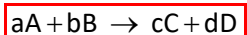


CINÉTICA QUÍMICA

La **velocidad de una reacción química** se define como la derivada de la concentración (Molaridad) de un reactivo o producto respecto del tiempo.



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

La **ley de velocidad** es la expresión que relaciona las concentraciones de uno o más reaccionantes o productos con la velocidad. Se tiene que determinar de forma experimental y en una reacción del tipo: $aA + bB \rightarrow cC + dD$ adopta la forma:

$$v = k \cdot [A]^x \cdot [B]^y$$

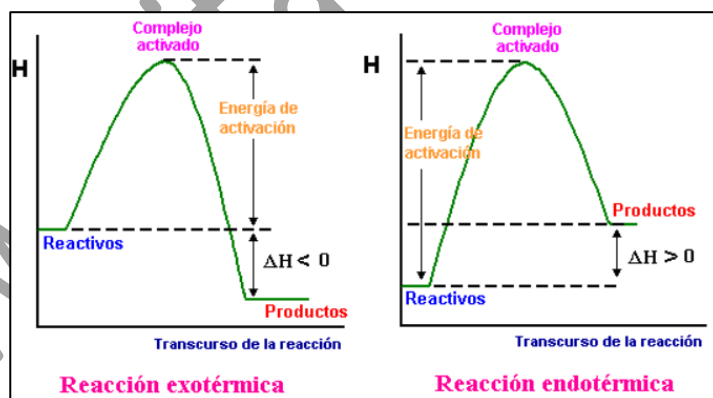
El exponente de cada concentración es el **orden parcial** de la reacción respecto de cada sustancia y la suma de todos ellos se denomina **orden global** de la reacción.

Los órdenes parciales de la reacción respecto de cada sustancia no son los coeficientes estequiométricos (molecularidad) que presentan las sustancias en la ecuación de la reacción, aunque, a veces, puedan coincidir.

Se denomina **molecularidad** de una reacción química al número de moléculas, átomos o iones que intervienen en una etapa elemental, es decir, que reaccionan simultáneamente.

La **k** se denomina **constante de velocidad** y sus dimensiones dependen del orden de la reacción que se considera.

Energía de activación: es la energía mínima necesaria, para que se produzca una reacción química, es decir, el requisito básico para que la reacción proceda.



$$\Delta H = E_a - E_{a_i}$$

- Reacción endotérmica $\Delta H > 0 \Rightarrow E_a > E_{a_i}$
- Reacción exotérmica $\Delta H < 0 \Rightarrow E_a < E_{a_i}$

Factores que influyen en la velocidad de la reacción:

- **Naturaleza de los reactivos:** Las sustancias covalentes dan lugar a reacciones lentas y las iónicas disueltas suelen reaccionar rápidamente.
- **Concentración de los reactivos:** La velocidad de la reacción aumenta al aumentar la concentración de los reactivos porque si aumenta el número de moléculas aumenta el número de choques eficaces.

• **Estado físico de los reactivos:** Los gases y los líquidos reaccionan mejor que los sólidos, y éstos reaccionan mejor si están pulverizados porque aumentan así su superficie de contacto y por tanto facilitan la reacción.

• **Presión:** Cuando se trata de reacciones entre sustancias gaseosas, un aumento de la presión parcial de cada una de ellas provoca un aumento de la concentración (P= c.R.T) y en consecuencia aumenta la velocidad de la reacción.

• **Temperatura:** Un aumento de la temperatura produce un aumento general en la energía cinética de las moléculas, lo que representa un mayor número de choques.

La dependencia de la constante de velocidad respecto de la temperatura viene dada por la ecuación de Arrhenius:

$$k = A \cdot e^{-Ea/RT} \quad \text{Tomando ln:} \quad \ln k = \ln A - \frac{Ea}{R \cdot T}$$

- A es una constante llamada factor de frecuencia.
- R = 8,314 (J/mol.K)
- Ea es la energía de activación en Julios
- T es la temperatura en K

Para dos temperaturas distintas, es fácil obtener la fórmula:

$$\ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right) = \frac{Ea}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$$

$$k_2 = k_1 \cdot e^{\frac{-Ea}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)}$$

• **Catalizadores.**

Son sustancias químicas ajenas a la reacción cuya presencia modifica la velocidad de la misma sin que ellas experimenten alteración alguna por lo que se recuperan al final de la reacción. Actúan en cantidades muy pequeñas y cambian el mecanismo de la reacción.

• **Positivos:** Aumentan la velocidad de la reacción al disminuir la energía de activación o facilitan el choque de las moléculas reaccionantes.

• **Negativos:** Disminuyen la velocidad de la reacción al aumentar la energía de activación o al dificultar los choques entre moléculas. A estos se les conoce como inhibidores.

$$\ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right) = \frac{Ea_1 - Ea_2}{R \cdot T}$$

Siendo:

Ea₁ y V₁ la energía de activación con catalizador y la velocidad de la reacción con catalizador. Ea₂ y V₂ la energía de activación sin catalizador y la velocidad de la reacción sin catalizador.

Constante del equilibrio:

$$K_c = \frac{K_d}{K_i}$$