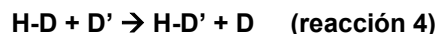
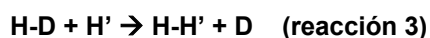
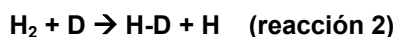
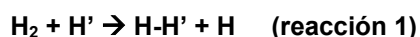


**PRACTICO 10**  
**Efectos isotópicos, y su implicancia en la constante de velocidad de una reacción química.**

**Objetivos :** Estudiar los efectos isotópicos sobre la constante de velocidad de una reacción química.

En general tanto la cinética como la propia termodinámica de una reacción química se ven afectadas por los distintos isótopos de los elementos, siendo en los más ligeros, como el hidrógeno, más importante el efecto isotópico debido a la mayor variación relativa de la masa. Cuando se pasa por ejemplo de hidrógeno a deuterio la masa atómica se multiplica por dos. Ello afecta, entre otras cosas, a las frecuencias vibracionales, que ocurren en la zona del infrarrojo, entre átomos enlazados, y por ende la capacidad de romper y formar enlaces de una molécula.

En este práctico se utilizará la reacción  $H_2 + H' \rightarrow H-H' + H$  y se sustituirán los distintos átomos de hidrógeno por átomos de deuterio como se observa a continuación, con la finalidad de evaluar el efecto que ejerce sobre la velocidad de la reacción:



**1. Cálculo de la constante de velocidad para las distintas reacciones**

Proceda a copiarse los archivos h3tr1.dat y h3tr1.jc que se encuentran bajo la ruta *home/usuario/polyrate8.0/testrun* con los nombres h2h.dat y h2h.jc respectivamente.

Proceda ahora a abrir el archivo h2h.dat. Como podrá observar el archivo contiene la información necesaria para estudiar la reacción de sustitución  $H_2 + H' \rightarrow HH' + H$ . Para dicho cálculo se emplea el método de Page-McIver para calcular los puntos a lo largo de la coordenada de reacción. Para que el programa pueda diferenciar que isótopo se está utilizando en un determinado cálculo se debe colocar el peso atómico del mismo como se muestra a continuación.

```
TITLE
H2 + H' → HH' + H: DMBE PES-QQ EKB+Morsella/Page-McIver; Test run h2H
END

ATOMS
1 H 1.0078
2 H 1.0078
3 H 1.0078
```

Recuerde que si al programa no se le especifica el isótopo utilizado, por defecto considera el que se encuentra en mayor proporción en la naturaleza.

La constante de velocidad solo se calcula para la reacción directa con CVT e ICVT utilizando las correcciones del efecto túnel MEPSAG (ZCT), CD-SCSAG (SCT).

Proceda ahora a modificar el rango de temperaturas para calcular la constante de velocidad así como también la energía de activación. Le aconsejamos un set de valores de temperatura para explorar: 98, 100, 150, 200, 300, 600, 800, 1000 y 1500.

A continuación abra el archivo h2h.jc y sustituya h3tr1 por h2h. Corra el cálculo correspondiente al ejecutable que acaba de analizar siguiendo la siguiente ruta: **./h2h.jc &**.

Una vez finalizado el cálculo proceda a abrir el archivo fu15, en el cual como recordará se encuentra un resumen de las constantes de velocidad de la reacción calculadas con distintos métodos y dentro del rango de temperaturas especificado en el *.dat*. Realice la corrección del formato de los datos y gráfíquelos en Excel. (Recuerde que no es necesario graficar todos los niveles de cálculo ya que por ejemplo un cálculo CVT da lo mismo que uno ICVT)

Proceda de forma análoga para evaluar las otras tres reacciones. Recuerde que debe generar para cada reacción el archivo *.dat* y el *.jc* y mantener las mismas condiciones asignadas en la reacción 1. Tenga especial cuidado a la hora de asignar cual de los átomos involucrados en la reacción es el isótopo deuterio (masa molecular 2.0140 Å).