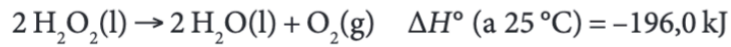


1. El poder oxidant de l'aigua oxigenada (H_2O_2) és degut a la facilitat d'aquest compost per a descompondre's en aigua i oxigen, segons la reacció següent:



- a) Calculeu la variació d'entropia estàndard de la reacció de descomposició de l'aigua oxigenada a 25°C . Justifiqueu si la reacció és espontània en condicions estàndard i a 25°C .

[1 punt]

- b) L'aigua oxigenada s'utilitza per a netejar ferides i desinfectar-les, ja que la sang conté catalasa, un enzim que fa de catalitzador de la descomposició de l'aigua oxigenada i l'alliberament d'oxigen. Què és un catalitzador? A partir d'un model cinètic, expliqueu com actua la catalasa en aquesta reacció química.

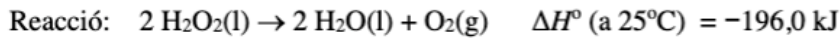
[1 punt]

DADES: Entropia absoluta en condicions estàndard i a 25°C :

Substància	$\text{O}_2(\text{g})$	$\text{H}_2\text{O}_2(\text{l})$	$\text{H}_2\text{O}(\text{l})$
$S^\circ (\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1})$	205,0	109,6	70,0

Solució:

Pregunta 1a



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

$$\Delta S^\circ = \sum n_p S^\circ (\text{productes}) - \sum n_r S^\circ (\text{reactius}) \quad [0,1 \text{ p}]$$

$$\Delta S^\circ = [(2 \times S^\circ_{\text{aigua}}) + (1 \times S^\circ_{\text{oxigen}})] - [(2 \times S^\circ_{\text{aigua oxigenada}})]$$

$$\Delta S^\circ = [(2 \times 70,0) + (1 \times 205,0)] - [(2 \times 109,6)]$$

$$\Delta S^\circ = 125,8 \text{ J / K} \quad [0,2 \text{ p}]$$

Esponantaneïtat: càlcul de l'energia lliure de la reacció

L'esponantaneïtat depèn de l'energia lliure de la reacció, ΔG° .

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: $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$ [0,1 p]

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

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

$$\Delta S^\circ(\text{reacció}) = 125,8 \text{ J/K} = 0,1258 \text{ kJ / K} \quad [0,3 \text{ p}]$$

Calculem la variació d'energia lliure de la reacció:

$$\Delta G^\circ(\text{reacció}) = (-196) - [298 \times (0,1258)]$$

$$\Rightarrow \Delta G^\circ(\text{reacció}) = -233,5 \text{ kJ} < 0$$

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

\Rightarrow La reacció és espontània en condicions estàndard i 25 °C [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 $\Delta H^\circ < 0$ i $\Delta S^\circ > 0$, 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

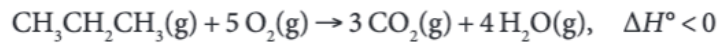
Justificació 1 (model cinètic de l'estat de transició o complex activat)

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.

6. El propà és un gas àmpliament utilitzat com a combustible. Quan reacciona amb oxigen produeix diòxid de carboni i aigua, segons la reacció exotèrmica següent:



- a) Calculeu l'entalpia estàndard d'aquesta reacció, a 298 K, a partir dels valors de la taula següent:

[1 punt]

Enllaç	C—C	C—H	O—H	O=O	C=O
Entalpia d'enllaç, en condicions estàndard i a 298 K (kJ mol^{-1})	348	413	463	498	804

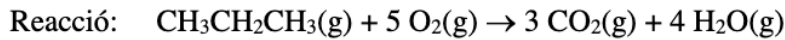
- b) Experimentalment, hem obtingut un valor de l'entalpia estàndard de combustió del propà de $-2\,045 \text{ kJ mol}^{-1}$. Quina quantitat de calor es despendrà, a pressió constant, si fem reaccionar 88 g de propà amb 500 g d'oxigen?

[1 punt]

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

Solució:

Pregunta 6a



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):

$$\Delta H^\circ = \sum n_r E_{\text{trencats}} - \sum n_p E_{\text{formats}} \quad [0,2 \text{ p}]$$

En els reactius cal trencar:

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

En els productes cal formar:

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

[0,5 p]

Càlcul de l'entalpia a partir dels valors d'energies d'enllaç:

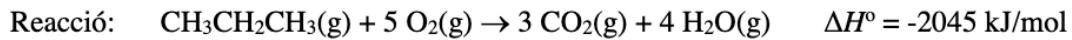
$$\Delta H^\circ = [(2 E_{\text{C-C}} + 8 E_{\text{C-H}} + 5 E_{\text{O=O}})] - [(6 E_{\text{C=O}}) + (8 E_{\text{O-H}})]$$

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

$$\Delta H^\circ = -2038 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \quad (\text{ó } -2038 \text{ kJ}) \quad [0,3 \text{ p}]$$

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

Pregunta 6b



Raonem quin reactiu és el limitant

Calculem els mols que tenim de cada reactiu:

Massa molecular del propà = $(3 \times 12) + (8 \times 1) = 44 \text{ g/mol}$

Massa molecular de l'O₂ = $(2 \times 16) = 32 \text{ g/mol}$

Mols de propà = $(88 \text{ g}) / (44 \text{ g/mol}) = \mathbf{2,0 \text{ mols}}$

Mols de O₂ = $(500 \text{ g}) / (32 \text{ g/mol}) = \mathbf{15,625 \text{ mols}}$

[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 ($2,0 \times 5 = 10 \text{ mols}$). 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]

⇒ Reacció química $q_p = -2045 \text{ kJ}$ per cada 1 mols de propà.

2,0 mols de propà $\times (-2045 \text{ kJ} / 1 \text{ mol de propà}) = -4090 \text{ kJ}$
(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.*