

Cinética Química

Prof. James Moraes de Almeida



MINISTÉRIO DA
EDUCAÇÃO

MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO



Teste

- Encontre o livre caminho médio e frequência de colisões do CO_2 .
 - Temperatura 300 K.
 - Pressão 1 atm.
 - Sessão de choque 0.52 nm^2 .
 - Velocidade média das moléculas 380 m/s.

$$\lambda = \frac{kT}{\sigma p}$$

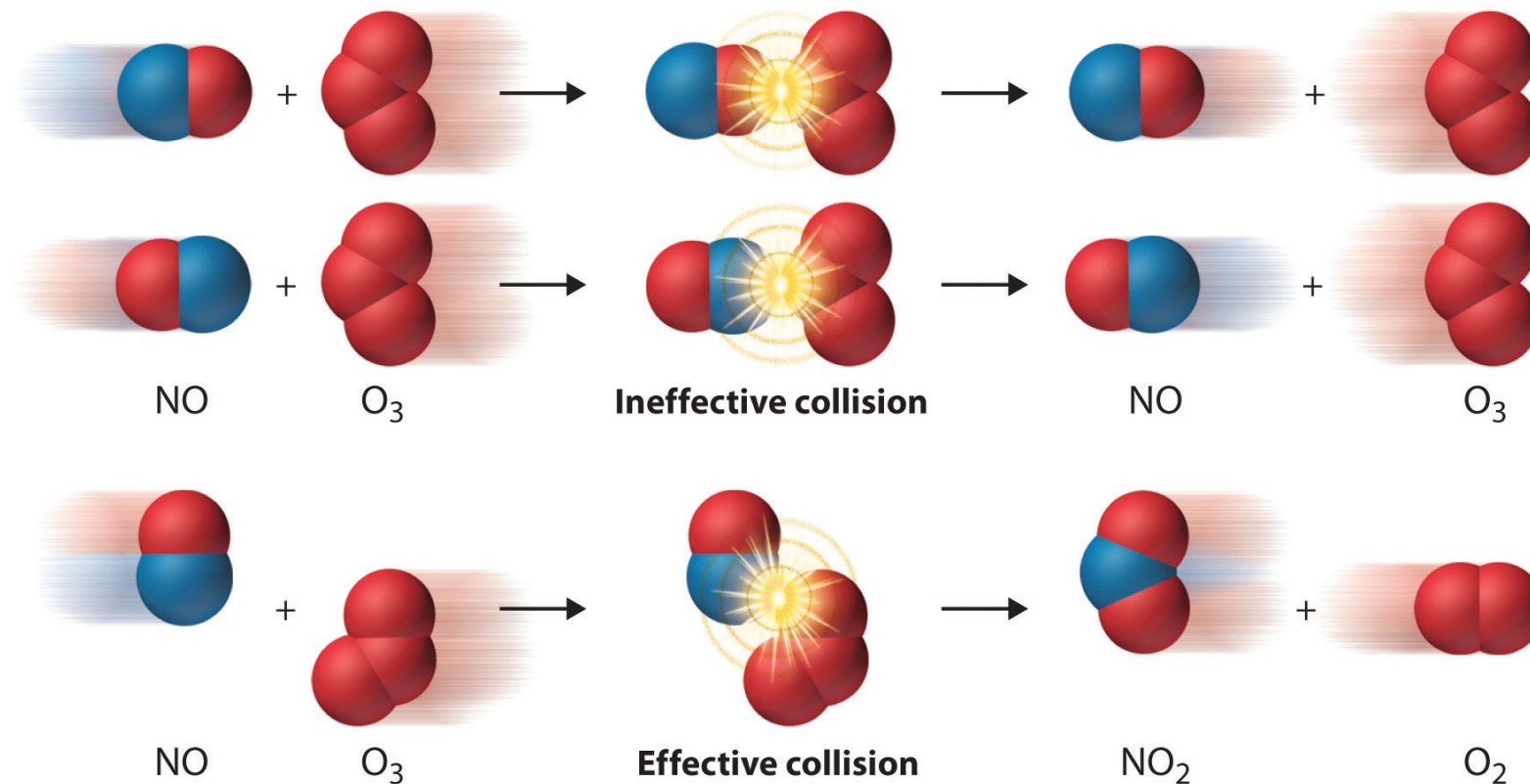
$$z = \frac{\sigma \bar{c}_{rel} p}{kT}$$

$$\bar{c}_{rel} = \sqrt{2} \bar{c}$$

$$k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

Dinâmica de reações

- Encontros reativos.
 - As moléculas podem reagir ou não ao colidirem.



Dinâmica de reações

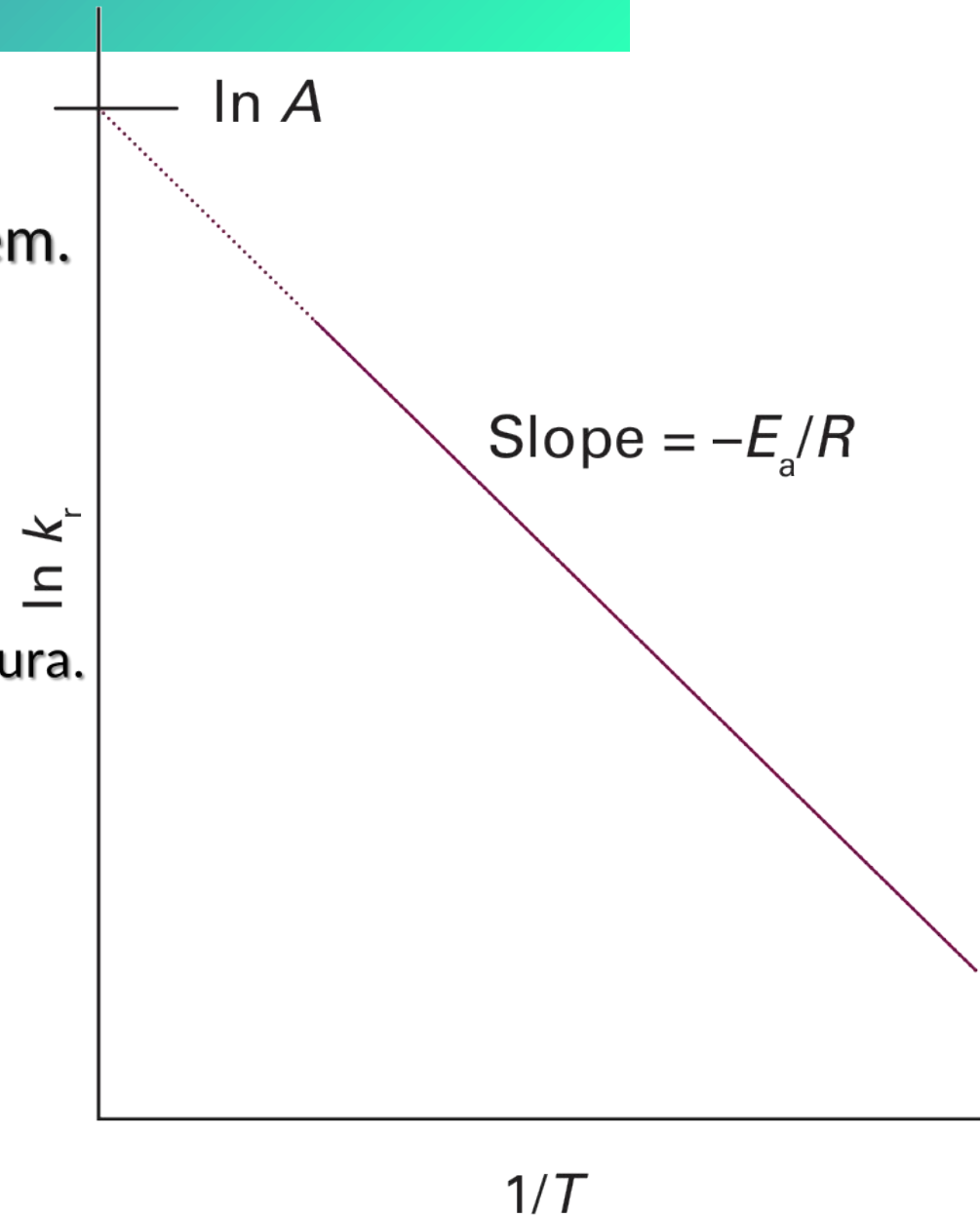
- Encontros reativos.
 - As moléculas podem reagir ou não ao colidirem.
 - Isso é determinado por uma taxa de reação:
 - A reação:
 - $A + B \rightarrow P$
 - Ocorre com uma taxa:
 - $v = k_r[A][B]$

Dinâmica de reações

- Encontros reativos.
 - As moléculas podem reagir ou não ao colidirem.
 - Isso é determinado por uma taxa de reação:
 - A reação:
 - $A + B \rightarrow P$
 - Ocorre com uma taxa:
 - $v = k_r [A][B]$
 - ↓
Constante de reação
 - ↘
Concentrações molares de A e B ($[A] = n_A/V$)

Dinâmica de reações

- Encontros reativos.
 - As moléculas podem reagir ou não ao colidirem.
 - Isso é determinado por uma taxa de reação:
 - $v = k_r[A][B]$
 - $k_r \propto \sigma \bar{c}_{rel}$
 - Mas k_r também depende da temperatura.
 - Como: $\ln k_r \propto -\frac{E_a}{RT}$
 - $k_r \propto e^{-E_a/RT}$
 - Logo: $k_r \propto \sigma \bar{c}_{rel} e^{-E_a/RT}$



Dinâmica de reações

- Encontros reativos.

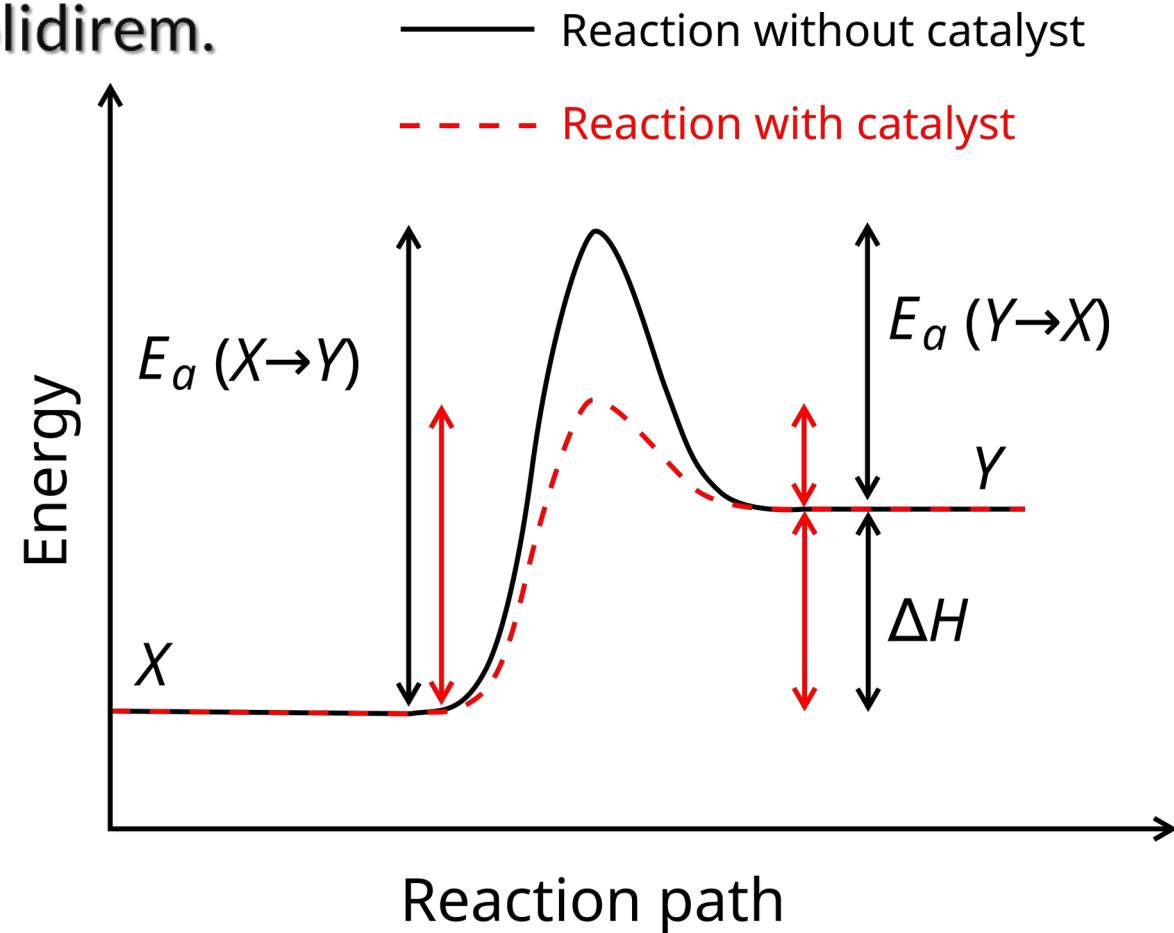
- As moléculas podem reagir ou não ao colidirem.

- Isso é determinado por uma taxa de reação:

- $v = k_r[A][B]$

- $k_r \propto \sigma \bar{c}_{rel} e^{-\frac{E_a}{RT}}$

- Sendo E_a a energia de ativação.



Dinâmica de reações

- Encontros reativos.

- As moléculas podem reagir ou não ao colidirem.

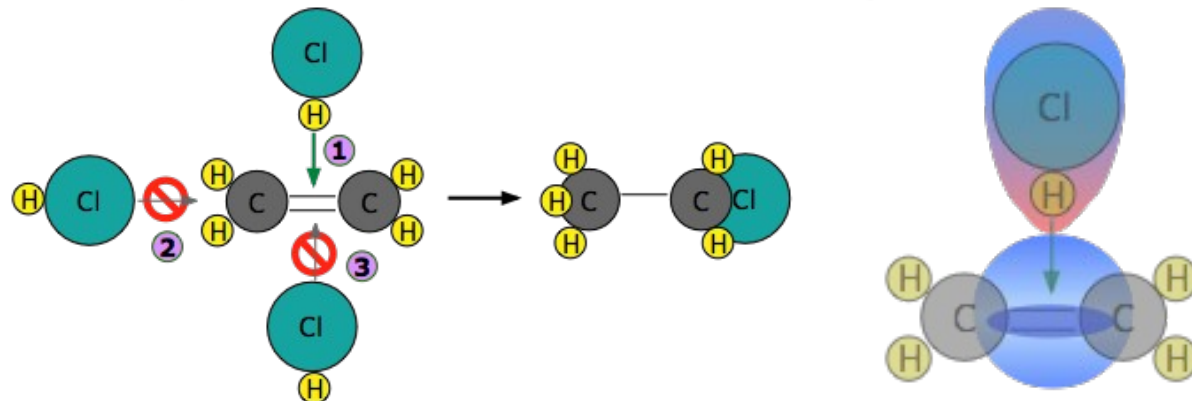
- Isso é determinado por uma taxa de reação:

- $v = k_r[A][B]$

- $k_r \propto \sigma \bar{c}_{rel} e^{-E_a/RT}$

- Mesmo com a energia de ativação necessária, a reação pode não ocorrer.

- A colisão precisa ocorrer com orientações corretas.



Precisamos de mais um termo, chamado **estérico**. Daremos o nome de P.

Dinâmica de reações

- Encontros reativos.
 - As moléculas podem reagir ou não ao colidirem.
 - Isso é determinado por uma taxa de reação:
 - $v = k_r[A][B]$
 - A colisão precisa ocorrer com orientações corretas.
 - $k_r \propto P\sigma\bar{c}_{rel}e^{-E_a/RT}$
 - Portanto temos três termos:
 - $k_r \propto \text{requerimento estérico} \times \text{taxa de colisão} \times \text{requerimento de energia}$

Dinâmica de reações

- Taxa de reação:

- $\nu = k_r [A][B]$

- $k_r \propto P \sigma \bar{c}_{rel} e^{-E_a/RT}$

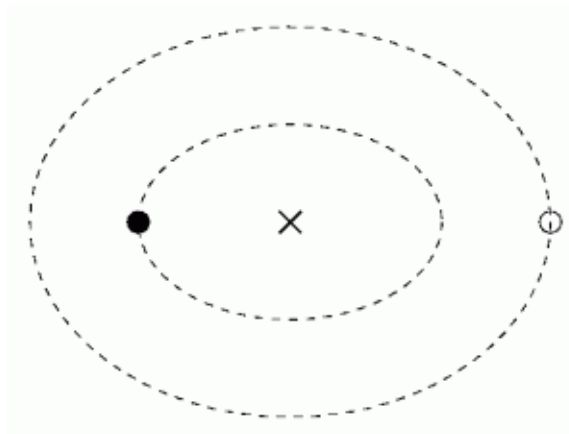
- Vamos voltar aos gases.

- $\bar{c} = \left(\frac{8kT}{\pi\mu} \right)^{1/2}$

- Mas o que é esse μ ?

- É a massa reduzida:

- $\mu = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B}$



Dinâmica de reações

- Taxa de reação:

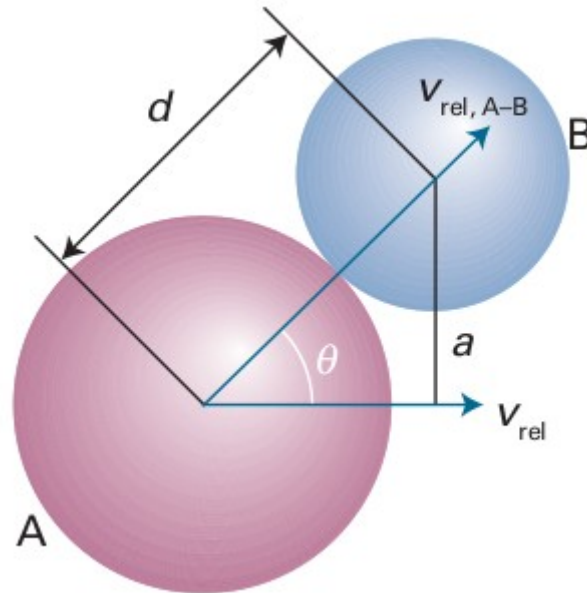
- $\nu = k_r [A][B]$

- $k_r \propto P \sigma \bar{c}_{rel} e^{-E_a/RT}$

- Vamos voltar aos gases.

- E o $\sigma = \pi d^2$

- Sendo $d = \frac{1}{2}(d_A + d_B)$



Dinâmica de reações

- Taxa de reação:

$$\nu = k_r [A][B]$$

- Vamos voltar aos gases.

- $k_r = N_A P \sigma \bar{c}_{rel} e^{-E_a/RT}$

- De onde veio o N_A ?

- Dedução longa...

Table 22.1* Arrhenius parameters for gas-phase reactions

	$A / (\text{dm}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1})$		$E_a / (\text{kJ mol}^{-1})$	P
	Experiment	Theory		
$2 \text{ NOCl} \rightarrow 2 \text{ NO} + 2 \text{ Cl}$	9.4×10^9	5.9×10^{10}	102	0.16
$2 \text{ ClO} \rightarrow \text{Cl}_2 + \text{O}_2$	6.3×10^7	2.5×10^{10}	0	2.5×10^{-3}
$\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$	1.24×10^6	7.4×10^{11}	180	1.7×10^{-6}
$\text{K} + \text{Br}_2 \rightarrow \text{KBr} + \text{Br}$	1.0×10^{12}	2.1×10^{11}	0	4.8

* More values are given in the *Data section*.

Dinâmica de reações

- Taxa de reação:

$$v = k_r [A][B]$$

- Vamos voltar aos gases.

- $k_r = N_A P \sigma \bar{c}_{rel} e^{-E_a/RT}$

- De onde veio o N_A ?

- Dedução longa...

- DESAFIO: Quem fizer essa dedução e me explicar ganha 100 pontos!

Dinâmica de reações

- Taxa de reação:

$$v = k_r [A][B]$$

- Vamos voltar aos gases.

- $k_r = N_A P \sigma \bar{c}_{rel} e^{-E_a/RT}$

- Podemos reescrever como:

- $k_r = A e^{-E_a/RT}$

- $A = N_A P \sigma \bar{c}_{rel}$

Dinâmica de reações

- Calcule a taxa de reação do H_2 com C_2H_4 a 300 K.
 - $H_2 + C_2H_4 \rightarrow C_2H_6$
 - Considere $A = 1.24 \cdot 10^6 \frac{dm^3}{mol \cdot s}$ e $E_a = 180 \text{ kJ/mol}$
 - Também considere que há 1 mol/dm^3 de cada reagente

OBRIGADO

James Moraes de Almeida

ilum.cnpem.br



MINISTÉRIO DA
EDUCAÇÃO

MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO

