



Scuola di Ingegneria Industriale e dell'Informazione
Insegnamento di **Chimica Generale**
083424 - CCS *CHI* e *MAT*



POLITECNICO DI MILANO



Stechiometria (cap. 3)

Prof. Attilio Citterio

Dipartimento CMIC "Giulio Natta"

<http://iscamap.chem.polimi.it/citterio/it/education>



- **La Mole e le Masse Molari / Masse Formula**
- **La Composizione Elementare**
- **Determinazione della Formula di un Composto Sconosciuto**
- **Formula Chimica e Calcoli delle Moli**
- **Scrittura e Bilanciamento di Equazioni Chimiche**
- **Calcoli sulle Quantità di Reagenti e Prodotti (calcoli stechiometrici)**
- **Resa percentuale**
- **Reagenti Limitanti**
- **Fondamenti della Stechiometria di Soluzioni**
 - **Espressioni della concentrazioni**
 - **Bilanci di massa per reazioni in soluzione**



Concetto di Mole

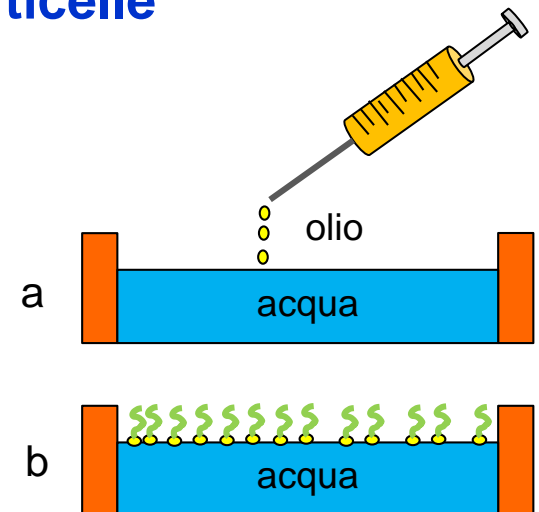
La Mole si basa sulla seguente definizione:

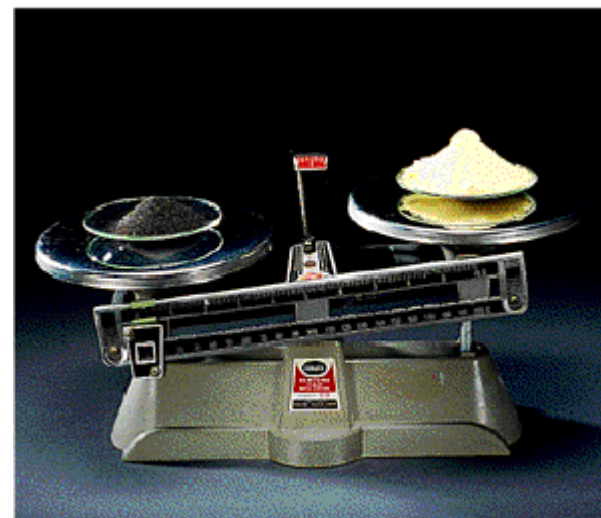
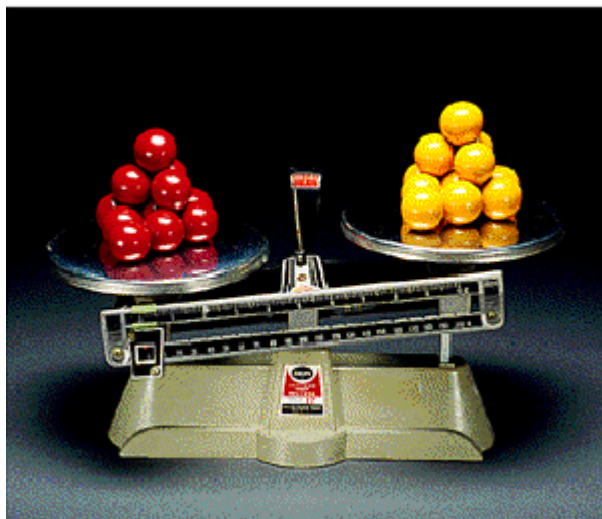
- *La quantità di sostanza che contiene tante particelle elementari (atomi, molecole, o altro) quanti atomi ci sono in esattamente 12 grammi di carbonio-12.*

1 Mole (mol) = massa di 6.022045×10^{23} particelle

N° AVOGADRO = $N_A = 6.022045 \times 10^{23}$ particelle

Esperimento di Franklin di olio su acqua (1757) – dall'area coperta si stima il numero di particelle di un monostrato di olio



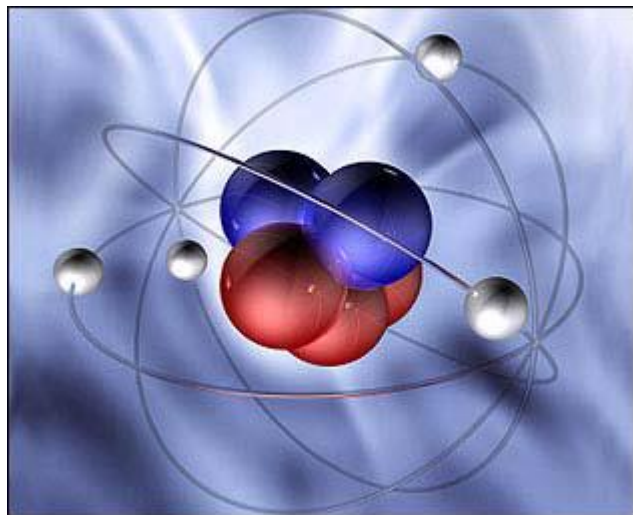


12 oggetti rossi \times 7 g ognuno = 84 g

12 oggetti gialli \times 4 g ognuno = 48 g

55.85 g Fe = 6.022×10^{23} atomi Fe

32.07 g S = 6.022×10^{23} atomi S



Submicroscopico

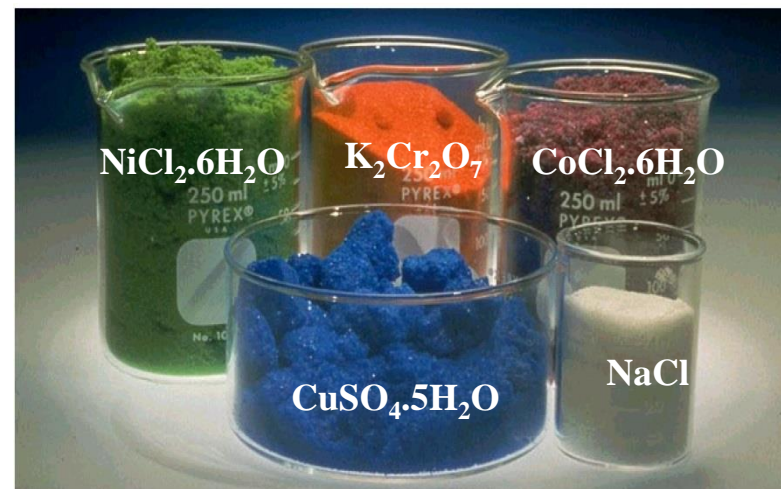
Bilancio di massa
e energia



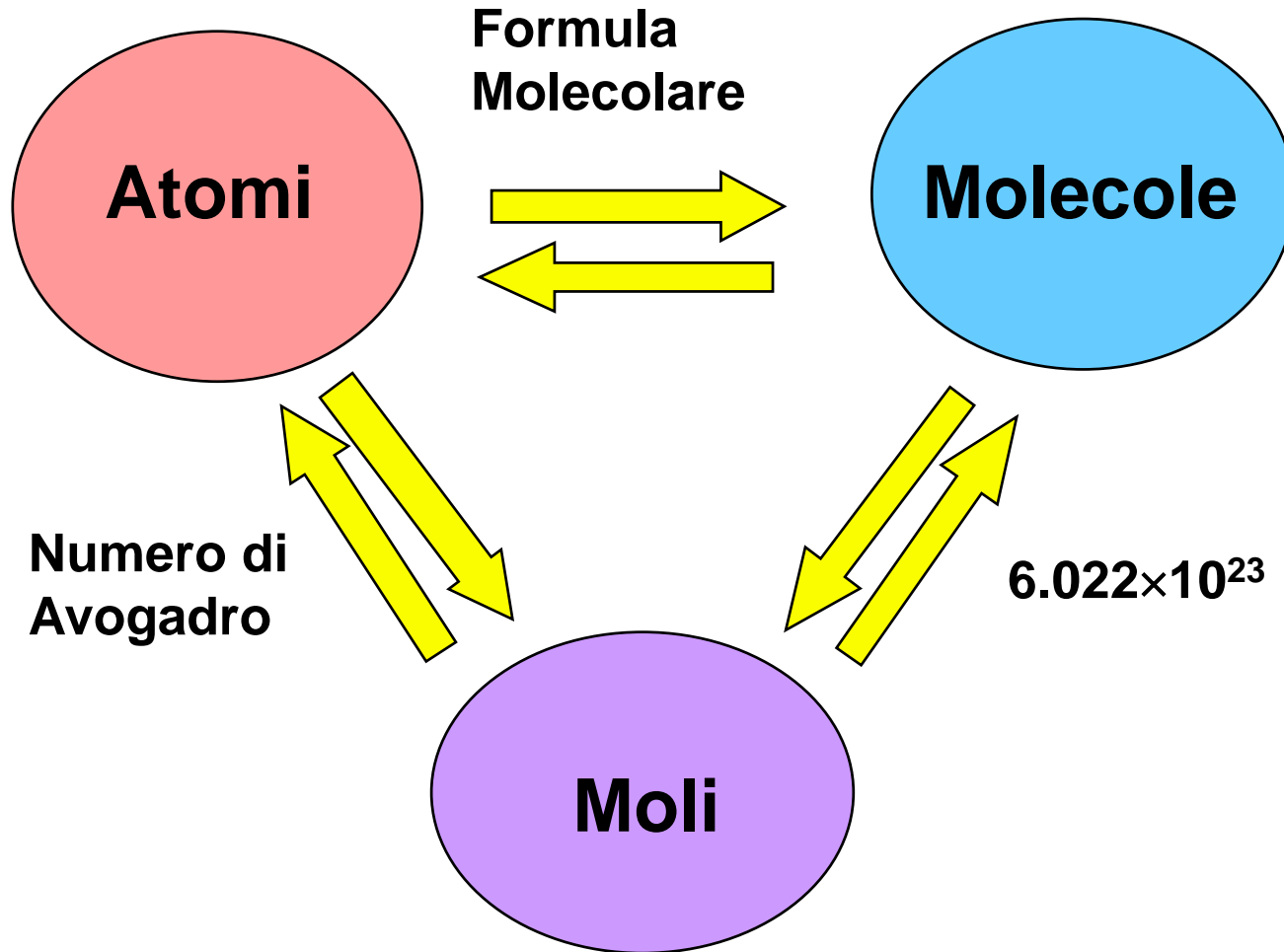
Macroscopico



Una Mole degli Elementi Rame, Zolfo, Mercurio, Carbonio e di Alcuni Sali a R.T.



1. Composizione Atomica e Mole





Relazione Mole - Massa di Elementi

Elemento	Atomo/Molecola	Massa Molare	Massa	Numero di Atomi
1 atomo di H	= 1.008 <i>uma</i>	1 mole di H	= 1.008 <i>g</i>	= 6.022×10^{23} atomi
1 atomo di Fe	= 55.85 <i>uma</i>	1 mole di Fe	= 55.85 <i>g</i>	= 6.022×10^{23} atomi
1 atomo di S	= 32.07 <i>uma</i>	1 mole di S	= 32.07 <i>g</i>	= 6.022×10^{23} atomi
1 atomo di O	= 16.00 <i>uma</i>	1 mole di O	= 16.00 <i>g</i>	= 6.022×10^{23} atomi
1 molecola di O ₂	= 32.00 <i>uma</i>	1 mole di O ₂	= 32.00 <i>g</i>	= 6.022×10^{23} molecole
1 molecola di S ₈	= 259.52 <i>uma</i>	1 mole di S ₈	= 259.52 <i>g</i>	= 6.022×10^{23} molecole

Massa Molecolare - Massa Molare (MW)

La massa molecolare di un composto espressa in ***uma (u)**** è numericamente uguale alla massa di una *mole* del composto espressa in ***grammi***.

Esempio: H₂O

$$\begin{aligned} \text{Massa Molecolare} &= (2 \times \text{massa atomica di H}) + \text{massa atomica di O} \\ &= 2 (1.008 \text{ u}) + 16.00 \text{ u} = \underline{\mathbf{18.02 \text{ u}}} \end{aligned}$$

$$\text{Massa di una molecola di acqua} = \underline{\mathbf{18.02 \text{ u}}}$$

$$\begin{aligned} \text{Massa Molare} &= (2 \times \text{massa atomica di H}) + \text{massa atomica di O} \times N \\ (\text{MW}) &= 2 (1.008 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}) + 16.00 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} = \underline{\mathbf{18.02 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}}} \end{aligned}$$

$$18.02 \text{ g H}_2\text{O} = 6.022 \times 10^{23} \text{ molecole di acqua} = 1 \text{ mole H}_2\text{O}$$

Nota: per molecole ad alto peso molecolare (biochimica) è rimasto l'uso di utilizzare l'unità di massa atomica con il simbolo **Da (Dalton)**.

Massa(Peso) Formula (F.W.)

- Massa Formula* – somma delle masse atomiche delle specie atomiche componenti una sostanza ionica o covalente (unità di formula, NON una molecola).

Esempio: Solfuro di Ammonio

F.W. = 68.1 u

N: $2 \times 14.0 \text{ u} = 28.0 \text{ u}$

H: $8 \times 1.0 \text{ u} = 8.0 \text{ u}$

S: $1 \times 32.1 \text{ u} = 32.1 \text{ u}$

68.1 u



A causa del suo odore ripugnante, il solfuro di ammonio è l'ingrediente attivo in vari scherzi, incluse le comuni bombolette puzzolenti.

*Talvolta questa grandezza è indicata come peso molecolare o peso formula, ma l'espressione corretta è quella di massa.

2. Composizione Percentuale

- Composizione% = # di g di ciascun elemento in 100 g di un composto

$$= \frac{\text{massa dell'elemento}}{\text{massa totale}} \times 100$$

Esempio: Solfuro di Ammonio $(\text{NH}_4)_2\text{S}$ (F.W. = 68.1 u)

$$\% \text{ N} = \frac{2 \times 14.0 \text{ u} \cdot N}{68.1 \text{ u} \cdot N (\text{NH}_4)_2\text{S}} \times 100 = 41.1\% \text{ N}$$

$$\% \text{ H} = \frac{8 \times 1.0 \text{ u} \cdot N \text{ H}}{68.1 \text{ u} \cdot N (\text{NH}_4)_2\text{S}} \times 100 = 11.7\% \text{ H}$$

$$\% \text{ S} = \frac{32.1 \text{ u} \cdot N \text{ S}}{68.1 \text{ u} \cdot N (\text{NH}_4)_2\text{S}} \times 100 = 47.1\% \text{ S}$$

(N = Numero di Avogadro)



Una Mole di Sostanze Comuni

CaCO_3

100.09 g

Ossigeno

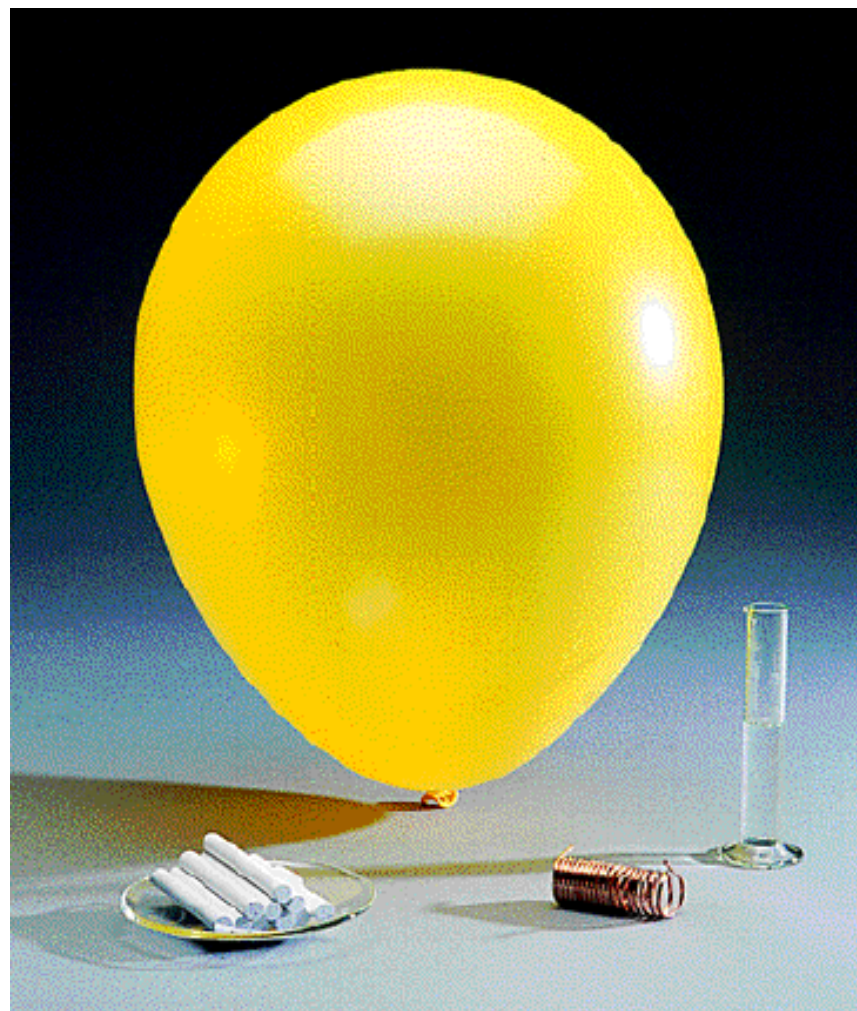
32.00 g

Rame

63.55 g

Acqua

18.02 g





Informazioni Contenute nella Formula Chimica del Glucosio $C_6H_{12}O_6$ (MW = $180.16 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$)

13

	Carbonio (C)	Idrogeno (H)	Ossigeno (O)
Atomi/molecole di composto	6 atomi	12 atomi	6 atomi
Moli di atomi/mole di composto	6 moli di atomi	12 moli di atomi	6 moli di atomi
Atomi/mole di composto	$6 \times (6.022 \times 10^{23})$ atomi	$12 \times (6.022 \times 10^{23})$ atomi	$6 \times (6.022 \times 10^{23})$ atomi
Massa/molecola del composto	$6 \times (12.01 \text{ u}) =$ 72.06 u	$12 \times (1.08 \text{ u}) =$ 12.10 u	$6 \times (16.00 \text{ u}) =$ 96.00 u
Massa/mole di composto	$72.06 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$	$12.10 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$	$96.00 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$



Calcolo della Composizione Percentuale Mediante Software

14

The screenshot displays the ACD/ChemSketch software interface. The main window shows a chemical structure of methane (CH₄) with its molecular formula, formula weight (16.04246), and composition (C(74.87%) H(25.13%)). The interface includes a menu bar (File, Edit, Pages, Tools, Templates, Options, Documents, Add-Ons, ACD/Labs, Help), a toolbar with various drawing and editing tools, and a workspace with a ruler and a color palette. The status bar at the bottom shows the current document name (NONAME01.SK2), page number (Page 1/1), and a list of open tabs (1-ChemSketch, 2-Database, 3-I-Lab).

ACD/ChemSketch ...

File Edit Pages Tools Templates Options Documents Add-Ons ACD/Labs Help

Structure Draw

cm 0 5 10 15 20

Molecular Formula: CH₄
Formula Weight: 16.04246
Composition: C(74.87%) H(25.13%)

Molecular Formula: CH₄
Formula Weight: 16.04246
Composition: C(74.87%) H(25.13%)

More...

<http://www.acdlabs.com/acdlabs-rss-feed.xml>: 10:17 Cannot download RSS! <http://www.acdlabs.com> Setup RSS

NONAME01.SK2 Modified Page 1/1 Properties

1-ChemSketch 2-Database 3-I-Lab

Software ChemSketch (freeware)

The image shows a screenshot of the ChemSketch software interface. The main window displays the 'About' dialog box for ACD/ChemSketch (Freeware) 2016.2.2. The dialog box contains the following information:

- ACD/ChemSketch (Freeware) 2016.2.2
- Freeware Version** (written in red text over the image)
- www.acdlabs.com
- Copyright © 1994-2016
Advanced Chemistry Development, Inc.
All Rights Reserved
- ACD/Labs 2016.2.2 (File Version C30E41, Build 90752, 20 Dec 2016)

Below the 'About' dialog box, there are two buttons: 'System Info...' and 'Contacts...'. The 'Contacts...' button is highlighted. To the right of the 'About' dialog box, there is a contact information window titled 'ACD/Labs Con...'. This window contains the following information:

- Advanced Chemistry Development, Inc.
- 8 King Street East, Suite 107,
Toronto, Ontario
M5C 1B5, Canada
- Toll-Free: (800) 304-3988
Tel: (416) 368-3435
Fax: (416) 368-5596
- http://www.acdlabs.com

At the bottom of the contact information window, there is a green checkmark icon and an 'OK' button. The background of the screenshot shows a chemical structure editor interface with a grid and various tool icons.



Problema: Il Tungsteno (W) è l'elemento usato come filamento nelle lampadine, e possiede il più alto punto di fusione tra gli elementi metallici (3680 °C). Quante moli di tungsteno e quanti atomi dell'elemento sono contenute in un campione di 35.0 mg del metallo?

Piano: Convertire la massa in moli dividendo la massa per il peso atomico del metallo, quindi calcolare il numero di atomi moltiplicando per il numero di Avogadro!

Soluzione: Convertendo dalla massa il peso di W in moli:

$$\text{Moli di W} = 35.0 \text{ mg W} \times \frac{1 \text{ mol W}}{183.9 \text{ g W}} = \mathbf{0.00019032 \text{ mol}}$$

(1.90·10⁻⁴ mol)

$$\text{N}^\circ \text{ di atomi W} = 1.90 \cdot 10^{-4} \text{ mol W} \times \frac{6.022 \cdot 10^{23} \text{ atomi}}{1 \text{ mol W}}$$

= 1.15·10²⁰ atomi di Tungsteno



Problema: Il Fosfato Trisodico è un componente di alcuni detergenti. Quante moli e unità di formula ci sono in un campione di 38.6 g?

Piano: *Determinare la formula, e la massa formula dalle masse atomiche di ciascun elemento moltiplicate per i coefficienti.*

Soluzione: La formula è Na_3PO_4 . Calcolando la massa formula :

$$\begin{aligned} F.W. &= 3 \times \text{Sodio} + 1 \times \text{Fosforo} + 4 \times \text{Ossigeno} = \\ &= 3 \times 22.99 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} + 1 \times 30.97 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} + 4 \times 16.00 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} \\ &= 68.97 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} + 30.97 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} + 64.00 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} = 163.94 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} \end{aligned}$$

Convertendo la massa in moli:

$$\text{moli Na}_3\text{PO}_4 = 38.6 \text{ g Na}_3\text{PO}_4 \times \frac{(1 \text{ mol Na}_3\text{PO}_4)}{163.94 \text{ g Na}_3\text{PO}_4} = \mathbf{0.23545 \text{ mol Na}_3\text{PO}_4}$$

$$\begin{aligned} \text{Unità di Formula} &= \mathbf{0.23545 \text{ mol Na}_3\text{PO}_4} \times \frac{6.022 \cdot 10^{23} \text{ unità formula}}{(1 \text{ mol Na}_3\text{PO}_4)} \\ &= \mathbf{1.46 \cdot 10^{23} \text{ unità di formula}} \end{aligned}$$



Diagramma a Flusso sui Calcoli delle Percentuali in Massa (peso) in Composti

Moli di X in una mole di Composto



Massa (g) di X in una mole di composto



Frazione di Massa di X



% in Massa di X

$MW (g \cdot mol^{-1})$ di X

Dividere per la massa (g) di una mole di composto

Moltiplicare per 100



Problema: Il comune zucchero è il saccarosio ($C_{12}H_{22}O_{11}$).

(a) Qual è la percentuale in massa degli elementi nel saccarosio?

(b) Quanti grammi di carbonio ci sono in 24.35 g di saccarosio?

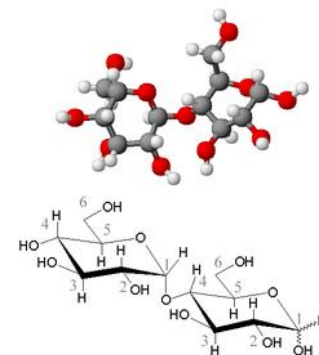
(a) Determinando le percentuali in massa di ogni elemento:

massa del C = $12 \times 12.01 \text{ g C/mol} = 144.12 \text{ g C per mole}$

massa dell'H = $22 \times 1.008 \text{ g H/mol} = 22.176 \text{ g H per mole}$

massa dell'O = $11 \times 16.00 \text{ g O/mol} = 176.00 \text{ g O per mole}$

342.296 g·mol⁻¹ (342.30)



Si calcola quindi la frazione di massa del C nel Saccarosio e la % C:

$$\text{Frazione di Massa di C} = \frac{\text{Massa totale of C}}{\text{massa di 1 mole di saccarosio}} = \frac{144.12 \text{ g C}}{342.30 \text{ g Comp.}}$$

$$= \mathbf{0.421046} \quad \Rightarrow \quad \% \text{ massa di C} = 0.421046 \times 100\% = \mathbf{42.11\%}$$



(a) *seguito*

$$\begin{aligned} \% \text{ Massa di H} &= \frac{\text{moli H} \times MW \text{ di H}}{\text{massa di 1 mol saccarosio}} \times 100\% = \frac{22 \times 1.008 \text{ g H}}{342.30 \text{ g}} \times 100\% \\ &= 6.48\% \text{ H} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \% \text{ Massa di O} &= \frac{\text{moli O} \times MW \text{ di O}}{\text{massa di 1 mol saccarosio}} \times 100\% = \frac{11 \times 16.00 \text{ g O}}{342.30 \text{ g}} \times 100\% \\ &= 51.42\% \text{ O} \end{aligned}$$

(b) *Determinazione della massa di carbonio:*

Massa (g) C = massa saccarosio \times (frazione di massa di C nel saccarosio)

$$\text{Massa (g) di C} = 24.35 \text{ g saccarosio} \times \frac{0.421046 \text{ g C}}{1 \text{ g saccarosio}} = 10.25 \text{ g di C}$$



Peso Molecolare e Composizione % del Composto Ionico NH_4NO_3

- $2 \text{ mol N} \times 14.01 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} = 28.02 \text{ g N}$
- $4 \text{ mol H} \times 1.008 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} = 4.032 \text{ g H}$
- $3 \text{ mol O} \times 15.999 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1} = 48.00 \text{ g O}$

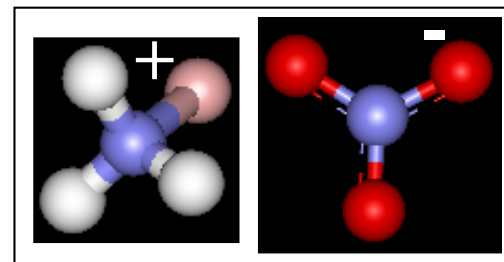
80.05 g·mol⁻¹ (FW)

$$\% \text{ N} = \frac{28.02 \text{ g N}_2}{80.05 \text{ g}} \times 100\% = 35.00\%$$

$$\% \text{ H} = \frac{4.032 \text{ g H}_2}{80.05 \text{ g}} \times 100\% = 5.037\%$$

$$\% \text{ O} = \frac{48.00 \text{ g O}_2}{80.05 \text{ g}} \times 100\% = \underline{59.96\%}$$

99.997%



(Triossonitrato di ammonio)
Nitrato di ammonio

Calcolare la Composizione Percentuale dell'Acido Solforico H₂SO₄

Massa Molare dell'Acido Solforico = MW_{H₂SO₄}

$$2(1.008 \text{ g}) + 1(32.07 \text{ g}) + 4(16.00 \text{ g}) = 98.09 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\%H = \frac{2 (1.008\text{g H})}{98.09\text{g}} \times 100\% = \mathbf{2.06\% H}$$

$$\%S = \frac{1 (32.07\text{g S})}{98.09\text{g}} \times 100\% = \mathbf{32.69\% S}$$

$$\%O = \frac{4 (16.00\text{g O})}{98.09\text{g}} \times 100\% = \mathbf{65.25\% O}$$

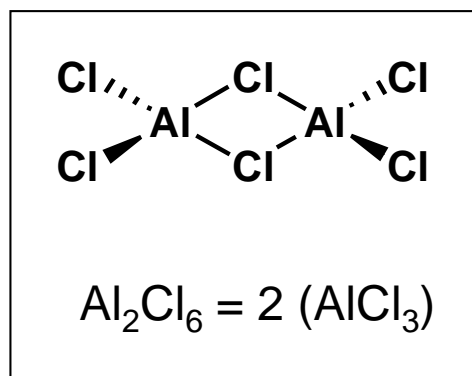
verifica **100.00%**

Formule Empirica e Molecolare

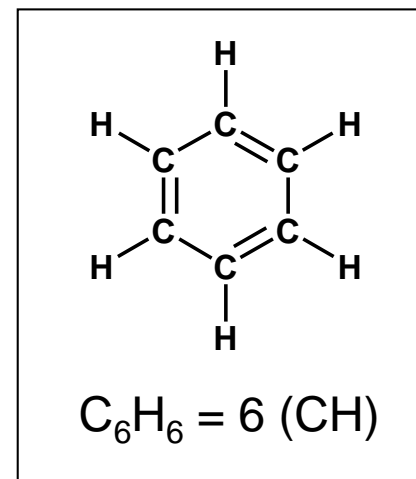
Formula Empirica - La formula più semplice per un composto che soddisfa l'analisi elementare!
L'insieme minimo dei gruppi complessivi di atomi.

Formula Molecolare - La formula del composto come realmente esiste, può essere un multiplo della formula empirica.

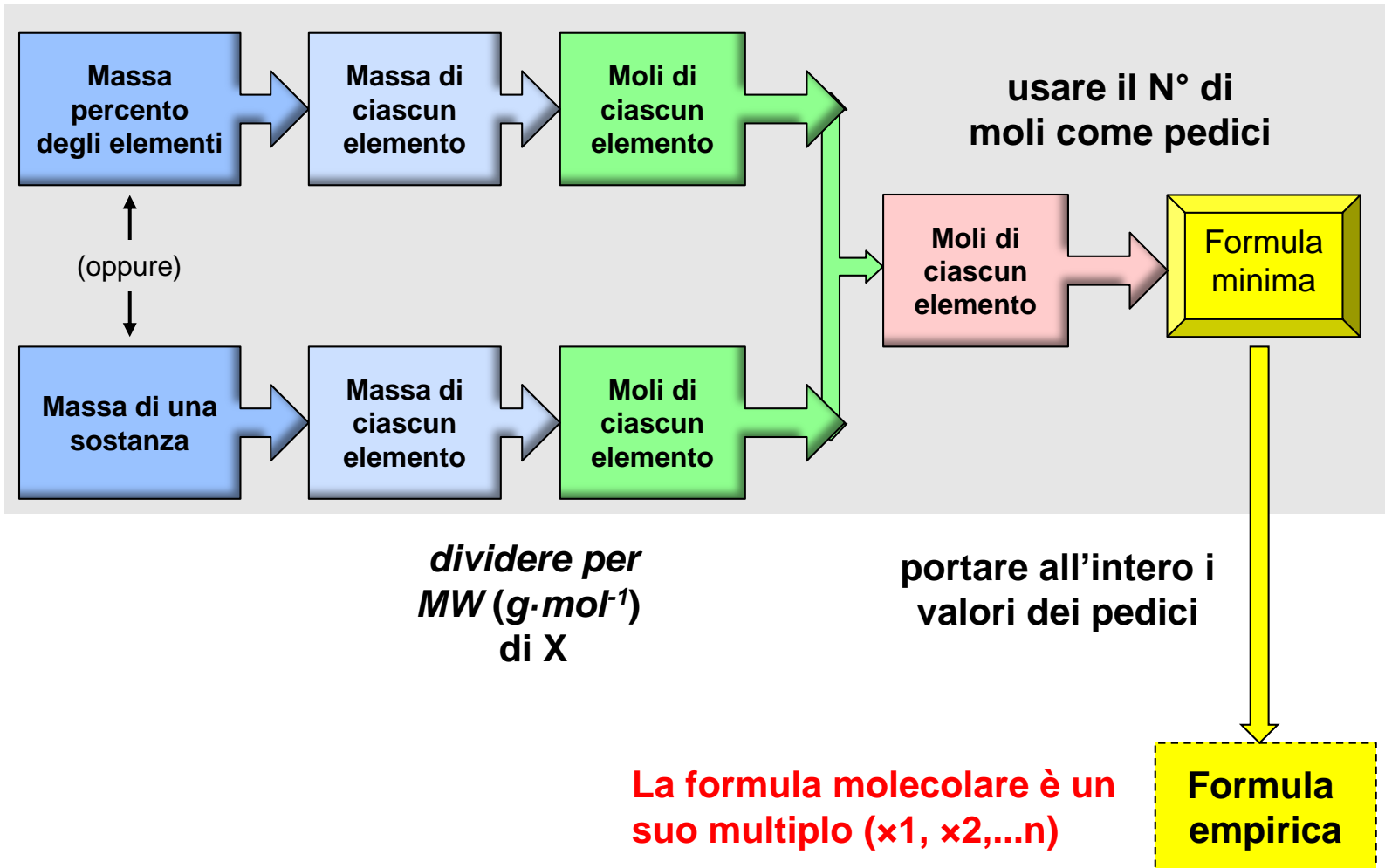
Per esempio:



Esacloruro di dialluminio



Benzene





Formula Empirica

Formula Molecolare (MW)

CH₂ (idrocarburi insaturi)

C₂H₄, C₃H₆, C₄H₈, polietilene

OH o HO

H₂O₂

S

S₈

C

C₆₀ (fullerene), C₇₀

NO₂

NO₂, N₂O₄

P₂O₅

P₄O₁₀

CH₂O (carboidrati)

C₆H₁₂O₆ (glucosio)



Nome	Formula	n	MW ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	Usò o Funzione
Formaldeide	CH_2O	1	30.03	Disinfettante, conservante biologico
Acido Acetico	$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$	2	60.05	Polimeri acetato, aceto (soluzione al 5%)
Acido Lattico	$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3$	3	90.08	Precipitante, si forma nei muscoli, prepar. esteri
Eritrosio	$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_4$	4	120.10	Si forma nel metabolismo degli zuccheri
Ribosio	$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_5$	5	150.13	Componente di molti acidi nucleici e vitam. B_{12}
Glucosio	$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$	6	180.16	Principale nutriente per l'energia delle cellule





Problema: L'analisi elementare di un campione di un composto fornisce i seguenti risultati: 5.677 g Na, 6.420 g Cr, e 7.902 g O. Qual è la formula empirica al composto. Assegnarne il nome?

Piano: Prima si deve convertire la massa degli elementi in moli di elementi usando le masse molari. Quindi si costruisce una formula preliminare e si assegna il nome al composto.

Soluzione: Determinazione delle moli dei vari elementi:

$$\text{Moli di Na} = 5.678 \text{ g Na} \times \frac{1 \text{ mol Na}}{22.99 \text{ g Na}} = 0.2469 \text{ mol di Na}$$

$$\text{Moli di Cr} = 6.420 \text{ g Cr} \times \frac{1 \text{ mol Cr}}{52.00 \text{ g Cr}} = 0.12447 \text{ mol di Cr}$$

$$\text{Moli di O} = 7.906 \text{ g O} \times \frac{1 \text{ mol O}}{16.00 \text{ g O}} = 0.4939 \text{ mol di O}$$



- Predisporre la formula preliminare :



- Convertire i pedici all'intero (dividendo tutto per il pedice minore):



- Arrotondare a numeri interi:



Cromato di Sodio
(tetraossocromato di sodio)
(sodium chromate)



Problema: Lo zucchero bruciato per produrre energia nelle cellule del corpo è il Glucosio ($MW = 180.16 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$), la cui analisi elementare è:

% massa C 40.00, **% massa H 6.719**, e **% massa O 53.27**.

(a) Determinare la formula empirica del glucosio. **(b)** la formula molecolare.

***Piano:** Si possiede solo la % in massa, e non il peso del composto per cui si assume di prendere 100 grammi del composto; la % diventa grammi e si può passare come prima alle masse degli elementi.*

Soluzione:

$$\text{Massa Carbonio} = (40.00\% \times 100 \text{ g})/100\% = 40.00 \text{ g C}$$

$$\text{Massa Idrogeno} = (6.719\% \times 100 \text{ g})/100\% = 6.719 \text{ g H}$$

$$\text{Massa Ossigeno} = (53.27\% \times 100 \text{ g})/100\% = 53.27 \text{ g O}$$

99.989 g di
Composto



- Convertendo dai grammi di Elementi a moli:

$$\text{Moli di C} = \text{massa di C} \times \frac{1 \text{ mol C}}{12.01 \text{ g C}} = 3.3306 \text{ mol C}$$

$$\text{Moli di H} = \text{massa di H} \times \frac{1 \text{ mol H}}{1.008 \text{ g H}} = 6.6657 \text{ mol H}$$

$$\text{Moli di O} = 53.27 \text{ g O} \times \frac{1 \text{ mol O}}{16.00 \text{ g O}} = 3.3294 \text{ mol O}$$

Si costruisce la formula preliminare $\text{C}_{3.33} \text{H}_{6.67} \text{O}_{3.33}$

Si converte al pedice intero, dividendo i pedici per il minimo comune:





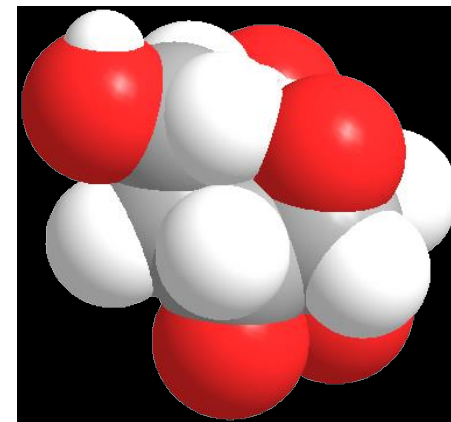
(b) Passando alla Formula Molecolare :

Il peso formula della formula empirica è:

$$1 \times C + 2 \times H + 1 \times O = 1 \times 12.01 + 2 \times 1.008 + 1 \times 16.00 = 30.03$$

$$\begin{aligned} \text{molteplicità} &= \frac{\text{MW del Glucosio}}{\text{massa della formula empirica}} \\ &= \frac{180.16}{30.03} = 6.00 = 6 \end{aligned}$$

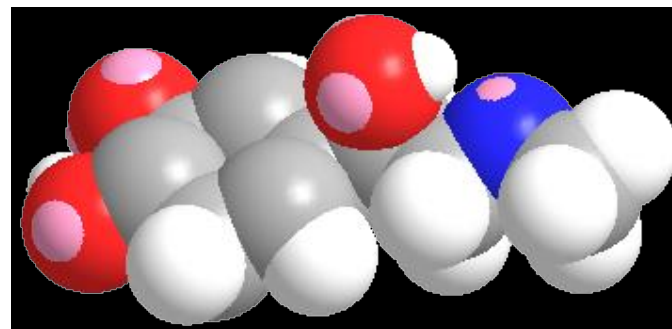
Pertanto la Formula Molecolare è:



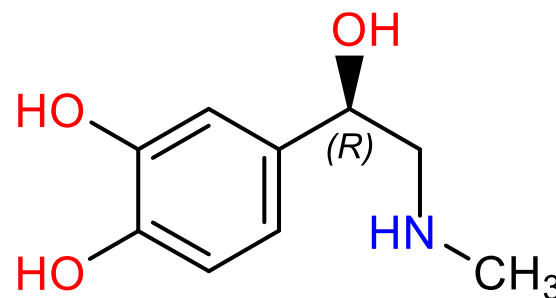


L'Analisi elementare è:

- C = 59.0 %
- H = 7.20 %
- O = 26.3 %
- N = 7.61 %



- **Determinare la Formula Empirica e**
- **se è compatibile con la struttura a fianco**





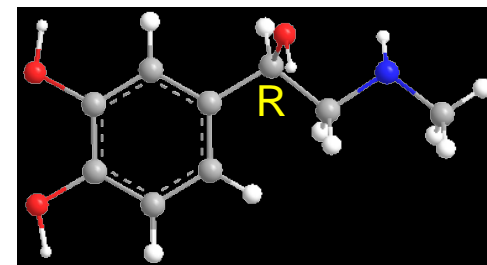
Adrenalina - II

Assumere 100 g.

- $C = 59.0 \text{ g C} / (12.01 \text{ g C} / \text{mol C}) = 4.91 \text{ mol C}$
- $H = 7.20 \text{ g H} / (1.008 \text{ g H} / \text{mol H}) = 7.14 \text{ mol H}$
- $O = 26.1 \text{ g O} / (16.00 \text{ g O} / \text{mol O}) = 1.63 \text{ mol O}$
- $N = 7.61 \text{ g N} / (14.01 \text{ g N} / \text{mol N}) = 0.543 \text{ mol N}$

Dividere per 0.543

- $C = 9.04 \text{ mol C} = 9.0 \text{ mol C}$
- $H = 13.1 \text{ mol H} = 13.0 \text{ mol H}$
- $O = 3.02 \text{ mol O} = 3.0 \text{ mol O}$
- $N = 1.00 \text{ mol N} = 1.0 \text{ mol N}$



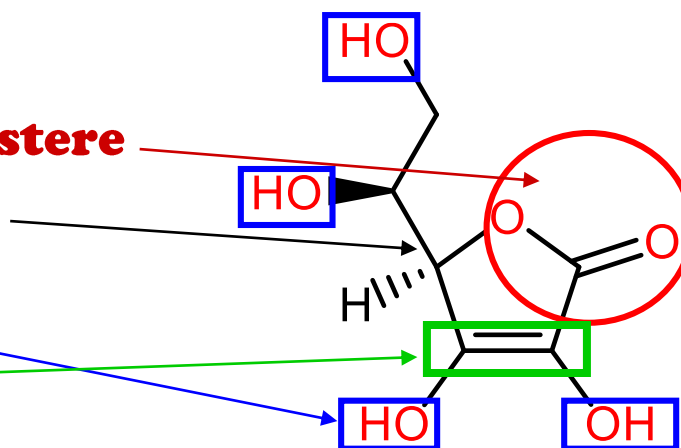
Acido Ascorbico

- Formula empirica $C_3H_4O_3$
- Formula molecolare $C_6H_8O_6$
- Peso Molecolare e Analisi elementare

▪ $C_6 = 12.011 \times 6 = 72.066$	72.066	C: 40.9%
▪ $H_8 = 1.008 \times 8 = 8.064$	8.064	H: 4.58%
▪ $O_6 = 15.999 \times 6 = 95.994$	95.994	O: 54.5%
	<hr/>	
	176.124 g/mol	

- Formula di struttura:

- **Gruppo Funzionale : Estere**
- **Residuo alchile**
- **Alcool (4)**
- **Alchene**



Acido Ascorbico: Proprietà e Sintesi

- Carbonio = Blu
- Idrogeno = Bianco
- Ossigeno = Rosso



Legami:

- **O-H: Covalente Polare**
- **C-H: Covalente Non polare**
- **C-C: Covalente Non polare**
- **C-O: Covalente Polare**
- **C=O: Covalente Polare**

Sintesi Industriale

Stadio 1 - 9 (Idrolisi dell'Amido): L'amido di Mais è idrolizzato a monomero (D-Glucosio) per azione di enzimi e del calore

Stadio 10 (Idrogenazione): Il D-Glucosio è convertito in D-Sorbitolo.

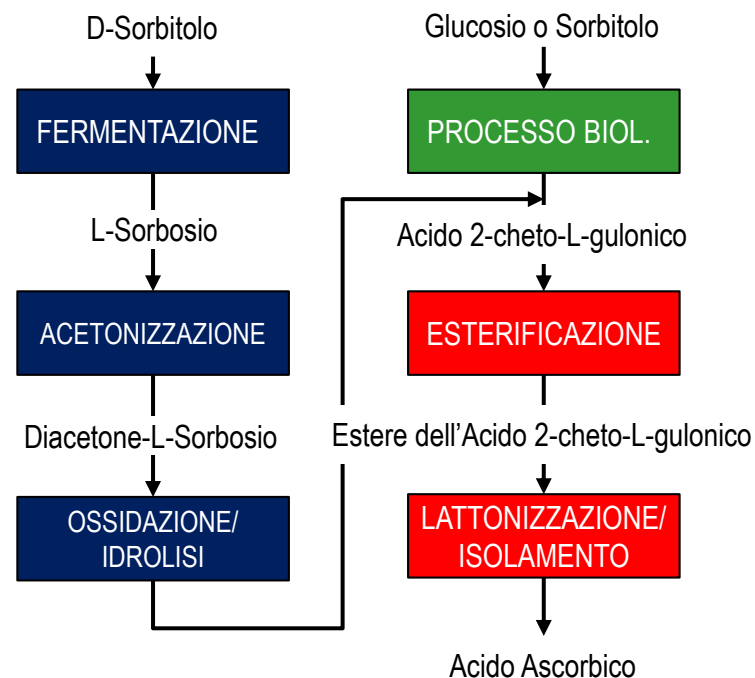
Stadio 11 (Fermentazione): Il D-Sorbitolo è convertito in L-Sorbosio.

Stadio 12 (Acetonizzazione): Il L-Sorbosio è derivatizzato con un acido a bassa temperatura.

Stadio 13 (Ossidazione): Il prodotto è quindi ossidato con un catalizzatore, acidificato, lavato e seccato a dare l'Acido L-Gluconico.

Stadio 14 (Idrolisi): L'Acido L-Gluconico è trattato con HCl a dare l'acido ascorbico grezzo.

Stadio 15 (Ricristallizzazione): L'acido ascorbico grezzo è filtrato, purificato e macinato per dare la polvere fine cristallina finale.





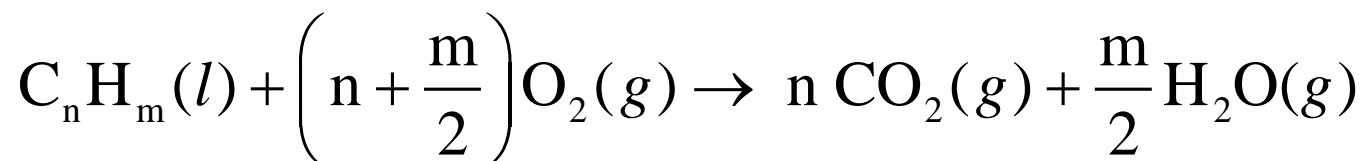
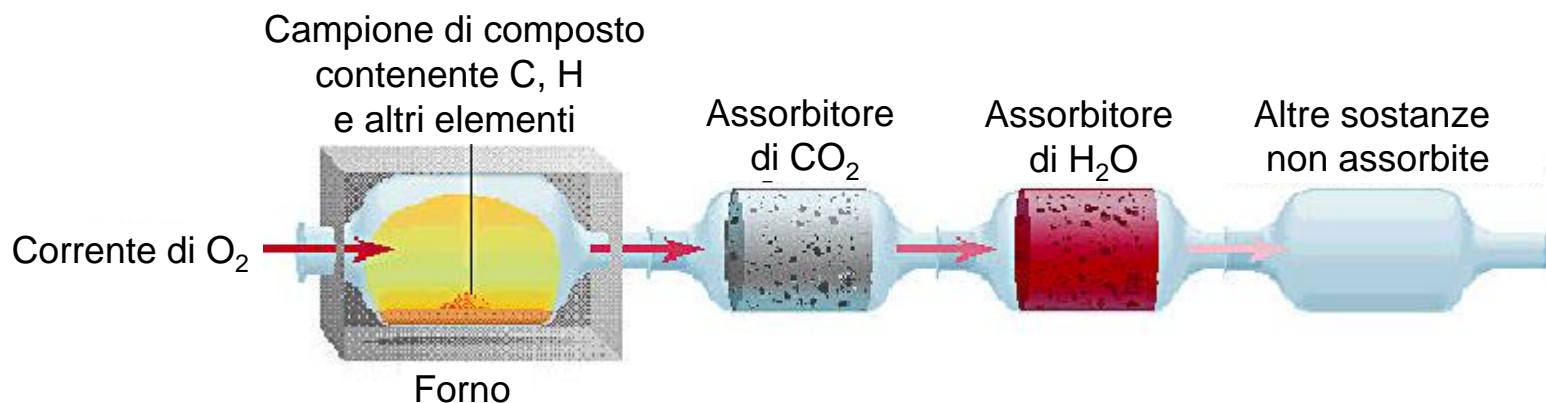
(a) Scrittura e Bilanciamento di Equazioni Chimiche

(b) Calcoli sulle Quantità di Reagenti e Prodotti



Combustione per la Determinazione della Composizione Chimica di un Composto Organico.

37



La Massa del campione è nota.

La Massa della CO₂ si determina per pesata dell'assorbitore di CO₂.

La Massa dell'H₂O si determina per pesata dell'assorbitore di H₂O.

La Massa del C si determina dalla massa della CO₂.

La Massa dell'H si determina dalla massa dell'H₂O.

La Massa restante è dovuta all'Ossigeno.



Per combustione in un eccesso di ossigeno, un campione di 6.49 *mg* di Vitamina C (acido L-ascorbico) fornisce 9.74 *mg* di CO₂ e 2.64 *mg* di H₂O. Calcolare la sua formula empirica!

- C: $9.74 \cdot 10^{-3} \text{ g CO}_2 \times (12.01 \text{ g C} / 44.01 \text{ g CO}_2)$
= **$2.65 \cdot 10^{-3} \text{ g di C}$**
- H: $2.64 \cdot 10^{-3} \text{ g H}_2\text{O} \times (2.016 \text{ g H}_2 / 18.02 \text{ g H}_2\text{O})$
= **$2.92 \cdot 10^{-4} \text{ g di H}$**
- Massa di Ossigeno = 6.49 *mg* - 2.64 *mg* - 0.30 *mg*
= **3.55 *mg* di O**

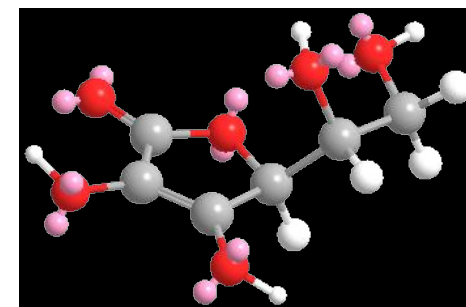
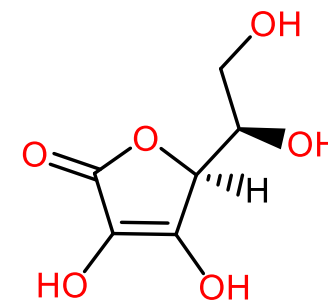
Conteggio di Oggetti a Massa Relativa Fissa

- $C = 2.65 \cdot 10^{-3} \text{ g C} / (12.01 \text{ g C} / \text{mol C}) = 2.21 \cdot 10^{-4} \text{ mol C}$
- $H = 0.295 \cdot 10^{-3} \text{ g H} / (1.008 \text{ g H} / \text{mol H}) = 2.92 \cdot 10^{-4} \text{ mol H}$
- $O = 3.54 \cdot 10^{-3} \text{ g O} / (16.00 \text{ g O} / \text{mol O}) = 2.21 \cdot 10^{-4} \text{ mol O}$

Dividendo ciascuno per $2.21 \cdot 10^{-4}$

- C = 1.00 Moltiplicando
ciascuno per 3 = 3.00 = 3.0
- H = 1.32 = 3.96 = 4.0
- O = 1.00 = 3.00 = 3.0

$C_3H_4O_3$ in realtà è il dimero **$C_6H_8O_6$**





Problema: L'eritrosio ($MW = 120 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$) è un importante composto chimico come materia prima in sintesi organica, e contiene Carbonio, Idrogeno e Ossigeno. L'analisi per combustione di un campione di 700.0 mg ha dato 1.027 g CO_2 e 0.4194 g di H_2O . Determinarne la Formula Chimica.

Piano: Trovare le masse di Idrogeno e Carbonio usando le frazioni di massa di H in H_2O , e di C in CO_2 . Si sottraggono quindi le masse del Carbonio e dell'Idrogeno dalla massa totale del campione per recuperare la massa dell'Ossigeno. Si passa al calcolo delle moli, e si costruisce la formula empirica, e, nota la massa molare (MW) si calcola la formula molecolare.



- Calcolo della frazione di massa degli elementi:

$$\text{Frazione di massa di C in CO}_2 = \frac{\text{mol C} \times \text{MW di C}}{\text{massa di 1 mol CO}_2}$$

$$\frac{(1 \text{ mol C} \times 12.01 \text{ g C}) / 1 \text{ mol C}}{44.01 \text{ g CO}_2} = 0.2729 \text{ g C} / 1 \text{ g CO}_2$$

$$\text{Frazione di massa di H in H}_2\text{O} = \frac{\text{mol H} \times \text{MW di H}}{\text{massa di 1 mol H}_2\text{O}}$$

$$\frac{(2 \text{ mol H} \times 1.008 \text{ g H}) / 1 \text{ mol H}}{18.02 \text{ g H}_2\text{O}} = 0.1119 \text{ g H} / 1 \text{ g H}_2\text{O}$$

- Calcolo delle masse di C e H

Massa dell'Elemento = massa del composto

× frazione di massa dell'elemento



Analisi per Combustione - II

- Metodo più semplice per Calcolare le frazioni di massa di C e H:

$$\text{frazione di C in CO}_2 = \frac{\text{massa di C}}{\text{massa di CO}_2}$$

$$\frac{12.01}{12.01 + 2 \times (16.00)} = 0.2729$$

$$\text{frazione di H in H}_2\text{O} = \frac{\text{massa di H}}{\text{massa di H}_2\text{O}}$$

$$\frac{2 \times 1.008}{16.00 + 2 \times (1.008)} = 0.1119$$



$$\begin{aligned}\text{Massa (g) di C} &= (\text{massa di CO}_2) \times (\text{frazione di massa di C in CO}_2) \\ &= (1.027 \text{ g CO}_2) \times (0.2729) \\ &= 0.2803 \text{ g C}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Massa (g) di H} &= (\text{massa di H}_2\text{O}) \times (\text{frazione di massa di H in H}_2\text{O}) \\ &= (0.4194 \text{ g H}) \times (0.1119) \\ &= 0.04693 \text{ g H}\end{aligned}$$

Si calcola quindi la massa di O per differenza:

$$\begin{aligned}\text{Massa (g) di O} &= \text{massa campione} - \text{massa di C} - \text{massa di H} \\ &= 0.700 \text{ g} - 0.2803 \text{ g C} - 0.04693 \text{ g H} \\ &= 0.37277 \text{ g O}\end{aligned}$$



Calcolo delle moli di ciascun elemento:

$$C = 0.2803 \text{ g C} / (12.01 \text{ g C} / \text{mol C}) = 0.02334 \text{ mol C}$$

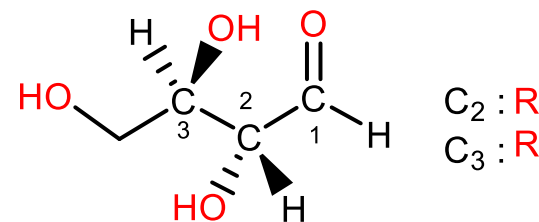
$$H = 0.04693 \text{ g H} / (1.008 \text{ g H} / \text{mol H}) = 0.04656 \text{ mol H}$$

$$O = 0.37277 \text{ g O} / (16.00 \text{ g O} / \text{mol O}) = 0.02330 \text{ mol O}$$

$$C_{0.02334} H_{0.04656} O_{0.02330} = CH_2O \text{ peso formula} = 30 \text{ g}\cdot\text{formula}^{-1}$$

$$120 \text{ (g}\cdot\text{mol}^{-1}) / 30 \text{ (g}\cdot\text{formula}^{-1}) = 4 \text{ unità di formula}$$

Il composto ha la formula minima: **$C_4H_8O_4$**



D-eritrosio

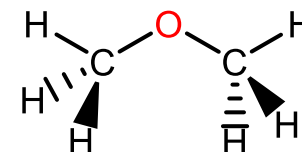
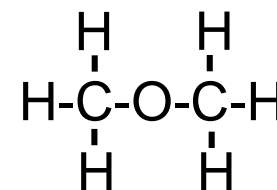
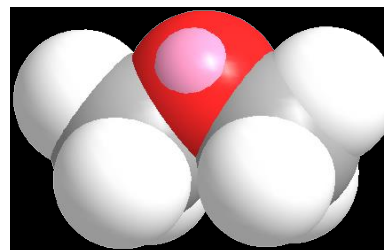
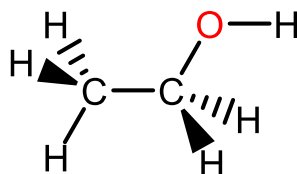
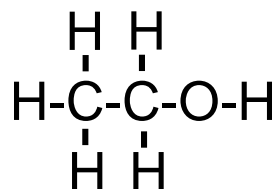
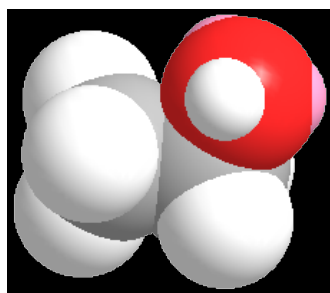


Isomeri Costituzionali (o Strutturali): hanno formula bruta identica ma diversa connettività:

45

Per esempio C_2H_6O):

Proprietà	Etanolo	Dimetil Etere
MW ($g \cdot mol^{-1}$)	46.07	46.07
Colore	Incolore	Incolore
Punto fusione	- 117 °C	- 138.5 °C
Punto ebollizione	78.5 °C	- 25 °C
Densità (a 20 °C)	0.789 $g \cdot mL^{-1}$	0.00195 $g \cdot mL^{-1}$





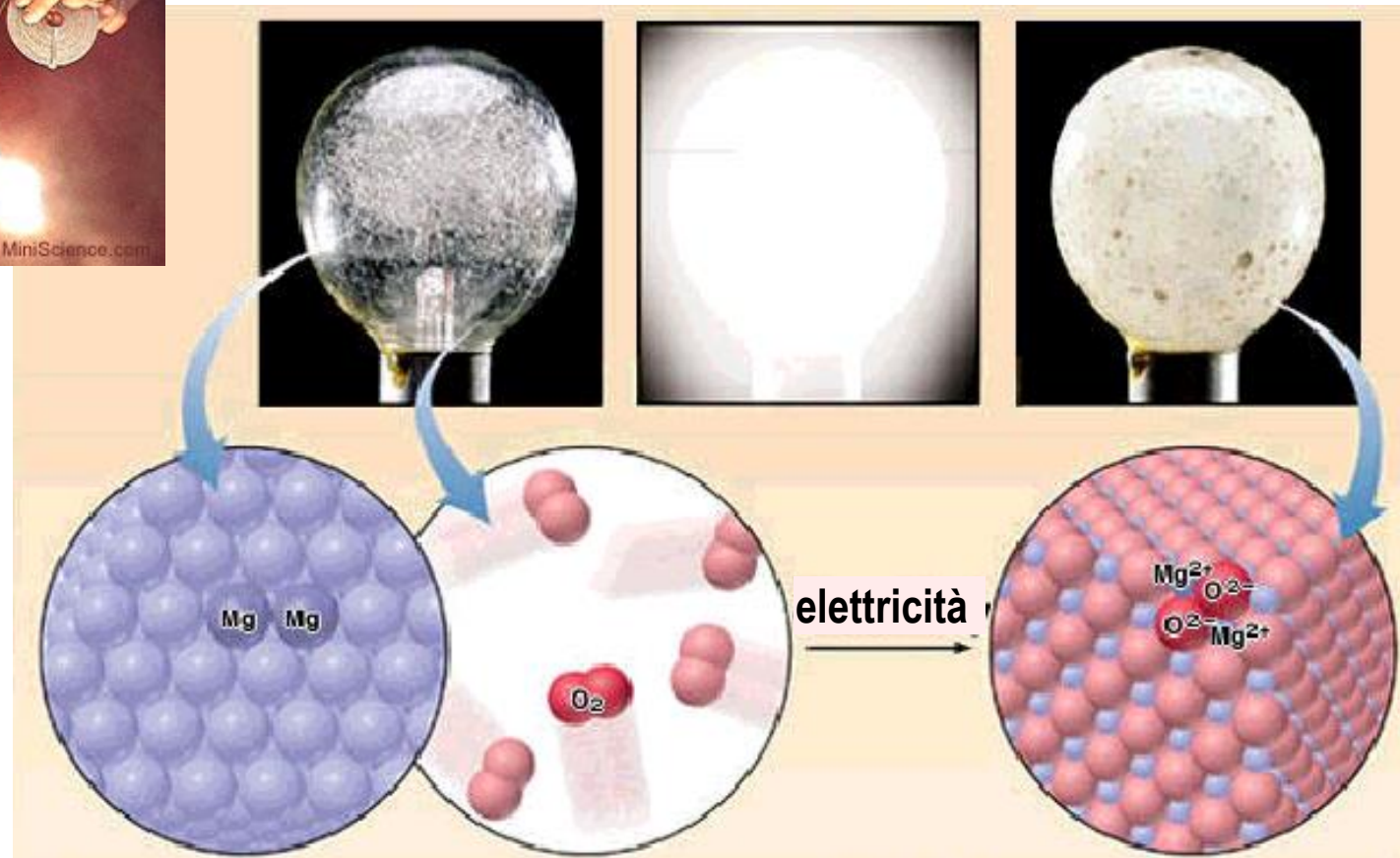
 POLITECNICO DI MILANO



Stechiometria delle Reazioni Chimiche e Calcoli Stechiometrici



Tre Stadi della Reazione Chimica che Avviene nel Flash





Equazioni Chimiche

Informazioni Qualitative (**tipi e numeri di atomi coinvolti; stati di aggregazione**)



Specie chimiche coinvolte (reagenti a sinistra e prodotti a destra)

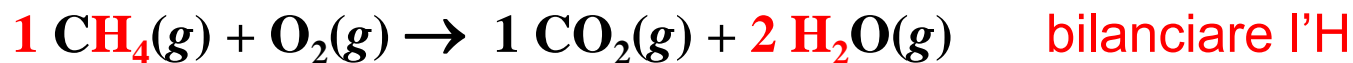
Fase della Materia: **(s)** solido
(l) liquido
(g) gassoso
(aq) liquido soluzione acquosa





Bilanci di massa (bilanci di atomi) - stesso numero di ciascun elemento

- (1) partire con l'elemento più semplice
- (2) passare agli altri elementi
- (3) portare tutti i numeri all'intero
- (4) ri-verificare il bilancio degli atomi

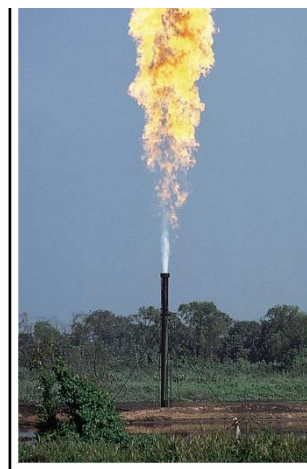
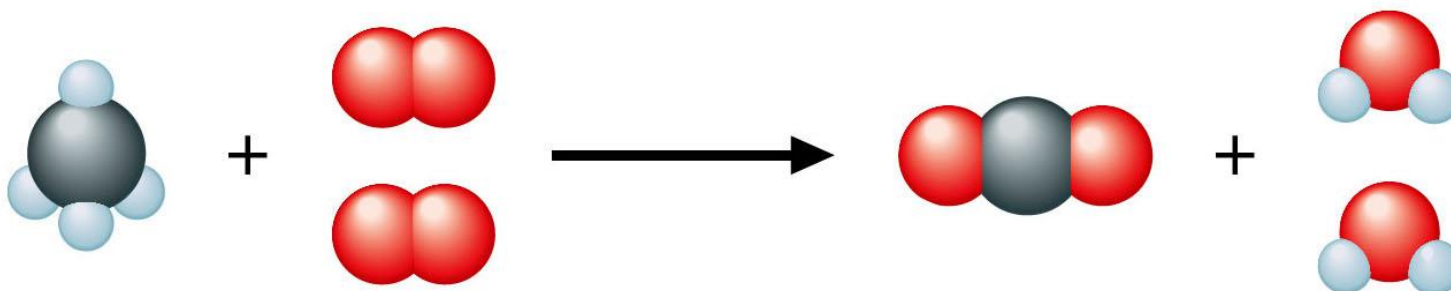
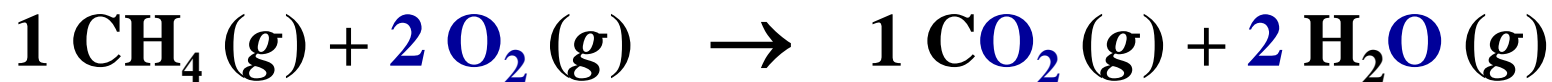


- bilancio delle cariche (nessun ione "spettatore")



Rappresentazione Visiva di una Reazione

- Combustione del metano





Bilanci in Equazioni Chimiche - I

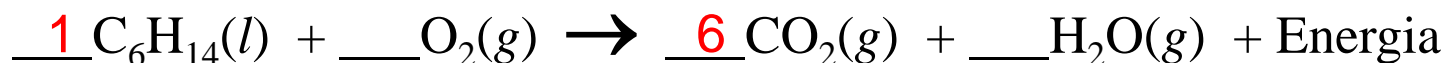
Problema: L'idrocarburo esano è un componente della Benzina che brucia nei motori delle auto con produzione di biossido di carbonio e acqua ma anche di energia. Scrivere l'equazione chimica bilanciata per la combustione dell'esano (C_6H_{14}).

Piano: Predisporre l'equazione passando dai nomi dei composti alle relative formule chimiche con spazi bianchi prima di ogni formula. Iniziare il bilancio dal composto più complesso e lasciare l'O per ultimo!

Soluzione:



Iniziare con la molecola di esano che genera 6 CO_2 !





Bilancio di Equazioni Chimiche - II

Gli atomi di H nell'esano si trasformano in H₂O, e si hanno 14 atomi di H, e poiché ogni molecola d'acqua ha due atomi di H, si otterranno un totale di 7 molecole d'acqua.



Siccome gli atomi di ossigeno provengono solo da molecole biatomiche (due atomi di O, O₂), si dovrebbe ottenere un numero pari di atomi di ossigeno a destra. Invece si hanno 7 molecole d'acqua! Si deve perciò moltiplicare l'esano per 2, ottenendo un totale di 12 molecole di CO₂, e 14 molecole di H₂O.



Ciò produce 12 O₂ dal biossido di carbonio, e 14 atomi di O dall'acqua, che richiede altre 7 molecole di O₂ per un totale di 19 O₂!

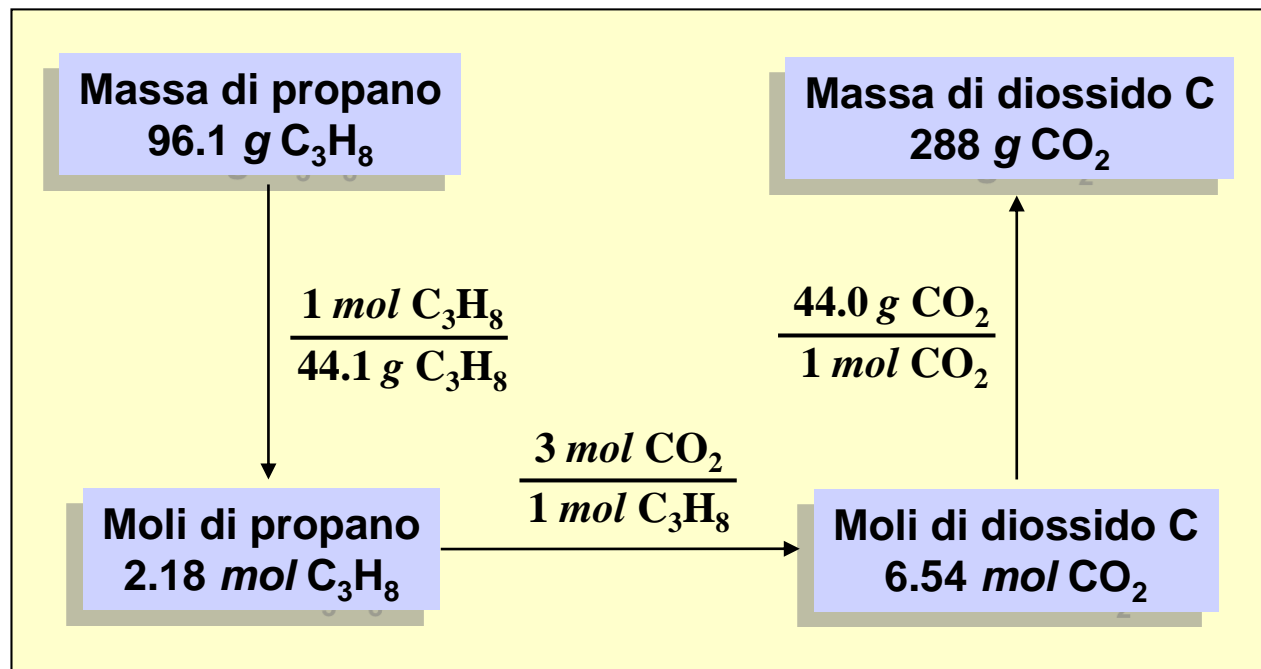
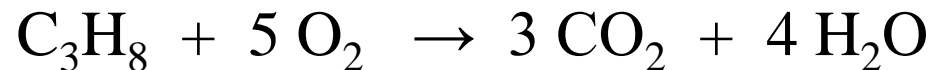




Se si conosce il numero di moli di una sostanza in una reazione chimica, allora la reazione chimica bilanciata fornisce il numero di moli di tutti gli altri reagenti e prodotti (**N.B. se la reazione va a termine [vedere equilibri chimici] ed è unica [vedere cinetica] !**).

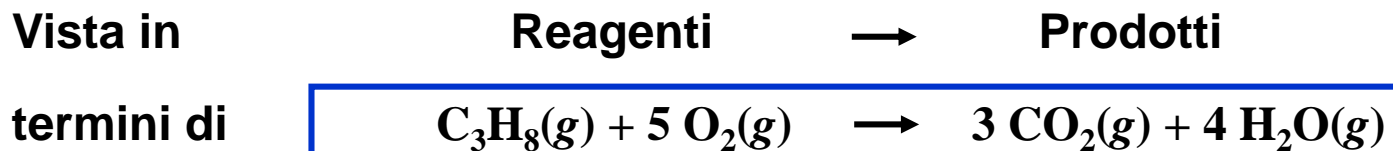
Esempio

1. Trovare la Massa di Biossido di Carbonio proveniente dalla combustione completa di 96.1 grammi di Propano (C_3H_8).

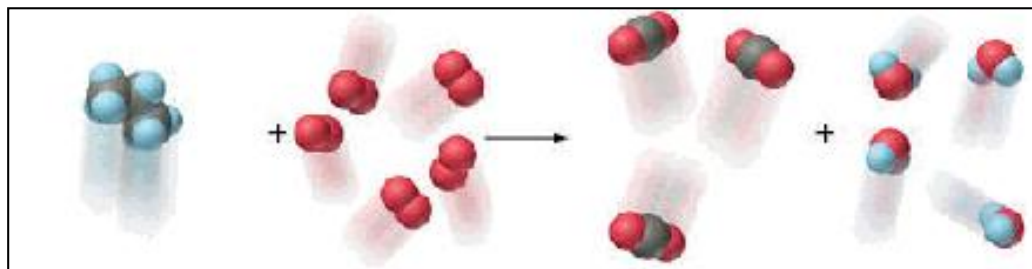




Informazioni Contenute in una Equazione Bilanciata



Molecole 1 molecola C_3H_8 + 5 molecole O_2 → 3 molecole CO_2 + 4 molecole H_2O



Quantità (moli) 1 mole C_3H_8 + 5 moli O_2 → 3 moli CO_2 + 4 moli H_2O

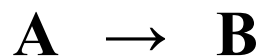
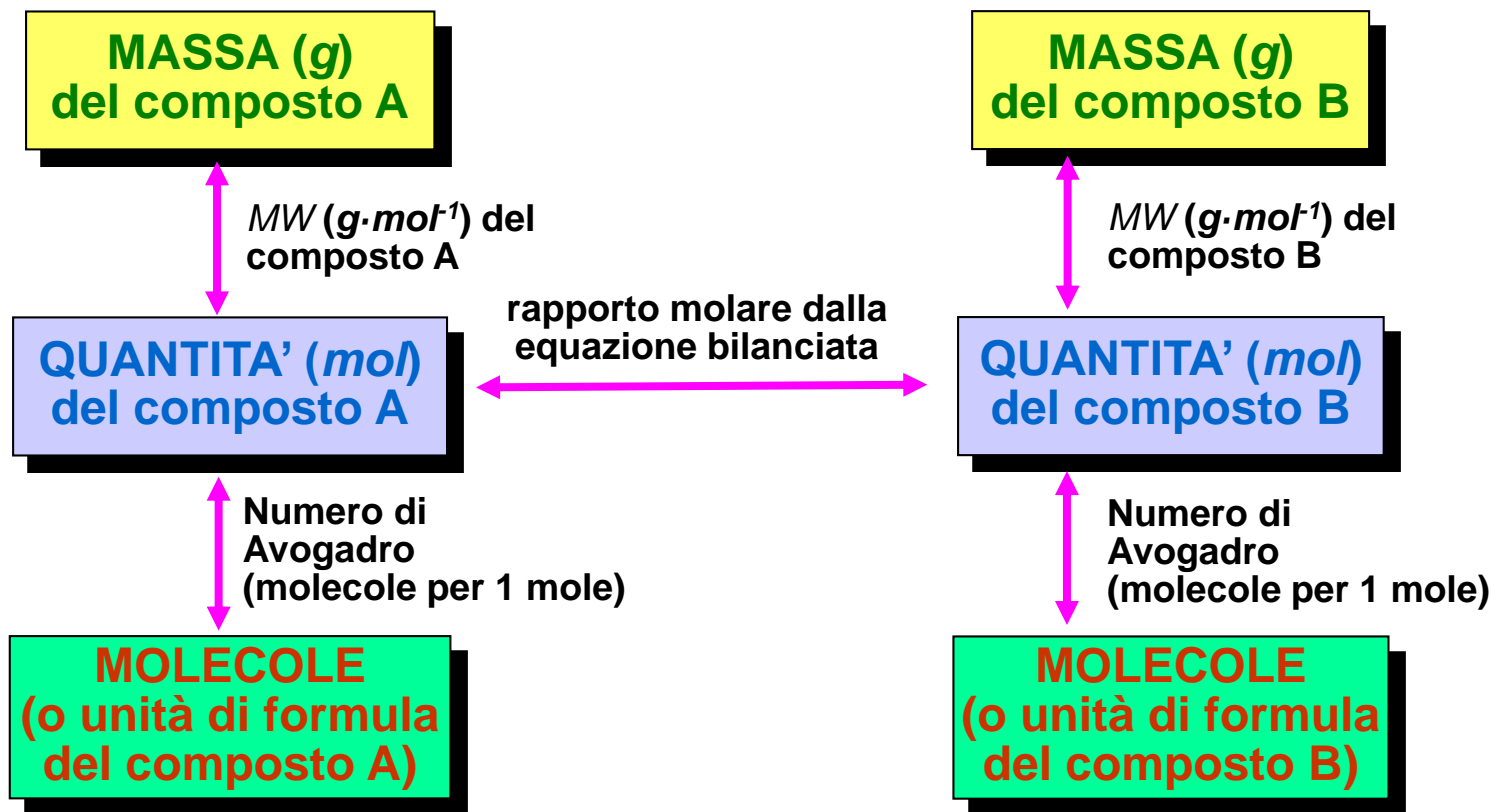
Massa (u) 44.09 u $\text{C}_3\text{H}_{8(g)}$ + 160.00 u $\text{O}_{2(g)}$ → 132.03 u $\text{CO}_{2(g)}$ + 72.06 u H_2O

Massa (g) 44.09 g $\text{C}_3\text{H}_{8(g)}$ + 160.00 g $\text{O}_{2(g)}$ → 132.03 g $\text{CO}_{2(g)}$ + 72.06 g H_2O

Massa totale (g) 204.09 g → 204.09 g



Riassunto delle Relazioni Massa-Mole-Coefficienti in una Reazione Chimica





Approccio Sistematico ai Bilanci di Massa

Indici	aA	+	bB	→	cC	+	dD
MW							
Massa							
Moli							
Volume							
Molarità							

Prima scrivere l'equazione bilanciata

Siglare le righe in questo modo



- Se si bruciano 4.00 g di metano in un eccesso di ossigeno quanti grammi di CO₂ si formeranno?

Indici	CH ₄	+	2 O ₂	→	CO ₂	+	2 H ₂ O
MW							
Massa	4.00 g						
Moli							
Vol							
Molarità							

Dato: massa del metano

Inserirlo nell'equazione bilanciata



Identificare l'incognita

- Se si bruciano 4.00 g di metano in un eccesso di ossigeno quanti grammi di CO₂ si formeranno?

Indici	CH ₄	+	2 O ₂	→	CO ₂	+	2 H ₂ O
MW	16.0 g·mol ⁻¹						
Massa	4.00 g						
Moli	x						
Vol							
Molarità							

MW del metano = 16.0

$mol = \frac{massa}{MW}$

Identificare l'incognita e la relazione matematica da usare!



Definire i Rapporti Molari

- Se si bruciano 4.00 g di metano in un eccesso di ossigeno quanti grammi di CO_2 si formeranno?

Indici	CH_4	+ 2 O_2	→	CO_2	+ 2 H_2O
MW					
Massa					
Moli	0.25	0.50		0.25	0.50
Vol					
Molarità					

Ora calcolare il numero di moli di metano.

I coefficienti denotano il rapporto molare delle specie in reazione



Recuperare le Masse dalle Moli

- Se si bruciano 4.00 g di metano in un eccesso di ossigeno quanti grammi di CO₂ si formeranno?

Indici	CH ₄	+	2 O ₂	→	CO ₂	+	2 H ₂ O
MW	16.0 g·mol ⁻¹				44.0 g·mol ⁻¹		
Massa	4.00 g				11.0 g		
Moli	0.25				0.25		
Vol							
Molarità							

mol × MW = massa

Ora correlare le moli alle masse con la relazione inversa.



Riempire il Resto della Tabella

- Se si bruciano 4.00 g di metano in un eccesso di ossigeno quanti grammi di CO₂ si formeranno?

Indici	CH ₄	+ 2 O ₂	→	CO ₂	+ 2 H ₂ O
MW	16.0 g·mol ⁻¹	32.0 g·mol ⁻¹		44.0 g·mol ⁻¹	18.0 g·mol ⁻¹
Masse	4.00 g	16.0 g		11.0 g	9.0 g
Moli	0.25	0.50		0.25	0.50
Vol					
Molarità					

- Conoscere il numero di moli di ogni specie in reazione (identificazione reagenti limitanti)
- Conoscere il MW di ogni specie coinvolta.



Ricontrollo Finale!!!!

- Se si bruciano 4.00 g di metano in un eccesso di ossigeno quanti grammi di CO₂ si formeranno?

Indici	CH ₄	+ 2 O ₂	→	CO ₂	+ 2 H ₂ O
MW	16.0 g·mol ⁻¹	32.0 g·mol ⁻¹		44.0 g·mol ⁻¹	18.0 g·mol ⁻¹
Masse	4.00 g	16.0 g		11.0 g	9.0 g
Moli	0.25	0.50		0.25	0.50
Vol	Massa totale dei reagenti consumati = massa dei prodotti formati.				
Molarità					

Il ricontrollo è parte essenziale del calcolo!



Problema: Data la seguente reazione chimica tra il Solfuro di Alluminio e l'acqua, se si prendono 65.80 g di Al_2S_3 :

- quante moli di acqua sono necessarie per la reazione?
- quanta massa di H_2S e di $\text{Al}(\text{OH})_3$ si sarà formata?



Piano: Calcolare le moli di Solfuro di Alluminio usando la sua massa molare, quindi dall'equazione, calcolare le moli di acqua, e quindi le moli di acido solfidrico, e infine la massa dell'acido solfidrico usando il suo peso molecolare.



Soluzione:

a1) massa molare del Solfuro di Alluminio = $150.17 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.

$$\begin{aligned} \text{moli Al}_2\text{S}_3 &= 65.80 \text{ g Al}_2\text{S}_3 \times \frac{1 \text{ mol Al}_2\text{S}_3}{150.17 \text{ g Al}_2\text{S}_3} \\ &= 0.4382 \text{ mol} \end{aligned}$$

a2) Determinare il rapporto in moli tra **Al₂S₃** e **H₂O**: per 1 mole di **Al₂S₃** si consumano 6 moli di H₂O

$$\text{rapporto in moli} = \frac{6 \text{ mol H}_2\text{O}}{1 \text{ mol Al}_2\text{S}_3}$$

a3) Usare il rapporto in moli per determinare il numero di moli di H₂O consumata.

$$\text{moli H}_2\text{O} = 0.4382 \text{ mol Al}_2\text{S}_3 \times \frac{6 \text{ mol H}_2\text{O}}{1 \text{ mol Al}_2\text{S}_3}$$



$$\text{b) } 0.4382 \text{ mol Al}_2\text{S}_3 \times \frac{3 \text{ mol H}_2\text{S}}{1 \text{ mol Al}_2\text{S}_3} = 1.314 \text{ mol H}_2\text{S}$$

massa molare di $\text{H}_2\text{S} = 34.09 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

$$\text{massa H}_2\text{S} = 1.314 \text{ mol H}_2\text{S} \times \frac{34.09 \text{ g H}_2\text{S}}{1 \text{ mol H}_2\text{S}} = \mathbf{44.81 \text{ g H}_2\text{S}}$$

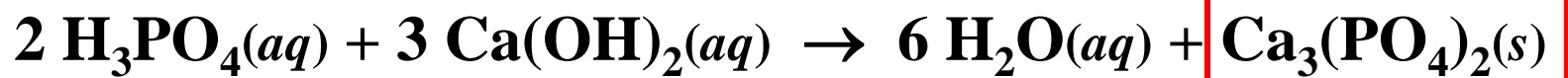
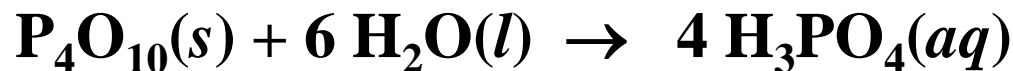
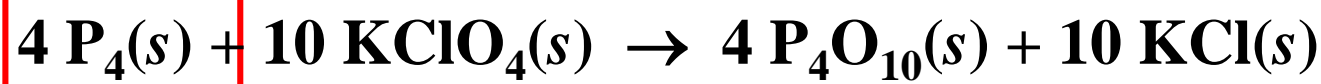
$$0.4382 \text{ mol Al}_2\text{S}_3 \times \frac{2 \text{ mol Al(OH)}_3}{1 \text{ mol Al}_2\text{S}_3} = 0.8764 \text{ mol Al(OH)}_3$$

massa formula di $\text{Al(OH)}_3 = 78.75 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

$$\begin{aligned} \text{massa Al(OH)}_3 &= 0.8764 \text{ mol Al(OH)}_3 \times \frac{78.75 \text{ g Al(OH)}_3}{1 \text{ mol Al(OH)}_3} \\ &= \mathbf{69.02 \text{ g Al(OH)}_3} \end{aligned}$$



Problema: E' possibile preparare il Fosfato di Calcio tramite la seguente sequenza di reazioni:



Dati 15.5 g P_4 e sufficienti quantità di KClO_3 , H_2O e $\text{Ca}(\text{OH})_2$, quale massa di Fosfato di Calcio si può formare?

- Piano:**
- (1) E' essenziale prima bilanciare tutte le reazioni!!
 - (2) Calcolare le moli di P_4 .
 - (3) Usare i rapporti molari per recuperare le moli di $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$.
 - (4) Riconvertire le moli di prodotto in massa usando la massa molare del Fosfato di Calcio.



Soluzione:

$$\text{moli di Fosforo} = 15.50 \text{ g P}_4 \times \frac{1 \text{ mol P}_4}{123.88 \text{ g P}_4} = 0.1251 \text{ mol P}_4$$

Per la reazione #1 $[4 \text{ P}_4(s) + 10 \text{ KClO}_4(s) \rightarrow 4 \text{ P}_4\text{O}_{10}(s) + 10 \text{ KCl}(s)]$

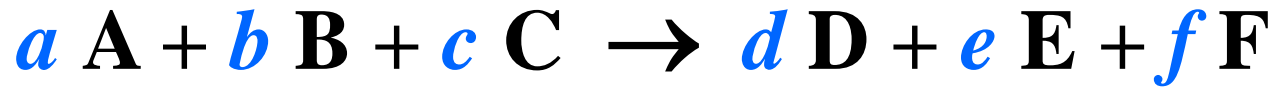
Per la reazione #2 $[1 \text{ P}_4\text{O}_{10}(s) + 6 \text{ H}_2\text{O}(l) \rightarrow 4 \text{ H}_3\text{PO}_4(aq)]$

Per la reazione #3 $[2 \text{ H}_3\text{PO}_4 + 3 \text{ Ca}(\text{OH})_2 \rightarrow 1 \text{ Ca}_3(\text{PO}_4)_2 + 6 \text{ H}_2\text{O}]$

$$0.1251 \text{ mol P}_4 \times \frac{4 \text{ mol P}_4\text{O}_{10}}{4 \text{ mol P}_4} \times \frac{4 \text{ mol H}_3\text{PO}_4}{1 \text{ mol P}_4\text{O}_{10}} \times \frac{1 \text{ mol Ca}_3(\text{PO}_4)_2}{2 \text{ mol H}_3\text{PO}_4} \\ = 0.2502 \text{ mol di Ca}_3(\text{PO}_4)_2$$

$$\text{MW Ca}_3(\text{PO}_4)_2 = 310.18 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\text{massa Ca}_3(\text{PO}_4)_2 = 0.2502 \text{ mol Ca}_3(\text{PO}_4)_2 \times \frac{310.18 \text{ g Ca}_3(\text{PO}_4)_2}{1 \text{ mol Ca}_3(\text{PO}_4)_2} = \underline{\underline{77.61 \text{ g Ca}_3(\text{PO}_4)_2}}$$



Operazioni per risolvere i problemi con agenti limitanti

- 1) Identificare il problema - Recuperare informazioni: massa, numero di moli, numero di molecole, volume e molarità della soluzione devono essere noti per **più di un reagente!**
- 2) Calcolare le moli di ciascun reagente!
- 3) Dividere le moli di ciascun reagente per il coefficiente (a , b , c , ecc...)!
- 4) Il reagente che presenta il valore in moli inferiore è l'agente limitante!
- 5) Usare il reagente limitante per calcolare le moli del prodotto desiderato, quindi convertire alle unità richieste (moli, masse, volume, N° atomi, ecc.)



Problemi sui Reagenti Limitanti

Problema: Una miscela combustibile agli albori dei lanci di razzi era composta da due liquidi, l'idrazina (N_2H_4) e il tetraossido di diazoto (N_2O_4). Questi composti si infiammano al contatto (ipergolici) per formare azoto e vapore acqueo. Quanti grammi di azoto si formano per mescolamento esattamente di $1.00 \cdot 10^2 \text{ g}$ di N_2H_4 e $2.00 \cdot 10^2 \text{ g}$ di N_2O_4 ?

Piano: Prima scrivere l'equazione bilanciata. *Poiché sono date le quantità di entrambi i reagenti, si tratta di un problema di reagente limitante.* Calcolare le moli di ciascun reagente, e quindi dividere per i coefficienti dell'equazione per trovare qual è la specie limitante ed usare questa per calcolare le moli di azoto, quindi calcolare la massa usando il peso molecolare dell'azoto.

Soluzione:





Problemi sui Reagenti Limitanti - cont.



$$\text{massa molare } \text{N}_2\text{H}_4 = (2 \times 14.01 + 4 \times 1.008) = 32.05 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\text{massa molare } \text{N}_2\text{O}_4 = (2 \times 14.01 + 4 \times 16.00) = 92.02 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\text{Moli di } \text{N}_2\text{H}_4 = (1.00 \times 10^2 \text{ g}) \times \frac{\text{mol}}{32.05 \text{ g}} = 3.12 \text{ mol } \text{N}_2\text{H}_4$$

$$\text{Moli di } \text{N}_2\text{O}_4 = (2.00 \times 10^2 \text{ g}) \times \frac{\text{mol}}{92.02 \text{ g}} = 2.17 \text{ mol } \text{N}_2\text{O}_4$$

Dividendo per i coefficienti: $3.12 \text{ mol} / 2 = 1.56 \text{ mol } \text{N}_2\text{H}_4$ ← **Limitante !**
 $2.17 \text{ mol} / 1 = 2.17 \text{ mol } \text{N}_2\text{O}_4$

$$\text{N}_2 \text{ prodotto} = (3.12 \text{ mol } \text{N}_2\text{H}_4) \times \frac{3 \text{ mol } \text{N}_2}{2 \text{ mol } \text{N}_2\text{H}_4} = 4.68 \text{ mol di } \text{N}_2$$

$$\text{Massa dell'azoto} = (4.68 \text{ mol } \text{N}_2) \times \frac{28.02 \text{ g } \text{N}_2}{\text{mol}} = \underline{\underline{131 \text{ g di } \text{N}_2}}$$



Resa Teorica: La quantità di prodotto indicata dal rapporto molare stechiometricamente equivalente nell'equazione bilanciata.

Reazioni Parallele e Consecutive: I reagenti portano in parallelo alla formazione di prodotti differenti (sottoprodotti) e i prodotti possono ulteriormente reagire, sottraendo massa alla resa teorica del prodotto principale.

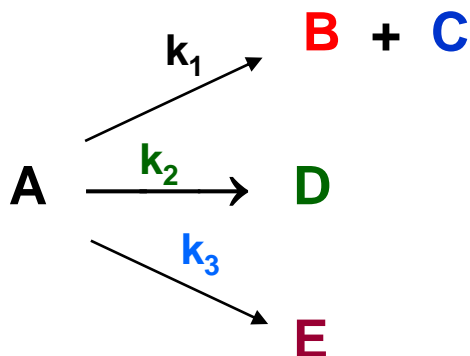
Resa Reale : La quantità reale di prodotto che si è ottenuta.

Resa Percentuale : (Resa %)

$$\text{Resa \%} = \frac{\text{Resa Reale}}{\text{Resa Teorica}} \times 100$$

Coprodotti e Sottoprodotti di una Reazione

Nell'ottenere un composto chimico (**B**) mediante una reazione a partire da un reagente **A** si deve sempre tener presente che la reazione di interesse può sempre portare alla formazione contemporanea di altri prodotti (coprodotti) e che possono sempre essere presenti altre reazioni parallele di **A** a dare altri composti (**D**, **E**) oppure che il prodotto ottenuto reagisca nell'ambiente a dare **F** in una reazione consecutiva. Se il composto **B** è di interesse, i composti **D**, **E** e **F** sono detti *sottoprodotti*, mentre **C** è il *coprodotto* della reazione.



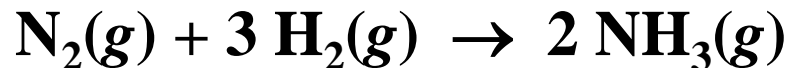
Reazioni parallele



Reazioni consecutive



- **Problema:** L'Ammoniaca si produce con il Processo Haber usando Azoto e Idrogeno gas. Se 85.90 g di azoto vengono fatti reagire con 21.66 g di idrogeno e la reazione forma 98.67 g di ammoniaca, qual è la resa percentuale della reazione?



Piano: Siccome sono state date le masse di entrambi i reagenti, si tratta di un problema di reagente limitante.

- a) come prima cosa determinare qual è l'agente limitante
- b) quindi calcolare la resa teorica,
- c) quindi la resa percentuale.



- **Soluzione:**

- Moli di Azoto e Idrogeno:

$$\text{mol N}_2 = \frac{85.90 \text{ g N}_2}{\left[\frac{28.02 \text{ g N}_2}{1 \text{ mol N}_2} \right]} = 3.066 \text{ mol N}_2$$

$$\text{mol H}_2 = \frac{21.66 \text{ g H}_2}{\left[\frac{2.016 \text{ g H}_2}{1 \text{ mol H}_2} \right]} = 10.74 \text{ mol H}_2$$

Dividere per il coefficiente per ottenere l'agente limitante:

$$\frac{3.066 \text{ g N}_2}{1} = \mathbf{3.066}$$



Limitante !

$$\frac{10.74 \text{ g H}_2}{3} = \mathbf{3.582}$$



Si hanno 3.066 *mol* di Azoto, ed è limitante, pertanto la resa teorica di ammoniaca è:

$$3.066 \text{ mol N}_2 \times \frac{2 \text{ mol NH}_3}{1 \text{ mol N}_2} = 6.132 \text{ mol NH}_3 \text{ (Resa Teorica in moli)}$$

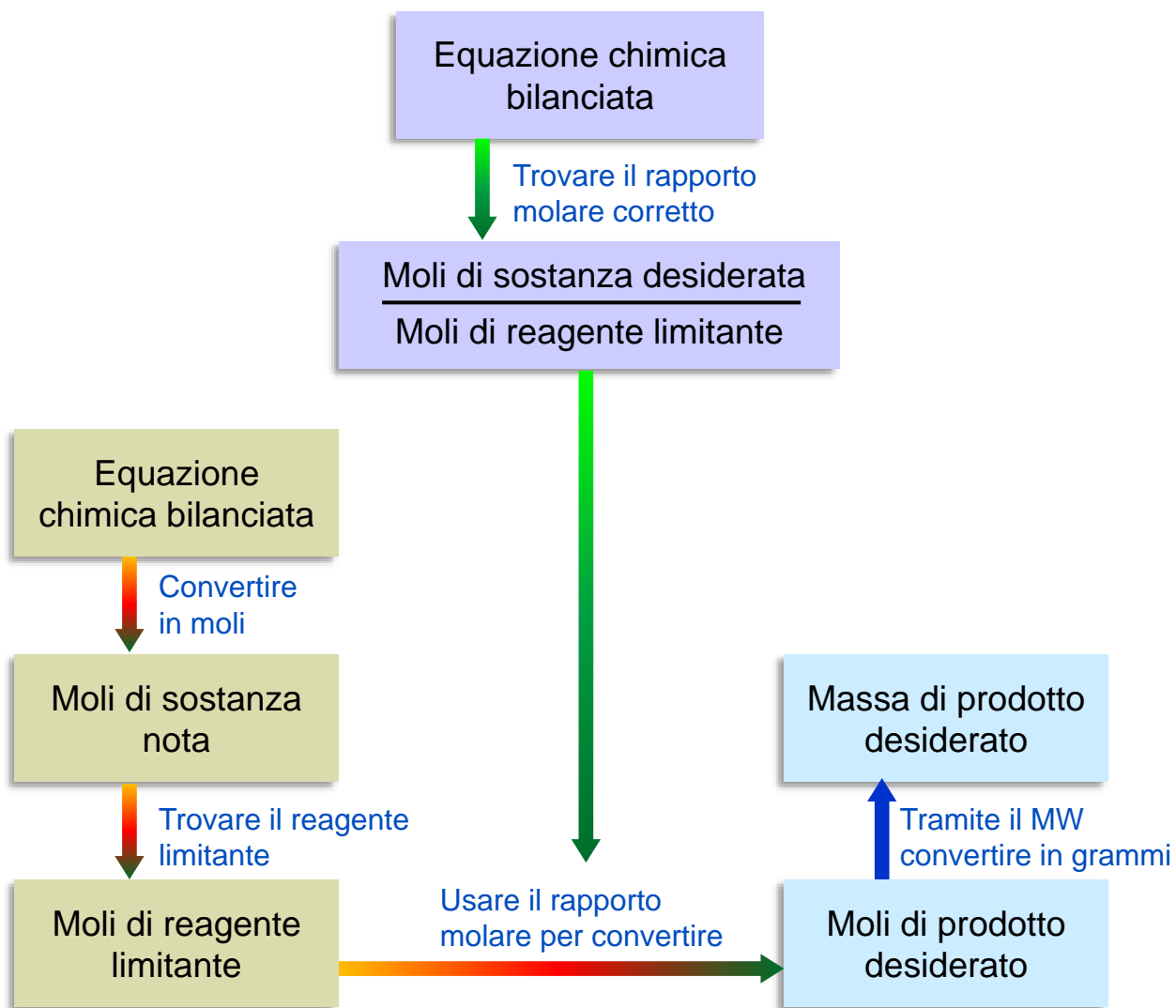
$$6.132 \text{ mol NH}_3 \times \frac{17.03 \text{ g NH}_3}{1 \text{ mol NH}_3} = 104.427 \text{ g NH}_3 \text{ (Resa Teorica in grammi)}$$

$$\text{Resa Percentuale} = \frac{\text{Resa Reale}}{\text{Resa Teorica}} \times 100\%$$

$$\text{Resa \%} = \frac{98.67 \text{ g NH}_3}{104.427 \text{ g NH}_3} \times 100\% = 94.49 \%$$



Diagramma di Flusso: Stechiometria di Reazioni con Reagenti Limitanti

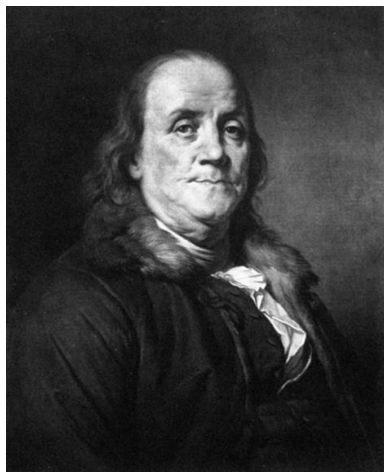




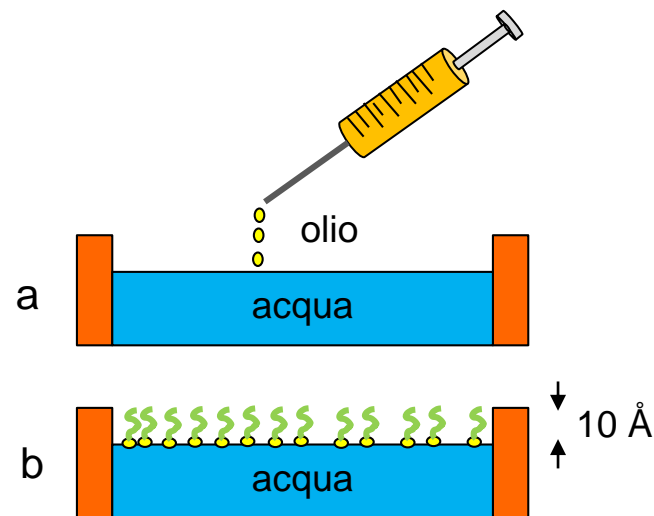
Molecole disposte su una superficie – Progressi



Il Concetto di Monostrato Molecolare dal Concetto di Mole



Esperimento di Franklin di olio su acqua (1757) – l'area coperta dall'olio risulta molto ampia e deve esser legata alla struttura dell'olio.



Lord Rayleigh (1842 – 1919) ripeté l'esperimento nel 1890, effettuando calcoli sullo spessore del film e ipotizzando che si trattasse di un monostrato.

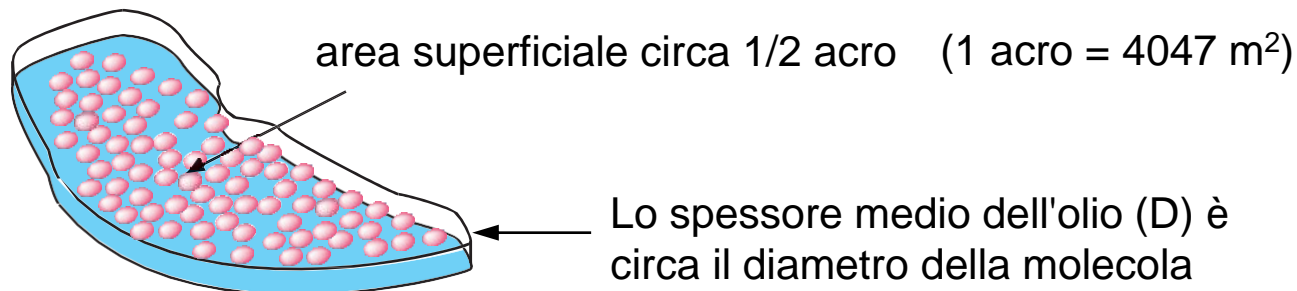


<http://mw.concord.org/modeler/showcase/biology/monolayer.html>



Dati dell'Esperimento :

2 mL di olio coprono circa 1/2 acro



Approssimando 1/2 acro come 2000 metri quadri, si può calcolare D:

Area superficiale $A = 2000 \text{ m}^2$

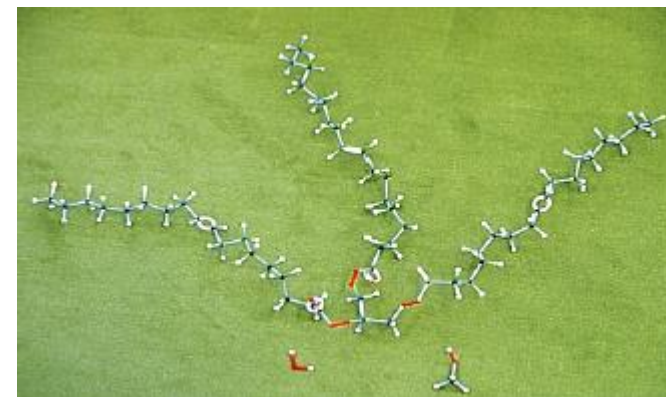
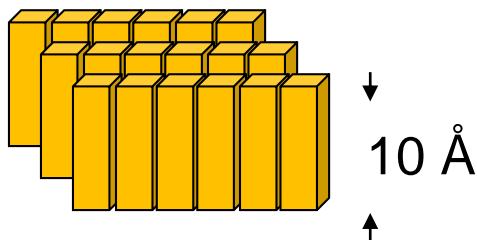
Diametro dello strato d'olio = D.

Volume dell'olio = $V = 2 \text{ cm}^3 \approx A \times D$

da cui:

$2 \text{ cm}^3 = 2000 \text{ m}^2 \times D$

$D = (2 \times 10^{-6} \text{ m}^3) : (2 \times 10^3 \text{ m}^2) = 10^{-9} \text{ m (10 \text{ \AA})}$



Molecola di trioleina (olio) - PM 885



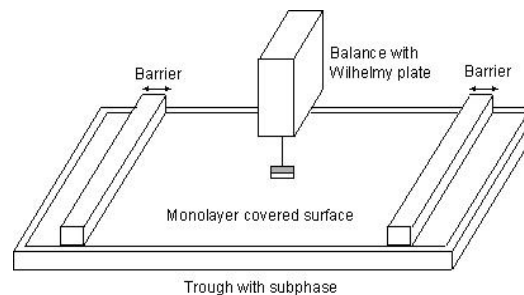
Agnes Pockels

1862-1935

- Condusse misure di tensione superficiale nella sua cucina attaccando un bottone mobile ad una bilancia



- Sviluppò un dispositivo per misurare i film superficiali, poi ripreso da Langmuir.
- Risultati pubblicati in Nature nel 1891.



Irving Langmuir

1881 - 1957

- Studiò i film sottili e l'adsorbimento superficiale alla General Electric.
- Nel 1917 “introdusse” il concetto di monostrato e la fisica 2D che descrive una superficie.
- Premio Nobel nel 1932 in chimica per le scoperte e gli studi sulla chimica delle superficie.

Applicazioni della Tecnologia del Monostrato

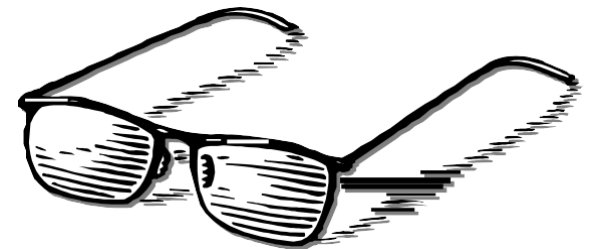
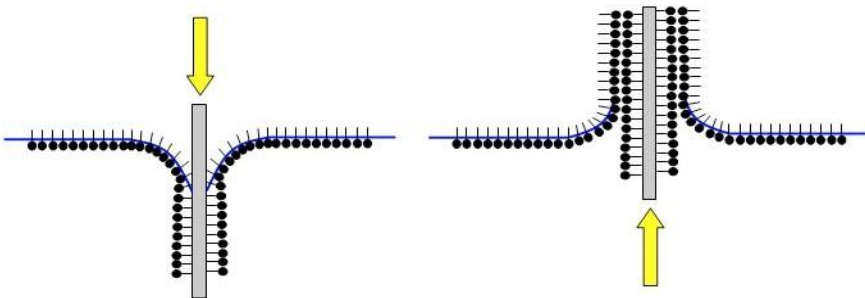


Katherine Blodgett

1898 - 1979

<http://home.frogned.net/~ejcov/blodgett2.jpg>

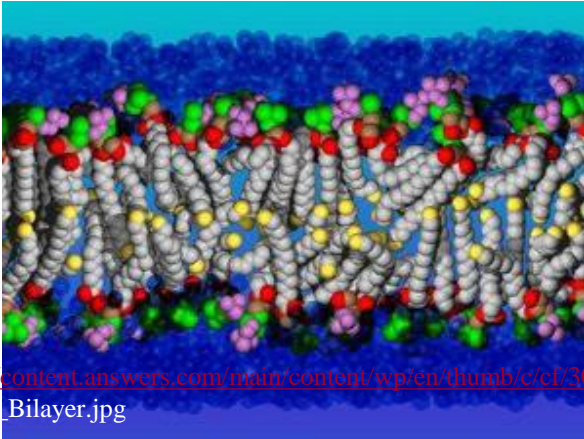
- Nel 1917 fu la prima donna assunta come scienziata in GE.
- Assistette Langmuir nel premio Nobel sull'adsorbimento di monostrati su superfici.
- Usò questa tecnologia per rivestire il vetro per ridurre riflessi e distorsioni per molte applicazioni pratiche delle lenti
- Sviluppò un metodo per misurare lo spessore di questi film. Portò ai primi vetri 100% trasparenti.



Misure di Superfici Estese alla Medicina:

Evert Gorter

1881 - 1954



- Misurò la tensione superficiale delle molecole di lipidi dei globuli rossi usando un dispositivo simile a quello di Langmuir.
- Dimostrò che i lipidi possono formare sia un bistrato che un monostrato.
- Concluse che le cellule sono circondate da uno strato grasso di due molecole.

Charles Ernest Overton

1865-1933

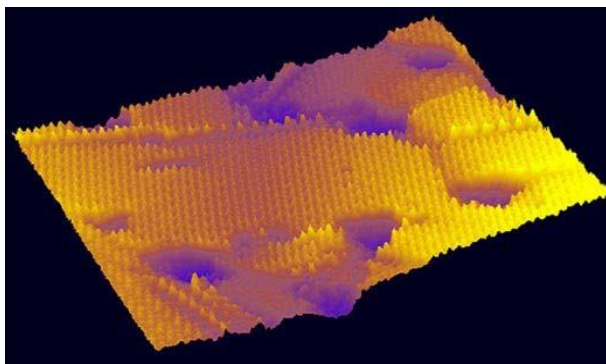
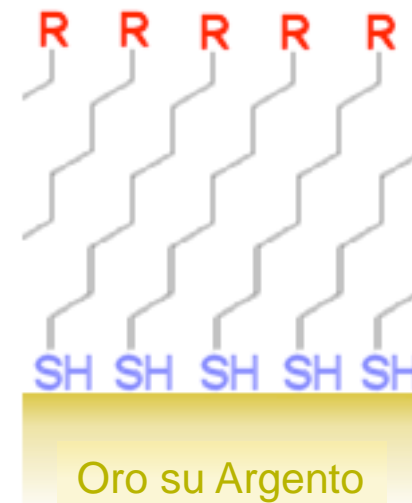
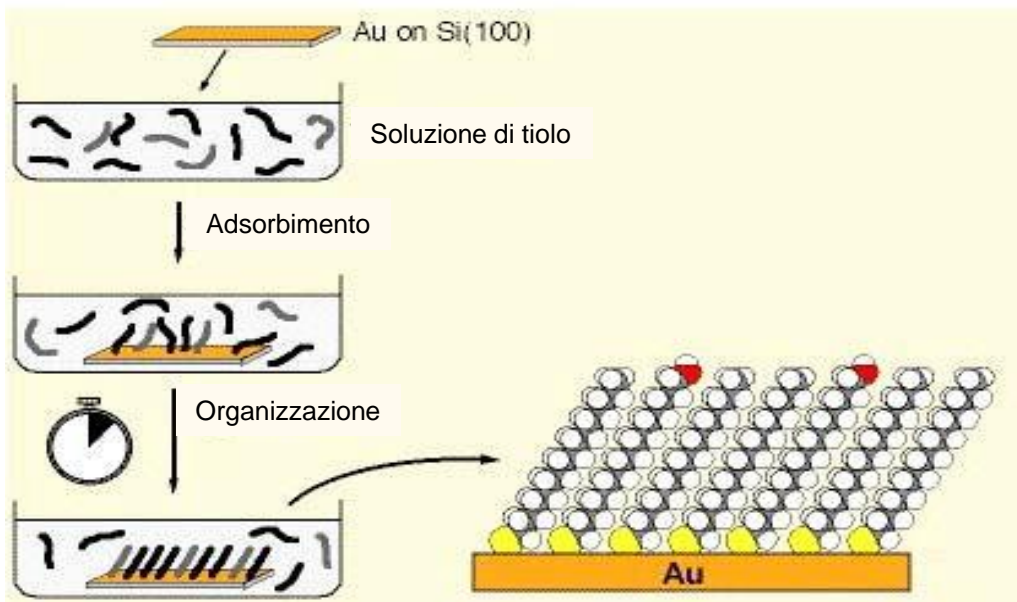


- Scopri, accidentalmente alcune importanti proprietà delle membrane.
- Ipotizzò analogie tra le membrane cellulari e i liquidi grassi (olio d'oliva) e che il trasporto nelle membrane dipendesse dalla polarità delle sostanze



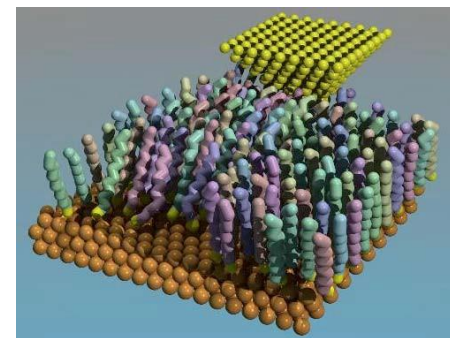


Monostrati auto-Assemblati



Modello STM

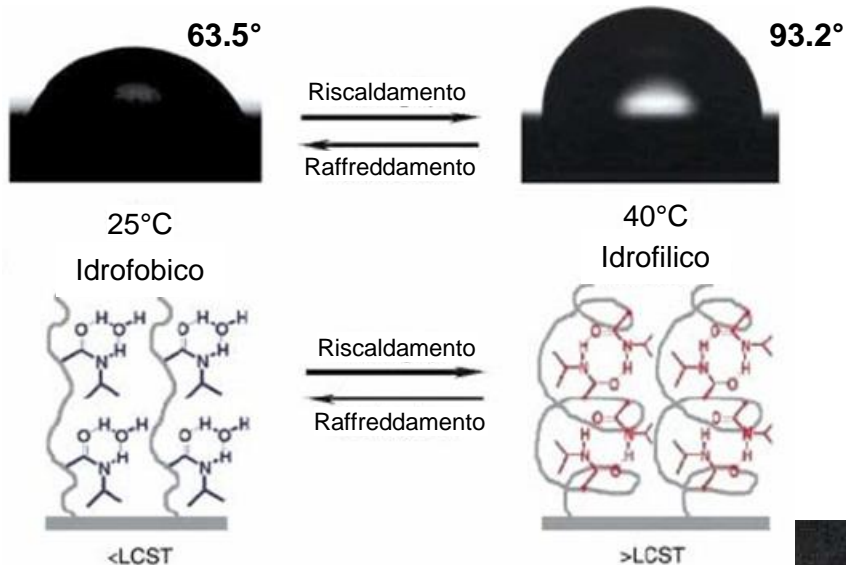
Immagine STM
di un SAM



Helv. Phys. Acta, 68:199, 1995.



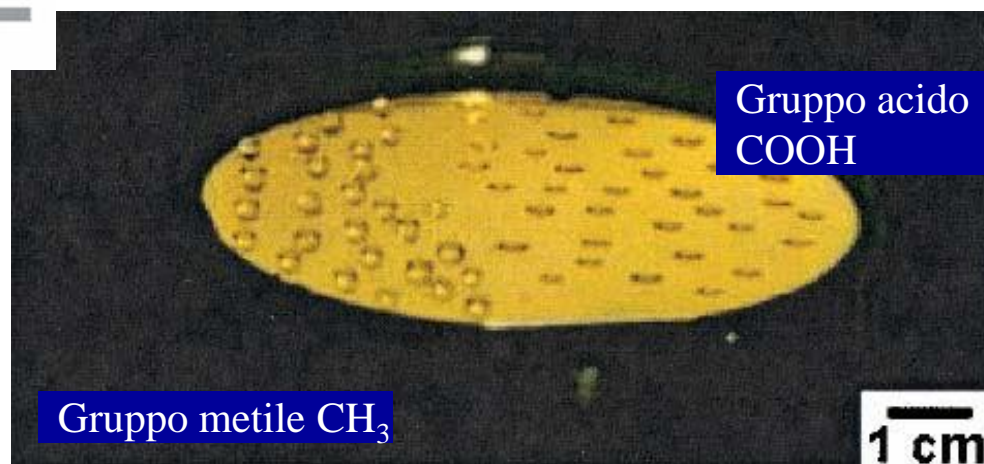
Monostrati auto-Assemblati e Proprietà delle Superfici



Angolo di contatto

alto
basso

idrofobico
idrofilico



Basso → Alto



Stenocara sp.



Parker, A., *et al.*, *Nature*. 2001, 414, 33.

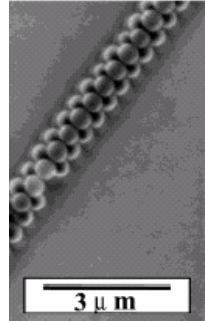
Nelumbo nucifera



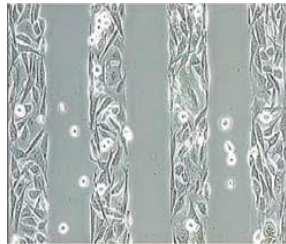


Usi degli Strati Auto-Assemblati

SAM per la Formazione di fili di Particelle

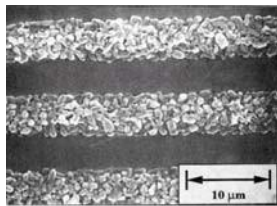


Masuda, Y., *et al.*, *Langmuir*. **2003**, 19, 5179.



Coltura a schema

Nuzzo, R., *Nat. Mater.* **2003**, 2, 207.



Crystallized LiClO₄

Crescita di cristalli su SAMS

Kumar, A., *et al.*, *Langmuir*. **1994**, 10, 1498

- Trasporto elettronico via cavi molecolari
- Aggancio di proteine to a superfici monostrato
- Rivestimenti di nanoparticelle
- Stampa di SAM strutturati via litografia
-

