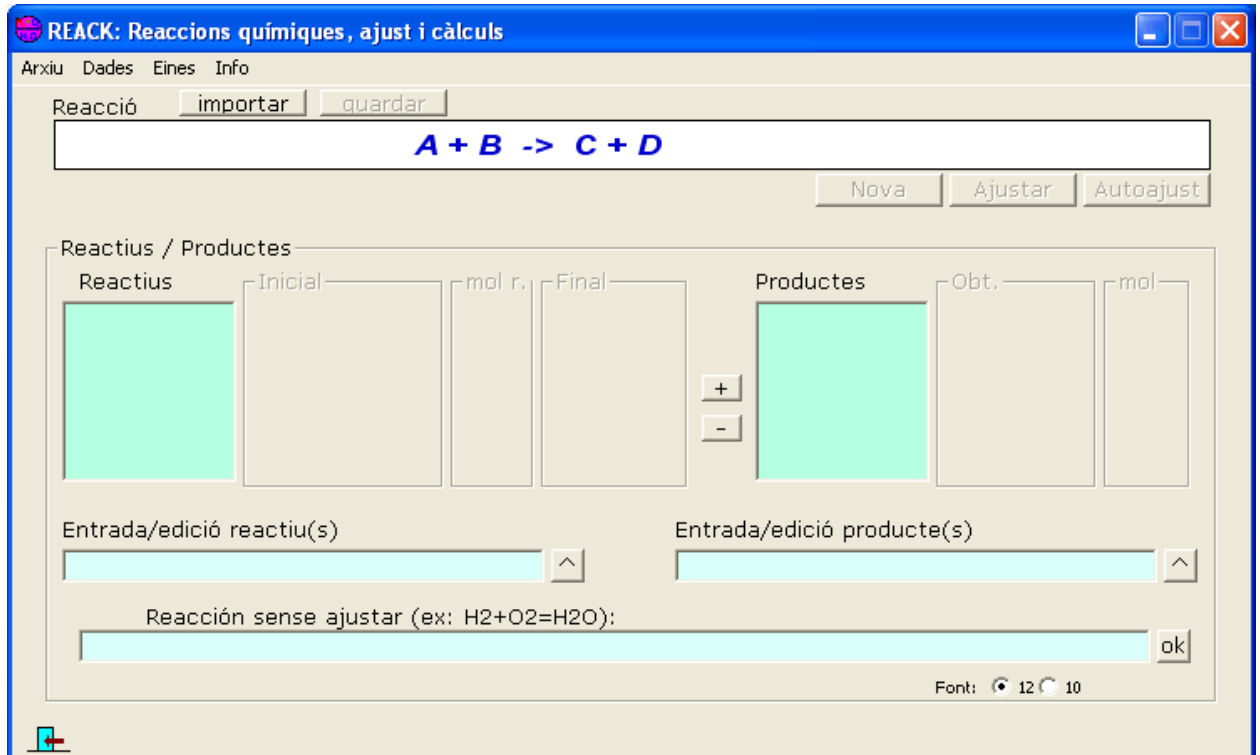


REACK

Ajust d'equacions químiques i càlculs estequiomètrics



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

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”

Prement el botó **importar** o seleccionant al menú **Dades** l'opció...

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

Dades	Eines	Info
		Masses atòmiques
		Fitxer d'elements
		Compostos usuals
		Reaccions tipus

The screenshot shows the 'Reaccions tipus' dialog box with the following elements and annotations:

- Grup de reaccions:** A dropdown menu currently showing 'aleatori'. Annotations include 'Grup de reaccions', 'Nou grup', 'Elimina', and 'Accepta nou'.
- Reaccions:** A list containing the chemical formula $C_3H_8 + O_2 = CO_2 + H_2O$. Annotations include 'Reacció seleccionada', 'Nova reacció', 'Elimina', and 'Accepta nova'.
- Descr.:** A text field containing 'Combustió del propà'. Annotation: 'Descripció (opcional)'.
- Buttons:** 'Passar ->' (Transfer the reaction to the program), 'Ordenar', and search buttons ('Cerca: [] ok').

Aquí, com podeu veure, també es poden afegir, modificar i eliminar: grups de reaccions y reaccions

Construir / editar manualment una reacció

Introduint els reactius i els productes a les seves caselles s'incorporen a les llistes i es va formant la reacció. També es pot introduir directament la reacció

Reacció

$C_3H_8 + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$

Combustió del propà

Reactius / Productes

Reactius	Inicial	mol r.	Final	Productes	Obt.	mol
C3H8 O2				CO2 H2O		

Entrada/edició reactiu(s)

Entrada/edició producte(s)

Reacció sense ajustar (ex: H2+O2=H2O):

Font:

També es poden introduir fórmules sense escriure-les amb que mostra llistes de **compostos**...

Dades Eines Info

- Masses atòmiques
- Fitxer d'elements
- Compostos usuals
- Reaccions tipus

Compostos usuals

òxids	hidròxids	àcids	sals	altres
H2O	SnO2	HCl	NaCl	NH3
Na2O	NaOH	HBr	KCl	CH4
K2O	KOH	HI	AgCl	C2H6
Ag2O	AgOH	H2S	MgCl2	C3H8
MgO	Mg(OH)2	H2SO4		
CaO	Ca(OH)2	HNO3		
BaO	Ba(OH)2	H2CO3		
ZnO	Zn(OH)2			

Transferir
Editar
Suprimir
Nou

Amb les opcions:

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

fórm nom

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

$C_3H_8 + O_2 \longrightarrow CO_2 + H_2O$

Combustió del propà

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

Ajust Manual: Prement el botó

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

Combustió del propà

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 . El programa calcularà els coeficients.

No és una opció recomenada 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'obindrà la reacció ajustada:

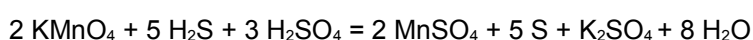
Reacció

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

Combustió del propà

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 dona $2 KMnO_4 + 2 H_2S + 2 H_2SO_4 = 2 MnSO_4 + S + K_2SO_4 + 4 H_2O$, que compleix la conservació dels àtoms, però ajustada pel mètode de l'ió-electró dona 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 i la 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 se n'introdueixen més s'ignoraran).

També es poden triar les unitats de les quantitats.

The screenshot shows the REACK software interface. The title bar reads "REACK: Reaccions químiques, ajust i càlculs". The main window contains a menu bar (Arxiu, Dades, Eines, Info) and a toolbar with "importar" and "guardar" buttons. The reaction equation is $C_3H_8 + 5 O_2 \rightarrow 3 CO_2 + 4 H_2O$, with the description "Combustió del propà". Buttons for "Nova", "Càlculs", and "Autoajust" are visible. The "Càlculs sobre la reacció" section has a table for reactants and products. The reactant table has columns for "Reactius", "Inicial", "mol r.", and "Final". The product table has columns for "Productes", "Obt.", and "mol". The reactant table contains "C3H8" and "O2" with initial values of "50 g" and "200 L cn" respectively. The product table is empty. Below the table is a text box for "M.A.: C = 12.01, H = 1.008, O = 16.00" and buttons for "Rst", "Calc", and "Problema >". At the bottom, there are unit selection options: "Unitats O2" with "gram" selected, "V dissolució" with "L cn" selected, and "L=f(P,T)" with "P: 1.00 atm" and "T: 20.0 °C".

Entrar dada/es

Elecció d'unitats

Calc

Prement **Calc** després d'introduir les dades, apareixen els resultats a les caselles buides:

The screenshot shows the REACK software interface after the calculation. The reaction equation and description remain the same. The "Càlculs sobre la reacció" section now shows the results in the table. The reactant table has "C3H8" with "50 g" and "1.13" mol r., and "O2" with "200 L cn" and "5.67" mol r. The "Final" column shows "0.000g" for C3H8 and "73.0L cn" for O2. The product table shows "CO2" with "150 g" and "3.40" mol, and "H2O" with "81.7 g" and "4.54" mol. The "M.A." text box and buttons are also present.

Problema: Pulsant **Problema >** apareix un esquema del problema :

Problema

Arxiu

Possible enunciati

El C₃H₈ reacciona amb O₂ per donar: CO₂ i H₂O.
 Si han intervingut 53.0 g de C₃H₈ del 80% i 120 L cn de O₂ calcula:
 Els L cn de CO₂ i g de H₂O obtinguts.

Resolució

REACCIÓ: C₃H₈ + 5 O₂ = 3 CO₂ + 4 H₂O

Dades:

C₃H₈: 53.0 g x 80/100 x 1 mol/44.10g = 0.962 mol <- R.Limitant
 O₂: 120 L cn x 1 mol/22.4L = 5.36 mol / 5 -> 1.07

Resultats:

REACTIU	mols reac.	quantitat	excés (=ini-reac.)
O ₂	0.962 x 5 = 4.81	4.81 x 22.4L/mol = 108L cn	-> 12.3 L cn final

PRODUCTE	mols formats	quantitats
CO ₂	0.962 x 3 = 2.88	x 22.4L/mol = 64.6 L cn
H ₂ O	0.962 x 4 = 3.85	x 18.02g/mol = 69.3 g

El

problema es pot guardar en mode text en un fitxer.

Si el fitxer ja existeix se li afegirà el problema, si no, es crearà .

Arxiu

- Guardar problema
- Veure fitxer
- Sortir

Guardar reacció utilitzada:

La reacció introduïda es pot **guardar** , si no hi era, a la relació de reaccions tipus amb la mateixa finestra vista per a importar-ne, lleugerament modificada:

GUARDAR REACCIÓ

Seleccionar TIPUS o crear + **ok**

Tipus: aleatori

Cerca: **ok** aleatòria

Reaccions: C₆H₆+O₂=CO₂+H₂O

Ordenar

- opcional: introduir Descripció
- Acceptar amb **ok**

Descr.

Passar ->

Càlcul de concentracions

Dins les eines internes del programa està el càlcul de concentracions de compostos triats a la llista o introduïts. Es pot calcular les diferents expressions de concentració a partir de les dades de preparació o la conversió d'una expressió de concentració a les altres.

També es pot fer servir, simplement, per calcular la massa molar d'un compost.

Eines	Intro
Càlcul concentracions	
Edició eines	
Calculadora de Windows	
Bloc de notes	

Concentració de dissolucions

Arxiu

Compost: HCl MM: 36.46

Densitat dissolució: 1.06 g/l

Preparació:

- g solut: 56
- ml dissolució: 800
- g disolvent:

Concentració:

- Molaritat: 1.92
- molalitat: 1.94
- gram/dm³: 70.0
- % en massa: 7.07

Buttons: ok, Calc

En aquest panell es pot convertir una expressió de concentració a les altres introduint-la i punxant el botó **Calc**

Qualsevol comentari o dubte sobre el programa el podeu enviar a

jog@scialt.com

O visitar la pàgina web: <http://www.scialt.com>