1. **Kinetika chemických reakcí a základy termochemie**
* **Kinetika chemických reakcí**
	+ Studuje rychlost chemických reakcí, její závislost na reakčních podmínkách a vysvětluje reakční mechanismus
	+ Z pohledu reakční kinetiky dělíme reakce
		- Izolované – probíhá pouze jedna reakce
		- Simultánní – v soustavě probíhá více reakcí současně
			* Zvratné – z reaktantu vznikají produkty a ve stejném okamžiku vznikají z produktu reaktanty
			* Paralelní – společné reaktanty reagují za vzniku různých produktů
			* Následné – produkt se stává reaktantem následující reakce
	+ **Rychlost chemické reakce**
		- Rychlost reakce je funkcí okamžitých koncentrací reaktantů
		- Je definována jako časový úbytek molární koncentrace libovolného reaktantu nebo přírůstek molární koncentrace libovolného produktu dělený jeho stechiometrickým koeficientem
		- Platí že: $v=-\frac{∆\left[A\right]}{a . ∆ t}=-\frac{∆\left[B\right]}{b . ∆ t}=\frac{∆\left[C\right]}{c . ∆ t}= \frac{∆\left[D\right]}{d . ∆ t}$
			* + v – rychlost reakce,
				+ $∆[C]$ – změna molární koncentrace látky C
				+ c – stechiometrický koeficient látky C
				+ ∆t – časový interval
		- Rychlost chemické reakce ovlivňuje
			* Tlak
			* Teplota
				+ Matematickou závislost rychlosti reakce na teplotě vyjadřuje Arrheniova rovnice
				+ Platí že: $k=A . e^{\frac{-E\_{A}}{RT}}$

k – rychlostní konstanta

A – frekvenční faktor

EA – aktivační energie [J . mol-1]

R – univerzální plynová konstanta: 8,314 J . K-1 . mol-1

T – absolutní teplota, udávaná v kelvinech

e – základ přirozeného logaritmu

* + - * + van’t Hoffovo pravidlo

Zvýšením teploty reaktantů o 10 °C má za následek dvoj až čtyřnásobné zvýšení reakční rychlosti

* + - * Koncentrace reagujících látek
				+ Závislost rychlosti reakce na koncentraci výchozích látek vyjadřuje kinetická rovnice
				+ Pokud probíhá za konstantní teploty, je její rychlost přímo úměrná součinu koncentrací výchozích látek
				+ Platí že: v = k. [A]a .[B]b

[A], [B] – rovnovážné koncentrace výchozích látek

a, b – stechiometrické koeficienty látek v rovnici

* + - * Přítomnost katalyzátorů
				+ Katalyzátory

Jsou látky ovlivňující rychlost chemické reakce

A + K = AK

AK + B = C + K

V průběhu reakce se nespotřebovávají, nemohou posunout chemickou rovnováhu ani změnit složení systému, který dospěl do rovnovážného stavu

Snižují aktivační energii a čas potřebný k dosažení chemické rovnováhy

Homogenní katalýza

reaktanty s katalyzátorem jsou ve stejné fázi a tvoří homogenní směs

Heterogenní katalýza

reaktanty s katalyzátorem jsou v různé fázi (nejčastěji je katalyzátor pevného skupenství, zatímco reaktanty plynné či kapalné)

Autokatalýza

katalyzátorem reakce je jeden z reakčních produktů

Biokatalyzátory

Jsou organické sloučeniny, které katalyzují chemické reakce v živých organismech

* + - * + Inhibitory

Zvyšují aktivační energii a tím zpomalují průběh dané reakce

Využívají se ke zpomalení reakcí, které jinak probíhají velice prudce nebo dokonce s výbuchem

* + - * + Katalytické jedy

Jsou látky zabraňující působení katalyzátorů

* + - * + Stabilizátory

Látky reagující s radikály a tím je zastaví

* + **Teorie aktivní srážek**
		- Vychází z předpokladu, že pro uskutečnění chemické reakce je nutná srážka mezi molekulami reagujících látek
		- Reakce proběhne pouze tehdy, srazí-li se částice, které mají dostatečnou energii a vhodnou prostorovou orientaci
		- Minimální energie, kterou musí částice mít, aby reakce proběhla se nazývá aktivační energie
		- Rozdíl mezi aktivační energii přímé a zpětné reakce určuje tepelné zabarvení reakce – reakční teplo ∆H.
	+ **Teorie aktivovaného komplexu**
		- Vychází z předpokladu, že v průběhu reakce musí soustava projít tzv. aktivovaného komplexu
		- Probíhají zde dva protichůdné děje, při štěpení původních vazeb se energie spotřebovává, zatímco se při tvoření nových uvolňuje



* **Chemická termodynamika**
	+ Vědní obor, který se zabývá energetickou bilancí chemických dějů, jejich uskutečnitelností a rovnováhami, které se v soustavě ustavují
	+ Soustava je část prostoru s jeho hmotnou náplní a od okolí je oddělena skutečnými nebo myšlenými stěnami
	+ Soustavy:
		- Otevřená – stěny dovolují výměnu hmoty i energie s okolím
		- Uzavřená – stěny dovolují pouze výměnu energie s okolím
		- Izolovaná – nedovoluje výměnu ničeho
	+ **Stavové veličiny** – jsou veličiny, které popisují aktuální stav soustavy
		- Jsou závislé pouze na počátečním a koncovém stavu soustavy
		- Druhy stavových veličin:
			* Extenzivní – závisí na velikosti systému
				+ Př.: Hmotnost, objem, látkové množství, enthalpie
			* Intenzivní - nezávisí na velikosti systému
				+ Př.: Hustota, tlak, teplota
	+ **Termodynamické děje**
		- Vratný děj
			* dochází k velkému množství malých změn
			* lze ho kdykoliv zastavit
			* lze ho uvést do původního stavu
		- Nevratný děj
			* nelze je vrátit zpět do původního stavu
			* jsou to všechny samovolné děje
	+ **Druhy dějů**
		- Izotermický děj – probíhá při konstantní teplotě
		- Izobarický děj – probíhá za konstantního tlaku
		- Izochorický děj – probíhá za konstantního objemu
		- Izotermický děj – probíhá za konstantní teploty
		- Adiabatický děj – při tomto ději se sice mění tlak, objem i teplota, ale nedochází k výměně tepla s okolím
	+ **Termochemie**
		- Zabývá se tepelnými jevy při chemických reakcí
		- Teplo, které se při reakcí uvolňuje nebo spotřebovává závisí na druhu reaktantů a produktů, na jejich množství a skupenství
		- **Reakční teplo**
			* Molární reakční teplo Qm je veličina udávající teplo, které systém při reakci přijme, pokud se daná reakce uskuteční v rozsahu 1 molu základních reakčních přeměn, tzn. chemické reakce se účastní takové látkové množství reaktantů, které odpovídá jejich stechiometrickým koeficientům – jednotkový rozsah
			* Probíhá-li reakce za konstantního objemu pak platí, že Qm se rovná zvýšení vnitřní energie soustavy ∆U
			* Probíhá-li reakce za konstantního tlaku pak platí, že Qm se rovná zvýšení enthalpie soustavy ∆H
				+ Reakční teplo ∆H, je teplo soustavou přijaté, případně uvolněné, uskuteční-li se reakce izobaricky v jednotkovém rozsahu a je-li teplota reaktantů a produktů stejná
			* **Enthalpie**
				+ Je extenzivní termodynamická fyzikální veličina, značená písmenem H a udávaná v joulech
				+ Závisí na velikosti systému
				+ Její absolutní hodnotu nelze změřit, stanovuje se pouze změna vztažená na dohodnutý standartní stav
				+ H = U + pV

pV – ideální plyn

* + - * + Jedná se o jeden ze 4 termodynamických potenciálů
			* Termochemické rovnice
				+ Jsou rovnice, u nichž je uvedena hodnota reakčního tepla a skupenství všech reaktantů a produktů
				+ V tabulkách lze najít standartní reakční tepla ∆H°, což jsou reakční tepla reakcí probíhajících za standartní teploty a tlaku: T = 298,15 K, p = 101,325 kPA
			* Typy reakcí podle tepelné bilance
				+ Reakce exotermické – teplo se uvolňuje, ∆H < 0
				+ Reakce endotermické – teplo se spotřebovává, ∆H > 0
		- **1. termochemický zákon** – Laplace-Lavoisierův zákon
			* Hodnota reakční tepla přímé a zpětné reakce, je stejná a liší se pouze znaménkem
		- **2. termochemický zákon** – Hessův zákon
			* Celkové reakční teplo reakce nezávisí na průběhu reakce, ale jen na počátečním a koncovém stavu
			* Zákon lze využít k výpočtu těžko dostupného reakčního tepla z vícestupňových reakcí, kdy výpočet lze provést pouze za předpokladu, že známe reakční tepla ostatních reakčních kroků dané vícestupňové reakce
			* Ze zákonu vyplívá, že celkové teplo je dáno součtem reakčních tepel všech dílčích reakcí
		- **Standardní slučovací teplo**
			* Je reakční teplo reakce, při které se z prvků ve standardním stavech, vznikne 1 mol sloučeniny ve standardním stavu
			* Převážně se používá v anorganické chemii a platí že slučovací teplo jakéhokoliv prvku je rovno 0
			* $∆H°= \sum\_{produktů}^{}|v|(∆H°)\_{sluč}-\sum\_{reaktantů}^{}|v|(∆H°)\_{sluč}$
				+ Od součtu slučovacích tepel produktů odečteme součet slučovacích tepel reaktantů
		- **Standardní spalné teplo**
			* Je reakční teplo reakce, kde 1 mol sloučeniny ve standardním stavu spálen (zoxidován) na nejstálejší oxidy ve standardním stavu
			* Spalné teplo vody je 0, ale spalná tepla prvků nulová nejsou
			* Používá se převážně v organické chemii
			* $∆H°= \sum\_{reaktantů}^{}|v|(∆H°)\_{spal}-\sum\_{produktů}^{}|v|(∆H°)\_{spal}$
				+ Od součtu spalovacích tepel reaktantů odečteme součet spalovacích tepel produktů