

CINETICA CHIMICA: Bath Bomb & Blue Dye

Cinetica chimica

Alcune nozioni di base

Studio della velocità di trasformazione della materia

- Reazioni velocissime $H^+ + OH^-$ (acido/base)
- Esplosioni (TNT, $KClO_4$, etc..) $< 10^{-8}$ s
- Reazioni veloci: Reazioni tra ioni in soluzione 10^{-3} s
- Reazioni a velocità intermedia: Reazioni organiche in soluzione $10^1 - 10^3$ s
- Reazioni lente: Fermentazioni 10^6 s
- Reazioni lentissime: Ossidazione aerobica di carbone, legna, etc. $> 10^8$ s

Per poter reagire le particelle devono urtarsi

- ✓ Lo *stato fisico dei reagenti* influenza la velocità di reazione.

Le molecole devono mescolarsi per urtarsi.

- ✓ Maggiore la *concentrazione* dei reagenti, maggiore la velocità di reazione.

Una maggiore concentrazione di particelle permette un maggior numero di collisioni.

- ✓ Maggiore la *temperatura*, maggiore la velocità di reazione.

A temperature più elevate le particelle hanno più energia e collidono più frequentemente ed efficacemente.

Cinetica delle reazioni: velocità

La velocità di reazione si misura come variazioni di concentrazione di reagenti o prodotti nell'unità di tempo.

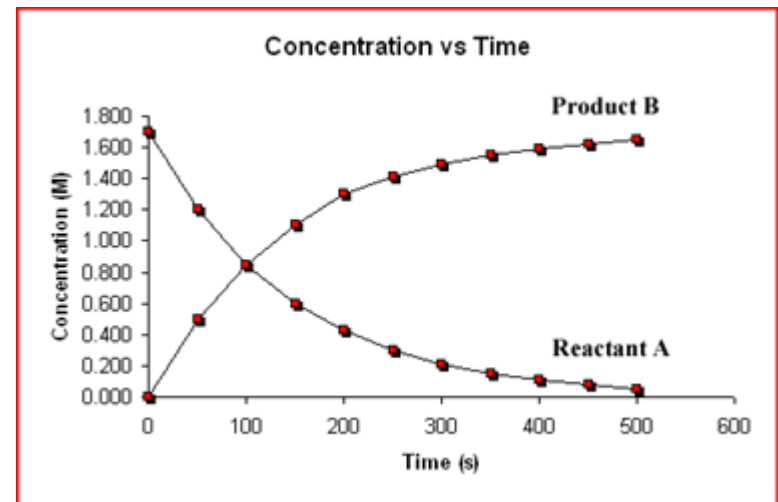
Per la generica reazione $A \rightarrow B$, si misura la concentrazione di A a t_1 e t_2 :

$$\text{velocità} = \frac{\text{variazione della concentrazione di A}}{\text{intervallo di tempo}} = \frac{\text{conc } A_2 - \text{conc } A_1}{t_2 - t_1} = \frac{\Delta[A]}{\Delta t}$$

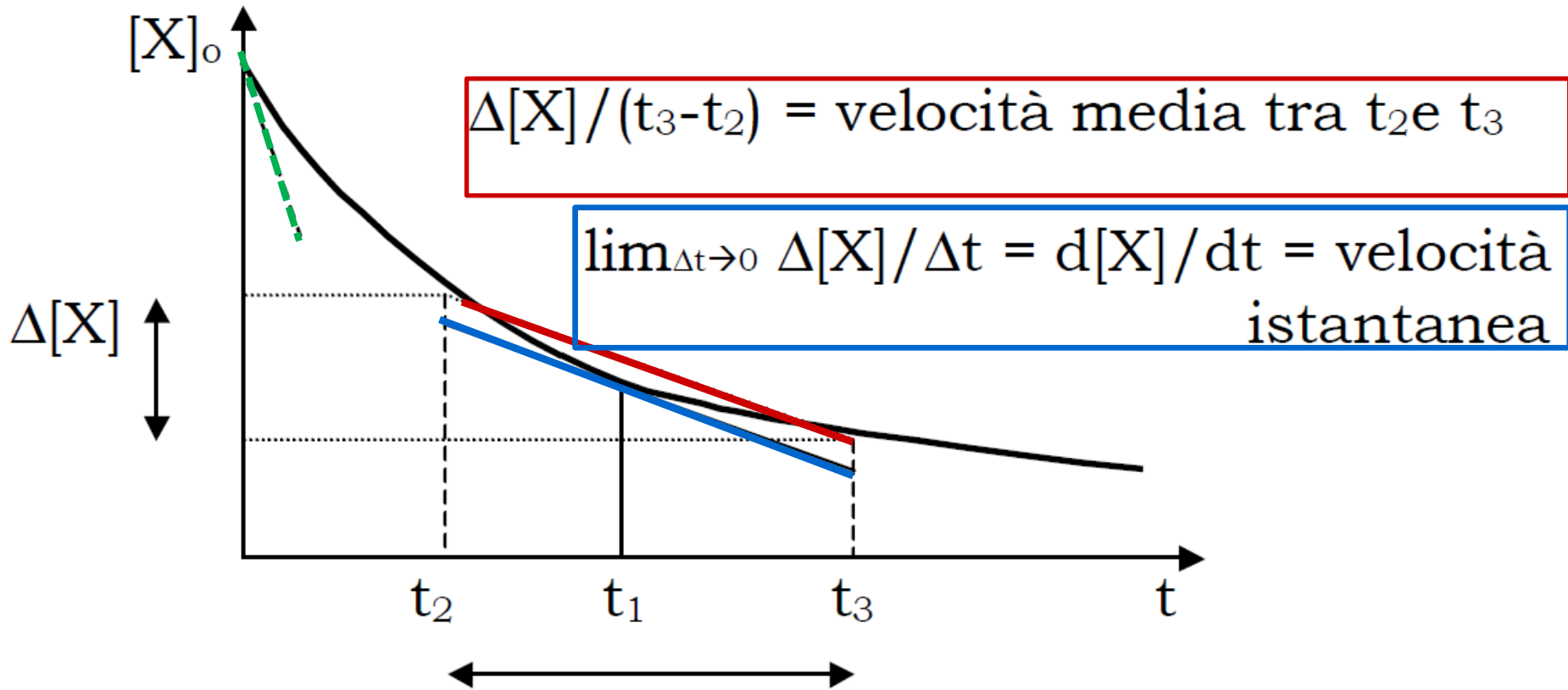
Le parentesi quadre indicano la concentrazione in moli per litro.

Si usa il segno **negativo** perché la concentrazione di A **diminuisce**.
La **velocità** deve essere **positiva**.

$$v = \frac{\text{Conc } B_2 - \text{Conc } B_1}{t_2 - t_1} = + \frac{\Delta[B]}{\Delta t}$$



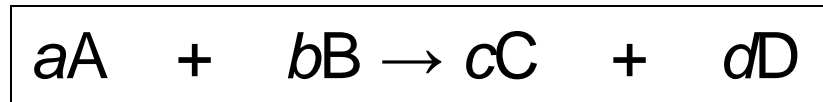
Velocità di reazione iniziale, media e istantanea



$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} (\Delta[X] / \Delta t)_{t=0} = (d[X] / dt)_{t=0} = \text{velocità iniziale}$$

Velocità di reazione e stechiometria

In generale, per la reazione



in cui a , b , c , e d sono i coefficienti stechiometrici dell'equazione bilanciata, la velocità è espressa come:

$$\text{velocità} = -\frac{1}{a} \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta[C]}{\Delta t} = \frac{1}{d} \frac{\Delta[D]}{\Delta t}$$



A few drops of blue food dye were added to water, followed by a solution of bleach.

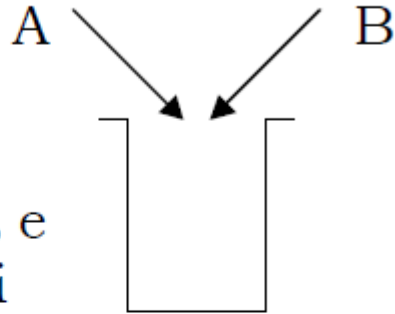


The color fades as the dye reacts with the bleach.

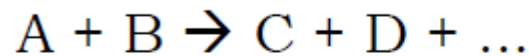
Come misurare la velocità di reazione

Bisogna misurare $[X]$ al variare del tempo

$t = 0$

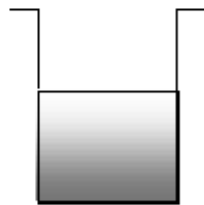


con $[A]_0$ e $[B]_0$ noti



- Colore
- Rotazione luce polarizzata
- Indice di rifrazione
- Spettri di assorbimento
- Metodi elettrici (potenziale elettrochimico, conducibilità)
- Conducibilità termica
- Viscosità
- Calore di reazione
- Punti di gelo
- Spettrometria di massa

$t > 0$



$[A]_0$ e $[B]_0 \Rightarrow [A]$ e $[B]$ misurabili

in situ (metodi **fisici**)
in tempo reale

prelievo
(quenching)

Metodi di
analisi **chimica**

Velocità di reazione: leggi cinetiche

In uno studio di cinetica chimica uno dei principali obiettivi consiste nel ricavare un'equazione che consenta di prevedere in che modo una velocità di reazione dipenda dalla concentrazione dei reagenti

Per una generica reazione a una data temperatura:



costante cinetica

$$\text{velocità} = k[A]^m[B]^n$$

Legge di velocità

Il termine k è la **costante di velocità**, che è specifica per una data reazione a una data temperatura.

Gli esponenti m e n sono gli **ordini di reazione** e si determinano **sperimentalmente**.

I valori di m e n **non** non sono necessariamente correlati ai coefficienti stechiometrici a e b .

Ordine di reazione

Ogni reazione ha un *ordine parziale* “rispetto a” o “in” ogni reagente.

Per la semplice reazione $A \rightarrow$ prodotti:

$$v = k[A]^m = 1$$

Se la velocità raddoppia quando $[A]$ raddoppia, la velocità dipende da $[A]^1$ e la reazione è di *primo ordine* rispetto ad A .

$$m = 2$$

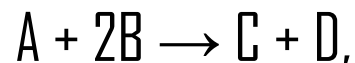
Se la velocità quadruplica quando $[A]$ raddoppia, la velocità dipende da $[A]^2$ e la reazione è di *secondo ordine* rispetto ad $[A]$.

$$v = k[A]^0 \quad m = 0$$

Se la velocità non cambia quando $[A]$ raddoppia, la velocità non dipende da $[A]$, e la reazione è di *ordine zero* rispetto ad A .

Determinazione dell'ordine di reazione

Per la generica reazione



La legge cinetica sarà:

$$\text{velocità} = k[A]^m[B]^n$$

Per determinare i valori di m e n , si esegue una serie di esperimenti in cui la concentrazione di un reagente viene mantenuta costante mentre si varia l'altra e si misura l'effetto di tali variazioni sulla velocità iniziale.

Gli ordini di reazione possono essere zero, interi positivi o negativi, o frazionari.

Determinazione dell'ordine di reazione

Esperimento	velocità iniziale (mol/L·s)	[A] iniziale (mol/L)	[B]iniziale (mol/L)
1	$1,75 \times 10^{-3}$	$2,50 \times 10^{-2}$	$3,00 \times 10^{-2}$
2	$3,50 \times 10^{-3}$	$5,00 \times 10^{-2}$	$3,00 \times 10^{-2}$
3	$3,50 \times 10^{-3}$	$3,00 \times 10^{-2}$	$2,50 \times 10^{-2}$
4	$7,00 \times 10^{-3}$	$3,00 \times 10^{-2}$	$5,00 \times 10^{-2}$

Negli esperimenti 1 e 2 si mantiene costante [B] e si raddoppia [A].
Poi si mantiene costante [A] e si raddoppia [B].

Determinazione dell'ordine di reazione

Per trovare m , l'ordine di reazione rispetto ad A, si confrontano gli esperimenti 1 e 2, in cui [B] è costante e [A] raddoppia:

$$\frac{\text{velocità 2}}{\text{velocità 1}} = \frac{k[A]_2^m [B]_2^n}{k[A]_1^m [B]_1^n} = \frac{[A]_2^m}{[A]_1^m} = \left(\frac{[A]_2}{[A]_1} \right)^m$$

$$\frac{3,50 \times 10^{-3} \text{ mol/L}\cdot\text{s}}{1,75 \times 10^{-3} \text{ mol/L}\cdot\text{s}} = \left(\frac{5,00 \times 10^{-2} \text{ mol/L}}{2,50 \times 10^{-2} \text{ mol/L}} \right)^m \quad 2,00 = (2,00)^m \quad \text{perciò } m = 1$$

Legge di velocità per reazioni di primo ordine

$$v = - \frac{d[A]}{dt} = k[A]$$

$$\frac{d[A]}{[A]} = -k dt \quad \int_{[A]_0}^{[A]_t} \frac{d[A]}{[A]} = -k \int_0^t dt$$

Legge cinetica integrata

$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = -kt$$

Velocità di reazione: leggi cinetiche integrate

Una legge cinetica integrata include il **tempo** come variabile.

Reazioni di primo ordine:

$$\text{velocità} = - \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = k [A]$$

$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = - kt$$

Reazioni di secondo ordine:

$$\text{velocità} = - \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = k [A]^2$$

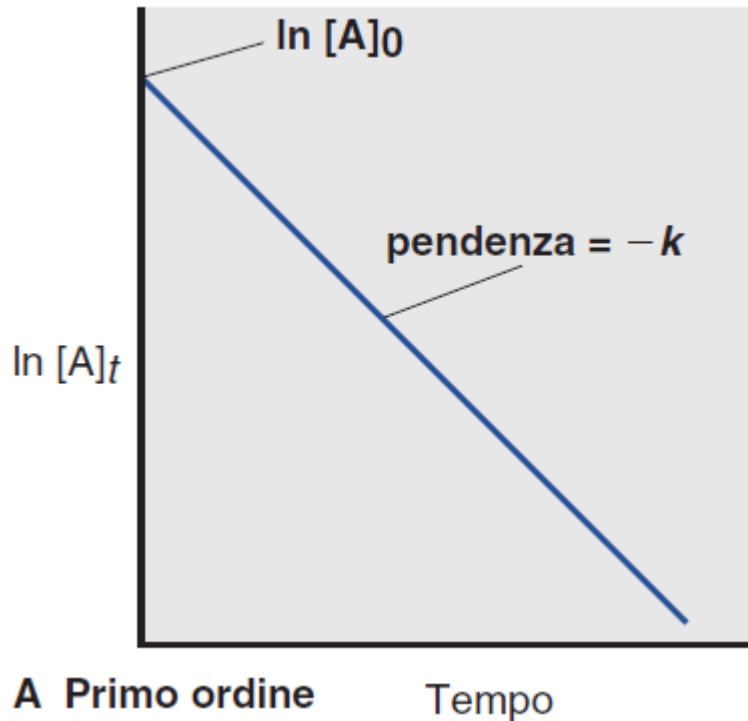
$$\frac{1}{[A]_t} - \frac{1}{[A]_0} = kt$$

Reazioni di ordine zero:

$$\text{velocità} = - \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = k [A]^0$$

$$[A]_t - [A]_0 = - kt$$

Velocità di reazione: leggi cinetiche integrate

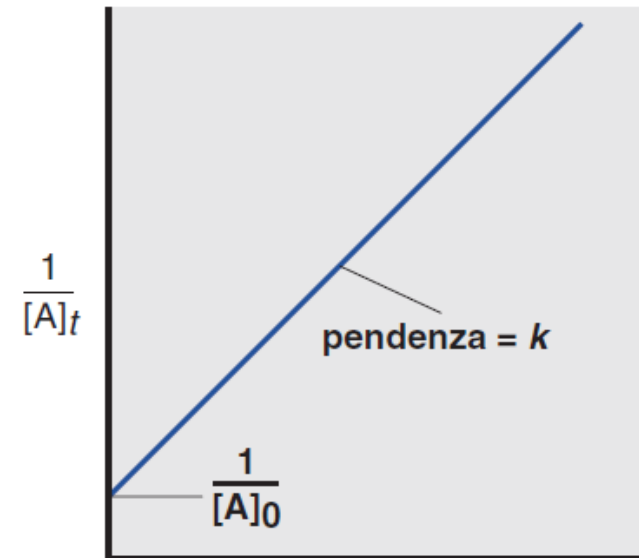


Legge cinetica integrata ordine 1

$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = -kt$$

Equazione della retta

$$\ln[A]_t = -kt + \ln[A]_0$$



Legge cinetica integrata ordine 2

$$\frac{1}{[A]_t} - \frac{1}{[A]_0} = kt$$

B Secondo ordine Tempo

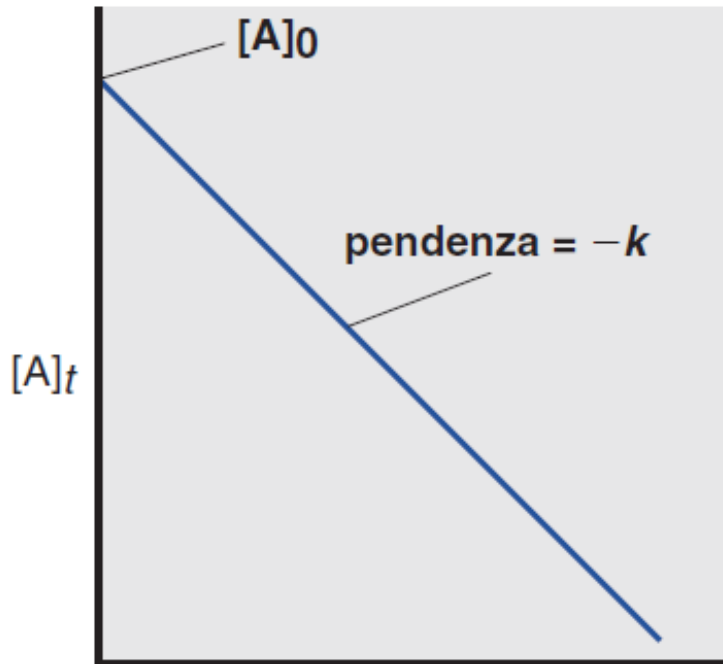
Velocità di reazione: leggi cinetiche integrate

Legge cinetica integrata

$$[A]_t - [A]_0 = -kt$$

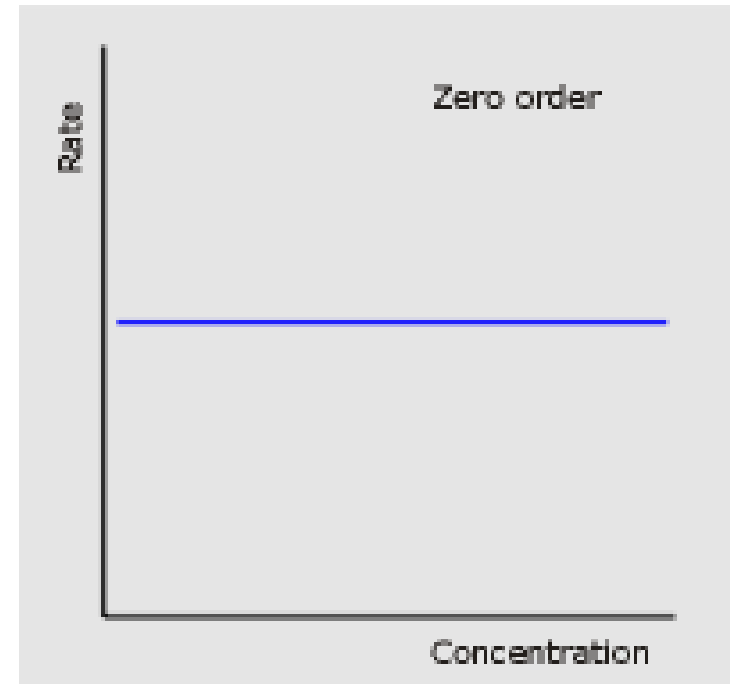
Equazione della retta

$$[A]_t = -kt + [A]_0$$



C Ordine zero

Tempo

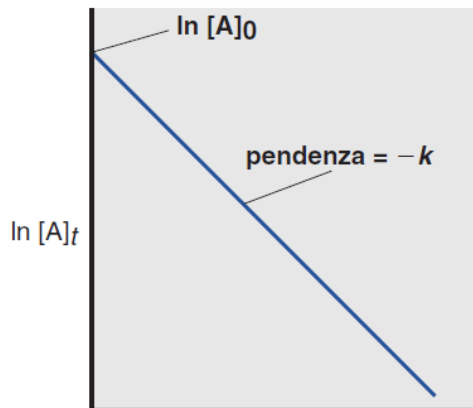


Reazioni di ordine zero:

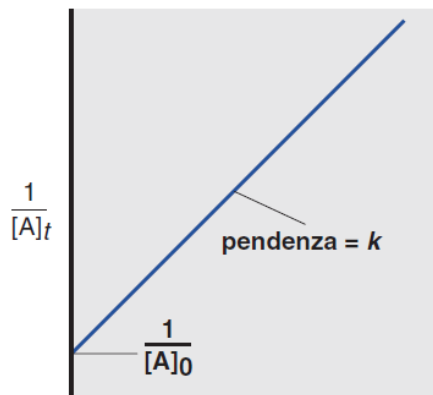
$$\text{velocità} = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = k[A]^0$$

Leggi cinetiche: to sum up

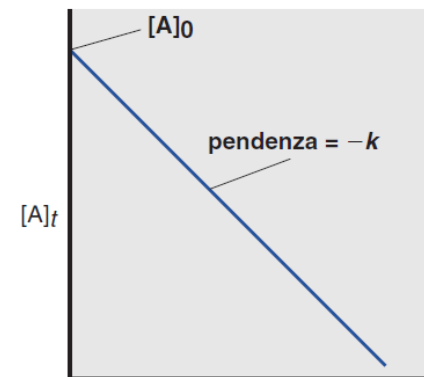
	Ordine zero	Primo ordine	Secondo ordine
legge cinetica	velocità = k	velocità = $k[A]$	velocità = $k[A]^2$
unità di misura di k	mol/L·s	1/s	L/mol·s
legge cinetica integrata	$[A]_t =$	$\ln [A]_t =$	$1/[A]_t =$
rappresentata da una retta	$-kt + [A]_0$	$-kt + \ln [A]_0$	$kt + 1/[A]_0$
funzione rappresentata da una retta	$[A]_t$ in funzione di t	$\ln [A]_t$ in funzione di t	$1/[A]_t$ in funzione di t
pendenza, intercetta con l'asse y	$-k, [A]_0$	$-k, \ln [A]_0$	$k, 1/[A]_0$
tempo di dimezzamento	$[A]_0/2k$	$(\ln 2)/k$	$1/k[A]_0$



A Primo ordine Tempo



B Secondo ordine Tempo



C Ordine zero Tempo

Effetto della temperatura: equazione di Arrhenius

La temperatura ha un importante effetto sulle velocità di reazione.

I dati sperimentali dimostrano che ***k* aumenta esponenzialmente con l'aumentare della temperatura.**

La relazione tra k e T è espressa dall'**equazione di Arrhenius**:

$$k = Ae^{-E_a/RT}$$

k = costante di velocità

A = fattore di frequenza

E_a = energia di attivazione

R = costante universale dei gas, $8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

Maggiore T → Maggiore k → Maggiore velocità

Effetto della temperatura: equazione di Arrhenius

Affinché un urto sia efficace non è sufficiente che si superi la barriera dell'energia di attivazione ma è anche necessario che le molecole reagenti abbiano la corretta orientazione relativa.

Il termine A nell'equazione di Arrhenius è il **fattore di frequenza** per la reazione.

$$k = Ae^{-E_a/RT}$$

$$A = pZ$$

p = probabilità di orientamento

Z = frequenza delle collisioni

Il termine p è specifico per ogni reazione ed è correlato alla complessità molecolare dei reagenti.

CINETICA CHIMICA: BATH BOMB e BLUE DYE

Principali equipments e vetreria necessari



Cilindro graduato



Beaker



Vetrini d'orologio



Beuta

Stativn



Termometro



Piastra riscaldante
e agitante



Pipetta Pasteur



Spatola

Reattivi necessari



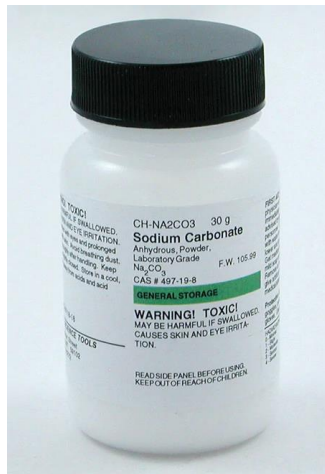
$MgSO_4 \cdot 7H_2O$
Sale di Epsom



$NaHCO_3$
Bicarbonato di sodio



H_2O_2



Na_2CO_3
Carbonato di sodio



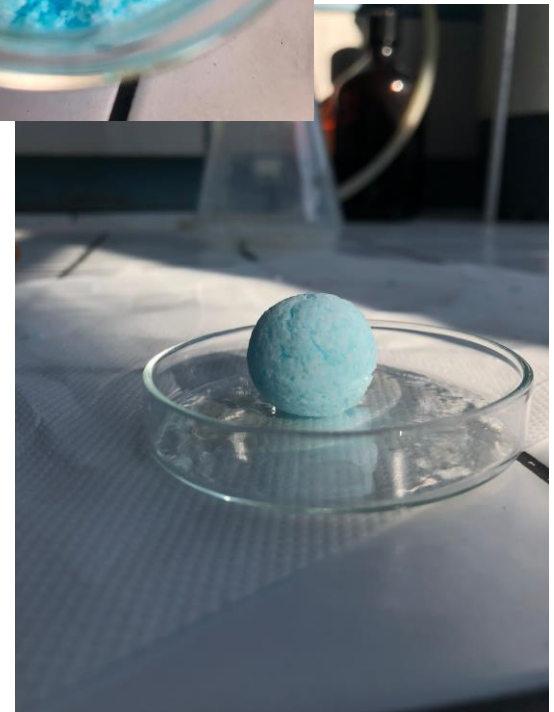
Colorante alimentare



Bath Bomb: Procedura sperimentale

Parte 1: Creare una Bath Bomb.

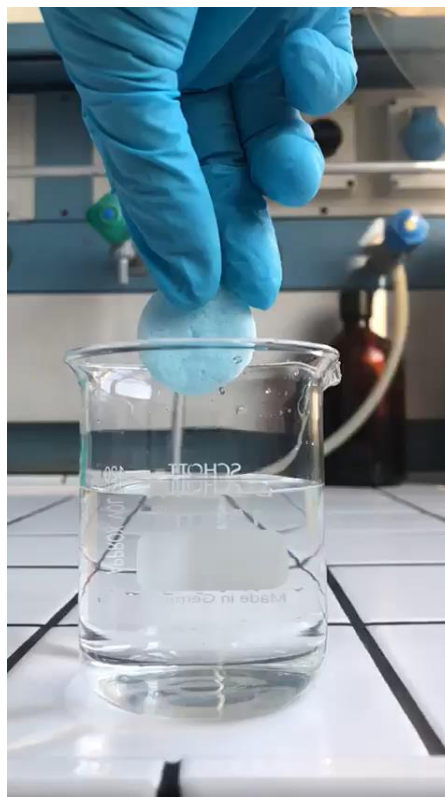
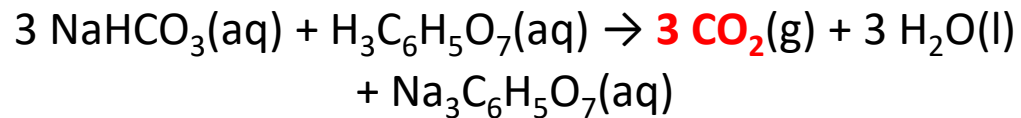
1. Su una bilancia tecnica, pesare 15 g di acido citrico, 15 g di sale di Epsom (solfato di magnesio eptaidrato, $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) e 30 g di bicarbonato di sodio. Mescolare questi ingredienti in un becher da 150 mL pulito e asciutto.
2. Aggiungere 2-3 gocce di colorante alimentare e mescolare.
3. Aggiungere circa 5 mL d'acqua in un cilindro graduato e, usando una pipetta pasteur, aggiungere lentamente 10 gocce d'acqua al becher con la miscela, una goccia alla volta e sempre mescolando.
4. La miscela dovrebbe iniziare a diventare compatta, formando grumi. Se la miscela è troppo secca, aggiungere altra acqua. È importante non aggiungere troppa acqua per permettere alla bath bomb di reagire correttamente.
5. Cercare di modellare **4 palline**, premendo bene in modo che risultino compatte.
6. Lasciare a seccare per 10 minuti.
7. Se la bath bomb è fragile e tende a sbriciolarsi, trasferire nuovamente la miscela nel becher e aggiungere un'altra goccia d'acqua, poi rimodellarla.
8. Una volta che la bath bomb è formata, lasciarla seccare all'aria per almeno altri 5 minuti. Pesarla e prendere nota della massa della bath bomb sul quaderno di laboratorio.



Parte 2: Reazione delle Bath Bombs in acqua.

Verranno fatte reagire 4 bath bombs a diverse temperature.

1. Aggiungere circa 300 mL di acqua a temperatura ambiente a un becher da 600 mL. Immergere la bath bomb nell'acqua e cronometrare il tempo impiegato dalla reazione. Avviare il timer appena la bath bomb è collocata in acqua e interromperlo appena non vengono più prodotte bolle.
2. Ripetere la misurazione del punto 1. in bagno a ghiaccio. Aggiungere ghiaccio al becher fino al raggiungimento di una temperatura di circa 5 °C, dopodiché immergere la bath bomb e misurare il tempo di reazione.
3. Ripetere la misurazione con 300 mL d'acqua calda. Scaldare su una piastra riscaldante fino a circa 60 °C, dopodiché immergere la bath bomb e misurare il tempo di reazione.
4. Ripetere la misurazione con 300 mL d'acqua quasi a ebollizione. Scaldare su una piastra riscaldante fino a circa 90 °C, dopodiché immergere la bath bomb e misurare il tempo di reazione.



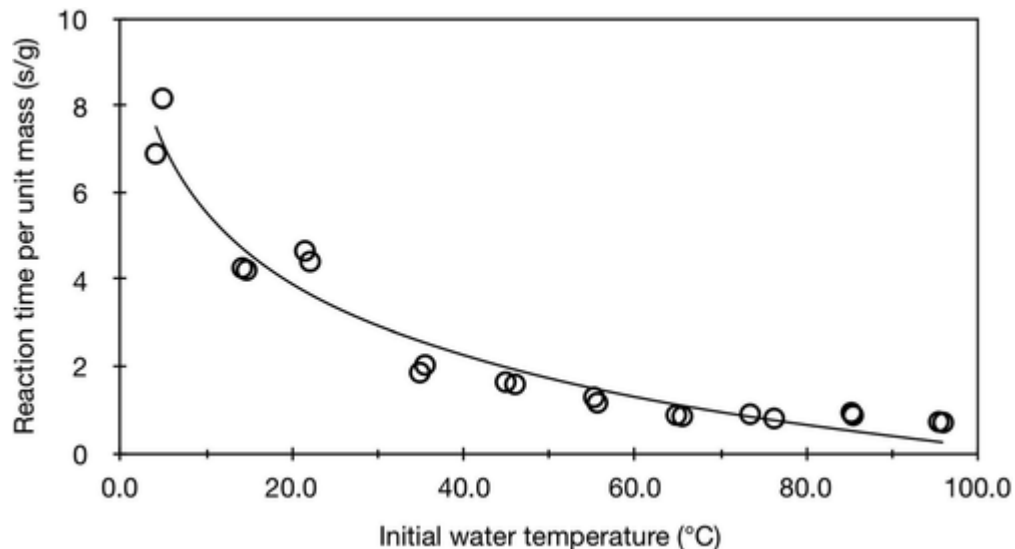
Parte 3: Raccolta dei dati sulla cinetica di reazione.

Ripetere la misurazione alle temperature di 5, 25, 60, 90 °C.

Raccogliere tutti i dati nella tabella seguente.

Costruire un grafico che riporti sulle ascisse la temperatura misurata di reazione e sulle ordinate il tempo di reazione per unità di massa.

Temperatura target (°C)	Temperatura misurata (°C)	Massa della bath bomb (g)	Tempo di reazione (s)	Tempo di reazione per unità di massa (s/g)
5				
25				
60				
90				



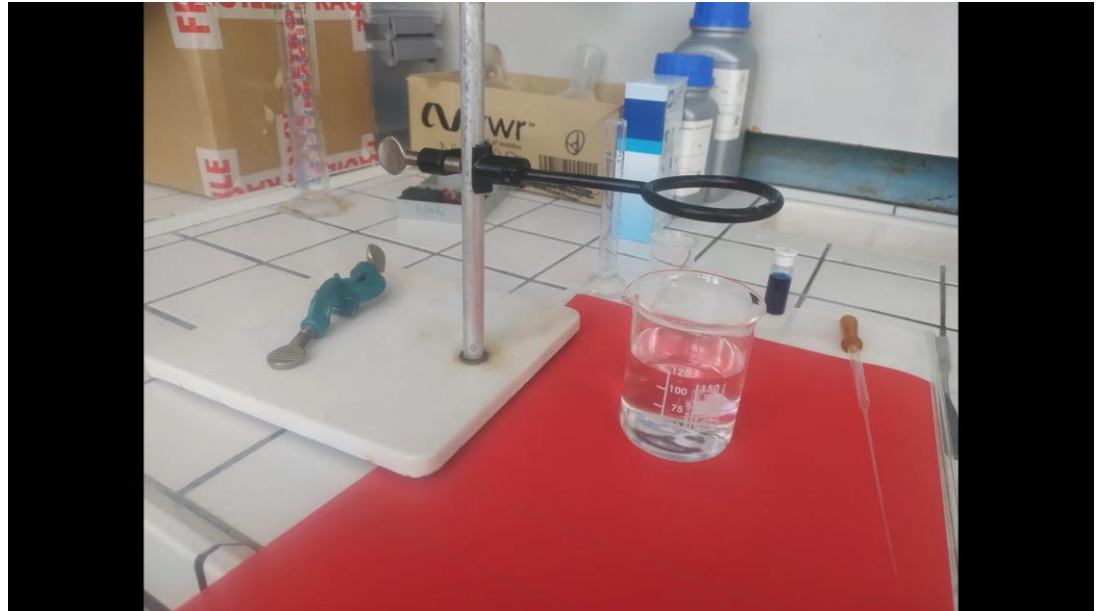
**Prendere dati
anche da almeno
2 vostri compagni**

Blue Dye: Procedura sperimentale

1. Preparare sostegno e foglio rosso
2. Aggiungere al beaker 100 mL H₂O dist
3. Aggiungere 10 mL di Na₂CO₃ 1M (prelevare con pipetta in un beaker piccolo)
4. Aggiungere 10 mL di H₂O₂ al 3 % m/m (prelevare con pipetta in un cilindro graduato)
5. Aprire l'app Color Grab, scansionare il colore e annotare il primo dei tre numeri riportati per il parametro RGB
6. Aggiungere una pipettata di colorante blu fino a che la soluzione sia blu (non troppo scuro) e monitorare con l'app **Color Grab** la variazione del parametro RGB nel tempo con un cronometro (**ogni 20 secondi fare scansione del colore**)



Color Grab



**Un file RGB contiene 3 strati sovrapposti di Rosso, Verde e Blu codificati su 256 livelli ciascuno (da 0 a 255) per riprodurre il nero bisogna modificare il colore a R=0, G=0 e B=0, per riprodurre il bianco bisogna modificare il colore a R=255, G=255 e B=255. Il sistema RGB è lo spazio colore utilizzato da monitor, scanner e fotocamere digitali.*

Data Analysis