

CB041 Química y Electroquímica

Departamento de Química

Reacciones Químicas VI Cinética Química

Autora: María Andrea Ureña



Ureña (FIUBA)



Contenidos:

1- Velocidad de reacción

Velocidad media de reacción

Velocidad instantánea

2- Factores que afectan la velocidad de reacción

3- Ecuación Cinética o Ley de velocidad de reacción

Orden de reacción; constante de velocidad; determinación experimental

Ecuación de velocidad integrada: relación concentración tiempo.

Reacciones de orden cero, primer orden y segundo orden.

4- Efecto de la temperatura

Ecuación de Arrhenius

5- Modelos de Reacción

Teoría de las Colisiones y Teoría del complejo Activado

6- Catalizadores

7- Mecanismos de reacción

Molecularidad

Reacción elemental



Introducción: ¿Qué estudia la Cinética Química?

Reacciones lentas

Corrosión de una pieza de hierro a la intemperie



Reacciones rápidas

Reacción de combustión de metano



AIRBAG

Reacción de descomposición térmica de la azida sódica



Ureña (FIUBA)



Introducción: ¿Qué estudia la Cinética Química?

Termodinámica → posibilidad de ocurrencia

Cinética química → cómo va a ocurrir

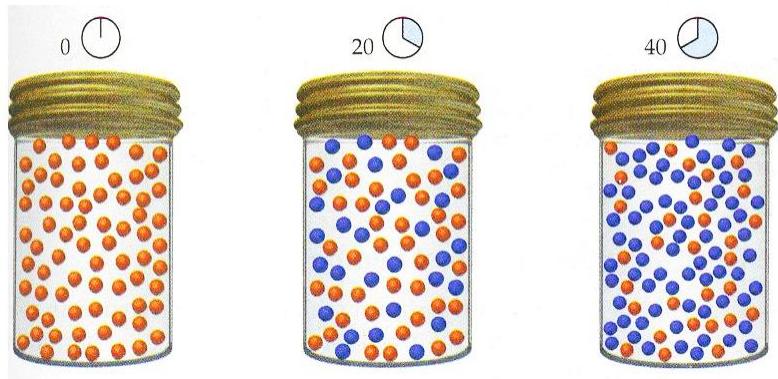
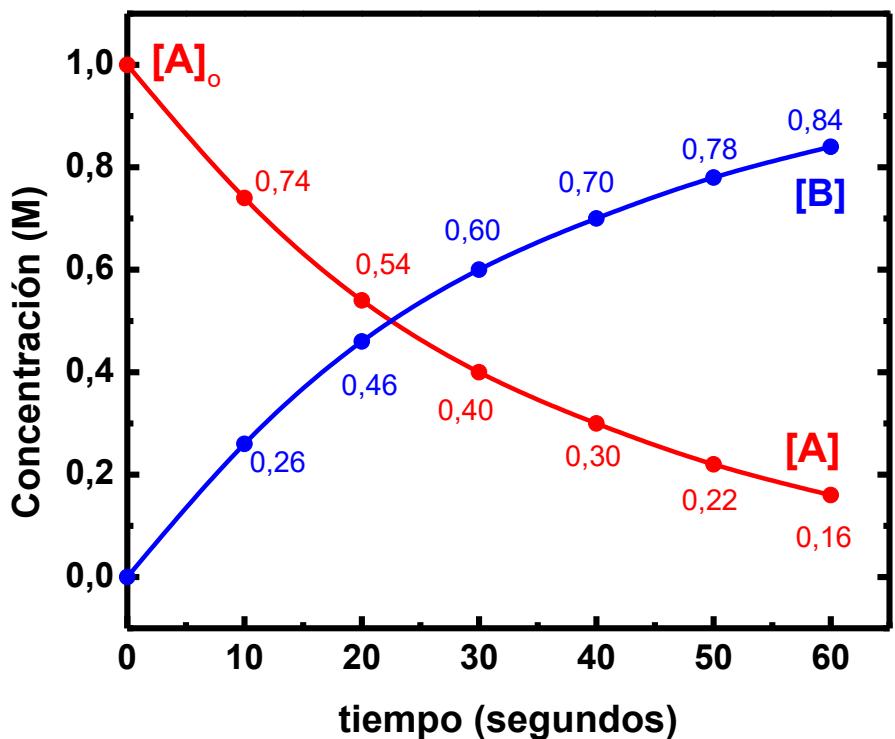
La cinética química estudia la rapidez o velocidad con que ocurre una reacción, y los mecanismos (o caminos) mediante los cuales los reactivos se convierten a productos.

El estudio de la cinética de una reacción es empírico.

Velocidad de reacción: conceptos



Volumen=cte



$t=0$
 $[A]=1\text{M}$
 $[B]=0$

$t=20\text{s}$
 $[A]=0,54\text{M}$
 $[B]=0,46\text{M}$

$t=40\text{s}$
 $[A]=0,30\text{M}$
 $[B]=0,70\text{M}$

La velocidad de reacción es el cambio en la concentración de un reactivo o de un producto dividido el intervalo de tiempo.

Velocidad de reacción: unidades

La velocidad de reacción es el cambio en la concentración de un reactivo o de un producto dividido el intervalo de tiempo.

Unidades:

$$[\text{velocidad de reacción}] = \left[\frac{\text{concentración}}{\text{tiempo}} \right] = \frac{M}{s} \text{ o } \frac{M}{\text{min}} , \frac{\text{masa (gr.)}}{s}$$

En reacciones en fase gaseosa:

$$[\text{velocidad de reacción}] = \left[\frac{\text{Presión}}{\text{tiempo}} \right] = \frac{\text{atm}}{s} \text{ o } \frac{\text{atm}}{\text{min}}$$

Velocidad de reacción: conceptos

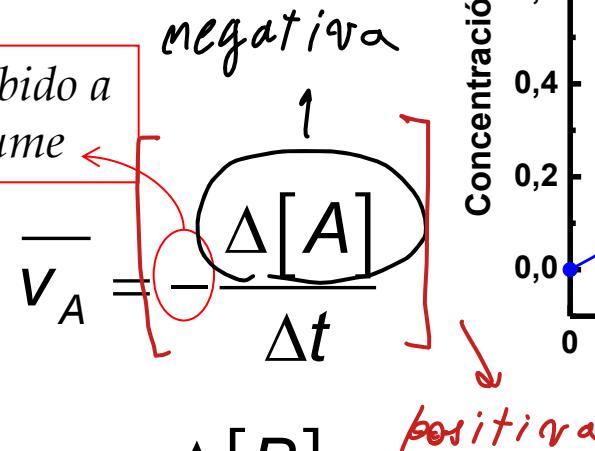
* Media o promedio

Velocidad media* de reacción



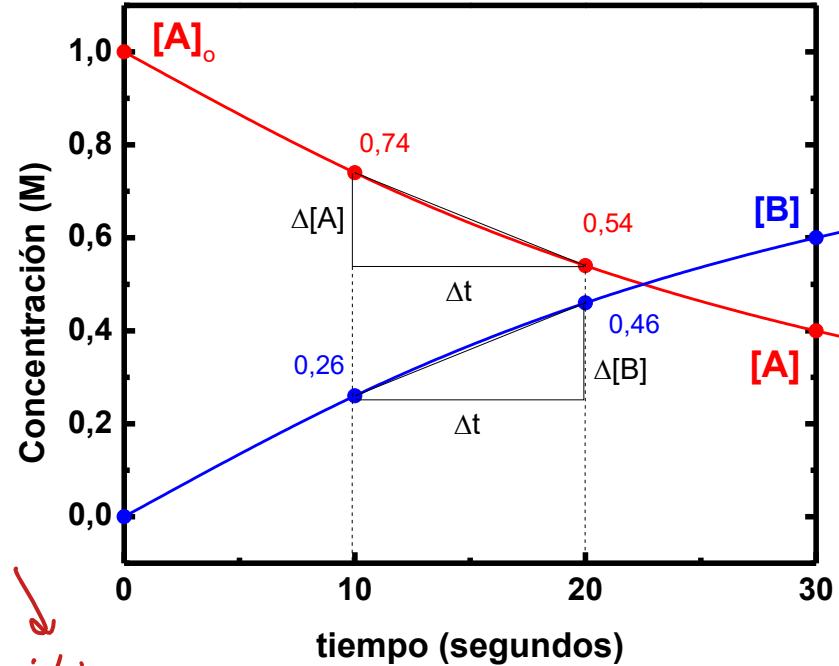
El signo (-) es debido a que A se consume

Velocidad media de desaparición de A



Velocidad media de formación de B

$$\bar{v}_B = \frac{\Delta [B]}{\Delta t}$$



$$\Delta[A] = [A]_f - [A]_i$$

$$\Delta[B] = [B]_f - [B]_i$$

La convención normal en cinética química es que las velocidades son positivas

→ ¿No te das una convención peor?

Ureña (FIUBA)



Velocidad de reacción: conceptos



En ese intervalo de tiempo:

Velocidad de desaparición de A

Tiempo (s)	[A] (M)	[B] (M)
0	1	0
10	0,5	1

$$\bar{v}_A = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = \frac{-(0,5-1)\text{M}}{10\text{s}} = 0,05 \text{ M/s}$$

Velocidad de aparición de B

$$\bar{v}_B = \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{(1-0)\text{M}}{10\text{s}} = 0,1 \text{ M/s}$$

Para independizarnos del compuesto al que se hace referencia :

Velocidad única media de reacción

$$\bar{v}_r = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = \frac{1}{2} \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = 0,05 \text{ M / s}$$

cada segundo que pasa:

Coeficiente estequiométrico

la concentración de A **disminuye** 1 x 0,05 mol/l
la concentración de B **aumenta** 2 x 0,05 mol/l



Velocidad de reacción: conceptos

Velocidad única media de reacción



Para un intervalo de tiempo:

$$\bar{v}_r = -\frac{1}{a} \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta[C]}{\Delta t} = \frac{1}{d} \frac{\Delta[D]}{\Delta t}$$

La velocidad única media depende de los coeficientes utilizados en la ecuación balanceada, por eso la ecuación química debe especificarse cuando se informa la velocidad única



Velocidad de reacción: conceptos

Velocidad instantánea de reacción

Cuando se realizan cambios infinitesimales, $\Delta t \rightarrow 0$

$$v_{\text{sust.}} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta [\text{sustancia}]}{\Delta t} = \frac{d[\text{sustancia}]}{dt}$$

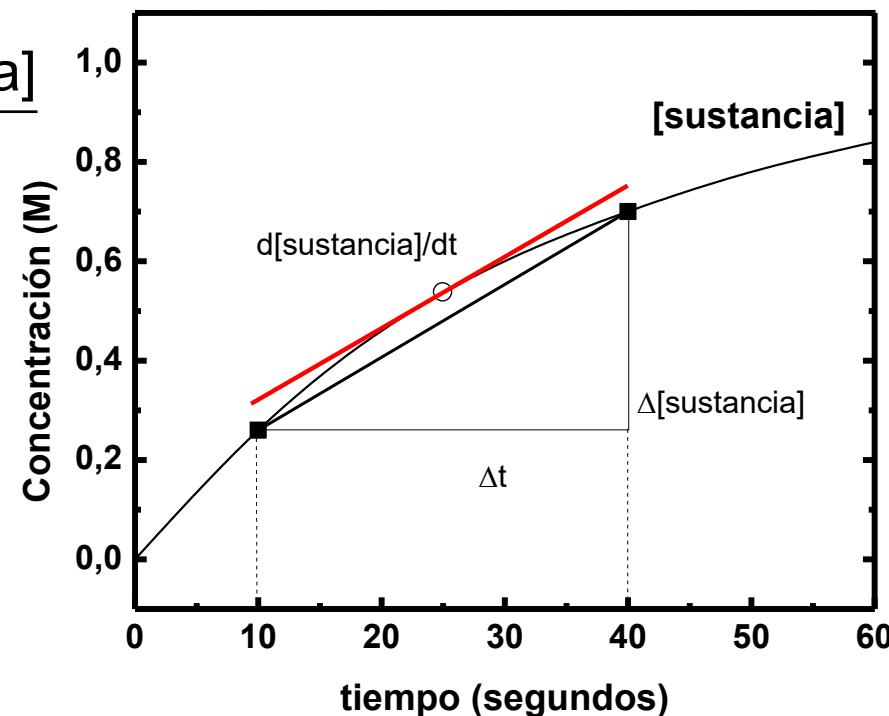


Velocidad instantánea de desaparición de A

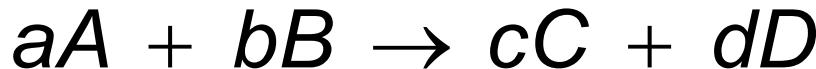
$$v_A = -\frac{d[A]}{dt}$$

Velocidad instantánea de formación de B

$$v_B = \frac{d[B]}{dt}$$



Velocidad de reacción: conceptos



En un intervalo de tiempo:

**Velocidad media
de reacción**

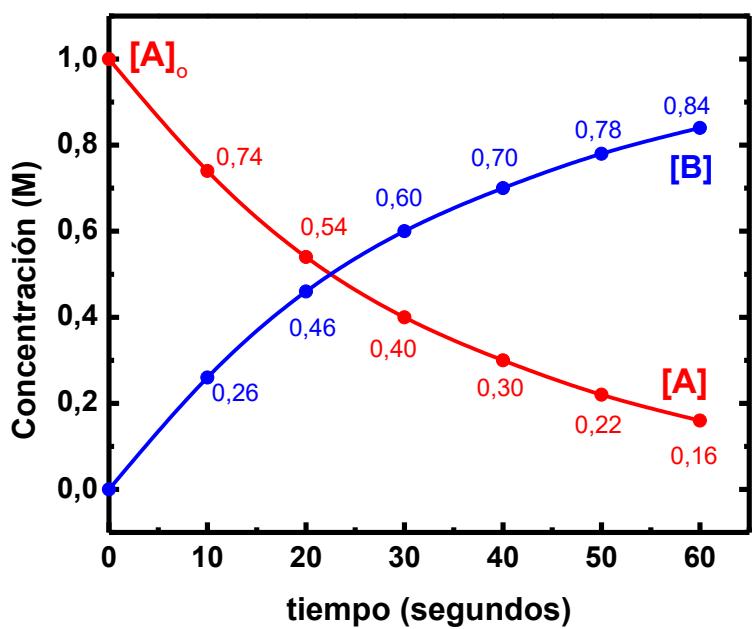
$$\bar{v}_r = -\frac{1}{a} \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta[C]}{\Delta t} = \frac{1}{d} \frac{\Delta[D]}{\Delta t}$$

Instantánea, $\Delta t \rightarrow 0$:

**Velocidad
instantánea de
reacción**

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

Velocidad de reacción: medida

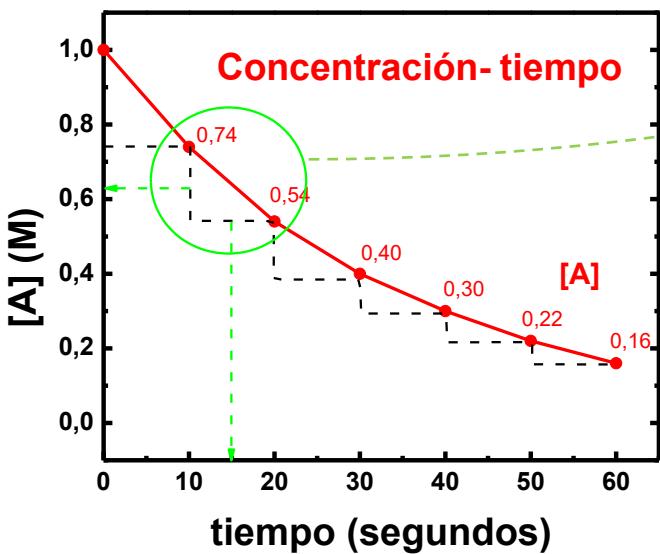


tiempo (s)	[A] (M)
0	1
10	0,74
20	0,54
30	0,4
40	0,3
50	0,22
60	0,16

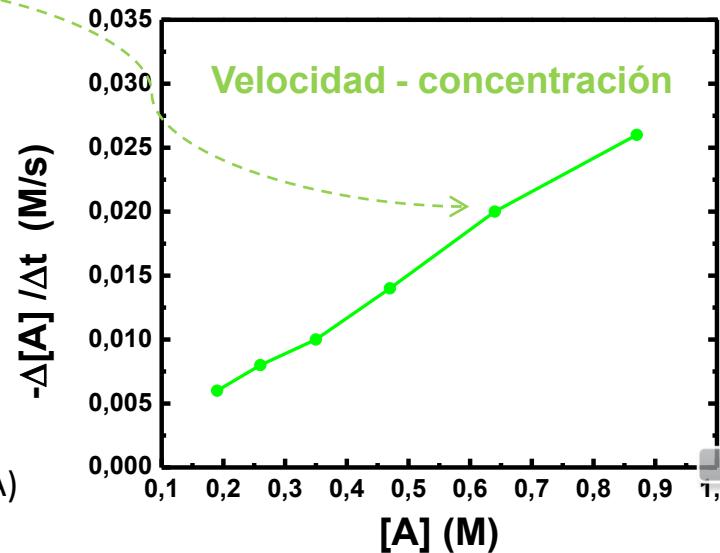
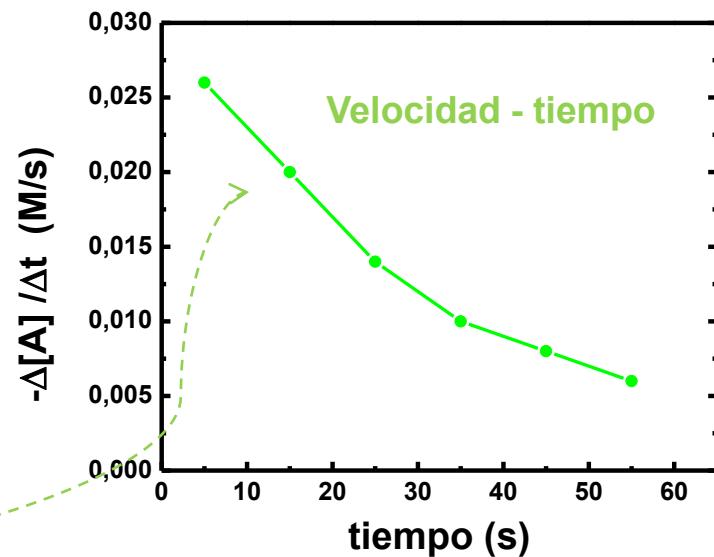
Velocidad de reacción: medida



Medida directa:



Calculados:



Velocidad de reacción: Ley de Velocidad



Ecuación cinética

o

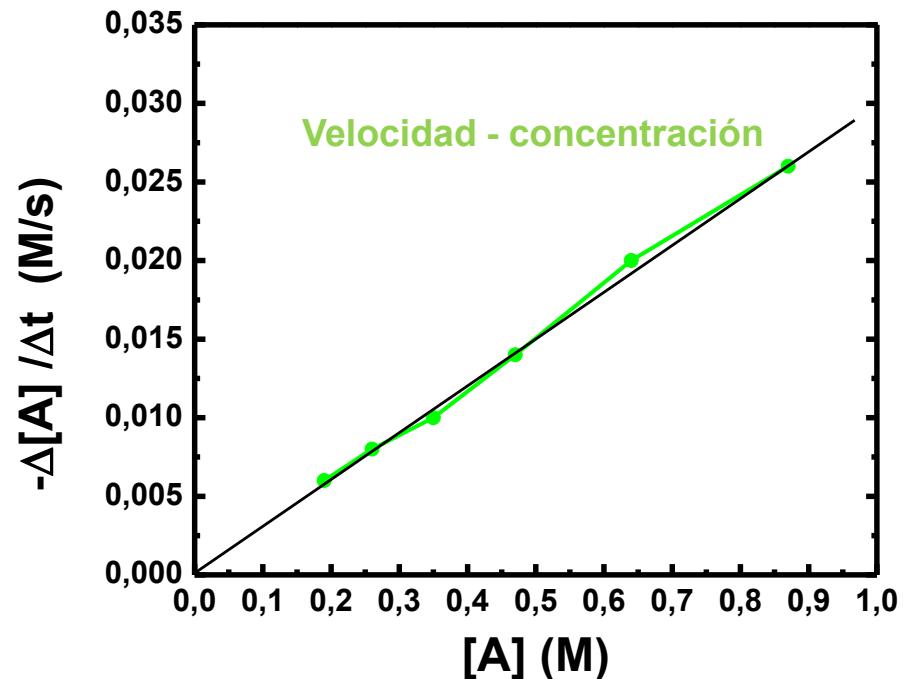
Ecuación de velocidad

o

Ley de velocidad

$$v_r = k \cdot [A]$$

Calculados:

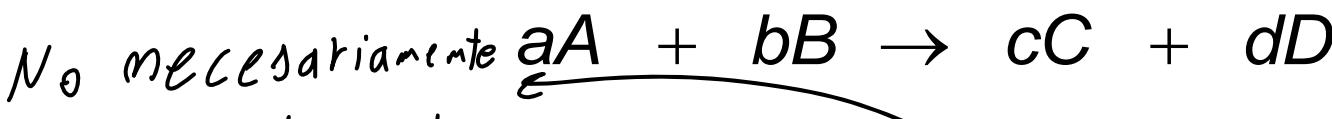


La Ec. Cinética o Ley de velocidad es la dependencia de la velocidad de reacción con la concentración

Ecuación de Velocidad: conceptos

Ecuación de velocidad o Ec. Cinética:

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



Tom los coeficientes
están que vienen métricos,
pero suelen serlo

$$v_r = k [A]^m [B]^n$$

Dependencia de la
velocidad de reacción
con la concentración

Se determinan experimentalmente

k = constante de velocidad (depende de T y catalizadores)

m = orden de reacción con respecto a la especie A

n = orden de reacción con respecto a la especie B

$m + n$ = orden total o global de la reacción

*Todas las leyes de velocidad se deben determinar
experimentalmente*

Ecuación de Velocidad: conceptos

$$v_r = k [A]^m [B]^n$$

Orden de reacción:

- **m, n, \dots : orden de reacción con respecto a A, B,...**
 - Generalmente con números enteros , positivos y pequeños: 0, 1, 2
 - Ocasionalmente pueden ser números fraccionarios y/o negativos.
 - m y n no tienen por qué coincidir con los coeficientes estequiométricos a y b.
coinciden en reacciones que transcurren en un solo paso (reacciones elementales)
- **$m + n + \dots$: orden de reacción total , u orden global de reacción**

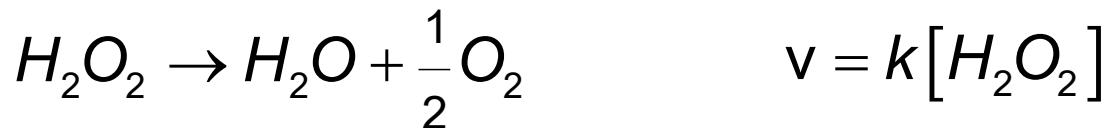
Constante de velocidad o cte cinética, k

- Depende de la reacción, de los catalizadores (si se usan), **y de la temperatura.**
- Su valor indica si una reacción es rápida o lenta
- Sus unidades dependen del orden global de la reacción

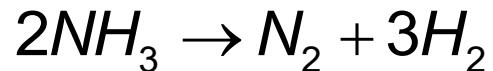
Unidades de k : $M^{1-(m+n+\dots)} / \text{tiempo}$: $M^{1-(\text{orden total})} / \text{tiempo}$

Ecuación de Velocidad: ejemplos

Ejemplos:



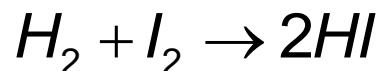
- el orden con respecto a H_2O_2 es 1; el orden global es 1
- reacción de primer orden global



v = k → No depende de la concentración de amoníaco.

- el orden con respecto a NH_3 es 0; el orden global es 0 → orden 0, $m=0$
- reacción de orden global cero

orden parcial respecto de H_2 : $m=1$



v = k[H_2][I_2] de I_2 : $m=1$
orden de la reacción:

- el orden con respecto a H_2 es 1 y con respecto a I_2 es 1 → $m+m=2$
- reacción de segundo orden global

Ecuación de Velocidad: determinación

Determinación de la ecuación de velocidad: Método de las velocidades iniciales

- Consiste en medir la velocidad inicial manteniendo las concentraciones de todos los reactivos constantes excepto la de uno y ver cómo afecta la variación de éste al valor de la velocidad manteniendo T=cte.



$$v = k [A]^m [B]^n$$

no depende de

1) Para determinar m y n : la concentración
de B ↑

$$\frac{v_2}{v_1} = \frac{k}{k} \frac{\cancel{[0,1 M]}^m}{\cancel{[0,1 M]}^m} \frac{[0,2 M]^n}{[0,1 M]^n} = 1 \Rightarrow 2^n = 1 \Rightarrow n=0$$

$$\frac{v_3}{v_1} = \frac{k}{k} \frac{[0,2 M]^m}{[0,1 M]^m} \frac{\cancel{[0,1 M]}^n}{\cancel{[0,1 M]}^n} = \frac{16 \cdot 10^{-5}}{4 \cdot 10^{-5}} = 4 \Rightarrow 2^m = 4 \Rightarrow m=2$$

2) Para determinar k:

$$k = \frac{v}{[A]^2} = \frac{4 \cdot 10^{-5} M/s}{(0,1 M)^2} = 4 \cdot 10^{-3} M^{-1}s^{-1}$$

$$v = k [A]^2$$



Ecuación o Ley de Velocidad integrada

Ecuación concentración - tiempo

A partir de la ecuación de velocidad es posible establecer cómo cambian con el tiempo las concentraciones de los reactivos

Las ecuaciones **concentración-tiempo** se llaman **ecuaciones de velocidad integradas**, porque resultan de la integración de la ecuación de velocidad, que es una ecuación diferencial

A→ productos

$$v = k [A]^m \quad \longrightarrow \quad -\frac{d[A]}{dt} = k [A]^m \quad \longrightarrow \quad [A] = f(t)$$

Ley de Velocidad integrada: Reacciones de orden 0

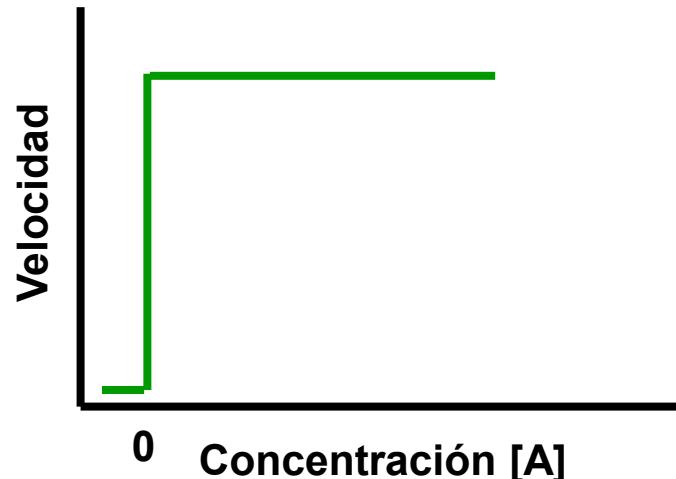
Reacciones de orden cero



$$v = k [A]^\alpha \quad \alpha = 0$$



$$v = k [A]^0 = k$$



La velocidad no depende de la concentración, es cte.

Unidades $k = \text{M} \times \text{s}^{-1}$

Ejemplo:



Ley de Velocidad integrada: Reacciones de orden 0

Reacciones de orden cero

$A \longrightarrow \text{Productos}$

$$v = k [A]^0 = k$$

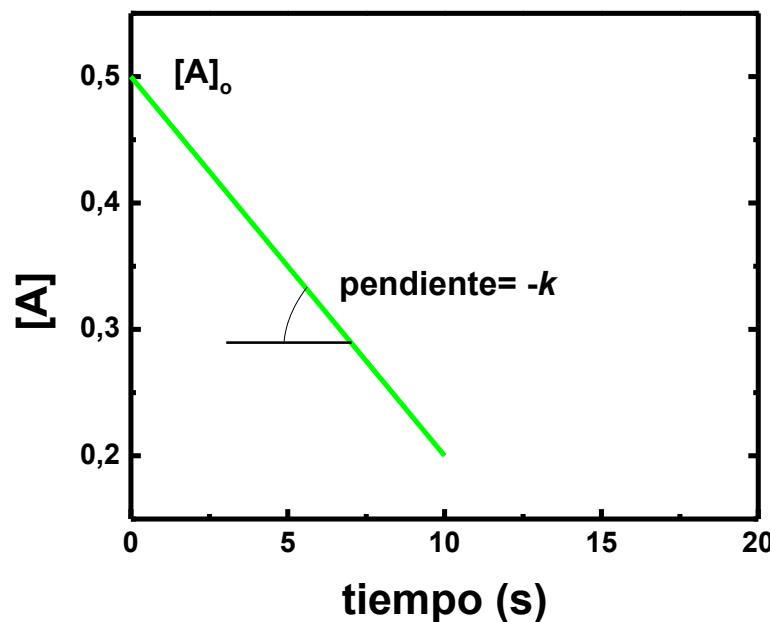
$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k ;$$

$$d[A] = -k dt ;$$

$$\int_{[A]_0}^{[A]_t} d[A] = -k \int_{t=0}^{t=t} dt ;$$

$$[A]_t - [A]_0 = -k(t - 0) ;$$

$$[A] = [A]_0 - k t$$



Ureña (FIUBA)

$k = 0,03 \text{ M/s}$

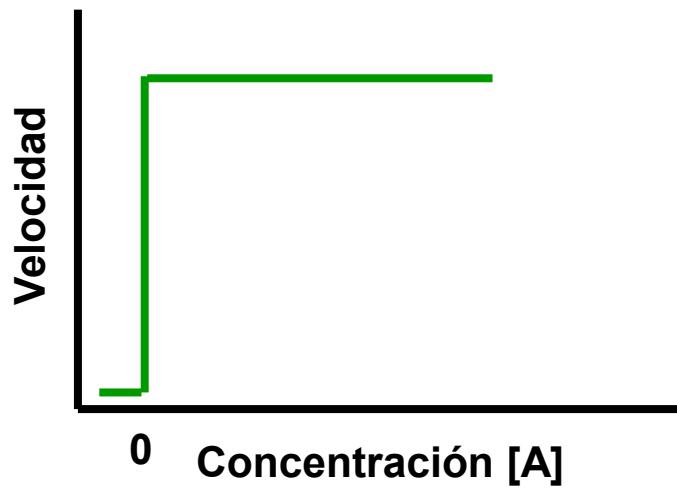


Ley de Velocidad integrada: Reacciones de orden 0

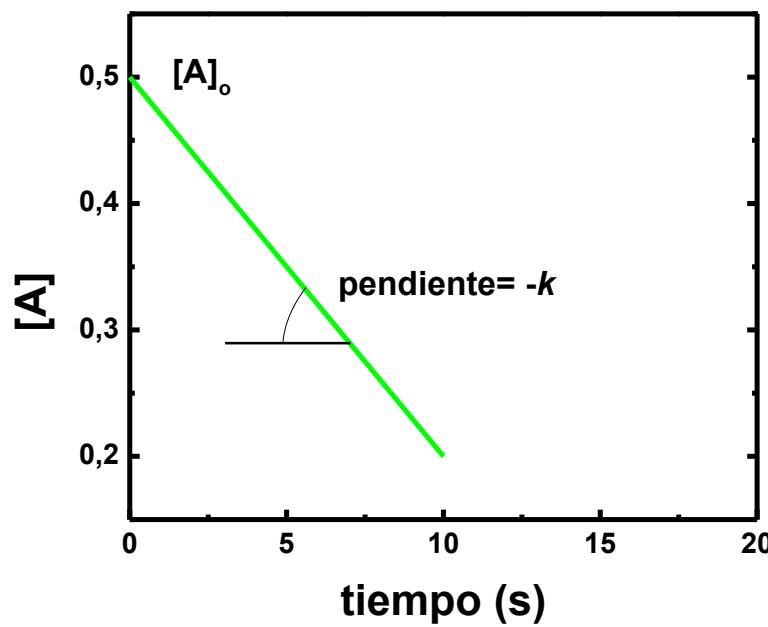
Reacciones de orden cero

$A \longrightarrow \text{Productos}$

$$v = k [A]^0 = k$$



$$[A] = [A]_0 - k t$$



Ley de Velocidad integrada: Reacciones de orden 1

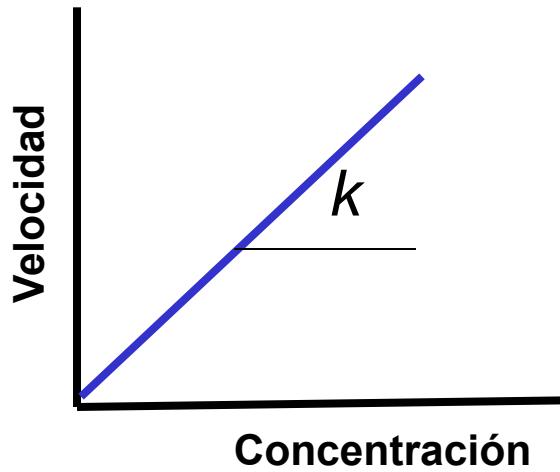
Reacciones de orden uno

$A \longrightarrow \text{Productos}$

$$v = k[A]^\alpha \quad \alpha = 1$$



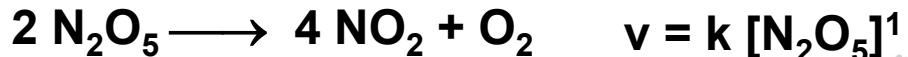
$$v = k[A]^1 = k[A]$$



La velocidad es lineal con la concentración.

Unidades $k = \text{s}^{-1}$

Ejemplo:



Ley de Velocidad integrada: Reacciones de orden 1

Reacciones de orden uno

$A \longrightarrow \text{Productos}$

$$v = k [A]$$

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k [A] ;$$

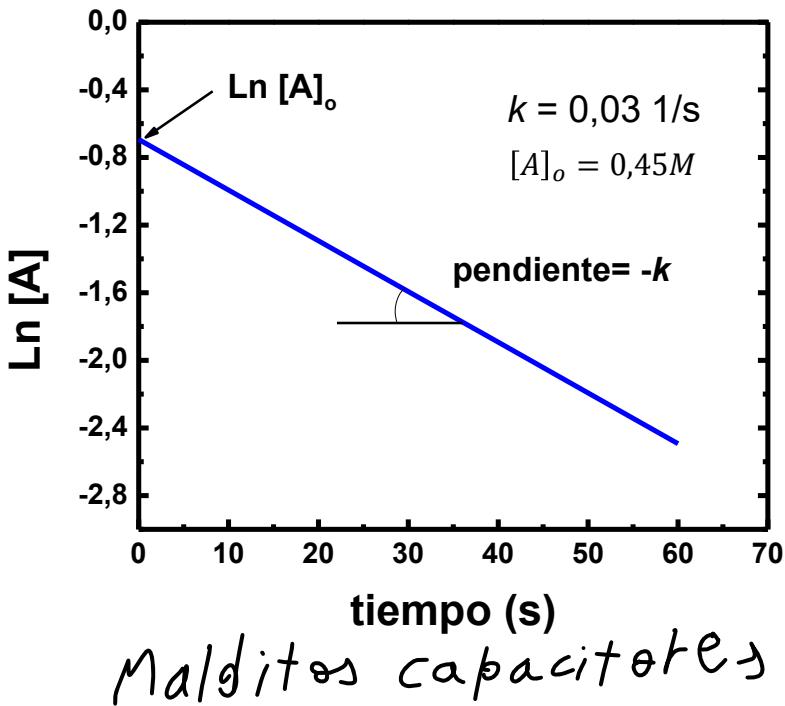
$$\frac{1}{[A]} d[A] = -k dt ;$$

$$\int_{[A]_0}^{[A]_t} \frac{1}{[A]} d[A] = -k \int_{t=0}^{t=t} dt ;$$

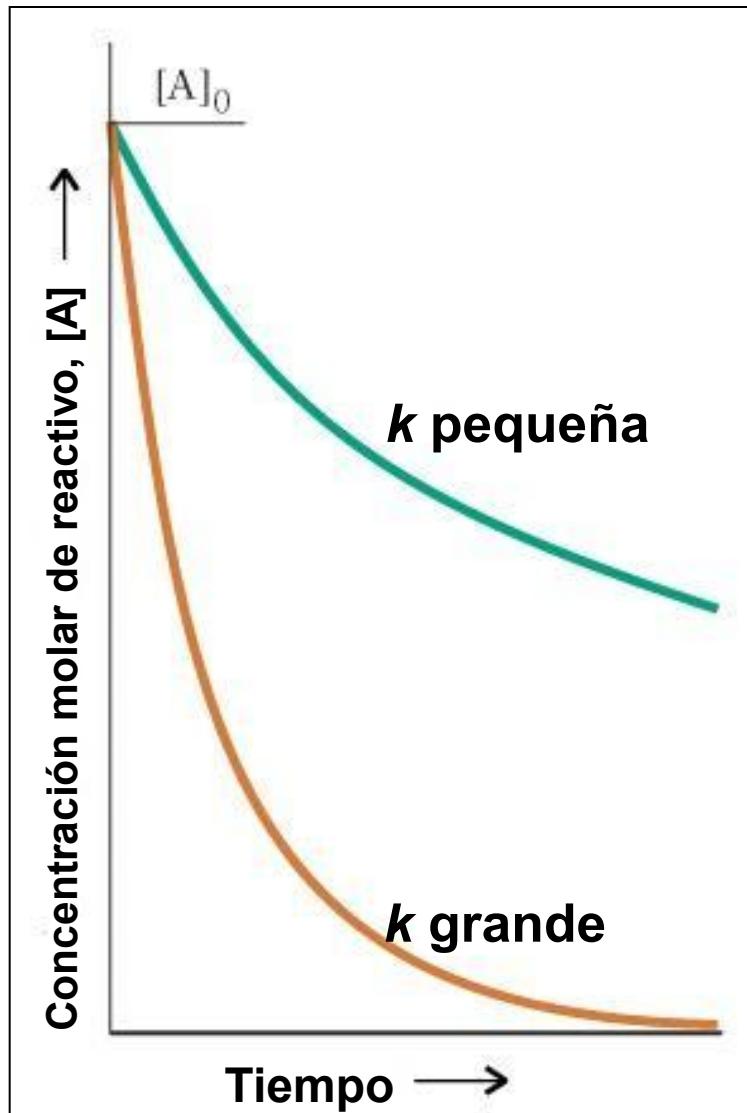
$$\ln[A]_t - \ln[A]_0 = -k(t - 0) ;$$

$$\ln[A] = \ln[A]_0 - k t$$

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



Ley de Velocidad integrada: Reacciones de orden 1



En las reacciones de primer orden la desintegración del reactivo cae en forma exponencial.

Cuanto mayor es la constante de velocidad, más rápido cae la concentración a partir de los mismos valores iniciales

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

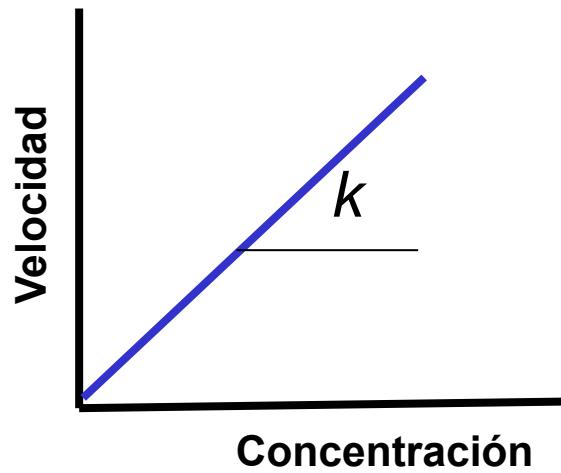
$$\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$$

Ley de Velocidad integrada: Reacciones de orden 1

Reacciones de orden uno

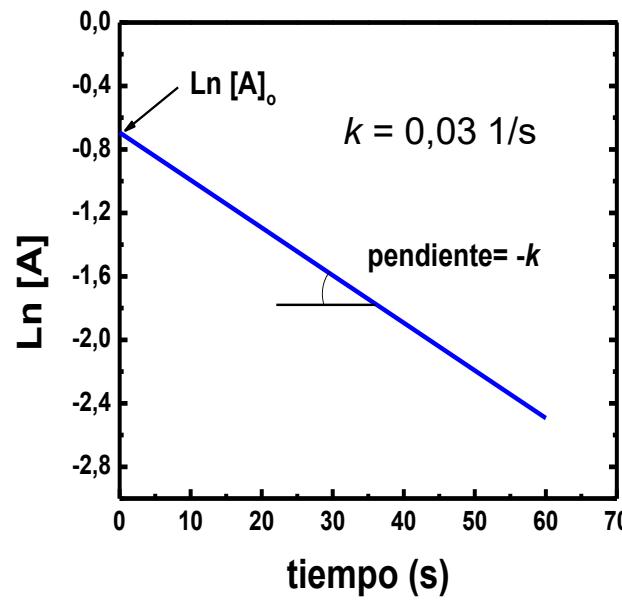
$A \longrightarrow \text{Productos}$

$$v = k [A]$$



$$\ln[A] = \ln[A]_0 - k t$$

$$[A] = [A]_0 e^{-k t}$$



Ley de Velocidad integrada: Reacciones de orden 2

Reacciones de orden dos

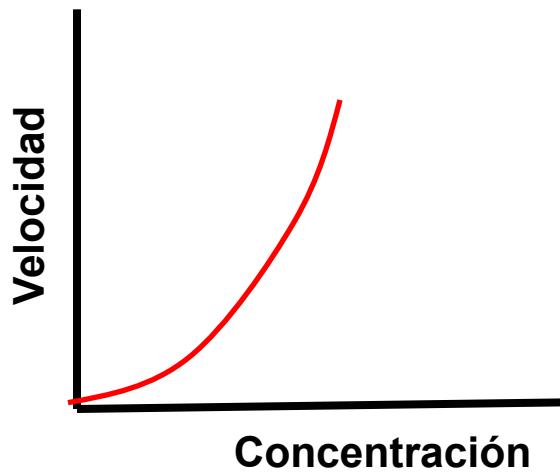
$A \longrightarrow \text{Productos}$

$$v = k [A]^\alpha \quad \alpha = 2$$



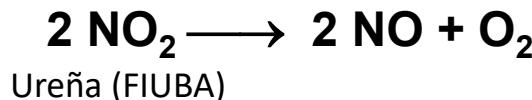
$$v = k [A]^2$$

La velocidad es cuadrática con la concentración.



Unidades $k = (\text{M.s})^{-1}$

Ejemplo:



$$v = k [\text{NO}_2]^2$$

Ley de Velocidad integrada: Reacciones de orden 2

Reacciones de orden dos

$A \longrightarrow \text{Productos}$

$$v = k [A]^2$$

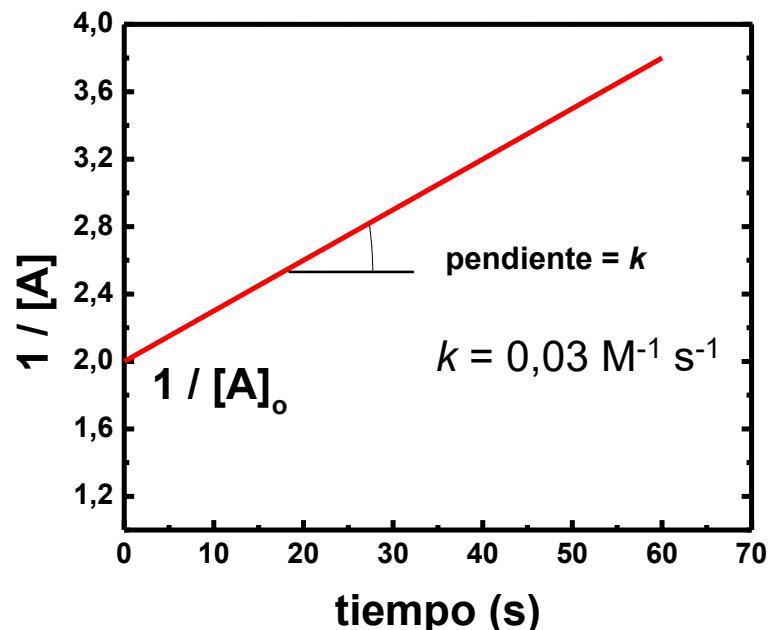
$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k [A]^2 ;$$

$$\frac{1}{[A]^2} d[A] = -k dt ;$$

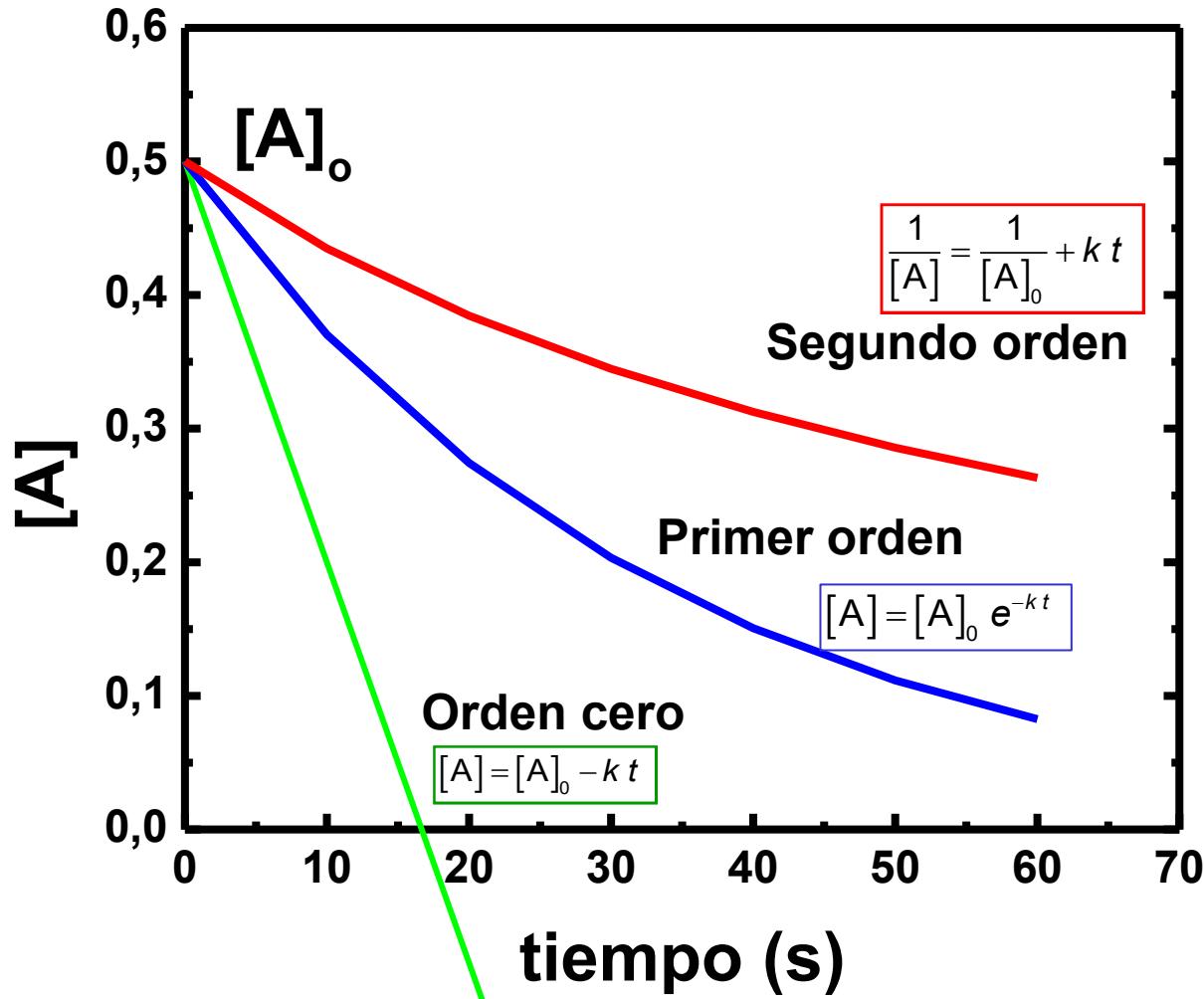
$$\int_{[A]_0}^{[A]_t} \frac{1}{[A]^2} d[A] = -k \int_{t=0}^{t=t} dt ;$$

$$-\frac{1}{[A]_t} + \frac{1}{[A]_0} = -k(t - 0) ;$$

$$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + k t$$



Ley de Velocidad integrada:



Reacciones con :

$$[A]_0 = 0,5$$

$$k_0 = 0,03 \text{ M.s}^{-1}$$

$$k_1 = 0,03 \text{ s}^{-1}$$

$$k_2 = 0,03 \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

Ley de Velocidad integrada: Vida Media

Vida media o Semivida (de un reactivo)

Es el tiempo que debe transcurrir para que la concentración de un reactivo se reduzca a la mitad

$$t_{1/2} ; \quad [A]_{t_{1/2}} = [A]_0 / 2$$

tiempo de vida media o semivida

Ley de Velocidad integrada: Vida Media

Vida media

$$t_{1/2}; \quad [A]_{t_{1/2}} = [A]_0 / 2$$

Reacciones de orden cero: $[A] = [A]_0 - k t$

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

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

Reacciones de primer orden: $\ln[A] = \ln[A]_0 - k t$

$$\ln \frac{[A]_0}{2} = \ln[A]_0 - k t_{1/2}; \quad k t_{1/2} = \ln 2;$$

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

Reacciones de segundo orden: $\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + k t$

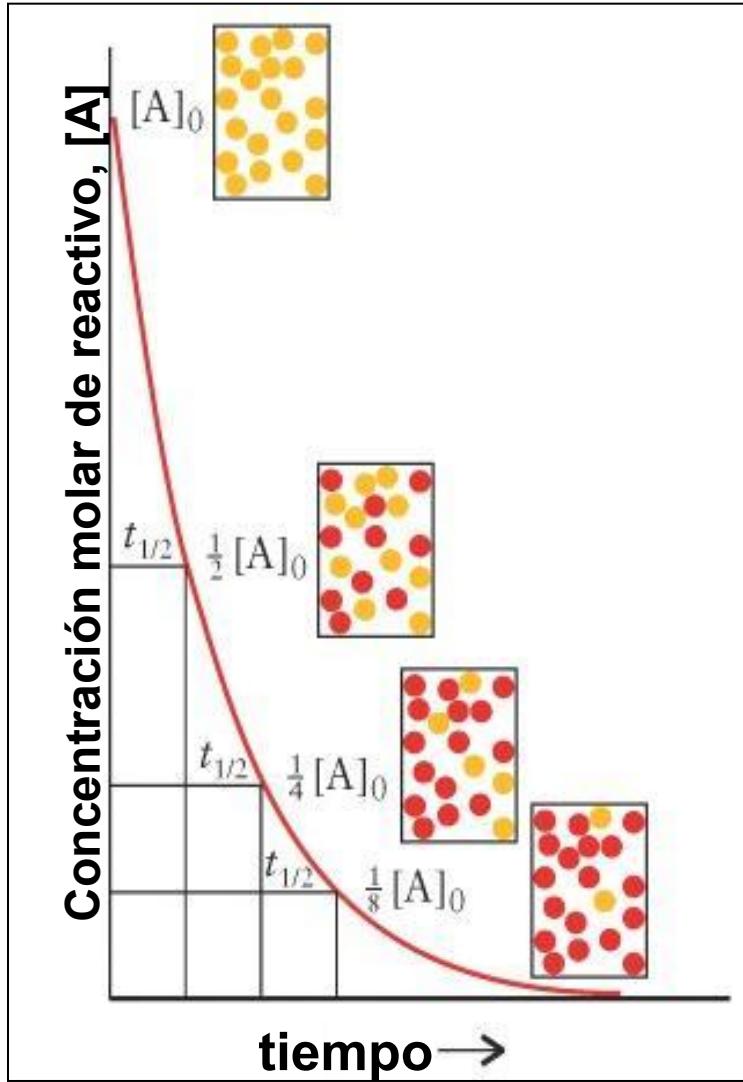
$$\frac{2}{[A]_0} = \frac{1}{[A]_0} + k t_{1/2}; \quad k t_{1/2} = \frac{1}{[A]_0};$$

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



Ley de Velocidad integrada: Vida Media

Reacciones de primer orden:



En las reacciones de primer orden el tiempo de vida media es siempre el mismo cualquiera sea la concentración al comienzo del intervalo elegido

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

Ureña (FIUBA)

Atkins-Jones, *Principios de Química. Los caminos del descubrimiento*. 3^o Ed. Editorial Médica Panamericana

Orden de reacción: Resumen

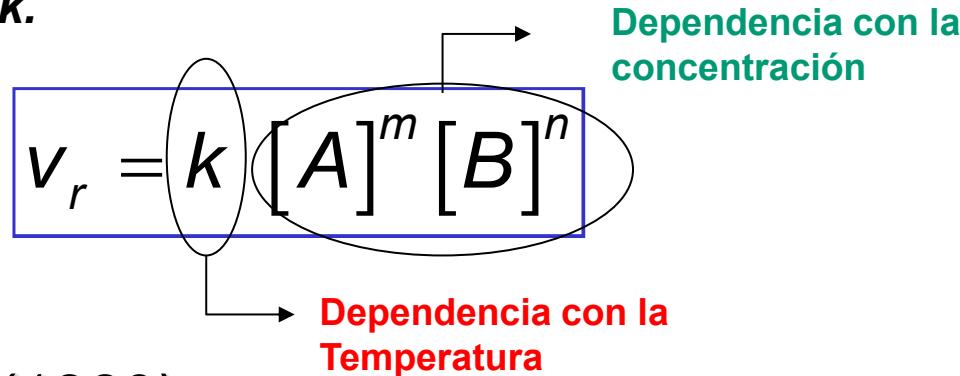
Orden	Ecuación de velocidad	Ecuación integrada	Vida media
0	$v = k \cdot [A]^0$	$[A] = [A]_0 - k t$	$[A]_0 / 2k$
1	$v = k \cdot [A]^1$	$\ln [A] = \ln [A]_0 - k \cdot t$	$\ln 2 / k$
2	$v = k \cdot [A]^2$	$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + k \cdot t$	$1 / ([A]_0 K)$

Efecto de la Temperatura

Dependencia de la constante de velocidad con la temperatura

La mayoría de las reacciones se aceleran con la temperatura.

La dependencia de la velocidad con la temperatura está representada por la constante de velocidad k .



Ley de Arrhenius (1889):

Arrhenius observó empíricamente que la constante de velocidad de una reacción cumplía con la ecuación:

A = factor pre exponencial o de frecuencia

E_a = energía de activación

Ureña (FIUBA)
Indep de la T

$$k = A e^{-E_a/RT}$$



Efecto de la Temperatura

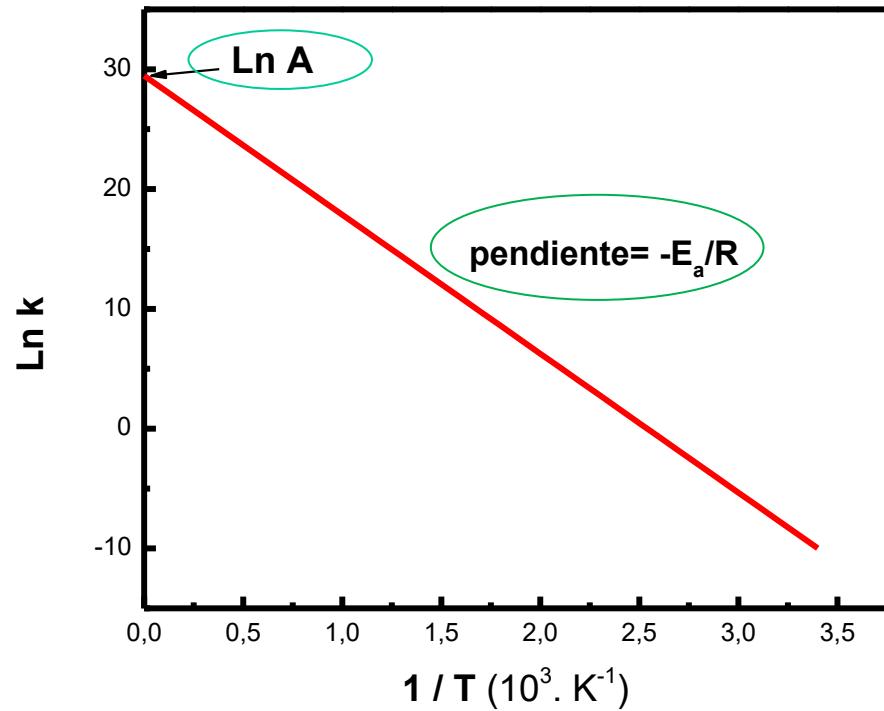
Ley de Arrhenius:

$$k = A e^{-E_a/RT}$$

Si linealizamos esta expresión:

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$

Podemos graficar $\ln k$ vs $1/T$

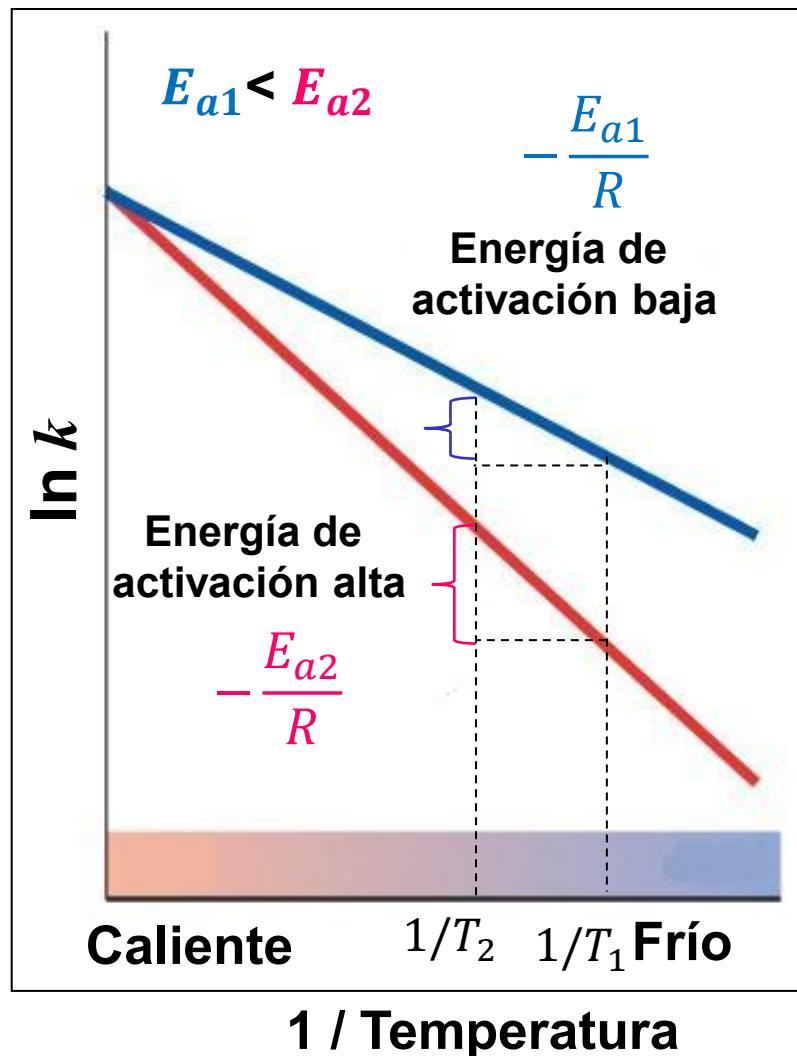


A = factor pre exponencial o de frecuencia

E_a = energía de activación

Consideramos que A y E_a son independiente de la temperatura.

Efecto de la Temperatura



Ley de Arrhenius

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$

A mayor energía de activación, mayor dependencia de la constante de velocidad con la temperatura

$E_a > 60 \text{ kJ/mol} \rightarrow$ la reacción depende fuertemente de T.

$E_a \approx 10 \text{ kJ/mol} \rightarrow$ la reacción depende ligeramente de T.

Efecto de la Temperatura

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

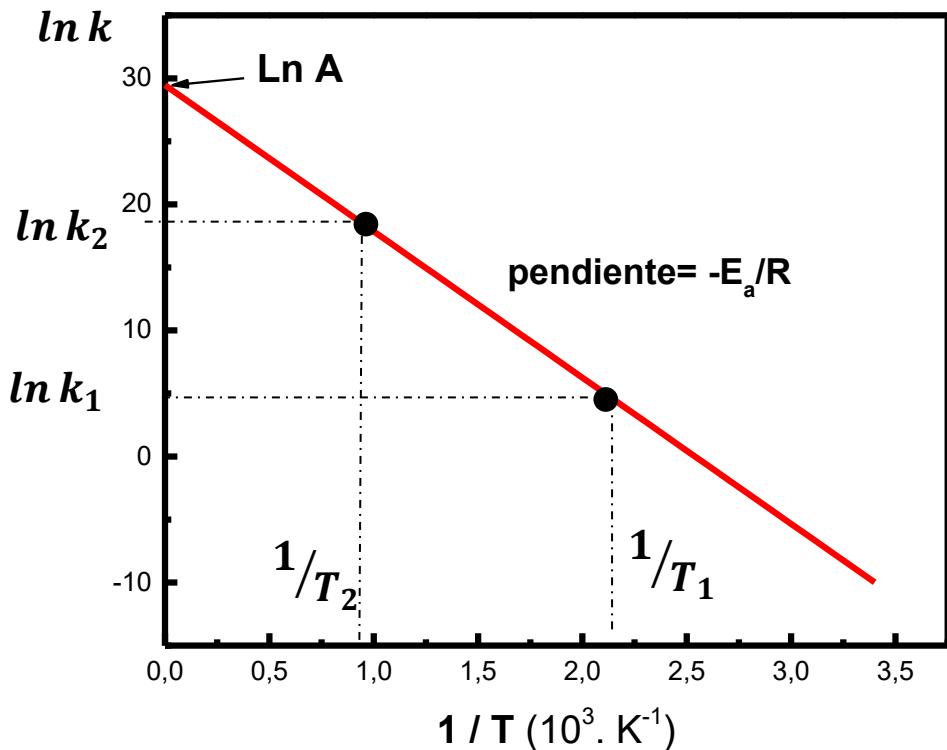
¿Como determinamos Ea y A?

Si conocemos el valor de la constante de velocidad a dos temperaturas, podemos calcular el valor de la **Ea** y de **A**

$$\ln k_1 = \ln A - \frac{E_a}{RT_1}$$

$$\ln k_2 = \ln A - \frac{E_a}{RT_2}$$

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



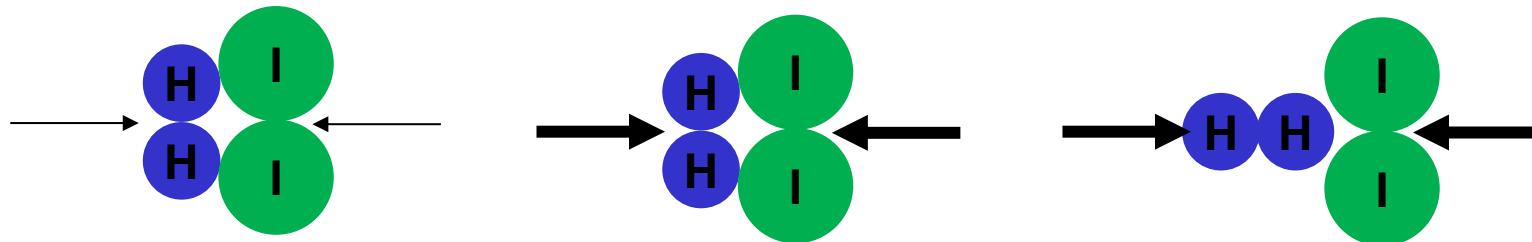
Modelos teóricos de la Cinética Química

¿Cómo ocurren las reacciones a nivel molecular?

Teoría de colisiones (1920) Gilbert Lewis

Esta teoría se basa en los **choques de los reactivos**, es decir en las colisiones. Cuando los reactivos chocan, pasan a productos, pero no todas las **colisiones son efectivas**.

- Las moléculas de reactantes deben poseer la **energía suficiente** para que pueda ocurrir la ruptura de enlaces, un reordenamiento de los átomos y luego la formación de los productos. Si no se dispone de la energía suficiente, las moléculas rebotan sin formar los productos
- Los choques deben tener la **orientación adecuada**.



COLISION NO EFECTIVA

- Orientación correcta
- Baja energía

COLISION EFECTIVA

- Orientación correcta
- Energía suficiente

COLISION NO EFECTIVA

- Orientación incorrecta
- Energía suficiente



Modelos teóricos de la Cinética Química

Para la Teoría de Colisiones:

El número de moléculas de productos es proporcional al número de choques entre las moléculas de los reactivos.

Velocidad de reacción = (frecuencia de colisión) X (fracción con energía suficiente)

$$(\text{frecuencia de colisión}) = \sigma \bar{v}_{\text{rel}} N_A^2 [A][B]$$

σ : sección eficaz

$$(\text{fracción con energía suficiente}) = e^{-E_{\min}/RT}$$

\bar{v}_{rel} : velocidad relativa de las molec.

E_{\min} = energía min. para choque efectivo

$$v_r = \sigma \bar{v}_{\text{rel}} N_A^2 e^{-E_{\min}/RT} [A][B]$$

$\underbrace{\phantom{\sigma \bar{v}_{\text{rel}} N_A^2}}$

k

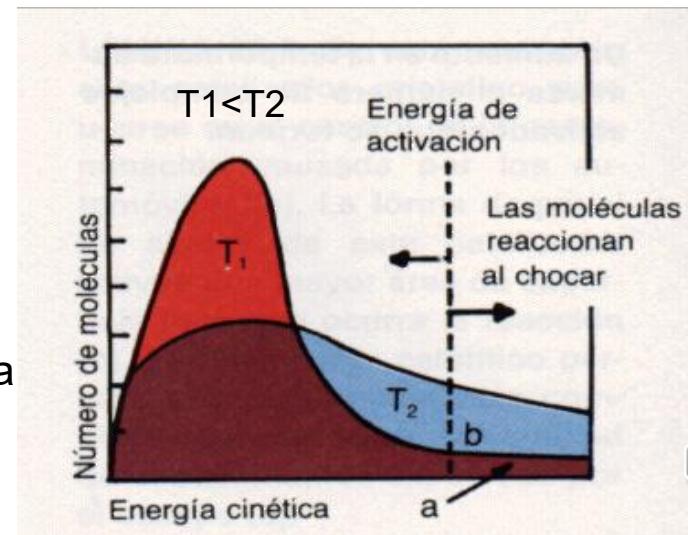
$$k = \sigma \bar{v}_{\text{rel}} N_A^2 e^{-E_{\min}/RT}$$

$\underbrace{\phantom{\sigma \bar{v}_{\text{rel}} N_A^2}}$

Energía de activación Ea

Factor pre-exponencial A:

relacionado con la frecuencia de colisión

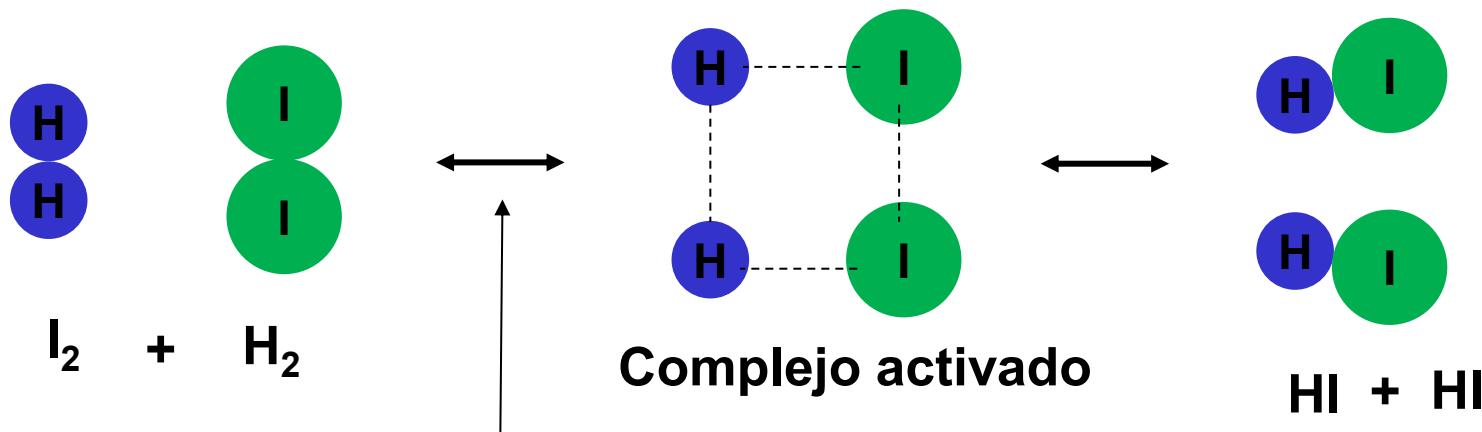
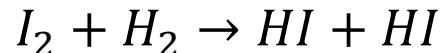


Modelos teóricos de la Cinética Química

Teoría del complejo activado

(1935) Henry Eyrin

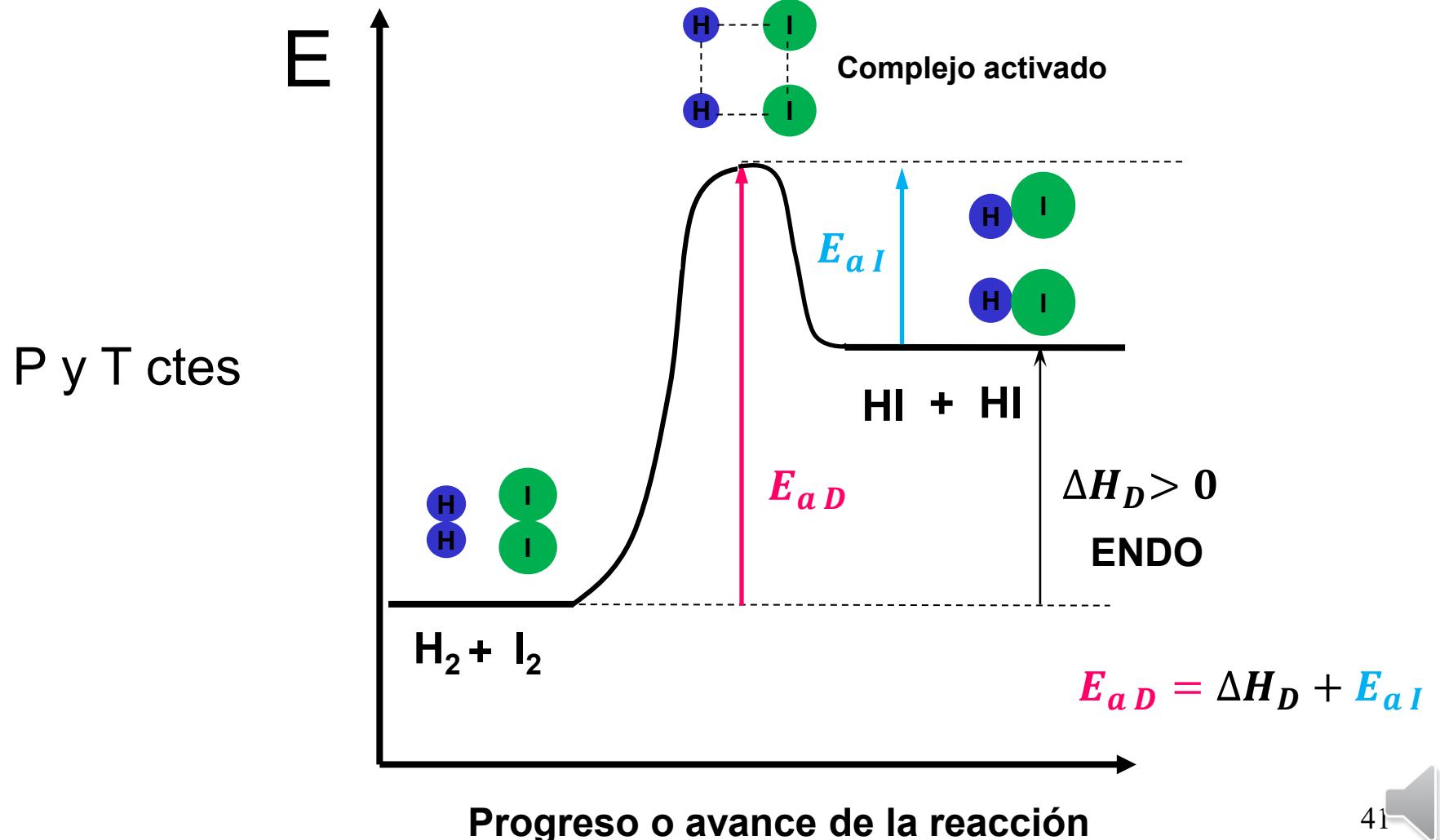
En esta teoría se forma un **estado intermedio** entre los reactivos y los productos que es un estado transitorio de mucha energía y recibe el nombre de **complejo activado**.



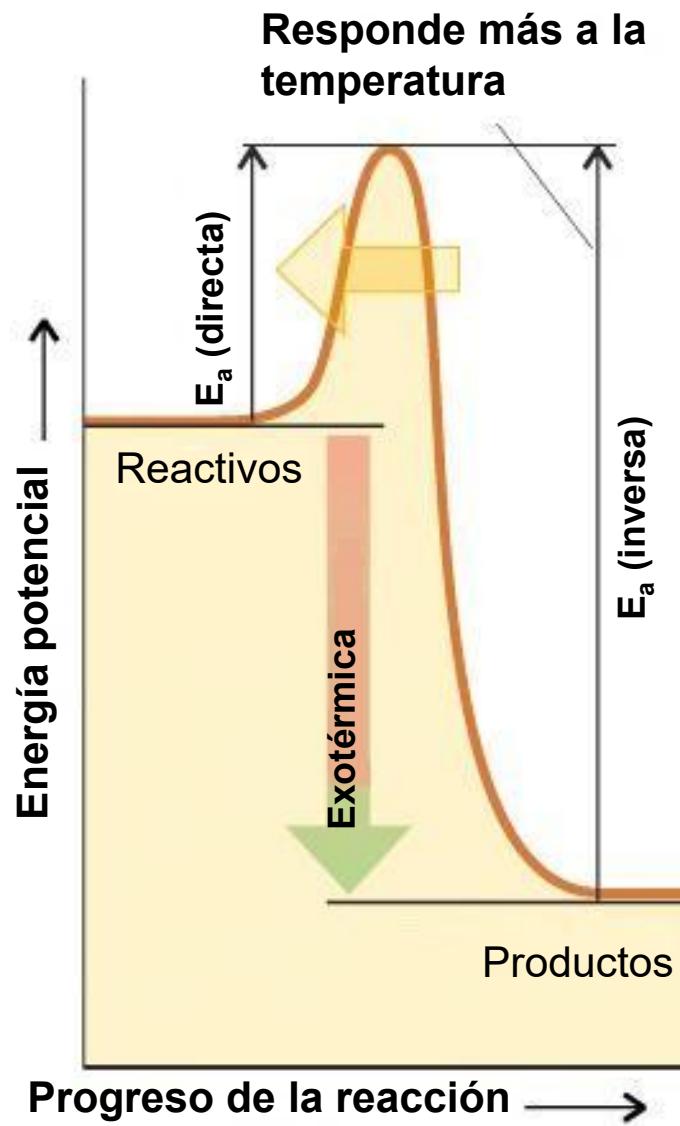
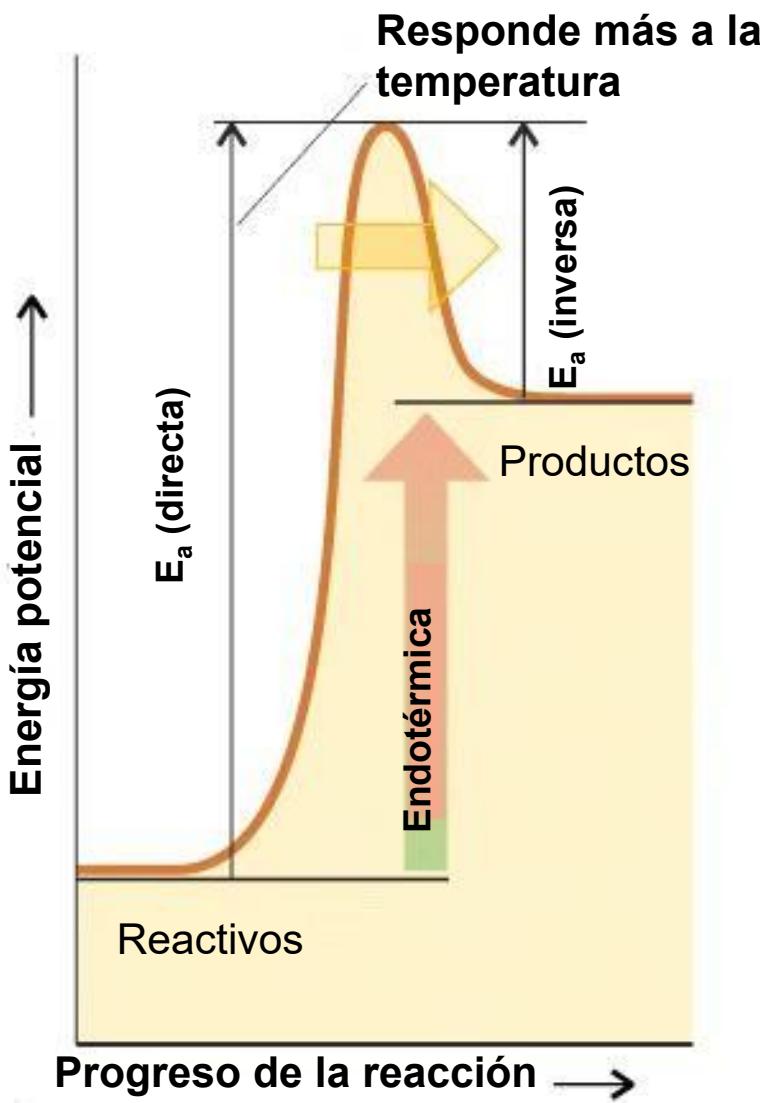
Los reactivos tienen que ganar energía para poder alcanzar al complejo activado que va a ser el de **máxima energía**

Modelos teóricos de la Cinética Química

Teoría del complejo activado



Efecto de la Temperatura



Catalizadores

Son sustancias que intervienen en alguna de las etapas de la reacción pero no se alteran pues se recuperan al final tal como se añadió y no intervienen en la ecuación global ajustada.

- ✓ Modifican el mecanismo de la reacción cambiando el tipo de complejo activado y la energía de activación necesaria para llegar a él.
- ✓ Modifican el valor de la Energía de activación.
- ✓ Modifica tanto la velocidad de la reacción directa como la inversa.
- ✓ El catalizador no modifica los aspectos termodinámicos de la reacción (entalpía de reacción, equilibrio químico, etc)

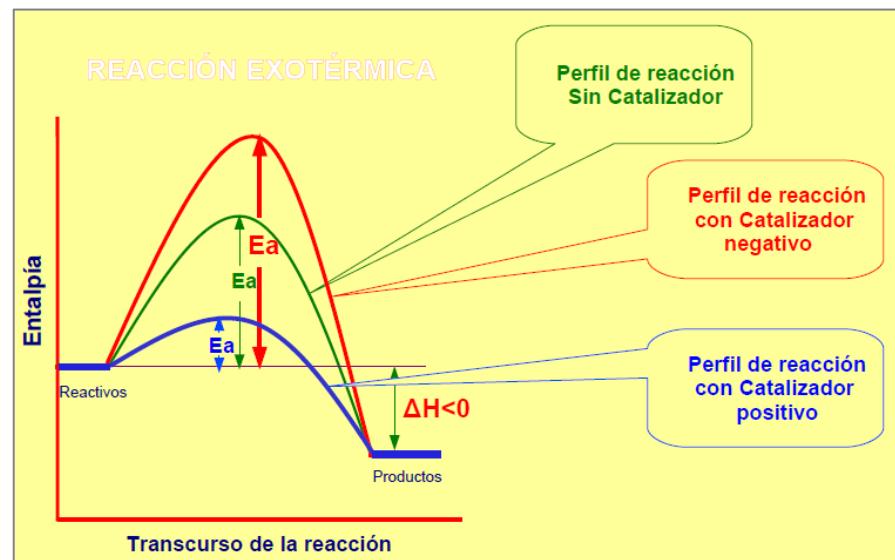
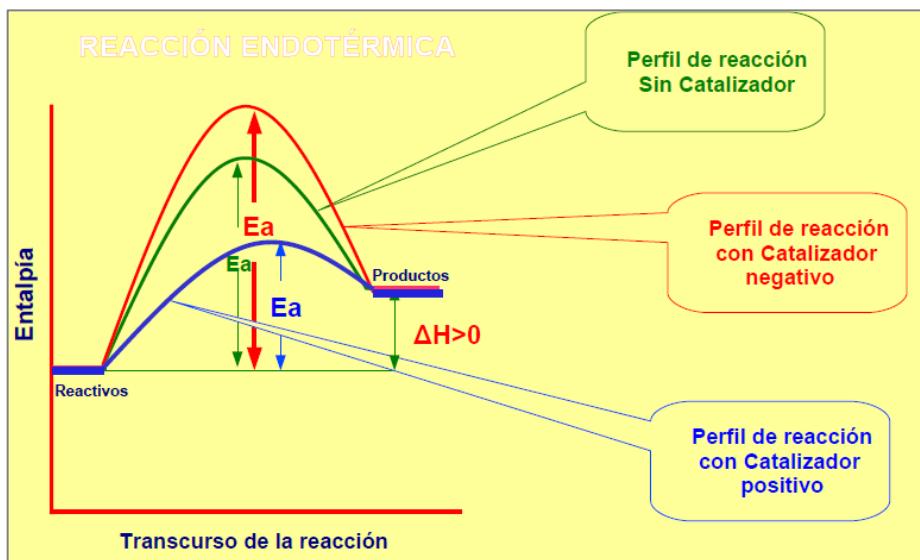
Catalizadores

Pueden ser:

Positivos :

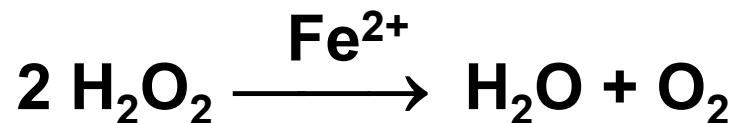
Hacen que la velocidad aumente al disminuir la Energía de activación.

Negativos: Hacen que la velocidad disminuya al aumentar la Energía de activación. (inhibidores o retardantes)

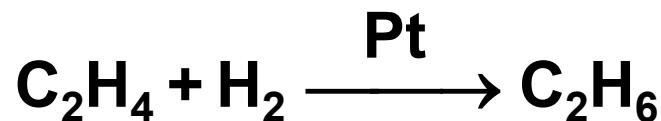


Catalizadores: clasificación

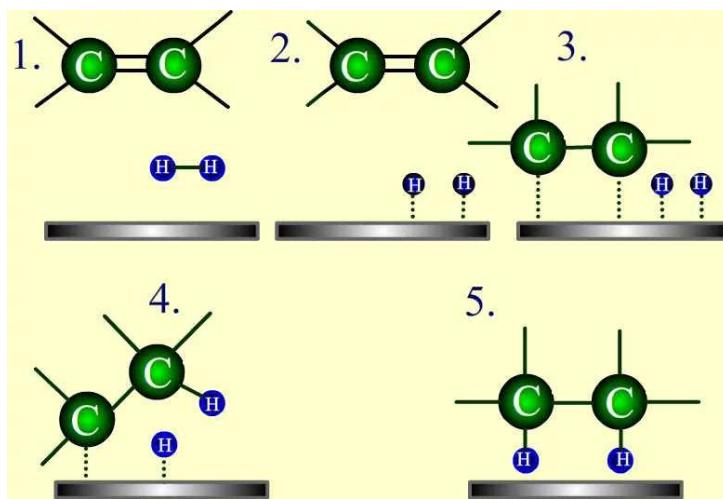
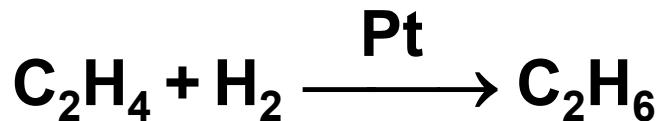
Homogéneo: se encuentra en la misma fase que los reactivos.



Heterogéneo: se encuentra en una fase diferente a los reactivos.
Por ejemplo, sólidos en contacto con gases.



Catalizadores



Catálisis metálica de la hidrogenación del eteno

Los catalizadores pueden sufrir “**envenenamiento**” o **inactivación** cuando alguna sustancia se adsorben con tanta intensidad sobre el catalizador que bloquea su superficie. (El As envenena al Pt)

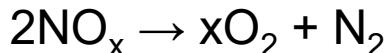
Catalizadores

Convertidor catalítico de los automóviles

Se utilizan para provocar la combustión completa y rápida del combustible sin quemar y para eliminar productos contaminantes como los óxidos de nitrógeno y monóxido de carbono.



Reducción de óxidos de nitrógeno a nitrógeno y oxígeno:



Oxidación de monóxido de carbono a dióxido de carbono:



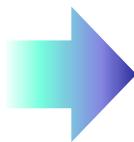
Consiste en una malla cerámica de canales longitudinales revestidos de materiales nobles como Platino, Rodio y Paladio

La velocidad de reacción se ve afectada por:

- 1- La concentración de reactivos (y productos) o presión si es fase gaseosa.**
- 2- La temperatura.**
- 3- Catalizadores.**
- 4- Área superficial (si los reactivos o los catalizadores son sólidos o líquidos).**

Mecanismos de reacción

El proceso por el cual se lleva a cabo una reacción se denomina **mecanismo de reacción**.

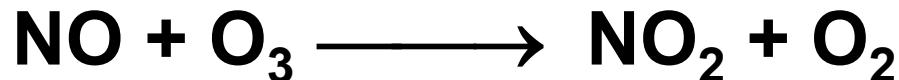


Conjunto de reacciones sencillas (**reacciones elementales**) que representan el avance de la reacción

Cada paso del mecanismo de reacción

→ **reacción elemental**

Molecularidad: número de moléculas que participan como reactivo en la reacción elemental. En una reacción elemental el orden es igual a la molecularidad

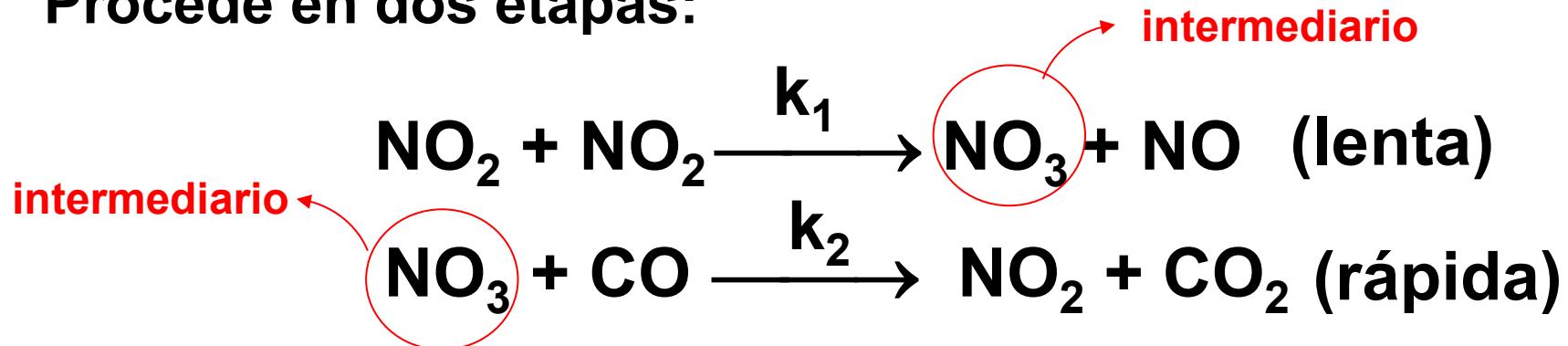


Mecanismos de reacción

Para la reacción global:



Procede en dos etapas:



Entonces: $v = k [\text{NO}_2]^2$

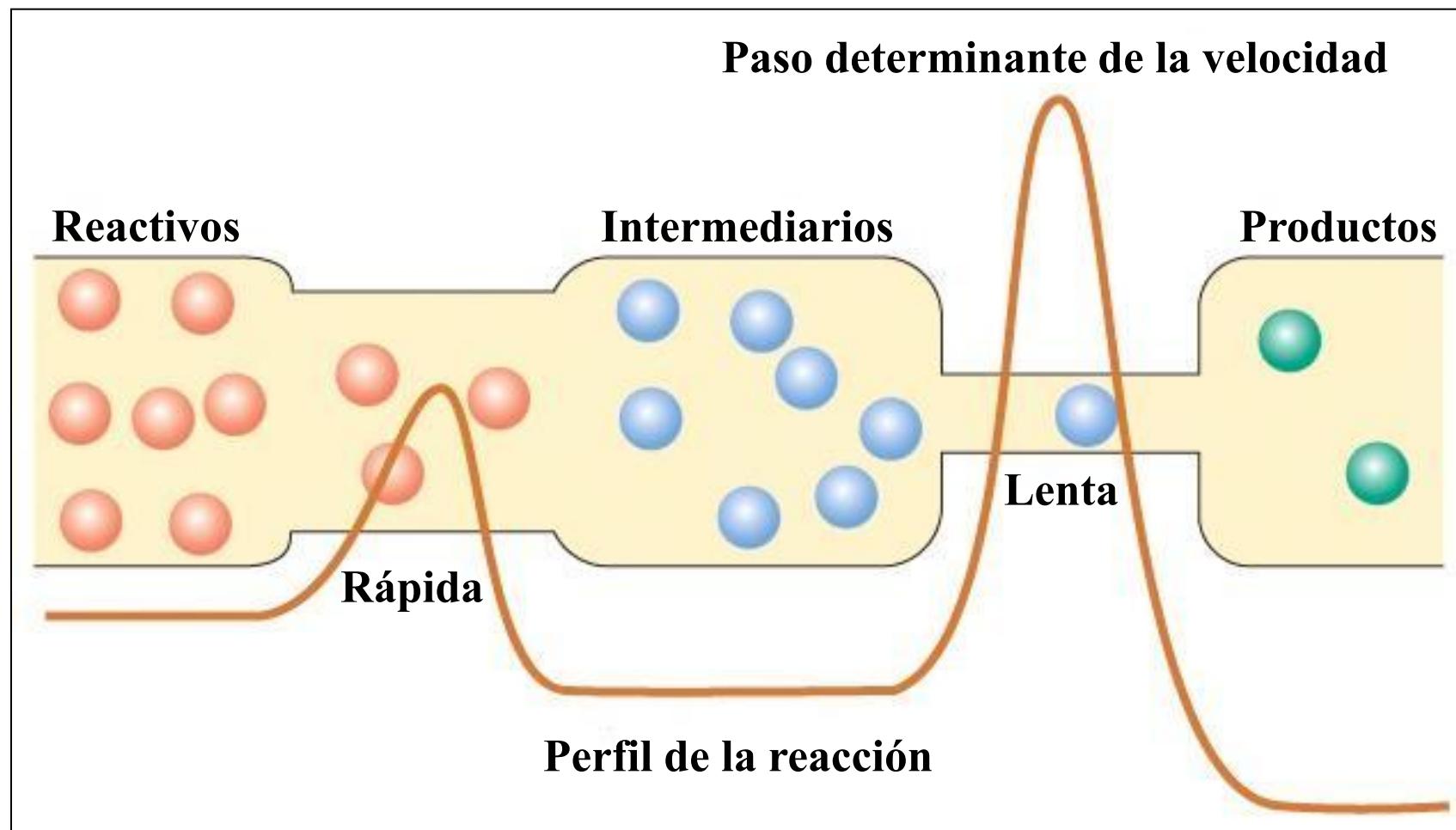
Intermediario: se genera y se consume en la reacción.

En el caso en que ocurra en más de una etapa, debemos considerar la velocidad de la reacción de la etapa más lenta.



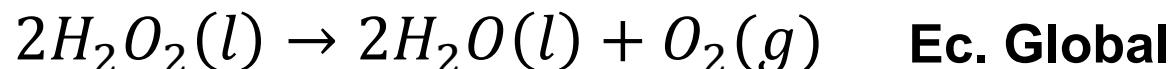
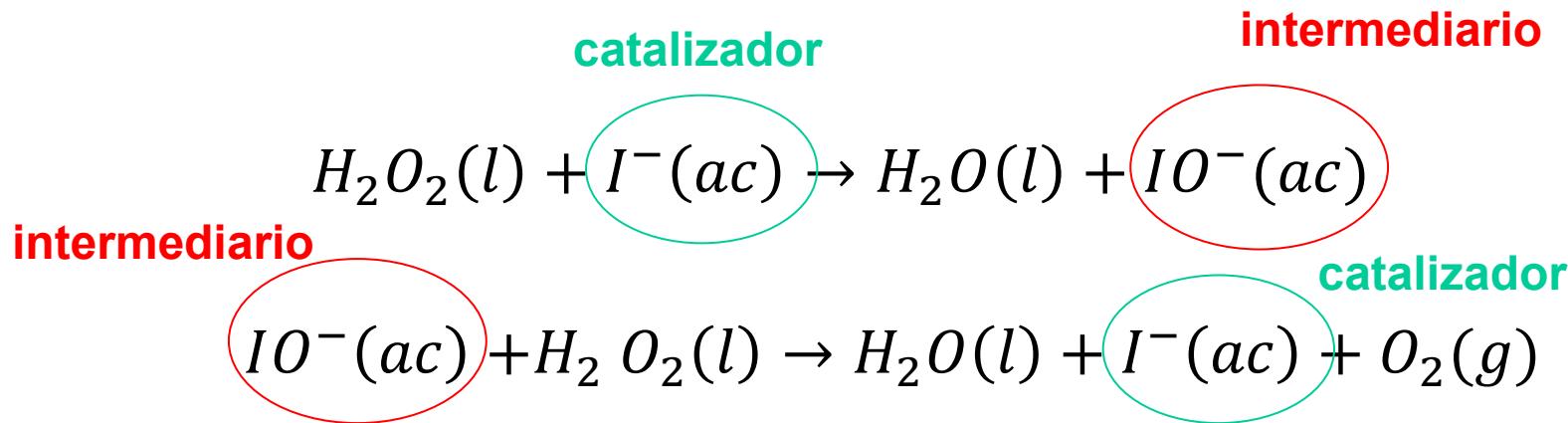
Mecanismos de reacción

Paso determinante de la velocidad



Catalizador e intermediario

Ejemplo: Veamos la reacción de descomposición de agua oxigenada (peróxido de hidrógeno) en agua y oxígeno en presencia de iones ioduro



El catalizador y el intermediario no aparecen en la ecuación global de la reacción, pero:

Catalizador: debo ponerlo para que intervenga en la reacción

Intermediario: se genera en la reacción.



Bibliografía:

- Atkins-Jones, *Principios de Química. Los caminos del descubrimientos.* 3° Ed. Editorial Medica Panamericana
- Brown-LeMay-Bursten. *Química. La ciencia central.* 9°Ed. Pearson
- Chang R. *Química.* 6ta. Edición. McGraw Hill.
- Atkins-de Paula. *Atkins Química Física.* 8º Ed. Editorial Medica Panamericana
- Ball David. *Fisicoquímica.* 1° Ed. Ed. Thompson

Ureña (FIUBA)

