

Exercício #5

Isabella B. — 11810773

1. Suponha que você tenha n moles de RH e n moles de X_2 e apenas 1 átomo de X radicalar. Considerando que estão em fase gasosa, que cada encontro pode gerar um produto, que só o H é reativo no RH, como calcular o número provável de ciclos gerados pelo átomo X?

Possuindo as constantes de equilíbrio das reações intermediárias (parâmetro experimental), podemos usá-las como probabilidades para tais reações, de tal forma que é possível aplicar o cálculo da esperança do número de ciclos gerados pelo átomo X. A esperança nos dá o número esperado para um evento pela soma das probabilidades onde o evento ocorre ponderadas pelo resultado à que correspondem, i.e.:

$$\mathbb{E}[\text{ciclos gerados por X}] = \sum_{k=0}^{\infty} k \cdot \mathbb{P}(k \text{ ciclos})$$

2. Faça um resumo das conclusões do paper anexado sobre porque uma espécie biradicalar tão reativa é tão “cineticamente persistente”.

Sendo as reações de abstração de H mais endotérmicas do que àquelas opostas — o que leva o O_2 a persistir já que a abstração de H pelo OOH^- é entalpicamente mais favorável —, temos também que a trimerização de O_2 é bastante endotérmica, o que também faz o O_2 ser persistente. Por trás desses fenômenos temos as ligações que compõem a molécula, e que possuem grande energia de ressonância devido à uma forte ligação π (mais forte que sua ligação σ) e que libera muita energia quando quebrada. Isso torna o O_2 uma molécula persistente e também faz com que ela seja capaz de prover energia para os seres vivos aeróbicos no nosso planeta.