

6. Chemické reakce

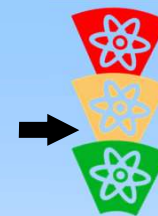


VYNALEZLI JSME ČISTÝ ZDROJ ENERGIE!

Jakub Wiener



Chemické reakce



Chemická reakce = vznik nových molekul

Co spolu bude reagovat ?

Jak reakci ovlivnit ?

Co bude produktem reakce ?

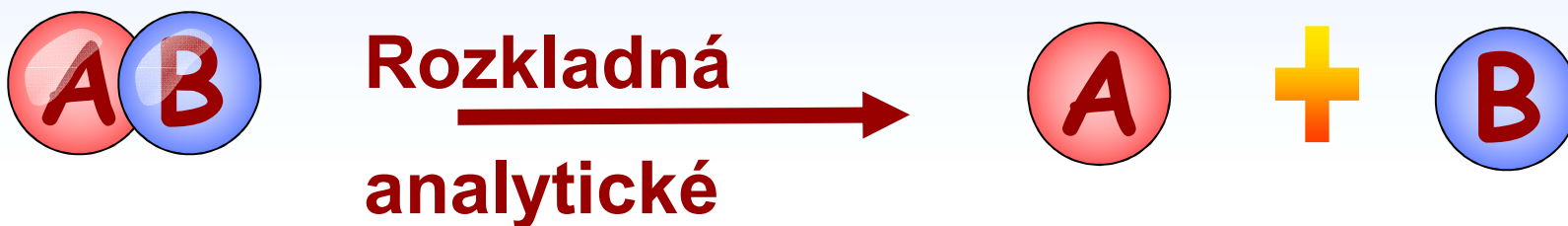
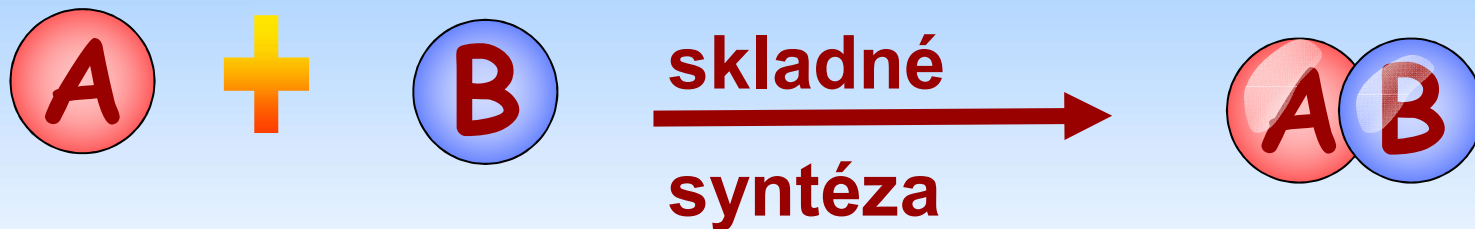
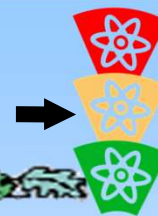
Uvolní se při reakci teplo ?

Jak rychle reakce poběží ?





Typy chemických reakcí



Typy chemických reakcí

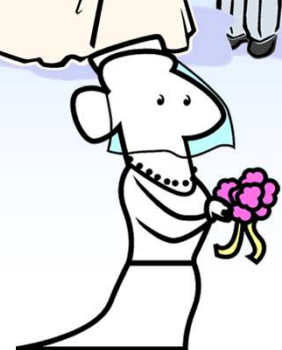


+

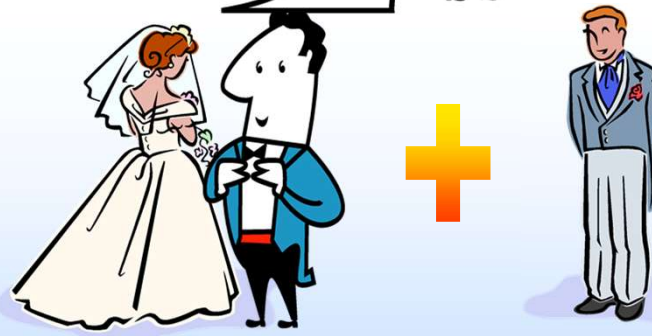
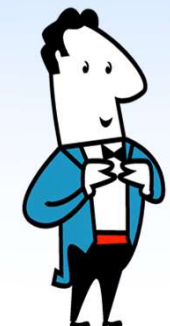
**skladné
syntéza**



**Rozkladná
Analytické**

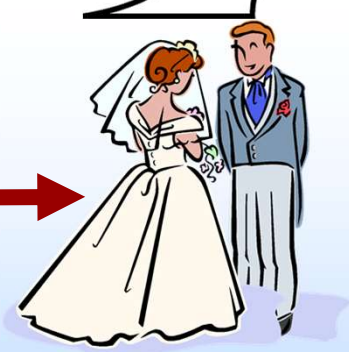


+

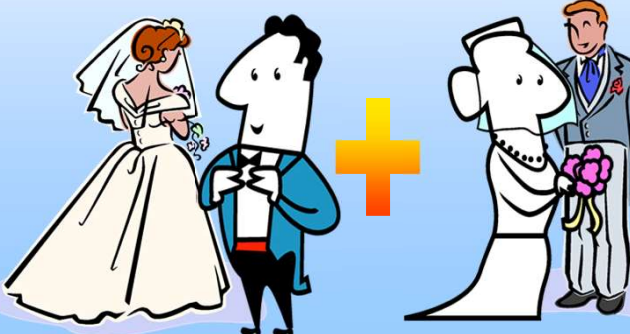
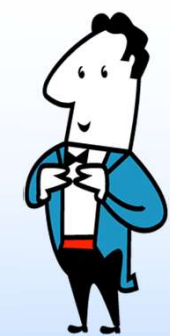


+

**Nahrazení
substituce**



+

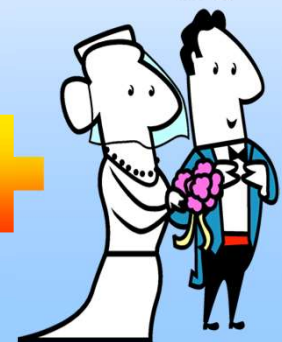


+

**dvojité nahrazení
konverze**

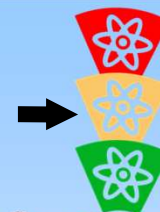


+

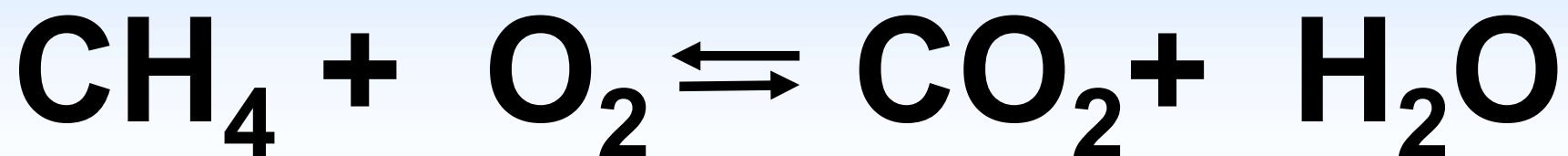




Chemické rovnice

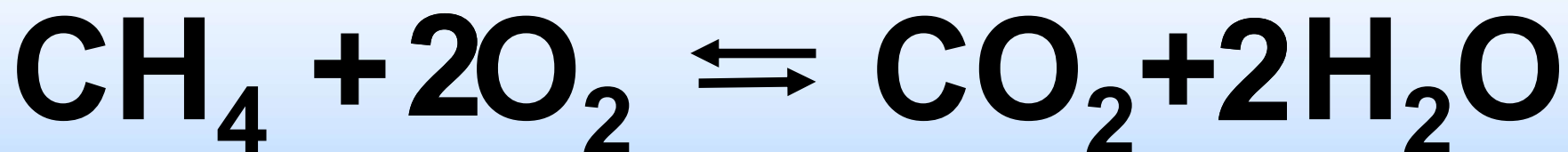


Metan + kyslík reagují za vzniku oxidu uhličitého a vody



Proč to není správně?

Protože výchozí látky a produkty mají jiné množství prvků !



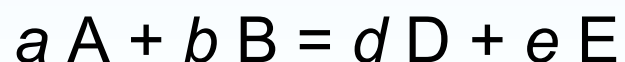
Stechiometrie: chemikálie reagují v určitých poměrech (např. 2:1) při vyjádření v počtu částic / v molech



Rovnovážný stav chem. reakce →



Vratné chemické reakce probíhají oběma směry. V uzavřeném systému se v nich tvoří rovnováha mezi reagujícími a produkovánými látkami dle **Guldberg-Waageova zákona**. Rovnováhu reakce:



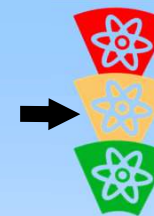
Ize vyjádřit takto:

$$\frac{c(D)^d \cdot c(E)^e}{c(A)^a \cdot c(B)^b} = K$$

kde A,B,C,D jsou látky vstupující do reakce, resp. reakcí produkováné, a, b, d, e jsou čísla, vyjadřující počet reagujících částic. Rovnovážná konstanta K vyjadřuje rovnováhu látkových koncentrací reagujících a produkováných látek. Výše uvedený zákon lze uplatnit i při vyjádření disociačních rovnovah.



Rovnováha a kinetika chem. reakce



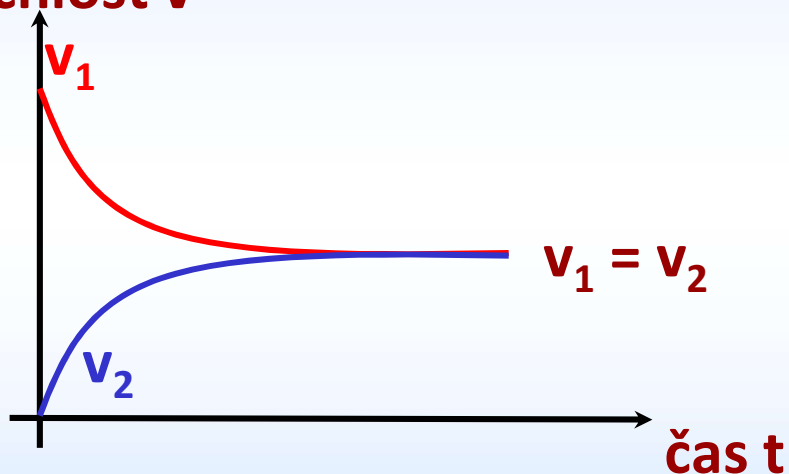
Reaktanty,

výchozí látky
 $aA + bB$



produkty
 $cC + dD$

Rychlost v



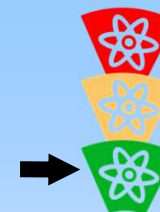
Soustava dospěje do
dynamické rovnováhy

Rychlost reakce je:

časový úbytek molární koncentrace některého z reaktantů, nebo
časový přírůstek molární koncentrace některého z produktů,
dělených jeho stechiometrickým koeficientem.

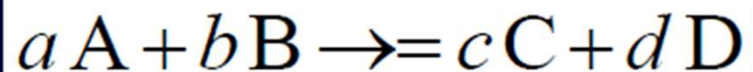


Chemické reakce Kinetika



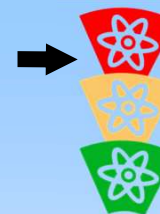
- reakční rychlost – okamžitá rychlost
- časový úbytek látkového množství reaktantu, přírůstek látkového množství produktu dělený příslušným stechiometrickým faktorem
- pro reakce **za konstantního objemu (např. v roztocích)**
časová změna koncentrace

$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt}$$

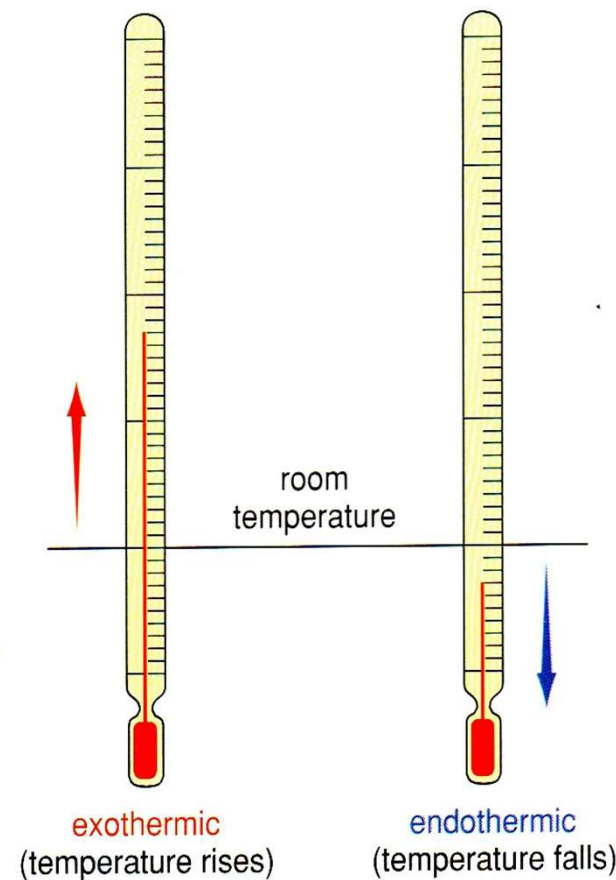
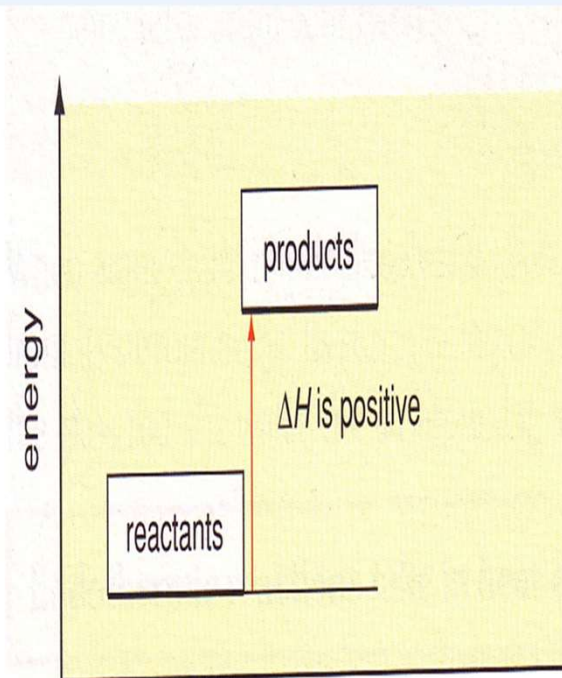
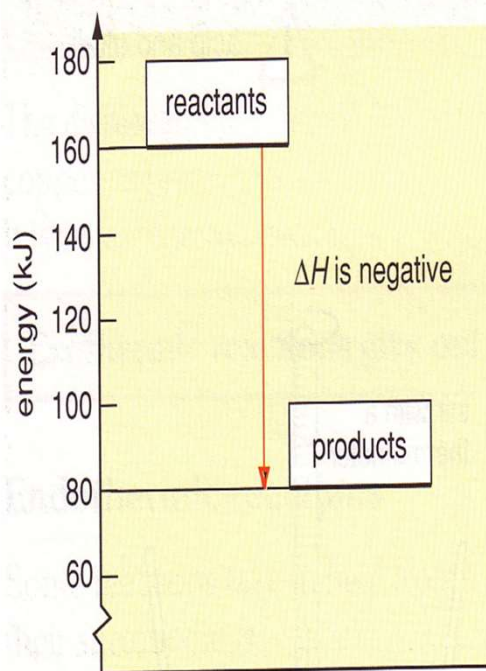




Tepelné zabarvení reakce



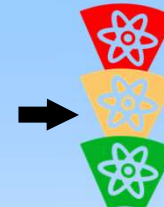
Změny enthalpie ΔH ('delta H')
vyjadřuje tepelné zabarvení reakce



Při exotermní reakci se teplo uvolňuje, při endotermní se spotřebovává – zvýšením teploty se potlačuje exotermní reakce



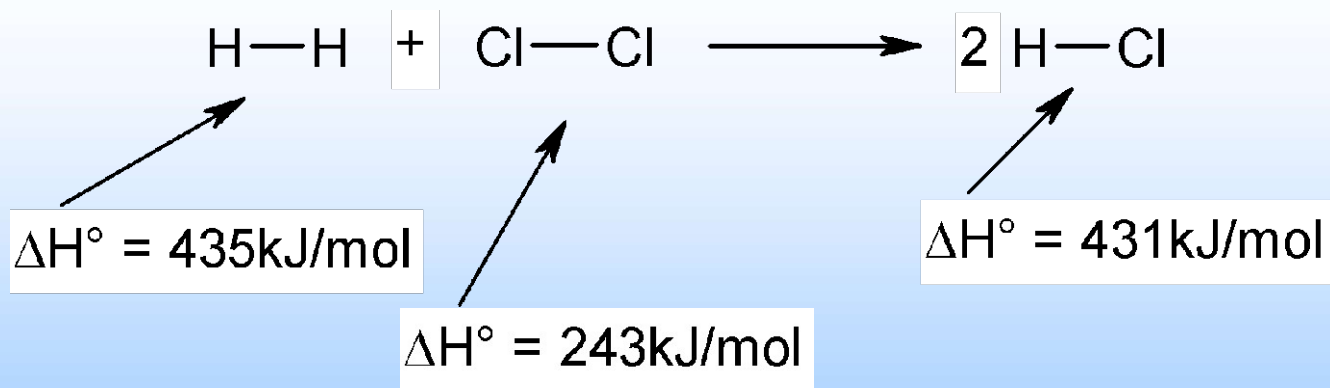
Pevnost chemické vazby



molární vazebné energie lze použít pro výpočet energetické bilance chemické reakce

Pro danou reakci pak lze vypočítat reakční teplo ΔH°

$$\Delta H^\circ = - \sum H^\circ_{\text{vznikající}} + \sum \Delta H^\circ_{\text{zanikající}}$$



$$\Delta H^\circ = -(2 * 431) + 243 + 435 = -184 \text{kJ/mol}$$



Pevnost vazby

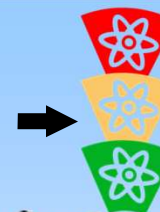


molární vazebná energie

vazba	ΔH° (kJ/mol)	vazba	ΔH° (kJ/mol)
H—H	435	(CH ₃) ₂ CH—H	395
D—D	444	(CH ₃) ₂ CH—F	439
F—F	159	(CH ₃) ₂ CH—Cl	339
Cl—Cl	243	(CH ₃) ₂ CH—Br	285
Br—Br	192	(CH ₃) ₂ CH—I	222
I—I	151	(CH ₃) ₂ CH—OH	385
H—F	569	(CH ₃) ₂ CH—OCH ₃	337
H—Cl	431	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ —H	410
H—Br	366	(CH ₃) ₃ C—H	381
H—I	297	(CH ₃) ₃ C—Cl	328
CH ₃ —H	435	(CH ₃) ₃ C—Br	264
CH ₃ —F	452	(CH ₃) ₃ C—I	207
CH ₃ —Cl	349	(CH ₃) ₃ C—OH	379
CH ₃ —Br	293	(CH ₃) ₃ C—OCH ₃	326
CH ₃ —I	234	C ₆ H ₅ CH ₂ —H	356
CH ₃ —OH	383	CH ₂ =CHCH ₂ —H	356
CH ₃ —OCH ₃	335	CH ₂ =CH—H	452
CH ₃ CH ₂ —H	410	C ₆ H ₅ —H	460
CH ₃ CH ₂ —F	444	HC≡C—H	523
CH ₃ CH ₂ —Cl	341	CH ₃ —CH ₃	368



Termodynamika – uskutečnitelnost reakce



Problém uskutečnitelnosti pro zmíněné **izotermicko – izobarické podmínky** byl vyřešen v roce 1875, kdy **J. W. Gibbs** odvodil **Gibbsovu energii (G)**. Ta je definována takto:

$$G = H - TS$$

úbytek Gibbsovy energie ΔG systému za konstantního tlaku a teploty, je roven maximální práci, kterou může systém odevzdat do okolí

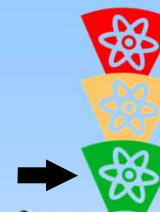
$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad \Delta G < 0 \quad \dots \text{samovolný děj}$$

Δ enthalpie H (teplo reakce z energií vazeb před a po reakci),
termodynamická teplota T (ve stupních K)

Δ entropie S (změna míra neuspořádanosti systému, nutno stanovit experimentálně)



Termodynamika – uskutečnitelnost reakce



PŘÍKLAD:

máte děj endotermický ($\Delta H > 0$, $\Delta H = 1200 \text{ kJ.mol}^{-1}$), změna entropie je taktéž kladná $\Delta S > 0$, $\Delta S = 3,5 \text{ kJ.mol}^{-1}$.

Při 20°C:

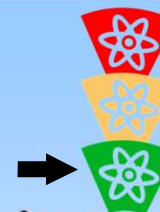
$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S = 1200 \text{ kJ.mol}^{-1} - 298,15 \text{ K} \cdot 3,5 \text{ kJ.K}^{-1}.\text{mol}^{-1} \\ = \underline{156,475 \text{ kJ.mol}^{-1}} \text{ neběží samovolně (reakce neproběhne)}$$

při 80°C

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S = 1200 \text{ kJ.mol}^{-1} - 353,15 \text{ K} \cdot 3,5 \text{ kJ.K}^{-1}.\text{mol}^{-1} = \\ \underline{-36,025 \text{ kJ.mol}^{-1}} \text{ běží samovolně (reakce proběhne)}$$



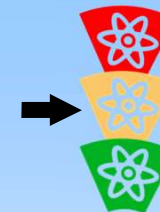
Termodynamika – uskutečnitelnost reakce



ΔH	ΔS	ΔG	průběh reakce / děje
+	-	+	vždy nesamovolný
-	+	-	samovolný
+	+	+ nebo -	samovolný pouze za podmínky: $\Delta H < T \Delta S$
-	-	+ nebo -	samovolný pouze za podmínky: $\Delta H > T \Delta S$
$\Delta H = T \Delta S$		$\Delta G = 0$	system je v rovnováze



Princip AKCE a REAKCE (La Chatelier)

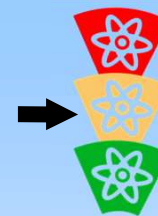


Akce		Reakce
Přidání výchozí látky	→	Zvýšení koncentrace produktu
Zvýšení tlaku (u plynů)	→	Zvýšení koncentrace ve směru menšího počtu plynných částic
Snížení tlaku (u plynů)	→	Zvýšení koncentrace ve směru většího počtu plynných částic
Snížení teploty	→	Posun ve směru exotermní reakce
Zvýšení teploty	→	Posun ve směru endotermní reakce

System, který je v rovnováze reaguje na každou změnu (teploty, tlaku, koncentrace, atd.) tak, aby tuto změnu potlačil.



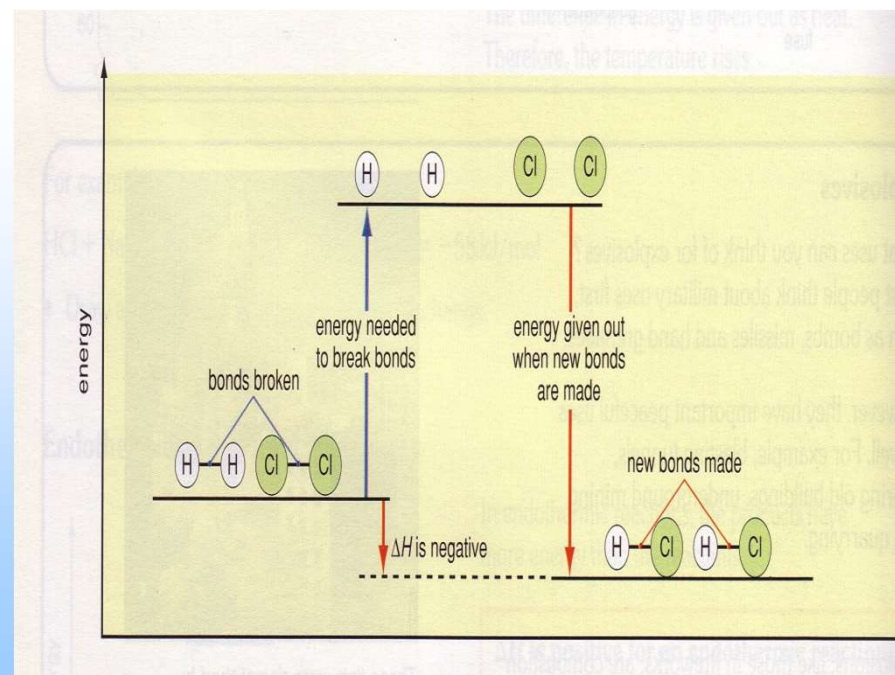
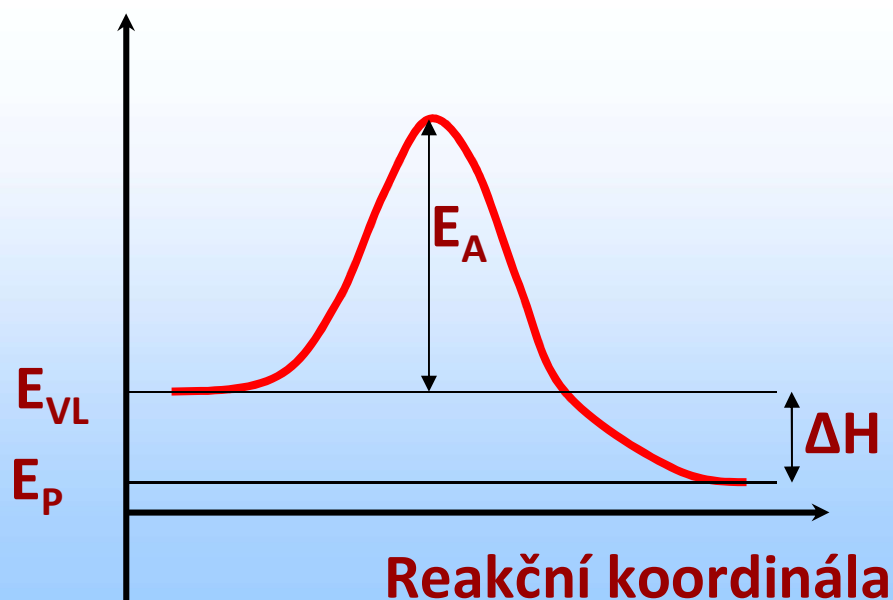
Reakční koordináta



Pro uskutečnění reakce je nutná SRÁŽKA mezi molekulami.

Částice musí mít dostatečnou energii = aktivační energie (E_A) = minimální energie, kterou musí částice mít, aby srážka mezi nimi byla účinná.

Energie

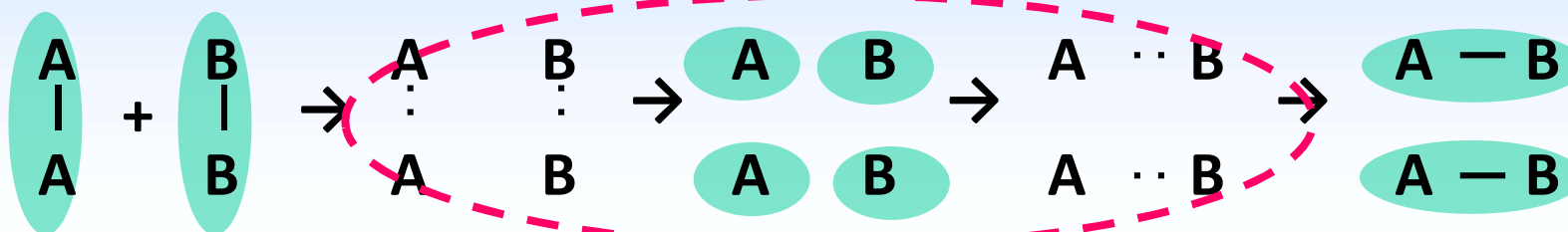




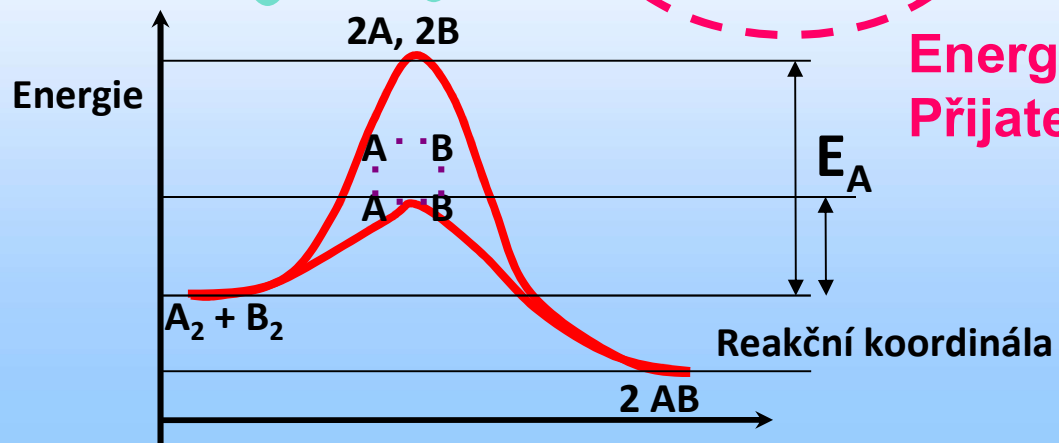
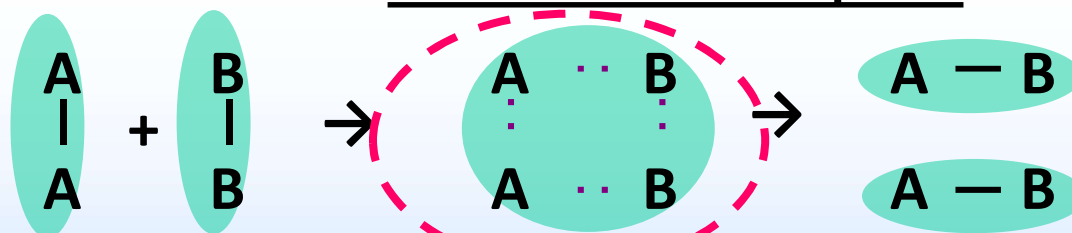
Teorie aktivovaného komplexu →



Energeticky nevýhodné!



Předpoklad: vznik tzv. aktivovaného komplexu.



Energeticky
Přijatelné!

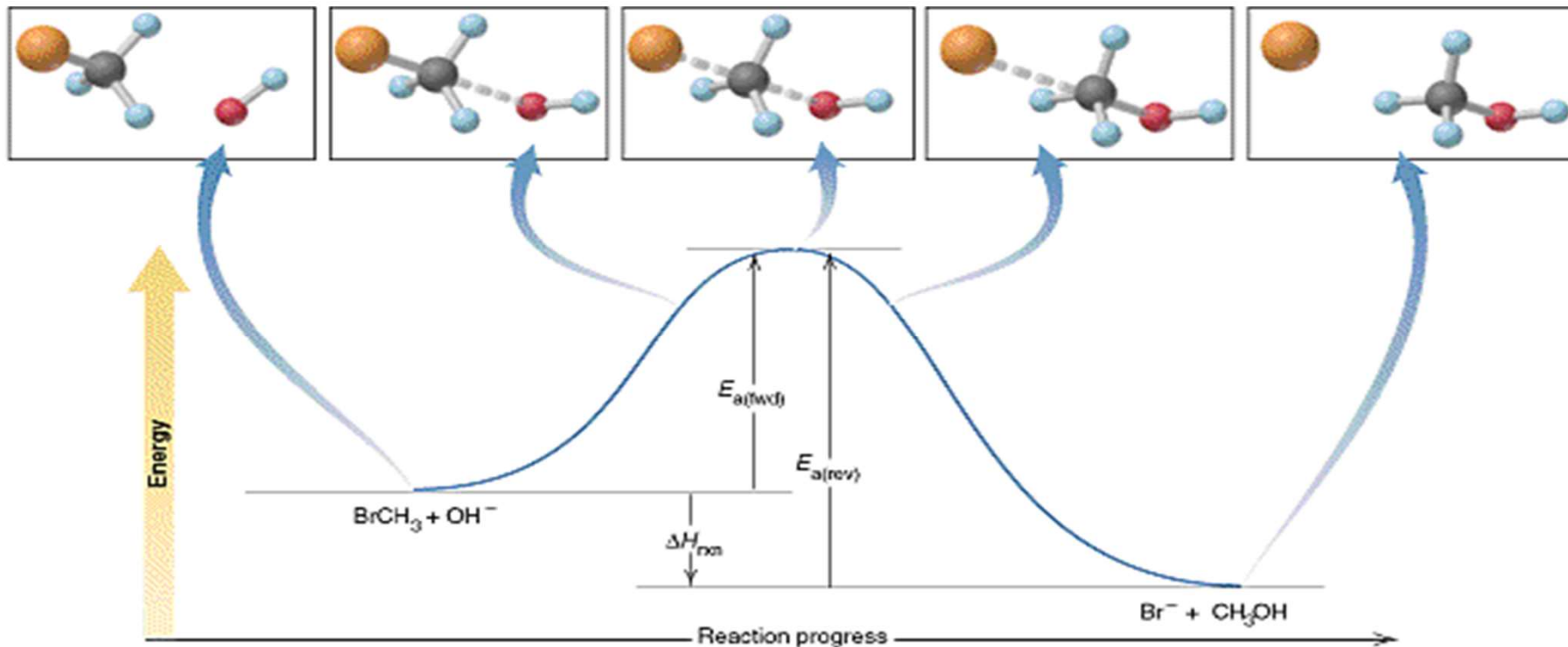
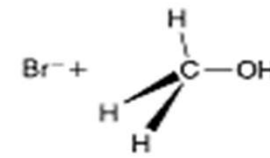
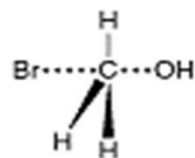
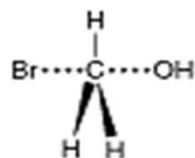
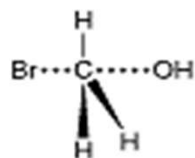
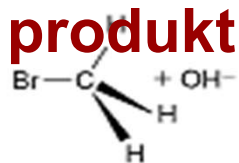


Teorie aktivovaného komplexu



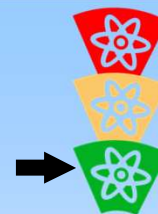
Výchozí látka
produkt

tranzitní stav

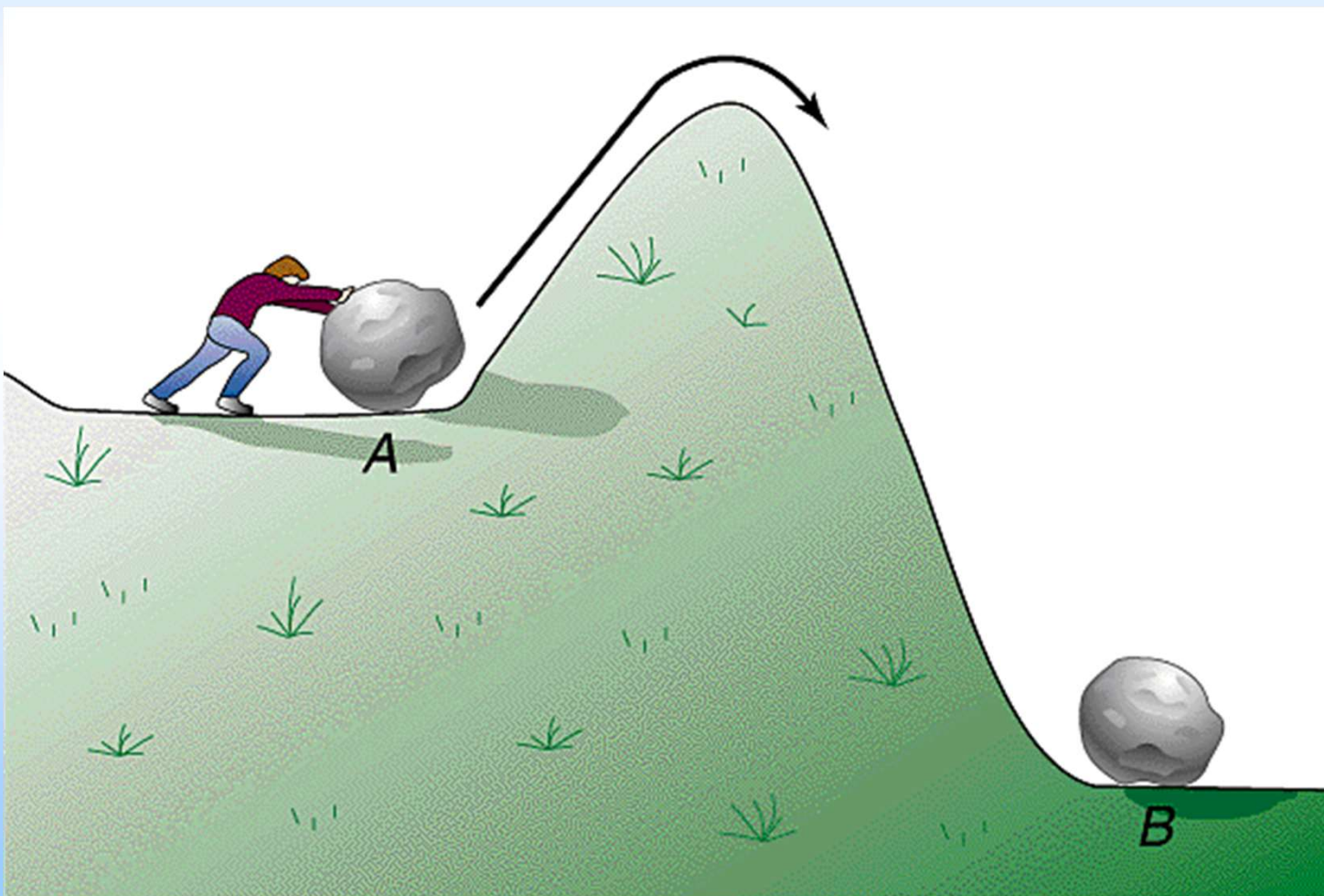




Teorie aktivovaného komplexu

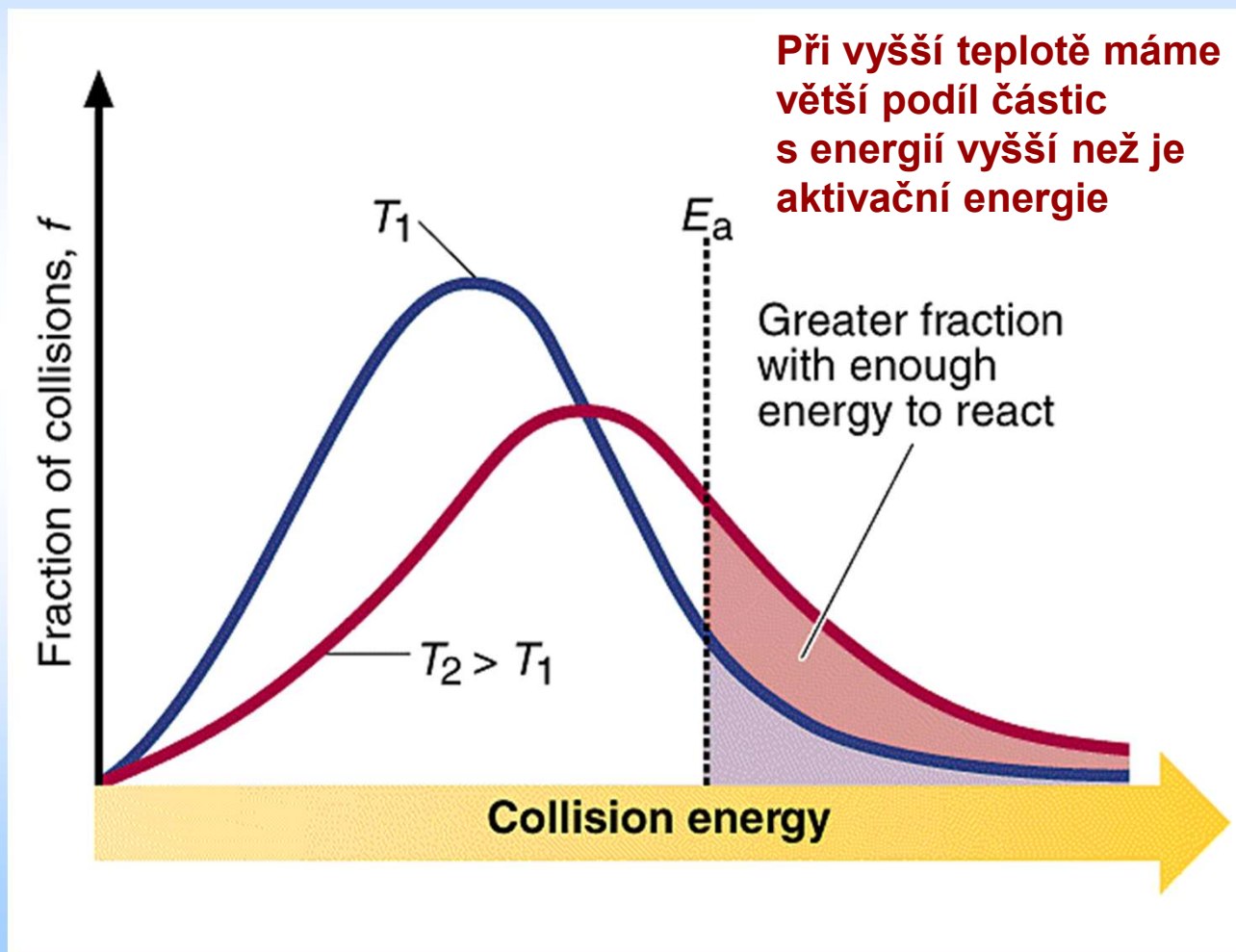


Energie = schopnost něco uskutečnit





Teplotní závislost rychlosti děje →

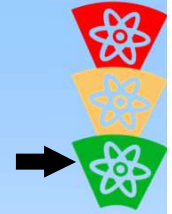


$$k = A e^{-E_a/RT}$$

Arrheniova rovnice
(rychlost děje jako funkce teploty)

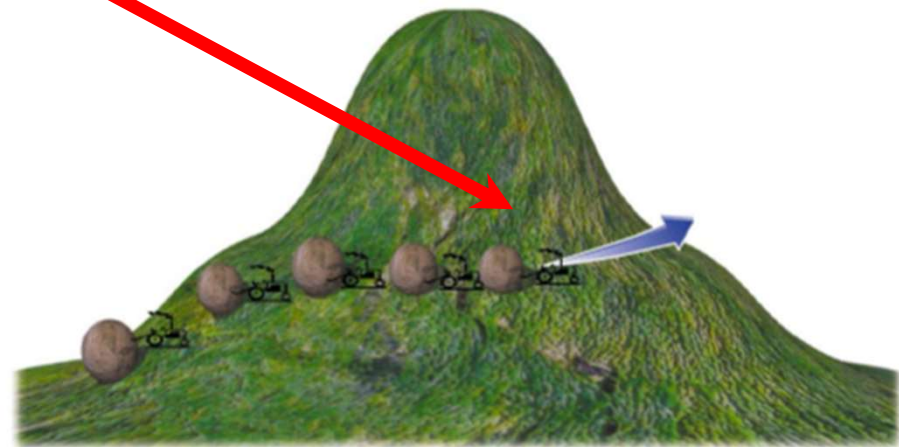
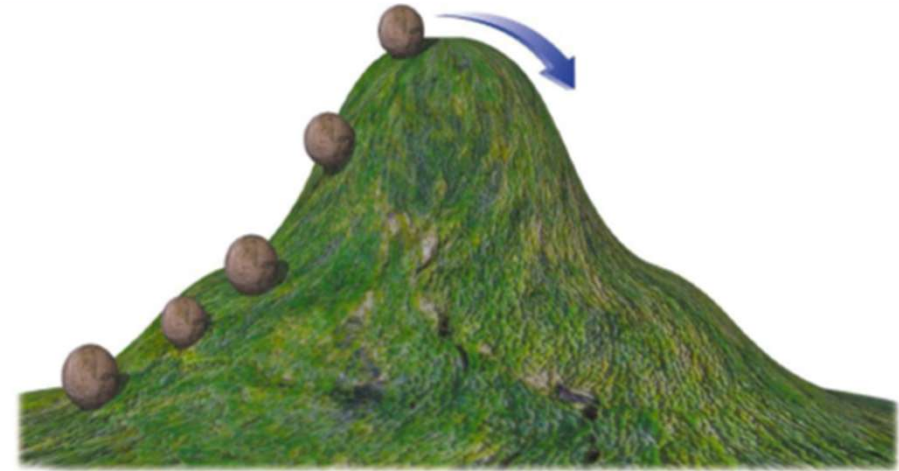


Teorie aktivovaného komplexu



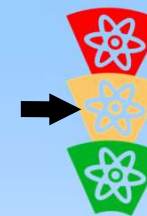
katalýza a inhibice

- katalyzátor mění cestu děje
- „převéde“ výchozí látky na produkty „pohodlnější“ cestou





Vliv katalyzátorů na průběh chemické reakce



E_A celé řady chem. reakcí je vysoká.

Existují látky (= katalyzátory), které umožňují vést reakční systém cestou, která je energeticky méně náročná!!!.

Katalyzátory ovlivňují (nejčastěji zvyšují) rychlost reakce, aniž by se jí zúčastnily (tzn. v průběhu reakce se nespotřebovávají).

Aktivátory – pozitivní katalyzátory

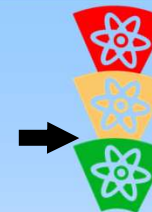
Inhibitory – negativní katalyzátory

Jedná se nejčastěji o některé: kyseliny, zásady, kovy, oxidy, soli...

Enzymy = biokatalyzátory



Vliv katalyzátorů na průběh chemické reakce



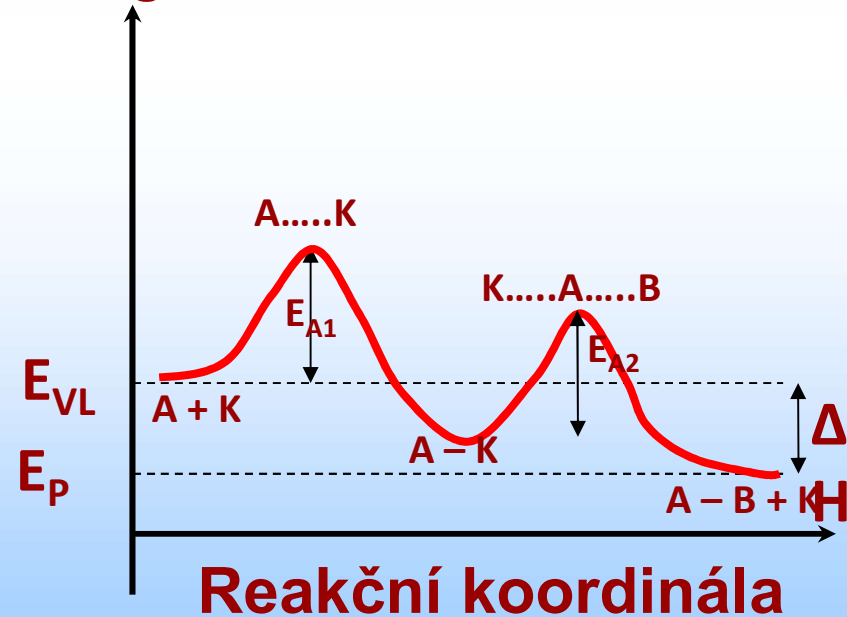
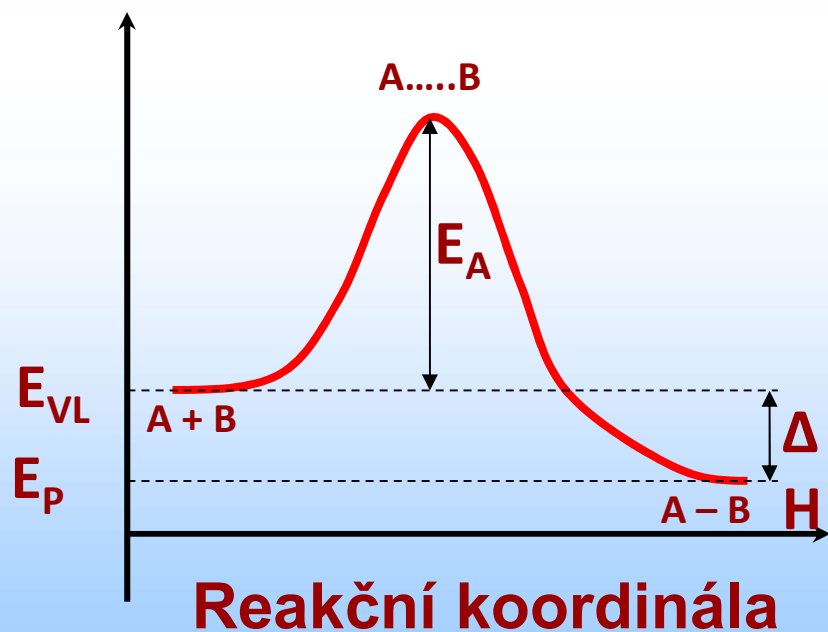
Bez katalyzátoru

S katalyzátorem (K)



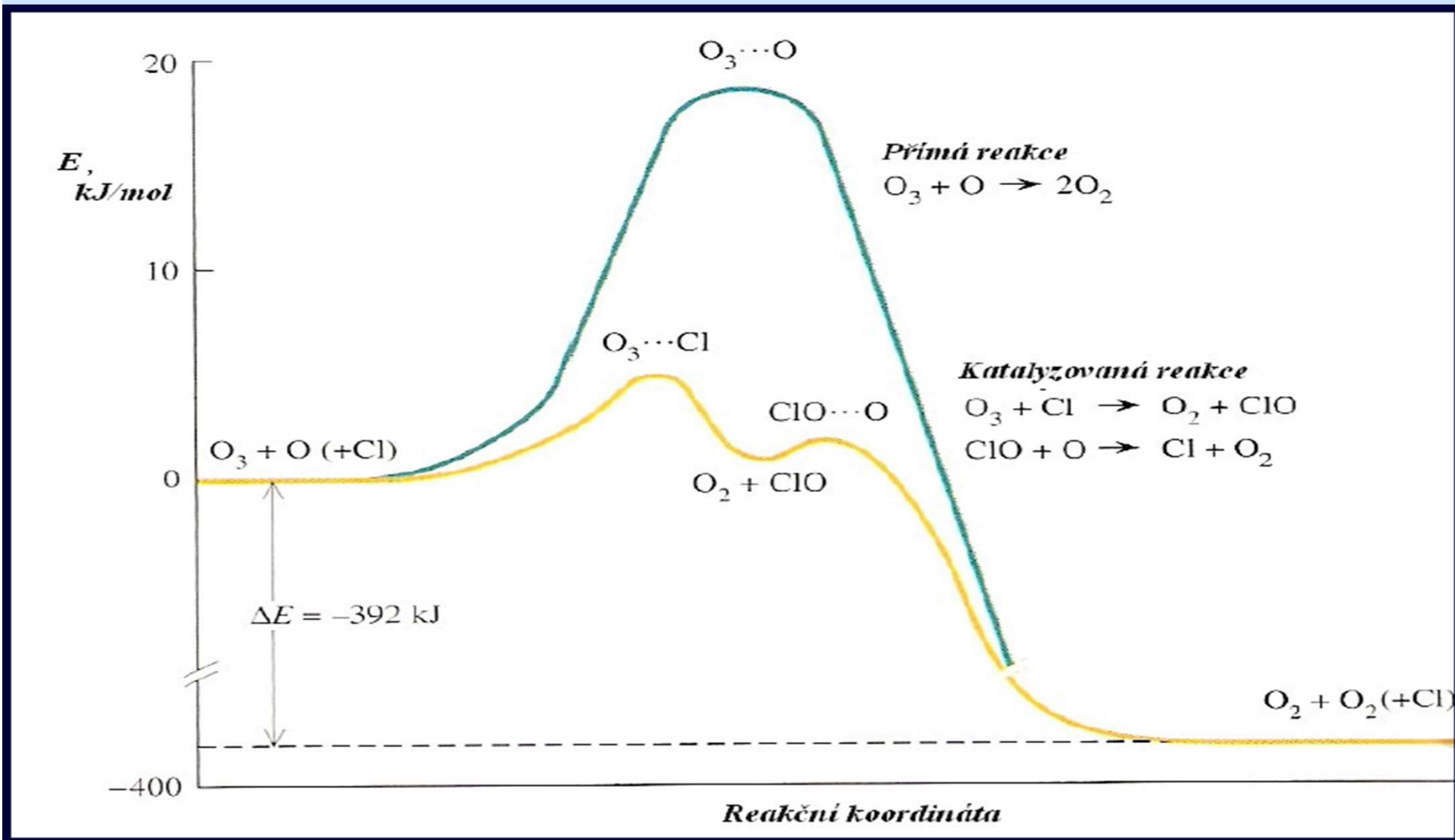
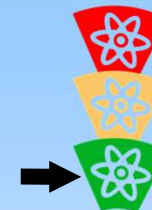
Energie

Energie



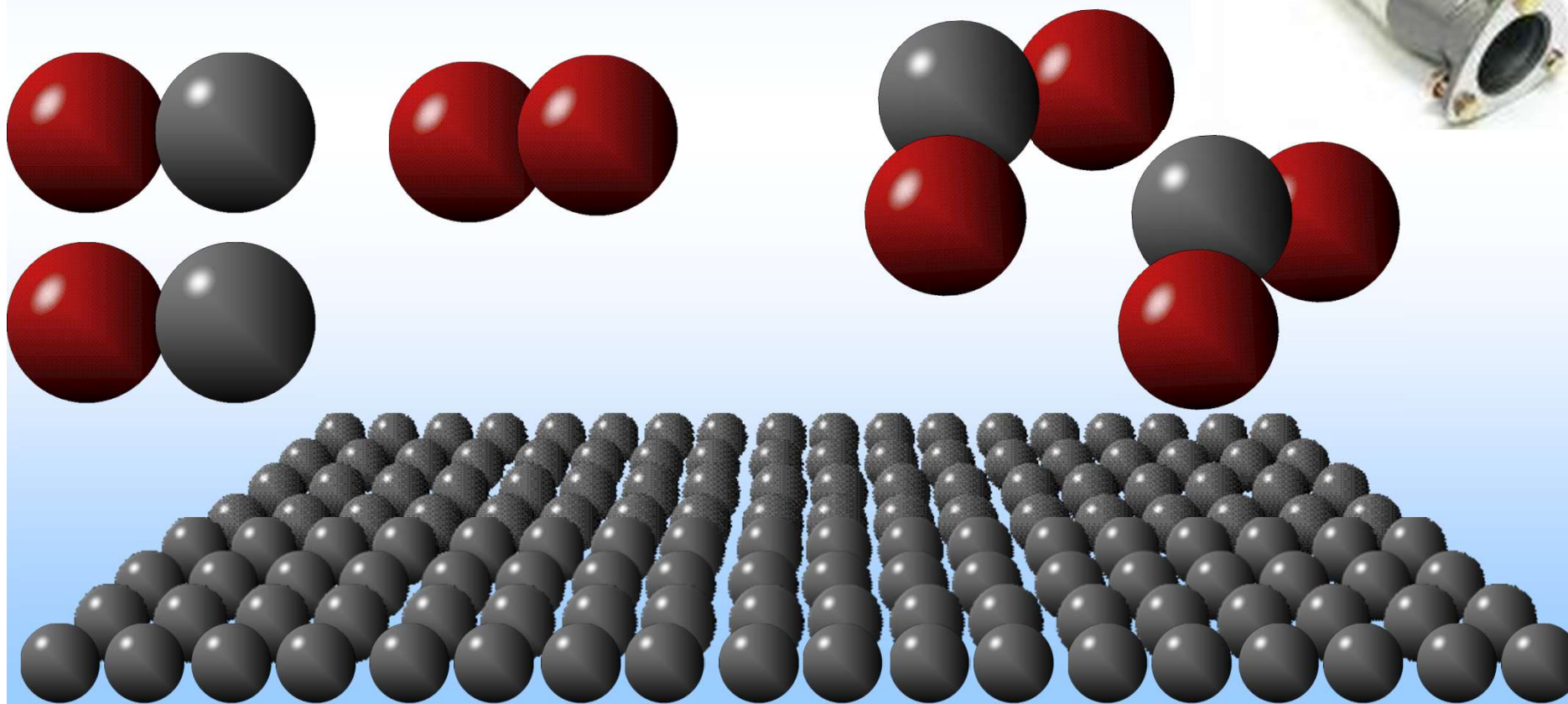
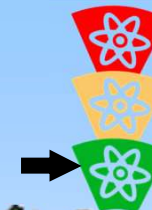


Katalýza



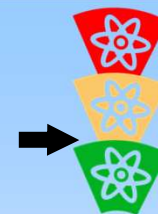


Katalýza





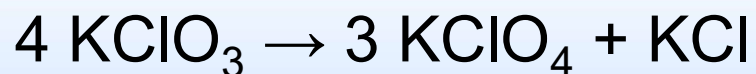
Redoxní reakce



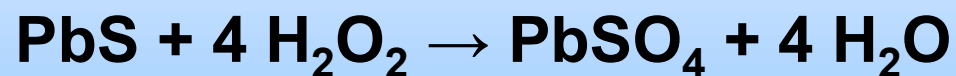
= chemické reakce, při kterých se mění oxidační čísla atomů
2 poloreakce = oxidace redukce

Oxidace ... příjem kyslíku ... oxidační číslo roste, prvek ztrácí elektrony

Redukce ... příjem vodíku ... oxidační číslo klesá, prvek získává elektrony

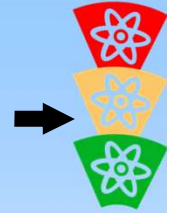


Disproporcionace – část molekul se oxiduje, část redukuje





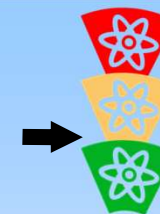
Bělení textilií



- Praní – odstraňování nečistot v podobě roztoku/disperze ve vodě
- Chemické čištění - odstraňování nečistot v podobě roztoku/disperze ve organickém rozpouštědle
- Bělení – chemické změna barevných nečistot na nebarevné pomocí redoxních reakcí a jejich následné odstranění v podobě roztoku ve vodě, bělíme redukčními činidly ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_4$) nebo mnohem častěji oxidačními činidly (H_2O_2 , NaClO)

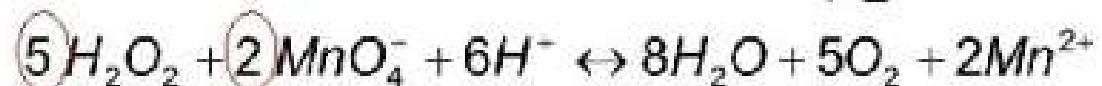
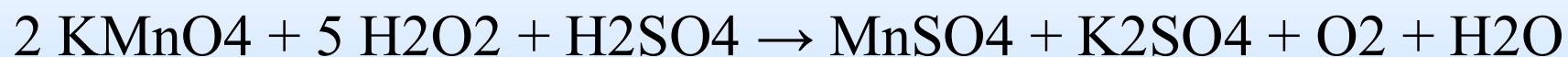


Bělení - koncentrace H₂O₂



Peroxid vodíku se manganometricky stanoví v kyselém prostředí H₂SO₄ za přítomnosti kationtu Mn²⁺.

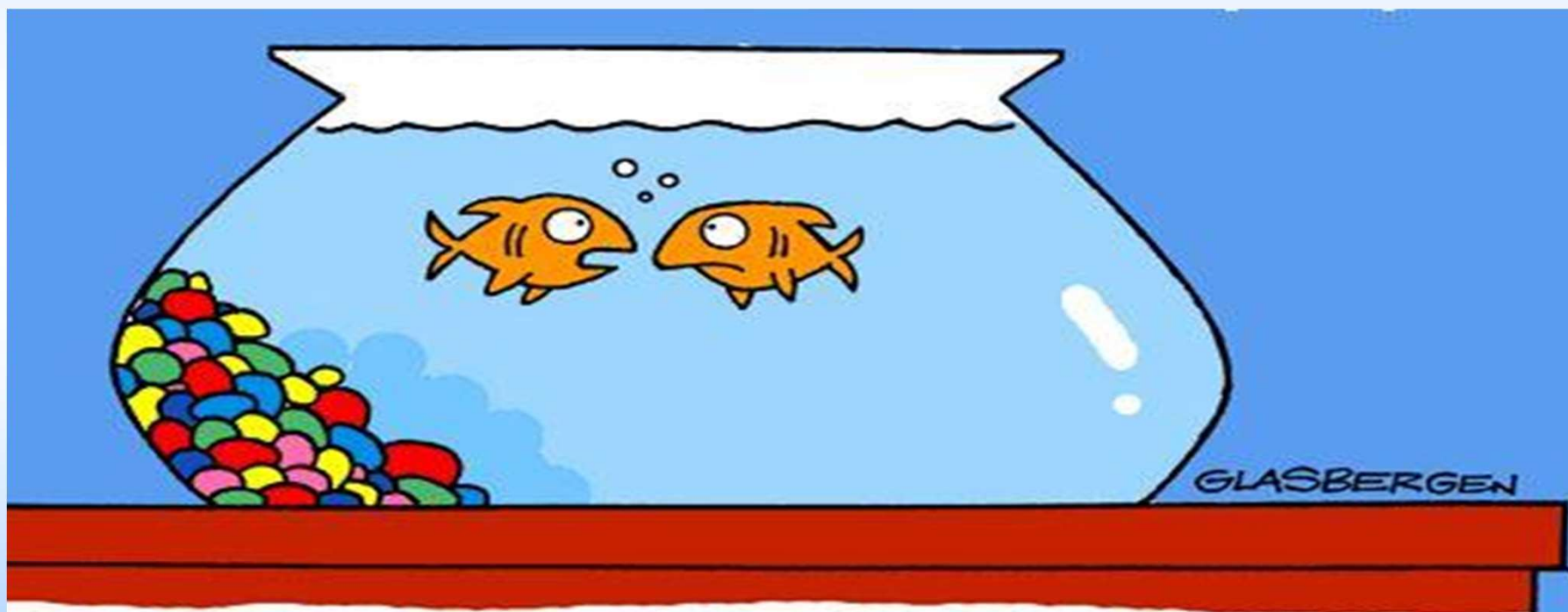
Zkoumaný vzorek H₂O₂ titrujte 0,02 M odměrným roztokem KMnO₄, poslední kapka odměrného roztoku zbarví směs v titrační baňce do růžova. Bylo dosaženo bodu ekvivalence – v roztoku zbývá stopová koncentrace manganistanu.



Po úpravě schématu na chemickou rovnici lze vypočítat, že 1 cm³ přesně 0,02 M roztoku KMnO₄ odpovídá 1,7007 mg H₂O₂.



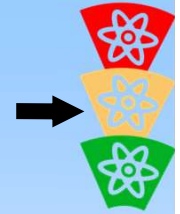
Voda – prostředí pro chemické reakce



Odcházím Norberte. Můžeš si nechat nádobu,
ale já si беру vodu a barevné kamínky.



Voda



V kapalně podobě: **Umožnění disociace molekuly barviva**

Transport barviva k vláknu

Vznik elektrického náboje vlákna

Otevření struktury vlákna (bobtnání)

Odvod „zplodin“ barvení (protionty, přenos elektrického náboje)

Umožnění migrace

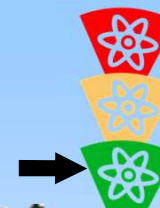
Základní rozpouštědlo

V plynné podobě: pára k ohřevu, sušení, vlhčení ...

Alternativy: nepolární rozpouštědla (organika, CO₂...) nebo sublimace barviva ... jen pro úzký výběr barviv a vláken

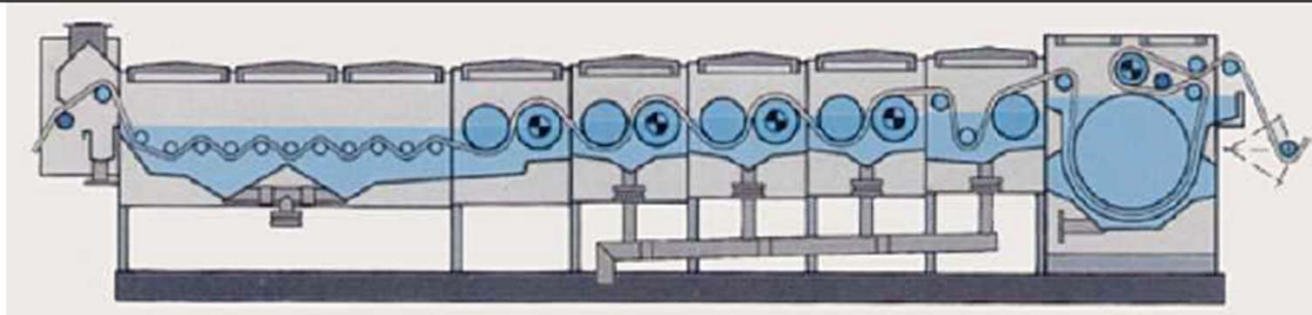


Voda v textilním průmyslu



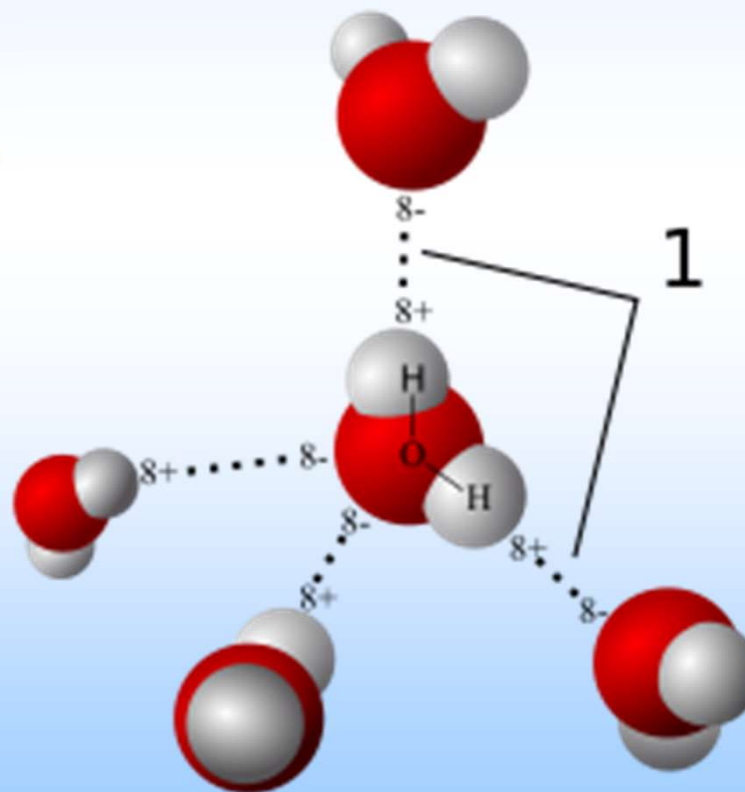
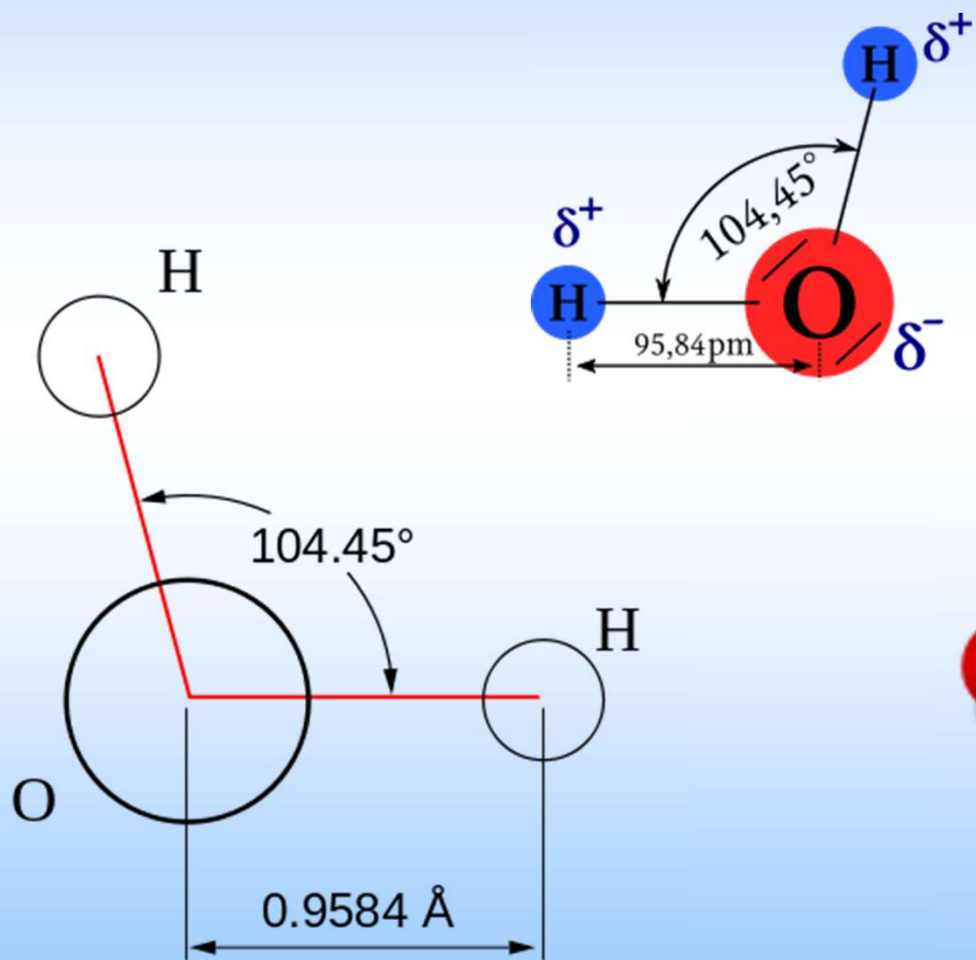
Spotřeba vody při zušlechťování textilií (1 kg^{-1})

Zušlechťování	Min	Průměr	Max
Vlna	4.2	11.7	77.6
Tkaniny	5.0	113.4	507.9
Pleteniny	20.0	83.4	377.8
Punčochové zboží	5.8	69.2	289.4
Koberce	8.3	46.7	162.6



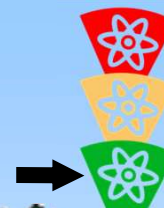


Voda – molekulární a nadmolekulární struktura





Ångström



Ångström nebo **angstrom** (symbol **Å**)
je jednotka délky.

Hodnota jednoho angstromu je rovna
0,1 nm neboli 10^{-10} m.

Nejedná se o jednotku SI.

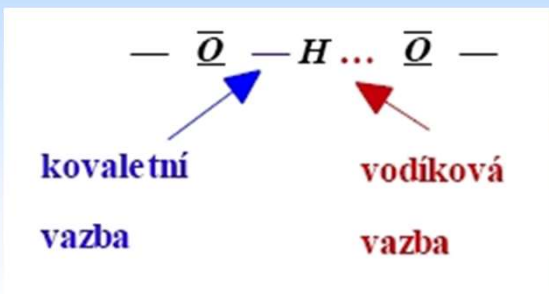
Jednotka používaná při vyjadřování
velikostí atomů, délek chemických
vazeb nebo vlnových délek spektrálních čar.

Jednotka je pojmenována
po švédském fyzikovi Andersi Jonasi
Ångströmovi 13. 8. 1814 - 21. 6. 1874





Voda – molekulární a nadmolekulární struktura



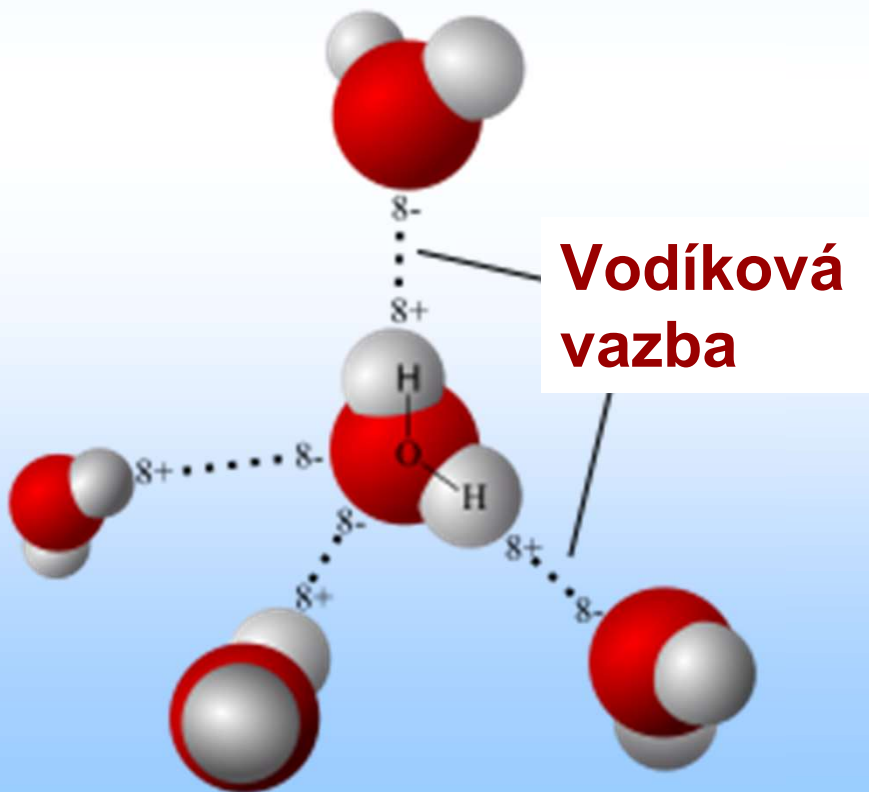
Chemická vazba okolo 400 kJ/mol

X

Mezimolekulární interakce

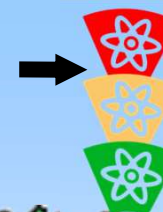
vodíkové vazby (můstky) + van der Waalsovy interakce max. (dipól – dipól, dipól-indukovaný dipól a disperzní)

Pod 40 kJ/mol





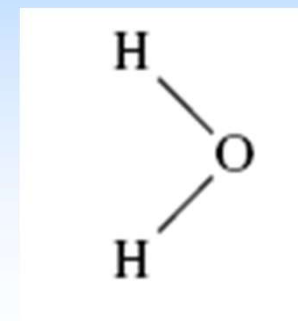
Chemické vlastnosti vody



Kovalentní vazby ve vodě jsou silně polární.
elektonegativita:

O ... 3,5

H ... 2,1



Polárně kovalentní a iontové sloučeniny jsou ve vodě více rozpustné než nepolární sloučeniny. Záporná místa v rozpouštějící se látce jsou přitahována kladnými místy v molekule vody a naopak.

Typ vazby	Příklad	Rozdíl elektronegativit
iontová $\Delta X > 1,7$	NaCl KF	(Cl) 3,00 – 0,90 (Na) = 2,10 (F) 4,00 – 0,83 (K) = 3,15
polární (polárně kovalentní) $0,4 < \Delta X < 1,7$	HCl H ₂ O	(Cl) 3,00 – 2,10 (H) = 0,90 (O) 3,50 – 2,10 (H) = 1,40
nepolární (kovalentní) $\Delta X < 0,4$	F ₂	(F) 4,00 – 4,00 (F) = 0



Voda X organická rozpouštědla



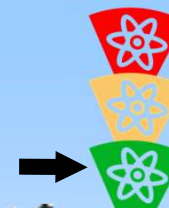
Nejdůležitější konstanty organických rozpouštědel přicházejících v úvahu pro textilní zušlechťování jsou uvedeny v následující tabulce:

Rozpouštědlo	bod varu [°C]	měrné teplo [kJ.kg ⁻¹ .K ⁻¹]	výparné teplo [kJ.kg ⁻¹]	povrchové napětí [mN.m ⁻¹]	dielektrická konstanta	rozpuštěnost vody v rozpouštědle
voda	100	4,19	2 264	73	80,4	---
methanol	65	2,43	1 201	23	32,6	neomez.
ethanol	78	2,34	941	23	24,3	neomez.
perchlorethylen	121	0,84	209	32	2,36	0,01
trichlorethylen	87	0,84	238	32	3,43	0,025
dichlormethan	41	0,59	331	29	9,08	0
1,1,1-trichlorethan	74	1,17	234	26	?	0

Množství tepla, které je při dané teplotě potřebné k přeměně jednoho kilogramu kapalné látky v plynnou fázi, se nazývá skupenské teplo výparné (vypařovací).



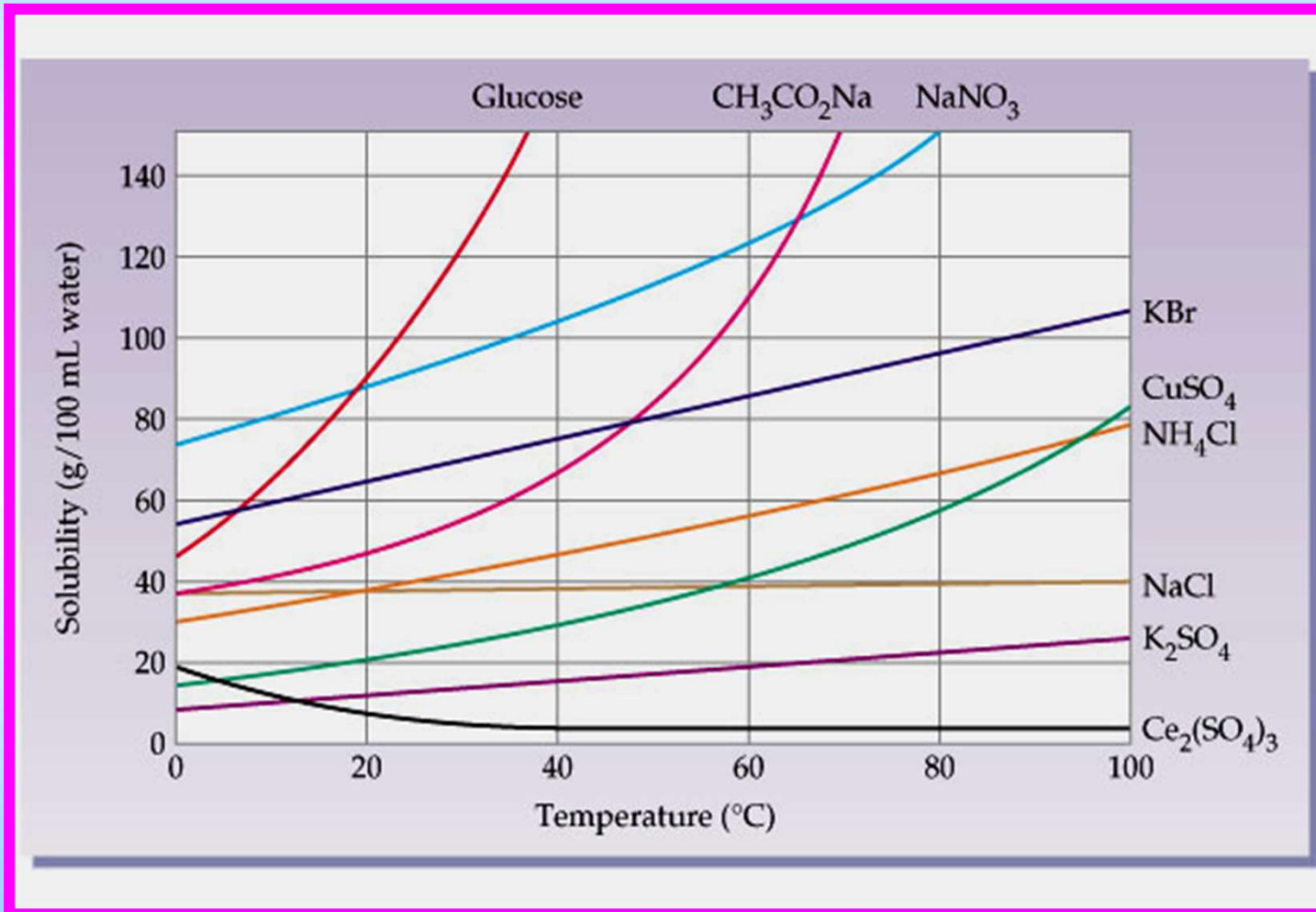
Rozdíly mezi kapalinami



		Polární	roztoky
Dielektrická konstanta	78	<u>voda</u>	soli amino kyseliny
	33	<u>metanol</u>	Polární organické
	25	<u>etanol</u>	polymery
	21	<u>aceton</u>	
	4.8	chloroform	éter
	2.4	toluen	tuky
	2.2	CCl ₄	oleje
		Nepolární	



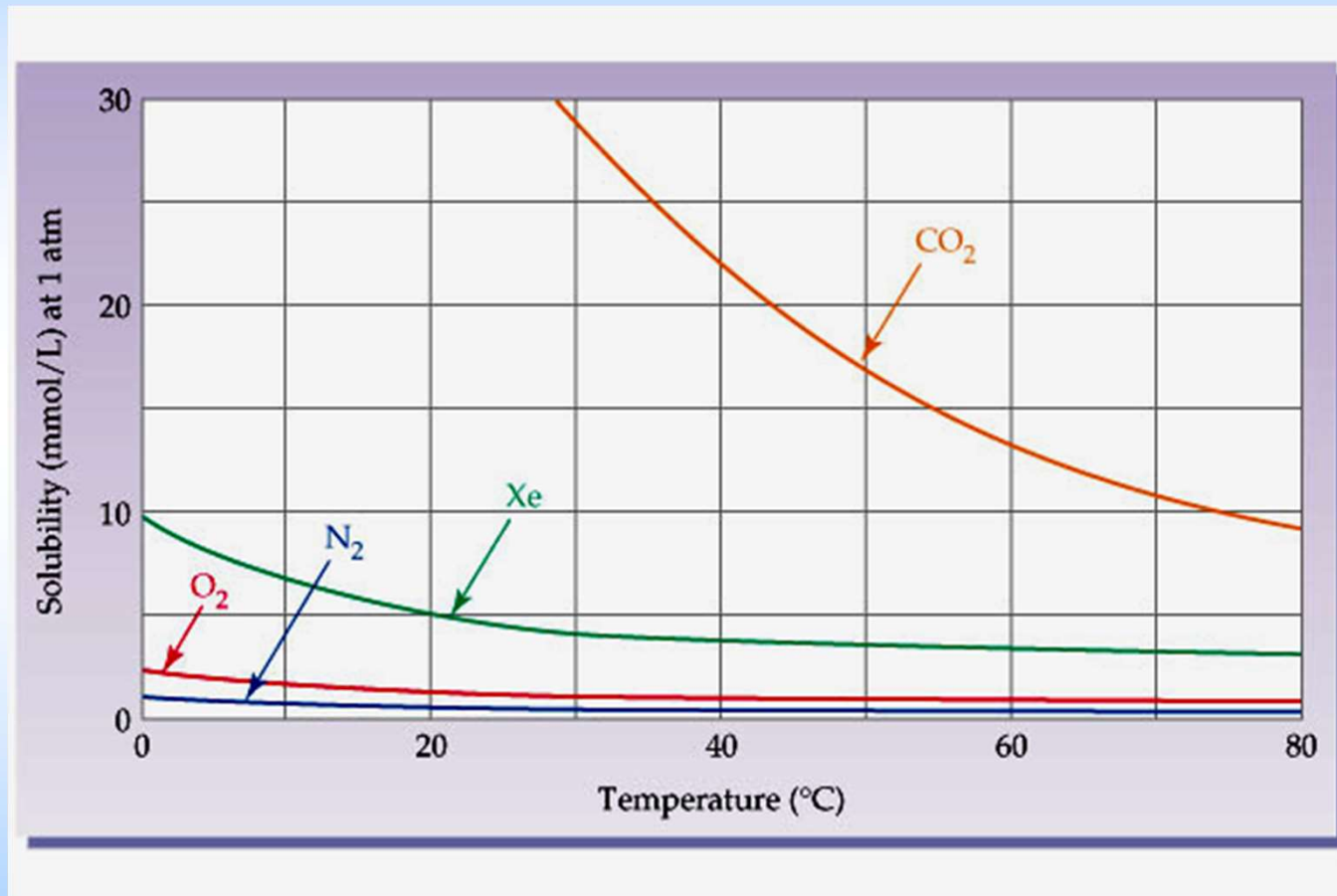
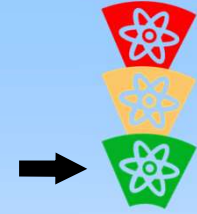
Vliv teploty na rozpustnost solí ve vodě



Vysoká teplota = rychlejší a vyšší koncentrace nasyceného roztoku



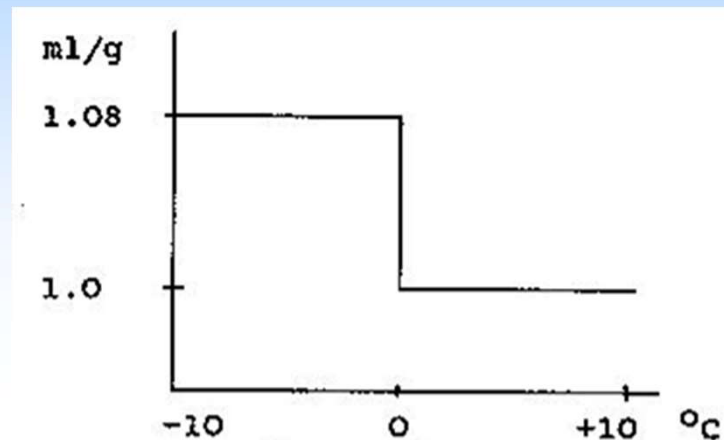
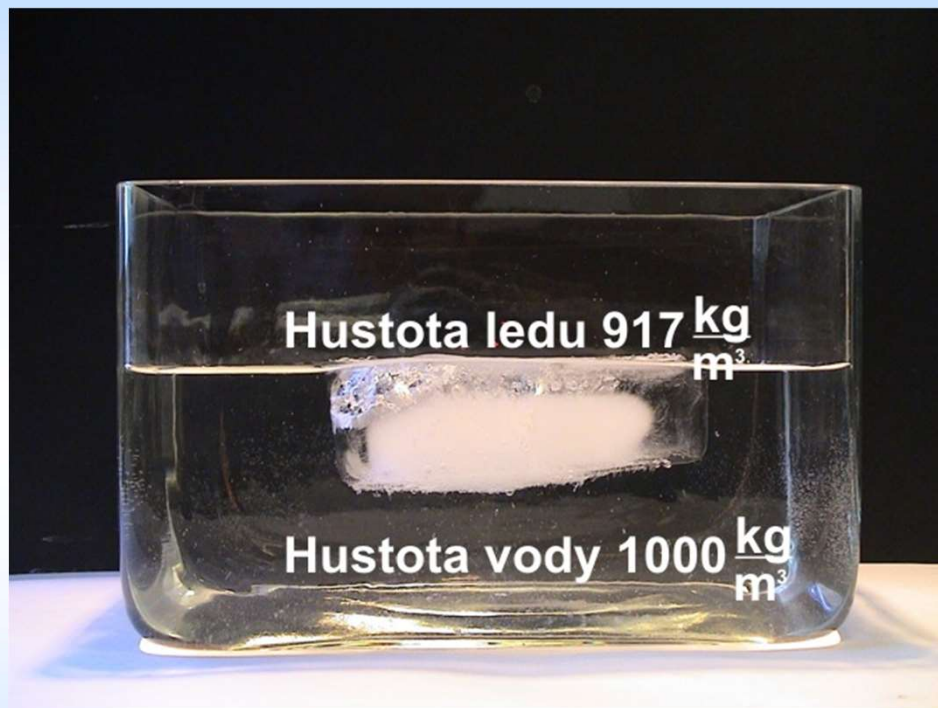
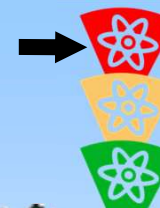
Vliv teploty na rozpustnost plynů ve vodě



Velký vliv tlaku ! Vysoká teplota – málo plynů !



Voda kapalná a led

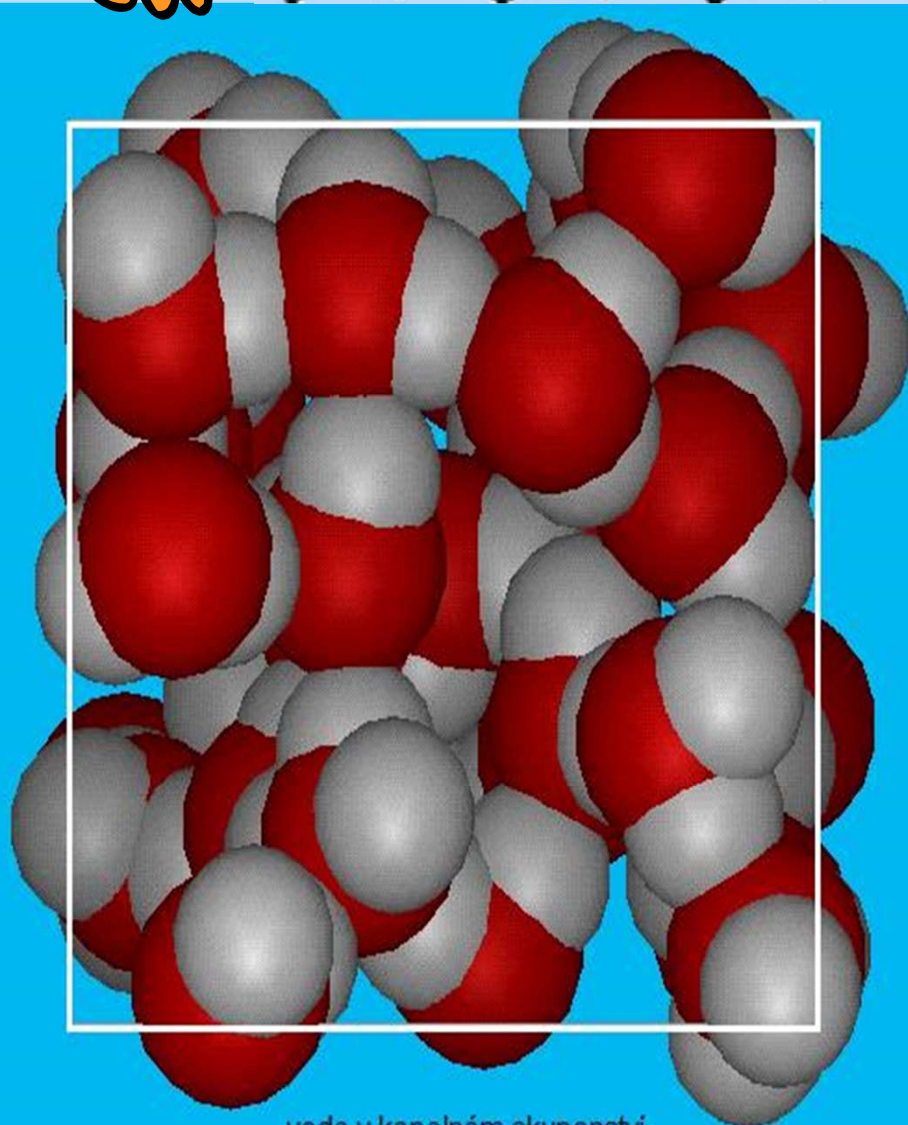
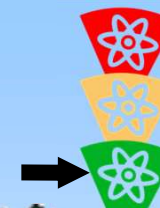


**Stlačení ledu = roztavení
(jízda na bruslích apod.)**

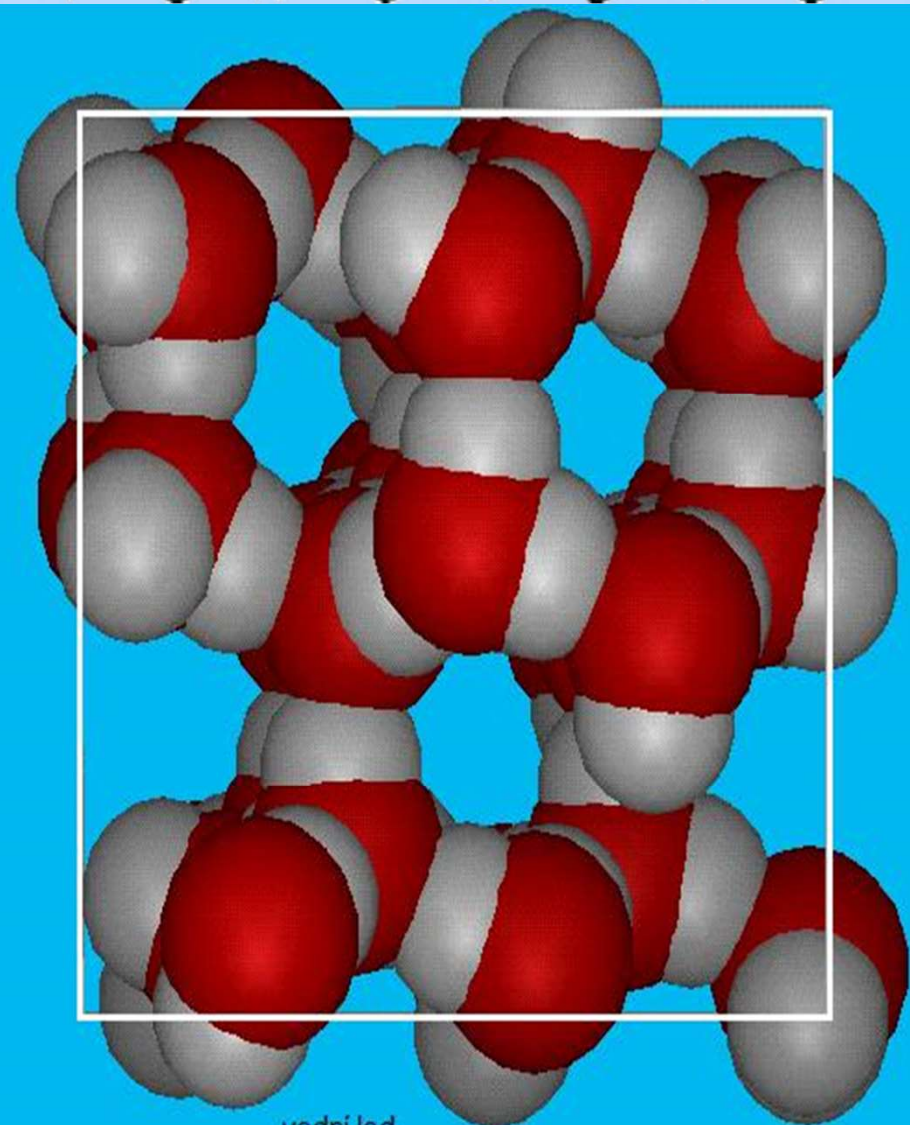




Voda kapalná a led



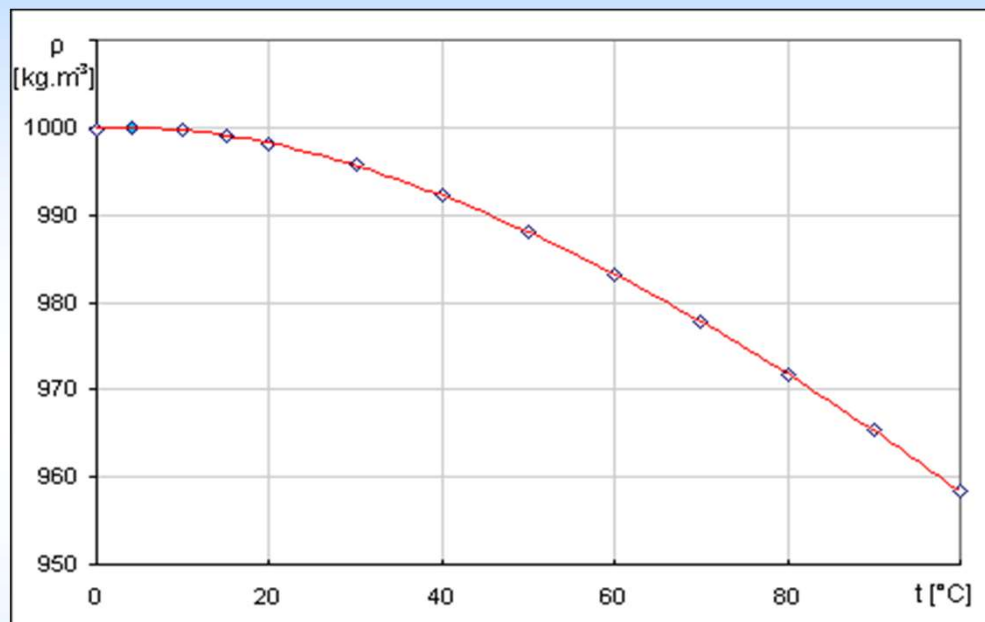
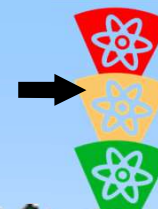
voda v kapalném skupenství



vodní led



Hustota vody



**KDE JE TOPNÉ TĚLESO
V RYCHLOVARNÉ
KONVICI??
U DNA - UPROSTŘED**

Kapalina s větší teplotou má menší hustotu a stoupá vzhůru

Vodu je nutné zahřívat zdola, protože zahřátá voda stoupá vzhůru a ke dnu klesá voda s nižší teplotou



Děkuji za pozornost!



A — tady voní dršťková!

<http://www.rencin.cz/>