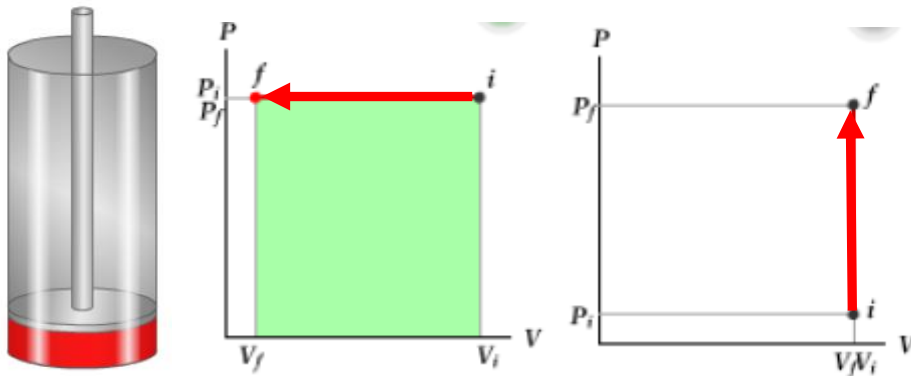


Unitat 12. Termodinàmica química

1. Conceptes bàsics

1. Què són les **variables d'estat** termodinàmiques? Posa'n alguns exemples.
2. Algunes variables d'estat termodinàmiques s'anomenen **funcions d'estat**. Quina és la principal característica de les funcions d'estat? Cita alguns exemples de funcions d'estat.
3. Quina diferència hi ha entre un **sistema** tancat i un sistema aïllat? Posa un exemple de cadascun.
4. Quins són els valors de pressió i temperatura **estàndard**? I els seus valors en **condicions normals**?
5. Un gas tancat en un cilindre es sotmès a diferents processos durant els quals s'enregistren les variacions dels valors de pressió i volum.



- a) Quin dels dos gràfics anteriors representa un procés isocòric? I quin correspon a un procés isobàric? Raona les teves respostes.
- b) Entra en l'aplicació següent i observa l'evolució del sistema en les quatre transformacions termodinàmiques estudiades. Anota les teves observacions.
<http://www.educaplus.org/game/transformaciones-termodinamicas>

2. Primer principi de la termodinàmica

1. El cafè és probablement la més universal de les preparacions aquoses que es consumeixen. Tenim 100 g de cafè a 15 °C i el posem al microones durant 1 minut per escalfar-lo. Quan acabem, en mesurem la temperatura i és de 75 °C. Si la calor específica del cafè és pràcticament la de l'aigua, quina és l'energia calorífica (variació d'energia interna) subministrada a aquesta preparació?

Dada: $C(\text{aigua líquida}) = 4,18 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
 $Q = \Delta U = 25,1 \text{ kJ}$

2. En una planta siderúrgica necessiten fondre una tona de ferro. Si la temperatura inicial del ferro és de 20 °C, s'ha d'escalfar fins a la seva temperatura de fusió (1530 °C) i fondre'l completament.

Dades: $C_e(\text{ferro}) = 0,45 \text{ kJ kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$; $L_f(\text{ferro}) = 293 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$

a) Dibuixeu el gràfic d'escalfament del procés



- a) Quina quantitat de calor (kJ) cal subministrar per escalfar la tona de ferro fins a la temperatura de fusió?
 b) I per fondre completament aquesta massa de ferro?
 c) Quina serà la quantitat de calor total subministrada en aquest procés?
 a) 679500 kJ; b) 293000 kJ; c) 972500 kJ

PAU 2007 sèrie 3

5. Responen a les qüestions següents:

5.1. Escalfem el gas d'un cilindre metàl·lic vertical dotat d'un pistó de 3 kN de pes i el pistó es desplaça 20 cm. Considerant que la calor absorbida pel gas ha estat de 40 J, calculeu la variació d'energia interna del gas.

[0,5 punts]

5.2. Quin significat físic té l'energia interna d'un sistema?

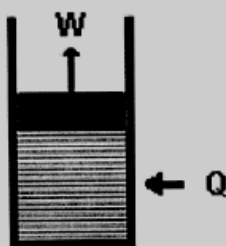
[0,5 punts]

5.3. Què vol dir que l'energia interna és una funció d'estat?

[0,5 punts]

5.4. Es pot determinar l'energia interna d'un sistema? Raoneu la resposta.

[0,5 punts]



$$\Delta U = q + w = 40 - 600 = -560 \text{ J}$$

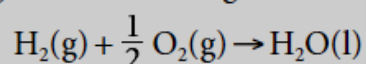
3. Entalpia

Càlcul de la variació d'entalpia de reacció (ΔH)

Mètode 1. A partir de la definició d'entalpia

PAU 2012 sèrie 4

L'hidrogen és un gas lleuger que s'usa com a combustible per a naus espacials i també, experimentalment, per a autobusos de transport urbà. Reacciona fàcilment amb l'oxigen i produeix aigua, segons la reacció següent:



Introduïm en un reactor 100 L d'hidrogen i 60 L d'oxigen, tots dos gasos mesurats a 298 K i a 1,0 bar, i a partir d'una guspira elèctrica comença el procés de combustió per a obtenir aigua líquida.

a) Calculeu la calor alliberada si la reacció es produeix a pressió constant i a 298 K.

[1 punt]

b) S'alliberaria més quantitat de calor si la reacció es produís a volum constant i a 298 K? Justifiqueu la resposta.

[1 punt]

DADES: Entalpia estàndard de formació de l'aigua(l), a 298 K: $\Delta H_f^\circ = -285,8 \text{ kJ mol}^{-1}$

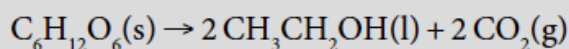
Constant dels gasos ideals: $R = 8,31 \times 10^{-2} \text{ bar L K}^{-1} \text{ mol}^{-1} = 8,31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

$$Q = 1154,1 \text{ kJ}; \Delta H = \Delta U + \Delta nRT; \Delta U > \Delta H$$

Mètode 2. Entalpies estàndard de formació (ΔH_f^0)

PAU 2015 sèrie 2

La glucosa ($C_6H_{12}O_6$) és un monosacàrid que és molt present en la nostra vida, ja que les cèl·lules l'utilitzen com a font d'energia i com a intermediari metabòlic. Una de les reaccions que es poden produir en el nostre organisme és la següent:



- a) A partir de les dades termodinàmiques de la taula, calculeu quina quantitat d'energia en forma de calor proporciona a l'organisme la reacció d'un mol de glucosa per a formar etanol, si es produeix a pressió constant.

[1 punt]

Compost	$CO_2(g)$	$C_6H_{12}O_6(s)$	$CH_3CH_2OH(l)$
Entalpia estàndard de formació, a 298 K ($kJ\ mol^{-1}$)	-393,5	-1 274,5	-277,0

- b) Justifiqueu si la quantitat d'energia en forma de calor que proporciona a l'organisme la reacció d'un mol de glucosa per a formar etanol, a volum constant, seria igual, superior o inferior a la que proporcionaria la reacció si s'efectués a pressió constant.

[1 punt]

DADA: Supposeu que les reaccions es duen a terme en condicions estàndard i a 298 K.

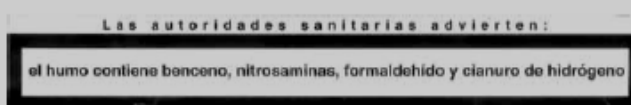
a) ΔH^0 reacció = -66,5 kJ ;

b) $Q_p = Q_v + \Delta nRT$ ($Q_p > Q_v$ però com els valors de Q_p i Q_v són negatius (s'allibera calor) $\rightarrow |Q_p| < |Q_v|$ o sigui que s'allibera més calor a volum constant que a pressió constant)

Mètode 2. Entalpies estàndard de formació (ΔH_f^0)

PAU 2009 sèrie 1

1. Tal com es fa constar en les advertències de les autoritats sanitàries espanyoles, el benzè (C_6H_6) és un agent cancerigen que és present en el fum del tabac.



- 1.1. Calculeu la calor a pressió constant que s'alliberarà en la combustió d'1 mol de benzè líquid en condicions estàndard a 25 °C.

[0,8 punts]

- 1.2. Definiu *entalpia de vaporització* d'una substància i calculeu l'entalpia de vaporització del benzè líquid en condicions estàndard a 25 °C i expresseu el resultat en $kJ \cdot kg^{-1}$.

[1,2 punts]

DADES:

Temperatura = 25 °C	$H_2O(l)$	$CO_2(g)$	$C_6H_6(l)$	$C_6H_6(g)$
$\Delta H_f^0 / kJ \cdot mol^{-1}$	-285,8	-393,5	49,0	82,9

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

- 3267,4 $kJ \cdot mol^{-1}$; 33,9 $kJ \cdot mol^{-1}$ 434 $kJ \cdot kg^{-1}$

Mètode 3. Entalpies d'enllaç ($\Delta H_{\text{enllaç}}$)

En els vols espacials, la massa de combustible és molt més important que el volum que ocupa perquè com més gran és la massa més costa escapar-se del camp gravitatori terrestre. La hidrazina (N_2H_4) ha estat utilitzada com a combustible per als coets perquè la seva reacció amb l'aigua oxigenada és molt exotèrmica:



- a) Calculeu la quantitat d'energia produïda en forma de calor, a pressió constant, en la reacció d'un kilogram d'hidrazina amb un kilogram d'aigua oxigenada, en condicions estàndard i a 298 K.

[1 punt]

- b) Calculeu l'energia d'enllaç $\text{N} \equiv \text{N}$, en condicions estàndard i a 298 K.

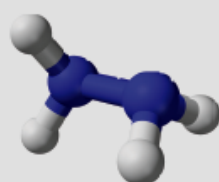
[1 punt]

DADES: Masses atòmiques relatives: $\text{H} = 1,0$; $\text{N} = 14,0$; $\text{O} = 16,0$

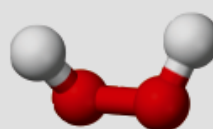
Valors de l'energia d'enllaç, en condicions estàndard i a 298 K (kJ mol^{-1}):

$E(\text{O}-\text{O}) = 146$; $E(\text{N}-\text{N}) = 158$; $E(\text{N}-\text{H}) = 391$; $E(\text{O}-\text{H}) = 464$

Representació de les fórmules estructurals de la hidrazina i de l'aigua oxigenada



hidrazina
($\text{H}_2\text{N}-\text{NH}_2$)



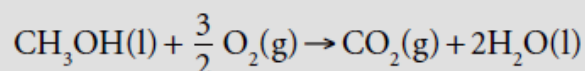
aigua oxigenada
($\text{H}-\text{O}-\text{O}-\text{H}$)

a) El reactiu limitant és l'aigua oxigenada (H_2O_2); Calor produïda = 3602,7 kJ

b) $E(\text{N} \equiv \text{N}) = 403 \text{ kJ}$

Mètode 3. Entalpies d'enllaç ($\Delta H_{\text{enllaç}}$)

L'alcohol metílic o metanol, CH_3OH , es fa servir com a combustible en les *fondues* de formatge, xocolata o carn. L'equació de la reacció de combustió del metanol és la següent:



- a) A partir de les dades d'aquesta taula, calculeu l'entalpia estàndard de combustió del metanol a 298 K.

[1 punt]

Enllaç	Entalpia d'enllaç en condicions estàndard i a 298 K (kJ mol^{-1})
C-H	414
O-H	528
C=O	715
O=O	498
C-O	352

- b) A partir de les entalpies estàndard de formació, s'ha calculat l'entalpia estàndard de combustió del metanol a 298 K, i el resultat obtingut és -726 kJ mol^{-1} . Calculeu la calor que s'allibera, a pressió constant, en cremar 96 g de metanol amb 320 g d'oxigen, en condicions estàndard i a 298 K.

[1 punt]

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

a) $-673 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ b) -2178 kJ

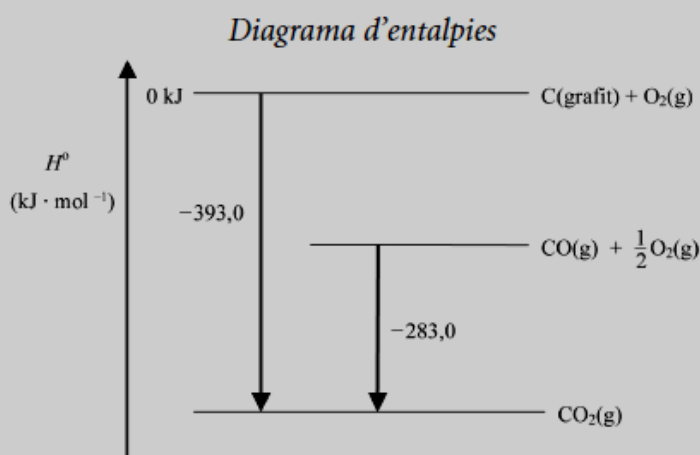
Mètode 4. Llei de Hess

PAU 2010 sèrie 2

3. La formació del CO és difícil de dur a terme experimentalment perquè, si no es fa servir un excés d'oxigen, la reacció és incompleta, i si hi ha un excés d'oxigen no es pot evitar que l'oxidació continuï i es formi també CO_2 . El valor de l'entalpia de formació del CO gasós es calcula a partir de la determinació de les entalpies de combustió del C grafit i del CO gasós.

a) Escriviu l'equació de la reacció de formació del CO gasós. Calculeu l'entalpia estàndard de formació del CO gasós a partir de la figura següent:

[1 punt]



- b) Es fan reaccionar, a pressió constant, 140 g de CO i 20,4 L d' O_2 gasós mesurats a 1,2 atm i 25 °C, i es forma CO_2 gasós. Quina quantitat de calor es desprèn en aquesta reacció?

[1 punt]

DADES: Considereu que en tots els casos les reaccions es produeixen en condicions estàndard i a 25 °C.

$$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}.$$

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

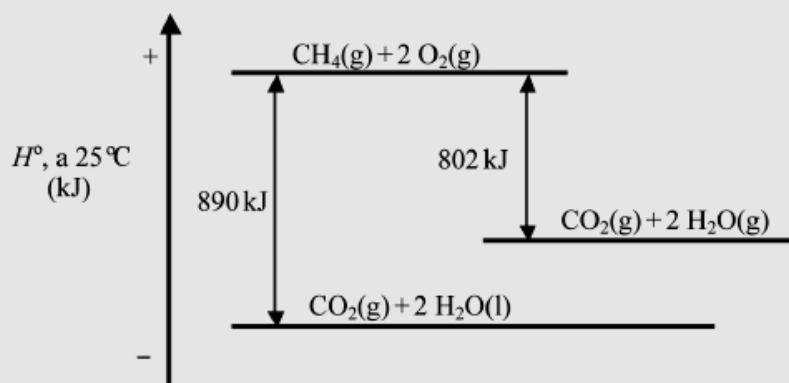
$$\Delta H_f^\circ(\text{CO}) = -110 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} ; \text{ Calor despesa: } 566 \text{ kJ}$$

Mètode 4. Llei de Hess

PAU 2012 sèrie 1

El gas natural és un dels combustibles fòssils més utilitzats a les llars per a la calefacció i per a cuinar. La composició d'aquest combustible varia lleugerament depenent de quin n'és l'origen; el que consumim al nostre país prové d'Algèria i conté més del 90 % en volum de metà. Observeu el diagrama i contesteu les qüestions següents:

Diagrama d'entalpies de la combustió del metà



a) Escriviu l'equació del procés de vaporització de l'aigua i calculeu-ne l'entalpia estàndard, expressada en kJ mol^{-1} .

[1 punt]

b) Per a muntar un petit negoci de restauració, calen diàriament $7,5 \times 10^4 \text{ kJ}$ d'energia en forma de calor. Quin volum d'aire, mesurat a 1,0 bar i 25°C , es necessita cada dia en la combustió del metà per a obtenir aquesta quantitat d'energia? Supposeu que la combustió es produeix a pressió constant (condicions estàndard) i s'obté aigua en estat líquid.

[1 punt]

DADES: Constant dels gasos ideals: $R = 8,31 \times 10^{-2} \text{ bar L K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

Composició de l'aire (% en volum):

78,08 % N_2 ; 20,95 % O_2 ; 0,93 % Ar; 0,04 % altres

a) $\text{H}_2\text{O}(l) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(g)$; A partir del gràfic s'obté que ΔH (vaporització) = 44 kJ mol^{-1}

b) Volum d'aire = 19222 L

Mètode 4. Llei de Hess

PAU 2011 sèrie 1

4. Un dels gasos més presents en la nostra vida és el metà, component principal del gas natural, que és un bon combustible. A partir de les dades de la taula següent, responeu a les qüestions.

Entalpies de combustió en condicions estàndard i a 298 K

Reacció de combustió	Entalpia de combustió (kJ mol^{-1})
$\text{CH}_4(\text{g}) + 2\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$	-890,3
$\text{C}(\text{s}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g})$	-393,5
$\text{H}_2(\text{g}) + \frac{1}{2}\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{l})$	-285,8

- a) Imagineu que us voleu dutxar amb l'aigua a una temperatura de 45 °C. Tenint en compte que l'aigua entra a l'escalfador a 10 °C i que en gastareu 30 L, digueu quina massa de metà cal cremar, a pressió constant, per a escalfar-la.
[1 punt]
- b) Escriviu la reacció corresponent a l'entalpia estàndard de formació del metà, i calculeu-ne el valor a 298 K.
[1 punt]

DADES: Densitat de l'aigua (entre 10 °C i 45 °C) = 1 kg L⁻¹.

Capacitat calorífica específica de l'aigua (entre 10 °C i 45 °C) = 4,18 JK⁻¹g⁻¹.

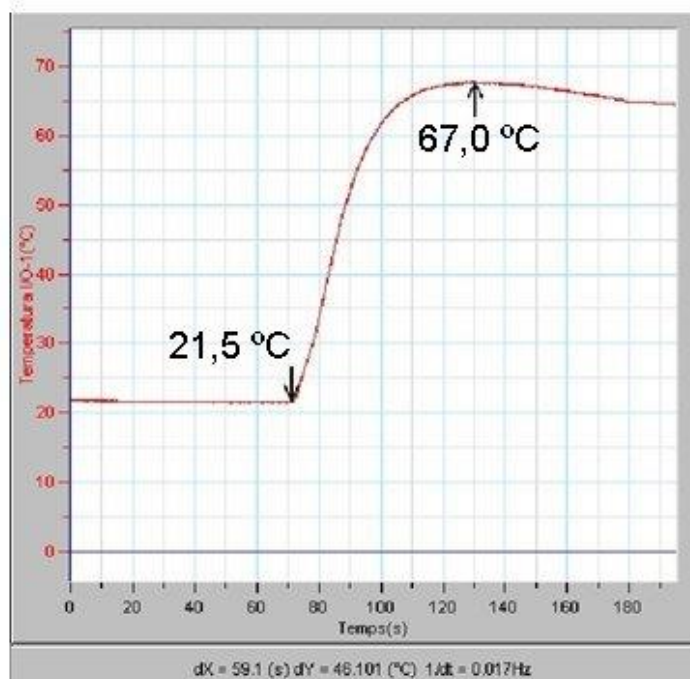
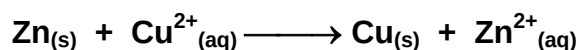
Massa molecular relativa del metà = 16,0.

$$q = C_e \cdot m \cdot \Delta T ; \text{Massa de metà} = 78,9 \text{ g}$$

$$\text{entalpia de la reacció de formació del metà} = -74,8 \text{ kJ}$$

Mètode 5. Determinació experimental

En una activitat experimental realitzada amb sensors a l'aula de ciències es determina la variació d'entalpia d'una reacció exotèrmica. L'equació química de la reacció estudiada és la següent:



Dins d'un termo que fa el paper de calorímetre es fan reaccionar 25 mL (aproximadament 25 g) d'una dissolució de CuSO_4 1,0 M amb un excés de zinc metàl·lic. Amb el sensor es registra la variació de la temperatura durant la reacció i s'obtenen les dades que mostra el gràfic adjunt.

- Raona la forma del gràfic. Què passa en cadascuna de les etapes que es distingeixen a la figura?
- Suposant que tota l'energia alliberada en la reacció és absorbida per la dissolució aquosa, calcula:
 - La quantitat de calor alliberada en aquesta reacció i que ha estat absorbida per l'aigua (Q) expressada en kJ
 - La variació d'entalpia (ΔH) de la reacció expressada en $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

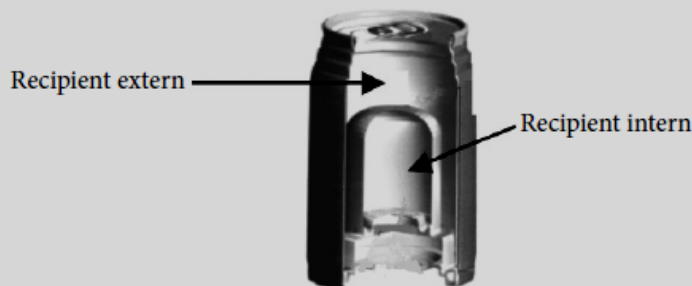
Dada: Capacitat calorífica de la dissolució = $4,180 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$

b) $4,75 \text{ kJ}$; $-190 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

Entalpia de dissolució

PAU 2013 sèrie 1

3. Una marca d'envasos de begudes ha patentat una llauna que permet obtenir begudes fredes o calentes en qualsevol lloc i a qualsevol hora del dia. L'envàs consta de dos recipients superposats: el recipient extern d'alumini conté la beguda i el recipient intern conté unes substàncies que entren en contacte en el moment que obrim l'envàs, sense barrejar-se amb la beguda en cap moment. En funció de quines substàncies hi hagi en el recipient intern, la beguda es refredarà o s'escalfarà.



- a) Supposeu que la substància que conté el recipient intern de la llauna és un sòlid que es dissol amb aigua en el moment d'obrir l'envàs. Quina substància de la taula següent triaríeu a l'hora de dissenyar la llauna, si voleu refredar la beguda? I si la voleu escalfar? Justifiqueu les respostes.

[1 punt]

Substància	CaCl_2	Na_2CO_3	KOH	NaCl	NH_4NO_3	NH_4Cl
Entalpia estàndard de solució ($\Delta H_{\text{sol}}^\circ$), a 25 °C (kJ g^{-1})	-8 878	-3 053	-774	+228	+491	+776

- b) Expliqueu el procediment experimental que seguiríeu al laboratori per a obtenir l'entalpia de solució del NaCl(s) en aigua i indiqueu el material que utilitzaríeu i les mesures experimentals que caldria determinar.

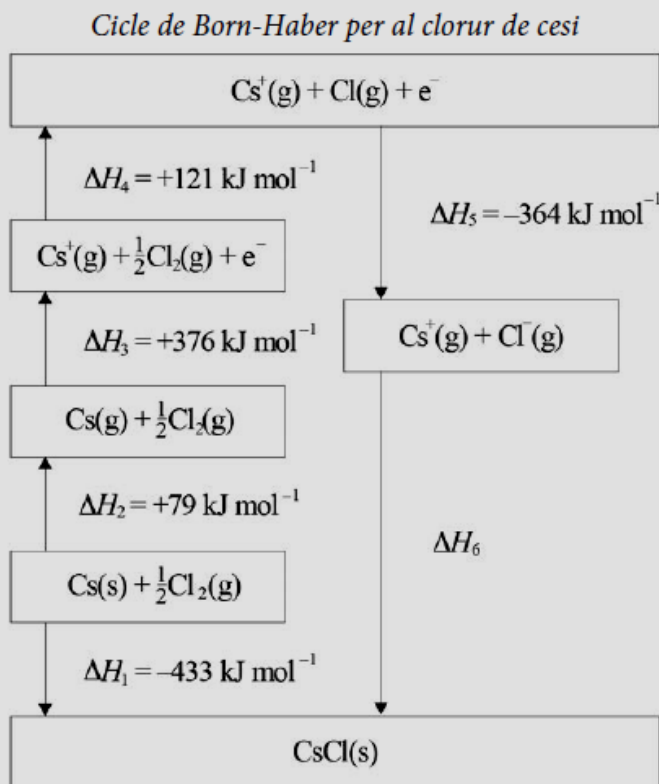
[1 punt]

- a) Raonament a partir del caràcter endotèrmic o exotèrmic de les entalpies de dissolució
b) Explicació procediment experimental amb calorímetre

Energia reticular (Cicle de Born-Haber)

PAU 2014 Sèrie 4

Les energies reticulars dels compostos iònics són útils per a predir els punts de fusió i les solubilitats en aigua d'aquest tipus de compostos. Per a poder calcular el valor de l'energia reticular d'un compost iònic s'utilitza el cicle de Born-Haber. A partir de la figura següent:



a) Escriuiu les reaccions corresponents a l'energia d'ionització del cesi, l'afinitat electrònica del clor i l'entalpia de formació del clorur de cesi, i indiqueu quin valor tenen les entalpies de cadascun d'aquests processos.

[1 punt]

b) Calculeu el valor de l'energia reticular del clorur de cesi.

[1 punt]

b) $E_{\text{reticular}}(\text{CsCl}) = \Delta H_6 = -645 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

Energia reticular (Cicle de Born-Haber)

PAU 2011 sèrie 1

5. Per a calcular l'energia reticular del clorur de sodi (-787 kJ mol^{-1}) cal conèixer les dades termodinàmiques que apareixen en la taula següent:

Dades termodinàmiques en condicions estàndard i a 298 K

<i>Magnituds termodinàmiques</i>	<i>Valor (kJ mol^{-1})</i>
Entalpia de sublimació del Na(s)	107
Primera energia d'ionització del Na	496
Entalpia de formació del Cl(g)	122
Afinitat electrònica del Cl	-349
Entalpia de formació del NaCl(s)	-411

- a) Expliqueu la diferència que hi ha entre els conceptes *energia d'ionització* i *afinitat electrònica* d'un element, i entre els conceptes *energia reticular* i *entalpia de formació* d'un compost iònic.

[1 punt]

- b) Expliqueu raonadament, a partir del model electrostàtic del sòlid iònic, si l'energia reticular del bromur de potassi serà més gran o més petita que la del clorur de sodi.

[1 punt]

DADES: Nombres atòmics (Z): $Z(\text{Na}) = 11$; $Z(\text{Cl}) = 17$; $Z(\text{K}) = 19$; $Z(\text{Br}) = 35$.

b) $E_{\text{reticular}}(\text{KBr}) < E_{\text{reticular}}(\text{NaCl})$

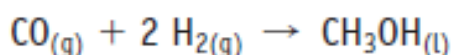
(cal fer raonament d'acord amb la mida dels ions i el model electrostàtic del sòlid iònic)

4. Entropia: segon i tercer principis de la termodinàmica

1. Escriu les equacions químiques que descriuen els processos següents i indica raonadament si representen un augment o una disminució de l'entropia del sistema:

- a) L'obtenció de l'aigua (gas) a partir de l'hidrogen i de l'oxigen gasosos.
- b) La sublimació del iode quan passa de sòlid a gas.
- c) Dissolució del NaCl (s) en aigua.
- d) Congelació de l'aigua
- e) Evaporació de l'etanol
- f) Dissolució del gas nitrogen en aigua

2. La reacció de síntesi del metanol líquid a partir del CO(g) i H₂(g) és:



Raona si en aquesta reacció es produeix un augment o una disminució de l'entropia del sistema.

Amb les dades adjuntes calcula el valor de la variació estàndard d'entropia (ΔS°) per aquesta reacció. El resultat obtingut està d'acord amb el raonament que has fet a l'apartat anterior?

Substància	CO _(g)	H _{2(g)}	CH ₃ OH _(l)
S° (J/(K·mol))	197,5	130,5	126,8

5. Espontaneïtat de les reaccions

1. D'acord amb l'equació $\Delta G = \Delta H - T \Delta S$ i el criteri d'espontaneïtat, justifica si es pot produir espontàniament una reacció endotèrmica i que alhora s'hi produeixi una disminució del desordre.

2. Raona si una reacció amb augment del desordre que és alhora exotèrmica és espontània.

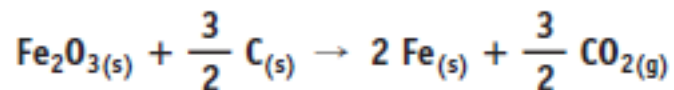
3. La termodinàmica ens descriu la possibilitat que s'esdevingui un procés determinat segons el signe de ΔH i de ΔS . Després d'estudiar els processos que s'indiquen a la taula indica quins d'aquests processos són sempre espontanis i quins tenen la possibilitat de ser-ho.

Procés	Signe ΔH	Signe ΔS	Signe ΔG	Espontaneïtat del procés
I	< 0	> 0		
II	> 0	< 0		
III	< 0	< 0		
IV	> 0	> 0		

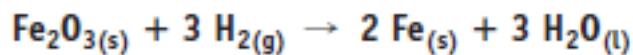
4. La variació d'entropia d'una reacció espontània, pot ser negativa? Raona-ho.

5. Respon de manera raonada les següents preguntes:

a) Indica si les reaccions següents són espontànies en condicions estàndard:



$$\Delta H^\circ = 233,95 \text{ kJ/mol}; \Delta S^\circ = 279,16 \text{ J/(K}\cdot\text{mol)}$$



$$\Delta H^\circ = -33,2 \text{ kJ/mol}; \Delta S^\circ = -215,15 \text{ J/(K}\cdot\text{mol)}$$

b) Si no són espontànies, calcula a quina temperatura ho seran si suposem que ΔH° i ΔS° són independents de la temperatura.

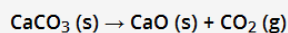
$$T > 838 \text{ K}; T < 154,3 \text{ K}$$

c) Per què la segona reacció té una variació d'entropia negativa?

6. Marca la resposta correcta. És obligatori indicar al costat de la pregunta els càlculs i/o raonaments realitzats per arribar a la resposta.

6.1.

Una informació important pels químics és saber a partir de quina temperatura es descompon el carbonat de calci d'una manera apreciable, és a dir, per a quina temperatura es fa espontània la reacció:



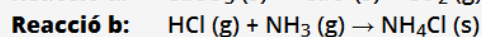
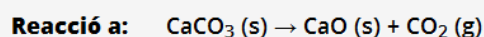
Es calcula per la reacció anterior les dades següents: $\Delta H_{\text{reacció}} = 177,8 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ i $\Delta S_{\text{reacció}} = 160,5 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ a 25 °C. Si es considera que els valors d'entalpia i entropia no es modifiquen en canviar la temperatura, podem dir que:

Resposta

1. ☐ La reacció no es espontània mai.
2. ☐ A 1113 K es descompon espontàniament el carbonat de calci.
3. ☐ A l'estiu si que es descompon, però al hivern no.
4. ☐ A la temperatura de 1,10 K es descompon el carbonat de calci.

6.2.

Indiqueu en quines de les següents reaccions la variació d'entropia (ΔS) al llarg del procés és més gran que zero:



Resposta

1. ☐ En els dues reaccions.
2. ☐ En cap de les dues reaccions.
3. ☐ Només en la reacció b.
4. ☐ Només en la reacció a.

6.3.

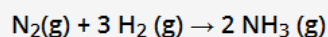
El nitrat d'amoní (NH_4NO_3), es dissol amb aigua de manera espontània i endotèrmica. Què és dedueix respecte als signes de ΔG i de ΔS pel procés de dissolució?

Resposta

1. ☐ Donat que el procés es espontani $\Delta G < 0$, i per tant cal que $\Delta S > 0$
2. ☐ El procés es espontani, això fa que $\Delta G > 0$, i per tant cal que $\Delta S > 0$
3. ☐ Els valors de ΔG i de ΔS del procés són negatius.
4. ☐ Perquè sigui espontani cal que $\Delta G > 0$ i $\Delta S < 0$

6.4.

El nitrogen es combina amb el hidrogen per a produir amoníac segons la reacció:



Calculeu la variació d'entropia estàndard a 25°C per aquesta reacció.

Dades:

Entropies absolutes estàndard, i a 25°C , de les substàncies gasoses (en $\text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$)

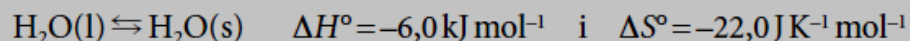
$$S^0(\text{NH}_3) = 193; S^0(\text{N}_2) = 192; S^0(\text{H}_2) = 131$$

Resposta

1. ☐ $-199 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$
2. ☐ $+199 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$
3. ☐ $+386 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$
4. ☐ $0 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$

PAU 2012 sèrie 3

El procés de solidificació de l'aigua, a 25 °C, presenta els valors següents:



Suposeu que els valors de les variacions d'entalpia i entropia del procés de solidificació de l'aigua no es modifiquen amb la temperatura, i responeu a les qüestions següents:

a) Expliqueu raonadament per què l'aigua, en condicions estàndard, no se solidifica a 25 °C, i sí que ho fa a -10 °C.

[1 punt]

b) Calculeu la temperatura, expressada en graus Celsius, per sota de la qual l'aigua se solidifica en condicions estàndard.

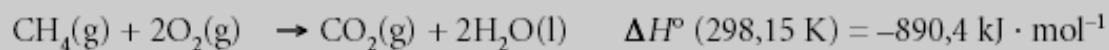
[1 punt]

a) Raonament a partir del criteri d'espontaneïtat

b) $T < 273 \text{ K}$

PAU 2009 sèrie 3

1. Les reaccions de combustió del carboni grafit, de l'hidrogen i del metà són:



- 1.1. Calculeu l'entalpia estàndard de formació del metà a 298,15 K.

[1 punt]

- 1.2. Raoneu si la reacció de combustió del metà serà espontània o no a 298,15 K.

[1 punt]

DADES:

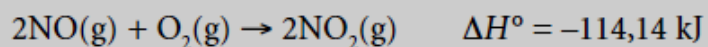
$T = 298,15 \text{ K}$	$\text{CH}_4(\text{g})$	$\text{O}_2(\text{g})$	$\text{CO}_2(\text{g})$	$\text{H}_2\text{O}(\text{l})$
$S^\circ / \text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$	186,3	205,1	213,7	69,9

$$\Delta H_f^\circ = -74,7 \text{ kJ/mol} ;$$

$$\begin{aligned} \Delta G &= -890,4 \text{ kJ} + 72,5 \text{ kJ} \\ &= -817,9 \text{ kJ} \end{aligned}$$

PAU 2010 sèrie 1

2. El diòxid de nitrogen es pot formar a partir del monòxid de nitrogen, a 298 K, segons la reacció següent:



- a) Raoneu si la reacció serà espontània en condicions estàndard i a 298 K.
[1 punt]
- b) Calculeu la calor a pressió constant que es despendrà en reaccionar 5,0 L de monòxid de nitrogen, mesurats a 298 K i 1,0 atm, amb un excés d'oxigen.
[1 punt]

DADES: $R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$.

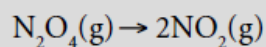
Temperatura = 298 K	NO(g)	O ₂ (g)	NO ₂ (g)
S°(J·K ⁻¹ ·mol ⁻¹)	210,8	205,1	240,1

$$\Delta S^\circ = -146,5 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \quad \Delta G^\circ = -70,5 \text{ kJ}$$

Calor despesa: 11,7 kJ

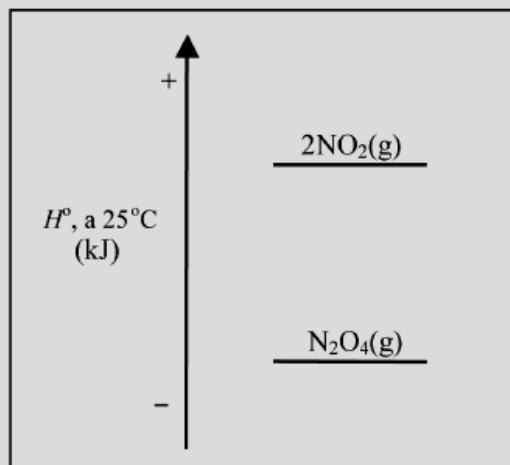
PAU 2011 sèrie 1

El tetròxid de dinitrogen es descompon en diòxid de nitrogen segons la reacció següent:



A partir de la figura, contesteu raonadament les qüestions següents.

Diagrama d'entalpies



- Quin signe tindran la variació d'entalpia estàndard (ΔH°) i la variació d'entropia estàndard (ΔS°) de la reacció de dissociació del N_2O_4 en NO_2 , a 25°C ?
[1 punt]
- Quan serà espontània, la reacció, a temperatures altes o a temperatures baixes?
[1 punt]

DADES: Suposeu que ΔH° i ΔS° no varien amb la temperatura.

- Cal raonar les respostes amb el gràfic: $\Delta H^\circ > 0$; $\Delta S^\circ > 0$
- A temperatures altes el segon terme serà més gran, $\Delta G^\circ < 0$, i la reacció serà espontània

PAU 2015 sèrie 15

En la fermentació acètica del vi, per acció dels bacteris del gènere *Acetobacter*, l'etanol reacciona amb l'oxigen de l'aire i es transforma en àcid etanoic (anomenat habitualment *àcid acètic*) i aigua, mescla líquida que dona lloc al vinagre.

- a) Escriviu la reacció de fermentació acètica del vi. Calculeu-ne la variació d'entalpia, en condicions estàndard i a 298 K, i justifiqueu si la reacció és endotèrmica o exotèrmica.

[1 punt]

- b) Calculeu la variació d'energia lliure de la reacció de fermentació acètica del vi, en condicions estàndard i a 298 K, i justifiqueu si la reacció és espontània.

[1 punt]

DADES: Entalpia estàndard de formació, a 298 K:

$$\Delta H_f^\circ(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}, \text{l}) = -277,6 \text{ kJ mol}^{-1};$$

$$\Delta H_f^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{l}) = -487,0 \text{ kJ mol}^{-1};$$

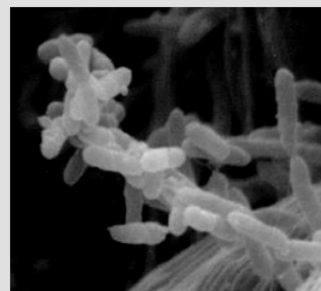
$$\Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = -285,8 \text{ kJ mol}^{-1}.$$

Energia lliure estàndard de formació, a 298 K:

$$\Delta G_f^\circ(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}, \text{l}) = -174,9 \text{ kJ mol}^{-1};$$

$$\Delta G_f^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{l}) = -392,6 \text{ kJ mol}^{-1};$$

$$\Delta G_f^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = -237,2 \text{ kJ mol}^{-1}.$$



Bacteris del gènere *Acetobacter*

$$\Delta H^\circ(\text{reacció}) = -495,2 \text{ kJ/mol} ; \Delta G^\circ(\text{reacció}) = -454,9 \text{ kJ/mol} (\Delta G^\circ < 0 \text{ reacció espontània})$$