

Cinética Química:

Introdução

A cinética química é o estudo das velocidades das reações químicas e dos fatores que as influenciam. Entender como e por que as reações ocorrem em determinadas velocidades é essencial para controlar processos químicos em laboratórios, indústrias e na natureza.

Velocidade das Reações Químicas

A velocidade de uma reação química indica a rapidez com que os reagentes se transformam em produtos. Para quantificá-la, analisamos a variação das concentrações dos reagentes ou produtos ao longo do tempo.

A expressão matemática para a velocidade média ((v)) de uma reação é:

$$v = \frac{\Delta[X]}{\Delta t}$$

Onde:

- $\Delta[X]$ é a variação da concentração da espécie química X (mol/L).
- Δt é o intervalo de tempo correspondente (s).

Interpretação dos Termos:

- $[X]$: Representa a concentração da espécie química X em mol/L. Pode ser um reagente (concentração diminui) ou um produto (concentração aumenta).
- $\Delta[X]$: É a diferença entre a concentração final e inicial de X .
- Δt : Intervalo de tempo entre a medição inicial e final.

Lei da Velocidade e Ordem de Reação

A lei da velocidade relaciona a velocidade de uma reação com as concentrações dos reagentes e é expressa por:

$$v = k[A]^m[B]^n$$

Onde:

- v : Velocidade da reação (mol/L·s).
- k : Constante de velocidade (depende da temperatura e da natureza dos reagentes).
- $[A]$ e $[B]$: Concentrações dos reagentes A e B (mol/L).
- m e n : Ordens de reação em relação aos reagentes A e B, respectivamente.

Interpretação dos Termos:

- k (Constante de Velocidade): Indica a rapidez com que a reação ocorre. Um valor maior de k significa uma reação mais rápida. Pode ser determinado experimentalmente rearranjando a lei de velocidade:

$$k = \frac{v}{[A]^m[B]^n}$$

- $[A]^m$ e $[B]^n$: Mostram como a velocidade da reação depende das concentrações dos reagentes. O expoente indica a ordem da reação em relação a cada reagente.

Como Determinar as Ordens de Reação (m e n):

1. **Experimentos com Concentrações Variáveis:** Medir a velocidade da reação alterando as concentrações de A e B separadamente.

2. Analisar a Relação entre Concentração e Velocidade:

- Se a velocidade dobra quando $[A]$ dobra, $m = 1$ (primeira ordem).
- Se a velocidade quadruplica quando $[A]$ dobra, $m = 2$ (segunda ordem).
- Se a velocidade não muda quando $[A]$ muda, $m = 0$ (ordem zero).

Exemplo Prático:

Suponha os seguintes dados experimentais:

Experimento	$[A]$ (mol/L)	$[B]$ (mol/L)	Velocidade (mol/L·s)
1	0,1	0,1	$1,0 \times 10^{-3}$
2	0,2	0,1	$2,0 \times 10^{-3}$
3	0,1	0,2	$4,0 \times 10^{-3}$

Análise:

- Variando $[A]$ (Experimentos 1 e 2):
 - $[A]$ dobra, $[B]$ constante, velocidade dobra.
 - Portanto, $m = 1$.
- Variando $[B]$ (Experimentos 1 e 3):
 - $[B]$ dobra, $[A]$ constante, velocidade quadruplica.
 - Portanto, $n = 2$.

Determinação de k :

Usando a lei de velocidade e os dados do Experimento 1:

$$k = \frac{v}{[A]^m[B]^n} = \frac{1,0 \times 10^{-3}}{(0,1)^1(0,1)^2} = \frac{1,0 \times 10^{-3}}{0,1 \times 0,01} = 1,0$$

Assim, a lei de velocidade para esta reação é:

$$v = 1,0[A]^1[B]^2$$

Tipos de Reações com Base na Ordem

- **Ordem Zero** ($v = k$):
 - A velocidade é constante e não depende da concentração dos reagentes.
- **Primeira Ordem** ($v = k[A]$):
 - A velocidade é diretamente proporcional à concentração de um reagente.
- **Segunda Ordem** ($v = k[A]^2$ ou $v = k[A][B]$):
 - A velocidade depende do quadrado da concentração de um reagente ou do produto das concentrações de dois reagentes.

Equações Integradas das Leis de Velocidade – NÃO CAI NA PROVA

Estas equações relacionam a concentração dos reagentes com o tempo:

- **Primeira Ordem:**

$$\ln[A] = \ln[A]_0 - kt \quad \text{NÃO CAI NA PROVA}$$

- $[A]$: Concentração no tempo t .
 - $[A]_0$: Concentração inicial.
 - k : Constante de velocidade.
 - t : Tempo.
- NÃO CAI NA PROVA

- **Segunda Ordem:**

$$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt \quad \text{NÃO CAI NA PROVA}$$

Energia de Ativação (E_a) e Equação de Arrhenius

NÃO CAI NA PROVA

A energia de ativação (E_a) é a energia mínima necessária para que os reagentes se transformem em produtos. A equação de Arrhenius relaciona a constante de velocidade (k) com a temperatura (T) e E_a :

$$k = Ae^{-E_a/(RT)}$$

NÃO CAI NA PROVA

Onde:

- A : Fator de frequência, relacionado à frequência e orientação eficaz das colisões.
- e : Base dos logaritmos naturais.
- E_a : Energia de ativação (J/mol).
- R : Constante universal dos gases (8,314 J/mol·K). NÃO CAI NA PROVA
- T : Temperatura absoluta (K).

Como Encontrar E_a Experimentalmente:

1. Medir k em Diferentes Temperaturas.
2. Aplicar o Logaritmo Natural:

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

NÃO CAI NA PROVA

3. Construir um Gráfico de $\ln k$ vs. $1/T$:

- A inclinação da reta será $-E_a/R$.
- A partir da inclinação, calcula-se E_a .

Interpretação dos Termos:

NÃO CAI NA PROVA

- A : Reflete a probabilidade de colisões eficazes.
- $-\frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T}$: Mostra que um aumento na temperatura T aumenta k , pois o termo negativo diminui.

NÃO CAI NA PROVA

Teoria das Colisões

Esta teoria explica como as reações ocorrem com base nas colisões entre partículas.

Princípios Básicos:

1. **Colisão Necessária:** As moléculas devem colidir para reagir.
2. **Energia Mínima (E_a):** As colisões devem ter energia suficiente para superar a barreira de ativação.
3. **Orientação Correta:** As moléculas devem colidir na orientação adequada para que a reação ocorra.

Complexo Ativado (Estado de Transição):

- É uma estrutura intermediária de alta energia formada durante a reação.
- Representa o ponto de máxima energia no caminho reacional.

Visualização:

Imagine duas moléculas se aproximando; elas precisam se alinhar corretamente e ter energia suficiente para formar o complexo ativado, que então se transforma nos produtos.

Fatores que Influenciam a Velocidade das Reações

1. Concentração dos Reagentes:

- **Como Influencia:** Aumenta a frequência de colisões.
- **Exemplo:** Em uma solução mais concentrada, há mais moléculas por unidade de volume.

Concentração aumenta, velocidade aumenta

2. Temperatura:

- **Como Influencia:** Aumenta a energia cinética média das moléculas.
- **Exemplo:** Aquecer uma reação geralmente acelera o processo.

3. Superfície de Contato:

- **Como Influencia:** Maior área exposta permite mais colisões.
- **Exemplo:** Um pó reage mais rápido que um sólido compacto.

Mais fácil fazer 1 ml de água evaporar do que um litro

4. Catalisadores:

- **Como Influencia:** Oferecem um caminho alternativo com menor (E_a).
- **Exemplo:** Enzimas aceleram reações biológicas sem serem consumidas.

participam da reação sem serem consumidos

5. Pressão (para Gases):

- **Como Influencia:** Aumenta a concentração dos reagentes gasosos.
- **Exemplo:** Compressão de gases em um recipiente.

+ Pressão >>> + partículas colidindo

Catalisadores

Tipos:

- **Homogêneos:** Mesma fase dos reagentes (ex.: catalisador líquido em solução).
- **Heterogêneos:** Fase diferente (ex.: catalisador sólido com reagentes gasosos).

Função:

- Diminuem a energia de ativação.
- Não alteram o equilíbrio químico final.
- Não são consumidos na reação.

Como Encontrar um Catalisador Apropriado:

- **Experimentação:** Testar diferentes substâncias que possam interagir com os reagentes.
 - **Análise do Mecanismo:** Identificar etapas onde um catalisador pode estabilizar o complexo ativado.
-

Mecanismos de Reação

Descrevem as etapas elementares que ocorrem durante a reação.

Componentes:

- **Etapas Elementares:** Reações simples que ocorrem em uma única colisão.
- **Intermediários:** Espécies formadas e consumidas durante o processo.

Etapa Determinante de Velocidade:

- É a etapa mais lenta.
- Controla a velocidade global da reação.

Análise do Mecanismo:

1. **Escrever Todas as Etapas.**
2. **Identificar Intermediários.**
3. **Relacionar com a Lei de Velocidade Experimental:**
 - A lei de velocidade geralmente reflete a concentração dos reagentes envolvidos na etapa lenta.

Abordagem para Resolver Problemas Complexos

Passo a Passo:

1. Compreensão Total do Problema:

- Leia atentamente.
- Destaque as informações importantes.

2. Organização dos Dados:

- Liste todas as variáveis conhecidas e desconhecidas.
- Escreva as equações relevantes.

3. Identificação dos Conceitos Envolvidos:

- Determine se o problema envolve cinética de ordem zero, primeira ou segunda.
- Verifique se há necessidade de aplicar a equação de Arrhenius.

4. Seleção das Fórmulas Apropriadas:

- Escolha as equações que relacionam diretamente as variáveis conhecidas às desconhecidas.

5. Resolução Algebrica:

- Manipule as equações para isolar a incógnita.
- Substitua os valores numéricos.

6. Verificação

- Confirme se o resultado faz sentido físico.
 - Verifique unidades e magnitude.
-

Exemplos de Aplicação

Exemplo 1: Determinação da Ordem de Reação

Problema: Em uma reação $A \rightarrow$ Produtos, duplicar a concentração de A quadruplica a velocidade da reação. Qual é a ordem em relação a A?

Resolução:

- Se $[A]$ dobra e v quadruplica, então $v \propto [A]^2$.
- Portanto, a reação é de segunda ordem em relação a A.

Exemplo 2: Cálculo da Energia de Ativação

Problema: A constante de velocidade de uma reação é $2,0 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ a 300 K e $8,0 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ a 310 K. Calcule Ea .

Resolução:

1. Usar a Equação de Arrhenius:

$$\ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right) = -\frac{Ea}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

2. Inserir os Valores:

$$\ln\left(\frac{8,0 \times 10^{-3}}{2,0 \times 10^{-3}}\right) = -\frac{Ea}{8,314}\left(\frac{1}{310} - \frac{1}{300}\right)$$

3. Calcular:

$$\ln 4 = -\frac{Ea}{8,314}\left(-\frac{10}{93.000}\right)$$

$$1,3863 = \frac{Ea}{8,314} \times \frac{10}{93.000}$$

4. Isolar Ea :

$$Ea = \frac{1,3863 \times 8,314 \times 93.000}{10} = 107.000 \text{ J/mol}$$