

Exercici 1a

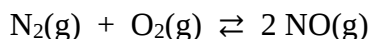
Càlcul de la K_c

Càlcul de les concentracions a l'inici (M) de cada compost ($V = 500 \text{ cm}^3 = 0,5 \text{ L}$):

Concentració de $\text{N}_2 = 0,5 \text{ mol} / 0,5 \text{ L} = 1 \text{ M}$

Concentració d' $\text{O}_2 = 0,5 \text{ mol} / 0,5 \text{ L} = 1 \text{ M}$

Concentració de totes les espècies en l'equilibri:



Concentració a l'inici	1	1		
Concentració a l'equilibri	1-x	1-x	2x	[0,20 p.]

La constant d'equilibri (K_c) a 1100 K és $1,0 \times 10^{-5}$, per tant:

$$1,0 \times 10^{-5} = \frac{[\text{NO}]^2}{[\text{N}_2][\text{O}_2]} = \frac{(2x)^2}{(1-x)(1-x)} = \frac{4x^2}{1-2x+x^2} \quad [0,30 \text{ p.}]$$

S'ha de resoldre l'equació de segon grau:

$$1,0 \cdot 10^{-5} - 2,0 \cdot 10^{-5} x + 1,0 \cdot 10^{-5} x^2 = 4x^2$$

$$4x^2 - 1,0 \cdot 10^{-5} x^2 + 2,0 \cdot 10^{-5} x - 1,0 \cdot 10^{-5} = 0$$

i com que $4x^2 \gg 1,0 \times 10^{-5} x^2$, es pot simplificar a $4x^2 - 1,0 \times 10^{-5} x^2 \cong 4x^2$

$$4x^2 + 2,0 \cdot 10^{-5} x - 1,0 \cdot 10^{-5} = 0$$

L'equació de segon grau té dues solucions:

$$x = 1,58 \cdot 10^{-3} \text{ i } x = -1,58 \cdot 10^{-3} < 0 \text{ que es descarta.} \\ \Rightarrow x = 1,58 \cdot 10^{-3} \text{ M}$$

[0,30 p.]

Per tant, les concentracions dels tres gasos a l'equilibri són:

$$[\text{N}_2]_{\text{eq}} = 1 - x = 1 - 1,58 \cdot 10^{-3} = \mathbf{0,998 \text{ M}} \quad [0,15 \text{ p.}]$$

$$[\text{O}_2]_{\text{eq}} = 1 - x = 1 - 1,58 \cdot 10^{-3} = \mathbf{0,998 \text{ M}} \quad [0,15 \text{ p.}]$$

$$[\text{NO}]_{\text{eq}} = 2 \times 1,58 \cdot 10^{-3} = \mathbf{3,16 \cdot 10^{-3} \text{ M}} \quad [0,15 \text{ p.}]$$

Exercici 1b

Justificació del tipus de reacció: exotèrmica o endotèrmica

Segons les dades de l'enunciat, la constant d'equilibri en concentracions (K_c) és més gran a temperatures altes (1100 K) i menor a temperatures baixes (298 K), per tant, la reacció és endotèrmica ($\Delta H^0 > 0$), ja que si la temperatura augmenta ($T_2 > T_1$), s'afavoreix la reacció cap a la dreta (productes) i la K_c augmenta.

$$\Rightarrow K_c (298 \text{ K}) = 1,0 \times 10^{-30} < K_c (1100 \text{ K}) = 1,0 \times 10^{-5}$$

$\Rightarrow$ A temperatura més elevada la K_c és més gran, per tant, la reacció és endotèrmica.

[0,30 p.]

Rendiment a altes i baixes temperatures

Com que la reacció és endotèrmica i la K_c incrementa amb la temperatura, la concentració del producte (NO) és més gran també a altes temperatures; per tant, el rendiment de la reacció és més gran a altes temperatures.

$$\Rightarrow K_c (1100 \text{ K}) > K_c (298 \text{ K})$$

$\Rightarrow$ El rendiment a altes temperatures serà més gran perquè la concentració de NO serà més gran en l'equilibri.

[0,30 p.]

Efecte en l'equilibri i el rendiment un augment de pressió a temperatura constant

En augmentar la pressió segons el principi de Le Châtelier, l'equilibri es desplaça cap el sentit amb menys nombre de mols, per, d'aquesta manera, produir una disminució de la pressió. En aquest cas no hi haurà cap efecte perquè el nombre de mols de reactius i de productes és el mateix ($\Delta n = 0$).

$\Rightarrow$ No s'afavoreix ni la reacció inversa (cap a l'esquerra) ni la reacció directa (cap a la dreta)

$\Rightarrow$ No es modifica el rendiment de la reacció quan incrementa la pressió. [0,30 p.]

Càlcul de la K_p

Relació entre K_c i K_p

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$$

[0,10 p.]

R: constant universal dels gasos ideals

T: temperatura en K

Δn : increment del nombre de mols de gasos al passar de reactius a productes.

Càlcul K_p (pressions expressades en atmosferes)

$$\Delta n = \sum n_{\text{productes}} - \sum n_{\text{reactius}} = 2 - 2 = 0 \quad \text{i} \quad RT = 0,082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \times 1100 \text{ K}$$

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n} = 1,0 \times 10^{-5} \left(0,082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \times 1100 \text{ K} \right)^0 = 1,0 \cdot 10^{-5}$$

$$\Rightarrow K_p = 1,0 \times 10^{-5}$$

[0,25 p.]