

Problemes resolts del tema ESPONTANEITAT (Q2_B1_5)

1. Compara les parelles de substàncies i indica quina té una major entropia en cada cas. Justifica la resposta.
 - a) Un mol de I_2 (s) o un mol de I_2 (g).
 - b) Un mol de H_2O (g) o un mol de H_2O (l).

Resolució:

a) I_2 (g)

El desordre d'un mol de gas és molt més gran que el d'un mol de sòlid; per tant, tindrà una major entropia

b) H_2O (g)

El desordre d'un mol de gas és molt més gran que el d'un mol de líquid; per tant, tindrà una major entropia.

2. Considera les següents reaccions:
 - a) H_2 (g) + Cl_2 (g) \rightarrow 2 HCl (g)
 - b) S (s) + O_2 (g) \rightarrow SO_2 (g)
 - c) $MgCO_3$ (s) \rightarrow MgO (s) + CO_2 (g)
 - a) Raona per a cadascun dels processos indicats si és d'esperar un augment o una disminució de l'entropia.
 - b) Calcula la variació d'entropia de les reaccions en condicions estàndard (consultar dades en la taula del llibre)
Sol.: a) $20 J \cdot K^{-1}$; b) $11,6 J \cdot K^{-1}$; c) $174,7 K^{-1}$

Resolució:

a)

Reacció a) hi ha el mateix nombre de mols de gasos a cada banda. Es de esperar un variació d'entropia molt petita, pròxima a zero.

Reacció b) hi ha el mateix nombre de mols de gasos a cada banda. Es de esperar un variació d'entropia molt petita, pròxima a zero

Reacció c) hi apareix un mol de gas a la dreta de l'equació (productes). El balanç és 1 mol de gas, així que es d'esperar un augment important de l'entropia.

b)

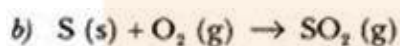
Els valors de les entropies estàndard dels reactius i dels productes es troben a la taula de dades del llibre.



$$\Delta S_r^\circ = \sum n S^\circ_{\text{productes}} - \sum m S^\circ_{\text{reactius}}$$

$$\Delta S_r^\circ = 2 \cdot S^\circ [\text{HCl} (\text{g})] - 1 \cdot S^\circ [\text{Cl}_2 (\text{g})] - 1 \cdot S^\circ [\text{H}_2 (\text{g})]$$

$$\Delta S_r^\circ = 2 \text{ mol} \cdot 187 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} - 1 \text{ mol} \cdot 223 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} - 1 \text{ mol} \cdot 131 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 20 \frac{\text{J}}{\text{K}}$$



$$\Delta S_r^\circ = \sum n S^\circ_{\text{productes}} - \sum n S^\circ_{\text{reactius}}$$

$$\Delta S_r^\circ = 1 \cdot S^\circ [\text{SO}_2 (\text{g})] - 1 \cdot S^\circ [\text{S} (\text{s})] - 1 \cdot S^\circ [\text{O}_2 (\text{g})]$$

$$\Delta S_r^\circ = 1 \text{ mol} \cdot 248,5 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} - 1 \text{ mol} \cdot 31,9 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} - 1 \text{ mol} \cdot 205 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 11,6 \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

c)

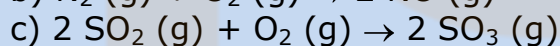
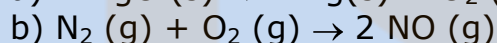
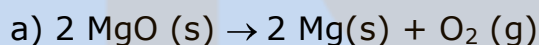


$$\Delta S_r^\circ = \sum n S^\circ_{\text{productes}} - \sum n S^\circ_{\text{reactius}}$$

$$\Delta S_r^\circ = 1 \cdot S^\circ [\text{CO}_2 (\text{g})] + 1 \cdot S^\circ [\text{MgO} (\text{s})] - 1 \cdot S^\circ [\text{MgCO}_3 (\text{s})]$$

$$\Delta S_r^\circ = 1 \text{ mol} \cdot 213,6 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} + 1 \text{ mol} \cdot 26,78 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} - 1 \text{ mol} \cdot 68,69 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} = 174,7 \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

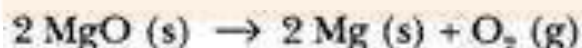
3. Calcula la variació d'entalpia lliure estàndard per a les reaccions següents a partir de les entalpies lliures de formació de reactius i productes. Raona si són espontànies o no.



Sol.: a) 1139 kJ; b) 173,4 kJ; c) -140 kJ

Resolució:

a)

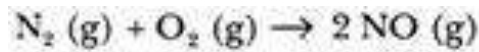


$$\Delta G_r^\circ = \sum n \Delta G_f^\circ_{\text{productes}} - \sum m \Delta G_f^\circ_{\text{reactius}}$$

$$\Delta G_r^\circ = 2 \text{ mol} (-569,6 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}) = 1139 \text{ kJ}$$

La reacció NO serà espontània perquè $\Delta G^\circ > 0$.

b)

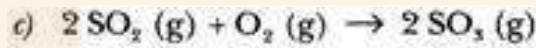


$$\Delta G^{\circ}_r = \sum n \Delta G^{\circ}_{f \text{ productes}} - \sum m \Delta G^{\circ}_{f \text{ reactius}}$$

$$\Delta G^{\circ}_r = 2 \text{ mol} \left(86,7 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) = 173,4 \text{ kJ}$$

La reacció NO serà espontània perquè $\Delta G^{\circ} > 0$.

c)



$$\Delta G^{\circ}_r = \sum n \Delta G^{\circ}_{f \text{ productes}} - \sum m \Delta G^{\circ}_{f \text{ reactius}}$$

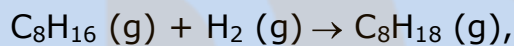
$$\Delta G^{\circ}_r = 2 \Delta G^{\circ}_f [\text{SO}_3 (\text{g})] - 2 \Delta G^{\circ}_f [\text{SO}_2 (\text{g})]$$

$$\Delta G^{\circ}_r = 2 \text{ mol} \left(-370,4 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) - 2 \text{ mol} \left(-300,4 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right)$$

$$\Delta G^{\circ}_r = -140 \text{ kJ}$$

La reacció SÍ serà espontània perquè $\Delta G^{\circ} < 0$

4. En la reacció:



si $\Delta S^{\circ} = -130 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ i $\Delta H^{\circ} = -125,5 \text{ kJ}$.

- a) Calcula la variació d'entalpia lliure estàndard per a aquesta reacció i indica si és espontània.
- b) Calcula la temperatura teòrica a la qual es d'esperar que es produeixi una situació d'equilibri.

Sol.: a) -86,8 kJ; b) 692°C

Resolució:

a) Observar que el valor de l'entalpia està en kJ i el de l'entropia en J. Per a poder substituir dades s'ha de treballar en un sistema coherent d'unitat. Per tant, o bé es passen els kJ a J o al revés. En aquest cas s'ha optat per treballar en kJ i passar el J de l'entropia a kJ:

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

$$\Delta G^{\circ} = -125,5 \text{ kJ} - 298 \text{ K} \cdot (-130 \cdot 10^{-3}) \frac{\text{kJ}}{\text{K}}$$

$$\Delta G^{\circ} = -86,8 \text{ kJ}$$

La variació d'entalpia lliure estàndard és de **-86,8 kJ** i la reacció serà espontània perquè $\Delta G^0 < 0$.

b) Això succeirà quan $\Delta G^0 = 0$.

$$T = \frac{\Delta H^0}{\Delta S^0} = \frac{125,5 \text{ kJ}}{0,130 \text{ kJ/K}} = 965 \text{ K} \rightarrow \mathbf{692^\circ\text{C}}$$

La reacció serà espontània per a temperatures inferiors a 692°C i serà NO espontània per a temperatures superiors.

