Química

Termodinàmica

Solucions · 99 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).

1. PAU 2026 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 1

Exercici 1.1 [1,25 punts]

- **Càlcul de la variació d'energia lliure de Gibbs de la reacció**

$$TiCl_{4\,(l)} + O_{2\,(g)} \rightarrow TiO_{2\,(s)} + 2\,Cl_{2\,(g)}$$

La variació de l'energia lliure de Gibbs d'aquesta reacció a 25 ºC ($\Delta G^\circ_{reacció}$) es pot calcular a partir de les corresponents variacions d'entalpia ($\Delta H^\circ_{reacció}$) i entropia ($\Delta S^\circ_{reacció}$) de la reacció.

- Càlcul de $\Delta H^\circ_{reacció}$:

El càlcul de $\Delta H^\circ_{reacció}$ a 25 ºC es pot fer a partir de les entalpies de formació de reactius ($\Delta H^\circ_{f,reactius}$) i productes ($\Delta H^\circ_{f,productes}$):

$$\Delta H^\circ_{reacció} = \sum_{productes} n_{productes} \cdot \Delta H^\circ_{f,productes} - \sum_{reactius} n_{reactius} \cdot \Delta H^\circ_{f,reactius}$$

[0,10 punts]

Operant amb la fórmula de $\Delta H^\circ_{reacció}$, s'obté:

$$\Delta H^\circ_{reacció} = (1 \cdot \Delta H^\circ_{f,TiO_2} + 2 \cdot \Delta H^\circ_{f,Cl_2}) - (1 \cdot \Delta H^\circ_{f,TiCl_4} + 1 \cdot \Delta H^\circ_{f,O_2})$$

$$\Delta H^\circ_{reacció} = (-944{,}0) - (-763{,}2) = -180{,}8 \text{ kJ mol}^{-1} = -180{,}8 \cdot 10^3 \text{ J mol}^{-1}$$

[0,15 punts]

- Càlcul de $\Delta S^\circ_{reacció}$:

El càlcul de $\Delta S^\circ_{reacció}$ a 25 ºC es pot fer a partir de les entropies absolutes de reactius ($S^\circ_{reactius}$) i productes ($S^\circ_{productes}$):

$$\Delta S^\circ_{reacció} = \sum_{productes} n_{productes} \cdot S^\circ_{productes} - \sum_{reactius} n_{reactius} \cdot S^\circ_{reactius}$$

[0,10 punts]

Operant amb la fórmula de $\Delta S^\circ_{reacció}$, s'obté:

$$\Delta S^\circ_{reacció} = (1 \cdot S^\circ_{TiO_2} + 2 \cdot S^\circ_{Cl_2}) - (1 \cdot S^\circ_{TiCl_4} + 1 \cdot S^\circ_{O_2})$$

$$\Delta S^\circ_{reacció} = (51{,}0 + 2 \cdot 223{,}0) - (353{,}2 + 205{,}0) = -61{,}2 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

[0,15 punts]

- Càlcul de $\Delta G^\circ_{reacció}$:

El càlcul de $\Delta G^\circ_{reacció}$ a 25 ºC es pot fer a partir de $\Delta H^\circ_{reacció}$ i $\Delta S^\circ_{reacció}$ utilitzant la següent expressió:

$$\Delta G^\circ_{reacció} = \Delta H^\circ_{reacció} - T \cdot \Delta S^\circ_{reacció}$$

[0,10 punts]

Operant amb la fórmula de $\Delta G^\circ_{reacció}$, s'obté:

$$\Delta G^\circ_{reacció} = -180{,}8 \cdot 10^3 - 298 \cdot (-61{,}2) = -162{,}56 \cdot 10^3 \text{ J mol}^{-1} \text{ (o } -162{,}56 \text{ kJ mol}^{-1})$$

[0,15 punts]

- **Espontaneïtat de la reacció**

  - Espontaneïtat de la reacció a 25 ºC:

    El criteri d'espontaneïtat d'una reacció sobre la base de $\Delta G^{\circ}_{reacció}$ és:

    $$\underline{\Delta G^{\circ}_{reacció} < 0 \Rightarrow \text{reacció espontània a condicions estàndard}}$$

    Com que a 25 ºC, $\Delta G^{\circ}_{reacció} = -162{,}56 \text{ kJ mol}^{-1} \Rightarrow$ <u>la reacció de producció de TiO_2 a 25 ºC és espontània a condicions estàndard</u>.

    [0,10 punts]

  - Interval de temperatures en què la reacció és espontània:

    En augmentar la temperatura, el factor entròpic ($\Delta S^{\circ}_{reacció} < 0$) anirà guanyant pes i anirà desafavorint la reacció fins fer-la no espontània. <u>La temperatura en què es produirà la transició d'un cas a l'altre serà aquella en què $\Delta G^{\circ}_{reacció} = 0$</u>.

    [0,10 punts]

    Aplicant l'equació de $\Delta G^{\circ}_{reacció}$ amb la condició de $\Delta G^{\circ}_{reacció} = 0$ i assumint que $\Delta H^{\circ}_{reacció}$ ($-180{,}8 \cdot 10^3 \text{ J mol}^{-1}$) i $\Delta S^{\circ}_{reacció}$ ($-61{,}2 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$) no varien amb la temperatura:

    $$0 = \Delta H^{\circ}_{reacció} - T \cdot \Delta S^{\circ}_{reacció} = -180{,}8 \cdot 10^3 - T \cdot (-61{,}2) \Rightarrow T = 2954{,}2 \text{ K}$$

    [0,15 punts]

    Per tant, <u>la reacció serà espontània a condicions estàndard per a l'interval de temperatures $T < 2954{,}2$ K</u>.

    [0,15 punts]

Exercici 1.2 [1,25 punts]

- **Estructures de Lewis i geometria**

  - Estructures de Lewis:

    Hidrogen (H, Z=1): $1s^1 \Rightarrow$ 1 e^- de València.

    Carboni (C, Z=6): $1s^2\ 2s^2\ 2p^2 \Rightarrow$ 4 e^- de València.

    Clor (Cl, Z=17): $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^5 \Rightarrow$ 7 e^- de València.

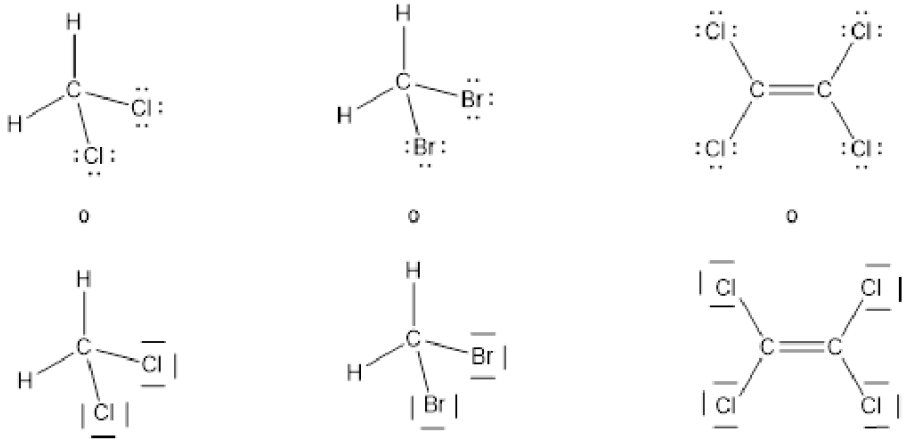
    Brom (Br, Z=35): $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^{10}\ 4p^5 \Rightarrow$ 7 e^- de València

    En total, s'han de col·locar:

    CH_2Cl_2: 4 + 2 · 1 + 2 · 7 e^- de València a l'estructura (20 e^-), corresponents a 10 parells d'electrons.

    CH_2Br_2: 4 + 2 · 1 + 2 · 7 e^- de València a l'estructura (20 e^-), corresponents a 10 parells d'electrons.

    C_2Cl_4: 2 · 4 + 4 · 7 e^- de València a l'estructura (36 e^-), corresponents a 18 parells d'electrons.



[0,60 punts]

  - Geometries:

    CH_2Cl_2: La geometria serà tetraèdrica, corresponent a una estructura AB_4 segons la teoria RPECV.

    CH_2Br_2: La geometria serà tetraèdrica, corresponent a una estructura AB_4 segons la teoria RPECV.

    C_2Cl_4: La geometria al voltant de cada àtom de C serà plana triangular, corresponent a una estructura AB_3 segons la teoria RPECV.

[0,40 punts]

- **Polaritat**

  Com que el clor és més electronegatiu que el carboni, els enllaços C-Cl del tetracloroetè estan polaritzats. Ara bé, a causa de la simetria de la molècula, els moments dipolars dels enllaços C-Cl s'anul·len entre ells en sumar-se. Per tant, la molècula de tetracloroetè és apolar.

[0,25 punts]

2. PAU 2026 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 3

Exercici 3.1 [1,25 punts]

- **Justificació del tipus de reacció: endotèrmica o exotèrmica**
  - Càlcul de l'entalpia estàndard de reacció:

    El càlcul de l'entalpia estàndard de la reacció ($\Delta H^\circ_{\text{reacció}}$) d'hidròlisi de la sacarosa en glucosa i fructosa a 298 K es pot fer a partir de les entalpies de formació de reactius ($\Delta H^\circ_{\text{f,reactius}}$) i productes ($\Delta H^\circ_{\text{f,productes}}$):

    $$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = \sum_{\text{productes}} n_{\text{productes}} \cdot \Delta H^\circ_{\text{f,productes}} - \sum_{\text{reactius}} n_{\text{reactius}} \cdot \Delta H^\circ_{\text{f,reactius}}$$

    [0,10 punts]

    Operant amb la fórmula de $\Delta H^\circ_{\text{reacció}}$, s'obté:

    $$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = (1 \cdot \Delta H^\circ_{\text{f,glucosa}} + 1 \cdot \Delta H^\circ_{\text{f,fructosa}}) - (1 \cdot \Delta H^\circ_{\text{f,sacarosa}} + 1 \cdot \Delta H^\circ_{\text{f,aigua}})$$

    $$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = (-1273,3 - 1265,6) – (-2226,0 – 285,8) = -27,1 \text{ kJ mol}^{-1}$$

    [0,40 punts]

  - Justificació del tipus de reacció:

    Com que $\Delta H^\circ_{\text{reacció}} < 0$ a 298 K, la reacció de metabolització de la sacarosa és exotèrmica a aquestes condicions.

    [0,20 punts]

- **Calor despresa o absorbida a pressió constant per a 8,5 g de sacarosa**
  - Relació entre l'entalpia de reacció i la calor a pressió constant:

    A pressió constant $\Rightarrow \Delta H_{\text{reacció}} = q_p$, on q_p és la calor despresa o absorbida a pressió constant a unes determinades condicions.

    [0,15 punts]

  - Càlcul de l'entalpia de reacció per a 8,5 g de sacarosa:

    Massa molar de la sacarosa ($C_{12}H_{22}O_{11}$) = 12 · 12 + 1 · 22 + 11 · 16 = 342 g mol^{-1}

    Entalpia de reacció per a 8,5 g de sacarosa = 8,5 g $C_{12}H_{22}O_{11}$ · (1 mol $C_{12}H_{22}O_{11}$ / 342 g $C_{12}H_{22}O_{11}$) · (-27,1 kJ / 1 mol $C_{12}H_{22}O_{11}$) = -0,674 kJ

    [0,25 punts]

    La reacció de metabolització de 8,5 g de sacarosa desprèn 0,674 kJ (o 674 J) de calor a pressió constant.

    [0,15 punts]

Exercici 3.2 [1,25 punts]

- **Tipus i nombre de grups funcionals**
  - Sacarosa: conté 8 grups alcohol (R-OH) i 3 grups èter (R-O-R') **[0,15 punts]**
  - Glucosa: conté 5 grups alcohol (R-OH) i 1 grup èter (R-O-R') **[0,15 punts]**
  - Fructosa: conté 5 grups alcohol (R-OH) i 1 grup èter (R-O-R') **[0,15 punts]**
- **Relació d'isomeria entre la glucosa i la fructosa**

  La glucosa i la fructosa són isòmers estructurals (o constitucionals), ja que presenten la mateixa fórmula molecular ($C_6H_{12}O_6$), però tenen una connectivitat diferent entre els seus àtoms. Per exemple, la glucosa forma una estructura cíclica de sis membres i la fructosa de cinc membres.

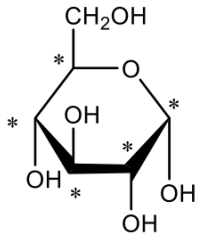
  [0,35 punts]

- **Quiralitat**

  Les molècules de sacarosa, glucosa i fructosa són quirals, ja que totes elles presenten estereocentres (o carbonis asimètrics), que són àtoms de carboni tetraèdrics que s'enllacen a quatre grups diferents al seu voltant.

  [0,25 punts]

  En concret, la molècula de glucosa presenta cinc estereocentres, que s'indiquen amb asteriscs a l'estructura:



Glucosa

[0,20 punts]

3. PAU 2026 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 3

Exercici 3.1 [1,25 punts]

- **Càlcul de l'entalpia de la reacció**

$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = (\sum n_p \, \Delta H^o_{f\ \text{productes}}) - (\sum n_r \, \Delta H^o_{f\ \text{reactius}}) \qquad \textbf{[0,10 punts]}$$

$$\Sigma\, n_p \, \Delta H^o_{f,\ \text{productes}} = [(1 \times \Delta H^o_{f,}\, CH_4) + (2 \times \Delta H^o_{f,}\, H_2O)]$$

$$\Sigma\, n_r \, \Delta H^o_{f,\ \text{reactius}} = [(1 \times \Delta H^o_{f,}\, CO_2) + (4 \times \Delta H^o_{f,}\, H_2)]$$

$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [1 \times (-74{,}8\ \text{kJ mol}^{-1}) + 2 \times (-241{,}8\ \text{kJ mol}^{-1})] - [1 \times (-393{,}5\ \text{kJ mol}^{-1}) + 4 \times 0]$$

$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = -\,164{,}9\ \text{kJ mol}^{-1} \qquad \textbf{[0,40 punts]}$$

- **Justificació del tipus de reacció**

Com que $\Delta H^\circ_{\text{reacció}} < 0$ a 298 K, la reacció de biometanació és exotèrmica a aquestes condicions.

[0,20 punts]

- **Calor que es desprèn quan s'obté 1,0 kg de CH_4**

Relació entre l'entalpia de reacció i la calor a pressió constant:

A pressió constant $\Rightarrow \Delta H_{\text{reacció}} = q_p$, on q_p és la calor despresa o absorbida a pressió constant a unes determinades condicions.

[0,15 punts]

Càlcul de l'entalpia de reacció per a 1,0 kg de metà:

Massa molecular del metà: $1 \times 12{,}0 + 4 \times 1{,}0 = 16\ \text{g mol}^{-1}$

$$1{,}0\ \text{kg metà} \frac{1000\ \text{g}}{1\ \text{kg}} \frac{1\ \text{mol metà}}{16\ \text{g}} = 62{,}5\ \text{mol metà}$$

Calor alliberada en l'obtenció d'un kg de metà:

$$62{,}5\ \text{mol metà} \frac{-164{,}9\ \text{kJ}}{\text{mol}} = -10\,306{,}25\ \text{kJ}$$

La reacció de biometanació per produir 1 kg de metà desprèn 10 306,25 kJ de calor a pressió constant.

[0,40 punts]

Exercici 3.2 [1,25 punts]

- **Càlcul de $\Delta S^0_{reacció}$**

$$\Delta S^o_{\text{reacció}} = (\sum n_p\ S^o_{\text{productes}}) - (\sum n_p\ S^o_{\text{reactius}})$$

[0,10 punts]

$$\Sigma\ n_p\ S^o_{\text{productes}} = [(1 \times S^o\ CH_4) + (2 \times S^o\ H_2O)]$$
$$\Sigma\ n_r\ H^o_{f\ \text{reactius}} = [(1 \times S^o\ CO_2) + (4 \times S^o\ H_2)]$$

$$\Delta S^o_{\text{reacció}} = [1 \times 186,3 + 2 \times 188,8] - [1 \times 213,7 + 4 \times 130,7] = -172,6\ J\ mol^{-1}\ K^{-1}$$

[0,40 punts]

- **Càlcul de $\Delta G^0_{reacció}$**

$$\Delta G^0_{\text{reacció}} = \Delta H^0_{\text{reacció}} - T \cdot \Delta S^0_{\text{reacció}}$$

[0,10 punts]

Primer es transformen les unitats d'entropia:

$$-172,6\ J\ mol^{-1}\ K^{-1} \times (1\ kJ / 1000\ J) = -0,1726\ kJ\ mol^{-1}\ K^{-1}$$

Operant amb la fórmula de $\Delta G^{\circ}_{\text{reacció}}$, s'obté:

$$\Delta G^0_{\text{reacció}} = -164,9\ kJ\ mol^{-1} - [298\ K \times (-0,1726\ kJ\ mol^{-1}\ K^{-1})] = -113,46\ kJ\ mol^{-1}$$

[0,40 punts]

- **Espontaneïtat de la reacció**

El criteri d'espontaneïtat d'una reacció en base a $\Delta G^0_{\text{reacció}}$ és:

$\underline{\Delta G^0_{\text{reacció}} < 0 \Rightarrow \text{reacció espontània a condicions estàndard}}$

Com que a 25 ºC, $\Delta G^0_{\text{reacció}} = -113,46\ kJ\ mol^{-1}$ $\Rightarrow$ <u>la reacció de biometanació a 25 ºC és espontània a condicions estàndard</u>. [**0,25 punts]**

4. PAU 2025 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 4

Exercici 4a

Formulació. Etanol: CH_3-CH_2-OH

Reacció de combustió de l'etanol

$$CH_3\text{-}CH_2\text{-}OH(l) + 3\ O_2(g) \rightarrow 2\ CO_2(g) + 3\ H_2O(g)$$ **[0,20 p.]**

Càlcul de l'entalpia estàndard de combustió de l'etanol

L'entalpia estàndard d'una reacció es pot calcular a partir de les energies dels enllaços trencats (reactius) menys les energies dels enllaços formats (productes):

$\Delta H^o = \Sigma\ n_r\ E_{\text{trencats}} - \Sigma\ n_p\ E_{\text{formats}}$ **[0,10 p.]**

En els reactius cal trencar:

1 enllaç C-C
5 enllaços C-H
1 enllaç C-O
1 enllaç O-H
3 enllaços O=O (3 mol O_2)

En els productes cal formar:

4 enllaços C=O (2 mol CO_2)
6 enllaços O-H (3 mol H_2O)

Per tant,

$\Delta H^o = [1\ E_{C\text{-}C} + 5\ E_{C\text{-}H} + 1\ E_{C\text{-}O} + + 1\ E_{O\text{-}H} + 3\ E_{O=O}] - [4\ E_{C=O} + 6\ E_{O\text{-}H}]$ **[0,30 p.]**

$\Delta H^o = [(1 \times 348) + (5 \times 412) + (1 \times 358) + (1 \times 463) + (3 \times 498)] - [(4 \times 799 + (6 \times 463)] =$

$= \mathbf{-\ 1251\ kJ\ mol^{-1}} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{\Delta H^o = -\ 1251\ kJ\ mol^{-1}}$ **[0,20 p.]**

Eficiència energètica de l'etanol i l'èter dimetílic per unitat de massa

Energia per gram de compost

Massa molar etanol (CH_3CH_2OH): 6 x 1 + 2 x 12 + 1 x 16 = 46 g mol^{-1}
Massa molar èter dimetílic (CH_3OCH_3): 6 x 1 + 2 x 12 + 1 x 16 = 46 g mol^{-1}

Etanol: - 1251 kJ mol^{-1} x 1 mol etanol / 46 g = **- 27,196 kJ g^{-1}**
Éter dimetílic: - 1292 kJ mol^{-1} x 1 mol èter dietílic / 46 g = **- 28,086 kJ g^{-1}** **[0,25 p.]**

Justificació

L'**èter dimetílic allibera més energia per gram** i el fa **més eficient** com a **combustible** per **unitat de massa**. **[0,20 p.]**

Exercici 4b

Raonament i justificació tipus d'isomeria

L'etanol i l'èter dimetílic **són isòmers** perquè tenen la **mateixa fórmula molecular C_2H_6O**, però **diferent connectivitat entres els seus àtoms**, per tant, es tracta de **diferents molècules** i tenen **diferents grups funcionals**.

[0,25 p.]

Això els converteix en **isòmers estructurals o constitucionals de grup funcional**, ja que pertanyen a diferents tipus de compostos: l'etanol és un **alcohol** (amb un grup hidroxil: −OH), mentre que l'èter dimetílic és un **èter** (amb un oxigen enllaç a dos àtoms de carboni: C–O–C).

[0,30 p.]

Efecte de l'estructura en la temperatura o punt d'ebullició

La diferència estructural té un impacte en les seves **propietats físiques**.

L'**etanol** té una **temperatura o punt d'ebullició més alta** que l'èter dimetílic a causa dels **enllaços d'hidrogen intermolecular** que pot formar amb altres molècules, entre l'hidrogen (H) d'una molècula d'etanol i l'oxigen (O) d'una altra molècula d'etanol, ja que té un grup −OH.

L'**èter dimetílic no pot formar aquests enllaços d'hidrogen**, resultant en un **punt d'ebullició més baix**.

[0,45 p.]

Les forces intermoleculars d'enllaç d'hidrogen són les més fortes que es poden establir entre molècules. L'etanol té el punt d'ebullició o temperatura d'ebullició més alts ja que cal **donar més energia** per separar les molècules d'etanol perquè passin a l'estat gasós.

[0,25 p.]

Exercici 4c

Enllaços característics de les molècules

Etanol: C-H, C-O i O-H

Èter dimetílic: C-H i C-O

- ⇒ Els **dos compostos** tenen en **comú enllaços C-H**.
- ⇒ Els dos compostos tenen en **comú enllaços C-O**. L'**enllaç C-O** de l'**alcohol** i l'**enllaç C-O-C** de l'**èter dimetílic** (del grup funcional èter).
- ⇒ L'**etanol** té un **grup funcional alcohol** i, per tant, un **enllaç O-H**.

[0,30 p.]

Identificació dels pics principals a l'espectre

Els pics principals (senyals) que es poden observar a l'espectre són:

- Banda a 3400 cm^{-1}: característica dels **alcohols**, **enllaç O-H** (3550 – 3200 cm^{-1})
- Banda a 3000-2800 cm^{-1}: característica de l'**enllaç C-H** (3000 – 2850 cm^{-1}), la presenten les **dues molècules**.
- Banda a 1100-1000 cm^{-1}: característica de l'**enllaç C-O** de l'**alcohol** (1260 – 1000 cm^{-1}) i l'**enllaç C-O-C** de l'**èter** (1300 – 1000 cm^{-1}), la presenten les **dues molècules**.

[0,45 p.]

Identificació de la molècula

Es tracta de la **molècula d'etanol** perquè la **banda de l'enllaç O-H** correspon al **grup funcional alcohol** (grup hidroxil), i **no** estaria **present** en l'espectre de l'**èter dimetílic**.

[0,50 p.]

Exercici 4d

Càlcul de l'entropia estàndard de la reacció

Reacció de combustió de l'èter dimetílic

$CH_3OCH_3(g) + 3\ O_2(g) \rightarrow 2\ CO_2(g) + 3\ H_2O(g)$ **[0,20 p.]**

Entropia estàndard de la reacció

$\Delta S^o_{\text{reacció}} = (\sum n_p\ S^o_{\text{productes}}) - (\sum n_p\ S^o_{\text{reactius}})$ **[0,10 p.]**

$(\Sigma\ n_p\ S^o_{\text{productes}}) = [(2 \times S^o\ CO_2) + (3 \times S^o\ H_2O)]$

$(\Sigma\ n_r\ S^o_{f\ \text{reactius}}) = [(1 \times S^o\ CH_3OCH_3) + (3 \times S^o\ O_2)]$

$\Delta S^o_{\text{reacció}} = [2 \times 213{,}6\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1} + 3 \times 188{,}8\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1}] - [1 \times 267{,}34\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1} + 3 \times 205{,}0\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1}] = 111{,}26\ \text{J K}^{-1}\ \text{mol}^{-1}$

$\Rightarrow$ **$\Delta S^o_{\text{reacció}} = 111{,}26\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1}$** **[0,30 p.]**

Càlcul de l'espontaneïtat de la reacció

Una **reacció** serà **espontània** quan **$\Delta G^0 < 0$**, i **[0,10 p.]**

$\Rightarrow$ **$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\ \Delta S^0$** **[0,10 p.]**

Primer, transformem les unitats d'entropia (J a kJ):

$111{,}26\ \text{J mol}^{-1}\ \text{K}^{-1} \times (1\ \text{kJ} / 1000\ \text{J}) = 0{,}11126\ \text{kJ mol}^{-1}\ \text{K}^{-1}$

Càlcul de l'espontaneïtat a 25 ºC

$T = 25\ ºC + 273\ K = 298\ K$

$\Delta H^0 = -1292\ \text{kJ mol}^{-1}$ *(enunciat)*

$\Delta G^0 = -1292\ \text{kJ mol}^{-1} - (298\ \text{K} \times (0{,}11126\ \text{kJ mol}^{-1}\ \text{K}^{-1})) = -1325{,}15\ \text{kJ mol}^{-1}$

$\Rightarrow$ **$\Delta G^0 = -1325{,}15\ \text{kJ mol}^{-1}$** **[0,30 p.]**

$\Rightarrow$ La **reacció** serà **espontània a 25 ºC** perquè **$\Delta G^0 < 0$** **[0,15 p.]**

5. PAU 2025 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 4

Exercici 4a

Tipus de reacció de polimerització

Els polímers es poden sintetitzar mitjançant dos tipus de processos de polimerització: **polimerització per reaccions per addició** (creixement en cadena) i **polimerització per reaccions per condensació** (creixement en etapes).

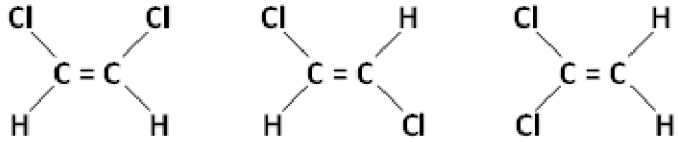
En les reaccions per addició es produeix un creixement de la cadena. En aquest tipus de reacció la molècula de monòmer sencer passa a formar part de la cadena de polímer.

El PVC és un polímer que s'obté a partir d'un monòmer, el clorur de vinil, mitjançant una reacció de **polimerització per addició** perquè s'obté una **macromolècula formada** amb **múltiples unitats del monòmer original** i **no s'obté cap altra molècula** a part del polímer.

[0,30 p.]

Formulació, tipus d'isomeria i nom dels diferents isòmers del dicloroetè i del tricloroetà

Dicloroetè:



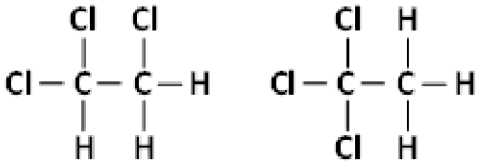
cis-1,2-dicloroetè *trans*-1,2-dicloroetè 1,1-dicloroetè

Els ***cis*-1,2-dicloroetè** i el ***trans*-1,2-dicloroetè** són **isòmers geomètrics** (mateixa fórmula molecular i mateixa connectivitat però diferent disposició en l'espai).

L'**1,1-dicloroetè** és un **isòmer estructural de posició** (mateixa formula molecular però diferent connectivitat) dels compostos ***cis*-1,2-dicloroetè** i ***trans*-1,2-dicloroetè.**

[0,50 p.]

Tricloroetà:



1,1,2-tricloroetà 1,1,1-tricloroetà

El 1,1,2-tricloroetà i el 1,1,1-tricloroetà són **isòmers estructurals de posició**. **[0,30 p.]**

Raonament. Aquests dos compostos **no presenten estereoisomeria òptica** perquè **no tenen cap carboni asimètric**, és a dir, no tenen cap carboni amb els quatre substituents diferents.

[0,15 p.]

Exercici 4b

Càlcul de la calor a pressió constant

Càlcul de l'entalpia estàndard de la reacció de síntesi del clorur de vinil

$$CH{\equiv}CH(g) + HCl(g) \rightarrow CH_2{=}CHCl(g)$$

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

$(\Sigma \, n_p \, \Delta H^o_{f,\text{ productes}}) = (1 \text{ x } \Delta H^o_f \, CH_2{=}CHCl)$

$(\Sigma \, n_r \, \Delta H^o_{f,\text{ reactius}}) = [(1 \text{ x } \Delta H^o_f \, CH{\equiv}CH) + (1 \text{ x } \Delta H^o_f \, HCl)]$

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = 1 \text{ x } (-37{,}26 \text{ kJ mol}^{-1}) - [1 \text{ x } (-226{,}9 \text{ kJ mol}^{-1}) + 1 \text{ x } (-92{,}3 \text{ kJ mol}^{-1}]$

$\Rightarrow \mathbf{\Delta H^o_{reacció} = 281{,}94 \text{ kJ mol}^{-1}}$ **[0,35 p.]**

Calor a pressió constant

$\Rightarrow \mathbf{q_p = \Delta H^o_{reacció}}$

$\Rightarrow \mathbf{q_p = 281{,}94 \text{ kJ mol}^{-1}}$ **[0,20 p.]**

Càlcul de la calor a volum constant

$\Rightarrow \mathbf{q_v = \Delta U^o_{reacció}}$ **[0,10 p.]**

Energia interna de la reacció a 25 ºC (298 K)

$\Delta H^o = \Delta U^o + \Delta n \, R \, T$

$\Delta n = 1 - 2 = -1 \text{ mol}$

$281{,}94 \, kJ \, \frac{1000 \, J}{1 \, kJ} = \Delta U^o + ((-1) \text{ x } 8{,}314 \text{ J K}^{-1}\text{mol}^{-1} \text{ x } 298 \text{ K})$

$\Delta U^o = 281940 \text{ J} + (1 \text{ x } 8{,}314 \text{ J K}^{-1}\text{mol}^{-1} \text{ x } 298 \text{ K}) = 284.417{,}57 \text{ J mol}^{-1}$

$\Rightarrow \mathbf{\Delta U^o = 284.417{,}57 \text{ J mol}^{-1}}$ **[0,35 p.]**

Justificació de quin tipus de reacció es tracta

La **reacció** que es produeix **és endotèrmica a 25 ºC** (298 K), perquè $\mathbf{\Delta H^o_{reacció} > 0}$ i, això significa que s'**absorbeix calor** durant la síntesi de clorur de vinil.

[0,15 p.]

Exercici 4c

Càlcul de l'entalpia estàndard de la reacció d'obtenció de l'1,1,2-tricloroetà

L'entalpia estàndard d'una reacció es pot calcular a partir de les energies dels enllaços trencats (reactius) menys les energies dels enllaços formats (productes):

$\Delta H^o = \Sigma\, n_r\, E_{\text{trencats}} - \Sigma\, n_p\, E_{\text{formats}}$ **[0,15 p.]**

Per a la reacció: $CH_2{=}CHCl(g) + Cl_2(g) \rightarrow CH_2Cl\text{-}CHCl_2(l)$

En els <u>reactius cal trencar</u>:

1 enllaç C=C
3 enllaços C-H
1 enllaç C-Cl
1 enllaç Cl-Cl

En els <u>productes cal formar</u>:

3 enllaços C-Cl
1 enllaç C-C
3 enllaços C-H

Per tant,

$\Delta H^o = [1\, E_{C=C} + 3\, E_{C-H} + 1\, E_{C-Cl} + 1\, E_{Cl-Cl}] - [3\, E_{C-Cl} + 1\, E_{C-C} + 3\, E_{C-H}]$ **[0,25 p.]**

$\Delta H^o = [(1 \times 608) + (3 \times 412) + (1 \times 328) + (1 \times 242)] - [(3 \times 328 + (1 \times 348) + (3 \times 412)] =$

$-154\ kJ\ mol^{-1}$

$\Rightarrow$ **$\Delta H^o = -154\ kJ\ mol^{-1}$** **[0,20 p.]**

Raonament del signe de l'entropia de la reacció i justificació qualitativa de la espontaneïtat en front de la temperatura

L'entropia és una magnitud que mesura el desordre d'un sistema. En aquesta reacció química es passa de **2 mols de gas en els reactius** a **1 mol de líquid en els productes**, per tant, **durant** el transcurs de **la reacció el desordre disminueix** i per això **<u>ΔS serà negatiu</u>.**

[0,25 p.]

Una **reacció** serà **espontània** quan **$\Delta G^0 < 0$**, i **[0,10 p.]**

$\Rightarrow$ **$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\,\Delta S^0$** **[0,10 p.]**

En aquesta reacció **ΔG^0 serà negativa** quan el terme $|T\,\Delta S^0|$ sigui **menor que** $|\Delta H^0|$, per tant, a **<u>temperatures baixes</u>** la reacció **<u>serà espontània</u>.**

[0,20 p.]

$\Delta H^o < 0$ i $\Delta S^0 < 0$ $\Rightarrow$ $\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\,\Delta S^0$

$(-) - T\,(-)$

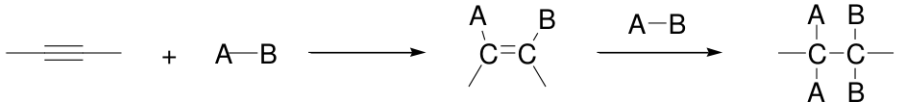
$(-) + T$

Exercici 4d

Tipus de reacció

Les dues reaccions són **reaccions d'addició a un enllaç múltiple on una molècula s'addiciona a l'enllaç múltiple**: es trenca un dels enllaços C-C i l'enllaç de la molècula A-B que s'addiciona per generar dos nous enllaços C-A i C-B amb el carbonis que formaven el doble enllaç. La molècula AB pot ser hidrogen, aigua, halògens, halogenurs d'hidrogen, etc.

Opcional. Reacció general en alquins: en els alquins, com que hi ha un enllaç triple, si hi ha suficient molècula AB l'addició pot continuar:



Opcional. Reacció general en alquens:



Formació del clorur de vinil:

$$CH{\equiv}CH(g) + H\text{-}Cl(g) \rightarrow CH_2{=}CHCl(g)$$

⇒ Es trenca un dels tres enllaços entre els dos carbonis de l'acetilè i l'enllaç H-Cl (molècula AB) per formar un nou enllaç C-H i C-Cl dels dos carbonis de l'acetilè.

Formació de l'1,1,2-tricloroetà:

$$CH_2{=}CHCl(g) + Cl_2(g) \rightarrow CH_2Cl\text{-}CHCl_2(l)$$

⇒ Es trenca un dels dos enllaços entre els dos carbonis del clorur de vinil i l'enllaç Cl-Cl (molècula AB, on els dos elements A i B són iguals) per formar dos nous enllaços C-Cl.

[0,50 p.]

Geometria molècula acetilè segons la teoria RPECV

Per la teoria de repulsions dels parells d'electrons de la capa de valència (RPECV) l'acetilè (CH≡CH) té **geometria lineal**. L'**àtom central** serà **qualsevol dels àtoms de carboni** que està unit a **dos parells enllaçats**, ja que els enllaços múltiples comptabilitzen com si fos un enllaç senzill, per tant, serà una **estructura tipus AB_2** de geometria lineal.

[0,35 p.]

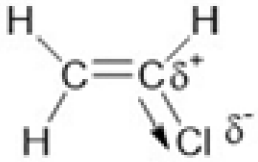
Exercici 4d (continuació)

Raonament polaritat molècula de clorur de vinil

Els **enllaços C-C no estan polaritzats** perquè els dos àtoms tenen la mateixa electronegativitat. Els **enllaços C-H pràcticament no estan polaritzats** perquè la **diferència d'electronegativitat** entre el C (2,5) i el H (2,2) **és molt petita**, en canvi **l'enllaç C-Cl està fortament polaritzat** perquè el **Cl** té una **electronegativitat (3,5) molt més gran** que la del **C (2,5)** i **atraurà amb més força els electrons de l'enllaç C-Cl**, i això provoca un determinat **moment dipolar** en les molècules.

Les molècules que presenten enllaços fortament polaritzats seran polars si la geometria de la molècula no compensa els enllaços polaritzats.

⇒ La **molècula de clorur de vinil és polar** perquè **no s'anul·la** el **moment dipolar** de l'enllaç C-Cl.



[0,40 p.]

6. PAU 2024 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 3

Pregunta 3a

$$CaO(s) + H_2O(l) \rightarrow Ca(OH)_2(s)$$

Calor de la reacció d'hidratació de la calç viva

Càlcul de l'entalpia estàndard de la reacció calor

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

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

$(\Sigma \, n_r \, \Delta H^o_{f,\text{ reactius}}) = [(1 \times \Delta H^o_f \, CaO) + (1 \times \Delta H^o_f \, H_2O)]$

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

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

Justificació que la reacció és exotèrmica

$\Rightarrow$ La **reacció és exotèrmica** perquè **$\Delta H^o_{\text{reacció}} < 0$**; 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

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

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

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

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

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

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

Problema 3b

Temperatura en condicions d'equilibri

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

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

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

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

Càlcul de l'entalpia de la reacció

Segons l'equació $\mathbf{\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\,\Delta S^0}$ **si** $\mathbf{T = 0} \Rightarrow \mathbf{\Delta G^0 = \Delta H^0}$

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

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

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

Espontaneïtat de la reacció

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

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

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

7. PAU 2024 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 3

Problema 3a

Reaccions de combustió

Glucosa: $C_6H_{12}O_6(s) + 6\ O_2(g) \rightarrow 6\ CO_2(g) + 6\ H_2O(l)$ **[0,25 p.]**

Etanol: $C_2H_5OH(l) + 3\ O_2(g) \rightarrow 2\ CO_2(g) + 3\ H_2O(l)$ **[0,25 p.]**

Càlcul de l'entalpia de la reacció de fermentació

Reaccions

Segons la reacció de fermentació $C_6H_{12}O_6(s) \rightarrow 2\ C_2H_5OH(l) + 2\ CO_2(g)$, reescrivim les reaccions de combustió de la glucosa i l'etanol per calcular l'entalpia estàndard de la reacció de fermentació de la glucosa aplicant la llei de Hess.

Reacció de combustió 1: directa

Glucosa: $C_6H_{12}O_6(s) + 6\ O_2(g) \rightarrow 6\ CO_2(g) + 6\ H_2O(l)$ $\Delta H^{o}_{r1} = -2813\ kJ\ mol^{-1}$

Reacció de combustió 2: doblada i girada

Etanol: $2\ [2\ CO_2(g) + 3\ H_2O(l) \rightarrow C_2H_5OH(l) + 3\ O_2(g)]$ $\Delta H^{o}_{r2} = -2 \times (-1367\ kJ\ mol^{-1})$

$C_6H_{12}O_6(s) \rightarrow 2\ C_2H_5OH(l) + 2\ CO_2(g)$ **[0,40 p.]**

Càlcul

Aplicant la llei de Hess:

$\Delta H^0_{fermentació} = \Delta H^{o}_{r1} - 2 \times \Delta H^{o}_{r2} = -2813\ kJ\ mol^{-1} - 2 \times (-1367\ kJ\ mol^{-1}) = -79\ kJ\ mol^{-1}$

$\Rightarrow \Delta H^0_{fermentació} = -79\ kJ\ mol^{-1}$ **[0,20 p.]**

Justificació del tipus de reacció

⇒ La reacció és **exotèrmica** perquè $\mathbf{\Delta H^0_{fermentació} < 0}$, i això significa que es desprèn calor durant la fermentació.

[0,15 p.]

Problema 3b

Càlcul de l'entropia estàndard de la reacció

Reacció de combustió de la glucosa:

$$C_6H_{12}O_6(s) + 6\ O_2(g) \rightarrow 6\ CO_2(g) + 6\ H_2O(l) \qquad \Delta H^o_{r1} = -2813\ kJ\ mol^{-1}$$

$\Delta S^o_{\text{reacció}} = (\sum n_p\ S^o_{\text{productes}}) - (\sum n_p\ S^o_{\text{reactius}})$

$(\Sigma\ n_p\ S^o_{\text{productes}}) = [(6 \times S^o\ CO_2) + (6 \times S^o\ H_2O)]$

$(\Sigma\ n_r\ S^o_{f\ \text{reactius}}) = [(1 \times S^o\ C_6H_{12}O_6) + (6 \times S^o\ O_2)]$

$\Delta S^o_{\text{reacció}} = [6 \times 213{,}8 + 6 \times 70{,}0] - [1 \times 2121{,}0 + 6 \times 205{,}2] = -1649{,}4\ J\ K^{-1}\ mol^{-1}$

$\Rightarrow$ **$\Delta S^o_{\text{reacció}} = -1649{,}4\ J\ mol^{-1}\ K^{-1}$** **[0,50 p.]**

Càlcul de l'espontaneïtat de la reacció

Una **reacció** serà **espontània** quan **$\Delta G^0 < 0$**, i **[0,10 p.]**

$\Rightarrow$ **$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\ \Delta S^0$** **[0,10 p.]**

Primer transformen les unitats d'entropia (J a kJ):

$$-1649{,}4\ J\ mol^{-1}\ K^{-1} \times (1\ kJ / 1000\ J) = -1{,}6494\ kJ\ mol^{-1}\ K^{-1}$$

Càlcul de l'espontaneïtat a 36,5 ºC

$T = 36{,}5 + 273\ K = 309{,}5\ K$

$\Delta H^o_{r1} = -2813\ kJ\ mol^{-1}$ (enunciat)

$\Delta G^0 = -2813\ kJ\ mol^{-1} - (309{,}5\ K \times (-1{,}6494\ kJ\ mol^{-1}\ K^{-1})) = -2302{,}5\ kJ\ mol^{-1}$

$\Rightarrow$ **$\Delta G^o_{\text{reacció}} = -2302{,}5\ kJ\ mol^{-1}$** **[0,35 p.]**

- *També es considerarà correcte si es calcula ΔG^o en $J\ mol^{-1}$, canviant les unitats de ΔH^0 de kJ a J, i s'obté un valor de $\Delta G^o_{\text{reacció}} = -2302{,}5 \times 10^3\ J\ mol^{-1}$.*

$\Rightarrow$ La **reacció** serà **espontània** en condicions fisiològiques **a 36,5 ºC** perquè **$\Delta G^0 < 0$**

[0,20 p.]

8. PAU 2023 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 2

Pregunta 2a

Càlcul de l'entalpia estàndard de la primera reacció (□Ho reacció)

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = (\sum n_p \, \Delta H^o_{\text{f productes}}) - (\sum n_r \, \Delta H^o_{\text{f reactius}})$

[0,10 p]

$(\Sigma \, n_p \, \Delta H^o_{f,\text{ productes}}) = [(1 \times \Delta H^o_{f,} \, C_2H_5Cl) + (1 \times \Delta H^o_{f,} \, HCl)]$

$(\Sigma \, n_r \, \Delta H^o_{f,\text{ reactius}}) = [(1 \times \Delta H^o_{f,} \, C_2H_6) + (1 \times \Delta H^o_{f,} \, Cl_2)]$

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [1 \times (-104{,}9 \text{ kJ mol}^{-1}) + 1 \times (-92{,}3 \text{ kJ mol}^{-1})] - [1 \times (-84{,}7 \text{ kJ mol}^{-1}) + 0]$

$\Rightarrow \mathbf{\Delta H^o_{reacció} = - 112{,}5 \text{ kJ mol}^{-1}}$

[0,20 p]

Càlcul de l'energia de Gibbs de la primera reacció (ΔG^o)

- Canvi unitats ΔS^o (J a kJ):

  $\Delta S^o = 2{,}09 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \times 1 \text{ kJ} / 1000 \text{ J} = 2{,}09 \times 10^{-3} \text{ kJ K}^{-1}\text{mol}^{-1}$

- Càlcul de ΔG^0 a 298 K:

  $\Delta G^0 = \Delta H^0 - T \, \Delta S^0$

  $\Delta G^0 = - 112{,}5 \text{ kJ mol}^{-1} - [298 \text{ K} \times (0{,}00209 \text{ kJ K}^{-1} \text{ mol}^{-1})] = -113{,}123 \text{ kJ mol}^{-1}$

  $\Rightarrow \mathbf{\Delta G^o_{\text{ reacció}} = -113{,}1 \text{ kJ mol}^{-1}}$

[0,20 p]

$\Rightarrow$ **La primera reacció serà espontània a 298 K (25 ºC) perquè □Go < 0**

[0,15 p]

Càlcul de l'energia de Gibbs de la segona reacció (ΔG^0)

- Canvi unitats ΔS^o (J a kJ):

  $\Delta S^o = -128{,}6 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \times 1 \text{ kJ} / 1000 \text{ J} = -0{,}1286 \text{ kJ K}^{-1}\text{mol}^{-1}$

- Càlcul de ΔG^0 a 298 K:

  $\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\,\Delta S^0$

  $\Delta G^0 = -64{,}9 \text{ kJ mol}^{-1} - [298 \text{ K} \times (-0{,}1286 \text{ kJ K}^{-1} \text{ mol}^{-1})] = -26{,}6 \text{ kJ mol}^{-1}$

  $\Rightarrow \Delta G^0$ reacció = -26,6 kJ mol-1

[0,20 p]

$\Rightarrow$ La segona reacció serà espontània a 298 K (25 ºC) perquè Go < 0

[0,15 p]

Significat del signe de la variació d'entropia

A nivell microscòpic, l'entropia indica el grau de desordre d'un sistema.

$\Rightarrow$ Si S↑ $\Rightarrow$ desordre ↑

$\Rightarrow \Delta S^o_{\text{reacció}} = (\sum n_p S^o_{\text{productes}}) - (\sum n_r S^o_{\text{reactius}})$

- Si la variació d'entropia d'una reacció és positiva, el desordre dels productes és superior al desordre dels reactius (1a reacció).

  Opcional: $\Delta S^o_{\text{reacció}} > 0 \Rightarrow (\sum n_p S^o_{\text{productes}}) > (\sum n_r S^o_{\text{reactius}})$

- Si la variació d'entropia d'una reacció es negativa, el desordre dels reactius és superior al desordre dels productes (2a reacció).

  Opcional: $\Delta S^o_{\text{reacció}} < 0 \Rightarrow (\sum n_p S^o_{\text{productes}}) < (\sum n_r S^o_{\text{reactius}})$

[0,25 p]

Pregunta 2b



El pictograma 1 indica que és inflamable.

Els productes amb aquest pictograma, acostumen a ser en format gas, aerosol, líquid o vapor i presenten un alt risc d'inflamació.

[0,30 p]



El pictograma 2 indica que és un perill greu per a la salut.

Substàncies que per ingestió o inhalació poden implicar riscos greus, aguts o crònics per a la salut. Es recomana evitar el contacte amb el cos humà.

[0,30 p]



El pictograma 3 indica irritació cutània.

Aquest producte, per contacte breu, perllongat o repetitiu amb la pell o les mucoses, pot provocar una reacció inflamatòria.

[0,35 p]



El pictograma 4 indica que és corrosiu.

Pot ser corrosiu per a alguns metalls, pot provocar cremades a la pell i lesions oculars greus.

[0,30 p]

9. PAU 2023 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 5

Problema 5a

Càlcul de l'entalpia de la reacció

$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = (\sum n_p \, \Delta H^o_{\text{f productes}}) - (\sum n_r \, \Delta H^o_{\text{f reactius}})$$

[0,10 p]

$$(\Sigma \, n_p \, \Delta H^o_{f,\text{ productes}}) = (2 \times \Delta H^o_{f,} \, NO_2)$$

$$(\Sigma \, n_r \, \Delta H^o_{f,\text{ reactius}}) = [(1 \times \Delta H^o_{f,} \, N_2O) + [(3/2 \times \Delta H^o_{f,} \, O_2)]$$

$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = (2 \times 33{,}2 \text{ kJ mol}^{-1}) - [(81{,}6 \text{ kJ mol}^{-1}) + (3/2 \times 0)]$$

$$\mathbf{\Delta H^o_{reacció} = -15{,}2 \text{ kJ mol}^{-1}}$$

[0,25 p]

Càlcul de la variació d'entropia

$$\Delta S^o_{\text{reacció}} = (\sum n_p \, S^o_{\text{productes}}) - (\sum n_r \, S^o_{\text{reactius}})$$

[0,10 p]

$$(\Sigma \, n_p \, S^o_{\text{productes}}) = (2 \times S^o \, NO_2)$$

$$(\Sigma \, n_r \, S^o_{\text{reactius}}) = [(1 \times S^o \, N_2O) + [(3/2 \times S^o \, O_2)]$$

$$\Delta S^o_{\text{reacció}} = (2 \times 240{,}1 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) - [(220{,}1 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) + (3/2 \times 205{,}2 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1})]$$

$$\mathbf{\Delta S^o_{reacció} = -47{,}7 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}}$$

[0,25 p]

Càlcul de la variació d'energia Gibbs a 298 K

- Canvi unitats ΔH^o (J a kJ):

  $$\Delta S^o = -47{,}7 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \times 1 \text{ kJ} / 1000 \text{ J} = -0{,}0477 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

- Càlcul de ΔG^0 a 298 K:

  $$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T \, \Delta S^0$$

  $$\Delta G^0 = -15{,}2 \text{ kJ mol}^{-1} - (298 \text{ K} \times -0{,}0477 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) = -0{,}9854 \text{ kJ mol}^{-1}$$

  $$\mathbf{\Rightarrow \Delta G^0 = -0{,}9854 \text{ kJ mol}^{-1}}$$

[0,25 p]

$\Rightarrow \Delta G^0 < 0$ per tant la reacció és espontània a 298 K

[0,10 p]

Interval de temperatures en què la reacció és espontània

Sí $\Delta G^0 = 0$ la reacció es troba en equilibri ⇒ $\Delta H^o_{\text{reacció}} = T \cdot \Delta S^o_{\text{reacció}}$

$$-15{,}2 = T \cdot (-0{,}0477) \Rightarrow T = \frac{-15{,}2}{-0{,}0477} = 318{,}66\ K$$

⇒ $\Delta G^0 < 0$ si T < 318,66 K

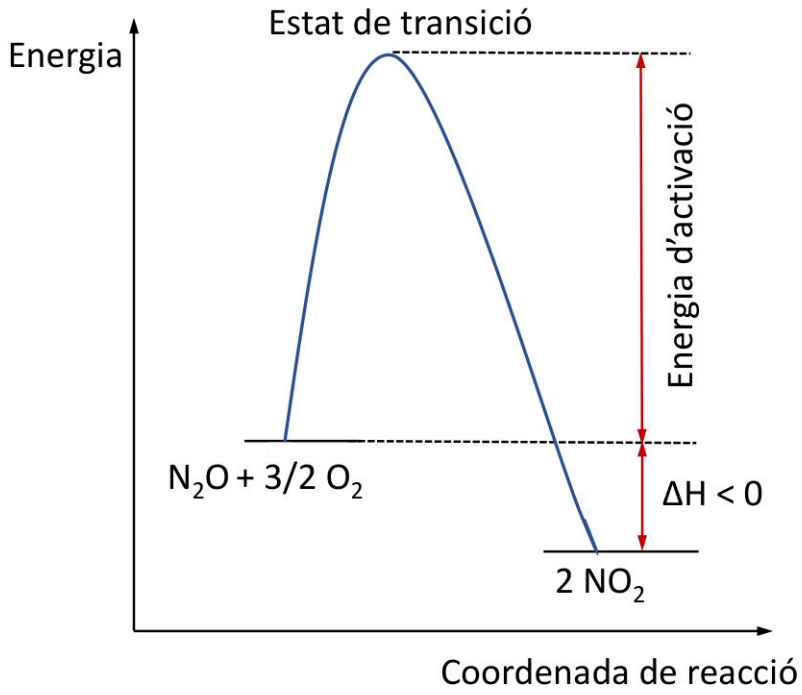
⇒ La reacció serà espontània a temperatures inferiors a 318,66 K

[0,20 p]

Pregunta 5b

Representació gràfica E vs. coordenada de reacció

[0,45 p]



- Cada ítem compta 0,15 p (□H, energia d'activació i estat de transició o complex activat)

Modificació de l'energia d'activació en afegir un catalitzador

Si la reacció es fa en presència d'un catalitzador, es modifica el valor de l'energia d'activació (E_a), ja que la funció del catalitzador és canviar el mecanisme de la reacció i amb això es pot modificar **l'energia d'activació (disminueix)** i **la velocitat de la reacció (augmenta).**

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

[0,45 p]

Modificació de l'entalpia de la reacció en afegir un catalitzador

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**

[0,35 p]

Pregunta 1a

Reaccions de combustió

1. Reacció de combustió de la hidrazina

$N_2H_4(l) + O_2(g) \rightarrow N_2(g) + 2\ H_2O(g)$

[0,20 p.]

2. Reacció de combustió de la dimetilhidrazina

$N_2H_2(CH_3)_2(l) + 4\ O_2(g) \rightarrow N_2(g) + 4\ H_2O(g) + 2\ CO_2(g)$

[0,20 p.]

Càlcul de les entalpies estàndard de reacció

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = (\sum n_p\ \Delta H^o_{\text{f productes}}) - (\sum n_r\ \Delta H^o_{\text{f reactius}})$

1. Entalpia estàndard de combustió de la hidrazina

$(\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\ \text{productes}}) = [(1 \times \Delta H^o_{f,}\ N_2) + (2 \times \Delta H^o_{f,}\ H_2O)]$

$(\Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\ \text{reactius}}) = [(1 \times \Delta H^o_{f,}\ N_2H_4) + (1 \times \Delta H^o_{f,}\ O_2)]$

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [0 + 2 \times (-241{,}8\ \text{kJ mol}^{-1})] - [1 \times (50{,}6\ \text{kJ mol}^{-1}) + 0]$

$\mathbf{\Delta H^o_{reacció} = -534{,}2\ kJ\ mol^{-1}}$

[0,30 p.]

2. Entalpia estàndard de combustió de la dimetilhidrazina

$(\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\ \text{productes}}) = [(1 \times \Delta H^o_{f,}\ N_2) + (4 \times \Delta H^o_{f,}\ H_2O) + (2 \times \Delta H^o_{f,}\ CO_2)]$

$(\Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\ \text{reactius}}) = [(1 \times \Delta H^o_{f,}\ N_2H_2(CH_3)_2) + (4 \times \Delta H^o_{f,}\ O_2)]$

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [0 + 4 \times (-241{,}8\ \text{kJ mol}^{-1}) + 2 \times (-393{,}5\ \text{kJ mol}^{-1}] - [1 \times (42{,}0\ \text{kJ mol}^{-1}) + 4 \times 0]$

$\mathbf{\Delta H^o_{reacció} = -1.796{,}2\ kJ\ mol^{-1}}$

[0,30 p.]

Elecció d'un dels combustibles

Canvi $\Delta H^o_{\text{reacció}}$ de kJ mol^{-1} a kJ g^{-1}:

Massa molar del N_2H_4: $2 \times 14 + 4 \times 1 = 32$ g mol^{-1}

Massa molar del $N_2H_2(CH_3)_2$: $2 \times 14 + 8 \times 1 + 2 \times 12 = 60$ g mol^{-1}

Hidrazina $\Rightarrow \mathbf{\Delta H^o_{reacció}} = -534{,}2$ kJ $mol^{-1} \times 1$ mol $N_2H_4/32$ g = **–16,7 kJ g^{-1}**

Dimetilhidrazina $\Rightarrow \mathbf{\Delta H^o_{reacció}} = -1.796{,}2$ kJ $mol^{-1} \times 1$ mol $N_2H_2(CH_3)_2/60$ g = **–29,9 kJ g^{-1}**

Justificació:

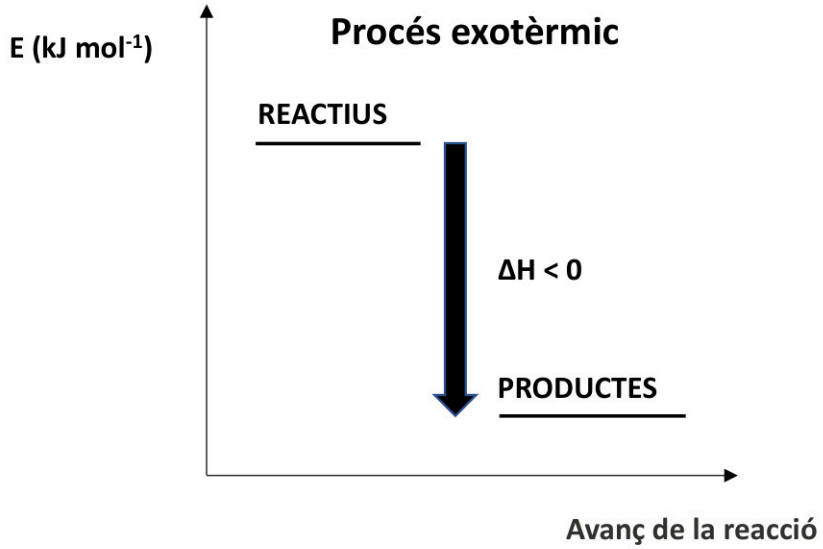
Com que la limitació és de pes, serà preferible utilitzar aquell combustible que generi més energia per unitat de massa. Es **recomana** utilitzar **dimetilhidrazina**, ja que **produeix més energia per unitat de massa** (–29,9 kJ g^{-1}).

[0,25 p.]

Pregunta 1b

Diagrama entàlpic del procés de combustió de la hidrazina

$N_2H_4(l) + O_2(g) \rightarrow N_2(g) + 2\ H_2O(g)$ $\Delta H^o_{reacció} < 0$



[0,65 p.]

Pictogrames



Perillós per aspiració: aquest producte pot arribar a l'organisme per inhalació i causar efectes greus, aguts o crònics molt diversos en la salut. Es recomana evitar el contacte amb el cos humà.

[0,30 p.]



Irritació cutània: aquest producte, per contacte breu, perllongat o repetitiu amb la pell o les mucoses, pot provocar una reacció inflamatòria.

[0,30 p.]

Pregunta 3a

Calor despresa a pressió constant

Reacció de fermentació de la glucosa: $C_6H_{12}O_6 \rightarrow 2\ CH_3CH_2OH + 2\ CO_2$ ΔH^o ?

- Escriure i igualar les reaccions de combustió

Combustió de la glucosa:
$C_6H_{12}O_6 + 6\ O_2 \rightarrow 6\ CO_2 + 6\ H_2O$ $\Delta H^o_{c,gl} = -2816{,}8$ kJ

[0,25 p]

Combustió de l'etanol:
$CH_3CH_2OH + 3\ O_2 \rightarrow 2\ CO_2 + 3\ H_2O$ $\Delta H^o_{c,et} = -1366{,}9$ kJ

[0,25 p]

- *L'etanol el poden escriure com C_2H_6O enlloc de CH_3CH_2OH en qualsevol reacció química.*

- Aplicar la llei de Hess

Combinem les dues reaccions de combustió perquè, en sumar-les, surti la reacció de fermentació de la glucosa.

$C_6H_{12}O_6 + 6\ O_2 \rightarrow 6\ CO_2 + 6\ H_2O$ $\Delta H^o_1 = \Delta H^o_{c,gl} = -2816{,}8$ kJ

$2\ x\ (2\ CO_2 + 3\ H_2O \rightarrow CH_3CH_2OH + 3\ O_2)$ $\Delta H^o_2 = -2\ x\ \Delta H^o_{c,et} = -2\ x\ (-1366{,}9) = +2733{,}8$ kJ

Llei de Hess: $\Delta H^o = \Delta H^o_1 + \Delta H^o_2$
$\Delta H^o = -2816{,}8 + 2733{,}8$
$\Delta H^o = -83{,}0$ kJ

[0,4 p]

A pressió constant: **$q_p = \Delta H$**

[0,1 p]

⇒ la calor de la reacció de fermentació de la glucosa (tal com esta igualada) és de -83,0 kJ. El signe negatiu ens indica que la calor es desprèn.

Aquesta dada és per 2 mol d'etanol:

1 mol CH_3CH_2OH x (- 83,0 kJ / 2 mol CH_3CH_2OH) = - 41,5 kJ

⇒ **Calor despresa per mol d'etanol: 41,5 kJ** (ó -41,5 kJ)

[0,25 p]

Pregunta 3b

Escriure la reacció química (entalpia estàndard de formació de l'etanol)

[0,4 p]

Reacció de formació l'etanol: **$2\ C(s) + 3\ H_2(g) + ½\ O_2(g) \rightarrow CH_3CH_2OH(g)$**

- *Ho considerem correcte encara que no indiquen l'estat físic de les substàncies:*

  $2\ C + 3\ H_2 + ½\ O_2 \rightarrow CH_3CH_2OH$

- *No és correcte si l'igualen de forma diferent: penalitzarem 0,3 p.*

Estimar el valor de l'entalpia estàndard de formació de l'etanol

L'entalpia estàndard d'una reacció es pot calcular a partir de les energies dels enllaços trencats (reactius) menys les energies dels enllaços formats (productes):

$$\Delta H^o = \Sigma\ n_r\ E_{trencats} - \Sigma\ n_p\ E_{formats}$$

[0,2 p]

En els reactius cal trencar:

3 enllaços H-H
1/2 enllaç O=O

En els productes cal formar:

1 enllaç C-C
5 enllaços C-H
1 enllaç C-O
1 enllaç O-H

$$\Delta H^o = [(3\ E_{H-H} + ½ \times E_{O=O})] - [(1\ E_{C-C}) + (5\ E_{C-H}) + (1\ E_{C-O}) + (1\ E_{O-H})]$$

[0,4 p]

$$\Delta H^o = [(3 \times 436) + (1/2 \times 498)] - [(1 \times 347) + (5 \times 414) + (1 \times 360) + (1 \times 464]$$

$$\Delta H^o = -1684\ kJ\ mol^{-1} \quad (ó\ -1684\ kJ)$$

[0,25 p]

12. PAU 2022 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 1

Pregunta 1a

Càlcul de l'entalpia de la reacció

$$CaO\ (s) + H2O\ (l) \rightarrow Ca(OH)2\ (s)$$

$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = (\sum n_p\, \Delta H^\circ_{f\,\text{productes}}) - (\sum n_r\, \Delta H^\circ_{f\,\text{reactius}})$

[0,10 punts]

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

$(\Sigma\ n_r\, \Delta H^\circ_{f\,\text{reactius}}) = [(1 \times \Delta H^\circ_f, CaO) + (1 \times \Delta H^\circ_f, H_2O)]$

$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = [-987] - [(-635) + (-286)] = -66\ \text{kJ mol}^{-1}$

$\Rightarrow \Delta H^\circ_{\text{reacció}} = -66\ \text{kJ mol}^{-1}$

[0,30 punts]

Càlcul de l'entropia de la reacció

$\Delta S^\circ_{\text{reacció}} = (\sum n_p\, S^\circ_{\text{productes}}) - (\sum n_p\, S^\circ_{\text{reactius}})$

[0,10 punts]

$(\Sigma\ n_p\, S^\circ_{\text{productes}}) = [(1 \times S^\circ\ Ca(OH)_2]$

$(\Sigma\ n_r\, H^\circ_{f\,\text{reactius}}) = [(1 \times S^\circ\ CaO) + (1 \times S^\circ\ H_2O)]$

$\Delta S^\circ_{\text{reacció}} = [83,4] - [39,8 + 69,8] = -26,2\ \text{J K}^{-1}\ \text{mol}^{-1}$

$\Rightarrow \Delta S^\circ_{\text{reacció}} = -26,2\ \text{J K}^{-1}\ \text{mol}^{-1}$

[0,30 punts]

Càlcul de l'espontaneïtat de la reacció

Una reacció serà espontània quan $\Delta G^\circ < 0$, i:

[0,10 punts]

$\Rightarrow \qquad \Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\,\Delta S^\circ$

[0,10 punts]

Primer es transformen les unitats d'entropia (de J a kJ):

$-26,2\ \text{J K}^{-1}\ \text{mol}^{-1} \times (1\ \text{kJ} / 1.000\ \text{J}) =$ **$-0,0262\ \text{kJ K}^{-1}\ \text{mol}^{-1}$**

Càlcul de ΔG° a 25 °C (298 K)

$\Delta G^\circ = -66 \text{ kJ mol}^{-1} - [298 \text{ K} \times (-0{,}0262 \text{ kJ K}^{-1} \text{ mol}^{-1})] = -58{,}194 \text{ kJ mol}^{-1}$

$\Rightarrow \Delta G^\circ_{\text{reacció}} = -58{,}194 \text{ kJ mol}^{-1}$

[0,10 punts]

La reacció serà espontània a 25 °C perquè $\Delta G^\circ < 0$.

[0,15 punts]

Pregunta 1b

$$CaO\ (s) + H_2O\ (l) \rightarrow Ca(OH)_2\ (s)$$

Primer es calcula el reactiu limitant

Massa molar CaO: 40 + 16 = 56 g mol^{-1}

Massa molar H_2O: 2 x 1 + 16 = 18 g mol^{-1}

$14 \text{ g CaO} \cdot \frac{1 \text{ mol CaO}}{56 \text{ g CaO}} = 0{,}25 \text{ mol CaO}$

$50 \text{ mL } H_2O \cdot \frac{1 \text{ g H2O}}{1 \text{ ml H2O}} \Rightarrow 50 \text{ g } H_2O \cdot \frac{1 \text{ mol H2O}}{18 \text{ g H2O}} = 2{,}78 \text{ mol } H_2O$

[0,10 punts]

CaO = 0,25 mol

H_2O = 2,78 mol

⇒ La reacció és 1 a 1, el reactiu limitant serà el que tingui menor nombre de mols:

mols CaO < mols H2O

⇒ El reactiu limitant és el CaO.

[0,25 punts]

Càlcul de la calor despresa a pressió constant

A pressió constant ⇒ $q_p = \Delta H^\circ_{\text{reacció}}$ i mol^{-1}

[0,20 punts]

$14 \text{ g CaO} \cdot \frac{1 \text{ mol CaO}}{56 \text{ g CaO}} \cdot \frac{-66 \text{ kJ}}{1 \text{ mol CaO}} = -16{,}5 \text{ kJ}$

(signe negatiu: desprèn calor)

⇒ Calor despresa = 16,5 kJ (o –16,5 kJ)

[0,25 punts]

Càlcul del volum de beguda que es pot escalfar

$Q = m\ C_e\ \Delta T$

[0,10 punts]

$Q = m \cdot 4{,}18\ \text{kJ kg}^{-1}\,^{\circ}\text{C}^{-1} \cdot (42 - 20) = 16{,}5\ \text{kJ}$

$\Rightarrow m = 0{,}1794\ \text{kg} = 179{,}4\ \text{g de beguda}$

[0,25 punts]

Amb la densitat calculem el volum:

$179{,}4\ \text{g} \cdot \frac{1\ \text{mL}}{0{,}9\ \text{g}} = 199{,}33\ \text{mL}$

$\Rightarrow$ volum = 199,3 mL

[0,10 punts]

13. PAU 2022 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 3

Pregunta 3.a)

$$C_6H_6(l) + 15/2\ O_2(g) \rightarrow 6\ CO_2(g) + 3\ H_2O(l)$$

Càlcul de la calor de combustió a pressió constant

A pressió constant $\Rightarrow$ $\boldsymbol{q_p = \Delta H^o_{reacció}}$

[0,25 p]

- Calculem l'entalpia estàndard de la reacció:

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = (\sum n_p\ \Delta H^o_{\text{f productes}}) - (\sum n_r\ \Delta H^o_{\text{f reactius}})$

[0,10 p]

$(\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\text{ productes}}) = [(6 \times \Delta H^o_{f,}\ CO_2) + (3 \times \Delta H^o_{f,}\ H_2O)]$

[0,10 p]

$(\Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\text{ reactius}}) = [(1 \times \Delta H^o_{f,}\ C_6H_6)]$

[0,10 p]

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [6 \times (-394\ \text{kJ mol}^{-1}) + 3 \times (-286\ \text{kJ mol}^{-1})] - [1 \times (49\ \text{kJ mol}^{-1})]$

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = -3271\ \text{kJ mol}^{-1}$

[0,40 p]

- *Si no hi posen unitats (o són errònies), es penalitzarà 0,1 p.*

- Calculem la calor alliberada en la combustió de 20 kg de benzè.
  - Mols de benzè:

    massa molecular del benzè: $12 \times 6 + 1 \times 6 = 78\ \text{g mol}^{-1}$

    $20\ kg\ benzè \frac{1000\ g}{1\ kg} \frac{1\ mol\ benzé}{78\ g} = \boldsymbol{256,41\ mol\ benzè}$

  - Calor de combustió:

$256{,}41\ mol\ benzè \frac{-3271\ kJ}{1\ mol\ benzè} = \boldsymbol{-838717\ kJ} \Rightarrow \text{Calor alliberada} = 838717\ \text{kJ}$

[0,30 p]

Pregunta 3.b)

Definició d'entalpia de vaporització

L'entalpia de vaporització d'una substància és la **quantitat de calor** (energia) a **pressió constant** que cal aportar **perquè una determinada quantitat de la substància líquida** (per exemple, 1 mol) **passi a vapor** a pressió constant i a **una determinada temperatura** que, generalment, es considera la temperatura d'ebullició. Es representa per $\Delta H_{\text{vaporització}}$.

[0,50 p]

- *Si no es diu que el canvi de fase líquid-vapor ha de tenir lloc a una temperatura determinada es penalitzarà 0,2 p.*

Càlcul de l'entalpia molar de vaporització del benzè líquid a 25 ºC

$$C_6H_6(l) \rightarrow C_6H_6(g) \quad \Delta H^0_{\text{vaporització}}$$

- Aplicant la llei de Hess:

$\Delta H^0_{\text{vaporització}} = \Delta H^0_f\,(C_6H_6(g)) - \Delta H^0_f\,(C_6H_6(l)) = 83\ \text{kJ mol}^{-1} - 49\ \text{kJ mol}^{-1} =$ **34 kJ mol^{-1}**

$\Rightarrow$ **$\Delta H^0_{\text{vaporització}}$ = 34 kJ mol^{-1}**

[0,50 p]

- Càlcul de l'energia (en forma de calor) per vaporitzar 1 kg de benzè:

A pressió constant $\Rightarrow$ **$q_p = \Delta H^0_{\text{reacció}}$**

$$1\ kg\ benzè\ \frac{1000\ g}{1\ kg}\ \frac{1\ mol\ de\ benzè}{78\ g\ de\ benzè}\ \frac{34\ kJ\ mol^{-1}}{1\ mol\ de\ benzè} = 435{,}90\ \text{kJ}$$

$\Rightarrow$ **Energia = 435,90 kJ**

[0,25 p]

Pregunta 3a

Formulació.

Etanol CH_3CH_2OH

[– 0,5 punts si no el formulen bé]

És correcte si el formulen com C_2H_5OH o C_2H_6O.

Escriure i ajustar l'equació de la reacció que es produeix en la fermentació de la cervesa

$C_6H_{12}O_6(s) \rightarrow 2\ CH_3CH_2OH(l) + 2\ CO_2(g)$

[0,25 punts]

Justificar que la reacció és exotèrmica, en condicions estàndard i 298 K

Calculem l'entalpia estàndard de la reacció

$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = (\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{\text{f, productes}}) - \Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{\text{f, reactius}})$$

[0,10 punts]

No és obligatori que expliciten aquesta fórmula, sempre que en els passos següents es visualitzi bé que l'estan aplicant.

$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [(\ 2 \times \Delta H^o_{\text{f, diòxid de carboni}}) + (\ 2 \times \Delta H^o_{\text{f, etanol}}] - [(1 \times \Delta H^o_{\text{f, glucosa}})]$$
$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [(2 \times (-393{,}5)) + ((2 \times (-277{,}7))] - [(1 \times (-1273{,}0))]$$
$$\mathbf{\Delta H^o_{reacció} = -\ 69{,}4\ kJ} \quad (\text{o } -69{,}4\ \text{kJ/mol})$$

[0,30 punts]

Si $\Delta H^o_{\text{reacció}} < 0 \Rightarrow$ Reacció exotèrmica

la reacció que es produeix en la fermentació de la cervesa **és exotèrmica**, en condicions estàndard i 298 K.

[0,10 punts]

Calcular la calor que es desprèn quan s'obté un kilogram d'etanol

A pressió constant $\Rightarrow$ $q_p = \Delta H^o_{reacció}$

[0,10 punts]

(on q_p és la calor a pressió constant)

Calculem el calor obtinguda quan obtenim 1,0 kg d'etanol

Dades:

Massa d'etanol = 1 kg = 1000 g
Massa molecular de l'etanol = (2 x 12,0) + (1 x 16,0) + (6 x 1,0) = 46,0 g / mol
Variació d'entalpia de la reacció (tal com està igualada) = −69,4 kJ

1000 g CH_3CH_2OH x (1 mol CH_3CH_2OH / 46,0 g CH_3CH_2OH) x
x (−69,4 kJ / 2 mol CH_3CH_2OH)= **−754,3 kJ**

Calor obtinguda (despresa) = 754,3 kJ

[0,40 punts]

Es penalitza 0,40 p (sobre 0,40 p) si no tenen en compte l'estequiometria de la reacció (relació entre mols d'etanol formats i calor despresa).

Pregunta 3b

Justificar si la calor alliberada a volum constant seria superior, inferior o igual

Si la reacció es realitza a volum constant $\Rightarrow q_v = \Delta E$

[0,25 punts]

on:

q_v és la calor a volum constant
ΔE és la variació d'energia interna de la reacció

Relació entre l'entalpia i l'energia interna d'una reacció:

$$\Delta H = \Delta E + \Delta \nu \, R \, T$$

[0,30 punts]

$\Delta \nu$ = diferència dels coeficients estequiomètrics (productes i reactius gasosos)

$\Rightarrow \quad \Delta E = \Delta H - \Delta \nu \, R \, T$
$\Rightarrow \quad q_v = q_p - \Delta \nu \, R \, T$

Reacció:

$$C_6H_{12}O_6(s) \rightarrow 2\ CH_3CH_2OH(l) + 2\ CO_2(g)$$

$\Delta \nu = (0+2) - (0) = +2$ (positiu !)

[0,20 punts]

Raonament 1 (qualitatiu)

En l'equació:

$q_v = q_p - \Delta \nu \, R \, T$:

$\Rightarrow \ q_p < 0$
$\Rightarrow \ - \Delta \nu \, R \, T < 0$ (R i T sempre són positius i $\Delta \nu$ és >0)
$\Rightarrow q_v$ serà un valor més negatiu que q_p
$\Rightarrow |q_v| > |q_p|$

La calor és negativa (s'allibera calor)

$\Rightarrow$ **s'alliberarà més quantitat de calor a volum constant**

[0,50 punts]

Raonament 2 (quantitatiu)

Dades que tenim:

ΔH^o (reacció) = - 69,4 kJ
R = 8,31 J / K mol = 8,31x10^{-3} kJ / K mol (transformat a kJ)
T = 298 K

Substituïm les dades en l'equació $\Delta E^o = \Delta H^o - \Delta\nu\ R\ T$:

$\Delta E^o = -69,4 - [(+2) \times (8,31\text{x}10^{-3}) \times (298)]$
$\Delta E^o = -74,4$ kJ
$|\Delta E^o| > |\Delta H^o| \Rightarrow |q_v| > |q_p|$

⇒ **s'alliberarà més quantitat de calor a volum constant**

[0,50 punts]

15. PAU 2021 · Setembre · Sèrie 1 · Exercici 1

Pregunta 1a

Reacció: $2\ N_2O(g) \rightarrow 2N_2(g) + O_2(g)$ $\quad \Delta H^o\ (25\ ^oC) = 86{,}0$ kJ

Justificació de la no-espontaneïtat de la reacció (condicions estàndard i 25 oC)

Calculem l'entropia de la reacció a 25 ºC, partir de les entropies absolutes:

$\Delta S^o = \Sigma\ n_p\ S^o$ (productes) - $\Sigma\ n_r\ S^o$ (reactius)

[0,1 p]

$\Delta S^o = [(2 \times S^o_{\text{nitrogen}}) + (1 \times S^o_{\text{oxigen}})] - [(2 \times S^o_{\text{monòxid de dinitrogen}})]$

$\Delta S^o = [(2 \times 191{,}6) + (1 \times 205{,}0)] - [(2 \times 220{,}0)])$

ΔS^o = 148,2 J / K (o 148,2 J / K mol)

[0,2 p]

Espontaneïtat. Càlcul de l'energia lliure de la reacció:

L'espontaneïtat depèn de l'energia lliure de la reacció, ΔG^o.

L'energia lliure de la reacció, a p i T constant, es pot calcular a partir de la variació d'entalpia i entropia de la reacció: $\Delta G^o = \Delta H^o - T\ \Delta S^o$

[0,1 p]

Dades: $\Delta H^o = 86{,}0$ kJ; $\Delta S^o = 148{,}2$ J / K; T = 25ºC = 298 K.

Homogeneïtzem les unitats, passant de kJ a J (entalpia) o de J a kJ (entropia):

$\Delta S^o = 148{,}2$ J / K = 0,1482 kJ / K

[0,1 p]

Calculem la variació d'energia lliure de la reacció:

$\Delta G^o = (86{,}0) - [298 \times (0{,}1482)]$

$\Rightarrow$ **$\Delta G^o = 41{,}8$ kJ > 0**

[0,2 p]

Si $\Delta G^o > 0$ $\Rightarrow$ la reacció no és espontània

$\Rightarrow$ **La reacció no és espontània en condicions estàndard i 25 ºC**

[0,3 p]

A partir de quina temperatura la reacció serà espontània

$\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$ Si $\Delta G^o < 0 \Rightarrow$ la reacció serà espontània.

Suposem que $\Delta G^o = 0$ i que ΔH^o i ΔS^o no varien amb la temperatura:

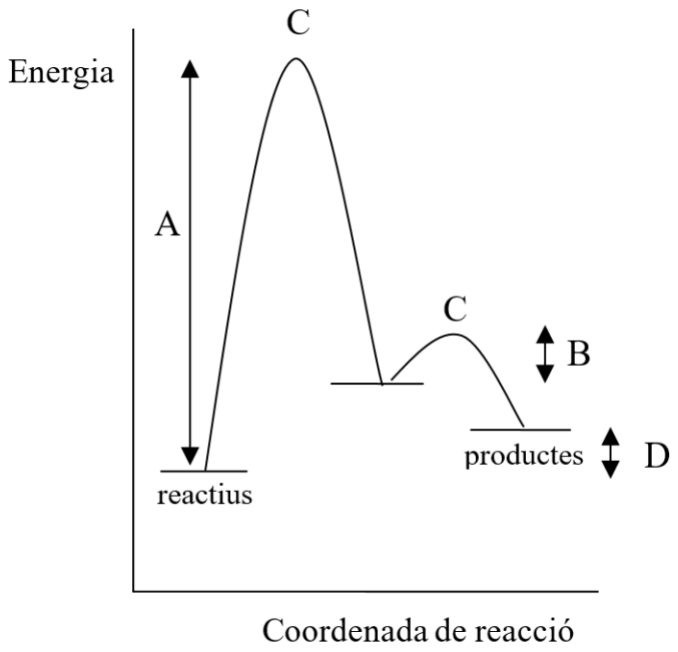
$0 = 86{,}0 - T\ 0{,}1482 \Rightarrow T = 580{,}3\ K$

A temperatura > 580,3 K la reacció serà espontània

[0,25 p]

Pregunta 1b

Gràfic: energia respecte a la coordenada de reacció



Dibuix (gràfic)

[0,4 p]

Assignació de magnituds:

A: Energia d'activació de l'etapa 1 (reacció lenta)

[0,15 p]

B: Energia d'activació de l'etapa 2 (reacció ràpida)

[0,15 p]

C: Estats de transició

[0,15 p]

D: Entalpia de la reacció global

[0,15 p]

Justificació que la reacció és de primer ordre

[0,25 p]

En un mecanisme de reacció, l'etapa lenta determina la velocitat de la reacció.

Les etapes d'un mecanisme de reacció són reaccions elementals (com diu l'enunciat) i, en aquest cas, **el coeficient estequiomètric coincideix amb l'ordre de reacció.**

L'etapa lenta és la primera: $N_2O \rightarrow N_2 + O$

v (reacció global) = v (etapa 1) = $k\,[N_2O]^1$

⇒ **Es tracta d'una reacció de 1er ordre perquè l'exponent de la concentració de N_2O és 1.**

16. PAU 2021 · Setembre · Sèrie 1 · Exercici 6

Pregunta 6a

Escriure la reacció de combustió de l'acetilè

[0,25 p]

Reacció: $C_2H_2(g) + 5/2\ O_2(g) \rightarrow 2\ CO_2(g) + H_2O(l)$

- *S'accepta qualsevol altre igualació correcte com, per exemple:*

$$2\ C_2H_2(g) + 5\ O_2(g) \rightarrow 4\ CO_2(g) + 2\ H_2O(l)$$

Càlcul de la quantitat de calor despresa en la combustió

Dades. 100 L $C_2H_2(g)$ i 500 L de $O_2(g)$ mesurats a 1,0 atm i 298 K

Raonem quin reactiu és el limitant

[0,4 p]

Si tenim les mateixes condicions de p i T, el nombre de mols de cada gas és proporcional al volum que ocupa. Per l'estequiometria de la reacció, per cada 1 mol de C_2H_2 necessitem 2,5 mol de O_2. Fixada una p i T, per cada 1 L de C_2H_2 necessitem 2,5 L de O_2.

Si tenim 100 L de C_2H_2 necessitem:

$$100\ L\ C_2H_2 \times (2{,}5\ L\ O_2 / 1\ L\ C_2H_2) = 250\ L\ de\ O_2$$

Disposem de més de 250 $\Rightarrow$ **el reactiu limitant és l'acetilè**

(i l'oxigen és el reactiu en excés)

Procediment alternatiu:

Calculem els mols de cada reactiu amb l'equació dels gasos ideals: $pV = n\ R\ T$

Acetilè(g): $n = pV / RT = (1 \times 100) / (0{,}082 \times 298) = 4{,}092$

Oxigen(g): $n = pV / RT = (1 \times 500) / (0{,}082 \times 298) = 20{,}462$

Si reaccionessin tots els mols d'acetilè necessitaríem:

$$4{,}092\ mol\ C_2H_2 \times (2{,}5\ mol\ O_2 / 1\ mol\ C_2H_2) = 10{,}23\ mol\ de\ O_2$$

Disposem de més de 10,23 mol de O_2 $\Rightarrow$ **el reactiu limitant és l'acetilè**

(i l'oxigen és el reactiu en excés)

Calculem calor despresa (q), a pressió constant:

$C_2H_2(g) + 5/2\ O_2(g) \rightarrow 2\ CO_2(g) + H_2O(g)$ $\quad \Delta H^o = -226{,}0$ kJ/mol

Calor, a pressió constant: $q_p = \Delta H$

[0,1 p]

Mols d'acetilè(g): n = pV / RT = (1 x 100) / (0,082 x 298) = 4,092

[0,2 p]

4,092 mol C_2H_2 x (–226 kJ / 1 mol C_2H_2) = – 924,8 kJ

(signe negatiu: desprèn calor)

Calor despresa = 924,8 kJ (o –924,8 kJ)

[0,3 p]

- *Si no indiquen les unitats de la calor despresa (o són incorrectes), es penalitzarà 0,1 p.*

Pregunta 6b

Entalpia estàndard de formació de l'acetilè gasós

Reacció: $C_2H_2(g) + 5/2\ O_2(g) \rightarrow 2\ CO_2(g) + H_2O(l)$ $\quad \Delta H^o_{\text{reacció}} = -226{,}0$ kJ/mol

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = (\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{\text{f, productes}}) - (\Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{\text{f, reactius}})$

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [(2 \times \Delta H^o_{\text{f, diòxid de carboni}}) + (1 \times \Delta H^o_{\text{f, aigua}}] - [(1 \times \Delta H^o_{\text{f, acetilè}})$

[0,2 p]

$-226 = [(2 \times (-393{,}8)) + (1 \times -285{,}8)] - [(1 \times \Delta H^o_{\text{f, acetilè}})]$

ΔHof, acetilè = - 847,4 kJ (o - 847,4 kJ / mol)

[0,5 p]

Raonar si es desprèn més calor en la reacció de formació de l'acetilè a p o V constant

Reacció de formació de l'acetilè: $2\ C(s) + H_2(g) \rightarrow C_2H_2(g)$

[0,2 p]

Si la reacció es realitza a pressió constant $\Rightarrow$ $\mathbf{q_p = \Delta H_{reacció}}$

(on q_p és la calor a pressió constant)

Si la reacció es realitza a volum constant $\Rightarrow$ $\mathbf{q_v = \Delta E}$

(on q_p és la calor a volum constant)

Relació entre l'entalpia (q_p) i l'energia interna (q_v) d'una reacció:

$$\Delta H = \Delta E + \Delta \nu\ R\ T$$

$$\Rightarrow \quad \Delta E = \Delta H - \Delta \nu\ R\ T$$

$$\Rightarrow \quad q_v = q_p - \Delta \nu\ R\ T$$

[0,2 p]

on $\Delta\nu$ és la **diferència dels coeficients estequiomètrics dels productes i dels reactius gasosos**

En la reacció de formació de l'acetilè:

$\Delta\nu = (1) - (1) = 0$

$\Rightarrow \quad q_v = q_p$

$\Rightarrow$ **La calor despresa és la mateixa, tant si la reacció es realitza a p o V constant.**

[0,15 p]

17. PAU 2021 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 2

Pregunta 2a

Calcular l'entalpia estàndard de formació de NaN_3

- Calculem l'entalpia estàndard de la reacció

$$N_2O(g) + 2\ NaNH_2(s) \rightarrow NaN_3(s) + NaOH(s) + NH_3(g) \qquad \Delta H^o_{reacció}$$

A pressió constant $\Rightarrow$ $\mathbf{q_p = \Delta H^o_{reacció}}$

[0,25 p]

La reacció està igualada amb 2 mol de $NaNH_2$:

2 mol $NaNH_2$ x (111,6 kJ / 4 mol $NaNH_2$) = 55,8 kJ

$\Delta H^o_{reacció}$ = 55,8 kJ (amb la igualació que surt a l'enunciat)

[0,3 p]

- Calculem l'entalpia estàndard de formació de l'azida de sodi

$$\Delta H^o_{reacció} = (\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\ productes}) - (\Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\ reactius})$$

$$(\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\ productes}) = [(1\ x\ \Delta H^o_{f,\ azida\ de\ sodi}) + (1\ x\ \Delta H^o_{f,\ NaOH}) + (1\ x\ \Delta H^o_{f,\ amoníac})]$$

$$(\Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\ reactius}) = [(1\ x\ \Delta H^o_{f,\ monòxid\ de\ dinitrogen}) + (2\ x\ \Delta H^o_{f,\ amidur\ de\ sodi})]$$

$$55,8 = [(\Delta H^o_{f,\ azida\ de\ sodi}) + (-425,2) + (-46,1)] - [(82,0) + (2\ x\ (-123,7))]$$

[0,4 p]

$\Delta H^o_{f,\ azida\ de\ sodi}$ **= 361,7 kJ** (o 361,7 kJ/mol)

[0,3 p]

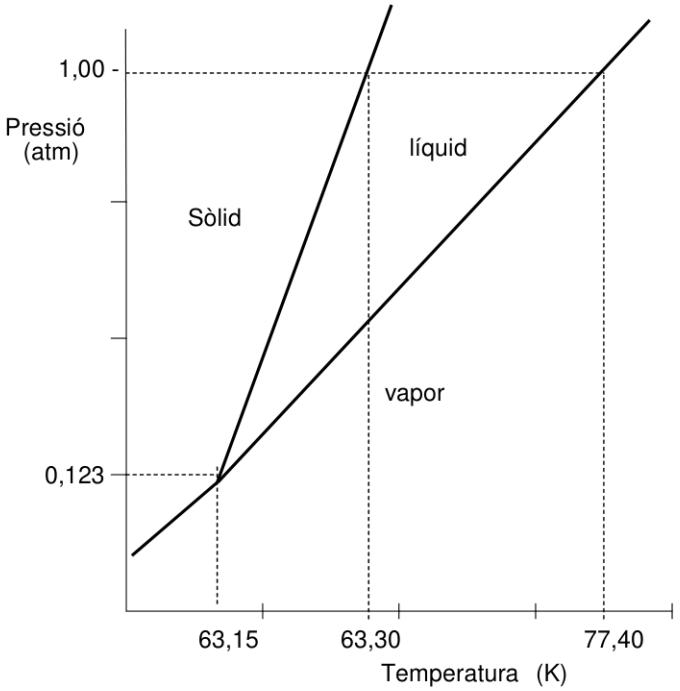
Pregunta 2b

Definició de punt triple

El punt triple correspon a unes condicions de pressió i temperatura en les quals coexisteixen en equilibri les tres fases d'una substància: fase sòlida, fase líquida i fase vapor (o gas).

[0,25 p]

Dibuix, aproximat, del diagrama de fases



- Posar les magnituds i unitats als eixos

[0,2 p]

- Dibuixar les línies d'equilibri de les fases

[0,2 p]

- Indicar en el dibuix els 3 punts experimentals (T, p)

[0,3 p]

Raonar si el nitrogen pot sublimar a p= 1atm

[0,3 p]

La sublimació implica que en augmentar la temperatura (a pressió constant) el compost passa directament de sòlid a gas (vapor).

Això només és possible per a pressions inferiors a la del punt triple.

En el cas del nitrogen: només pot sublimar per a $p < 0{,}123$ atm

$\Rightarrow$ **el nitrogen no pot sublimar a pressió atmosfèrica**

---

18. PAU 2021 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 7

PREGUNTA 7a

$\Delta H^{o}_{combustió}$ (metà) per donar vapor d'aigua = -801,4 kJ/mol de metà (caldera convencional)

$CH_4(g) + 2\ O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + 2\ H_2O(g)$

Reacció de combustió del metà en caldera de condensació (per donar aigua estat líquid):

$CH_4(g) + 2\ O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + 2\ H_2O(l)$

[0,35 p]

$\Delta H^{o}_{combustió}$ (metà) per donar aigua líquida =

$= \Delta Hf\ (CO_2(g)) + 2\Delta H_f\ (H_2O_{(l)}) - \Delta H_f\ (CH_4(g)) =$

$= (-393,5\ kJ/mol) + 2\cdot(-285,5\ kJ/mol) - (-74,8\ kJ/mol) = -889,7\ kJ/mol$

[0,6 p]

Quan es crema un mol de metà en la caldera convencional es desprenen 801,4 kJ d'energia.

Quan es crema un mol de metà en la caldera de condensació es desprenen 889,7 kJ d'energia, la qual representa més energia per quantitat de combustible, per tant, es justifica la seva major eficiència energètica.

[0,3 p]

PREGUNTA 7b

La relació entre calor a pressió i volum constant és: $Q_V = Q_P - \Delta nRT$

[0,25 p]

A la caldera convencional, la variació de nombre de mols de gasos és

$\Delta n = 3$ (productes) – 3 (reactius) = 0;

$Q_P = -801,4\ kJ\cdot mol^{-1}$

$Q_V = -801,4\ kJ\cdot mol^{-1} - \Delta nRT = -801,4\ kJ\cdot mol^{-1}$

[0,4 p]

A la caldera de condensació, la variació de nombre de mols de gasos és

$\Delta n = 1 - 3 = -2$

$QP = -889{,}2\ kJ \cdot mol^{-1}$

$QV = -889{,}2\ kJ \cdot mol^{-1} + 2RT = -889{,}2 + 2 \times 8{,}314 \times 10^{-3}\ kJ \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1} \times 298\ K = -884{,}7\ kJ \cdot mol^{-1}$

[0,4 p]

A volum constant, la caldera convencional desprèn la mateixa calor que a pressió constant. La caldera de condensació desprèn menys calor a volum constant que a pressió constant.

[0,2 p]

19. PAU 2020 · Setembre · Sèrie 4 · Exercici 6

Pregunta 6a

Calcular la variació d'entalpia estàndard de la reacció

$$4\ NH_3(g) + 5\ O_2(g) \rightleftarrows 4\ NO\ (g) + 6\ H_2O(g)$$

Relacionem l'entalpia de la reacció amb l'entalpia de formació de reactius i productes:

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = (\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\text{ productes}}) - (\Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\text{ reactius}})$ **[0,25 p]**

$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [4 \text{ x } \Delta H^o_f(NO) + 6 \text{ x } \Delta H^o_f(H_2O)] - [4 \text{ x } \Delta H^o_f(NH_3)]$
$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [(4 \text{ x } 90{,}3) + (6\text{x } (-241{,}8))] - [4 \text{ x } (-46{,}1)]$

$\Rightarrow$ **$\Delta H^o_{\text{reacció}} = -905{,}2$ kJ** (o −905,2 kJ/mol) **[0,4 p]**

Justificar si l'espontaneïtat d'aquesta reacció depèn o no de la temperatura

L'espontaneïtat, a p i T constant, depèn de l'energia lliure de la reacció, ΔG^o.

$\Delta G^o = \Delta H^o - T\ \Delta S^o$ **[0,25 p]**

Si $\Delta G^o < 0$ $\Rightarrow$ la reacció és espontània **[0,1 p]**

Dades de la reacció:

$\Delta H^o_{\text{reacció}} < 0$ (−905,2 kJ)
$\Delta S^o_{\text{reacció}} > 0$ (180,5 J/K)

Per a calcular ΔG^o:

1r. terme: $\Delta H^o_{\text{reacció}}$ és negatiu.
2n. terme: $-T\ \Delta S^o$ també és sempre negatiu ja que T > 0 (en Kelvin) i $\Delta S^o_{\text{reacció}} > 0$

$\Rightarrow$ per a qualsevol temperatura tenim: $\Delta G^o < 0$

$\Rightarrow$ l'espontaneïtat d'aquesta reacció no depèn de la temperatura
[0,25 p]

Pregunta 6b

Justificar amb quines unitats s'expressa la velocitat de reacció **[0,5 p]**

La velocitat d'una reacció ens indica la variació de la concentració d'un reactiu o producte quan varia el temps.

Per tant, tindrà unitats de concentració dividit per temps:

$v = \Delta c / \Delta t$

$\Rightarrow$ Unitat de la velocitat de reacció $\Rightarrow$ $mol \cdot L^{-1} \cdot s^{-1}$

Explicar quina és la funció de la malla de platí i rodi en la reacció **[0,5 p]**

L'enunciat ens diu que cal oxidar **catalíticament** l'amoníac segons la reacció:

$$4\ NH_3(g) + 5\ O_2(g) \rightleftarrows 4\ NO\ (g) + 6\ H_2O(g)$$

La malla de platí i rodi té la funció de catalitzador:

⇒ augmentar la velocitat de la reacció.

Raonar si la malla modifica la variació d'entalpia estàndard de la reacció **[0,25 p]**

Els catalitzadors incideixen només en la cinètica d'una reacció química (velocitat); no modifiquen l'equilibri químic, ni les magnituds termodinàmiques (per exemple ΔH^o).

⇒ La malla de platí i rodi no modifica la variació d'entalpia estàndard de la reacció (ΔH^o).

20. PAU 2020 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 3

PREGUNTA 3a

Reaccions ajustades:

$C_4H_{10}(g) + 13/2\ O_2(g) \rightarrow 4\ CO_2(g) + 5\ H_2O(l)$

$C_3H_8(g) + 5\ O_2(g) \rightarrow 3\ CO_2(g) + 4\ H_2O(l)$ **[0,25 p]**

Determinar l'entalpia de combustió estàndard

Entalpia de la reacció de combustió:

$$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = (\Sigma\ n_p\ \Delta H^\circ_{f,\ \text{productes}}) - (\Sigma\ n_r\ \Delta H^\circ_{f,\ \text{reactius})}$$

Butà:

$$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = [4 \times \Delta H^\circ_{f,}(CO_2) + 5 \times \Delta H^\circ_{f,}(H_2O)] - [(1 \times \Delta H^\circ_{f,}\ C_4H_{10})]$$

$$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = [4 \times -393{,}5 + 5 \times -285{,}8] - [(1 \times -126{,}2)] = -2876{,}8\ kJ{\cdot}mol^{-1}\ C_4H_{10}$$

[0,5 p]

Propà:

$$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = [3 \times \Delta H^\circ_{f,}(CO_2) + 4 \times \Delta H^\circ_{f,}(H_2O)] - [(1 \times \Delta H^\circ_{f,}\ C_3H_8)]$$

$$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = [3 \times -393{,}5 + 4 \times -285{,}8] - [(1 \times -103{,}8)] = -2219{,}9\ kJ{\cdot}mol^{-1}\ C_3H_8$$

[0,5 p]

PREGUNTA 3b

Efecte hivernacle

Quin combustible genera més mols de CO_2 per quantitat de calor alliberada:

Butà:
Calor a pressió constant per mol de CO_2 = -2876,8 kJ / 4 mols de CO_2 = -719,2 $kJ \cdot mol^{-1}$ de CO_2
L'invers del valor anterior representa el nombre de mols de CO_2 per quantitat de calor alliberada:
$(719{,}2\ kJ \cdot mol^{-1}\ de\ CO_2)^{-1} = 1{,}39 \times 10^{-3}\ mol\ de\ CO_2 \cdot kJ^{-1}$

Propà:
Calor a pressió constant per mol de CO_2 = -2219,9 kJ / 3 mols de CO_2 = -740,0 $kJ \cdot mol^{-1}$ de CO_2
El nombre de mols de CO_2 per quantitat de calor alliberada:
$(740{,}0\ kJ \cdot mol^{-1}\ de\ CO_2)^{-1} = 1{,}35 \times 10^{-3}\ mol\ de\ CO_2 \cdot kJ^{-1}$

[0,5 p]

El butà allibera més mols de CO_2 per quantitat de calor alliberada, per tant, el butà contribueix més a l'augment de l'efecte hivernacle.

[0,75 p]

21. PAU 2020 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 5

PREGUNTA 5a

Reacció ajustada: $2\ B_5H_9(l) + 12\ O_2(g) \rightarrow 5\ B_2O_3(s) + 9\ H_2O(l)$ **[0,25 p]**

$\Delta H^o_{reacció} = \Sigma\ np \cdot \Delta H^o_{productes} - \Sigma\ np \cdot \Delta H^o_{reactius}$
$\Delta H^o_{reacció} = 5\ mol\ (-1273{,}5\ kJ \cdot mol^{-1}) + 9\ mol\ (-285{,}8\ kJ \cdot mol^{-1}) - 2\ mol\ (+73{,}2\ kJ \cdot mol^{-1}) =$
$\Delta H^o_{reacció}$ = -9086,1 kJ (per 2 mols de B_5H_9) = -4543,05 $kJ \cdot mol^{-1}$ B_5H_9 **[0,5 p]**

La variació d'entalpia a pressió constant és: $\Delta H = Q_P$

Calor alliberada a pressió constant Q_p:
Q_p = 1 g B_5H_9 x (1 mol B_5H_9 / 63 g B_5H_9) x (-9086,1 kJ / 2 mols de B_5H_9) = **-72,11 kJ**
[0,5 p]

PREGUNTA 5b

Reacció ajustada: $C_8H_{18}(l) + 25/2\ O_2(g) \rightarrow 8\ CO_2(g) + 9\ H_2O(l)$ **[0,25 p]**

La variació d'energia interna del sistema és la suma del calor a pressió constant i el treball:
$\Delta U = Q_P + W$
La variació d'entalpia a pressió constant és: $\Delta H = Q_P$
La variació d'energia interna a volum constant és $\Delta U = Q_V$
El treball és: $W = -\Delta nRT$
Reorganitzant les equacions anteriors: $Q_V = \Delta H - \Delta nRT$ **[0,4 p]**

$Q_v = \Delta H - \Delta nRT = -5512\ kJ - (8 - 25/2) \cdot 8{,}31\times10^{-3}\ kJ\cdot mol^{-1}K^{-1} \cdot 298\ K =$
$Q_v = -5500{,}9$ kJ per 1 mol d'octà

L'energia obtinguda en la combustió de 1 g és:
1 g octà x (1 mol octà / 114 g octà) x (-5500,9 kJ / 1 mol octà) = **-48,25 kJ** **[0,6 p]**

22. PAU 2020 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 6

PREGUNTA 6a

La reacció igualada és: $CH_3OH(g) + H_2S(g) \rightarrow CH_3SH(g) + H_2O(g)$

Per a que la reacció sigui espontània: $\Delta G^o = \Delta H^o - T\Delta S^o < 0$ **[0,3 p]**

Calculem $\Delta H^o = \sum np\ \Delta H^o_{productes} - \sum nr\ \Delta H^o_{reactius} = [(-228,6)+(-22,9)] - [(-20,6)+(-201,0)] =$
$= -29,9$ KJ **[0,3 p]**

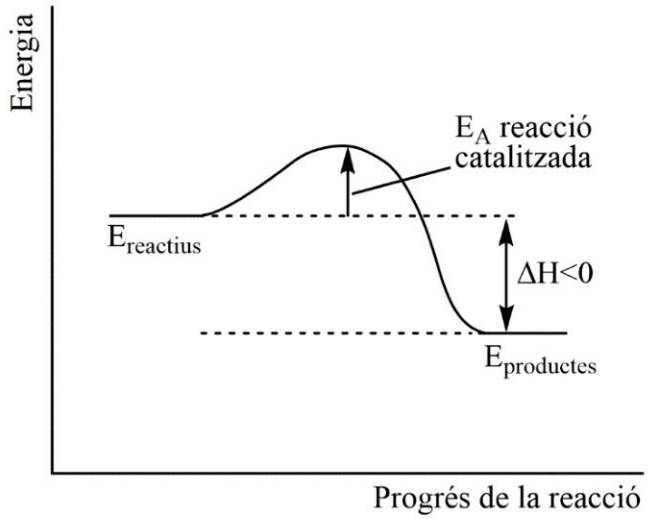
Calculem $\Delta S^o = \sum np\ S^o_{productes} - \sum nr\ S^o_{reactius} = (188,8+255,2) - (239,9+205,8) =$
$= -1,7\ J\ K^{-1} = -1,7 \cdot 10^{-3}\ kJ\ K^{-1}$ **[0,3 p]**

Calculem $\Delta G^o = -29,9 - 673\ (-1,7\times10^{-3}) = -28,8$ kJ <0

La reacció serà espontània a 673 K. **[0,35 p]**

PREGUNTA 6b

Diagrama d'energies de la reacció:



[0,35 p]

El catalitzador disminueix l'energia d'activació de la reacció i per tant hi haurà més molècules que aconsegueixen aquesta energia i augmentarà la velocitat de la reacció. **[0,45 p]**

L'entalpia de la reacció és la diferencia entre l'energia dels productes i la dels reactius. Per tant el catalitzador no modificarà l'entalpia de la reacció. **[0,45 p]**

23. PAU 2019 · Setembre · Sèrie 5 · Exercici 1

Pregunta 1a

Reacció: $2\ H_2O_2(l) \rightarrow 2\ H_2O(l) + O_2(g)$ $\quad \Delta H^o$ (a 25ºC) $= -196{,}0$ kJ

Calculem l'entropia de la reacció a partir de les entropies absolutes:

$\Delta S^o = \Sigma\ n_p\ S^o$ (productes) - $\Sigma\ n_r\ S^o$ (reactius) **[0,1 p]**

$\Delta S^o = [(2 \times S^o_{aigua}) + (1 \times S^o_{oxigen})] - [(2 \times S^o_{aigua\ oxigenada})]$
$\Delta S^o = [(2 \times 70{,}0) + (1 \times 205{,}0)] - [(2 \times 109{,}6)])$
$\Delta S^o = 125{,}8$ J / K **[0,2 p]**

Espontaneïtat: càlcul de l'energia lliure de la reacció

L'espontaneïtat depèn de l'energia lliure de la reacció, ΔG^o.
L'energia lliure de la reacció, *a p* i *T* constant, es pot calcular a partir de la variació d'entalpia i entropia de la reacció: $\Delta G^o = \Delta H^o - T\ \Delta S^o$ **[0,1 p]**

Dades: $\Delta H^o = -196{,}0$ kJ
$\Delta S^o = 125{,}8$ J / K

Homogeneïtzem les unitats, passant-les de kJ a J (entalpia) o de J a kJ (entropia):
ΔS^o(reacció) = 125,8 J/K = 0,1258 kJ / K **[0,3 p]**

Calculem la variació d'energia lliure de la reacció:
ΔG^o(reacció) = (-196) – [298 x (0,1258)]
$\Rightarrow$ **ΔG^o(reacció) = - 233,5 kJ < 0**

Si $\Delta G^o < 0$ $\Rightarrow$ la reacció és espontània **[0,1 p]**

$\Rightarrow$ **La reacció és espontània en condicions estàndard i 25 ºC** **[0,2 p]**

- *No cal arribar al càlcul concret de l'energia lliure mentre indiquin que el valor surt negatiu.*
- *Ho poden raonar de forma qualitativa:*
  $\Rightarrow$ en una reacció química en què $\Delta H^o < 0$ i $\Delta S^o > 0$, la reacció serà espontània a qualsevol temperatura.

Pregunta 1b

Concepte de catalitzador: **[0,4 p]**

Un catalitzador és una substància que s'afegeix a la reacció, sense consumir-se, i augmenta la velocitat de la reacció.

Com intervé la catalasa (catalitzador) en la cinètica de la reacció: **[0,6 p]**

La catalasa modifica el mecanisme de la reacció, i aconsegueix que en el nou mecanisme **disminueixi l'energia d'activació**.

Justificació: han de fer servir UN del dos models

Justificació 1 (model cinètic de l'estat de transició o complex activat)

Segons el model cinètic de l'estat de transició o complex activat, la velocitat d'una reacció dependrà de la energia d'activació o l'energia que han d'assolir les molècules de reactius per arribar a l'estat de transició: com més petita sigui més alta serà la velocitat.

Justificació 2 (model cinètic de col·lisions)

Segons el model cinètic de col·lisions, 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 reactius per reaccionar quan xoquen: com més petita sigui més alta serà la velocitat.

24. PAU 2019 · Setembre · Sèrie 5 · Exercici 3

Pregunta 3a

$$NH_4NO_3(s) \rightarrow NH_4^+(aq) + NO_3^-(aq) \qquad \Delta H_{\text{dissolució}} \ ?$$

Procediment experimental per determinar $\Delta H_{\text{dissolució}}$:

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 NH_4NO_3 sòlid al calorímetre. Agitem ràpidament 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 baixar (s'estabilitzi). Mesurem aquesta temperatura final.

[0,4 p]

- *Suposem que el calorímetre no absorbeix calor (aquesta consideració no cal que s'expliciti)*

Material:

- Calorímetre (per exemple un vas de plàstic amb tapa i aïllat).
- Termòmetre.
- Balança (i pipeta o proveta si mesurem el volum d'aigua).

[0,3 p]

Mesures experimentals que necessitem

- Massa de NH_4NO_3 i massa o volum de l'aigua.
- Temperatura inicial de l'aigua, i temperatura final de la solució una vegada s'ha estabilitzat.

[0,2 p]

Altres dades que necessitem per calcular la $\Delta H_{\text{dissolució}}$

- Capacitat calorífica de la solució **[0,1 p]**

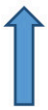
Pregunta 3b

Solució formada: àcida, neutra o bàsica? Justificació (model Bronsted- Lowry) **[0,7 p]**

Reacció de dissolució de la sal: $NH_4NO_3(s) \rightarrow NH_4^+(aq) + NO_3^-(aq)$

Dels dos ions, NH_4^+ i NO_3^-, **només té reacció d'hidròlisi l'ió amoni, NH_4^+**. Aquest ió, segons el model de Bronsted-Lowry, **actua com a àcid i amb aigua cedeix H^+ generant ions H_3O^+, que fa que la solució final sigui àcida** (a més de formar amoníac, que és la base feble conjugada).

$$NH_4^+(aq) + H_2O(l) \rightleftarrows NH_3(aq) + H_3O^+(aq)$$



solució àcida

Opcional: l'ió nitrat no té ni caràcter àcid ni bàsic; si amb aigua captés ions H^+ generaríem un àcid fort (HNO_3), però aquest no es forma mai en solució aquosa.

Com es modificaria el pH de la solució si doblem la quantitat de NH_4NO_3 **[0,3 p]**

Tenim l'equilibri següent de l'ió amoni en aigua:

$$NH_4^+(aq) + H_2O(l) \rightleftarrows NH_3(aq) + H_3O^+(aq)\ K_a$$

Si en una reacció en equilibri augmentem la quantitat d'un reactiu, la reacció es desplaça cap a la formació de productes. En aquesta reacció, si dissolem més massa de nitrat d'amoni, estem augmentant la concentració d'ions amoni, els quals generen una concentració més alta d'ions H_3O^+.

$pH = - \log [H_3O^+]$

Si $[H_3O^+]$ augmenta $\Rightarrow$ **pH disminueix**

25. PAU 2019 · Setembre · Sèrie 5 · Exercici 6

Pregunta 6a

Reacció: $CH_3CH_2CH_3(g) + 5\ O_2(g) \rightarrow 3\ CO_2(g) + 4\ H_2O(g)$

L'entalpia estàndard d'aquesta reacció es pot calcular a partir de les entalpies dels enllaços trencats (reactius) menys les entalpies dels enllaços formats (productes):

$$\Delta H^o = \Sigma\ n_r\ E_{trencats} - \Sigma\ n_p\ E_{formats}$$ **[0,2 p]**

En els reactius cal trencar:

2 enllaços C-C
8 enllaços C-H
5 enllaços O=O (5 molècules × 1 enllaç O=O / molècula)

En els productes cal formar:

6 enllaços C=O (3 molècules × 2 enllaços C=O / molècula)
8 enllaços O-H (4 molècules × 2 enllaços O-H / molècula)

[0,5 p]

<u>Càlcul de l'entalpia a partir dels valors d'energies d'enllaç:</u>

$\Delta H^o = [(2\ E_{C=C} + 8\ E_{C-H} + 5\ E_{O=O})] - [(6\ E_{C=O}) + (8\ E_{O-H})]$

$\Delta H^o = [(2 \times 348) + (8 \times 413) + (5 \times 498)] - [(6 \times 804) + (8 \times 463)] = -2038$ kJ

$\Delta H^o = -2038$ kJ · mol^{-1} (ó -2038 kJ) **[0,3 p]**

- *Si no indiquen les unitats (o són errònies) es penalitza amb 0,2 p.*

Pregunta 6b

Reacció: $CH_3CH_2CH_3(g) + 5\ O_2(g) \rightarrow 3\ CO_2(g) + 4\ H_2O(g)$ $\Delta H^o = -2045$ kJ/mol

Raonem quin reactiu és el limitant

Calculem els mols que tenim de cada reactiu:
Massa molecular del propà = (3 x 12) + (8 x 1) = 44 g/mol
Massa molecular de l'O_2 = (2 x16) = 32 g/mol

Mols de propà = (88 g) / (44 g/mol) = **2,0 mols**
Mols de O_2 = (500 g) / (32 g/mol) = **15,625 mols**

[0,1 p]

El reactiu limitant és el propà, ja que l'estequiometria de la reacció és 1 a 5 (propà/oxigen). Per fer reaccionar tot el propà (2,0 mols) ens calen 5 vegades més mols d'oxigen (2,0 x 5 = 10 mols). En tenim 15,625: per tant, tenim suficient oxigen perquè tot el propà reaccioni.

[0,6 p]

Calculem la calor despresa (q), a pressió constant:

$q_p = \Delta H$ **[0,1 p]**

$\Rightarrow$ Reacció química q_p = – 2045 kJ per cada 1 mols de propà.

2,0 mols de propà x (–2045 kJ / 1 mol de propà) = –4090 kJ
(signe negatiu: desprèn calor)

Calor despresa = 4090 kJ (ó – 4090 kJ) **[0,2 p]**

- *Si no indiquen les unitats de la calor despresa (o són incorrectes) es penalitza amb 0,1 p.*

26. PAU 2019 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 3

Pregunta 3a

Formulació Etanol: CH_3CH_2OH **[– 0,5 p si no el formulen bé]**

Reacció de combustió de l'etanol

$CH_3CH_2OH(l) + 3\ O_2(g) \rightarrow 2\ CO_2(g) + 3\ H_2O(l)$ **[0,2 p]**

- *Es considera correcte encara que no expliciten l'estat físic de les substàncies (líquids i gasos).*

Comparació entre la combustió de l'octà i de l'etanol

Calculem l'entalpia estàndard de la reacció de combustió de l'etanol:

$\Delta H^o_{reacció} = (\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\ productes}) - \Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\ reactius})$ **[0,1 p]**

$\Delta H^o_{reacció} = [(\ 2 \times \Delta H^o_{f,\ diòxid\ de\ carboni}) + (\ 3 \times \Delta H^o_{f,\ aigua}] - [(1 \times \Delta H^o_{f,\ etanol})]$
$\Delta H^o_{reacció} = [(2 \times (-393)) + ((3 \times (-264))] - [(1 \times (-278))]$
$\Delta H^o_{reacció} = -1300\ kJ$ **[0,2 p]**

A pressió constant $\Rightarrow\ q_p = \Delta H^o_{reacció}$ **[0,1 p]**
(on q_p és la calor a pressió constant)

Calculem la calor obtinguda en cremar 1 litre d'etanol:

Dades. Massa molecular de l'etanol = (2 x 12) + (1 x 16) + (6 x 1) = 46 g/mol
Densitat de l'etanol líquid = 780 g/L
Variació d'entalpia de la reacció (tal com està igualada) = −1300 kJ

1 L CH_3CH_2OH x (780 g CH_3CH_2OH / 1 L CH_3CH_2OH) x
x (1 mol CH_3CH_2OH /46 g CH_3CH_2OH) x (−1300 kJ /1 mol CH_3CH_2OH) = −22043 kJ

$\Rightarrow$ Calor obtinguda (despresa) = 22043 kJ **[0,3 p]**

Comparem la calor obtinguda en cremar octà o etanol:
Combustió 1 L d'octà $\Rightarrow\ q_p = 31842$ kJ
Combustió 1 L d'etanol $\Rightarrow\ q_p = 22043$ kJ

$\Rightarrow$ **En cremar 1 L d'etanol s'obté menys energia en forma de calor que en cremar 1 L d'octà.** **[0,1 p]**

Pregunta 3b



A B C D

Perills que ens indiquen aquests pictogrames

- **Pictograma A: inflamable.**
  Aquest producte crema molt fàcilment en contacte amb una flama, una espurna, electricitat estàtica, etc.

  [0,3p]

- **Pictograma B: irritació cutània.**
  Aquest producte, per contacte breu, perllongat o repetitiu amb la pell o les mucoses, pot provocar una reacció inflamatòria.

  [0,3 p]

- **Pictograma C: perillós per aspiració.**
  Aquest producte pot arribar a l'organisme per inhalació i causar efectes greus, aguts o crònics molt diversos a la salut. Així, poden provocar efectes cancerígens, tòxics per a la reproducció, causar efectes nefastos en les funcions sexuals, modificar el funcionament de certs òrgans (fetge, pulmons), el sistema nerviós, entre d'altres.

  [0,2 p]

- **Pictograma D: perillós per al medi ambient (aquàtic).**
  Aquest producte provoca efectes nefastos per als organismes que es troben en aquest ecosistema (medi ambient aquàtic), a curt o llarg termini.

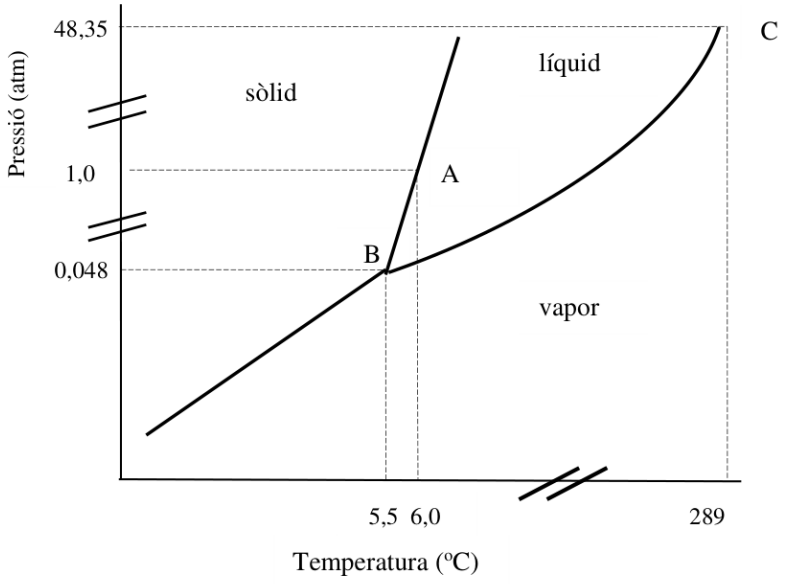
  [0,2 p]

  - *En l'explicació dels perills del pictograma D, considerem correcte tant si expliciten* ***medi ambient aquàtic*** *(que és el més correcte) o només* ***medi ambient****.*

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

Pregunta 5a

Dibuix, aproximat, del diagrama de fases del benzè (indicant les dades)



- Posar les magnituds i unitats als eixos. **[0,1 p]**
- Dibuixar les línies d'equilibri de les fases i indicar l'estat del benzè (sòlid, líquid i vapor –o gas–). **[0,3 p]**

- Indicar en el dibuix el punt de fusió (A). **[0,2 p]**
- Indicar en el dibuix el punt triple (B). **[0,2 p]**
- Indicar en el dibuix el punt crític (C). **[0,2 p]**

Pregunta 5b

<u>Justificar si la vaporització del benzè és espontània (condicions estàndard i 70 ºC)</u>

Procés de vaporització: $C_6H_6(l) \rightarrow C_6H_6(g)$

L'espontaneïtat depèn del signe de l'energia lliure de la reacció o procés, ΔG^o.

La variació d'energia lliure de la reacció es pot calcular a partir de la variació d'entalpia i entropia de la reacció o procés (a pressió i temperatura constants):

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

$C_6H_6(l) \rightarrow C_6H_6(g)$ $\quad \Delta H^o$ (a 25ºC) = 33,74 kJ/mol; $\quad \Delta S^o$ (a 25ºC) ?

<u>Calculem la variació d'entropia del procés de vaporització:</u>

$\Delta S^o = (\Sigma\ n_p\ S^o_{productes}) - (\Sigma\ n_r\ S^o_{reactius})$

$\Delta S^o_{vap} = S^o$(benzè, gasós) $- S^o$(benzè, líquid)

$\Delta S^o_{vap} = (269{,}31) - (173{,}26)$

$\Rightarrow$ **ΔS^o(reacció) = 96,05 J/K**(o 96,05 J/K mol)

[0,3 p]

- *Si no indiquen les unitats de l'entropia (o són incorrectes), es penalitzarà 0,1 p.*

Els valors de ΔH^o i ΔS^o a 70 ºC suposem que són els mateixos que a 25 ºC. Homogeneïtzem les unitats (transformant l'entalpia a J o l'entropia a kJ):

ΔH^o_{vap} (a 70 ºC) = 33,74 kJ = 33740 J (**ho hem transformat a J**)

ΔS^o_{vap} (a 70 ºC) = 96,05 J / K

<u>Calculem la variació d'energia lliure del procés de vaporització a 70 ºC (343 K)</u>

$\Delta G^o_{vap} = (33740) - (343 \times 96{,}05)$

$\Rightarrow$ **ΔG^o_{vap} = 794,85 J > 0** (o 794,85 J/mol) **[0,3 p]**

El procés de vaporització del benzè <u>no és espontani</u>, en condicions estàndard i 70 ºC, ja que <u>el valor de ΔG^o_{vap} és positiu</u>.

[0,2 p]

- *Si no indiquen les unitats de l'energia lliure (o són incorrectes). es penalitzarà 0,1 p.*

28. PAU 2019 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 1

Pregunta 1a

Reacció: $H_2O_2(l) \rightarrow H_2O(l) + ½\ O_2(g)$ $\quad \Delta H^o = -98$ kJ

Procediment 1

L'espontaneïtat, a p i T constant, depèn de l'energia lliure de la reacció, ΔG^o. Coneixem el valor de ΔH^o, i ens falta el de ΔS^o.

Càlcul de la variació d'entropia de la reacció

$\Delta S^o(\text{reacció}) = (\Sigma\ n_p\ S^o_{\text{productes}}) - (\Sigma\ n_r\ S^o_{\text{reactius}})$ **[0,1 p]**

$\Delta S^o(\text{reacció}) = [1 \cdot S^o(H_2O, l) + 1/2 \cdot S^o(O_2,g)] - [1 \cdot S^o(H_2O_2, l)]$
$\Delta S^o(\text{reacció}) = [(1 \cdot 69,9) + (½ \cdot 205,1)] - [(1 \cdot 102,0)]$

ΔS^o(reacció) = 70,45 J · K^{-1} **[0,2 p]**

- *Si no indiquen les unitats (o són errònies) es penalitzarà 0,2 p*
- *Si no expliciten la fórmula $\Delta S^o(\text{reacció}) = (\Sigma n_p S^o_{productes}) - (\Sigma n_r S^o_{reactius})$ perquè directament substitueixen els valors d'entropia de cada substància, no es penalitza com dècima de punt.*

A p i T constants: **$\Delta G^o = \Delta H^o - T\ \Delta S^o$** **[0,2 p]**

on $\Delta H^o = -98$ kJ $= -98000$ J; $\quad T = 298$ K; $\quad \Delta S^o = 70,45$ J K^{-1}
$\Delta G^o = (-98000) - (298 \cdot 70,45) = -118994$ J $\quad (-118,994$ kJ)

$\Delta G^o = -118994$ J $< 0 \Rightarrow$ reacció espontània **[0,2 p]**

- *No és necessari que l'alumne expliciti el valor de l'energia lliure de la reacció, mentre expliqui clarament com es calcula i indiqui que el seu valor és negatiu.*
- *Si expliciten el valor de la variació d'energia lliure de la reacció, però no indiquen les seves unitats (o són incorrectes) es penalitzarà 0,1 p*

Dependència de l'espontaneïtat amb la temperatura:

De l'equació $\Delta G^o = \Delta H^o - T\ \Delta S^o$ deduïm:

Primer terme negatiu: $\Delta H^o < 0$

Segon terme negatiu: $-T\ \Delta S^o < 0$ $\quad (T > 0$ –en Kelvin- i $\Delta S^o > 0)$

$\Rightarrow$ Per qualsevol valor de temperatura: $\Delta G^o < 0$
$\Rightarrow$ reacció espontània (independent de la temperatura) **[0,3 p]**

- *És correcte si indiquen que la reacció és exotèrmica ($\Delta H^o < 0$) i augmenta el desordre ($\Delta S^o > 0$). Això implica que és espontània a qualsevol temperatura.*

Pregunta 1a (continua)

Procediment 2

L'espontaneïtat, a p i T constant, depèn de l'energia lliure de la reacció, ΔG^o.

Sabem que $\Delta H^o < 0$

Observant la reacció podem dir que el productes estan més "desordenats" que els reactius, ja que estem generant gasos. L'entropia mesura el grau de desordre d'un sistema: com més desordre, més entropia.

$\Rightarrow \Delta S^o = S^o_{\text{productes}} - S^o_{\text{reactius}} > 0$ **[0,3 p]**

De l'equació $\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$ deduïm:

Primer terme negatiu: $\Delta H^o < 0$

Segon terme negatiu: $-298 \cdot \Delta S^o < 0$ $(\Delta S^o > 0)$

$\Rightarrow$ ΔG^o (a 298 K) < 0

$\Rightarrow$ reacció espontània a 298 K **[0,4 p]**

Dependència de l'espontaneïtat amb la temperatura:

De l'equació $\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$ deduïm:

Primer terme negatiu: $\Delta H^o < 0$

Segon terme negatiu: $-T\,\Delta S^o < 0$ $(T > 0$ –en Kelvin- i $\Delta S^o > 0)$

$\Rightarrow$ Per qualsevol valor de temperatura: $\Delta G^o < 0$

$\Rightarrow$ reacció espontània (independent de la temperatura) **[0,3 p]**

Pregunta 1b

Tenim dues longituds d'ona:

$\lambda_1 = 633 \text{ nm} \times (10^{-9} \text{ m} / 1 \text{ nm}) = 6{,}33 \times 10^{-7} \text{ m}$

$\lambda_2 = 405 \text{ nm} \times (10^{-9} \text{ m} / 1 \text{ nm}) = 4{,}05 \times 10^{-7} \text{ m}$

Quina de les dues radiacions és més energètica

Energia de la radiació: $E = h\nu$

La freqüència es pot posar en funció de la longitud d'ona: $\nu = c / \lambda$

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

Calculem l'energia de les dues radiacions:

$E_1 = 6{,}63 \times 10^{-34} \cdot 3{,}00 \times 10^{8} / 6{,}33 \times 10^{-7} = 3{,}14 \times 10^{-19}$ J

$E_2 = 6{,}63 \times 10^{-34} \cdot 3{,}00 \times 10^{8} / 4{,}05 \times 10^{-7} = 4{,}91 \times 10^{-19}$ J

⇒ **La radiació de 405 nm és més energètica que la de 633 nm** **[0,3 p]**

Procediment alternatiu:
No és necessari fer el càlcul de l'energia de cada radiació. Es suficient si indiquen, raonadament, que la longitud d'ona i l'energia d'una radiació electromagnètica són inversament proporcionals (és a dir, que a menor longitud d'ona tenim més energia). ***Aquest raonament seria 0,5 p.***

Amb quin tipus de radiacions estem il·luminant les nanopartícules

Transformem les dues longituds d'ona a freqüència:

$\nu = c / \lambda$

$\boldsymbol{\nu_1} = 3{,}00 \times 10^{8} / 6{,}33 \times 10^{-7} = \mathbf{4{,}74 \times 10^{14}\ s^{-1}}$ **(ó Hz)**

$\boldsymbol{\nu_2} = 3{,}00 \times 10^{8} / 4{,}05 \times 10^{-7} = \mathbf{7{,}41 \times 10^{14}\ s^{-1}}$ **(ó Hz)**

[0,2 p]

Observant la taula:

⇒ deduïm que les dues radiacions estan dins la franja 3×10^{16} Hz i 4×10^{14} Hz

⇒ **es tracta de radiacions ultraviolada-visible** **[0,3 p]**

29. PAU 2019 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 6

Pregunta 6a

Formulació. Propà $CH_3CH_2CH_3$
Butà $CH_3CH_2CH_2CH_3$

[– 0,5 p si no formulen bé <u>els dos compostos</u>]

- *Es penalitza 0,5 p tant si s'equivoquen en la formulació d'un compost (propà o butà) o en els dos.*

<u>Reaccions de combustió</u>

Combustió del propà $\mathbf{CH_3CH_2CH_3 + 5\ O_2 \rightarrow 3\ CO_2 + 4\ H_2O}$ **[0,15 p]**

Combustió del butà $\mathbf{CH_3CH_2CH_2CH_3 + 13/2\ O_2 \rightarrow 4\ CO_2 + 5\ H_2O}$ **[0,15 p]**

(o també per al butà: $2\ CH_3CH_2CH_2CH_3 + 13\ O_2 \rightarrow 8\ CO_2 + 10\ H_2O$*)*

<u>Quin compost genera menys CO_2</u>

Volem obtenir: q = 1500 kJ

A pressió constant (1,0 bar): $\mathbf{q_p = \Delta H^o}$ **[0,1 p]**

Calculem els mols de CO_2 que generem en la combustió del propà:
Propà: ΔH^o_{comb} (propà) = -2220 kJ mol^{-1} = energia despresa en forma de calor

1500 kJ x (1 mol propà / 2220 kJ) x (3 mol CO_2 / 1 mol propà) = **2,027 mol CO_2**
[0,2 p]

Calculem els mols de CO_2 que generem en la combustió del butà:
Butà: ΔH^o_{comb} (butà) = -2876 kJ mol^{-1} = energia despresa en forma de calor

1500 kJ x (1 mol butà / 2876 kJ) x (4 mol CO_2 / 1 mol butà) = **2,086 mol CO_2**
[0,2 p]

⇒ **la combustió del propà genera menys quantitat de CO_2** **[0,2 p]**

Pregunta 6b

Dades:

Temperatura inicial: T_i = 20 ºC
Temperatura final: Tf = 80 ºC
Combustió: n= 145 g de butà
ΔH^o_{comb} (butà) = -2876 kJ mol^{-1}
Capacitat calorífica específica de l'aigua líquida (entre 20 i 80°C) = 4180 J kg^{-1} $^oC^{-1}$

Calor despresa en la combustió del butà:

Massa molecular butà = (4 x 12,0) + (10 x 1,0) = 58,0 g/mol

145 g butà x (1 mol butà / 58,0 g butà) x (2876 kJ / 1 mol butà) =
= **7190 kJ** (ó 7190000 J) **[0,3 p]**

La calor despresa en la combustió, és la calor que absorbeix l'aigua. [0,1 p]

Càlcul de la calor absorbida per l'aigua

$q = C_e\ m\ \Delta T$ **[0,3 p]**

Substituint:
7190000 = 4180 x m x (80 – 20)
m = (7190000 / (4180 x 60) = 28,668 kg

Massa d'aigua= 28,668 kg **[0,3 p]**

- *Si no indiquen les unitats de la massa (o són errònies) es penalitzarà 0,2 p*

30. PAU 2018 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 6

Pregunta 6*a*

Procediment 1

Primera reacció de la taula: $2\ NH_3(g) + CO_2(g) \rightarrow H_2NCONH_2(s) + H_2O(l)$ $\Delta H^o_1 = -133{,}3$ kJ

Per determinar ΔH_f de la urea sòlida podem relacionar la variació d'entalpia de la reacció anterior (ΔH^o_1) amb les entalpies de formació dels productes i reactius:

$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = (\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\ \text{productes}}) - (\Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,,\ \text{reactius}})$$

$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [(1 \times \Delta H^o_{f,\ \text{urea, s}}) + 1 \times (\Delta H^o_{f,\ \text{aigua, l}}] - [(2 \times \Delta H^o_{f,\ \text{amoníac, g}}) + (1 \times \Delta H^o_{f,\ CO2,\ g})]$$

[0,3 p]

Les reaccions 3, 4 i 5 de la taula són, respectivament, les entalpies estàndard de formació del $NH_3(g)$, de l'$H_2O(l)$ i del $CO_2(g)$.

$\Delta H^o_{f,\ \text{amoníac, g}} = -46{,}1$ kJ; $\Delta H^o_{f,\ \text{aigua, l}} = -285{,}8$ kJ; $\Delta H^o_{f,\ CO2,\ g} = -393{,}5$ kJ **[0,3 p]**

Substituint: $-133{,}3 = [(\Delta H^o_{f,\ \text{urea, s}}) + (-285{,}8)] - [(2 \times (-46{,}1)) + (-393{,}5)]$

$\Delta H^o_{f,\ \text{urea, s}} = -333{,}2$ kJ

L'entalpia de formació de la urea sòlida és –333,2 kJ (o –333,2 kJ mol^{-1})

[0,4 p]

- *Es descomptaran 0,2 p si no indiquen les unitats (o són errònies)*

Procediment 2

La reacció de formació de la urea es pot escriure com:

$N_2(g) + 2\ H_2(g) + C(s) + ½\ O_2(g) \rightarrow H_2NCONH_2(s)$ $\Delta H^o_{f,\ \text{urea, s}}$ **[0,3 p]**

Aquesta reacció es pot escriure com a combinació de les següents reaccions de la taula:

$2\ NH_3(g) + CO_2(g) \rightarrow H_2NCONH_2(s) + H_2O(l)$	$\Delta H^o_1 = -133{,}3$ kJ	(reacció 1)
$2 \times [½\ N_2(g) + 3/2\ H_2(g) \rightarrow NH_3(g)]$	$\Delta H^o_3 = 2x\ (-46{,}1)$	(reacció 3, doblada)
$H_2O(l) \rightarrow H_2(g) + ½\ O_2(g)$	$\Delta H^o_{-4} = -(-285{,}8)$ kJ	(reacció 4, girada)
$C(s) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$	$\Delta H^o_5 = -393{,}5$ kJ	(reacció 5)

[0,3 p]

Aplicant la llei de Hess: $\Delta H^o_{f,\ \text{urea, s}} = \Delta H^o_1 + \Delta H^o_3 + \Delta H^o_{-4} + \Delta H^o_5$

$\Delta H^o_{f,\ \text{urea, s}} = -133{,}3 + (2x\ (-46{,}1)) + (285{,}8) + (-393{,}5)$

$\Delta H^o_{f,\ \text{urea, s}} = -333{,}2$ kJ

L'entalpia de formació de la urea sòlida és –333,2 kJ (o –333,2 kJ mol^{-1})

[0,4 p]

- *Es descomptaran 0,2 p si no indiquen les unitats (o són errònies)*

Pregunta 6*b*

Procés de dissolució de la urea en aigua:

$H_2NCONH_2(s) \rightarrow H_2NCONH_2(aq)$ $\quad \Delta H^o_{dis}$?

<u>Càlcul de la variació d'entalpia del procés de dissolució de la urea</u>

La reacció anterior es pot posar com a <u>combinació de les dues primeres reaccions</u> de la taula:

$H_2NCONH_2(s) + H_2O(l) \rightarrow 2\ NH_3(g) + CO_2\ (g)$ $\quad \Delta H^o_{-1} = -\ (-133{,}3)$ kJ (reacció 1, girada)

$2\ NH_3(g) + CO_2(g) \rightarrow H_2NCONH_2(aq) + H_2O(l)$ $\quad \Delta H^o_2 = -\ 119{,}3$ kJ (reacció 2)

[0,4 p]

Aplicant la llei de Hess: $\quad \mathbf{\Delta H^o_{dis} = \Delta H^o_{-1} + \Delta H^o_2}$

$\Delta H^o_{dis} = (133{,}3) + (-\ 119{,}3)$
$\Delta H^o_{dis} = 14{,}0$ kJ

La variació d'entalpia del procés de dissolució de la urea és 14,0 kJ (o 14,0 kJ mol^{-1})

[0,3 p]

- *Es descomptaran 0,1 p si no indiquen les unitats (o són errònies)*

<u>Efecte de la temperatura al procés de dissolució de la urea</u> **[0,3 p]**

El procés de dissolució és endotèrmic ($\Delta H_{dis} > 0$). Això vol dir que <u>la reacció absorbeix calor quan va de reactius (urea sòlida) a productes (urea dissolta).</u>

Si la temperatura augmenta, estem donant calor i la reacció es desplaça cap a la dreta, i es dissol més urea.

31. PAU 2018 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 3

Pregunta 3.a)

Reacció: $CH_3CH_2OH(l) + 3\ O_2(g) \rightarrow 2\ CO_2(g) + 3\ H_2O(g)$ $\quad \Delta H^o = -1249$ kJ

Dades: Massa d'etanol = 1,38 g
Variació d'entalpia de la reacció (tal com està igualada) = −1249 kJ

Càlcul de la calor alliberada:

$\Delta H^o = q_p$ (on q_p és la calor de la reacció a pressió contant)

[0,1 p]

1,38 g CH_3CH_2OH x (1 mol CH_3CH_2OH /46 g CH_3CH_2OH) x (−1249 kJ /1 mol CH_3CH_2OH) = −37,47 kJ

⇒ **Calor despresa = 37,47 kJ** (o 37470 J) **[0,3 p]**

- *No cal que en els factors de conversió escriguin la calor amb signe negatiu.*
- *És correcte si el resultat l'expressen en kJ o en J.*
- *Si no apliquen correctament la relació estequiomètrica entre els mols del reactiu i la calor alliberada es penalitza 0,3 p.*

Càlcul de la temperatura final de l'aigua:

Càlcul de la calor que es necessita per escalfar l'aigua: $q = C_e \cdot m \cdot \Delta T$ **[0,2 p]**

q = 37,47 kJ x (1000 J / 1 kJ) = 37470 J
(és la calor alliberada per la combustió d'1,38 g d'etanol)
C_e (aigua líquida) = 4,18 J g^{-1} $^oC^{-1}$
massa d'aigua = m = V x d = 300 cm^3 x (1,00 g / 1 cm^3) = 300 g
$\Delta T = (T_{final} - 15)$

Substituint a l'equació:
37470 = 4,18 x 300 x (t_{final} - 15)
37470 = 1254 t_{final} - 18810

⇒ **Temperatura final: t_{final} = 44,9 °C** **[0,4 p]**

- *Es penalitzarà 0,2 p si no indiquen les unitats (o són errònies)*

Pregunta 3.b)

Reacció: $CH_3CH_2OH(l) + 3\ O_2(g) \rightarrow 2\ CO_2(g) + 3\ H_2O(g)$ $\Delta H^o = -1249$ kJ

L'entalpia estàndard d'aquesta reacció està relacionada amb l'entalpia (o energia) dels enllaços trencats (reactius) i l'entalpia (o energia) dels enllaços formats (productes):

$\Delta H^o = (\Sigma\ n_r\ E_{trencats}) - (\Sigma\ n_p\ E_{formats})$ **[0,2 p]**

En els reactius cal trencar:
1 enllaç C-C
1 enllaç C-O
1 enllaç O-H
5 enllaços C-H
3 x 1 enllaç O=O

[0,2 p]

En els productes cal formar:
2 x 2 enllaços C=O
3 x 2 enllaços O-H

[0,2 p]

$\Delta H^o = [1\ E_{C-C} + 1\ E_{C-O} + 1\ E_{O-H} + 5\ E_{C-H} + 3\ E_{O=O}] - [4\ E_{C=O} + 6\ E_{O-H}]$

$-1249 = [(1 \times 348) + (1 \times 360) + (1 \times 463) + (5 \times 412) + (3 \times E_{O=O})] - [(4 \times 797) + (6 \times 463)]$

$E_{O=O}$ = 495 kJ (o 495 kJ · mol^{-1}) **[0,4 p]**

- *Si no indiquen les unitats (o són errònies) es penalitzarà 0,2 p.*

32. PAU 2018 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 7

Pregunta 7.a)

Càlcul de la variació d'entropia de la reacció

Reacció: $Ag_2O(s) \rightarrow 2Ag(s) + 1/2\ O_2(g)$

$\Delta S^o(\text{reacció}) = (\Sigma\ n_p\ S^o_{productes}) - (\Sigma\ n_r\ S^o_{reactius})$ **[0,2 p]**

$\Delta S^o(\text{reacció}) = [2 \cdot S^o(Ag(s)) + 1/2 \cdot S^o(O_2(g))] - [1 \cdot S^o(Ag_2O(s))]$

$\Delta S^o(\text{reacció}) = [(2 \cdot 42{,}7) + (\frac{1}{2} \cdot 205{,}1)] - [(1 \cdot 127{,}8)] = 60{,}15\ J \cdot K^{-1}$

ΔS^o(reacció) = 60,15 J · K^{-1} **[0,4 p]**

- *Si no indiquen les unitats (o són errònies) es penalitzarà 0,2 p.*
- *Si no expliciten la fórmula $\Delta S^o(\text{reacció}) = (\Sigma\ n_p\ S^o_{productes}) - (\Sigma\ n_r\ S^o_{reactius})$ perquè directament substitueixen els valors d'entropia de cada substància, no es penalitza CAP dècima (puntuació d'aquest subapartat: 0,6 p).*

Significat del signe de la variació d'entropia **[0,4 p]**

A nivell microscòpic, **l'entropia ens indica el grau de desordre d'un sistema.**

Si: **S↑ ⇒ desordre ↑**

ΔS^o(reacció) = (Σ n_p $S^o_{productes}$) – (Σ n_r $S^o_{reactius}$)

Si la variació d'entropia d'una reacció és positiva (com ha sortit en el càlcul anterior):

ΔS^o(reacció) > 0 ⇒ (Σ n_p $S^o_{productes}$) > (Σ n_r $S^o_{reactius}$)

⇒ **el desordre dels productes és superior al desordre dels reactius**

- *És correcte si en el raonament indiquen que el desordre dels productes és superior al dels reactius perquè en la reacció es forma un gas (oxigen), a partir d'un sòlid.*

Pregunta 7.b)

Influència de la temperatura amb l'espontaneïtat de la reacció

L'espontaneïtat, a p i T constant, depèn del signe l'energia lliure de la reacció, ΔGº:

Si $\Delta G^º < 0 \Rightarrow$ reacció espontània **[0,2 p]**

En el gràfic s'observa:

A T baixes: $\Delta G^º > 0 \Rightarrow$ reacció no espontània
A T altes: $\Delta G^º < 0 \Rightarrow$ reacció espontània

[0,3 p]

Reacció exotèrmica o endotèrmica: justificació

Justificació 1

A p i T constants, la variació d'energia lliure d'una reacció, ΔGº, es pot calcular com:

$\Delta G^º = \Delta H^º - T\,\Delta S^º$ **[0,2 p]**

En el gràfic tenim representats ΔGº (ordenada) i T (abscissa); per tant, la variació d'entalpia seria l'ordenada a l'origen de la recta.

$\Rightarrow$ **segons el gràfic: ordenada a l'origen > 0**
$\Rightarrow$ **$\Delta H^º > 0 \Rightarrow$ Reacció endotèrmica** **[0,3 p]**

Justificació 2

A p i T constants, la variació d'energia lliure d'una reacció, $\Delta G^º$, es pot calcular com:

$\Delta G^º = \Delta H^º - T\,\Delta S^º$ **[0,2 p]**

Del càlcul de la pregunta 7.a) hem vist que: $\Delta S^º > 0$
I en el gràfic es pot veure que a temperatures altes $\Rightarrow$ $\Delta G^º < 0$

$\Delta G^º = \Delta H^º - T\,\Delta S^º$
Segon terme negatiu: $T\,\Delta S^º < 0$ (T –en Kelvin– sempre és positiva)
Si el primer terme és positiu: $\Delta H^º > 0$
$\Rightarrow$ A T altes aconseguirem que el segon terme sigui més gran que el primer (però negatiu) i que $\Delta G^º < 0$ (reacció espontània)

$\Rightarrow$ **$\Delta H^º > 0 \Rightarrow$ Reacció endotèrmica** **[0,3 p]**

Opcionalment:

Si tinguéssim $\Delta H^º < 0$ (amb $\Delta S^º > 0$), la reacció seria espontània per a qualsevol temperatura.

Això no concorda amb el gràfic, ja que observem que l'espontaneïtat ($\Delta G^º < 0$) depèn de la temperatura.
$\Rightarrow \Delta H^º > 0 \Rightarrow$ Reacció endotèrmica

33. PAU 2018 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 6

Pregunta 6a

Reacció de combustió del butà:

$$C_4H_{10}(g) + 13/2\ O_2(g) \rightarrow 4\ CO_2(g) + 5\ H_2O(l) \qquad \Delta H^o\ ?$$

Càlcul de l'entalpia de la reacció (ΔH^o)

Relacionem l'entalpia de la reacció amb l'entalpia de formació de reactius i productes:

$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = (\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\ \text{productes}}) - (\Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\ \text{reactius}}) \qquad \textbf{[0,1 p]}$$

$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [4 \times \Delta H^o_f(CO_2) + 5 \times \Delta H^o_f(H_2O)] - [(1 \times \Delta H^o_f(\text{butà})]$$

$$\Delta H^o_{\text{reacció}} = [(4 \times -393,5) + (5 \times -285,8)] - [(1 \times -126,2)]$$

$\Rightarrow$ $\mathbf{\Delta H^o_{reacció} = -2876,8\ kJ}$ (ó **−**2876,8 kJ/ mol) **[0,2 p]**

- *Si no indiquen les unitats de la entalpia de reacció (o són incorrectes) es penalitzarà 0,1 p*

Massa de butà que cal per escalfar l'aigua.

massa d'aigua = 100 L x (1 kg / 1 L) = 100 kg
$\Delta T = (85 - 15) = 70^oC$

$q = C_e\ m\ \Delta T$ **[0,2 p]**

$q = 4180\ J \cdot kg^{-1}\ {}^oC^{-1} \times 70^oC \times 100\ kg = 29260000\ J = 2,926 \times 10^7\ J$

$q = 2,926 \times 10^7\ J \times (1\ kJ / 1000\ J) = 2,926 \times 10^4\ kJ$ **[0,2 p]**

ΔH_{comb} metà = –2876,82 kJ/ mol

A pressió constant: $q = \Delta H$ = **−**2876,8 kJ/ mol (calor alliberada) **[0,1 p]**

Massa molecular del butà = (4 x 12) + (10 x 1) =58 g/mol

$2,926 \times 10^4$ kJ x (1 mol butà / 2876,8 kJ) x (58,0 g butà / 1 mol butà) = 589,9 g butà

Massa de butà = 589,9 g **[0,2 p]**

Pregunta 6b

Reacció de combustió del butà: $C_4H_{10}(g) + 13/2\ O_2(g) \rightarrow 4\ CO_2(g) + 5\ H_2O(l)$

Signe de la variació d'entropia **[0,5 p]**

El signe de la **variació d'entropia serà negativa** ja que el desordre en els productes és inferior al dels reactius, degut a que el nombre de molècules de gas és menor en els productes (4 molècules) que en els reactius 7,5 molècules).

↑ molècules de gasos ⇒ ↑ desordre ⇒ S^o ↑

S^o(productes) < S^o (reactius)

$\Delta S^o = S^o(\text{productes}) - S^o(\text{reactius}) < 0$

$$\mathbf{\Delta S^o < 0}$$

Espontaneïtat de la reacció a temperatures molt altes

Per determinar l'espontaneïtat d'una reacció, a p i T constant, es mesura la variació d'energia lliure (ΔG^o), que es calcula:

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

Si $\mathbf{\Delta G^o < 0}$ ⇒ **reacció espontània** **[0,1 p]**

En la reacció de combustió del butà tenim:

$\Delta H^o < 0$
$\Delta S^o < 0$

En l'equació $\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$, el primer terme ($\Delta H^o$) és negatiu i el segon ($-T\Delta S^o$) és positiu, ja que la temperatura en Kelvin sempre és positiva.
Si la temperatura és molt alta, el segon terme (positiu) pot superar al primer (negatiu); en aquestes condicions ΔG^o serà positiva, i la reacció no serà espontània.

⇒ **La reacció no és espontània a temperatures molt altes.** **[0,2 p]**

34. PAU 2017 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 1

Pregunta 1a

Reacció: $2\ NaHCO_3(s) \rightarrow Na_2CO_3(s) + CO_2(g) + H_2O(g)$

$\Delta H^o_{reacció} = (\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\ productes}) - (\Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\ reactius})$ **[0,2 p]**

$\Delta H^o_{reacció} = [(1 \times \Delta H^o_{f,\ carbonat\ de\ sodi}) + (1 \times \Delta H^o_{f,\ diòxid\ de\ carboni}) + (1 \times \Delta H^o_{f,\ aigua}]$
$- [(2 \times \Delta H^o_{f,\ hidrogencarbonat\ de\ sodi})$

$\Delta H^o_{reacció} = [(1 \times (-1131,0)) + (1 \times (-393,5)) + (1 \times -241,8)] - [(2 \times (-947,7)]$

$\Delta H^o_{reacció} = +\ 129,1\ kJ$ **[0,3 p]**

A pressió constant $\Rightarrow$ **$q_p = \Delta H^o_{reacció}$**
(on q_p és la calor a pressió constant) **[0,2 p]**

$q_p = 129,1\ kJ > 0$ $\Rightarrow$ la reacció absorbeix calor **[0,3 p]**

Pregunta 1b

Si la reacció es realitza a volum constant $\Rightarrow$ $\mathbf{q_v = \Delta E}$ **[0,2 p]**

on: q_v és la calor a volum constant
ΔE és la variació d'energia interna de la reacció

Relació entre l'entalpia i l'energia interna d'una reacció:

$\mathbf{\Delta H = \Delta E + \Delta \nu\ R\ T}$ **[0,3 p]**

$\Rightarrow$ $\Delta E = \Delta H - \Delta \nu\ R\ T$
$\Rightarrow$ $q_v = q_p - \Delta \nu\ R\ T$

on $\Delta \nu$ és la <u>diferència dels coeficients estequiomètrics dels productes i dels reactius gasosos</u>

Reacció: $2\ NaHCO_3(s) \rightarrow Na_2CO_3(s) + CO_2(g) + H_2O(g)$

$\mathbf{\Delta \nu = (0 + 1 + 1) - (0) = 2}$ **(positiu !)** **[0,2 p]**

<u>Raonament</u> per decidir si q_v (calor a volum constant) és més gran o més petita que q_p (calor a pressió constant):

En l'equació: $q_v = q_p - \Delta \nu\ R\ T = q_p - 2\ R\ T$

$\Rightarrow$ $\mathbf{q_p > 0}$ (la reacció, a pressió constant, absorbeix calor)

$\Rightarrow$ $\mathbf{-2\ R\ T < 0}$ **(els valors d'R i T sempre són positius)**

Per tant: $\mathbf{q_v < q_p}$

La calor absorbida per la reacció <u>és més petita a volum constant</u> que a pressió constant.
[0,3 p]

35. PAU 2017 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 1

Pregunta 1.a)

Reacció: $2\ C_7H_5(NO_2)_3(s) \rightarrow 7\ C(s) + 7\ CO(g) + 3\ N_2(g) + 5\ H_2O(g)$

$\Delta H^o_{reacció} = (\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\ productes}) - (\Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\ reactius})$ **[0,2 p]**

$\Delta H^o_{reacció} = [(7 \times \Delta H^o_{f,\ monòxid\ de\ carboni}) + (5 \times \Delta H^o_{f,\ aigua})] - (2 \times \Delta H^o_{f,\ TNT})$

$\Delta H^o_{reacció} = [(7 \times (-110,3)) + (5 \times (-241,6))] - (2 \times (-364,1)$

$\Delta H^o_{reacció} = -1251,9$ kJ **[0,3 p]**

A pressió constant $\Rightarrow$ **$q_p = \Delta H^o_{reacció}$** **[0,2 p]**
(on q_p és la calor a pressió constant)

Massa molecular del TNT = (7x12)+(5x1)+(3x14)+(6x16)=227 g/mol

2,27 kg TNT x (1000 g TNT / 1 kg TNT) x (1 mol TNT / 227 g TNT) x
x (-1251,9 kJ / 2 mol TNT) = - 6259,5 kJ

Calor produïda = 6259,5 kJ **[0,3 p]**

Pregunta 1.b)

a) El signe de la **<u>variació d'entropia serà positiva</u>** ja que el desordre en els productes és superior al dels reactius, degut al fet que el nombre de molècules de gas és major en els productes (15 molècules) que en els reactius (0 molècules).

↑ molècules de gasos ⇒ ↑ desordre ⇒ S^o ↑

S^o(productes) > S^o (reactius)

$\Delta S^o = S^o(\text{productes}) - S^o(\text{reactius}) > 0$

$\Delta S^o > 0$ **[0,5 p]**

Per determinar l'espontaneïtat d'una reacció, a p i T constant, es calcula la variació d'energia lliure (ΔG^o):

$\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$
Si **$\Delta G^o < 0$ ⇒ reacció espontània** **[0,2 p]**

En la reacció del TNT tenim:

$\Delta H^o < 0$
$\Delta S^o > 0$

En l'equació $\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$, el primer terme ($\Delta H^o$) és negatiu i el segon ($-T\Delta S^o$**)** és també negatiu, ja que la temperatura en Kelvin sempre és positiva. Per tant ΔG^o serà sempre negativa

Per a qualsevol temperatura, la reacció serà espontània **[0,3 p]**

Pregunta 4

a) $C_2H_5OH\ (l) + 3\ O_2\ (g) \rightarrow 2\ CO_2\ (g) + 3\ H_2O\ (l)$ a 25ºC (0,2 punts)

Càlcul de la variació d'entalpia ($\Delta H°$):

$$\Delta H° = (\sum \nu_i \cdot \Delta H°_{f\ i})_{\text{productes}} - (\sum \nu_R \cdot \Delta H°_{f\ i})_{\text{reactius}}$$ (0,1 punts)

$\Delta H° = [2 \cdot \Delta H°_f (CO_2(g)) + 3 \cdot \Delta H°_f (H_2O(l))] - [\Delta H°_f (C_2H_5OH(l)) + 3 \cdot \Delta H°_f (O_2(g))]$

$\Delta H° = [2 \cdot (-393,5) + 3 \cdot (-285,8,5)] - [(-277,6) + 3 \cdot 0]$

$\Delta H° = -787 - 857,4 + 277,6 = -1366,8$ kJ/mol etanol

$\Delta H° = -1366,8$ kJ/mol (0,3 punts)

Càlcul de la variació d'energia interna ($\Delta E°$):

$\Delta H° = \Delta E° + P\,\Delta V = \Delta E° + \Delta\nu\ R\ T$

Variació del nombre de mols de gas entre productes i reactius: $\Delta\nu = 2 - 3 = -1$

(0,2 punts)

$\Delta E° = \Delta H° - \Delta n\ R\ T = -1366,8 \times 10^3 - (-1)\ (8,31)\ (298) = -1364323,6$ J/mol etanol

$\Delta E° = -1364,3$ kJ/mol (0,2 punts)

b) P = constant. $Q_p = \Delta H$ (0,2 punts)

Etanol : V=1 L = 1000 cm^3

n = (1000 cm^3) (790 g/cm^3) / (46 g/mol) = 17,17391304 mol

(0,2 punts)

$Q_p = (17,17391304$ mol etanol$)\ (-1366,8$ kJ/mol etanol$) = -23473,30435$ kJ

$Q_p = -23473,3$ kJ (0,3 punts)

Entropia: En els productes hi ha menys mols de gas i més mols de líquid que en els reactius. En passar de reactius a productes hi ha menys desordre, per tant, hi haurà una disminució de l'entropia. $\Delta S° < 0$

(0,3 punts)

37. PAU 2016 · Setembre · Sèrie 1 · Exercici 4

4. TERMOQUÍMICA

a) Vaporització de l'aigua: $H_2O(l) \rightleftarrows H_2O(g)$

$\Delta H^o = \Delta H^o_f\ (H_2O(g)) - \Delta H^o_f\ (H_2O(l)) = -241{,}8 - (-285{,}8) =$ 44,0 kJ/mol (a 1 atm: condicions estàndard). (0,25 punts)

Com que el procés de vaporització de l'aigua és endotèrmic, absorbeix l'energia produïda per la combustió i això ajuda a sufocar el foc. (0,25 punts)

Calor a pressió constant:
$Q_P = \Delta H = (1000\ g)\ (1\ mol / 18\ g)\ (44{,}0\ kJ / mol) = 2444{,}4\ kJ$ $Q_P = 2444$ kJ (0,5 punts)

NOTA: Si no indiquen que la calor a pressió constant és igual a la variació d'entalpia, resteu-hi 0,25 punts.

b) $\Delta G^o = \Delta H^o - T\ \Delta S^o$ (0,25 punts)

Com que la vaporització és un canvi de fase, es tracta d'un equilibri. A 1 atm, $\Delta G^o = 0$.

Llavors: $T_{e,n} = \Delta H^o / \Delta S^o$ (0,25 punts)

$\Delta S^o = S^o\ (H_2O(g)) - S^o\ (H_2O(l)) = 188{,}0 - 70{,}0 = 118{,}0$ J/mol·K (0,25 punts)

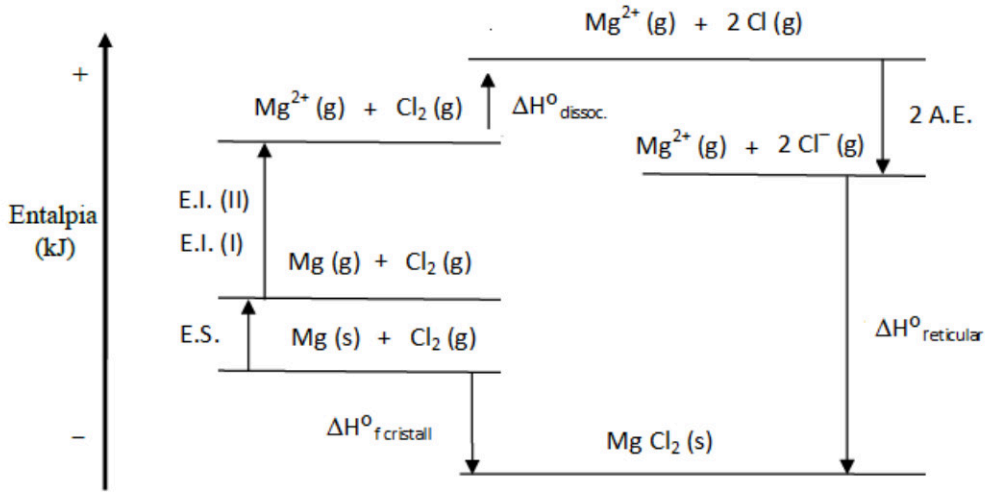
Per tant: $T_{e,n} = \Delta H^o / \Delta S^o = 44{,}0 \cdot 10^3 / 118{,}0 = 372{,}88$ K = 99,88ºC $T_{e,n} = 99{,}9$ ºC $\simeq$ 100ºC (0,25 punts)

38. PAU 2016 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 5

5. ENERGIA RETICULAR

a)

Diagrama d'entalpies del clorur de magnesi



(0,5 punts)

$\Delta H°_{f\ cristall}$ = E.S. (Mg) + E.I. (I) + E.I. (II) + $\Delta H°_{d}$ (Cl_2) + 2 A.E. (Cl) + $\Delta H°_{reticular}$

$-641{,}2 = 146{,}3 + 736{,}3 + 1448{,}4 + 242{,}6 + 2\,(-364{,}5) + \Delta H°_{reticular}$

$\Delta H°_{reticular} = -641{,}2 - 146{,}3 - 736{,}3 - 1448{,}4 - 242{,}6 + 729 = -2485{,}8$ kJ

$\Delta H°_{reticular} = -2486$ kJ/mol $MgCl_2$ (0,5 punts)

b) L'energia reticular dóna una idea de la força d'atracció entre els ions del compost iònic. Aquesta atracció depèn, segons el model electrostàtic del sòlid iònic, de la càrrega dels ions i de la distància que els separa. (0,25 punts)

Llei de Coulomb: $\boldsymbol{F = k\,\frac{q_+\,q_-}{r^2}}$

Com més gran sigui la càrrega entre els ions i més petita la distància entre ells (ions més petits) més atracció hi haurà, la qual cosa implica més energia reticular (valor absolut), és a dir, més energia s'alliberarà en la formació del compost iònic.
(0,25 punts)

Les càrregues entre els ions són les mateixes (+2 del catió i –1 de l'anió) i el radi de l'anió és el mateix (Cl^-). Per tant, la diferència l'hem d'explicar d'acord amb el radi dels cations Mg^{2+} i Ca^{2+}. (0,25 punts)

Mg^{2+} (10 electrons): $1s^2\ 2s^2\ 2p^6$
Ca^{2+} (18 electrons): $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6$
L'ió Ca^{2+} (n = 3) és més gran que l'ió Mg^{2+} (n = 2). En conseqüència, la distància entre el catió i l'anió és més petita en el cas del $MgCl_2$, la qual cosa implica una atracció més gran. Per tant, el valor absolut de l'energia reticular del $MgCl_2$ és més gran que el de l'energia reticular del $CaCl_2$. (0,25 punts)

N.B. No és necessari que posin la llei de Coulomb. Poden dir que les càrregues són les mateixes (+2 i -1, per a cada compost) i que l'única diferència és la distància entre els ions. Com que el Mg^{2+} es més petit que el Ca^{2+}, l'atracció serà més gran en el $MgCl_2$.

39. PAU 2016 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 4

Pregunta 4a

Reacció: $2\ CaO(s) + 2\ SO_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2\ CaSO_4(s)$

Calculem l'entalpia de la reacció (tal com està ajustada):

$\Delta H^o_{reacció} = (\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\ productes}) - \Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\ reactius}$ **[0,2 punts]**

L'entalpia de formació de l'oxigen, en condicions estàndard, és 0.

$\Delta H^o_{reacció} = [2 \times \Delta H^o_{f,\ sulfat\ de\ calci}] - [(2 \times \Delta H^o_{f,\ òxid\ de\ calci}) + (2 \times \Delta H^o_{f,\ diòxid\ de\ sofre})]$
$\Delta H^o_{reacció} = [2 \times (-1432,7)] - [(2 \times (-635,1)) + (2 \times (-296,4))]$

$\Delta H^o_{reacció} = -1002,4$ kJ **[0,3 punts]**

A pressió constant: **$Q_p = \Delta H^o_{reacció}$** **[0,2 punts]**
On: Q_p és la calor a pressió constant.

Calculem la calor alliberada si s'eliminen, cada minut, 447 g de SO_2:

Massa molecular del SO_2: M = (32)+ (2 x 16) = 64 g/mol

(447 g SO_2/min) (1 mol SO_2 / 64 g SO_2) (–1002,4 kJ / 2 mol SO_2) =
= –3500,6 kJ

Q_p = –3500,6 kJ/min
Per tant, s'eliminen 3500,6 kJ/min **[0,3 punts]**

- *Si no apliquen bé la relació estequiomètrica entre la calor de reacció i els mol de SO_2, s'ha de penalitzar 0,2 punts (sobre 0,3punts).*

Pregunta 4b

Si la reacció es realitza a volum constant: $Q_v = \Delta U$
on: Q_v és la calor a volum constant.
ΔU és la variació d'energia interna de la reacció. **[0,2 punts]**

Relació entre l'entalpia i l'energia interna d'una reacció: $H = U + PV$

$\Delta H = \Delta U + \Delta(PV) = \Delta U + (\Delta\nu)\, R\, T \Rightarrow \Delta U = \Delta H - (\Delta\nu)\, R\, T$

on $\Delta\nu$ és la diferència dels coeficients estequiomètrics dels productes i dels reactius gasosos.

Per tant: $Q_v = Q_p - (\Delta\nu)\, R\, T$ **[0,3 punts]**

Reacció: $2\ CaO(s) + 2\ SO_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2\ CaSO_4(s)$

$\Delta\nu = 0 - (2 + 1) = -3$ (negatiu!)

[0,1 punts]

Dades que tenim:
$Q_p = \Delta H^o$ (reacció) = $-$ 1002,4 kJ
R = 8,31 J / (K mol) = 8,31 x 10^{-3} kJ / (K mol) **(passat a kJ)**
T = 298 K

Substituïm les dades en l'equació: $Q_v = Q_p - (\Delta\nu)\, R\, T$

$Q_v = -1002{,}4 - [(-3)\ (8{,}31 \times 10^{-3})\ (298)]$
$Q_v = -$ 995,0 kJ $\Rightarrow$ S'alliberen 995,0 kJ.

Com que 995,0 < 1002,4, **s'alliberarà menys quantitat de calor a volum constant.**
[0,4 punts]

També podrien fer el raonament **qualitativament**. Q_p és negatiu i $-(\Delta\nu)RT$ és positiu. Per tant, Q_v és menys negatiu que Q_p i, per tant, s'allibera menys calor a volum constant.

40. PAU 2016 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 5

Pregunta 5a

L'espontaneïtat en condicions estàndard depèn de l'energia lliure de la reacció, ΔG°:

$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\,\Delta S^\circ$ **[0,2 punts]**

Reacció: $CH_3COOH(l) \rightarrow CH_4(g) + CO_2(g)$ ΔH° (a 298 K) = 18,10 kJ

Calculem la variació d'entropia de la reacció en condicions estàndard:

$\Delta S^\circ_{\text{reacció}} = (\Sigma\, n_p\, S^\circ_{\text{productes}}) - (\Sigma\, n_r\, S^\circ_{\text{reactius}})$

$\Delta S^\circ_{\text{reacció}} = [(S^\circ_{\text{metà}}) + (S^\circ_{\text{diòxid de carboni}})] - [S^\circ_{\text{àcid acètic}}]$ **[0,1 punts]**

$\Delta S^\circ_{\text{reacció}} = [187,9 + 213,7] - [159,8]$

$\Delta S^\circ_{\text{reacció}} = 241,8\ J\ K^{-1}$ **[0,2 punts]**

Homogeneïtzem les unitats, passant tot a J o kJ, i calculem de la variació d'energia lliure:

$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = 18,10\ kJ = 18100\ J$

$\Delta S^\circ_{\text{reacció}} = 241,8\ J\ K^{-1}$

$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ = (18100) - (298)\,(241,8)$

$\Delta G^\circ = = -53956\ J = -54,0\ kJ$ **[0,3 punts]**

$\Delta G^\circ < 0 \Rightarrow$ La reacció és espontània. **[0,2 punts]**

- *Si no homogeneïtzen les unitats d'entalpia i entropia, passant-ho tot a J o a kJ, es penalitza 0,3 punts.*

Pregunta 5b

En l'eix abscisses d'un espectre de masses **es representa la relació massa/càrrega (m/z)** **[0,2 punts]**

- *Si indiquen "massa" en lloc del quocient "massa/càrrega" es penalitza 0,1 punts.*

Calculem les masses molars o pesos moleculars del tres compostos que intervenen en la reacció:

P_m (àcid acètic) = 60
P_m (metà) = 16
P_m (diòxid de carboni) = 44

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).

El pic que té una relació m/z més alta, en l'espectre de masses de la figura, té un valor m/z = 60. El podem interpretar com el pic molecular de la substància en qüestió. Com que aquest valor és igual a 60, es tracta de l'**àcid acètic**. **[0,3 punts]**

Si tenim en compte la fórmula de la molècula CH_3COOH, i les masses de cada àtom, la massa dels següents ions es correspon als tres pics de més intensitat observats en l'espectre de masses:

Pic m/z = 60 $\Rightarrow$ CH_3COOH^+
Pic m/z = 45 $\Rightarrow$ $COOH^+$
Pic m/z = 43 $\Rightarrow$ CH_3CO^+ **[0,5 punts]**

- *Si no indiquen que aquests "fragments" són ions amb càrrega positiva (X^+) es penalitza 0,1 punts.*

41. PAU 2015 · Setembre · Sèrie 5 · Exercici 2

Pregunta 2a

Reacció de fermentació acètica del vi:

$CH_3CH_2OH(l) + O_2(g) \rightarrow CH_3COOH(l) + H_2O(l)$ **[0,2 p]**

- *Es considerarà correcte encara que no explicitin l'estat físic (líquid o gas) de cada substància.*

Càlcul de l'entalpia de la reacció

Relacionem l'entalpia de la reacció amb l'entalpia de formació de reactius i productes:

ΔH^o (reacció) = $(\Sigma\, n_p\, \Delta H^o_{f,\,productes}) - (\Sigma\, n_r\, \Delta H^o_{f,\,reactius})$

ΔH^o(reacció) = $[\Delta H^o_f(CH_3COOH) + \Delta H^o_f(H_2O)] - [\Delta H^o_f(CH_3CH_2OH) + \Delta H^o_f(O_2)]$ **[0,3 p]**

L'entalpia estàndard de formació de l'oxigen és zero.

ΔH^o(reacció) = $[(-487{,}0) + (-285{,}8)] - [(-277{,}6)]$

$\Rightarrow$ **ΔH^o(reacció) = −495,2 kJ** (ó −495,2 kJ/ mol) **[0,3 p]**

- *Si no indiquen les unitats de l'entalpia de reacció (o són incorrectes) es penalitzarà 0,1 punts.*

$\Rightarrow$ **La reacció és exotèrmica** ja que l'entalpia és negativa (desprèn calor). **[0,2 p]**

Pregunta 2b

Càlcul de l'energia lliure de la reacció

Relacionem l'energia lliure de la reacció amb l'energia lliure de formació de reactius i productes:

ΔG^o (reacció) = (Σ n_p $\Delta G^o_{f,\ productes}$) – ($\Sigma$ n_r $\Delta G^o_{f,\ reactius}$)

ΔG^o(reacció) = [ΔG^o_f(CH_3COOH) + ΔG^o_f(H_2O)] − [ΔG^o_f(CH_3CH_2OH) + ΔG^o_f(O_2)] **[0,3 p]**

L'energia lliure estàndard de formació de l'oxigen és zero.

ΔG^o(reacció) = [(−392,6) + (−237,2)]] – [(−174,9)]

⇒ **ΔG^o(reacció) = −454,9 kJ** (ó −454,9 kJ/mol) **[0,4 p]**

- *Si expliciten el valor de la variació d'energia lliure de la reacció, però no indiquen les seves unitats (o són incorrectes), es penalitzarà 0,2 punts.*

Espontaneïtat de la reacció

L'espontaneïtat, a p i T constant, depèn de l'energia lliure de la reacció, ΔG^o.
Si $\Delta G^o < 0$ ⇒ la reacció és espontània
ΔG^o(reacció) = −454,9 kJ

⇒ **ΔG^o(reacció) < 0 ⇒ La reacció és espontània** **[0,3 p]**

42. PAU 2015 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 5

Pregunta 5a

Reacció: $C_6H_{12}O_6$ (s) → 2 C_2H_5OH (l) + 2 CO_2 (g)

$\Delta H^o_{reacció}$ = (Σ n_p $\Delta H^o_{f,\ productes}$) - Σ n_r $\Delta H^o_{f,\ reactius}$) **[0,2 p]**

$\Delta H^o_{reacció}$ = [(2 x $\Delta H^o_{f,\ etanol}$) + (2 x $\Delta H^o_{f,\ diòxid\ de\ carboni}$)] – (1 x $\Delta H^o_{f,glucosa}$)

$\Delta H^o_{reacció}$ = [(2 x (-277,0)) + (2 x (-393,5))] – [1 x (-1274,5)] **[0,3 p]**

$\Delta H^o_{reacció}$ = -66,5 kJ (ó -66,5 kJ/mol de glucosa) **[0,3 p]**

A pressió constant ⇒ **q_p = $\Delta H^o_{reacció}$** (on q_p és la calor a pressió constant)

Un mol de glucosa proporciona a l'organisme 66,5 kJ d'energia en forma de calor. **[0,2 p]**

Pregunta 5b

Si la reacció es realitza a volum constant $\Rightarrow$ $\mathbf{q_v = \Delta E}$ **[0,2 p]**

on: q_v és la calor a volum constant
ΔE és la variació d'energia interna de la reacció

Relació entre l'entalpia i l'energia interna d'una reacció:

$$\mathbf{\Delta H = \Delta E + \Delta \nu\ R\ T}$$ **[0,3 p]**

$\Rightarrow$ $\Delta E = \Delta H - \Delta \nu\ R\ T$
$\Rightarrow$ $q_v = q_p - \Delta \nu\ R\ T$

on $\Delta \nu$ és la diferència dels coeficients estequiomètrics dels productes i dels reactius gasosos

Reacció: $C_6H_{12}O_6(s) \rightarrow 2\ CH_3CH_2OH(l) + 2\ CO_2(g)$

$$\mathbf{\Delta \nu = (0 + 2) - (0) = 2}$$ **(positiu !)** **[0,2 p]**

<u>Raonament</u> per decidir si q_v és més gran o més petit que q_p

En l'equació: $q_v = q_p - \Delta \nu\ R\ T = q_p - 2\ R\ T$

$\Rightarrow$ $q_p < 0$ (la reacció, a pressió constant, proporciona calor a l'organisme)

$\Rightarrow$ $-2\ R\ T < 0$ (R i T sempre són positius)

Per tant: $q_v < q_p$

Però les dues calors (q_p i q_v) són negatives (s'allibera calor) $\Rightarrow$ $\mathbf{|q_v| > |q_p|}$

La calor que proporciona la reacció de la glucosa per a formar etanol <u>és superior a volum constant</u> que a pressió constant. **[0,3 p]**

43. PAU 2015 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 7

Pregunta 7a

El punt de fusió ens indica la temperatura on coexisteixen en equilibri la fase sòlida i líquida del brom, a pressió atmosfèrica (1 atm). **[0,3 p]**

El punt triple correspon a unes condicions de pressió i temperatura en què coexisteixen en equilibri les tres fases del brom: brom sòlid, brom líquid i brom gasós.

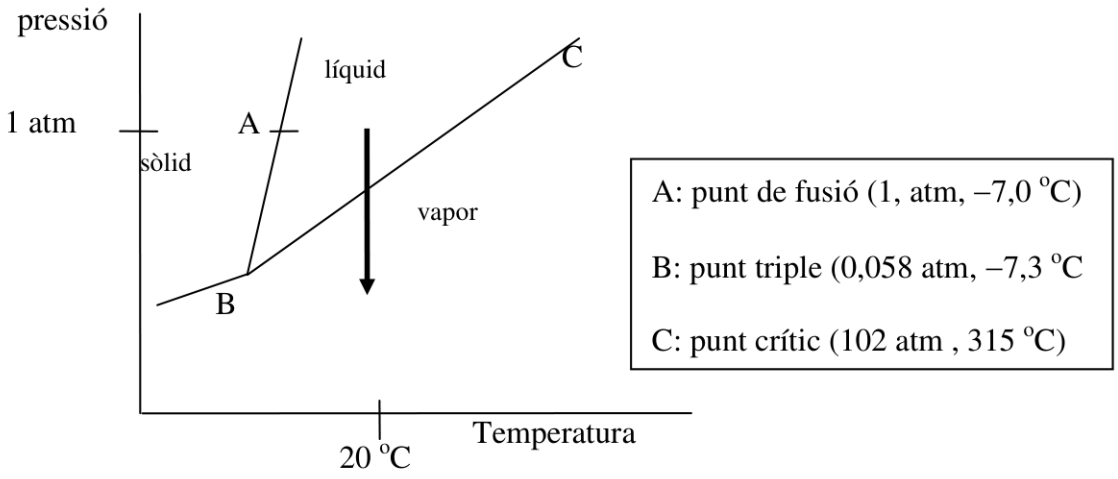
[0,3 p]

En un recipient tenim brom a 20 ^{o}C i 1 atm: el brom es troba en fase líquida**. Si anem disminuint la pressió, mantenint la temperatura, arribarà un moment en què el brom líquid comença a transformar-se en brom gasós.** **[0,2 p]**

Justificació: **[0,2 p]**

Raonament 1:
L'equilibri "líquid - vapor" ve donat per la línia que uneix el punt triple i el punt crític. A 20 ^{o}C i 1 atm el brom està en estat líquid: ens trobem en un punt per sobre del punt triple i per sota del punt crític. En disminuir la pressió, mantenint la temperatura, arribarem al punt d'equilibri líquid – vapor, i el brom es transforma en vapor (gas).

Raonament 2
Es pot fer un dibuix esquemàtic del diagrama de fases, on es visualitzi el procés .



A: punt de fusió (1, atm, –7,0 ^{o}C)

B: punt triple (0,058 atm, –7,3 ^{o}C

C: punt crític (102 atm , 315 ^{o}C)

Pregunta 7b

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

$$Br_2(l) \leftrightarrows Br_2(g)$$

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

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

Aquest procés estarà en equilibri si: $\mathbf{\Delta G = 0.}$ **[0,2 p]**

Calculem la variació d'entropia:

$\Delta S = (\Sigma\, n_p\, S_p) - (\Sigma\, n_p\, S_p)$

$\Delta S = (S_{\text{brom gas}}) - (S_{\text{brom líquid}}) =$

$\Delta S = (245,4) - (152,2) = 93,2$ J / K **[0,2 p]**

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

$\Delta H = 30,91$ kJ $= 30910$ J

$\Delta S = 93,2$ J / K

Substituïm l'entalpia i entropia del brom en l'equació del càlcul de l'energia lliure, i igualem a zero (condició d'equilibri):

$\mathbf{0 = \Delta G = \Delta H - T\,\Delta S}$

$0 = 30910 - (T \times 93,2)$

$\Rightarrow$ $T = 331,7$ K

$\Rightarrow$ **La temperatura d'ebullició del brom és 331,7 K** **[0,3 p]**

Calculem la temperatura d'ebullició en graus centígrads:

$T = 331,7 - 273 \Rightarrow T = 58,7\ ^oC$

$\Rightarrow$ **La temperatura d'ebullició del brom és 58,7 ^oC** **[0,1 p]**

- ***És correcte*** *(més exacte)* ***si per a calcular la temperatura en ^oC ho fa restant el valor de 273,15 a la temperatura en K*** *($T = 331,7 - 273,15 = 58,55\ ^oC$).*
- *Si no transformen les unitats de kJ a J (o a l'inrevés), es penalitzen 0,3 p.*

44. PAU 2015 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 2

Pregunta 2a

Reacció:

$4\ C_3H_5N_3O_9(l) \rightarrow 6\ N_2(g) + 12\ CO_2(g) + O_2(g) + 10\ H_2O(l)$ $\quad \Delta H^o(298\ K) = -6165{,}6\ kJ$

Dades. Massa de $C_3H_5N_3O_9 = 0{,}60\ mg = 6{,}0 \times 10^{-4}\ g$
Variació d'entalpia de la reacció (tal com està igualada) = −6165,6 kJ

Càlcul del volum d'oxigen

Massa molar de $C_3H_5N_3O_9 = (12 \times 3) + (1 \times 5) + (14 \times 3) + (16 \times 9) = 227\ g/mol$

Calculem els mol d'oxigen:

$6{,}0 \times 10^{-4}\ g\ C_3H_5N_3O_9 \times (1\ mol\ C_3H_5N_3O_9 / 227\ g\ C_3H_5N_3O_9) \times$
$\times (1\ mol\ O_2 / 4\ mol\ C_3H_5N_3O_9) = 6{,}607 \times 10^{-7}\ mol\ O_2$ **[0,2 p]**

Apliquem l'equació dels gasos ideals per calcular el volum d'oxigen:

$p\ V = n\ R\ T \Rightarrow V = (n\ R\ T) / p$

Dades: $p = 1{,}0\ bar$
$R = 8{,}3 \times 10^{-2}\ bar\ L / K\ mol$
$T = 298\ K$
$n\ (O_2) = 6{,}607 \times 10^{-7}\ mol$

$V = (6{,}607 \times 10^{-7} \times 8{,}3 \times 10^{-2} \times 298) / 1{,}0$

$\Rightarrow$ **$V = 1{,}63 \times 10^{-5}$ L d'oxigen** **[0,3 p]**

Càlcul de la calor alliberada:

$\Delta H^o = q_p$ (on q_p és la calor de la reacció a pressió contant) **[0,2 p]**

$6{,}0 \times 10^{-4}\ g\ C_3H_5N_3O_9 \times (1\ mol\ C_3H_5N_3O_9 / 227\ g\ C_3H_5N_3O_9) \times$
$\times (-6165{,}6\ kJ / 4\ mol\ C_3H_5N_3O_9) = -4{,}03 \times 10^{-3}\ kJ$ (ó 4,03 J)

$\Rightarrow$ Calor alliberada = $4{,}03 \times 10^{-3}$ kJ (ó 4,03 J) **[0,3 p]**

- *Es correcte si el resultat l'expressen com $-4{,}03 \times 10^{-3}$ kJ (o –4,03 J)*

Pregunta 2b

Reacció:

$4\ C_3H_5N_3O_9(l) \rightarrow 6\ N_2(g) + 12\ CO_2(g) + O_2(g) + 10\ H_2O(l) \quad \Delta H^o(298\ K) = -6165{,}6\ kJ.$

Relació entre l'entalpia de la reacció i les entalpies de formació de reactius i productes:

$$\Delta H^o_{reacció} = (\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\ productes}) - \Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\ reactius})$$

$$\Delta H^o_{reacció} = [(6\ \Delta H^o_f(N_2)) + (12\ \Delta H^o_f(CO_2)) + (1\ \Delta H^o_f(O_2)) + (10\ \Delta H^o_f(H_2O)] - [4\ \Delta H^o_f(C_3H_5N_3O_9)]$$

[0,3 p]

Les entalpies de formació estàndard del nitrogen i de l'oxigen són zero.

$$-6165{,}6 = [(12 \times (-393{,}5)) + (10 \times (-285{,}8))] - [4 \times \Delta H^o_f(C_3H_5N_3O_9)]$$

$$\Rightarrow \mathbf{\Delta H^o_f(C_3H_5N_3O_9)] = -353{,}6\ kJ/mol}$$ **[0,7 p]**

- *Si no indiquen les unitats de la entalpia de reacció (o són incorrectes) es penalitzarà 0,2 p. Cal indicar que l'entalpia de formació s'expressa sempre per mol (J/mol ó kJ/mol).*

45. PAU 2014 · Setembre · Sèrie 5 · Exercici 3

Pregunta 3

a) Reacció: $N_2H_4(l) + 2\ H_2O_2(l) \rightarrow N_2(g) + 4\ H_2O(l)$ ΔH^o (a 298 K) = –245 kJ

Calculem els mols que tenim de cada reactiu:

Massa molecular N_2H_4 = (2 x 14) + (4 x 1) = 32 g/mol
Massa molecular H_2O_2 = (2 x 1) + (2 x16) = 34 g/mol

Mols de N_2H_4 = (1000 g) / (32 g/ mol) = **31,25 mols**
Mols de H_2O_2 = (1000 g) / (34 g/mol) = **29,41 mols**

[0,1 p]

Raonem quin reactiu és el limitant.

El reactiu limitant és l'aigua oxigenada (H_2O_2), ja que l'estequiometria de la reacció és 1 a 2 (hidrazina / aigua oxigenada). Per reaccionar tota la hidrazina (31,25 mols) caldria el doble de mols d'aigua oxigenada (62,50 mols) i en tenim menys (29,41 mols).

[0,5 p]

Calculem la calor despresa (q), a pressió constant:

$q_p = \Delta H$
$\Rightarrow$ Reacció química q_p = – 245 kJ per cada 2 mols d'aigua oxigenada

29,41 mols de H_2O_2 x (–245 kJ / 2 mols de H_2O_2) = – 3602,7 kJ
(signe negatiu: desprèn calor)

Calor produïda = 3602,7 kJ (ó – 3602,7 kJ) **[0,4 p]**

- *Si no indiquen les unitats de la calor despresa (o són incorrectes) es penalitzarà 0,2 p*

Pregunta 3

b) Reacció: $N_2H_4(l) + 2\ H_2O_2(l) \rightarrow N_2(g) + 4\ H_2O(l)$ ΔH^o (a 298 K) = –245 kJ

L'entalpia estàndard d'aquesta reacció està relacionada amb les energies dels enllaços trencats (reactius) i les energies dels enllaços formats (productes):

$$\Delta H^o = \Sigma\ n_r\ E_{trencats} - \Sigma\ n_p\ E_{formats}$$ **[0,3 p]**

En els reactius cal trencar:
1 enllaç N-N
4 enllaços N-H
2 x 1 enllaç O-O
2 x 2 enllaços O-H

En els productes cal formar:
1 enllaç N≡N
4 x 2 enllaços O-H **[0,4 p]**

$\Delta H^o = [(1\ E_{N-N} + 4\ E_{N-H} + 2\ E_{O-O} + 4\ E_{O-H})] - [(1\ E_{N\equiv N}) + (8\ E_{O-H})]$

$-245 = [(1 \times 158) + (4 \times 391) + (2 \times 146) + (4 \times 464)] - [(1 \times E_{N\equiv N}) + (8 \times 464)] =$

$E_{N\equiv N}$ = 403 kJ **(ó 403 kJ · mol^{-1})** **[0,3 p]**

- *Si no indiquen les unitats (o són errònies) es penalitzarà 0,1 p.*

46. PAU 2014 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 3

Pregunta 3

a) Reacció: C(grafit) ⇆ C(diamant)

La variació d'energia lliure de la reacció es pot calcular a partir de la variació d'entalpia i entropia de la reacció: $\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$ **[0,1 p]**

Calculem la entalpia de la reacció en funció de les entalpies de formació:
ΔH^o(reacció) = (n_p Σ $\Delta H^o_{f,\,productes}$) – ($n_p$ Σ $\Delta H^o_{f,\,reactius}$)
ΔH^o(reacció) = ΔH^o_f(C,diamant) − ΔH^o_f(C,grafit)
ΔH^o(reacció) = (1,9) – (0,0)
ΔH^o(reacció) = 1,9 kJ (ó 1,9 kJ·mol^{-1}) **[0,2 p]**

- *Si no indiquen les unitats de la entalpia de reacció (o són incorrectes) es penalitzarà 0,1 p*

Calculem la variació d'entropia de la reacció, a partir de les entropies absolutes:
ΔS^o(reacció) = (n_p Σ S^o_p) – (= (n_r Σ S^o_r)
ΔS^o(reacció) = S^o(C,diamant) − S^o(C,grafit)
ΔS^o(reacció) = (2,4) – (5,7)
ΔS^o(reacció) = −3,3 J·K^{-1} (ó −3,3 J·K^{-1}·mol^{-1}) **[0,2 p]**

- *Si no indiquen les unitats de l'entropia de reacció (o són incorrectes) es penalitzarà 0,1 p*

Homogeneïtzem les unitats, passant de kJ ó a J (entalpia) o de J a kJ (entropia):

ΔH^o(reacció) = 1,9 kJ = 1900 J

Calculem la variació d'energia lliure de la reacció:
ΔG^o(reacció) = (1900) – [298 x (-3,3)])
⇒ **ΔG^o(reacció) = 2883,4 J (ó 2883,4 J·mol^{-1})** **[0,3 p]**

- *És correcte si ho expressen com a 2,8834 kJ (ó 2,8834 kJ·mol^{-1})*

- *Si no indiquen les unitats de l'energia lliure de reacció (o són incorrectes) es penalitzarà 0,1 p.*

L'espontaneïtat depèn de l'energia lliure de la reacció, ΔG^o.

Si $\Delta G^o < 0$ ⇒ la reacció és espontània

ΔG^o(reacció) = 2883,4 J > 0 ⇒ reacció no espontània **[0,2 p]**

Pregunta 3

b) Reacció de combustió del carboni grafit:

$C(grafit) + O_2 \rightarrow CO_2$ **[0,2 p]**

- *Acceptem com a correcte:* **$C + O_2 \rightarrow CO_2$**

Càlcul de la calor que es necessita per escalfar l'aigua: **$q = C_e \cdot m \cdot \Delta T$** **[0,1 p]**

C_e = calor específica de l'aigua = 4,18 $J \cdot g^{-1} \cdot {}^oC^{-1}$
m = massa de l'aigua = 2 L x (1000 mL / 1 L) x (1,0 g / mL) = 2000 g
ΔT = increment de temperatura = 100 – 10 = 90 ^oC

[0,1 p]

q = 4,18 x 2000 x 90 $\Rightarrow$ **q = 752400 J = 752,4 kJ** **[0,2 p]**

A partir de l'entalpia de combustió del carboni grafit:
ΔH^o_{comb} = q (pressió constant) = –395,5 kJ/mol

Càlcul de la massa mínima de carboni grafit:

752,4 kJ x (1 mol C(grafit) / 395,5 kJ) x (12,0 g C(grafit)/ 1 mol C(grafit)) =
= 22,83 g de C(grafit)

Massa de carboni (grafit) = 22,83 g **[0,4 p]**

- *Es penalitzarà 0,2 p si no indiquen les unitats (o són errònies)*

47. PAU 2014 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 3

Pregunta 3

a) Reaccions dels processos: **[0,2 p + 0,2 p +0,2 p]**

Energia d'ionització del cesi: $\mathbf{Cs(g) \rightarrow Cs^{+}(g) + e^{-}}$

Afinitat electrònica del clor: $\mathbf{Cl(g) + e^{-} \rightarrow Cl^{-}(g)}$

Entalpia de formació del clorur de cesi: $\mathbf{Cs(s) + \frac{1}{2} Cl_2(g) \rightarrow CsCl(s)}$

Valor de l'entalpia de cada procés anterior**:** **[0,1 p + 0,1 p + 0,2 p]**

Energia d'ionització del cesi: $\mathbf{\Delta H_3 = 376\ kJ \cdot mol^{-1}}$

Afinitat electrònica del clor: $\mathbf{\Delta H_5 = -364\ kJ \cdot mol^{-1}}$

Entalpia de formació del clorur de cesi: $\mathbf{\Delta H_1 = -433\ kJ \cdot mol^{-1}}$

Pregunta 3

b) **La energia reticular correspon al valor ΔH_6.** **[0,2 p]**

Si apliquem la llei de Hess tenim:

$\mathbf{\Delta H_2 + \Delta H_3 + \Delta H_4 + \Delta H_5 + \Delta H_6 = \Delta H_1}$ **[0,4 p]**

(és correcte posar-ho d'altres formes)

$\Delta H_6 = \Delta H_1 - \Delta H_2 - \Delta H_3 - \Delta H_4 - \Delta H_5$

$\Delta H_6 = (-433) - (79) - (376) - (121) - (-364)$

$\Delta H_6 = -645\ kJ \cdot mol$ (ó – 645 kJ)

La energia reticular del CsCl té un valor de $-645\ kJ \cdot mol^{-1}$ **[0,4 p]**

- *Si no donen les unitats (o són errònies) es penalitza 0,2 p.*

48. PAU 2014 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 4

Pregunta 4

a) La variació d'entropia està relacionada amb el grau de desordre de reactius i productes. Les molècules de gas tenen un grau de desordre més gran que les molècules de líquid ó sòlid.
nº molècules gas ↑ ⇒ grau desordre ↑ ⇒ S ↑ **[0,4 p]**

Reacció A: $SnO_2(s) + 2\ H_2(g) \rightarrow Sn(s) + 2\ H_2O(g)$

nº molècules gas productes = nº molècules gas reactius

S (productes) ≈ S^o (reactius) ⇒ $\mathbf{\Delta S \approx 0}$

Reacció B $SnO_2(s) + C(s) \rightarrow Sn(s) + CO_2(g)$

nº molècules gas productes > nº molècules gas reactius

S (productes) > S^o (reactius) ⇒ $\mathbf{\Delta S > 0}$

La reacció B tindrà una variació d'entropia més gran, en condicions estàndard i 298 K. **[0,6 p]**

Pregunta 4

b) La variació d'energia lliure d'una reacció es pot calcular a partir de les energies lliures de formació de cada compost:

$$\Delta G^o\,(\text{reacció}) = (\Sigma\ n_p\ \Delta G^o_{f,\ \text{productes}}) - (\Sigma\ n_r\ \Delta G^o_{f,\ \text{reactius}})$$ **[0,3p]**

Si agafem la reacció B: $SnO_2(s) + C(s) \rightarrow Sn(s) + CO_2(g)$

$$\Delta G^o(\text{reacció B}) = [1x\Delta G^o_f\,(Sn) + 1x\Delta G^o_f\,(CO_2)] - [1x\ \Delta G^o_f(SnO_2) + 1x\ \Delta G^o_f(C)]$$ **[0,3p]**

Substituïm, tenint en compte que la ΔG^o_f dels elements carboni i estany és zero:

$$125{,}5 = [-399{,}4] - [\Delta G^o_f(SnO_2)]$$

⇒ $\mathbf{\Delta G^o_f(SnO_2) = -524{,}9\ kJ}$ **(ó 524,9 kJ·mol^{-1})** **[0,4 p]**

- *Si no indiquen les unitats es penalitza 0,2 p.*

49. PAU 2013 · Setembre · Sèrie 1 · Exercici 3

Pregunta 3

a) Si volem refredar la beguda que conté el recipient extern de la llauna, cal que en el recipient intern hi hagi **un sòlid** que en el moment d'obrir la llauna **es dissolgui en aigua tot absorbint calor.**

[0,2 p]

Cal triar un sòlid que la seva **entalpia de dissolució sigui positiva**.
Això vol dir: NaCl, NH_4NO_3 ó NH_4Cl.

[0,2 p]

Per triar la substància òptima agafaria aquella que amb la mateixa quantitat de massa (grams) absorbeix més quantitat de calor.

És a dir, triaria la substància que té **l'entalpia de dissolució més alta** (més positiva)

Substància òptima per refredar: NH_4Cl. **[0,1 p]**

Si volem escalfar la beguda que conté el recipient extern de la llauna, cal que en el recipient intern hi hagi **un sòlid** que en el moment d'obrir la llauna **es dissolgui en aigua tot desprenent calor.**

[0,2 p]

Cal triar un sòlid que la seva **entalpia de dissolució sigui negativa**.
Això vol dir: $CaCl_2$, Na_2CO_3 ó KOH.

[0,2 p]

Per triar la substància òptima agafaria aquella que amb la mateixa quantitat de massa (grams) desprèn més quantitat de calor.

És a dir, triaria la substància que té **l'entalpia de dissolució més petita** (més negativa)

Millor substància per escalfar: $CaCl_2$. **[0,1 p]**

Pregunta 3

b) 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 NaCl sòlid al calorímetre. Agitem ràpidament 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. **[0,4 p]**

Material:

- Calorímetre (per exemple un vas de plàstic amb tapa i aïllat)
- Termòmetre
- Balança
- Pipeta o una proveta, si mesurem el volum d'aigua.

[0,3 p]

Mesures experimentals que necessitem:

- Massa de NaCl
- Massa o volum de l'aigua.
- Temperatura inicial de l'aigua.
- Temperatura final de la solució, una vegada s'ha estabilitzat.

[0,3 p]

50. PAU 2013 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 1

Pregunta 1

a) Reacció: $CaO(s) + H_2O(l) \rightarrow Ca(OH)_2(s)$ **[0,1 p]**

Calculem la entalpia de la reacció en funció de les entalpies de formació.

ΔH^o (reacció) = $(\Sigma\ n_p\ \Delta H^o_{f,\ productes}) - \Sigma\ n_r\ \Delta H^o_{f,\ reactius})$
ΔH^o(reacció) = $[\Delta H^o_f(Ca(OH)_2)] - [\Delta H^o_f(CaO) + \Delta H^o_f(H_2O)]$ **[0,2 p]**

ΔH^o(reacció) = [−985,8] – [(−635,1) + (−285,8)] = −64,9 kJ **[0,2 p]**

A pressió constant: ΔH^o(reacció) = calor **[0,2 p]**

La reacció és exotèrmica donat que l'entalpia és negativa**.**
La reacció desprèn calor. **[0,3 p]**

Pregunta 1

b) L'espontaneïtat, a p i T constant, depèn de l'energia lliure de la reacció, ΔG^o.

Si $\Delta G^o < 0 \Rightarrow$ la reacció és espontània **[0,3 p]**

Calculem la variació d'energia lliure de la reacció, a partir de les energies lliures de formació de cada compost:

ΔG^o (reacció) = $(\Sigma\ n_p\ \Delta G^o_{f,\ productes}) - \Sigma\ n_r\ \Delta G^o_{f,\ reactius})$
ΔG^o(reacció) = $[1x\ \Delta G^o_f\ (Ca(OH)_2)] - [1x\ \Delta G^o_f(CaO) + 1x\ \Delta G^o_f(H_2O)]$
[0,4 p]

ΔG^o(reacció) = [-898,5] – [-604,0 + (-237,1)] = −57,4 kJ

−57,4 kJ < 0 $\Rightarrow$ **reacció espontània** **[0,3 p]**

51. PAU 2013 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 1

Pregunta 1

a) Reacció: $C_2H_4 + H_2 \rightarrow C_2H_6$
etè età

L'entalpia estàndard d'aquesta reacció es pot calcular a partir de les entalpies dels enllaços trencats (reactius) menys les entalpies dels enllaços formats (productes):

$$\Delta H^o = \Sigma\, n_r\, E_{trencats} - \Sigma\, n_p\, E_{formats}$$ **[0,3 p]**

En els reactius cal trencar:
1 enllaç C=C
4 enllaços C-H
1 enllaç H-H

En els productes cal formar:
1 enllaç C-C
6 enllaços C-H **[0,4 p]**

$\Delta H^o = [(4\ E_{C-H} + 1\ E_{C=C} + 1\ E_{H-H})] - [(6\ E_{C-H}) + (1\ E_{C-C})]$

$\Delta H^o = [(4 \times 413) + (1 \times 614) + (1 \times 436)] - [(6 \times 413) + (1 \times 348)] = -124$ kJ

$\Delta H^o = -124$ kJ · mol^{-1} (ó -124 kJ) **[0,3 p]**

Pregunta 1

b) El signe de la **variació d'entropia serà negativa**, ja que el desordre en els productes és inferior al dels reactius, degut a que el nombre de molècules de gas és menor en els productes (1 molècula) que en els reactius (2 molècules).

↑ molècules de gasos ⇒ ↑ desordre ⇒ S^o ↑

S^o(productes) < S^o (reactius)

$\Delta S^o = S^o$(productes) – S^o(reactius) < 0

$\Delta S^o < 0$ **[0,5 p]**

Per determinar l'espontaneïtat d'una reacció, a p i T constant, es mesura la variació d'energia lliure (ΔG^o), que es calcula:

$\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$ **[0,2 p]**

Si $\Delta G^o < 0 \Rightarrow$ **reacció espontània** **[0,1 p]**

En la reacció d'hidrogenació de l'etè per formar età tenim:

$\Delta H^o < 0$
$\Delta S^o < 0$

En l'equació $\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$, el primer terme ($\Delta H^o$) és negatiu i el segon ($-T\Delta S^o$) és positiu, ja que la temperatura en Kelvin sempre és positiva. Perquè la variació d'energia lliure sigui negativa (**reacció espontània**) cal que el segon terme sigui petit i, per tant, la **temperatura ha de ser baixa.**

[0,2 p]

52. PAU 2012 · Setembre · Sèrie 4 · Exercici 2

Pregunta 2

a) Reacció de l'H_2: $H_2(g) + ½\ O_2(g) \rightarrow H_2O(l)$ ΔH_r

L'entalpia d'aquesta reacció és l'entalpia de combustió de l'hidrogen , que és la mateixa que la de formació de l'aigua líquida:

$$\Delta H_r = \Delta H^o_{\text{combustió}}\ (H_2) = \Delta H^o_f\ (H_2O\ (l)) = -\ 285{,}8\ kJ \cdot mol^{-1}$$

[0,1 p]

Cal calcular quin reactiu és el limitant:

Mols de O_2 $\Rightarrow$ $pV = n\ R\ T$ $\Rightarrow$ $n = (p\ V) / (R\ T)$
$n = (1\ bar \times 60\ L) / (8{,}31 \cdot 10^{-2}\ bar \cdot L \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1} \times 298\ K)$
$n = 2{,}423\ mol\ de\ O_2$

Mols de H_2 $\Rightarrow$ $pV = n\ R\ T$ $\Rightarrow$ $n = (p\ V) / (R\ T)$
$n = (1\ bar \times 100\ L) / (8{,}31 \cdot 10^{-2}\ bar \cdot L \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1} \times 298\ K)$
$n = 4{,}038\ mol\ de\ H_2$

L'estequiometria de la reacció ens diu que per cremar 1 mol de H_2 ens cal 0,5 mols d'O_2. Amb les dades que tenim es dedueix que si es crema tot l'H_2 tenim suficient oxigen: $4{,}038/2 = 2{,}019 < 2{,}423$.

- **l'hidrogen és el reactiu limitant** **[0,4 p]**

A pressió constant: **$\Delta H = q_p$ (calor)** **[0,2 p]**

Calculem la calor despresa, a partir del reactiu limitant:

$4{,}038\ mol\ H_2 \times (-285{,}8\ kJ / 1\ mol\ H_2) = -1154{,}1\ kJ$

Calor despresa: 1154,1 kJ **[0,3 p]**

Pregunta 2

b) Si la reacció es realitza a **<u>volum constant</u>** tenim:

Variació d'energia interna = calor $\Rightarrow$ $\mathbf{\Delta E = q_v}$ **[0,2 p]**

La relació entre l'entalpia i l'energia interna és:

$\mathbf{\Delta H = \Delta E + (\Delta n)\ R\ T}$ **[0,2 p]**

On (Δn) representa la diferència entre els coeficients estequiomètrics de productes i reactius gasosos.

Per tant: $\Delta E = \Delta H - (\Delta n)\ R\ T$

$(\Delta n) = (0) - (1 + 0{,}5) = -1{,}5 < 0$ **[0,1 p]**

El **segon terme** de l'equació $\Delta E = \Delta H - (\Delta n)\ R\ T$ **és positiu** i, per tant:

$\Delta E > \Delta H$ (tenint en compte el signe negatiu que tenen) **[0,2 p]**

(ó $|\Delta E| < |\Delta H|$ si ho comparem en valor absolut)

<u>Opcionalment</u> es pot fer el càlcul <u>(no és obligatori)</u>. Cal transforma la R a kJ (o l'entalpia a J):

$\Delta E = (-1154{,}1) - [(-1{,}5) \times (8{,}31 \cdot 10^{-3}) \times (298)] = -1150{,}4\ \text{kJ} > \Delta H$

L'energia interna és més gran que l'entalpia (tenint en comte el signe negatiu). Això vol dir que s'alliberaria <u>menys quantitat de calor a volum constant que a pressió constant.</u>

[0,3 p]

53. PAU 2012 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 3

Pregunta 3

a) A pressió constant (condicions estàndard) i temperatura constant:

$\Delta G^o = \Delta H^o - T\Delta S^o$ **[0,1 p]**

Si: $\Delta G^o < 0$ **el procés és espontani** **[0,2 p]**

Unifiquem les unitats de l'entalpia i l'entropia (tot a J ó tot a kJ)

$\Delta H^o = -146{,}0$ kJ $= -146000$ J

$\Delta S^o = -186{,}7$ J · K^{-1} **[0,2 p]**

Calculem la temperatura per aconseguir que la $\Delta G^o = 0$

$0 = -146000 - T\,(-186{,}7) \Rightarrow$ **T = 782 K** **[0,3 p]**

Per T > 782 K $\Rightarrow$ la variació d'energia lliure és positiva (procés no espontani)

Solució: Si T < 782 K la reacció és espontània **[0,2 p]**

b) Si el pH baixa de 7,97 a 5,45:

ΔpH = 7,97 – 5,45 = 2,52 (aproximadament 3 unitats de pH) **[0,1 p]**

pH = -log $[H_3O^+] \Rightarrow [H_3O^+] = 10^{pH}$ **[0,2 p]**

$\Delta([H_3O^+]) = 10^{\Delta pH}$

$\Delta([H_3O^+]) = 10^{\Delta pH} = 10^{2,52} = 331$ **[0,3 p]**

(ó també:: $\Delta([H_3O^+]) = 10^{\Delta pH} \sim 10^3 = 1000$)

La disminució del pH ha estat de 2,52 unitats (aproximadament 3). L'augment de la concentració de $[H_3O^+]$ ha estat de 331 vegades (aproximadament 1000), i no de 100000 vegades.

[0,4 p]

54. PAU 2012 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 5

Pregunta 5

a) Procés de vaporització de l'aigua:

$H_2O(l) \rightarrow H_2O(g)$ **[0,1 p]**

ó també: $H_2O(l) \leftrightarrows H_2O(g)$

Pel diagrama podem interpretar que l'entalpia de combustió d'un mol de metà per formar aigua líquida és –890 kJ i per formar aigua en estat gasós –802 kJ. **[0,2 p]**

La diferència correspon a l'entalpia de vaporització de **dos mols d'aigua**. Aquesta entalpia és positiva, perquè cal donar calor a l'aigua per passar-la de líquid a gas:

$2\ H_2O(l) \rightarrow 2\ H_2O(g)$ ΔH (vaporització) = (– 802) – (–890) = + 88 kJ

[0,4 p]

L'entalpia de vaporització de l'aigua, expressada en kJ mol^{-1} serà:

88 kJ / 2 mol= 44 kJ mol^{-1}

ΔH (vaporització) = 44 kJ mol^{-1} **[0,3 p]**

b) Reacció de combustió d'un mol de metà per donar aigua líquida**:**

$CH_4(g) + 2\ O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + 2\ H_2O(l)$ ΔH = –890 kJ **[0,2 p]**

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

Calculem els mols d'oxigen necessaris per obtenir l'energia que requereix el negoci:

$7{,}5 \cdot 10^4$ kJ x (2 mols O_2 / 890 kJ) = 168,54 mols O_2 **[0,3 p]**

Transformem els mols d'oxigen a litres amb l'equació dels gasos ideals:

p= 1 bar; T= 25 °C = 298 K

$pV = nRT \Rightarrow V = nRT / p$

$V = 168{,}54 \text{ x } 8{,}31 \cdot 10^{-2} \text{ x } 298 \text{ K} / 1 \Rightarrow$ V = 4173,7 L O_2 **[0,2 p]**

Transformem el volum d'oxigen en volum d'aire:

4173,7 L O_2 x (100 L aire / 20,95 L O_2) = 19922 L aire

Volum d'aire = 19222 L **[0,2 p]**

55. PAU 2012 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 3

Pregunta 3

a) Procés de solidificació de l'aigua: $H_2O(l) \rightleftharpoons H_2O(s)$

A pressió constant (condicions estàndard) i temperatura constant:

$$\Delta G^o = \Delta H^o - T\Delta S^o$$ **[0,2 p]**

Si: $\Delta G^o < 0$ **procés espontani** **[0,1 p]**

Unifiquem les unitats de l'entalpia i l'entropia (tot a J ó tot a kJ)

$$\Delta H^o = -6{,}0 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} = -6000 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta S^o = -22 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$ **[0,1 p]**

A 298K (25 ºC)

$$\Delta G^o = -6000 - 298\ (-22{,}0) = 556 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$\Delta G^o > 0$ a 25 ºC el procés de solidificació de l'aigua no és espontani **[0,3 p]**

A 263K (–10 ºC)

$$\Delta G^o = -6000 - 263\ (-22{,}0) = -214 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$\Delta G^o < 0$ a –10 ºC el procés de solidificació de l'aigua és espontani **[0,3 p]**

b) La temperatura per sota de la qual solidifica l'aigua serà quan **$\Delta G^o = 0$,** que representa quan el procés canvia de tendència d'espontaneïtat.

$$\Delta G^o = \Delta H^o - T\Delta S^o = 0$$ **[0,3 p]**

Calculem la temperatura a la qual es produeix aquest canvi de tendència:

$$-6000 - T\ (-22) = 0 \Rightarrow T = 273 \text{ K}$$ **[0,5 p]**

Calculem la temperatura en graus centígrads:

$$T = 273 \text{ K} \Rightarrow \mathbf{T = 0\ ^oC}$$ **[0,2 p]**

56. PAU 2012 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 7

Pregunta 7

a) Reacció de combustió de l'etanol:

$$\mathbf{CH_3CH_2OH + 3\ O_2 \rightarrow 2\ CO_2 + 3\ H_2O}$$ **[0,2 p]**

(ó també: $C_2H_6O + 3\ O_2 \rightarrow 2\ CO_2 + 3\ H_2O$)

Per trobar l'entalpia estàndard de formació de l'etanol:

Procediment 1

La reacció corresponent a l'entalpia estàndard de formació de l'etanol és:

$$2\ C(s) + 3\ H_2(g) + \tfrac{1}{2}\ O_2(g) \rightarrow CH_3CH_2OH\ (g) \quad \Delta H_{f,\ etanol}$$ **[0,2 p]**

L'entalpia de la reacció de formació de l'etanol ($\Delta H_{f,\ etanol}$) la podem trobar aplicant la llei de Hess. Caldria fer la següent suma de reaccions:

Reacció 1: $2\ CO_2(g) + 3\ H_2O(l) \rightarrow CH_3CH_2OH\ (g) + 3\ O_2(g)$ $\Delta H_1 = -1 \text{x } (-1369{,}0)$ kJ
Reacció 2: $2 \text{ x } (C(s) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g))$ $\Delta H_2 = 2 \text{ x } (-393{,}5)$ kJ
Reacció 3: $3 \text{ x } (H_2(g) + \tfrac{1}{2}\ O_2(g) \rightarrow H_2O(l))$ $\Delta H_3 = 3 \text{ x } (-285{,}8)$ kJ

Utilitzant la llei de Hess: $\Delta H_{f,etanol} = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3$ **[0,3 p]**

$$\Delta H_{f,\ etanol} = (1369{,}0) + (-787) + (-857{,}4) = -275{,}4 \text{ kJ}$$

L'entalpia de la reacció de formació de l'etanol = –275,4 kJ (ó –275,4 kJ · mol^{-1}) **[0,3 p]**

Procediment 2

Podem relacionar l'entalpia de combustió de l'etanol, que tenim a la taula, amb les entalpies de formació dels productes, CO_2 i H_2O, i l'entalpia de formació dels reactius (etanol, que serà la incògnita).

$$CH_3CH_2OH(g) + 3\ O_2(g) \rightarrow 2\ CO_2(g) + 3\ H_2O(l) \quad \Delta H^o_{comb,\ etanol}$$

$$\Delta H^o_{comb,\ etanol} = [(2 \text{ x } \Delta H^o_f\ CO_2) + (3 \text{ x } \Delta H^o_f\ H_2O)] - [\Delta H^o_{f,\ etanol}]$$ **[0,3 p]**

$$-1369{,}0 = [2 \text{ x } (-393{,}5) + 3 \text{ x } (-285{,}8)] - [\Delta H^o_{f,\ etanol}]$$ **[0,2 p]**

$$[\Delta H^o_{f,\ etanol}] = -275{,}4 \text{ kJ}$$

L'entalpia de la reacció de formació de l'etanol = –275,4 kJ (ó –275,4 kJ · mol^{-1}) **[0,3 p]**

b) Càlcul del preu de l'etanol:

Primer calculem, per cada euro, la **quantitat d'energia produïda en la combustió de l'octà**

(1 L octà / 1,30 euros) x (1000 mL octà / 1 L octà) x (0,70 g octà / 1 mL octà) x

x (1 mol, octà / 114 g octà) x (5445,3 kJ / 1 mol octà) = **25720,04 kJ / euro**

[0,4 p]

Amb un euro aconseguim 25720,04 kJ d'energia en la combustió de l'octà; amb la combustió de l'etanol volem obtenir la mateixa quantitat d'energia per euro. **Agafem l'energia calculada per l'octà (i per euro) i la transformem en litres d'etanol**:

(1 euro / 25720,04 kJ) x (1369,0 kJ / 1 mol etanol) x (1 mol etanol / 46 g etanol) x

x (0,79 g etanol / 1 mL etanol) x (1000 mL etanol / 1 L etanol) = 0,91 euros / L

Preu de l'etanol: 0,91 euros / L **[0,6 p]**

57. PAU 2011 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 5

Pregunta 5

a) Procediment experimental:

En un calorímetre hi col·loquem un volum (o massa) conegut de solució de HCl 2,00 M i mesurem la temperatura inicial amb un termòmetre. En altra recipient tenim una solució de KOH 2,00 M a la mateixa temperatura. Mesurem un volum (o massa) conegut de solució de KOH 2,00 M i l'afegim al calorímetre; agitem la mescla, 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. **[0,4 p]**

Material:

- Calorímetre: per exemple un vas de plàstic amb tapa i aïllat.
- Termòmetre
- Balança (si mesurem la massa de les solucions); pipeta o proveta (si mesurem el volum de les solucions)

[0,3 p]

Mesures experimentals que necessitem:

- Massa o volum de cada solució (HCl i NaOH)
- Temperatura inicial dels reactius
- Temperatura final una vegada ha acabat la reacció.

[0,3 p]

Pregunta 5

b) Reacció: $H^+(aq) + OH^-(aq) \rightarrow H_2O(l)$ $\Delta H = -56{,}1\ kJ \cdot mol^{-1}$

100 mL HCl = 0,100 L HCl
250 mL NaOH = 0,250 L KOH

Calculem els mols que tenim de cada reactiu:

Mols de H^+ = Mols de HCl = 0,100 L x 2,00 mol / L = 0,200 mols **[0,1 p]**

Mols de OH^- = Mols de KOH = 0,250 L x 2,00 mol /L = 0,500 mols **[0,1 p]**

Raonem quin reactiu és el limitant.
El reactiu limitant és el H^+ (ó HCl) , ja que l'estequiometria de la reacció és 1 a 1, i tenim menys mols de HCl que de NaOH.
[0,4 p]

Calculem la calor despresa:

0,200 mols de H^+ x (-56,1 kJ / 1 mol H^+) = –11,22 kJ
(signe negatiu: desprèn calor)

Calor despresa = 11,22 kJ **[0,4 p]**

58. PAU 2011 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 4

Pregunta 4

a) Calculem la massa d'aigua a escalfar i la variació de temperatura de l'aigua:

massa d'aigua = m = 30 L x (1 kg / 1 L) = 30 kg = 30000 g
variació de temperatura = ΔT = (45 – 10) = 35 ^{o}C = 35 K **[0,1 p]**

Càlcul de la calor que es necessita per escalfar l'aigua:

$q = C_e \cdot m \cdot \Delta T$
$q = 4{,}18\ J \cdot K^{-1} \cdot g^{-1}$ x 30000 g x 35 K = 4389000 J = 4389 kJ **[0,3 p]**

A partir de les dades de la taula obtenim l'entalpia de combustió del metà:

ΔH_{comb} metà = –890,3 kJ/mol

A pressió constant: $q = \Delta H$ = –890,3 kJ / mol metà (calor alliberada)
[0,2 p]

Càlcul de la massa de metà:

4389 kJ x (1 mol metà / 890,3 kJ) x (16,0 g metà / 1 mol metà) = 78,9 g metà

Massa de metà = 78,9 g **[0,4 p]**

Pregunta 4

b) La reacció corresponent a l'entalpia estàndard de formació del metà és:

$$\mathbf{2\ H_2\,(g) + C(s) \rightarrow CH_4\,(g)} \quad \Delta H_{f\,metà} \qquad \textbf{[0,3 p]}$$

Per determinar la variació d'entalpia pel procés anterior:

Procediment 1

L'entalpia de la reacció de formació del metà ($\Delta H_{f\,metà}$) la podem trobar aplicant la llei de Hess. **[0,1 p]**

Caldria fer la següent suma de reaccions:

Reacció 1: $CO_2\,(g) + 2\ H_2O(l) \rightarrow CH_4(g) + 2\ O_2(g)$ $\quad \Delta H_1 = -1 \times (-890,3)$ kJ

Reacció 2: $C(s) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$ $\quad \Delta H_2 = -393,5$ kJ

Reacció 3: $2 \times (H_2(g) + \frac{1}{2}\ O_2(g) \rightarrow H_2O(l))$ $\quad \Delta H_3 = 2 \times (-285,8)$ kJ

Utilitzant la llei de Hess: $\Delta H_{f\,metà} = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3$ **[0,4 p]**

$$\Delta H_{f\,metà} = (890,3) + (-393,5) + (-571,6) = -74,8 \text{ kJ}$$

L'entalpia de la reacció de formació del metà = –74,8 kJ (ó –74,8 kJ · mol^{-1}) **[0,2 p]**

Procediment 2

Podem relacionar l'entalpia de combustió del metà que tenim a la taula amb les entalpies de formació dels producte i reactius, és a dir, amb les entalpies de formació del CO_2 (que és igual a la de combustió i que tenim a la taula), amb l'entalpia de formació de l'aigua (que és igual a la de combustió i que també tenim a la taula) i amb l'entalpia de formació del metà, que serà la incògnita. **[0,3 p]**

$$CH_4(g) + 2\ O_2(g) \rightarrow CO_2\,(g) + 2\ H_2O(l) \quad \Delta H^o_{comb}$$

$$\Delta H^o_{comb} = [(\Delta H^o_f\ CO_2) + 2 \times (\Delta H^o_f\ H_2O)] - [\Delta H^o_f\ CH_4]$$

$$-890,3 = [(-393,5) + 2 \times (-285,8)] - [\Delta H^o_f\ CH_4] \qquad \textbf{[0,2 p]}$$

$$[\Delta H^o_f\ CH_4] = -74,8 \text{ kJ}$$

L'entalpia de la reacció de formació del metà = –74,8 kJ (ó – 74,8 kJ · mol^{-1}) **[0,2 p]**

59. PAU 2011 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 2

Pregunta 2

a) El signe de la **variació d'entalpia serà positiva**, ja que la figura ens mostra que l'entalpia dels productes és més gran que la dels reactius.

Figura: H^o(productes) > H^o (reactius)

$\Delta H^o = H^o$(productes) – H^o(reactius) > 0

$$\Delta H^o > 0$$ **[0,5 p]**

El signe de la **variació d'entropia serà positiva**, ja que el desordre en els productes és superior a la dels reactius, degut a que el nombre de molècules de gas és major en els productes (2 molècules) que en els reactius (1 molècula).

↑ molècules de gasos ⇒ ↑ desordre ⇒ S^o ↑

S^o(productes) > S^o (reactius)

$\Delta S^o = S^o$(productes) – S^o(reactius) > 0

$$\Delta S^o > 0$$ **[0,5 p]**

Pregunta 2

b) Si la variació d'energia lliure és negativa la reacció serà espontània:

$\Delta G^o < 0 \Rightarrow$ reacció espontània **[0,2 p]**

$\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$ **[0,2 p]**

El primer terme és positiu ($\Delta H^o > 0$) i el segon terme és negatiu ($-T\Delta S^o < 0$).

A **temperatures altes** el segon terme serà més gran, $\Delta G^o < 0$, i **la reacció serà espontània**. **[0,6 p]**

60. PAU 2011 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 4

Pregunta 4

a) Equació de combustió: $CH_3OH + 3/2\ O_2 \rightarrow CO_2 + 2\ H_2O$

L'entalpia estàndard de combustió es pot calcular a partir de les entalpies dels enllaços trencats (reactius) menys les entalpies dels enllaços formats (productes):

$$\Delta H = \Sigma\ n_r\ E_{trencats} - \Sigma\ n_p\ E_{formats}$$ **[0,2 p]**

En els reactius, per cada molècula cal trencar:

3 enllaços C-H
1 enllaç C-O
1 enllaç O-H
1 enllaç O=O **[0,2 p]**

En els productes, per cada molècula, cal formar:

2 enllaços C=O
2 enllaços O-H **[0,2 p]**

$\Delta H = [(3E_{C-H} + E_{C-O} + E_{O-H}) + (3/2 \cdot E_{O=O})\ ] - [(2E_{C=O}) + (2 \cdot 2E_{O-H})]$ **[0,2 p]**

$\Delta H = -673\ kJ \cdot mol^{-1}$ (ó -673 kJ) **[0,2 p]**

Pregunta 4

b) La calor alliberada (a pressió constant) serà igual a la variació d'entalpia:

$q = \Delta H = -726\ kJ \cdot mol^{-1}$ **[0,1 p]**

Cal comprovar, d'entrada, quin reactiu és el limitant i quin està en excés.

Massa molecular del metanol = 32
Mols de metanol = 96 / 32 = 3

Massa molecular de l'oxigen = 32
Mols d'oxigen: 320 / 32 = 10 **[0,2 p]**

El metanol és el reactiu limitant (i l'oxigen el reactiu en excés), ja que la relació estequiomètrica és 1 mol de metanol per cada 3/2 mols d'oxigen i ens trobem amb una relació 3 a 10. **[0,4 p]**

A partir dels mols de metanol (reactiu limitant) i la variació d'entalpia de la reacció calculem la calor alliberada:

(3 mols metanol) x (- 726 kJ / 1 mol de metanol) = –2178 kJ

Calor alliberada = 2178 kJ (ó – 2178 kJ) **[0,3 p]**

61. PAU 2010 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 3

Pregunta 3

a) Reacció de formació del CO: **$C(s) + 1/2\ O_2(g) \rightarrow CO(g)$** **[0,2 p]**

Pel diagrama es pot deduir que:

$\Delta H^o_f(CO) + \Delta H^o_{combusió}(CO) = \Delta H^o_{combusió}(CO_2)$

o que : $\Delta H^o_f(CO) + (-283) = (-393)$ **[0,4 p]**

$\Delta H^o_f(CO) = -110\ kJ \cdot mol^{-1}$ **[0,4 p]**

b) Reacció combustió del CO:

$CO(g) + \frac{1}{2}\ O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$ $\Delta H^o_{combusió}(CO) = -283\ kJ \cdot mol^{-1}$

Cal calcular quin reactiu és el limitant:

Mols de CO = (140 g CO) x 1 mol CO / 28 g) = 5 **[0,1 p]**

Mols de $O_2 \Rightarrow pV = n\,R\,T \Rightarrow n = (p\,V) / (R\,T)$

$n = (1{,}2\ atm \times 20{,}4\ L) / (0{,}082\ atm \cdot L \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1} \times 298\ K)$

n = 1 mol de O_2 **[0,2 p]**

L'estequiometria de la reacció ens diu que per cremar 1 mol de CO ens cal 0,5 mols d'O_2. Amb les dades que tenim es dedueix que:

- **l'oxigen és el reactiu limitant** **[0,2 p]**

Calculem la calor despresa:

$1\ mol\ O_2 \times (1\ mol\ CO / \frac{1}{2}\ mol\ O_2) \times (-283\ kJ / 1\ mol\ CO) = -566\ kJ$

Calor despresa: 566 kJ (ó −566 kJ) **[0,5 p]**

62. PAU 2010 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 6

Solució no disponible: la pauta oficial no la inclou o no s'ha pogut localitzar.

63. PAU 2010 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 7

Solució no disponible: la pauta oficial no la inclou o no s'ha pogut localitzar.

64. PAU 2010 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 2

Pregunta 2

a) Reacció: $2\ NO(g) + O_2(g) \rightarrow 2NO_2(g)$

La reacció espontània si $\Delta G^o < 0$ **[0,2 p]**

- Calculem l'entropia de la reacció a partir de les entropies absolutes, a 298 K:

$\Delta S^o = \Sigma\ n_p\ S^o\ (\text{productes}) - \Sigma\ n_r\ S^o\ (\text{reactius})$

$\Delta S^o = [2 \cdot S^o(NO_2)] - [2 \cdot S^o(NO) + 1 \times S^o(O_2)]$ **[0,2 p]**

$\Delta S^o = (2 \times 240{,}1) - (2 \times 210{,}8 + 1 \times 205{,}1)$

$\Delta S^o = -146{,}5\ J \cdot K^{-1}$ **[0,1 p]**

- Unifiquem les unitats: J o kJ:

$\Delta S^o = -146{,}5\ J \cdot K^{-1} = -146{,}5 \cdot 10^{-3}\ kJ \cdot K^{-1}$ **[0.1 p]**

- Calculem ΔG^o a 298 K: $\Delta G^o = \Delta H^o - T\ \Delta S^o$ **[0,2 p]**

$\Delta G^o = (-114{,}14) - [298 \times (-146{,}5 \cdot 10^{-3})]$

$\Delta G^o = -70{,}5$ kJ (ó -70500 J) **[0,2 p]**

b) Calculem els mols NO a partir de l'equació dels gasos ideals: $pV = n\ RT$

$n = (p \cdot V) / (R \cdot T)$; $n = (1 \cdot 5) / (0{,}082 \cdot 298)$; $n = 0{,}205$ mols NO **[0,3 p]**

Reacció: $2\ NO(g) + O_2(g) \rightarrow 2\ NO_2(g)$ $\Delta H^o = -114{,}14$ kJ

Calor a pressió constant = $q_p = \Delta H^o$ **[0,3 p]**

Calor: 0,205 mol NO x (–114,14 kJ / 2 mol NO) = –11,7 kJ

Calor despresa: 11,7 kJ (ó $-11{,}7$ kJ) **[0,4 p]**

65. PAU 2010 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 3

Pregunta 3

a) L'energia lliure (ΔG) la podem calcular en condicions estàndard i a 25 °C:

$$\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$$ **[0,3 p]**

$\Delta H^o = 178\ kJ \cdot mol^{-1}$ $\Delta S^o = 165\ J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1} = 165 \cdot 10^{-3}\ kJ \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$
$\Delta G^o = (178) - (298 \times 165 \cdot 10^{-3})$

$\Delta G^o = 128{,}83\ kJ \cdot mol^{-1}$ (ó $128830\ J \cdot mol^{-1}$) **[0,4 p]**

- *Si no passen de J a kJ (o al revés) la puntuació serà:* **[0 p]**

$\Delta G^o > 0$ Reacció no espontània **[0,3 p]**

b) Per que sigui **espontània:** **$\Delta G^o < 0$**

Cal buscar la temperatura perquè: **$\Delta G^o = 0$** **[0,3 p]**

$\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$ $0 = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$

$T = \Delta H^o / \Delta S^o = 178 / 165 \cdot 10^{-3}$

T = 1079 K (temperatura mínima perquè sigui espontània) **[0,7 p]**

- *Si no posen unitats (o estan malament) es puntuarà:* **[0,4 p]**

66. PAU 2010 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 5

Pregunta 5

a) La variació d'entalpia d'una reacció es pot calcular (aplicant la llei de Hess) com la suma de les entalpies (o energies) dels enllaços trencats menys la dels enllaços formats:

$$\Delta H = (\Sigma\, n_r\, E_{trencats}) \;-\; (\Sigma\, n_p E_{formats}) \qquad \textbf{[0,4 p]}$$

Si $\Delta H < 0 \;\Rightarrow$ E (enllaços formats) > E (enllaços trencats)

Per tant és més gran la quantitat d'energia implicada en la formació d'enllaços que en el trencament d'enllaços. **[0,6 p]**

b) Aplicant l'equació anterior: $\Delta H = (\Sigma\, n_r\, E_{trencats}) \;-\; (\Sigma\, n_p E_{formats})$

En la reacció de combustió del metà:

En els reactius, per cada molècula, cal trencar 4 enllaços C-H i 1 enllaç O=O. **[0,2 p]**

En els productes, per cada molècula, cal formar 2 enllaços C=O i 2 enllaços O-H. **[0,2 p]**

$$\Delta H = [(4\, E_{C\text{-}H}) + (2 \times E_{O=O})] - [(2\, E_{C=O}) + (2 \times 2\, E_{O\text{-}H})] \qquad \textbf{[0,3 p]}$$

$$-849{,}3 = [(4 \times E_{C\text{-}H}) + (2 \times 498)] - [(2 \times 805) + (4 \times 464)]$$

Entalpia d'enllaç $\mathbf{E_{C\text{-}H} = 405\ kJ\ mol^{-1}}$**.** **[0,3 p]**

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

67. PAU 2009 · Setembre · Sèrie 1 · Exercici 1

Exercici 1

1.1 Càlcul de la calor a pressió constant o variació d'entalpia

Combustió del benzè: $C_6H_6(l) + 7{,}5O_2(g) \rightarrow 6CO_2(g) + 3H_2O(l)$ $\quad \Delta H^0_r$ [0,3 punts]

$\Delta H^0_r = 3\Delta H^0_f\, H_2O(l) + 6\Delta H^0_f\, CO_2(g) - \Delta H^0_f\, C_6H_6(l)$ [0,3 punts]

$\Delta H^0_r = 3(-285{,}8) + 6(-393{,}5) - (49{,}0) = -3267{,}4\ kJ\cdot mol^{-1}$ [0,2 punts]

1.2 Definició i càlcul de la entalpia de vaporització

Entalpia de vaporització d'una substància és la calor a pressió constant que cal aportar per a que una determinada quantitat de la substància líquida (p.e. 1 mol) passi a vapor, a pressió constant i a una determinada temperatura que, generalment, es considera la temperatura d'ebullició. [0,6 punts]

No cal que l'alumne indiqui que el canvi de fase líquid-vapor té lloc a pressió constant.
Si en la definició no s'esmenta que el canvi de fase ha de tenir lloc a una temperatura determinada i constant, la resposta es valorarà amb 0,4 punts.

Càlcul de la entalpia molar de vaporització del benzè líquid a 25 ºC, ΔH^0_3.

$6C(grafit) + 3H_2(g) \rightarrow C_6H_6(l)$ $\quad \Delta H^0_1 = 49{,}0$ kJ

$6C(grafit) + 3H_2(g) \rightarrow C_6H_6(g)$ $\quad \Delta H^0_2 = 82{,}9$ kJ

$C_6H_6(l) \rightarrow C_6H_6(g)$ $\quad \Delta H^0_3$

Aplicant la Llei de Hess: $\Delta H^0_3 = \Delta H^0_2 - \Delta H^0_1 = 82{,}9 - 49{,}0 = 33{,}9\ kJ\cdot mol^{-1}$ [0,3 punts]

Si s'ometen les reaccions anteriors i, fent servir les dades de la taula adjunta, s'indica que $\Delta H^0_3 = 82{,}9 - 49{,}0 = 33{,}9\ kJ\cdot mol^{-1}$ també es considerarà ben resolt aquest apartat (0,3 punts)

Càlcul de la entalpia de vaporització d'1 kg de benzè líquid a 25 ºC, ΔH^0_3.

$$\frac{33{,}9\ kJ}{1\ mol\ benzè}\cdot\frac{1\ mol\ benzè}{78{,}0\ g\ benzè}\cdot\frac{1000\ g\ benzè}{1\ kg\ benzè} = 434\ kJ\cdot kg^{-1}$$ [0,3 punts]

68. PAU 2009 · Juny · Sèria 3 · Exercici 1

Exercici 1

1.3 Càlcul de l'entalpia estàndard de formació del metà:

Reacció de formació del metà: $C(grafit) + 2H_2(g) \rightarrow CH_4(g)$ $\quad \Delta H^0_f$ [0,3 punt]

$C(grafit) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$ $\quad \Delta H^0_1\,(298{,}15\ K) = -393{,}5\ kJ/mol$
$H_2(g) + \frac{1}{2}O_2(g) \rightarrow H_2O(l)$ $\quad \Delta H^0_2\,(298{,}15\ K) = -285{,}8\ kJ/mol$
$CH_4(g) + 2O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + 2H_2O(l)$ $\quad \Delta H^0_3\,(298{,}15\ K) = -890{,}4\ kJ/mol$

$\Delta H^0_f = \Delta H^0_1 + 2\Delta H^0_2 - \Delta H^0_3$ [0,5 punt]
$\Delta H^0_f = -393{,}5\ kJ + 2(-285{,}8)\ kJ - (-890{,}4)\ kJ = -74{,}7\ kJ$
$\Delta H^0_f = -74{,}7\ kJ/mol$ [0,2 punt]

1.4 Caràcter espontani de la reacció de combustió del metà:

Criteri d'espontaneïtat: $\Delta G < 0$ o el que és el mateix: $\Delta H - T\Delta S < 0$ [0,2 punt]
$\Delta G = -890{,}4\ kJ - 298{,}15\ K\ \Delta S$ [0,2 punt]

$\Delta S = 2 \cdot 69{,}9\ J\ K^{-1} + 1 \cdot 213{,}7\ J\ K^{-1} - 2 \cdot 205{,}1\ J\ K^{-1} - 186{,}3\ J\ K^{-1}$
$= -243\ J\ K^{-1}$
$= -243\ 10^{-3}\ kJ\ K^{-1}$ [0,2 punt]

$\Delta G = -890{,}4\ kJ - 298{,}15\ K\ (-243\ 10^{-3})\ kJ\ K^{-1}$
$\Delta G = -890{,}4\ kJ + 72{,}5\ kJ$
$= -817{,}9\ kJ$ [0,2 punt]
per la qual cosa es pot afirmar que la reacció és espontània. [0,2 punt]

69. PAU 2009 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 1

Exercici 1

1.1 Combustions del grafit i del metà:

$C(grafit) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$ $\quad \Delta H^0_1$ [0,1 punt]

$CH_4(g) + 2O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + 2H_2O(l)$ $\quad \Delta H^0_2$ [0,1 punt]

ΔH^0_1 coincideix amb la calor de formació del $CO_2(g)$: $\Delta H^0_1 = -393{,}5$ kJ [0,2 punt]

$\Delta H^0_2 = 2(-285{,}8) + (-393{,}5) - 0 - (-78{,}4) = -886{,}7$ kJ $\quad \Delta H^0_2 = -886{,}7$ kJ [0,2 punt]

Pel grafit: $10^3\ kg\ CO_2 \cdot \frac{10^3\ g\ CO_2}{1\ kg\ CO_2} \cdot \frac{1\ mol\ CO_2}{44\ g\ CO_2} \cdot \frac{393{,}5\ kJ}{1\ mol\ CO_2} = 8\,943\,181{,}8\ kJ$

[0,2 punt]

Pel metà: $10^3\ kg\ CO_2 \cdot \frac{10^3\ g\ CO_2}{1\ kg\ CO_2} \cdot \frac{1\ mol\ CO_2}{44\ g\ CO_2} \cdot \frac{886{,}7\ kJ}{1\ mol\ CO_2} = 20\,152\,272{,}7\ kJ$

[0,2 punt]

1.2 Caràcter endotèrmic o exotèrmic de la reacció:

$C(g) + 2H_2(g) \rightarrow CH_4(g)$ $\quad \Delta H^0_r$

Sublimació del grafit: $C(grafit) \rightarrow C(g)$ $\quad \Delta H^0_{sub} = 718{,}4$ kJ [0,2 punt]

Formació del metà: $C(grafit) + 2H_2(g) \rightarrow CH_4(g)$ $\quad \Delta H^0_f = -78{,}4$ kJ [0,2 punt]

$\Delta H^0_r = \Delta H^0_f - \Delta H^0_{sub} = -78{,}4\ kJ - 718{,}4\ kJ$ [0,2 punt]

$\Delta H^0_r = -796{,}8$ kJ [0,2 punt]

Atès que $\Delta H^0_r < 0$ la reacció és exotèrmica. [0,2 punt]

70. PAU 2009 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 5 (Opció B)

Exercici 5B

5.1 Resposta correcta: b
5.2 Resposta correcta: a
5.3 Resposta correcta: c
5.4 Resposta correcta: c

71. PAU 2008 · Setembre · Sèrie 4 · Exercici 4 (Opció B)

OPCIÓ B

4.1 Signe de ΔH i ΔS de la reacció

Es tracta d'una reacció de combustió i les combustions són exotèrmiques. D'altra banda, la reacció plantejada correspon a la reacció de formació de l'aigua líquida que, tal com es pot veure a partir de les dades aportades en la taula annexa, té una entalpia negativa en les condicions estàndard.

[0,4 punts]

Es tracta d'una reacció de combustió entre dos gasos en la que es forma un líquid. En aquesta reacció la ΔS és negativa, atès que hi ha un guany en l'ordre molecular al llarg de la reacció.

[0,4 punts]

4.2 Càlcul ΔH^0_f d'un mol d'aigua gas a 100 ºC

(1) $H_2(g) + \frac{1}{2}O_2(g) \rightarrow H_2O(l)$ a 25 ºC $\quad \Delta H_1 = -285{,}8$ kJ

(2) $H_2O(l)$ a 25 ºC → $H_2O(l)$ a 100 ºC $\quad \Delta H_2 = 18 \cdot 4{,}18 \cdot (100 - 25)$ J
$= 5643$ J $= 5{,}64$ kJ

[0,2 punts]

(3) $H_2O(l)$ a 100 ºC → $H_2O(g)$ a 100 ºC $\quad \Delta H_3 = 40{,}66$ kJ

[0,2 punts]

(4) $H_2(g) + \frac{1}{2}O_2(g) \rightarrow H_2O(g)$ a 100 ºC $\quad \Delta H_4$ [0,2 punts]

(4) = (1) + (2) + (3) i $\quad \Delta H_4 = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3$ [0,2 punts]
$= -285{,}8 + 5{,}64 + 40{,}66 = -239{,}5$ kJ·mol^{-1}

0,4 punts]

72. PAU 2008 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 1

1.1 Combustions del propà i el butà

Combustió del propà: $C_3H_8(g) + 5O_2(g) \rightarrow 3CO_2(g) + 4H_2O(l)$ H^0_1 [0,25 punts]
Combustió del butà: $C_4H_{10}(g) + 6{,}5O_2(g) \rightarrow 4CO_2(g) + 5H_2O(l)$ H^0_2 [0,25 punts]

$H^0_1 = 4\ H^0_f H_2O(l) + 3\ H^0_f CO_2(g) - H^0_f C_3H_8(g)$
$H^0_1 = 4(-285{,}8) + 3(-393{,}5) - (-103{,}8) = -2219{,}9$ kJ [0,25 punts]

$H^0_2 = 5\ H^0_f H_2O(l) + 4\ H^0_f CO_2(g) - H^0_f C_4H_{10}(g)$
$H^0_2 = 5(-285{,}8) + 4(-393{,}5) - (-126{,}5) = -2876{,}5$ kJ [0,25 punts]

Atès que la calor a pressió constant és la H:

propà: calor a pressió constant per mol de $CO_2 = -2219{,}9/3 = -740$ kJ/mol de CO_2
butà: calor a pressió constant per mol de $CO_2 = -2876{,}5/4 = -719{,}1$ kJ/mol de CO_2

No caldrà posar el signe (-) si s'indica que és una calor alliberada pel sistema [0,25 + 0,25 punts]

1.2 Raonament:

En la combustió del propà s'allibera més energia per mol de CO_2 emès. Per aquesta raó es pot considerar un combustible relativament més net que el butà. [0,5 punts]

Si no es fan els càlculs però s'indica que el combustible més "net" serà aquell que alliberi més energia per mol de CO_2 format (o menys CO_2 per unitat d'energia alliberada), l'apartat es puntuarà amb [0,2 punts]

73. PAU 2008 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 3

3.1 Reaccions de combustió:

(1) combustió completa $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$ [0,2 punts]
(2) combustió incompleta $CH_4 + 3/2O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$ [0,2 punts]

Càlcul de ΔH^0 a 25 ºC per a cada reacció:

Combustió completa: $\Delta H^0_1 = 2\cdot(-285{,}8) + (-393{,}5) - (-74{,}8) - 0$
$\Delta H^0_1 = -890{,}3$ kJ·mol^{-1} [0,3 punts]

Combustió incompleta: $\Delta H^0_2 = 2\cdot(-285{,}8) + (-110{,}5) - (-74{,}8) - 0$
$\Delta H^0_2 = -607{,}3$ kJ·mol^{-1} [0,3 punts]

Arguments per a mantenir en bon estat els carburadors dels vehicles a motor i prevenir que tingui lloc la combustió incompleta:

Evitar l'emissió d'un gas tòxic (CO) [0,2 punts]
Aprofitar millor l'energia del combustible (en la combustió incompleta, el metà proporciona menys energia) [0,2 punts]

3.2 Càlcul de la ΔH^0 de la reacció proposada:

$$CO(g) + \tfrac{1}{2}O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$$

El valor de ΔH^0 a 25 ºC és: -393,5 – (-110,5) = - 283,0 kJ·mol^{-1} [0,3 punts]
Es tracta, doncs, d'una reacció exotèrmica.

D'altra banda, ΔS^0 de la reacció és negativa, atès que en el decurs de la reacció hi ha una pèrdua en el grau de desordre molecular.

[0,3 punts]

74. PAU 2007 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 1

1. Valoració de l'àcid acètic:

1.1 $\Delta H^0_{\text{reacció}}$ = -1274,4 – (-393,5 · 6) – (-285,9 · 6) = 2802,0 kJ [0,5 punts]

1.2 La reacció tindrà una $\Delta S^0_{\text{reacció}}$ negativa, atès que en el decurs de la reacció hi ha un guany en l'ordre molecular.
Càlcul de $\Delta S^0_{\text{reacció}}$ = 212 + (6 x 205,1) – (6 x 213,7) – (6 x 69,9) = -259 J·K^{-1}·mol^{-1}
Com que la reacció presenta una $\Delta S^0_{\text{reacció}}$ negativa i a més és endotèrmica, aquesta reacció no serà espontània en les condicions considerades.
Per a que tingui lloc, caldrà una aportació d'energia al sistema (energia lumínica).
[0,5 punts]

1.3 Combustió de 25 g de glucosa,

$$25{,}00 \ \ g \ \ glucosa \ \ . \frac{1 \ \ mol \ \ glucosa}{180{,}0 \ \ g \ \ glucosa} . \frac{-2802 \ \ kJ}{1 \ \ mol \ \ glucosa} = -389 \ \ kJ$$

[0,5 punts]

1.4 La reacció de combustió de la glucosa serà termodinàmicament espontània en les condicions estàndard (reacció inversa a la de l'enunciat).
Des d'un punt de vista cinètic, la velocitat d'aquesta reacció a 25 ºC és pràcticament nul·la. Això es deu a que presenta una elevada energia d'activació.
En les reaccions químiques una cosa són els criteris termodinàmics (possibilitat o no de que es doni una reacció en determinades condicions) i l'altre els aspectes cinètics relacionats amb la velocitat amb la que succeeixen les reaccions. [0,5 punts]

75. PAU 2007 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 5 (Opció A)

5.1 A partir del primer principi de la termodinàmica tenim: $\Delta U = q + w$
calor = q = 40 J (positiu per ser absorbit pel sistema)
treball = w = F·d = - 3000 N · 0,2 m = - 600 J (negatiu per ser un treball donat pel sistema)
$\Delta U = q + w$ = 40 – 600 = - 560 J (el sistema ha rebaixat la seva energia interna) [0,5 punts]

5.2 Significat de l'energia interna: energia que el sistema pot donar sota la forma d'un treball o una calor (o emmagatzemar quan sobre ell es fa un treball o s'aplica una calor). Correspon a la suma de les energies de les partícules que integren el sistema. [0,5 punts]

5.3 L'energia interna d'un sistema és una funció d'estat per què la seva variació al llarg d'una transformació tan sols depèn de les característiques dels estats inicial i final de la transformació i no es veu afectada per la via o camí per on ha tingut lloc l'esmentada transformació. [0,5 punts]

5.4 En termodinàmica no resulta possible determinar l'energia interna d'un sistema en un determinat estat. Tan sols resulta possible determinar la variació d'aquesta magnitud d'estat al llarg d'una transformació del sistema. [0,5 punts]

76. PAU 2007 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 4 (Opció A)

OPCIÓ A

4A Obtenció del benzè

Estimació de la variació d'entropia:

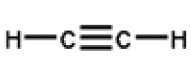
En el decurs de la reacció hi ha un guany en l'ordre molecular (tres molècules de gas donen lloc a una molècula de líquid, estructuralment més ordenada que les molècules de gas). Per aquesta raó cap esperar una variació d'entropia negativa. [0,4 punt]

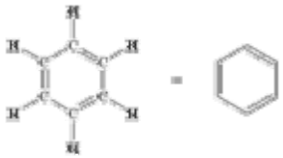
Càlcul de la calor bescanviada en la formació de 50 g de benzè:

$$50{,}0\ g\ benzè \cdot \frac{1\ mol\ benzè}{78{,}0\ g\ benzè} \cdot \frac{-631\ kJ}{1\ mol\ benzè} = -404{,}5\ kJ$$

[0,4 punt]

Estructures de Lewis:





[0,3 punt]

Estructura de l'etí [0,2 punt]
Estuctura del benzè [0,2 punt]

Geometries moleculars: etí: molècula lineal amb un angle d'enllaç de 180º [0,3 punt]
benzè: molècula hexagonal amb angles d'enllaç de 120º [0,3 punt]

Distàncies d'enllaç:
La distància d'enllaç és més petita a mesura que augmenta l'ordre d'enllaç (o nombre d'enllaços). Així, l'enllaç entre carbonis (triple) de l'etí serà més curt que el present en el benzè, donat que en aquesta molècula l'ordre d'enllaç es situa entre el valor d'un enllaç senzill i d'un doble (ordre 1,5).
[0,2 punt]

77. PAU 2007 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 1

1. Oxidació de l'etanol

1.1 La reacció és: $CH_3\text{-}CH_2OH(l) + O_2(g) \rightarrow CH_3\text{-}COOH(l) + H_2O(l)$

y la seva ΔH^0 de reacció és: $\Delta H^0 = -487{,}0 + (-285{,}8) - 0 - (-277{,}6) = -495{,}2$ kJ [0,4 punts]

de manera que la reacció serà exotèrmica ($\Delta H^0 < 0$) [0,1 punts]

Càlcul de la variació d'entropia:

$\Delta S^0 = 159{,}8 + 70{,}0 - 160{,}7 - 205{,}0 = -135{,}9\ J \cdot K^{-1}$ [0,3 punts]

La variació d'entropia de la reacció és negativa, cosa que vol dir que hi ha un guany en l'ordre molecular en el decurs de la reacció. Aquest resultat és congruent amb el fet que l'estat físic dels reactius sigui el de líquid i gas mentre que els dos productes de reacció són líquids. [0,2 punts]

1.2 Càlcul de la variació d'energia de Gibbs

$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0 = -495{,}2\ kJ - (273 + 25)\ K \cdot (-0{,}1359)\ kJ \cdot K^{-1} = (-495{,}2 + 40{,}5)\ kJ = -454{,}7\ kJ$ [0,4 punts]

com $\Delta G^0 = -454{,}7$ kJ ($\Delta G^0 < 0$) la reacció serà espontània, a 25 ºC en les condicions estàndard [0,2 punts]

1.3 Estabilitat de l'etanol en les farmacioles.

El fet que una reacció sigui espontània ($\Delta G < 0$) no vol dir que necessàriament la reacció tingui lloc amb una velocitat observable. De fet, moltes reaccions espontànies amb prou feines es donen atès que, en les condicions habituals, posseeixen unes velocitats de reacció molt petites (elevades energies d'activació). La oxidació de l'etanol és una d'aquestes reaccions.

L'oxidació de l'etanol es posa en evidència si el vi s'exposa a l'acció de l'aire. En el vi poden créixer determinats microorganismes (p.e. *Acetobacter sp.*) que actuen de biocatalitzadors fent que la reacció d'oxidació avanci a una velocitat considerable.

Aquest fet, no es dóna en el cas de l'alcohol de les nostres farmacioles. Els bacteris biocatalitzadors no poden créixer en l'alcohol. Els flascons d'alcohol es guarden ben tapats per evitar que el producte s'evapori i prevenir possibles contaminacions. A més, els microorganismes biocatalitzadors no poden viure en l'alcohol donat que és un poderós antisèptic.

Concepte clau: diferència entre consideracions termodinàmiques (espontaneïtat) i cinètiques (velocitats de reacció apreciables). [0,4 punts]

78. PAU 2007 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 5 (Opció B)

5. respostes a les preguntes (no cal justificació)

5.1 resposta correcta: (c) [0,5 punts]
5.2 resposta correcta: (d) [0,5 punts]
5.3 resposta correcta: (b) [0,5 punts]
5.4 resposta correcta: (c) [0,5 punts]

79. PAU 2006 · Setembre · Sèrie 4 · Exercici 4 (Opció B)

Solució no disponible: la pauta oficial no la inclou o no s'ha pogut localitzar.

80. PAU 2006 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 5 (Opció B)

5. respostes a les preguntes (no cal justificació)

5.1	resposta correcta: (a)	[0,5 punts]
5.2	resposta correcta: (c)	[0,5 punts]
5.3	resposta correcta: (c)	[0,5 punts]
5.4	resposta correcta: (d)	[0,5 punts]

81. PAU 2006 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 4 (Opció A)

OPCIÓ A

4. Combustió del metanol

a) Reacció de combustió del metanol: $CH_3\text{-}OH\ (l) + 3/2\ O_2\ (g) \rightarrow CO_2\ (g) + 2\ H_2O\ (l)$ [0,4 punt]

b) $\Delta H^{\theta}_{\text{combustió, 25 ºC}} = 2\ (-285{,}6) + (-393{,}5) - (-238{,}7) = -\ 726\ \text{kJ mol}^{-1}$ [0,6 punt]

c) per factors de conversió: energia alliberada = 18 150 kJ [0,5 punt]

d) cap esperar que la variació entròpica associada a la reacció sigui negativa, atès que hi ha un guany en l'ordre molecular (disminució del nombre de mols d'espècies gasoses) en el decurs de la reacció. [0,5 punt]

82. PAU 2005 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 4 (Opció B)

OPCIÓ B

4. Reacció hidrazina + peròxid d'hidrogen

a) $\Delta H^{\circ} = 4\ \Delta H_f^{\circ}\ (H_2O) - \Delta H_f^{\circ}\ (N_2H_4) - 2\ \Delta H_f^{\circ}\ (H_2O_2) = -\ 818{,}4\ \text{kJ·mol}^{-1}$ [0,5 punts]

$\Delta S^{\circ} = 4\ S^{\circ}\ (H_2O) + S^{\circ}\ (N_2) - S^{\circ}\ (N_2H_4) - 2\ S^{\circ}\ (H_2O_2) = 130{,}84\ \text{J·K}^{-1}\text{mol}^{-1}$ [0,5 punts]

b) $\Delta G^{\circ} = \Delta H^{\circ} - T\Delta S^{\circ}$; $\Delta G^{\circ} = -\ 857{,}4\ \text{kJ·mol}^{-1} < 0 \rightarrow$ reacció espontània [0,5 punts]

c) Per factors de conversió: energia = $\Delta H^{\circ} \cdot n(N_2H_2) = 27280\ \text{kJ}$ [0,5 punts]

83. PAU 2005 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 5 (Opció B)

6. respostes a preguntes objectives (no cal justificació)

5.5	resposta correcta: (b)	[0,5 punts]
5.6	resposta correcta: (a)	[0,5 punts]
5.7	resposta correcta: (c)	[0,5 punts]
5.8	resposta correcta: (b)	[0,5 punts]

84. PAU 2005 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 3

3. Combustió del butà (massa molecular = 58 g·mol^{-1})

a) $C_4H_{10} + 13/2\ O_2$? $4\ CO_2 + 5\ H_2O$ [0,5 punts]

b) $?H^0 = 4(-393{,}5) + 5(-285{,}5) - 124{,}7 = -\ 2876\ \text{kJ·mol}^{-1}$ [0,5 punts]

c) 12,5 kg = 215,5 mol butà ? $6{,}20 \cdot 10^5$ kJ [0,5 punts]

d) $m\ ?\ \dfrac{6{,}20\,10^5\ \text{kJ}}{?40 - 10?\text{K} \cdot 4{,}18\,\text{kJ·kg}^{?1}\text{K}^{?1}}\ ?\ 4944\ \text{kg}\ H_2O$ [0,5 punts]

85. PAU 2004 · Setembre · Sèrie 5 · Exercici 2

2. Obtenció d'acetilè

a) $\Delta H_r^\circ = \Delta H_f^\circ\ (Ca(OH)_2) + \Delta H_f^\circ\ (C_2H_2) - 2\ \Delta H_f^\circ\ (H_2O\ (l)) - \Delta H_f^\circ\ (CaC_2\ (s))$
$\Delta H_f^\circ\ (C_2H_2) = 226{,}3\ kJ{\cdot}mol^{-1}$ [0,5 punts]

b) $C_2H_2 + 5/2\ O_2 \rightarrow 2\ CO_2 + H_2O$ [0,5 punts]
$\Delta H_r^\circ = \Delta H_f^\circ\ (H_2O) + 2\ \Delta H_f^\circ\ (CO_2) - \Delta H_f^\circ\ (C_2H_2) = -1303{,}3\ kJ{\cdot}mol^{-1}$ [0,5 punts]

c) 6,4 g $CaC_2 \rightarrow$ 0,1 mol $CaC_2 \Rightarrow$ 0,1 mol C_2H_2
combustió de l'acetilè format: 130,3 kJ·mol [0,5 punts]

86. PAU 2004 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 5 (Opció A)

5. Gràfic ΔG^0

a) $\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0$: $\Delta G^0 = 0$ a $T = 400$ K [0,5 punts]
b) Per a $T < 400$ K, la reacció serà espontània ($\Delta G^0 < 0$) [0,5 punts]
c) A $T = 0$, $\Delta G^0 = \Delta H^0 = -40\ kJ{\cdot}mol^{-1} \rightarrow$ La reacció és exotèrmica [0,5 punts]
d) ΔG^0 s'incrementa amb la temperatura, per tant, < 0 [0,5 punts]

87. PAU 2004 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 2

2. Neutralització

a) 25 cm^3 HCl 2 M $\rightarrow$ 0,05 mol HCl $\rightarrow$ 2,7 kJ [0,5 punts]
b) Reacció exotèrmica: la dissolució s'escalfarà. [0,5 punts]
c) $Q = m{\cdot}c_p{\cdot}\Delta T \rightarrow \Delta T = 12{,}4$ K = 12,4 ºC $\rightarrow$ $T_f = 32{,}4$ ºC [1 punt]

88. PAU 2003 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 3

3. Oxidació de l'amoníac

a) $\Delta H_r^\circ = 4\ \Delta H_f^\circ\ (NO) + 6\ \Delta H_f^\circ\ (H_2O) - 4\ \Delta H_f^\circ\ (NH_3) = -905{,}48\ kJ{\cdot}mol^{-1}$ [0,5 punts]
b) $\Delta S_r^\circ = 4\ S^\circ(NO) + 6\ S^\circ(H_2O) - 4\ S^\circ(NH_3) - 5\ S^\circ(O_2) = 180{,}52\ J{\cdot}K^{-1}mol^{-1}$ [0,5 punts]
c) $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$; ΔG° sempre és negatiu, per tant la reacció serà espontània a qualsevol temperatura. [0,5 punts]
d) Cap a l'esquerra, on hi ha una disminució de volum. [0,5 punts]

89. PAU 2003 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 2

2. Reacció: $SO_{2\,(g)} + ½\ O_{2\,(g)} \rightarrow SO_{3\,(g)}$

a) A partir de la reacció s'obté immediatament, $\Delta H = -98\ kJ{\cdot}mol^{-1}$ *(Pot acceptar-se com a resultat el doble, –196 kJ·mol^{-1}, si la reacció està igualada amb 1 mol d'oxigen, tenint en compte que les unitats són kJ per mol d'extensió de la reacció)*. Es tracta d'un procés exotèrmic.

b) $\Delta H = \Delta U + \Delta(PV) \Rightarrow \Delta U = \Delta H - RT{\cdot}\Delta(n) \Rightarrow \Delta U = \Delta H + ½RT = -96{,}76\ kJ{\cdot}mol^{-1}$
(O bé $-193{,}52\ kJ{\cdot}mol^{-1}$)

c) De l'equació dels gasos ideals i les condicions de mesura del gas, 30 $dm^3 \Rightarrow$ 1,23 mol SO_3 $\Rightarrow$ es desprenen 120,54 kJ. *(Evidentment, aquí no seria acceptable el doble, ja que –196 kJ corresponen a 2 mol de SO_3)*.

90. PAU 2002 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 2

2. Etanol: CH_3CH_2OH Etè (o etilè): C_2H_4
   a) (I) $\mathbf{CH_3CH_2OH + 3\ O_2 \rightarrow 2\ CO_2 + 3\ H_2O}$ [0,3 punts]
   (II) $\mathbf{C_2H_4 + 3\ O_2 \rightarrow 2\ CO_2 + 2\ H_2O}$ [0,3 punts]
   b) Restant les equacions: (II) – (I) $\Rightarrow$ $C_2H_4 + H_2O \rightarrow CH_3CH_2OH$
   $\Delta H^o = \Delta H^o_{(II)} - \Delta H^o_{(I)} = -1411 - (-1367) = \mathbf{-44\ kJ \cdot mol^{-1}}$ [0,6 punts]
   c) $\Delta S^o = S^o(\text{etanol}) - S^o(\text{etè}) - S^o(\text{aigua}) = -128{,}71\ J \cdot K^{-1} mol^{-1}$
   $\Delta G^o = \Delta H^o - T\Delta S^o = ... = \mathbf{-4{,}6\ kJ \cdot mol^{-1} \Rightarrow la\ reacció\ és\ espontània}$ [0,8 punts]

91. PAU 2002 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 5 (Opció A)

5.
   a) $\mathbf{KClO_3 \rightarrow KCl + 3/2\ O_2}$ (o bé $2\ KClO_3 \rightarrow 2\ KCl + 3\ O_2$)
   b) $\Delta H^o = \Delta H^o(KCl) - \Delta H^o(KClO_3) = -437 - (-398) = \mathbf{-39\ kJ \cdot mol^{-1}} \Rightarrow$ **reacció exotèrmica** [0,5 punts]
   c) La reacció transforma un sòlid en un altre sòlid més un gas; s'incrementa el "desordre" i, per tant, l'entropia: $\boldsymbol{\Delta S > 0}$ [0,5 punts]
   d) $\Delta G^o = \Delta H^o - T\Delta S^o$ Si $\Delta H^o < 0$ i $\Delta S^o > 0$, $\Rightarrow$ $\boldsymbol{\Delta G^o < 0}$, i la reacció és espontània [0,5 punts]

92. PAU 2001 · Setembre · Sèrie 4 · Exercici 5 (Opció B)

5. Fermentació de la glucosa:
   a) Combustió de la glucosa: $C_6H_{12}O_6 + 6\ O_2 \rightarrow 6\ CO_2 + 6\ H_2O$ $\Delta H_1 = -2813\ kJ \cdot mol^{-1}$
   Combustió de l'etanol: $C_2H_5OH + 3\ O_2 \rightarrow 2\ CO_2 + 3\ H_2O$ $\Delta H_2 = -1371\ kJ \cdot mol^{-1}$
   combinant les reaccions: (1) – 2 x (2) = reacció de l'enunciat
   $\Delta H_{\text{fermentació}} = -2813 - 2 \times (-1371) = -71\ kJ \cdot mol^{-1}$
   b) Exotèrmica, ja que la variació d'entalpia és negativa
   c) Calor despresa = 315,6 kJ

93. PAU 2001 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 5 (Opció A)

Solució no disponible: la pauta oficial no la inclou o no s'ha pogut localitzar.

94. PAU 2000 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 1

Solució no disponible: la pauta oficial no la inclou o no s'ha pogut localitzar.

95. PAU 2000 · Setembre · Sèrie 6 · Exercici 3

3.-

a) Escriure l'equació termoquímica per 1 mol de butà $C_4H_{10(g)} + 13/2\ O_{2(g)} \rightarrow 4\ CO_{2(g)} + 5\ H_2O_{(l)}$ i indicar a continuació que la variació d'entalpia és –2660 kJ mol^{-1}

b) Calcular amb PV=nRT el nombre de mols que conté 1 m^3 de butà i multiplicar-ho per 2660 kJ per mol.

c) Aplicar la relació: variació d'entalpia = variació d'energia interna més el producte de la variació del nombre de mols gasosos per R i per la temperatura. La variació del nombre de mols gasosos és –3,5 mol. El càlcul de la variació de l'energia interna es refereix a la combustió d'un mol de butà.

96. PAU 2000 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 1

1.- a) Planteig de l'equació de combustió. Calculem els mols de propà a partir dels grams de propà i amb l'estequiometria de la reacció s'obtenen els mols de CO_2. El càlcul del volum és inmediat.

b) A partir dels mols de propà, s'obté el valor de la quantitat de calor despresa. Amb la relació de la capacitat calorífica, la temperatura i la calor subministrada, es calcula la massa que es pot escalfar.

97. PAU 2000 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 5 (Opció B)

Solució no disponible: la pauta oficial no la inclou o no s'ha pogut localitzar.

98. PAU 2000 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 1

1.- a) Calculem la entalpia estàndar de reacció: $\Sigma\ \Delta H^o$ productes - $\Sigma\ \Delta H^o$ reactius.

b) apliquem $\Delta G^o = \Delta H^o - T\ \Delta S^o$. La primera reacció té un valor menor de ΔG^o, per tant serà la termodinàmicament més favorable.

c) Molt tòxic

Productes que inhalats, ingerits o en contacte amb la pell provoquen lesions i fins i tot la mort

Cal evitar el contacte amb ells.

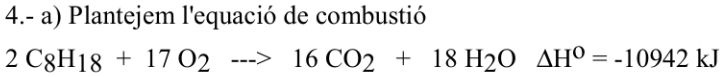
Extremadament inflamable.

Productes autoinflamables o molt fàcilment inflamables o que en contacte amb l'aigua generen gasos inflamables. Cal mantenir-los lluny de fonts de calor, espurnes i flames.

99. PAU 2000 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 4 (Opció A)

OPCIÓ A

4.- a) Plantejem l'equació de combustió



$$2\ C_8H_{18} + 17\ O_2 \longrightarrow 16\ CO_2 + 18\ H_2O \quad \Delta H^o = -10942\ kJ$$

b) El volum es passa a grams (densitat) i a mols (massa molecular) i amb el valor de ΔH^o per la reacció es calcula la calor.