

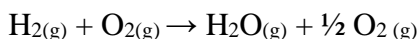
## Desafio 2: Definição da reação química e as leis de velocidade

Na presente etapa do trabalho, foi utilizado o modelo de simulação atomística, produzido no desafio 1, como base para produzir um algoritmo que realiza uma análise sobre a cinética química da reação de formação da água através de cálculos e produção de gráficos a partir das leis de velocidade de conversão e ordem de reação.

### 1. Introdução

A Cinética Química, é o estudo das taxas de reação, mudanças nas concentrações dos reagentes e dos produtos pelo tempo, ela é uma área importante para a física e a química, pois, a partir desses estudos é possível prever a velocidade de uma reação, otimizar as condições de reações, visando o desenvolvimento de novos materiais, por exemplo.

A formação da água, representada na reação química, equação 1, é um exemplo clássico, capaz de descrever os princípios e leis da cinética química.



Equação 1: Reação de formação da água.

### 2. Objetivos

Nessa etapa do trabalho foi utilizado o modelo de simulação atomística, produzido na etapa anterior, que respeita as leis físicas, como, a conservação de energia e momento e a distribuição de Maxwell-Boltzmann, como base para produzir um novo algoritmo que simula a reação química de formação da água. Dados experimentais foram aplicados para obter as leis de velocidade de conversão da reação e a ordem de reação.

### 3. Metodologia

Para a fundamentação teórica foram utilizados materiais bibliográficos, como ATKINS (2018) [1], MCQUARRIE (1997) [3],

SCHROEDER (2010) [5] e LARSEN [4] e os dados experimentais foram retirados do FOUSTOUKOS [2].

Para a realização dos cálculos da lei de velocidade de conversão da reação e ordem de reação foram utilizados algoritmos programados em Python, que usam bibliotecas para auxiliar no desenvolvimento do processo, como, Numpy para gerar os vetores de armazenamento e Matplotlib para gerar o gráfico de concentração pelo tempo.

O algoritmo está disponibilizado no repositório do GitHub e pode ser acessado neste link: <https://github.com/Leprechas/Cinetica-quimica/tree/main>.

### 4. Fundamentação teórica

#### 4.1 Lei da velocidade da conversão da reação

As leis de velocidade de conversão ou leis de taxas, são equações matemáticas que explicam como que a reação ocorre durante o tempo e como a concentração dos reagentes implica na formação de produtos. As leis de taxas são empíricas e únicas de cada reação, para a reação de formação de água, equação 1, tem-se a lei de velocidade geral e para este caso nas equações 2 e 3. Neste contexto, será utilizada a lei de taxa diferencial, que é capaz de descrever a taxa de reação em termos de mudança na concentração dos reagentes durante um intervalo de tempo específico, logo, a lei de taxa diferencial

geral e da reação em análise pode ser descrita nas equações 4 e 5;

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

Equação 2: Lei de velocidade

Em que,

V é a velocidade da reação

k é a constante de velocidade

[A] e [B] são as concentrações dos reagentes

m e n são os expoentes de ordem da reação para os reagentes A e B, respectivamente.

$$V = k[H_2]^2[O_2]$$

Equação 3: Lei de velocidade da formação da água

$$d[C]/dt = k[A]^m[B]^n$$

Equação 4: Lei de taxa diferencial

Em que,

[A] e [B] são as concentrações dos reagentes

[C] é a concentração do produto

k é a constante de velocidade

t é o intervalo de tempo

$$d[H_2O]/dt = 2k[H_2]^2[O_2]$$

Equação 5: Lei de taxa diferencial da formação da água

#### 4.2 Ordem da reação

A ordem de reação se refere ao expoente que descreve a relação entre a velocidade da reação e a concentração dos reagentes.

É possível dividir a ordem de reação em primeira ordem, segunda ordem e ordem zero, a primeira ordem ocorre quando a velocidade da reação é diretamente proporcional à concentração de um único reagente, equação 6; a segunda ordem de reação ocorre quando a velocidade da reação é diretamente proporcional ao produto das concentrações de dois reagentes, equação 7; a ordem zero ocorre quando

a velocidade da reação não depende da concentração de nenhum reagente, equação 8. Por fim, a ordem global é a soma das ordens em relação a todos os reagentes.

$$V(t) = -d[A]/dt = k[A]$$

Equação 6: Fórmula diferencial da primeira ordem de reação

$$V(t) = -d[A]/dt = k[A]^2$$

Equação 7: Fórmula diferencial da segunda ordem de reação

$$V(t) = -d[A]/dt = k$$

Equação 8: Fórmula diferencial da ordem zero de reação

Para a reação de formação da água, equação 1, a ordem de reação do primeiro reagente, H<sub>2</sub>, é segunda ordem e do segundo reagente, O<sub>2</sub>, é primeira ordem, logo, a ordem global da reação é 3. Portanto, pode-se descrever o comportamento dos dois reagentes pelas equações 9 e 10 que são equações de primeira e segunda ordem, que devem representar simultaneamente a concentração do H<sub>2</sub> e do O<sub>2</sub> durante o tempo.

$$V(t) = -d[H_2]/dt = k[H_2]^2$$

Equação 9: Fórmula diferencial da segunda ordem de reação para o H<sub>2</sub>

$$V(t) = -d[O_2]/dt = k[O_2]$$

Equação 10: Fórmula diferencial da primeira ordem de reação para o O<sub>2</sub>

#### 4.3 Relação da constante de velocidade (k) e a Temperatura(T)

A constante de velocidade k é uma constante única para cada reação e depende da temperatura. De forma geral, se a temperatura aumenta, a constante de velocidade deve aumentar significativamente. Essa constatação é verificada conforme descrito na equação de Arrhenius, equação 11. Ela confirma que k varia exponencialmente com a

temperatura, o que resulta em uma velocidade de reação maior.

$$K = Ae^{-E_a/RT}$$

A é o fator de pré-exponencial

E<sub>a</sub> é a energia de ativação

R é a constante dos gases ideais

T é a temperatura em Kelvin

Equação 11: Equação de Arrhenius

## 5. Resultados

Os gráficos 1 e 2 apresentam a variação da concentração referente a cada componente envolvido na reação durante o tempo (H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O e ½ O<sub>2</sub>). O que acontece na reação é que o encontro entre H<sub>2(g)</sub> e O<sub>2(g)</sub> gera moléculas H<sub>2</sub>O (g ou aq), a depender da temperatura e pressão do sistema, e átomos de O<sub>2</sub>. A reação ocorre porque as ligações de hidrogênio são mais difíceis de se romperem em uma reação por serem ligações fortes, e o átomo de oxigênio é mais eletronegativo, então ele reagirá com o elemento que tem íons positivos, neste caso o H<sup>+</sup>, quebrando a ligação O<sub>2</sub>. Nesse sentido, os gráficos mostram a evolução das concentrações de reagentes (H<sub>2</sub> e O<sub>2</sub>) e produtos (H<sub>2</sub>O e ½ O<sub>2</sub>) nessa reação química ao longo do tempo.

As concentrações de H<sub>2</sub> e O<sub>2</sub> diminuem à medida que o tempo avança. Isso é apontado pela linha decrescente no gráfico. A inclinação da linha é uma indicação da taxa de consumo dos reagentes. A rapidez com que a concentração dos reagentes diminui depende da estequiometria da reação e das ordens de reação envolvidas. Por isso quando a temperatura é 523,15K tem-se um  $k = 0.000535$  e a reação ocorre mais rápido em relação à quando ela ocorre a uma temperatura de 328,15K e a um  $k = 0.0000269$ .

As concentrações de H<sub>2</sub>O e ½ O<sub>2</sub> aumentam à medida que o tempo avança e é proporcional ao decaimento dos reagentes. A inclinação da linha crescente no gráfico é uma indicação da taxa de formação dos produtos. Assim

como com os reagentes, a velocidade de formação dos produtos também depende da estequiometria e das ordens de reação.

O ponto onde as linhas se cruzam evidencia o momento em que ambos produtos e reagentes adquirem uma concentração equivalente e logo em seguida, a linha tende para uma constante. Isso significa que os reagentes em solução foram totalmente consumidos e a reação se equilibra.

Usando a equação 1, 9, 10, pode-se produzir gráficos de concentração pelo tempo, onde havia a mesma concentração inicial de H<sub>2</sub> e O<sub>2</sub>, 50 mols total do sistema em um tempo total de análise de 60 segundos, considerando duas temperaturas diferentes, a mais baixa delas é equivalente à taxa  $k = 0.0000269$ , gráfico 1, e em seguida a temperatura, mais alta é equivalente à taxa  $k = 0.000535$ , gráfico 2.

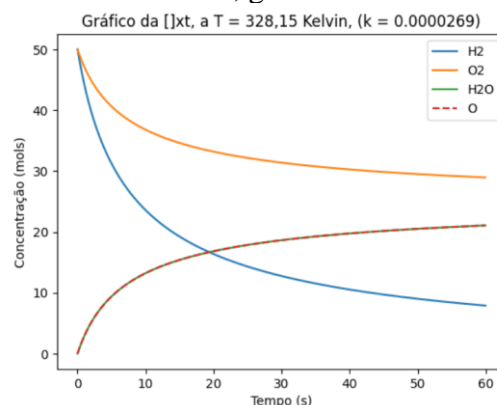


Gráfico 1: Gráfico da concentração pelo tempo, na Temperatura = 328,15K

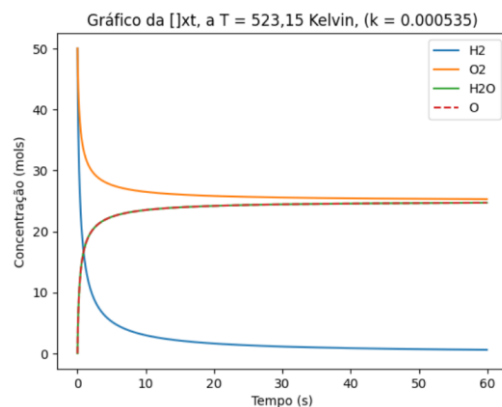
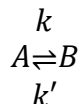


Gráfico 2: Gráfico da concentração pelo tempo, na Temperatura = 523,15K

### 5.1 A reversibilidade do sistema

A reação envolvendo  $\text{H}_2$  e  $\text{O}_2$  para formação de  $\text{H}_2\text{O}$  teoricamente é reversível, mas para isso é preciso que o valor de  $k'$  seja muito maior para reação se reverter do que o  $k$  necessário para a formação dos produtos.



Nessa perspectiva, são necessários mecanismos atuando no sistema para ocorrer a separação dos átomos da molécula formada. Um desses mecanismos é a eletrólise da água que consiste em um processo químico no qual a água é decomposta em hidrogênio ( $\text{H}_2$ ) e oxigênio ( $\text{O}_2$ ), usando eletricidade. Esse processo ocorre em um dispositivo chamado célula eletrolítica, constituído por dois eletrodos, geralmente feitos de platina ou outro material condutor, imersos em água numa cuba eletrolítica e conectados a uma fonte de energia elétrica, como uma bateria ou uma fonte de corrente contínua. Com a aplicação de uma diferença de potencial nesse meio eletrolítico, ocorre a migração de íons positivos em direção ao cátodo (eletrodo negativo), no qual sofre a redução, e íons negativos em direção ao ânodo (eletrodo positivo), onde acontece a oxidação. A reação redox pode ser vista logo adiante.

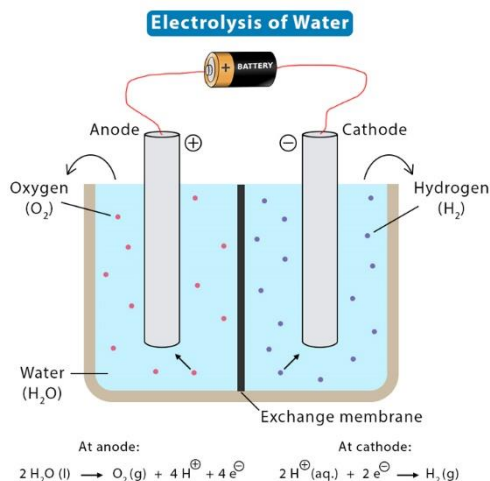
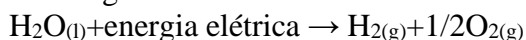


Figura 1: Eletrólise da água.

Fonte: <https://www.chemistrylearner.com/>

Essa reação é útil em vários contextos, incluindo a produção de hidrogênio gasoso que pode ser usado como combustível limpo e renovável com potencial de descarbonização, assim como a obtenção de oxigênio puro e em experimentos laboratoriais e industriais.

## 6. Conclusão

A partir dos gráficos de concentração pelo tempo, conclui-se que houve a formação de 25 de mols de  $\text{H}_2\text{O}$  e 25 de mols de  $1/2 \text{O}_2$ , todos os 50 mols de  $\text{H}_2$  foram consumidos e só 25 mols de  $\text{O}_2$  foram consumidos, sobrando 25 mols de  $\text{O}_2$ , logo, tais reações comprovaram que em temperaturas mais altas, como 523,15K, ocorrem mais rapidamente que as em temperaturas mais baixas, como 328,15K, graças a influência direta da temperatura na constante de velocidade ( $k$ ).

Por fim, como a reação não apresenta reversibilidade espontaneamente, dada as condições ambientais, bem como as considerações feitas, os gráficos podem representar um sistema ideal.

## Referências Bibliográficas

- [1] ATKINS, Peter; JONES, Loretta; LAVERMAN, Leroy. Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente. 7. ed. – Porto Alegre: Bookman, 2018.
- [2] FOUSTOUKOS, Dionysis I.; HOUGHTON, Jennifer L.; SEYFRIED, William E.; et al. Kinetics of  $\text{H}_2$ – $\text{O}_2$ – $\text{H}_2\text{O}$  redox equilibria and formation of metastable  $\text{H}_2\text{O}_2$  under low temperature hydrothermal conditions. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, v. 75, n. 6, p. 1594–1607, 2011. Disponível em: <<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0016703710006940>>. Acesso em: 18 out. 2023.
- [3] LARSEN, Delmar. *Chemistry 2C*. Disponível em: <[https://chem.libretexts.org/Courses/University\\_of\\_California\\_Davis/UCD\\_Chem\\_002C/UCD\\_Chem\\_2C\\_\(Larsen\)/Text/05%3A\\_Chemical\\_Kinetics](https://chem.libretexts.org/Courses/University_of_California_Davis/UCD_Chem_002C/UCD_Chem_2C_(Larsen)/Text/05%3A_Chemical_Kinetics)>. Acesso em: 16 out. 2023.

[4] MCQUARRIE, Donald A.; SIMON, John D. Physical chemistry: a molecular approach. Sausalito, Calif: Univ. Science Books, 1997.

[5] SCHROEDER, Daniel V. An introduction to thermal physics. San Francisco, CA: Addison Wesley, 2000.