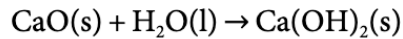


1. En el mercat hi ha diversos envasos per a aliments i begudes que són autoescalfables. Aquests envasos consten de dos compartiments: un que conté l'aliment o la beguda i l'altre on es produeix una reacció química exotèrmica. En les begudes autoescalfables comercials, la reacció que produeix la calor necessària per a escalfar-les és la següent:



- a) Calculeu la variació d'entalpia estàndard d'aquesta reacció a 25 °C. Justifiqueu, mitjançant els càlculs necessaris, si la reacció serà espontània a 25 °C.

[1,25 punts]

- b) Si dins de l'envàs hi ha 50,0 mL d'aigua i 14,0 g d'òxid de calci, calculeu quants mL d'una beguda de densitat 0,9 g mL⁻¹, que inicialment es troba a pressió constant i 20 °C, podem escalfar fins a 42 °C.

[1,25 punts]

DADES: Capacitat calorífica de la beguda (entre 10 °C i 45 °C); $C_e = 4,18 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ °C}^{-1}$.

Masses atòmiques relatives: Ca = 40,0; O = 16,0; H = 1,0.

Densitat de l'aigua = 1,0 g mL⁻¹.

Densitat de la beguda = 0,9 g mL⁻¹.

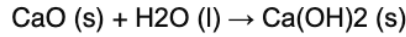
Entalpies estàndard de formació i entropies molars estàndard absolutes a 298 K:

Substància	CaO(s)	H ₂ O(l)	Ca(OH) ₂ (s)
$\Delta H_f^\circ \text{ (kJ mol}^{-1}\text{)}$	-635	-286	-987
$S^\circ \text{ (JK}^{-1} \text{ mol}^{-1}\text{)}$	39,8	69,8	83,4

Solució:

Pregunta 1a

Càlcul de l'entalpia 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 punts]

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

$$(\sum n_r \Delta H^\circ_{f \text{ reactius}}) = [(1 \times \Delta H^\circ_{f, \text{CaO}}) + (1 \times \Delta H^\circ_{f, \text{H}_2\text{O}})]$$

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

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

[0,30 punts]

Càlcul de l'entropia de la reacció

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

[0,10 punts]

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

$$(\sum n_r S^\circ_{\text{reactius}}) = [(1 \times S^\circ_{\text{CaO}}) + (1 \times S^\circ_{\text{H}_2\text{O}})]$$

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

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

[0,30 punts]

Càlcul de l'espontaneïtat de la reacció

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

[0,10 punts]

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

[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)

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

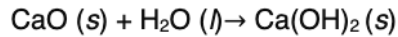
$$\Rightarrow \Delta G^\circ_{\text{reacció}} = -58,194 \text{ kJ mol}^{-1}$$

[0,10 punts]

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

[0,15 punts]

Pregunta 1b



Primer es calcula el reactiu limitant

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

$$\text{Massa molar H}_2\text{O: } 2 \times 1 + 16 = 18 \text{ g mol}^{-1}$$

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

$$50 \text{ mL H}_2\text{O} \cdot \frac{1 \text{ g H}_2\text{O}}{1 \text{ mL H}_2\text{O}} \Rightarrow 50 \text{ g H}_2\text{O} \cdot \frac{1 \text{ mol H}_2\text{O}}{18 \text{ g H}_2\text{O}} = 2,78 \text{ mol H}_2\text{O}$$

[0,10 punts]

$$\text{CaO} = 0,25 \text{ mol}$$

$$\text{H}_2\text{O} = 2,78 \text{ mol}$$

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

$$\text{mols CaO} < \text{mols H}_2\text{O}$$

⇒ El reactiu limitant és el CaO.

[0,25 punts]

Càlcul de la calor despresa a pressió constant

$$\text{A pressió constant } \Rightarrow q_p = \Delta H^{\circ}_{\text{reacció}} \text{ i mol}^{-1}$$

[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)

$$\Rightarrow \text{Calor despresa} = 16,5 \text{ kJ} \quad (\text{o } -16,5 \text{ kJ})$$

[0,25 punts]

Càlcul del volum de beguda que es pot escalfar

$$Q = m C_e \Delta T$$

[0,10 punts]

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

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

[0,25 punts]

Amb la densitat calculem el volum:

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

$$\Rightarrow \text{volum} = 199,3 \text{ mL}$$

[0,10 punts]