

TERMOQUÍMICA

- Quin treball extern es produeix en la combustió de benzè a 27 °C?
Sol: 3743.4 J
- Calculeu el treball que es realitza quan es comprimeixen de forma isotèrmica i reversible 50 g de nitrogen des d'una pressió d'1 atm fins a 20 atm a la temperatura de 25 °C. Calculeu també el treball que realitza el gas en l'expansió isotèrmica en tornar a l'estat inicial amb una pressió constant d'1 atm. Suposeu que el nitrogen es comporta idealment.
Sol: 13.26 kJ, -4.21 kJ
- Per a la reacció $2 \text{CO}(g) + \text{O}_2(g) \rightarrow 2 \text{CO}_2(g)$, la variació d'entalpia a 25 °C té un valor de 563 kJ. Calculeu la variació d'energia interna a la mateixa temperatura.
Sol: 565.5 kJ
- Calculeu ΔH° per a les següents reaccions gasoses utilitzant dades d'energia d'enllaç:
 - $\text{HCl} + \text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$
 - $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{C}_2\text{H}_4$
 - $\text{CH}_4 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{HCl} + \text{CH}_3\text{Cl}$
 Energies d'enllaç (H-Cl) = 432; (C=C) = 615; (C=O) = 728; (C-H) = 413; (C-Cl) = 328; (O-H) = 463; (C-C) = 348; (Cl-Cl) = 243; (C-O) = 351 kJ/mol.
Sol: -42 kJ, 34 kJ, -104 kJ
- Una part del butà, $\text{C}_4\text{H}_{10}(g)$, contingut en una ampolla de 200 L a 26 °C s'extrau i es crema a pressió constant en un excés d'aire. Com a resultat d'això, la pressió del gas dins l'ampolla es redueix de 2.35 atm a 1.10 atm. La calor despesa es fa servir per a elevar la temperatura de 132.5 L d'aigua de 26.0 a 62.2 °C. Suposant que els productes de la combustió són exclusivament $\text{CO}_2(g)$ i $\text{H}_2\text{O}(l)$, determineu el rendiment d'aquest calfador d'aigua, és a dir, quin tant per cent de la calor de combustió és absorbit per l'aigua?

espècie	$\text{C}_4\text{H}_{10}(g)$	$\text{CO}_2(g)$	$\text{H}_2\text{O}(l)$
ΔH°_f (kJ/mol)	-124.73	-393.5	-285.83

 Sol: 69.1 %
- Un procediment per a reduir les emissions de $\text{CO}_2(g)$ és utilitzar combustibles que generen una gran quantitat de calor per mol de $\text{CO}_2(g)$ produït. Amb aquesta perspectiva, quin és el millor combustible, la gasolina [considereu que és octà, $\text{C}_8\text{H}_{18}(l)$] o el metà, $\text{CH}_4(g)$.

espècie	$\text{C}_8\text{H}_{18}(l)$	$\text{CO}_2(g)$	$\text{H}_2\text{O}(l)$	$\text{CH}_4(g)$
ΔH°_f (kJ/mol)	-249.07	-393.5	-285.83	-74.8

 Sol: El metà és més bon combustible.
- En el metabolisme de la glucosa, $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6(s)$, s'obté $\text{CO}_2(g)$ i $\text{H}_2\text{O}(l)$ com a productes. La calor despesa en el procés es transforma en treball útil amb un rendiment del 70%. Calculeu la massa de glucosa metabolitzada per una persona de 58.0 kg que puja una muntanya de 1450 m. Suposeu que el treball realitzat en pujar és aproximadament quatre vegades el treball necessari per a elevar 58.0 kg a una altura de 1450 m.

espècie	$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6(s)$	$\text{CO}_2(g)$	$\text{H}_2\text{O}(l)$
ΔH°_f (kJ/mol)	-1273,3	-393.5	-285.83

Sol: 303g

8. En la combustió de l'hexà, C_6H_{14} , per donar $H_2O(l)$ i $CO_2(g)$, es desprenen 11.57 kcal per gram d'hexà. Calculeu la calor de formació de l'hexà sabent que la calor de formació a 25 °C del CO_2 és -94 kcal/mol i la de l'aigua líquida, -68.3 kcal/mol.
Sol: -47.08 kcal/mol

9. Calculeu l'entalpia de formació del $Ca(OH)_2(s)$ a 18 °C i 1 atm, a partir de les dades següents:
 $\Delta H_{f,291}^{\circ}(H_2O, l) = -68.370$ kcal/mol $\Delta H_{f,291}^{\circ}(CaO, s) = -151.800$ kcal/mol
 $CaO(s) + H_2O(l) \rightarrow Ca(OH)_2(s)$ $\Delta H_{291}^{\circ} = -15.260$ kcal/mol
Sol: -235.4 kcal/mol

10. Per a la reacció: $H_2(g) + 1/2 O_2(g) \rightarrow H_2O(l)$
calculeu el canvi de entalpia i d'energia interna, a 25 °C a partir de les dades següents:
 $C(s) + 2H_2O(g) \rightarrow CO_2(g) + 2H_2(g)$ $\Delta H_1 = 21.5$ kcal
 $C(s) + 1/2 O_2(g) \rightarrow CO(g)$ $\Delta H_2 = -26.4$ kcal
 $H_2O(g) \rightarrow H_2O(l)$ $\Delta H_3 = -10.5$ kcal
 $CO(g) + 1/2 O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$ $\Delta H_4 = -67.6$ kcal
Sol: -74.8 kcal; -73.9 kcal/mol

11. Tenim les següents dades de calors de formació a 298 K:
 $C_2H_5OH(l) = -66.0$ kcal/mol $CO_2(g) = -94.0$ kcal/mol $H_2O(l) = -68.3$ kcal/mol
Calors de combustió 298 K per donar $H_2O(l)$ i $CO_2(g)$:
 $CO(g) = -68$ kcal/mol $CH_4(g) = -212$ (kcal/mol)
Capacitats calorífiques, C_p :
 $CH_4(g) = 5.0$ cal/mol K; $CO_2(g) = 7.0$ cal/mol K; $C_2H_5OH(l) = 32.0$ cal/mol K
a) Calculeu ΔH_{298} i ΔE_{298} per a la reacció $3 CH_4(g) + CO_2(g) \rightarrow 2 C_2H_5OH(l)$
b) Calculeu $\Delta H_{(-100\text{ }^{\circ}C)}$ per a la reacció anterior.
Sol: 17.8 kcal, 120.2 kcal, 2.6 kcal,

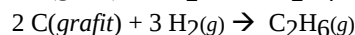
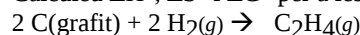
12. Considerant la informació següent a 298 K:
 $4 C_2H_5Cl(g) + 13 O_2(g) \rightarrow 2 Cl_2(g) + 8 CO_2(g) + 10 H_2O(g)$ $\Delta H^{\circ} = -1229.6$ kcal
Calor de combustió de l'età, $C_2H_6(g) = -372.8$ kcal/mol
Calor de formació de l'aigua, $H_2O(g) = -57.8$ kcal/mol, $H_2O(l) = -68.3$ kcal/mol, $HCl(g) = -21$ kcal/mol
a) Calculeu ΔH_{298} i ΔE_{298} per a la reacció $C_2H_6(g) + Cl_2(g) \rightarrow C_2H_5Cl(g) + HCl(g)$.
b) Calculeu ΔH_{398} per a la reacció anterior, suposant que ΔC_p és igual a 10 cal/K.
Sol: -26 kcal, -26 kcal, -25.86 kcal

13. Si apliquem la calor necessària, es vaporitzen 15 g de benzè per via reversible a la temperatura d'ebullició de 80.2 °C. Si suposem que la pressió és d'1 atm i que la calor de vaporització és de 94.4 cal/g, calculeu q, w, ΔE° , ΔH° , ΔS° i ΔG° .
Sol: 1416 cal, -135 cal, 1281 cal, 1416 cal, 4.0 cal/K, 0.

14. A partir dels valors de la taula següent, mesurats a 25 °C,
- | Substància | S° (cal/mol K) | Entalpia de combustió ΔH° (kcal/mol) |
|------------|----------------|--------------------------------------|
|------------|----------------|--------------------------------------|

C(<i>grafit</i>)	1.4	-94.2
H ₂ (g)	31.2	-68.4
C ₂ H ₄ (g)	52.2	-333.2
C ₂ H ₆ (g)	55.6	-372.8

Calculeu ΔH°, ΔS° i ΔG° per a les dues reaccions següents:



Assenyaleu també si en aquestes condicions ambdues reaccions són espontànies

Sol: 8 kcal, -13 cal/K, 11.88 kcal; -20.8 kcal, -40.8 cal/K, -8.6 kcal

15. Per a la reacció de fotosíntesi: $6 \text{ CO}_2(\text{g}) + 6 \text{ H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow \text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6(\text{g}) + 6 \text{ O}_2(\text{g})$

calculeu els valors de ΔH°, ΔS° i ΔG° a partir de les dades següents:

espècie	C ₆ H ₁₂ O ₆ (s)	CO ₂ (g)	H ₂ O(l)	O ₂ (g)
ΔH° _f (kcal/mol)	-304.60	-94.85	-68.32	0.0
S° (cal/mol)	50.70	51.06	16.72	49.00

a) Indiqueu si la reacció és exotèrmica o endotèrmica. b) Comenteu l'espontaneïtat de la reacció i la seua relació amb els valors de ΔH°, ΔS° i ΔG°.

Sol: ΔH° = 674.42 kcal; ΔS° = -61.98 cal/K; ΔG° = 692.89 kcal

16. El canvi d'entalpia estàndard durant la desnaturalització (o desenrotllament) de la proteïna inhibidora de la tripsina de soia és 238 kJ/mol. La desnaturalització té lloc espontàniament a 50 °C. Estimeu l'entropia per a aquest procés i interpreteu el signe i la magnitud d'aquest valor en termes del comportament molecular observat.

Sol: >736 J/mol

17. Per a la reacció $\text{C}_2\text{H}_6(\text{g}) + 7/2 \text{ O}_2(\text{g}) \rightarrow 2 \text{ CO}_2(\text{g}) + 3 \text{ H}_2\text{O}(\text{l})$

calculeu els valors de ΔH°, ΔS° i ΔG° a partir de les dades següents.

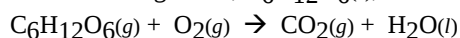
Substància	ΔH° _f (kcal/mol)	ΔG° _f (kcal/mol)	S° _f (cal/mol K)
C ₂ H ₆ (g)	-20.236	-7.860	54.850
O ₂ (g)	0.000	0.000	49.003
CO ₂ (g)	-94.052	-94.260	51.061
H ₂ O(l)	-68.317	-56.700	16.716

a) Indiqueu si la reacció és exotèrmica o endotèrmica.

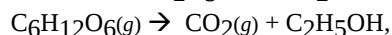
b) Comenteu l'espontaneïtat de la reacció i la seua relació amb els valors de ΔH°, ΔS° i ΔG°.

Sol: -372.8 kcal, -74.1 cal/K, -350.6 kcal

18. L'oxidació de la glucosa, C₆H₁₂O₆(s), als teixits corporals produeix CO₂(g) i H₂O(l):



En canvi, la descomposició anaeròbica, que es du a terme durant la fermentació, produeix alcohol etílic, C₂H₅OH, i CO₂(g).



Determineu l'energia lliure estàndard d'aquests processos.

espècie	$C_6H_{12}O_6(s)$	$CO_2(g)$	$H_2O(l)$	$C_2H_5OH(l)$
ΔG°_f (kJ/mol)	-910.4	-394.4	-237.13	-168.51

Sol: ΔG°_f (kJ/mol) (ox. aeròbica) = -2879; ΔG°_f (kJ/mol) (oxidació anaeròbica) = -215

19. Les cèl·lules utilitzen la hidròlisi del trifosfat d'adenosina, ATP, com a font d'energia. La conversió d'ATP en ADP té un canvi d'energia lliure estàndard de -30.5 kJ/mol. Si tota l'energia lliure provinent del metabolisme de la glucosa es consumeix en la conversió d'ADP en ATP, quants mols d'ATP es poden produir per cada mol de glucosa?

espècie	$C_6H_{12}O_6(s)$	$CO_2(g)$	$H_2O(l)$
ΔG°_f (kJ/mol)	-910.4	-394.4	-237.13

Sol: 94.4 mols ATP/mol glucosa

20. Calculeu els valors de ΔH° , ΔS° i ΔG° a 298 K i a 398 K, per a la reacció:

$SO_2(g) + 2 H_2S(g) \rightarrow 3 S(ròmbic) + 2 H_2O(l)$ a partir de les dades següents:

Substància	ΔH°_f (kJ/mol)	S° (cal/mol K)	C_p (cal/mol K)
$SO_2(g)$	-70,960	59.24	9,841
$H_2S(g)$	-5,300	49.15	8,911
$S(ròmbic)$	0,000	7.62	5,674
$H_2O(l)$	-68,317	16.72	18,014

Sol: -56.0 kcal, -101.4 cal/K, -25.8 kcal; -11.7 kcal, -104.8 cal/K, -15.5 kcal

21. L'interès en la producció bacteriana de proteïnes per aliments sintètics s'ha centrat en la reacció que dona glicina (NH_2CH_2COOH) a partir de compostos senzills com l'amoniac, el metà i l'oxigen. $NH_3(g) + 2 CH_4(g) + 5/2 O_2(g) \rightarrow NH_2CH_2COOH(s) + 3 H_2O(l)$

Considerant la següent informació a 25°C:

Entalpia de formació del $NH_3(g)$ = -11.02 kcal/mol

Entalpia de combustió del $CH_4(g)$ = -212.72 kcal/mol

Entalpia de formació de la $NH_2CH_2COOH(s)$ = -128.40 kcal/mol

Entalpia de formació del $H_2O(l)$ = -68.32 kcal/mol

Entalpia de formació del $CO_2(g)$ = -94.53 kcal/mol

	$NH_3(g)$	$CH_4(g)$	$O_2(g)$	$NH_2CH_2COOH(s)$	$H_2O(l)$
C_p (cal/mol K)	8.38	8.44	7.02	23.71	17.99
S°_{298} (cal/mol K)	46.00	44.52	49.03	24.74	16.71

a) Calculeu l'entalpia estàndard a 25 °C per a aquesta reacció.

b) Calculeu ΔH° a 90°C per a la mateixa reacció, considerant C_p constant en l'interval 25°C - 90°C.

c) Digueu si la reacció serà espontània o no a 25°C.

Sol: a) -285.44 kcal; b) -283.2 kcal; c) Sí, -230.98 kcal