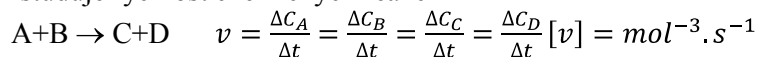


## Chemická kinetika a chemické rovnováhy

### Kinetika

- studuje rychlost chemických reakcí



#### 1) Srážková teorie

- podmínkou chemické reakce je srážka molekul reaktantů
- molekuly se musí srazit s dostatečnou energií – aktivační energie a ve vhodné prostorové orientaci

#### 2) Teorie aktivovaného komplexu

Při postupném přibližování molekul dochází k zeslabování vazeb mezi atomy v molekulách výchozích látek a začínají se vytvářet nové vazby mezi atomy různých molekul. Vzniká nový nestálý celek – aktivovaný komplex.

### Faktory ovlivňující rychlost reakce

#### 1) Koncentrace reaktantů

- rychlost reakce závisí přímo úměrně na součinu koncentrací reaktantů
- $v = k \cdot C_A \cdot C_B$  k- rychlostní konstanta, Guldberg-Waage formuloval

#### 2) Teplota

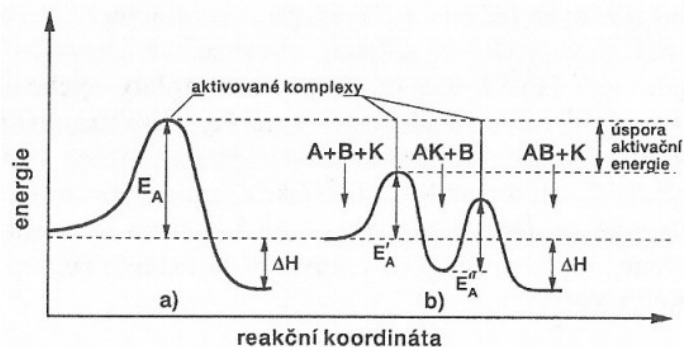
- van'tHoffovo pravidlo: Zvýší-li se teplota o 10°C vzroste rychlost reakce 2x až 3x
- teplota má největší vliv na rychlost reakce

#### 3) Velikost reakčního povrchu

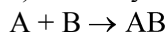
- když je látka rozdrčená, zvýší se rychlost reakce
- rychleji probíhá reakce v kapalinách, nejrychleji v plynech

#### 4) Katalyzátor

- je látka, která ovlivňuje rychlost chemické reakce
- **pozitivní katalyzátor** ⇒ zvýšení rychlosti chemické reakce, snížení reakční energie
- **negativní katalyzátor** (inhibitor) ⇒ snížení rychlosti reakce



a) Nekatalyzovaná reakce, reaktanty A a B spolu reagují za vzniku produktu AB.



b) Katalyzovaná reakce, reaktanty spolu nereagují přímo, katalyzátor tvoří meziprodukt



Další faktory ovlivňující reakční rychlost jsou **míchání reakční směsi** a **tlak** (v případě, kdy je alespoň jeden reaktant plynný).

## Chemické rovnováhy

Pokud v soustavě za daných vnějších podmínek neprobíhá žádný samovolný děj, je soustava v rovnovážném stavu. V soustavě je konstantní jak koncentrace výchozích látek, tak produktů.

### Zákon chemické rovnováhy

Uvažujme reakci v roztoku nebo plynné fázi:  $m \text{ A} + n \text{ B} \leftrightarrow p \text{ C} + q \text{ D}$

Rychlost přeměny produktů je dána vztahem  $v_1 = k_{AB}[A]^m[B]^n$ , rychlost zpětné reakce můžeme vyjádřit jako  $v_2 = k_{CD}[C]^p[D]^q$ , kde  $k_{AB}$  a  $k_{CD}$  jsou příslušné rychlostní konstanty a  $[X]$  je koncentrace (nebo přesněji aktivita) látky X. Aby nastala rovnováha, musí být rychlosti stejné, vztah pro rovnovážnou

konstantu této reakce bude:  $K_{eq} = \frac{k_{AB}}{k_{CD}} = \frac{[C]^p \cdot [D]^q}{[A]^m \cdot [B]^n}$

$K > 1$  Vyšší koncentrace **produktů**  $\rightarrow$

$K < 1$  Vyšší koncentrace **reaktantů**  $\leftarrow$

$K = 1$  Koncentrace produktů a reaktantů **vyrovnaná**

Zvratné reakce probíhají současně oběma směry. Výsledná rychlost přeměny je dána rozdílem rychlostí reakcí v obou směrech. Dynamická rovnováha se ustaví tehdy, když se rychlosti reakce zpětné i původní rovnají (jejich rozdíl se rovná nule).

### Posouvání rovnováhy

Princip akce a reakce: *Porušení rovnováhy vnějším zásahem (akcí) vyvolá děj (reakce) směřující k ustavení původní rovnováhy*

#### a) Změnou koncentrace

Zvýšení koncentrace reaktantů vede ke zvýšení koncentrace produktů.

Odebírání produktů vede k jejich nahrazení a snížení koncentrace reaktantů.

#### b) Změnou tlaku

Zvýšení tlaku zvýší koncentraci ve směru **menšího** počtu plynných částic.

Zmenšení tlaku zmenší koncentraci ve směru **většího** počtu plynných částic.

#### c) Změnou teploty

Zvýšení teploty zvýší koncentraci ve směru **endotermické** reakce.

Snížení teploty zvýší koncentraci ve směru **exotermické** reakce.

#### d) Ovlivnění katalyzátorem

Katalyzátor sice urychlí ustavení rovnováhy, neovlivňuje však hodnotu  $K_c$ , a tedy ani rovnovážné složení soustavy.

## Termochemie

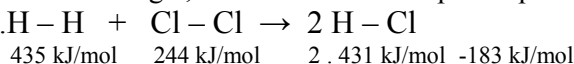
odvětví termodynamiky zabývající se tepelnými změnami chemických reakcí

### Vazebná energie

Každá vazba mezi atomy má vazebnou energii, která se uvolní při vzniku vazby. Čím je tato energie vyšší, tím jsou atomy k sobě poutány pevněji.

K rozštěpení vazby je třeba energie o velikosti vazebné energie.

Energetická bilance je hodnota energie, o kterou musíme opravit pravou stranu rovnice, aby platil zákon zachování energie.



### Entalpie $\Delta H$

- dokážeme určit jen její změnu = množství tepla, které se uvolní/spotřebuje při dějích za konstantního tlaku

- Popisuje jakousi „vnitřní energii“ soustavy. Ta je rovna součtu kinetických energií neuspořádaně se pohybujících částic a součtu potenciálních energií vzájemných poloh těchto částic platí:

$$\Delta H = H_2 - H_1 \dots H_1 - \text{vnitřní energie soustavy před reakcí}$$

...  $H_2$  - vnitřní energie soustavy po reakci

**exotermní reakce** - soustava do svého okolí teplo uvolňuje,  $\Delta H < 0$

**endotermní reakce** - soustava teplo do svého okolí přijímá,  $\Delta H > 0$

**atermické reakce** - během reakce se teplo ani nespotebovává, ani neuvolňuje, v přírodě neobvyklé

### Reakční teplo $\Delta H^0$ [ $\Delta H^0$ ] = kJ mol<sup>-1</sup>

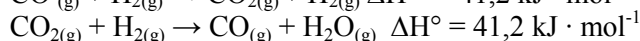
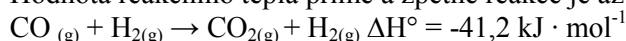
- množství tepla, které soustava přijme/uvolní, jestliže se v ní za konstantního tlaku uskuteční reakce v rozsahu 1 molu reakčních přeměn

- vyjadřuje se změnou entalpie

## Termochemické zákony

### 1. termochemický zákon

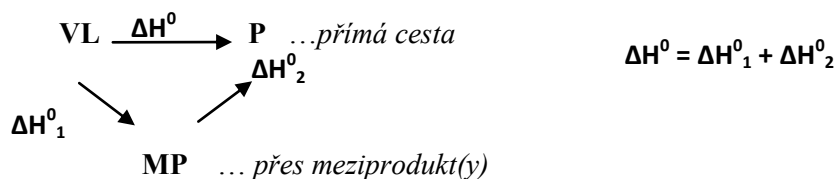
Hodnota reakčního tepla přímé a zpětné reakce je až na znaménko stejná. (Lavoisier-Laplaceův zákon)



### 2. termochemický zákon

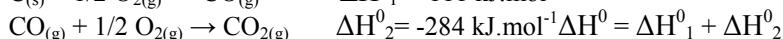
Celkové reakční teplo reakce, kterou vzniká nějaký produkt, nezávisí na způsobu, jakým tento produkt z výchozích látek vzniká, ale pouze na počátečním a konečném stavu.

Hessův trojúhelník



Oxid uhličitý může vzniknout z uhlíku a kyslíku buď reakcí:  $\text{C}_{(s)} + \text{O}_{2(g)} \rightarrow \text{CO}_{2(g)} \quad \Delta H^0 = -395 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

nebo postupně reakcemi:



### Standardní slučovací teplo $\Delta H^0_{sl}$ $\Delta H^0 = \sum_P \Delta H^0_{sl} - \sum_{VL} \Delta H^0_{sl}$

- je reakční teplo reakce, při níž z prvků ve standardních stavech vznikne 1 mol sloučeniny ve standardním stavu. př.:  $1/2 \text{N}_{2(g)} + 3/2 \text{H}_{2(g)} \rightarrow \text{NH}_{3(g)} \quad [\Delta H^0_{sl}] \text{NH}_3 = 46 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

### Standardní spalné teplo $\Delta H^0_{sp}$ $\Delta H^0 = \sum_{VL} \Delta H^0_{sp} - \sum_P \Delta H^0_{sp}$

- je reakční teplo reakce, při níž se 1 mol látky ve standardním stavu spálí v proudu kyslíku na konečné oxidační produkty ve standardním stavu.