

## Katalýza / inhibice

Ovlivnění rychlosti chemické reakce pomocí katalyzátoru / inhibitoru

1

## Katalýza

### Homogenní

- acidobazická (katalyzátor:  $H^+$  nebo  $OH^-$ )
- autokatalýza (katalyzátor: produkt reakce)
- selektivní (katalyzátor: enzym)

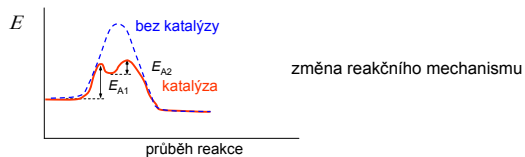
### Heterogenní

- katalyzátor: - v jiné fázi (s) než reaktanty  
- s velkým specifickým povrchem

2

## Katalyzátory

- látky  $\downarrow E_A$  a tím  $\uparrow k$  a tedy i  $\uparrow v$



- neovlivňují rovnovážné složení soustavy
- urychlí ustavení rovnovážného stavu

3

## Inhibitory

- látky snižující rychlost reakce
- **stabilizátory** - inaktivují reaktivní meziprodukty (např.  $\cdot OH$ ,  $\cdot O_2^-$ ,  $\cdot R$ )
- **katalytické jedy** - inaktivují katalyzátor

4

☞ Jak se nazývají tyto radikály  $\cdot OH$ ,  $\cdot O_2^-$ ,  $\cdot R$ ?

- a) hydroxidový, oxidový, alkylový
- b) hydroxylový, oxidový, alkoxylový
- c) hydroxylový, peroxidový, alkylový
- d) hydroxidový, superoxidový, alkoxylový
- e) správná odpověď není uvedena

5

## Faktory ovlivňující rychlost chemické reakce

- **koncentrace reaktantů** ... kinetická rovnice
- **teplota** ... Arrheniova rovnice
- **tlak** ... reaktanty v plynné fázi  
( $\uparrow p \rightarrow \downarrow V(\text{reaktantů}) \rightarrow \uparrow c(\text{reaktantů}) \rightarrow \uparrow v$ )
- **velikost reagujících částic** ... reaktanty v tuhé fázi  
(menší částice – větší reakční povrch)
- **katalyzátory, inhibitory**

6



## 1. Věta termodynamická

- energie se neztrácí ani nevzniká, ale jeden druh energie se mění v jiný (**zákon zachování energie**)
- součet všech druhů energie v uzavřeném systému se nemění, i když tam probíhají jakékoliv procesy

13

## 1. Věta termodynamická

### Vnitřní energie $U$

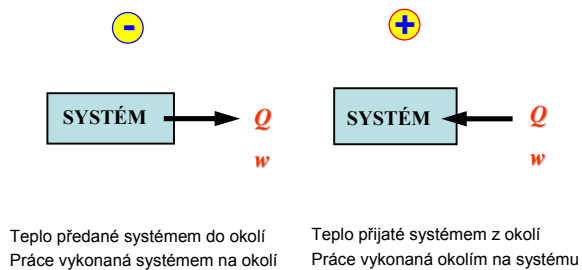
- součet všech druhů energie v systému

$$\Delta U = Q + w$$

- Teplota  $Q$**  energie způsobující změny teploty systému
- Práce  $w$**  jakákoliv změna energie kromě tepla (objemová, elektrická, osmotická, ...)

14

## Znaménková konvence



15

## Entalpie $H$

- reakce = většinou izobarické děje v otevřeném systému

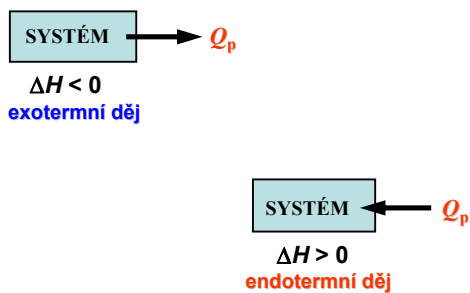
$$p_{\text{okolí}} = \text{konstantní}$$

$$\Delta H = Q_p$$

$H$  = tepelný obsah soustavy při  $p_{\text{okolí}} = \text{konst.}$

16

## Entalpie $H$



17

$$\Delta H = \Sigma (\text{energie vazeb produktů}) - \Sigma (\text{energie vazeb VL})$$

z toho plyne, že u exotermních reakcí ( $\Delta H < 0$ )

produkty reakce mají celkově:

- nižší energii než reaktanty
- pevnější vazby než reaktanty

18

## Standardní podmínky ° (např. $\Delta H^\circ_{298}$ )

čisté látky	$T = 298,15 \text{ K}$
plyny navíc	$p = 101,325 \text{ kPa}$
látky v roztoku navíc	$c = 1 \text{ mol/l}$

19

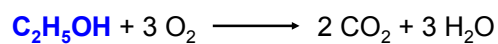
☀ Jaké bude pH vodného roztoku za standardních podmínek?

20

## Standardní spalné teplo

- reakční teplo reakce spálení **1 molu** sloučeniny v nadbytku kyslíku

$$(\Delta H^\circ_{298})_{\text{spal}}$$



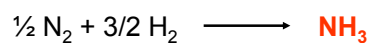
$$(\Delta H^\circ_{298})_{\text{spal}} = -1371 \text{ kJ/mol}$$

21

## Standardní slučovací teplo

- reakční teplo reakce vzniku **1 molu** sloučeniny přímo z prvků

$$(\Delta H^\circ_{298})_{\text{sluč}}$$

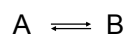


$$(\Delta H^\circ_{298})_{\text{sluč}} = 46 \text{ kJ/mol}$$

22

## Termochemické zákony

### 1. Termochemický zákon (Lavoisierův-Laplaceův)

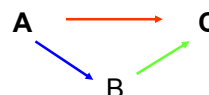


$$\Delta H_{\text{A} \rightarrow \text{B}} = -\Delta H_{\text{A} \leftarrow \text{B}}$$

Hodnota reakčního tepla přímé a zpětné reakce se liší pouze znaménkem.

23

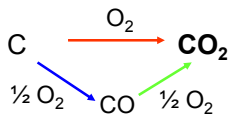
### 2. Termochemický zákon (Hessův)



$$\Delta H_{\text{A} \rightarrow \text{C}} = \Delta H_{\text{A} \rightarrow \text{B}} + \Delta H_{\text{B} \rightarrow \text{C}}$$

24

Příklad užití Hessova zákona



$$\Delta H_{\text{C} \rightarrow \text{CO}_2} = \Delta H_{\text{C} \rightarrow \text{CO}} + \Delta H_{\text{CO} \rightarrow \text{CO}_2}$$

25

## 2. Věta termodynamická

- Všechny systémy se snaží dosáhnout rovnovážného stavu.
- Energie vesmíru je konstantní, přičemž entropie vesmíru se konstantně zvyšuje.
- Teplu nemůže samovolně přecházet z tělesa o teplotě nižší na těleso o teplotě vyšší.
- Příroda spěje od stavů méně pravděpodobných ke stavům více pravděpodobným.

26

## 2. Věta termodynamická

### Entropie $S$

- míra neuspořádanosti systému
- míra pravděpodobnosti  $P$  stavu systému

$$\Delta S = \frac{Q_{\text{rev}}}{T} \quad S = k_B \ln P$$

- entropie systému odpovídá teplu, které se ztrácí do okolí (nebo přijímá z okolí) při dané teplotě systému

27

## Pro samovolný děj platí

Obecně:

$$\Delta S_{\text{vesmíru}} = \Delta S_{\text{systému}} + \Delta S_{\text{okolí}} > 0$$

Pro děje v izolované soustavě:

$$\Delta S_{\text{systému}} \geq 0$$

28

## Děje zvyšující entropii (neuspořádanost)

- přechod  $(s) \rightarrow (l) \rightarrow (g)$
- rozpad složitých molekul/komplexů

29

## Uskutečnitelnost chemických reakcí

- **samovolný děj** probíhá tak dlouho, dokud není dosaženo **největší stability systému = rovnováhy**

Možnosti dosažení rovnovážného stavu:

30

## Gibbsova energie (volná entalpie) $G$

- pro děje v uzavřeném systému za **konst. ( $p, T$ )<sub>okolí</sub>**

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

$$\Delta G < 0$$

**exergonní děj**  
samovolný děj  
systém konající práci

$$\Delta G > 0$$

**endergonní děj**

31

## Kriterium spontánnosti děje

- v průběhu reakce  $G$  klesá, tj.

$$\Delta G = G_2 - G_1 < 0 \quad \text{tj.} \quad G_2 < G_1$$

- za rovnováhy  $\Delta G = 0$  ( $G_2 = G_1$ )

- $\Delta G$  nic neříká o rychlosti reakce

32

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

aby platilo  $\Delta G < 0$  musí být  $\Delta H < T\Delta S$

Samovolný děj:

- |                                    |            |
|------------------------------------|------------|
| 1) $\Delta H < 0$ a $\Delta S > 0$ | <b>ANO</b> |
| 2) $\Delta H > 0$ a $\Delta S > 0$ | <b>ANO</b> |
| 3) $\Delta H < 0$ a $\Delta S < 0$ | <b>ANO</b> |

33

- ☀ Při jaké změně  $H$  a  $S$  je  $\Delta G$  vždy kladná?

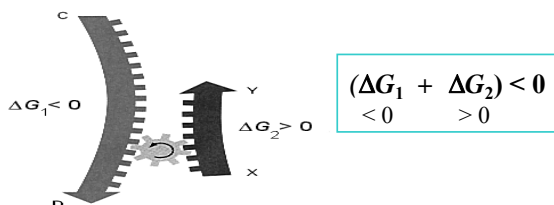
$\Delta H > 0$       endotermní reakce

$\Delta S$

34

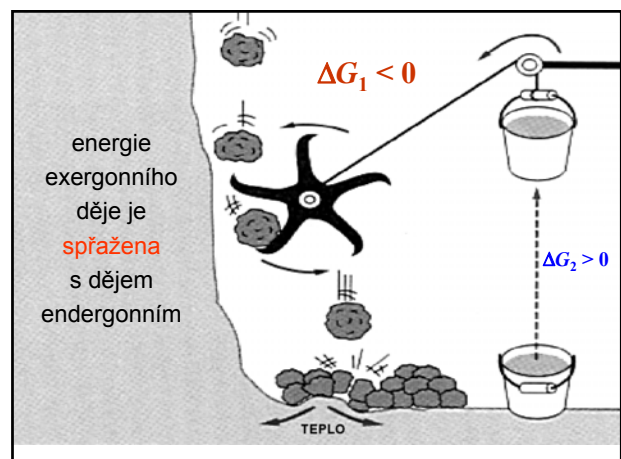
## Přeměny energie v živých systémech

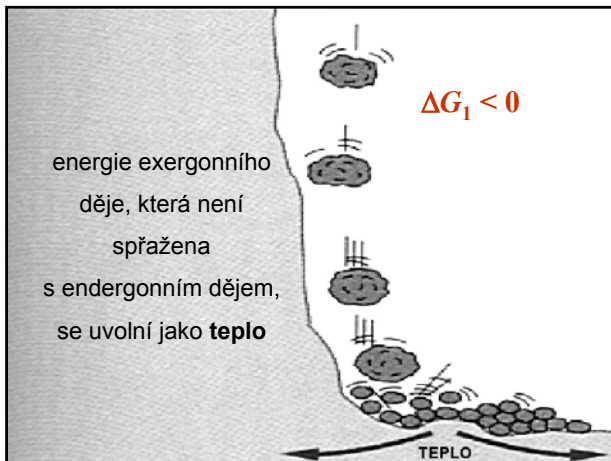
- endergonní reakce** ( $\Delta G_2 > 0$ ) probíhají ve „spřažení“ s exergonními reakcemi ( $\Delta G_1 < 0$ )



- reakce jsou **spřažené** pomocí **enzymů**

35





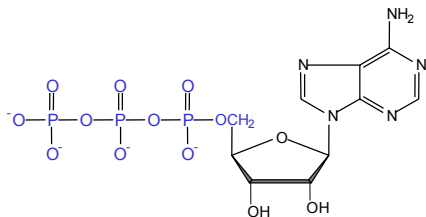
## Makroergní (vysokoenergetické) sloučeniny

- ve své struktuře konzervují energii uvolněnou při exergonních reakcích
- jejich rozkladem se energie uvolňuje a pohání endergonní reakce

38

ATP

adenosintrifosfát



## Rovnovážné stavy

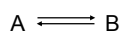
Chemické rovnováhy  
Zvratné reakce

40

## Rovnovážné stavy

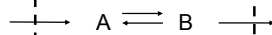
uzavřený systém

$$\Delta G = 0$$



otevřený systém

$$\Delta G \neq 0$$

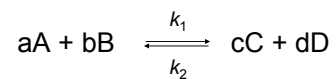


**dynamická rovnováha**

- složení soustavy je konstantní
- reakce v soustavě probíhají

41

## A) Homogenní systém



$$v_1 = k_1 c_A^a c_B^b \quad v_2 = k_2 c_C^c c_D^d$$

Rovnovážný stav:  $v_1 = v_2$

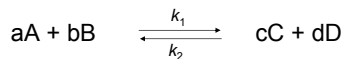
$$k_1 [A]^a [B]^b = k_2 [C]^c [D]^d$$

rovnovážné koncentrace

42

## Zákon chemické rovnováhy

(Guldbergův-Waageův zákon)



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

Rovnovážná konstanta

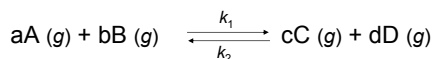
$$K_c = \frac{k_1}{k_2} = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

43

☞ Vyjádřete rovnovážnou konstantu pro kyselinu dusitou ve vodě?

44

Guldbergův-Waageův zákon  
pro plynné soustavy



$$K_p = \frac{k_1}{k_2} = \frac{(pC)_r^c (pD)_r^d}{(pA)_r^a (pB)_r^b}$$

*rovnovážné parciální tlaky plynů*

45

## B) Heterogenní systém



$$K_p = (pD)_r^d$$

parciální tlaky pevných látek

- jsou malé a konstantní
- jsou zahrnuty do  $K_p$

46

☞ Vyjádřete rovnovážnou konstantu pro reakci přípravy páleného vápna?



47

## Stav reakční soustavy v rovnováze

$K > 1$     převažují produkty

$K < 1$     převažují reaktanty

$K \approx 1$     vratná reakce

$K > 10^4$     nevratná (ireverzibilní) reakce

$K < 10^{-4}$     reakce v daném směru neprobíhá

48



## Faktory ovlivňující rovnovážný stav

Princip akce a reakce (Le Chatelierův-Braunův)

**Porušení rovnováhy vnějším zásahem vyvolá děj směřující ke zrušení tohoto vnějšího zásahu.**

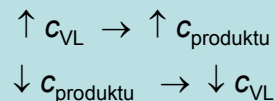
Vnější zásah:

- $\Delta$  koncentrace reaktantů
- $\Delta$  teploty systému
- $\Delta$  tlaku systému

49

$\Delta$ koncentrace reaktantů vyvolá **novou rovnováhu**

s jinými rovnovážnými koncentracemi



50

$\Delta$  teploty vyvolá **novou rovnováhu s jinou hodnotou  $K$**

zvýšení  $T$ : urychlí endotermní reakci  
snížení  $T$ : urychlí exotermní reakci

Jak ovlivní  $\uparrow T$  hodnotu  $K$ ?

Je-li reakce  $A \rightarrow B$  endotermní :  $\uparrow K$   
exotermní :  $\downarrow K$

51

$\Delta$  tlaku vyvolá **novou rovnováhu s jinou hodnotou  $K$**

a to pouze u reakcí, u nichž se mění  $n$  plynných reakčních složek

zvýšení tlaku  $\Rightarrow$  urychlí reakci ve směru poklesu  $n$  složek soustavy

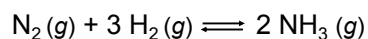
Jak ovlivní  $\uparrow p$  hodnotu  $K$ ?

U reakce:  $A(g) + B(g) \rightleftharpoons 2 C(g) + D(g)$   $\downarrow K$   
 $A(g) + B(g) \rightleftharpoons D(g)$   $\uparrow K$

52

☛ Jak ovlivní rovnováhu reakce syntézy amoniaku

- zvýšení tlaku v systému
- zvýšení teploty ( $\Delta H^\circ = -92$  kJ/mol)



$\uparrow p \Rightarrow$

$\uparrow T \Rightarrow$

53

## Periodický systém prvků

Mendělejevův periodický zákon

54

## Periodický zákon



D. I. Mendělejev (1869)

Vlastnosti prvků a jejich sloučenin jsou periodicky závislé na „atomové váze“ ( $A_r$ ).

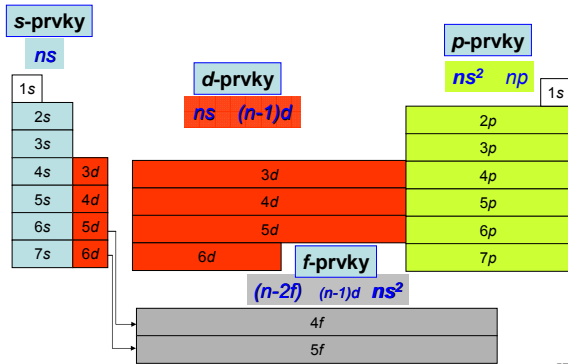
Vlastnosti prvků a jejich sloučenin jsou periodickou funkcí jejich protonového čísla.

55

## Periodická tabulka prvků

1																	18										
IA	2												13	14	15	16	17	VIIIA									
H	He											III A	IV A	V A	VIA	VII A	0										
Li	Be	III B	IV B	VB	VIB	VII B	VIII B	IX B	X B	IB	IIB	B	C	N	O	F	Ne										
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar										
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr										
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe										
Cs	Ba											Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra											Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt										
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu											
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr											

## Umístění valenčních elektronů v orbitalech



57

## hlavní skupiny A

nepřechodné/základní prvky

1																	18	
IA	2												13	14	15	16	17	VIIIA
H	He											III A	IV A	V A	VIA	VII A	0	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca											Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr											In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba											Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra																	

s- a p-prvky

## vedlejší skupiny B

kovy

barevné sloučeniny

proměnlivé ox. č.

tvorba komplexních sloučenin

přechodné/  
tranzitní prvky

		3	4	5	6	7	8	9	10	11	12						
		III B	IV B	VB	VIB	VII B	VIII B	VIII B	IX B	X B	IIB						
		Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn						
		Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd						
		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg							
		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt										
		La															
		Ac															

d-prvky

## Obecné vlastnosti prvků podle jejich umístění v periodické tabulce

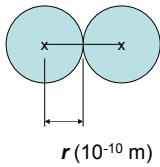
Prvky ve skupině

- mají zpravidla stejnou konfiguraci valenčních e<sup>-</sup>
- mají tedy podobné vlastnosti

60

## Velikost atomů a iontů

### Atomový poloměr



dle typu vazby

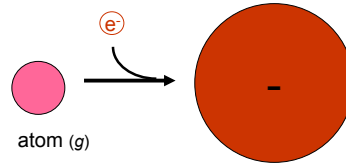
- kovalentní
- iontový
- kovový

molekula, krystal

61

## Elektronová afinita

- energie uvolněná při vzniku aniontu z atomu v plynném stavu

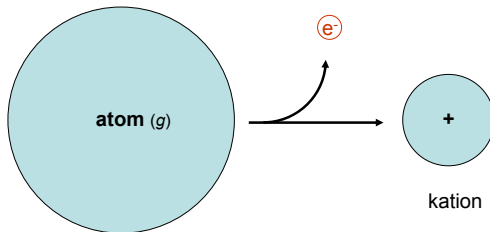


- schopnost prvku tvořit anionty

62

## První ionizační energie

- energie nutná k odtržení  $e^-$  z atomu v plynném stavu



63

## Periodické vlastnosti prvků

v znázorněném směru se **zmenšuje**

- **atomový poloměr**

64

v znázorněném směru **vzrůstá**

- **nekovový charakter**
- **oxidační účinky prvku**
- **elektronegativita**
- **ionizační energie**
- **$e^-$  afinita**

65

- Který z uvedených čtyř prvků patří mezi nepřechodné prvky?

- Cd
- Mn
- Ti
- U
- všechny patří mezi přechodné prvky

66

☛ Mezi nepřechodné prvky skupiny VI (skupiny 16) periodické soustavy patří:

- a) molybden
- b) bismut
- c) uran
- d) chrom
- e) žádný z uvedených prvků

67

☛ Mezi přechodné prvky skupiny VII (skupiny 7) patří:

- a) chrom
- b) astat
- c) nikl
- d) mangan
- e) žádný z uvedených prvků

68

☛ Vybete z nabídnutých protonové číslo prvku, který musí patřit mezi kovy:

- a) 19
- b) 15
- c) 17
- d) 9
- e) žádný z uvedených prvků

69

☛ Který z uvedených čtyř prvků nepatří mezi kovy?

- a) Br
- b) Ba
- c) Bi
- d) Be
- e) žádný z uvedených prvků

70

☛ Vybete správné tvrzení o *d* prvcích: *d* prvky mají

- a) oxidační čísla ve všech sloučeninách stejná
- b) všechny sloučeniny a ionty bezbarvé
- c) všechny oxidy jen zásadotvorné
- d) malou schopnost tvořit koordinační sloučeniny
- e) správné tvrzení není uvedeno

71

☛ Vybete pravdivý výrok o *s*- a *p*-prvcích: S rostoucím protonovým číslem prvků téže skupiny se zvyšuje jejich

- a) ionizační energie
- b) elektronová afinita
- c) elektronegativita
- d) atomový poloměr
- e) správná odpověď není uvedena

72