



### **Sèrie 3**

L'alumnat ha de respondre quatre preguntes de les set proposades.

En la correcció de cada pregunta de l'examen ha de sortir, ben marcada, la puntuació sobre 1,25 punts de cada apartat.

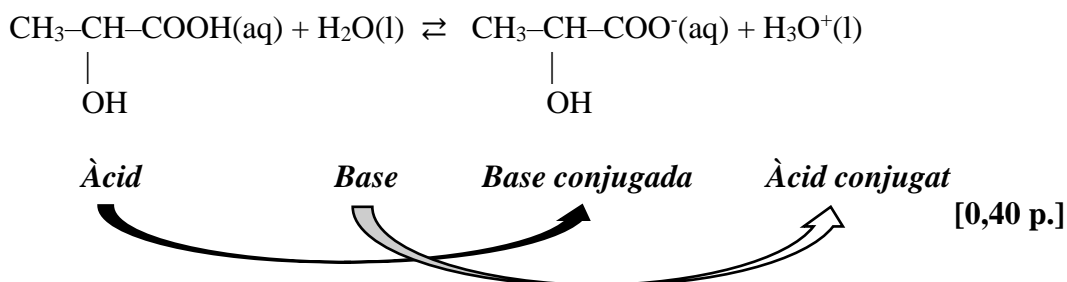
Com a norma general, tingueu en compte que un error no s'ha de penalitzar dues vegades. Si un càlcul necessita un resultat anterior i aquest és erroni, cal valorar la resposta independentment del valor numèric, i tenir en compte el procediment de resolució (sempre que els valors emprats o els resultats no siguin absurds).

Un error en la formulació penalitza 0,5 punts en aquell apartat, com s'explicita en la pauta. En cap cas un apartat pot tenir una puntuació negativa.

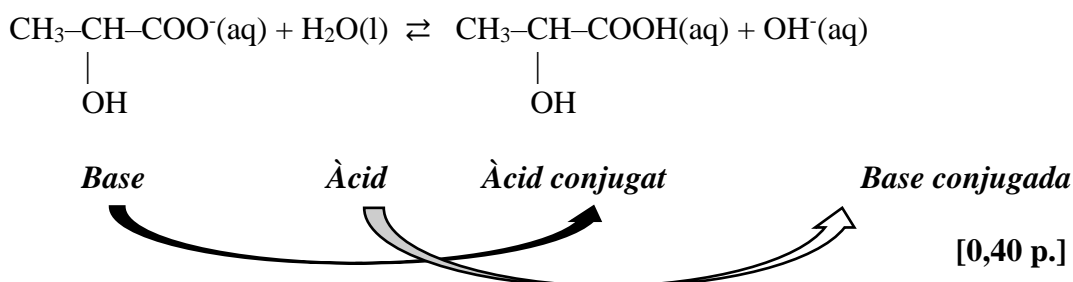


### Pregunta 1a

#### Reacció de l'àcid làctic amb aigua



#### Reacció de l'ió lactat amb aigua



#### pH d'una solució de lactat de sodi

El fet que l'ió sodi no reaccioni amb aigua i que la reacció de l'ió lactat en aigua tingui una **hidròlisi bàsica** doni  $\text{OH}^-\text{(aq)}$  justifica que una solució de lactat de sodi en aigua tingui **pH bàsic** (pH més gran).

[0,20 p.]

#### Identificació de solucions de lactat de sodi i d'àcid làctic

El paper indicador de pH tindrà diferent color si la solució és àcida (vermell) o bàsica (blau). Amb el paper de pH universal la solució d'àcid làctic donaria color de la zona àcida (vermell-groc) i una solució de lactat de sodi el color corresponent a les solucions bàsiques (verd-blau).

⇒ **Àcid làctic:** color paper indicador universal **vermell-groc** (0-5) – **pH àcid**

⇒ **Lactat de sodi:** color paper indicador universal **verd-blau** (6-10) – **pH bàsic**

[0,25 p.]



### Pregunta 1b

#### Concentració de la solució d'àcid làctic pH = 2,8

##### Concentració d'ió hidroni (oxidani/oxoni)

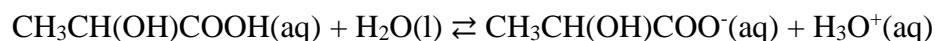
$$\text{pH} = 2,8$$

$$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] = 2,8 \Rightarrow [\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-\text{pH}} = 10^{-2,8} = 1,585 \times 10^{-3} \text{ M}$$

$$\Rightarrow [\text{H}_3\text{O}^+] = 1,585 \times 10^{-3} \text{ M}$$

[0,25 p.]

##### Concentració d'àcid làctic



Concent. inici	$C_0$	—	—
Concent. equilibri	$C_0 - x$	$x$	$x$

$$K_a = \frac{[\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{COO}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{COOH}]}$$

$$1,38 \times 10^{-4} = \frac{[(x) \cdot (x)]}{(C_0 - x)} = \frac{(1,585 \times 10^{-3})^2}{(C_0 - 1,585 \times 10^{-3})}$$

$$1,38 \times 10^{-4} C_0 - 2,19 \times 10^{-7} = 2,512 \times 10^{-6} \Rightarrow C_0 = 0,0198 \text{ M} \quad [0,50 \text{ p.}]$$

#### Grams d'àcid làctic per preparar 1,0 L de solució

##### Massa molecular

$$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{COOH} : 3 \times 12,0 + 6 \times 1,0 + 3 \times 16 = 90 \text{ g mol}^{-1} \quad [0,10 \text{ p.}]$$

$$0,0198 \text{ M àcid làctic} / 1 \text{ L} \times 90 \text{ g} / 1 \text{ mol d'àcid làctic} \times 1 \text{ L} = 1,782 \text{ g d'àcid làctic}$$

$$\Rightarrow 1,782 \text{ g d'àcid làctic} \quad [0,20 \text{ p.}]$$

#### Material de vidre

El material de vidre que és imprescindible utilitzar per a preparar 1,0 L d'aquesta solució de concentració exactament coneguda és un **matràs aforat d'1,0 L**.

##### Justificació:

El matràs aforat és un material de vidre volumètric que conté un **volum exacte de líquid**. S'utilitza per a preparar amb exactitud un determinat volum de dissolució d'una concentració coneguda.

En aquest cas, un volum d'un 1,0 L.

[0,20 p.]



### Pregunta 2a

#### Transició electrònica corresponent a $\lambda = 587,49 \text{ nm}$

Càlcul de la freqüència associada amb la longitud d'ona:

$$\nu = c / \lambda \quad [0,10 \text{ p.}]$$

$$\nu = 3,00 \times 10^8 \text{ m s}^{-1} / 587,49 \times 10^{-9} \text{ m}$$

$$\Rightarrow \nu = 5,106 \times 10^{14} \text{ s}^{-1} \text{ (o } 5,106 \times 10^{14} \text{ Hz)} \quad [0,20 \text{ p.}]$$

A partir de l'equació de Planck es relaciona la freqüència de la radiació amb l'energia:

$$E = h \nu \quad [0,10 \text{ p.}]$$

$$E = h \nu = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J s} \cdot 5,106 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

$$\Rightarrow E = 3,386 \times 10^{-19} \text{ J} \quad [0,20 \text{ p.}]$$

- També poden calcular directament l'energia: (0,60 punts)

$$E = h \nu = h c / \lambda$$

$$\Rightarrow E = \frac{h \cdot c}{\lambda}; E = \frac{6,63 \times 10^{-34} \text{ J s} \cdot 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}}{587,49 \times 10^{-9} \text{ m}} = 3,386 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Canvi d'unitats:

$$3,386 \times 10^{-19} \text{ J} \times 1 \text{ eV} / 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 2,116 \text{ eV}$$

La transició correspon a una diferència d'energia de 2,116 eV; segons les dades de la taula correspon a la transició de l'orbital 3d a 2p.

$$\Delta E = E_{2p} - E_{3d} = 21,08 \text{ eV} - 23,20 \text{ eV} = -2,12 \text{ eV (energia emesa)}$$

$\Rightarrow$  La radiació emesa ( $\lambda = 587,49 \text{ nm}$ ) correspon a una transició electrònica des de l'orbital 3d a 2p. [0,30 p.]

#### Freqüència de radiació per excitar un electró des de l'estat fonamental a l'orbital 3s

L'estat fonamental correspon a l'orbital 1s. La transició és des de l'orbital 1s a 3s.

$$\Delta E = E_{3s} - E_{1s} = 22,81 \text{ eV} - 0 \text{ eV} = 22,81 \text{ eV (energia absorbida)} \quad [0,15 \text{ p.}]$$

Canvi d'unitats (eV a J):

$$22,81 \text{ eV} \frac{1,6 \times 10^{-19} \text{ J}}{1 \text{ eV}} = 3,650 \times 10^{-18} \text{ J}$$

Càlcul d'energia:

$$E = h \nu$$

$$\nu = E / h \Rightarrow \nu = 3,650 \times 10^{-18} \text{ J} / 6,63 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

$$\Rightarrow \nu = 5,505 \times 10^{15} \text{ s}^{-1} \text{ (o } 5,505 \times 10^{15} \text{ Hz)} \quad [0,20 \text{ p.}]$$



## Pregunta 2b

### Bases fonamentals del model atòmic mecanicoquàntic

Les bases fonamentals del model atòmic mecanicoquàntic actual són el principi d'incertesa de Heisenberg i la dualitat ona-còrpuscle de De Broglie.

#### Principi d'incertesa de Heisenberg:

No es pot conèixer amb exactitud la posició i el moment (quantitat de moviment) d'un electró, de manera que sorgeix el concepte de probabilitat.

#### Dualitat ona-partícula de De Broglie:

La dualitat ona-partícula de De Broglie afirma que les partícules poden comportar-se com a ones i viceversa. Així, els electrons a escala atòmica es comporten com a ones.

[0,20 p.]

### Concepte d'orbital segons el model atòmic mecanicoquàntic

Un orbital atòmic, segons el model ondulatori de l'àtom, és una **funció d'ona**, solució de l'equació de Schrödinger, que ens descriu una **regió de l'espai on hi ha una alta probabilitat de trobar un electró** en un determinat estat energètic, **fixats els nombres quàntics (n, l i m)**.

[0,25 p.]

### Nombres quàntics dels electrons de valència d'àtom d'He i un àtom de Ne

#### Configuracions electròniques

He (Z=2)  $1s^2$

Ne (Z=10)  $1s^2, 2s^2, 2p^6$

#### Nombres quàntics dels electrons de valència

**He:** dos electrons de valència ( $1s^2$ )

(n, l, m, s): (1, 0, 0,  $\frac{1}{2}$ ), (1, 0, 0,  $-\frac{1}{2}$ )

[0,20 p.]

**Ne:** sis electrons de valència ( $2p^6$ )

(n, l, m, s): (2, 1, 0,  $\frac{1}{2}$ ), (2, 1, 0,  $-\frac{1}{2}$ )

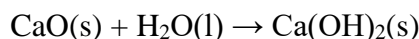
(2, 1, 1,  $\frac{1}{2}$ ), (2, 1, 1,  $-\frac{1}{2}$ )

(2, 1, -1,  $\frac{1}{2}$ ), (2, 1, -1,  $-\frac{1}{2}$ )

[0,60 p.]



### Pregunta 3a



#### Calor de la reacció d'hidratació de la calç viva

##### Càlcul de l'entalpia estàndard de la reacció calor

$$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = (\sum n_p \Delta H^\circ_{f, \text{productes}}) - (\sum n_r \Delta H^\circ_{f, \text{reactius}}) \quad [0,10 \text{ p.}]$$

$$(\sum n_p \Delta H^\circ_{f, \text{productes}}) = [(1 \times \Delta H^\circ_{f, \text{Ca(OH)}_2})]$$

$$(\sum n_r \Delta H^\circ_{f, \text{reactius}}) = [(1 \times \Delta H^\circ_{f, \text{CaO}}) + (1 \times \Delta H^\circ_{f, \text{H}_2\text{O}})]$$

$$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = [1 \times (-985,6 \text{ kJ mol}^{-1})] - [1 \times (-634,9 \text{ kJ mol}^{-1}) + 1 \times (-285,5 \text{ kJ mol}^{-1})]$$

$$\Rightarrow \Delta H^\circ_{\text{reacció}} = -65,2 \text{ kJ mol}^{-1} \quad [0,30 \text{ p.}]$$

##### Justificació que la reacció és exotèrmica

$\Rightarrow$  La reacció és exotèrmica perquè  $\Delta H^\circ_{\text{reacció}} < 0$ ; per tant, en el procés d'hidratació de CaO es desprèn calor.

[0,15 p.]

#### Càlcul de la calor despresa per tona de calç viva

$$\text{Massa molar CaO} = 1 \times 40 + 1 \times 16 = 56 \text{ g mol}^{-1} \quad [0,10 \text{ p.}]$$

$$1 \text{ tona} \frac{1000 \text{ kg}}{1 \text{ tona}} \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \frac{1 \text{ mol}}{56 \text{ g}} = 17.857,14 \text{ mol CaO}$$

$$\Rightarrow 17.857,14 \text{ mol CaO} \quad [0,20 \text{ p.}]$$

$$\Rightarrow \text{A pressió constant} \Rightarrow q_p = \Delta H^\circ_{\text{reacció}} \quad [0,10 \text{ p.}]$$

$$q_p = n \Delta H^\circ_{\text{reacció}} = 17.857,14 \text{ mol CaO} \times (-65,2 \text{ kJ mol}^{-1}) = -1,164 \times 10^6 \text{ kJ}$$

$$\Rightarrow q_p = -1,164 \times 10^6 \text{ kJ (calor despresa)} \quad [0,30 \text{ p.}]$$



### Problema 3b

#### Temperatura en condicions d'equilibri

$$\Rightarrow \Delta G^0 = \Delta H^0 - T \Delta S^0 \quad [0,20 \text{ p.}]$$

Una reacció estarà en **equilibri** quan  $\Delta G^0 = 0$ .

De la gràfica de  $\Delta G^0$  enfront de T, es pot determinar que la **temperatura d'equilibri és 350 K**, perquè a 350 K el valor de  $\Delta G^0 = 0$ .

$$\Rightarrow \text{La temperatura d'equilibri és 350 K perquè } \Delta G^0 = 0 \quad [0,30 \text{ p.}]$$

#### Càlcul de l'entalpia de la reacció

Segons l'equació  $\Delta G^0 = \Delta H^0 - T \Delta S^0$  si  $T = 0 \Rightarrow \Delta G^0 = \Delta H^0$

De la gràfica de  $\Delta G^0$  enfront de T es pot deduir que quan  $T = 0$ , el valor de  $\Delta G^0 = 300 \text{ kJ mol}^{-1}$ ; per tant,  $\Delta H^0 = 300 \text{ kJ mol}^{-1}$

$$\Rightarrow \Delta H^0 = 300 \text{ kJ mol}^{-1} \quad [0,25 \text{ p.}]$$

$$\Rightarrow \text{La reacció és endotèrmica perquè } \Delta H^0_{\text{reacció}} > 0 \text{ i absorbeix calor} \quad [0,15 \text{ p.}]$$

#### Espontaneïtat de la reacció

- Una reacció és **espontània** quan  $\Delta G^0 < 0$  [0,10 p.]
- Una reacció **no és espontània** quan  $\Delta G^0 > 0$  [0,10 p.]

De la gràfica de  $\Delta G^0$  enfront de T es pot deduir que la reacció **serà espontània** ( $\Delta G^0 < 0$ ) a **temperatures majors de 350 K**.

$$\Rightarrow \text{La reacció serà espontània } (\Delta G^0 < 0) \text{ a } T > 350 \text{ K} \quad [0,15 \text{ p.}]$$



### Pregunta 4a

#### Càlcul de la $K_c$

Càlcul de les concentracions en l'equilibri (M) de cada compost ( $V = 2,0 \text{ L}$ ):

Concentració de  $\text{N}_2\text{O}_4 = 0,20 \text{ mol} / 2,0 \text{ L} = 0,1 \text{ M}$

Concentració de  $\text{NO}_2 = 0,29 \text{ mol} / 2,0 \text{ L} = 0,145 \text{ M}$  [0,20 p.]

	$\text{N}_2\text{O}_4(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{NO}_2(\text{g})$	
Concentració inici	—	—
Concentració equilibri	0,1 M	0,145 M

La constant d'equilibri ( $K_c$ ) a 373 K és:

$$K_c = \frac{[\text{NO}_2]^2}{[\text{N}_2\text{O}_4]} = \frac{(0,145 \text{ M})^2}{(0,1 \text{ M})} = \frac{0,021}{0,1} = 0,210 \quad \text{[0,50 p.]}$$

#### Càlcul $K_p$

- Relació entre  $K_c$  i  $K_p$

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n} \quad \text{[0,20 p.]}$$

R: constant universal dels gasos ideals; T: temperatura en K

$\Delta n$ : increment del nombre de mols de gasos en passar de reactius a productes

- Càlcul  $K_p$  (pressions en atmosferes)

$$\Delta n = \sum n_{\text{productes}} - \sum n_{\text{reactius}} = 2 - 1 = 1 \quad RT = 0,082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \times (373)$$

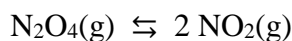
$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n} = 0,210 \left( 0,082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \times 373 \text{ K} \right)^1 = 6,43$$

$$\Rightarrow K_p = 6,43 \quad \text{[0,35 p.]}$$





### Pregunta 4b



*incolor*      *marró*

#### Quin compost de nitrogen predomina a l'estiu?

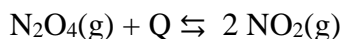
Si a l'estiu l'ambient té un color més marronós que a l'hivern, vol dir que hi ha més proporció de diòxid de nitrogen ( $\text{NO}_2$ ) a l'estiu a les ciutats contaminades. A l'estiu el procés està afavorit cap a la dreta.

⇒ A l'estiu hi ha més  $\text{NO}_2$  a l'ambient a les ciutats contaminades.

[0,25 p.]

#### Com afecta a l'equilibri un augment de temperatura?

La reacció de dissociació del  $\text{N}_2\text{O}_4$  està desplaçada cap a la dreta a l'estiu, quan la temperatura és més elevada, degut a que el  $\text{N}_2\text{O}_4$  absorbeix calor per transformar-se en  $\text{NO}_2$ .



⇒ Les temperatures són més altes a l'estiu i la reacció està desplaçada a productes (cap a la dreta).

[0,30 p.]

#### Justificació del tipus de reacció: exotèrmica o endotèrmica

Quan la temperatura augmenta (a l'estiu) la reacció està desplaçada cap a productes (cap a la dreta). Això indica que la reacció és endotèrmica, ja que, en aquest tipus de reaccions, la constant d'equilibri augmenta amb la temperatura.

La reacció és endotèrmica, està desplaçada cap a productes a l'estiu.

⇒ A temperatura més elevada la  $K_c$  és més gran; per tant, la reacció és endotèrmica.

⇒  $K_c$  (estiu) >  $K_c$  (hivern)

[0,35 p.]

#### Efecte en l'equilibri del canvi de pressió a temperatura constant

En augmentar la pressió segons el principi de Le Chatelier, l'equilibri es desplaça cap al sentit amb menys nombre de mols per, d'aquesta manera, produir una disminució de la pressió. En aquest cas,  $\Delta n = 1$  ( $\Delta n = \sum n_{\text{productes}} - \sum n_{\text{reactius}} = 2 - 1 = 1$ ) i l'efecte serà que la reacció es desplaçarà en el sentit dels reactius (cap a l'esquerra) i es produirà més  $\text{N}_2\text{O}_4$ .

En disminuir la pressió, l'equilibri es desplaça cap al sentit amb un nombre més gran de mols per, d'aquesta manera, produir un augment de la pressió. En aquest cas,  $\Delta n = 1$  i l'efecte serà que la reacció es desplaçarà en el sentit dels productes (cap a la dreta) i es produirà més  $\text{NO}_2$ .

⇒ Si la pressió augmenta, s'afavoreix la reacció inversa (cap a l'esquerra).

⇒ Si la pressió disminueix, s'afavoreix la reacció directa (cap a la dreta).

[0,35 p.]



### Pregunta 5a

**Formulació.** Amoníac:  $\text{NH}_3$

**[−0,50 p. si no formulen bé]**

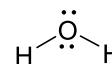
#### Estructures de Lewis

**$\text{H}_2\text{O}$**

O = 6 electrons de valència

H = 1 electró de valència

$6 + 2 \times 1 = 8$  electrons (4 parells per col·locar)



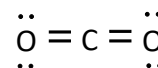
**[0,25 p.]**

**$\text{CO}_2$**

C = 4 electrons de valència

O = 6 electrons de valència

$4 + 6 \times 2 = 16$  electrons (8 parells per col·locar)



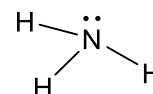
**[0,20 p.]**

**$\text{NH}_3$**

N = 5 electrons de valència

H = 1 electró de valència

$5 + 3 \times 1 = 8$  electrons (4 parells per col·locar)



**[0,20 p.]**

#### Què ens explica la teoria de RPECV?

La teoria de repulsió dels parells d'electrons de la capa de valència diu que els parells d'electrons enllaçats i no enllaçats que envolten l'àtom central d'una molècula covalent s'orienten allunyant-se prou entre si per aconseguir que les repulsions colombianes entre els parells d'electrons siguin mínimes.

**[0,15 p.]**

#### Geometria de les molècules segons la teoria de RPECV

$\text{H}_2\text{O}$ : dos parells enllaçats, dos parells lliures  $\Rightarrow$  geometria angular ( $\text{AB}_2\text{E}_2$ )

**[0,15 p.]**

$\text{CO}_2$ : quatre parells enllaçats, cap parell lliure  $\Rightarrow$  geometria lineal ( $\text{AB}_2$ )

**[0,15 p.]**

$\text{NH}_3$ : tres parells enllaçats, un parell lliure  $\Rightarrow$  geometria piramidal trigonal ( $\text{AB}_3\text{E}$ )

**[0,15 p.]**



### Pregunta 5b

#### Molècula polar i apolar

⇒ Una molècula és apolar quan la resultant dels moments dipolars dels seus enllaços és zero.

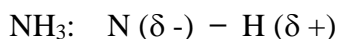
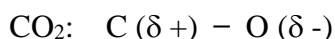
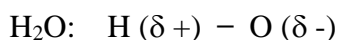
⇒ Una molècula és polar quan la resultant dels moments dipolars dels seus enllaços és diferent de zero. [0,20 p.]

#### Polaritat de les molècules i factors que afecten la polaritat

L'**electronegativitat dels àtoms** que formen l'enllaç i la **geometria de les molècules** són els factors que defineixen la polaritat d'una molècula. [0,10 p.]

#### Electronegativitat

En les tres molècules, la **diferència d'electronegativitat** entre els seus àtoms polaritza els enllaços, els quals presenten un determinat **moment dipolar**:



[0,15 p.]

#### Geometria

La *molècula d'aigua* presenta una geometria angular i això aporta un moment dipolar diferent de zero i és polar.

⇒ La **molècula d'aigua és polar** perquè **no s'anul·len els moments dipolars dels dos enllaços**.

La *molècula de diòxid de carboni* presenta una geometria lineal i això aporta un moment dipolar diferent de zero i és apolar.

⇒ La **molècula de diòxid de carboni és apolar** perquè **s'anul·len els moments dipolars dels dos enllaços**.

La *molècula d'amoníac* presenta una geometria piramidal trigonal i això aporta un moment dipolar diferent de zero i és polar.

⇒ La **molècula d'amoníac és polar** perquè **no s'anul·len els moments dipolars dels tres enllaços**. [0,45 p.]

#### Raonament de les diferències en els punts d'ebullició

Els **enllaços** de les quatre molècules es troben **polaritzats** degut a les diferències d'electronegativitat dels àtoms enllaçats, i es dona la **diferència d'electronegativitat** més gran en la **molècula d'aigua**.

Aquesta distribució de càrrega de la **molècula d'aigua** fa que les molècules s'uneixin per **enllaços d'hidrogen**. L'enllaç d'hidrogen intermolecular es produeix entre l'àtom d'**H** d'una molècula i l'àtom d'**O** d'una altra molècula i provoca un augment en el punt d'ebullició de l'aigua respecte als hidrurs del grup 16. [0,35 p.]



### Pregunta 6a

#### Justificació de l'ordre de reacció respecte al peròxid

L'equació de la velocitat de la reacció es pot escriure així:  $v = k [\text{H}_2\text{O}_2]^\alpha$

En què  $\alpha$  és l'ordre de reacció respecte al peròxid d'hidrogen. [0,10 p.]

De la taula de dades experimentals dels experiments (1) i (3) es pot veure l'efecte de la concentració de peròxid d'hidrogen en la velocitat de la reacció:

$$[\text{H}_2\text{O}_2]_{\text{exp 3}} / [\text{H}_2\text{O}_2]_{\text{exp 1}} = 0,30 / 0,15 = 2 \quad \text{i} \quad v_{\text{exp 3}} / v_{\text{exp 1}} = 12,7 \cdot 10^{-3} / 6,3 \cdot 10^{-3} = 2$$

Càlcul amb les experiències (3) i (2):

$$[\text{H}_2\text{O}_2]_{\text{exp 3}} / [\text{H}_2\text{O}_2]_{\text{exp 2}} = 0,30 / 0,25 = 1,2 \quad \text{i} \quad v_{\text{exp 3}} / v_{\text{exp 2}} = 12,7 \cdot 10^{-3} / 10,5 \cdot 10^{-3} = 1,2$$

⇒ S'observa que en **duplicar la concentració de peròxid d'hidrogen es duplica la velocitat** (experiments 1 i 3). Es comprova que la relació es manté constant amb la segona tanda d'experiments.

⇒ Això indica que **l'ordre de reacció respecte al peròxid d'hidrogen és 1**.

**$\alpha = 1$ ; la reacció és d'ordre 1 respecte de  $\text{H}_2\text{O}_2$**  [0,50 p.]

#### Càlcul de la constant de velocitat i justificació de les unitats

- Agafant la velocitat inicial de la reacció i les concentracions inicials de  $\text{H}_2\text{O}_2$  en un experiment (el tercer per exemple), es troba el següent:

$$v = k [\text{H}_2\text{O}_2]$$

Canvi d'unitats:  $12,7 \cdot 10^{-3} \text{ mmol L}^{-1} \text{ s}^{-1} \times (1 \text{ mol} / 1000 \text{ mmol}) = 12,7 \cdot 10^{-6} \text{ mol L}^{-1} \text{ s}^{-1}$

Experiment 3:  $12,7 \cdot 10^{-6} \text{ mmol L}^{-1} \text{ s}^{-1} = k (0,30 \text{ mmol L}^{-1})^1$

$$k = \frac{v}{[\text{H}_2\text{O}_2]} \rightarrow k = \frac{12,7 \cdot 10^{-6} \text{ mol L}^{-1} \text{ s}^{-1}}{0,30 \text{ mol L}^{-1}} = 4,2 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$$

[0,35 p.]

- Justificació en funció de la llei de velocitat; les unitats de velocitat són:  $\frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{s}}$

Per tant:

$$\frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{s}} = k \frac{\text{mol}}{\text{L}} \rightarrow k = \frac{1}{\text{s}} \quad [0,20 \text{ p.}]$$

⇒ L'expressió completa de velocitat és:  **$v = 4,2 \cdot 10^{-5} [\text{H}_2\text{O}_2]$**  [0,10 p.]



### Pregunta 6b

#### Efecte del KI segons el model cinètic de col·lisions

El **KI és un catalitzador**. Un catalitzador és una substància que s'afegeix a la reacció, sense consumir-se, i augmenta la velocitat de reacció. **[0,10 p.]**

Un **catalitzador modifica el mecanisme** de la reacció i aconseguix que en el **nou mecanisme disminueixi l'energia d'activació, i augmenti la velocitat de reacció**.

La velocitat d'una reacció és proporcional al nombre de xocs entre les molècules de reactius per unitat de volum i temps. **L'energia d'activació és l'energia cinètica mínima** que cal que assoleixin les molècules de reactiu per reaccionar quan xoquen: com més petita sigui, més alta serà la velocitat.

**[0,30 p.]**

#### Efecte del KI en l'entalpia de la reacció

Si la reacció es fa en presència d'un catalitzador, la reacció global serà la mateixa i, per tant, la variació d'entalpia de la reacció no es modifica, ja que només depèn de l'entalpia de reactius i productes.

⇒ Un **catalitzador no modifica l'entalpia de la reacció** **[0,25 p.]**

#### Efecte de la temperatura i del volum segons el model cinètic de col·lisions

##### Efecte de l'augment de temperatura a volum constant

Un augment de la temperatura mantenint el volum constant implica que tindrem més molècules de reactiu amb una energia cinètica mínima per produir xocs efectius (és a dir, més proporció de xocs efectius) i, per tant, augmentarà la velocitat de la reacció.

⇒ En **augmentar la temperatura, la probabilitat que les molècules xoquin augmenta i, per tant, augmentarà la velocitat de la reacció**.

**[0,30 p.]**

##### Efecte de l'augment del volum a temperatura constant

Un augment del volum mantenint la temperatura constant implica que la concentració de les partícules reaccionants disminuirà, la qual cosa fa que la probabilitat que es produeixin xocs efectius que donin lloc a la reacció també disminueixi, i, per tant, també ho farà la velocitat de reacció.

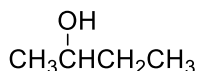
⇒ En **augmentar el volum, la probabilitat de xocar les molècules disminueix i, per tant, disminuirà la velocitat de la reacció**.

**[0,30 p.]**

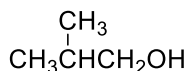


### Pregunta 7a

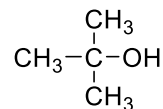
#### Isòmers constitucionals de posició i cadena del butan-1-ol



butan-2-ol  
2-butanol  
*sec*-butanol



2-metilpropan-1-ol  
2-metil-1-propanol  
isobutanol

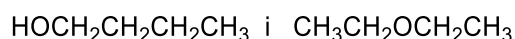


2-metilpropan-2-ol  
2-metil-2-propanol  
*tert*-butanol

[0,60 p.]

- *S'accepten qualsevol dels tres noms, nomenclatura IUPAC 1993, nomenclatura IUPAC 1979 o nom comú.*

#### Relació isomèrica entre el butan-1-ol i el dietilèter



[0,10 p.]

El butan-1-ol i el dietilèter presenten la mateixa fórmula molecular  $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$ , però tenen connectivitat diferent; per tant, són isòmers constitucionals de grup funcional: l'1-butanol té una funció alcohol i el dietilèter té una funció èter.

[0,20 p.]

#### Concepte de quiralitat molecular i isomeria dels butanols

Quiralitat: molècules o compostos amb la mateixa fórmula molecular i amb la mateixa connectivitat que tenen la relació objecte-imatge especular no superposables i, per tant, constitueixen una parella d'enantiòmers (estereoisòmers òptics).

[0,15 p.]

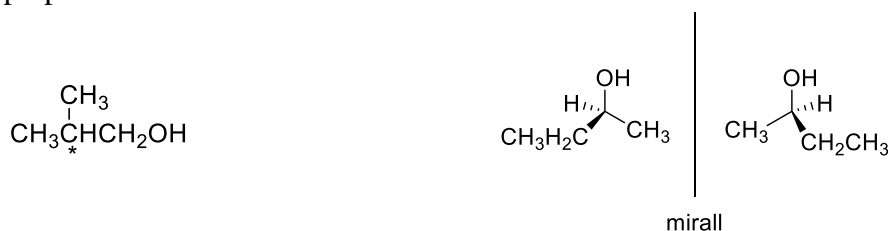
#### Isomeria

El butan-2-ol és una molècula quiral.

[0,10 p.]

Es pot veure bé que serà una molècula quiral perquè el **carboni de la posició 2** és un **estereocentre** o **carboni quiral**, **carboni tetraèdric amb els quatre substituents diferents**. Per tant, el butan-2-ol presenta un parell d'enantiòmers que són imatge especular l'un de l'altre no superposables.

[0,10 p.]

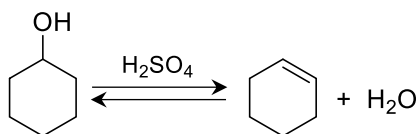


- *No cal que facin el dibuix tridimensional, només que indiquin el carboni quiral.*

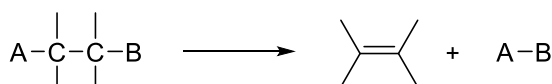


**Pregunta 7b**

**Tipus de reaccions**

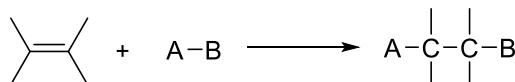


La reacció de **deshidratació del ciclohexanol** (reacció directa) és una **reacció d'eliminació**. En les reaccions d'eliminació, dos àtoms o dos grups d'àtoms situats en carbonis adjacents s'eliminen de la molècula produint un enllaç múltiple. **[0,20 p.]**



En el cas del **ciclohexanol**, s'ha **perdut** la funció **alcohol** i **un** dels **hidrògens** del carboni adjacent **per formar el doble enllaç**. **[0,15 p.]**

La reacció d'**hidratació del ciclohexè** (reacció inversa) és una **reacció d'addició**. Les reaccions d'addició són contràries a la reacció d'eliminació en què una molècula petita s'addiciona al doble enllaç. **[0,20 p.]**



En el cas del **ciclohexè**, s'ha **addicionat** una **molècula d'aigua**, un dels carbonis del **doble enllaç** forma un nou enllaç amb la **funció alcohol** i l'altre, amb un **hidrogen**. **[0,15 p.]**

- *No és necessari que indiquin les reaccions d'eliminació i d'hidratació.*

**Solubilitat en aigua de ciclohexanol i ciclohexè**

El **ciclohexanol** conté la **funció alcohol**; en la funció alcohol tant l'**enllaç C-O** com l'**enllaç O-H** estan **fortament polaritzats** per la **diferència d'electronegativitat dels àtoms** que formen l'enllaç, és a dir, és un **compost lleugerament polar**. A més, el **ciclohexanol** pot **interaccionar** amb **aigua** formant **enllaços** per pont d'**hidrogen**. En canvi, el **ciclohexè** és un hidrocarbur que **no té enllaços polaritzats** i **no pot formar enllaços** per pont d'**hidrogen**, és un **compost apolar**. **[0,20 p.]**

La **solubilitat de les molècules** depèn de la **fortalesa de les forces intermoleculars** que es puguin establir entre **dissolvent** i **solut**. Les **forces intermoleculars més fortes** són les d'**enllaç per pont d'hidrogen**. L'**aigua** pot **establir interaccions per pont d'hidrogen fortes** amb el **ciclohexanol** però **no amb el ciclohexè**. **[0,20 p.]**

⇒ El **ciclohexanol** serà **més soluble** en **aigua** que el **ciclohexè**. **[0,15 p.]**