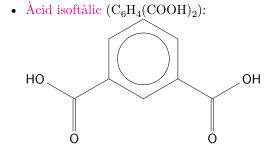
Resol els exercicis autoavaluables del tema i respon la consulta a moodle especificant quants d'ells has fet bé i quants malament. Respondre aquesta consulta és obligatori per poder accedir a propers lliuraments dins l'assignatura.

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.

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	$\Delta H_f^{\circ} (\mathrm{MJ  kmol}^{-1})$	$\Delta G_f^{\circ} (\mathrm{MJ}  \mathrm{kmol}^{-1})$
$CH_3OH(g)$	-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 per cada kg de combustible?

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.

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
$CH_3OH(1)$	-238.6	-166.2
$O_2(g)$	0	0
$CO_2(g)$	-393.5	-394.4
$H_2O(g)$	-241.8	-228.6
$H_2O(1)$	-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 per cada kg de combustible?

Traduït d'aquesta col·lecció d'exercicis

#### Resposta

Les dades venen donades en MJ kmol<sup>-1</sup>, que equivalen a kJ mol<sup>-1</sup>.

a. Quanta calor es genera cremant 1 kg de metanol en un motor de combustió interna (IC)?

En un motor de combustió interna, el metanol entra en forma gasosa, així que utilitzarem les entalpies de formació del metanol gasós i de l'aigua gasosa:

$$2 \operatorname{CH}_3 \operatorname{OH}(g) + 3 \operatorname{O}_2(g) \longrightarrow 2 \operatorname{CO}_2(g) + 4 \operatorname{H}_2 \operatorname{O}(g)$$

Podem calcular la calor de combustió utilitzant les entalpies de formació estàndard  $(\Delta H_f^{\circ})$  de les substàncies implicades:

$$\begin{split} \Delta H_r^\circ &= \sum \Delta H_f^\circ(\text{productes}) - \sum \Delta H_f^\circ(\text{reactius}) \\ &= [2 \cdot (-393.5) + 4 \cdot (-241.8)] - [2 \cdot (-201.2) + 3 \cdot 0] \\ &= [-787.0 + (-967.2)] - [-402.4 + 0] \\ &= (-1754.2) - (-402.4) \\ &= -1351.8 \text{ kJ/mol} \end{split}$$

Per tant, la calor de combustió és de  $-1351.8/2 = -675.9 \,\mathrm{MJ \, kmol}^{-1}$ . La massa molar del metanol és  $32 \,\mathrm{g} \,\mathrm{mol}^{-1} = 32 \,\mathrm{kg} \,\mathrm{kmol}^{-1}$ , per tant:

$$\frac{-675.9}{32} = -21.1 \,\mathrm{MJ \, kg^{-1}}$$

Així doncs, 1 kg de metanol produeix 21,1 MJ en un motor IC.

b. Quanta energia elèctrica produeix una pila de combustible ideal per kg de metanol?

L'energia elèctrica és igual a la variació d'energia lliure de Gibbs:

$$W_e = -\Delta G$$

Podem calcular l'energia d'una pila ideal de metanol utilitzant les energies lliures de formació ( $\Delta G_f^{\circ}$ ) de les substàncies implicades:

$$\Delta G_r^{\circ} = \sum \Delta G_f^{\circ} (\text{productes}) - \sum \Delta G_f^{\circ} (\text{reactius})$$

$$= [2 \cdot (-394.4) + 4 \cdot (-228.6)] - [2 \cdot (-161.9) + 3 \cdot 0]$$

$$= [-788.8 + (-914.4)] - [-323.8 + 0]$$

$$= (-1703.2) - (-323.8)$$

$$= -1379.4 \text{ kJ/mol}$$

Per tant, l'energia elèctrica produïda per la pila de combustible és  $de -1379.4/2 = -689,7 \,\mathrm{MJ\,kmol}^{-1}$ . La massa molar del metanol és  $32\,\mathrm{g\,mol}^{-1} = 32\,\mathrm{kg\,kmol}^{-1}$ . per tant, l'energia produïda en una pila ideal de metanol seria:

 $\frac{-689.7}{32} = -21.6 \,\mathrm{MJ \, kg^{-1}}$ 

# 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).