

## EJEMPLO 2:

Se ha estudiado la cinética de una reacción química irreversible obteniéndose los siguientes resultados a 140°C:

$C_A$ (mol/l)	0,1	0,089	0,074	0,063	0,045
t (seg)	0	13	34	59	120

Si suponemos que se trata de una reacción irreversible de primer orden:

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k C_A$$

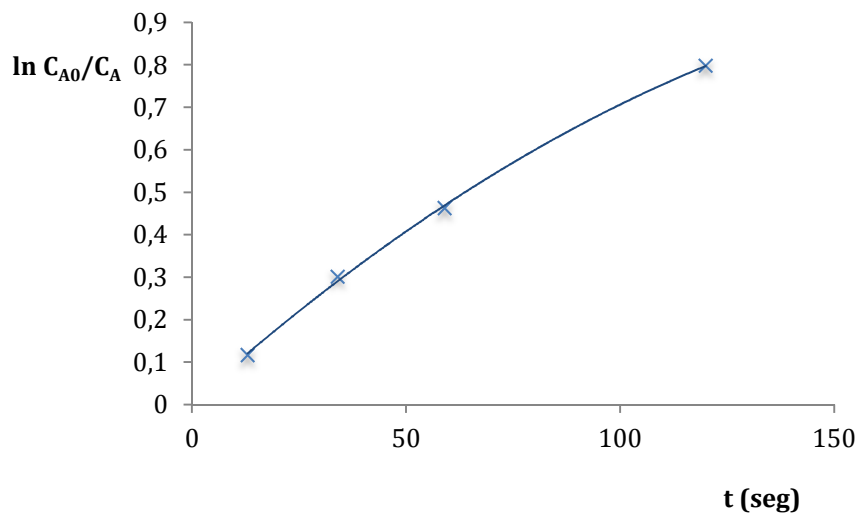
Aplicando en primer lugar el **método integral**, la ecuación integrada queda:

$$\ln \frac{C_{A0}}{C_A} = k \cdot t$$

Es decir, representando  $\ln C_{A0} / C_A$  frente a t ha de ajustarse los puntos experimentales a una línea recta.

Por lo tanto construimos la siguiente tabla para posteriormente representar los datos:

$C_A$ (mol/l)	0,1	0,089	0,074	0,063	0,045
t (seg)	0	13	34	59	120
$\ln C_{A0}/C_A$	-	0,116	0,301	0,462	0,798



Como se ve, la representación no da una línea recta, por lo tanto la reacción no es de primer orden.

Habría que seguir probando otros órdenes de reacción, integrando la ecuación diferencial y linealizándola para ver si los datos experimentales se ajustan a la recta linealizada.

Aplicando el **método diferencial**:

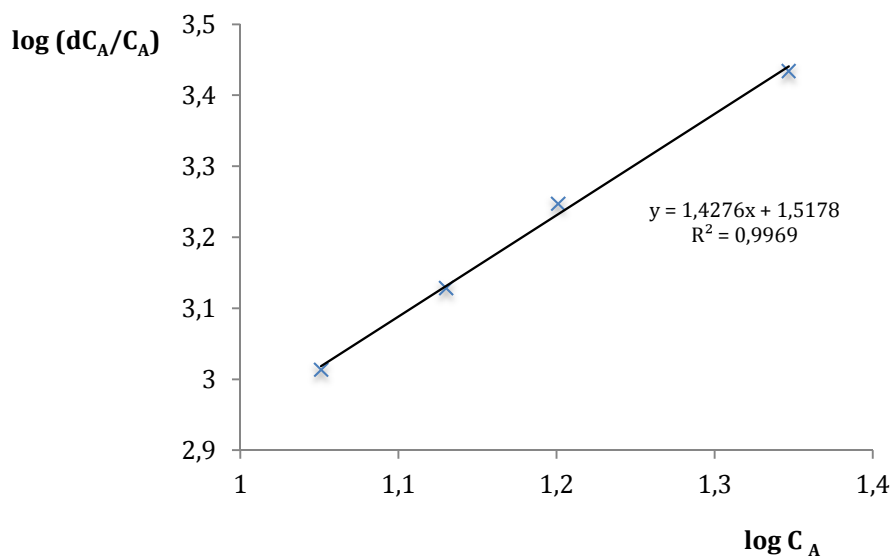
$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = k C_A^n$$

Si aplicamos logaritmos a ambos términos queda:

$$\log\left(-\frac{dC_A}{dt}\right) = \log k + n \log C_A$$

Por tanto habrá que calcular las pendientes en cada punto de la curva de  $C_A$  frente a  $t$  y representar el logaritmo de dichos valores frente a el logaritmo de  $C_A$ . Así queda:

$C_A$ (mol/l)	0,1	0,089	0,074	0,063	0,045
$t$ (seg)	0	13	34	59	120
$dC_A/dt$	-	$9,70 \cdot 10^{-4}$	$7,44 \cdot 10^{-4}$	$5,66 \cdot 10^{-4}$	$3,68 \cdot 10^{-4}$
$\log(dC_A/dt)$	-	-3,013	-3,128	-3,247	-3,434
$\log C_A$	-	-1,051	-1,130	-1,201	-1,347



Por tanto el orden de reacción será 1,4 y la constante de velocidad es 32,9.