

Relatório - Cinética Química

Modelos físico-químicos que descrevem processos de reações químicas

Ana Clara Batista Loconi¹, João Pedro Aroucha de Brito¹

¹Ilum - Escola de Ciência, Campinas - São Paulo, Brazil

E-mail: ana220073@ilum.cnpem.br, joao220047@ilum.cnpem.br

Professor Amauri Jardim de Paula

I. INTRODUÇÃO

A. Apresentação do projeto

A cinética química é um ramo da química que se dedica ao estudo das taxas ou velocidades nas quais as reações químicas acontecem, bem como à investigação dos diversos fatores que podem influenciar essas velocidades. Em uma reação química, os reagentes são transformados em produtos através de um processo específico para cada tipo de reação.

Em essência, a cinética química busca compreender as reações químicas no nível molecular, elucidando como as colisões entre as moléculas dos reagentes levam à quebra e formação de ligações químicas, resultando na conversão dos reagentes em produtos. Isso envolve investigar as etapas intermediárias da reação e determinar as equações matemáticas que descrevem como as concentrações dos reagentes e produtos alteram-se ao longo do tempo.

O presente artigo, tem como objetivo, apresentar e relatar todo o desenvolvimento de um projeto que visa construir uma simulação de uma reação química, levando em conta, sua progressão. Para isso, é necessário compreender uma série de conceitos, como, leis de velocidade, distribuição estatística das velocidades das partículas e princípios físico-químicos subjacentes à reação.

B. Conceitos Básicos

Alguns conceitos em relação a reações químicas devem ser definidos, a fim de compreender as etapas de desenvolvimento abordadas em cada desafio.

Toda reação, tem um mecanismo, que baseia-se na descrição detalhada da sequência de reações que ocorrem para converter reagentes em produtos. No contexto da cinética química, o mecanismo de reação inclui informações sobre as etapas intermediárias que levam à formação dos produtos finais. Para avaliar a validade de um mecanismo proposto, é necessário verificar sua consistência com os dados experimentais e a lei da velocidade observada.

As leis de velocidade são equações que conectam as concentrações dos reagentes em uma reação química com a taxa na qual a reação acontece. Elas explicam como as concentrações afetam o consumo dos reagentes e a formação dos produtos. Normalmente, são expressas como equações diferenciais, cuja a taxa de mudança da concentração é proporcional a potências das concentrações dos reagentes.

A forma básica é $v = k[A]^m$, sendo v a velocidade da reação, k a constante de velocidade (dependendo da temperatura e propriedades da reação), $[A]$ a concentração do reagente A, e m a ordem da reação em relação a A (que descreve a dependência da taxa de reação comparada a concentração dos reagentes).

Determinar as leis de velocidade é essencial para entender

mecanismos de reação e prever taxas de reação com base nas concentrações. Contudo, alguns fatores como, energia de ativação, temperatura, pressão e catalizadores, podem afetar a velocidade das reações químicas e, por consequência, a previsão da taxa de reação.

E, para que ocorra uma reação química, é necessário uma quantidade mínima de energia (para que as partículas dos reagentes colidam em uma orientação favorável), chamada de Energia de Ativação.

O valor desta energia varia de acordo com a reação. Quando a energia de ativação é atingida, forma-se o complexo ativado, que é uma estrutura intermediária e instável entre os reagentes e os produtos. Ela pode ser calculada experimentalmente medindo a taxa de reação em diferentes temperaturas e usando a equação de Arrhenius.

C. Desafios

Com base nos conceitos já definidos, o projeto desenvolve-se em três desafios significativos que cercam tais tópicos. O produto final, diz respeito a criação de um modelo de simulação para uma possível reação química.

Para o primeiro desafio, é necessário criar um modelo inicial que descreva as variáveis físicas pertinentes para cada partícula considerada na reação química. Esse modelo poderá ser formado por duas ou três dimensões, abrangendo as posições e velocidades das partículas. Durante a construção do modelo, devem ser levados em consideração os princípios e leis relacionados às colisões das partículas, incluindo a conservação do momento e da energia, em conformidade com a distribuição de Maxwell-Boltzmann.

II. MÉTODOS E RESULTADOS

Na seção de introdução, foram apresentados alguns conceitos fundamentais da cinética química, juntamente com suas definições. Agora, serão abordados os detalhes necessários para a resolução do primeiro desafio.

A. Desafio 1

A fim de compreender e simular reações químicas, levando em consideração os fatores de influência, adota-se como a etapa inicial, a definição de gases ideais para as partículas. A lei dos gases ideais descreve o comportamento de gases que consistem em partículas pequenas e em constante movimento, sofrendo colisões elásticas, sem atração significativa entre elas, e para simplificar, assumiremos que as moléculas se comportam como esferas maciças, de modo que não há interações entre as partículas, exceto quando colidem entre si. Essa lei estabelece que a pressão de um gás é diretamente proporcional à sua densidade e à temperatura absoluta. Essa

relação implica que um aumento na temperatura ou densidade resulta em um aumento na pressão, mantendo-se a outra variável constante, e vice-versa.

Desse modo, a teoria cinética dos gases busca compreender as propriedades dos gases, como sua falta de forma e volume definidos, alta compressibilidade, capacidade de preencher os recipientes e comportamento em relação à pressão e temperatura. Essa teoria oferece uma explicação satisfatória dessas propriedades ao considerar que um gás é composto por um grande número de partículas em movimento constante e colisões elásticas. O objetivo principal é conectar as propriedades, como pressão e temperatura, com o comportamento das partículas individuais, fornecendo assim uma compreensão fundamental do comportamento dos gases.

Já sabemos que a única interação entre as moléculas serão durante as colisões. Isso se justifica pela lei das pressões parciais de Dalton, que define a pressão total de uma mistura de gases sendo a soma das pressões individuais que cada gás exerceria se estivesse sozinho. Assim, as forças entre as moléculas de um gás e as de outros gases na mistura sejam desprezíveis. Mesmo considerando um gás como uma mistura de dois gases idênticos, as forças entre suas próprias moléculas também são desprezíveis. Portanto, todas as propriedades macroscópicas de um gás são originadas, principalmente, do movimento das moléculas.

Temos então, as seguintes relações:

$$PV = \frac{2}{3}N\frac{1}{2}m(V^2)$$

$$\frac{1}{2}m(V^2) = \frac{3}{2}kT$$

As equações apresentadas relacionam diferentes propriedades de um gás. A primeira equação associa a pressão (P) à energia cinética média das moléculas de translação. A segunda equação estabelece uma relação entre a temperatura absoluta em Kelvin (T) e essa mesma energia cinética média. Quando a pressão de um gás aumenta (com volume constante), a energia cinética média das moléculas também aumenta, resultando em um aumento na temperatura do gás.

Essa expressão mantém sua validade mesmo quando consideramos as colisões entre moléculas. Nas colisões elásticas entre partículas idênticas, ocorre a troca de velocidades, de modo que se uma molécula é desviada de sua trajetória antes de colidir com uma parede, outra molécula assume seu lugar. Isso não afeta a relação entre a pressão do gás e a energia cinética média das moléculas. Além disso, essa relação não depende da forma do recipiente. Podemos imaginar uma região cúbica dentro de qualquer recipiente e a demonstração anteriormente apresentada ainda se aplica. Como a pressão é uniforme em todo o recipiente quando o gás está em equilíbrio, a pressão calculada é válida para todas as superfícies do recipiente, independentemente de sua forma.

Em relação a temperatura, a expressão que a relaciona à energia cinética média de suas moléculas é, também, deduzida pela teoria cinética dos gases. Essa relação é expressa como,

$$PV = nRT$$

em que, P é a pressão, V é o volume, n é o número de mols do gás, R é a constante dos gases ideais, T é a temperatura absoluta e k é a constante de Boltzmann.

A dedução mostra que a energia cinética média das moléculas de um gás ideal é diretamente proporcional à temperatura absoluta do gás, o que significa que a temperatura é uma medida da energia cinética média das moléculas do gás. Isso também se relaciona com a lei zero da termodinâmica, que estabelece que a temperatura está relacionada com a energia cinética média das moléculas e que, quando as energias cinéticas médias são iguais, não há fluxo de energia médio entre os gases.

B. Simulação

A partir dos conceitos definidos, inicia-se a construção de uma simulação que descreve a dinâmica de partículas para gases ideais. Dessa forma, com uma ferramenta visual, os comportamentos deste sistema podem ser compreendidos mais facilmente. Para isso, utiliza-se de linguagens computacionais, neste caso, implementação em Python e o uso de suas bibliotecas visuais e matemáticas para cálculos das equações apresentadas e ilustração das moléculas. A simulação das partículas, pode ser separada em seus principais tópicos de construção, sendo estes:

- Geração da partícula;
- Colisão das partículas e paredes;
- Colisão entre partículas;
- "Passo" da simulação;
- Curva Maxwell-Boltzmann;
- Histograma de velocidades.

1) *Geração da Partícula*: Para iniciar a construção da simulação, é necessário gerar partículas com base em um elemento químico específico, dessa forma, calcula-se a massa para cada partícula, este valor influencia diretamente na dinâmica do sistema. Inicialmente, as partículas podem ser posicionadas dentro da caixa de duas formas, sendo distribuídas aleatoriamente ou partindo do centro da caixa. Para que sua velocidade seja calculada, é necessário basear-se na temperatura da simulação para obter a velocidade média das partículas no gás.

2) *Colisão das Partículas e Paredes*: A partir das partículas existentes, são geradas colisões na simulação. A simulação monitora constantemente a ocorrência de colisões entre as partículas e as paredes da caixa de simulação. Cada parede é tratada como uma superfície virtual, dessa forma, quando uma partícula se aproxima de uma parede, o código verifica se ocorre uma colisão com base na posição da partícula e sua velocidade. Se uma colisão é detectada, a velocidade da partícula é invertida na direção da parede.

3) *Colisão entre Partículas*: Além das colisões entre as partículas e as paredes, o código também examina as colisões entre as próprias partículas, realizando verificações em cada passo da simulação. Isso ocorre, através de cálculos da distância entre os centros de todas as combinações possíveis de pares de partículas. Se a distância for menor do que a soma dos raios das partículas, uma colisão é identificada. As

velocidades das partículas envolvidas são então ajustadas de acordo com as leis da física para refletir a colisão. A Figura 1 exemplifica parte da simulação, mostrando os vetores de velocidade de duas partículas e a interface de colisão entre elas, baseando-se no vetor normal entre as partículas.

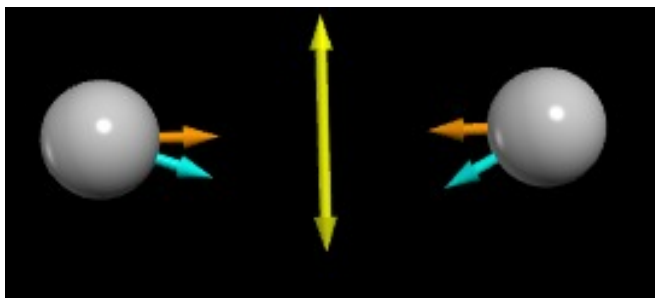


Fig. 1. Simulação das partículas de gases ideais com vetores de velocidade e interface de colisão.

4) "Passo" da Simulação: As partículas foram criadas, apresentam velocidades e espaços definidos para suas colisões, Mas, como determinar as próximas posições?

A simulação evolui em etapas de tempo conhecidas como "passos". Em cada passo, as posições das partículas são modificadas de acordo com suas velocidades atuais, permitindo que elas se desloquem pelo espaço da simulação. A detecção de colisões entre as partículas e as paredes é realizada a cada passo, garantindo que todas as interações sejam devidamente tratadas.

5) Curva Teórica: Com o objetivo de analisar estatisticamente as colisões das partículas, o código incorpora a criação de curvas teóricas para cada elemento químico simulado. Essas curvas teóricas são originadas, a partir da distribuição de Maxwell-Boltzmann, que descreve como as velocidades das partículas devem se distribuir em um gás ideal a uma temperatura específica. As curvas teóricas atuam como pontos de referência e são representadas graficamente juntamente com os resultados da simulação.

6) Desenho do Histograma de Velocidades: O código possui a capacidade de criar um histograma de velocidades. Esse histograma é utilizado para visualizar a distribuição das velocidades das partículas na simulação. Ele divide o intervalo de velocidades em pequenos intervalos chamados "bins" (ou caixas), assim, atualiza esses bins regularmente com base nas velocidades atuais das partículas. Isso resulta em uma representação gráfica da densidade de probabilidade das velocidades das partículas, permitindo uma análise detalhada da distribuição de velocidades na simulação. O histograma gerado oferece a oportunidade de observar como a distribuição de velocidades na simulação se compara à distribuição teórica da curva de Maxwell-Boltzmann. A Figura 2 ilustra o histograma gerado durante uma simulação.

Em suma, este projeto visa a construção de uma simulação que representa a dinâmica de partículas em um gás ideal. Ao longo deste processo, foram definidos conceitos fundamentais da cinética química, incluindo leis de velocidade, mecanismos de reação e fatores de alteração. A simulação abrange a geração de partículas, colisões com as paredes da

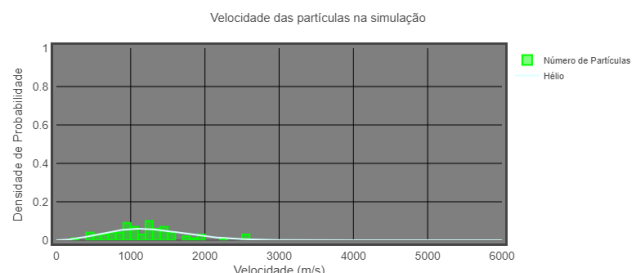


Fig. 2. Histograma das velocidades das partículas na simulação, seguindo a distribuição teórica de Maxwell-Boltzmann.

caixa, interações entre as próprias partículas, avanço em incrementos de tempo, geração de curvas teóricas baseadas na distribuição de Maxwell-Boltzmann e criação de histogramas de velocidades para análise. Esse trabalho constitui a primeira fase do projeto, estabelecendo as bases para simulações mais detalhadas no futuro.

III. REFERÊNCIAS

References

- [1] URL: https://cesad.ufs.br/ORBI/public/uploadCatalogo/16435016022012Instrumentacao_para_Ensino_de_Fisica_II_Aula_9.pdf.
- [2] Luiz Antônio Sodré Costa. *Sumário - uffj.br*. URL: <https://www2.uffj.br/quimicaead/wp-content/uploads/sites/224/2013/03/APOSTILA-DE-CIN%3%89TICA-QU%3%8DMICA-EADQUIO47.pdf>.
- [3] David White. *UNESP - Faculdade de Engenharia - Câmpus de Ilha Solteira*. URL: https://www.feis.unesp.br/Home/departamentos/fisicaequimica/relacaodocentes973/cinetica_quimica.pdf.
- [4] Hélsio Onusic. *Í í - University of São Paulo*. URL: <https://portal.if.usp.br/labdid/sites/portal.if.usp.br/labdid/files/TeoriaCinetica2017.pdf>.
- [5] Donald A. McQuarrie and John D. Simon. *Physical Chemistry: A Molecular Approach*. Sausalito, California: University Science Books, 1997.