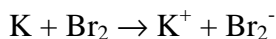


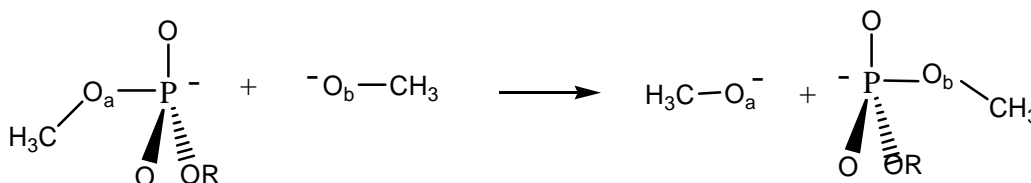
1.- Es posible estimar el factor estérico en algunas reacciones. Así, en el caso de la reacción  $K + Br_2 \rightarrow KBr + Br$  se puede obtener como el cociente entre la sección de colisión ( $\pi d^2$ , siendo  $d=4.0 \text{ \AA}$ ) con la sección dada por la distancia ( $R^*$ ) a la cual se pondría en marcha el ‘mecanismo de arpón’:



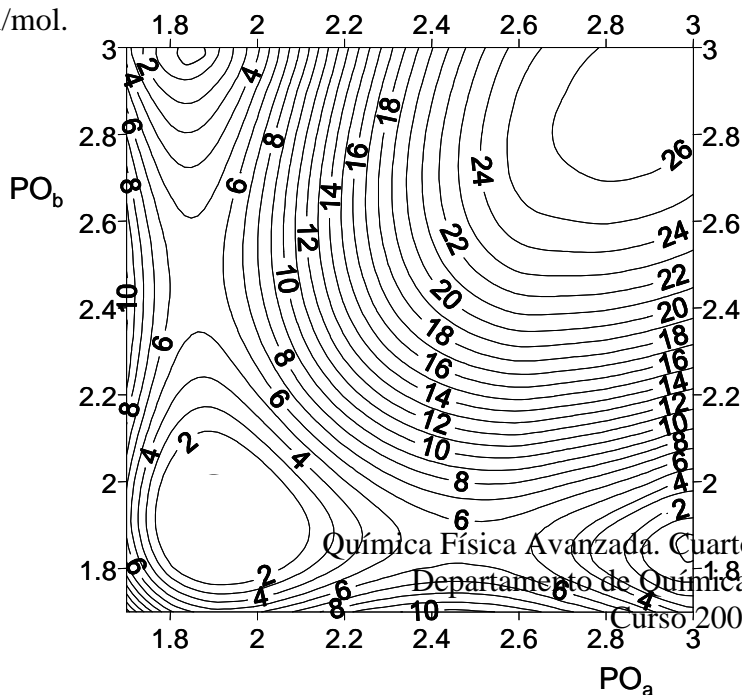
Una vez iniciado este mecanismo las trayectorias de los iones serían atractivas y colisionarían dando lugar a productos. Para calcular la distancia  $R^*$  y la sección correspondiente ( $\pi R^{*2}$ ) tenga en cuenta que la energía necesaria para arrancar un electrón del átomo de potasio (energía de ionización) debe venir compensada por la afinidad electrónica de la molécula de bromo (250 kJ/mol) y la energía de atracción electrostática entre los iones resultantes (función de  $R^*$ ).

- Busque en la bibliografía la energía de ionización del potasio
- Plantee el balance energético del mecanismo arpón cuando la transferencia electrónica tienen lugar a una distancia  $R$  y calcule la distancia  $R^*$  para la cual el coste energético es nulo.
- Distancias menores favorecerán de  $R^*$  darán lugar a transferencia y por tanto a reacción. Calcule el factor estérico como el cociente entre los factores preexponenciales obtenidos a 300K estimando la sección eficaz con  $R^*$  o con el diámetro de colisión y compárelo con el valor experimental (4.8).

2. La siguiente superficie de energía potencial corresponde a la reacción en disolución acuosa:

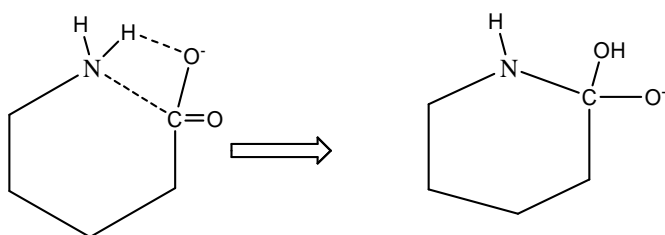


Las distancias  $PO_a$  y  $PO_b$  vienen dadas en angstroms y las líneas isoenergéticas aparecen separadas cada 1 kcal/mol.



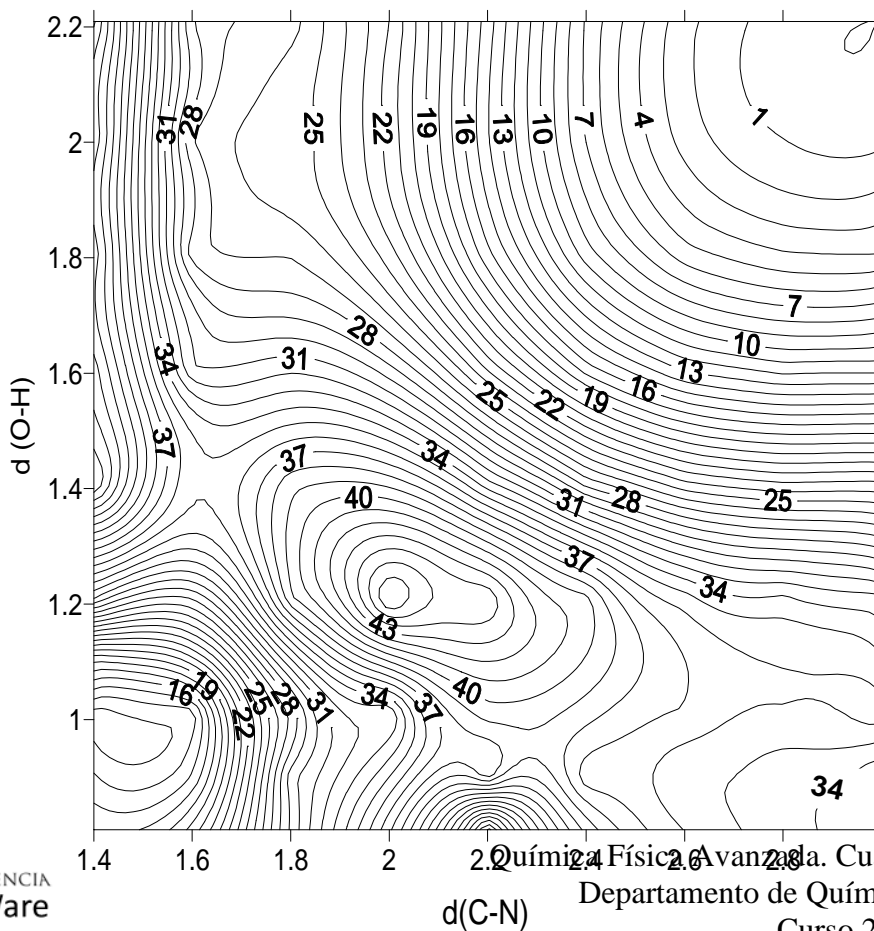
Dar los valores de las distancias  $PO_a$  y  $PO_b$  para los distintos puntos estacionarios que aparecen, indicando su naturaleza (reactivos, productos, estructuras de transición...). Dibujar, aproximadamente, un diagrama energía potencial-coordenada de reacción.

3. Se ha estudiado la siguiente reacción trazando para ello la superficie de energía potencial en función de las dos distancias que parecen punteadas en el dibujo. La superficie de energía potencial se representa mediante curvas isotenciales trazadas cada 1 kcal/mol.



3.1. Describe todos los puntos estacionarios relevantes desde el punto de vista de reactividad que aparecen sobre la SEP indicando su naturaleza (reactivos, productos, estructuras de transición, intermedios), el valor de las distancias seleccionadas así como su energía.

3.2. Representa la variación de la energía potencial con la coordenada de reacción para los posibles mecanismos de reacción, indicando los valores aproximados de la energía de activación y de reacción. Describe los mecanismos indicando cuál se dará preferentemente.



*Soluciones:* 1. b)  $R^* = 8.23 \text{ \AA}$  c) 4.23