Pontificia Universidad Católica de Chile
Taller 3
Química para Ingeniería
QIM100E, 2023

Cinética Química

1. Método de las velocidades iniciales

La reacción en medio ácido entre el ion bromato (BrO_3^-) y el ion bromuro (Br^-), es determinada por la siguiente ecuación química:

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

La tabla 1 resume los resultados de 4 experimentos independientes en los cuales se varió la concentración inicial de ambos reactivos. Utilizando estos datos, determine los órdenes de reacción de los 3 reactantes (bromato, bromuro y protón), el orden de reacción global y el valor de la constante de velocidad, *k*.

Tabla 1

Experimento	$[BrO_3^-]_0$ (mol L^{-1})	$[Br^-]_0$ (mol L^{-1})	$[H^+]_0$ (mol L^{-1})	Velocidad inicial (mol L^{-1} s^{-1})
1	0,20	0,20	0,20	$1,6 \times 10^{-3}$
2	0,40	0,20	0,20	$3,2 \times 10^{-3}$
3	0,40	0,40	0,20	$6,4 \times 10^{-3}$
4	0,20	0,20	0,40	$6,4 \times 10^{-3}$

2. Ley de velocidad integrada

a) El ácido carbónico que produce la efervescencia de los refrescos se descompone espontáneamente en dióxido de carbono y agua de acuerdo con la siguiente reacción químicas:

$$H_2CO_3(ac) \longrightarrow H_2O(l) + CO_2(g)$$

Un ingeniero midió, a temperatura constante, la concentración de ácido carbónico a diferentes tiempos luego de transcurrida la reacción, y sus resultados son expresados en la tabla 2. Utilizando estos datos, determine:

i) El orden de reacción para la descomposición de ácido carbónico

ii) La constante de velocidad de la reacción de descomposición
iii) La concentración de ácido carbónico a los 350 segundos luego de iniciar la reacción

Tabla 2

$[H_2CO_3]$(mol L^{-1})	Tiempo (min)
0,1000	0
0,0707	50
0,0500	100
0,0250	200
0,0125	300
0,00625	400

b) La descomposición térmica del acetaldehído (etanal) gaseoso se produce a una temperatura constante de 500°C, y en dicho proceso se generan los gases metano y monóxido de carbono, como se expresa la siguiente reacción.

$$CH_3CHO(g) \longrightarrow CH_4(g) + CO(g)$$

Un investigador estudió este proceso de descomposición y determinó la concentración de etanal a diferentes tiempos, y sus resultados son expresado en la tabla 3. Con relación a estos resultados, determine:

i) El orden de reacción para la descomposición de etanal
ii) La constante de velocidad de la reacción de descomposición de acetaldehído
iii) Cuanto tiempo debe avanzar la reacción para que la concentración de etanal sea de 0,004 mol/L

Tabla 3

$[CH_3CHO]$ (mol L^{-1})	Tiempo (h)
0,0200	0
0,0142	5
0,0110	10
0,0090	15
0,0076	20
0,0066	25

3. Vida Media

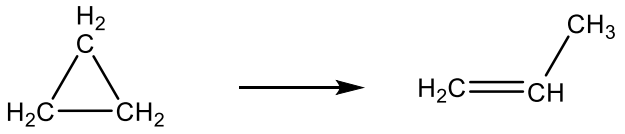
a) Determine la vida media ($t_{1/2}$) de las reacciones especificadas en los problemas 2a y 2b

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

i) Determine la vida media para la descomposición de PH_3
ii) Si se parte de una concentración inicial de PH_3 de 2,00 mol L^{-1}, cuánto tiempo se requerirá para llegar a una concentración de 0,350 mol L^{-1}

4. Energía de Activación

a) El ciclopropano es un compuesto orgánico que, a temperaturas superiores a 400 ºC, sufre una reacción de isomerización que involucra la ruptura de un enlace sigma y la formación de un enlace pi, de acuerdo con la reacción descrita a continuación.



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

A partir de los datos entregados en la tabla 4, calcule el valor de la energía de activación (E_a) para este proceso.:

Tabla 4

T (ºC)	k (s^{-1})
477	0,00018
523	0,0027
577	0,0300
623	0,2600

b) 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 10ºC.

i) Asumiendo que esta aproximación es correcta, calcule el valor de la energía de activación para un proceso que muestra este comportamiento.

ii) ¿Cómo se compara este valor con el obtenido en la pregunta 4a? ¿se podrá asumir esta aproximación para el proceso descrito en 4a?

c) El Ácido acetoacético, CH_3COCH_2COOH se descompone en solución ácida produciendo acetona y dióxido de carbono de acuerdo a la siguiente reacción química:

$$CH_3COCH_2COOH(ac) \xrightarrow{H^+} CH_3COCH_3(ac) + CO_2(g)$$

La reacción sigue una cinética de primer orden, y presenta un tiempo de vida media de $t_{1/2}$ = 0,77 h a 25°C y $t_{1/2}$ = 0,04 h a 102°C.

i) Calcule la energía de activación de esta reacción.
ii) Determine a qué temperatura la vida media de la reacción será igual a 10 minutos