

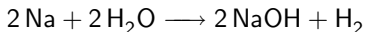
Química 2n de Batxillerat

Cinètica química

Novembre de 2010

Experimentalment s'observa que algunes reaccions tenen lloc molt ràpidament i altres molt lentament:

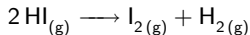
- Un tros de ferro exposat a l'atmosfera reacciona molt lentament amb l'aire.
- En canvi la reacció del sodi amb aigua és molt ràpida i molt exotèrmica.



La cinètica química estudia la velocitat de les reaccions químiques i els factors dels quals depèn.

Velocitat de reacció (I)

Considerem la reacció de descomposició del HI representada per la següent equació química:



Si volem definir la velocitat de la reacció d'alguna manera convenient, sembla raonable que ho haurem de fer a partir de la velocitat a que desapareixen els reactius i de la que apareixen els productes. Aquestes velocitats són:

$$v(\text{HI}) = -\frac{\Delta [\text{HI}]}{\Delta t}; v(\text{I}_2) = \frac{\Delta [\text{I}_2]}{\Delta t}; v(\text{H}_2) = \frac{\Delta [\text{H}_2]}{\Delta t}$$

Ara bé, degut als diferents valors dels coeficients estequiomètrics aquestes velocitats no tenen perquè ser iguals. En l'exemple que estem estudiant per cada dos mols de iodur d'hidrogen que desapareixen, apareix un mol de iode i un mol d'hidrogen. Per tant la velocitat de desaparició del iodur és el doble que la d'aparició del iode i de l'hidrogen:

$$\frac{v(\text{HI})}{2} = -v(\text{I}_2) = -v(\text{H}_2)$$

Velocitat de reacció (II)

Per tant, el problema és com definir la velocitat de reacció de forma única. Per una reacció general de la forma



la IUPAC (International Union of Pure Applied Chemistry) proposa definir la velocitat de reacció per un procés que té lloc en un sistema tancat i a volum constant com:

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

Les unitats de la velocitat de reacció són, per tant, $\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3 \cdot \text{s}}$.

Com a exercici escriu aquesta relació per a l'exemple inicial de la reacció del iodur d'hidrogen.

Equació de la velocitat de reacció

Per a una reacció genèrica:



hi ha una relació entre la velocitat de reacció i les molaritats dels reactius que es coneix com equació de la velocitat i és :

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

- k és l'anomenada constant de la velocitat de reacció que depèn de la temperatura.
- Les molaritats dels reactius s'indiquen com sempre per $[A]$ i $[B]$.
- Els nombres m i n reben el nom d'ordres de reacció respecte als reactius A i B respectivament (també ordres parcials). Aquests nombres no són necessàriament iguals als coeficients estequiomètrics excepte en reaccions elementals (veure més endavant el mecanisme de reacció).
- La suma dels ordres de reacció respecte a cadascun dels reactius s'anomena ordre total de reacció. En aquest cas seria $m + n$.

Reaccions químiques. Energia d'activació (I)

Recordatori:

- Les partícules (àtoms, molècules o ions) que formen les substàncies que reaccionen es mouen.
- En els gasos la llibertat de moviment és molt gran, en els líquids menor i en els sòlids molt menor, però tot i així en els sòlids les partícules poden vibrar al voltant de posicions fixes.
- La velocitat mitjana de les partícules d'un gas depèn de la temperatura del cos, però a una mateixa temperatura els valors de les velocitats de les partícules presenten una certa dispersió respecte al valor mitjà. És a dir no totes es mouen a la mateixa velocitat.

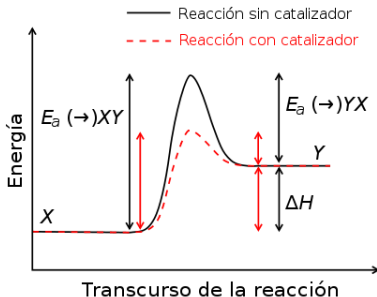
Cal que les partícules xoquin

Perquè es produeixi una reacció química és condició necessària, però no suficient, que les partícules que reaccionen xoquin les unes amb les altres.

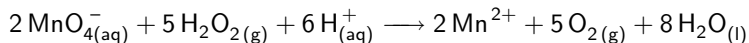
Reaccions químiques. Energia d'activació (II)

Degut al fet que no totes les partícules es mouen a la mateixa velocitat, no tots els xocs entre partícules donen lloc a una reacció química. Perquè això passi, és necessari que les partícules que xoquen tinguin un mínim d'energia, que rep el nom d'**energia d'activació**, i aleshores parlem de **xoc eficaç**.

Si a temperatura ambient l'energia d'activació d'una reacció és molt alta, la reacció serà molt lenta, encara que sigui espontània.



Mecanisme d'una reacció



Tenint en compte el model dels xocs moleculars presentat en aquest tema, perquè aquesta reacció es produís caldria que xoquessin a la vegada 13 partícules. Aquesta circumstància és molt improbable que es doni, però la reacció té lloc a gran velocitat.

Es pensa que les reaccions químiques complicades tenen lloc a través d'una sèria de reaccions més senzilles. Aquesta sèrie de reaccions reben el nom de **mecanisme de reacció**.

Factors que influeixen en la velocitat d'una reacció

- Estat de divisió de les espècies químiques que reaccionen.
 - Com més fragmentat, més superfície i més xocs.
- La temperatura del sistema.
 - Augment del nombre de xocs per unitat de temps.
 - Més molècules amb energia d'activació.
- La concentració dels reactius.
- La presència de catalitzadors. Aquests productes actuen disminuint l'energia d'activació de la reacció.