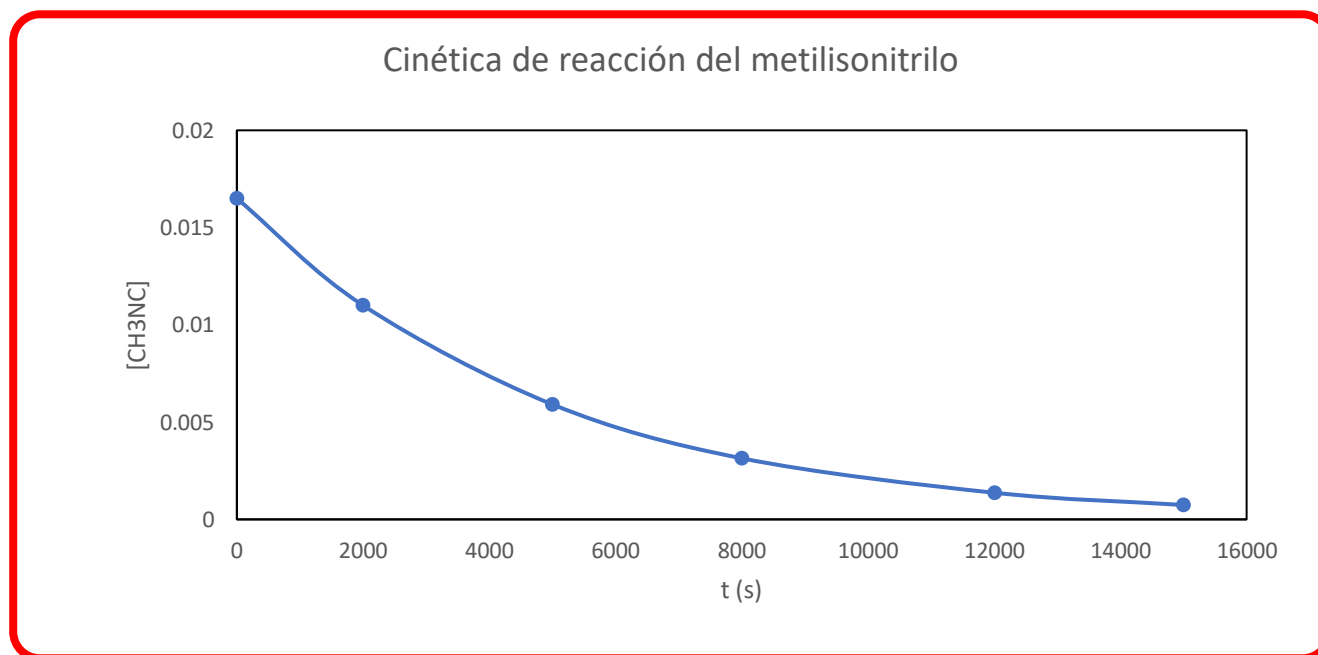


Tarea 11. Velocidad de reacción y orden de reacción

De acuerdo con los resultados del simulador

Velocidad de reacción (velocidad promedio e instantánea)					
Instrucción: Llenar las celdas de color amarillo, los resultados aparecen en las celdas de color verde					
El rearreglo del metil-isonitrilo CH_3NC se monitoreó en fase gaseosa y se obtuvieron los siguientes datos:					
1) Obtener velocidad promedio					
Tiempo (s)	$[\text{CH}_3\text{NC}]$ (M)	$\text{Ln}[\text{CH}_3\text{NC}]$	v	k	$v = - \frac{[\text{CH}_3\text{NC}]_t - [\text{CH}_3\text{NC}]_{t_0}}{t - t_0}$
0	0.0165	-4.10439490	3.42344E-06	0.0002075	
2000	0.0110	-4.50986001	2.28229E-06	r^2	
5000	0.0059	-5.13110945	1.22621E-06	0.9999837	
8000	0.0031	-5.76353248	6.51491E-07		
12000	0.0014	-6.59294454	2.84249E-07	$v = k(A)^1$	
15000	0.0007	-7.20886037	1.53536E-07		
2) Obtener velocidad instantánea					
	tiempo (s)	v instantánea (M/s)	Pendiente	-9.9985E-07	
	3500.0		Ordenada al origen	9.7170E-06	
		1.55765E-06			

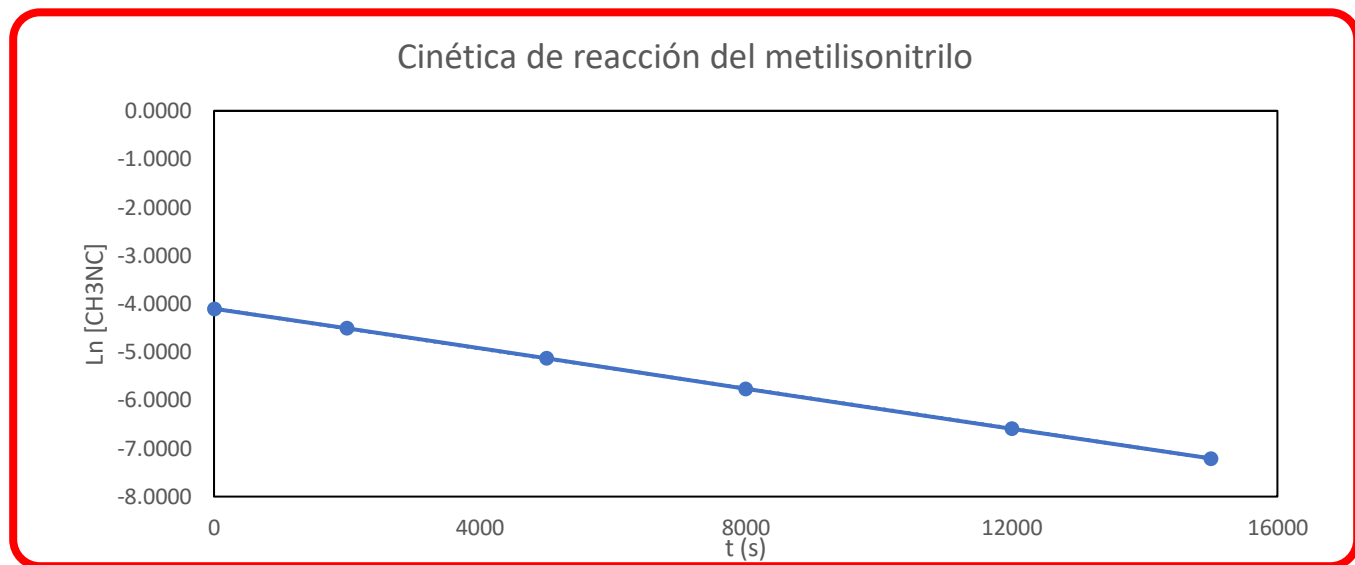
Las gráficas a obtener son las siguientes:



Aquí se observa que la cinética no corresponde a una relación lineal directa y se descarta un orden de reacción 0.

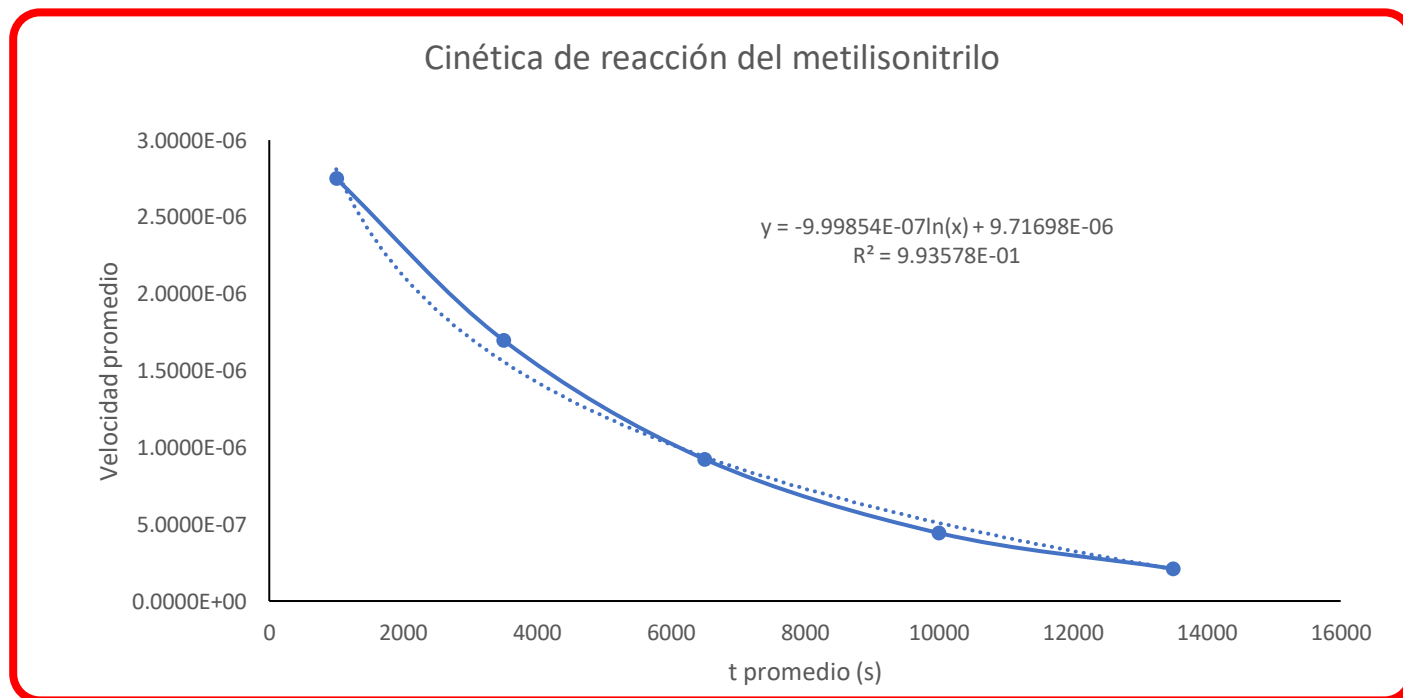
Los datos de concentración se linealizan aplicando logaritmo natural, lo que indica que el orden de reacción es de 1, la cual presenta un coeficiente de determinación de 0.9999837 el cual indica un buen ajuste con la ecuación correspondiente de ecuación cinética $v=k(A)^1$. Donde una vez integrada es posible obtener la concentración en cualquier tiempo de acuerdo con la cinética de orden 1.

$$[A]_t = [A]_0 - akt \quad \text{donde } a=1 \text{ y } k=0.0002075 \text{ s}^{-1}$$



También este orden de reacción corresponde a la molecularidad de 1, al ser una reacción elemental, por lo tanto, es una reacción unimolecular.

Al obtenerse la velocidad media, se observa que esta disminuye conforme avanza el tiempo, por lo que se puede asegurar que los datos se pueden linealizar aplicando logaritmo natural a esta variable de respuesta vs tiempo promedio, debido a que en la obtención de la velocidad media pierde un grado de libertad.



Por lo tanto, con la ecuación obtenida es posible obtener velocidad instantánea, donde Ln de x corresponde al tiempo que desea evaluar, por lo tanto, para un tiempo de 3500 s la velocidad instantánea es de 1.55765E-06 M/s

En la segunda parte del simulador se tienen los siguientes datos y resultados:

Obtención de orden de reacción y k de velocidad

Instrucción: Llenar las celdas de color amarillo, los resultados aparecen en las celdas de color verde

Orden (n)	0	1	2	3
Tiempo (h)	[A] M	ln [A]	1/[A]	1/[A] ²
0	0.2200	-1.5141	4.5455	20.6612
1	0.2000	-1.6094	5.0000	25.0000
2	0.1740	-1.7487	5.7471	33.0295
3	0.1600	-1.8326	6.2500	39.0625
4	0.1400	-1.9661	7.1429	51.0204
5	0.1200	-2.1203	8.3333	69.4444
6	0.1000	-2.3026	10.0000	100.0000
7	0.0800	-2.5257	12.5000	156.2500
8	0.0600	-2.8134	16.6667	277.7778
9	0.0400	-3.2189	25.0000	625.0000
10	0.0230	-3.7723	43.4783	1890.3592

aA → B

a = 1

$v = k(A)^n$

Comprobación

[A] M	t (h)
Orden 0	0.2003
Orden 1	0.1791
Orden 2	0.9016
Orden 3	0.6239

Pendiente =	-0.0197	-0.2059	2.9344	116.0554
r ² =	0.999	0.917	0.684	0.477
k =	0.0197	0.2059	1.4672	38.6851
	mol/Lh	1/h	L/molh	L ² /mol ² h
Ley de velocidad:	v = k(A) ⁰	v = k(A) ¹	v = k(A) ²	v = k(A) ³
Orden:	Cero	Primer	Segundo	Tercer



Dr. Juan Carlos Vázquez Lira 2022 V2

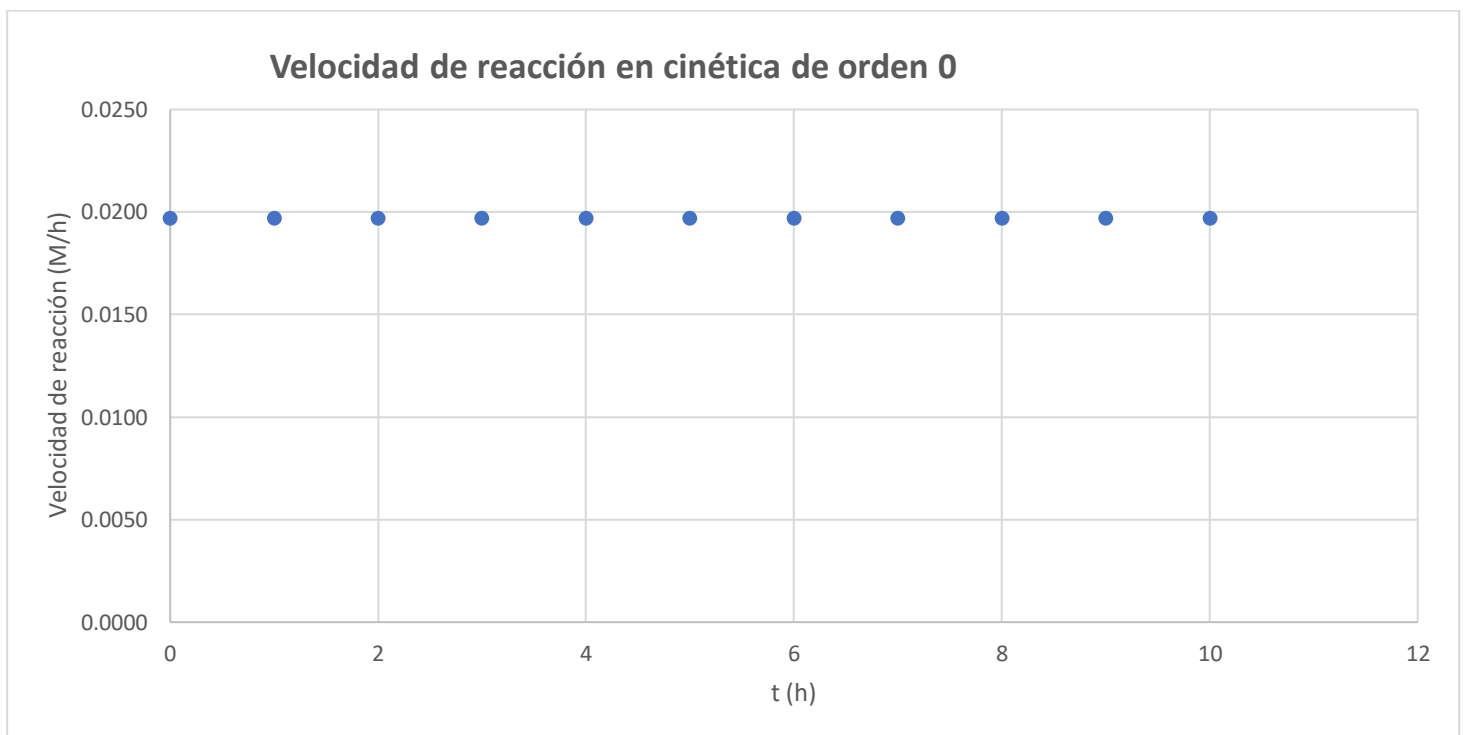
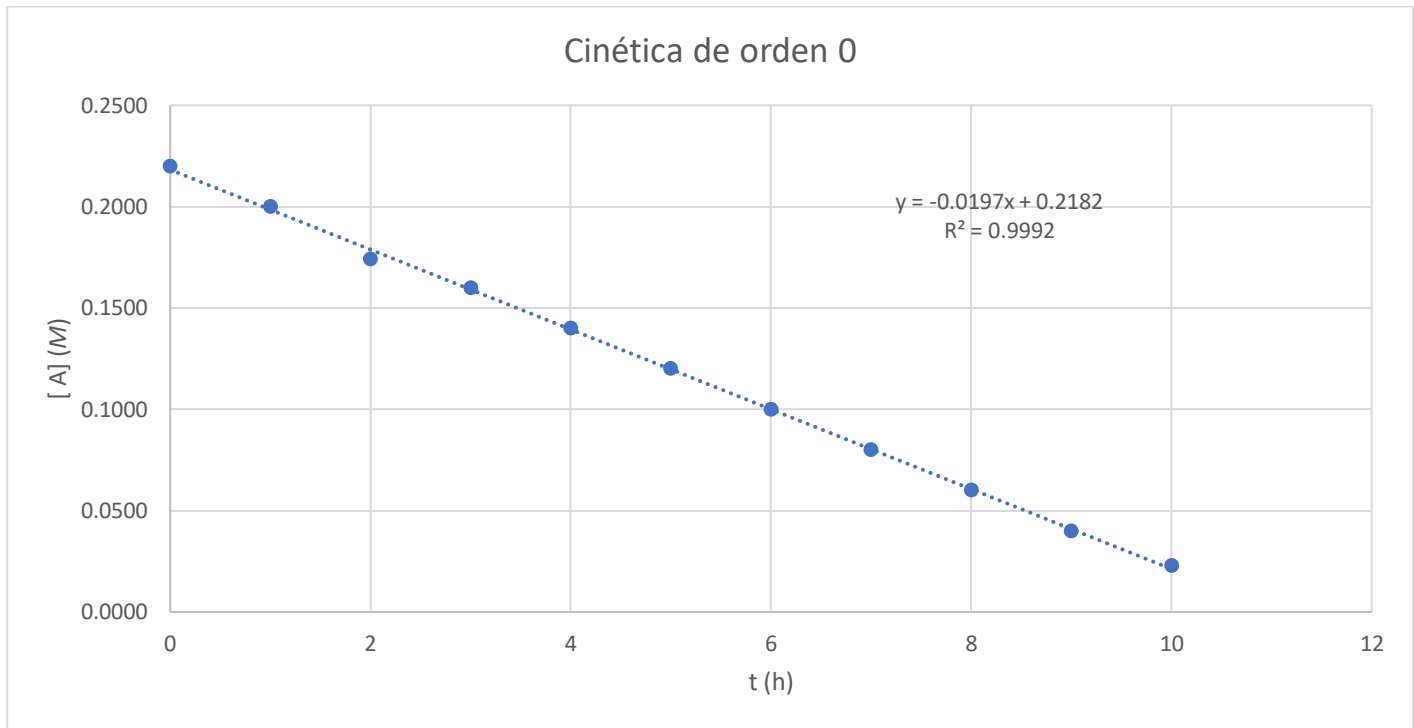
Con apoyo del programa DGAPA-UNAM-PAPIME PE-202021

De acuerdo con el ajuste para encontrar el orden de reacción, el mejor coeficiente de determinación lo presenta la cinética de orden 0 que corresponde a una relación lineal, la molecularidad de la reacción también es de 1 y es posible que corresponda a una reacción elemental unimolecular.

Al ser una cinética de orden 0 la velocidad de reacción debe ser constante en todo el rango de concentraciones de acuerdo con la ecuación:

$$v=k(A)^0$$

Por lo tanto, deben obtenerse las siguientes gráficas:



Con el anterior gráfico se confirma la cinética de orden 0 donde la velocidad de reacción es constante en todo el rango de concentraciones.

Al realizar la comprobación con la cinética de orden 0 en todo el rango de tiempo se obtienen los siguientes resultados

Comprobación

[A] M	t (h)
0.2200	0
0.2003	1
0.1806	2
0.1609	3
0.1412	4
0.1215	5
0.1018	6
0.0821	7
0.0624	8
0.0427	9
0.0230	10

[A] M
0.2200
0.2000
0.1740
0.1600
0.1400
0.1200
0.1000
0.0800
0.0600
0.0400
0.0230

Se observa que la correspondencia a una cinética de orden 0 se ajusta con un adecuado coeficiente de determinación de 0.9992.