

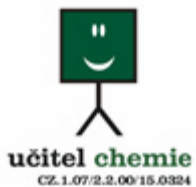


Investice do rozvoje vzdělávání

# Inovace profesní přípravy budoucích učitelů chemie

**CZ.1.07/2.2.00/15.0324**

*Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.*



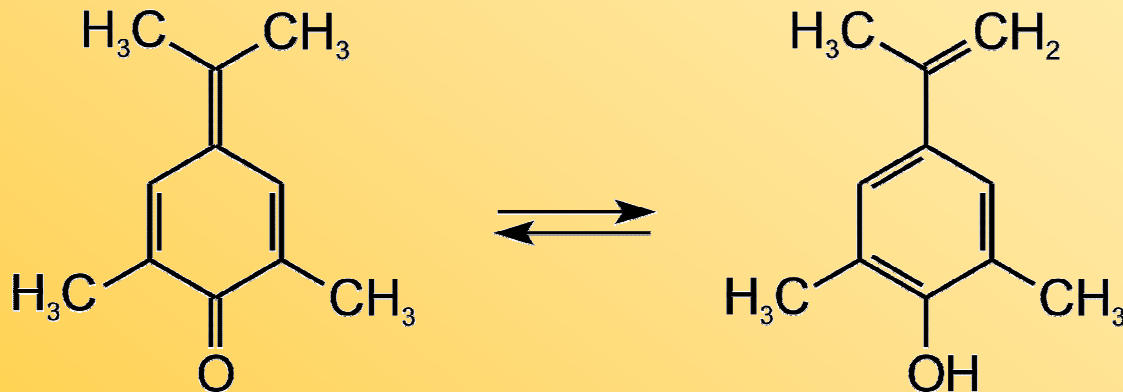
Investice do rozvoje vzdělávání

# Chemické reakce

*Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.*

# CHEMICKÉ REAKCE

- z mikroskopického hlediska lze za *chemickou reakci* považovat jakýkoliv proces spojený s přestavbou atomové a elektronové struktury látek, resp. reorganizací stávajícího uspořádání vazeb
- z makroskopického pohledu se jedná o děj, při němž určité látky, *reaktanty*, zanikají, a jiné, *produkty*, se vytvářejí

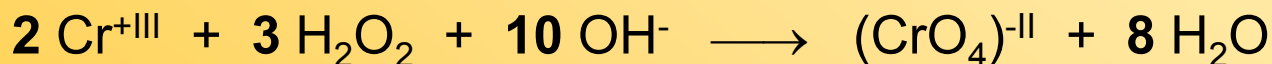


- reaktivita látek je důsledkem více či méně omezené stability jejich atomové a elektronové struktury
- omezenou tendenci ke změnám lze zpravidla překonat *změnou vnějších fyzikálních podmínek* nebo *zavedením vhodných látek* do daného systému

## Zápis chemické reakce - chemická rovnice

- formální zápis chemické reakce – vyjadřuje stechiometrii reakce a přesně specifikuje identitu reaktantů a produktů
- podmínky správnosti: *zachování druhu a počtu atomů, zachování elektrického náboje*

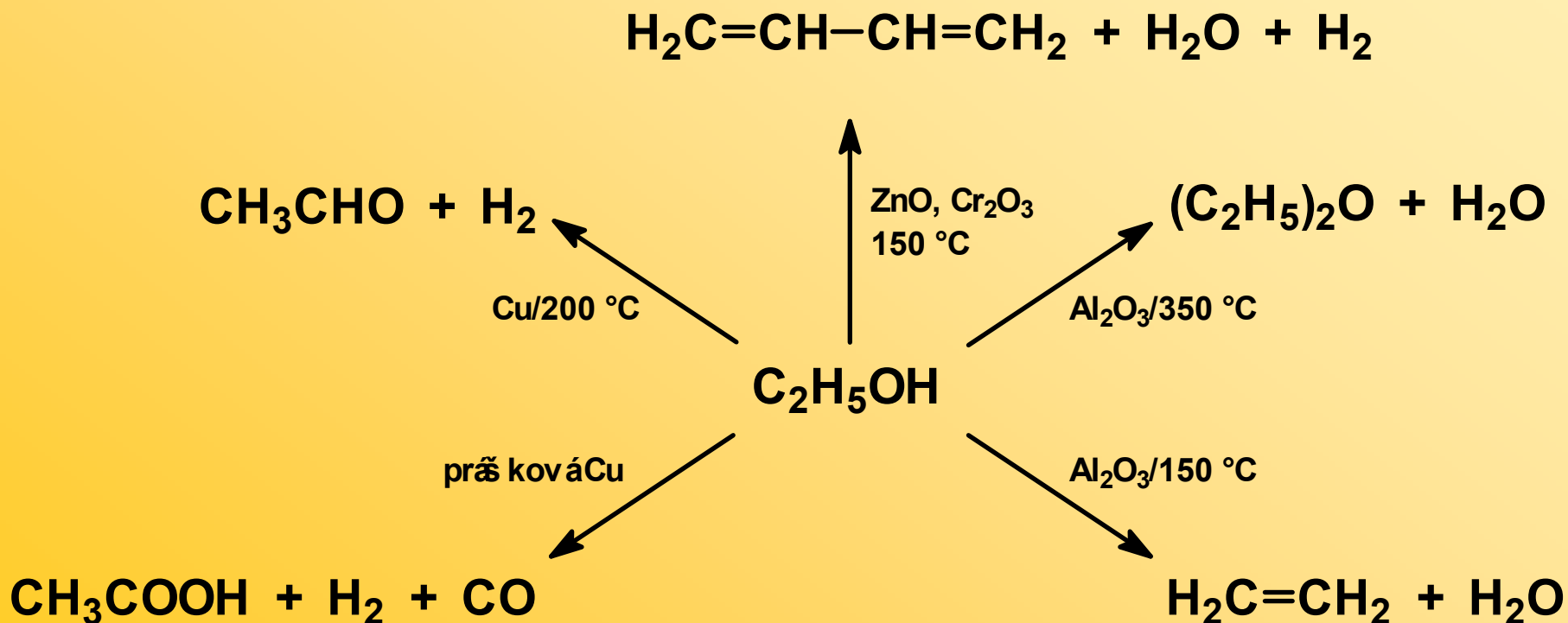
### Příklad:



- zápis může obsahovat další zpřesňující informace:
  - symbol skupenského stavu v závorce za příslušnou sloučeninou – (s), (l), (g)
  - plynný produkt z reakce unikající – ↑
  - vylučující se z reakční směsi jako sraženina – ↓
- k šipce zápisu reakce lze připojit údaj o teplotě, tlaku, uvádí se katalyzátor, prostředí (rozpouštědlo)
- vedle rovnice lze uvést údaj o tepelné bilanci reakce

## Reakční schéma I

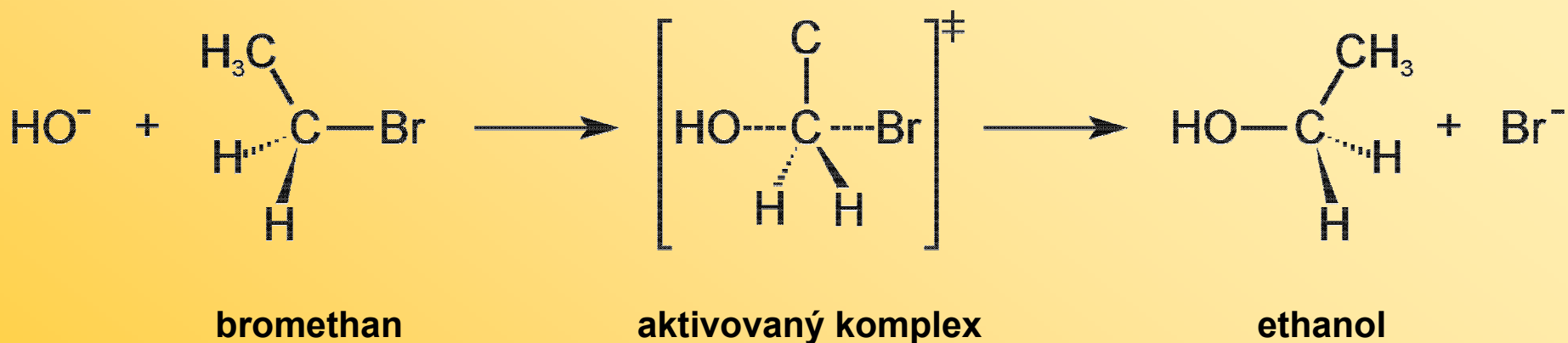
- kvalitativní charakterizace chemických dějů
- vyjadřuje reaktivitu, respektive reakční možnosti určité látky



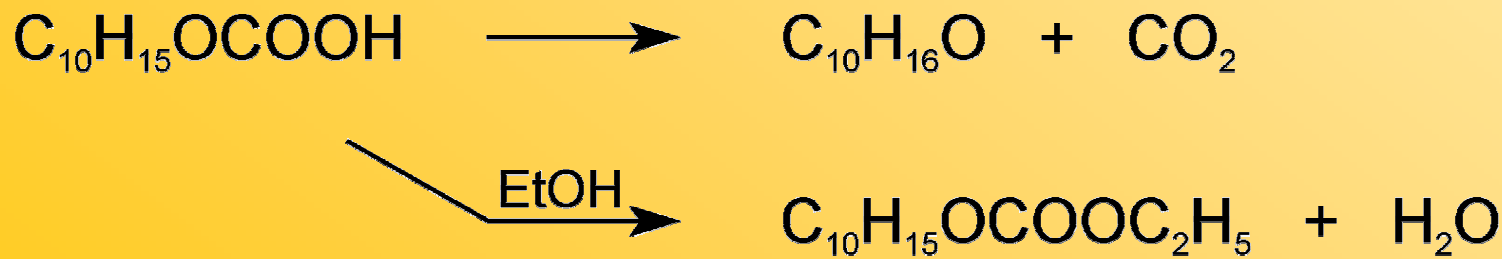
## Reakční schéma II

– vyjadřuje sled reakcí v probíhající chemickém systému (následně i paralelně)

*nukleofilní substituce*

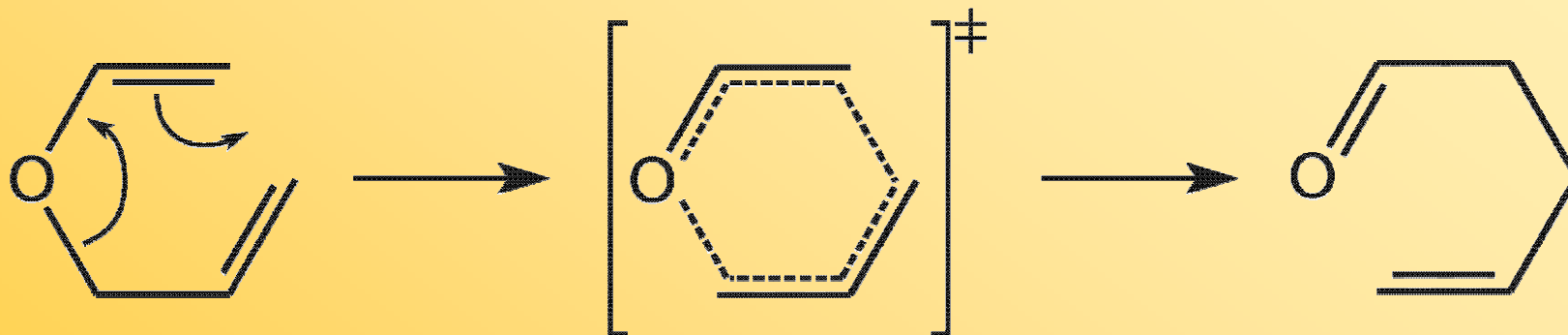


rozklad kyseliny *d*-kamfokarboxylové za zvýšené teploty v absolutním ethanolu



### Reakční schéma III

- naznačuje přeskupování funkčních skupin či elektronové hustoty
- intramolekulární přesmyk vinyletheru na aldehyd*



## **Typy chemických reakcí**

– reakce lze formálně klasifikovat dle řady různých hledisek

**skupenský stav reaktantů**

*homogenní systém, heterogenní systém*

**stechiometrie reaktantů**

*procesy skladné, rozkladné, substituční, podvojně záměny*

**redoxní změna substrátu**

**typ, charakter a účinek reaktantu (činitla) na substrát**

*chlorace, nitrace, sulfonace, ...*

**reakce substrátu s rozpouštědlem**

*hydrolýza, solvolýza*

**mechanismus reakce**

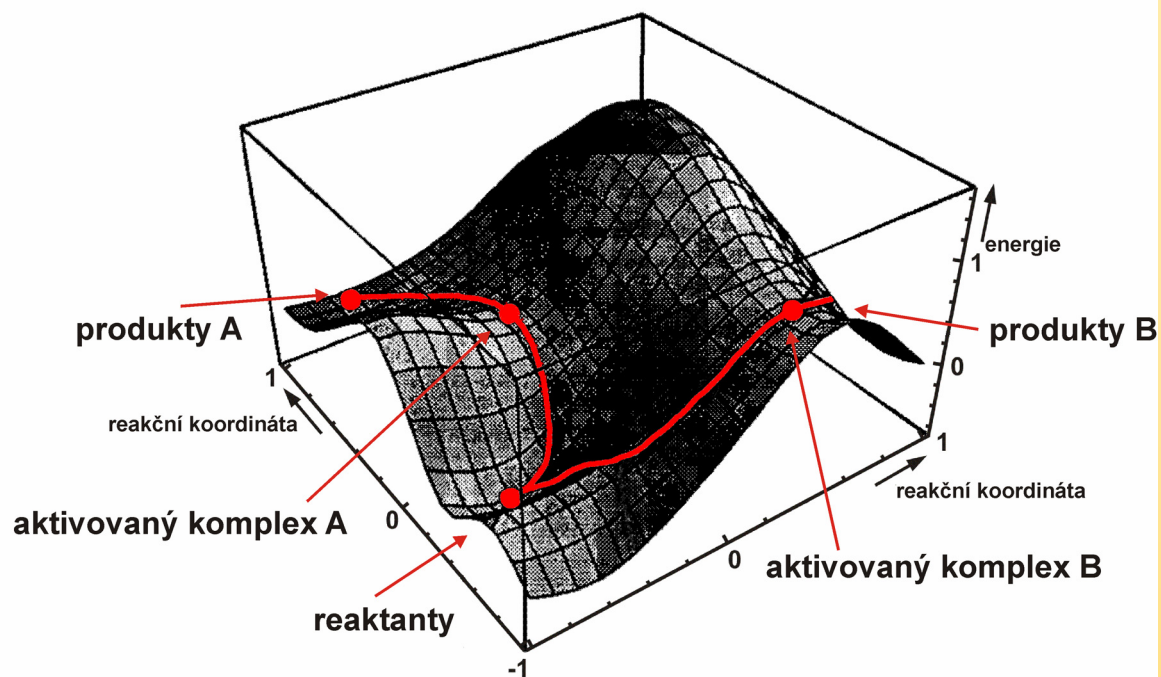
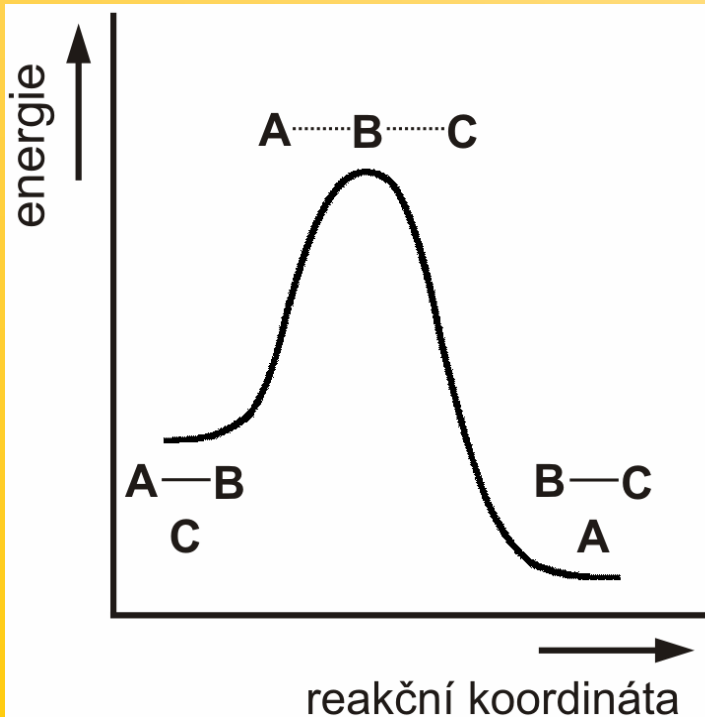
*reakce molekulové, iontové, radikálové*

*reakce oxidačně-redukční, acidobazické, koordinační*



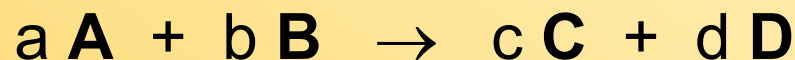
## Mechanismus chemické reakce

- cesta, kterou je proces chemické přeměny realizován na atomární úrovni
- počet reakčních kroků může být různý – jednokrokové x vícekrokové reakce
- mechanismus je reprezentován *reakční koordinátou* – geometrická veličina vystihující charakter a míru změn ve vzájemném uspořádání atomů v reagujícím systému
- reakční koordináta může být vyjádřena například měnící se délkou chemické vazby, velikostí vazebného úhlu, v případně složitějších molekul a reakcí potom různými kombinacemi těchto parametrů



## Rychlost chemických reakcí

- rychlost  $v$ , se kterou se reaktanty mění na produkty
- lze obecně postihnout sledováním změn koncentrace jednotlivých komponent reakčního systému



$$v = -\frac{1}{a} \cdot \frac{\Delta c(\mathbf{A})}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \cdot \frac{\Delta c(\mathbf{B})}{\Delta t}$$

$$v = +\frac{1}{c} \cdot \frac{\Delta c(\mathbf{C})}{\Delta t} = +\frac{1}{d} \cdot \frac{\Delta c(\mathbf{D})}{\Delta t}$$

kde  $c(\mathbf{A}) - c(\mathbf{D})$  jsou molární koncentrace jednotlivých reaktantů a produktů;  
 $a - d$  jsou stechiometrické koeficienty;  $t$  je čas

## ***Srážková teorie reakční rychlosti***

- reakce mezi dvěma molekulami je podmíněna jejich dostatečnou energií a vhodnou orientací  $\Rightarrow$  molekuly musí být aktivovány
- Arrheniova rovnice pro *rychlostní konstantu*  $k$

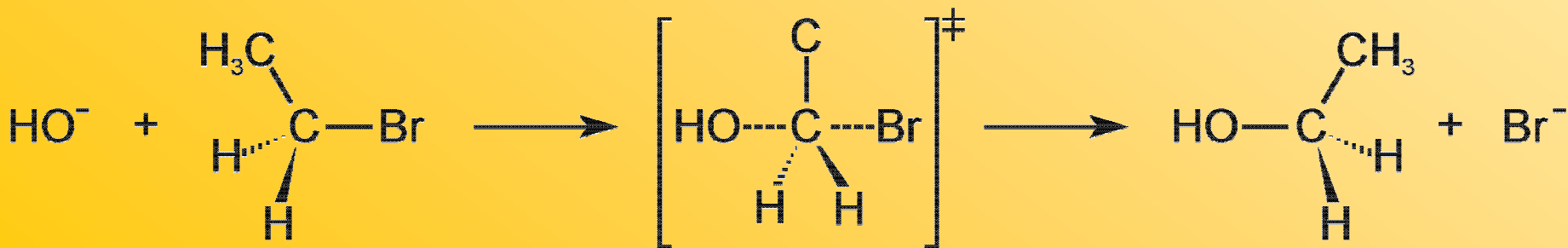
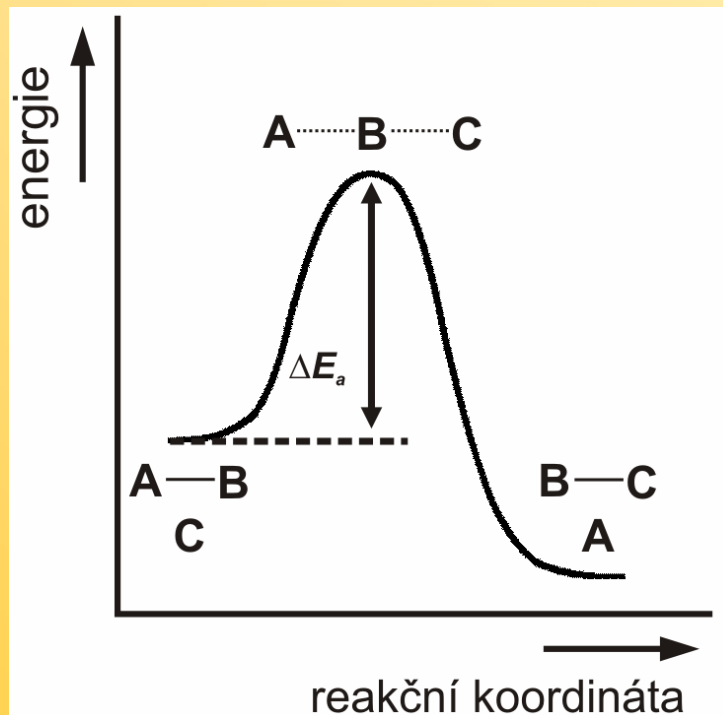
$$k = PZe^{-\frac{E_a}{RT}} = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$

- Z** – počet srážek reagujících molekul v jednotkové koncentraci za jednotkový čas; **P** – faktor určující pravděpodobnost, že při srážce reakce proběhne;
- E<sub>a</sub>** – Arrheniova aktivační energie; **R** – molární plynová konstanta;
- T** – termodynamická teplota; **A** – frekvenční faktor zahrnující veličiny **Z** a **P**

- nedostatky:
  - rychlostní konstanta vždy roste s narůstající teplotou
  - teorie nebere v úvahu existenci meziproductů

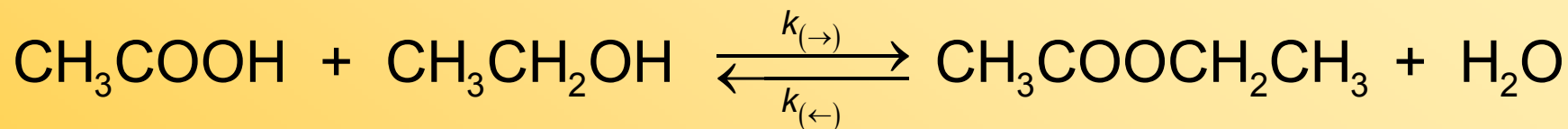
## Rychlost chemických reakcí – aktivovaný komplex

- útvar na reakční cestě mající nejvyšší energii
- má-li být reakce úspěšně zrealizována, musí být aktivovaný komplex vytvořen, tzn. musí být dodáno odpovídající množství energie – aktivační energie  $E_a$



## Rozsah chemické reakce – chemická rovnováha

- míra, s jakou je reakční přeměna uskutečněna
- problematiku chemické rovnováhy řeší *chemická termodynamika*
- kvantitativní charakteristikou chemické rovnováhy je *rovnovážná konstanta K*

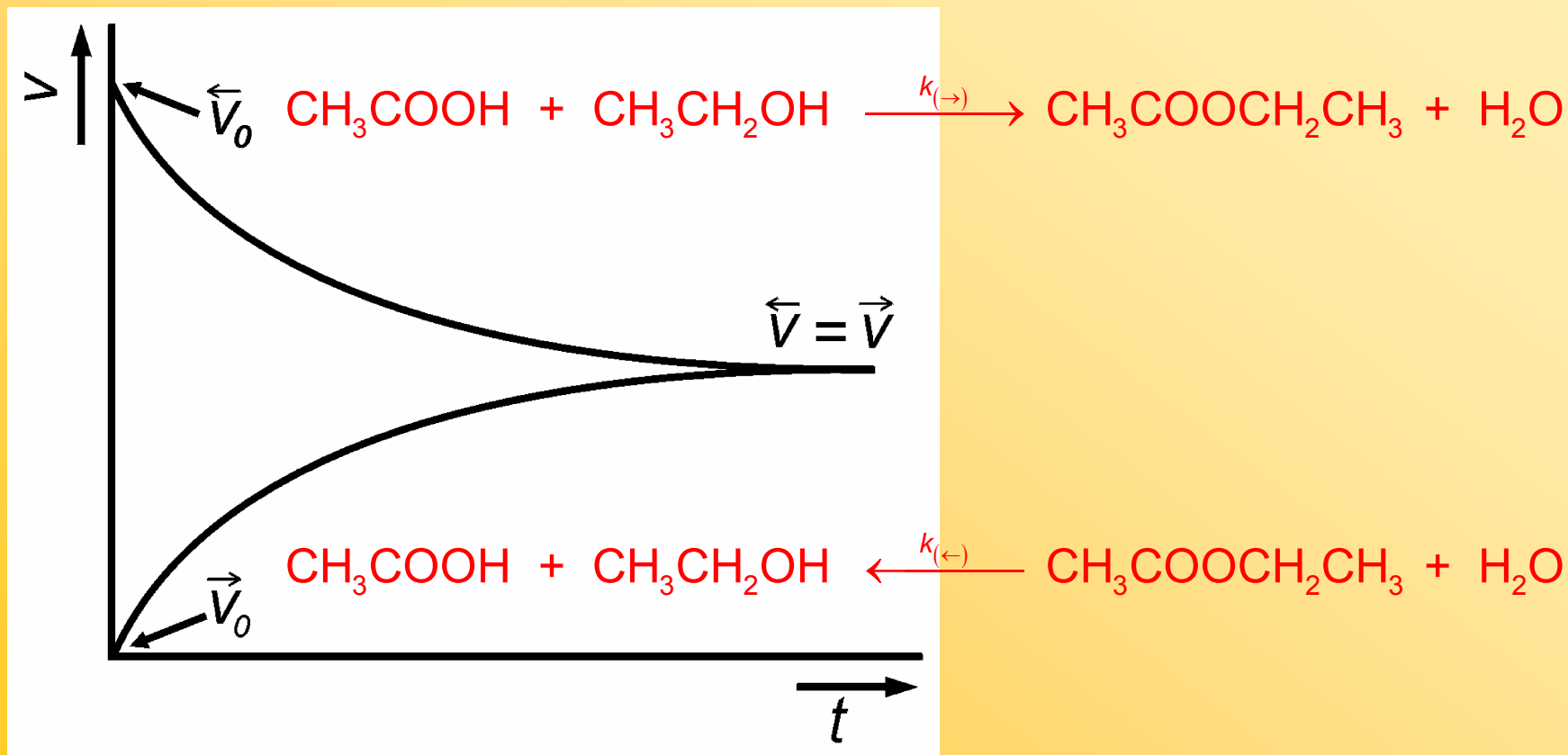


$$K = \frac{[\text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3][\text{H}_2\text{O}]}{[\text{CH}_3\text{COOH}][\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}]} = \frac{k_{(\rightarrow)}}{k_{(\leftarrow)}}$$

- ve stavu chemické rovnováhy se složení systému nemění
- porušením chemické rovnováhy, např. změnou koncentrace některé ze složek jsou iniciovány děje vedoucí k znovustavení rovnovážného stavu (zákon akce a reakce)

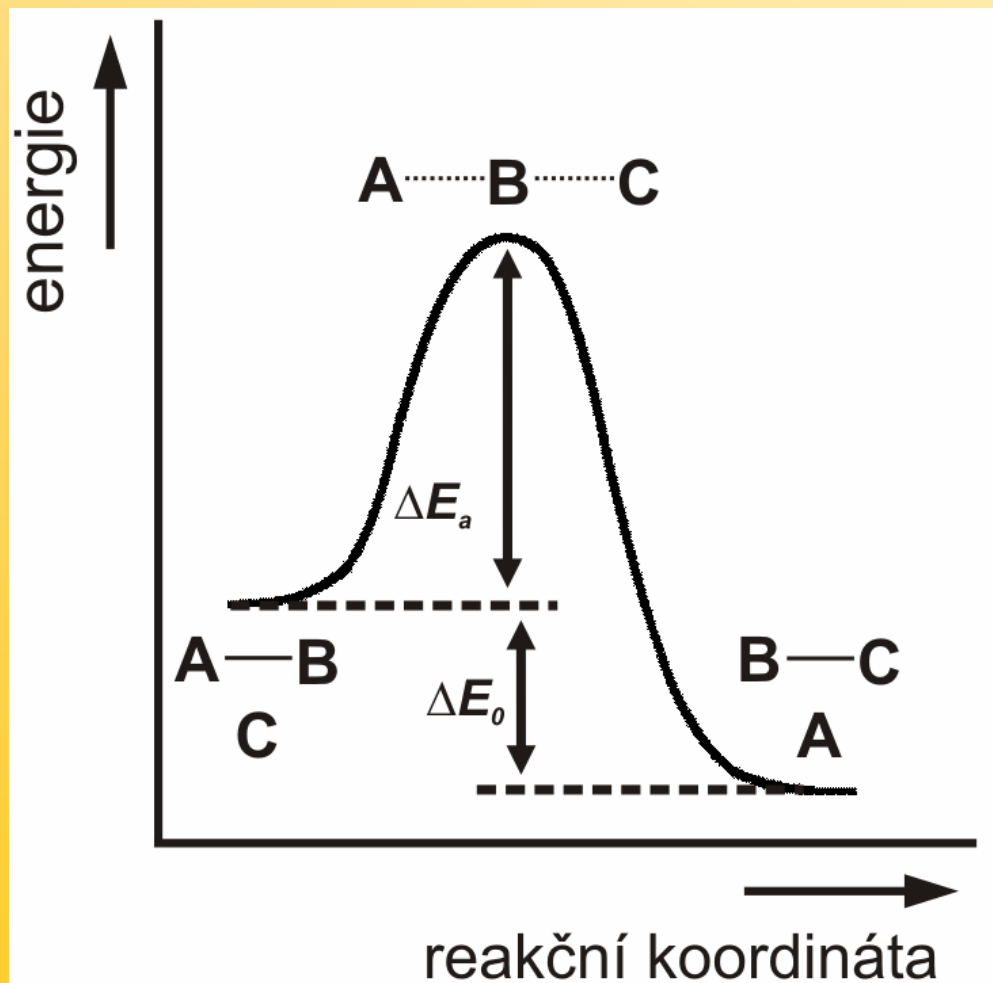
## Dynamická rovnováha

- chemická rovnováha není statickým stavem, složení chemického systému se nemění v důsledku protisměrných reakcí probíhajících stejnou rychlostí



## Chemická rovnováha – celková energie reakce

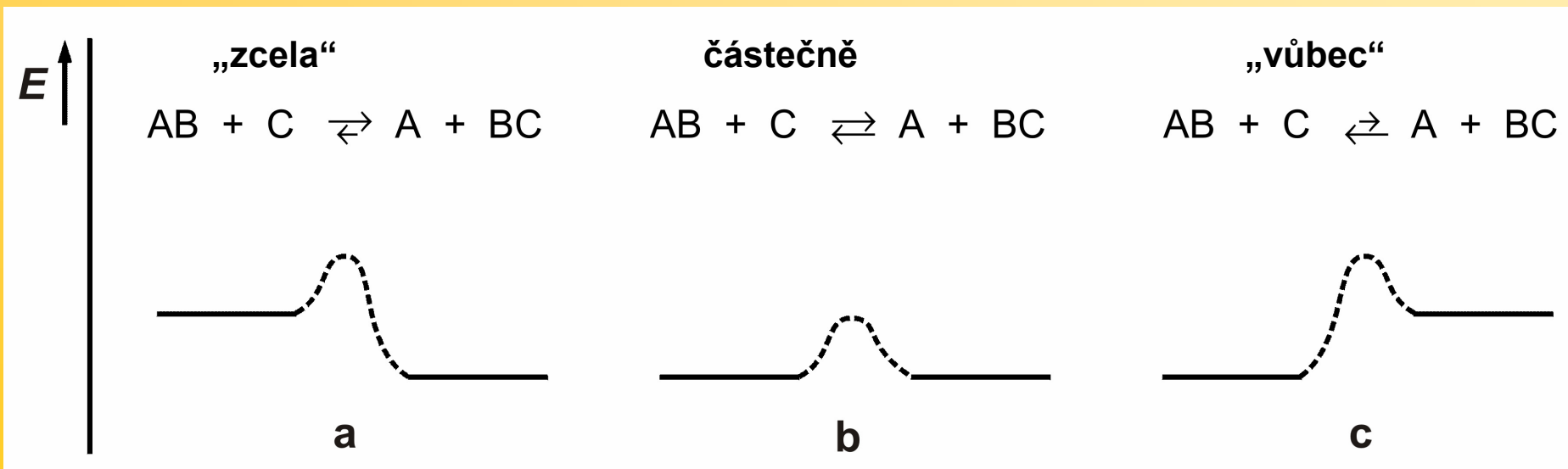
- hnací silou chemické reakce je celková změna energie, tzn. energetický rozdíl mezi reaktanty a produkty
- celková změna energie a poloha chemické rovnováhy jsou nezávislé na velikosti aktivační energie



## Chemická rovnováha – celková energie reakce

- **exoergické reakce** – celková energie produktů je nižší než celková energie reaktantů – rovnováha (složení) je posunuta ve prospěch produktů
- **endoergické reakce** – celková energie produktů je vyšší než celková energie reaktantů – rovnováha (složení) je posunuta ve prospěch reaktantů

### závislost energie na reakční koordinátě pro reakce probíhající





## **Použitá literatura**

*Vacík J.: Obecná chemie. SPN, Praha 2000.*

*Vacík J. a kol.: Přehled středoškolské chemie. SPN, Praha 1993.*

*Klikorka J., Hájek B., Votinský J.: Obecná a anorganická chemie, SNTL/ALFA 1985.*

*Fischer O. a kol.: Fyzikální chemie. SPN, Praha 1983.*

*Panchartek J., Štěrbá V., Večeřa M.: Reakční mechanismy v organické chemii. SNTL, Praha 1981.*