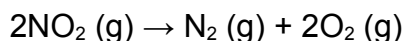




### CUESTIONES DE QUÍMICA

De entre las cuestiones 5, 6, 7 y 8 que a continuación se proponen, el aspirante elegirá libremente y contestará a 3 de ellas.

8.- Con los datos experimentales de la tabla, calcular gráficamente la energía de activación de la reacción



Temperatura (K):	1.125	1.053	1.001	838
k(l/mol.s):	11,59	1,67	0,380	0,0011

Comentario: no se debe usar punto para separar millares <http://www.bipm.org/en/CGPM/db/22/10/> reaffirms that "Numbers may be divided in groups of three in order to facilitate reading; neither dots nor commas are ever inserted in the spaces between groups", as stated in Resolution 7 of the 9th CGPM, 1948.

Viendo las unidades de la constante de reacción, como  $v = k[\text{NO}_2]^2$  y las unidades de velocidad son (mol/L)/s podemos ver que el orden de reacción es dos, aunque no lo usamos en la resolución.

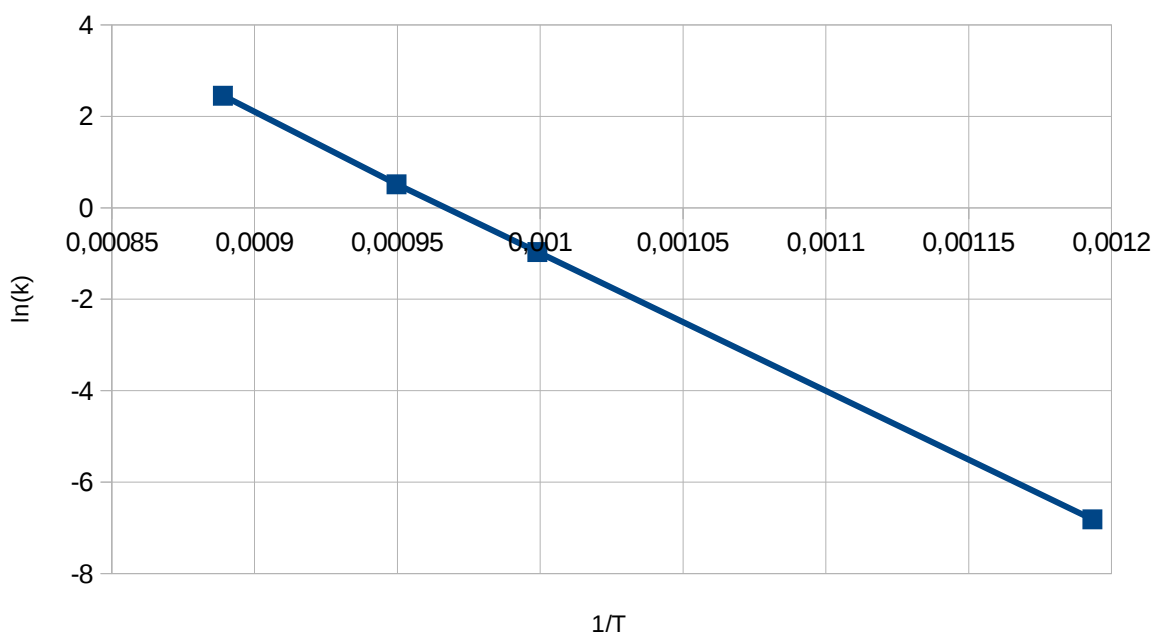
Utilizamos la fórmula de Arrhenius  $k = A e^{\frac{-E_a}{RT}}$ , pero como se pide calcular gráficamente, debemos operar con los datos para conseguir una relación lineal que poder ajustar mediante mínimos cuadrados en una regresión lineal

$$\ln(k) = \ln(A) - \frac{E_a}{RT} = -\frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T} + \ln(A)$$

Lo podemos ver como una recta  $y = a \cdot x + b$ , donde  $y = \ln(k)$ ,  $x = 1/T$ ,  $b = \ln(A)$  y  $a = -E_a/R$

T (K)	1125	1053	1001	838
k (L/mol.s)	11,59	1,67	0,38	0,0011
1/T	0,00088889	0,00094967	0,00099900	0,00119332
ln(k)	2,45014266	0,51282363	-0,96758403	-6,81244510

Representando vemos que se ajusta bien a una recta



Si realizamos un ajuste por mínimos cuadrados (se puede hacer con una calculadora científica, pero lo hacemos aquí con wolframalpha)



<http://www.wolframalpha.com/input/?i=linear+fit+{{0.00088889%2C2.45014266}}+%2C+{{0.00094967%2C0.51282363}}%2C+{{0.00099900%2C-0.96758403}}%2C+{{0.00119332%2C-6.81244510}}>

Input interpretation:

fit	data	{{0.00088889, 2.45014266}, {0.00094967, 0.51282363}, {0.000999, -0.96758403}, {0.00119332, -6.81244510}}
	model	linear function

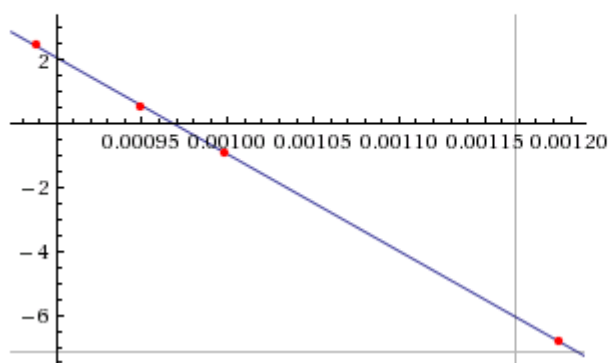
Least-squares best fit:

$$29.3462 - 30\,316.4x$$

Fit diagnostics:

AIC	BIC	$R^2$	adjusted $R^2$
-8.90901	-10.7501	0.999882	0.999823

Plot of the least-squares fit:



Vemos que  $a = -30316,4$ . Como

$$a = \frac{-E_a}{R} \Rightarrow E_a = 8,31 \frac{J}{K \cdot mol} \cdot 30316,4 K = 251929 J/mol \approx 252 kJ/mol$$