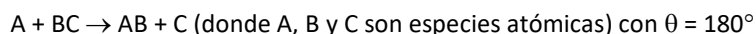


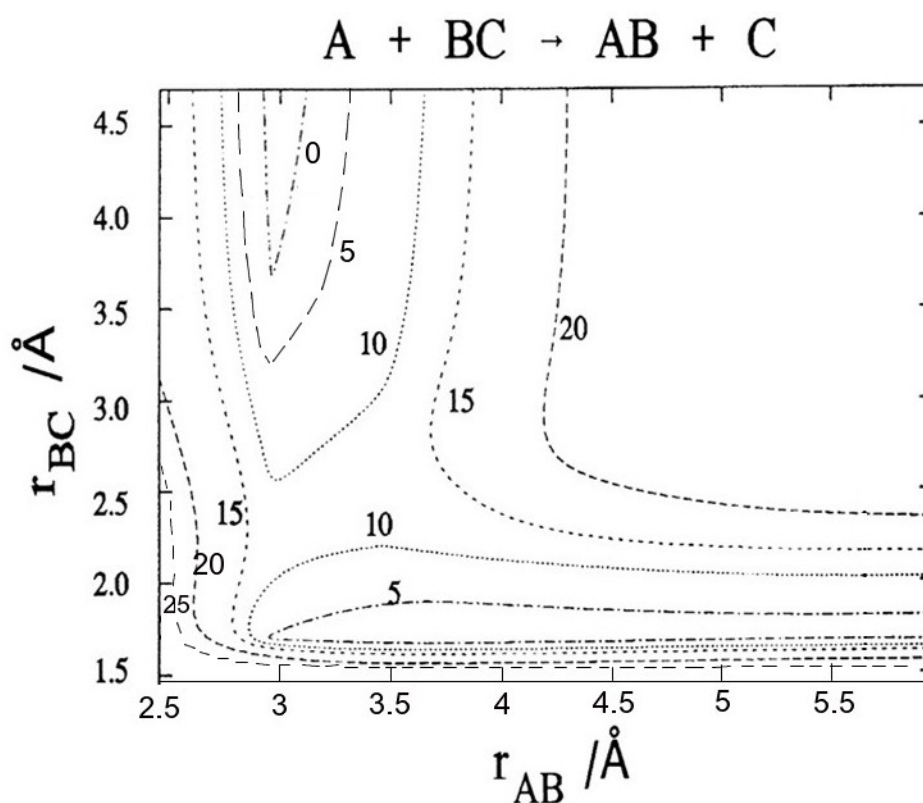
PROBLEMAS DE QUÍMICA FÍSICA II. Curso 2018-2019

Problemas de Cinética Química: Teorías Cinéticas

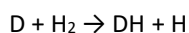
37. Se muestra la superficie de energía potencial calculada para la reacción:



Los valores de energía correspondientes a cada curva se indican en la figura y están en kcal/mol; se ha considerado el cero de energía en los reactivos separados. Basándote en la figura: (a) indica los valores aproximados de las barreras energéticas para la reacción directa e inversa, así como el balance energético global de la reacción directa; (b) determina de manera aproximada la configuración geométrica de los reactivos, de los productos y del estado de transición. Sitúalos en la gráfica; (c) dibuja de manera aproximada la gráfica (bidimensional) de energía potencial frente a coordenada de reacción; (d) calcula (aprox.) las energías de disociación de las moléculas BC y AB.



38. (a) Utilizando la teoría del estado de transición, calcula la constante de velocidad de la reacción a 600 K:

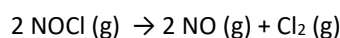


$$\Delta E_0^\ddagger = 5.79 \times 10^{-20} \text{ J}, (q^\ddagger / q_D q_{H_2}) V = 1.33 \times 10^{-23} \text{ cm}^3, k_B = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J/K}, h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s.}$$

(b) Si sabemos que k_{exp} a 450 K es $9 \times 10^9 \text{ cm}^3/\text{mol s}$, k_{exp} a 600 K es $9.51 \times 10^{10} \text{ cm}^3/\text{mol s}$, y que k calculada según la TCA a 450 K es $5.5 \times 10^9 \text{ cm}^3/\text{mol s}$, razona si tiene mayor o menor importancia el efecto túnel con el aumento de la temperatura.

Resultado: $9.27 \times 10^7 \text{ mol}^{-1} \text{ L s}^{-1}$

39. Los parámetros de Arrhenius para la descomposición troposférica de cloruro de nitrosilo a 300 K son $A = 1.00 \times 10^{13} \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ y $E_a = 104 \text{ kJ mol}^{-1}$.



Calcula la entalpía y la entropía de activación a 300 K.

Resultado: 99 kJ mol^{-1} , $-12.7 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$

40. La reacción de asociación en fase gas entre F_2 y IF_5 a $65^\circ C$ es de primer orden en cada reactivo. La energía de activación experimental es 58.6 kJmol^{-1} , y el factor preexponencial es $1.32 \times 10^{10} \text{ L mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Calcula la energía de Gibbs de activación.

Resultados: $\Delta G^{\ddagger,0_c} = 76.2 \text{ kJ/mol}$