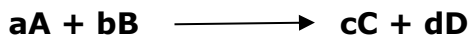


UNITAT 5: CINÈTICA QUÍMICA

1) VELOCITAT DE REACCIÓ: La cinètica química s'encarrega de l'estudi de la rapidesa en que es produeixen les reaccions químiques.

Velocitat mitjana de reacció: per a una reacció homogènia entre gasos o entre reactius en dissolució es defineix com la variació en la concentració (mol/l) d'un dels reactius o productes en un interval de temps (s):



$$V_m = \frac{-1}{a} \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = \frac{-1}{b} \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta[C]}{\Delta t} = \frac{1}{d} \frac{\Delta[D]}{\Delta t} \quad \text{Unitats són mol}\cdot\text{l/s}$$

- La velocitat respecte dels reactius es considera negativa i la calculada respecte als productes es considera positiva, afectada del valor dels coeficients estequiomètrics respectius.
- La V_m no és constant. Disminueix a mesura que els reactius desapareixen. La calculada és per a un interval de temps concret.

Velocitat instantània de reacció: és la velocitat que té una reacció en un instant de temps concret.

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

Velocitat de desaparició d'un reactiu o d'aparició d'un producte $V_A = \frac{\Delta[A]}{\Delta t} \dots$

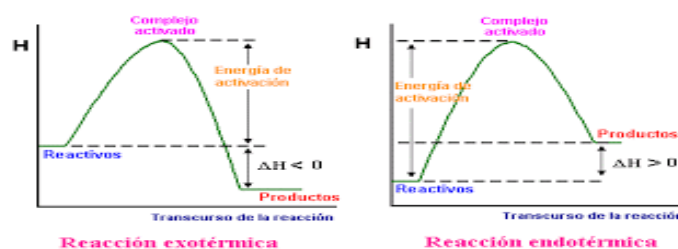
2) COM OCORREN LES REACCIONS:

Teoria de les col·lisions (Lewis): Les reaccions es produeixen pels xocs entre les molècules, els àtoms o els ions dels reactius. La velocitat de reacció depèn de:

- la freqüència dels xocs per unitat de volum
- l'eficàcia dels xocs: que tinguen prou energia perquè es trenquen els enllaços (energia d'activació), i que la orientació del xoc siga la adequada.

L'energia necessària per a que un xoc siga efectiu i trenque els enllaços per a què tinga lloc la reacció s'anomena energia d'activació.

Teoria del complex activat (Eyring): En xocar les molècules dels reactius, es forma un agregat que és una molècula en sí mateixa (=complex activat o de transició), uns enllaços estan en procés de formació i altres de ruptura, la seua energia és superior a la dels productes i a la dels reactius. L'energia d'activació és la energia necessària per formar-se el complex activat (sempre $E_a > 0$).



3) EQUACIÓ DE LA VELOCITAT: Equació (determinada experimentalment) que expressa la velocitat d'una reacció en un determinat instant en funció de les concentracions dels reactius presents:

$$V = K \cdot [A]^n \cdot [B]^m$$

k (constant de velocitat o cinètica. **El seu valor depèn de** la mateixa reacció, de la temperatura i de la presència d'un catalitzador). Com més gran siga el seu valor major serà la velocitat de la reacció i **les seues unitats depenen** de l'ordre total de la reacció.

n ; m (ordres parcials de la reacció respecte a cadascuna de les substàncies)

Així podem dir, per exemple, que:

Si $n=0$ (l'equació és d'ordre 0 respecte a A i aquest reactiu no apareix en l'equació).

Si $n=1$ (l'equació és d'ordre 1 respecte a A i la velocitat és directament proporcional a la [A])

Si $n=2$ (l'equació és d'ordre 2 respecte a A i la velocitat és directament proporcional a la [A]²)

O total = n+m (ordre global de la reacció)

MÈTODE PER A CALCULAR L'ORDRE TOTAL D'UNA REACCIÓ I PER TANT L'EQUACIÓ DE LA VELOCITAT: És manté constant la concentració d'un dels reactius i es va canviant la concentració de l'altre mentre que s'estudia com afecta aquest canvi a la velocitat inicial de la reacció.

4) FACTORS QUE AFECTEN A LA VELOCITAT D'UNA REACCIÓ

- **La concentració dels reactius.** La velocitat augmenta amb la concentració dels reactius (segons l'equació de la velocitat).
- **La naturalesa, estat físic i grau de subdivisió dels reactius.**

a) Les substàncies en estat gasos reaccionen més ràpidament que les que estan en dissolució i aquestes més que les sòlides.

b) En fase gasosa, un augment de la pressió total (per exemple si disminueix el volum) de la mescla fa augmentar la velocitat.

c) En reactius sòlids, la velocitat augmenta amb el grau de subdivisió dels reactius.

- **La temperatura de la reacció.** La velocitat d'una reacció augmenta amb la temperatura segons l'equació d'**Arrhenius**.
- **La presència de catalitzadors.** Són substàncies que augmenten la velocitat (i per tant el valor de la constant) d'una reacció sense ser consumides en el procés. La catàlisi és homogènia si tots (reactius-productes-catalitzador) estan en la mateixa fase i heterogènia si estan en fases diferents.

Els catalitzadors no canvien el valor de l'entalpia de la reacció (ΔH) si no que disminueixen l'energia d'activació.