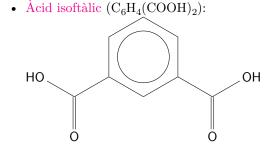
Resol els exercicis autoavaluables del tema i respon la consulta a moodle especificant quants d'ells has fet bé i quants malament. Respondre aquesta consulta és obligatori per poder accedir a propers lliuraments dins l'assignatura.

Les respostes 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. Polimerització

Dona l'estructura de la poliamida feta dels monòmers indicats a continuació:



1,6-hexà diamina ( $C_6H_4(COOH)_2$ ):  $H_2N$  $NH_2$ 

### Extret de [1]

## Exercici Autoavaluable II. Reducció de la magnetita amb monòxid de carboni

Mostra les semireaccions implicades en la reducció de l'òxid de ferro mitjançant monòxid de carboni. Suposa que l'òxid de ferro es troba com a magnetita, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. A partir d'aquestes semireaccions, dedueix la reacció global i calcula el potencial estàndard de la reacció.

Exercici Autoavaluable III. Energia alliberada en la formació d'aigua L'energia s'allibera quan l'hidrogen i l'oxigen reaccionen per produir aigua. Aquesta energia prové del fet que els enllaços finals H-O representen un estat d'energia total més baix que els enllaços inicials H-H i O=O.

Pàgina 1

Calculeu quanta energia (en kJ mol<sup>-1</sup> de producte) s'allibera per la reacció següent a pressió constant, donades les entalpies estàndard d'enllaç. Les entalpies estàndard d'enllaç indiquen l'entalpia absorbida quan es trenquen enllaços a temperatura i pressió estàndard (298 K i 1 atm).

Entalpies d'enllaç estàndard:

- $H-H = 432 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$
- $O=O = 494 \text{ kJ mol}^{-1}$
- $H-O = 460 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$

Reacció:

$$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \longrightarrow H_2O$$

# Exercici Autoavaluable IV. Cotxes amb cel·la de combustible de metanol

Les entalpies i energies lliures de formació (a condicions estàndar) de les espècies d'interès són:

Substància	$\Delta h_f^{\circ}  (\mathrm{MJ}  \mathrm{kmol}^{-1})$	$\Delta g_f^{\circ} \; (\mathrm{MJ}  \mathrm{kmol}^{-1})$
$CH_3OH(g)$	-201.2	-161.9
$CH_3OH(1)$	-238.6	-166.2
$O_2(g)$	0	0
$CO_2(g)$	-393.5	-394.4
$H_2O(g)$	-241.8	-228.6
$H_2O(l)$	-285.9	-237.2

- a) Quanta calor s'obté en cremar 1 kg de metanol en un motor d'explosió interna (IC)?
- b) Quanta energia elèctrica produiria una pila de combustible ideal (amb metanol i aire) per cada kg de combustible?
- c) Quanta calor rebutja la pila de combustible?
- d) Si un motor IC té un rendiment del  $20\,\%$  i una pila pràctica del  $60\,\%$ , i si un cotxe amb metanol i motor IC fa  $10 \,\mathrm{km} \,\mathrm{L}^{-1}$ , quin seria el rendiment (km/l) del mateix cotxe amb pila de combustible?

- e) Si condueixes 2000 km al mes i un galó de metanol val 2,40 €, quant s'estalvia a l'any en combustible si s'utilitza el vehicle amb pila de combustible? Pots pensar en altres estalvis?
- f) Si tens un préstec a 10 anys i pagues el 18 % anual del preu total del cotxe, de quant pot ser el sobrecost màxim del vehicle amb pila perquè et surti igual de car que el cotxe amb motor IC?

Traduït d'aquesta col·lecció d'exercicis

#### **Solucions**

### Exercici Autoavaluable I. Polimerització

Dona l'estructura de la poliamida feta dels monòmers indicats a continuació:

• Àcid isoftàlic (C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>(COOH)<sub>2</sub>):

• 1,6-hexà diamina ( $C_6H_4(COOH)_2$ ):  $H_2N$  $NH_2$ 

### Extret de [1]

#### Resposta

Quan es dibuixa el producte polimèric d'una polimerització per creixement en etapes, és important identificar primer la reacció que forma l'enllaç repetitiu entre els monòmers. En aquest cas, la reacció és una substitució nucleofílica acílica entre un àcid carboxílic i una amina per formar una amida.

1. Connecta dos monòmers per formar un dímer utilitzant la reacció indicada.

Pàgina 4

2. Trenca els mateixos enllaços que abans, excepte que els enllaços per a la connexió final es mostraran sortint del dímer.

3. Col·loca claudàtors al voltant del dímer i posa una "n"en cursiva a la part inferior dreta.

# Exercici Autoavaluable II. Reducció de la magnetita amb monòxid de carboni

Mostra les semireaccions implicades en la reducció de l'òxid de ferro mitjançant monòxid de carboni. Suposa que l'òxid de ferro es troba com a magnetita, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. A partir d'aquestes semireaccions, dedueix la reacció global i calcula el potencial estàndard de la reacció.

#### Resposta

Semireaccions:

$$Fe_3O_4(s) + 8 H^+ + 8 e^- \longrightarrow 3 Fe(s) + 4 H_2O \quad E^\circ = 0,085 V$$
  
 $CO(g) + H_2O \longrightarrow CO_2(g) + 2 H^+ + 2 e^- \quad E^\circ = -(-0,11 V) = 0,11 V$ 

Reacció global:

$$Fe_3O_4(s) + 4CO(g) \longrightarrow 3Fe(s) + 4CO_2(g)$$

Potencial estàndard global:

$$\Delta E^{\circ} = 0.085 \,\mathrm{V} + 0.11 \,\mathrm{V} = 0.195 \,\mathrm{V}$$

Exercici Autoavaluable III. Energia alliberada en la formació d'aigua L'energia s'allibera quan l'hidrogen i l'oxigen reaccionen per produir aigua. Aquesta energia prové del fet que els enllaços finals H-O representen un estat d'energia total més baix que els enllaços inicials H-H i O=O.

Calculeu quanta energia (en kJ mol<sup>-1</sup> de producte) s'allibera per la reacció següent a pressió constant, donades les entalpies estàndard d'enllaç. Les entalpies estàndard d'enllaç indiquen l'entalpia absorbida quan es trenquen enllaços a temperatura i pressió estàndard (298 K i 1 atm).

Entalpies d'enllaç estàndard:

- $H-H = 432 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$
- $O=O = 494 \text{ kJ mol}^{-1}$
- $H-O = 460 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$

Reacció:

$$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \longrightarrow H_2O$$

# Resposta

L'aigua (H<sub>2</sub>O) conté dos enllaços H-O, així que:

Energia alliberada en formar els enllaços:  $2 \times 460 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1} = 920 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$ 

Els reactius tenen:

$$H_2: 432 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$$
 (un enllaç H $-\mathrm{H}$ )

$$\frac{1}{2} O_2 : \frac{1}{2} \times 494 \, \mathrm{kJ} \, \mathrm{mol}^{-1} = 247 \, \mathrm{kJ} \, \mathrm{mol}^{-1}$$

Energia necessària per trencar enllaços:  $432 + 247 = 679 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$ 

Resultat:

Energia alliberada =  $920 \text{ kJ mol}^{-1} - 679 \text{ kJ mol}^{-1} = 241 \text{ kJ mol}^{-1}$ 

# Exercici Autoavaluable IV. Cotxes amb cel·la de combustible de me-

Les entalpies i energies lliures de formació (a condicions estàndar) de les espècies d'interès són:

Substància	$\Delta h_f^{\circ} \; (\mathrm{MJ}  \mathrm{kmol}^{-1})$	$\Delta g_f^{\circ} \; (\mathrm{MJ}  \mathrm{kmol}^{-1})$
$CH_3OH(g)$	-201.2	-161.9
$\mathrm{CH_3OH}(l)$	-238.6	-166.2
$O_2(g)$	0	0
$CO_2(g)$	-393.5	-394.4
$H_2O(g)$	-241.8	-228.6
$H_2O(l)$	-285.9	-237.2

a) Quanta calor s'obté en cremar 1 kg de metanol en un motor d'explosió interna (IC)?

- b) Quanta energia elèctrica produiria una pila de combustible ideal (amb metanol i aire) per cada kg de combustible?
- c) Quanta calor rebutja la pila de combustible?
- d) Si un motor IC té un rendiment del  $20\,\%$  i una pila pràctica del  $60\,\%$ , i si un cotxe amb metanol i motor IC fa  $10 \,\mathrm{km}\,\mathrm{L}^{-1}$ , quin seria el rendiment (km/l) del mateix cotxe amb pila de combustible?
- e) Si condueixes 2000 km al mes i un galó de metanol val 2,40 €, quant s'estalvia a l'any en combustible si s'utilitza el vehicle amb pila de combustible? Pots pensar en altres estalvis?
- f) Si tens un préstec a 10 anys i pagues el 18 % anual del preu total del cotxe, de quant pot ser el sobrecost màxim del vehicle amb pila perquè et surti igual de car que el cotxe amb motor IC?

Traduït d'aquesta col·lecció d'exercicis

### Resposta

a) La reacció de combustió és:

$$2 \text{ CH}_3 \text{OH} + 3 \text{ O}_2 \longrightarrow 2 \text{ CO}_2 + 4 \text{ H}_2 \text{O}$$

Tant el metanol com l'aigua són gasosos. La calor de combustió és:

$$\Delta H = -676.5 \,\mathrm{MJ \, kmol^{-1}}$$

Massa molar del metanol =  $32 \,\mathrm{g} \,\mathrm{mol}^{-1}$ . Per tant:

$$\frac{-676.5}{32} = -21.1 \,\mathrm{MJ \, kg^{-1}}$$

El metanol líquid hauria produït  $-20.0 \,\mathrm{MJ\,kg^{-1}}$ . La diferència és la calor de vaporització de l'alcohol. Aquesta calor és absorbida pel carburador de l'ambient. Cal notar que aquestes són calors de combustió que corresponen a l'aigua com a producte en forma de vapor.

b) L'energia elèctrica ideal generada és:

$$\Delta G = -685.3 \, \text{MJ kmol}^{-1}$$

Però amb oxigen a 0,2 atm, tenim:

$$\Delta G = -685.3 + 1.5 \cdot 4.0 = -679.3 \,\mathrm{MJ \, kmol}^{-1}$$

$$\Rightarrow \frac{-679.3}{32} = -21.2 \,\mathrm{MJ \, kg^{-1}}$$

c) Calor absorbida per la cèl·lula:

$$Q = |\Delta H| - |\Delta G| = 638.5 - 679.3 = 40.9 \,\text{MJ kmol}^{-1} \Rightarrow \frac{40.9}{32} = 1,28 \,\text{MJ kg}^{-1}$$

d) 
$$W_{\rm IC} = 0.2 \cdot 21.1 = 4,22 \, \rm MJ \, kg^{-1}$$
 
$$W_{\rm FC} = 0.6 \cdot 21.2 = 12,72 \, \rm MJ \, kg^{-1}$$
 Nou rendiment = 
$$\frac{12.72}{4.22} \cdot 10 = 30,13 \, \rm km \, L^{-1}$$

e) Distància anual =  $12 \cdot 2000 \,\mathrm{km} = 24\,000 \,\mathrm{km}$ Consum IC =  $\frac{24000}{10}$  = 2400 L, FC =  $\frac{24000}{30.13}$   $\approx 796.8$  L Cost IC =  $\frac{2400}{3.78} \cdot 2.4 \approx 1523.8 \, \text{€}, \quad \text{FC} = \frac{796.8}{3.78} \cdot 2.4 \approx 505.9 \, \text{€}$ Estalvi anual =  $1523.8 - 505.9 = 1017.9 \in$ 

#### Altres estalvis:

Igualant:

- No es necessita oli.
- Frenada regenerativa (estalvi de combustible i energia).
- Cap consum a les parades.
- Sense revisió de gasos.

f) 
$$\text{Cost IC} = 0.18 P_{\text{IC}} + 1524, \quad \text{Cost FC} = 0.18 P_{\text{FC}} + 502$$

$$0.18P_{\rm IC} + 1524 = 0.18P_{\rm FC} + 502 \Rightarrow P_{\rm FC} = P_{\rm IC} + 11250 \in$$

# Bibliografia

[1] 21.9: Polyamides and Polyesters - Step-Growth Polymers. en. Ag. de 2015. URL: https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Organic\_Chemistry/Organic\_Chemistry\_ (Morsch\_et\_al.)/21%3A\_Carboxylic\_Acid\_Derivatives-\_Nucleophilic\_Acyl\_Substitution\_Reactions/21.09%3A\_Polyamides\_and\_Polyesters\_-\_Step-Growth\_Polymers (cons. 04-05-2025).