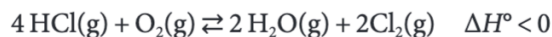


7. El clor és un dels elements més utilitzats en la nostra societat i forma part de molts productes que fem servir en la vida quotidiana. És utilitzat directament com a agent desinfectant i blanquejant, i també com a matèria primera en la producció de polímers com el PVC. En el procés Deacon, el clor s'obté industrialment per oxidació de l'àcid clorhídric segons la reacció química següent:



Introduïm 32,85 g de HCl i 38,40 g de O₂ en un reactor tancat de 10 L en el qual prèviament hem fet el buit. Escalfem la barreja de reacció a 390 °C, i quan s'assoleix l'equilibri observem que hem obtingut 28,40 g de Cl₂.

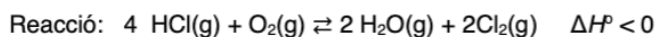
- a) Calculeu la constant d'equilibri en concentracions (K_c) de la reacció, a 390 °C.
[1,25 punts]
- b) Raoneu com es veurien afectats el rendiment de la reacció i la constant d'equilibri en concentracions (K_c) si:
- disminuïm el volum del recipient;
 - augmentem la massa inicial de O₂;
 - augmentem la temperatura;
 - afegim un catalitzador.

[1,25 punts]

DADES: Masses atòmiques relatives: H = 1,0; O = 16,0; Cl = 35,5.

Solució:

Pregunta 7a



Calcular la K_c

- Calculem les masses moleculars i els mols:

$$\text{Massa molecular (HCl)} = 1,0 + 35,5 = 36,5 \text{ g/mol}$$

$$\text{Massa molecular (O}_2\text{)} = 2 \times 16,0 = 32 \text{ g/mol}$$

$$\text{Massa molecular (Cl}_2\text{)} = 2 \times 35,5 = 71 \text{ g/mol}$$

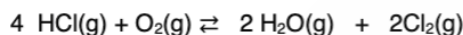
$$\text{Mols inicials de HCl} = 32,85 \text{ g HCl} \times (1 \text{ mol HCl} / 36,5 \text{ g HCl}) = 0,90$$

$$\text{Mols inicials de O}_2 = 38,40 \text{ g O}_2 \times (1 \text{ mol O}_2 / 32 \text{ g O}_2) = 1,20$$

$$\text{Mols en equilibri de Cl}_2 = 28,40 \text{ g Cl}_2 \times (1 \text{ mol Cl}_2 / 71 \text{ g Cl}_2) = 0,40$$

[0,15 p]

- Plantegem l'equilibri:



mols inicials	0,90	1,20	--	--
mols equilibri	$0,90 - 4x$		$1,20 - x$	$2x$ $2x$

Dada.

En equilibri tenim 0,40 mol Cl_2

$$2x = 0,40 \Rightarrow x = 0,20 \quad [0,4 \text{ p}]$$

És correcte si plantegen l'equilibri havent calculat prèviament les concentracions en mol/L (compte: en aquest cas el volum per trobar K_c serà d'1 L).

- Calculem les concentracions en equilibri (en M) de cada compost ($V=10 \text{ L}$)

$$[\text{HCl}] = [0,90 - (4 \times 0,20)] / 10 = 0,010 \text{ M}$$

$$[\text{O}_2] = (1,20 - 0,20) / 10 = 0,100 \text{ M}$$

$$[\text{H}_2\text{O}] = (2 \times 0,20) / 10 = 0,040$$

$$[\text{Cl}_2] = 0,40 / 10 = 0,040 \text{ M}$$

[0,2 p]

- Càlcul de la constant d'equilibri:

$$K_c = ([\text{H}_2\text{O}]^2 \cdot [\text{Cl}_2]^2) / ([\text{HCl}]^4 \cdot [\text{O}_2])$$

[0,3 p]

$$K_c = [(0,040^2 \times 0,040^2)] / [(0,010)^4 \cdot (0,100)]$$

$$\Rightarrow K_c = 2,56 \times 10^3$$

[0,2 p]

Es penalitzarà 0,1 p, si expressen la constant d'equilibri amb unitats.

Pregunta 7b

Com afecta al rendiment de la reacció

- Una disminució del volum

En disminuir el volum del recipient, augmenta la pressió en el seu interior. La reacció és desplaçada cap a on hi ha menys mols de gasos (*coeficients estequiomètrics*) per tornar a una nova situació d'equilibri.

$$\text{Mols de gasos reactius} = 4 + 1 = 5$$

$$\text{Mols de gasos productes} = 2 + 2 = 4$$

⇒ La reacció es desplaçarà cap la dreta i produirà més clor.

⇒ Augmenta el rendiment de la reacció

[0,2 p]

- Un augment de la massa d'oxigen

En augmentar la massa d'oxigen (reactiu) la reacció és desplaçada cap a la dreta (productes) per restablir un nou estat d'equilibri.

⇒ La reacció es desplaçarà cap la dreta i produirà més clor.

⇒ Augmenta el rendiment de la reacció

[0,2 p]

- Un augment de la temperatura

La reacció és exotèrmica ($\Delta H^p < 0$). Això ens indica que la reacció desprèn calor en la reacció directa (cap a la dreta) i absorbeix calor en a reacció inversa (cap a l'esquerra)

Un augment de temperatura implica aportar calor al sistema.

⇒ Afavorim la reacció inversa (cap l'esquerra) i es produirà menys clor.

⇒ Disminueix el rendiment de la reacció

[0,2 p]

- Afegim un catalitzador

Un catalitzador modifica la cinètica de la reacció (velocitat) però no altera la constant d'equilibri de la reacció, ni les concentracions dels compostos (reactius i productes) en equilibri.

⇒ No es modifica el rendiment de la reacció

[0,2 p]

Com afecta a la constant d'equilibri, K_c

La K_c només depèn de la temperatura.

⇒ la disminució del volum, l'augment de massa d'oxigen o l'addició d'un catalitzador no modifica la constant d'equilibri K_c

[0,3 p]

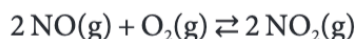
L'augment de temperatura afavoreix la reacció cap a l'esquerra (reactius)

⇒ la K_c disminueix

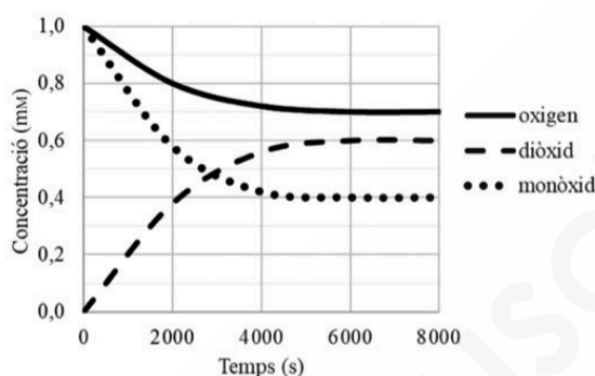
[0,15 p]

6. Segons l'Organització Mundial de la Salut, hi ha grans ciutats del nostre país que superen els líndars permesos de gas NO_2 , establerts en $40 \mu\text{g m}^{-3}$ de mitjana anual, la qual cosa provoca diversos problemes de salut respiratòria. Aquest gas prové majorment de la conducció de vehicles amb combustible derivat del petroli.

La reacció de formació de NO_2 és un procés que arriba a l'equilibri d'acord amb l'equació química següent:



Per a determinar la constant d'equilibri de l'equació química anterior, vam fer un experiment en un recipient tancat i vam obtenir els resultats següents:



- a) Determineu el valor de les concentracions en l'equilibri de cada gas expressades en unitats de molaritat. Calculeu la constant d'equilibri en concentracions (K_c) de la reacció. Digueu si en algun moment la concentració de diòxid de nitrogen ha superat el líndar establert per l'Organització Mundial de la Salut, i justifiqueu la resposta.

[1,25 punts]

- b) Experimentalment, s'ha demostrat que el valor de la constant d'equilibri K_c disminueix en augmentar la temperatura. Raoneu si el procés és exotèrmic o endotèrmic. Determineu si es formarà més diòxid de nitrogen a l'estiu o a l'hivern.

[1,25 punts]

DADES: $1 \text{ mM} = 1 \times 10^{-3} \text{ M}$.

Masses atòmiques relatives: N = 14,0; O = 16,0.

Solució:

PREGUNTA 6a

Concentracions a l'equilibri en molaritat

$$[\text{NO}] = 4 \times 10^{-4} \text{ M}$$

$$[\text{O}_2] = 7 \times 10^{-4} \text{ M}$$

$$[\text{NO}_2] = 6 \times 10^{-4} \text{ M}$$

[0,5 p]

[només 0,2p si les unitats són incorrectes]

Constant d'equilibri de concentracions

$$K_c = \frac{[\text{NO}_2]^2}{([\text{NO}]^2 [\text{O}_2])} = \frac{(6 \times 10^{-4})^2}{(4 \times 10^{-4})^2 \cdot 7 \times 10^{-4}} = 3214,3$$

[0,5 p]

Concentració de diòxid de nitrogen ha superat el llindar establert per la OMS

Llindar OMS $40 \mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$ NO_2

Calculem aquesta concentració del llindar en unitats de molaritat:

$$40 \mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3} \text{NO}_2 \times (1 \text{m}^3 / 1000\text{L}) \times (1\text{g} / 10^6 \mu\text{g}) \times (1 \text{mol NO}_2 / 46 \text{g NO}_2) = 8,7 \times 10^{-10} \text{ M}$$

La concentració de $[\text{NO}_2] = 6 \times 10^{-4} \text{ M}$ de l'experiment és superior al llindar establert per la OMS.

[0,25 p]

PREGUNTA 6b

D'acord al principi de Le Châtelier, en provocar una pertorbació a un sistema en equilibri, aquest evoluciona en el sentit de contrarestar la pertorbació. En augmentar la temperatura exterior, el sistema evolucionarà absorbint calor de l'entorn. A més, canvia el valor de les constants d'equilibri.

[0,25 p]

En el cas del problema, si el valor de K_c disminueix en augmentar la temperatura, segons l'expressió de K_c significa que augmenten les concentracions de monòxid de nitrogen i d'oxigen i disminueix la de diòxid de nitrogen, és a dir que l'equilibri s'ha desplaçat cap a la formació de reactius. Per aquest motiu es pot deduir que la reacció és exotèrmica.

Si fos endotèrmica, al augmentar la temperatura afavoriríem la formació de producte.

[0,6 p]

Es formarà més diòxid de nitrogen en el procés contrari, quan disminueixi la temperatura externa, o sigui a l'hivern.

[0,4 p]