

Criteri di arrotondamento

L'arrotondamento deve essere eseguito in modo da ridurre al minimo il valore assoluto della differenza tra il numero originale e quello arrotondato (scarto, distanza tra i due numeri).

$5,78347 \rightarrow 5,78$ *si arrotonda per difetto,*

5,79 ha uno scarto maggiore in modulo

$5,78347 - 5,78 = 0,00347$ $5,78347 - 5,79 = -0,00653$

$0,00347 < 0,00653$

$7,26901 \rightarrow 7,27$ *si arrotonda per eccesso,*

7,26 ha uno scarto maggiore in modulo

$7,26901 - 7,27 = -0,00099$ $7,26901 - 7,26 = 0,00901$

$0,00099 < 0,00901$

Se lo scarto è il medesimo, cioè quanto la cifra da rimuovere è un 5 seguito da zeri, **si aumenta la cifra di 1 se dispari e la si lascia invariata se è pari:**

4,765 → 4,76 si arrotonda per difetto (gli scarti in modulo sono uguali, 0,005)

1,3650 → 1,36 si arrotonda per difetto (gli scarti in modulo sono uguali, 0,0050)

4,775 → 4,78 si arrotonda per eccesso (gli scarti in modulo sono uguali, 0,005)

1,350 → 1,4 si arrotonda per eccesso (gli scarti in modulo sono uguali, 0,0050)

1,36501 → 1,37 si arrotonda per eccesso

L'arrotondamento comporta degli errori numerici che si aggiungono agli errori di misura.

Per limitare l'effetto degli errori di arrotondamento, conservare sempre almeno due cifre addizionali oltre l'ultima cifra significativa durante i calcoli e riportare le cifre significative solo nel risultato finale.

Risultato intermedio

3,1345³⁴ 5 cifre significative + due cifre addizionali

Risultato finale

3,1345 5 cifre significative

Metodi di verifica dei risultati

Controllo della ragionevolezza dei risultati

La soluzione ottenuta deve avere un senso.

Esempi:

- Una frazione deve essere compresa tra 0 e 1, la somma di tutte le frazioni deve essere 1.
- Una massa molare media deve avere un valore intermedio alle masse molari da cui è stata ottenuta.
- Un volume, una temperatura termodinamica possono assumere solo valori maggiori o uguali a zero.
- Le unità di misura devono essere coerenti con la grandezza calcolata.

Sostituzione della soluzione nell'equazione iniziale

Quando si risolve un'equazione (o un sistema di equazioni), si può verificare la correttezza della soluzione mediante la sua sostituzione nell'equazione (o sistema di equazioni).

Nel caso di un'equazione di secondo grado $ax^2 + bx + c = 0$, si può verificare che le radici x_1 e x_2 soddisfino le seguenti relazioni:

$$x_1 + x_2 = -b/a \quad x_1 x_2 = b/a$$

Infatti

$$ax^2 + bx + c = a(x - x_1)(x - x_2) = a[x^2 - (x_1 + x_2)x + x_1 x_2] = 0$$

$$x^2 + \frac{b}{a}x + \frac{c}{a} = x^2 - (x_1 + x_2)x + x_1 x_2$$

$$x_1 + x_2 = -b/a \quad x_1 x_2 = b/a$$

Verifica dell'ordine di grandezza di risultati

Si controlla che la soluzione ritenuta esatta sia di un ordine di grandezza analogo a quello stimato con un calcolo approssimato.

Nel caso di calcoli aritmetici, il valore ottenuto con la calcolatrice può essere confrontato con il suo ordine di grandezza ottenuto come segue:

1. Sostituire tutti le quantità numeriche con valori interi usando potenze di 10 (notazione scientifica) per numeri molto piccoli o molto grandi.

27,36 \rightarrow 20 o 30 (il valore che rende l'operazione aritmetica più facile)

63 473 \rightarrow 6×10^4

0,002887 \rightarrow 3×10^{-3}

2. Calcolare il risultato a mano, continuando ad arrotondare i risultati intermedi

$$\frac{36\,720 \times 0,0624}{0,000478} \approx \frac{(4 \times 10^4)(5 \times 10^{-2})}{5 \times 10^{-4}} = 4 \times 10^{4-2+3} = 4 \times 10^6$$

valore corretto: $4,79 \times 10^6$

3. Se un addendo è molto minore di un altro lo si può non considerare

$$\frac{1}{4,13 + 0,0476} \approx \frac{1}{4,13} \approx \frac{1}{4} = 0,25 \quad \text{valore corretto: } 0,239$$

Esercizio

Una miscela gassosa è costituita da elio (15,0% in massa), idrogeno (25,0% in massa), azoto (55,0% in massa) e anidride solforosa. La densità della miscela è 2,10 g/L e la pressione è uguale a 14,0 atm.

Calcolare:

- la temperatura della miscela gassosa in kelvin;
- la composizione della miscela in frazioni molari;
- la concentrazione dei componenti della miscela in mol/L.

$$R = 8,314463 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \quad 1 \text{ atm} = 101325 \text{ Pa}$$

Masse atomiche relative (pesi atomici)

He: 4,0026

H: 1,00794

N: 14,0067

O: 15,9994

Calcolo delle masse molari delle specie chimiche

He $M_1 = 4,0026 \text{ g/mol}$

H₂ $M_2 = 2 \times 1,00794 = 2,01588 \text{ g/mol}$

N₂ $M_3 = 2 \times 14,0067 = 28,0134 \text{ g/mol}$

SO₂ $M_4 = 32,065 + 2 \times 15,9994 = 64,063(8) \text{ g/mol} = 64,064 \text{ g/mol}$

Calcolo della frazione in massa di anidride solforosa

$$\sum_{i=1}^{N_c} \omega_i = \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4 = 1 \Rightarrow \omega_4 = 1 - \omega_1 - \omega_2 - \omega_3$$

$$\omega_4 = 1 - 0,150 - 0,250 - 0,550 = 0,050 \text{ (due cifre significative)}$$

$$\omega_1/M_1 = 0,0374(76) \text{ mol/g} \quad (\text{valore arrotondato in cifre significative } 0,0375 \text{ mol/g})$$

$$\omega_2/M_2 = 0,124(06) \text{ mol/g} \quad (0,124 \text{ mol/g})$$

$$\omega_3/M_3 = 0,0196(36) \text{ mol/g} \quad (0,0196 \text{ mol/g})$$

$$\omega_4/M_4 = 0,00078(05) \text{ mol/g} \quad (0,00078 \text{ mol/g})$$

$$\sum_{k=1}^{N_c} \omega_k/M_k = \omega_1/M_1 + \omega_2/M_2 + \omega_3/M_3 + \omega_4/M_4 = 0,181(90) \text{ mol/g} \quad (0,182 \text{ mol/g})$$

$$\bar{M} = \frac{1}{\sum_{k=1}^{N_c} \frac{\omega_k}{M_k}} = \frac{1}{0,181(90)} = 5,49(74) \text{ g/mol} \quad (5,50 \text{ g/mol})$$

Calcolo della temperatura

$$PV = nR \Rightarrow T = \frac{PV}{nR}$$

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{n\bar{M}}{V} \Rightarrow \frac{\rho}{\bar{M}} = \frac{n}{V}$$

$$\Rightarrow T = \frac{P\bar{M}}{\rho R}$$

$R = 8,314463 \text{ J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ **unità di misura in SI**

Il Sistema Internazionale (SI) richiede:

- *pressione in Pa*
- *volume in m^3*
- *temperatura termodinamica in K*
- *massa molare in kg/mol*
- *densità in kg/m^3*

$$P = 14,0 \text{ atm} = 14,0 \times 101325 = 1,41(86) \times 10^5 \text{ Pa}$$

$$\bar{M} = 5,49(74) \text{ g/mol} = 5,49(74) \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$$

$$\rho = 2,10 \text{ g/L} = 2,10 \text{ kg/m}^3 \text{ (SI)}$$

$$T = \frac{P\bar{M}}{R\rho} = 447 \text{ K} = 173 \text{ }^\circ\text{C}$$

Calcolo della composizione in frazioni molari

$$x_i = \frac{\omega_i \bar{M}}{M_i} \quad \left(M_i = \frac{m_i}{n_i} \quad \bar{M} = \frac{m}{n} \Rightarrow \frac{\bar{M}}{M_i} = \frac{m}{n} \frac{n_i}{m_i} = \frac{n_i/n}{m_i/m} = \frac{x_i}{\omega_i} \right)$$

$$x_1 = 0,206(02) = \mathbf{0,206}$$

$$x_2 = 0,681(76) = \mathbf{0,682}$$

$$x_3 = 0,107(93) = \mathbf{0,108}$$

$$x_4 = 0,0042(90) = \mathbf{0,0043}$$

verifica: $\sum_{i=1}^{N_c} x_i = 1$

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1,000$$

verifica: $\bar{M} = \sum_{k=1}^{N_c} x_k M_k$

$$\bar{M} = x_1 M_1 + x_2 M_2 + x_3 M_3 + x_4 M_4 = 5,49(74) \text{ g/mol}$$

Calcolo delle concentrazioni

$$c = \frac{\rho}{M} = \frac{2,10}{5,49(74) \times 10^{-3}} = 382, (00) \text{ mol/m}^3 = 0,382(00) \text{ mol/L}$$

$$c_i = x_i c$$

$$c_1 = 78,7 \text{ mol/m}^3 = 0,0787 \text{ mol/L}$$

$$c_2 = 260, \text{ mol/m}^3 = 0,260 \text{ mol/L}$$

$$c_3 = 41,2 \text{ mol/m}^3 = 0,0412 \text{ mol/L}$$

$$c_4 = 79 \text{ mol/m}^3 = 0,079 \text{ mol/L}$$

Esercizio

Un campione di 6,00 g di argento puro al 84,0% in massa viene fatto reagire con 8,00 g di una soluzione acquosa di acido solforico al 36,5% in massa. Calcolare i grammi di solfato d'argento e i litri di diossido di zolfo gassoso (misurati in condizioni normali: 0°C e 1 atm) prodotti sapendo che la resa della reazione è pari all'85,2%.

Domanda

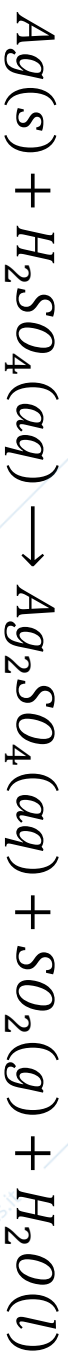
Rispondere sinteticamente alla seguente domanda **MOTIVANDO** la risposta (una frase).

Un'ulteriore aggiunta di argento aumenta il diossido di zolfo prodotto?

$$R = 8,314463 \text{ J mol}^{-1}\text{K}^{-1} \quad 1 \text{ atm} = 101325 \text{ Pa}$$

Schema della reazione non bilanciata

L'idrogeno dell'acido solforico richiede la presenza di acqua, oltre che come solvente, nei prodotti.

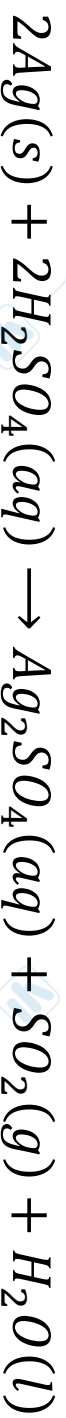


Bilanciamento della reazione

Bilancio l'argento



Bilancio lo zolfo



Bilancio l'idrogeno



L'ossigeno è bilanciato



Associazione di un indice a ciascuna specie chimica

specie	Ag	H_2SO_4	Ag_2SO_4	SO_2	H_2O
Indice i	1	2	3	4	5
ν_i	-2	-2	1	1	2

Calcolo delle masse molari

$$\text{Ag:} \quad M_1 = 107,87 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{H}_2\text{SO}_4: \quad M_2 = 2 \times 1,01 + 32,06 + 4 \times 16,00 = 98,08 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{Ag}_2\text{SO}_4: \quad M_3 = 2 \times 107,87 + 32,06 + 4 \times 16,00 = 311,80 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{SO}_2: \quad M_4 = 32,06 + 2 \times 16,00 = 64,06 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{H}_2\text{O:} \quad M_5 = 2 \times 1,01 + 16,00 = 18,02 \text{ g mol}^{-1}$$

Calcolo delle moli iniziali dei reagenti

Purezza dell'argento: 84,0%

$$m_{0,1} = 6,00 \times 0,840 = 5,04(00) \text{ g}$$

$$n_{0,1} = \frac{m_{0,1}}{M_1} = \frac{5,04(00)}{107,87} = 0,0467(23) \text{ mol}$$

$$m_{0,2} = 8,00 \times 0,365 = 2,92(00) \text{ g}$$

$$n_{0,2} = \frac{m_{0,2}}{M_1} = \frac{2,92(00)}{98,08} = 0,0297(72) \text{ mol}$$

Calcolo del reagente limitante

$$\zeta_{max} = \min \left\{ \frac{n_{0,1}}{-\nu_1}, \frac{n_{0,2}}{-\nu_2} \right\} = \min \left\{ \frac{0,0467(23)}{2}, \frac{0,0297(72)}{2} \right\}$$

$$\zeta_{max} = \min\{0,0233(61), 0,0148(86)\} = 0,0148(86) \text{ mol}$$

Il reagente limitante è l'acido solforico

Calcolo del grado di avanzamento effettivo

$$\eta = 0,852 \quad \text{resa della reazione (85,2\%)}$$

$$\zeta = \eta \zeta_{max} = 0,852 \times 0,0148(86) = 0,0126(83) \text{ mol}$$

In questo caso, le moli iniziali dei prodotti sono uguali a zero ad esclusione dell'acqua presente nella soluzione di acido solforico.

Calcolo della quantità finali di solfato d'argento

$$n_{0,3} = 0 \quad \nu_3 = 1 \quad n_3 = n_{0,3} + \nu_3 \zeta = \nu_3 \zeta = \zeta = 0,0126(83) \text{ mol}$$

$$m_3 = n_3 M_3 = 0,0126(83) \times 311,80 = \mathbf{3,95 \text{ g}}$$

Calcolo del volume occupato dal diossido di zolfo in condizioni normali

$$n_{0,4} = 0 \quad \nu_4 = 1 \quad n_4 = n_{0,4} + \nu_4 \zeta = \nu_4 \zeta = \zeta = 0,0126(83) \text{ mol}$$

$$T_n = 273,15 \text{ K} \quad P_n = 1 \text{ atm} = 101325 \text{ Pa}$$

$$R = 8,314463 \text{ J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$$

$$V_{NTP} = \frac{n_4 R T_n}{P_n} = \frac{0,0126(83) \times 8,314463 \times 273,15}{101325} = 2,84 \times 10^{-4} \text{ m}^3 = \mathbf{0,284 \text{ L}}$$

DOMANDA

Rispondere sinteticamente alla seguente domanda **MOTIVANDO** la risposta (una frase).

Un'ulteriore aggiunta di argento aumenta il diossido di zolfo prodotto?

No. Poiché il reagente limitante è l'acido solforico, l'argento è già in eccesso per cui una sua ulteriore aggiunta non influenza la reazione.