

## QUÍMICA FÍSICA

### Trabajo Práctico de Aula N° 2.

#### Efecto de la Temperatura en la Ecuación Cinética

- 1- En un artículo reciente (Orkin et al, J. Phys. Chem., 1997, 101:174), las constantes de velocidad se determinaron en el caso de la reacción entre el radical hidroxilo y el clorobrometano:



Los datos obtenidos incluían los siguientes valores de la constante de velocidad  $k$  para las siguientes temperaturas.

T (K)	k (cm <sup>3</sup> molécula <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )
298	1,11x10 <sup>-13</sup>
313	1,34x10 <sup>-13</sup>
330	1,58x10 <sup>-13</sup>

Demuestre gráficamente que los datos obedecen a la ecuación de Arrhenius (aproximadamente) y determine el valor preexponencial  $A$  y la energía de activación  $E_a$ .

- 2- Usando la información deducida en el problema anterior para determinar la constante de velocidad a 370 K. Compare este valor con el valor determinado experimentalmente de  $2,10 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ molécula}^{-1} \text{ s}^{-1}$ .
- 3- Determine  $A$  y  $E_a$  a partir de los siguientes datos:

T (K)	300	350	400	450	500
k (dm <sup>3</sup> moléc <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	7,9X10 <sup>6</sup>	3,0X10 <sup>7</sup>	7,9X10 <sup>7</sup>	1,7X10 <sup>8</sup>	3,2X10 <sup>8</sup>

- 4- Calcule el cociente de las constantes cinéticas a temperatura ambiente para dos reacciones que tienen igual valor de  $A$  pero cuyas  $E_a$  difieren en:
- 1 Kcal mol<sup>-1</sup>
  - 10 Kcal mol<sup>-1</sup>
- 5- Calcule  $E_a$  para una reacción cuya constante de velocidad a temperatura ambiente se duplica cuando se incrementa en 10 °C la temperatura. Repita los cálculos para una reacción cuya constante de velocidad se triplica.

- 6- Se investiga la dependencia con la temperatura de la hidrólisis catalizada por ácidos de la penicilina donde la variación de  $k_1$  con la temperatura se da en la siguiente tabla. Determine la energía de activación y el factor preexponencial de Arrhenius para esta rama de la hidrólisis.

<b>T (°C)</b>	<b>K<sub>1</sub> (s<sup>-1</sup>)</b>
22,2	$7,0 \times 10^{-4}$
27,2	$9,8 \times 10^{-4}$
33,7	$1,6 \times 10^{-3}$
38,0	$2,0 \times 10^{-3}$

- 7- La velocidad de una reacción bimolecular a 500 K es diez veces mayor que a 400 K. Calcule su energía de activación:
- a- A partir de la ecuación de Arrhenius
  - b- A partir de la teoría de la colisión
  - c- Determine cuál es la diferencia porcentual de la velocidad de reacción a 600 K predicha por estos dos métodos.
- 8- La pirolisis del etano tiene lugar con una energía de activación de unas 75000 calorías. Determine el aumento relativo de la velocidad de descomposición a 650°C con respecto a 500°C.