
Corso: Elementi di chimica

4 CFU

Docente: Annaluisa Mariconda

E-mail: annaluisa.mariconda@unibas.it

Testi consigliati

- L. Palmisano, M. Schiavello **Elementi di Chimica** Edises
- J. C. Kotz, P. M. Treichel, J. R. Townsend, D. A. Treichel **Chimica** Edises
- L. Cipolla **Metodi e strumenti per l'insegnamento e l'apprendimento della chimica** EdiSES
Testo utile, eventualmente, per l'esame a scelta o
a supporto per l'insegnamento

Modalità di esame

Esame scritto composto da esercizi numerici e domande di teoria riguardanti i contenuti del corso.

Programma del corso

- Cenni storici: dal lontano passato alla chimica moderna
- La struttura della materia: atomi e molecole
- Proprietà periodiche
- Il concetto di mole e le formule chimiche
- Nomenclatura chimica
- I legami chimici
- Reazioni chimiche: aspetti quantitativi
- Stati fisici: solido, liquido, gas. Passaggi di stato. Diagramma di stato dell'acqua.
- Soluzioni
- Velocità di Reazione
- Equilibrio chimico. Acidi, basi e sali

Prerequisiti

- 1) Regole algebriche, le proprietà delle potenze, delle proporzioni, delle uguaglianze in generale.
- 2) Percentuali.
- 3) Equazioni di primo e secondo grado.
- 3) Nozioni di proporzionalità diretta e inversa fra grandezze.
- 4) Notazione scientifica.

Programma del corso

- **Cenni storici: dal lontano passato alla chimica moderna.**
- La struttura della materia: atomi e molecole.
- Proprietà periodiche.
- Il concetto di mole e le formule chimiche.
- Nomenclatura chimica.
- I legami chimici.
- Reazioni chimiche: aspetti quantitativi.
- Stati fisici: solido, liquido, gas. Passaggi di stato. Diagramma di stato dell'acqua.
- Soluzioni.
- Velocità di Reazione.
- Equilibrio chimico. Acidi, basi e sali.

Storia della CHIMICA

- 1- Le origini (preistoria / IV-V secolo d.C.)**
- 2- Periodo alchimista (IV-V secolo d.C. / XVII d.C.)**
- 3- Età del flogisto (XVII secolo / XVIII secolo)**
- 4- Chimica moderna (dal XVIII secolo in poi)**

Cenni storici: dal lontano passato alla chimica moderna

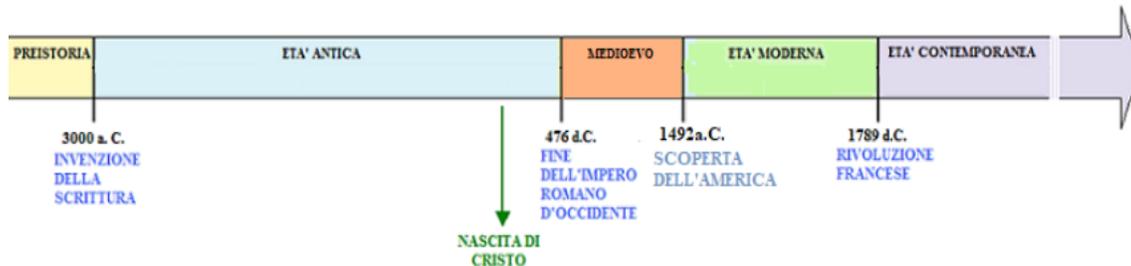
Origini della chimica

Pur essendo di origini antichissime (preistoria) la **CHIMICA** si sviluppò nell'epoca moderna, molto più tardi delle altre scienze naturali.

Ostacoli oggettivi: era facile trarre conclusioni radicalmente errate da esperimenti rudimentali per la difficoltà di allestire esperimenti 'esemplari'.

Documento storico più antico: Epoca **Assiro-Babilonese (XIV secolo a.C.)**
Ricetta su tavole di argilla per colorare i vetri in verde mediante rame.

Civiltà greca classica (dal V al IV a.C.): lo scienziato è il filosofo (egli argomenta teorie generali senza il supporto di esperimenti)



Teoria atomistica

Anassagora (~ 450 a.C.) negò la possibilità di creare o distruggere la materia (intuì la trasformazione della materia)

Democrito (~ 400 a.C.) parlò di particelle indivisibili e invisibili differenti in forma, posizione e disposizione

Cenni storici: dal lontano passato alla chimica moderna

Dottrina di Empedocle (V secolo a.C.)

La sua idea dei quattro elementi (**terra**, **acqua**, **aria** e **fuoco**) che combinandosi tra loro dessero origine alle molteplici e mutevoli sostanze naturali.

Esempio: deduzioni errate da un esperimento rudimentale

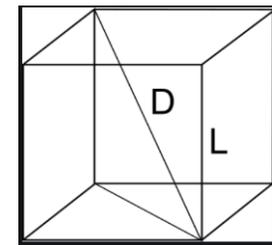
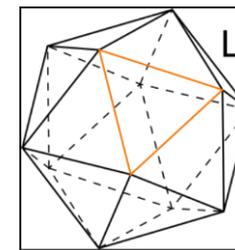
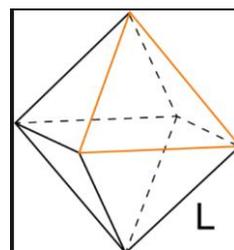
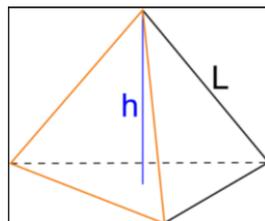
La combustione

Bruciando del legno si ha la netta impressione che la fiamma fuoriesca dal legno stesso (il **fuoco**) insieme al fumo (l'**aria**), mentre resta incombusto un residuo di cenere (la **terra**) e, se il legno non è secco, si osserva anche la fuoriuscita della linfa (liquido incolore) che può essere scambiato per **acqua**. E' innegabile quindi che l'idea del legno, bruciando, si decomponga in **fuoco**, **terra**, **acqua** e **aria** sia una conclusione abbastanza suggestiva.



Platone

Perfezionò l'idea di Empedocle attribuendo agli atomi degli elementi specifiche forme che ne spiegavano le proprietà. Es. gli 'atomi' di **fuoco** erano tetraedri, quelli di **aria** ottaedri, quelli di **acqua** e **terra** icosaedri e cubi, rispettivamente.



Cenni storici: dal lontano passato alla chimica moderna

Periodo Ellenistico

323 a.C. - 23 a.C. dalla morte di Alessandro Magno a quella di Cleopatra d'Egitto

Euclide-Tolomeo-Archimede

Svolta: l'osservazione sperimentale cessò di essere indegna e se ne riconobbe l'utilità senza togliere alla 'filosofia' il ruolo predominante. L'esperimento venne riconosciuto utile solo per confermare le teorie elaborate a priori.

2- Alchimia (IV-V secolo d.C. / XVI d.C.)

Gli alchimisti avevano come 'missione' creare la pietra filosofale che doveva servire per la fabbricazione dell'oro, raggiungere l'onniscienza e l'immortalità attraverso la scoperta di rimedi per tutte le malattie.

Tale dottrina aveva fondamenta mistiche e simboliche.

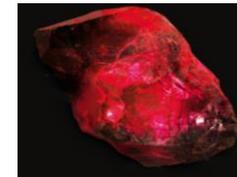
Alchimia cinese

Teoria dei 5 elementi: metallo, legno, terra, acqua, fuoco.

Fabbricazione dell'oro e utilizzo del suo potere terapeutico (opportunamente ingerito potesse dare vita eterna).

Alchimia araba

Trasmutazione dei metalli in oro.



Storia della chimica

XVI secolo

Grande impulso scientifico:

- nella fisica (Galileo Galilei) → nascita del metodo sperimentale
- nell'astronomia (Copernico)
- nell'anatomia (Vesalius)

Paracelso (1493-1541) medico dal temperamento polemico e violento.

Scopo della chimica: preparazione di medicinali (*iatrochimica*).

Sottopose tutti i metalli ad una serie di reazioni 'standardizzate' preparando un elevato numero di 'medicamenti', molti certamente dannosi se non letali, ma facendo un utilissimo lavoro di sistematica chimica.

Libavius (1540-1616) vede nell'alchimia l'arte di produrre magisteri ed estrarre le essenze pure per mezzo della separazione dei corpi dalle miscele'.

Storia della chimica

XVII secolo

Glauber (1680) studiò numerosi sali tra cui il solfato sodico (Na_2SO_4) a cui attribuì infinite virtù. Oggi riconosciamo soltanto virtù lassative.

Van Hekmont studiò estesamente i gas (parola derivata dal greco *chaos*).

Ne preparò diversi: anidride carbonica (CO_2), anidride solforosa (SO_2), ossido di azoto (NO), idrogeno solforato (H_2S)

La **teoria dei 4 elementi** resistette fino all'età moderna che si arricchì della proposta di **Becher** e **Stahl** (1702). Essi proposero che tutti i materiali combustibili contenessero un elemento chiamato **flogisto**.

Questo si allontanava quando la sostanza bruciava:

- i metalli, quando bruciavano, perdevano flogisto e lasciavano un residuo (calce);
- i residui, riscaldati con carbone e legna, riassorbivano flogisto e ridiventavano metallo;
- il carbone di legna è ricco di flogisto.

Storia della chimica

XVIII secolo

Pensiero chimico moderno

Antoine Lavoisier (1743-1794)

Sulla base dei suoi esperimenti, concluse che la massa era la quantità fondamentale conservata in una reazione chimica.

Legge di conservazione della massa

La massa totale dei prodotti formati in una reazione chimica deve essere esattamente uguale alla massa totale delle sostanze di partenza.



XVIII secolo

I chimici dell'epoca si impegnarono a preparare e descrivere composti puri e a decomporli negli elementi dai quali erano formati.

Furono isolati: l'idrogeno (H_2), l'azoto (N_2), l'ossido nitroso (N_2O_3), l'ossido nitrico (N_2O_5), il monossido di carbonio (CO), il biossido di zolfo (SO_2), il cloruro di idrogeno (HCl), l'ammoniaca (NH_3), l'ossigeno (O_2)...senza conoscere l'esatta composizione.

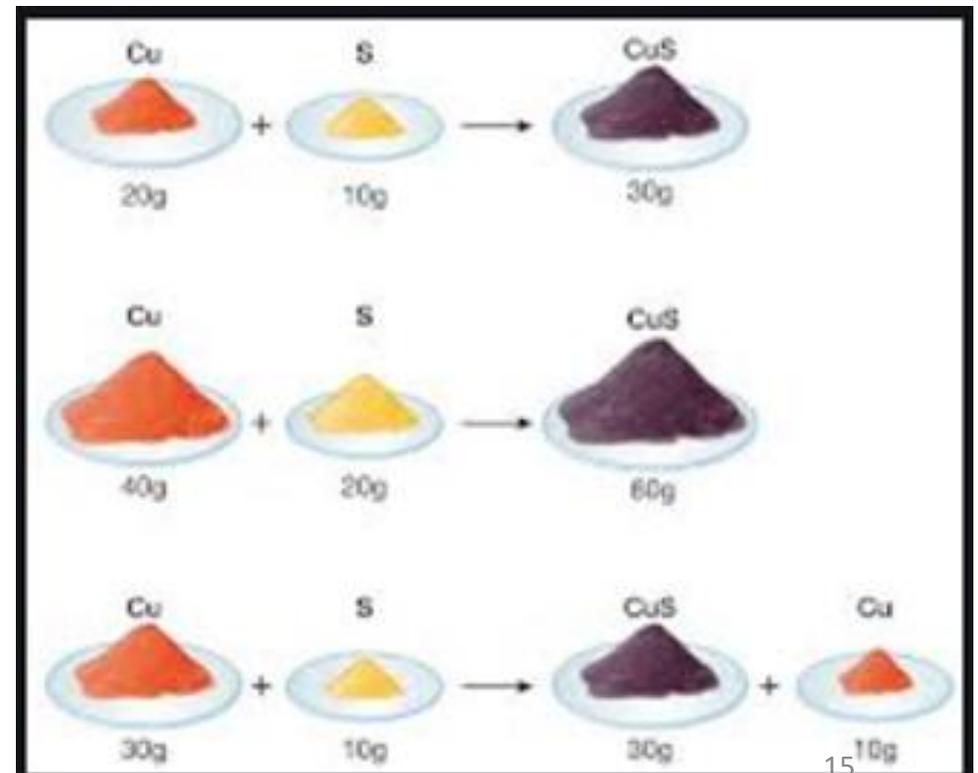
Storia della chimica

XIX secolo

Dalle osservazioni sperimentali furono dedotte delle leggi:

Legge di **Proust** (1754-1826) o legge delle proporzioni definite:

Quando due sostanze si combinano per formare un composto, le loro masse si combinano in proporzioni definite e costanti.

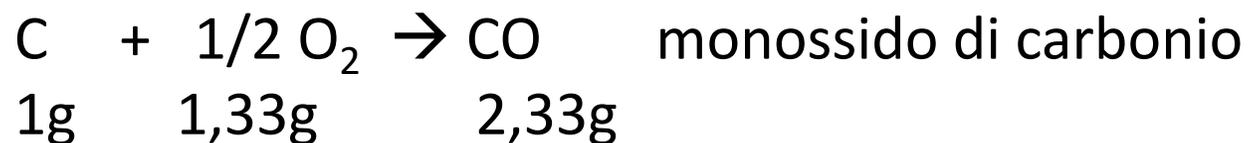


Storia della chimica

XVIII secolo

Legge di **Dalton** (1788) o legge delle proporzioni multiple

Quando due elementi si combinano in modi diversi per formare diversi composti, posta fissa la quantità di uno dei due elementi, la quantità dell'altro elemento necessaria a reagire per formare un diverso composto risulterà essere un **multiplo** o **sottomultiplo** di se stessa, in rapporti esprimibili con numeri piccoli ed interi.



Storia della chimica

XIX secolo

Calcolo delle masse atomiche e attribuzione della formula chimica molecolare

Tre informazioni:

- Masse di combinazione
- Masse atomiche
- Formule molecolari

Note due su tre sarebbe stato possibile ricavare la terza (purtroppo solo le masse di combinazione erano misurabili).

Cannizzaro nel 1860 trovò la soluzione basandosi sui lavori non riconosciuti di **Avogadro**.

La determinazione delle masse molecolari era possibile accettando **l'ipotesi di Avogadro**.

Storia della chimica

XVIII secolo

L'ipotesi di Avogadro trae origine dal lavoro di **Gay-Lussac** (1808):

A) Volumi uguali di cloruro di idrogeno e di ammoniaca reagiscono per dare un solido neutro.

B) Due volumi di idrogeno reagiscono con un volume di ossigeno per dare due volumi di vapore acqueo.



C) Tre volumi di idrogeno reagiscono con uno di azoto per dare due volumi di ammoniaca.



D) Un volume di idrogeno reagisce con uno di cloro per dare due volumi di cloruro di idrogeno gassoso.

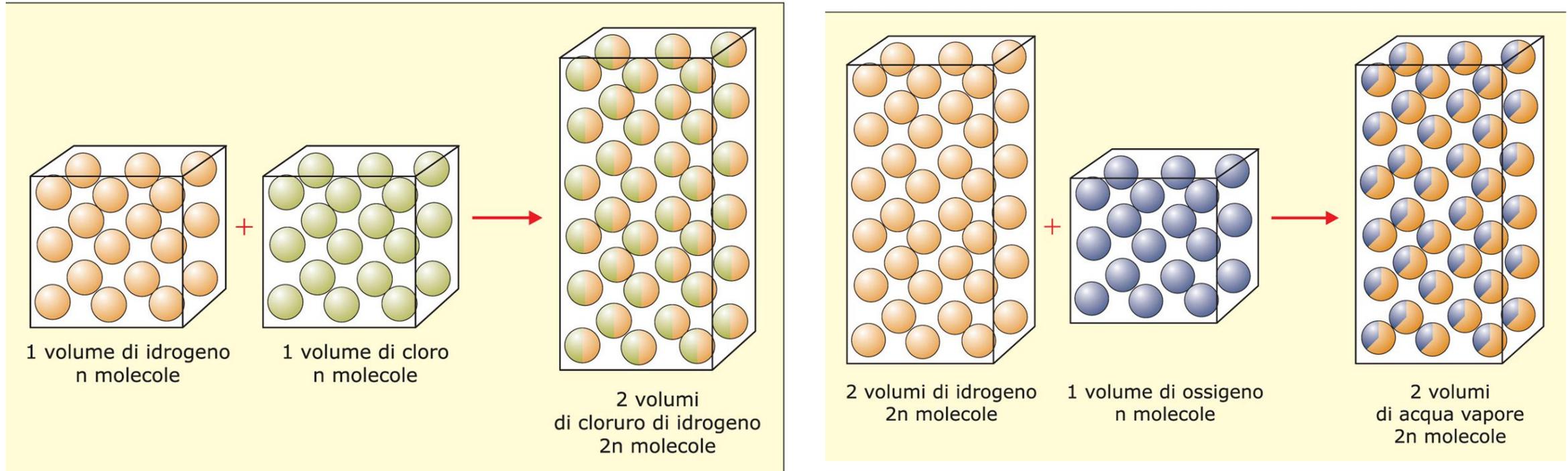


Avogadro spiegò questo comportamento dei gas ipotizzando che '**volumi uguali di gas diversi contengono lo stesso numero di molecole**'.

Egli dedusse anche che le molecole di idrogeno, ossigeno, azoto e cloro dovessero essere biatomiche: H_2 , O_2 , N_2 , Cl_2 .

Cenni storici: dal lontano passato alla chimica moderna

Avogadro spiegò questo comportamento dei gas ipotizzando che **'volumi uguali di gas diversi contengono lo stesso numero di molecole'**.



Egli dedusse anche che le molecole di idrogeno, ossigeno, azoto e cloro dovessero essere biatomiche: H_2 , O_2 , N_2 , Cl_2 .

Storia della chimica

XIX secolo

Cannizzaro propose un metodo rigoroso convincendo anche i più restii.

Questo metodo permetteva di calcolare la massa atomica di qualsiasi elemento presente in composti con densità gassose misurabili.

Regola di Cannizzaro: 'le varie quantità in peso di uno stesso elemento, contenute nelle molecole di sostanze diverse, sono tutte multipli di una stessa quantità, la quale deve ritenersi il peso atomico dell'elemento.'

Da queste masse atomiche e dalla composizione percentuale si giunse, senza ambiguità, alle formule chimiche.

Storia della chimica

XIX secolo

TABELLA 1.2

Illustrazione della regola di Cannizzaro



Palmisano, Schiavello
Fondamenti di Chimica, III Ed.
EdiSES

Composto	Massa molecolare	Massa di ciascun elemento contenuta in una massa pari al peso molecolare			Formula
		C	H	Cl	
Metano	16	12	4		CH ₄
Etano	30	24	6		C ₂ H ₆
Benzene	78	72	6		C ₆ H ₆
Cloroformio	119,5	12	1	106,5	CHCl ₃
Cloruro di etile	64,5	24	5	35,5	C ₂ H ₅ Cl
Tetracloruro di carbonio	154	12		142	CCl ₄
Peso atomico		12	1	35,5	

Programma del corso

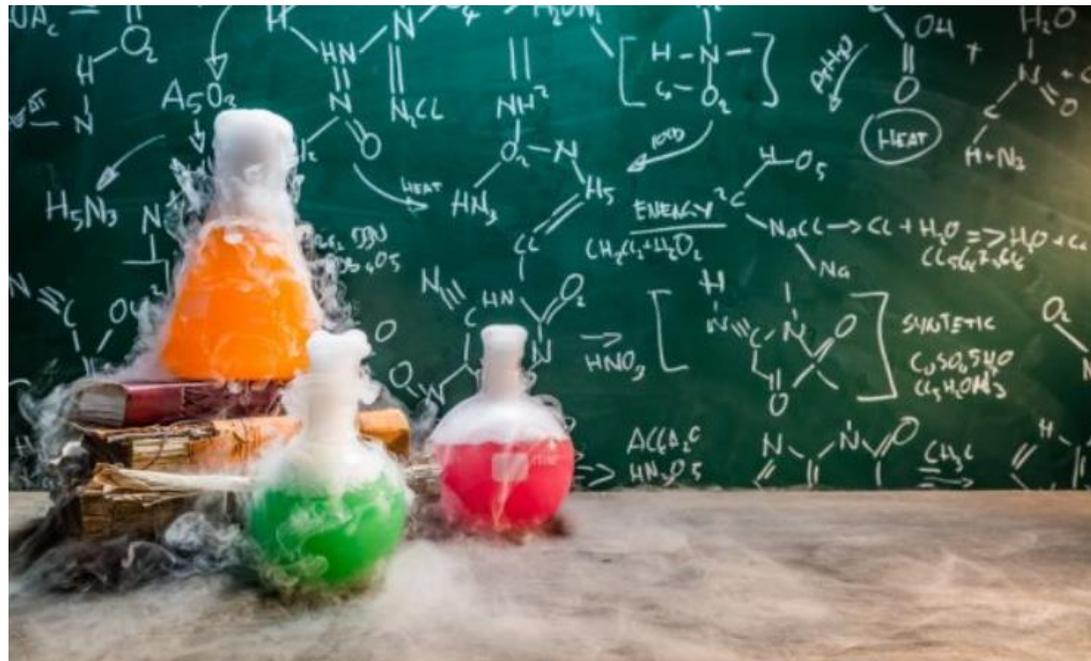
- Cenni storici: dal lontano passato alla chimica moderna.
- **La struttura della materia: atomi e molecole.**
- Proprietà periodiche.
- Il concetto di mole e le formule chimiche.
- Nomenclatura chimica.
- I legami chimici.
- Reazioni chimiche: aspetti quantitativi.
- Stati fisici: solido, liquido, gas. Passaggi di stato. Diagramma di stato dell'acqua.
- Soluzioni.
- Velocità di Reazione.
- Equilibrio chimico. Acidi, basi e sali.
- Elettrochimica.

La struttura della materia: atomi e molecole

Definizione:

La **chimica** è la scienza che studia la materia (composizione, struttura e proprietà) e le sue trasformazioni – spontanee o no – che portano alla formazione di sostanze diverse da quelle di partenza e che sono dette “reazioni chimiche”.

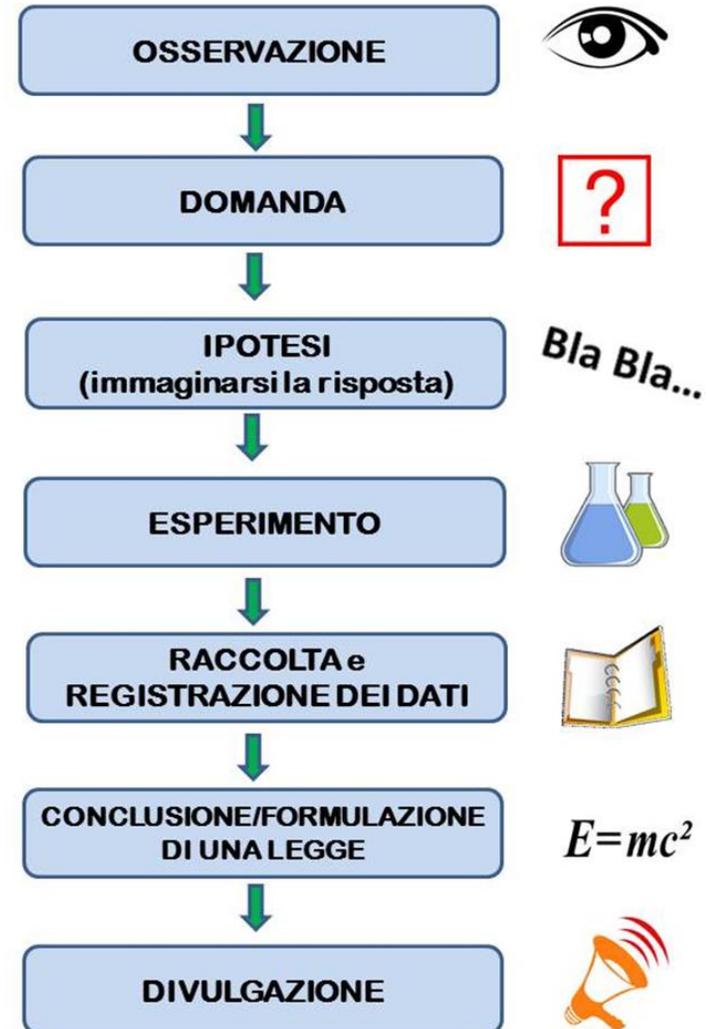
La Chimica è una Scienza Centrale!



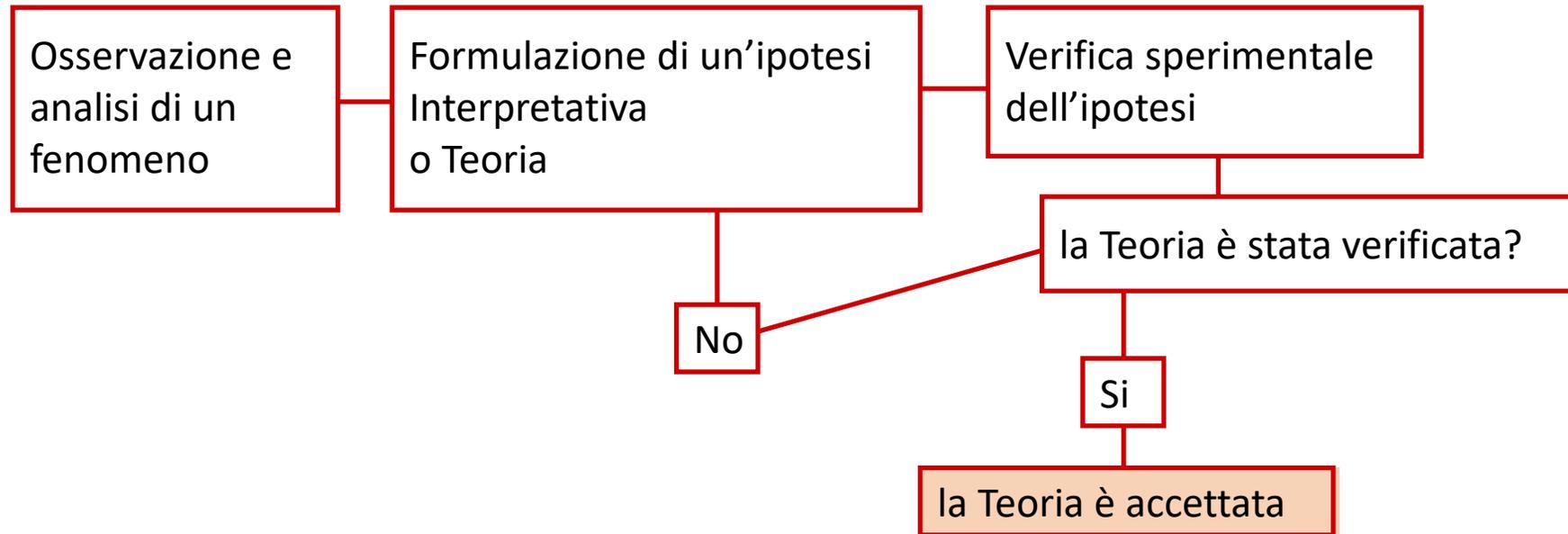
Metodo sperimentale

Lavoisier fu il primo a stabilire e seguire un vero metodo scientifico, basato sull'osservazione, sull'uso di metodi di misura quantitativi condotti in esperimenti obiettivi e ripetibili. Il suo rigore scientifico gli permise di determinare la legge della conservazione della massa, invalidando definitivamente l'ipotesi del flogisto del chimico G.E. Stahl (1659-1734).

Il metodo scientifico



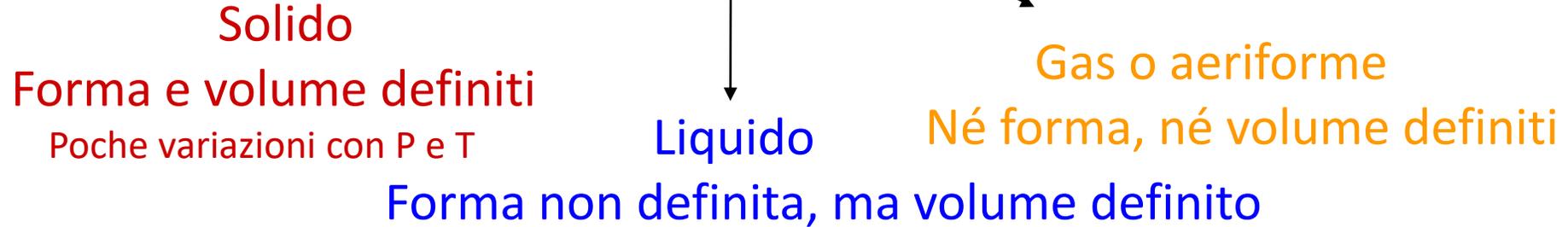
Metodo sperimentale



La struttura della materia: atomi e molecole

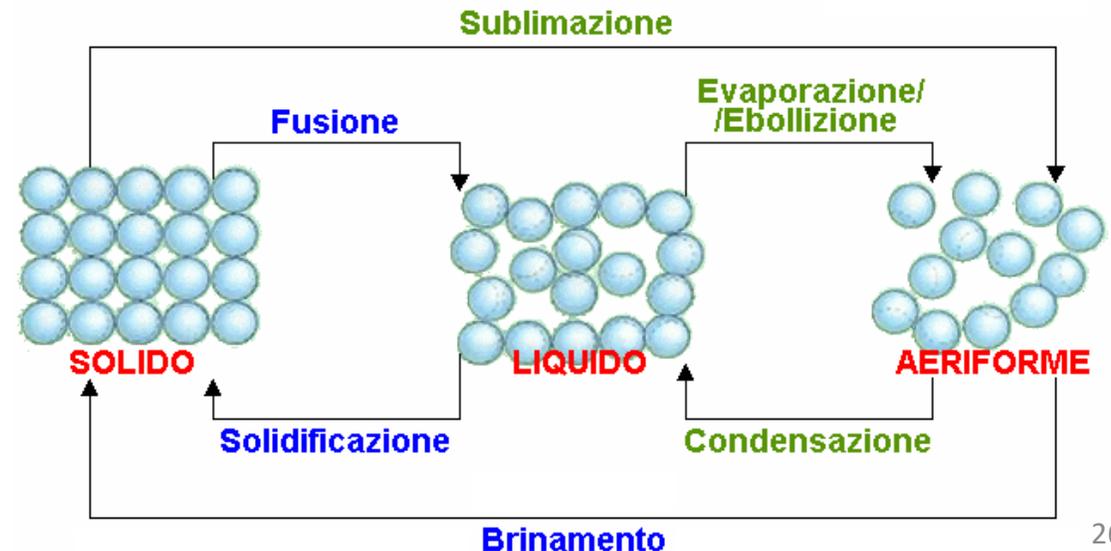
Si può definire **materia** tutto ciò che ha una massa ed occupa spazio

Stati di aggregazione



La materia, se sottoposta a variazione di temperatura e pressione, subisce una **trasformazione da uno stato fisico ad un altro**, chiamato **passaggio di stato**.

Tale trasformazione è fisica e non chimica, perché non viene alterata la composizione della sostanza, ma solo il modo in cui sono legate le particelle.



Grandezze estensive e grandezze intensive

Le grandezze che descrivono le proprietà della materia sono di due tipi

- **grandezze estensive:** proprietà che dipendono dalla dimensione del campione (**massa, volume, forza**);
- **grandezze intensive:** proprietà fisiche di un materiale che non dipendono dalla dimensione del campione (**temperatura, pressione, densità**).

La $T_{\text{ebollizione}}$ dell'acqua
è $100\text{ }^{\circ}\text{C}$



0,500 l H₂O



1,00 l H₂O

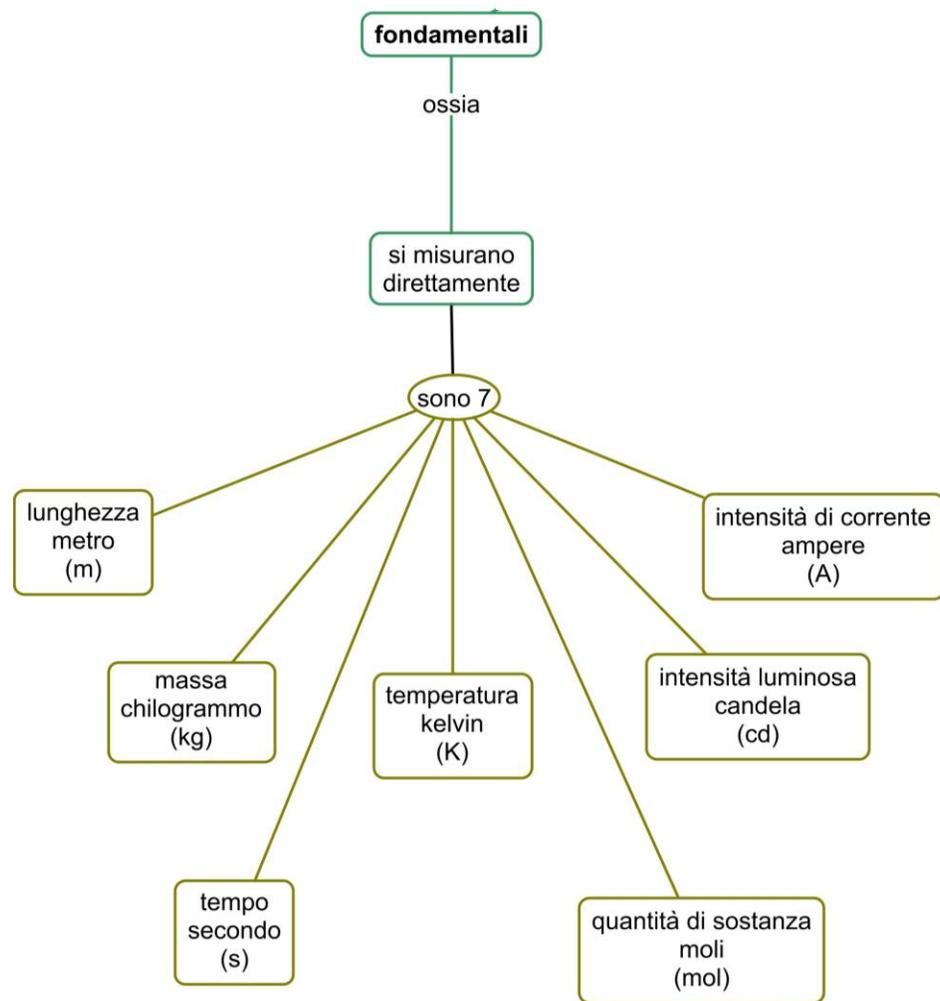
Grandezze fondamentali Sistema internazionale (SI)

Le **sette** grandezze fondamentali, sono grandezze fisiche indipendenti; ciò significa che non dipendono da altre grandezze. Le unità di misura sono definite in modo univoco.

Grandezza fisica	Simbolo della grandezza	Nome dell'unità di misura	Simbolo dell'unità di misura
lunghezza	l	metro	m
massa	m	kilogrammo	kg
tempo	t	secondo	s
corrente elettrica	I	ampere	A
temperatura	T	kelvin	K
quantità di sostanza	n	mole	mol
intensità luminosa	iv	candela	cd

...in base a queste unità di misura si possono definire tutte le altre, dette **derivate**, che si possono ottenere combinando le grandezze fondamentali con relazioni matematiche.

Grandezze derivate



Grandezza fisica	Nome dell'unità di misura	Simbolo dell'unità di misura	Definizione dell'unità di misura SI
area	metro quadrato	m ²	
volume	metro cubo	m ³	
densità o massa volumica	kilogrammo al metro cubo	kg/m ³	
forza	newton	N	$N = \text{kg} \cdot \text{m}/\text{s}^2$
pressione	pascal	Pa	$\text{Pa} = \text{N}/\text{m}^2$
energia, calore, lavoro	joule	J	$J = \text{N} \cdot \text{m}$
velocità	metri al secondo	m/s	
accelerazione	metri al secondo quadrato	m/s ²	
potenza	watt	W	$W = \text{J}/\text{s}$
carica elettrica	coulomb	C	$C = \text{A} \cdot \text{s}$
differenza di potenziale elettrico, forza elettromotrice	volt	V	$V = \text{J}/\text{C}$
resistenza	ohm	Ω	$\Omega = \text{V}/\text{A}$
frequenza	hertz	Hz	$\text{Hz} = 1/\text{s}$

La struttura della materia: atomi e molecole

I principali sottomultipli del metro sono:

1 decimetro	=	1 dm	=	0,1 metri	=	$1 \cdot 10^{-1}$ m
1 centimetro	=	1 cm	=	0,01 metri	=	$1 \cdot 10^{-2}$ m
1 millimetro	=	1 mm	=	0,001 metri	=	$1 \cdot 10^{-3}$ m
1 micrometro	=	1 μ m	=	0,000001 metri	=	$1 \cdot 10^{-6}$ m
1 nanometro	=	1 nm	=	0,000000001 metri	=	$1 \cdot 10^{-9}$ m
1 ångström	=	1 Å	=	0,0000000001 metri	=	$1 \cdot 10^{-10}$ m
1 picometro	=	1 pm	=	0,0000000000001 metri	=	$1 \cdot 10^{-12}$ m

ESEMPIO

L'atomo d'oro ha un diametro di circa $1,44 \cdot 10^{-10}$ m. Calcola il diametro in nanometri e in ångström.

La struttura della materia: atomi e molecole

I principali sottomultipli del metro sono:

1 decimetro	= 1 dm	= 0,1 metri	= $1 \cdot 10^{-1}$ m
1 centimetro	= 1 cm	= 0,01 metri	= $1 \cdot 10^{-2}$ m
1 millimetro	= 1 mm	= 0,001 metri	= $1 \cdot 10^{-3}$ m
1 micrometro	= 1 μ m	= 0,000001 metri	= $1 \cdot 10^{-6}$ m
1 nanometro	= 1 nm	= 0,000000001 metri	= $1 \cdot 10^{-9}$ m
1 ångström	= 1 Å	= 0,0000000001 metri	= $1 \cdot 10^{-10}$ m
1 picometro	= 1 pm	= 0,0000000000001 metri	= $1 \cdot 10^{-12}$ m

ESEMPIO

L'atomo d'oro ha un diametro di circa $1,44 \cdot 10^{-10}$ m. Calcola il diametro in nanometri e in ångström.

Soluzione Devi trasformare i metri in nanometri: sapendo che $1 \text{ nm} = 1 \cdot 10^{-9}$ m, il diametro è uguale a 0,144 nm, cioè a 1,44 Å, poiché $1 \text{ Å} = 1 \cdot 10^{-10}$ m.

$$\begin{array}{cccc} \text{nm} & \text{m} & \text{nm} & \text{m} \\ 1 & : 1 \times 10^{-9} & = X & : 1,44 \cdot 10^{-10} \text{ m} \end{array}$$

$$X = (1 \text{ nm} \times 1,44 \times 10^{-10} \text{ m}) / 1 \times 10^{-9} \text{ m} = 1,44 \times 10^{-1} \text{ nm}$$

$$10^{-10} / 10^{-9} = 10^{-10-(-9)} = 10^{-10+9} = 10^{-1}$$

- 1) Prodotto di potenze con la stessa base
- 2) Quoziente di potenze con la stessa base
- 3) Potenza di potenza
- 4) Prodotto di potenze con lo stesso esponente
- 5) Quoziente di potenze con lo stesso esponente

$$a^m \cdot a^n = a^{m+n}$$

$$\frac{a^m}{a^n} = a^{m-n}$$

$$(a^m)^n = a^{m \cdot n}$$

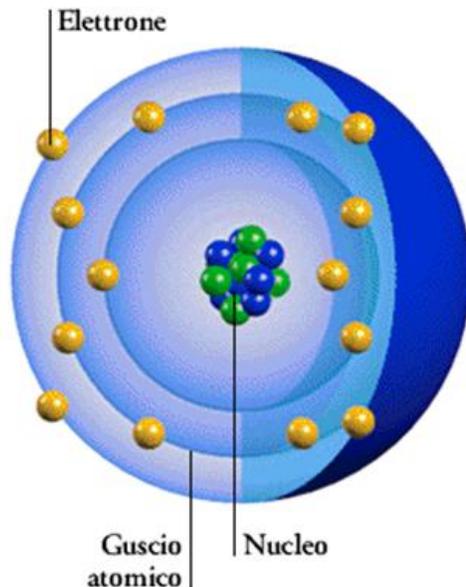
$$a^n \cdot b^n = (a \cdot b)^n$$

$$\frac{a^n}{b^n} = \left(\frac{a}{b}\right)^n$$

La struttura della materia: atomi e molecole

La materia risulta costituita da atomi.

Il termine atomo deriva dal greco (che non si può tagliare) e rispecchia l'idea di una unità fondamentale ed indivisibile.



Tutti gli atomi sono costituiti da un numero variabile di particelle subatomiche: **elettroni (1897)**, **protoni (1919)** e **neutroni (1932)**.

L'**elettrone** fu la prima particella ad essere teorizzata e scoperta.

Esperimento di Thomson (1897)

Rapporto carica/massa (e/m) = 1.76×10^8 coulomb g^{-1} .

Esperimento di Millikan (1911)

Carica di un singolo elettrone = 1.60×10^{-19} C (carica unitaria)

Esperimento di Rutherford (1911)

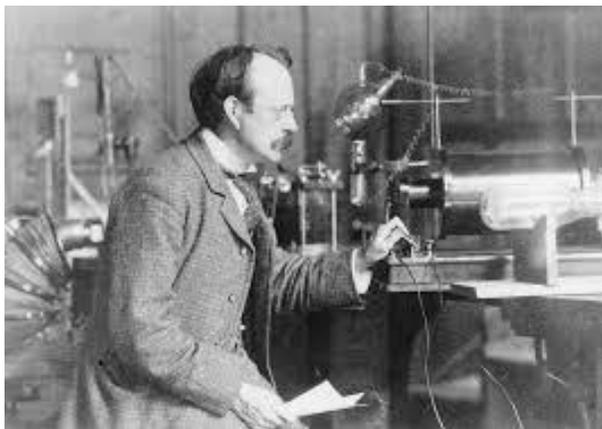
Rutherford dimostrò che l'atomo era costituito da un nucleo carico positivamente e dagli elettroni che occupavano spazio intorno.

Esperimento di Thomson (1897)

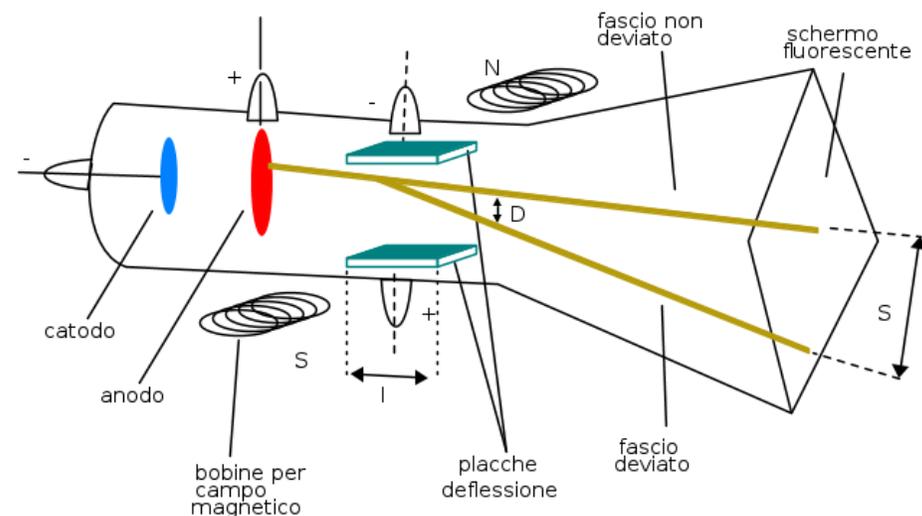
Thomson fu in grado di calcolare il rapporto carica/massa $(e/m)=1.76 \times 10^8$ coulomb g^{-1} .

Tubo di Crookes (o tubo catodico)

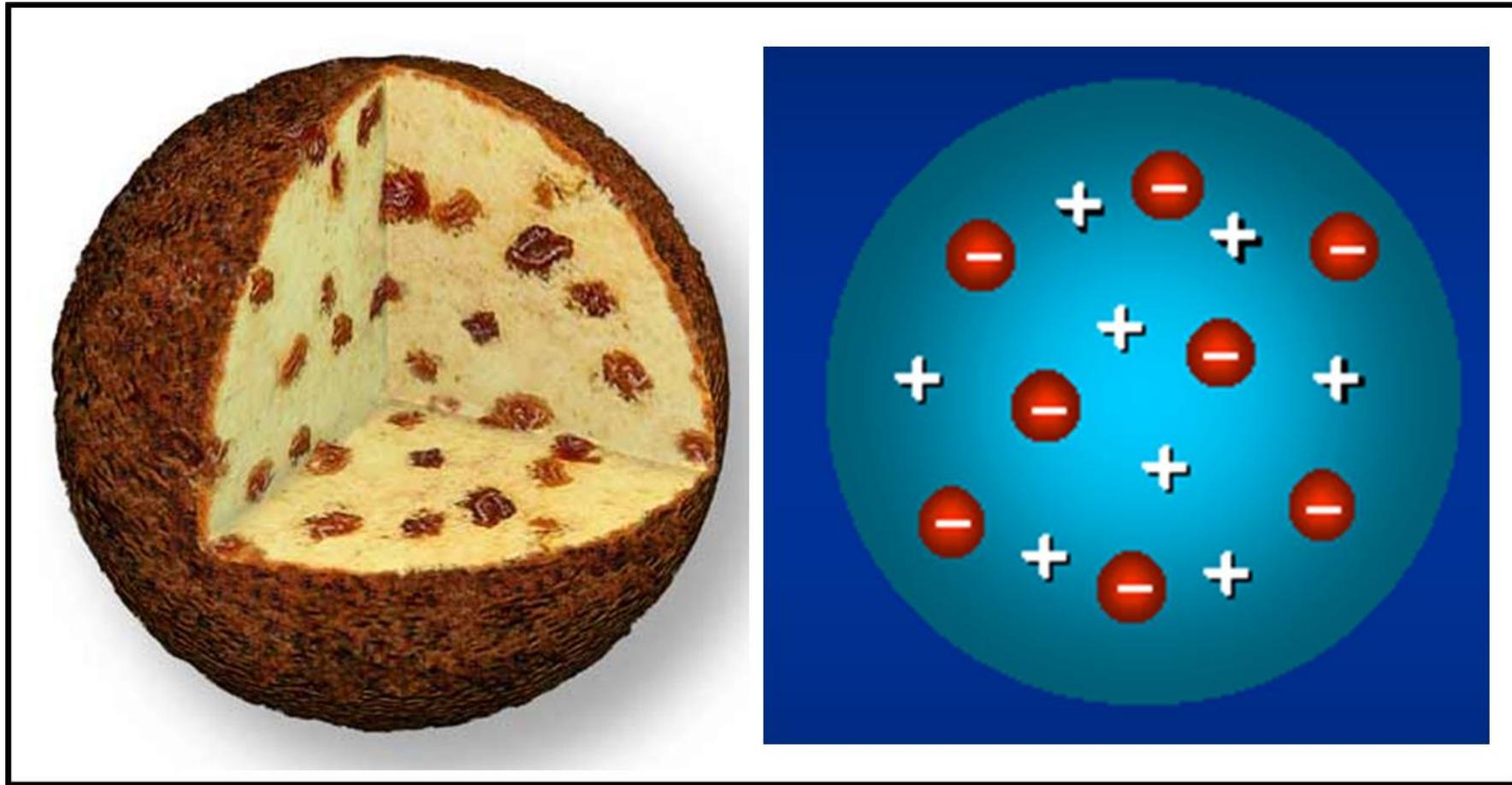
Gli elettroni (raggi catodici) fluivano da sx verso dx. Se veniva applicato soltanto un campo elettrico il fascio di elettroni subiva una deviazione verso il basso; se veniva applicato un campo magnetico, il fascio veniva deviato verso l'alto. Modulando l'intensità dei due campi Thomson riuscì a realizzare la condizione in cui il fascio non presentava deviazioni. Dai valori dell'intensità dei due campi egli riuscì a calcolare la velocità del fascio. Da questa velocità e dal valore della deviazione in presenza del solo campo elettrico arrivò a calcolare il rapporto e/m .



J.J. Thomson



Modello atomico di Thomson 1904



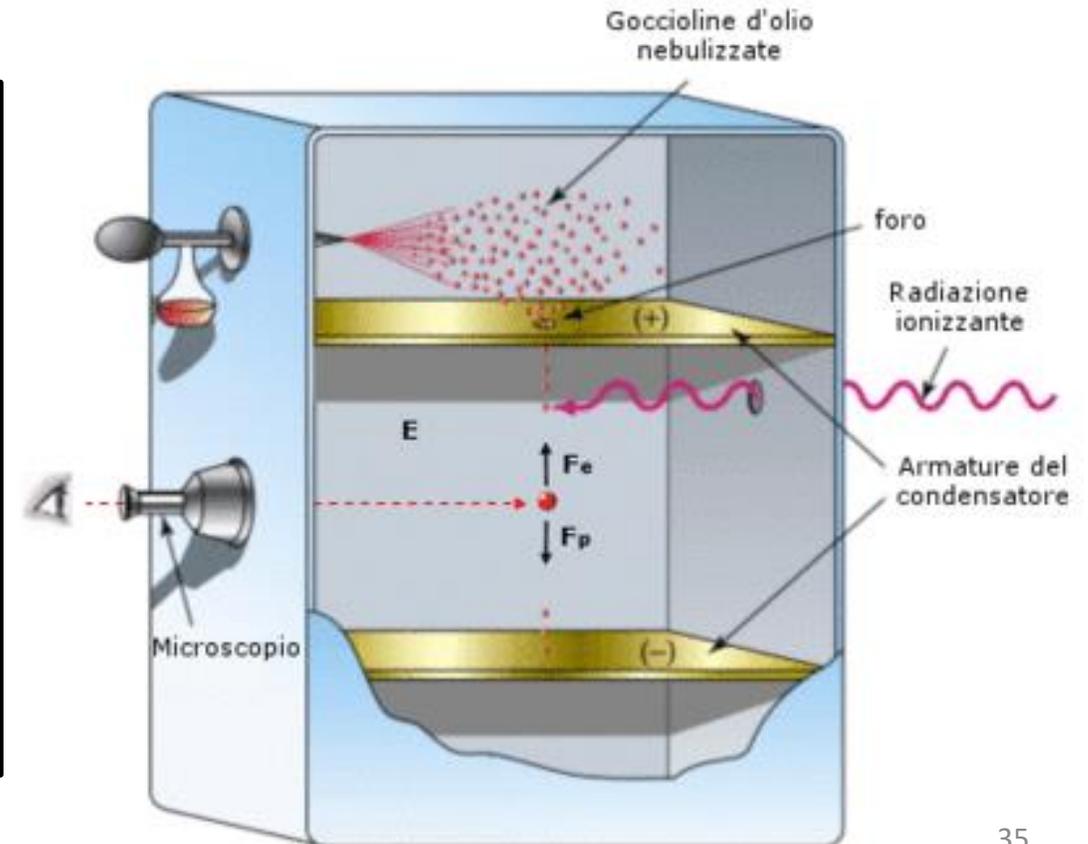
Elettroni = particelle cariche negativamente
Protoni = particelle cariche positivamente

Esperimento di Millikan (1911)

Millikan determinò le cariche possedute da varie goccioline e scoprì che esse erano sempre multipli interi di un preciso valore: 1.59×10^{-19} C (coulomb).

Carica di un singolo elettrone = 1.60×10^{-19} C (carica unitaria)

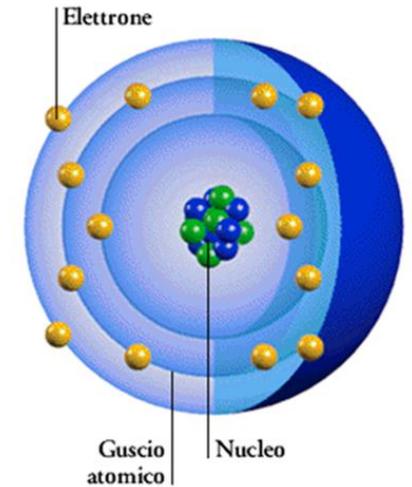
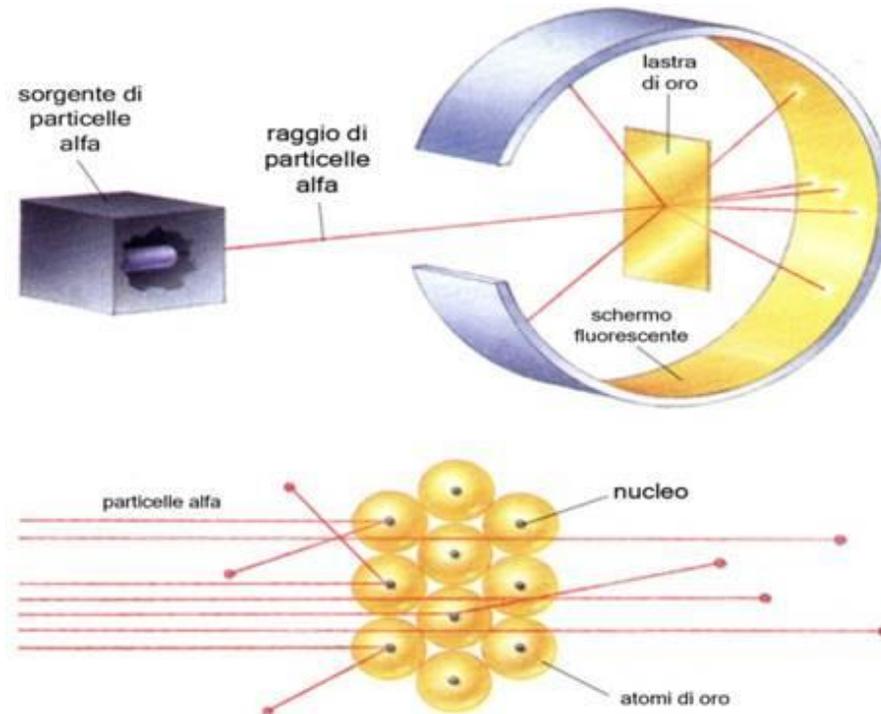
La velocità stazionaria di caduta della goccia dipende dalla forza peso (funzione della massa della goccia e quindi del suo volume) e dall'attrito con l'aria (funzione del suo raggio). Dalla misura della velocità stazionaria è possibile risalire al valore del raggio e quindi alla massa della goccia. L'intensità del campo elettrico necessario ad arrestare il moto della goccia moltiplicato per la carica elettrica della goccia deve eguagliare la forza peso.



Esperimento di Rutherford

Rutherford dimostrò attraverso un esperimento che la struttura dell'atomo era caratterizzata dal nucleo, carico positivamente, e dagli elettroni che occupavano la maggior parte dello spazio intorno.

Particelle α cariche positivamente
Nuclei di elio



Chadwick 1932

Chadwick nel 1932 scopre il neutrone.
Particella neutra.

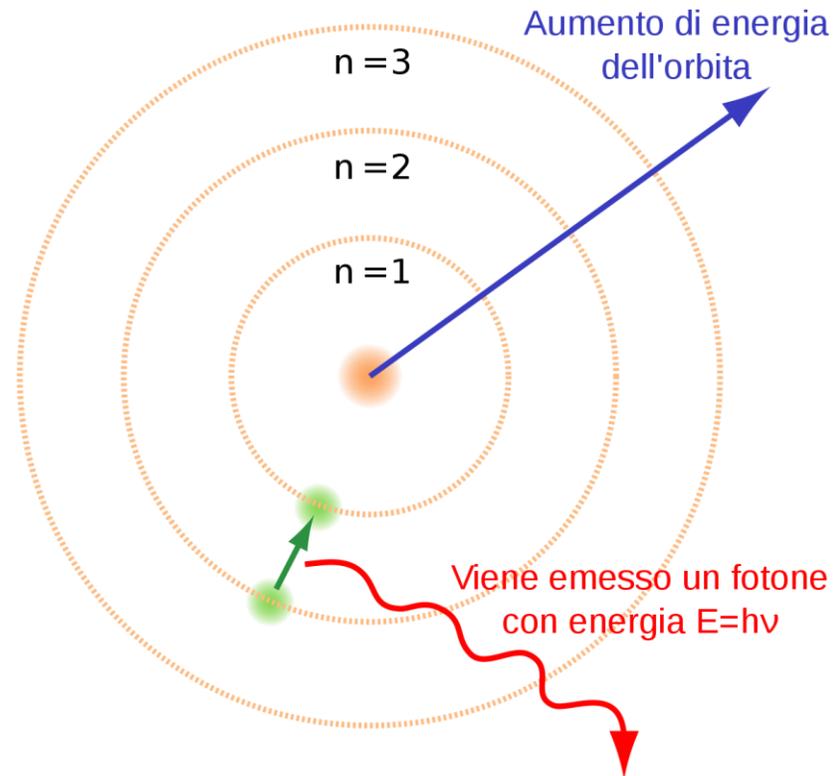
Rutherford riteneva che gli elettroni si muovessero lungo traiettorie circolari attorno al nucleo. Tale modello era in contrasto con le leggi di fisica classica: se l'elettrone si muoveva attorno ad un nucleo carico positivamente, esso avrebbe perso progressivamente energia sotto forma di radiazione elettromagnetica e sarebbe caduto sul nucleo percorrendo una traiettoria a spirale.

L'atomo di Bohr

1. l'elettrone percorre solo determinate orbite circolari dette orbite stazionarie;
2. all'elettrone sono permesse solo certe orbite, a cui corrispondono determinati valori di energia (quantizzata);
4. per passare da un'orbita a un'altra a livello energetico più elevato, l'elettrone assorbe energia;
5. per passare da un'orbita a un'altra a contenuto energetico minore, l'elettrone emette un fotone (energia) di appropriata frequenza;
6. l'energia del fotone emesso o assorbito corrisponde alla differenza di energia delle due orbite.

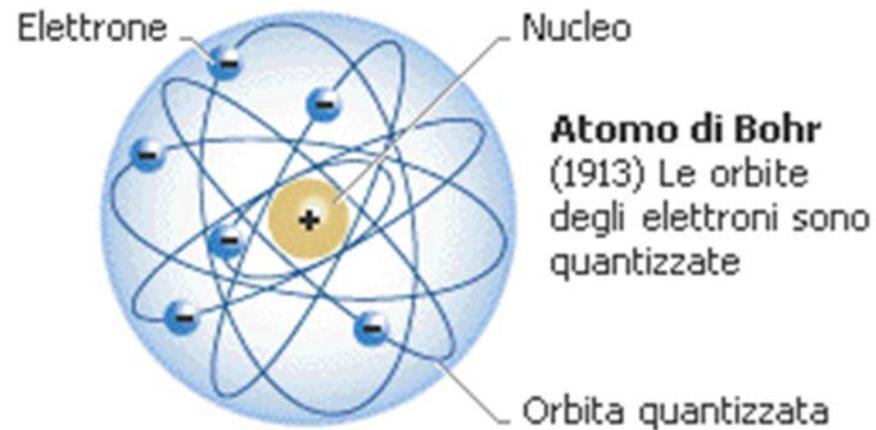
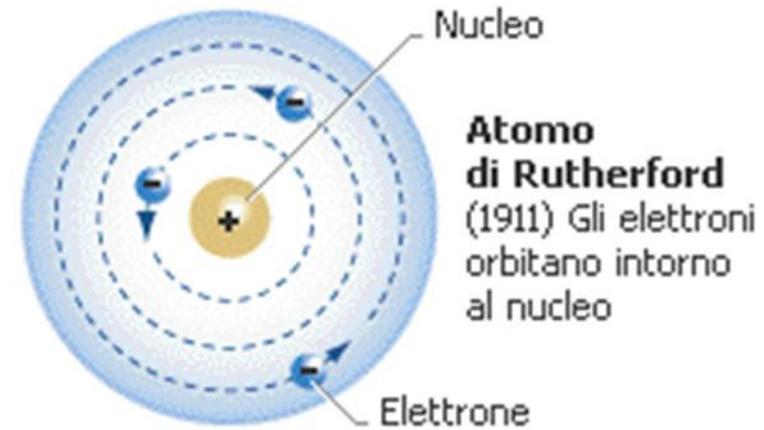
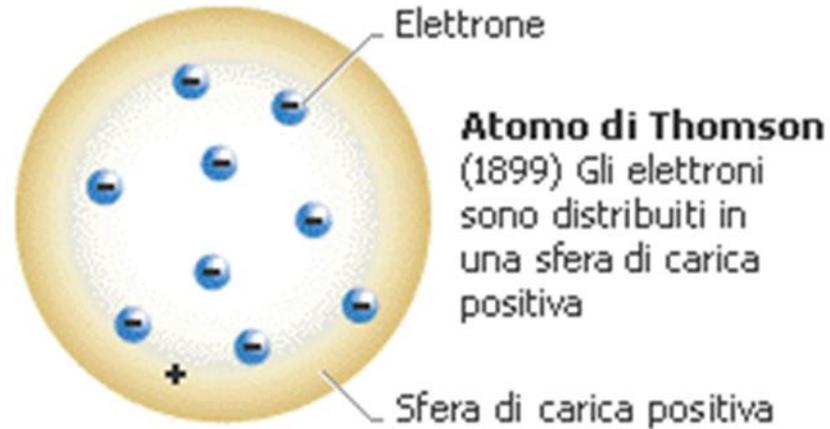
L'ATOMO DI BOHR

Le orbite degli elettroni in un atomo sono **quantizzate**.



Il modello atomico di Bohr presentò presto tutti i suoi limiti: non era applicabile ad atomi con molti elettroni e non spiegava gli spettri atomici in presenza di un campo magnetico.

Modelli atomici



Principio di indeterminazione di Heisenberg (1927)

E' impossibile determinare con assoluta precisione la posizione (x) ed il momento (q=m x v) di un elettrone.

L'incertezza sulla posizione, Δx , e quella sul momento, Δq , di un elettrone devono soddisfare la relazione:

$$\Delta p \Delta x \geq h / 4\pi$$



Heisenberg in 1927.

Più precisamente la posizione di un elettrone è determinata, meno precisamente è noto il momento, e viceversa --

Heisenberg, articolo sull'indeterminazione, 1927

La struttura della materia: atomi e molecole

Modello meccanico ondulatorio

L'elettrone non è più un corpuscolo materiale in movimento, ma una nuvola elettronica di carica uguale a quella di un elettrone, la cui densità varia in funzione dello spazio e del tempo.

La densità sarà tanto maggiore quanto maggiore è la probabilità che l'elettrone occupi quella regione dello spazio.

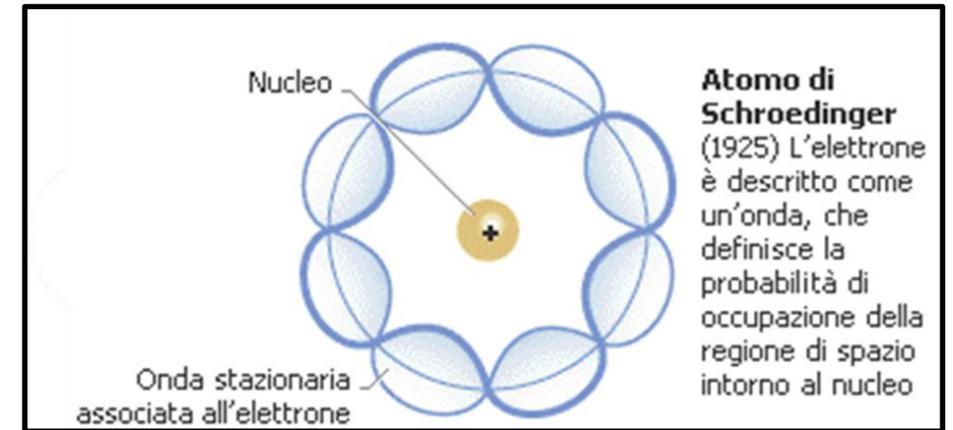
Per ogni elettrone all'interno di un atomo esistono soltanto particolari 'zone' funzioni d'onda, cui competono valori di energia ben definiti (condizione di quantizzazione dell'energia).

Il quadrato della funzione d'onda rappresenta la probabilità di trovare la particella nell'unità di volume e quindi la densità di probabilità.

Alla luce di questo il concetto di orbita viene sostituito da quello di orbitale.
Lo spazio occupato dall'elettrone è descritto mediante il concetto di orbitale.

L'orbitale di un elettrone è la regione di spazio dove la probabilità di trovarlo è massima.

L'orbitale è caratterizzato da una particolare terna di valori di n , l , m ed il numero quantico di **spin**.



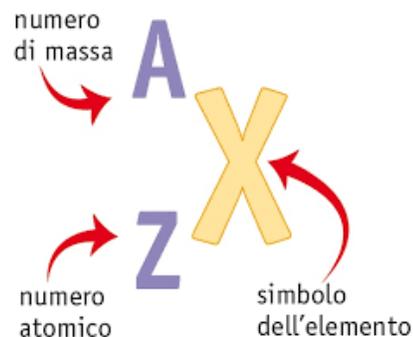
Numero atomico Z

Il numero di **protoni** presenti nel nucleo di un elemento si chiama **numero atomico** (Z).

In un atomo neutro vi è un uguale numero di elettroni.

Numero di massa A

Il **numero di massa** rappresenta il numero totale di **protoni e neutroni** presenti in un atomo.



$$\begin{aligned} \text{Protoni} + \text{Neutroni} &= 4 \\ 2 + \text{Neutroni} &= 4 \\ \text{Neutroni} &= 4 - 2 = 2 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \text{Protoni} + \text{Neutroni} &= 23 \\ 11 + \text{neutroni} &= 23 \\ \text{Neutroni} &= 23 - 11 = 12 \end{aligned}$$

Isotopi → atomi aventi lo stesso Z, ma diverso A

I numeri quantici

- 1- Numero quantico principale (**n**), specifica il livello energetico di un elettrone nell'atomo: individua l'energia dell'orbitale;
- 2- Numero quantico secondario (**l**) o angolare indica la **forma** dell'orbitale in cui si trova un elettrone (s, p, d, f);
- 3- Numero quantico magnetico (**m**), specifica l'**orientamento** dell'orbitale; numero orbitali per tipo.
- 4- Numero quantico magnetico di spin (**m_s**), indica il verso di rotazione dell'elettrone in un orbitale con i valori +1/2 e -1/2.

I numeri quantici

1- Il numero quantico principale **n** ($n = 1, 2, 3, \dots$, a infinito) definisce il livello energetico dell'elettrone che è proporzionale alla distanza dal nucleo.

I livelli sono $n=1, n=2, n=3, n=4, n=5, n=6, n=7$.

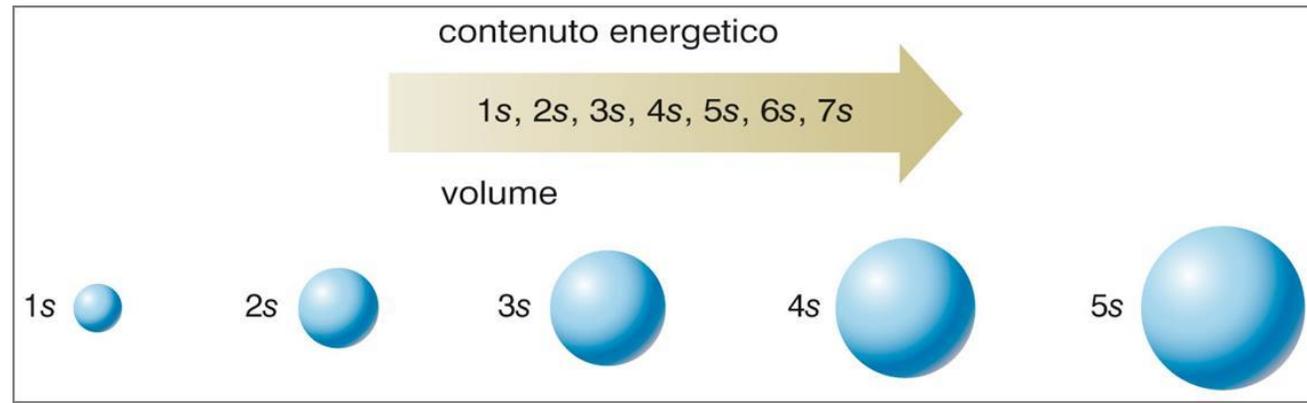
Questi sette livelli di energia sono in grado di descrivere la struttura elettronica di tutti gli elementi della tavola periodica.

2- Il numero quantico secondario **l** ($l = 0, 1, \dots, n-1$) determina le caratteristiche geometriche dell'orbitale. Per es., per $n=1, l=0$; per $n=2, l=0,1$ e così via...

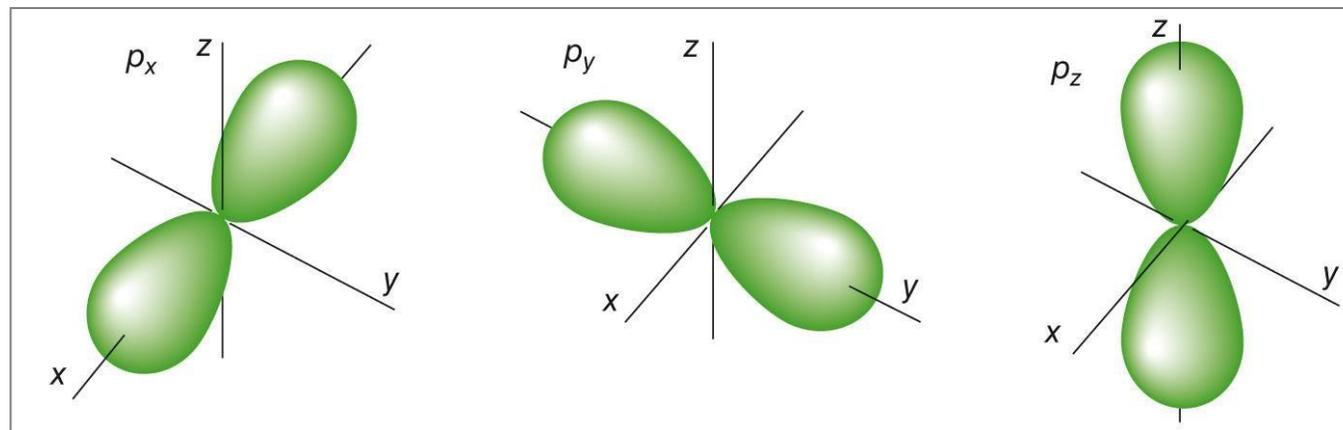
valori di l	0	1	2	3
orbitale:	s	p	d	f

La struttura della materia: atomi e molecole

La superficie di contorno degli orbitali s è una sfera il cui volume aumenta all'aumentare del numero quantico principale n .

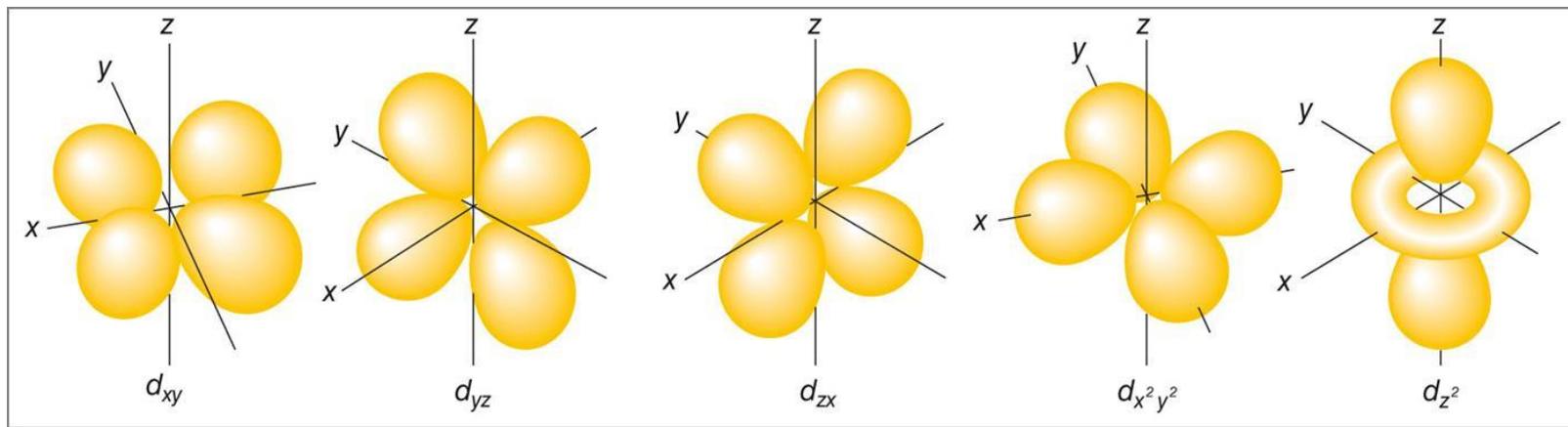


La superficie di contorno degli orbitali p è un doppio lobo che si espande lungo gli assi x , y e z .

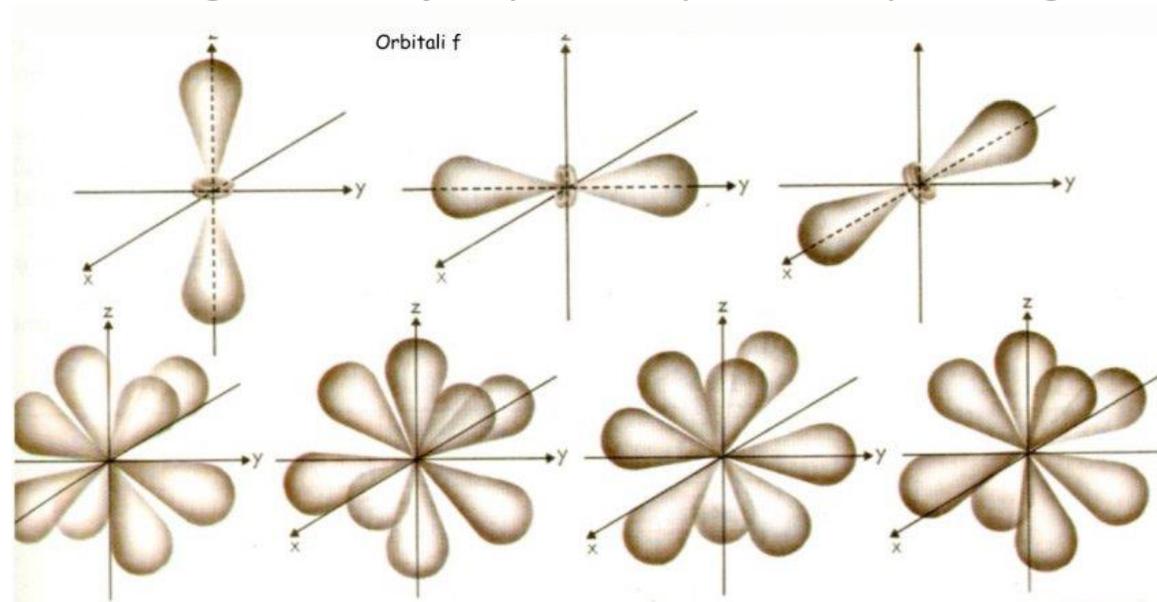


La struttura della materia: atomi e molecole

La superficie di contorno degli orbitali d è a quattro lobi



La superficie di contorno degli orbitali f è più complicata rispetto agli orbitali s , p e d .



I numeri quantici

3- Il **numero quantico magnetico** m ($m = -l, 0, +l$) definisce quanti orbitali della stessa forma, ma con orientazione diversa, possono coesistere in un sottolivello.

4- Il **numero quantico di spin** è il quarto numero quantico. Esso possiede soltanto due valori $-1/2$ e $+1/2$.

Ciascun valore corrisponde a una rotazione in senso orario o antiorario dell'elettrone; esso infatti si comporta come se fosse una piccola trottola con proprietà magnetiche.

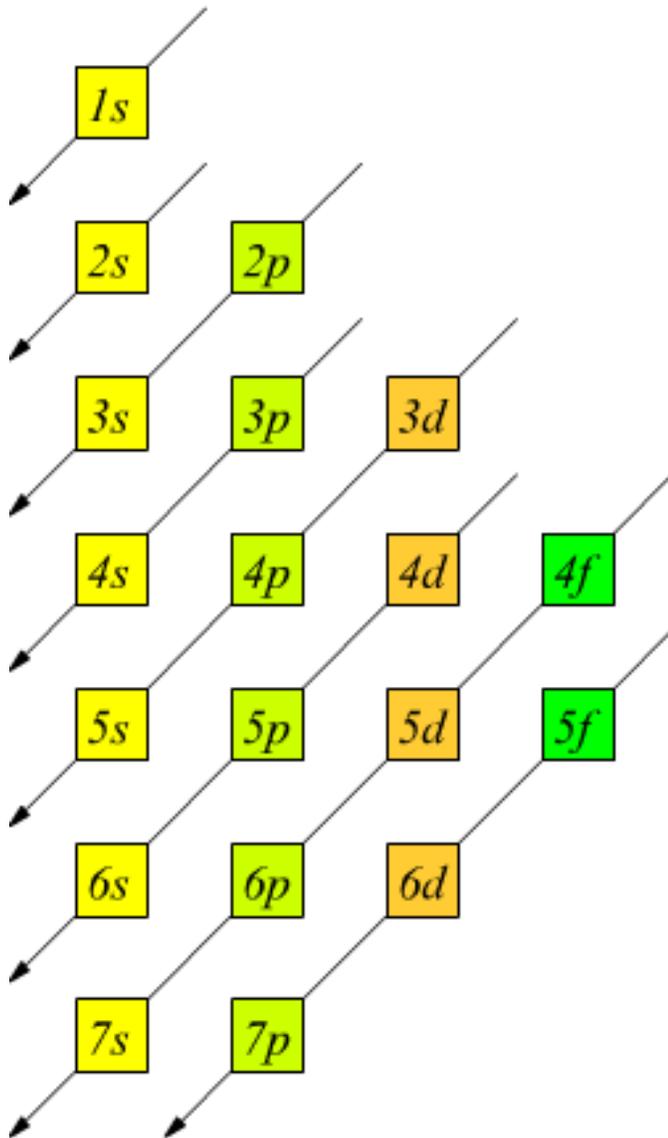
$$\uparrow +\frac{1}{2} \quad \downarrow -\frac{1}{2}$$

Il riempimento degli orbitali

Gli elettroni si dispongono intorno al nucleo rispettando tre regole:

- 1- Il principio dell'aufbau, secondo il quale gli elettroni si collocano dapprima in orbitali con minore energia a cominciare dalla posizione più vicina al nucleo.
- 2- Il **principio di esclusione di Pauli**, secondo cui due elettroni che occupano lo stesso orbitale hanno spin opposto.
- 3- La **regola della massima molteplicità** o **regola di Hund** secondo cui se ci sono più orbitali della stessa energia (DEGENERI), prima si colloca un elettrone su ciascun orbitale vuoto e poi si completano gli orbitali semipieni. Ciò consente agli elettroni di trovarsi alla massima distanza possibile, minimizzando la repulsione reciproca.

La struttura della materia: atomi e molecole



La notazione con cui si scrivono quali sono gli orbitali occupati e la misura in cui lo sono si chiama **configurazione elettronica**.

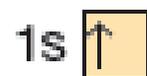
Un valido aiuto nella ‘costruzione’ della configurazione elettronica viene dalla cosiddetta regola della diagonale.

La configurazione elettronica di un atomo viene rappresentata graficamente **indicando gli elettroni con delle freccette**. Se invece la si vuole esprimere **simbolicamente**, si indica il numero del livello di energia seguito dal simbolo del sottolivello e si pone a esponente di quest’ultimo il numero totale di elettroni contenuti (per esempio la notazione $1s^2$ significa **due elettroni nell’orbitale 1s** e si legge “uno esse due”).

Il riempimento degli orbitali

Costruiamo alcune configurazioni elettroniche:

L'**idrogeno** ha un solo elettrone ($Z=1$)



idrogeno

che si trova nell'orbitale a più bassa energia e cioè nell' $1s$.

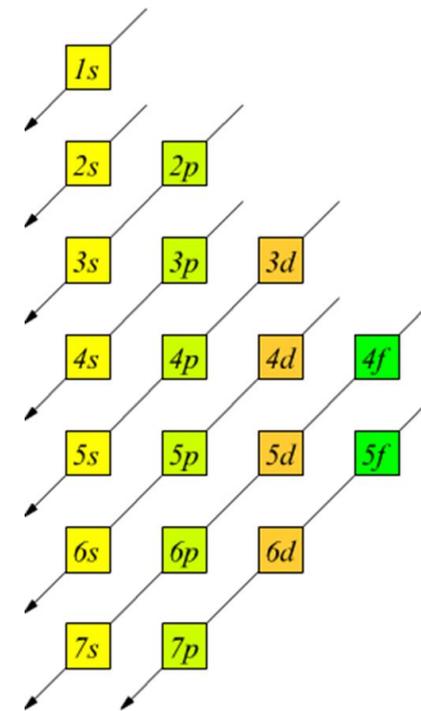
La sua configurazione elettronica è pertanto $1s^1$.

L'**elio** ha due elettroni ($Z=2$), che si collocano nello stesso orbitale ($1s$),



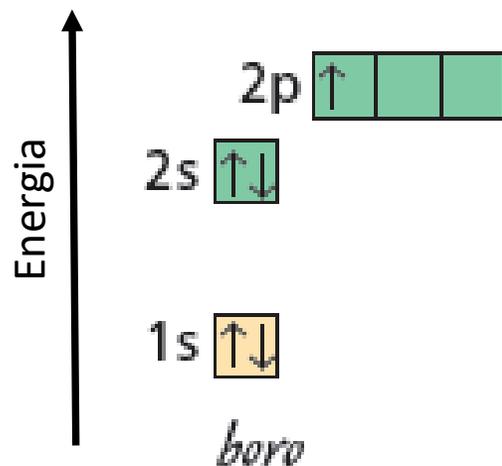
elio

ma con spin opposto. Con l'elio, il primo livello energetico è pieno, cioè completamente occupato; la configurazione elettronica è $1s^2$.

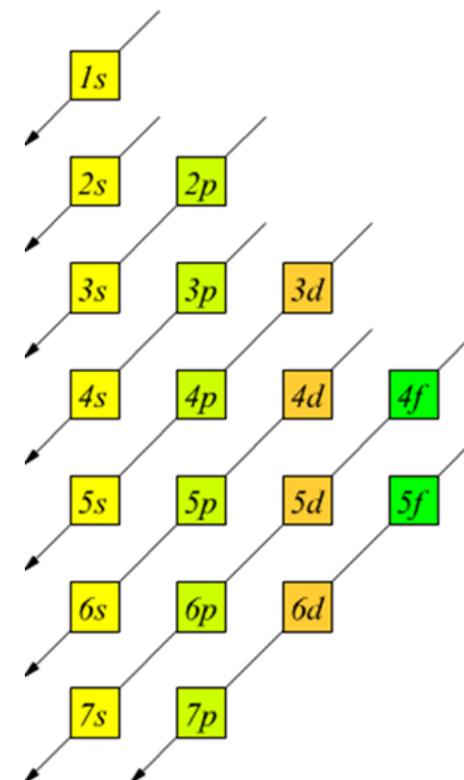


Il riempimento degli orbitali

Il **boro** ha cinque elettroni ($Z=5$).

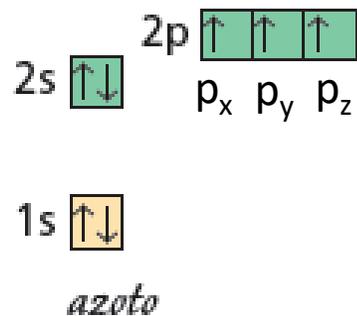


La configurazione elettronica è $1s^2 2s^2 2p^1$.

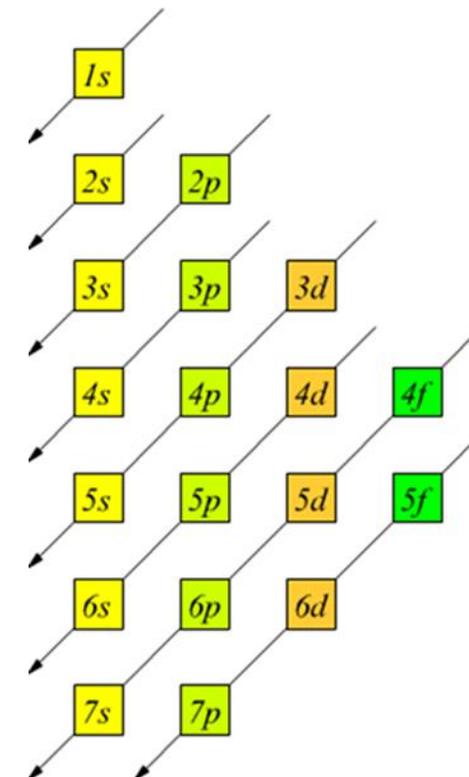
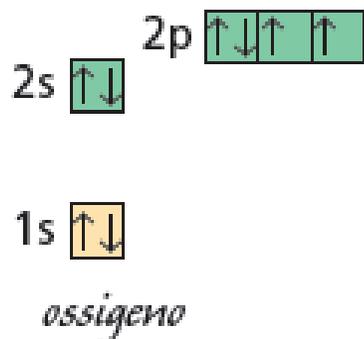


La struttura della materia: atomi e molecole

L'**azoto** ha sette elettroni ($Z=7$), due nell' $1s$, due nel $2s$ e uno in ciascuno dei tre orbitali $2p$, con configurazione elettronica $1s^2 2s^2 2p^3$. Gli elettroni del $2p$ hanno spin paralleli per la regola di Hund.



L'**ossigeno** ha otto elettroni ($Z=8$) e quindi ha un elettrone in più rispetto alla configurazione dell'azoto. Il nuovo elettrone andrà a saturare l'orbitale $2p_x$, per cui la configurazione risulta $1s^2 2s^2 2p^4$.



La struttura della materia: atomi e molecole

L'ordine di riempimento degli orbitali procede poi regolarmente seguendo le priorità indicate dalla regola della diagonale.

Quando si devono utilizzare gli orbitali **d** ed **f**, la situazione viene complicata dal fatto che alcuni sottolivelli di differenti livelli hanno un contenuto energetico **simile**. Questo genera il passaggio di un elettrone verso la **situazione energeticamente più favorita**.

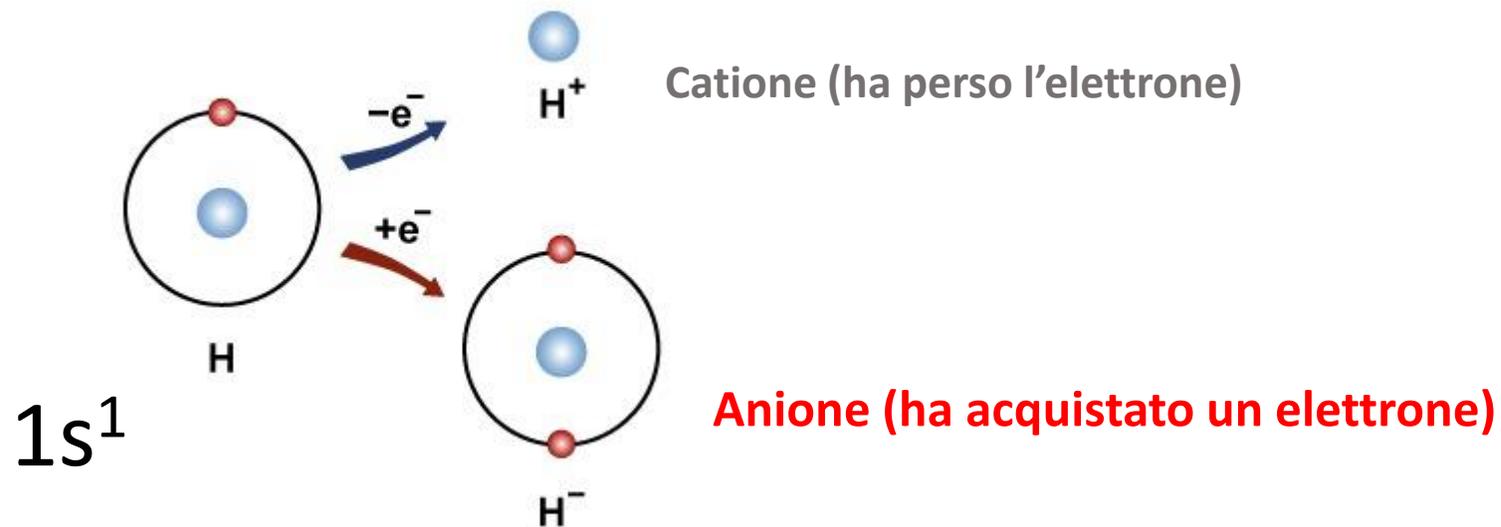
Nel **cromo**, per esempio, gli elettroni dei livelli più esterni sono nella configurazione **$3d^5 4s^1$** , invece che **$3d^4 4s^2$** come potremmo attenderci dalla regola della diagonale.

Ciò si spiega con il fatto che un **sottolivello occupato completamente** o **occupato esattamente a metà (semioccupato)** rappresenta una situazione **energeticamente più favorevole** rispetto a quella in cui nel sottolivello è presente un numero di elettroni che non permette nessuna di tali configurazioni.



La struttura della materia: atomi e molecole

Una molecola o un atomo elettricamente carichi vengono detti **ioni**. Poiché hanno perso o guadagnato uno o più elettroni rispetto all'atomo neutro, il processo di perdita/acquisizione viene detto **ionizzazione**.



La ionizzazione viene eseguita solitamente tramite applicazione di alta energia agli atomi, in forma di potenziale elettrico o radiazione. Gli ioni caricati negativamente sono conosciuti come **anioni** (che sono attratti dagli anodi) e quelli caricati positivamente sono chiamati **cationi** (e sono attratti dai catodi). Gli ioni possono essere monovalenti (indicati con un + o -), bivalenti (con due + o -) ecc. e si dividono in monoatomici e poliatomici.

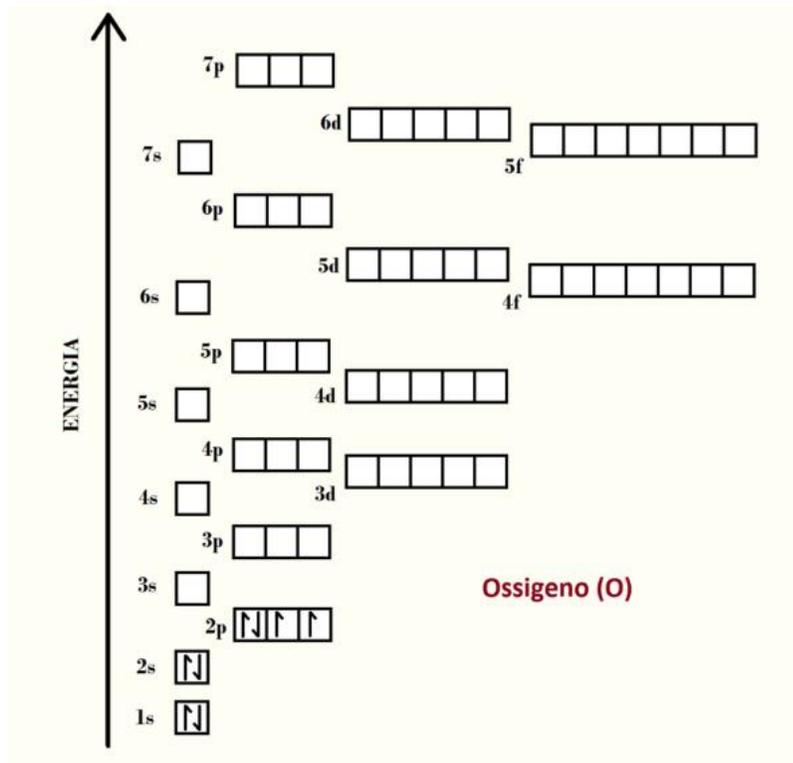
La struttura della materia: atomi e molecole

Configurazione elettronica di ioni

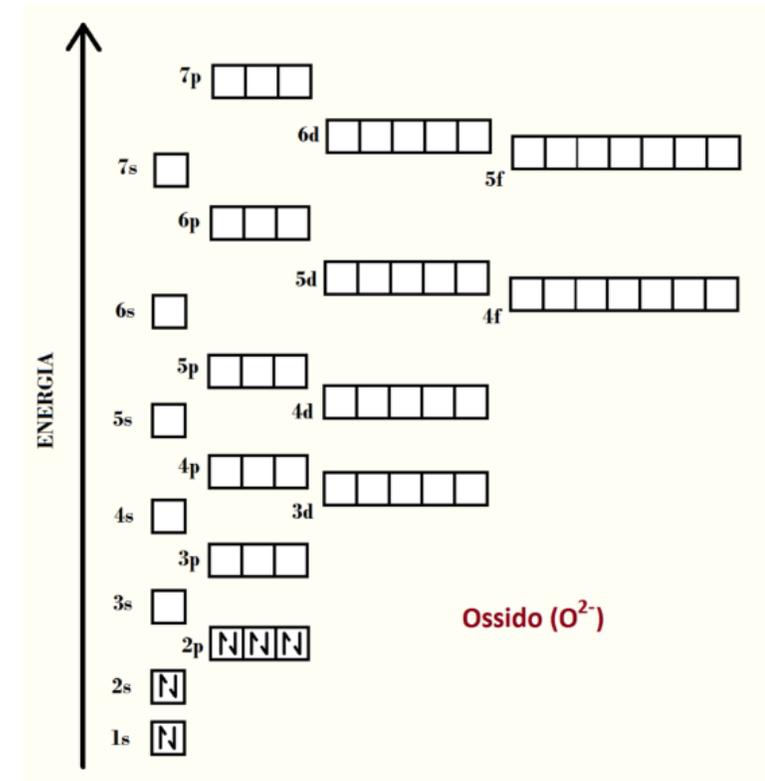
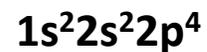
Ossigeno **O** e quella dello ione ossido **O²⁻**

Il numero atomico dell'ossigeno è 8, per lo ione O²⁻ gli elettroni saranno 8+2, ovvero 10

Per gli anioni gli elettroni vanno sommati



Ossigeno (O)



Ossido (O²⁻)

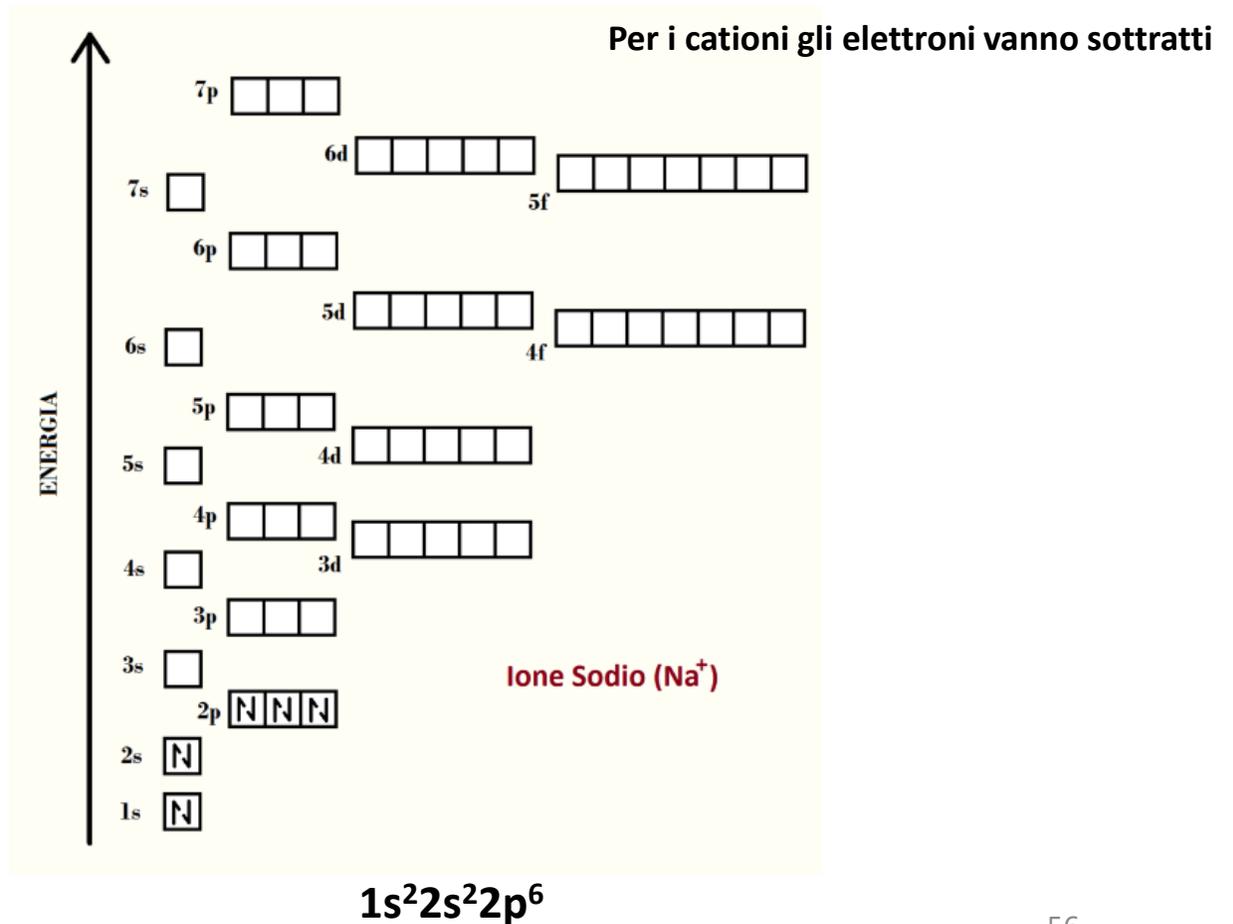
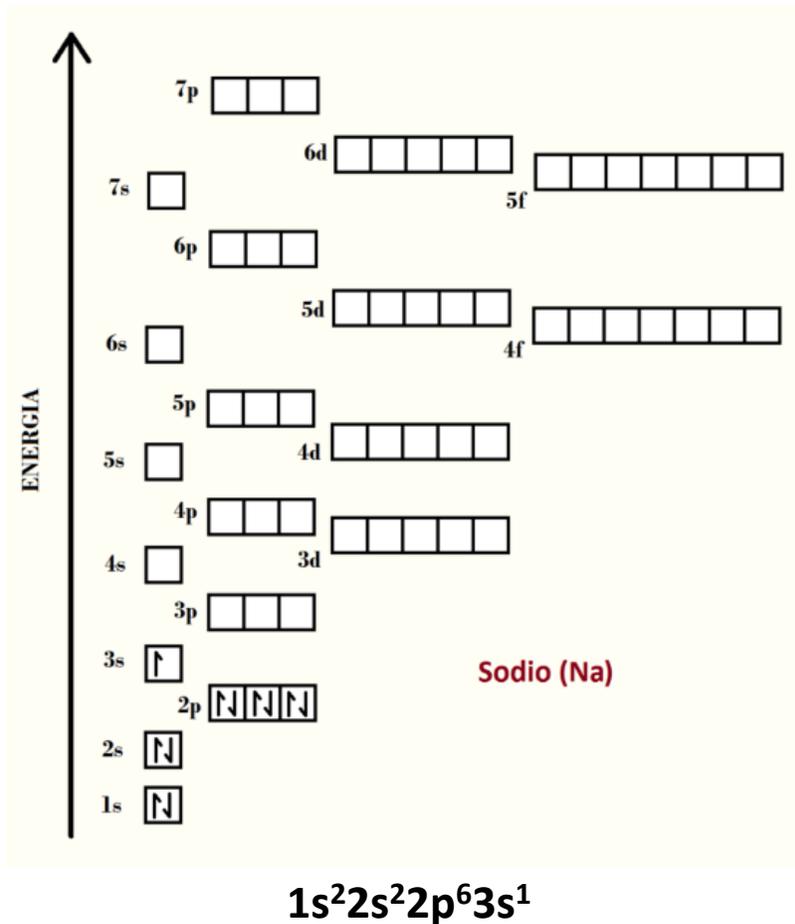


La struttura della materia: atomi e molecole

Configurazione elettronica di ioni

Sodio Na e quella dello ione Na⁺

Il numero atomico del sodio è 11, per lo ione Na⁺ gli elettroni saranno 11-1, ovvero 10



Il guscio elettronico più esterno è chiamato **guscio di valenza**.

Elettroni più esterni → elettroni di valenza



Reazioni chimiche

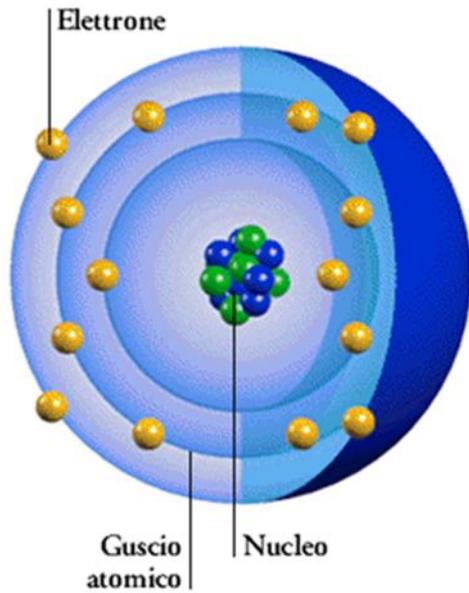
Le proprietà chimiche di un elemento sono funzioni della sua configurazione elettronica.

Paramagnetismo e diamagnetismo

Se la configurazione elettronica prevede almeno un elettrone **spaiato** si hanno elementi **paramagnetici**, se non ve ne sono si hanno elementi **diamagnetici**.

Gli elementi **paramagnetici** vengono attratti da un campo magnetico; gli elementi **diamagnetici** ne vengono debolmente respinti.

La struttura della materia: atomi e molecole



Il raggio di un atomo è compreso tra i 30 e i 150 picometri (pm)
 $1 \text{ pm} = 0.000000000001 \text{ metri} = 10^{-12} \text{ m}$

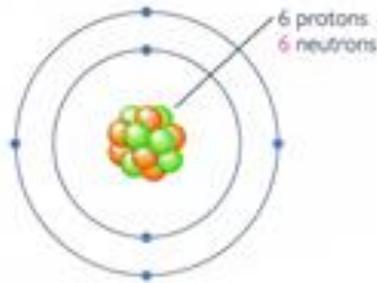
Lo spazio occupato dal nucleo può essere paragonato



nucleo

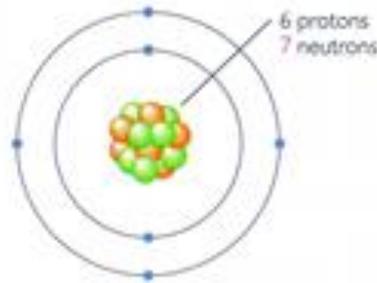
Isotopi

^{12}C



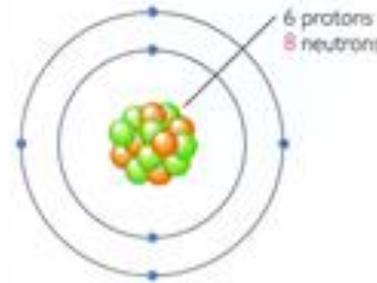
Carbon-12
(6P + 6N)
Atomic weight = 12

^{13}C



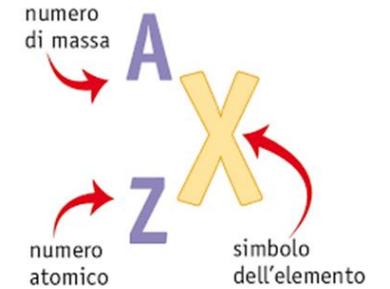
Carbon-13
(6P + 7N)
Atomic weight = 13

^{14}C

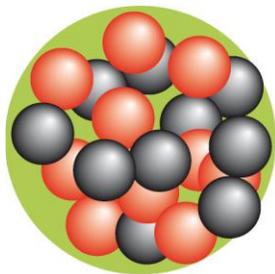


Carbon-14
(6P + 8N)
Atomic weight = 14

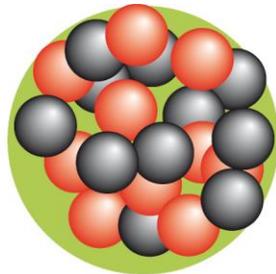
- + Proton (atomic mass = 1)
- + Neutron (atomic mass = 1)
- Electron (atomic mass = 0)



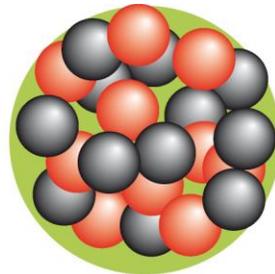
Numero atomico $Z=6$
Numero di massa $A=12, A=13, A=14$
Rispettivamente: 6, 7 e 8 neutroni.



Neon-20
($^{20}_{10}\text{Ne}$)



Neon-21
($^{21}_{10}\text{Ne}$)



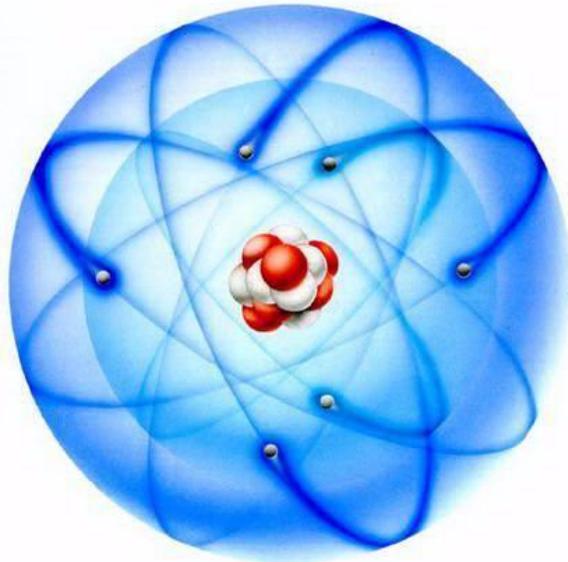
Neon-22
($^{22}_{10}\text{Ne}$)

Numero atomico $Z=10$
Numero di massa $A=20, A=21, A=22$
Rispettivamente: 10, 11 e 12 neutroni.

La struttura della materia: atomi e molecole

Una proprietà fondamentale dell'atomo è la sua massa.

Le masse delle particelle elementari misurate in kilogrammi risultano essere:

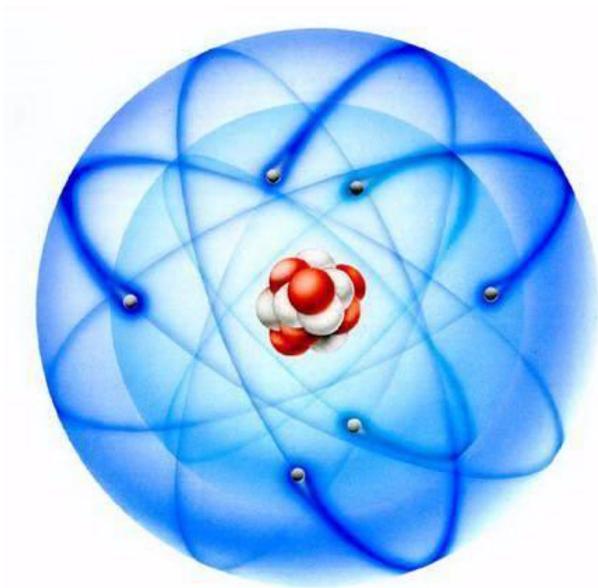


Protone: 1.672623×10^{-27} kg

Neutrone: 1.674929×10^{-27} kg

Elettrone: $9.1093690 \times 10^{-31}$ kg

La massa del protone è 1836 volte maggiore di quella dell'elettrone!!!

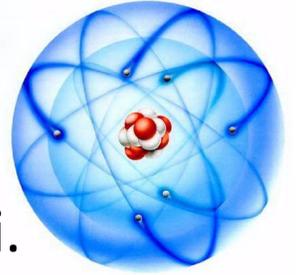


La massa di un atomo dovrebbe essere data dalla somma delle masse di tutte le particelle subatomiche che lo costituiscono.

In realtà il valore risulta inferiore a causa del fenomeno noto come **difetto di massa**.

Quando i nucleoni (protoni e neutroni) si legano insieme per la costruzione del nucleo dell'atomo, liberano una grande quantità di energia. Questo comporta la diminuzione della massa secondo l'equazione $E=mc^2$ (m è la contrazione di massa e c la velocità della luce).

La struttura della materia: atomi e molecole



Le masse degli atomi misurate in kilogrammi o in grammi sono valori molto piccoli.

Ad esempio, la massa di un atomo di carbonio-12 corrisponde a $1,99 \cdot 10^{-26}$ kg.

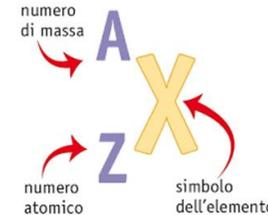
E' più conveniente perciò usare **masse atomiche relative**, cioè masse atomiche che sono rapportate ad una grandezza di riferimento.

A questo scopo è stata introdotta un'opportuna massa di riferimento che è **l'unità di massa atomica u o uma** (chiamata anche dalton) che corrisponde alla dodicesima parte della massa di un atomo di carbonio-12 ovvero a $1,66 \cdot 10^{-27}$ Kg.

La massa atomica relativa di un atomo è determinata per confronto con l'unità di massa atomica e viene espressa in u.

Pertanto: la massa atomica relativa indica quante volte la massa di un atomo è maggiore rispetto a un dodicesimo della massa del carbonio-12.

La struttura della materia: atomi e molecole



Le masse atomiche sono elencate nella tavola periodica. La massa atomica di un atomo di ossigeno è 16 volte l'unità di massa atomica, cioè 16u, mentre la massa di un atomo di fluoro è circa 19 volte l'unità di massa atomica, cioè 19u.

In realtà i valori elencati nella tavola periodica tengono conto anche dell'abbondanza relativa dei vari isotopi presenti in natura:

Ad esempio: il cloro è sempre costituito dal 75.8% di ^{35}Cl (34.969 u) e dal 24.5% da ^{37}Cl (36.966 u).

Operando attraverso una media pesata dei due isotopi si ottiene la massa atomica relativa:

$$0.758 \times 34.969 = 26.50$$

$$0.245 \times 36.966 = 9.05$$

Dalla somma si ottiene 35.45 u che corrisponde alla massa atomica del cloro.

16 O OXYGEN 16.00	17 F FLUORINE 18.998	18 Ne NEON 20.180
32 S SULPHUR 32.06	35 Cl CHLORINE 35.45	36 Ar ARGON 39.948
78.971	79.904	83.798

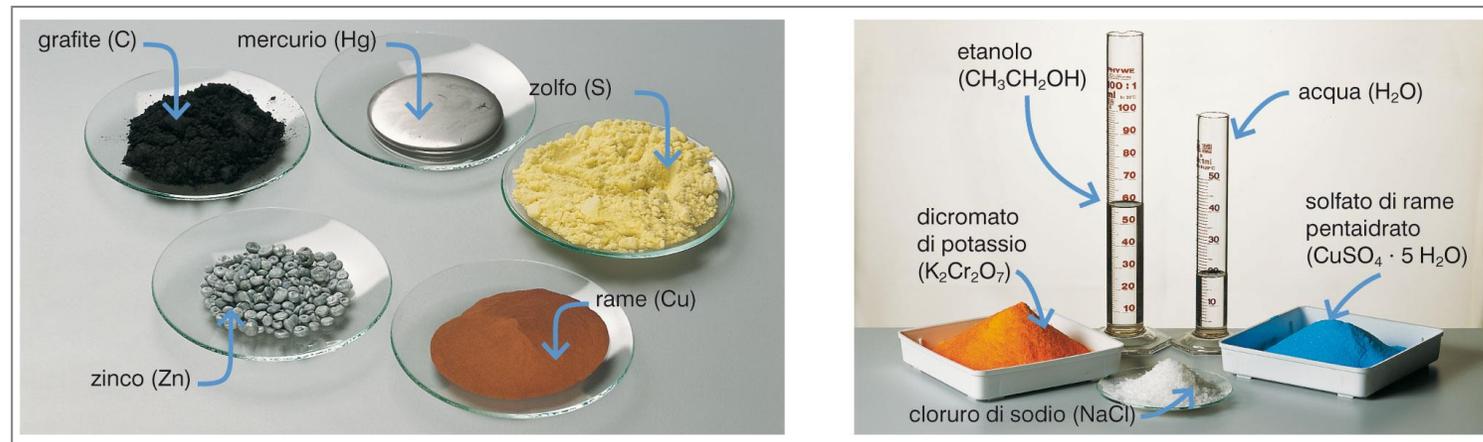
La struttura della materia: atomi e molecole

Il valore dell'unità di massa atomica, $1 \text{ u} = 1,66 \times 10^{-27} \text{ kg}$, è estremamente piccolo per essere misurato con gli strumenti a noi conosciuti.

È stato perciò necessario trovare una grandezza che mettesse in relazione gli atomi e le molecole con le grandezze misurabili con le bilance.

Questa grandezza è la **mole** (mol).

La **massa molare (MM)** che si misura in g/mol, è la massa di una mole.



La struttura della materia: atomi e molecole

La massa di **una mole** di un elemento (o di una molecola) è **uguale** alla **sua massa atomica** (o molecolare) espressa in grammi/mole.

Una mole di...	...corrisponde a...
H	1.0079 g
H ₂	2 g
O	15.999 g
O ₂	32 g
¹² C	12.011 g
H ₂ O	18 g

Una mole è la quantità di sostanza che contiene un numero di particelle elementari uguali al numero di atomi contenuti in 12 g di ¹²C.

Avogadro si pose il problema di quante particelle elementari fossero contenute in una mole e lo risolse tramite il rapporto:

1 g mol^{-1} (massa molare) / $1.660540 \times 10^{-24} \text{ g}$ (massa atomica) = $6.022 \cdot 10^{23}$ particelle/mol
è noto come **numero** o **costante di Avogadro**.

Il numero di Avogadro è il fattore che permette di passare dalla scala atomica microscopica alla scala macroscopica.

In chimica si ragiona in moli.

Conoscendo la **massa molare** è possibile convertire i **grammi** in **moli** e viceversa attraverso le relazioni:

$$1- \text{Moli (mol)} = \text{massa (g)} / \text{MM (g/mol)}$$

$$2- \text{massa (g)} = \text{moli (mol)} \times \text{MM (g/mol)}$$

Relazioni inverse

$$3- \text{MM (g/mol)} = \text{massa (g)} / \text{moli (mol)}$$

Esercizi numerici:

Calcolare la massa molecolare dell'acqua H₂O.

$$2 \text{ atomi di H} = 2 \times (1.0079 \text{ g/mol}) = 2.0158 \text{ g/mol}$$

$$1 \text{ atomo di O} = 1 \times (15.9994) = 15.9994 \text{ g/mol}$$

$$\text{massa molecolare H}_2\text{O} = 18.01 \text{ g/mol}$$

$$1 \text{ mole di H}_2\text{O pesa } 18.01 \text{ g}$$

Calcolare la massa molecolare di CH₃CH₂Cl.

$$2 \text{ atomi di C} = 2 \times (12,01 \text{ g/mol}) = 24,02 \text{ g/mol}$$

$$5 \text{ atomi di H} = 5 \times (1,01 \text{ g/mol}) = 5,05 \text{ g/mol}$$

$$1 \text{ atomo di Cl} = 1 \times (35,45 \text{ g/mol}) = 35,45 \text{ g/mol}$$

$$\text{massa molecolare CH}_3\text{CH}_2\text{Cl} = 64,52 \text{ g/mol}$$

La struttura della materia: atomi e molecole

Esercizi numerici:

Calcolare la massa molecolare di SO_2 e le moli contenute in 2.378 g di tale composto.

MA = massa atomica

MA (O) = 16 g/mol MA (S) = 32.06 g/mol

$$2 \text{ atomi di O} = 2 \times (16 \text{ g/mol}) = 32 \text{ g/mol}$$

$$1 \text{ atomo di S} = 1 \times (32.06 \text{ g/mol}) = 32.06 \text{ g/mol}$$

Massa Molecolare (somma delle masse atomiche) $\text{SO}_2 = 64.06 \text{ g/mol}$

$$1\text{- Moli (mol)} = \text{massa (g)} / \text{MM (g/mol)}$$

$$\text{Moli (mol)} = 2.378 \text{ g} / 64.06 \text{ g/mol}$$

$$\text{Moli} = 3.71 \times 10^{-2} \text{ mol}$$

$$1\text{- Moli (mol)} = \text{massa (g)} / \text{MM (g/mol)}$$

$$2\text{- massa (g)} = \text{moli (mol)} \times \text{MM (g/mol)}$$

$$3\text{- MM (g/mol)} = \text{massa (g)} / \text{moli (mol)}$$

Esercizi numerici:

- 1- Moli (mol) = massa (g) / MM (g/mol)
- 2- massa (g) = moli (mol) x MM (g/mol)
- 3- MM (g/mol) = massa (g) / moli (mol)

Calcolare quante molecole di fosgene sono presenti in 0.2374 g di fosgene (COCl₂).

Sappiamo che 1 mole contiene 6.022x10²³ particelle

$$1- \text{Moli (mol)} = \text{massa (g)} / \text{MM (g/mol)}$$

$$\text{MA(O)} = 16 \text{ g/mol} \quad \text{MA (C)} = 12.011 \text{ g/mol} \quad \text{MA (Cl)} = 35.453 \text{ g/mol}$$

$$\text{MM COCl}_2 = 16.000 + 12.011 + (2 \times 35.453) = 98.917 \text{ g/mol}$$

$$\text{Moli (mol)} = 0.2374 \text{ g} / 98.917 \text{ g/mol}$$

$$\text{Moli} = 2.4 \times 10^{-3} \text{ mol} = 0.0024 \text{ mol}$$

$$\text{Proporzione} \quad 1 \text{ mole} : 6.022 \times 10^{23} \text{ molecole} = 2.4 \times 10^{-3} \text{ mol} : X$$

$$X \text{ molecole} = (6.022 \times 10^{23} \text{ molecole} \times 2.4 \times 10^{-3} \text{ mol}) / 1 \text{ mol}$$

$$X \text{ molecole} = 14.45 \times 10^{20} \text{ molecole di COCl}_2$$

Esercizi numerici:

Calcolare quante molecole di fosgene sono presenti in 0.2374 g di fosgene (COCl_2).

Quanti atomi di carbonio, ossigeno e cloro sono presenti in 0.2374 g di fosgene (COCl_2).

Sappiamo che 1 mole contiene 6.022×10^{23} particelle

Proporzione 1 mole : 6.022×10^{23} molecole = 2.4×10^{-3} mol : X

X molecole = $(6.022 \times 10^{23} \text{ molecole} \times 2.4 \times 10^{-3} \text{ mol}) / 1 \text{ mol}$

X molecole = 14.45×10^{20} molecole di COCl_2

Nella molecola di fosgene sono presenti:

1 mole di atomi di C

1 mole di atomi di O

2 moli di atomi di Cl

X atomi di C e O = 14.45×10^{20} atomi

X atomi di Cl = $2 \times 14.45 \times 10^{20}$ atomi = 28.90×10^{20} atomi

Composizione percentuale di un sistema

Dato un sistema a più componenti, la sua composizione può essere espressa in percentuale.

Se indichiamo con q_i le parti di un generico componente 'i' e con q_t le parti totali del sistema, la sua composizione percentuale (%) si ricava applicando la relazione:

$$i \% = (q_i/q_t) \times 100$$

Supponiamo di avere un sistema a tre componenti (A, B, C), le cui quantità, espresse in parti siano:

$$A = 20 \text{ parti} \quad B = 15 \text{ parti} \quad C = 3 \text{ parti} \quad \text{Parti totali del sistema: } 20+15+3=38$$

La composizione % del sistema risulta:

$$A\% = (20/38) \times 100 = 52,63\%$$

$$B\% = (15/38) \times 100 = 39,47\%$$

$$C\% = (3/38) \times 100 = 7,90\%$$

Esercizi numerici:

Calcolare la percentuale degli elementi nel sale KMnO_4 .

$$\text{MA}(\text{O}) = 16 \text{ g/mol} \quad \text{MA}(\text{K}) = 39.10 \text{ g/mol} \quad \text{MA}(\text{Mn}) = 54.94 \text{ g/mol}$$

$$\text{MM } \text{KMnO}_4 = 39.10 + 54.94 + (4 \times 16) \text{ g/mol} = 158.04 \text{ g/mol}$$

$$\text{massa (g)} = \text{moli (mol)} \times \text{MM (g/mol)} \quad \rightarrow \quad 1 \text{ mole di } \text{KMnO}_4 \text{ pesa } 158.04 \text{ g}$$

$$\% \text{ K} = (39.10 \text{ g/mol} / 158.04 \text{ g/mol}) \times 100 = 24.74 \%$$

$$\% \text{ Mn} = (54.94 \text{ g/mol} / 158.04 \text{ g/mol}) \times 100 = 34.76 \%$$

$$\% \text{ O} = (4 \times 16 \text{ g/mol} / 158.04 \text{ g/mol}) \times 100 = 40.50 \%$$

Formule chimiche

1- La formula che esprime i rapporti tra i numeri di atomi dei diversi elementi presenti nella molecola di una sostanza è chiamata **formula minima o empirica**.

I rapporti sono espressi utilizzando i numeri interi più piccoli possibili:

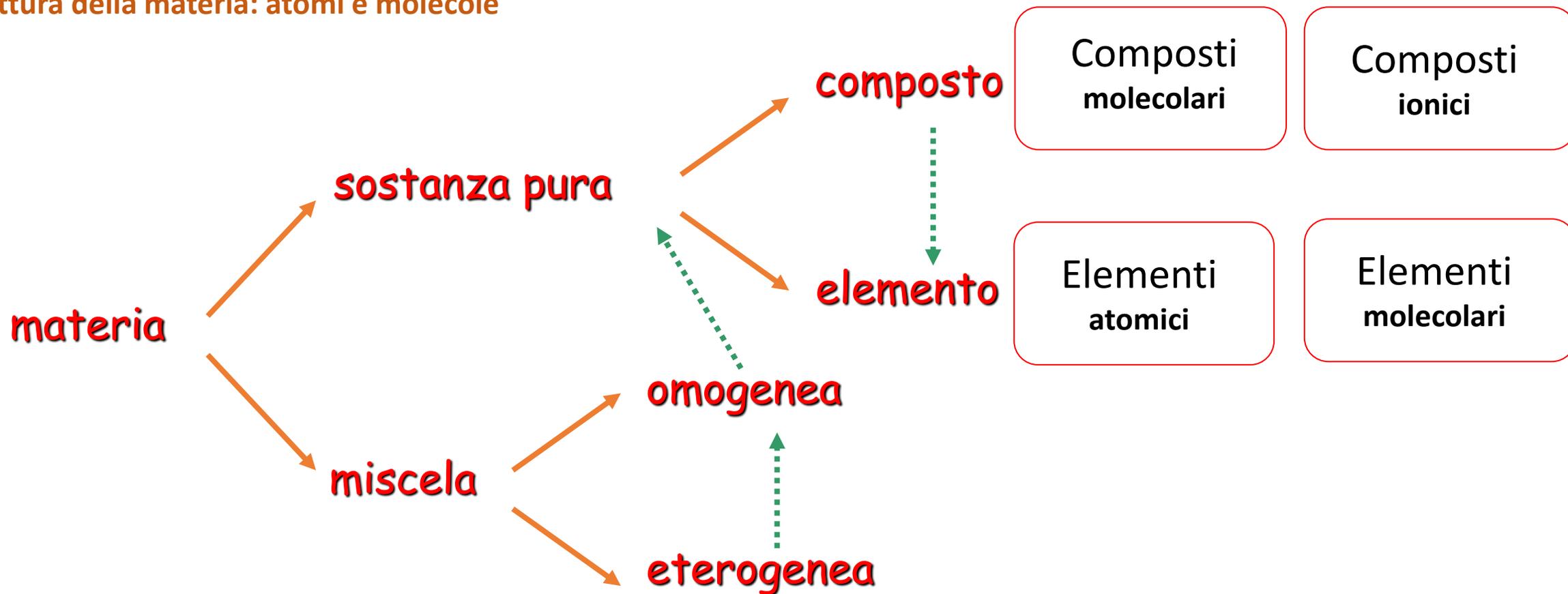
Esempio: la formula empirica del benzene è CH. Ciò significa che il rapporto tra gli atomi di carbonio e di idrogeno è di 1:1.

2- La **formula molecolare** esprime il numero di atomi dei diversi elementi **realmente** contenuti in una molecola del composto considerato e risulta uguale alla formula minima o ad un suo multiplo.

Esempio: la formula molecolare del benzene è C_6H_6 e significa che ogni molecola di benzene è costituita da 6 atomi di C e 6 di H.

3- La formula di struttura indica in quale modo gli atomi sono legati tra loro e come essi sono disposti nello spazio.

La struttura della materia: atomi e molecole



Elementi: contengono un solo tipo di atomo; organizzati nella tavola periodica caratterizzati da un simbolo (Tavola periodica degli elementi)

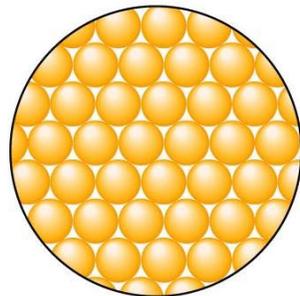
Composto: sostanza pura costituita da uno o più elementi tenuti insieme da un legame chimico. H₂O: composto binario
Composti organici e inorganici

Sostanze pure

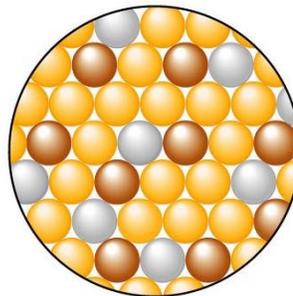
Composizione, proprietà chimiche e fisiche costanti
Separabili mediante tecniche chimiche

Miscela

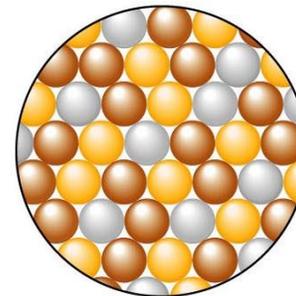
composizione variabile (da una miscela all'altra)
proprietà correlate ai componenti
Separabili mediante tecniche fisiche



24 karat gold



18 karat gold



14 karat gold

