

Cenni di cinetica chimica

Termodinamica → si occupa della stabilità relativa tra reagenti e prodotti in una reazione chimica

Cinetica chimica → si occupa dello studio della velocità con cui avviene una reazione chimica.

In particolare gli studi cinetici riguardano:

- ✓ la dipendenza della velocità di reazione da fattori sperimentali
- ✓ la sequenza dei processi chimici o fisici attraverso cui ha luogo la conversione tra reagenti e prodotti.

La velocità di reazione dipende da:

- Natura dei reagenti
- Concentrazione dei reagenti
- Temperatura di reazione
- Presenza di eventuali catalizzatori
- Superficie dell'interfaccia (se la reazione avviene tra reagenti in due fasi diverse)

Consideriamo la seguente reazione chimica:



La velocità media di formazione del prodotto P è data dall'aumento della concentrazione del prodotto nell'unità di tempo:

$$\text{velocità} = \frac{\Delta[P]}{\Delta t} = \frac{[P]_2 - [P]_1}{t_2 - t_1}$$

Chiaramente la formazione di P avviene contemporaneamente al consumo di A:

$$\text{velocità} = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{[A]_2 - [A]_1}{t_2 - t_1}$$

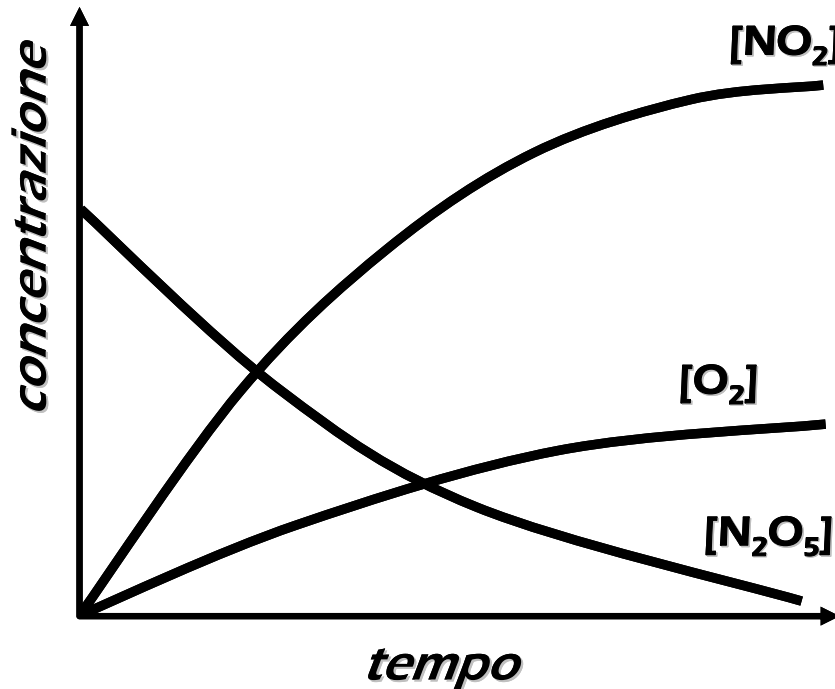
Si definisce velocità di reazione l'aumento della concentrazione dei prodotti o la diminuzione della concentrazione dei reagenti nell'unità di tempo:

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

In generale quando sono presenti coefficienti stechiometrici bisogna tenerne conto. Consideriamo ad esempio la reazione:



$$v = \frac{\Delta[\text{O}_2]}{\Delta t} = \frac{1}{4} \frac{\Delta[\text{NO}_2]}{\Delta t} = -\frac{1}{2} \frac{\Delta[\text{N}_2\text{O}_5]}{\Delta t}$$



Dipendenza della velocità di reazione dalla concentrazione

Sperimentalmente si trova che la velocità di una reazione chimica dipende dalla concentrazione dei reagenti.

Tale dipendenza è espressa dall' equazione cinetica

$$v = k [\text{Reag 1}]^a \cdot [\text{Reag 2}]^b$$

Gli esponenti a e b sono in genere (ma non sempre) numeri interi e vanno determinati sperimentalmente.

La costante **k** è chiamata **costante di velocità** o **costante cinetica** e dipende solo dalla natura dei reagenti e dalla temperatura.

Teorie delle reazioni chimiche

Le reazioni chimiche possono essere descritte a livello molecolare mediante due teorie:

- la teoria delle collisioni**
- la teoria dello stato di transizione.**

Esse permettono di interpretare diversi aspetti della cinetica chimica e soprattutto di spiegare la variazione della velocità di reazione dalla temperatura.

Teoria delle collisioni

Affinchè reazione chimica abbia luogo è necessario che le molecole dei reagenti vengano in contatto.

Le molecole devono quindi urtarsi:

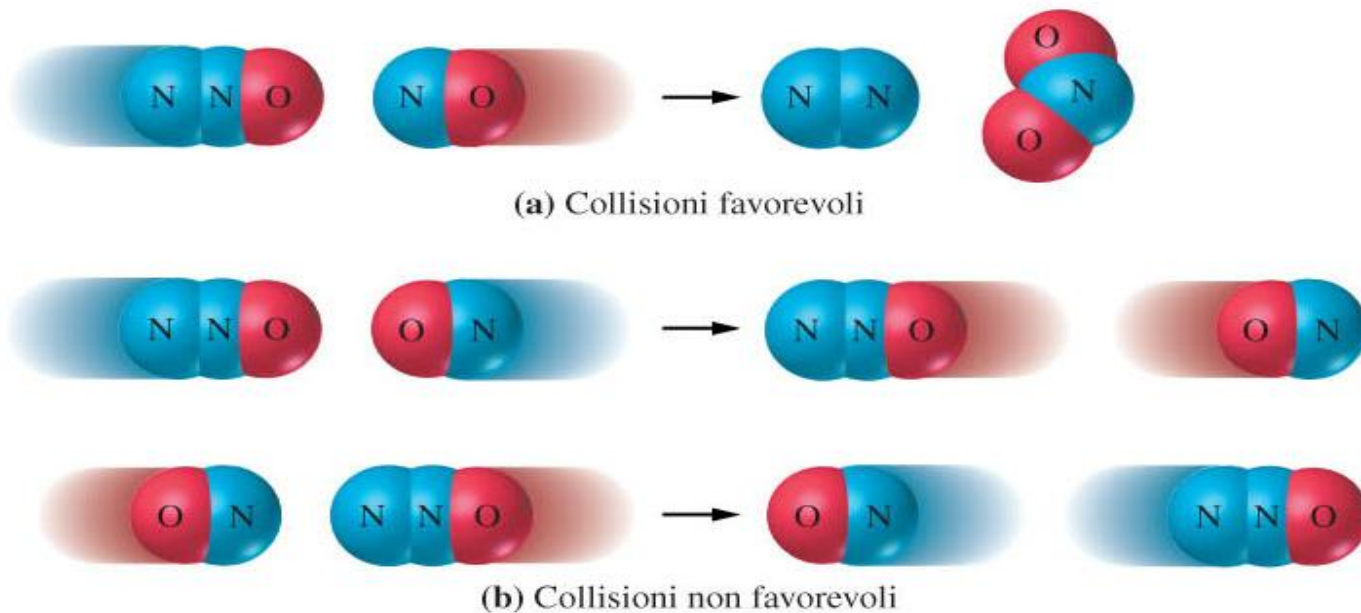
**con un energia sufficiente e con un'opportuna orientazione
(URTO EFFICACE)**

L'energia minima richiesto affinché l'urto dia luogo alla reazione chimica è detta **energia di attivazione, E_a , e dipende dalla particolare reazione considerata.**

Un altro fattore che influenza la velocità della reazione chimica è l'**orientazione** delle molecole nel momento della loro collisione. Ad esempio se consideriamo la reazione:



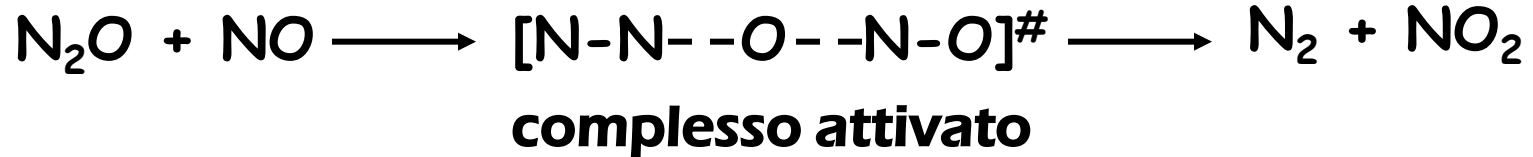
possiamo immaginare sia il risultato di un urto tra una molecola di N_2O e una di NO con energia maggiore di E_a e la giusta orientazione.



Teoria dello stato di transizione

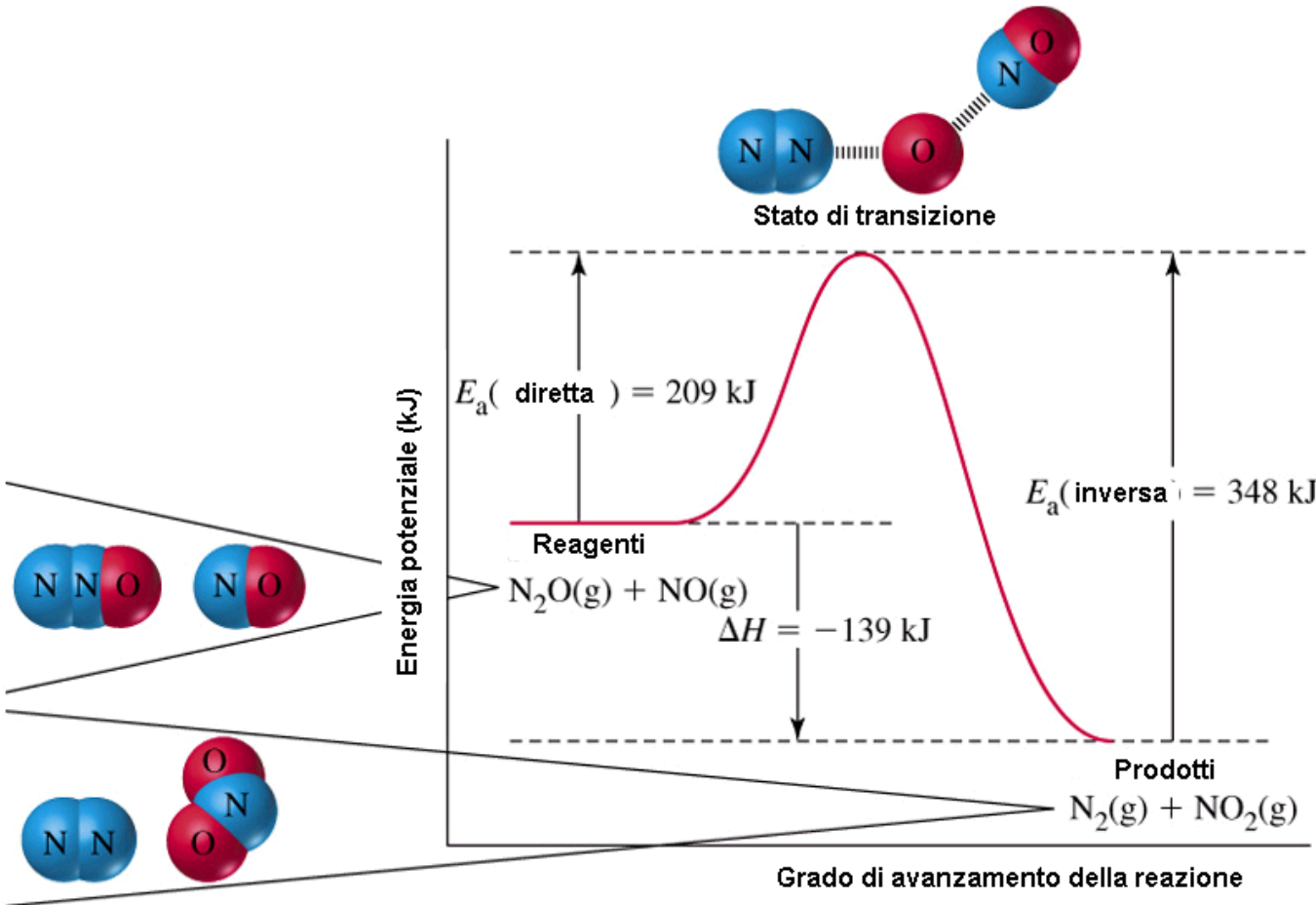
La teoria dello stato di transizione assume che in seguito alla collisione tra le molecole reagenti si formi una specie instabile detta **complesso attivato** che in seguito si rompe per formare i prodotti.

Nel caso della reazione tra N_2O e NO ciò può essere rappresentato come:



Quando le molecole di reagente si avvicinano comincia a formarsi il legame O-N, prima che il legame N-O si rompa del tutto. Lo stato di transizione corrisponde ad una specie instabile in cui il legame N-O in N_2O si è indebolito ma non ancora rotto e il legame O-N del prodotto NO_2 si inizia a formare ma non è ancora completo.

Dal punto di vista energetico questo corrisponde ad una situazione in cui l'energia cinetica della collisione viene assorbita dal complesso attivato e si concentra nei legami che si devono rompere o formare. Se un'energia sufficiente si accumula in uno dei due legami, questo si rompe.



Catalisi

Chiamiamo catalizzatore una sostanza che aumenta la velocità di una data reazione chimica senza entrare a far parte della reazione complessiva e quindi senza subire trasformazioni.

In generale un catalizzatore non prende parte alla reazione, ma cambia l'energia dello stato di transizione.

