

Cinètica i Dinàmica de reaccions químiques

És ben sabut que la Química és la branca del coneixement que s'ocupa de l'estudi de les propietats de la matèria i llurs transformacions, es a dir, les reaccions químiques pròpiament dites.

Si bé és cert que les reaccions químiques s'acostumen a estudiar de manera fenomenològica tot considerant una certa quantitat de compostos que reaccionen entre ells per donar uns determinats productes d'acord amb l'estequiometria de la reacció, per tal de poder interpretar i comprendre quelcom de les reaccions químiques que tenen lloc, cal tenir present l'estructura atòmica i molecular de la matèria.

Així, per tal de que una determinada reacció es produeixi cal, en primer lloc, que les molècules que hi participen s'acostin suficientment tot col·lisionant entre elles. En aquest cas, és possible que si el xoc corresponent té lloc en les condicions escaients, és possible que la reacció tingui lloc o no, de manera però que mai tindrem una certesa completa de que la reacció es produeixi. Per tant, a una reacció química que té lloc a una certa temperatura fixada, li podem associar una certa probabilitat de que, efectivament tingui lloc i com més elevada sigui aquesta probabilitat, més ràpida resulta la reacció considerada. Des del punt de vista fenomenològic, el que una reacció vagi més o menys ràpida, ve caracteritzat pel valor del que s'anomena la seva 'constant de velocitat', de manera que les reaccions que a nivell molecular presenten una elevada probabilitat de xocs reactius presenten alhora una constant de velocitat més gran que aquelles que tenen una probabilitat de xoc reactiu menor. Aquesta constant de velocitat és, a més a més, funció de la temperatura de manera que, generalment, augmentant la temperatura la reacció augmenta la seva velocitat.

La probabilitat de reacció, entre d'altres variables, depèn de l'energia del xoc, de l'orientació d'una molècula respecte de l'altra així com també de l'estat de moviment dels àtoms dintre de la molècula, és a dir, de la vibració molecular.

La recerca que desenvolupa el nostre grup es centra en la caracterització de magnituds que caracteritzen la cinètica i la dinàmica de les reaccions que s'estudien, en general en fase gas, bé sigui de manera experimental al laboratori o mitjançant tècniques de simulació teòriques i computacionals.

Per tal de poder estudiar experimentalment, amb el major detall possible els xocs moleculars que porten a la reacció, tot procurant que la reacció no estigui molestada per efectes no desitjables, s'utilitzen les anomenades tècniques de 'feixos moleculars' en dues versions diferents. Cadascuna de les dues tècniques s'utilitza en funció de les característiques de la reacció i de les propietats que es vulguin o puguin mesurar. A partir de l'adequat tractament i anàlisi de les mesures experimentals, es pot arribar a esbrinar el com la reacció es produeix a nivell molecular.

De manera paral·lela a l'activitat experimental es desenvolupen estudis teòrics de dinàmica de la reactivitat química tot emprant tècniques de simulació teòriques i computacionals, sigui en base a mètodes de dinàmica clàssica o en base a mètodes de la mecànica quàntica.

Durant la visita al nostres laboratoris es mostraran els equips experimentals disponibles així com també s'oferirà una aproximació a les simulacions de dinàmica de reaccions.