

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. Combustió del benzè

Si 8,20 g de  $C_6H_6$  (benzè) es combinen amb oxigen en una reacció de combustió, quants grams d' $H_2O$  es produiran?

### Exercici Autoavaluable II. Fórmula 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. Fórmula 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?

### 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  $\Delta H_f = 6.01$  kJ/mol.

### Exercici Autoavaluable V. Energia interna de la combustió del grafit

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

**Exercici Autoavaluable VI. Energia interna de la combustió del propà**

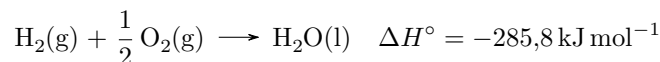
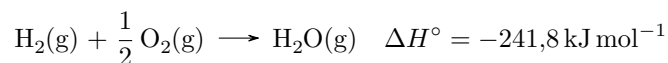
Determinar la variació d'energia interna per al procés de combustió d'1 mol de propà a 25 °C i 1 atm, si la variació d'entalpia, en aquestes condicions, val -2219,8 kJ.

**Exercici Autoavaluable VII. Calor normal de reacció**

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

**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**

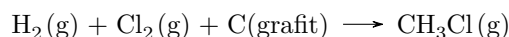
Tenint en compte aquestes energies d'enllaç:

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

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 Autoavaluable X. Entalpia de reacció**

Fent servir les dades de la taula d'energies d'enllaç, estima la calor alliberada a pressió constant en la reacció:



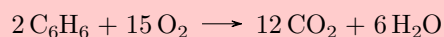
si la calor de vaporització del grafit a àtoms de carboni és de 170.9 kcal mol<sup>-1</sup>.

**Solucions****Exercici Autoavaluable I. Combustió del benzè**

Si 8,20 g de  $C_6H_6$  (benzè) es combinen amb oxigen en una reacció de combustió, quants grams d' $H_2O$  es produiran?

**Resposta**

Equació química equilibrada:



Massa molar de  $C_6H_6 = 6(12,01) + 6(1,008) = 78,11 \text{ g/mol}$

Massa molar d' $H_2O = 2(1,008) + 16,00 = 18,016 \text{ g/mol}$

$$8,20 \text{ g } C_6H_6 \times \frac{1 \text{ mol } C_6H_6}{78,11 \text{ g } C_6H_6} \times \frac{6 \text{ mols } H_2O}{2 \text{ mols } C_6H_6} \times \frac{18,016 \text{ g } H_2O}{1 \text{ mol } H_2O} = 5,68 \text{ g } H_2O$$

**Exercici Autoavaluable II. Fórmula 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  $CO_2$  conté 1 mol de carboni, per tant, utilitzem un factor de conversió:

$$\text{Massa molar de } CO_2 = 12,01 + 2(16,00) = 44,01 \text{ g/mol}$$

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

Cada mol de H<sub>2</sub>O conté 2 mols d'hidrogen:

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

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

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

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:

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

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

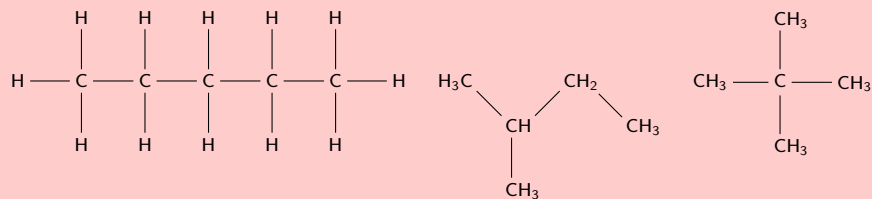
a partir d'aquests valors podem calcular la fórmula empírica, dividint per qualsevol dels dos i aleshores fent que els valors obtinguts siguin nombres enters:

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

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

Per obtenir nombres enters, multipliquem per 5, i obtenim la fórmula empírica del compost: C<sub>5</sub>H<sub>12</sub> (pentà). No sabem en quina forma es presentarà, però, el pentà de totes les mostrades a la taula:

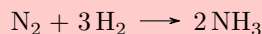
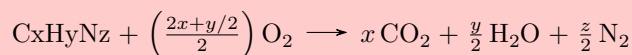
<i>n</i> -pentà	<i>iso</i> -pentà	<i>neo</i> -pentà
-----------------	-------------------	-------------------

**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.

Càlcul del nombre de mols de carboni

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

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

Càlcul 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 *adicional* per

transformar el nitrogen en un altre compost: amoníac):

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

Càlcul del nombre de mols de nitrogen:

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

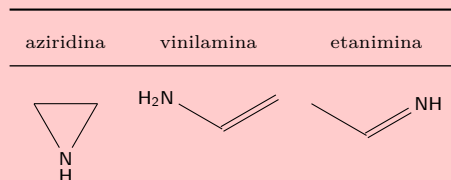
Dividim tots els valors entre el menor nombre de mols (0,1468):

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

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

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

La fórmula empírica del compost és  $\text{C}_2\text{H}_5\text{N}$ , que pot correspondre 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  $\Delta H_f = 6.01$  kJ/mol.

**Resposta**

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:

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

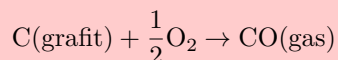
Per tant, l'increment d'energia interna en fondre 1 mol de gel és aproximadament 6.01 kJ/mol, no significativament diferent de l'increment d'entalpia.

**Exercici Autoavaluable V. Energia interna de la combustió del grafit**

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  $0,0053 \text{ L mol}^{-1}$ .

**Resposta**

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:

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

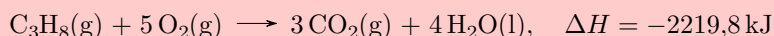


**Exercici Autoavaluable VI. Energia interna de la combustió del propà**

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 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**

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

**Resposta**

La reacció donada és:



Per calcular la calor normal de reacció, fem servir les entalpies de formació estàndard  $\Delta H_f^\circ$  de les substàncies implicades. Els valors típics són:

Compost	$\Delta H_f^\circ$ (kJ mol <sup>-1</sup> )
Fe <sub>2</sub> O <sub>3(s)</sub>	-824,2 kJ mol <sup>-1</sup>
H <sub>2(g)</sub>	0 kJ mol <sup>-1</sup>
Fe <sub>(s)</sub>	0 kJ mol <sup>-1</sup>
H <sub>2</sub> O <sub>(aq)</sub>	-285,8 kJ mol <sup>-1</sup>

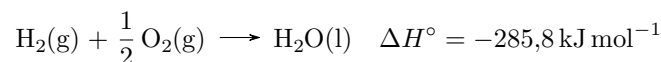
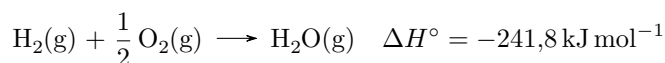
L'entalpia de reacció es calcula com:

$$\begin{aligned}\Delta H^\circ &= \sum \Delta H_f^\circ(\text{productes}) - \sum \Delta H_f^\circ(\text{reactius}) \\ &= [2 \times 0 \text{ kJ mol}^{-1} + 3 \times -285,8 \text{ kJ mol}^{-1}] - [-824,2 \text{ kJ mol}^{-1} + 3 \times 0 \text{ kJ mol}^{-1}] \\ &= [-857,4 \text{ kJ mol}^{-1}] - [-824,2 \text{ kJ mol}^{-1}] \\ &= -33,2 \text{ kJ mol}^{-1}\end{aligned}$$

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

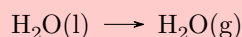
### Exercici Autoavaluable VIII. Entalpia de vaporització de l'aigua

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  $\text{C}\equiv\text{O}$  i el  $\text{CO}_2$  té dos dobles enllaços  $\text{O}=\text{C}=\text{O}$  (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:  $1077 \text{ kJ mol}^{-1}$
- 2 enllaços O-H a  $\text{H}_2\text{O}$ :  $2 \times 464 \text{ kJ mol}^{-1} = 928 \text{ kJ mol}^{-1}$

**Formació d'enllaços (allibera energia):**

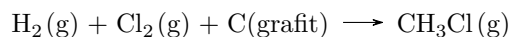
- 2 enllaços C-O a  $\text{CO}_2$ :  $2 \times 805 \text{ kJ mol}^{-1} = 1610 \text{ kJ mol}^{-1}$
- 1 enllaç H-H en  $\text{H}_2$ :  $436 \text{ kJ mol}^{-1}$

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. Entalpia de reacció**

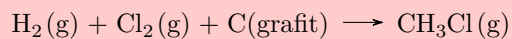
Fent servir les dades de la taula d'energies d'enllaç, estima la calor alliberada a pressió constant en la reacció:



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

**Resposta**

La reacció donada és:



Per calcular l'entalpia de reacció, utilitzem les energies d'enllaç de la taula corresponent i la calor de vaporització del grafit.

**Trencament d'enllaços (requereix energia):**

- H-H:  $104,2 \text{ kcal mol}^{-1}$
- Cl-Cl:  $57,8 \text{ kcal mol}^{-1}$
- C(grafit  $\rightarrow$  àtoms):  $170,9 \text{ kcal mol}^{-1}$

**Formació d'enllaços (allibera energia):**

- 3 enllaços C-H:  $3 \times 98,7 \text{ kcal mol}^{-1} = 296,1 \text{ kcal mol}^{-1}$
- 1 enllaç C-Cl:  $80 \text{ kcal mol}^{-1}$

El càlcul de l'entalpia de reacció és:

$$\begin{aligned}\Delta H &= \text{energia trencament} - \text{energia formació} \\ &= (104,2 \text{ kcal mol}^{-1} + 57,8 \text{ kcal mol}^{-1} + 170,9 \text{ kcal mol}^{-1}) \\ &\quad - (296,1 \text{ kcal mol}^{-1} + 80 \text{ kcal mol}^{-1}) \\ &= 332,9 \text{ kcal mol}^{-1} - 376,1 \text{ kcal mol}^{-1} \\ &= -43,2 \text{ kcal mol}^{-1}\end{aligned}$$