reaccions inorgàniques

Quan estudiem una reacció inorgànica hem de tenir en compte 2 aspectes:

- TERMODINÀMICS: regulen des d'un punt de vista energètic la viabilitat o no del procés
- CINÈTICS: aporten informació sobre la velocitat del procés i els factors que permeten modificar-la

ASPECTES TERMODINÀMICS

$$\boxed{\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S} \longrightarrow$$

- $\Delta G < 0$ procés viable
- $\Delta G = 0$ procés en equilibri
- $\Delta G > 0$ procés no viable (el seu invers sí)

ΔH: sol ser el factor determinant perquè $T \cdot \Delta S$ petit.

Les reaccions controlades entròpicament són aquelles que comporten un gran augment d'entropia. ($\Delta S \gg 1$) ↳ combustions, descomposicions tèrmiques (es produeixen molts mols de gas)

Una reacció pot ser termodinàmicament viable ($\Delta G < 0$) i tenir una cinètica tan lenta que no s'arribi a donar "mai", o pot donar com a productes espècies químiques que reben el nom de passivadors, que paralitzen l'avanç de la reacció.

Donades dues reaccions, la que tindrà una termodinàmica més favorable serà aquella amb un ΔG més negatiu.

equilibri

$\Delta G = 0$ $\quad aA + bB \rightleftharpoons cC + dD \quad K^0 = e^{-\Delta G / RT} \simeq \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$

En funció dels valors de K d'una reacció podem determinar cap a quin dels 2 sentits està més desplaçada la reacció a l'equilibri:

- $K \gg 1$: $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$
- $K \simeq 1$: $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$
- $K \ll 1$: $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$

El Principi de Le Chatelier ens dóna una explicació per saber com es desplacen les reaccions en equilibri en funció de diferents variables:

"Si un sistema en equilibri es sotmet a un canvi de condicions, aquest es desplaçarà cap a un nou estat d'equilibri per contrarestar l'efecte que l'ha pertorbat"

- Canvi en les concentracions: $R \rightleftharpoons P$
  - Si augmenta la concentració dels reactius la reacció es desplaçarà cap a la dreta: $R \rightleftharpoons P$
  - Si augmenta la concentració dels productes, la reacció es desplaçarà cap a l'esquerra: $R \rightleftharpoons P$
- Canvi en la temperatura: $\ln\left(\frac{K_2}{K_1}\right) = \frac{\Delta_r H^\circ}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$ ← equació de Van't Hoff
  - $\Delta_r H^\circ > 0$: $\Delta T > 0$ $K_2 > K_1$ i $\Delta T < 0$ $K_2 < K_1$
  - $\Delta_r H^\circ < 0$: $\Delta T > 0$ $K_2 < K_1$ i $\Delta T < 0$ $K_2 > K_1$

La reacció es desplaça cap al sentit endotèrmic

La reacció es desplaça cap al sentit exotèrmic

ASPECTES CINÈTICS

$$aA + bB \longrightarrow cC + dD$$

$$v = -\frac{\partial [\text{reactius}]}{\partial t} = \frac{\partial [\text{productes}]}{\partial t} = k \cdot [A]^x \cdot [B]^y$$

constant de velocitat

ordres de reacció respecte A i B

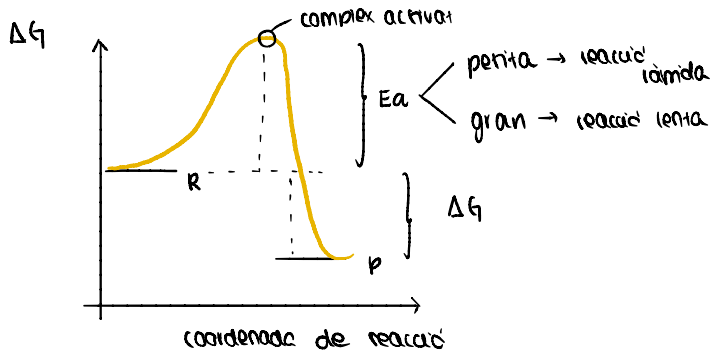
$x+y$ = ordre total de la reacció.

equació d'Arrhenius

$$k = A \cdot e^{-Ea/RT}$$

energia d'activació

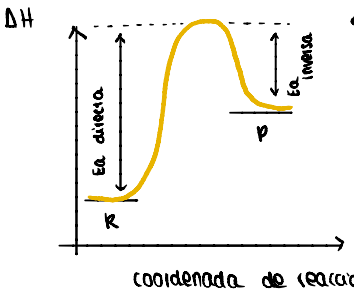
Factor de freqüència



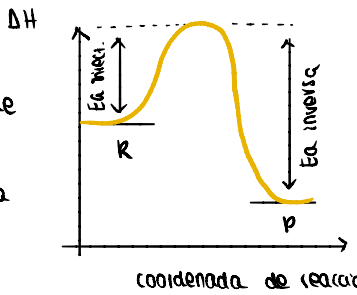
FACTORS QUE PERMETEN MODIFICAR LA CINÈTICA:

- Superfície de contacte amb es reactius: com més extensa és més ràpidament es dóna la reacció.
- Temperatura (eq. Arrhenius): sovint un $\Delta T > 0$ millora la cinètica de la reacció.
- Catalitzadors (espècie química que augmenta la velocitat d'una reacció sense consumir-se ni alterar l'estat final o inicial de la reacció. Proporciona un mecanisme alternatiu per la reacció amb una energia d'activació més petita)

catalitzadors negatius: retenitzen la reacció, augmenten Ea.



Reacció endotèrmica:
Ea directa més gran que Ea inversa.
R depèn més fortament de la temperatura que R'.



Reacció exotèrmica:
Ea directa més petita que Ea inversa.
R' depèn més fortament de la temperatura que R.