

RESA DI UNA REAZIONE CHIMICA

Claudio Tavagnacco 03.02.2005

In molte operazioni chimiche è **inevitabile** ottenere una quantità di prodotti inferiore a quella teorica.

MOTIVI

1) espressamente di natura chimica.

a) equilibrio non totalmente spostato a destra; (**principio di Le Chatelier**)

b) alla reazione principale sono accoppiate reazioni parallele o consecutive che forniscono prodotti diversi da quello voluto.

A + B -->	C	principale
A + B -->	D	secondaria parallela
C -->	F	consecutiva
A + C -->	G	consecutiva father-son

2) legati alle operazioni pratiche che si eseguono.

si perde **sempre** un po' di prodotto nelle manipolazioni:

- non si recupera totalmente un prodotto dalle pareti dei recipienti o dagli imbuti;
- ricristallizzando un prodotto se ne perde una parte perché esso è un po' solubile anche nel solvente freddo;
- filtrando una soluzione su filtro a pieghe, un po' di soluto precipita nei pori della carta da filtro e viene perso, oppure il soluto passa oltre la carta mentre si filtra su imbuto di Buchner;
- del soluto resta assorbito sui boiling chips;
- si spande del soluto pesandolo;...

È necessario, valutare la **resa %** di una sintesi chimica e cioè determinare

$(\text{quantità reale} / \text{quantità teorica}) * 100$

INCREMENTO DELLA RESA

Motivo 1)

a) **Uso dei catalizzatori** per accelerare alcune reazioni a scapito di altre indesiderate

b) **Se equilibrio poco spostato a dx**

- aggiungere un eccesso di uno o più reattivi
- sottrarre i prodotti via via che si formano.

c) **Se reazione endotermica**

- aumentare la temperatura a cui si opera.

d) **Se reazione esotermica**

- abbassare la temperatura, stando attenti a non rallentarla troppo: usare catalizzatori

e) **Se sono coinvolti dei gas**

si può operare opportunamente sulla pressione del sistema (**principio di Le Chatelier**)

Motivo 2

Operare col massimo dell'attenzione per perdere la minima quantità di prodotto.

Cambiare metodologia (solventi, T, P, concentrazioni, apparecchiature di forma e volume adeguati,...)

Valutare il rapporto qualità / quantità



Calcolo della resa

È necessario:

- 1) conoscere esattamente la stechiometria della reazione e verificare se uno dei reattivi risulta in difetto: tale reattivo è detto **fattore o reattivo limitante**;
- 2) calcolare quale dovrebbe essere la quantità di prodotto ottenuto, se tutto il **reattivo limitante** reagisse e non ci fossero perdite di sostanze nel corso delle operazioni;
- 3) calcolare % della resa come

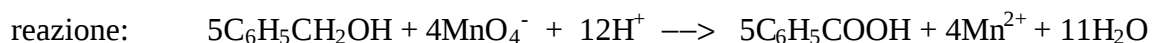
(quantità prodotto ottenuto / quantità teorica) * 100.

Esempio

5.00 g di KMnO_4 vengono fatti reagire a $T = 100\text{ }^\circ\text{C}$ con 2.00 mL di alcol benzilico in presenza di 10.0 mL di H_2SO_4 concentrato con purezza del 96% w/w e densità 1840 g/mL.

Usando i dati in tabella e sapendo che si ottengono 0.25 g di acido benzoico (prodotto principale), determinare la resa % della reazione rispetto al reattivo limitante.

composto	PM	densità g/mL
alcol benzilico	108.13	1.05
H_2SO_4	98.078	1.84
KMnO_4	158.04	---
acido benzoico	122.12	---



(correggere il 9 con 11 nel testo pag. 220 ediz. 2000)

$n^\circ \text{ moli (solido)} = g/\text{PM}$

$n^\circ \text{ moli (soluzioni)} = M \cdot V$

$\text{densità} = \text{massa}/V$

È necessario appurare chi sia il reattivo limitante: per questo si deve calcolare il numero di moli di ciascun reattivo introdotte nell'ambiente di reazione.

KMnO_4

$n^\circ \text{ moli } \text{KMnO}_4 = 5 \text{ g} / 158.04 = 0.0316$

alcol benzilico

$\text{massa} = 1.05 \text{ g/mL} \times 2 \text{ mL} = 2.1 \text{ g} \quad n^\circ \text{ moli} = 2.1 \text{ g} / 108.13 = 0.0194$

H_2SO_4

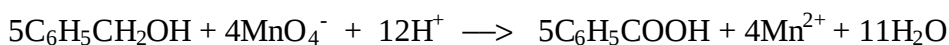
$\text{massa di 1 L} \Rightarrow 1.84 \text{ g/mL} \times 1000 \text{ mL/L} = 1840 \text{ g}$

$\text{di cui acido puro } 1840 \text{ g} \times 96/100 = 1766.4 \text{ g}$

$n^\circ \text{ moli} = 1766.4 \text{ g} / 98.078 = 18.01 \text{ moli/L} = M$

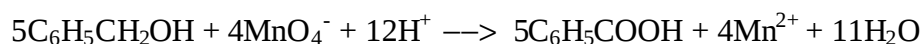
In 10 mL di soluzione sono contenute: $18.01 : 1000 \text{ mL} = X : 10 \text{ mL}$
 $X = 0.18$ moli di H_2SO_4 ovvero sono presenti 0.36 moli di H^+ .

La reazione globale è:



	n° moli presenti	coeff. stech.	n° moli / coeff. stech.	normalizzazione
H^+	0.36	12	0.03	7.7
KMnO_4	0.0316	4	0.0079	2
a.benzilico	0.0194	5	0.0039	1

Dal rapporto n° moli/coeff.steichiometrico si evince che **a.benzilico è il reattivo limitante** mentre H_2SO_4 e KMnO_4 sono in eccesso.



iniziale 0.0194 0.0316 0.36

Moli di MnO_4^- che reagiscono = $4/5$ (moli a.benzilico) = 0.0155: ne restano 0.016

Moli di H^+ che reagiscono = $12/5$ (moli a.benzilico) = 0.0466: ne restano 0.313

n° moli di acido benzoico teoricamente prodotte = n° moli di alcol benzilico iniziale

= 0.0194 pari a 2.37 g.

La resa % risulta, dunque: $0.25 \text{ g} / 2.37 \text{ g} \times 100 = 10 \%$.

Se ricristallizzando il prodotto ne rimangono 0.120 g, qual è la resa globale della sintesi ?

$0.1 / 2.37 \times 100 = 5 \%$.