

Contents

Clase 3: Energía de Activación y Catálisis	1
--	---

Clase 3: Energía de Activación y Catálisis

Objetivos:

- Comprender el concepto de energía de activación y su relación con la velocidad de reacción.
- Aprender a calcular la energía de activación utilizando la ecuación de Arrhenius.
- Distinguir entre catálisis homogénea y heterogénea, comprendiendo sus mecanismos de acción.
- Analizar ejemplos de catálisis en procesos industriales y biológicos.

Contenido Teórico Detallado:

1. Energía de Activación (E_a):

- Definición: La energía mínima requerida para que las moléculas reaccionantes puedan superar la barrera energética y formar el complejo activado, conduciendo a la formación de productos.
- Estado de transición: El estado de máxima energía durante la reacción, donde los enlaces se están rompiendo y formando simultáneamente.
- Diagrama de energía: Representación gráfica del cambio de energía potencial durante el curso de una reacción, mostrando la energía de los reactivos, productos, el estado de transición y la energía de activación.
- Relación con la velocidad de reacción: Una energía de activación más baja implica una velocidad de reacción más alta, ya que más moléculas tendrán suficiente energía para superar la barrera.

2. Ecuación de Arrhenius:

- Ecuación: $k = A e^{-E_a/RT}$
 - k : constante de velocidad
 - A : factor de frecuencia o factor pre-exponencial (relacionado con la frecuencia de colisiones y la orientación correcta de las moléculas)
 - E_a : energía de activación
 - R : constante de los gases ideales ($8.314 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$)
 - T : temperatura absoluta (K)
- Interpretación: La ecuación de Arrhenius cuantifica la dependencia de la constante de velocidad (y, por lo tanto, la velocidad de reacción) con la temperatura y la energía de activación.
- Cálculo de E_a : Utilizando dos puntos de datos (k_1 , T_1 y k_2 , T_2), se puede calcular E_a mediante la siguiente ecuación derivada de la ecuación de Arrhenius:
$$\ln(k_2/k_1) = -E_a/R (1/T_2 - 1/T_1)$$
 - * Limitaciones: La ecuación de Arrhenius asume que A y E_a son independientes de la temperatura, lo cual no siempre es válido en reacciones complejas.

3. Catálisis:

- Definición: Proceso por el cual una sustancia (catalizador) aumenta la velocidad de una reacción química sin ser consumida en el proceso.
- Mecanismo de acción: Los catalizadores proporcionan un camino de reacción alternativo con una menor energía de activación.
- Tipos de catálisis:
 - *Catálisis Homogénea*: El catalizador y los reactivos están en la misma fase (ej. catálisis ácida o básica en solución). Ejemplos:
 - * La catálisis ácida en la hidrólisis de ésteres. El ácido actúa como catalizador en la solución acuosa.
 - * La catálisis enzimática en soluciones acuosas en sistemas biológicos.

- *Catálisis Heterogénea*: El catalizador y los reactivos están en fases diferentes (ej. catalizador sólido y reactivos gaseosos o líquidos). Ejemplos:
 - * El craqueo catalítico del petróleo utilizando zeolitas sólidas.
 - * El convertidor catalítico en automóviles (platino, paladio y rodio).
- *Catálisis Enzimática*: Catalizadores biológicos (enzimas) que son altamente específicos y eficientes.

4. Ejemplos de Catálisis:

- Proceso Haber-Bosch: Síntesis de amoníaco ($N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$) utilizando un catalizador de hierro. Crucial para la producción de fertilizantes.
- Craqueo catalítico del petróleo: Ruptura de hidrocarburos pesados en hidrocarburos más ligeros (gasolina, etc.) utilizando catalizadores de zeolita.
- Convertidor catalítico de automóviles: Eliminación de contaminantes (CO, NOx, hidrocarburos) de los gases de escape utilizando catalizadores de platino, paladio y rodio.
- Enzimas: Catalizadores biológicos que participan en una vasta gama de reacciones metabólicas (ej. amilasa, catalasa).

Ejemplos/Casos de Estudio:

- **Descomposición del peróxido de hidrógeno (H₂O₂):**
 - Sin catalizador, la descomposición es lenta.
 - En presencia de un catalizador como el yoduro (I⁻), la descomposición se acelera significativamente. El yoduro actúa como catalizador homogéneo.
 - La enzima catalasa en la sangre cataliza la descomposición de H₂O₂ en agua y oxígeno de forma extremadamente eficiente.
- **Hidrogenación de alquenos:**
 - La hidrogenación de alquenos (adición de H₂ a un doble enlace) es lenta sin un catalizador.
 - Catalizadores heterogéneos como el paladio (Pd) o el platino (Pt) soportados sobre carbón activado (Pd/C o Pt/C) facilitan la reacción. El hidrógeno se adsorbe en la superficie del catalizador, debilitando el enlace H-H y permitiendo que reaccione más fácilmente con el alqueno.

Problemas Prácticos/Ejercicios con Soluciones:

1. Cálculo de Energía de Activación:

- La constante de velocidad para una reacción es $2.0 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ a 25°C y $5.0 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ a 75°C. Calcular la energía de activación para esta reacción.
- **Solución:**
 - $T_1 = 25^\circ\text{C} = 298 \text{ K}$
 - $k_1 = 2.0 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$
 - $T_2 = 75^\circ\text{C} = 348 \text{ K}$
 - $k_2 = 5.0 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$
 - $\ln(k_2/k_1) = -E_a/R (1/T_2 - 1/T_1)$
 - $\ln(5.0 \times 10^{-2} / 2.0 \times 10^{-3}) = -E_a / 8.314 \text{ J/mol} \cdot \text{K} (1/348 \text{ K} - 1/298 \text{ K})$
 - $3.219 = -E_a / 8.314 \text{ J/mol} \cdot \text{K} (-4.81 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1})$
 - $E_a = 55600 \text{ J/mol} = 55.6 \text{ kJ/mol}$

2. Efecto de un Catalizador:

- Una reacción tiene una energía de activación de 100 kJ/mol. Si un catalizador disminuye la energía de activación a 60 kJ/mol, ¿cuántas veces aumentará la velocidad de reacción a 25°C, asumiendo que el factor pre-exponencial (A) permanece constante?
- **Solución:**

- $k_1 = A * \exp(-E_{a1}/RT) = A * \exp(-100000 \text{ J/mol} / (8.314 \text{ J/mol} \cdot \text{K} * 298 \text{ K})) = A * \exp(-40.32)$
- $k_2 = A * \exp(-E_{a2}/RT) = A * \exp(-60000 \text{ J/mol} / (8.314 \text{ J/mol} \cdot \text{K} * 298 \text{ K})) = A * \exp(-24.20)$
- $k_2/k_1 = \exp(-24.20) / \exp(-40.32) = \exp(40.32 - 24.20) = \exp(16.12) = 1.09 \times 10^7$
- La velocidad de reacción aumenta aproximadamente 10.9 millones de veces.

3. Catálisis Heterogénea:

- Describe el proceso de hidrogenación de eteno (C_2H_4) a etano (C_2H_6) utilizando un catalizador de níquel (Ni) sólido. ¿Cuáles son los pasos involucrados y cómo el catalizador afecta la reacción?
- **Solución:**
 - **Adsorción:** Tanto el eteno como el hidrógeno se adsorben en la superficie del níquel. El níquel proporciona sitios activos donde las moléculas pueden unirse.
 - **Activación:** El enlace H-H se debilita en la superficie del níquel, facilitando la formación de enlaces Ni-H. El doble enlace en el eteno también se debilita por su interacción con la superficie del níquel.
 - **Reacción:** Los átomos de hidrógeno en la superficie del níquel reaccionan con el eteno adsorbido, formando primero un radical etilo y luego etano.
 - **Desorción:** El etano formado se desorbe de la superficie del níquel, liberando los sitios activos para que se adsorban más moléculas de eteno e hidrógeno.
 - El catalizador proporciona una superficie donde la concentración de los reactivos aumenta y la energía de activación para la reacción disminuye, acelerando la formación de etano.

Materiales Complementarios Recomendados:

- **Libros de texto:**
 - "Química Física" de Peter Atkins y Julio de Paula.
 - "Principios de Química" de Zumdahl y DeCoste.
- **Recursos en línea:**
 - Khan Academy: Sección de cinética química.
 - ChemLibreTexts: Artículos sobre energía de activación y catálisis.
- **Artículos de investigación:**
 - Buscar artículos recientes sobre catálisis en revistas especializadas como "Journal of Catalysis" o "Applied Catalysis".