

## Versió Sep-08

### Aplicacions Informàtiques per a la Química. Innovació Educativa Exercicis per al Full de càlcul "EXCEL". Curs 2008/2009

NOTA: Qualsevol manipulació en un Full de càlcul (FC) equival a realitzar una programació informàtica. Per a poder programar cal tenir molt clar, amb tot detall, el que s'ha de fer i com fer-lo pas a pas. Al programar el full de càlcul per a realitzar operacions matemàtiques, resulta útil tenir a mà paper per a escriure les expressions que es deuen utilitzar.

#### 1.- Exercicis d'introducció per a programar formules senzilles

1.1.- Trobar el valor de les següents expressions programant cadascuna d'elles en una cel·la d'un full de càlcul, usant únicament els operadors bàsics (+, -, \*, /, ^) per als següents valors de a i b: a=3, b=5

Pràctica dels parèntesis

$$\frac{a+b}{a} \quad a + \frac{b}{a} \quad \frac{ba}{a+b}$$

R: 2,67; 4,67; 1,88

Pràctica de l'operador "^^"

$$5a + 2b^2 - a^2 \quad \frac{a^2}{b^2} - \frac{b}{a} \quad \left[ (5a - 2b^2)^2 - a^2 \right]^2$$

R: 56; -1,31; 1478656

1.2.- Trobar el valor de les següents expressions programant cadascuna d'elles en una cel·la d'un full de càlcul, usant únicament els operadors bàsics (+, -, \*, /, ^).

$$\frac{a+b}{c-d} \quad a + \frac{b}{c} - d \quad a + \frac{b-c}{d} \quad a + \frac{b}{c-d}$$

$$a - \frac{b}{c} \quad a - \frac{b(c-a)}{d(c+a)}$$
$$(d-a)$$

$$3a^3 + 2b^2c - d^{-2} \quad \frac{a^{-2} + b^{-5}}{cd^{-3} - 4acb}$$

$$\sqrt{a + \frac{b}{c}} \quad \frac{\sqrt[3]{(a + \frac{b}{c})^2}}{b} \quad \frac{\sqrt[3]{a} + \sqrt{b}}{\sqrt{c+d-a}} \quad \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

usant els següents valors enters : a=2, b=4, c=1, d=8

Comprovació: els valors de les expressions són, respectivament, :

-0,86; -2,00; 2,38; 1,43  
 -22,00; 2,17  
 55,98; -0,01  
 2,45; 0,83; 3,26; -0,29; -1,71.

NOTA: Per a verificar que una volta introduïdes i validades les expressions anteriors el FC ha quedat “programat”, verifiqueu com els resultats canvien si s'usen altres valors enters en les cel·les que contenen a, b, c i d variant a entre -2 i 2 , b entre 0 i 4, c entre 1 i 5 i d entre 4 i 8...

En ocasions Excel no sap donar una solució.

Què succeeix, per exemple, si a=-2, b=0, c=1 i d=4 i per què?

Què succeeix si a=b=c=d=1?

1.3.- a) Calculeu les següents funcions per a un valor arbitrari de x que prendrem com x=30

$$y = \text{sen}(x); \quad y = \text{sen}(x^2); \quad y = \cos\left(\frac{x}{\pi}\right); \quad y = \text{sen}^2(x) - \cos(x^2)$$

$$y = |\ln(0.012x)|; \quad y = (0.02x^3 - 5.3x)e^{0.3x}$$

$$y = \frac{x^2}{\sqrt[3]{5x^4 + \frac{10}{x}}}; \quad y = \text{tg}(x)0.753^{(0.001x^2 + \frac{5}{x})}$$

R: -0,9880; 0,9978; -0,9923; 0,9100; 1,0217; 3087274,9764; 5,6462; -4,7329

b) Calculeu les mateixes funcions per a  $x = \pi^2$  ;  $x = 2\pi$  ;  $x = \pi/3$  ;  $x = e$  disposant els resultats, amb tres xifres decimals, en forma de taula, en una fulla Excel.

| x       | y1     | y2     | y3     | y4    | y5    | y6          | y7    | y8     |
|---------|--------|--------|--------|-------|-------|-------------|-------|--------|
| 30      | -0,988 | 0,998  | -0,992 | 0,910 | 1,022 | 3087274,976 | 5,646 | -4,733 |
| $\pi^2$ | -0,430 | -0,020 | -1,000 | 1,185 | 2,133 | -638,961    | 2,691 | 0,402  |
| $2\pi$  |        |        |        |       |       |             |       |        |
| $\pi/3$ |        |        |        |       |       |             |       |        |
| e       |        |        |        |       |       |             |       |        |

## 2.- Exercicis amb fórmules senzilles basats en exemples de Física i Química

Quan es volen calcular propietats o magnituds en Química o en Física, es deu posar molta atenció en les unitats de mesura i en el significat dels valors que s'obtenen per a evitar errors

2.1- Recordeu la fórmula clàssica del moviment de caiguda lliure d'un cos de massa  $m$  :

$$h = h_0 + v_0 t - \frac{1}{2} g t^2$$

on  $h$  indica l'altura on es troba el cos en l'instant  $t$ ,  $h_0$  indica l'altura inicial (instant  $t=0$ ),  $v_0$  és la velocitat inicial del cos i  $g$  és l'acceleració de la gravetat (valor estàndard de  $g=9,80665 \text{ m s}^{-2}$ ).

Programeu la fórmula en el full de càlcul per a obtenir els valors d' $h$  per a aquestes dades:

$$h_0 = 100,0 \text{ m} ; v_0 = 5 \text{ m s}^{-1} ; t = 5 \text{ s} \quad \text{R:} \quad 2,42 \text{ m}$$

$$h_0 = 500,0 \text{ m} ; v_0 = 0 \text{ m s}^{-1} ; t = 2,25 \text{ s} \quad \text{R:} \quad 475,18 \text{ m}$$

$$h_0 = 500,0 \text{ m} ; v_0 = -1,25 \text{ m s}^{-1} ; t = 0,001 \text{ s} \quad \text{R:} \quad 500,00 \text{ m}$$

(Quants decimals cal demanar en aquest cas per a apreciar una  $h$  diferent d' $h_0$  ?)

$$h_0 = 2,0 \text{ m} ; v_0 = 50 \text{ km/h} ; t = 1 \text{ s} \quad \text{R:} \quad 10,99 \text{ m}$$

(Atenció a les unitats en aquest cas)

2.2.- Aquesta és l'expressió que dona la freqüència de vibració d'una massa  $m$  penjada d'un moll de constant de força  $k$ :

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Les unitats, en el Sistema Internacional, per a  $k$  són  $\text{N m}^{-1}$  i les de  $m$  són  $\text{kg}$  (de massa). Calculeu la freqüència de vibració si

$$k = 3,0 \text{ N m}^{-1} ; m = 10 \text{ kg} \quad \text{R:} \quad 0,087 \text{ s}^{-1}$$

$$k = 100,0 \text{ N m}^{-1} ; m = 10 \text{ kg} \quad \text{R:} \quad 0,503 \text{ s}^{-1}$$

$$k = 5,0 \text{ N m}^{-1} ; m = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg} \quad \text{R:} \quad 8,71 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$$

(aquest exemple correspon a un enllaç químic actuant com un moll al que estigués lligat un àtom d'hidrogen).

Quina freqüència tindrà el mateix enllaç movent un àtom d'oxigen de 15,9994 uma (unitats de massa atòmica)? (NOTA: una uma equival a  $1,66054 \times 10^{-27} \text{ kg}$ )

$$\text{R:} \quad 2,18 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$$

2.3.- Aquesta expressió reproduïx l'Energia Potencial  $V$  d'interacció entre dos àtoms de gas noble:

$$V = 4 \varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]$$

En aquesta expressió  $R$  és la distància entre els àtoms en Angstrom. Programeu el full de càlcul per a

calcular l'energia potencial V per als casos següents:

(NOTA: “ue” significa “unitats d'energia”. Una d'aquestes ue equival a  $8,314 \times 10^{-3}$  KJ/mol; Å són Angstrom  $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$ )

$\epsilon = 10,22 \text{ ue}$  ;  $\sigma = 2,556 \text{ Å}$  ; (aquests paràmetres corresponen a la interacció He-He)

R = 2,5 Å. Res: 6,637 ue

R = 2,869 Å. Res: -10,22 ue

R = 10,0 Å Res: -0,0114 ue

$\epsilon = 35,60 \text{ ue}$  ;  $\sigma = 2,749 \text{ Å}$  ; (aquests paràmetres corresponen a la interacció Ne-Ne)

R = 2,5 Å. Res: 193,25 ue

R = 3,09 Å Res: -35,60 ue

R = 10,0 Å Res: -0,061 ue

2.4.- Recordeu les expressions del volum V i la superfície S d'una esfera:

$$V = \frac{4}{3} \pi r^3 \quad ; \quad S = 4 \pi r^2$$

Calculeu V, S i el quocient S/V d'una esfera de radio...

r = 0,875 m. Res:  $3,429 \text{ m}^{-1}$

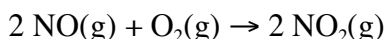
r = 3 m. Res:  $1 \text{ m}^{-1}$

2.5.- Les companyies elèctriques facturen el consum en kiloWatts-hora (kWh). Aquesta és una unitat de treball. Volem saber a quanta energia equival el consum de 25 kWh en Joules i en kilocalories, expressats en notació científica amb tres xifres decimals ( $n,nnn \times 10^m$ )

Recordeu:  $1 \text{ W} = 1 \text{ J s}^{-1}$ ;  $1 \text{ cal} = 4,184 \text{ J}$  (valor exacte).

Res:  $9,000 \times 10^7 \text{ J} \equiv 2,151 \times 10^4 \text{ kcal}$

2.6.- En la reacció química:



l'increment d'entalpia estàndar ( $\Delta H^\circ$ ) i el d'entropia estàndar ( $\Delta S^\circ$ ) a 298,15 K són, respectivament,  $-114,1 \text{ kJ}$  i  $-146,5 \text{ J K}^{-1}$ . La reacció serà espontània (en condicions estàndar) quan la variació d'energia lliure de Gibbs estàndar ( $\Delta G^\circ$ ) siga menor que zero. Sabent que es compleix

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

estimeu (variant T), quin rang de temperatures fan la reacció espontània i no espontània (en condicions estàndar), suposant  $\Delta H^\circ$  i  $\Delta S^\circ$  constants en aquests rangs. (Atenció, cuidat amb les unitats de  $\Delta S^\circ$ ).

2.7.- La constant d'equilibri d'una reacció pot obtenir-se mitjançant l'expressió:

$$\ln K_{eq} = \frac{-\Delta H^\circ}{RT} + \frac{\Delta S^\circ}{R}$$

Trobar el valor de  $\ln K_{eq}$  en el rang de temperatures de 800 a 1150 K en intervals de 50 graus per a una reacció a partir de les següents dades. R (constante de los gases) = 8,3145 J/(mol K);  $\Delta H^\circ = -180,0$  kJ/mol;  $\Delta S^\circ = -179,4$  J/(mol K). A quina temperatura aproximada valdrà  $\ln K_{eq} = 13,8$ ?

2.8.- La fórmula empírica d'un compost pot calcular-se si es coneix el seu anàlisi elemental. Trobar la fórmula empírica de un compost (un alcà halosubstituit) que té la composició: C 10,73%; H 0,90%; Br 71,39%; F 16,79%.

Si a més es coneix la massa molecular, podem determinar també la fórmula molecular. En aquest cas,  $M_r = 223,84$ . Calculeu la fórmula molecular

Res: fórmules: empírica: C H Br O ; molecular: C<sub>2</sub> H<sub>2</sub> Br<sub>2</sub> F<sub>2</sub>

AJUDA: Per cada element, E, es determina un index provisional "n" dividint  $\%(\text{E})/\text{Ar}(\text{E})$ . El index empíric de cada element E s'obté dividint cada "n" pel mínim de tots ells. Si algun índex no és quasi enter, cal multiplicar per algún factor per a que tots els indexes siguin enters.

2.9.- Altres composts per calcular la fórmula empírica i la fórmula molecular

a) Histidina (un aminoàcid): C 46,45%; H 5,850%; N 27,08%; O 20,62%. Res: C<sub>2</sub> H<sub>3</sub> O N

(calculeu també la fórmula molecular, si sabem que  $M_r(\text{Histidina})=155,07$ )

b) Triptòfan (un altre aminoàcid): C 64,69%; H 5,92%; N 13,72%; O 15,67%. Res: C<sub>11</sub> H<sub>22</sub> O<sub>2</sub> N<sub>2</sub>

(calculeu també la fórmula molecular, si sabem que  $M_r(\text{Triptòfan})=204,09$ )

c) Timina (una base del DNA): C 47,62%; H 4,76%; N 22,21%; O 25,37%. Res: C<sub>5</sub> H<sub>6</sub> O<sub>2</sub> N<sub>2</sub>

(calculeu també la fórmula molecular, si sabem que  $M_r(\text{Timina})=126,11$ )

d) Estricnina (un verí molt perillós utilitzat com a raticida). C 75,45%; H 6,587%; N 8,383%; O 9,581%.

Res: C<sub>21</sub> H<sub>22</sub> O<sub>2</sub> N<sub>2</sub> (Nota: en aquest cas cal multiplicar per dos el resultat inicial)  $M_r(\text{Estricnina})=334,41$

### 3.- Matrius i vectors

3.1.- Operacions bàsiques amb matrius.

a) Sumar i multiplicar les matrius **M** i **N** següents

b) Restar i dividir de les dues maneres possibles les matrius **M** i **N** següents

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 2 & 7 \\ 3 & 5 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{N} = \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 7 & 2 \end{pmatrix}$$

3.2.- Construïu les matrius 3x3 següents, que en direm **A** i **B**:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 7 \\ 1 & 3 & -5 \\ 2 & 6 & -2 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 3 & -5 & 9 \\ -1 & 2 & 4 \\ -3 & -7 & 4 \end{pmatrix}$$

a) Calculeu el determinant de **A** i el de **B**

b) Calculeu la matriu inversa de **A**

c) Calculeu el producte **AB**, el producte **BA** i el quocient **A/B**

d) Calculeu el determinant del quocient.

Resultat de l'apartat a)  $|\mathbf{A}| = 16$ ;  $|\mathbf{B}| = 265$ ; d):  $|\mathbf{A/B}| = 0,06038$

3.3.- a) Construïu una matriu 3x3. Calculeu el seu determinant.

b) Si és distint de 0, calculeu la matriu inversa. (Si el determinant val 0, canvieu la matriu i torneu a començar)

c) Multipliqueu ambdues matrius per a obtenir una matriu unitat 3x3.

3.4.- a) Construïu una matriu més gran que en l'exercici anterior (6x6, per exemple) i comproveu que el determinant d'una matriu canvia de signe si es permuten de lloc entre elles dues files qualssevol.

b) Comproveu el mateix per a la permutació de dues columnes.

3.5.- a) Construïu dues matrius quadrades arbitràries, (almenys, 4x4) i comproveu que si dues matrius quadrades es multipliquen, els seus determinants també ho fan.

b) Es compleix el mateix amb la suma de matrius? Comproveu-lo.

3.6.- a) Prenni dues matrius quadrades (almenys, 4x4) que només es diferencien en una columna. Construïu una tercera matriu igual a les anteriors però en la qual la columna diferent sigui suma (o resta) de les dues columnes que eren diferents en les dues primeres matrius. Comproveu ara que la suma (o resta) dels determinants de les dues primeres matrius sí és igual al determinant de la tercera.

3.7.- a) Construïu una matriu 2x4 i altra 4x3. Multipliqui-les.

b) Construïu altres parells de matrius no quadrades que puguin multiplicar-se i multipliqueu-les (per exemple, matrius 3x2 i 2x5 o 5x3 i 3x2.)

c) Ídem per als casos

c1.- 3x1 i 1x3

c2.- 1x3 i 3x1 (Producte escalar d'un vector fila per un vector columna)

c3.-  $3 \times 3$  i  $3 \times 1$  (Producte d'una matriu per un vector columna)

c4.-  $1 \times 3$  i  $3 \times 3$  (Producte d'un vector fila per una matriu).

3.8.- a) Feu servir el FC per a operar amb vectors:

Sumeu els vectors  $3\mathbf{i} + 4\mathbf{j} - 6\mathbf{k}$  i  $2,4\mathbf{i} - 5\mathbf{j} + 1,3\mathbf{k}$

Calculeu el quocient dels seus mòduls.

b) Obtingueu el producte escalar dels dos vectors anteriors.

c) Obtingueu l'angle que formen entre ells a partir del producte escalar i els seus mòduls.

d) Repetiu els exercicis anteriors amb altres vectors definits per vostè.

3.9.- Sumar els vectors  $\mathbf{r} = 3\mathbf{i} + 5,5\mathbf{j} + 8\mathbf{k}$  i  $\mathbf{s} = 2,4\mathbf{i} + 3,5\mathbf{j} + 5\mathbf{k}$  i usar l'anomenada "regla del cosinus"

$$|\mathbf{r} + \mathbf{s}|^2 = |\mathbf{r}|^2 + |\mathbf{s}|^2 + 2|\mathbf{r}||\mathbf{s}|\cos(\theta)$$

per a obtenir l'angle  $\theta$  que formen  $\mathbf{r}$  i  $\mathbf{s}$ .

#### **4.- Exercicis de sèries, representació de funcions i construcció de taules.**

##### 4.1.- *Exercici model de representació de funcions*

a) Construir una sèrie en columna de valors de x entre 0 i 2 amb un interval de 0.05 entre ells.

b) Calcular en columnes contigües les funcions

$$1^x; \left(\frac{1}{2}\right)^x; \left(\frac{1}{e}\right)^x; \left(\frac{1}{10}\right)^x;$$

c) Representar gràficament totes aquestes funcions en la mateixa gràfica.

d) Ajustar l'eix de les ordenades (y) entre 0 i 5

e) Calcular ara columnes addicionals amb les funcions

$$2^x; e^x; 10^x$$

i afegir-les a la mateixa gràfica anterior.

##### 4.2.- Realitzar un exercici similar a l'anterior amb les següents dades:

Interval de les abscisses (x) : Entre 0 i 2

Primer grup de funcions:

$$x^1; x^{3/4}; x^{1/2}; x^{1/3}; x^{1/5}; x^{1/100}$$

Interval de les ordenades (y): Entre 0 i 2

Segon grup de funcions

$$x^{4/3}; x^2; x^3; x^5; x^{25}$$

*NOTA: En la construcció de taules és important sovint l'ús correcte de les referències absolutes. Els exercicis següents deuen fer-se usant referències absolutes quan sigui convenient o necessari.*

*NOTA: L'exercici següent és “un model” per a molts altres similars. Es tracta d'exercicis pensats per a ajudar a entendre la diferència entre “paràmetres” i “variables” d'una funció i per a conèixer amb detall diversos tipus de funcions.*

##### 4.3.- Generar una taula de valors de la funció lineal:

$$y = m x + b$$

on m i b són paràmetres; x, la variable independent; y la variable dependent.

- Construir una taula de valors de y que resulten quan x varia de -10 fins a 10 de 0,1 en 0,1. Per a això és necessari tenir un conjunt de paràmetres {m,b}. Prendrem uns valors arbitraris però situats en cel·les ben definides. Per a començar, prendre m=1, b=1. Els valors de y es programaran de manera que depenguin de les adreces absolutes de les cel·les que contenen els valors de m i de b.

-Al costat de la taula (x,y), fer la representació gràfica de la corba “y en funció de x”.

-Modificar les cel·les que contenen m i/o b. Verificar l'efecte sobre la gràfica. Fer un estudi sistemàtic del que ocorre al modificar m o b.



#### 4.4.- Taules de doble entrada

a) Construïu una taula de volums (en litres) per a un mol de gas ideal a diferents P (0.8, 1.0, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8 i 2.0 atm) per a un conjunt de valors de T (260, 265, 270 ..., fins a 400 K). Els volums corresponents a cada P fixa deuran aparèixer en columna (per tant les P estaran en una fila i les T en columna).

b) Construïu altra taula a part equivalent a l'anterior però en la qual per a cada T fixa apareguen els volums en columna per a les diferents P (per tant les P estaran en una columna i les T en una fila). Ha de preveure que el nombre de mols del gas poden modificar-se, de manera que ambdues taules deuen recalcularse automàticament si es modifica el nombre n de mols de gas. El valor de n deurà estar indicat en una única cel·la a part.

AJUDA: Recordeu que  $R=0,0820578 \text{ atm L K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ . Amb les dades obtindrà dues taules de volums de gasos ideals en L (litres)

NOTA: Per què no apareix en cap cel·la el famós valor de 22,4 L que “se suposa” que ocupa un mol?

c) Dupliqueu ara les dues taules en altra part del document Excel. En les taules duplicades les dades de volum deuen llegir-se en  $\text{cm}^3$ . Les quatre taules (les dues inicials i les dues duplicades) deuran recalcularse soles cada vegada que es canvie el nombre n de mols. (NOTA: Si té coneixements avançats de Excel, pot duplicar les taules en un full de càlcul a part però en el mateix document o “llibre” Excel.)

#### 4.5.- Calculador de masses moleculars d'hidrocarburs i altres molècules orgàniques.

Els alcans, (mono)alquens i (mono)alquins tenen les fórmules generals  $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$ ,  $\text{C}_n\text{H}_{2n}$  i  $\text{C}_n\text{H}_{2n-2}$  respectivament.

a) Feu una taula que pugua “créixer” còmodament on, donat “n”, s'obtingua al costat, en columnes successives, les masses moleculars relatives de l'alcà, l'alquè i l'alquí corresponents.

b) Amplieu la taula de manera que en columnes contigües a cada hidrocarbur, s'obtingua el percentatge en pes de cada element (C i H)

DADES:  $A_r(\text{C})=12,0107$ ,  $A_r(\text{H})=1,0079$

#### 4.6.- Calculador de masses moleculars de molècules orgàniques comunes.

Considereu molècules de fórmula molecular general  $\text{C}_a \text{H}_b \text{O}_c \text{N}_d$

Construïu una taula que pugua “créixer” còmodament on, donades “a, b, c, d” obtingueu al costat la massa molecular del compost  $\text{C}_a \text{H}_b \text{O}_c \text{N}_d$  corresponent (i de tots els seus isòmers, naturalment) així com el percentatge en pes de cada element.

DADES:  $A_r(\text{C})=12,0107$ ,  $A_r(\text{H})=1,0079$ ,  $A_r(\text{O})=15,9994$ ,  $A_r(\text{N})=14,0067$ .

Alguns resultats de control:

$\text{CH}_4$  ( $M_r=16,0423$ , %C: 74,87, %H: 25,13).

$\text{C}_2\text{H}_4$  ( $M_r=28,0530$ , %C: 85,63, %H: 14,37).

$\text{H}_2\text{CO}$  ( $M_r=30,0259$ , %C: 40,00, %H: 6,71, %O: 53,29)

$\text{CH}_5\text{N}$  ( $M_r=31,0569$ , %C: 38,67, %H: 16,23, %N: 45,10).

4.7.-

a) Genereu sèries aritmètiques de valors en columna segons aquestes dades:

|                     |                  |               |
|---------------------|------------------|---------------|
| Valor inicial: -100 | Valor final: 100 | Increment: 10 |
| -10                 | 10               | 0,5           |
| 0                   | 360              | 5             |

b) Genereu sèries geomètriques de valors en columna:

|                  |                    |                          |
|------------------|--------------------|--------------------------|
| Valor inicial: 1 | Valor "final": 200 | "Increment" o raó: 1,1   |
| 100              | Valor "final": 0,2 | "Increment" o raó: 0,975 |

c) La sèrie de les potències de 2 amb valor inicial  $2^1$  i valor final en  $2^{32}$  o en  $2^{64}$  és molt important en informàtica teòrica (amb n bits, el numero enter més gran que pot representar-se és  $2^n$ ). Aquesta sèrie pot generar-se com sèrie geomètrica. Genereu les sèries fins a  $2^{32}$  i fins a  $2^{64}$

d) Calculeu la sèrie de potències de 2 fins  $1,0 \times 10^{32}$  i fins  $1,0 \times 10^{64}$  i obtingau quants elements té cadascuna d'elles.

R: Nombre d'elements de la sèrie: Fins a  $10^{32}$  : 107; fins a  $10^{64}$  : 213.

Practiqueu la generació d'altres sèries (temporals, geomètriques...).

NOTA: Les sèries aritmètiques es caracteritzen per "l'increment" entre els elements contigus. Les sèries geomètriques es caracteritzen per la "raó" o quocient entre elements contigus. El valor "final" en les dades per a generar sèries actua com element màxim o mínim el valor del qual no pot depassar-se.

4.8.- Genereu una sèrie de valors de la variable independent x i programeu les següents funcions:

$$e^x, e^{-x}, \operatorname{sh}x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}, \operatorname{ch}x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$$

Les funcions  $\operatorname{sh}x$  i  $\operatorname{ch}x$  definides dalt es diuen "sinus hiperbòlic" i "cosinus hiperbòlic" respectivament. (Són funcions que apareixen com solució de certes equacions diferencials d'interès en Química i en Física. Es diuen "hiperbòliques" perquè poden definir-se de forma semblant a les funcions trigonomètriques clàssiques o circulars, però es defineixen sobre una hipèrbola en lloc de sobre una circumferència).

a) Comproveu que els valors obtinguts dalt per a  $\operatorname{sh}x$  i  $\operatorname{ch}x$  són els mateixos que els que proporcionen les funcions  $\operatorname{SENOH}()$  i  $\operatorname{COSH}()$  predefinides al full de càlcul Excel.

b) Comproveu també que es compleix la relació trigonomètrica  $\operatorname{ch}^2x - \operatorname{sh}^2x = 1$  per a tots els valors de x. (Recordeu que en el cas de les funcions trigonomètriques circulars  $\sin(x)$  i  $\cos(x)$  allò que és igual a 1 és la **suma** dels quadrats).

c) De la mateixa manera que la tg trigonomètrica és igual al quocient ( $\sin x / \cos x$ ), es defineix la tangent hiperbòlica

$$\operatorname{th}x = \operatorname{sh}x / \operatorname{ch}x.$$

Comproveu que els valors de  $\operatorname{th}x$  obtinguts per quocient són iguals als de la funció  $\operatorname{TANH}()$  predefinida al full de càlcul Excel.

4.9.- Construïu sèries similars de valors per a altres funcions matemàtiques. Per exemple:

a)  $y = \ln(\sin x)$

b)  $y = e^{-x} \ln x$ . (Comproveu cap a quin valor tendeix aquesta funció a valors molt grans de x).

c)  $y = x(1+x^2)^{1/2}$ .

d)  $y = \operatorname{tg}^3(x)^{1/2}$ .

e) Proveu altres funcions.

## **5.- Ajustaments i representació d'errors. Interpolacions i extrapolacions**

5.1.- Ajustament de dades (x,y) a una recta

$$y = m x + b$$

S'ha de calcular

a) La “pendent” m i la “ordenada en l'origen” b, el “coeficient de regressió” R i els errors d'ajustament associats a m i a b

- Les dades següents s'han obtingut a l'amidar la propietat “y” en els vuit punts “x”
- Representar les dades de y enfront de x i ajustar-los a una línia recta, de manera que l'ajustament proporcione l'equació de la recta i el quadrat del coeficient de regressió.
- Usar la funció ESTIMACION.LINEAL(...;...;...;...) de EXCEL per a obtenir el mateix ajustament, i els errors associats a la pendent m i a l'ordenada en l'origen

| x   | y     |
|-----|-------|
| 3,0 | -0,37 |
| 3,7 | -0,35 |
| 4,4 | -0,31 |
| 5,1 | -0,27 |
| 5,9 | -0,25 |
| 6,6 | -0,23 |
| 7,3 | -0,19 |
| 8,0 | -0,14 |

Res:  $y = 0,0436x - 0,5038$ ;  $R^2 = 0,9884$ ; Valor de  $m = 0,044 \pm 0,002$ ;  $b = -0,50 \pm 0,01$

5.2.- Exercici d'ajustament d'una equació coneguda a dades experimentals.

S'ha amidat la viscositat (en centiStokes, cSt) de dissolucions de D-fructosa en aigua, a diverses temperatures.

Els resultats del mesurament van ser

| temp / °C | $\mu'$ /cSt (1%) | $\mu'$ /cSt (2%) | $\mu'$ /cSt (3%) |
|-----------|------------------|------------------|------------------|
| 15        | 1,17             | 1,18             | 1,20             |
| 17        | 1,12             | 1,13             | 1,16             |
| 20        | 1,04             | 1,05             | 1,07             |
| 22        | 0,99             | 1,00             | 1,03             |
| 25        | 0,93             | 0,94             | 0,97             |
| 27        | 0,88             | 0,90             | 0,92             |
| 30        | 0,83             | 0,84             | 0,86             |

Se sap que la relació entra la viscositat i la T ve donada per

$$\mu' = A e^{B/T}$$

o be

$$\ln \mu' = \ln A + BT^{-1}$$

Determinar  $\ln A$  i  $B$  (amb el seu error) per a cada dissolució de D-\*fructosa a partir de l'ajustament.

### 5.3 Exercici per a trobar una funció que s'ajuste a les dades

Supose's que les dades següents s'han obtingut al mesurar la propietat "y" en els vint-i-un punts "x".

-Representar les dades de y enfront de x

- Buscar l'expressió matemàtica "y=funció de x" que representa el millor ajustament o, si escau, un ajustament acceptable de les dades. Obtenir la representació gràfica de la funció proposada.

| x   | y     |
|-----|-------|
| 3,0 | 21,85 |
| 3,3 | 18,59 |
| 3,5 | 18,57 |
| 3,8 | 18,53 |
| 4,0 | 16,31 |
| 4,3 | 13,81 |
| 4,5 | 13,75 |
| 4,8 | 14,77 |
| 5,0 | 10,85 |
| 5,3 | 9,60  |
| 5,5 | 9,26  |
| 5,8 | 7,86  |
| 6,0 | 7,03  |
| 6,3 | 5,25  |
| 6,5 | 4,16  |
| 6,8 | 5,76  |
| 7,0 | 3,00  |
| 7,3 | 2,29  |
| 7,5 | 1,56  |
| 7,8 | 1,10  |
| 8,0 | 0,83  |

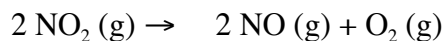
$$\text{Res: } y = 0,0719x^3 - 0,9040x^2 - 1,1111x + 30,7006; \quad R^2 = 0,9830$$

## 5.4 Ajustaments de dades en Cinètica Química-

### 5.4.1.- Exercici d'exemple

Els ajustaments lineals són de gran utilitat per a determinar l'ordre cinètic d'una reacció química respecte a un reactiu en el cas de reaccions que tenen un comportament senzill.

Considerem la reacció



que podem considerar del tipus  $(A \rightarrow B + 1/2 C)$

Dades:  $[\text{NO}_2]$  en M enfront de t en s

| t / s | [A] / M |
|-------|---------|
| 0     | 0,01    |
| 50    | 0,0079  |
| 100   | 0,0065  |
| 200   | 0,0048  |
| 300   | 0,0038  |

Per a trobar l'ordre, cal representar  $[A]$ ,  $\ln[A]$ ,  $1/[A]$  i  $1/[A]^2$  enfront de t. Si s'obté una recta en algun d'aquests casos, la reacció serà d'ordre zero, un, dos o tres, respectivament, respecte al  $\text{NO}_2$ . El pendent de la recta ens donarà el valor de la constant de velocitat (corresponent a la reacció escrita de manera que el coeficient estequiomètric del reactiu de referència, A, valgui 1)

R: Ordre 2;  $k = 0,5445 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$

5.4.2 Realitzar el mateix tipus d'exercici per al cas següent:

Reacció  $2 A \rightarrow A_2$  (Dimerització)

$(A \rightarrow 1/2 A_2)$

Dades\*:  $[A]$  en M front a t en min.

| t / min | [A] / M |
|---------|---------|
| 0       | 0,0680  |
| 40      | 0,0502  |
| 80      | 0,0403  |
| 120     | 0,0331  |
| 160     | 0,0284  |
| 240     | 0,0223  |
| 300     | 0,0187  |
| 420     | 0,0147  |
|         |         |

Representar  $[A]$ ,  $\ln[A]$ ,  $1/[A]$  i  $1/[A]^2$  front a t. Si s'obté una recta en algun d'aquests casos, la reacció serà d'ordre zero, un, dos o tres, respectivament, respecte al reactiu A. Determinar l'ordre cinètic respecte a A i la constant o coeficient cinètic de velocitat k.

R: Ordre 2.  $k = 0,1272 \text{ M}^{-1}\text{min}^{-1}$

\*( Les dades corresponen a la dimerització de l'òxid de nitril a  $40^\circ \text{C}$  )

5.4.3 Realitzar el mateix tipus d'exercici per al cas següent:

Reacció  $A(g) \rightarrow$  Productes amb dades de pressió parcial enfront de temps.

( $A \rightarrow$  Productes)

Dades\*: **Pressió parcial de A (P)** en mmHg enfront de **t** en s

| t / s | P / mmHg |
|-------|----------|
| 0     | 348      |
| 600   | 247      |
| 1200  | 185      |
| 2400  | 105      |
| 3600  | 58       |
| 4800  | 33       |
| 6000  | 18       |
| 7200  | 10       |

Representar  $P$ ,  $\ln(P)$ ,  $1/P$  i  $1/P^2$  enfront de  $t$ . Si s'obté una recta en algun d'aquests casos, la reacció serà d'ordre zero, un, dos o tres, respectivament, respecte al reactiu A .

\*( Les dades corresponen a la descomposició del del pentòxid de dinitrogen  $N_2O_5$  a  $45^\circ C$  )

R: Ordre 1,  $k=0,00021 s^{-1}$

5.4.4.- Realitzar el mateix tipus d'exercici

Altra reacció ( $A \rightarrow$  Productes) amb dades de concentració enfront de temps \*

Dades\*:  $[A]$  en M enfront de  $t$  en min.

| t / min | [A] / M  |
|---------|----------|
| 195     | 1,61E-02 |
| 604     | 1,47E-02 |
| 1246    | 1,29E-02 |
| 2180    | 1,14E-02 |
| 3690    | 9,60E-03 |
| 4655    | 8,85E-03 |
| 6210    | 7,20E-03 |
| 8135    | 5,70E-03 |
|         |          |

Representar  $[A]$ ,  $\ln[A]$ ,  $1/[A]$  i  $1/[A]^2$  enfront de  $t$ . Si s'obté una recta en algun d'aquests casos, la reacció serà d'ordre zero, un, dos o tres, respectivament, respecte al reactiu  $A$ .

\*(La descomposició del butadié a 500 K es comporta de forma similar a aquestes dades).

R: Ordre 1,  $k=5,5 \times 10^{-5} \text{ min}^{-1}$

## 5.5 Representació i ajust de dades en rangs molt diferents

5.5.1.- Utilitzar les dades  $(x,y)$  de l'exercici 5.3 per a representar, en la mateixa gràfica, les sèries de punts  $(x,y)$  i  $(x, x^y)$ .

Utilitzar l'opció "eix secundari" i altres opcions per a que la gràfica permeti la representació clara de les sèries, i els seus ajustos corresponents.

5.5.2.- Fer el mateix amb les sèries  $(x, e^x)$  y  $(x, e^y)$ , estant representada la sèrie  $(x,y)$  i sense estar representada.



## 6.- Resolució numèrica d'equacions

6.1.- a) Resoldre l'equació

$$x^2 = 2x^3$$

R: 0,0 ; 0,0080386; 0,500

b) Resoldre les equacions: (Nota: Es dona un resultat. En alguns casos podria haver més d'un resultat. **¡És molt important que s'entengui perquè pot passar això i què cal fer per a trobar altres possibles resultats!**)

$$4/(x+x^{1/2}) = 3x \quad R: 0,79242$$

$$2x^2 = 1/x^{1/2} R: 0,75786$$

$$2x^4 = 1/(x^{1/2}+x) R: 0,74646$$

$$2x^3 = 1/(x^3+x) \quad R: -0,75180$$

$$(\sin(x))^3 - 1/\tan(x) = \cos(x) \quad R: 1,18080 \text{ radians} = 67,6551^\circ$$

$$x^x = 2x^3 \quad R: 0,73624$$

6.2.- Resoldre el problema 2.6 trobant la temperatura absoluta exacta a la qual la reacció està en equilibri ( $\Delta G^\circ=0$ ).

6.3.- Resoldre el problema 2.7 trobant la temperatura absoluta exacta a la qual la constant d'equilibri és 984609,111.

6.4.- Siga la matriu

$$\begin{bmatrix} 7 & 4 & 9 \\ 5 & 9 & 8 \\ 1 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

quant ha de valer l'element  $a_{11}$  per a que el determinant de la matriu sigui 7?

6.5.- Trobar, usant buscar objectiu, valors de b que fan  $r=0$ .

$$r = (a^3 - 3c^2)^{1/2}$$

$$a = 3b^2 + 2b - 1$$

$$c = 5b^2 - 3b - 1$$

6.6.- Trobar el màxim de  $F = 6xy - 3y^2 + z - z^2$  modificant simultàniament les variables  $y, z$  però no la  $x$  que és igual a 7. Solució:  $(x, y, z) = (7; 7; 0,5)$

6.7.- Trobar almenys un zero d'aquesta mateixa funció variant  $x, y, z$  alhora.

Algunes solucions:  $(3,4940; 7,0000; 0,5000)$   $(5,0610; 0,1073; 2,3640)$

6.8.- La funció  $y = (x-2)^{3/2}$  té un mínim. Trobar-lo. Solució:  $x=2, y=0$ .

Nota: La solució ha de complir una condició perquè  $y$  sigui real.

6.9.- Donades les funcions  $F$  i  $G$ , a on  $F = xy$ ,  $G = 2x + 3y + 1$ , obtenir els valors de  $(x, y)$  que fan màxim  $F$  quan  $G$  val 14. Solució:  $x = 3,25; y = 2,17$ .

6.10.- Trobar dos nombres que la seva suma done 15 i el producte dels quals done 10.

Solució: 14,301; 0,699.

6.11.- Trobar dos nombres que la seva suma valga  $e*\pi$  i el producte dels quals valga  $e+\pi$ .

Solució : 0,752497; 7,787238.

6.12.- Trobar dos nombres que el seu producte siga 16 i la seua suma siga mínima.

Solució: 4,4.

6.13.- Trobar dos nombres que el seu producte siga 16 i la suma d'un d'ells amb el quadrat de l'altre siga mínima.

Solució : 8; 2.

6.14.- Siguen les equacions:  $x^2 + y = 3$  ;  $y^2 + x = 5$ . Trobar les seues arrels.

Solució :  $x=1$ ,  $y=2$ .

6.15.- Donada l'equació  $y = 4x^4 - 7x^2 - x + 2^{1/2}$ , trobar: els seus dos mínims, el seu màxim i les seves quatre arrels. Nota: per a trobar més d'una solució cal provar diferents valors inicials. (Ajuda: Es recomana començar per buscar les arrels (valors de  $x$  que fan  $y=0$ ))

6.16.- El mateix per a la funció:  $y = 4x^5 - 11x^3 + 5x + 2^{1/2}$ . (Aquest polinomi té 3 arrels reals, dues màxims i dos mínims).

6.17.- Trobar la distància mínima entre el punt (4,2) i la paràbola  $y^2=8x$

(Ajuda: La distància entre dos punts,  $(x,y)$  i  $(4,2)$  ve donada per  $((x-4)^2+(y-2)^2)^{1/2}$  ).

(Verificar que la resposta equival a  $8^{1/2}$  )

## **7.- Exercicis addicionals**

*Els problemes no sempre es presenten acompanyats de la fórmula que es necessita (com era el cas en els exercicis de l'apartat 2). Quan ocorre aço hem de deduir-la o buscar-la pensant un poc, o demanant ajuda als llibres, o tractant de trobar entre varis (treball en equip) la forma de resoldre'l.*

### **7.1.- Exercicis d'enunciat general**

*Es proposa que aquests enunciats sigan analitzats en grup abans de programar-los en el full de càlcul.*

7.1.1- Cert país, poc inclinat a canviar de costums anteriors a la Revolució Francesa de 1789, utilitza l'arcaïca escala de temperatures de Fahrenheit. 32°F equivalen a 0°C, i 212°F equivalen a 100°C. Programeu el Full de càlcul de manera que donada una temperatura en °F obtingueu el seu equivalent en °C amb dos dígits decimals, i viceversa.

7.1.2.- Un globus meteorològic emplenat amb  $H_2$  a  $P=1,00$  atm i a 25°C té un diàmetre de 3,00 m. Si ascendeix fins a regions elevades, el globus trobarà temperatures i pressions més baixes. Això afectarà al volum del gas tancat en el globus, i per tant al volum del globus. Programeu el Full de càlcul per a que li done

el diàmetre del globus per a una  $t$  (en  $^{\circ}\text{C}$ ) i una pressió donades.

AJUDES:

- 1.- Suposeu comportament ideal del gas i globus perfectament esfèric i hermètic.
- 2.- Unes condicions probables en l'alta atmosfera són  $t = -40^{\circ}\text{C}$  i  $p = 0,50$  atm. Obtingueu el diàmetre del globus en aquestes condicions i també para ( $t = -30^{\circ}\text{C}$  i  $p = 0,60$  atm) i para ( $t = -50^{\circ}\text{C}$  i  $p = 0,40$  \*atm).
- 3.- Recordeu que per a un gas ideal,  $pV/T$  és constant si el nombre de mols no canvia. En problemes anteriors té l'expressió per al volum d'una esfera.

## 7.2.- Exercicis de dissolucions i solubilitats

(NOTA: Les expressions i notacions necessàries per a aquest apartat es donen en document a banda)

7.2.1.- Quants g de sosa càustica, NaOH, suposada pura, s'han de pesar per a preparar 100  $\text{cm}^3$  de dissolució 0,01M?

R: 0,04 g

7.2.2.- Quants ml de metanol,  $\text{CH}_3\text{OH}$ , cal pipetejar per a preparar 100  $\text{cm}^3$  de dissolució 0,5M? La densitat del metanol, suposat pur, és  $D_4^{20} = 0,792$ .

(NOTA:  $D_4^{20}$  o  $D_{20/4}$  vol dir "densitat a  $20^{\circ}\text{C}$  relativa a l'aigua pura a  $4^{\circ}\text{C}$  que té una densitat de 1.000  $\text{kg}/\text{dm}^3$ ).

R: 2,02 ml

7.2.3.- Quants g de mostra s'han de pesar per a preparar 2 litres de dissolució 0,25 M de  $\text{FeCl}_3$  a partir de una mostra amb riquesa 86,5%?

R: 93,87 g

7.2.4.- Quants g de mostra de  $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ , suposat pur, s'han de pesar per a preparar 12 litres de dissolució 1,50 M en  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  ?

R: 5148,4 g

7.2.5.- Quina és la concentració molar i molal d'un  $\text{HNO}_3$  concentrat, de densitat 1,405  $\text{kg}/\text{dm}^3$  i riquesa 68,1% ?.

R: 15,18M ; 33,88 molal;

7.2.6.- Quants ml d'àcid ortofosfòric  $\text{H}_3\text{PO}_4$  cal pipetejar per a preparar 500  $\text{cm}^3$  de dissolució 0,3M? La densitat del  $\text{H}_3\text{PO}_4$  concentrat és 1,69  $\text{g}/\text{cm}^3$  i la seua riquesa el 85% en pes.

R: 10,23 ml

## Exercicis addicionals de dissolucions

7.2.7.- Quants ml de ClH concentrat cal pipetejar per a preparar 500 ml de dissolució 0,05M? La densitat del ClH concentrat, de riquesa 34,5% (en pes), és de 1,18  $\text{kg}/\text{dm}^3$ .

R: 2,24 ml

7.2.8.- Quina és la concentració molal de l'àcid ortofosfòric  $\text{H}_3\text{PO}_4$  al 85% (p/p)? I la seua molaridad? I la seua fracció molar?

R: 57,82 molal. 14,74 M.  $x=0,51$ .

7.2.9.- Quants ml de formaldehid HCOH de riquesa 35% (p/v) cal pipetejar per a preparar 250 ml de dissolució 0,8M? La densitat del formaldehid al 35% és de 1,08 kg/dm<sup>3</sup>.

R: 17,16 ml.

7.2.10.- Quants g de KNO<sub>3</sub> de riquesa 98% i Mr=101,11 cal pesar per a preparar 5 dissolucions de 100 ml cadascuna que siguen 0,9, 0,85, 0,80, 0,75 i 0,70 M respectivament?

R: 9,29; 8,77; 8,25; 7,74; 7,22

7.2.11.- Quants ml d'acetona (Mr=58,08) de riquesa 99,5% (p/p) cal pipetejar per a preparar 1 litre de dissolució  $2 \times 10^{-4}$  M? La densitat D 20/4 de l'acetona al 99,5% és 0,79.

R: 0,015 ml.

7.2.12.- Doneu la concentració molar i molal de l'acetona al 99,5% usada como a solut d'eixida en l'exercici anterior. Doneu també la fracció molar en acetona d'aquest solut d'eixida.

R: 13,53M; 3426,31 molal;  $x=0,9840$

7.2.13.- Quants g de mostra de Coure II Sulfat pentahidrat (CuSO<sub>4</sub>·5H<sub>2</sub>O), suposat pur, cal pesar per a preparar 750 ml de dissolució 2,5 M en CuSO<sub>4</sub> ? (Mr de la sal hidratada =249,68. Mr de la sal anhidra =159,6.).

R:624,20 g

### Solubilitats

7.2.14.- Les dades que segueixen corresponen a valors experimentals de pKs, a 25°C, de sals molt poc solubles en aigua, de estequiometria tipus AB. Utilitzeu el Full de Càlcul per obtenir:

-La solubilitat  $s$  de cadascuna de les sals. AJUDA: Recordeu que  $s = (K_s)^{1/2}$ .

- Les solubilitats mitjanes de:

Els halurs de Cu: (CuX).

Els halurs de Ag: (AgX).

Els clorurs (MCl).

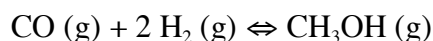
Els bromurs (MBr).

| <u>Sal</u> | <u>pKs</u>     |
|------------|----------------|
| CuBr       | 8,2291         |
| AgCl       | 9,7399         |
| CuCl       | 6,4949         |
| AgBr       | 12,1135        |
| TlCl       | 3,6990         |
| CuI        | 11,9586        |
| <u>AgI</u> | <u>16,0809</u> |

### 7.3 Exercicis d'equilibri químic

### 7.3.1.- Llei d'acció de masses

Un/una químic/química tracta de verificar la llei d'acció de masses i determinar l'expressió correcta de la constant d'equilibri per la reacció



Per fer-ho realitza tres experiments (a la mateixa temperatura!) en els que mesura la concentració de les espècies una volta assolit l'equilibri:

|               | CO (g) | H <sub>2</sub> (g) | CH <sub>3</sub> OH (g) |
|---------------|--------|--------------------|------------------------|
| Experiment 1  |        |                    |                        |
| Inici (M)     | 0.100  | 0.100              | 0.000                  |
| Equilibri (M) | 0.0911 | 0.0822             | 0.00892                |
| Experiment 2  |        |                    |                        |
| Inici (M)     | 0.000  | 0.000              | 0.100                  |
| Equilibri (M) | 0.0753 | 0.151              | 0.0247                 |
| Experiment 3  |        |                    |                        |
| Inici (M)     | 0.100  | 0.100              | 0.100                  |
| Equilibri (M) | 0.138  | 0.176              | 0.0620                 |

El/la químic/a no recorda bé l'expressió correcta de la Constant d'Equilibri. Fent ús de les dades anteriors, proveu tres expressions diferents i determineu quina n'és la correcta:

$$K_1 = [\text{CH}_3\text{OH}]/[\text{CO}][\text{H}_2]$$

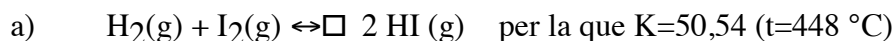
$$K_2 = [\text{CH}_3\text{OH}]/[\text{CO}]^2 [\text{H}_2]$$

$$K_3 = [\text{CH}_3\text{OH}]/[\text{CO}][\text{H}_2]^2$$

(RECORDEU que... l'expressió correcta de la constant serà aquella que done el mateix valor de K en els tres experiments).

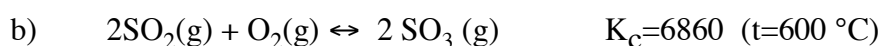
### 7.3.2- Exercicis d'equilibris químics per resoldre'ls amb “**buscar objetivo**”

Programeu amb l'Excel el problema clàssic d'equilibri (Donada una reacció a una T a la qual la seua  $K_{\text{equil}}$  és coneguda, i donades les concentracions inicials de reactius i/o productes, trobar les concentracions en condicions d'equilibri, a eixa T) per a les següents reaccions:



a.1)  $[\text{H}_2]_0 = 1,0 \text{ M}$  ;  $[\text{I}_2]_0 = 1,0 \text{ M}$  ;  $[\text{HI}]_0 = 0$ .

a.2)  $[\text{H}_2]_0 = 5,0 \times 10^{-3} \text{ M}$  ;  $[\text{I}_2]_0 = 1,0 \times 10^{-2} \text{ M}$  ;  $[\text{HI}]_0 = 1,0 \times 10^{-2} \text{ M}$



b.1)  $[\text{SO}_2]_0 = 3,2 \times 10^{-3} \text{ M}$  ;  $[\text{O}_2]_0 = 1,6 \times 10^{-3} \text{ M}$  ;  $[\text{SO}_3]_0 = 1,06 \times 10^{-2} \text{ M}$



c.1) Supposeu diversos casos de concentracions inicials i analitzeu acuradament els resultats.

NOTA: Recordeu que si les condicions inicials s'estableixen en forma de concentracions, heu d'usar la relació entre  $K_p$  i  $K_c$  per a una reacció amb increment net,  $\Delta n$ , de mols **gasosos**:

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$$

### 7.3.3.- Exercicis d'equilibris per a resoldre amb **Solver**

Donada la reacció:  $A (g) + B (g) \rightleftharpoons 2C (g)$  amb una constant d'equilibri  $K_p^\circ = 10$  i unes pressions parcials inicials per a A i C de 5 i 3 bar, respectivament, obtenir la pressió parcial inicial del gas B perquè, en l'equilibri, la pressió parcial del gas C no sigui major de 4 bar. Suposar que l'equilibri es desplaça inicialment cap a la formació de C .

Solució:  $P_B$  inicial = 0,819 bar.