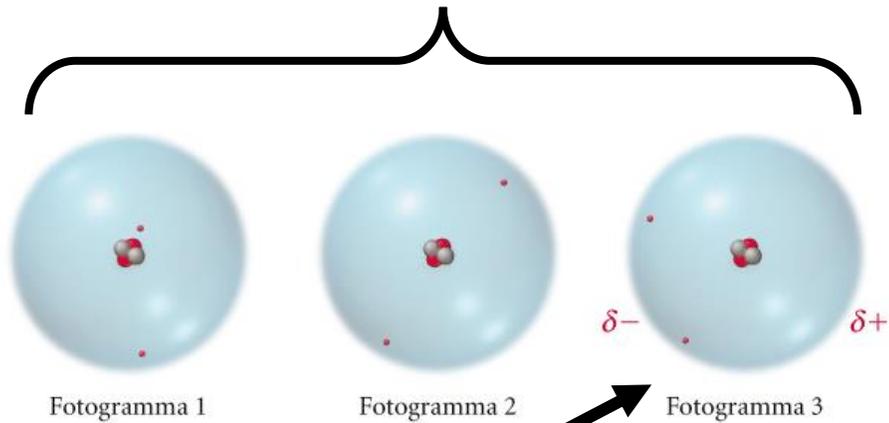


Elettroni come particelle in movimento

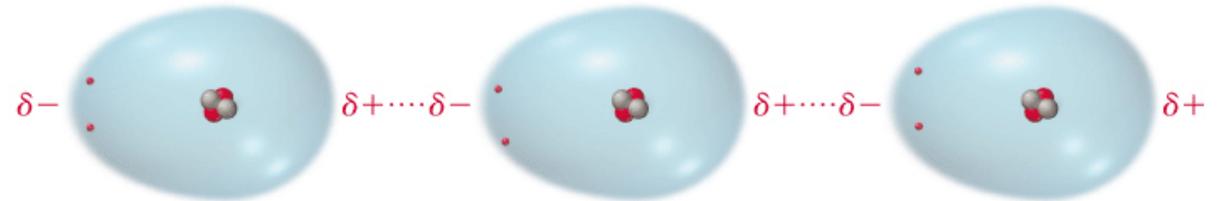
Atomo di elio



Formazione di un
dipolo istantaneo

Forze di dispersione

Un dipolo istantaneo su ciascun atomo di elio induce dei dipoli negli atomi vicini, che si attraggono l'un l'altro.



Formazione di dipoli indotti

Forza di dispersione (o di London, 1930)

Equazione di London

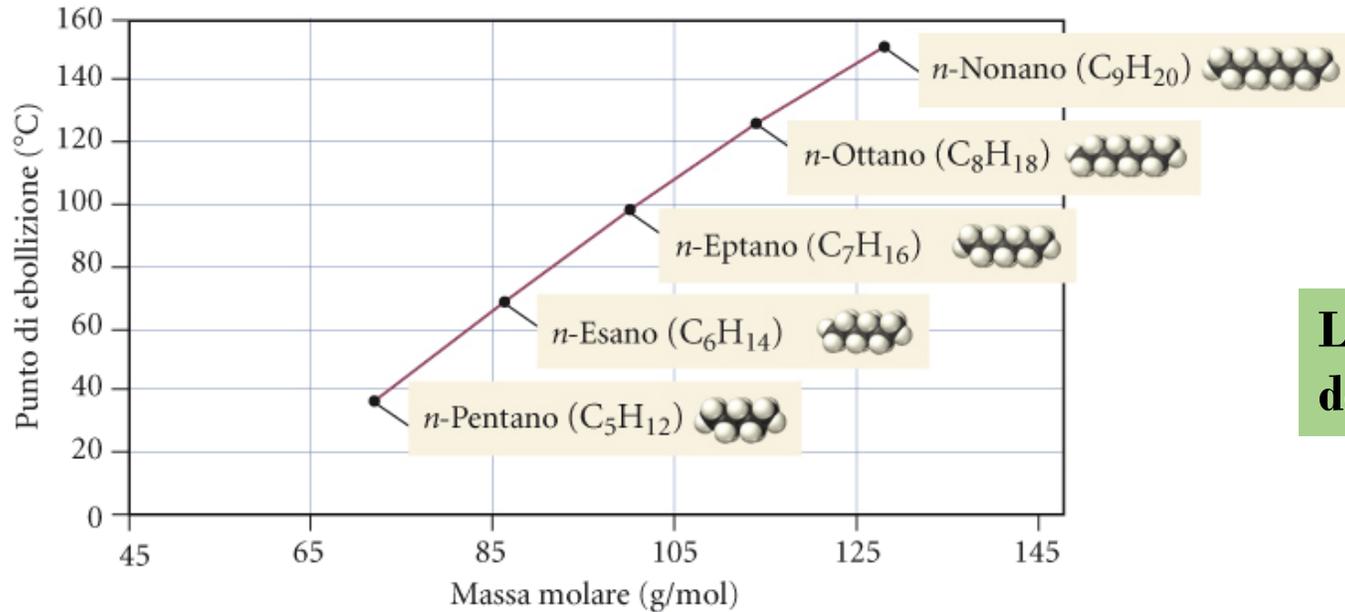
$$E_L = -\frac{3}{4} \frac{E_{\text{ion}} \cdot \alpha^2}{r^6}$$

Polarizzabilità (α): propensione di un atomo a deformare la propria nuvola elettronica in un campo elettrico

TABELLA 11.3 Punti di ebollizione dei gas nobili

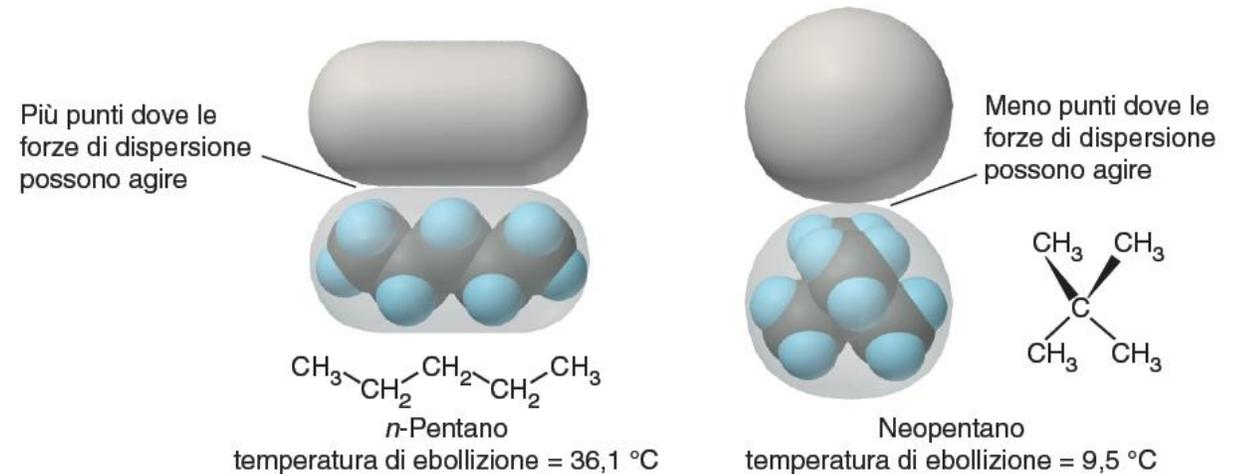
Gas nobile	Massa molare (g/mol)	Punto di ebollizione (K)
He 	4.00	4.2
Ne 	20.18	27
Ar 	39.95	87
Kr 	83.80	120
Xe 	131.30	165

Dipendenza della forza di dispersione

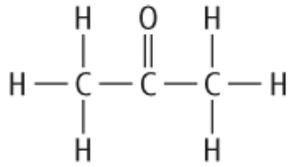


La forza di dispersione aumenta all'aumentare della massa molare

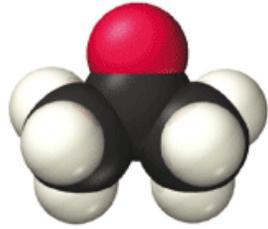
La forza di dispersione aumenta all'aumentare della superficie di contatto



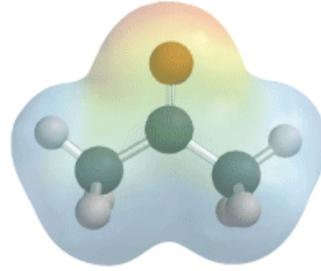
Forza dipolo-dipolo (o di Keesom, 1912)



Formula di struttura



Modello molecolare



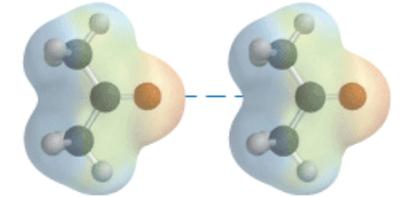
Mappa del potenziale elettrostatico

Forze dipolo-dipolo

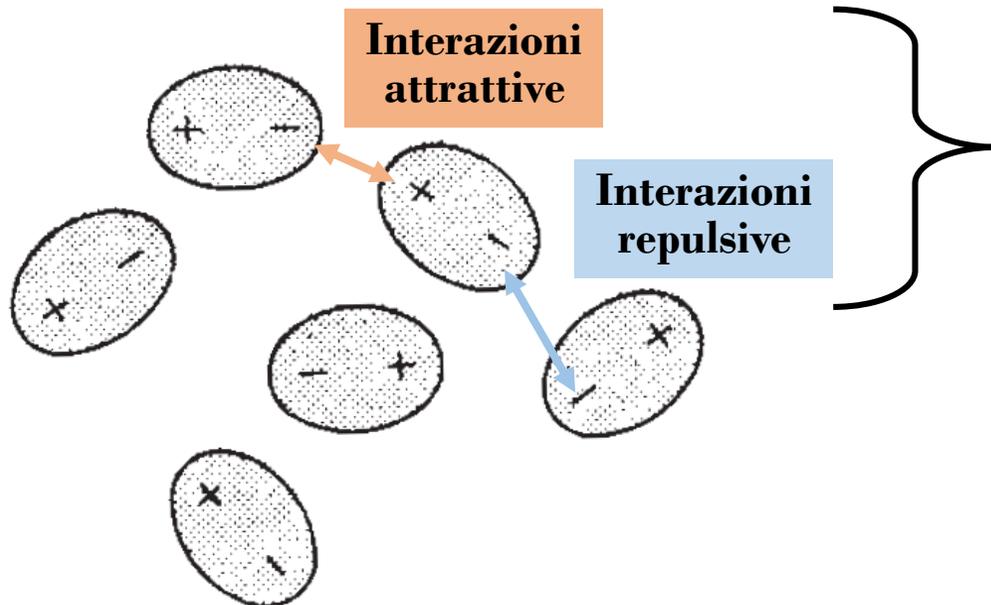
L'estremità positiva di una molecola polare è attratta dall'estremità negativa di una molecola vicina.



Modello molecolare



Mappa del potenziale elettrostatico



In media prevalgono le interazioni attrattive, conducendo ad una energia pari a:

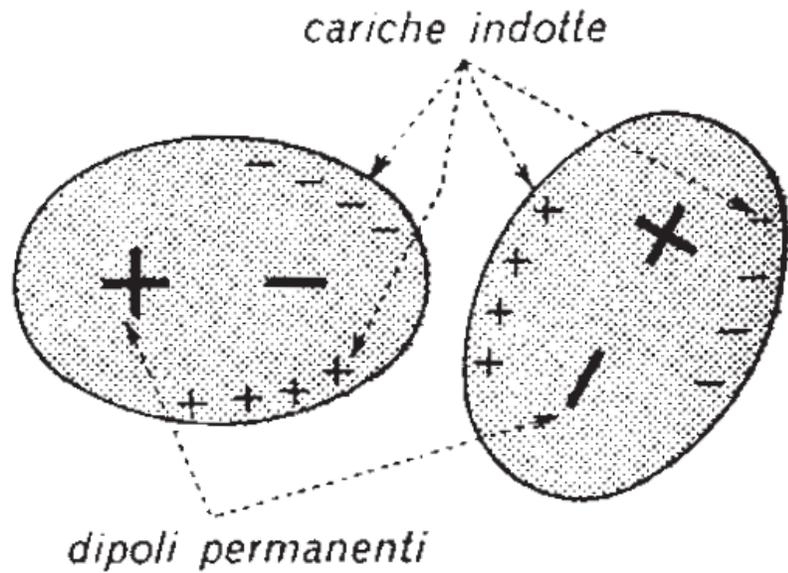
$$E_{or} = - \frac{2\mu^4}{3kT} \frac{1}{r^6}$$

μ è il momento di dipolo

Effetti della polarità sulle forze di interazione

Nome	Formula	Massa molare (g/mol)	Struttura	p.e. (°C)	p.f. (°C)	
Formaldeide	CH ₂ O	30.03	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \end{array}$		-19.5	-92
Etano	C ₂ H ₆	30.07	$\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} \\ & \\ \text{H}-\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$		-88	-172

Forza dipolo-dipolo indotto (o di Debye, 1920)



Dipoli mutuamente indotti in molecole polari con orientazione casuale l'una rispetto all'altra

$$E_{ind} = - \frac{2a\mu^2}{r^6}$$

L'energia dipende sia dalla polarizzabilità che dal momento di dipolo permanente

Forze di van der Waals

**Dispersione
London, 1930**

universali

**Dipolo-dipolo
Keesom, 1912**

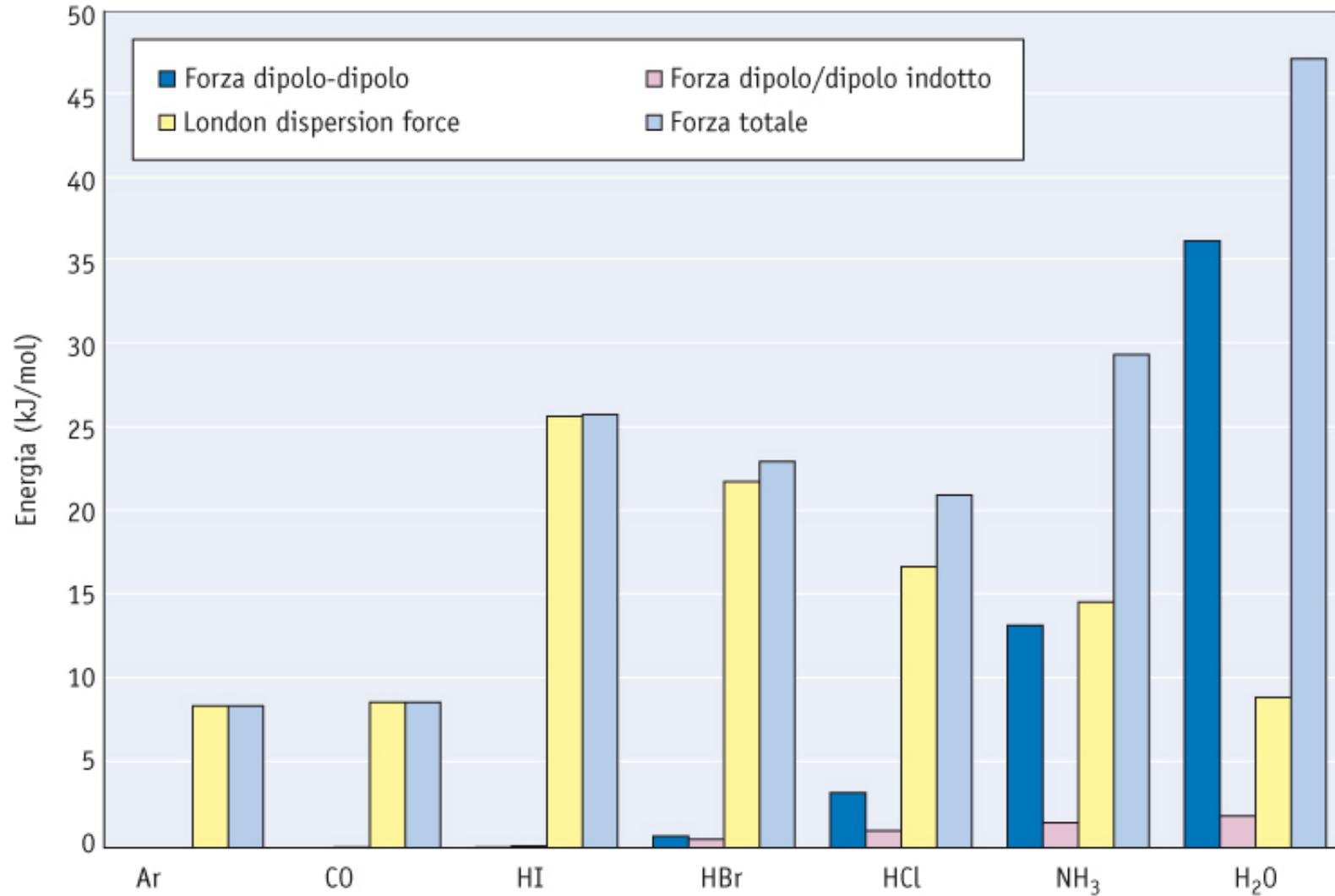
**Solo con dipoli
permanenti**

**Dipolo-dipolo indotto
Debye, 1920**

**Contributo
minoritario**

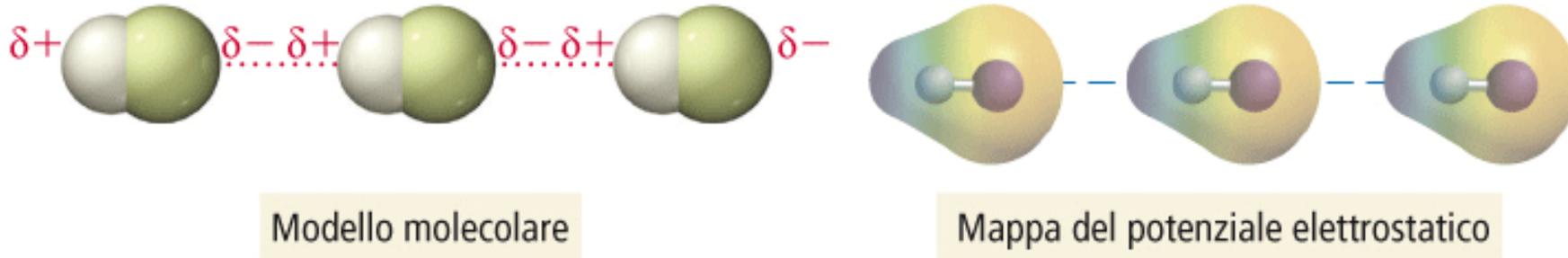
$$E \propto 1/r^6$$

Forze di van der Waals



Legame ad idrogeno

Quando gli H legano direttamente F, O o N, gli atomi legati acquisiscono delle cariche parziali relativamente grandi, dando luogo a forti attrazioni dipolo-dipolo tra molecole vicine.



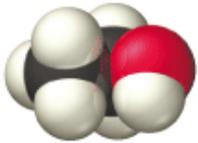
Si manifestano solo se in una molecola sono presenti i seguenti gruppi:

-O-H

-N-H

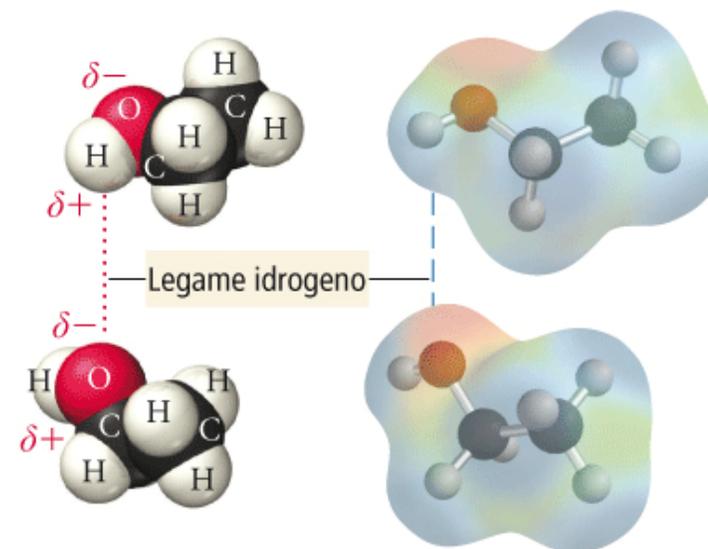
F-H

Effetti del legame ad idrogeno sulle forze di interazione

Nome	Formula	Struttura	Massa molare (g/mol)	p.e. (°C)	p.f. (°C)
Etanolo	C_2H_6O		46.07	78.3	-114.1
Dimetil etere	C_2H_6O		46.07	-22.0	-138.5

Legame idrogeno nell'etanolo

La parziale carica positiva su H è attratta con forza dalla parziale carica negativa su O.

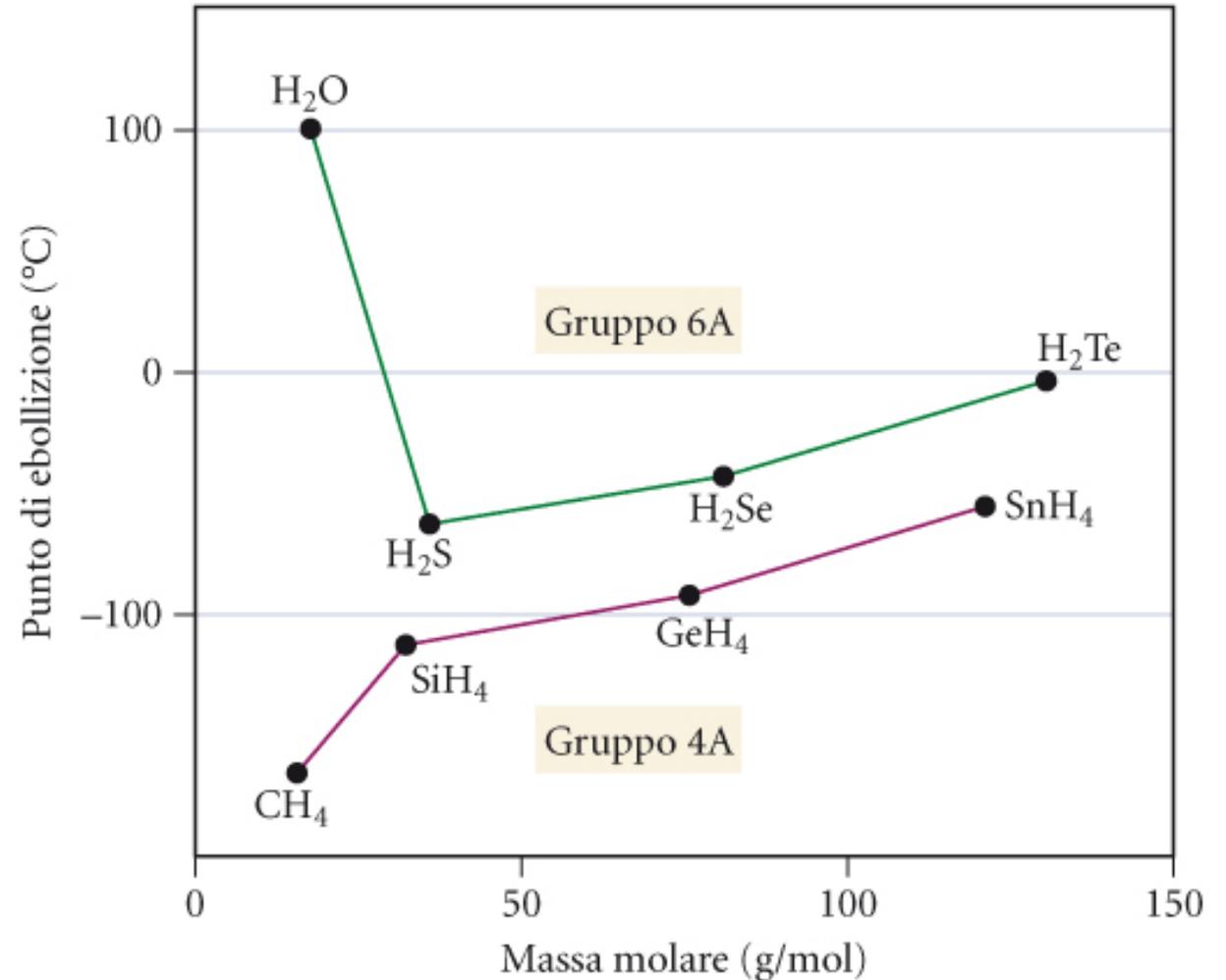
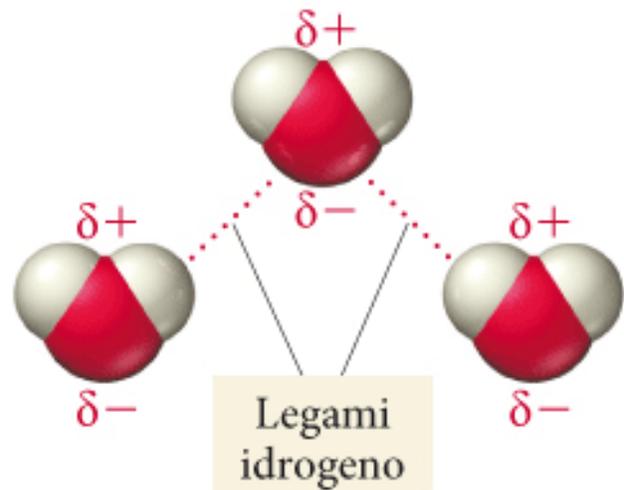
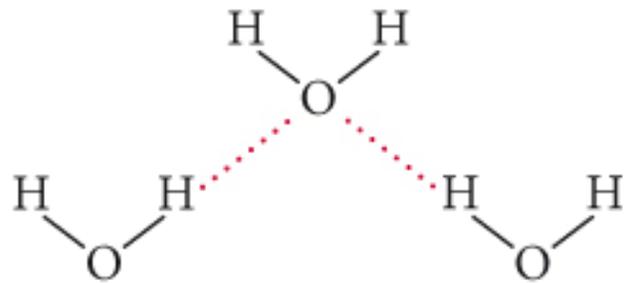


Modelli molecolari

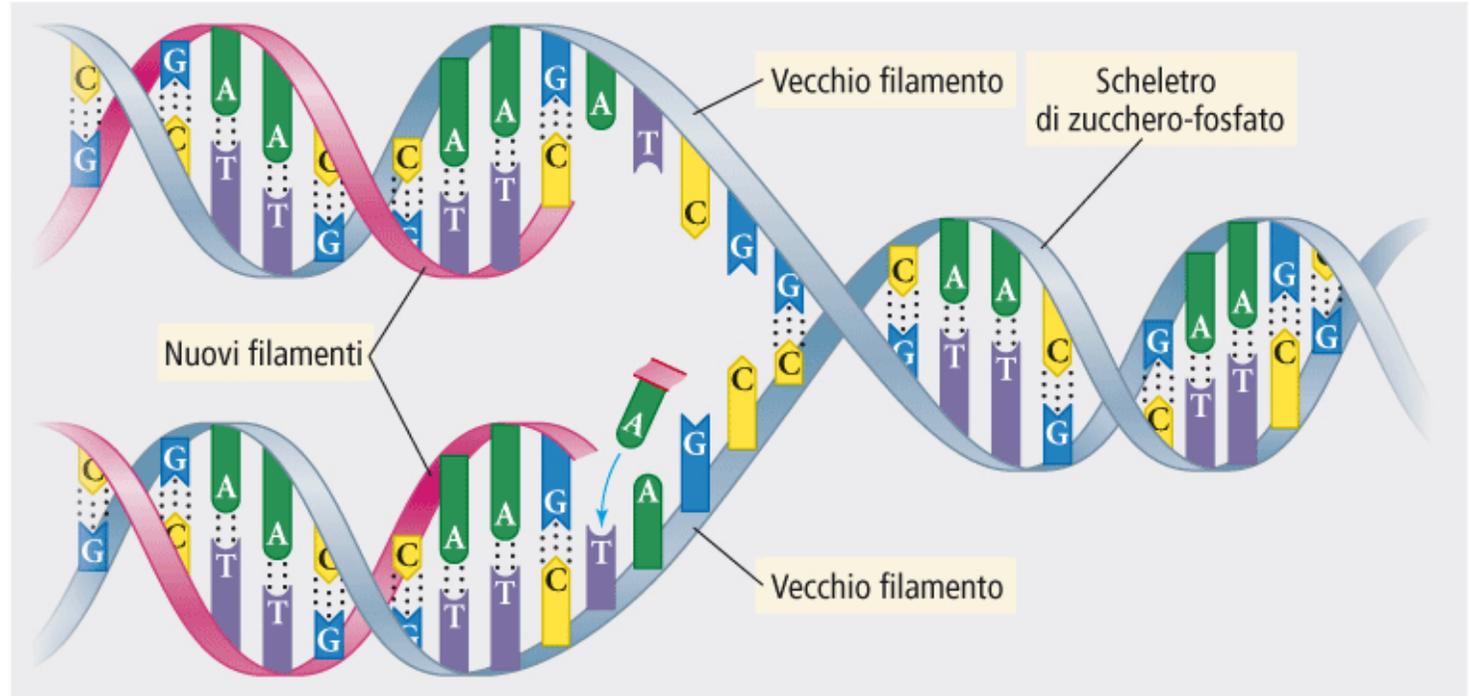
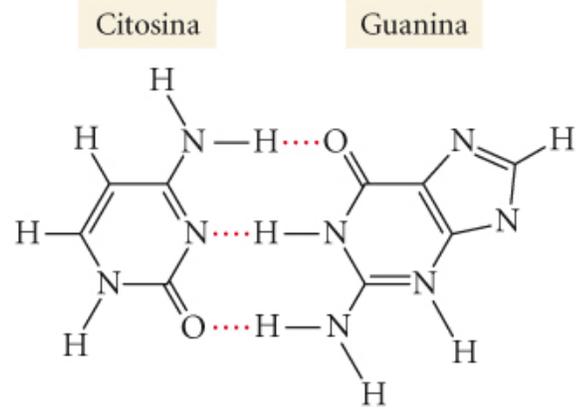
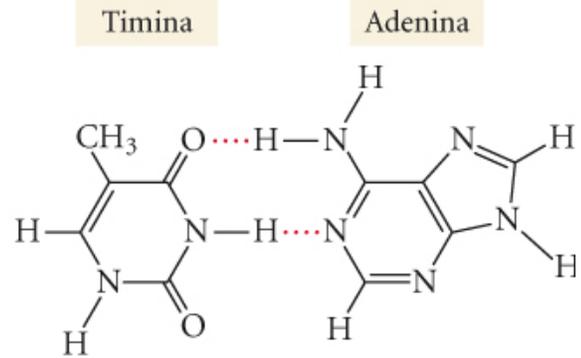
Mappe del potenziale elettrostatico

Effetti del legame ad idrogeno sulle forze di interazione

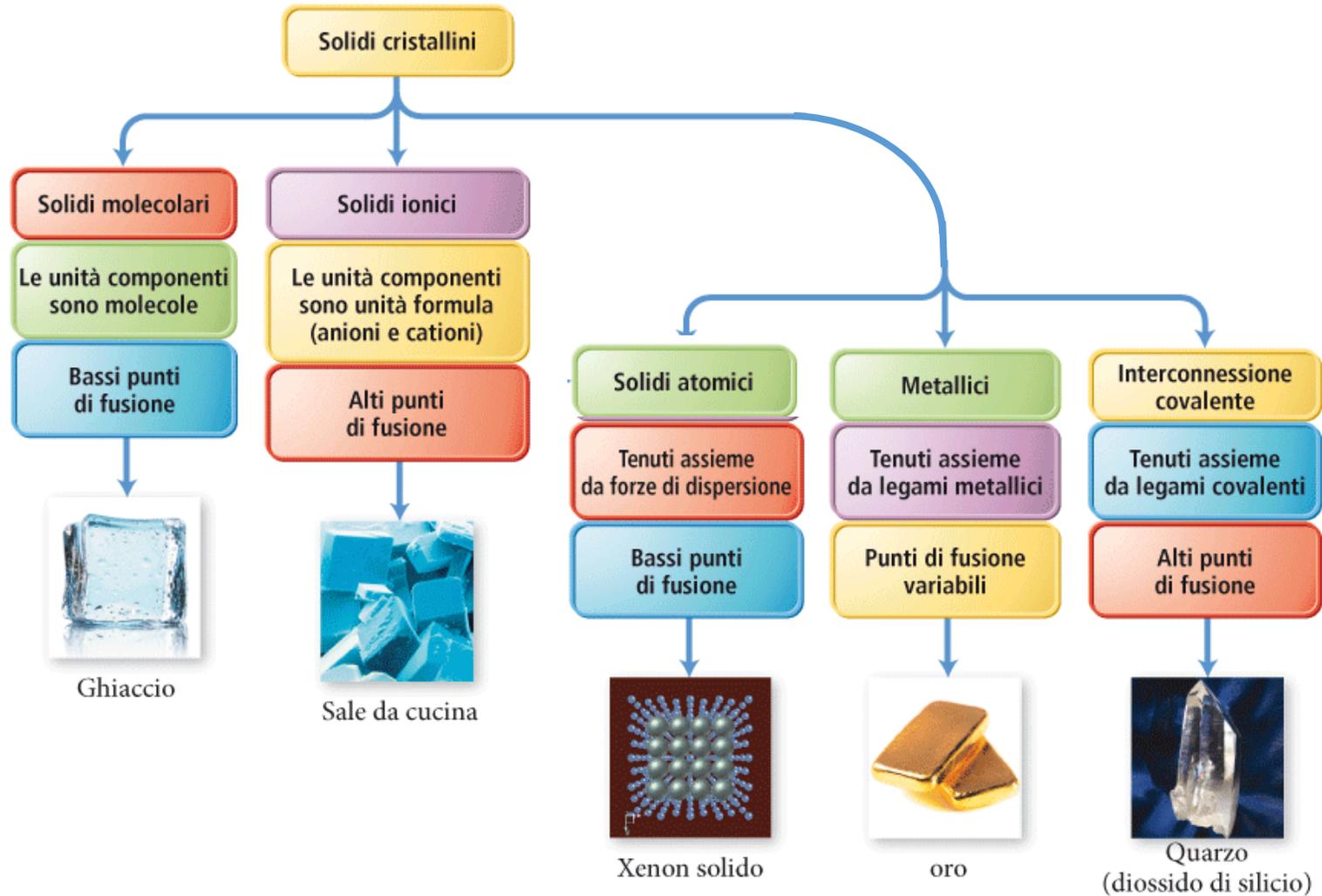
Legame idrogeno nell'acqua



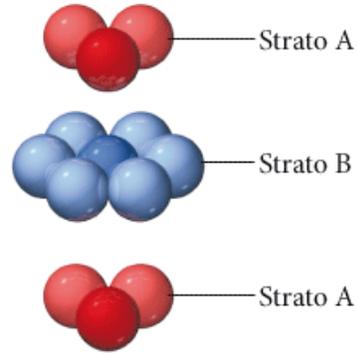
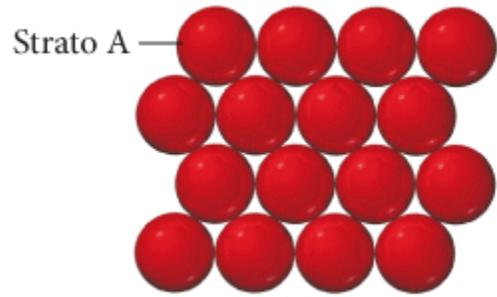
Il legame ad idrogeno nel DNA



Descrizione dei solidi

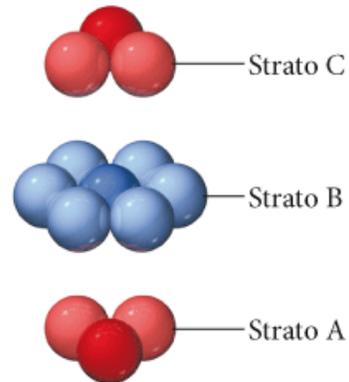
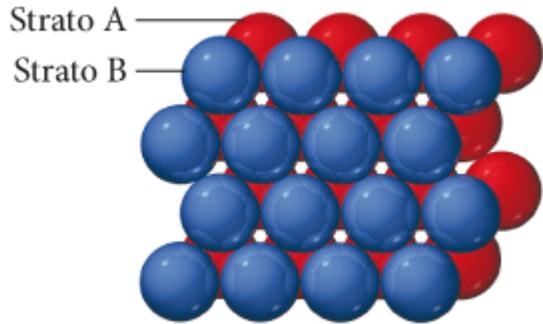
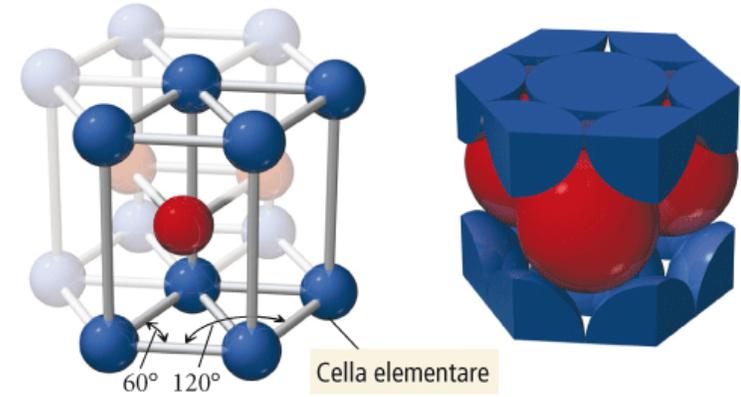


Impaccamento compatto



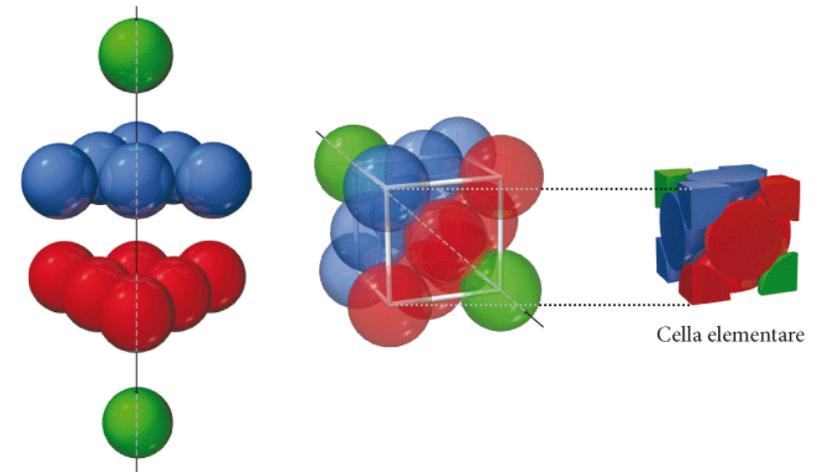
Impaccamento esagonale compatto

Struttura ad impaccamento esagonale compatto

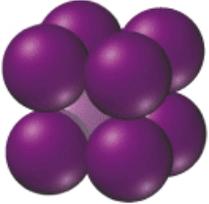
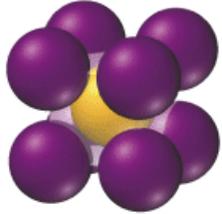
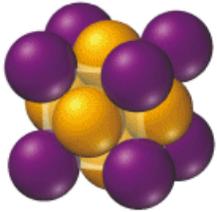


Impaccamento cubico compatto

Impaccamento cubico compatto = cella cubica a facce centrate



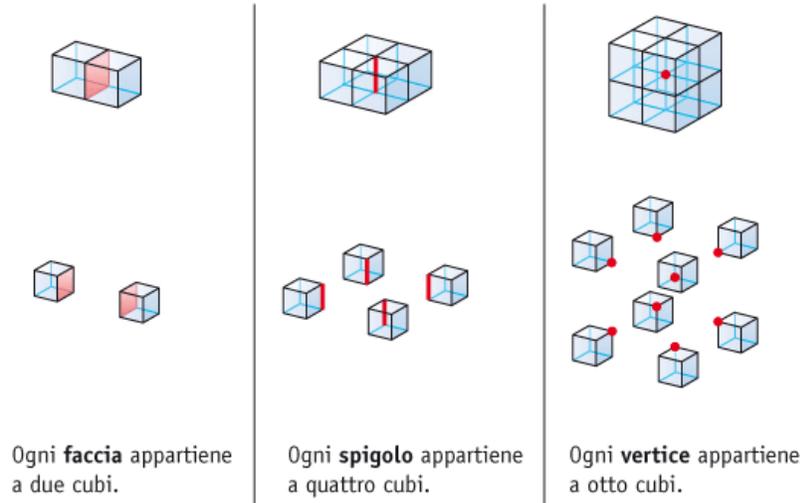
Reticoli cubici

Nome della cella cubica	Atomi per cella elementare	Struttura	Numero di coordinazione	Lunghezza degli spigoli in termini di r	Efficienza dell'impaccamento (frazione di volume occupato)
Cubica semplice	1		6	$2r$	52%
Cubica a corpo centrato	2		8	$\frac{4r}{\sqrt{3}}$	68%
Cubica a facce centrate	4		12	$2\sqrt{2}r$	74%

▲ **FIGURA 12.4 I reticoli cristallini cubici** I diversi colori usati per gli atomi in questa figura sono stati usati solo per maggiore chiarezza. Tutti gli atomi in ogni struttura sono identici. Le celle elementari, come quelle cubiche di questa figura, sono in genere rappresentate con atomi "interi", ma in realtà solo una porzione dell'atomo è inclusa nella cella.

Reticoli cubici: numero di coordinazione

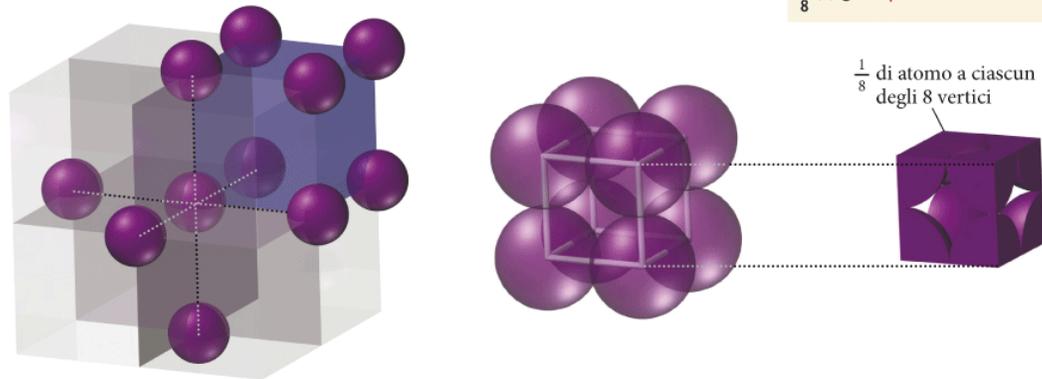
Per il calcolo del numero di coordinazione, ogni atomo interno alla cella vale 1, ogni atomo sulla faccia vale $\frac{1}{2}$, ogni atomo sullo spigolo vale $\frac{1}{4}$ e ogni atomo sul vertice vale $\frac{1}{8}$.



Cella elementare cubica semplice

Numero di coordinazione = 6

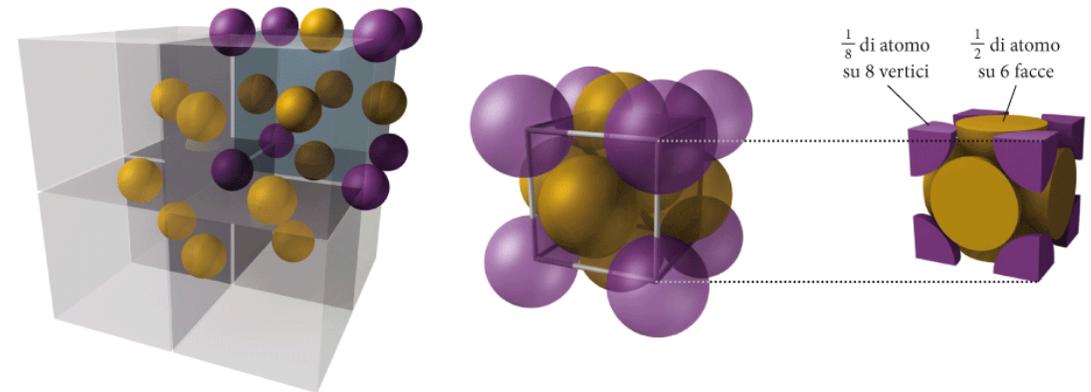
Atomi per cella elementare = $\frac{1}{8} \times 8 = 1$



Cella elementare cubica a facce centrate

Numero di coordinazione = 12

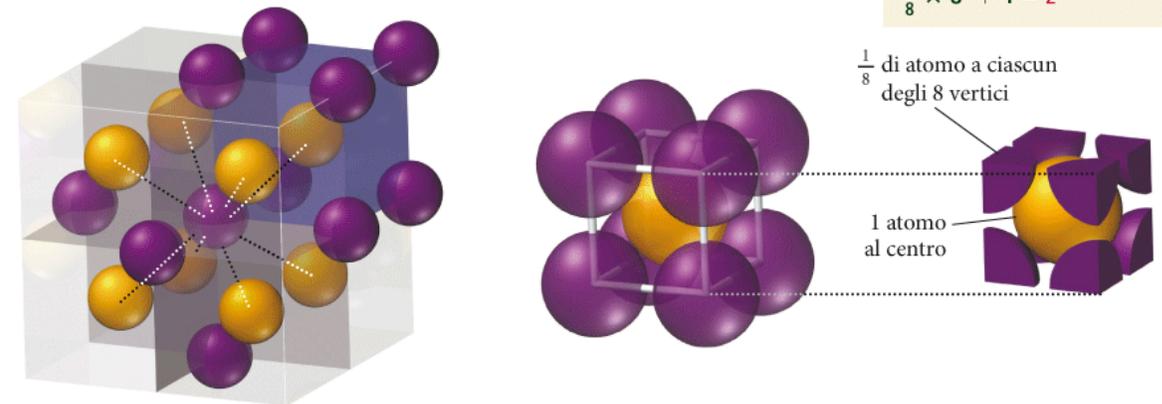
Atomi per cella elementare = $(\frac{1}{8} \times 8) + (\frac{1}{2} \times 6) = 4$



Cristallo cubico a corpo centrato

Numero di coordinazione = 8

Atomi per cella elementare = $\frac{1}{8} \times 8 + 1 = 2$



Esempio 12.2 Calcolo dell'efficienza di impaccamento di una cella elementare

Calcolare l'efficienza di impaccamento di una cella elementare cubica semplice.

RISULTATO

L'efficienza di impaccamento è definita come il rapporto tra il volume della cella elementare occupato dagli atomi e il volume della cella elementare stessa, tutto moltiplicato per 100.

$$\text{Efficienza di impaccamento} = \frac{V_{\text{atomo}}}{V_{\text{cella elementare}}} \times 100$$

Per prima cosa, si determina il volume occupato dagli atomi. Ciascuna cella elementare contiene un atomo, perciò il volume occupato dagli atomi della cella elementare è semplicemente il volume di un atomo.

$$V_{\text{atomo}} = \frac{4}{3} \pi r^3$$

Quindi si calcola il volume del cubo in termini di raggio degli atomi. Il volume di un cubo è dato dalla lunghezza dello spigolo elevata al cubo; la lunghezza dello spigolo della cella cubica semplice è $2r$.

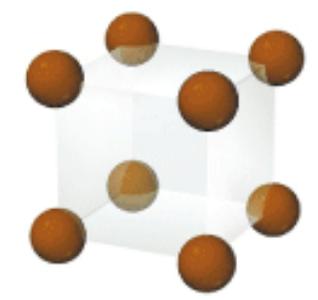
$$\begin{aligned} V_{\text{cella elementare}} &= l^3 \\ &= (2r)^3 \\ &= 8r^3 \end{aligned}$$

Si calcola l'efficienza di impaccamento dividendo il volume dell'atomo per il volume della cella elementare e moltiplicando per 100.

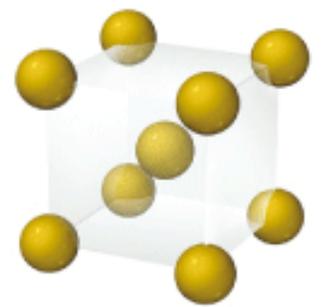
$$\begin{aligned} \text{Efficienza di impaccamento} &= \frac{V_{\text{atomo}}}{V_{\text{cella elementare}}} \times 100 \\ &= \frac{\frac{4}{3} \pi r^3}{8r^3} \times 100 \\ &= \frac{4}{3} \frac{\pi r^3}{8r^3} \times 100 \\ &= \frac{4}{24} \pi \times 100 = 52.36\% \end{aligned}$$

Reticoli metallici

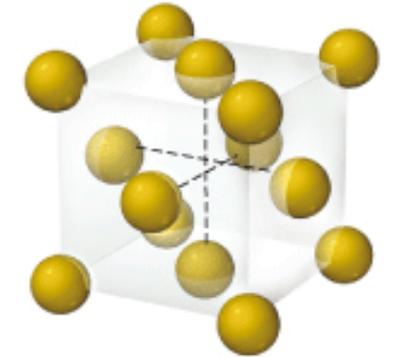
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac															



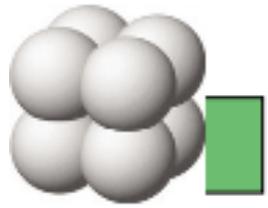
(a) Polonio



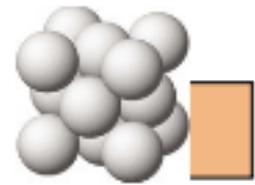
(b) Tungsteno



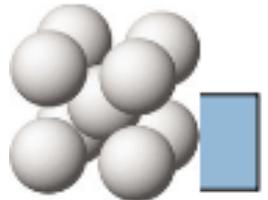
(c) Nichel



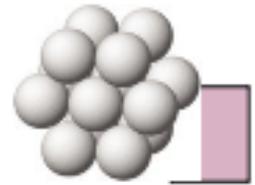
Cubico primitivo



Cubico compatto
(Cubico a facce centrate)



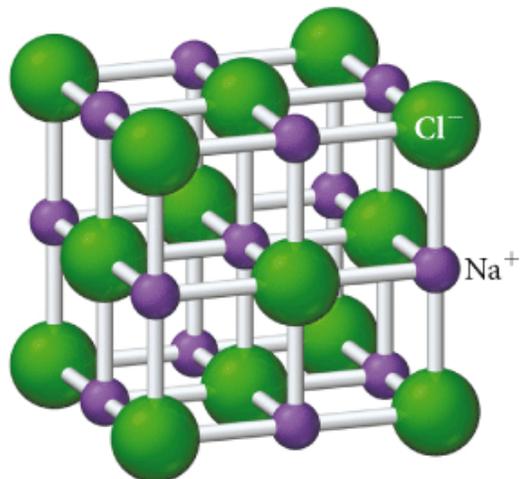
Cubico a corpo centrato



Esagonale compatto

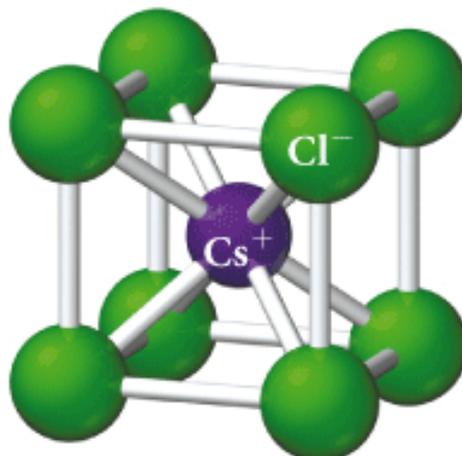
Reticoli ionici

Cloruro di sodio (NaCl)



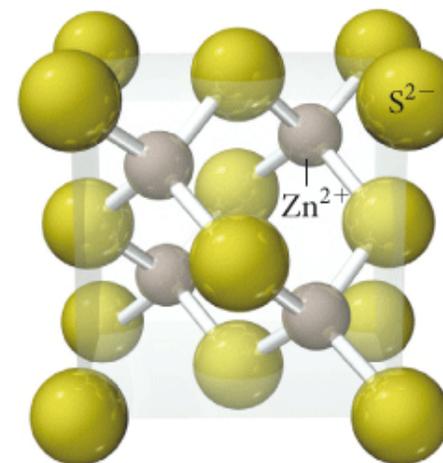
**Reticolo cubico
a facce centrate
dei cloruri**

Cloruro di cesio (CsCl)



**Reticolo cubico
primitivo dei
cloruri**

Zincoblenda (ZnS)

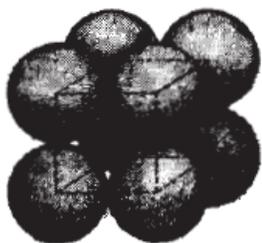


**Reticolo cubico
a facce centrate
dei solfuri**

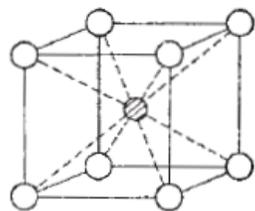
Solo reticoli cubici degli anioni

Reticoli ionici

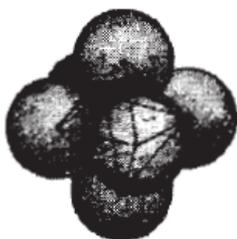
In funzione delle dimensioni relative dei due ioni si ottengono coordinazioni diverse



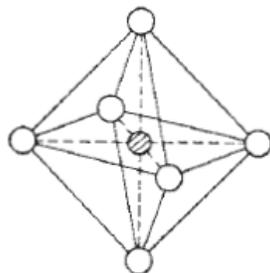
a - Coordinazione cubica



Esempio:
cloruro di cesio, CsCl;



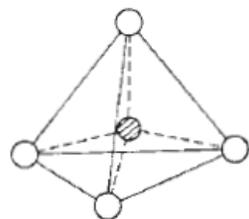
b - Coordinazione ottaedrica



Esempio:
cloruro di sodio, NaCl;



c - Coordinazione tetraedrica

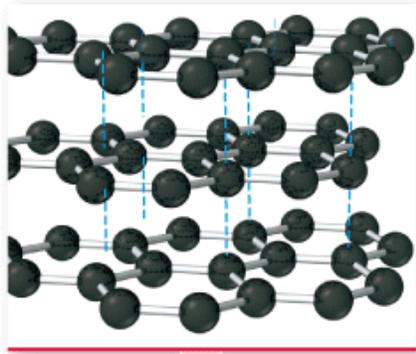


Esempio:
blenda, ZnS.

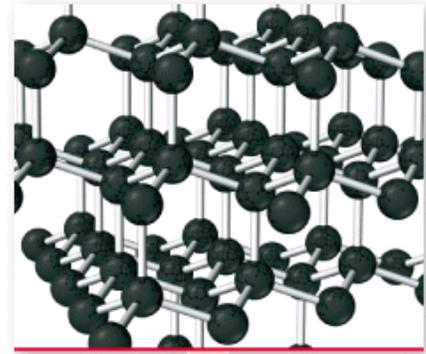
Rapporto dei raggi ionici e strutture reticolari di alcuni composti ionici di tipo M^+X^- .

Numero di coordinazione	Tipo di coordinazione	Valore del rapporto r_+/r_-	Modello strutturale	Esempi	
				Composto	r_+/r_-
8	cubica	$\frac{r^+}{r^-} > 0,732$	CsCl	CsCl	0,922
				CsBr	0,852
				TlCl	0,773
				TlBr	0,714
6	ottaedrica	0,732—0,414	NaCl	KCl	0,734
				RbI	0,676
				NaCl	0,541
				NaI	0,447
4	tetraedrica	0,414—0,225	ZnS (blenda)	ZnS	0,389
				ZnSe	0,366
				BeO	0,207

Reticoli covalenti



(a) Grafite



(b) Diamante

