

REACK

Ajust i càlculs d'equacions químiques

The screenshot shows the REACK software interface. At the top, the title bar reads "Reaccions químiques: ajust i càlculs". Below it is a menu bar with "Arxiu", "Dades", "Eines", "Info", and "Sortir". The main area is titled "Reacció" and contains a text box with the chemical equation $C_4H_{10} + O_2 \longrightarrow CO_2 + H_2O$. To the right of this text box are three buttons: "Nova", "Ajustar", and "Autoajust". Below the equation is a section titled "Reactius / Productes". This section is divided into two columns: "Reactius" and "Productes". Under "Reactius", there are input fields for "C4H10" and "O2". To the right of these are three columns: "Inicial", "mol r.", and "Final". Under "Productes", there are input fields for "CO2" and "H2O", and a "mol" column to the right. At the bottom of the "Reactius" and "Productes" sections are yellow buttons with up and down arrows, and a central "+ -" button. A small icon is visible in the bottom left corner of the window.

- [Reaccions: incorporar / editar.](#)
- [Ajustar una reacció:](#)
- [Càlculs basats en una reacció:](#)
- [Problema](#)

Reaccions: incorporar / editar.

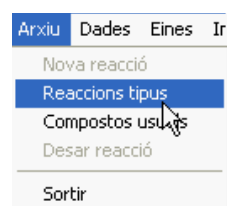
Només es pot treballar amb reaccions “mol·leculars” (no parcials iòniques) i que tan sols continguin les fórmules (sense indicacions de l'estat de les substàncies o d'altres)

- [Incorporar reaccions tipus o “standard”](#)
- [Construir /editar manualment una reacció](#)

Incorporar reaccions tipus o “standard”

Selecció al menú **Arxiu** l'opció...

Es mostra la finestra que connecta amb la base de dades de reaccions tipus

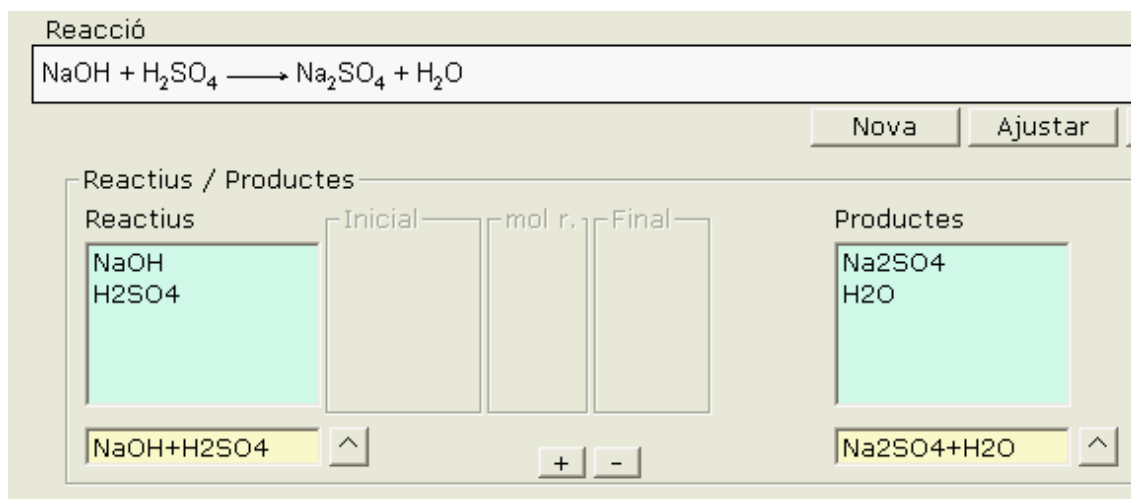
Aquesta imatge mostra la finestra 'Reaccions tipus' de l'aplicació. A la part superior, hi ha dos botons de selecció: 'Tipus' (amb 'aleatori' seleccionat) i 'Reaccions' (amb 'aleatòria' seleccionat). A sota, hi ha una llista de tipus de reaccions: 'Redox', 'Combustió', 'Descomposició', 'Síntesi' i 'Diverses'. El tipus 'Redox' està seleccionat. A la dreta, hi ha una casella d'edició amb la fórmula química $\text{KMnO}_4 + \text{NaNO}_2 + \text{HCl} = \text{MnCl}_2 + \text{NaNO}_3 + \text{KCl} + \text{H}_2\text{O}$. A la part inferior dreta, hi ha un botó 'Passar ->'. A la part inferior esquerra, hi ha un botó amb una 'x' que serveix per eliminar la reacció. Les anotacions indiquen: 'Reacció seleccionada' (puntant a la fórmula), 'Elimina la reacció' (puntant al botó 'x'), i 'Transfereix la reacció a la finestra principal' (puntant al botó 'Passar ->').

Amb aquesta finestra també es pot, tant en els tipus com a les reaccions:

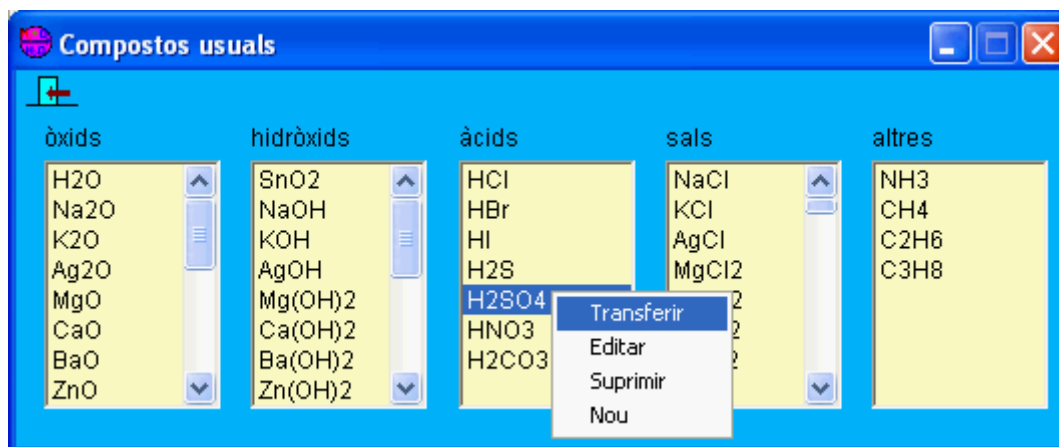
- **Afegir-ne**: introduint el nom o la reacció a la casella d'edició i prement **Return**
- **Modificar**: seleccionant un nom o reacció, modificar i **Return**
- **Eliminar**: seleccionar i prémer el botó

Construir / editar manualment una reacció

Introduint els reactius (un per un o de cop) per una banda i els productes per l'altra es va formant la reacció...

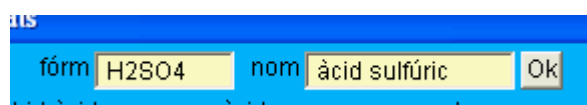


Una facilitat per introduir fórmules sense escriure-les és invocar la finestra de **compostos**...



Amb les opcions:

- **Transferir** a la llista de fórmules de la reacció
- **Editar** el compost seleccionat
- **Suprimir** –lo
- **Nou**: incorporar un nou compost



Ajustar una reacció

Un cop carregada o construïda una reacció, cal ajustar la seva equació per tal que reflecteixi la proporció en mols dels compostos que hi intervenen

Reacció

$C_3H_8 + O_2 \longrightarrow CO_2 + H_2O$

Nova Ajustar Autoajust

- [Ajust Manual](#)
- [AutoAjust](#)

Ajust Manual: Prement el botó **Ajustar**

Es despleguen les caselles per a introduir els coeficients dels reactius i dels productes

Reacció

$C_3H_8 +$ $O_2 \longrightarrow$ $CO_2 +$ H_2O

Nova accepta Autoajust

S'acaba amb el botó **accepta** i el programa acceptarà l'ajust o donarà missatges d'error si no és correcte.

AutoAjust: Amb el botó **Autoajust**. El programa calcularà els coeficients.

No és una opció recomenable des del punt de vista de l'aprenentatge, però serà útil quan el que es vol és passar directament a la fase de càlculs.

En qualsevol dels casos, s'obtindrà la reacció ajustada:

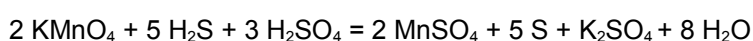
Reacció

$C_3H_8 + 5 O_2 \longrightarrow 3 CO_2 + 4 H_2O$

Nova Càlculs Autoajust

Nota quant a l'autoajust de reaccions: el mètode utilitzat és purament matemàtic i, encara que rarament, en les reaccions **Redox** pot donar un resultat matemàticament correcte però químicament fals: és a dir tal que el nombre d'electrons cedits pel reductor no sigui igual al de captats per l'oxidant. Un exemple:

La reacció $KMnO_4 + H_2S + H_2SO_4 = MnSO_4 + S + K_2SO_4 + H_2O$, ajustada pel mètode matemàtic dóna $2 KMnO_4 + 2 H_2S + 2 H_2SO_4 = 2 MnSO_4 + S + K_2SO_4 + 4 H_2O$, que compleix la conservació dels àtoms, però ajustada pel mètode de l'ió-electró dóna l'equació químicament real:



Càlculs basats en una reacció:

Un cop ajustada, prement el botó **Càlculs** es despleguen les caselles per a la introducció de dades y presentació de resultats.

Es poden introduir les dades de:

- Un o més reactius (si és més d'un es calcularà el reactiu limitant)
- O, alternativament, la d'un sol producte (si s'en introdueixen més s'ignoraran).

També es poden triar les unitats de les quantitats.

Reacció

$$\text{C}_3\text{H}_8 + 5 \text{O}_2 \longrightarrow 3 \text{CO}_2 + 4 \text{H}_2\text{O}$$

Nova Càlculs Autoajust

Càlculs sobre la reacció

Reactius	Inicial	mol r.	Final	Productes	mol
C3H8	60 g	0.071	56.851g	CO2	4.800 L cn 0.214
O2	8 L cn	0.357	0.000L cn	H2O	5.149 g 0.285

Unitats
 gram mol L cn L = f(P,T) P: [] atm T: [] °C

Prement **OK** després d'introduir les dades, apareixen els resultats a les caselles buïdes, i es mostra una finestra amb un esquema del "problema" format:

REACCIÓ: $\text{C}_3\text{H}_8 + 5 \text{O}_2 = 3 \text{CO}_2 + 4 \text{H}_2\text{O}$

Dades:

C3H8: 60 g · 1 mol/44.1g = 1.361 mol
 O2: 8 L cn · 1 mol/22.4L / 5 = 0.071429 <- R.L.

Resultats:

REACTIU	mols que reaccionen	excès
C3H8	0.071429 × 1 = 0.071429	1.29 mol × 44.1g/mol = 56.85 g

PRODUCTE	mols formats
CO2	0.071429 × 3 = 0.214286 × 22.4 L/mol = 4.8 L cn
H2O	0.071429 × 4 = 0.285714 × 18g/mol = 5.15 g

El problema es pot desar en mode text en un fitxer.

Si no existeix es crearà, i si ja hi és se li afegirà el problema

Arxiu

Afegir a...

Sortir