

4. ZINETIKA KIMIKOA

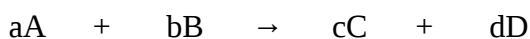
Zergatik da garrantzitsua?

- INDUSTRIAN azkarrago ekoizteko.
- MEDIKUNTZAN sendagaiek dituzten molekulak azkarrago edo motelago askatzeko.
- ELIKADURAN janarian botatzen diren kontserbatzaileek motelten dituzte oxidazio-erredukzioak.

1. Erreakzio abiadura

Erreakzio baten abiadura jakiteko aztertzen da nola aldatzen den erreaktiboan ala produktuen kontzentrazioa erreakzioa gertatu ahala (hau da, denbora pasatu ahala).

Demagun honako erreakzio hau:



↓

koefiziente
estekiometrikoak

↓

erreaktiboak
desagertzen ari
dira

↓

-

↓

produktuak
agertzen ari dira

↓

+

Batez besteko abiadura (V_{bb}):

$$V_{bb} = -\frac{1}{a} \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta[C]}{\Delta t} = \frac{1}{d} \frac{\Delta[D]}{\Delta t}$$

Logikoaenez, abiadura ez da konstantea izango:

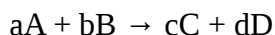
$$t \uparrow V \downarrow$$

Denbora pasa ahala abiadura motelduko da, izan ere, erreaktiboan kontzentrazioa gutxitzen da eta hauek aurkitzeko aukera ere gutxitzen da, gainera motelago mugitzen dira.

V-ren unitateak → mol / L·s

Abiadura-ekuazioa

Erreakzio kimiko jakin baterako abiadura eta erreaktiboan kontzentrazioa erlazionatzen du eta erreakzio bakoitzak bat dauka.



$$V = k[A]^x[B]^y$$

- V : erreakzioaren abiadura $[\text{mol} / \text{L} \cdot \text{s}]$
- k : abiadura konstantea erreakzio jakin baterako (erreakzio bakoitzak bere k).
Temperaturaren mende dago $\rightarrow k \uparrow V \uparrow$
- $[A]$, $[B]$: erreaktiboaren unean uneko kontzentrazio molarra $[\text{mol} / \text{L}]$
- x , y : erreakzioaren ordena partziala, esperimentalki kalkulaturako berretzaileak (beti ez dira koefiziente estekiometrikoak)

Erreakzioaren ordena erreaktibo batetik

Abiadura-erreakzioaren erreaktibo horrek duen berretzailea.

Adibidez:

- ▷ $2\text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow 4\text{NO}_2 (\text{g}) + \text{O}_2 (\text{g})$
 $V = k [\text{N}_2\text{O}_5]^1$ 1. ordena N_2O_5 -rekiko
- ▷ $2\text{NO}_2 \rightarrow 2\text{NO} (\text{g}) + \text{O}_2 (\text{g})$
 $V = k [\text{NO}_2]^2$ 2. ordena NO_2 -rekiko

Erreakzioaren ordena totala

Abiadura-erreakzioaren erreaktiboaren berretzaileen lotura.

Adibidez:

- ▷ $2\text{NO}_2 (\text{g}) + \text{F}_2 (\text{g}) \rightarrow 2\text{NO}_2\text{F} (\text{g})$
 $V = k [\text{NO}_2]^1 [\text{F}_2]^1$ 1 + 1 = 2. ordena totala
- ▷ $\text{CO} (\text{g}) + \text{NO}_2 (\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2 (\text{g}) + \text{NO} (\text{g})$
 $V = k [\text{NO}_2]^2 [\text{CO}]^0$ 2. ordena totala eta NO_2 -rekiko
 $[\text{CO}]^0 = 1 \rightarrow 0$. ordena CO -arekiko, CO -k ez du eraginik abiaduran

2. Teoria zinetikoa

Talken teoria

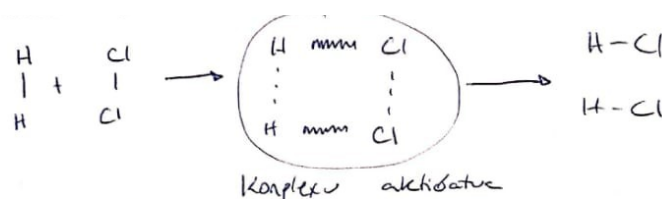
Erreakzio kimiko bat gerta dadin...

- ➔ Erreaktiboaren molekulek TALKA egin behar dute.
- ➔ Talka ERAGINKORRA izateko behar da:
 - Orientazio egokia.
 - Talken energia zinetikoa nahikoa izatea loturak apurtzeko \rightarrow AKTIBAZIO-ENERGIA.

Konplexu aktibatuen teoria

Erreaktiboaren molekulek elkarren kontra jotzen dutenean energia altua eta iraupen laburra duen bitarteko egoera bat sortzen da: KONPLEXU AKTIBATUA.

Lotura batzuk apurtzean, besteak sortzen dira bitartean.



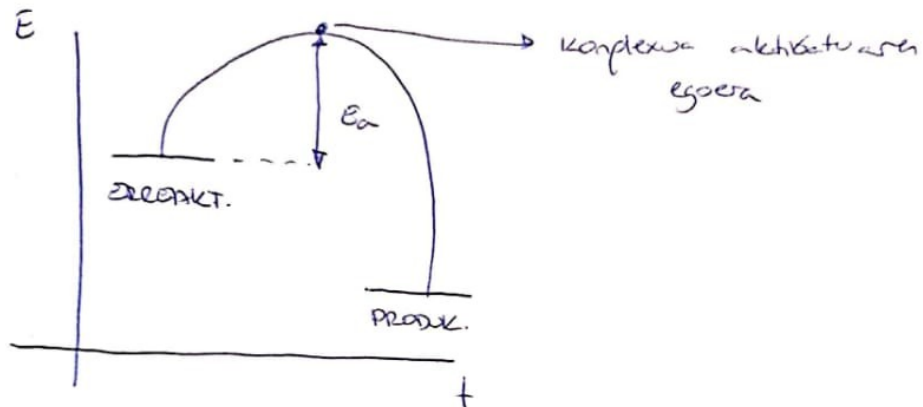
Konplexu aktibatua oso ezegonkorra da eta beharrezkoa den energia konplexua sortzeko, AKTIBAZIO-ENERGIA (E_a).

E_a eta abiadura erlazionatuta daude:

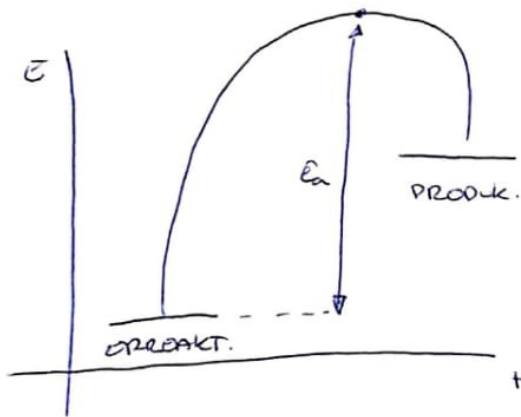
$$E_a \downarrow V \uparrow$$

Izan ere, aktibazio-energia gutxituz gero errazago heltzen da tarteko egoerara.

→ Erreakzio exotermikoa $\Delta H < 0$



→ Erreakzio endotermikoa $\Delta H > 0$



3. Abiaduran eragina duten faktoreak

1. Temperatura

T ↑ V ↑ (k-n eragina duelako)

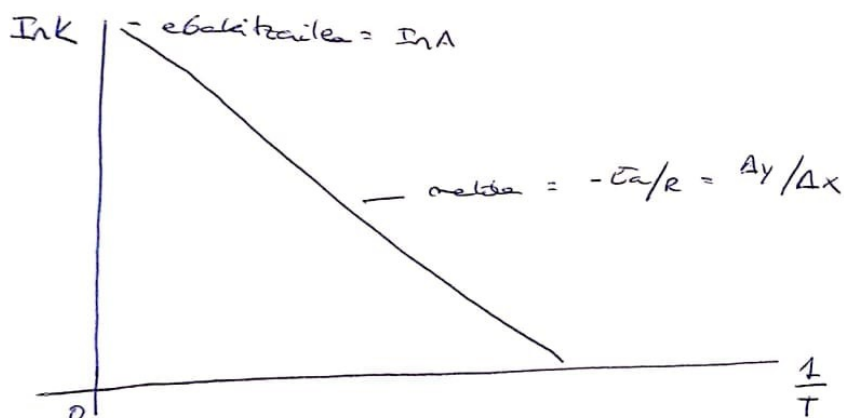
Menpekotasun hori neurtzeko Arrhenius ekuazioa erabiltzen da:

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

- A : maiztasun-faktoreak (talken maiztasuna) (k-ren unitateak)
- e : 2,7182...
- E_a : aktibazio-energia [KJ/mol]
- R : 0,082 atm·L / k·mol = 8,31·10⁻³ KJ / k·mol
- T : temperatura [K]

Normalean era honetan ere erabiltzen da Arrhenius ekuazioa:

$$\ln k = \frac{-E_a}{R} \cdot \frac{1}{T} + \ln A \quad (y = mx + b)$$



2. Erreakzioen eragina

- **Kontzentrazioa**

[] ↑ V ↑

[] ↓ V ↓

- **Izaera kimikoa**

lotura ionikoak → V ↑

lotura kobalenteak → V ↓

- **Egoera fisikoa**

likidoak, gasak → V ↑

solidoak → V ↓

- **Solidoen zatiketa maila**

zatiketa ↑ ukipen gainazala ↑ → V ↑

zatiketa ↓ ukipen gainazala ↓ → V ↓

4. Katalizatzaileak

Substantzia bat da, erreakzio kimiko batean abiaduraren aldaketa bat eragiten duena.

EZ DA KONTSUMITZEN → ez du erreakzioan parte hartzen

- Katalizatzaile positiboak: $V \uparrow$ ($E_a \downarrow$)
- Katalizatzaile negatiboak: $V \downarrow$ ($E_a \uparrow$)