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 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'amoníac (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 $\Delta H_f = 6.01~\mathrm{kJ/mol.}$

Exercici Autoavaluable V. Energia interna de la combustió del grafit Càlcul 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): $-110.5 \,\mathrm{kJ}\,\mathrm{mol}^{-1}$. El grafit té un volum molar de $0,0053 \,\mathrm{L}\,\mathrm{mol}^{-1}$.

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 $-2219.8 \,\mathrm{kJ}$.

Exercici Autoavaluable VII. Calor normal de reacció

Calcula la calor normal de la reacció $Fe_2O_{3(s)} + 3H_{2(g)} \iff 2Fe_{(s)} + 3H_2O_{(aq)}$

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:

$$\mathrm{H_2(g)} + \frac{1}{2}\,\mathrm{O_2(g)} \,\longrightarrow\, \mathrm{H_2O(g)} \quad \Delta H^\circ = -241.8\,\mathrm{kJ}\,\mathrm{mol}^{-1}$$

$$\mathrm{H_2(g)} + \frac{1}{2}\,\mathrm{O_2(g)} \,\longrightarrow\, \mathrm{H_2O(l)} \quad \Delta H^\circ = -285.8\,\mathrm{kJ}\,\mathrm{mol}^{-1}$$

Exercici Autoavaluable IX. Entalpia de reacció

Tenint en compte aquestes energies d'enllaç:

	$E_b / \mathrm{kJ} \; \mathrm{mol}^{-1}$
C-O al monòxid de carboni	+1077
C-O al diòxid de carboni	+805
О-Н	+464
Н-Н	+436

Calcula l'entalpia de la reacció: $CO_{(g)} + H_2O_{(g)} \longrightarrow CO_{2(g)} + H_{2(g)}$

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:

$$H_2(g) + Cl_2(g) + C(grafit) \longrightarrow CH_3Cl(g)$$

si la calor de vaporització del grafit a àtoms de carboni és de 170.9 kcal mol⁻¹.

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:

$$2 C_6 H_6 + 15 O_2 \longrightarrow 12 CO_2 + 6 H_2 O$$

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

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

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

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 CO_2 conté 1 mol de carboni, per tant, utilitzem un factor de conversió:

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

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

Cada mol de H₂O conté 2 mols d'hidrogen:

Massa molar de
$$H_2O = 2(1,008) + 16,00 = 18,016$$
 g/mol

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

Massa total calculada =
$$10,426$$
 g C + $2,100$ g H = $12,526$ 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:

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

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

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: C₅H₁₂ (pentà). No sabem en quina forma es presentarà, però, el pentà de totes les mostrades a la taula:

> n-pentà iso-pentà neo-pentà

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'amoníac (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?

Resposta

Escrivim primer les equacions químiques:

$$\text{CxHyNz} + \left(\frac{2x+y/2}{2}\right) \text{O}_2 \longrightarrow x \text{CO}_2 + \frac{y}{2} \text{H}_2\text{O} + \frac{z}{2} \text{N}_2$$

$$N_2 + 3 H_2 \longrightarrow 2 NH_3$$

L'important és veure que tot el carboni (en forma de CO₂) que apareix a la primera equació prové del contingut al compost problema, com també passa amb tot l'hidrogen (en forma de H₂O) i tot el nitrogen en forma de NH₃. 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

$$12,923 \neq \mathrm{CO}_2 \times \frac{1 \text{ mol CO}_2}{44,011 \neq \mathrm{CO}_2} \times \frac{1 \text{ mol } C}{1 \text{ mol CO}_2}$$

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

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 addicional 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:

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

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

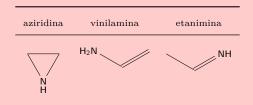
Dividim tots els valors entre el menor nombre de mols (0,1468):

$$\frac{0,29363}{0,1468} = 2 \pmod{C}$$

$$\frac{0,7334}{0.1468} = 5 \pmod{H}$$

$$\frac{0,1468}{0,1468} = 1 \pmod{N}$$

La fórmula empírica del compost és C_2H_5N , 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 $\Delta H_f = 6.01 \text{ kJ/mol.}$

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:

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

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 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): $-110.5 \,\mathrm{kJ}\,\mathrm{mol}^{-1}$. El grafit té un volum molar de $0.0053 \,\mathrm{L}\,\mathrm{mol}^{-1}$.

Resposta

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

$$C(grafit) + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO(gas)$$

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

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

on:

- ΔH és l'entalpia de combustió del grafit a CO.
- Δn_q és el canvi en el nombre de mols de gasos.
- R és la constant dels gasos ideals $(8,314 \,\mathrm{J}\,\mathrm{mol}^{-1}\,\mathrm{K}^{-1})$.
- \bullet 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 desaparicció del grafit (0,0053 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 $-110.5 \,\mathrm{kJ}\,\mathrm{mol}^{-1}$. Agafant la temperatura de 298 K:

$$\Delta U = -110.5 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1} - \frac{1}{2} \cdot 8.314 \,\mathrm{J} \,\mathrm{mol}^{-1} \,\mathrm{K}^{-1} \cdot 298 \,\mathrm{K} \times 10^{-3} \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{J}^{-1}$$
$$= -110.5 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1} - 1.239 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$$
$$= -111.739 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$$

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 $-2219.8 \,\mathrm{kJ}$.

Resposta

Escrivim primer la reacció igualada

$$C_3H_8(g) + 5 O_2(g) \longrightarrow 3 CO_2(g) + 4 H_2O(l), \quad \Delta H = -2219.8 \text{ kJ}$$

Increment de mols de gasos:

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

$$\Delta U = \Delta H - \Delta n \ R \ T$$

$$= -2219.8 \, \text{kJ} + 3 \, \text{mol} \times 8.3145 \times 10^{-3} \, \text{kJ} \, \text{mol}^{-1} \, \text{K}^{-1} \times 298 \, \text{K} = -2212 \, \text{kJ}$$

Exercici Autoavaluable VII. Calor normal de reacció

Calcula la calor normal de la reacció $Fe_2O_{3(s)} + 3H_{2(g)} \iff 2Fe_{(s)} + 3H_2O_{(aq)}$

Resposta

La reacció donada és:

$$Fe_2O_{3(s)} + 3H_{2(g)} \iff 2Fe_{(s)} + 3H_2O_{(aq)}$$

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

$$\begin{array}{ccc} \text{Compost} & \Delta H_f^{\circ} \ (\text{kJ mol}^{-1}) \\ \text{Fe}_2\text{O}_{3(\text{s})} & -824.2 \, \text{kJ mol}^{-1} \\ \text{H}_{2(\text{g})} & 0 \, \text{kJ mol}^{-1} \\ \text{Fe}_{(\text{s})} & 0 \, \text{kJ mol}^{-1} \\ \text{H}_2\text{O}_{(\text{aq})} & -285.8 \, \text{kJ mol}^{-1} \end{array}$$

L'entalpia de reacció es calcula com:

$$\Delta H^{\circ} = \sum \Delta H_f^{\circ}(\text{productes}) - \sum \Delta H_f^{\circ}(\text{reactius})$$

$$= [2 \times 0 + 3 \times (-285.8)] - [-824.2 + 3 \times 0]$$

$$= [-857.4] - [-824.2]$$

$$= -33.2 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Per tant, la calor normal de la reacció és $-33.2 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$.

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:

$$H_2(g) + \frac{1}{2} O_2(g) \longrightarrow H_2O(g) \quad \Delta H^{\circ} = -241.8 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$$

$$\mathrm{H_2(g)} + \frac{1}{2}\,\mathrm{O_2(g)} \,\longrightarrow\, \mathrm{H_2O(l)} \quad \Delta H^\circ = -285.8\,\mathrm{kJ}\,\mathrm{mol}^{-1}$$

Resposta

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

$$H_2O(1) \longrightarrow H_2O(g)$$

i es pot obtenir restant les dues equacions:

$$\Delta H_{\text{vap}}^{\circ} = \Delta H^{\circ}(H_2O(g)) - \Delta H^{\circ}(H_2O(l))$$

$$\Delta H_{\rm vap}^{\circ} = -241.8\,{\rm kJ\,mol}^{-1} - (-285.8\,{\rm kJ\,mol}^{-1}) = \Delta H_{\rm vap}^{\circ} = 44.0\,{\rm kJ\,mol}^{-1}$$

Exercici Autoavaluable IX. Entalpia de reacció

Tenint en compte aquestes energies d'enllaç:

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

Calcula l'entalpia de la reacció: $CO_{(g)} + H_2O_{(g)} \longrightarrow CO_{2(g)} + H_{2(g)}$

Resposta

La reacció donada és:

$$CO_{(g)} + H_2O_{(g)} \longrightarrow CO_{2(g)} + H_{2(g)}$$

on el CO té un triple enllaç ${\rm C}{\equiv}{\rm O}$ i el CO $_2$ 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 enllac C-O a CO: $1077 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$
- 2 enllacos O-H a H₂O: $2\times464 \text{ kJ mol}^{-1} = 928 \text{ kJ mol}^{-1}$

Formació d'enllaços (allibera energia):

- 2 enllaços C-O a CO₂: $2 \times 805 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1} = 1610 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$
- 1 enllaç H-H en H $_2$: $436 \,\mathrm{kJ} \,\mathrm{mol}^{-1}$

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

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

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:

$$H_2(g) + Cl_2(g) + C(grafit) \longrightarrow CH_3Cl(g)$$

si la calor de vaporització del grafit a àtoms de carboni és de 170.9 kcal mol⁻¹.

Resposta

La reacció donada és:

$$H_2(g) + Cl_2(g) + C(grafit) \longrightarrow CH_3Cl(g)$$

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: $104.2 \,\mathrm{kcal} \,\mathrm{mol}^{-1}$
- $Cl-Cl: 57.8 \text{ kcal mol}^{-1}$
- C(grafit \longrightarrow àtoms): 170,9 kcal mol⁻¹

Formació d'enllaços (allibera energia):

- 3 enllaços C-H: $3 \times 98.7 \,\mathrm{kcal} \,\mathrm{mol}^{-1} = 296.1 \,\mathrm{kcal} \,\mathrm{mol}^{-1}$
- 1 enllaç C-Cl: $80 \,\mathrm{kcal} \,\mathrm{mol}^{-1}$

El càlcul de l'entalpia de reacció és:

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