

Cinética Química

Conceito de velocidade de reação, reações de primeira ordem, reações de segunda ordem e equação de Arrhenius.

Cinética

Estuda a velocidade dos **processos químicos**.

Além de informações sobre a velocidade com que ocorrem as reações, a cinética também fornece detalhes do **mecanismo da reação** (exatamente como ocorre a reação)

Teorias da Cinética Química

- Teoria das colisões
- Complexo Ativado

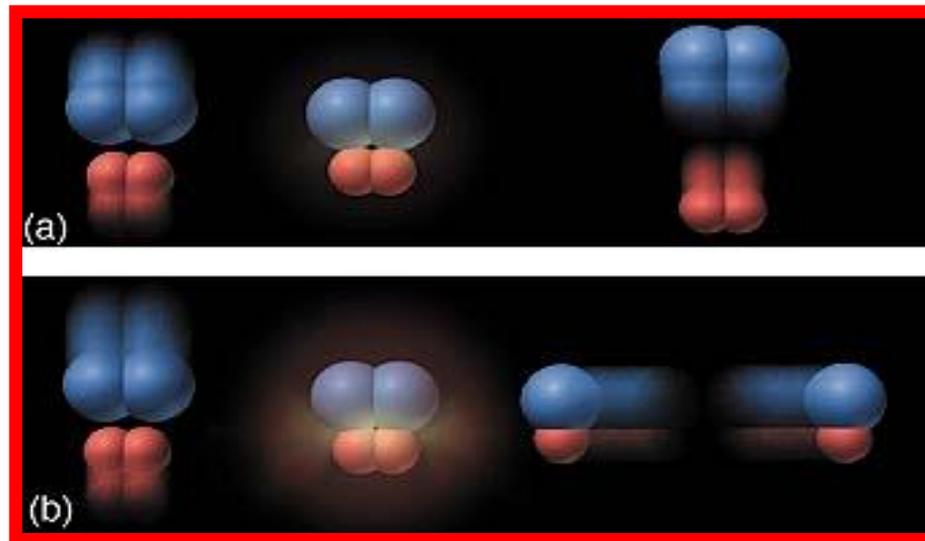
Teoria das colisões

- A velocidade da reação é diretamente proporcional ao número de moléculas que colidem por unidade de tempo (*frequência de colisão*).
- **notas:**
 - 1. A reação química pode ocorrer somente quando moléculas reagentes colidem com outras moléculas.
 - 2. Quando moléculas colidem, apenas uma fração das colisões entre as moléculas conduzem a reação química

Tipos de Colisões:

- ***Colisões Efetivas*** - resultará em uma reação química
- ***Colisões Inefetivas***- nenhuma reação ocorrerá

Colisões entre moléculas reagentes deve ser suficientemente energética para ocorrer a reação



- (a) *Se os reagentes estão movimentando-se muito lentamente, eles simplesmente afastam-se uns dos outros e a reação não ocorre.*
- (b) *Se os reagentes estão movimentando-se energeticamente suficientes e eles estão corretamente orientados, a reação pode ocorrer.*

Requisitos para uma Colisão Efetiva:

- ***Energia de Ativação: (E_a)***

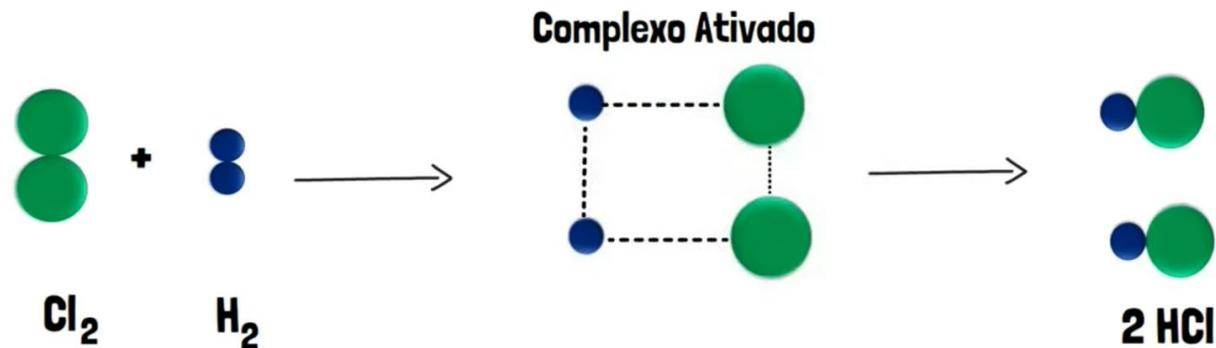
Quantidade mínima de energia que as moléculas devem ter nas suas colisões para ocorrer uma reação química.

- ***Propriedade de Orientação das Moléculas***

Dois Caminhos Possíveis

- (a) Se as moléculas estão orientadas adequadamente, uma colisão energética suficientemente conduzirá a reação.
- (b) Se a orientação das moléculas colidentes estiver errada, não haverá reação

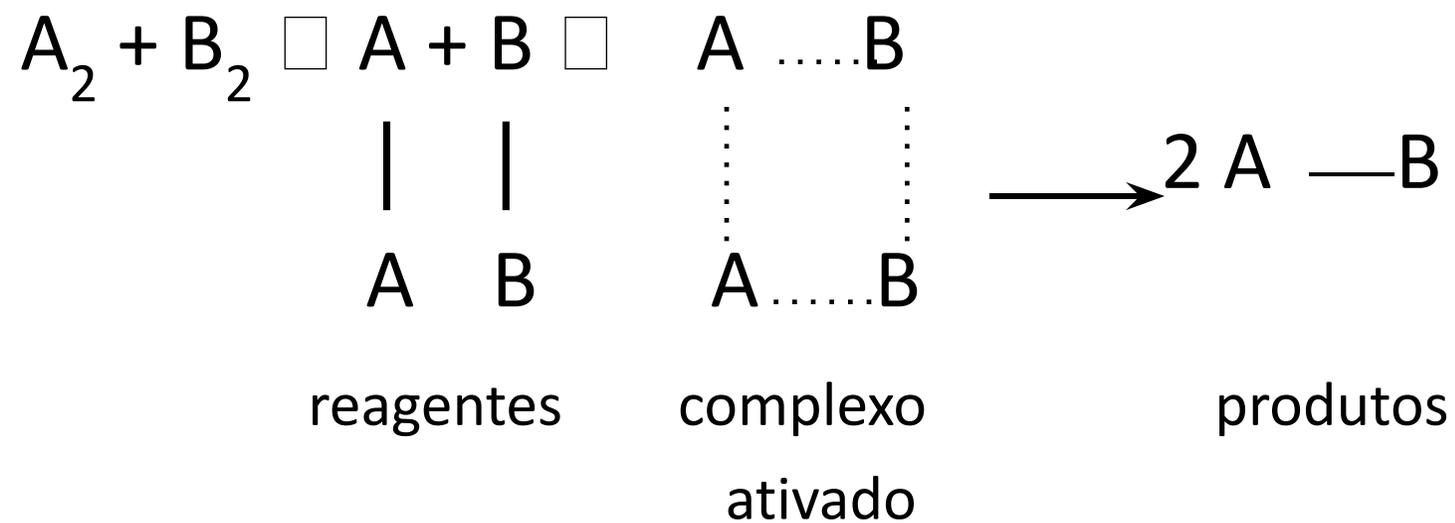
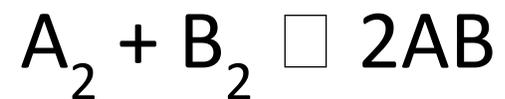
Energia de Ativação



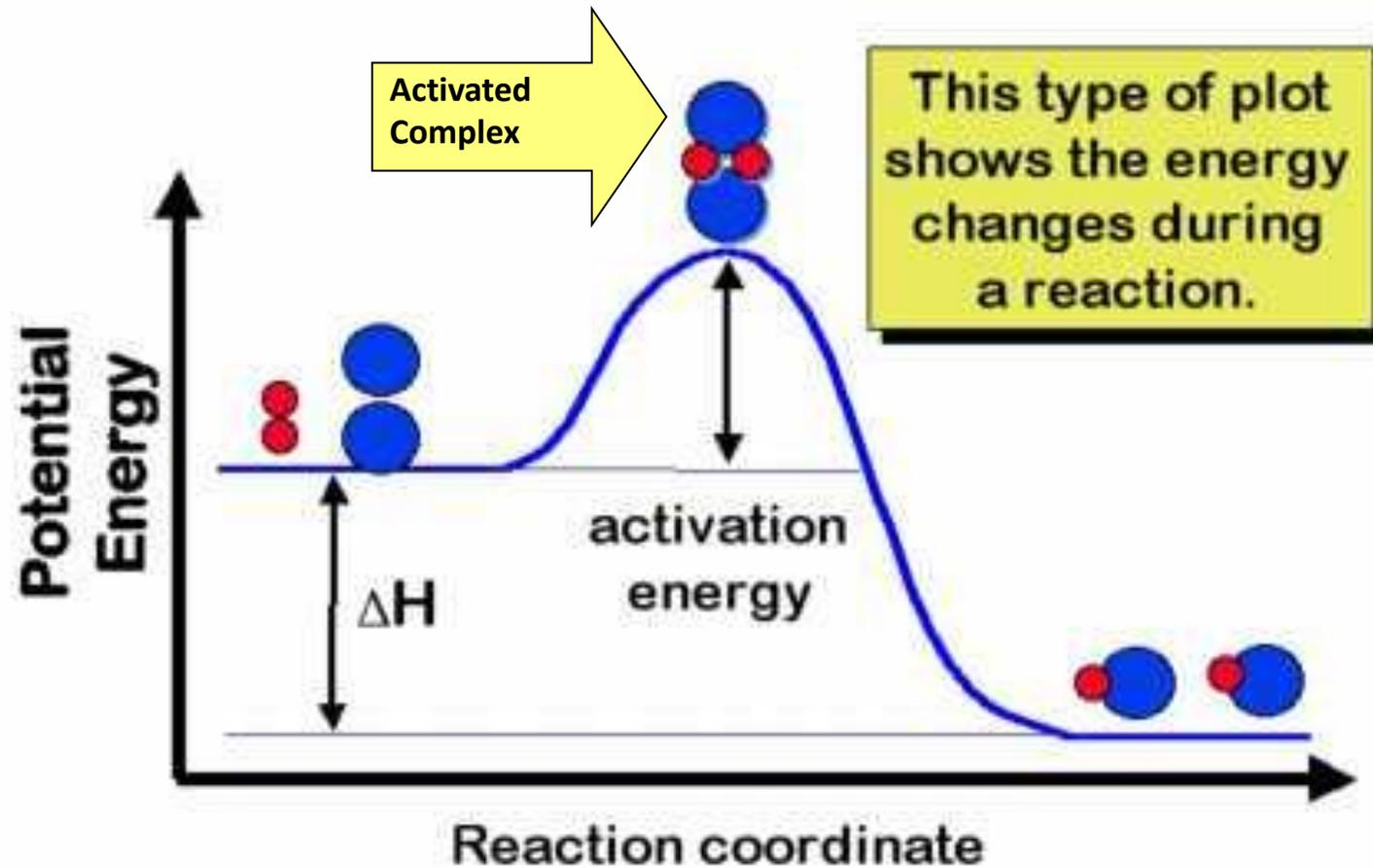
Complexo ativado

- As moléculas reagentes, como um resultado das colisões, formam espécies intermediárias (***complexo ativado***) antes da formação dos produtos.

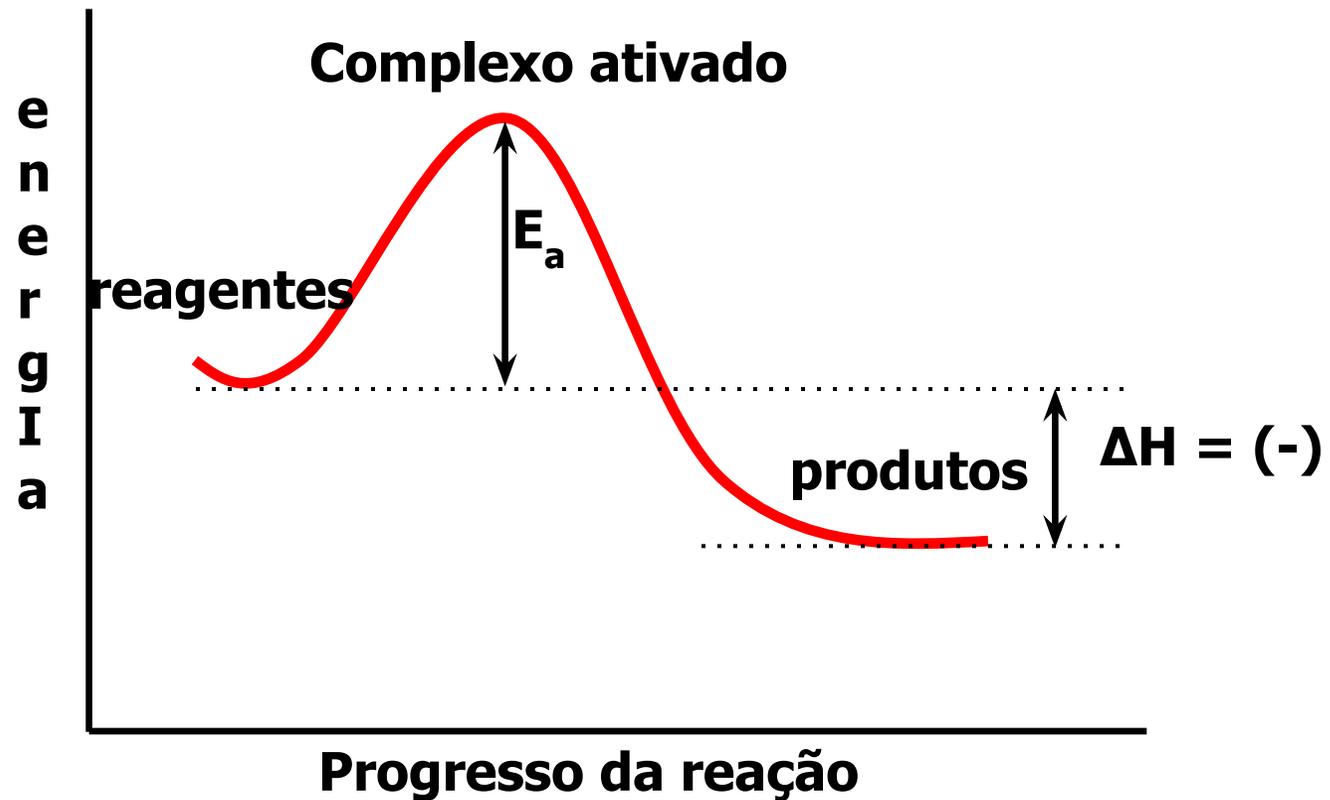
- Em uma reação hipotética,



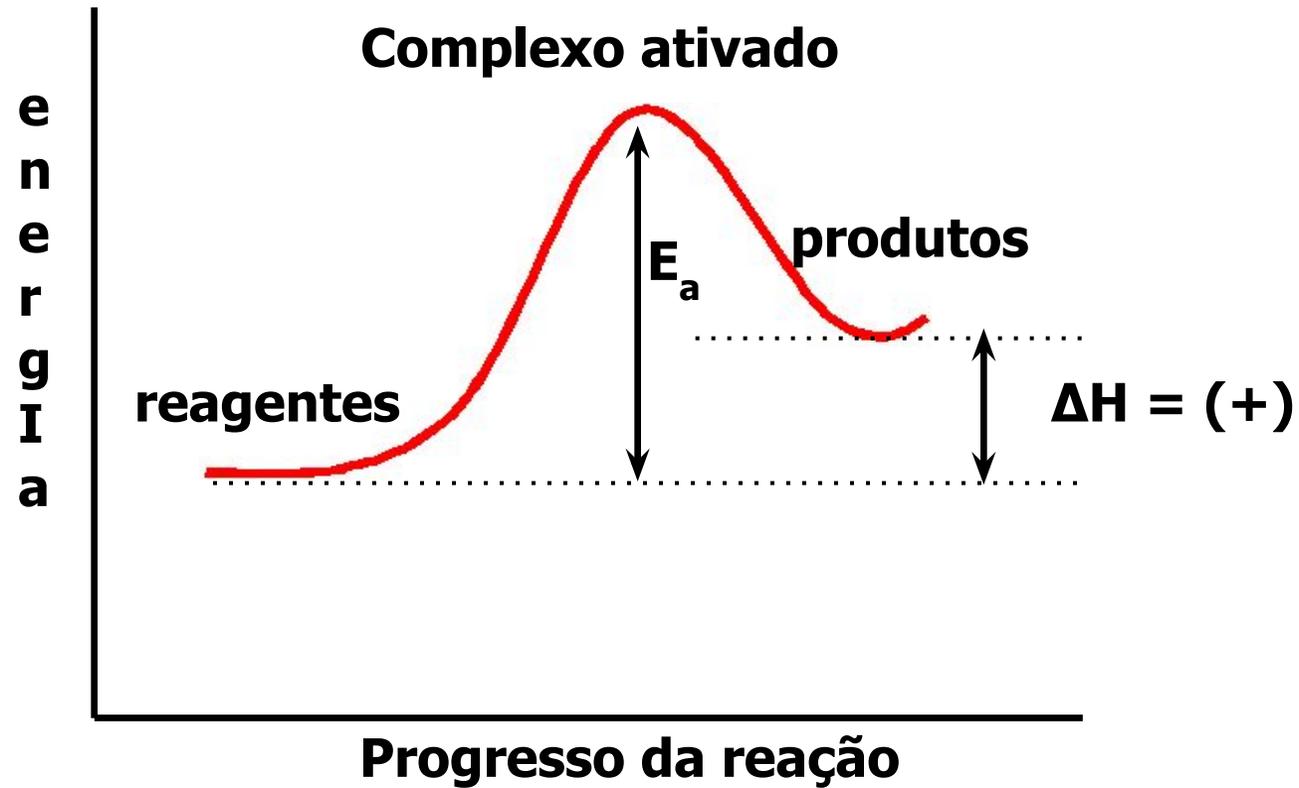
Perfil da reação



Perfil de uma Reação Exotérmica



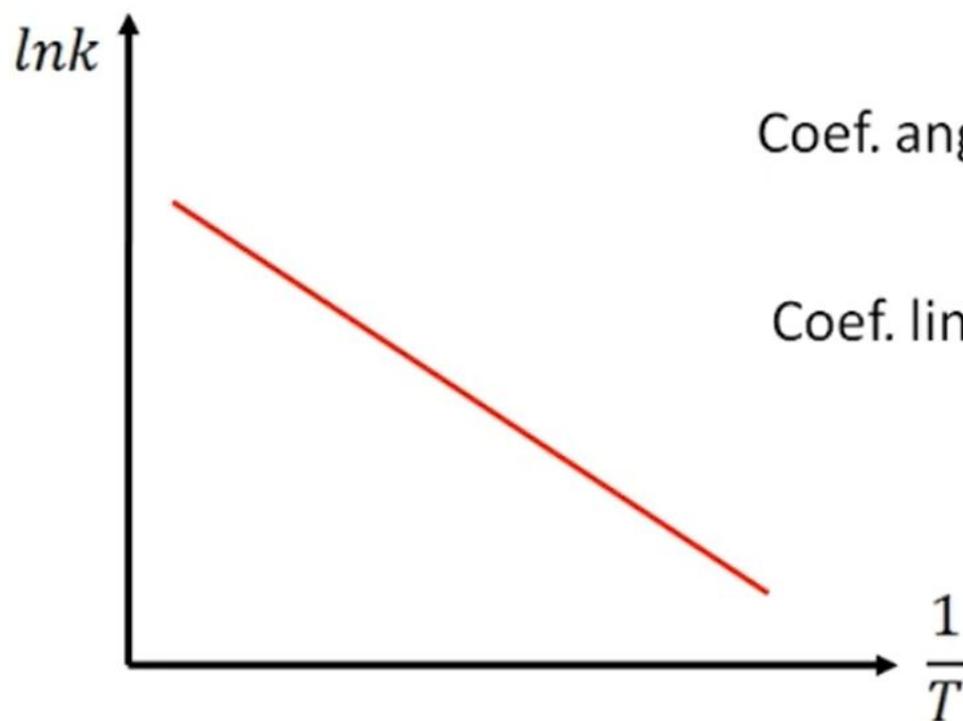
Perfil de uma Reação Endotérmica



$$k = Ae^{-\frac{Ea}{RT}}$$

$$\ln k = \ln A - \left(\frac{Ea}{R}\right)\frac{1}{T}$$

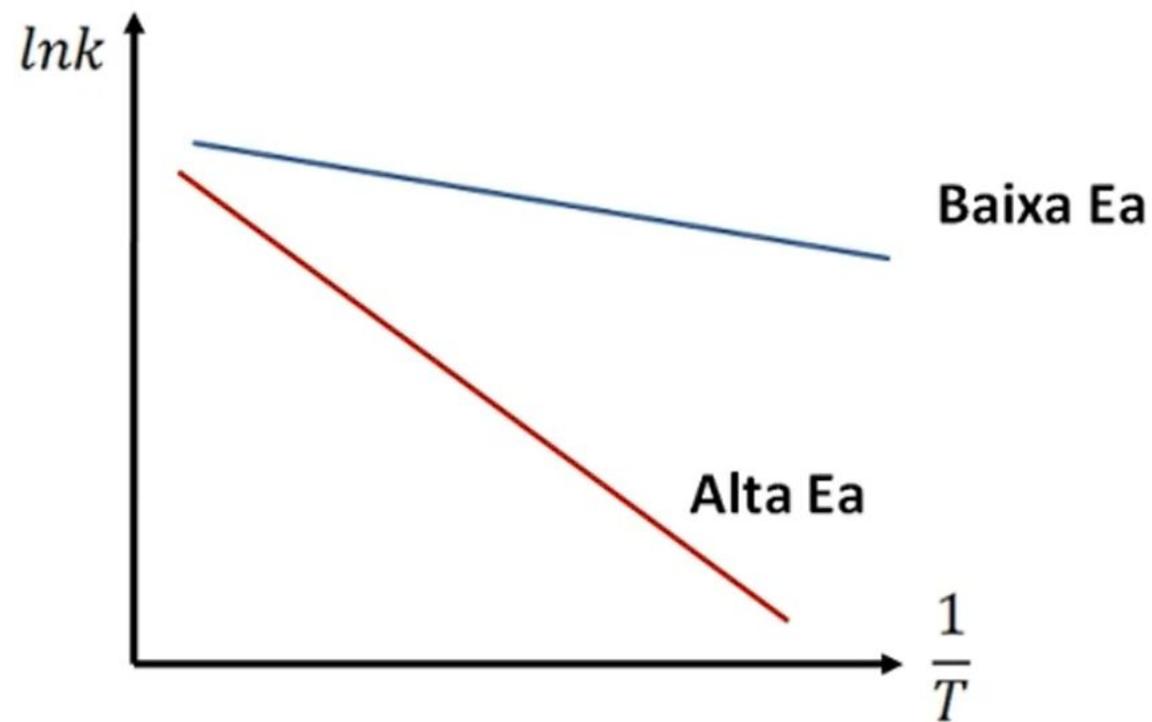
O parâmetro de Arrhenius A é denominado de **fator pré-exponencial** e o parâmetro Ea é denominado de **energia de ativação**.



Coef. angular: $-\left(\frac{Ea}{R}\right)$

Coef. linear: $\ln A$

Observe que, **quanto maior for a energia de ativação mais a constante de velocidade varia com a temperatura.**



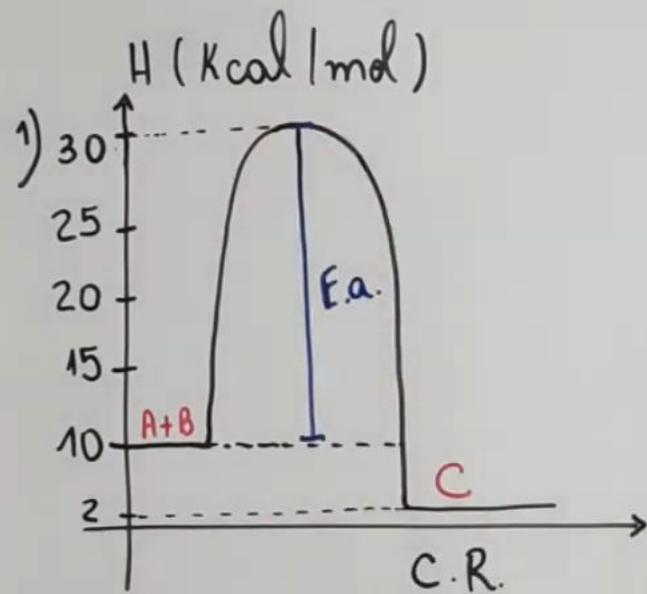
Segundo a **teoria das colisões**, a energia de ativação é a **energia mínima de uma colisão efetiva**.

Segundo a **teoria do estado de transição**, a energia de ativação é a **diferença entre a energia dos reagentes e do estado de transição na superfície de energia potencial**.

Em ambos os casos, a energia de ativação pode ser interpretada para uma **barreira energética** que precisa ser superada para que a reação ocorra.

Ou seja:

“Reações com energia de ativação alta são lentas e reações com energia de ativação baixa são rápidas”



$$E.a. = C.A. - H.R.$$

$$E.a. = 30 - 10$$

$$E.a. = 20 \text{ Kcal/mol}$$