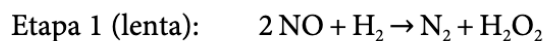


1. La majoria de les reaccions químiques són el resultat de diverses etapes. Per a determinar l'equació de velocitat de la reacció química següent:



s'ha observat experimentalment que el mecanisme de la reacció química és:



- a) Quina de les dues etapes determina la velocitat de la reacció química? Escriviu l'equació de la velocitat i justifiqueu la resposta. Indiqueu els ordres parcials de l'equació de la velocitat respecte a cada reactiu i l'ordre total de la reacció. Justifiqueu les unitats de la constant de velocitat.

[1,25 punts]

- b) Representeu en un gràfic l'energia de la reacció en funció de la coordenada de la reacció i indiqueu-hi l'energia d'activació de les dues etapes, la variació de l'entalpia, els complexos activats i l'intermedi de la reacció. Justifiqueu, a partir del model cinètic de l'estat de transició, quina de les dues etapes tindrà una energia d'activació més elevada.

[1,25 punts]

Solució:

Pregunta 1.a)

Dades de l'exercici



Etapa determinant

L'etapa més lenta determina la velocitat de la reacció global, per tant, l'etapa determinant és l'etapa 1.

[0,20 p]

Equació de velocitat i justificació

$$v = k [\text{NO}]^2 \cdot [\text{H}_2] \quad (\text{equació 1})$$

En les etapes d'un mecanisme de reacció, els exponents de cada concentració coincideixen amb els coeficients estequiomètrics.

[0,35 p]

Ordres parcials i ordre total de la reacció

Segons l'equació de velocitat (equació 1), podem dir que: $v = k [\text{NO}]^\alpha \cdot [\text{H}_2]^\beta$

$\alpha=2$ i per tant és d'ordre 2 respecte a NO

[0,10 p]

$\beta=1$ i per tant és d'ordre 1 respecte a H_2

[0,10 p]

L'ordre total de la reacció és la suma dels ordres parcials ($\alpha + \beta$) de l'equació de velocitat:

$$\text{Ordre total} = \alpha + \beta = 2 + 1 = 3$$

[0,10 p]

Unitats de la constant de velocitat

$v = k [\text{NO}]^2 \cdot [\text{H}_2]$ les unitats de la velocitat sempre són les mateixes $\text{mol L}^{-1} \text{s}^{-1}$

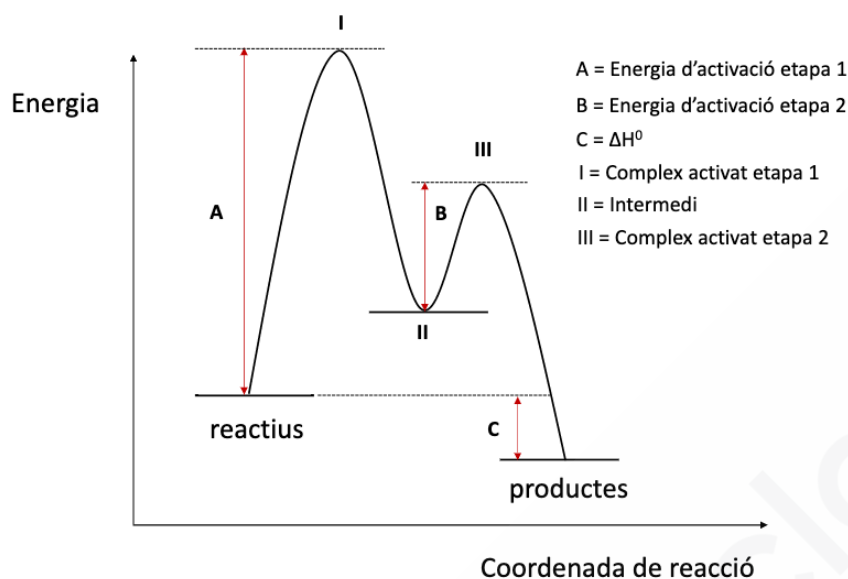
i, en aquest mecanisme, les unitats per a la concentració són:

$$[\text{NO}]^2 = \text{mol}^2 \text{L}^{-2} \text{ i } [\text{H}_2] = \text{mol L}^{-1}$$

$$\frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{s}} = k \frac{\text{mol}^2}{\text{L}^2} \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad \rightarrow \quad k = \frac{\text{L}^2}{\text{mol}^2 \text{s}}$$

[0,40 p]

Pregunta 1b



[0,60 p]

- Es penalitzarà 0,1 p per cada un dels ítems que no hagin indicat (complex activat etapa 1 (I), intermedi (II), complex activat etapa 2 (III), energia d'activació etapa 1 (A), energia d'activació etapa 2 (B) i entalpia ΔH^0 (C)).

Model cinètic de l'estat de transició o complex activat

L'estat de transició és un intermedi inestable per la seva elevada energia (energia d'activació). La velocitat d'una reacció depèn de l'energia d'activació o energia que han d'assolir les molècules de reactius per arribar a l'estat de transició o complex activat: com més petita sigui més alta serà la velocitat.

[0,30 p]

L'energia d'activació de la primera etapa (A) serà més gran que l'energia d'activació de la segona etapa (B), perquè la primera etapa del mecanisme de la reacció global és l'etapa lenta. Els reactius necessitaran més energia per a la formació del complex activat en la primera etapa i, per tant, serà més lenta, perquè hi haurà menys partícules que tindran l'energia cinètica necessària per arribar al complex activat i formar els productes.

[0,35 p]