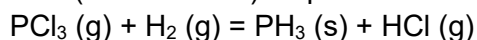


Prima Prova Parziale – CHIMICA – Compito B

- (6p) Rappresentare la geometria della molecola di AsCl_3Br_2 , descriverne i legami con la teoria del legame di valenza e prevederne la polarità: presentare il ragionamento seguito (As, Z = 33)
- (6p) Il diossano, solvente molto usato in chimica, mostra la seguente composizione percentuale: C 53.5%, H 9.2%, O 36.3%. 0.545 g di diossano, vaporizzati a 225 °C in un recipiente del volume di 1.55 L, generano una pressione di 124 torr. Calcolare la formula molecolare del diossano.
- (6p) Bilanciare le seguenti equazioni chimiche:
 - $\text{Fe}(\text{HSO}_4)_3 + \text{Ca}(\text{OH})_2 = \text{CaSO}_4 + \text{Fe}(\text{OH})_3 + \text{H}_2\text{O}$
 - $\text{K}_2\text{CrO}_4 + \text{FeCl}_2 + \text{KOH} = \text{Fe}(\text{OH})_3 + \text{Cr}(\text{OH})_3 + \text{KCl}$
 Assegnare i nomi ai composti della reazione a, sia in nomenclatura tradizionale che in nomenclatura IUPAC. Nota: Fe possiede 2 stati di ossidazione: +2 e +3

- (3p) Definire il criterio di spontaneità di una reazione chimica e calcolare in quale intervallo di temperature la seguente reazione (da bilanciare) è spontanea:



Composto	PCl_3	H_2	PH_3	HCl
$\Delta H_f^\circ (\text{kJ mol}^{-1})$	-287.0		5.4	- 92.31
$S_f^\circ (\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1})$	311.78	130.68	210.23	186.91

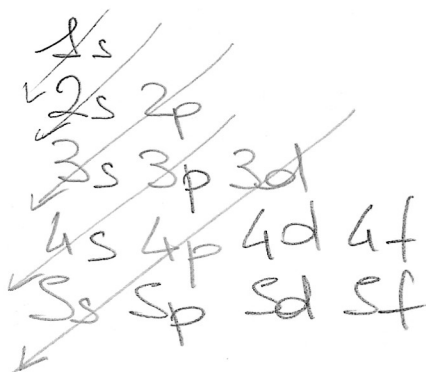
- (6p) Un reattore indeformabile del volume di 10.00 L viene riempito con 10 g di una miscela di Al e Fe metallici e con 44.68 g di HCl gassoso e portato alla temperatura di 350 K. In queste condizioni, i due metalli reagiscono con HCl formando AlCl_3 , FeCl_2 e sviluppando H_2 gassoso. Sapendo che, al termine della reazione, si sono formati 40.07 g della miscela di sali, calcolare:
 - La composizione in massa della miscela metallica iniziale;
 - La composizione in massa della miscela di sali prodotta dalla reazione;
 - La pressione totale nel contenitore, le pressioni parziali dei gas presenti e la composizione della miscela gassosa finale.
- (3p) Tra le quaterne quantiche presentate, individuare quella corretta, assegnare l'orbitale atomico corrispondente e spiegare per quale motivo queste quaterne quantiche sono sbagliate.

$n = 3; l = 0; m_l = 0; m_s = 1$

$n = 2; l = 1; m_l = 0; m_s = -1/2$

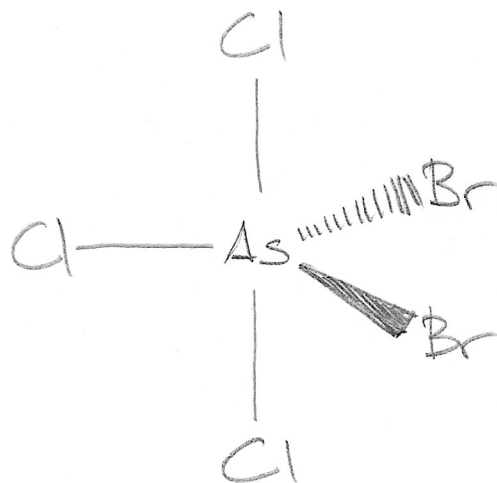
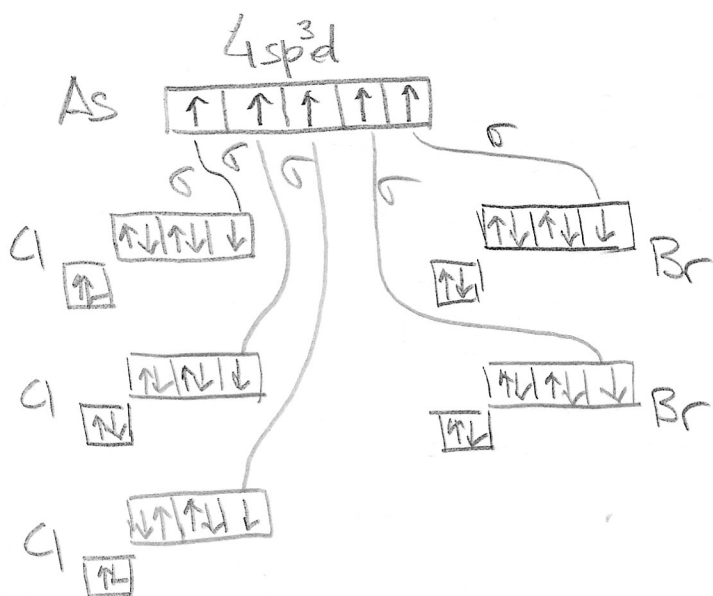
Masse atomiche:

H 1.00794 g/mol; C 12.0107 g/mol; O 15.9994 g/mol; Al 26.981538 g/mol; Cl 35.453 g/mol; Fe 55.845 g/mol.

COMPITO B**Es. 1** AsCl₃Br₂ As $Z=33$ Guscio di valenza: $4s^2 4p^3$

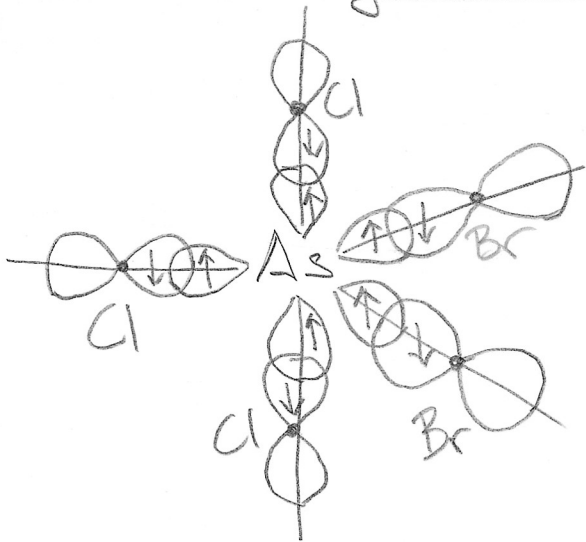
$$n^{\circ}e^- = 5(As) + 3 \cdot 1(Cl) + 2 \cdot 1(Br) = 10e^-$$

5 coppie strutturali

Geometria coppie strutturali: AX_5 Geometria molecolare AX_5 Δs ibridizzato sp^3d 

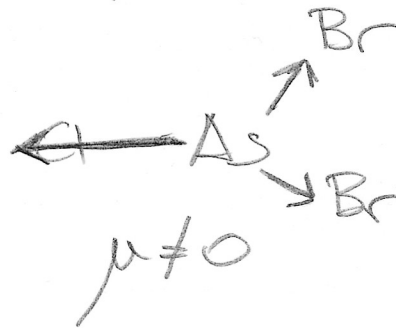
Br è meno elettronegativo di Cl. Di conseguenza, il legame As-Br è meno polare del legame As-Cl. Come conseguenza, la densità elettronica attorno ad As sarà maggiore nel legame As-Br rispetto al legame As-Cl. La coppia di legame As-Br sarà quindi più ingombrante della coppia As-Cl. In conclusione, gli atomi di Br occupano le posizioni meno ingombre nella geometria AX_5 , cioè quelle equatoriali.

Schema Legami σ

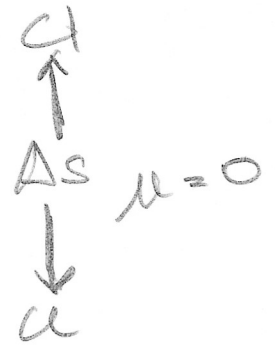


Polarità

Equatoriali:



Assiale:



La molecola è POLARE.

Es. 2 $PV = nRT = \frac{G}{MM} \cdot RT$

$$MM = \frac{GRT}{PV} = \frac{0,545 \cdot 0,0821 \cdot (273,15 + 225)}{\frac{124}{760} \cdot 1,55} = 88,14 \text{ g/mol}$$

Formula generale: $C_xH_yO_z$

$$x = \frac{MM \cdot \%C}{MA_C \cdot 100} = \frac{88,14 \cdot 53,5}{12,0107 \cdot 100} = 3,93 \approx 4$$

$$y = \frac{MM \cdot \%H}{MA_H \cdot 100} = \frac{88,14 \cdot 9,2}{1,00794 \cdot 100} = 8,04 \approx 8$$

$$z = \frac{MM \cdot \%O}{MA_O \cdot 100} = \frac{88,14 \cdot 36,3}{15,9994 \cdot 100} = 2,00$$

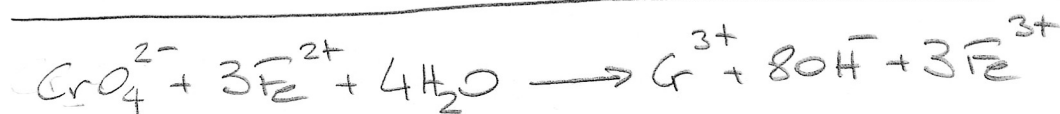
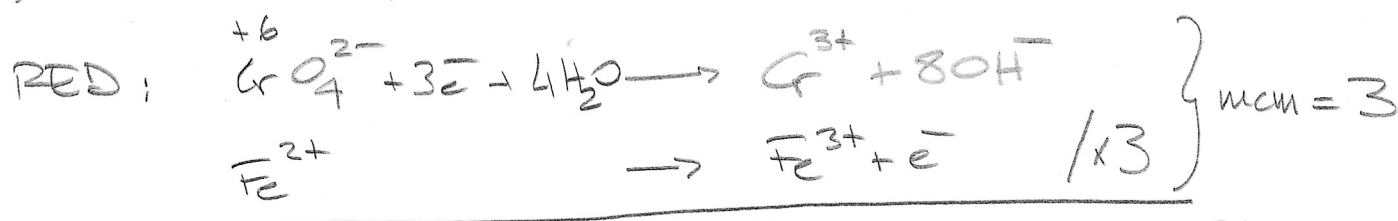
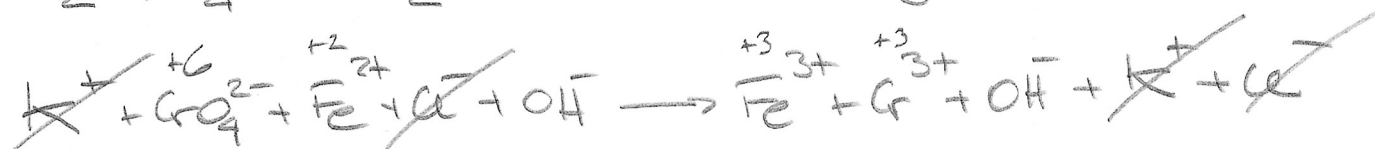
Formula molecolare = $C_4H_8O_2$

Es. 3 • Reazione a:



Composto	Tradizionale	IUPAC
$\text{Fe}(\text{HSO}_4)_3$	Idrogeno solfato ferrico	Tri tetraossosolfato (VI) di ferro (III)
$\text{Ca}(\text{OH})_2$	Idrossido di calcio	Idrossido di calcio
CaSO_4	Solfato di calcio	Tetraossosolfato (VI) di calcio
$\text{Fe}(\text{OH})_3$	Idrossido ferrico	Idrossido di ferro (III)
H_2O	Acque	Acque

• Reazione b:



Es. 4 Criterio di spontaneità: $\Delta G < 0$



$$\begin{aligned}\Delta H_{\text{reaz}}^\circ &= (\Delta H_{\text{f}, \text{PH}_3}^\circ + 3\Delta H_{\text{f}, \text{HCl}}^\circ) - (\Delta H_{\text{f}, \text{PCl}_3}^\circ + 3\Delta H_{\text{f}, \text{H}_2}^\circ) = \\ &= [5,4 + 3(-92,31)] - (-287,0 + 3 \cdot \phi) = 15,5 \text{ kJ mol}^{-1}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta S_{\text{reaz}}^\circ &= (S_{\text{f}, \text{PH}_3}^\circ + 3S_{\text{f}, \text{HCl}}^\circ) - (S_{\text{f}, \text{PCl}_3}^\circ + 3S_{\text{f}, \text{H}_2}^\circ) = \\ &= (210,23 + 3 \cdot 186,91) - (311,78 + 3 \cdot 130,68) = 64,74 \text{ J mol}^{-1} \text{K}^{-1}\end{aligned}$$

$$\Delta G_{\text{reaz}}^\circ = \Delta H_{\text{reaz}}^\circ - T \cdot \Delta S_{\text{reaz}}^\circ = 15,5 - 298,15 \cdot 64,74 \cdot 10^{-3} = -3,8 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Supponendo che ΔH_{reaz} e ΔS_{reaz} siano costanti con la temperatura:

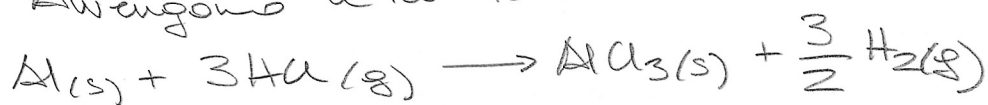
$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S < 0 \Rightarrow T\Delta S > \Delta H$$

Siccome $\Delta S > 0$:

$$T > \frac{\Delta H}{\Delta S} = \frac{15,5 \cdot 10^3}{64,74} = 239 \text{ K}$$

La reazione sarà spontanea al di sopra di 239 K.

Es. 5 Avengono le reazioni:



Considerando n_{Al} e n_{Fe} come le moli di Al e Fe nella miscela iniziale e tenendo conto della stechiometria delle reazioni:

$$m_{Al} = m_{Al_2O_3} = x$$

$$m_{Fe} = m_{FeCl_2} = y$$

$$\begin{cases} G_{Al+Fe} = m_{Al} \cdot MA_{Al} + m_{Fe} \cdot MA_{Fe} \end{cases}$$

$$\begin{cases} G_{Al_2O_3+FeCl_2} = m_{Al_2O_3} \cdot MM_{Al_2O_3} + m_{FeCl_2} \cdot MM_{FeCl_2} \end{cases}$$

$$\begin{cases} 10,00 = 26,981538x + 55,845y \end{cases}$$

$$\begin{cases} 40,07 = 133,340x + 126,751y \end{cases}$$

Risolvendolo: $x = 0,241 \text{ mol}$; $y = 0,0626 \text{ mol}$

$$G_{Al} = m_{Al} \cdot MA_{Al} = 0,241 \cdot 26,981538 = 6,50 \text{ g}$$

$$G_{Fe} = m_{Fe} \cdot MA_{Fe} = 0,0626 \cdot 55,845 = 3,50 \text{ g}$$

$$\%Al = \frac{G_{Al}}{G_{Al} + G_{Fe}} = \frac{6,50}{6,50 + 3,50} = 65,0\%$$

$$\%Fe = \frac{G_{Fe}}{G_{Al} + G_{Fe}} = \frac{3,50}{6,50 + 3,50} = 35,0\%$$

$$G_{Al_2O_3} = m_{Al_2O_3} \cdot MM_{Al_2O_3} = 0,241 \cdot 133,340 = 32,1 \text{ g}$$

$$G_{FeCl_2} = m_{FeCl_2} \cdot MM_{FeCl_2} = 0,0626 \cdot 126,571 = 7,92 \text{ g}$$

$$\%Al_2O_3 = \frac{G_{Al_2O_3}}{G_{Al_2O_3} + G_{FeCl_2}} = \frac{32,1}{32,1 + 7,92} = 80,3\%$$

$$\%FeCl_2 = \frac{G_{FeCl_2}}{G_{Al_2O_3} + G_{FeCl_2}} = \frac{7,92}{32,1 + 7,92} = 19,8\%$$

$$n_{\text{HCl, iniz}} = \frac{G_{\text{HCl}}}{MM_{\text{HCl}}} = \frac{44,68}{36,461} = 1,225 \text{ mol}$$

$$n_{\text{HCl, stech}} = 3n_{\text{Al}} + 2n_{\text{Fe}} = 3 \cdot 0,241 + 2 \cdot 0,0626 = 0,848 \text{ mol}$$

$$n_{\text{HCl, ecc}} = n_{\text{HCl, iniz}} - n_{\text{HCl, stech}} = 1,225 - 0,848 = 0,377 \text{ mol}$$

$$n_{\text{H}_2} = \frac{3}{2} n_{\text{Al}} + n_{\text{Fe}} = \frac{3}{2} \cdot 0,241 + 0,0626 = 0,424 \text{ mol}$$

$$P_{\text{HCl}} = \frac{n_{\text{HCl, ecc}} \cdot R \cdot T}{V} = \frac{0,377 \cdot 0,0821 \cdot 350}{10,00} = 1,083 \text{ atm}$$

$$P_{\text{H}_2} = \frac{n_{\text{H}_2} \cdot R \cdot T}{V} = \frac{0,424 \cdot 0,0821 \cdot 350}{10,00} = 1,218 \text{ atm}$$

$$P_{\text{Tot}} = P_{\text{HCl}} + P_{\text{H}_2} = 1,083 + 1,218 = 2,301 \text{ atm}$$

$$x_{\text{HCl}} = \frac{P_{\text{HCl}}}{P_{\text{Tot}}} = \frac{1,083}{2,301} = 0,471$$

$$x_{\text{H}_2} = \frac{P_{\text{H}_2}}{P_{\text{Tot}}} = \frac{1,218}{2,301} = 0,529$$

Es. 6

$n \quad l \quad m_l \quad m_s$

3 0 0

1

NON ACCETTABILE

$m_s = \pm 1/2$

2 1 0

$1/2$

Accettabili
Orbitale 2p