



Centro Stampa

ATTENZIONE QUESTI APPUNTI SONO OPERA DI STUDENTI, NON SONO STATI VISIONATI DAL DOCENTE. IL NOME DEL PROFESSORE SERVE SOLO PER IDENTIFICARE IL CORSO.

N° 4344

MATERIALI DI IMPIEGO TECNOLOGICI -
CHIMICA -
TEORIA 2021-22

DI BAU' MIRIAM

Table of Contents

CHIMICA DI BASE	3
1. 4 TIPOLOGIE DI MATERIALI	3
2. STRUTTURA DELL'ATOMO	11
3. LEGAMI CHIMICI	21
4. LEGAME IONICO	23
5. LEGAME COVALENTE	27
6. LEGAME COVALENTE DATIVO	33
6. LEGAME METALLICO	46
7. I 3 STATI DI AGGREGAZIONE DELLA MATERIA	48
8. I GAS	48
9. LEGGI INTERMOLECOLARI	58
10. STATO GASSOSO	65
11. STATO LIQUIDO	67
12. LEGAME IDROGENO	74
13. STATO SOLIDO	78
14. RETICOLO CRISTALLINO	79
15. SOLIDI IONICI	83
16. SOLIDI COVALENTI	94
17. SOLIDI METALLICI	98
18. STRUTTURE CRISTALLINE DEI METALLI	99
18. DIFETTI RETICOLARI	104
19. METALLI AMORFI	111
20. SOLUZIONI ELETTROLITICHE	112
21. PROPRIETA' ELETTRICHE DEI MATERIALI	129
21. SEMICONDUTTORI	139
22. DIELETTRICI	151
23. PROPRIETA' TERMICHE DEI MATERIALI	158
24. SHOCK TERMICO DEI MATERIALI CERAMICI	164
CHIMICA DEI MATERIALI	177
1. LEGHE METALLICHE	177
2. DIAGRAMMA DI STATO FERRO - CEMENTITE	178
3. COME VIENE PRODOTTO UN ACCIAIO	191
4. TRATTAMENTI TERMICI	196
5. CLASSIFICAZIONE DEGLI ACCIAI	230

6. CORROSIONE dei metalli	241
CORROSIONE UNIFORME O GENERALIZZATA	246
1. CORROSIONE ATMOSFERICA	247
CORROSIONE LOCALIZZATA.....	250
1. PITTING O CORROSIONE PER VAIOLATURA	250
2. CORROSIONE INTERSTIZIALE O IN FESSURA (CREVICE)	252
3. CORROSIONE INTERGRANULARE.....	256
CORROSIONE GALVANICA	259
7. SISTEMATICA DEGLI ACCIAI INOSSIDABILI	271
1. ACCIAI MARTENSITICI.....	280
2. ACCIAI FERRITICI.....	281
3. ACCIAI AUSTENITICI.....	283
4. ACCIAI DUPLEX	286
5. INOX INDURENTI PER PRECIPITAZIONE	287
8. GHISE.....	288
1. GHISA BIANCA	291
2. GHISA GRIGIA.....	293
3. GHISA MALLEABILE	295
4. GHISA SFEROIDALE.....	296
5. GHISE LEGATE	298
9. EFFETTO DEGLI ALLIGANTI NEGLI ACCIAI.....	299

CHIMICA DI BASE

1. 4 TIPOLOGIE DI MATERIALI

- **Compositi (non trattati in questo corso)**
- **Polimerici** → organici. Chimica organica=chimica del carbonio. Elemento principale=>Carbonio
Materiali polimerici chiamati anche macromolecolari perchè formati da molecole di dimensioni molto grandi.
Polimeri inorganici=> Siliconi. Nei polimeri inorganici l'elemento principale è il Silicio
AMORFI
Sono formati da regioni non **cristalline**
PARZIALMENTE CRISTALLINI
Formati da regioni non cristalline, amorfhe, e da regioni cristalline
Polimero completamente amoro, non cristallino Es. Resine termoindurenti
Polimero parzialmente cristallini Es. Nylon
PVC e Poliesteri sono polimeri parzialmente cristallini.
Il PET è un poliestere.
I polimeri hanno una scarsa conducibilità elettrica e anche termica. I polimeri sono soprattutto isolanti e non hanno proprietà magnetiche. Le proprietà meccaniche dei polimeri dipendono molto dal tipo di polimero. Ci sono materiali polimerici termoplastici che si possono deformare sia elasticamente (reversibile) ma anche plasticamente (permanente)
I termoplastici hanno elevata duttilità e di deformarsi in modo irreversibile.
Il Nylon ha anche una buona resistenza meccanica.
Un materiale che ha elevata resistenza meccanica e capacità di deformazione plastica nulla è la resina, polimeri termoindurenti. La resina ha una alta rigidità e quando si tenta di deformarla plasticamente si rompe.
Le proprietà meccaniche dipendono dal tipo di polimero.
--Molecole organiche per lo più non cristalline
--Alcuni sono composti da regioni cristalline e non cristalline
--Scarsi conduttori elettrici, quindi utilizzati come isolanti
--Resistenza meccanica e duttilità variano moltissimo
ESEMPI:
Polivinil Cloruro (PVC), Poliesteri
Applicazioni: Dispositivi, DVD, Tessuti, etc.
- **Ceramici**
Formati da atomi o ioni.
← Elementi metallici e non metallici sono legati insieme chimicamente.
← **Inorganici**, ma possono essere cristallini, non cristallini o semicristallini.
← **Elevata durezza, e resistenza all'usura.**
← **Isolanti molto buoni.** Utilizzati per rivestimenti di forni per trattamenti termici e fusione di metalli
Nei materiali ceramici possono anche entrare solidi molecolari, ad es. vetro (materiale ceramico amoro)
Solidi ionici e covalenti sono cristallini, non amorfi
Spesso formati da metallo e non metallo oppure da un metallo e da un semimetallo (o metalloide).
Proprietà meccaniche: duri e fragili, non si riesce a deformare plasticamente il materiale ceramico. Si può deformare plasticamente applicando elevate forze. La duttilità e la tenacità sono trascurabili.
Tenacità nulla.
Cattivi conduttori di elettricità e termici.

Vengono utilizzati come dielettrici o vengono utilizzati per produrre o rivestire le pareti dei forni dove si fondono i metalli (i fusori) perché i materiali ceramici sopportano temperature molto alte.

ESEMPI: Porcellana, Vetri, Nitruro di silicio, Carburo di tungsteno (carbonio non metallo e tungsteno metallo)

- **Metallici**

METALLO PURO

LEGA

Formati da un metallo e da un non metallo □ Acciai e Ghise

Ferro(metallo) + Carbonio (Non metallo)

← Composti da uno o più elementi metallici

↳ Esempi: Ferro, Rame, Alluminio.

← Un elemento metallico può combinarsi con elementi non metallici

↳ Esempi: Carburo di Tungsteno, Ossido di Ferro

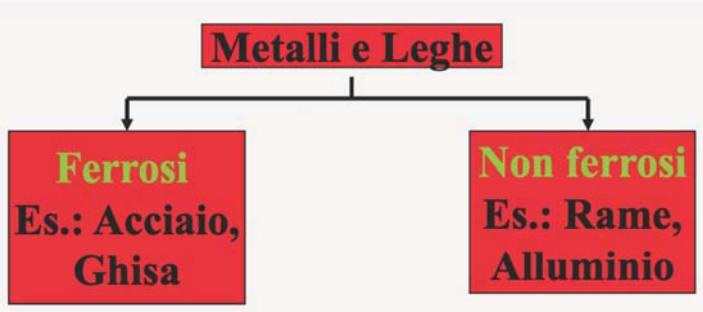
← Inorganici, hanno struttura cristallina

← Buoni conduttori termici ed elettrici.

Le leghe non ferrose sono formate dal metallo principale e da altri metalli (metalli aggiunti)

Acciaio □ lega interstiziale

Titanio □ lega sostituzionale



Il metallo puro ha proprietà meccaniche inferiori rispetto a una lega.

I metalli sono duttili e malleabili.

I metalli si possono deformare sia elasticamente (maniera reversibile) sia plasticamente (maniera irreversibile) e sono anche tenaci a seconda della lega.

La tenacità di una lega può essere inferiore a quella di un metallo puro.

Dal punto di vista delle applicazioni i materiali li definiamo "funzionali" perché vengono utilizzati per scopi ben precisi.

Dal punto di vista delle applicazioni ci sono molti più materiali e dipendono dal settore a cui è destinato un certo tipo di materiale:



Materiali magnetici duri → si utilizzano come magneti permanenti

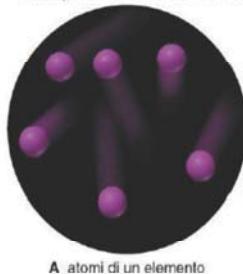
Materiali magnetici teneri o dolci

Materiali intelligenti a memoria di forma → Nichel e Titanio

Grafene → proprietà meccaniche superiori alle leghe metalliche ma ad elevato costo.

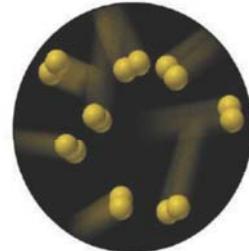
Definizioni dei componenti della materia

Elemento - è il tipo di materia più semplice, con proprietà fisiche e chimiche esclusive. *Un elemento è costituito da una sola specie di atomo*. Perciò, non può essere scomposto in un tipo di materia più semplice con metodi fisici o chimici.



A atomi di un elemento

Molecola - è un'unità strutturale indipendente costituita da due o più atomi legati chimicamente tra loro.



B molecole di un elemento

I materiali sono costituiti da elementi chimici. L'elemento è la sostanza più semplice che si conosca. A livello macroscopico non posso scomporre un elemento in sostanze più semplici dell'elemento stesso.

Posso combinare due o più elementi chimici e farli reagire tra loro per formare una sostanza più complessa, il composto chimico. Un composto chimico può essere suddiviso negli elementi che lo formano.

L'elemento chimico a livello microscopico può essere formato da atomi oppure dalle molecole.

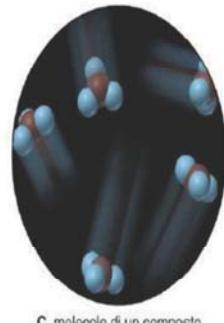
Esistono elementi chimici atomici ed elementi chimici molecolari. La molecola è l'insieme di due o più atomi. Due o più atomi possono formare questa entità chiamata molecola che è più complessa del singolo atomo. Le molecole possono essere formate da atomi uguali che appartengono allo stesso elemento chimico o da atomi che appartengono ad elementi chimici diversi.

ESEMPI: Idrogeno (gas) formato da molecole biatomiche, 2 atomi uguali di idrogeno. Ferro è un elemento atomico. Biossido di Carbonio (CO₂) è un gas composto formato da molecole (1 atomo di carbonio e 2 di ossigeno)

Definizioni dei componenti della materia

Composto - è un tipo di materia

costituito da *due o più elementi diversi che sono legati chimicamente tra loro.*



I legami chimici possono essere interatomici o intermolecolari.

Nei polimeri le molecole sono legate tra loro da legami intermolecolari.

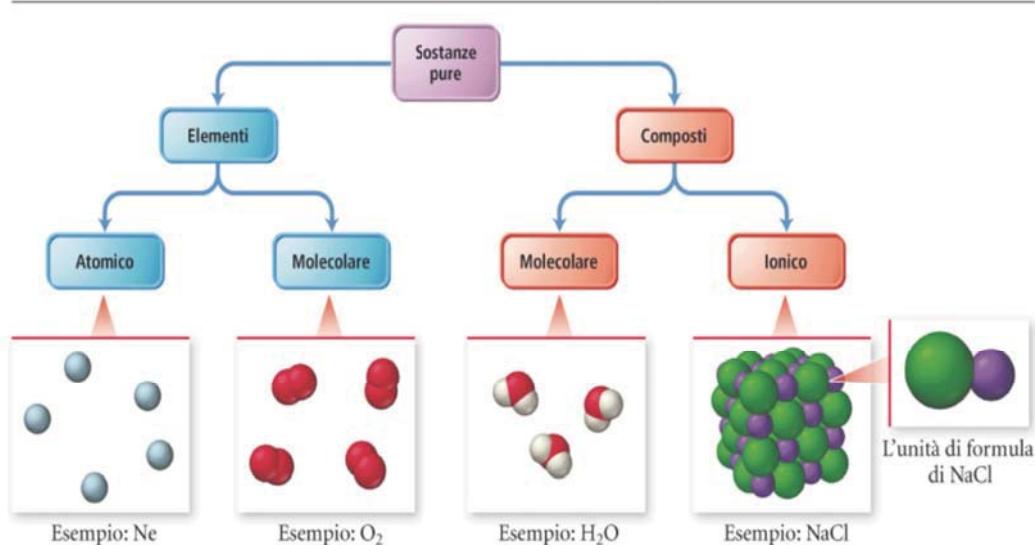
Gli elementi chimici sono 118 ma i composti chimici sono milioni.

I composti chimici organici sono i più numerosi.

I composti chimici inorganici sono migliaia.

Nei composti chimici organici rientrano i composti che appartengono alla biochimica (proteine, amminoacidi ecc.) Possono essere naturali o artificiali.

Classificazione di elementi e composti



Visione molecolare degli elementi e dei composti

I composti chimici possono anche essere formati da ioni, non solo da molecole.

Ioni positivi e ioni negativi

ESEMPIO: Cloruro di Sodio (sale da cucina) Ioni sodio (positivi) + Ioni cloro (negativi)

Nei composti rientrano le leghe o soluzioni solide

Mentre gli elementi o sono formati da atomi o da molecole (biatomiche)

I composti chimici sono formati o da molecole che possono essere poliatomiche o da ioni ESEMPIO:

Solfuro di zinco \rightarrow ioni zolfo (-) ioni zinco (+)

TAVOLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

1	1A	Periodic Table of the Elements																		18B
1	H	2A																		
2	Li	Be																		
3	Na	Mg	3B																	
4	K	Ca	Sc																	
5	Rb	Sr	Y																	
6	Cs	Ba	La	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	Fr	Ra	Ac	t	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds									
	1.00794	6.941	13.9954		40.078	87.905	180.9479	183.84	186.207	196.23	196.217	195.078	196.9605	200.59	204.1833	207.2	208.980	229.098	223.190	
	1.00794	6.941	13.9954		40.078	87.905	180.9479	183.84	186.207	196.23	196.217	195.078	196.9605	200.59	204.1833	207.2	208.980	229.098	223.190	

* Serie dei lantanidi	58 Ce 146,115	59 Pr 140,908	60 Nd 144,248	61 Pm (145)	62 Sm 150,116	63 Eu 151,965	64 Gd 157,255	65 Tb 158,925	66 Dy 162,530	67 Ho 164,930	68 Er 167,246	69 Tm 168,934	70 Yb 173,046	71 Lu 174,967
† Serie degli attinidi	90 Th 232,038	91 Pa 231,036	92 U 238,029	93 Np 237,048	94 Pu (240)	95 Am (240)	96 Cm (242)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (264)	102 No (268)	103 Lr (269)

Di 118 elementi chimici 91 sono naturali o allo stato libero come elemento o allo stato composto, gli altri 27 sono artificiali, vengono prodotti attraverso le reazioni nucleari.

ESEMPIO:

prodotto artificialmente. Plutonio, non esiste in natura, viene prodotto bombardando l'isotopo dell'uranio 238 e si bombarda con i neutroni.

Tutti gli elementi artificiali sono radioattivi, instabili.

Era gli elementi naturali ci sono elementi radioattivi ES. Urano

Gli elementi chimici si suddividono in 3 classi:

1. METALLI (caselle gialle)
Classe più numerosa di elementi chimici 70/75%.
 2. NON METALLI (caselle azzurre e rosa)
 3. SEMI METALLI O METALLOIDI (caselle verdi)
Hanno proprietà intermedie tra i metalli e i non metalli

Gli elementi sono raggruppati per colonne, 18. Le colonne sono chiamate gruppi.

(si considerano dall'alto verso il basso)

Raggruppati in file (da sinistra verso destra). File=Periodi. Ci sono 7 periodi.

Periodic Table of the Elements																																					
1	IA 1	IIA 2	IIIB 3	IVB 4	VB 5	VIB 6	VIIB 7	VIII 8		VIIIB 11		IIIA 13	IVA 14	VA 15	VIA 16	VIIA 17	VIIIA 18																				
1																																					
2																																					
3																																					
4																																					
5																																					
6																																					
7																																					

Le colonne dalla n°3 alla n°12 sono chiamati METALLI DI TRANSIZIONE.

Ferro, Rame, Titanio, Nickel.

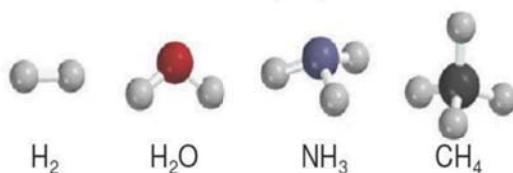
Fanno parte dei metalli di transizione anche i due periodi al di sotto del corpo principale della tabella. La prima fila è chiamata serie dei Lantanidi i Terre rare.

Il primo elemento di questa serie è il Lantanio (La)

La seconda fila è chiamata serie degli Attinidi, primo elemento Attinio (Ac) e questi sono tutti radioattivi.

Gli elementi dal n° 93 NP, Nettunio, fino al 118, sono chiamati Transuranici, sono Attinici ma detti anche Transuranici.

- Gruppo 1 togliendo l'idrogeno (H) → sono tutti metalli, metalli ALCALINI.
- Gruppo 2 (Be, Mg, Ca) → sono metalli ALCALINO-TERROSI
- Gruppo 17 F, Cl, Br, I → non metalli, ALOGENI
- Gruppo 18 (rosa) → non metalli, tutti gas, GAS NOBILI o GAS RARI o GAS INERTI (He, Ne, Kr, Ar) Unici elementi che non danno origine a composti chimici. Non esistono composti chimici dei gas nobili. Sono GAS ATOMICI, unici gas formati da atomi e non da molecole.
- Una **molecola** è costituita da almeno due atomi in proporzioni definite e costanti, legati da forze chimiche



Una **molecola biatomica** contiene solo due atomi

H_2 , N_2 , O_2 , Br_2 , HCl , CO

Una **molecola poliatomica** contiene più di due atomi

O_3 , H_2O , NH_3 , CH_4

Elementi molecolari costituiti da molecole biatomiche (2 atomi uguali)

I composti chimici possono essere formati da molecole biatomiche (HCl acido cloridrico, CO monossido di carbonio) possiamo però avere anche molecole poliatomiche (H₂O, NH₃ ammoniaca, CH₄ metano, O₃ ozono) o anche da ioni (NaCl Cloruro di Sodio)

Elementi molecolari

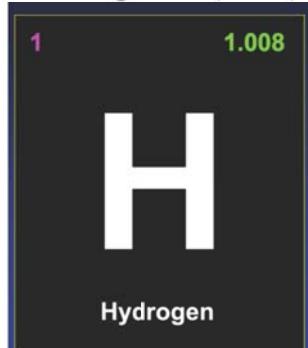
Elementi molecolari

Gli elementi indicati con il colore esistono principalmente come molecole biatomiche (in giallo) o molecole poliameriche (in rosso).

(caselle gialle) Br (liquido) Iodio (solido)

(caselle rosa) elementi molecolari solidi fosforo, zolfo e selenio sono elementi chimici molecolari ma le molecole sono poliatomiche tutti uguali, formati dallo stesso elemento.

Tutti gli altri elementi sono elementi poliatomici germanio, silicio, sono metalloidi formati da atomi.



Simbolo chimico es H, numero intero che va da 1 a 118 (numero atomico).

L'atomo è formato da 3 tipi di particelle elementari:

- Elettrone
 - Protone
 - Neutrone

Protone e neutrone si trovano nel nucleo. Attorno al nucleo si muovono gli elettroni.

Gli elettroni sono particelle che possiedono una carica elettrica.

Gli elettroni sono particelle che possiedono una

I protoni hanno una carica elettrica positiva.

I neutroni non hanno carica elettrica

I neutroni non hanno carica elettrica.
I neutroni e i protoni si chiamano anche Nucleoni. Il numero di elettroniche si muove intorno al nucleo è uguale al numero di protoni presenti nel nucleo dell'atomo.

uguale al numero di protoni

L'atomo complessivamente **NON** ha carica elettrica. È elettricamente **NEUTRO**.

Perché la carica elettrica del protone è esattamente uguale alla carica elettrica dell'elettrone in valore assoluto.

Il Numero atomico è esattamente uguale al numero di protoni presenti nell'atomo così come è uguale al numero di elettroni.

ESEMPI:

L'idrogeno ha 1 elettrone ed 1 protone.

L'uranio ha numero atomico 92, 92 elettroni e 92 protoni.

Al crescere del numero atomico cresce il numero di protoni ed elettroni nell'atomo.

1.008 => N° decimale chiamato MASSA ATOMICA RELATIVA.

Si definisce massa atomica relativa:

massa dell'atomo considerato

unità di massa atomica

u.m.a. = unità di massa atomica:

$$\frac{1}{12} \text{ massa isotopo } {}^{12}_6\text{C} = 1.6605 \cdot 10^{-24} \text{ g}$$

$$\text{Numero di Avogadro} = \frac{1}{1.66 \cdot 10^{-24}} = 6.022 \cdot 10^{23}$$

1/12 della massa di un atomo di Carbonio

Massa atomica relativa = massa atomica assoluta dell'atomo / unità di massa atomica

La massa atomica relativa ci dice di quante volte la massa di un atomo è più grande dell'unità di massa atomica.

L'idrogeno ha una massa atomica relativa che è 1.008 volte più grande dell'unità di massa atomica.

L'inverso dell'unità di massa atomica è un valore molto grande, il numero di Avogadro.

Il numero di Avogadro si ottiene prendendo l'inverso dell'u.m.a.

Il numero di Avogadro rappresenta il numero di particelle contenute nella mole di una sostanza.

La mole è la quantità di sostanza che contiene un numero di Avogadro di particelle che formano la sostanza stessa.

Le particelle possono essere atomi, molecole o ioni.

MOLE

Quantità di sostanza contenente tante unità elementari (atomi, molecole, ioni) quanti sono gli atomi contenuti in 12 grammi di ${}^{12}\text{C}$

12 massa atomica relativa del carbonio

12 grammi di carbonio corrispondono ad 1 mole di carbonio

Mole = quantità di sostanza corrispondente alla sua massa atomica relativa o alla sua massa molecolare relativa.

Massa atomica relativa dell'H 1.008. In 1 mole di H ci sono n° di Avogadro particelle.

Massa molare

$$M = \frac{m \text{ (g)}}{n \text{ (mol)}}$$

$$\frac{12 \text{ g mol}^{-1}}{6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}} = 1.993 \cdot 10^{-23} \text{ g}$$

ESEMPIO:

Rame massa atomica relativa 65.37

1 mole di rame corrisponde a 65.37 grammi

Quanti atomi di Rame in 1 mole? Il n° di Avogadro di atomi.

Composto H₂O

La massa molecolare dell'acqua è 18 circa = somma delle masse atomiche relative che costituiscono la molecola (16+2*1)

1 mole di acqua ha 18 grammi

Molecole = N° di Avogadro

1.993×10^{-3} è la massa atomica assoluta di un atomo di carbonio (12= quantità in grammi di 1 mole di carbonio)

Massa atomica relativa VS massa atomica assoluta

2. STRUTTURA DELL'ATOMO

Esistono composti chimici costituiti da atomi

Le proprietà dei materiali dipendono dal tipo di legame chimico tra le particelle ed il tipo di legame dipende dalla struttura atomica

Le particelle

Il nucleo è di dimensioni ridotte rispetto all'atomo.

Carica in Coulomb [C] = unità di misura della carica elettrica nel SI

Neutrone leggermente più grande del protone.

L'elettrone è circa 1837 volte più piccolo del protone.

La carica elettrica dell'elettrone compensa la carica elettrica del protone

N° elettroni = N° protoni → atomo elettricamente neutro

N° elettroni = N° atomico = N° protoni (numero intero che va da 1 a 118)

Esistono particelle (ioni) che possono avere carica elettrica (+) o (-)

L'atomo è circa 100 mila volte più grande del nucleo.

Il raggio del nucleo è circa 10^{-15} metri

Raggio atomico = 10^{-10} metri

Nel nucleo protoni e neutroni hanno massa molto più grande degli elettroni. Quasi tutta la massa dell'atomo è concentrata nel nucleo.

Per qualunque elemento chimico gli atomi non sono tutti uguali (ad eccezione del Fluoro) avranno tutti lo stesso numero di protoni ed elettroni ma possiamo avere atomi appartenenti allo stesso elemento chimico caratterizzati da un numero diverso di neutroni e quindi di massa. Il n° di massa = n° di protoni + n° neutroni

ES. Il Carbonio

n° Atomico → 6

Nel nucleo dell'atomo di C ci sono 6 protoni e 6 elettroni

ma in natura un certo numero di questi atomi di carbonio avranno nel nucleo 6 neutroni, altri 7 neutroni, e altri avranno nel nucleo 8 neutroni

Se vado a fare la somma protoni + neutroni avrò atomi con n° massa 12(6 protoni 6 neutroni), 13(6 protoni 7 neutroni), 14(6 protoni 8 neutroni)

Gli atomi con stesso numero atomico ma diverso numero di massa si chiamano isotopi

3 isotopi del carbonio

isotopo 12, 13 e 14

Gli isotopi hanno una diversa, differente abbondanza chimica, ossia di tutti gli isotopi di un elemento chimico ce ne è uno che è il più abbondante fra tutti e caratterizza la maggior parte degli atomi di quell'elemento.

Per il carbonio è l'isotopo 12 (6 protoni e 6 neutroni). = isotopo che ha la maggior abbondanza chimica. L'unità di massa atomica infatti era riferita ad 1/12 del C12.

Ci saranno molti meno atomi di carbonio che apparterranno all'isotopo 13 e ancora meno all'isotopo 14 (radioattivo)

ES. Uranio

2 isotopi naturali

92 protoni, n° atomico 92

può avere 146 neutroni (n° di massa 238 = 146+92)

oppure può avere 143 neutroni (n° di massa 235 = 143+92)

L'uranio 238 è l'isotopo più abbondante (+ del 99% degli atomi di uranio)

(0,7% appartengono all'uranio 235)

Quasi tutti gli elementi chimici hanno 2 o + isotopi (esclusi quelli prodotti artificialmente tramite reazioni nucleari)

elementi chimici **monoisotopici** sono pochissimi

ES. FLUORO → Gli atomi sono effettivamente tutti uguali, il FLUORO 19 ha 1 SOLO ISOTopo

il numero di neutroni presenti nel nucleo stabilisce se è stabile oppure no.

L'elettrone si muove intorno al nucleo perché è attratto dal nucleo stesso.

Fra cariche elettriche esiste la forza elettrostatica, forza di COULOMB, questa forza può essere attrattiva oppure repulsiva.

Attrattiva → se cariche elettriche hanno segno opposto

Repulsiva → se cariche elettriche hanno lo stesso segno

La forza elettrostatica è attrattiva.

Il nucleo è stato scoperto nel 1911 (Rutherford)

Il neutrone è stato scoperto nel 1936

Nei primi modelli gli elettroni venivano considerati come dei corpi macroscopici, si applicavano le leggi della meccanica classica.

Si è scoperto che l'elettrone non si comportava solo come particella materiale ma aveva anche un comportamento ondulatorio. Era un dualismo onda-corpuscolo. Si comportava sia come particella che come onda. Ma se si comporta come un'onda non posso definire una traiettoria perciò il concetto di traiettoria e di orbita (circolare← Rutherford/ellittica← Bohr) cade.

L'orbita è l'insieme delle posizioni occupate istante per istante da un corpo durante il suo movimento lungo la traiettoria.

Tutti i modelli atomici basati sulla meccanica classica

1. Modello atomico di Thomson
2. Modello atomico di Rutherford
3. Modello atomico di Bohr

elaborati quando si considerava l'elettrone come un corpo macroscopico, tutti questi modelli atomici falliscono.

Eisenberg e Schrodinger hanno elaborato un nuovo modello basato sulla meccanica quantistica → teoria probabilistica → non si tratta di individuare con esattezza la posizione dell'elettrone in un punto dello spazio intorno al nucleo ad un determinato istante ma di probabilità.

La teoria quantomeccanica

L'atomo di idrogeno è l'atomo più semplice su cui è stata applicata questa teoria.

Alcune conseguenze della teoria quantomeccanica:

Se i modelli atomici che hanno preceduto il modello quantomeccanico parlavano di orbita, la teoria quantomeccanica sostituisce al concetto di orbita il concetto di orbitale.

L'orbita è la traiettoria che compie l'elettrone nel suo moto attorno al nucleo (posizione dell'elettrone occupata istante per istante attorno al nucleo)

L'orbitale è chiamato anche superficie limite perché delimita un volume di spazio attorno al nucleo all'interno del quale la probabilità di trovare l'elettrone è almeno del 90%.

Esistono infiniti orbitali, infinite superfici limite. Gli orbitali sono soluzioni analitiche dell'equazione di Schrodinger presa dalla meccanica classica (equazione delle onde) e la si è adattata all'elettrone considerato come un'onda.

E' un'equazione differenziale alle derivate parziali. Le soluzioni di questa equazione sono infinite e si chiamano ORBITALI.

Ogni orbitale ha una sua espressione matematica, è una funzione e come funzione ha anche una rappresentazione grafica.

Gli orbitali sono caratterizzati da valori che assume una terna di numeri chiamati numeri quantici.

Ogni orbitale assume 3 numeri (quantici) che caratterizzano ciascun orbitale. Questi numeri non sono indipendenti l'uno dall'altro, sono correlati tra loro.

1. N° quantico principale $n \rightarrow$ può assumere infiniti valori interi e vanno da (1 a infinito)
2. N° quantico angolare/azimutale/secondario $l \rightarrow$ può assumere infiniti valori che vanno da (0 a $n-1 = N^{\circ}$ quantico principale -1)
3. N° quantico magnetico $m \rightarrow$ può assumere valori interi che vanno da (+l a -l = N° quantico angolare, 0 incluso)

Ogni orbitale è caratterizzato dai valori che assumono questi numeri quantici.

Significato dei numeri quantici caratterizzanti gli orbitali

a) Il numero quantico principale n è in relazione con le dimensioni e l'energia dell'orbitale

energia dell'elettrone che si trova all'interno dell'orbitale, nel volume di spazio racchiuso da questa superficie limite.

All'aumentare di n (N° quantico principale) aumentano le dimensioni della superficie limite e anche l'energia che ha l'orbitale, ovvero dell'elettrone.

Negli elettroni l'energia dipende anche dal n° quantico angolare

b) Il numero quantico angolare l è in relazione con la forma dell'orbitale

(per $l = 0$, orbitale di forma sferica, per $l = 1$, orbitali con forma di otto,...)

I definisce la forma di questa superficie limite. A seconda del valore di l avremo superfici con geometrie diverse, orbitali con forme diverse.

c) Il numero quantico magnetico m è in relazione con l'orientazione dell'orbitale:

per $l = 0, m = 0$ (nessuna orientazione)

per $l = 1, m = +1, 0, -1$ (3 orbitali degeneri in tre direzioni)

caratterizza l'orientamento nello spazio. La geometria sferica non ha un'orientazione preferenziale.

$l=1 \rightarrow$ elicoidale a forma di 8 con orientamento diverso a seconda del valore di m .

Al crescere di l avremo orbitali con geometrie sempre più complesse ed orientati nello spazio a seconda del valore di m . L'unica geometria che non ha un'orientazione preferenziale è la sfera $\rightarrow l=0, m=0$

A seconda del valore di l gli orbitali avranno una forma diversa, una geometria diversa. Identifichiamo questi orbitali con forme diverse con delle lettere.

$s \rightarrow$ sferici

$p \rightarrow$ elicoidali

$d \rightarrow$ forma complessa

$f \rightarrow$ geometria ancora più complicata

g

I può assumere valori infiniti ma gli elementi sono solo 118 perciò gli atomi di questi elementi chimici possono ospitare fino a 118 elettroni. Per i sistemi atomici conosciuti sono sufficienti questi 4 tipi di orbitali (orbitali di tipo g vuoti, mai occupati da elettroni). L'atomo ha dimensioni finite, non infinite. Sulle dimensioni degli atomi influiscono gli orbitali occupati dagli elettroni, non quelli vuoti.

<i>l</i>	0	1	2	3
Simbolo	s	p	d	f

Come si collocano gli elettroni in queste 4 tipologie di orbitali?

Per ogni valore del numero quantico principale n quale è il massimo n^o di orbitali che avranno quel valore specifico di n ?

Secondo la teoria quantistica questo valore è n^2 .

Il numero massimo di orbitali per un determinato valore di n è n^2

Tutti gli orbitali caratterizzati dallo stesso valore di n numero quantico principale definiscono il livello energetico o guscio elettronico (shell).

A ciascun livello energetico si attribuisce una lettera dell'alfabeto.

Gli orbitali con lo stesso numero quantico n si dice che appartengono allo stesso strato elettronico:

K ($n = 1$), L ($n = 2$), M ($n = 3$), N ($n = 4$),.....

$n=1 \rightarrow 1^2=1$ orbitali \rightarrow Livello energetico K

$n=2 \rightarrow 2^2=4$ orbitali \rightarrow Livello energetico L

n va da 1 a 7! Perchè gli elementi chimici sono raggruppati in colonne ed in file, periodi, 7, valore di n , numero quantico principale \rightarrow corrispondente ai 7 periodi della tavola periodica degli elementi

Per i sistemi atomici fino ad ora conosciuti.

Livelli energetici:

O ($n=5$)

P ($n=6$)

Q ($n=7$)

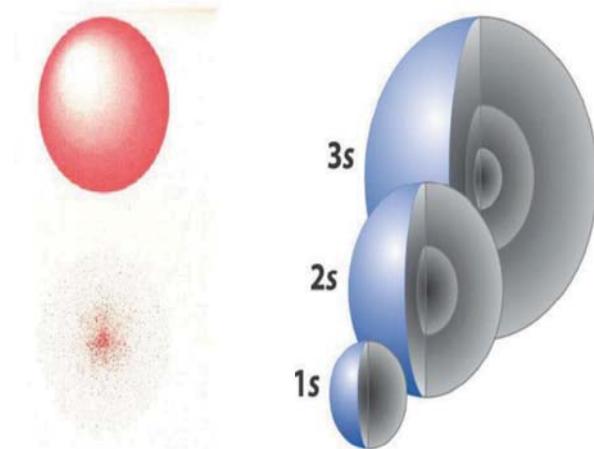
Il numero massimo di elettroni presenti per un determinato valore di n è $2 n^2$

Per ogni valore di n il max n^o di elettroni che può essere ospitato complessivamente negli orbitali che hanno lo stesso valore di n è $2n^2$.

Ci permette di capire quanti sono gli orbitali per ogni valore di n e quanti elettroni può ospitare.

Geometrie degli orbitali di tipo S

$l=0$ orbitale sferico di tipo s



La sfera aumenta le dimensioni al crescere di n ma non cresce solo la sfera, cresce anche l'energia.

Quanti elettroni ci possono essere all'interno di ciascun orbitale di tipo s?

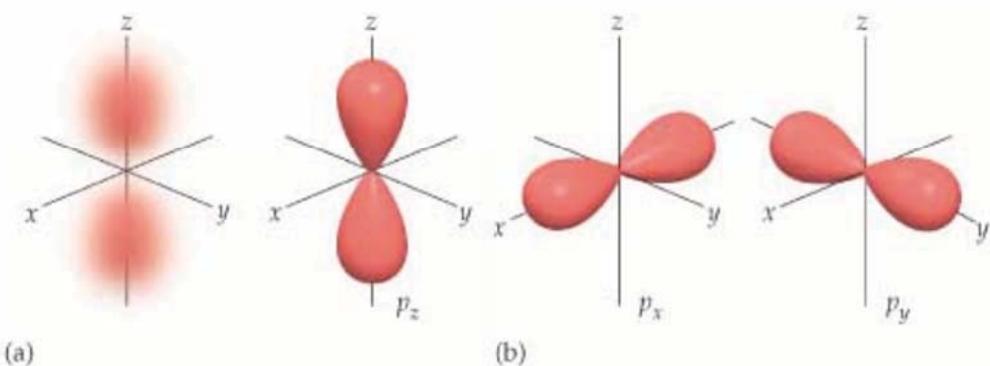
$S, L=0$, per $n=1 \rightarrow 1$ orbitale e $2n^2 = 2$

Gli orbitali di tipo s possono ospitare al più 2 elettroni

Per ogni valore di n c'è un solo orbitale di s. Ciascuno di questi orbitali possono ospitare al più 2 elettroni.

Orbitali di tipo p

Non sono più sferici, hanno forma elicoidale.



Orbitali P con $n=2$, Orbitali 2p (differenti orientazioni nello spazio)

Non esistono gli orbitali 1p

Px diretto lungo asse x

Gli orbitali P possono ospitare al più 2 elettroni anche se complessivamente essendo 3 possono ospitarne 6.

per $n=3 \rightarrow 9$ orbitali

1s 3s

3p 3p

5d 3d (più complessi come geometria)

Gli orbitali di tipo d sono 5.

quanti elettroni con $n=3$? $L=M \rightarrow 18$ $2n^2$

2 in s

6 in p

10 in d = 10 elettroni \rightarrow 2 elettroni per ciascun orbitale

Costante è il n° di elettroni presenti in ciascun orbitale non è mai superiore a 2.

Per $n=4$ $L=N$ 16 orbitali

1s 4s

3p 4p

5d 4d

gli altri 7 orbitali avranno $L=3$ e sono gli orbitali di tipo f \rightarrow 4f perché $n=4$

Gli orbitali f sono 7.

Quanti elettroni ci saranno nel livello energetico n m=4 \rightarrow 32

2 elettroni in 4s

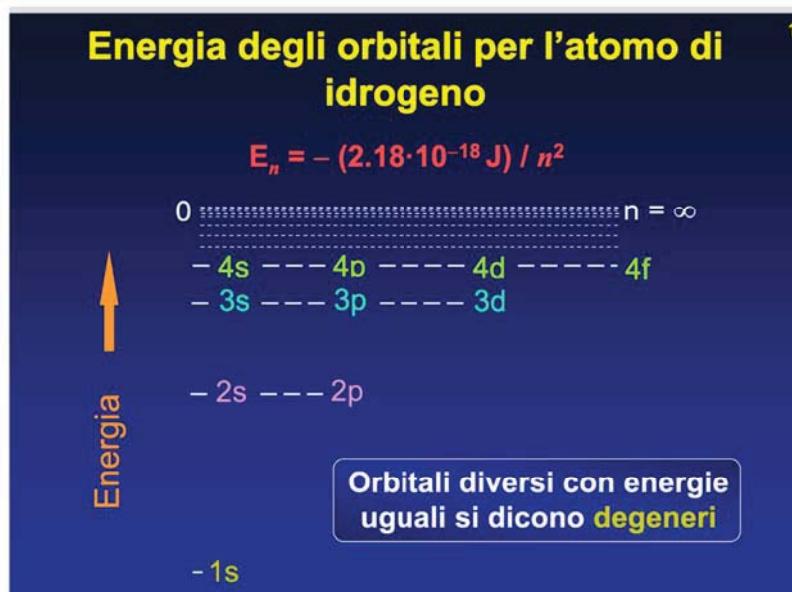
6 elettroni in 4p

10 elettroni in 4d

8 elettroni nei 7 orbitali di tipo f (ospitano sempre 14 elettroni) 2 elettroni per ciascun orbitale.

Ogni orbitale non può ospitare più di 2 elettroni

A seconda del numero atomico dell'elemento considerato. Dato il numero atomico di un elemento dobbiamo essere in grado di rappresentare la sua configurazione elettronica qualunque sia il numero atomico assegnato.



Nel caso dell'atomo di idrogeno l'energia degli orbitali ha questa rappresentazione, l'energia cresce al crescere del numero quantico principale n.

L'orbitale di energia più bassa è 1s (n=1)

2s e 2p (n=2) \rightarrow stessa energia, degeneri

n=3 3s, 3p, 3d

n=4 4s, 4p, 4d, 4f \rightarrow energia superiore rispetto agli orbitali con n=3

sia gli orbitali con n=3 ed n=4 hanno tutti la stessa energia, stesso valore di n, degeneri.

Dove si trova l'elettrone?

Normalmente nell'orbitale 1s. Nell'orbitale di energia più bassa. Al crescere di n questi orbitali si allontanano dal nucleo.

L'elettrone o gli elettroni che occupano orbitali con n>1 si troverebbe a distanze via via maggiori dal nucleo.

L'elettrone nell'orbitale 1 s ha la più bassa energia ma ha la più alta energia di legame perché essendo molto vicino al nucleo l'elettrone è fortemente legato al nucleo (dato dalla forza attrattiva). Il nucleo esercita una attrazione sull'elettrone. Questa forza attrattiva è inversamente proporzionale al quadrato della distanza. A piccola distanza dal nucleo l'elettrone risente di una grande forza attrattiva eletrostatica. Se l'elettrone si trova più distante dal nucleo risentirebbe meno dalla forza attrattiva.

L'elettrone può occupare orbitali con n>1 se si fornisce energia all'atomo di idrogeno (termica, luminosa..)

Se sufficiente l'elettrone assorbe questa energia che viene somministrata all'atomo ed effettua una transizione dall'orbitale 1 s ad orbitali ad energia più alta, con n>1.

L'orbitale 1s dove normalmente si trova l'atomo di idrogeno definisce lo stato fondamentale dell'atomo di idrogeno. Quando viene somministrata energia all'atomo e l'elettrone assorbe energia ed effettua una transizione in un orbitale ad energia più alta si parla di stato eccitato per l'atomo di idrogeno. L'elettrone tende a ritornare nello stato fondamentale in un tempo di 10^{-8} secondi. L'elettrone ritorna dallo stato eccitato nell'orbitale con n=1. In questa transizione inversa emette l'energia che aveva assorbito per effettuare la transizione diretta sotto forma di radiazioni elettromagnetiche (ultraviolette).

Esiste lo spettro energetico dell'atomo di idrogeno che è stato determinato sperimentalmente da Bohr.

Cosa succede nel momento in cui invece dell'atomo di idrogeno vado a considerare atomi con più elettroni? N° atomico > 1? Vale ancora la distribuzione energetica dell'atomo di idrogeno? No.

Si verificano fenomeni che non avvengono nell'atomo di idrogeno.

1. se ci sono più elettroni esisteranno forze repulsive tra gli elettroni stessi (soprattutto tra elettroni che occupano lo stesso orbitale ma anche fra elettroni di orbitali diversi anche se meno intense) Più le cariche elettriche sono vicine più la forza elettrostatica è intensa
2. gli elettroni che occupano gli orbitali + vicini al nucleo esercitano una azione di schermo nei confronti degli elettroni che occupano gli orbitali più distanti. L'attrazione che il nucleo esercita sugli elettroni è minore di quello che dovrebbe essere grazie a questa azione schermante.

Il modello quanto-mecanico si complica ulteriormente.

→ Metodo delle approssimazioni successive

Conseguenze:

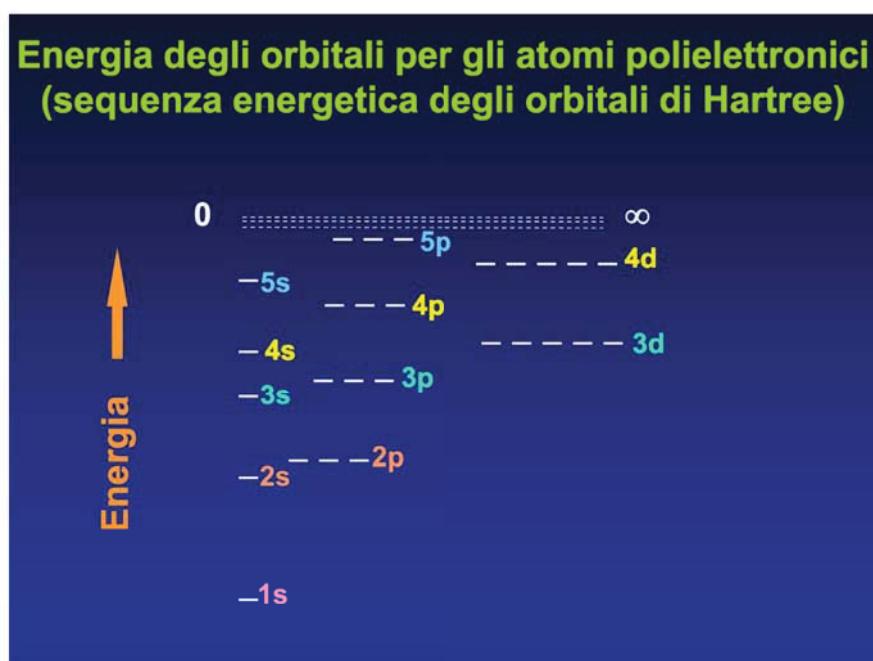
- Scompare la degenerazione che caratterizzava l'atomo di idrogeno.
- Negli atomi a + elettroni l'energia degli orbitali non dipende più dal valore di n ma anche e soprattutto dal valore di l (n° quantico angolare)

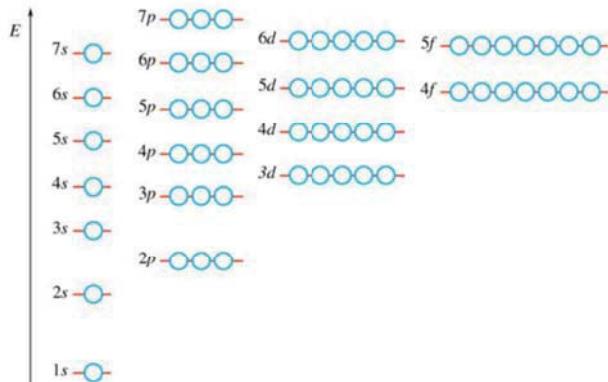
n=2 orbitali 2p hanno energia maggiore degli orbitali 2s.

n=3 orbitali 3d (l=2) hanno energia maggiore degli orbitali 3p (l=1)

L'energia degli orbitali cresce al crescere di l.

Per atomi con un gran numero di elettroni addirittura orbitali con un valore di n + piccolo ma un valore di l + grande possiedono energia maggiore di quello con n grande e l piccolo.





Principio dell'Aufbau

7p n=7

Questo principio dice che a seconda del numero atomico dell'elemento chimico considerato, a seconda del n° di elettroni presenti nell'atomo di quell'elemento chimico, gli elettroni stessi occupano dapprima gli orbitali di più bassa energia ed una volta saturato quegli orbitali, vanno ad occupare orbitali di energia progressivamente crescente seguendo questa distribuzione.

1s → 2s → 2p → 3s → 3p → 4s → 3d

A questo punto diventa possibile che una volta conosciuto il numero atomico posso costruire la configurazione energetica di qualunque elemento chimico.

Periodic Table of the Elements

Group numbers 1–18 represent the system recommended by the International Union of Pure and Applied Chemistry.

sulla base degli orbitali possiamo suddividere i vari elementi della tavola periodica in 4 blocchi:

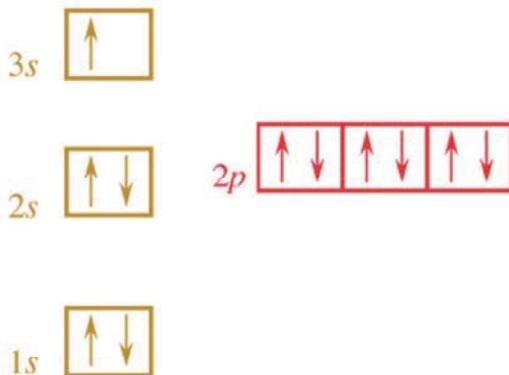
blocco s, p, d, f

blocco s → metalli alcalini, metalli alcalino-terrosi, idrogeno ed elio → gli orbitali più distanti dal nucleo e gli atomi di questi elementi occupati da elettroni sono orbitali di tipo s.

blocco p → dal 13° al 18° gruppo escluso l'elio, alogenici (17° gruppo) → gli orbitali più distanti dal nucleo degli atomi di questi elementi occupati da elettroni sono orbitali di tipo p

blocco d → metalli di transizione, gruppo dal 3 al 12 → gli orbitali più distanti dal nucleo degli atomi di questi elementi occupati da elettroni sono orbitali di tipo d

blocco f → lantanidi ed attinidi, metalli di transizione ma elementi che costituiscono il blocco f → gli orbitali più distanti dal nucleo degli atomi di questi elementi occupati da elettroni sono orbitali di tipo f



Atomo di Na

numero atomico del sodio → 11

Configurazione elettronica del sodio

Il sodio è uno degli elementi del blocco s → orbitale più esterno del blocco s

All'interno dello stesso orbitale ci sono due elettroni in direzioni opposte perché esiste un quarto numero quantico:

n, m, l caratterizzano l'orbitale. Questo quarto numero quantico non caratterizza l'orbitale ma caratterizza l'elettrone.

Numero quantico di spin



è stato introdotto questo numero quantico perché l'elettrone non solo si muove attorno al nucleo ma ruota anche su se stesso in senso orario o in senso antiorario.

Una particella elettricamente carica che si muove produce un campo magnetico ed è associato un vettore.

Anche la rotazione dell'elettrone su se stesso produce un campo magnetico supplementare che si aggiunge al campo magnetico prodotto dall'elettrone attorno al nucleo a questo campo magnetico è associato un momento magnetico, lo spin. Vettore associato alla rotazione dell'elettrone su se stesso in senso orario o antiorario.

Senso orario → momento magnetico diretto verso l'alto → SPIN PARALLELO

Senso antiorario → momento magnetico di spin è un vettore diretto verso il basso → SPIN ANTIPARALLELO

Quale è il valore del numero quantico di spin? Non è intero, è frazionario

vale $+1/2$ se lo spin è PARALLELO

vale $-\frac{1}{2}$ se lo spin è ANTIPARALLELO

2 elettroni sono collocati all'interno dell'orbitale con spin parallelo e spin antiparallelo. Questo obbedisce al principio di esclusione di Pauli:

“all'interno dello stesso orbitale i due elettroni che lo occupano devono avere spin opposti”

Ci deve essere un accoppiamento di spin tra i 2 elettroni.

“Un orbitale non può contenere più di due elettroni e questi devono avere direzioni di spin opposte” .

I due elettroni a spin opposto si dicono accoppiati



gli elettroni essendo carichi negativamente tendono a respingersi e l'orbitale sarebbe instabile. Se i due elettroni hanno spin accoppiati si genera una forza attrattiva che vince ed ostacola la forza elettrostatica repulsiva che dovrebbe manifestarsi fra i due elettroni stessi.

Ecco perchè ogni orbitale può ospitare più elettroni ma con spin opposti.

Configurazioni elettroniche degli elementi del secondo periodo

Z		2s	2p
3	Li [He]	○	
4	Be [He]	○○	
5	B [He]	○○	○
6	C [He]	○○	○○
7	N [He]	○○	○○○
8	O [He]	○○	○○○○
9	F [He]	○○	○○○○○
10	Ne [He]	○○	○○○○○○

Principio di Hund

Z → numero atomico n=2

viene rappresentata la configurazione elettronica degli orbitali più esterni dell'atomo. Orbitali più esterni ancora occupati da elettroni.

[He] → rappresentazione della configurazione elettronica interna degli atomi

Gli elettroni che occupano gli orbitali più esterni si chiamano ELETTRONI DI LEGAME o ELETTRONI DI VALENZA ed entrano in gioco nella formazione dei legame chimici.

ES:

Carbonio 6 elettroni Z=6

2 elettroni in 1s

2 elettroni in 2s

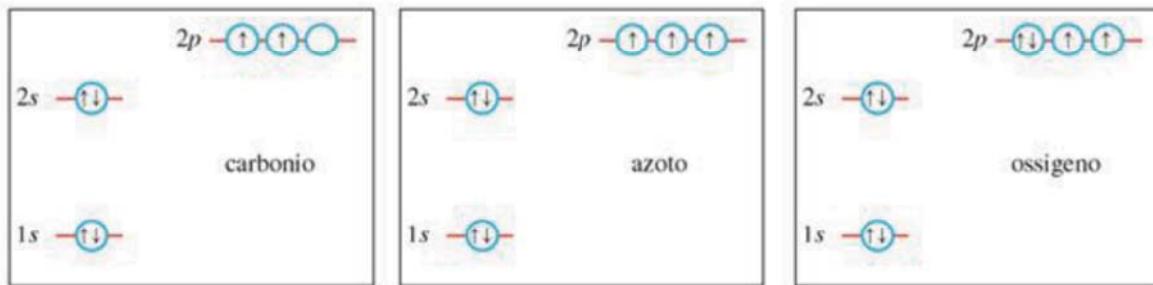
2 elettroni occupano uno ciascuno i primi due orbitali 2p con spin parallelo

Si collocano in orbitali diversi per il principio di Hund.

“Se possibile gli elettroni che devono occupare gli orbitali con stesso numero quantico i gli elettroni tendono ad occupare orbitali diversi”

Negli atomi polielettronici gli orbitali degeneri vengono dapprima occupati tutti singolarmente da elettroni con spin parallelo (condizioni che soddisfano il minimo di energia) e solo successivamente da altri elettroni che si accoppiano con i precedenti

orbitali polielettronici o isoenergetici. Perché se occupano orbitali diversi sono più distanti tra loro e le repulsioni elettrostatiche sono minori. La forza elettrostatica inversamente proporzionale al quadrato della distanza è più debole.



L'ultimo elemento, il Neon, satura tutti gli orbitali con gli elettroni. 8 orbitali più esterni, ottetto elettronico, configurazione otteziale del Neon. Massima stabilità chimica.

Avendo tutti gli orbitali esterni saturi di elettroni il Neon ha una reattività chimica trascurabile, non va a formare composti chimici, è un gas inerte. Massima stabilità energetica, minimo contenuto di energia. Sono gli unici gas MONOATOMICI, non formati da molecole ma da atomi (non da 2 molecole ma da 1). (Neon gas nobile) Massima stabilità e minimo contenuto energetico → inerzia chimica

Gli elementi che precedono il Neon non hanno l'ottetto elettronico esterno, ci sono elettroni spaienti. (uno o più orbitali non sono saturi) Questi elementi chimici hanno elevata reattività chimica, tendono a formare composti chimici per riempire gli orbitali dove mancano gli elettroni, per raggiungere la stessa configurazione otteziale dei gas nobili. Non possiedono la massima stabilità energetica, hanno minore inerzia → maggiore reattività chimica.

Elettroni più esterni → elettroni di legame o di valenza (entrano in gioco nei legami chimici)

3. LEGAMI CHIMICI

La formazione dei composti chimici avviene attraverso l'instaurarsi di legami chimici perché gli atomi di questi elementi devono in qualche modo raggiungere la configurazione otteziale esterna caratteristica dei gas nobili (ci sono violazioni della regola dell'ottetto).

All'interno del composto chimico l'elemento raggiunge la massima stabilità energetica a differenza dei gas nobili che hanno una stabilità intrinseca senza dover formare composti (18° gruppo della tavola periodica degli elementi).

LEGAMI CHIMICI

Interatomici

Ionico

Covalente

Metallico

Intermolecolari

Interazioni di Van der Waals

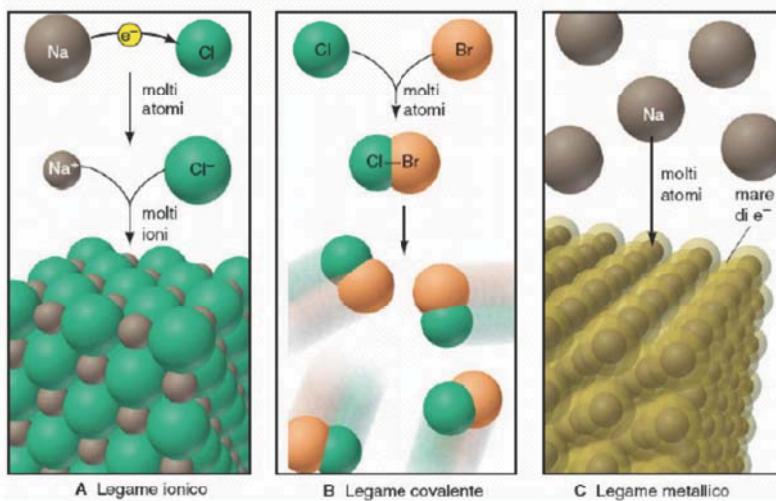
Legame a idrogeno

Quali sono le tipologie di legami in grado di formarsi:

- Interatomici (3) Significativamente + forti dei legami intermolecolari
- 4. IONICO → avviene fra ioni
- 4. COVALENTE → avvengono fra atomi
- 3. METALLICO → avvengono fra atomi
- intermolecolari Interviene la dimensione della molecola
- 1. INTERAZIONI DI VAN DER WAALS → caratterizzano i gas (molecole o macromolecole/polimeri)
- 2. LEGAME A IDROGENO → tra macromolecole=polimeri o liquidi (es. acqua)

3 tipologie di legami interatomici

I tre modelli del legame chimico



- **IONICO** → tra ioni positivi e negativi
- **COVALENTE** → tra atomi. A differenza del legame metallico nel legame covalente c'è una messa in condivisione di elettroni (degli elettroni di legame)
- **METALLICO** Gli elettroni dei legami più esterni (di legame o di valenza) non sono condivisi tra atomi ma sono elettroni liberi, possono muoversi con moto casuale (nelle 3 direzioni dello spazio, isotropo) all'interno del metallo.

Il legame più forte dei 3 è il legame **covalente > ionico > metallico**

La forza del legame incide anche sulle proprietà meccaniche dei materiali.

La capacità di deformazione elastica di un materiale (rigidità) (deformarsi reversibilmente) è correlata alla forza del legame esistente tra le particelle che formano il materiale (ioni, molecole, atomi).

Grandezza che caratterizza tutti i legami

prendiamo in considerazione 2 atomi a distanza infinita l'uno dall'altro => non c'è alcuna interazione tra questi 2 atomi. A distanza infinita l'energia potenziale dei 2 atomi è zero. Immaginiamo di avvicinare progressivamente i 2 atomi e vediamo come varia la forza e l'energia dei due atomi in funzione della distanza tra gli atomi.

Avremo questa situazione:

mano a mano che si avvicinano i 2 atomi si manifestano delle forze attrattive elettrostatiche tra il nucleo (+) e gli elettroni (-) e fra il nucleo del secondo atomo e gli elettroni del primo atomo. Cariche di segno opposto → forze attrattive. In conseguenza di queste forze i 2 atomi iniziano a stabilizzarsi e la loro energia potenziale da 0 diventa negativa, inizia a diminuire. Più avviciniamo gli atomi tra loro più le forze attrattive aumentano.

Minore è la distanza maggiore è la forza.

I 2 atomi tendono sempre più a stabilizzarsi fino a quando si raggiunge una distanza particolare r_0 . A questa distanza si ha la formazione del legame tra i due atomi.

r_0 → i due atomi formano un legame chimico → raggiungono la max stabilità. La loro energia potenziale raggiunge un minimo

Se provassimo a diminuire ancora la distanza sotto r_0 iniziano a manifestarsi non più forze elettrostatiche attrattive ma forze repulsive tra i nuclei dei 2 atomi e tra gli elettroni dei 2 atomi. A causa di queste forze repulsive la stabilità dei 2 atomi diminuisce e l'energia potenziale aumenta rapidamente. Alla distanza di legame la forza che si manifesta tra i 2 atomi è zero. La curva continua mi dà la forza netta $FN = FR$ (forza repulsiva) + FA (forza attrattiva).

$$FR+FA=0$$

Per l'energia in corrispondenza di r_0 si forma il legame chimico tra i 2 atomi. L'energia potenziale raggiunge il valore minimo.

Andamento dell'energia potenziale in funzione della distanza r . Alla distanza di legame r_0 l'energia potenziale netta raggiunge il valore minimo E_0 (energia di legame).

L'energia netta è la somma di una energia repulsiva e di una energia attrattiva.

$$E = \int F dr$$

$$EN = \int FN dr$$

$$EN = \int FA dr + \int FR dr = EA + ER$$

Alla distanza di legame l'energia netta raggiunge questo valore minimo dove le 2 forze si equilibrano.

$E_0 \rightarrow$ energia di legame

sia la distanza di legame r_0 sia l'energia di legame E_0 dipendono dalla coppia di atomi che interagiscono

La forza del legame è correlata alle proprietà meccaniche

La capacità di un materiale di deformarsi elasticamente (in modo reversibile)

Come correliamo la forza del legame alla capacità di deformazione elastica?

Il modulo di young è la capacità di deformazione elastica del materiale stesso.

il modulo di young è proporzionale alle pendenza della curva che riporta la forza di legame in funzione della distanza calcolata in corrispondenza di r_0 . calcolata alla distanza di legame.

$E (dF/dr)r_0 \rightarrow$ modulo elastico → misura della rigidità del materiale

Legame covalente	Legame (covalente) ionico	Legame metallico	Legame a idrogeno	Interazioni di Van der Waals
------------------	---------------------------	------------------	-------------------	------------------------------

LEGAMI INTERATOMICI

LEGAMI INTERMOLECOLARI

MODULO ELASTICO

Materiale	Modulo di Young [GPa]	Legame
Diamante	$E=700$	COVALENTE
SiO ₂	$E= \text{circa } 70$	COVALENTE
Al ₂ O ₃ (allumina)	$E=380$	COVALENTE IONICO (<covalente)
AISI1020	$E=207$	METALLICO
Nylon	$E=3,79$	IDROGENO (polimero)
HDPE	$E=1,08$	INTERAZIONI VAN DER WAALS (polimero)
PVC	$E=2,41$	INTERAZIONI VAN DER WAALS (polimero)
C40	$E= 650-750$	METALLICO

4. LEGAME IONICO

covalente > ionico > metallico

Si manifesta normalmente tra metalli e non metalli e può dare origine solo a sostanze solide.

Gli ioni sono atomi non elettricamente neutri bensì elettricamente carichi → particelle elettricamente cariche.

Sono atomi che o hanno perso o hanno acquistato elettroni di valenza o di legame.

ES.

LITIO → 3 elettroni e 3 protoni

Il litio tende a cedere 1 elettrone nel momento in cui reagisce con il FLUORO l'atomo di LITIO cede un elettrone al FLUORO. Questo avrà 2 elettroni e 3 protoni. Non è più un atomo neutro (Ugual n° di protoni ed elettroni) diventa uno ione positivo perché il terzo protone non viene più compensato. Ione positivo → CATIONE → ATOMI CHE CEDONO 1 O + ELETTRONI a causa dei protoni scoperti all'interno del nucleo

FLUORO → 9 elettroni e 9 protoni. Quando il FLUORO acquista 1 elettrone dal LITIO avrà 9 protoni e 10 elettroni. Questo elettrone trasforma l'atomo in uno ione negativo ANIONE → ATOMI CHE ACQUISTANO 1 O + ELETTRONI e non sono compensati dai corrispondenti protoni presenti nel nucleo.

I metalli hanno la caratteristica di cedere sempre elettroni quando si legano ai non metalli metalli → ioni positivi → cationi (1° metalli alcalini e 2° gruppo metalli alcalino - terrosi)

I metalli alcalini cedono 1 solo elettrone. Formano ioni positivi monocarichi Li^+ K^+

I metalli alcalino-terrosi cedono 2 elettroni. (di valenza o di legame) Formano ioni positivi Bicarichi Mg^{2+} Ba^{2+} L'alluminio non è un metallo di transizione, fa parte del 13° gruppo della tavola periodica ed in questo caso può dare origine a ioni positivi tri carichi Al^{3+} (cede 3 elettroni)

Nel momento in cui l'atomo metallico cede 1 o + elettroni raggiunge la stessa configurazione elettronica del gas nobile! Raggiunge la max stabilità energetica.

Il Litio cedendo un elettrone raggiunge la configurazione elettronica dell'elio

Il Magnesio raggiunge la configurazione elettronica del Neon.

In questo modo lo ione positivo all'interno del composto chimico ha raggiunto la massima stabilità.

I non metalli tendono a formare al contrario dei metalli ioni negativi. Tendono ad acquistare 1 o + elettroni. Acquistando 1 o + elettroni raggiungono la stessa configurazione elettronica di un gas nobile. All'interno di un composto questi hanno raggiunto la max stabilità energetica (minima reattività).

Il Fluoro forma ioni negativi monocarichi → 17° gruppo → ioni negativi monocarichi F^- Cl^- Br^- I^-

L'Ossigeno tende a formare ioni negativi bicarichi, ACQUISTANDO 2 elettroni O^{2-} , S^{2-} Se^{2-} Te^{2-}

Azoto tende ad acquistare ioni negativi tricarichi

il fluoro acquistano 1 elettrone raggiunge la configurazione elettronica del neon. Raggiungendo la configurazione elettronica di un gas nobile per ioni positivi o ioni negativi raggiungono la stabilità energetica → minima reattività.

I metalli tendono a formare ioni positivi perché?

Perché hanno una bassa energia di ionizzazione.

energia che viene ceduta ad un atomo metallico M allo stato isolato (gassoso) G per strappargli l'elettrone dell'orbitale più esterno e portare questo elettrone a distanza infinita dal nucleo dell'atomo stesso.

E (KJ mole⁻¹)

$\text{M(g)} + E_1 = \text{M+(g)} + e^-$

resta lo ione metallico M^+ allo stato gassoso

E_1 = energia di prima ionizzazione che devo fornire ad 1 atomo neutro per strappargli un elettrone

E_2 = energia di seconda ionizzazione

dallo ione M^{2+} posso fornire ancora energia E_3 per strappare un terzo elettrone e formare lo ione M^{3+}

E_3 = energia di terza ionizzazione

Energia di ionizzazione → Una delle proprietà periodiche degli elementi chimici e varia in funzione della posizione degli elementi all'interno della tavola periodica.

Andamento del potenziale (o energia) di prima ionizzazione

Come proprietà periodica l'energia di ionizzazione diminuisce lungo i gruppi dall'alto verso il basso e aumenta lungo i periodi da sinistra verso destra.

I metalli hanno la più bassa energia di ionizzazione e quindi tendono più facilmente elettroni

I non metalli hanno energia più alta e tendono a formare ioni negativi

I gas nobili hanno le più alte energie di ionizzazione perché la configurazione elettronica otteziale conferisce a questi elementi la max stabilità. Per far loro cedere elettroni bisogna fornire energie molto grandi.

Perchè i non metalli hanno maggiore tendenza a formare ioni negativi?

Perchè hanno elevata affinità elettronica

Ae (KJ mole⁻¹)

L'affinità elettronica è l'energia che viene ceduta da un atomo (isolato) non metallico allo stato gassoso G quando acquista un elettrone e si trasforma di conseguenza in uno ione negativo X^-

Ae = energia ceduta dall'atomo al sistema quando l'atomo acquista uno o più elettroni per formare ioni negativi. L'atomo X di un non metallo ha acquistato un elettrone e ha formato lo ione negativo X^-

La convenzione è che l'energia di ionizzazione è considerata positiva perché il sistema cede energia all'atomo

$\text{X(g)} + e^- = \text{X-(g)} +$

Affinità elettronica, A_e (kJ / mole)

$$X(g) + e^- = X^-(g) + A_e$$

A_e (energia ceduta)

L' energia ceduta porta segno negativo

Più alta è l'affinità elettronica maggiore sarà la capacità dell'atomo di acquistare elettroni e quindi formare ioni negativi

Più bassa è l'energia di ionizzazione e maggiore sarà la capacità dell'atomo di formare ioni positivi

L'affinità elettronica è una proprietà elettronica degli elementi chimici e varia in funzione della posizione degli elementi all'interno della tavola periodica.

I valori sono i KJ mol⁻¹

L'affinità elettronica segue lo stesso trend dell'energia di ionizzazione. Diminuisce lungo i gruppi dall'alto verso il basso e aumenta lungo i periodi da sinistra verso destra.

Gli elementi con le più alte affinità elettroniche sono i non metalli e hanno maggiore tendenza ad acquistare elettroni e formare ioni negativi

I metalli hanno più bassa affinità elettronica a cedere elettroni e formare ioni positivi

Non esiste un metallo in grado di formare ioni negativi

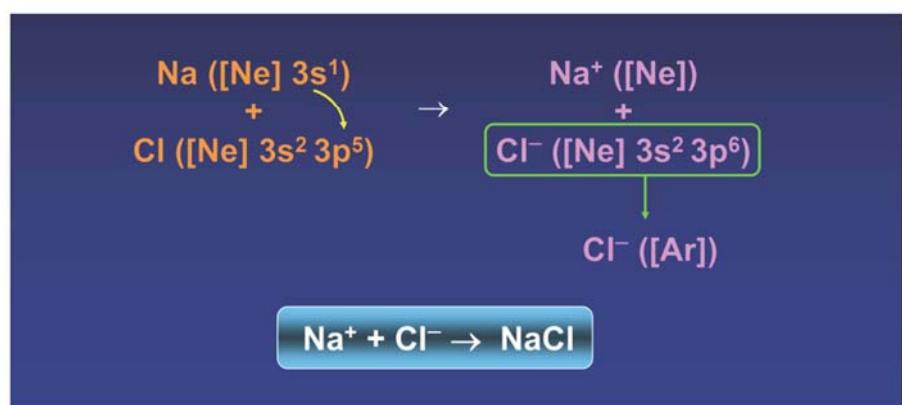
I non metalli possono dare origine a ioni positivi

Se per i gas nobili avevamo un'elevata energia o potenziale di ionizzazione i gas nobili non hanno affinità elettronica. Non esistono valori di affinità elettronica perché i loro atomi presentano la max stabilità (intrinseca) anche se sono non metalli.

Le variazioni si potrebbero spiegare

COME avviene la formazione di un composto ionico
legame ionico → dà luogo solo a sostanze SOLIDE

ESEMPIO: Cloruro di Sodio NaCl



Sodio (1° gruppo metallo alcalino N° atomico 11)

Cloro (n° atomico 17 gruppo 17 alogeno gas)

Viene messo in evidenza la configurazione elettronica esterna dell'atomo di sodio

$3s1 \rightarrow$ nell'orbitale $3s$ c'è 1 elettrone (di legame o valenza)

per il cloro ci sono 2 elettroni nell'orbitale $3s$ e 5 elettroni nei 3 orbitali $3p$

Gli orbitali p sono 3 con 5 elettroni

L'atomo di sodio è un metallo e cede l'elettrone dell'orbitale $3s$ all'atomo di Cloro

L'atomo di Sodio diventa uno ione sodio (catione) con configurazione elettronica del Neon \rightarrow 10 elettroni

Il cloro acquista l'elettrone $3s1$ dall'atomo di Sodio. Negli orbitali più esterni ci saranno 2 elettroni in $3s$ e 6 elettroni nei 3 orbitali $3p$ \rightarrow ione negativo Cl^- con configurazione elettronica dell'Argon.

Tra catione e anione \rightarrow si manifesta una interazione elettrostatica attrattiva \rightarrow formazione del sale \rightarrow Cloruro di sodio \rightarrow legame ionico di natura elettrostatica

come forza attrattiva

la forza elettrostatica è direttamente proporzionale alle cariche degli ioni e inversamente proporzionale alle dimensioni degli ioni

Gli atomi di sodio cedono 1 elettrone agli atomi di cloro

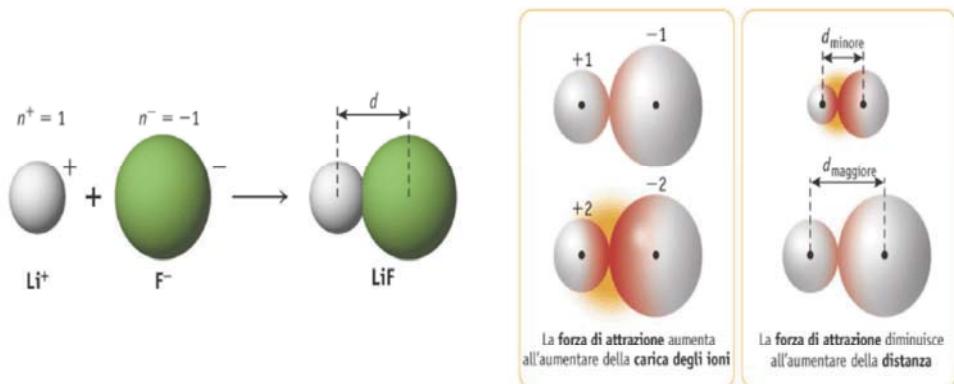
Il cloruro di sodio è formato da ioni sodio che si alternano a ioni cloro.

Tutti i solidi ionici si comportano come il Cloruro di Sodio. (metallo + non metallo)

Cloruro di Sodio \rightarrow reticolo cristallino con disposizione regolare e ordinata di ioni (+) e (-)

in modo tale che ioni cloro e ioni sodio sono a contatto tra di loro. 1 ione + e 1 ione -. Non ci sono interazione elettrostatiche repulsive ma solo attrattive. Il cristallo del cloruro di sodio è stabile. Tutti i solidi ionici si possono rappresentare così.

La forza di Coulomb è inversamente proporzionale alle dimensioni degli ioni



Forze elettrostatiche nel legame ionico

Litio metallo alcalino \rightarrow ione positivo monocarico Li^+ catione

fluoro alogeno \rightarrow ione negativo monocarico F^- anione

la forza elettrostatica attrattiva risulta direttamente proporzionale alle cariche degli ioni

maggiore è la carica più intensa è la carica elettrostatica

a parità di carica maggiore è la distanza di legame e meno intensa risulta la forza \rightarrow legame più debole

La temperatura di fusione è funzione dell'energia reticolare che dipende dagli ioni e dalle loro dimensioni (distanza di legame)

La forza elettrostatica attrattiva

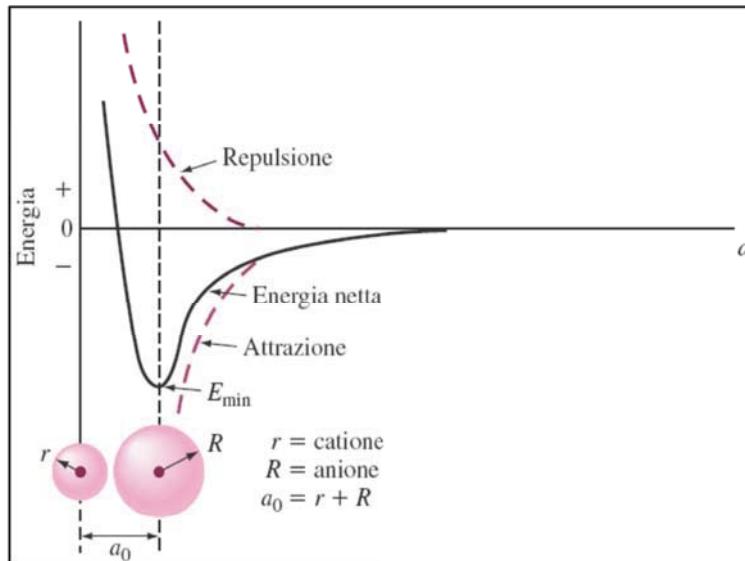
cresce al crescere della carica degli ioni

ma si indebolisce all'aumentare delle loro dimensioni perché la loro distanza aumenta

Consideriamo due atomi

metallo e non metallo a distanza infinita ed energia potenziale nulla

Atomo di Sodio (metallo) atomo di Cloro (non metallo) quando avviciniamo i 2 atomi iniziano a manifestarsi delle forze attrattive tra il nucleo dell'atomo di cloro e gli elettroni dell'atomo di cloro. Siccome sono forze attrattive man mano che diminuiamo la distanza l'energia potenziale diventa negativa e i 2 atomi tendono a stabilizzarsi alla distanza di legame l'atomo di sodio(catione Na^+) cede 1 elettrone all'atomo di cloro (anione Cl^-) e l'energia potenziale raggiunge il valore minimo.



a = distanza tra i 2 atomi

r = raggio

a_0 = distanza tra i due nuclei

alla distanza di legame a_0 l'energia potenziale raggiunge il valore minimo E_{\min}

se proviamo ad avvicinare ulteriormente i due ioni si manifestano delle interazioni elettrostatiche repulsive tra i nuclei dei 2 ioni e tra gli elettroni dei 2 ioni e questo tende a destabilizzare il legame \rightarrow l'energia potenziale aumenta rapidamente

energia attrattiva \rightarrow predomina a distanze maggiori della distanza di legame a_0

energia repulsiva \rightarrow è dominante a distanze minori della distanza di legame a_0

$$EA = -[(Z_1 e)(Z_2 e)]/[4 \pi \epsilon_0 a]$$

Energia Attrattiva \rightarrow segue la legge di Coulomb

ϵ_0 = costante dielettrica nel vuoto

Z_1 e Z_2 sono i numeri atomici dell'anione e del catione

Z_1^*e e Z_2^*e rappresentano le cariche dell'anione e del catione

$$ER = B/a^n$$

B ed n sono due costanti numeriche il cui valore dipende dalla coppia di ioni che andiamo a considerare

Energia Repulsiva \rightarrow non segue la legge di Coulomb

I solidi ionici sono cristallini

A seconda del solido ionico la distanza di legame e l'energia di legame E_{\min} e a_0 varieranno

L'energia Netta è la somma delle 2 curve tratteggiate in rosso = $E_a + E_r$

5. LEGAME COVALENTE

Può dare origine a sostanze liquide, gassose o solide.

Si manifesta normalmente tra non metalli ma può anche manifestarsi tra metalli e semi metalli/metallodi o anche tra non metalli e semi metalli.

Il legame covalente è caratterizzato da una condivisione di elettroni (quelli di valenza o di legame). Non c'è una cessione o un acquisto.

Da 1 fino a 3 elettroni

Non è un legame di natura elettrostatica.

Il legame covalente può anche verificarsi tra atomi di elementi uguali (dello stesso elemento chimico)

ES. H₂, O, N, F

è l'unico legame che giustifica l'esistenza delle molecole (biatomiche)

Si Silicio metalloide o semimetallo

ogni atomo di silicio mette in condivisione un certo n° di elettroni

Quando la sostanza non è un composto chimico possono essere messi in condivisione fino a 4 elettroni

Se consideriamo i semimetalli la condivisione del n° di elettroni può essere superiore a 3

ogni atomo di silicio mette in condivisione 4 elettroni

ogni atomo di silicio forma 4 legami covalenti con altrettanti atomi di silicio e forma un complesso tetraedrico

Per rappresentare il legame covalente esiste una rappresentazione grafica. La cosiddetta rappresentazione di Lewis.

ES: come si forma il legame covalente H₂ secondo la rappresentazione di Lewis

molecole biatomiche o poliatomiche

biatomiche → H₂

Legame covalente nella molecola H₂ secondo l'ipotesi di Lewis



il puntino corrisponde ad 1 elettrone

ogni atomo di H mette in condivisione l'unico elettrone che possiede → H₂

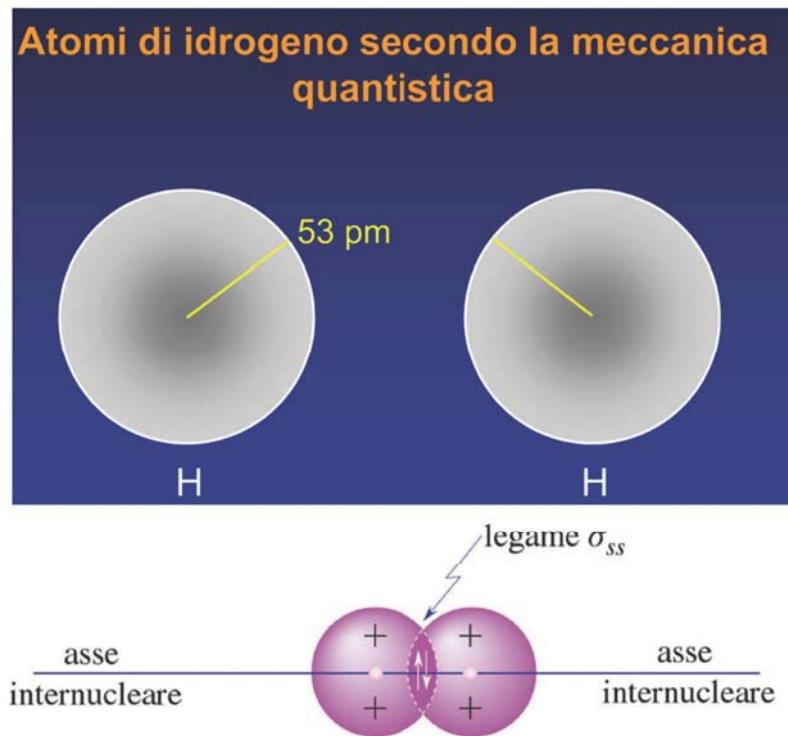
TEORIA DEL LEGAME DI VALENZA (elaborata da Lewis per spiegare il legame covalente)

(meno complessa della teoria dell'orbitale molecolare)

molecola biatomica omonucleare (2 atomi =)

Nell'atomo di H l'elettrone si trova nell'orbitale 1s (sferico e di dimensioni ridotte)

L'elettrone si trova nel suo stato fondamentale



Molecola H_2

I 2 orbitali 1s si sovrappongono parzialmente → si origina una regione detta regione a massima densità elettronica → la regione nella quale la probabilità di trovare il doppietto elettronico (di legame) è di almeno il 90%

all'interno di questa regione sono rappresentati i 2 elettroni che formano il doppietto di legame (e seguono il principio di esclusione di Pauli uno con spid parallelo e uno con spid antiparallelo)

Questo doppietto elettronico si dice che è condiviso in modo uguale perché i 2 atomi sono uguali. Il doppietto elettronico si trova alla stessa distanza dai nuclei dei 2 atomi di H.

Le distanze tra doppietto e nuclei sono uguali.

La retta che attraversa i nuclei dei 2 atomi di H si chiama asse internucleare. La sovrapposizione degli orbitali 1s avviene lungo l'asse internucleare ovvero parallelamente all'asse. Quando la sovrapposizione avviene lungo l'asse internucleare (parallelamente) il legame è detto di tipo SIGMA.

Nella molecola H_2 esiste un legame di tipo SIGMA, esiste un doppietto di legame (2 elettroni messi in condivisione dai 2 atomi di H)

La sovrapposizione avviene lungo l'asse internucleare.

Nella molecola di idrogeno H_2 c'è un solo legame perché c'è un solo doppietto di legame condiviso.

Se consideriamo i 2 atomi di H a distanza infinita come varia l'energia potenziale in funzione della distanza? → stesso trend del legame ionico

a distanza infinita energia potenziale = 0 non ci sono interazioni

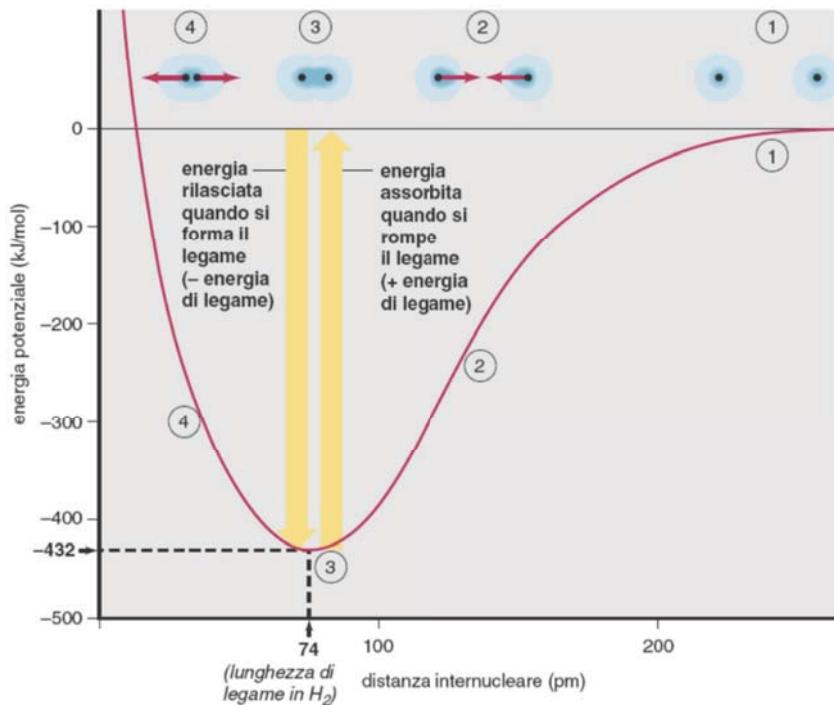
Man mano che avviciniamo i 2 atomi di H iniziano a manifestarsi delle interazioni attrattive tra il nucleo del primo e l'elettrone del secondo e tra il nucleo del secondo e l'elettrone del primo. I due atomi iniziano a stabilizzarsi e l'energia potenziale da 0 inizia a diventare negativa e diventa sempre più negativa al diminuire della distanza.

Alla distanza di legame gli orbitali 1s e i 2 atomi di H si sovrappongono parzialmente → LEGAME SIGMA si forma il doppietto elettronico di legame. Molecola H_2 . I 2 atomi raggiungono max stabilità e minimo valore di energia potenziale. Se avvicinassimo ulteriormente i 2 atomi di nuovo si avrebbe una repulsione elettrostatica tra i nuclei dei 2 atomi e tra gli elettroni e l'energia potenziale aumenterebbe rapidamente.

La distanza di legame e l'energia di legame dipendono da una molecola che andiamo a considerare. Distanza di legame o equilibrio per H_2 → 74 pm

energia potenziale alla distanza di legame (negativa) $\rightarrow -436 \text{ kJ/mol}$

Formazione del legame covalente in H_2

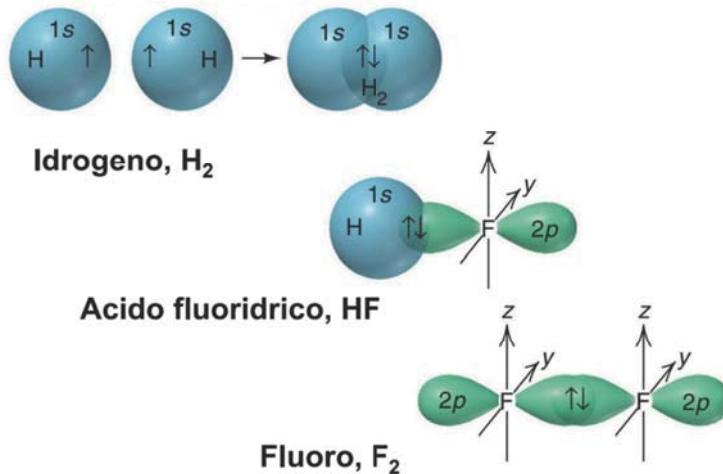


L'energia di legame cosa rappresenta?

E' l'energia che devo fornire alla molecola per spezzare il legame (covalente) esistente tra i due atomi e portare i due atomi a distanza infinita l'uno dall'altro.

L'energia di legame come la distanza di legame dipenderanno dal tipo di molecola che vado a considerare.
Non solo gli orbitali si possono sovrapporsi

Sovrapposizione degli orbitali e accoppiamento degli spin in tre molecole biatomiche



$\text{HF} \rightarrow$ molecola biatomica \rightarrow legame covalente di tipo SIGMA ma formato dalla sovrapposizione dell'orbitale 1s dell'H e dell'orbitale 2p del F \rightarrow 1 doppietto elettronico condiviso

Nella molecola F_2 abbiamo un solo legame covalente di tipo SIGMA ma la sovrapposizione è data da 2 orbitali 2p. Ogni atomo di fluorio mette a disposizione l'elettrone spaiato che possiede. Gli altri orbitali 2p hanno ciascuno un doppietto elettronico.