

Cinética Química



- Velocidad de reacción
- Ecuación de velocidad
- Cinética de 1^{er} orden
- Cinética de 2^o orden
- Tiempo de semireacción
- Ecuación de Arrhenius
- Calculo de k a T_2 a partir de k a T_1
- Determinación de la energía de activación
- Catalizadores

Velocidad de reacción



- ✚ Se define como la variación con el tiempo de la concentración de una de las sustancias (reactivos o productos) de la reacción.



$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt}$$

Ecuación de velocidad



Es la ecuación que relaciona las concentraciones de los reactivos con la velocidad.



$$v = k [A]^{\alpha} [B]^{\beta} \Rightarrow \text{mol l}^{-1} \text{s}^{-1}$$

- ✚ α : orden parcial de la reacción respecto de A
- ✚ β : orden parcial de la reacción respecto de B
- ✚ $\alpha + \beta$: orden global de la reacción

Cinética de 1^{er} orden



$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k[A] \Rightarrow \frac{d[A]}{[A]} = -k dt \Rightarrow \text{integrando} \Rightarrow$$

$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]} = -\int_0^t k dt \Rightarrow \ln \frac{[A]}{[A]_0} = -kt \Rightarrow \underline{\underline{[A] = [A]_0 e^{-kt}}}$$

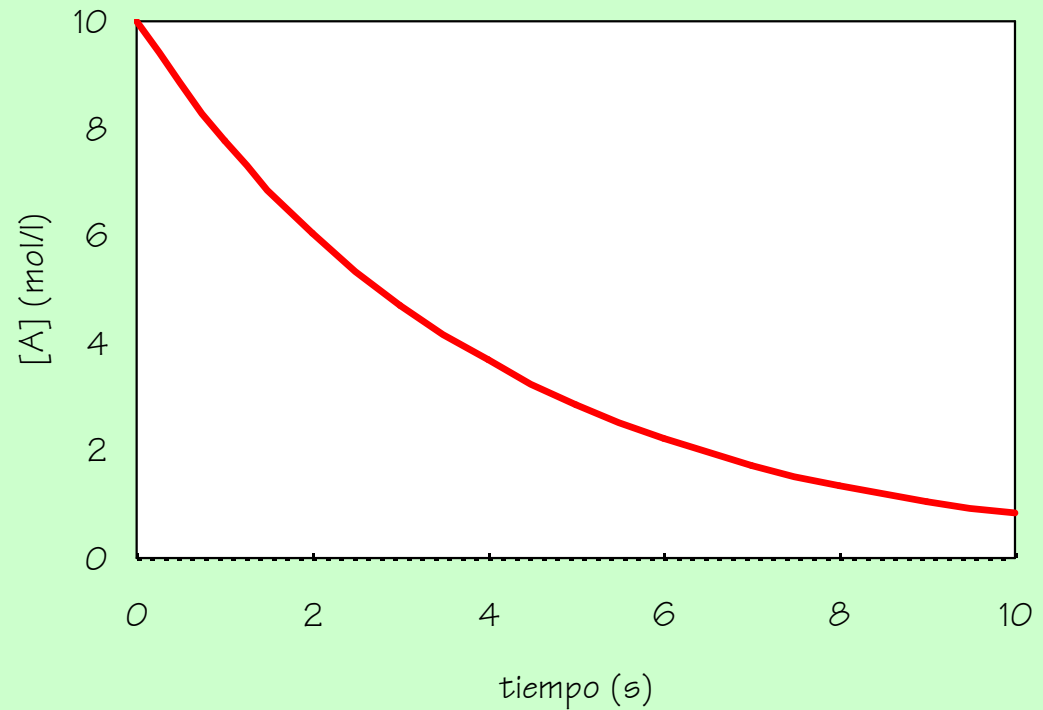
Gráfica

Cálculo de k

Gráfica cinética 1^{er} orden

$$[A] = [A]_0 e^{-kt}$$

Variación de la concentración con el tiempo



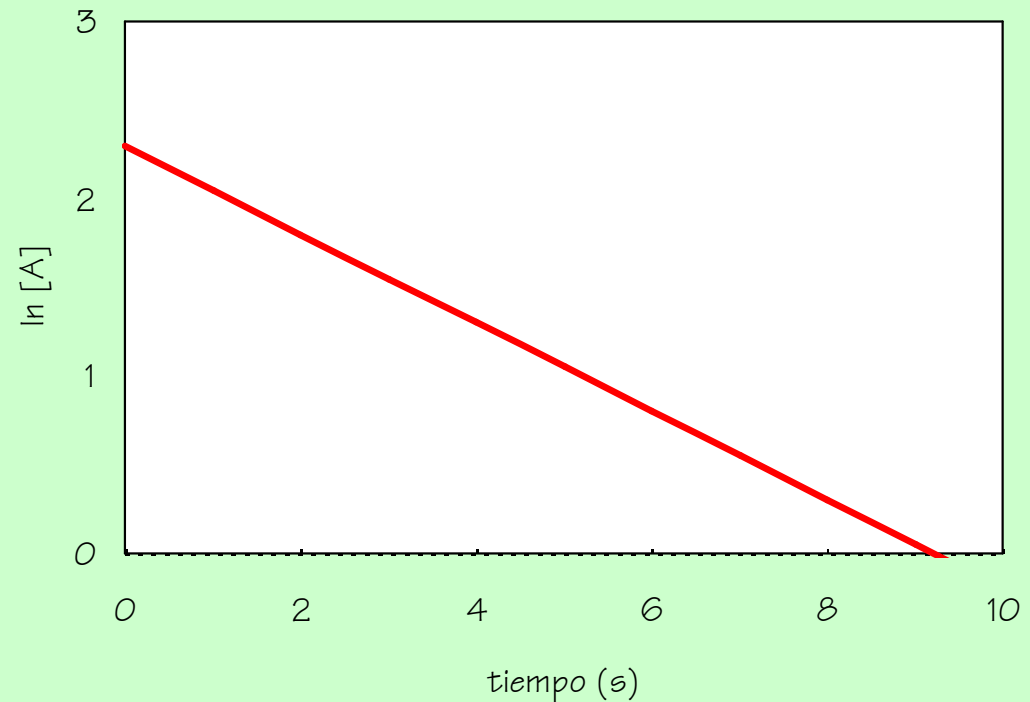
Determinación gráfica de k (1^{er} orden)



✚ Representar:

✚ Y de la pendiente de la recta, obtener $-k$

$\ln [A]$ frente al tiempo



Cinética de 2º orden



$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k[A]^2 \Rightarrow \frac{d[A]}{[A]^2} = -k dt \Rightarrow \text{integrando} \Rightarrow$$

$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]^2} = -\int_0^t k dt \Rightarrow \frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0} = kt \Rightarrow \underline{\underline{\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt}}$$

Cálculo de k

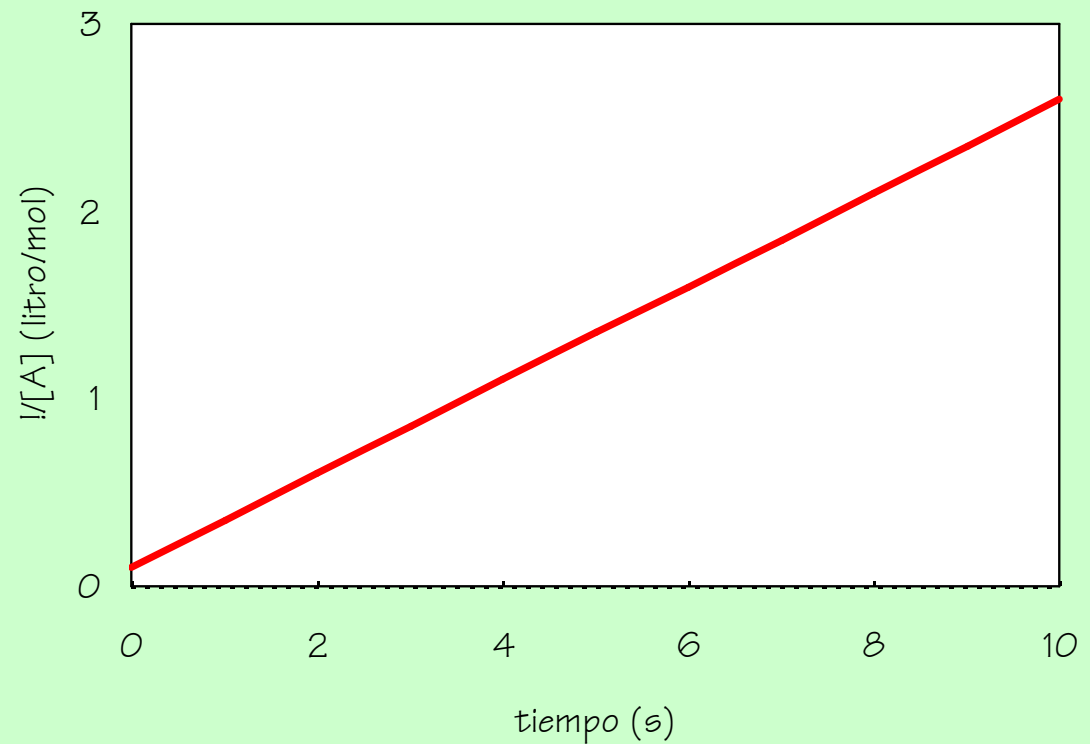
Determinación gráfica de k (2° orden)



✚ Representar:

✚ Y de la pendiente de la recta, obtener k

$1/[A]$ frente al tiempo



Tiempo de semireacción



✚ Se define como el tiempo que tarda una muestra en reducirse a la mitad.

✚ Para una cinética de 1^{er} orden:

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

✚ Para una cinética de 2^o orden:

$$t_{1/2} = \frac{1}{k [A]_0}$$

Ecuación de Arrhenius



- ✚ Expresa como varia la constante cinética k con la temperatura:

$$k = A e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

- ✚ E_a : energía de activación
- ✚ R : constante de los gases ideales
- ✚ T : temperatura

Calculo de k a T_2 a partir de k a T_1



- ✚ Si disponemos del valor de k a la temperatura T_1 y queremos calcular el valor de k a T_2 :

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = -\frac{E_a}{R} \left[\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right]$$

- ✚ Valores de R:

- ✚ $R = 8.31 \text{ J/mol } ^\circ\text{K}$
- ✚ $R = 2 \text{ cal/mol } ^\circ\text{K}$

Determinación de la energía de activación (E_a)

✚ Supongamos que tenemos datos de cómo varia la constante cinética k con la temperatura.

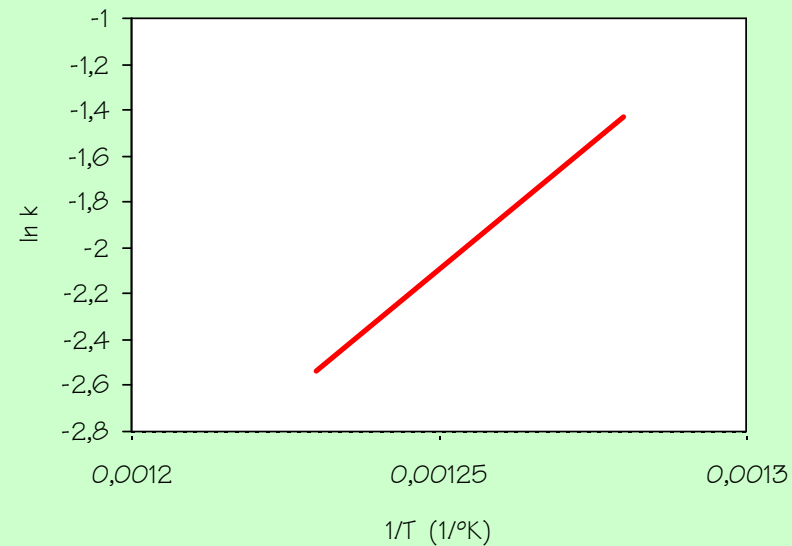
✚ Se representa:

$\ln k$ frente a $1/T$

✚ Se calcula la pendiente:

$$-E_a/R$$

✚ Y de ese dato se obtiene la E_a



Catalizadores



- ✚ Son sustancias que hacen **variar la velocidad de una reacción** sin que ellos sufran ningún cambio químico permanente.
- ✚ **Solo** modifican la velocidad de las reacciones que se producen espontáneamente.
- ✚ Nunca puede provocar una reacción que no se realice por si sola.
- ✚ Si aumenta la velocidad de reacción se llama **catalizador positivo**, y, si la retarda, se denomina **catalizador negativo o inhibidor**.