

Energia de ativação

Luís Spencer Lima

Faculdade de Ciências da Universidade do Porto

CITAÇÃO

Lima, L. S. (2015)

Energia de ativação,

Rev. Ciência Elem., V3(02):035.

doi.org/10.24927/rce2015.035

EDITOR

José Ferreira Gomes,

Universidade do Porto

RECEBIDO EM

06 de março de 2010

ACEITE EM

06 de fevereiro de 2011

PUBLICADO EM

15 de junho de 2015

COPYRIGHT

© Casa das Ciências 2015.

Este artigo é de acesso livre, distribuído sob licença Creative Commons com a designação [CC-BY-NC-SA 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/), que permite a utilização e a partilha para fins não comerciais, desde que citado o autor e a fonte original do artigo.

rce.casadasciencias.org



Designa-se por energia de ativação (símbolo E_a) a energia mínima necessária para que as espécies reagentes iniciem uma reação química. Alternativamente, e de acordo com a teoria do estado de transição, a energia de ativação corresponde à diferença de energia entre os reagentes e o complexo ativado, que é uma estrutura intermediária na conversão de reagentes e produtos e que corresponde ao ponto de energia potencial máxima ao longo da coordenada reacional.

O conceito de energia de ativação foi introduzido em 1889 pelo físico e químico sueco Svante Arrhenius no âmbito dos seus estudos em cinética química. É um parâmetro com uma forte influência na velocidade das reações, pois quanto maior for a energia de ativação, mais lenta é a reação (para uma dada temperatura). A equação que traduz a variação da velocidade específica (k) com a temperatura absoluta (T) e a energia de ativação é a denominada equação de Arrhenius.

$$K = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Nesta equação, R representa a constante dos gases e A designa-se por fator pré-exponencial ou fator de frequência, estando relacionado com a frequência de colisões entre moléculas de reagentes e com a sua orientação. Tem as mesmas unidades que k . Apesar do seu nome, esta equação foi proposta pela primeira vez em 1884 pelo químico holandês Jacobus van't Hoff. No entanto, foi Arrhenius quem apresentou uma explicação física e a interpretou. Arrhenius alegou que, para os reagentes se transformarem em produtos, era necessário que os primeiros adquirissem uma quantidade de energia mínima, a energia de ativação (E_a). Para uma dada temperatura, a fração de moléculas que têm uma energia cinética superior a E_a pode ser calculada através da distribuição de Maxwell-Boltzmann ou através da mecânica estatística.

Esta equação é muito importante no campo da cinética, pois permite a determinação da energia de ativação de uma reação após a determinação da velocidade específica a várias temperaturas. A logaritmização da equação (1) resulta na seguinte equação

$$\ln K = -\frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T} + \ln A$$

Assim, verificando-se a equação de Arrhenius, a representação gráfica de $\ln(k)$ em função de $1/T$ é numa linha reta com declive igual a $-E_a/R$ e ordenada na origem igual a $\ln(A)$.

Uma das formas mais importantes de acelerar uma reação química é através da adição de um catalisador. Ao contrário do que é muitas vezes afirmado, o catalisador não diminui

a energia de ativação da reação não catalisada. O que acontece é que o catalisador fornece um caminho alternativo para os reagentes se converterem em produtos, através de uma sequência de passos que envolvem uma energia de ativação consideravelmente menor, o que faz com que a reação ocorra mais rapidamente (ver FIGURA 1).

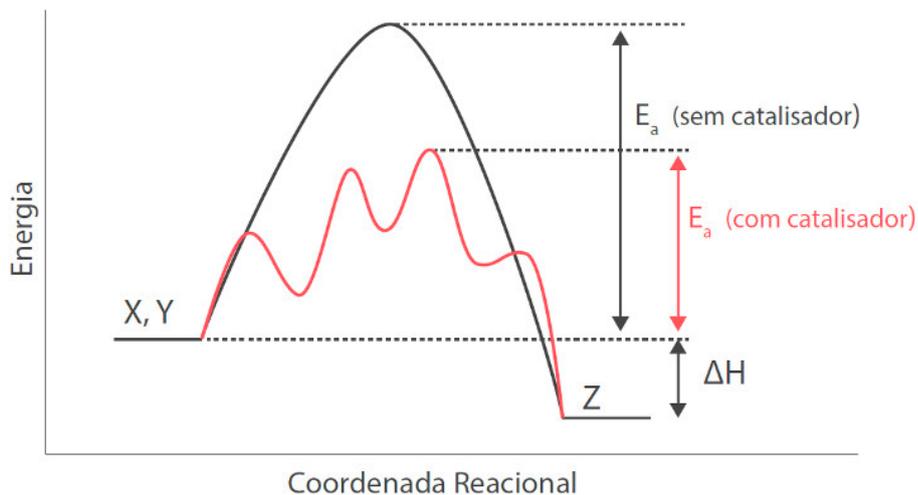


FIGURA 1. Comparação dos valores de energia de ativação de uma reação química hipotética $X + Y \rightarrow Z$ com e sem catalisador.

A nível biológico, as reações associadas ao metabolismo são aceleradas por ação de catalisadores especiais denominados enzimas, cujos mecanismos de reação envolvem uma energia de ativação muito inferior à da reação não catalisada.