

ZANICHELLI

Valitutti, Falasca, Tifi, Gentile

Chimica

concetti e modelli.blu

ZANICHELLI

Capitolo 20

La velocità di reazione

ZANICHELLI

Sommario

1. Che cos'è la velocità di reazione
2. L'equazione cinetica
3. Gli altri fattori che influiscono sulla velocità di reazione
4. La teoria degli urti
5. L'energia di attivazione
6. Il meccanismo di reazione

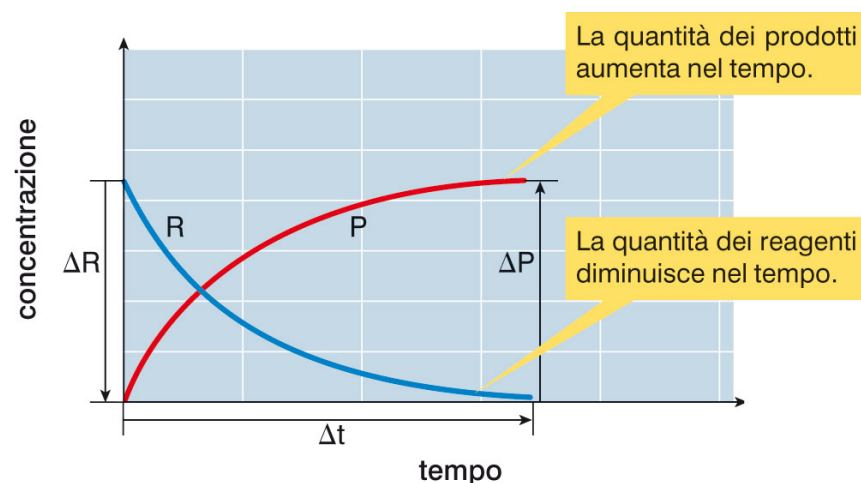
Che cos'è la velocità di reazione (I)

Lo studio di tutti gli aspetti relativi alla velocità delle trasformazioni chimiche è affrontato dalla **cinetica chimica**.



Che cos'è la velocità di reazione (II)

La **velocità di reazione** è la variazione della concentrazione dei reagenti $\Delta[R]$, o dei prodotti $[\Delta P]$, nell'intervallo di tempo Δt .



La velocità di reazione è una grandezza intensiva e quindi non dipende dalla massa del sistema.

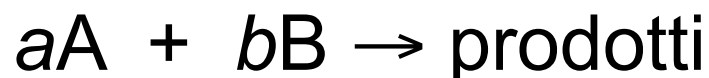
L'equazione cinetica (I)

Sperimentalmente si è potuto stabilire che la velocità della maggior parte delle reazioni chimiche dipende dalla concentrazione dei reagenti.

L'equazione cinetica è una relazione matematica che lega la velocità v di una data reazione alla concentrazione molare dei reagenti.

L'equazione cinetica (II)

Data la reazione



la velocità della reazione si calcola con la relazione

$$v = k \cdot [A]^n \cdot [B]^m$$

con k = **costante specifica di velocità**
(dipende dalla temperatura).

Gli esponenti n ed m sono numeri interi,
sperimentali e **non** corrispondono ai coefficienti
stechiometrici dei reagenti.

L'equazione cinetica (III)

L'**ordine della reazione** è determinato dalla somma degli esponenti delle concentrazioni dei reagenti che compaiono nell'equazione cinetica.

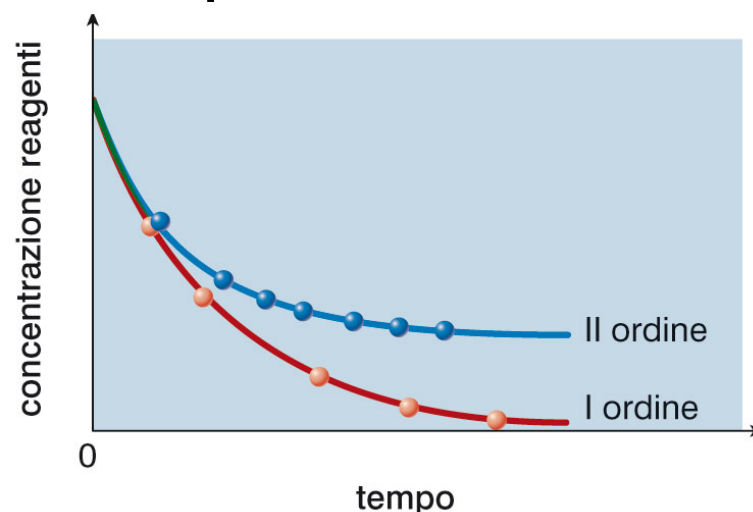
In generale, le reazioni di ordine superiore al secondo sono rare, mentre esistono reazioni di **ordine zero** in cui la velocità è indipendente dalla concentrazione del reagente e l'equazione cinetica è:

$$v = k$$

L'equazione cinetica (IV)

Nelle reazioni di **primo ordine** la velocità è direttamente proporzionale alla concentrazione del reagente.

Nelle reazioni di **secondo ordine** la velocità è direttamente proporzionale al quadrato della concentrazione del reagente, cosicché decresce nel tempo meno rapidamente.



Gli altri fattori che influiscono sulla velocità di reazione (I)

La velocità di una reazione dipende da:

- la natura dei reagenti;
- la temperatura;
- la superficie di contatto fra i reagenti;
- la presenza di catalizzatori.

Gli altri fattori che influiscono sulla velocità di reazione (II)

La **natura dei reagenti** influisce sulla velocità di reazione nella misura in cui ogni sostanza ha una peculiare attitudine a trasformarsi in virtù delle proprietà chimiche e fisiche.

Un aumento di **temperatura** aumenta la velocità di una trasformazione chimica.

Gli altri fattori che influiscono sulla velocità di reazione (III)

Quando i reagenti non sono nello stesso stato di aggregazione, reagiscono tanto più velocemente quanto più **è estesa** la loro **superficie di contatto**.



Gli altri fattori che influiscono sulla velocità di reazione (IV)

I **catalizzatori** sono sostanze che accelerano una reazione chimica senza entrarne a far parte e quindi senza consumarsi durante la reazione.

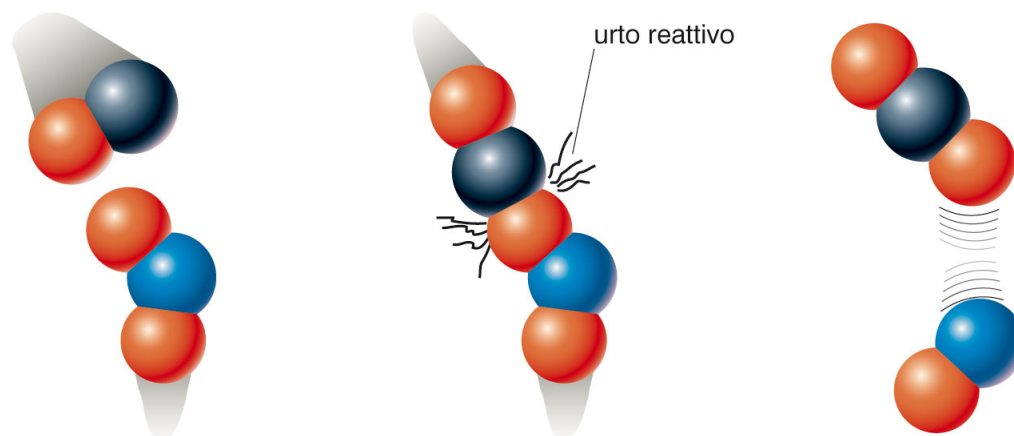
I catalizzatori sono sostanze altamente specifiche che accelerano soltanto un tipo di reazione.

I catalizzatori biologici sono gli **enzimi**, sostanze di natura proteica che rappresentano la classe a massima specificità.

La teoria degli urti (I)

La modalità principale per cui avvengono le trasformazioni chimiche viene spiegata attraverso la **teoria degli urti**.

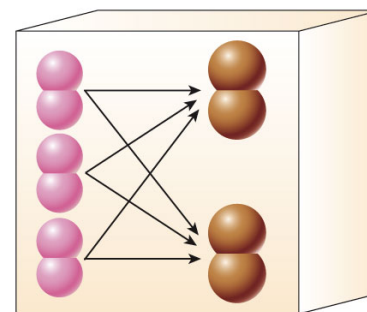
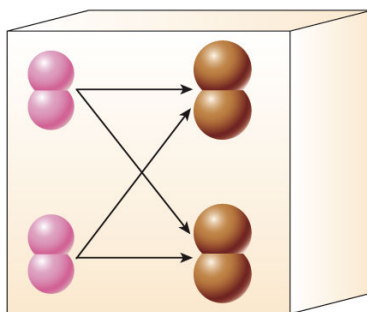
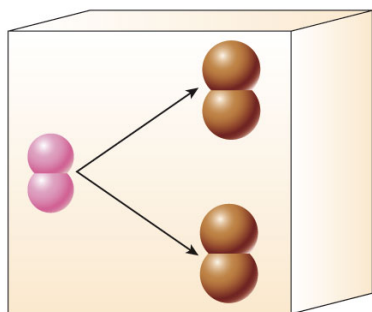
Le molecole dei reagenti possono scambiarsi gli atomi e dare luogo ai prodotti solo se, urtandosi, vengono in reciproco contatto.



ZANICHELLI

La teoria degli urti (II)

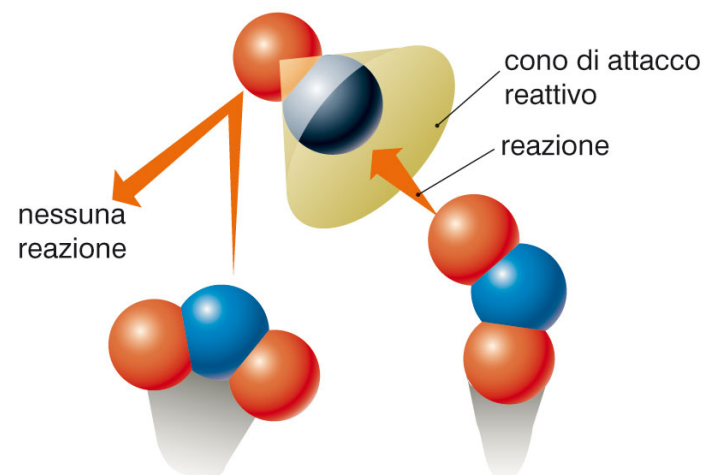
La teoria degli urti spiega quindi l'effetto della concentrazione sulla velocità di reazione: maggiore è la concentrazione, più possibilità hanno le molecole di urtarsi e quindi maggiori sono le probabilità che la reazione avvenga.



La teoria degli urti (III)

Gli **urti efficaci** hanno:

- un'orientazione appropriata;
- energia sufficiente per dare luogo alla trasformazione.



Gli urti efficaci rappresentano una piccola quantità rispetto agli urti totali.

La teoria degli urti (IV)

Una reazione chimica può avvenire

- se il numero di urti è abbastanza elevato,
 - se questi avvengono con l'orientamento corretto
 - e se l'energia è sufficiente a portare gli atomi alla distanza di legame.

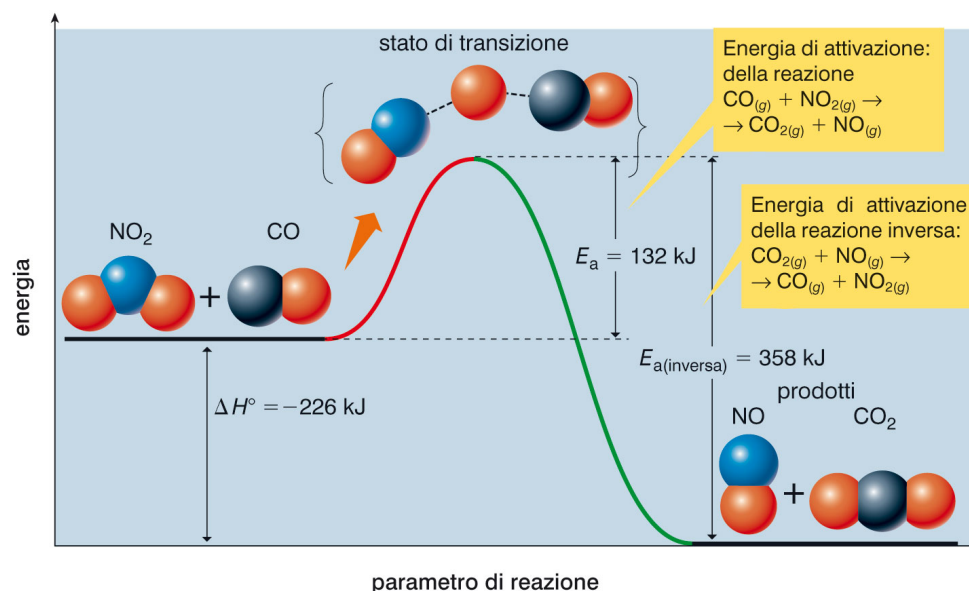
L'energia di attivazione (I)

Le molecole possono reagire in seguito a uno specifico aumento della loro energia potenziale che prende il nome di **energia di attivazione**.

L'energia di attivazione è l'energia minima che occorre ai reagenti per rompere alcuni dei loro legami e per iniziare una reazione.

L'energia di attivazione (II)

Lo **stato di transizione** è la fase della reazione in cui si stanno rompendo i legami dei reagenti e sono in via di formazione i legami tra le molecole dei prodotti, con la formazione di un composto intermedio detto **complesso attivato**.



L'energia di attivazione (III)

Il dislivello energetico tra i reagenti e i prodotti corrisponde alla variazione di entalpia ΔH .

L'esistenza dell'energia di attivazione spiega l'influenza della temperatura sulla velocità di reazione.

All'aumentare della temperatura, aumenta il contenuto energetico delle molecole, ovvero aumenta il numero degli urti efficaci rendendo più veloce la trasformazione.

L'energia di attivazione (IV)

L'equazione di Arrhenius è la relazione matematica che mette in relazione velocità di reazione e temperatura:

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

k = costante cinetica specifica

T = temperatura assoluta

E_a = energia di attivazione

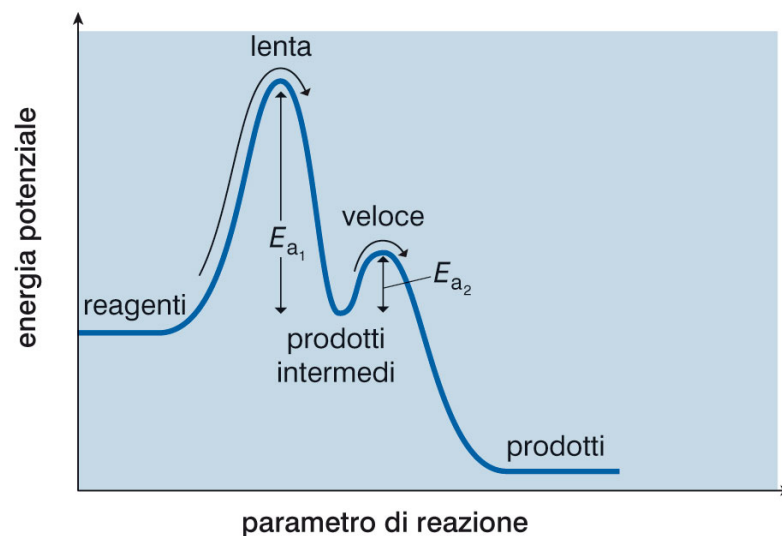
A = costante specifica di reazione

R = costante universale dei gas

Il meccanismo di reazione (I)

Il **meccanismo di una reazione** è la successione degli stadi, o reazioni elementari, attraverso cui i reagenti si trasformano in prodotti.

Lo stadio più lento (**stadio limitante**) determina la velocità dell'intero processo e la sua equazione cinetica.



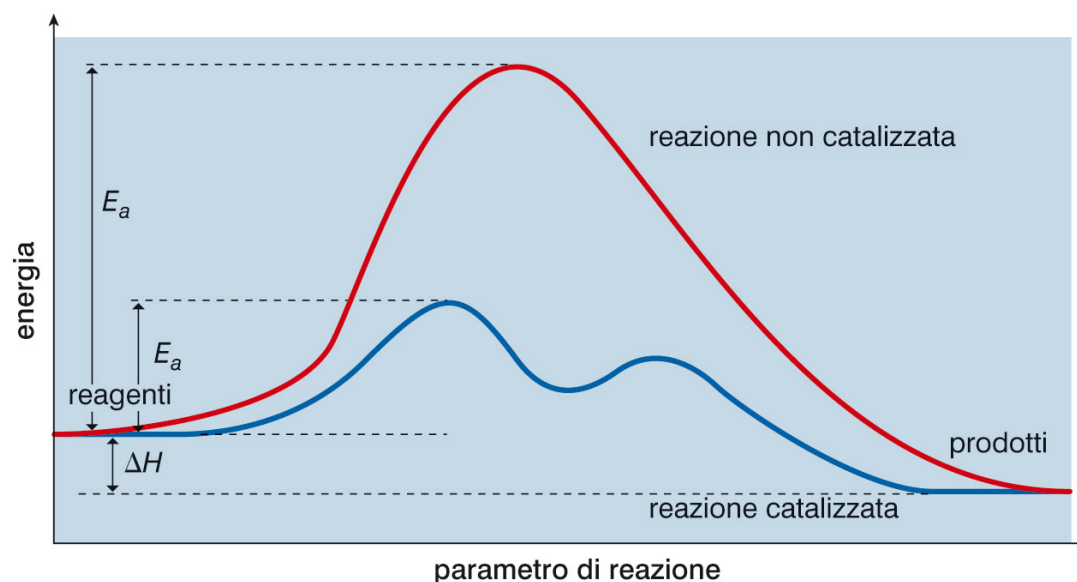
Il meccanismo di reazione (II)

La **molecolarità di una reazione elementare** indica il numero di molecole reagenti che vi partecipano.

Sono più frequenti le reazioni monomolecolari e dimolecolari rispetto alle trimolecolari, che risultano rare per la scarsa probabilità che tre molecole si urtino contemporaneamente e in modo efficace.

Il meccanismo di reazione (III)

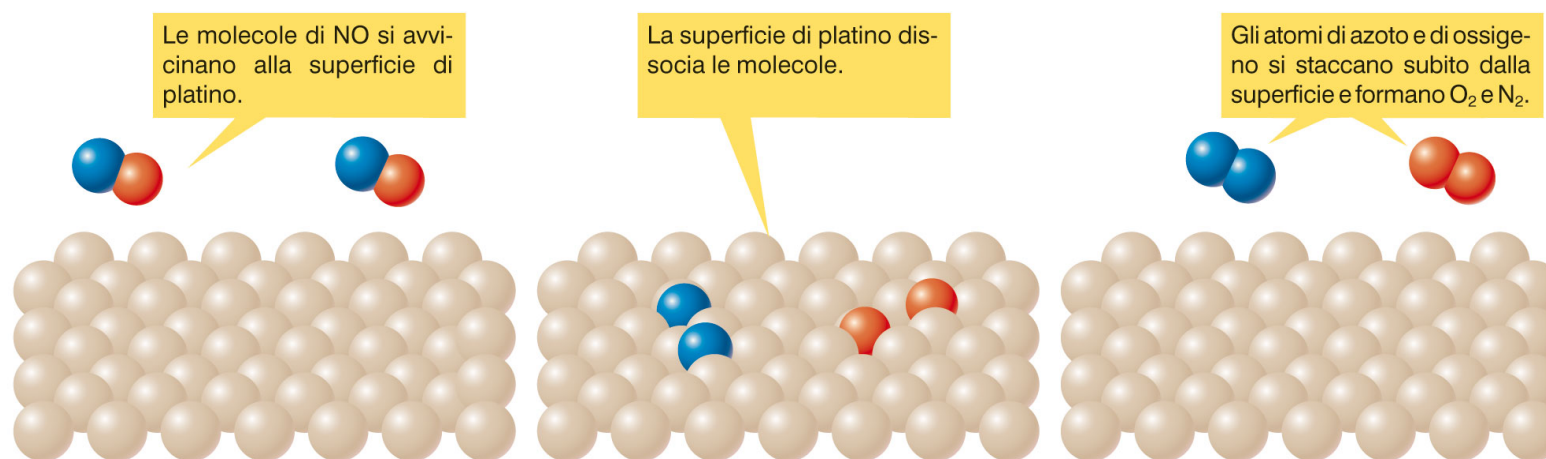
Un catalizzatore accelera una reazione perché ne abbassa il contenuto di energia di attivazione rispetto al percorso non catalizzato.



Il meccanismo di reazione (IV)

I catalizzatori possono essere:

- **omogenei** se nella stessa fase dei reagenti e dei prodotti;
- **eterogenei** se in una fase diversa dei reagenti e dei prodotti.



ZANICHELLI