

Interazioni intermolecolari

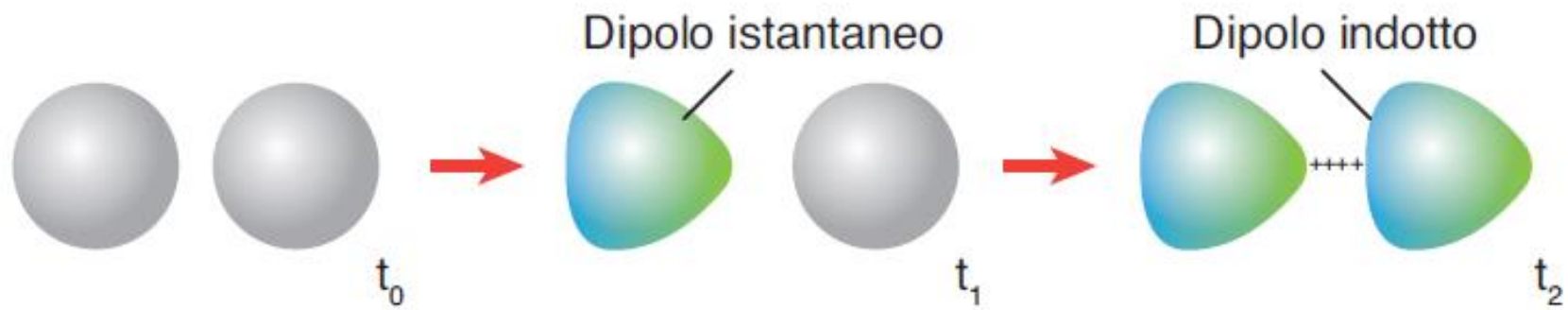
Tra le molecole si stabiliscono forze che sono meno intense di quelle all'interno della molecola, ma comunque importanti per prevedere il comportamento di una sostanza. Le interazioni intermolecolari dipendono dalla **natura delle molecole**.

$E(\text{Cl}-\text{Cl}) = 240 \text{ kJ/mol}$ [legame forte (legame covalente)]

$E(\text{Cl}_2 \cdots \text{Cl}_2) = 3.0 \text{ kJ/mol}$ [legame debole (interazioni intermolecolari)]

Interazioni intermolecolari:

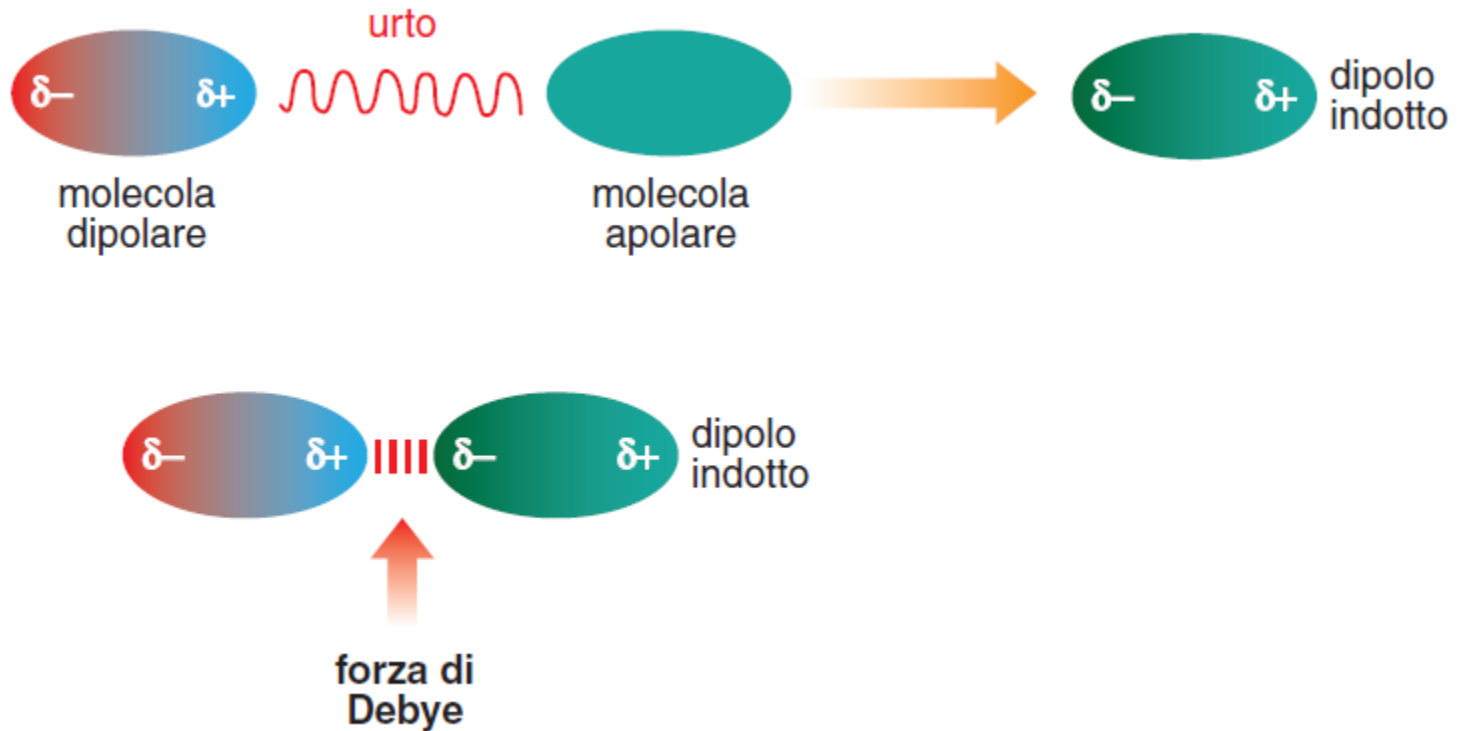
Interazione dipolo istantaneo – dipolo indotto



Forze di dispersione o di London

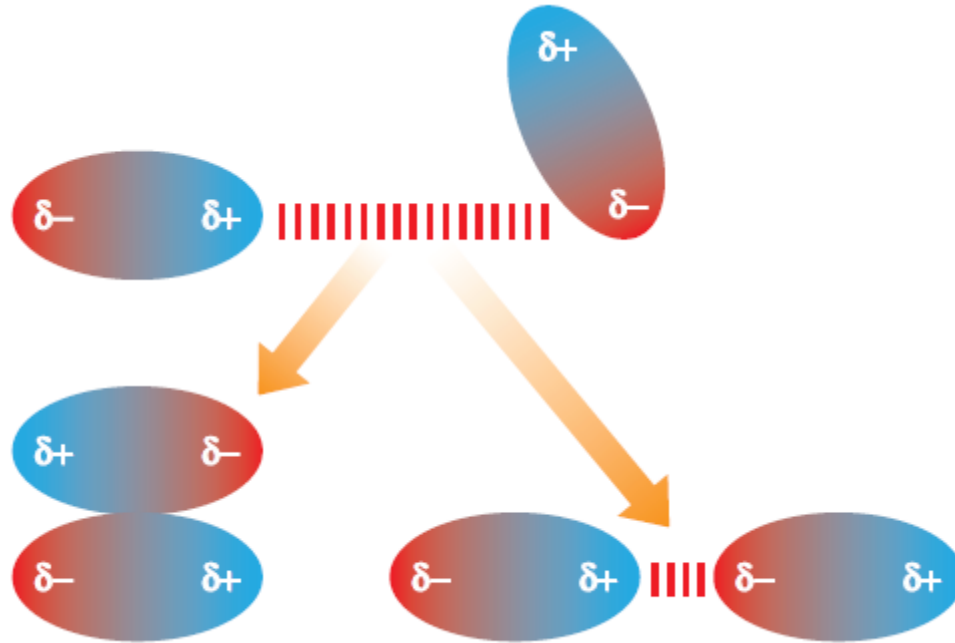
Interazioni intermolecolari:

Interazione dipolo – dipolo indotto



Interazioni intermolecolari

Interazione dipolo – dipolo



17 VIIA	
9	18,9984
-1	-1
0,00189	
-221,7	
-188	
F	
Fluoro	
17	35,453
-1	7,5,3,1,-1
0,00322	
-101,7	
-34	
Cl	
Cloro	
35	79,904
-1	7,5,3,1,-1
0,007139	
-7,2	
58	
Br	
Bromo	
53	126,9045
-1	7,5,1,-1
4,94	
113,3	
183	
I	
Iodio	
85	(210)
-	7,5,3,1,-1
302	
335	
At	
Astatio	

F_2 gas, p.e. $-188\text{ }^{\circ}\text{C}$

Cl_2 gas, p.e. $-34,7\text{ }^{\circ}\text{C}$

Br_2 liquido, p.e. $58,8\text{ }^{\circ}\text{C}$

I_2 solido, p.f. $114\text{ }^{\circ}\text{C}$



fluoro



cloro



bromo



iodio

STATI di AGGREGAZIONE a $20\text{ }^{\circ}\text{C}$



SOLIDI



LIQUIDI

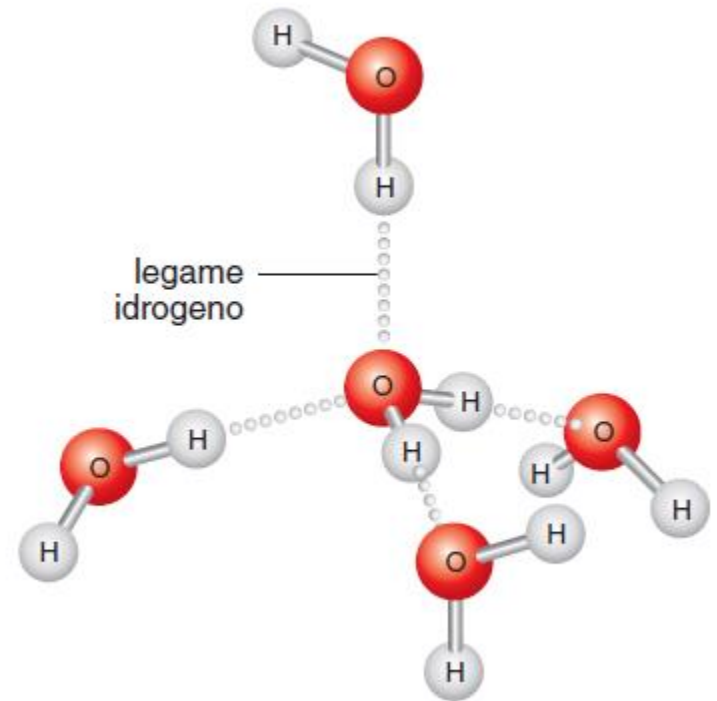
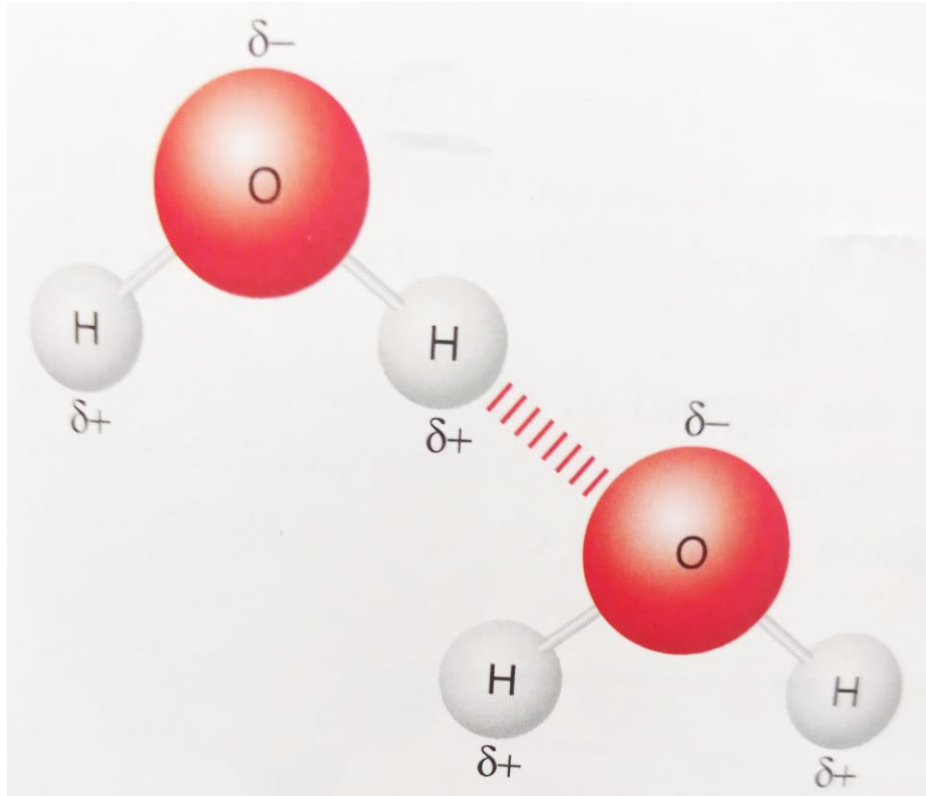


GASSOSI

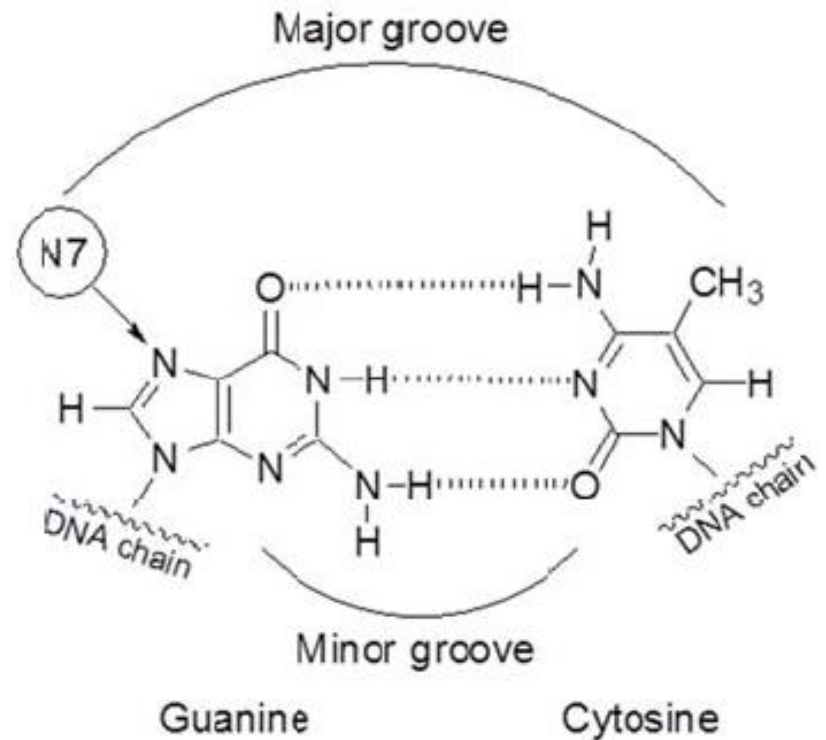
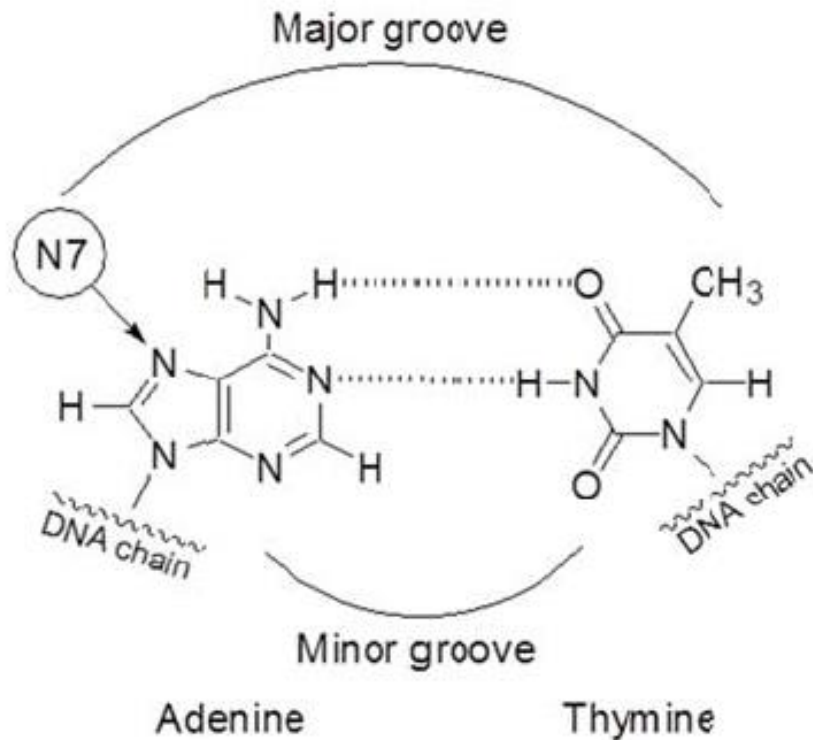


ARTIFICIALI

Legame a idrogeno



Il legame a idrogeno è responsabile della struttura doppia elica del DNA



Interazioni intermolecolari

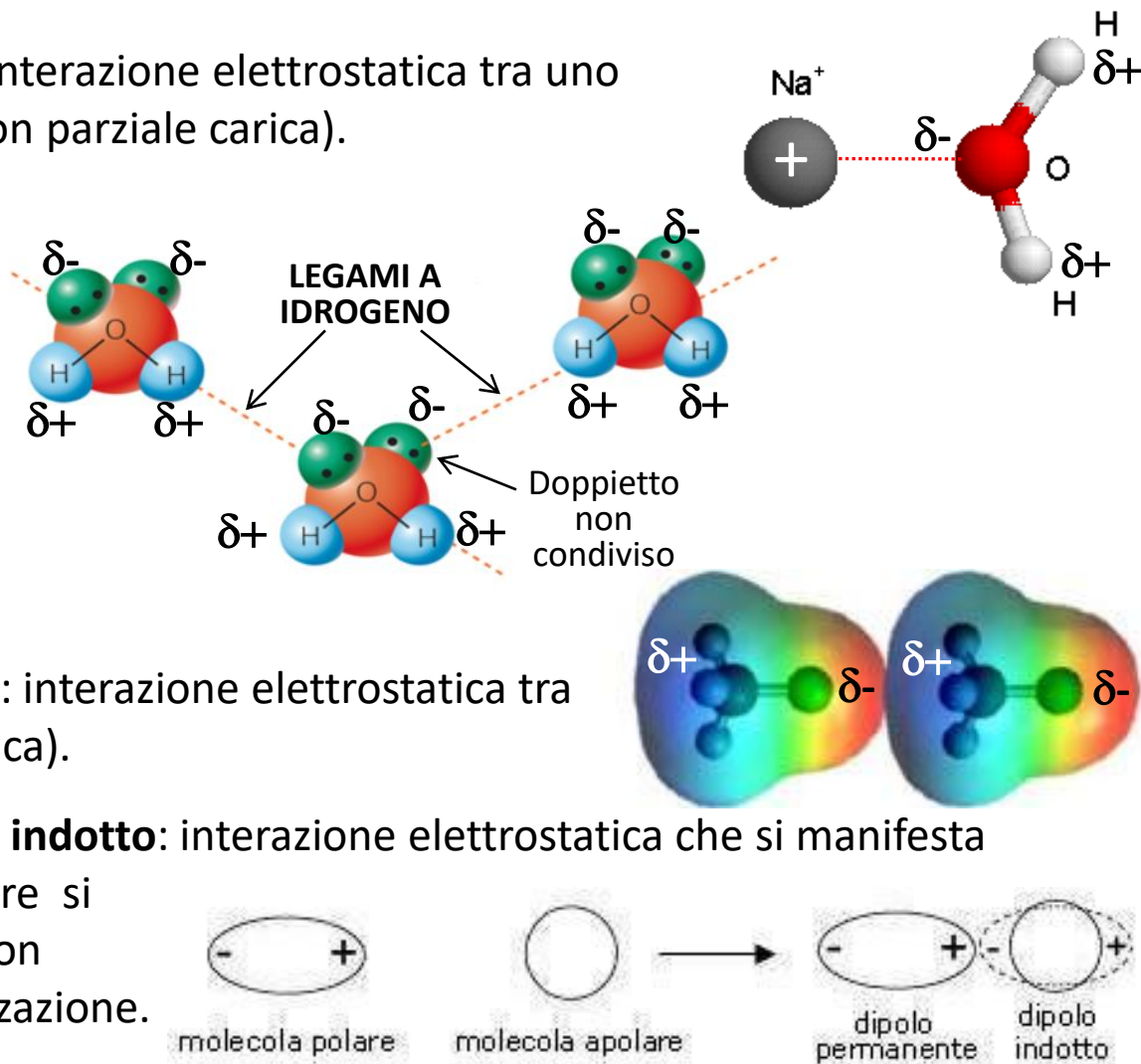
F
O
R
Z
A

Interazione ione – dipolo: interazione elettrostatica tra uno ione (carico) e un dipolo (con parziale carica).

Legame a idrogeno: è un tipo particolare di interazione tra dipoli molecolari; si osserva in molecole in cui l'idrogeno è legato ad un atomo molto elettronegativo (F, O, N).

Interazione dipolo – dipolo: interazione elettrostatica tra due dipoli (con parziale carica).

Interazione dipolo – dipolo indotto: interazione elettrostatica che si manifesta quando un dipolo molecolare si avvicina ad una molecola non polare e ne causa la polarizzazione.



Stati di aggregazione della materia

Lo stato di aggregazione dipende da temperatura e pressione

Per **condizioni standard** si intende pressione = 1 atm,

temperatura = 25°C

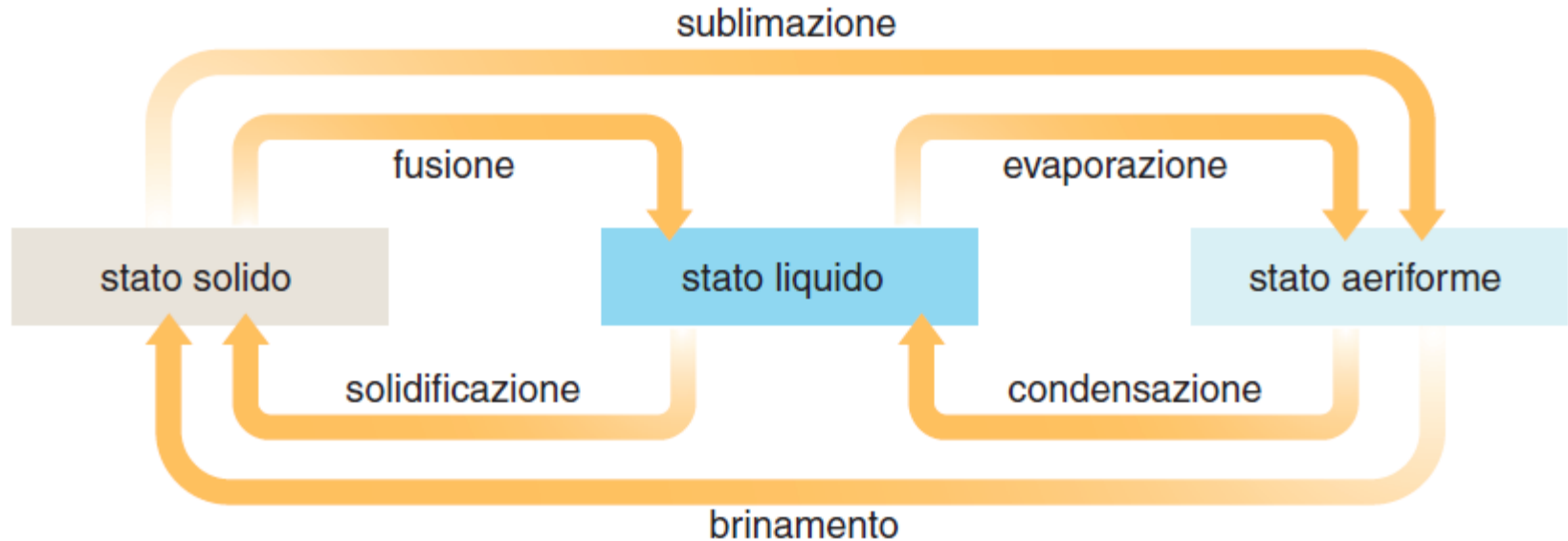


Gas: volume e forma del recipiente che lo contiene

Liquido: volume proprio e forma del recipiente che lo contiene

Solido: volume e forma propri

Transizioni di fase o passaggi di stato



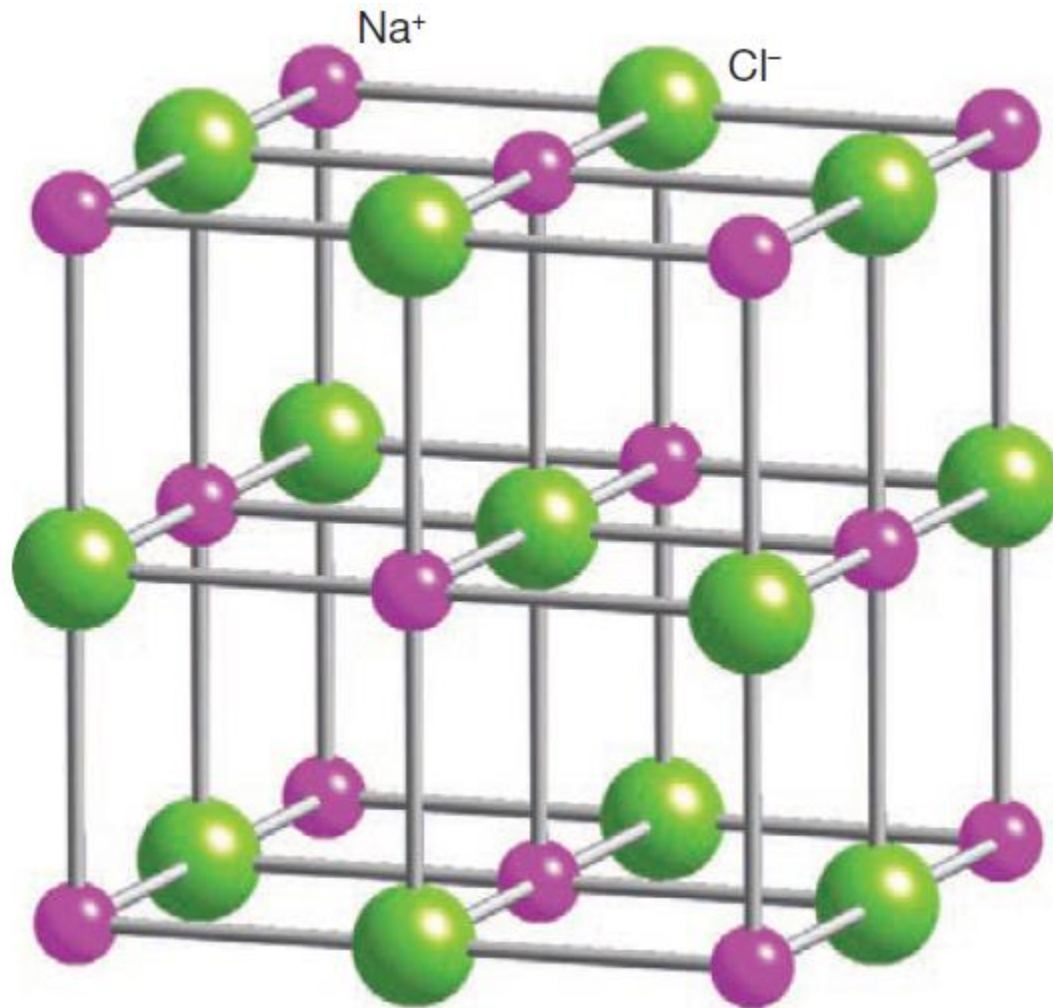
In alcune condizioni (pressione e temperatura di transizione),
due fasi sono contemporaneamente presenti all'equilibrio.

Esempio: Mettendo un cubetto di ghiaccio in un bicchiere di acqua a temperatura ambiente, il cubetto si scioglie. Ma se siamo a 0°C , il cubetto e l'acqua liquida sono in equilibrio.

Stato solido

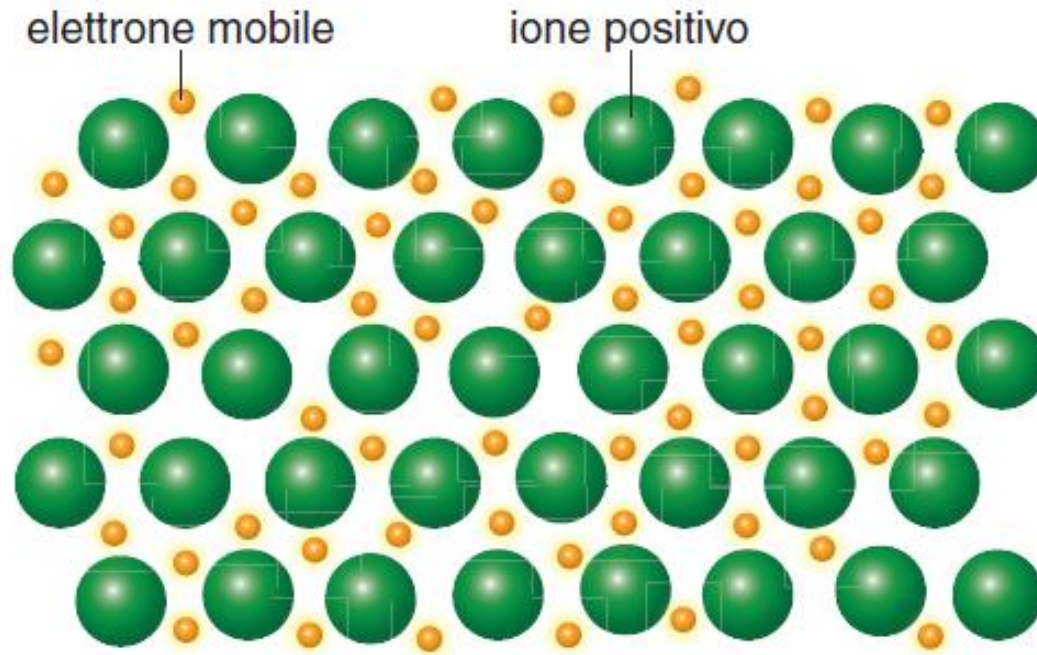
- Solidi ionici
- Solidi metallici
- Solidi covalenti
- Solidi molecolari

Solidi ionici



Alto punto di fusione, fragili, non conduttori, solubili in acqua

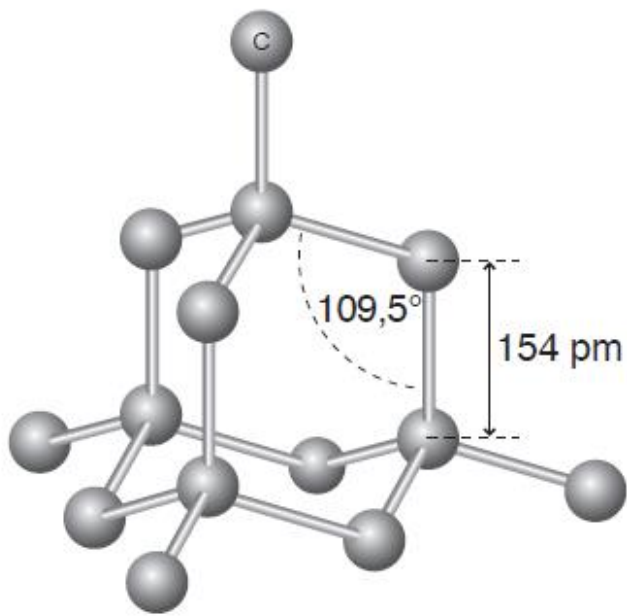
Solidi metallici



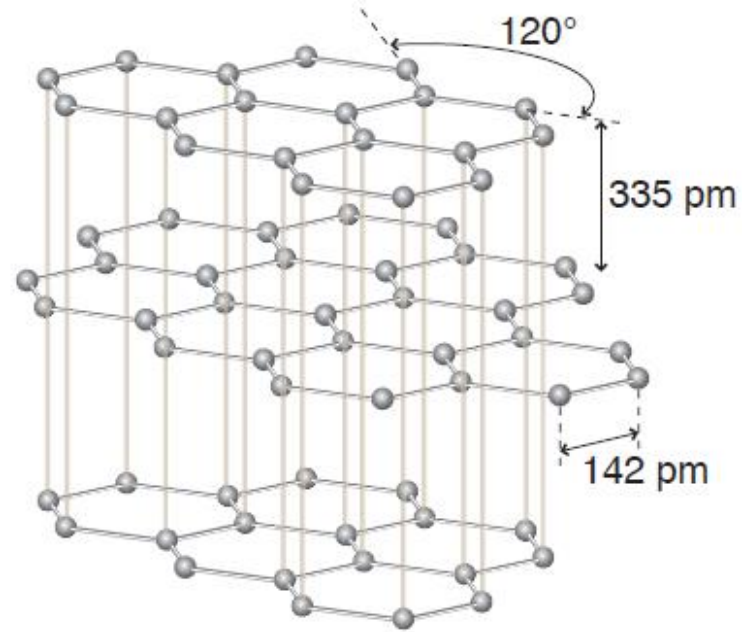
Un metallo può essere pensato come costituito da un reticolo di cationi immersi in un mare di elettroni mobili. Il legame metallico, come quello ionico, non è direzionale

Conduttori, duttili, malleabili, lucenti

Solidi covalenti



diamante



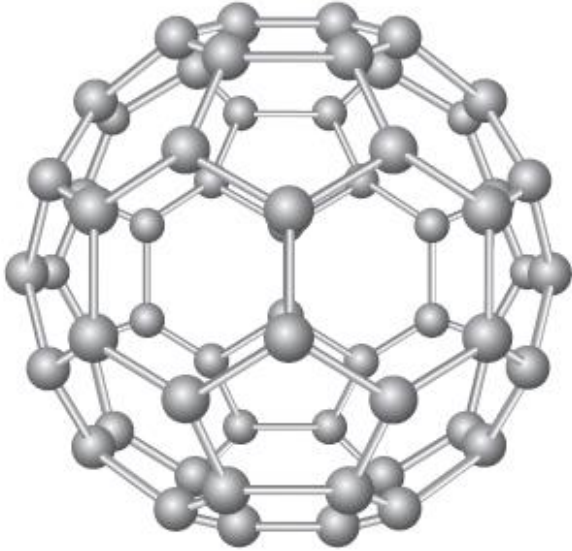
grafite

Nei solidi covalenti gli atomi sono tenuti insieme da legami covalenti

Spesso sono altofondenti, molto duri

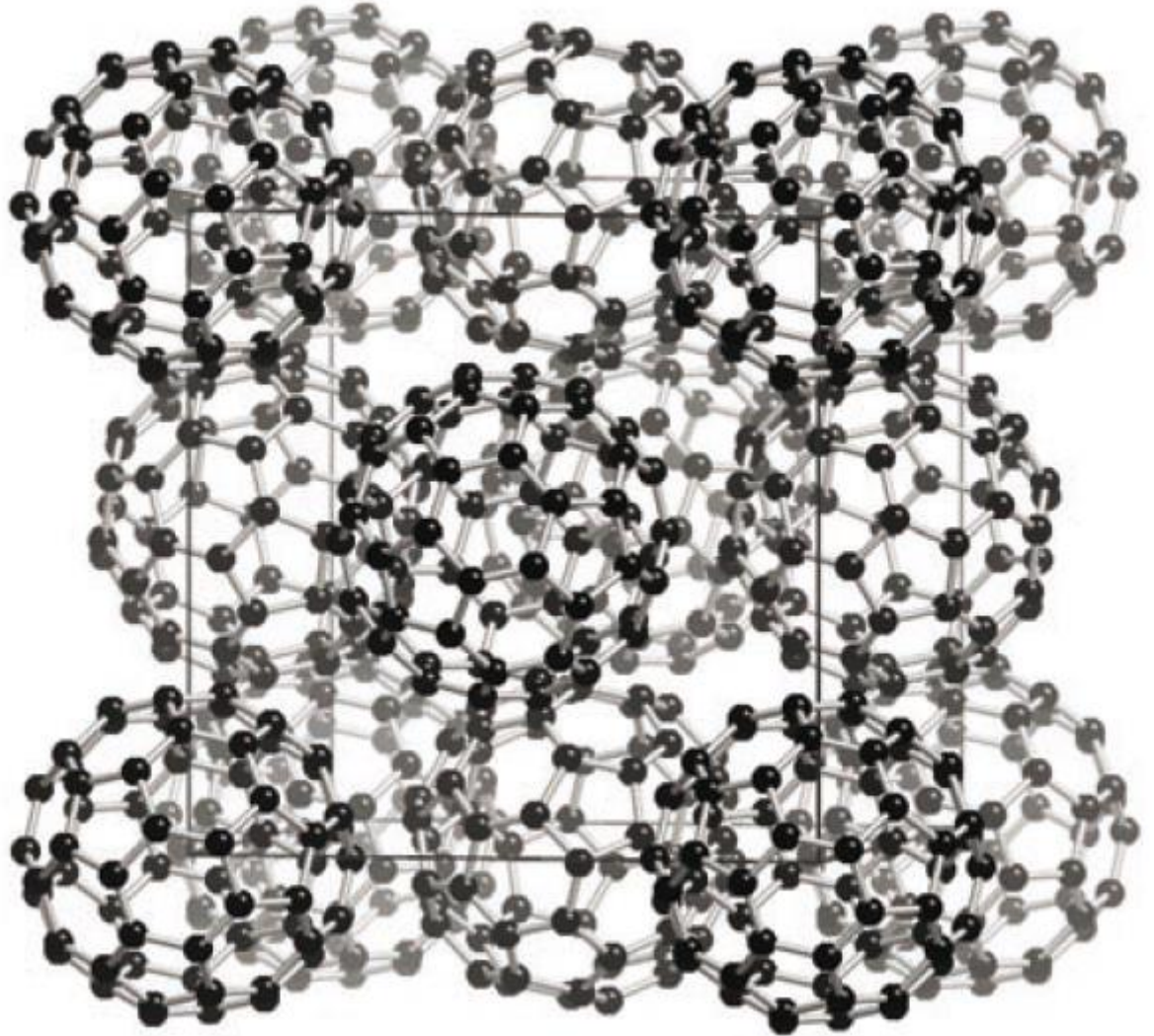
Diamante e grafite sono 2 forme allotropiche del carbonio

Solidi molecolari

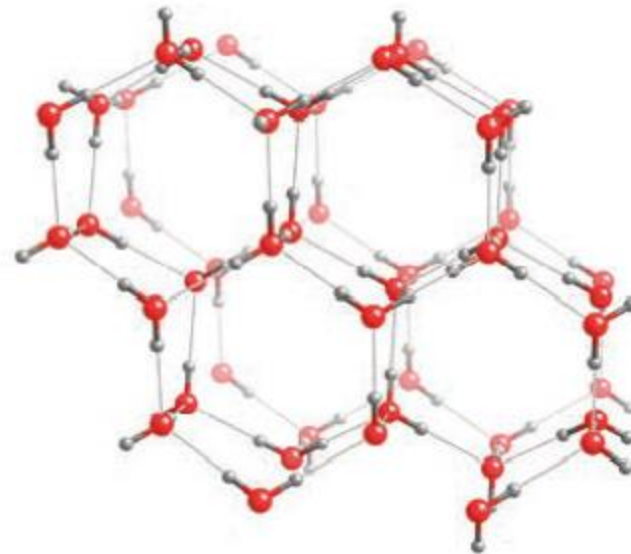
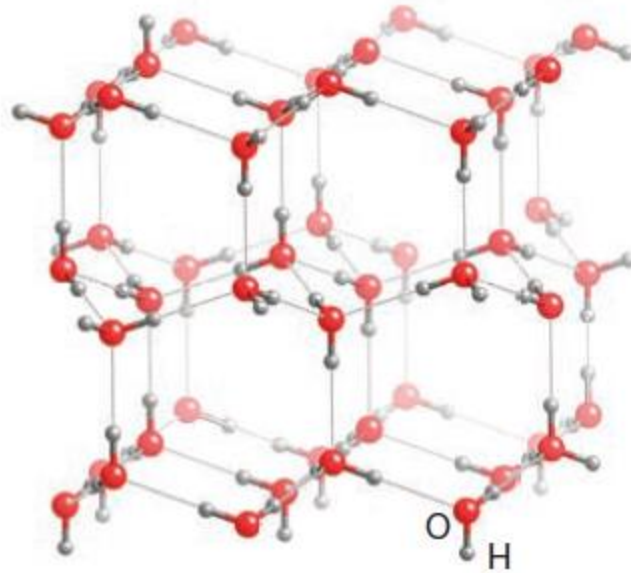


Fullerene o C_{60}

*Il fullerene è un altro
allotropo del carbonio*



Il ghiaccio è un solido molecolare



Stati di aggregazione della materia

Lo stato di aggregazione dipende da temperatura e pressione

Per **condizioni standard** si intende pressione = 1 atm,

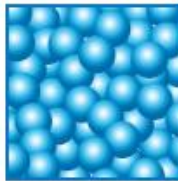
temperatura = 25°C



nei gas le particelle
sono distanti fra loro
e disordinate



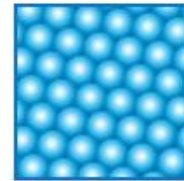
Gas: volume e
forma del
recipiente che lo
contiene



nei liquidi le particelle
sono vicine fra loro
e disordinate



Liquido: volume
proprio e forma del
recipiente che lo
contiene

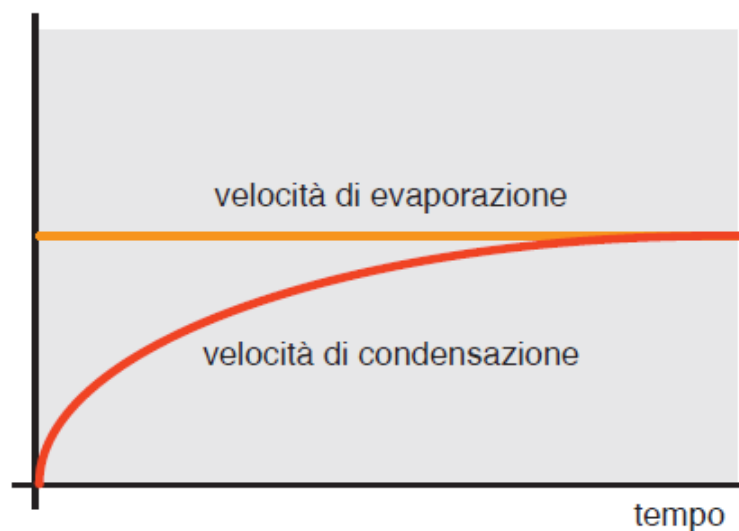
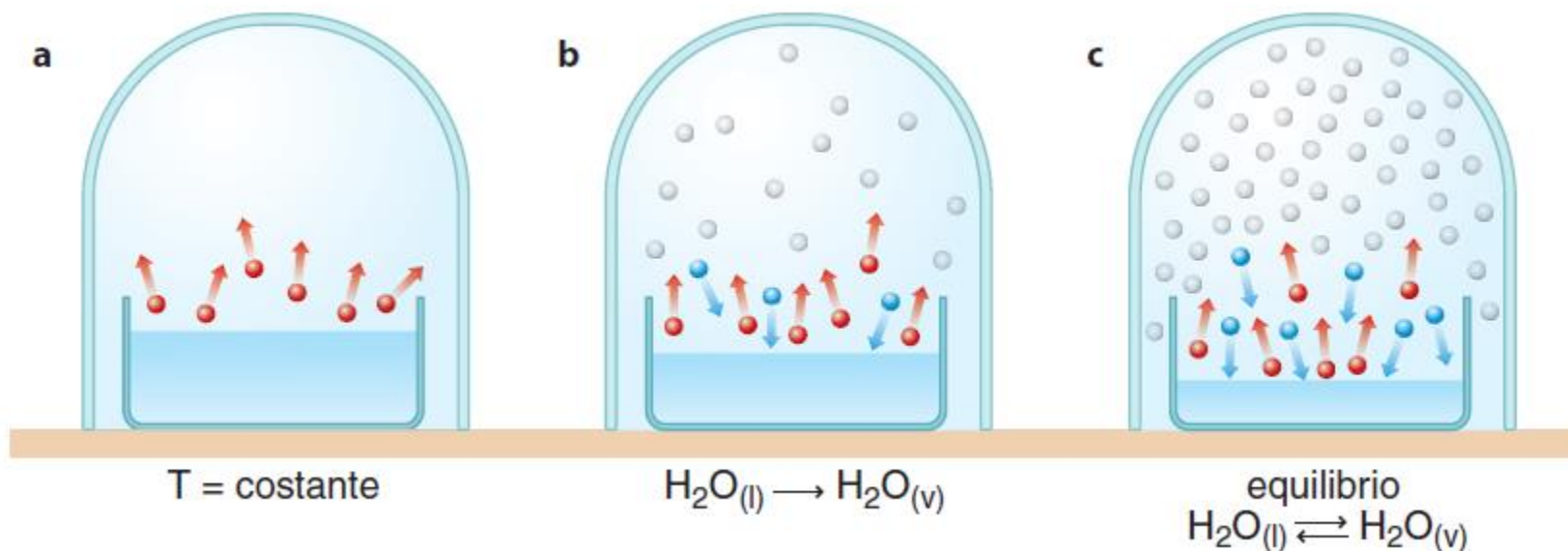


nei solidi le particelle
sono vicine fra loro
e ordinate

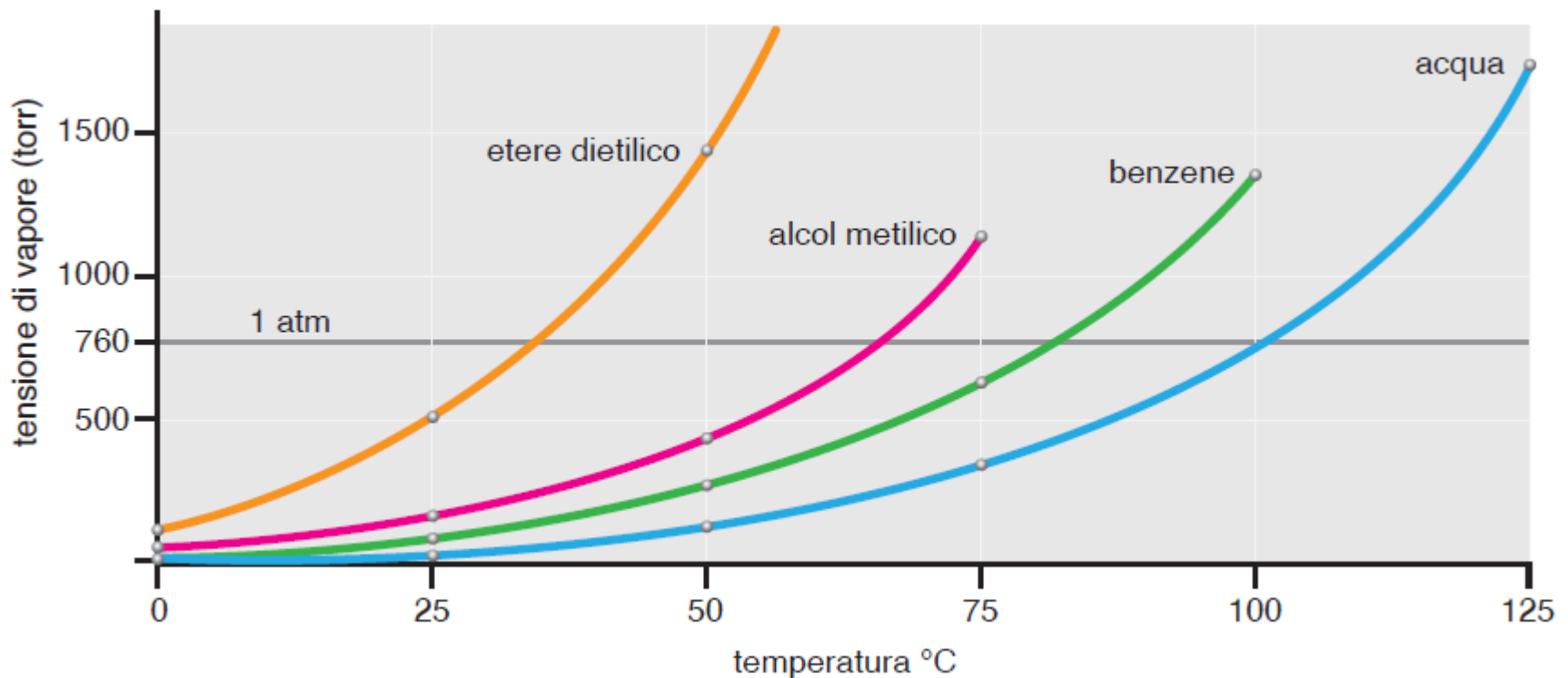


Solido: volume e
forma propri

In un sistema chiuso, un liquido si mette in equilibrio dinamico con il suo vapore



La pressione di un vapore in equilibrio con il liquido si chiama anche *tensione di vapore* e, ovviamente, dipende dalla temperatura



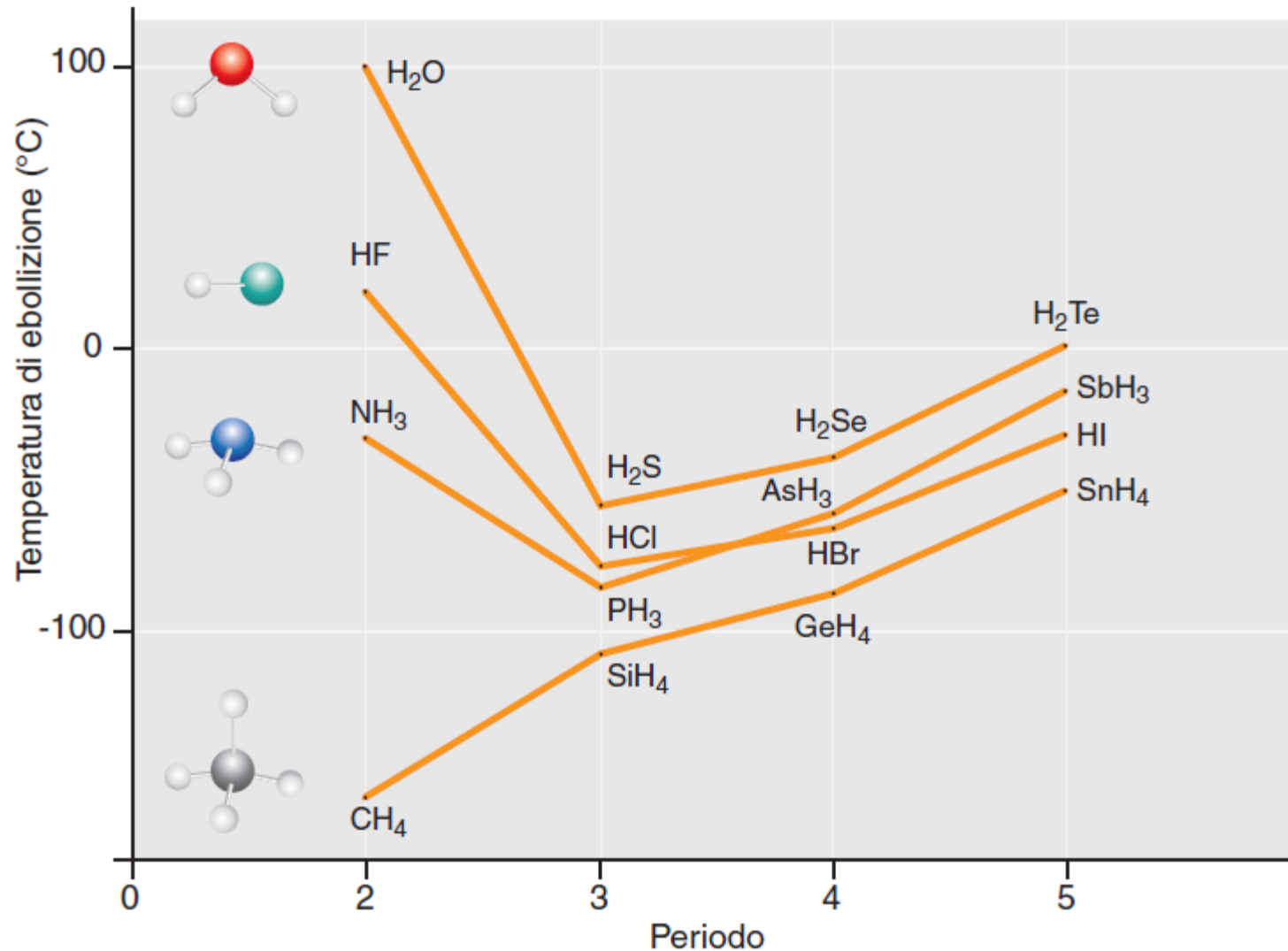
Liquidi con alta tensione di vapore si dicono *volatili*

Andamento della tensione di vapore dell'acqua con la temperatura fino all'ebollizione

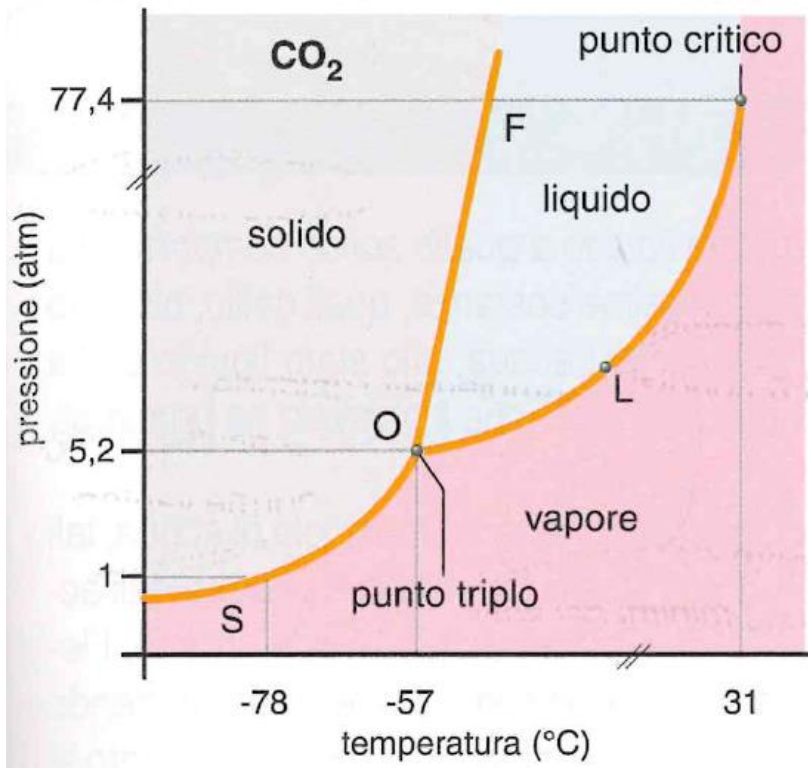
Temperatura (°C)	Tensione di vapore (mm Hg)
0	4,6
10	9,2
20	17,5
30	31,8
40	55,3
50	92,5
60	149,4
70	233,7
80	355,1
90	525,8
100	760,0



Il legame a idrogeno è responsabile dell'alto punto di ebollizione dell'acqua



Diagrammi di fase



Per ciascuna sostanza, elemento o composto, è possibile disegnare un diagramma di fase che rappresenta in ciascun punto una coppia di condizioni di temperatura e pressione e lo stato fisico di **equilibrio** della sostanza in quelle condizioni.

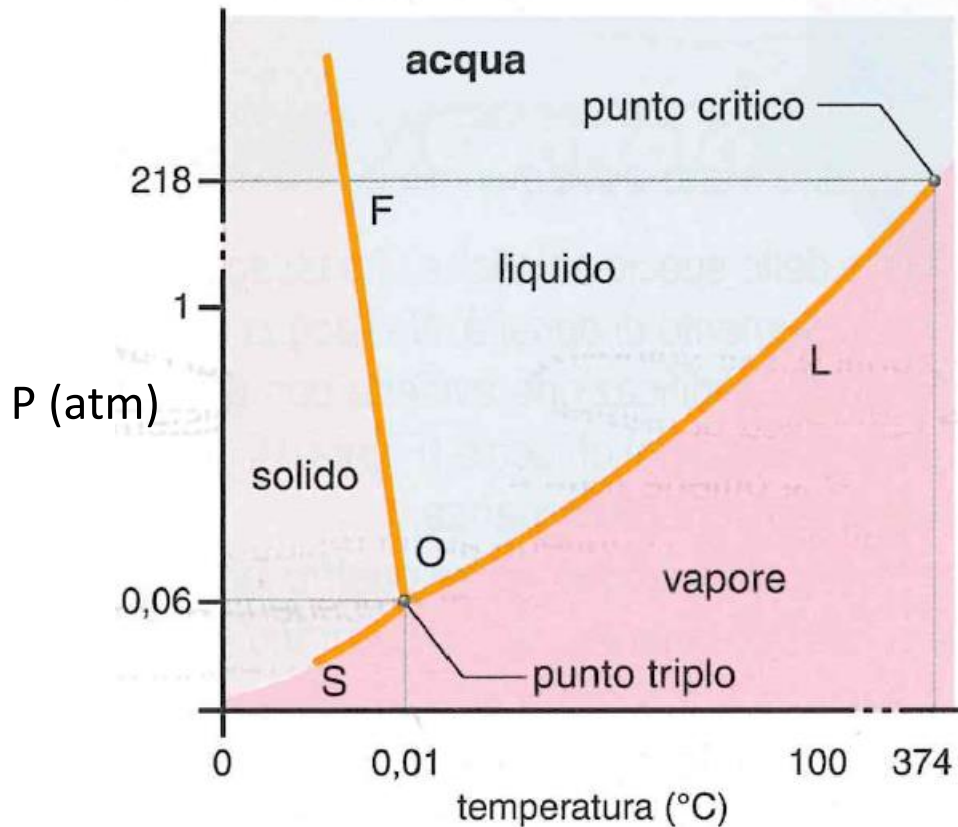
Le linee che separano i diversi stati rappresentano **transizioni di fase**, in cui due fasi sono **all'equilibrio**.

A pressione ambiente, l'anidride carbonica è un gas. La sua temperatura di brinamento (trasformazione da gas a solido) a pressione ambiente (1 atm) è -78,5 $^{\circ}\text{C}$.

Il **punto triplo** è la coppia di condizioni di pressione e temperatura alla quale le tre fasi – solido, liquido e gas – sono in equilibrio.

Il punto triplo dell'anidride carbonica è a 5,2 atm e a -56,6 $^{\circ}\text{C}$.

Diagramma di fase dell'acqua



Il diagramma di fase dell'acqua presenta alcune particolarità a causa delle forze intermolecolari che tengono assieme le molecole di acqua (legami a idrogeno).

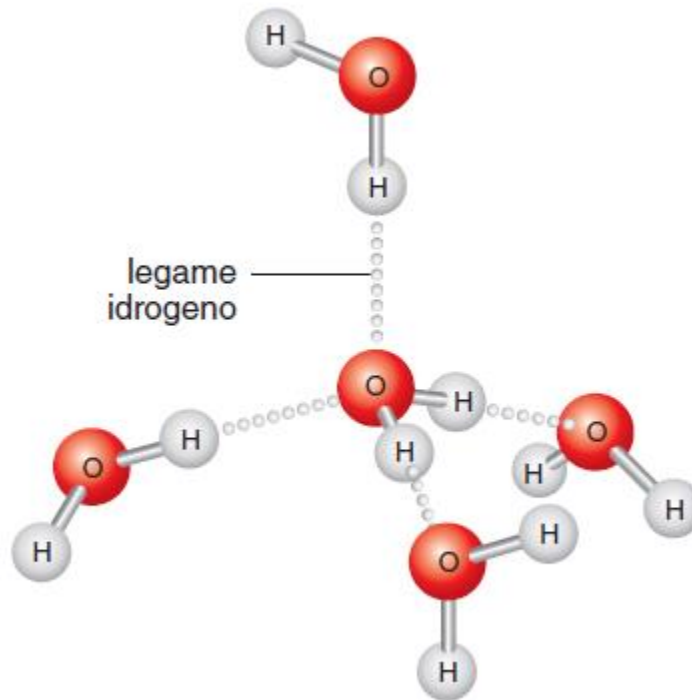
A pressione ambiente, la temperatura di congelamento dell'acqua è 0°C.

A pressione ambiente, la temperatura di evaporazione dell'acqua è 100°C.

Il punto triplo dell'acqua si trova a 0.006 atm e 0.01°C.

A differenza dell'anidride carbonica e della maggior parte delle sostanze, la pendenza della curva di congelamento (o fusione) dell'acqua è negativa.

La maggior parte delle sostanze solidifica per compressione, mentre l'acqua liquefa per compressione. La densità del ghiaccio è inferiore alla densità dell'acqua liquida (*il ghiaccio galleggia!*).



Il legame a idrogeno è responsabile della minor densità del ghiaccio rispetto all'acqua

Stato gassoso

Nello stato gassoso, le interazioni tra le molecole sono molto deboli. Le molecole sono libere di muoversi in ogni direzione e occupano tutto lo spazio a disposizione. La densità del gas è molto bassa, ovvero ci sono poche molecole per unità di volume.

Ciascun gas esercita sul proprio contenitore una **pressione** (forza/area superficiale)

La pressione di un gas viene misurata in Pascal (Pa) ma, in chimica, si usano spesso ancora le atmosfere (atm) e i mmHg.

$$1 \text{ atm} = 1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ mmHg}$$

Gas ideali ed equazione di stato

Un gas è definito **ideale** se: 1) il volume occupato dalle particelle è trascurabile rispetto al volume del gas; 2) le particelle non interagiscono tra loro; 3) gli urti fra le particelle e le pareti del contenitore sono perfettamente elastici.

Legge di Boyle (T costante): $P_1 V_1 = P_2 V_2$

1° Legge di Gay-Lussac (P costante): $V_1/T_1 = V_2/T_2$

2° Legge di Gay-Lussac (V costante): $P_1/T_1 = P_2/T_2$

Legge di Avogadro (T, p costanti): volumi uguali di gas diversi nelle stesse condizioni di P e T contengono un uguale numero di molecole

Gas ideali ed equazione di stato

Un gas è definito **ideale** se: 1) il volume occupato dalle particelle è trascurabile rispetto al volume del gas; 2) le particelle non interagiscono tra loro; 3) gli urti fra le particelle e le pareti del contenitore sono perfettamente elastici.

Equazione di stato dei gas ideali

$$P V = n R T$$

dove R è la costante universale dei gas ed è pari a

$$R = 0.082058 \text{ L atm/(mol K)}.$$

$$R = 8.314 \text{ J/(K mol)}$$

La temperatura è espressa in gradi Kelvin (K). Per convertire gradi Celsius (t) a Kelvin (T):

$$T = (t + 273.15) \text{ K}$$

Questa legge è rigorosamente valida solo per i **gas ideali**. Per i **gas reali**, sono necessarie alcune correzioni all'equazione di stato (*equazione di Van der Waals*).

$$PV = nRT$$

Ne consegue che in condizioni standard, cioè pressione atmosferica ($P = 1 \text{ atm}$) e $25 \text{ }^{\circ}\text{C}$ ($T = 298,15 \text{ K}$), una mole di un qualsiasi gas ($n = 1$) occupa un volume di $22,4 \text{ L}$.

$$PV = nRT$$

Ne consegue che in condizioni standard, cioè pressione atmosferica ($P = 1 \text{ atm}$) e 25°C ($T = 298,15 \text{ K}$), una mole di un qualsiasi gas ($n = 1$) occupa un volume di $22,4 \text{ L}$.

$$n = \frac{g}{MM}$$

Densità del gas

$$\leftarrow d = \frac{g}{V} = P \times \frac{MM}{RT}$$

Esempio:

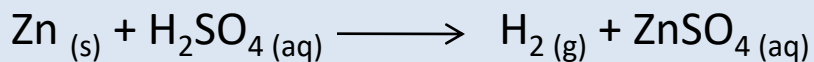
Calcolare il volume di un campione di 72 g di anidride solforosa a 26°C e 1.2 atm.

$$m(\text{SO}_2) = 64.06 \text{ g/mol} \quad \Rightarrow \quad n(\text{SO}_2) = \frac{m(\text{SO}_2)}{m(\text{SO}_2)} = 1.124 \text{ mol}$$

$$P = 1.2 \text{ atm}$$
$$T = 26^\circ\text{C} = (26 + 273.15) \text{ K} = 299.15 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad V = \frac{n(\text{SO}_2) \cdot R \cdot T}{P} = 23.00 \text{ L}$$

Esempio:

Un campione di 1.00 g di Zn è trattato con un eccesso di acido solforico diluito. Si forma H₂ e solfato di zinco. Calcolare il volume di H₂ che sviluppa dalla reazione alla temperatura di 30°C e alla pressione di 2 bar.



$$PA(\text{Zn}) = 65.41 \text{ g/mol} \quad \Rightarrow \quad n(\text{Zn}) = \frac{m(\text{Zn})}{PA(\text{Zn})} = 0.0153 \text{ mol} = n(\text{H}_2)$$

$$P = 2 \text{ bar} = (2 / 1.01) \text{ atm} = 1.98 \text{ atm}$$
$$T = 30^\circ\text{C} = (30 + 273.15) \text{ K} = 303.15 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad V = \frac{n(\text{H}_2) \cdot R \cdot T}{P} = 0.192 \text{ L}$$

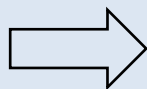
Esempio:

Determinare la massa molecolare di un gas ideale A sapendo che 1.739 g occupano un volume di 381 mL alla pressione di 0.901 atm e alla temperatura di 65°C.

$$P = 0.901 \text{ atm}$$

$$T = 65^{\circ}\text{C} = (65 + 273.15) \text{ K} = 338.15 \text{ K}$$

$$V = 0.381 \text{ L}$$



$$n(\text{A}) = \frac{P \cdot V}{R \cdot T} = 0.0124 \text{ mol}$$

$$\text{mm}(\text{A}) = \frac{m(\text{A})}{n(\text{A})} = \frac{1.739 \text{ g}}{0.0124 \text{ mol}} = 140.24 \text{ g/mol} \quad 140.24 \text{ u}$$

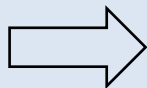
Esempio:

Determinare la massa molecolare di un gas ideale A che ha una densità di 1.435 g/L alla temperatura di 26.4°C e alla pressione di 0.838 atm.

$$P = 0.838 \text{ atm}$$

$$T = 26.4^{\circ}\text{C} = (26.4 + 273.15) \text{ K} = 299.55 \text{ K}$$

$$d = m(\text{A})/V = 1.435 \text{ g/L}$$



$$\text{mm}(\text{A}) = \frac{d \cdot R \cdot T}{P}$$

$$\text{mm}(\text{A}) = \frac{1.435 \text{ g/L} \times 0.0821 \text{ L atm/(mol K)} \times 299.15 \text{ K}}{0.838 \text{ atm}} = 42.06 \text{ g/mol} \quad 42.06 \text{ u}$$

Miscela di gas

Cosa succede quando due o più gas vengono mescolati? I gas sono sempre miscibili tra loro, ma come si calcola la pressione totale e la pressione di ciascun gas in una miscela?

Definiamo la **pressione parziale** di un gas in una miscela come la pressione che il gas eserciterebbe se occupasse da solo tutto il volume, nelle stesse condizioni di temperatura.

Consideriamo una miscela di 3 gas diversi, in quantità n_1 , n_2 e n_3 , in un contenitore di volume V e alla temperatura T :

La pressione parziale del primo gas è pari a: $P_1 = \frac{n_1 \cdot R \cdot T}{V}$

La pressione parziale del secondo gas è pari a: $P_2 = \frac{n_2 \cdot R \cdot T}{V}$

La pressione parziale del terzo gas è pari a: $P_3 = \frac{n_3 \cdot R \cdot T}{V}$



- **Legge di Dalton** (John Dalton, 1766-1844):
Per una miscela di gas ideali in un contenitore, la pressione totale è uguale alla somma delle pressioni parziali dei singoli gas:

$$P_{totale} = P_1 + P_2 + P_3 + \dots$$

Ovvero:

$$P_{totale} = \frac{(n_1 + n_2 + n_3 + \dots) \cdot R \cdot T}{V}$$

Esempio:

1.00 g di H₂ sono introdotti in un recipiente di 1.00 dm³ contenente He alla temperatura di 373 K e alla pressione di 2.52·10⁵ Pa. Calcolare la pressione totale nel recipiente alla temperatura di 373 K.

$$m(\text{H}_2) = 2.02 \text{ g/mol} \implies n(\text{H}_2) = m(\text{H}_2) / m(\text{H}_2) = 0.495 \text{ mol}$$

$$T = 373 \text{ K} \\ V = 1.00 \text{ dm}^3 = 1.00 \text{ L} \implies P(\text{H}_2) = \frac{n(\text{H}_2) R T}{V} = 15.16 \text{ atm}$$

$$P(\text{He}) = 2.52 \cdot 10^5 \text{ Pa} = (2.52 \cdot 10^5 / 1.01 \cdot 10^5) \text{ atm} = 2.50 \text{ atm}$$

$$P_{\text{totale}} = P(\text{H}_2) + P(\text{He}) = 17.66 \text{ atm} = (17.66 \cdot 1.01 \cdot 10^5) \text{ Pa} = 17.84 \cdot 10^5 \text{ Pa}$$

Esempio:

Il perclorato di ammonio esplode per riscaldamento producendo acido cloridrico, azoto, ossigeno e acqua: $4\text{NH}_4\text{ClO}_4(\text{s}) \longrightarrow 4\text{HCl}(\text{g}) + 2\text{N}_2(\text{g}) + 5\text{O}_2(\text{g}) + 6\text{H}_2\text{O}(\text{g})$

Calcolare la pressione totale in un recipiente di 1.00 L quando 1.00 g del sale viene fatto esplodere a 723K.

$$m(\text{NH}_4\text{ClO}_4) = 117.50 \text{ g/mol} \implies n(\text{NH}_4\text{ClO}_4) = m / m = 0.00851 \text{ mol}$$

$$n(\text{HCl}) = n(\text{NH}_4\text{ClO}_4) = 0.00851 \text{ mol}$$

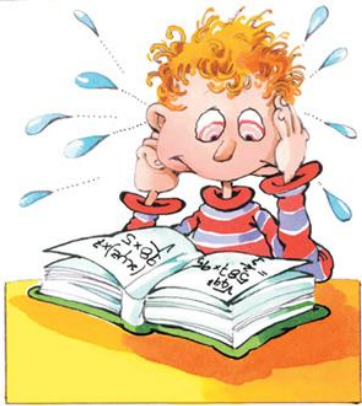
$$n(\text{N}_2) = n(\text{NH}_4\text{ClO}_4) / 2 = 0.00426 \text{ mol}$$

$$n(\text{O}_2) = n(\text{NH}_4\text{ClO}_4) \cdot 5 / 4 = 0.0106 \text{ mol}$$

$$n(\text{H}_2\text{O}) = n(\text{NH}_4\text{ClO}_4) \cdot 6 / 4 = 0.0128 \text{ mol}$$

$$P_{\text{totale}} = n_{\text{totali}} \cdot RT / V = 0.0362 \text{ mol} \cdot 723 \text{ K} \cdot 0.0821 \text{ atm L K}^{-1} \text{ mol}^{-1} / 1.00 \text{ L} = 2.15 \text{ atm}$$

Esercizi



1. Indicare tra quali delle seguenti molecole possono instaurarsi legami a idrogeno:

BH_3 HF NH_3 HCl H_2O H_2S

2. Calcolare il volume occupato da 0.355 moli di CO_2 alla temperatura di 25°C e alla pressione di 3 atm. Cosa succede all'aumentare della pressione del gas?
3. Una bombola contiene N_2 gassoso alla pressione di $1.51 \cdot 10^7$ Pa, il volume della bombola è 75 dm^3 . Calcolare la massa di azoto che è contenuta nella bombola a 295 K.
4. Calcolare il volume che 105 g di O_2 occupano in condizioni standard.
5. 5.0 moli di N_2 e 3.5 moli di O_2 sono poste in uno stesso recipiente e la pressione portata a $1.01 \cdot 10^7$ Pa con un pistone. Calcolare la pressione parziale dei due gas.

6. In un recipiente di 50 dm^3 di volume contenente H_2 ed He a 293 K ed a $5.05 \cdot 10^5 \text{ Pa}$, la pressione parziale di H_2 è $3.84 \cdot 10^5 \text{ Pa}$. Calcolare le moli di ciascun gas nel recipiente.
7. Un recipiente rigido di 2.00 dm^3 di volume contiene N_2 a 750 torr ed a 22°C . Calcolare la pressione totale nel recipiente dopo che vi sono stati introdotti anche 0.10 moli di He e 0.10 moli di Ne.