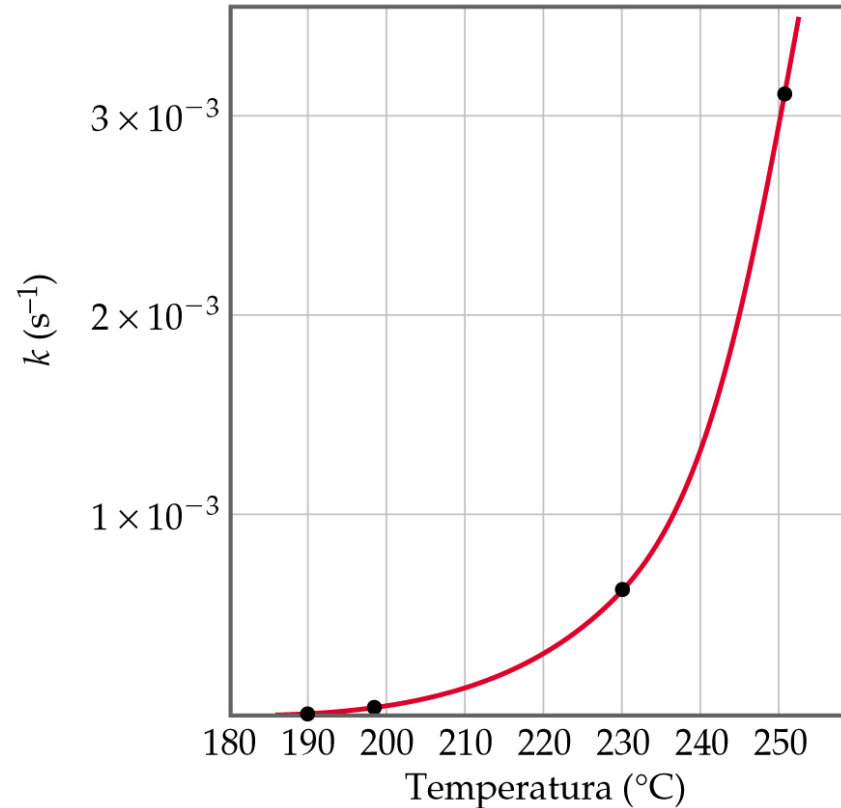


Temperatura e velocidade de reação



Conclusão: Existe um aumento exponencial da constante k com a temperatura e por tanto da velocidade que é proporcional a k.

Qual será a razão deste comportamento? O que explica este comportamento?

Temperatura e velocidade

Energia de ativação (E_a)

- Teoria de Arrhenius: As moléculas devem possuir uma quantidade mínima de energia para uma reação efetiva. Por quê?
 - Para que formem produtos, as ligações químicas devem ser quebradas nos reagentes e formadas nos produtos.
 - A quebra de ligação requer energia.
- A energia de ativação E_a corresponde a energia mínima necessária para proceder a reação química.

Temperatura e velocidade

Energia de ativação

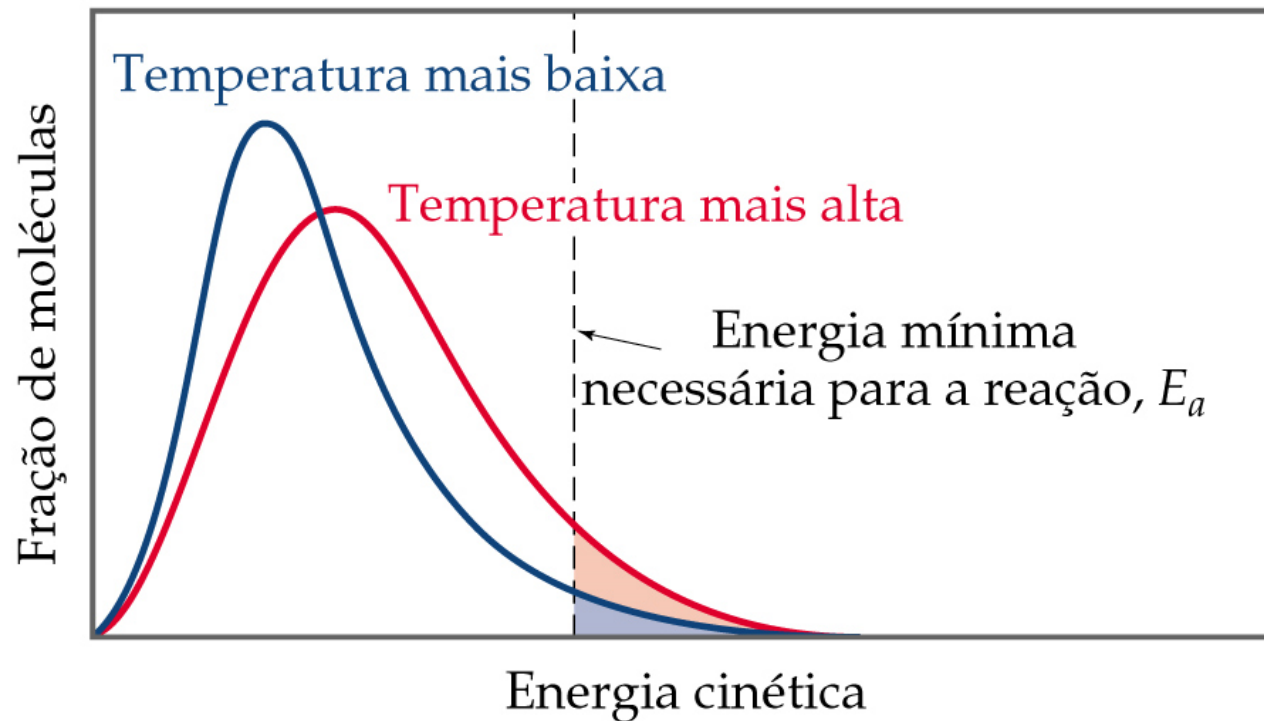
- Como uma molécula de reagente adquire energia suficiente para superar a barreira de energia de ativação?
- A partir da teoria cinética molecular, sabemos que, à medida que a temperatura aumenta, a velocidade média das moléculas e a energia cinética aumenta.
- Podemos mostrar que a fração de moléculas, f , com energia igual ou maior do que E_a é proporcional ao fator de Boltzmann

$$f = e^{-E_a/RT}$$

onde R é a constante dos gases (8,314 J/mol K).

Temperatura, velocidade molecular e energia cinética

Energia de ativação



Distribuição de Maxwell-Boltzmann

Temperatura e velocidade

Equação de Arrhenius

- A variação da constante de velocidade de reação com a temperatura absoluta (T) é descrita pela equação de Arrhenius:

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

- k é a constante de velocidade, E_a é a energia de ativação, R é a constante dos gases (8,314 J/K mol) e T é a temperatura em K.
- A é chamada de fator de frequência.
- A é uma medida da probabilidade de uma colisão favorável.
- Tanto A como E_a são específicos para uma determinada reação.

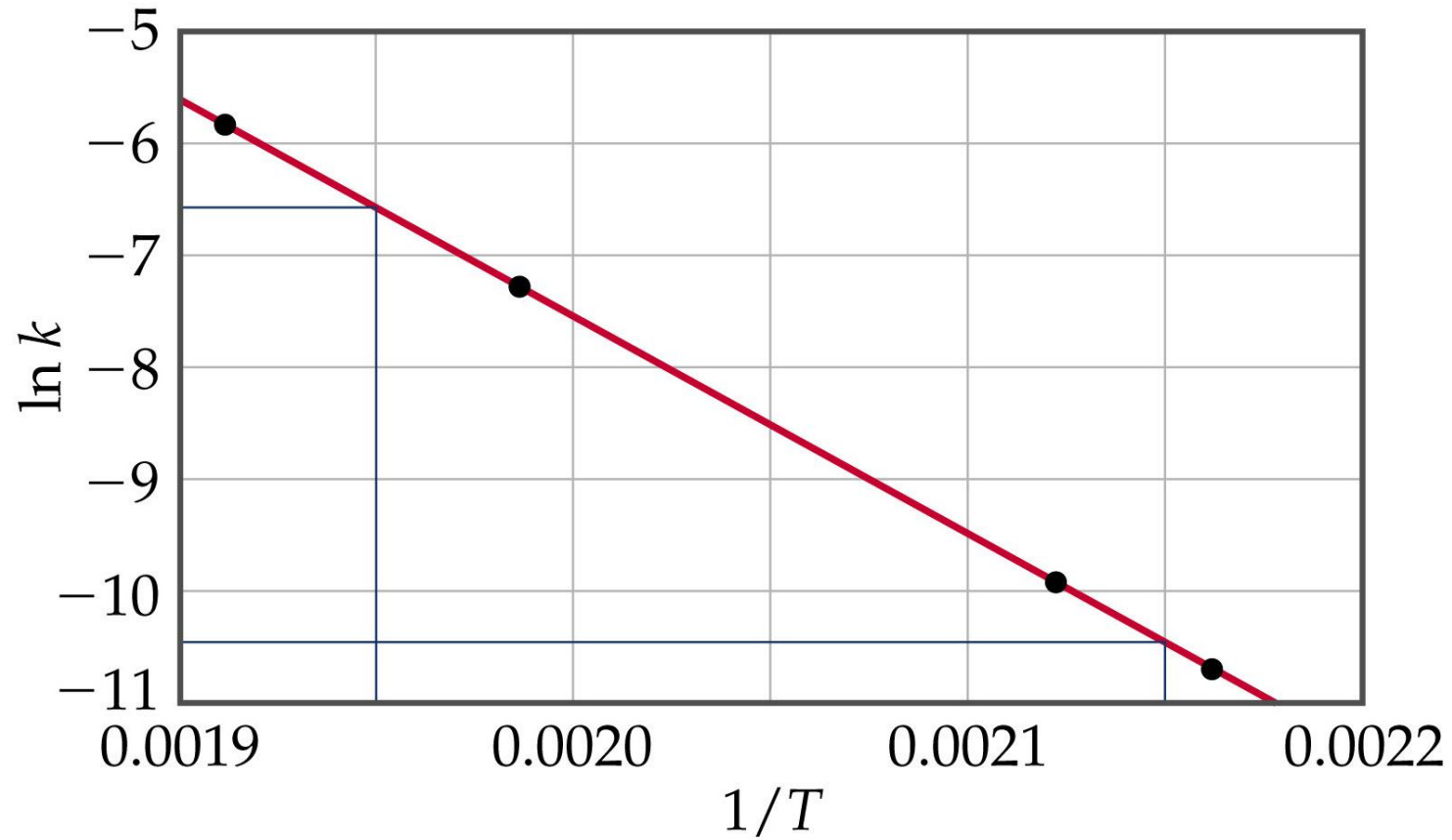
Determinando a energia de ativação

- Se tivermos um bom conjunto de dados, podemos determinar E_a e A graficamente reformulando a equação de Arrhenius:

$$\ln k = -\frac{E_a}{RT} + \ln A$$

- A partir da reação acima, um gráfico de $\ln k$ versus $1/T$ terá uma inclinação de $-E_a/R$ e interceptação de $\ln A$.

Temperatura e velocidade

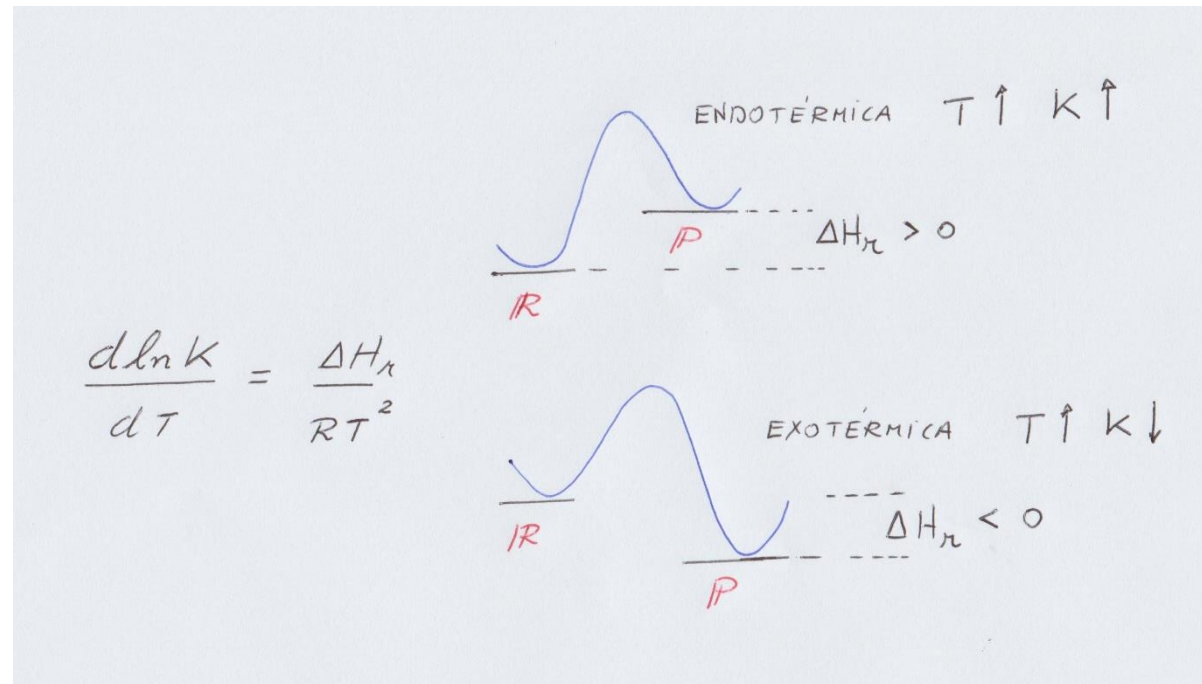


TERMODINÂMICA DE REAÇÕES E EFEITO DA TEMPERATURA

Calor de reação à pressão constante = Variação de Entalpia (ΔH)

Equação de van't Hoff e Princípio de Le Chatelier

Situação de equilíbrio $K = \frac{[R]_{\text{eq}}}{[P]_{\text{eq}}}$



Cinética ou conversão de “Reagentes em Produtos” é uma condição de não equilíbrio. A cinética define/controla em quanto tempo reagentes são convertidos em produtos até o equilíbrio (taxas). A termodinâmica estabelece a relação de equilíbrio entre as concentrações no tempo longo (*infinito*), e de uma certa forma o rendimento no processo.