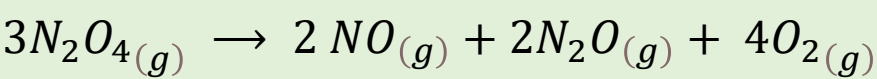


1. Donades les dades de la taula i les definicions per a la reacció a 25 °C:



Dades termoquímiques		
substància	ΔH°_f (KJ·mol ⁻¹)	S° (J·K ⁻¹ ·mol ⁻¹)
N ₂ O _(g)	82,5	219,85
NO _(g)	90,25	210,76
N ₂ O _{4(g)}	9,16	304,29
O _{2(g)}	0	205,14

$$\Delta S^0_{sistema} = \sum S^0_{productes} - \sum S^0_{reactius} ; \qquad \Delta H^0_{sistema} =$$

$$\sum \Delta H^0_f productes - \sum \Delta H^0_f reactius$$

$$\Delta G = \Delta H^0_{sistema} - T \cdot \Delta S^0_{sistema} ; \quad \Delta S^0_{entorn} = - \frac{\Delta H^0_{sistema}}{T}$$

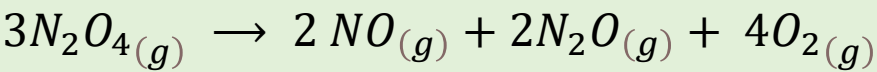
a) $\Delta S^0_{sistema} = \sum S^0_{productes} - \sum S^0_{reactius} = 4 \cdot S^0_{O_2} + 2 \cdot S^0_{N_2O} + 2 \cdot S^0_{NO} - 3 \cdot S^0_{N_2O_4}$

$$\Delta S^0_{sistema} = 4 \cdot 205,14 + 2 \cdot 219,85 + 2 \cdot 210,76 - 3 \cdot 304,29 = 768,91 \frac{J}{mol \cdot K}$$

b) $\Delta H^0_{sistema} = \sum H^0_{productes} - \sum H^0_{reactius} = 4 \cdot \Delta H^0_{O_2} + 2 \cdot \Delta H^0_{N_2O} + 2 \cdot \Delta H^0_{NO} - 3 \cdot \Delta H^0_{N_2O_4}$

$$\Delta H^0_{sistema} = 4 \cdot 0 + 2 \cdot 82,5 + 2 \cdot 90,25 - 3 \cdot 9,16 = 328,02 \frac{kJ}{mol}$$

1. Donades les dades de la taula i les definicions per a la reacció a 25 °C:



Dades termoquímiques		
substància	ΔH^0_f (KJ·mol ⁻¹)	S^0 (J·K ⁻¹ ·mol ⁻¹)
N ₂ O _(g)	82,5	219,85
NO _(g)	90,25	210,76
N ₂ O _{4(g)}	9,16	304,29
O _{2(g)}	0	205,14

$$\Delta S^0_{sistema} = \sum S^0_{productes} - \sum S^0_{reactius} ; \quad \Delta H^0_{sistema} =$$

$$\sum \Delta H^0_f productes - \sum \Delta H^0_f reactius$$

$$\Delta G = \Delta H^0_{sistema} - T \cdot \Delta S^0_{sistema} ; \quad \Delta S^0_{entorn} = - \frac{\Delta H^0_{sistema}}{T}$$

c) ΔS^0_{entorn}

$$\Delta S^0_{entorn} = - \frac{\Delta H^0_{sistema}}{T} = - \frac{328,02}{298} = 1,1 \frac{kJ}{mol \cdot K}$$

d) ΔG

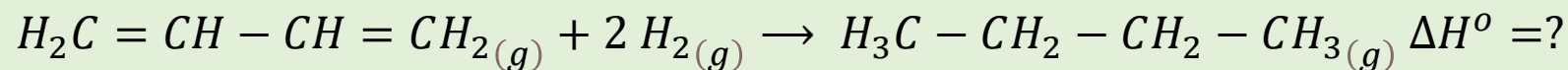
$$\Delta G = \Delta H^0_{sistema} - T \cdot \Delta S^0_{sistema} = 328,02 - 298 \cdot 0,769 = 98,86 \frac{kJ}{mol}$$

e) Digues si aquesta reacció és espontània o no espontània i si és reversible o irreversible.

La reacció no és espontània a 298 K

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T \cdot \Delta S^0 = 0 \rightarrow T = \frac{\Delta H^0 - \Delta G^0}{\Delta S^0} = \frac{328,02 - 98,86}{0,769} = 297 K ; T > 0 \rightarrow Reversible$$

2. Calcula, a partir de les energies d'enllaç, l'entalpia estàndard d'hidrogenació del butadiè.



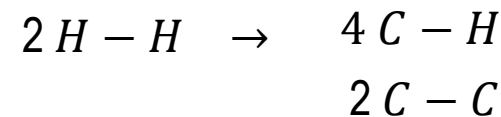
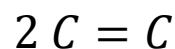
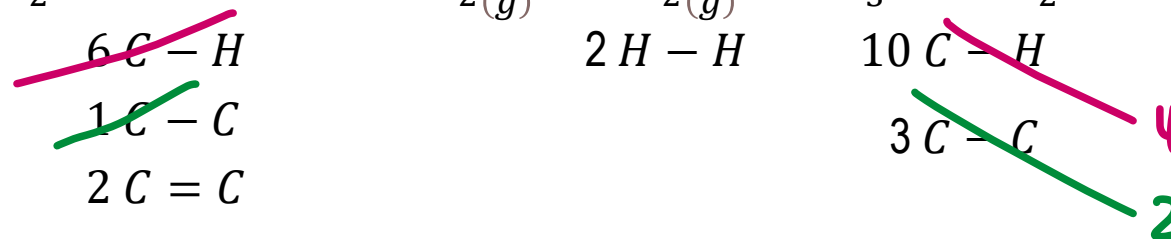
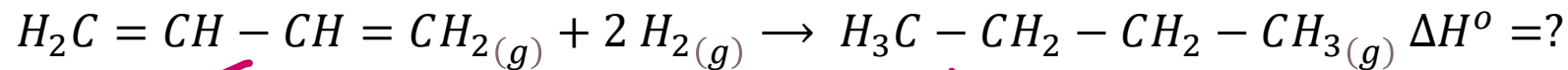
Entalpies d'enllaç estàndard (kJ·mol⁻¹) :

$$\Delta H^0(H - H) = 436$$

$$\Delta H^0(C - H) = 414$$

$$\Delta H^0(C - C) = 347$$

$$\Delta H^0(C = C) = 611$$



$$\Delta H^0_{reacció} = \sum H^0_{productes} - \sum H^0_{reactius} = 4 \cdot \Delta H^0_{C-H} + 2 \cdot \Delta H^0_{C-C} - 2 \cdot \Delta H^0_{H-H} - 2 \cdot \Delta H^0_{C=C}$$

$$\Delta H^0_{reacció} = 4 \cdot (-414) + 2 \cdot (-347) - 2 \cdot (-436) - 2 \cdot (-611) = -256 \frac{kJ}{mol}$$

3. Per a la reacció: $A \rightarrow Productes$ s'han trobat les següents dades:

Dades cinètiques			
Experiment	$[A]_0(\text{mol}\cdot\text{L}^{-1})$	$[A](\text{mol}\cdot\text{L}^{-1})$	t(s)
1	1,512	1,496	30
2	2,584	2,552	60

a) Determina l'ordre de reacció.

$$v_1 = - \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = - \frac{[A] - [A]_0}{\Delta t} = - \frac{1,496 - 1,512}{30} = 5,3 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{s}}$$
$$v_2 = - \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = - \frac{[A] - [A]_0}{\Delta t} = - \frac{2,552 - 2,584}{60} = 5,3 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{s}}$$

v no depèn de $[A]_0$ i si $v = k \cdot [A] \rightarrow v = k$

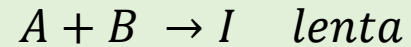
$$\begin{aligned} v_1 &= k[A]_0^\alpha = k \cdot 1,512^\alpha \\ v_2 &= k[A]_0^\alpha = k \cdot 2,584^\alpha \end{aligned} \rightarrow \frac{v_2}{v_1} = \frac{k \cdot 2,584^\alpha}{k \cdot 1,512^\alpha} = \frac{2,584^\alpha}{1,512^\alpha} = \left(\frac{2,584}{1,512}\right)^\alpha = 1,7^\alpha$$
$$1 = 1,7^\alpha \rightarrow \alpha = 0 \rightarrow v = k$$

ordre de reacció 0

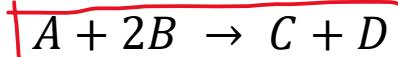
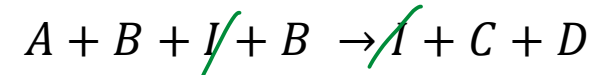
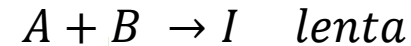
b) Determina el valor de la constant de reacció.

$$v = k \rightarrow k = 5,3 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{s}}$$

4. Un possible mecanisme per a una reacció és:



a) Troba l'equació global de la reacció.



b) Indica quina espècie és un intermedi de reacció.

I, atès que no apareix a l'equació global de la reacció.

c) Dona una possible equació de la velocitat de reacció.

Com que la reacció lenta determina la velocitat global de la reacció:

$$v = k \cdot [A] \cdot [B]$$