

## Unità di massa atomica

L'unità di massa atomica (simbolo **u**) è uguale a **1/12 della massa dell'atomo di carbonio-12.**

L'unità di massa atomica è chiamata anche **dalton** (simbolo **Da**).

L'unità di massa atomica equivale a una massa assoluta di  $1,66053886 \times 10^{-24} g$ .

$1 u = 1 Da = 1,66053886 \times 10^{-24} g$

## Massa atomica

La massa atomica di un elemento è la **media delle masse dei suoi isotopi naturali ponderata secondo le rispettive abbondanze**, cioè la somma della massa atomica di ciascun isotopo ( $m_{isotopo}$ ) moltiplicata per la corrispondente frazione ( $f_{isotopo}$ ) che rappresenta l'abbondanza relativa in un campione naturale.

$$m_{\text{atomo media}} = \sum_{\text{isotopi}} (f_{\text{isotopo}} \cdot m_{\text{isotopo}})$$

## Massa atomica relativa

La massa atomica relativa è uguale alla massa atomica divisa per l'unità di massa atomica.

$$\text{massa atomica relativa} = \frac{\text{massa atomica (u)}}{1/12 \text{ massa di 1 atomo di } ^{12}\text{C (u)}}$$

La **massa atomica relativa** è una **grandezza adimensionale**.

## Mole

1 mole di oggetti contiene un numero di oggetti uguale a quello degli atomi di carbonio presenti in 12 g di carbonio-12.

### Numero di Avogadro

Il numero di oggetti corrispondente a una mole è detto numero di Avogadro. Poiché la massa di un atomo di carbonio-12 è uguale a  $1,99265 \times 10^{-23} \text{ g}$ , il numero di Avogadro è:

$$N = \frac{12 \text{ g}}{1,99265 \times 10^{-23} \text{ g}} = 6,221415 \times 10^{23}$$

Il numero di Avogadro è adimensionato.

## Costante di Avogadro

Il numero di oggetti per mole è detto **costante di Avogadro ed è dimensionato**.

*Costante di Avogadro*  $N_A = 6,221415 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

$1 \text{ g} = \text{numero di Avogadro} \times \text{unità di massa atomica} = N \cdot u$

$1 \frac{\text{g}}{\text{mole}} = \text{costante di Avogadro} \times \text{unità di massa atomica} = N_A u$

*massa di una mole di atomi in g*  $= N \cdot (m_{\text{atomo}} \text{ in unità di massa atomica})$

*massa molare di un elemento in  $\frac{\text{g}}{\text{mol}}$*   $= N_A \cdot (m_{\text{atomo}} \text{ in unità di massa atomica})$

## Massa molare

La **massa molare di un elemento** è la massa dei suoi atomi riferita a una mole.

La **massa molare di un composto molecolare** è la massa delle sue molecole.

La **massa molare di un composto ionico** è la massa della sua **unità formula** riferita una mole .

$$m. \text{ molare in } \frac{g}{mol} = N_A \cdot (m_{\text{unità formula in unità di massa atomica)})$$

Le dimensioni della massa molare sono massa/mole. La massa molare è normalmente espressa in g/mol.

La massa (m) di un campione è uguale al prodotto delle moli (n) per la massa molare (M):

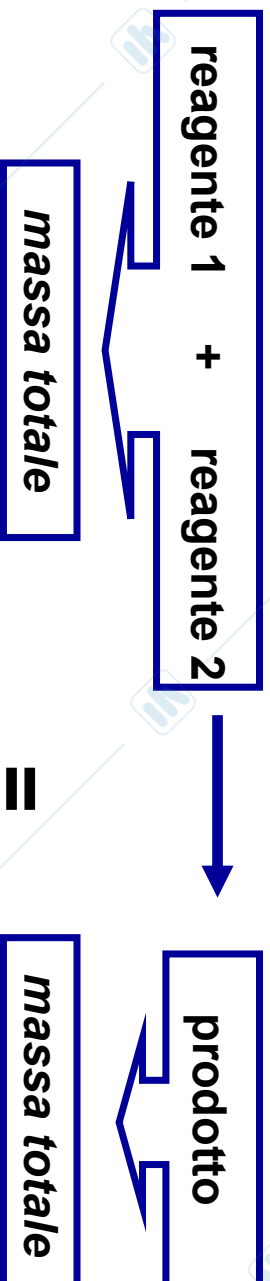
*massa = moli × massa molare*

$$m = nM$$

# LEGGE DI CONSERVAZIONE DELLA MASSA

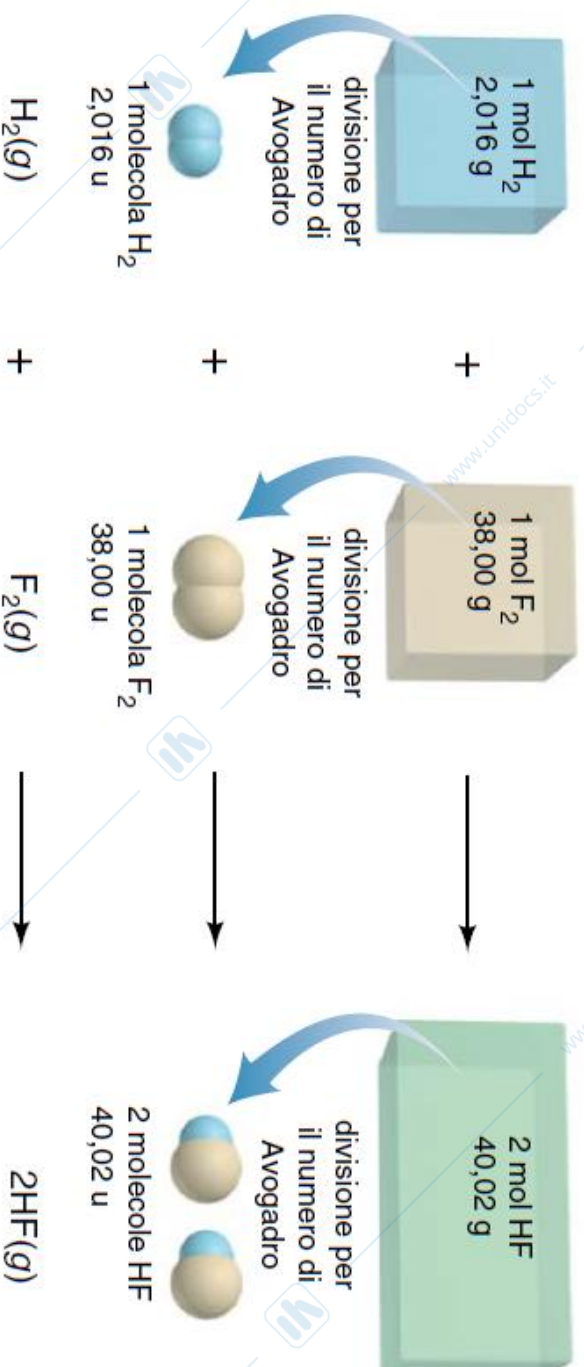
A. Lavoisier (1775)

*La somma delle masse delle sostanze reagenti è uguale alla somma delle masse dei prodotti di reazione.*



## Equazioni chimiche

Un'**equazione chimica** è un enunciato in formule che esprime le **identità** e le **quantità** delle sostanze che partecipano a una trasformazione chimica o fisica



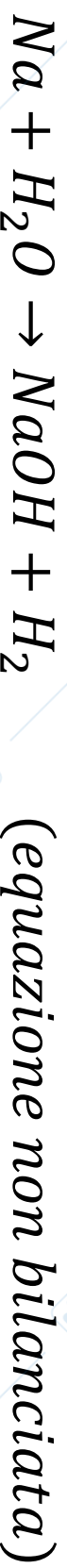
La formazione di HF gassoso a livello macroscopico e a livello molecolare

# Equazioni chimiche

La reazione chimica si simboleggia con una freccia che separare i reagenti (a sinistra) dai prodotti (a destra)

*reagenti* → *prodotti*

I reagenti e i prodotti sono espressi mediante formule chimiche, ad esempio



L'equazione deve essere bilanciata, ovvero deve soddisfare **la legge di conservazione della massa**, questo significa che il numero di atomi di ciascun elemento deve uguale prima e dopo la reazione.

## Bilanciamento equazioni chimiche



I coefficienti stechiometrici  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$  devono soddisfare le seguenti equazioni

*Conservazione Na*:  $a = c$

*Conservazione H*:  $2b = c + 2d$

*Conservazione O*:  $b = c$

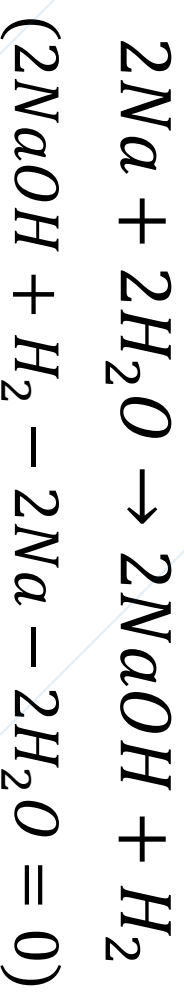
Si hanno tre equazioni indipendenti e quattro incognite, le soluzioni sono infinite.

$$2d = 2b - c = 2b - b = b; \quad 2d = b = c = a$$

Di norma, si adotta la soluzione con i minori valori interi dei coefficienti stechiometrici, ponendo:

$$d = 1, \quad b = c = a = 2$$

L'equazione bilanciata diventa



L'equazione chimica può riportare anche lo stato di aggregazione dei singoli reagenti e dei prodotti mediante i **simboli di stato**:

(s): *solido*    (l): *liquido*    (g): *gas*    (aq): *soluzione acquosa*



Se si vuole segnalare che la reazione richiede temperatura elevata, si aggiunge un  $\Delta$  alla freccia:



Si possono aggiungere altre informazioni come la presenza di un catalizzatore:



## Strategia per bilanciare le equazioni

Bilanciare un elemento per volta partendo dagli **elementi che sono presenti nel minor numero di formule** e bilanciando per ultimi gli **elementi non combinati**.

Esempio, combustione del metano



Si bilanciano prima il carbonio e l'idrogeno, e per ultimo l'ossigeno.

1. *C già bilanciato:*  $CH_4 + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$
2. *bilancio H:*  $CH_4 + O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$
3. *bilancio O:*  $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$
4. *simboli di stato:*  $CH_4(g) + 2O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + 2H_2O(g)$

Esempio, combustione dell'esano



Si bilanciano prima il carbonio e l'idrogeno, e per ultimo l'ossigeno.

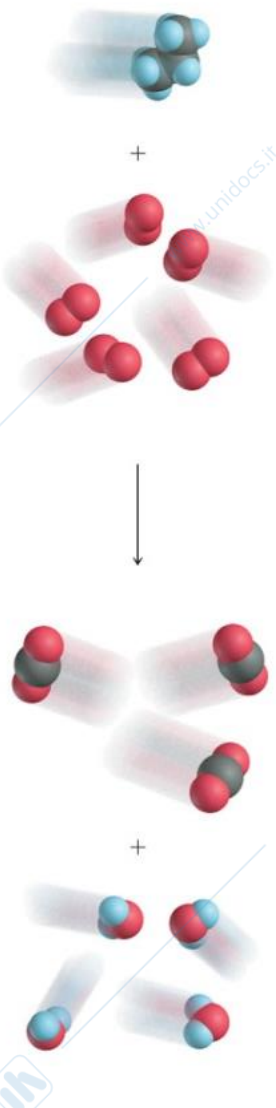
1. *bilancio C:*  
$$C_6H_{14} + O_2 \rightarrow 6CO_2 + H_2O$$
2. *bilancio H:*  
$$C_6H_{14} + O_2 \rightarrow 6CO_2 + 7H_2O$$
3. *bilancio O:*  
$$C_6H_{14} + 19/2 O_2 \rightarrow 6CO_2 + 7H_2O$$
4. *numeri interi:*  
$$2C_6H_{14} + 19O_2 \rightarrow 12CO_2 + 14H_2O$$
5. *simboli di stato:*



## Informazioni contenute in un'equazione bilanciata



Molecole 1 molecola  $\text{C}_3\text{H}_8$  + 5 molecole  $\text{O}_2$   $\longrightarrow$  3 molecole  $\text{CO}_2$  + 4 molecole  $\text{H}_2\text{O}$



Quantità (mol) 1 mol  $\text{C}_3\text{H}_8$  + 5 mol  $\text{O}_2$   $\longrightarrow$  3 mol  $\text{CO}_2$  + 4 mol  $\text{H}_2\text{O}$

Massa (u) 44,09 u  $\text{C}_3\text{H}_8$  + 160,00 u  $\text{O}_2$   $\longrightarrow$  132,03 u  $\text{CO}_2$  + 72,06 u  $\text{H}_2\text{O}$

Massa (g) 44,09 g  $\text{C}_3\text{H}_8$  + 160,00 g  $\text{O}_2$   $\longrightarrow$  132,03 g  $\text{CO}_2$  + 72,06 g  $\text{H}_2\text{O}$

Massa totale(g) 204,09 g  $\longrightarrow$  204,09 g

## REAGENTE LIMITANTE

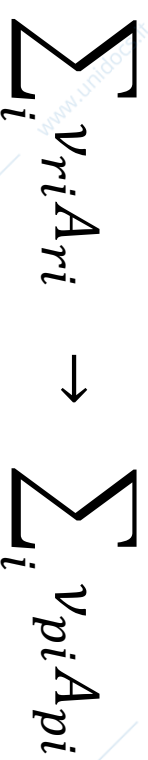
- In tutte le reazioni viste sin qui si è assunto che i reagenti fossero presenti nelle quantità corrette (stechiometriche) per reagire completamente.
- In realtà, un reagente può **limitare** la quantità di prodotto che si può formare.
- Il reagente **limitante** è si esaurisce completamente al termine della reazione.
- Un reagente **non limitante** si dice in **eccesso**, parte di questo reagente rimane inalterata alla fine della reazione.

## Grado di avanzamento della reazione e reagente limitante

Una reazione chimica è normalmente scritta nella seguente forma



oppure usando i simboli di sommatoria



dove

$A_{ri}$  è il simbolo che rappresenta il reagente  $i$

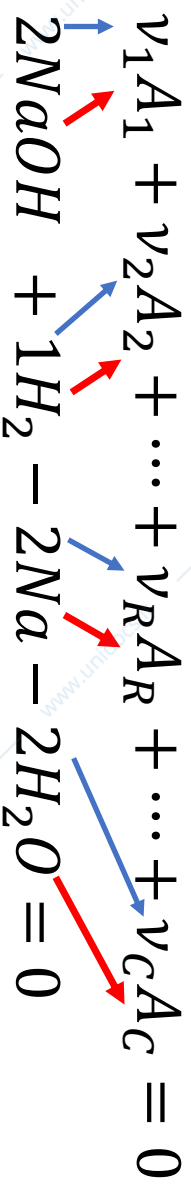
$\nu_{ri}$  è il coefficiente stechiometrico del reagente  $i$

$A_{pj}$  è il simbolo che rappresenta il prodotto  $j$

$\nu_{pj}$  è il coefficiente stechiometrico del prodotto  $j$

L'equazione può essere espressa in forma più compatta assumendo i coefficienti stechiometrici ( $\nu_i$ ) **positivi per i prodotti e negativi per i reagenti**.

In questo caso, l'equazione diventa:



Usando il simbolo di sommatoria

$$\sum_i \nu_i A_i = 0 \quad (\nu_i > 0 \text{ per i prodotti e } \nu_i < 0 \text{ per i reagenti})$$

$A_i$  è il simbolo che rappresenta la sostanza  $i$

$\nu_i$  è il coefficiente stechiometrico della sostanza  $i$

Le moli di una sostanza  $i$  che partecipa alla reazione sono uguali alla somma di questi due termini:

$$n_i = n_i^0 + n_i^g$$

$n_i^0$  sono le moli iniziali

$n_i^g$  sono le moli dovute alla reazione

Analogamente a quanto fatto per i coefficienti stechiometrici, consideriamo positive le moli generate dalla reazione ( $n_i^g > 0$ , prodotti) e negative le moli consumate ( $n_i^g < 0$ , reagenti).

Le moli generate (prodotti) o consumate (reagenti) devono rispettare la stechiometria della reazione.



Il rapporto tra le moli generate/consumate ( $n_i^g$ ) e il corrispondente coefficiente stechiometrico ( $\nu_i$ ) è uguale per tutte le sostanze coinvolte nella reazione:

$$\frac{n_1^g}{\nu_1} = \frac{n_2^g}{\nu_2} = \dots = \frac{n_i^g}{\nu_i} = \dots = \frac{n_C^g}{\nu_C} = \zeta$$

Definiamo questo rapporto **grado di avanzamento della reazione** ( $\zeta$ ).

## Grado di avanzamento

Se la reazione non è ancora iniziata le moli generate/consumate sono nulle e il grado di avanzamento è uguale a zero.

$$n_i = n_i^0$$

Durante la reazione le quantità di sostanze presenti possono essere in funzione del grado di avanzamento:

$$n_i = n_i^0 + n_i^g = n_i^0 + \nu_i \zeta$$

È importante notare che il **grado di avanzamento è una grandezza dimensionata espressa in moli.**

## Reagenti inizialmente in proporzioni stechiometriche

Se la reazione è di non di equilibrio e i reagenti sono in **proporzioni stechiometriche**, allora tutti i reagenti si esauriscono contemporaneamente.

per i reagenti si ha:

$$n_i = n_i^0 + \nu_i \zeta_{max} = 0 \quad n_i^0 = -\nu_i \zeta_{max}$$

$$\zeta_{max} = \frac{n_i^0}{-\nu_i} \quad \text{con } i \text{ tale che } \nu_i < 0$$

Per i prodotti, se **inizialmente sono assenti** ( $n_i^0 = 0$ )

$$n_i = \nu_i \zeta_{max} \quad \text{con } i \text{ tale che } \nu_i > 0$$

## Reagenti inizialmente non in proporzioni stechiometriche

Se la reazione non è di equilibrio e i reagenti non sono in proporzioni stechiometriche, **la reazione può continuare solo fino a che uno dei reagenti non si esaurisce.**

Il reagente che esaurendosi ferma la reazione è detto **reagente limitante**.

$$n_l = n_l^0 + \nu_l \zeta_{max} = 0 \quad \frac{n_l^0}{-\nu_l} = \zeta_{max} \quad l : \text{reagente limitante}$$

Il reagente limitante è uguale al minimo valore dei rapporti tra le moli iniziali di ciascun reagente e il corrispondente coefficiente stechiometrico:

$$\zeta_{max} = \min \left\{ \frac{n_1^0}{-\nu_1}, \frac{n_2^0}{-\nu_2}, \dots, \frac{n_i^0}{-\nu_i}, \dots, \frac{n_R^0}{-\nu_R} \right\} = \min \left\{ \frac{n_i^0}{-\nu_i} \text{ tale che } \nu_i < 0 \right\}$$

Consideriamo la reazione di combustione del metano



Si ha che 1 mole di metano reagisce con 2 moli di ossigeno.



Se si è in presenza di una mole di metano e una mole si ossigeno:

$$n_{CH_4}^0 = 1 \text{ mol} \quad \nu_{CH_4} = -1, \quad n_{O_2}^0 = 1 \text{ mol} \quad \nu_{O_2} = -2$$

$$\zeta_{max} = \min \left\{ \frac{n_{CH_4}^0}{-\nu_{CH_4}}, \frac{n_{O_2}^0}{-\nu_{O_2}} \right\} = \min \left\{ \frac{1}{1}, \frac{1}{2} \right\} = \frac{1}{2}$$

L'ossigeno è il reagente limitante, mentre il metano è il reagente in eccesso.

## Resa di una reazione

La resa di una reazione chimica (resa o rendimento percentuale se moltiplicata per 100) è il rapporto tra la quantità di prodotto desiderato effettivamente ottenuta e la quantità di prodotto che si otterrebbe se la reazione avvenisse in modo completo.

$$\eta = \frac{m_p^g}{(m_p^g)_{max}} = \frac{n_p^g M_P}{(n_p^g)_{max} M_P} = \frac{n_p^g}{(n_p^g)_{max}} = \frac{\nu_P \zeta}{\nu_P \zeta_{max}} = \frac{\zeta}{\zeta_{max}}$$

$\eta$ : resa della reazione

$P$ : prodotto desiderato

Nel caso di **reazioni di equilibrio la conversione del reagente limitante non è mai completa.**

La presenza di **reazioni secondarie** porta ha una **resa minore di uno** anche nel caso di una conversione completa del reagente limitante.

Il reagente limitante si esaurisce perché partecipa anche ad altre reazioni.

Si ha un grado di avanzamento per ogni reazione.

$$n_i = n_i^0 + n_i^{1g} + n_i^{2g} + \dots + n_i^{Rg} = n_i^0 + \nu_i^1 \zeta_1 + \nu_i^2 \zeta_2 + \dots + \nu_i^R \zeta_R$$

