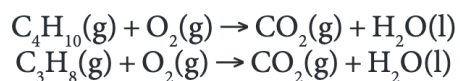


3. El butà i el propà són dos combustibles gasosos utilitzats en la indústria i la llar. Les reaccions no ajustades de combustió d'aquests gasos són les següents:



- a) Ajusteu les reaccions.

Calculeu l'entalpia de combustió estàndard del butà i del propà a pressió constant.

[1,25 punts]

- b) Un dels gasos causants de l'efecte d'hivernacle és el CO_2 . Justifiqueu quin dels dos combustibles genera més mols de CO_2 per quantitat de calor alliberada a pressió constant.

[1,25 punts]

DADES: Entalpies estàndard de formació a 25 °C:

$$\Delta H_f^\circ (\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = -285,8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}; \quad \Delta H_f^\circ (\text{CO}_2, \text{g}) = -393,5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}.$$

$$\Delta H_f^\circ (\text{C}_4\text{H}_{10}, \text{g}) = -126,2 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}; \quad \Delta H_f^\circ (\text{C}_3\text{H}_8, \text{g}) = -103,8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}.$$

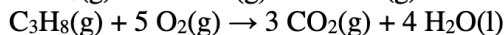
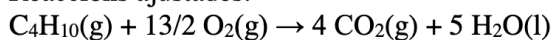
Masses atòmiques relatives: H = 1,0; C = 12,0; O = 16,0.

Temperatura de l'experiment: 25 °C.

Solució:

PREGUNTA 3a

Reaccions ajustades:



[0,25 p]

Determinar l'entalpia de combustió estàndard

Entalpia de la reacció de combustió:

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

Butà:

$$\Delta H_{\text{reacció}}^{\circ} = [4 \times \Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{CO}_2) + 5 \times \Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{H}_2\text{O})] - [(1 \times \Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{C}_4\text{H}_{10}))]$$

$$\Delta H_{\text{reacció}}^{\circ} = [4 \times -393,5 + 5 \times -285,8] - [(1 \times -126,2)] = -2876,8 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} \text{ C}_4\text{H}_{10}$$

[0,5 p]

Propà:

$$\Delta H_{\text{reacció}}^{\circ} = [3 \times \Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{CO}_2) + 4 \times \Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{H}_2\text{O})] - [(1 \times \Delta H_{\text{f}}^{\circ}(\text{C}_3\text{H}_8))]$$

$$\Delta H_{\text{reacció}}^{\circ} = [3 \times -393,5 + 4 \times -285,8] - [(1 \times -103,8)] = -2219,9 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} \text{ C}_3\text{H}_8$$

[0,5 p]

PREGUNTA 3b

Efecte hivernacle

Quin combustible genera més mols de CO₂ per quantitat de calor alliberada:

Butà:

Calor a pressió constant per mol de CO₂ = -2876,8 kJ / 4 mols de CO₂ = -719,2 kJ·mol⁻¹ de CO₂

L'invers del valor anterior representa el nombre de mols de CO₂ per quantitat de calor alliberada:

$$(719,2 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} \text{ de CO}_2)^{-1} = 1,39 \times 10^{-3} \text{ mol de CO}_2 \cdot \text{kJ}^{-1}$$

Propà:

Calor a pressió constant per mol de CO₂ = -2219,9 kJ / 3 mols de CO₂ = -740,0 kJ·mol⁻¹ de CO₂

El nombre de mols de CO₂ per quantitat de calor alliberada:

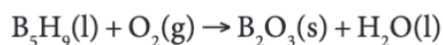
$$(740,0 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1} \text{ de CO}_2)^{-1} = 1,35 \times 10^{-3} \text{ mol de CO}_2 \cdot \text{kJ}^{-1}$$

[0,5 p]

El butà allibera més mols de CO₂ per quantitat de calor alliberada, per tant, el butà contribueix més a l'augment de l'efecte hivernacle.

[0,75 p]

5. Els hidrurs de bor s'han utilitzat com a combustibles de coets en la indústria aeroespacial. Un d'aquests hidrurs, el B_5H_9 , s'inflama espontàniament en l'aire i dona òxid de bor(III) i aigua, d'acord amb la reacció no ajustada següent:



- a) Ajusteu la reacció.

Calculeu la quantitat de calor alliberada quan es crema 1 g de l'hidrur a la pressió constant d'1 atm.

[1,25 punts]

- b) La gasolina amb un índex d'octà («octanatge») alt està composta majorment per octà líquid. Escriviu la reacció ajustada de combustió de l'octà en la qual s'obté diòxid de carboni gasós i aigua líquida.

Calculeu l'energia obtinguda en la combustió d'1 g d'aquest hidrocarbur a volum constant.

[1,25 punts]

DADES: Entalpies estàndard de formació (25 °C):

$$\Delta H_f^\circ (B_5H_9, l) = +73,2 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}.$$

$$\Delta H_f^\circ (B_2O_3, s) = -1 273,5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}.$$

$$\Delta H_f^\circ (H_2O, l) = -285,8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}.$$

Masses atòmiques relatives: H = 1,0; B = 10,8; C = 12,0; O = 16,0.

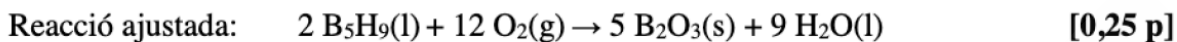
Entalpia estàndard de combustió de l'octà: $-5 512 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$.

$R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$.

Temperatura: 25 °C.

Solució:

PREGUNTA 5a



$$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = \sum np \cdot \Delta H^\circ_{\text{productes}} - \sum np \cdot \Delta H^\circ_{\text{reactius}}$$

$$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = 5 \text{ mol} (-1273,5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}) + 9 \text{ mol} (-285,8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}) - 2 \text{ mol} (+73,2 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}) =$$

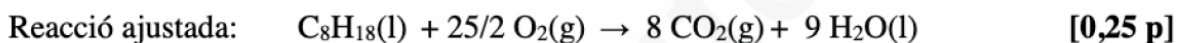
$$\Delta H^\circ_{\text{reacció}} = -9086,1 \text{ kJ (per 2 mols de B}_5\text{H}_9) = -4543,05 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \text{ B}_5\text{H}_9$$
 [0,5 p]

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

Calor alliberada a pressió constant Q_P :

$$Q_P = 1 \text{ g B}_5\text{H}_9 \times (1 \text{ mol B}_5\text{H}_9 / 63 \text{ g B}_5\text{H}_9) \times (-9086,1 \text{ kJ} / 2 \text{ mols de B}_5\text{H}_9) = -72,11 \text{ kJ}$$
 [0,5 p]

PREGUNTA 5b



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]

$$Q_V = \Delta H - \Delta nRT = -5512 \text{ kJ} - (8 - 25/2) \cdot 8,31 \times 10^{-3} \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \text{K}^{-1} \cdot 298 \text{ K} =$$

$$Q_V = -5500,9 \text{ kJ per 1 mol d'octà}$$

L'energia obtinguda en la combustió de 1 g és:

$$1 \text{ g octà} \times (1 \text{ mol octà} / 114 \text{ g octà}) \times (-5500,9 \text{ kJ} / 1 \text{ mol octà}) = -48,25 \text{ kJ}$$
 [0,6 p]

6. El metantiol ($\text{CH}_3\text{-SH}$) és un gas incolor amb una olor similar a la col fermentada i és una de les principals substàncies responsables del mal alè. Es produeix d'una manera natural amb la descomposició bacteriana de les proteïnes i, per tant, s'estudia com a indicador de la degradació d'aliments.

Se sintetitza per reacció entre el metanol i el sulfur d'hidrogen a $400\text{ }^\circ\text{C}$, utilitzant l'alúmina i el wolfram de potassi com a catalitzadors:

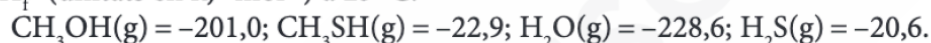


- a) Determineu si la reacció serà espontània o no a aquesta temperatura.
[1,25 punts]
- b) Representeu gràficament el diagrama d'energies de la reacció amb catalitzador, i indiqueu l'energia d'activació i l'entalpia de la reacció.
Expliqueu com el catalitzador modifica la velocitat de la reacció.
Indiqueu també si el catalitzador modifica l'entalpia de la reacció. Justifiqueu les respostes.

[1,25 punts]

DADES: Masses atòmiques relatives: $\text{H} = 1,0$; $\text{C} = 12,0$; $\text{O} = 16,0$; $\text{S} = 32,0$.

ΔH_f° (unitats en $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$) a $25\text{ }^\circ\text{C}$:



S° (unitats en $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) a $25\text{ }^\circ\text{C}$:



NOTA: Supposeu que els valors de variació d'entalpia i d'entropia no canvien amb la temperatura.

Solució:

PREGUNTA 6a

La reacció igualada és: $\text{CH}_3\text{OH}(\text{g}) + \text{H}_2\text{S}(\text{g}) \rightarrow \text{CH}_3\text{SH}(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g})$

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

Calculem $\Delta H^\circ = \sum n_p \Delta H^\circ_{\text{productes}} - \sum n_r \Delta H^\circ_{\text{reactius}} = [(-228,6) + (-22,9)] - [(-20,6) + (-201,0)] = -29,9 \text{ KJ}$ [0,3 p]

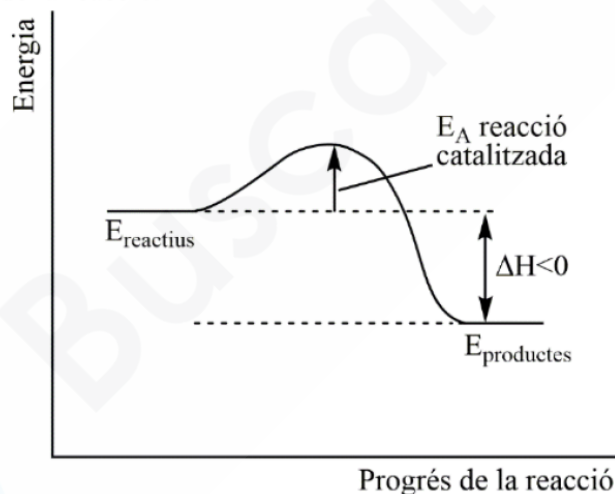
Calculem $\Delta S^\circ = \sum n_p S^\circ_{\text{productes}} - \sum n_r S^\circ_{\text{reactius}} = (188,8 + 255,2) - (239,9 + 205,8) = -1,7 \text{ J K}^{-1} = -1,7 \cdot 10^{-3} \text{ kJ K}^{-1}$ [0,3 p]

Calculem $\Delta G^\circ = -29,9 - 673 (-1,7 \cdot 10^{-3}) = -28,8 \text{ kJ} < 0$

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 aconseguen aquesta energia i augmentarà la velocitat de la reacció. [0,45 p]

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