

Cinética Química - Apresentação do problema

Amauri Jardim de Paula

2023.2

1 Tópicos centrais do problema

A cinética química trata das taxas (velocidades) nas quais as reações químicas ocorrem, e todos os fatores que podem influenciar essas taxas. Nas reações químicas temos sempre uma conversão entre reagentes e produtos, e essa conversão se dá de forma específica para cada tipo de reação [McQuarrie et al., 1997; Atkins and de Paula, 2017]. Assim, teremos como problema central desta disciplina a simulação computacional de uma reação química seguindo os conceitos e equações da cinética química.

Os tópicos principais associados ao problema são:

1. Mecanismos de reação: Existem etapas individuais e podem haver espécies intermediárias em reações químicas. Especialmente as reações complexas ocorrem através de uma série de etapas elementares que, juntas, formam uma reação global.
2. Leis de velocidade: A taxa da reação depende das concentrações dos reagentes, e essa relação podem ser representada por uma lei. Estas são expressões que relaciona matematicamente a taxa de reação com as concentrações dos reagentes.
3. Energia de ativação: Para que haja conversão entre reagentes e produtos existe uma barreira de energia que os reagentes devem superar. Compreender a energia de ativação auxilia na compreensão da dependência da temperatura da reação.
4. A ordem da reação: A concentração de cada reagente pode afetar de forma diferente a taxa de reação. A ordem de reação determina essa dependência da taxa de reação em relação à concentração de cada reagente.
5. Fatores que afetam a taxa de reação: Fatores externos como temperatura, pressão e catalisadores, influenciam a taxa de reação. Esses fatores podem alterar significativamente a velocidade de uma reação química.

2 Objetivos

O objetivo principal desta atividade é o de simular como uma reação química evolui do ponto de vista da cinética química, considerando as leis de velocidades, a distribuição estatística da velocidade das partículas e os conceitos físico-químicos envolvidos na reação.

2.1 Objetivos específicos

1. Definir todas as condições iniciais do sistema, considerando a reação química escolhida;

2. Definir as velocidades das partículas considerando uma função estatística apropriada;
3. Identificar as leis de velocidade para a reação química escolhida;
4. Definir condições de energia de ativação para a reação química;
5. Incorporar todos esses parâmetros e conceitos em um modelo computacional (usando Python) que simule a cinética da reação química.

3 Expectativas

Ao longo do desenvolvimento do problema espera-se que os grupos (2 alunos):

1. Compreendam todos os conceitos físico-químicos e as equações matemáticas que descrevem a cinética de reações químicas;
2. Desenvolvam um *script* em Python que simule a cinética de uma reação química escolhida pelo grupo, incorporando todos os conceitos e equações físico-químicas relevantes.

4 Competências a serem desenvolvidas e avaliadas

1. Identificar variáveis envolvidas em sistemas físico-químicos de interesse;
2. Compreensão de conceitos e de equações físico-químicas de interesse;
3. Organização e estruturação de soluções de problemas;
4. Análise, interpretação e discussão de resultados;
5. Conceitos em programação;
6. Elaboração de relatórios científicos.

5 Desafios

Ao longo do semestre teremos 3 grandes desafios que deverão ser vencidos em etapas, rumo à construção do modelo de simulação da reação química escolhida pelo grupo. Haverá uma data para o término de cada desafio, e os resultados entregue para cada desafio serão avaliados (com nota).

5.1 Descrição do movimento de partículas

Nesse desafio, os grupos deverão desenvolver um modelo inicial que descreva as variáveis físicas relevantes para cada partícula (átomo ou molécula) que serão consideradas na reação química. Essa descrição pode ser feita em 2 ou 3 dimensões. Considere a posição e a velocidade das partículas. Esse modelo deve também obedecer princípios e leis que envolvem a colisão das partículas, como a conservação do momento e a conservação da energia. Além disso, deve ser considerada a natureza estatística dessas partículas, e que seu comportamento depende de variáveis termodinâmicas (i.e. temperatura). Os grupos podem considerar as partículas como gases ideais.

5.2 Definição da reação química e as leis de velocidade

Nesse desafio os grupos deverão considerar que as partículas definidas no desafio anterior (reagentes) podem ser convertidas em um outro tipo de partícula (produto), o que caracterizaria uma reação química. Essa conversão deve obedecer leis de velocidade de conversão, as quais são definidas experimentalmente. As leis são equações diferenciais que dependem da concentração dos reagentes e também de uma constante específica, a ordem da reação.

5.3 Estereoquímica e energia de ativação

No último desafio deve se considerar que a conversão de reagentes para produtos depende de aspectos espaciais e energéticos. Nem toda colisão atômica ou molecular entre reagentes leva à formação de produtos. Há questões estereoquímicas (espaciais) envolvidas que regem a formação dos produtos. Além disso, deve se considerar que existem os catalisadores que podem alterar completamente as leis de velocidade para as reações. Esses aspectos devem ser considerados no último desafio.

6 Produtos

Cada grupo de 2 alunos deverá entregar ao final do semestre o código da simulação (postados no GitHub) bem como um documento escrito em formato de artigo científico de até 5 páginas. No documento o grupo deverá descrever de forma detalhada como funciona do ponto de vista teórico o modelo de simulação gerado. Incorpore no documento escrito os conceitos, as fórmulas matemáticas, descrição dos algoritmos desenvolvidos, e outros aspectos relevantes para o entendimento do modelo de simulação.

7 Referências

P. Atkins and J. de Paula. *Físico-química*. LTC, 2017. ISBN 8521634633.

D. A. McQuarrie, J. D. Simon, and J. Choi. *Physical Chemistry: A Molecular Approach*. University Science Books, 1997. ISBN 0935702997.