

Dr. Fermín Huarte Larrañaga
*Departament de Ciència de Materials i
Química Física*

Dr. Xavier Giménez Font
*Departament de Ciència de Materials i
Química Física*



Treball Final de Grau

**Use of Python Programming Tools in Physical Chemistry
Laboratories.**

**Ús d'eines de Programació en Python en Laboratoris de Química
Física.**

Romà Zapata Bosch

June 2020



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

B:KC Barcelona
Knowledge
Campus
Campus d'Excel·lència Internacional

Aquesta obra està subjecta a la llicència de:
Reconeixement–NoComercial–SenseObraDerivada



<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/es/>

Technology will never replace great teachers but technology in the hands of great teachers is transformational.

George Couros

En primer lloc vull donar les gràcies al Dr. Fermin Huarte, per, fins i tot en una situació d'excepcionalitat com la que hem viscut, ajudar-me i guiar-me en tot el desenvolupament d'aquest treball.

En segon lloc vull agrair al Dr. Xavier Giménez els recursos que m'ha proporcionat.

També vull agrair al Dra. Maria Carme Sousa per posar-me en contacte amb els estudiants i permetre que l'enquesta es pogués dur a terme.

Finalment vull agrair a tots els meus companys i amics de classe que m'han cedit les seves dades de quan van fer el laboratori per a poder posar a prova els notebooks.

REPORT

CONTENTS

1. SUMMARY	3
2. RESUM	5
3. INTRODUCTION	7
3.1. Google Colab Python Notebooks	7
3.2. Why Notebooks	8
3.3. Notebook Uses	8
3.4. Background Survey	9
4. OBJECTIVES	15
5. DEVELOPED MATERIAL	16
5.1 General Structure	16
5.2 Developed Notebooks	17
5.2.1 Tutorial Notebook	17
5.2.2 Kinetic Notebooks	19
5.2.2.1 Kinetics in chromium-EDTA complex formation	19
5.2.2.2 Kinetics in catalytical H ₂ O ₂ decomposition	23
5.2.2.3 Conductimetric monitoring of an Ester Hydrolysis	26
5.2.2.4 Multi Kinetic Notebook	28
5.2.3 Ternary phase diagram notebooks	30
5.2.3.1 Acetic Acid / Water / Chloroform System	31
5.2.3.2 Ethyl Acetate / Water / Butanol System	33
6. CONCLUSIONS	36
7. REFERENCES AND NOTES	37
8. ACRONYMS	38
APPENDICES	39
Appendix 1: Developed Notebooks	40

1. SUMMARY

Nowadays, the students in the course “Laboratori Basic de Quimica Fisica” have a laboratory guide which, alongside the recommended bibliography and the teachers help, must lead them into the understanding of some concepts on each practice while guides them to a correct execution on the experimental procedure proposed. Although the given resources are helpful, some fundamentals on these practices can sometimes be hard to understand and this could lead to confusion in some students.

On the other hand, during the first year of university, the students of the grade participate in a course named “Recursos Informatics”. During this subject, the students are taught in the use of some computer science tools which can be useful during all their studies and even during their professional career. These tools allow the student to do graphical representations and data treatment among other stuff. Nevertheless, this aptitude that has been developed is not always used in other fields such as the laboratories.

The main goal of this study is *developing software* that can help the students of the laboratory to understand the physical chemistry concepts behind the practices they do. This tool also has to help them to see which data treatment has to be done and the reasons behind choosing this one while showing the students that, applying the knowledge they got in “Recursos informatics”, it is quite easy to accelerate this process.

The chosen tool is the *notebooks* hosted on the Google Colaboratory platform. This tool is based in the python programming language taught in “Recursos informatics”. This tool creates what appears as an interactive website where the student will have text and images explaining the basis of the practices and helping them to learn them and, simultaneously, allows them to do the data treatment on their data.

Keywords: Physical chemistry, Software, Development, Notebook.

2. RESUM

Actualment, els alumnes del laboratori basic de química física disposen d'un guió de pràctiques que, juntament amb la bibliografia recomanada i amb l'ajut dels professors, els ha de servir per a realitzar les pràctiques correctament alhora que aprenen i entenen els fonaments que s'intenta ensenyar en cadascuna d'elles. Tot i que els recursos dels que disposen són realment útils, alguns dels conceptes explicats no son senzills d'entendre i això pot dur a confusions en l'alumnat.

Per altra banda, els alumnes del grau durant el primer curs realitzen l'assignatura "Recursos informàtics". Durant aquesta assignatura se'ls hi proporciona un seguit d'eines informàtiques que han de ser capaços d'utilitzar durant la resta dels seus estudis i, fins i tot, quan entrin al món laboral. Són eines que permeten la representació gràfica i el tractament de dades experimentals. No obstant això, aquesta competència que han desenvolupat sovint no és aprofitada en altres àmbits com per exemple en els laboratoris.

L'objectiu principal d'aquest treball és el *desenvolupament d'una eina informàtica* que pugui ajudar als alumnes a comprendre millor les pràctiques. Aquesta eina els ha d'ajudar, també, a veure quin és el tractament que s'ha de realitzar en les seves dades i el perquè és aquest tractament i no un altre alhora que se'ls hi mostra com, aprofitant les eines que han rebut durant l'assignatura "Recursos informàtics", poden accelerar aquest procediment que a vegades pot ser lent i feixuc.

L'eina escollida són els "*notebooks* de Google Colab". Aquesta eina està basada en el llenguatge de programació python, que aprenen durant l'assignatura anteriorment esmentada. Utilitzar aquesta eina permet la creació del que s'assembla a una pàgina web interactiva on l'alumne disposarà de text i imatges que reforçaran l'estudi realitzat durant les pràctiques i que, simultàniament, els permetrà realitzar el tractament de les seves dades.

Paraules clau: Química física, Eina informàtica, Desenvolupar, Notebook,.

3. INTRODUCTION

Currently in the subject “Laboratori Bàsic de Química Física”, the students have a laboratory guide which is followed during this laboratory. In this guide, most of the fundamentals of each experimental procedure appear as well as the steps the students must follow to do this experimental procedure. The students in this laboratory have to read, understand, and carry out the studies that appear in this guide. Moreover, the experimental data obtained in the laboratory must be treated in order to fulfil the objectives of each practice.

On the other hand, in the first year of the bachelor grade, the students study a subject called “Recursos informàtics”. In this subject excel, octave and python programming language are explained. Those are tools that allow them to make graphical representations and data treatment and that are supposed to be used during their grade studies and further. Nowadays, most students are not using these tools during the laboratories.

The main objective of this work is to develop a tool which the students can use to improve their understanding on the fundamentals that are taught in the laboratory practices and that simplifies the data treatment taking profit on the tools provided in “Recursos informàtics”. The chosen tool has been the Google Colaboratory notebooks. These are like interactive websites where the students will be able to upload their experimental data and see how it is treated step by step with a brief explanation of why these steps are taken. These notebooks are complementary to the laboratory guide but allow blended learning in which the student has another tool to learn and to improve his understanding of the concepts.

3.1 GOOGLE COLAB PYTHON NOTEBOOKS

The developed material in this study consists of 7 notebooks conceived in the [Google Colab](#) platform. Google Colab is a free-to-use platform for executable documents that can be written, shared, and executed.

A Notebook is an electronic version of a laboratory notebook. The user can annotate, insert data, comments, equations, graphs, statistics, HTML links in it and it provides an interactive framework to develop scientific data analysis.

Notebook documents consist of cells. There are two types of cells: text cells and code cells, both can contain text and images. The main difference is that code cells can execute python code. Using both text and code cells it is possible to create an interactive document in which the student can learn and simultaneously treat his/her experimental data.

One of the advantages of the Google Colab platform is that it can run this code cells without any previous set up on your computer. The students do not need to spend time setting up tools in their Operating System and just by having an internet connection and access to Google is enough to use the notebooks.

These 7 notebooks can also be downloaded by the student and used as any other notebook shown in “Recursos informàtics”

3.2 WHY NOTEBOOKS

Using this tool has a wide selection of advantages that will be summarized in the next list:

- Notebooks are quite modular, and it is relatively easy to add and to take out anything needed just by knowing a little on the python programming language. This can be useful if some teacher wants the students to focus on something or if he considers something less significant in a practice.
- The simplification of the data treatment allows the students to have more time to think and understand each practice.
- Notebooks are not intrusive. Notebooks can be used completely online so it does not require any program to be downloaded on the student computer.
- Constant improvement is allowed. As said before notebooks are easy to modify. After each laboratory session these can be improved considering both teachers and students opinions without putting much effort into it.
- Helps to maintain the student's attention throughout the whole exercise: As the student needs to be active while reading the notebook, this interactive tool helps them to keep the focus on each detail of the exercise, avoiding possible distractions.

3.3 NOTEBOOK USES

Nowadays in the laboratory, the teachers tell the students which experimental procedure should be followed by each of them. The students follow the laboratory guide and write a small report of each of these experimental procedures in their notebooks. Once this experimental procedure is completed, they do the required data treatment and answer some questions given in the

laboratory guide and some other questions given by the teacher. Also, at the ending of the laboratory course, a small exam is done.

The implementation of the notebooks would not interfere in this routine. When receiving a practice, the students should also take a first look at the corresponding notebook. This would be done to have a look at the practice context and to check which data will be needed during the notebook. Once they finish their experimental procedure, the notebook would be retaken. This time the students would upload their measured data and do the pertinent treatment. The results obtained should be written down in the laboratory notebook. In addition, the downloaded graphical representations could be included in the laboratory report.

These notebooks are developed to be used by the students during the LBQF and, as had been said, aim to help the students to understand the fundamentals of this laboratory while facilitating the data treatment on the practices impaired in it. Although, another possible application for the notebooks could be making the students remember the concepts learned in 'Recursos informàtics'. This could be done by erasing some code lines and letting the student write them to fulfil the desired task. As it is not the main objective of this course, this should be done with simple code cells. An example could be:

“Write a cell that calculates the concentration of the compound A after the density, the molar mass, and the solution volume are given by the user”

Besides, these could stimulate some students that, once they have seen that they are capable of applying the concepts learned in “Recursos informàtics” in a real case, may write some other code lines, or use some of this notebooks, to help them in further occasions.

The students using the notebooks will also be learning some cross-cutting concepts such as the creation of graphic sources and the implementation of them in the laboratory report and/or notebook, number of significant figures, linear regression, etc.

3.4. BACKGROUND SURVEY

In order to consider the students' point of view in the development of a tool like this, a survey has been made to the students that have done the subject “Laboratori Bàsic de Química Física” during the first semester and at the beginning on the second semester of the 2019-2020 course. This survey has been made online and, from 78 students that received it, 34 students answered.

This survey can be useful to check if there is a need for this tool and could be useful to compare results once the notebooks have been implemented in the laboratory. This could serve to check if the notebooks impact on the students' perception and comprehension of the laboratory fundamentals.

Which practices have you done during the laboratory? (Figure 1)

Considering that the students in the LBQF do, at least, one practice related on kinetics and one related on phase diagrams, it is seen that the practices done by the majority of them are: “Kinetics in chromium-EDTA complex formation” and “Ternary phase diagram, H_2O , acetic acid and chloroform system”

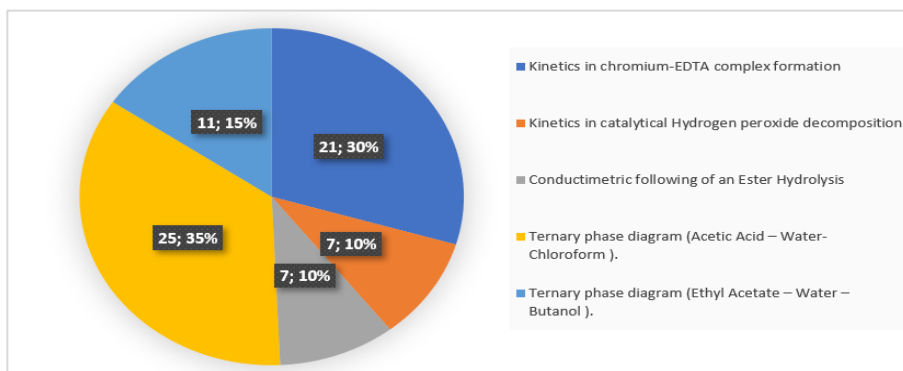


Figure 1. Students answers to the question: “Which practices have you done during the laboratory?”

How would you value your understanding of the laboratory fundamentals? (Figure 2)

In their view, most students have a nice comprehension of the laboratory practices fundamentals. This question may be useful to compare the results once the notebooks are implemented in the laboratory. Despite this, it is important to remember that this is only the student's perception and even it is important to make the students feel that they are learning it does not necessarily mean it is true.

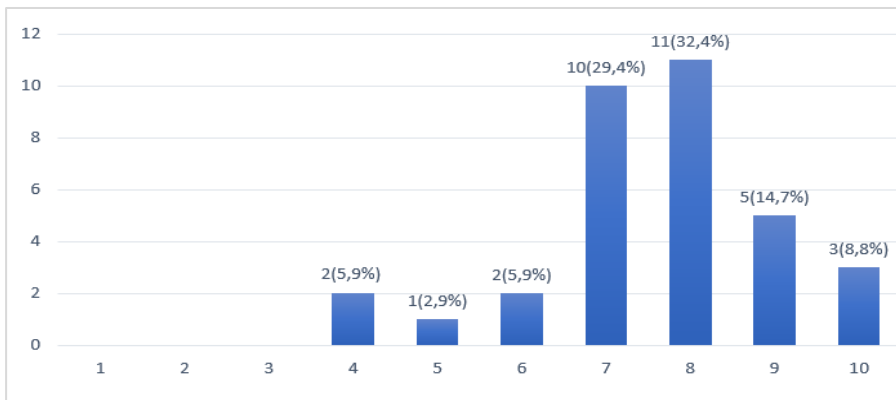


Figure 2. Students answer to the question: "How would you value your understanding of the laboratory fundamentals?" Considering 10 means "Very good understanding" and 0 means "not understood at all"

Are the recommended bibliography and the laboratory guide enough resources to completely understand the practices? (Figure 3)

44% of the respondents consider that more resources are needed to correctly understand the laboratory practices.

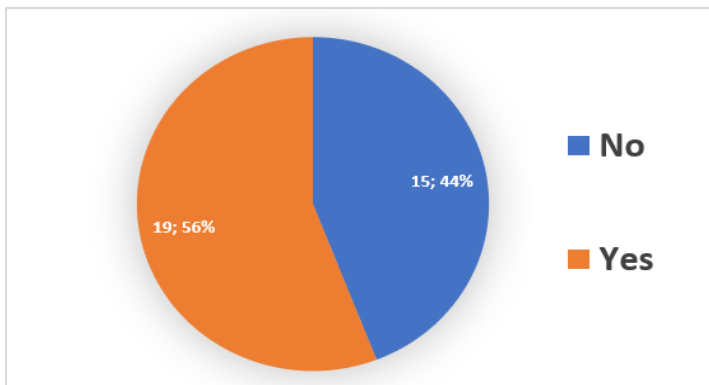


Figure 3. Students answer to the question: "Are the recommended bibliography and the laboratory guide enough resources to completely understand the practices?"

Which of these parts did you consider the hardest during the laboratory? (Figure 4)

It is a logical response that the most challenging part during the laboratory is the understanding of the concepts behind the practices. However, a big percentage of the students consider complicated doing the data treatment on each of the experiments. Using these notebooks could ease both parts.

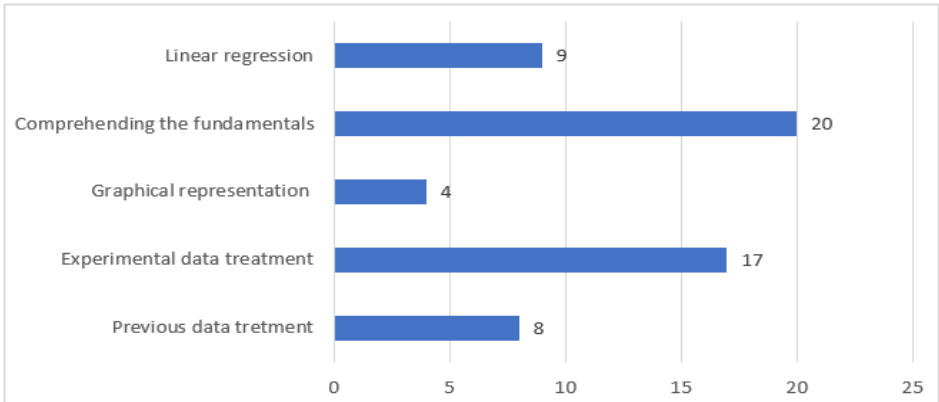


Figure 4. Students answer to the question: “Which of these parts did you consider the hardest during the laboratory?”

Which of these parts took more time to be done? (Figure 5)

29.4% of the respondents think that the data treatment is the part where more time is invested. The implementation of the notebooks aims to shorten the amount of time invested in this part letting the student more time to focus on understanding each practice.

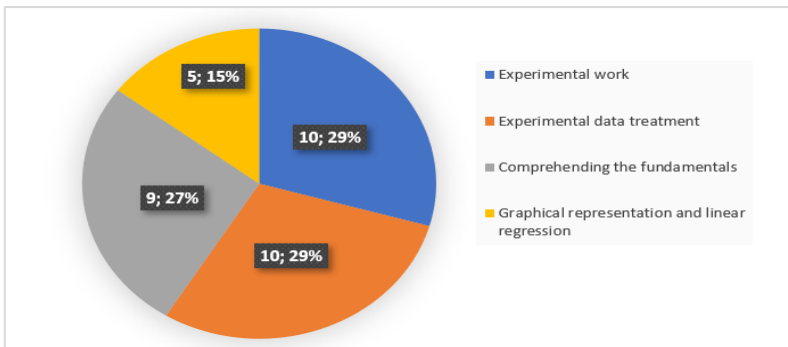


Figure 5. Students answer to the question: “Which of these parts took more time to be done?”

Do you think that the time invested in the practices corresponds to the concepts you learn from them? (Figure 6)

Near 40% of the students believe that the time invested in the practices does not correspond to the concepts learned on it.

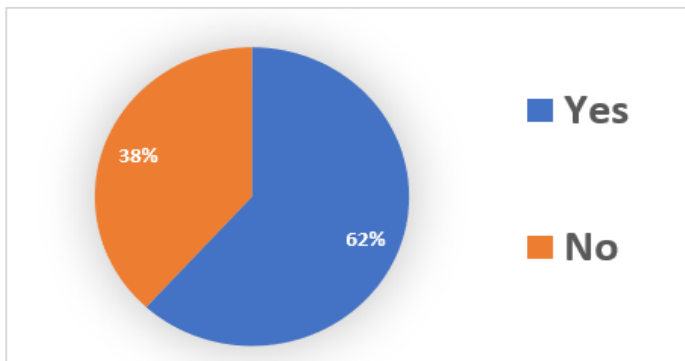


Figure 6. Students answer to the question: "Do you think that the time invested in the practices corresponds to the concepts you learn from them?"

Do you consider it useful to implement a computer tool that facilitates the processing and representation of laboratory data? (Figure 7)

Practically, all students think that obtaining a tool like this could be useful in the laboratory.

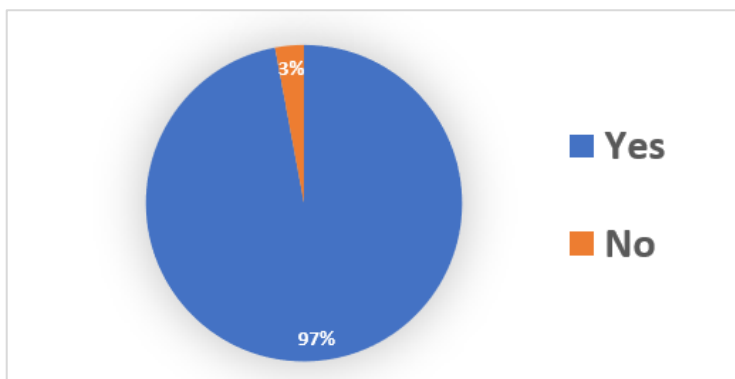


Figure 7. Students answer to the question: "Do you consider it useful to implement a computer tool that facilitates the processing and representation of laboratory data?"

How useful do you think the subject "Recursos informàtics" has been so far? (Figure 8)

Despite 62 % of the students agree that this subject is between *quite useful* and *very useful*, there is a 38% that considers this subject between *not useful* and *little useful*. Using the notebooks during the laboratory maybe could change this opinion on the students as they could see direct applications of what they learned before.

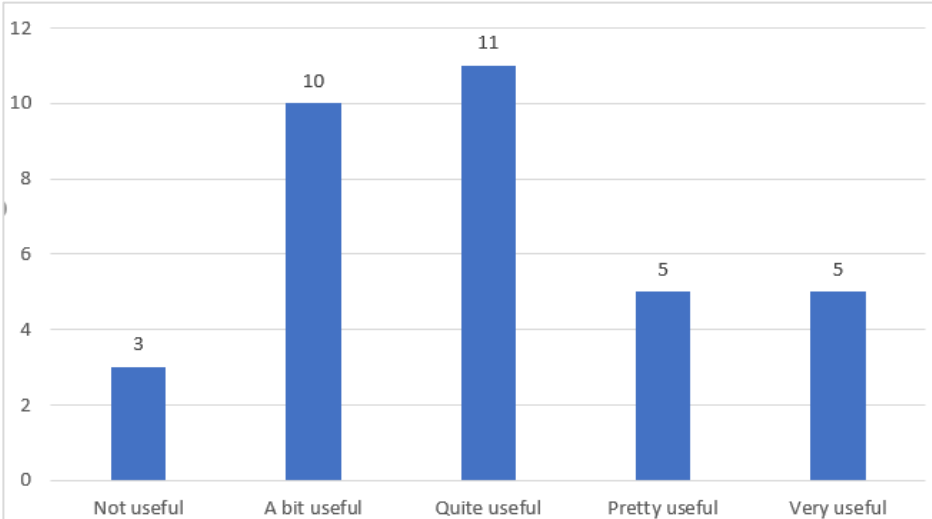


Figure 8. Students answer to the question: “How useful do you think the subject “Recursos Informàtics” has been so far?”

Do you think a tool like this could help you to understand some LBQF fundamentals? (Figure 9)

85% of the respondents believe that a tool like this could help them to improve the laboratory fundamentals understanding.

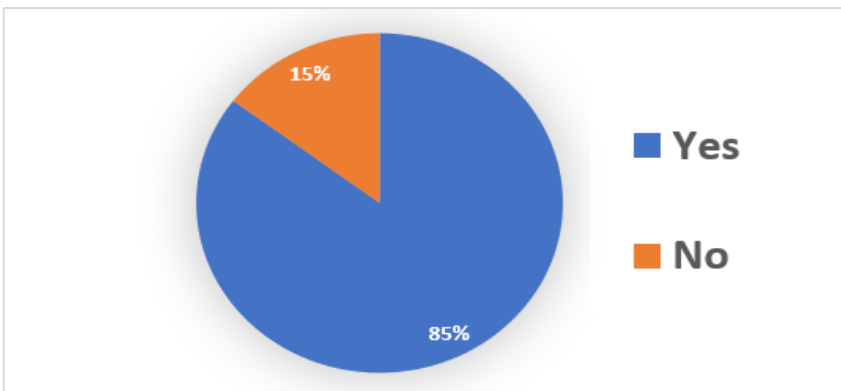


Figure 9. Students answer to the question: “Do you think a tool like this could help you to understand some LBQF fundamentals?”

Considering all these results, a big percentage of the respondents believe that the laboratory practices have room for improvement and that more resources would help them to fully understand the practices. It is important to see that a big percentage of the students consider the data treatment a hard and very time-consuming part of the practices.

Having this in mind, the notebooks may be a useful tool that improves the students' perception and understanding of the laboratory reducing the time invested on some parts, like the experimental data treatment and the graphical representation of this data, and increasing the available time to focus on understanding the physical chemistry concepts. Also, the notebooks can help the students to understand these fundamentals.

4. OBJECTIVES

The main objective of this study is the development of python notebooks to improve the understanding of some physical chemistry laboratory practices. These notebooks aim to assist students in data treatment as in learning the fundamentals of each practice and, therefore, their academic performance. After that the other objectives would be the following:

- To provide a tool for students to further develop and maintain skills in the use of computational tools taught in "Recursos informàtics".
- To develop a tutorial notebook for everyone to learn how to work with notebooks.
- To allow the students to concentrate on physio-chemical concepts by providing tools for systematic data analysis and representation.
- To facilitate means for the student to develop instrumental capabilities such as graphical representation, simple programming, etc.
- To improve the students' comprehension of the laboratory fundamentals.

5. DEVELOPED MATERIAL

Preparing learning material needs a lot of time and dedication. Furthermore, when this material is supposed to be used by the students alone, this material must be easy to understand and to work with it.

In this section, it will be explained how a total of 7 “Google Collaborate” python notebooks have been developed during this study.

Before the creation of each notebook two things must be clear:

- 1) The concepts that the notebook wants to clarify.
- 2) The data treatment that must be done in the practice

Two types of notebooks have been developed in this study focusing on either Kinetics or Ternary Phase Diagrams. Additionally, a Tutorial notebook has been developed to help students in using the other notebooks.

5.1 GENERAL STRUCTURE

All notebooks follow a general structure to keep the student in a comfortable and easy to follow environment while using these notebooks. This structure is assembled by alternating text and code cells. The text cells are used to explain physical chemistry concepts and to guide the student through the notebook. The code cells are used in the data treatment required for each practice and in a short self-assessment during and/or at the end of each notebook.

The notebooks are divided into sections that can be quickly navigated by the student.

The general structure behind every notebook is, in a very simplified way:

- Context.
- Data loading and treatment.
- Graphical representation.
- Self-assessment.

The context section contains an explanation of some of the fundamentals of the practice in which the student is working. Also, there are the objectives of the notebook. The concepts that do not appear in this section are scattered through the notebook in other text cells.

In the data loading and treatment section is where the student loads his measured data and inputs some constant values. (e.g. the temperature at which the experiment was carried, the density of a compound, etc) The code cells, once the student executes them, carry out all the

data treatment required. Before each code cell, the student gets some instruction to follow or a brief explanation on what the cell is going to do once it gets executed such as “*The next cell is going to calculate the percentages of the three compounds and put them in a table that will be shown to you*”.

At least one graphical representation is done in each of the notebooks. Notebooks allow the student to visually represent those graphics and even download them if it is necessary. In this way, the student can use them again in other circumstances and include them in the laboratory report and/or notebook.

At the end of each notebook, the student can find a brief self-assessment that can be answered in the notebook to check if they have understood properly the concepts that appear in the notebook. In some notebooks, there is also a self-assessment between two sections to test the student comprehension of the previously done section.

5.2 DEVELOPED NOTEBOOKS

Note (1): Despite the developed notebooks appear in appendix 1 of this report, these are not meant to be printed, since some printing problems may appear. The online view of the notebooks is recommended. This can be done by just clicking on the links provided in this report.

Note (2): All notebooks are ready with experimental data to allow the readers of this report to use them and to see how a user of this notebooks would feel working with them. When the notebooks are given to the students, neither the links on the uploading data cells or the input values which appear as “Valors de prova” should be in the notebooks.

5.2.1 Tutorial Notebook

A [Tutorial Notebook](#) has been developed to help the student to learn how to work with all the notebooks. As its name explains, it is a tutorial where the student will get the instructions to follow in each notebook. This notebook is the first that the student is going to receive and due to this, it must be very easy to understand and to use.

After a brief introduction to the notebook, the student can find a short explanation of the notebooks' structure, the different types of cells, and their uses. Here it is also explained how to run code cells.

For the notebook to work properly, the student must run every code cell in the order that this is placed. For this purpose, a big focus is made on it in this as in all notebooks.

The next part of this notebook explains what the sections in a notebook are and how to navigate between them.

Following this, it comes one of the most important parts of this entire notebook, the data loading section. The students need to load their experimental data in each notebook so this section must be very clear. There are two main ways of uploading data into these notebooks: by inputs or by spreadsheets. Inputs are used when the students need to upload small amounts of data. (e.g. the molar mass of a compound or two) and the students will only need to type down the required value after running the cell. Otherwise, spreadsheets are used when a big amount of data is required and the process to upload them is a little more complicated. The students get the instructions to follow step by step in this notebook and a hyperlink to this notebook appears every time the student has to do this process. The explanation of the methodology is reinforced by using images that guide the students (Figure 10). The student has to try to fill and upload an example table.



<https://docs.google.com/spreadsheets/d/1oAZb9OlxSGKZotktevyErXRJlqmP8lwcKyjf6yUayJE/edit#gid=0>

Figure 10: Example of a google spreadsheet hyperlink with the section that must be copied by the student coloured in red.

Once the student has learnt how to upload data into the notebook. A brief example is shown on how it will look when some data treatment is done in a notebook. There will be a brief explanation of what the code cell is going to do before the code cell itself which the student must run.

As in the laboratory practices chosen in this study, there's always, at least, one graphical representation the next step in this notebook is showing the students how a plot is made just by running the code cell and how to download it by simply clicking on a button that appears below it. The student is told that the graphics in the notebooks will be made using his/her data. This time the graph is an example and it will not require to upload any data.

The next step of the notebook consists of showing the student how to answer the self-evaluation questions that will appear on the notebooks with a very simple question. Also, it is shown to the

student that it is possible to automatically check if the answers are correct by simply clicking over a button.

Lastly, a summary of the most important ideas on the tutorial notebook appears to remember them to the student.

5.2.2 Kinetics notebooks

The developed kinetic notebooks have the objective of teaching the students some fundamentals of Kinetics such as what is the reaction rate and how to determine it, what is the order of a reaction, etc. Also, the students will learn how to treat their data to adjust it depending on the order of that reaction. In the laboratory, the students carry out three kinetic-related practices:

- [Kinetics in chromium-EDTA complex formation.](#)
- [Kinetics in catalytical H₂O₂ decomposition.](#)
- [Conductimetric monitoring of an ester hydrolysis.](#)

. To teach these fundamentals, four notebooks have been developed. Three of them are, respectively for each laboratory experiment. The fourth is an idea for a hypothetical study case scenario in which the students initially won't know the order of a reaction, this one is called [Multikinetics Notebook](#).

5.2.2.1 Kinetics in chromium-EDTA complex formation

This notebook starts with a brief context of the experiment done by the students. The reaction that has been done is explained and just after this, the notebook objectives appear.

In the first section of the notebook, the initial concentration of each reactant is calculated. This is done because it is a question in the laboratory guide that the students have to answer. For this to be done, students need to upload a data table following the instructions given in the Tutorial notebook. In this case, though, the explanation on how to do it is less exhaustive as the students in this notebook must have previously completed the tutorial notebook. Just in case the student does not remember how to do it, it is given a hyperlink to the tutorial notebook. By running the code cells, the student will get the calculated concentration of each reactant.

The next section in the notebook consists of the determination of the reaction rate. Firstly, it is explained to the student why the working reaction has a "pseudo rate" and how to get to this conclusion.

The reaction rate should follow the next equation:

$$v_d = k \cdot [[Cr(H_2O)_5(NO_3)]^{2+}]^m \cdot [H_2Y^{2-}]^n \quad (\text{Eq. 1})$$

And the reaction order would be calculated by $m + n$

But if we consider

$$k' = k \cdot [H_2Y^{2-}]^n \quad (\text{Eq. 2})$$

Then the reaction rate would be:

$$v_d = k' \cdot [[Cr(H_2O)_5(NO_3)]^{2+}]^m \quad (\text{Eq. 3})$$

So, it would have a "pseudo rate" = m

In this experimental procedure, the students measure the absorbances through reaction time. The Lambert-Beer law is shown to them and an application to this specific case which leads them to the first equation that has to be represented in this notebook (Equation 4):

$$\ln(A_\infty - A_t) = \ln(A_\infty - A_0) \cdot k't \quad (\text{Eq. 4})$$

In case the student needs any more information to understand everything, a link to the laboratory guide is added below for them to check any doubt they still have.

One important thing to understand in this practice is how temperature affects kinetics. In the laboratory, the experiment is carried out at three different temperatures. In the notebook, the student is required to input these 3 working temperatures.

After this, the student must upload a data table containing the absorbances and the time these absorbances were measured for each temperature, again a brief explanation on how to do it and a link to the tutorial notebook are shown to help the student. They also measure an absorbance called A_∞ which is measured after leaving the reaction progress for 24 hours. This value is loaded into the notebook by an input.

Using all this data, a hidden code cell calculates $\ln(A_\infty - A_t)$ at each time and allows the student to check the calculated values for each reaction time by selecting each of them in a drop-down tab. As this is the first hidden code cell in this notebook a message reminding the student to run it is written below.

The next step is the representation of the calculated values in a $\ln(A_\infty - A_t)$ vs Time(min) chart. In this representation the student will be able to see how this data has a linear trend or, in case it is not linear, check if anything went wrong during the experimental procedure and/or the notebook itself. In this plot, the data at each of the three temperatures are represented each one

with a different colour and symbol. This simultaneous representation aims to help the student to see how changing the temperature influences on kinetics. The students are reminded that they can download this graphic if needed. (Figure 11)

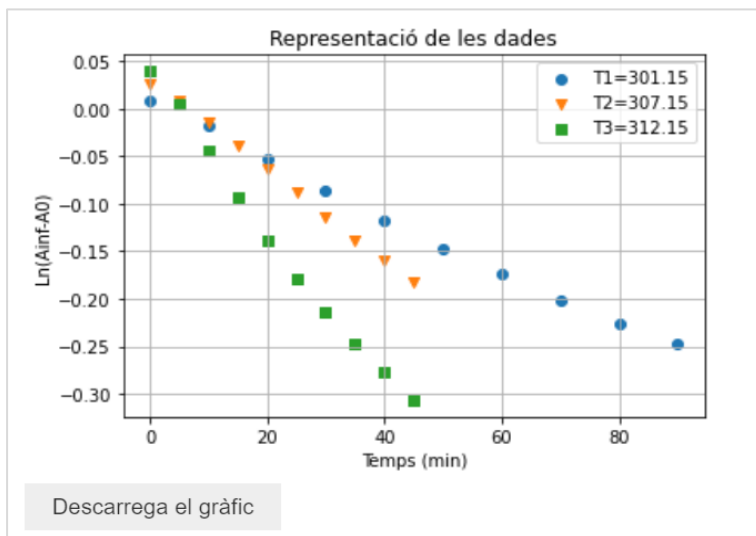


Figure 11. Screenshot of the printed graph and the download button seen by the student

The linear trend that appeared in this data can lead to an equation by doing a linear regression of the data. The student is reminded that this adjusts into the equation 4 and the linear regression is done by the code cells and the student receives a table filled with the slope, the interception, and the coefficient of determination (r^2) for each temperature. One step further this regression line is represented in a chart. In this same chart, the calculated values appear as well to let the students check how the linear representation fits with their data. The student can

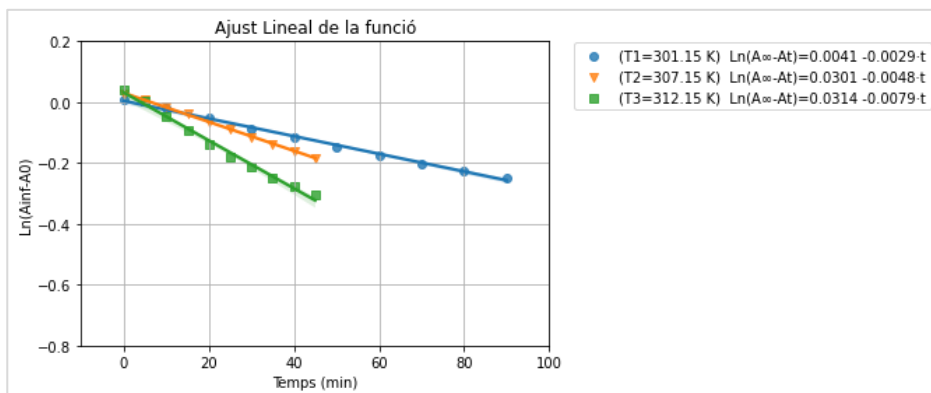


Figure 12. Downloaded plot with both the data and the regression lines.

download this graph if it is required. (Figure 12)

Once this adjustment is done, the student has been able to confirm if this is reaction's pseudo rate equals 1 or not just by seeing if it is a good fitting or not. If it is good, the slope of each line is each pseudo kinetic constant (k') and from the interception, it is possible to obtain the absorbance at the beginning of the reaction (A_0) with a simple calculation. A text cell shows the students how to do this before doing it in a code cell. Once it is done, the student obtains a table with the calculated kinetic pseudo constants and A_0 at each temperature.

The next section on the notebook aims to obtain both the activation energy required in this reaction and the preexponential factor (A) by doing a linear regression following Arrhenius Law.(Equation 5

$$k = A \cdot e^{-\frac{Ea}{RT}} \text{ (Eq. 5)} \quad \rightarrow \quad \ln k = \ln A - \frac{Ea}{RT} \text{ (Eq. 6)}$$

After a brief explanation of this law to the students and showing them which will be the linear adjustment that is going to be done, a table containing k' and each working temperature is done before calculating both $\ln k$ and $1/T$. These values will be used to do the linear regression $\ln k$ vs T^{-1} and the students will receive a table with the slope, the intercept, and the coefficient of determination(r^2) of this regression. This linear regression is also represented in a chart with each of the three values calculated to check if the fitting is good enough. (Figure 13)

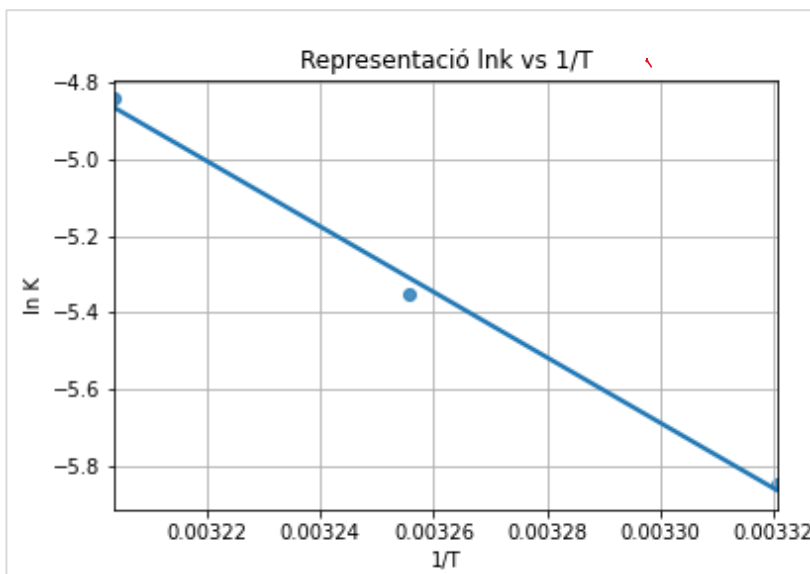


Figure 13. Downloaded plot with both the data and the regression line.

From the slope of this equation, it is possible to obtain the activation energy and from the intercept, it is possible to obtain the preexponential factor (A). After telling the student how this is done in a text cell, the following code cell calculates these values and shows the calculated value to the students.

Lastly, the students have to complete a brief self-assessment. The questions in this self-assessment are focused on letting the student check if some fundamentals such as, which factors affect the reaction rate, how these factors affect it have been properly understood.

5.2.2.2 Kinetics in catalytical H₂O₂ decomposition

This notebook starts with a brief context of the experiment done by the students. The reaction that has been done is explained and just after this, the notebook objectives appear.

Just after this, the first section on the notebook begins. The main objectives in this section are the calculation of both the initial concentration of hydrogen peroxide and the kinetic constant. This is explained to the students by showing them the equation that their data should follow. In this equation, these values ([H₂O₂] and k) are coloured in order to point their importance. (Figure 14)

Determinació de la pseudoconstant de velocitat k i de $[H_2O_2]_0$

En aquesta secció introduiràs les teves dades experimentals i els hi faràs el tractament adequat per a representar-les gràficament segons l'expressió:

$$\ln([H_2O_2]) = \ln([H_2O_2]_0) - 2 \cdot k \cdot t$$

i veure si aquesta representació lineal segueix una tendència lineal. Un cop fet això faràs l'ajust lineal de les dades a partir del que podràs calcular la constant de velocitat k i la concentració inicial d'aigua oxigenada $[H_2O_2]_0$.

Figure 14. Screenshot of the notebook text cell with the coloured [H₂O₂] and k.

After reminding the students how critical is to execute every cell in the notebook, a note clarifying how the notebook is going to refer to the three mixtures with different catalyst concentration appears. Then the students have to create and upload a table with the titration volumes of KMnO₄ in mL and the time each of these titrations was carried following the instructions given in the Tutorial notebook. In case the students do not remember how to do it, a brief explanation and a link to the tutorial notebook supports them. Following this, a code cell defines a function to calculate the concentration of H₂O₂ using the titration volumes uploaded by the students. For these calculations to be possible the students need to enter the KMnO₄ concentration, this is done with an input.

After this input, a hidden code cell calculates uses the previously defined function to calculate every $[H_2O_2]$ and their corresponding $\ln[H_2O_2]$ values which will be used later on the equation adjustment. As this is the first hidden code cell in this notebook, a message reminding the student to run it is written below. The students can check these calculated values if they request it.

The next step is the graphical representation of the calculated $\ln[H_2O_2]$ in front of each reaction time. This is done because it is expected that the data should adjust to the following equation:

$$\ln[H_2O_2] = \ln[H_2O_2]_0 - 2 \cdot k \cdot t \text{ (Eq. 7)}$$

As it is a really important point in this practice to see how the catalyst concentration affects the reaction rate, all three data series are represented in the same chart. In this plot, the data corresponding to each mixture is represented with a different colour and symbol. The student can download this graphic if required. (Figure 15)

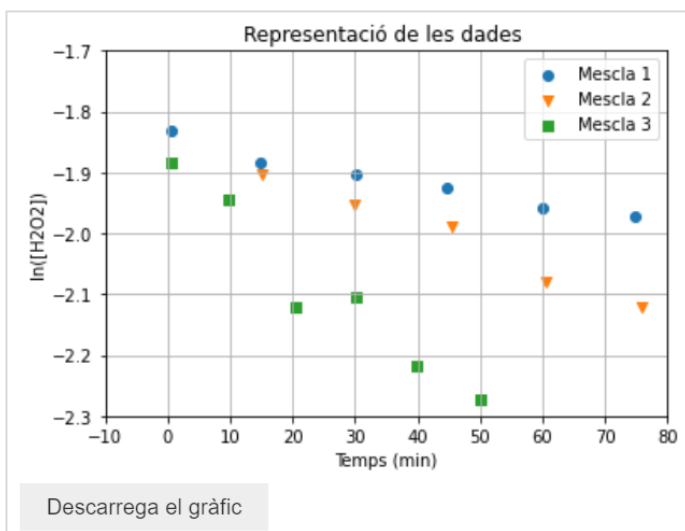


Figure 15. Screenshot of the printed graph and the download button seen by the student.

The linear trend that appeared in this data can lead to an equation by doing a linear regression of the data. The student is reminded that this adjusts into the equation 7 and the linear regression is done by the code cells and the student receives a table filled with the slope, the

interception, and the coefficient of determination (r^2) for each of the three mixtures. Students can download this figure if needed. (Figure 16)

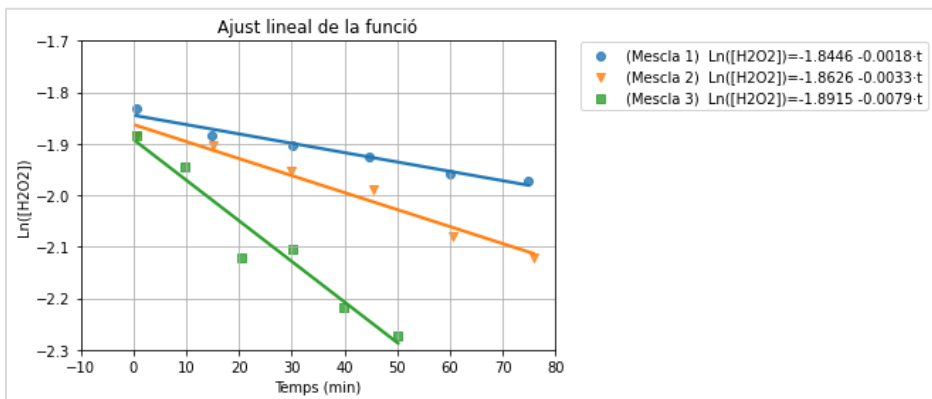


Figure 16. Downloaded plot with both the data and the regression lines

Once this adjustment is seen the student has been able to check how this reaction follows a kinetic of pseudo rate 1 and that, using the values obtained with the regression it is possible to obtain both the kinetic constant and the initial hydrogen peroxide concentration. How to do this is shown to the student and, after calculating it with a code cell, the student receives a results table containing the calculated values for each mixture.

The next section on the notebook aims to determine the reaction order of the used catalyst. Another important value to determine in this section is the kinetic constant of this catalyst. A brief explanation leads the students into fitting their data in a linear trend following the equation:

$$\ln k = k_{cat} + \alpha \cdot \ln([Fe^{3+}]) \quad (\text{Eq.8})$$

The catalyst kinetic constant (k_{cat}) and the reaction order (α) are coloured differently to point the students their importance. Following this, the students need to input the concentration of Fe^{3+} in each of the three mixtures. These values are used to generate a table filled with the $\ln k$ and the correspondent $\ln[Fe^{3+}]$ that will be used in the fitting of equation 8.

The following code cells do the graphical representation of this data allowing the student to see this linear trend. After this, a message reminds the student that this trend is due to equation 8 and just afterwards his linear regression is done and represented. The student can download these two charts if it is required. (Figure 17)

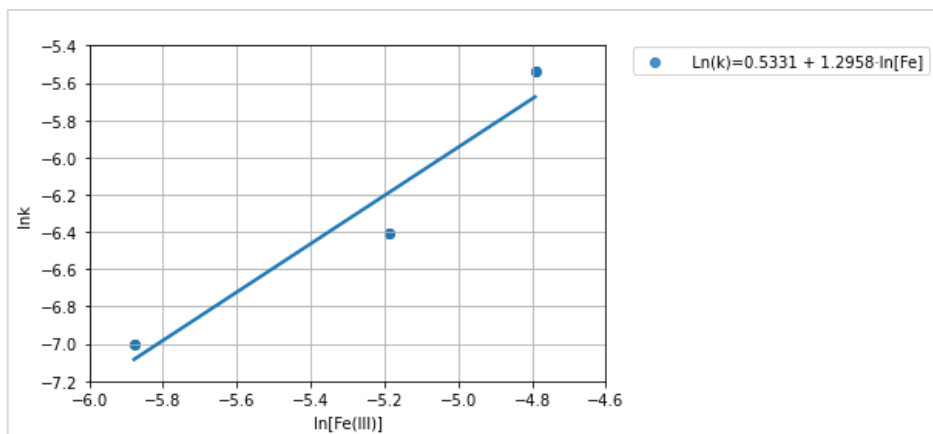


Figure 17. Downloaded plot with both the data and the regression line.

Ending this section, a message to the student indicating which is the k_{cat} calculated value as well as the alpha value. This alpha value is shown as a floating number and as an integer.

The last section on this notebook aims to determine the half-life for each mixture. The student receives an explanation of what is this half-life and how to calculate it in a general case. Then there is an explanation on how to apply it to this case. After this, a code cell calculates it and shows the calculated values with a table.

Lastly, the students have to complete a brief self-assessment. The questions in this self-assessment are focused on letting the student check if some fundamentals such as, how a catalyst and the concentration of this catalyst affect to a reaction, which other factors affect to the reaction rate have been understood.

5.2.2.3 Conductimetric monitoring of an ester hydrolysis

This notebook starts with a brief explanation of the fundamentals of the practice the student has done in the laboratory. Concepts such as why is it possible to control this reaction by a conductimetry or how to fit the obtained data are explained. Also, as this reaction's reaction order is supposed to be two, a brief explanation on how to fit order two reactions appear.

This notebook aims to calculate the kinetic constant of the carried reaction. To do this, the students first have to upload the conductance measures obtained in the laboratory and the time for each of these measurements. The students have to do this following the instructions given in the tutorial notebook. To help them, a brief explanation appears as well as a message leading

them to the tutorial notebook in case it is needed. After this, the students have to input the conductance measured 24 hours after the reaction has started (G_{∞}). All this data is going to be used to carry out the adjustment of the function:

$$\frac{1}{G_t - G_{\infty}} = \frac{1}{G_0 - G_{\infty}} + \frac{[A]_0 \cdot k}{G_0 - G_{\infty}} \cdot t \quad (\text{Eq. 9})$$

The next step in the notebook is doing the data treatment to, later on, do the adjustment. the code cell calculates $\frac{1}{G_t - G_{\infty}}$ and shows the calculated values to the students using a data table.

Following this, a message reminds the student which representation is going to be done. Also, it is pointed out that, considering this reaction's order is two, in the representation of the previously calculated values a linear trend should be seen. The next cell does this representation and the student can download this plot if it is required. (Figure 18)

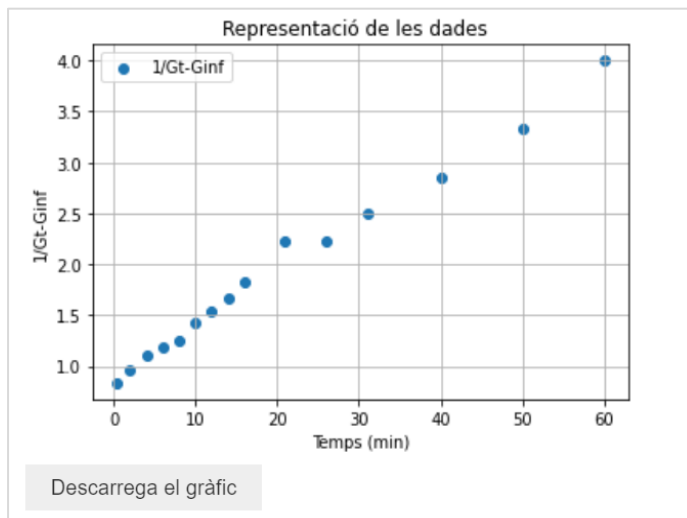


Figure 18. Screenshot of the printed graph and the download button seen by the student.

The linear trend that appeared in this data can lead to an equation by doing a linear regression of the data. The student is reminded that this adjusts into equation 9 and the linear regression is done by the code cells. The student receives a table filled with the slope, the interception, and the coefficient of determination (r^2). Right after this, the regression line is represented in a chart. In this same chart, the calculated values appear as well to let the students check how the linear

representation fits with their data. The student can download this graph if it is required. (Figure 19)

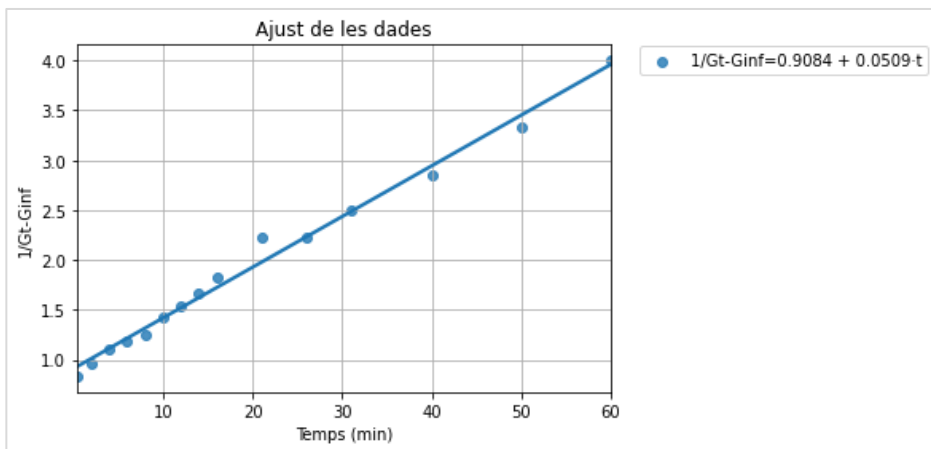


Figure 19. Downloaded plot with both the data and the regression line

Finally, it is explained to the students how to calculate the kinetic constant (k) using the slope of the regression line. To do this, the initial concentration of ethyl acetate is required. The students have to input this value and once it is done the notebook prints out the calculated kinetic constant.

At the end of the notebook, a brief self-assessment allows the students to check if the fundamentals of this practice have been correctly understood. The questions in this self-assessment are focused on concepts such as, why it is important to use the same conductivity cell, how the conductance measurement evolves during the reaction or how other factors such as temperature affect to the reaction's rate.

5.2.2.4 Multi kinetic notebook

This notebook is not meant to be utilized specifically in any of the practices carried out presently in the laboratories. The idea behind this notebook is to be used by the student in a general case study situation. In this case study, students that have already completed another kinetics-related practice will follow one new experimental procedure. This procedure will lead the students to the determination of the concentration of a compound on several reaction times. Once these measurements are completed, the students should be able to determine the reaction order. To do this, this notebook will assist them by doing the required calculations for each reaction order.

The students will upload their measured concentrations and the time these measurements were made. After this, one reaction order will be selected, and the notebook will try to fit the data according to this selection. The students will get the calculated slope, interception, and coefficient of determination (r^2) and graphical representations to check if the measured data fits with the selected reaction order. If the fitting is not good enough, the student can select another reaction order and attempt to do this linear regression again until the right reaction order is found.

This notebook starts with a brief message explaining the student that the main objective is to determine the reaction order of the given reaction. After this, some important kinetics fundamentals are explained such as what is the reaction rate, what is the rate equation and how to determine its order and also a brief explanation on which should be the calculations done for each reaction order. These fundamentals aim to help the student to understand which procedure is being followed in the notebook depending on the chosen reaction order. After this explanation, there is a table summarizing up everything.

Then the students have to create and upload a table with the measured concentrations and the time each of these concentrations were measured. This has to be done following the instructions given in the Tutorial notebook. In case the students do not remember how to do it, a brief explanation and a link to the tutorial notebook supports them.

Even if the first selected order is not the right one, the student can return to the “order selection” cell and repeat the whole procedure without any inconvenience. As this is crucial in order to exploit all the notebook opportunities, a message explaining this to the student appears. A message recommends the student to try each reaction order at least one time. This is done to help the student to visualize the differences for each case.

In the next cell, the student chooses which reaction order wants to try fitting. Just after this, the calculations that will be done for each reaction order appear as a reminder to the student (Figure 20). The following cell does the proper calculations according to the chosen reaction order. These calculated values are shown to the student in a table.

Segons l'ordre de reacció escollit, el programa provarà d'ajustar les dades introduïdes d'una de les 3 maneres següents:

$$\text{Ordre 0} \rightarrow [A]_t = -k \cdot t + [A]_0$$

El programa farà un ajust lineal de la concentració amb el temps

$$\text{Ordre 1} \rightarrow \ln[A]_t = -k \cdot t + \ln[A]_0$$

El programa farà un ajust lineal del logaritme de la concentració amb el temps

$$\text{Ordre 2} \rightarrow \frac{1}{[A]_t} = +k \cdot t + \frac{1}{[A]_0}$$

El programa farà un ajust lineal de la inversa de la concentració amb el temps

Figure 20. Screenshot of the notebook's text cell explaining the different adjustments.

The following step is to try to fit this previously treated data and obtain the slope, the interception, and the coefficient of determination (r^2). A text cell explains this to the students and the following code cell does the linear regression and puts these calculated values in a table. The values for the reaction orders that have not been chosen yet, appear in the table as "not calculated". The values for the reaction orders that have been calculated at least once are saved and appear every time the student repeats the procedure in this same table. This may be useful to let the students visualize the discrepancy between the calculated values for each reaction order.

The next section of the notebook does the graphical representation of the treated data for the last chosen reaction order. This graphical representation is done twice. Firstly, only the treated data is represented on the chart. Secondly, in another code cell, both the treated data and the linear regression calculated are plotted to let the student visually check if the fitting is good enough. The points and regression of these graphical representations are coloured with the same colour as the examples for each reaction order given in the first section. The student can download both graphical representations if it is required and use them to determine the right reaction order.

5.2.3 Ternary phase diagram notebooks

In the laboratory, there are two practices focused on ternary phase diagrams. Both are quite similar, but the components of the different mixtures are different. The two systems are:

- [Acetic Acid / Water / Chloroform system](#)

- [Ethyl Acetate / Water / 1-Butanol system](#)

These two practices aim to teach the student some concepts like, what is Gibbs phase law and how to use it, how to work with a ternary phase diagram, what are the degrees of freedom, etc. To help the students to understand all of these fundamentals, one notebook for each of the systems have been developed.

5.2.3.1 Acetic acid / Water / Chloroform system

This notebook begins with a brief explanation of the fundamentals of the practice. It is explained what Gibbs law is, what a ternary phase diagram is and, using some figures to illustrate it, it is explained how to read the different points in a ternary phase diagram. After this, the objectives of the notebook appear.

In the first section of this notebook, the main goal is to calculate the composition of each one of the ternary systems prepared by the student. To do this, the students have to create and upload a table filled with the added volume (in mL) of each of the compounds for each mixture. The student has to do this as explained in the tutorial notebook. A brief reminder, as well as a link to this tutorial notebook, supports the student to do so.

Once the data is uploaded, a cell defines three functions. These three functions will be used later to calculate the mass of each compound in each mixture which is needed to calculate the mass percentage of each compound in each mixture. To do these calculations, aside from the functions, some constant values are needed. The students must input them in the next code cell. These needed values are the chloroform density and the acetic acid molar mass, concentration, and density.

Before advancing further, in order to check if the students know how to do these calculations, a small self-assessment appears. In this self-assessment, the students will receive three random volumes of a hypothetic mixture. Using these volumes, their job is to calculate the mass and the percentage corresponding to each of the compounds in this hypothetic mixture. The students can check if the answer is correct just by pressing a check button that appears below.

The next cell in the notebook calculates the mass and the percentage for each mixture introduced by the students and shows these calculated values to the student in a table.

The next section on the notebook aims to graphically represent the coexistence curve. There is a brief explanation for the students to know what this coexistence curve is. After this brief explanation, the students have to input the solubility of water in chloroform and the solubility of chloroform in water.

Once this is done the next cell represents, in a ternary diagram, one point for each of the students' mixtures and one point for each of the solubilities. These are represented in different

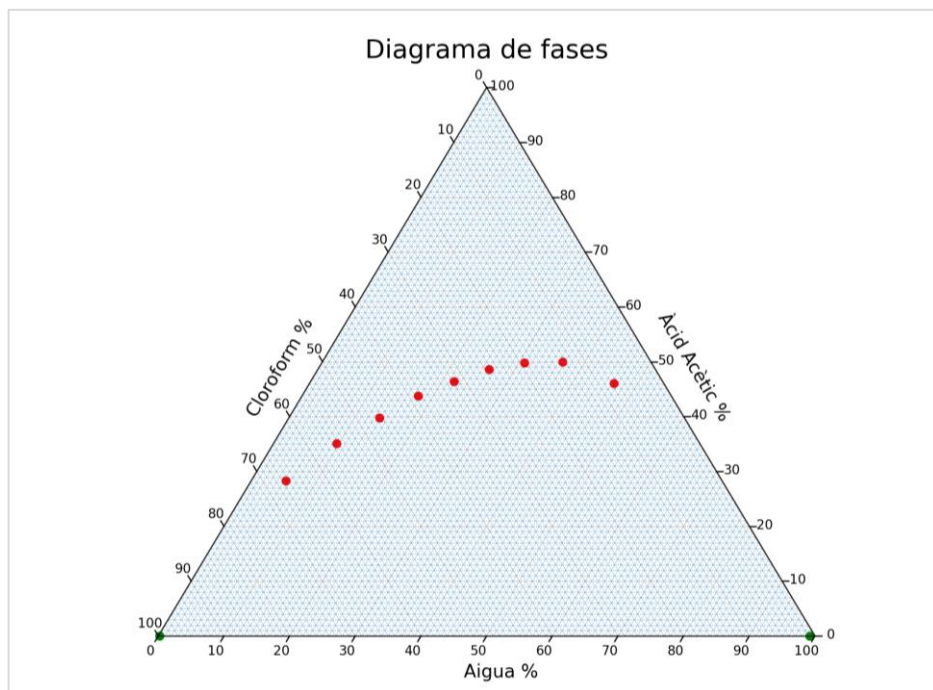


Figure 21. Example of the ternary plot obtained by the students

colours to help the student to distinguish them. (Figure 21)

In this part, it has been attempted to make the code cells adjust the experimental data that has been obtained by the students. The idea with this adjustment was to be able to represent the coexistence curve in the notebook's diagram. Unfortunately, it has not been possible to obtain this adjustment. Therefore, the representation of the coexistence curve in the notebook has been removed from the notebook. Instead, a message appears in this part of the notebook telling the students to download the representation and to draw the coexistence curve manually.

The next section's goal is to ease the tie line representation to the students. To do this, the students first receive a brief explanation of what are these tie lines.

In this part of the practice, the students receive instructions from the teacher to prepare another ternary mixture. After agitating and leaving this mixture to rest for some time, it is going to be

heterogeneous and present a two-phase equilibrium. Once this is seen, the students have to split up these two phases and determine the composition of each of them.

If the points corresponding to these compositions are represented in a ternary diagram, it is possible to draw a tie line by drawing the line that ties them. The students have to input these three points and the code cells will draw the line between them in another ternary diagram (Figure 22) The students can download this diagram and extend this line to obtain the corresponding tie line.

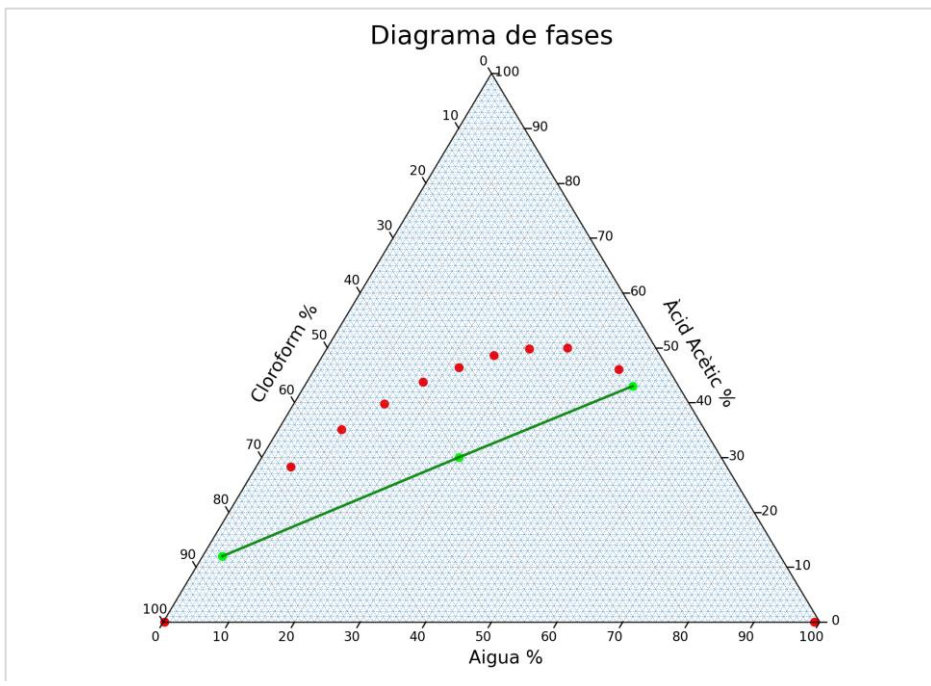


Figure 22. Example of the ternary plot with the tie line obtained by the students

Finally, a brief self-assessment allows the student if the fundamentals of the practices are well understood. The questions in this self-assessment are focused on checking if the student is capable of correctly determine the number of phases and the degrees of freedom in different points of the ternary diagram.

5.2.3.2 Ethyl acetate / Water / Butanol system`

This notebook begins with a brief explanation of the fundamentals of the practice. It is explained what Gibbs law is, what a ternary phase diagram is and, using some figures to illustrate it, it is

explained how to read the different points in a ternary phase diagram. After this, the objectives of the notebook appear.

In the first section of this notebook, the main goal is to calculate the composition of each one of the ternary systems prepared by the student. To do this, the students have to create and upload a table filled with the added volume (in mL) of each of the compounds for each mixture. The students have to do this following the instructions given in the tutorial notebook. A link to the tutorial notebook appears in case the students need to check it again.

Once the data is uploaded, a cell defines three functions. These three functions will be used later to calculate the mass of each compound in each mixture. This is needed to calculate the mass percentage of each compound in each mixture. To apply these functions to the students' case, some constant values are needed. The students have to look for these values and input them. These needed values are the 1-butanol density(g/mL) and ethyl acetate's density(g/mL), molar mass(g/Mol) and concentration (Mol/L).

Before advancing further, to check if the students know how to do these calculations, a small self-assessment appears. In this self-assessment, the students will receive three random volumes of a hypothetical mixture. Using these volumes, their job is to calculate the mass and the percentage corresponding to each of the compounds in this hypothetical mixture. The students can check if the answer is correct just by pressing a check button that appears below. The next cell in the notebook calculates the mass and the percentage for each mixture introduced by the students and shows these calculated values to the student in a table. The next section on the notebook aims to graphically represent the coexistence curve. There is a brief explanation for the students to know what this coexistence curve is. In these systems, there are two pairs of partially miscible liquids, it is explained to the student that, in this case, two coexistence curves should be seen in a ternary diagram. After this brief explanation, the students have to input the reciprocal solubility of water and 1-butanol and the reciprocal solubility of ethyl acetate and water.

Once this is done the next cell represents, in a ternary diagram, one point for each of the students' mixtures and one point for each of the solubilities. These are represented in different colours to help the student to distinguish them. (Figure 23)

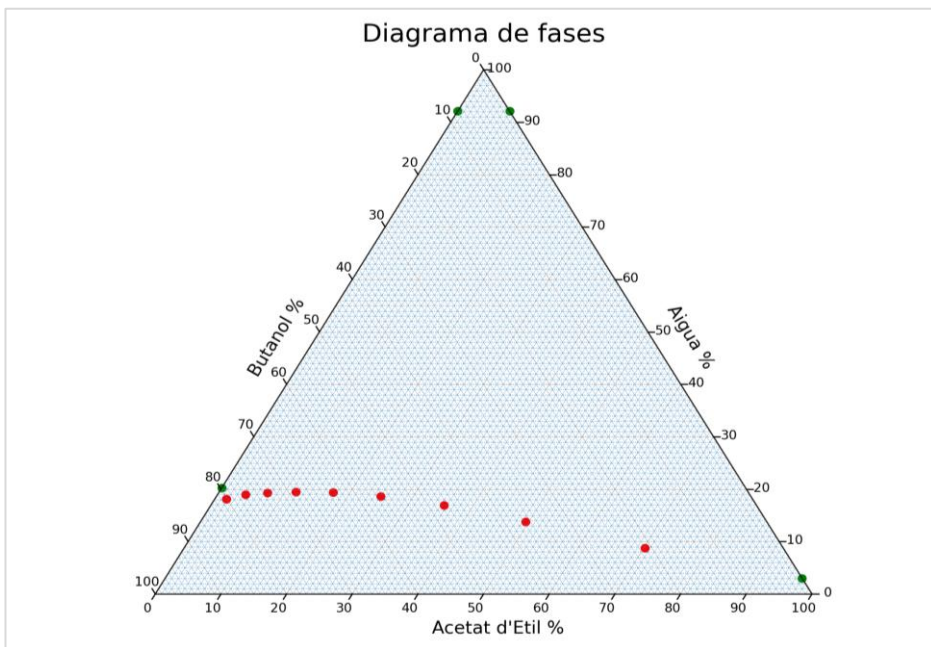


Figure 23. Example of the ternary plot obtained by the students.

In this part, it has been attempted to make the code cells adjust the experimental data that has been obtained by the students. The idea with this adjustment was to be able to represent the coexistence curve in the notebook's diagram. Unfortunately, it has not been possible to obtain this adjustment. Therefore, the representation of the coexistence curve in the notebook has been removed from the notebook. Instead, a message appears in this part of the notebook telling the students to download the representation and to draw the coexistence curves manually.

In this practice, tie lines are not obtained experimentally because the axes of the ternary diagram are, indeed, tie lines. Anyways, a brief explanation on how to obtain these tie lines in another type of graph appears as well.

Finally, a brief self-assessment allows the student if the fundamentals of the practices are well understood. The questions in this self-assessment are focused on checking if the student is capable of correctly determine the number of phases and the degrees of freedom in different points of the ternary diagram.

6. CONCLUSIONS

The notebooks development has been a difficult work and it has needed a lot of time and dedication. In fact, it demands a time that a teacher may not have. Anyways, these notebooks present the possibility to improve the students' comprehension and to facilitate the teachers' job.

Due to the sanitary crisis and the limitations imposed to online teaching/learning, it has not been possible to actually implement these tools in a physical chemistry laboratory. However,, it is expected that, in case this implementation is done, the students can take profit of the notebooks and enjoy the advantages that they present.

Even though the notebooks are ready to be used in a laboratory course, it is important to remember that, as they are relatively easy to modify, the notebooks can be constantly improving considering their evaluation after each laboratory course by students and faculty.

Further studies could be done to check if using the notebooks affects to the academic performance of the students and, in case the notebooks do affect, how. Also, notebooks could be implemented in other laboratory courses and in some subjects of the bachelor grade if the results of this implementation were good enough.

These days students and teachers live surrounded by technology and most of them are almost constantly using it. It should be taken more profit of the possibilities offered by this technology and notebooks could be one way of doing so.

In conclusion, the use of notebooks is a resource that can improve both teaching and learning quality while allowing the students to participate more actively in their formation.

7. REFERENCES AND NOTES

1. B. Allan, Blended Learning: Tools for Teaching and Training. **2007**,1,2,3,4
<https://doi.org/10.29085/97818560478457>.
2. F.Huarte "Introducció a la programació en Python" :
<http://cvfitxers.ub.edu/docs/106899/PYTHON/IntroPython.html>
3. H., Petrucci, Ralph, Herring, F. Geoffrey, D., Madura, Jeffrey, Bissonnette, Carey, QUÍMICA GENERAL 11ED. **2017**, 20, 922-949.
http://www.ingebook.com.sire.ub.edu/ib/NPcd/IB_BooksVis?cod_primaria=1000193&codigo_libro=6.
4. J. Claret, C. M. Muller, R. Reigada, Química Física 1: Aplicació de la termodinàmica a sistemes d'interès químic. **2011**, 5, 110-114
5. Jupyter Widgets: https://ipywidgets.readthedocs.io/en/stable/user_guide.html
6. Latex Project: <https://www.latex-project.org/>
7. Matplotlib: <https://matplotlib.org/>
8. P. Atkins, J.de Paula ,Atkins. Química Física, Ed 8, **2006**
9. Pandas: <https://pandas.pydata.org/>
10. Seaborn Visualizing linear relationships: <https://seaborn.pydata.org/tutorial/regression.html>
11. Universitat de Barcelona, Guia de laboratori (LBQF), **2020**,1.1-1.3 + 3.1-3.2.

8. ACRONYMS

LBQF: “Laboratori bàsic de química física”

APPENDICES

APPENDIX 1: DEVELOPED NOTEBOOKS

▼ Notebook Tutorial

Introducció

Bones! Si estàs en aquest notebook és possible que sigui el primer cop que treballes amb un notebook de "Google Colab".

- L'objectiu principal d'aquest notebook és que aprenguis a treballar amb els notebooks del LBQF d'una manera ràpida i pràctica.

▼ Cel·les

Els notebooks estan formats per diverses **cel·les**. Si fas click sobre una part del notebook veuràs on comença i acaba la cel·la.

Hi ha 2 tipus de cel·les:

- Cel·les de text
- Cel·les de codi o programació

Ara mateix estàs llegint una **cel·la de text**, en aquestes cel·les hi trobaràs:

- Explicacions sobre el fonament teòric de la pràctica en la que estàs .
- Instruccions a seguir en el propi notebook.

En les cel·les de text pot ser que hi apareixi alguna paraula o un conjunt de paraules de color blau blau i subratllat. Es tracta d'enllaços (links) que et permetran anar ràpidament a alguna pàgina si ho necessites. *Exemple: Si fas click aniràs al [Campus Virtual](#)*

La propera és una **cel·la de codi o programació**, per executar-la fes clic sobre la cel·la i posteriorment sobre la cantonada superior esquerra, sobre el símbol "play" :



```
print("Has executat la primera cel·la de codi")
```

☞ Has executat la primera cel·la de codi

Les cel·les de codi utilitzen el llenguatge de programació *Python* que has après a la assignatura *Recursos informàtics*. Amb els coneixements adquirits en aquesta assignatura, en tindràs prou per poder seguir el sentit dels petits programes de les cel·les de codi.

La gran majoria de cel·les contenen un copi complet que **no has de modificar**. Només en determinades ocasions, se't demanarà que completis algun fragment de codi com a l'exemple:

```
#### Completa el codi de la cel·la ####
def g( , , ):
    return (x+y)**z
a =
b = input()
c = a + b
d=g( , , )
print( "si sumem {} i {} i elevem la suma a {}, obtenim el valor {}".format( , , , , )
```

Algunes cel·les de codi estaran **amagades**, són cel·les en que s'hi acostumen a definir funcions que s'empraran per a càlculs posteriors o bé són conjunts de codi molt llargs que allargarien el notebook innecessàriament.

Has d'executar-les de la mateixa manera que les que tenen el codi visible. No és necessari que les despleguis, però si ho vols fer només cal que apretis sobre "MOSTRAR CÓDIGO"

MOSTRAR CÓDIGO

```
print("Introdueix dos valors per a que siguin sumats:")
Valor1= float(input("Valor 1 = "))
Valor2= float(input("Valor 2 = "))
d= f(Valor1,Valor2)
print("La suma de {} i {} és igual a {}".format(Valor1,Valor2,d))
```

```
↳ Introdueix dos valors per a que siguin sumats:
Valor 1 = 902
Valor 2 = 410
La suma de 902.0 i 410.0 és igual a 1312.0
```

Si la cel·la anterior no et funciona correctament comprova que has executat la cel·la amagada anterior

És **molt important** que executis **TOTES** les cel·les en l'ordre en què estan col·locades i que no te'n deixis cap ja que sino el notebook no funcionarà correctament.

▼ Seccions

Els notebooks estan ordenats per **seccions**. Una secció és un conjunt format per una o més cel·les que poden ser tant de codi com de text i que estan relacionades entre si i/o tenen un

objectiu comú. Per exemple fins aquest punt del tutorial has vist 3 seccions:

1. Introducció
2. Cel·les
3. Seccions

Pots navegar entre les diferents seccions de manera ràpida clicant sobre el símbol :



de la barra lateral esquerre.

▼ Introducció de dades

Durant els notebooks hauràs d'introduir dades, tant resultats dels teus experiments com constants que hauràs de buscar a la bibliografia recomanada de la pràctica. Hi haurà 2 maneres principals de fer-ho:

- Introduint les dades a través del teclat (escrivint-les) mitjançant la instrucció `input`.
- Introduint-les prèviament en un full de càlcul que llegirem automàticament des del notebook.

▼ Inputs

Els `inputs` o valors d'entrada et seran indicats amb una cel·la de text prèviament. Per introduir-los executa la cel·la immediatament posterior a la de text i introdueix el que se't demani. Si has d'introduir un nombre amb decimals, **has d'utilitzar el símbol "."**

En la propera cel·la has d'introduir el teu nom

```
print("Introdueix el teu nom:")
a = input()
print(" Bones {} has introduït el teu nom correctament".format(a))
```

```
↳ Introduueix el teu nom:
Romà
Bones Romà has introduït el teu nom correctament
```

En general s'utilitzaran inputs quan hagi d'introduir poques dades de cop (temperatures de treball, constants de la pràctica, densitats, masses, etc.)

Si t'equivoques en introduir el valor d'entrada només has de tornar a executar la cel·la de codi i podràs tornar-ho a intentar els cops que necessitis.

▼ Fulls de càlcul

Quan hagis d'introduir moltes dades s'utilitzarà un full de càlcul de google. Per fer-ho segueix aquests 5 passos:

1. Crea un full de càlcul de google amb les dades que t'indiqui el notebook en el que estàs treballant. Quan se't demani veuràs una taula model :

Aquesta	taula	és un	exemple	de taula	model
dades	dades	dades	dades	dades	dades

És molt important que els títols siguin exactament els que surten a la taula model de cada notebook (altrament la resta del programa no funcionarà)

2. Selecciona la opció "Comparteix" i tria aquesta opció:

Tothom a Internet pot **cercar-ho i consultar-ho** ▼

3. Copia la part del enllaç **del teu full** corresponent a la part marcada en vermell del següent link:

<https://docs.google.com/spreadsheets/d/1oAZb9OlxSGKZotktevyErXRJlqmP8lwckYjif6yUayJE/edit#gid=0>

4. Enganxa la part copiada al lloc indicat entre ##### de la cel·la de codi posterior.

#####

uid= "1IV_dek7afLHgnSYjDkixXZHhdG7-LWcUPhpPxDjRUqE" #Enganxa aquí la part de l'enllaç

#####

5. Executa la cel·la i comprova que el notebook ha llegit correctament les teves dades.

Quan se't demani trobaràs un missatge com aquest: "Si no recordes com fer-ho pots revisar-ho al [Notebook Tutorial](#)"

Prova de generar, emplenar i introduir una taula com la següent amb les vostres dades

Nom	Cognoms	Edat	Color preferit	Cançó preferida	Menjar preferit
dades	dades	dades	dades	dades	dades

```
import pandas as pd
#####
uid = "1QdKgg75tgnMBvpZm0mXN0BT46BwY3Su63ndYpzYF20c" #Enganxa aquí la part de l'enllaç correspon
#####
url = f"https://docs.google.com/spreadsheets/d/{uid}/export?format=csv"
df = pd.read_csv(url)
df #Comprova que les dades que apareixen son les que has introduit.
```



Nom Cognoms Edat Color preferit Cancó preferida Menjar preferit

▼ Tractament de dades

Els notebooks tractaran les dades que hagi introduït seguint el procediment habitual de la pràctica. Habitualment hi haurà una cel·la de text que t'explicarà el que farà la propera cel·la de codi com en aquest exemple:

La següent cel·la de codi multiplicarà els dos nombres *Valor 1* i *Valor 2* que has introduït abans

```
Multip= Valor1*Valor2
print("Si multipliques {} per {} el resultat és {}".format(Valor1,Valor2,Multip))
```

☞ Si multipliques 902.0 per 410.0 el resultat és 369820.0

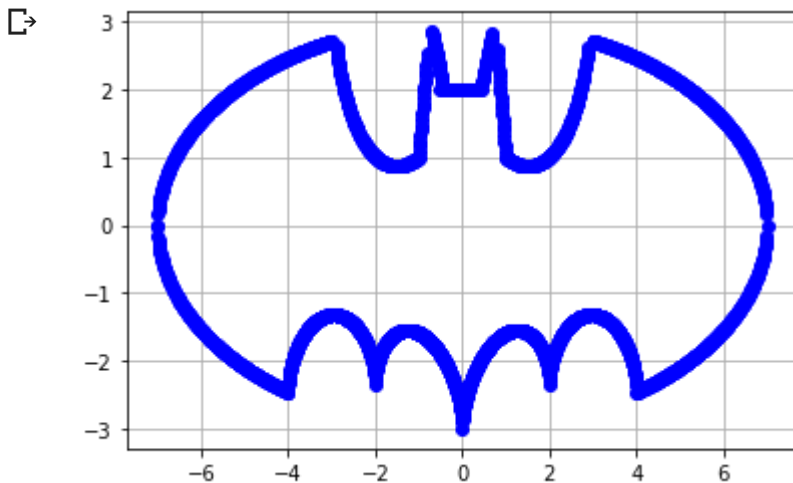
▼ Representacions gràfiques

En els notebooks es representaran gràficament dades experimentals que hagi trobat al laboratori. Podràs descarregar aquests gràfics apretant al botó :

Descarrega el gràfic

Que apareixerà sota el gràfic després d'executar la cel·la.

MOSTRAR CÓDIGO



Descarrega el gràfic

▼ Autoavaluacions

Durant el notebook i/o al final pot ser que hi hagi alguna prova d'autoavaluació per a que comprovis que estàs entenent tant la pràctica realitzada al laboratori com els càlculs que realitza el notebook.

Per fer-les introdueix el que s'et demani i apreta al botó "Comprova!" que apareixerà després d'executar la cel·la de l'autoavaluació per saber si has respost correctament o no.

En Joan té 3 pomes, en Miquel en té 5 i la Carla en té el doble que en Joan.

Qui té més pomes?

Persona_amb_mes_Pomes: Carla ▼

Quantes pomes té la Carla?

Pomes_Carla: 6

Quantes pomes tenen entre tots?

Total_Pomes:

14



Comprova!

Correcte!

Resum de les idees més importants:

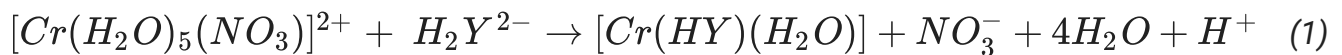
- Executa **TOTES** les cel·les en l'**ordre en que estan disposades**.
- **Llegeix i segueix les instruccions** rebudes a les cel·les de text.
- **No modifiquis** el codi a no ser que se't demani de manera explícita.
- Recorda que pots **tornar a visitar** aquest notebook si no recordes com fer algun pas.
- **Consulta** al professor tot el que no et quedi clar o no entenguis.

▼ Cinètica de la formació del complex Cr(III)-EDTA

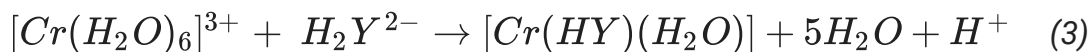
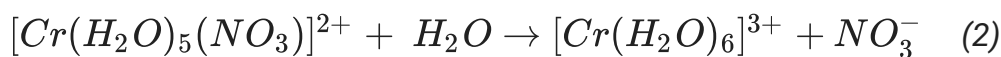
▼ Context

En aquest notebook treballaràs l'estudi de la cinètica d'una reacció a temperatures diferents mitjançant la mesura de l'absorbància del seu producte.

Afegint una sal d'un metall pesant, com per exemple el Crom(III), a les solucions de Na_2EDTA es forma un compost de color porpra. La velocitat d'aquesta reacció es veu afectada per la temperatura i això es pot comprovar mesurant l'absorbància al llarg del temps de reacció a diferents temperatures conegudes i constants. L'estequiometria d'aquesta reacció ve donada per:



I el seu mecanisme es pot escriure com:



On Y^{4-} representa l'io etilendiaminotetracetat.

Objectius

- Comprovar que la reacció és de pseudoordre 1 i que, per tant, amb el tractament adequat s'ajusta a una cinètica d'ordre 1.
- Entendre el concepte de pseudoconstant de reacció.
- Visualitzar com canvia la velocitat d'una reacció en modificar la temperatura de treball.
- Determinar l'energia d'activació mitjançant un ajust lineal.

Recorda executar totes les cel·les en l'ordre en què apareixen.

▼ Càlcul de les concentracions inicials dels reactius

En aquesta secció calcularàs les concentracions inicials dels reactius Na_2EDTA i $Cr(NO_3)_3$. Per fer-ho hauràs d'introduir un seguit de dades en una fulla de càlcul i el programa prendrà aquestes dades per a realitzar el càlcul.

Crea un full de càlcul de Google i emplena'l seguint el model de 2 columnes que tens a continuació:

Valors	Unitats
--------	---------

Valors	Unitats
	$g Na_2EDTA$
$\frac{g}{mol}$	Na_2EDTA
	mL Solució A
	$g Cr(NO_3)_3$
$\frac{g}{mol}$	$Cr(NO_3)_3$
	mL Solució B

Recorda que els títols de les columnes han d'estar escrits de la mateixa manera que al model

Selecciona la opció "Comparteix" i tria aquesta opció:

Tothom a Internet pot **cercar-ho i consultar-ho** ▾

Finalment, l'aplicatiu Google et proporcionarà un enllaç al fitxer amb les dades, similar al que hi ha a continuació. Copia la part del link que fa referència al fitxer (part marcada en vermell en el següent exemple):

<https://docs.google.com/spreadsheets/d/1oAZb9OIxSGKZotktevyErXRJlqmP8lwcKyif6yUayJE/edit#gid=0>

i enganxa-la en la cel·la de codi que hi ha en aquest notebook, just a la cel·la següent, en la instrucció que es troba entre els senyals ##### .

Si no recordes com fer-ho pots revisar-ho al [Notebook Tutorial](#)

```
import pandas as pd
#####
uid = "1ggA6Mliv3jb0_j80nfzK0te3E0d8wLM5dabAdJ-N1S0" #Enganxa aquí la part de l'enllaç corresponc
#####
url = f"https://docs.google.com/spreadsheets/d/{uid}/export?format=csv"
kt = pd.read_csv(url)
kt.head(n=10)
#Comprova que les dades que apareixen a continuació son les que has introduït.
```

↳	Valors	Unitats
0	9.306	g Na2EDTA
1	372.240	g/molNa2EDTA
2	250.000	mL solucio A
3	3.001	g nitrat de crom(III)
4	400.150	g/mol nitrat de crom(III)
5	25.000	mL solució B

La següent cel·la definirà una funció que s'utilitzarà per a realitzar el càlcul de la concentració inicial de cada reactiu.

```
"""Funció que calcula la concentració en mol/L d'una solució
coneixent la massa pesada (m), la massa molecular (M) i el volum (V)"""
def c(m,M,V) :
    return m*1000/(M*V)
```

La propera cel·la calcularà la concentració de cadascun dels reactius i et mostrarà aquests valors calculats.

```
#Es prenen les dades de la taula per a calcular les concentracions
mNa2EDTA=kt['Valors'][0]
MNa2EDTA=kt['Valors'][1]
VA=kt['Valors'][2]

mNC3= kt['Valors'][3]
MNC3= kt['Valors'][4]
VB= kt['Valors'][5]
#S'empra la funció per a realitzar el càlcul
cNa2EDTA= c(mNa2EDTA,MNa2EDTA,VA)
cNC3= c(mNC3,MNC3,VB)
print("La concentració de la solució A és {:.1f} mol/L i la de la solució B es {:.1f} mol/L".form
```

↳ La concentració de la solució A és 0.1 mol/L i la de la solució B es 0.3 mol/L

▼ Determinació de l'ordre de reacció i de la pseudoconstant de velocitat k'

Amb la reacció (1) tindriem la següent equació de la velocitat de descomposició dels productes:

$$v_d = k \cdot [[Cr(H_2O)_5(NO_3)]^{2+}]^m [H_2Y^{2-}]^n$$

L'ordre d'aquesta reacció es calcularia sumant $m + n$, però si treballem amb excés de Na_2EDTA podem suposar com a constant la concentració d'aquest compost i ens quedaria la següent equació de la velocitat:

$$v_d = k' \cdot [[Cr(H_2O)_5(NO_3)]^{2+}]^m$$

$$\text{on } k' = k \cdot [H_2Y^{2-}]^n$$

A temperatura constant i amb excès de Na_2EDTA la reacció és de **pseudoordre "m"** respecte el Crom(III). Si **suposem** que **m=1**, la reacció segueix l'equació de velocitat:

$$[C] = [C]_0 \cdot \exp(-k' \cdot t)$$

Aprofitant el canvi de color que és produeix es pot seguir com avança la reacció mesurant l'absorbància amb un espectrofotòmetre aplicant la llei de *Lambert Beer*: $Abs = \varepsilon \cdot l \cdot [C]$

Mitjançant la llei de Lambert Beer obtenim :

$$\ln(A_{\infty} - A_t) = \ln(A_{\infty} - A_0) - k' \cdot t$$

Per a més informació pots mirar el guió de pràctiques de laboratori al [Campus Virtual](#)

A continuació has d'**introduir les temperatures** a les que has mesurat l'absorbància en graus Celsius (°C) mitjançant 3 inputs consecutius. Durant el notebook veuràs referències a aquestes 3 temperatures amb els noms de T1, T2 i T3 respectivament.

Temperatures de prova = 26, 31 i 36

```
print("Introdueix la temperatura 1 (T1)")
Temp1=float(input()) + 276.15
print("Introdueix la temperatura 2 (T2)")
Temp2=float(input()) + 276.15
print("Introdueix la temperatura 3 (T3)")
Temp3=float(input()) + 276.15
```

```
↳ Introdueix la temperatura 1 (T1)
   26
   Introdueix la temperatura 2 (T2)
   31
   Introdueix la temperatura 3 (T3)
   36
```

Genera i empena una fulla de càlcul amb 6 columnes seguint el següent model:

Temps (min) T1	Absorbància T1	Temps (min) T2	Absorbància T2	Temps (min) T3	Absorbància T3
----------------	----------------	----------------	----------------	----------------	----------------

Recorda que els títols de les columnes han d'estar escrits de la mateixa manera que al model

Copia i enganxa la part del link en el lloc indicat a la propera secció de codi.

Si no recordes com fer-ho pots revisar-ho al notebook [Tutorial](#)

```
import pandas as pd
#####
uid= "1mdnZxLwr9zImouZkHbTirUvcr00ZFHVu0YphgQnLGxE"#Enganxa aquí la part de l'enllaç corresponent
#####
url = f"https://docs.google.com/spreadsheets/d/{uid}/export?format=csv"
df = pd.read_csv(url)
df.head(n=11) #Comprova que les dades que apareixen a continuació son les que has introduït.
```

```
↳
```

	Temps(min) T1	Absorbància T1	Temps(min) T2	Absorbància T2	Temps(min) T3	Absorbància T3
0	0.0	0.072	0	0.054	0	0.040
1	10.0	0.098	5	0.072	5	0.076
2	20.0	0.132	10	0.094	10	0.124
3	30.0	0.163	15	0.119	15	0.169
4	40.0	0.191	20	0.142	20	0.209
5	50.0	0.217	25	0.165	25	0.244

Ara has d'introduir A_{∞} mitjançant un input

A_{∞} de prova = 1.08

```
print("Introdueix A Infinit")
Ainf=float(input())
```

```
↳ Introdueix A Infinit
1.08
```

A continuació el programa, utilitzant les dades que acabes d'introduir, calcularà el valor de $\ln(A_{\infty} - A_t)$ per a cada valor de temps. Aquests càlculs serviran per a fer l'ajust lineal i per a representar-lo.

Recorda que encara que la propera cel·la estigui oculta l'has d'executar d'igual manera que qualsevol altre cel·la de codi

MOSTRAR CÓDIGO

Si vols visualitzar els valors que seran representats, selecciona "Dades a la temperatura 1 (T1)", "Dades a la temperatura 2 (T2)" o bé "Dades a la temperatura 3 (T3)" en el desplegable de la següent cel·la de codi

Escull quines dades vols visualitzar

Tria_quina_vols_veure: Dades a la temperatura 1 (T1) ▼

```
↳
```

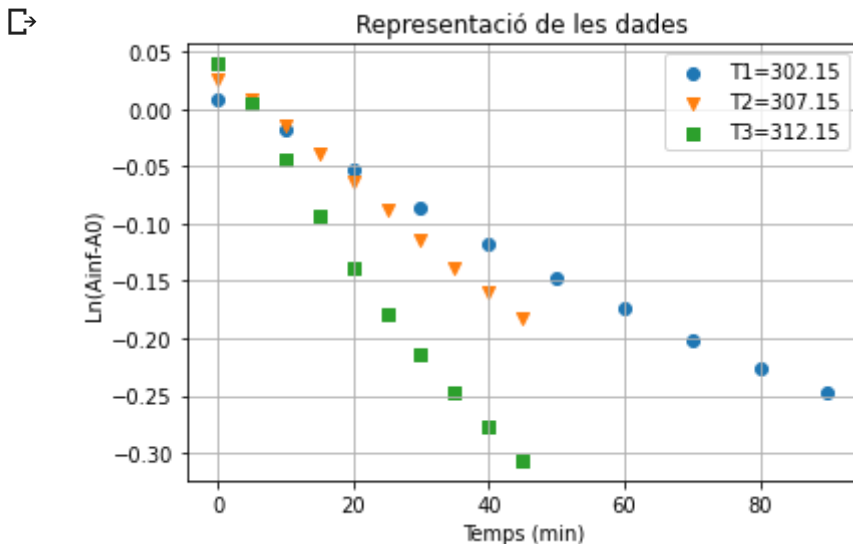
	Temps(min) T1	$\ln(A_{inf}-\text{Absorbància T1})$
0	0.0	0.007968
1	10.0	-0.018164

Tot seguit es representarà el $\ln(A_{inf} - A_0)$ vs $Temps(min)$ a les tres temperatures de treball. En cas que sigui una reacció d'ordre 1 veuràs que les dades de cada temperatura formen una línia recta.

Recorda que pots descarregar el gràfic fent clic sobre el botó "Descarrega el gràfic" que apareixerà un cop executis la cel·la

```
import matplotlib.pyplot as plt
plt.figure()
plt.scatter(x1, y1, label="T1={}".format(Temp1))
plt.scatter(x2, y2, marker='v', label="T2={}".format(Temp2))
plt.scatter(x3, y3, marker='s', label="T3={}".format(Temp3))

plt.xlabel("Temps (min)")
plt.ylabel("Ln(Ainf-A0)")
plt.title("Representació de les dades")
#plt.axis([-10, 100, -0.8, 0.2])
plt.grid(True)
plt.legend()
plt.savefig("Gràfic.png")
plt.show()
#@title
import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)
```



Descarrega el gràfic

La tendència de linea recta que observes és la de l'equació:

$$\ln(A_{\infty} - A_t) = \ln(A_{\infty} - A_0) - k' \cdot t$$

Per tant si fem un ajust lineal de les dades podrem obtenir k' com el pendent de la recta que segueixen les dades.

A continuació es farà l'ajust lineal de les dades i veuràs una taula amb els valors del *pendent*, *l'ordenada a l'origen* i r^2 per a cada temperatura de treball. Per fer-ho executa les properes dues cel·les.

```
pip install scipy
```

```
Requirement already satisfied: scipy in /usr/local/lib/python3.6/dist-packages (1.4.1)
Requirement already satisfied: numpy>=1.13.3 in /usr/local/lib/python3.6/dist-packag
```

```
from scipy import stats
slope1, intercept1, r_value1, p_value1, std_err1 = stats.linregress(x1, y1)
slope2, intercept2, r_value2, p_value2, std_err2 = stats.linregress(x2, y2)
slope3, intercept3, r_value3, p_value3, std_err3 = stats.linregress(x3, y3)

reg=pd.DataFrame()
reg['Temperatura (K)']=(Temp1,Temp2,Temp3)
reg['Pendent']=(slope1,slope2,slope3)
reg["Ordenada a l'origen"]=(intercept1,intercept2,intercept3)
reg["r2"]=(r_value1**2,r_value2**2,r_value3**2)
reg
```

```

└─>

```

	Temperatura (K)	Pendent	Ordenada a l'origen	r2
0	302.15	-0.002900	0.004140	0.996275
1	307.15	-0.004753	0.030096	0.999053
2	312.15	-0.007872	0.031385	0.992265

Per comprovar com s'ajusten les dades a la recta que hem trobat les podem representar en la mateixa gràfica i veure que la recta segueix la tendència de les dades.

La següent cel·la representarà les dades i la recta de regressió en un gràfic

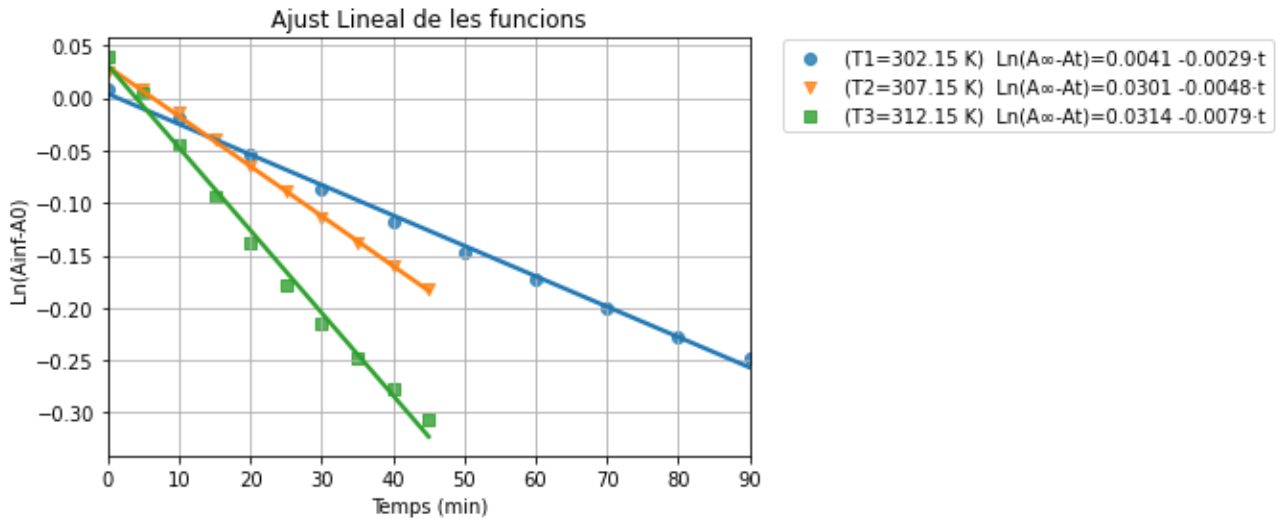
$\ln(A_{inf} - A_0)$ vs $Temps(min)$

Recorda que pots descarregar el gràfic fent clic sobre el botó "Descarrega el gràfic"

```
import seaborn as sns
plt.figure()
sns.regplot(x1,y1,label="(T1={} K) Ln(A∞-At)={:.4f} {:.4f}·t".format(Temp1,intercept1,slope1),ci=
sns.regplot(x2,y2,marker='v',label="(T2={} K) Ln(A∞-At)={:.4f} {:.4f}·t".format(Temp2,intercept2,
sns.regplot(x3,y3,marker='s',label="(T3={} K) Ln(A∞-At)={:.4f} {:.4f}·t".format(Temp3,intercept3,
```

```
plt.xlabel("Temps (min)")
plt.ylabel("Ln(Ainf-A0)")
plt.title("Ajust Lineal de les funcions")
#plt.axis([-10, 100, -0.8, 0.2])
plt.grid(True)
plt.legend(bbox_to_anchor=(1.05, 1), loc='upper left', borderaxespad=0.1)
plt.savefig("Gràfic.png", bbox_inches='tight')
plt.show()
```

```
import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)
```



Descarrega el gràfic

Donat que la recta representada és:

$$\ln(A_{\infty} - A_t) = \ln(A_{\infty} - A_0) - k' \cdot t$$

Per a calcular A_0 cal fer:

$$A_0 = -e^{(\text{Ordenada a l'origen})} + A_{\infty}$$

La propera cel·la calcularà A_0 a les tres temperatures de treball.

```
import math
A0T1=-math.exp(intercept1) + Ainf
A0T2=-math.exp(intercept2) + Ainf
A0T3=-math.exp(intercept3) + Ainf
print( "A la Temperatura 1 = {} K A0 = {:.4f}".format(Temp1,A0T1))
print( "A la Temperatura 2 = {} K A0 = {:.4f}".format(Temp2,A0T2))
```



```
print( "A la Temperatura 3 = {} K A0 = {:.4f}".format(Temp3,A0T3))
```

```
↳ A la Temperatura 1 = 302.15 K A0 = 0.0759
   A la Temperatura 2 = 307.15 K A0 = 0.0494
   A la Temperatura 3 = 312.15 K A0 = 0.0481
```

Executant la següent cel·la podràs veure un resum dels resultats obtinguts en aquesta secció.

```
Resultats=pd.DataFrame()
Resultats['Temperatura(K)']=reg['Temperatura (K)']
Resultats['Pseudoconstant de velocitat']=-reg['Pendent']
Resultats['A0']=(A0T1,A0T2,A0T3)
Resultats
```

```
↳
```

	Temperatura(K)	Pseudoconstant de velocitat	A0
0	302.15	0.002900	0.075852
1	307.15	0.004753	0.049447
2	312.15	0.007872	0.048117

▼ Dependència de les velocitats de reacció amb la temperatura.

Com ja has vist, les tres rectes eren diferents entre si, això és degut a que la velocitat d'una reacció depen de la temperatura a la que es dugui a terme aquesta. Es pot esperar que les reaccions químiques siguin més ràpides a temperatures més altes.

El 1889 Arrhenius va demostrar que les constants de velocitat de moltes reaccions varien amb la següent equació:

$$k = A \cdot e^{\left(\frac{-Ea}{R \cdot T}\right)}$$

En la que si fem logaritmes a ambdós costats obtenim:

$$\ln k = \ln A - \frac{Ea}{R \cdot T}$$

La representació del $\ln k$ front $1/T$ ens permet determinar l'energia d'activació d'una reacció. (Figura 1)

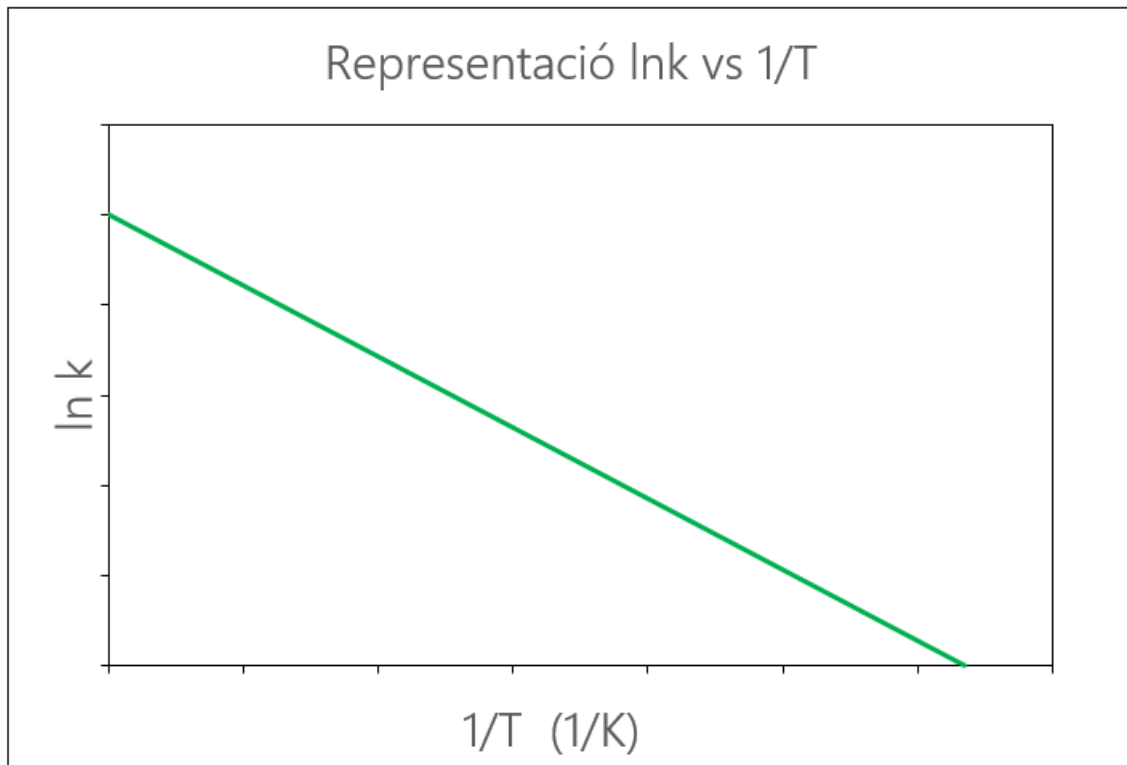


Figura 1. Representació del $\ln k$ vs $1/T$

A continuació el programa prendrà les k' calculades prèviament i farà una taula juntament amb la temperatura a la que cada k' ha estat mesurada.

```
Arr=pd.DataFrame()
Arr["k'"] = (-slope1,-slope2,-slope3)
Arr['T'] = (Temp1,Temp2,Temp3)
Arr
```

	k'	T
0	0.002900	302.15
1	0.004753	307.15
2	0.007872	312.15

A continuació es calcularà el $\ln(k')$ i $1/T$ per a poder fer l'ajust seguint l'equació d'Arrhenius.

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{R \cdot T}$$

També es farà l'ajust lineal de les dades i veuràs una taula amb els valors del *pendent*, l'*ordenada a l'origen* i r^2 .

```
lnk=np.log(np.abs(Arr["k'"]))
iT=(Arr['T'])**(-1)
slopeArr, interceptArr, r_valueArr, p_valueArr, std_errArr = stats.linregress(iT, lnk)
RegArr=pd.DataFrame()
RegArr['Paràmetre']=("Pendent", "Ordenada a l'origen", "r2")
```

```
RegArr["Paràmetre"]=(pendent,ordenada_a_l'origen,r_value**2)
RegArr["Valor"]=(slopeArr,interceptArr,r_valueArr**2)
```

RegArr

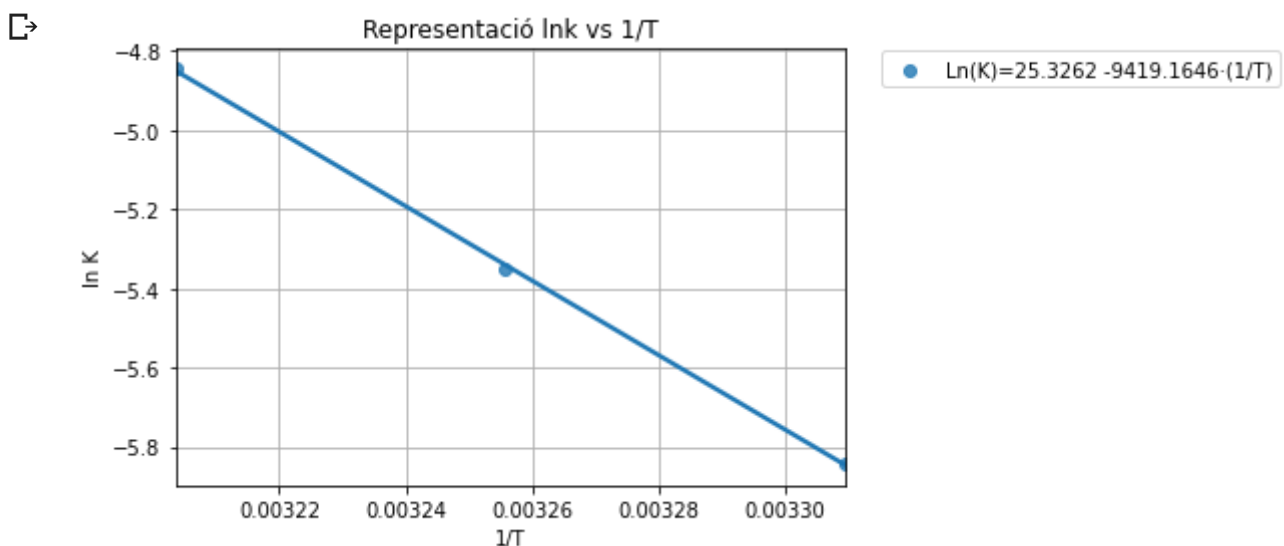
	Paràmetre	Valor
0	Pendent	-9419.164561
1	Ordenada a l'origen	25.326196
2	r2	0.999760

Tot seguit veuràs la representació de l'ajust lineal calculat prèviament per a comprovar aquesta tendència lineal entre $\ln(k')$ i $1/T$.

Recorda que pots descarregar el gràfic fent clic sobre el botó "Descarrega el gràfic"

```
sns.regplot(iT,lnk,label="Ln(K)={:.4f} {:.4f}·(1/T)".format(interceptArr,slopeArr),ci=None)
plt.xlabel("1/T")
plt.ylabel("ln K")
plt.title("Representació lnk vs 1/T")
#plt.axis([0.00320, 0.00333, -3.6, -2.4])
plt.grid(True)
plt.legend(bbox_to_anchor=(1.05, 1), loc='upper left', borderaxespad=0.1)
plt.savefig("Gràfic.png")
plt.show()
```

```
import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)
```



Descarrega el gràfic

Donat que la recta representada és:

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{R \cdot T}$$

Per a calcular l'energia d'activació (E_a):

$$E_a = -\text{pendent} \cdot R$$

Per calcular el factor preexponencial (A):

$$A = e^{\text{Ordenada a l'origen}}$$

La propera cel·la calcularà tant l'energia d'activació (E_a) com el factor preexponencial (A)

```
R=8.3143
```

```
Ea= -slopeArr*(R)
```

```
A=math.exp(interceptArr)
```

```
print("L'energia d'activació és {:.4f} J/Mol i el factor preexponencial és {:.4f} ".format(Ea,A))
```

```
↳ L'energia d'activació és 78313.7599 J/Mol i el factor preexponencial és 99776266635.
```

▼ Autoavaluació

Un cop ja has acabat tot el tractament numèric de dades experimentals i has obtingut els resultats que esperaves, et proposem un breu qüestionari d'autoavaluació per a que vegis si has assolit els objectius d'aprenentatge plantejats en aquesta pràctica.

Quan acabis de respondre pots comprovar si ho has fet bé fent click sobre el botó "Comprova!" que apareixerà un cop executis la cel·la

Pregunta 1: Quines unitats té la constant de velocitat si suposem que respecte el Na₂EDTA la reacció és d'ordre 1?

Resposta1: L/(mol·min) ▼

Pregunta 2: En general, quan augmentem la temperatura d'una reacció:

Resposta2: La velocitat augmenta ▼

Pregunta 3: Com es veu modificada l'absorbància en el transcurs de la reacció?

Resposta3: Disminueix ▼

Pregunta 4: Quina absorbància caldria esperar als 80 minuts de reacció a la Temperatura 1?

Resposta4: 0.29

Pregunta 5: Quina absorbència caldria esperar als 80 minuts de reacció a la Temperatura 3?

Resposta5: 0.53

Pregunta 6: Si la concentració inicial de Na₂EDTA fos 0.001M, quins canvis esperaries veure en la reacció?

Resposta6: No es veuria cap canvi



Comprova!

La Resposta 3 :Disminueix és incorrecte

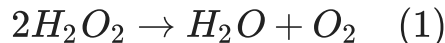
La Resposta 6 :No es veuria cap canvi és incorrecte

▼ Cinètica de descomposició catalítica del H_2O_2

Context

En aquest notebook es treballarà l'efecte de la concentració de catalitzador sobre la velocitat d'una reacció.

La reacció estudiada és la de descomposició del peròxid d'hidrogen:



És una reacció fortament catalitzada per cations metàl·lics com el Fe^{3+} .

Aquesta reacció segueix l'equació de la velocitat següent:

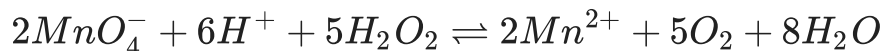
$$v = -\frac{1}{2} \cdot \frac{d[H_2O_2]}{dt} = k_{no\ cat} \cdot [H_2O_2] + k_{cat} \cdot [Fe^{3+}]^\alpha \cdot [H_2O_2]$$

De la que s'obté l'equació integrada de la velocitat següent:

$$\ln([H_2O_2]) = \ln([H_2O_2]_0) - 2 \cdot k' \cdot t$$

$$\text{on } k' = k_{cat} \cdot [Fe^{3+}]^\alpha$$

Per seguir la cinètica de la reacció es realitza una valoració amb $KMnO_4$ de concentració coneguda a baixa temperatura amb l'objectiu de determinar la concentració d' H_2O_2 a diferents temps mitjançant la reacció:



Objectius

- Calcular la constant de velocitat de la reacció a diferents concentracions de catalitzador i la concentració inicial de peròxid d'hidrogen.
- Visualitzar com canvia el transcurs de la reacció en emprar diferents concentracions de catalitzador.
- Determinar l'ordre de reacció respecte el catalitzador així com la seva constant de velocitat (k_{cat})

▼ Determinació de la pseudoconstant de velocitat k' i de $[H_2O_2]_0$

En aquesta secció introduiràs les teves dades experimentals i els hi faràs el tractament adequat per a representar-les gràficament segons l'expressió:

$$\ln([H_2O_2]) = \ln([H_2O_2]_0) - 2 \cdot k' \cdot t$$

i veure si aquesta representació lineal segueix una tendència lineal. Un cop fet això faràs l'ajust lineal de les dades a partir del que podràs calcular la constant de velocitat k' i la concentració inicial d'aigua oxigenada $[H_2O_2]_0$.

Recorda executar totes les cel·les en l'ordre en què apareixen.

En aquesta pràctica has realitzat tres mesures utilitzant mescles de diferent concentració de catalitzador. El notebook es referirà a aquestes tres mescles com a M1, M2 i M3 respectivament.

En primer lloc crea un full de càlcul de google i emplena'l amb les teves dades experimentals mesurades al laboratori. Aquesta taula ha de contenir el volum valorant de $KMnO_4$ en mL i el temps en minuts al que s'ha realitzat aquesta valoració. Aquí tens un exemple per a veure com han d'ésser els títols:

Temps (min) M1	Volum $KMnO_4$ (mL) M1	Temps (min) M2	Volum $KMnO_4$ (mL)M2	Temps (min) M3	Volum $KMnO_4$ (mL) M
----------------	------------------------	----------------	-----------------------	----------------	-----------------------

Recorda que els títols de les columnes han d'estar escrits de la mateixa manera que al model.

Selecciona la opció "Comparteix" i tria aquesta opció:

Tothom a Internet pot **cercar-ho i consultar-ho** ▾

Finalment copia i enganxa la part del link **de la teva fulla** corresponent a la part marcada en vermell del següent link:

<https://docs.google.com/spreadsheets/d/1oAZb9OlxSGKZotktevyErxRJlqmP8lwckYjf6yUayJE/edit#gid=0>

al lloc indicat entre #####.

Si no recordes com fer-ho pots revisar-ho al notebook [Tutorial](#)

```
import pandas as pd
#####
uid= "1IV_dek7afLHgnSYjDkixXZHhdG7-LWcUPhpPxDjRUqE" #Enganxa aquí la part de l'enllaç corresponen
#####
url = f"https://docs.google.com/spreadsheets/d/{uid}/export?format=csv"
df = pd.read_csv(url)

df #Comprova que les dades son les que has introduit.
```



Temps(min) M1	Volum KMnO4(mL) M1	Temps(min) M2	Volum KMnO4(mL) M2	Temps(min) M3	Volum KMnO4(mL) M3
------------------	-----------------------	------------------	-----------------------	------------------	-----------------------

La propera cel·la definirà una funció que més endavant s'utilitzarà per a realitzar el càlcul de la concentració de peròxid d'hidrogen a partir dels mililitres de $KMnO_4$ de les teves dades.

```

"""Funció que calcula la concentració en mol/L d'una solució d'H2O2 (C)
a partir del volum valorant en mL de KMnO4 (mLKMnO4) i de la concentració
en mol/L de la solució de KMnO4(MKMnO4)"""
def C(MKMnO4,mLKMnO4):
    return mLKMnO4*MKMnO4*(5/2)*(1/5)

```

Per calcular la concentració de peròxid d'hidrogen, és necessari que introdueixis la concentració en mol/L del $KMnO_4$. A continuació has d'introduir aquesta concentració.

Concentració de $KMnO_4$ de prova= 0.04 (mol/L)

```

print("Introdueix la concentració en mol/L de KMNO4")
MKMnO4=float(input())

```

```

↳ Introdueix la concentració en mol/L de KMNO4
0.04

```

A continuació el programa, utilitzant les dades que acabes d'introduir, calcularà el valor de $\ln([H_2O_2])$ per a cada valor de temps. Aquests càlculs serviran per a fer l'ajust lineal i per a representar-lo.

Recorda que encara que la propera cel·la estigui oculta l'has d'executar d'igual manera que qualsevol altre cel·la de codi.

MOSTRAR CÓDIGO

Si vols visualitzar els valors que seran representats, , selecciona "Dades en la mescla 1 (M1)", "Dades en la mescla 2 (M2)" o bé "Dades en la mescla 3 (M3)" en el desplegable de la següent cel·la de codi.

Escull quines dades vols visualitzar

Tria_quina_vols_veure: Dades en la mescla 1 (M1) ▼

```

↳

```


	Temps(min)	M1	$\ln([H_2O_2])$	M1
0	0.53		-1.832581	
1	14.82		-1.883875	
2	20.25		-1.902800	

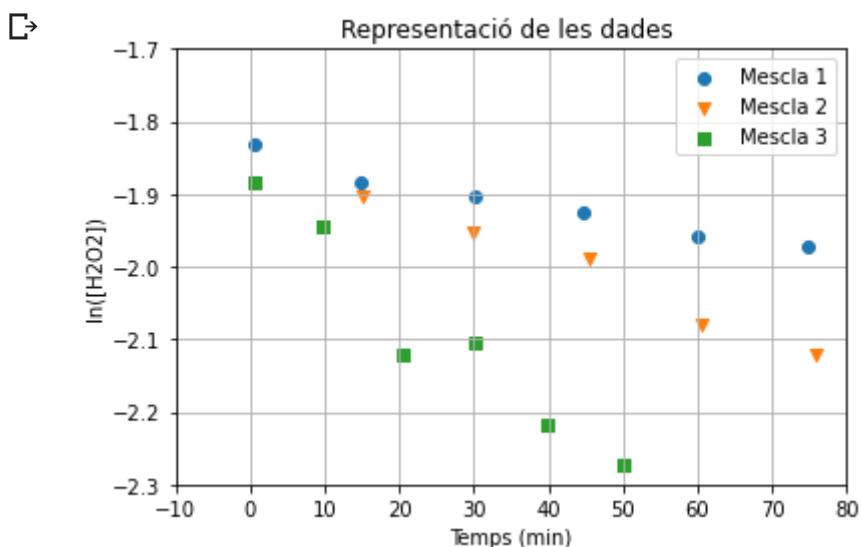
Tot seguit es representarà el $\ln([H_2O_2])$ vs $Temps(min)$ a les tres mesclades experimentals.

Recorda que pots descarregar el gràfic fent clic sobre el botó "Descarrega el gràfic"

```
import matplotlib.pyplot as plt
plt.figure()
plt.scatter(x1, y1, label="Mescla 1")
plt.scatter(x2, y2, marker='v', label="Mescla 2")
plt.scatter(x3, y3, marker='s', label="Mescla 3")

plt.xlabel("Temps (min)")
plt.ylabel("ln([H2O2])")
plt.title("Representació de les dades ")
plt.axis([-10, 80, -2.3, -1.7])
plt.grid(True)
plt.legend()
plt.savefig("Gràfic.png", bbox_inches='tight')
plt.show()

import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)
```



Descarrega el gràfic

La tendència de línia recta que observes és la de l'equació:

$$\ln([H_2O_2]) = \ln([H_2O_2]_0) - 2 \cdot k' \cdot t$$

Per tant si fem un ajust lineal de les dades podrem obtenir k' dividint el pendent de la recta

A continuació es farà l'ajust lineal de les dades. Veuràs una taula amb els valors del *pendent*, *l'ordenada a l'origen* i r^2 en funció de la temperatura.

```
pip install scipy
```

```
Requirement already satisfied: scipy in /usr/local/lib/python3.6/dist-packages (1.4.1)
Requirement already satisfied: numpy>=1.13.3 in /usr/local/lib/python3.6/dist-packages
```

```
from scipy import stats
slope1, intercept1, r_value1, p_value1, std_err1 = stats.linregress(x1, y1)
slope2, intercept2, r_value2, p_value2, std_err2 = stats.linregress(x2, y2)
slope3, intercept3, r_value3, p_value3, std_err3 = stats.linregress(x3, y3)
reg=pd.DataFrame()
```

```
reg['Mescla']=("Mescla 1", "Mescla 2", " Mescla 3")
reg['Pendent']=(slope1,slope2,slope3)
reg["Ordenada a l'origen"]=(intercept1,intercept2,intercept3)
reg["r2"]=(r_value1**2,r_value2**2,r_value3**2)
reg
```

```
↳
```

	Mescla	Pendent	Ordenada a l'origen	r2
0	Mescla 1	-0.001817	-1.844554	0.968162
1	Mescla 2	-0.003305	-1.862593	0.966782
2	Mescla 3	-0.007891	-1.891545	0.946288

La següent cel·la representarà les dades i la recta de regressió en un gràfic $\ln([H_2O_2])$ vs $Temps(min)$.

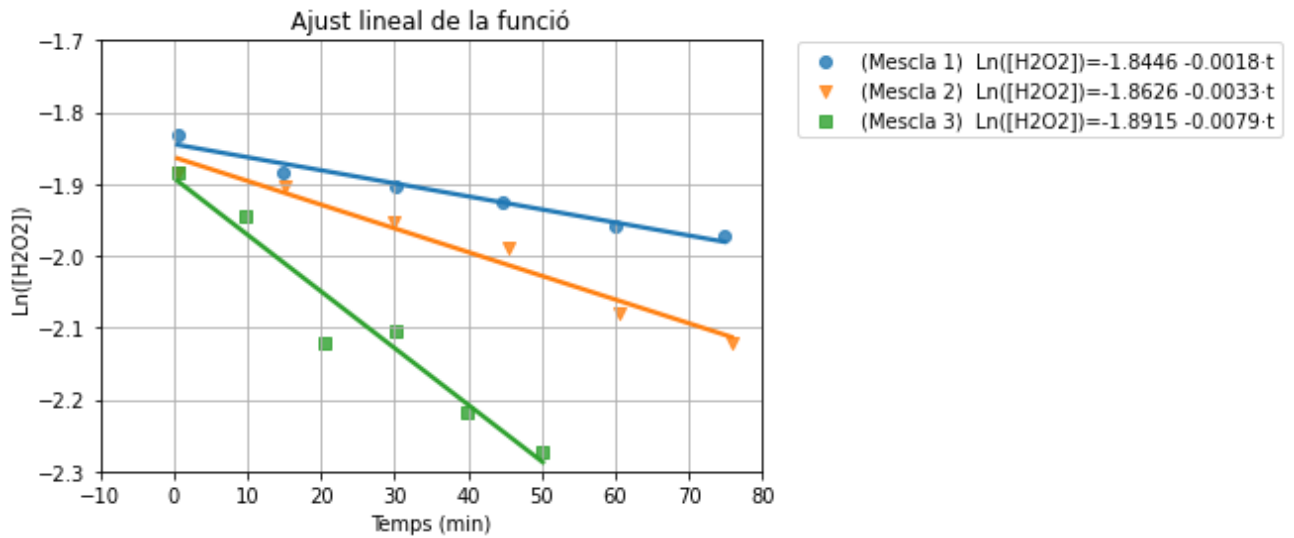
```
import seaborn as sns
plt.figure()
sns.regplot(x1,y1,label="(Mescla 1) Ln([H2O2])={:.4f} {:.4f}·t".format(intercept1,slope1),ci=Non
sns.regplot(x2,y2,marker='v',label="(Mescla 2) Ln([H2O2])={:.4f} {:.4f}·t".format(intercept2,slo
sns.regplot(x3,y3,marker='s', label="(Mescla 3) Ln([H2O2])={:.4f} {:.4f}·t".format(intercept3,s1
```

```
plt.xlabel("Temps (min)")
plt.ylabel("Ln([H2O2])")
plt.title("Ajust lineal de la funció")
plt.axis([-10, 80, -2.3, -1.7])
plt.grid(True)
plt.legend(bbox_to_anchor=(1.05, 1), loc='upper left', borderaxespad=0.1)
plt.savefig("Gràfic.png", bbox_inches='tight')
plt.show()
```

```
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    files.download("Gràfic.png")
    button.on_click(on_button_clicked)
```

```
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)
```

```
↳ /usr/local/lib/python3.6/dist-packages/statsmodels/tools/_testing.py:19: FutureWarning
import pandas.util.testing as tm
```



Descarrega el gràfic

Donat que la recta representada és:

$$\ln([H_2O_2]) = \ln([H_2O_2]_0) - 2 \cdot k \cdot t$$

Per a calcular $[H_2O_2]_0$ cal fer:

$$[H_2O_2]_0 = e^{(\text{Ordenada a l'origen})}$$

La propera cel·la calcularà tant $[H_2O_2]_0$ com la pseudoconstant de velocitat (k') de la reacció i mostrarà els valors obtinguts per a cada mescla.

```
pd.set_option('precision', 2)
import math
Resultats=pd.DataFrame()
Resultats['Mescla']=reg['Mescla']
Resultats["k'"]=-reg['Pendent']/2
Resultats['[H2O2]0']=(math.exp(intercept1),math.exp(intercept2),math.exp(intercept3))
Resultats
```

```
↳
```

	Mescla	k'	[H2O2]0
0	Mescla 1	9.08e-04	0.16
1	Mescla 2	1.65e-03	0.16
2	Mescla 3	3.95e-03	0.15

▼ Determinació de l'ordre de reacció respecte al catalitzador (α)

En aquesta secció determinaràs l'ordre de reacció respecte al catalitzador Fe^{3+} .

Considerant que tenim les k' en diferents mescules de reacció amb diferents concentracions de $[Fe^{3+}]$ Partint de l'equació següent:

$$k' = k_{cat} \cdot [Fe^{3+}]^\alpha$$

Fent logaritmes als dos costats podem fer-ne un ajust lineal que ens permetrà obtenir tant la k_{cat} com α :

$$\ln k' = k_{cat} + \alpha \cdot \ln([Fe^{3+}])$$

La propera cel·la generarà una taula amb els $\ln k'$ emprant les constants de velocitat calculades a la secció anterior. Aquesta taula també inclourà el càlcul de $\ln[Fe^{3+}]$. Aquestes dades s'utilitzaran, més endavant, per a realitzar la representació i ajust de la recta:

$$\ln k = k_{cat} + \alpha \cdot \ln([Fe^{3+}])$$

A continuació has d'introduir la concentració de Ferro (III) (en mol/L) en cadascuna de les tres mescules.

Concentracions de Fe^{3+} de prova

$$M1 : Fe_{M1}^{3+} = 0.0028 \text{ (Mol/L)}$$

$$M2 : Fe_{M2}^{3+} = 0.0056 \text{ (Mol/L)}$$

$$M3 : Fe_{M3}^{3+} = 0.0083 \text{ (Mol/L)}$$

```
Taula=pd.DataFrame()
Taula['lnk']=(np.log(-slope1/2),np.log(-slope2/2),np.log(-slope3/2))
print("Introdueix la concentració de Ferro(III) en la Mescla 1 ")
FeM1=float(input())
print("Introdueix la concentració de Ferro(III) en la Mescla 2 ")
FeM2=float(input())
print("Introdueix la concentració de Ferro(III) en la Mescla 3 ")
FeM3=float(input())
Taula['[Fe(III)]']=(FeM1,FeM2,FeM3)
Taula['ln[Fe(III)]']=(np.log(FeM1),np.log(FeM2),np.log(FeM3))
Taula
```

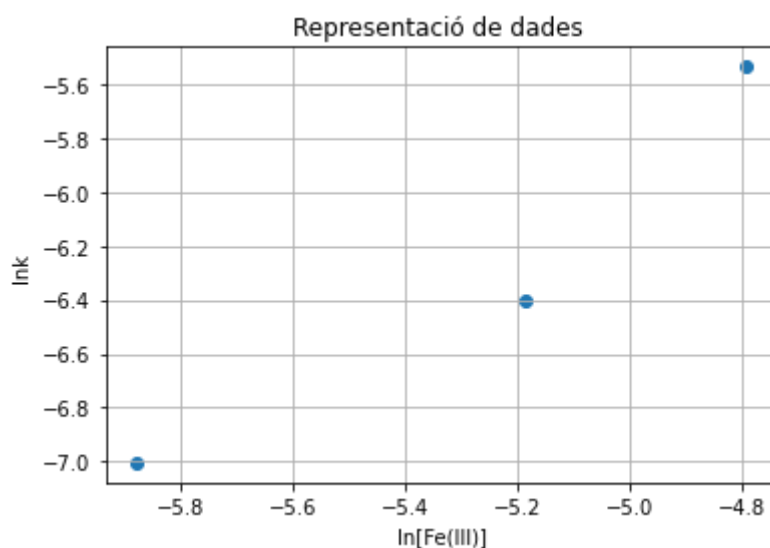
```
↳ Introdueix la concentració de Ferro(III) en la Mescla 1
0.0028
Introdueix la concentració de Ferro(III) en la Mescla 2
0.0056
Introdueix la concentració de Ferro(III) en la Mescla 3
0.0083
```

	lnk	[Fe(III)]	ln[Fe(III)]
0	-7.00	2.80e-03	-5.88
1	-6.41	5.60e-03	-5.18
2	-5.54	8.30e-03	-4.79

En la propera cel·la es durà a terme la representació gràfica de $\ln k$ vs $\ln[Fe^{3+}]$

```
lnk=Taula['lnk']
lnFe=Taula['ln[Fe(III)]']
plt.scatter(lnFe, lnk)
plt.xlabel("ln[Fe(III)]")
plt.ylabel("lnk ")
plt.title("Representació de dades ")
#plt.axis([-10, 80, -2.3, -1.7])
plt.grid(True)
#plt.legend()
plt.savefig("Gràfic.png", bbox_inches='tight')
plt.show()

import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)
```



Descarrega el gràfic

Com pots veure, encara que disposes de pocs valors, aquests poden ajustar-se a una línia recta. És la recta d'equació:

$$\ln k = k_{cat} + \alpha \cdot \ln([Fe^{3+}])$$

La propera cel·la realitzarà l'ajust de les dades.

Del pendent de la recta ajustada podràs obtenir l'ordre de reacció (α) i de l'ordenada a l'origen la constant de velocitat del catalitzador (k_{cat})

```
slopeFe, interceptFe, r_valueFe, p_valueFe, std_errFe = stats.linregress(lnFe, lnk)
```

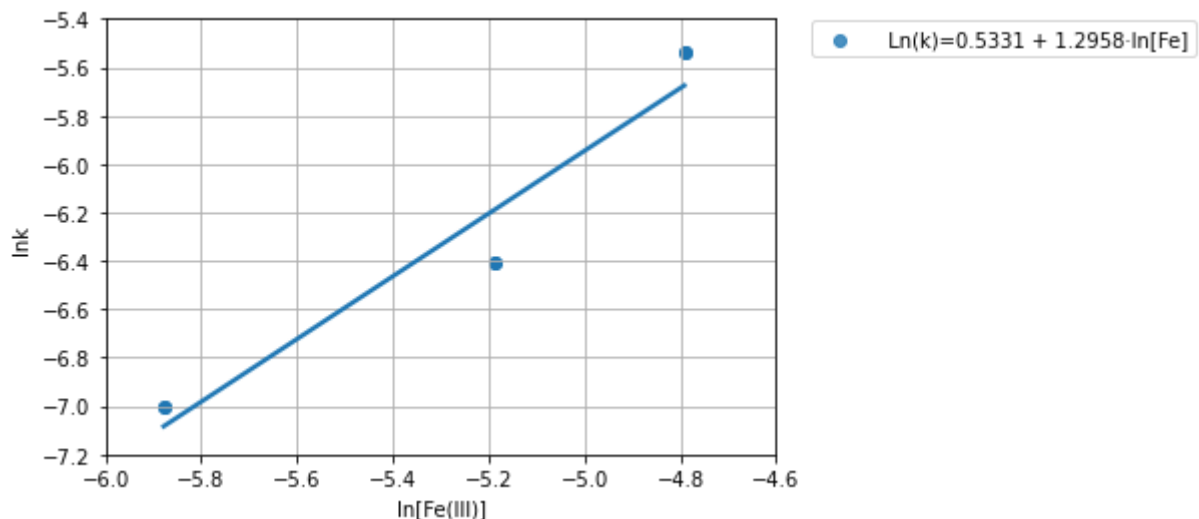
```

sns.regplot(lnFe,lnk,label=" Ln(k)={:.4f} + {:.4f}·ln[Fe]".format(interceptFe,slopeFe),ci=None)

plt.scatter(lnFe, lnk)
plt.xlabel("ln[Fe(III)]")
plt.ylabel("lnk ")
plt.title(" ")
plt.axis([-6, -4.6, -7.2, -5.4])
plt.grid(True)
plt.legend(bbox_to_anchor=(1.05, 1), loc='upper left', borderaxespad=0.1)
plt.savefig("Gràfic.png", bbox_inches='tight')
plt.show()

import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)

```



Descarrega el gràfic

Executant la propera cel·la veuràs quina és la constant de velocitat (k_{cat}) i quin és l'ordre de reacció (α) respecte al Fe(III).

```

Kcat=math.exp(interceptFe)
print("La kcat = {:.4f} i l'ordre de reacció respecte al Ferro(III) és {:.4f} que aproximant a u

```

↳ La kcat = 0.5331 i l'ordre de reacció respecte al Ferro(III) és 1.2958 que aproximar

▼ Determinació del temps de semireacció

En aquesta secció calcularàs el temps de semireacció $t_{1/2}$ de la reacció estudiada a partir de les k de les diferents mescles que has determinat a la primera secció del notebook.

El **temps de semireacció** o vida mitja d'una reacció és el temps necessari per a consumir la meitat d'un dels reactius. És a dir, que per a $t = t_{1/2}$ tenim que $[A]_t = \frac{[A]_0}{2}$ pertant en funció del ordre de reacció podem calcular $t_{1/2}$ per a una reacció :



de les següents maneres:

Ordre de Reacció	$t_{1/2}$
0	$\frac{[A]_0}{2ak}$
1	$\frac{\ln 2}{ak}$
2	$\frac{1}{ak[A]_0}$

Considerant que la reacció segueix l'equació:

$$\ln([H_2O_2]_t) = \ln([H_2O_2]_0) - 2 \cdot k \cdot t$$

i sabent que per a $t = t_{1/2}$ tenim que $[H_2O_2]_t = \frac{[H_2O_2]_0}{2}$,

si ho introduïm a l'equació de velocitat tenim que:

$$\ln\left(\frac{[H_2O_2]_0}{2}\right) = \ln([H_2O_2]_0) - 2 \cdot k \cdot t_{1/2}$$

d'on podem aïllar $t_{1/2}$ per a calcular-lo:

$$t_{1/2} = \frac{\ln(2)}{2k}$$

La propera cel·la realitzarà aquest càlcul i generarà una taula amb el valor, en minuts, del temps de semireacció per a cadascuna de les tres mescles.

```
VM=pd.DataFrame()
VM['Mescla']=reg['Mescla']
VM['Temps de semireacció(min)']=(np.log(2)/(-slope1),np.log(2)/(-slope2),np.log(2)/(-slope3))
VM
```

	Mescla	Temps de semireacció(min)
0	Mescla 1	381.55
1	Mescla 2	209.73
2	Mescla 3	87.84

▼ Autoavaluació

Un cop ja has acabat tot el tractament numèric de dades experimentals i has obtingut els resultats que esperaves, et proposem un breu qüestionari d'autoavaluació per a que vegis si has assolit els objectius d'aprenentatge plantejats en aquesta pràctica.

Quan acabis de respondre pots comprovar si ho has fet bé fent click sobre el botó "Comprova!" que apareixerà un cop executis la cel·la

Pregunta 1: Quines unitats té la constant de velocitat (k)?

Resposta1: L/(mol·min) ▼

Pregunta 2: En general, quan augmentem la concentració del catalitzador de la reacció:

Resposta2: La velocitat augmenta ▼

Pregunta 3: Quines unitats té la constant del catalitzador (kcat)?

Resposta3: L/(mol·min) ▼

Pregunta 4: Utilitzant un catalitzador es modifica...?

Resposta4: Cap de les anteriors ▼

Pregunta 5: Augmentant la temperatura a la que es dona la reacció, la velocitat d'aquesta:

Resposta5: Augmenta ▼



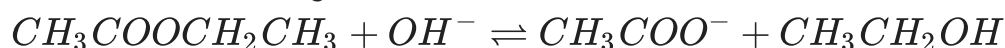
Comprova!

▼ Seguiment per conductimetria de la cinètica d'hidròlisi d'un éster

▼ Context

En aquest notebook treballaràs el seguiment d'una reacció mitjançant la mesura de la conductància al llarg del temps de reacció.

La reacció que estudiaràs és la següent:



Que tot i tractar-se d'un equilibri, es pot tractar com una reacció unidireccional al principi de la reacció donada la baixa velocitat en la direcció inversa.

Es tracta d'una **reacció d'ordre 2** i donat que només considerarem la descomposició del reactiu A tenim que:

$$\text{Velocitat de reacció} = k \cdot [A]^2$$

d'on podem fer la integral:

$$\int_{[A]_0}^{[A]_t} \frac{d[A]}{[A]^2} = -k \int_0^t dt$$

que un cop resolta obtenim:

$$\frac{1}{[A]_t} = +k \cdot t + \frac{1}{[A]} \quad (1)$$

Per tant, realitzant la representació $1/[A]_t$ Vs Temps, podrem observar una tendència lineal com la que veus en la *Figura 1*

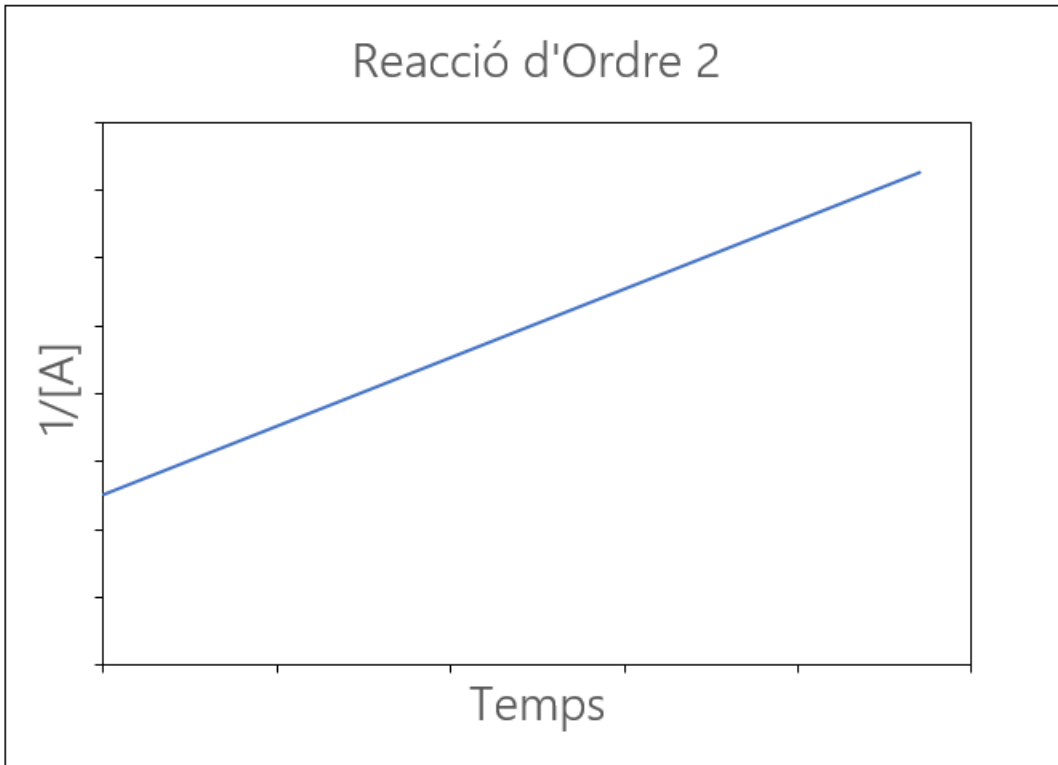


Figura 1 : Representació de la inversa de la concentració ($\frac{1}{[A]}$) respecte del temps

Donada la diferent conductivitat dels ions OH^- i CH_3COO^- la reacció es pot seguir mitjançant la mesura de la conductivitat iònica de la solució mentre es produeix la reacció. La **conductivitat** és una propietat additiva i, per a electròlits diluïts, la conductivitat d'una espècie (κ_i) depèn de la seva conductivitat molar (λ_i) i de la concentració de l'espècie ($\kappa_i = \lambda_i \cdot [I]$) tenim que:

$$\frac{1}{\kappa_t - \kappa_\infty} = \frac{1}{\kappa_0 - \kappa_\infty} + \frac{[A]_0 \cdot k}{\kappa_0 - \kappa_\infty} \cdot t \quad (2)$$

Tot i això, durant la pràctica mesurarem la conductància (G) en comptes de la conductivitat (κ). La conductància és la inversa de la resistència i té com a unitats els Siemens (Ω^{-1})

Considerant que la relació entre la conductivitat i la conductància és:

$$\kappa = G \cdot \frac{l}{A} = G \cdot k_{cel\cdot la}$$

Si ho substituïm a l'equació (2) tenim que:

$$\frac{1}{G_t - G_\infty} = \frac{1}{G_0 - G_\infty} + \frac{[A]_0 \cdot k}{G_0 - G_\infty} \cdot t$$

Recorda executar totes les cel·les en l'ordre en què apareixen

▼ Determinació de la constant de velocitat k

En aquesta secció introduiràs les teves dades experimentals, els hi faràs el tractament per a poder-les representar en un gràfic $\frac{1}{G_t - G_\infty}$ vs Temps(min). Mitjançant aquest gràfic podràs comprovar si es tracta d'una reacció d'ordre 2 i determinar la constant de velocitat k .

En primer lloc crea una fulla de càlcul de google i emplena-la amb les teves dades experimentals mesurades al laboratori.

Aquí tens un exemple per a veure com han d'ésser els títols:

Temps (min) Conductància (mS)

Recorda que els títols de les columnes han d'estar escrits de la mateixa manera que al model.

Copia i enganxa la part del link en el lloc indicat a la propera secció de codi.

Si no recordes com fer-ho pots revisar-ho al notebook [Tutorial](#)

```
import pandas as pd
#####
uid= "19SY9ec9I-ygYIjzNpM0zPYdbWCLXQCv9-Td9mmJLQsI"
#####
url = f"https://docs.google.com/spreadsheets/d/{uid}/export?format=csv"
df = pd.read_csv(url)
df.head(n=11) #Comprova que les dades que apareixen a continuació son les que has introduït.
```

↳	Temps(min)	Conductància (mS)
0	0.46	2.10
1	2.00	1.95
2	4.00	1.80
3	6.00	1.75
4	8.00	1.70
5	10.00	1.60
6	12.00	1.55
7	14.00	1.50
8	16.00	1.45
9	21.00	1.35
10	26.00	1.35

Ara has d'introduir G_∞ mitjançant un input

G_∞ de prova = 0.9 (mS)

```
print("Introdueix G∞")
```

```
print( Introducció de )
Ginf=float(input())
```

```
↳ Introduueix G∞
0.9
```

Tot seguit el programa calcularà $G_t - G_\infty$ i $\frac{1}{G_t - G_\infty}$ i veuràs una taula amb les teves dades i les calculades pel programa.

```
df["Gt-Ginf"]=df["Conductància (mS)"]-Ginf
df["1/Gt-Ginf"]=1/df["Gt-Ginf"]
y=df['1/Gt-Ginf']
x=df['Temps(min)']
df
```

```
↳
```

	Temps(min)	Conductància (mS)	Gt-Ginf	1/Gt-Ginf
0	0.46	2.10	1.20	0.833333
1	2.00	1.95	1.05	0.952381
2	4.00	1.80	0.90	1.111111
3	6.00	1.75	0.85	1.176471
4	8.00	1.70	0.80	1.250000
5	10.00	1.60	0.70	1.428571
6	12.00	1.55	0.65	1.538462
7	14.00	1.50	0.60	1.666667
8	16.00	1.45	0.55	1.818182
9	21.00	1.35	0.45	2.222222
10	26.00	1.35	0.45	2.222222
11	31.00	1.30	0.40	2.500000
12	40.00	1.25	0.35	2.857143
13	50.00	1.20	0.30	3.333333
14	60.00	1.15	0.25	4.000000

Ara es farà la representació gràfica de $\frac{1}{G_t - G_\infty}$ vs Temps(min) donat que es tracta d'una reacció d'ordre 2, en aquesta representació hauries de poder apreciar una tendència lineal.

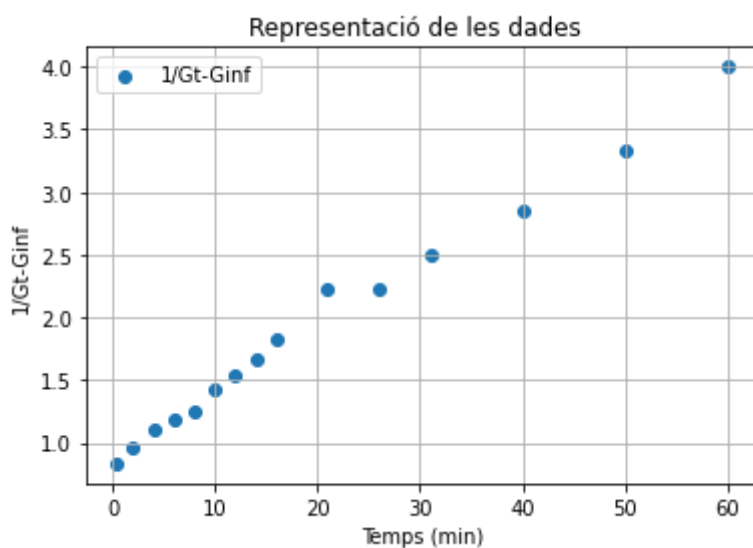
Recorda que pots descarregar el gràfic fent clic sobre el botó "Descarrega el gràfic"

```
import matplotlib.pyplot as plt

plt.scatter(x, y, label="1/Gt-Ginf")
plt.xlabel("Temps (min)")
plt.ylabel("1/Gt-Ginf")
plt.title("Representació de les dades ")
```

```
#plt.axis([-2, 80, -10, 40]) #Treient el símbol i modificant els valors pots canviar els límits
plt.grid(True)
plt.legend()
plt.savefig("Gràfic.png", bbox_inches='tight')
plt.show()
```

```
import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)
```



Descarrega el gràfic

La tendència de linea recta que observes és la de l'equació:

$$\frac{1}{G_t - G_\infty} = \frac{1}{G_0 - G_\infty} + \frac{[A]_0 \cdot k}{G_0 - G_\infty} \cdot t$$

Per tant si fem un ajust lineal de les dades podrem obtenir $\frac{[A]_0 \cdot k}{G_0 - G_\infty}$ com el pendent de la recta que segueixen les dades i d'aquest pendent obtenir la constant de reacció k .

A continuació es farà l'ajust lineal de les dades i veuràs una taula amb els valors del *pendent*, l'*ordenada a l'origen* i r^2 .

```
pip install scipy
```

Requirement already satisfied: scipy in /usr/local/lib/python3.6/dist-packages (1.4.0)
Requirement already satisfied: numpy>=1.13.3 in /usr/local/lib/python3.6/dist-packages

```
from scipy import stats
slope, intercept, r_value, p_value, std_err = stats.linregress(x, y)
```

```
Reg=pd.DataFrame()
Reg['Paràmetre']="Pendent","Ordenada a l'origen","r2")
Reg["Valor"]=(slope,intercept,r_value**2)
```

Reg

	Paràmetre	Valor
0	Pendent	0.050870
1	Ordenada a l'origen	0.908378
2	r2	0.990455

Per comprovar com s'ajusten les dades a la recta que hem trobat, les podem representar en la mateixa gràfica i veure que la recta segueix la tendència de les dades.

La següent cel·la representarà les dades i la recta de regressió en un gràfic

$\frac{1}{G_t - G_\infty}$ vs Temps(min)

Recorda que pots descarregar el gràfic fent clic sobre el botó "Descarrega el gràfic"

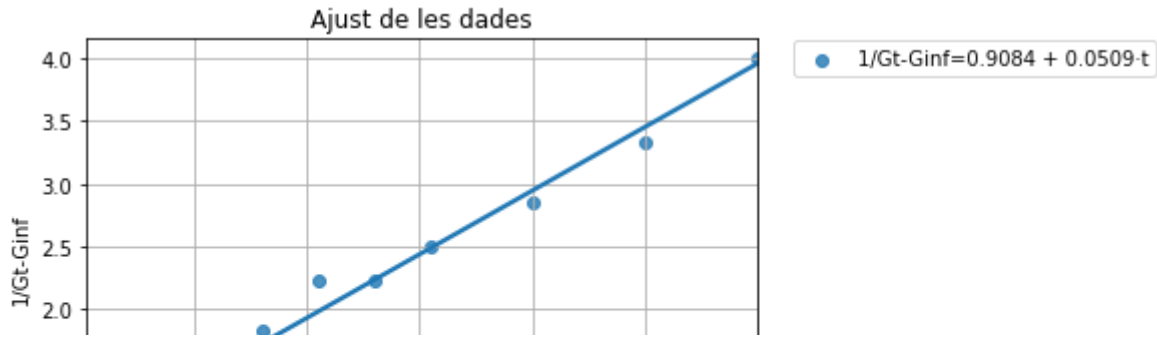
```
import seaborn as sns
sns.regplot(x,y,label="1/Gt-Ginf={:.4f} + {:.4f}·t".format(intercept,slope),ci=None)

plt.xlabel("Temps (min)")
plt.ylabel("1/Gt-Ginf")
plt.title("Ajust de les dades")
#plt.axis([-10, 100, -0.8, 0.2]) Treient el símbol # i modificant els valors pots canviar els líns
plt.grid(True)
plt.legend(bbox_to_anchor=(1.05, 1), loc='upper left', borderaxespad=0.1)
plt.savefig("Gràfic.png", bbox_inches='tight')
plt.show()

import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)
```

☞

```
/usr/local/lib/python3.6/dist-packages/statsmodels/tools/_testing.py:19: FutureWarni
import pandas.util.testing as tm
```



Donat que la recta que representada és :

$$\frac{1}{G_t - G_\infty} = \frac{1}{G_0 - G_\infty} + \frac{[A]_0 \cdot k}{G_0 - G_\infty} \cdot t$$

Per obtenir k cal fer:

$$k = \frac{\text{pendent} \cdot (G_0 - G_\infty)}{[A]_0}$$

Com pots veure, per a calcular k és necessari conèixer la concentració inicial d'acetat d'etil. En la propera cel·la has d'introduir la concentració inicial de l'acetat d'etil. Aquesta cel·la calcularà k i et mostrarà el valor d'aquesta

Valor de prova

Concentració Acetat d'etil = 0.184(mol/L)

```
print("Introdueix la concentració inicial d'Acetat d'etil en mol/L")
Ci = float(input())
k=slope*intercept**(-1)/Ci
print("La constant de velocitat és {:.4f}".format(k))
```

```
↳ Introdueix la concentració inicial d'Acetat d'etil en mol/L
0.184
La constant de velocitat és 0.3044
```

▼ Autoavaluació

Un cop ja has acabat tot el tractament numèric de dades experimentals i has obtingut els resultats que esperaves, et proposem un breu qüestionari d'autoavaluació per a que vegis si has assolit els objectius d'aprenentatge plantejats en aquesta pràctica.

Quan acabis de respondre pots comprovar si ho has fet bé fent click sobre el botó "Comprova!" que apareixerà un cop executis la cel·la

Pregunta 1: Quines unitats té la constant de velocitat (k)?

Resposta1: Sense respondre

Pregunta 2: Per què cal utilitzar durant tot l'experiment la mateixa cel·la de conductivitat?

Resposta2: Sense respondre



Pregunta 3: Com es veu modificada la conductància en el transcurs de la reacció?

Resposta3: Sense Respondre



Pregunta 4: Els ions amb més conductivitat són:

Resposta4: Sense respondre



Pregunta 5: Augmentant la temperatura a la que es dona la reacció, la velocitat d'aquesta:

Resposta5: Sense respondre



Comprova!

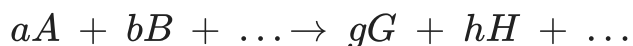
▼ Cinètica d'una reacció

L'objectiu d'aquest notebook és que puguis determinar quin és l'ordre de la reacció que estàs estudiant a partir de la concentració d'un dels reactius al llarg del temps.

Velocitat d'una reacció química

La velocitat d'una reacció química descriu la rapidesa amb la que es modifica la concentració d'un reactiu o d'un producte al transcórrer el temps.

En una reacció:



$$V_{mitjana} \text{ de reacció} = -\frac{1}{a} \cdot \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \cdot \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{1}{g} \cdot \frac{\Delta[G]}{\Delta t} = \frac{1}{h} \cdot \frac{\Delta[H]}{\Delta t}$$

Per als reactius es pren el signe negatiu perquè la velocitat sigui una magnitud positiva.

Equació de la velocitat

$$\text{Velocitat de reacció} = k \cdot [A]^m \cdot [B]^n$$

$[A]$ i $[B]$ són les molaritats dels reactius

m i n són nombres normalment enters i petits que determinen l'ordre de reacció

k és la constant de velocitat

Ordre de reacció

El terme ordre de reacció està relacionat amb els exponents m i n .

Si $m = 1$ la reacció és d'ordre 1 respecte d'A

Si $n = 2$ la reacció és d'ordre 2 respecte de B

L'ordre de reacció total és la suma $m + n + \dots$

Constant de velocitat

El valor de k depèn de la reacció, de la presència o no d'un catalitzador i de la temperatura. Com major és k major és la velocitat de la reacció. Les seves unitats depenen dels ordres m, n, \dots

Emprant l'equació de velocitat podem calcular la velocitat de la reacció coneixent les concentracions dels reactius però, com s'estableix aquesta equació?

Mètode de les velocitats inicials

En una reacció en que poguem mesurar la quantitat de producte format en funció del temps en duplicar la concentració inicial d'un dels reactius i mesurant la velocitat inicial de la reacció podem conèixer l'ordre del reactiu del que hem modificat la concentració.

Ordre del reactiu	Velocitat
0	v
1	$2v$
2	$4v$
3	$8v$

Reaccions d'ordre 0

Si només considerem la descomposició del reactiu A tenim que:

$$\text{Velocitat de reacció} = k \cdot [A]^0 = k$$

El gràfic concentració-temperatura és una línia recta de pendent negatiu La velocitat de la reacció es k , es manté constant i és el pendent de la recta canviat de signe.

Equació integrada de la velocitat:

$$[A]_t = -k \cdot t + [A]_0$$

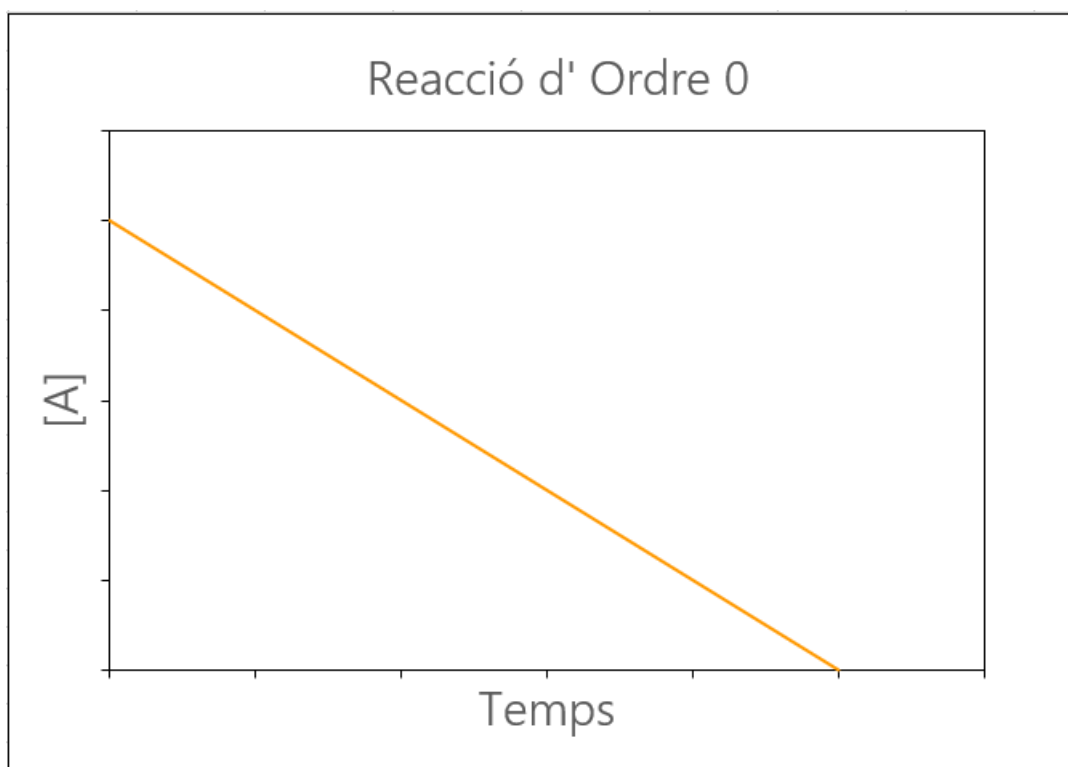


Figura 1. Representació de la concentració respecte del temps per a una reacció d'ordre 0

Reaccions d'ordre 1

Si només considerem al descomposició del reactiu A tenim que:

$$\text{Velocitat de reacció} = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = k \cdot [A]^1$$

d'on podem fer la integral:

$$\int_{[A]_0}^{[A]_t} \frac{d[A]}{[A]} = -k \int_0^t dt$$

que un cop resolta obtenim:

$$\ln[A]_t = -k \cdot t + \ln[A]_0$$

Representar el logaritme neperià de la concentració en front del temps és un mètode per a comprovar si la reacció és d'ordre 1.

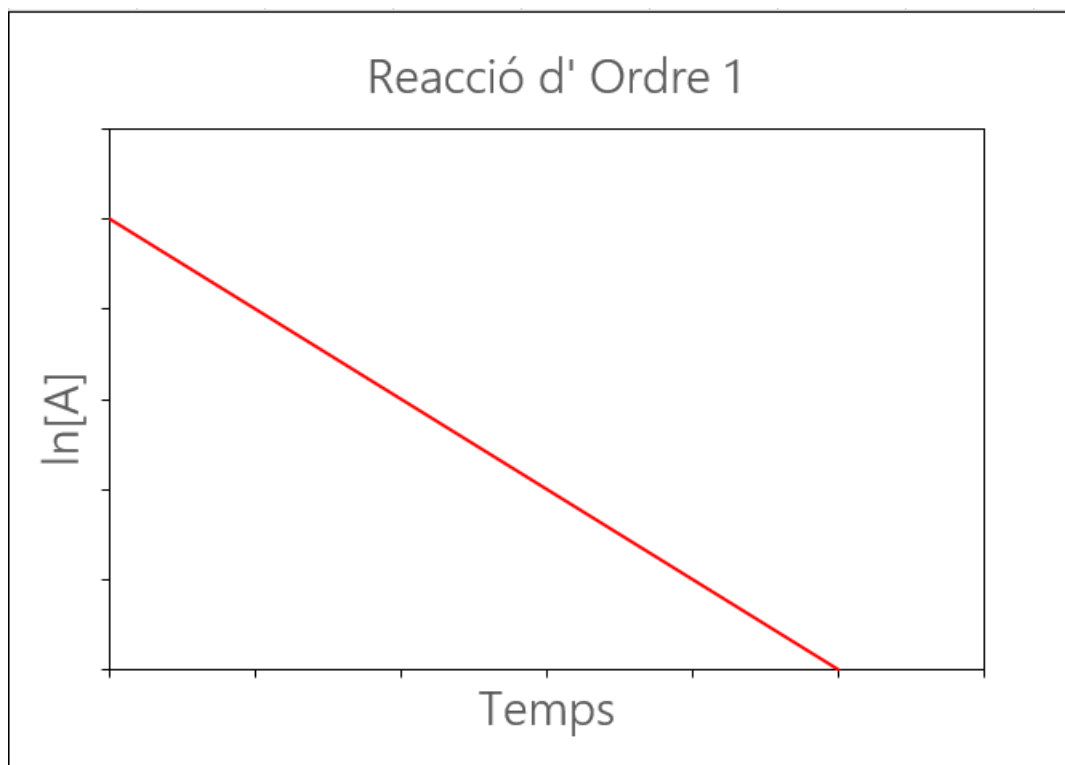


Figura 2. Representació del logaritme neperià de la concentració respecte del temps per a una reacció d'ordre 1

Reaccions d'ordre 2

Si només considerem al descomposició del reactiu A tenim que:

$$\text{Velocitat de reacció} = k \cdot [A]^2$$

d'on podem fer la integral:

$$\int_{[A]_0}^{[A]_t} \frac{d[A]}{[A]^2} = -k \int_0^t dt$$

que un cop resolta obtenim:

$$\frac{1}{[A]_t} = +k \cdot t + \frac{1}{[A]_0}$$

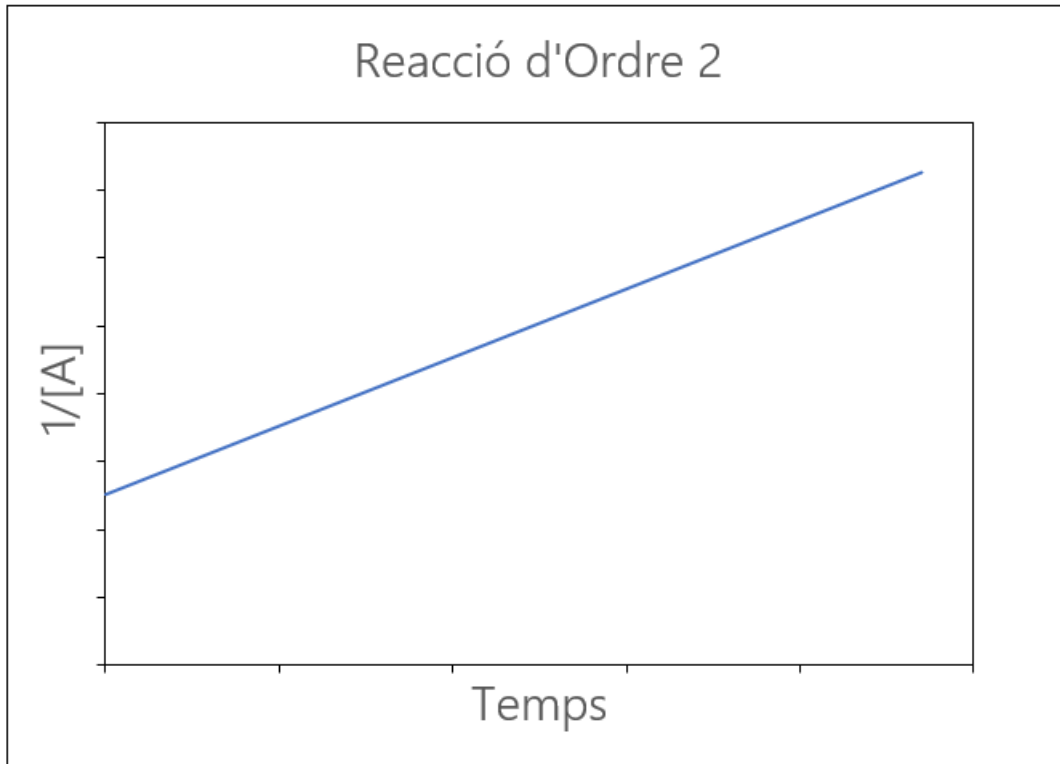


Figura 3. Representació de la inversa de la concentració respecte del temps per a una reacció d'ordre 2

▼ Resum

Resum per a una reacció hipotètica $aA \rightarrow \text{productes}$

Ordre	Equació de Velocitat	Equació Integrada de la velocitat	Regressió lineal	k	Vida mitjana
0	$v = k$	$[A]_t = -akt + [A]_0$	$[A]$ vs temps	$-\frac{1}{a}$ x pendent	$\frac{[A]_0}{2 \cdot a \cdot k}$
1	$v = k \cdot [A]$	$\ln[A]_t = -akt + \ln[A]_0$	$\ln[A]$ vs temps	$-\frac{1}{a}$ x pendent	$\frac{\ln 2}{a \cdot k}$
2	$v = k[A]^2$	$\frac{1}{[A]_t} = akt + \frac{1}{[A]_0}$	$1/[A]$ vs temps	$\frac{1}{a}$ x pendent	$\frac{1}{a \cdot k \cdot [A]_0}$

La propera cel·la conté "variables de control". Aquestes serveixen per a que no es borri automàticament els valors calculats en l'ajust de les dades (pendent, ordenada a l'origen i r^2) per a un determinat ordre de reacció quan solicites al programa que els calculi per a un altre ordre de reacció.

Només cal que l'executis al principi del notebook.

```
#Executar aquesta cel·la al principi per a resetejar els valors de p q i r
p=0
q=0
r=0
```

Crea una fulla de càlcul de Google i emplena-la seguint el model de 2 columnes que tens a continuació:

Concentració(mol/L) Temps(min)

Recorda que els títols de les columnes han d'estar escrits de la mateixa manera que al model

Selecciona la opció "Comparteix" i tria aquesta opció:

Tothom a Internet pot **cercar-ho i consultar-ho** ▾

Finalment, l'aplicatiu Google et proporcionarà un enllaç al fitxer amb les dades, similar al que hi ha a continuació. Copia la part del link que fa referència al fitxer (part marcada en vermell en el següent exemple):

<https://docs.google.com/spreadsheets/d/1oAZb9OlxSGKZotktevyErXRJIqmP8lwcKyjf6yUayJE/edit#gid=0>

i enganxa-la en la cel·la de codi que hi ha en aquest notebook, just a la cel·la següent, en la instrucció que es troba entre els senyals ##### .

Si no recordes com fer-ho pots revisar-ho al [Notebook Tutorial](#)

```
import pandas as pd
#####
uid = "1oAZb9OlxSGKZotktevyErXRJIqmP8lwcKyjf6yUayJE" #Enganxa aquí la part de l'enllaç corresponc
#####
url = f"https://docs.google.com/spreadsheets/d/{uid}/export?format=csv"
df = pd.read_csv(url)
df #Comprova que les dades que apareixen son les que has introduït.
```



```
if RO == 1:  
    y=np.log(df['Concentració(mol/L)'])  
    eixY= "Ln(Concentració)"  
    color='r'  
if RO == 2:  
    y=1/(df['Concentració(mol/L)'])  
    eixY= "1/Concentració"  
    color='b'  
Ajust=pd.DataFrame()  
Ajust['Temps(min)']=x  
Ajust[eixY]=y  
Ajust
```



	Concentració(mol/L)	Temps(min)
0	50	0
1	49	1
2	48	2
3	47	3
4	46	4
5	45	5
6	44	6
7	43	7
8	42	8
9	41	9
10	40	10
11	39	11
12	38	12
13	37	13
14	36	14
15	35	15
16	34	16
17	33	17
18	32	18
19	31	19
20	30	20
21	29	21
22	28	22
23	27	23
24	26	24
25	25	25
26	24	26
27	23	27
28	22	28
29	21	29
30	20	30
31	19	31
32	18	32

32	10	32
33	17	33
34	16	34
35	15	35
36	14	36

Aquest notebook és una mica diferent de la resta. Donat que no coneixes l'ordre de la reacció que has estat estudiant, és possible que el primer cop que executis les seves cel·les no escullis l'ordre correcte. En cas que sigui així no pateixis. Pots tornar enrere i repetir l'execució de les cel·les des d'aquest punt on escolliràs quin ordre de reacció vols provar.

Un cop arribis fins al càlcul del pendent, la ordenada a l'origen i r^2 , el notebook guardarà aquests valors i els podràs veure quan ho necessitis. Et recomanem que arribis fins al final del notebook almenys un cop amb cada ordre de reacció per a que puguis veure quin és l'ordre de reacció al que s'ajusten millor les teves dades.

▼ Selecció de l'ordre de reacció

Selecciona l'ordre de reacció que vulguis provar

Ordre_reaccio:

0

Segons l'ordre de reacció escollit, el programa provarà d'ajustar les dades introduïdes d'una de les 3 maneres següents:

$$\text{Ordre 0} \rightarrow [A]_t = -k \cdot t + [A]_0$$

El programa farà un ajust lineal de la concentració amb el temps

$$\text{Ordre 1} \rightarrow \ln[A]_t = -k \cdot t + \ln[A]_0$$

El programa farà un ajust lineal del logaritme de la concentració amb el temps

$$\text{Ordre 2} \rightarrow \frac{1}{[A]_t} = +k \cdot t + \frac{1}{[A]_0}$$

El programa farà un ajust lineal de la inversa de la concentració amb el temps

La propera cel·la realitzarà els càlculs necessaris per a realitzar l'ajust d'acord amb l'ordre que hagi sol·licitat i et mostrarà una taula amb els valors ja calculats.

```
import numpy as np
x=df['Temps(min)']
if RO == 0:
    y=df['Concentració(mol/L)']
    eixY= "Concentració(mol/L)"
    color='#FFA500'
```

	Temps(min)	Concentració(mol/L)
0	0	50
1	1	49
2	2	48
3	3	47
4	4	46
5	5	45
6	6	44
7	7	43
8	8	42
9	9	41
10	10	40
11	11	39
12	12	38
13	13	37
14	14	36
15	15	35
16	16	34
17	17	33
18	18	32
19	19	31
20	20	30
21	21	29
22	22	28

La propera cel·la generarà una taula que inclourà els valors del pendent, la ordenada a l'origen i r^2 calculats. Els valors corresponents als ordres de reacció per als que no hagi fet aquest càlcul apareixeran a la taula com a "No Calculat"

```

~ ~ ~
pip install scipy

[+] Requirement already satisfied: scipy in /usr/local/lib/python3.6/dist-packages (1.4.
Requirement already satisfied: numpy>=1.13.3 in /usr/local/lib/python3.6/dist-packag

~ ~ ~

from scipy import stats
slope, intercept, r_value, p_value, std_err = stats.linregress(x, y)
if R0 == 0:
    slope0, intercept0, r_value0, p_value0, std_err0 = stats.linregress(x, y)

```

```

p=p+1
if R0 == 1:
    slope1, intercept1, r_value1, p_value1, std_err1 = stats.linregress(x, y)
    q=q+1
if R0 == 2:
    slope2, intercept2, r_value2, p_value2, std_err2 = stats.linregress(x, y)
    r=r+1

reg=pd.DataFrame()
reg['Ordre de reacció']=("Ordre 0","Ordre 1","Ordre 2")
reg['Pendent']=("No calculat","No calculat","No calculat")
reg["Ordenada a l'origen"]=("No calculat","No calculat","No calculat")
reg["r2"]=("No calculat","No calculat","No calculat")

if p > 0:
    reg.loc[0,'Pendent']=slope0
    reg.loc[0,"Ordenada a l'origen"]=intercept0
    reg.loc[0,'r2']=r_value0**2
if q > 0:
    reg.loc[1,'Pendent']=slope1
    reg.loc[1,"Ordenada a l'origen"]=intercept1
    reg.loc[1,'r2']=r_value1**2
if r > 0:
    reg.loc[2,'Pendent']=slope2
    reg.loc[2,"Ordenada a l'origen"]=intercept2
    reg.loc[2,'r2']=r_value2**2
reg

```

↳	Ordre de reacció	Pendent	Ordenada a l'origen	r2
0	Ordre 0	-1	50	1
1	Ordre 1	No calculat	No calculat	No calculat
2	Ordre 2	No calculat	No calculat	No calculat

La propera cel·la representarà els valors calculats de **l'últim ordre de reacció que hagi sol·licitat**

Recorda que si ho desitges pots descarregar el gràfic fent click sobre el botó "Descarrega el gràfic"

```

import matplotlib.pyplot as plt
plt.figure()
plt.scatter(x, y, label="Representació de {}".format(eixY), c=color)
plt.xlabel("Temps (min)")
plt.ylabel(eixY)
plt.title("Representació de les dades considerant cinètica d'ordre {}".format(R0))
#plt.axis([-10, 100, -0.8, 0.2])
plt.grid(True)
plt.legend()
plt.savefig("Gràfic.png", bbox_inches='tight')
plt.show()

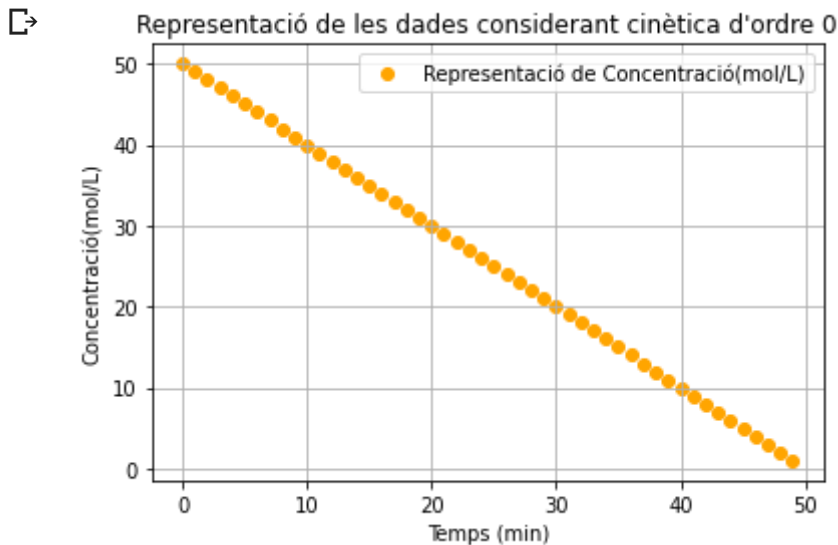
#@title
import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display

```

```

from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)

```



Descarrega el gràfic

La següent cel·la representarà l'ajust lineal realitzat de les dades de **l'últim ordre de reacció que hagi sol·licitat**. Recorda que si ho desitjes pots descarregar el gràfic fent click sobre el botó "Descarrega el gràfic"

```

import seaborn as sns
plt.figure()
sns.regplot(x,y,label=" {}={:.4f} + {:.4f}·t".format(eixY,intercept,slope),color=color)

plt.xlabel("Temps (min)")
plt.ylabel(eixY)
plt.title("Representació de les dades considerant cinètica d'ordre {}".format(RO))
#plt.axis([-10, 100, -0.8, 0.2])
plt.grid(True)
plt.legend(bbox_to_anchor=(1.05, 1), loc='upper left', borderaxespad=0.1)
plt.savefig("Gràfic.png", bbox_inches='tight')
plt.show()

```

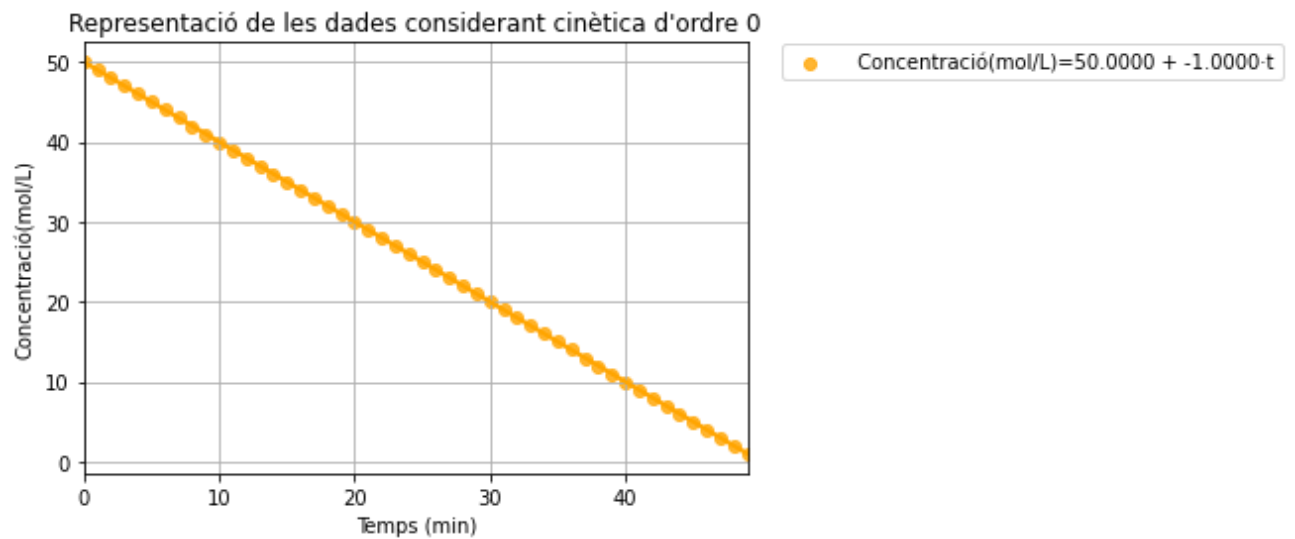
```

import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)

```

↳

```
/usr/local/lib/python3.6/dist-packages/statsmodels/tools/_testing.py:19: FutureWarni  
import pandas.util.testing as tm
```



Descarrega el gràfic

Diagrama de fases ternaris (Sistema Aigua - Àcid Acètic - Cloroform)

Context

En aquest notebook es treballarà amb la representació d'un diagrama de fases utilitzant les dades experimentals obtingudes per l'alumne al laboratori. Es treballarà, també, la regla de les fases de Gibbs:

$$L = C - F + 2.$$

On L és el nombre de graus de llibertat, C el nombre de components i F el nombre de fases del sistema

La **regla de les fases de Gibbs** és una relació que ens permet deduir **el nombre de graus de llibertat** de qualsevol sistema termodinàmic sigui homogeni o heterogeni. Els graus de llibertat són el **nombre de variables intensives** independents del sistema, és a dir el nombre de variables independents entre si que **no depenen de la grandària ni de la quantitat de materia**.

Segons aquesta regla en un sistema de 3 components poden existir un màxim de 4 graus de llibertat. En fixar la pressió i la temperatura d'un sistema, aquest queda determinat coneixent només dues variables intensives. És a dir, coneixent les fraccions molars (o màssiques) de 2 dels 3 components podem construir un diagrama representant els estats d'equilibri a pressió i temperatura constants.

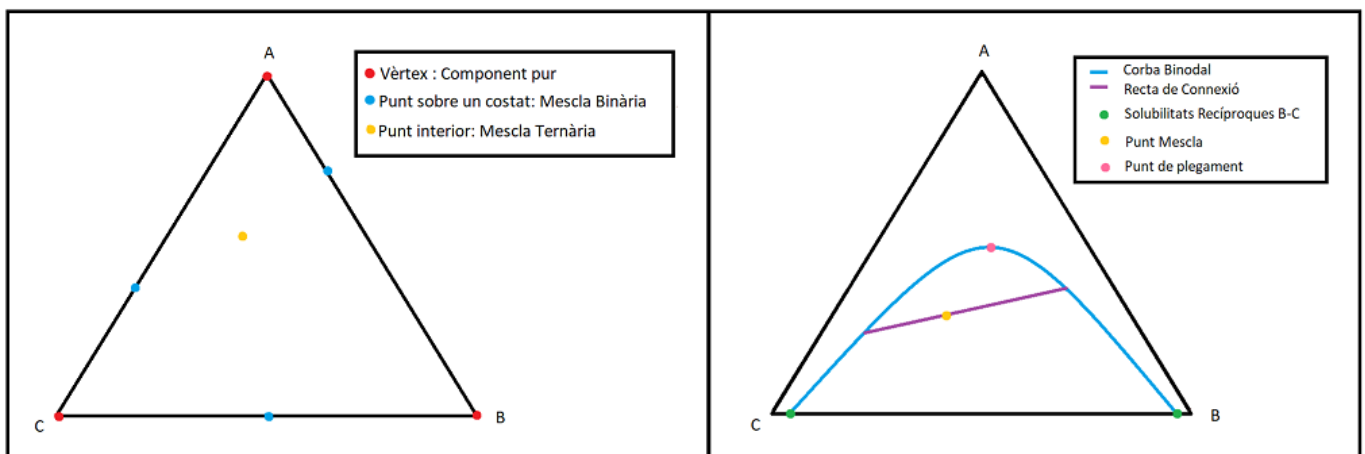


Figura 1. Descripció de diferents punts en un diagrama de fases ternaris

Donat que les zones on hi ha una fase o dues són contínues, per a construir el diagrama només s'han de trobar els límits que separen aquestes zones del diagrama que presenten 1 fase o dues.

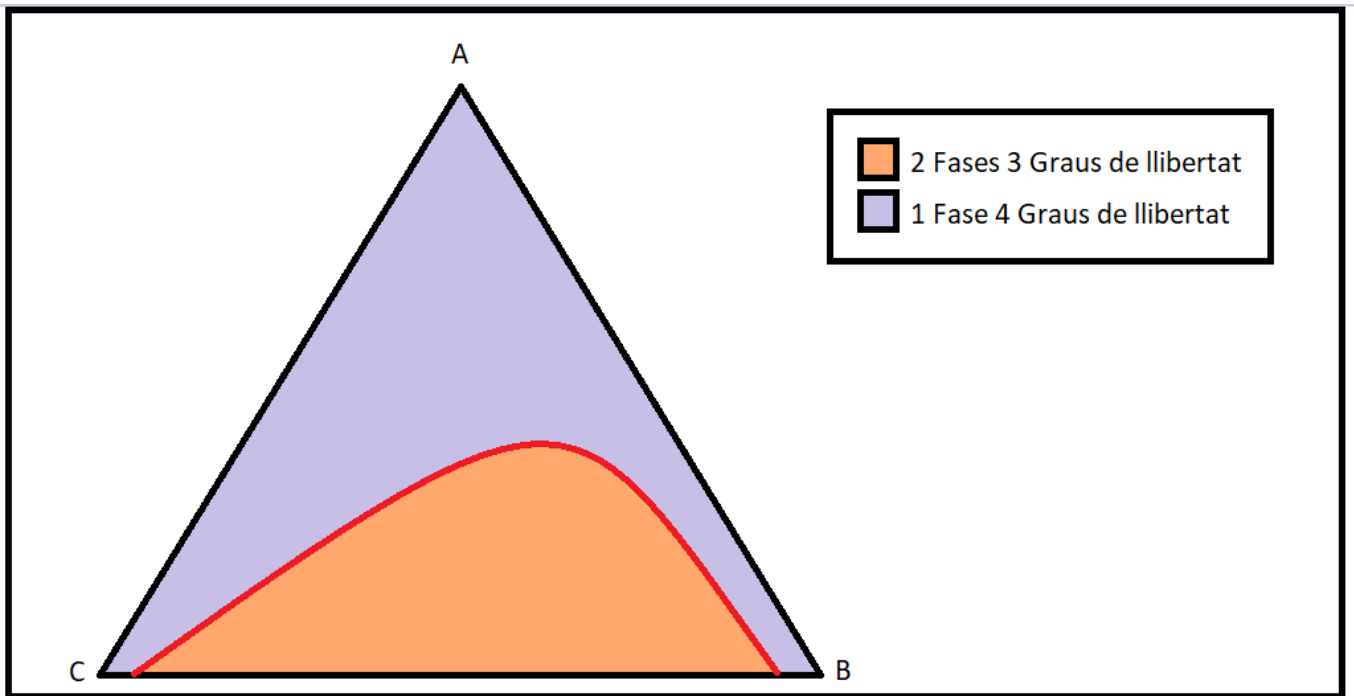


Figura 2. Il·lustració del nombre de fases i graus de llibertat en diverses zones d'un diagrama de fases ternaries

Objectius

- Entendre i treballar la regla de les fases de Gibbs.
- Saber expressar la composició en sistemes multicomponent
- Practicar la incorporació de fonts gràfiques en un informe de pràctiques o a la llibreta
- Caracteritzar un diagrama de fases ternari i identificar-hi zones homogènies i heterogènies
- Representar i interpretar la corba binodal com a equilibri entre el sistema homogeni i heterogeni.

▼ Introducció i tractament previ de les dades

En aquesta secció del notebook introduiràs totes les dades necessàries i es faran els càlculs adients per a la posterior representació de la corba binodal.

Algunes són dades experimentals que has mesurat al laboratori i d'altres les has de buscar al handbook.

```
pip install python-ternary
```



Collecting python-ternary

Downloading <https://files.pythonhosted.org/packages/a7/df/9850fc9b3e8893e11725a787>

| ██ | 6.5MB 2.5MB/s

Requirement already satisfied: matplotlib>=2 in /usr/local/lib/python3.6/dist-packag

Requirement already satisfied: cycler>=0.10 in /usr/local/lib/python3.6/dist-package

Requirement already satisfied: numpy>=1.11 in /usr/local/lib/python3.6/dist-packages

Requirement already satisfied: kiwisolver>=1.0.1 in /usr/local/lib/python3.6/dist-pa

Requirement already satisfied: python-dateutil>=2.1 in /usr/local/lib/python3.6/dist

Requirement already satisfied: pyparsing!=2.0.4,!=2.1.2,!=2.1.6,>=2.0.1 in /usr/loca

Requirement already satisfied: six in /usr/local/lib/python3.6/dist-packages (from c

Building wheels for collected packages: python-ternary

Building wheel for python-ternary (setup.py) ... done

Created wheel for python-ternary: filename=python_ternary-1.0.7-cp36-none-any.whl

En aquesta secció determinaràs la composició de cada un dels sistemes ternaris preparats en els tubs d'assaig. Expressaràs la composició del sistema emprant el percentatge en massa dels seus components.

En primer lloc has de construir un full de càlcul que tingui tres columnes amb el nombre de mil·lilitres afegits d'aigua, àcid acètic i cloroform. Les columnes del full han de portar els títols "H2O (mL), Acètic (mL) i Cloroform (mL)", respectivament.

H2O (mL)	Acètic (mL)	Cloroform (mL)
----------	-------------	----------------

Recorda que els títols de les columnes han d'estar escrits de la mateixa manera que al model

Selecciona la opció "Comparteix" i tria aquesta opció:

Tothom a Internet pot **cercar-ho i consultar-ho** ▼

Finalment, l'aplicatiu Google et proporcionarà un enllaç al fitxer amb les dades, similar al que hi ha a continuació. Copia la part del link que fa referència al fitxer (part marcada en vermell en el següent exemple):

<https://docs.google.com/spreadsheets/d/1oAZb9OlxSGKZotktevyErXRJlqmP8lwckKyif6yUayJE/edit#gid=0>

i enganxa-la en la cel·la de codi que hi ha en aquest notebook, just a la cel·la següent, en la instrucció que es troba entre els senyals ##### .

Si no recordes com fer-ho pots revisar-ho al [Notebook Tutorial](#)

```
import pandas as pd
#####
uid = "1qWxmDUOjL6R14aIP4mFIFuER7xhwYIgnxNwOKs-zQMc" #Enganxa aquí la part de l'enllaç
#####
url = f"https://docs.google.com/spreadsheets/d/{uid}/export?format=csv"
df = pd.read_csv(url)
df.head(n=10) #Comprova que les dades son les que has introduit.
```



	H2O (mL)	Acètic (mL)	Cloroform (mL)
0	0.5	2.75	4.5
1	1.0	3.65	4.0
2	1.5	4.30	3.5
3	2.0	4.90	3.0
4	2.5	5.25	2.5
5	3.0	5.50	2.0
6	3.5	5.55	1.5
7	4.0	5.35	1.0

La següent cel·la definirà tres funcions que seran emprades per a calcular la massa de cadascun dels components en cadascuna de les mescles ternàries.

Recorda que has d'executar-la com qualsevol altre

```
#defineixo les funcions
def mAc(PMAc,mLAc,MAc):
    return mLAc*MAc*PMAc/1000
    """ Càlcul de la massa d'acètic en una dissolució de concentració coneguda
    PMAc - massa molecular acètic (g/mol)
    mLAc - volum de dissolució (mL)
    MAc - concentració de la dissolució (mol/L) """

def mclor(dclor,mLclor):
    return dclor* mLclor
    """ Càlcul de la massa de cloroform en una dissolució de concentració coneguda
    dclor - densitat del cloroform (g/mL)
    mLclor - volum de dissolució (mL) """

def mH2O(gAc,dAc,mLAc,mLH2O):
    return (mLAc*dAc-gAc)+mLH2O
    """ Càlcul de la massa d'aigua en una dissolució d'acètic de concentració coneguda
    gAc - massa d'acètic (g/mol)
    mLAc - volum d'acètic en la dissolució (mL)
    dAc - densitat de la dissolució d'acètic (g/mL)
    mLH2O - volum d'aigua en la dissolució (mL) """
```

A continuació has d'introduir un seguit de valors de referència o constants com a valors d'entrada per realitzar els càlculs de composició, els valors que has d'introduir son:

- Densitat del Cloroform (g/mL)
- Massa molecular de l'Àcid Acètic (g/Mol)
- Concentració de l'Àcid Acètic (Mol/L)
- Densitat de l'Àcid Acètic (g/mL)

S'utilitzaran per a **calcular els grams i els percentatges** de cadascun dels components a partir dels mL introduïts a la fulla de càlcul.

Pots trobar tots aquests valors al laboratori.

Valors de prova :

- Densitat del Cloroform = 1.492 (g/mL)
- Massa molecular de l'Àcid Acètic = 60 (g/Mol)
- Concentració de l'Àcid Acètic = 17.3 (Mol/L)
- Densitat de l'Àcid Acètic = 1.049 (g/mL)

```
#Cloroform
print("Introdueix la densitat del Cloroform en g/mL:")
dclor=float(input())
#Acètic
print("Introdueix la massa molecular de l'Àcid Acètic en g/Mol ")
PMac=float(input())
print("Introdueix la concentració de l'Àcid Acètic en Mol/L ")
MAc=float(input())
print("Introdueix la densitat de l'Àcid Acètic en g/mL")
dAc=float(input())
```

```
↳ Introdueix la densitat del Cloroform en g/mL:
1.492
Introdueix la massa molecular de l'Àcid Acètic en g/Mol
60
Introdueix la concentració de l'Àcid Acètic en Mol/L
17.3
Introdueix la densitat de l'Àcid Acètic en g/mL
1.049
```

▼ Autoavaluació

Abans de continuar comprova si saps calcular els grams de cada component i la composició de la mescla expressada en percentatge en massa de cada component.

Quan executis la següent cel·la, el programa et proporcionarà la composició en mL d'una mescla ternària hipotètica. Tu has de calcular els grams corresponents de cada substància i els percentatges i introduir-los amb les xifres significatives.

Recorda que un cop hakis introduït la teva resposta pots comprovar si és correcte clicant sobre el botó "comprova"

MOSTRAR CÓDIGO

```
↳ Donats els següents valors de mL de cada component, calcula els grams i el percentat
Àcid Acètic = 6.9 mL
Aigua = 4.6 mL
Cloroform = 5.4 mL
```

Introdueix els valors calculats amb 2 xifres decimals

Grams_Acetic: 15

Grams_Aigua: 0.00

Grams_Cloroform: 0.00

Percentatge_Acetic: 0.00

Percentatge_Aigua: 0.00

Percentatge_Cloroform: 0.00

☞ Comprova!

Ara que has comprovat que saps determinar la composició de cadascun dels components en un sistema ternari, en la següent secció de codi es farà un càlcul dels grams i dels percentatges de cadascun dels components. Tot seguit veuràs una taula amb els valors de mL, grams i percentatges de cada substància.

```
print("Quantes xifres decimals creus raonables per proporcionar els resultats?")
d=int(input())

pd.set_option('precision', d)
df['Acètic (g)']= mAc(PMAc,df['Acètic (mL)'],MAc)
df['H2O (g)'] = mH2O(df['Acètic (g)'],dAc,df['Acètic (mL)'],df['H2O (mL)'])
df['Cloroform (g)']= mclor(dclor,df['Cloroform (mL)'])
cols = [ 'Acètic (g)', 'H2O (g)', 'Cloroform (g)']

for col in cols:
    df[col[0]] = df[col] * 100 / df[cols].sum(axis=1)
percent = df[['A','H','C']]
df
```

☞

Quantes xifres decimals creus raonables per proporcionar els resultats?

2

H ₂ O (mL)	Acètic (mL)	Cloroform (mL)	Acètic (g)	H ₂ O (g)	Cloroform (g)	A	H	C
--------------------------	----------------	-------------------	---------------	-------------------------	------------------	---	---	---

▼ Corba binodal

En un sistema de tres components no completament miscibles, l'exemple més senzill és el cas en el que només una parella de components és parcialment miscible.

En fer un diagrama ternari d'un sistema com aquest, en que l'acid acètic és completament miscible tant en cloroform com en aigua, apareix **una corba binodal**. En canvi, en un sistema de 3 components on tots fossin parcialment miscibles entre si, n'hi hauria dues.

La corba separa les zones del diagrama en que hi ha una sola fase, on el sistema és **homogeni**, de les que n'hi ha dues, en les que el sistema és **heterogeni** i talla el costat que uneix els dos components parcialment miscibles pels punts corresponents a les solubilitats recíproques d'aquests. Aquesta corba binodal indicant els punts d'equilibri on el sistema passa de ser homogeni a ser heterogeni. En la *Figura 3* Pots veure aquesta separació.

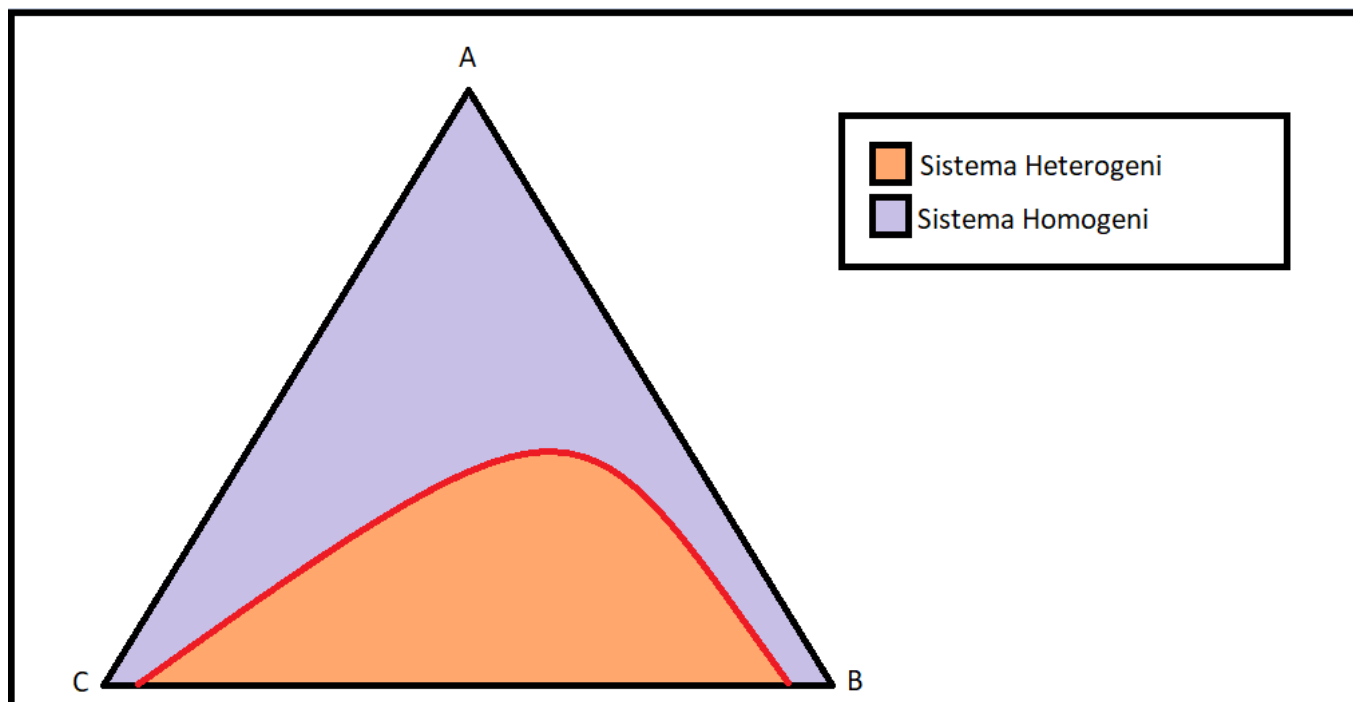


Figura 3. Il·lustració indicant les zones del diagrama on el sistema és homogeni i les zones on és heterogeni

Tot seguit has d'introduir les solubilitats del cloroform i l'aigua mitjançant dos valors d'entrada(input)

Valors de prova:

- Solubilitat del Cloroform en Aigua = 0.82 (%)
- Solubilitat de l'Aigua en Cloroform = 0.2 (%)

```
print("Introdueix la solubilitat del Cloroform en Aigua:")
SolCH=float(input())
print("Introdueix la solubilitat de l'Aigua en Cloroform")
SolHC=float(input())
SolR=pd.DataFrame( )
SolR['H']=(SolHC,100-SolCH)
SolR['A']=(0,0)
SolR['C']=(100-SolHC,SolCH)
percentAj=percent.append(SolR,ignore_index=True)
SolR
```

```
↳ Introdueix la solubilitat del Cloroform en Aigua:
0.82
Introdueix la solubilitat de l'Aigua en Cloroform
0.2
```

	H	A	C
0	0.20	0	99.80
1	99.18	0	0.82

▼ Representació de la corba binodal

Tot seguit es representaran en un gràfic els punts corresponents als valors que has trobat experimentalment (**en vermell**) i a les solubilitats dels components parcialment miscibles (**en verd**)

Recorda que pots descarregar-te el gràfic clicant sobre el botó de sota.

```
import ternary
fig, tax = ternary.figure(scale=100)
fig.set_size_inches(10, 9) # Mida gràfic
tax.scatter(percent[['H','A','C']].values,c='r') #Selecció de dades
tax.scatter(SolR[['H','A','C']].values,c='green')
#tax.plot(percent[['H','A','C']].values,c='r',)

tax.gridlines(multiple=1) # % del gràfic que ocupa cada triangle
tax.get_axes().axis('off')
#Etiquetes als costats
fontsize = 14
offset = 0.08 #distància dels noms respecte els costats del triangle
tax.bottom_axis_label("Aigua %", fontsize=fontsize, offset=-offset)
tax.right_axis_label("Àcid Acètic %", fontsize=fontsize, offset=offset)
tax.left_axis_label("Cloroform %", fontsize=fontsize, offset=offset)
tax.set_title("Diagrama de fases", fontsize=20)
# Decoració.
tax.boundary(linewidth=1)
tax.gridlines(multiple=10, color="gray")
tax.ticks(axis='lbr', linewidth=1, multiple=10)
tax.get_axes().axis('off')

tax.show()
```

```
#@title
```

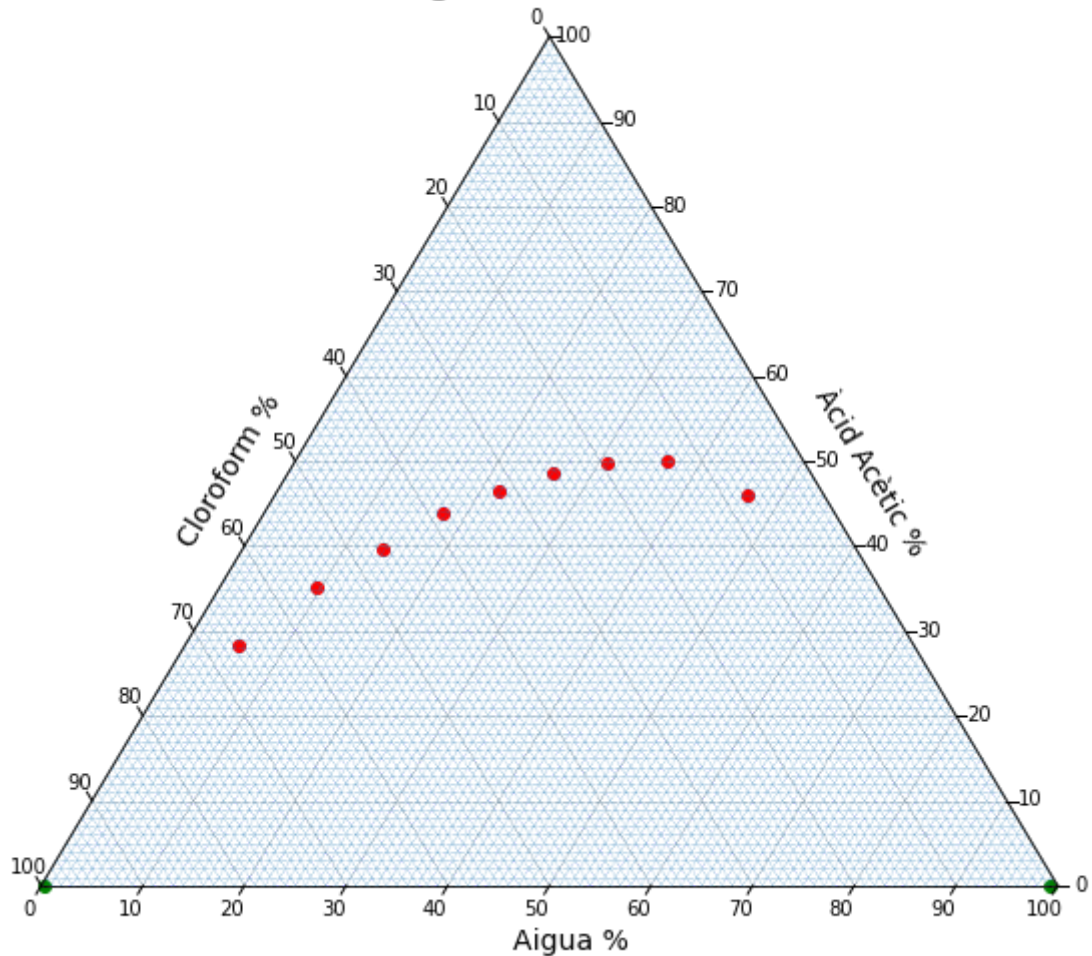
```

import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    tax.savefig("Gràfic.png")
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)

```



Diagrama de fases



Descarrega el gràfic

Per a obtenir la teva corba binodal, pots descarregar el gràfic que has obtingut en la cel·la anterior i traçar-hi a mà la corba que passaria per tots els punts que hi ha representats.

▼ Recta de Connexió

En les zones del diagrama en que el sistema és homogeni els punts indiquen la composició de cadascun dels components d'aquesta mescla homogènia. (Figura 4)

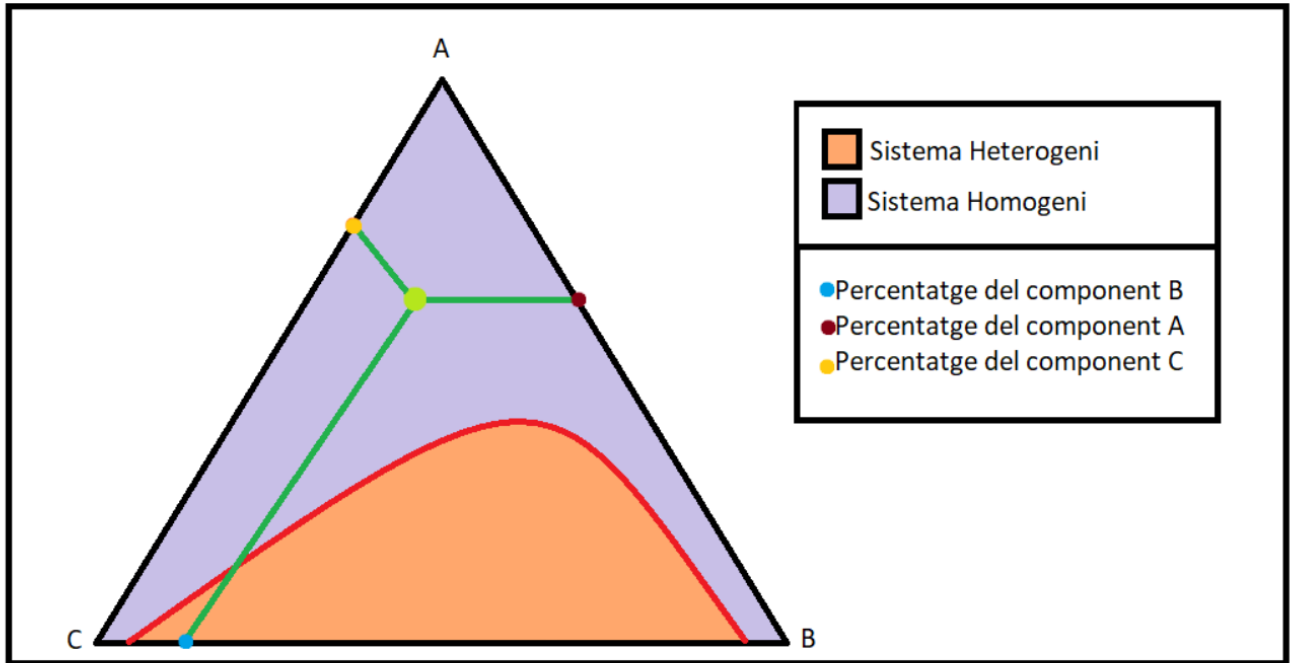


Figura 4. Il·lustració indicant com trobar la composició en una mescla homogènia

En canvi, en un sistema heterogeni, tenim dues fases en equilibri. La composició d'aquestes dues fases en equilibri es pot trobar mitjançant la recta de connexió que passa pel punt que representa la composició del sistema. (Figura 5)

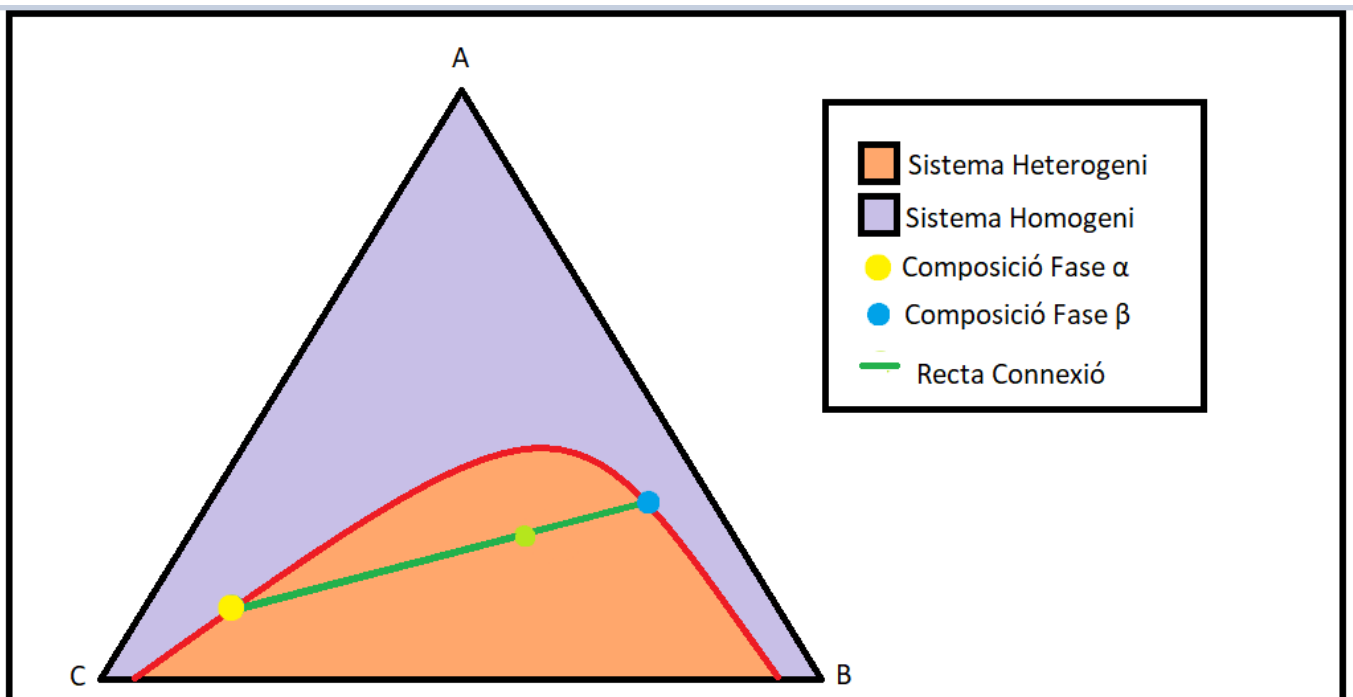


Figura 5. Il·lustració recta de connexió.

i es pot calcular la composició de cadascuna d'aquestes fases (*Figura 6*)

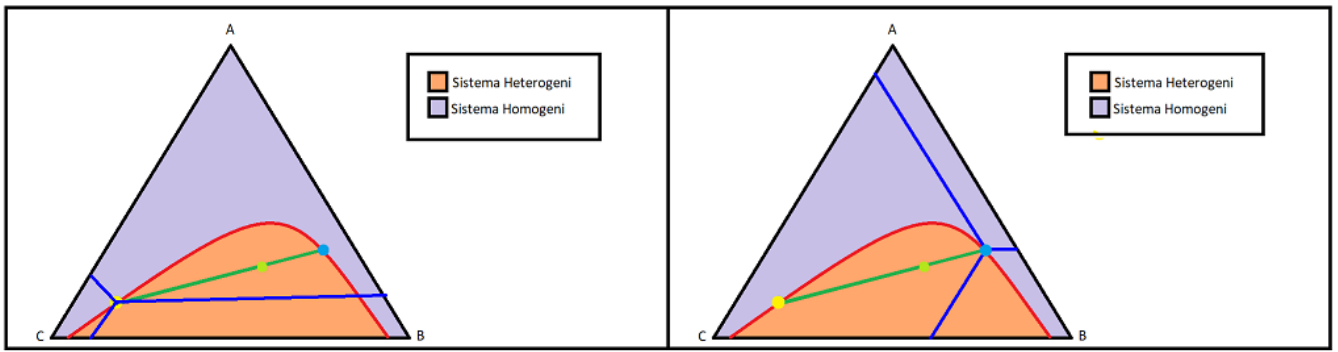


Figura 6. Il·lustració càlcul de composició de cadascuna de les fases.

En aquest sistema ternari, les rectes de connexió no són paral·leles entre si. Això és perquè tot i que l'àcid acètic és totalment miscible en l'aigua i el cloroform, no es reparteix de igual manera en els dos components.

Per a determinar una recta de connexió s'analitza la composició de cadascuna de les fases en una mescla ternària. En aquest cas, realitzant la valoració de l'àcid acètic en tindràs prou ja que els extrems d'aquesta recta estan situats sobre la línia binodal.

En les properes cel·les, hauràs d'introduir el percentatge en massa de cadascun dels components per a dibuixar una part de la recta de connexió en el gràfic.

En primer lloc introduiràs els valors corresponents als percentatges de la mescla que t'ha demanat el professor que preparis (es correspondria amb el punt de color **verd clar** de la *Figura 6*)

Valors de prova:

- Percentatge Àcid Acètic = 30 (%)
- Percentatge Aigua = 30 (%)
- Percentatge Cloroform = 40 (%)

```
print("Introdueix el percentatge en massa d'acid acètic")
H1=float(input())
print("Introdueix el percentatge en massa d'aigua")
A1=float(input())
print("Introdueix el percentatge en massa de cloroform")
C1=float(input())
```

```
☞ Introdueix el percentatge en massa d'acid acètic
30
Introdueix el percentatge en massa d'aigua
30
Introdueix el percentatge en massa de cloroform
40
```


Ara has d'introduir els valors corresponents als percentatges en massa de cadascuna de les fases.

En primer lloc, introdueix el percentatge de cada component en la fase aquosa. (Es correspondria amb el punt de color **blau clar** de la *Figura 6*)

Valors de prova:

- Percentatge Àcid Acètic ($Fase_{aq}$) = 43 (%)
- Percentatge Aigua ($Fase_{aq}$) = 50(%)
- Percentatge Cloroform ($Fase_{aq}$) = 7 (%)

```
print("Introdueix el percentatge en massa d'acid acètic en la fase aquosa")
A2=float(input())
print("Introdueix el percentatge en massa d'aigua en la fase aquosa")
H2=float(input())
print("Introdueix el percentatge en massa de cloroform en la fase aquosa")
C2=float(input())
```

```
↳ Introdueix el percentatge en massa d'acid acètic en la fase aquosa
43
Introdueix el percentatge en massa d'aigua en la fase aquosa
50
Introdueix el percentatge en massa de cloroform en la fase aquosa
7
```

Ara, introdueix el percentatge de cada component en la fase orgànica. (Es correspondria amb el punt de color **groc** de la *Figura 6*)

Valors de prova:

- Percentatge Àcid Acètic ($Fase_{org}$) = 12 (%)
- Percentatge Aigua ($Fase_{org}$) = 3 (%)
- Percentatge Cloroform ($Fase_{org}$) = 85 (%)

```
print("Introdueix el percentatge en massa d'acid acètic en la fase orgànica")
A3=float(input())
print("Introdueix el percentatge en massa d'aigua en la fase orgànica")
H3=float(input())
print("Introdueix el percentatge en massa de cloroform en la fase orgànica")
C3=float(input())
```

```
↳ Introdueix el percentatge en massa d'acid acètic en la fase orgànica
12
Introdueix el percentatge en massa d'aigua en la fase orgànica
3
Introdueix el percentatge en massa de cloroform en la fase orgànica
85
```

```
MesclaExp=pd.DataFrame()
MesclaExp['A']=(A1,A2,A3)
```

```
MesclaExp['H']=(H1,H2,H3)
MesclaExp['C']=(C1,C2,C3)
MesclaExp
```

	A	H	C
0	30.0	30.0	40.0
1	43.0	50.0	7.0
2	12.0	3.0	85.0

La propera cel·la representarà en el diagrama de fases ternari els punts que has introduït i la recta de connexió.

```
import ternary
fig, tax = ternary.figure(scale=100)
fig.set_size_inches(10, 9) # Mida gràfic
tax.scatter(percentAj[['H','A','C']].values,c='r') #Selecció de dades
tax.scatter(MesclaExp[['H','A','C']].values,c='#00FF00')

tax.gridlines(multiple=1) # % del gràfic que ocupa cada triangle
tax.get_axes().axis('off')
#Etiquetes als costats
fontsize = 14
offset = 0.08 #distància dels noms respecte els costats del triangle
tax.bottom_axis_label("Aigua %", fontsize=fontsize, offset=-offset)
tax.right_axis_label("Àcid Acètic %", fontsize=fontsize, offset=offset)
tax.left_axis_label("Cloroform %", fontsize=fontsize, offset=offset)
tax.set_title("Diagrama de fases", fontsize=20)
# Decoració.
tax.boundary(linewidth=1)
tax.gridlines(multiple=10, color="gray")
tax.ticks(axis='lbr', linewidth=1, multiple=10)
tax.get_axes().axis('off')
#Dibuixar Línies

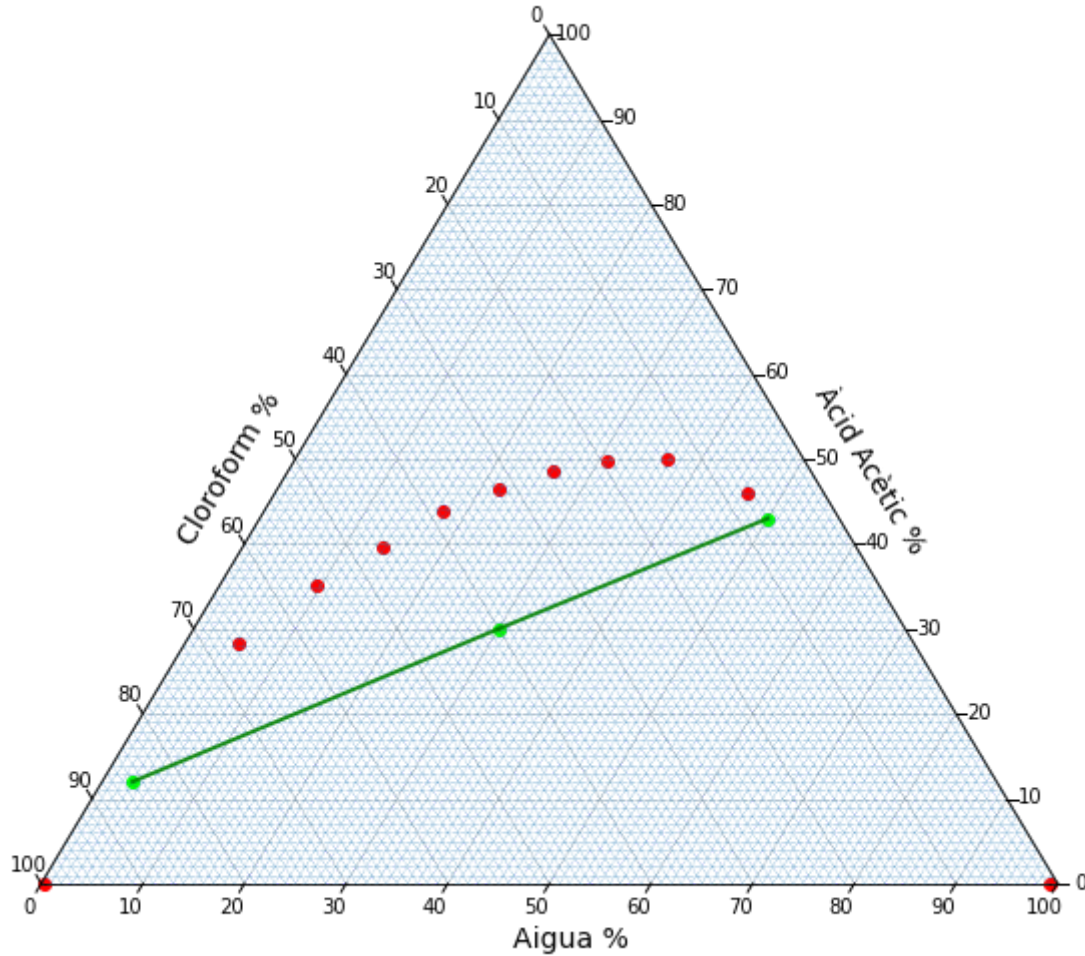
p1, p2 = (MesclaExp['H'][0],MesclaExp['A'][0],MesclaExp['C'][0]),(MesclaExp['H'][1],MesclaExp['A']
tax.line(p1, p2, linewidth=2, color='green', alpha=0.9, linestyle="-")
p3, p4 = (MesclaExp['H'][0],MesclaExp['A'][0],MesclaExp['C'][0]),(MesclaExp['H'][2],MesclaExp['A']
tax.line(p3, p4, linewidth=2, color='green', alpha=0.9, linestyle="-")

tax.show()

#@title
import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    tax.savefig("Gràfic.png")
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
display(button, output)
```



Diagrama de fases



Descarrega el gràfic

Per a completar la recta de connexió, descarrega el gràfic i allarga la part de recta que ja hi ha dibuixada utilitzant un regle.

▼ Autoavaluació

Ara que ja has realitzat tot el tractament de dades i has après a treballar amb un diagrama de fases ternari, et proposem un breu qüestionari per a que puguis comprovar que si has assolit els objectius d'aprenentatge d'aquesta pràctica.

Quan acabis de respondre pots comprovar si ho has fet bé fent click sobre el botó "Comprova!" que apareixerà un cop executis la cel·la.

Si considerem una mescla amb un 15% d'aigua, un 75% d'àcid acètic i un 10% de cloroform:

Pregunta 1: Quantes fases presentarà aquesta mescla?

Resposta1: Una fase

Pregunta 2: Quants graus de llibertat hi ha a la zona on està representat del diagrama?

Resposta2: No contestat

Pregunta 3: Si fixem la temperatura i la pressió, amb quantes variables més en tenim prou per a poder determinar la composició de la mescla?

Resposta3: No contestat

Si considerem una mescla que contingui un 40% d'aigua, un 10% d'àcid acètic i un 50% de cloroform:

Pregunta 4: Quantes fases presentarà aquesta mescla?

Resposta4: No contestat

Pregunta 5: Quants graus de llibertat hi ha a la zona on està representat del diagrama?

Resposta5: No contestat

Pregunta 6: Si fixem la temperatura i la pressió, amb quantes variables més en tenim prou per a poder determinar la composició de la mescla?

Resposta6: No contestat



Comprova!

Diagrama de Fases Ternàries: Sistema Aigua - n-Butanol - Acetat d'etil

Context

En aquest notebook es treballarà amb la representació d'un diagrama de fases utilitzant les dades experimentals obtingudes per l'alumne al laboratori. Es treballarà, també, la regla de les fases de Gibbs:

$$L = C - F + 2.$$

On L és el nombre de graus de llibertat, C el nombre de components i F el nombre de fases del sistema

La **regla de les fases de Gibbs** és una regla que ens permet deduir **el nombre de graus de llibertat** de qualsevol sistema termodinàmic sigui homogeni o heterogeni. Els graus de llibertat són el **nombre de variables intensives** independents del sistema, és a dir el nombre de variables independents entre si que **no depenen del tamany ni de la quantitat de matèria**.

Segons aquesta regla en un sistema de 3 components poden existir un màxim de 4 graus de llibertat. En fixar la pressió i la temperatura d'un sistema, aquest queda determinat coneixent només dues variables intensives. És a dir, coneixent les fraccions molars (o màssiques) de 2 dels 3 components podem construir un diagrama representant els estats d'equilibri a pressió i temperatura constants.

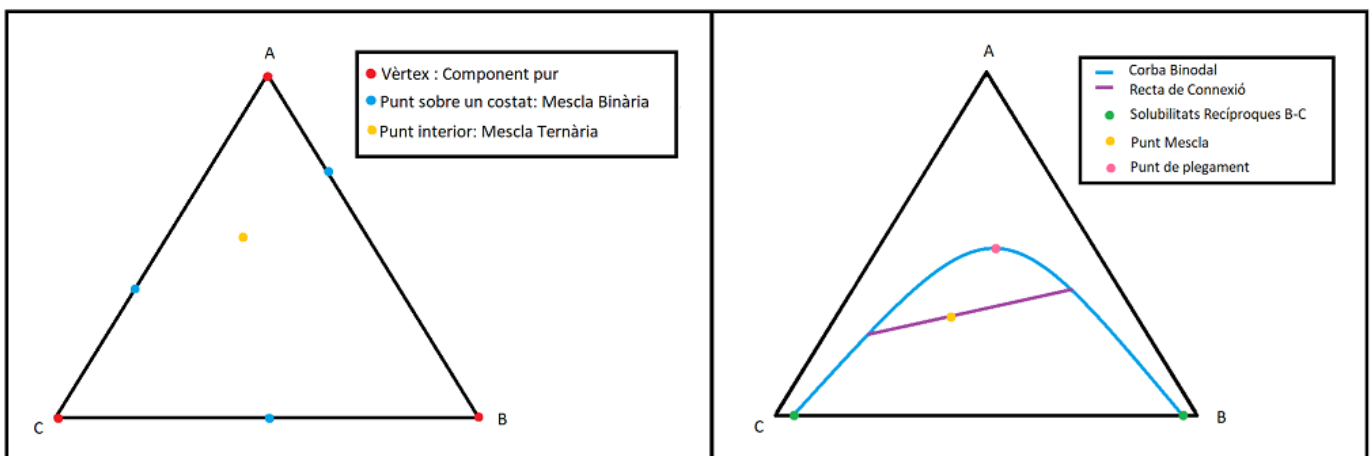


Figura 1: Descripció de diferents punts en un diagrama de fases ternàries

Donat que les zones on hi ha una fase o dues són contínues, per a construir el diagrama només s'han de trobar els límits que separen aquestes zones del diagrama que presenten 1 fase o dues.

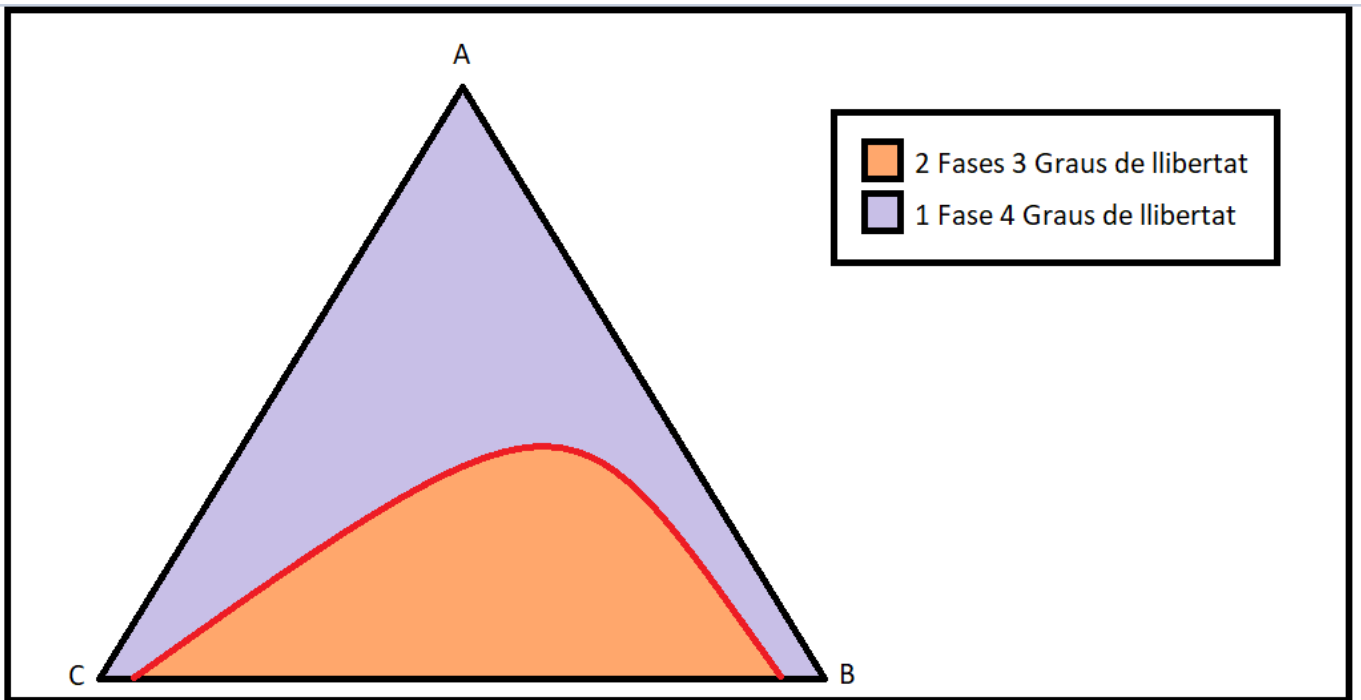


Figura 2: Il·lustració del nombre de fases i graus de llibertat en diverses zones d'un diagrama de fases ternàries

Objectius

- Entendre i treballar la regla de les fases de Gibbs.
- Practicar el càlcul de percentatges de diferents components
- Saber expressar la composició en sistemes multicomponent
- Practicar la incorporació de fonts gràfiques en un informe de pràctiques o a la llibreta
- Caracteritzar un diagrama de fases ternari i identificar-hi zones homogènies i heterogènies
- Representar i interpretar la corba binodal com a equilibri entre el sistema homogeni i heterogeni.

▼ Introducció i tractament previ de les dades

En aquesta secció del notebook s'hi introduiran totes les dades necessàries per a la posterior representació de la corba binodal.

Algunes són dades experimentals trobades per l'alumne al laboratori, d'altres s'han de buscar els valors al handbook.

```
pip install python-ternary
```



	H2O (mL)	Acetat d'Etil (mL)	Butanol (mL)
0	0.5	4.5	1.50
1	1.0	4.0	3.30
2	1.5	3.5	5.20
3	2.0	3.0	7.50
4	2.5	2.5	10.10
5	3.0	2.0	13.10
6	3.5	1.5	16.45
7	4.0	1.0	20.05

La següent cel·la definirà tres funcions que seran emprades per a calcular la massa de cadascun dels components en cadascuna de les mesclures ternàries.

Recorda que has d'executar-la com qualsevol altre

```
#defineixo les funcions
def mAc(PMAc,mLAc,MAc):
    return mLAc*MAc*PMAc/1000
    """ Càlcul de la massa d'acetat d'etil en una dissolució de concentració coneguda
    PMAc - massa molecular acetat d'etil (g/mol)
    mLAc - volum de dissolució (mL)
    MAc - concentració de la dissolució (mol/L) """

def mbut(dbut,mLbut):
    return dbut* mLbut
    """ Càlcul de la massa de n-Butanol en una dissolució de concentració coneguda
    dbut - densitat del Butanol (g/mL)
    mLbut - volum de dissolució (mL) """

def mH2O(gAc,dAc,mLAc,mLH2O):
    return (mLAc*dAc-gAc)+mLH2O
    """ Càlcul de la massa d'aigua en una dissolució d'acetat d'etil de concentració coneguda
    gAc - massa d'acetat d'etil (g/mol)
    mLAc - volum d'acetat d'etil en la dissolució (mL)
    dAc - densitat de la dissolució d'acetat d'etil (g/mL)
    mLH2O - volum d'aigua en la dissolució (mL) """
```

A continuació has d'introduir un seguit de valors de referència o constants com a valors d'entrada per realitzar els càlculs de composició, els valors que has d'introduir són:

- Densitat Butanol (g/mL)
- Massa molecular Acetat d'etil (g/Mol)
- Concentració Acetat d'etil (Mol/L)
- Densitat Acetat d'etil (g/L)

S'utilitzaran per a **calcular els grams i els percentatges** de cadascun dels components a partir dels mL introduïts a la fulla de càlcul.

Pots trobar tots aquests valors al laboratori.

Valors de prova:

- Densitat Butanol = 0.810 (g/mL)
- Massa molecular Acetat d'etil= 88 (g/Mol)
- Concentració Acetat d'etil = 10.22 (Mol/L)
- Densitat Acetat d'etil = 0.9 (g/mL)

```
#Butanol
print("Introduir la densitat del Butanol en g/mL:")
dbut=float(input())
#Acetat d'etil
print("Introduir la massa molecular de l'Acetat d'etil en g/mol ")
PMac=float(input())
print("Introduir la concentració de l'Acetat d'etil en Mol/L ")
MAc=float(input())
print("Introduir la densitat de l'Acetat d'etil en g/mL")
dAc=float(input())
```

```
↳ Introduir la densitat del Butanol en g/mL:
0.810
Introduir la massa molecular de l'Acetat d'etil en g/mol
88
Introduir la concentració de l'Acetat d'etil en Mol/L
10.22
Introduir la densitat de l'Acetat d'etil en g/mL
0.9
```

▼ Autoavaluació

Abans de continuar comprova si saps calcular els grams de cada component i la composició de la mescla expressada en percentatge en massa de cada component.

Quan executis la següent cel·la, el programa et proporcionarà la composició en mL d'una mescla ternària hipotètica. Tu has de calcular els grams corresponents de cada substància i els percentatges i introduir-los amb les xifres significatives.

Recorda que un cop hagis introduït la teva resposta pots comprovar si és correcte clicant sobre el botó "comprova"

MOSTRAR CÓDIGO

```
↳ Donats els següents valors de mL de cada component, calcula els grams i el percentatge
Acetat d'etil = 6.0 mL
Aigua = 2.4 mL
Butanol = 1.2 mL
```

Introdueix els valors calculats amb 2 xifres decimals

Grams_Acetats: 9.22

Grams_Aigua: 0.65

Grams_Butanol: 2.268

Percentatge_Acetats: 75.97

Percentatge_Aigua: 10

Percentatge_Butanol: 20



Comprova!

Ara que has comprovat que saps determinar la composició de cadascun dels components en un sistema ternari, en la següent secció de codi es farà un càlcul dels grams i dels percentatges de cadascun dels components. Tot seguit veuràs una taula amb els valors de mL, grams i percentatges de cada substància.

```
print("Quantes xifres decimals creus raonables per proporcionar els resultats?")
d=int(input())

pd.set_option('precision', d)
df["Acetat d'Etil (g)"]= mAc(PMAc,df["Acetat d'Etil (mL)"],MAc)
df['H2O (g)'] = mH2O(df["Acetat d'Etil (g)"],dAc,df["Acetat d'Etil (mL)"],df['H2O (mL)'])
df['Butanol (g)']= mbut(dbut,df['Butanol (mL)'])
cols = ["Acetat d'Etil (g)", 'H2O (g)', 'Butanol (g)']

for col in cols:
    df[col[0]] = df[col] * 100 / df[cols].sum(axis=1)
percent = df[['A', 'H', 'B']]
df
```



Quantes xifres decimals creus raonables per proporcionar els resultats?

2

H₂O (mL) Acetat d'Etil (mL) Butanol (mL) Acetat d'Etil (g) H₂O (g) Butanol (g)

▼ Corba binodal

En un sistema de tres components no completament miscibles, l'exemple més senzill és el cas en el que només una parella de components és parcialment miscible.

En fer un diagrama ternari d'un sistema com aquest, apareix **una corba binodal**. Aquesta corba separa les zones del diagrama en que hi ha una sola fase, on el sistema és **homogeni**, de les que n'hi ha dues, en les que el sistema és **heterogeni** i talla el costat que uneix els dos components parcialment miscibles pels punts corresponents a les solubilitats recíproques d'aquests.

Aquesta corba binodal indica els punts d'equilibri on el sistema passa de ser homogeni a ser heterogeni. En la *Figura 3* Pots veure aquesta separació.

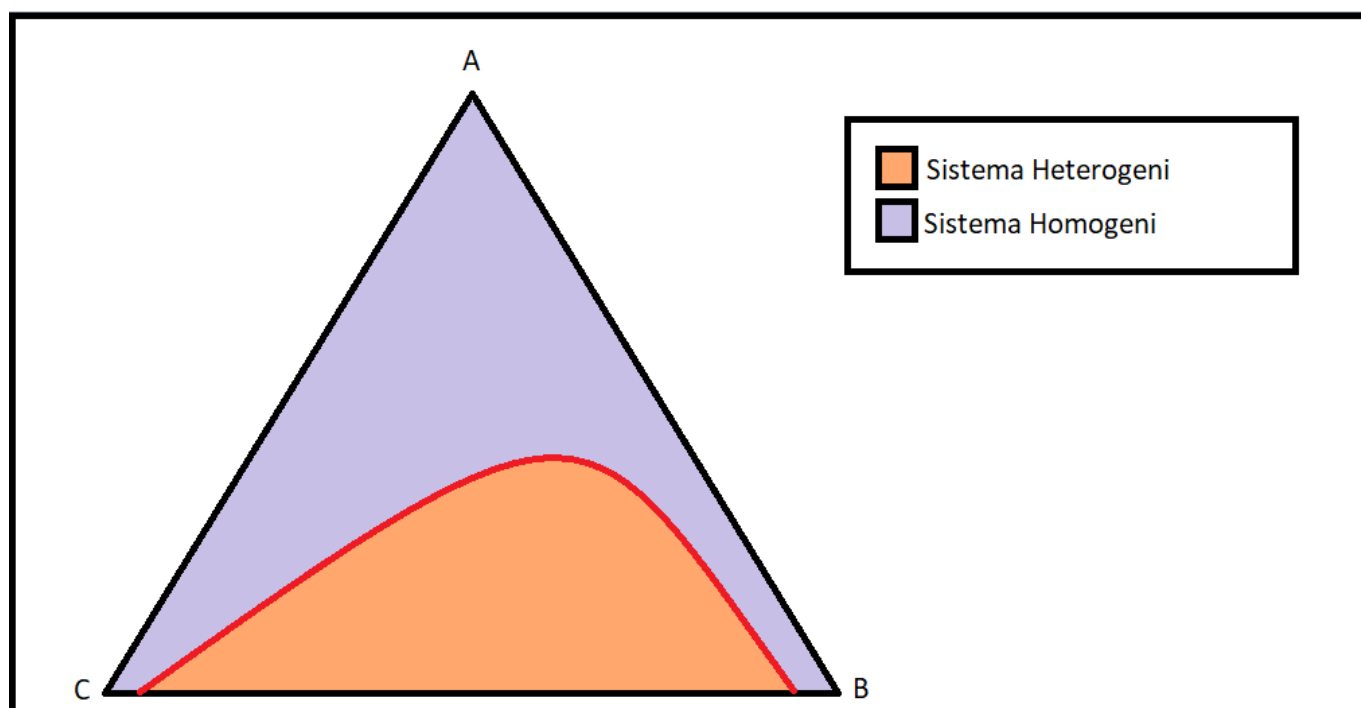


Figura 3. Il·lustració indicant les zones del diagrama on el sistema és homogeni i les zones on és heterogeni

Aquest no és el cas de la pràctica que has realitzat ja que presenta dues parelles de líquids parcialment miscibles entre si. De fet, en el cas de la teva pràctica el que veuràs són dues corbes binodals com en la imatge de la *Figura 4*.

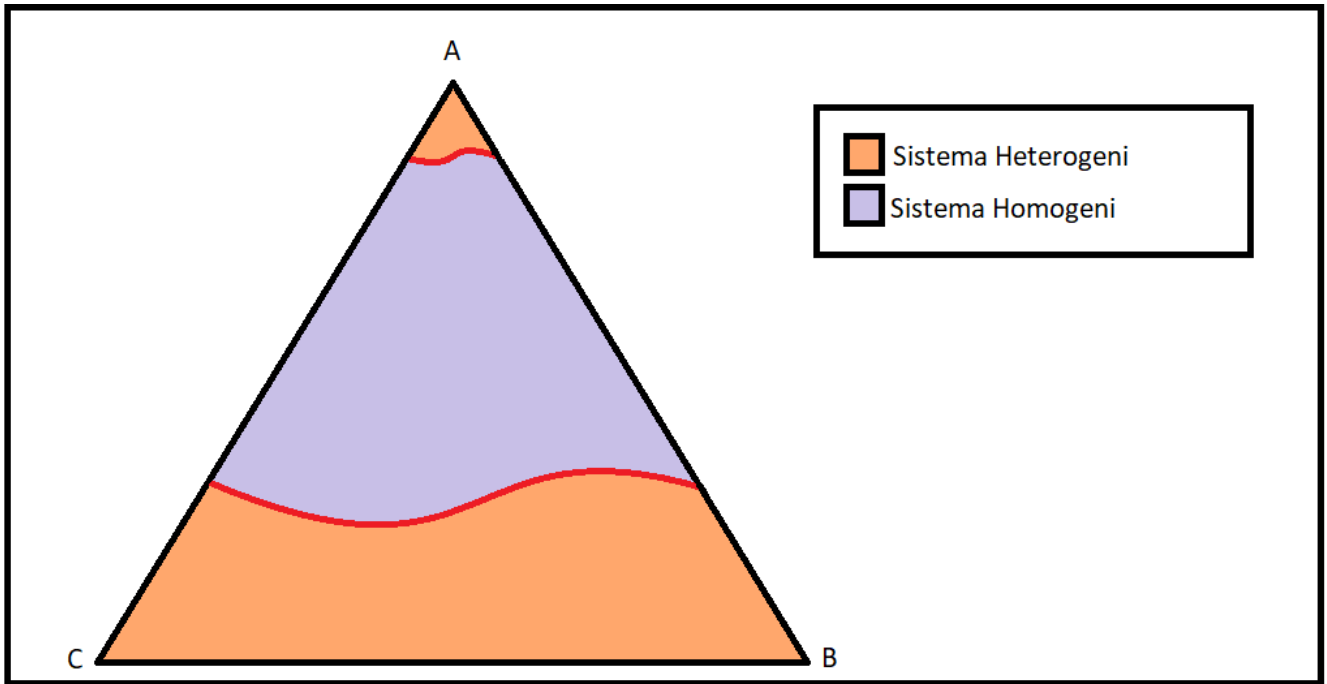


Figura 4. Il·lustració indicant les zones del diagrama on el sistema és homogeni i les zones on és heterogeni per un sistema amb dues parelles de líquids parcialment miscibles entre si.

Tot seguit has d'intrudir les solubilitats recíproques tant de l'aigua amb el butanol com de l'aigua amb l'acetat d'etil mitjançant 4 inputs

Valors de prova:

- Solubilitat de l'Aigua en Butanol = 20.27 (%)
- Solubilitat del Butanol en Aigua = 7.9 (%)
- Solubilitat de l'Aigua en Acetat d'etil = 3 (%)
- Solubilitat de l'Acetat d'etil en Aigua = 7.9 (%)

```
print("Introdueix la solubilitat de l'Aigua en Butanol:")
SolHB=float(input())
print("Introdueix la solubilitat del Butanol en Aigua:")
SolBH=float(input())
print("Introdueix la solubilitat de l'Aigua en Acetat d'etil:")
SolHA=float(input())
print("Introdueix la solubilitat de l'Acetat d'etil en Aigua:")
SolAH=float(input())
SolR = pd.DataFrame( )
SolR['H']=(SolHB,100-SolBH,SolHA,100-SolAH)
SolR['A']=(0,0,100-SolHA,SolAH)
SolR['B']=(100-SolHB,SolBH,0,0)
SolR
```



Introdueix la solubilitat de l'Aigua en Butanol:
20.27
Introdueix la solubilitat del Butanol en Aigua:
7.9
Introdueix la solubilitat de l'Aigua en Acetat d'etil:
3
Introdueix la solubilitat de l'Acetat d'etil en Aigua:
7.9

	H	A	B
0	20.27	0.0	79.73
1	92.10	0.0	7.90
2	3.00	97.0	0.00

▼ Representació de les corbes binodals

Tot seguit es representaran en un gràfic els punts corresponents als valors que has trobat experimentalment (**en vermell**) i les solubilitats recíproques (**en verd**)

Pots descarregar-te el gràfic clicant sobre el botó de sota.

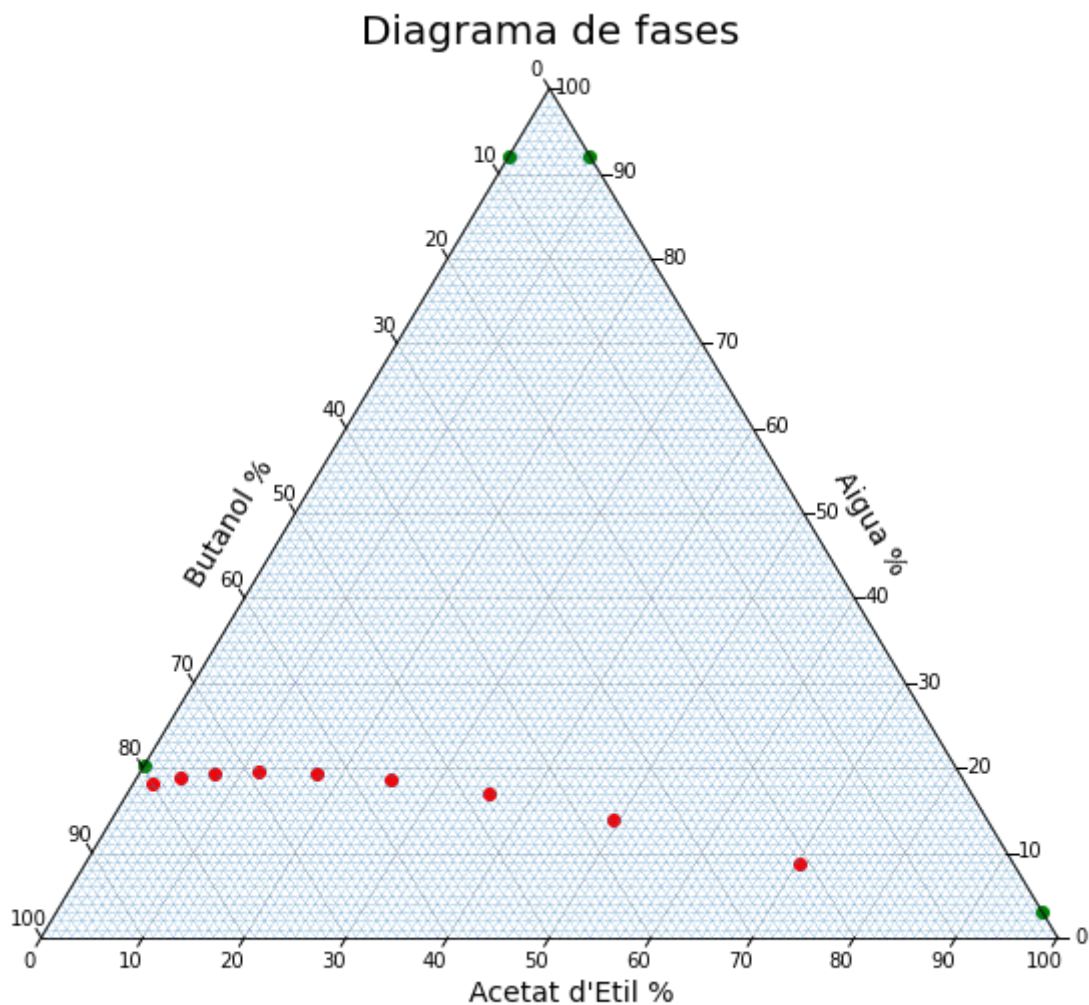
```
import ternary
fig, tax = ternary.figure(scale=100)
fig.set_size_inches(10, 9) # Mida gràfic
tax.scatter(percent[['A', 'H', 'B']].values, c='r') #Selecció de dades
tax.scatter(SolR[['A', 'H', 'B']].values, c='green')

tax.gridlines(multiple=1) # % del gràfic que ocupa cada triangle
tax.get_axes().axis('off')
#Etiquetes als costats
fontsize = 14
offset = 0.08 #distància dels noms respecte els costats del triangle
tax.bottom_axis_label("Acetat d'Etil %", fontsize=fontsize, offset=-offset)
tax.right_axis_label("Aigua %", fontsize=fontsize, offset=offset)
tax.left_axis_label("Butanol %", fontsize=fontsize, offset=offset)
tax.set_title("Diagrama de fases", fontsize=20)
# Decoració.
tax.boundary(linewidth=1)
tax.gridlines(multiple=10, color="gray")
tax.ticks(axis='lbr', linewidth=1, multiple=10)
tax.get_axes().axis('off')

tax.show()

#@title
import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from google.colab import files
button = widgets.Button(description="Descarrega el gràfic")
output = widgets.Output()
def on_button_clicked(b):
    tax.savefig("Gràfic.png")
    files.download("Gràfic.png")
button.on_click(on_button_clicked)
```

```
display(button, output)
```



Descarrega el gràfic

Per a obtenir les teves corbes binodals, pots descarregar el gràfic i traçar-les a mà.

Recta de Connexió

En les zones del diagrama en que el sistema és homogeni els punts indiquen la composició de cadascun dels components d'aquesta mescla homogènia. (Figura 5)

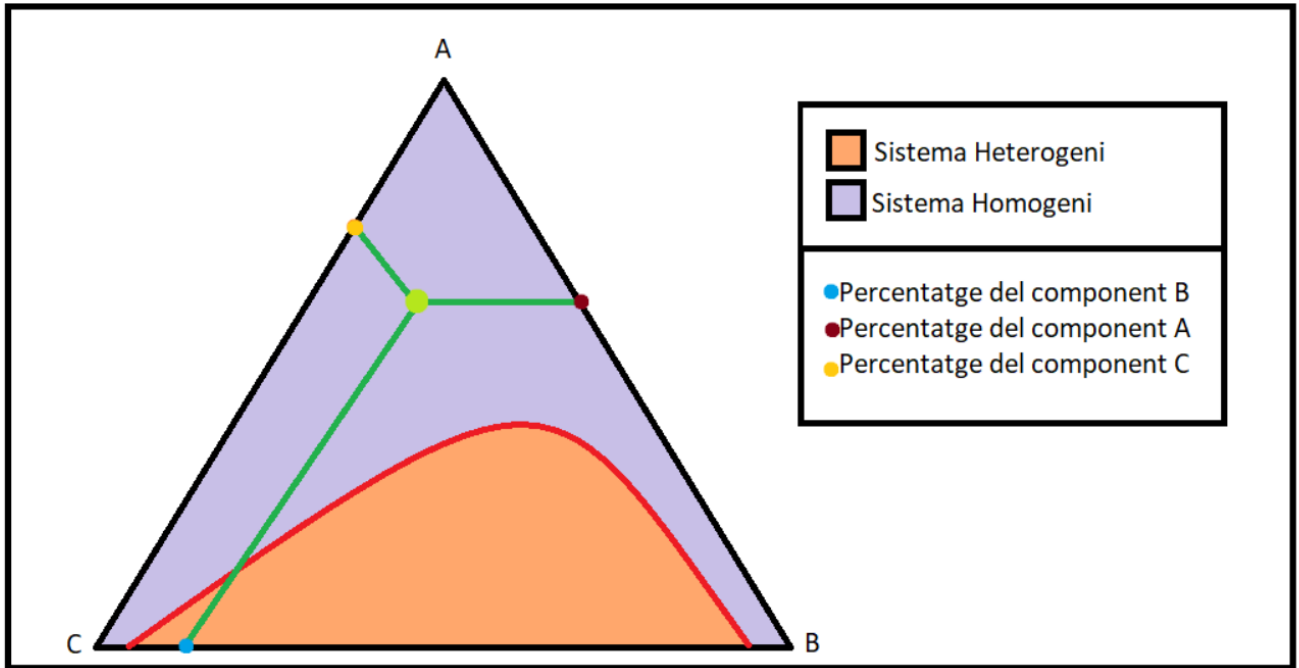


Figura 5. Il·lustració indicant com trobar la composició en una mescla homogènia

En canvi, en un sistema heterogeni, tenim dues fases en equilibri. La composició d'aquestes dues fases en equilibri es pot trobar mitjançant la recta de connexió que passa pel punt que representa la composició del sistema. (Figura 6)

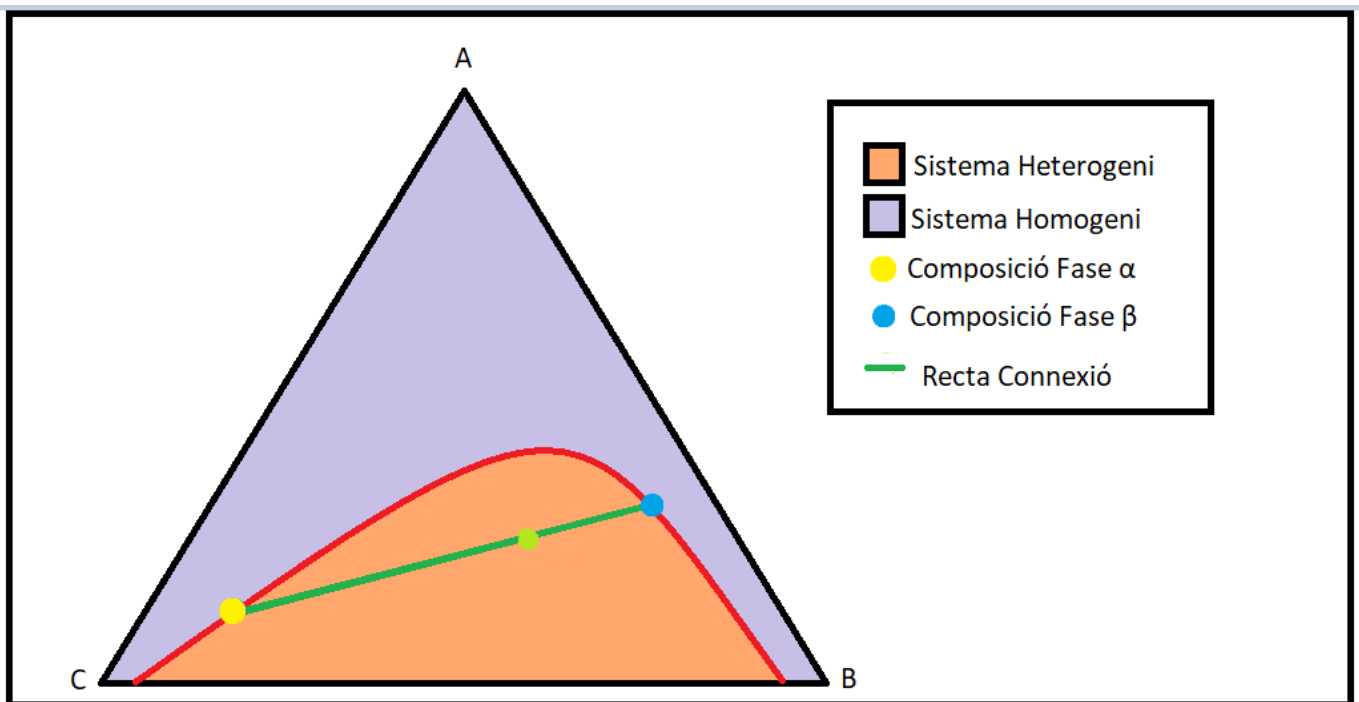


Figura 6. Il·lustració recta de connexió.

i es pot calcular la composició de cadascuna d'aquestes fases (*Figura 7*)

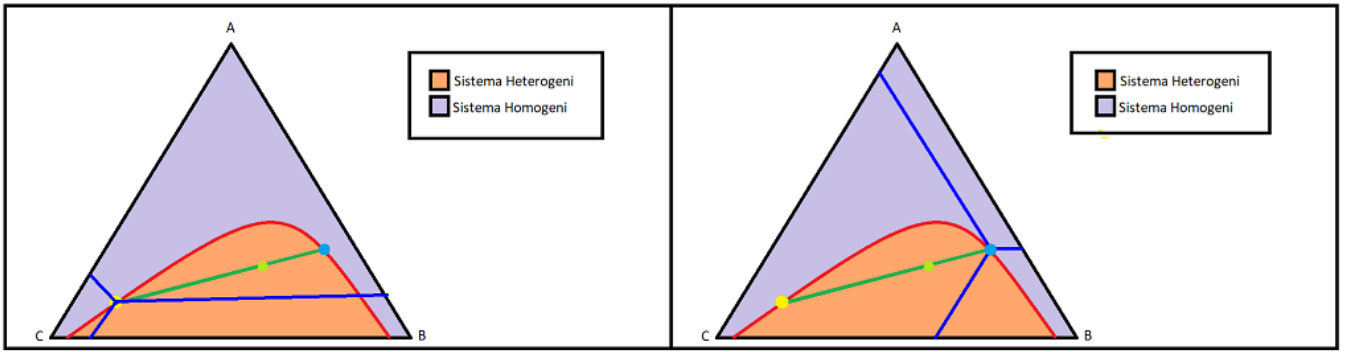


Figura 7. Il·lustració càlcul de composició de cadascuna de les fases.

En el diagrama que has representat anteriorment, els eixos del triangle són rectes de connexió.

▼ Autoavaluació

Ara que ja has realitzat tot el tractament de dades i has après a treballar amb un diagrama de fases ternari, et proposem un breu qüestionari per a que puguis comprovar que si has assolit els objectius d'aprenentatge d'aquesta pràctica.

Quan acabis de respondre pots comprovar si ho has fet bé fent click sobre el botó "Comprova!" que apareixerà un cop executis la cel·la.

Si considerem una mescla amb un 50% d'aigua, un 30% d'acetat d'etil i un 20% de butanol:

Pregunta 1: Quantes fases presentarà aquesta mescla?

Resposta1: Una fase ▼

Pregunta 2: Quants graus de llibertat hi ha a la zona on està representat del diagrama?

Resposta2: No contestat ▼

Pregunta 3: Si fixem la temperatura i la pressió, amb quantes variables més en tenim prou per a poder determinar la composició de la mescla?

Resposta3: No contestat ▼

Si considerem una mescla amb un 10% d'aigua, un 15% d'acetat d'etil i un 75% de butanol:

Pregunta 4: Quantes fases presentarà aquesta mescla?

Resposta4: No contestat ▼

Pregunta 5: Quants graus de llibertat hi ha a la zona on està representat del diagrama?

Resposta5: No contestat ▼

Pregunta 6: Si fixem la temperatura i la pressió, amb quantes variables més en tenim prou per a poder determinar la composició de la mescla?

Resposta6: No contestat ▼



Comprova!