Chemické reakce

Chemická rovnice, typy chemických reakcí, kinetika chemických reakcí

Chemická reakce

- Chemická reakce je děj, při kterém dochází ke vzniku nebo zániku chemických vazeb.
- *Reaktant* – látka, která do reakce vstupuje.
- *Produkt* – látka, která z reakce vystupuje.
- *Mechanismus reakce* – sled elementárních reakčních kroků, ze kterých se skládá chemická reakce.
- *Chemická rovnice* – popis chemické reakce. Většinou popisuje pouze počáteční a konečný stav. Chemická rovnice nemusí odpovídat reakčnímu mechanismu.

Chemická rovnice

- Chemická rovnice vyjadřuje *stechiometrii* reakce a popisuje reaktanty a produkty.
- *Vyčíslená chemická rovnice* musí mít na každé straně stejný počet atomů daného druhu (tzn. při reakci nesmí docházet k přeměně atomů).
- $PbO_2 + 4\ HCl \rightarrow PbCl_2 + Cl_2 + 2\ H_2O$
- Pokud jsou v rovnici ionty, musí být součet nábojů na levé a pravé straně rovnice stejný (*zákon zachování elektrického náboje*).
- $2\ Cr^{3+} + 3\ H_2O_2 + 10\ OH^- \rightarrow 2\ CrO_4^{2-} + 8\ H_2O$

Chemická rovnice

- Chemická rovnice může obsahovat i další důležité informace, např. skupenství látek a reakční podmínky.
  - Skupenství se zapisuje za vzorec látky do závorky.
    - s – solidus, pevné skupenství
    - l – liquidus, kapalina
    - g – gaseus, plyn
    - aq – vodný roztok
- $2\ NaOH\ (aq) + CO_2\ (g) \xrightarrow{T = 25\ ^\circ C} Na_2CO_3\ (aq) + H_2O\ (l)$

Typy chemických reakcí

- Izomerace – při této reakci dochází pouze ke změně struktury látky, nemění se ani počet ani druh atomů tvořících molekulu.
- Syntéza – ze dvou nebo více prvků nebo sloučenin vznikne produkt, který je většinou složitější než výchozí látky.
- Dekompozice – molekula se rozpadne na několik jednodušších látek.
  - $2\ H_2O \rightarrow 2\ H_2 + O_2$
- Substituce – část molekuly je nahrazena jiným atomem nebo skupinou.
- Podvojná záměna – dvě látky si při reakci vymění atomy nebo funkční skupiny.
  - $NaCl + AgNO_3 \rightarrow NaNO_3 + AgCl$

Typy chemických reakcí

- Redoxní reakce – při reakci se mění oxidační čísla atomů. Redoxní reakce lze rozepsat na dvě poloreakce – oxidaci a redukci.
  - Oxidace – atom odevzdává elektrony. Oxidační číslo se zvyšuje.
  - Redukce – atom přijímá elektrony. Oxidační číslo se snižuje.
  - $Fe + CuSO_4 \rightarrow FeSO_4 + Cu$
- Hoření – prudká oxidace (nejčastěji) kyslíkem. Jedná se o velmi exotermní reakci.

Typy chemických reakcí

- Podle skupenského stavu reaktantů
  - *Homogenní* – skupenství reaktantů i produktů je kapalné nebo plynné.
    - $H_2\ (g) + Cl_2\ (g) \rightarrow 2\ HCl\ (g)$
  - *Heterogenní* – reakce probíhá na rozhranní fází.
    - $WO_3\ (s) + NiO\ (s) \rightarrow NiWO_4\ (s)$
    - $MoO_3\ (s) + 3\ H_2\ (g) \rightarrow Mo\ (s) + 3\ H_2O\ (g)$
    - $2\ NaOH\ (aq) + CO_2\ (g) \rightarrow Na_2CO_3\ (aq) + H_2O\ (l)$

Typy chemických reakcí

- Podle tepelného zabarvení
  - *Exotermické reakce* – teplo se při reakci uvolňuje.
  - *Endotermické reakce* – teplo se při reakci spotřebovává.

Hnací síla chemických reakcí

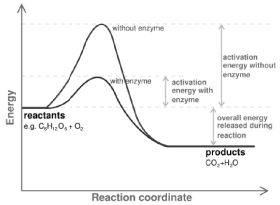
- *Entropie S* – míra neuspořádanosti systému.
- *Entalpie H* – stavová veličina, vyjadřuje množství tepelné energie uložené v jednotkovém množství látka.
- $G = H - TS$
- *Gibbsova energie G* – stavová veličina, která svou změnou charakterizuje ochotu systému k spontánním procesům.
- $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$
- Pokud je hodnota ΔG záporná, reakce probíhá samovolně.

Chemická kinetika

- Chemická kinetika se zabývá studiem časového průběhu chemických reakcí.
- *Formální reakční kinetika* – popisuje časový průběh reakcí z makroskopického hlediska. Zavádí pojem *rychlosti reakce*.
- *Nauka o reakčních mechanismech* – popisuje reakci jako sled elementárních reakcí.

Reakční rychlost

- Aby mohla proběhnout chemická reakce mezi látkami, musí být splněny tři podmínky:
  - částice reaktantů se musí srážet – pokud nebudou částice v kontaktu, k reakci nedojde
  - při srážkách musí mít částice správnou vzájemnou orientaci – aby mohla reakce proběhnout, musí se částice srazit tak, aby se k sobě přiblížili reagující části molekul
  - částice musí mít při srážce dostatečnou energii – na cestě od reaktantů k produktům musí systém překonat energetickou bariéru (aktivační energie)



Reakční rychlost

- Rychlost chemické reakce je časová změna látkové koncentrace kterékoliv komponenty reakce, dělená příslušným stechiometrickým koeficientem.
- Rychlost chemické reakce je vždy kladná.
- aA + bB → cC + dD
- $v = -\frac{1}{a}\frac{d[A]}{d\tau} = -\frac{1}{b}\frac{d[B]}{d\tau} = +\frac{1}{c}\frac{d[C]}{d\tau} = +\frac{1}{d}\frac{d[D]}{d\tau}$
- Rychlost reakce je závislá na koncentracci výchozích látek a v průběhu reakce se mění uměrně ke změnám těchto koncentrací.
- $v = k[A]^{\alpha}[B]^{\beta}...$
- Konstanta *k* je rychlostní konstanta reakce.
- Exponenty α a β jsou *dílčí řády reakce*. součet všech dílčích řádů reakce označujeme jako *celkový řád reakce*.
- Exponenty α a β mohou, ale nemusí být totožné se stechiometrickými koeficienty *a* a *b*.

Faktory ovlivňující reakční rychlost

- Teplota
  - Zahřátím reakční směsi dodáme do systému energii, což vede ke zvýšení rychlosti reakce. Vliv teploty na rychlost reakce popisuje *Arrheniova rovnice*.

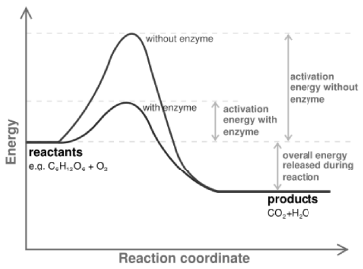
$$k = Ze^{-\frac{E^a}{RT}}$$

  - kde k je rychlostní konstanta, Z je frekvenční faktor (konstanta, která vyjadřuje pravděpodobnost s jakou dojde k účinné srážce reagujících molekul), E^a je aktivační energie, R je molární plynová konstanta a T je termodynamická teplota.
  - V případě, že je reakce exotermní, může zvýšení teploty způsobit pokles rychlosti reakce.
- Koncentrace – s rostoucí koncentrací roste i pravděpodobnost účinné srážky reagujících molekul.
- Tlak – pokud je alespoň jeden reaktant plynný, lze rychlost reakce ovlivnit tlakem. Příčina je stejná jako u koncentrace, zvýšením tlaku se zvýší pravděpodobnost srážky molekul.

Faktory ovlivňující reakční rychlost

- Katalyzátor – přítomnost katalyzátoru mění reakční rychlost. Tento efekt je způsoben změnou mechanismu reakce, katalyzátor mění reakční koordinátu reakce.
  - Katalyzátory, které zvyšují reakční rychlost se nazývají *pozitivní katalyzátory.*
  - Katalyzátory, které snižují reakční rychlost se nazývají negativní *katalyzátory (inhibitory)*.

Reakční koordináta



- Reakční koordináta je abstraktní jednorozměrná souřadnice, která popisuje postup reakce v reakční cestě.
- Obrázek znázorňuje rozdíl mezi reakční koordinátou katalyzované a nekatalyzované reakce.
- Nekatalyzovaná reakce má podstatně vyšší energetickou bariéru, kterou je nutno překonat, aby chemická reakce mohla proběhnout.