

Chemická kinetika

– je vedná disciplína, ktorá **skúma rýchlosť** chemických reakcií /tj. ako rýchlo sa reaktanty premieňajú na produkty/. Skúma aj ich závislosť od reakčných podmienok a **faktory**, ktoré ovplyvňujú rýchlosť reakcií. Chemická kinetika sa zaoberá teda aj vysvetľovaním reakčného mechanizmu priebehu chemických reakcií, tj. akým **spôsobom** sa menia reaktanty na produkty.

Podmienky - faktory ovplyvňujúce priebeh chemickej reakcie: teplota, tlak, koncentrácia reaktantov, prítomnosť katalyzátorov, inhibítorov, prítomnosť elektromagnetického žiarenia a iných faktorov.

Priebeh chemických reakcií

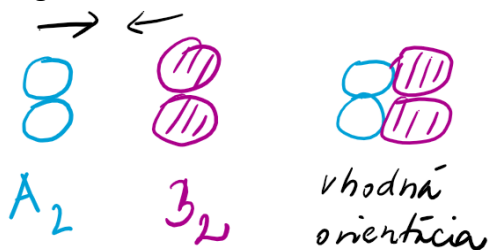
Priebeh chemických reakcií vysvetľujú dve teórie: **zrážková teória** a **teória aktivovaného komplexu**.

Zrážková teória

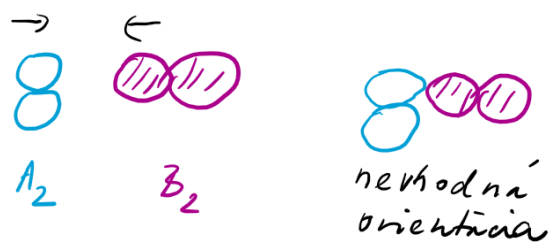
Základom zrážkovej teórie je predpoklad/**podmienka**, že ak má dôjsť k vzájomnej reakcii častíc /**má nastať chemická reakcia**/, tak sa tieto **častice musia najprv zraziť**. Zrážka častíc musí byť **účinná**, a aby zrážka viedla k reakcii musia mať častice v okamihu zrážky **vhodnú priestorovú orientáciu** a dostatočnú minimálnu energiu, ktorú nazývame **aktivačná energia** /značka E_A . Aktivačná energia je potrebná na rozštiepenie zanikajúcich väzieb v reaktantoch.

Schéma vhodnej a nevhodnej orientácie:

a) zrážka bude účinná, ak sú molekuly orientované časťami/atómami, ktoré sú schopné spolu reagovať:



b) zrážka bude neúčinná – molekuly sú orientované časťami, ktoré spolu nereagujú:

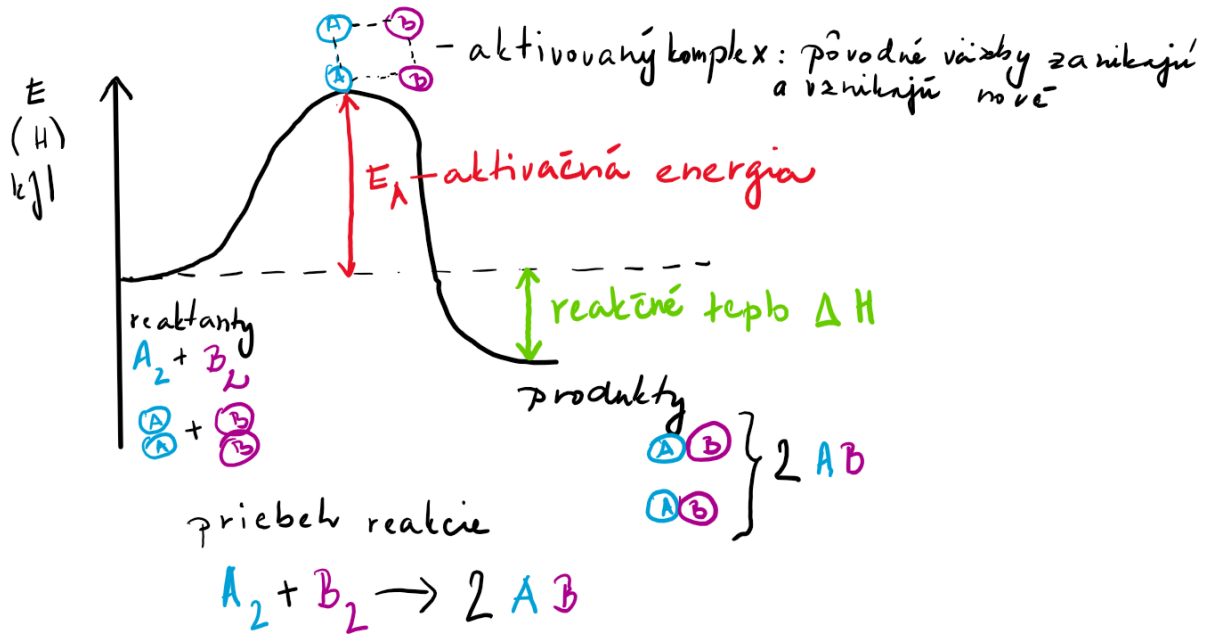


Teória aktivovaného komplexu

- presnejšie vysvetľuje energetickú bilanciu priebehu chemickej reakcie.

- jej základom je predpoklad, že **pri účinnej zrážke** častíc dochádza k **vzniku aktivovaného komplexu**, pre ktorý je charakteristická hodnota aktivačnej energie E_A (hodnota aktivačnej energie sa rovná rozdielu hodnôt energie aktivovaného komplexu a energie reaktantov)
- aktivovaný komplex predstavuje **energetickú bariéru** medzi reaktantami a produktami
- aktivovaný komplex predstavuje systém s **najväčšou energiou** /pozri obr.1 nižšie/
- v aktivovanom komplexe staré väzby ešte nezanikli úplne, nové väzby ešte plne nevznikli
- tento systém je energeticky bohatý a **nestály**, preto sa rýchlo **rozpadá** buď na pôvodné reaktanty alebo na nové produkty, pričom dochádza k uvoľňovaniu energie.

obr. 1



Hodnota reakčného tepla ΔH sa rovná rozdielu energie produktov a energie reaktantov.

Schéma priebehu exotermickej reakcie:

obr. 2

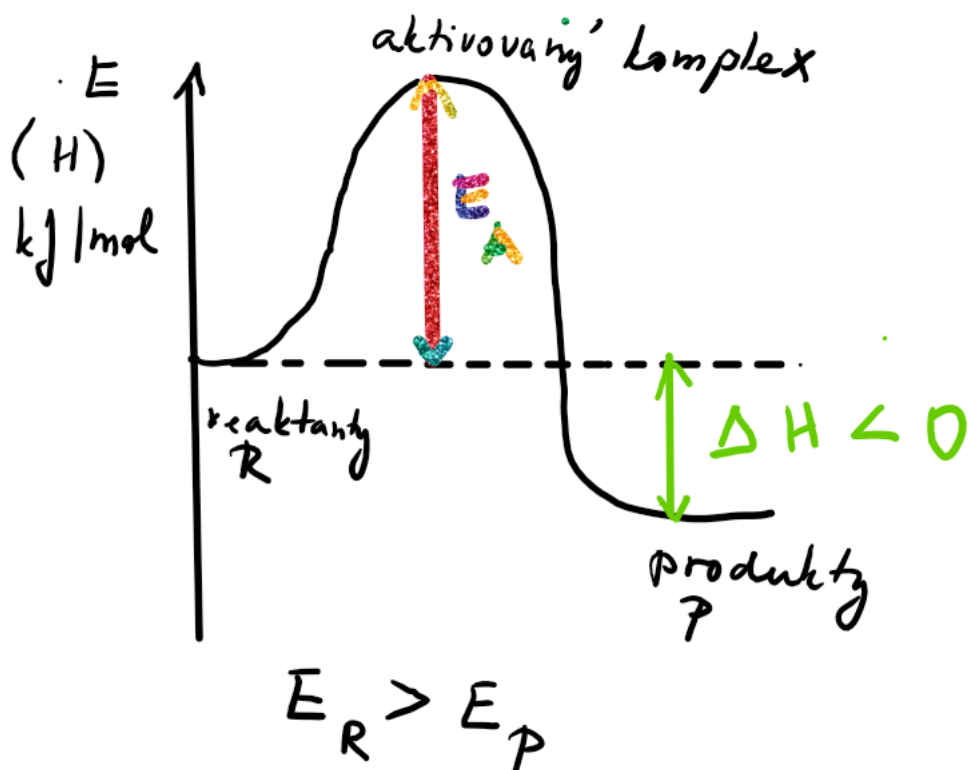
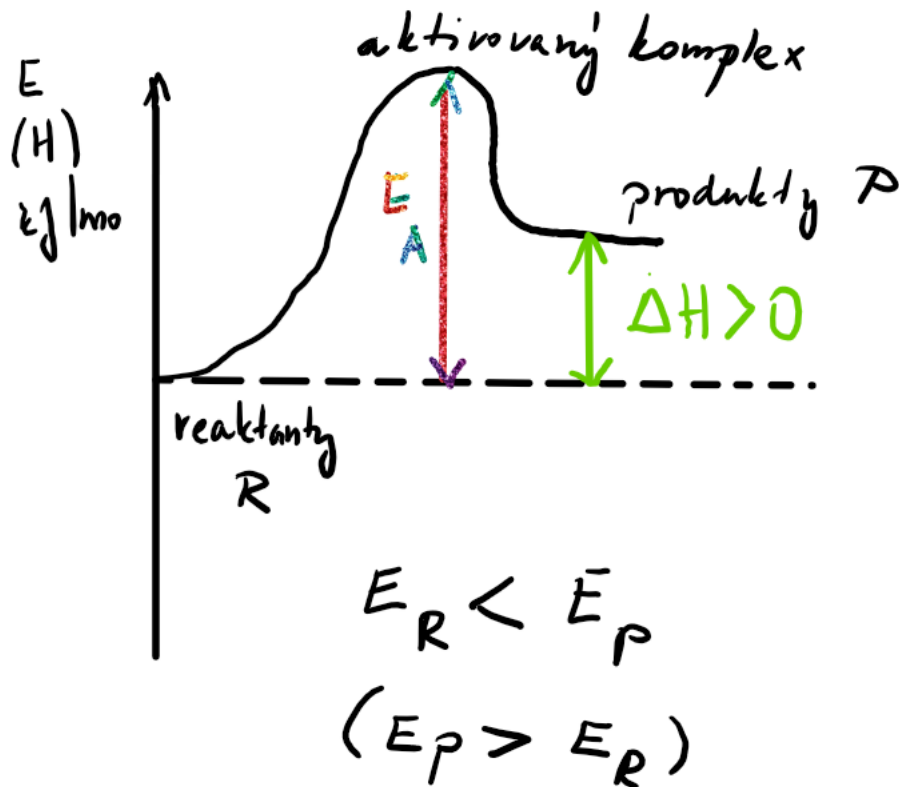


Schéma priebehu endotermickej reakcie:

obr.3



Rýchlosť chemických reakcií

Predstavu o rýchlosti chemickej reakcie získame podľa toho, ako rýchlo:

- vzniká plyný produkt,
- nastane zmena farby reakčnej zmesi na inú /napr. bezfarebná na žltú/,
- sa mení intenzita sfarbenia reaktantov alebo produktov /napr. z bledomodrej na tmavomodrú/,
- vzniká málorozpustný produkt /= zrazenina/,
- sa znižuje objem tuhých reaktantov atď.

Niektoré **chemické reakcie** /ďalej **skratka CHR**/ prebiehajú veľmi **pomaly** – napríklad korózia = hrdzavenie kovov, vznik kvapľov v jaskyniach, tuhnutie malty, hnitie dreva a podobne. Iné prebiehajú **rýchlo**, napríklad neutralizácia /= reakcia kyseliny so zásadou/, reakcia sodíka s vodou, výbuch plynu a podobne.

Rýchlosť reakcie **závisí** od:

a) **počtu efektívnych = účinných zrážok** častíc látok.

Zrážka je účinná vtedy, ak sú častice vhodne orientované a majú dostatočnú energiu (aktivačnú). Čím viac častíc je v systéme a čím majú väčšiu energiu, tým je väčšia pravdepodobnosť zrážky, a tým bude aj vyššia rýchlosť CHR.

b) od **veľkosti aktivačnej energie** – čím je menšia, tým ľahšie môže nastať reakcia, pretože energetická bariéra je menšia, CHR prebehne rýchlejšie. Naopak, čím je hodnota E_A vyššia, reakcie prebiehajú pomalšie, energetická bariéra je vysoká.

Z dôvodu **presného merania** a určenia rýchlosti, **rýchlosť CHR** :

- definujeme ako **zmenu koncentrácie reaktantov R* alebo produktov P** za určitý časový interval**.
- **jednotka** rýchlosti chemických reakcií sa vyjadruje v [mol . dm⁻³ . s⁻¹]

Pozn.:*koncentrácia reaktantov sa počas reakcie znižuje = nastáva úbytok R,

**koncentrácia produktov sa počas reakcie zvyšuje = nastáva prírastok P

značka rýchlosti
↓
$$v = \frac{\Delta C(AB)}{\Delta t} = \frac{\text{zmena koncentrácie látky AB [mol/dm}^3\text{]}}{\text{časový interval [s]}}$$

čítaj "ný"

$$\Delta t = t_2 - t_1 \text{ časový interval}$$

$$\Delta C = c_2 - c_1 \text{ zmena koncentrácie sledovanej látky}$$

↓ → c v čase t₁
c v čase t₂

$$v = - \frac{\Delta C(A)}{\Delta t} - \text{zmena koncentrácie reaktantu A}$$

↓
znamienko **minus**, pretože c(A) klesá = množstvo reaktantu sa znižuje počas reakcie

!!! Pozn.: Počas priebehu CHR sa rýchlosť reakcie mení – na začiatku prebieha väčšinou rýchlejšie, s narastajúcim časom klesá. Preto počas dlhšieho časového úseku ide teda skôr o **priemernú rýchlosť**.

Príklad 1:

Vypočítajte rýchlosť chemickej reakcie ak viete, že koncentrácia produktu AB sa zmenila z 0,7 mol/dm³ na 2 mol/dm³ za 0,5 min.

Riešenie: c₁(AB) = 0,7 mol/dm³
 c₂(AB) = 2,0 mol/dm³
 Δt = 0,5 min = 30 s - premena času na sekundy!

$$v = \frac{\Delta c}{\Delta t}$$

$$\Delta c(AB) = c_2 - c_1 = 2 \text{ mol/dm}^3 - 0,7 \text{ mol/dm}^3 = 1,3 \text{ mol/dm}^3$$

$$\Delta t = 30 \text{ s}$$

$$v = \frac{1,3}{30} = 0,043 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$$

Odpoveď: Rýchlosť chemickej reakcie je 0,043 mol.dm⁻³.s⁻¹.