

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 compiles a <https://biocomputing-teaching.github.io/WebQuimicaAutomocio/pdf/Exercise.pdf>

Exercici Autoavaluable I. Ratio d'empaquetament

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.

Exercici Autoavaluable II. Interacció Coulòmbica

L'energia potencial Coulòmbica entre dos ions es pot expressar com:

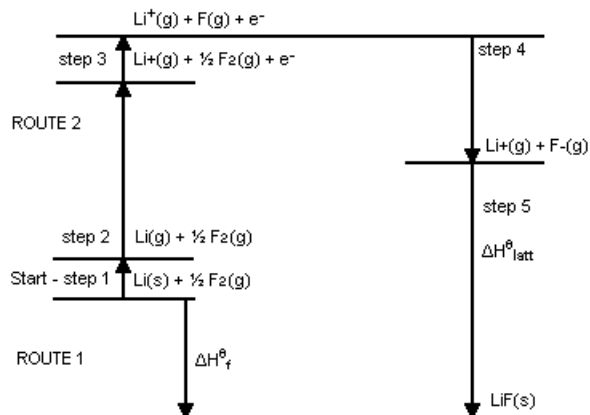
$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1)$$

on e és la càrrega de l'ió, ϵ_0 és la permitivitat del buit i r és la distància entre els ions.

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

Exercici Autoavaluable III. Born-Haber

Calcula l'energia reticular del Fluorur de Liti usant l'esquema del cicle de Born-Haber que en trobaras a la [Wikipedia](#):



sabent que:

- L'energia de sublimació del liti és 161 kJ mol^{-1} .
- L'energia d'ionització del liti és 520 kJ mol^{-1} .
- L'energia de dissociació del fluor és 158 kJ mol^{-1} .
- L'afinitat electrònica del fluor és -328 kJ mol^{-1} .
- L'energia de formació del compost és -617 kJ mol^{-1} .

Exercici Autoavaluable IV.

Compara, per a diferents tipus de sòlids (covalents, iònics, metàl·lics o moleculars), les següents característiques: pressió de vapor, punt de fusió, punt d'ebullició, duresa, fragilitat, conducció elèctrica en estat sòlid, i conducció elèctrica en estat líquid.

Exercici Autoavaluable V. Defectes de Frenkel

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

Exercici Autoavaluable VI. Defectes de Frenkel i Schottky

Si la densitat del clorur sòdic sense defectes és de 2.165 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 Autoavaluable VII.

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

Exercici Autoavaluable VIII.

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 Autoavaluable IX.

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

Exercici Autoavaluable X.

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 Autoavaluable XI.

Perquè a la Taula ??? no apareix la p_v de l'He, H_2 i CH_4 ?

Exercici Autoavaluable XII.

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

Exercici Autoavaluable XIII.

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

Exercici Autoavaluable XIV.

La pressió de vapor de l'aigua a 20 °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?

Solucions

Exercici Autoavaluable I. Ratio d'empaquetament

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.

Resposta

La ratio d'empaquetament (RE) es defineix com la fracció entre el volum ocupat pels àtoms en una cel · la unitat i el volum total de la cel · la.

1. Cúbica Centrada en la Cara

- Conté 4 àtoms per cel · la unitat.
- Relació entre el costat de la cel · la a i el radi atòmic r :

$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} \quad (2)$$

- Volum de la cel · la unitat:

$$V_{\text{cel} \cdot \text{la}} = a^3 = \left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^3 \quad (3)$$

- Volum ocupat pels àtoms:

$$V_{\text{àtoms}} = 4 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3 \quad (4)$$

- Ratio d'empaquetament:

$$RE = \frac{V_{\text{àtoms}}}{V_{\text{cel} \cdot \text{la}}} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^3} \approx 0.74 \quad (5)$$

2. Cúbica Centrada en el Cos

- Conté 2 àtoms per cel · la unitat.
- Relació entre el costat de la cel · la a i el radi atòmic r :

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} \quad (6)$$

- Volum de la cel · la unitat:

$$V_{\text{cel} \cdot \text{la}} = a^3 = \left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3 \quad (7)$$

- Volum ocupat pels àtoms:

$$V_{\text{àtoms}} = 2 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3 \quad (8)$$

- Ratio d'empaquetament:

$$RE = \frac{V_{\text{àtoms}}}{V_{\text{cel} \cdot \text{la}}} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} \approx 0.68 \quad (9)$$

Exercici Autoavaluable II. Interacció Coulòmbica

L'energia potencial Coulòmbica entre dos ions es pot expressar com:

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (10)$$

on e és la càrrega de l'ió, ϵ_0 és la permitivitat del buit i r és la distància entre els ions.

Se sap que una molècula gasosa de NaCl té una distància interatòmica de 2,38 Å. Quina és l'energia potencial Coulòmbica d'un mol d'aquestes molècules?

Resposta

L'energia potencial Coulòmbica entre dos ions es pot expressar com:

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (11)$$

on e és la càrrega de l'ió, ϵ_0 és la permitivitat del buit i r és la distància entre els ions.

Se sap que una molècula gasosa de NaCl té una distància interatòmica de 2,38 Å.

Calculant l'energia potencial per una parella d'ions:

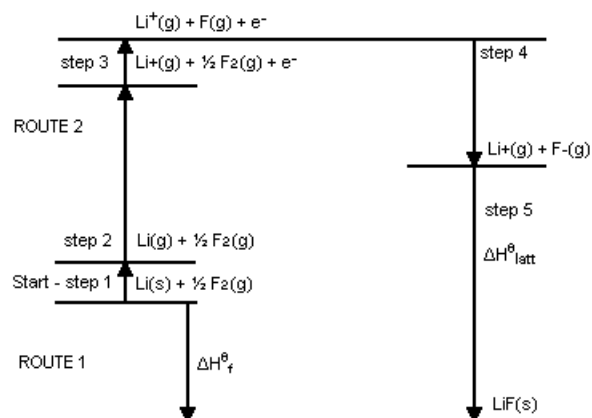
$$U = \frac{(1.602 \times 10^{-19} \text{C})^2}{4\pi(8.854 \times 10^{-12} \text{F m}^{-1})(2.38 \times 10^{-10} \text{m})} = 9,69 \times 10^{-19} \text{J} \quad (12)$$

Multiplicant per un mol de molècules ($6,022 \times 10^{23}$):

$$U_{\text{mol}} = U \times N_A = 583,76 \text{ kJ mol}^{-1} \quad (13)$$

Exercici Autoavaluable III. Born-Haber

Calcula l'energia reticular del Fluorur de Liti usant l'esquema del cicle de Born-Haber que en trobaras a la [Wikipedia](#):



sabent que:

- L'energia de sublimació del liti és 161 kJ mol^{-1} .
- L'energia d'ionització del liti és 520 kJ mol^{-1} .
- L'energia de dissociació del fluor és 158 kJ mol^{-1} .
- L'afinitat electrònica del fluor és -328 kJ mol^{-1} .
- L'energia de formació del compost és -617 kJ mol^{-1} .

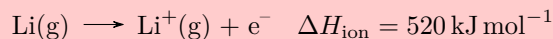
Resposta

L'energia reticular ($U_{\text{reticular}}$, ΔH_{lat} a l'esquema) es pot calcular mitjançant el cicle de Born-Haber, tenint en compte les dades proporcionades:

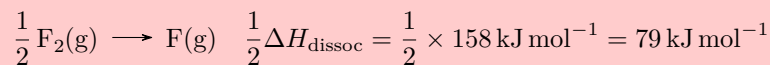
- Sublimació del liti:



- Ionització del liti:



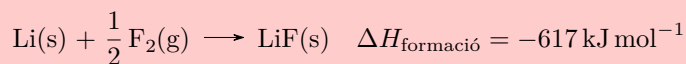
- Dissociació del fluor:



- Afinitat electrònica del fluor:



- Formació del compost iònic:



El cicle de Born-Haber en aquest cas estableix:

$$\Delta H_{\text{formació}} = \Delta H_{\text{sub}} + \Delta H_{\text{ion}} + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{dissoc}} + \Delta H_{\text{afin}} + U_{\text{reticular}} \quad (14)$$

o bé:

$$U_{\text{reticular}} = \Delta H_{\text{formació}} - (\Delta H_{\text{sub}} + \Delta H_{\text{ion}} + \frac{1}{2} \Delta H_{\text{dissoc}} + \Delta H_{\text{afin}}) \quad (15)$$

Substituint els valors:

$$\begin{aligned} U_{\text{reticular}} &= -617 \text{ kJ mol}^{-1} - (161 \text{ kJ mol}^{-1} + 520 \text{ kJ mol}^{-1} + 79 \text{ kJ mol}^{-1} + -328 \text{ kJ mol}^{-1}) \\ &= -1049 \text{ kJ mol}^{-1} \end{aligned}$$

Exercici Autoavaluable IV.

Compara, per a diferents tipus de sòlids (covalents, iònics, metàl·lics o moleculars), les següents característiques: pressió de vapor, punt de fusió, punt d'ebullició, duresa, fragilitat, conducció elèctrica en estat sòlid, i conducció elèctrica en estat líquid.

Resposta

Les característiques dels diferents tipus de sòlids són les següents:

Sòlids covalents: (com el diamant o el quars) tenen enllaços molt forts, donant lloc a punts de fusió i ebullició alts, però no condueixen l'electricitat.

Sòlids iònics: (com el NaCl) tenen punts de fusió alts i són fràgils. No condueixen l'electricitat en estat sòlid però sí en estat líquid.

Sòlids metàl·lics: (com el ferro o el coure) tenen punts de fusió variables i són bons conductors elèctrics tant en estat sòlid com líquid.

Sòlids moleculars: (com el gel o el diòxid de carboni sòlid) tenen forces intermoleculars febles, la qual cosa els dona baixos punts de fusió i ebullició i una pressió de vapor elevada.

Taula 1: Comparació de propietats dels diferents tipus de sòlids.

Propietat	Sòlids Covalents	Sòlids Iònics	Sòlids Metàl·lics	Sòlids Moleculars
Pressió de vapor	Molt baixa	Baixa	Baixa	Alta
Punt de fusió	Molt alt	Alt	Variable	Baix
Punt d'ebullició	Molt alt	Alt	Variable	Baix
Duresa	Molt dura	Dura	Variable	Tova
Fragilitat	Fràgil	Fràgil	No fràgil	Fràgil
Conducció elèctrica (sòlid)	No	No	Sí	No
Conducció elèctrica (líquid)	No	Sí	Sí	No

Exercici Autoavaluable V. Defectes de Frenkel

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

Resposta

El coure (Cu) té una estructura cúbica de cara centrada (FCC), amb una aresta de la cel·la unitària de 3.61\AA . En aquesta estructura, els intersticis poden ser ocupats per àtoms més petits sense distorsionar la xarxa si la mida d'aquests àtoms és adequada.

Els intersticis en una xarxa FCC es poden dividir en dues categories:

1. Intersticis octaèdrics: Un en cada vèrtex de la cel·la unitària.

2. Intersticis tetraèdrics: N'hi ha més en la xarxa, situats entre els àtoms de la xarxa.

L'àtom de zinc (Zn) té un radi atòmic similar al del coure. Aquest àtom es pot inserir en un interstici octaèdric sense distorsionar excessivament l'estructura.

Exercici Autoavaluable VI. Defectes de Frenkel i Schottky

Si la densitat del clorur sòdic sense defectes és de 2.165 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)

Resposta

- a) **Defectes de Frenkel:** Els defectes de Frenkel impliquen la creació d'un defecte en què un ió es mou fora de la seva posició normal, creant un buit i un ió fora de la seva posició. Aquesta redistribució no afecta el volum global del cristall, però sí que redueix la densitat. La nova densitat es calcula com:

$$\rho_f = \rho_0 \left(1 - \frac{n_f}{N}\right)$$

on $\rho_0 = 2,165 \text{ g/cm}^3$ és la densitat inicial, i $\frac{n_f}{N} = 10^{-3}$ és el ratio de defectes. Per tant:

$$\rho_f = 2.165 (1 - 10^{-3}) = 2.165 \times 0.999 = 2,1638 \text{ g/cm}^3$$

- b) **Defectes de Schottky:** Els defectes de Schottky impliquen la creació de parelles de vacants (un ió de clorur i un ió de sodi deixen els seus llocs). Això redueix el nombre d'ions presents, la qual cosa disminueix la densitat. La nova densitat es calcula com:

$$\rho_s = \rho_0 \left(1 - \frac{2n_s}{N}\right)$$

on $\frac{n_s}{N} = 10^{-3}$ és el ratio de defectes de Schottky. Per tant:

$$\rho_s = 2.165 (1 - 2 \times 10^{-3}) = 2.165 \times 0.998 = 2,1622 \text{ g/cm}^3$$

Exercici Autoavaluable VII.

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

Exercici Autoavaluable VIII.

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 Autoavaluable IX.

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 Autoavaluable X.

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 Autoavaluable XI.

Perquè a la Taula ?? no apareix la p_v de l'He, H_2 i CH_4 ?

Exercici Autoavaluable XII.

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

Exercici Autoavaluable XIII.

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

Exercici Autoavaluable XIV.

La pressió de vapor de l'aigua a 20°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?