

## Problemes resolts del tema ESPONTANEITAT (Q2\_B1\_5)

1. Compara les parelles de substàncies i indica quina té una major entropia en cada cas. Justifica la resposta.
  - a) Un mol de  $I_2$  (s) o un mol de  $I_2$  (g).
  - b) Un mol de  $H_2O$  (g) o un mol de  $H_2O$  (l).

### Resolució:

a)  $I_2$  (g)

El desordre d'un mol de gas és molt més gran que el d'un mol de sòlid; per tant, tindrà una major entropia

b)  $H_2O$ (g)

El desordre d'un mol de gas és molt més gran que el d'un mol de líquid; per tant, tindrà una major entropia.

2. Considera les següents reaccions:
  - a)  $H_2$  (g) +  $Cl_2$  (g)  $\rightarrow$  2  $HCl$  (g)
  - b)  $S$  (s) +  $O_2$  (g)  $\rightarrow$   $SO_2$  (g)
  - c)  $MgCO_3$  (s)  $\rightarrow$   $MgO$  (s) +  $CO_2$  (g)
  - a) Raona per a cadascun dels processos indicats si és d'esperar un augment o una disminució de l'entropia.
  - b) Calcula la variació d'entropia de les reaccions en condicions estàndard (consultar dades en la taula del llibre)  
*Sol.: a)  $20 J \cdot K^{-1}$ ; b)  $11,6 J \cdot K^{-1}$ ; c)  $174,7 K^{-1}$*

### Resolució:

a)

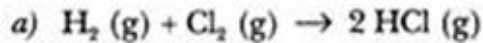
*Reacció a)* hi ha el mateix nombre de mols de gasos a cada banda. Es de esperar un variació d'entropia molt petita, pròxima a zero.

*Reacció b)* hi ha el mateix nombre de mols de gasos a cada banda. Es de esperar un variació d'entropia molt petita, pròxima a zero

*Reacció c)* hi apareix un mol de gas a la dreta de l'equació (productes). El balanç és 1 mol de gas, així que es d'esperar un augment important de l'entropia.

b)

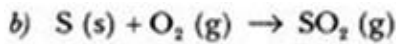
Els valors de les entropies estàndard dels reactius i dels productes es troben a la taula de dades del llibre.



$$\Delta S_r^\circ = \sum n S^\circ_{\text{productes}} - \sum m S^\circ_{\text{reactius}}$$

$$\Delta S_r^\circ = 2 \cdot S^\circ [\text{HCl} (\text{g})] - 1 \cdot S^\circ [\text{Cl}_2 (\text{g})] - 1 \cdot S^\circ [\text{H}_2 (\text{g})]$$

$$\Delta S_r^\circ = 2 \text{ mol} \cdot 187 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} - 1 \text{ mol} \cdot 223 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} - 1 \text{ mol} \cdot 131 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 20 \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

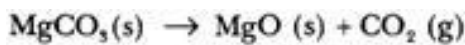


$$\Delta S_r^\circ = \sum n S^\circ_{\text{productes}} - \sum n S^\circ_{\text{reactius}}$$

$$\Delta S_r^\circ = 1 \cdot S^\circ [\text{SO}_2 (\text{g})] - 1 \cdot S^\circ [\text{S} (\text{s})] - 1 \cdot S^\circ [\text{O}_2 (\text{g})]$$

$$\Delta S_r^\circ = 1 \text{ mol} \cdot 248,5 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} - 1 \text{ mol} \cdot 31,9 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} - 1 \text{ mol} \cdot 205 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 11,6 \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

c)

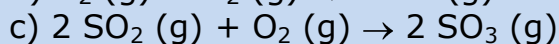
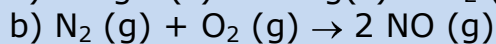
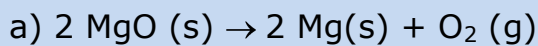


$$\Delta S_r^\circ = \sum n S^\circ_{\text{productes}} - \sum n S^\circ_{\text{reactius}}$$

$$\Delta S_r^\circ = 1 \cdot S^\circ [\text{CO}_2 (\text{g})] + 1 \cdot S^\circ [\text{MgO} (\text{s})] - 1 \cdot S^\circ [\text{MgCO}_3 (\text{s})]$$

$$\Delta S_r^\circ = 1 \text{ mol} \cdot 213,6 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} + 1 \text{ mol} \cdot 26,78 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} - 1 \text{ mol} \cdot 68,69 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 174,7 \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

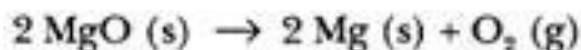
3. Calcula la variació d'entalpia lliure estàndard per a les reaccions següents a partir de les entalpies lliures de formació de reactius i productes. Raona si són espontànies o no.



Sol.: a) 1139 kJ; b) 173,4 kJ; c) -140 kJ

### Resolució:

a)

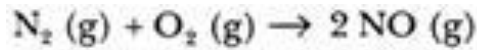


$$\Delta G_r^\circ = \sum n \Delta G_f^\circ_{\text{productes}} - \sum m \Delta G_f^\circ_{\text{reactius}}$$

$$\Delta G_r^\circ = 2 \text{ mol} (-569,6 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}) = 1139 \text{ kJ}$$

La reacció NO serà espontània perquè  $\Delta G^0 > 0$ .

b)



$$\Delta G^\circ_r = \sum n \Delta G^\circ_{f \text{ productes}} - \sum m \Delta G^\circ_{f \text{ reactius}}$$

$$\Delta G^\circ_r = 2 \text{ mol} \left( 86,7 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) = 173,4 \text{ kJ}$$

La reacció NO serà espontània perquè  $\Delta G^\circ > 0$ .

c)



$$\Delta G^\circ_r = \sum n \Delta G^\circ_{f \text{ productes}} - \sum m \Delta G^\circ_{f \text{ reactius}}$$

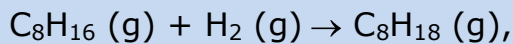
$$\Delta G^\circ_r = 2 \Delta G^\circ_r [\text{SO}_3 (\text{g})] - 2 \Delta G^\circ_r [\text{SO}_2 (\text{g})]$$

$$\Delta G^\circ_r = 2 \text{ mol} \left( -370,4 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) - 2 \text{ mol} \left( -300,4 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right)$$

$$\Delta G^\circ_r = -140 \text{ kJ}$$

La reacció SÍ serà espontània perquè  $\Delta G^\circ < 0$

4. En la reacció:



si  $\Delta S^\circ = -130 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$  i  $\Delta H^\circ = -125,5 \text{ kJ}$ .

- a) Calcula la variació d'entalpia lliure estàndard per a aquesta reacció i indicà sí és espontània.
- b) Calcula la temperatura teòrica a la qual es d'esperar que es produeixi una situació d'equilibri.

Sol.: a) -86,8 kJ; b) 692°C

**Resolució:**

a) Observar que el valor de l'entalpia està en kJ i el de l'entropia en J. Per a poder substituir dades s'ha de treballar en un sistema coherent d'unitat. Per tant, o bé es passen els kJ a J o al revés. En aquest cas s'ha optat per treballar en kJ i passar el J de l'entropia a kJ:

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

$$\Delta G^\circ = -125,5 \text{ kJ} - 298 \text{ K} \cdot (-130 \cdot 10^{-3}) \frac{\text{kJ}}{\text{K}}$$

$$\Delta G^\circ = -86,8 \text{ kJ}$$

La variació d'entalpia lliure estàndard és de **-86,8 kJ** i la reacció serà espontània perquè  $\Delta G^0 < 0$ .

b) Això succeirà quan  $\Delta G^0 = 0$ .

$$T = \frac{\Delta H^0}{\Delta S^0} = \frac{125,5 \text{ kJ}}{0,130 \text{ kJ/K}} = 965 \text{ K} \rightarrow \mathbf{692^\circ\text{C}}$$

La reacció serà espontània per a temperatures inferiors a  $692^\circ\text{C}$  i serà NO espontània per a temperatures superiors.