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. Pressió pneumàtics

Un conductor comprova la pressió dels pneumàtics pel matí aviat, quan la temperatura és de  $15^{\circ}$ C, i és de  $1.3\times10^{5}$  Pa. Al migdia la temperatura és 15 graus més elevada. Quina és la pressió dels pneumàtics ara?.

#### Exercici Autoavaluable II. Gas ideal en CN

Calcular el volum molar d'un gas ideal a condicions normals (1 atm i 0°C).

#### Exercici Autoavaluable III. Comparativa TCG per a H<sub>2</sub> i He

Es prepara una mescla de gasos d'hidrogen  $(H_2)$  i heli (He) tal que les molècules de cada gas produeixin el mateix nombre de col·lisions amb la paret per unitat de temps. Determinem quin gas té la concentració més alta.

#### Exercici Autoavaluable IV. Pressions parcials aire

La composició percentual, en massa, de l'aire sec al nivell del mar és, aproximadament,  $N_2/O_2/Ar=75.5/23.2/1.3$ . Quina és la pressió parcial de cada component quan la pressió total és 1.20 atm?.

#### Exercici Autoavaluable V. Fracció metà en una mescla

Una barreja de metà  $\mathrm{CH_4}$  i d'acetilè  $\mathrm{C_2H_2}$  ocupava un cert volum a una pressió total de 63 mmHg. La mostra es va cremar a  $\mathrm{CO_2}$  i  $\mathrm{H_2O}$ . Se'n va recollir el  $\mathrm{CO_2}$  en el mateix volum inicial i la mateixa temperatura inicial, i es va veure que la seva pressió era de 96 mmHg. Quina era la fracció de metà a la mescla de gasos inicials?

#### Exercici Autoavaluable VI. Fòrmula molecular d'un compost gasós

Un compost gasós que se sap que conté només carboni, hidrogen i nitrogen es barreja amb el volum d'oxigen exactament necessari per a la seva combustió completa a  $\rm CO_2$ ,  $\rm H_2O$  i  $\rm N_2$ . La combustió de 9 volums de la mescla gasosa produeix 4 volums de  $\rm CO_2$ , 6 volums de vapor d'aigua i 2 volums de  $\rm N_2$ , tots a la mateixa temperatura i pressió.

Quants volums d'oxigen es necessiten per a la combustió? Quina és la fórmula molecular del compost?

# Exercici Autoavaluable VII. Pressió parcial $PCl_5$ en una mescla (adaptat de [2])

Una mostra de  $PCl_5$ , que pesa 2,69 g, es va col·locar en un flascó d'1,00 L i es va evaporar completament a una temperatura de 250 °C. La pressió observada a aquesta temperatura va ser 1,00 atm. Existeix la possibilitat que una part del  $PCl_5$  s'hagi dissociat d'acord amb l'equació:

$$PCl_5(g) \longrightarrow PCl_3(g) + Cl_2(g)$$
 [R1]

Quines són les pressions parcials del  $PCl_5$ ,  $PCl_3$  i  $Cl_2$  en aquestes condicions experimentals?

#### Exercici Autoavaluable VIII. Airbag (adaptat de [1])

Els coixins de seguretat (airbag) dels cotxes s'inflen mitjançant una sèrie de reaccions químiques ràpides que produeixen gas en menys de  $0,04\,\mathrm{s}$ . En les seves primeres versions, la reacció es basava en la descomposició de NaN<sub>3</sub> (extremadament tòxic), seguida de dues reaccions addicionals per neutralitzar els subproductes perillosos. Les equacions químiques d'aquest procés són:

$$2 \operatorname{NaN}_3 \longrightarrow 2 \operatorname{Na} + 3 \operatorname{N}_2(g)$$
 [R2]

$$10 \,\mathrm{Na} + 2 \,\mathrm{KNO_3} \longrightarrow \mathrm{K_2O} + 5 \,\mathrm{Na_2O} + \mathrm{N_2(g)} \tag{R3}$$

$$K_2O + Na_2O + 2SiO_2 \longrightarrow K_2SiO_3 + Na_2SiO_3$$
 [R4]

Un coixí de seguretat de conductor té un volum aproximat de  $65\,\mathrm{L}$  i la pressió final dins del coixí és de 1,35 atm. La temperatura dins del coixí just després de la reacció és  $300\,^{\circ}\mathrm{C}$  (573 K). Suposem que s'utilitzen  $65\,\mathrm{g}$  de NaN3.

- 1. Quina quantitat de nitrogen gas  $(N_2)$  es genera en mols només en la primera reacció?
- 2. Quin volum ocuparà aquest gas dins del coixí de seguretat segons la llei dels gasos ideals? És suficient aquest volum per inflar completament el coixí de seguretat?

- 3. Si considerem també la segona reacció, que genera més nitrogen gas, com afectaria això el volum total de gas produït?
- 4. Quan el gas s'expandeix a l'exterior a través dels orificis del coixí, la seva pressió baixa de 1,35 atm a 1,00 atm. Quin percentatge de reducció de temperatura es produeix durant aquesta expansió?

### Exercici Autoavaluable IX. Relació $\frac{C_P}{C_V}$

Perquè hi ha diferències entre els quocients de capacitat calorífica  $(C_P/C_V)$  de gasos monoatòmics respecte els diatòmics? (Adona't que si un gas monoatòmic ideal, pel fet d'estar només augmentant la seva energia cinètica translacional té una  $C_V = \frac{3}{2}R$ , es pot entendre que per a cada component (eix) necessita  $\frac{1}{2}R$ )

#### Exercici Autoavaluable X. Comportament no ideal d'un gas

Perquè  $\mathrm{CO}_2$  i  $\mathrm{O}_2$  tenen una desviació negativa respecte al comportament del gas ideal a pressions i temperatures moderades, mentres que l'He i el  $\mathrm{H}_2$  presenten una deviació positiva en les mateixes condicions?

#### Solucions

#### Exercici Autoavaluable I. Pressió pneumàtics

Un conductor comprova la pressió dels pneumàtics pel matí aviat, quan la temperatura és de  $15^{\circ}$ C, i és de  $1.3\times10^{5}$  Pa. Al migdia la temperatura és 15 graus més elevada. Quina és la pressió dels pneumàtics ara?

#### Resposta

Les dades són:

• Pressió inicial:  $P_1 = 1.3 \times 10^5 \,\mathrm{Pa}$ 

• Temperatura inicial:  $T_1 = 15$  °C = 288 K

• Temperatura final:  $T_2 = 30 \,^{\circ}\text{C} = 303 \,\text{K}$ 

• Suposem que el volum dels pneumàtics es manté constant.

Com que el volum no canvia, podem utilitzar la llei de Gay-Lussac per determinar la pressió final:

$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$$

Aïllant  $P_2$ :

$$P_2 = P_1 \times \frac{T_2}{T_1} = (1.3 \times 10^5 \,\text{Pa}) \times \frac{303 \,\text{K}}{288 \,\text{K}} = (1.3 \times 10^5 \,\text{Pa}) \times 1.0521 = 1.37 \times 10^5 \,\text{Pa}$$

#### Exercici Autoavaluable II. Gas ideal en CN

Calcular el volum molar d'un gas ideal a condicions normals (1 atm i 0°C).

#### Resposta

Les condicions normals (CN) per a un gas ideal són:

• Pressió: P = 1 atm

• Temperatura: T = 0 °C = 273,15 K

• Constant dels gasos:  $R = 0.0821 \,\mathrm{Latm} \,\mathrm{mol}^{-1} \,\mathrm{K}^{-1}$ 

L'equació dels gasos ideals és:

$$PV = nRT$$

Aïllem el volum molar  $V_m$ , considerant n=1 mol:

$$V_m = \frac{RT}{P}$$

Substituïm les dades:

$$V_m = \frac{(0.0821 \,\mathrm{L\,atm\,mol}^{-1}\,\mathrm{K}^{-1}) \times (273.15\,\mathrm{K})}{1\,\mathrm{atm}} \approx 22.4 \,\mathrm{L\,mol}^{-1}$$

#### Exercici Autoavaluable III. Comparativa TCG per a $\mathrm{H}_2$ i He

Es prepara una mescla de gasos d'hidrogen  $(H_2)$  i heli (He) tal que les molècules de cada gas produeixin el mateix nombre de col·lisions amb la paret per unitat de temps. Determinem quin gas té la concentració més alta.

#### Resposta

#### Consideració com a gasos ideals

L'energia cinètica translacional d'un mol de gas és

$$\langle E_c \rangle = N_0 \frac{m \langle c^2 \rangle}{2} = \frac{3}{2} RT$$

on  $M = N_0 m$  és la massa molecular del gas en kg mol<sup>-1</sup>.

Per tant, la velocitat quadràtica mitjana és:

$$c_{\rm rms} = \sqrt{\frac{3RT}{M}} \tag{1}$$

Com que la taxa de col·lisions amb la paret és proporcional a  $nv_{\rm rms}$ , imposem la condició d'igualtat:

$$n_{\rm H_2} \cdot \sqrt{\frac{3RT}{M_{\rm H_2}}} = n_{\rm He} \cdot \sqrt{\frac{3RT}{M_{\rm He}}} \tag{2}$$

A l'Eq. 2 hem usat que el nombre de col·lisions és proporcional al producte del nombre de molècules per la velocitat promig a la que es mouen. Per a

entendre-ho, imaginem un cas simple de tres pilotes que es mouen a 10 m/s en línia recta i fan rebots entre dues parets d'una habitació. Si l'habitació fa 10 metres de llarg, en 10 segons cada pilota haurà tocat les parets 10 cops. Per tant, el nombre de xocs haurà estat 30. Si enlloc de 3 pilotes en tinguéssim 10 que es mouen a 3 metres per segon, haurien tocat les parets també 30 cops (cada pilota, en 10 segons, hauria recorregut 30 metres, i per tant hauria xocat 3 cops contra les parets; com que tenim 10 pilotes, el nombre total de xocs és 30).

Substituint masses moleculars  $M_{\rm H_2}=2$  g/mol i  $M_{\rm He}=4$  g/mol a l'Eq. 2:

$$n_{\rm H_2} \cdot \sqrt{\frac{1}{2}} = n_{\rm He} \cdot \sqrt{\frac{1}{4}} \tag{3}$$

$$n_{\rm H_2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = n_{\rm He} \cdot \frac{1}{2} \tag{4}$$

Resolent per  $n_{\rm H_2}$ :

$$n_{\rm H_2} = \frac{n_{\rm He}}{\sqrt{2}} \tag{5}$$

Per tant, la concentració de  $H_2$  ha de ser més baixa que la de He. És a dir, si volem igualar les vegades que xoquen contra les parets d'un volum les molècules d'He i d'H2, hem de plantejar l'expressió d'igualtat de l'Eq.  $\frac{2}{2}$  on la partícula amb més massa, pel fet d'anar més lenta, necessitarà més partícules en moviment, és a dir, més concentració.

#### Consideració com a gasos no ideals

Si considerem gasos reals, hem de corregir la velocitat mitjana tenint en compte el factor de compressibilitat Z:

$$v_{\rm rms} = \sqrt{\frac{3ZRT}{M}} \tag{6}$$

Ara, l'Eq. 2 es transforma en:

$$n_{\rm H_2} \cdot \sqrt{\frac{3Z_{\rm H_2}RT}{M_{\rm H_2}}} = n_{\rm He} \cdot \sqrt{\frac{3Z_{\rm He}RT}{M_{\rm He}}}$$

d'on

$$\frac{n_{\rm H_2}}{n_{\rm He}} = \sqrt{\frac{\frac{3Z_{\rm He}RT}{M_{\rm He}}}{\frac{3Z_{\rm H_2}RT}{M_{\rm H_2}}}} = \sqrt{\frac{Z_{\rm He}M_{\rm H_2}}{Z_{\rm H_2}M_{\rm He}}}$$

A pressions altes,  $Z_{\rm H_2} > Z_{\rm He}$  per les interaccions intermoleculars més fortes d'hidrogen (veure la Fig. ?? del tema 1), la qual cosa encara reforça més la diferència entre les concentracions de les dues expècies químiques.

#### Exercici Autoavaluable IV. Pressions parcials aire

La composició percentual, en massa, de l'aire sec al nivell del mar és, aproximadament,  $N_2/O_2/Ar=75.5/23.2/1.3$ . Quina és la pressió parcial de cada component quan la pressió total és 1.20 atm?.

#### Resposta

En 100gr d'aire tindrem 75.5, 23.2 i 1.3 gr de  $N_2$ ,  $O_2$  i Ar, respectivament. Podem calcular la seva fracció molar calculant el número de mols de cadascun i dividint pel total. Després, només cal multiplicar per la pressió corresponent i sabrem la pressió parcial de cada component:

$$\begin{split} n_{\mathrm{N_2}} &= 75.5 \text{g} \cdot \frac{1mol}{28.02 \text{g}} = 2.69 mol \\ n_{\mathrm{O_2}} &= 23.2 \text{g} \cdot \frac{1mol}{32.00 \text{g}} = 0.725 mol \\ n_{\mathrm{Ar}} &= 1.3 \text{g} \cdot \frac{1mol}{39.95 \text{g}} = 0.033 mol \end{split}$$

	$N_2$	$O_2$	Ar
Fracció molar	0.780	0.210	0.0096
Pressió parcial (nivell del mar)/atm	0.780	0.210	0.0096
Pressió parcial $(P_T = 1.20 \text{atm}))/\text{atm}$	0.936	0.252	0.012

#### Exercici Autoavaluable V. Fracció metà en una mescla

Una barreja de metà  $\mathrm{CH_4}$  i d'acetilè  $\mathrm{C_2H_2}$  ocupava un cert volum a una pressió total de 63 mmHg. La mostra es va cremar a  $\mathrm{CO_2}$  i  $\mathrm{H_2O}$ . Se'n va recollir el  $\mathrm{CO_2}$  en el mateix volum inicial i la mateixa temperatura inicial, i es va veure que la seva pressió era de 96 mmHg. Quina era la fracció de metà a la mescla de gasos inicials?

#### Resposta

#### OPCIÓ 1:

Definim x com la fracció molar de metà (CH<sub>4</sub>) i y com la fracció molar d'acetilè (C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>):

$$x + y = 1$$

Les reaccions de combustió són:

$$CH_4 + 2O_2 \longrightarrow CO_2 + 2H_2O$$
 (7)

$$C_2H_2 + \frac{5}{2}O_2 \longrightarrow 2CO_2 + H_2O$$
 (8)

on veiem que 1 mol de  $CH_4$  produeix 1 mol de  $CO_2$  i que 1 mol de  $C_2H_2$  produeix 2 mols de  $CO_2$ . Si tenim un nombre total de mols n, llavors:

- Mols de metà: xn
- Mols d'acetilè: yn

Els mols de  $CO_2$  formats són:

$$n_{\rm CO_2} = xn + 2yn$$

Com que el volum i la temperatura es mantenen constants, segons la llei dels gasos ideals la pressió és directament proporcional als mols:

$$P_{\text{CO}_2} = (xn + 2yn) \cdot \frac{P_{\text{total}}}{n}$$

Substituint els valors donats:

$$96 = (x + 2y) \cdot 63$$

d'on

$$x + 2y = \frac{32}{21}$$

Ara ja podem resoldre el sistema:

$$x + y = 1 \tag{9}$$

$$x + 2y = \frac{32}{21} \tag{10}$$

i obtenim

$$x = 1 - \frac{11}{21} = \frac{10}{21}$$

Per tant, la fracció de metà en la mescla inicial és:

$$\frac{10}{21} \approx 0.476$$
 o  $47.6\%$ 

#### OPCIÓ 2:

Definim les pressions parcials inicials com  $P^i_{\mathrm{CH}_4}=x$  i  $P^i_{\mathrm{C}_2\mathrm{H}_2}=y$ . Segons les Equacions 7 i 8, les pressions finals seran  $P^f_{\mathrm{CH}_4}=x$  i  $P^f_{\mathrm{C}_2\mathrm{H}_2}=2y$ . Sabent que la pressió total inicial és 63 mmHg i que la final és 96 mmHg, obtenim el sistema:

$$\begin{cases} x + y = 63 \\ x + 2y = 96 \end{cases}$$

Solucionant-lo, obtenim que  $x=30\,\mathrm{mmHg}$  i  $y=33\,\mathrm{mmHg}$  que impliquen fraccions molars inicial de  $\chi^i_{\mathrm{CH}_4}=30/63=0.476$  i  $\chi^i_{\mathrm{C}_2\mathrm{H}_2}=33/63=0.523$ .

Notar que usar la llei dels gasos ideals i, per tant, observar que podem treballar indistintament amb nombre de mols o pressions parcials sempre que la reacció involcri gasos, simplifica la resolució de l'exercici.

#### Exercici Autoavaluable VI. Fòrmula molecular d'un compost gasós

Un compost gasós que se sap que conté només carboni, hidrogen i nitrogen es barreja amb el volum d'oxigen exactament necessari per a la seva combustió completa a  $\rm CO_2$ ,  $\rm H_2O$  i  $\rm N_2$ . La combustió de 9 volums de la mescla gasosa produeix 4 volums de  $\rm CO_2$ , 6 volums de vapor d'aigua i 2 volums de  $\rm N_2$ , tots a la mateixa temperatura i pressió.

Quants volums d'oxigen es necessiten per a la combustió? Quina és la fórmula molecular del compost?

#### Resposta

Sigui la fórmula molecular del compost gasós, CxHyNz. La seva combustió completa segueix l'equació general:

$$CxHyNz + \frac{2x + y/2}{2}O_2 \longrightarrow xCO_2 + \frac{y}{2}H_2O + \frac{z}{2}N_2$$

Sabem que la combustió de 9 volums de la mescla gasosa produeix:

- 4 volums de  $CO_2 \Rightarrow x = 4$ .
- 6 volums de  ${\rm H_2O} \Rightarrow y=12$  (perquè cada mol d'aigua conté 2 àtoms d'hidrogen).
- 2 volums de  $N_2 \Rightarrow z = 4$  (perquè cada mol de  $N_2$  prové de 2 àtoms de nitrogen).

Dividint tots els valors pel més petit, obtenim la fórmula empírica del compost:  $[C_1H_3N_1]_n$ . Realment no sabem si és  $C_1H_3N_1$ ,  $C_2H_6N_2$ ,  $C_4H_{12}N_4$ , etc. Per tal de determinar-ho, mirem quina de les fòrmules moleculars compleix les restriccions del nombre de volums inicials i finals.

• Suposem que la molècula sigui  $C_4H_{12}N_4$ . En aquest cas, la reacció de combustió és:

$$C_4H_{12}N_4 + 7O_2 \longrightarrow 4CO_2 + 6H_2O + 2N_2$$

que, si agafem els coeficients directament com a nombre de volums ens diu que de 8 volums a reactius es generen 12 volums a productes. Per tant, aquesta opció no compleix les restriccions.

- Suposem que sigui  $C_2H_6N_2$ . En aquest cas, la reacció seria:

$$C_2H_6N_2+\frac{7}{2}\,O_2\,\longrightarrow\,2\,CO_2+3\,H_2O\,+\,N_2$$

En aquest cas, el nombre de mols a esquerra i dreta és, respectivament, 4.5 i 6 que sí compleixen la proporció de volums donada en l'enunciat.

Per tant, la fórmula molecular del compost és C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>.

Per tal que el nombre de volums de productes sigui 12, com ens demana l'enunciat, hem de multiplicar per 2 tota l'expressió i així trobem els volums que hem de tenir d'oxigen:

$$2 C_2 H_6 N_2 + 7 O_2 \longrightarrow 4 CO_2 + 6 H_2 O + 2 N_2$$

És a dir, que per obtenir 12 volums de productes a partir de 9 de reactius, la proporció compost:oxigen ha de ser 2:7. Necessitem, doncs, 7 volums d'oxigen i 2 de compost per fer la reacció amb les dades donades.

# Exercici Autoavaluable VII. Pressió parcial $PCl_5$ en una mescla (adaptat de [2])

Una mostra de  $PCl_5$ , que pesa 2,69 g, es va col·locar en un flascó d'1,00 L i es va evaporar completament a una temperatura de 250 °C. La pressió observada a aquesta temperatura va ser 1,00 atm. Existeix la possibilitat que una part del  $PCl_5$  s'hagi dissociat d'acord amb l'equació:

$$PCl_5(g) \longrightarrow PCl_3(g) + Cl_2(g)$$
 [R5]

Quines són les pressions parcials del  $\mathrm{PCl}_5,\ \mathrm{PCl}_3$  i  $\mathrm{Cl}_2$  en aquestes condicions experimentals?

#### Resposta

La solució d'aquest problema implica diverses etapes. Per determinar si s'ha dissociat una part del  $PCl_5$ , calculem primerament la pressió que s'hauria observat si no s'hagués dissociat el  $PCl_5$ . Això es pot calcular a partir del nombre de mols de  $PCl_5$  utilitzats, juntament amb el volum i la temperatura del flascó. Com que el pes molecular del  $PCl_5$  és  $208\,\mathrm{g\,mol^{-1}}$ , el nombre de mols de  $PCl_5$  inicialment presents en el flascó és:

$$n = 2,69 \,\mathrm{g} \cdot \frac{1 \mathrm{mol}}{208 \,\mathrm{g}} = 0.0129 \mathrm{mol}.$$

La pressió corresponent a aquest nombre de mols seria:

$$P = \frac{nRT}{V} = \frac{(0.0129 \text{mol})(0.082 \,\text{L}\,\text{atm}\,\text{mol}^{-1}\,\text{K}^{-1})(523.15\,\text{K})}{1.00\,\text{L}} = 0.553\,\text{atm}.$$

Com que la pressió observada és superior a aquesta, s'ha de produir certa dissociació del  $PCl_5$ . Aplicant la llei de les pressions parcials, podem escriure:

$$P_{\text{PCl}_z} + P_{\text{PCl}_z} + P_{\text{Cl}_z} = P_t = 1,00 \,\text{atm.}$$
 (11)

Ara observem que:

Atès que es produeix un mol de  $\mathrm{PCl}_3$  i un mol de  $\mathrm{Cl}_2$  per cada mol de  $\mathrm{PCl}_5$  dissociat,

$$P_{\text{Cl}_2} = P_{\text{PCl}_3}, \quad P_{\text{PCl}_5} = 0.553 \,\text{atm} - P_{\text{Cl}_2}.$$

i podem reescriure l'Equació 11 com:

$$0.553 \, \text{atm} - P_{\text{Cl}_2} + P_{\text{Cl}_2} + P_{\text{Cl}_2} = 1.00 \, \text{atm}.$$

Resolent, obtenim:

$$P_{\text{Cl}_2} = 0.447 \,\text{atm},$$

i

$$P_{\text{PCl}_3} = 0.447 \, \text{atm}, \quad P_{\text{PCl}_5} = 0.106 \, \text{atm}.$$

#### Exercici Autoavaluable VIII. Airbag (adaptat de [1])

Els coixins de seguretat (airbag) dels cotxes s'inflen mitjançant una sèrie de reaccions químiques ràpides que produeixen gas en menys de  $0.04\,\mathrm{s}$ . En les seves primeres versions, la reacció es basava en la descomposició de NaN<sub>3</sub> (extremadament tòxic), seguida de dues reaccions addicionals per neutralitzar els subproductes perillosos. Les equacions químiques d'aquest procés són:

$$2 \operatorname{NaN}_3 \longrightarrow 2 \operatorname{Na} + 3 \operatorname{N}_2(g)$$
 [R6]

$$10 \,\mathrm{Na} + 2 \,\mathrm{KNO_3} \longrightarrow \mathrm{K_2O} + 5 \,\mathrm{Na_2O} + \mathrm{N_2(g)} \qquad [\mathrm{R7}]$$

$$K_2O + Na_2O + 2SiO_2 \longrightarrow K_2SiO_3 + Na_2SiO_3$$
 [R8]

Un coixí de seguretat de conductor té un volum aproximat de  $65\,\mathrm{L}$  i la pressió final dins del coixí és de  $1,35\,\mathrm{atm}$ . La temperatura dins del coixí just després de la reacció és  $300\,^{\circ}\mathrm{C}$  ( $573\,\mathrm{K}$ ). Suposem que s'utilitzen  $65\,\mathrm{g}$  de  $\mathrm{NaN_3}$ .

- 1. Quina quantitat de nitrogen gas  $(\mathrm{N}_2)$ es genera en mols només en la primera reacció?
- 2. Quin volum ocuparà aquest gas dins del coixí de seguretat segons la llei dels gasos ideals? És suficient aquest volum per inflar completament el coixí de seguretat?
- 3. Si considerem també la segona reacció, que genera més nitrogen gas, com afectaria això el volum total de gas produït?
- 4. Quan el gas s'expandeix a l'exterior a través dels orificis del coixí, la seva pressió baixa de 1,35 atm a 1,00 atm. Quin percentatge de reducció de temperatura es produeix durant aquesta expansió?

#### Resposta

1. La quantitat de nitrogen gas (N2) generada a R6 ve donada per la descomposició de NaN3:

$$2 \operatorname{NaN}_3 \longrightarrow 2 \operatorname{Na} + 3 \operatorname{N}_2(g)$$

Primer, calculem el nombre de mols de  $NaN_3$  disponibles:

$$n_{\text{NaN}_3} = \frac{65 \,\mathrm{g \, NaN}_3}{65,019 \,\mathrm{g \, mol}^{-1} \,\mathrm{NaN}_3} = 1,00 \,\mathrm{mol} \,\mathrm{NaN}_3$$
 (12)

De l'estequiometria de la reacció, per cada  $2\,\mathrm{mol}$  de  $\mathrm{NaN_3},$  es formen  $3\,\mathrm{mol}$  de  $\mathrm{N_2}:$ 

$$n_{\rm N_2} = 1,00 \,\mathrm{mol} \,\mathrm{NaN_3} \times \frac{3}{2} = 1,50 \,\mathrm{mol} \,\mathrm{N_2}$$
 (13)

2. Per a calcular el volum ocupat pel gas, segons la llei dels gasos ideals:

$$V = \frac{nRT}{P} \tag{14}$$

on:

- $n = 1,50 \, \text{mol}$
- $R = 0.0821 \,\mathrm{Latm} \,\mathrm{mol}^{-1} \,\mathrm{K}^{-1}$
- $T = 573 \, \text{K}$
- $P = 1.35 \, \text{atm}$

$$V = \frac{1,50\,\mathrm{mol} \times 0,0821\,\mathrm{L\,atm\,mol}^{-1}\,\mathrm{K}^{-1} \times 573\,\mathrm{K}}{1,35\,\mathrm{atm}} = 52,3\,\mathrm{L} \tag{15}$$

El volum necessari per inflar el coixí de seguretat és d'uns 65 L. Atès que només la primera reacció genera  $52,3\,\mathrm{L}$ , sembla que no és suficient. No obstant això, la segona reacció també genera gas  $N_2$ , augmentant el volum total.

3. Calculem ara la contribució de la reacció R7. Cada  $10 \, \text{mol}$  de Na reacciona per produir  $1 \, \text{mol}$  de  $N_2$ . És fàcil veure que  $1 \, \text{mol}$  de  $NaN_3$  a la primera reacció va generar  $1,00 \, \text{mol}$  de Na. Per tant, la segona reacció produeix:

$$n_{\rm N_{2,2}} = 1,00 \,\text{mol}\, \text{Na} \times \frac{1}{10} = 0,10 \,\text{mol}\, \text{N}_2$$
 (16)

Afegint aquest nitrogen al total:

$$n_{\text{N}_2,\text{total}} = 1,50 \,\text{mol} + 0,10 \,\text{mol} = 1,60 \,\text{mol}$$
 (17)

El nou volum total serà:

$$V_{\text{total}} = \frac{1,60 \,\text{mol} \times 0,0821 \,\text{L} \,\text{atm} \,\text{mol}^{-1} \,\text{K}^{-1} \times 573 \,\text{K}}{1,35 \,\text{atm}} = 55,7 \,\text{L}$$
 (18)

Aquest volum segueix estant per sota del mínim requerit (65 L), però cal recordar que les reaccions són fortament exotèrmiques, la qual cosa elevarà la temperatura i, en conseqüència, augmentarà el volum de gas.

4. Refredament del gas en expandir-se fora del coixí:

Segons la llei de Gay-Lussac:

$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2} \tag{19}$$

On:

- $P_1 = 1.35 \, \text{atm}, T_1 = 573 \, \text{K}$
- $P_2 = 1,00 \, \text{atm}, T_2 \, \text{\'es} \, \text{la temperatura final}$

$$T_2 = T_1 \times \frac{P_2}{P_1} = 573 \,\mathrm{K} \times \frac{1,00 \,\mathrm{atm}}{1,35 \,\mathrm{atm}} = 424 \,\mathrm{K}$$
 (20)

El percentatge de reducció de temperatura és:

$$\frac{T_1 - T_2}{T_1} \times 100 = \frac{573 \,\mathrm{K} - 424 \,\mathrm{K}}{573 \,\mathrm{K}} \times 100 = 25.9\% \tag{21}$$

Així, la temperatura del gas disminueix aproximadament un  $26\,\%$  quan s'expandeix fora del coixí de seguretat, ajudant a evitar cremades als passatgers.

## Exercici Autoavaluable IX. Relació $\frac{C_P}{C_V}$

Perquè hi ha diferències entre els quocients de capacitat calorífica  $(C_P/C_V)$  de gasos monoatòmics respecte els diatòmics? (Adona't que si un gas monoatòmic ideal, pel fet d'estar només augmentant la seva energia cinètica translacional té una  $C_V = \frac{3}{2}R$ , es pot entendre que per a cada component (eix) necessita  $\frac{1}{2}R$ )

#### Resposta

Els quocients de la capacitat calorífica dels gasos diatòmics són molt menors que 1,67, i hem d'esbrinar la raó d'aquestes desviacions.

Primerament, notem que  $C_V$ , la capacitat calorífica deguda al moviment de translació de les molècules, és igual a  $\frac{3}{2}R$ , i que hi ha tres components independents de velocitat associats amb el moviment de translació. Per tant, podem inferir que cadascun dels tres moviments de translació independents contribueix amb  $\frac{1}{2}R$  a la capacitat calorífica molar. Sobre aquesta base, podríem esperar que, si algun altre tipus de moviment fos accessible a les molècules de gas, hi hauria més contribucions a la capacitat molar i aquestes entrarien en unitats de  $\frac{1}{2}R$ .

A més de tenir els tres moviments de translació, una molècula diatòmica pot rotar al voltant del seu centre de massa segons dos modes mútuament perpendiculars i independents. Assignant  $\frac{1}{2}R$  com la contribució de cadascun d'aquests moviments a la capacitat calorífica, tenim:

$$C_V = \underbrace{\frac{3}{2}R}_{\text{traslació}} + \underbrace{\frac{1}{2}R + \frac{1}{2}R}_{\text{rotació}} = \frac{5}{2}R,$$

$$C_P = C_V + R = \frac{7}{2}R,$$

$$\frac{C_P}{C_V} = \frac{\frac{7}{2}R}{\frac{5}{2}R} = \frac{7}{5} = 1,40.$$

#### Exercici Autoavaluable X. Comportament no ideal d'un gas

Perquè  $\mathrm{CO}_2$  i  $\mathrm{O}_2$  tenen una desviació negativa respecte al comportament del gas ideal a pressions i temperatures moderades, mentres que l'He i el  $\mathrm{H}_2$  presenten una deviació positiva en les mateixes condicions?

#### Resposta

Els gasos  $\mathrm{CO}_2$  i  $\mathrm{O}_2$  presenten una desviació negativa respecte al comportament ideal perquè tenen interaccions intermoleculars atractives significatives. Aquestes forces atractives fan que, a pressions i temperatures moderades, les molècules s'acostin més del que prediu l'equació del gas ideal, reduint així el volum efectiu i fent que el factor de compressibilitat  $z = \frac{PV}{RT}$  sigui menor que 1.

D'altra banda, els gasos com l'heli (He) i l'hidrogen ( $\rm H_2$ ) presenten una desviació positiva perquè tenen interaccions intermoleculars molt febles i, a mesura que augmenta la pressió, dominen els efectes de repulsió a causa del volum finit de les molècules. Això fa que el gas ocupi un volum lleugerament superior al que prediu el model ideal, fent que z>1 en aquestes condicions.

# Bibliografia

- [1] Geoffrey M. Bowers i Ruth A. Bowers. *Understanding Chemistry through Cars*. en. CRC Press, nov. de 2014. ISBN: 978-1-4665-7184-6. DOI: 10.1201/b17581. URL: https://www.taylorfrancis.com/books/9781466571846.
- [2] Bruce H. Mahan. QUIMICA Curso Universitario. Español. 1977.