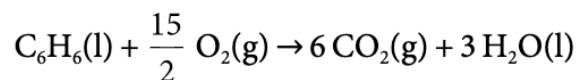


3. El benzè (C_6H_6) és un hidrocarbur perillós, ja que emet vapors tòxics que poden produir càncer. Es poden produir traces de benzè en la combustió incompleta de materials rics en carboni, com ara en les erupcions volcàniques i en els incendis forestals, i és un component del fum de les cigarretes. La reacció de combustió del benzè és la següent:



- a) Calculeu la calor a pressió constant que s'alliberarà en la combustió de 20 kg de benzè líquid en condicions estàndard.

[1,25 punts]

- b) El benzè és un hidrocarbur que es pot vaporitzar en condicions estàndard a 25 °C. Expliqueu què és l'entalpia de vaporització d'una substància i calculeu l'entalpia molar de vaporització del benzè líquid en condicions estàndard i a 25 °C. Quina serà l'energia en forma de calor, a pressió constant, necessària per a vaporitzar 1 kg de benzè?

[1,25 punts]

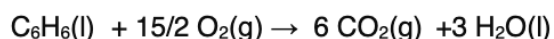
DADES: Masses atòmiques relatives: H = 1,0; C = 12,0.

Entalpies estàndard de formació a 298 K:

Substància	$H_2O(l)$	$CO_2(g)$	$C_6H_6(l)$	$C_6H_6(g)$
$\Delta H_f^\circ (kJ mol^{-1})$	-286	-394	49	83

Solució:

Pregunta 3.a)



Càlcul de la calor de combustió a pressió constant

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

[0,25 p]

- Calculem l'entalpia estàndard de la reacció:

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

[0,10 p]

$$(\sum n_p \Delta H^\circ_{f, \text{productes}}) = [(6 \times \Delta H^\circ_{f, \text{CO}_2}) + (3 \times \Delta H^\circ_{f, \text{H}_2\text{O}})]$$

[0,10 p]

$$(\sum n_r \Delta H^\circ_{f, \text{reactius}}) = [(1 \times \Delta H^\circ_{f, \text{C}_6\text{H}_6})]$$

[0,10 p]

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

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

[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.

- o Mols de benzè:

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

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

- o Calor de combustió:

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

[0,30 p]

Pregunta 3.b)

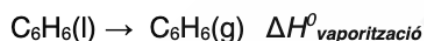
Definició d'entalpia de vaporització

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 °C



- Aplicant la llei de Hess:

$$\Delta H^{\circ}_{\text{vaporització}} = \Delta H^{\circ}_f(\text{C}_6\text{H}_6(\text{g})) - \Delta H^{\circ}_f(\text{C}_6\text{H}_6(\text{l})) = 83 \text{ kJ mol}^{-1} - 49 \text{ kJ mol}^{-1} = \mathbf{34 \text{ kJ mol}^{-1}}$$

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

[0,50 p]

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

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

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

$$\Rightarrow \mathbf{\text{Energia} = 435,90 \text{ kJ}}$$

[0,25 p]

3. En la fermentació de la cervesa, la glucosa sòlida $\text{—C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6(\text{s})\text{—}$ del malt es transforma en etanol líquid i diòxid de carboni gasós mitjançant un procés anaeròbic (en absència d'oxigen).

a) Escriviu i ajusteu l'equació de la reacció que es produeix en la fermentació de la cervesa. Justifiqueu que aquesta reacció és exotèrmica, en condicions estàndard i a 298 K, i calculeu la calor que es desprèn quan s'obté 1 kg d'etanol si efectuem la reacció a pressió constant.

[1,25 punts]

b) Digueu si la calor alliberada seria superior, inferior o igual en el cas que efectuésim la reacció a volum constant, i justifiqueu-ho, qualitativament o quantitativament.

[1,25 punts]

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

Constant universal dels gasos ideals: $R = 8,31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$.

Entalpies estàndard de formació a 298 K:

Substància	etanol(l)	$\text{CO}_2(\text{g})$	$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6(\text{s})$
$\Delta H_f^\circ (\text{kJ mol}^{-1})$	-277,7	-393,5	-1 273,0

Solució:

Pregunta 3a

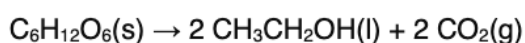
Formulació.

Etanol $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$

[– 0,5 punts si no el formulen bé]

És correcte si el formulen com $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ o $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$.

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



[0,25 punts]

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

Calculem l'entalpia estàndard de la reacció

$$\Delta H^{\text{p}}_{\text{reacció}} = (\sum n_{\text{p}} \Delta H^{\text{p}}_{\text{f, productes}}) - \sum n_{\text{r}} \Delta H^{\text{p}}_{\text{f, reactius}}$$

[0,10 punts]

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

$$\Delta H^{\text{p}}_{\text{reacció}} = [(2 \times \Delta H^{\text{p}}_{\text{f, diòxid de carboni}}) + (2 \times \Delta H^{\text{p}}_{\text{f, etanol}})] - [(1 \times \Delta H^{\text{p}}_{\text{f, glucosa}})]$$

$$\Delta H^{\text{p}}_{\text{reacció}} = [(2 \times (-393,5)) + (2 \times (-277,7))] - [(1 \times (-1273,0))]$$

$$\Delta H^{\text{p}}_{\text{reacció}} = -69,4 \text{ kJ} \quad (\text{o } -69,4 \text{ kJ/mol})$$

[0,30 punts]

Si $\Delta H^{\text{p}}_{\text{reacció}} < 0 \Rightarrow$ 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 $\Rightarrow q_p = \Delta H^{\circ}_{\text{reacció}}$

[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 = $(2 \times 12,0) + (1 \times 16,0) + (6 \times 1,0) = 46,0 \text{ g / mol}$

Variació d'entalpia de la reacció (tal com està igualada) = $-69,4 \text{ kJ}$

$1000 \text{ g CH}_3\text{CH}_2\text{OH} \times (1 \text{ mol CH}_3\text{CH}_2\text{OH} / 46,0 \text{ g CH}_3\text{CH}_2\text{OH}) \times$
 $\times (-69,4 \text{ kJ} / 2 \text{ mol CH}_3\text{CH}_2\text{OH}) = \mathbf{-754,3 \text{ kJ}}$

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:

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

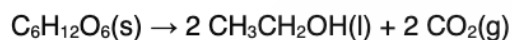
[0,30 punts]

Δv = diferència dels coeficients estequiomètrics (productes i reactius gasosos)

$$\Rightarrow \Delta E = \Delta H - \Delta v R T$$

$$\Rightarrow q_v = q_p - \Delta v R T$$

Reacció:



$$\Delta v = (0+2) - (0) = + 2 \text{ (positiu !)}$$

[0,20 punts]

Raonament 1 (qualitatiu)

En l'equació:

$$q_v = q_p - \Delta v R T:$$

$$\Rightarrow q_p < 0$$

$$\Rightarrow -\Delta v R T < 0 \text{ (R i T sempre són positius i } \Delta v \text{ és } > 0)$$

$$\Rightarrow q_v \text{ serà un valor més negatiu que } q_p$$

$$\Rightarrow |q_v| > |q_p|$$

La calor és negativa (s'allibera calor)

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

[0,50 punts]