

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.

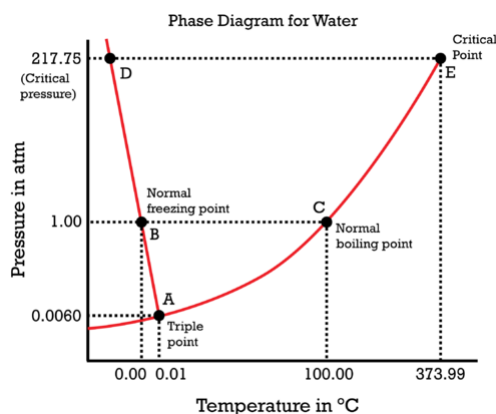
Les respostes als exercicis es poden trobar al final del document i també compilades a <https://biocomputing-teaching.github.io/WebQuimicaAutomocio/pdf/Exercise.pdf>

### Exercici Autoavaluable I. Vaporització de l'aigua en un recipient tancat

La pressió de vapor de l'aigua a 25 °C és de 23,76 torr. Si es tanquen 1,25 g d'aigua en un recipient de 1,5 L, hi haurà algun líquid present? Si és així, quina massa de líquid?

### Exercici Autoavaluable II. Diagrama de fases de l'aigua

Segons la imatge:



1. Quina és la temperatura de fusió de l'aigua a 1 atm?
2. Quina és la temperatura d'ebullició de l'aigua a 1 atm?
3. Quina és la pressió de vapor de l'aigua a 25 °C?
4. Quina és la pressió crítica de l'aigua?
5. Quina és la temperatura crítica de l'aigua?
6. A quines condicions de temperatura i pressió es troba l'aigua en estat líquid, sòlid i gasós, tots tres en equilibri?

7. Determina si l'aigua és sòlida, líquida o gasosa en cadascuna de les següents combinacions de temperatura i pressió:

- 1 atm i  $20^{\circ}\text{C}$
- 0.006 atm i  $100^{\circ}\text{C}$
- 210 atm i  $100^{\circ}\text{C}$
- 10 atm i  $50^{\circ}\text{C}$

Adaptat de [Libretexts Chemistry](#).

### Exercici Autoavaluable III. Termodinàmica de la vaporització de l'aigua

Calcular els canvis d'energia lliure, entalpia i entropia per a la vaporització de l'aigua líquida a la temperatura de  $100^{\circ}\text{C}$  i 1 atm de pressió, sabent que la calor de vaporització és  $40,7\text{ kJ mol}^{-1}$ .

### Exercici Autoavaluable IV. Manteniment d'un material a temperatura controlada

Un material molt sensible ha de mantenir-se a una temperatura propera a  $0^{\circ}\text{C}$  per evitar-ne la degradació. Es disposa únicament d'aigua i de metanol (tots dos a temperatura ambient) com a líquids, i de nitrogen líquid i gel sec (diòxid de carboni sòlid) com a agents refrigerants.

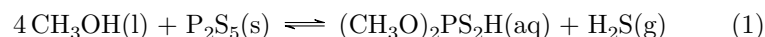
Quina combinació de líquid i agent refrigerant s'hauria d'utilitzar per crear un bany de refrigeració adequat? Justifica la resposta, sabent que:

- $\text{CO}_2(\text{s})$  sublima a  $-78,5^{\circ}\text{C}$ .
- $\text{N}_2(\text{l})$  bull a  $-195,8^{\circ}\text{C}$ .
- L'aigua congela a  $0^{\circ}\text{C}$ .
- El metanol congela a  $-143,7^{\circ}\text{C}$ .

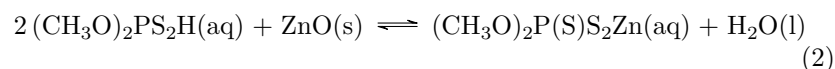
### Exercici Autoavaluable V. Propietats lubricants del ZDDP

La síntesi del Zinc Dialquilditiofosfat (ZDDP) es basa en la reacció entre l'àcid dialquilditiofosfòric i l'òxid de zinc:

1. Síntesi de l'àcid dialquilditiofosfòric  $((\text{CH}_3\text{O})_2\text{PS}_2\text{H})$ :



2. Síntesi del ZDDP  $((\text{CH}_3\text{O})_2\text{P}(\text{S})\text{S}_2\text{Zn})$ :



Fixem-nos en la Reacció 4. Es tracta d'una reacció reversible que pot assolir un equilibri químic.

1. Escriu l'expressió de la constant d'equilibri  $K_c$  per aquesta reacció.
2. Explica qualitativament com afecta la presència d'aigua ( $\text{H}_2\text{O}$ ) al desplaçament de l'equilibri i, en conseqüència, a la quantitat de ZDDP disponible.
3. Relaciona aquest desplaçament d'equilibri amb la capacitat del lubricant de protegir les superfícies metàl·liques.

### Exercici Autoavaluable VI. Calor de dissolució del $\text{CaCl}_2$

En un experiment de calorimetria, es vol determinar la calor de dissolució del  $\text{CaCl}_2$ .

- Es va fer passar un corrent de 1,03 A durant 23 s a través d'una resistència amb una diferència de potencial de 12,00 V.
  - Durant aquest procés, la temperatura de l'aigua del calorímetre va augmentar de 20,340 °C a 22,340 °C.
  - Posteriorment, es van dissoldre 2,45 g de  $\text{CaCl}_2$  sòlid en el calorímetre, provocant una pujada de temperatura de 20,34 °C a 26,22 °C.
1. Calcula el **factor de calibratge** del calorímetre en  $\text{J}^\circ\text{C}^{-1}$  (el factor de calibratge és la quantitat d'energia (en joules) necessària per augmentar la temperatura del calorímetre en 1°C).
  2. Calcula la **variació d'entalpia** ( $\Delta H$ ) de dissolució del  $\text{CaCl}_2$  en  $\text{kJ mol}^{-1}$ .

**Solucions****Exercici Autoavaluable I. Vaporització de l'aigua en un recipient tancat**

La pressió de vapor de l'aigua a 25 °C és de 23,76 torr. Si es tanquen 1,25 g d'aigua en un recipient de 1,5 L, hi haurà algun líquid present? Si és així, quina massa de líquid?

**Resposta**

Suposem que tota l'aigua s'evapora. Calculem quina pressió exerciria el vapor:

1. Calculem els mols d'aigua:

$$n = \frac{m}{M} = \frac{1,25 \text{ g}}{18,015 \text{ g mol}^{-1}} = 0,0694 \text{ mol}$$

2. Calculem la pressió que exerciria aquest vapor si tot s'evaporés, amb l'equació dels gasos ideals:

$$P = \frac{nRT}{V}$$

On:

- $R = 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
- $T = 298,15 \text{ K}$
- $V = 1,5 \text{ L} = 0,0015 \text{ m}^3$

$$P = \frac{0,0694 \times 8,314 \times 298,15}{0,0015} = 114\,624 \text{ Pa} = 861 \text{ Torr}$$

Com que  $861 \text{ Torr} \gg 23,76 \text{ Torr}$ , l'aigua no pot evaporar-se completament: s'assoleix la pressió de vapor abans.

Ara calculem quants mols serien necessaris per assolir només 23,76 Torr. Convertim primer aquesta pressió a unitats del SI:

$$23,76 \text{ Torr} \times \frac{1,013\,25 \times 10^5 \text{ Pa}}{760 \text{ Torr}} = 3165 \text{ Pa}$$

$$n = \frac{PV}{RT} = \frac{3165 \times 0,0015}{8,314 \times 298,15} = 0,000\,191 \text{ mol}$$

Convertim a massa:

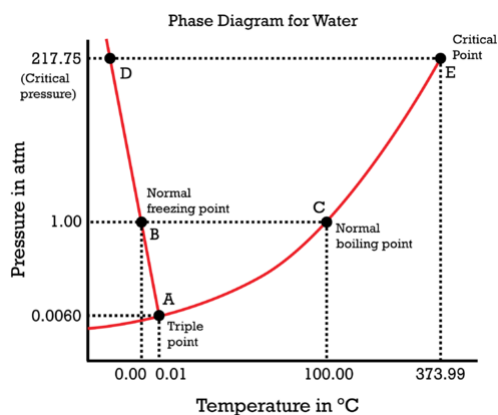
$$m = n \cdot M = 0,000191 \cdot 18,015 = 0,003\,44 \text{ g}$$

Això vol dir que només 0,003 44 g d'aigua s'evaporen per generar la pressió de vapor. Per tant, la massa d'aigua líquida que resta és:

$$1,25 \text{ g} - 0,003 44 \text{ g} = 1,2466 \text{ g}$$

### Exercici Autoavaluable II. Diagrama de fases de l'aigua

Segons la imatge:



1. Quina és la temperatura de fusió de l'aigua a 1 atm?
2. Quina és la temperatura d'ebullició de l'aigua a 1 atm?
3. Quina és la pressió de vapor de l'aigua a 25 °C?
4. Quina és la pressió crítica de l'aigua?
5. Quina és la temperatura crítica de l'aigua?
6. A quines condicions de temperatura i pressió es troba l'aigua en estat líquid, sòlid i gasós, tots tres en equilibri?
7. Determina si l'aigua és sòlida, líquida o gasosa en cadascuna de les següents combinacions de temperatura i pressió:
  - 1 atm i 20 °C
  - 0.006 atm i 100 °C
  - 210 atm i 100 °C
  - 10 atm i 50 °C

Adaptat de [Libretexts Chemistry](#).

**Resposta**

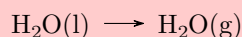
1. 0 °C
2. 100 °C
3. 0,0060 atm a 1 atm. En concret, 0,032 atm
4. 217,75 atm
5. 373,99 °C
6. 0,006 atm i 0,01 °C
7. (a) Líquid  
(b) Gas  
(c) Líquid  
(d) Líquid

**Exercici Autoavaluable III. Termodinàmica de la vaporització de l'aigua**

Calcular els canvis d'energia lliure, entalpia i entropia per a la vaporització de l'aigua líquida a la temperatura de 100 °C i 1 atm de pressió, sabent que la calor de vaporització és 40,7 kJ mol<sup>-1</sup>.

**Resposta**

Volem calcular els canvis d'energia lliure, entalpia i entropia per a la vaporització de l'aigua líquida:



L'entropia de vaporització és l'augment d'entropia durant la vaporització d'un líquid. Aquest augment és sempre positiu, ja que el grau de desordre augmenta en la transició d'un líquid en un volum relativament petit a un vapor o gas que ocupa un espai molt més gran. A pressió estàndard  $P^\ominus = 1 \text{ atm}$ , el valor es denota com  $\Delta S_{\text{vap}}^\ominus$  i normalment s'expressa en J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>.

Per a una transició de fase com la vaporització o la fusió (fusió d'un sòlid), ambdues fases poden coexistir en equilibri a temperatura i pressió constants i, per tant, en aquest cas l'increment d'energia lliure de Gibbs del procés és igual a zero:

$$\Delta G_{\text{vap}}^\ominus = \Delta H_{\text{vap}}^\ominus - T_{\text{vap}} \Delta S_{\text{vap}}^\ominus = 0,$$

on  $\Delta H_{\text{vap}}^{\ominus}$  és la calor o entalpia de vaporització. L'entropia de vaporització és llavors igual a la calor de vaporització dividida pel punt d'ebullició:

$$\Delta S_{\text{vap}}^{\ominus} = \frac{\Delta H_{\text{vap}}^{\ominus}}{T_{\text{vap}}}$$

Substituïm valors:

$$\Delta S_{\text{vap}}^{\ominus} = \frac{40,7 \times 10^3 \text{ J mol}^{-1}}{373,15 \text{ K}} = 109 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$\Delta H_{\text{vap}}^{\ominus} = 40,7 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta G_{\text{vap}}^{\ominus} = 0$$

#### Exercici Autoavaluable IV. Manteniment d'un material a temperatura controlada

Un material molt sensible ha de mantenir-se a una temperatura propera a  $0^{\circ}\text{C}$  per evitar-ne la degradació. Es disposa únicament d'aigua i de metanol (tots dos a temperatura ambient) com a líquids, i de nitrogen líquid i gel sec (diòxid de carboni sòlid) com a agents refrigerants.

Quina combinació de líquid i agent refrigerant s'hauria d'utilitzar per crear un bany de refrigeració adequat? Justifica la resposta, sabent que:

- $\text{CO}_2(\text{s})$  sublima a  $-78,5^{\circ}\text{C}$ .
- $\text{N}_2(\text{l})$  bull a  $-195,8^{\circ}\text{C}$ .
- L'aigua congela a  $0^{\circ}\text{C}$ .
- El metanol congela a  $-143,7^{\circ}\text{C}$ .

#### Resposta

Els refrigerants nitrogen líquid i gel sec ( $\text{CO}_2(\text{s})$ ) es transformen en gas a temperatures molt baixes. Un cop gasosos, ja no són "útils", ja que no poden ser afegits al bany. Per tant, si s'afegeixen quantitats suficients de qualsevol d'aquests refrigerants a qualsevol dels líquids disponibles, la temperatura del bany baixaria molt per sota del punt de congelació del líquid, resultant en un "bloc" sòlid en lloc d'un bany líquid.

Per sortir de l'atzucac, pensem en un got d'aigua amb gel. Si s'hi afegeix prou gel, l'aigua i el gel acabaran equilibrant-se a  $0^{\circ}\text{C}$ , que és el punt d'equilibri de l'aigua, on poden coexistir els estats sòlid i líquid (veure també Exercici III). Tot i que ara mateix no es disposa de gel, el mateix concepte es pot aplicar. Si s'afegeix massa refrigerant, tota l'aigua es congelarà. Però si s'hi afegeix només la quantitat justa, el bany de refrigeració es mantindrà a  $0^{\circ}\text{C}$ , formant un medi que és parcialment sòlid i parcialment líquid, ideal per mantenir la temperatura òptima del material sensible.

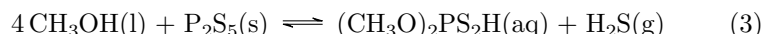
L'aigua és perfecta per aquest propòsit perquè roman líquida a  $0^{\circ}\text{C}$ , i no pot mantenir-se líquida a cap temperatura inferior. En canvi, com que l'metanol congela a  $-143,7^{\circ}\text{C}$ , afegir-hi gel sec o nitrogen líquid faria que el bany baixés molt més de  $0^{\circ}\text{C}$ , cosa que destruiria el material.

Així doncs, no importa quin refrigerant es faci servir: tant el gel sec com el nitrogen líquid poden portar l'aigua fins a  $0^{\circ}\text{C}$ . Tanmateix, l'metanol no es una opció.

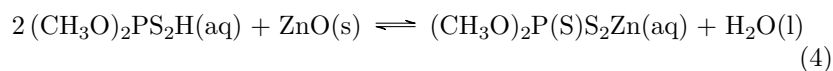
### Exercici Autoavaluable V. Propietats lubricants del ZDDP

La síntesi del Zinc Dialquilditiofosfat (ZDDP) es basa en la reacció entre l'àcid dialquilditiofosfòric i l'òxid de zinc:

1. Síntesi de l'àcid dialquilditiofosfòric  $((\text{CH}_3\text{O})_2\text{PS}_2\text{H})$ :



2. Síntesi del ZDDP  $((\text{CH}_3\text{O})_2\text{P}(\text{S})\text{S}_2\text{Zn})$ :



Fixem-nos en la Reacció 4. Es tracta d'una reacció reversible que pot assolir un equilibri químic.

1. Escriu l'expressió de la constant d'equilibri  $K_c$  per aquesta reacció.
2. Explica qualitativament com afecta la presència d'aigua ( $\text{H}_2\text{O}$ ) al desplaçament de l'equilibri i, en conseqüència, a la quantitat de ZDDP disponible.
3. Relaciona aquest desplaçament d'equilibri amb la capacitat del lubricant de protegir les superfícies metàl·liques.



**Resposta**

1. L'expressió de la constant d'equilibri és:

$$K_c = \frac{[(\text{CH}_3\text{O})_2\text{P}(\text{S})\text{S}_2\text{Zn}]}{[(\text{CH}_3\text{O})_2\text{PS}_2\text{H}]^2}$$

(L'activitat de sòlids i líquids purs, com ZnO i H<sub>2</sub>O, es considera constant i no apareix en  $K_c$ ).

2. Si s'acumula aigua al sistema (per exemple, per contaminació o degradació), segons el principi de Le Châtelier, l'equilibri es desplaçarà cap a l'esquerra, reduint la formació de ZDDP.
3. D'entrada, amb menys ZDDP disponible, es formaran menys capes protectores sobre les superfícies metàl·liques. Això comporta un augment del desgast i una disminució de la vida útil del lubricant i dels components mecànics. No obstant això, el ZDDP també pot actuar com a antioxidant i inhibidor de la corrosió, així que la seva presència és important per mantenir les propietats lubricants del lubricant. En general, un equilibri adequat entre la formació de ZDDP i la seva degradació és essencial per garantir un bon rendiment del lubricant.

**Exercici Autoavaluable VI. Calor de dissolució del CaCl<sub>2</sub>**

En un experiment de calorimetria, es vol determinar la calor de dissolució del CaCl<sub>2</sub>.

- Es va fer passar un corrent de 1,03 A durant 23 s a través d'una resistència amb una diferència de potencial de 12,00 V.
  - Durant aquest procés, la temperatura de l'aigua del calorímetre va augmentar de 20,340 °C a 22,340 °C.
  - Posteriorment, es van dissoldre 2,45 g de CaCl<sub>2</sub> sòlid en el calorímetre, provocant una pujada de temperatura de 20,34 °C a 26,22 °C.
1. Calcula el **factor de calibratge** del calorímetre en J °C<sup>-1</sup> (el factor de calibratge és la quantitat d'energia (en joules) necessària per augmentar la temperatura del calorímetre en 1°C).
  2. Calcula la **variació d'entalpia** ( $\Delta H$ ) de dissolució del CaCl<sub>2</sub> en kJ mol<sup>-1</sup>.

**Resposta****1. Factor de calibratge del calorímetre**

El factor de calibratge es calcula a partir de l'energia elèctrica subministrada al calorímetre i el canvi de temperatura resultant.

$$Q_{\text{elec}} = I \cdot V \cdot t$$

On:

$$I = 1,03 \text{ A}, \quad V = 12,00 \text{ V}, \quad t = 23 \text{ s}$$

Substituint els valors:

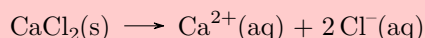
$$Q_{\text{elec}} = 1,03 \text{ A} \times 12,00 \text{ V} \times 23 \text{ s} = 284,64 \text{ J}$$

El canvi de temperatura és:

$$\Delta T = 22,340^\circ\text{C} - 20,340^\circ\text{C} = 2^\circ\text{C}$$

Per tant, el factor de calibratge del calorímetre és:

$$C_{\text{cal}} = \frac{Q_{\text{elec}}}{\Delta T} = \frac{284,64 \text{ J}}{2^\circ\text{C}} = 142,32 \text{ J }^\circ\text{C}^{-1}$$

**2. Variació d'entalpia de dissolució del  $\text{CaCl}_2$**  La dissolució del  $\text{CaCl}_2$  en aigua és un procés exotèrmic, i la reacció química es pot escriure com:

El calor mesurat pel calorímetre durant la dissolució del  $\text{CaCl}_2$  es pot trobar utilitzant el factor de calibratge i el canvi de temperatura:

$$\Delta T_{\text{dissol}} = 26,22^\circ\text{C} - 20,34^\circ\text{C} = 5,88^\circ\text{C}$$

$$Q_{\text{cal}} = C_{\text{cal}} \cdot \Delta T_{\text{dissol}} = 142,32 \text{ J }^\circ\text{C}^{-1} \times 5,88^\circ\text{C} = 836,98 \text{ J}$$

El nombre de mols de  $\text{CaCl}_2$  dissolts es calcula amb la massa i la massa molar del  $\text{CaCl}_2$ :

$$n_{\text{CaCl}_2} = \frac{m_{\text{CaCl}_2}}{M_{\text{CaCl}_2}} = \frac{2,45 \text{ g}}{111 \text{ g mol}^{-1}} = 0,0221 \text{ mol}$$

Finalment, la variació d'entalpia de dissolució del  $\text{CaCl}_2$  es calcula com:

$$\Delta H = \frac{Q_{\text{cal}}}{n_{\text{CaCl}_2}} = \frac{836,98 \text{ J}}{0,0221 \text{ mol}} = 37\,854,75 \text{ J mol}^{-1} = 38 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Tinguem en compte que la variació d'entalpia és negativa, ja que la dissolució del  $\text{CaCl}_2$  és un procés exotèrmic (notem que, en dissoldre la sal, s'apuja la temperatura del calorímetre). Per tant, la resposta final és  $-38 \text{ kJ mol}^{-1}$ .