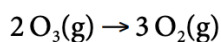


6. A la superfície terrestre, l'ozó ( $O_3$ ) és un dels indicadors de la contaminació de l'aire. Diversos estudis indiquen que, quan l'ozó es troba en estat estacionari, és a dir, quan la velocitat de la reacció de producció i de destrucció de l'ozó és la mateixa, la seva concentració és  $2,0 \times 10^{-8} \text{ mol L}^{-1}$ . Suposeu que l'únic procés de destrucció de l'ozó és la formació d'oxigen molecular, segons la reacció química següent:



- a) Escriviu l'equació de velocitat de la reacció de destrucció de l'ozó, si sabem que segueix una cinètica de segon ordre. Calculeu la constant de velocitat d'aquesta reacció si estimem que la producció de l'ozó degut a totes les fonts és  $7,2 \times 10^{-13} \text{ mol L}^{-1} \text{ h}^{-1}$ , i que l'ozó es troba en estat estacionari. Expliqueu, a partir d'un model cinètic, com afecta la temperatura a la velocitat de reacció.

[1,25 punts]

- b) Calculeu l'energia de Gibbs estàndard de la reacció de destrucció de l'ozó a 298 K i justifiqueu que és espontània. Si sabem que l'espontaneïtat d'aquesta reacció no depèn de la temperatura, raoneu si la reacció és endotèrmica o exotèrmica.

[1,25 punts]

DADA: Energia de Gibbs estàndard de formació a 298 K:  $\Delta G_f^\circ (O_3) = 142,7 \text{ kJ mol}^{-1}$ .

## Solució:

### Pregunta 6a

#### Escriure l'equació de velocitat

Reacció de destrucció de l'ozó:  $2 \text{O}_3 (\text{g}) \rightarrow 3 \text{O}_2 (\text{g})$

La velocitat d'una reacció és igual a la constant de velocitat multiplicada per la concentració de cada reactiu elevat al seu ordre de reacció, que en la reacció anterior és 2.

$$\Rightarrow \text{Equació velocitat: } v = k [\text{O}_3]^2$$

[0,3 p]

#### Calcular la constant de velocitat

Dades. Velocitat de producció ozó =  $7,2 \times 10^{-13} \text{ mol/L h}$   
[O<sub>3</sub>] =  $2,0 \times 10^{-8} \text{ mol / L}$

L'ozó es troba en estat estacionari: velocitat de producció ozó = velocitat destrucció ozó

$$\Rightarrow \text{velocitat destrucció ozó} = 7,2 \times 10^{-13} \text{ mol/L h}$$

$$k = v / [\text{O}_3]^2 \Rightarrow k = (7,2 \times 10^{-13}) / (2,0 \times 10^{-8})^2$$

$$\Rightarrow k = 1800 \text{ mol}^{-1} \text{ L h}^{-1}$$

[0,4 p]

#### Explicar com afecta la temperatura a la velocitat d'una reacció (model)

Un augment de temperatura de la reacció fa **augmentar la velocitat de la reacció**.

[0,15 p]

Raonaments: només cal que en proposin un.

[0,4 p]

#### Segons el model de col·lisions:

Un augment de temperatura provoca que hi hagi més molècules amb una energia cinètica mínima per xocar i reaccionar.

#### Segons el model de l'estat de transició o complex activat:

Un augment de temperatura fa que les molècules tinguin més energia per superar la barrera energètica que suposa l'energia d'activació (diferència d'energia entre reactius i estat de transició).

### Pregunta 6b

#### Calcular l'energia lliure estàndard de la reacció de destrucció de l'ozó

Reacció de destrucció de l'ozó:  $2 \text{O}_3(\text{g}) \rightarrow 3 \text{O}_2(\text{g})$   $\Delta G^\circ$  ?

Relació entre la energia lliure d'una reacció i les energies lliures estàndard de formació de reactius i productes:

$$\Delta G^\circ_{\text{reacció}} = (\sum n_p \Delta G^\circ_{f, \text{productes}}) - (\sum n_r \Delta G^\circ_{f, \text{reactius}})$$

$$\Delta G^\circ_{\text{reacció}} = (3 \times \Delta G^\circ_{f, \text{oxigen}}) - (2 \times \Delta G^\circ_{f, \text{ozó}})$$

[0,2 p]

$$\Delta G^\circ_{f, \text{oxigen}} = 0$$

$$\Delta G^\circ_{f, \text{ozó}} = 142,7 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta G^\circ_{\text{reacció}} = (0) - (2 \times 142,7)$$

$$\Rightarrow \Delta G^\circ_{\text{reacció}} = -285,4 \text{ kJ} \quad (\text{o } -285,4 \text{ kJ/mol})$$

[0,2 p]

#### Raonar si la reacció de destrucció de l'ozó és endotèrmica o exotèrmica

Per determinar l'espontaneïtat d'una reacció, a p i T constant, es mesura la variació d'energia lliure ( $\Delta G^\circ$ ), que es calcula:  $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$

[0,2 p]

$$\Rightarrow \text{Si } \Delta G^\circ < 0 \Rightarrow \text{reacció espontània}$$

[0,2 p]

El signe de la variació d'entropia serà positiva, ja que el desordre en els productes és superior al dels reactius, degut a que el nombre de molècules de gas és major en els productes (3 molècules) que en els reactius (2 molècules).

$$\Rightarrow \Delta S^\circ > 0$$

[0,2 p]

En la reacció de destrucció de l'ozó tenim:

$$T > 0 \quad (\text{temperatura en Kelvin})$$

$$\Delta S^\circ > 0$$

$$\Delta G^\circ < 0 \quad (\text{reacció espontània})$$

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$$

El segon terme ( $-T \Delta S^\circ$ ) serà sempre negatiu.

Si el valor de  $\Delta H^\circ$  es negatiu (reacció exotèrmica), el valor de  $\Delta G^\circ$  sempre serà negatiu (independentment de la T).

**$\Rightarrow$  Reacció exotèrmica**