

Resol els exercicis autoavaluables del tema i respon la consulta a moodle especificant quants d'ells has fet bé i quants malament. Respondre aquesta consulta és obligatori per poder accedir a propers lliuraments dins l'assignatura.

Les respuestes als exercicis es poden trobar al final del document i també compilades a <https://biocomputing-teaching.github.io/WebQuimicaAutomocio/pdf/Exercise.pdf>

Exercici Autoavaluable I. Combustió del benzè

Si 8,20 g de C₆H₆ (benzè) es combinen amb oxigen en una reacció de combustió, quants grams d'H₂O es produiran?

Exercici Autoavaluable II. Fòrmula empírica d'un compost petroquímic

Després de la combustió en 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.

Exercici Autoavaluable III. Formula empírica d'un compost CxHyNz

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 (CO₂) i 6,608 g d'aigua (H₂O). El tractament del nitrogen amb gas H₂ va donar com a resultat 2,501 g d'amoniàc (NH₃). La combustió completa de 11,014 g del compost va necessitar 10,573 g d'oxigen (O₂). Quina és la fórmula empírica del compost?

Exercici Autoavaluable IV. Fonent gel

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

Exercici Autoavaluable V. Energia interna de la combustió del grafit

Càcul de ΔU 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 (ΔH): $-110,5 \text{ kJ mol}^{-1}$. El grafit té un volum molar de $0,0053 \text{ L mol}^{-1}$.

Exercici Autoavaluable VI. Energia interna de la combustió del propà

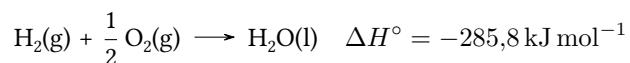
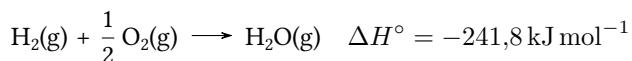
Determinar la variació d'energia interna per al procés de combustió d'1 mol de propà a 25 °C i 1 atm, si la variació d'entalpia, en aquestes condicions, val $-2219,8 \text{ kJ}$.

Exercici Autoavaluable VII. Calor normal de reacció



Exercici Autoavaluable VIII. Entalpia de vaporització de l'aigua

Determineu l'entalpia de vaporització de l'aigua en condicions estàndard a partir de les següents reaccions:



Exercici Autoavaluable IX. Entalpia de reacció

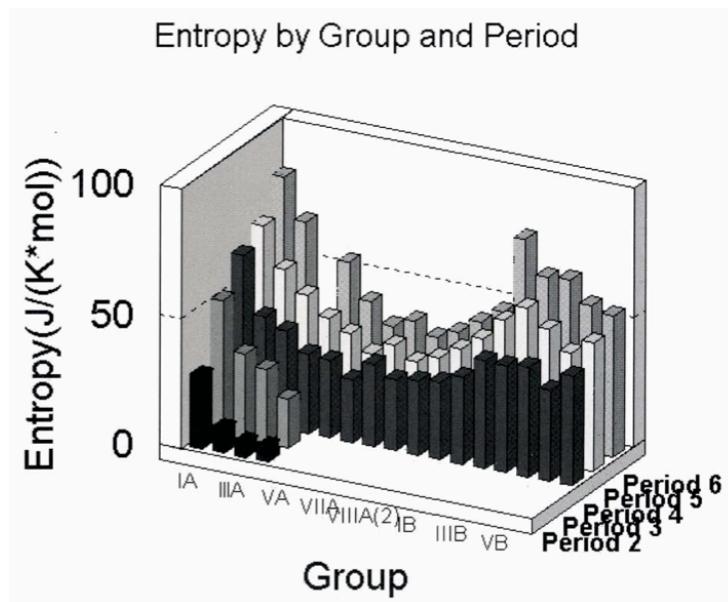
Tenint en compte aquestes energies d'enllaç:

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



Exercici Autoavaluable X. Entropia i taula periòdica





La Figura mostra l'entropia normal S_{298}° per a elements de la taula periòdica, exclosos elements poliatòmics i que no formen sòlids.^[1] Pots explicar:

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

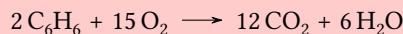
Solucions

Exercici Autoavaluable I. Combustió del benzè

Si 8,20 g de C₆H₆ (benzè) es combinen amb oxigen en una reacció de combustió, quants grams d'H₂O es produiran?

Resposta

Equació química equilibrada:



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

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

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

Exercici Autoavaluable II. Fòrmula empírica d'un compost petroquímic

Després de la combustió en 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.

Resposta

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 CO₂ conté 1 mol de carboni, per tant, utilitzem un factor de conversió:

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

$$38,196 \cancel{\text{g CO}_2} \times \frac{1 \cancel{\text{mol CO}_2}}{44,01 \cancel{\text{g CO}_2}} \times \frac{1 \cancel{\text{mol C}}}{1 \cancel{\text{mol CO}_2}} \times \frac{12,01 \text{ g C}}{1 \cancel{\text{mol C}}} = 10,426 \text{ g de C}$$



Cada mol de H₂O conté 2 mols d'hidrogen:

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

$$18,752 \frac{\text{g H}_2\text{O}}{\text{mol H}_2\text{O}} \times \frac{1 \frac{\text{mol H}_2\text{O}}{\text{mol H}_2\text{O}}}{18,016 \frac{\text{g H}_2\text{O}}{\text{mol H}_2\text{O}}} \times \frac{2 \frac{\text{mols H}}{\text{mol H}_2\text{O}}}{1 \frac{\text{mol H}_2\text{O}}{\text{mol H}}} \times \frac{1,008 \frac{\text{g H}}{\text{mol H}}}{1 \frac{\text{mol H}}{\text{mol H}}} = 2,100 \text{ g de H}$$

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

Podem comprovar que el pes de C i H en els productes iguala el pes dels mateixos elements en els reactius. Com que el valor inicial és de 12,501 g, la diferència es deu a errors d'arrodoniment.

Ara ens interessa veure en quina proporció estan els mols de C i H en el compost inicial:

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

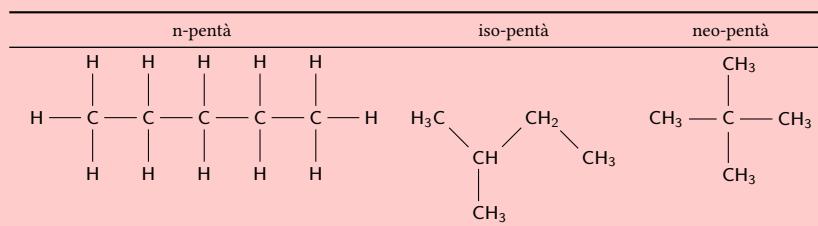
$$\frac{2,100 \text{ g H}}{1,008 \text{ g/mol}} = 2,083 \text{ mols H}$$

a partir d'aquests valors podem calcular la fórmula empírica, dividint per qualsevol dels dos i aleshores fent que els valors obtinguts siguin nombres enteros:

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

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

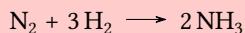
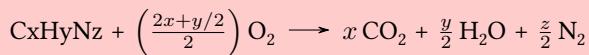
Per obtenir nombres enteros, multipliquem per 5, i obtenim la fórmula empírica del compost: C₅H₁₂ (pentà). No sabem en quina forma es presentarà, però, el pentà de totes les mostrades a la taula:



Exercici Autoavaluable III. Formula empírica d'un compost $C_xH_yN_z$
 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?

Resposta

Escrivim primer les equacions químiques:



L'important és veure que tot el carboni (en forma de CO_2) que apareix a la primera equació prové del contingut al compost problema, com també passa amb tot l'hidrogen (en forma de H_2O) i tot el nitrogen en forma de NH_3 . Per tant, només ens cal trobar els mols generats de cadascun dels tres elements i la seva proporció en els productes serà la que existia als reactius.

Càcul del nombre de mols de carboni

$$12,923 \text{ g } CO_2 \times \frac{1 \text{ mol } CO_2}{44,011 \text{ g } CO_2} \times \frac{1 \text{ mol } C}{1 \text{ mol } CO_2}$$

$$= \frac{12,923}{44,011} = 0,29363 \text{ mols de } C$$

Càcul del nombre de mols d'hidrogen (notar que la segona reacció és a part de la primera; en la segona reacció usem un excés d'hidrogen addicional per transformar el nitrogen en un altre compost: amoníac):

$$6,608 \text{ g } H_2O \times \frac{1 \text{ mol } H_2O}{18,02 \text{ g } H_2O} \times \frac{2 \text{ mols } H}{1 \text{ mol } H_2O}$$

$$= \frac{6,608 \times 2}{18,02} = 0,7334 \text{ mols de } H$$

Càlcul del nombre de mols de nitrogen:

$$2,501 \text{ g NH}_3 \times \frac{1 \text{ mol NH}_3}{17,04 \text{ g NH}_3} \times \frac{1 \text{ mol N}}{1 \text{ mol NH}_3}$$

$$= \frac{2,501}{17,04} = 0,1468 \text{ mols de N}$$

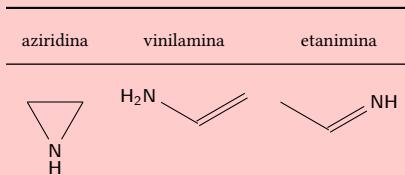
Dividim tots els valors entre el menor nombre de mols (0,1468):

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

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

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

La fórmula empírica del compost és $\text{C}_2\text{H}_5\text{N}$, que pot corresponent a diversos isòmers:



Exercici Autoavaluable IV. Fonent gel

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

Resposta

L'increment d'entalpia (ΔH) 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 (ΔU) es pot calcular utilitzant la relació entre entalpia i energia interna:

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

On P és la pressió i ΔV és el canvi de volum. El canvi de volum ΔV 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:

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

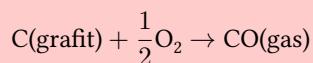
Per tant, l'increment d'energia interna en fondre 1 mol de gel és aproximadament 6.01 kJ/mol, no significativament diferent de l'increment d'entalpia.

Exercici Autoavaluable V. Energia interna de la combustió del grafit

Càcul de ΔU 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 (ΔH): $-110,5 \text{ kJ mol}^{-1}$. El grafit té un volum molar de $0,0053 \text{ L mol}^{-1}$.

Resposta

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



Per calcular el canvi d'energia interna (ΔU) per a aquesta reacció, utilitzarem la relació entre ΔU i ΔH (entalpia de reacció):

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

on:

- ΔH és l'entalpia de combustió del grafit a CO.
- Δn_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 $22,4 \text{ L}$. 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, ΔU es calcula com:

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

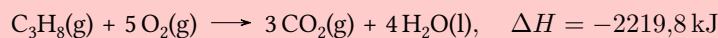
L'entalpia de combustió del grafit a CO (ΔH) és aproximadament $-110,5 \text{ kJ mol}^{-1}$. Agafant la temperatura de 298 K :

$$\begin{aligned}\Delta U &= -110,5 \text{ kJ mol}^{-1} - \frac{1}{2} \cdot 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \cdot 298 \text{ K} \times 10^{-3} \text{ kJ J}^{-1} \\ &= -110,5 \text{ kJ mol}^{-1} - 1,239 \text{ kJ mol}^{-1} \\ &= -111,739 \text{ kJ mol}^{-1}\end{aligned}$$

Exercici Autoavaluable VI. Energia interna de la combustió del propà
 Determinar la variació d'energia interna per al procés de combustió d'1 mol de propà a 25°C i 1 atm, si la variació d'entalpia, en aquestes condicions, val $-2219,8 \text{ kJ}$.

Resposta

Escrivim primer la reacció igualada



Increment de mols de gasos:

$$n_{\text{reactius}} = 1 + 5 = 6; \quad n_{\text{productes}} = 3 \quad \Rightarrow \Delta n = -3$$

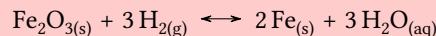
$$\begin{aligned} \Delta U &= \Delta H - \Delta n R T \\ &= -2219,8 \text{ kJ} + 3 \text{ mol} \times 8,3145 \times 10^{-3} \text{ kJ mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \times 298 \text{ K} = -2212 \text{ kJ} \end{aligned}$$

Exercici Autoavaluable VII. Calor normal de reacció



Resposta

La reacció donada és:



Per calcular la calor normal de reacció, fem servir les entalpies de formació estàndard ΔH_f° de les substàncies implicades. Els valors típics són:

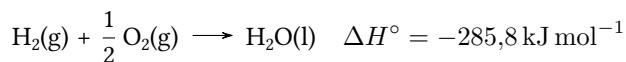
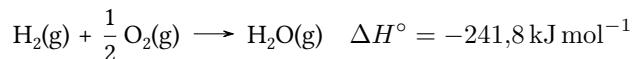
Compost	ΔH_f° (kJ mol $^{-1}$)
$\text{Fe}_2\text{O}_{3(\text{s})}$	-824,2 kJ mol $^{-1}$
$\text{H}_{2(\text{g})}$	0 kJ mol $^{-1}$
$\text{Fe}_{(\text{s})}$	0 kJ mol $^{-1}$
$\text{H}_2\text{O}_{(\text{aq})}$	-285,8 kJ mol $^{-1}$

L'entalpia de reacció es calcula com:

$$\begin{aligned} \Delta H^\circ &= \sum \Delta H_f^\circ(\text{productes}) - \sum \Delta H_f^\circ(\text{reactius}) \\ &= [2 \times 0 + 3 \times (-285.8)] - [-824.2 + 3 \times 0] \\ &= [-857.4] - [-824.2] \\ &= -33,2 \text{ kJ mol}^{-1} \end{aligned}$$

Per tant, la calor normal de la reacció és $-33,2 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Exercici Autoavaluable VIII. Entalpia de vaporització de l'aigua
 Determineu l'entalpia de vaporització de l'aigua en condicions estàndard a partir de les següents reaccions:

**Resposta**

L'entalpia de vaporització de l'aigua en condicions estàndard es defineix com:



i es pot obtenir restant les dues equacions:

$$\Delta H_{\text{vap}}^\circ = \Delta H^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{g})) - \Delta H^\circ(\text{H}_2\text{O}(\text{l}))$$

$$\Delta H_{\text{vap}}^\circ = -241,8 \text{ kJ mol}^{-1} - (-285,8 \text{ kJ mol}^{-1}) = \Delta H_{\text{vap}}^\circ = 44,0 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Exercici Autoavaluable IX. Entalpia de reacció

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: $\text{CO}_{(\text{g})} + \text{H}_2\text{O}_{(\text{g})} \longrightarrow \text{CO}_{2(\text{g})} + \text{H}_{2(\text{g})}$

Resposta

La reacció donada és:



on el CO té un triple enllaç C≡O i el CO₂ té dos dobles enllaços O=C=O (és a dir, estem parlant d'enllaços diferents amb diferents energies d'enllaç). a la molècula d'aigua, per

la seva banda, hi ha dos enllaços O–H. Per calcular l'entalpia de reacció, utilitzem les energies d'enllaç proporcionades.

Trencament d'enllaços (requereix energia):

- 1 enllaç C–O a CO: 1077 kJ mol^{-1}
- 2 enllaços O–H a H₂O: $2 \times 464 \text{ kJ mol}^{-1} = 928 \text{ kJ mol}^{-1}$

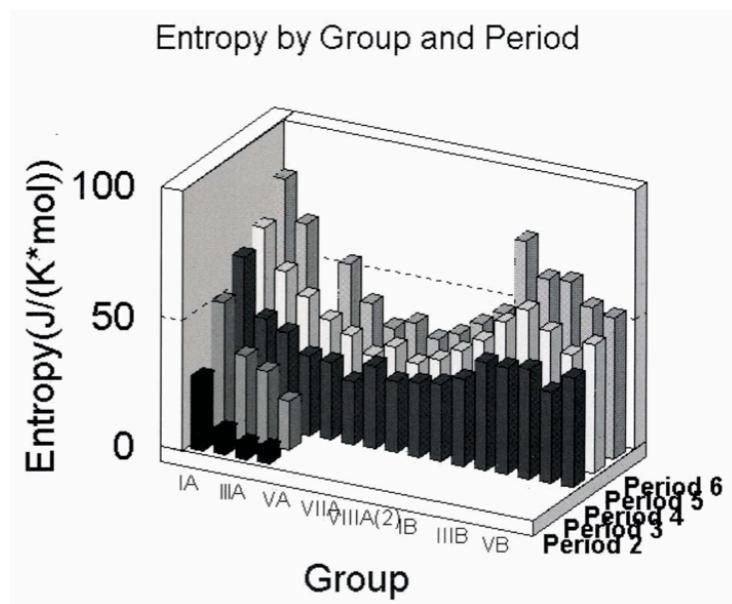
Formació d'enllaços (allibera energia):

- 2 enllaços C–O a CO₂: $2 \times 805 \text{ kJ mol}^{-1} = 1610 \text{ kJ mol}^{-1}$
- 1 enllaç H–H en H₂: 436 kJ mol^{-1}

El càlcul de l'entalpia alliberada durant la reacció és (notar els signes):

$$\begin{aligned}\Delta H &= \text{energia trencament} - \text{energia formació} \\ &= (1077 \text{ kJ mol}^{-1} + 928 \text{ kJ mol}^{-1}) - (1610 \text{ kJ mol}^{-1} + 436 \text{ kJ mol}^{-1}) \\ &= 2005 \text{ kJ mol}^{-1} - 2046 \text{ kJ mol}^{-1} \\ &= -41 \text{ kJ mol}^{-1}\end{aligned}$$

Exercici Autoavaluable X. Entropia i taula periòdica



La Figura mostra l'entropia normal S_{298}° per a elements de la taula periòdica, exclosos elements poliatòmics i que no formen sòlids.^[1] Pots explicar:

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

Bibliografia

- [1] 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](https://doi.org/10.1021/ed072p16). URL: <https://doi.org/10.1021/ed072p16> (cons. 09-08-2023).