***ZINETIKA KIMIKOA***

**ERREAKZIO ABIADURA**

Denbora unitate bakoitzean galtzen den erreaktibo baten kantitatea edo denbora unitate bakoitzean eratzen den produktu baten kantitatea adierazten du erreakzio abiadurak.

Erreakzio abiadura kalkulatzeko: saiakuntzaren bidez. Ikerketen bidez lortzen den adierazpenari abiaduraren lege diferentziala edo abiadura ekuazioa esaten zaio eta honelako itxura izaten du:

$v=k\left[A\right]^{α}\left[B\right]^{β}$… (LAM legea= Guldberg eta Waagen legea)

Abiadura-ekuazioan agertzen den K konstantea, abiadura konstantea da, erreakzio bakoitzarentzat berezia da, baina tenperaturaren menpe dago Arrhenius-en ekuazioak adierazten duen bezala:

$$k=Ae^{{-E}/{RT}}$$

**ERREAKZIOEN MEKANISMOA (ERREAKZIO KONPLEXUEN ETAPA KONTROLATZAILEA)**

Erreakzio kimiko gehienak ez dira gertatzen ekuazio estekiometrikoan adierazten duen legez, bitarteko prozesu edo etapa batzuetan baino. Etapa bakoitzari oinarrizko prozesua edo oinarrizko erreakzioa esaten zaio.

Erreakzio kimikoan gertatzen diren oinarrizko erreakzioen multzoari erreakzio mekanismoa esaten zaio.

Mekanismo horren barneko etapa edo oinarrizko erreakzio motelenak zehazten du prozesu osoaren abiadura, eta oinarrizko etapa horretako erreaktiboen koefizienteak izango dira abiadura-ekuazioan ageriko diren mailak (berretzaileak).

**ERREAKZIO ABIADURAN ZERIKUSIA DUTEN FAKTOREAK**

* **Katalizatzaileak:** Erreakzio kimiko batean presente dagoenean abiadura aldaketa bat eragiten duen substantzia da eta ez da erreakzioan zehar kontsumitzen.
	+ Katalizatzaile positiboek erreakzioaren abiadura handiagotzen dute; Gaur egun gehien erabiltzen direnak
	+ Katalizatzaile negatibo edo inhibitzaileek erreakzioaren abiadura moteltzen dute. Elikagaien industriak garrantzitsuak, elikagaiak hondatu ditzaketen erreakzioak moteldu edo eragozteko.

Erreakzioaren bukaeran aldagabe mantentzen dira, eta horregatik ekuazio estekiometrikoan ez dira agertzen ez erreaktibo, ez produktu moduan.

Katalizatzaileek erreakzioari ohiko prozesuan baino aktibazio-energia txikiagoa (positiboek) edo aktibazio energia handiagoa (negatiboek) eskatzen duten bide alternatibo bat eskaintzen diote.

Katalitzaile motak:

* Katalizatzaile homogeneoak: Katalizatzailea erreaktiboak daudeneko fase berdinean badago, prozesua: katalisi homogeneoa
* Katalizatzaile heterogeneo edo ukipenekoak: Katalizatzailea erreaktiboen fase berdinean ez, fase desberdinean badago. Gasen arteko edo likidoen arteko erreakzioetan aritzen diren solidoak, industria kimikoan oso erabiliak.

***OREKA KIMIKOA***

Erreakzio kimiko batzuetan transformazio kimikoa norantz atean zein alderantzizkoan gertatzen da, oreka kimikoa gertatzen da. Erreakzio horiei itzulgarriak deritze.

**OREKA KIMIKOAREN LEGEA**

Sistema itxi eta tenperatura jakin batean gertatzen den edozein erreakzioak (itzulgarria bada) oreka lortzen du azkenean. Une horretan, masa ekintzaren legeak eraginda, oreka kimikoaren legea izenekoa betetzen da. Oreka kimikoa lortzean:

 a A + b B c ⮀ C + d D

$K\_{c}=\frac{K\_{z}}{K\_{a}}=\frac{\left[C\right]^{c}\left[D\right]^{d}}{\left[A\right]^{a}\left[B\right]^{b}}$ Kc: Orekan dagoen erreakzioaren konstantea

**OREKAREN KONSTANTEA**

Oreka-konstantearen balioa, koefiziente estekiometrikoen eta tenperaturaren menpe eta ekuazioaren bi atalen ordenaren menpe dago. Adibideak:

1. kasua: H2 (g) + I2 (g) ⮀ 2 HI (g) ; $K\_{1}=\frac{\left[HI\right]^{2}}{\left[H\_{2}\right]\left[I\_{2}\right]}$

2. kasua: 2 HI (g) ⮀ H2 (g) + I2 (g) ; $K\_{2}=\frac{\left[H\_{2}\right]\left[I\_{2}\right]}{\left[HI\right]^{2}}$

3. kasua: $\frac{1}{2}$ H2 (g) + $\frac{1}{2}$ I2 (g) ⮀ HI (g) ; $K\_{3}=\frac{\left[HI\right]}{\left[H\_{2}\right]^{{1}/{2}}\left[I\_{2}\right]^{{1}/{2}}}$

1. eta 2. kasuak konparatuz gero, ekuazio berdinak baina *alderantziz*. Euren oreka konstanteak alderantzizkoak: K1=1/K

1. eta 3. Kasuak, bata eta bestea idazteko erabilitako *koefiziente estekiometrikoak desberdinak.* Oreka konstantearen arteko erlazioa, koefizienteen izendatzailearekin erlazionatuta dago:

K1=K32 (izendatzailea)

**PROBLEMETARAKO ERABILGARRIAK**

**Disoziazio-gradua, α:** Hasierako mol bakoitzeko zenbat substantzia disoziatzen den.

$\frac{n hasieran}{x disoziatu}=\frac{1 mol hasieran}{α} ; α=\frac{x}{n hasiera}$ ∆H ematean erreakzio zuzenarena da

$\left[substantzia\right]=C=\frac{n}{v}$ C-ren unitatea: M edo mol/l $K\_{p}=K\_{c}\left(R·T\right)^{∆n}$

$∆n=∑n produktuak- ∑n erreaktiboak$

Tenperatura aldatzen bada, Kc eta Kp aldatu, bestela ez

disoziatu=deskonposatu // eratu=sintetizatu

**Le Chatelier** printzipioaren arabera sistema eragindako aldaketaren kontra desplazatuko da.

* **Tenperatura igo**tzen bada, gas nahasteari edo sistemari beroa ematen zaio. Sistemak bero hori xurgatu egingo du, erreakzio endotermikoa eginez. Kasu honetan…
* **Tenperatura jaist**en bada, gas nahasteari edo sistemari beroa kentzen zaio. Sistemak galdutako bero kopuru hori berreskuratuko du beroa askatuz, erreakzio exotermikoa eginez. Kasu honetan…
* **Presioa handi**tzen bada, substantziek bolumen txikiagoa hartzeko noranzkoan desplazatzen da oreka, hau da, gas nahastea edo sistema mol kopuru gutxien dagoen aldera desplazatzen da. Kasu honetan…
* **Presioa txiki**tzen bada, substantziek bolumen handiagoa hartzeko noranzkoan desplazatzen da oreka, hau da, gas nahastea edo sistema mol kopuru gehien dagoen aldera desplazatzen da. Kasu honetan…
* **Substantzia kopurua handi**tzen bada, sistemak aldaketa horren aurka substantzia hori gastatu beharko du, sistemaren oreka desplazatuz. Kasu honetan, erreakzio zuzena / alderantzizkoa egingo da. Hau da, **substantziaren kontzentrazioa handi**tzen bada, sistema substantzia kontsumitzen deneko noranzkoan desplazatzen da.
* **Substantzia kopurua txiki**tzen bada, sistemak aldaketa horren aurka substantzia hori sortu beharko du, sistemaren oreka desplazatuz. Kasu honetan, erreakzio erreakzio zuzena / alderantzizkoa egingo da. Hau da, **substantziaren kontzentrazioa txiki**tzen bada, sistema substantzia ekoizten deneko noranzkoan desplazatzen da.

Erreakzioa ematerakoan ez baldin badago mol kopuru aldaketarik presio aldaketak ez du eraginik orekan. Katalizatzaileek ere ez dute eraginik oreka konstantearengan, eta ez du oreka norantz batean edo bestean desplazatzen, bi norabideetan ematen diren erreakzioen abiadura aldatzen du.

**OREKA HOMOGENEOAK eta HETEROGENEOAK / FASE GASEOSOAN (Kp)**

$K\_{p}= \frac{P\_{C}^{c} · P\_{D}^{d}}{P\_{A}^{a}· P\_{B}^{b}}$non bakoitzaren presio partziala jarri behar den

* **Homogeneoa:** Espezie kimiko guztiak fase berean, egoera berean badaude.
* **Heterogeneoa:** Erreaktiboak eta produktuak fase edo egoera ezberdinean daude.

Heterogeneoaren kasuan gasen kontzentrazioak soilik ageri dira, edo akuosoak bestela, oreka konstantean (Kps=Ks=disolbagarritasun biderkadura).

Prezipitatu ondoren geratzen den soberakina **hauspeakina** da eta disolbagaitza den substantzien kontzentrazioen arteko biderkadura Kps baino handiagoa bada hauspeakina bai, txikiagoa bada ez

Disoluzio ase edo saturatuaren kontzentrazioa **disolbagarritasuna (s)** da.