Chimica

Simone Balducci

1 Moli

La mole è la grandezza fisica che quantifica la quantità di sostanza (da non confondere con la massa, che quantifica la quantità di materia). In una mole di sostanza è contenuto un numero di Avogadro di molecole (ovvero 6.022×10^{23}).

La massa di sostanza e il numero di moli sono legate dalla massa molare, caratteristica per ogni elemento chimico. L'unità di misura della massa molare (o massa molecolare, che nella pratica è la stessa cosa) è g/mol.

Esempio

Si consideri una quantità di 2g di monossido di carbonio, CO. La massa molare di un composto si ottiene sommando le masse molari dei singoli elementi (eventualmente moltiplicate per il rispettivo pedice).

Per il monossido di carbonio quindi la massa molare è 12 + 16 = 28 g/mol. Si può quindi calcolare il numero di moli:

$$n = \frac{m}{Mm} = \frac{12 \, g}{28 \, g/mol} = 0.43 \, mol$$

Una volta ottenuto il numero di moli della quantità di materia considerata, si può calcolare il numero di molecole:

$$N = n \times N_A = 0.43 \times 6.022 \times 10^{23} \approx 2.6 \times 10^{23} \ molecole$$

Esercizio A quante moli corrispondono $4\,ml$ di un composto avente massa molecolare pari a $50\,g/mol$ e densità $1.25\,g/ml$?

Per calcolare il numero di moli è necessaria la massa. Questa non viene

fornita, ma viene fornito il volume del campione, che unito alla densità ci permette di calcolare la massa:

$$\rho = \frac{m}{V} \rightarrow m = \rho \cdot V = 4 \, ml \cdot 1.25 \, g/mol = 5 \, g$$

A questo punto è sufficiente dividere il valore della massa per la massa molare, ottenendo così il numero di moli:

$$n = \frac{5 g}{50 g/mol} = 0.1 mol$$

2 Reazioni chimiche

Le reazioni chimiche sono processi in cui la natura dei componenti coinvolti cambia.

Le reazioni per poter avvenire devono essere bilanciate, ovvero il numero di atomi di ogni singolo elemento (e degli elettroni nelle redox) deve essere invariato prima e dopo il processo. Questo deriva dal principio di Lavoisier, che sancisce che la somma delle masse dei reagenti deve essere sempre uguale alla somma delle masse dei prodotti.

Bilanciare una reazione significa calcolare i coefficienti stechiometrici, ovvero quei numeri che determinano il rapporto delle molecole, e che fanno si che ogni componente sia bilanciato.

Quanto si bilancia una reazione si segue un ordine preciso:

- Metalli
- Semimetalli
- Ossigeno
- Idrogeno

Questo ordine velocizza di molto il calcolo dei coefficienti stechiometrici, ma a volte risulta necessario ribilanciare degli elementi già bilanciati in precedenza dopo aver bilanciato i successivi.

Esempio

$$NO_2 + H_2O \rightarrow HNO_3 + NO$$

In questa reazione non sono presenti metalli, quindi si passa all'azoto. Per bilanciare gli azoti si potrebbe mettere un 2 davanti a NO_2 . Si nota tuttavia che per bilanciare gli idrogeni è necessario mettere un 2 davanti all' HNO_3 . Questo porta il numero totale di azoti tra i prodotti a 3, quindi il coefficiente stechiometrico del NO_2 è 3. Si nota infine che gli ossigeni sono bilanciati, quindi la reazione è bilanciata.

$$3NO_2 + H_2O \rightarrow 2HNO_3 + NO$$

2.1 Reazioni redox

Le reazioni redox sono reazioni in cui alcuni elementi cambiano numero di ossidazione. Questo implica che ci sia uno scambio di elettroni, che devono essere bilanciati come gli altri elementi.

Esempio

Arriva

3 Soluzioni

Quando una sostanza (il soluto) viene disciolta in un solvente, come l'acqua, si ottiene una soluzione. Per le soluzioni si definisce una grandezza fisica, la concentrazione, uguale al rapporto tra la quantità di soluto disciolta e la quantità di solvente.

L'unità di misura più comune per la concentrazione è la molarità. La molarità è definita come il rapporto tra il numero di moli del soluto e il volume in litri di solvente in cui il soluto è disciolto.

$$M = \frac{n}{V(l)_{slz}}$$

Esempio

Sciogliendo 12 g di sale da cucina, NaCl, in 100 ml di acqua si ottiene una soluzione avente concentrazione di 2 M.

Infatti, calcolando il numero di moli si trova che questo vale

$$n = \frac{12\,g}{58.45\,g/mol} = 0.205\,mol$$

e dividendo per il volume di solvente (convertito in litri) si ottiene la concentrazione

$$M = \frac{0.205 \, mol}{0.1 \, l} \approx 2 \, M$$

Esercizio

A quale volume bisogna diluire $10 \, ml$ di HCl $6 \, M$ per ottenere HCl $0.5 \, M$?

L'incognita è il volume finale della soluzione. Per la formula della molarità, possiamo ottenere il volume conoscendo la concentrazione e il numero di moli. Per il numero di moli è importante notare che, aggiungere acqua alla soluzione ne cambia la concentrazione, ma non cambia assolutamente il numero di moli di soluto. Quindi per sapere il numero di moli nella soluzione finale basta calcolare il numero di moli nella soluzione iniziale:

$$n_f = n_i = V_i \cdot M_i = 0.01 \, ml \cdot 6 \, M = 0.06 \, mol$$

da cui si trova il volume che deve avere la soluzione finale per avere la concentrazione richiesta:

$$V_f = \frac{0.06 \, mol}{0.5 \, M} = 0.12 \, l = 120 \, ml$$

3.1 Miscelazione di soluzioni

Quando si miscelano due soluzioni aventi lo stesso soluto, in generale si ottiene una nuova soluzione avente diversa concentrazione.

Per calcolare la nuova concentrazione è sufficiente considerare che miscelare le due soluzioni vuol dire sommare il numero di moli contenuto in ciascuna delle soluzioni, e anche i volumi.

Esempio

Si prendano due soluzioni di HCl, una di $100\,ml$ con molarità $0.1\,M$ e una di $300\,ml$ con molarità $0.2\,M$.

Il numero totale di moli vale

$$n = n_1 + n_2 = M_1V_1 + M_2V_2 = 0.1 \cdot 0.1 + 0.2 \cot 0.3 = 0.07 \, mol$$

mentre il volume totale della soluzione è

$$V = V_1 + V_2 = 100 + 300 = 400 \, ml$$

La concentrazione finale risulta quindi:

$$M = \frac{0.07 \, mol}{0.4 \, l} = 0.175 \, M$$

4 Equilibrio chimico

L'equilibrio chimico è una condizione dinamica che si instaura quando la velocità della reazione diretta e quella della reazione inversa sono uguali. E' importante specificare che l'equilibrio chimico è una condizione dinamica, perchè anche se macroscopicamente sembra che il sistema sia in uno stato stazionario, non è quello che avviene microscopicamente.

L'esempio più semplice è quello dello scioglimento di una quantità di sale in un contenitore pieno di acqua, in cui si ha la formazione del corpo di fondo (sale non disciolto che si deposita sul fondo del contenitore). Microscopicamente si vedrebbe una certa quantità di sale che viene disciolta nell'acqua, e una quantità uguale di sale disciolto che precipita e contribuisce a formare il corpo di fondo. All'equilibrio chimico questi due processi avvengono allo stesso modo, mantenendo quindi invariato il sistema macroscopicamente.

4.1 Costante di equilibrio e quoziente di reazione

Quando una reazione raggiunge la costante di equilibrio, le concentrazioni dei reagenti e dei prodotti rispettano una relazione precisa, ovvero quella della costante di equilibrio.

Per una reazione generica

$$aA + bB \rightarrow cC + dD$$

la costante di equilibrio e' data dalla relazione

$$K_{eq} = \frac{[C]_{eq}^{c}[D]_{eq}^{d}}{[A]_{eq}^{a}[B]_{eq}^{b}}$$

dove le parentesi quadre rappresentano le concentrazioni molari, e le concentrazioni sono quelle all'equilibrio.

Si definisce anche un'altra grandezza, ovvero il quoziente di reazione. Il quoziente di reazione e' dato da una reazione identica a quella della costante di equilibrio:

$$Q_r = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

La differenza tra la costante di equilibrio e il quoziente di reazione sta al livello concettuale, perche' nella prima le concentrazioni sono quelle di equilibrio, mentre nel secondo le concentrazioni sono generiche. Ovviamente quindi i valori delle due costanti non sono necessariamente uguali.

Nello specifico, il quoziente di reazione puo' essere maggiore o minore della costante di equilibrio:

- $Q_r > K_{eq}$ In questo caso si ha che le concentrazioni dei prodotti sono maggiori di quelle all'equilibrio (o le concentrazioni dei reagenti sono minori), quindi per il principio di Chatelier la reazione inversa sara' favorita, e il quoziente di reazione diminuira' fino a raggiungere il valore della costante di equilibrio.
- $Q_r < K_{eq}$ Analogamente al caso precedente, la reazione favorita sara' quella diretta.

5 pH

5.1 Acidi e basi

Esistono diverse definizioni di acidi e basi. Una definizione molto comunque e' che gli acidi sono sostanze in grado di liberare ioni H^+ (che in soluzione acquosa equivalgono a H_3O^+) quando disciolti in acqua, mentre le basi liberano ioni OH^- .

$$HCl + H_2O \rightarrow H_3O^+ + Cl^-$$

 $NaOH + H_2O \rightarrow Na^+ + H_2O + OH^-$

Questa e' la definizione degli acidi e delle basi secondo Bronsted e Lowry. Nella definizione di Lewis invece, gli acidi sono sostanze elettrofile, ovvero in grado di accettare elettroni, mentre le basi sono in grado di donare gli elettroni. Un esempio di acido di acido di Lewis e' lo ione Zn^{2+} :

$$Zn^{2+} + 2H_2O \to Zn(OH)_2 + 2H^+$$

Si vede infatti che in questa reazione lo zinco ha una carica positiva, e accetta la carica negativa (quindi gli elettroni) provenienti dall'acqua per formare un composto neutro.

5.2 Il pH e il pOH

Il pH e' dato da una relazione logaritmica:

$$pH = -\log[H+]$$

Questa grandezza quantifica l'acidita' di una soluzione (sottolineo soluzione, non si puo' calcolare il pH di una pasticca di NaOH per esempio). Esiste la controparte del pH, che e' il pOH, che quantifica la basicita' della soluzione, ed e' definita in maniera equivalente:

$$pOH = -\log[OH -]$$

Il pH e il pOH di una soluzione sono legati dalla relazione:

$$ph + pOH = 14$$

5.3 Acidi/basi forti e deboli

Gli acidi e le basi si dividono in forti e deboli in base al loro grado di dissociazione.

Gli acidi e le basi forti si dissociano completamente quando disciolti in acqua

$$HCl \rightarrow H^+ + Cl^-$$

$$NaOH \rightarrow Na^+ + OH^-$$

Gli acidi e le basi deboli invece si dissociano solo parzialmente, e instaurano quindi una condizione di equilibrio con i prodotti di dissociazione, che prendono il nome di acidi e basi coniugati.

Prendendo ad esempio la reazione dell'acido acetico

$$CH_3COOH + H_2O \rightleftharpoons CH_3COO^- + H^+$$

il composto CH_3COO^- e' la base coniugata all'acido acetico. Essendo questa reazione all'equilibrio, essa ha una costante di equilibrio, che prende il nome di costante di equilibrio acida, Ka

$$Ka = \frac{[H^+][CH_3COO^-]}{[CH_3COOH]}$$

e questa costante e' caratteristica per ogni acido.

Il nome acido debole suggerisce che questi si dissocino poco, quindi liberino piccole quantita' dello ione H^+ , la cui concentrazione sara' quindi molto piccola. Questo vuol dire che in generale le costanti acide hanno valori molto piccoli, dell'ordine di 10^{-6} o inferiori.

Il discorso per le basi deboli e' completamente anologo.

Essendo la dissociazione degli acidi e delle basi solo parziale, non si puo' usare la stessa formula degli acidi e delle basi forti per il calcolo del pH e del pOH. Facendo i calcoli e mediante delle semplificazioni (in generale sempre applicabili) si ottengono le seguenti formule:

$$pH = -\log(Ca \cdot Ka)$$

$$pOH = -\log(Cb \cdot Kb)$$

dove Ca e Cb sono rispettivamente le concentrazioni dell'acido o della base debole.

5.4 Soluzioni tampone

Le soluzioni tampone sono soluzioni che si oppongono alla variazione del pH per piccole aggiunte di acidi o basi. Si puo' formare una soluzione tampone combinando un acido debole con un suo sale oppure una base debole e un suo sale.

Prendiamo ad esempio una soluzione di un generico acido debole HA (questo potrebbe essere l'acido acetico, CH_3COOH) e un suo sale MA (ricordiamo che un sale si ottiene combinando uno ione metallico M^+ con un radicale negativo A^-). Una volta messi in acqua, questi due composti danno luogo alle seguenti reazioni:

$$HA + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + A^-$$

 $MA \to M^+ + A^-$

dove la prima e' una classica dissociazione acida debole, che e' una reazione all'equilibrio, mentre la seconda e' la dissociazione totale che i sali presentano quando vengono disciolti in acqua.

La seconda reazione aumenta la concentrazione dello ione A^- nella soluzione, e questo fa retrocedere la dissociazione dell'acido.

Se ora andiamo ad aggiungere un acido forte alla soluzione, come ad esempio l'acido cloridrico HCl, questo si dissocera' completamente e liberera' quindi ioni H^+ . Questi ioni andrebbero ad abbassare il pH e a rendere la soluzione piu' acida, se non fosse per lo ione A^- , che per via della dissociazione del sale e' presente in grande quantita'. Lo ione A^- va a legarsi con lo ione H^+ , e questo impedisce che il pH si alzi di troppo.

6 Termochimica

La termochimica studia l'energia coinvolta nelle reazioni chimiche per determinare se queste siano favorite o no.

7 Chimica organica