Materiali

NUMERI ATOMICI E MASSE ATOMICHE

NUMERO ATOMICO = numero di protoni presenti nel nucleo, identifica un elemento

MASSA ATOMICA (RELATIVA) = massa in grammi di una mole di atomi (1 mole = $6,025 \cdot 10^{23}$ atomi = N_A atomi)

UNITÀ DI MASSA ATOMICA = 1/12 della massa di un atomo di CARBONIO 12 (6 PROTONI e 6 NEUTRONI), unità di misura di riferimento per le masse atomiche con questa scala si ha che:

MASSA ATOMICA RELATIVA MOLARE DEL CARBONIO C12 = 12g

STRUTTURA ELETTRONICA DEGLI ATOMI

Gli elettroni negli atomi possono occupare solo certi livelli di energia (ORBITALI). Quando questi passano da un livello maggiore a uno minore di energia emettono una QUANTITÀ DISCRETA DI ENERGIA (quanto) sotto forma di radiazione detta FOTONE

La variazione di energia associata al passaggio è:

$$\Delta E = h\nu \qquad h = \text{costante di Planck} = 6,63 \cdot 10^{-34}\ J \cdot s$$

$$\downarrow \quad c = \nu\lambda = 3 \cdot 10^{8}\ m/s \ (\text{velocità della luce})$$

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} \qquad \lambda = \text{lungh. d'onda del fotone}$$

L'energia dell'elettrone dell'H per i vari livelli d'energia consentiti è data da:

$$E = -\frac{2\pi^2 m e^4}{n^2 h^2} = -\frac{13,6}{n^2}\ eV$$

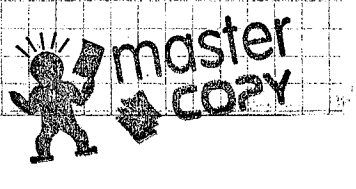
eq. di Bohr

m = massa e^-
e = carica e^-
n = n° quantico principale, indica il livello di energia

NUMERI QUANTICI ED ENERGIA DI IONIZZAZIONE IN H

1. n NUMERO QUANTICO PRINCIPALE $\boxed{1 \leq n \leq 7}$
   Rappresenta il LIVELLO DI ENERGIA ASSUNTO DALL'ELETTRONE tra quelli possibili
   $n = 1$ corrisponde allo STATO MINIMO DI ENERGIA POSSIBILE pari a $-13,6\ eV$
   Quando e^- è eccitato a livelli di energia superiori ($n > 1$) l'energia AUMENTA e il suo valore ASSOLUTO DIMINUISCE es $n = 2 \rightarrow -3,4\ eV$
   Per $n = +\infty \rightarrow E = 0\ eV$
   L'energia TOTALE RICHIESTA PER RIMUOVERE UN e^- COMPLETAMENTE DALL'ATOMO (di H) è $13,6\ V$ = ENERGIA DI IONIZZAZIONE DELL'e^- NELL'IDROGENO

2. l NUMERO QUANTICO AZIMUTALE $\boxed{0 \leq l \leq n-1}$
   Specifica il LIVELLO ENERGETICO SECONDARIO all'interno del livello principale. Definisce, inoltre, una REGIONE DI SPAZIO CON ELEVATA PROBABILITÀ DI TROVARVI L'ELETTRONE.
   $l = 0 \rightarrow s$ $\quad l = 1 \rightarrow p$ $\quad l = 2 \rightarrow d$ $\quad l = 3 \rightarrow f$
   I livelli secondari vengono detti anche ORBITALI



ORBITALE = regione di spazio all'interno del quale la densità di un PARTICOLARE e^- / una COPPIA di e^- è ALTA

3. m_l NUMERO QUANTICO MAGNETICO $\boxed{-l \leq m_l \leq l}$
Specifica l'ORIENTAMENTO SPAZIALE di un SINGOLO ORBITALE ATOMICO

4. m_s NUMERO QUANTICO DI SPIN $\boxed{m_s = \pm 1/2}$
Specifica la DIREZIONE DI ROTAZIONE di un e^- INTORNO AL PROPRIO ASSE (orario e antiorario). DUE e^- POSSONO OCCUPARE LO STESSO ORBITALE MA DEVONO AVERE SPIN OPPOSTI

PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE DI HEISENBERG

La posizione e il momento (massa · velocità) di un elettrone NON POSSONO ESSERE DETERMINATI CONTEMPORANEAMENTE → per questo motivo il moto di e^- attorno al nucleo viene di solito rappresentato da una DENSITÀ DI NUVOLA DI CARICA ELETTRONICA

PRINCIPIO DI ESCLUSIONE DI PAULI

due ELETTRONI NON POSSONO AVERE I 4 NUMERI QUANTICI UGUALI

STRUTTURA ELETTRONICA A ATOMI A PIÙ ELETTRONI

Ci sono 7 strati di elettroni principali ognuno dei quali è associato ad un certo livello di energia. Ciascuno strato può contenere al MAX UN CERTO NUMERO di e^- DEFINITO a seconda dei numeri quantici e pari a $2n^2$ (n = n° quantico principale)

$n=1 \rightarrow 2$ $n=2 \rightarrow 8$ $n=3 \rightarrow 18$ $n=4 \rightarrow 32$

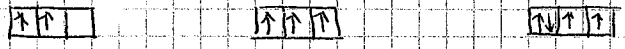
Il raggio dell'atomo (se approssimato a una SFERA) NON È COSTANTE MA DIPENDE DALLE CONDIZIONI AL CONTORNO. In generale:
con qualche eccezione
- Se n AUMENTA → R AUMENTA
- Scorrendo lungo un PERIODO della TAVOLA PERIODICA → RIMANE INVARIATO

L'ordine in cui gli elettroni riempiono gli orbitali è il seguente:

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^6\ 5s^2 \ldots$

7s 7p 7d
6s 6p 6d 6f
5s 5p 5d 5f
4s 4p 4d 4f
3s 3p 3d
2s 2p
1s

Elettroni con stesso n e stesso l tendono ad ottenere, finquando possibile, lo stesso spin:

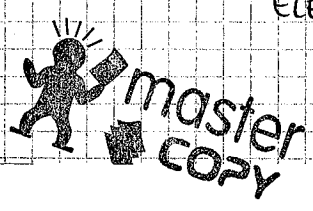


$2e^-$ in un p $\quad 3e^-$ in un p $\quad 4e^-$ in un p

REATTIVITÀ CHIMICA ED ELETTRONEGATIVITÀ

Gli elementi tendono a reagire a seconda della loro stabilità e dei loro e^- esterni.
I più STABILI sono i GAS NOBILI il cui GUSCIO ELETTRONICO PIÙ ESTERNO HA UNA CONFIGURAZIONE DEL TIPO s^2p^6 (8 e^- esterni)

Elementi
- ELETTROPOSITIVI o natura METALLICA
  - o liberano e^- nelle reazioni → IONI POSITIVI o CATIONI
  - o n° ossidazione positivo
- ELETTRONEGATIVI o natura NON METALLICA
  - o accettano e^- nelle reazioni → IONI NEGATIVI o ANIONI
  - o n° ossidazione negativo



Alcuni elementi possono essere sia ELETTROPOSITIVI sia ELETTRONEGATIVI → più numeri di ossidazione

Il comportamento elettropositivo / elettronegativo è quantificato dal valore di ELETTRONEGATIVITÀ di un elemento definito come il GRADO DI ATTRAZIONE DEGLI ELETTRONI DA PARTE DI UN ATOMO.
I valori di elettronegatività vanno da 0 a 4,1 (0 poco elettronegativo → elettr. positivo, 4,1 molto elettronegativo → elettr. negativo)

Legami chimici

LEGAMI PRIMARI → IONICO
→ COVALENTE
→ METALLICO

LEGAMI SECONDARI → A DIPOLO PERMANENTE
→ A DIPOLO FLUTTUANTE

LEGAME IONICO

Si forma tra ELEMENTI MOLTO ELETTROPOSITIVI e ELEMENTI MOLTO ELETTRONEGATIVI. Vengono TRASFERITI ELETTRONI DAGLI ATOMI ELETTRO + AGLI ELETTRO − → vengono prodotti: CATIONI (IONI +) e ANIONI (IONI −)

Le FORZE DI LEGAME sono dovute alle FORZE COULOMBIANE (elettrostatiche) DI ATTRAZIONE TRA GLI IONI DI CARICA OPPOSTA. Il LEGAME SI FORMA quando esso porta a UNA SIGNIFICATIVA RIDUZIONE DELL'ENERGIA POTENZIALE DEGLI IONI.

In generale si avrà:
- una DIMINUZIONE DI DIMENSIONI DEL "neo" CATIONE (che cede uno o più e⁻ del guscio più esterno → perde il guscio esterno)
- un AUMENTO DI DIMENSIONI DEL "neo" ANIONE (acquista e⁻ → → si espande e aumenta rapporto e⁻/protoni)

L'interazione tra i due IONI a CARICA OPPOSTA dà origine a una forza risultante pari:

$$F_{RISULTANTE} = \underbrace{F_{ATTRATTIVA}}_{\text{F. COULOMBIANA}} + \underbrace{F_{REPULSIVA}}_{\text{F. RISULTATO SPERIMENTALE}}$$

$$-\frac{(Z_1 \cdot e)(Z_2 e)}{4\pi\varepsilon_0 a^2} \qquad + \frac{n\,b}{a^{n+1}}$$

$Z_1 = Z_2 =$ n° e⁻ rimossi/aggiunti dagli atomi per formare gli IONI
a = DISTANZA TRA I DUE IONI
b, n = costanti

$F_{ATTRATTIVA}$ = F. di Coulomb applicata ai due ioni

$F_{REPULSIVA}$ = si crea se i due ioni si avvicinano troppo per la REPULSIONE ESERCITATA TRA LE DUE NUBI ELETTRONICHE DEGLI IONI

L'ENERGIA POTENZIALE associata alla coppia di ioni in un legame ionico è:

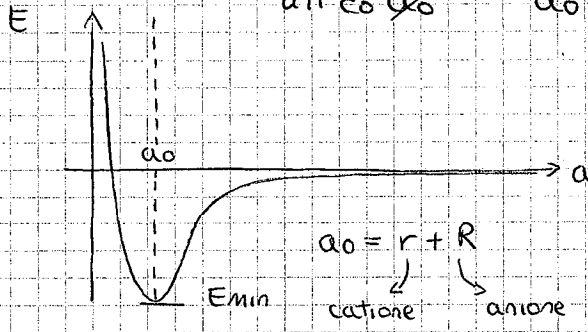
$$E = \underbrace{\frac{n\,b}{a^n}}_{\text{E. REPULSIVA}} - \underbrace{\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 a}}_{\text{E. ATTRATTIVA}}$$

(energia ASSORBITA PER VINCERE LA FORZA REPULSIVA DELLE NUBI ELETTRONICHE) (energia RILASCIATA QUANDO GLI IONI SI AVVICINANO)

master COPY

L'ENERGIA POTENZIALE TOT RISULTA MINIMA quando $a = a_0$ (DISTANZA DI EQUILIBRIO). Per questo valore di a la FORZA RISULTANTE RISULTA NULLA.

$$F = 0 = -\frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0^2} + \frac{nb}{a_0^{n+1}} \rightarrow a_0^{n-1} = \frac{nb\,4\pi\varepsilon_0}{z_1 z_2 e^2}$$



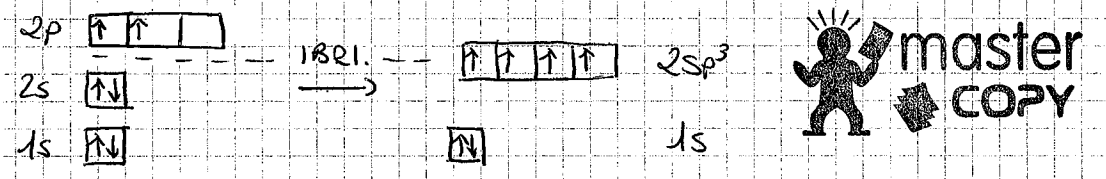
Il LEGAME IONICO ha un CARATTERE NON DIREZIONALE poiché quando gli ioni si uniscono a formare un solido lo fanno SENZA UN'ORIENTAZIONE PREFERENZIALE poiché l'attrazione elettrostatica è INDIPENDENTE DALL'ORIENTAZIONE DELLE CARICHE

I CRISTALLI IONICI si formano con una struttura dove ogni + o − circondato da un determinato numero di ioni − o +. Se il RAPPORTO TRA RAGGIO CATIONE E RAGGIO ANIONE DIMINUISCE IL CATIONE SARÀ CIRCONDATO DA UN NUMERO MINORE DI ANIONI.
ALL'AUMENTARE DELLA DIMENSIONE DELLO IONE DIMINUISCE L'ENERGIA DI RETICOLO (energia immagazzinabile all'interno di un reticolo) poiché gli ELETTRONI DI LEGAME DEGLI IONI PIÙ GRANDI RISENTONO MENO DELL'ATTRAZIONE DEL NUCLEO e quindi "irrobustiscono" meno il reticolo

LEGAME COVALENTE

Ha luogo in ATOMI CON PICCOLE DIFFERENZE DI ELETTRONEGATIVITÀ (vicini nella tavola periodica).
Gli ATOMI METTONO IN COMUNE I LORO ELETTRONI ESTERNI S E P CON ALTRI ATOMI IN MODO DA ASSUMERE LA CONFIGURAZIONE ELETTRONICA DI UN GAS NOBILE. Ciascuno dei due atomi contribuisce con un elettrone a formare un legame costituito da una COPPIA DI ELETTRONI IN COMUNE.
In questo modo l'ENERGIA DEI DUE ATOMI UNITI RISULTA MINORE DELLA SOMMA DELLE ENERGIE DEI DUE ATOMI SEPARATI → MAGGIORE STABILITÀ. Nonostante la formazione del legame vi sia, quindi, LIBERATA ENERGIA.
Il legame covalente è CARATTERIZZATO DA UN ADDENSAMENTO DELLA NUVOLA DI CARICA ELETTRONICA NELLA ZONA COMPRESA TRA I DUE NUCLEI. Le due nuvole elettroniche INTERAGISCONO e SI SOVRAPPONGONO

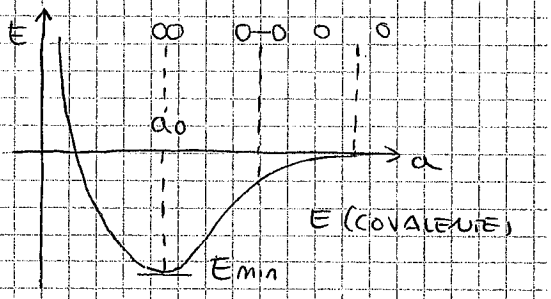
GLI ATOMI DI CARBONIO hanno una configurazione del tipo $1s^2\,2s^2\,2p^2$.
Normalmente ciò permetterebbe di formare solo 2 LEGAMI COVALENTI.
In realtà C può formare fino a 4 LEGAMI COVALENTI.
Ciò avviene grazie al processo di IBRIDIZZAZIONE degli orbitali 2s e 2p.
L'orbitale 2s aumenta la sua energia mentre i 3 orbitali 2p diminuiscono la propria creando 4 ORBITALI IBRIDI sp^3 AVENTI TUTTI LA STESSA ENERGIA → SI POSSONO COSÌ FORMARE 4 LEGAMI COVALENTI.
L'ibridizzazione è possibile poiché nonostante venga immagazzinata energia per l'orbitale 2s l'energia TOTALE FINALE DEL SISTEMA CON 4 LEGAMI COVALENTI RISULTERÀ MINORE



master COPY

Una molecola basata sulla struttura sp^3 del C è il METANO (CH_3) e lo STESSO DIAMANTE DEVE LA SUA DUREZZA A QUESTO TIPO STRUTTURA.
Un'altra molecola particolare è il BENZENE C_6H_6 che mostra una STRUTTURA AD ANELLO ESAGONALE nella quale si mostrano alternati legami

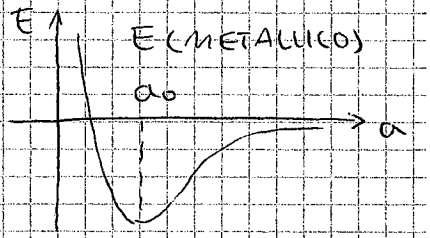
singoli e doppi C–C. In realtà questa configurazione non è totalmente corretta in quanto sembra che gli ELETTRONI DI LEGAME DELL'ANELLO BENZENICO SIANO DELOCALIZZATI ovvero si muovono tra i 6 gli atomi C e che quindi siano condivisi da tutti e 6 contemporaneamente



LEGAME METALLICO

Si ha nei METALLI SOLIDI. Gli ATOMI sono AFFIANCATI IN MODO COMPATTO secondo uno schema regolare detto STRUTTURA CRISTALLINA.
Formando in questo modo gli atomi sono così vicini da permettere agli ELETTRONI DI VALENZA DI ESSERE ATTRATTI DA PIÙ NUCLEI CONTEMPORANEAMENTE ADIACENTI
Gli ELETTRONI DI VALENZA NON SONO quindi ASSOCIATI AD UN ATOMO IN PARTICOLARE ma sono DISPERSI TRA GLI ATOMI
I metalli solidi, quindi, sono solitamente modellizzati come una STRUTTURA DI IONI POSITIVI (SENZA e DI VALENZA) + NUBE DI ELETTRONI DI VALENZA DELOCALIZZATI i quali sono detti ELETTRONI LIBERI poiché sono debolmente legati ai nuclei e possono muoversi facilmente all'interno del cristallo. A loro sono dovute le proprietà di CONDUCIBILITÀ TERMICA ED ELETTRICA DEI METALLI.
I PIANI di IONI POSITIVI possono molto SCORRERE FACILMENTE GLI UNI SUGLI ALTRI permettendo così una GRANDE DEFORMAZIONE SENZA ROTTURA
Il legame metallico NON È DIREZIONALE in quanto gli ELETTRONI DI VALENZA VENGONO CONDIVISI DA PIÙ ATOMI
Come per gli altri legami, il legame metallico è possibile grazie alla maggiore stabilità finale
In generale MINORE È IL NO DI ELETTRONI DI VALENZA TANTO MAGGIORE È IL CARATTERE METALLICO DEL LEGAME ovvero di è una MAGGIORE LIBERTÀ DI MOVIMENTO PER GLI ELETTRONI LIBERI.
All'AUMENTARE DEL NO DI E VALENZA AUMENTANO LE ENERGIE DI LEGAME E IL PTO DI FUSIONE. In particolare si ha un aumento SOSTENUTO NEI METALLI DI TRANSIZIONE dovuto all'ibridazione dsp che indica la presenza nel LEGAME DI UNA FRAZIONE DI LEG. COVALENTE

LEGAMI SECONDARI (INTERATOMICI)



PRIMARI	SECONDARI
Si formano per la DIMINUZIONE DELL'ENERGIA DELLA COPPIA DI ATOMI	Si formano PER ATTRAZIONE TRA DIPOLI ELETTRICI ALL'INTERNO DI ATOMI/MOLECOLE

I DIPOLI elettrici si formano in MOLECOLE IN CUI SONO SEPARATI I CENTRI DI CARICA NEGATIVA DAI CENTRI DI CARICA POSITIVA che quali creano un MOMENTO DI DIPOLO

$\mu = qd$ — q = quantità di carica elettrica; d = distanza tra i centri di carica

↳ momento di dipolo

I DIPOLI interagiscono TRA LORO attraverso FORZE ELETTROSTATICHE le quali coinvolgono MOLECOLE CONTENENTI I DIPOLI facendo attrarre tra loro due CENTRI DI CARICA APPARTENENTI A DUE MOLECOLE / ATOMI DIFFERENTI
OPPOSTA

I legami che si formano tramite i dipoli sono anche detti FORZE DI VAN DER WAALS