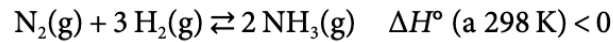


2. L'amoníac té moltes aplicacions tant domèstiques com industrials, entre les quals una de les més esteses és la fabricació d'adobs. L'obtenció d'amoníac per mitjà de l'anomenat *mètode de Haber-Bosch* fou el primer procés químic industrial a utilitzar l'alta pressió per a una reacció química. L'amoníac s'obté en la reacció directa entre els gasos nitrogen i hidrogen a pressions extremament altes (entre 200 i 400 atm) i a temperatures d'entre 200 i 600 °C.



- a) En un reactor de 25,0 L a 440 °C s'introdueixen 5,0 mol d'hidrogen i 2,0 mol de nitrogen. Quan el sistema arriba a l'equilibri s'obtenen 50,0 g d'amoníac. Calculeu els valors de la constant d'equilibri en concentracions (K_c) i la constant d'equilibri en pressions (K_p) a aquesta temperatura.
[1,25 punts]
- b) Per a aconseguir el màxim rendiment en l'obtenció de l'amoníac, el procés de Haber-Bosch es realitza a pressió elevada i es va eliminant l'amoníac del reactor a mesura que s'obté. Justifiqueu per què es realitzen aquestes dues operacions. Com afectarà un increment de temperatura al rendiment de la reacció i a la constant d'equilibri en concentracions (K_c)?
[1,25 punts]

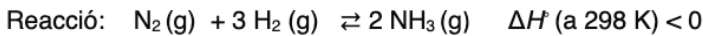
DADES: Masses atòmiques relatives: N = 14,0; H = 1,0.

Constant universal dels gasos ideals:

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

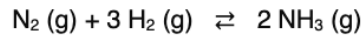
Solució:

Pregunta 2a



Càlcul de K_p

Càlcul de la concentració de totes les espècies en l'equilibri:



mols a l'inici	2	5	--
mol en l'equilibri	$2 - x$	$5 - 3x$	$2x$

[0,30 punts]

Massa molecular (NH_3) = $14 + 3 \times 1 = 17 \text{ g/mol}$

$$\text{mols NH}_3 \Rightarrow 50 \text{ g} \frac{1 \text{ mol NH}_3}{17 \text{ g NH}_3} = 2,9412 \text{ mol NH}_3$$

$$2,9412 \text{ mol NH}_3 = 2x \Rightarrow x = 1,4706 \text{ mol}$$

[0,15 punts]

Càlcul de les concentracions en equilibri (en M) de cada compost ($V = 25 \text{ L}$):

$$\text{Concentració de N}_2 \text{ en l'equilibri} = (2 - 1,4706) \text{ mol} / 25 \text{ L} = 0,021176 \text{ M}$$

$$\text{Concentració de H}_2 \text{ en l'equilibri} = (5 - 3 \times 1,4706) \text{ mol} / 25 \text{ L} = 0,023528 \text{ M}$$

$$\text{Concentració de NH}_3 \text{ en l'equilibri} = 2,9412 \text{ mol} / 25 \text{ L} = 0,117648 \text{ M}$$

[0,10 punts]

Càlcul de la constant d'equilibri (K_c):

$$K_c = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{N}_2][\text{H}_2]^3} = \frac{0,117648^2}{0,021176 \cdot (0,023528)^3} = 5,02 \times 10^4$$

[0,40 punts]

$$\Rightarrow K_c = 5,02 \times 10^4$$

Càlcul de K_p

– Relació entre K_c i K_p :

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$$

[0,10 punts]

R : constant universal dels gasos ideals; T : temperatura en K

Δn : increment del nombre de mols de gasos en passar de reactius i productes

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

$$\Delta n = \sum n_{\text{productes}} - \sum n_{\text{reactius}} = 2 - 4 = -2 \quad T = (440 + 273) \text{ K}$$

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n} = 5,02 \times 10^4 \left(0,082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \times 713 \text{ K} \right)^{-2} = 14,68$$

$$\Rightarrow K_p = 14,68$$

[0,20 punts]

Pregunta 2b

Efecte de l'increment de pressió

En augmentar la pressió segons el principi de Le Châtelier, l'equilibri es desplaça cap al sentit amb menys nombre de mols. En aquest cas, serà en el sentit de productes, és a dir, en la producció d'amoníac i, per tant, augmentarà el rendiment de la reacció.

⇒ Afavoreix la reacció directa (cap a la dreta) i es produirà més amoníac.

⇒ **Augmenta el rendiment de la reacció.**

[0,30 punts]

Efecte de l'eliminació del NH₃

Si es va eliminant l'amoníac del reactor a mesura que va avançant la reacció, l'equilibri es desplaçarà cap a productes (producció d'amoníac) per aconseguir les concentracions de l'equilibri. Per tant, en global s'obindrà més rendiment d'amoníac.

⇒ Afavorim la reacció directa (cap a la dreta) i es produirà més amoníac.

⇒ **Augmenta el rendiment de la reacció.**

[0,30 punts]

Un augment de la temperatura

La reacció és exotèrmica ($\Delta H < 0$). Això ens indica que la reacció desprèn calor en la reacció directa (cap a la dreta) i absorbeix calor en la reacció inversa (cap a l'esquerra). Un augment de temperatura implica aportar calor al sistema.

⇒ Afavorim la reacció inversa (cap a l'esquerra) i es produirà menys amoníac.

⇒ **Disminueix el rendiment de la reacció.**

[0,30 punts]

Com afecta la constant d'equilibri, K_c

Per a una reacció determinada, la constant d'equilibri K_c només depèn de la temperatura.

⇒ La variació de pressió (increment) i l'eliminació de productes (amoníac) no modifica la **constant d'equilibri K_c** .

L'augment de temperatura afavoreix la reacció cap a l'esquerra (reactius)

⇒ **la K_c disminueix.**

[0,35 punts]