

Kem. reakcija kot snovna in energijska sprememba

- vsak sistem vsebuje določeno količino notranje E (energije)
- segrevanje v zaprti posodi: E se poveča za toliko, kolikor smo dovedli toplote
- segrevanje v odprti posodi: *entalpija* snovi se poveča za toliko, kolikor smo dovedli toplote
- E: energija | H: entalpija (sprememba E ali $H=Q$)
- *entalpija*: notranja toplota (grk.)
- notranja energija: kin. E gradnikov, moč vezi (šibke, kovalentne), jedrske sile

Alotropija

- to, da obstaja nek element v različnih oblikah oz. *modifikacijah* v istem agregatnem stanju
- npr. ogljik kot diamant in grafit
- pri spojinah to *polimorfija*

Računanje z entalpijami

- izvajamo kem. rea. v odprtih posodah
- toplota se *absorbira* (sprošča) in je točno enaka spremembi entalpije sistema oz. reakcijske zmesi
- = toplote se računa s pomočjo spremembe entalpije
- entalpija odvisna od pogojev v katerih se snov nahaja
- v tabelah *standardni* pogoji (neki določeni) – standardne entalpije H° (merjene pri 10^5 Pa, 25°C , snov mora biti pri tej temp. stabilna)

Endotermne in eksotermne reakcije

(glej skico na 4)

Vrste entalpij

- sežigna (toplota, ki se sprosti pri sežigu)
- nevtralizacijska, itd.
- toplota sprošča ali porablja tudi pri fiz. procesih (v odprti posodi pri konstantnem tlaku: talilna ental., izparilna, topilna...)

Notranja ener. v vsakdanjem živ.

- sproščanje toplote in svetlobe pri gorenju goriva (premog, bencin)
- sproščanje ener. pri izgorevanju hrane v telesu
- fotosinteza pri rastlinah = endotermna reakcija

Hitrost kem. reakcije

- različna hitrost (npr. rjavenje železa počasi)
- najhitrejša reak. eksplozije (npr. pokalni plin $\text{H}_2 + \text{O}_2$)
- hitrost merimo z množino produkta, ki nastane oz. reaktanta, ki se porabi v časovni enoti
- Hitrost = sprememba koncentracije snovi : čas potreben za to = $\Delta x : \Delta t$ [mol/l s]
- (glej graf na 7): krivulja strmo pada nato bolj položna; hitrost reakcije velika, nato vedno

manjša

- na začetku reak. hitrost ponavadi najhitrejša, ker so koncentracije reaktantov največje

Vpliv na hitrost reakcije

1. sama narava reaktantov oz. vrsta reakcije

2. vpliv koncentracije (glej skico na 8)

- med gradniki reaktantov pride do reak. - zaradi normalnega termičnega gibanja trčijo skupaj
- če je konc. večja je v enem litru reakcijske snovi več molekul in v 1 sek. se zgodi več trkov;
- hitrost reak. je večja (podoben vpliv kot konc. snovi pri plinih povečava pritiska)

3. vpliv površine oz. velikosti delcev

- tekočina ali plin reagira s trdno snovjo le na njeni površini (le površ. gradniki dostopni za trke)
- zdrobimo trdno snov - površina močno poveča (več gradnikov dostopnih za trke, hitrost reak. večja)
- npr. kos aluminija ne gori, alu. prah pa je vnetljiv
- velja tudi pri fiz. procesih (sladkor v prahu stopi pred kocko)

4. vpliv temp.

- (glej skico na 9)
- pri trku pri majhni hitrosti (majhni not. ener.) molekule odbijejo; za kem. reak. moramo povečati hitrost (energijo)
- najmanjša potrebna energija za uspešen trk in reak. = *aktivacijska energija (E_a)* (poenostavljeno)
- pri reakciji razcepijo vezi reaktantov
- pri nastanku novih vezi v produktih energija sprosti
- eksotermne reak.: sproščena ener. večja od vložene aktivacijske = pri reak. energija sprošča
- endotermne reak.: sproščena ener. manjša od vložene = pri reak. energija porablja
- aktivacijski kompleks: v trenutku trka naj bi nastala "molekula", ki takoj razpade v dejanski produkt
- potrebno akti. ener. dobimo tako, da zmes segrejemo
- molekule reaktantov dobijo večjo hitrost (kin. ener.); vse nimajo enako, vendar veliko tistih, ki imajo vsaj aktivacijsko (več uspešnih trkov, večja hitrost reakcije)
- nižja temp. = manjša hitrost reak. (živila v hladilniku)
- reakcija med H in O pri sobni temp. skoraj ne poteka, tako počasna
- prižgemo vžigalico, zmes se segreje, dovolj molekul doseže akti. ener., reakcija začne potekati
- reakcija eksotermna; sprosti se še več toplote, to pospeši reak., sam mehanizem reakcije je eksploziven
- *reakcijski mehanizem*: zaporedje posameznih vmesnih stopenj, preko katerih iz reaktantov nastanejo produkti

5. vpliv svetlobe

- fotosinteza, reakcije pri fotografiranju

6. vpliv katalizatorjev

- (glej skici na 12)
- katalizator: snov, ki poveča hitrost kem. reakcije, ne da bi se pri tem porabljala
- katalizator zniža akti. ener., *energijsko bariero*
- tako ima več molekul zadostno ener.
- spremeni mehanizem reakcije
- zadoščajo majhne količine kata.
- če so reaktanti, produkti in katalizatorji vsi v isti fazi (npr. tekoči) je to *homogena kataliza*
- če kata. v drugi fazi je *heterogena kataliza*
- nasprotno od katalizatorjev; *inhibitorji* (zmanjšujejo hitrost oz. zavirajo reakcijo)
- znani avtomobilski kata. (na kata. neizgorele snovi pretvorijo v manj strupene pline)
- kata. uporabljajo v ind.
- za živa bitja pomembni *biokatalizatorji*; *encimi* oz. *fermenti*
- biokata. regulirajo hitrost reak. v organizmih (prebavljanje)