

11. Cinètica de les reaccions químiques.

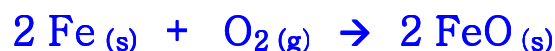
Nivell: Batxillerat.

11.1. Descripció

En la pantalla de presentació del model, el text explica què s'entén per cinètica de reacció i introdueix les dues teories elementals de la cinètica química: les col·lisions i el complex activat. També mostra una gràfica de l'energia de les partícules en el cas d'una reacció exotèrmica, assenyalant els nivells d'energia dels reactius, productes i complex activat.

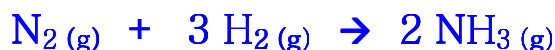
Es presenten, com exemple, quatre reaccions ja vistes en el model de tipus de reaccions: Les síntesis de l'òxid de ferro(II) i l'amoníac i les descomposicions del iodur d'hidrogen i l'òxid de mercuri(II). El menú "Reaccions" permet triar una.

- Síntesi de l'òxid de ferro(II):



L'oxigen gas reacciona amb el ferro metall per formar l'òxid de ferro(II). La reacció té lloc en la superfície del ferro, interfase sòlid-gas, i l'òxid queda en forma d'estructura cristal·lina.

- Síntesi de l'amoníac:



L'amoníac gas es forma a partir de nitrogen i hidrogen, també gasos. La reacció es produeix per xocs entre les molècules de nitrogen i hidrogen.

- Descomposició del iodur d'hidrogen:



El iodur d'hidrogen gas es descompon en els seus elements constituents, hidrogen i iode, també gasos. La reacció es produeix pels xocs entre les molècules de iodur d'hidrogen.

- Descomposició de l'òxid de mercuri(II):



A partir d'uns 300 °C, l'òxid de mercuri(II) sòlid es descompon en oxigen i mercuri. En aquest model es considera que la temperatura és superior a 357 °C, punt d'ebullició del mercuri, per tal que, tant l'oxigen com el mercuri surtin en estat gasós.

En la pantalla es mostren inicialment: l'equació química de la reacció, la identificació dels àtoms, molècules o ions que intervenen i un quadre amb les partícules presents en cada instant.

El menú "Accions" permet:

- Tornar a la situació inicial.
- Congelar la imatge per observar com estan distribuïdes les partícules en un moment determinat.
- Marcar o desmarcar una o més partícules, per poder seguir la seva evolució.

El menú "Eines" serveix per:

- Augmentar o disminuir el nombre de partícules, en funció de les prestacions reals de l'ordinador, o per veure una dissolució més concentrada.
- Canviar el diàmetre de partícula per veure millor l'acció, o ajustar-lo per tal que tingui la millor aparença en cada resolució de pantalla.
- Mesurar el temps de reacció o d'evolució de les partícules en el curs d'una reacció.
- Controlar la velocitat del procés per tal d'aprofitar al màxim les prestacions reals de l'ordinador.

El menú "Cinètica" permet adquirir dades de nombre de partícules de tots els components que es troben en la fase gasosa en funció del temps, a diferents intervals regulars o mitjançant el cronòmetre. Les dades surten en una taula a la part superior dreta de la pantalla. Un cop s'ha començat a adquirir dades, es pot aturar el procés o esborrar totalment les dades amb les opcions corresponents del mateix menú. L'opció "Desenvolupament de la reacció" proposa dues situacions, al començament i al final, del desenvolupament de la reacció.

El menú "Finestra" conté:

- una presentació en PowerPoint i
- una introducció teòrica del tema que es tracta,
- propostes de treball, en forma de preguntes o experiències virtuals i
- la guia didàctica en la que s'expliquen particularitats de la construcció del model i es fan consideracions per treballar amb ell.

Al menú "Arxiu", l'opció "Document de text" permet obrir un document per anotar dades mentre s'està utilitzant el model. L'opció "Elaboració d'informe (Word)" conté un exemple de com es poden contestar les preguntes o fer l'informe de les experiències de les "Propostes de treball" i una fitxa en blanc que es pot utilitzar pel mateix fi. En la fitxa es pot copiar (amb el procediment de Windows de Copiar/Enganxar) el text de la pregunta feta en la proposta de treball. Aquests arxius són "Només de lectura" per tenir-los sempre disponibles i, per tant, s'han de renomenar per poder-los guardar. També permet exportar les dades i fer una gràfica Excel (Arxiu / Gràfiques Excel) a partir de les dades adquirides en el menú "Cinètica".

11.2. Consideracions didàctiques.

En la representació de les partícules s'han respectat els diàmetres relatius dels àtoms i ions. Únicament l'hidrogen s'ha representat amb el diàmetre mínim que permet la seva visualització i no és proporcional a les dimensions dels altres.

Dins del menú "Accions", marcar una partícula (Accions / Marcar/Desmarcar partícules) permet veure com un àtom forma part primer d'una molècula i després d'una altra o passa a formar o ha format part d'un cristall.

Les opcions d'augmentar o disminuir el nombre de partícules, "Eines / Nombre de partícules", o canviar el diàmetre, "Eines / Diàmetre", o "Eines / Velocitat de procés" permeten veure en detall algun procés o, simplement, ajustar les possibilitats reals de l'ordinador al desenvolupament del procés. El cronòmetre (Eines / Cronòmetre), és una eina auxiliar que funciona prement el botó de la part inferior dreta.

Els menús "Accions", "Eines" i "Cinètica" estan disponibles només quan s'ha triat una reacció de les següents:

- Síntesi de l'òxid de ferro(II). El ferro metall es representa amb una estructura d'àtoms ordenada situada al fons del recipient de reacció. L'òxid de ferro(II) que es va formant es representa amb una estructura d'ions positius i negatius que vol recordar la seva estructura cristal·lina. Cada unitat de FeO formada queda en el lloc on s'ha produït la reacció, però enquadrada en la hipotètica xarxa cristal·lina que es podria completar a sobre de la superfície del ferro. Després d'una estona de reacció, aquesta xarxa es visualitza millor.
- Síntesi de l'amoníac. L'amoníac es forma quan xoquen una molècula de nitrogen i una altra d'hidrogen, havent dues més d'hidrogen suficientment properes. Si es produeix el xoc, però no hi són properes les altres dues molècules d'hidrogen, la reacció no es produeix. Dels hidrògens de l'amoníac es visualitzen dos o els tres, segons sigui la orientació de la molècula després dels xocs amb les parets i les altres molècules.
- Descomposició del iodur d'hidrogen. La reacció es produeix quan xoquen dues molècules de iodur d'hidrogen amb l'orientació adequada per que quedin propers els dos àtoms d'hidrogen i els dos àtoms de iode, per formar les molècules corresponents. Si xoquen sense aquesta orientació la reacció no es produeix. Els dos àtoms que formen cada molècula tenen una orientació que va canviant amb els xocs amb les parets i les altres molècules.
- Descomposició de l'òxid de mercuri(II). Es produeix de forma aleatòria i espontàniament cada 0,5 segons, aproximadament. Es vol posar de manifest que, a temperatura superior a 357 °C, els ions que formen l'òxid de mercuri(II) tenen ja prou energia com per passar a estat gasós, ja que aquesta substància es descompon per sobre dels 300 °C. El fixar el temps en uns 0,5 segons ha estat per raons de millor visualització. Amb l'opció "Eines / Velocitat del procés" es pot produir la descomposició més ràpidament. La orientació dels àtoms d'oxigen dins de la molècula d'oxigen va canviant amb els xocs amb les parets i les altres molècules.

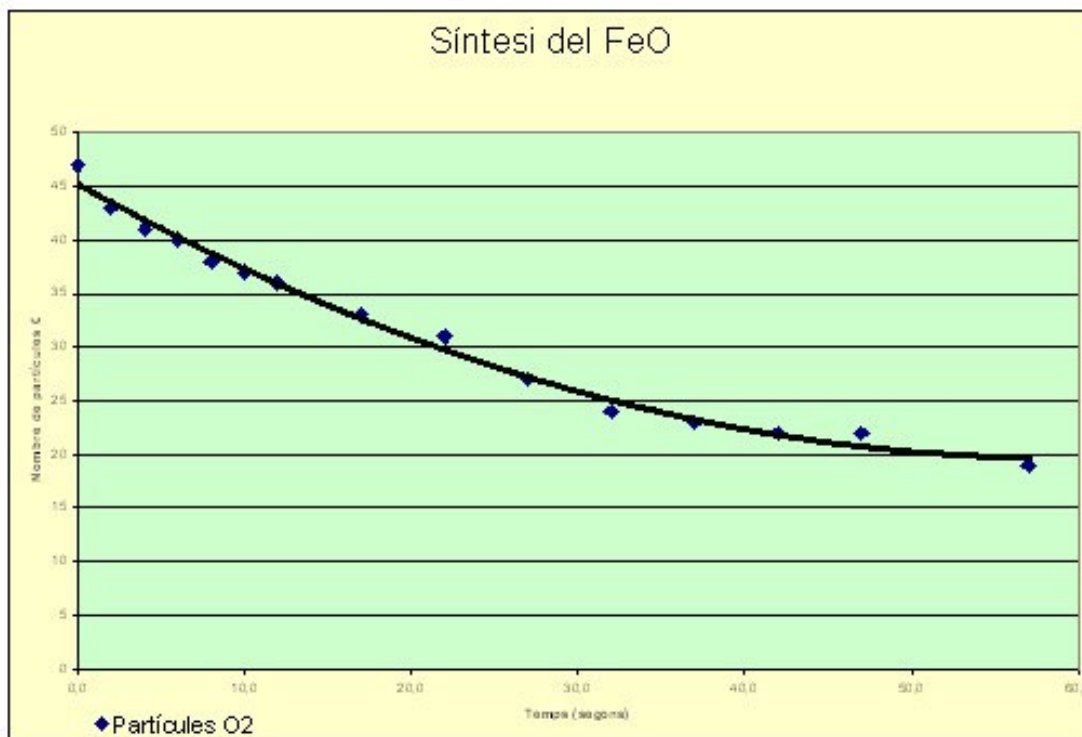
L'opció "Adquirir dades" del menú "Cinètica" permet obtenir dades de nombre de partícules i temps, a diferents interval triats per l'usuari, fins i tots a intervals diferents dins d'una mateixa taula: es pot començar cada 0,5 s i després canviar a 1 s o altres intervals.

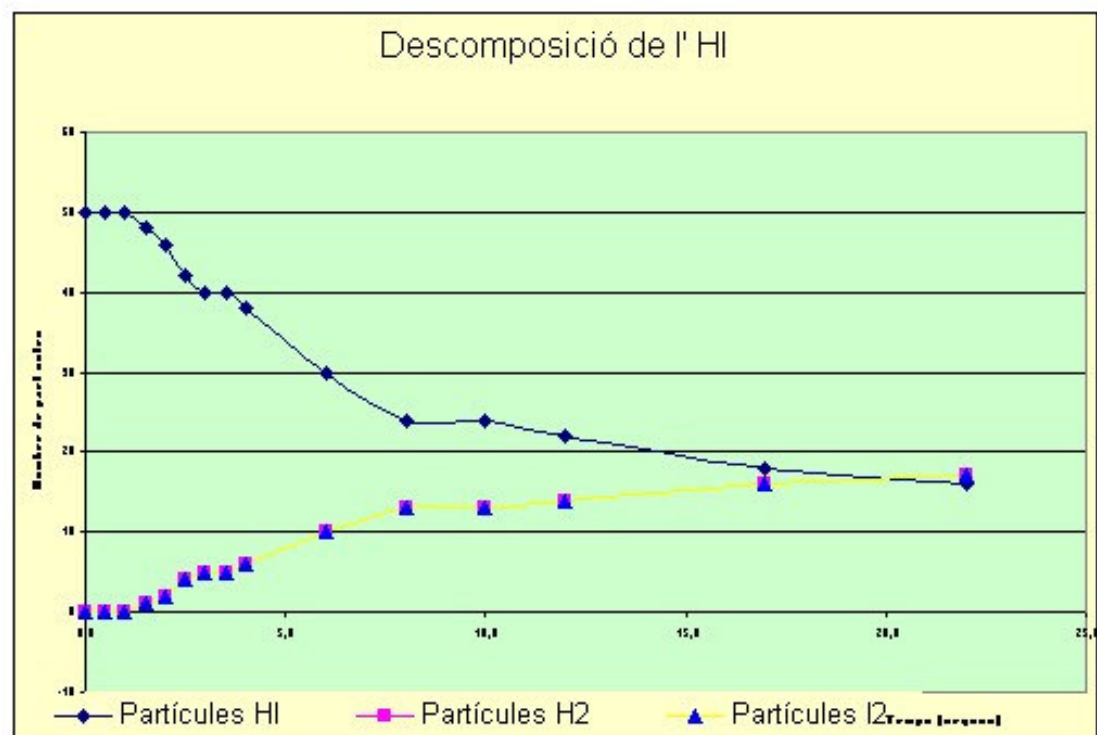
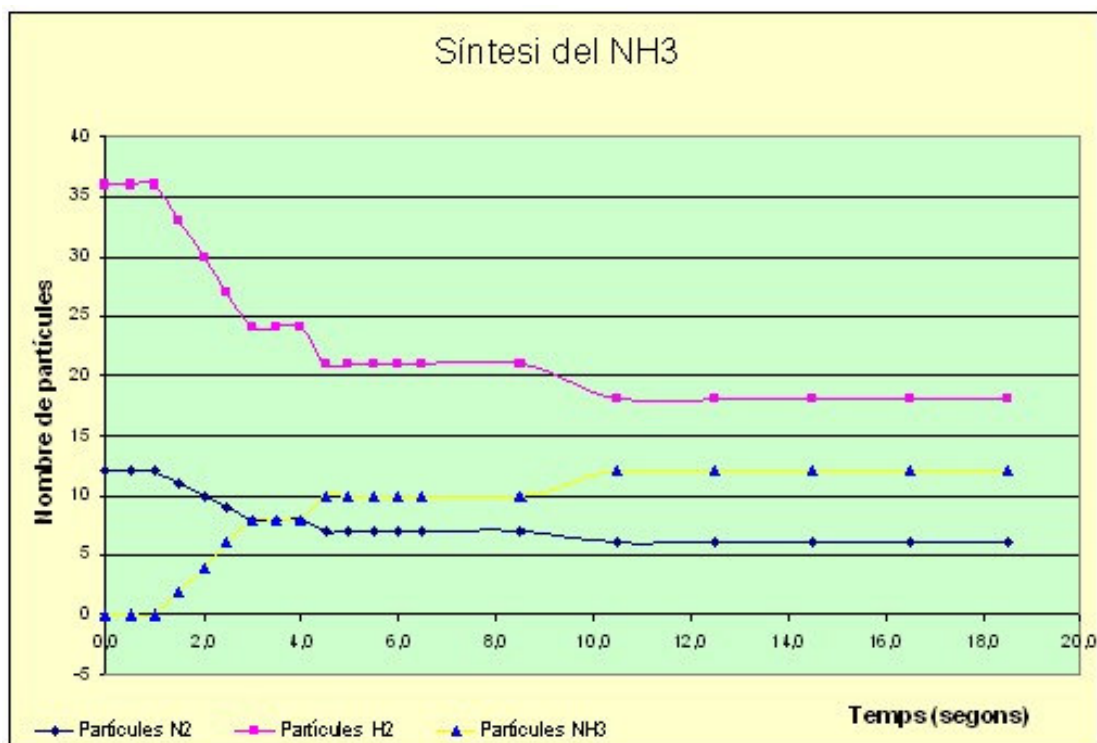
També es poden agafar dades amb el cronòmetre, esperant a veure quin és el millor moment per mesurar el nombre de partícules. L'interval més adequat per obtenir les dades depèn de la reacció que es vol estudiar i de la potència de l'ordinador, així que cal fer algunes proves abans de fer la taula definitiva.

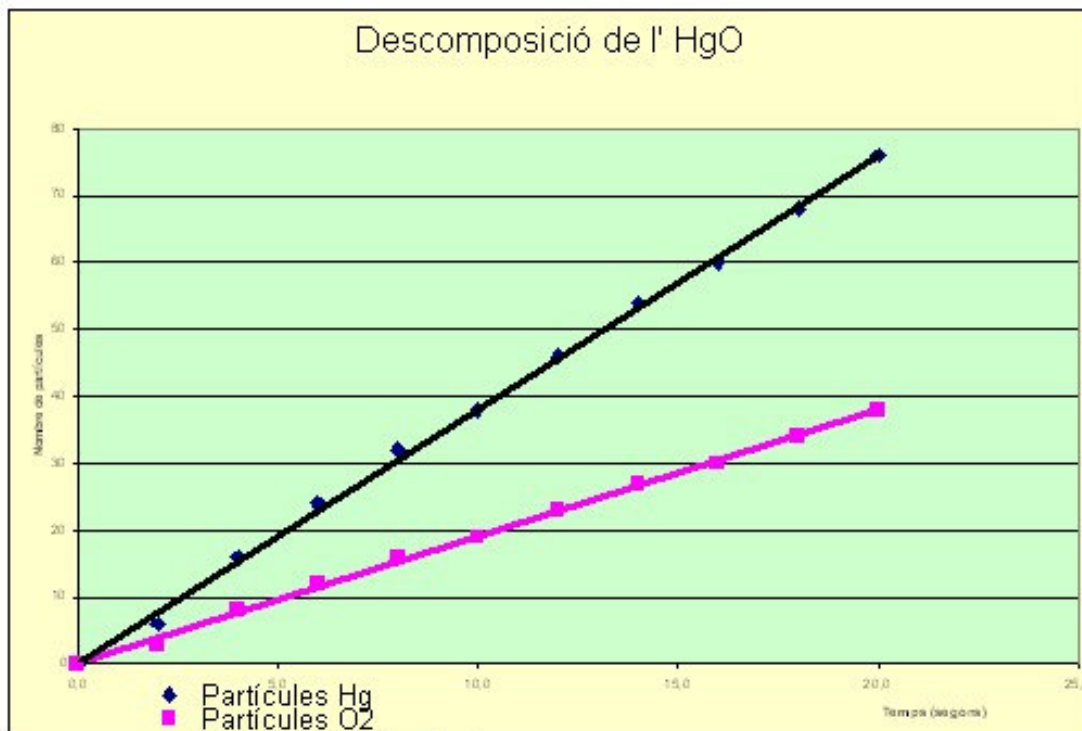
Un cop es tenen les dades, es pot fer la gràfica en Excel (Arxiu / Gràfiques Excel) per obtenir la corba característica. En el gràfic, s'ajusta als punts una línia exponencial, que no sempre ha de ser la més adequada a les dades obtingudes. Fent clic a sobre de la línia amb el botó dret del ratolí i anant a "Formato de línea de tendencia / Tipo" es poden triar altres tipus de línies de regressió o anant a "Borrar", eliminar-la.

Cal notar que, cada vegada que es tria una reacció del menú "Reacciones" s'inicia de nou la reacció. Així, per fer una gràfica, pot ser convenient seguir els passos següents:

- un cop triada la reacció que es vol,
- activar l'opció "Cinètica / Adquirir dades cinètiques" i provar els intervals en els que surt millor la gràfica,
- tornar a fer clic a sobre de la mateixa reacció del menú "Reacciones" per tal que comenci de nou la mesura de dades i tenir la gràfica des del principi.







L'opció "Desenvolupament de la reacció" del menú "Cinètica" permet visualitzar els instants inicial i final del desenvolupament de cada reacció.

- En la síntesi de l'òxid de ferro(II), el primer instant representa l'aproximació dels dos àtoms d'oxigen, ja separats un de l'altre, als dos àtoms de ferro, que ja s'han separat de l'estructura metàl·lica. Prement el botó de continuar, es veu el segon instant, en el que s'acaben de transformar en ions i s'han situat a sobre de la superfície del ferro.
- En la síntesi de l'amoníac, el primer instant mostra dues molècules d'hidrogen i amoníac que són a punt de xocar i tenen a prop dues molècules més d'hidrogen. El segon instant mostra ja les dues molècules d'amoníac acabades de formar però encara juntes.
- En la descomposició del iodur d'hidrogen, el primer instant mostra el xoc efectiu entre dues molècules de iodur d'hidrogen en el que els àtoms d'hidrogen i els àtoms de iode han quedat suficientment a prop per formar les dues molècules d'hidrogen i iode. El següent instant ja mostra les dues molècules de iodur d'hidrogen formades però encara molt properes.
- En la descomposició de l'òxid de mercuri(II), el primer instant mostra les dues parelles d'ions que, escollits aleatòriament, reaccionaran. En el segon instant els ions ja s'han transformat en dos àtoms de mercuri i dos àtoms d'oxigen que s'ajunten per formar una molècula.

En l'opció "Desenvolupament de la reacció", en les tres primeres reaccions es mostra només una part de l'espai en el que transcorre la reacció. Així que, a vegades, la reacció tarda una estona en produir-se en la zona d'espai mostrada. Per tornar al menú de "Reaccions" cal anar a l'opció "Tornar a reaccions" del menú "Cinètica".