

AULA 1 – CONCEITOS GERAIS

A cinética química tem por finalidade caracterizar a lentidão ou a rapidez das reações químicas, ou seja, verificar a **velocidade** com que as reações irão ocorrer.

Cinética química é o estudo da velocidade das reações químicas e dos fatores que influem nessa velocidade.

Chamamos de **velocidade média** de uma reação química a relação entre a variação da quantidade de reagente consumida ou de produto formado pelo intervalo de tempo gasto nesta variação.

Para uma reação química genérica, temos:



Velocidade de Consumo do Reagente A

$$v = \frac{\text{quantidade consumida do reagente A}}{\Delta t}$$

Velocidade de Consumo do Reagente B

$$v = \frac{\text{quantidade consumida do reagente B}}{\Delta t}$$

Velocidade de Formação do Produto C

$$v = \frac{\text{quantidade formada do produto C}}{\Delta t}$$

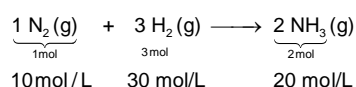
Dependendo das grandezas utilizadas, a velocidade pode ser expressa como variação da concentração pelo tempo (mol/L · tempo), variação da quantidade (mol/tempo), da massa (g/tempo), e assim por diante.

Vamos considerar agora um exemplo prático de como calcular a velocidade média de reagentes e produtos e também a velocidade média da reação química.

Exemplo

Na reação entre nitrogênio e hidrogênio observou-se a formação de 20 mol/L de amônia nos primeiros 5 minutos. Calcule a velocidade média de formação de amônia, bem como a de consumo dos reagentes.

De acordo com a reação devidamente balanceada, temos:



Cálculo das velocidades médias:

$$\text{em relação ao N}_2 : v(\text{N}_2) = \frac{10 \text{ mol/L}}{5 \text{ min}} = 2 \text{ mol/L} \cdot \text{min}$$

$$\text{em relação ao H}_2 : v(\text{H}_2) = \frac{30 \text{ mol/L}}{5 \text{ min}} = 6 \text{ mol/L} \cdot \text{min}$$

$$\text{em relação ao NH}_3 : v(\text{NH}_3) = \frac{20 \text{ mol/L}}{5 \text{ min}} = 4 \text{ mol/L} \cdot \text{min}$$

Para obtermos a velocidade média da reação química a partir da velocidade média de consumo ou formação dos componentes, basta dividirmos estes valores pelo coeficiente estequiométrico da equação balanceada.

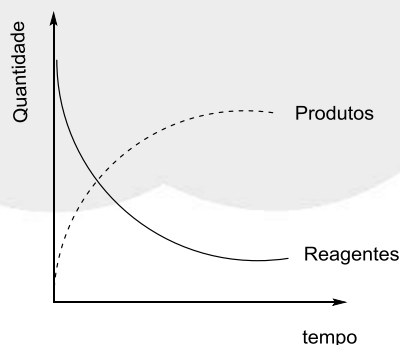
$$v(\text{Reação}) = -\frac{v(\text{N}_2)}{1} = -\frac{v(\text{H}_2)}{3} = +\frac{v(\text{NH}_3)}{2}$$

$$v(\text{Reação}) = -\frac{(2 \text{ mol/L} \cdot \text{min})}{1} = -\frac{(6 \text{ mol/L} \cdot \text{min})}{3} = +\frac{(4 \text{ mol/L} \cdot \text{min})}{2}$$

$$v(\text{Reação}) = 2 \text{ mol/L} \cdot \text{min}$$

Note que na equação para o cálculo da velocidade da reação existem sinais positivos e negativos. Convencionou-se desta forma que para os reagentes temos sinais negativos e para produtos, sinais positivos.

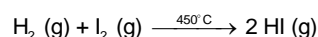
Graficamente podemos representar a variação da quantidade de reagentes e produtos em função do tempo:



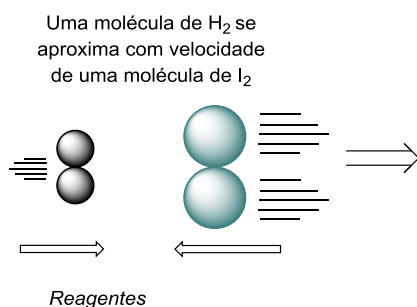
Agora que sabemos como calcular a velocidade média de reação, podemos entender um pouco melhor como as reações ocorrem.

Teoria das Colisões

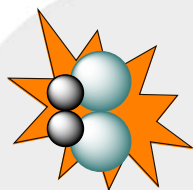
Observe a reação entre hidrogênio e iodo em estado gasoso:



Etapas da reação:

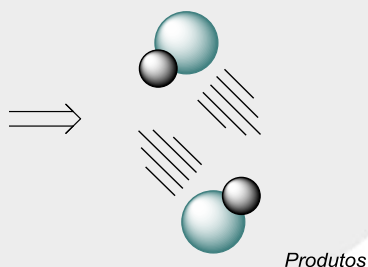


Choque violento



Complexo Ativado

Moléculas de HI produzidas se afastam rapidamente



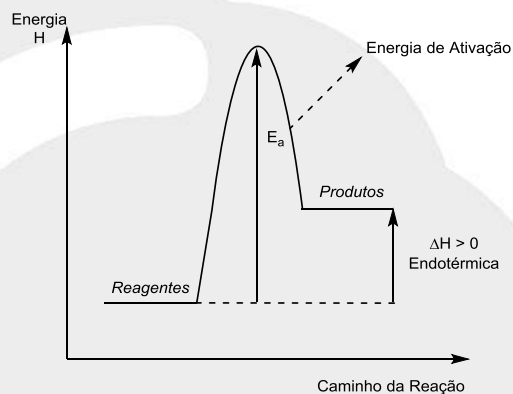
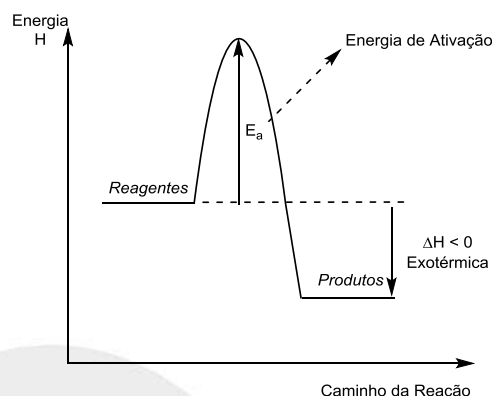
De acordo com a teoria das colisões, para uma reação química ocorrer, são necessárias três condições básicas:

1. Deve haver colisões entre as moléculas dos reagentes;
2. A colisão deve ser efetiva para a formação do complexo ativado;
3. A colisão deve ocorrer com energia igual ou superior à energia de ativação.

Energia de Ativação e Complexo Ativado

- **Complexo Ativado:** é uma estrutura intermediária entre os reagentes e os produtos. Nele temos ligações químicas intermediárias (sendo rompidas e formadas).
- **Energia de ativação (E_a):** é a mínima energia que as moléculas dos reagentes devem possuir para a formação do **Complexo Ativado**.

Graficamente, temos:



Algo interessante a se notar é que, para reações que ocorrem sob mesmas condições:

- quanto maior a energia de ativação, menor a velocidade;
- quanto menor a energia de ativação, maior a velocidade.

AULA 2 – FATORES QUE INFLUENCIAM A VELOCIDADE DE REAÇÕES

Alguns fatores externos podem tornar as reações químicas mais rápidas ou mais lentas. Podemos elencar quatro fatores que têm influência direta na velocidade das reações químicas:

1. Temperatura
2. Concentração
3. Superfície de Contato
4. Catalisador

Temperatura

De acordo com a **regra de van't Hoff**, a elevação em $10^\circ C$ na temperatura dobra a velocidade de uma dada reação.

Concentração

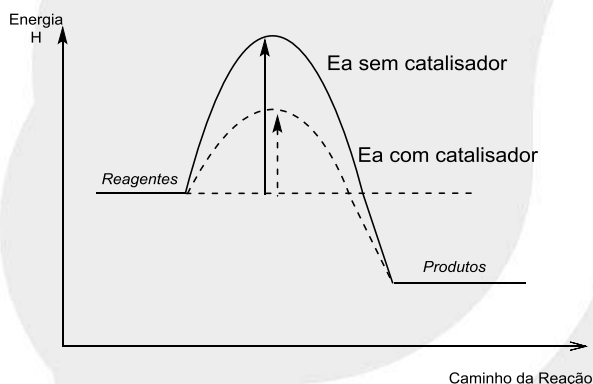
O aumento da concentração dos reagentes aumenta o número de colisões entre as moléculas e consequentemente temos um aumento na velocidade.

Superfície de Contato

Para reagentes que estejam no estado sólido, verifica-se experimentalmente que quanto mais finamente dividido (maior superfície de contato), maior será o número de colisões entre ele e o outro reagente. Consequentemente teremos maior velocidade de reação.

Catalisador

Catalisadores sempre aceleram uma reação química. Fazem isso através da **diminuição da energia de ativação** (E_a) dos processos químicos.



AULA 3 – LEI DA VELOCIDADE / LEI DA CINÉTICA

A lei da velocidade é calculada sempre da mesma maneira:

$$v = k \cdot [\text{reagentes}]^x$$

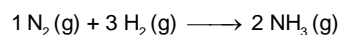
v = velocidade

k = constante da velocidade

$[]$ = concentração em mol/L

x = ordem

Para reações elementares, ou seja, aquelas que ocorrem numa etapa única, a lei da velocidade é expressa considerando os coeficientes estequiométricos da reação balanceada como sendo as ordens dos reagentes. Observe o exemplo para uma reação elementar:



$$v = k \cdot [\text{N}_2]^1 [\text{H}_2]^3$$

Nesta reação, dizemos que o nitrogênio tem ordem 1 e o hidrogênio tem ordem 3. Podemos dizer também que a reação como um todo possui ordem igual a 4.

Para reações que ocorrem em duas ou mais etapas, devemos verificar a lei da velocidade através de experimentos.

Exemplo

Considere a seguinte reação:



A uma dada temperatura constante, três experimentos foram realizados. Os resultados estão contidos na tabela abaixo que utilizaremos para expressar a lei da velocidade correta para esta reação:

Experimento	[NO] em mol/L	[H ₂] em mol/L	Velocidade em mol/L.s
1	0,1	0,1	$1,2 \cdot 10^{-4}$
2	cte 0,1	cte 0,2	cte $2,4 \cdot 10^{-4}$
3	x2 0,2	cte 0,2	x4 $9,6 \cdot 10^{-4}$

Pelos resultados mostrados na tabela, percebemos que a velocidade é proporcional à concentração de H_2 e proporcional ao quadrado da concentração de NO. Sendo assim, a lei da velocidade pode ser escrita da seguinte maneira:

$$v = k \cdot [\text{NO}]^2 [\text{H}_2]$$

O que chamamos de **mecanismo de reação** é o conjunto das reações elementares pelas quais temos uma reação chamada de **global**.

Atenção: é importante notar que a velocidade da reação é determinada sempre pela **etapa lenta** das reações, ou seja, a etapa que possui a maior energia de ativação.