

CAPITULO II

2. Reacción Química

Es el proceso por el cual, compuestos químicos son transformados a otros productos con propiedades físico químicas totalmente diferentes, este proceso involucra a toda una variedad de fenómenos.(21)

2.1 Clasificación de las reacciones

Se las clasifica de acuerdo con el número y tipos de fases implicadas, en los siguientes grupos:

- Reacciones elementales
- Reacciones no elementales
- Sistemas homogéneos
- Sistemas heterogéneos

Reacciones Elementales.- Cuando el transcurso de la misma se representa en una sola ecuación estequiométrica y una sola ecuación cinética.(26)

Ejemplo:

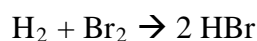


Cuya cinética es:

$$(-r_A) = k C_A C_B$$

Reacciones No elementales.- cuando para representar los cambios observados se requiere más de una ecuación estequiométrica, necesitándose entonces más de una expresión cinética para seguir las variaciones de la composición de cada uno de los componentes de la reacción.(26)

Ejemplo:



Cuya cinética es:

$$r_{\text{HBr}} = \frac{k_1 (\text{H}_2) (\text{Br}_2)^{1/2}}{k_2 + (\text{HBr}) / (\text{Br}_2)}$$

Sistemas Homogéneos.- Una reacción es homogénea cuando los reactantes, productos y aun los catalizadores se encuentran en una misma fase.

Sistemas Heterogéneos.- Una reacción es heterogénea si los componentes del sistema reaccionante se hallan en diferentes fases.

TABLA 1. Clasificación de las reacciones químicas catalizadas y no catalizadas. (26)

Fase	No catalizadas	Catalizadas
Homogéneas	La mayor parte de las reacciones en fase gaseosa	La mayor parte de las reacciones en fase líquida
	Reacciones rápidas tales como la combustión de una llama	Reacciones en sistemas coloidales
		Reacciones enzimáticas, microbiológicas.
Heterogéneas	Combustión de carbón	Síntesis de amoníaco
	Tostación de minerales	Oxidación del amoníaco para dar ácido nítrico
	Ataque de sólidos por ácidos	Cracking del petróleo
	Absorción gas - líquido con reacción	Oxidación de SO ₂ a SO ₃
	Reducción de minerales de hierro y acero.	

2.2 Velocidad de Reacción

La velocidad en cualquier reacción química depende de las concentraciones de los reaccionantes de tal manera que es función de la reacción particular. En los casos sencillos en que los reaccionantes sufren una interacción directa en un suceso simple para formar los

productos sin intervención de sustancias intermedias, la velocidad de tal reacción particular es proporcional a los productos de las concentraciones de las sustancias reaccionantes, elevando cada concentración a una potencia igual al número de moléculas (o iones o átomos) de la sustancia que tiene que participar en el *suceso simple*.(22)

La velocidad de reacción se la define como, el cambio del número de moles de un componente del sistema reaccionante con el tiempo en un volumen determinado.

Matemáticamente se define como :

$$r_i = \frac{dn_i}{Vdt} \quad (1)$$

Donde:

r_i = Velocidad de reacción del componente i en el sistema reaccionante

V = Volumen del sistema

n_i = número de moles del componente i

t = tiempo

2.2.1 Variables que intervienen en la velocidad de reacción

La velocidad de reacción química es función de Concentración, Presión y Temperatura, tanto para sistemas homogéneos como para sistemas heterogéneos.

- Las variables que mayor influencia tienen en los sistemas homogéneos son la temperatura, presión y la composición.
- En los sistemas heterogéneos, en los que están presente más de una etapa, los reactantes pasan de una fase a otra durante la reacción, en cuyo caso será importante la velocidad de transporte de materia.

En reacciones heterogéneas exotérmicas catalizadas la velocidad de transferencia de calor es importante, ya que si el calor desprendido durante la reacción no se disipa rápidamente, puede producir dentro del catalizador una distribución de temperaturas no uniforme que originará velocidades de reacción diferentes.

Por lo tanto la transición de calor y materia juegan un papel importante en la determinación de las velocidades de reacción en sistemas heterogéneos.

La velocidad de reacción del componente A, en un sistema reaccionante, en fase homogénea para una ecuación elemental a volumen constante, puede representarse con la siguiente ecuación:

$$(-r_A) = f(\text{temperatura, presión, composición, constante})$$

$$(-r_A) = \frac{1}{V} \frac{dN_A}{dt} = f(T, P, C, k)$$

Por definición:

$$C = \frac{N_A}{V}$$

Diferenciando cuando:

$$dC = \frac{dN_A}{V}$$

Sustituyendo en la ecuación de velocidad.

$$(-r_A) = \frac{dC_A}{dt} = k f(P, T, C) \quad (2)$$

Donde:

k = Constante cinética determinada experimentalmente

P = Presión

T = Temperatura

C_A = Concentración del componente A

→ si la presión es constante, procesos isobáricos(40)

$$-r_i = \frac{dC_i}{dt} = k f(T, C)$$

→ si la temperatura es constante, procesos isotérmicos(40)

$$-r_i = \frac{dC_i}{dt} = k_f(P, C)$$

En estas condiciones, esto es, a temperatura y presión constantes la velocidad de reacción es función únicamente de la concentración.(25)

$$(-r_i) = k_f(C) \quad (3)$$

2.3 Molecularidad y Orden de reacción

Molecularidad.- La molecularidad de una reacción elemental es el número de moles que intervienen en la reacción, y se ha encontrado que sus valores son uno, dos y, en ocasiones tres. La molecularidad únicamente se expresa con valores enteros, no tiene valores fraccionarios.

Orden de Reacción.- Es el máximo exponente a la que están elevadas la concentraciones en la ecuación de la velocidad de reacción. El orden varía de cero a tres, incluyendo los valores fraccionarios de este rango.

El Orden de reacción es aplicable solo para reacciones elementales en fase homogénea.

El modelo cinético para una reacción de orden n es:

$$(-r_i) = \frac{dC_i}{dt} = kC_i^n \quad (4)$$

En esta ecuación n varía de cero a tres incluyendo valores fraccionarios dentro del intervalo.

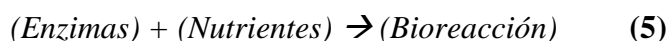
Los modelos cinéticos para orden cero, uno, dos, tres y fraccionarios se representan en la siguiente tabla:

TABLA 2. Modelo cinéticos para reacciones elementales. (16)

$(-r_i) = \frac{dC_i}{dt} = kC_i^n$		
Orden	n	Ecuación
Cero	0	$-r_i = k$
Primero	1	$-r_i = kC_i$
Segundo	2	$-r_i = kC_i^2$
Tercer	3	$-r_i = kC_i^3$
Fraccionario	Ej. 1.5	$-r_i = kC_i^{1.5}$

2.4 Bioreacción

Las reacciones bioquímicas son reacciones químicas con la participación de microorganismos tales como, bacterias, hongos, mohos y levaduras, que no intervienen directamente en la reacción si no que suministran sustancias propias, producto del metabolismo tales como las enzimas.(29)



2.5 Cinética Bioquímica.

Es el estudio de la velocidad con la que reactivos se transforman en productos bajo ciertas condiciones específicas (temperatura, presión y concentración).

La cinética de reacción se manifiesta mediante el cambio de concentración de uno de los componentes del sistema reaccionante con el tiempo.

Las bioreacciones generalmente son reacciones no elementales en fase heterogénea y los modelos cinéticos son determinados experimentalmente. Existen en la literatura algunos modelos, el mas popular es el de Michaelis Menten.

2.6 Modelo cinético de Michaelis – Menten

Este modelo se ajusta razonablemente bien a los datos experimentales particularmente en proceso de fermentación.

Matemáticamente este modelo se representa con la siguiente ecuación.

$$-r_A = \frac{k C_A C_{E_0}}{C_A + M} \quad (6)$$

Donde:

C_A = Concentración de sustrato

C_{E_0} = Concentración inicial de enzima

k = Constante cinética

M = Constante de Michaelis – Menten

Tanto la constante de k como M son determinados experimentalmente y sus valores son característicos para cada bioreacción.

