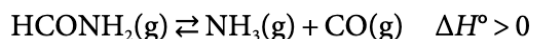


5. La formamida, també coneguda com a *metanamida*, s'utilitza en la fabricació de paper com a suavitzant per a descompondre les fibres del paper. A altes temperatures, la formamida ( $\text{HCONH}_2$ ) es descompon en amoníac i monòxid de carboni d'acord amb l'equilibri següent:



- a) En un recipient de 10,0 L de volum, on prèviament s'ha fet el buit, hi dipositem 9,0 g de formamida i l'escalfem fins a aconseguir una temperatura de 500 K. Una vegada assolit l'equilibri, la pressió a l'interior del reactor arriba a 1,56 atm. Determineu el valor de la constant d'equilibri en concentracions ( $K_c$ ) i la constant d'equilibri en pressions ( $K_p$ ) a 500 K.

[1,25 punts]

- b) Raoneu com es veurien afectats el rendiment de la reacció i la constant d'equilibri en concentracions ( $K_c$ ) si:

- augmentem el volum del recipient;
- augmentem el nombre de mols de CO;
- augmentem la temperatura;
- afegim un catalitzador.

[1,25 punts]

DADES: Masses atòmiques relatives: C = 12,0; H = 1,0; O = 16,0; N = 14,0.

Constant universal dels gasos ideals:

$$R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} = 0,082 \text{ atm L K}^{-1} \text{ mol}^{-1}.$$

## Solució:

### Pregunta 5.a)

#### Càlcul de $K_c$

- Càlcul dels mol de  $\text{HCONH}_2$  a partir de la massa molar:

Massa molecular ( $\text{HCONH}_2$ ) =  $1+12+16+14+2= 45 \text{ g/mol}$

$$9,0 \text{ g HCONH}_2 \cdot \frac{1 \text{ mol HCONH}_2}{45 \text{ g HCONH}_2} = 0,2 \text{ mol HCONH}_2$$

[0,10 p]

- Càlcul del nombre de mols i concentració de totes les espècies en l'equilibri:

	$\text{HCONH}_2(\text{g}) \rightleftharpoons \text{NH}_3(\text{g}) + \text{CO}(\text{g})$		
inici	0,2	--	--
equilibri	0,2-x	x	x

[0,20 p]

A partir de l'equació dels gasos ideals es calcula el  $n_{\text{equilibri}}$  i "x"

Les condicions experimentals són:

$$V = 10 \text{ L}$$

$$P = 1,56 \text{ atm}$$

$$T = 500 \text{ K}$$

$$P V = n R T$$

$$n = (P V) / (R T)$$

$$n = (1,56 \text{ atm} \times 10 \text{ L}) / (0,082 \text{ atm L K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \times 500 \text{ K})$$

$$\Rightarrow n_{\text{equilibri}} = \mathbf{0,3805 \text{ mol de gasos en l'equilibri}}$$

[0,10 p]

Nombre de mols de cada espècie gasosa en l'equilibri:

$$n_{\text{equilibri}} = 0,3805 \text{ mol de gasos} = (0,2 - x) + x + x$$

$$\Rightarrow 0,3805 = 0,2 + x \Rightarrow \mathbf{x = 0,1805 \text{ mol}}$$

[0,10 p]

Càlcul de les concentracions en equilibri per calcular  $K_c$ :

$$[\text{HCONH}_2] = \frac{(0,2 - x) \text{ mol}}{10 \text{ L}} = \frac{(0,2 - 0,1805) \text{ mol}}{10 \text{ L}} = 1,95 \times 10^{-3} \text{ M}$$

$$[\text{NH}_3] = [\text{CO}] = \frac{x \text{ mol}}{10 \text{ L}} = \frac{0,1805 \text{ mol}}{10 \text{ L}} = 1,805 \times 10^{-2} \text{ M}$$

[0,10 p]

Càlcul de  $K_c$  amb les concentracions de les substàncies en estat gasós:

$$K_c = \frac{[\text{NH}_3][\text{CO}]}{[\text{HCONH}_2]} = \frac{(1,805 \times 10^{-2})(1,805 \times 10^{-2})}{1,95 \times 10^{-3}} = \mathbf{0,167}$$

$\Rightarrow K_c = 0,167$

[0,30 p]

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

**Càlcul de  $K_c$**

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

$\Delta n$ : variació del nombre de mol de gasos en la reacció

Càlcul  $K_p$  (si les pressions s'expressen en atmosferes):

$$\Delta n = \sum n_{\text{productes}} - \sum n_{\text{reactius}} = 2 - 1 = 1$$

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n} = 0,167 \left( 0,082 \frac{\text{atm}\cdot\text{l}}{\text{K}\cdot\text{mol}} \times 500 \text{ K} \right)^1 = \mathbf{6,847}$$

$\Rightarrow K_p = \mathbf{6,847}$

[0,25 p]

- Es penalitzarà 0,1 p si expressen la constant d'equilibri amb unitats.
- També és considerarà correcte si calculen  $K_p$  amb  $R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ .

### Problema 5.b)

#### Com afecta el rendiment de la reacció

- Un augment del volum

En augmentar el volum del recipient, disminueix la pressió en el seu interior. La reacció es desplaçarà cap a on hi ha més mols de gasos (*coeficients estequiòmètrics*) per tornar a una nova situació d'equilibri.

Mols de gasos reactius = 1

Mols de gasos productes = 1 + 1 = 2

⇒ La reacció es desplaçarà cap la dreta i produirà més CO i NH<sub>3</sub>

⇒ **Augmenta el rendiment de la reacció**

[0,20 p]

- Un augment del nombre de mols de CO

En augmentar el nombre de mols de CO (producte) la reacció es desplaçarà cap a l'esquerra (reactius) per restablir un nou estat d'equilibri.

⇒ La reacció es desplaçarà cap l'esquerra i produirà menys CO i NH<sub>3</sub>

⇒ **Disminueix el rendiment de la reacció**

[0,20 p]

- Un augment de la temperatura

La reacció és endotèrmica ( $\Delta H^{\circ} > 0$ ). Això ens indica que la reacció absorbeix calor en la reacció directa (cap a la dreta) i desprèn calor en la reacció inversa (cap a l'esquerra).

Un augment de temperatura implica aportar calor al sistema.

⇒ Afavorim la reacció directa (cap la dreta) i es produirà més CO i NH<sub>3</sub>

⇒ **Augmenta el rendiment de la reacció**

[0,20 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**

[0,20 p]

#### Com afecta la constant d'equilibri, $K_c$

La  $K_c$ , per a una determinada reacció, només depèn de la temperatura.

⇒ **l'augment del volum, l'augment de mols de CO o l'addició d'un catalitzador no modifica la constant d'equilibri  $K_c$**

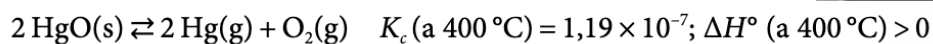
[0,30 p]

**L'augment de temperatura afavoreix la reacció cap a la dreta (productes)**

⇒ **la  $K_c$  augmenta**

[0,15 p]

7. L'any 1772, el químic anglès Joseph Priestley obtingué per primera vegada oxigen escalfant òxid de mercuri(II) sòlid. Actualment, sabem que quan aquest compost s'escalfa es descompon reversiblement en vapor de mercuri i oxigen gasós, segons l'equilibri heterogeni següent:



- a) Introduïm 0,10 mol d'òxid de mercuri(II) en un recipient rígid de 10 L. Posteriorment, el tapem i l'escalfem fins a 400 °C. Determineu la massa d'oxigen que obtenim quan s'assoleix l'equilibri.

[1,25 punts]

- b) Suposeu que realitzem l'experiment de l'apartat anterior escalfant el recipient només fins a 300 °C, sense modificar la quantitat d'òxid de mercuri(II) que hi introduïm ni el volum del recipient. Obtindrem més o menys massa d'oxigen? Haurà canviat el valor de la constant d'equilibri en concentracions,  $K_c$ ? Justifiqueu les respostes.

[1,25 punts]

DADA: Massa atòmica relativa: O = 16,0.

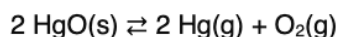
## Solució:

### Pregunta 7a

Determinar la massa d'oxigen que s'obté quan s'assoleix l'equilibri

Expressió de la constant d'equilibri

Reacció:



$$K = [\text{Hg}]^2 \cdot [\text{O}_2]$$

[0,30 punts]

Plantejament de l'equilibri

	2 HgO(s)	$\rightleftharpoons$	2 Hg(g)	+	O <sub>2</sub> (g)
Inicial	0,10				
Equilibri	0,10 - 2x		2x		x

[0,20 punts]

**No és obligatori que expliciten el plantejament de l'equilibri**, sempre que en els passos següents es visualitzi que substitueixen correctament les concentracions de Hg i O<sub>2</sub> en equilibri en la constant  $K_c$ .

Càlcul de x (mols de O<sub>2</sub>):

$$V = 10 \text{ L}$$

$$K = (2x / 10)^2 \cdot (x / 10)$$

$$K = 4x^3 / 1000 \quad \Rightarrow \quad 1,19 \times 10^{-7} = 4x^3 / 1000$$

$$x = (2,975 \times 10^{-5})^{1/3}$$

$$x = 3,10 \times 10^{-2} \quad \Rightarrow \quad \text{mols de O}_2 \text{ en equilibri} = 3,10 \times 10^{-2}$$

[0,50 punts]

Si no han explicitat el plantejament de l'equilibri, però quan substitueix les dades a la  $K_c$  per trobar x ho fan bé, aquest apartat es valora amb 0,70 p enlloc de 0,50 p.

Càlcul de la massa de O<sub>2</sub>

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

$$3,10 \times 10^{-2} \text{ mol O}_2 \times (32,0 \text{ g O}_2 / 1 \text{ mol O}_2) = 0,992 \text{ g O}_2$$

$\Rightarrow$  en equilibri s'obtenen **0,992 g d'oxigen gasós**

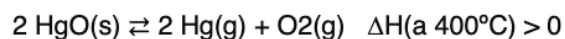
[0,25 punts]

### Pregunta 7b

**Justificar si obtindrem més o menys massa d'oxigen a 300°C**

Variable: temperatura

Reacció:



La reacció és endotèrmica ( $\Delta H > 0$ ). Això vol dir que absorbeix calor per formar els productes (desplaçar-se cap a la dreta), i desprèn calor per a formar els reactius (desplaçar-se cap a l'esquerra).

Si disminuïm la temperatura, estem traient calor i afavorim que la reacció es desplaci cap a l'esquerra, disminuint la quantitat d'oxigen en el nou equilibri.

**Si la reacció la realitzem a 300°C enlloc de 400°C obtenim menys massa d'oxigen.**

[0,80 punts]

**Justificar si es modifica el valor de la  $K_c$  a 300°C**

La constant d'equilibri en concentracions ( $K_c$ ) només depèn de la temperatura.

**Si la reacció la realitzem a 300°C enlloc de 400°C canvia la  $K_c$ .**

[0,45 punts]