

OLIMPIADA DE CHIMIE 2021
Proba de baraj
17 aprilie
Chimie fizică - termodinamică

Subiectul I

(10 puncte)

Informații:

- (1) $R = 0,082 \text{ L} \cdot \text{atm} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$; $R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
- (2) Pentru definirea condițiilor standard se va considera $1 \text{ atm} = 1 \text{ bar}$.
 $1 \text{ atm} = 760 \text{ mmHg} = 101325 \text{ Pa}$
- (3) Se consideră că $0^\circ \text{C} = 273 \text{ K}$;
- (4) $1 \text{ cal} = 4,184 \text{ J}$
- (5) $\rho_{\text{etanol}} = 0,79 \text{ g/cm}^3$

Sake, unul dintre simbolurile naționale ale Japoniei, este o băutură alcoolică, transparentă, cu o istorie de peste 1300 de ani, produsă prin fermentarea orezului. Conținutul în etanol al acestei băuturi este de aproximativ 20 %.

a) Principalul combustibil utilizat ca înlocuitor de benzină pentru vehicule este bioetanolul. Combinând etanol cu benzină, putem “oxigena” amestecul de combustibil, astfel încât acesta arde mai eficient reducând astfel emisiile poluante. Calculați cantitatea de CO_2 obținută în urma reacției de oxidare a unui litru de etanol lichid în condiții normale.

Variația căldurii molare izobare a CO_2 gazos ($C_p \text{ JK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$) cu temperatura este de forma $C_p = a + bT$ unde $a = 28,1$ iar $b = 3,3 \cdot 10^{-2}$.

Pentru cazul încălzirii cantității de CO_2 obținută la punctul **a)** de la 0 la 200°C :

- b)** calculați variația entalpiei (ΔH),
- c)** exprimați valoarea căldurii în condițiile în care are loc reacția (Q),
- d)** calculați lucrul mecanic (W),
- e)** calculați variația energiei interne (ΔU),
- f)** calculați variația entropiei (ΔS).
- g)** Interpretați din punct de vedere termodinamic, folosind doar câteva cuvinte, semnul valorilor ΔH , Q , W , ΔU și ΔS la finalul procesului.
- h)** Care este valoarea lucrului mecanic în condiții izocore?

Esterii se găsesc în cantități mici în Sake, dar contribuția lor la aroma băuturii este totuși considerabilă. Printre cei mai comuni reprezentanți ai acestei clase de compuși organici prezenți în Sake se numără acetatul de etil, acetatul de izobutil, butiratul de etil, lactatul de etil etc.

i) Calculați constanta de echilibru (K) pentru reacția de esterificare a etanolului cu acid acetic. Cum puteți interpreta această valoare? Folosiți datele din tabel de mai jos.

j) Determinați contribuția $\Delta_r H^\circ$ și $\Delta_r S^\circ$ la valoarea constantei de echilibru la 298 K . Ce constatați?

Compus	$\Delta_f H^\circ$ (kJ/mol)	S° (cal/K mol)
C ₂ H ₅ -OH	-277,7	38,41
CH ₃ -COOH	-484,5	38,19
CH ₃ COO-C ₂ H ₅	-479,0	62,00
H ₂ O	-285,8	16,71

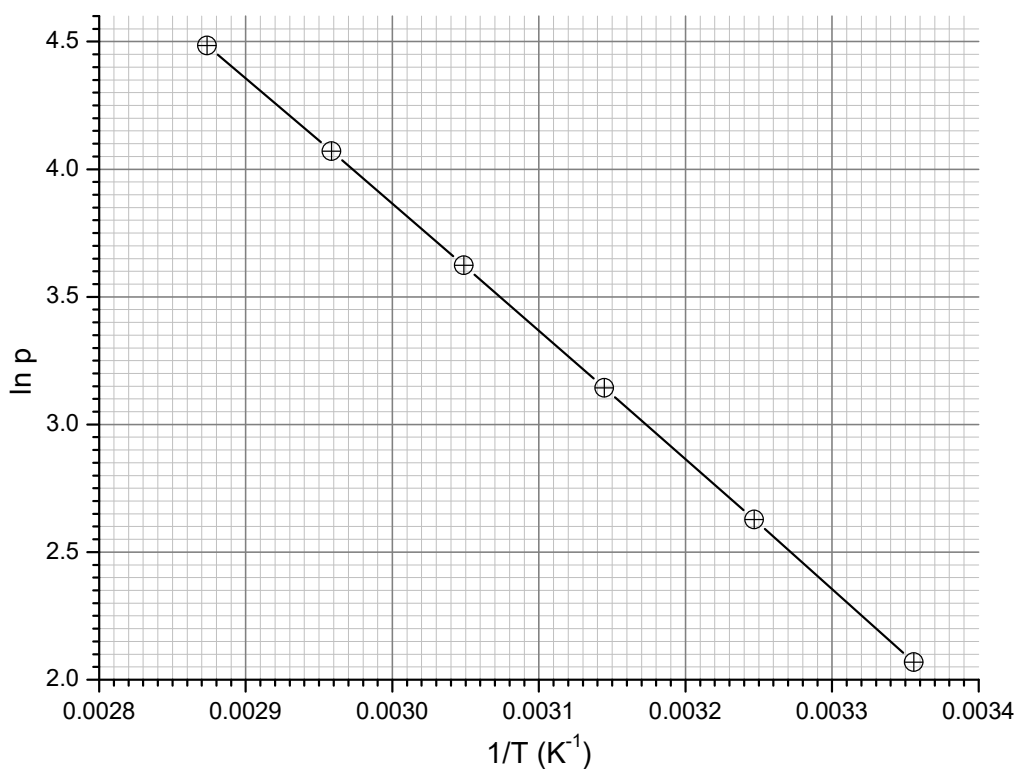
Kunz și colaboratorii (*J. Chem. Eng. Data*, 2004, 49, 607-612) au efectuat măsurători ale presiunii de vapori ale etanolului la diferite temperaturi. Rezultatele experimentelor se găsesc în tabelul alăturat.

k) Determinați entalpia de vaporizare a etanolului știind că relația dintre temperatură și presiune este dată de

relația Clausius-Clapeyron $\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta_{vap} H}{T \Delta V}$.

T (°C)	25	35	45	55	65	75
p (kPa)	7,916	13,841	23,169	37,456	58,580	88,655

Reprezentarea datelor corespunzătoare tabelului este dată în graficul alăturat.



Subiectele au fost propuse de: Lect. Dr. Ing. Lucian-Cristian Pop, Universitatea "Babeș-Bolyai", Cluj-Napoca

Olimpiada de Chimie 2021

Proba de baraj - Subiect Termodinamică Chimică

Pagină 2 din 2