Chimica

Paolo Bettelini

Contents

1	Chi	mica	3
	1.1	Notazione scientifica	3
	1.2	Sistema Internazionale	4
			4
			4
		1.2.3 Misure	4
2	Tras	sformazioni	5
3	Clas	ssificazione	6
	3.1	Definizione	6
	3.2	Soluzioni (miscugli omogenei)	7
	3.3	Tecniche di separazione	7
	ъ 1		_
4	Kad 4.1	v	88
	4.1		8
	4.3	v	8
	4.4		8
	1.1	Typos of Idealations	_
5	Ene	80	9
	5.1		9
	5.2		9
	5.3		9
	5.4	Electronegativity	9
6	Acio	ds 1	D
7	Red	lox 1	1
	7.1	Definizione	1
	7.2	Numeri di ossidazione	1
	7.3	Reazione spontanea	1
	7.4	Semireazioni	
	7.5	Esercizi	2
8	Pola	arità 1	4
9	Løar	mi secondari (forze intermolecolari)	4
•	9.1	Dissoluzione del sale nell'acqua	
	9.2	Forze deboli nell'H2O	
	9.3	Sviluppo del calore nelle reazioni	
10	The	ermodinamica chimica 1	_
τÛ		Teoria degli urti efficaci	
		Fauilibrio	

	10.3 Principio di Le Chatelier	21
11	Isotopi dell'idrogeno	22
	11.1 Deuterio	22
	11.2 Trizio	22
12	Acqua con deuterio e trizio	22
	12.1 Densità	22

1 Chimica

Definizione Sistema

Con sistema si intende un oggetto o insieme di oggetti isolati di cui di studiano le prorpietà 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;
- osolato: se non scambia nè energia nè material con l'ambiente.

Studiare un sistema significa descrivere le sue proprietà

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

Le priorità 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	1	metro	m
Massa	m	kilogrammo	kg
Tempo	t	secondo	S
Corrente elettrica	1	ampere	Α
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	m³	
Densità	kilogrammo al metro cubo	kg/m³	
Forza	newton	N	$N = kg \cdot m/s^2$
Pressione	pascal	Pa	Pa = N/m²
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 tisolfato di sofio.
- 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

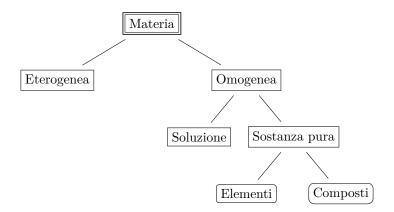
Acqua (H_2O)

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 or 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 $t_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{k}$.

$$\frac{1}{2}M_0 = M_0 e^{-kt}$$

$$\frac{1}{2} = e^{-kt}$$

$$\ln\left(\frac{1}{2}\right) = -kt$$

$$t = \frac{\ln 2}{k}$$

4.4 Types of radiations

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

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

$$^{238}_{92}\mathrm{U} \longrightarrow ^{4}_{2}\alpha + ^{234}_{90}\mathrm{Th}$$

 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, whist the β^- one is emitted when it has too many neutrons.

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

 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 dumbell-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. Eletrons 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 2s3 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 completly empty or completly full is unstable. The excess electors 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 if given by the different 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.

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

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

$$pH + pOH = 14$$

7 Redox

7.1 Definizione

Definizione Reazione di ossidoriduzione

Le reazioni di ossidoriduzione (redox) sono una reazione chimica in cui gli elettroni vengono trasferiti tra due reagenti che vi partecipano. Le reazioni di ossidoriduzione sono composte da un

- agente riducente: la sostanza che si ossida donando elettroni;
- agente ossidante: la sostanza ossida prendendo elettroni.

Una reazione redox comporta un cambiamento nello stato di ossidazione di uno o più atomi.

7.2 Numeri di ossidazione

Definizione Numero di ossidazione

Il *numero di ossidazione* è la carica elettrica virtuale che si può attribuire a un atomo o a uno ione impegnato in un legame chimico, immaginando di spostare tutti gli elettroni del legame sull'atomo più elettronegativo.

Lo stato di ossidazione o numero di ossidazione di un atomo in una molecola rappresenta la sua capacità di perdere o guadagnare elettroni in una reazione chimica. In una molecola neutra, la somma degli stati di ossidazione di tutti gli atomi è sempre uguale a zero. Ciò significa che la somma degli elettroni persi da alcuni atomi è uguale alla somma degli elettroni acquistati da altri atomi. In una molecola ha l'atomo con la più alta elettronegatività sempre il numero di ossidazione negativo.

- 1. Elementi singoli e liberi hanno sempre un numero di ossidazione di 0;
- 2. ioni monoatomici hanno sempre un numero di ossidazione pari alla propria carica;
- 3. il fluoro ha sempre numero di ossidazione di -1 essendo il più elettronegativo;
- 4. la somma di tutti i numeri di ossidazione degli atomi in una molecola deve essere uguale alla carica della particella;
- 5. l'idrogeno ha numero di ossidazione +1 nei composti con i non metalli e -1 nei composti con i metalli;
- 6. l'ossigeno ha quasi sempre un numero di ossidazione di -2, -1 per i perossidi;
- 7. i metalli dei gruppi I e II hannno rispetivamente numeri di ossidazione di +1 e +2;
- 8. gli alogeni hanno numero di ossidazione -1 nei composti con i metalli e un numero di ossidazione positivo quando si legano a O o F.

Se lo stato di ossidazione aumenta, la molecola si ossida (perde elettroni).

Se lo stato di ossidazione diminuisce, la molecola si riduce (acquista elettroni).

7.3 Reazione spontanea

Definizione Reazione spontanea

Una reazione è spontanea se procede spontaneamente.

7.4 Semireazioni

Definizione Semireazioni

Le semireazioni (di ossidazione e di riduzione) sono delle reazioni che indicano il numero di elettroni che vengono ceduti o accettati.

Esercizio Scrivi le semireazioni di ossidoriduzione

Data la reazione

$$2Na + Cl_2 \rightarrow 2NaCl$$

Con i numeri di ossidazione

• Na

 $\bullet \operatorname{Cl}_2$ 0

• NaCl +1, -1

Le equazioni di semireazione sono

$$2\mathrm{Na} \rightarrow 2\mathrm{Na}^+ + 2\mathrm{e}^-$$

$$\text{Cl}_2 + 2\text{e}^- \rightarrow 2\text{Cl}^-$$

7.5 Esercizi

Esercizio Trova il numero di ossidazione

• NaCLO₃ +1, +5, -2

• $SnCL_4$ +4, -1

• MnO_4^{2-} +6, -2

• MnO_2 +4, -2

• H_2O_2 1, -1

L'idrogeno ha solo un elettrone, per cui il numero di ossidazione dell'ossigeno deve essere ridotto.

Esercizio la combustione del metano è una reazione di ossidoriduzione?

La reazione

$$\mathrm{CH_4} + 2\mathrm{O_2} \rightarrow \mathrm{CO_2} + 2\mathrm{H_2O}$$

ha numeri di ossidazione

• CH_4 -4, +1

 \bullet O_2

• CH_2 -2, +1

• H_2O +1, -2

Di conseguenza C si ossida e O si riduce.

Tutte le combustioni sono reazioni ossidoriduzione, dove l'ossigeno è ossidante. La formazione della ruggine è una ossidazione, dove l'ossigeno è ossidante.

Esercizio Stechiometrica e reazione di ossi-riduzione

Una lamina metallica di zinco elementare della massa iniziale di 5,474 grammi viene immersa in una soluzione acquosa azzurra contenente solfato di rame ($CuSO_4$). Si osserva che sulla superficie di contatto tra la lamina e la soluzione avviene una reazione chimica che porta alla formazione di rame elementare in polvere. Inoltre, la soluzione acquosa si decolora lentamente (diminuzione del contenuto di solfato di rame). Oltre al rame elementare, dalla reazione viene prodoto solfato di zinco ($ZnSO_4$), disciolto in soluzione.

Dopo circa 24 ore si nota che tutto il solfato di rame si è consumato. A questo punto, la rimanente lamina di zinco viene tolta dalla soluzione. In seguito, vien sciaquata, asciugata ed infine pesata. La massa finale della lamina ammonta a 4,928 grammi. Il rame elementare prodotto, una volta separato dalla soluzione, viene anch'esso pesato.

1. Scrivi l'equazione chimica bilanciata relativa alla trasformazione chimica. Per ognuna delle sostanze esplicita il rispettivo stato di aggregazione.

Il numeri di ossidazione sono

• Zn	0
• Cu	0
\bullet CuSO ₄	+2, +6, -2
\bullet ZnSO ₄	+2, +6, -2

Il rame si riduce e lo zinco si ossida.

- 2. Quale elemento si è ossidato e quale invece si è ridotto?
- 3. Scrivi le equazioni chimiche relative alla semi-reazione di riduzione rispettivamente di ossidazione.
- 4. Determina la massa di rame elementare prodotta.
- 5. Determina la massa del solfato di rame disciolto nella soluzione azzurra iniziale.
- 6. Determina la massa di solfato di zinco presente nella soluzione finale incolore.
- 7. Quale massa finale della lamina di zinco si sarebbe misurata se la massa di rame elementare prodotta fosse state 1,000 grammi?
- 8. Quale quantità in elettroni (in moli) sono stati trasferiti in totale durante tutta la durata del processo di ossido-riduzione?

8 Polarità

Definizione Polarità

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

Il legale 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, oer essere solubile in acqua una moecola deve essere polare.

9 Lgami secondari (forze intermolecolari)

Definizione Forza forte

Legame covalente, metallico o ionico.

Definizione Forza debole

Forze di Van der Walls, forze di Londom, 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, di dice dipolo-dipolo. Infatti, il legame ponte idrogeno è dipolo-dipolo ma ha un nome speicfico. Le forze di Van der Walls 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 negative 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.

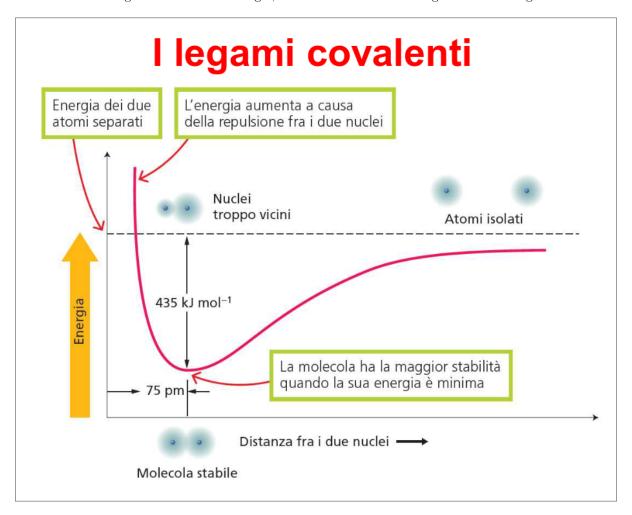
9.2 Forze deboli nell'H2O

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 giocchi di neve è esagonale. Quando l'acqua è gassosa non ci sono queste forze debole, e quando sono liquide ce ne sono poche e casuali. Il motivo è che l'energia aumuenta 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 circostance 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 durettamente 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.

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

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 Thermodinamica 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

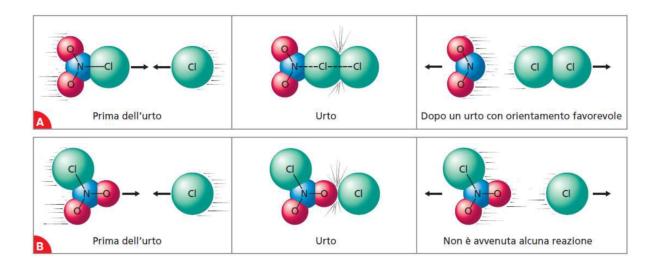
$$v=-\frac{1}{a}\frac{d[A]}{dt}=-\frac{1}{b}\frac{d[B]}{dt}=\frac{1}{p}\frac{d[P]}{dt}=\frac{1}{q}\frac{d[Q]}{dt}$$

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.



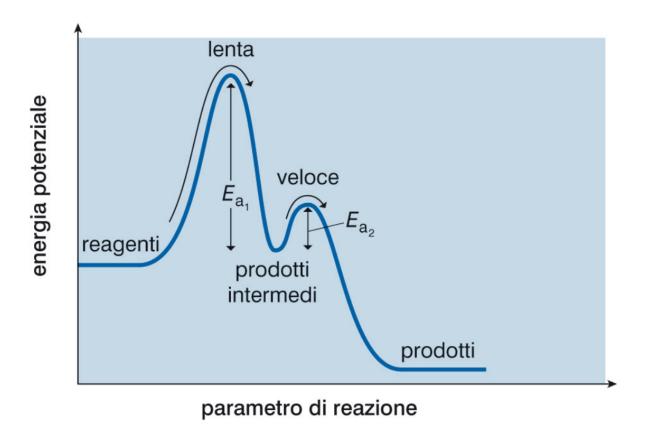
Affinché gli urti siano efficaci occorre che le particelle che entrano in contatto abbiano un'energia cinetica molecolare minima, ossia l'energia di attivazione.

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.



18

10.2 Equilibrio

In una reazione chimica, vi sono sia reazioni dirette che inverse. Questo siginfica 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.

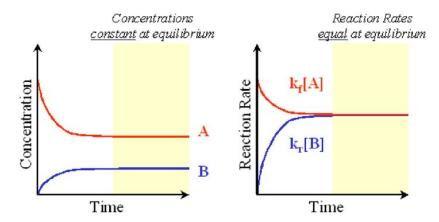
Il Concetto di Equilibrio

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

$$A \Longrightarrow B$$

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 Legge di azione di massa

Data una reazione generica

$$dD + eE \rightleftharpoons fF + gG$$

l'espressione dell'azione di massa è

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

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. Di conseguenza,

se il K è grandisimo la reazione inversa è quasi ininfluente, perché ve n'è pochissima.

Esempio La creazione di ammoniaca NH_3 possiede come reagenti N_2 e H_2 . La reazione termochimica è data da

$$N_{2(g)} + H_{2(g)} \rightleftharpoons NH_{3(g)}$$

Siccome abbiamo $\Delta H=-46.2 \frac{\rm kJ}{\rm mol}$, possiamo convenientemente bilanciare l'equazione in maniera tale da avere 1 mole di ammoniaca

$$\frac{1}{2}N_{2(\mathsf{g})} + \frac{3}{2}H_{2(\mathsf{g})} \rightleftharpoons NH_{3(\mathsf{g})}$$

Partendo da un punto della reazione di equilibrio, aggiungere H_2 o N_2 porterà uno sbilanciamento dell'equilibrio. Di conseguenza, I valori di N_2 e H_2 diminuiranno, favorendo la creazione di ammoniaca. Allo stesso modo, togliere dell'ammoniaca porta alla creazione di nuova ammoniaca, a scapito di H_2 e N_2 . Togliendo uno dei reagenti, la concentrazione di ammoniaca scende per riequilibrare la reazione, e quella dell'altro reagente sale, e viceversa. I rapporti fra le differenze di concentrazioni che bilanciano la reazione dopo uno squilibrio sono proporzionali ai coefficienti stechiometrici: togliendo dell'ammoniaca, la concentrazione di H_2 diminuirà maggiormente di quella di N_2 .

I modi per aumentare la concentrazione di un prodotto sono:

- 1. Aumentare i reagenti;
- 2. Aumentare il volume del reattore;
- 3. Aumentare la temperatura (se $\Delta H > 0$). Aumentando la temperatura, i prodotti aumentano se la reazione è endotermica ($\Delta H > 0$), mentre i prodotti diminuiscono se è esotermica ($\Delta H < 0$);
- 4. Aumentare la pressione (se ho più molti nei reagenti che nei prodotti). Se si aumenta la pressione, la miscela all'equilibrio cambia composizione e diminuisce il numero totale di molecole allo stato gassoso presenti nel recipiente. Non c'è effetto della pressione se non c'è variazione nel numero di molecole durante la reazione. L'aumento della pressione sposta l'equilirio verso la parte della reazione che possiede meno molti di gas. Questo è dato dal fatto che il sistema deve bilanciare l'aumento della pressione, spostando la reazione verso dove vi sono meno moli di gas (nei reagenti o nei prodotti);
- 5. Togliere prodotto (per spostare l'equilibrio e fare generare altro prodotto, anche se meno di quanto ne ho tolto, ma il quantitativo totale aumenta).

Il catalizzatore non aumenta la concentrazione di un prodotto, bensì solo la concentrazione. La temperatura è l'unico fattore al quale cambia la costante K.

10.3 Principio di Le Chatelier

Definizione Principio di Le Chatelier

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

Esercizio Spiega l'effetto ottenuto sull'equilibrio da una reazione

$$O_{2(g)} + N_{2(g)} \rightleftharpoons 2NO_{2(g)}$$

- aumento della temperatura: se la reazione diretta è endotermica, scaldare favorirà la produzione di prodotti, mentre se la reazione è esotermica, raffreddare favorirà la formazione di prodotti;
- diminuzione della pressione: ci sono due moli di gas sia a destra che a sinistra, per cui non abbiamo nessun influsso.
- aumento della concentrazione di ossigeno: viene favorita la produzione di prodotti (spostamento verso destra);
- diminuzione pressione parziale di N_2 : viene diminuita la concentrazione di azoto, e per cui avremo meno prodotti;
- aumento della concentrazione NO: aumentano i reagenti (viene favorita la reazione inversa):
- presenza di un catalizzatore: l'equilibrio non cambia.

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 tracciatore in studi scientifici e biologici.

11.2 Trizio

Il secondo isotopo dell'idrogeno è è il trizio, indicato con T o 3H . A differenza dell'idrogeno comune, il deuterio 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.