) I/II gruppo

legame covalente: tra atomi con elevata affinità elettronica (non metalli)
+ apolare se atomi covalenti nel legame sono uguali e hanno stessa elettronegat.
- polare atomi hanno diversa tendenza ad attrarre elettroni di legame

regola dell'ottetto: un atomo può formare tanti legami covalenti quanti sono i suoi orbitali di valenza semioccupati

ibridazione: consiste nella promozione di un elettrone dall'orbitale s a l'orbitale p così da avere 4 uguali orbitali con la stessa energia (sp³ CARBONIO)

TEORIA DEGLI ORBITALI MOLECOLARI: gli elettroni di una molecola vengono descritti da funzioni d'onda dette orbitali molecolari, tenendo conto di TUTTE le interazioni attrattive con i nuclei della molecola e TUTTE le interazioni repulsive con gli altri elettroni.
→ Alla descrizione della molecola concorrono TUTTI gli elettroni non solo quelli di valenza spaiati.
L'equazione di Schrödinger può essere risolta in modo rigoroso solo per H_2^+, per il resto si usa il metodo di approssimazione L.C.A.O. con il quale le funzioni d'onda degli orbitali molecolari si ottengono come combinazioni lineari delle funzioni d'onda degli orbitali atomici.

orbitale di legame: generato dall'interferenza costruttiva tra due orbitali atomici, ha minore energia (σ)
orbitale di antilegame: generato dall'interferenza distruttiva di due orbitali atomici, ha maggiore energia (π)

Si forma un legame quando il numero di elettroni orb. mol. di legame è maggiore del numero di elettroni orb. mol. di antilegame

legame metallico: gli elettroni di valenza sono "relativamente liberi" di muoversi nella struttura cristallina → mare di elettroni che tengono insieme cationi. Lo spostamento dei piani della struttura cristallina di un metallo non provoca forze forte repulsive. Infatti i metalli sono caratterizzati da bassa energia di ionizzazione, buona conducibilità termica, malleabilità, duttilità.

Tel. 388/9837745

conduzione elettrica nei metalli può essere spiegata in termini di orbitali molecolari che non sono localizzati, ma si estendono nel solido in tutte le direzioni → numero degli orbitali enorme e i loro livelli energetici sono così vicini da formare una banda continua

N atomi danno origine a N orb md che portano N elettroni, ancora in ogni orbitale si possono sistemare 2 elettroni, avremo la banda degli N orbitali riempita per metà (orbitali di legame) e N/2 orbitali disponibili (antilegame) che possono essere occupati con una spesa di energia termica/radiante/elettrica

banda di valenza: si forma quando per la formazione degli orbitali molecolari sono interessati gli orbitali atomici di valenza che contengono gli elettroni
Banda di conduzione: si ottiene dalla combinazione degli orbitali atomici ad energia immediatamente superiore rispetto agli orbitali di valenza

CONDUZIONE DI ENERGIA: si spiega - attraverso il movimento di elettroni all'interno della banda di valenza se questa non è completamente occupata (caso dei metalli alcalini).
- quando b. valenza è completa attraverso il movimento degli elettroni della banda di valenza a quella di conduzione grazie al fatto che tali bande risultano contigue o sovrapposte (non c'è GAP)

isolanti e semiconduttori: banda di valenza e di conduzione separate da GAP energia
↳ conduttività aumenta con l'aumento della temperatura

attrazione dipolo-dipolo: attrazioni elettriche che si sviluppano tra molecole polari quando la sostanza si trova nello stato condensato (solido/liquido)
⊕⊖ ⊕⊖ attrazioni più intense di quelle tra molecole apolari
infatti le sostanze polari presentano punti fusione e ebollizione più elevati

legame a idrogeno:
più forte elettronegatività → più grande momento dipolare della molecola →
→ più forte legame a idrogeno → T ebollizione più elevato

MATERIA

FAHRENHEIT: $°F = \frac{9}{5} \cdot °C + 32$
KELVIN: $K = °C + 273,15$

STATO GASSOSO

Temperatura critica: al di sopra della quale non è possibile liquefare un gas per compressione. T_c > VAPORE T_c < GAS
gas: - hanno forma e volume propri
- sono altamente comprimibili e completamente miscibili
- esercitano una pressione $P = \frac{F}{S}$

pressione: 1 atm = 760 TORR = 760 mm Hg = 101,325 KPa 1 bar = 100 Pa

legge di Boyle $P \cdot V = k$ md. e T costante
legge di Charles $V = b \cdot T$ md. e P costanti
legge di Avogadro $V = a \cdot n$ T e P costanti

condizioni normali: 0°C, 1 atm, 1 mole ($6,022 \cdot 10^{23}$ atomi/molecole) 22,4 L
condizioni standard: 25°C, 1 atm, 1 mole " 24,45 L

legge dei gas ideali $PV = nRT$
↳ 0,082 $\frac{l \cdot atm}{md \cdot K}$ (condizioni normali) / 8,31 $\frac{J}{md \cdot K}$

densità: $\frac{m}{V} = d = \frac{MP}{RT}$ massa molare: $PV = \frac{m}{M}RT \rightarrow M = \frac{mRT}{PV}$

miscele di gas → le leggi dei gas possono essere applicate anche a una miscela di gas non reattivi

pressione esercitata da una singola componente del gas e pressione parziale

legge di Dalton: $P_{totale} = \Sigma$ pressioni parziali dei gas nella miscela

pressione parziale = $p_A = \frac{n_A RT}{V_{totale}}$ / $p_A = X_A \cdot P_{tot}$ → frazione molare $\frac{n_A}{n_{totali}}$

Fissata la temperatura le molecole del gas si muoveranno a velocità diverse tra loro con energia cinetica diversa

→ velocità quadratica media dipende da temperatura e massa molecolare gas

$\bar{u}$ aumenta all'aumentare della temperatura e diminuisce all'aumentare della massa molecolare del gas

velocità media di diffusione del gas

velocità di fuga velocità minima iniziale a cui un oggetto senza propulsione deve muoversi per potersi allontanare indefinitivamente da una sorgente di campo gravitazionale

conduzione termica trasmissione di calore da zone a T maggiore a quelle a T minore
- nei gas è dovuta alla diffusione atomica e molec.
- nei liquidi e nei solidi dovuta a onde elastiche
- materiali metallici dovuta all'oscillazione di elettroni liberi

conducibilità termica (λ) è il flusso di calore (Q) che attraversa una superficie unitaria A di spessore unitario d sottoposto a un gradiente termico ΔT di un grado Kelvin (o Celsius)

$$\lambda = \frac{Q \cdot d}{A \cdot \Delta T} \quad \frac{W}{m \cdot K}$$

ΔT 1°C / 1°K

trasmittanza termica U flusso di calore che attraversa una superficie unitaria sottoposta a differenza di natura pari a un grado Kelvin (o Celsius)

Essa è pari all'inverso della sommatoria delle resistenze termiche degli strati che compongono la superficie considerata $U = \frac{1}{\Sigma R_i}$

resistenza termica è il rapporto tra lo spessore d dello strato considerato e la sua conducibilità termica λ $R = d/\lambda$

Gas ideale: insieme di atomi e molecole puntiformi (volume trascurabile) che si muovono senza interagire tra loro (forze attrazione intermolec. trascurabili)

Gas reale: a basse temperature e alte pressioni i gas si comportano in modo non ideale. non si può applicare la legge $PV = nRT$

equazione di van der Waals → considera il volume proprio delle molecole e le forze intermolecolari

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

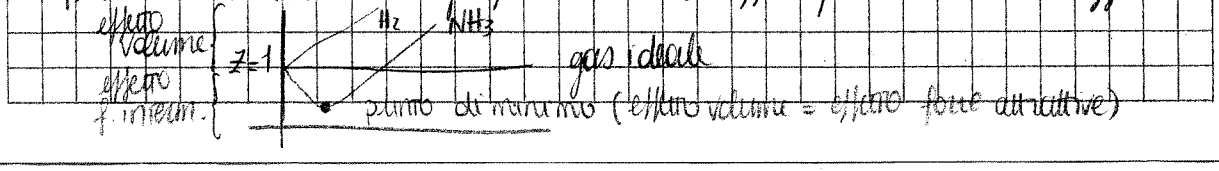
nb: correzione per volume; $\frac{n^2 a}{V^2}$: correzione per forze intermolec.

fattore di comprimibilità: $Z = 1$ per i gas ideali

$Z < 1$ gas più comprimibile rispetto al gas ideale → prevalgono forze attrattive intermolec.

$Z > 1$ gas meno comprimibile → prevale effetto dovuto al volume proprio delle molecole

punto di minimo nel grafico indica effetto forze attrattive = effetto volume



non è possibile liquefare gas per compressione

liquefazione dei gas: VAPORE < Temperatura critica < GAS
più alta è la T_c più forti sono le forze attrattive tra molecole

effetto Joule-Thomson secondo cui l'espansione di un gas al di sotto di una certa temperatura caratteristica (T_i) produce una diminuzione di temperatura (spesa di energia sottoforma di calore che è proporzionale alla diminuzione di pressione (per rompere legami intermolecolari)
Maggiori sono le interazioni molecolari maggiore sarà l'effetto di diminuzione della temperatura a parità di ΔP
Per H_2 e He effetto Joule Thomson negativo → espansione provoca riscaldamento
(condizionatori sfruttano l'effetto Joule-Thomson)

CONDIZIONATORE: compressore comprime freon che raggiunge T_c, Freon arriva allo scambiatore esterno B cede parte del suo calore all'aria e si raffredda e si liquefa, passa per un "tubo capillare" e dell'espansa si diluisce in parte gassoso e in parte liquido e la sua temperatura scende. Arriva allo scambiatore d'aria A e cede frigori all'aria.
1 frigoria = -1 chilocaloria
Freon R12, Freon R22, CFC, HCFC, HFC 407C, HFC 410A

reazioni chimiche a completamento: TUTTI i reagenti si trasformano in prodotti
all'equilibrio a termine della reazione ci sono sia reagenti che prodotti
queste sono reversibili e si trovano in una condizione di equilibrio dinamico
velocità di reazione diretta = velocità di reazione inversa
esempio → tensione di vapore $H_2O_{(l)} \rightleftharpoons H_2O_{(g)}$
soluzione satura: solubilizzazione e precipitazione si bilanciano

legge delle azioni di massa: $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$ → $\frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b} = K_c$ costante di equilibrio in funzione delle concentrazioni molari

reazione chimica di equilibrio in fase omogenea dove tutti gli elementi sono nella stessa fase.

possono avere costanti di equilibrio anche in funzione di numero di moli e in funzione della frazione molare delle specie gassose, ma queste non sono vere costanti di equilibrio poiché il loro valore non è costante a T costante ma dipende anche da pressione e volume

$\frac{[p_C]^c[p_D]^d}{[p_A]^a[p_B]^b} = K_p$ costante di equilibrio in funzione delle pressioni parziali

$K_p \cdot K_c \gg 1$ sono favoriti i prodotti $K_p = K_c(RT)^{\Delta n_g}$ $K_p \cdot K_c \ll 1$ favoriti i reagenti

se una miscela non è all'equilibrio si calcola il quoziente di reazione $Q = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b}$ e lo si confronta con la costante di equilibrio della reazione.
$Q = K$ equilibrio $Q > K$ numeratore elevato reazione si sposta verso i reagenti $Q < K$ denominatore troppo elevato reazione si sposta verso i prodotti

equilibrio eterogeneo: reagenti e prodotti sono in fasi diverse
(la concentrazione di un solido non viene considerata nel calcolo della costante)
e di un solvente

principio di Le Chatelier: Se un equilibrio chimico viene perturbato dall'esterno l'equilibrio si sposterà in modo tale da rendere minimi gli effetti della perturbazione