



PQI 3221:  
CINÉTICA QUÍMICA E PROCESSOS AMBIENTAIS

AULA 11

---

CINETICA QUIMICA

---

## Cinética Química

**Cinética Química** é o estudo da **velocidade** na qual as reações químicas ocorrem

Seus objetivos, no entanto, vão um pouco além de avaliar apenas esse aspecto. A cinética se ocupa também de **compreender** como as reações químicas ocorrem.

Ou seja, de entender **como**, envolvendo **quais espécies químicas**, e segundo quantas/quais **etapas** aquelas transformações ocorrem

Para que a ação da cinética química seja efetiva, é inevitável que as reações passem a ser observadas no **nível molecular**

Existem quatro fatores importantes que afetam as velocidades das reações:

- I. Estado físico e/ou fase em que se encontra cada reagente
- II. Concentrações dos reagentes
- III. Temperatura na qual a reação ocorre
- IV. Presença de um catalisador

---

3

---

## Velocidade de Reação

**Velocidade de reação** corresponde a forma como varia a concentração de determinada substância **reagente**, ou **produto** (que esteja, portanto, envolvida em um processo de transformação) ao **longo do tempo**

Existem duas maneiras de medir a velocidade da reação:



- a velocidade na qual os reagentes são consumidos (no exemplo, a variação na quantidade de matéria de A por unidade de tempo).
- a velocidade na qual o produto é formado (no exemplo, a variação na quantidade de matéria de B por unidade de tempo);

$$\text{velocidade} = - \frac{\Delta[A]}{\Delta t}$$

$\Delta[A]$  = mudança de concentração de A ao longo de um período  $\Delta t$

$$\text{velocidade} = + \frac{\Delta[B]}{\Delta t}$$

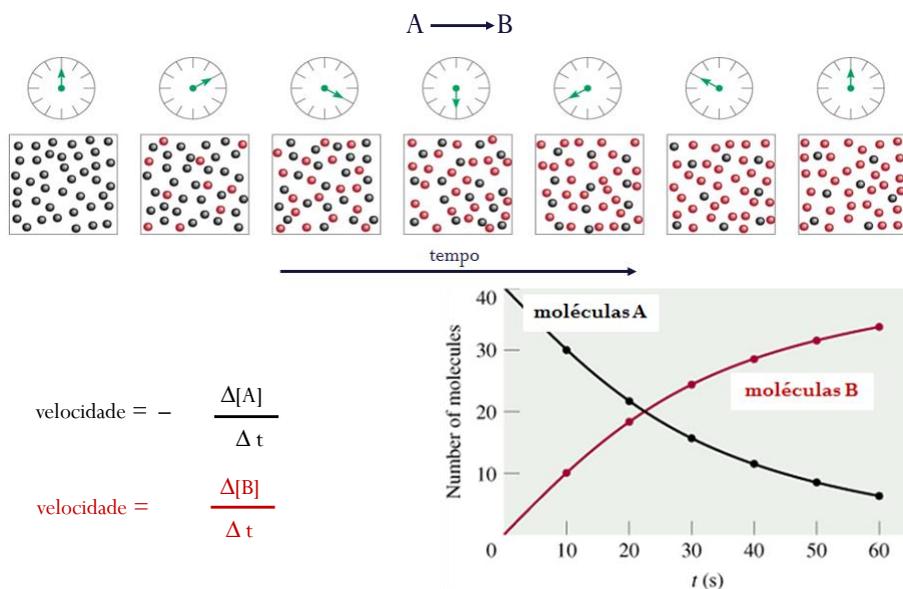
$\Delta[B]$  = mudança de concentração de B ao longo de um período  $\Delta t$

Como [A] diminui com o tempo, pelo fato deste ser reagente e, portanto, consumido durante a reação, o valor de  $\Delta [A]$  é negativo

---

4

## Velocidade de Reação



5

## Varição da Concentração com o Tempo

A unidade mais utilizada para medição de velocidade de reação consistem da concentração em **quantidade de matéria** (mol/L, kmol/m<sup>3</sup>, mmol/ml, etc).

Isso ocorre, entre outros motivos, pois em sistemas fechados (  $\therefore$  em que:  $V = \text{constante}$ ) as concentração em quantidade de matéria (p.e. mol/L) e a quantidade de matéria (p.e. mols) são diretamente **proporcionais**

Considere a equação que segue, em que clorobutano em fase aquosa, reage com água para formar álcool n-butílico e ácido clorídrico



6

---

## Variação da Concentração com o Tempo

Dados de Velocidade<sup>(\*)</sup> de reação entre C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>Cl e água

Tempo, <i>t</i> (s)	[C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> Cl] (mol/L)	Velocidade média (mol L s)
0,0	0,1000	
50,0	0,0905	1,9 × 10 <sup>-4</sup>
100,0	0,0820	1,7 × 10 <sup>-4</sup>
150,0	0,0741	1,6 × 10 <sup>-4</sup>
200,0	0,0671	1,4 × 10 <sup>-4</sup>
300,0	0,0549	1,22 × 10 <sup>-4</sup>
400,0	0,0448	1,01 × 10 <sup>-4</sup>
500,0	0,0368	0,80 × 10 <sup>-4</sup>
800,0	0,0200	0,560 × 10 <sup>-4</sup>
10.000	0	

(\*): os valores de velocidade estão apontados em módulo na tabela acima, dado que o C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>Cl é reagente. Em verdade, as velocidades médias nesse caso são negativas por se tratar de uma espécie química que está sendo consumida



7

---

## Variação da Concentração com o Tempo

Observações e Constatações

Pode-se calcular a **velocidade média** da reação em termos do desaparecimento de C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>Cl

A unidade para a velocidade média será [(mol/L)/s]

Percebe-se que a velocidade média diminui com o tempo ou, conforme a reação evolui

A velocidade em que ocorre o fenômeno expresso pela equação pode ser representada por um gráfico do tipo: **[C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>Cl] vs. tempo**

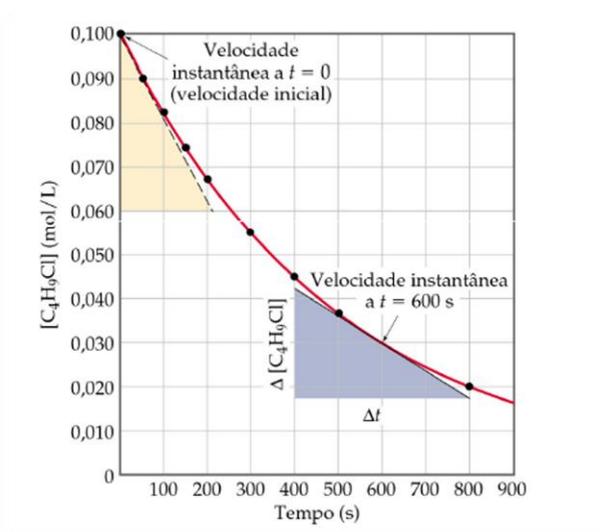
A velocidade a qualquer instante de tempo (**velocidade instantânea**) é expressa graficamente pela inclinação da tangente da curva, ou seja, pelo **coeficiente angular** da mesma reta (ou ainda, e como não poderia deixar de ser, pela derivada simples da concentração no tempo, **medida neste mesmo estágio** do processo)

A **velocidade instantânea** é diferente da velocidade média. Trata-se de um **valor pontual**, tomado em instante (ou circunstância) bem definido ao longo do desenvolvimento da reação

Geralmente chama-se a velocidade instantânea simplesmente de '**velocidade**'

8

### Varição da Concentração com o Tempo

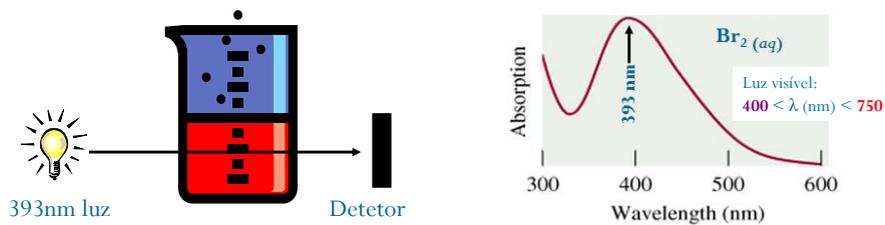


9

### Varição da Concentração com o Tempo



Sentido de evolução em termos de tempo de reação

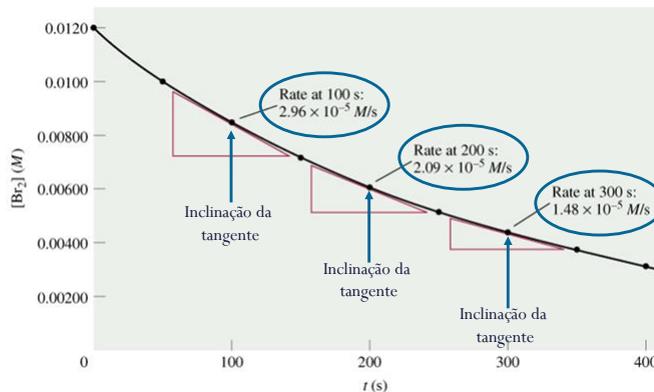


10

## Variação da Concentração com o Tempo



Time (s)	[Br <sub>2</sub> ] (M)
0.0	0.0120
50.0	0.0101
100.0	0.00846
150.0	0.00710
200.0	0.00596
250.0	0.00500
300.0	0.00420
350.0	0.00353
400.0	0.00296



$$\text{Velocidade Média} = - \frac{\Delta[\text{Br}_2]}{\Delta t} = - \frac{[\text{Br}_2]_{\text{final}} - [\text{Br}_2]_{\text{inicial}}}{t_{\text{final}} - t_{\text{inicial}}}$$

**Velocidade Instantânea** = velocidade tomada em um momento específico

## Variacão da Concentração com o Tempo

Taxa de Reação entre Bromo molecular e ácido fórmico a 25°C

Time (s)	[Br <sub>2</sub> ] (M)	Rate (M/s)	$k = \frac{\text{rate}}{[\text{Br}_2]} (\text{s}^{-1})$
0.0	0.0120	$4.20 \times 10^{-5}$	$3.50 \times 10^{-3}$
50.0	0.0101	$3.52 \times 10^{-5}$	$3.49 \times 10^{-3}$
100.0	0.00846	$2.96 \times 10^{-5}$	$3.50 \times 10^{-3}$
150.0	0.00710	$2.49 \times 10^{-5}$	$3.51 \times 10^{-3}$
200.0	0.00596	$2.09 \times 10^{-5}$	$3.51 \times 10^{-3}$
250.0	0.00500	$1.75 \times 10^{-5}$	$3.50 \times 10^{-3}$
300.0	0.00420	$1.48 \times 10^{-5}$	$3.52 \times 10^{-3}$
350.0	0.00353	$1.23 \times 10^{-5}$	$3.48 \times 10^{-3}$
400.0	0.00296	$1.04 \times 10^{-5}$	$3.51 \times 10^{-3}$

Velocidade Instantânea

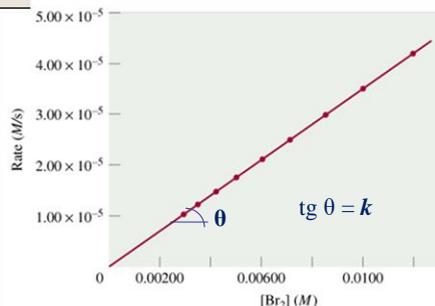
Velocidade de reação  $\propto$  [Br<sub>2</sub>]

Velocidade =  $k \cdot [\text{Br}_2]$

$$k = \frac{\text{velocidade}}{[\text{Br}_2]}$$

$k = 3.50 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1} = \text{Constante de Reação}$

Ou seja:  
**k** corresponde ao coeficiente angular da Função de 1°. Grau que representa a relação entre:  
 Velocidade de reação = Rate =  $r = f([\text{Br}_2])$



---

## LEIS DE VELOCIDADE

Problema:

A velocidade inicial de uma reação  $A + B \rightarrow C$  foi medida para várias concentrações iniciais diferentes de A e B. Os resultados são apresentados na tabela abaixo:

Número do Experimento	[A] (mol/L)	[B] (mol/L)	Veloc. inicial (mol L <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )
1	0,100	0,100	$4,0 \times 10^{-5}$
2	0,100	0,200	$4,0 \times 10^{-5}$
3	0,200	0,100	$16,0 \times 10^{-5}$

Pede-se:

- Determine a Lei de velocidade para a reação;
- Determine a magnitude da constante de reação;
- Calcule a velocidade de reação para a situação em que  $[A] = 0,050$  mol/L e  $[B] = 0,100$  mol/L
- A partir dos dados indicados descreva a forma como  $[A]$  varia com o tempo.

---

13

---

## LEIS DE VELOCIDADE

Problema:

Os seguintes dados foram medidos para a reação de óxido nítrico com hidrogênio:



Número do Experimento	[NO] (mol/L)	[H <sub>2</sub> ] (mol/L)	Veloc. inicial (mol L <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )
1	0,10	0,10	$1,23 \times 10^{-3}$
2	0,10	0,20	$2,46 \times 10^{-3}$
3	0,20	0,10	$4,92 \times 10^{-3}$

Pede-se:

- Determine a Lei de velocidade para a reação;
- Calcule a constante de velocidade;
- Calcule a velocidade de reação para a situação em que  $[\text{NO}] = 0,050$  mol/L e  $[\text{H}_2] = 0,150$  mol/L
- Determine a forma como  $[\text{H}_2]$  varia com o tempo para uma situação em que grandes quantidades adicionais de NO fossem dosadas no sistema após a Lei de velocidade de reação ter sido determinada.

---

14