

CINÈTICA QUÍMICA

1. Càlcul de la velocitat I

Un recipient de 2 dm^3 conté 0,6 mol d'hidrogen i 0,2 mol de nitrogen que reaccionen segons:
 $\text{N}_2 (\text{g}) + 3 \text{H}_2 (\text{g}) \rightarrow 2 \text{NH}_3 (\text{g})$. Al cap de 5 minuts han desaparegut 0,002 mol de nitrogen. Calculeu la velocitat mitjana de la reacció durant aquest temps : $2 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{min}^{-1}$.

2. Càlcul de la velocitat I

Per estudiar una reacció: $\text{A} + 2 \text{B} \rightarrow \text{C} + 3 \text{D}$, es mesura D amb el temps obtenint la següent taula:

t (s)	0	1	2	3	4	5
n _D (mol)	0	12	20	26	30	33

Sabent que el volum del recipient és de 4 litres, calculeu:

- La velocitat mitjana entre 0 i 1 s : $1 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.
- La velocitat mitjana entre 0 i 5 s : $0,55 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.
- La velocitat mitjana entre 4 i 5 s : $0,25 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.

3. Càlcul de la velocitat II* (derivada gràfica o numèrica)

Donada la reacció: $\text{A} \rightarrow \text{B}$, es disposa de la següent taula de valors:

t (s)	0	10	20	30	40
[A] (mol/L)	1,00	0,50	0,25	0,12	0,06

Calculeu:

- La velocitat mitjana entre 0 i 40 s : $0,024 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.
- La velocitat instantània als 20 s : $0,017 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ (un cert error és acceptable).
- La velocitat instantània als 15 s : $0,025 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ (un cert error és acceptable).

4. Càlcul de la velocitat II* (derivada gràfica o numèrica)

Donada la reacció: $2\text{A} \rightarrow \text{B}$, es disposa de la següent taula de valors:

t (min)	0	1	2	3	4
[A] (mol/L)	0,25	0,12	0,08	0,06	0,05

Calculeu:

- La velocitat mitjana entre 0 i 4 minuts : $0,025 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{min}^{-1}$.
- La velocitat instantània a 1 min : $0,031 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{min}^{-1}$ (un cert error és acceptable).
- La velocitat instantània a 2 min : $0,014 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{min}^{-1}$ (un cert error és acceptable).

5. Equació de velocitat II

A la reacció: $\text{A} + \text{B} \rightarrow \text{C} + \text{D}$, s'observa que en duplicar la concentració de B la velocitat és quadruplica, però si es duplica la concentració de A, mantenint B constant, no canvia gens. Deduïu l'equació de la velocitat de reacció : $v = k[\text{B}]^2$.

6. Equació de velocitat II

A la reacció: $\text{CO} (\text{g}) + \text{NO}_2 (\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2 (\text{g}) + \text{NO} (\text{g})$, sabem que la constant de velocitat de reacció val $0,5 \text{ mol}^{-1} \cdot \text{dm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ a 400°C . Quant valdrà la velocitat a 400°C si les dues concentracions són $0,001 \text{ M}$? : $5 \cdot 10^{-7} \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.

7. *Equació de velocitat II*

Estudiant la reacció: $2 \text{O}_3 (\text{g}) \rightarrow 3 \text{O}_2 (\text{g})$, a una certa temperatura i diverses pressions inicials s'obté la següent taula de valors:

$P_{\text{ozó}} (\text{atm})$	0,2	0,2	0,4
$P_{\text{oxigen}} (\text{atm})$	0,5	1,0	1,0
$v (\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1})$	6,0	3,0	12

Quin és l'ordre de reacció respecte cada substància i el total? : 2, -1 i 1.

8. *Equació de velocitat II*

La velocitat de la reacció: $2 \text{NO} (\text{g}) + \text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow 2 \text{NO}_2 (\text{g})$, s'ha mesurat a 25 °C obtenint la taula:

$[\text{NO}] (\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3})$	0,020	0,020	0,020	0,040	0,010
$[\text{O}_2] (\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3})$	0,010	0,020	0,040	0,020	0,020
$v (\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1})$	0,028	0,057	0,114	0,227	0,014

Calculeu:

- L'ordre de reacció respecte cada substància i el total : 2, 1 i 3.
- La constant de velocitat de reacció : $7 \cdot 10^3 \text{ mol}^{-2} \cdot \text{dm}^6 \cdot \text{s}^{-1}$.

9. *Mecanismes II*

Deduïu la reacció global combinant els passos elementals:

- Transformació de l'ozó en oxigen: $\text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{O}$; $\text{O} + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{O}_2$
: $2 \text{O}_3 \rightarrow 3 \text{O}_2$.
- Síntesi del bromur d'hidrogen: $\text{Br} + \text{H}_2 \rightarrow \text{HBr} + \text{H}$; $\text{H} + \text{Br}_2 \rightarrow \text{HBr} + \text{Br}$
: $\text{H}_2 + \text{Br}_2 \rightarrow 2 \text{HBr}$.
- Síntesi del iodur d'hidrogen: $\text{I}_2 \rightarrow 2\text{I}$; $\text{I} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{I}$; $\text{I} + \text{H}_2\text{I} \rightarrow 2 \text{HI}$
: $\text{H}_2 + \text{I}_2 \rightarrow 2 \text{HI}$.
- Descomposició del pentaòxid de dinitrogen en diòxid de nitrogen i oxigen: $\text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{NO}_3$; $\text{NO}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{NO}$; $\text{NO} + \text{NO}_3 \rightarrow 2 \text{NO}_2$
: $2 \text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow 4 \text{NO}_2 + \text{O}_2$.

10. *Mecanismes II*

La reacció de síntesi del bromur d'hidrogen: $\text{H}_2 + \text{Br}_2 \rightarrow 2 \text{HBr}$, se suposa que transcorre segons el següent mecanisme: i) iniciació $\text{Br}_2 \rightleftharpoons 2 \text{Br}$ ràpidament s'aconsegueix l'equilibri, ii) propagació $\text{Br} + \text{H}_2 \rightarrow \text{HBr} + \text{H}$ lenta, $\text{H} + \text{Br}_2 \rightarrow \text{HBr} + \text{Br}$ mitjana.

Deduïu l'equació de la velocitat de reacció : $v = k[\text{Br}_2]^{1/2}[\text{H}_2]$.

11. *Mecanismes II*

S'ha descobert que la velocitat de la reacció: $2 \text{NO} (\text{g}) + \text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow 2 \text{NO}_2 (\text{g})$, obeeix l'equació de velocitat: $v = k[\text{NO}]^2[\text{O}_2]$. Deduïu quins dels següents mecanismes són compatibles amb les dades:

- $\text{NO} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{N}_2\text{O}_2$ ràpida ; $\text{N}_2\text{O}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{NO}_2$ lenta
: és compatible.
- $\text{NO} + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{N}$ lenta ; $\text{N} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{NO}_2$ ràpida
: no és compatible, donaria l'equació $v = k[\text{NO}]^2$.
- $\text{NO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{NO}_3$ ràpida ; $\text{NO}_3 + \text{NO} \rightarrow 2 \text{NO}_2$ lenta
: és compatible.
- $\text{NO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}$ lenta ; $\text{NO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NO}_2$ ràpida
: no és compatible, donaria l'equació $v = k[\text{NO}][\text{O}_2]$.

12. *Mecanismes II*

S'ha comprovat que a la reacció de transformació de l'ozó en oxigen: $2 \text{O}_3 \rightarrow 3 \text{O}_2$, l'equació de velocitat de reacció ve donada per $v = k[\text{O}_3]^2[\text{O}_2]^{-1}$ i per explicar-ho s'han proposat diferents mecanismes que heu de valorar:

- a) $\text{O}_3 + \text{O}_3 \rightarrow 3 \text{O}_2$.
: impossible, donaria l'equació $v = k[\text{O}_3]^2$.
- b) $\text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{O}$ lenta ; $\text{O} + \text{O}_3 \rightleftharpoons 2 \text{O}_2$ ràpida
: impossible, donaria l'equació $v = k[\text{O}_3]$.
- c) $\text{O}_3 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{O}$ ràpida ; $\text{O} + \text{O}_3 \rightarrow 2 \text{O}_2$ lenta
: és possible.
- d) $\text{O}_3 + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{O}_4$ lenta ; $\text{O}_4 \rightleftharpoons 2 \text{O}_2$ ràpida
: impossible, donaria l'equació $v = k[\text{O}_3]^2$.
- e) $\text{O}_3 + \text{O}_3 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{O}_4$ ràpida ; $\text{O}_4 \rightarrow 2 \text{O}_2$ lenta
: és possible.