

# Appunti Fondamenti di chimica per Bioingegneria

Leonardo Silvagni

5 ottobre 2021

## Sommario

Appunti delle lezioni di Fondamenti di chimica per Bioingegneria, la parte di chimica inorganica, tenuta dall'inimitabile professor Mozzon.

## 1 La Materia

La materia è composta da atomi. Fino a fine 1800 si pensava queste fossero le particelle fondamentali ed indivisibili (da cui a-tomos, indivisibile) della materia. Solo successivi e sempre più avanzati studi sull'elettricità hanno portato alla scoperta di varie particelle subatomiche

### 1.1 Caratteristiche principali delle particelle subatomiche

Particella	Simbolo	Massa	Carica	Anno scoperta
elettrone	$e^-$	$9,109 \cdot 10^{-28} g$	$-1,602 \cdot 10^{-19} C$	1897
protone	$p^+$	$1,671 \cdot 10^{-24} g$	$1,602 \cdot 10^{-19} C$	1917
neutrone	$n$	$1,671 \cdot 10^{-24} g$	0	1932

Tabella 1: Caratteristiche principali delle particelle subatomiche.

### 1.2 I Modelli Atomici

1. Dalton 1803
2. Thomson 1904 A panettone
3. Rutherford 1911-1917 Gli esperimenti finali portarono alla scoperta del protone
4. Bohr - Sommerfeld 1913
5. Shrodinger 1926

E' da notare che Bohr studiò solo l'atomo di Idrogeno, Sommerfeld estese il modello ad ulteriori specie chimiche. La novità principale di questo modello è stata l'introduzione delle orbite circolari ed ellittiche degli elettroni attorno al nucleo. In un atomo neutro, protoni ed elettroni si trovano nella stessa quantità, mentre i neutroni sono in numero variabile.

### 1.3 Il nucleo

Protoni, neutroni e reazioni nucleari non sono di interesse della chimica, in quanto nelle reazioni chimiche il nucleo rimane intoccato, reazioni chimiche sono relazioni tra elettroni.

- **NUCLEONI**  $\rightarrow$  Protoni e neutroni
- Somma del numero di protoni e neutroni, numero di massa  $\mathcal{A}$
- Numero di protoni  $\mathcal{Z}$
- Numero di neutroni  $\mathcal{A} - \mathcal{Z}$

## Nota

Specie chimiche con lo stesso numero di elettroni danno le stesse reazioni chimiche e possiedono le stesse proprietà chimico fisiche

### 1.3.1 I NUCLIDI

I nuclidi sono le diverse specie di atomi caratterizzate da nuclei di definita composizione. Un nuclide viene rappresentato dal simbolo che indica la particella, con apice e pedice a sinistra per indicare numero di massa e numero atomico, apice e pedice a destra per indicare la carica e il numero di atomi

$${}^A_ZX_n^\pm$$

Due nuclidi si dicono **isobari** se hanno diverso numero atomico ma uguale numero di massa

$${}^{14}_6C \quad {}^{14}_7N$$

Due nuclidi si dicono **isotopi** se hanno lo stesso numero atomico ma diverso numero di massa. Cambia il numero di neutroni

$${}^{16}_8O \quad {}^{17}_8O$$

### 1.3.2 Gli isotopi

Tutti gli elementi chimici presenti in natura sono costituiti da miscele di **nuclidi diversi**, caratterizzati tutti dallo stesso numero atomico ma diverso numero di massa, isotopi appunto.

$${}^{20}_{10}Ne \quad {}^{21}_{10}Ne \quad {}^{22}_{10}Ne$$

Esempi di isotopi di neon

$${}^{16}_8O \text{ } p = 99.979\% \quad {}^{17}_8O \text{ } p = 0.037\% \quad {}^{18}_8O \text{ } p = 0.204\% \quad (1)$$

Isotopi naturali dell'ossigeno, non radioattivi

Gli isotopi naturali sono presenti in natura in forma stabile, non sono soggetti a decadimento radioattivo. La *abbondanza percentuale* è intesa come numero di atomi, e sono costanti nell'universo, salvo ambienti specifici dove possono casualmente esserci variazioni minime dei valori

$${}^1_1H \text{ } \textit{Prozio } p = 99.984\% \quad {}^2_1H \text{ } \textit{Deuterio } p = 0.016\% \quad {}^3_1H \text{ } \textit{Trizio } p = 10^{-15}\%$$

Il *prozio* è notato anche semplicemente con Idrogeno, il *deuterio* con Idrogeno pesante e si nota anche solo con *D*, o  ${}^2_1D$ , Il *trizio* con *T* o  ${}^3_1T$

Se noi sostituissimo all'idrogeno il deuterio per formare l'acqua, per formare l'acqua pesante  ${}^2_1H_2O$ , questo elemento bolle a  $101.43^\circ C$ , e fonde a  $3.82^\circ C$ .

## 1.4 La massa

### 1.4.1 La massa atomica

Le masse degli atomi vengono determinate con uno strumento che si chiama spettrometro di massa e sono masse atomiche **assolute**, i loro pesi sono molto piccoli. E' stato perciò conveniente definire una particolare unità di misura, l'unità di massa atomica (uma), definita come

$$1 \text{ uma} = \frac{1}{12} \text{ della massa di } {}^{12}_6C = 1.6606 \times 10^{-24} g$$

Dividendo la massa atomica assoluta per l'unità di massa atomica posso ottenere la massa atomica relativa.

$$m_{ar} = \frac{m_{aa}}{uma}$$

### 1.4.2 La massa di un elemento

La massa di un elemento, ovvero la massa atomica media o il peso atomico. Abbiamo visto che gli elementi sono composti da miscele di diversi isotopi. Nei calcoli chimici dobbiamo considerare la presenza di ogni isotopo per ottenere il valore medio della massa atomica di un elemento. Indicando con "E" un generico elemento della tavola periodica, avremo

$$M_e = \frac{\sum_i M_i p_i}{100} \quad (2)$$

$M_i$  è calcolato in uma. Esempio:

$$M_{16O} = 15.9949 \text{ uma}$$

$$M_{17O} = 16.9991 \text{ uma}$$

$$M_{18O} = 17.9992 \text{ uma}$$

Da cui, utilizzando la formula (2) e conoscendo l'abbondanza percentuale (1), si ottiene la massa media dell'ossigeno

$$M_O = 15.9994 \text{ uma}$$

#### Nota

Conoscendo la formula chimica e sommando le masse degli atomi si ottiene la massa molecolare.

### 1.4.3 La mole ed il Numero di Avogadro

La maggior parte delle reazioni chimiche coinvolge un numero enorme di particelle (atomi, molecole etc...). E' stato perciò conveniente definire una nuova grandezza, la mole (mol), che rappresenta un numero grande e fisso di particelle, comparabile alla quantità di particelle usate in un esperimento reale.

DEF: *Una mole di una determinata sostanza è la quantità di tale sostanza che contiene tante entità elementari (Atomi, ioni, molecole etc...) quanti sono gli atomi contenuti in 12 g esatti di  $^{12}_6C$ .*

Possiamo determinare facilmente questo numero di atomi: basta dividere la massa totale per la massa di un atomo. Da questo il numero di Avogadro è

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ entità/mol.}$$

### 1.4.4 La massa molare

Esempio : *Si voglia determinare la massa molare di  $H_2O$*

1. La massa espressa in uma di  $H_2O$  è di 18.015 uma
2. La massa in grammi di una molecola di  $H_2O$  è 18.015 uma  $\cdot 1.6606 \cdot 10^{-24}$
3. In una mole di  $H_2O$  ci sono  $N_A$  molecole
4. La massa espressa in grammi di una mole di  $H_2O$  è (numero molecole)  $\cdot$  (massa in g di una molecola)

Una mole di  $H_2O$  pesa 18.015 g, così per qualsiasi sostanza, il peso di una mole di un dato elemento X è pari allo stesso valore numerico della sua massa molecolare o atomica espressa in uma.

#### Il numero di Moli

Ne segue dalla definizione di massa molare che è possibile impostare la seguente relazione

$$M_{(g)} : 1_{(mol)} = m_{(g)} : n_{(mol)} n = \frac{m}{M}$$

### 1.4.5 Gli elementi e i composti

Le sostanze pure presenti in natura o prodotte artificialmente si dividono in:

- Sostanze elementari
- Composti

Le sostanze elementari sono formate da un solo tipo di elemento, presente con uno o più atomi.

Le sostanze elementari si presentano sotto forma di

1. Singoli atomi isolati
2. Atomi combinati in molecole distinte, come  $H_2$
3. Aggregati di atomi dove non è possibile individuare nessuna entità discreta, come una barretta di ferro

I composti sono invece formati da elementi diversi. Si possono presentare sotto forma di

1. Molecole distinte, come il metano  $CH_4$
2. Insiemi di ioni aggregati da forze di natura elettrostatica, esempio  $NaCl$  (Non esistono molecole ioniche, sono in realtà sviluppi tridimensionali compenetrati)
3. Concatenazioni infinite di atomi, esempio  $SiO_2$ . Non si trovano molecole singole di tali composti. sviluppo tridimensionale di  $SiO_4^{2-}$

## 1.5 Il significato dei simboli e delle formule chimiche

Le sostanze elementari vengono rappresentate con simboli. I composti vengono rappresentati con formule. Tanto i simboli quanto le formule hanno un duplice significato:

1. Qualitativo : Indicano un certo tipo di sostanza
2. Quantitativo: Rappresentano contemporaneamente un atomo o una molecola o una quantità in grammi pari ad una mole

### 1.5.1 Il numero di ossidazione

Trattando il legame chimico vedremo che quando due o più atomi si legano insieme per formare un aggregato poliatomico avviene sempre una redistribuzione degli elettroni, i quali vengono persi, acquistati, condivisi etc. . .

Il numero di Ossidazione *no* è un parametro che tiene conto di questa nuova redistribuzione.

Non è in realtà qualcosa che esiste nella realtà, traspone un concetto appartenente ai legami ionici, è stato inventato per due motivi:

1. Nomenclatura in chimica inorganica
2. Bilanciamento delle reazioni di ossidoriduzione complesse

Il numero di ossidazione viene indicato ponendo sopra il simbolo di ogni elemento il suo *no*.

Il numero di ossidazione può essere determinato:

1. Conoscendo la formula di struttura di LEWIS del composto e i valori di elettronegatività degli elementi presenti nel composto
2. Facendo uso delle **REGOLE EMPIRICHE**
  - (a) il *no* degli elementi nelle sostanze elementari è zero
  - (b) Gli elementi elencati presentano invariabilmente in tutti i loro composti il seguente *no*:
    - Tutti i metalli alcalini (Prima colonna a sx) sempre +1
    - Tutti i metalli alcalino-terrosi (Seconda colonna a sx) sempre +2

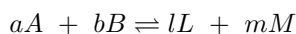
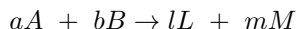
- Cadmio Cd sempre +2
  - Zinco Zn sempre +2
  - boro B sempre +3
  - Alluminio Al sempre +3
  - Fluoro F sempre -1
  - Argento Ag sempre +1
  - Idrogeno H sempre +1 tranne negli idruri metallici dove no = -1
  - Ossigeno O sempre -2 tranne in OF<sub>2</sub> dove ha no pari a +2 e nei perossidi o superossidi
- (c) Tutti gli altri elementi della tavola periodica presentano no variabili da composto a composto.
- Ferro : +2 , +3
  - Rame : +1 , +2
  - Zolfo : -2 , +4 , +6
  - Cloro, Bromo e Iodio : -1 , +1 , +3 , +5 , +6
- (d) La somma algebrica dei no di tutti gli atomi di ciascun elemento presenti nella formula è uguale alla carica della formula

$$\sum no = \text{carica formula}$$

Esempi: determinare no di  $SO_4^{2-}$  (+6), no di  $Cu^{2+}$  (+2), utilizzando la formula sopra.

### 1.5.2 La rappresentazione delle equazioni chimiche

Le equazioni chimiche rappresentano i cambiamenti che avvengono nelle sostanze durante le reazioni chimiche. Tutte le reazioni chimiche si possono rappresentare con questi due simbologie:



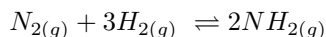
Dove le lettere maiuscole sono le formule chimiche, le lettere minuscole i coefficienti stechiometrici.

## 1.6 La classificazione delle reazioni chimiche

- Sulla base della completezza :
  - Reazioni complete
  - Reazioni di equilibrio
- Dal tipo di reazione
  - Redox
  - Non Redox
- Su base di calore ceduto o acquistato
  - Esotermiche
  - Endotermiche

### 1.6.1 La classificazione sulla base della completezza

1. Reazione completa: Almeno un reagente si trasforma completamente nel prodotto
2. Reazione di equilibrio: Ci sono reazioni nelle quali la reazione inizia, ed arrivati ad un certo punto detto di "equilibrio chimico", le quantità di prodotti che si formano non vengono più aumentate e neanche diminuite, perchè le ulteriori quantità di prodotto che si formano reagiscono tra di loro per ridare i reagenti di partenza



Questa reazione di equilibrio da 32 g di N<sub>2</sub> produce solo 1 g di NH<sub>3</sub>

### 1.6.2 Classificazione sulla base del tipo di reazione

1. Reazioni non Redox : Sono le reazioni che avvengono senza variazioni del numero di ossidazione degli elementi presenti
2. Reazioni Redox : Sono le reazioni che avvengono con variazioni del numero di ossidazione degli elementi presenti.

#### Le reazioni Redox

Una specie chimica si dice che si ossida quando un elemento che la costituisce aumenta il suo no.

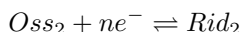
Una specie chimica si dice che si riduce quando un elemento che la costituisce diminuisce il suo no.

Una sostanza è detta *agente riducente* quando riduce un'altra sostanza e viene anche chiamata *FORMA RIDOTTA (Rid)* di una coppia redox.

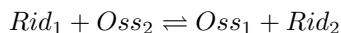
Una sostanza è detta *agente ossidante* quando ossida un'altra sostanza e viene anche chiamata *FORMA OSSIDATA (Ox)* di una coppia redox.



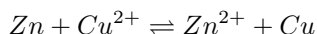
Questa scrittura si chiama *semireazione di ossidazione*. Gli elettroni persi devono essere acquistati da una specie due



Una reazione di ossidoriduzione è la somma di due semireazioni



Esempio

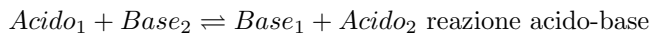
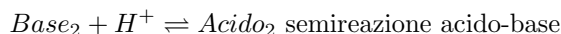
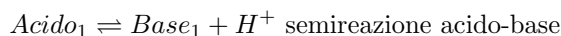


$Oss_1/Rid_1$  e  $Oss_2/Rid_2$  costituiscono due coppie coniugate redox

#### Le reazioni non Redox

##### Il concetto di acido-base secondo Bronsted e Lowry:

Un acido è una specie donatrice di protoni  $H^+$ , mentre una base è una specie accettrice di protoni  $H^+$



### 1.6.3 Il bilanciamento delle reazioni chimiche

Il processo di bilanciamento di qualsiasi reazione chimica si basa su due principi:

1. Bilancio di massa : numero e tipo di atomi di ciascun elemento deve essere uguale nei due membri dell'equazione.
2. Bilancio di carica : La somma algebrica delle cariche nei due membri dell'equazione deve coincidere

Questi due principi vengono applicati contemporaneamente modificando gli opportuni coefficienti stechiometrici. Si usano quattro metodi:

1. Metodo empirico (o metodo per verifica). E' utile per bilanciare reazioni non redox e reazioni redox semplici
2. Metodo algebrico
3. Metodo diretto
4. Metodo delle semireazioni

Noi adotteremo solo quello empirico, gli ultimi sono utili per reazioni complesse.

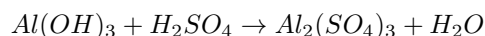
**Metodo empirico** significa aggiustare i coefficienti stechiometrici dati inizialmente per tentativi fintantochè non si ottiene la reazione bilanciata correttamente. Schema:

1. Si bilancia un elemento alla volta
2. I coefficienti stechiometrici ottenuti in ogni passaggio non vanno più modificati fino al termine del processo.

Strategia:

1. Se un elemento compare solo in un composto nelle due parti dell'equazione, si deve bilanciare per primo questo elemento; Nel caso si presenti questa situazione per più di un elemento si inizierà il bilanciamento dall'elemento con numero di atomi diseguale.
2. Quando uno dei reagenti o dei prodotti è presente come sostanza elementare, si deve bilanciare questo elemento per ultimo.

Esercizio: Bilanciare la seguente reazione usando il metodo empirico



Bilancio di Al  $2Al(OH)_3 + H_2SO_4 \rightarrow Al_2(SO_4)_3 + H_2O$

Bilancio di S  $2Al(OH)_3 + 3H_2SO_4 \rightarrow Al_2(SO_4)_3 + H_2O$

Bilancio di H  $2Al(OH)_3 + 3H_2SO_4 \rightarrow Al_2(SO_4)_3 + 6H_2O$

Bilancio di O  $2Al(OH)_3 + 3H_2SO_4 \rightarrow Al_2(SO_4)_3 + 6H_2O$  Già bilanciato

## 1.7 I calcoli stechiometrici

### 1.7.1 Il rapporto molare

Sulla base delle convenzioni fatte alle formule dei composti si può attribuire il significato di una quantità di sostanza in grammi pari alla massa molecolare. Quindi le equazioni chimiche si possono trasformare in equazioni numeriche se al posto delle formule si sostituiscono le quantità in grammi pari alle masse molecolari.

Esempio: vedi libro, comunque è intuitivo.

Nei calcoli stechiometrici si tratta di trovare le quantità di reagenti e prodotti quando sia nota la quantità di uno di essi. Noto uno trovo l'altro.

**La risoluzione di questo problema** si può raggiungere con due procedimenti, sostanzialmente equivalenti:

1. **Metodo delle masse** : si imposta una proporzione con le masse molari moltiplicate per i rispettivi coefficienti stechiometrici

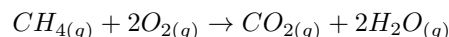
$$3mol \cdot M_{H_2}g/mol : 1mol \cdot M_{N_2}g/mol = m(g)_{H_2} : m(g)_{N_2}$$

2. **Metodo delle moli** : si imposta una proporzione con i coefficienti stechiometrici:

$$3mol_{H_2} : 1mol_{N_2} = n_{mol_{H_2}} : n'_{mol_{N_2}}$$

Dal secondo si può facilmente ricavare il primo, da  $m = n \cdot M$

Esempio pag 48 libro: Data la seguente reazione già bilanciata e che prosegue in modo completo



Calcolare la quantità in g di acqua che si forma bruciando 1kg di  $CH_4$

Troviamo le moli di metano

$$n = m/M = \frac{1000.00g}{16.039g/mol} = 62.348mol$$

$$n_{H_2O} = 2 \cdot 62.348 = 124.696mol$$

$$m_{H_2O} = n_{H_2O} \cdot M_{H_2O} = 2246.398g.$$

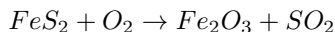
### 1.7.2 Il rendimento

Non lo vediamo

### 1.7.3 Il reagente limitante

Spesso avviene che in una reazione chimica un reagente sia presente in quantità inferiore a quella richiesta in base ai rapporti stechiometrici dati dall'equazione chimica. Tale reagente viene chiamato **REAGENTE LIMITANTE** poichè limita la quantità di prodotto che si può formare. Quando tutto il reagente limitante ha reagito, non si formano più prodotti, anche se sono ancora presenti quantità di altri reagenti che ovviamente rimarranno non reagite.

Esercizio pagina 50: Determinare il reagente limitante ed il volume in litri di  $SO_2$  che si libera facendo reagire 850g di pirite  $FeS_{2(s)}$  con 300 litri di  $O_2$  considerando entrambi i volumi alla temperatura di 25 gradi e alla pressione di 1 atmosfera secondo la reazione seguente da bilanciare con il metodo empirico e che procede in modo completo



$4FeS_2 + 11O_2 \rightarrow 2Fe_2O_3 + 8SO_2$  Si possono anche tenere le frazioni, non cambia il significato

Troviamo le moli

$$n_{FeS_2} = \frac{850g}{119.97g/mol} = 7.085mol$$

$$pv = nRT \quad R=0.08206 \frac{l \cdot atm}{mol \cdot K}$$

$$1atm \cdot 300l = n_{O_2} \cdot 0.08206 \frac{l \cdot atm}{mol \cdot K} \cdot (273.15 + 25)K$$

$$n_{O_2} = 12.262mol$$

Ma se

$$4mol_{FeS_2} : 11mol_{O_2} = 7.085mol_{FeS_2} : n'mol_{O_2}$$

$$n'mol_{O_2} = 19.48mol$$

Ma io ho meno moli, ergo l'ossigeno è il reagente limitante, brucia una parte della pirite ed il resto rimane non reagita

$$11mol_{O_2} : 8mol_{SO_2} = 12.262 : n^*$$

$$n^*_{mol_{SO_2}} = \frac{8 \cdot 12.262}{11} = 8.918mol$$

$$v^*_{SO_2} = \frac{n^*_{SO_2} RT}{p} = 128.19l$$

## 1.8 Le soluzioni liquide

Soluzioni è un termine generico con cui si suole designare un sistema a più componenti fisicamente omogeneo, cioè una qualsiasi **fase** in cui sono presenti più specie chimiche. In una soluzione liquida si indica come *solvente* il componente che ha lo stesso stato di aggregazione di questa, e come *soluto* l'altro (o gli altri) componenti.

Nel caso la soluzione si presenti nello stesso stato di aggregazione di due o più componenti, si indica con *solvente* quello presente in maggiore quantità.

La composizione di una soluzione viene definita precisando le quantità relative dei componenti

1. *Frazione ponderale*  $w_i$  del componente i-esimo definita come il rapporto tra la massa del componente e la massa totale
2. *Frazione ponderale percentuale* (Nota come percenuale in massa) Se il rapporto che definisce la frazione ponderale viene moltiplicato per 100 si ottiene la **frazione ponderale percentuale**:  
 $w'_i = 100w_i = 100 \frac{m_i}{m_{sol}}$
3. *Frazione molare* Se  $n_1, n_2, \dots, n_i$  rappresentano il numero di moli dei diversi componenti della soluzione, si definisce frazione molare del componente i-esimo  $\mathcal{X}_i$  il rapporto tra il numero di moli  $n_i$  ed il numero di moli  $n_{tot}$  totali nella soluzione. Cioè  $\mathcal{X}_i = \frac{n_i}{n_{tot}}$