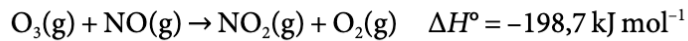


3. Els òxids de nitrogen destrueixen la capa d'ozó de l'atmosfera perquè catalitzen la descomposició de l'ozó segons la reacció:



Hem dut a terme quatre experiments per a determinar la velocitat inicial de reacció a diferents concentracions i hem obtingut els resultats següents:

Experiment	Concentració inicial O_3 (mol L^{-1})	Concentració inicial NO (mol L^{-1})	Velocitat inicial ($\text{mol L}^{-1} \text{ s}^{-1}$)
1	0,020	0,025	42,0
2	0,015	0,010	12,6
3	0,015	0,030	37,8
4	0,010	0,050	42,0

- a) Justifiqueu l'ordre de la reacció respecte a cada reactiu, l'ordre total de la reacció i calculeu la constant de velocitat.
[1,25 punts]
- b) Partint del model cinètic de col·lisions, justifiqueu l'efecte de la temperatura i del volum del reactor en la velocitat de la reacció. Què és un catalitzador? Expliqueu com actua un catalitzador en una reacció química a partir d'un model cinètic.
[1,25 punts]

Solució:

Pregunta 3a

Determinació de l'ordre de reacció

- L'equació de la velocitat de la reacció es pot escriure: $v = k [\text{O}_3]^\alpha [\text{NO}]^\beta$

[0,10 punts]

on α és l'ordre de reacció respecte a l'ozó i β és l'ordre de reacció respecte al monòxid de nitrogen.

- De la taula de dades experimentals es poden comparar els experiments (2) i (3), que tenen la mateixa concentració d'ozó:

Tercer experiment: $37,8 \text{ mol L}^{-1} \text{ s}^{-1} = k (0,015 \text{ mol L}^{-1})^\alpha (0,030 \text{ mol L}^{-1})^\beta$

Segon experiment: $12,6 \text{ mol L}^{-1} \text{ s}^{-1} = k (0,015 \text{ mol L}^{-1})^\alpha (0,010 \text{ mol L}^{-1})^\beta$

En dividir tenim: $3 = 1 \times 3^\beta \Rightarrow \beta = 1$; **la reacció serà d'ordre 1 respecte al NO.**

[0,40 punts]

- De la taula de dades experimentals poden comparar els experiments (1) i (4), que tenen la mateixa velocitat:

Primer experiment: $42 \text{ mol L}^{-1} \text{ s}^{-1} = k (0,020 \text{ mol L}^{-1})^\alpha (0,025 \text{ mol L}^{-1})^\beta$

Quart experiment: $42 \text{ mol L}^{-1} \text{ s}^{-1} = k (0,010 \text{ mol L}^{-1})^\alpha (0,050 \text{ mol L}^{-1})^\beta$

En dividir es troba: $1 = 2^\alpha \times (0,5)^\beta \Rightarrow \alpha = 1$; **la reacció serà d'ordre 1 respecte a O₃.**

[0,40 punts]

L'ordre total de la reacció és igual a la suma de $\alpha + \beta = 2$.

[0,10 punts]

Càlcul de la constant de velocitat

Agafant la velocitat inicial de la reacció i les concentracions inicials de cada reactiu en un experiment (el primer, per exemple) es troba:

Experiment 1: $42 \text{ mol L}^{-1} \text{ s}^{-1} = k (0,020 \text{ mol L}^{-1})^1 (0,025 \text{ mol L}^{-1})^1$

$$\Rightarrow k = 84.000 \text{ mol}^{-1} \text{ L s}^{-1}$$

[0,25 punts]

L'expressió completa de velocitat és: $v = 84.000 [\text{O}_3] [\text{NO}]$

Pregunta 3b

Efecte de la temperatura i del volum segons el model cinètic de col·lisions

Efecte de la temperatura

Un augment de la temperatura implica que tindrem més molècules amb una energia cinètica mínima per fer xocs efectius (és a dir, més proporció de xocs efectius) i, per tant, augmentarà la velocitat de la reacció.

[0,30 punts]

Efecte del volum

En augmentar el volum, la probabilitat de xocar les molècules disminueix i, per tant, disminueix la velocitat de la reacció.

[0,30 punts]

Què és un catalitzador

Un catalitzador és una substància que s'afegeix a la reacció, sense consumir-se, i augmenta la velocitat de reacció.

Un catalitzador modifica el mecanisme de la reacció, aconseguint que en el nou mecanisme disminueixi l'energia d'activació, i augmenti la velocitat de reacció.

[0,30 punts]

Justificació: han d'emprar un dels dos models

Justificació segons el model cinètic de l'estat de transició o complex activat

La velocitat d'una reacció depèn de l'energia d'activació o l'energia que han d'assolir les molècules de reactius per arribar a l'estat de transició: com més petita sigui, més alta serà la velocitat i el catalitzador disminuirà l'energia d'activació.

Justificació segons el model cinètic de col·lisions

La velocitat d'una reacció és proporcional al nombre de xocs entre les molècules de reactius per unitat de volum i temps. L'energia d'activació és l'energia cinètica mínima que cal que assoleixin les molècules de reactiu per reaccionar quan xoquen: com més petita sigui, més alta serà la velocitat.

[0,35 punts]