
APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA

Problemes Tema 3.1: Manipulador Algebraic-1 Variables, operadors, expressions

Grau en Química

1º SEMESTRE

**Universitat de València
Facultat de Química
Departament de Química Física**



Aquesta obra está sota una [licència de Creative Commons](#)

I. CÀLCULS ARITMÈTICS

1. Exemple de càlcul convencional: $3.4 \times 6.5 \times 7$

Res.: 154.7

2. Efectuar les següents operacions, comprovant la diferència entre utilitzar nombres sencers i decimals.

Obtenir primer els resultats amb totes las xifres que dona el MA.

Obtenir després els mateixos resultats amb sols tres xifres decimals.

a)	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2} \sqrt{3}$	$\sqrt{12}$	$\sqrt{6} \sqrt{10}$	$\sqrt[3]{6} \sqrt[3]{10}$
b)	$\frac{1}{2} + \frac{1}{3}$	$\frac{1}{4} - \frac{2}{3}$	$\frac{16}{20}$	$\frac{2}{3} \frac{5}{7}$	$\frac{1}{6} + \frac{2}{3} \frac{5}{8}$
c)	$\frac{3(4+5)}{2(6-1)}$	$\frac{\sqrt{3}(4+5/9)}{\sqrt{2}(6-1)}$	$\frac{7-11}{(6-1)/5} - \frac{2}{7}$	$\frac{1}{15} + \frac{2}{7} - \frac{6}{5}$	$\sqrt{\frac{1}{15}} + \frac{\sqrt{2}}{7} - \frac{\sqrt{6}}{\sqrt{5}}$
d)	$1 + \frac{1 + \frac{1}{2}}{2}$	$6\sqrt{\frac{\sqrt{2}}{2}}$			$5\sqrt{\frac{\sqrt{3}}{3}}$
e)	$\frac{(4+5)[2(2-3)+6(5-1)]}{5(4-1)-(2-3)6}$				

Res.:

1.414	2.449	3.464	7.746	3.915
.8333	-3.083	0.800	.4762	.5833
2.7	1.116	-4.286	-.8476	-.6352
1.266	1.328			
9.429				

3. Realitzeu les següents operacions per a practicar l'input del MA i les diferències entre usar punts decimals o no a l'operar amb nombres

- a) $1+(1+(1+(1+(1+(1+(1+(1+10))))))))$
- b) $\frac{345}{12457} + \frac{567}{234567} - 2$ $\sqrt{1+\sqrt{1+\sqrt{1+\sqrt{5}}}}$
- c) $\frac{345}{12457} + \frac{567.25}{234567} - 2$ $\sqrt{1+\sqrt{1+\sqrt{1+\sqrt{5.00}}}}$
- d) $1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{5}}}}$

Res.:

a)	18	
b)	-639557056/324666791	1.6349
c)	-1.9699	1.6349
d)	1.6471	

4. Càlculs amb nombres grans. Observeu la diferència respecte a una calculadora convencional que només pot donar 12 dígits

a)	3^{25}	847 288 609 443
b)	3^{30}	
c)	3^{40}	
d)	5^{55}	
e)	3^{100}	
f)	3^{1000}	
g)	3.00^{100}	5.1537752...x10⁴⁷

5. Calculeu el nombre de molècules en un got d'aigua (destil·lada, a 4 °C) de 100 ml. (1 L pesa 1 kg).

Res.: 3.343×10^{24} molècules d'aigua

6. Calculeu el nombre de nuclis d'H (protons) en 1.00 m^3 (aproximadament equivalent a 1 Tona = 1000 kg) d'aigua.

Res.: 6.686×10^{28} núclis

7. Un 1.15 % són nuclis de Deuteri (D). Quants D hi ha en 1.00 m^3 d'aigua?

Res.: 7.689×10^{26} núclis

II.- VARIABLES

Exemples de problemes per a ser resolts tractant de tenir en compte les unitats.

1. Calculeu la temperatura absoluta d'un gas ideal de massa atòmica igual a 18 unitats si: $p = 2 \text{ atm}$, $V = 100 \text{ L}$, $\text{massa} = 2 \text{ kg}$

Res.: 21.95 K

2. Donada la reacció en fase gasosa: $2\text{NO}(g) + \text{O}_2(g) \rightarrow 2\text{NO}_2(g)$. Quants grams d'oxigen reaccionen amb 5 mols de monòxid de nitrogen suposant que la reacció consumeix tot el NO?. Quin volum ocuparà el producte de la reacció a $p=2 \text{ atm}$ i $t = 30 \text{ }^\circ\text{C}$?

Res.: 79.997 g d'O₂; 62.115 L

3. Calculeu l'energia cinètica en J, d'un objecte de massa 3.00 kg movent-se a 6.50 m/s

Res.: 63.4 J

4. a) Obtenir l'energia cinètica en J, d'un cotxe de 1000.0 kg movent-se a 100 km/hora. b) Amb aquesta energia, quants L d'aigua podrien evaporar-se? (a 25 °C es necessiten 44.02 kJ per a evaporar un mol d'aigua. c) Amb aquesta energia, a quina altura podria elevar-se des del sòl una persona de 80 kg.?

Res.: a) 385802. J ; .1579 L; 492.1 m

5. Una vegada resolt el darrer problema serà fàcil canviar el valor de la velocitat en km/h. Obtenir l'altura a la qual s'aixeca el cos de 80 kg si la velocitat és 80 km/h, 60 km/h, 40 km/h, i 20 km/h.

Res.: 314.9 m; 177.2 m; 78.74 m; 19.68 m;

III.- EXPRESSIONS

1. Simplificar l'expressió algebraica:

$$(x+y+z)^3 - (x+y-z)^3 - (x-y+z)^3 - (-x+y+z)^3$$

Res.: 24 x y z;

2. Realitzeu les següents operacions:

a) $\frac{x-a}{4} + \frac{x-2a}{x+3a}$

b) $\frac{6x-5}{2} - \frac{2x-8}{3}$

c) $\frac{x+3}{x-2} + \frac{x+1}{x+2}$

d) $\frac{a-5b}{2-3b} + \frac{3a+2b}{2-6a}$

3. Desenvolpeu la setena potència de la suma d'**a** i **b** i la vuitena de la seua diferència. Obtingueu la diferència entre ambdós desenvolupaments.

4. Descompondre en productes els polinomis:

a) $x^3 - 2x^2 - 5x + 6$

b) $x^6 + 2x^5 - 8x^4 - 14x^3 + 11x^2 + 28x + 12$

c) $b^4 - 2a^2b^2 + a^4$

d) $b^6 - 3a^2b^4 + 3a^4b^2 - a^6$

5. Treure factors comuns en l'expressió: $a^3 b - a b^3$

6. Treure factors comuns en l'expressió:

$$-\sqrt{a} b^{5x} e^{-ab^2} + 3\sqrt{a} b^{5x} e^{-ab^2} x - 5\sqrt{a} b^{5x} e^{-ab^2+2c} - 2\sqrt{a} b^{5x} e^{-ab^2} x y + 3\sqrt{a} b^{5x} e^{-ab^2} y^5$$

IV.- EXPRESSIONS: PROBLEMES APLICATS

1. Supposeu el següent cas: S'ha amidat la velocitat a la qual s'escalfen dues mostres de materials diferents, A i B. Les velocitats d'escalfament d'ambdues mostres, entre 20 °C i 500 °C s'han ajustat a expressions matemàtiques:

Mostra A: $v_A = 4.52/t + 0.02 t^2$.

Mostra B: $v_B = 19.99 + 3.123 t + 0.0015 t^{1/2}$.

- Obtenir una expressió per a la diferència de velocitats
- Obtenir el valor d'aquesta diferència a 100 °C, 200 °C, 300 °C i a 400 °C.

2. Calculeu distàncies entre objectes que es mouen: Distàncies dependents del temps t.

Prendrem $r^2 = a^2 + b^2$ i veurem què passa si **a** o **b** depenen de t

a) $a = k t$

b) $a = k t$, $b = K t$

c) $a = t_0 + k t$, $b = t_0 - k t$

d) $a = ((t+b)^2)/2$, $b = s+1$

3. La nomenada “força centrípeta” és la qual permet mantenir un cos de massa **m** girant amb moviment circular uniforme. Està relacionada amb la velocitat i el radi de gir per l'expressió

$$f = m v^2 / r.$$

Sabent que **v** està relacionada amb la velocitat angular **w** mitjançant la relació $v = w \cdot r$ i que la velocitat angular està relacionada amb el nomenat “període de gir, **T**” per $w = 2\pi/T$, donar la relació entre el valor de la força i el període **T**

NOTA: La força, la velocitat, la velocitat angular i el radi són vectors. Ací es tracta de relacions entre “mòduls” d'aquests vectors.

4. Buscant relacions físiques on aparega l'acceleració causada per la gravetat, g, trobem aquestes dues:

El període d'oscil·lació d'un pèndol val $T = (4 \pi^2 l) / g$
on **l** és la longitud del pèndol.

L'acceleració **g** està relacionada amb la massa de la Terra, **M** i el seu radi **R**, per $g = G (M/R^2)$ essent **G** la constant gravitatòria universal de Newton.

Obtenir l'expressió de **T** que permeti calcular la massa **M** de la Terra coneixent el seu radi **R**.

5. El nomenat "potencial d'interacció intermolecular de Kratzer", proposat en 1920, té la forma: $V = -\frac{a}{x+x_0} + \frac{b}{(x+x_0)^2}$.

Obtenir altres formes del potencial **V** en funció de **R** i **R_m** sabent que entre **a** i **b** hi ha una relació donada per $x_0 = 2b/a$ i que $x = R - R_m$ essent $R_m = x_0$.

6. L'equació d'estat de van der Waals dels gasos reals té la forma (per a un mol de gas): $\left(P + \frac{a}{v^2}\right)(v-b) = RT$; al mateix temps, els paràmetres **a** i **b** s'obtenen, per a un gas concret, a partir de les nomenades "constants crítiques" d'això gas, mitjançant les relacions: $a = \frac{9}{8}RT_c v_c$; i $b = \frac{v_c}{3}$.

a).- Obtenir l'equació d'estat de van der Waals en funció de les constants crítiques: **T_c** (temperatura crítica) i **v_c** (volum molar crític).

b).- Sabent a més a més que el "factor de compressibilitat crític" es defineix com $z_c = \frac{P_c v_c}{RT_c}$, obtenir l'equació de van der Waals en funció de la **P_c**, la **T_c** i **z_c**, però no el **v_c**.