

Aula

10

EXERCÍCIOS SOBRE: TEORIA DA COLISÃO, TEORIA DO ESTADO ESTACIONÁRIO E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL.

Glauber Silva Godoi

META

Desenvolver no aluno a capacidade de extrair os parâmetros cinéticos de uma reação química a partir da aplicação das teorias estudadas.

OBJETIVOS

Ao final desta aula, o aluno deverá:

calcular parâmetros cinéticos de uma reação química a partir das teorias apresentadas; obter dados termodinâmicos de uma reação química utilizando os conhecimentos que aprendeu sobre a Teoria do Estado Estacionário; reconhecer as diferenças entre dois importantes tipos de métodos computacionais que podem ser usados no estudo cinético de reações químicas.

PRÉ-REQUISITOS

Teoria da Colisão, Teoria do Estado Estacionário, Simulação Computacional.

INTRODUÇÃO

Caro aluno, nesta aula iremos realizar alguns exercícios com o objetivo de determinar parâmetros cinéticos de algumas reações químicas a partir das teorias apresentadas no capítulo anterior. Inicialmente iremos trabalhar com a Teoria da Colisão. Para isso irei apresentar alguns exercícios resolvidos, discutindo-os também para que em seguida você possa colocar a mão na massa, ou seja, começar a resolver questões semelhantes. Com isso você irá ganhar confiança na resolução de exercícios. Em seguida iremos trabalhar com a Teoria da Colisão, realizando a mesma filosofia. Lembre-se que esta teoria tem grande importância na obtenção de dados termodinâmicos. Por último, você irá responder algumas perguntas relacionadas com os métodos computacionais apresentados, isto é, Dinâmica Molecular e Métodos de Monte Carlo. Estes métodos são valiosas ferramentas computacionais que podem ser usadas no estudo cinético de reações químicas.

TEORIA DA COLISÃO

Vamos agora resolver alguns exercícios relacionados com os conceitos aprendidos na aula anterior, tais como, densidade de colisão, fator energético, fator estérico, etc. Começaremos primeiramente com a seguinte questão:

1. Exercício resolvido

Para a reação de hidrogenação do eteno à 628 K foi obtido $A = 1,24 \times 10^{-6} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ (fator pré-exponencial da equação de Arrhenius). Considerando que a área de secção transversal de colisão do hidrogênio e do eteno são respectivamente, $\sigma_{\text{H}_2} = 0,27 \text{ nm}^2$ e $\sigma_{\text{C}_2\text{H}_4} = 0,64 \text{ nm}^2$, calcule qual o valor do fator estérico P.

Resposta:

Para resolver esta questão, podemos notar que o valor de A, constante pré-exponencial, pode ser facilmente obtida a partir da equação (24) da Aula 8:

$$k_2 = P\sigma \left(\frac{8kT}{\pi\mu} \right)^{1/2} N_A e^{-E_a/RT}$$

Mas

$$k_2 = A e^{-E_a/RT}, \text{ Equação de Arrhenius.}$$

Portanto, comparando as duas equações:

$$A = P\sigma \left(\frac{8kT}{\pi\mu} \right)^{1/2} N_A = PA' \quad (1)$$

Onde A é o fator exponencial experimental fornecido pela questão, e A' é o resultado obtido para a equação $\sigma \left(\frac{8kT}{\pi\mu} \right)^{1/2} N_A$. Observe que A' é o fator exponencial A, porém sem levar em conta o fator estérico P. Para determinar A' precisamos calcular σ e μ . Um detalhe importante é que σ será dada simplesmente pela semi-soma dos valores respectivos para a área de secção transversal de colisão do hidrogênio e do eteno, ou seja:

$$\sigma = \sigma_{\text{H}_2} + \sigma_{\text{C}_2\text{H}_4} = \frac{(0,27 \text{ nm}^2 + 0,64 \text{ nm}^2)}{2} \cong 0,92 \text{ nm}^2.$$

Agora precisamos determinar o valor da massa reduzida μ . A massa reduzida pode ser obtida usando os valores de massa atômica do hidrogênio, $m_{\text{H}_2} = 2,016 \text{ u}$, e do eteno, $m_{\text{C}_2\text{H}_4} = 28,05 \text{ u}$, na equação (13) da Aula 8:

$$\mu = \frac{m_{\text{H}_2} m_{\text{C}_2\text{H}_4}}{m_{\text{H}_2} + m_{\text{C}_2\text{H}_4}} = \frac{(2,016)(28,05)}{2,016 + 28,05} = 1,884 \text{ u} \left(\frac{1,66 \times 10^{-27} \text{ kg}}{1 \text{ u}} \right) = 3,12 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

Lembre-se que é importante realizar a conversão de unidade de massa atômica u para kg, já que iremos realizar os cálculos no Sistema Internacional (SI). Usando os dados obtidos, vamos agora calcular o valor de A' , onde a constante de Boltzmann $k = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$, $T = 628 \text{ K}$:

$$A' = \sigma \left(\frac{8kT}{\pi\mu} \right)^{1/2} N_A = 7,37 \times 10^{11} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}.$$

De posse de todos estes dados podemos finalmente realizar o cálculo de P a partir da equação (1):

$$P = \frac{A}{A'} = \frac{1,24 \times 10^{-6} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}}{7,37 \times 10^{11} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}} = 1,7 \times 10^{-6}$$

Como o valor de P é muito menos do que 1 significa dizer que a reação é difícil de ocorrer o que justifica o emprego, por exemplo, de catalisadores com o objetivo de tornar a reação mais rápida. Agora que você já está mais familiarizado com o cálculo de P , tente resolver a seguinte questão:

Exercício proposto 1:

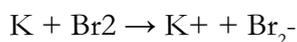
A reação $\text{NO} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{NOCl} + \text{Cl}$ possui o valor de $A = 4,0 \times 10^{19} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ à 298 K. Considerando que $\sigma_{\text{NO}} = 0,42 \text{ nm}^2$ e $\sigma_{\text{Cl}_2} = 0,93 \text{ nm}^2$, determine o valor de P .

Agora, vamos fazer um exercício para uma reação envolvendo o mecanismo do arpão:

2. Exercício resolvido

Determine o valor de P para a reação envolvendo o mecanismo do arpão entre K e Br_2 através da estimativa da distância mínima energeticamente favorável entre as espécies reagentes para que ocorra transição eletrônica.

Para resolver esta questão precisamos avaliar todas as contribuições energéticas envolvendo as espécies em colisão para que ocorra a transição:



Isto pode ser feito a partir da soma das seguintes contribuições: a energia de ionização E_I do metal (K), a afinidade eletrônica AE do ametal (Br_2) e a interação coulombiana (ou coulômbica) E_C , dada pela relação $-e^2 / 4\pi\epsilon_0 r$, ou seja:

$$E_T = E_I + AE + E_C \quad (2)$$

Porém é importante lembrar que a energia de ionização é a energia necessária para arrancar um elétron da última camada, enquanto que a afinidade eletrônica é a energia liberada quando uma determinada espécie recebe o elétron. De mesmo modo, a energia devido à interação coulombiana também é uma energia liberada pelo sistema. Portanto, representando cada parcela da equação (2) como sendo positiva, quando existe gasto de energia, e negativa, quando a energia é liberada, obtemos a equação final:

$$E_T = E_I - AE - e^2 / 4\pi\epsilon_0 r \quad (3)$$

Como a energia de ionização E_I é normalmente superior em relação à afinidade eletrônica AE , é necessário que as espécies se aproximem a uma distância mínima de modo que o termo devido à interação coulombiana também contribua para que o elétron seja arrancado. Quando isto ocorrer a energia total do sistema se tornará negativa (as moléculas continuarão a se aproximar cada vez mais), de modo que podemos escrever que

$$E_T = E_I - AE - e^2 / 4\pi\epsilon_0 r < 0 \quad (4)$$

Ou

$$e^2 / 4\pi\epsilon_0 r > E_I - AE \quad (5)$$

A condição prévia a descrita na equação (5) é quando:

$$e^2 / 4\pi\epsilon_0 r^* = E_I - AE \quad (6)$$

De modo que r^* representa a distância mínima necessária entre as espécies reagentes para que a transição eletrônica ocorra, ou seja:

$$r^* = e^2 / 4\pi\epsilon_0 (E_I - AE) \quad (7)$$

Portanto nós podemos identificar a área da secção transversal reativa para este caso como sendo

$\sigma^* = \pi r^{*2}$, de modo que podemos definir P como sendo:

$$P = \frac{\pi r^{*2}}{\pi d^2} = \frac{r^{*2}}{d^2} = \left(\frac{e^2}{4\mu\epsilon_0 d (E_I - AE)} \right)^2 \quad (8)$$

Utilizando os valores das constantes: carga do elétron $e = -1,602 \times 10^{-19}$ C; constante elétrica $\epsilon_0 = 8,845 \times 10^{-12}$ F m⁻¹; a semi-soma dos diâmetros iônicos do K e do Br₂ $d = 400$ pm (lembre-se da equação (9) da aula 8); a energia de ionização $E_I(K) = 420$ kJ mol⁻¹ (ou 7×10^{-19} J caso consideremos

para apenas um átomo); a afinidade eletrônica $AE(\text{Br}_2) = 250 \text{ kJ mol}^{-1}$ (ou $4,2 \times 10^{-19} \text{ J}$ caso consideremos para apenas uma única molécula) obtemos:

$$P = \left(\frac{e^2}{4\mu\epsilon_0 d(E_I - AE)} \right)^2 = 4,2$$

Que é um valor muito próximo do obtido experimentalmente, 4,8!
Agora você irá resolver um problema semelhante ao apresentado:

2. Exercício proposto

Estime o valor de P para o mecanismo do arpão envolvendo o Na e o Cl_2 , onde $d = 350 \text{ pm}$, $E_I(\text{Na}) = 458 \text{ kJ mol}^{-1}$; e $AE(\text{Cl}_2) = 230 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Os cálculos apresentados até agora mostram que o conceito de fator estérico não é completamente inútil, e em alguns casos seu valor pode ser estimado de maneira satisfatória. No entanto, em reações mais complexas o valor de P não pode ser obtido de maneira tão simples, exigindo uma teoria mais sofisticada, que é exatamente o que pretende a Teoria do Estado Estacionário.

Agora vamos ver um exemplo interessante para determinação da frequência de colisão z , e da densidade de colisão Z de um determinado gás, a partir de informações sobre a sua temperatura e pressão, bem como o seu respectivo diâmetro molecular.

3. Exercício resolvido

Calcule a frequência de colisão z , e a densidade de colisão Z , para a amônia à 25°C e 100kPa , considerando que: o raio da molécula $r = 190 \text{ pm}$ e que a massa atômica $m = 17 \text{ u}$. Qual é o aumento em percentual quando a temperatura é aumentada em 10 K à volume constante?

Resposta:

Antes de efetuar o cálculo para esta questão precisamos definir uma maneira de estabelecer uma relação entre \mathcal{N} e informações como pressão e temperatura do gás. Isto pode ser feito lembrando que \mathcal{N} é a densidade de moléculas por unidade de volume, isto é:

$$\mathcal{N} = \frac{N}{V} \quad (9)$$

Mas o número de moléculas pode ser definido como sendo nN_A , onde n é o número de mol e N_A é a constante de Avogadro, de modo que a equação (9) fica:

$$\mathcal{N} = \frac{nN_A}{V} = \frac{n}{V} N_A \quad (10)$$

Esta equação pode ser obtida diretamente a partir da equação (6) da aula 2.

Sabemos também que a partir da lei do gás ideal, $pV = nRT$, podemos escrever:

$$\frac{n}{V} = \frac{p}{RT} \quad (11)$$

Substituindo (11) em (10) obtemos:

$$\mathcal{N} = \frac{pN_A}{RT} = \frac{p}{kT} \quad (12)$$

Lembrando que a constante universal dos gases pode ser obtida a partir da equação $R = k N_A$, onde k é a constante de Boltzmann e N_A a constante de Avogadro.

Agora podemos definir a frequência de colisão z (eq. 8 da aula 8) como sendo:

$$z = \frac{\sigma \bar{c}_{rel} \rho}{kT} \quad (13)$$

Antes de determinar o valor de z devemos lembrar que:

σ pode ser calculado a partir da equação (10) da aula 8, lembrando que o diâmetro da molécula

$d = 2r$, onde r é o raio da molécula;

e que \bar{c}_{rel} pode ser calculado a partir da eq. (14) da aula 8, onde a massa reduzida $\mu = \frac{m}{2}$, visto que temos apenas colisões envolvendo moléculas de amônia.

Portanto, $z = 6,64 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$. Este é um número muito grande e nos dá a noção de quantas vezes uma molécula de amônia colide por segundo!

Para o cálculo de Z podemos empregar a equação (12) porém com uma pequena modificação. Como estamos nos referindo a Z envolvendo apenas um tipo de molécula A, a equação (12) se torna:

$$Z_{AA} = \frac{1}{2} z N_A = \frac{1}{2} z \frac{p}{kT} \quad (14)$$

Lembrando dos seguintes detalhes: o fator $\frac{1}{2}$ foi introduzido para que as colisões entre as moléculas A entre si não sejam contadas duplamente, já que não é possível diferenciar colisões A-A entre si; N_A pode ser calculado a partir da equação (9) desta aula, e que por sua vez está relacionada com a equação (12) também desta aula. Portanto a partir dos valores dados do problema obtemos $Z_{AA} = 8,07 \times 10^{34} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$.

Sobre a última questão, se a temperatura for aumentada de 10 K, como $Z_{AA} \propto (T)^{1/2}$ podemos definir a relação entre Z_{AA} para $T = 308$ K e $T = 298$ K, isto é, antes do aumento:

Portanto:

$$\frac{Z_{AA}(308)}{Z_{AA}(298)} = \frac{(308)^{1/2}}{(298)^{1/2}} = 1,016$$

Isto é equivalente a dizer que o aumento foi de 1,6 %. Você pode verificar isso simplesmente considerando que em $T = 298$ K o valor de Z_{AA} pode ser representado por 1 e após o aumento, $T = 308$ K, por 1,016. Por isso a razão obtida vale 1,016. Fazendo os cálculos em percentual, esta diferença representa apenas:

$$(1,016 - 1) \times 100 = 1,6 \%$$

Este é o motivo que nos permite concluir que o motivo pelo qual grandes variações de velocidade de reação não se devem a fatores de colisão mas sim a variações de maior magnitude no fator energético, cuja dependência com T é exponencial.

Antes de concluir este exercício, existe outro aspecto importante relacionado à primeira parte da questão. O cálculo da frequência de colisão nos permite avaliar também qual o tempo médio que a molécula gasta entre uma colisão e outra. Observe agora que interessante, se nós temos como avaliar este tempo, bem como a velocidade média relativa da molécula, nós temos como avaliar, portanto a distância média percorrida pela molécula entre cada colisão, denominada caminho livre médio λ . Utilizando estas relações apresentadas e também a equação (15) da aula 8, $\bar{c}_{rel} = 2^{1/2}\bar{c}$, nós podemos definir λ como sendo:

$$\lambda = \frac{kT}{2^{1/2}\sigma p} \quad (14)$$

A partir destas informações você consegue determinar qual o caminho livre médio para a amônia à 25 °C e a 100 kPa?

Após determinar o valor de λ para a pergunta acima, responda o seguinte exercício:

3. Exercício proposto

Calcule a frequência de colisão z , e a densidade de colisão Z , para o monóxido de carbono à 25 °C e 100kPa, considerando que: o raio da

molécula $r = 180 \text{ pm}$ e que a massa atômica $m = 28 \text{ u}$. Qual é o aumento em percentual quando a temperatura é aumentada em 10 K à volume constante?

Antes de realizar um cálculo geral para determinação da constante de velocidade de reação k , vamos avaliar um aspecto interessante que diz respeito à influência da magnitude da energia de ativação no equilíbrio químico K . Primeiro vamos definir uma relação entre a constante de equilíbrio K e as constante de velocidade de reação direta k , e reversa k' , para uma reação química do tipo $A + B \rightarrow C + D$. No equilíbrio sabemos que a velocidade de reação direta é igual a velocidade de reação reversa, de modo que :

$$v = k[A][B] \quad (15)$$

e

$$v = k'[C][D] \quad (16)$$

Combinado as equações (15) e (16) obtemos uma relação entre a Lei de Ação das Massas e as constantes de velocidade direta e reversa de uma determinada reação química:

$$K = \frac{[C][D]}{[A][B]} = \frac{k}{k'} \quad (17)$$

Deste modo, levando em consideração a Lei de Arrhenius sob a forma , nós podemos concluir que em uma reação endotérmica, por exemplo, cujo valor de energia de ativação é maior para a reação direta, apresentará uma dependência mais forte do valor de k , com o aumento da temperatura, de modo que a razão k / k' será maior do que 1 o que implica em dizer que a reação será favorecida na direção dos produtos. Isso está em perfeito acordo com o Princípio de Le Chatelier. Observe a figura 1 e tente realizar o mesmo raciocínio, só que agora para a reação reversa. Tente também responder as seguintes perguntas:

- Como reações exotérmicas e endotérmicas reagem quando no aumento de temperatura?
- Como isso está relacionado com o Princípio de Le Chatelier?

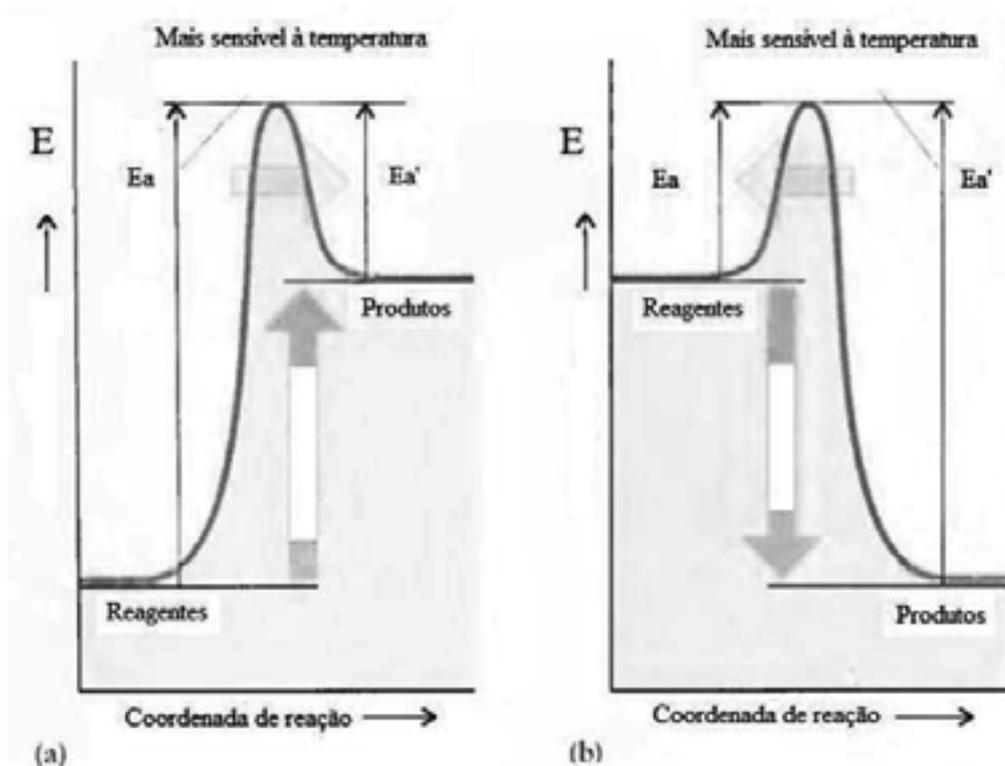


Figura 1: Diagrama esquemático de perfil de reação para dois casos: a) reação endotérmica; b) reação exotérmica.

Adaptado de: ATKINS, P. W.; JONES, L. L.; Chemistry Principles, 4ed., Freeman, 2008.

Agora tente realizar o exercício proposto 4 envolvendo todos estes fatores da Teoria da colisão para a determinação do valor da constante de velocidade.

4. Exercício proposto

Determine k_2 para a reação de segunda ordem $D_{2(g)} + Br_{2(g)} \rightarrow 2DBr_{(g)}$ à 450 K., considerando que ela seja bimolecular. Dados: $\sigma = 0,30 \text{ nm}^2$; $\mu = 3,90 \text{ u}$; e a energia de ativação de 200 kJ mol^{-1} .

Utilizando a equação (24) da aula 8, e considerando que $P = 1$, determinamos que:

$$k_2 = 1,71 \times 10^{-15} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}.$$

Agora que já vimos vários exemplos relacionados com a Teoria da Colisão, vamos partir para alguns exemplos relacionados com a Teoria do Estado de Transição. Posteriormente você responderá algumas questões relacionadas com a última parte da aula 8 sobre Simulação Computacional.

TEORIA DO ESTADO DE TRANSIÇÃO

A Teoria do Estado de Transição teve como objetivo original explicar o comportamento observado em uma determinada reação, permitindo estimar o valor da constante de velocidade. No entanto, a dificuldade em descrever a superfície de potencial pela qual algumas reações se processam, e deste modo poder identificar a configuração do complexo ativado fez com que esta teoria encontrasse algumas dificuldades. Porém, os conceitos introduzidos por esta teoria permitiu estabelecer relações importantes entre os processos de ativação e funções termodinâmicas. Nesta parte da aula iremos realizar alguns cálculos com o objetivo de determinar parâmetros cinéticos da reação a partir de dados termodinâmicos e vice-versa.

Vamos começar esta parte da aula com o seguinte exercício:

4. Exercício resolvido

A reação $A^- + H^+ \rightarrow P$ possui a seguinte lei empírica $k_2 = (8,72 \times 10^{12})e^{-(6134K)/T} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Determine a entalpia e a entropia de ativação à 25 °C.

Resposta:

Observando a lei empírica podemos concluir que o valor de $A = 8,72 \times 10^{12} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ e que $E_a/R = 6134K$. Como a reação ocorre em solução o valor de $\Delta H^\ddagger = E_a - RT$ (eq. 16 aula 9), portanto:

$$\Delta H^\ddagger = E_a - RT = (8,31 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1})(6134K) - (8,31 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1})(298K) = 48,52 \text{ kJ mol}^{-1}.$$

O cálculo de ΔS^\ddagger pode ser feito a partir da combinação da equação (15) da aula 9 com a equação da Lei de Arrhenius, ou seja, $k_2 = Ae^{-E_a/RT}$. Comparando estas equações após substituir o valor de E_a conforme a equação $\Delta H^\ddagger = E_a - RT$, podemos definir a seguinte relação:

$$\Delta S^\ddagger = R \left(\ln \frac{A}{B} - 1 \right) \quad (18)$$

Onde A é o fator pré-exponencial $A = 8,72 \times 10^{12} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$, e $B = \frac{kT}{h p}$.

Lembre-se que no cálculo de B as constantes são: T a temperatura absoluta; R a constante dos gases; k a constante de Boltzmann; p° a pressão no estado padrão, neste caso $1 \times 10^5 \text{ Pa}$; e h a constante de Planck $6,626 \times 10^{-34} \text{ J s}^{-1}$.

Realizando estes cálculos você deve encontrar $B = 1,54 \times 10^{11} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Com este valor de B substituindo na equação (18) obtemos $\Delta S^\ddagger = -32,2 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

Agora tente resolver as questões seguintes:

5. Exercício proposto

Uma determinada reação possui a seguinte lei empírica $k_2 = (6,45 \times 10^{13})e^{-(5375K)/T}$ $\text{dm}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$. Determine a energia livre de ativação à 25 °C.

Dica: Equação (10) aula 9; considere $\kappa = 1$.

Exercício proposto 6:

Uma reação de recombinação em fase gasosa é de primeira ordem em relação a cada um de seus reagentes. Considerando $E_a = 49,6 \text{ kJ mol}^{-1}$ e a constante de velocidade $k = 0,23 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ à 55 °C determine a entropia de ativação à 55 °C.

Dica: Neste caso, como a reação é em fase gasosa, $\Delta H^\ddagger = E_a - 2RT$ (eq. 14 aula 9), de modo que ΔS^\ddagger é dada pela equação:

$$\Delta S^\ddagger = R \left(\ln \frac{A}{B} - 2 \right) \quad (19)$$

Onde A e B tem os mesmos significados discutidos no exercício resolvido 4.

7. Exercício proposto

Para a reação em fase gasosa de decomposição unimolecular do ozônio o valor de $A = 2,3 \times 10^{13} \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ e $E_a = 30,0 \text{ kJ mol}^{-1}$. Determine os valores de ΔH^\ddagger , ΔS^\ddagger e ΔG^\ddagger à 298 K.

Dica: Embora esta reação seja em fase gasosa, por ser unimolecular, ΔS^\ddagger e ΔH^\ddagger devem ser calculados conforme o procedimento usado no exercício resolvido 4 (reação em solução).

Agora que nós já discutimos alguns aspectos importantes sobre a Teoria do Estado Estacionário, vamos agora finalizar a aula com algumas questões sobre Simulação Computacional.

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Na aula 9 vimos que as abordagens da Dinâmica molecular e dos Métodos de Monte Carlo são diferentes embora permitam avaliar corretamente o comportamento de reações químicas.

Baseado no que você aprendeu na aula 9 sobre Simulação Computacional, tente responder as seguintes questões:

1. O que possibilitou o avanço dos métodos computacionais ao longo das últimas décadas?
2. Como você poderia explicar as diferenças básicas entre a Dinâmica molecular e o Método de Monte Carlo.

CONCLUSÃO

Nesta aula pudemos avaliar em termos práticos as aplicações de cada teoria apresentada para o estudo cinético de reações, mostrando as particularidades de cada uma. A Teoria de colisão nos permitiu além de avaliar os fatores de frequência de colisão, estérico e energético, apresentar o conceito de caminho livre médio. A Teoria do Estado de Transição nos permitiu extrair informações termodinâmicas úteis ao entendimento do processo de ativação. Sobre a Simulação computacional, você foi motivado a buscar as diferenças básicas entre dois importantes métodos computacionais, e uma das causas que permitiram a evolução desta área tão importante.

RESUMO

Nesta aula de exercício você aprendeu os procedimentos necessários para determinação dos fatores que contribuem para o cálculo da velocidade de uma reação química e de sua constante de velocidade, ou seja, os fatores: estérico, energético e de frequência de colisões entre as espécies. Já na Teoria do estado Estacionário foi mostrada a importância da teoria na determinação de funções termodinâmicas no processo de ativação tais como: variação da energia livre de Gibbs ΔG^\ddagger , de entalpia ΔH^\ddagger e de entropia ΔS^\ddagger . Além disso, vimos que as abordagens da Dinâmica molecular e dos Métodos de Monte Carlo são diferentes embora permitam avaliar corretamente o comportamento de reações químicas.

PRÓXIMA AULA

Caro aluno, após esta enxurrada de conhecimento, nós iremos finalmente iniciar nosso trabalho de laboratório. Na próxima aula iremos nos deparar com um exemplo de obtenção de parâmetros cinéticos a partir de dados experimentais.

REFERÊNCIAS

- ATKINS, P. W.; Físico-Química, vol. 1, 8ed., Editora LTC, São Paulo, 2008.
CASTELLAN, G.; Fundamentos de físico-química, Editora LTC, São Paulo, 1972.
MOORE, W. J.; Físico-química, vol 1, Editora Edgar Blucher, São Paulo, 1976.

