



## Tema 14. Problemas de Cinética Química

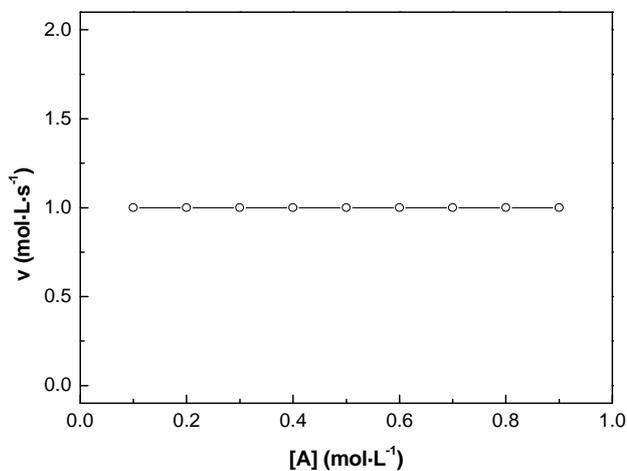
### Problema 1

Considere la reacción de orden cero  $A \rightarrow \text{productos}$ . a) Escriba la ley de velocidad. b) ¿Cuáles son las unidades de la constante de velocidad? c) Dibuje la gráfica que represente la variación de la velocidad con la concentración de A. d) ¿Puede ser la molecularidad cero?

a)  $v = k \cdot [A]^0 = k$

$v = k$

b)  $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$



d) La molecularidad nunca puede ser cero puesto que siempre es necesaria la participación de al menos una especie química en un proceso elemental

a)  $V = k$ ; b)  $\text{mol L}^{-1} \text{s}^{-1}$ ; c) Línea paralela al eje de abscisas; d) No

## Problema 2

A partir de los datos de temperatura y constante de velocidad que aparecen en la tabla, calcule gráficamente el valor de aquel o aquellos parámetros cinéticos que considere oportunos, diciendo de qué parámetro o parámetros se trata y cuáles son sus unidades.

T (K)	338	328	318	308
k 10 <sup>4</sup> (s <sup>-1</sup> )	48.7	15.0	4.98	1.35

La ecuación de Arrhenius es:

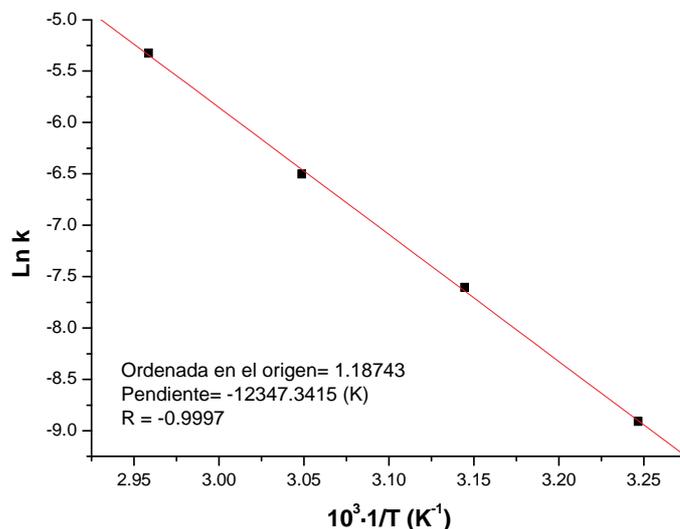
$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{R \cdot T}}$$

donde A es el factor de frecuencia o factor preexponencial, E<sub>a</sub> es la energía de activación, R es la constante general de los gases y T la temperatura absoluta.

Tomando logaritmos de la expresión anterior tenemos:

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{R \cdot T}$$

que representa la ecuación de una línea recta del tipo, y = a + b·x, donde Ln k sería la y, y 1/T sería la x. Por tanto si se representa el Ln k frente a la inversa de la temperatura se debería obtener una línea recta de cuya pendiente se podría obtener la energía de activación (pendiente = -E<sub>a</sub>/R) y de cuya ordenada en el origen se podría obtener el valor del factor preexponencial (ordenada en el origen = Ln A)



Según los resultados de la gráfica y el correspondiente ajuste de los datos a una línea recta mediante la utilización de mínimos cuadrados se obtiene:

$$\text{Pendiente} = 12347.3415 (\text{K}) = -E_a/R \Rightarrow E_a = 12347.3415 (\text{K}) \cdot 1.987 (\text{cal} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$$
$$E_a = 24534.1 \text{ cal} \cdot \text{mol}^{-1}$$

**Ordenada en el origen = 1.18743 = Ln A  $\Rightarrow$  A = 3.279 s<sup>-1</sup>**

**Ea = 24.53 kcal/mol; A = 3.279 s<sup>-1</sup>**