

# CINÉTICA QUÍMICA

Química 2.º Bach

Rodrigo Alcaraz de la Osa

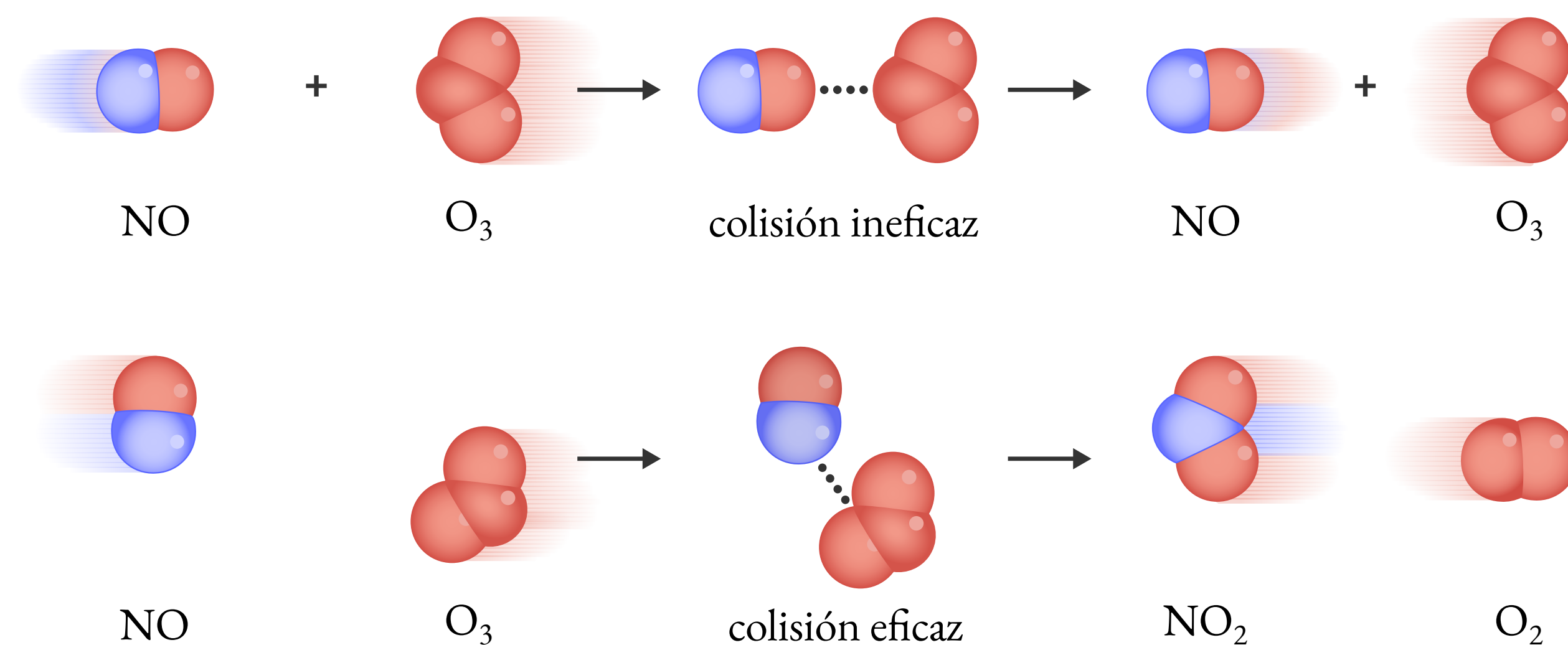


La **CINÉTICA QUÍMICA** es la rama de la **química física** que se ocupa de **comprender** las **velocidades** de las **reacciones químicas**.

## Teorías de las reacciones químicas

### Teoría de colisiones

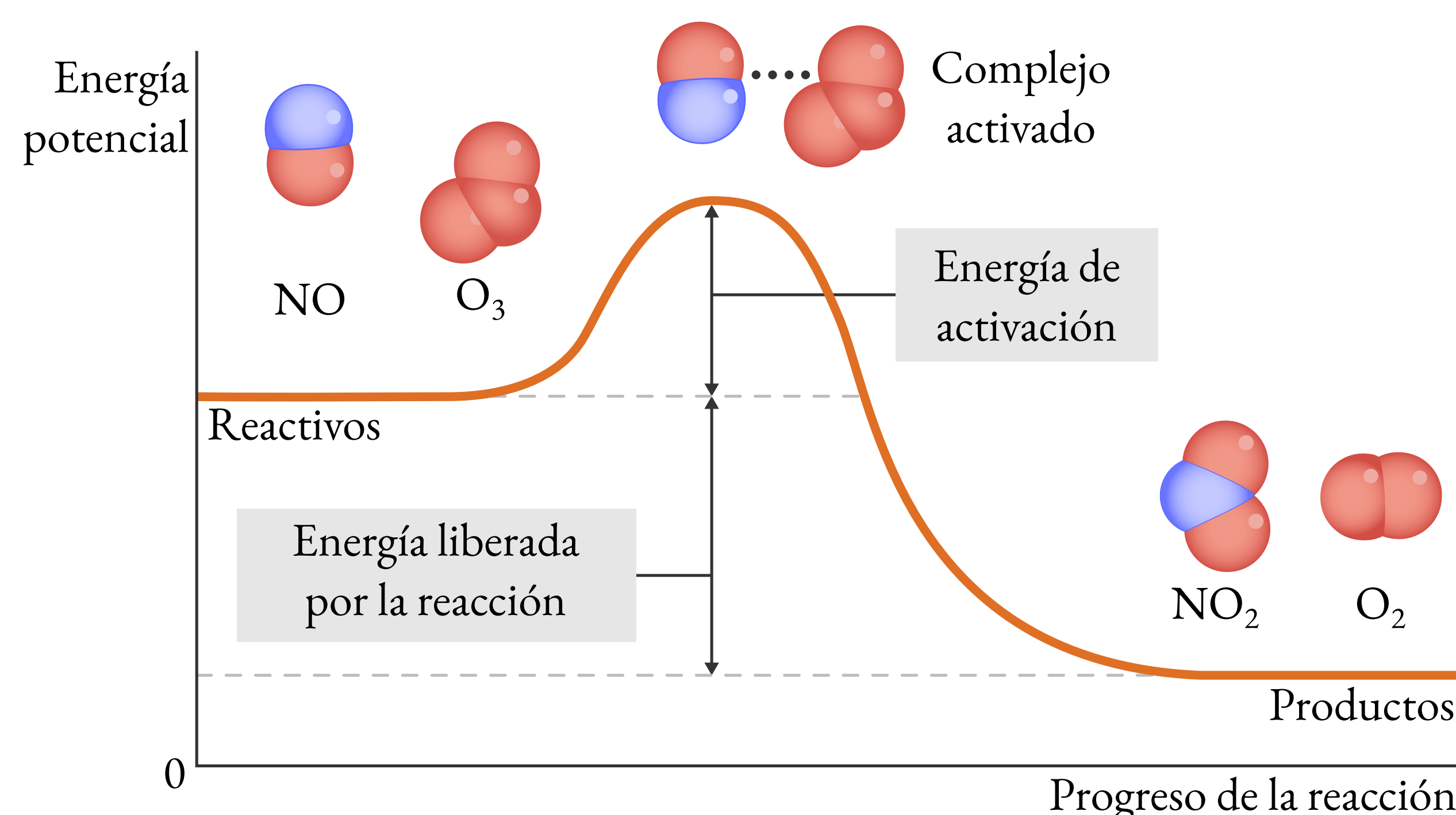
La **TEORÍA DE COLISIONES**, propuesta por Lewis en 1918, explica una reacción desde el punto de vista dinámico. Nos dice que las reacciones se producen a partir de choques entre las moléculas de los reactivos. Para que estos choques sean **EFICACES**, las moléculas han de tener suficiente energía (**ENERGÍA DE ACTIVACIÓN**) y una orientación adecuada.



Adaptada de <https://www.coursehero.com/sg/general-chemistry/collision-theory/>

### Teoría del estado de transición o del complejo activado

La **TEORÍA DEL ESTADO DE TRANSICIÓN**, propuesta por Henry Eyring en 1935, explica una reacción química desde el punto de vista energético. Cuando las moléculas de los reactivos chocan, dan lugar a un **ESTADO DE TRANSICIÓN**, muy inestable, donde se forma un **COMPLEJO ACTIVADO**, en el que unos enlaces se están formando y otros rompiendo.



Cuanto menor sea la energía de activación, más rápida será la reacción química.

Adaptada de <https://www.coursehero.com/sg/general-chemistry/collision-theory/>

## Mecanismos de reacción

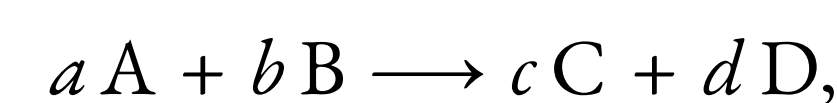
El **mecanismo** de una **reacción** es el conjunto de procesos o reacciones elementales por los que se produce el cambio químico global.

Las especies que no aparecen en la reacción global se denominan **intermedios de reacción**, ya que se producen en un proceso elemental pero se consumen en otro.

La velocidad de una reacción viene determinada por la reacción elemental más lenta, llamada **etapa limitante** o **controlante** de la **velocidad**.

## Velocidad de reacción

Es la **velocidad** a la que **ocurre** una **reacción química**. En una **ecuación química** general:



$a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $d$  representan los **coeficientes estequiométricos** mientras que A, B, C y D representan los **símbolos químicos** de los átomos o la **fórmula molecular** de los compuestos que reaccionan (lado izquierdo) y los que se producen (lado derecho).

Definimos la **velocidad instantánea de reacción**,  $v$ , como:

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

donde [ ] representa **concentración**, medida en mol L<sup>-1</sup>. En general, la velocidad de una reacción química disminuye con el tiempo y se determina experimentalmente, midiendo la concentración a intervalos de tiempo conocidos.

## Ecuaciones cinéticas

**Relacionan** la **velocidad de reacción** con la **concentración** de los **reactivos**:

$$v = k[A]^n[B]^m,$$

donde  $k$  es la constante de velocidad ( $\uparrow k \rightarrow \uparrow v$ ); [A] y [B] las concentraciones (molares) de los reactivos; y  $n$  y  $m$  son los órdenes de reacción parciales (orden total =  $n + m$ ). En el caso de **reacciones elementales** (una sola etapa), los órdenes parciales coinciden con los coeficientes estequiométricos, por lo que el orden total coincide con la **molecularidad**.

Orden	Reacción	Ecuación	Ejemplo
Cero	A → Productos	$v = k[A]^0 = k$	Oxidación de metales Reacciones catalizadas por enzimas
Uno	A → Productos	$v = k[A]$	$H_2O_2(l) \rightarrow H_2O(l) + \frac{1}{2} O_2(g)$ $v = k[H_2O_2]$
Dos	A + B → Productos	$v = k[A][B]$	$NO_3(g) + NO(g) \rightarrow 2 NO_2(g)$ $v = k[NO_3][NO]$
	A → Productos	$v = k[A]^2$	$HI(g) \rightarrow \frac{1}{2} H_2(g) + \frac{1}{2} I_2(g)$ $v = k[HI]^2$
	A + B + C → Productos	$v = k[A][B][C]$	
Tres	A + B → Productos	$v = k[A]^2[B]$	$2 NO(g) + Cl_2(g) \rightarrow 2 NOCl(g)$ $v = k[NO]^2[Cl_2]$
	A → Productos	$v = k[A]^3$	

### Vida media o periodo de semireacción $t_{1/2}$

Definimos la **VIDA MEDIA** O **PERIODO DE SEMIREACCIÓN**,  $t_{1/2}$ , como el tiempo necesario para que la concentración de un determinado reactivo se reduzca a la mitad.

Orden	0	1	2
Integración	$[A] = [A]_0 - kt$	$[A] = [A]_0 \cdot e^{-kt}$	$[A] = \frac{[A]_0}{1 + [A]_0 kt}$
$t_{1/2}$	$\frac{[A]_0}{2k}$	$\frac{\ln 2}{k}$	$\frac{1}{k[A]_0}$

## Factores que influyen en la velocidad de reacción

### Naturaleza de los reactivos

La **naturaleza** y la **fuerza** de los **enlaces** en las moléculas **reactivas** influyen en gran medida en la velocidad de su transformación en productos. Las sustancias iónicas suelen reaccionar más rápidamente que las covalentes a temperatura ambiente.

### Estado de agregación y grado de división de los reactivos

Cuando los reactivos están en estados distintos, la reacción sólo puede ocurrir en su área de contacto. Esto significa que **cuanto más finamente dividido** esté un **reactivo** sólido o líquido, **mayor** será su **área de superficie** por unidad de volumen y **mayor** será el **contacto** con el otro reactivo, por lo que la **reacción** será **más rápida**.

$$v_{\text{gas}} > v_{\text{líquido}} > v_{\text{sólido}}$$

### Concentración de los reactivos

La velocidad de reacción depende de las concentraciones de los reactivos:

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

**Cuanto mayor** sea la **concentración**, más moléculas habrá y más probable será que colisionen y reaccionen entre sí, dando lugar a un **aumento** de la **velocidad de reacción**.

### Temperatura

A **mayor temperatura**, las moléculas tienen más energía térmica y son más susceptibles de chocar eficazmente, **umentando** la **velocidad de reacción**. La **ecuación de Arrhenius** relaciona la constante de velocidad  $k$  con la temperatura  $T$ :

$$k = A e^{-\frac{E_a}{RT}},$$

donde  $A$  es el factor de frecuencia, que refleja la frecuencia de las colisiones,  $E_a$  es la energía de activación y  $R = 8.31 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$  es la constante universal de los gases ideales.

### Catalizadores

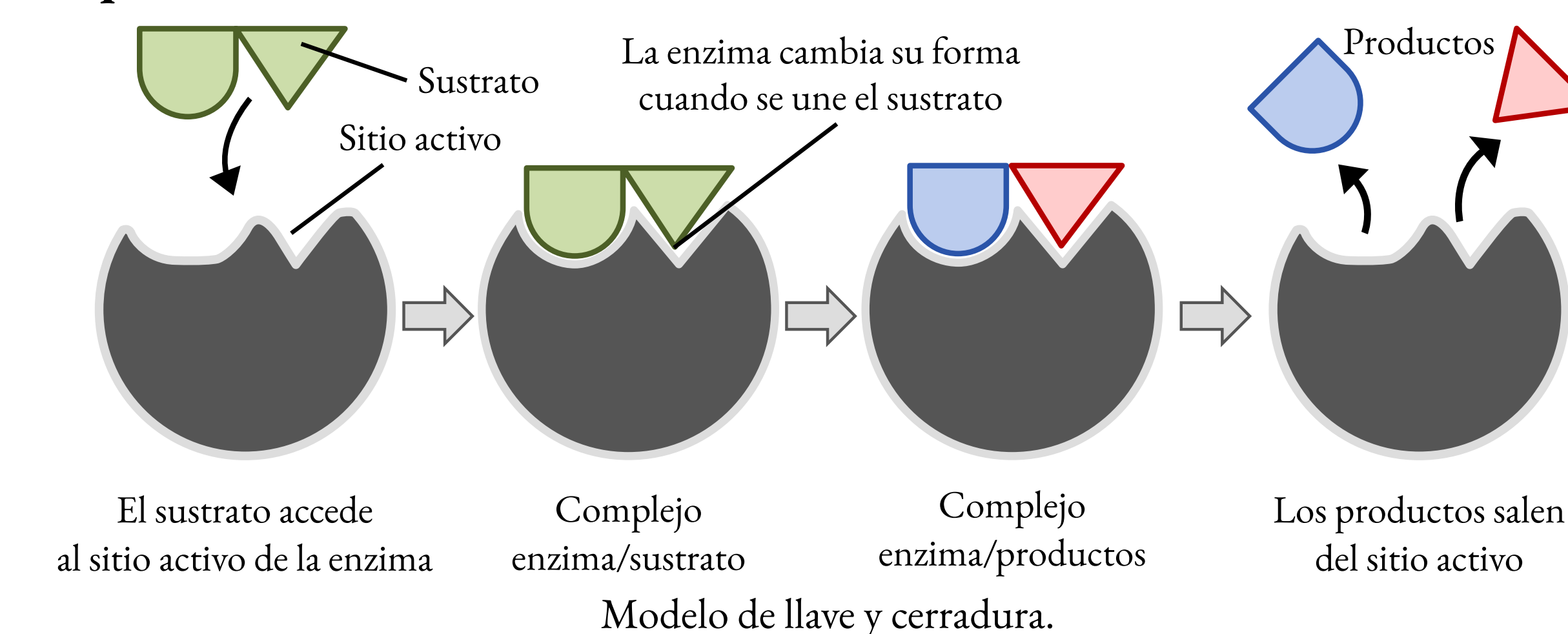
Un **catalizador** es una **sustancia** que **altera** la **velocidad** de una **reacción** química sin consumirse durante la misma. Distinguiamos entre **catalizadores**:

**Positivos** **Aumentan** la **velocidad** de reacción disminuyendo la energía de activación.

**Negativos (inhibidores)** **Disminuyen** la **velocidad** de reacción aumentando  $E_a$ .

Distinguiamos también entre **catálisis homogénea** o **heterogénea** dependiendo de si la fase del catalizador es la misma o no que la de los reactivos.

**Catálisis enzimática** Las **proteínas** que actúan como **catalizadores** en las **reacciones bioquímicas** se llaman **enzimas**.



Adaptada de [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Induced\\_fit\\_diagram\\_es.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Induced_fit_diagram_es.svg)