

# Química Enginyeria de l'Automoció: Exercicis

Jordi Villà i Freixa (jordi.villa@uvic.cat)

Curs 2024-2025

## Índex

1	Els gasos i el seu comportament	1
2	Combustió	17
3	Piles i bateries	25
4	Forces intermoleculars	27
5	Controlant la temperatura	30
6	Química de materials	35
7	Llum i química	35

## 1 Els gasos i el seu comportament

### Exercici 1

Un conductor comprova la pressió dels pneumàtics pel matí aviat, quan la temperatura és de 15°C, i és de  $1.3 \times 10^5$  Pa. Al migdia la temperatura és 15 graus més elevada. Quina és la pressió dels pneumàtics ara?.

Les dades són:

- Pressió inicial:  $P_1 = 1.3 \times 10^5$  Pa

- Temperatura inicial:  $T_1 = 15\text{ }^{\circ}\text{C} = 288\text{ K}$
- Temperatura final:  $T_2 = 30\text{ }^{\circ}\text{C} = 303\text{ K}$
- Suposem que el volum dels pneumàtics es manté constant.

Com que el volum no canvia, podem utilitzar la llei de Gay-Lussac per determinar la pressió final:

$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$$

Aïllant  $P_2$ :

$$P_2 = P_1 \times \frac{T_2}{T_1} = (1.3 \times 10^5 \text{ Pa}) \times \frac{303 \text{ K}}{288 \text{ K}} = (1.3 \times 10^5 \text{ Pa}) \times 1.0521 = 1.37 \times 10^5 \text{ Pa}$$

### Exercici 2

Dalt de l'Everest, la pressió atmosfèrica és de 0,33 atm i la temperatura de 50 sota zero. Quina és la densitat de l'aire si en CN és de  $1.29 \text{ g dm}^{-3}$ ?

Sabem que la densitat de l'aire en condicions normals (CN) és:

$$\rho_{\text{CN}} = 1.29 \text{ g dm}^{-3}$$

Les condicions a dalt de l'Everest són:

- Pressió atmosfèrica:  $P = 0.33 \text{ atm}$
- Temperatura:  $T = -50\text{ }^{\circ}\text{C} = 223 \text{ K}$
- Condicions normals (CN):
  - Pressió normal:  $P_{\text{CN}} = 1 \text{ atm}$
  - Temperatura normal:  $T_{\text{CN}} = 273 \text{ K}$

Sabem que la densitat d'un gas està relacionada amb la pressió i la temperatura segons l'expressió:

$$\frac{\rho}{\rho_{\text{CN}}} = \frac{P}{P_{\text{CN}}} \times \frac{T_{\text{CN}}}{T}$$

Aïllant  $\rho$ :

$$\rho = \rho_{\text{CN}} \times \frac{P}{P_{\text{CN}}} \times \frac{T_{\text{CN}}}{T}$$

Substituïm els valors donats:

$$\rho = (1.29 \text{ g dm}^{-3}) \times \frac{0.33 \text{ atm}}{1 \text{ atm}} \times \frac{273 \text{ K}}{223 \text{ K}} = 0.52 \text{ g dm}^{-3}$$

### Exercici 3

Calcular el volum molar d'un gas ideal a condicions normals (1 atm i 0°C).

Les condicions normals (CN) per a un gas ideal són:

- Pressió:  $P = 1 \text{ atm}$
- Temperatura:  $T = 0^\circ\text{C} = 273.15 \text{ K}$
- Constant dels gasos:  $R = 0.0821 \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$

L'equació dels gasos ideals és:

$$PV = nRT$$

Aïllem el volum molar  $V_m$ , considerant  $n = 1 \text{ mol}$ :

$$V_m = \frac{RT}{P}$$

Substituïm les dades:

$$V_m = \frac{(0.0821 \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) \times (273.15 \text{ K})}{1 \text{ atm}} \approx 22.4 \text{ L mol}^{-1}$$

### Exercici 4

Quant gas hi ha en una mostra de volum  $0.5 \text{ dm}^3$ , a  $80^\circ\text{C}$  i  $800 \text{ Torr}$  de pressió?

**Exercici 5**

Pots calcular el volum ocupat per molècula en un gas ideal a CN?. Es troben dues molècules molt freqüentment en un gas a baixa pressió?

**Exercici 6**

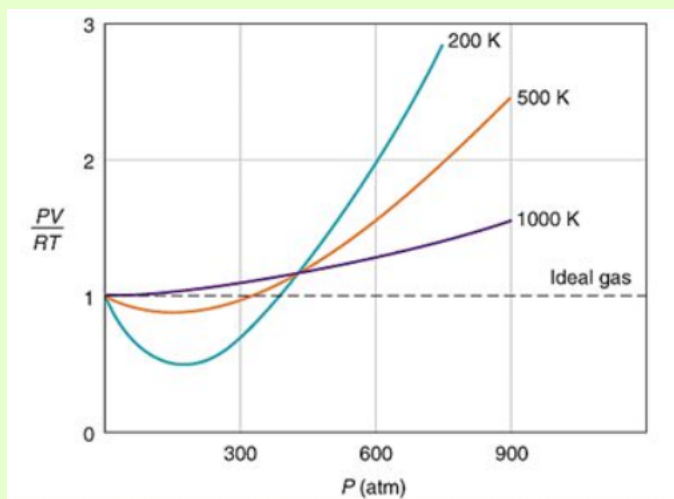
Si a CN la densitat d'un gas ideal és de  $2.62 \text{ g dm}^{-3}$ , quina és la seva massa molar? i quina densitat tindrà a  $300 \text{ K}$  i  $2.4 \times 10^5 \text{ Pa}$   $2.4 \times 10^5 \text{ Pa}$ ?

**Exercici 7**

Quant gas hi ha en una mostra de volum  $0.5 \text{ dm}^3$ , a  $80$  graus Celsius i  $800$  Torr de pressió?.

**Exercici 8**

Què passa segons l'Equació de van der Waals si la pressió es fa propera a zero o bé la temperatura es fa molt gran per a un gas real? La figura mostra el factor de compressibilitat per a un mateix gas a diferents temperatures



**Exercici 9**

Es prepara una mescla de gasos d'hidrogen ( $H_2$ ) i heli ( $He$ ) tal que les molècules de cada gas produeixin el mateix nombre de col·lisions amb la paret per unitat de temps. Determinem quin gas té la concentració més alta.

**Consideració com a gasos ideals**

L'energia cinètica translacional d'un mol de gas és

$$\langle E_c \rangle = N_0 \frac{m \langle c^2 \rangle}{2} = \frac{3}{2} RT$$

on  $M = N_0 m$  és la massa molecular del gas en  $\text{kg mol}^{-1}$ .

Per tant, la velocitat quadràtica mitjana és:

$$c_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{3RT}{M}} \quad (1)$$

Com que la taxa de col·lisions amb la paret és proporcional a  $nv_{\text{rms}}$ , imposem la condició d'igualtat:

$$n_H \cdot \sqrt{\frac{3RT}{M_H}} = n_{He} \cdot \sqrt{\frac{3RT}{M_{He}}} \quad (2)$$

Substituint masses moleculars  $M_H = 2 \text{ g/mol}$  i  $M_{He} = 4 \text{ g/mol}$ :

$$n_H \cdot \sqrt{\frac{1}{2}} = n_{He} \cdot \sqrt{\frac{1}{4}} \quad (3)$$

$$n_H \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = n_{He} \cdot \frac{1}{2} \quad (4)$$

Resolent per  $n_H$ :

$$n_H = \frac{n_{He}}{\sqrt{2}} \quad (5)$$

Per tant, la concentració de  $H_2$  ha de ser més alta que la de  $He$ .

**Consideració com a gasos no ideals**

Si considerem gasos reals, hem de corregir la velocitat mitjana tenint en compte el factor de compressibilitat  $Z$ :

$$v_{\text{rms}} = \sqrt{\frac{3ZRT}{M}} \quad (6)$$

A pressions altes,  $Z_{\text{H}_2} > Z_{\text{He}}$  per les interaccions intermoleculars més fortes d'hidrogen, la qual cosa redueix la seva velocitat i altera la relació de concentracions calculada abans.

Amb l'equació de van der Waals:

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT \quad (7)$$

On  $a_{\text{H}} > a_{\text{He}}$ , la densitat efectiva de  $\text{H}_2$  serà menor que en el cas ideal, cosa que, novament, fa necessari afegir més partícules de  $\text{H}_2$  que d'He per a assolir la mateixa taxa de col·lisions.

### Exercici 10

La composició percentual, en massa, de l'aire sec al nivell del mar és, aproximadament,  $\text{N}_2/\text{O}_2/\text{Ar}=75.5/23.2/1.3$ . Quina és la pressió parcial de cada component quan la pressió total és 1.20 atm?

En 100gr d'aire tindrem 75.5, 23.2 i 1.3 gr de  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$  i Ar, respectivament. Podem calcular la seva fracció molar calculant el número de mols de cadascun i dividint pel total. Després, només cal multiplicar per la pressió corresponent i sabrem la pressió parcial de cada component:

$$n_{\text{N}_2} = 75.5\text{g} \cdot \frac{1\text{mol}}{28.02\text{g}} = 2.69\text{mol}$$

$$n_{\text{O}_2} = 23.2\text{g} \cdot \frac{1\text{mol}}{32.00\text{g}} = 0.725\text{mol}$$

$$n_{\text{Ar}} = 1.3\text{g} \cdot \frac{1\text{mol}}{39.95\text{g}} = 0.033\text{mol}$$

	$\text{N}_2$	$\text{O}_2$	Ar
Fracció molar	0.780	0.210	0.0096
Pressió parcial (nivell del mar)/atm	0.780	0.210	0.0096
Pressió parcial ( $P_T = 1.20\text{atm}$ )/atm	0.936	0.252	0.012

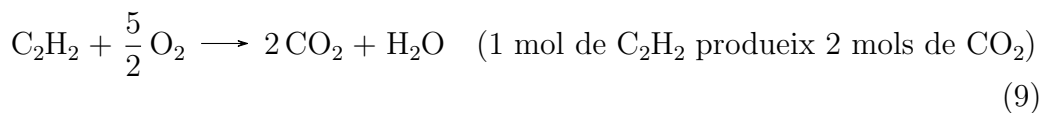
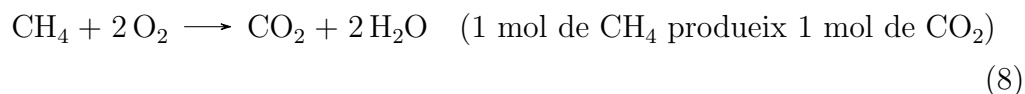
**Exercici 11**

Una barreja de metà  $\text{CH}_4$  i d'acetilè  $\text{C}_2\text{H}_2$  ocupava un cert volum a una pressió total de 63 mmHg. La mostra es va cremar a  $\text{CO}_2$  i  $\text{H}_2\text{O}$ . Se'n va recollir el  $\text{CO}_2$  en el mateix volum inicial i la mateixa temperatura inicial, i es va veure que la seva pressió era de 96 mmHg. Quina era la fracció de metà a la mescla de gasos inicials?

Definim  $x$  com la fracció molar de metà ( $\text{CH}_4$ ) i  $y$  com la fracció molar d'acetilè ( $\text{C}_2\text{H}_2$ ):

$$x + y = 1$$

Les reaccions de combustió són:



Si tenim un nombre total de mols  $n$ , llavors:

- Mols de metà:  $xn$
- Mols d'acetilè:  $yn$

Els mols de  $\text{CO}_2$  formats són:

$$n_{\text{CO}_2} = xn + 2yn$$

Com que el volum i la temperatura es mantenen constants, segons la llei dels gasos ideals la pressió és directament proporcional als mols:

Així:

$$P_{\text{CO}_2} = (xn + 2yn) \cdot \frac{P_{\text{total}}}{n}$$

Substituint els valors donats:

$$96 = (x + 2y) \cdot 63$$

d'on

$$x + 2y = \frac{32}{21}$$

Ara ja podem resoldre el sistema:

$$x + y = 1 \quad (10)$$

$$x + 2y = \frac{32}{21} \quad (11)$$

i obtenim

$$x = 1 - \frac{11}{21} = \frac{10}{21}$$

Per tant, la fracció de metà en la mescla inicial és:

$$\frac{10}{21} \approx 0.476 \quad \text{o} \quad 47.6\%$$

### Exercici 12

Un compost gasós que se sap que conté només carboni, hidrogen i nitrogen es barreja amb el volum d'oxigen exactament necessari per a la seva combustió completa a  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  i  $\text{N}_2$ . La combustió de 9 volums de la mescla gasosa produeix 4 volums de  $\text{CO}_2$ , 6 volums de vapor d'aigua i 2 volums de  $\text{N}_2$ , tots a la mateixa temperatura i pressió.

Quants volums d'oxigen es necessiten per a la combustió? Quina és la fórmula molecular del compost?

El compost gasós conté carboni (C), hidrogen (H) i nitrogen (N). Es barreja amb oxigen suficient per a la combustió completa, donant com a productes diòxid de carboni ( $\text{CO}_2$ ), aigua ( $\text{H}_2\text{O}$ ) i nitrogen molecular ( $\text{N}_2$ ).

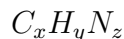
Es donen les següents dades:

- Volum de la mescla gasosa: 9 volums
- Volum de  $\text{CO}_2$  produït: 4 volums
- Volum de  $\text{H}_2\text{O}$  produït: 6 volums



- Volum de  $N_2$  produït: 2 volums

Sigui la fórmula del compost:



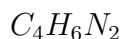
L'equació de combustió és:



Per la conservació dels àtoms:

- Carboni:  $x = a = 4 \Rightarrow x = 4$  - Hidrogen:  $y = 2b = 6 \Rightarrow y = 6$  - Nitrogen:  $z = 2c = 2 \Rightarrow z = 2$

Així, la fórmula del compost és:



Per trobar el volum d'oxigen utilitzat, considerem la combustió completa:



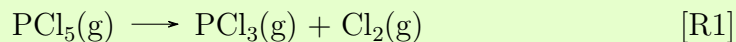
L'oxigen es consumeix en la formació de  $CO_2$  i  $H_2O$ :

$$O_2 \text{ necessari} = \frac{(4 \times 2) + (3 \times 1)}{2} = \frac{8 + 3}{2} = 5.5 \text{ volums}$$

Per tant, el volum d'oxigen necessari és \*\*5.5 volums\*\*.

### Exercici 13

Una mostra de  $PCl_5$ , que pesa 2.69 g, es va col·locar en un flascó d'1.00 L i es va evaporar completament a una temperatura de  $25^\circ C$ . La pressió observada a aquesta temperatura va ser 1.00 atm. Existeix la possibilitat que una part del  $PCl_5$  s'hagi dissociat d'acord amb l'equació:



Quines són les pressions parcials del  $PCl_5$ ,  $PCl_3$  i  $Cl_2$  en aquestes condicions experimentals? (Adaptat de [2])

La solució d'aquest problema implica diverses etapes. Per determinar si s'ha dissociat una part del  $\text{PCl}_5$ , calculem primerament la pressió que s'hauria observat si no s'hagués dissociat el  $\text{PCl}_5$ . Això es pot calcular a partir del nombre de mols de  $\text{PCl}_5$  utilitzats, juntament amb el volum i la temperatura del flascó. Com que el pes molecular del  $\text{PCl}_5$  és  $208 \text{ g mol}^{-1}$ , el nombre de mols de  $\text{PCl}_5$  inicialment presents en el flascó és:

$$n = 2.69 \text{ g} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{208 \text{ g}} = 0.0129 \text{ mol}.$$

La pressió corresponent a aquest nombre de mols seria:

$$P = \frac{nRT}{V} = \frac{(0.0129 \text{ mol})(0.082 \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1})(523.15 \text{ K})}{1.00 \text{ L}} = 0.553 \text{ atm}.$$

Com que la pressió observada és superior a aquesta, s'ha de produir certa dissociació del  $\text{PCl}_5$ . Aplicant la llei de les pressions parcials, podem escriure:

$$P_{\text{PCl}_5} + P_{\text{PCl}_3} + P_{\text{Cl}_2} = P_t = 1.00 \text{ atm}. \quad (12)$$

Ara observem que:

Atès que es produeix un mol de  $\text{PCl}_3$  i un mol de  $\text{Cl}_2$  per cada mol de  $\text{PCl}_5$  dissociat,

$$P_{\text{Cl}_2} = P_{\text{PCl}_3}, \quad P_{\text{PCl}_5} = 0.553 \text{ atm} - P_{\text{Cl}_2}.$$

i podem reescriure l'Equació 12 com:

$$0.553 \text{ atm} - P_{\text{Cl}_2} + P_{\text{Cl}_2} + P_{\text{Cl}_2} = 1.00 \text{ atm}.$$

Resolent, obtenim:

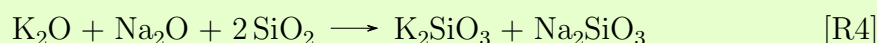
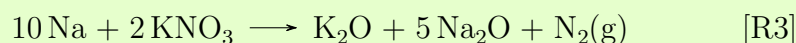
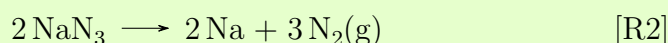
$$P_{\text{Cl}_2} = 0.447 \text{ atm},$$

i

$$P_{\text{PCl}_3} = 0.447 \text{ atm}, \quad P_{\text{PCl}_5} = 0.106 \text{ atm}.$$

**Exercici 14**

Els coixins de seguretat (*airbag*) dels cotxes s'inflen mitjançant una sèrie de reaccions químiques ràpides que produeixen gas en menys de 0.04 s. En les seves primeres versions, la reacció es basava en la descomposició de  $\text{NaN}_3$  (extremadament tòxic), seguida de dues reaccions addicionals per neutralitzar els subproductes perillosos. Les equacions químiques d'aquest procés són:



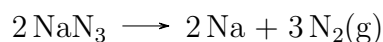
Un coixí de seguretat de conductor té un volum aproximat de 65 L i la pressió final dins del coixí és de 1.35 atm. La temperatura dins del coixí just després de la reacció és 300 °C (573 K). Suposem que s'utilitzen 65 g de  $\text{NaN}_3$ .

1. Quina quantitat de nitrogen gas ( $\text{N}_2$ ) es genera en mols només en la primera reacció?
2. Quin volum ocuparà aquest gas dins del coixí de seguretat segons la llei dels gasos ideals? És suficient aquest volum per inflar completament el coixí de seguretat?
3. Si considerem també la segona reacció, que genera més nitrogen gas, com afectaria això el volum total de gas produït?
4. Quan el gas s'expandeix a l'exterior a través dels orificis del coixí, la seva pressió baixa de 1.35 atm a 1.00 atm. Quin percentatge de reducció de temperatura es produeix durant aquesta expansió?

(Adaptat de [1]).

1. Quantitat de nitrogen gas ( $\text{N}_2$ ) generada a R2:

La reacció de descomposició de  $\text{NaN}_3$  és:



Primer, calculem el nombre de mols de  $\text{NaN}_3$  disponibles:

$$n_{\text{NaN}_3} = \frac{65 \text{ g}}{65.019 \text{ g mol}^{-1}} = 1.00 \text{ mol} \quad (13)$$

De l'estequiometria de la reacció, per cada 2 mol de  $\text{NaN}_3$ , es formen 3 mol de  $\text{N}_2$ :

$$n_{\text{N}_2} = 1.00 \text{ mol} \times \frac{3}{2} = 1.50 \text{ mol} \quad (14)$$

2. Volum ocupat pel gas segons la llei dels gasos ideals:

Utilitzem l'equació dels gasos ideals:

$$V = \frac{nRT}{P} \quad (15)$$

On:

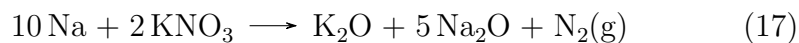
- $n = 1.50 \text{ mol}$
- $R = 0.0821 \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
- $T = 573 \text{ K}$
- $P = 1.35 \text{ atm}$

$$V = \frac{1.50 \text{ mol} \times 0.0821 \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \times 573 \text{ K}}{1.35 \text{ atm}} = 52.3 \text{ L} \quad (16)$$

El volum necessari per inflar el coixí de seguretat és d'uns 65 L. Atès que només la primera reacció genera 52.3 L, sembla que no és suficient. No obstant això, la segona reacció també genera gas  $\text{N}_2$ , augmentant el volum total.

3. Contribució de la segona reacció al volum total de gas:

La reacció R3 genera gas addicional:



Cada 10 mol de Na reacciona per produir 1 mol de  $N_2$ . Sabem que la primera reacció va generar 1.00 mol de Na. Per tant, la segona reacció produeix:

$$n_{N_2,2} = 1.00 \text{ mol} \times \frac{1}{10} = 0.10 \text{ mol} \quad (18)$$

Afegint aquest nitrogen al total:

$$n_{N_2,\text{total}} = 1.50 \text{ mol} + 0.10 \text{ mol} = 1.60 \text{ mol} \quad (19)$$

El nou volum total serà:

$$V_{\text{total}} = \frac{1.60 \text{ mol} \times 0.0821 \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \times 573 \text{ K}}{1.35 \text{ atm}} = 55.7 \text{ L} \quad (20)$$

Aquest volum segueix estant lleugerament per sota del mínim requerit (65 L), però cal recordar que les reaccions són fortament exotèrmiques, la qual cosa elevarà la temperatura i, en conseqüència, augmentarà el volum de gas.

4. Refredament del gas en expandir-se fora del coixí:

Segons la llei de Gay-Lussac:

$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2} \quad (21)$$

On:

- $P_1 = 1.35 \text{ atm}$ ,  $T_1 = 573 \text{ K}$
- $P_2 = 1.00 \text{ atm}$ ,  $T_2$  és la temperatura final

$$T_2 = T_1 \times \frac{P_2}{P_1} = 573 \text{ K} \times \frac{1.00 \text{ atm}}{1.35 \text{ atm}} = 424 \text{ K} \quad (22)$$

El percentatge de reducció de temperatura és:

$$\frac{T_1 - T_2}{T_1} \times 100 = \frac{573 \text{ K} - 424 \text{ K}}{573 \text{ K}} \times 100 = 25.9\% \quad (23)$$

Així, la temperatura del gas disminueix aproximadament un 26 % quan s'expandeix fora del coixí de seguretat, ajudant a evitar cremades als passatgers.

### Exercici 15

Perquè hi ha diferències entre els quocients de capacitat calorífica ( $C_P/C_V$ ) de gasos monoatòmics respecte els diatòmics? (Adona't que si un gas monoatòmic ideal, pel fet d'estar només augmentant la seva energia cinètica translacional té una  $C_V = \frac{3}{2}R$ , es pot entendre que per a cada component (eix) necessita  $\frac{1}{2}R$ )

Els quocients de la capacitat calorífica dels gasos diatòmics són molt menors que 1,67, i hem d'esbrinar la raó d'aquestes desviacions.

Primerament, notem que  $C_V$ , la capacitat calorífica deguda al moviment de translació de les molècules, és igual a  $\frac{3}{2}R$ , i que hi ha tres components independents de velocitat associats amb el moviment de translació. Per tant, podem inferir que cadascun dels tres moviments de translació independents contribueix amb  $\frac{1}{2}R$  a la capacitat calorífica molar. Sobre aquesta base, podríem esperar que, si algun altre tipus de moviment fos accessible a les molècules de gas, hi hauria més contribucions a la capacitat molar i aquestes entrarien en unitats de  $\frac{1}{2}R$ .

A més de tenir els tres moviments de translació, una molècula diatòmica pot rotar al voltant del seu centre de massa segons dos modes mútuament perpendiculars i independents. Assignant  $\frac{1}{2}R$  com la contribució de cadascun d'aquests moviments a la capacitat calorífica, tenim:

$$C_V = \underbrace{\frac{3}{2}R}_{\text{traslació}} + \underbrace{\frac{1}{2}R + \frac{1}{2}R}_{\text{rotació}} = \frac{5}{2}R,$$

$$C_P = C_V + R = \frac{7}{2}R,$$

$$\frac{C_P}{C_V} = \frac{\frac{7}{2}R}{\frac{5}{2}R} = \frac{7}{5} = 1,40.$$

**Exercici 16**

Qui es mou més ràpid, una molècula d'oxigen o una de nitrogen en dues mostres d'aquests gasos a la mateixa temperatura? Pots explicar perquè la pressió és independent de la natura de les molècules?

**Exercici 17**

Calcula la velocitat mitjana de les molècules d'hidrògen a 25°C.

La velocitat mitjana de les molècules d'un gas es pot calcular a partir de la distribució de Maxwell-Boltzmann. Utilitzant la distribució de Maxwell com a distribució de probabilitats, es pot determinar la velocitat mitjana molecular en una mostra de gasos:

$$\langle v \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} v f(v) dv$$

Substituint la funció de distribució de Maxwell-Boltzmann:

$$\langle v \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} v \cdot 4\pi \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} v^2 \exp \left( -\frac{mv^2}{2k_B T} \right) dv$$

Aplicant la següent integral coneguda de les taules d'integrals:

$$\int_0^{\infty} x^{2n+1} e^{-ax^2} dx = \frac{n!}{2a^{n+1}}$$

i agafant  $n = 1$ , s'obté:

$$\langle v \rangle = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{m}{2k_B T} \right)^{-2}$$

Finalment, simplificant,

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} \quad (24)$$

Substituint les dades a l'Eq. 24::

$$R = 8.314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}, \quad T = 298 \text{ K}, \quad M = 2.016 \times 10^{-3} \text{ kg/mol} \quad (25)$$

$$v_{mitjana} = \sqrt{\frac{8 \times 8.314 \times 298}{\pi \times 2.016 \times 10^{-3}}} \quad (26)$$

$$v_{mitjana} \approx 1.57 \times 10^3 \text{ m/s} \quad (27)$$

### Exercici 18

Considerant que no es comporta idealment, calcula la temperatura de 10 mol de monòxid de carboni (CO) sotmesos a una pressió de 5 kPa en un volum de 2 m<sup>3</sup>.

L'equació de Van der Waals per gasos reals és:

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

on  $a$  i  $b$  són constants que depenen de la naturalesa del gas. En el nostre cas:

- Nombre de mols:  $n = 10 \text{ mol}$
- Pressió:  $P = 5 \text{ kPa} \cdot \frac{1 \text{ atm}}{101.325 \text{ kPa}} = 0.0493 \text{ atm}$
- Volum:  $V = 2 \text{ m}^3 = 2000 \text{ L}$
- Constants de Van der Waals per CO:
  - $a = 1.4850 \text{ L}^2 \text{ atm mol}^{-2}$
  - $b = 0.03985 \text{ L mol}^{-1}$
- Constant dels gasos:  $R = 0.0821 \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$

Calculem el terme de correcció de la pressió:

$$P + \frac{an^2}{V^2} = 0.0493 + \frac{(1.4850)(10)^2}{(2000)^2} = 0.0493 \text{ atm}$$

Calculem el volum corregit:

$$V - nb = 2000 - (10 \times 0.03985) = 2000 - 0.3985 = 1999.6 \text{ L}$$



Es pot veure com l'efecte de la no idealitat en aquest gas és molt reduït. Substituïm a l'equació:

$$(0.0493)(1999.6) = (10)(0.0821)T$$

$$T = \frac{98.57}{0.821} = 120 \text{ K}$$

### Exercici 19

Perquè  $\text{CO}_2$  i  $\text{O}_2$  tenen una desviació negativa respecte al comportament del gas ideal a pressions i temperatures moderades, mentre que l'He i el  $\text{H}_2$  presenten una desviació positiva en les mateixes condicions?

Els gasos  $\text{CO}_2$  i  $\text{O}_2$  presenten una desviació negativa respecte al comportament ideal perquè tenen interaccions intermoleculars atractives significatives. Aquestes forces atractives fan que, a pressions i temperatures moderades, les molècules s'acostin més del que prediu l'equació del gas ideal, reduint així el volum efectiu i fent que el factor de compressibilitat  $z = \frac{PV}{RT}$  sigui menor que 1.

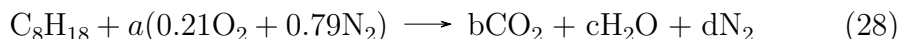
D'altra banda, els gasos com l'heli (He) i l'hidrogen ( $\text{H}_2$ ) presenten una desviació positiva perquè tenen interaccions intermoleculars molt febles i, a mesura que augmenta la pressió, dominen els efectes de repulsió a causa del volum finit de les molècules. Això fa que el gas ocupi un volum lleugerament superior al que prediu el model ideal, fent que  $z > 1$  en aquestes condicions.

## 2 Combustió

### Exercici 20

Determina la reacció de combustió de l'octà en presència d'aire.

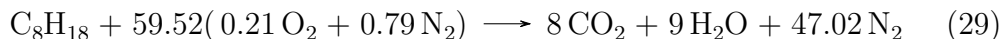
La base de càlcul és 1 mol de  $\text{C}_8\text{H}_{18}$ . Plantegem la reacció de combustió de 1 mol amb  $a$  moles d'aire:



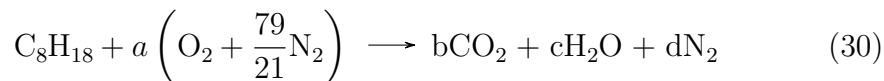
Els coeficients estequiomètrics  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$  es calculen mitjançant el balanç de les espècies atòmiques C, H, O i N:

- Balanç de C:  $8 = b \Rightarrow b = 8 \text{ mol CO}_2 / 1 \text{ mol C}_8\text{H}_{18}$
- Balanç de H:  $18 = 2c \Rightarrow c = 9 \text{ mol H}_2\text{O} / 1 \text{ mol C}_8\text{H}_{18}$
- Balanç de  $\text{O}_2$ :  $0.21a = b + \frac{c}{2} \Rightarrow a = 59.52 \text{ mol aire} / 1 \text{ mol C}_8\text{H}_{18}$
- Balanç de  $\text{N}_2$ :  $0.79a = d \Rightarrow d = 47.02 \text{ mol N}_2 / 1 \text{ mol C}_8\text{H}_{18}$

Així, la reacció teòrica de combustió és:



Un mètode alternatiu és plantejar la reacció de combustió en funció només de l'oxigen:



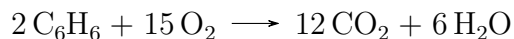
Els balanços es fan com segueix:

- Balanç de C:  $8 = b \Rightarrow b = 8 \text{ mol CO}_2 / 1 \text{ mol C}_8\text{H}_{18}$
- Balanç de H:  $18 = 2c \Rightarrow c = 9 \text{ mol H}_2\text{O} / 1 \text{ mol C}_8\text{H}_{18}$
- Balanç de  $\text{O}_2$ :  $a = b + \frac{c}{2} \Rightarrow a = 12.5 \text{ mol O}_2 / 1 \text{ mol C}_8\text{H}_{18}$
- Balanç de  $\text{N}_2$ :  $\frac{79}{21}a = d \Rightarrow d = 47.02 \text{ mol N}_2 / 1 \text{ mol C}_8\text{H}_{18}$

### Exercici 21

Si 8,20 g de  $\text{C}_6\text{H}_6$  (benzè) es combinen amb oxigen en una reacció de combustió, quants grams de  $\text{H}_2\text{O}$  es produiran?

Equació química equilibrada:



Massa molar de  $\text{C}_6\text{H}_6 = 6(12,01) + 6(1,008) = 78,11 \text{ g/mol}$

Massa molar de  $\text{H}_2\text{O} = 2(1,008) + 16,00 = 18,016 \text{ g/mol}$

$$8,20 \text{ g } \cancel{\text{C}_6\text{H}_6} \times \frac{1 \text{ mol } \text{C}_6\text{H}_6}{\cancel{78,11 \text{ g } \text{C}_6\text{H}_6}} \times \frac{6 \text{ mols } \text{H}_2\text{O}}{2 \cancel{\text{ mols } \text{C}_6\text{H}_6}} \times \frac{18,016 \text{ g } \text{H}_2\text{O}}{1 \cancel{\text{ mol } \text{H}_2\text{O}}} = 5,68 \text{ g } \text{H}_2\text{O}$$

### Exercici 22

Després de la combustió amb excés d'oxigen, 12,501 g d'un compost petroquímic van produir 38,196 g de diòxid de carboni i 18,752 g d'aigua. Una anàlisi prèvia va determinar que el compost no conté oxigen. Estableix la seva fórmula empírica.

Sabem que el compost només conté carboni i hidrogen. L'objectiu és determinar les masses d'aquests elements i trobar la seva relació molar.

Cada mol de  $\text{CO}_2$  conté 1 mol de carboni, per tant, utilitzem un factor de conversió:

Massa molar de  $\text{CO}_2 = 12,01 + 2(16,00) = 44,01 \text{ g/mol}$

$$38,196 \text{ g } \cancel{\text{CO}_2} \times \frac{1}{\cancel{44,01 \text{ g } \text{CO}_2}} \times \frac{1 \text{ mol } C}{1 \text{ mol } \text{CO}_2} \times \frac{12,01 \text{ g } C}{1 \cancel{\text{ mol } C}}$$

$$\frac{38,196 \times 12,01}{44,01} = 10,426 \text{ g de } C$$

Cada mol de  $\text{H}_2\text{O}$  conté 2 mols d'hidrogen:

Massa molar de  $\text{H}_2\text{O} = 2(1,008) + 16,00 = 18,016 \text{ g/mol}$

$$18,752 \text{ g } \cancel{\text{H}_2\text{O}} \times \frac{1}{\cancel{18,016 \text{ g } \text{H}_2\text{O}}} \times \frac{2 \text{ mols } H}{1 \text{ mol } \text{H}_2\text{O}} \times \frac{1,008 \text{ g } H}{1 \cancel{\text{ mol } H}}$$

$$\frac{18,752 \times 2 \times 1,008}{18,016} = 2,100 \text{ g de } H$$

$$\text{Massa total calculada} = 10,426 \text{ g C} + 2,100 \text{ g H} = 12,526 \text{ g}$$

Com que el valor inicial és de 12,501 g, la diferència es deu a errors d'arrodoniment.

Càlcul de la relació molar:

$$\frac{10,426 \text{ g C}}{12,01 \text{ g/mol}} = 0,868 \text{ mols C}$$

$$\frac{2,100 \text{ g H}}{1,008 \text{ g/mol}} = 2,083 \text{ mols H}$$

Determinació de la fórmula empírica:

$$\frac{0,868}{0,868} = 1$$

$$\frac{2,083}{0,868} = 2,4$$

Per obtenir nombres enters, multipliquem per 5, i obtenim la fórmula empírica del compost:  $C_5H_{12}$  (pentà).

### Exercici 23

Durant l'anàlisi per combustió d'un compost desconegut que conté només carboni, hidrogen i nitrogen, es van mesurar 12,923 g de diòxid de carboni ( $CO_2$ ) i 6,608 g d'aigua ( $H_2O$ ). El tractament del nitrogen amb gas  $H_2$  va donar com a resultat 2,501 g d'amoníac ( $NH_3$ ). La combustió completa de 11,014 g del compost va necessitar 10,573 g d'oxigen ( $O_2$ ). Quina és la fórmula empírica del compost?

Càlcul del nombre de mols de carboni

$$\begin{aligned} 12,923 \text{ g } CO_2 &\times \frac{1 \text{ mol } CO_2}{44,011 \text{ g } CO_2} \times \frac{1 \text{ mol C}}{1 \text{ mol } CO_2} \\ &= \frac{12,923}{44,011} = 0,29363 \text{ mols de C} \end{aligned}$$

Càlcul del nombre de mols d'hidrogen

$$\begin{aligned} 6,608 \text{ g H}_2\text{O} &\times \frac{1 \text{ mol H}_2\text{O}}{18,02 \text{ g H}_2\text{O}} \times \frac{2 \text{ mols H}}{1 \text{ mol H}_2\text{O}} \\ &= \frac{6,608 \times 2}{18,02} = 0,7334 \text{ mols de H} \end{aligned}$$

Càlcul del nombre de mols de nitrogen:

$$\begin{aligned} 2,501 \text{ g NH}_3 &\times \frac{1 \text{ mol NH}_3}{17,04 \text{ g NH}_3} \times \frac{1 \text{ mol N}}{1 \text{ mol NH}_3} \\ &= \frac{2,501}{17,04} = 0,1468 \text{ mols de N} \end{aligned}$$

Dividim tots els valors entre el menor nombre de mols (0,1468):

$$\frac{0,29363}{0,1468} = 2 \quad (\text{mol C})$$

$$\frac{0,7334}{0,1468} = 5 \quad (\text{mol H})$$

$$\frac{0,1468}{0,1468} = 1 \quad (\text{mol N})$$

La fórmula empírica del compost és  $\text{C}_2\text{H}_5\text{N}$ .

### Exercici 24

Calcula l'increment d'energia i d'entalpia en fondre 1 mol de gel. Els volums molars del gel i l'aigua són 0.0196 L/mol i 0.0180 L/mol, respectivament. La calor de fusió de l'aigua és  $\Delta H_f = 6.01 \text{ kJ/mol}$ .

Per fondre 1 mol de gel ( $\text{H}_2\text{O}$  sòlid) a  $0^\circ\text{C}$  i convertir-lo en aigua líquida a  $0^\circ\text{C}$ , necessitem conèixer la calor de fusió de l'aigua. La calor de fusió de l'aigua és  $\Delta H_f = 6.01 \text{ kJ/mol}$ .

L'increment d'entalpia ( $\Delta H$ ) en fondre 1 mol de gel és simplement la calor de fusió:

$$\Delta H = \Delta H_f = 6.01 \text{ kJ/mol}$$

Els volums molars del gel i l'aigua són 0.0196 L/mol i 0.0180 L/mol, respectivament. L'increment d'energia interna ( $\Delta U$ ) es pot calcular utilitzant la relació entre entalpia i energia interna:

$$\Delta H = \Delta U + P\Delta V$$

On  $P$  és la pressió i  $\Delta V$  és el canvi de volum.

El canvi de volum  $\Delta V$  es pot calcular com:

$$\Delta V = V_{\text{líquid}} - V_{\text{sòlid}} = 0.0180 \text{ L/mol} - 0.0196 \text{ L/mol} = -0.0016 \text{ L/mol}$$

Convertint el canvi de volum a metres cúbics:

$$\Delta V = -0.0016 \text{ L/mol} \times \frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ L}} = -1.6 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$$

Assumint que la pressió és 1 atm (101.3 kPa):

$$P\Delta V = 101.3 \text{ kPa} \times (-1.6 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}) = -0.000162 \text{ kJ/mol}$$

Així doncs, l'increment d'energia interna és:

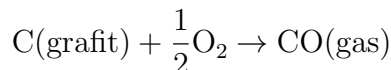
$$\Delta U = \Delta H - P\Delta V = 6.01 \text{ kJ/mol} - (-0.000162 \text{ kJ/mol}) = 6.010162 \text{ kJ/mol}$$

Per tant, l'increment d'energia interna en fondre 1 mol de gel és aproximadament 6.01 kJ/mol, i l'increment d'entalpia és 6.01 kJ/mol.

### Exercici 25

Càlcul de  $\Delta U$  per a la combustió del grafit a CO (gas) en condicions estàndard (298 K i 1 atm), si l'entalpia de combustió del grafit a CO ( $\Delta H$ ):  $-110.5 \text{ kJ mol}^{-1}$ . El grafit té un volum molar de  $0.0053 \text{ L mol}^{-1}$ .

La reacció de combustió del grafit a CO (gas) es pot escriure com:



Per calcular el canvi d'energia interna ( $\Delta U$ ) per a aquesta reacció, utilitzarem la relació entre  $\Delta U$  i  $\Delta H$  (entalpia de reacció):

$$\Delta U = \Delta H - \Delta(PV) = \Delta H - \Delta n_g RT$$

On:

- $\Delta H$  és l'entalpia de combustió del grafit a CO.
- $\Delta n_g$  és el canvi en el nombre de mols de gasos.
- $R$  és la constant dels gasos ideals ( $8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ).
- $T$  és la temperatura en Kelvin.

Per a la reacció de combustió del grafit a CO:

$$\Delta n_g = n_{\text{productes}} - n_{\text{reactius}} = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$$

Un mol de gas a condicions estàndard ocupa un volum de 22.4 L. Per tant, el canvi de 11.2 litres de gas a 298 K fa que la desaparició del grafit ( $0.0053 \text{ L mol}^{-1}$ ) sigui menyspreable.

Així doncs,  $\Delta U$  es calcula com:

$$\Delta U = \Delta H - \frac{1}{2}RT$$

L'entalpia de combustió del grafit a CO ( $\Delta H$ ) és aproximadament  $-110.5 \text{ kJ mol}^{-1}$ . Agafant la temperatura de 298 K:

$$\begin{aligned}\Delta U &= -110.5 \text{ kJ mol}^{-1} - \frac{1}{2} \cdot 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \cdot 298 \text{ K} \times 10^{-3} \text{ kJ J}^{-1} \\ &= -110.5 \text{ kJ mol}^{-1} - 1.239 \text{ kJ mol}^{-1} \\ &= -111.739 \text{ kJ mol}^{-1}\end{aligned}$$

### Exercici 26

Calcula la calor normal de la reacció  $\text{Fe}_2\text{O}_{3(\text{s})} + 3 \text{H}_{2(\text{g})} \longleftrightarrow 2 \text{Fe}_{(\text{s})} + 3 \text{H}_2\text{O}_{(\text{aq})}$

### Exercici 27

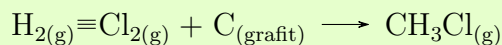
Tenint en compte aquestes energies d'enllaç:

	$E_b / \text{kJ mol}^{-1}$
C-O al monòxid de carboni	+1077
C-O al diòxid de carboni	+805
O-H	+464
H-H	+436

Calcula l'entalpia de la reacció:  $\text{CO}_{(g)} + \text{H}_2\text{O}_{(g)} \longrightarrow \text{CO}_{2(g)} + \text{H}_{2(g)}$

### Exercici 28

Fent servir les dades de la Taula 1, estima l'energia alliberada a pressió constant en la reacció:



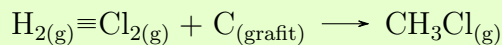
si la calor de vaporització del grafit a àtoms de carboni és de  $170.9 \text{ kcal mol}^{-1}$ .

Taula 1: Energies d'enllaç promig en  $\text{kcal mol}^{-1}$ [2]

Enllaç	$\bar{D}$	Enllaç	$\bar{D}$
C-H	98.7	C-C	82.6
C-F	$\approx 110$	C=C	145.8
C-Cl	80	C $\equiv$ C	199.6
C-Br	69	C-O	85
C-I	55	C=O	178
C-N	80	O-H	110.6

### Exercici 29

Fent servir les dades de la Taula 1, estima l'energia alliberada a pressió constant en la reacció:



si la calor de vaporització del grafit a àtoms de carboni és de  $170.9 \text{ kcal mol}^{-1}$ .



### 3 Piles i bateries

#### Exercici 30

Se sap que una molècula gasosa de NaCl té una distància interatòmica de 2.38Å. Quina és l'energia potencial Coulòmbica d'un mol d'aquestes molècules?

#### Exercici 31

Dedueix l'equació de Born-Mayer a partir de considerar, de forma simplificada, que l'energia d'atracció Coulòmbica es pot expressar com  $-\frac{Me^2}{r}$  i que la repulsió entre ions es pot expressar com  $\frac{B}{r^n}$ .

#### Exercici 32

L'òxid de magnesi, MgO, té la mateixa estructura que el NaCl. Sabent que  $r(\text{Mg}^{2+}) = 72\text{pm}$  i que  $r(\text{O}^{2-}) = 140\text{pm}$ , calcula l'energia de malla d'aquest compost iònic.

#### Exercici 33

Fent servir el cicle de Born-Haber, estima l'entalpia de malla del KCl.

#### Exercici 34

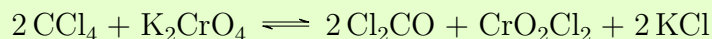
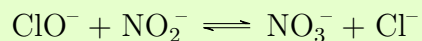
Quin és el pH d'una dissolució de 0.1 M de clorur d'hidrogen? i d'una d'àcid benzoic a la mateixa concentració?

#### Exercici 35

Els productes de solubilitat de  $\text{Fe}(\text{OH})_3$  i  $\text{Zn}(\text{OH})_2$  són  $4 \cdot 10^{-38}$  i  $4.5 \cdot 10^{-17}$ . A quin pH podem considerar que la precipitació de l'hidròxid de ferro és pràcticament completa mentre que l'ió  $\text{Zn}^{2+}$  queda a una concentració de 0.5 M?

**Exercici 36**

Són reaccions REDOX



?

**Exercici 37**

Iguala la reacció  $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{I}^- \rightleftharpoons \text{I}_2 + \text{H}_2\text{O}$ . Pista: quan hakis d'afegir hidrogen, fes-ho en forma de protons  $\text{H}^+$ .

**Exercici 38**

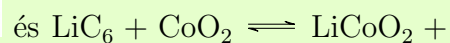
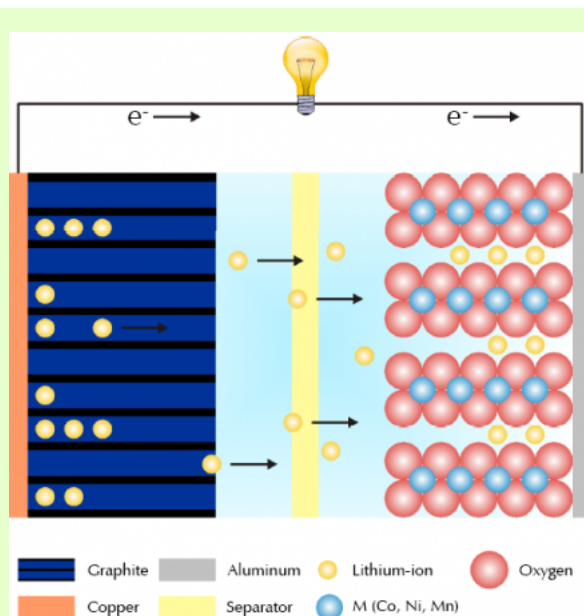
Iguala la reacció entre en benzaldehyd i l'ió  $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$  per donar àcid benzoïc i ió  $\text{Cr}^{+3}$ . Pista: on calguin oxigens, afegeix molècules d'aigua; on calguin hidrogens, afegeix protons.

**Exercici 39**

Iguala la reacció  $\text{ClO}^- + \text{CrO}_2^- \rightleftharpoons \text{CrO}_4^- + \text{Cl}^-$  en una dissolució bàsica. Pista: fes com sempre però al final tingues en compte que els reactius han d'incorporar l'ió  $\text{OH}^-$ .

**Exercici 40**

La reacció que té lloc en una bateria d'ió liti com la de la imatge



Escriu les dues mitges reaccions i fes-hi el balanç. Calcula el potencial de cel·la a partir de la  $\Delta\varepsilon^\circ$  del  $\text{Li}^+$  (-3.0V) i del  $\text{CoO}_2$  (+1.1V). Quins valors obtindries per a la reacció que tindria lloc en una bateria de Li i  $\text{O}_2$  ( $\Delta\varepsilon^\circ$  de la reacció  $\text{O}_{2(g)} + 2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \rightarrow \text{H}_2\text{O}_{2(aq)}$  és 0.3V).

## 4 Forces intermoleculars

### Exercici 41

La ratio d'empaquetament d'una cel·la unitat es defineix com la fracció entre el volum omplert pels àtoms que la formen i el seu volum total. Calcula el RE de la cel·la unitat cúbica centrada en la cara i de la cel·la unitat cúbica centrada en el cos (veure Figura ??).

### Exercici 42

Usant la descripció del Cicle de Born-Haber que trobaràs a la Wikipedia ([https://ca.wikipedia.org/wiki/Cicle\\_de\\_Born-Haber](https://ca.wikipedia.org/wiki/Cicle_de_Born-Haber)) calcula l'energia reticular del Fluorur de Liti.

**Exercici 43**

Compara, per als diferents tipus de sòlids descrits, les següents característiques:

1. pressió de vapor
2. punt de fusió
3. punt d'ebullició
4. duresa
5. fragilitat
6. conducció elèctrica en estat sòlid
7. conducció elèctrica en estat líquid

**Exercici 44**

El coure té una estructura cúbica de cara centrada, i l'aresta de la cel·la unitària és de  $3.61 \text{ \AA}$ . Pots suggerir algun tipus d'àtom que es pugui col·locar en els intersticis de la seva xarxa sense distorsionar-la?

**Exercici 45**

Si la densitat del clorur sòdic sense defectes és de  $2.165 \text{ g cm}^{-3}$ , quina seria la densitat si tingués un ratio de  $10^{-3}$  defectes de a) Frenkel; b) Schottky. (el volum no varia amb els defectes)

**Exercici 46**

Explica, segons la teoria cinètico-molecular, la Figura ???. Com interpretes els termes *equilibri dinàmic* i *saturació*?

**Exercici 47**

És possible que un líquid arribi a estar sobreescalfat: temperatura superior a la d'ecullició per a aquella pressió però encara estat líquid, la qual cosa succeeix quan és molt pur i no hi ha partícules de pols. Com aconseguiries que no es produeixi aquest sobreescalfament?

**Exercici 48**

Què ens produirà una cremada més gran: una massa  $m$  d' $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$  a 100 graus o la mateixa quantitat d'aigua líquida a la mateixa temperatura?

**Exercici 49**

En un recipient hi ha aigua líquida. Es connecta el recipient a una bomba de buit i es va abaixant la pressió sobre el líquid. Si la temperatura és de 60 graus, a quina pressió bullirà l'aigua?

**Exercici 50**

Perquè a la Taula ?? no apareix la  $p_v$  de l'He,  $\text{H}_2$  i  $\text{CH}_4$ ?

**Exercici 51**

Raona com canvia la  $p_v$  d'una dissolució en funció de la seva concentració.

**Exercici 52**

Determina la relació entre l'increment de pressió de vapor d'una dissolució i la fracció molar del solut.

**Exercici 53**

La pressió de vapor de l'aigua a  $20^\circ\text{C}$  és 17.54 mmHg. Quan dissolem 114 g de sucrosa en 1000 g d'aigua, la pressió de vapor es redueix en 0.11 mmHg. Quin és el pes molecular de la sucrosa?

**Exercici 54**

Quina és la constant de solubilitat del cromat d'argent ( $\text{Ag}_2\text{CrO}_4$ ) si la concentració d'una dissolució saturada d'aquesta sal té una concentració de  $6.7 \times 10^{-5} \text{ M}$  d'ions cromat?

**Exercici 55**

S'afegeix ió  $\text{Ag}^+$  a una dissolució que conté  $\text{Cl}^-$  i  $\text{I}^-$ , ambdós a una concentració de  $0.01 \text{ M}$ . Què precipita abans,  $\text{AgCl}$  i  $\text{AgI}$ . Quina és la concentració d'ions  $\text{Ag}^+$  quan la primera sal comença a precipitar? I quina és la concentració de l'anió del primer precipitat quan la segona sal comença a precipitar?

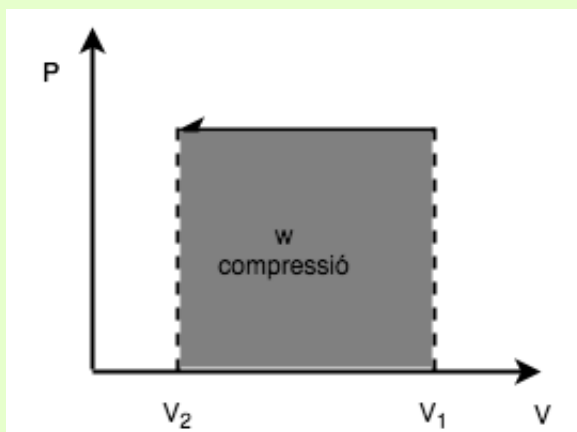
**Exercici 56**

Raona perquè per a una dissolució en la qual  $\Delta H_{\text{sol}} < 0$ , un augment de la temperatura fa que la solubilitat disminueixi, i a l'inrevés.

## 5 Controlant la temperatura

**Exercici 57**

Calcula el treball realitzat per comprimir un gas a pressió constant entre un volum inicial  $V_1$  i un volum final  $V_2$ .



**Exercici 58**

Calcula el treball per dur un gas en un cilindre amb un èmbol des d'un estat de pressió 2 atm i volum 10 l fins a un estat de pressió 5 atm i volum 15 l per dos camins diferents:

1. Primer escalfant el gas a volum constant i després alliberant l'èmbol a pressió externa constant fins al volum desitjat.
2. Segon deixant l'èmbol lliure (pressió externa constant) mentre escalfem el gas, seguit de continuar escalfant fins que arribem a la pressió objectiu.

**Exercici 59**

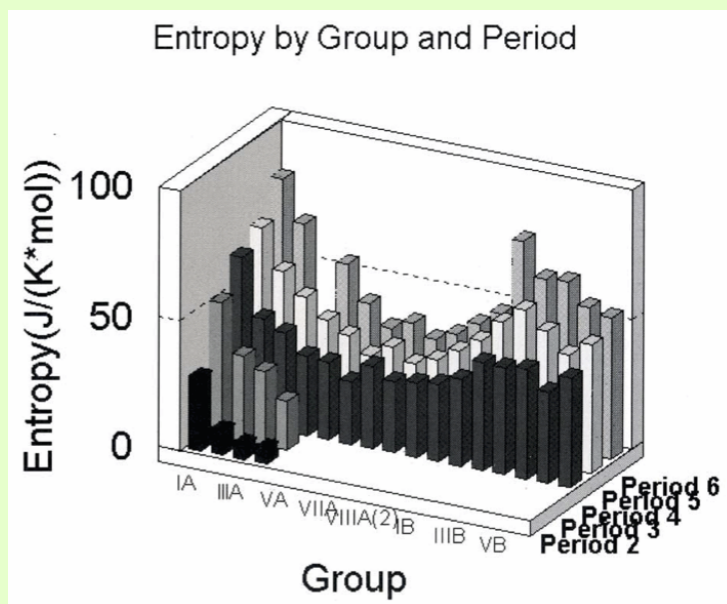
- Calcular el treball d'expansió reversible i isotèrmic, a 25 °C, de 3 mol d'un gas ideal entre 2 L i 3 L de volum.
- I si es tracta d'un procés irreversible?
- Repeteix els dos apartats anteriors per a un procés de compressió entre 3 L i 2 L del mateix gas.

**Exercici 60**

A partir de l'expressió de l'energia cinètica mitja de les molècules d'un gas ideal, calcula l'energia de translació que tindrà aquest gas a 298 K.

**Exercici 61**

Quina calor se li ha de donar a un gas ideal perquè s'expandeixi de manera reversible i isotèrmica de  $V_1$  a  $V_2$  ( $V_2 > V_1$ )?

**Exercici 62**

La Figura mostra l'entropia normal  $S_{298}^{\circ}$  per a elements de la taula periòdica, exclosos elements poliatòmics i que no formen sòlids.[3] Pots explicar:

1. perquè l'entropia augmenta en augmentar el període ( $n$  més gran);
2. perquè l'entropia decreix al centre de cada període;i
3. quin és l'efecte d'un augment de l'empaquetament o del grau de coordinació dels elements en l'entropia?

**Exercici 63**

Calcula l'energia lliure, l'entalpia i l'entropia normals per a la reacció  $3\text{H}_{2(g)} + \text{N}_{2(g)} \longrightarrow 2\text{NH}_{3(g)}$ . Què afavoreix i què desafavoreix la reacció? Succeiria igual a qualsevol temperatura?

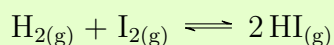
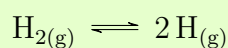


**Exercici 64**

Calcular els canvis d'energia lliure, entalpia i entropia per a la vaporització de l'aigua líquida. Quina influència hi té la pressió de vapor de l'aigua?

**Exercici 65**

Pots racionalitzar qualitativament els quatre factors implicats en la descripció de l'equilibri químic en les reaccions:



? Per a les dues reaccions, calcula el valor de  $\Delta G^\circ$  a partir de dades obtingudes a la literatura (usa els enllaços de la Secció ??).

**Exercici 66**

Com afectaria l'ús d'un catalitzador la corba d'energia lliure que hem dibuixat en el cas de la reacció de descomposició tèrmica del  $\text{CaCO}_3$ ?

**Exercici 67**

Perquè podem usar la pressió de vapor enlloc de la concentració per a una substància gasosa en l'expressió de la constant d'equilibri? Succeiria el mateix si el sistema no fos ideal? Serveix l'expressió per a qualsevol concentració de les substàncies reaccionants?

**Exercici 68**

Pots raonar perquè la constant d'equilibri de la descomposició tèrmica del  $\text{CaCO}_3$  és igual a  $P_{\text{CO}_2}$ ?

**Exercici 69**

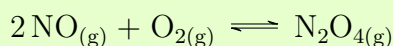
Com afecta la constant d'equilibri el fet d'igualar la reacció química amb coeficients que són els doble o el triple dels escrits inicialment?

**Exercici 70**

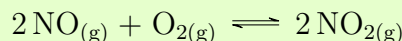
Quina és la relació entre la constant d'equilibri d'una reacció i la de la seva inversa?

**Exercici 71**

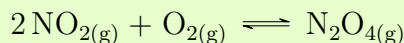
Escriu la constant d'equilibri de la reacció



a partir de les de les reaccions



i

**Exercici 72**

La constant d'equilibri de la reacció d'isomerització entre l'*n*-butà i l'isobutà és 2.5. Representa gràficament la tendència del sistema en funció de diverses concentracions inicials de cadascuna de les dues substàncies. (Pista: representa la pressió de vapor de l'*n*-butà en abscisses i la de l'isobutà en ordenades com mostra la Taula ??).

**Exercici 73**

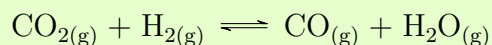
Fes una interpretació similar per al cas de la reacció de dissociació del sulfat de bari en els seus components iònics (veure Taula ??).

**Exercici 74**

La constant d'equilibri de la dissociació del  $\text{NH}_4\text{HS}$  sòlid en amoniac i sulfur d'hidrogen és de  $0.11 \text{ atm}^2$ . Si posem una mica d'aquest sòlid en un recipient tancat que conté amoniac a una pressió de  $0.5 \text{ atm}$ . Quina és la pressió final del sistema un cop assolit l'equilibri?

**Exercici 75**

La constant d'equilibri de la reacció



a 690K és 0.10. Quina és la pressió d'equilibri del sistema si barregem 0.5 mol de  $\text{CO}_2$  i 0.5 mol de  $\text{H}_2$  en un recipient de 5 l a 690K? Si augmentéssim la T, la pressió augmentaria o disminuiria?

**Exercici 76**

Escriu la reacció àcid-base de l'ió carbonat en aigua en equilibri amb l'ió bicarbonat. Qui té el rol d'àcid i de base en la reacció directa i la inversa?

## 6 Química de materials

## 7 Llum i química

**Exercici 77**

Sabries explicar perquè la rotació en la molècula d'etilè ( $\text{C}_2\text{H}_4$ ) és més costosa energèticament que la rotació en la molècula d'età ( $\text{C}_2\text{H}_6$ )?

**Exercici 78**

La funció de Fermi  $f(E)$  dona la probabilitat de que un determinat estat energètic sigui ocupat a una determinada temperatura superior a 0K:

$$f(E) = \left( 1 + \exp \left[ \frac{E - E_f}{k_B T} \right] \right)^{-1}$$

a) Dibuixa  $f(E)$ . b) Si el nivell de Fermi per al coure és de 7eV, raona com es distribuïran els seus electrons a 0K i a 1000K. .

**Exercici 79**

Quants nodes té la funció  $\psi(2s)$ ? i la  $\psi(3s)$ ? i la  $\psi(2p)$ ?

**Exercici 80**

A partir de la densitat de probabilitat podem preguntar-nos coses com on és el màxim de probabilitat (solucionant  $\frac{dD(r)}{dr} = 0$ ) o bé calculant el valor promig de la distància de l'electró al nucli segons  $\langle r \rangle_{n,l} = \int_0^\infty r D(r) dr$ . Mostra que  $\langle r \rangle_{2s} = \frac{6a_0}{Z}$  i  $\langle r \rangle_{2p} = \frac{5a_0}{Z}$  (veure Figura ??).

**Exercici 81**

L'àtom de sodi es comporta de forma similar a l'àtom d'hidrogen pel que fa a la seva facilitat de "donar" un electró. Ho pots explicar en base a les densitats de probabilitat explicades a l'apartat anterior? Pensa en la llei de Coulomb i l'efecte pantalla dels electrons interiors.

**Exercici 82**

Escriu la configuració electrònica de l'argó i del potassi. Perquè després d'omplir els orbitals 3p no omplim els orbitals 3d? Com raones que els metalls de transició de les darreres columnes de la taula periòdica tinguin típicament valències de +2?

**Exercici 83**

Pots explicar les dades de la Figura ?? en base a la configuració electrònica dels elements representats?

## Referències

- [1] Geoffrey M. Bowers i Ruth A. Bowers. *Understanding Chemistry through Cars*. en. CRC Press, nov. de 2014. ISBN: 978-1-4665-7184-6. DOI: 10.1201/b17581. URL: <https://www.taylorfrancis.com/books/9781466571846>.
- [2] Bruce H. Mahan. *QUÍMICA Curso Universitario*. Español. 1977.

- [3] Travis Thoms. “Periodic Trends for the Entropy of Elements”. A: *J. Chem. Educ.* 72.1 (gen. de 1995). Publisher: American Chemical Society, pàg. 16. ISSN: 0021-9584. DOI: 10.1021/ed072p16. URL: <https://doi.org/10.1021/ed072p16> (cons. 09-08-2023).