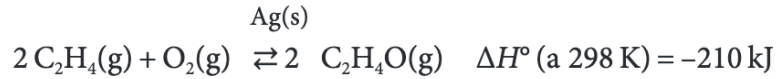


2. El 14 de gener de 2020 es va produir una gran explosió en una indústria de Tarragona dedicada a la fabricació d'òxid d'etilè. Aquest producte químic s'obté a partir de l'oxidació de l'etilè amb un excés d'oxigen, emprant plata com a catalitzador, segons l'equació química següent:



- a) En un reactor d'1,00 L, i a la temperatura de 298 K, aconseguim obtenir 0,51 mol d'òxid d'etilè fent reaccionar 2,5 mol d'etilè i 1,0 mol d'oxigen en presència de plata. Determineu el valor de la constant d'equilibri en concentracions (K_c) a 298 K. Diguen si el valor de la constant d'equilibri en pressions (K_p) és igual o diferent que el valor de la constant d'equilibri en concentracions a 298 K, i justifiqueu la resposta.

[1,25 punts]

- b) Tindrem un rendiment de la reacció més favorable si la duem a terme en un reactor d'1,00 L i a la temperatura de 400 K? I si la duem a terme en un reactor de 0,50 L i a la temperatura de 298 K? Si mantenim el volum i la temperatura del reactor (1,00 L i 298 K), però no hi introduïm plata, disminuiria la concentració d'òxid d'etilè quan s'assolís l'equilibri? Raoneu les respostes.

[1,25 punts]

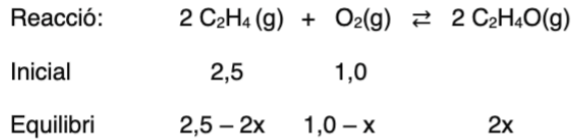
DADA: Constant dels gasos ideals: $R = 8,31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} = 0,082 \text{ atm L K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$.

Solució:

Pregunta 2a

Reacció: $2 \text{C}_2\text{H}_4(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{C}_2\text{H}_4\text{O}(\text{g})$ ΔH^0 (a 298 K) = -210 kJ

Determinar la K_c



Dades en equilibri:

$$\text{mol de } \text{C}_2\text{H}_4\text{O} = 0,51 \Rightarrow 2x = 0,51 \Rightarrow x = 0,255 \text{ mol}$$

[0,2p]

Mols en equilibri:

$$n(\text{C}_2\text{H}_4) = 2,5 - 2x = 2,5 - (2 \times 0,255) = 1,990$$

$$n(\text{O}_2) = 1,0 - x = 1,0 - 0,255 = 0,745$$

$$n(\text{C}_2\text{H}_4\text{O}) = 0,51$$

Concentracions en equilibri: volum = 1 L

$$[\text{C}_2\text{H}_4] = 1,990 / 1 \Rightarrow [\text{C}_2\text{H}_4] = 1,990 \text{ M}$$

$$[\text{O}_2] = 0,745 / 1 \Rightarrow [\text{O}_2] = 0,745 \text{ M}$$

$$[\text{C}_2\text{H}_4\text{O}] = 0,51 / 1 \Rightarrow [\text{C}_2\text{H}_4\text{O}] = 0,510 \text{ M}$$

[0,3 p]

Constant d'equilibri en concentracions:

$$K_c = \frac{[\text{C}_2\text{H}_4\text{O}]^2}{[\text{C}_2\text{H}_4]^2 [\text{O}_2]}$$

[0,3 p]

$$\text{Substituïm: } K_c = \frac{(0,510)^2}{[(1,990)^2 (0,745)]}$$

$$\Rightarrow K_c = 0,0882$$

[0,2 p]

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

Justificar si K_p és igual o diferent de K_c

La relació entre la K_p i la K_c és: $K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$

[0,15 p]

On Δn és la diferència de coeficients estequiomètrics entre productes i reactius (només gasos):

$$\Delta n = (2) - (2 + 1) = -1$$

Perquè $K_p = K_c$ cal que $\Delta n = 0$.

$$\text{Si } \Delta n = -1 \Rightarrow K_p \neq K_c$$

[0,1 p]

És correcte si calculen el valor de K_p i comproven que és diferent de K_c

Pregunta 2b

Reacció: $2 \text{C}_2\text{H}_4(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{C}_2\text{H}_4\text{O}(\text{g})$ ΔH° (a 298 K) = -210 kJ

Justificar si el rendiment és més favorable si V=1,00 L i T=400 K

[0,5 p]

Variable: temperatura (sense canviar el volum).

La reacció és exotèrmica ($\Delta H < 0$). Això vol dir que desprèn calor per formar els productes, i absorbeix calor per a formar els reactius.

Si augmentem la temperatura, estem afegint calor i afavorim la reacció cap a l'esquerra: formació de reactius.

⇒ Afavorir els reactius implica **disminuir el rendiment de la reacció**.

Justificar si el rendiment és més favorable si V=0,50 L i T=298 K

[0,5 p]

Variable: volum (sense canviar la temperatura).

Si el volum del reactor disminueix, la pressió augmenta.

Quan la pressió total del recipient augmenta, la reacció es desplaça cap a on hi ha menys mols de gasos, per assolir un nou equilibri.

En la reacció, en els productes tenim menys mols de gasos (2) que en els reactius (3).

Per tant, afavorim que la reacció es desplaci cap a la dreta (formació de productes).

⇒ Afavorir els productes implica **augmentar el rendiment de la reacció**

Disminuirà, o no, la $[\text{C}_2\text{H}_4\text{O}]$ en equilibri si no hi posem Ag(s)

[0,25 p]

Mantenim el volum i la temperatura, però no hi afegim el catalitzador (plata sòlida).

Un catalitzador augmenta la velocitat de reacció, però no modifica l'equilibri (ni la K_c). Per tant, s'arriba al mateix estat d'equilibri amb o sense catalitzador.

⇒ La concentració d'òxid d'etilè (producte) no haurà disminuït quan s'arribi a l'equilibri (tindrem la mateixa concentració).