

# Calcoli applicati alla chimica analitica

- Unità di misura del Sistema Internazionale
- Soluzioni e loro concentrazioni
- Stechiometria chimica

# Unità di misura SI

Il **Sistema Internazionale delle Unità** (SI) è un sistema standardizzato per esprimere le **misure**, che sono il risultato del processo di **misurazione**.

Il sistema SI è basato su 7 **unità fondamentali**.

Unità di base SI		
Quantità fisica	Nome dell'unità	Abbreviazione
Massa	chilogrammo	kg
Lunghezza	metro	m
Tempo	secondo	s
Temperatura	kelvin	K
Quantità di sostanza	mole	mol
Corrente elettrica	ampere	A
Intensità luminosa	candela	cd

Le altre unità SI sono **derivate** da queste. Ad esempio, il **litro** è un'unità di misura SI derivata dal metro, e definita come  $10^{-3} \text{ m}^3$ .

# Unità di misura SI

Prefissi per le unità SI		
Prefisso	Abbreviazione	Moltiplicatore
tera-	T	$10^{12}$
giga-	G	$10^9$
mega-	M	$10^6$
chilo-	k	$10^3$
etto-	h	$10^2$
deca-	da	$10^1$
deci-	d	$10^{-1}$
centi-	c	$10^{-2}$
milli-	m	$10^{-3}$
micro-	$\mu$	$10^{-6}$
nano-	n	$10^{-9}$
pico-	p	$10^{-12}$
femto-	f	$10^{-15}$
atto-	a	$10^{-18}$

yotta-	Y	$10^{24}$
zetta-	Z	$10^{21}$
esa-	E	$10^{18}$
peta-	P	$10^{15}$
tera-	T	$10^{12}$
giga-	G	$10^9$
mega-	M	$10^6$
kilo-	k	$10^3$
deci-	d	$10^{-1}$
centi-	c	$10^{-2}$
milli-	m	$10^{-3}$
micro	$\mu$	$10^{-6}$
nano-	n	$10^{-9}$
pico-	p	$10^{-12}$
femto-	f	$10^{-15}$
atto-	a	$10^{-18}$
zepto-	z	$10^{-21}$
yocto-	y	$10^{-24}$

# Massa e peso

- La **massa** è una misura invariabile della quantità di materia in un oggetto.

L'unità SI della massa, il chilogrammo, è definita come la massa di uno standard di Pt-Ir conservato presso l'Istituto internazionale dei pesi e delle misure di Sèvres (Francia).

- Il **peso** è la forza di attrazione gravitazionale tra un oggetto e la materia vicina (normalmente la Terra).

- Massa e peso sono correlati dalla relazione

$$p = mg$$

dove  $g$  è l'accelerazione di gravità.

# Massa e peso

- I risultati di un'analisi chimica devono sempre essere espressi in *massa*, per essere indipendenti dalla località.
- Il processo di **pesata** viene eseguito per *confronto* tra un oggetto di massa nota e l'oggetto di cui determinare la massa.
- Poiché  $g$  è costante per i due oggetti, dai pesi misurati con la bilancia è possibile ricavare la massa dell'oggetto incognito.

# Quantità di sostanza

- La **mole** (mol) è l'unità SI usata per esprimere la quantità di una specie chimica.
- Una mole è definita come la quantità di sostanza che contiene tante unità quanti sono gli atomi di 0,012 kg  $^{12}\text{C}$ .
- Se la sostanza è una specie chimica, le unità a cui ci si riferisce sono gli atomi o le molecole.

# Mole e numero di Avogadro

- In 1 mol di una specie chimica vi sono approssimativamente  $6,022_{141\ 99} \times 10^{23}$  molecole.
- Il numero di molecole in 1 mol è detto **numero di Avogadro**.
- In chimica analitica, per comodità, si usa spesso un sottomultiplo della mole, la **millimole** (mmol) pari a  $10^{-3}$  mol.

# Massa molare

- La **massa molare** ( $\mathcal{M}$ ) di una sostanza è la massa (espressa in g) di 1 mol di quella sostanza. La massa molare si esprime quindi in g oppure in g/mol.
- Le masse molari dei composti si calcolano sommando le masse molari di tutti gli atomi che ne costituiscono la formula chimica.

mole = g / peso molecolare (peso atomico)

# Massa molare

- La **massa molare relativa** ( $\mathcal{M}_r$ ) di una sostanza è il rapporto tra la massa di 1 mol di quella sostanza e 1/12 della massa di 1 mol di  $^{12}\text{C}$ .
- La massa molare relativa è quindi un numero adimensionale (non ha unità di misura).
- Poiché 1/12 della massa di 1 mol di  $^{12}\text{C}$  è, per definizione, uguale a 1 g, la massa molare e la massa molare relativa sono numericamente uguali.

# Concentrazione delle soluzioni

La **concentrazione molare** ( $c_x$ ) di una soluzione della specie chimica X è il numero di moli di quella specie contenute in un litro di soluzione.

L'unità di misura della concentrazione molare è la molarità (M), che ha le dimensioni di mol L<sup>-1</sup>.

$$c_x = \frac{\text{numero di moli di soluto}}{\text{numero di litri di soluzione}} = \frac{\text{n. mmol di soluto}}{\text{n. mL di soluzione}}$$

# Concentrazione delle soluzioni

La **concentrazione molare analitica** (o *molarità analitica*) di una sostanza in soluzione indica il numero *totale* di moli di un soluto (a prescindere dal suo stato chimico) in un litro di soluzione.

La molarità analitica è utile per esprimere le modalità di preparazione di una soluzione, in quanto ad es. permette di calcolare la *pesata corretta* da effettuare per prelevare la quantità desiderata di una specie solida prima di aggiungerla alla soluzione.

La concentrazione molare analitica è anche detta concentrazione formale (F)

# Concentrazione delle soluzioni

La **concentrazione molare di equilibrio** è la concentrazione molare di una specie in una soluzione all'equilibrio chimico.

Per calcolare la molarità di equilibrio di una specie in soluzione, nota la molarità analitica della sostanza da cui ha origine la specie, è necessario conoscerne le *proprietà chimiche in soluzione*.

Le concentrazioni molari di equilibrio sono rappresentate ponendo tra parentesi quadre la formula chimica della specie:  $[X]$ .

# Concentrazione delle soluzioni

Ad esempio, se prepariamo una soluzione di **acido solforico** ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) disciogliendo 1,00 mol di  $\text{H}_2\text{SO}_4$  per litro di soluzione:

La **concentrazione analitica** di  $\text{H}_2\text{SO}_4$  sarà pari a 1,00 mol/L, cioè 1,00 M (o 1,00 F).

Poiché la specie  $\text{H}_2\text{SO}_4$  in soluzione acquosa si dissocia completamente in ioni  $\text{HSO}_4^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$  e  $\text{H}^+$ , note le costanti di dissociazione si può calcolare che:

$$[\text{H}_2\text{SO}_4] = 0,00 \text{ M}$$

$$[\text{HSO}_4^-] = 0,99 \text{ M}$$

$$[\text{SO}_4^{2-}] = 0,01 \text{ M}$$

$$[\text{H}^+] = 1,01 \text{ M}$$

## Esempi

- ❖ 20 mL di HCl 0,02 M  $\Leftrightarrow$  0,4 mmol HCl
- ❖ 0,4 mmol HCl  $\Leftrightarrow$  400  $\mu$ mol HCl
- ❖ 30 mL di NaOH 0,05 M  $\Leftrightarrow$   $1,5 \cdot 10^{-3}$  mol NaOH
- ❖ 0,2345 g di NaCl in 25 mL  $\Leftrightarrow$   $0,2345 / (0,025 \cdot 58,443)$  (g.mol/g.L)  
= 0,160 M
- ❖ 0,0040 g/kg  $\Leftrightarrow$  4,0 ppm  $\Leftrightarrow$  4000 ppb
- ❖ 0,5 mL HA (P = 98%; d = 1,25 g/mL;  $M = 66$ ) in 100 mL  $\Leftrightarrow$   
 $(0,5 \cdot 1,25 \cdot 0,98) / (66 \cdot 0,1)$  (mL.g/mL)/(g/mol.l) = 0,093 mol/L
- ❖  $C_{\text{analitica}} = 0,045$  M  $\Leftrightarrow$  0,030 M HAc + 0,015 M NaAc

# Concentrazione delle soluzioni

## Definizioni di **concentrazione percentuale**

$$\% \text{ in peso (} w/w \text{) o massa (} m/m \text{)} = \frac{\text{peso (o massa) del soluto}}{\text{peso (o massa) della soluzione}} \times 100\%$$

$$\% \text{ in volume (} v/v \text{)} = \frac{\text{volume del soluto}}{\text{volume della soluzione}} \times 100\%$$

$$\% \text{ in peso/volume (} w/v \text{)} = \frac{\text{peso del soluto in g}}{\text{volume della soluzione in mL}} \times 100\%$$

# Concentrazione delle soluzioni

Uso delle concentrazioni percentuali

La concentrazione in %  $w/w$  è spesso usata per definire la concentrazione di reagenti commerciali, perché è indipendente dalla temperatura.

Con le %  $v/v$  e  $w/v$  si specifica la preparazione di soluzioni rispettivamente per aggiunta di soluti liquidi o solidi.

# Concentrazione delle soluzioni

Parti per milione (ppm) e parti per miliardo (ppb)

$$c_{\text{ppm}} = \frac{\text{massa del soluto}}{\text{massa della soluzione}} \times 10^6 \text{ ppm}$$

$$c_{\text{ppb}} = \frac{\text{massa del soluto}}{\text{massa della soluzione}} \times 10^9 \text{ ppb}$$

(ppb = **p**arts **p**er **b**illion)

ppm  $\Leftrightarrow$  mg/kg

ppb  $\Leftrightarrow$   $\mu$ g/kg  $\Leftrightarrow$  ng/g

ppm  $\Leftrightarrow$  mg/L

ppb  $\Leftrightarrow$   $\mu$ g/L

# Concentrazione delle soluzioni

## Rapporto di volume soluzione:diluyente

La concentrazione di una soluzione si può specificare a partire da quella di una soluzione più concentrata, indicando **quanti volumi di solvente aggiungere alla soluzione concentrata**. Ad es. 1:4 indica 1 volume di soluzione concentrata e 4 volumi di solvente.

Questa notazione può essere ambigua perché a volte per 1:4 si intende 1 volume di soluzione concentrata in 3 volumi di solvente (4 volumi in totale)

# Concentrazione delle soluzioni

Una notazione analoga al rapporto di volume è quella in **rapporti percentuali** (ad es. 1:4 → 20%:80%) che ha il pregio di essere meno ambigua.

## Funzioni *p*

La funzione *p* esprime una concentrazione come il **logaritmo in base 10 cambiato di segno**. La notazione *p* ha il vantaggio di esprimere le concentrazioni come piccoli numeri positivi.

$$pX = -\log[X]$$

## FUNZIONI p

In notazione scientifica, l'operatore p indica il logaritmo negativo del valore della grandezza in oggetto.

$$\diamond K_{\text{eq}} = 5 \cdot 10^{-16} \Leftrightarrow \text{p}K_{\text{eq}} = -\log(K_{\text{eq}}) = 15,30$$

$$\diamond [\text{H}_3\text{O}^+] = 2 \cdot 10^{-4} \text{ M} \Leftrightarrow \text{pH} = -\log[\text{H}_3\text{O}^+] = 3,70$$

$$\diamond [\text{Cl}^-] = 7 \cdot 10^{-11} \text{ M} \Leftrightarrow \text{pCl} = 10,15$$

$$\diamond S (\text{solubilità}) = 2,5 \cdot 10^{-8} \text{ mg/kg} \Leftrightarrow \text{pS} = 7,60$$

# Densità e gravità specifica

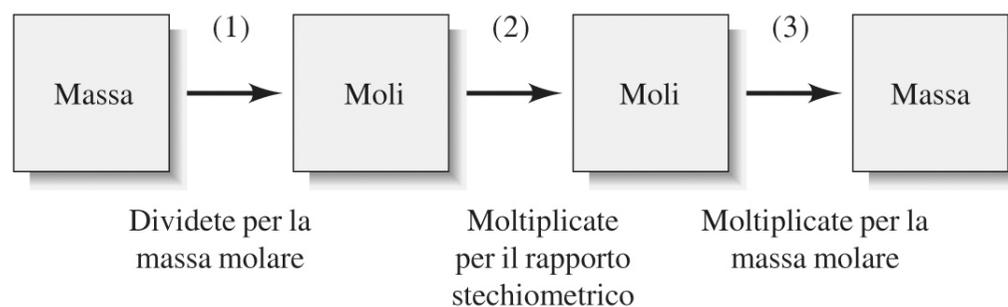
La **densità** di una sostanza è la sua massa per unità di volume, e si esprime solitamente in kg/L o g/mL. Espressa in queste unità la densità delle soluzioni acquose diluite è circa uguale a 1 (l'unità di misura SI sarebbe  $\text{kg/m}^3$ ).

La **gravità specifica** è il rapporto tra la massa di una sostanza e la massa di un ugual volume di acqua. E' un numero adimensionale.

# Stechiometria chimica

La **stechiometria** è la relazione quantitativa tra specie chimiche che reagiscono tra di loro.

Figura 4-2 Diagramma di flusso per l'esecuzione dei calcoli stechiometrici. (1) Quando si ha la massa di un reagente o di un prodotto, essa deve essere prima convertita in numero di moli, usando la massa molare. (2) Il rapporto stechiometrico fornito dall'equazione chimica viene quindi usato per trovare il numero di moli dell'altro reagente che si combina con la sostanza originaria o il numero di moli di prodotto che si forma. (3) Infine, la massa dell'altro reagente o del prodotto viene calcolata dalla sua massa molare.



## PROBLEMI DI DILUIZIONE

$$V_1M_1 = V_2M_2$$

### DIAGRAMMA DI FLUSSO



- (1) Dividere per il peso molecolare
- (2) Moltiplicare per il rapporto stechiometrico
- (3) Moltiplicare per il peso molecolare