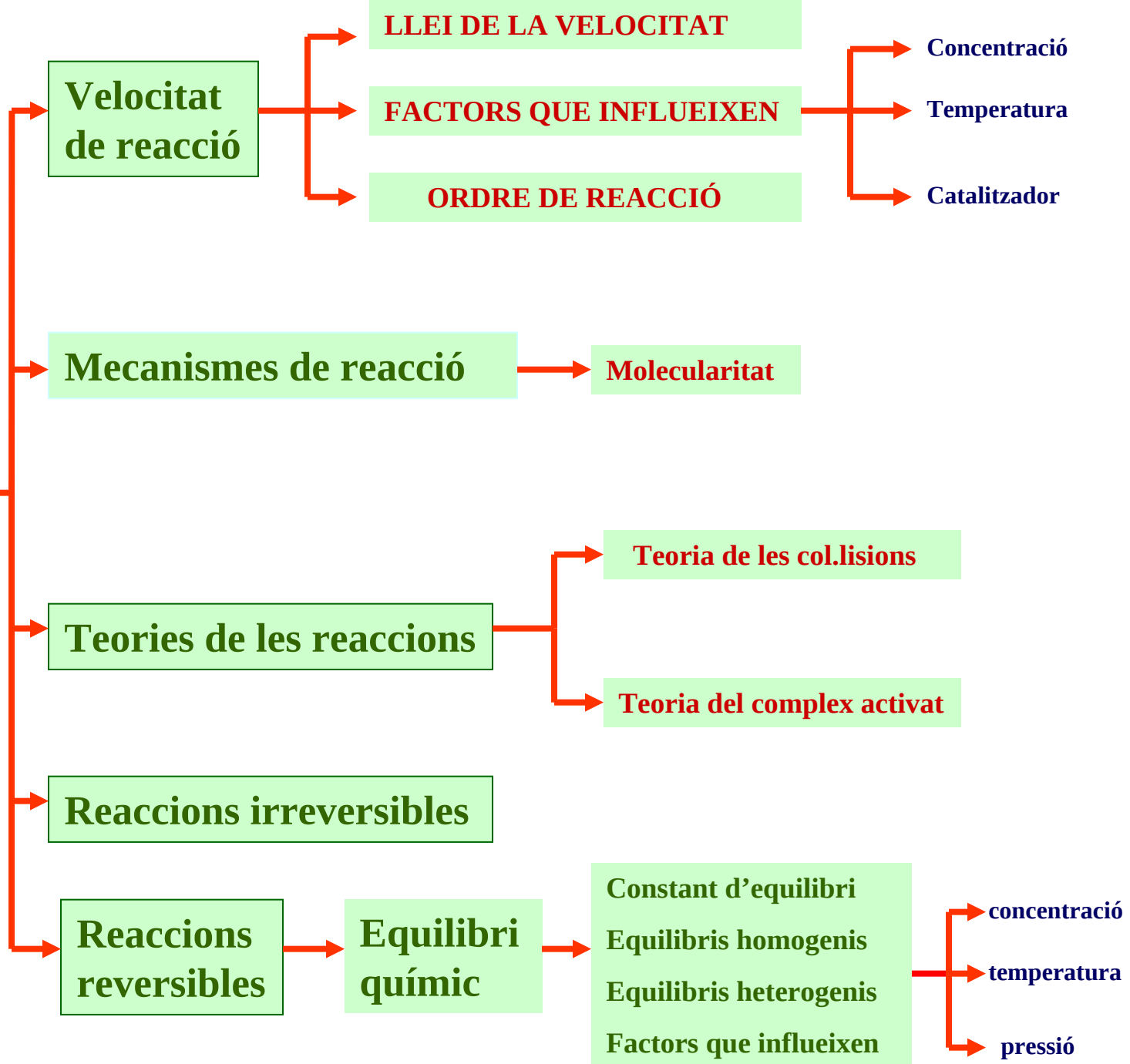


CINÈTICA QUÍMICA



VELOCITAT DE REACCIÓ

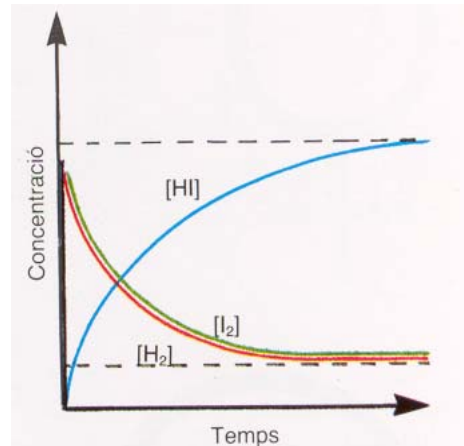
$$V_m = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t}$$



$$V_A = -\frac{d[A]}{dt} \quad V_B = -\frac{d[B]}{dt}$$

$$V_C = \frac{d[C]}{dt}$$

$$V_D = \frac{d[D]}{dt}$$



Llei de la velocitat

És una equació que relaciona la velocitat d'una reacció química amb les concentracions dels reactius.

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

On k és la *constant de la velocitat*, que representa la velocitat de la reacció quan els reactius tenen de concentració la unitat.

Els exponents de cada factor representen l'*ordre de reacció* referits al reactiu corresponent.

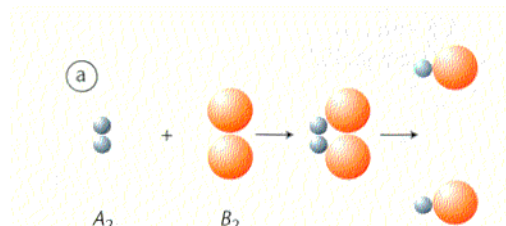
MECANISMES DE REACCIÓ

- ▶ **Reaccions elementals o concertades** → tenen lloc en una sola etapa, es produeix una sola col·lisió.
- ▶ **Molecularitat** d'una reacció és el nombre d'àtoms, molècules o ions que intervenen en una reacció elemental. Poden ser *unimoleculars*, *bimoleculars* o *trimoleculars*.
- ▶ **Reaccions per etapes**: transcorren a través d'una sèrie de passos successius. El conjunt d'etapes elementals d'una reacció global és el *mecanisme de reacció*.

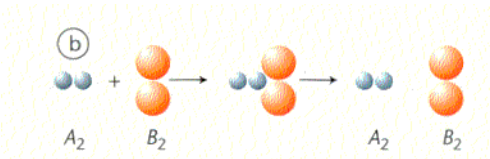
Teoria de les col·lisions

Perquè tingui lloc una reacció química, les partícules reaccionants han de col·lidir. Perquè aquests xocs siguin eficaços, han de comportar la ruptura d'uns enllaços i la formació d'uns altres.

EFICAÇ



NO EFICAÇ



CONDICIONS :

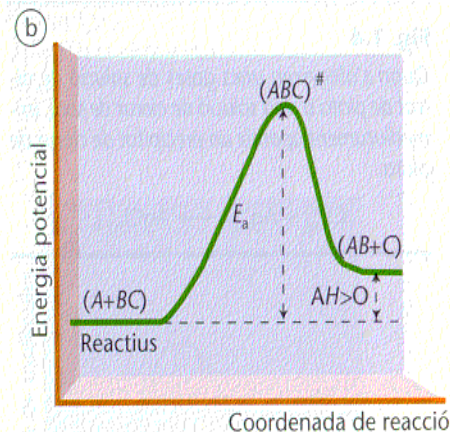
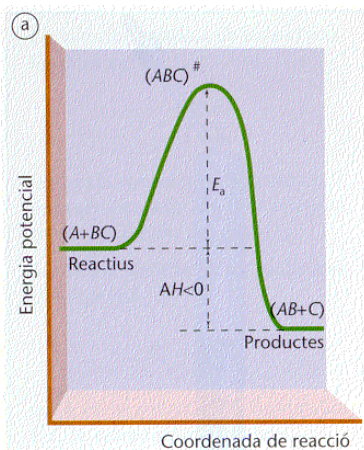
▶ Les molècules, els àtoms o els ions dels reactius han de tenir l'energia cinètica suficient perquè en la seva col·lisió es puguin trencar els enllaços que calgui. És l'energia d'activació.

▶ El xoc s'ha de produir amb l'orientació adequada. Les partícules que xoquin amb de fer-ho amb un angle determinat. Factor estèric.

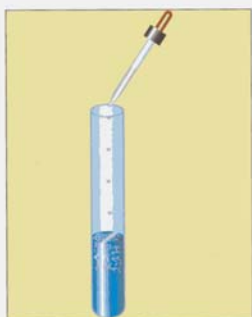
Teoria del complex activat

Quan dues partícules s'apropen per reaccionar, si tenen l'energia suficient, primer formen una espècie, *el complex activat o l'estat de transició*.

Les gràfiques mostren com les partícules han de traspasar una barrera de potencial perquè reaccionin; l'energia necessària prové de la seva energia cinètica.



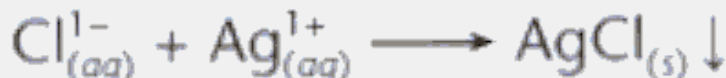
FACTORS QUE INFLUEIXEN



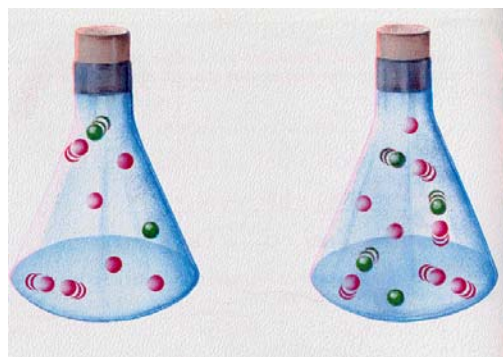
▶ INFLUÈNCIA DELS REACTIUS

Les reaccions entre substàncies iòniques en dissolució acostumen a ser molt ràpides, ja que no cal trencar enllaços.

Les reaccions en què s'han de trencar enllaços per formar-se'n uns altres acostumen a ser lentes a temperatura ambient.



▶ INFLUÈNCIA DE LA CONCENTRACIÓ



L'augment de concentració incrementa la probabilitat dels xocs entre les molècules i augmenta, per tant la velocitat de reacció. El nombre de xocs entre les molècules és proporcional a la concentració de cada un dels reactius.

▶ INFLUÈNCIA DE LA SUPERFÍCIE DE CONTACTE ENTRE ELS REACTIUS

Les reaccions heterogènies amb reactius en fases diverses, dificultat perquè les substàncies entrin en contacte. Les reaccions entre sòlids són més ràpides com més fragmentats estiguin.

Les millors condicions quan els reactius siguin gasos o estiguin en dissolució, el contacte entre les partícules que han de reaccionar és molt més fàcil.



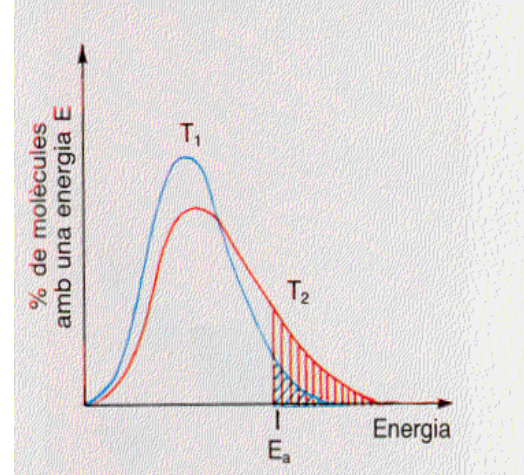


INFLUÈNCIA DE LA TEMPERATURA

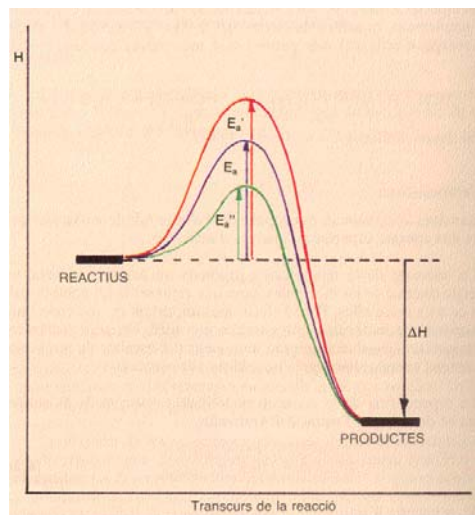
Un augment de la temperatura provoca sempre un increment de la velocitat de reacció.

La influència és doble : * sobre la velocitat de les partícules dels reactius.

* sobre l'energia cinètica de les partícules

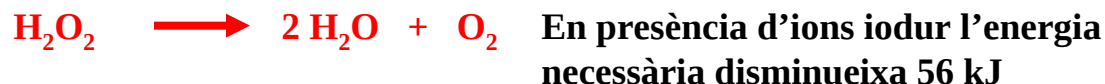


INFLUÈNCIA DELS CATALITZADORS



Un catalitzador és una substància que fa augmentar considerablement la velocitat d'una reacció química determinada. Aquesta substància es recupera íntegrament al final de la reacció. Pot ser un element químic, un compost o bé una mescla .

CATÀLISI HOMOGÈNIA: Catalitzador i reactius estan en la mateixa fase.



CATÀLISI HETEROGÈNIA: Catalitzador i reactius estan en fases diferents.

Reacció de l'hidrogen i l'oxigen, la presència de platí finament dividit augmenta la velocitat .

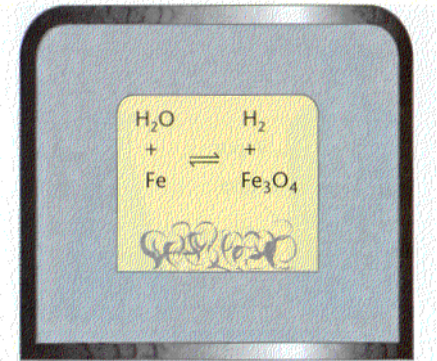
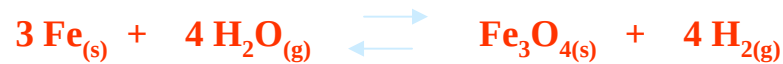
CATÀLISI ENZIMÀTICA: Catalitzadors de naturalesa proteica (enzims)



EQUILIBRI QUÍMIC

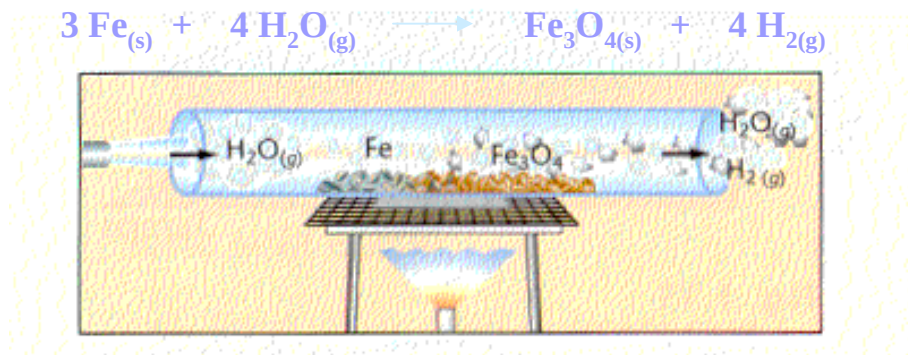
REACCIONS REVERSIBLES

Els productes de la reacció reaccionen entre ells per donar el reactius de partida.

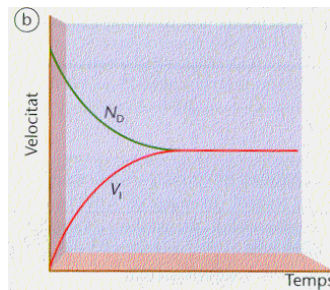
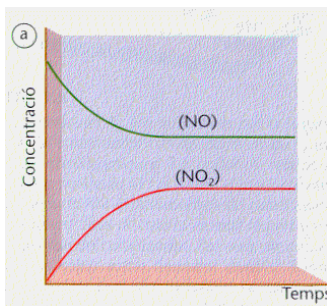


REACCIONS IRREVERSIBLES

Els productes no reaccionen entre ells per donar els reactius.



Velocidad neta de la reacció = velocitat directa - velocitat inversa



A mesura que augmenta el temps la concentració de NO disminueix i la de NO₂ augmenta.

L'equilibri químic és dinàmic.



LA CONSTANT D' EQUILIBRI

$$v_D = k_D [NO][O_3]$$

$$v_I = k_I [NO_2][O_2]$$

En l'equilibri les dues velocitats són iguals, $v_D = v_I$

$$k_D [NO][O_3] = k_I [NO_2][O_2] \longrightarrow \frac{k_D}{k_I} = \frac{[NO_2][O_2]}{[NO][O_3]} = k_C$$

k_C s'anomena constant d'equilibri



$$k_C = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

- * Una constant d'equilibri elevada vol dir que la reacció directa ha tingut lloc en una gran extensió.
- * La constant d'equilibri és una propietat característica de cada reacció i varia amb la temperatura.
- * El seu valor és independent del nombre d'etapes en què té lloc la reacció.



EL COCIENT DE REACCIÓ

Quan un sistema no està en equilibri, l'expressió de la constant d'equilibri no es compleix. La relació entre els reactius i els productes s'anomena quocient de reacció

$$Q_c = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

- * Quan es compleix que $Q_c = K_c$ el sistema està en equilibri
- * Si $Q_c < K_c$ els reactius estan en excés respecte als valors que corresponen a l'equilibri; per tant el sistema evolucionarà cap a la formació de productes. Cap a la **DRETA**
- * Si $Q_c > K_c$ significa que els productes estan en excés respecte als corresponents valors d'equilibri; per tant el sistema evolucionarà cap a l'**ESQUERRA**.

LA CONSTANT REFERIDA A LES PRESSIONS PARCIALES

$$K_p = \frac{p_C^c \cdot p_D^d}{p_A^a \cdot p_B^b}$$

$$p_A = c_A RT \text{ donde } c_A = n/V$$

Si substituïm a l'expressió de K_p resulta

$$K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$$

LA CONSTANT REFERIDA A LES FRACCIONS MOLARS

Segons la llei de Dalton

$$p_A = x_A P$$

$$K_p = K_x \cdot P^{\Delta n}$$



EQUILIBRIS HETEROGENIS

Quan les substàncies que intervenen en una reacció estan en fases diferents. Les més freqüents entre sòlids i gasos i en les solucions entre líquids i sòlids.



Si aquesta reacció es realitza en un recipient tancat, com que és reversible, s'assoleix l'equilibri.

$$K_c = \frac{[\text{CaO}][\text{CO}_2]}{[\text{CaCO}_3]}$$

En aquesta expressió apareixen les concentracions de dos sòlids i un gas. La concentració d'un sòlid pur resta sempre constant

$$K'_c = [\text{CO}_2]$$

$$K_p = P_{\text{CO}_2}$$

La constant referida a les pressions. Que significa que, quan s'arriba a l'estat d'equilibri, la pressió resta constant.

EQUILIBRIS IÒNICS

Hi ha dissolucions en les quals el solut està més o menys ionitzat. Les reaccions entre substàncies iòniques en dissolució són reaccions reversibles a les quals podem aplicar les lleis de l'equilibri químic.



$$K_c = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]}$$

La concentració d'aigua no s'acostuma incloure en l'expressió de la constant d'equilibri perquè, com és el dissolvent, resta pràcticament constant durant tot el procés.



PRINCIPI DE LE CHATELIER

Qualsevol modificació dels factors que determinen l'equilibri n'origina un desplaçament en el sentit que contrareasta aquesta modificació.

CONCENTRACIÓ

$$K_c = \frac{[HI]^2}{[I_2][H_2]}$$

Com que el sistema està en equilibri, $Q_c = K_c$

$$Q_c = \frac{[HI]^2}{[I_2][H_2]}$$

* Si afegim H_2 augmenta la concentració d'aquesta substància, per tant augmenta el denominador de l'expressió de la constant d'equilibri. El sistema reacciona disminuint la concentració d'hidrogen. L'equilibri s'ha desplaçat cap a **dreta**.

FACTORS

TEMPERATURA

* Si la temperatura d'un sistema químic augmenta, la reacció es desplaçarà en el sentit en què té lloc una absorció d'energia.

* Si disminueix, l'equilibri es desplaça en el sentit en què es desprèn energia.

PRESSIÓ

Una variació de pressió implica una variació de volum, especialment en els gasos. També variarà la concentració dels components del sistema.

Aplicant Le Chatelier, el equilibri es desplaçarà en el sentit de contrarestar la variació de pressió.

