



QUÍMICA

El metanol es pot obtenir amb un rendiment del 74 % fent reaccionar, en fase gas a 100 °C, monòxid de carboni i hidrogen en proporcions estequiomètriques. Un cop assolit l'equilibri es dissol el metanol en aigua obtenint una dissolució del 50 % en massa i densitat 0,8 g/mL.

1. Quines pressions parcials inicials (abans de reaccionar) i finals (després) tenen tots els gasos si el volum del recipient és de 2 litres i el volum de solució de metanol obtinguda és de 3,004 mL?
R: a l'inici 0,776 (CO) i 1,552 (H₂) atm; al final 0,2 (CO), 0,4 (H₂) i 0,576 (MeOH) atm;
2. Quant val la constant d'equilibri de la reacció a 100 °C a partir dels resultats anteriors?
R: $K_p = 18 \text{ atm}^{-2}$; $K = 18$.
3. Calculeu la variació d'entalpia estàndard a partir de les entalpies d'enllaç corresponents.
R: $-105 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ és un valor aproximat perquè les entalpies d'enllaç són valors promig.
4. Calculeu la variació d'entalpia estàndard a partir de les entalpies de formació corresponents.
R: $-90,61 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ és més exacte que l'anterior.
5. Calculeu la variació d'energia interna de la reacció.
R: $-84,4 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$.
6. Calculeu la calor de la reacció per a les quantitats indicades al primer apartat.
R: $-3,17 \text{ kJ}$, és negatiu perquè és exotèrmica: la calor *alliberada* és $+3,17 \text{ kJ}$.
7. Calculeu la variació d'entropia estàndard a partir de les entropies corresponents.
R: $-218,9 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$.
8. Calculeu la variació d'entalpia lliure (de Gibbs) a 100 °C a partir de les entalpies i entropies de reacció estàndards que són aproximadament independents de la temperatura.
R: $-8,96 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$.
9. Calculeu termodinàmicament la constant d'equilibri a partir de l'energia lliure de Gibbs.
R: $K = 18$.
10. En un recipient de 2 litres introduïm, en fase gas a 100 °C, monòxid de carboni i hidrogen a les pressions parcials de 0,776 (CO) i 1,552 (H₂) atm. Deduïu les pressions parcials finals i el rendiment a partir de la constant d'equilibri.
R: 0,2 (CO), 0,4 (H₂) i 0,576 (MeOH) atm; 74 %.

Dades: escolliu les que calguin.

Constants: $R = 0,082 \text{ atm}\cdot\text{L}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1} = 8,314 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$.

Masses atòmiques (g·mol⁻¹): H = 1 , C = 12 , O = 16 .

$\Delta_E H^0$ (kJ·mol⁻¹): C–O 351 , C=O 804 , C≡O 1076 , H–H 436 , C–H 413 , O–H 463 .

$\Delta_F H^0$ (kJ·mol⁻¹): CO $-110,50$; MeOH $-201,11$.

S^0 (J·K⁻¹·mol⁻¹): CO 197,9 ; H₂ 130,5 ; MeOH 240,0 .