



**UCSF**  
Universidad Católica  
de Santa Fe

**Farmacia**



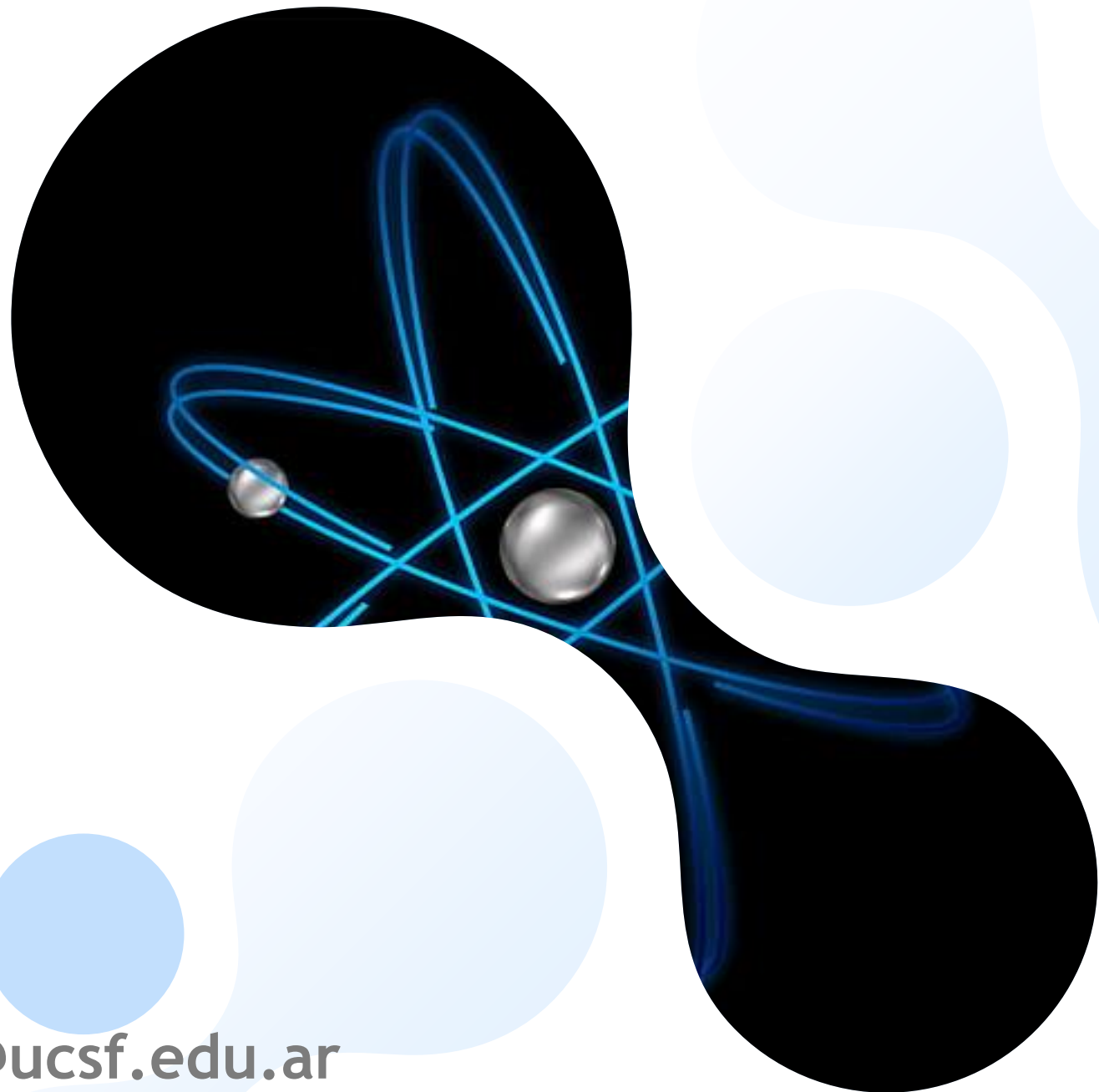
**Facultad de Ciencias de la Salud**

# Química General

**Cristhian Andrés  
Fonseca B.**



[cristhian.fonsecabenitez@ucsf.edu.ar](mailto:cristhian.fonsecabenitez@ucsf.edu.ar)





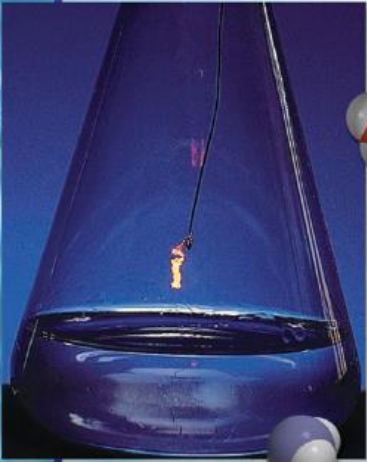
# Cinética Química





# Bibliografía de apoyo


Cinética química



Un alambre caliente de platino se funde cuando se lo sostiene sobre una disolución de amoníaco concentrado. La oxidación del amoníaco para producir óxido nítrico y agua, catalizada por el platino, es altamente exotérmica. Esta reacción es el primer paso hacia la síntesis del ácido nítrico. Los modelos muestran moléculas de amoníaco, oxígeno, óxido nítrico y agua.

13

Chang, Capítulo 13



14

LA REACCIÓN DE BELOUSOV-ZHABOTINSKY es una de las más famosas en el mundo químico. Los remolinos de colores corresponden a los productos que se forman, sin agitar, en diferentes lugares y momentos en la placa de Petri.

CINÉTICA QUÍMICA


Brown, Capítulo 14

Cinética química

16

CONTENIDO

- 16.1 Velocidad de reacción
- Factores que afectan la velocidad de reacción
- 16.2 Naturaleza de los reactivos
- 16.3 Concentración de los reactivos: expresión de la ley de velocidad
- 16.4 Concentración en función del tiempo: ecuación integrada de velocidad
- 16.5 Teoría de las colisiones de la velocidad de reacción
- 16.6 Teoría del estado de transición
- 16.7 Mecanismos de reacción y expresión de la ley de velocidad
- 16.8 Temperatura: ecuación de Arrhenius
- 16.9 Catalizadores



Un edificio en llamas es un ejemplo de una reacción rápida muy exotérmica. Los bomberos emplean los principios básicos de la cinética química para combatir el fuego. Cuando se esparce agua sobre el fuego, su evaporación absorbe gran cantidad de energía, con esto se reduce la temperatura y la reacción se hace más lenta. Otros métodos comunes para extinguir incendios incluyen cubrirlos con CO<sub>2</sub> (empleado en algunos extintores), lo cual reduce el suministro de oxígeno, y aislarlos (en el caso de incendios forestales y en parques), lo cual remueve el material combustible. En ambos casos, la eliminación de un reactivo hace más lenta o detiene la reacción.

Whitten, Capítulo 16



# Velocidad



Usain Bolt,  $V_{\max}$ : 44 km/h

La **velocidad** o rapidez es la proporción de la variación de una magnitud con respecto al tiempo.

$$velocidad = \frac{\Delta d}{\Delta t}$$

tiempo,  $t$



Litros de agua  
por minuto



Distancia,  $d$





# Velocidad de reacción

La **velocidad de una reacción** describe qué tan rápido se consumen los reactivos y se forman los productos. Como resultado, podemos seguir el progreso de una reacción al medir ya sea la disminución en la concentración de los reactivos, o el aumento en la concentración de los productos. De acuerdo con la experiencia, no todas las reacciones ocurren con la misma velocidad; por ejemplo, la combustión del alcohol o el gas metano se da con suma rapidez, mientras que la oxidación del hierro por el aire es sumamente lento.





# Velocidad de reacción

Supongamos una reacción sencilla:

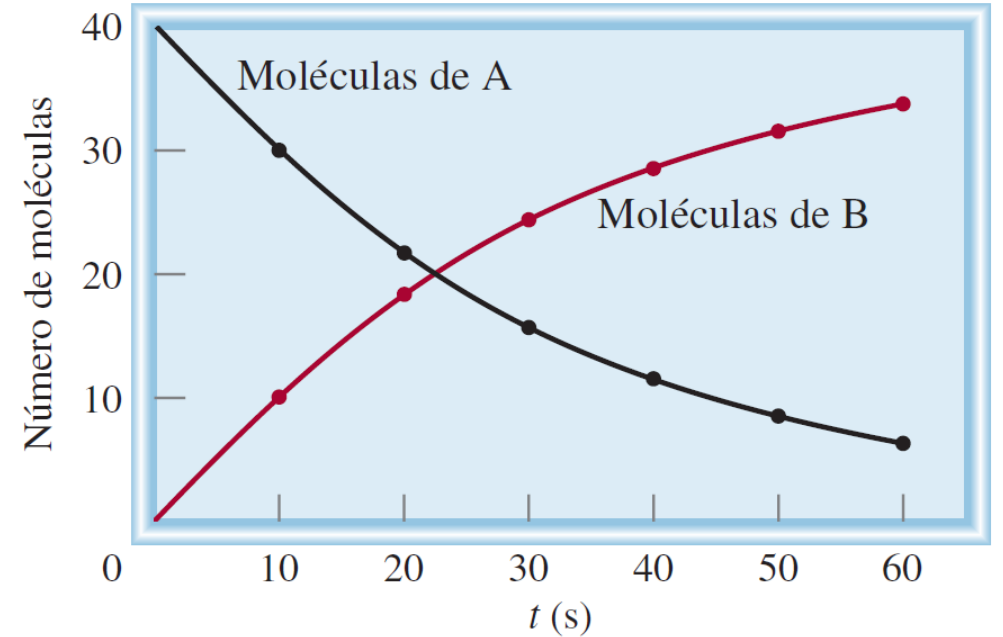


La velocidad se puede expresar como:

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

$$velocidad = \frac{\Delta[B]}{\Delta t}$$

$\Delta[B]$  no requiere un signo menos, ya que la concentración de B aumenta con el tiempo.



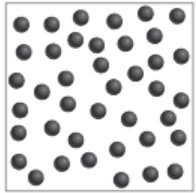
El símbolo  $\Delta$  representa el cambio de una magnitud entre una situación final y una inicial.



# Velocidad de reacción

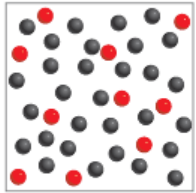
Por convención, las velocidades se expresan como cantidades positivas. El signo menos convierte a  $\Delta[A]$  en una **velocidad de desaparición**.

0 s



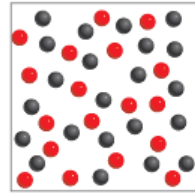
1.00 mol A  
0.00 mol B

10 s



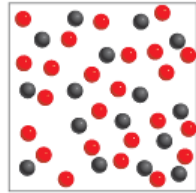
0.54 mol A  
0.46 mol B

20 s

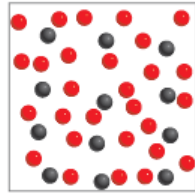


0.30 mol A  
0.70 mol B

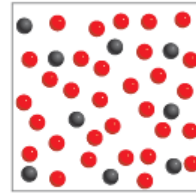
30 s



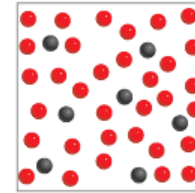
40 s



50 s



60 s



$V = 1L$

Velocidad de aparición de B

$$\text{rapidez} = \frac{[B] \text{ en } t_2 - [B] \text{ en } t_1}{t_2 - t_1} = \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{0.46 \text{ M} - 0.00 \text{ M}}{20 \text{ s} - 0 \text{ s}} = 2.3 \times 10^{-2} \text{ M/s}$$

Velocidad de desaparición de A

$$\text{rapidez} = -\frac{[A] \text{ en } t_2 - [A] \text{ en } t_1}{t_2 - t_1} = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{0.54 \text{ M} - 1.00 \text{ M}}{20 \text{ s} - 0 \text{ s}} = 2.3 \times 10^{-2} \text{ M/s}$$



# Velocidad de reacción

Cuatro factores afectan en forma determinante la velocidad de una reacción química:

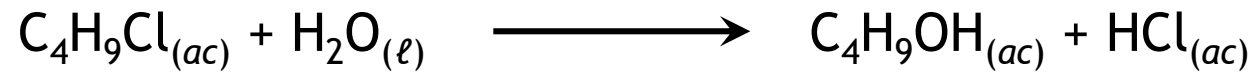
1. **El estado físico de los reactivos.** Los reactivos deben unirse para reaccionar. Cuanto más rápido colisionen las moléculas reactantes unas con otras, más rápido reaccionan. Cuando la reacción está limitada por el área de contacto de los reactivos, tienden a proceder con más velocidad si aumenta el área superficial del sólido.
2. **Concentraciones de los reactivos.** La mayoría de las reacciones químicas ocurren más rápido si aumenta la concentración de uno o más de los reactivos. Conforme aumenta la concentración de los reactivos, se incrementa la frecuencia de las colisiones de las moléculas del reactivo, lo que origina velocidades de reacción mayores.
3. **Temperatura de reacción.** Las velocidades de reacciones químicas aumentan según se incrementa la temperatura. Cuando las moléculas se mueven más rápido, colisionan con más frecuencia y con mayor energía, lo que aumenta las velocidades de reacción.
4. **La presencia de un catalizador.** Los catalizadores son agentes que aumentan las velocidades de reacción sin consumirse. Afectan los tipos de colisiones (y, por lo tanto, alteran el mecanismo), lo que da lugar a la reacción.





# Velocidad de reacción

Ejemplo: el cloruro de butilo ( $C_4H_9Cl$ ) reacciona con el agua para formar alcohol butílico ( $C_4H_9OH$ ) y ácido clorhídrico:



Si se miden las concentraciones del reactivo a distintos tiempos, se puede construir una tabla de datos que ayuda a analizar el comportamiento de la sustancia en la reacción a esas determinadas condiciones, y por lo tanto, evaluar la velocidad entre los distintos intervalos de tiempo.

**TABLA 14.1** • Datos de la velocidad de reacción del  $C_4H_9Cl$  con agua

Tiempo, $t$ (s)	$[C_4H_9Cl](M)$	Velocidad promedio ( $M/s$ )
0.0	0.1000	$1.9 \times 10^{-4}$
50.0	0.0905	$1.7 \times 10^{-4}$
100.0	0.0820	$1.6 \times 10^{-4}$
150.0	0.0741	$1.4 \times 10^{-4}$
200.0	0.0671	$1.22 \times 10^{-4}$
300.0	0.0549	$1.01 \times 10^{-4}$
400.0	0.0448	$0.80 \times 10^{-4}$
500.0	0.0368	$0.560 \times 10^{-4}$
800.0	0.0200	
10,000	0	

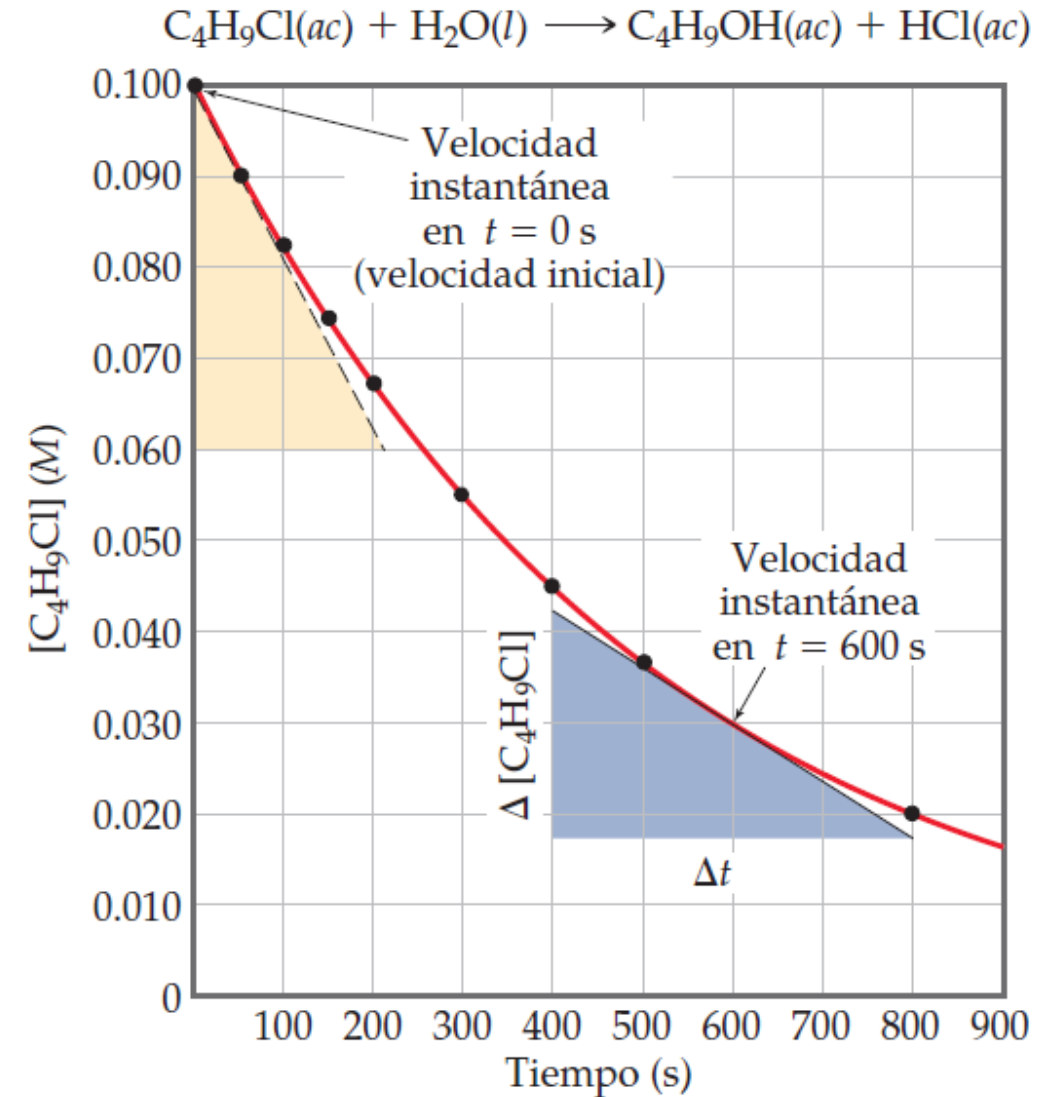


# Velocidad de reacción

Al construir una gráfica con los resultados de la tabla, entre la concentración de  $C_4H_9Cl$  y el tiempo, se observa que la velocidad (pendiente) disminuye a medida que pasa el tiempo.

**TABLA 14.1** • Datos de la velocidad de reacción del  $C_4H_9Cl$  con agua

Tiempo, $t$ (s)	$[C_4H_9Cl]$ (M)	Velocidad promedio (M/s)
0.0	0.1000	
50.0	0.0905	$1.9 \times 10^{-4}$
100.0	0.0820	$1.7 \times 10^{-4}$
150.0	0.0741	$1.6 \times 10^{-4}$
200.0	0.0671	$1.4 \times 10^{-4}$
300.0	0.0549	$1.22 \times 10^{-4}$
400.0	0.0448	$1.01 \times 10^{-4}$
500.0	0.0368	$0.80 \times 10^{-4}$
800.0	0.0200	$0.560 \times 10^{-4}$
10,000	0	





# Velocidad de reacción

La **velocidad instantánea** es la velocidad en un instante en particular de la reacción. Si se quisiera conocer la velocidad instantánea a 600 s, se procede como sigue:

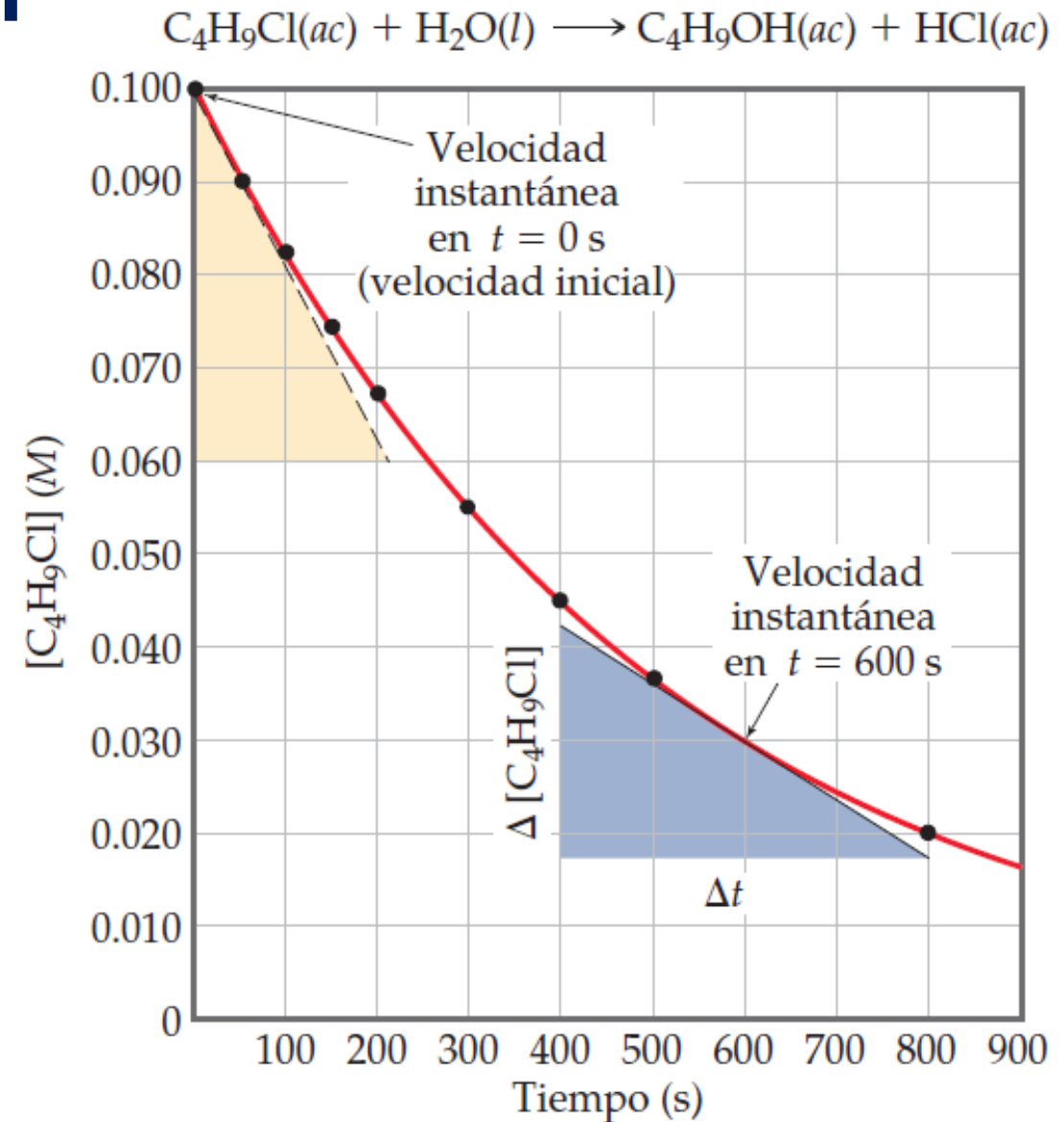
$$\text{Velocidad instantánea} = - \frac{\Delta[\text{C}_4\text{H}_9\text{Cl}]}{\Delta t}$$

$$\text{Velocidad instantánea} = - \frac{(0.020 - 0.045) \text{ M}}{(800 - 400) \text{ s}}$$

$$\text{Velocidad instantánea} = 6.25 \times 10^{-5} \text{ M/s}$$

También se puede usar la interpolación lineal:

$$y = y_0 + \frac{(y_1 - y_0)}{(x_1 - x_0)} * (x - x_0)$$





# Velocidad de reacción y estequiometría

El caso hasta aquí analizado solo contempla reacciones 1:1. Para reacciones con distinta estequiometría, se procede de la siguiente manera, por ejemplo:



En la reacción se observa que por cada mol de B que se forma, desaparecen dos moles de A. La rapidez se puede expresar como:

$$\text{velocidad} = -\frac{1}{2} \frac{\Delta[A]}{\Delta t}$$

$$\text{velocidad} = \frac{\Delta[B]}{\Delta t}$$



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



# Leyes de las Velocidades de reacción

A medida que cambia la concentración de los reactivos a temperatura constante, la velocidad de reacción cambia. La expresión de la **ley de velocidad** de una reacción se escribe para describir la manera en que su velocidad depende de la concentración. Esta ley de velocidad se deduce experimentalmente de cada reacción, para lo cual se estudia la variación de su velocidad con la concentración. La expresión de la ley de velocidad de una reacción en la cual A, B, ... son los reactivos que tiene la forma general:



$$\text{velocidad} = k[A]^x[B]^y \dots$$

Los valores  $x$  e  $y$  suelen ser enteros pequeños o cero. Representan el **orden de reacción** respecto a ese reactivo.

La constante  $k$  recibe el nombre de **constante de velocidad específica** (o sólo constante de velocidad) de la reacción a una temperatura en particular. Los valores de los exponentes,  $x$ ,  $y$ , y de la constante,  $k$ , no necesariamente tienen relación con los coeficientes de la ecuación química balanceada de la reacción global, y deben determinarse por medios experimentales.





# Leyes de las Velocidades de reacción



$$velocidad = k[A]^x[B]^y \dots$$

Los valores  $x$  e  $y$  suelen ser enteros pequeños o cero. Representan el **orden de reacción** respecto a ese reactivo.

Una potencia de **uno** significa que la velocidad es directamente proporcional a la concentración de ese reactivo.

Una potencia de **dos** significa que la velocidad es directamente proporcional al *cuadrado* de esa concentración.

Una potencia de **cero** significa que la velocidad no depende de la concentración de ese reactivo, *siempre que algo de reactivo este presente*.

Se dice que el valor de  $x$  es el orden de reacción respecto de A y que  $y$  es el orden de reacción respecto de B. El **orden de la reacción global** es la suma del orden de los reactivos,  $x + y$ .

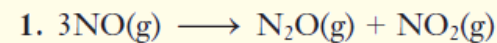


# Leyes de las Velocidades de reacción

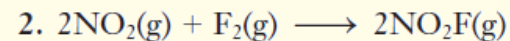
Los siguientes puntos resumen el estudio de la ley de rapidez o ley de velocidad:

1. Las leyes de la rapidez siempre se determinan en forma experimental. A partir de las concentraciones de los reactivos y de la rapidez inicial es posible determinar el orden de una reacción y, por tanto, la constante de rapidez de la reacción.
2. El orden de una reacción siempre se define en términos de las concentraciones de los reactivos (no de los productos).
3. El orden de un reactivo no está relacionado con el coeficiente estequiométrico del reactivo en la reacción global balanceada.

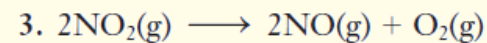
Ejemplos de reacciones químicas y sus órdenes de reacción:



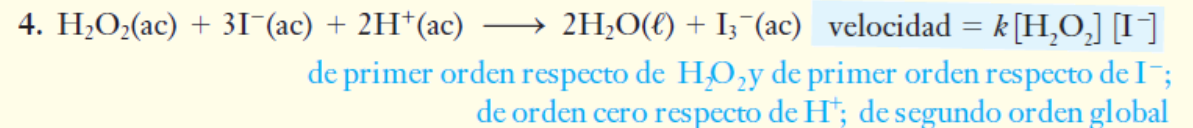
velocidad =  $k[\text{NO}]^2$   
de segundo orden respecto del NO;  
de segundo orden global



velocidad =  $k[\text{NO}_2][\text{F}_2]$   
de primer orden respecto de  $\text{NO}_2$  y de primer  
orden respecto de  $\text{F}_2$ ; de segundo orden global



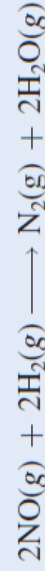
velocidad =  $k[\text{NO}_2]^2$   
de segundo orden respecto de  $\text{NO}_2$ ;  
de segundo orden global



velocidad =  $k[\text{H}_2\text{O}_2][\text{I}^-]$   
de primer orden respecto de  $\text{H}_2\text{O}_2$  y de primer orden respecto de  $\text{I}^-$ ;  
de orden cero respecto de  $\text{H}^+$ ; de segundo orden global

### EJEMPLO 13.3

La reacción del óxido nítrico con hidrógeno a 1280°C es



A partir de los siguientes datos, medidos a dicha temperatura, determine: *a*) la ley de rapidez, *b*) su constante de rapidez y *c*) la rapidez de la reacción cuando  $[\text{NO}] = 12.0 \times 10^{-3} M$  y  $[\text{H}_2] = 6.0 \times 10^{-3} M$ .

Experimento	$[\text{NO}] (M)$	$[\text{H}_2] (M)$	Rapidez inicial (M/s)
1	$5.0 \times 10^{-3}$	$2.0 \times 10^{-3}$	$1.3 \times 10^{-5}$
2	$10.0 \times 10^{-3}$	$2.0 \times 10^{-3}$	$5.0 \times 10^{-5}$
3	$10.0 \times 10^{-3}$	$4.0 \times 10^{-3}$	$10.0 \times 10^{-5}$

**Estrategia** Se tiene un conjunto de datos de rapidez de reacción y de concentración y se pide que se determine la ley de rapidez y la constante de rapidez. Se supone que la ley de rapidez tiene la forma de

$$\text{rapidez} = k[\text{NO}]^x[\text{H}_2]^y$$

¿Cómo utilizamos estos datos para determinar  $x$  y  $y$ ? Una vez que se conoce el orden para los reactivos, podemos calcular  $k$  a partir de cualquier conjunto de rapidez y concentraciones. Finalmente, la ley de rapidez permite calcular la rapidez a cualquier concentración de NO y H<sub>2</sub>.

**Solución a)** Los experimentos 1 y 2 muestran que cuando se duplica la concentración de NO a una concentración constante de H<sub>2</sub>, la rapidez se cuadruplica. Si se toma la proporción de las rapidez a partir de estos dos experimentos

$$\frac{\text{rapidez}_2}{\text{rapidez}_1} = \frac{5.0 \times 10^{-5} M/s}{1.3 \times 10^{-5} M/s} \approx 4 = \frac{k(10.0 \times 10^{-3} M)^x(2.0 \times 10^{-3} M)^y}{k(5.0 \times 10^{-3} M)^x(2.0 \times 10^{-3} M)^y}$$

Por tanto,

$$\frac{(10.0 \times 10^{-3} M)^x}{(5.0 \times 10^{-3} M)^x} = 2^x = 4$$

o  $x = 2$ , es decir, la reacción es de segundo orden con respecto al NO. Los experimentos 2 y 3 indican que al duplicar [H<sub>2</sub>] a [NO] constante se duplica la rapidez. Aquí escribimos la relación como

$$\frac{\text{rapidez}_3}{\text{rapidez}_2} = \frac{10.0 \times 10^{-5} M/s}{5.0 \times 10^{-5} M/s} = 2 = \frac{k(10.0 \times 10^{-3} M)^x(4.0 \times 10^{-3} M)^y}{k(10.0 \times 10^{-3} M)^x(2.0 \times 10^{-3} M)^y}$$

Por tanto,

$$\frac{(4.0 \times 10^{-3} M)^y}{(2.0 \times 10^{-3} M)^y} = 2^y = 2$$

o  $y = 1$ , es decir, la reacción es de primer orden en H<sub>2</sub>. Por tanto, la ley de rapidez está dada por

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

lo que muestra que es una reacción de tipo (2 + 1) o de tercer orden global.

*b)* La constante de rapidez  $k$  se calcula utilizando los valores de cualquiera de los experimentos. Reacomodando la ley de rapidez, obtenemos

$$k = \frac{\text{rapidez}}{[\text{NO}]^2[\text{H}_2]}$$



# Leyes de las Velocidades de reacción

Los datos del experimento 2 dan como resultado

$$\begin{aligned}k &= \frac{5.0 \times 10^{-5} \text{ M/s}}{(10.0 \times 10^{-3} \text{ M})^2(2.0 \times 10^{-3} \text{ M})} \\ &= 2.5 \times 10^2 / \text{M}^2 \cdot \text{s}\end{aligned}$$

c) Utilizando la constante de rapidez conocida y las concentraciones de NO y H<sub>2</sub>, escribimos

$$\begin{aligned}\text{rapidez} &= (2.5 \times 10^2 / \text{M}^2 \cdot \text{s})(12.0 \times 10^{-3} \text{ M})^2(6.0 \times 10^{-3} \text{ M}) \\ &= 2.2 \times 10^{-4} \text{ M/s}\end{aligned}$$

**Comentario** Observe que la reacción es de primer orden en relación con H<sub>2</sub>, a pesar de que el coeficiente estequiométrico de H<sub>2</sub> en la ecuación balanceada es 2. El orden de un reactivo no está relacionado con el coeficiente estequiométrico del reactivo en la ecuación global balanceada.



# Ley de las Velocidades de reacción

De la constante de velocidad específica,  $k$ , se debe decir que:

1. Una vez que se conoce el orden de reacción, los datos experimentales deben usarse para determinar el valor de  $k$  de la reacción en condiciones adecuadas.
2. El valor que se determina corresponde a una reacción específica, representada por la ecuación balanceada.
3. Las unidades de  $k$  dependen del orden global de la reacción.
4. El valor que se determina no cambia con la concentración de los reactivos o productos.
5. El valor que se determina no cambia con el tiempo.
6. El valor que se determina corresponde a la reacción a una temperatura en particular y varía si cambia la temperatura.
7. El valor que se determina depende de la presencia de un catalizador.

La constante de velocidad  $k$  tiene unidades de  $1/s$  o  $s^{-1}$





# Relación de la concentración y el tiempo

$$\text{velocidad} = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t} \quad \text{velocidad} = k[A]$$

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

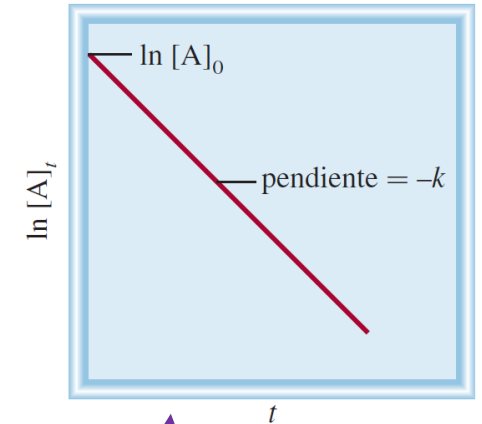
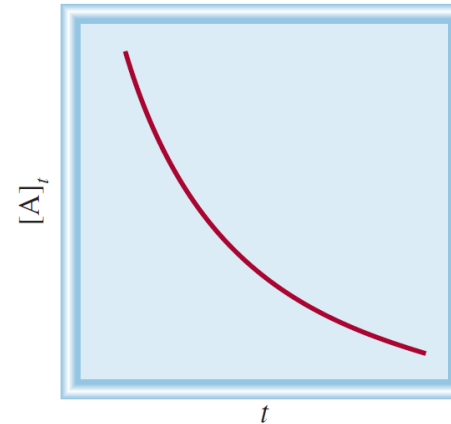
Cálculo

$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = -kt$$

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

$$y = m x + b$$

Ecuación para una línea recta



Para una reacción de primer orden, se obtiene una línea recta al graficar  $\ln[A]_t$  vs tiempo.



# Relación de la concentración y el tiempo

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

$$PV = n_A RT$$

$$\frac{n_A}{V} = [A] = \frac{P}{RT}$$

$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = \ln \frac{P_t/RT}{P_0/RT} = \ln \frac{P_t}{P_0} = -kt$$

$$\ln P_t = (-k)(t) + \ln P_0$$

Para una **reacción de primer orden** en la que se tienen reactivos gaseosos, las concentraciones molares se reemplazan por la presión  $P_0$  y  $P_t$  del gas



# Vida media

A medida que procede una reacción, la concentración del reactivo o de los reactivos disminuye. Otra medición de la rapidez de una reacción, que se relaciona con la concentración y el tiempo, es la **vida media** ( $t_{1/2}$ ) que es el tiempo requerido para que la concentración de un reactivo disminuya a la mitad de su valor inicial.

$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = -kt \longrightarrow \frac{1}{k} \ln \frac{[A]_0}{[A]_t} = t$$

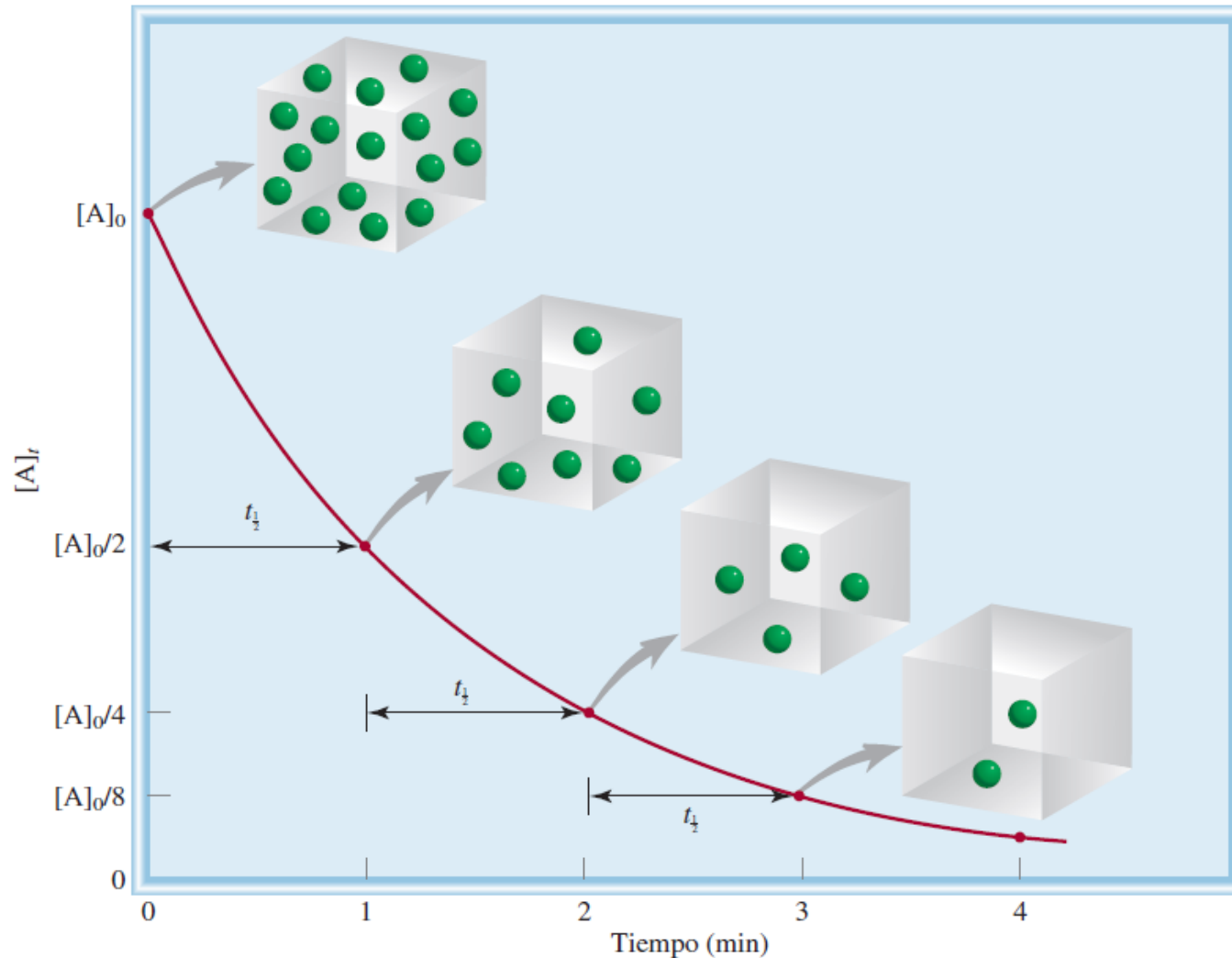
$$t_{1/2} = \frac{1}{k} \ln \frac{[A]_0}{[A]_0/2} \longrightarrow t_{1/2} = \frac{1}{k} \ln 2$$

$$t_{1/2} = \frac{0.693}{k}$$

Para una **reacción de primer orden**, la vida media de un reactivo es independiente de la concentración del reactivo. Toma el mismo tiempo para que la concentración disminuya a la mitad desde 1.0 M o desde 0.5 M.



# Vida media



Gráfica de  $[A]_t$  con respecto del tiempo para la reacción de primer orden  $A \rightarrow \text{productos}$ .

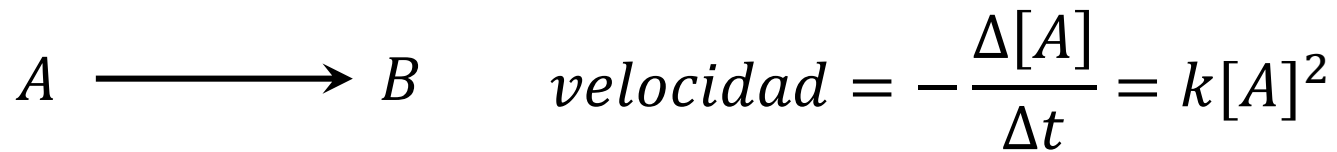
La vida media de la reacción es de 1 min. Cada vez que transcurre una vida media, la concentración de A se divide a la mitad.



# Relación de la concentración y el tiempo

## Reacciones de segundo orden

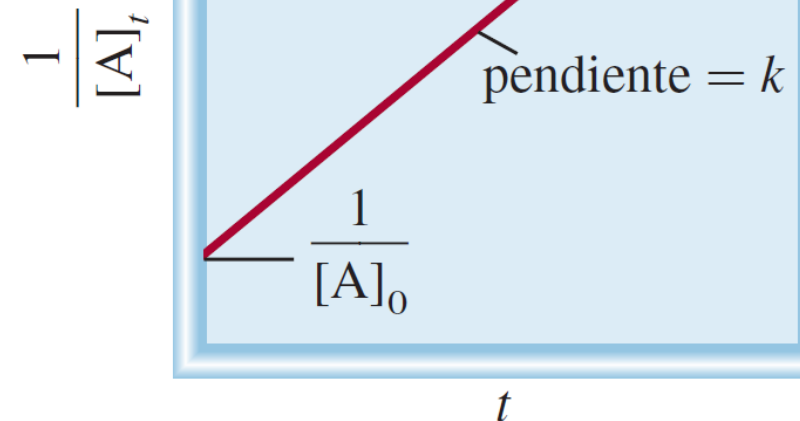
Una **reacción de segundo orden** es una reacción cuya rapidez depende de la concentración de uno de los reactivos elevada a la segunda potencia o de la concentración de dos reactivos diferentes, cada uno elevado a la primera potencia. El tipo más sencillo comprende sólo una clase de molécula como reactivo:



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

$$y = m x + b$$

↙ Cálculo







# Vida media

## Reacciones de segundo orden

La deducción de la ecuación de la vida media para una reacción de segundo orden es:

$$\frac{1}{[A]_t} = (k)(t) + \frac{1}{[A]_0} \qquad \frac{1}{[A]_0/2} = kt_{1/2} + \frac{1}{[A]_0}$$

Al despejar  $t_{1/2}$ , se tiene:

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

Para una **reacción de segundo orden**, la vida media es inversamente proporcional a la concentración inicial del reactivo.

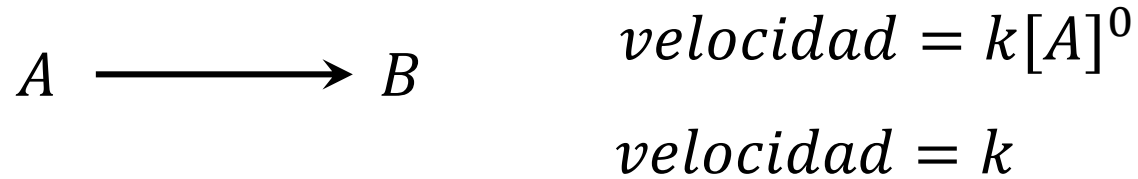
Realizar mediciones de la vida media a diferentes concentraciones iniciales es una forma de distinguir entre una reacción de primer orden y una de segundo orden.



# Relación de la concentración y el tiempo

## Reacciones de orden cero

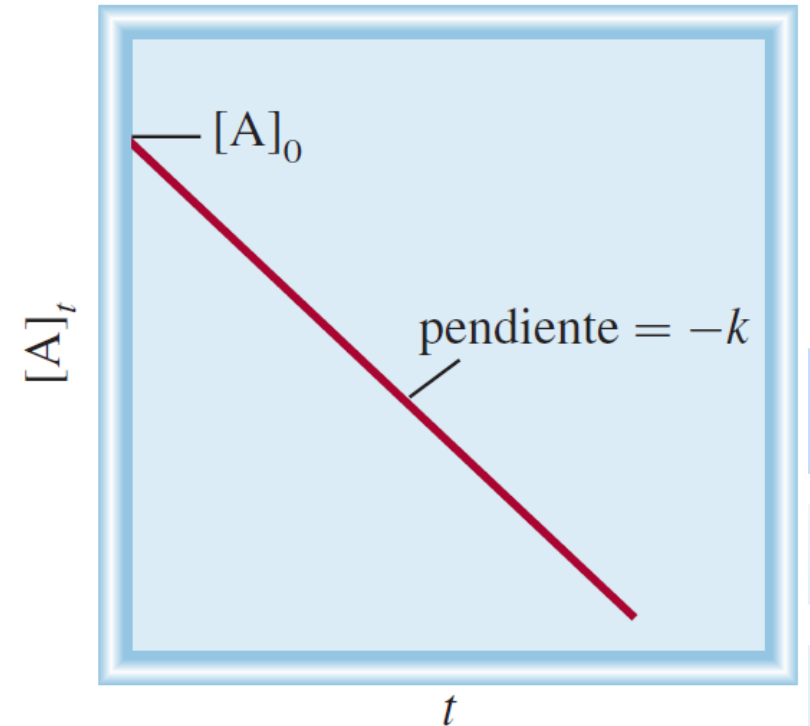
Las reacciones de primero y de segundo orden son los tipos de reacciones más conocidas. Las reacciones de orden cero son poco comunes. Para una reacción de orden cero



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

$y = mx + b$

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





# Relación de la concentración y el tiempo

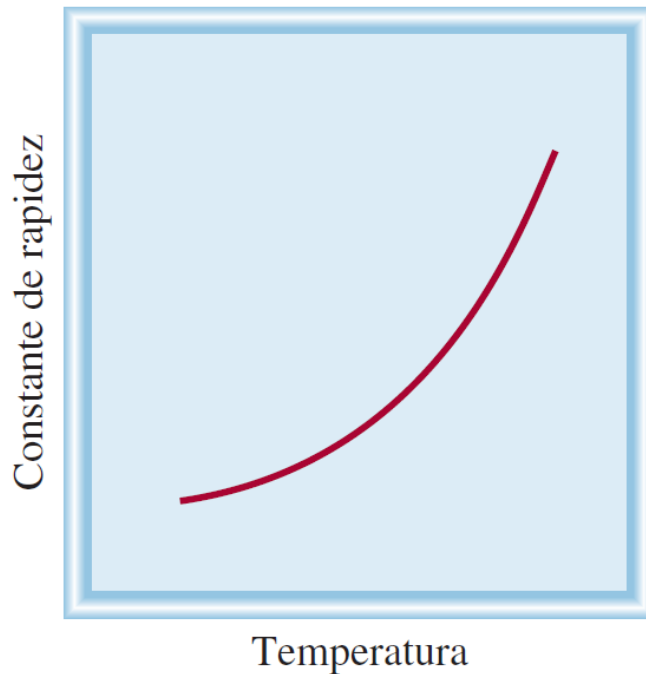
**TABLA 13.3** Resumen de la cinética de las reacciones de orden cero, de primero y de segundo orden

Orden	Ley de rapidez	Ecuación de tiempo vs. concentración	Vida media
0	rapidez = $k$	$[A]_t = -kt + [A]_0$	$\frac{[A]_0}{2k}$
1	rapidez = $k[A]$	$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = -kt$	$\frac{0.693}{k}$
2 <sup>†</sup>	rapidez = $k[A]^2$	$\frac{1}{[A]_t} = kt + \frac{1}{[A]_0}$	$\frac{1}{k[A]_0}$

<sup>†</sup> A  $\longrightarrow$  producto.

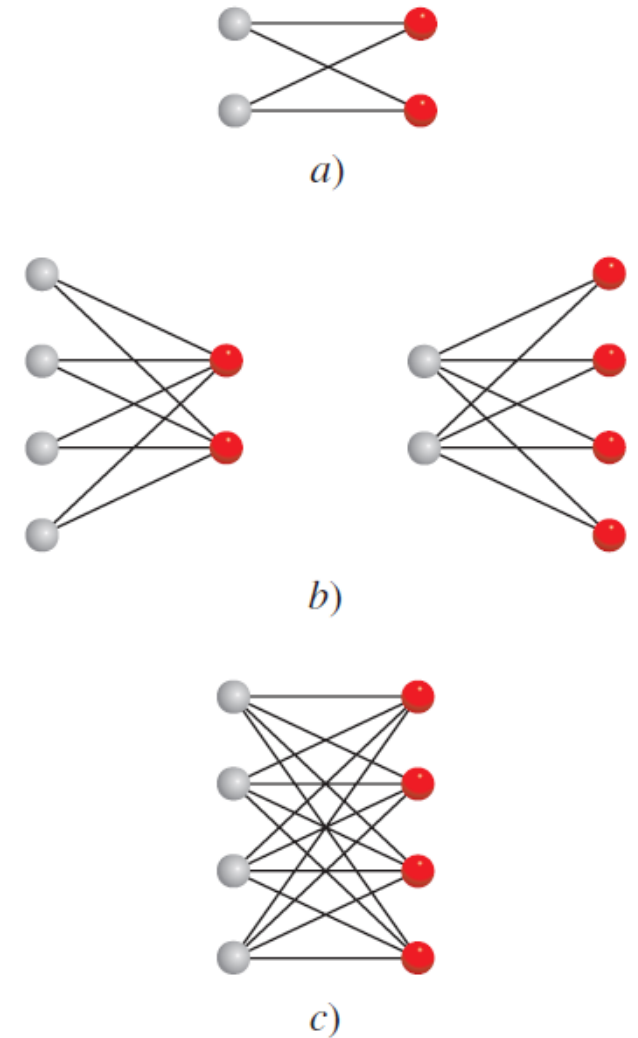


# Velocidad de reacción y temperatura



Con muy pocas excepciones, la rapidez de las reacciones aumenta al incrementar la temperatura. Dado que para que se lleve a cabo una reacción química las partículas de los reactivos deben estar en contacto, se puede relacionar la velocidad de la reacción con el número de colisiones moleculares por segundo.

Cualquier molécula en movimiento posee energía cinética; cuanto más rápido se mueve, su energía cinética es mayor (teoría cinética molecular).



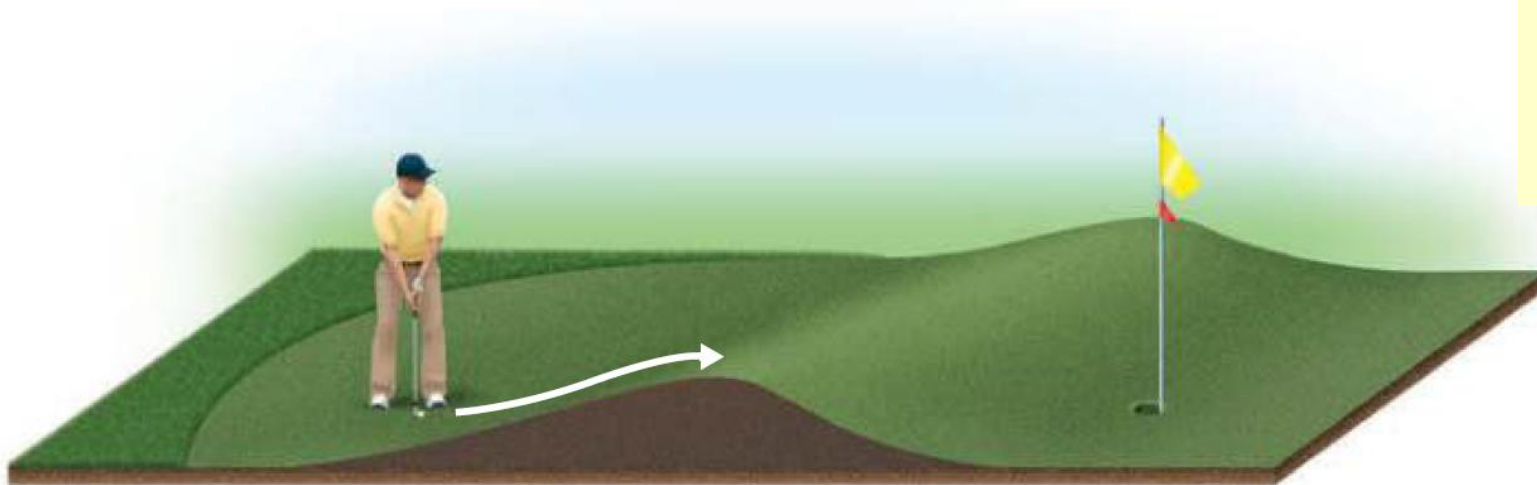


# Energía de activación

Para que una reacción se efectúe, una molécula de reactivo A debe chocar y romperse con una molécula de reactivo B, a una energía mínima determinada. Esta energía se denomina **energía de activación** ( $E_a$ ). Si no está presente esta energía, las moléculas permanecen intactas y no habrá cambios por la colisión.



La energía de activación es como una barrera que evita que reaccionen las moléculas menos energéticas

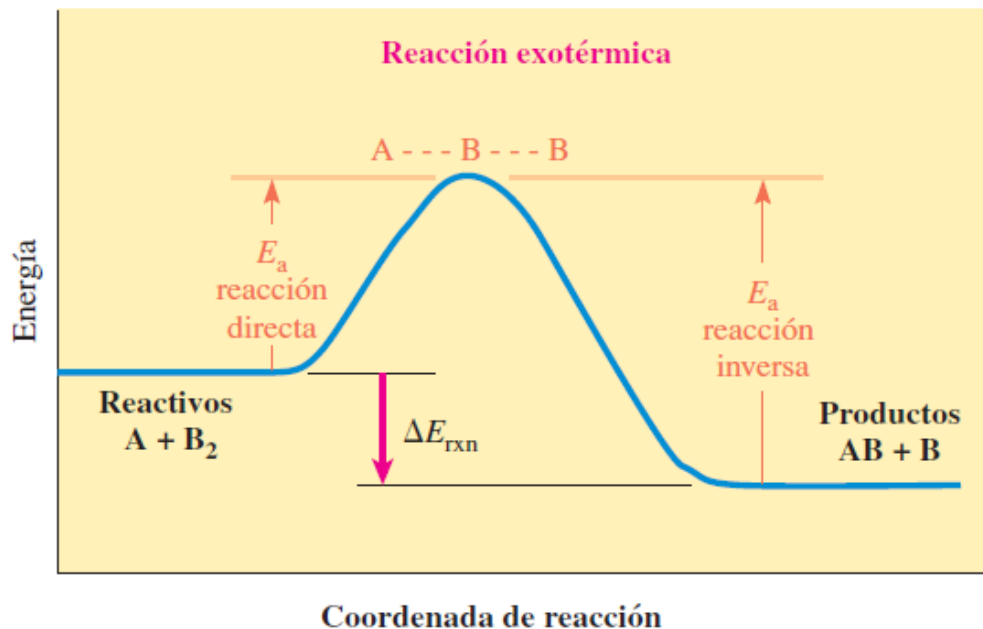




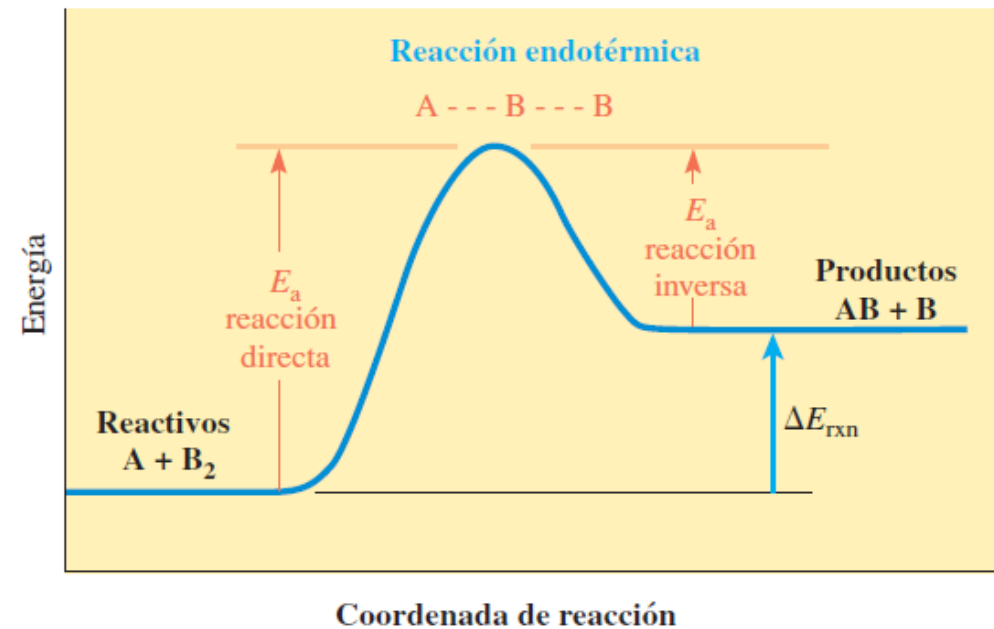
# Energía de activación

Las moléculas que chocan deben tener energía cinética total igual o mayor que la energía de activación ( $E_a$ ). Cuando las moléculas chocan, forman un complejo activado (también denominado **estado de transición**), que es una especie transitoria con alta energía potencial formada por las moléculas de los reactivos como resultado de una colisión, antes de que formen el producto.

**Reacción exotérmica**  
(productos más estables)



**Reacción endotérmica**  
(productos menos estables)





# Velocidad de reacción y temperatura

## Ecuación de Arrhenius

La dependencia de la constante de rapidez de una reacción con respecto de la temperatura se expresa mediante la siguiente ecuación, conocida como la **ecuación de Arrhenius**:

$$k = Ae^{-E_a/RT}$$

$E_a$ : Energía de activación (kJ/mol)

$R$ : Constante de los gases (8,314 J/mol K)

$T$ : Temperatura absoluta (K)

$A$ : Factor de frecuencia

La función inversa del logaritmo natural ( $\ln$ ) está dada por el número de Euler, ( $e^x$ )

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

$$\ln k = \left( -\frac{E_a}{R} \right) \left( \frac{1}{T} \right) + \ln A$$

$$y = m x + b$$



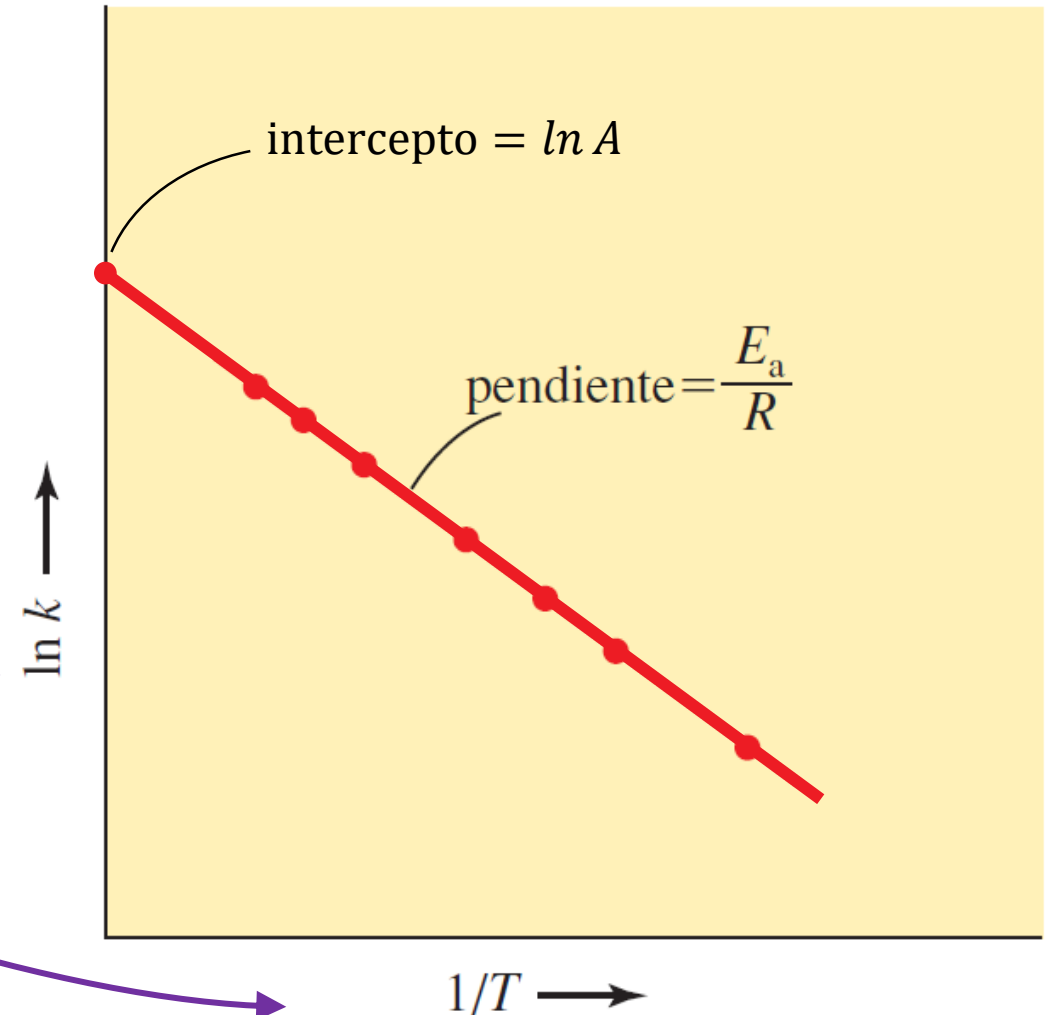


# Ecuación de Arrhenius

La **ecuación de Arrhenius** sirve para determinar la energía de activación de una reacción específica a una temperatura dada. Se debe construir una tabla de valores de  $k$  y  $T$ , se busca  $\ln k$  y  $1/T$ , se grafican los resultados y se hace la **regresión lineal** para poder determinar  $E_a$  (de la pendiente) y  $\ln A$  (del intercepto).

$T$	$k$	$1/T$	$\ln k$
$x_1$	$y_1$		
$x_2$	$y_2$		
$x_3$	$y_3$		

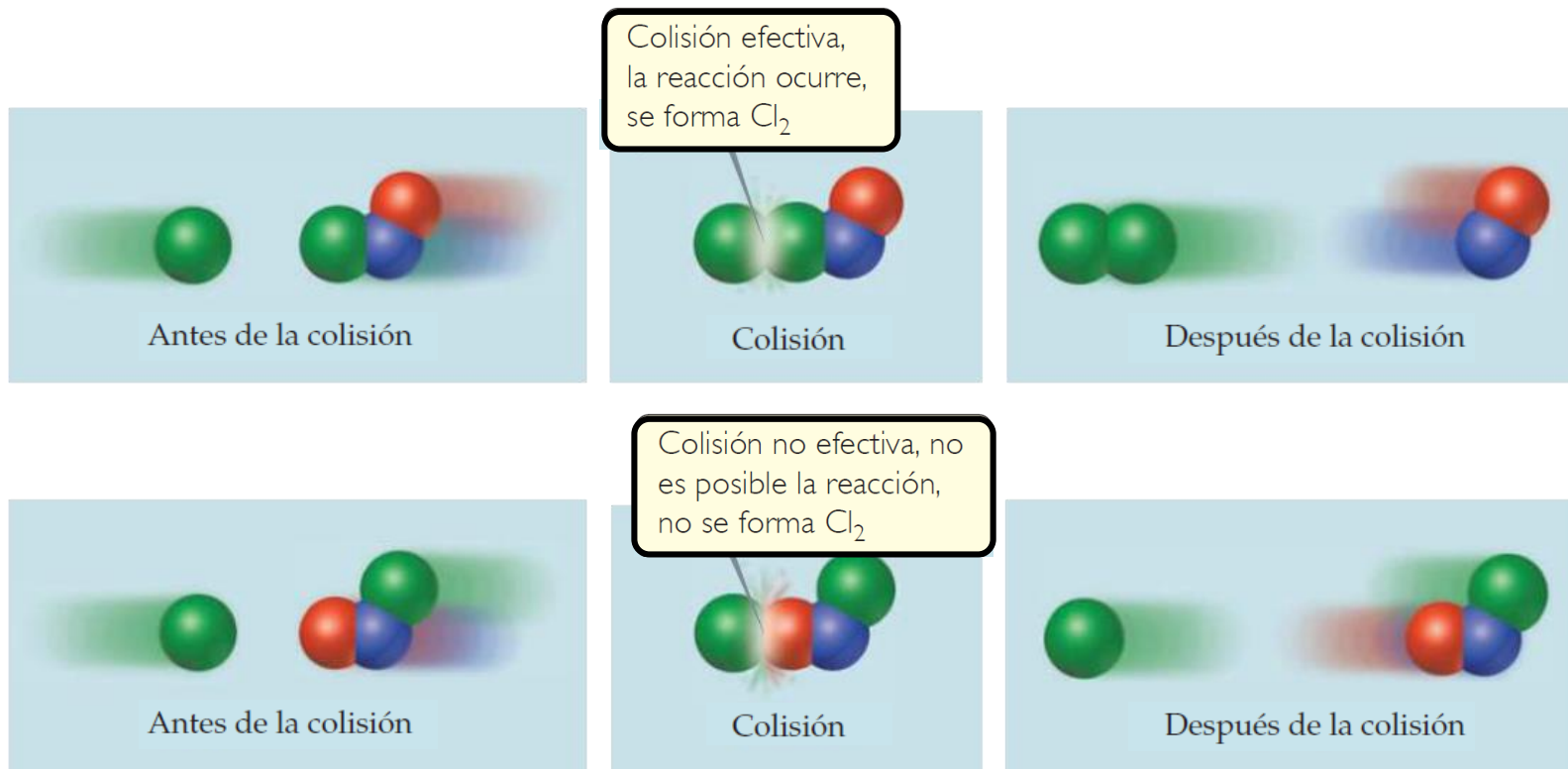
$$\ln k = \left( -\frac{E_a}{R} \right) \left( \frac{1}{T} \right) + \ln A$$



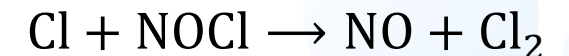


# Modelo de colisiones

El **modelo de colisiones**, basado en la teoría cinética molecular, explica el efecto de la concentración y la temperatura en la velocidad de reacción. Se fundamenta en que las moléculas deben chocar para que reaccionen. Cuanto mayor sea el número de colisiones por segundo, mayor será la velocidad de reacción.



Por lo tanto, conforme aumenta la concentración de las moléculas del reactivo, se incrementa el número de colisiones, lo que da lugar a un incremento en la velocidad de reacción.

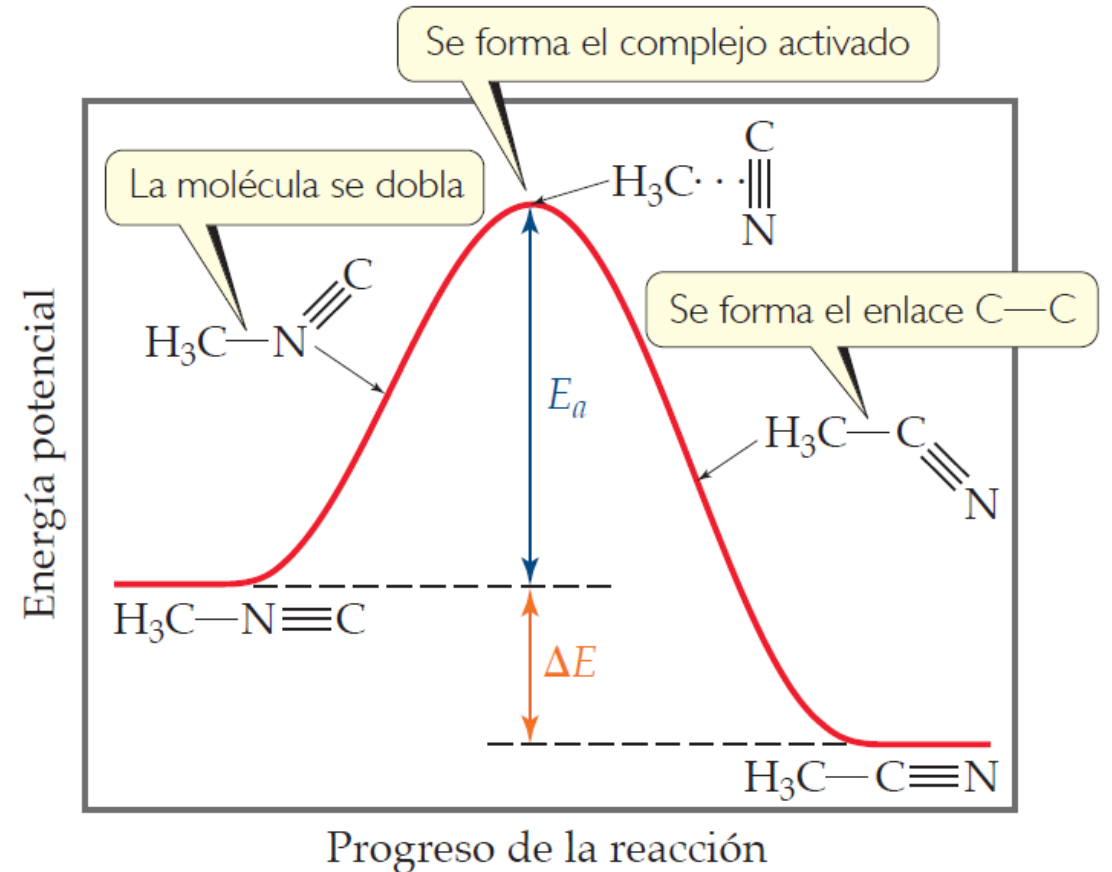
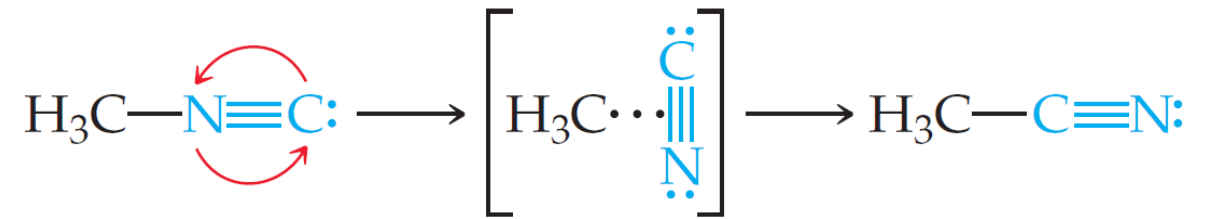




# Mecanismos de reacción

Una ecuación química balanceada indica las sustancias presentes al inicio de la reacción y aquellas presentes al final de la misma. Sin embargo, no brinda información sobre el detallado proceso que ocurre a nivel molecular conforme los reactivos se transforman en productos.

Al proceso mediante el cual una reacción ocurre se le conoce como **mecanismo de reacción** y describe con gran detalle el orden en que se rompen y se forman los enlaces, así como los cambios en las posiciones relativas de los átomos en el transcurso de la reacción.



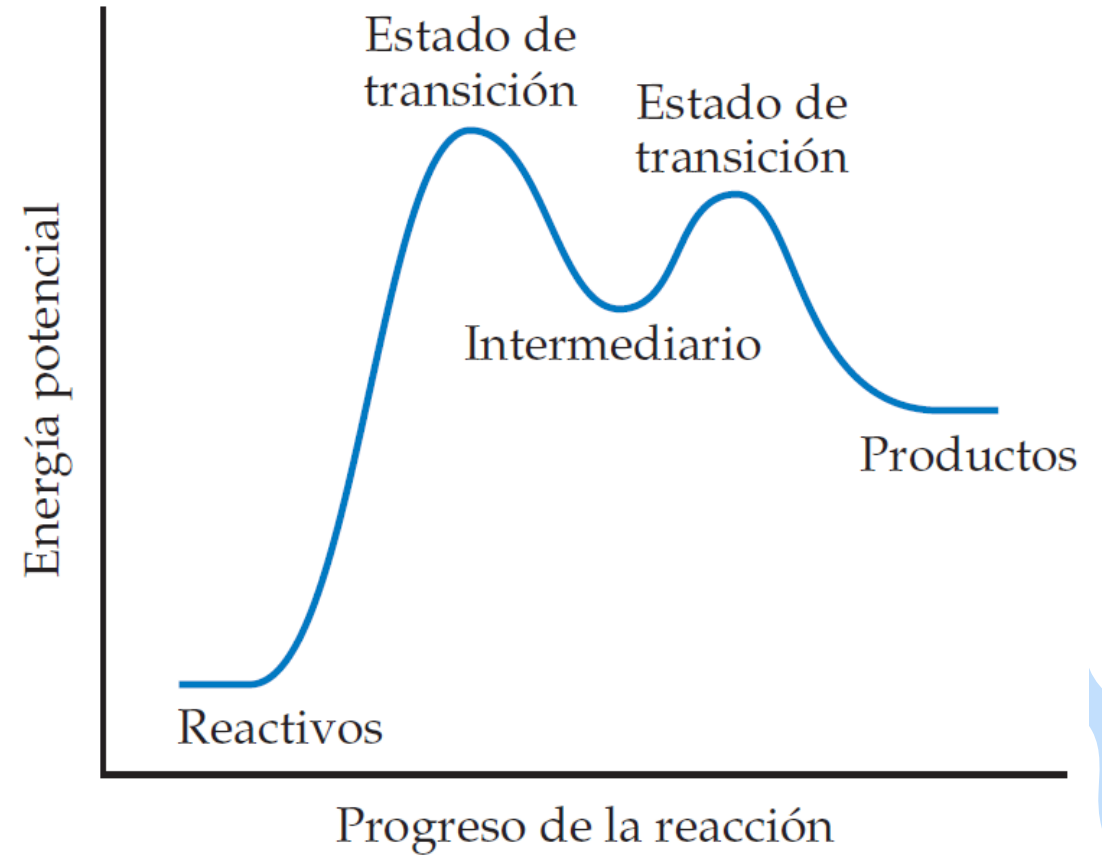


# Mecanismos de reacción

Teniendo en cuenta que una reacción química puede ocurrir en varias etapas con diferentes estados de transición, se pueden tener varios estados intermedios con distintas energías. Esto ayuda a ver la evolución de la energía en reacciones secuenciales.

El número de moléculas que participan como reactivos en una reacción define la **molecularidad** de la misma.

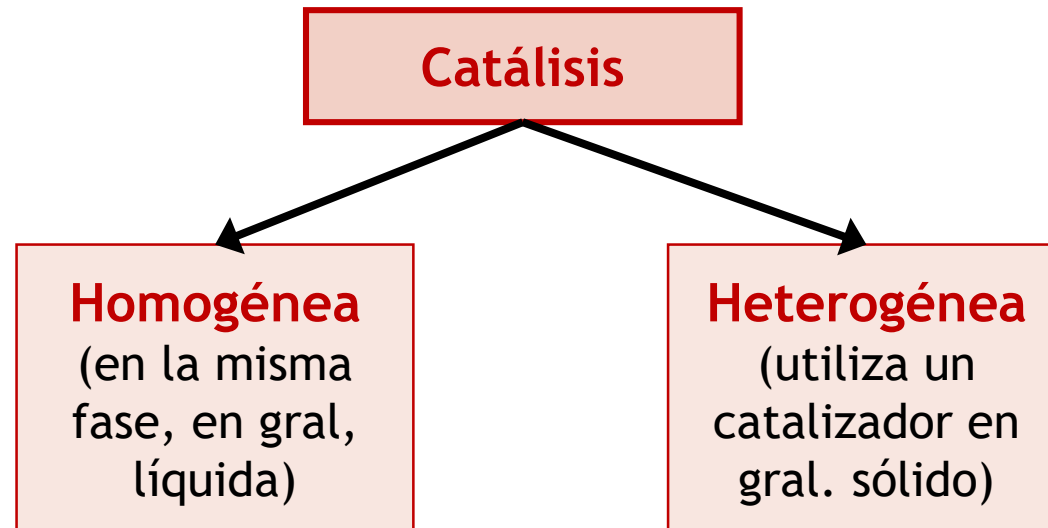
- Si solo hay una molécula implicada, la reacción es **unimolecular**.
- Las reacciones que implican la colisión de moléculas de dos reactivos son **bimoleculares**.
- Las reacciones que comprenden la colisión simultánea de tres moléculas son **termoleculares**.





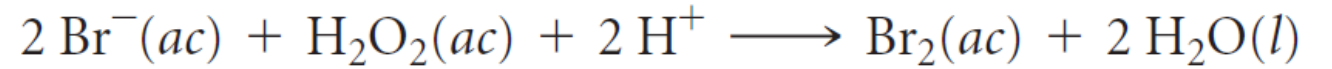
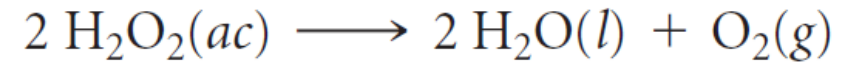
# Catalizadores

Los **catalizadores** son sustancias que pueden agregarse a los sistemas de reacción para incrementar la velocidad de reacción, lo que permite que las reacciones tengan lugar a través de trayectorias alternativas en las que se incrementa la velocidad de reacción y se disminuye la energía de activación. Los catalizadores no participan en la formación de los productos como reactivos, sino que son sustancias que ayudan a que la reacción se lleve a cabo con mayor facilidad.

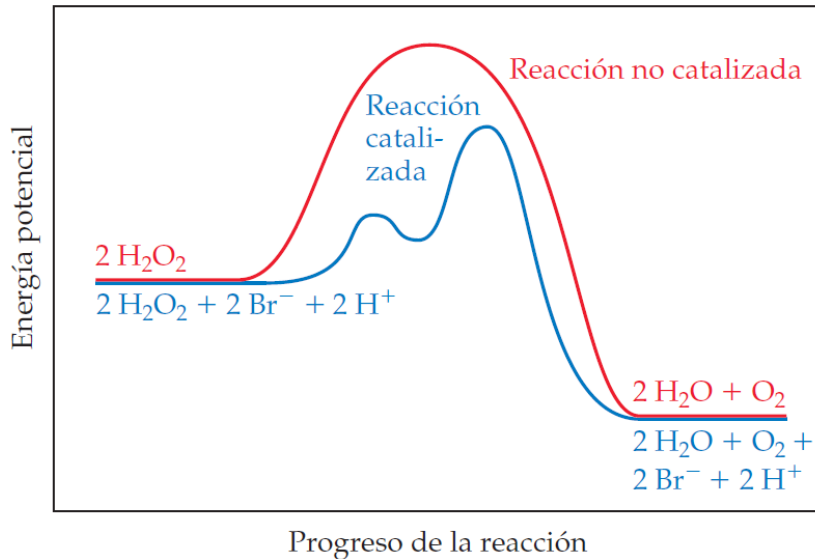




# Catalizadores



La descomposición del peróxido de hidrógeno por los iones bromuro es un ejemplo de **catálisis homogénea** (al final del proceso los componentes quedan en una sola fase).



Secuencia de tres fotografías que muestran el progreso de la reacción en un tubo de ensayo:

- Foto 1:** Se muestra la adición del catalizador  $\text{NaBr}$  a la mezcla de reacción. El líquido es incoloro.
- Foto 2:** Se muestra la formación de una solución amarilla-anaranjada, indicando la presencia de  $\text{H}_2\text{O}_2(ac)$  en disolución ácida.
- Foto 3:** Se muestra la reacción completada, con una solución incolora.

Diagramas moleculares debajo de cada foto:

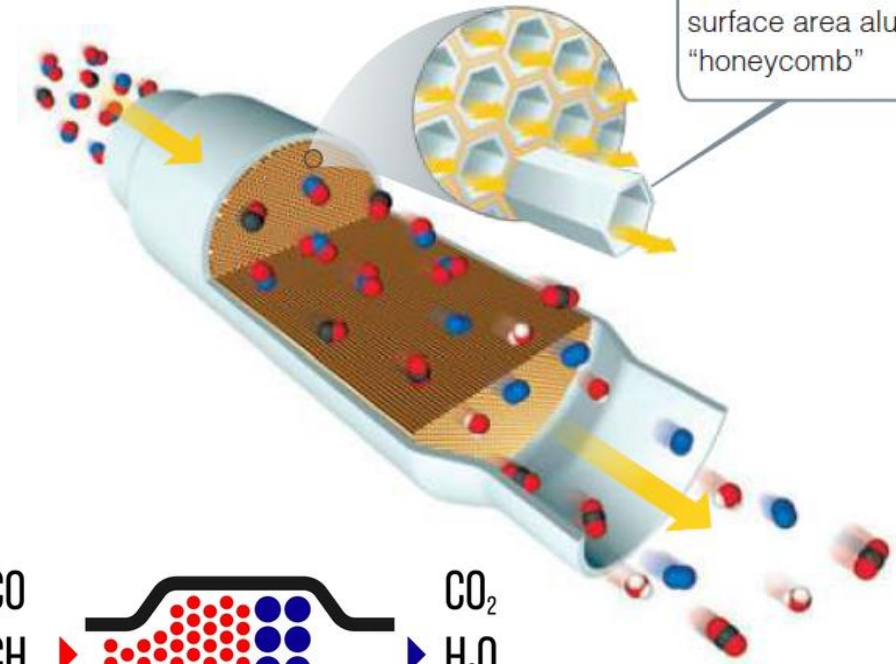
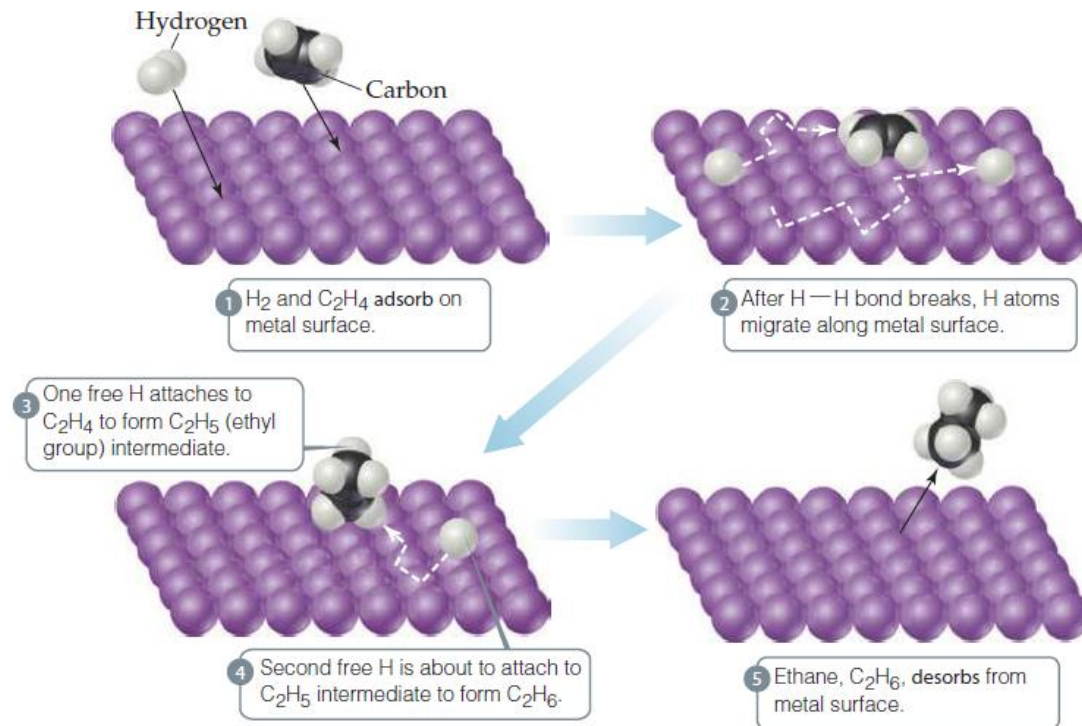
- Diagrama 1:** Muestra moléculas de  $\text{H}_2\text{O}_2$  (dos átomos de hidrógeno en rojo y dos de oxígeno en blanco).
- Diagrama 2:** Muestra moléculas de  $\text{H}_2\text{O}_2$  y iones  $\text{Br}^-$  (un átomo de bromo en verde).
- Diagrama 3:** Muestra moléculas de  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{O}_2$ , así como iones  $\text{Br}^-$  y  $\text{H}^+$  (un átomo de hidrógeno en blanco).



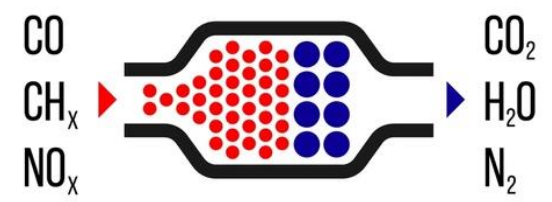


# Catalizadores

La transformación de los gases de combustión de un auto por un convertidor es un ejemplo de **catálisis heterogénea** (el catalizador y los reactivos están en diferente fase).



Metal catalyst impregnated on high surface area alumina "honeycomb"



¿Qué tipo de sistema es un convertidor catalítico?  
¿Qué variables pueden afectar este sistema?





# Visualización de conceptos

- Calcular  $1/T$  y  $\ln K$
- Determinar  $E_a$  (pendiente) y  $\ln A$  (intercepto)
- Identificar gráficamente los componentes de la función dibujada.

