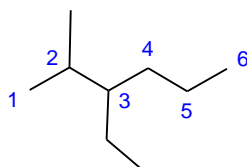


Esercitazione 9 del 13/11/2020_SQUADRA 2

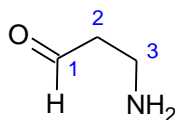
1) Scrivere la struttura lineare delle seguenti molecole organiche

- a) 2-metil-3-etil-esano
- b) 3-ammino-propanale
- c) 3-esanone
- d) 3-buten-2-olo
- e) 1-pentantiolo
- f) acido 3-idrossi-benzoico

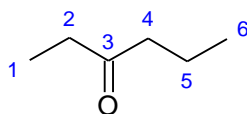
R: a) Si tratta di un alcano con catena principale a 6 atomi di carbonio. La molecola presenta 2 ramificazioni, una in posizione 2 (quindi sul C2) ed una in posizione 3 (quindi sul C3), rappresentate rispettivamente da un gruppo metile (CH_3) e da un gruppo etile (CH_2CH_3)



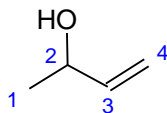
b) Si tratta di una molecola la cui catena principale è costituita da 3 atomi di carbonio (si denota dal prefisso propan-). Dal nome possiamo dedurre anche l'appartenenza della molecola alle ALDEIDI (la desinenza -ALE identifica, infatti, le aldeidi), e questo gruppo funzionale sarà posizionato su C1. E' presente un altro sostituito, un gruppo amminico ($-\text{NH}_2$) in posizione 3.



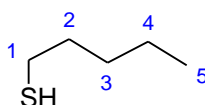
c) Si tratta di una molecola la cui catena principale è costituita da 6 atomi di carbonio (dal prefisso esan-). Il nome ci dice che appartiene alla classe dei chetoni (dalla desinenza -one). Nello specifico, questo gruppo carbonilico è posizionato sul C3.



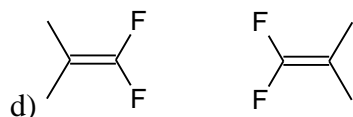
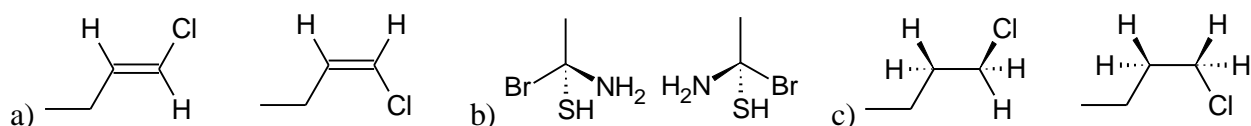
d) Si tratta di una molecola la cui catena principale è costituita da 4 atomi di carbonio e che presenta un'insaturazione in posizione 3 (3-buten.). Il nome ci dice anche che è presente un gruppo OH (desinenza -olo) in posizione 2.



e) Si tratta di una molecola la cui catena principale è costituita da 5 atomi di carbonio (pentan) e che presenta un gruppo SH in posizione 1 come sostituito (-tiolo)



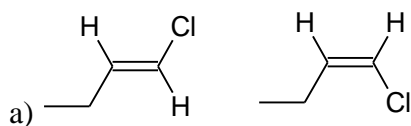
2) Determinare se le seguenti coppie di molecole sono isomeri, giustificando la risposta



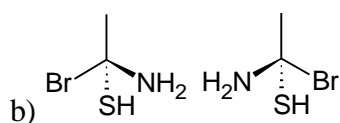
R: Si definiscono ISOMERE due molecole che hanno la stessa formula bruta, cioè gli stessi atomi costituenti. Tra gli isomeri possiamo distinguere:

-ISOMERI COSTITUZIONALI: due molecole sono isomeri costituzionali (detti anche strutturali) quando hanno la stessa formula bruta, ma gli atomi sono legati da differenti connettività;

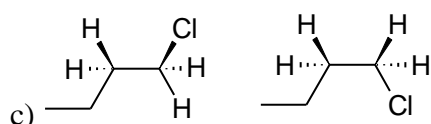
- STEREOISOMERI: due molecole sono stereoisomeri se hanno stessa formula bruta, stessa connettività, ma sono contraddistinti da differente orientazione nello spazio. Tra gli stereoisomeri, ricordiamo gli ISOMERI CIS-TRANS, tipici dei composti in cui la rotazione attorno al legame C-C richiede una spesa di energia non trascurabile; e gli ENANTIOMERI, i quali sono immagini speculari e quindi non sovrapponibili.



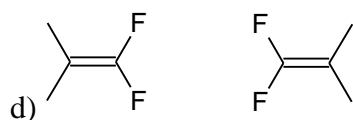
La differenza tra la prima e la seconda molecola sta nella disposizione dell'atomo di cloro rispetto al piano costituito dal doppio legame C-C. Essendo che la rotazione attorno al legame C-C nei doppi legami è energeticamente dispendiosa (in quanto comporta la rottura del legame π), le due molecole non sono facilmente interconvertibili e rappresenteranno, quindi, due entità differenti. Si tratta di isomeri CIS-TRANS;



Queste due molecole presentano un centro stereogenico (C con 4 sostituenti diversi) e sono immagini speculari l'una dell'altra, quindi non sovrapponibili. Si tratta quindi di ENANTIOMERI.

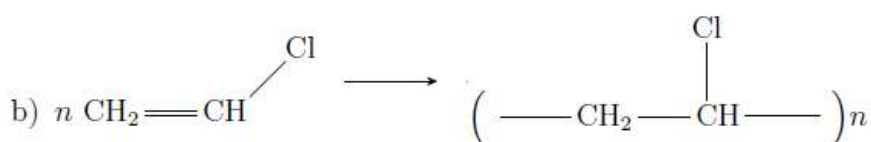
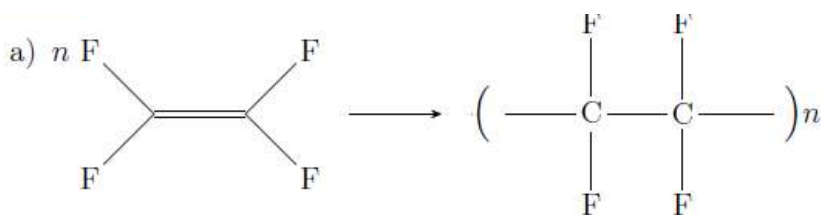


Diversamente da a), in questo caso la presenza di un legame semplice (σ) tra i carboni evidenziati consente un'interconversione tra le molecole che non prevede spesa energetica significativa. Le due molecole, quindi, sono sostanzialmente UGUALI.



Anche queste due molecole sono UGUALI, in quanto, pur essendo immagini speculari, non presentano centri stereogenici e quindi non possono cadere nel gruppo degli enantiomeri.

3) Individuare il tipo e il numero di legami che si rompono e si formano nelle seguenti reazioni di sintesi di polimeri:



- a) Nel passaggio da tetra fluoro etilene (monomero, sulla sinistra) a poli-tetrafluoro etilene (Polimero, sulla destra, detto anche Teflon) si ha la rottura di un legame π tra i due atomi di C e la formazione di due nuovi legami σ C-C.
- b) Nel passaggio da cloroetilene (monomero sulla sinistra, detto anche vinilcloruro) a policloroetilene (polimero, sulla destra, detto anche polivinilcloruro (PVC)) si ha, come nel caso a), la rottura di un legame π tra i due atomi di C e la formazione di due nuovi legami σ C-C.

4) Quanto lavoro compie un gas che ha inizialmente pressione $P=1.70$ atm e volume $V=1.56$ L, espandendosi contro una pressione esterna costante di 1.80 atm? Il sistema cede o guadagna energia? Ipotizzare che il sistema possa scambiare calore in modo tale che all'inizio e alla fine dell'espansione la temperatura sia la stessa.

R: Il lavoro associato all' espansione di un gas può essere calcolato come

$$w = -P \times \Delta V$$

In questo caso, il lavoro è compiuto dal gas contro una pressione esterna, quindi P sarà P_{ext} e ricaveremo la variazione di volume sfruttando la legge di Boyle, in quanto siamo in condizioni di temperatura costante.

$$P_i \times V_i = P_f \times V_f$$

Se il gas compie un lavoro contro una pressione esterna P_{ext} , possiamo considerare che la sua pressione finale P_f eguaglierà P_{ext} .

L'incognita rimane, dunque, il volume finale

$$V_f = P_i \times V_i / P_f = 1.70 \text{ atm} \times 1.56 \text{ L} / 1.80 \text{ atm} = 1.47 \text{ L}$$

Possiamo infine calcolare il lavoro compiuto dal gas in $L \times \text{atm}$

$$w = - P_{\text{ext}} \times \Delta V = -1.80 \times (1.47 - 1.56) = 0.16 \text{ atm} \times \text{L} \text{ che corrispondono a } 16.2 \text{ J (fattore di conversione} = 101.33 \text{ J/atm} \times \text{L}).$$

Il lavoro ha segno positivo (il volume finale è minore del volume iniziale), quindi è l'ambiente a compiere lavoro sul sistema, quindi a spendere energia--> il sistema guadagnerà energia.

5) Quando 1.015 g di NaOH sono disciolti in 150.0 g di acqua in un calorimetro, la temperatura dell'acqua aumenta da 23.50 °C a 25.32 °C. Sapendo che la capacità termica del calorimetro è 32.90 J/°C e il calore specifico dell'acqua è 4.184 J/(g °C), calcolare il calore molare della dissoluzione della soda. Ipotizzare che la capacità termica dell'acqua resti costante in seguito all'aggiunta di NaOH.

R: Il calorimetro è un dispositivo che ci permette di misurare la quantità di calore scambiato durante una determinata trasformazione, sia essa fisica o chimica. Il calorimetro è uno strumento che rappresenta un sistema chiuso, isolato termicamente. Per le reazioni che avvengono in acqua, normalmente si impiegano i calorimetri a pressione costante. Il suo funzionamento si basa sul fatto che la quantità di calore scambiata durante un processo deve, per la legge di conservazione dell'energia, eguagliare in valore assoluto quella scambiata dall'ambiente, che avrà però segno opposto.

$$q = - q_{\text{ambiente}}$$

Nel nostro caso, l'ambiente è rappresentato da due componenti, cioè l'acqua ed il calorimetro stesso.

$$q = -(q_{\text{H}_2\text{O}} + q_{\text{calorimetro}})$$

Calcoleremo $q_{\text{calorimetro}}$ come prodotto tra la capacità termica del calorimetro (dato del testo) e la differenza di temperatura (ricavabile dai dati del testo):

$$q_{\text{calorimetro}} = C_{\text{calorimetro}} \times \Delta T = 32.90 \text{ J/}^\circ\text{C} \times (25.32 - 23.50)^\circ\text{C} = 59.89 \text{ J}$$

Per l'acqua, invece, non ci viene data la capacità termica, ma il calore specifico (capacità termica per unità di massa) e la massa della soluzione (soluto più solvente). Supponendo, come dice il testo, che la capacità termica della soluzione sia uguale alla capacità termica dell'acqua, possiamo ricavare il $q_{\text{H}_2\text{O}}$ come segue:

$$q_{\text{H}_2\text{O}} = c_{\text{H}_2\text{O}} \times m_{\text{soluzione}} \times \Delta T = 4.184 \text{ J/(g }^\circ\text{C)} \times (150 \text{ g} + 1.015 \text{ g}) \times (25.32 - 23.50)^\circ\text{C} = 1150 \text{ J}$$

Il calore associato al nostro processo, sarà quindi uguale a :

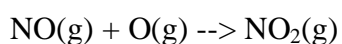
$$q = -q_{\text{ambiente}} = -(1150 + 59.89) = -1209 \text{ J} = -1.21 \text{ kJ}$$

Ci viene richiesto, in realtà, un calore molare di dissoluzione. Dovremo, quindi, dividere questo valore, che si riferisce all'intero processo, per il n di moli di NaOH:

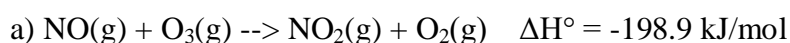
$$n_{\text{NaOH}} = 1.015 \text{ g} / 40 \text{ g/mol} = 2.54 \times 10^{-3} \text{ mol}$$

$$q_{\text{molare}} = 1.21 \text{ kJ} / 2.54 \times 10^{-3} \text{ mol} = -43.34 \text{ kJ/mol}$$

6) Calcolare la variazione di entalpia della seguente reazione



sapendo che

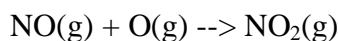


R: Per calcolare l'entalpia di un processo, magari non determinabile sperimentalmente per diversi motivi, è possibile sfruttare la legge di Hess, la quale enuncia che "Il calore scambiato in una certa

reazione, sotto il vincolo della pressione costante, è indipendente dal cammino compiuto, ma dipende solo dallo stato iniziale e finale del sistema".

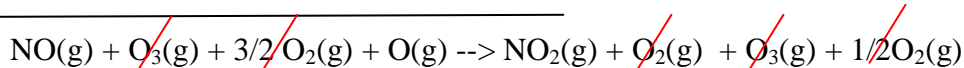
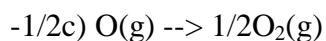
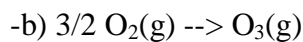
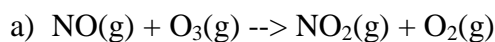
In sostanza, come una reazione può essere ottenuta dalla somma di reazioni differenti, anche i valori di entalpia subiscono lo stesso computo.

La reazione di cui vogliamo misurare la variazione di entalpia è la seguente:

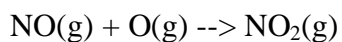


ed a disposizione abbiamo le reazioni a) b) e c), di cui conosciamo i valori di entalpia.

Per ottenere la reazione target, sarà necessario operare la somma a) - b) - 1/2 c)



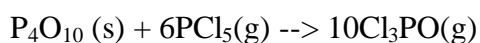
che semplificata dà



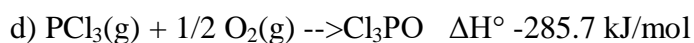
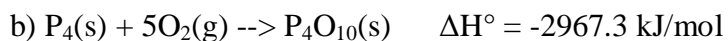
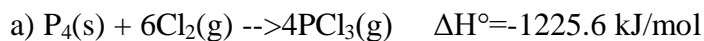
ΔH° reazione sarà quindi determinato con lo stesso criterio:

$$\Delta H^\circ \text{ reazione} = \Delta H^\circ \text{a} - \Delta H^\circ \text{b} - 1/2 \Delta H^\circ \text{c} = -198.9 + 142.3 - 1/2(495) = -304.1 \text{ kJ/mol}$$

7) Calcolare il valore di ΔH° per la reazione



avvalendosi dei seguenti dati



Come per l'esercizio precedente, anche in questo caso si sfrutta la legge di Hess per ricavare il valore di entalpia della reazione

La reazione complessiva può essere vista come la seguente somma dei processi elencati:

R: a) - b) -6c) +10d)

$\Delta H^\circ_{\text{reazione}}$ sarà quindi determinato con lo stesso criterio:

$$\Delta H^\circ_{\text{reazione}} = \Delta H^\circ_a - \Delta H^\circ_b - 6\Delta H^\circ_c + 10\Delta H^\circ_d = -1225.6 + 2967.3 + 6 \times (84.2) - 10 \times (285.7) = -610.1 \text{ kJ/mol}$$