

Chemické reakce

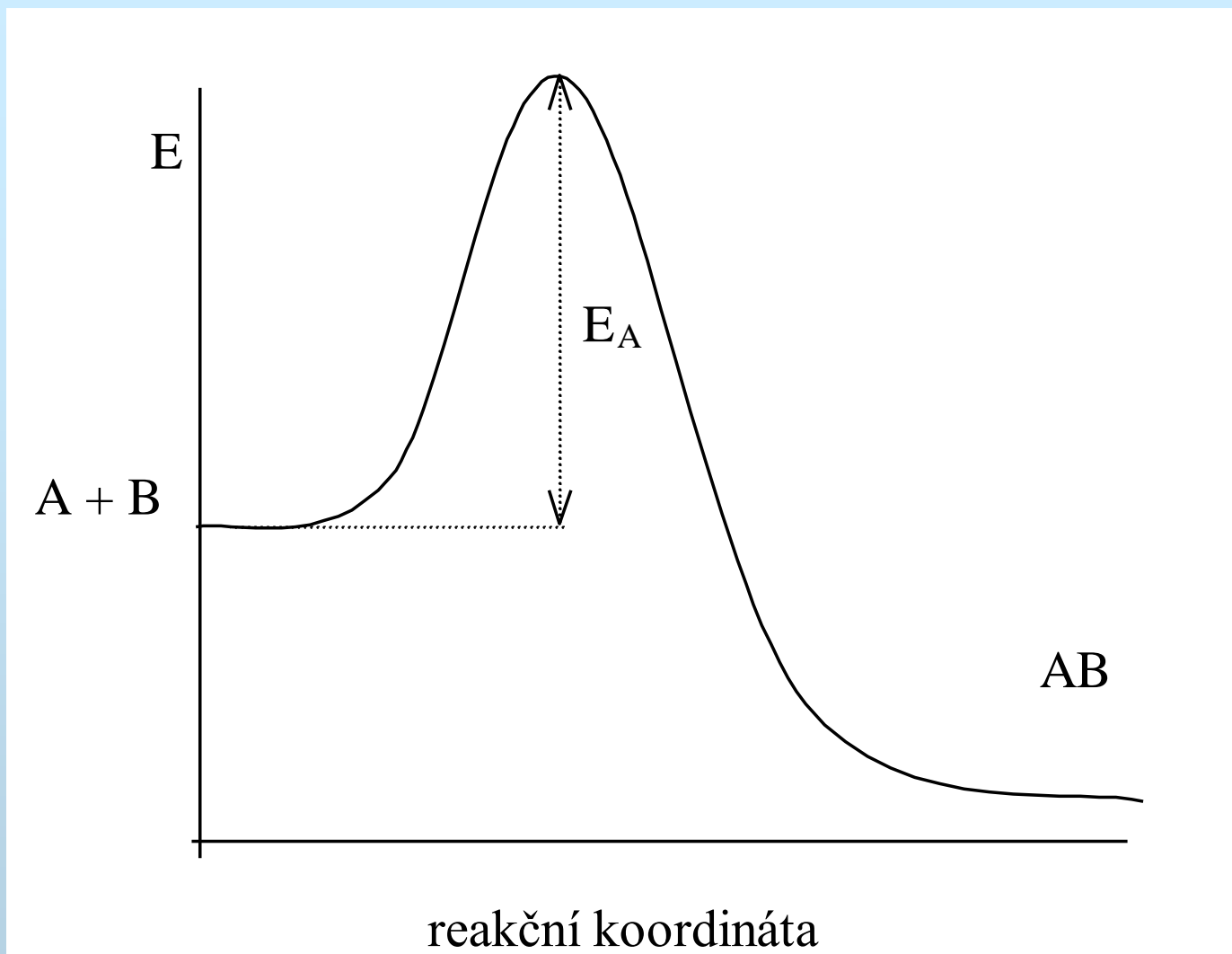
Chemická reakce je děj, při kterém se výchozí látky mění na jiné látky zánikem původních a vznikem nových vazeb

Každá změna ve vazebných poměrech je spojena se změnou energie systému (spotřebování resp. uvolňování energie v různých formách)

- **Reakční mechanismus**
dílčí kroky, kterými se
změny uskutečňují
- **Chemická (reakční) kinetika**
- **Chemická termodynamika**

Reakční kinetika

Dvě molekuly mohou zreagovat jen tehdy, mají-li při vzájemné srážce dostatečnou kinetickou energii.



E_A aktivační energie

Faktory ovlivňující rychlost chemických reakcí

Vliv koncentrace složek

Guldberg – Waageův zákon

rychlost reakce pro reakci



$$v = k \cdot [A]^a \cdot [B]^b$$

Faktory ovlivňující rychlost chemických reakcí

Vliv teploty

Při zvýšení teploty o 10 °C se rychlost reakce zvyšuje dvoj- až čtyřnásobně.

Arrheniova rovnice

$$k = A \cdot e^{-E_A/RT}$$

k rychlostní konstanta

E_A aktivační energie příslušné reakce

R plynová konstanta

T absolutní teplota

A předexponenciální faktor (konstanta)

Katalýza a katalyzátory

Katalyzátor

- nevyskytuje se v souhrnné rovnici reakce
- výrazně ovlivňuje rychlost reakce
- vede reakci jiným reakčním mechanismem

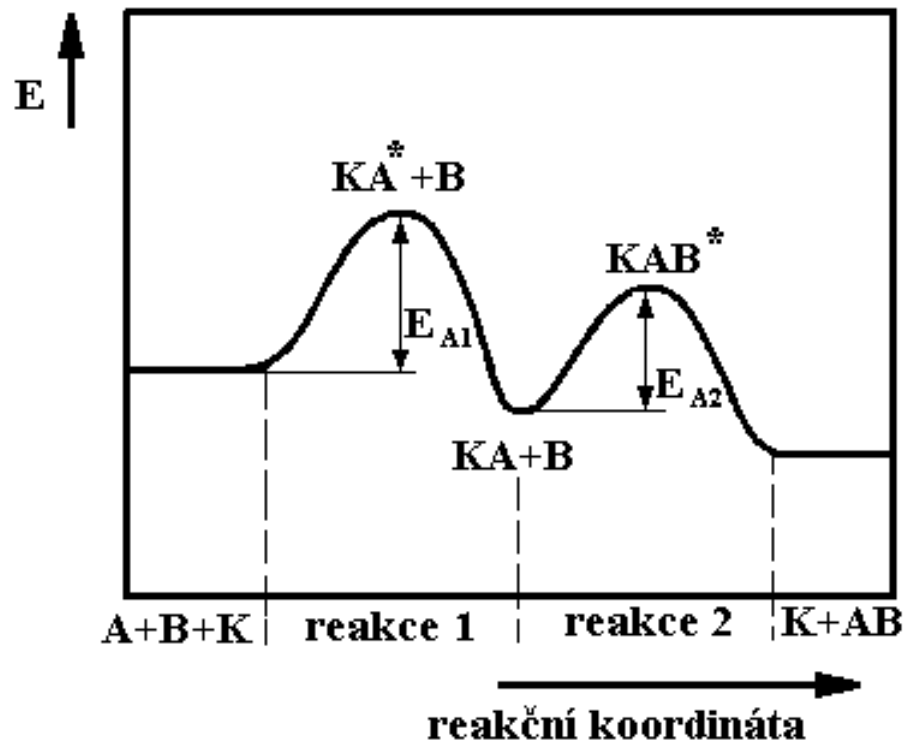
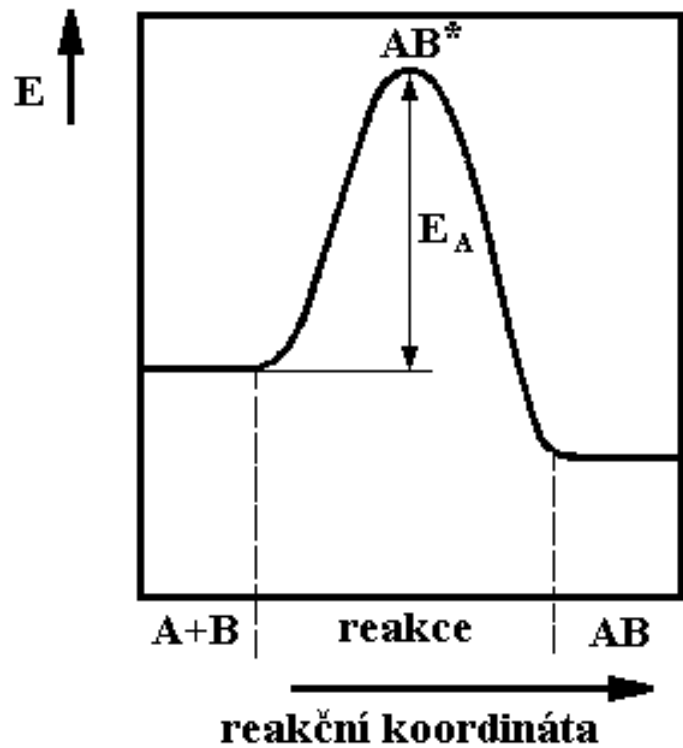
Průběh reakce

Obecný průběh reakce



Průběh reakce s katalyzátorem





Katalyzátory

- **homogenní a heterogenní**
- **nespecifické a specifické (enzymy)**
- **inhibitory (negativní katalyzátory)**

stabilizátory k potlačování korozních pochodů nebo samovolného rozkladu chemikálií

Celkový energetický efekt reakce se vlivem katalyzátoru nezmění

Termodynamika chemických reakcí

Chemická termodynamika se zabývá především energetickou bilancí chemických dějů, jejich uskutečnitelností a rovnováhami, které se v průběhu dějů ustavují.

Termochemie

Termochemie je část termodynamiky, která se kvantitativně zabývá tepelnými jevy, které provází chemické reakce i řadu dalších dějů (skupenské přeměny, rozpouštění látek).

Reakční teplo

množství tepla, které systém při reakci vymění s okolím

I. věta termodynamická

Je to v podstatě zákon zachování energie, aplikovaný na termodynamické děje.

$$\Delta U = Q + W$$

Vzrůst vnitřní energie systému je při jakémkoliv ději roven součtu tepla a práce, které systém při tomto ději z okolí přijal.

Entalpie H

$$\Delta U = Q - p \cdot \Delta V$$

za stálého tlaku izobarický děj

$p = \text{konst.}$

$$Q_p = \Delta H$$

$$\Delta H = \Delta U + p \cdot \Delta V$$

Změna entalpie (ΔH) při reakci

Reakce exotermické ($\Delta H < 0$)

Reakce endotermické ($\Delta H > 0$)

Termodynamické děje

Vždy nutno uvést rovnici příslušného chemického děje včetně označení skupenského stavu

s - solidus, pevná látka (+ modifikace)

l - liquidus, kapalina

g - gaseus, plyn

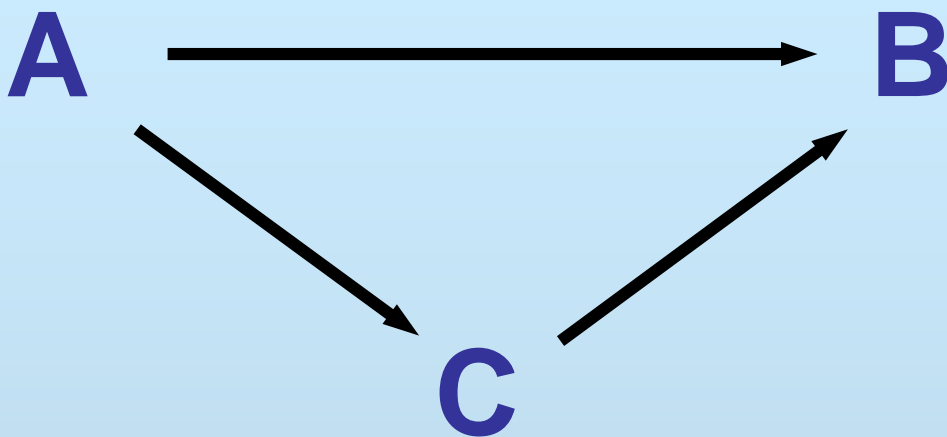
I. termochemický zákon

Reakční teplo dané reakce a reakční teplo téže reakce, probíhající za stejných podmínek opačným směrem, je až na znaménko stejné:

$$\Delta H_{(A \rightarrow B)} = - \Delta H_{(B \rightarrow A)}$$

II. termochemický zákon

Reakční teplo závisí pouze na počátečním a konečném stavu soustavy a nikoliv na cestě, po které ke změně došlo, což znamená, že reakční teplo dané reakce je součtem reakčních tepel postupně prováděných reakcí, vycházejících ze stejných výchozích látek a končících stejnými produkty.

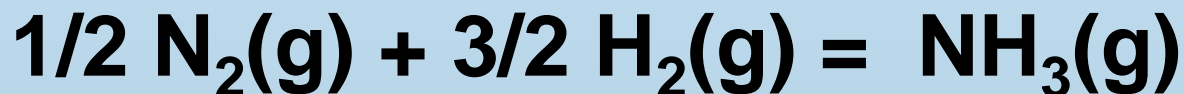


$$\Delta H_{(A \rightarrow B)} = \Delta H_{(A \rightarrow C)} + \Delta H_{(C \rightarrow B)}$$

Slučovací teplo sloučeniny

reakční teplo reakce, při níž vznikne 1 mol této sloučeniny přímo z prvků

slučovací teplo amoniaku

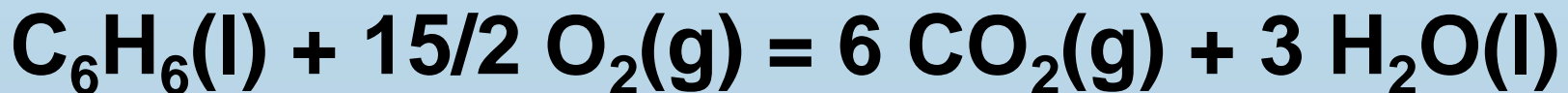


$$(\Delta H^0_{298})_{\text{sluč}} = -46 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

Spalné teplo sloučeniny

reakční teplo reakce, při níž se 1 mol dané látky zoxiduje na nejstálejší oxidy (v případě organických látek CO_2 a H_2O)

spalné teplo benzenu



$$(\Delta H^0_{298})_{\text{spal}} = -3300 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

Hodnoty slučovacích a spalných tepel tabelovány

Výpočet standardního reakčního tepla jakékoliv reakce

$$\begin{aligned}\Delta H^0_{298} &= \sum v \cdot (\Delta H^0_{298})_{\text{sluč}} \text{ produktů} - \\ &\quad \sum v \cdot (\Delta H^0_{298})_{\text{sluč}} \text{ výchozích látek} = \\ &= \sum v \cdot (\Delta H^0_{298})_{\text{spal}} \text{ výchozích látek} - \\ &\quad \sum v \cdot (\Delta H^0_{298})_{\text{spal}} \text{ produktů}\end{aligned}$$

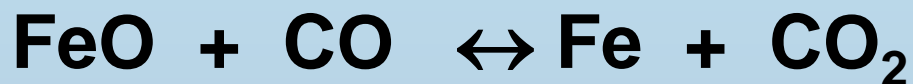
v stechiometrické koeficienty
v chemické rovnici

Chemická rovnováha

Reakce jednosměrná

spálení uhlovodíku v přebytku kyslíku na oxid uhličitý a vodu

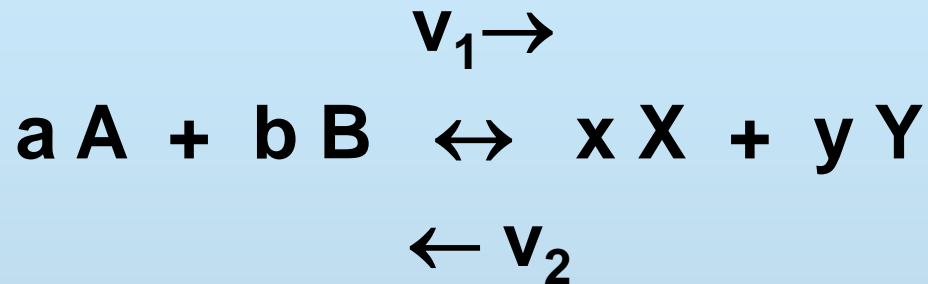
Reakce zvratná



míru zreagování určují vedle rovnovážné konstanty teplota, povaha reakce, složení reakční soustavy a (někdy) tlak

Dynamická rovnováha

V rovnováze je rychlost zvratných reakcí stejná



$$v_1 = k_1 \cdot c_A^a \cdot c_B^b$$

$$v_2 = k_2 \cdot c_X^x \cdot c_Y^y$$

c_i okamžité koncentrace jednotlivých složek

k_1 a k_2 příslušné rychlostní konstanty

Rovnovážný stav

$$V_1 = V_2$$

$$k_1 \cdot [A]^a \cdot [B]^b = k_2 \cdot [X]^x \cdot [Y]^y$$

úpravou dostáváme Guldberg-Waageův zákon chemické rovnováhy

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{[X]^x \cdot [Y]^y}{[A]^a \cdot [B]^b} = K_c$$

Vliv reakčních podmínek na stupeň konverze

Le Chatelierův princip pohyblivé rovnováhy

(princip akce a reakce)

Působí-li na soustavu v rovnováze nějaký vnější vliv (změna teploty, tlaku, koncentrace), začnou v soustavě probíhat reakce, vedoucí k takovému posunutí rovnováhy, aby se účinek vnějšího zásahu snížil.

Vliv teploty

Při zvýšení teploty dojde k posunu rovnováhy ve směru endotermického děje a naopak při snížení teploty ve směru exotermického děje.