

INVESTIGACIÓN: MECANISMOS DE ACCIÓN Y CINÉTICA CATALÍTICA

AUTORES: Alvaro Steven Sabogal Montalvo, CC 1013260732, Correo institucional

alsabogalm@unal.edu.co

Juliana Lizzet Losada Guzman, TI 1025143643, Correo Institucional jlosadag@unal.edu.co

Diego Jose Arias Gomez, TI 1111773134, Correo Institucional diariasgo@unal.edu.co

CURSO: 1000024-B Principios de química Grupo 6

PROFESOR: Josue Itsman Clavijo Penagos

1.MECANISMOS DE ACCIÓN CATALÍTICA

1.1 Introducción a la Especificidad Catalítica

La catálisis es un fenómeno fundamental en la química, donde una sustancia (el catalizador) acelera la velocidad de una reacción sin consumirse. En el contexto de la **Química Inorgánica**, la catálisis heterogénea (donde el catalizador es un sólido) es esencial para procesos industriales. La clave de la eficiencia catalítica es la **selectividad**, que se explica a través de modelos que describen la interacción geométrica y electrónica entre el sustrato y el sitio activo del catalizador.

1.2 Modelos de Interacción Sitio-Sustrato

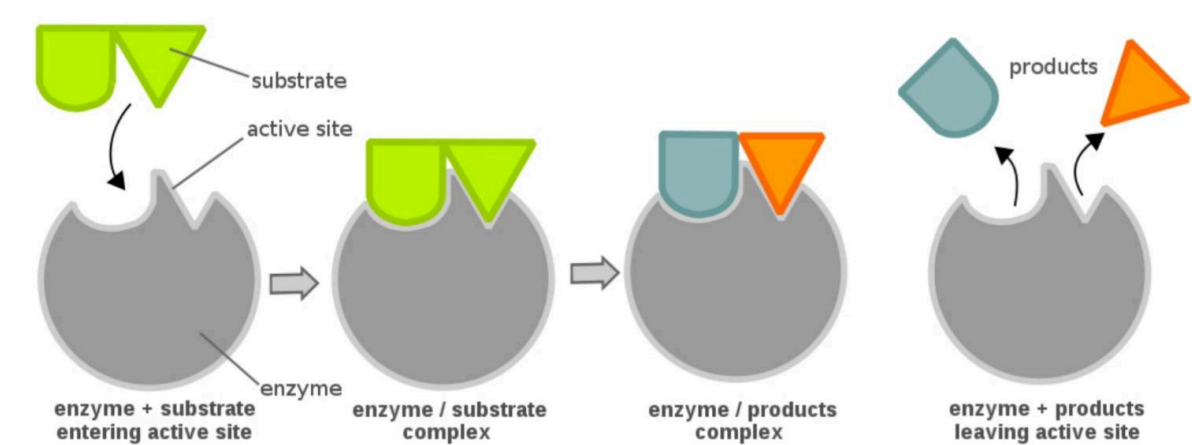
Estos modelos, aunque nacidos en la bioquímica, tienen equivalentes directos en la química de superficies y materiales.

1.2.1 Modelo Llave-Cerradura (Key-Lock)

Este modelo describe la selectividad basada en la geometría y el tamaño predefinidos.

- **Perspectiva Orgánica (Histórica):** Fue propuesto por **Emil Fischer en 1894** para explicar la especificidad de las enzimas con los azúcares. Postula que el sitio activo enzimático es una estructura rígida perfectamente complementaria al sustrato.
- **Perspectiva Inorgánica (Catálisis Selectiva de Forma):** Su analogía más clara se encuentra en los catalizadores microporosos como las **Zeolitas**.
 - **Mecanismo:** Las zeolitas poseen una red cristalina rígida con poros de tamaño y forma uniformes (la "cerradura"). Solo las moléculas reactivas que cumplen con las dimensiones geométricas exactas (la "llave") pueden difundirse hacia los sitios catalíticos internos.
 - **Química Orgánica Aplicada:** Este mecanismo permite la **selectividad de forma de reactante**, crucial en el craqueo catalítico de hidrocarburos pesados (ej. en la refinación de petróleo), donde se discriminan los alcanos lineales (que entran) de los voluminosos (que son excluidos).

Caso de Estudio Práctico	Mecanismo Llave-Cerradura	Ejemplo
Inorgánica/Industrial (Zeolitas)	Producción de p-Xileno	La industria petroquímica requiere isómeros específicos del xileno, siendo el p-xileno el más valioso. La zeolita ZSM-5 (un aluminosilicato microporoso) actúa como el catalizador "cerradura". El p-xileno es el único isómero que puede difundirse y salir del poro de la zeolita debido a que es lineal. Los isómeros o-xileno y m-xileno son más voluminosos y quedan excluidos dentro del poro. La selectividad se basa puramente en la exclusión estérica que impone la geometría rígida de la zeolita.
Orgánica/Bioquímica	Acción de la Sucrasa (Invertasa)	La enzima sucrasa solo cataliza la hidrólisis de la sacarosa (un disacárido específico) en glucosa y fructosa. El sitio activo de la sucrasa tiene una forma y distribución de cargas perfectas para la sacarosa, pero es totalmente inactiva frente a otros azúcares estructuralmente similares como la lactosa o la maltosa.
Principio Común	Selectividad por Exclusión/Afinidad	La acción catalítica solo ocurre si la geometría del sustrato es pre-existente y complementaria a la del sitio activo.



Two substrates (©IMEowbot y Jerry Crimson Mann).

Figura 1. Recuperada de <https://ocw.unican.es/pluginfile.php/715/course/section/397/Tema%25202B-Bloque%2520I-Enzymas.pdf?hl=es-CO>

1.2.2 Modelo de Ajuste Inducido (Induced-Fit)

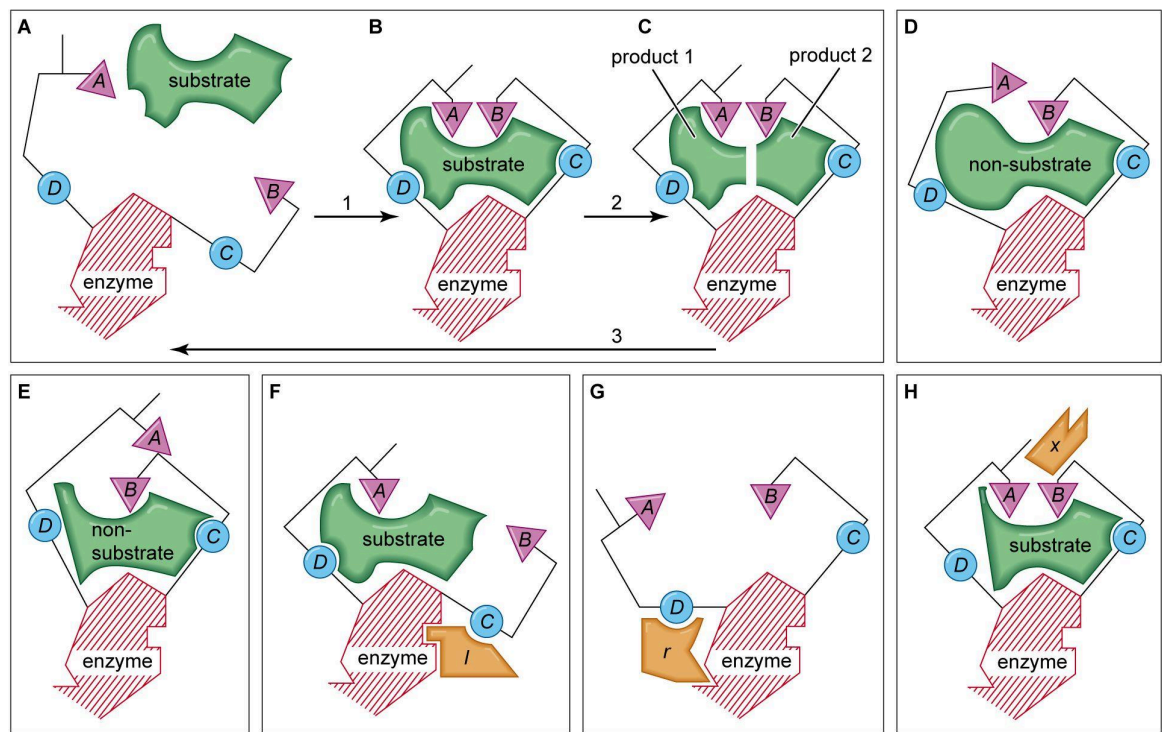
Este modelo describe una interacción más dinámica y energéticamente más favorable para la catálisis.

- **Perspectiva Orgánica (Bioquímica):** Introducido por **Daniel Koshland Jr. en 1958**, propone que el sitio activo no es estático, sino flexible. La unión inicial del sustrato induce un cambio conformacional significativo en la enzima. Este reordenamiento asegura un acoplamiento óptimo y alinea los grupos catalíticos para estabilizar el estado de transición de la reacción.
- **Perspectiva Inorgánica (Reconstrucción Dinámica de Superficie):** En la catálisis heterogénea, el fenómeno análogo es la **reconstrucción de superficie inducida por la adsorción** del reactivo.
 - **Mecanismo:** Las superficies de catalizadores metálicos (ej. metales de transición) no son estáticas. La **adsorción** (unión superficial) de un reactivo puede inducir el reordenamiento de los átomos de la superficie metálica para formar un sitio activo más eficiente.
 - **Química Orgánica Aplicada:** Este dinamismo es crucial en la catálisis sobre metales, donde la interacción permite la creación de **intermediarios organometálicos superficiales** con geometrías específicas para obtener un producto orgánico deseado.

Caso de Estudio Práctico	Mecanismo de Ajuste Inducido	Ejemplo
Orgánica/Bioquímica	Función de la Hexoquinasa	La hexoquinasa es una enzima que fosforila la glucosa (primer paso del metabolismo). Al inicio, el sitio activo tiene una forma abierta y no es completamente óptima para la catálisis. Cuando la glucosa se une, la enzima sufre un cambio conformacional masivo, cerrándose alrededor del sustrato. Este "abrazo" excluye el agua del sitio activo y acerca los cofactores necesarios para la reacción, creando el ambiente químico perfecto y forzando a la glucosa hacia el estado de transición.
Inorgánica/Superficie Metálica	Reconstrucción de Pt/Rh en el Control de Emisiones	En la catálisis heterogénea, el rendimiento de los catalizadores metálicos (como los usados en el control de emisiones automotrices) depende de la oxidación. La adsorción de CO o NO puede inducir un reordenamiento de los átomos superficiales del rodio (Rh) o platino (Pt) a alta temperatura. La nueva disposición de los átomos superficiales (la "estructura inducida") es la que maximiza la estabilidad del estado de

transición para la ruptura de enlaces, acelerando la conversión de CO en CO₂.

Principio Común	Adaptación y Tensión Catalítica	El catalizador no solo reconoce al sustrato, sino que lo distorsiona y modifica su propia estructura para lograr el estado de transición más bajo posible.
-----------------	---------------------------------	--



© Encyclopædia Britannica, Inc.

Figura 2. Recuperada de:
<https://www.britannica.com/science/induced-fit-theory#/media/1/286696/1422>

1.3 Comparativa de Selectividad

Característica	Modelo Llave-Cerradura (Key-Lock)	Modelo Ajuste Inducido (Induced-Fit)
Rigidez	Estructura rígida y predefinida.	Estructura flexible y dinámica.
Origen de Selectividad	Exclusión estérica (tamaño/forma).	Adaptación electrónica/conformacional.

Ejemplo Inorgánico	Zeolitas (Tamices moleculares).	Superficies metálicas (Pt, Pd) reestructurables.
Ejemplo Orgánico	Enzimas metabólicas clásicas (Fischer).	Hexoquinasa y receptores alostéricos (Koshland).

1.4 Conclusión y Relevancia

Los modelos de Llave-Cerradura y Ajuste Inducido son pilares conceptuales. Mientras el primero explica la selectividad por exclusión estérica en estructuras rígidas (Zeolitas), el segundo justifica la alta eficiencia y adaptabilidad de la mayoría de los catalizadores biológicos y de superficie metálica, donde la dinámica molecular es clave para reducir la energía de activación.

2. Mecanismos de Degradación Catalítica:

La degradación catalítica es un proceso en el cual se reduce la complejidad de una molécula, generalmente una toxina, mediante el catalizador, el cual descompone la molécula. Este mecanismo se utiliza para tratar contaminantes, reciclar plásticos y producir combustibles.

Algunos de sus mecanismos son adsorción, dónde el contaminante se adhiere a la superficie del catalizador, generación de radicales y activación, dónde el catalizador facilita la activación de oxidantes.

Un ejemplo de esto se encuentra en el análisis de la degradación de plásticos no reutilizables, en dónde mediante un catalizador (no especificado) se obtiene Dióxido de carbono y Agua, un mecanismo más eficiente que evita la producción de combustible como residuos del tratamiento de los plásticos.

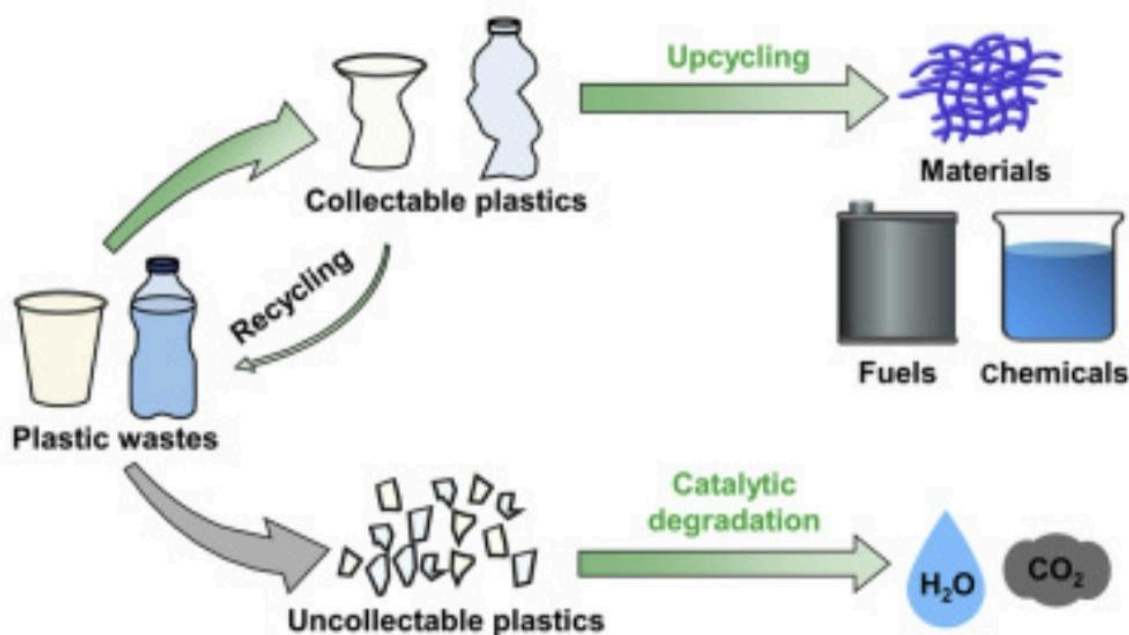


Figura 3. Diferencia entre plásticos reutilizables y no reutilizables. Recuperada de: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666386421002186>

2. Mecanismos de Desactivación Catalítica:

Desactivación Catalítica

La desactivación catalítica es un proceso mediante el cual se reduce la efectividad del catalizador, disminuyendo, en consecuencia, la eficiencia de la reacción; esto se logra al envejecer o inhibir el catalizador mediante procesos químicos como el envenenamiento y físicos como el bloqueo. Estos procesos pueden o no ser reversibles.

2.1 Envenenamiento (Azufre-Mercurio)

El envenenamiento es un mecanismo químico, en su mayoría irreversible, en el cual un componente bloquea la catálisis para otro. Según Bartholomew, C. H. (2001) “el envenenamiento tiene un significado operativo; es decir, si una especie actúa como un veneno depende de su fuerza de adsorción en relación con las otras especies que compiten por sitios catalíticos.”

Estos “venenos” se clasifican según su estructura química, en donde resaltan los grupos V, VI y VII, y los metales pesados. Al mismo tiempo, existe la selectividad del envenenamiento; hay tres tipos de selectividad del envenenamiento, el envenenamiento selectivo, donde se prioriza la adsorción del veneno en los sitios más activos a bajas concentraciones. En segundo lugar, se encuentra el envenenamiento antiselectivo, donde los sitios de menor actividad se bloquean primero. Finalmente, se encuentra el envenenamiento no selectivo, donde la pérdida de actividad es proporcional a la concentración del veneno, lo cual se evidencia en la Tabla 1.

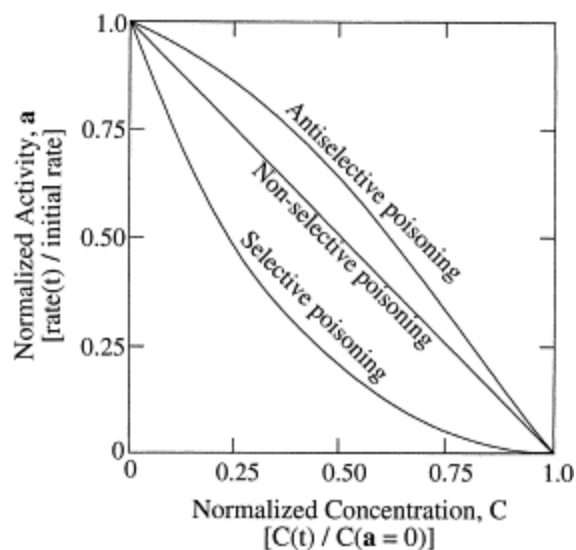


Figura 4. Recuperada de [https://doi.org/10.1016/s0926-860x\(00\)00843-7](https://doi.org/10.1016/s0926-860x(00)00843-7)

Un ejemplo de este mecanismo se encuentra en la hidrodesulfuración, en donde a un compuesto sulfuro se le agrega H_2 y un catalizador metálico, para luego obtener H_2S ; el azufre se adsorbe en el metal del catalizador, lo que genera menor eficiencia y daños irreversibles en el catalizador. Para esta reacción no hay una fórmula específica dada la amplitud de posibilidades de catalizadores (Al_2O_3 , por ejemplo)

2.2 Bloqueo

El bloqueo, definido según Sustainability Directory como: “un proceso físico. Depósitos como cenizas de petróleo (fósforo, zinc, calcio) u hollín de carbón recubren la superficie del catalizador, impidiendo que los gases de escape lleguen a los sitios activos”.

Con esto se refiere a la deposición física de algún elemento o compuesto sobre el catalizador, lo cual puede resultar incluso en la desintegración de partículas en el catalizador o fallas en el reactor al taponar los vacíos; estas reacciones tienen una clasificación muy variada, ya que clasificaciones como las de Menon (PG Menon) sugieren clasificarlas según su sensibilidad al coque (elementos derivados de los carburos), mientras que otras más generales las sugieren según su sensibilidad a la estructura.

Este proceso es reversible y generalmente requiere la reactivación de los poros del catalizador.

Un ejemplo de este mecanismo se encuentra en la refinación de petróleo, donde mediante el hidroprocesamiento se inyecta H_2 a alta presión a el petróleo crudo en un reactor con altas temperaturas, junto a un catalizador, lo cual aumenta la eficiencia y elimina impurezas como azufre, nitrógeno, y metales de los productos (como combustibles y aceites); sin embargo, este llega a generar la desactivación del catalizador por coque o metales, los cuales llegan a contaminar el reactor causando caídas de presión y aumentos en costos de producción, además de aumentar en medida los gases del efecto invernadero.

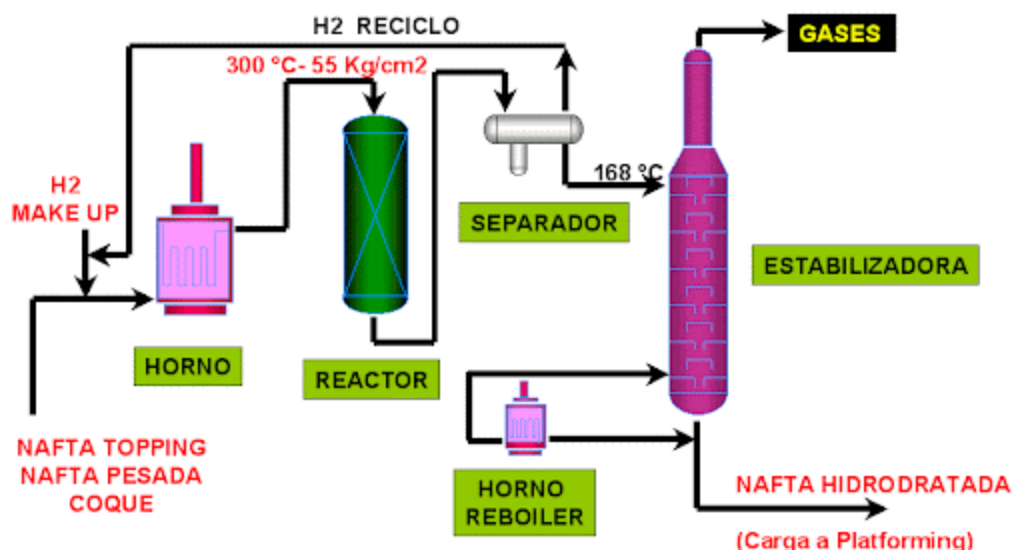
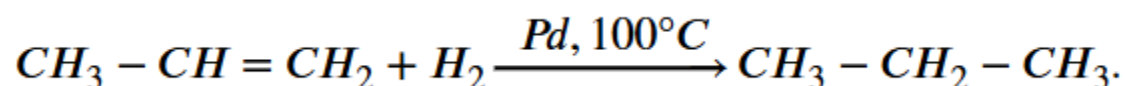


Figura 5. Recuperada de <http://gustato.com/petroleo/hidrotratamiento.html>

2.3 Saturación

La saturación es un proceso físico reversible, en el cual las moléculas se adhieren a la superficie del catalizador, de manera que la superficie activa del catalizador quede totalmente ocupada, en otras palabras, no queda espacio para que otra molécula se adsorba. Una vez completado el proceso, aunque se aumente la concentración del reactivo o la velocidad de la reacción no hay cambios en el catalizador.

Este tipo de mecanismos se encuentra en la hidrogenación, donde se agrega H_2 a compuestos inorgánicos insaturados para convertirlos en compuestos saturados, como el hidrogenar alquenos para llegar a alcanos o aldehídos a alcoholes. En la hidrogenación de alquenos, por ejemplo, se busca separar el enlace doble que forman dos carbonos entre sí, generando únicamente enlaces sencillos; este tipo de mecanismos se utiliza en la industria farmacéutica, cosmética y alimentaria.



Se evidencia la fórmula de obtención de propano, un combustible ampliamente utilizado en la industria alimentaria.

Cinetica quimica:

Resumen

La cinética química estudia la velocidad con la que ocurren las reacciones y los factores que la

controlan. Aunque se conocen muchos aspectos teóricos, la rapidez de una reacción sigue determinando de forma experimental, debido a la complejidad de los procesos a nivel molecular. La velocidad depende de variables como la temperatura, la concentración, el estado físico de los reactivos y la presencia de catalizadores, y suele expresarse mediante ecuaciones de velocidad obtenidas empíricamente. Además, conceptos clave como la energía de activación y la ecuación de Arrhenius permiten entender cómo la temperatura influye en la constante de velocidad. En conjunto, la cinética química permite describir, comparar y predecir el comportamiento dinámico de las reacciones químicas en diversos sistemas.

Cinética enzimática de Michaelis-Menten

El modelo cinético de Michaelis–Menten describe cómo varía la velocidad de una reacción enzimática según la concentración del sustrato. Propone que la enzima (E) se une al sustrato (S) formando un complejo enzima-sustrato (ES), el cual luego se convierte en producto (P). Este modelo permite entender por qué las reacciones enzimáticas aumentan su velocidad con más sustrato, pero solo hasta cierto límite.

Para calcular la velocidad de reacción según Michaelis–Menten se requieren dos parámetros: V_{max} , que es la velocidad máxima cuando la enzima está saturada, y K_m , que es la concentración de sustrato a la que la velocidad alcanza la mitad de V_{max} . Con estos valores, los cuales irían ubicados de la siguiente manera $v = (V_{max} \cdot [S]) / (K_m + [S])$

Ejemplo práctico: Supón que una enzima tiene $V_{max} = 10 \mu\text{mol}/\text{min}$ y $K_m = 5 \text{ mM}$. Si trabajas con una concentración de sustrato de $[S] = 5 \text{ mM}$, entonces:

$$v = (10 \cdot 5) / (5 + 5) = 50 / 10 = 5$$

Esto significa que, a esa concentración de sustrato, la reacción ocurre a la mitad de la velocidad máxima.

Cinética de Lineweaver–Burke

El método de Lineweaver–Burke es una forma modificada del modelo de Michaelis–Menten que sirve para linealizar la ecuación y poder obtener más fácil los valores de K_m y V_{max} . En vez de usar la relación directa entre velocidad y sustrato, este método toma los recíprocos de ambos valores y genera una línea recta. Por eso también se le llama “doble recíproca”. Aunque es útil, a veces exagera los errores experimentales, pero igual se usa mucho en análisis básico.

Para calcularlo se necesita medir varias velocidades iniciales (v) a distintas concentraciones de sustrato ($[S]$). Luego se toman los recíprocos: $1/v$ y $1/[S]$. La ecuación lineal queda así.

$$1/v = (K_m/V_{max}) \cdot (1/[S]) + (1/V_{max})$$

Ejemplo práctico: si al graficar obtienes una recta con pendiente 0.2 y la intersección en Y 0.1, entonces $(1/V_{max}) = 0.1$, así que $V_{max} = 10$ luego $K_m = \text{la pendiente} \cdot V_{max} = 0.2 \cdot 10 = 2$ por lo que ya tendríamos los parámetros de la enzima.

Ecuaciones Pseudocinéticas

Las ecuaciones pseudocinéticas se usan cuando en una reacción hay un reactivo que está en muchísima mayor concentración que el otro, tanto que prácticamente no cambia durante la reacción. En ese caso, la reacción que originalmente podría ser de segundo orden o más, se puede “simplificar” y tratarla como si fuera de primer orden con respecto al reactivo que sí cambia. Esto sirve para analizar la cinética más fácil y entender cómo evoluciona la reacción sin tener tanto caos matemático.

Para calcular una pseudocinetica se necesita identificar cuál reactivo está en exceso enorme, casi constante, y cuál es el reactivo limitante. Luego se toma la ley de velocidad original, por ejemplo: $\text{velocidad} = k[A][B]$. Si B está en exceso, se considera que $[B] \approx \text{constante}$ y la k se modifica a una $k' = k[B]$. Así la ecuación queda como si fuera de primer orden: $\text{velocidad} = k'[A]$. Con eso ya se pueden usar las ecuaciones de primer orden normales.

Ejemplo práctico: Supón que la reacción tiene una constante $k = 0.4 \text{ L/mol}\cdot\text{s}$ y la concentración de B es tan grande que se mantiene más o menos en 5 mol/L . Entonces $k' = k[B] = 0.4 \cdot 5 = 2$. Así la velocidad queda $\text{velocidad} = 2[A]$. Esto permite calcular cómo disminuye A con el tiempo usando la fórmula de primer orden: $\ln([A]_0/[A]_t) = k't$.

Referencias

1. **Nelson, D. L., & Cox, M. M.** (2017). *Lehninger. Principios de Bioquímica* (7.^a ed.). Ediciones Omega, España. (Manual universitario estándar para los mecanismos de acción enzimática).
2. **Fischer, E.** (1894). *Einfluss der Configuration auf die Wirkung der Enzyme*. Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft, 27(3), 2985-2993. (Fuente primaria del modelo Llave-Cerradura).
3. **Koshland, D. E.** (1958). *Application of a Theory of Enzyme Specificity to Protein Synthesis*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 44(2), 98-104. (Fuente primaria del modelo Ajuste Inducido).
4. **Universidad Complutense de Madrid (UCM).** (S.f.). *Síntesis, caracterización y aplicaciones catalíticas de zeolitas básicas*. (Tesis o recurso académico sobre zeolitas). Recuperado de: <https://webs.ucm.es/BUCM/tesis/qui/ucm-t25174.pdf>
5. **Universidad de Cantabria (UCAN).** (S.f.). *Tema 2B - Bloque I: Enzimas. Cinética Enzimática*. (Recurso de curso abierto sobre la base bioquímica del modelo). Recuperado de: <https://ocw.unican.es/pluginfile.php/715/course/section/397/Tema%25202B-Bloque%2520I-Enzimas.pdf>
6. **Britannica.** (S.f.). *Induced-fit theory*. (Definición clave de la teoría de ajuste inducido). Recuperado de: <https://www.britannica.com/science/induced-fit-theory>
7. **Wikipedia.** (S.f.). *Adsorción*. (Concepto fundamental para la interacción reactivo-catalizador heterogéneo). Recuperado de: <https://es.wikipedia.org/wiki/Adsorci%C3%B3n>
8. **Calle Chumo, R. N., & Calle Chumo, D. A.** (2022). *Catálisis heterogénea en fase sólida: aplicaciones para la descontaminación de CO y N₂O*. Editorial CIDE. (Libro/recurso sobre catálisis heterogénea). Recuperado de: <https://repositorio.cidecuador.org/bitstream/123456789/813/1/Libro%20Catalisis%20Heterogenea%20%20VERSION%20FINAL.pdf>
9. **Texto (Resumen de información y Creación de tablas):** Uso de Gemini AI
10. Bartholomew, C. H. (2001). Mechanisms of catalyst deactivation. *Applied Catalysis. A, General*, 212(1–2), 17–60. [https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(00\)00843-7](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(00)00843-7)
11. Moghaddama, M., Abbassi, A., & Ghazanfarian, J. (2022). Microstructure effects on performance and deactivation of hierarchically structured porous catalyst: A pore network model. En *arXiv [physics.flu-dyn]*. <http://arxiv.org/abs/2202.02720>
12. Pham, P. T. H., Pham, C. Q., Dam, T.-T., Nguyen, Q.-A., & Nguyen, T. M. (2025). A comprehensive review of catalyst deactivation and regeneration in heavy oil hydroprocessing. *Fuel Processing Technology*, 267(108170), 108170. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2024.108170>

13. Sustainability Directory. (2025, noviembre 26). *What is the difference between catalyst poisoning and catalyst fouling?* Pollution → Sustainability Directory.
<https://pollution.sustainability-directory.com/learn/what-is-the-difference-between-catalyst-poisoning-and-catalyst-fouling/>
14. Usos del propano: para qué se utiliza el gas y sus aplicaciones. (2019, noviembre).
Primagas. <https://www.primagas.es/blog/usos-del-propano>
15. (S/f-a). Sciencedirect.com. Recuperado el 9 de diciembre de 2025, de
<https://www.sciencedirect.com/science/chapter/bookseries/abs/pii/S036005640860454X>
16. (S/f-b). Sciencedirect.com. Recuperado el 9 de diciembre de 2025, de
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/030451029085053K>
17. (S/f-c). Mdpi.com. Recuperado el 9 de diciembre de 2025, de
<https://www.mdpi.com/2073-4344/5/1/145>
18. (S/f-d). Sciencedirect.com. Recuperado el 9 de diciembre de 2025, de
<https://www.sciencedirect.com/topics/chemistry/hydrodesulfurization#:~:text=Perot-,1%20INTRODUCCI%C3%93N,proceso%20del%20fen%C3%B3meno%20de%20intercambio.>
19. *Kinetic Model - an overview | ScienceDirect Topics*.
<https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/kinetic-model>.
20. Fisicanet. (s. f.). *Cinética enzimática*. En Fisicanet. Recuperado de
<https://www.fisicanet.com.ar/quimica/bioquimica/ap05-cinetica-enzimatica.php>
21. Cinética de Michaelis-Menten». *Wikipedia, la enciclopedia libre*,
https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Cin%C3%A9tica_de_Michaelis-Menten&oldid=155178450.
22. «Diagrama de Lineweaver-Burk». *Wikipedia, la enciclopedia libre*,
https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Diagrama_de_Lineweaver-Burk&oldid=144031432.
23. «2.8.1: Pseudo-1st-Order Reactions».
[https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Kinetics/02%3A_Reaction_Rates/2.08%3A_Second-Order_Reactions/2.8.01%3A_Pseudo-1st-order_reactions](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Kinetics/02%3A_Reaction_Rates/2.08%3A_Second-Order_Reactions/2.8.01%3A_Pseudo-1st-order_reactions).