Química

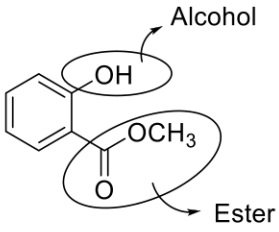
Tècniques espectroscòpiques

Solucions · 15 exercicis

Proves d'accés a la universitat (PAU) de Catalunya. Ordenats del més recent al més antic.
Retalls dels exàmens i pautes oficials (selecat.cat / universitats.gencat.cat).

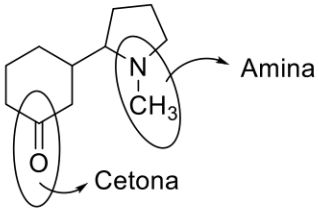
Pregunta 7a

Identificació de grups funcionals



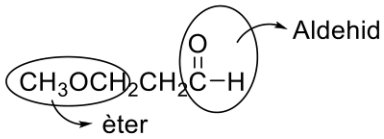
[0,30 p.]

0,15 p. l'alcohol
0,15 p. l'èster



[0,30 p.]

0,15 p. cetona
0,15 p. amina

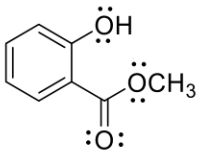


[0,30 p.]

0,15 p. aldehid
0,15 p. èter

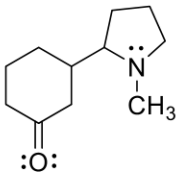
Parells d'electrons no compartits

Al ser compostos neutres, els àtoms d'oxigen i nitrogen, per tal de complir l'octet, han de tenir al seu voltant parells d'electrons no compartits.



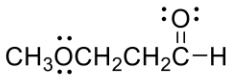
[0,15 p.]

0,05 p. l'alcohol
0,10 p. l'èster



[0,10 p.]

0,05 p. amina
0,05 p. cetona



[0,10 p.]

0,05 p. aldehid
0,05 p. èter

Pregunta 7b

Senyals característics dels diferents grups funcionals de les molècules

Compost **A**: C-H, O-H, C=C, C=O i C-O **[0,10 p.]**

Compost **B**: C-H, C=O i C-N **[0,10 p.]**

Compost **C**: C-H, C=O i C-O **[0,10 p.]**

Els **tres compostos** tenen en comú **una funció carbonil (C=O)**, **enllaços C-H**. El compost **A** i **C** també tenen en comú **enllaços C-O**.
El compost **B** és l'únic que presenta **enllaços C-N**, però s'observen pràcticament a la mateixa regió de l'espectre que els enllaços C-O.
El compost **A** és l'únic que presentarà senyals dels **enllaços O-H** i **C=C**.

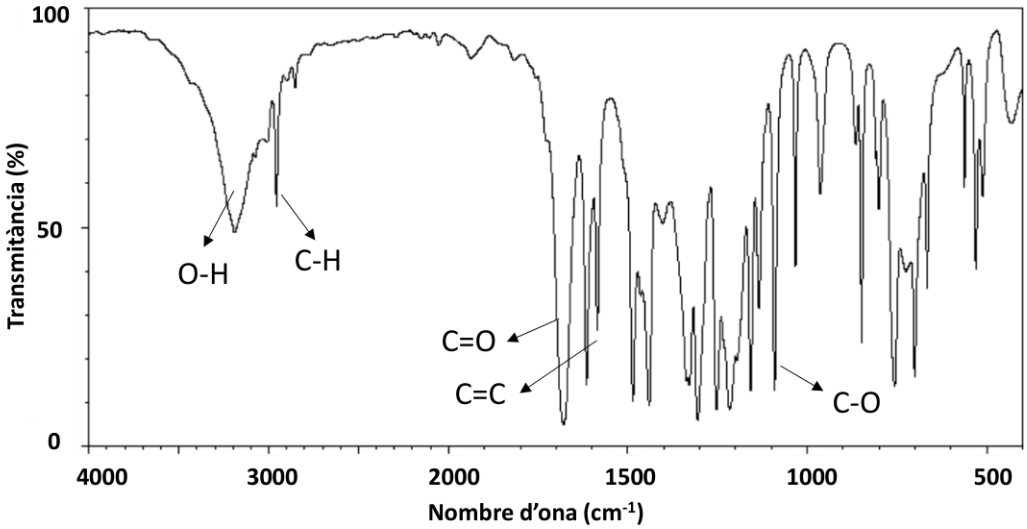
[0,25 p.]

Senyals a l'espectre d'IR

En l'espectre d'IR de la molècula problema s'observen senyals corresponents a les bandes: **O-H (al voltant de 3.200 cm^{-1})**, C-H (al voltant de 2.900 cm^{-1}), C=O (al voltant de 1.700 cm^{-1}), **C=C (al voltant de 1.600 cm^{-1})** i C-O (al voltant de 1.100 cm^{-1}).

[0,50 p.]

- *No és necessari que s'indiquin els senyals de les bandes en l'espectre IR, només han d'indicar el tipus d'enllaç i el nombre d'ona aproximat.*



Identificació de la molècula

Es tracta del compost **A** perquè en l'espectre s'observa clarament el senyal de la **vibració de l'enllaç O-H** al voltant de **3.200 cm^{-1}**, així com el senyal de la **vibració de C=C** al voltant de **1.600 cm^{-1}** que només pot donar el compost **A** perquè conté en la seva estructura una funció alcohol i un anell aromàtic.

[0,20 p.]

Pregunta 2a

Formulació

Etanol: CH_3CH_2OH

Acetona o propanona: CH_3COCH_3

(–0,5 p. si no formulen bé qualsevol dels compostos.)

Identificació del pic base i el pic de l'ió molecular

Mostra I

Pic base: m/z= 31

Pic de l'ió molecular: m/z= 46

[0,25 p.]

Mostra II

Pic base: m/z= 43

Pic de l'ió molecular: m/z= 58

[0,25 p.]

Informació que donen els pics

- El *pic base* és el fragment més estable i s'hi assigna sempre una intensitat relativa del 100%, ja que és el més abundant en la mescla d'ions que es produeix.
- *El pic d'ió molecular* (o ió pare) apareix com el pic de massa més gran i correspon a la massa molar del compost. La molècula s'ha ionitzat, però no s'ha trencat.

[0,25 p.]

Identificació justificada dels espectres

Càlcul de la massa molar

- Massa molar del CH_3CH_2OH: $6 \times 1 + 2 \times 12 + 1 \times 16 = 46$ g mol^{-1}
- Massa molar del CH_3COCH_3: $6 \times 1 + 3 \times 12 + 1 \times 16 = 58$ g mol^{-1}

[0,10 p.]

Identificació i justificació

- La **mostra I és l'etanol**, perquè el pic del seu ió molecular coincideix amb la massa molar de l'etanol 46 g mol^{-1}.
- La **mostra II és l'acetona**, perquè el pic del seu ió molecular coincideix amb la massa molar de l'acetona o propanona 58 g mol^{-1}.

[0,40 p.]

Pregunta 2b

Càlcul de la longitud d'ona

Nombre d'ona = 1.700 cm^{-1}

- El nombre d'ona és l'invers de la longitud d'ona:

$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$

[0,10 p.]

$$\lambda = \frac{1}{\bar{\nu}} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{1}{1.700\ cm^{-1}} = 5{,}882\ x\ 10^{-4}\ cm$$

$$\boldsymbol{\lambda = 5{,}882\ x\ 10^{-4} cm}$$

[0,35 p.]

Càlcul de la freqüència

λ = c / ν

[0,10 p.]

- És necessari canviar les unitats de la longitud d'ona de cm a m:

$5{,}882 \times 10^{-4}\ cm = 5{,}882 \times 10^{-6}\ m$

ν = c / λ ⇒ ν = 3,0 × 108 m s^{-1} / 5,882 × 10-6 m

ν = 5,10 × 1013 $\mathbf{s^{-1}}$ (o 5,10 × 1013 Hz)

[0,30 p.]

Càlcul de l'energia

- L'equació de Planck relaciona l'energia de la radiació amb la freqüència:

E = h ν

[0,10 p.]

E = h ν ⇒ *E* = 6,63 × 10^{-34} J s × 5,10 × 10^{13} s^{-1}

$\boldsymbol{E = 3{,}38 \times 10^{-20}\ J}$

[0,30 p.]

3. PAU 2021 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 1

PREGUNTA 1a

Les antocianines absorbeixen el color verd en un rang de longituds d'ona de 497-570 nm, ($4{,}97\text{-}5{,}70\times10^{-7}$ m).

Càlcul de freqüència

Freqüència = velocitat de la llum / longitud d'ona

Pel 497nm:

$\nu = 3\times10^{8}\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1} / 4{,}97\times10^{-7}\ \text{m} = 6{,}04\times10^{14}\ \text{s}^{-1}$

Pel 570nm:

$\nu = 3\times10^{8}\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1} / 5{,}70\times10^{-7}\ \text{m} = 5{,}26\times10^{14}\ \text{s}^{-1}$

Rang de freqüència: $(5{,}26\text{-}6{,}04)\times10^{14}\ \text{s}^{-1}$

[0,75p]

Càlcul d'energia

Energia = constant de Planck x freqüència

Pel 497nm:

$E = 6{,}63\times10^{-34}\ \text{J}\cdot\text{s} \times 6{,}04\times10^{14}\ \text{s}^{-1} = 4{,}00\times10^{-19}\ \text{J}$

Pel 570nm:

$E = 6{,}63\times10^{-34}\ \text{J}\cdot\text{s} \times 5{,}26\times10^{14}\ \text{s}^{-1} = 3{,}49\times10^{-19}\ \text{J}$

Rang d'energia: $(3{,}49\text{-}4{,}00)\times10^{-19}\ \text{J}$

[0,5p]

PREGUNTA 1b

- Fenomen espectroscòpic IR, UV-Vis
- Infraroig: l'energia de la radiació permet transicions dels estats vibracionals de les molècules.
- UV-Vis: la radiació té energia suficient per produir transicions electròniques des de l'estat electrònic fonamental fins l'excitat.
- Per tal que produeixi l'absorció, ja sigui infraroja o ultraviolada, l'energia de la radiació incident ha de coincidir amb la necessària de la transició en qüestió.

[0,75p]

Ordre energètic IR, Visible, UV

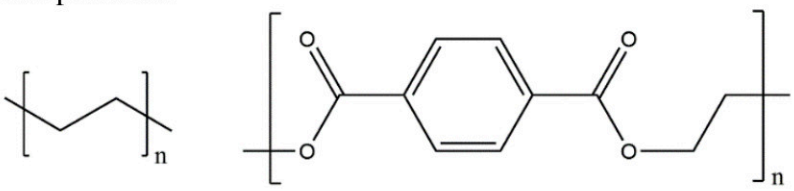
L'ordenació dels tres espectres per ordre creixent d'energia seria: infraroig, visible (des de vermell fins a violat) i ultraviolat.

[0,5p]

4. PAU 2020 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 2

PREGUNTA 2a

Estructures dels dos polímers:



polietilè polièster

El polietilè conté dos grups metilè (-CH_2-) en cada unitat polimèrica.
El polièster conté, entre d'altres, dos grups èster (-COO-) en cada unitat polimèrica.

Fonaments de la tècnica espectroscòpica d'infraroig

Quan una molècula absorbeix radiació infraroja (IR) es produeixen canvis d'energia vibracional de la molècula (canvis en la vibració dels enllaços de la molècula). L'energia d'aquest tipus de radiació és capaç de provocar un salt des del nivell fonamental d'energia vibracional a un nivell excitat. **[0,3 p]**

Identificació del polímer

Dades espectroscòpiques a la regió de l'infraroig:

Enllaç	Tipus de compost	Interval de nombre d'ona (cm^{-1})
C – H	alcans (C–C–H)	2970–2850
	alquens (C=C–H)	3095–3010
C – O	alcohols, èters, àcids carboxílics, èsters	1300–1050
C = O	aldehids, cetones, àcids carboxílics, èsters	1760–1690

El polietilè només presenta enllaços C–H d'alcans caracteritzables mitjançant els pics de l'interval 2970–2850 cm^{-1}. **[0,3 p]**

El poliestirè presenta enllaços C–O i C=O del grup èster caracteritzables mitjançant els pics dels intervals 1300–1050 i 1760–1690 cm^{-1}. **[0,3 p]**

L'espectre no presenta cap pic assignable a enllaços èster, per tant el polímer només pot ser de polietilè.

[0,35 p]

PREGUNTA 2b

Longitud d'ona = (nombre d'ona)$^{-1}$
Freqüència = velocitat de la llum / longitud d'ona = velocitat de la llum x nombre d'ona
Energia = constant de Planck x freqüència

De les anteriors equacions deduïm que:
- l'energia és directament proporcional a la freqüència
- la freqüència és directament proporcional al nombre d'ona.
- el pic de major energia de l'espectre B és aquell amb major nombre d'ona, és a dir **2915 cm^{-1}**

[0,2 p]

Càlcul de longitud d'ona
Longitud d'ona (nm) = 10^7 / nombre d'ona (cm^{-1}) = 10^7 / 2915 cm^{-1} = **3430 nm** ($3{,}430 \cdot 10^{-6}$ m)

[0,35 p]

Càlcul de freqüència
Freqüència (s^{-1}) = velocitat de la llum (m·s^{-1}) x nombre d'ona (m^{-1})
$\nu = 3\times10^8$ m·s^{-1} x 291500 m^{-1} = **$8{,}75\times10^{13}$ s^{-1}** (Hz)

O bé,
Freqüència (s^{-1}) = velocitat de la llum (m·s^{-1}) / longitud d'ona (m)
$\nu = 3\times10^8$ m·s^{-1} / $3{,}430\times10^{-6}$ m = **$8{,}75\times10^{13}$ s^{-1}** (Hz)

[0,35 p]

Càlcul d'energia
Energia (J) = constant de Planck (J·s) x freqüència (s^{-1})
$E = 6{,}63\times10^{-34}$ J·s x $8{,}75\times10^{13}$ s^{-1} = **$5{,}80\times10^{-20}$ J**

[0,35 p]

5. PAU 2019 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 7

Pregunta 7a

Reacció: $CH_3CHOHCH_3(g) \rightleftarrows CH_3COCH_3(g) + H_2(g) \quad \Delta H > 0$

Variable temperatura: raonament **[0,5 p]**

La reacció és endotèrmica ($\Delta H > 0$). Això vol dir que absorbeix calor per formar els productes (desplaçar-se cap a la dreta), i desprèn calor per a formar els reactius.

Si augmentem la temperatura, estem afegint més calor i afavorim que la reacció es desplaci cap a la dreta (formació de productes), augmentant la producció d'acetona.

⇒ **A la indústria li convé treballar a temperatures altes.**

Variable pressió: raonament **[0,5 p]**

Quan la pressió total del recipient augmenta, la reacció es desplaça cap a on hi ha menys mols de gasos, per assolir un nou equilibri.

En aquesta reacció tenim menys de gasos en els reactius (1) que en els productes (1+1=2).

Si volem que la reacció es desplaci cap a la dreta (productes), per augmentar la producció d'acetona, caldrà disminuir la pressió.

⇒ **A la indústria li convé treballar a pressions baixes.**

Pregunta 7b

Compostos: $CH_3CHOHCH_3$ prapan-2-ol (2-propanol) **alcohol**
CH_3COCH_3 acetona (propanona) **cetona**

Expliqueu en què es basa l'espectroscòpia infraroja **[0,2 p]**

Quan una molècula absorbeix radiació infraroja (IR) es produeixen canvis d'energia vibracional de la molècula (canvis en la vibració dels enllaços de la molècula). L'energia d'aquest tipus de radiació és capaç de provocar un salt des del nivell fonamental d'energia vibracional a un nivell excitat.

Què representen els pics que s'obtenen amb aquesta tècnica **[0,2 p]**

Els pics representen els canvis d'energia dels diferents tipus de vibracions dels enllaços que conté la molècula.

Justifiqueu quin producte conté la mostra líquida **[0,6 p]**

Opcional: llistat de tots els tipus d'enllaços

⇒ propan-2-ol: CH_3-CHOH-CH_3
Tenim enllaços C–C, C–H, C–O i O–H

⇒ acetona: CH_3COCH_3
Tenim enllaços C–C, C–H i C=O

Tenim com a possibles compostos **un alcohol i una cetona**.

L'absorció de la radiació IR de l'enllaç O-H en un alcohol provoca un pic a valors alts de nombre d'ona (3200-3600 cm^{-1}). Aquest pic no apareix en l'espectre, la qual cosa ens indica que el compost no és un alcohol.

A més, l'absorció de la radiació IR de l'enllaç C=O en una cetona provoca un pic a valors de nombre d'ona entre 1690-1760 cm^{-1}. Aquest pic sí que apareix en l'espectre, el que ens indica que el compost és una cetona.

De l'espectre IR de la figura es dedueix que es tracta d'una cetona.

⇒ **Per tant, la mostra conté acetona (propanona)**

6. PAU 2017 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 5

Pregunta 5a

Formulació: àcid propanoic: CH_3CH_2COOH **[– 0,5 p si no formulen bé]**

Absorció de radiació infraroja **[0,3 p]**

Quan una molècula absorbeix radiació infraroja (IR) es produeixen **canvis d'energia vibracional** de la molècula (canvis en la **vibració dels enllaços** de la molècula). L'energia d'aquest tipus de radiació és capaç de provocar un salt des del nivell fonamental d'energia vibracional a un nivell excitat.

Quina informació aporta l'espectroscòpia infraroja **[0,2 p]**

Ens aporta informació dels tipus d'enllaços que hi ha en una molècula.

Identificació del compost de cada ampolla **[0,5 p]**

Opcional: formulació i llistat de tots els tipus d'enllaços

⇒ etanoat d'etil: $CH_3CH_2COOCH_2CH_3$
Tenim enllaços C–C, C–H, C–O i C=0

⇒ àcid propanoic: CH_3CH_2COOH
Tenim enllaços C–C, C–H, C=O, C–O i O–H.

La diferenciació entre l'èster (etanoat d'etil) i l'àcid carboxílic (àcid propanoic) està en l'enllaç O-H que té l'àcid.

De l'espectre IR de l'ampolla A es dedueix que tenim un enllaç O-H pel pic que surt cap a 3 500 cm^{-1} i que no observem en l'espectre de l'ampolla B. L'ampolla A, per tant, conté l'àcid.

A part, en l'espectre de l'ampolla A s'observen els pics dels altres enllaços, com per exemple el del C=O (1 750 cm^{-1}) el del C-O (1 200 cm^{-1}).

⇒ **AMPOLLA A: àcid propanoic**
⇒ **AMPOLLA B: etanoat d'etil**

- *És correcte si la identificació dels compostos de cada ampolla es fa només pel pic de l'enllaç O-H de l'àcid propanoic.*

Pregunta 5b

Què li passa a una molècula quan se la sotmet a l'espectrometria de masses? **[0,4 p]**

La molècula es fragmenta formant diversos ions positius (normalment amb càrrega +1).

Opcional: a vegades un dels ions és l'ió molecular (M^+)

Què detectem en un espectre de masses? **[0,4 p]**

Detectem un conjunt d'ions amb una determinada relació massa / càrrega (m/z) que provenen de la **fragmentació** de la molècula original.

Quina informació ens aporta l'espectre de masses? **[0,2 p]**

L'estudi dels ions que apareixen en l'espectre de masses permet**:**

(n'hi ha prou amb UNA de les dues respostes)

- Determinar **quina molècula tenim** en la nostra mostra.

- Determinar **el pes molecular** de la molècula.

7. PAU 2016 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 4

4. ESPECTROMETRIA DE MASSES

a) Eix horitzontal: Representa la relació massa/càrrega (m/z) dels fragments de la molècula. (0,3 punts)

Cocaïna: $C_{17}H_{21}NO_4$ P_m = 303 g/mol
Amfetamina: $C_9H_{13}N$ P_m = 135 g/mol

L'últim pic correspon al fragment més gran i és el pic molecular, que es forma quan la molècula perd 1 electró: M^+ = 303. Aquest valor correspon al pes molecular de la cocaïna. (0,7 punts)

b) $P\ V_m = R\ T \Rightarrow V_m = R\ T / P = (0{,}082)\ (532) / (1) = 42{,}886$ L/mol

V_m = 42,9 L/mol (0,5 punts)

Diferències entre un gas real i un gas ideal:
1) Les molècules d'un gas real tenen un volum finit. En un gas ideal, suposem que el volum de les molècules és nul.
2) En un gas real, hi ha interacció entre les molècules (per exemple, forces intermoleculars). En un gas ideal, suposem que aquestes forces són nul·les. (0,5 punts)

8. PAU 2014 · Setembre · Sèrie 5 · Exercici 7

Pregunta 7

a) **Formulació:** 2-propanol: CH_3-CHOH-CH_3
àcid propanoic: CH_3CH_2COOH

[– 0,5 p si no formulen bé]

- *No és obligatori que els formulin, però si ho fan i la fórmula d'un dels dos és incorrecta es penalitzaran 0,5 p (tan si les fórmules errònies són una com si són dues)*

[*En cap cas la subpregunta 7a pot tenir una puntuació negativa*]

Absorció de radiació infraroja. **[0,4 p]**

Quan una molècula absorbeix radiació infraroja (IR) es produeixen **canvis d'energia vibracional** de la molècula (canvis en la **vibració dels enllaços** de la molècula). L'energia d'aquest tipus de radiació és capaç de provocar un salt des del nivell fonamental d'energia vibracional a un nivell excitat.

Identificació del compost pur: **[0,6 p]**

Opcional: formulació i llistat de tots els tipus d'enllaços

⇒ 2-propanol: CH_3-CHOH-CH_3
Tenim enllaços C–C, C–H, C–O i O–H

⇒ àcid propanoic: CH_3CH_2COOH
Tenim enllaços C–C, C–H, C=O, C–O i O–H.

Tenim com a possibles compostos **un alcohol i un àcid carboxílic**.

En ambdós compostos tenim un enllaç O-H. **L'absorció de la radiació IR de** l'enllaç O-H és diferent en un alcohol (pic a 3200-3260 cm^{-1}) que en un àcid carboxílic (pic a 2500-2700 cm^{-1}).

A més, un àcid carboxílic ha de mostrar l'absorció de la radiació IR de l'enllaç C=O (pic a 1690-1760 cm^{-1}), que no s'ha de veure en un alcohol ja que no té aquest tipus d'enllaç.

De l'espectre IR de la figura es dedueix que es tracta d'un alcohol, ja que observem el pic de l'enllaç O-H (pic ampla entre 3200-3260 cm^{-1}) i no observem el pic del grup C=O, entre 1690-1760 cm^{-1}.

⇒ Per tant el compost pur és el 2-propanol

Pregunta 7

b) La longitud d'ona (λ) d'una radiació és la inversa del nombre d'ona ($\bar{\nu}$)

$\lambda = 1 / \bar{\nu}$ **[0,1 p]**

Substituïm: $\lambda = 1 / 900$

$\Rightarrow$ **Longitud d'ona: $\lambda = 1{,}11 \cdot 10^{-3}$ cm** **[0,2 p]**

- *Si no posen unitats (o estan malament) es penalitzarà 0,1 p.*

La relació entre la freqüència d'una radiació la longitud d'ona és: $\nu = c / \lambda$ **[0,1 p]**

Transformem la longitud d'ona de cm a a m:

$\lambda = 1{,}11 \cdot 10^{-3}$ cm x (1 m / 100 cm) = $1{,}11 \cdot 10^{-5}$ m

Substituïm: $\nu = 3{,}00 \cdot 10^{8} / 1{,}11 \cdot 10^{-5}$

$\Rightarrow$ **Freqüència: $\nu = 2{,}70 \cdot 10^{13}$ s^{-1} (ó = $2{,}70 \cdot 10^{13}$ Hz)** **[0,2 p]**

- *Si no posen unitats (o estan malament) es penalitzarà 0,1 p.*
- *És correcte calcular la freqüència a partir del nombre d'ona: $\nu = c\ \bar{\nu}$)*

A partir de l'equació de Planck podem relacionar l'energia de la radiació (E) amb la freqüència (ν):

$E = h\ \nu$ **[0,2 p]**

Substituïm: $E = 6{,}63 \cdot 10^{-34}$ x $2{,}70 \cdot 10^{13}$

$\Rightarrow$ **Energia: $E = 1{,}79 \cdot 10^{-20}$ J** **[0,2 p]**

- *Si no posen unitats (o estan malament) es penalitzarà 0,1 p.*
- *És correcte calcular l'energia de la radiació a partir de la longitud d'ona o el nombre d'ona: $E = h\ c/\lambda$ ó $E = hc\ \bar{\nu}$)*

9. PAU 2013 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 6

Pregunta 6

a) Eix abscisses d'un espectre de masses: **relació massa / càrrega (m / z). [0,4 p]**

Els pics d'un espectre de masses s'interpreten en base a la formació de fragments de la molècula, normalment amb càrrega positiva unitària (+1). Si tenim en compte la fórmula de la molècula, CH_3COCH_3, i les masses de cada àtom, la massa dels següents fragments es correspon als pics observats a l'espectre de masses:

Pic m/z = 58 $\Rightarrow$ $CH_3COCH_3^+$
Pic m/z = 43 $\Rightarrow$ CH_3CO^+
Pic m/z = 15 $\Rightarrow$ CH_3^+

[0,6 p]

b) En un espectre infraroig (IR) es representa:
Abscisses: Longitud d'ona (o freqüència, o nombre d'ona)
Ordenades: Absorbància (o transmitància)

[0,4 p]

En un espectre IR d'una substància observem una sèrie de pics que estan relacionats amb els diferents tipus d'enllaç que hi ha entre els àtoms de la molècula (vibració). Ens dóna, per tant, informació dels grups funcionals de la substància.

[0,2 p]

Si féssim un espectre IR d'una mostra d'**acetona pura**, ens hauria d'aparèixer un pic en una zona de longitud d'ona característica del grup carbonil (enllaç doble carboni i oxigen, C=O) .
Si la **mostra d'acetona està impurificada** amb algun alcohol, per exemple el 2-propanol, en l'espectre IR observaríem, a més del pic del grup carbonil (C=O), un altre pic a la zona de longitud d'ona característica d'un grup hidroxil (enllaç senzill oxigen i hidrogen, O–H).

[0,4 p]

10. PAU 2012 · Setembre · Sèrie 4 · Exercici 7

Pregunta 7

a) Els tres compostos possibles que contenen les ampolles A i B tenen els següents grups funcionals i enllaços:

3-pentanona: CH_3-CH_2-CO-CH_2-CH_3 grup C=O més els enllaços C-C, C-H

3-pentanol: CH_3-CH_2-CHOH-CH_2-CH_3 grup O-H més els enllaços C-C, C-H, C-O

pentà: CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3 grup: cap més els enllaços C-C i C-H

[0,4 p]

En l'espectre IR de l'ampolla A no observem ni el senyal d'absorció del grup carbonil C=O (1650-1760 cm^{-1}), ni el del grup hidroxil O-H (3250-3550 cm^{-1}), ni el de l'enllaç C-O (1000-1300 cm^{-1}). S'observa el senyal dels enllaços C-H (2850-3000) que ha d'aparèixer en els tres compostos.

Això ens indica que l'ampolla A conté el pentà

[0,3 p]

En l'espectre IR de l'ampolla B observem el senyal d'absorció del grup hidroxil O-H (3250-3550 cm^{-1}) i el senyal del l'enllaç C=O (1000-1300 cm^{-1}); no s'observa el senyal del enllaç carbonil C=O (1650-1760 cm^{-1}). S'observa també el senyal de l'enllaç C-H (2850-3000) que ha d'aparèixer en els tres compostos.

Això ens indica que l'ampolla B conté el 3-pentanol

[0,3 p]

Pregunta 7

b) La temperatura d'ebullició del pentà correspon a la **temperatura d'equilibri** entre els estats líquid i vapor (gas) d'aquest compost.

$$C_5H_{12}(l) \leftrightarrows C_5H_{12}(g)$$ **[0,1 p]**

Perquè aquest procés estigui en **equilibri** (a p i T constant) $\Rightarrow$ $\mathbf{\Delta G = 0}$

[0,1 p]

La variació d'energia lliure es pot posar en funció de l'entalpia i l'entropia:

$$\mathbf{\Delta G = \Delta H - T\,\Delta S}$$ **[0,2 p]**

Homogeneïtzem les unitats de l'entalpia i l'entropia:

$\Delta H = 26{,}7$ kJ $mol^{-1} = 26700$ J mol^{-1}

$\Delta S = 84{,}4$ J $K^{-1}mol^{-1}$

[0,3 p]

Substituïm l'entalpia i entropia de vaporització del pentà en aquesta equació i igualem a zero (condició d'equilibri):

$0 = 26700 - T\,(84{,}4) \Rightarrow T = 316{,}4$ K

La temperatura d'ebullició del pentà és 316,4 K (ó 43,4 ^oC)

[0,3 p]

- *Si no indiquen unitats de la temperatura (o són errònies) es penalitza 0,1 p.*

11. PAU 2012 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 4

Pregunta 4

a) Freqüència: $\nu = c / \lambda$ **[0,2 p]**

Transformem les unitats de la longitud d'ona:

$$\lambda = 4{,}237\ \mu m \times (1\ m / 10^6\ \mu m) = 4{,}237 \cdot 10^{-6}\ m$$

$$\nu = (3 \cdot 10^8) / (4{,}237 \cdot 10^{-6})$$

$$\nu = \mathbf{7{,}08 \cdot 10^{13}\ s^{-1}} \quad (\text{ó Hz}) \qquad \textbf{[0,3 p]}$$

Energia de la radiació:

Procediment 1

$E = h\nu$ **[0,2 p]**

$E = h\ \nu = (6{,}63 \cdot 10^{-34}) \cdot (7{,}08 \cdot 10^{13})$

$$\mathbf{E = 4{,}69 \cdot 10^{-20}\ J} \qquad \textbf{[0,3 p]}$$

Procediment 2

$E = h\ c / \lambda$ **[0,2 p]**

$E = (6{,}63 \cdot 10^{-34}) \cdot (3{,}00 \cdot 10^8) / (4{,}237 \cdot 10^{-6})$

$$\mathbf{E = 4{,}69 \cdot 10^{-20}\ J} \qquad \textbf{[0,3 p]}$$

b) Aquesta radiació infraroja (IR) produeix un **canvi d'estat (o nivell) vibracional** de les molècules de CO_2. Les molècules passen d'un estat vibracional de menys energia a un altra de més energia.

[0,5 p]

Les molècules de CO_2 gas només absorbeixen certes radiacions IR perquè **per passar una molècula d'un nivell de vibració a un altra nivell de vibració ens cal una determinada energia (diferència d'energies dels dos nivells vibracionals).** Aquesta energia l'aporta una determinada longitud d'ona de radiació electromagnètica que, per tant, pot ser absorbida.

[0,5 p]

12. PAU 2011 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 7

Pregunta 7

a) En el eix d'ordenades es representa **la transmitància o l'absorbància** **[0,2 p]**

En el eix d'abscisses es representa el **nombre d'ona** (o qualsevol altre paràmetre que caracteritzi la radiació, com **la longitud d'ona, la freqüència o l'energia**).
[0,2 p]

Quan una molècula absorbeix radiació infraroja es produeixen **canvis d'energia vibracional** degut a les deformacions dels enllaços per tensió i flexió. L'energia d'aquest tipus de radiació és **capaç de provocar un salt des del nivell fonamental d'energia vibracional a un nivell excitat**. L'espectre IR obtingut per una molècula es caracteritza per una sèrie de pics, de diferents alçades, que corresponen a les diferents transicions vibracionals dels enllaços de la molècula. **[0,6 p]**

Pregunta 7

b) El **He no donarà cap pic perquè no té cap enllaç** i, per tant, no hi ha possibilitat de cap vibració. **[0,4 p]**

Donaran més pics les substàncies que tinguin major nombre de enllaços diferents.
[0,3 p]

El CH_4 té un sol tipus d'enllaç, C-H.
El $CH_3(CH_2)_5CH_2OH$ té els enllaços C-H, C-C, C-O i O-H.
El NH_2CH_2COOH té els enllaços anteriors i, a més, C=O, C-N i N-H.

Per tant, **hi haurà més pics en la substància: NH_2CH_2COOH.** **[0,3 p]**

13. PAU 2010 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 4

Pregunta 4

a) Ens donen l'energia per fer la transició vibracional d'un mol de molècules de HCl i ens demanen l'energia per una molècula:

(32,7 kJ / mol HCl) x (1000 J / 1 kJ) x (1 mol HCl / 6,02 · 10^{23} molècules HCl) =

= 5,432· 10^{-20} J / molècula

Energia: 5,432 · 10^{-20} J (ó 5,432 · 10^{-20} J / molècula) **[0,7 p]**

- *Si el resultat l'expressen en kJ/ molècula la puntuació serà* **[0,4 p]**
- *Si el resultat l'expressen en J/ mol la puntuació serà* **[0 p]**

Un molècula de HCl hauria d'absorbir una radiació infraroja (IR), ja que aporten l'energia suficient per provocar transicions vibracionals en un molècula. **[0,3 p]**

b) A partir de l'equació de Planck relacionarem l'energia de la radiació amb la freqüència (ν), la longitud d'ona (λ):

$E = h \nu$ **[0,2 p]**

Freqüència: $\nu = E / h = 5{,}432 \cdot 10^{-20}$ J / $6{,}63 \cdot 10^{-34}$ J · s

Freqüència = 8,19 · 10^{13} s^{-1} **[0,3 p]**

- *Si no posen unitats (o estan malament) es puntuarà:* **[0,1 p]**

$\lambda = c / \nu$ **(o $\lambda = h\,c / E$)** **[0,2 p]**

Longitud d'ona = 3 · 10^{8} m · s^{-1} / 8,19 · 10^{13} s^{-1}

Longitud d'ona = 3,66 · 10^{-6} m **[0,3 p]**

Si no posen unitats (o estan malament) es puntuarà: **[0,1 p]**

Pregunta 5

a) **L'ordre de reacció respecte a un reactiu és la potència a la qual està elevada la concentració d'aquest reactiu en l'equació velocitat.**

Equació de velocitat: $v = k [A]^a \cdot [B]^b$ a i b són els ordres de reacció.

[0,4p]

Si la cinètica de la hidròlisi àcida de la sacarosa és de primer ordre respecte la sacarosa, vol dir que l'equació de velocitat (suposades constants les concentracions dels altres reactius – en aquest cas l'aigua -) seria:

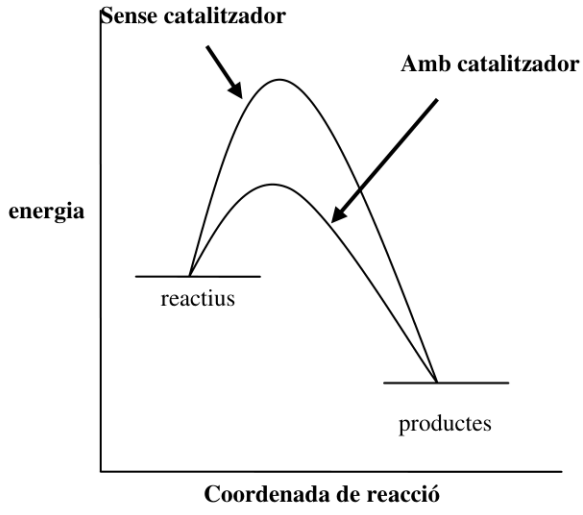
$v = k [\text{sacarosa}]^1$

El gràfic velocitat en front de la concentració de sacarosa seria lineal**: gràfic B.**

[0,6 p]

b) Un **catalitzador** és una substància que posem a la reacció, que **no es consumeix**, però que **augmenta la velocitat de la reacció**. **[0,3 p]**

Segons el model de l'estat de transició, una reacció per passar de reactius a productes passa per un estat de transició de més energia que reactius i productes; la diferència d'energies entre l'estat de transició i els reactius s'anomena **energia d'activació**. El catalitzador **proporciona un mecanisme alternatiu a la reacció: passa per un altra estat de transició que fa que la reacció tingui una energia d'activació més petita i, per tant, una velocitat més alta.** **[0,7 p]**



Pregunta 6

a) Procediment experimental:

- En un calorímetre hi col·loquem un determinat volum d'aigua (o una determinada massa d'aigua) i mesurem la temperatura inicial. Posteriorment afegim una determinada massa de KOH sòlid al calorímetre. Agitem la mescla per dissoldre tot el sòlid, tapem el calorímetre i esperem un temps fins que la temperatura que ens marca el termòmetre deixi de pujar (s'estabilitzi). Mesurem aquesta temperatura final. **[0,5 p]**

Material:

- Calorímetre (per exemple un vas de plàstic amb tapa i aïllat)
- Reactius: aigua i KOH sòlid
- Termòmetre
- Balança
- Si mesurem el volum d'aigua farem servir una pipeta (volum petit) o una proveta (volums més grans) **[0,5 p]**

  - *Formulació incorrecte de l'hidròxid de potassi en aquest apartat o en el següent:* **-0.5 p**

b) Massa d'aigua = 200 mL x (1 g / mL) = 200 g

m = massa de la solució final = 200 + 2 = 202 g **[0,1 p]**

Calor absorbida per la solució = $m \cdot c \cdot \Delta T$ **[0,1 p]**

Calor absorbida per la solució = $202 \cdot 4{,}18 \cdot 2{,}5 = 2110{,}9$ J **[0,2 p]**

q = calor despresa per la reacció = calor absorbida per la solució

q = 2110,9 J quan es dissolen 2 g de KOH **[0,1 p]**

Massa molecular del KOH = 56,1

Si la pressió és constant: $\Delta H = q$ **[0,1 p]**

Calor despresa $\Rightarrow$ $\Delta H < 0$ (signe negatiu) **[0,1 p]**

$\Delta H = (-2110{,}9 \text{ J} / 2 \text{ g KOH}) \times (56{,}1 \text{ g KOH} / 1 \text{ mol KOH})$

$\mathbf{\Delta H = -59211 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}}$ **[0,3 p]**

Pregunta 7

a) Cal calcular ΔG, que representa el balanç del canvi d'entalpies i entropies del sistema. A pressió i temperatura constants tenim: $\Delta G = \Delta H - T\,\Delta S$ **[0,2 p]**

Cal passar els valors donats a J o a kJ.

$\Delta H^o = -2808\ kJ \cdot mol^{-1}$

$\Delta S^o = 182\ J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1} = 0{,}182\ kJ \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$

T= 37 + 273 = 310 K

ΔG = -2808 – (310 x 0,182) = –2864,42 $kJ \cdot mol^{-1}$ **[0,4 p]**

Massa molecular de la glucosa = 180

Calculem l'energia lliure per 10 g de glucosa (una cullerada):

10 g x 1 mol/180 g x (–2864,42 kJ/1mol) = –159,1 kJ

Energia lliure per 10 g de glucosa = –159,1 kJ **[0,4 p]**

b) Que **el valor de l'energia lliure o energia de Gibbs** resulti **negatiu**, vol dir que el balanç global del procés incloent l'entalpia i l'entropia és favorable, és a dir que la **reacció és espontània**. Per tant, **es pot transferir energia al sistema humà (**treball útil). **[1 p]**

- *Si el raonament és només $\Delta H < 0 \Rightarrow$ transfereix energia al sistema humà* ***[només 0,3 p]***

14. PAU 2010 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 6

Pregunta 6

a) **Quan la molècula de CO_2 absorbeix radiació infraroja (IR) es produeixen canvis d'energia vibracional**. L'energia d'aquest tipus de radiació és capaç de provocar un salt des del nivell fonamental d'energia vibracional a un nivell excitat.

[0,5 p]

Les molècules de CO_2 només absorbeixen certes radiacions IR perquè **per passar una molècula d'un nivell de vibració a un altra nivell de vibració ens cal una determinada energia (diferència d'energies dels dos nivells vibracionals).** Aquesta energia l'aporta una determinada freqüència de la radiació electromagnètica que, per tant, pot ser absorbida.

[0,5 p]

- *No és necessari formular el diòxid de carboni (CO_2), però si el formulen malament penalitzaria 0.5 punts*.

b) A partir de l'equació de Planck relacionarem l'energia de la radiació amb la freqüència (ν) o la longitud d'ona (λ)

$E = h\,\nu$ **[0,2 p]**

Freqüència $\nu = E / h = 1{,}33 \cdot 10^{-20}\ J / 6{,}63 \cdot 10^{-34}\ J \cdot s$

Freqüència = $2{,}01 \cdot 10^{13}\ s^{-1}$ **[0,3 p]**

- *Si no posen unitats (o estan malament) es puntuarà:* **[0,1 p]**

Longitud d'ona: $\lambda = c / \nu$ (o $\lambda = h\,c / E$) **[0,2 p]**

$\lambda = c / \nu = 3 \cdot 10^{8}\ m \cdot s^{-1} / 2{,}01 \cdot 10^{13}\ s^{-1}$

Longitud d'ona = $1{,}49 \cdot 10^{-5}$ m **[0,3 p]**

- *Si no posen unitats (o estan malament) es puntuarà:* **[0,1 p]**

15. PAU 2010 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 7

Pregunta 7

a) Equacions: $E = h\nu \quad \nu = c/\lambda$ **[0,2 p]**

Radiació 1: $2{,}65 \cdot 10^{-17}$ J (energia)

$E = 265 \cdot 10^{-19}$ J

Radiació 2: $2{,}70 \cdot 10^{-7}$ m (longitud d'ona)

$E = (6{,}63.10^{-34}\ \text{J} \cdot \text{s}) \cdot (3 \cdot 10^{8}\ \text{m} \cdot \text{s}^{-1}) / (2{,}70 \cdot 10^{-7}\ \text{m}) = 7{,}37 \cdot 10^{-19}$ J

[0,2 p]

Radiació 3: $5.10^{14}\ \text{s}^{-1}$ (freqüència)

$E = (6{,}63.10^{-34}\ \text{J} \cdot \text{s}) \cdot (5{,}10 \cdot 10^{14}\ \text{s}^{-1}) = 3{,}38 \cdot 10^{-19}$ J

[0,2 p]

Ordenació: **E(radiació 1) > E(radiació 2) > E(radiació 3)**

[0,4 p]

b) **Quan la molècula de O_3 absorbeix radiació ultraviolada (UV) es produeixen canvis d'energia electrònica**. L'energia d'aquest tipus de radiació és capaç de provocar un salt des del nivell fonamental d'energia electrònica de la molècula a un nivell excitat.

[0,5 p]

Quan la molècula de CO_2 absorbeix radiació infraroja (IR) es produeixen canvis d'energia vibracional. L'energia d'aquest tipus de radiació és capaç de provocar un salt des del nivell fonamental d'energia vibracional a un nivell excitat.

[0,5 p]