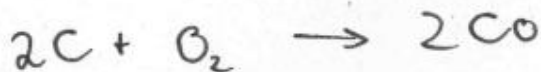


Esercitazione 7 - Squadra 1 (Chimica e Materiali) 30/10/2020

7.1 In un reattore di volume incognito vengono messi 50g di carbonio (densità 2,267 g/ml) e poi riempito con 410g di ossigeno a 170 bar (normali condizioni). La temperatura viene aumentata fino a 500°C e tutto il carbonio si trasforma in CO a causa di un particolare catalizzatore. Calcolare a quale pressione il reattore deve resistere per non scoppiare.

Per capire com'è la situazione dopo la reazione dobbiamo considerare l'equazione:

La reazione cambia la quantità di sostanza dei gas



50g 410g

$$\hookrightarrow n_C = \frac{50g}{12,01g/mol}$$

$$= \underline{\underline{4,163 mol}}$$

$$\hookrightarrow n_{O_2} = \frac{410g}{32g/mol}$$

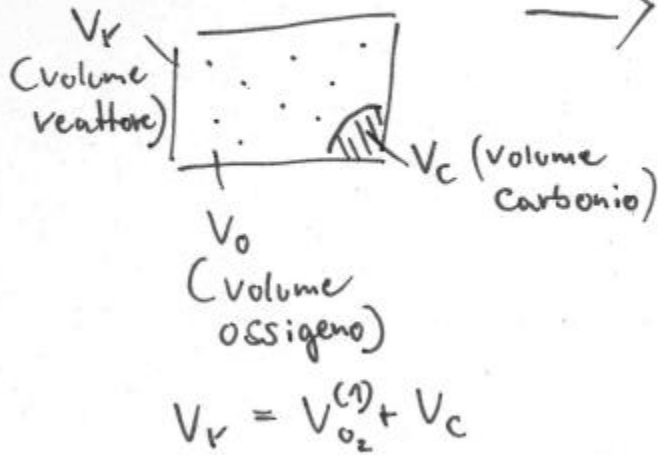
$$= \underline{\underline{12,813 mol}}$$

C è quindi il reagente limitante

Quindi per gli stati si sa che:

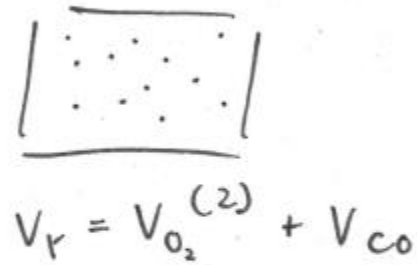
7.1

Stato 1
Prima della
reazione



Reazione
 \Rightarrow

Stato 2
Dopo la
reazione



\rightarrow vogliamo sapere $p^{(2)}$

Quindi si può calcolare la pressione con la legge generale dei gas:

Legge generale dei gas \rightarrow

$$p^{(2)} = \frac{nRT}{V} = \frac{n(\text{gas})RT}{V(\text{gas})}$$

$$= \frac{[n_{O_2}^{(2)} + n_{CO}]RT}{V_R}$$

$$= \frac{[n_{O_2}^{(2)} + n_{CO}]RT}{V_{O_2}^{(1)} + V_C}$$

Si deve quindi calcolare i valori:

* Dall'equazione si vede che

$$\underline{n(CO) = n(C)}$$

$$\rightarrow n(CO) = \underline{\underline{4,163 \text{ mol}}}$$

$$\cancel{n_{O_2}^{(2)}} = \cancel{n_{O_2}^{(1)}}$$

$$* \quad 2n(CO_2) = n(C) \rightarrow n(CO_2) = \frac{1}{2} n(C)$$

$$\begin{aligned} \rightarrow n_{O_2}^{(2)} &= n_{O_2}^{(1)} - \frac{1}{2} n(C) \\ &= 12,813 \text{ mol} - \frac{1}{2} \cdot 4,163 \text{ mol} \\ &= \underline{\underline{10,7315 \text{ mol}}} \end{aligned}$$

$$* \quad V_{O_2}^{(1)} = \frac{nRT}{p} = \frac{n_{O_2}^{(1)} RT}{p} = \frac{\frac{m_{O_2}}{M(O_2)} RT}{p}$$

$$= \frac{\cancel{410} / \cancel{32} \text{ g/mol} \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \cdot (273 + 25) \text{ K}}{170 \text{ bar}}$$

$$= 186,73 \frac{\text{J}}{\text{bar}} \frac{1 \text{ m}}{10^5 \text{ Pa}} = 1,8673 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 = \underline{\underline{1,8673 \text{ l}}}$$

$$* \quad V_c = m_c / \rho_c = \frac{\cancel{50} \text{ g}}{\cancel{2,267} \text{ g/ml}} = 22,1 \text{ ml} = \underline{\underline{0,0221 \text{ l}}}$$

$$\Rightarrow p^{(2)} = \frac{[10,732 \text{ mol} + 4,163 \text{ mol}] \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \cdot (273 + 500) \text{ K}}{1,8673 + 0,0221 \text{ l}}$$

$$= 50665 \frac{\text{N}}{\text{m}^2} \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$$

$$= 50665 \cdot 10^3 \frac{\text{N}}{\text{m}^2} \cdot 10^{-5} \text{ bar} = \underline{\underline{506,65 \text{ bar}}}$$

7.2 Determinare quale tipo di legame chimico unisce gli atomi nei seguenti composti Cl_2 , Br_2 , Li , LiCl , NH_4Cl . Poi disporre in ordine crescente la temperatura di ebollizione di loro, spiegando il motivo. Com'è l'ordine per la temperatura di fusione?

* Cl_2 , Br_2 , sono composti covalenti. Tra gli atomi ci sono esclusivamente legami covalenti. I composti sono molecole.

* LiCl è un composto ionico formato da cationi e anioni che interagiscono tramite forze elettrostatiche. Sono ordinati in un reticolo cristallino praticamente infinito. Quindi LiCl non è una molecola.

* Li è un metallo. Gli atomi neutrali sono ordinati in un reticolo cristallino che interagiscono tramite il legame metallico.

* NH_4Cl . In questo composto ci sono legami covalenti tra gli atomi N e H che formano uno ione molecolare. Tra questo NH_4^+ e Cl^- sono le forze elettrostatiche come per NaCl .

La temperatura di ebollizione T_{eb} di una specie è sostanzialmente determinata dalla forza delle interazioni intermolecolari. Più sono forti, più alta la temperatura di ebollizione. Per ordinare si deve quindi ordinare la forza dei legami.

*Per LiCl , NH_4Cl sono le forze elettrostatiche che sono forti (ciò determinano uno stato solido del composto a T e P ambiente). Per ordinare i due sali si può utilizzare la teoria HSAB quindi:

$$T_{\text{eb}}(\text{LiCl}) > T_{\text{eb}}(\text{NH}_4\text{Cl})$$

*Per Li la forza è il legame metallico, che è meno forte della forza elettronica.

$$T_{\text{eb}}(\text{LiCl}) > T_{\text{eb}}(\text{NH}_4\text{Cl}) > T_{\text{eb}}(\text{Li})$$

* Cl_2 , Br_2 , le forze intermolecolari che si instaurano sono deboli forze dipolo-dipolo e forze di London. Le forze di London sono più forte, più grandi le molecole. Quindi:

$$T_{\text{eb}}(\text{LiCl}) > T_{\text{eb}}(\text{NH}_4\text{Cl}) > T_{\text{eb}}(\text{Li}) > T_{\text{eb}}(\text{Br}_2) > T_{\text{eb}}(\text{Cl}_2)$$

7.4 Quale forza intermolecolare è responsabile per:

a. $T_{\text{eb}}(\text{HF}) > T_{\text{eb}}(\text{HCl})$

R. Legami d'idrogeno

C'è anche la forza di Van-der-Waals, questa però è più grande per HCl (perché è più grande).

b. $T_{\text{eb}}(\text{essano}) > T_{\text{eb}}(\text{metano})$

R. Forze Van-der-Waals

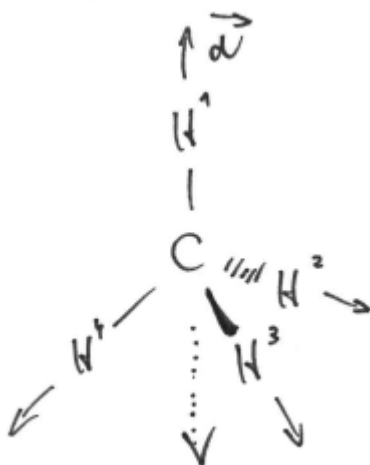
c. $T_{\text{eb}}(\text{HI}) > T_{\text{eb}}(\text{HBr})$

R. Forze Van-der-Waals

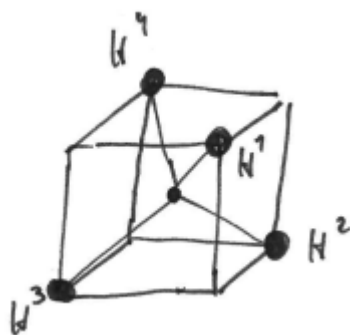
7.5 Quale dei seguenti molecole ha un dipolo: CH_4 , CH_3OH , HBr , CO , CO_2 , N_2 , P_4 , PF_5 , BF_3 , NH_3 .

* CH_4 : No

Il motivo è che a causa della simmetria della molecola i dipoli dei legami si cancellano:



Per capire meglio si mette la molecola in un cubo:

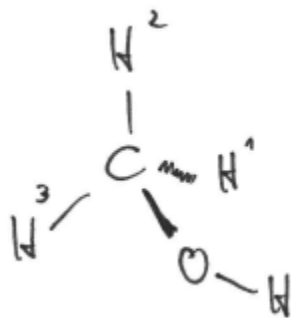


Così si vede meglio che

$$\vec{d}(\text{CH}_4) = -\vec{d}(\text{CH}_2 + \text{CH}_3 + \text{CH}_4) \\ \times 4 \text{ (per ogni H)}$$

*CH₃OH: Sì

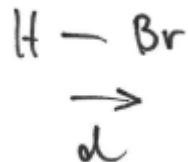
Questa non vale più quando si sostituisce uno degli atomi con un altro come O:



$$\vec{d}(\text{CO}) \neq \vec{d}(\text{CH}_1 + \text{CH}_2 + \text{CH}_3)$$

Quindi la simmetria è troppo bassa e si risulta un dipolo in totale.

*HBr: Sì

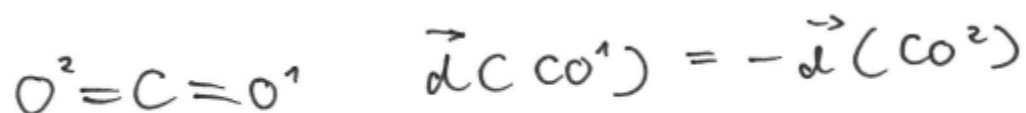


Simmetria troppo bassa

*CO: Sì

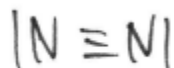
Basta solo rendersi conto che la simmetria è la stessa come per HBr! Quindi anche NO, SO, HF, ClF,... avranno un dipolo. Basta solo capire quale la simmetria di una molecola!

*CO₂: No



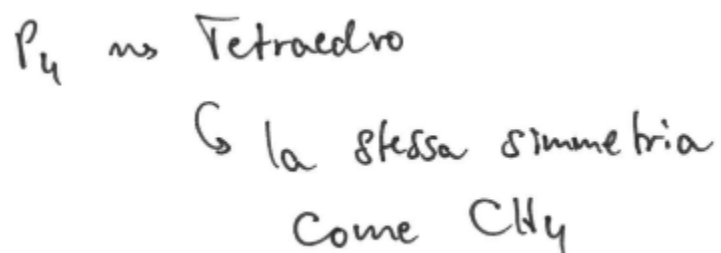
In questo caso si vede facilmente che si cancellano.

*N₂: No



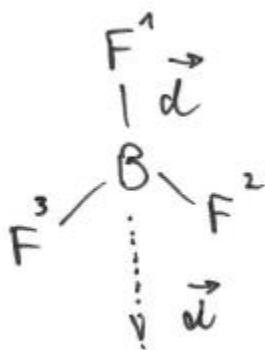
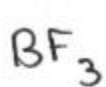
Perché anche se sono due atomi, la simmetria in totale è la stessa come per CO₂. Una molecola lineare e simmetrica. Per esempio, anche per Cl₂, Br₂, H-C≡C-H (Acetilene). Tutti uguali!

*P₄: No



È lo stesso argomento. Basta capire che la simmetria è la stessa. L'atomo in centro di CH₄ cambia niente.

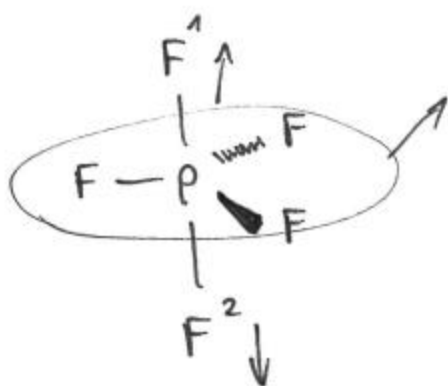
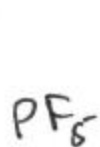
*BF₃: No



$$\vec{d}(\text{BF}^1) = -\vec{d}(\text{BF}^2 + \text{BF}^3) \times 3!$$

Trigonale planare.

*PF₅: No



questa parte
della molecola
identica con BF₃ !

$$d(\text{PF}^1) = -d(\text{PF}^2)$$

Trigonale bipiramidale. Si potrebbe considerare come se fosse una combinazione della simmetria di CO₂ e BF₃ per capire che si cancellano.

*NH₃: Sì



Piramide trigonale. Perché non è più planare come BF₃ non si cancellano più.