

Cinética Química - Problema 2

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 análise 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 analisar como uma reação química evolui do ponto de vista da cinética química, considerando as leis de velocidades e os conceitos físico-químicos envolvidos na reação.

2.1 Objetivos específicos

1. Buscar dados experimentais envolvendo a cinética de uma reação química específica;

2. Entender como as velocidades das moléculas se comportam do ponto de vista estatístico (especialmente os gases);
3. Identificar as leis de velocidade para uma reação química usando dados experimentais;
4. Discutir como a constante de velocidade (k) varia com a temperatura;
5. Discutir como a energia de ativação influencia a cinética de uma 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. Busquem dados experimentais relacionados à cinética de uma reação química em específico, analisem os dados e incorporem 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. Elaboração de relatórios científicos.

5 Desafios

Ao longo do semestre teremos 3 grandes desafios que deverão ser vencidos em etapas, resultando em documentos que deverão ser entregues em formato de artigos científicos, os quais abordarão os tópicos descritos acima. Haverá uma data para o término de cada desafio e os resultados entregue para cada desafio serão avaliados (com nota).

5.1 As velocidades das partículas

Nesse desafio, os grupos deverão desenvolver um relatório que incorpore os modelos teóricos capazes de prever a distribuição de velocidades e o livre caminho médio de átomos e moléculas. Os grupos podem considerar as partículas como gases ideais. Como referência para cumprir esse desafio, sugere-se a leitura do Capítulo 27 do livro *Physical Chemistry: A Molecular Approach* (Donald McQuarrie e John Simon).

5.2 Definição da reação química e as leis de velocidade

Nesse desafio os grupos deverão buscar dados experimentais de uma reação química específica e determinar a lei de velocidade desta, considerando a concentração dos reagentes, a constante de velocidade (k) e a ordem da reação. Considerar que k varia com a temperatura. Como referência para cumprir esse desafio, sugere-se a leitura do Capítulo 28 do livro *Physical Chemistry: A Molecular Approach* (Donald McQuarrie e John Simon) ou os textos do Chem Libre Texts sobre Cinética Química.

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 a cinética das reações. Os grupos deverão descrever como esses aspectos influenciam uma reação química. Sugere-se buscar uma reação química na literatura que tenha sua cinética alterada pela presença de um catalisador. Dados experimentais devem ser usados. Como referência para cumprir esse desafio, sugere-se a leitura do Capítulo 29 do livro *Physical Chemistry: A Molecular Approach* (Donald McQuarrie e John Simon) ou os textos do Chem Libre Texts sobre Cinética Química.

6 Produtos

Cada grupo de 2 alunos deverá entregar documentos escritos em formato de artigos científicos de até 5 páginas para cada desafio apresentado. Incorpore nos documentos escritos os conceitos, as fórmulas matemáticas, descrição dos modelos e outros aspectos relevantes considerando os tópicos apresentados.

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.