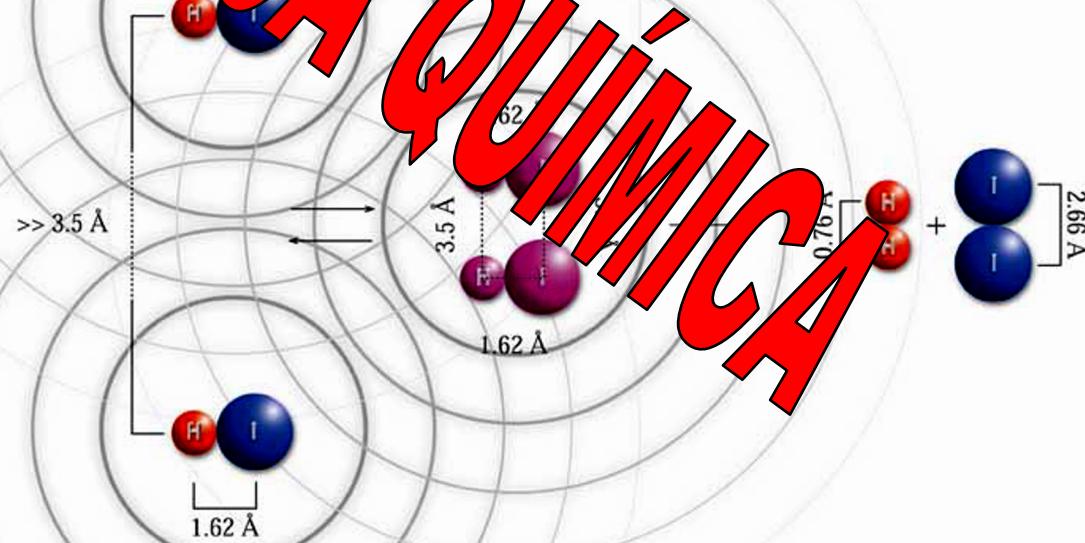
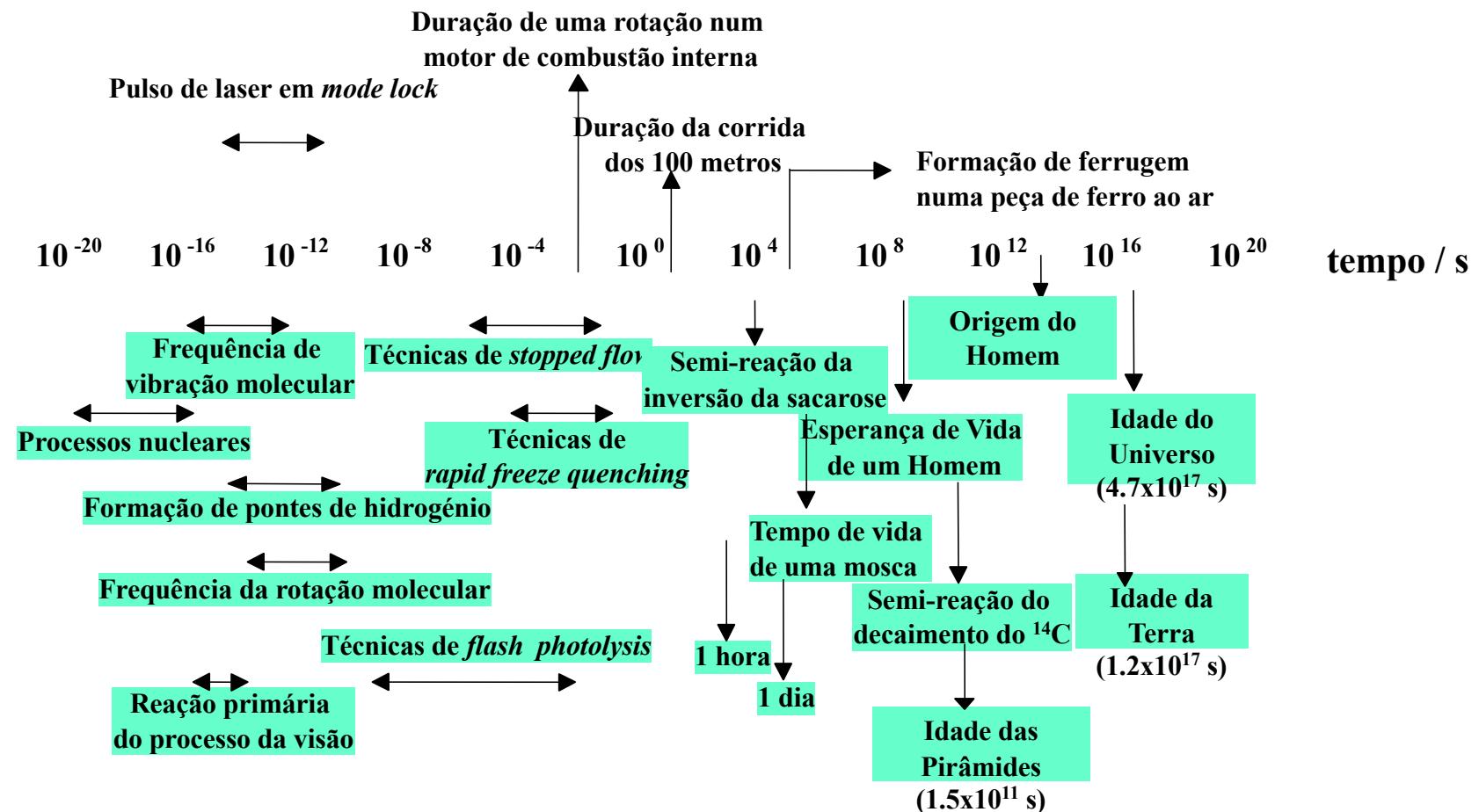


CINÉTICA QUÍMICA



A Escala do Tempo para uma série de fenómenos químicos e físicos



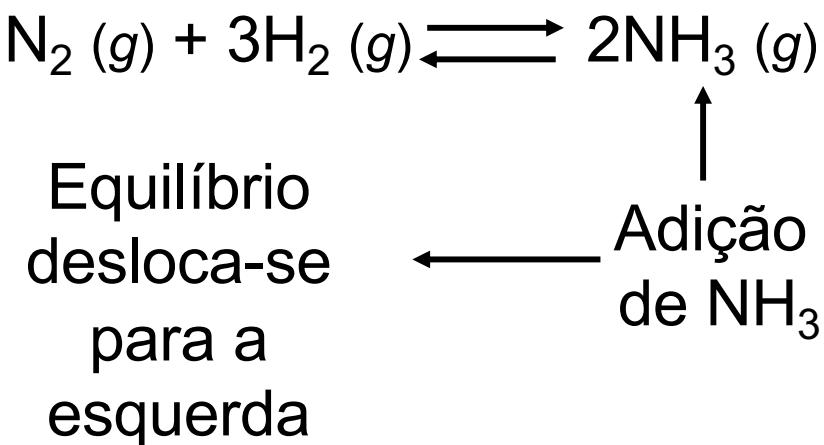
Cinética química

O equilíbrio e a velocidade das reações

Equilíbrio é um estado no qual não ocorrem mudanças observáveis com o passar do tempo.

O equilíbrio químico é atingido quando:

- As velocidades da reação directa e inversa são iguais e
- As concentrações de reagentes e produtos permanecem constantes



Cinética química

Equilíbrio e a velocidade das reações



Termodinamicamente favorável mas muito lenta



Termodinamicamente favorável e muito rápida

Termodinâmica – a reação ocorre ?

Cinética – a que velocidade ocorre a reação ?

Termodinâmica versus Cinética



$$\Delta G^0 = -241.8 \text{ kJ mol}^{-1}$$

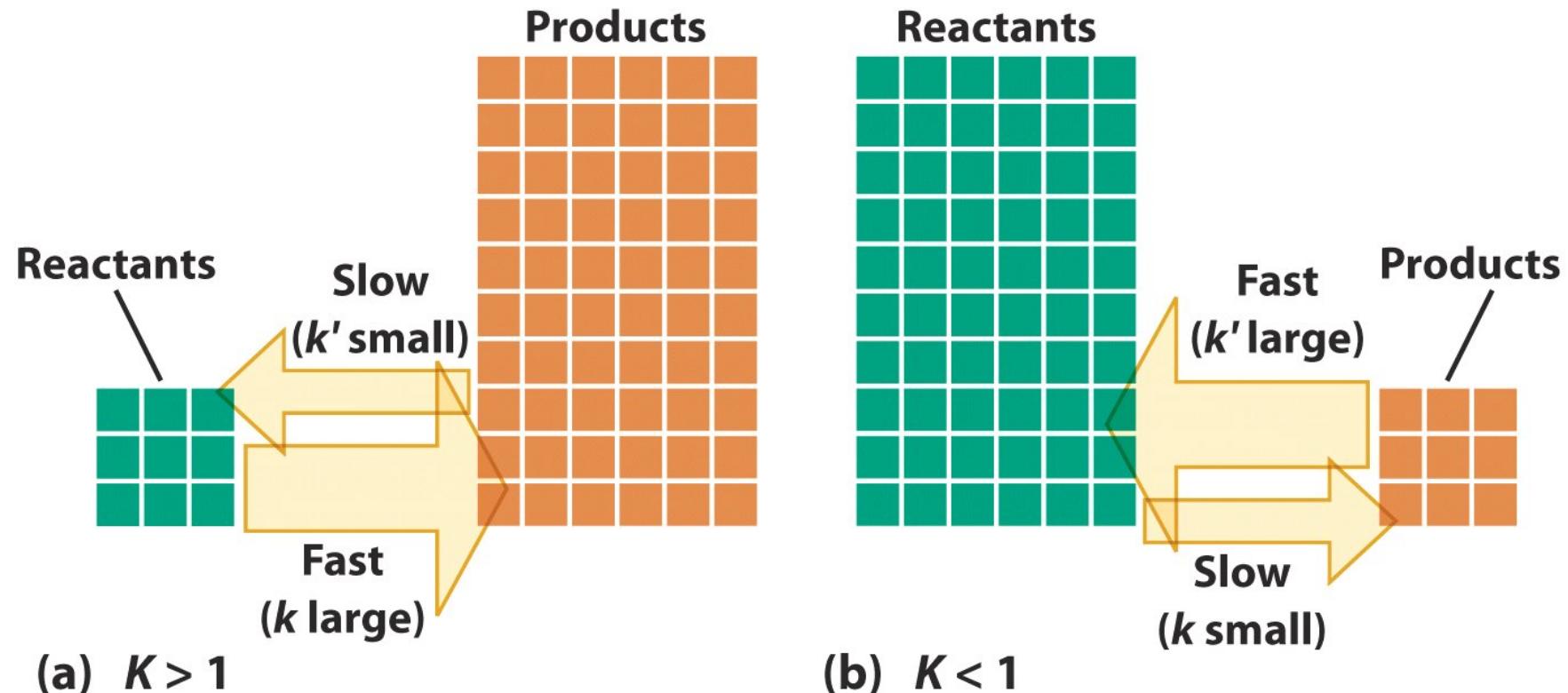
Reação rápida (explosão) ou lenta (inércia reacional)



$$\Delta G^0 = -80.3 \text{ kJ mol}^{-1}$$

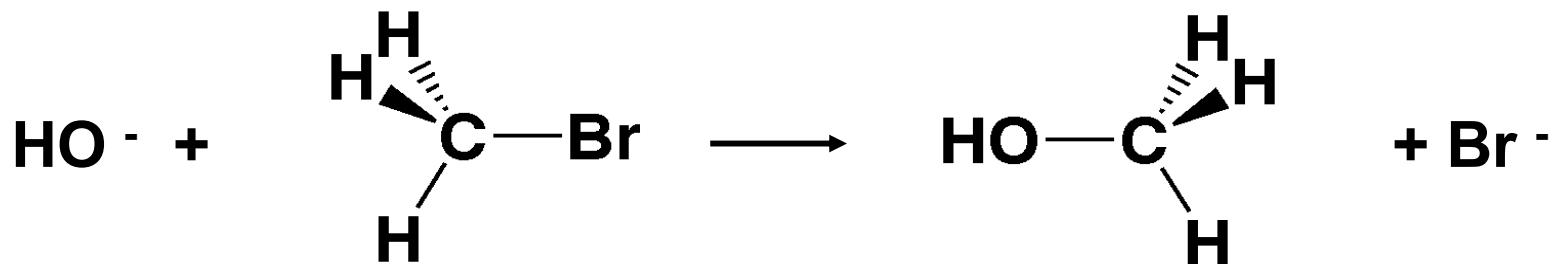
Reação muito rápida

Termodinâmica versus Cinética



Cinética química

O que é que determina a velocidade de uma reação ?



Para ocorrer reação as moléculas têm que colidir

Número de colisões por unidade de tempo



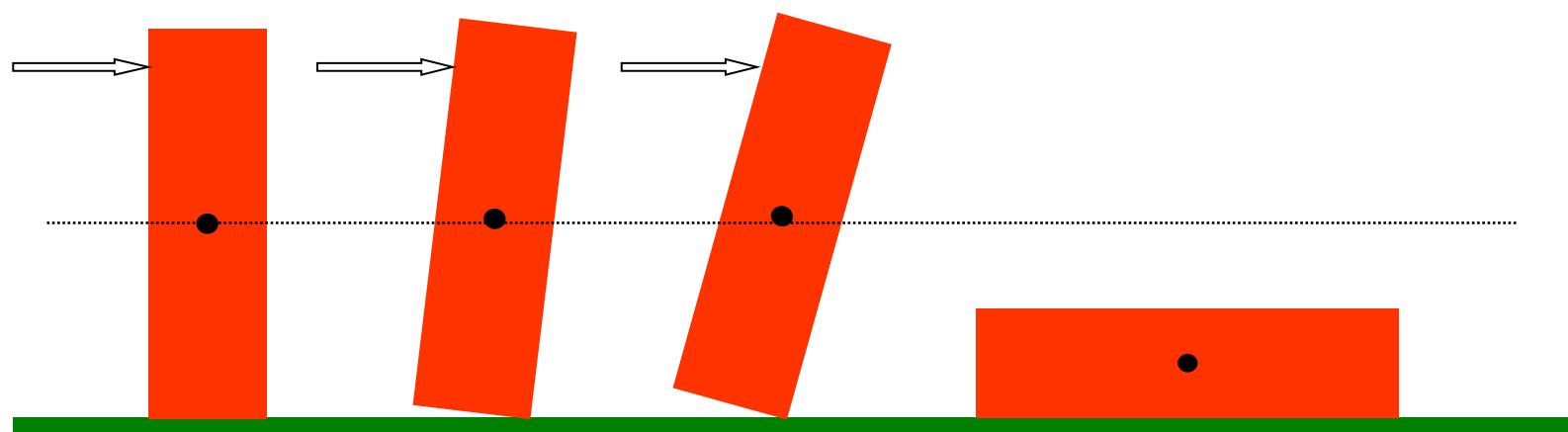
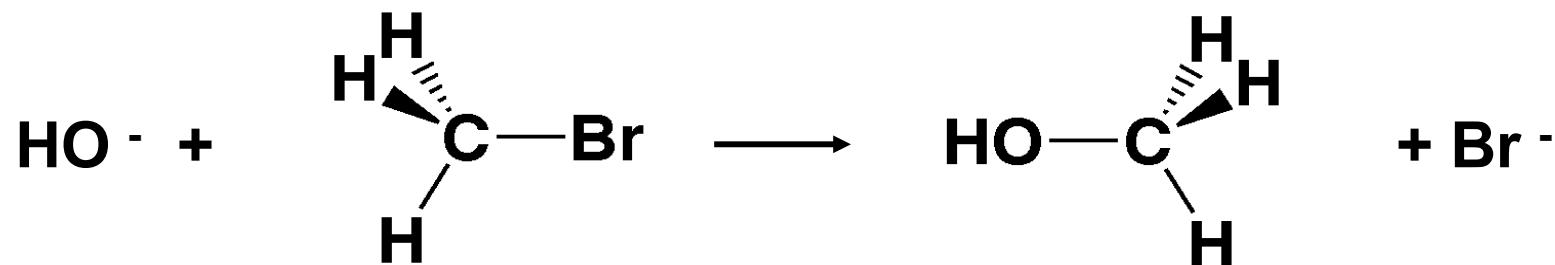
Concentração, velocidade e tamanho das espécies

As colisões têm que ter uma orientação correta

A colisão tem que ter energia suficiente para vencer a barreira energética

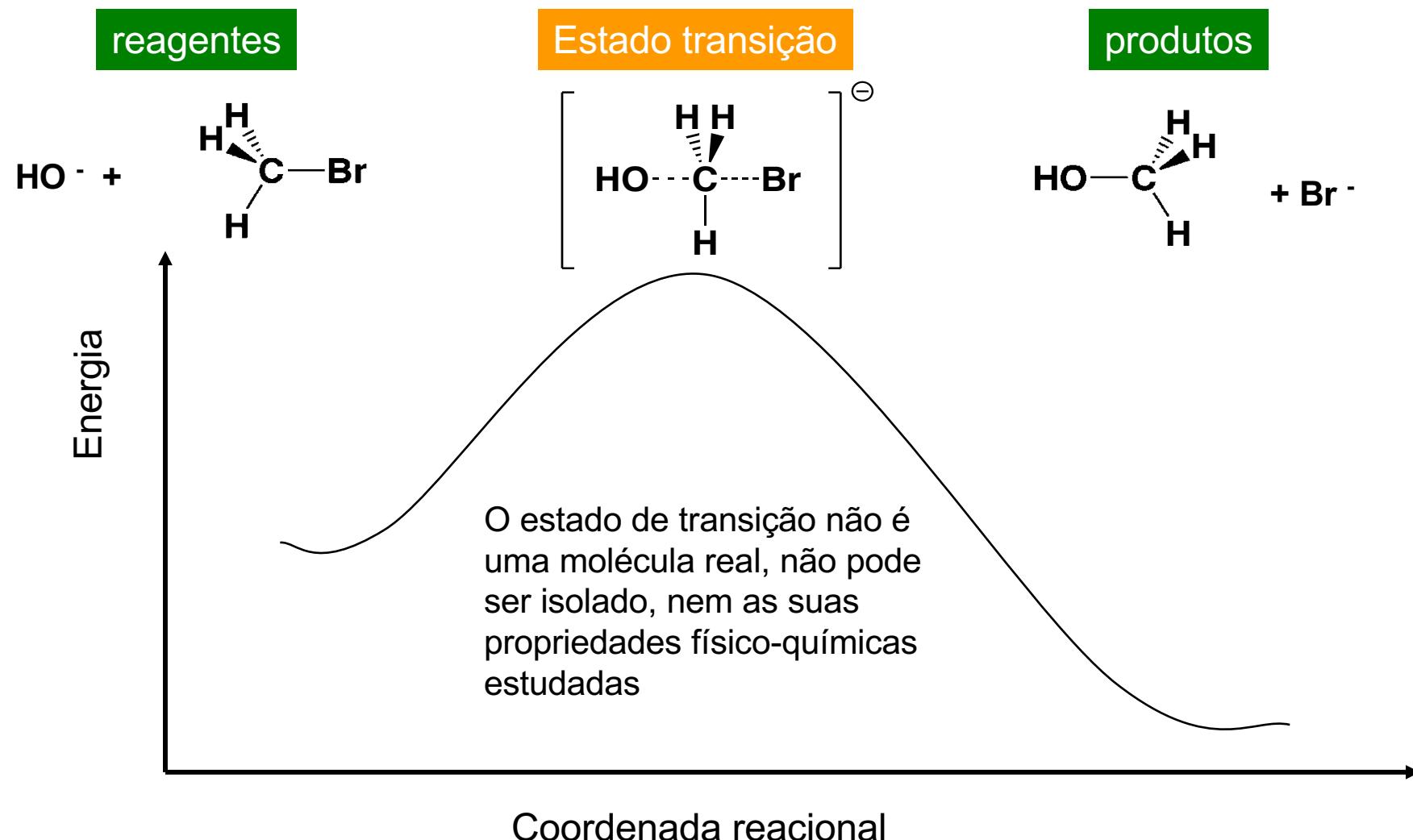
Cinética química

Porque é que existe uma barreira energética ?



Cinética química

Porque é que existe uma barreira energética ?



Cinética química

Lei de velocidade

$$\text{Velocidade da reação} = k [\text{OH}^-][\text{CH}_3\text{Br}]$$

Velocidade de reação é a variação da concentração de um reagente ou produto com o tempo (M/s).



$$\text{vel} = -\frac{\Delta[\text{A}]}{\Delta t}$$

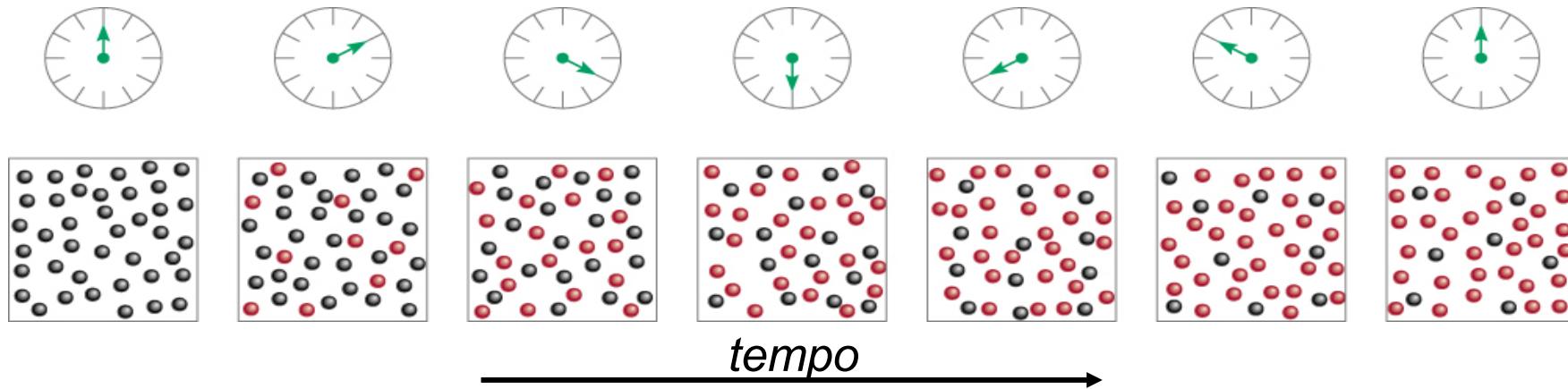
$\Delta[\text{A}]$ = variação da concentração de A durante o período de tempo Δt

$$\text{vel} = \frac{\Delta[\text{B}]}{\Delta t}$$

$\Delta[\text{B}]$ = variação da concentração de B durante o período de tempo Δt

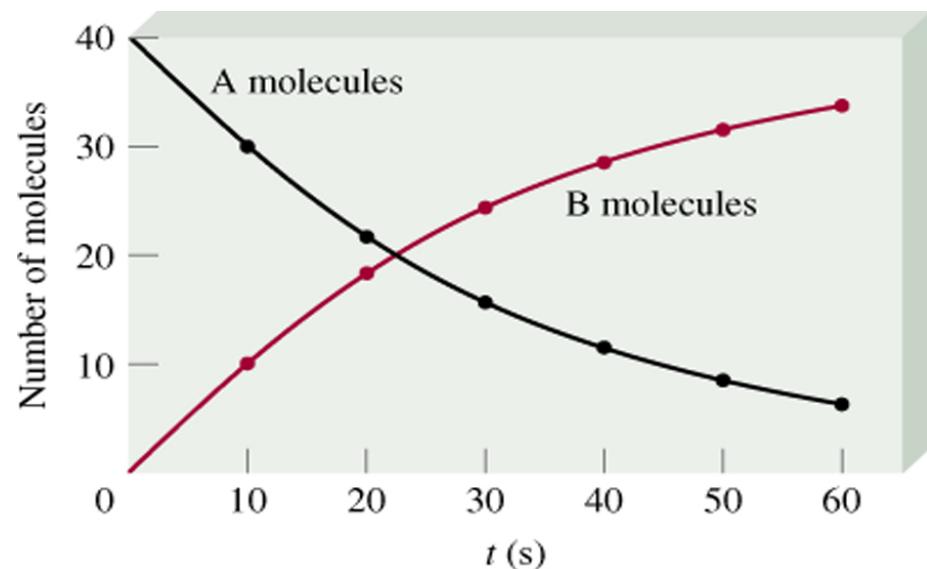
Como $[\text{A}]$ diminui com o tempo, $\Delta[\text{A}]$ é negativo.

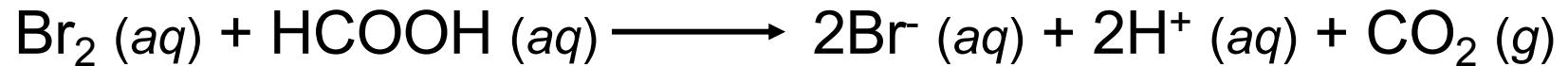
Cinética química



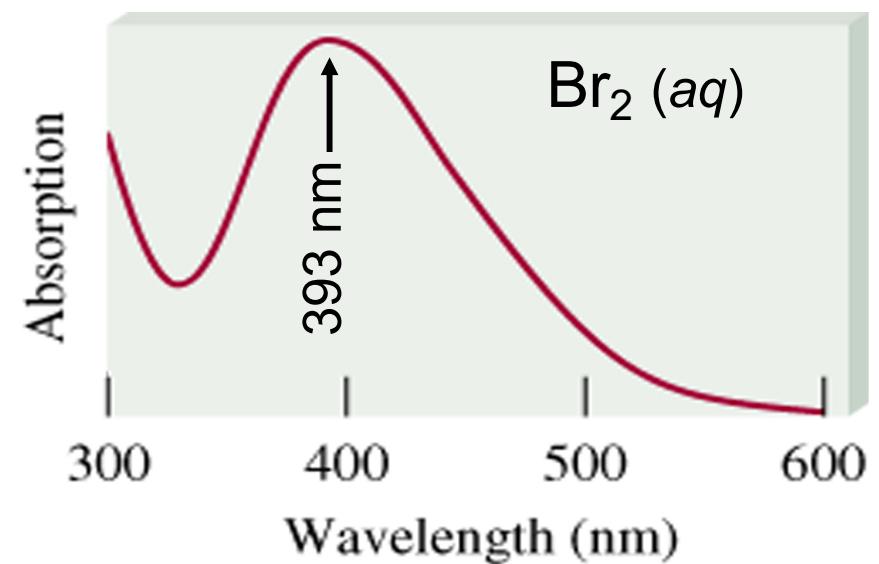
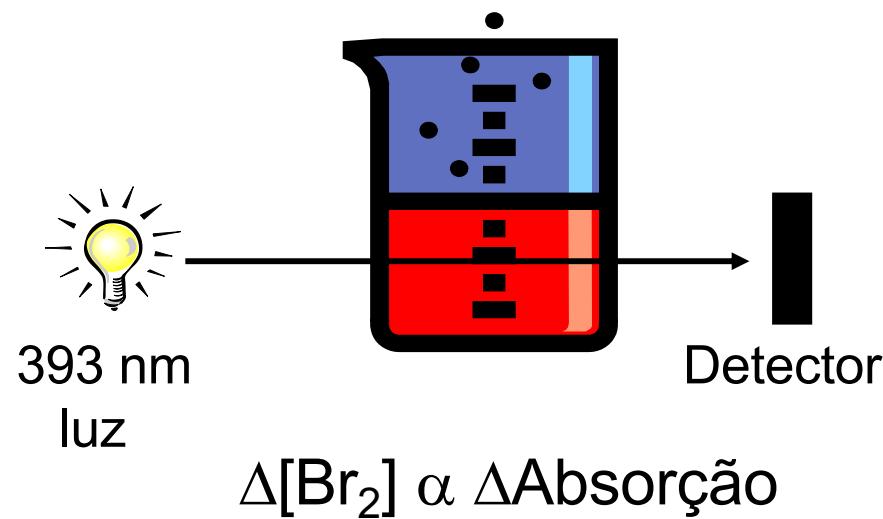
$$\text{vel} = - \frac{\Delta[A]}{\Delta t}$$

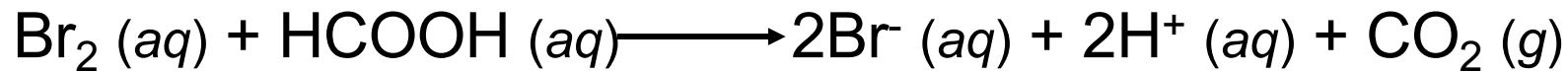
$$\text{vel} = \frac{\Delta[B]}{\Delta t}$$



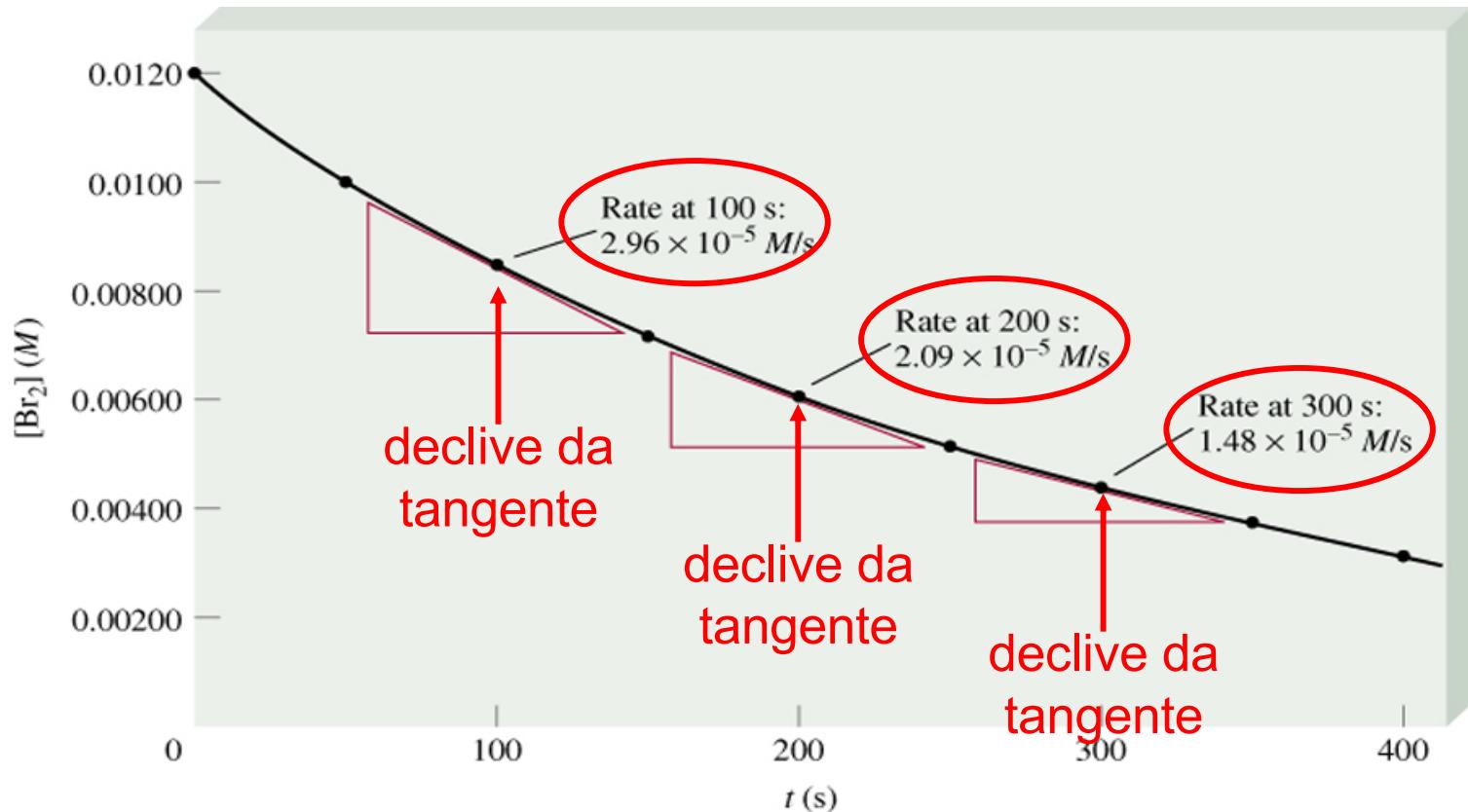


tempo →





Time (s)	[Br ₂] (M)
0.0	0.0120
50.0	0.0101
100.0	0.00846
150.0	0.00710
200.0	0.00596
250.0	0.00500
300.0	0.00420
350.0	0.00353
400.0	0.00296



$$\text{Vel média} = - \frac{\Delta [\text{Br}_2]}{\Delta t} = - \frac{[\text{Br}_2]_{\text{final}} - [\text{Br}_2]_{\text{inicial}}}{t_{\text{final}} - t_{\text{inicial}}}$$

Vel instantânea = velocidade num instante específico no tempo

TABLE 13.1

Rates of the Reaction Between Molecular Bromine and Formic Acid at 25°C

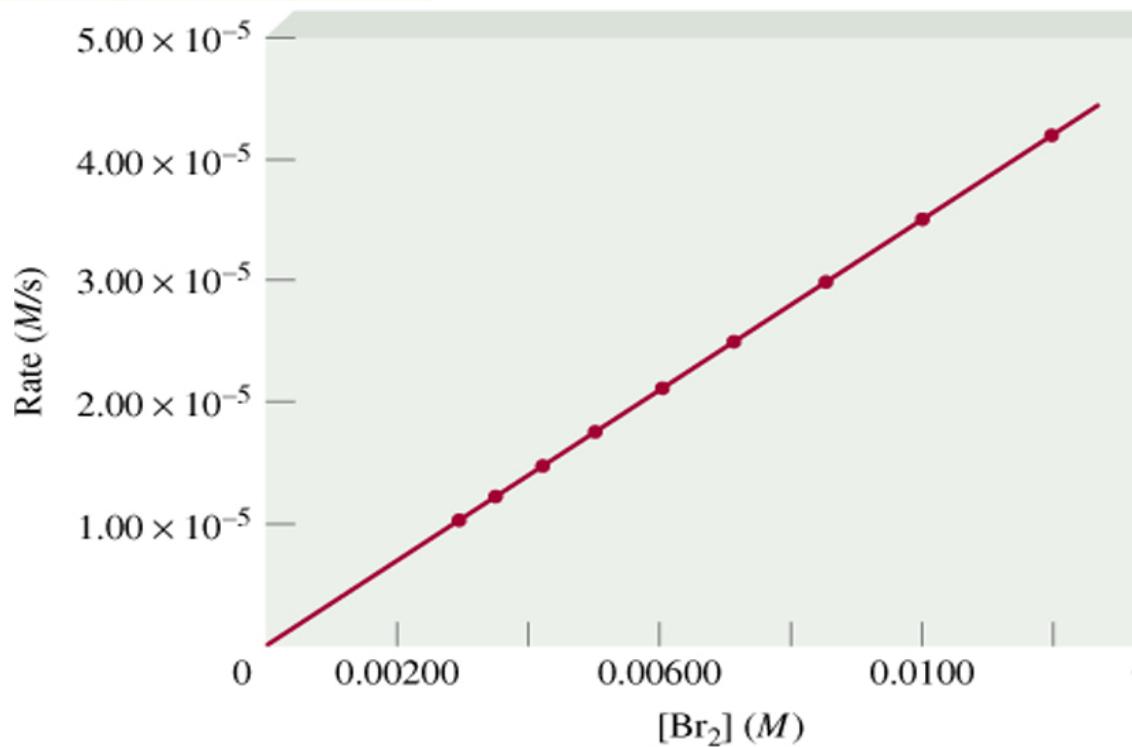
Time (s)	[Br ₂] (M)	Rate (M/s)	$k = \frac{\text{rate}}{[\text{Br}_2]} (\text{s}^{-1})$
0.0	0.0120	4.20×10^{-5}	3.50×10^{-3}
50.0	0.0101	3.52×10^{-5}	3.49×10^{-3}
100.0	0.00846	2.96×10^{-5}	3.50×10^{-3}
150.0	0.00710	2.49×10^{-5}	3.51×10^{-3}
200.0	0.00596	2.09×10^{-5}	3.51×10^{-3}
250.0	0.00500	1.75×10^{-5}	3.50×10^{-3}
300.0	0.00420	1.48×10^{-5}	3.52×10^{-3}
350.0	0.00353	1.23×10^{-5}	3.48×10^{-3}
400.0	0.00296	1.04×10^{-5}	3.51×10^{-3}

$$v \propto [Br_2]$$

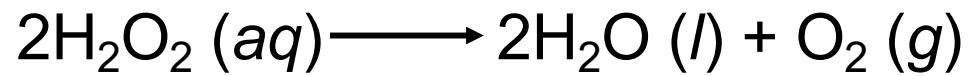
$$v = k [Br_2]$$

$$k = \frac{v}{[Br_2]} = \text{constante de velocidade}$$

$$= 3.50 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$$



Cinética química



$$PV = nRT$$

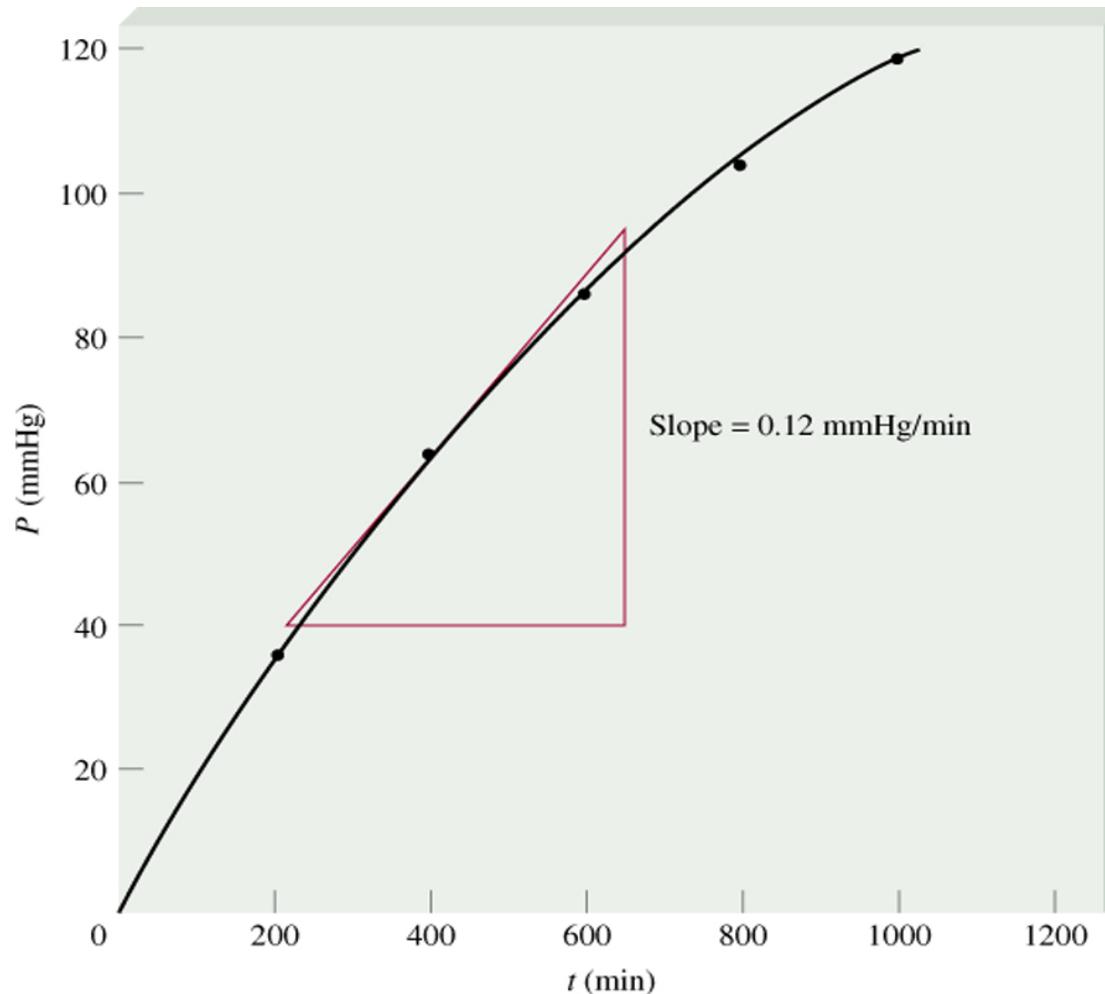
$$P = \frac{n}{V}RT = [\text{O}_2]RT$$

$$[\text{O}_2] = \frac{1}{RT}P$$

$$\text{vel} = \frac{\Delta[\text{O}_2]}{\Delta t} = \frac{1}{RT} \frac{\Delta P}{\Delta t}$$

medir ΔP com o tempo

Cinética química



Cinética química

Velocidades de reação e estequioimetria



Duas moles de A são consumidas por cada mole de B formada.

$$\text{velocidade} = - \frac{1}{2} \frac{\Delta[\text{A}]}{\Delta t} \quad \text{vel} = \frac{\Delta[\text{B}]}{\Delta t}$$

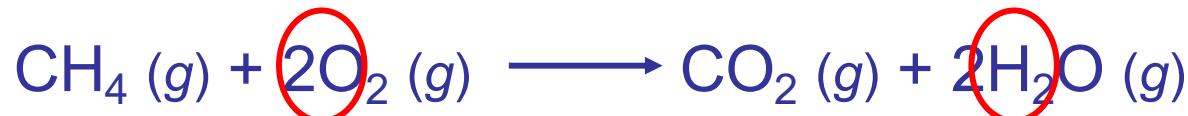


$$\text{vel} = - \frac{1}{a} \frac{\Delta[\text{A}]}{\Delta t} = - \frac{1}{b} \frac{\Delta[\text{B}]}{\Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta[\text{C}]}{\Delta t} = \frac{1}{d} \frac{\Delta[\text{D}]}{\Delta t}$$

Cinética química

Velocidades de reação e estequeometria

Escreva a expressão para a velocidade da reação:



$$\text{vel} = - \frac{\Delta[\text{CH}_4]}{\Delta t} = - \frac{1}{2} \frac{\Delta[\text{O}_2]}{\Delta t} = \frac{\Delta[\text{CO}_2]}{\Delta t} = \frac{1}{2} \frac{\Delta[\text{H}_2\text{O}]}{\Delta t}$$

Cinética química

A Lei de velocidade

A **lei de velocidade** expressa a relação entre a velocidade de uma reação, a constante de velocidade e as concentrações dos reagentes elevadas a uma determinada potência.



$$\text{velocidade} = k [A]^x [B]^y$$

reacção de **ordem x** em relação a A

reacção de **ordem y** em relação a B

reacção de ordem **(x + y)** (global)

Cinética química

A lei de velocidade

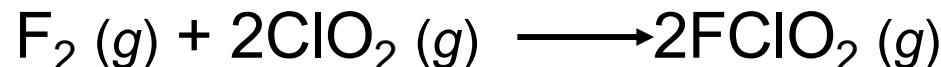


Table 13.2 Rate Data for the Reaction between F₂ and ClO₂

$$v = k [F_2]^x [ClO_2]^y$$

[F ₂](M)	[ClO ₂](M)	Initial Rate (M/s)
1. 0.10	0.010	1.2×10^{-3}
2. 0.10	0.040	4.8×10^{-3}
3. 0.20	0.010	2.4×10^{-3}

Duplicar [F₂] com [ClO₂] constante

A velocidade duplica

$$x = 1$$

Quadruplicar [ClO₂] com [F₂] constante

A velocidade quadruplica

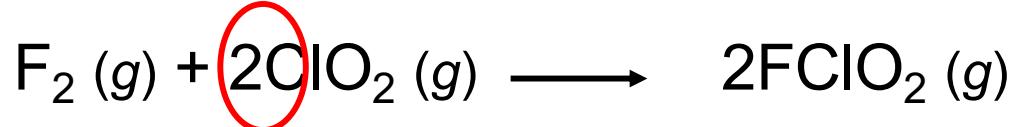
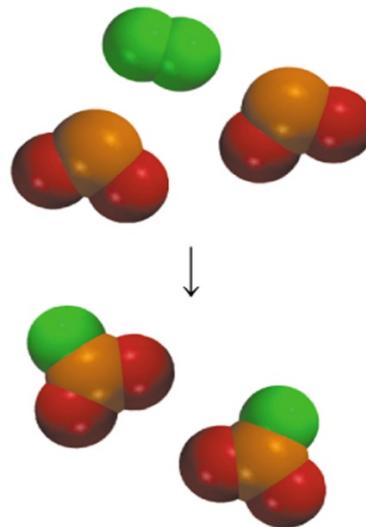
$$y = 1$$

$$\text{velocidade} = k [F_2][ClO_2]$$

Cinética química

A lei de velocidade

- As leis de velocidade são **sempre** determinadas experimentalmente.
- A ordem de reação é **sempre** definida em termos da concentração dos reagentes.
- A ordem em relação a um reagente **não é** determinada pelo coeficiente estequeométrico desse reagente na equação química acertada.



$$v = k [F_2][ClO_2]^1$$

Determine a lei de velocidade e calcule a constante de velocidade para a seguinte reação a partir dos dados da tabela:



Exp.	$[S_2O_8^{2-}]$	$[I^-]$	Vel inicial (M/s)
1	0.08	0.034	2.2×10^{-4}
2	0.08	0.017	1.1×10^{-4}
3	0.16	0.017	2.2×10^{-4}

$$v = k [S_2O_8^{2-}]^x [I^-]^y$$

$$y = 1$$

$$x = 1$$

$$v = k [S_2O_8^{2-}] [I^-]$$

Duplica $[I^-]$, duplica a velocidade (exp. 1 & 2)

Duplica $[S_2O_8^{2-}]$, duplica a velocidade (exp. 2 & 3)

$$k = \frac{v}{[S_2O_8^{2-}] [I^-]} = \frac{2.2 \times 10^{-4} \text{ M/s}}{(0.08 \text{ M})(0.034 \text{ M})} = 0.081 \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

Cinética química

Reações de primeira ordem



$$-\frac{d[A]}{dt} = k [A]$$

$$v = -\frac{d[A]}{dt} \quad v = k [A]$$

$$k = \frac{v}{[A]} = \frac{M/s}{M} = 1/s \text{ ou } s^{-1}$$

$$\int_{[A]_0}^{[A]_t} \frac{d[A]}{[A]} = \int_0^t -k dt$$

[A]_t concentração de A a qualquer tempo t
[A]₀ concentração de A para o tempo t=0

$$\int_{[A]_0}^{[A]_t} \frac{d[A]}{[A]} = \ln [A]_t - \ln [A]_0$$

$$\int \frac{1}{x} dx = \ln x + \text{constante}$$

$$\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$$

$$[A] = [A]_0 \exp(-kt)$$

Cinética química

Reações de primeira ordem



$$k = \frac{v}{[A]} = \frac{M/s}{M} = 1/s \text{ ou } s^{-1}$$

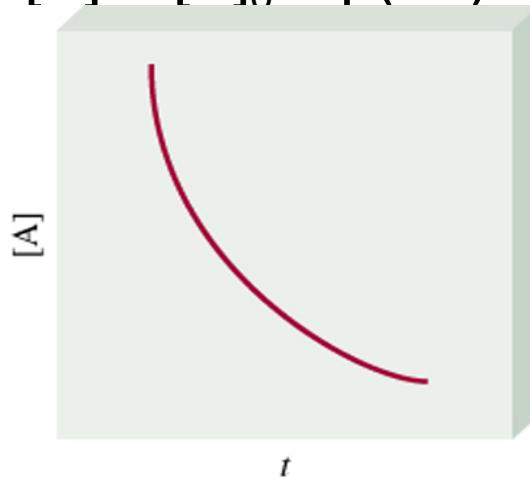
$$v = - \frac{d[A]}{dt} \quad v = k [A]$$

$$-\frac{d[A]}{dt} = k [A]$$

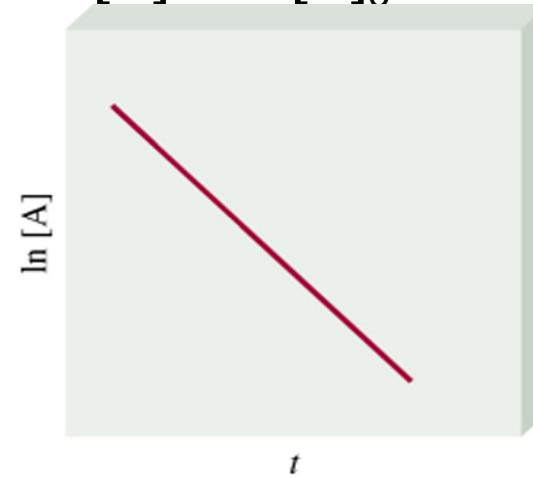
[A] concentração de A a qualquer tempo t

[A]₀ concentração de A para o tempo $t=0$

$$[A] = [A]_0 \exp(-kt)$$



$$\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$$



A reação $2A \longrightarrow B$ é de 1^a ordem em A com uma constante de velocidade de $2.8 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ a 80°C . Quanto tempo demorará para que a concentração de A diminua de 0.88 M para 0.14 M ?

$$\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$$

$$[A]_0 = 0.88 \text{ M}$$

$$[A] = 0.14 \text{ M}$$

$$kt = \ln[A]_0 - \ln[A]$$

$$t = \frac{\ln[A]_0 - \ln[A]}{k} = \frac{\ln \frac{[A]_0}{[A]}}{k} = \frac{\ln \frac{0.88 \cancel{\text{M}}}{0.14 \cancel{\text{M}}}}{2.8 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}} = 66 \text{ s}$$

Cinética química

Reações de primeira ordem

O tempo de **semi-reação (meia-vida ou semivida)**, $t_{1/2}$, é o tempo requerido para a concentração de um reagente atingir metade do valor da sua concentração inicial.

$$t_{1/2} = \frac{\ln \frac{[A]_0}{[A]_0/2}}{k} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{0.693}{k}$$

$t_{1/2} = t$ quando $[A] = [A]_0/2$

Qual a meia-vida do N_2O_5 se este se decompor com uma constante de velocidade de $5.7 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$?

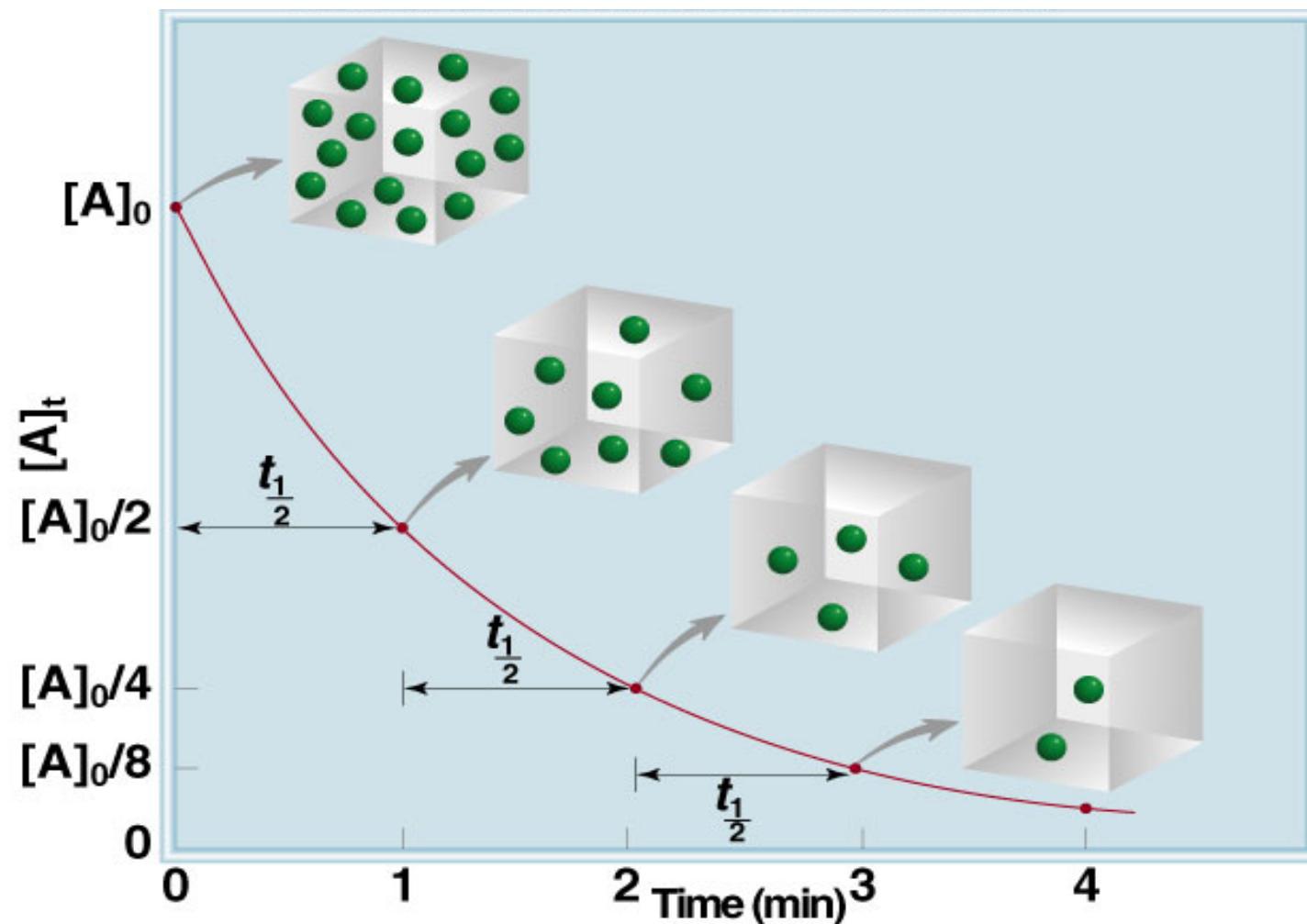
$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{0.693}{5.7 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}} = 1200 \text{ s} = 20 \text{ minutos}$$

Como se identifica que a decomposição é de 1^a ordem?

unidades de $k (\text{s}^{-1})$

Cinética química

Reações de primeira ordem



Cinética química

Reações de segunda ordem



$$v = - \frac{d[A]}{dt} \quad v = k [A]^2$$

$$-\frac{d[A]}{dt} = k [A]^2$$

$$k = \frac{v}{[A]^2} = \frac{M/s}{M^2} = 1/M\cdot s \text{ ou } M^{-1}s^{-1}$$

$$\int_{[A]_0}^{[A]_t} \frac{d[A]}{[A]^2} = \int_0^t -k dt$$

[A]_t concentração de A a qualquer tempo t
[A]₀ concentração de A para o tempo t=0

$$\int_{[A]_0}^{[A]_t} \frac{d[A]}{[A]^2} = -\frac{1}{[A]_t} + \frac{1}{[A]_0}$$

$$\int \frac{1}{x^2} dx = -\frac{1}{x} + \text{constante}$$

$$\frac{1}{[A]_t} = kt + \frac{1}{[A]_0}$$

$$[A]_t = \frac{[A]_0}{1 + [A]_0 kt}$$

Cinética química

Reações de segunda ordem



$$v = - \frac{d[A]}{dt} \quad v = k [A]^2$$

$$k = \frac{v}{[A]^2} = \frac{M/s}{M^2} = 1/M \cdot s \text{ ou } M^{-1}s^{-1} \quad - \frac{d[A]}{dt} = k [A]^2$$

$$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt$$

[A] concentração de A a qualquer tempo t
[A]₀ concentração de A para o tempo $t = 0$

$$t_{1/2} = t \text{ quando } [A] = [A]_0/2$$

$$t_{1/2} = \frac{1}{k[A]_0}$$

Cinética química

Reações de ordem zero



$$v = - \frac{d[A]}{dt} \quad v = k [A]^0 = k$$

$$k = \frac{v}{[A]^0} = M/s$$

$$- \frac{d[A]}{dt} = k$$

$$[A] = [A]_0 - kt$$

[A] concentração de A a qualquer tempo t
[A]₀ concentração de A para o tempo $t = 0$

$$t_{1/2} = t \text{ quando } [A] = [A]_0/2$$

$$t_{1/2} = \frac{[A]_0}{2k}$$

Cinética química

Sumário da cinética das reações de ordem 0, 1 e 2

Ordem	Lei de velocidade	Equação concentração-tempo	meia-vida
0	$v = k$	$[A] = [A]_0 - kt$	$t_{1/2} = \frac{[A]_0}{2k}$
1	$v = k [A]$	$\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$	$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$
2	$v = k [A]^2$	$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt$	$t_{1/2} = \frac{1}{k[A]_0}$

Cinética química

Mecanismos reacionais

A lei da velocidade não pode ser normalmente escrita a partir de uma equação de uma reação química.

A razão prende-se com o facto de a maioria das reações químicas ser o resultado de uma variedade de muitos passos reacionais chamados **passos elementares simples** ou de **reações elementares**.

Cada **reação elementar** descreve um evento distinto, normalmente uma colisão entre partículas.

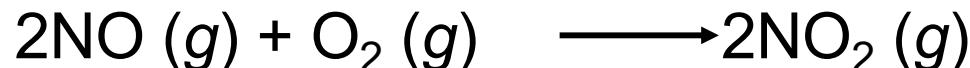
Uma sequência de reações elementares descrevendo uma sucessão de eventos que acreditamos ocorrer para uma determinada reação química corresponde a um **mecanismo reacional**.

Cinética química

Mecanismos reacionais

O progresso de uma reação pode ser representado ao nível molecular por uma série de **passos elementares simples** ou de **reações elementares**.

À sequência proposta dos passos elementares que conduzem à formação de produtos é chamado **mecanismo da reação**.

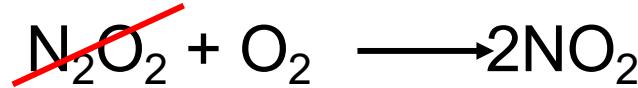


N_2O_2 é detectado durante a reação!

Passo elementar:



+ Passo elementar:



Reacção global:

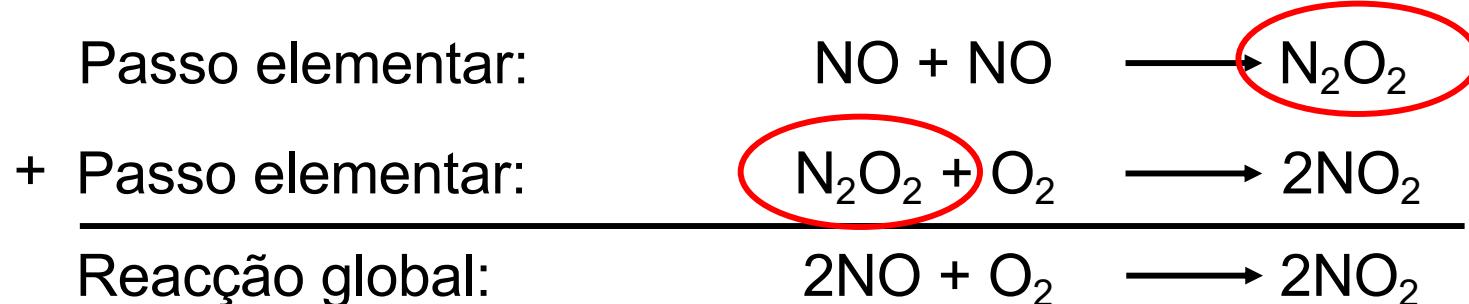


Cinética química

Mecanismos reacionais

Intermediários são espécies que aparecem durante o mecanismo da reação mas não na equação final acertada.

Um **intermediário** é sempre formado num passo elementar e consumido num passo elementar posterior.



A **molecularidade de uma reação** é o nº de moléculas (átomos ou iões) que reagem durante um passo elementar.

- **reação unimolecular** – passo elementar com 1 molécula
- **reação bimolecular** – passo elementar com 2 moléculas
- **reação termolecular** – passo elementar com 3 moléculas

Cinética química

Leis da velocidade e passos elementares

reação unimolecular



reação bimolecular



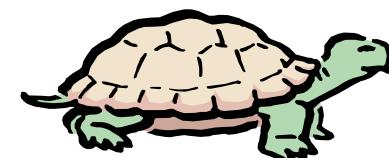
reação bimolecular



Escrita de mecanismos reacionais plausíveis:

- A soma dos passos elementares **tem** de resultar na equação acertada global da reação.
- O passo determinate da velocidade deve prever a mesma lei de velocidade que a determinada experimentalmente.

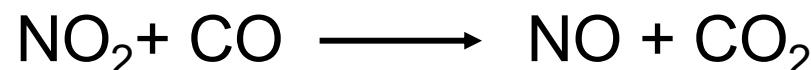
O **passo determinante da velocidade** é o passo mais **lento** na sequência de passos que conduzem à formação de produto.



A lei de velocidade experimental para a reação entre NO_2 e CO para produzir NO e CO_2 é: $v = k[\text{NO}_2]^2$. Acredita-se que a reação ocorre em dois passos:



Qual a equação global da reacção?



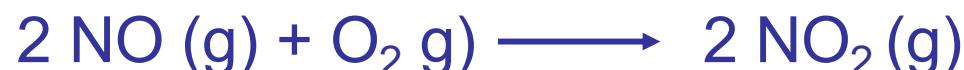
Qual o intermediário?



O que podemos dizer acerca da velocidade relativa dos passos 1 e 2?

$v = k [\text{NO}_2]^2$ é a lei para o passo 1 logo
o passo 1 deve ser mais lento que o passo 2

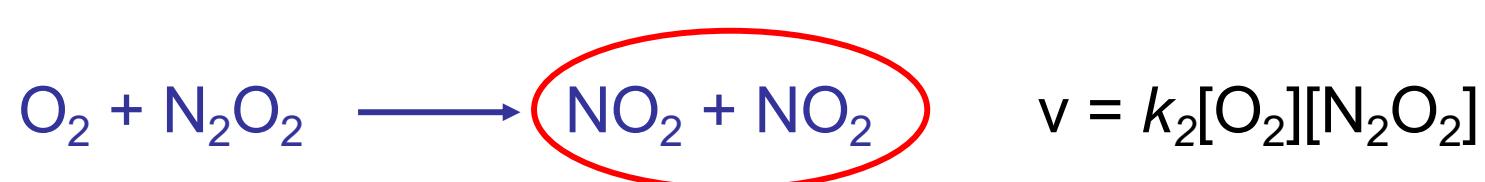
Proponha uma lei de velocidade para a oxidação em fase gasosa de NO a NO₂ com base no mecanismo proposto e compare-a com a experimental, $v = k [NO]^2 [O_2]$



passo 1- dimerização bimolecular rápida e seu reverso:



passo 2 - reação bimolecular lenta onde uma molécula de O₂ colide com o dímero (reverso lento demais para incluir).



Formação de produto $v (\text{NO}_2) = 2k_2[\text{O}_2][\text{N}_2\text{O}_2]$

Proponha uma lei de velocidade para a oxidação em fase gasosa de NO a NO₂ com base no mecanismo proposto e compare-a com a experimental, $v = k[NO]^2[O_2]$

Formação de produto $v (NO_2) = 2 k_2 [O_2] [N_2O_2]$

O intermediário N₂O₂ é formado no passo 1, consumido na reação reversa e consumido no passo 2.



Velocidade de formação de N₂O₂:

$$v (N_2O_2) = k_1[NO]^2 - k_{-1}[N_2O_2] - k_2[O_2][N_2O_2]$$

Proponha uma de lei de velocidade para a oxidação em fase gasosa de NO a NO₂ com base no mecanismo proposto e compare-a com a experimental, $v = k [NO]^2 [O_2]$

$$v (NO_2) = 2k_2[O_2][N_2O_2]$$

$$v (N_2O_2) = k_1[NO]^2 - k_{-1}[N_2O_2] - k_2[O_2][N_2O_2]$$

Aproximação do **estado estacionário**:

A taxa de formação efetiva de qualquer intermediário é nula.

$$k_1[NO]^2 - k_{-1}[N_2O_2] - k_2[O_2][N_2O_2] = 0$$

Rearranjando:

$$[N_2O_2] = \frac{k_1[NO]^2}{k_{-1} + k_2[O_2]}$$

Proponha uma de lei de velocidade para a oxidação em fase gasosa de NO a NO₂ com base no mecanismo proposto e compare-a com a experimental, $v = k [NO]^2 [O_2]$

Substituindo a expressão para [N₂O₂] na lei de velocidade obtida para a formação de NO₂:

$$v (NO_2) = 2k_2[O_2][N_2O_2]$$

$$[N_2O_2] = \frac{k_1[NO]^2}{k_{-1} + k_2[O_2]}$$

$$v (NO_2) = \frac{2k_1k_2[NO]^2[O_2]}{k_{-1} + k_2[O_2]}$$

A lei de velocidade obtida é muito diferente da experimental,

$$v = k [NO]^2 [O_2]$$

Proponha uma lei de velocidade para a oxidação em fase gasosa de NO a NO_2 com base no mecanismo proposto e compare-a com a experimental, $v = k [\text{NO}]^2 [\text{O}_2]$

$$v (\text{NO}_2) = \frac{2k_1 k_2 [\text{NO}]^2 [\text{O}_2]}{k_{-1} + k_2 [\text{O}_2]}$$

Passo 2 é lento comparado com o rápido equilíbrio do passo 1:

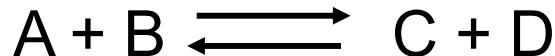
$$k_{-1}[\text{N}_2\text{O}_2] \gg k_2[\text{O}_2] [\text{N}_2\text{O}_2] \text{ logo } k_{-1} \gg k_2[\text{O}_2]$$

$$v (\text{NO}_2) = \frac{2k_1 k_2}{k_{-1}} [\text{NO}]^2 [\text{O}_2]$$

Que está de acordo com a lei experimental se: $k = \frac{2k_1 k_2}{k_{-1}}$

Cinética química

Velocidades e equilíbrio mais uma vez...



Equilíbrio é um estado no qual não ocorrem mudanças observáveis com o passar do tempo.

O equilíbrio químico é atingido quando:

- As velocidades da reação directa e inversa são iguais e
- As concentrações de reagentes e produtos permanecem constantes

$$K = \frac{[C][D]}{[A][B]}$$



$$v = k_1[A][B]$$



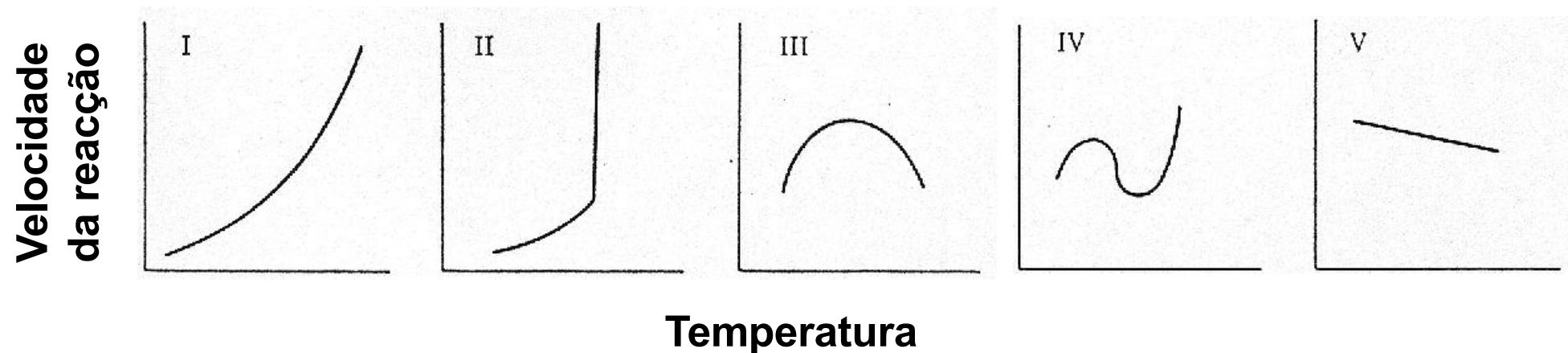
$$v = k_{-1}[C][D]$$

$$k_1[A][B] = k_{-1}[C][D]$$

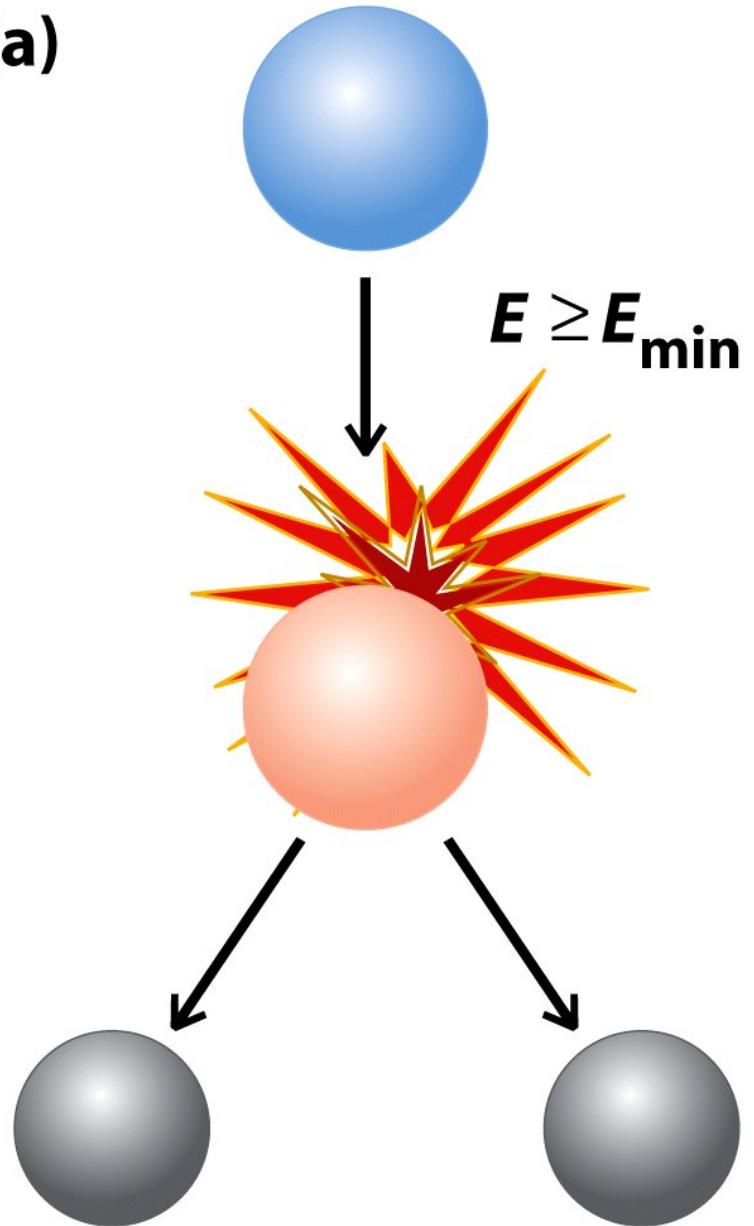
$$\frac{[C][D]}{[A][B]} = \frac{k_1}{k_{-1}}$$

$$K = \frac{k_1}{k_{-1}}$$

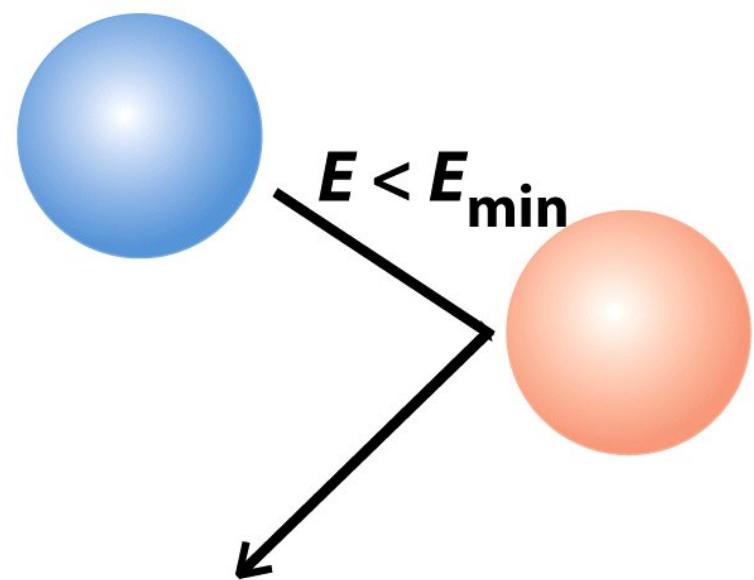
Diferentes dependências da velocidade de uma reacção com a temperatura.



(a)

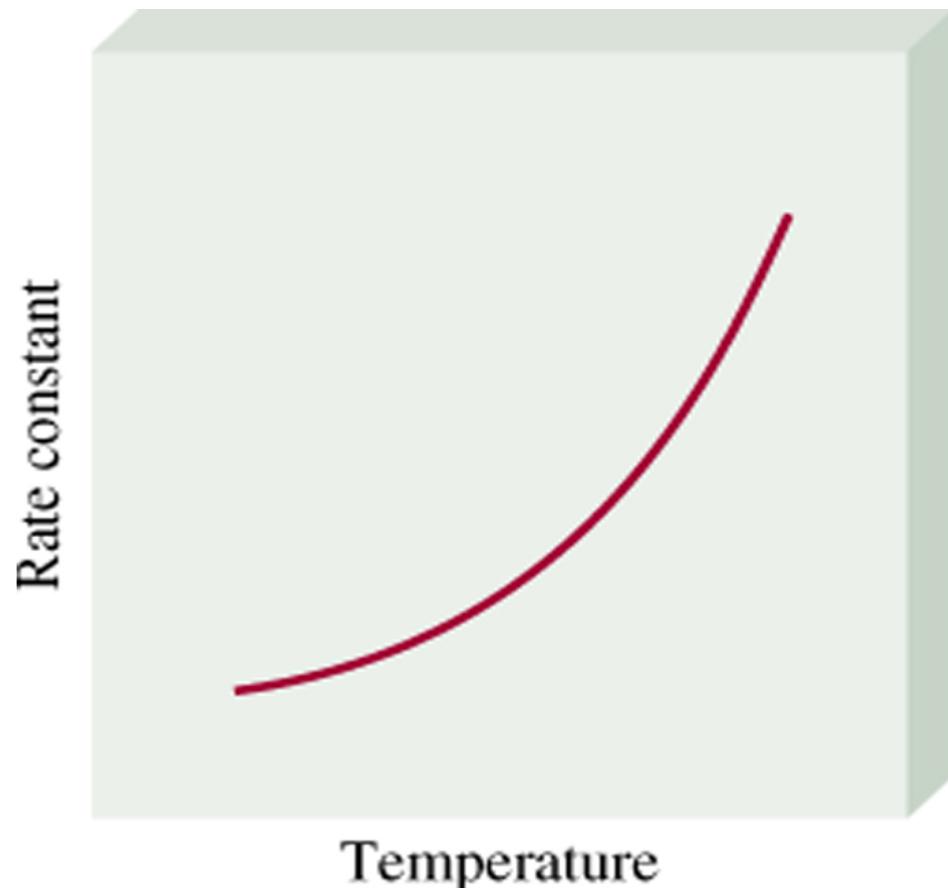


(b)



Cinética química

Dependência da constante de velocidade da temperatura



$$k = A \cdot \exp(-E_a/RT)$$

(Equação de Arrhenius)

E_a energia de ativação (J/mol)

R const. dos gases (8.314 J/K•mol)

T temperatura absoluta

A factor pré-exponencial

$$\ln k = -\frac{E_a}{R} \frac{1}{T} + \ln A$$

A **energia de ativação (E_a)** é a quantidade mínima de energia necessária para iniciar uma reação química.

Dependência da constante de velocidade com a temperatura.

Lei de Arrhenius

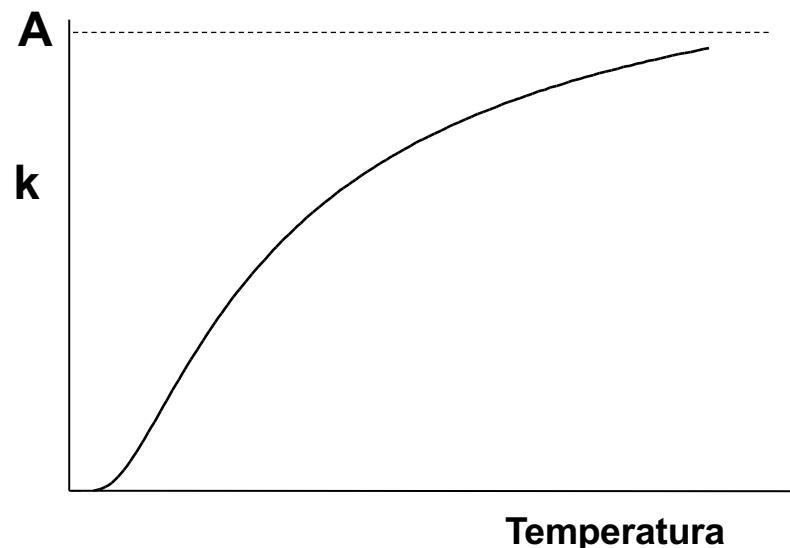
$$k = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

E_a = energia de ativação (J/mol)

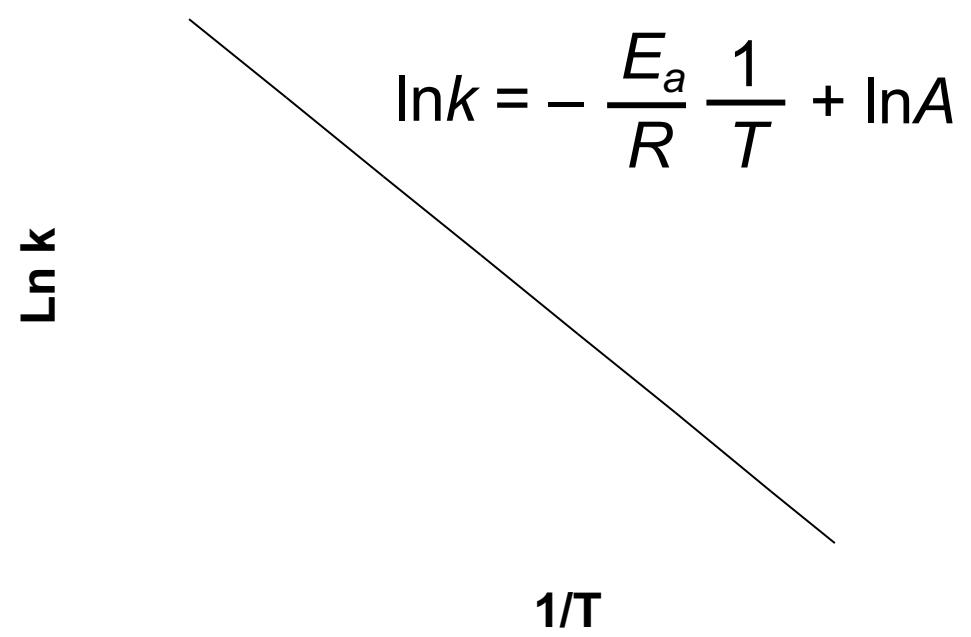
R = constante dos gases ($8,314 \text{ J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$)

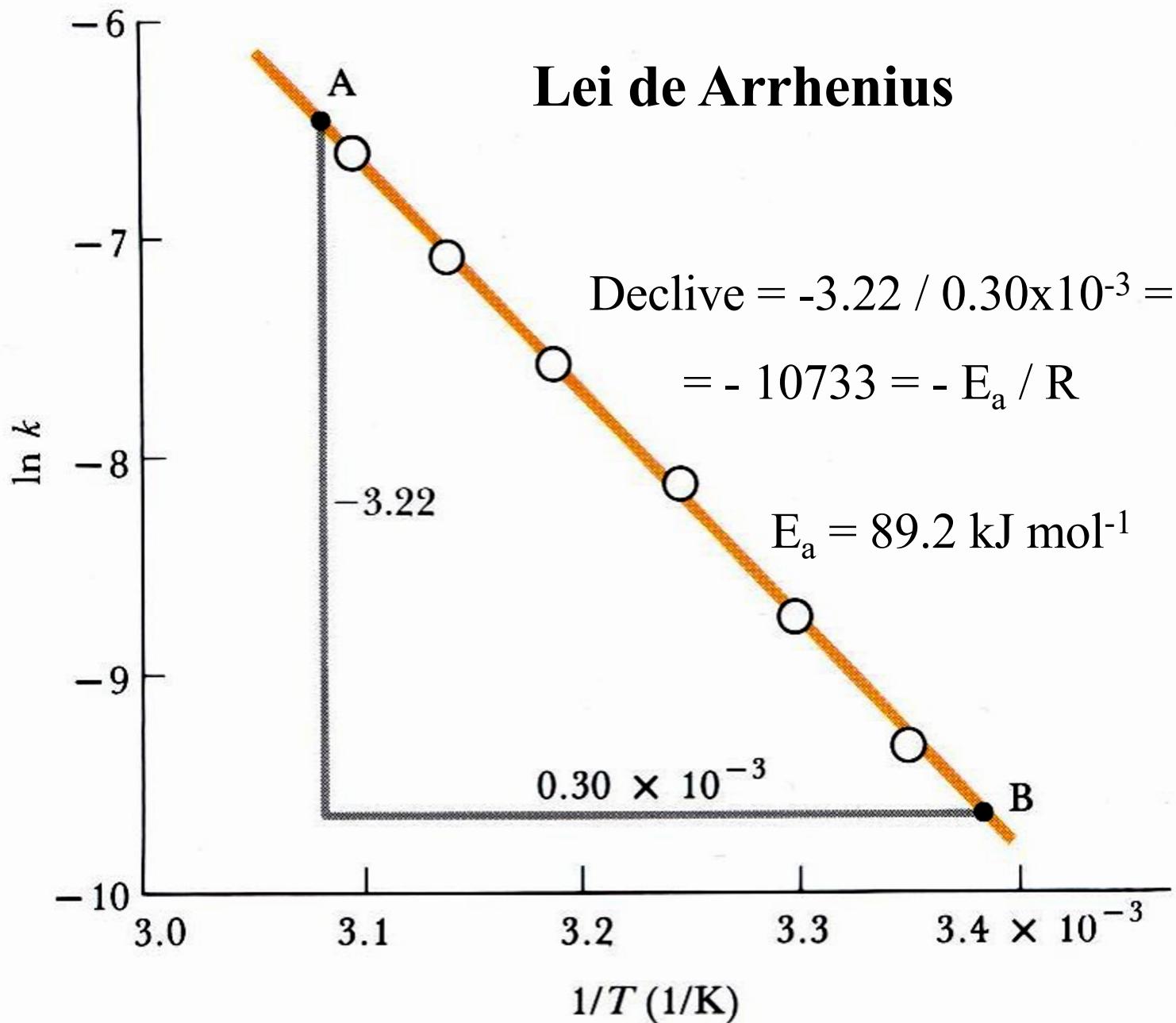
T = temperatura absoluta

A = fator de frequência

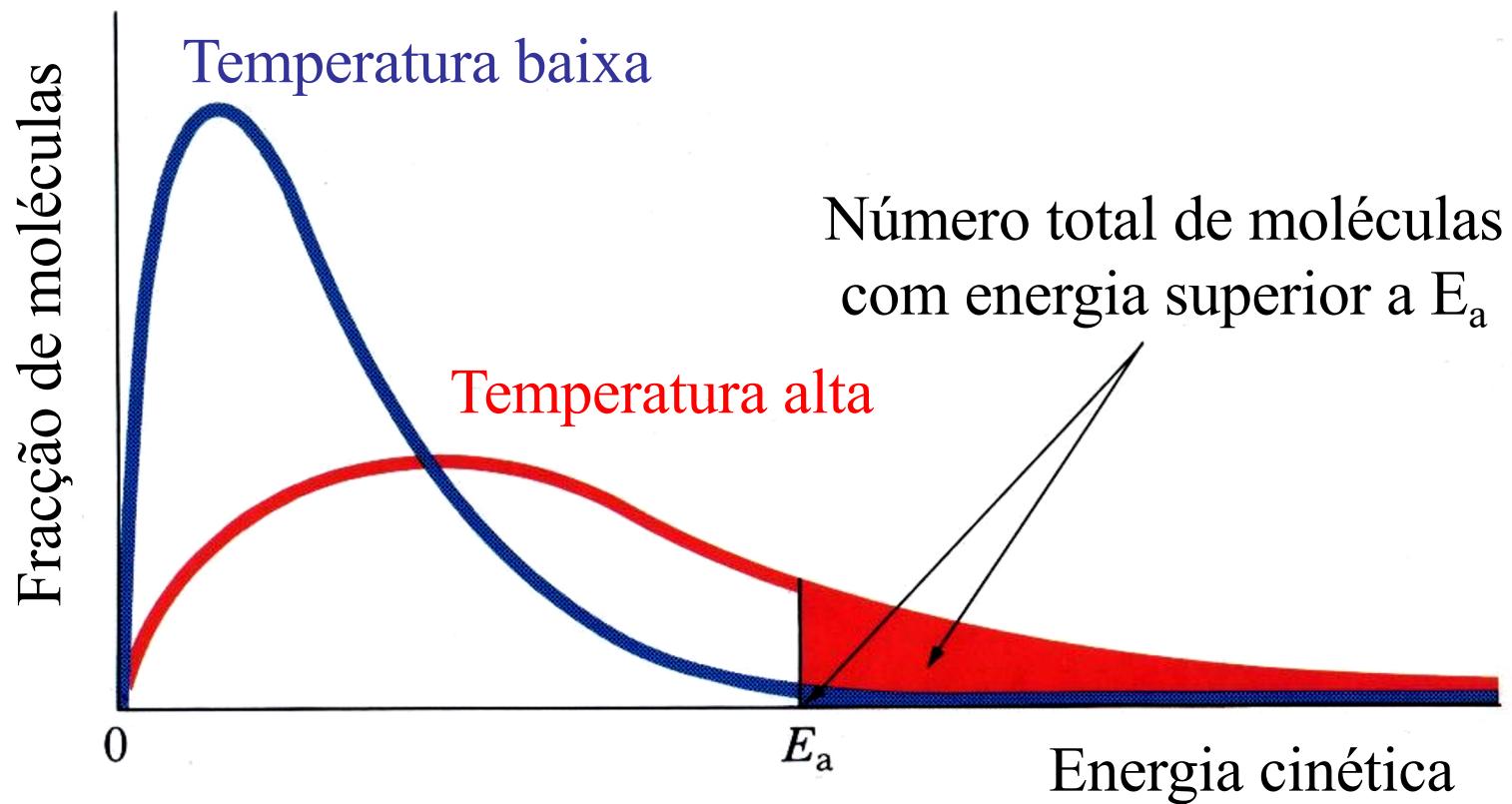


Linearização da Lei de Arrhenius





Lei de Arrhenius

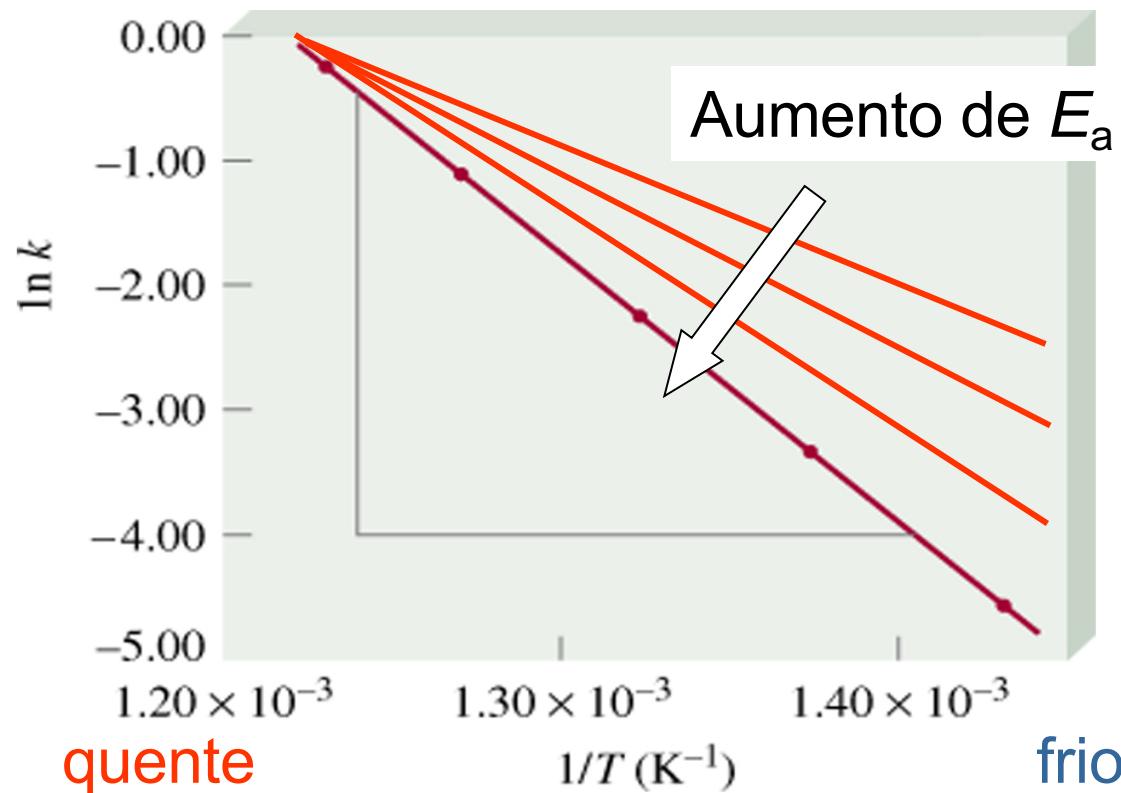


Cinética química

Dependência da constante de velocidade da temperatura

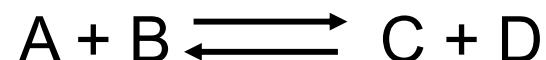
$$\ln k = - \frac{E_a}{R} \frac{1}{T} + \ln A$$

Quanto maior a E_a maior a resposta de k a uma mesma variação de temperatura

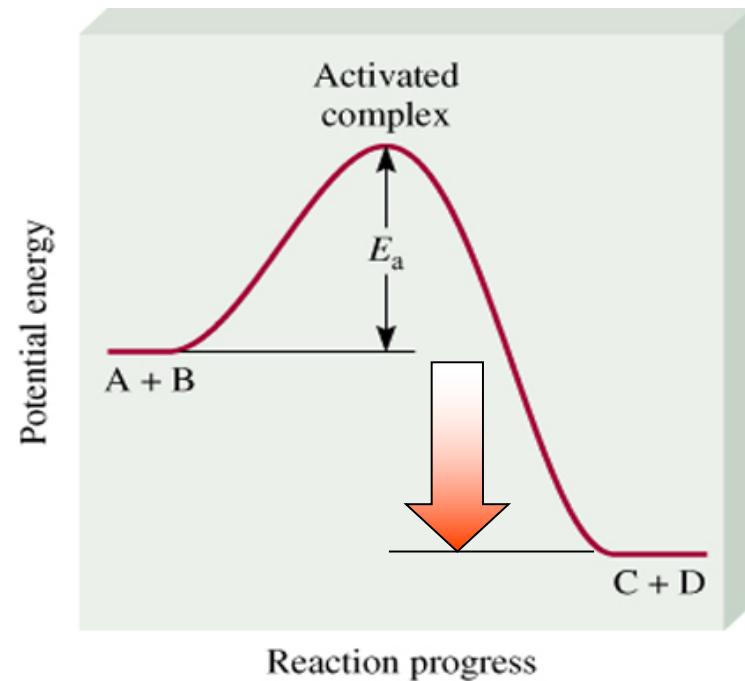


Cinética química

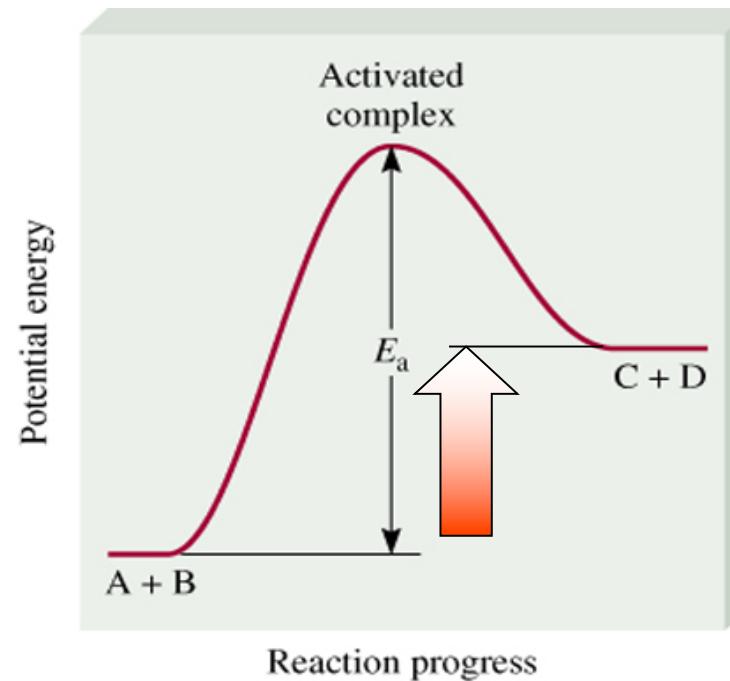
Energia de ativação (E_a), temperatura e equilíbrio



Reação Exotérmica



Reação Endotérmica



Cinética química

Modelos reacionais moleculares

Um modelo reacional a nível molecular tem que prever a dependência da temperatura das constantes de velocidade, tal como expressa pela equação de Arrhenius. Deve também revelar o significado dos parâmetros **A** e **E_a**.

Teoria das colisões - reações em fase gasosa - conceptualmente mais simples. A reação só ocorre se as moléculas se encontrarem e ocorrer uma colisão

Teoria do complexo activado - teoria mais geral, engloba reações em fase gasosa e reações em solução.

Em solução as moléculas “caminham” através do solvente e podem passar longos períodos na vizinhança umas das outras.

Cinética química

Modelos reacionais moleculares

Teoria das colisões - reações em fase gasosa - conceptualmente mais simples. A reação só ocorre se as moléculas se encontrarem e colidirem com uma energia cinética suficiente.

Existe uma energia cinética mínima para colisão efetiva, E_{min} .

Temos que para uma dada temperatura, a constante de velocidade é menor do que a prevista pela teoria das colisões. Orientação: Requisito estéreo - P.

Velocidade = frequência colisões x fração com energia suficiente

$$\ln k = P(\sigma \bar{v}_{rel} N_A^2) - \frac{E_{min}}{RT}$$

Cinética química

Modelos reacionais moleculares

Teoria do complexo ativado - teoria mais geral, engloba reações em fase gasosa e reações em solução.

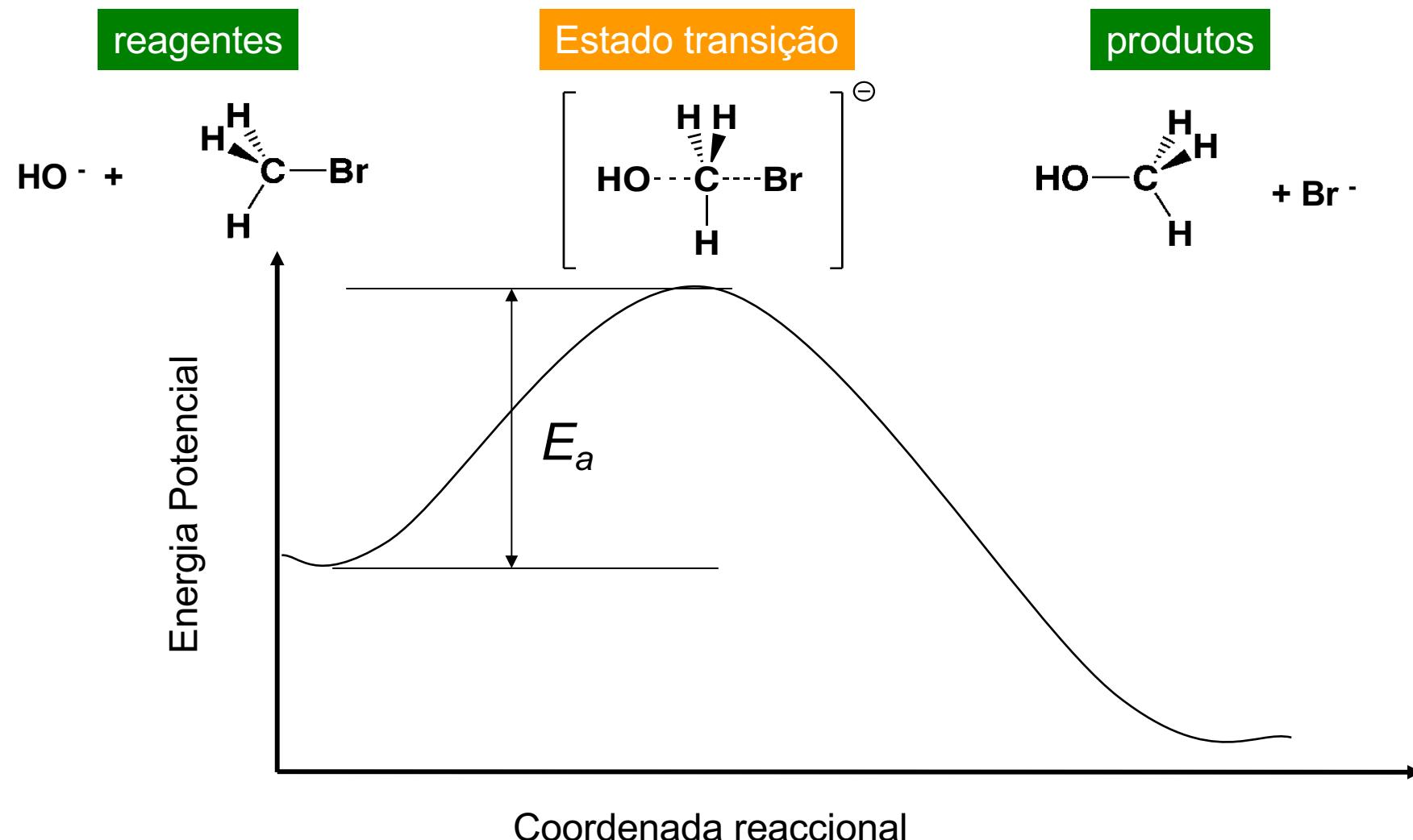
Em solução as moléculas “caminham” através do solvente e podem passar longos períodos na vizinhança umas das outras.

Quando as moléculas se aproximam distorcem-se uma à outra. Este encontro resulta na formação de um **complexo ativado** - um arranjo das duas moléculas que pode continuar originando produtos ou voltar para trás dando origem aos reagentes, dependendo da energia cinética que os reagentes possuem.

Neste complexo ativado as ligações originais são mais longas e estão enfraquecidas, as novas ligações estão só parcialmente formadas.

Cinética química

Teoria do complexo ativado



Cinética química

Modelos reacionais moleculares

Um modelo reacional a nível molecular tem que prever a dependência da temperatura das constantes de velocidade, tal como expressa pela equação de Arrhenius. Deve também revelar o significado dos parâmetros **A** e **E_a**.

Teoria das colisões - Para reações em fase gasosa - uma reação só ocorre se as moléculas de reagente colidirem com uma energia cinética igual ou superior à energia de ativação e com uma orientação correta.

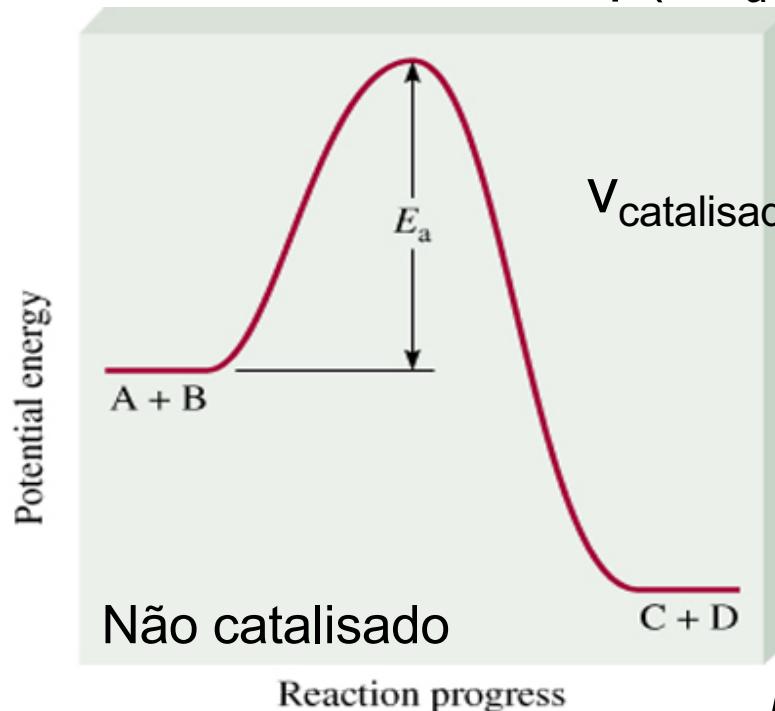
Teoria do complexo activado - teoria mais geral - uma reação só ocorre se duas moléculas adquirirem energia suficiente, por exemplo do solvente que as rodeia, para formarem um complexo activado e ultrapassar uma barreira energética.

Cinética química

Catalisadores

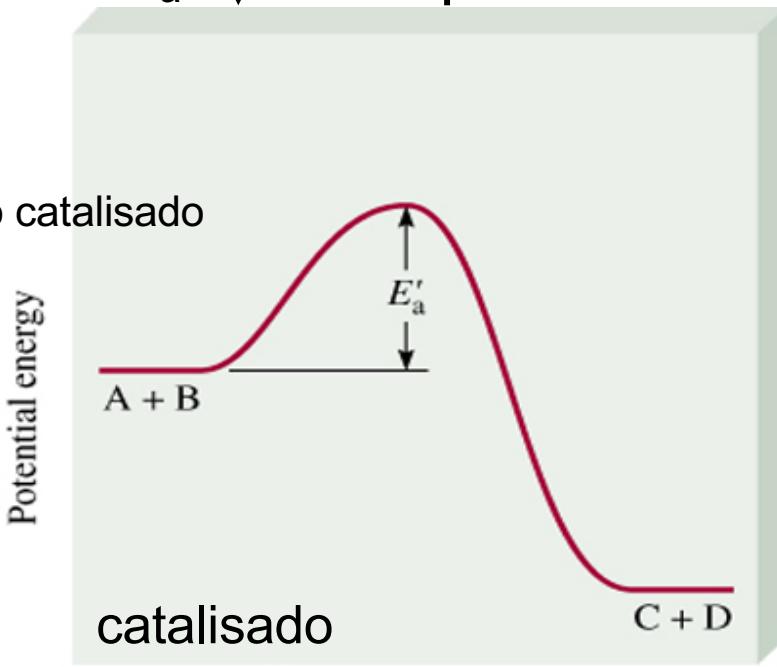
Um **catalisador** é uma substância que aumenta a velocidade de uma reação química sem ser ele próprio consumido nessa reação.

$$k = A \cdot \exp(-E_a/RT)$$



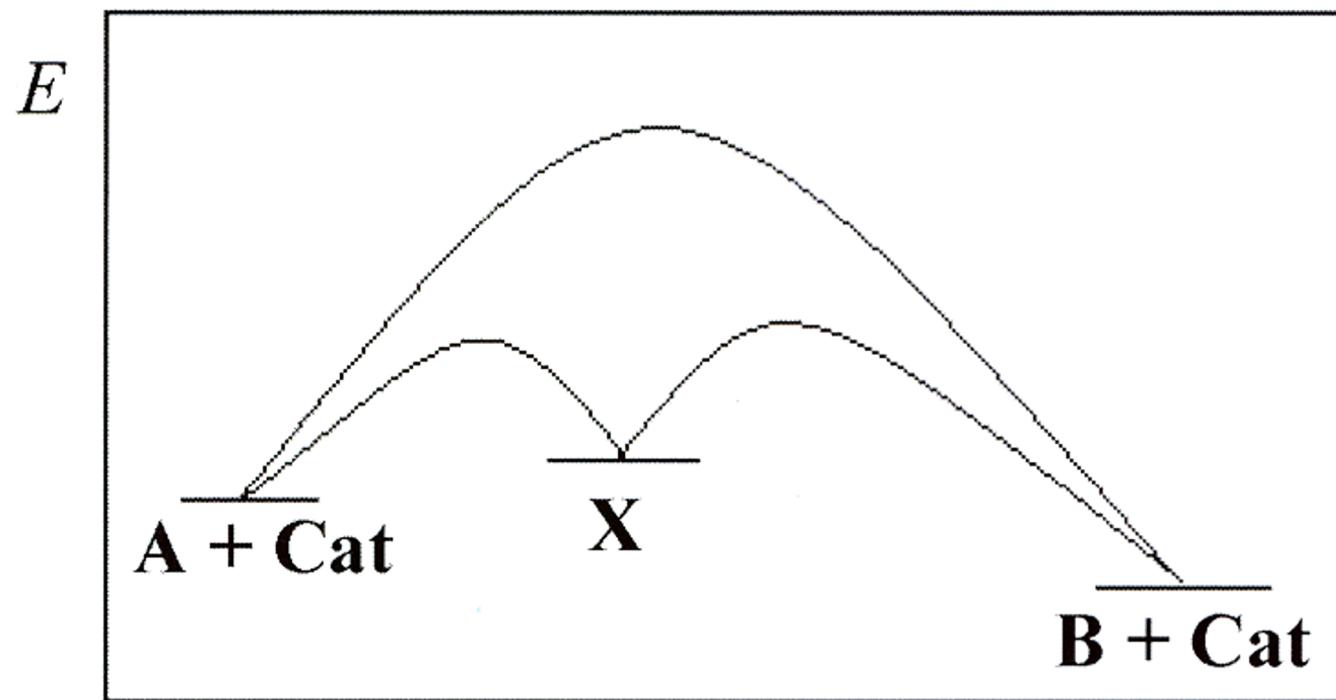
$$E' < E_a$$

$$E_a \downarrow \quad k \uparrow$$



$$\text{Reaction progress}$$

Catálise



Coordenada reacional

Cinética química

Catalisadores

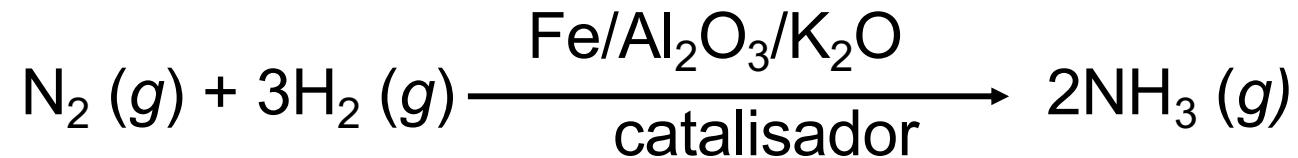
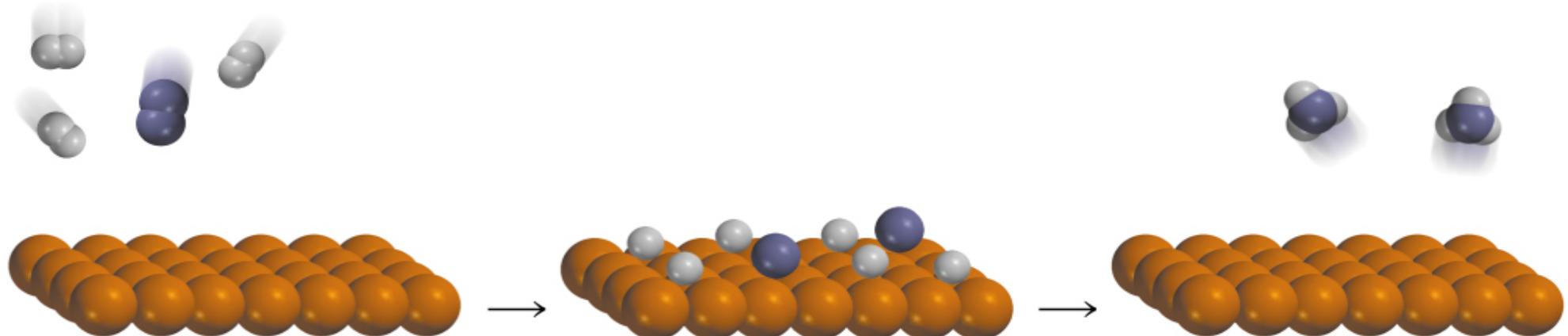
Em **catálise heterogénea**, os reagentes e o catalisador estão em fases diferentes.

- Síntese da amónia de Haber
- Processo de Ostwald para a produção de ácido nítrico
- Conversores catalíticos

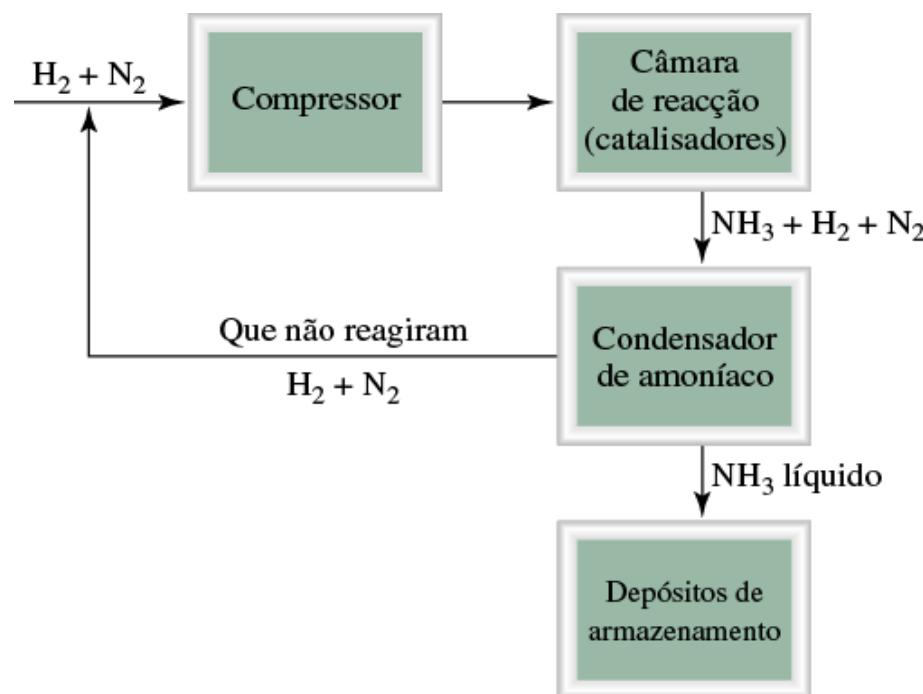
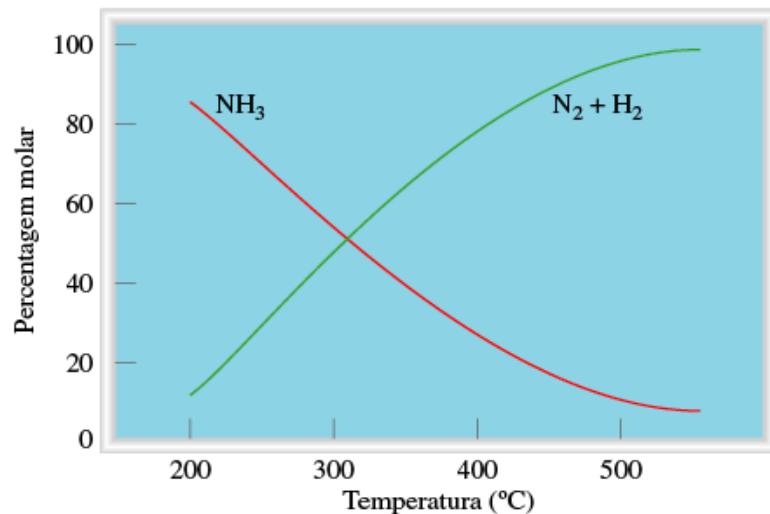
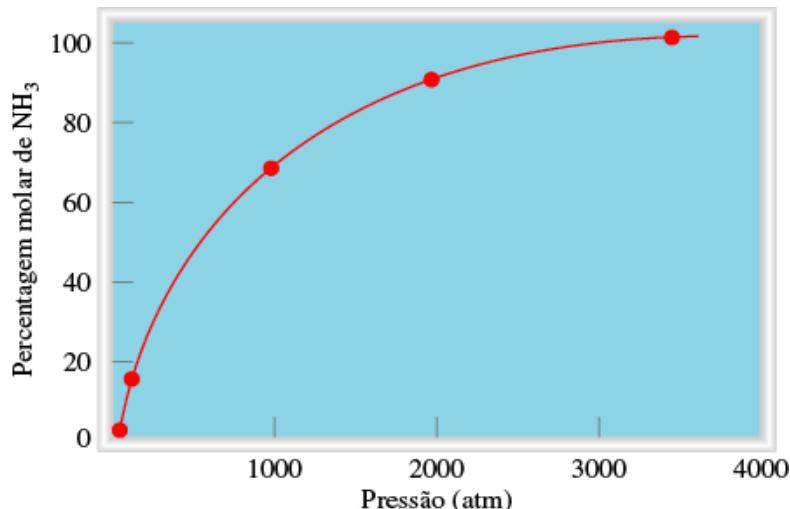
Em catálise **homogénea**, os reagentes e os catalisadores estão dispersos numa única fase, normalmente líquida.

- Catálise ácida
- Catalise básica

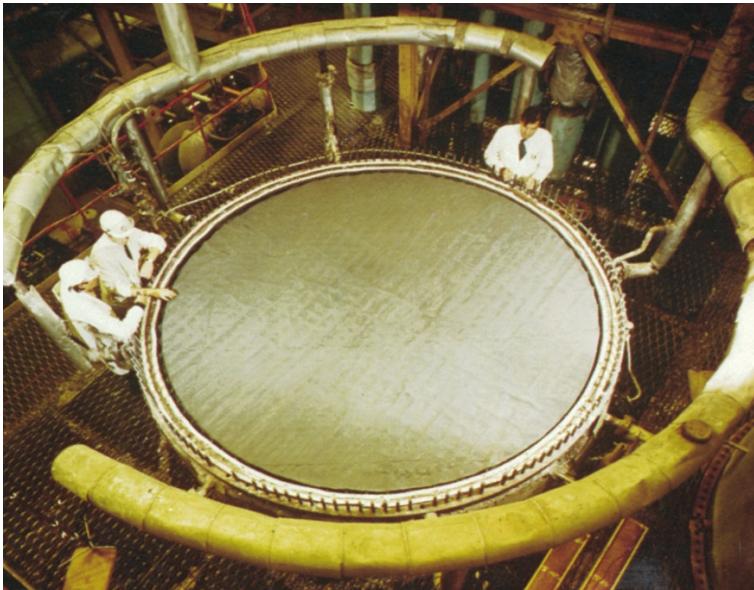
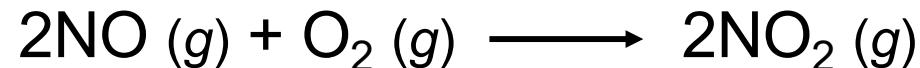
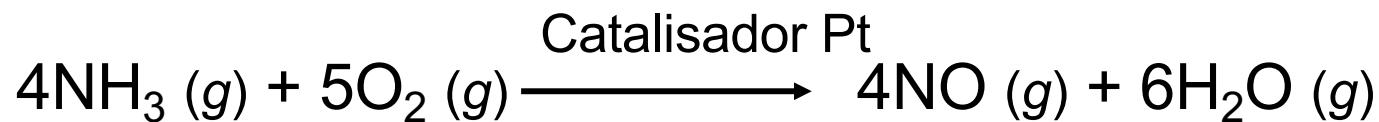
Processo de Haber



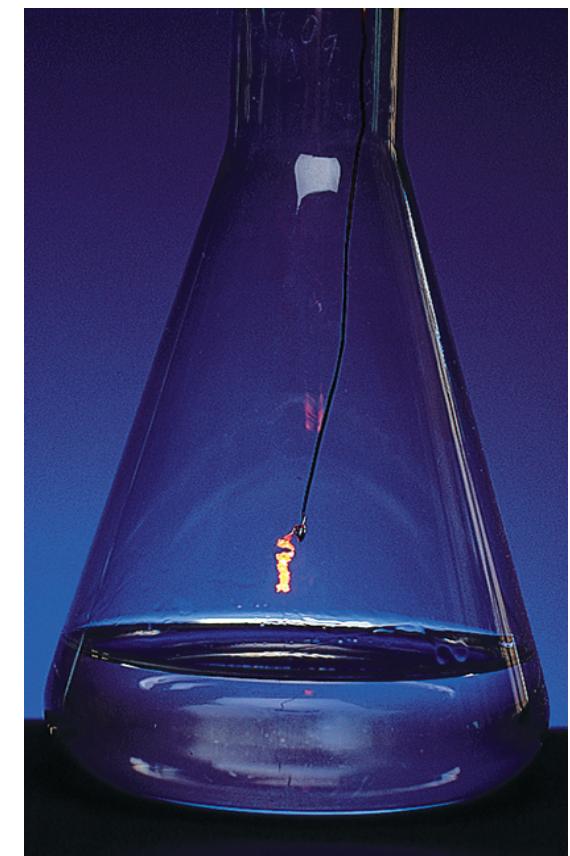
Química em Ação: O Processo Haber



Processo de Ostwald

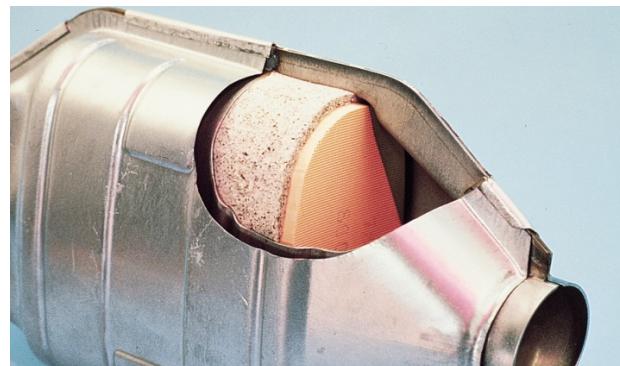
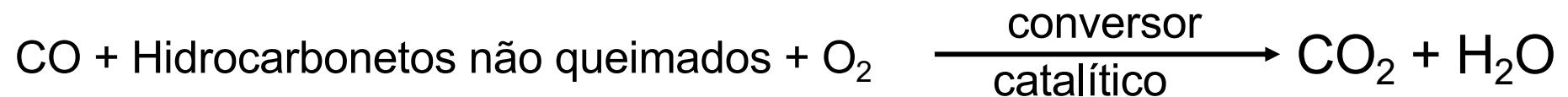
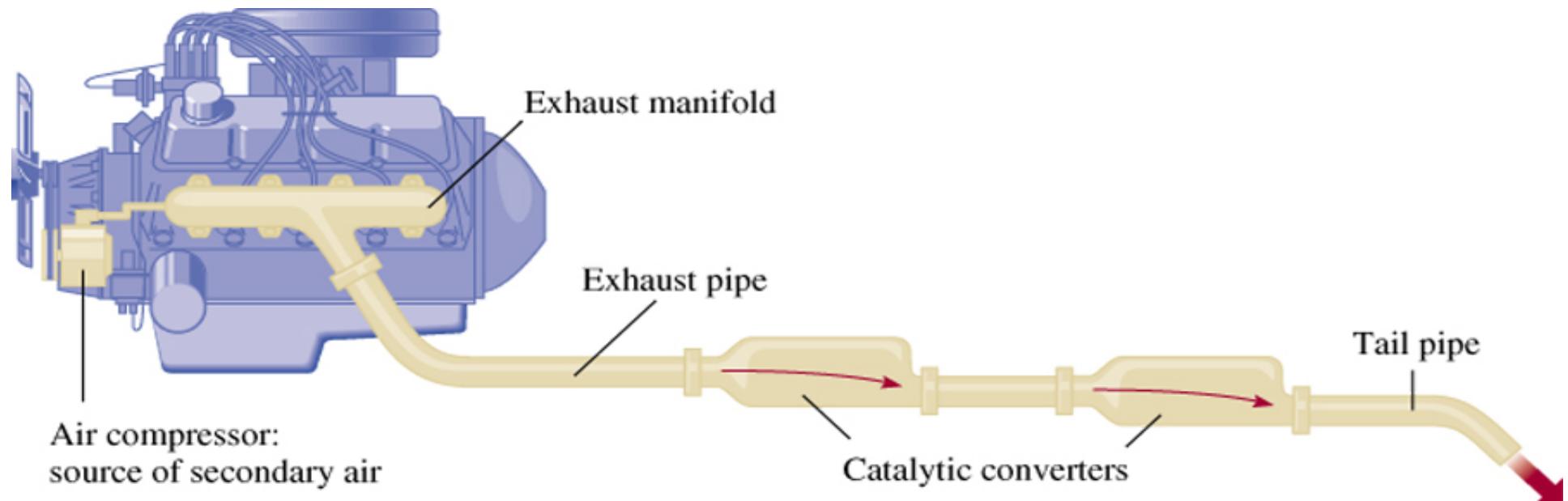


Catalisadores de Pt-Rh usados
no processo de Ostwald

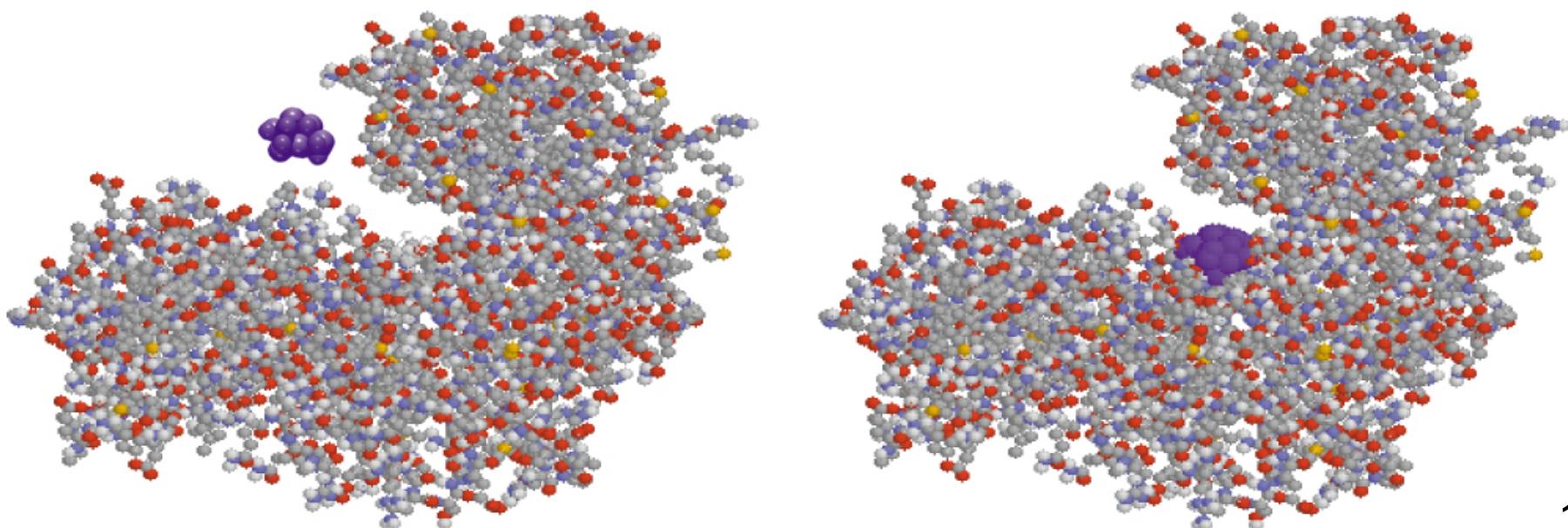
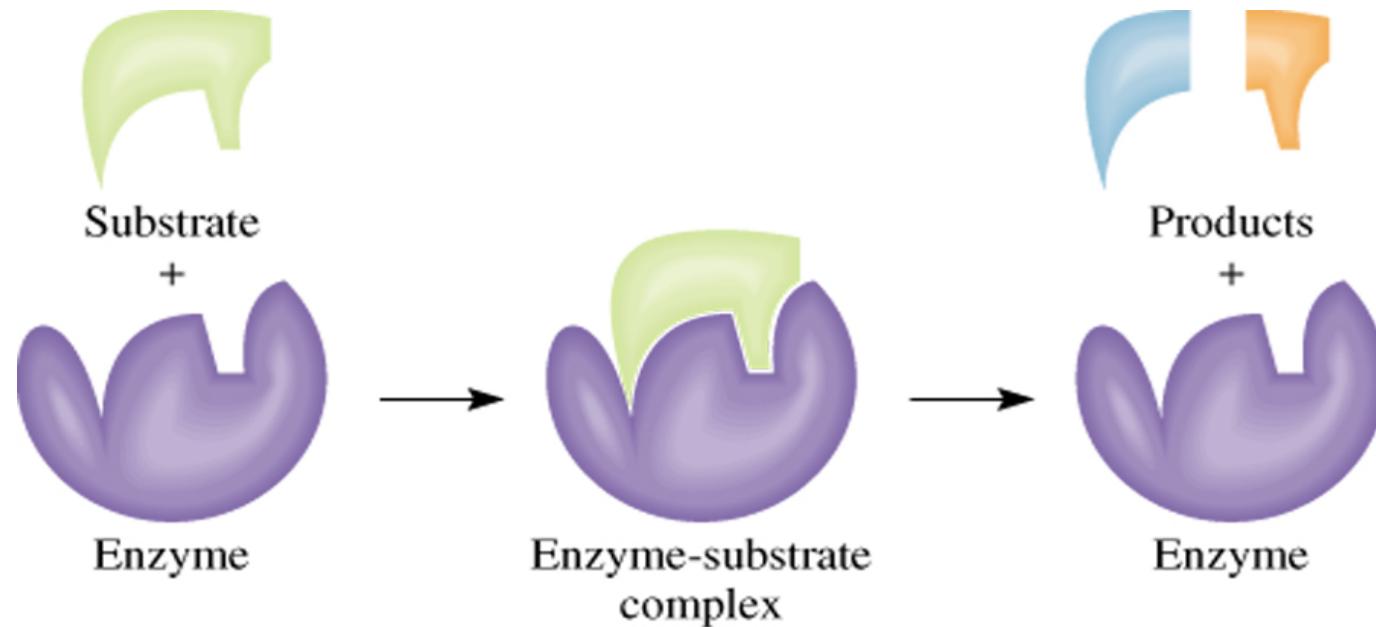


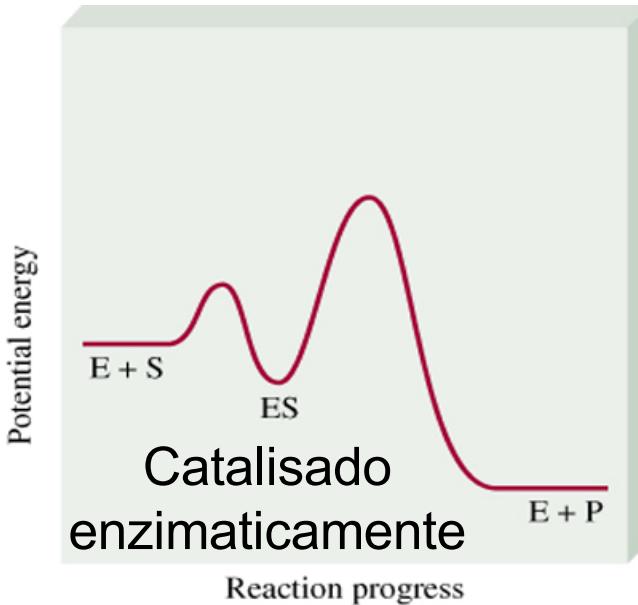
Fio de Pt quente
Sobre solução de NH₃

Conversores Catalíticos



Catálise enzimática





$$v = \frac{d[P]}{dt}$$

$$v = k [ES]$$

