Pontificia Universidad Católica de Chile

Taller 3

Cinética Química

Química para Ingeniería

QIM100E, 2024

1. Una reacción química transcurre a través de dos etapas elementales:

$NO_2Cl_{(g)} \rightarrow NO_{2\,(g)} + Cl_{(g)}$ (lenta)

$NO_2Cl_{(g)} + Cl_{(g)} \rightarrow NO_{2\,(g)} + Cl_{2\,(g)}$ (rápida)

a) Escriba la ecuación global.
b) Indique la etapa determinante de la velocidad.
c) Deduzca la ley de velocidad.
d) Justifique si existen intermediarios en el mecanismo propuesto.

Velocidad y Método de las velocidades iniciales

2. La combustión del butano ocurre a través de la siguiente reacción química:

$C_4H_{10}\,(g) + 13/2\,O_2\,(g) \rightarrow 4\,CO_2\,(g) + 5\,H_2O\,(g)$

Si se consumen 5,5 moles de butano cada 20 minutos de reacción, ¿cuántos moles de dióxido de carbono se producirán en 55 min?

3. Se tiene la siguiente reacción química genérica A + B + C → Productos, se obtuvieron los siguientes datos (Tabla 1).

Tabla 1

Experimento	[A], mM	[B], mM	[C], mM	V mmol/(L s)
Exp1	1,2	1,2	1,2	8,7
Exp2	1,9	1,2	1,2	13,7
Exp3	1,2	3,0	1,2	51
Exp4	1,9	3,0	2	129

Usando los datos de la tabla 1, calcule la constante de velocidad y los órdenes parciales y totales dela reacción

4. La reacción entre iones bromato (BrO_3^-) y bromuro (Br^-) en solución acuosa y bajo condiciones acídicas, es dada por la siguiente ecuación:

$$BrO_3^- (ac) + 5Br^- (ac) + 6H^+ (ac) \longrightarrow 3Br_2 (l) + 3H_2O (l)$$

La tabla 2 resume los resultados de 4 experimentos en los cuales se varía la concentración inicial de reactantes ($[\ ]_0$).

Tabla 2

Experimento	$[BrO_3^-]_0$ (mol/L)	$[Br^-]_0$ (mol/L)	$[H^+]_0$ (mol/L)	Velocidad inicial (mol/L·s)
1	0,10	0,10	0,10	$8,0 \times 10^{-4}$
2	0,20	0,10	0,10	$1,6 \times 10^{-3}$
3	0,20	0,20	0,10	$3,2 \times 10^{-3}$
4	0,10	0,10	0,20	$3,2 \times 10^{-3}$

Usando los datos de la tabla 2, determine los órdenes de reacción de los 3 reactantes (bromato, bromuro y protón), el orden de reacción general y el valor de la constante de velocidad, *k*.

Ley de velocidad integrada

5. En la siguiente reacción química:

N_2 (g) + 3 H_2 (g) → 2 NH_3 (g),

El nitrógeno está reaccionando a una velocidad de 0,4 M/min, con esta información calcule lo siguiente

a) Calcule la velocidad de desaparición del hidrógeno y la velocidad de formación del amoniaco.

b) Con la información que dispone, ¿podría proponer valores correctos para x e y en la expresiónde velocidad o se requiere más información? (Adapt. LR, 2007)

6. Se tiene la siguiente reacción química:

2 NO (g) + O2 (g) → 2 NO2 (g)

Al respecto se sabe que la reacción es de segundo orden respecto de NO y de primer orden respecto del oxígeno.

a) Escriba la ecuación de velocidad.

b) Suponga que se triplica el volumen del medio de reacción sin variar las masas absolutas de NO y O_2. Indique en qué proporción variaría la velocidad de la reacción.

7. Se tiene la siguiente reacción exotérmica:

$$A\ (g) + 3\ B\ (g) \rightarrow 2\ C\ (g).$$

Al respecto se sabe que la reacción es de primer orden respecto de A y de segundo orden respecto de B.

a) Escriba la ecuación de velocidad de esa reacción.

b) ¿Cómo se modificaría la velocidad de reacción si:

i) se duplica la concentración de A;

ii) se cuadruplica la concentración de B (Adapt. Can, 2007)

8. La descomposición de N_2O_5 en fase gaseosa ocurre de acuerdo a la siguiente reacción:

$$2N_2O_5\ (g) \longrightarrow 4NO_2\ (g) + O_2\ (g)$$

La tabla 3 muestra los datos recolectados para esta descomposición a temperatura constante.

Tabla 3

$[N_2O_5]$ (mol/L)	**Tiempo (s)**
0,1000	0
0,0707	50
0,0500	100
0,0250	200
0,0125	300
0,00625	400

a) Utilizando estos datos, determine el orden de reacción para este proceso y calcule el valor de laconstante de velocidad

b) Usando los datos de la pregunta a), determine $[N_2O_5]$ a t = 150 s después de comenzada lareacción

9. El bromuro de nitrosilo (NOBr) descompone térmicamente a 10 °C de acuerdo a la siguiente reacción:

$$2NOBr\ (g) \longrightarrow 2NO\ (g) + Br_2\ (g)$$

Usando los valores de la tabla 4, recolectados a 10 °C, determine el orden de reacción para esta descomposición.

Tabla 4

[NOBr] (mol/L)	**Tiempo (s)**
0,010	0
0,0071	2
0,0055	4
0,0045	6
0,0038	8
0,0033	10

Vida Media

10. Determine la vida media ($t_{1/2}$) de las reacciones especificadas en los problemas 7a y 8

11. El compuesto inorgánico phosphina (PH_3) descompone en solución, siguiendo una cinética de primer orden. Bajo estas condiciones, y partiendo de una solución de concentración inicial 1,00 mol/L de PH_3, se requieren 120 s para llegar a una concentración final de 0,250 mol/L de PH_3.

a) Determine la vida media para la descomposición de PH_3
b) Si se parte de una concentración inicial de PH_3 de 2,00 mol/L, cuánto tiempo se requerirá para llegar a una concentración de 0,350 mol/L

12. Considere la siguiente reacción de primer orden: A → productos, donde $[A]_0$ = 0,815 y [A] = 0,630 M transcurridos 15,0 min.

a) ¿Cuál es el valor de la constante de velocidad?
b) ¿Cuál es la vida media de esta reacción?
c) ¿Cuánto tiempo debe pasar para que [A] = 0,240 M?
d) ¿Cuál será la concentración de [A] transcurridas 2 horas?

13. Para la reacción A → productos, se han obtenido los siguientes datos: t = 0 min, $[A]_0$ =0,715 M; 22 s, 0,605 M; 74 s, 0,345 M; 132 s, 0,055 M.

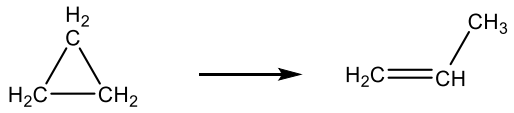
a) ¿Cuál es el orden de la reacción?
b) ¿Cuál es la vida media de la reacción? (Fuente: Petrucci 2011)

Energía de Activación

14. La constante de velocidad de una reacción se duplica al elevarse la temperatura de 20 ºC a 30 ºC. Calcular la energía de activación.

15. La energía de activación de una reacción es igual a 120 kJ/mol. Con esta información calcule la temperatura a la que se debe elevar el medio donde se encuentra dicha reacción para que el valor de la constante se duplique respecto al valor a 300 K.

16. El ciclopropano es un compuesto orgánico que sufre una reacción de isomerización de acuerdoa la reacción descrita más abajo, y que involucra la ruptura de un fuerte enlace covalente:



C_3H_7 ***ciclopropano*** ***C_3H_7*** ***propeno***

A altas temperaturas (> 400 °C), el siguiente set de datos fue recolectado para esta reacción:

Tabla 4

T (°C)	***k*** **(s^{-1})**
477	0,00018
523	0,0027
577	0,030
623	0,26

Calcule el valor de la energía de activación (E_a) para este proceso.

17. La teoría de Arrhenius establece que la velocidad de una reacción química es dependiente de la temperatura. En química, una aproximación común es asumir que la velocidad de una reacción se aumenta al doble, por cada aumento de 10 °C. Asumiendo que esta aproximación es correcta, calcule el valor de la energía de activación para un proceso muestra este comportamiento. ¿Cómo se compara este valor con el obtenido en el problema 15)? ¿se podrá asumir esta aproximación para proceso descrito en el problema 15)?

18. Para una reacción entre los reactivos A y B→ productos, la constante de velocidad es igual a 0,385 L /(mol s) a 327 °C y 16,5 L /(mol s) a 443 °C. Al respecto se le solicita calcular lo siguiente:

a) La energía de activación.
b) El factor de frecuencia.
c) La constante de velocidad a 500 °C.