

Cognoms.....Nom.....GRUP:C

1. Contesteu breument però justificadament a las següents qüestions:

1.1.- Se tenen dos cubetes de 100 cm² d'àrea superficial i 5 cm de profunditat plenes d'aigua a 25 °C (tensió superficial 72.5 mN/m). En una d'elles s'afegeix una certa quantitat de tensioactiu. A continuació s'introdueixen dos capil.lars idèntics en les cubetes, essent l'altura assolida pel líquid en un d'ells 1.21 vegades major que en l'altre. Suposant menyspreable els canvis en la densitat i que la interfase es comporta idealment calculeu el nombre de mols de tensioactiu que s'han afegit.

1.2.- Es disposa d'una mostra de polímer polidispers i de dos dissolvents (A i B) tals que les temperatures theta corresponents són $\Theta_A = 25$ °C i $\Theta_B = 2$ °C. Expliqueu quin dissolvent triaria i com procediria si es volguera fraccionar la mostra treballant inicialment a 15 °C.

1.3.- Una reacció de recombinació $A(g) + B(g) \rightarrow C(g)$ està catalitzada per un cert sòlid de forma que el reactiu A i el producte s'adsorbeixen. Se sap a més a més que l'etapa lenta és la desorció del producte. Obtingueu una expressió per a la velocitat inicial i determineu l'ordre de reacció global a temperatures altes

1.4.- Comenteu la següent frase: "La sedimentació de dispersions col.loidals al augmentar la força iònica del medi es deu al fet que es produïx un augment de les interaccions atractives entre aquestes partícules com a conseqüència de la formació d'una doble capa"

1.5.- En una reacció de trencament homolític $RH \rightarrow R + H$ s'ha determinat que l'efecte cinètic isotòpic per substitució de l'hidrogen per deuteri és igual a 9.3 a 30 °C. Suposant menyspreable l'efecte túnel.

Quan valdrà l'efecte cinètic isotòpic a 20 °C?

■ 1.1.- Nombre de mols de tensioactiu afegits.

Si h^* correspon a l'altura d'arribada en el capil.lar que conté aigua pura, i h la corresponent en el capil.lar que conté aigua + tensioactiu, i el mateix podem simbolitzar per a les tensions superficials, γ^* i γ , podem concloure que segons la relació entre l'altura del menisc en un capil.lar i la γ :

$$h = \frac{2\gamma \cos[\theta]}{(\rho^L - \rho^V)gR} \text{ implicarà que } \frac{h^*}{h} = \frac{\gamma^*}{\gamma}; \quad \gamma^* - \gamma = \pi = \Gamma RT \text{ (interfase ideal)}$$

$$\frac{h^*}{h} = 1.21 = \frac{\gamma^*}{\gamma^* - \Gamma RT} \implies 1.21 \gamma^* - 1.21 \Gamma RT = \gamma^* \implies 0.21 \gamma^* = 1.21 \Gamma RT$$

$$\Gamma = \frac{0.21 \gamma^*}{1.21 RT} / . \{ \gamma^* \rightarrow 0.0725 \text{ N/m}, R \rightarrow 8.314 \text{ J/(K mol)}, T \rightarrow 298.15 \text{ K} \} / . \frac{\text{N}}{\text{J}} \rightarrow \frac{1}{\text{m}}$$

$$\frac{5.07606 \times 10^{-6} \text{ mol}}{\text{m}^2}$$

$$n = \Gamma A / . A \rightarrow 0.01 \text{ m}^2$$

$$5.07606 \times 10^{-8} \text{ mol}$$

StyleForm["nº mols afegits = " PrecedenceForm[n], Subsubsection, FontColor -> RGBColor[0, 0, 1]]

nº mols afegits = 5.07606 × 10⁻⁸ mol

■ 1.2.- Fraccionament de la mostra a 15 °C

(1) Dissoldre el polímer amb el dissolvent B la qual temperatura $\Theta_B = 2$ °C

(2) Afegir dissolvent tipus A (de $\Theta_A = 25$ °C), a la dissolució i així el dissolvent A precipitarà els pesos moleculars alts del polímer.

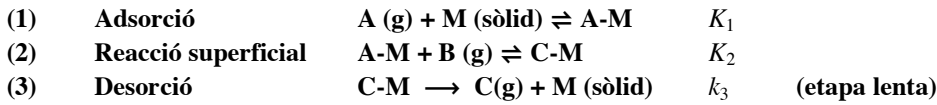
(3) Recollir la fracció precipitada.

Nota: En principi, no valdria refredar la mostra perquè en aquest cas ens demanen que treballem a temperatura de 15 °C i cal pensar que hem d'ajudar-nos de sols els dissolvents de distinta Θ (que faran un paper semblant).

■ 1.3.- Expressió de la velocitat inicial i de l'ordre de reacció a T altes.

Reacció global genèrica: $A(g) + B(g) \rightarrow C(g)$

Etales de detall de l'evolució de la reacció global genèrica:



Expressió corresponent a la velocitat controlant de la reacció:

$$v = k_3 \theta_C - k_{-3} (1 - \theta_A - \theta_C) P_C$$

Tot i que les etapes (1) i (2) són ràpides i per tant es prendran d'equilibri (governades per una $K_{\text{equilibri}}$)

$$K_A = \frac{\theta_A}{P_A (1 - \theta_A - \theta_C)} ;$$

$$K_2 = \frac{\theta_C}{\theta_A P_B} ;$$

Resolguent el següent sistema d'equacions s'obté per a cadascuna de les variables:

$$\text{Solve} \left[\left\{ v == k_3 \theta_C - k_{-3} (1 - \theta_A - \theta_C) P_C, K_A == \frac{\theta_A}{(P_A (1 - \theta_A - \theta_C))}, K_2 == \frac{\theta_C}{(\theta_A P_B)} \right\}, \theta_A, \{v, \theta_C\} \right]$$

$$\left\{ \left\{ \theta_A \rightarrow \frac{K_A P_A}{1 + K_A P_A + K_2 K_A P_A P_B} \right\} \right\}$$

$$\text{Solve} \left[\left\{ v == k_3 \theta_C - k_{-3} (1 - \theta_A - \theta_C) P_C, K_A == \frac{\theta_A}{(P_A (1 - \theta_A - \theta_C))}, K_2 == \frac{\theta_C}{(\theta_A P_B)} \right\}, \theta_C, \{v, \theta_A\} \right]$$

$$\left\{ \left\{ \theta_C \rightarrow \frac{K_2 K_A P_A P_B}{1 + K_A P_A + K_2 K_A P_A P_B} \right\} \right\}$$

$$\text{Solve} \left[\left\{ v == k_3 \theta_C - k_{-3} (1 - \theta_A - \theta_C) P_C, K_A == \frac{\theta_A}{(P_A (1 - \theta_A - \theta_C))}, K_2 == \frac{\theta_C}{(\theta_A P_B)} \right\}, v, \{\theta_A, \theta_C\} \right]$$

$$\left\{ \left\{ v \rightarrow \frac{K_3 K_2 K_A P_A P_B - k_{-3} P_C}{1 + K_A P_A + K_2 K_A P_A P_B} \right\} \right\}$$

Tenint en compte que en les condicions inicials: $P_C = 0$, la darrera expressió de la velocitat inicial, v_0 , quedarà:

$$v_0 = \% [[1, 1]] [[2]] /. P_C \rightarrow 0$$

$$\frac{k_3 K_2 K_A P_A P_B}{1 + K_A P_A + K_2 K_A P_A P_B}$$

Si la Temperatura és alta, les K_i del denominador se faràn molxícotetes i per tant seran menyspreables com a termes suma, aleshores:

$1 \gg (K_A P_A + K_2 K_A P_A P_B)$ quedant la velocitat inicial com:

$$v_{0T} = k_3 K_A P_A P_B = k_{ap} P_A P_B \quad (* \text{ que és de segon ordre } *)$$

$$k_{ap} P_A P_B$$

`StyleForm[FrameBox[TableForm[{v0, v0T}, TableHeadings -> {"v_inicial =", "ordre = 2"}, None]], Subsubsection, FontColor -> RGBColor[0, 0, 1]] // DisplayForm`

$v_{\text{inicial}} = \frac{k_3 K_2 K_A P_A P_B}{1 + K_A P_A + K_2 K_A P_A P_B}$
$\text{ordre} = 2 \quad k_{ap} P_A P_B$

■ 1.4.- Comentar frase.

Dit argument és **FALS**.

Al afegir un electròlit es forma doble capa neutralitzant parcialment la càrrega del col.loide i minva així la repulsió electrostàtica. D'aquesta manera guanyen les interaccions dispersives i es produeix la coagulació.

■ 1.5.- Efecte cinètic isotòpic.

Segons s'esdevé de l'equació d'Arrhenius:

$$\frac{k_H}{k_D} \simeq \text{Exp} \left[\frac{\varepsilon_0(\text{RH}) - \varepsilon_0(\text{RD})}{k_B T} \right]$$

Com l'energia $\varepsilon_0 = \frac{1}{2} h \nu$ se tindrà que $\varepsilon_0(\text{RH}) - \varepsilon_0(\text{RD}) = \frac{1}{2} h (\nu_{\text{RH}} - \nu_{\text{RD}})$

La relació que lliga les freqüències amb les masses reduïdes de cada sistema és:

$$\nu_{\text{RH}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu_{\text{RH}}}}$$

$$\nu_{\text{RD}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu_{\text{RD}}}}$$

Per tant la relació que lliga a les freqüències ens porta a que:

$$\frac{\nu_{\text{RH}}}{\nu_{\text{RD}}} = \sqrt{\frac{\mu_{\text{RD}}}{\mu_{\text{RH}}}} \simeq \sqrt{2}$$

Com la relació de masses reduïdes del segon membre és semblant a 2, aleshores :

$$\Delta\varepsilon_0 = \varepsilon_0(\text{RH}) - \varepsilon_0(\text{RD}) = \frac{1}{2} h (\nu_{\text{RH}} - \nu_{\text{RD}}) = \frac{1}{2} h \nu_{\text{RH}} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right)$$

Per tant el valor de $\Delta\varepsilon_0$ vindrà a ser:

$$\Delta\varepsilon_0 = \frac{1}{2} h \nu_{\text{RH}} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right) / . \{ h \rightarrow 6.62608 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \}$$

$$9.70367 \times 10^{-35} \text{ J s } \nu_{\text{RH}}$$

Ara bé en l'exponencial apareix el terme: $\frac{\Delta\varepsilon_0}{k_B T}$ si ho deixem en funció de sols la temperatura

$$\% / k_B / . k_B \rightarrow 1.38066 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$$

$$7.02828 \times 10^{-12} \text{ K s } \nu_{\text{RH}}$$

L'expressió que queda per a l'efecte cinètic serà: $\frac{k_H}{k_D} \simeq \text{Exp} \left[\frac{7.02828 \times 10^{-12} \nu_{\text{RH}}}{T} \right]$

$$\text{Solve} \left[9.3 = \text{Exp} \left[\frac{7.02828 \cdot 10^{-12} \text{ K s } \nu_{\text{RH}}}{T} \right], \nu_{\text{RH}} \right] / . T \rightarrow (273.15 + 30) \text{ K}$$

$$\left\{ \left\{ \nu_{\text{RH}} \rightarrow \frac{9.6187 \times 10^{13}}{\text{s}} \right\} \right\}$$

Si volem calcular l'efecte isotòpic a una altra temperatura farem:

```
Solve[efecteIsotòpic == Exp[ $\frac{7.02828 \cdot 10^{-12} \text{ K s } v_{RH}}{T}$ ], efecteIsotòpic] /.
{ T -> (273.15 + 20) K, vRH ->  $\frac{9.6187 \cdot 10^{13}}{s}$  }
{{efecteIsotòpic -> 10.0351}}
```

StyleForm["Efecte Isotòpic = $\frac{k_H}{k_D}$ (20 °C) = 10.035",
Subsubsection, FontColor -> RGBColor[0, 0, 1]]

Efecte Isotòpic = $\frac{k_H}{k_D}$ (20 °C) = 10.035

2.- S'ha mesurat a 298 K la tensió superficial dels següents sistemes:

2.1.- Per mesures electrocapil.lars de la interfase Hg/CsCl 1M, colorant de ftalocianina 10^{-3} M en aigua, a diferents potencials aplicats respecte a un elèctrode de referència. La tensió superficial, expressada en dines cm^{-1} se ajusta a l'equació:

$$\gamma = 347.3 - 0.306 E - 3.53 \cdot 10^{-4} E^2 - 9.41 \cdot 10^{-8} E^3,$$

en la qual el potencial, E , ve donat en mV i pot prendre valors entre 0 mV i -1200 mV.

- Expresseu aquesta funció en unitats del Sistema Internacional.
- Calculeu el potencial de càrrega zero.
- Calculeu la densitat de càrrega a -1 V.
- Calculeu la capacitat diferencial a aquest mateix potencial.

2.2.- Del colorant dissolt en aigua, que és un tint per a la fusta, mitjançant la mesura d'altures arribades en un capil.lar de diàmetre intern $\Phi = 0.40$ mm col.locat verticalment a la superfície del líquid en repòs es va mesurar la tensió superficial a vàries temperatures.

$t/^\circ\text{C}$	10	20	30
h/cm	7.56	7.43	7.29
$\rho/\text{g cm}^{-3}$	0.9997	0.9982	0.9957

- Calculeu la tensió superficial a aquestes temperatures.
- Calculeu les pressions que cal aplicar des de fora a l'interior del capil.lar per a que es forme bombolles d'aire de 0.20 mm de radi, a les mateixes temperatures.

■ 4.1.- a) Unitats en SI:

Per a passar de dines cm^{-1} a N m^{-1} (SI) haurem de multiplicar per 10^{-3} o siga que establim la següent relació: $10^{-3} \gamma(\text{din/cm}) \equiv \gamma(\text{N/m})$ i de la mateixa forma tindrem per al potencial: $10^{-3} E(\text{mVolts}) \equiv E(\text{Volts})$, aleshores Per a realitzar el canvi d'unitats d'una fórmula original a una nova procedirem de la manera següent:

L'original: $\gamma(\text{din/cm}) = 347.3 - 0.306 E(\text{mV}) - 3.53 \cdot 10^{-4} E(\text{mV})^2 - 9.41 \cdot 10^{-8} E(\text{mV})^3$

Pas 1^{er}: $\gamma(\text{din/cm}) \frac{10^{-3}}{10^{-3}} = 347.3 - 0.306 E(\text{mV}) \frac{10^{-3}}{10^{-3}} - 3.53 \cdot 10^{-4} E(\text{mV})^2 \frac{10^{-6}}{10^{-6}} - 9.41 \cdot 10^{-8} E(\text{mV})^3 \frac{10^{-9}}{10^{-9}}$

cada grupet de termes que tinguem amb les unitats adients el transformem:

Pas 2^{on} $\gamma(\text{N/m}) \frac{1}{10^{-3}} = 347.3 - 0.306 E(\text{V}) \frac{1}{10^{-3}} - 3.53 \cdot 10^{-4} E(\text{V})^2 \frac{1}{10^{-6}} - 9.41 \cdot 10^{-8} E(\text{V})^3 \frac{1}{10^{-9}}$

Pas 3^{er} $\gamma(\text{N/m}) = 347.3 \cdot 10^{-3} - 0.306 E(\text{V}) \frac{10^{-3}}{10^{-3}} - 3.53 \cdot 10^{-4} E(\text{V})^2 \frac{10^{-3}}{10^{-6}} - 9.41 \cdot 10^{-8} E(\text{V})^3 \frac{10^{-3}}{10^{-9}}$

Finalment $\gamma(\text{N/m}) = 0.3473 - 0.306 E(\text{V}) - 0.353 E(\text{V})^2 - 9.41 \cdot 10^{-2} E(\text{V})^3$

■ b) Càlcul del potencial de càrrega zero:

$$\gamma[\text{Epot}_] := 0.3473 - 0.306 \text{Epot} - 0.353 \text{Epot}^2 - 9.41 \cdot 10^{-2} \text{Epot}^3$$

$$\gamma[\text{Epot}]$$

$$0.3473 - 0.306 \text{Epot} - 0.353 \text{Epot}^2 - 0.0941 \text{Epot}^3$$

El potencial de càrrega zero s'assoleix quan la $\sigma = -\frac{\partial\gamma}{\partial E} = 0$ per tant, derivant la funció respecte del potencial i igualant a zero tindrem en el màxim $\frac{\partial\gamma}{\partial E} = 0$

$$\mathbf{D}[\gamma[\text{Epot}], \text{Epot}]$$

$$-0.306 - 0.706 \text{Epot} - 0.2823 \text{Epot}^2$$

$$\mathbf{Solve}[\mathbf{D}[\gamma[\text{Epot}], \text{Epot}] == 0, \text{Epot}]$$

$$\{\{\text{Epot} \rightarrow -1.94301\}, \{\text{Epot} \rightarrow -0.557872\}\}$$

Tot i que l'electrocapilar està dissenyat per que es compleixca l'equació entre 0 mVolts i - 1200mVolts (-1.2V) s'ols serà vàlida la segona solució de l'equació de l'electrocapilar.

$$\mathbf{StyleForm}["E_{\sigma=0} = -0.55787 \text{ Volts}", \mathbf{Subsubsection}, \mathbf{FontColor} \rightarrow \mathbf{RGBColor}[0, 0, 1]]$$

$$E_{\sigma=0} = -0.55787 \text{ Volts}$$

■ c) Densitat de càrrega a -1 Volt

La densitat de càrrega, $\sigma = -\frac{d\gamma}{dE}$ per tant si tenim l'expressió corresponent a $\frac{d\gamma}{dE}$, canviem el signe i fem $E_{\text{pot}} = -1$ Volt
Tot i que l'expressió està en unitats del S.I. les unitats corresponent a σ es devindran com:

$$|\sigma| = \left| -\frac{d\gamma}{dE} \right| = \frac{N/m}{V} = \frac{Nm}{m^2 V} = \frac{J}{m^2 V} = \frac{CV}{m^2 V} = \frac{C}{m^2}$$

$$-\mathbf{D}[\gamma[\text{Epot}], \text{Epot}] \frac{\mathbf{C}}{\mathbf{m}^2} /. \text{Epot} \rightarrow -1$$

$$-\frac{0.1177 \text{ C}}{\text{m}^2}$$

$$\mathbf{StyleForm}["\sigma = -\frac{0.1177 \text{ C}}{\text{m}^2}", \mathbf{Subsubsection}, \mathbf{FontColor} \rightarrow \mathbf{RGBColor}[0, 0, 1]]$$

$$\sigma = -\frac{0.1177 \text{ C}}{\text{m}^2}$$

■ d) Càlcul de la capacitat diferencial a potencial de -1 Volt

La capacitat, C, es defineix com la variació de la σ respecte del potencial, per tant derivant de nou:

$$\mathbf{C} = \mathbf{D}[\sigma[\text{Epot}], \text{Epot}] = -\mathbf{D}[\gamma[\text{Epot}], \{\text{Epot}, 2\}];$$

$$-\mathbf{D}[\gamma[\text{Epot}], \{\text{Epot}, 2\}]$$

$$0.706 + 0.5646 \text{Epot}$$

Les unitats de la capacitat al S.I. s'obtenen de l'expressió: $|C| = \left| \frac{d\sigma}{dE} \right| = \frac{C/m^2}{V} = \frac{F}{m^2} = \frac{\text{Faradi}}{\text{m}^2}$

$$-\mathbf{D}[\gamma[\text{Epot}], \{\text{Epot}, 2\}] \frac{\mathbf{F}}{\mathbf{m}^2} /. \text{Epot} \rightarrow -1$$

$$\frac{0.1414 \text{ F}}{\text{m}^2}$$

```
StyleForm["C =  $\frac{0.1414 F}{m^2}$ ", Subsubsection, FontColor -> RGBColor[0, 0, 1]]
```

$$C = \frac{0.1414 F}{m^2}$$

■ 4.2.- a) Tenció superficial a aquestes temperatures.

La tensió superficial s'estableix a partir de l'equació que iguala les forces: $2 \pi R \gamma = \pi R^2 \rho g h$

$$\gamma = \frac{R h \rho g}{2};$$

On γ es la tensió superficial, R , és el radi del capilar d'ascens del líquid, h , és l'altura assolida en la columna, ρ , la densitat del líquid, i g , l'acceleració de la gravetat.

$$R := \frac{0.40}{2} 10^{-3} \text{ m};$$

$$h := \{7.56, 7.43, 7.29\} 10^{-2} \text{ m};$$

$$\rho := \{0.9997, 0.9982, 0.9957\} 10^3 \text{ (kg / m}^3\text{)};$$

$$\text{gamma} = \gamma / . g \rightarrow 9.81 \text{ (m / s}^2\text{)} / . \frac{\text{kg}}{\text{s}^2} \rightarrow \text{N m}^{-1}$$

$$\left\{ \frac{0.0741414 \text{ N}}{\text{m}}, \frac{0.0727571 \text{ N}}{\text{m}}, \frac{0.0712074 \text{ N}}{\text{m}} \right\}$$

```
StyleForm[
  FrameBox[TableForm[{gamma  $\frac{\text{m}}{\text{N}}$ }, TableHeadings -> {" $\gamma$  (N m-1)", {"10 °C", "20 °C", "30 °C"}}]],
  Subsubsection, FontColor -> RGBColor[0, 0, 1]] // DisplayForm
```

	10 °C	20 °C	30 °C
γ (N m ⁻¹)	0.0741414	0.0727571	0.0712074

■ b) Càlcul de les pressions que cal fer per provocar bombolles esfèriques de 0.2 mm de radi.

Segons l'equació de Young-Laplace, la diferència de pressions, $\Delta P = P_{\text{int}} - P_{\text{ext}}$, en una superfície esfèrica és igual a $\frac{2\gamma}{R}$

$$\Delta P = \frac{2 \gamma}{R} = \frac{2 \frac{R h \rho g}{2}}{R} = h \rho g$$

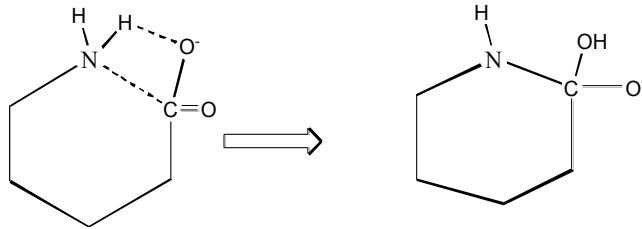
$$\text{increP} = 2 \text{ gamma} / R$$

$$\left\{ \frac{741.414 \text{ N}}{\text{m}^2}, \frac{727.571 \text{ N}}{\text{m}^2}, \frac{712.074 \text{ N}}{\text{m}^2} \right\}$$

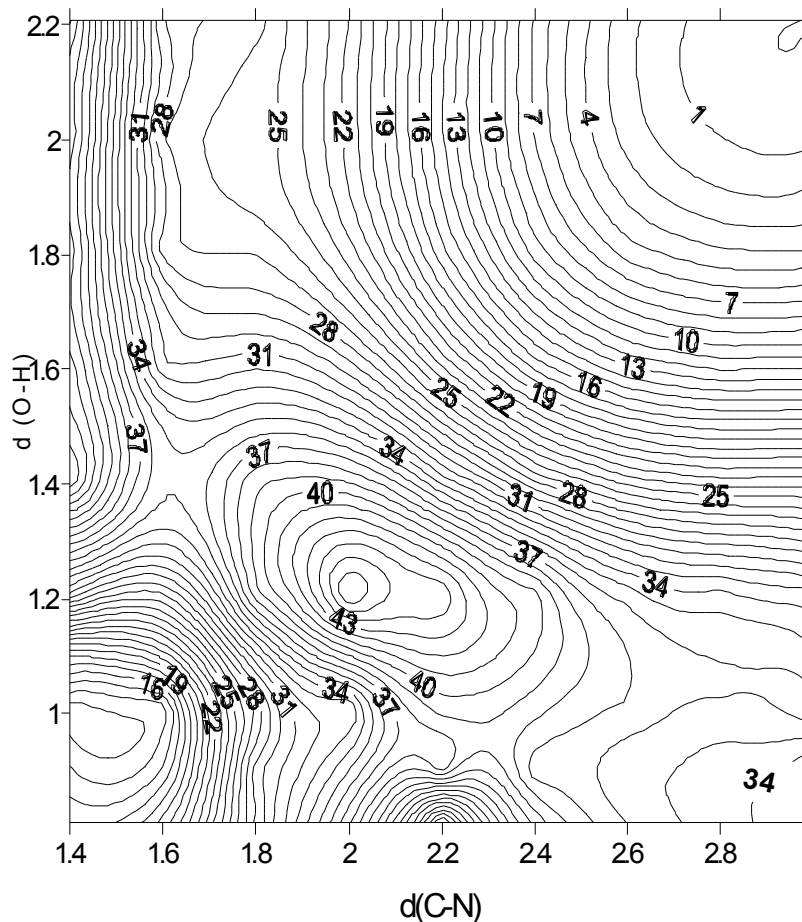
```
StyleForm[FrameBox[
  TableForm[{increP  $\frac{\text{m}^2}{\text{N}}$ }, TableHeadings -> {" $\Delta P$  (N m-2)", {"10 °C", "20 °C", "30 °C"}}]],
  Subsubsection, FontColor -> RGBColor[0, 0, 1]] // DisplayForm
```

	10 °C	20 °C	30 °C
ΔP (N m ⁻²)	741.414	727.571	712.074

3. - S'ha estudiat la següent reacció traçant la superfície d'energia potencial (SEP) en funció de les dues distàncies que apareixen amb línia de punts en el dibuix. La superfície d'energia potencial se representa mitjançant corbes isopotencials traçades cada 1 kcal/mol.



- 3.1.-** Descriu tots els punts estacionaris relevantes des del punt de vista de la reactivitat que apareixen sobre la SEP indicant la seua naturalesa (reactius, productes, estructures de transició, intermedis), el valor de les distàncies seleccionades així com llur energia.
- 3.2.-** Representeu la variació de l'energia potencial amb la coordinada de reacció per als possibles mecanismes de reacció, indicant els valors aproximats de les energies d'activació i de reacció. Descriu els mecanismes indicant quin es donarà preferentment.
- 3.3.-** S'ha mesurat experimentalment la constant de velocitat d'aquesta reacció en fase gas a 125 °C i 135 °C essent els seus valors, $2.35 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ i $6.32 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ respectivament. Calculeu l'entropia i l'entalpia d'activació a 125 °C.



■ **5.1.-** descripció de totes les espècies relevantes:

Espècies	d (O - H) / Å	d (C - N) / Å	Energia (kcal / mol)
Reactius	2.2	2.9	0
Productes	0.85	1.5	13
Intermedi1	0.9	2.9	34
TS1	1.1	2.9	36
TS2	0.95	2.3	38
TS3	1.4	1.65	35

Utilitzarem doncs els valors obtingut de E_a i A per a calcular el que ens demanen:

$$\Delta H_{\text{activació}} = E_a - R T \quad / . \quad \{E_a \rightarrow 133661.47 \text{ J mol}^{-1}, R \rightarrow 8.314 \text{ J / (K mol)}, T \rightarrow 408.15 \text{ K}\}$$

$$\frac{130268. \text{ J}}{\text{mol}}$$

$$\% 10^{-3} / 4.18 \text{ kcal / J}$$

$$\frac{31.1646 \text{ kcal}}{\text{mol}}$$

$$\Delta S_{\text{activació}} = (J / (K \text{ mol})) \text{ Log} \left[\frac{A h}{k_B T E} \right] / .$$

$$\{A \rightarrow 8.07642 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}, h \rightarrow 6.62608 \cdot 10^{-34} \text{ J s}, k_B \rightarrow 1.38066 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}, T \rightarrow 408.15 \text{ K}\}$$

$$- \frac{5.65682 \text{ J}}{\text{K mol}}$$

Que vindrà amb les unitats adients d'una entropia molar, o siga J/(K mol)

```
StyleForm[FrameBox[TableForm[{\Delta H_{activació}, \Delta S_{activació}}, TableHeadings -> {"\Delta H^\ddagger", "\Delta S^\ddagger"}]],
Subsubsection, FontColor -> RGBColor[0, 0, 1]] // DisplayForm
```

ΔH^\ddagger	$\frac{130268. \text{ J}}{\text{mol}}$
ΔS^\ddagger	$-\frac{5.65682 \text{ J}}{\text{K mol}}$

4.- Marqueu sense ambigüitat sobre el full de l'enunciat d'aquesta qüestió la resposta correcta per a cadascun dels següents apartats, tot i tenint en compte que cada resposta correcta val 1.25 punts i si és incorrecta descomptarà 0.3 punts:

4.1.- En un sistema en el qual es forma una monocapa ideal:

- l'àrea ocupada per cada molècula augmenta amb la pressió superficial.
- la tensió superficial minva de forma lineal amb la concentració de tensioactiu.
- les isoterms d'adsorció mostren un tram horitzontal corresponent al canvi d'estat superficial.
- la concentració superficial d'excés del tensioactiu és dependent de l'àrea de la interfase.

4.2- En general, en un procés de quimisorció:

- l'energia d'activació és negativa i l'entalpia d'adsorció és positiva.
- l'entalpia d'adsorció és positiva i l'energia d'activació és nul.la.
- l'energia d'activació és nul.la i l'entalpia d'adsorció és nul.la.
- l'entalpia d'adsorció és negativa i l'energia d'activació és positiva.

4.3- En una reacció gasosa amb catàlisi heterogènia:

- l'energia d'activació may és negativa.
- l'energia d'activació sempre és negativa.
- l'energia d'activació sempre és positiva.
- l'energia d'activació pot ésser negativa.

4.4.- En catàlisi heterogènia amb un únic reactiu, on l'etapa d'adsorció controla la velocitat de la reacció:

- la velocitat inicial és proporcional a la pressió inicial.
- la velocitat inicial és proporcional a la pressió dels productes.
- la velocitat inicial minva amb la pressió inicial.
- la velocitat inicial és independent de la pressió.

4.5.- Tots els polímers estan caracteritzats per una temperatura de transició vítre, T_g , tal que:

- tots els polímers a $T_{\text{ambient}} > T_g$ presenten propietats plàstiques i cert grau d'elasticitat.
- sols els termoplàstics i els elastòmers a $T_{\text{ambient}} < T_g$ són plàstics, flexibles i deformables.
- els polímers termoestables a $T_{\text{ambient}} > T_g$ poden modificar la seua forma.
- a $T_{\text{ambient}} > T_g$ els termoplàstics poden modificar la seua forma i els termoestables no.

4.6.- El pes molecular terme mitjà en pes (M_w) d'un polimer és 100000 i el seu índex de polispersitat $I = 2$

- a) $M_n = 50000$ i $M_z = 120000$
- b) $M_n = 50000$ i $M_z = 90000$
- c) $M_n = 35000$ i $M_z = 120000$
- d) $M_n = 200000$ i $M_z = 220000$

4.7.- La temperatura Θ és:

- a) la temperatura a la que $\chi_1 = 1/2$
- b) temperatura a la qual l'efecte de volum exclòs es nul.la.
- c) és la temperatura crítica d'un polimer de $M \rightarrow \infty$
- d) les tres respostes anteriors són correctes.

4.8.- Una mostra polimèrica és soluble en un dissolvent:

- a) a qualsevol temperatura.
- b) exclusivament per damunt de la temperatura crítica superior i per de baix de la temperatura crítica inferior.
- c) exclusivament per de baix de la temperatura crítica superior i per damunt de la temperatura crítica inferior.
- d) Sols per damunt de la temperatura crítica superior.