

Chimica

Paolo Bettelini

Contents

1	Chimica	3
1.1	Notazione scientifica	3
1.2	Sistema Internazionale	4
1.2.1	Grandezze fondamentali	4
1.2.2	Grandezze derivate	4
1.2.3	Misure	4
2	Trasformazioni	5
3	Classificazione	6
3.1	Definizione	6
3.2	Soluzioni (miscugli omogenei)	7
3.3	Tecniche di separazione	7
4	Radioactivity	8
4.1	Definition	8
4.2	Decay	8
4.3	Half-life	8
4.4	Types of radiations	8
5	Energy levels	9
5.1	Ionic bond	9
5.2	Metallic bond	9
5.3	Covalent bond	9
5.4	Electronegativity	9
6	Acids	10
7	Redox	11
7.1	Definition	11
7.2	Oxidation State	11
7.3	Spontaneous reactions	11
8	Polarità	12
9	Lgami secondari (forze intermolecolari)	12
9.1	Dissoluzione del sale nell'acqua	12
9.2	Forze deboli nell'H ₂ O	12
9.3	Sviluppo del calore nelle reazioni	13
10	Termodinamica chimica	15
10.1	Teoria degli urti efficaci	15
10.2	Equilibrio	17

11 Isotopi dell'idrogeno	19
11.1 Deuterio	19
11.2 Trizio	19
12 Acqua con deuterio e trizio	19
12.1 Densità	19

1 Chimica

Definizione Sistema

Con *sistema* si intende un oggetto o insieme di oggetti isolati di cui si studiano le proprietà termodinamiche.

Definizione Ambiente

Con *ambiente* si intende tutto ciò che si trova al di fuori del sistema e che è in grado di provocare in esso una modifica delle proprietà termodinamiche.

Sistema \subseteq Ambiente \subseteq Universo.

Un sistema può essere:

- **aperto:** se scambia materia/energia con l'ambiente;
- **chiuso:** se scambia solo energia con l'ambiente;
- **isolato:** se non scambia né energia né materia con l'ambiente.

Studiare un sistema significa descrivere le sue proprietà

- **Qualitative:** possono essere definite senza avvalersi di misure.
- **Quantitative:** richiedono delle misure.

Le proprietà misurabili sono delle *grandezze*.

1.1 Notazione scientifica

La notazione scientifica viene espressa come

$$a \cdot 10^k, \quad a \in [1, 10)$$

1.2 Sistema Internazionale

1.2.1 Grandezze fondamentali

Grandezza fisica	Simbolo della grandezza fisica	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	i_v	candela	cd

1.2.2 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	kilogrammo al metro cubo	kg/m^3	
Forza	newton	N	$N = kg \cdot m/s^2$
Pressione	pascal	Pa	$Pa = N/m^2$
Energia, lavoro, calore	joule	J	$J = N \cdot m$
Velocità	metri al secondo	m/s	

1.2.3 Misure

Sottomultiplo	Prefisso	Simbolo	Multiplo	Prefisso	Simbolo
10^{-1}	deci-	d-	10	deca-	da-
10^{-2}	centi-	c-	10^2	etto-	h-
10^{-3}	milli-	m-	10^3	kilo-	k-
10^{-6}	micro-	μ -	10^6	mega-	M-
10^{-9}	nano-	n-	10^9	giga-	G-
10^{-12}	pico-	p-	10^{12}	tera-	T-

2 Trasformazioni

Le trasformazioni possono essere classificate come *chimiche* o *fisiche*.

Definizione Trasformazione chimica

Una *trasformazione chimica* modifica la sostanza.

Nelle trasformazioni chimiche, gli atomi sono gli stessi ma gli elementi sono diversi. Le particelle quindi mutano.

Definizione Trasformazione fisica

Una *trasformazione fisica* non modifica la materia ma il suo stato.

Nelle trasformazioni fisiche, la materia mantiene le sue proprietà e rimane invariata.

Esempio Trasformazioni chimiche

- Combustione di una candela (anche fisica).
- Cottura di un uovo (le proteine cambiano).
- Formazione della ruggina.

Esempio Trasformazioni fisica

- Combustione di una candela (anche chimica).
- Sbucciare una mela.
- Scaldare il tiosolfato di sodio.
- Dissoluzione dello zucchero nell'acqua.

3 Classificazione

3.1 Definizione

Definizione Sostanza pura elementare

Una *sostanza pura elementare* è composta da un solo tipo di elemento.

Definizione Sostanza pura composta

Una *sostanza pura composta* è composta da un solo tipo di composto.

Definizione Soluzione

Una *soluzione* è una sostanza composta da diversi tipi di composti in maniera omogenea.

Esempio Sostanza pura composta

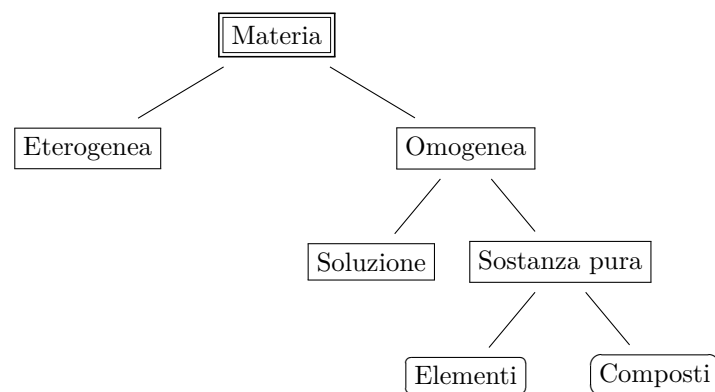
Acqua (H_2O)

Esempio Sostanza pura elementare

Azoto (N)

Esempio Soluzione

$50\%N + 50\%H_2$



- La materia può essere classificata come materia *eterogenea* e materia *omogenea*.
- La materia omogenea può essere classificata come *miscuglio omogeneo* (soluzione) oppure come *sostanza pura*.
- Le sostanze pure possono essere classificati come *elementi* oppure *composti*.

3.2 Soluzioni (miscugli omogenei)

Ogni soluzione è caratterizzata da un *soluto* ed un *solvente*.

Definizione Solubilità

La *solubilità* è la quantità massima che una sostanza può essere sciolta da una determinata quantità di solvente.

La solubilità dipende dalle proprietà chimica e altri fattori come la temperatura. La solubilità dei gas diminuisce con l'aumento della temperatura.

Una soluzione è detta *satura* o *insatura* se ha raggiunto il suo quantitativo massimo o meno.

Quando un soluto viene sciolto in un solvente, il volume della soluzione aumenta, ma meno della somma dei due volumi. Questo è dato dal fatto che il soluto prende spazio fra le molecole del solvente.

3.3 Tecniche di separazione

Definizione Decantazione

La *decantazione* si usa di solito per separare due liquidi di densità diversa sfruttando la gravità.

Esempio Decantazione

la separazione dell'olio e l'acqua.

Definizione Distillazione

La *distillazione* sfrutta i diversi punti di ebollizione di due liquidi per separarli. La miscela viene riscaldata fino a quando solo uno delle due componenti diventa vapore, per poi spostarla e riaffreddarla.

Definizione Cromatografia

La *cromatografia* sfrutta la tendenza delle sostanze a sciogliersi o interagire con diverse specie chimiche.

Definizione Estrazione

L'*estrazione* si basa sulla maggiore o minore solubilità di un componente di un miscuglio in una certa miscela.

Definizione Filtrazione

TODO

Definizione Centrifugazione

TODO

4 Radioactivity

4.1 Definition

Radioactivity is a set of physical-nuclear processes through which some unstable or radioactive atomic nuclei decay, in a certain period of time called decay time.

An unstable nuclei will keep emitting radiations and transmuting to other nuclei until the atom is stable.

4.2 Decay

The mass of a radioactive material will decrease exponentially.

$$M(t) = M_0 \cdot e^{-kt}$$

$M(t)$ is the mass (or number of particles) after a certain time t . M_0 is the initial mass and k is the rate of decay.

4.3 Half-life

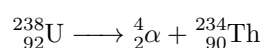
The time of half-life is given by $t_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{k}$.

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}M_0 &= M_0 e^{-kt} \\ \frac{1}{2} &= e^{-kt} \\ \ln\left(\frac{1}{2}\right) &= -kt \\ t &= \frac{\ln 2}{k}\end{aligned}$$

4.4 Types of radiations

There are three types of radiations that can be emitted by an unstable nuclei.

α particles An α particle is a helium nuclei. For example



β particles There are two types of β particles. β^+ and β^- . A β^+ particle is emitted when the nuclei is unstable due to having too many protons, whilst the β^- one is emitted when it has too many neutrons.

$$\begin{cases} \beta^+, & {}_1^0\text{e} \text{ (positron)} \\ \beta^-, & {}_{-1}^0\text{e} \text{ (electron)} \end{cases}$$

γ particles γ rays are photons of electromagnetic energy. They have 0 mass and 0 charge.

5 Energy levels

An electron is a fundamental particle. It is attracted by protons in the atom nuclei but they repelled by one another. The places where the electrons are found around the nuclei are called *atomic orbitals*.

There are two types of orbitals, **s** and **p**. Electrons in **s** orbitals can be measured to be in a spherical region around the nuclei, whilst electrons in **p** orbitals have a dumbbell-shaped position region (zero-probability of being measured at the center of the nuclei). An orbital can host up to two electrons. Orbitals are grouped in different zones. Electrons in zones closer to the center have lower energy and the amount of energy to move an electron from its zone to the next one is constant.

At the lower energy there is a single 1s orbital that can hold two electrons. At the next energy level, there are four orbitals: 2s, 2p₁, 2p₂ and 2p₃ for up to 8 electrons at this level of energy. In larger atoms electrons can be found at the level 3s and 3p

Atoms where the level with most energy is not completely empty or completely full is unstable. The excess electrons are called valence electrons. An atom may share, give or take electrons with other atoms to become stable.

5.1 Ionic bond

An ionic bond is a transfer of valence electrons between metallic atoms and non-metallic atoms. The outcome of this process is a positive ion (more protons than electrons) and a negative ion (more electrons than protons). These ions attract each other often forming a crystal structure.

5.2 Metallic bond

A metallic bond is a transfer of valence electrons between metallic atoms. The valence electrons continually move from one atom to another and are not associated with any specific pair of atoms. This creates a structure of positive ions which conducts electricity (since electrons can freely move).

5.3 Covalent bond

A covalent bond is a sharing of pairs of electrons between non-metallic atoms. A covalent bond happens just between two atoms, it can be simple, double or triple (2, 4, 6 total shared electrons).

5.4 Electronegativity

Electronegativity is a measure of an atom's ability to attract shared electrons to itself. The type of bond is given by the difference of electronegativity between two atoms.

- 0 - 0.4: Pure covalent bond
- 0.4 - 1.7: Polar covalent bond
- 1.7 - : Ionic bond

6 Acids

The pH level is a measure of the acidity or alkalinity of a solution. It is a logarithmic scale that ranges from 0 to 14, with 7 being considered neutral. A pH value below 7 indicates acidity, while a pH value above 7 indicates alkalinity.

The pH scale is based on the concentration of hydrogen ions (H^+) in a solution. An acidic solution has a higher concentration of H^+ ions, while an alkaline solution has a lower concentration of H^+ ions. The pH scale is logarithmic..

OH stands for hydroxide ion, which is a negatively charged molecule consisting of one oxygen atom and one hydrogen atom. It is the conjugate base of water (H_2O) and plays a role in determining the pH level of a solution. The concentration of OH^- ions in a solution is directly related to its alkalinity, as the higher the concentration of OH^- ions, the more alkaline the solution is.

$$\text{pH} = -\log_{10}(\text{H}^+)$$

$$\text{pOH} = -\log_{10}(\text{OH}^-)$$

$$\text{pH} + \text{pOH} = 14$$

7 Redox

7.1 Definition

Redox (reduction-oxidation) reactions are a chemical reaction in which electrons are transferred between two reactants participating in it. A redox reaction involves a change in the oxidation state of one or more atoms. Whoever loses electrons is oxidized, whilst whoever gains electrons is reduced.

7.2 Oxidation State

The oxidation state or oxidation number of an atom in a molecule represents its ability to lose or gain electrons in a chemical reaction. In a neutral molecule, the sum of the oxidation states of all atoms is always equal to zero. This means that the sum of the electrons lost by some atoms is equal to the sum of the electrons gained by other atoms.

1. Individual elements always have an oxidation number of 0.
2. Monoatomic ions always have an oxidation number of 0.
3. Hydrogen (*almost*) always has an oxidation number of +1.
4. Oxygen (*almost*) always has an oxidation number of -2 .

If the oxidation state increases, the molecule oxidises (loses electrons).

If the oxidation state decreases, the molecule reduces (gains electrons).

7.3 Spontaneous reactions

A reaction is *spontaneous* if it proceeds spontaneously.

8 Polarità

Definizione Polarità

Una molecola è polare (non pura) se vi è una carica parziale.

Il legame ionico è quello più polare perché strappa un elettrone.

La differenza di elettronegatività deve essere da 0 a 0.45 per essere puro (il valore 0.45 è scelto per considerare il legame CH come apolare).

Quando una molecola è fatta solo da 2 atomi, se il legame è polare, la molecola è polare. Quando ci sono più legami, è necessario almeno un legame polare ma la molecola non deve essere simmetrica, altrimenti le cariche parziali si annullano.

Le sostanze apolari si sciolgono in solventi apolari, e quelli polari in quelli polari. Di conseguenza, per essere solubile in acqua una molecola deve essere polare.

9 Legami secondari (forze intermolecolari)

Definizione Forza forte

Legame covalente, metallico o ionico.

Definizione Forza debole

Forze di Van der Waals, forze di London, ponte a idrogeno.

I legami secondari (deboli, intermolecolari) sono responsabili delle interazioni fra molecole uguali o diverse tra loro, o anche fra parti diverse della stessa molecola.

Se il legame non è un ponte idrogeno ma è lo stesso principio, si dice dipolo-dipolo. Infatti, il legame ponte idrogeno è dipolo-dipolo ma ha un nome specifico. Le forze di Van der Waals sono i legami dipolo-dipolo. Quando le interazioni non sono polari si parla di forze di London.

9.1 Dissoluzione del sale nell'acqua

L'acqua ed il sale Na^+Cl^- inducono un polo. Le cariche positive dell'acqua (idrogeno) vengono attratte da quelle negative del cloruro, mentre quelle negative dell'acqua (ossigeno) vengono attratti da quelle positive del sale (Na). Il cristallo del sale viene quindi separato dalle forze esercitate dai dipoli dell'acqua.

Il motivo per cui il cristallo si spacca e non le molecole di acqua è dato dal fatto che l'energia delle interazioni deboli è più che sufficiente per compensare l'energia necessaria per rompere le interazioni ione-ione nel cristallo e alcuni legami idrogeno acqua-acqua.

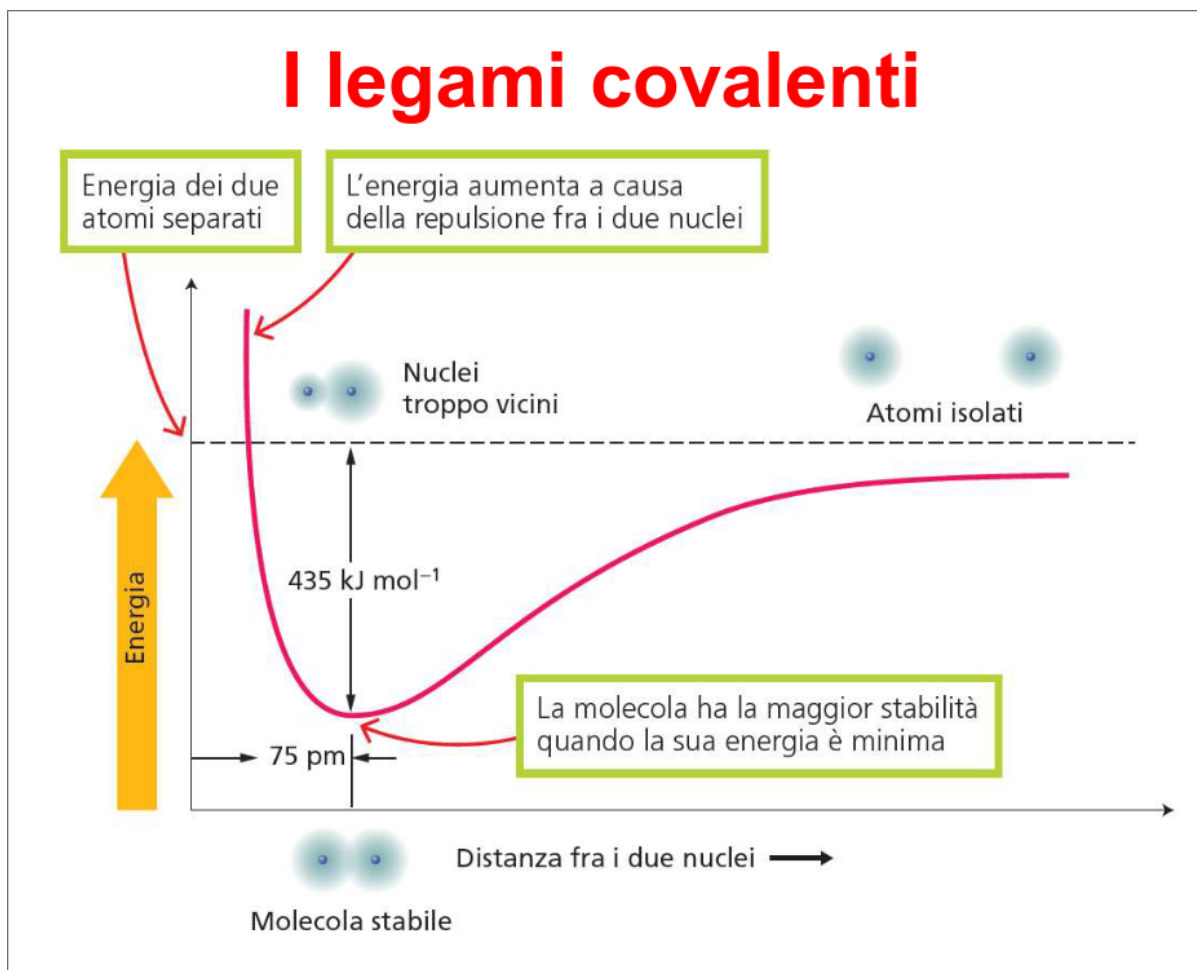
9.2 Forze deboli nell' H_2O

I ponti a idrogeno creano una struttura esagonale con le molecole d'acqua, formando il ghiaccio. Questo è il motivo per cui la struttura dei giochi di neve è esagonale. Quando l'acqua è gassosa non ci sono queste forze deboli, e quando sono liquide ce ne sono poche e casuali. Il motivo è che l'energia aumenta con l'aumentare della temperatura, e per cui con temperature troppe alte, questa energia spacca i legami deboli.

Il sale nell'acqua salata rende più difficile la creazione di ponti a idrogeno.

9.3 Sviluppo del calore nelle reazioni

La rottura di un legame necessita di energia, mentre la formazione di legami libera energia.



Definizione Entalpia

L'*entalpia* è la quantità di energia interna che un sistema termodinamico può scambiare con l'ambiente.

Definizione Reazione esotermica

Una *reazione esotermica* è una reazione che libera energia termica.

La reazione esotermica possiede le seguenti caratteristiche:

- la reazione rilascia calore;
- l'ambiente circostante si scalda;
- l'entalpia $\Delta H_{\text{reazione}} < 0$;
- i legami che si formano nei prodotti sono più forti di quelli che si rompono nei reagenti;
- i prodotti hanno energia inferiore rispetto ai reagenti.

Definizione Reazione endotermica

Una *reazione endotermica* è una reazione che assorbe energia termica.

La reazione esotermica possiede le seguenti caratteristiche:

- l'entalpia $\Delta H_{\text{reazione}} > 0$;

In una reazione esotermica all'equilibrio chimico, aumentando la temperatura si sposta tale equilibrio verso i reagenti, per cui la reazione inversa è favorita rispetto alla reazione diretta per temperature elevate. Il segno della variazione di entalpia (che è un aspetto termodinamico) indica semplicemente la predisposizione della reazione chimica ad evolversi in senso diretto o inverso, mentre per conoscere la velocità di reazione è necessario considerare gli aspetti cinetici.

L'energia è direttamente proporzionale alle mole, e quindi alla massa.

Il calore acquisito o rilasciato da un corpo è direttamente proporzionale alla variazione di temperatura a cui va incontro e si ricava dall'espressione

$$Q = mc\Delta T$$

dove c è il calore specifico.

Definizione Entalpia standard di formazione

L'*entalpia standard di formazione* di una sostanza, o *calore standard di formazione* è la quantità di calore assorbita o liberata quando una mole della sostanza viene formata, a 25° C e 1 atm, dai suoi elementi nei loro stati standard.

Conoscendo l'entalpia delle sostanze, per qualunque reazione possiamo calcolare direttamente la variazione di energia di reazione.

$$\Delta H_{\text{reazione}}^{\circ} = \sum_{f \in \text{prodotti}} (\Delta H_f^{\circ}) - \sum_{f \in \text{reagenti}} (\Delta H_f^{\circ})$$

L'Entalpia Standard di Formazione, ΔH_f° , di una sostanza è il ΔH° della sua reazione di formazione.

Una sostanza pura ha sempre entalpia di formazione $\Delta H_f^{\circ} = 0$.

10 Termodinamica chimica

Definizione Energia di attivazione

L'*energia di attivazione* è l'energia necessaria a far accadere una reazione chimica.

Definizione Catalizzatore

Un *catalizzatore* è una sostanza in grado di influenzare la velocità di una reazione chimica senza essere consumata.

Il catalizzatore accelera la reazione abbassando l'energia di attivazione dando la possibilità che si realizzi un nuovo percorso che porta ai prodotti, caratterizzato da uno stadio cineticamente determinante con una minor energia di attivazione rispetto a quello della reazione non catalizzata.

Definizione Velocità di reazione

Per rappresentare la *velocità di reazione*, descriviamo la variazione nel tempo della concentrazione di una specie presente nell'equazione chimica

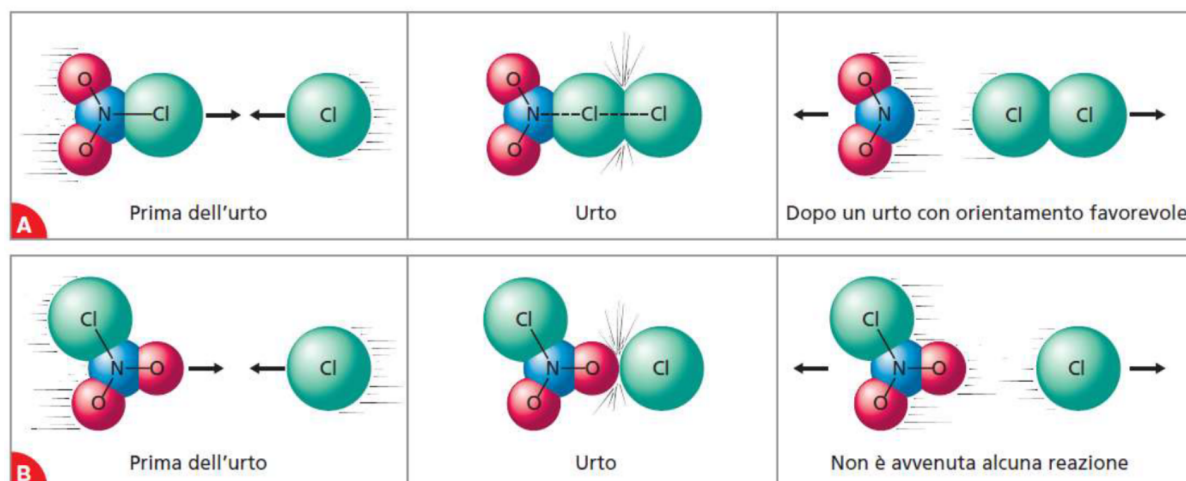
$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{p} \frac{d[P]}{dt} = \frac{1}{q} \frac{d[Q]}{dt}$$

dove a, b, p, q sono i coefficienti stechiometrici per i reagenti A e B e i prodotti P e Q .

10.1 Teoria degli urti efficaci

Definizione Teoria degli urti

La *teoria degli urti* indica che la velocità di una reazione è proporzionale al numero di urti efficaci che avvengono nell'unità di tempo fra le molecole dei reagenti. Un urto è *efficace* solo se porta alla formazione delle molecole dei prodotti.



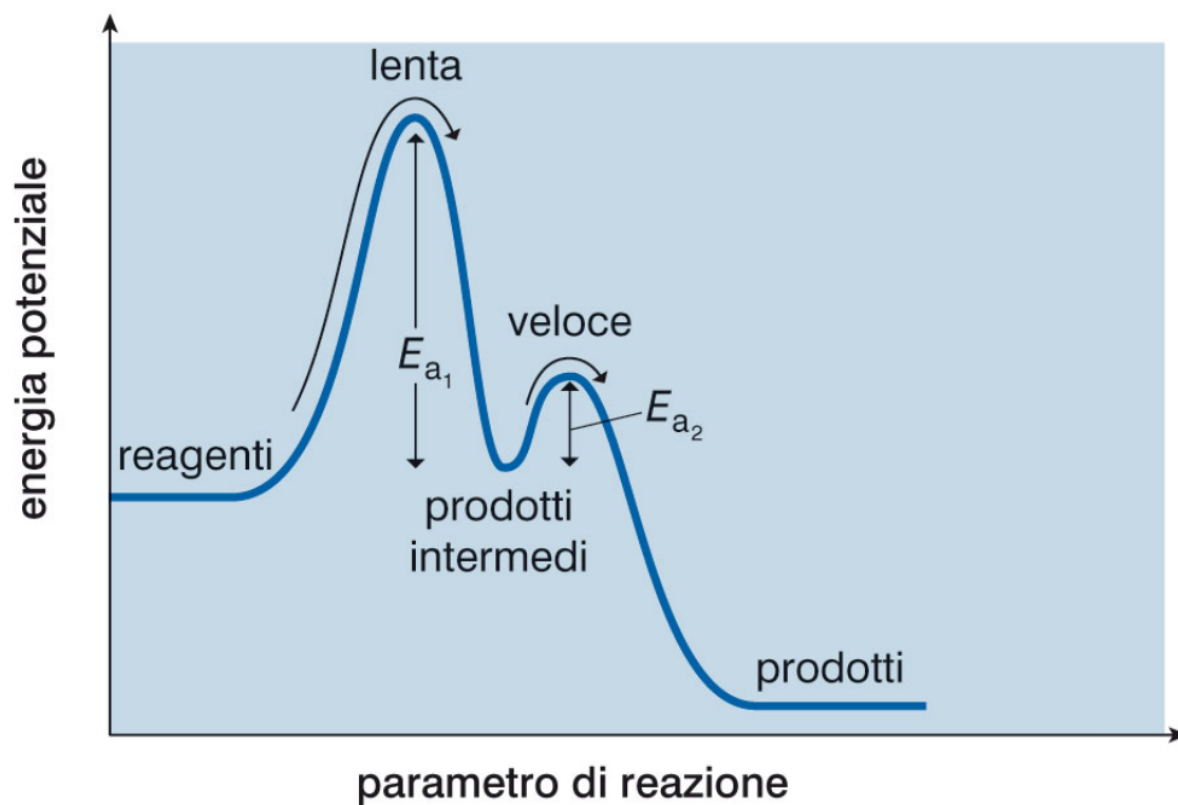
Affinché gli urti siano efficaci occorre che le particelle che entrano in contatto abbiano un'energia cinetica molecolare minima, ossia l'energia di attivazione.

Dopo un urto, le molecole rallentano: la loro energia cinetica diminuisce e si trasforma in energia potenziale.

Definizione Stato di transizione

Con *stato di transizione* si intende il momento della reazione in cui il legame tra i reagenti è parzialmente rotto e il nuovo legame è parzialmente formato (complesso attivato).

La sua energia corrisponde al punto più alto del diagramma dell'energia potenziale.



10.2 Equilibrio

In una reazione chimica, vi sono sia reazioni dirette che inverse. Questo significa che è si giungere ad un equilibrio dove il numero di reagenti e quello di prodotti tendono ad essere in equilibrio, con scambi continui fra i due.

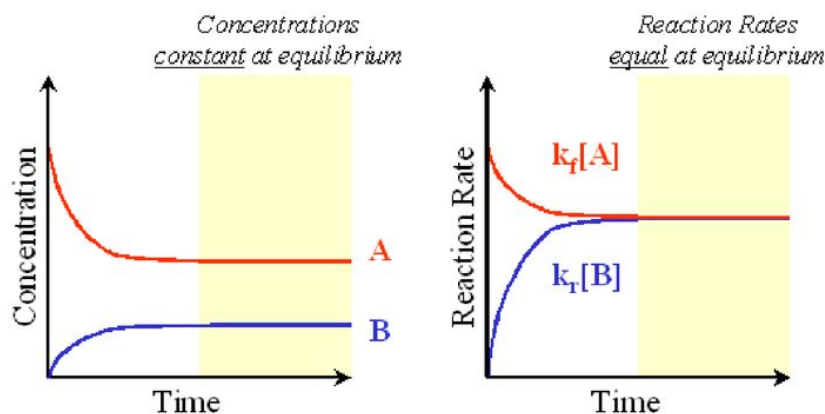
Il Concetto di Equilibrio

Questa situazione è nota come **equilibrio dinamico**. Le reazioni diretta e inversa si rappresentano con una doppia freccia nell'equazione chimica:



All'equilibrio dinamico:

- Le *concentrazioni* di A e B sono costanti
- Le *velocità delle reazioni diretta e inversa* sono uguali



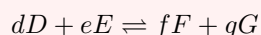
Il grafico della reazione può essere quindi diviso in *regione cinetica* e *regione di equilibrio*. Nell'equilibrio *dinamico* le molecole continuano costantemente a cambiare, e la velocità di reazione diretta diventa quella di reazione indiretta. Nell'*equilibrio statico* le reazioni si fermano.

Definizione Principio di Le Chatelier

Secondo *principio di Le Chatelier*, ogni sistema tende a reagire ad una perturbazione impostagli dall'esterno minimizzandone gli effetti.

Definizione Legge di azione di massa

Data una reazione generica



l'espressione dell'azione di massa è

$$\frac{[F]^f [G]^g}{[D]^d [E]^e} = K$$

dove K è la *costante di equilibrio* e relaziona le concentrazioni delle singole specie chimiche all'equilibrio.

Le dimensioni di K variano con la stechiometria della reazione.

Ogni reazione possiede una costante di equilibrio caratteristica, il cui valore dipende solo dalla temperatura.

Se K è grande, la reazione è spostata a destra, e vi sono pochi reagenti e tanti prodotti.

11 Isotopi dell'idrogeno

11.1 Deuterio

Il primo isotopo dell'idrogeno è il *deuterio*, indicato con D o 2H . A differenza dell'idrogeno comune, il deuterio possiede un neutrone nel nucleo oltre al protone. A causa di questa caratteristica, il deuterio ha una massa atomica leggermente superiore rispetto all'idrogeno normale. Il deuterio è utilizzato in varie applicazioni, come nei reattori nucleari per la produzione di energia e come tracciante in studi scientifici e biologici.

11.2 Trizio

Il secondo isotopo dell'idrogeno è il trizio, indicato con T o 3H . A differenza dell'idrogeno comune, il trizio possiede due neutroni nel nucleo oltre al protone. A causa di questa composizione nucleare, il trizio ha una massa atomica maggiore rispetto agli altri isotopi dell'idrogeno. Il trizio è radioattivo e decade nel tempo con una emivita di circa 12,3 anni, emettendo particelle beta.

12 Acqua con deuterio e trizio

È possibile ottenere dell'acqua, H_2O , utilizzando gli isotopi D e T al posto di H .

Queste sostanze sono chiamate *acqua pesante* (D_2O) e *acqua superpesante* (T_2O).

12.1 Densità

	Acqua	Acqua pesante	Acqua Superpesante
Liquido (g/cm^3)	0.997	1.11	1.20
Solido (g/cm^3)	0.9168	1.105	?

Normalmente, le molecole dell'acqua che ghiaccia si organizzano, e creano molti spazi (caso unico). Questo implica che il ghiaccio abbia una densità minore dell'acqua, per cui esso galleggia se immerso nell'acqua.

Possiamo quindi notare dalla tabella come la versione solida dell'acqua pesante galleggi nell'acqua normale [1].

References

- [1] 1.1 The Density of Deuterated Water. Purdue University Chemistry Education. URL: https://chemed.chem.purdue.edu/demos/main_pages/1.1.html.