Química

Equilibri químic

Solucions · 64 exercicis

Proves d'accés a la universitat (PAU) de Catalunya. Ordenats del més recent al més antic.
Retalls dels exàmens i pautes oficials (selecat.cat / universitats.gencat.cat).

1. PAU 2026 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 1

Exercici 1.1 [1,25 punts]

- **Càlcul de la constant d'equilibri K_c**
  - Càlcul de les concentracions a l'equilibri:

    $[NO_2]_{eq}$ = 0,2 mols / 2 L = 0,1 M $[SO_2]_{eq}$ = 1,6 mols / 2 L = 0,8 M

    $[NO]_{eq}$ = 0,8 mols / 2 L = 0.4 M $[SO_3]_{eq}$ = 1,2 mols / 2 L = 0,6 M
  - Càlcul de la K_c:

$$K_c = \frac{[NO]_{eq} \cdot [SO_3]_{eq}}{[NO_2]_{eq} \cdot [SO_2]_{eq}} = \frac{0,4 \cdot 0,6}{0,1 \cdot 0,8} = 3,0$$

[0,25 punts]

El càlcul es pot fer directament utilitzant el nombre de mols i indicant explícitament que el volum per a cadascuna de les concentracions es cancel·la a l'expressió de la K_c

- **Càlcul de les concentracions d'equilibri després d'afegir 10 g de NO**
  - Càlcul de les concentracions inicials:

    $[NO_2]_0$ = 0,1 M $[SO_2]_0$ = 0,8 M $[SO_3]_0$ = 0,6 M

    Mols afegits NO = 10 g / 30 g mol^{-1} = 0,333 mols

    $[NO]_0$ = (0,8 mols + 0,333 mols) / 2 L = 0,566 M

[0,10 punts]

  - Plantejament i resolució de l'equació associada a la K_c:

    Com que s'ha addicionat més quantitat de producte, l'equilibri es desplaçarà cap a la formació de reactius; és a dir, la concentració de NO_2 i SO_2 augmentarà, i la de NO i SO_3 disminuirà.

$$NO_{2\,(g)} + SO_{2\,(g)} \leftrightharpoons NO_{(g)} + SO_{3\,(g)}$$

Concentracions inicials	0,1	0,8	0,566	0,6
Concentracions a l'eq.	0,1+x	0,8+x	0,566-x	0,6-x

[0,20 punts]

Introduint les expressions de les concentracions a l'equilibri a l'equació de la K_c:

$$K_c = \frac{[NO]_{eq} \cdot [SO_3]_{eq}}{[NO_2]_{eq} \cdot [SO_2]_{eq}} = \frac{(0,566-x) \cdot (0,6-x)}{(0,1+x) \cdot (0,8+x)} = 3,0$$

[0,20 punts]

Després d'operar, s'obté la següent equació de segon grau:

$$2x^2 + 3,866x - 0,0996 = 0$$

Els dos resultats d'aquesta equació són x = 0,0254 i x = -1,958, dels quals només té sentit químic x = 0,0254 M.

[0,30 punts]

El càlcul es pot fer treballant amb el nombre de mols a l'expressió de la K_c, tot indicant explícitament que el volum per a cadascuna de les concentracions es cancel·la. En aquest cas, el valor de x *correcte seria* x = 0,0509 mols.

- Càlcul de les concentracions finals a l'equilibri:

  $[NO_2]_{eq}$ = 0,1 M + 0,0254 M = 0,125 M $[SO_2]_{eq}$ = 0,8 M + 0,0254 M = 0,825 M

  $[NO]_{eq}$ = 0,566 M – 0,0254 M = 0,541 M $[SO_3]_{eq}$ = 0,6 M – 0,0254 M = 0,575 M

[0,20 punts]

Exercici 1.2 [1,25 punts]

- **Justificació del tipus de reacció: endotèrmica o exotèrmica**

  A partir de les dades subministrades a la taula i del càlcul de la K_c a 1150 ºC, es pot veure que la constant d'equilibri disminueix en augmentar la temperatura. Per tant, això vol dir que la reacció directa és exotèrmica ($NO_2 + SO_2 \rightarrow NO + SO_3$) i la reacció inversa és endotèrmica ($NO + SO_3 \rightarrow NO_2 + SO_2$). D'aquesta manera, en augmentar la temperatura, el sistema respondrà absorbint calor i afavorint la reacció inversa endotèrmica; és a dir, disminuint el valor de la K_c.

  En conclusió, com que K_c (460 ºC) > K_c (800 ºC) > K_c (1150 ºC), la reacció de producció de SO_3 i NO a partir de NO_2 i SO_2 és exotèrmica ($\Delta H < 0$).

  [0,45 punts]

- **Factors que afavoreixen la pluja àcida**

  - Augment de la pressió atmosfèrica:

    Donat que hi ha el mateix nombre de mols de gas en reactius i productes, l'equilibri no es veurà modificat per un canvi en la pressió atmosfèrica. Per tant, no s'afavorirà o no s'afectarà la pluja àcida.

    [0,40 punts]

  - Augment de la quantitat de NO a l'atmosfera:

    Si augmenta la concentració d'un dels productes (NO), l'equilibri respondrà fent-lo reaccionar per disminuir-ne la concentració pel principi de Le Chatelier. Això implicarà que també reaccioni SO_3 i, per tant, disminueixi la seva concentració. En conseqüència, això farà que es desafavoreixi la pluja àcida.

    [0,40 punts]

2. PAU 2025 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 1

Exercici 1a

Càlcul de la K_c

Càlcul de les concentracions a l'inici (M) de cada compost (V = 500 cm^3 = 0,5 L):

Concentració de N_2 = 0,5 mol / 0,5 L = 1 M

Concentració d'O_2 = 0,5 mol / 0,5 L = 1 M

Concentració de totes les espècies en l'equilibri:

$$N_2(g) + O_2(g) \rightleftarrows 2\,NO(g)$$

Concentració a l'inici	1	1		
Concentració a l'equilibri	1-x	1-x	2x	**[0,20 p.]**

La constant d'equilibri (K_c) a 1100 K és 1,0 x 10^{-5}, per tant:

$$1{,}0\ x\ 10^{-5} = \frac{[NO]^2}{[N_2][O_2]} = \frac{(2x)^2}{(1-x)\cdot(1-x)} = \frac{4x^2}{1-2x+x^2} \qquad \textbf{[0,30 p.]}$$

S'ha de resoldre l'equació de segon grau:

$$1{,}0 \cdot 10^{-5} - 2{,}0 \cdot 10^{-5}\,x + 1{,}0 \cdot 10^{-5}\,x^2 = 4x^2$$

$$\mathbf{4x^2 - 1{,}0 \cdot 10^{-5}\,x^2} + 2{,}0 \cdot 10^{-5}\,x - 1{,}0 \cdot 10^{-5} = 0$$

i com que $4x^2$ >>> 1,0 x 10^{-5} x^2, es pot simplificar a $4x^2 - 1{,}0 \times 10^{-5}\,x^2 \cong \mathbf{4x^2}$

$$4x^2 + 2{,}0 \cdot 10^{-5}\,x - 1{,}0 \cdot 10^{-5} = 0$$

L'equació de segon grau té dues solucions:

x = 1,58 ·10^{-3} i *x = - 1,58 · 10^{-3} < 0 que es descarta.*

⇒ x = 1,58 · 10^{-3} M **[0,30 p.]**

Per tant, les concentracions dels tres gasos a l'equilibri són:

$[N_2]_{eq}$ = 1 - x = 1 – 1,58 ·10^{-3} = **0,998 M** **[0,15 p.]**

$[O_2]_{eq}$ = 1 - x = 1 – 1,58 ·10^{-3} = **0,998 M** **[0,15 p.]**

$[NO]_{eq}$ = 2 x 1,58 ·10^{-3} = **3,16 · 10^{-3} M** **[0,15 p.]**

Exercici 1b

Justificació del tipus de reacció: exotèrmica o endotèrmica

Segons les dades de l'enunciat, la constant d'equilibri en concentracions (K_c) és més gran a temperatures altes (1100 K) i menor a temperatures baixes (298 K), per tant, la reacció és endotèrmica ($\Delta H^0 > 0$), ja que si la temperatura augmenta (T2 >T1), s'afavoreix la reacció cap a la dreta (productes) i la K_c augmenta.

⇒ $\boldsymbol{K_c}$ **(298 K)** = 1,0 x 10^{-30} < $\boldsymbol{K_c}$ **(1100 K)** = 1,0 x 10^{-5}

⇒ A **temperatura més elevada** la $\boldsymbol{K_c}$ **és més gran**, per tant, la **reacció és endotèrmica.**

[0,30 p.]

Rendiment a altes i baixes temperatures

Com que la reacció és endotèrmica i la K_c incrementa amb la temperatura, la concentració del producte (NO) és més gran també a altes temperatures; per tant, el rendiment de la reacció és més gran a altes temperatures.

⇒ $\boldsymbol{K_c}$ **(1100 K)** > $\boldsymbol{K_c}$ **(298 K)**

⇒El **rendiment a altes temperatures serà més gran** perquè la **concentració de NO serà més gran en l'equilibri.** **[0,30 p.]**

Efecte en l'equilibri i el rendiment un augment de pressió a temperatura constant

En augmentar la pressió segons el principi de Le Châtelier, l'equilibri es desplaça cap el sentit amb menys nombre de mols, per, d'aquesta manera, produir una disminució de la pressió. En aquest cas no hi haurà cap efecte perquè el nombre de mols de reactius i de productes és el mateix ($\Delta n = 0$).

⇒ **No s'afavoreix** ni la **reacció inversa** (cap a l'esquerra) ni la **reacció directa** (cap a la dreta)
⇒ **No es modifica el rendiment de la reacció quan incrementa la pressió.** **[0,30 p.]**

Càlcul de la K_p

Relació entre K_c i K_p

$$Kp = Kc\ (RT)^{\Delta n}$$ **[0,10 p.]**

R: constant universal dels gasos ideals
T: temperatura en K
Δn: increment del nombre de mols de gasos al passar de reactius a productes.

Càlcul *Kp* (pressions expressades en atmosferes)

$\Delta n = \Sigma\ n_{\text{productes}} - \Sigma\ n_{\text{reactius}} = 2 - 2 = 0$ i $RT = 0{,}082\ \frac{atm \cdot L}{K \cdot mol}\ x\ 1100\ K$

$$Kp = Kc\ (RT)^{\Delta n} = 1{,}0\ x\ 10^{-5} \left(0{,}082\ \frac{atm \cdot L}{K \cdot mol}\ x\ 1100\ K\right)^{0} = 1{,}0 \cdot 10^{-5}$$

⇒ $\boldsymbol{Kp = 1{,}0\ x\ 10^{-5}}$ **[0,25 p.]**

3. PAU 2025 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 2

Exercici 2a

Càlcul de la constant d'equilibri en concentracions, K_c

$$N_2(g) + 3\,H_2(g) \rightleftarrows 2\,NH_3(g)$$

La constant d'equilibri (K_c) a 1000 K és:

$$K_c = \frac{[NH_3]^2}{[N_2][H_2]^3}$$ **[0,25 p.]**

Substituint els valors de les concentracions en l'equilibri en l'equació de la K_c s'obté:

$$K_c = \frac{[NH_3]^2}{[N_2][H_2]^3} = \frac{(0{,}36)^2}{(0{,}142)\cdot(1{,}84)^3} = 0{,}1465$$

$\Rightarrow$ $\boldsymbol{K_c = 0,1465}$ **[0,40 p.]**

Càlcul de la constant d'equilibri en pressions, K_p

Relació entre K_c i K_p

$$K_p = K_c(RT)^{\Delta n}$$ **[0,25 p.]**

R: constant universal dels gasos ideals
T: temperatura en K
Δn: increment del nombre de mols de gasos al passar de reactius i productes

Càlcul Kp (pressions expressades en atmosferes)

$\Delta n = \Sigma\, n_{\text{productes}} - \Sigma\, n_{\text{reactius}} = 2 - 4 = -2$ i $RT = 0{,}082\ \frac{atm\,L}{K\,mol}\ x\ 1000\ K$

$$K_p = K_c(RT)^{\Delta n} = 0{,}1465\left(0{,}082\ \frac{atm\cdot L}{K\cdot mol}\ x\ 1000\ K\right)^{-2} = 2{,}179\ x\ 10^{-5}$$

$\Rightarrow$ $\boldsymbol{Kp = 2,179\ x\ 10^{-5}}$ **[0,35 p.]**

Exercici 2b

Efecte de la pressió en el rendiment

Com que el nombre de mols disminueix, **Δn** = Σ *mols productes* - Σ *mols reactius* = **- 2**, les altes pressions afavoreixen el costat on la suma dels coeficients estequiomètrics és menor; per tant, els productes.

És a dir, a altes pressions augmenta el rendiment i a baixes pressions, disminueix.

⇒El **rendiment a baixes pressions disminueix** perquè **s'afavoreix** la **reacció inversa** (cap a l'esquerra)

⇒El **rendiment a altes pressions augmenta** perquè **s'afavoreix** la **reacció directa** (cap a la dreta)

[0,50 p.]

Efecte de la temperatura en el rendiment

La constant d'equilibri varia en variar la temperatura.

Com que la reacció és **exotèrmica** (ΔH < 0), el **valor de la K_c disminuirà** amb **l'increment de la temperatura**:

⇒ K_c **(T < 1000 K)** > K_c **(1000 K)**

i, per tant, la concentració del producte (NH_3) és menor també a altes temperatures, en conseqüència, el rendiment de la reacció disminueix a altes temperatures.

⇒ A **baixes temperatures** el **rendiment serà més gran** perquè la **concentració de NH_3** serà **major en l'equilibri.**

⇒ A **altes temperatures** el **rendiment serà més petit** perquè la **concentració de NH_3** serà **menor en l'equilibri.**

[0,50 p.]

Efecte de la temperatura en la velocitat de la reacció

Les **temperatures baixes no afavoreixen la velocitat de reacció**, ja que si la **temperatura** és més **baixa**, **disminueix el nombre de xocs**.

⇒ A **baixes temperatures** hi haurà **menys xocs** i la **velocitat serà menor.**

⇒ A **altes temperatures** hi haurà **més xocs** i la **velocitat serà major.**

[0,25 p.]

4. PAU 2024 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 4

Pregunta 4a

Càlcul de la K_c

Càlcul de les concentracions en l'equilibri (M) de cada compost (V = 2,0 L):

Concentració de N_2O_4 = 0,20 mol / 2,0 L = 0,1 M
Concentració de NO_2 = 0,29 mol / 2,0 L = 0,145 M **[0,20 p.]**

	$N_2O_4(g)$	⇆	$2\ NO_2(g)$
Concentració inici	–		–
Concentració equilibri	0,1 M		0,145 M

La constant d'equilibri (K_c) a 373 K és:

$$K_c = \frac{[NO_2]^2}{[N_2\ O_4]} = \frac{(0{,}145\ M)^2}{(0{,}1\ M)} = \frac{0{,}021}{0{,}1} = 0{,}210$$ **[0,50 p.]**

Càlcul K_p

- Relació entre K_c i K_p

$$Kp = Kc\ (RT)^{\Delta n}$$ **[0,20 p.]**

R: constant universal dels gasos ideals; T: temperatura en K
Δn: increment del nombre de mols de gasos en passar de reactius a productes

- Càlcul Kp (pressions en atmosferes)

$\Delta n = \Sigma\ n_{\text{productes}} - \Sigma\ n_{\text{reactius}} = 2 - 1 = 1$ $\qquad RT = 0{,}082\ \frac{atm \cdot L}{K \cdot mol}\ x\ (373)$

$$K_p = K_c\ (RT)^{\Delta n} = 0{,}210\ \left(0{,}082\ \frac{atm \cdot L}{K \cdot mol}\ x\ 373\ K\right)^1 = 6{,}43$$

$\Rightarrow$ **K_p = 6,43** **[0,35 p.]**

Pregunta 4b

$$N_2O_4(g) \leftrightarrows 2\ NO_2(g)$$

incolor *marró*

Quin compost de nitrogen predomina a l'estiu?

Si a l'estiu l'ambient té un color més marronós que a l'hivern, vol dir que hi ha més proporció de diòxid de nitrogen (NO_2) a l'estiu a les ciutats contaminades. A l'estiu el procés està afavorit cap a la dreta.

⇒ A l'**estiu hi ha més NO_2** a l'ambient **a les ciutats contaminades**.

[0,25 p.]

Com afecta a l'equilibri un augment de temperatura?

La reacció de dissociació del N_2O_4 està desplaçada cap a la dreta a l'estiu, quan la temperatura és més elevada, degut a que el N_2O_4 absorbeix calor per transformar-se en NO_2.

$$N_2O_4(g) + Q \leftrightarrows 2\ NO_2(g)$$

⇒ Les **temperatures** són **més altes** a l'estiu i la **reacció està desplaçada a productes** (cap a la dreta).

[0,30 p.]

Justificació del tipus de reacció: exotèrmica o endotèrmica

Quan la temperatura augmenta (a l'estiu) la reacció està desplaçada cap a productes (cap a la dreta). Això indica que la reacció és endotèrmica, ja que, en aquest tipus de reaccions, la constant d'equilibri augmenta amb la temperatura.

La **reacció** és **endotèrmica**, està **desplaçada** cap a **productes** a l'**estiu**.

⇒ A **temperatura més elevada** la K_c **és més gran**; per tant, la **reacció és endotèrmica.**

⇒ K_c (estiu) > K_c (hivern)

[0,35 p.]

Efecte en l'equilibri del canvi de pressió a temperatura constant

En augmentar la pressió segons el principi de Le Chatelier, l'equilibri es desplaça cap al sentit amb menys nombre de mols per, d'aquesta manera, produir una disminució de la pressió. En aquest cas, $\Delta n = 1$ ($\Delta n = \Sigma n_{productes} - \Sigma n_{reactius} = 2 - 1 = 1$) i l'efecte serà que la reacció es desplaçarà en el sentit dels reactius (cap a l'esquerra) i es produirà més N_2O_4.

En disminuir la pressió, l'equilibri es desplaça cap al sentit amb un nombre més gran de mols per, d'aquesta manera, produir un augment de la pressió. En aquest cas, $\Delta n = 1$ i l'efecte serà que la reacció és desplaçarà en el sentit dels productes (cap a la dreta) i es produirà més NO_2.

⇒ **Si la pressió augmenta, s'afavoreix la reacció inversa** (cap a l'esquerra).

⇒ **Si la pressió disminueix, s'afavoreix la reacció directa** (cap a la dreta).

[0,35 p.]

Problema 4a

Càlcul de la constant d'equilibri K_c

Càlcul dels mols inicials d'etanol **[0,10 p.]**

Massa molar d'etanol: $CH_3CH_2OH = 2 \times 12 + 6 \times 1 + 16 = 46$ g mol^{-1}

$$115\ mL\ \frac{0{,}80\ g}{1\ mL}\frac{1\ mol\ etanol}{46\ g} = 2\ mol\ d'etanol$$

Càlcul dels mols a l'equilibri

$$CH_3COOH(l) + CH_3CH_2OH(l) \rightleftharpoons CH_3COOCH_2CH_3(l) + H_2O(l)$$

Mols inici	1 mol	2 mol	--	--	
Mols equilibri	1 – x	2 – x	x	x	**[0,15 p.]**

- *Càlcul de la x:*

Si a l'equilibri hi ha 0,15 mols d'àcid acètic, es pot calcular la x:
En l'equilibri ⇒ 1 – x = 0,15 mols d'àcid acètic
⇒ **x = 0,85 mols** **[0,15 p.]**

- *Càlcul de concentracions:*

Considerant el valor de la x i que el volum es manté constant i igual a V:

Mols $CH_3COOH = 0{,}15$ ⇒ $[CH_3COOH] = 0{,}15 / V$
Mols $CH_3CH_2OH = 2 - 0{,}85 = 1{,}15$ ⇒ $[CH_3CH_2OH] = 1{,}15 / V$
Mols $CH_3COOCH_2CH_3 = 0{,}85$ ⇒ $[CH_3COOCH_2CH_3] = 0{,}85 / V$
Mols $H_2O = 0{,}85$ ⇒ $[H_2O] = 0{,}85 / V$

Càlcul de K_c

Com que el volum es manté constant, en aquest cas es pot simplificar el càlcul de K_c:

$$K_c = \frac{[CH_3COOCH_2CH_3][H_2O]}{[CH_3COOH][CH_3CH_2OH]} = \frac{0{,}85 \cdot 0{,}85}{0{,}15 \cdot 1{,}15} = 4{,}188$$

⇒ **K_c = 4,188** **[0,40 p.]**

Pictograma 1 i 3



Inflamable. Els productes amb aquest pictograma acostumen a ser en **format gas, aerosol, líquid o vapor** i presenten un alt risc d'inflamació. **[0,15 p.]**



Pictograma 2
Corrosiu. Pot ser corrosiu per a alguns metalls; pot provocar cremades a la pell i lesions oculars greus. **[0,15 p.]**

Pictograma 4



Irritació cutània. Aquest producte, per contacte breu, perllongat o repetitiu amb la pell o les mucoses, pot provocar una reacció inflamatòria. **[0,15 p.]**

Pregunta 4b

Raoneu com afecta el rendiment de la reacció l'excés d'etanol i l'eliminació d'aigua

Segons el principi de Le Châtelier, la producció d'acetat d'etil augmentarà quan la pertorbació de l'equilibri provoqui que l'equilibri es desplaci cap a la dreta (en el sentit dels productes). Per tant, si es formen més productes, incrementarà el rendiment de la reacció.

Gran excés d'etanol

Si hi ha un gran excés d'etanol s'està **incrementant la concentració d'un dels reactius**; per compensar-ho, segons el principi de Le Châtelier, **l'equilibri es desplaçarà cap a la formació de productes** i, per tant, el **rendiment** de la reacció **augmenta**.

⇒ **Afavoreix la reacció directa** (cap a la dreta) i es produirà més acetat d'etil i més aigua.

⇒ **El rendiment de la reacció augmenta.** **[0,45 p.]**

Eliminació de l'aigua

L'aigua és un dels productes de la reacció; en **eliminar-la es disminueix la concentració d'un dels productes.** Per compensar-ho, segons el principi de Le Châtelier, **l'equilibri es desplaça cap a la formació de productes** i, per tant, el **rendiment** de la reacció **augmenta**.

⇒ **Afavoreix la reacció directa** (cap a la dreta) i es produirà més acetat d'etil i més aigua.

⇒ **El rendiment de la reacció augmenta.** **[0,45 p.]**

Rendiment sense catalitzador àcid

La presència o l'absència de catalitzador no afecta el rendiment de la reacció.

Un catalitzador modifica la cinètica de la reacció (velocitat), però no n'altera l'equilibri. **Els catalitzadors actuen augmentant la velocitat de la reacció**; per tant, la reacció serà més lenta sense catalitzador.

⇒ **El rendiment de la reacció serà el mateix**, però la reacció serà més lenta

[0,35 p.]

6. PAU 2023 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 3

Pregunta 3a

Efecte d'un increment de temperatura a l'equilibri i la Kc segons els tipus de reacció: endotèrmica o exotèrmica

En una reacció endotèrmica ($\Delta H^0 > 0$) l'augment de temperatura afavoreix la reacció cap a la dreta (productes).

- Per tant, un **augment de temperatura** ($T_2 > T_1$) **augmenta** el valor de la **constant d'equilibri** de la reacció:

  $\Rightarrow K_c{}^{T2} > K_c{}^{T1}$ per reaccions endotèrmiques

[0,25 p]

En una reacció exotèrmica ($\Delta H^0 < 0$) l'augment de temperatura afavoreix la reacció cap a l'esquerra (reactius).

- Per tant, un **augment de temperatura** ($T_2 > T_1$) **disminueix** el valor de la **constant d'equilibri** de la reacció:

  $\Rightarrow K_c{}^{T2} < K_c{}^{T1}$ per reaccions exotèrmiques

[0,25 p]

Justificació de tipus de reacció: exotèrmica o endotèrmica

Com es pot veure en les dades de la taula, en **augmentar la temperatura** es **produeix un augment de la constant d'equilibri** de la reacció, per tant, **la reacció és endotèrmica** ($\Delta H^0 > 0$), ja que si la temperatura augmenta ($T_2 > T_1$), s'afavoreix la reacció cap a la dreta i la K_c augmenta.

⇒ Kc T2 > Kc T1 es tracta d'una reacció endotèrmica

[0,25 p]

Efecte en l'equilibri de la variació de pressió a temperatura constant

En augmentar la pressió segons el principi de Le Châtelier, l'equilibri es desplaça cap al sentit amb menys nombre de mols, per d'aquesta manera produir una disminució de la pressió. En aquest cas serà en el sentit dels reactius, és a dir en la producció de triòxid de sofre i, per tant, disminueix el rendiment de la reacció.

⇒ **Afavoreix** la **reacció inversa** (cap a l'esquerra) i es produirà menys diòxid de sofre

⇒ **Disminueix el rendiment de la reacció**

[0,25 p]

Efecte en l'equilibri de l'increment de volum a temperatura constant

En augmentar el volum segons el principi de Le Châtelier, l'equilibri es desplaça cap al sentit amb més nombre de mols, per d'aquesta manera produir un increment de la pressió. En aquest cas serà en el sentit dels productes és a dir en la producció de diòxid de sofre i oxigen per tant augmenta el rendiment de la reacció.

⇒ **Afavoreix la reacció directa** (cap a la dreta) i es produirà més diòxid de sofre i oxigen

⇒ **Augmenta el rendiment de la reacció**

[0,25 p]

Pregunta 3b

Concentracions de les espècies a l'equilibri

	$2\ SO_3(g)$	$\rightleftarrows$	$2\ SO_2(g)$	+	$O_2(g)$
concentració inici	c		--		--
concentració equilibri	c – 2x		2x		x

Càlcul x:

Si a l'equilibri hi ha 2 mol O_2 i es coneix el volum es pot calcular "x":

V = 0,80 L

$[O_2]$ = nombre de mols / volum

$$\Rightarrow [O_2] = \frac{n}{V} = \frac{2{,}0\ mol\ O_2}{0{,}80\ L} = 2{,}5\ \text{M}$$

⇒ x = 2,5

[0,30 p]

Càlcul de concentracions a l'equilibri:

	$2\ SO_3(g)$	$\rightleftarrows$	$2\ SO_2(g)$	+	$O_2(g)$
concentració inici	c		--		--
concentració equilibri	c – 5		5		2,5

- x = 2,5
- per tant, es coneixen totes les concentracions menys $[SO_3]$
  - el valor de K_c a 1000 K es pot obtenir de la taula ⇒ K_c (1000 K)= 3,2 x 10^{-3}

$$K_c = \frac{[SO_2]^2\,[O_2]}{[SO_3]^2} = \frac{5^2\ \cdot\ 2{,}5}{(c-5)^2} = 3{,}2\ x\ 10^{-3}$$

[0,35 p]

⇒ 62,5 = 0,0032 (c^2 – 10 c + 25) ⇒ 0,0032 c^2 – 0,032 c – 62,42 = 0

⇒ **c** = $144{,}75\ \text{mol L}^{-1}$ = **144,75 M**

[0,30 p]

l'altra solució és negativa

Les concentracions a l'equilibri són:

⇒ **[SO3]eq = c – 5 = 144,75 - 5 = 139,75 M**

⇒ **[SO2]eq = 5 M**

⇒ **[O2]eq = 2,5 M**

[0,30 p]

7. PAU 2023 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 3

Pregunta 3a

Càlcul de la constant d'equilibri en concentracions (Kc)

	$Cl_2(g)$	+ $SO_2(g)$	⇄	$SO_2Cl_2(g)$
Mols inici	--	--		--
Mols equilibri	0,5	0,1		0,4

Càlcul de les concentracions en equilibri (en M) de cada compost (V=1 L):

Concentració de Cl_2 en l'equilibri = 0,5 mol / 1 L = **0,5 M**

Concentració SO_2 en l'equilibri = 0,1 mol / 1 L = **0,1 M**

Concentració SO_2Cl_2 en l'equilibri = 0,4 mol / 1 L = **0,4 M**

[0,15 p.]

Càlcul de la constant d'equilibri (Kc):

$$K_c = \frac{[SO_2Cl_2]}{[Cl_2]\,[SO_2]} = \frac{0{,}4\ M}{0{,}5\ M\ \cdot\ 0{,}1M} = 8{,}0$$

⇒ Kc = 8,0 [0,25 p.]

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

Nova concentració en l'equilibri després d'afegir 0,3 mols de SO2

	$Cl_2(g)$	+ $SO_2(g)$	⇄	$SO_2Cl_2(g)$
Mols inici	0,5	0,1+0,3		0,4
Mols equilibri	0,5-x	0,4-x		0,4+x
Concentracions Equilibri	(0,5-x)/1	(0,4-x)/1		(0,4+x)/1

[0,15 p.]

Càlcul valor de x:

$$K_c = 8 = \frac{[SO_2Cl_2]}{[Cl_2\,]\,[SO_2]} = \frac{(0{,}4 + x)}{(0{,}5 - x)\cdot(0{,}4 - x)} = \frac{(0{,}4 + x)}{0{,}2 - 0{,}9\,x + x^2}$$

[0,25 p.]

Reordenant termes s'obté una equació de segon grau:

$(0{,}4 + x) = 8\,(0{,}2 - 0{,}9\,x + x^2) \Rightarrow 8\,x^2 - 8{,}2\,x + 1{,}2 = 0$

Resolent l'equació de segon grau s'obté $x_1 = 0{,}848$ i $x_2 = 0{,}177$.

El valor $x_1 = 0{,}848$ donaria concentracions negatives, només el valor 0,177 donarà resultats coherents. ⇒ **x = 0,177**

[0,20 p.]

Càlcul de la concentració (en M) en equilibri del clorur de sulfuril (V=1,0 L):

$[SO_2Cl_2]$ l'equilibri = (0,4 mol + x) / 1 L = (0,4 mol + 0,177 mol) / 1 L = **0,577 M**

⇒ La concentració de clorur de sulfuril en l'equilibri és 0,557 M.

[0,25 p.]

Pregunta 3b

Com afecta el rendiment de la reacció

- Un augment de temperatura

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

  ⇒ **Afavorim la reacció inversa** (cap a l'esquerra), formació de diòxid de sofre i clor gasós, i es produirà menys SO_2Cl_2.

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

  [0,30 p.]

- Un augment del volum del recipient

  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 estequiomètrics*) per tornar a una nova situació d'equilibri.

  Mols de gasos reactius = 1 + 1 = 2 i mols de gasos productes = 1.

  ⇒ La reacció es desplaçarà cap a l'esquerra i es produirà menys SO_2Cl_2.

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

  [0,30 p.]

– Eliminació del catalitzador

Els catalitzadors modifiquen la velocitat de la reacció i no afecten l'equilibri químic.

⇒ **El rendiment de la reacció no quedarà afectat.**

[0,25 p.]

Com afecta el valor de la constant d'equilibri en concentracions (K_c) l'augment de temperatura i volum, i l'eliminació del catalitzador.

Per a una determinada reacció, la constant d'equilibri K_c **només depèn de la temperatura**, ni la variació de volum, ni la presència o no d'un catalitzador l'afectaran.

⇒ **La variació de volum i la presència o no d'un catalitzador no varien la K_c.**

En ser una **reacció exotèrmica** ($\Delta H^o < 0$), **l'augment de temperatura afavoreix la reacció cap a l'esquerra** (reactius).

⇒ **La K_c disminueix.**

[0,40 p.]

8. PAU 2023 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 4

Pregunta 4a

Calcular les concentracions de les tres substàncies en transcórrer 2 h

Reacció: $H_2(g) + I_2(g) \rightleftarrows 2\ HI(g)$ K_c (a 703 K) = 54,3

Dades. Temperatura = 703 K
Volum del reactor = 1,00 L
Inicial: t =0 0,0130 mol H_2; 0,0080 mol I_2; 0,0440 mol HI
t = 2h 0,0480 mol HI

	$H_2(g)$ +	$I_2(g)$ ⇄	2 HI(g)
t=0	0,0130	0,0080	0,0440
t=2	0,0130-x	0,0080-x	0,0440 + 2x

Sabem que a t=2 h ⇒ n_{HI} =0,0480 mol:
0,0440 + 2 x = 0,0480
⇒ **x = 0,0020 mol** (mols que reaccionen de cada reactiu)

[0,2 p]

Mol de cada substància (a t=2 h):
$n_{hidrogen}$ = 0,0130 – 0,0020 = 0,0110 mol
n_{iode} = 0,0080 – 0,0020 = 0,0060 mol
n_{HI} = 0,0480 mol

[0,1 p]

- *És correcte si troben aquestes dades per estequiometria (amb factors de conversió).*

Concentracions (a t=2 h)
[H_2] = $n_{hidrogen}$ / V = 0,0110 / 1,00 **= 0,0110 M**
[I_2] = n_{iode} / V = 0,0060 / 1,00 = **0,0060 M**
[HI] = n_{HI} / V = 0,0480 / 1,00 **= 0,0480 M**

[0,2 p]

- *És correcte si calculen directament les concentracions.*

Calcular el quocient de reacció (Q_c)

L'expressió de Q_c és com la constant d'equilibri (K_c) amb les concentracions de cada substància en un instant donat (fora de l'equilibri):

$$Q_c = ([HI]^2) / ([H_2] \times [I_2])$$

[0,3 p]

on les concentracions són a t= 2 h
$Q_c = (0,0480)^2) / [(0,0110) \times (0,0060)]$

$Q_c = 34,9$

[0,2 p]

Raonament de si el contingut del reactor està en equilibri

Comparem la Q amb la K_c: $K_c = 54,3$ $Q_c = 34,9$

$Q \neq K_c \Rightarrow$ **La reacció no està en equilibri**

[0,25 p]

Pregunta 4b

Dades. A les 5 h, la reacció està en equilibri.

Efecte sobre els mols de HI en disminuir el volum del reactor

[0,35 p]

En disminuir el volum, augmenta la pressió.

Quan la pressió total del recipient augmenta, la reacció es desplaça cap a on hi ha menys mols de gasos (coeficients estequiomètrics) per tal d'assolir un nou estat d'equilibri.

Reacció: $H_2(g) + I_2(g) \rightleftarrows 2\,HI(g)$

El nombre de mols de gasos (coeficients estequiomètrics) és el mateix en reactius i productes:

$n_{reactius} = 1 + 1 = 2$ i $n_{productes} = 2$.

En aquesta reacció, **la pressió no afecta a l'equilibri** i no desplaça la reacció ni cap a reactius ni cap a productes.

⇒ **la quantitat de mols de HI és la mateixa.**

Efecte sobre els mols de HI en eliminar $H_2(g)$

[0,3 p]

Si disminueix la concentració d'un reactiu, la reacció deixa d'estar en equilibri. El sistema torna a un nou equilibri desplaçant la reacció cap a l'esquerra (reactius) -principi de Le Châtelier.-

Reacció: $H_2(g) + I_2(g) \rightleftarrows 2\,HI(g)$

⇒ **la quantitat de mols de HI disminueix.**

Efecte sobre els mols de HI en introduir un catalitzador

[0,3 p]

La presència d'un catalitzador afecta a la velocitat de reacció, però no modifica l'equilibri químic. La constant d'equilibri no es modifica, ni tampoc les concentracions de reactius i productes a l'equilibri.

⇒ **la quantitat de mols de HI és la mateixa.**

Efecte sobre els mols de HI en augmentar la temperatura del reactor

[0,3 p]

L'entalpia estàndard de formació del HI és positiva (reacció endotèrmica):

Reacció: $H_2(g) + I_2(g) \rightleftarrows 2\,HI(g)$ $\Delta H > 0$

Una reacció endotèrmica absorbeix calor.

Un augment de temperatura implica que estem aportant més calor. La calor afavoreix la reacció cap a la dreta (productes).

⇒ **la quantitat de mols de HI augmenta.**

9. PAU 2022 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 2

Pregunta 2a

Reacció: $N_2\,(g) + 3\,H_2\,(g) \rightleftarrows 2\,NH_3\,(g)$ $\quad \Delta H^\circ$ (a 298 K) < 0

Càlcul de *Kp*

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

$$N_2\,(g) + 3\,H_2\,(g) \rightleftarrows 2\,NH_3\,(g)$$

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

[0,30 punts]

Massa molecular (NH_3) = 14 + 3 x 1 = 17 g/mol

mols NH_3 $\Rightarrow$ 50 g $\frac{1\ \text{mol}\ NH_3}{17\ \text{g}\ NH_3}$ = 2,9412 mol NH_3

2,9412 mol $NH_3 = 2x \Rightarrow$ $\boldsymbol{x = 1{,}4706\ \text{mol}}$

[0,15 punts]

Càlcul de les concentracions en equilibri (en M) de cada compost (V = 25 L):

Concentració de N_2 en l'equilibri = (2 – 1,4706) mol / 25 L = 0,021176 M

Concentració de H_2 en l'equilibri = (5 – 3 x 1,4706) mol / 25 L = 0,023528 M

Concentració de NH_3 en l'equilibri = 2,9412 mol / 25 L = 0,117648 M

[0,10 punts]

Càlcul de la constant d'equilibri (K_c):

$$Kc = \frac{[NH_3]^2}{[N_2]\,[H_2]^3} = \frac{0{,}117648^2}{0{,}021176 \cdot (0{,}023528)^3} = 5{,}02 \text{ x } 10^4$$

[0,40 punts]

$$\Rightarrow \boldsymbol{K_c = 5{,}02 \text{ x } 10^4}$$

Càlcul de K_p

- Relació entre K_c i K_p:

$$Kp = Kc\ (RT)^{\Delta n}$$

[0,10 punts]

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

Δ*n*: increment del nombre de mols de gasos en passar de reactius i productes

- Càlcul de *Kp* (si les pressions s'expressen en atmosferes):

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

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

$$\Rightarrow\ \boldsymbol{Kp = 14{,}68}$$

[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 NH_3

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'obtindrà 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 ($\Delta H^\circ < 0$). 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]

10. PAU 2022 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 5

Pregunta 5.a)

Càlcul de K_c

- Càlcul dels mol de $HCONH_2$ a partir de la massa molar:

  Massa molecular ($HCONH_2$) = 1+12+16+14+2= 45 g/mol

  9,0 g $HCONH_2$· $\frac{1mol\ HCONH_2}{45\ g\ HCONH_2}$ = 0,2 mol $HCONH_2$

[0,10 p]

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

	$HCONH_2(g) \rightleftarrows NH_3(g) + CO(g)$		
inici	0,2	--	--
equilibri	0,2-x	x	x

[0,20 p]

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

Les condicions experimentals són:

V= 10 L

P = 1,56 atm

T = 500 K

P V = n R T

n = (P V) / (RT)

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

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

[0,10 p]

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

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

$\Rightarrow$ 0,3805 = 0,2 + x $\Rightarrow$ **x = 0,1805 mol**

[0,10 p]

Càlcul de les concentracions en equilibri per calcular K_c:

$$[\mathrm{HCONH_2}] = \frac{(0{,}2 - x)\ mol}{10\ L} = \frac{(0{,}2 - 0{,}1805)\ mol}{10\ L} = 1{,}95\ x10^{-3}\ M$$

$$[\mathrm{NH_3}] = [CO] = \frac{x\ mol}{10\ L} = \frac{0{,}1805\ mol}{10\ L} = 1{,}805\ x\ 10^{-2}\ M$$

[0,10 p]

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

$$Kc = \frac{[NH_3\,][CO]}{[\mathrm{HCONH_2}]} = \frac{(1{,}805\ x\ 10^{-2})(1{,}805\ x\ 10^{-2})}{1{,}95\ x\ 10^{-3}} = \mathbf{0,167}$$

$\Rightarrow$ 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:

$$Kp = Kc\ (RT)^{\Delta n}$$

[0,10 p]

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

Δn: variació del nombre de mol de gasos en la reacció

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

Δn = Σ n $_{\text{productes}}$ – Σ n $_{\text{reactius}}$ = 2 – 1 = 1

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

$\Rightarrow$ $\boldsymbol{K_p}$ **= 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 J K^{-1} 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 és desplaçarà cap a on hi ha més mols de gasos (*coeficients estequiomètrics*) 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_3

  ⇒ **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 és 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_3
  ⇒ **Disminueix el rendiment de la reacció**

  [0,20 p]

- Un augment de la temperatura

  La reacció és endotèrmica ($\Delta H^o > 0$). Això ens indica que la reacció absorbeix calor en la reacció directa (cap a la dreta) i desprèn calor en a 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_3
  ⇒ **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, Kc

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]

Pregunta 7a

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

Expressió de la constant d'equilibri

Reacció:

$2\ HgO(s) \rightleftarrows 2\ Hg(g) + O_2(g)$

$K = [Hg]^2 \cdot [O_2]$

[0,30 punts]

Plantejament de l'equilibri

	$2\ HgO(s)$	$\rightleftarrows 2\ Hg(g)$	$+\ O_2(g)$
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_2 en equilibri en la constant K_c.

Càlcul de x (mols de O_2):

$V = 10\ L$

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

$K = 4x^3 / 1000 \quad \Rightarrow \quad 1,19x10^{-7} = 4x^3 / 1000$

$x = (2,975x10^{-5})^{1/3}$

$x = 3,10x10^{-2} \Rightarrow$ mols de O_2 en equilibri = $3,10x10^{-2}$

[0,50 punts]

Si no han explicitat el plantejament de l'equilibri, però quan substitueix les dades a la *Kc* 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_2)

Massa molecular (O_2) = 16,0 x 2 = 32,0 g/mol

$3,10x10^{-2}\ mol\ O_2 \times (32,0\ g\ O_2 / 1\ mol\ O_2) = 0,992\ g\ O_2$

$\Rightarrow$ **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 300ºC

Variable: temperatura

Reacció:

$$2\ HgO(s) \rightleftarrows 2\ Hg(g) + O2(g) \quad \Delta H(\text{a } 400ºC) > 0$$

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 300ºC enlloc de 400ºC obtenim menys massa d'oxigen**.

[0,80 punts]

Justificar si es modifica el valor de la K_c a 300ºC

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

Si la reacció la realitzem **a 300ºC enlloc de 400ºC canvia la K_c**.

[0,45 punts]

12. PAU 2021 · Setembre · Sèrie 1 · Exercici 2

Pregunta 2a

Reacció: $2\ C_2H_4\,(g) + O_2(g) \rightleftarrows 2\ C_2H_4O(g)$ $\quad \Delta H^0$ (a 298 K) = -210 kJ

Determinar la Kc

Reacció:	$2\ C_2H_4\,(g)$	+	$O_2(g)$	$\rightleftarrows$	$2\ C_2H_4O(g)$
Inicial	2,5		1,0		
Equilibri	2,5 – 2x		1,0 – x		2x

Dades en equilibri:

mol de C_2H_4O = 0,51 $\Rightarrow$ 2x = 0,51 $\Rightarrow$ x = 0,255 mol

[0,2p]

Mols en equilibri:

n (C_2H_4) = 2,5 – 2x = 2,5 – (2 x 0,255) = 1,990

n (O_2) = 1,0 – x = 1,0 – 0,255 = 0,745

n (C_2H_4O) = 0,51

Concentracions en equilibri: volum =1 L

[C_2H_4] = 1,990/ 1 $\Rightarrow$ **[C_2H_4] = 1,990 M**

[O_2] = 0,745 / 1 $\Rightarrow$ **[O_2] = 0,745 M**

[C_2H_4O] = 0,51 / 1 $\Rightarrow$ **[C_2H_4O] = 0,510 M**

[0,3 p]

Constant d'equilibri en concentracions:

$K_c = ([C_2H_4O]^2) / ([C_2H_4]^2\ [O_2])$

[0,3 p]

Substituïm: $K_c = (0,510)^2 / [(1,990)^2\ (0,745)]$

$\Rightarrow$ $\boldsymbol{K_c = 0,0882}$

[0,2 p]

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

Justificar si K_p és igual o diferent de K_c

La relació entre la K_p i la K_c és: $K_p = K_c\,(RT)^{\Delta n}$

[0,15 p]

On Δn és la diferència de coeficients estequiomètrics entre productes i reactius (només gasos):

$\Delta n = (2) - (2 + 1) = -1$

Perquè $K_p = K_c$ cal que Δn = 0.

Si $\Delta n = -1 \Rightarrow \boldsymbol{K_p \neq K_c}$

[0,1 p]

És correcte si calculen el valor de Kp i comproven que és diferent de Kc

Pregunta 2b

Reacció: $2\ C_2H_4\,(g) + O_2(g) \rightleftarrows 2\ C_2H_4O(g)$ ΔH^0 (a 298 K)= -210 kJ

Justificar si el rendiment és més favorable si V=1,00 L i T=400 K

[0,5 p]

Variable: temperatura (sense canviar el volum).

La reacció és exotèrmica (ΔH < 0). Això vol dir que desprèn calor per formar els productes, i absorbeix calor per a formar els reactius.

Si augmentem la temperatura, estem afegint calor i afavorim la reacció cap a l'esquerra: formació de reactius.

⇒ Afavorir els reactius implica **disminuir el rendiment de la reacció.**

Justificar si el rendiment és més favorable si V=0,50 L i T=298 K

[0,5 p]

Variable: volum (sense canviar la temperatura).

Si el volum del reactor disminueix, la pressió augmenta.

Quan la pressió total del recipient augmenta, la reacció es desplaça cap a on hi ha menys mols de gasos, per assolir un nou equilibri.

En la reacció, en els productes tenim menys mols de gasos (2) que en els reactius (3).

Per tant, afavorim que la reacció es desplaci cap a la dreta (formació de productes).

⇒ Afavorir els productes implica **augmentar el rendiment de la reacció**

Disminuirà, o no, la [C2H4O] en equilibri si no hi posem Ag(s)

[0,25 p]

Mantenim el volum i la temperatura, però no hi afegim el catalitzador (plata sòlida).

Un catalitzador augmenta la velocitat de reacció, però no modifica l'equilibri (ni la K_c). Per tant, s'arriba al mateix estat d'equilibri amb o sense catalitzador.

⇒ La concentració d'òxid d'etilè (producte) no haurà disminuït quan s'arribi a l'equilibri (tindrem la mateixa concentració).

13. PAU 2021 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 7

Pregunta 7a

Reacció: $4\ HCl(g) + O_2(g) \rightleftarrows 2\ H_2O(g) + 2Cl_2(g)$ $\quad \Delta H^o < 0$

Calcular la K_c

- Calculem les masses moleculars i els mols:

Massa molecular (HCl) = 1,0 + 35,5 = 36,5 g/mol

Massa molecular (O_2) = 2 x 16,0 =32 g/mol

Massa molecular (Cl_2) = 2 x 35,5 =71 g/mol

Mols inicials de HCl = 32,85 g HCl x (1 mol HCl / 36,5 g HCl) = 0,90

Mols inicials de O_2 = 38,40 g O_2 x (1 mol O_2 / 32 g O_2) = 1,20

Mols en equilibri de Cl_2 = 28,40 g Cl_2 x (1 mol Cl_2 / 71 g cl_2) = 0,40

[0,15 p]

- Plantegem l'equilibri:

	$4\ HCl(g)$	$+\ O_2(g) \rightleftarrows$	$2\ H_2O(g)$	$+\ 2Cl_2(g)$
mols inicials	0,90	1,20	--	--
mols equilibri	0,90 – 4x		1,20 – x	2x 2x

Dada.

En equilibri tenim 0,40 mol Cl_2

$2x = 0,40 \Rightarrow$ **x = 0,20** **[0,4 p]**

És correcte si plantegen l'equilibri havent calculat prèviament les concentracions en mol/L (compte: en aquest cas el volum per trobar K_c serà d'1 L).

- Calculem les concentracions en equilibri (en M) de cada compost (V=10 L)

$[HCl] = [0,90 – (4 \times 0,20)] / 10 = 0,010$ M

$[O_2] = (1,20 – 0,20) / 10 = 0,100$ M

$[H_2O] = (2 \times 0,20) / 10 = 0,040$

$[Cl_2] = 0,40 / 10 = 0,040$ M

[0,2 p]

- Càlcul de la constant d'equilibri:

$K_c = ([H_2O]^2 \cdot [Cl_2]^2) / ([HCl]^4 \cdot [O_2]$

[0,3 p]

$K_c = [(0{,}040^2 \times 0{,}040^2)] / [(0{,}010)^4 \cdot (0{,}100)]$

$\Rightarrow$ **$K_c = 2{,}56 \times 10^3$**

[0,2 p]

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

Pregunta 7b

Com afecta al rendiment de la reacció

- Una disminució del volum

En disminuir el volum del recipient, augmenta la pressió en el seu interior. La reacció és desplaçarà cap a on hi ha menys mols de gasos (*coeficients estequiomètrics*) per tornar a una nova situació d'equilibri.

Mols de gasos reactius = 4 + 1 = 5

Mols de gasos productes = 2 + 2 = 4

$\Rightarrow$ La reacció es desplaçarà cap la dreta i produirà més clor.

$\Rightarrow$ Augmenta el rendiment de la reacció

[0,2 p]

- Un augment de la massa d'oxigen

En augmentar la massa d'oxigen (reactiu) la reacció és desplaçarà cap a la dreta (productes) per restablir un nou estat d'equilibri.

$\Rightarrow$ La reacció es desplaçarà cap la dreta i produirà més clor.

$\Rightarrow$ Augmenta el rendiment de la reacció

[0,2 p]

- Un augment de la temperatura

La reacció és exotèrmica ($\Delta H^o < 0$). Això ens indica que la reacció desprèn calor en la reacció directa (cap a la dreta) i absorbeix calor en a reacció inversa (cap a l'esquerra)

Un augment de temperatura implica aportar calor al sistema.

$\Rightarrow$ Afavorim la reacció inversa (cap l'esquerra) i es produirà menys clor.

$\Rightarrow$ Disminueix el rendiment de la reacció

[0,2 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

[0,2 p]

Com afecta a la constant d'equilibri, Kc

La Kc només depèn de la temperatura.

⇒ la disminució del volum, l'augment de massa d'oxigen o l'addició d'un catalitzador no modifica la constant d'equilibri Kc

[0,3 p]

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

⇒ la Kc disminueix

[0,15 p]

14. PAU 2021 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 6

PREGUNTA 6a

Concentracions a l'equilibri en molaritat

$[NO] = 4\times10\text{-}4$ M

$[O_2] = 7\times10\text{-}4$ M

$[NO_2] = 6\times10\text{-}4$ M

[0,5 p]

[només 0,2p si les unitats són incorrectes]

Constant d'equilibri de concentracions

$K_c = [NO_2]^2 / ([NO]^2 [O_2]) = (6\times10^{-4})^2 / ((4\times10^{-4})^2 \cdot 7\times10^{-4})) = 3214,3$

[0,5 p]

Concentració de diòxid de nitrogen ha superat el llindar establert per la OMS

Llindar OMS 40 $\mu g\cdot m^{-3}$ NO2

Calculem aquesta concentració del llindar en unitats de molaritat:

40 $\mu g\cdot m^{-3}$ NO_2 x ($1m^3$ / 1000L) x (1g /10^6 µg) x (1 mol NO_2 / 46 g NO_2) = $8,7\times10^{-10}$ M

La concentració de $[NO_2] = 6\times10^{-4}$ M de l'experiment és superior al llindar establert per la OMS.

[0,25 p]

PREGUNTA 6b

D'acord al principi de Le Châtelier, en provocar una pertorbació a un sistema en equilibri, aquest evoluciona en el sentit de contrarestar la pertorbació. En augmentar la temperatura exterior, el sistema evolucionarà absorbint calor de l'entorn. A més, canvia el valor de les constants d'equilibri.

[0,25 p]

En el cas del problema, si el valor de Kc disminueix en augmentar la temperatura, segons l'expressió de Kc significa que augmenten les concentracions de monòxid de nitrogen i d'oxigen i disminueix la de diòxid de nitrogen, és a dir que l'equilibri s'ha desplaçat cap a la formació de reactius. Per aquest motiu es pot deduir que la reacció és exotèrmica.

Si fos endotèrmica, al augmentar la temperatura afavoriríem la formació de producte.

[0,6 p]

Es formarà més diòxid de nitrogen en el procés contrari, quan disminueixi la temperatura externa, o sigui a l'hivern.

[0,4 p]

---

15. PAU 2020 · Setembre · Sèrie 4 · Exercici 5

Pregunta 5a

Determinar quina seria la qualitat de l'aire (EQAB)

Reacció: $2\ NO(g) + O_2(g) \rightleftarrows 2\ NO_2(g)$ K_c (a 20º C) = $3{,}21 \times 10^2$

Expressió de la constant d'equilibri: $K_c = [NO_2]^2 / ([NO]^2 \cdot [O_2])$ **[0,4 p]**

Dades en equilibri: $[NO] = 4{,}20 \times 10^{-10}$ M
$[O_2] = 8{,}31 \times 10^{-2}$ M

Aïllem $[NO_2]$ i substituïm les dades:

$[NO_2]^2 = (K_c \times [NO]^2 \times [O_2]))$

$[NO_2]^2 = (3{,}21 \times 10^2) \times (4{,}20 \times 10^{-10})^2 \times (8{,}31 \times 10^{-2})$

$[NO_2]^2 = 4{,}7055 \times 10^{-18}$

$[NO_2] = 2{,}1692 \times 10^{-9}$ M **[0,2 p]**

Transformem les unitats de la $[NO_2]$, de M a µg/m^3

Massa molecular $NO_2 = (14) + (2 \times 16) = 46$ g/mol

$2{,}1692 \times 10^{-9}$ mol NO_2 / L x (46 g NO_2 / 1 mol NO_2) x (10^6 µg NO_2 / 1 g NO_2) x
x (1 L / 1 dm^3) x (10^3 dm^3 / 1 m^3) = 99,8 µg/m^3

[0,25 p]

$[NO_2] = 99{,}8$ µg/m^3 $\Rightarrow$ Aquest valor es troba, segons la taula, entre 40 i 140 µg/m^3:

$\Rightarrow$ **La qualitat de l'aire (EQAB) és moderada** **[0,4 p]**

Pregunta 5b

Justificar quan és previsible que hi hagi més boira fotoquímica en una ciutat, en dies molt calorosos o en dies de molt fred

Efecte de la temperatura sobre l'equilibri

La reacció és endotèrmica ($\Delta H^o > 0$). Això vol dir que necessita absorbir calor per formar productes (desplaçar-se cap a la dreta).

Si augmentem la temperatura, **dies molt calorosos**, estem subministrant més calor a la reacció i afavorim que aquesta es desplaci cap a la dreta (productes). Es produeix més NO_2, **i augmenta la boira fotoquímica.**

[0,625 p]

Justificar quan és previsible que hi hagi més boira fotoquímica en una ciutat, en dies d'alta pressió o de baixa pressió

Efecte de la pressió sobre l'equilibri

Si la pressió total augmenta, la reacció es desplaça cap a on hi ha menys mols de gasos.

En la reacció de formació del NO_2 a partir de NO i O_2, en els productes tenim menys mols de gasos (2) que en els reactius (2 + 1 = 3).

En dies d'alta pressió afavorim que la reacció es desplaci cap a la dreta (productes). Es produeix més NO_2, **i augmenta la boira fotoquímica**.

[0,625 p]

16. PAU 2020 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 5

PREGUNTA 5a

Reacció ajustada: $N_2(g) + O_2(g) \rightleftarrows 2\ NO(g)$

Relació entre K_c i K_p, càlcul de K_p

Quan en una reacció en equilibri totes les especies que intervenen són gasos és habitual utilitzar la constant K_p, en funció de les pressions parcials dels gasos, en lloc de la K_c, en funció de les concentracions.

La K_p i la K_c estan relacionades per la següent expressió:

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

R = constant universal dels gasos ideals

T = temperatura en K

Δn = increment del nombre de **mols de gasos** al passar de reactius a productes

[0,6 p]

$K_c = 4{,}0 \times 10^4$

$\Delta n = 2$ mols NO – 1 mol N_2 – 1 mol $O_2 = 0$

$K_p = Kc\ (RT)^{\Delta n} = 4{,}0 \times 10^4\ (RT)^0 = 4{,}0\times10^4 \times 1 = 4{,}0\times10^4$

$Kp = 4{,}0\times10^4$ **[0,65 p]**

PREGUNTA 5b

Càlcul pressions parcials

A l'equilibri: $P_{NO} = 0{,}2$ atm; $P_{N2} = P_{O2} = x$

$$Kp = \frac{(P_{NO})^2}{P_{N2}\ P_{O2}} \quad ; \quad 4 \times 10^4 = \frac{(0{,}2\ atm)^2}{x^2} \quad ; \quad x^2 = \frac{(0{,}2\ atm)^2}{4 \times 10^4}$$

$x = 10^{-3}$ atm **$P_{N2} = P_{O2} = 10^{-3}$ atm** **[0,75 p]**

Efecte de la pressió en la formació de monòxid

El nombre de mols de gasos és igual a reactius i productes. $N_2(g) + O_2(g) \rightleftarrows 2\ NO(g)$

Una variació de la pressió no modificarà el desplaçament de l'equilibri, per tant, no afavorirà la formació del NO.

[0,5 p]

17. PAU 2020 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 3

PREGUNTA 3a

	$SO_3(g)$	⇄	$SO_2(g)$ +	½ $O_2(g)$
Inici	C_o		-	-
Equilibri	$C_o - x$		x	x/2

(C_o és la concentració inicial de SO_3)

$$K_c = [SO_2]\cdot[O_2]^{1/2} / [SO_3] = (x \cdot (x/2)^{1/2}) / (C_o - x) = 0,47$$

[0,25 p]

A l'equilibri hi ha 2 mols d'O_2 en un volum de 0,8 L.

La concentració molar d'O_2 a l'equilibri és:
2 mols / 0,8 L = 2,5 mols·L^{-1}

[0,2 p]

Calculem x:
x/2 = 2,5 mol·L^{-1} → x = 5 mol·L^{-1}

Recuperem l'expressió de K_c i substituïm els valor de K_c i x:
$K_c = (5 \cdot (5/2)^{1/2}) / (C_o - 5) = 0,47$

Aïllem C_o = 21,82 mol·L^{-1}

[0,4 p]

Calculem la concentració de totes les espècies a l'equilibri:
[SO_3] = $C_o - x$ = (21,82 – 5) mol·L^{-1} = **16,82 mol·L^{-1}**
[SO_2] = x = **5 mol·L^{-1}**
[O_2] = 2,5 mols·L^{-1}

[0,4 p]

PREGUNTA 3b

Mantenir el SO_3 dissociat significa desplaçar l'equilibri cap a la dreta per a la formació de productes. Com la reacció és endotèrmica ($\Delta H^o > 0$), a l'absorbir calor l'equilibri es desplaçarà cap a la formació de productes. Per tant, mantenir el recipient a altes temperatures afavorirà la dissociació del SO_3.

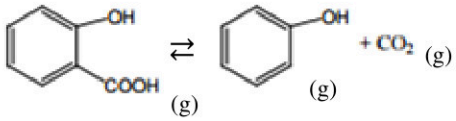
[0,6 p]

Als productes hi ha més mols de gasos que als reactius. Convé treballar a baixa pressió per desplaçar l'equilibri cap a la dreta per a la formació de productes.

[0,65 p]

18. PAU 2019 · Setembre · Sèrie 5 · Exercici 5

Pregunta 5a



$\Delta H < 0$

àcid salicílic fenol

Expressió de la constant d'equilibri en concentracions:

K_c = [fenol] x [CO_2] / [àcid salicílic] **[0,2 p]**

Quantitat formada de CO_2 gasós:

Dades: Volum reactor = 50 mL.

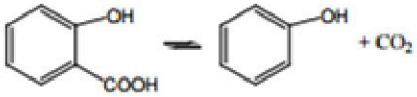
Mols inicials d'àcid salicílic = 0,3453 g /138,12 g/mol = 0,0025.

Volum en equilibri de CO_2 = 48,9 mL = 0,0489 L (a 1,0 atm i 298 K).

pV = n RT $\Rightarrow$ n = pV / RT = (1,0 x 0,0489) / (0,082 x 298)

$\Rightarrow$ **n = 2,00 x 10^{-3} mols de CO_2 en equilibri** **[0,2 p]**

Plantejament de l'equilibri:



mols inicials	0,0025	0	0	
mols en equilibri	0,0025 – x	x	x	**[0,1 p]**

Càlcul de la constant d'equilibri

Hem calculat els mols de CO_2 en equilibri (x): $\Rightarrow$ x = 2,00 x 10^{-3} = 0,00200.

Les concentracions en equilibri de les tres substàncies en el volum del reactor (50 mL, és a dir, 0,050 L) són les següents:

[àcid salicílic] = (0,0025 – x) / (0,050) = (0,0025 – 0,00200) / 0,050 = 0,0100 M

[fenol] = (x) / (0,050) = (0,00200) / (0,050) = 0,0400 M

[CO_2] = (x) / (0,050) = = (0,00200) / (0,050) = 0,0400 M

K_c = [fenol] x [CO_2] / ([àcid salicílic])

$\Rightarrow$ K_c = (0,0400) x (0,0400) / (0,0100)

K_c = 0,16 **[0,5 p]**

- *Es penalitza amb 0,2 p. si expressen la constant d'equilibri amb unitats.*

Pregunta 5b

Variable volum (mantenim la temperatura): raonament **[0,5 p]**

Una modificació del volum (de 50 a 100 mL), mantenint la temperatura a 473 K, modifica la pressió total en el recipient que conté tots els compostos en forma gasosa, i això pot afectar l'equilibri.

Si el volum augmenta, la pressió total del recipient disminueix i la reacció es desplaça cap a on hi ha més mols de gasos (coeficients estequiomètrics).

En aquesta reacció, en els productes tenim més mols de gasos (1+1=2) que en els reactius (1).

⇒ **Un augment de volum del reactor fa que la reacció es desplaci cap a productes i, per tant, es descompon més quantitat d'àcid salicílic.**

Variable temperatura (mantenint el volum): raonament **[0,5 p]**

La reacció és exotèrmica ($\Delta H < 0$). Això vol dir que desprèn calor per formar productes (desplaçament de l'equilibri cap a la dreta), i n'absorbeix quan forma reactius (desplaçament de l'equilibri cap a l'esquerra).

Si augmentem la temperatura (de 473 a 550 K) mantenint el volum del reactor en 50 mL, estem subministrant més calor i afavorim que la reacció absorbeixi calor i es desplaci cap a l'esquerra (reactius).

⇒ **Un augment de la temperatura del reactor farà que la reacció es desplaci cap als reactius i, per tant, es descompongui menys quantitat d'àcid salicílic.**

19. PAU 2018 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 1

Pregunta 1*a*

Dades: 2,24 g N_2 i 0,64 g O_2

Massa molar: $N_2 = 2 \times 14 = 28$ g/mol
$O_2 = 2 \times 16 = 32$ g/mol

Mols inicials: $n_{nitrogen} = 2{,}24 \text{ g} / 28 \text{ g/mol} = 0{,}08 \text{ mol } N_2$
$n_{oxigen} = 0{,}64 \text{ g} / 32 \text{ g/mol} = 0{,}02 \text{ mol } O_2$

Primer de tot cal igualar la reacció de formació del monòxid de nitrogen:

Reacció igualada: $N_2(g) + O_2(g) \rightleftarrows 2\ NO(g)$ **[0,1 p]**

- *Ho considerem correcte si l'alumne la iguala: ½ $N_2(g)$ + ½ $O_2(g)$ ⇄ $NO(g)$. Acceptem que la constant K_c que es dona en l'enunciat és també vàlida per a aquesta igualació.*

Reacció: $N_2(g) + O_2(g) \rightleftarrows 2\ NO(g)$ K_c (a 2000 °C) = 0,100

Inicial	0,08	0,02	—	
Equilibri	0,08 – x	0,02 – x	2x	**[0,2 p]**

Constant d'equilibri en concentracions:

$K_c = [NO]^2 / ([N_2] \cdot [O_2])$ **[0,2 p]**

Substituïm les concentracions en equilibri:

volum = 2,4 L

$0{,}100 = (2x / 2{,}4)^2 / [((0{,}08\text{-}x)/2{,}4) \cdot ((0{,}02\text{-}x)/2{,}4)]$ **[0,2 p]**

Els valors del volum (2,4 L) es poden simplificar

$0{,}100 = (2x)^2 / ((0{,}08\text{-}x) \cdot (0{,}02\text{-}x))$

Arribem a l'equació de 2n grau: $3{,}9\ x^2 + 0{,}01\ x - 1{,}6 \times 10^{-4} = 0$

Solució: $x = 5{,}25 \times 10^{-3}$ **[0,1 p]**

Monòxid de nitrogen que es formarà:

$\Rightarrow 2x = 2 \cdot (5{,}25 \times 10^{-3}) = 1{,}05 \times 10^{-2}$ mol de NO en equilibri

Massa de NO que es formarà:

Massa molar: NO = 14 + 16 = 30 g/mol

$1{,}05 \times 10^{-2}$ mol NO x (30 g NO / 1 mol NO) = 0,315 g de NO

⇒ **Es formaran 0,315 g de NO** **[0,2 p]**

Pregunta 1*b*

Reacció: $N_2(g) + O_2(g) \rightleftarrows 2\,NO(g)$ K_c (a 2000 ^oC) = 0,100 $\Delta H > 0$

Variable pressió: raonament **[0,5 p]**

Quan la pressió total del recipient augmenta, la reacció es desplaça cap a on hi ha menys mols de gasos (coeficients estequiomètrics), per assolir un nou equilibri.

En la reacció del N_2 amb l'O_2, en els productes tenim el mateix nombre de mols de gasos (2) que en els reactius (1 + 1 = 2).

⇒ **Un augment de la pressió no afectarà la quantitat de monòxid de nitrogen format**

Variable temperatura. Raonament: **[0,5 p]**

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

Si augmentem la temperatura, estem afegint calor i afavorim la reacció cap a la dreta (formació de productes: monòxid de nitrogen).

⇒ **Un augment de la temperatura provocarà un augment de la quantitat de monòxid de nitrogen format**

20. PAU 2018 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 5

Pregunta 5.a)

Reacció: $COCl_2(g) \rightleftarrows CO(g) + Cl_2(g)$

Càlcul de la constant d'equilibri en pressions

Dades en equilibri:
Pressió total = 2,00 bar
Pressió parcial CO = 0,017 bar
Pressió parcial Cl_2 = 0,017 bar

Expressió de la constant d'equilibri: $\boldsymbol{K_p = (p_{CO} \times p_{clor}) / (p_{fosgen})}$ **[0,3 p]**

La pressió total es pot posar en funció de la pressió parcial de tots els gasos:

$p = p_{fosgen} + p_{CO} + p_{clor} \quad \Rightarrow \quad p_{fosgè} = p - p_{CO} - p_{clor}$

$p_{fosgen} = 2,00 – 0,017 - 0,017$

$\boldsymbol{p_{fosgen} = 1,966}$ **bar**

En equilibri, la pressió parcial del fosgen és 1,996 **[0,2 p]**

Substituint valors: $K_p = (0,017 \times 0,017) / (1,966)$

$\boldsymbol{K_p = 1,47 \times 10^{-4}}$ **[0,2 p]**

- *Si expressen la constant amb unitats es penalitza 0,1 p.*

Comparació entre *K*p i *K*c

La relació entre K_p i K_c ve donada per l'expressió: $K_p = K_c (RT)^{\Delta v}$

Δv = diferència entre els coeficients estequiomètrics de productes i reactius gasosos.

$\Delta v = (1 + 1) – (1) = 1$

En ser Δv diferent de zero, K_p i K_c no tenen el mateix valor. **[0,3 p]**

Pregunta 5.b)

Efecte d'una disminució del volum del recipient en la dissociació del fosgen

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

Mols de gasos reactius = 1
Mols de gasos productes = 1 + 1 = 2

Per tant, la reacció es desplaçarà cap l'esquerra (reactius), és a dir, es fabricarà més fosgen.

⇒ **La dissociació del fosgen serà menor.** **[0,4 p]**

Efecte de l'addició d'un catalitzador en la dissociació del fosgen

En afegir el catalitzador, les concentracions en equilibri de reactius i productes no s'alteren. El **catalitzador només modifica la cinètica de la reacció (velocitat), però no altera l'equilibri de la reacció.**

⇒ **Per tant la dissociació del fosgen serà la mateixa.** **[0,4 p]**

Efecte d'una disminució del volum del recipient o de l'addició d'un catalitzador en la constant t'equilibri

La constant d'equilibri, K_p, **NOMÉS depèn de la temperatura.**

Si la temperatura es manté constant:

⇒ **la K_p no es modifica en cap dels dos casos.** **[0,2 p]**

21. PAU 2018 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 4

Pregunta 4a

Reacció: $H_2(g) + I_2(g) \rightleftarrows 2\ HI(g)$ **K_c (a 673 K) = 57,7**

Dades.

Temperatura = 673 K
Volum del reactor = 50,0 L
Tenim: 1,0 mol H_2
1,0 mol I_2
2,0 mol HI

Raonament de si la mescla es troba en equilibri

Raonament 1: a partir de la K_p

Expressió de la constant d'equilibri, K_p

$K_p = (p_{HI}^2) / (p_{hidrogen} \times p_{iode})$ **[0,2 p]**

Equació dels gasos ideals (en mescles): $p_i V = n_i R T$

Calculem les pressions parcials inicials de cada substància:

$p_{HI} = (n_{HI} R T) / V = (2,0 \times 0,082 \times 673) / 50,0 = 2,20744$ atm
$p_{hidrogen} = (n_{hidrogen} R T) / V = (1,0 \times 0,082 \times 673) / 50,0 = 1,10372$ atm
$p_{iode} = (n_{iode} R T) / V = (1,0 \times 0,082 \times 673) / 50,0 = 1,10372$ atm

[0,2 p]

Calculem el valor de Q (mateixa expressió que la K_p, però substituint les pressions parcial en equilibri per les inicials):

$Q = (2,20744)^2 / [(1,10372) \times (1,10372)] \Rightarrow$ **Q = 4,0** **[0,1 p]**

Comparem la Q (4,0) amb la K_p (57,7): **$Q \neq K_c$**

$\Rightarrow$ **La reacció no està en equilibri** **[0,2 p]**

Raonament 2: a partir de la K_c

Expressió de la constant d'equilibri:

$K_c = [HI]^2 / ([H_2] \cdot [I_2])$ **[0,1 p]**

De l'expressió: $K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$

Δn = (mols de gasos productes) – (mols de gasos reactius)
$\Delta n = (2) – (1 + 1) = 0$

$\Rightarrow K_c = K_p \Rightarrow K_c$ (a 673 K) = 57,7 **[0,1 p]**

Calculem les concentracions inicials de cada substància:

$[HI] = n_{HI} / V = 2,0 / 50,0 = 0,040$ M
$[H_2] = n_{hidrogen} / V = 1,0 / 50,0 = 0,020$ M
$[I_2] = n_{iode} / V = 1,0 / 50,0 = 0,020$ M **[0,2 p]**

Calculem el valor de Q (mateixa expressió que la K_c, però substituint les concentracions en equilibri per les inicials):

$Q = [(0,040)^2] / [(0,020)\cdot(0,020)] \Rightarrow$ **Q = 4,0**

[0,1p]

Comparem la Q amb la K_c: $Q \neq K_c$

$\Rightarrow$ **La reacció no està en equilibri** **[0,2 p]**

Raonament de com evolucionarà la reacció amb els temps **[0,3 p]**

Q < K La reacció ha de desplaçar-se cap a reactius o cap a productes per tal que quan s'arribi a l'equilibri es compleixi: Q = K

La reacció avançarà cap a la dreta (productes), augmentant la concentració dels productes (HI), i disminuint la concentració dels reactius (H_2 i I_2) per augmentar el valor de la Q, fins que s'iguali amb el valor de la K (K_c ó K_p) i s'arribi a l'equilibri.

Pregunta 4b

Reacció exotèrmica o endotèrmica (justificació) **[0,5 p]**

Una reacció exotèrmica desprèn calor i una reacció endotèrmica absorbeix calor.

De la taula "temperatura vs K_p" es pot observar que a l'augmentar la temperatura disminueix la K_p.

Un augment de temperatura implica que estem aportant més calor; si la K_p disminueix vol dir que la calor afavoreix que es formin més reactius i menys productes.

$\Rightarrow$ la calor està afavorint la reacció cap a l'esquerra (reactius)

$\Rightarrow$ la reacció cap a la dreta (formació de HI) s'afavoreix traient calor (baixant la temperatura).

$\Rightarrow$ **la reacció $H_2(g) + I_2(g) \rightleftarrows 2\,HI(g)$ és exotèrmica**

Efecte de la pressió en el rendiment de la reacció (justificació)

El rendiment d'una reacció augmenta si es formen més quantitat de productes. **[0,1 p]**

Quan la pressió total del recipient augmenta, la reacció es desplaça cap a on hi ha menys mols de gasos (coeficients estequiomètrics) per tal d'assolir un nou estat d'equilibri. **[0,2 p]**

En la reacció: $H_2(g) + I_2(g) \rightleftarrows 2\,HI(g)$
El nombre de mols de gasos (coeficients estequiomètrics) és el mateix en reactius i productes:

$n_{reactius} = 1 + 1 = 2$
$n_{productes} = 2$

En aquesta reacció, **la pressió no afecta a l'equilibri** i no desplaça la reacció ni cap a reactius ni cap a productes.
$\Rightarrow$ **En aquesta reacció, la pressió no afecta al rendiment de la reacció.** **[0,2 p]**

22. PAU 2017 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 6

Pregunta 6a

Reacció: $C_{10}H_8(s) \rightleftarrows C_{10}H_8(g)$ K_c (a 298 K)= $4{,}29 \times 10^{-6}$

Expressió de la K_c de l'equilibri heterogeni de sublimació del naftalè:

$K_c = [C_{10}H_8(g)]$ **[0,4 p]**

Càlcul dels mols (o concentració) de naftalè gasós en equilibri **[0,3 p]**

Massa molecular del naftalè = (10 x 12) + (8 x 1) =128 g/mol

Mols inicials de naftalè inicials = 0,64 g naftalè x (1 mol naftalè / 128 g naftalè)
Mols inicials de naftalè inicials = 0,0050

Volum = 20 L

	$C_{10}H_8(s)$	$\rightleftarrows$	$C_{10}H_8(g)$
Inicial	0,0050	--	
Equilibri	0,0050 – x		x

$K_c = 4{,}29 \times 10^{-6} = (x / 20)$
$\Rightarrow$ $x = 4{,}29 \times 10^{-6} \times 20$
$\Rightarrow$ **$x = 8{,}58 \times 10^{-5}$ mols de naftalè gasós en equilibri**

- *L'alumne pot calcular la concentració de naftalè gasós en equilibri en lloc del nombre de mols. Això és totalment correcte.*

Càlcul del percentatge de naftalè sublimat en equilibri: **[0,3 p]**

% de naftalè sublimat = [(mols naftalè gasosos en equilibri) / (mols naftalè inicials)] x 100

% de naftalè sublimat = $(8{,}58 \times 10^{-5} / 0{,}0050) \times 100$
% de naftalè sublimat = 1,716

Pregunta 6b

Reacció: $C_{10}H_8(s) \rightleftarrows C_{10}H_8(g)$ ΔH^o(a 298K) = 72,0 kJ mol^{-1}.

El signe de la **variació d'entropia serà positiva**, ja que el desordre en els productes és superior al dels reactius, perquè el nombre de molècules de gas és major en els productes (1 molècula) que en els reactius (cap molècula).

$\uparrow$ molècules de gasos $\Rightarrow$ $\uparrow$ desordre $\Rightarrow$ $S^o \uparrow$

S^o (productes) > S^o (reactius)

$\Delta S^o = S^o$ (productes) – S^o (reactius) > 0

$\Delta S^o > 0$ **[0,5 p]**

- *Si no fan cap raonament la puntuació d'aquest apartat serà nul·la (0 p).*

Per determinar l'espontaneïtat d'una reacció, a p i T constant, es mesura la variació d'energia lliure (ΔG^o), que es calcula:

$\Delta G^o = \Delta H^o - T\,\Delta S^o$ **[0,2 p]**

Si **$\Delta G^o < 0$ $\Rightarrow$ reacció espontània** **[0,1 p]**

En la reacció de sublimació del naftalè tenim:

$\Delta H^o > 0$
$\Delta S^o > 0$

En l'equació $\Delta G^o = \Delta H^o - T\Delta S^o$, el primer terme ($\Delta H^o$) és positiu i el segon ($-T\Delta S^o$) és negatiu, ja que la temperatura en Kelvin sempre és positiva. Perquè la variació d'energia lliure sigui negativa (**reacció espontània**) cal que el segon terme sigui alt i, per tant, la **temperatura ha de ser alta.**

$\Rightarrow$ **L'espontaneïtat del procés de sublimació s'afavoreix a temperatures altes.**
[0,2 p]

23. PAU 2017 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 4

Pregunta 4.a)

Quan en una reacció química s'assoleix l'equilibri, les concentracions de reactius i productes es mantenen constants amb el temps. Segons el gràfic, les concentracions d'A, B i C en equilibri serien:

[A] = 5 M [B] = 10 M [C] = 15 M **[0,2 p]**

Reacció: $2\ A\ (g) \rightleftarrows 2\ B\ (g) + 3\ C\ (g)$

Constant d'equilibri K_c:

Expressió de la constant: $K_c = ([B]^2 \times [C]^3) / ([A]^2)$ **[0,2 p]**

$K_c = (10^2 \times 15^3) / (5^2)$

$K_c = 13500$ **[0,2 p]**

- *Si expressen la K_c amb unitats es penalitzarà 0,1 p.*

Constant d'equilibri K_p:

Procediment 1 per calcular la K_p

$K_p = K_c\ (RT)^{\Delta n}$ **[0,2 p]**

$R = 0{,}082\ atm\ L\ K^{-1}$

$T = 300\ K$

Δn (diferència de coeficients estequiomètrics de gasos entre productes i reactius)

$\Delta n = (2+3)-(2)=3$

$K_p = 13500 \times (0{,}082 \times 300)^3$

$K_p = 2{,}01 \times 10^8$ **[0,2 p]**

- *Si expressen la K_p amb unitats es penalitzarà 0,1 p.*

Procediment 2 per calcular la K_p

Expressió de la constant: $K_p = (p_B^2 \times p_C^3) / (p_A^2)$ **[0,2 p]**

Equació dels gasos en pressió parcial: $p_i\ V = n_i\ R\ T$

$p_i = n_i\ R\ T / V = C_i\ R\ T$

$p_A = 5 \times 0{,}082 \times 300 = 123\ atm$

$p_B = 10 \times 0{,}082 \times 300 = 246\ atm$

$p_C = 15 \times 0{,}082 \times 300 = 369\ atm$

Substituint les pressions en la K_p:

$K_p = (246^2 \times 369^3) / (123^2)$

$K_p = 2{,}01 \times 10^8$ **[0,2 p]**

Si expressen la K_p amb unitats es penalitzarà 0,1 p.

Pregunta 4.b)

Modificació de la K_c **[0,5 p]**

La constant d'equilibri, K_c, només depèn de la temperatura.

Per tant, si la T es manté constant, la K_c també es manté constant
(independentment del canvi de volum).

Modificació de la massa del reactiu A **[0,5 p]**

Si augmentem el volum de recipient, **disminueix la pressió total** i la reacció per mantenir l'equilibri (*Llei de Le Chatelier*) **es desplaça cap a on hi ha més mols de gasos**.

Mols de gasos reactius (coeficients estequiomètrics) = 2
Mols de gasos productes (coeficients estequiomètrics) = 2 + 3= 5

La reacció es desplaça cap als productes i, per tant, disminueix la massa d'A.

24. PAU 2017 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 5

Pregunta 5

a) $2\ SO_2\ (g) + O_2\ (g) \rightleftarrows 2\ SO_3\ (g)$
$2\ mol \quad 1\ mol \quad 2\ mol$

Càlcul de la Q_c:

$Q_c = [SO_3]_o^2 / ([O_2]_o\ [SO_2]_o^2)$

$Q_c = (2/10)^2 / ((2/10)^2\ (1/10)) = 10$ (0,4 punts)

Càlcula de la K_c:

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

$\Delta n = n_{(gasos\ productes)} - n_{(gasos\ reactius)} = (2) - (2+1) = -1$

$K_c = 2{,}5\ 10^{10} / (0{,}082 \times 500)^{-1}$

$K_c = 1{,}025 \times 10^{12}$

(0,2 punts)

Comparació Q_c i K_c:

$Q_c = 10 < i\ \ K_c = 1{,}025 \times 10^{12}$

$Q_c < K_c$

No es troba a l'equilibri, i evoluciona cap a la formació de producte per igualar la Q_c amb la K_c

(0,4 punts)

- *També es podria argumentar a partir de $Q_P < K_P$.*

b) Disminució de la temperatura.
Com que la reacció és exotèrmica, una disminució de la temperatura fa desplaçar l'equilibri cap a la formació de producte.

$2\ SO_2\ (g) + 3\ O_2\ (g) \rightleftarrows 2\ SO_3\ (g) + \text{“Q”}$

$\downarrow T \Rightarrow \downarrow Q$. Segons Le Châtelier: $\uparrow Q \Rightarrow \rightarrow$ formació de producte. (0,3 punts)

D'altra banda, K_p augmenta en disminuir T ja que la reacció és exotèrmica. S'ha de recordar que la constant d'equilibri només depèn de T. (0,2 punts)

Disminució de la pressió.

Segons Le Châtelier: $\uparrow P \Rightarrow$ es desplaça cap a on hi ha més mols de gas
$\Rightarrow$ formació de reactius. (0,3 punts)

La K_p no varia amb la pressió ja que només depèn de la temperatura. (0,2 punts)

25. PAU 2016 · Setembre · Sèrie 1 · Exercici 2

2. EQUILIBRI QUÍMIC

a) Segons la llei de Dalton: $P = \sum p_i \Rightarrow p_{hidrogen} = P - p_{CO} - p_{metanol}$

$p_{hidrogen}$ = 1,00 – 0,27 – 0,20 = 0,53 atm (0,25 punts)

$K_p = \frac{p_{metanol}}{p_{CO} \cdot p^2_{hidrogen}} = \frac{0,20}{0,27 \cdot 0,53^2} = 2,637026489$ $K_P = 2,64$ (0,25 punts)

Relació entre K_p i K_c: $K_p = K_c\ (RT)^{\Delta \upsilon} \rightarrow K_c = K_p\ (RT)^{-\Delta \upsilon}$ (0,25 punts)

$CO(g) + 2\ H_2(g) \rightleftarrows CH_3OH(g) \rightarrow \Delta \upsilon = 1 - (1 + 2) = -2$

$K_c = (2,637026489)[(0,082)(673)]^{-(-2)}$ =8031,049922 $K_C = 8031$ (0,25 punts)

NOTA: Si posen unitats a les constants d'equilibri, resteu 0,1 punts a cada constant.

b) Un catalitzador modifica la velocitat de la reacció però no altera la posició de l'equilibri. En afegir un catalitzador, les concentracions dels compostos (reactius i productes) no s'alteren. Per tant, l'addició d'un catalitzador no augmentarà (ni disminuirà) la producció de metanol. (0,5 punts)

Si augmentem la pressió, segons el principi de Le Châtelier aquesta variable ha de disminuir, per la qual cosa l'equilibri es desplaçarà cap a on hi ha menys mols gasosos, és a dir, cap a la formació de productes. En conseqüència, un augment de la pressió total conduirà a un augment de la producció de metanol. (0,5 punts)

26. PAU 2016 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 6

6. EQUILIBRI QUÍMIC

a)

	N_2 (g)	+	3 H_2 (g)	⇄	2 NH_3 (g)
I	1 mol		3 mol		0
− R/P	− x		− 3 x		2 x
F	1 − x		3 (1 − x)		2 x

(0,25 punts

n_T = 1 – x + 3 (1 – x) + 2 x = 4 – 2 x = 2 (2 – x) mol
P V = n_T R T ⇒ P V = 2 (2 – x) R T ⇒
x = 2 – P V / (2 R T) = 2 – (80,0) (1,3) / ((2) (0,082) (528)) = 0,79896526 mol
(0,5 punts)

% N_2 convertit = (n (N_2) convertit / n (N_2) inicial) · 100 = (x / 1) · 100 =
= (0,79896526 / 1) (100) = 79,8965 N_2 convertit = 79,9% (0,25 punts)

b) $K_C = [NH_3]^2 / ([N_2]\ [H_2]^3)$ (0,25 punts)

$K_C = 4\ x^2\ V^2 / 27\ (1 - x)^4 = (4)\ (0,79896526)^2\ (1,3)^2 / ((27)\ (1 - 0,79896526)^4) = 97,8485$
$K_C = 97,8$ (0,75 punts)

27. PAU 2016 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 3

Pregunta 3a

$CH_3CH_2CH_2COOH(l) + CH_3CH_2OH\,(l) \rightleftarrows CH_3CH_2CH_2COOCH_2CH_3(l) + H_2O(l)$
àcid alcohol èster aigua

Càlcul de Q_c

Suposant un volum total V, el quocient Q_c és:

Q_c = [èster] [aigua] / [àcid] [alcohol]
Q_c = [(0,50/V) (0,50/V)] / [(0,40/V) (0,40/V)]

- *Si no comenten res del volum, i directament escriuen la Q_c amb els mol de reactius i productes, s'ha de penalitzar 0,1 punts (sobre 0,2 punts).*

Calculem el valor de Q_c (el volum no afecta el càlcul perquè es simplifica) i el comparem amb K_c:

$Q_c = (0,50)^2 / (0,40)^2$
Q_c = 1,56 **[0,2 punts]**

$Q_c = 1,56$ i $K_c = 4,0$
$\Rightarrow$ **$Q_c \neq K_c$ $\Rightarrow$ La mescla no està en equilibri** **[0,3 punts]**

Càlcul de les quantitats en equilibri

Plantegem l'equilibri:

$CH_3CH_2CH_2COOH(l) + CH_3CH_2OH\,(l) \leftrightarrows CH_3CH_2CH_2COOCH_2CH_3(l) + H_2O(l)$

inicial:	0,40 mol	0,40	0,50	0,50
equilibri	0,40 – x	0,40 – x	0,50 + x	0,50+x

[0,2 punts]

K_c = [èster] [aigua] / [àcid] [alcohol] *(el volum no intervé perquè es simplifica)*

$4,0 = [(0,50 + x) (0,50 + x)] / [(0,40 - x) (0,40 - x)]$
$4,0 = (0,50 + x)^2 / (0,40 - x)^2$
$(4,0)^{1/2} = (0,50 + x)/(0,40 - x)$
$0,80 - 2x = 0,50 + x$
$\Rightarrow$ $x = 0,10$ mol **[0,1 punts]**

Quantitats en equilibri

Mols d'àcid = 0,40 – x = 0,40 – 0,10 **= 0,30 mol**
Mols d'alcohol = 0,40 – x = 0,40 – 0,10 **= 0,30 mol**
Mols d'èster = 0,5 + x = 0,50 + 0,10 **= 0,60 mol**
Mols d'aigua = 0,5 + x = 0,50 + 0,10 = **0,60 mol** **[0,2 punts]**

Pregunta 3b

Estratègia 1: augmentar la pressió **[0,3 punts]**

En una reacció en equilibri amb presència de gasos**, un augment de pressió modifica l'equilibri desplaçant la reacció cap a on hi ha menys mol de gasos,** per restablir un nou equilibri.

En la reacció d'obtenció de l'èster no hi ha **cap reactiu ni producte que sigui gasós**. Per tant, l'equilibri no es modificarà amb un augment de pressió.

Per tant, no aconseguirem millorar el rendiment de la reacció d'obtenció de l'èster.

Estratègia 2: afegir-hi una substància higroscòpica **[0,4 punts]**

La substància higroscòpica faria **disminuir la concentració d'aigua** de la mescla líquida.

En una reacció en equilibri**,** si disminuïm la concentració d'un producte es modifica l'equilibri **desplaçant la reacció cap a la formació de productes** per restablir un nou equilibri.

Per tant, aconseguirem millorar el rendiment de la reacció d'obtenció de l'èster.

Estratègia 3: afegir-hi més alcohol **[0,3 punts]**

Augmentem la concentració d'alcohol a la mescla.

En una reacció en equilibri**,** si augmentem la concentració d'un reactiu es modifica l'equilibri **desplaçant la reacció cap a la formació de productes** per restablir un nou equilibri.

Per tant, aconseguirem millorar el rendiment de la reacció d'obtenció de l'èster.

28. PAU 2015 · Setembre · Sèrie 5 · Exercici 6

Pregunta 6a

Reacció: $2\ NO(g) + 2\ H_2(g) \leftrightarrows N_2(g) + 2\ H_2O(g) \quad \Delta H < 0$

Inicial	1,0	1,0		
Equilibri	1,0 – 2x	1,0 – 2x	x	2x

[0,2 p]

Dades en equilibri:

mol de $N_2 = 0,3$

$\Rightarrow$ **x = 0,3**

Mols en equilibri:

n (NO) = 1,0 – 2x = 1,0 – (2 x 0,3) = 0,4

n (H_2) = 1,0 – 2x = 1,0 – (2 x 0,3) = 0,4

n (N_2) = x = 0,3

n (H_2O) = 2x = 2 x 0,3 = 0,6

Concentracions en equilibri:

Volum =10 L

[NO] = 0,4 / 10 $\Rightarrow$ **[NO] = 0,04 M**

[H_2] = 0,4 / 10 $\Rightarrow$ **[H_2] = 0,04 M**

[N_2] = 0,3 / 10 $\Rightarrow$ **[N_2] = 0,03 M**

[H_2O] = 0,6 / 10 $\Rightarrow$ **[H_2O] = 0,06 M**

[0,4 p]

Constant d'equilibri en concentracions:

$K_c = ([N_2]\,[H_2O]^2) / ([NO]^2\ [H_2]^2)$ **[0,2 p]**

Substituïm:

$K_c = [(0,03) \times (0,06)^2] \ / [(0,04)^2\ (0,04)^2]$

$\Rightarrow$ **K_c = 42,2** **[0,2 p]**

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

Pregunta 6b

Reacció: $2\ NO(g) + 2\ H_2(g) \leftrightarrows N_2(g) + 2\ H_2O(g)$ $\Delta H < 0$

Si volem eliminar el NO generat en un reactor químic mitjançant la reacció amb H_2 (segons la reacció anterior), hem de cercar unes condicions que desplacin al màxim l'equilibri químic d'aquesta reacció cap a la formació de productes (desplaçar la reacció cap a la dreta).

[0,2 p]

- *Si aquest raonament el fan quan justifiquen les condicions òptimes de pressió i temperatura, aquests 0,2 punts queden incorporats als subapartats posteriors (0,5 p + 0,5 p)*

Variable temperatura: raonament **[0,4 p]**

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

Si disminuïm la temperatura, estem retirant calor i afavorim la reacció cap a la dreta (formació de productes), millorant el rendiment de la reacció.

$\Rightarrow$ **Millor treballar a temperatura baixa.**

Variable pressió: raonament **[0,4 p]**

Quan la pressió total del recipient augmenta, la reacció es desplaça cap a on hi ha menys mols de gasos, per assolir un nou equilibri.

En la reacció del NO amb H_2, en els productes tenim menys mols de gasos (2+1 = 3) que en els reactius (2+2=4).
Per tant, si volem que la reacció es desplaci cap a la dreta (productes) caldrà **augmentar la pressió.**

$\Rightarrow$ **Millor treballar a pressió alta.**

29. PAU 2015 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 1

Pregunta 1a

Reacció: $2\ NO_2(g) \rightleftharpoons 2\ NO(g) + O_2(g)$

Calculem les masses moleculars i els mols en equilibri de cada compost:

Massa molar $NO_2 = 14 + (2 \times 16) = 46$ g/mol
Massa molar $NO = 14 + 16 = 30$ g/mol
Massa molar $O_2 = 2 \times 16 = 32$ g/mol

Mols en equilibri $NO_2 = 3{,}45\ g\ NO_2 \times (1\ mol\ NO_2 / 46\ g\ NO_2) = 0{,}075$
Mols en equilibri $NO = 0{,}60\ g\ NO \times (1\ mol\ NO / 30\ g\ NO) = 0{,}020$
Mols en equilibri $O_2 = 0{,}32\ g\ O_2 \times (1\ mol\ O_2 / 32\ g\ O_2) = 0{,}010$

[0,1 p]

Calculem les concentracions en equilibri (en M) de cada compost (V=5,0 L):

$[NO_2] = 0{,}075 / 5{,}0 = 0{,}015$ M
$[NO] = 0{,}020 / 5{,}0 = 0{,}004$ M
$[O_2] = 0{,}010 / 5{,}0 = 0{,}002$ M

[0,2 p]

Constant d'equilibri en concentracions: $K_c = ([NO]^2 \times [O_2]) / [NO_2]^2$ **[0,2 p]**

Càlcul de la constant d'equilibri:

$K_c = (0{,}004^2 \times 0{,}002) / (0{,}015)^2$

$K_c = 1{,}42 \times 10^{-4}$ **[0,2 p]**

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

Constant d'equilibri en pressions, K_p:

$K_p = K_c (RT)^{\Delta\nu}$ **[0,1 p]**

On: $\Delta\nu$ = mols productes (gasosos) – mols reactius (gasosos)

$\Delta\nu = (2+1) - (2) = 1$

$T = 327 + 273 = 600$ K

$K_p = 1{,}42 \times 10^{-4} (0{,}082 \times 600)^1$

$K_p = 7{,}0 \times 10^{-3}$ **[0,2 p]**

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

Pregunta 1b

Un **catalitzador modifica la cinètica** de la reacció (velocitat) però **no altera la constant d'equilibri de la reacció.**

En afegir el catalitzador, les concentracions dels compostos (reactius i productes) no s'alteren.

⇒ **Per tant no produiríem més monòxid de nitrogen (NO).**

[0,5 p]

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

Mols de gasos reactius = 2
Mols de gasos productes = 2 + 1

⇒ Per tant, la reacció es desplaçarà cap a la dreta, és a dir, **es fabricarà més monòxid de nitrogen (NO).**

[0,5 p]

30. PAU 2015 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 4

Pregunta 4a

Reacció: $2\ NO\ (g) + O_2\ (g) \leftrightarrows 2\ NO_2\ (g)$ K_p (a 430 ºC)=$1,5x10^5$

Dades de les pressions parcials:
$p_{(NO)} = 2,1x10^{-3}$ bar
$p_{(O2)} = 1,1x10^{-2}$ bar
$p_{(NO2)} = 1,40x10^{-1}$ bar

Calculem el valor de Q_p amb les dades que ens donen de les pressions parcials:

$$Q_p = [(p(_{NO2})^2] / [(p(_{NO})^2\ (p(_{O2})]$$ **[0,2 p]**

$$Q_p = [(1,40x10^{-1})^2] / [(2,1x10^{-3})^2\ (1,10x10^{-2})]$$

$$Q_p = 4,0x10^5$$ **[0,2 p]**

Comparem Q_p i K_p:

$Q_p \neq K_p \Rightarrow$ La reacció no està en equilibri **[0,2 p]**

Desplaçament de l'equilibri:

Si comparem la Q_p amb la K_p veiem que: **$Q_p > K_p$**
$\Rightarrow$ La reacció s'ha de desplaçar cap a la formació de reactius (esquerra).

D'aquesta manera la pressió parcial dels reactius (NO i O_2) augmentaran i la del producte (NO_2) disminuirà, aconseguint que la Q_p disminueixi fins a tenir el valor de K_p i arribant a un nou equilibri.

$\Rightarrow$ Quan la reacció assoleix l'equilibri, la pressió parcial del NO_2 serà més baixa.
[0,4 p]

Pregunta 4b

Reacció exotèrmica o endotèrmica? **[0,5 p]**

Una reacció és exotèrmica quan desprèn calor en la reacció de formació dels productes, i és endotèrmica quan n'absorbeix.

Analitzant les dades de la taula, observem que a mesura que la temperatura augmenta (subministrem més calor) la constant d'equilibri, K_p, disminueix; això ens indica que la reacció a temperatura altes està menys desplaçada cap a la formació de productes (o més desplaçada cap als reactius).

Això vol dir que en subministrar calor la reacció s'està desplaçant cap a la formació de reactius (esquerra).

⇒ **Reacció exotèrmica**

És millor fer l'experiment en un reactor de 10 L o de 100 L? **[0,5 p]**

Si el volum augmenta (de 10 L a 100 L) estem disminuïm la pressió. Una disminució de pressió del sistema desplaça l'equilibri cap a la on hi ha més mols de gasos (coeficients estequiomètrics).

Mol de gasos:

Reactius = 2 + 1

Productes = 2

⇒ La reacció es desplaça cap als reactius

Per afavorir l'oxidació del NO a NO_2 (desplaçar la reacció cap als productes) és millor fer l'experiment en un recipient de menor volum (per augmentar la pressió)

⇒ **Millor un recipient de 10 L**

31. PAU 2014 · Setembre · Sèrie 5 · Exercici 1

Pregunta 1

a) **Formulació: Iodur d'hidrogen HI** **[– 0,5 p si no formulen bé]**
[*En cap cas la subpregunta 1a pot tenir una puntuació negativa*]

Reacció de síntesi de l'HI: $\mathbf{H_2(g)} + \mathbf{I_2(g)} \rightleftharpoons \mathbf{2\ HI(g)}$ **[0,2 p]**

- *Es considerarà correcte si la reacció de síntesi està igualada amb altres coeficients estequiomètrics, per exemple: 1/2 $H_2(g)$ + 1/2 $I_2(g)$ ⇌ $HI(g)$. Lògicament, l'expressió de la constant d'equilibri canviarà i el valor numèric final de la K_c també.*

Constant d'equilibri de concentracions: $\mathbf{K_c = [HI]^2 / ([H_2]\cdot[I_2])}$ **[0,2 p]**

Dades:
Mols inicials $H_2(g)$ = 7,78
Mols inicials $I_2(g)$ = 5,40
Mols finals HI = 9,34

Plantejament de l'equilibri:

	$H_2(g)$ +	$I_2(g)$ ⇌	2 HI(g)
mols inicials	7,78	5,40	0
mols en equilibri	7,78– x	5,40–x	2 x

mols de HI en equilibri = 9,34 = 2 x

⇒ x = 9,34 / 2 ⇒ **x = 4,67** **[0,2 p]**

Calculem les concentracions en equilibri per V = 10,0 litres:
$[H_2] = (7,78 – x) / 10,0 = (7,780 – 4,67) / 10,0 = 0,311$ M
$[I_2] = (5,40 – x) / 10,0 = (5,40 – 4,67) / 10,0 = 0,073$ M
[HI = 9,34 / 10,0 = 0,934 M
[0,2 p]

Càlcul de la constant d'equilibri:

$K_c = [HI]^2 / ([H_2]\cdot[I_2])$ ⇒ $K_c = (0,934)^2 / [(0,311) \times (0,073)]$

K_c = 38,4 **[0,2 p]**

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

- *Si la reacció de síntesi estava igualada: 1/2 $H_2(g)$ + 1/2 $I_2(g)$ ⇌ $HI(g)$, la constant d'equilibri té un valor de 6,20.*

Pregunta 1

b) **<u>Efecte sobre la constant d'equilibri en concentracions (K_c)</u>:** **[0,4 p]**

La constant d'equilibri en concentracions d'una reacció **<u>només depèn de la temperatura</u>.**

Per tant, **<u>la K_c no es modificarà</u>** tant si addicionem iode com si addicionem un catalitzador, mentre mantinguem la temperatura a 445 ^oC.

<u>Efecte sobre el rendiment de la reacció</u>:

Un augment del rendiment d'una reacció implica que la reacció fabriqui més productes (HI), és a dir que la reacció es desplaci cap a la dreta.

Si addicionem més iode (reactiu) la reacció es desplaça cap a la dreta, formació de més HI, per arribar a un nou equilibri (llei de Le Châtelier) que compleixi la mateixa K_c.

$\Rightarrow$ Per tant, **l'addició de iode augmenta el rendiment de la reacció**.

[0,3 p]

Si addicionem un catalitzador es modifica la velocitat de la reacció, però no l'equilibri químic. La reacció arribarà amb menys temps al mateix estat d'equilibri, fabricant la mateixa quantitat de HI.

$\Rightarrow$ Per tant, **l'addició d'un catalitzador no modifica el rendiment de la reacció**.

[0,3 p]

32. PAU 2014 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 6

Pregunta 6

a) Reacció: $2\ NaN_3(s) \rightleftharpoons 2\ Na(s) + 3\ N_2(g)$

Constant d'equilibri de concentracions: $K_c = [N_2]^3$ **[0,3 p]**

Calculem la massa molecular de l'azida de sodi:

Massa molecular del NaN_3= (23,0) + (14,0 x 3) = 65 g/mol

Mols inicials de NaN_3= 71,5 g NaN_3 x (1 mol NaN_3 / 65 g NaN_3) = 1,1 mols de NaN_3

Mols en equilibri de NaN_3 = 6,5 g NaN_3 x (1 mol NaN_3 / 65 g NaN_3) = 0,1 mols NaN_3 **[0,1 p]**

Plantejament de l'equilibri i càlcul de "x":

	$2\ NaN_3(s)$	$\rightleftharpoons$	$2\ Na(s) +$	$3\ N_2(g)$
mols inicials	1,1		0	0
mols en equilibri	1,1 – 2 x		2 x	3x

mols de NaN_3 en equilibri = 0,1 = 1,1 – 2 x

$\Rightarrow$ x =(1,1 -0,1)/ 2 = 0,50 **[0,2 p]**

Calculem la concentració de N_2 en equilibri sabent que: V = 1,0 L

$[N_2] = 3x / 1,0 = (3 \times 0,50) / 1,0$

$\Rightarrow$ **$[N_2]$ = 1,5 M** **[0,2 p]**

Càlcul de la constant d'equilibri:

$K_c = [N_2]^3 \quad \Rightarrow \quad K_c = (1,5)^3$

K_c = 3,375 **[0,2 p]**

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

Pregunta 6

b) Per descompondre més azida de sodi cal que la reacció es desplaci cap a la dreta.

Augment de la temperatura (V= constant). **[0,5 p]**

Raonament:

La reacció és endotèrmica ($\Delta H > 0$). Això vol dir que necessita absorbir calor per formar productes (desplaçar-se cap a la dreta).

Si augmentem la temperatura, estem subministrant més calor i afavorim la reacció cap a la dreta, descomponent més azida de sodi.

Augment del volum (T=constant). **[0,5 p]**

Raonament 1

Una modificació del volum, quan s'ha assolit l'equilibri, modifica la pressió total en el recipient que conté tots els compostos en forma gasosa, i això pot afectar a l'equilibri.

Si el volum augmenta, la pressió total del recipient disminueix, i la reacció es desplaça cap a on hi ha més mols de gasos.

En la reacció de descomposició de l'azida de sodi, en els productes tenim més mols de gasos (3) que en els reactius (0). Per tant la reacció es desplaci cap a la dreta (productes), i **es descompon més azida de sodi.**

Raonament 2

Una modificació del volum fa variar les concentracions dels reactius i productes en equilibri**.**

La constant d'equilibri només depèn de la concentració de N_2:

$$K_c = [N_2]^3 \qquad = (n / V)^3 = n^3 / V^3$$

Si augmentem el volum (V), i la K_c no ha de variar ja que només depèn de la temperatura, el nombre de mols de nitrogen (n) han d'augmentar. Per tant, la reacció es desplaç cap a la dreta, i **es descompon més azida de sodi.**

33. PAU 2013 · Setembre · Sèrie 1 · Exercici 6

Pregunta 6

a) Reacció: $CH_4\,(g) + H_2O(g) \leftrightarrows CO\,(g) + 3\,H_2\,(g)$ $K_c = 0{,}26$

Expressió de la constant d'equilibri:

$$K_c = ([CO] \cdot [H_2]^3) / ([CH_4] \cdot [H_2O])$$ **[0,2 p]**

Calculem les concentracions inicials de cada compost (moment de la injecció):

V = 2 L
n (metà) = n (aigua) = n (CO) = n (hidrogen) = 0,8 mols

$[CH_4] = [H_2O] = [CO] = [H_2] = 0{,}8 / 2 = 0{,}4$ M

[0,2 p]

Calculem el valor de Q (mateixa expressió que la K_c, però substituint les concentracions en equilibri per les inicials):

$$Q = [(0{,}4) \cdot (0{,}4)^3] / [(0{,}4)\cdot(0{,}4)] \Rightarrow \mathbf{Q = 0{,}16}$$

[0,2 p]

Comparem la Q amb la K_c: **$Q < K_c$**

- La reacció no està en equilibri ($Q \neq K_c$)
- La reacció avançarà cap a la dreta, augmentant la concentració dels productes (CO i H_2), i disminuint la concentració dels reactius (CH_4 i aigua) per augmentar el valor de la Q, fins que s'iguali amb el valor de la K_c i s'arribi a l'equilibri.

[0,4 p]

Pregunta 6

b) Si volem millorar el rendiment de la reacció vol dir que ens interessa fabricar el màxim de productes, és a dir, **desplaçar la reacció cap a la dreta**.

[0,2 p]

Variable volum: raonament **[0,4 p]**

Raonament 1

Una modificació del volum, quan s'ha assolit l'equilibri, modifica la pressió total en el recipient que conté tots els compostos en forma gasosa, i això pot afectar a l'equilibri.

Si el volum disminueix, la pressió total del recipient augmenta, i la reacció es desplaça cap a on hi ha menys mols de gasos.
Si el volum augmenta, la pressió total del recipient disminueix, i la reacció es desplaça cap a on hi ha més mols de gasos.

En la reacció del metà amb aigua, en els productes tenim més mols de gasos (4) que en els reactius (2). Per tant, si volem que la reacció es desplaci cap a la dreta (productes) caldrà augmentar el volum.

Raonament 2

Una modificació del volum fa variar les concentracions dels reactius i productes en equilibri**.**

Si en equilibri tenim n_1 i n_2 mols de cada producte, i n_3 i n_4 mols de cada reactiu, en un volum total V (en litres):

$$K_c = [(n_1 /V) \cdot (n_2/V)^3] / [(n_3/V) \cdot (n_4/V)] = (n_1 \cdot n_2 / n_3 \cdot n_4) / V^2$$

Si augmentem el volum (V), i la K_c no ha de variar ja que només depèn de la temperatura, el quocient $(n_1 \cdot n_2 / n_3 \cdot n_4)$ ha d'augmentar. Cal que el nombre de mols de productes (n_1 i n_2) augmentin, tot disminuint els de reactius (n_3 i n_4). Millorarem així el rendiment de la reacció (desplaçament de la reacció cap a la dreta).

Variable temperatura: raonament: **[0,4 p]**

La reacció és endotèrmica ($\Delta H > 0$). Això vol dir que necessita absorbir calor per formar productes (desplaçar-se cap a la dreta).

Si augmentem la temperatura, estem subministrant més calor i afavorim la reacció cap a la dreta, millorant el rendiment de la reacció.

34. PAU 2013 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 2

Pregunta 2

a) Dades inicials:

V = 200 L
T = 400 K
P = 1,64 atm (només amb formamida gasosa)
R = 0,082 atm L / K mol

Calculem els mols de formamida, a partir de l'equació dels gasos ideals:

$pV = n\,R\,T \Rightarrow n = p\,V / RT \Rightarrow n = (1{,}64 \times 200) / (0{,}082 \times 400)$

n = 10,0 mols de formamida **[0,2 p]**

Reacció: $HCONH_2(g) \leftrightarrows NH_3(g) + CO(g)$ $K_c = 4{,}8$

Inicial	10	--	--
Equilibri	10 – x	x	x

Expressió de la constant d'equilibri:
$K_c = [NH_3]\,[CO] / [NCONH_2]$ **[0,2 p]**

Substituint les dades en equilibri (V = 200 L):
$K_c = 4{,}8 = (x/200) \cdot (x/200) / (10 - x / 200)$
$4{,}8 = (x^2) / [200\,(10 - x)]$
$x^2 + 960\,x - 9600 = 0$

Resolent l'equació de segon grau (i agafant només la solució positiva):
x = 9,9 mols de formamida que reaccionen **[0,3 p]**

Per trobar la concentració de formamida en equilibri:

$[HCONH_2] = (10 - x) / V = (10 - 9{,}9) / 200$

$[HCONH_2] = 5 \cdot 10^{-4}$ M **[0,3 p]**

Pregunta 2

b) **Variable: quantitat d'amoníac**

Si a la mescla en equilibri li afegim una mica d'amoníac, la reacció es desplaçarà cap a l'esquerra (formació de reactius, formamida) per retornar a un nou estat d'equilibri. Degut a que el volum és fix, **augmentarà la concentració de formamida.**

Justificació: $K_c = [NH_3]\,[CO] / [NCONH_2]$

Si augmenta la concentració de NH_3 ja no es compliria la constant d'equilibri ($Q > K_c$).

Això vol dir que la reacció es desplaçarà cap a l'esquerra (reactius). Cal que la concentració de NH_3 i CO disminueixin i la concentració de $HCONH_2$ augmenti perquè els nous valors de concentració compleixin la K_c.

[0,5 p]

Variable: volum del recipient

Si augmentem el volum del recipient, disminueix la pressió en el seu interior.

Una disminució de la pressió fa que la reacció es desplaci cap a on hi ha més mols de gasos.

Mols de gasos (productes) = 1 + 1 = 2
Mols de gasos (reactius)) 1

La reacció es desplaçarà a la dreta (productes), disminuint els mols de formamida.

Tenim: $[HCONH_2]$ = mols formamida / volum del recipient

Els mols de formamida han disminuït i el volum ha augmentat, per tant **la concentració de formamida disminueix.**

[0,5 p]

35. PAU 2012 · Setembre · Sèrie 4 · Exercici 6

Pregunta 6

a) L'expressió de la constant d'equilibri de la reacció és:

$$K_c = [NH_3]^2 / ([N_2] \cdot [H_2]^3)$$ **[0,3 p]**

A partir del gràfic podem obtenir els valors de les concentracions en equilibri de cada compost:

$[NH_3] = 2$ M

$[N_2] = 0{,}5$ M

$[H_2] = 3$ M

[0,3 p]

Substituint aquests valors a la K_c:

$$K_c = (2)^2 / [(0{,}5) \text{ x } (3)^3] = 0{,}296$$

La constant d'equilibri en concentracions és 0,296 **[0,4 p]**

- *Es penalitzarà 0,2 p si es dóna la constant amb unitats.*

b) Observem en el gràfic que quan introduïm nitrogen al reactor, mantenint la temperatura, les concentracions de nitrogen i hidrogen (reactius) disminueixen i la concentració d'amoníac (producte) augmenta.

[0,2 p]

Això ho podem justificar, aplicant la llei de Le Chatelier: quan es pertorba un equilibri aquest tendeix a reaccionar per contrarestar la pertorbació i tornar a un nou equilibri.

Si la temperatura no varia, la constant d'equilibri (K_c) és manté constant. **[0,2 p]**

En afegir nitrogen, reactiu, les noves concentracions ja no complirien la constant d'equilibri. La reacció es desplaça cap a la dreta (formació de productes) i així amb les noves concentracions es torna a complir la K_c.

[0,6 p]

36. PAU 2012 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 2

Pregunta 2

a) $CO(g) + Cl_2(g) \rightleftharpoons COCl_2(g)$

L'expressió de la constant d'equilibri en pressions d'aquesta reacció és:

$K_p = (p_{fosgè}) / (p_{CO} \cdot p_{clor})$ **[0,2 p]**

Per determinar la K_p plantegem l'equilibri:

	$CO(g) +$	$Cl_2(g) \rightleftharpoons$	$COCl_2(g)$
mols inicials	2,0	5,0	
mols en equilibri	2,0 – x	5,0 – x	x

[0,1 p]

Si sabem que en equilibri tenim 1,0 mols de CO, podem calcular la "x":

$2,0 - x = 1,0 \Rightarrow x = 1,0$ (mol de CO que reacciona)

En l'equilibri hi haurà:
mol de CO = 1,0 (enunciat del problema)
mols de $Cl_2 = 5,0 - x = 5,0 - 1,0 = 4,0$
mol de $COCl_2 = x = 1,0$

[0,2 p]

<u>Raonament 1:</u>

Per trobar les pressions parcials en equilibri podem emprar l'expressió:
pressió parcial = (pressió total) x (fracció molar) $\mathbf{p_i = p \cdot x_i}$

on la pressió total és: p = 17,44 bar, i la fracció molar d'un component es calcula amb el nombre de mols del component i el nombre de mols totals: $\mathbf{x_i = n_i / n}$

Les fraccions molars seran:
$x_{CO} = 1/6$
$x_{clor} = 4/6$
$x_{fosgè} = 1/6$ **[0,1 p]**

Les pressions parcials seran:
$p_{CO} = p \cdot x_{CO} = 17,44 \cdot (1/6) = 2,907$ bar
$p_{clor} = p \cdot x_{clor} = 17,44 \cdot (4/6) = 11,627$ bar
$p_{fosgè} = p \cdot x_{fosgè} = 17,44 \cdot (1/6) = 2,907$ bar **[0,2 p]**

La K_p serà: $K_p = (2,907) / (2,907 \cdot 11,627)$

$\boldsymbol{K_p = 0,086}$ **[0,2 p]**

- *Si indiquen unitats en la constant d'equilibri es penalitzarà 0,1 p.*

Pregunta 2

a) (continua)

Raonament 2:

Per trobar les pressions parcials en equilibri podem emprar l'expressió:

$p_i V = n_i R T \quad \Rightarrow \quad \mathbf{p_i = (n_i R T) / V}$

Calculem els mols totals en equilibri:
mols totals = 1,0 + 4,0 + 1,0 = 6,0

Cal calcular el volum del recipient (V): $p V = n R T$
$p = 17{,}44$ bar
$n = 6{,}0$ mols
$R = 0{,}0831$ bar · L / K mol
$T = 350$ K

Per tant, el volum és:
$V = n R T / p = (6{,}0 \cdot 0{,}0831 \cdot 350) / 17{,}44 = 10{,}006$ L **[0,1 p]**

Les pressions parcials seran: $\mathbf{p_i = (n_i R T) / V}$

$p_{CO} = n_{CO} R T / V = (1{,}0 \cdot 0{,}0831 \cdot 350) / 10{,}006 = 2{,}907$ bar
$p_{clor} = n_{clor} R T / V = (4{,}0 \cdot 0{,}0831 \cdot 350) / 10{,}006 = 11{,}627$ bar
$p_{fosgè} = n_{fosgè} R T / V = (1{,}0 \cdot 0{,}0831 \cdot 350) / 10{,}006 = 2{,}907$ bar
[0,2 p]

La K_p serà: $K_p = (2{,}907) / (2{,}907 \cdot 11{,}627)$

Constant d'equilibri de pressions = $\mathbf{K_p = 0{,}086}$ **[0,2 p]**

- *Si indiquen unitats en la constant d'equilibri es penalitzarà 0,1 p.*

Pregunta 2

b) La constant d'equilibri de pressions d'una reacció només depèn de la temperatura. Per tant, **la constant K_p no es modificarà** encara que variï el volum, si mantenim la temperatura. **[0,4 p]**

Si el volum es redueix augmenta la pressió total, varien les pressions parcials de cada component i la reacció deixa d'estar en equilibri. La reacció es desplaçarà cap a on hi ha menys mols de gasos (coeficients estequiomètrics) per tornar a l'equilibri. **[0,3 p]**

Reactius: 1 mol de CO + 1 mol de clor = 2 mols

Productes: 1 mol de fosgè = 1 mol

Per tornar a l'equilibri, la reacció es desplaçarà cap a la formació de productes (dreta), **augmentant el nombre de mols de fosgè**, disminuint el nombre de mols de clor i monòxid de carboni. **[0,3 p]**

37. PAU 2011 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 2

Pregunta 2

a) Per aconseguir un alt rendiment de la reacció, aquesta ha d'anar el màxim cap a la formació de productes (SO_3). **[0,3 p]**
Això succeeix si la constant d'equilibri és alta. **[0,4 p]**
De la taula podem deduir que **a temperatures baixes (500 K) tenim un rendiment més alt.** **[0,3 p]**

Pregunta 2

b) Per aconseguir un alt rendiment de la reacció, aquesta s'ha d'anar el màxim cap a la formació de productes (SO_3). La pressió no modifica la constant d'equilibri, però pot desplaçar la reacció cap a productes o reactius. **[0,2 p]**

Aplicant el principi de Le Chatelier, si la pressió augmenta l'equilibri de la reacció es desplaça cap a on hi ha menys mols de gasos. **[0,4 p]**

En el reacció igualada, tenim 3 mols de gasos en reactius i 2 mols de gasos en productes. Per tant un **augment de pressió desplaçarà la reacció cap a la formació de productes i augmentarà el rendiment**. **[0,4 p]**

38. PAU 2011 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 1

Pregunta 1

a) Reacció de dissociació del $N_2O_4(g)$: $N_2O_4(g) \rightleftharpoons 2\ NO_2(g)$

Constant d'equilibri de concentracions: $K_c = [NO_2]^2 / [N_2O_4]$ **[0,2 p]**

- *Es considerarà correcte si la reacció de dissociació està igualada d'una altra manera, per exemple: ½ $N_2O_4(g) \rightleftharpoons NO_2(g)$. Lògicament, l'expressió de la constant d'equilibri canviarà.*

Calculem les masses moleculars:

Massa molecular del N_2O_4 = 92 g / mol
Massa molecular del NO_2 = 46 g / mol

Mols inicials de reactiu = 184 g N_2O_4 x (1 mol N_2O_4 / 92 g N_2O_4) = 2,0 mols de N_2O_4
Mols finals de producte = 36,8 g NO_2 x (1 mol NO_2 / 46 g NO_2) = 0,80 mols NO_2
[0,1 p]

Plantejament de l'equilibri:

	$N_2O_4(g)$	$\rightleftharpoons$	$2\ NO_2(g)$
mols inicials	2,0		0
mols en equilibri	2,0 - x		2 x

[0,2 p]

mols de NO_2 en equilibri = 0,80 = 2 x $\Rightarrow$ x = 0,80 / 2 = 0,40 mols **[0,1 p]**

Calculem les concentracions en equilibri sabent que: V = 4,00 litres

$[N_2O_4] = (2,0 - x) / 4,00 = (2,0 - 0,40) / 4,00 = 0,40$ M
$[NO_2] = (2\ x) / 4,00 = (0,80) / 4,00 = 0,20$ M **[0,2 p]**

Càlcul de la constant d'equilibri:

$K_c = [NO_2]^2 / [N_2O_4] \Rightarrow K_c = (0,20)^2 / (0,40)$

K_c = 0,10 **[0,2 p]**

Pregunta 1

b) Reacció:

$N_2O_4(g) \rightleftharpoons 2\ NO_2(g)$
incolor marró

Si a l'estiu l'aire és més marró que a l'hivern vol dir que hi ha més proporció de NO_2 a l'estiu que a l'hivern.
[0,2 p]

Per tant, la reacció de dissociació del N_2O_4 està més desplaçada cap a la dreta a l'estiu, quan la temperatura és més alta, degut a que el N_2O_4 absorbeix la calor.
[0,5 p]

Si absorbeix calor, **la reacció de dissociació del N_2O_4 és endotèrmica**.
[0,3 p]

39. PAU 2011 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 1

Pregunta 1

a) $N_2(g) + 3\ H_2(g) \leftrightarrows 2\ NH_3(g)$

b)

	N_2	H_2	NH_3
Mols inicial	9,0	6,0	12,0

Calculem les concentracions inicials de tots els compostos:

$[N_2]_o$ = 9,0 mol / 3,0 L = 3,0 M
$[H_2]_o$ = 6,0 mol / 3,0 L = 2,0 M
$[NH_3]_0$ = 12,0 mols / 3,0 L = 4,0 M **[0,2 p]**

La constant d'equilibri (K_c) té la següent expressió:

$Kc = [NH_3]^2 / ([H_2]^3 \cdot [N_2])$

Per tant el valor de Q, amb les concentracions inicials, es calcularà:

$Q = [NH_3]_0^2 / ([H_2]_o^3 \cdot [N_2]_o)$ **[0,1 p]**

$Q = (4,0^2) / [(2,0^3) \cdot (3,0]$
$Q = 0,67$ **[0,2 p]**

Pel fet que **Q és diferent de Kc** $\Rightarrow$ <u>la reacció no està en equilibri</u> **[0,2p]**

En obtenir un valor de Q (0,50) més petit que Kc (1,2) la reacció es desplaçarà cap a la dreta per produir més amoníac i augmentar el numerador de Q fins que s'assoleixi l'equilibri (Q = Kc). **[0,3 p]**

Pregunta 1

c) En disminuir el volum del recipient, augmenta la pressió en el seu interior. En augmentar la pressió la reacció és desplaçarà cap a on hi ha menys mols de gasos per tornar a una nova situació d'equilibri. **[0,2 p]**

Mols de gasos reactius = 1 + 3 = 4
Mols de gasos productes = 2

Per tant, <u>la reacció es desplaçarà cap la dreta</u>, és a dir, i **es fabricarà més amoníac**. **[0,3 p]**

Si afegim un <u>catalitzador es pot modificar la cinètica</u> de la reacció (velocitat) però no canviarà la constant d'equilibri. **[0,2 p]**

Per tant, **en no alterar-se l'equilibri, no es fabricarà més amoníac.** **[0,3 p]**

40. PAU 2010 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 1

Pregunta 1

a) Quan augmentem la temperatura de 298 K a 1100 K, la constant d'equilibri augmenta, és a dir la reacció va més cap a la dreta. **[0,4 p]**

Això ens indica que quan afegim calor, la reacció l'absorbeix i evoluciona formació de productes.

La reacció és endotèrmica ($\Delta H > 0$) **[0,6 p]**

b) Plantegem les condicions inicials i d'equilibri de la reacció:

	$N_2(g)$	+ $O_2(g)$	⇆ 2 NO(g)	Kc (1100 K)
Inicial	1	1	-	
Equilibri	1 – x	1 – x	2x	**[0,2 p]**

$Kc = 10^{-5} = [NO]^2 / ([N_2]\,[O_2])$ **[0,2 p]**

$Kc = [(2x / 1)^2] / [((1-x) / 1) \cdot ((1-x) / 1)]$

$Kc = 10^{-5} = (2x)^2 / (1-x)^2$ **[0,2 p]**

Fent l'arrel quadrada a cada costat de l'equació:

$10^{-2,5} = 2x / (1-x)$

$x = 1{,}58 \cdot 10^{-3}$ mols **[0,2 p]**

Mols de NO a l'equilibri = 2x

<u>Mols de NO a l'equilibri = $3{,}2 \cdot 10^{-3}$</u> **[0,2 p]**

- *Si suposem que la "x" és petita s'arriba a la mateixa solució.*

41. PAU 2009 · Setembre · Sèrie 1 · Exercici 4 (Opció B)

OPCIÓ B

Exercici 4-B

4.1 Raonament del caràcter irritant del boirum d'òxids de nitrogen

Atès que la reacció bidireccional escrita és endotèrmica ($\Delta H > 0$), al augmentar la temperatura s'afavorirà la formació de productes. Així doncs, com que en l'enunciat s'indica que el producte (NO_2) és més irritant que el reactiu (N_2O_4), caldrà esperar que un boirum de NO_2 i N_2O_4 sigui més irritant a l'estiu (equilibri més desplaçat cap a la formació de NO_2) que no pas a l'hivern.

[0,5 punts]

4.2 Càlcul de K_p

$$N_2O_4(g) \leftrightarrows 2NO_2(g) \qquad \Delta H = 59 \text{ kJ}$$

Equilibri: $p_{N2O4} = 0{,}70$ atm $\qquad p_{total} = 1{,}00$ atm

La pressió parcial del NO_2 en l'equilibri serà: $p_{NO2} = 1{,}00 - 0{,}70 = 0{,}30$ atm [0,3 punts]

i l'expressió i el valor de K_p seran:

$$K_p = \frac{p_{NO2}{}^2}{p_{N2O4}} = \frac{0{,}30^2}{0{,}70} = 0{,}13$$

expressió de K_p [0,3 punts]

valor de K_p [0,4 punts]

No es penalitzarà el fet d'expressar K_p amb unitats

4.3 Càlcul dels mols dels gasos en l'equilibri

aplicant la llei dels gasos ideals: $0{,}30 \cdot 2 = n_{NO2}(eq) \cdot 0{,}082 \cdot 298{,}15$
d'on: $n_{NO2}(eq) = 0{,}0245$ mols NO_2 [0,25 punts]

i $0{,}70 \cdot 2 = n_{N2O4}(eq) \cdot 0{,}082 \cdot 298{,}15$
d'on: $n_{N2O4}(eq) = 0{,}0573$ mols N_2O_4 [0,25 punts]

5.1 Resposta correcta: c
5.2 Resposta correcta: a
5.3 Resposta correcta: c
5.4 Resposta correcta: c

42. PAU 2009 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 3

Exercici 3

3.1. Equilibri d'oxidació del HCl

	$4HCl(g)$	$+ O_2(g)$	$\leftrightarrows$	$2Cl_2(g)$	$+ 2H_2O(g)$
Condicions inicials (mol)	3,6	2,0		0	0
Equilibri:		1,4			

Mols d'oxigen que han reaccionat = 2,0 – 1,4 = 0,6 mol
En conseqüència, el nombre de mols dels gasos restants en l'equilibri serà:

mols Cl_2 = 2 · 0,6 = 1,2 mol Cl_2 [0,2 punt]
mols H_2O = 2 · 0,6 = 1,2 mol H_2O [0,2 punt]
mols HCl = 3,6 – (4·0,6) = 1,2 mol HCl [0,2 punt]

3.2. Càlcul de K_c

$$K_c = \frac{[Cl_2]^2 \cdot [H_2O]^2}{[HCl]^4 \cdot [O_2]} = \frac{\left[\frac{1,2}{2}\right]^2 \cdot \left[\frac{1,2}{2}\right]^2}{\left[\frac{1,2}{2}\right]^4 \cdot \left[\frac{1,4}{2}\right]} = 1,43$$

[expressió: 0,2 punts; expressió ben substituïda: 0,2 punts, resultat final: 0,2 punts]

3.3. Càlcul de la pressió total:

Per calcular la pressió total del gasos en l'equilibri, cal calcular prèviament el nombre total de mols en l'equilibri:

n_{TOTAL} = 1,4 + 1,2 + 1,2 + 1,2 = 5,0 mol [0,3 punt]

de manera que la pressió total serà:

$p_{TOTAL} \cdot V = n_{TOTAL} \cdot R \cdot T$ [0,2 punt]
$p_{TOTAL} \cdot 2 = 5,0 \cdot 0,082 \cdot 423,15$
p_{TOTAL} = 86,75 atm [0,3 punt]

OPCIÓ A

43. PAU 2009 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 3

Exercici 3

3.1. Molaritat de les substàncies en l'equilibri i valor de K_c

	$2SO_2(g) + O_2(g)$	⇆	$2SO_3(g)$
Condicions inicials (mol)	0,4 0,4		0
Equilibri:			$[SO_3] = 0,17$ M

Mols de les substàncies en l'equilibri:

$SO_3(g)$ = 0,34 mol

$O_2(g)$ = 0,4 – 0,17 = 0,23 mol [0,4 punt]

$SO_2(g)$ = 0,4 – 0,34 = 0,06 mol [0,4 punt]

Concentracions en l'equilibri:

$[SO_3(g)]$ = 0,17 M

$[O_2(g)]$ = 0,115 M [0,1 punt]

$[SO_2(g)]$ = 0,03 M [0,1 punt]

Càlcul de la constant d'equilibri:

$$K_c = \frac{[SO_3]^2}{[SO_2]^2 \cdot [O_2]} = \frac{[0,17]^2}{[0,03]^2 \cdot [0,115]} = 279,2$$

[expressió: 0,2 punt; resultat: 0,3 punt]

3.2. Efecte provocat per un augment de la temperatura a volum constant:

Atès que la reacció és exotèrmica, un augment de la temperatura farà que augmenti el grau de descomposició del triòxid de sofre (desplaçament de l'equilibri cap a l'esquerra).

En conseqüència, un augment de la temperatura portarà a que en el nou estat d'equilibri la concentració de SO_3 sigui menor que la de la situació d'equilibri inicial.

[0,5 punt]

OPCIÓ A

44. PAU 2008 · Setembre · Sèrie 4 · Exercici 3

3.1 Equilibri de dissociació del N_2O_4

	$N_2O_4(g)$	⇆	$2NO_2(g)$	$\Delta H > 0$
Inici:	n^0_{N2O4}		0	
Equilibri:	$n_{N2O4} = 0,030$ mol			$p_{total} = 0,75$ atm

Pressions parcials de cada gas en l'equilibri:

Aplicant la llei dels gasos ideals: $p_{N2O4}(eq) \cdot 2 = 0,030 \cdot 0,082 \cdot 373,15$ [0,1 punts]

d'on: $p_{N2O4}(eq) = 0,46$ atm [0,2 punts]

La pressió parcial del NO_2 en l'equilibri serà:

$p_{NO2} = 0,75 – 0,46 = 0,29$ atm [0,2 punts]

Càlcul de *Kp*

$$K_p = \frac{p_{NO2}{}^2}{p_{N2O4}} = \frac{0{,}29^2}{0{,}46} = 0{,}18$$

[0,2 punts expressió + 0,2 punts resultat]

Càlcul dels mols inicials de N_2O_4 (n^0_{N2O4}):

$n^0_{N2O4} = n_{N2O4}(eq) + \frac{1}{2}\, n_{NO2}(eq)$ [0,2 punts]

mols de NO_2 en l'equilibri (aplicant la llei dels gasos ideals):

$0{,}29 \cdot 2 = n_{NO2}(eq) \cdot 0{,}082 \cdot 373{,}15$ [0,1 punts]

d'on: $n_{NO2}(eq) = 0{,}019$ mol [0,1 punts]

mols de N_2O_4 inicials:

$n^0_{N2O4} = n_{N2O4}(eq) + \frac{1}{2}\, n_{NO2}(eq) = 0{,}030 + \frac{1}{2}\, 0{,}019$

$= 0{,}0395 \text{ mol} \approx 0{,}040 \text{ mol}$

[0,2 punts]

3.2 Efecte de l'augment de la temperatura

La reacció és endotèrmica ($\Delta H > 0$). Atès aquest fet, un augment de la temperatura modificarà el valor de la constant d'equilibri que, en ser més gran, originarà una nova situació d'equilibri on la concentració (i la pressió parcial) de NO_2 serà més gran (desplaçament de l'equilibri cap a la formació de productes).
Per aquesta raó, s'enfosquirà el color de la mescla dels dos gasos en equilibri.

[0,5 punts]

45. PAU 2008 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 4 (Opció B)

OPCIÓ B

4.1 Càlcul del nombre total de mols en l'equilibri

	$N_2(g)$ +	$3H_2(g)$	⇆	$2NH_3(g)$	
Condicions inicials (mol)	10	30		0	
Equilibri (mol):	10-x	30-3x		2x	mols totals = 40 –2x
Equilibri (mol):	4,4	30-3x		2x	mols totals = 40 –2x

[0,2 punts]

Càlcul dels mols de $N_2(g)$ que han reaccionat: $10 - x = 4,4$
d'on $x = 10 - 4,4 = 5.6$ [0,2 punts]

Mols de $NH_3(g)$ en l'equilibri: $NH_3(g) = 2 \cdot 5,6 = 11,2$ mol [0,3 punts]

Mols dels gasos en l'equilibri:
$N_2(g) = 4,4$ mol
$H_2(g) = 30\text{-}3 \cdot 5,6 = 13,2$ mol
$NH_3(g) = 2 \cdot 5,6 = 11,2$ mol

Total gasos = 28,8 mol [0,3 punts]

4.2 Càlcul de les pressions parcials en l'equilibri:

Es podran calcular a través de l'expressió $p_i = x_i\, p_{total}$ i de les fraccions molars de cada gas.

Pressions parcials dels gasos en l'equilibri:

$N_2(g) = 4,4 \cdot 50 / 28,8 = 7,64$ atm [0,2 punts]
$H_2(g) = 13,2 \cdot 50/28,8 = 22,92$ atml [0,2 punts]
$NH_3(g) = 11,2 \cdot 50/28,8 = 19,44$ atm [0,2 punts]
Comprovació: Pressió total = = 50 atm

4.2 Càlcul de K_p

El valor de K_p serà:

$$K_p = \frac{p_{NH3}^{\ 2}}{p_{N2} \cdot p_{H2}^{\ 3}} = \frac{19,44^2}{7,64 \cdot 22,92^3} = 4,1 \cdot 10^{-3}$$

[0,1 punts expressió + 0,3 punts valor]

46. PAU 2008 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 4 (Opció B)

OPCIÓ B

4.1 Equilibri de dimerització del NO_2

	$2NO_2(g)$	⇆	$N_2O_4(g)$
Inici:	0,130 mol		
Equilibri:	0,011 M		

Nombre de mols de NO_2 en l'equilibri: n_{NO2} (eq) = 0,011 mol·L^{-1} · 2 L = 0,022 mol NO_2

Mols de NO_2 que han reaccionat: n_{NO2} (reac) = 0,130 − 0,022 = 0,108 mol NO_2 [0,3 punts]

Mols de N_2O_4 en l'equilibri: n_{N2O4} (eq) = ½ 0,108 = 0,054 mol N_2O_4 [0,2 punts]

Concentració de N_2O_4 en l'equilibri: 0,054 / 2 = 0,027 M [0,1 punts]

Càlcul de K_c:

$$K_c = \frac{c_{N2O4}}{c_{NO2}^{\ 2}} = \frac{0,027}{0,011^2} = 223,1$$

[0,2 punts expressió + 0,2 punts resultat]

4.2 Efecte de l'addició de gas inert i càlcul de la pressió final

A temperatura i volum constant, la incorporació d'una determinada quantitat de gas inert no té efecte sobre la situació d'equilibri. Això sí, atès que es produeix un augment en el nombre de mols de gas, té lloc un augment de la pressió a l'interior del recipient. [0,5 punts]

Càlcul de la pressió a l'interior del recipient:

Mols totals: mols N_2O_4 + mols NO_2 + mols gas inert = 0,054 + 0,022 + 0,200 = 0,276 mol

Aplicant l'equació del gas ideal:

$p_{TOTAL} \cdot 2 = 0,276 \cdot 0,082 \cdot 298,15$ [0,3 punts]

d'on: $p_{TOTAL} = 3,37$ atm [0,2 punts]

47. PAU 2007 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 3

3. Equilibri de gasos

3.1 mols de cada substància en l'equilibri:

reacció:	2 HI (g) ⇆	H_2 (g) +	I_2 (g)
mols a l'inici	0,80	0	0
mols a l'equilibri	0,80 – 2x	x	x
molaritats	(0,80 – 2x)/2	x/2	x/2

[0,2 punts]

Equació de la constant d'equilibri:

$$1{,}56.10^{-2} = \frac{x/2\,.\,x/2}{((0{,}80-2x)/2)^2} = \frac{x^2}{(0{,}80-2x)^2}$$

[0,2 punts]

que condueix a la següent equació de segon grau: $0{,}9376\ x^2 + 4{,}99\ 10^{-2}\ x - 9{,}98\ 10^{-3} = 0$
a una única arrel positiva:

$$x = 0{,}08$$

de manera que els mols de les espècies en equilibri seran:

HI (g) = 0,80 – 0,16 = 0,64 mols
H_2 (g) = 0,08 mols
I_2 (g) = 0,08 mols

[0,6 punts]

Càlcul de la pressió total en l'equilibri:

En el transcurs de la reacció no es produeix cap variació respecte al nombre de mols totals de gas:

mols totals = mols inicials de IH (g) = 0,80 – 2x + x + x = 0,80 [0,2 punts]

D'aquesta manera, la pressió total en l'equilibri serà:

$$P = \frac{nRT}{V} = \frac{0{,}80\,.\,0{,}08206\,.(273+400)}{2} = 22.1\ atm$$

Si el càlcul es fa en pascals, el resultat és: $2{,}24.10^6$ Pa

[0,4 punts]

Efecte de la presència d'un catalitzador sobre K_c = no té cap efecte
K_c tan sols es veu influïda per la temperatura
[0,2 punts]

Efecte de la presència d'un catalitzador sobre la situació d'equilibri = no té cap efecte
s'acceleren les reaccions directa e inversa i l'estat d'equilibri resta invariable
[0,2 punts]

48. PAU 2006 · Setembre · Sèrie 4 · Exercici 2

2. Equilibri del iodur d'hidrogen

a) Reacció: 2 HI (g) ⇆ H_2 (g) + I_2 (g) [0,25 punts]

b) Càlcul de la pressió parcial a 25 ºC del HI.
Aplicant l'equació d'estat del gas ideal s'obté: p = 4,264 10^4 Pa.
Es considerarà correcte el càlcul de la pressió en atmosferes. [0,4 punts]

c) quantitat d' HI en l'equilibri = 1,345 10^{-2} mol ; [0,25 punts]
quantitat de I_2 = quantitat d' H_2 = 1,875 10^{-3} mol. [0,5 punts]

d) Càlcul de K_c = 1,94 10^{-2}

$$K_C = \frac{\left(1{,}875\ 10^{-3}\right)^2}{(1{,}345\ 10^{-2})^2} = 1{,}94\ 10^{-2}$$

[0,6 punts]

3- Equilibri àcid base. Àcid acètic.

a) $[H^+] = c\alpha$ = 0,100 . 0,013 = 1,3 10^{-3} M.
pH = -Log $[H^+]$ = - Log 1,3 10^{-3} = 2,89; pH = 2,89. [0,4 punts]

b) Càlcul de la K_a

$$K_a = \frac{1{,}3\ 10^{-3}\ .\ 1{,}3\ 10^{-3}}{0{,}1\ (1 - 0{,}013)} = 1{,}71\ \ 10^{-5}$$

[0,4 punts]

c) Càlcul del volum de dissolució 0,250 M de KOH. V = 0,020 L. [0,4 punts]

d) Procediment de valoració:
Material: bureta de 25 mL, pipeta aforada (o de doble aforament) de 50 mL, erlenmeyer de 250 mL. Material auxiliar: pera d'aspiració (o estri semblant), vas de precipitats de 100 mL (per prendre una petita quantitat de la dissolució d'àcid abans de pipetejar els 50 mL), embut petit, pipeta Pasteur o comptagotes, flascó rentador amb aigua destil·lada.
Reactius: dissolució de fenolftaleïna, dissolució de KOH 0,250 M i aigua destil·lada.
Procediment: Es carrega una bureta de 25 mL amb la dissolució de KOH (amb l'ajuda d'un petit embut, sense deixar bombolles d'aire a dins de la bureta, amb compte amb els vessaments, ...). Amb una pipeta aforada (o de doble aforament) de 50 mL pipetegem la dissolució d' àcid acètic 0,100 M amb l'ajut d'una pera o un altre estri d'aspiració i els disposem (caiguda per gravetat) dins d'un matràs erlenmeyer de 250 mL (podem rentar les parets amb un xic d'aigua procedent d'una flascó rentador). Dins del matràs erlenmeyer disposem també dues gotes d'un indicador que, com ara la fenolftaleïna amb un canvi de color d'incolor a rosa intens, permet la visualització

del canvi de color en la regió alcalina (pH 8,0 – 9,0). Obrim la clau de la bureta i deixem caure la dissolució de KOH sobre la d'àcid agitant contínuament el contingut de l'erlenmeyer. Quan veiem que l'indicador fa intenció de canviar de color, addicionem la dissolució alcalina gota a gota fins observar el canvi de coloració de l'indicador. Tanquem la clau de la bureta i anotem el volum consumit de dissolució de KOH, tot evitant errors de paralatge. [0,8 punts]

49. PAU 2006 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 1

1. Síntesi del metanol

a) Mols presents en l'equilibri: CO = 1,2 mol ; H_2 = 0,4 mol i Me-OH = 0,8 mol. [0,5 punts]

b) El càlcul de K_p es pot fer a través del valor de les pressions parcials en l'equilibri o bé calculant prèviament el valor de K_c . Es puntuarà correctament l'exercici tant si el càlcul es fa emprant atmosferes com Pa com unitats de pressió.
Procediment 1: càlcul de les pressions parcials
p (Me-OH) = $3.99\ 10^6$ Pa = 39.4 atm
p (H_2) = $2.00\ 10^6$ Pa = 19,7 atm
p (CO) = $6.00\ 10^6$ Pa = 59,0 atm
o bé: Procediment 2: a través del càlcul previ de càlcul de K_c
K_c = 4,17 [0,6 punts]
Càlcul de K_p
$K_p = 1{,}68\ 10^{-13}$ (treballant en Pa) o bé $1{,}72\ 10^{-3}$ (si es treballa en atmosferes) [0,4 punts]
Per bé que K_c i K_p siguin constants addimensionals, es considerarà correcte la resposta encara que l'estudiant hagi expressat el valor d'aquestes constants amb unitats.

c) L'augment del volum del reactor provocarà un desplaçament de l'equilibri inicial cap a la formació de CO i H_2 (desplaçament de la reacció cap a on es formi un nombre major de mols de gas) [0,5 punts]

50. PAU 2006 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 3

3. Síntesi de l'amoníac

a) Les concentracions de les espècies en l'equilibri són: $[NH_3]$ = 0,40 M ; $[N_2]$ = 0,20 M i $[H_2]$ = 0,25 M. [0,2 punts]
Aquestes concentracions permeten calcular una K_c = 51,28 [0,4 punts]

b)

	N_2	+ 3 H_2	⇆ 2 NH_3
mols en l'equilibri inicial	040	0,50	0,80
mols en el nou equilibri	n + 0,40 – 0,1	0,50 – 0,3	0,80 + 0,2 = 1,0
concentracions	(n +0,3)/2	0,2/2	½

la descripció de la nova situació d'equilibri (mols o concentracions) es puntuarà amb [0,45 punts]
El valor n, obtingut substituint en l'equació de la constant d'equilibri els valors de les concentracions anteriors, és : n = 9,45 mol de N_2 [0,35 punts]

c) Donat que la reacció és exotèrmica, podem augmentar el rendiment disminuint la temperatura. També s'augmenta el rendiment augmentant la concentració d'un dels reactius o bé del dos. Augmentant la pressió (o disminuint el volum del reactor) també afavorim la formació d'amoníac per desplaçament de la reacció cap a on hi ha menys nombre de mols de gas. Dues qualsevol d'aquestes raons es puntuaran amb: [0,6 punts]

51. PAU 2005 · Setembre · Sèrie 3 · Exercici 3

3. Equilibri CO + H_2O (massa molecular = 58 g·mol^{-1})

a) $K_P = \dfrac{P_{CO_2} P_{H_2}}{P_{CO} P_{H_2O}} = \dfrac{[CO_2][H_2]}{[CO][H_2O]} = K_c$ (ja que no hi ha increment en el nombre de mols

[0,5 punts]

b) [CO] = 3 – x ; $[H_2O]$ = 1 – x ; $[CO_2] = [H_2]$ = x

$0{,}64 = \dfrac{x^2}{(3-x)(1-x)}$ → x = 0,684 mol·dm^{-3}

[CO] = 2,316 mol·dm^{-3} ; $[H_2O]$ = 0,316 mol·dm^{-3} ; $[CO_2] = [H_2]$ = 0.684 mol·dm^{-3} [1 punt]

c) No es modificarà l'equilibri ja que, en no haver variació del nombre de mols, la pressió no afecta a l'equilibri. [0,5 punts]

52. PAU 2005 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 2

2. Descomposició NOCl

a) $2\ NOCl \rightleftharpoons 2\ NO + Cl_2$ fracció descomposta: $x = 0,2$

$[NOCl] = 1,6\ mol\cdot dm^{-3}$; $[NO] = 0,4\ mol\cdot dm^{-3}$; $[Cl_2] = 0,2\ mol\cdot dm^{-3}$ [0,5 punts]

$$K_c = \frac{[NO]^2\,[Cl_2]}{[NOCl]^2} = 0,0125\ mol\cdot dm^{-3}$$ [0,5 punts]

(es pot admetre amb o sense unitats)

b) Nombre total de mols de gas = 2,2.

A partir de $PV = nRT$, $P = 117,3$ atm [0,5 punts]

c) – Disminuint la pressió (o augmentant el volum del recipient).

– Incrementant la quantitat de reactiu o traient els productes.

(Només cal donar un dels dos mètodes. Si només es comenta la possible influència de la temperatura ***en relació amb el hipotètic caràcter exotèrmic o endotèrmic de la reacció****, compteu 0,25 punts)*

53. PAU 2005 · Juny · Sèrie 4 · Exercici 4 (Opció B)

OPCIÓ B

4. Esterificació

a) $CH_3–CH_2–COOH + CH_3–CH_2–OH \rightleftharpoons CH_3–CH_2–COO–CH_2–CH_3 + H_2O$ [0,5 punts]

b) [[èster] = $[H_2O] = x / V$

[àcid] = [etanol] = $(1 - x) / V$; $K_c = 16 = \frac{x^2}{(1-x)^2}$ ⇒ $4 = \frac{x}{1-x}$ ⇒ $x = 0,8 / V$

$mol\cdot dm^{-3}$

(s'accepta considerar que el volum és V = 1 L) [1 punt]

c) $CH_3–CH_2–CH_2–CH_2–COOH$ àcid pentanoic

$CH_3–CH_2–CH_2–COO–CH_3$ butanoat de metil

$CH_3–COO–CH_2–CH_2–CH_3$ acetat de propil [0,5 punts]

(només cal donar-ne un)

54. PAU 2004 · Setembre · Sèrie 5 · Exercici 4 (Opció B)

OPCIÓ B

4. Reacció esterificació

a) $$K_c = \frac{[CH_3COOCH_2CH_3][H_2O]}{[CH_3COOH][CH_3CH_2OH]} = \frac{(2/3)(2/3)}{(1/3)(1/3)} = 4$$ [0,5 punts]

b) El pH augmentarà, perquè disminueix la concentració de l'àcid acètic. [0,5 punts]

c) El catalitzador incrementa la velocitat de la reacció, però no variarà la conversió (o fracció de èster format), ja que no modifica la posició de l'equilibri. [0,5 punts]

55. PAU 2004 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 3

3. Descomposició del fosgè

a) $K_P = K_c\,(RT)^{\Delta n}$; $\Delta n = 1$ $K_c = K_P\,(RT)^{-1} = 2{,}13\cdot10^{-4}$ mol·dm^{-3} [0,5 punts]

b) 1 mol $COCl_2 \rightarrow 0{,}01$ mol·L$^{-1} \rightarrow 0{,}47$ atm (pressió inicial P^0)

$$K_P = \frac{P_{CO}P_{Cl_2}}{P_{COCl_2}} = \frac{x^2}{P^o - x} \rightarrow \begin{cases} x = 0{,}0686\ atm = P_{CO} = P_{Cl_2} \\ P_{COCl_2} = 0{,}47 - 0{,}0686 = 0{,}401\ atm \end{cases}$$

En concentracions: [CO] = [Cl_2] = 0,00146 mol·L^{-1} ; [$COCl_2$] = 0,0085 mol·L^{-1} [1 punt]

c) En incrementar el volum, disminueix la pressió, i la reacció es desplaça en el sentit de l'increment en el nombre de mols, per tant, s'afavoreix la descomposició. [0,5 punts]

56. PAU 2003 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 4 (Opció B)

OPCIÓ B

4. Síntesi del metanol

a) $CO + 2\ H_2 \rightarrow CH_3OH$ [0,5 punts]

b) [CH_3OH] = 0,15 / 5 = 0,03 mol·L^{-1}
[CO] = (1 – 0,15) / 5 = 0,17 mol·L^{-1}
[H_2] = (1 – 2 · 0,15) / 5 = 0,14 mol·L^{-1} [0,5 punts]

c) $K_c = \dfrac{[CH_3OH]}{[CO][H_2]^2} = 9{,}0$ L^{2}mol^{-2} ; $K_p = K_c\,(RT)^{-2} = 5{,}4\cdot10^{-3}$ atm^{-2} [0,5 punts]

d) Disminuint la temperatura (per ser reacció exotèrmica)
Incrementant la pressió total (en haver disminució del nombre de mols de gas) [0,5 punts]

57. PAU 2002 · Setembre · Sèrie 1 · Exercici 5 (Opció A)

5. $N_2O_4 \rightleftarrows 2\ NO_2$

a) $K_c = \dfrac{[NO_2]^2}{[N_2O_4]} = \dfrac{(0{,}29/2)^2}{(0{,}20/2)} =$ **0,210 mol·L^{-1}** [0,5 punts]

$K_p = K_c \cdot RT$ = 0,210 mol·L^{-1}·0,082 atm·L·K^{-1}·mol^{-1}·373 K = **6,43 atm = 6,51·10^5 Pa** [0,5 punts]

b) nova quantitat inicial de N_2O_4 = 0,29+0,11 = 0,40 mol $\Rightarrow$ 0,2 mol·L^{-1}
x = quantitat reaccionada de N_2O_4

$$K_c = \frac{(0{,}2 - 2x)^2}{(0{,}10 + x)} = 0{,}210\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1} \Rightarrow x = 0{,}0205\ \text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$$

$c(NO_2)$ = **0,159 mol·L^{-1}** $c(N_2O_4)$ = **0,1205 mol·L^{-1}** [1 punt]

58. PAU 2002 · Juny · Sèrie 2 · Exercici 5 (Opció B)

5. $K_c = \dfrac{[SO_3][NO]}{[SO_2][NO_2]} = \dfrac{n(SO_3)n(NO)}{n(SO_2)n(NO_2)} = 3$

a) $\dfrac{0{,}8\cdot0{,}8}{0{,}4\cdot0{,}4} = 4 > K_c \Rightarrow$ **no està en equilibri**: es desplaçarà cap a l'esquerra [0,5 punts]

b) $\dfrac{(0{,}8 - x)^2}{(0{,}4 + x)^2} = 3 \Rightarrow x^2 + 2x - 0{,}08 = 0 \Rightarrow x = 0{,}04$

$n(SO_2) = n(NO_2) =$ **0,44 mol**
$n(SO_3) = n(NO) =$ **0,76 mol** [1 punt]

c) **No es modifica**, en no haver increment de nombre de mols en la reacció [0,5 punts]

59. PAU 2001 · Setembre · Sèrie 4 · Exercici 3

3. Reacció $CO + H_2O$
   a) $[CO] = [H_2O] = 0{,}1 - x$; $[CO_2] = [H_2] = x$

$$K = \frac{x^2}{(0{,}1-x)^2} = 10 \rightarrow 9x^2 - 2x + 0{,}1 = 0 \rightarrow x = 0{,}076 \text{ mol·dm}^{-3}$$

   b) La pressió total del sistema no afecta a l'equilibri perquè no hi ha variació en el nombre de mols entre reactius i productes.
   c) En augmentar la temperatura, disminueix la constant d'equilibri. Per tant, la reacció és exotèrmica.

60. PAU 2001 · Juny · Sèrie 5 · Exercici 5 (Opció B)

Solució no disponible: la pauta oficial no la inclou o no s'ha pogut localitzar.

61. PAU 2000 · Setembre · Sèrie 2 · Exercici 2

Solució no disponible: la pauta oficial no la inclou o no s'ha pogut localitzar.

62. PAU 2000 · Setembre · Sèrie 6 · Exercici 4 (Opció B)

OPCIÓ B

4.-

a) Planteig de l'equació d'equilibri. 2 SO_3 → 2 SO_2 + O_2. A partir dels grams de SO_3 es calculen els mols. El mateix amb l'oxigen. En l'equilibri 0,014 - 2x → 2x x, essent x la concentració de l'oxigen. Tenim un volum de 2 litres. Amb aquestes dades es calcula la Kc.

b) Com hi han més mols de gas a la dreta, si augmenta la pressió, la reacció es desplaçarà cap a l'esquerra a fi de mantenir el valor de la Kc. Llei d'acció de masses.

c) Corrosiu

El contacte amb substàncies corrosives destrueix teixits vius i altres materials.

Cal evitar el contacte amb la pell, els ulls i la roba i no inhalar els vapors.

Tòxic

Productes que inhalats, ingerits o en contacte amb la pell provoquen lesions i fins i tot la mort.

Cal evitar el contacte.

63. PAU 2000 · Juny · Sèrie 1 · Exercici 2

2.- a) l quedar 1,4 mols d'oxigen vol dir que han reaccionat 0,6. Es plnteja l'equació de la Kc tenint en conte que treballem amb un volum de dos litres. Cal tenir present els coeficients de la reacció, tant en el planteig com en l'equació.

b) Augment de temperatura: equació exotèrmica, dona calor, contrarestar l'efecte. Desplaçament a l'esquerra. Augment de pressió: Hi han més mols de gas a l'esquerra. Llei d'acció de masses. Pressions parcials. Manteniment del valor de la Kp. Desplaçament a la dreta

3 a) H_2O, filtració. Solució, NaCl. Sòlid: sorra, esteàric. CCl_4, filtració. Solució, esteàric. Sòlid, sorra. Les soluciions s'evaporen en una càpsula de porcellana o cristal.litzador. S'obtè el sòlid corresponent.

b) Amb un punt de fusió.

c) Tòxic

Productes que inhalats, ingerits o en contacte amb la pell provoquen lesions i fins i tot la mort.

Cal evitar el contacte.

Irritant

Productes que actuen sobre las pell, els ulls i les mucoses en general. Irriten les vies respiratòries. Cal evitar el contacte amb els ulls i la pell, no n'inhalar els vapors.

64. PAU 2000 · Juny · Sèrie 3 · Exercici 3

3.- a)Amb la relació $Kp=Kc(RT)^{\Delta n}$ calculem la Kp.

b) Com hi han més mols a la dreta, si augmenta la pressió, la reacció es desplaçarà cap a l'esquerra a fi de mantenir el valor de la Kc.

c) L'equilibri és endotèrmic per que al disminuir la temperatura augmenta la concentració de N_2O_4.