Prima prova in itinere – Corso di Chimica – A.A. 2019/2020

Compito A

1. (6p) Rappresentare la geometria della molecola di AsF_3Cl_2, descriverne i legami con la teoria del legame di valenza e prevederne la polarità: presentare il ragionamento seguito (As, Z = 33)

2. (6p) In un reattore indeformabile da 45.00 L vengono introdotti 150.0 g di CH_4 e 350.0 g di acqua. La temperatura viene portata a 750°C ed avviene la reazione in fase gassosa:
   $CH_4 + H_2O = CO_2 + H_2$
   Calcolare:
   - Le quantità dei prodotti formatesi
   - Le quantità dei reagenti rimasti inalterati
   - La pressione interna del recipiente e le pressioni parziali dei vari gas presenti.

3. (6p) Bilanciare le seguenti equazioni chimiche:
   a. $BaCl_2 + H_3PO_4 = Ba_3(PO_4)_2 + HCl$
   b. $KMnO_4 + K_2SO_3 + KOH = MnO_2 + K_2SO_4$

   Assegnare i nomi ai composti della reazione a, sia in nomenclatura tradizionale che in nomenclatura IUPAC.

4. (6p) Il ferro carbonile ha formula generale $Fe_x(CO)_y$. La combustione in presenza di un largo eccesso di O_2 di 1.000 g di tale composto producono 0.4076 g di Fe_2O_3 e 1.1233 g di CO_2. Calcolare la formula minima del ferro carbonile.

5. (3p) Definire il criterio di spontaneità di una reazione chimica e calcolare in quale intervallo di temperature la seguente reazione (da bilanciare) è spontanea:
   $Hg\ (l) + HCl\ (g) = Hg_2Cl_2\ (s) + H_2\ (g)$

Composto	Hg	HCl	Hg_2Cl_2	H_2
ΔH_f^0 (kJ mol^{-1})		- 92.31	- 1265.22	
S_f^0 (J mol^{-1} K^{-1})	76.02	186.91	192.5	130.68

6. (3p) Solo una delle seguenti quaterne di numeri quantici è possibile. Individuare quella corretta, indicare in quale orbitale atomico si trova l'elettrone e spiegare per quale motivo l'altra è sbagliata.
   n = 4; l = 2; m_l = 3; m_s = 1/2 n = 3; l = 1; m_l = 0; m_s = -1/2

Masse atomiche:
H 1.00794 g/mol; C 12.0107 g/mol; O 15.9994 g/mol; Fe 55.845 g/mol.

1ª PROVA IN ITINERE - A.A 2019/2020

COMPITO A

Es. 1 AsF_3Cl_2

As. Z = 33

Configurazione elettronica As: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^3$

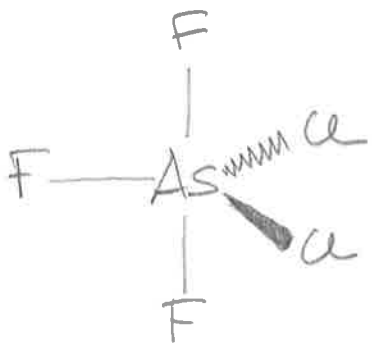
Livello di valenza: $4s^2 4p^3$

n° elettroni valenza: 5(As) + 3·1(F) + 3·2(Cl) = 10 elettroni

n° coppie strutturali: 5

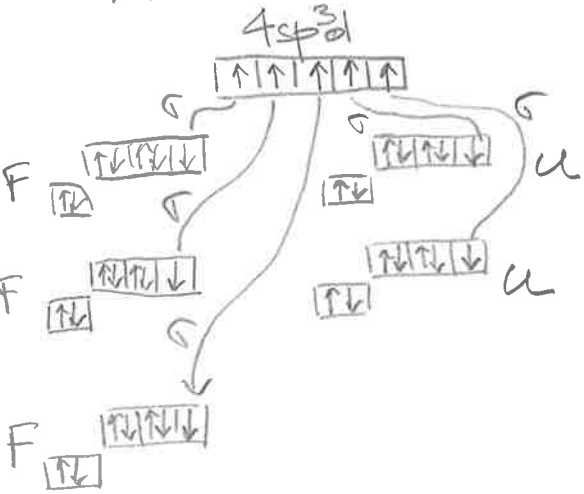
Geometria coppie strutturali: AX_5

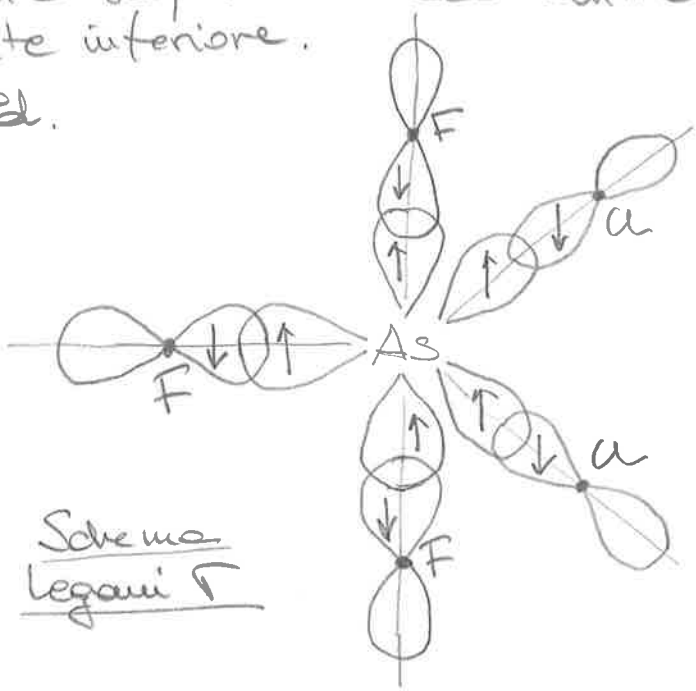
Geometria molecola: AX_5 BIPIRAMIDE TRIGONALE



Fe Cl possono formare solo legami singoli quando sono atomi terminali. La coppia di legame As-Cl è più ingombrante di quella As-F perché è meno polarizzata verso l'atomo terminale a causa della minor elettronegatività di Cl rispetto a F. Di conseguenza, i due legami As-Cl occuperanno 2 posizioni equatoriali. Le altre 3 posizioni saranno occupate da As-F. L'angolo $Cl\text{-}\hat{As}\text{-}Cl$ sarà leggermente superiore a 120° mentre quello $F\text{-}\hat{As}\text{-}Cl$ sarà leggermente inferiore.

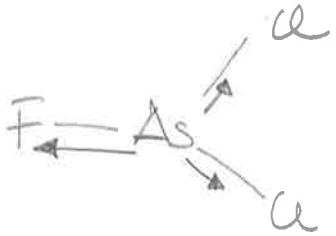
As sarà ibridizzato sp^3d.





Schema legami

La molecola AsF_3Cl_2 è polare. Tutti i legami saranno polari e la somma vettoriale dei dipoli sul piano equatoriale è non nulla.



$\mu \neq 0$

Es. 2

$$n_{CH_4} = \frac{m_{CH_4}}{MM_{CH_4}} = \frac{1590}{16,0425} = 9,350 \text{ mol}$$

$$n_{H_2O} = \frac{m_{H_2O}}{MM_{H_2O}} = \frac{3590}{18,0153} = 19,43 \text{ mol}$$

$$CH_{4(g)} + 2H_2O_{(g)} \longrightarrow CO_{2(g)} + 4H_{2(g)}$$

	CH_4	$2H_2O$	CO_2	$4H_2$
iniz.	9,350	19,43	—	—
var.	−9,350	−18,70	+9,350	+37,40
fine	—	0,73	9,350	37,40

↑ REAGENTE LIMITANTE

$$m_{CO_2} = n_{CO_2} \cdot MM_{CO_2} = 9,350 \cdot 44,0095 = 411,5 \text{ g}$$

$$m_{H_2} = n_{H_2} \cdot MM_{H_2} = 37,40 \cdot 2,01588 = 75,39 \text{ g}$$

$$m_{H_2O,res.} = n_{H_2O,res} \cdot MM_{H_2O} = 0,73 \cdot 18,0153 = 13,15 \text{ g}$$

$$n_{TOT} = n_{CO_2} + n_{H_2} + n_{H_2O,res} = 9,350 + 37,40 + 0,73 = 47,48 \text{ mol}$$

$$P_{TOT} = \frac{n_{TOT} \cdot RT}{V} = \frac{47,48 \cdot 0,0821 \cdot (273,15+750)}{45,00} = 88,63 \text{ atm}$$

$$P_{CO_2} = P_{TOT} \cdot x_{CO_2} = P_{TOT} \cdot \frac{n_{CO_2}}{n_{TOT}} = 88,63 \cdot \frac{9,350}{47,48} = 17,45 \text{ atm}$$

$$P_{H_2} = P_{TOT} \cdot x_{H_2} = P_{TOT} \cdot \frac{n_{H_2}}{n_{TOT}} = 88,63 \cdot \frac{37,40}{47,48} = 69,81 \text{ atm}$$

$$P_{H_2O} = P_{TOT} \cdot x_{H_2O} = P_{TOT} \cdot \frac{n_{H_2O,ris}}{n_{TOT}} = 88{,}63 \cdot \frac{0{,}73}{47{,}48} = 1{,}36 \text{ atm}$$

Es. 3 ② $3BaCl_2 + 2H_3PO_4 \longrightarrow Ba_3(PO_4)_2 + 6HCl$

	Tradizionale	IUPAC
$BaCl_2$	Cloruro di bario	Dicloruro di bario
H_3PO_4	Acido (orto)fosforico	Acido tetraossofosforico (V)
$Ba_3(PO_4)_2$	(Orto)Fosfato di bario	Di tetraossofosfato (V) di tribario
HCl	Acido cloridrico	Cloruro di idrogeno

ⓑ $KMnO_4 + K_2SO_3 + KOH \longrightarrow MnO_2 + K_2SO_4$

$$K^+ + \overset{+7}{Mn}O_4^- + \overset{+4}{S}O_3^{2-} + OH^- \longrightarrow \overset{+4}{Mn}O_2 + K^+ + \overset{+6}{S}O_4^{2-}$$

RED: $\overset{+7}{Mn}O_4^- + 3e^- + 2H_2O \longrightarrow \overset{+4}{Mn}O_2 + 4OH^-$ /x2 m.c.m. = 6

ox: $\overset{+4}{S}O_3^{2-} + 2OH^- \longrightarrow \overset{+6}{S}O_4^{2-} + 2e^- + H_2O$ /x3

$$2MnO_4^- + \cancel{H_2O} + 3SO_3^{2-} + \cancel{6OH^-} \longrightarrow 2MnO_2 + 2OH^- + 3SO_4^{2-} + \cancel{3H_2O}$$

$$2KMnO_4 + 3K_2SO_3 \longrightarrow 2MnO_2 + 3K_2SO_4 + 2KOH$$

Es. 4 $Fe_x(CO)_y + \left(\frac{3x}{2} + \frac{y}{2}\right)O_2 \longrightarrow \frac{x}{2}Fe_2O_3 + y\,CO_2$

$$n_{Fe_2O_3} = \frac{m_{Fe_2O_3}}{MM_{Fe_2O_3}} = \frac{0{,}4076}{159{,}6882} = 2{,}552 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$$

$$n_{CO_2} = \frac{m_{CO_2}}{MM_{CO_2}} = \frac{1{,}1233}{44{,}0095} = 2{,}552 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$$

$$\frac{m_{Fe_2O_3}}{m_{CO_2}} = \frac{x/2}{y} = \frac{3{,}882 \cdot 10^{-3}}{3{,}882 \cdot 10^{-2}/10}$$

$$\frac{x}{y} = \frac{2}{10} = \frac{1}{5}$$ Formula minima: $Fe(CO)_5$

Es. 5 Spontaneità di una reazione: $\Delta G^\circ < 0$

$$2Hg_{(l)} + 2HCl_{(g)} \longrightarrow Hg_2Cl_{2(s)} + H_{2(g)}$$

$$\Delta H^\circ_{reaz} = \Delta H^\circ_{f,Hg_2Cl_2} + \Delta H^\circ_{f,H_2} - 2\Delta H^\circ_{f,Hg} - 2\Delta H^\circ_{f,HCl} =$$

$$= -1265{,}2 - 2\cdot(-92{,}31) = -1089{,}6 \ kJ\,mol^{-1}$$

$$\Delta S^\circ_{reaz} = S^\circ_{f,Hg_2Cl_2} + S^\circ_{f,H_2} - 2S^\circ_{f,Hg} - 2S^\circ_{f,HCl} =$$

$$= 192{,}5 + 130{,}68 - 2\cdot 76{,}02 - 2\cdot 186{,}91 = -202{,}68 \ J\,mol^{-1}K^{-1}$$

$\Delta H^\circ < 0$, $\Delta S^\circ < 0$ $\Rightarrow$ la reazione è spontanea per $T < \frac{\Delta H^\circ}{\Delta S^\circ}$

$$T = \frac{\Delta H^\circ}{\Delta S^\circ} = \frac{-1089{,}6}{-202{,}68 \cdot 10^{-3}} = 5332 \ K$$

Es. 6 $n=4$ $l=2$ $m=3$ $m_s=1/2$ SBAGLIATA

Le condizioni per m sono: $-l \leq m \leq l$

$n=3$ $l=1$ $m=0$ $m_s=-1/2$ CORRETTA

L'elettrone sta in un orbitale 3p