

# CINÉTICA QUÍMICA



Facultad de Ingeniería Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



# Cinética química

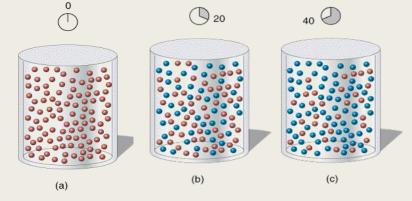
Es la rama de la química que proporciona las herramientas que se pueden utilizar para estudiar las velocidades de las reacciones químicas en los niveles tanto macroscópico como atómico. En este último nivel la información suministrada permite establecer los mecanismos por los cuales ocurren las reacciones, posibilitando intervenir sobre la velocidad de reacción y optimizar procesos.

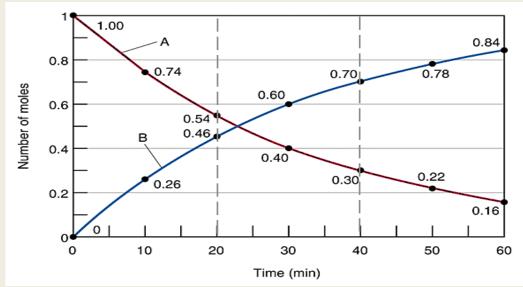
es de crucial importancia en ámbitos científicos y tecnológicos con implicaciones económicas, industriales y medioambientales.



**Velocidad de reacción:** Cambio en la concentración de los reactivos y/o productos por unidad de tiempo.

$$\begin{array}{c} \text{REACTIVOS} \to \text{PRODUCTOS} \\ \mathsf{A} \to \mathsf{B} \end{array}$$





Velocidad media B = 
$$\frac{\text{cambio de concentración molar de B}}{\text{cambio del tiempo}} = \frac{\Delta [B]}{\Delta t}$$

 $\Delta[B] = [B \ en \ tiempo \ final(tf)] - [B \ en \ tiempo \ inicial(t_i)]$   $\Delta t = tiempo \ final(tf) - tiempo \ inicial(t_i)$ 

Velocidad media A = 
$$-\frac{\Delta[A]}{\Delta t}$$
 =  $-\frac{[A]en\ tf - [A]en\ ti}{t_f - ti}$ 

$$-\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = \frac{\Delta[B]}{\Delta t}$$

## Velocidad de reacción y Estequiometría

$$2 HI(g) \longrightarrow H_2(g) + I_2(g)$$

Velocidad = 
$$-\frac{1}{2} \frac{\Delta[HI]}{\Delta t} = \frac{\Delta[H_2]}{\Delta t} = \frac{\Delta[I_2]}{\Delta t}$$

En general, para una reacción:

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

La velocidad está dada por:

Velocidad única promedio de la reacción 
$$= -\frac{1}{a}\frac{\Delta[A]}{\Delta T} = -\frac{1}{b}\frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{\Delta[C]}{\Delta t} = \frac{\Delta[D]}{\Delta t}$$



### **EJEMPLO**: Descomposición del HI

$$2 HI(g) \longrightarrow H_2(g) + I_2(g)$$

tiempo (s) [HI] (M) [H<sub>2</sub>] (M) [I<sub>2</sub>] (M)

En ese intervalo de tiempo 
$$\begin{cases}
0 & 2,32 & 0 & 0 \\
400 & 1,72 & 0,30 & 0,30
\end{cases}$$

Velocidad única de Reacción promedio:

$$-\frac{1}{2} \frac{\Delta[HI]}{\Delta t} = \frac{\Delta[H_2]}{\Delta t} = \frac{\Delta[I_2]}{\Delta t}$$

$$-\frac{1}{2}\frac{(1,72-2,32)M}{(400-0)s} = \frac{(0,30-0)M}{(400-0)s} = \frac{(0,30-0)M}{(400-0)s}$$

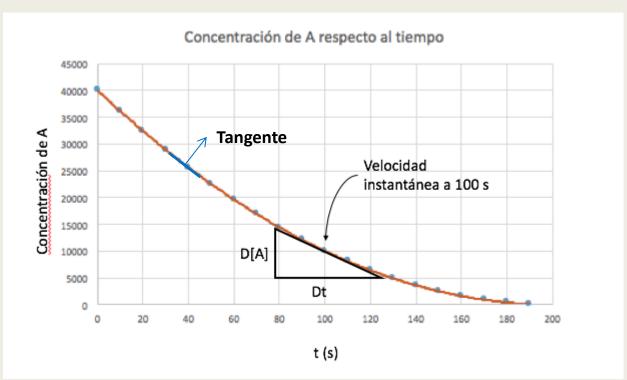
$$0,00075 \text{ M/s} = 0,00075 \text{ M/s} = 0,00075 \text{ M/s}$$

### Cada segundo que pasa:

la concentración de HI disminuye  $\mathbf{2}$  x 0,00075 mol/l la concentración de H<sub>2</sub> aumenta  $\mathbf{1}$  x 0,00075 mol/l la concentración de I<sub>2</sub> aumenta  $\mathbf{1}$  x 0,00075 mol/l



### Velocidad Instantánea de reacción



$$a A + b B \rightarrow g G + h H$$

$$\Delta t \rightarrow 0$$

$$V = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{g} \frac{d[G]}{dt} = \frac{1}{h} \frac{d[H]}{dt}$$



# En general:

$$a A + b B \rightarrow g G + h H$$

En un intervalo de tiempo se calcula la Velocidad Única Promedio:

$$\mathbf{v} = -\frac{1}{a} \frac{\Delta[\mathbf{A}]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{1}{g} \frac{\Delta[G]}{\Delta t} = \frac{1}{h} \frac{\Delta[H]}{\Delta t}$$

En intervalos pequeños, se calcula la Velocidad Instantánea:

$$\Delta t \to 0$$

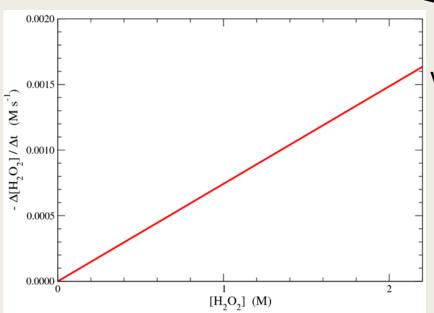
$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{g} \frac{d[G]}{dt} = \frac{1}{h} \frac{d[H]}{dt}$$



# EXPRESIÓN DE LA LEY DE VELOCIDAD

Ejemplo: Descomposición del  $H_2O_2$   $H_2O_2 \rightarrow H_2O + \frac{1}{2}O_2$ 

				2		
tiempo (s	s)	[H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ] (M)	Δt (s)	$\Delta[H_2O_2]^2(M)$	v (M/s)	
0		2,32	400	-0,60	0,0015	
400		1,72	400	-0,42	0,0013	
800		1,30	400	-0,32	0,00080	
1200		0,98	400	-0,25	0,00063	
1600		0,73	400	-0,19	0,00048	
		,	400	-0,15	0,00038	
		,	400	-0,11	0,00028	
2000 2400 2800		0,54 0,39 0,28	400	-0,15	0,00038	



Se relacionan a través de una pendiente

Velocidad inicial de desaparición del  ${
m H_2O_2} \propto [H_2O_2]_{inicial}$ 

Velocidad inicial de desaparición del  $\mathbf{H_2O_2} = k[H_2O_2]_{inicial}$ 

Ecuación cinética o Ley de velocidad

$$\mathbf{v} = k [H_2 O_2]$$



### Ecuación de velocidad, Ley de velocidad o Ecuación cinética

Ecuación empírica que relaciona la velocidad de reacción con las concentraciones molares de los compuestos que participan en la reacción.

$$a A + b B + \cdots \rightarrow g G + h H + \cdots$$

$$v = k [A]^{m} [B]^{n} \cdots$$

#### Orden de reacción

- > m, n, ...: orden de reacción con respecto a A, B, ...
  - Generalmente, son números enteros positivos pequeños: 0, 1, 2.
  - Ocasionalmente, pueden ser números fraccionarios y/o negativos.
  - NO están relacionados con los coeficientes estequiométricos de la reacción global: Tanto m y a como n y b NO tienen por qué coincidir. Solo concuerdan en reacciones que transcurren en un solo paso denominadas reacciones elementales.
- > m+n+...: orden de reacción total, u orden global de reacción.

#### Constante de velocidad o constante cinética: k

- Depende de la reacción, de la temperatura y de los catalizadores si los hubiera.
- Su valor indica si la reacción es rápida o lenta.
- Sus unidades dependen del orden de la reacción.

$$k = |M^{1-(m+n+...)}/t \implies = |M^{1-(orden total)}/t$$

