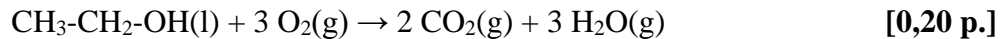


#### Exercici 4a

Formulació. Etanol: CH<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>-OH

#### Reacció de combustió de l'etanol



#### Càlcul de l'entalpia estàndard de combustió de l'etanol

L'entalpia estàndard d'una reacció es pot calcular a partir de les energies dels enllaços trencats (reactius) menys les energies dels enllaços formats (productes):

$$\Delta H^\circ = \sum n_r E_{\text{trencats}} - \sum n_p E_{\text{formats}} \quad [0,10 \text{ p.}]$$

En els reactius cal trencar:

- 1 enllaç C-C
- 5 enllaços C-H
- 1 enllaç C-O
- 1 enllaç O-H
- 3 enllaços O=O (3 mol O<sub>2</sub>)

En els productes cal formar:

- 4 enllaços C=O (2 mol CO<sub>2</sub>)
- 6 enllaços O-H (3 mol H<sub>2</sub>O)

Per tant,

$$\Delta H^\circ = [1 E_{\text{C-C}} + 5 E_{\text{C-H}} + 1 E_{\text{C-O}} + 1 E_{\text{O-H}} + 3 E_{\text{O=O}}] - [4 E_{\text{C=O}} + 6 E_{\text{O-H}}] \quad [0,30 \text{ p.}]$$

$$\Delta H^\circ = [(1 \times 348) + (5 \times 412) + (1 \times 358) + (1 \times 463) + (3 \times 498)] - [(4 \times 799) + (6 \times 463)] =$$

$$= - 1251 \text{ kJ mol}^{-1} \Rightarrow \Delta H^\circ = - 1251 \text{ kJ mol}^{-1} \quad [0,20 \text{ p.}]$$

#### Eficiència energètica de l'etanol i l'èter dimetílic per unitat de massa

Energia per gram de compost

Massa molar etanol (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH): 6 x 1 + 2 x 12 + 1 x 16 = 46 g mol<sup>-1</sup>

Massa molar èter dimetílic (CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>): 6 x 1 + 2 x 12 + 1 x 16 = 46 g mol<sup>-1</sup>

**Etanol:** - 1251 kJ mol<sup>-1</sup> x 1 mol etanol / 46 g = - 27,196 kJ g<sup>-1</sup>

**Èter dimetílic:** - 1292 kJ mol<sup>-1</sup> x 1 mol èter dietílic / 46 g = - 28,086 kJ g<sup>-1</sup> [0,25 p.]

Justificació

**L'èter dimetílic allibera més energia per gram i el fa més eficient com a combustible per unitat de massa.** [0,20 p.]

## Exercici 4b

### Raonament i justificació tipus d'isomeria

L'etanol i l'èter dimetílic **són isòmers** perquè tenen la **mateixa fórmula molecular  $C_2H_6O$** , però **diferent connectivitat entre els seus àtoms**, per tant, es tracta de **diferents molècules** i tenen **diferents grups funcionals**.

[0,25 p.]

Això els converteix en **isòmers estructurals o constitucionals de grup funcional**, ja que pertanyen a diferents tipus de compostos: l'etanol és un alcohol (amb un grup hidroxil:  $-OH$ ), mentre que l'èter dimetílic és un èter (amb un oxigen enllaç a dos àtoms de carboni:  $C-O-C$ ).

[0,30 p.]

### Efecte de l'estructura en la temperatura o punt d'ebullició

**La diferència estructural té un impacte en les seves propietats físiques.**

L'etanol té una **temperatura o punt d'ebullició més alta** que l'èter dimetílic a causa dels **enllaços d'hidrogen intermolecular** que pot formar amb altres molècules, entre l'hidrogen (H) d'una molècula d'etanol i l'oxigen (O) d'una altra molècula d'etanol, ja que té un grup  $-OH$ .

L'èter dimetílic **no pot formar aquests enllaços d'hidrogen**, resultant en un **punt d'ebullició més baix**.

[0,45 p.]

Les forces intermoleculars d'enllaç d'hidrogen són les més fortes que es poden establir entre molècules. L'etanol té el punt d'ebullició o temperatura d'ebullició més alts ja que cal **donar més energia** per separar les molècules d'etanol perquè passin a l'estat gasós.

[0,25 p.]

## Exercici 4c

### Enllaços característics de les molècules

Etanol: C-H, C-O i O-H

Èter dimetílic: C-H i C-O

- ⇒ Els **dos compostos** tenen en **comú enllaços C-H**.
- ⇒ Els dos compostos tenen en **comú enllaços C-O**. L'**enllaç C-O** de l'**alcohol** i l'**enllaç C-O-C** de l'**èter dimetílic** (del grup funcional èter).
- ⇒ L'**etanol** té un **grup funcional alcohol** i, per tant, un **enllaç O-H**.

[0,30 p.]

### Identificació dels pics principals a l'espectre

Els pics principals (senyals) que es poden observar a l'espectre són:

- Banda a 3400  $\text{cm}^{-1}$ : característica dels **alcohols**, **enllaç O-H** (3550 – 3200  $\text{cm}^{-1}$ )
- Banda a 3000-2800  $\text{cm}^{-1}$ : característica de l'**enllaç C-H** (3000 – 2850  $\text{cm}^{-1}$ ), la presenten les **dues molècules**.
- Banda a 1100-1000  $\text{cm}^{-1}$ : característica de l'**enllaç C-O** de l'**alcohol** (1260 – 1000  $\text{cm}^{-1}$ ) i l'**enllaç C-O-C** de l'**èter** (1300 – 1000  $\text{cm}^{-1}$ ), la presenten les **dues molècules**.

[0,45 p.]

### Identificació de la molècula

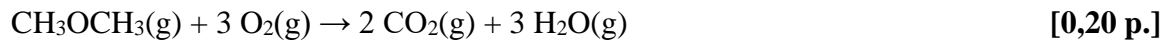
Es tracta de la **molècula d'etanol** perquè la **banda de l'enllaç O-H** correspon al **grup funcional alcohol** (grup hidroxil), i **no estaria present** en l'espectre de l'**èter dimetílic**.

[0,50 p.]

## Exercici 4d

### Càlcul de l'entropia estàndard de la reacció

#### Reacció de combustió de l'èter dimetilic



#### Entropia estàndard de la reacció

$$\Delta S^\circ_{\text{reacció}} = (\sum n_p S^\circ_{\text{productes}}) - (\sum n_r S^\circ_{\text{reactius}}) \quad [0,10 \text{ p.}]$$

$$(\sum n_p S^\circ_{\text{productes}}) = [(2 \times S^\circ \text{CO}_2) + (3 \times S^\circ \text{H}_2\text{O})]$$

$$(\sum n_r S^\circ_{\text{reactius}}) = [(1 \times S^\circ \text{CH}_3\text{OCH}_3) + (3 \times S^\circ \text{O}_2)]$$

$$\Delta S^\circ_{\text{reacció}} = [2 \times 213,6 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} + 3 \times 188,8 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}] - [1 \times 267,34 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} + 3 \times 205,0 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}] = 111,26 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\Rightarrow \Delta S^\circ_{\text{reacció}} = 111,26 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \quad [0,30 \text{ p.}]$$

### Càlcul de l'espontaneïtat de la reacció

Una reacció serà espontània quan  $\Delta G^0 < 0$ , i [0,10 p.]

$$\Rightarrow \Delta G^0 = \Delta H^0 - T \Delta S^0 \quad [0,10 \text{ p.}]$$

Primer, transformem les unitats d'entropia (J a kJ):

$$111,26 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1} \times (1 \text{ kJ} / 1000 \text{ J}) = 0,11126 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

#### Càlcul de l'espontaneïtat a 25 °C

$$T = 25 \text{ °C} + 273 \text{ K} = 298 \text{ K}$$

$$\Delta H^0 = -1292 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ (enunciat)}$$

$$\Delta G^0 = -1292 \text{ kJ mol}^{-1} - (298 \text{ K} \times (0,11126 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ K}^{-1})) = -1325,15 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Rightarrow \Delta G^0 = -1325,15 \text{ kJ mol}^{-1} \quad [0,30 \text{ p.}]$$

$\Rightarrow$  La reacció serà espontània a 25 °C perquè  $\Delta G^0 < 0$  [0,15 p.]