

Esercizio 3: Acido formico

3.1) Volume di acido formico nell'iniezione: $3 \cdot 10^{-3}$ mL

Sapendo che questi sono l'80% di quelli totali, $V_{\text{HCOOH tot}} = 3.75 \cdot 10^{-3}$ mL

3.2) $1000 \text{ mL} / 3 \cdot 10^{-3} \text{ mL} = 3.33 \cdot 10^5$ formiche

3.3) Quantità rilasciata = $m = V \cdot d = 3 \cdot 10^{-3} \text{ mL} \cdot 1.2 \text{ g/mL} = 3.6 \cdot 10^{-3} \text{ g}$

$n = m/\text{MM} = 3.6 \cdot 10^{-3} \text{ g} / 46 \text{ g/mol} = 7.82 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$

3.4) $n_{\text{HCOOH}} = n_{\text{NaHCO}_3} = 7.82 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$, $m = n \cdot \text{MM} = 7.82 \cdot 10^{-5} \text{ mol} \cdot 84 \text{ g/mol} = 6.57 \text{ mg}$

3.5) $C = n/V = 7.82 \cdot 10^{-5} \text{ mol} / 0,001 =$

3.6) $[\text{HCOOH}] + [\text{HCOO}^-] = 7.82 \cdot 10^{-2} \text{ M}$; $[\text{HCOO}^-] = [\text{H}^+] = 3.71 \cdot 10^{-3} \text{ M}$; $[\text{HCOOH}] = 0.07449 \text{ M}$

3.7) $\text{pH} = \text{pKa} + \log [A^-] / [HA]$, $\text{pKa} = 2.43 + 1.3 = 3.78$

Esercizio 4: Decomposizione termica del solfato di rame

4.1) A = $\text{CuSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (14.5% di $\text{MM}(\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}) = 36 \text{ g/mol}$ persi, 2 di H_2O persi)

B = $\text{CuSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (29% di $\text{MM}(\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}) = 72 \text{ g/mol}$ persi, 4 di H_2O persi)

C = CuSO_4 (36.25 % di $\text{MM}(\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}) = 90 \text{ g/mol}$ persi, 5 moli di H_2O persi)

4.2) $\text{MM}_E = 32 \% \text{ di } \text{MM}(\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}) = 79.5 \text{ g/mol}$, E = CuO

Possiamo notare che passando da E ad F la perdita di massa del campione equivale a 8 g/mol, ovvero la metà della massa molare di un ossigeno. Usando 2 moli di E allora F avrà complessivamente 1 ossigeno in meno delle 2 molecole di F. Di conseguenza la reazione sarà:



4.3) Visto che in questo passaggio si perdono 80 g/mol (Da C, ovvero 159.5 g/mol, si passa a D, ovvero 119.5 g/mol, ma le moli sono 2) possiamo ipotizzare che si perde SO_3 (MM = 80 g/mol):

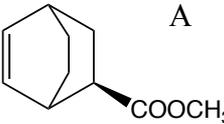
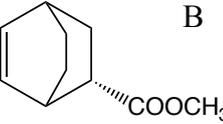
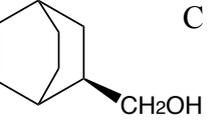
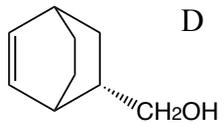
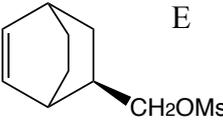
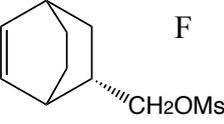
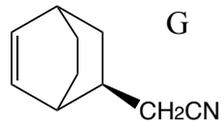
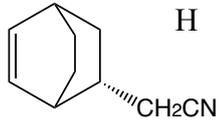
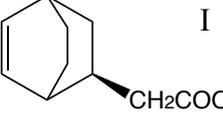
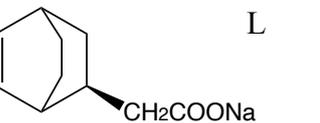
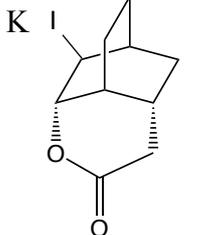
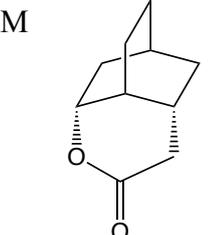
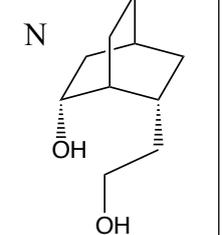
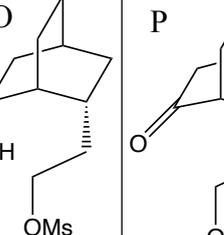
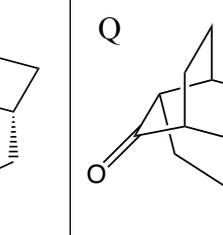
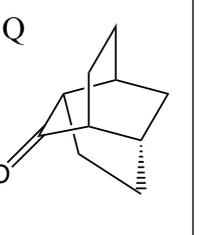
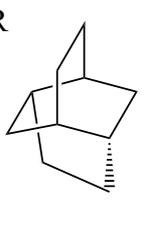


Esercizio 5: Spettro NMR di Nanoputians

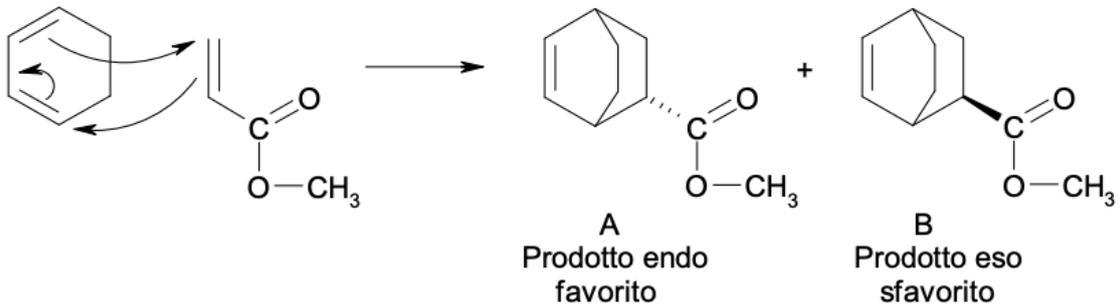
Segnale	Idrogeno sul carbonio
A	7
B	19 e 23
C	11 e 9
D	36
E	17
F	39 e 37
G	39 e 37
H	3 e 14
I	15 e 12
J	40
K	27,28,29 e 33,34,35
L	1 e 16
M	41

Esercizio 6: Sintesi organica

6.1)

6.2)



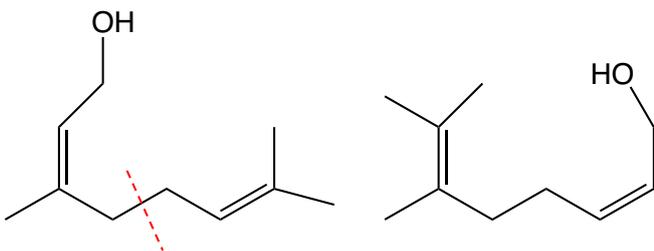
Esercizio 7: Determinazione della sequenza di un peptide

- Scissione con bromuro di cianogeno CNBr (scissione su Met)
- Scissione con chimotripsina (scissione su Phe, Tyr, Trp)
- Scissione con tripsina (scissione su Arg, Lys)

Sequenza ottenuta: $\text{NH}_2\text{-Leu-Met-Val-Tyr-Met-Lys-Cys-Trp-COOH}$

Esercizio 8: Terpeni

8.1) $\text{A} = \text{C}_{10}\text{H}_{18}\text{O}$. Dall'analisi delle informazioni fornite possiamo giungere a 2 possibili molecole:

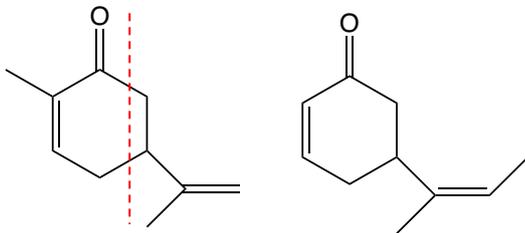


Tuttavia la 2° molecola è da escludere perché non è un terpene, mentre la prima lo è perché è come se fosse formata da 2 unità isopreniche. (mostrato con la linea rosse)

8.2) D = C₁₀H₁₄O

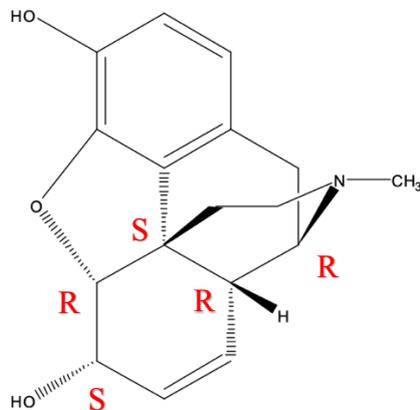
Dalle insaturazioni (4) possiamo capire che siamo in presenza di un ciclo.

L'assorbimento a 1675 cm⁻¹ che dopo l'idrogenazione diventa 1715 cm⁻¹ conferma la presenza di un chetone alfa-beta insaturo. Dal prodotto ottenuto attraverso la scissione del pentadiolo possiamo determinare 2 possibili molecole:



Tuttavia la 2° molecola è da escludere perché non è un terpene, mentre la prima lo è perché è come se fosse formata da 2 unità isopreniche (mostrato con le linea rossa)

Esercizio 9: Stereochimica



Esercizio 10: Velocità e meccanismo di reazione

10.1 Nella legge cinetica compaiono tutti i reagenti prima dello stadio lento, quindi nel nostro caso essendo che in entrambi i meccanismi il secondo stadio è lo stadio lento nella legge cinetica compariranno sia H₂ che I₂

Avremo quindi che:

1° caso: $V = d[\text{HI}] / dt = k_1 [\text{H}_2] [\text{I}]^2$ e che $[\text{I}]^2 = K * [\text{I}_2]$, quindi $V = k_1 K [\text{H}_2] [\text{I}_2]$

1° caso: $V = d[\text{HI}] / dt = k_2 [\text{H}_2] [(\text{I}_2)_d]$ e che $[(\text{I}_2)_d] = K' * [\text{I}_2]$, quindi $V = k_2 K' [\text{H}_2] [\text{I}_2]$

10.2 Utilizziamo l'equazione di Arrhenius per determinare l'energia di attivazione:

$$E_{\text{dir}} = 170185 \text{ J} = 170.2 \text{ kJ}$$

10.3 Il legame H-H è molto più forte del legame I-I

10.4 $E_{\text{inv}} = E_{\text{dir}} - \Delta U = 170.2 \text{ kJ} + 8.2 \text{ kJ} = 178.4 \text{ kJ}$

10.5 Applicando l'approssimazione dello stato stazionario si ottiene:

$$[\text{IAr}] = [\text{I}] [\text{Ar}]^2 k_1 / (k_2 [\text{Ar}] + k_3 [\text{I}]), \text{ dove } k_1/k_2 = K''$$

$$V = d[\text{I}_2]/dt = k_3 [\text{IAr}] [\text{I}] = k_3 [\text{I}]^2 [\text{Ar}]^2 k_1 / (k_2 [\text{Ar}] + k_3 [\text{I}])$$

10.6 L'energia di attivazione è definita come la differenza tra l'energia dello stato di transizione e l'energia dei reagenti. Lo stato di transizione (Ar----I----I) risulta più stabile dei singoli reagenti (I, I e Ar) e di conseguenza l'energia di attivazione di questa reazione sarà negativa.