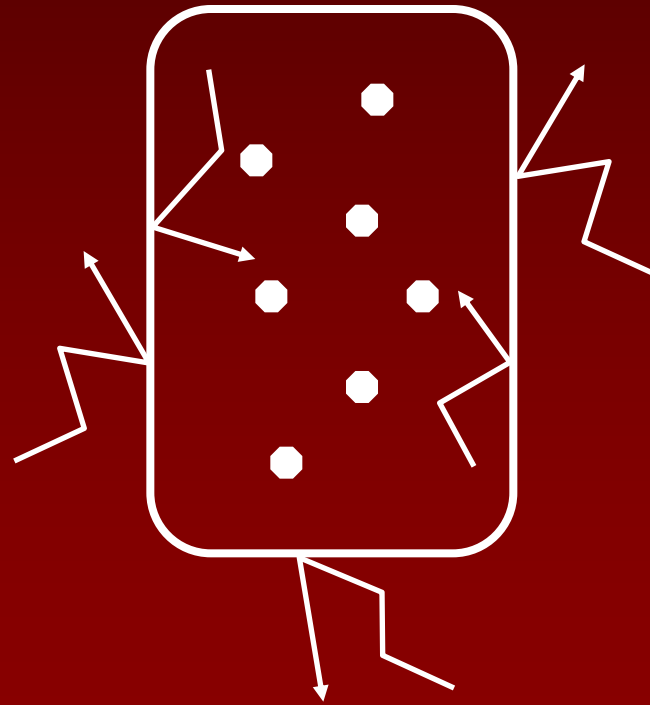
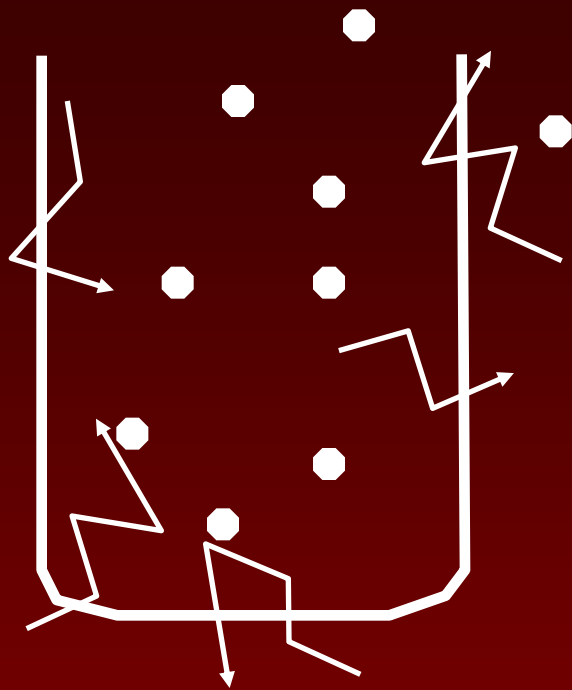


# Termodinamika



# Energie

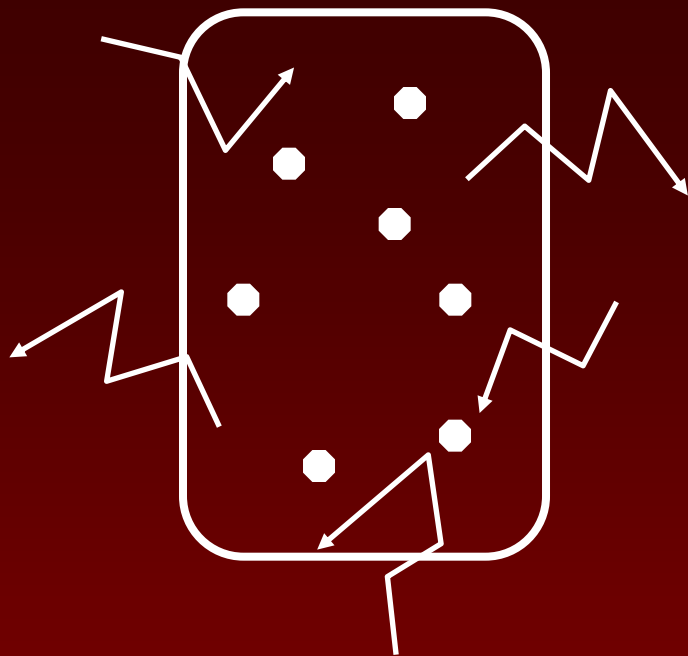
- **Schopnost konat práci**
- **Práce v chemii – řízená změna energie vycházející z děje (chemického)**
- **Energie - kynetická, solární, termální, chemická, potenciální**



## Otevřená soustava

**Termodynamika studuje fyzikální a chemické děje v systémech (soustavách) z hlediska energie**

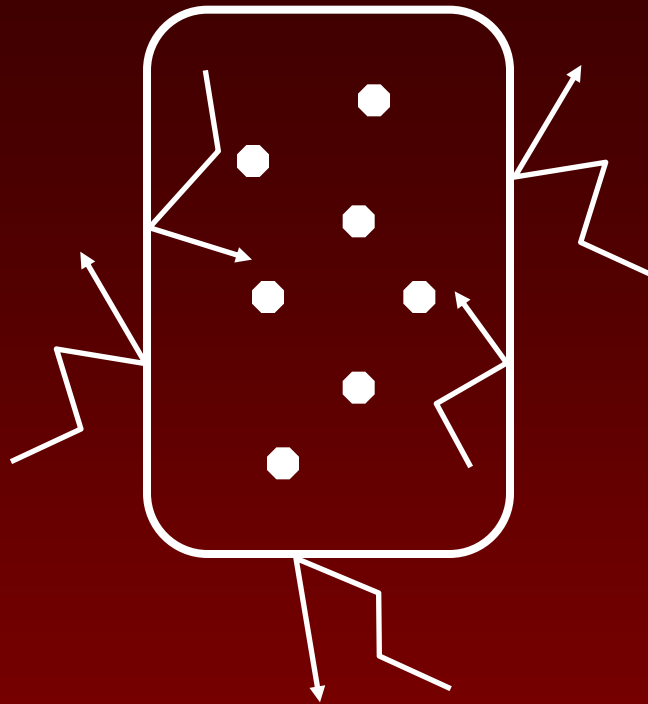
**Proč některé reakce produkují teplo ( $\text{NaOH} + \text{H}_2\text{O}$ ) a jiným musíme teplo dodávat?**



## Uzavřená soustava

**K popisu stavu, v jakém se soustava nachází používáme STAVOVÉ veličiny**

**Tlak –  $P$ ; Hmotnost –  $m$ ; Teplota –  $T$ ; Objem –  $V$**



# Izolovaná soustava

(nereálná)

Extenzivní stavové vel. závisí na velikosti soustavy

$m, V$



## Izobarický a izotermický děj

**Intenzivní stav. vel. nezávisí na velikosti soustavy**

**$T, P$**

**Snaha o udržení alespoň jedné intenzivní vel.  
konstantní – proč?**



# Termochemie

## Tepelné zabarvení reakcí

### Entalpie – H

Extenzivní stavová veličina – vlastnost látek.

Nelze ji absolutně měřit – relativní hodnota  
vztažená ke standardnímu stavu

Standardní stav  $\rightarrow$  298,15 K, 101,325 kPa  $\rightarrow$  H=0

# Termochemie



## Tepelné zabarvení reakcí

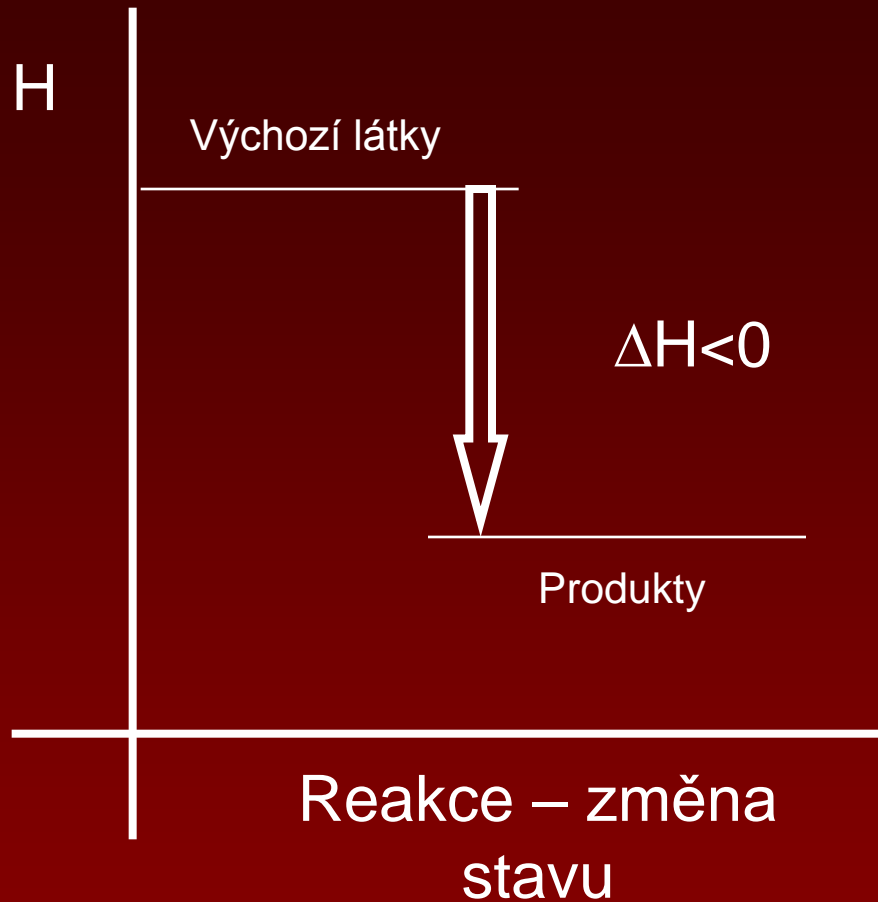
Reakční teplo –  $\Delta H$

množství tepla, které soustava vymění s okolím při reakci v rozsahu jednoho molu reakčních přeměn za konstantního tlaku. Jednotka - [J] (jouly)

Jedná se o stavovou veličinu?

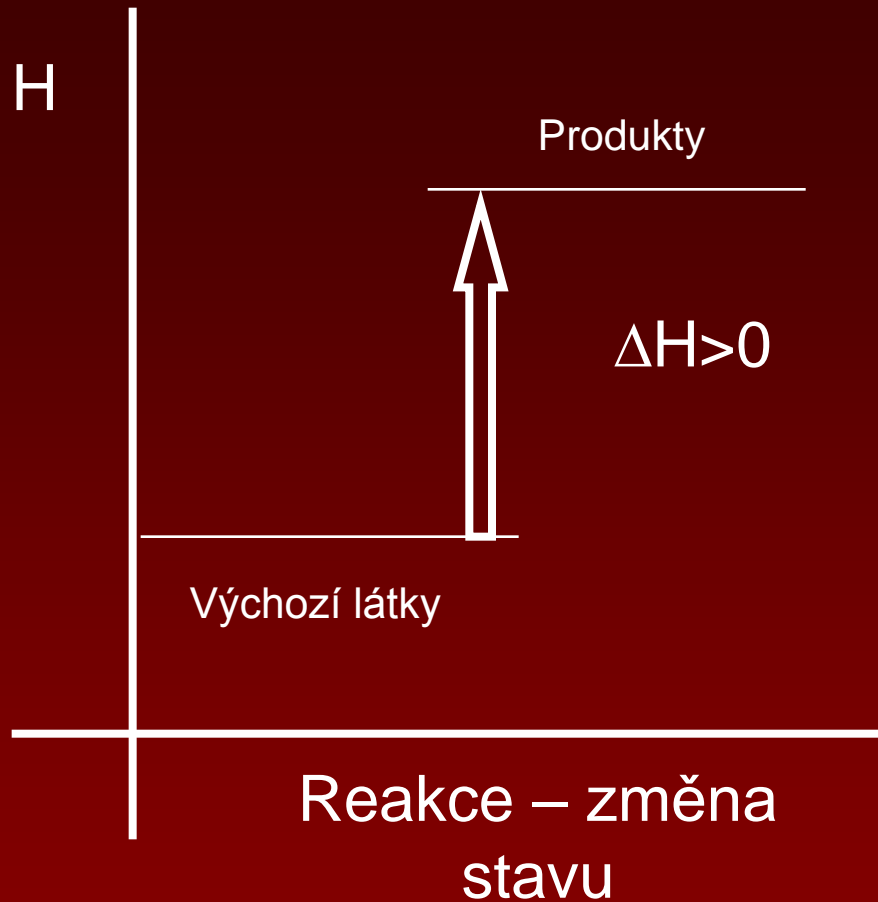


# Termochemie



**Exotermní reakce – záporná změna reakčního tepla  
– systém ztratil energii (ochladil se – zahřál okolí)**

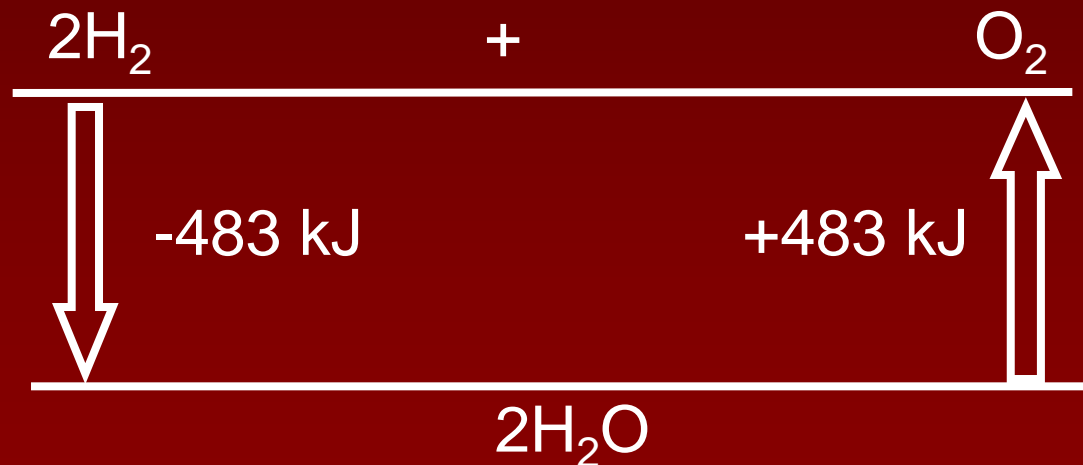
# Termochemie



**Endotermní reakce – kladná změna reakčního tepla  
– systém přijal energii (získal teplo – ochladil okolí)**

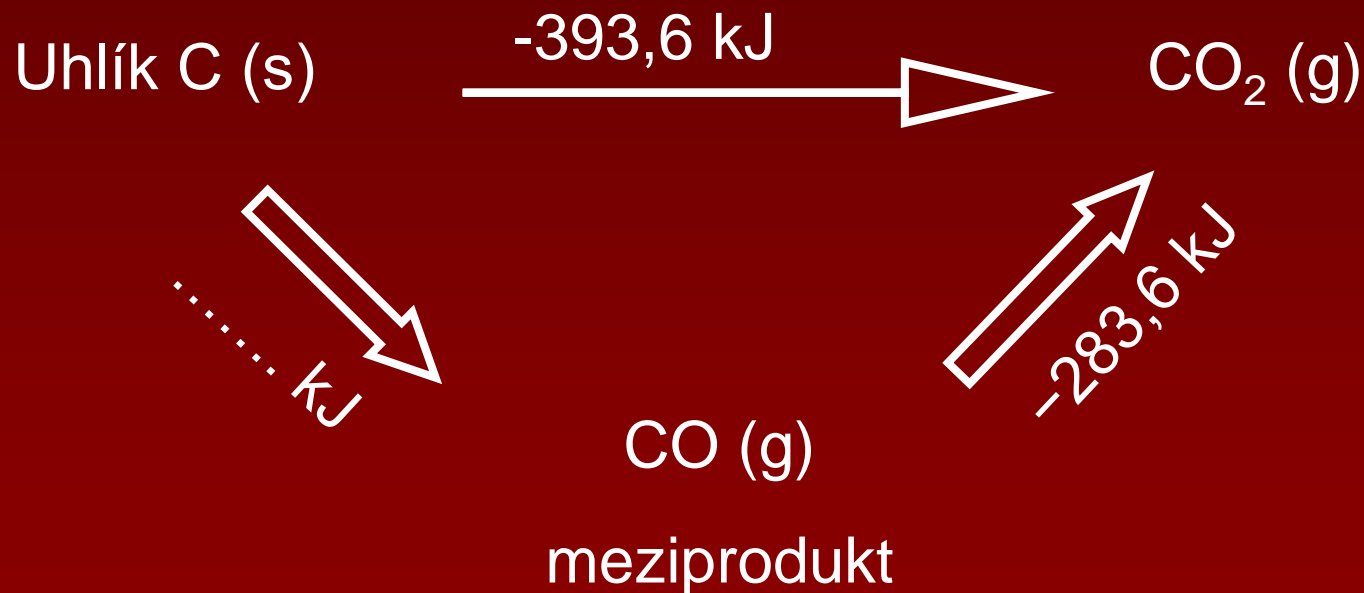
# Termochemie

I. Reakční teplo přímé a protisměrné reakce je stejné až na znaménko (Laplace–Lavoisier)



# Termochemie

**II. Výsledné reakční teplo reakce nezávisí na průběhu, pouze na koncových stavech (Hess)**



# Termochemie

**Standardní slučovací teplo →**

$$\Delta H^0_{298} \text{ (sluč) [Kj.mol}^{-1}\text{]}$$

**Je to reakční teplo, které se uvolní při vzniku 1 molu látky (sloučeniny) přímo z prvků.**

**Standardní slučovací tepla jsou nulová pro prvky  
Pro sloučeniny se určují a upřesňují měřením  
(empiricky)**

**Umožňují spočítat reakční tepla reakcí**

# Termochemie

**Výpočet reakčního tepla ze standardních slučovacích tepel reaktantů a produktů**

$$\Delta H^0_{298} = \sum \Delta H^0_{\text{sluč}} (\text{produkty}) - \sum \Delta H^0_{\text{sluč}} (\text{reakt.})$$

**Standardní sluč. tepla jednotlivých látek je třeba násobit stechiometrickými koef. dle rovnice rce.**

# Termochemie

**Standardní spalné teplo →**

$$\Delta H^0_{298 \text{ (spal)}} [\text{Kj.mol}^{-1}]$$

**Je to teplo, které se uvolní při spálení 1 molu látky (sloučeniny) na nejstálější oxidy (snažší určení).**

**Pro sloučeniny se určují a upřesňují měřením (empiricky)**

**Umožňují spočítat reakční tepla reakcí**

# Termochemie

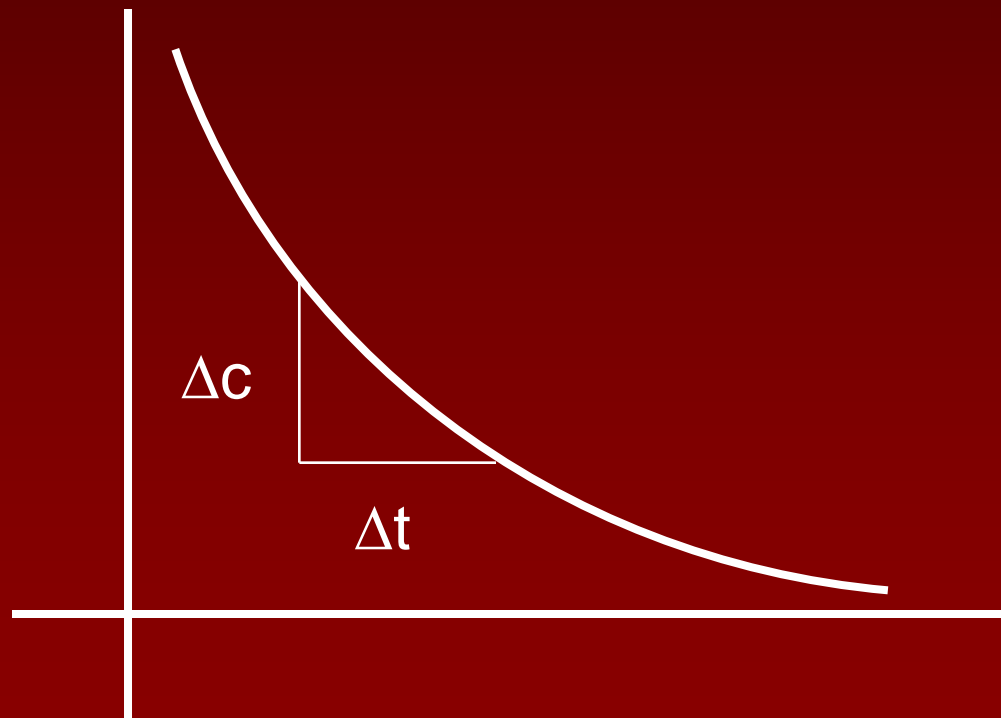
**Výpočet reakčního tepla ze standardních spalovacích tepel reaktantů a produktů**

$$\Delta H^0_{298} = \sum \Delta H^0_{\text{spal}} (\text{reaktanty}) - \sum \Delta H^0_{\text{spal}} (\text{produkty})$$

**Standardní spalná tepla jednotlivých látek je třeba násobit stechiometrickými koef. dle rovnice rce.**



# Kinetika



# Reakční kinetika

**Zabývá se rychlostí reakcí z různých hledisek**

**Na atomární úrovni lze reakci nahlížet jako sérii srážek doprovázenou zánikem původních a vznikem nových vazeb.**

**Mechanismus reakce popisují v zásadě dvě teorie:**

**Teorie aktivních srážek (TAS)**

**Teorie aktivovaného komplexu (TAK)**

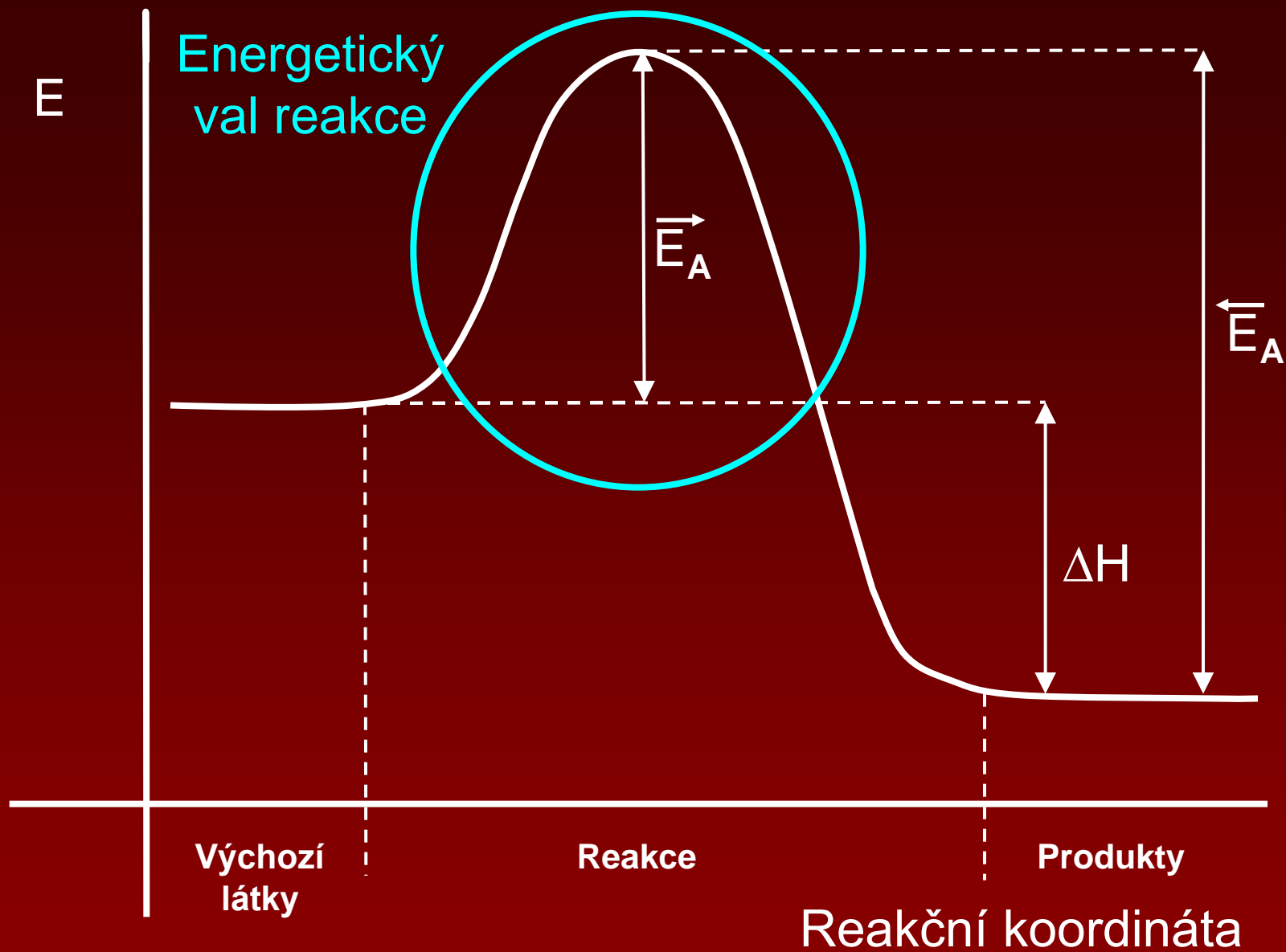
# Teorie aktivních srážek

Srážka molekul je pro reakci nezbytná. Kolidující částice musí mít navíc dostatečnou energii →

musí dojít ke zrušení původních vazeb =  
= endotermní děj = spotřeba energie.

Minimální energie částic pro účinnou srážku –

**AKTIVAČNÍ ENERGIE  $E_A$ .**



# Teorie aktivních srážek

**Vnitřní energii částic lze ovlivnit dodáním energie ve formě tepla.**

**Počet efektivních srážek v systému roste s rostoucí teplotou systému**

**Tzn.: Více částic bude dosahovat aktivační energie**

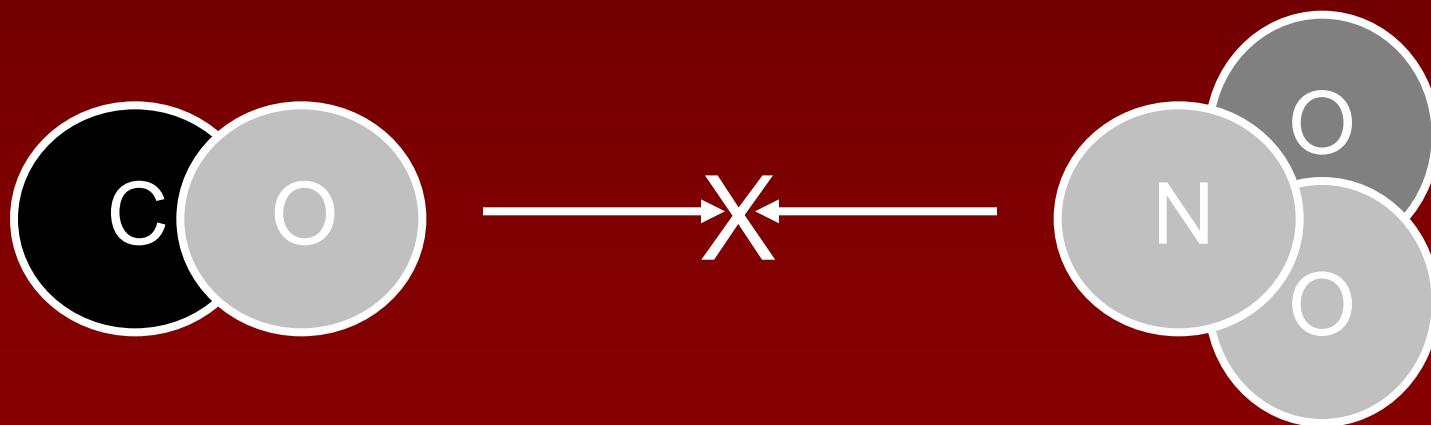
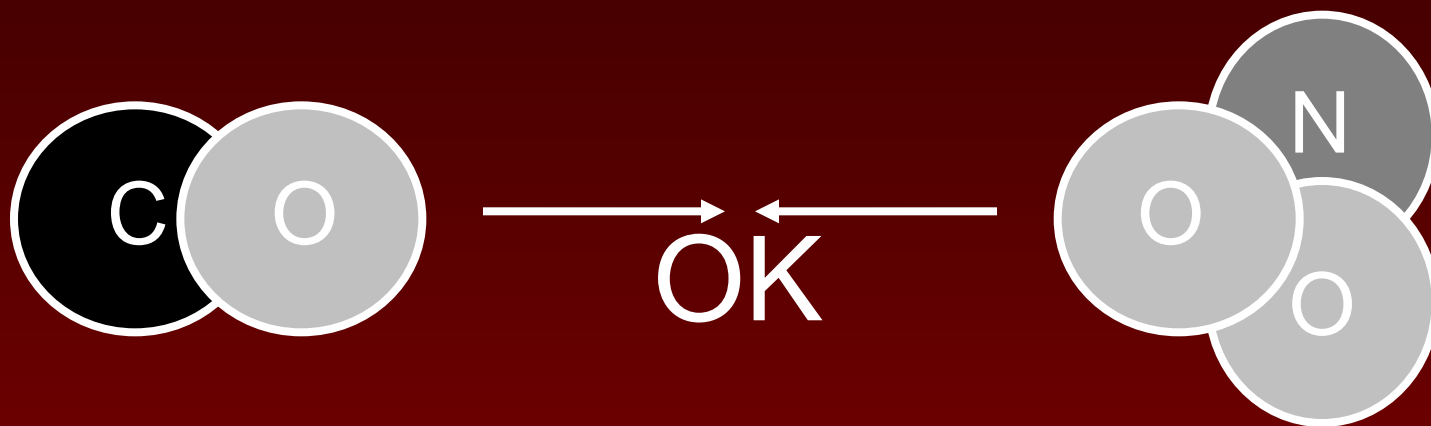
**Tzn.: Snížením teploty lze reakci efektivně zpomalovat (praktické využití – vymyslete tři příklady)**

# Teorie aktivních srážek

**Efektivita reakce nezávisí pouze na vnitřní energii č.**

**Může reakce proběhnout, pokud se molekuly srazí, ale nesprávnými „konci“?**

**Další podmínkou pro efektivní srážku je VHODNÁ PROSTOROVÁ ORIENTACE reagujících molekul**



# Teorie aktivovaného komplexu

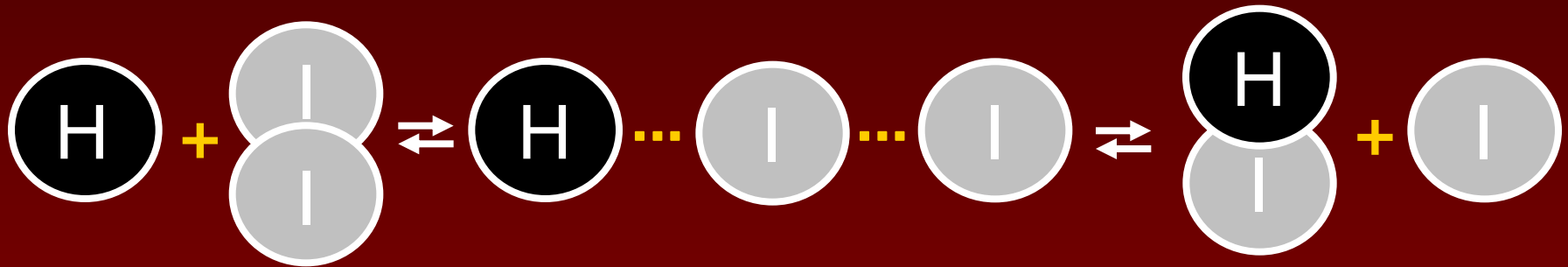
**Množství pozorovaných efektivních srážek  
převyšovalo teoretický odhad založený na TAS**

**Tzn.: V průběhu reakce existuje  
mechanismus, který pomáhá snižovat  $E_A$**

**Tímto mechanismem může být vznik**

**AKTIVOVANÉHO KOMPLEXU**





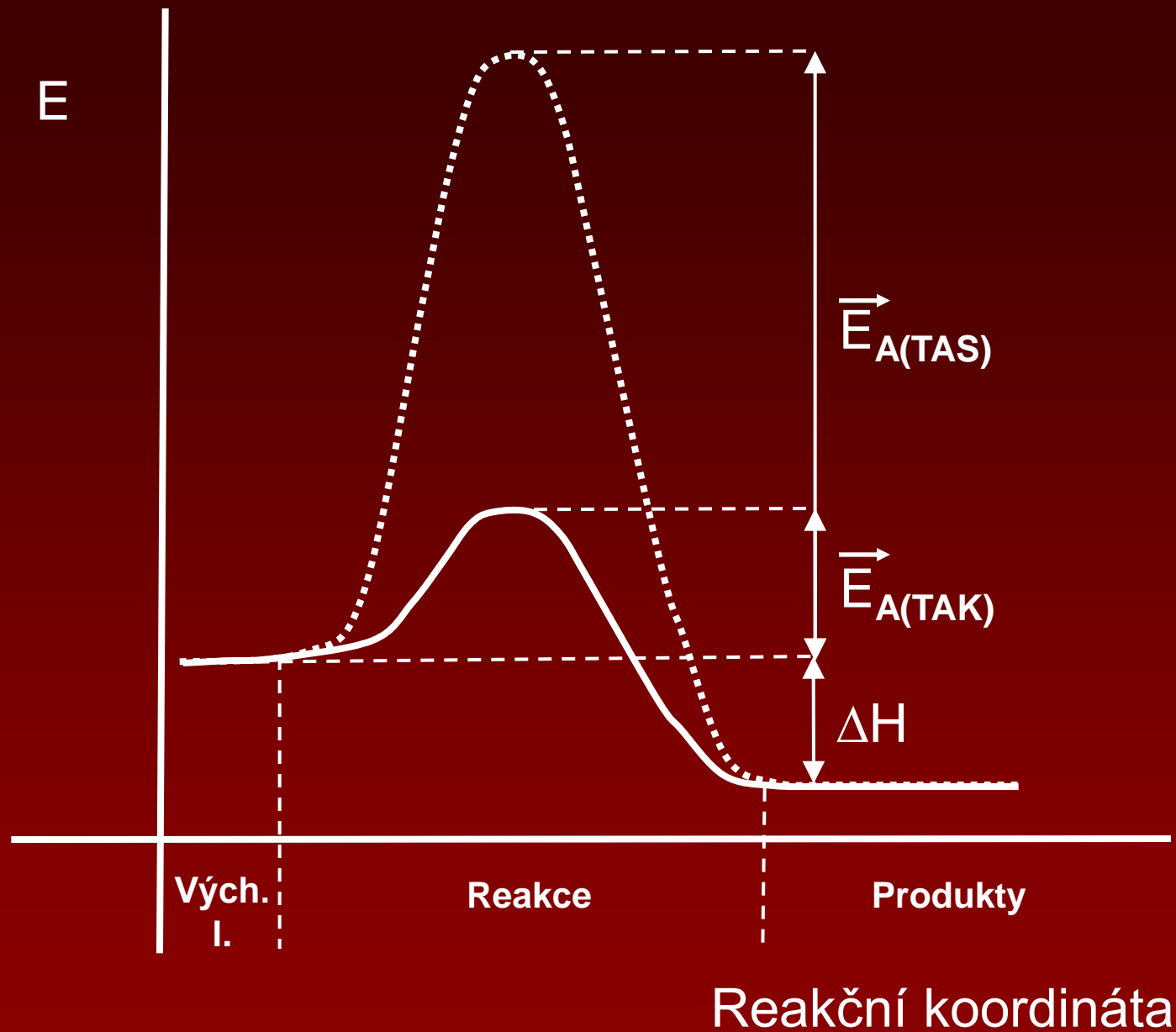
**Akt. komplex – SOUČASNĚ oslabení starých (I-I) a tvorba nových vazeb (H...I)**

**Oslabení starých vazeb – spotřeba E**  
**Tvorba nových vazeb – uvolnění E**

**Probíhá současně → energetická bilance je proto příznivější než u TAS**

**Lépe odpovídá zkušenosti (empirickým hodnotám)**

**Porovnej teoretické hodnoty TAS a TAK v grafu**



# Reakční rychlost

Obecně pro zvratnou rci  $a A + b B \rightleftharpoons c C + d D$

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

**[A]** – molární koncentrace látky A

**a** – stechiometrický koeficient látky A

**Δ[A]** – změna molární koncentrace látky A

**Δ t** - změna času

# Reakční rychlost

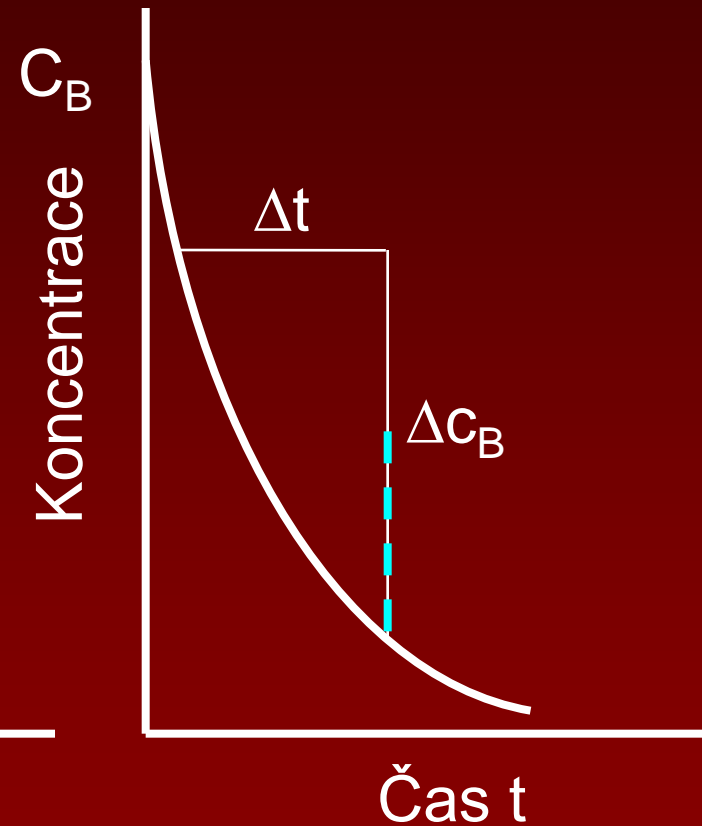
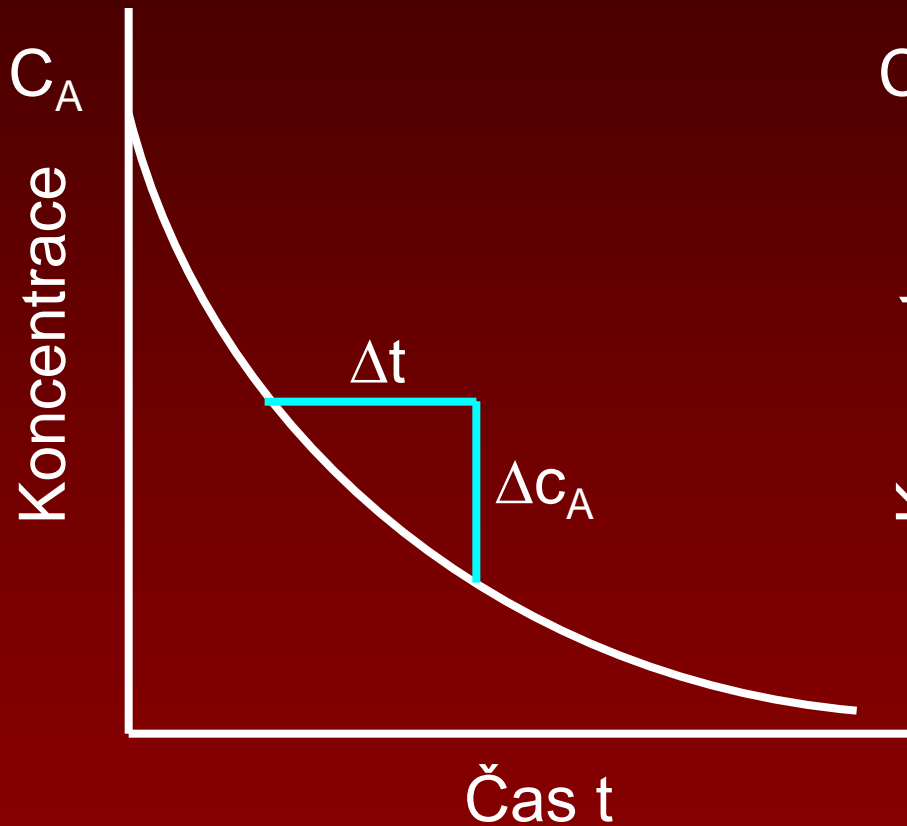
Rychlost reakce lze definovat přes úbytky jednotlivých látek

$$v_a = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t} \quad v_b = -\frac{\Delta[B]}{\Delta t} \quad v_d = \frac{\Delta[D]}{\Delta t} \quad (\text{doplň samostatně C})$$

Je třeba uvádět indexem, přes kterou látku rychlost vyjadřuji, protože →

$$\frac{\Delta[A]}{\Delta[B]} = \frac{a}{b} = \frac{v_a}{v_b} \quad \mathbf{a} \quad \frac{\Delta[A]}{\Delta[D]} = \frac{a}{d} = \frac{v_a}{v_d}$$

# Reakční rychlost



**Která reakce probíhá rychleji?**

# Reakční rychlost

Rychlost reakce lze zjistit také z okamžitých koncentrací reagujících látek (Gultberg a Waage):



$$v_1 = k_1 \cdot [A]^a \cdot [B]^b$$

$$v_2 = k_2 \cdot [C]^c \cdot [D]^d$$

$k_1, k_2$  = rychlostní konstanty. Závislé na T a typu reakce – tabelováno

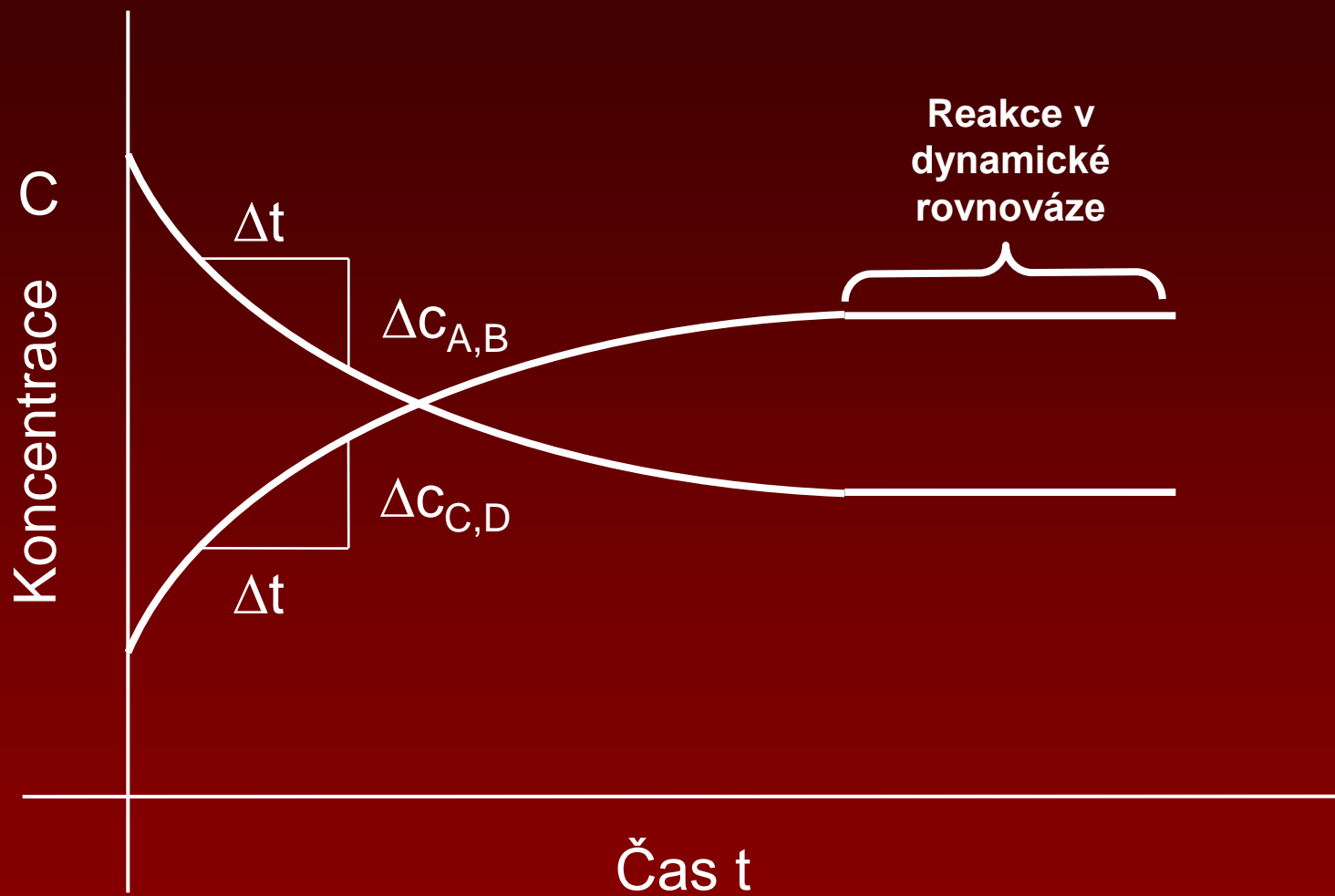
# Reakční rychlost

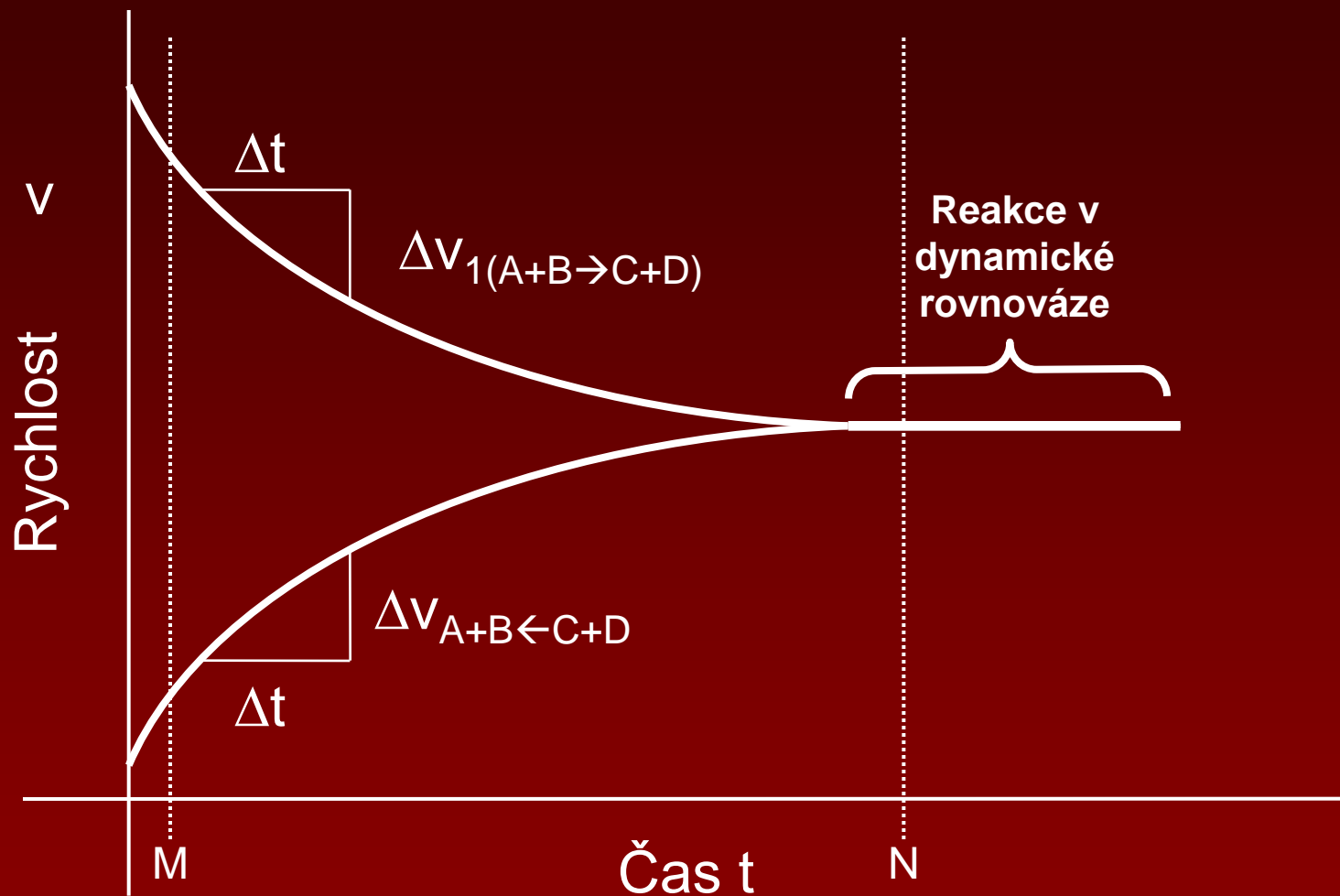
**Parametr, která má největší vliv na rychlost chemické reakce:**

**MOLÁRNÍ KONCENTRACE**  
reaktantů/produktů

**Koncentrace reagujících látek se v průběhu reakce mění - vyjádřete do grafu jak**







# Reakční rychlost

**V bodě M:**



**V bodě N:**



# Reakční rychlost

$$V_1 = k_1 \cdot [A]^a \cdot [B]^b \quad V_2 = k_2 \cdot [C]^c \cdot [D]^d$$

Od bodu N můžeme psát:

$$v_1 = v_2$$

$$k_1 \cdot [A]^a \cdot [B]^b = k_2 \cdot [C]^c \cdot [D]^d$$

$$\frac{k_1}{k_2} = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

$$K = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

# Reakční rychlost

$$K = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

**K - rovnovážná konstanta reakce**

**[A],[B],[C],[D] v tomto vztahu – rovnovážné koncentrace**

**Jak prakticky poznám, že systém dosáhl v reakci dynamické rovnováhy? .....**

# Reakční rychlost příklad i

Po ustavení rovnováhy v roztoku byly naměřeny následující koncentrace látek:

$$\text{N}_2 = 0,425$$

$$\text{H}_2 = 0,575$$

$$\text{NH}_3 = 0,150$$

Vypočítejte rovnovážnou konstantu reakce

# Reakční rychlost příklad ii

Po ustavení rovnováhy v roztoku byly naměřeny následující koncentrace látek:

$$\text{H}_2 = 5,1 \cdot 10^{-5}$$

$$\text{I}_2 = 3,1 \cdot 10^{-3}$$

$$\text{HI} = 2,7 \cdot 10^{-3}$$

Vypočítejte rovnovážnou konstantu reakce

# Reakční rychlost příklad iii

Rovnovážná konstanta  $K_c$  reakce



má hodnotu  $K_c = 56,4$  (při  $721,15^\circ\text{K}$ ).

Jaké množství HI obsahuje rovnovážná směs, když smísíme:

**a) 1 mol  $\text{H}_2$  a 1 mol  $\text{I}_2$**

**b) 8 mol  $\text{H}_2$  a 1 mol  $\text{I}_2$**



# Reakční rychlost

**Vliv teploty na rychlost (Van 't Hoff):**

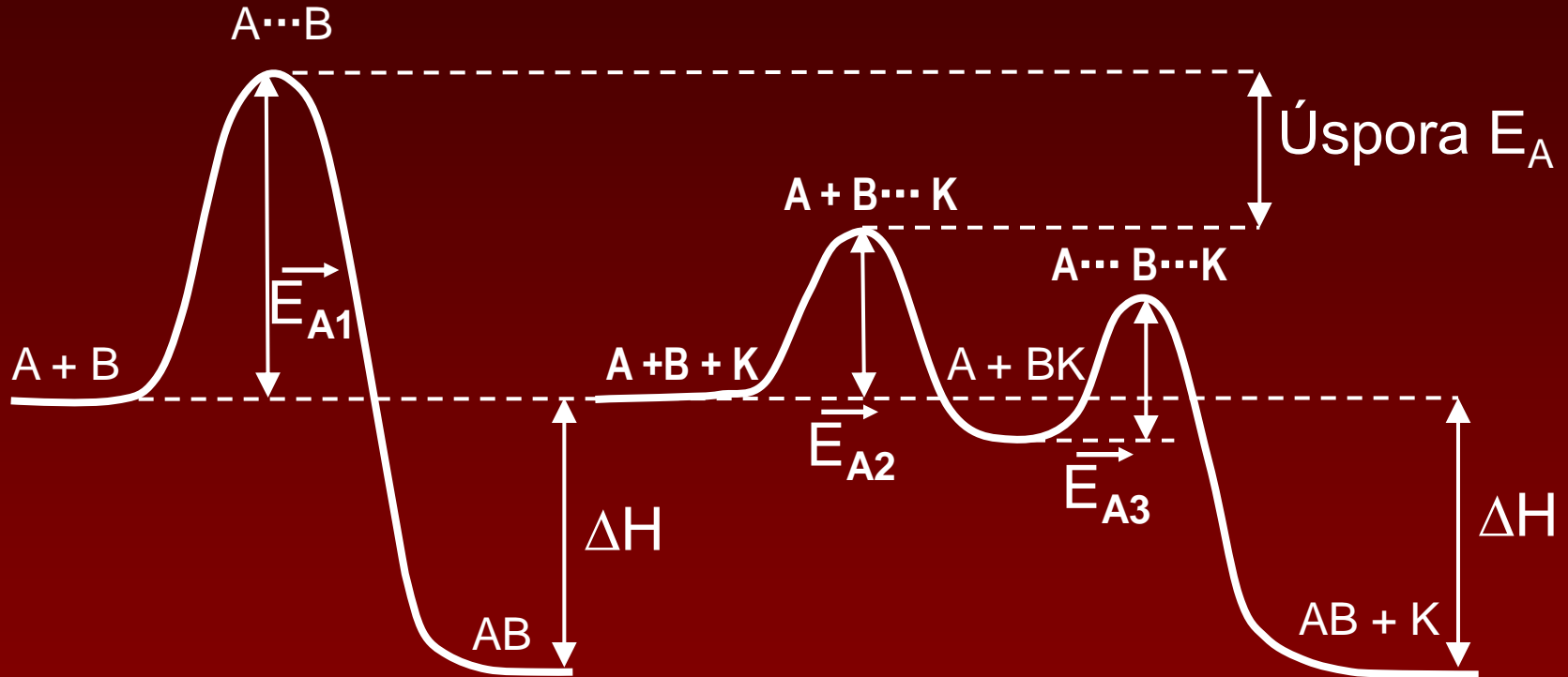
$$\Delta T = +10^{\circ}\text{C} \rightarrow \Delta v \sim 4.v$$

**POZOR – mění se rovnovážná konstanta**

**Rovnovážná konstanta je funkcí teploty a v tabulkách se udává pro .....**

E

# Reakční rychlost



**Vliv katalyzátorů K na rychlost rce**

Reakční koordináta