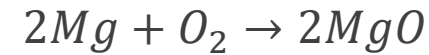


Reaktiot ja energia

Kemiallisen reaktion perusteita

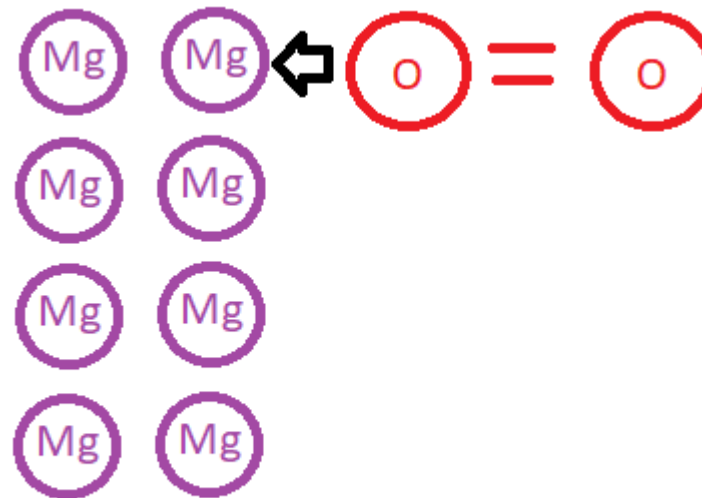
Miksi kemiallinen reaktio tapahtuu

- ▶ Tarkastellaan magnesiumin palamista.

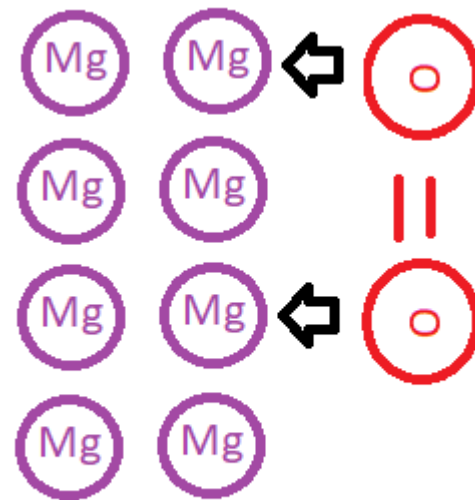


- ▶ Milloin tämä reaktio voi alkaa?
 - ▶ Jotta aineet voivat reagoida keskenään, niiden on törmättävä keskenään sopivassa **kulmassa** ja riittävällä **nopeudella**.

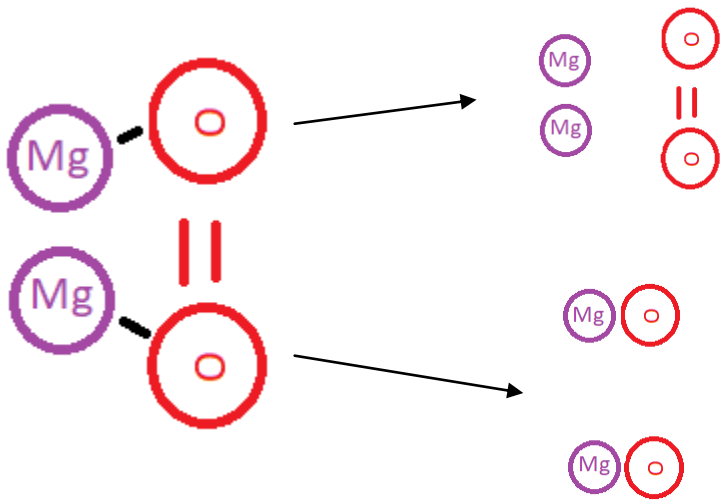
- ▶ Reaktio ei pääse tapahtumaan, koska sidoselektronit eivät pääse reagoimaan.



► Nyt reaktio voi tapahtua.



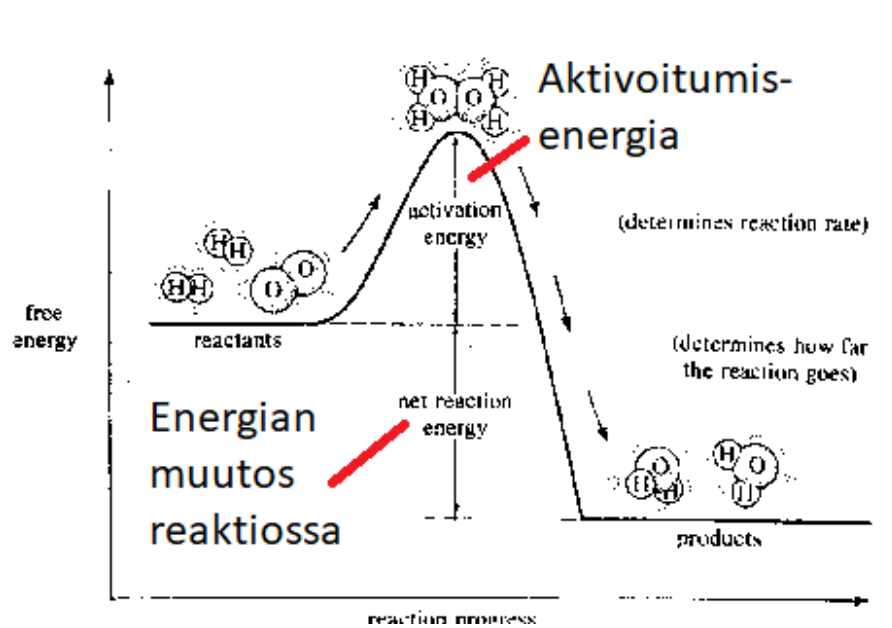
- Reaktin alussa muodostuu ns. **siirtymäkompleksi**, joka voi hajota takaisin lähtöaineiksi tai reaktiotuotteiksi.



Ei reaktiota

Reaktio

- ▶ Siirtymäkompleksin energiataso on korkeampi kuin **lähtöaineilla** tai **reaktiotuotteilla**. Kemiassa aineet pyrkivät energiainimiin, minkä vuoksi siirtymäkompleksit ovat aina lyhytikäisiä ja epävakaita.
- ▶ Reaktion käynnistymiseen vaadittavaa energiaa kutsutaan **aktivoitumisenergiaksi**.



► Milloin kemialliset reaktiot ovat spontaaneja?

► Tähän vaikuttaa kaksi tekijää

1. Systeemi pyrkii energia minimiin

► Energiatasot voidaan laskea **entalpian H** avulla. Reaktiossa entalpiian muutos on

$$\Delta H = H(\text{reaktiotuotteet}) - H(\text{lähtöaineet})$$

► Jos $\Delta H < 0$, reaktiossa vapautuu energiaa, eli se on **eksoterminen** reaktio.

► Jos $\Delta H > 0$, reaktio sitoo energiaa, eli se on **endoterminen** reaktio.

2. Systeemi pyrkii **entropia** maksimiin.

► Entropiaa kuvaa systeemin epäjärjestystä.

$$\Delta S = S(\text{reaktiotuotteet}) - S(\text{lähtöaineet})$$

- ▶ Kun yhdistämme nämä ehdot, saamme kirjoitettua kaavan **Gibbsin energialle**.

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

ΔH = entalpian muutos

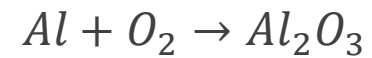
ΔS = entropian muutos

T = lämpötila kelvineissä.

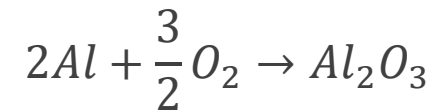
- ▶ Kun $\Delta G < 0 \Rightarrow$ reaktio on spontaani.
 - ▶ Jos reaktiossa entropia kasvaa, siitä saadaan aina spontaani nostamalla lämpötilaa.
 - ▶ Jos reaktiossa entropia pienenee, reaktio on spontaani jos, ja vain jos, reaktiossa entalpia pienenee riittävästi.

Reaktioyhtälön kirjoittaminen ja tasapainottaminen

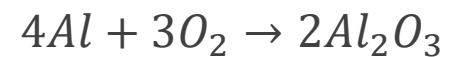
- ▶ Tasapainoita reaktioyhtälö:



- ▶ 1) Aineita ei saa hävitä eikä ilmestyä lisää.



- ▶ Lähes aina halutaan, että reaktioyhtälön kertoimet ovat pienimmät mahdolliset kokonaisluvut, joilla yhtälön molemmilla puolilla on yhtä paljon kaikkia alkuaineita.



► 2) Merkitään aineiden olomuodot.

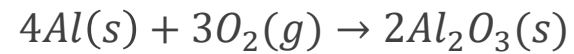
- Aineiden olomuodot merkitään aineiden perään sulkuihin käyttämällä olomuodon lyhennettä.

(s)= kiinteä **solid**

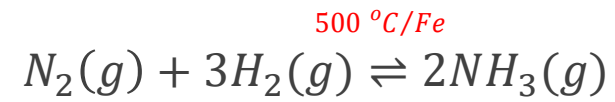
(l)= neste **liquid**

(g)= kaasu **gas**

(aq)= liuennut **aqueous solution**



- ▶ 3) Merkitään reaktion olosuhteet ja katalyytit.



” \rightleftharpoons ” merkitsee tasapainoreaktiota, eli reaktio voi edetä molempiin suuntiin (KE5)

Reaktioyhtälön käyttö

- ▶ Kuinka monta moolia typpikaasua muodostuu, kun 100g kuparioksidia reagoi ammoniakin kanssa?



- ▶ 1) Tasapainotetaan reaktioyhtälö.

► 1) Tasapainotetaan reaktioyhtälö.

► Tasapainotettu reaktioyhtälö:



- 2) Ratkaistaan kuparioksidin ainemäärä.

$$n(\text{CuO}) = \frac{m(\text{CuO})}{M(\text{CuO})}$$

$$M(\text{CuO}) = 63,55 \text{ g/mol} + 16,00 \text{ g/mol}$$

Kuparin moolimassa

Hapen moolimassa

$$M(\text{CuO}) = 79,55 \text{ g/mol}$$

$$n(\text{CuO}) = \frac{100\text{ g}}{79,55\text{ g/mol}} = 1,25707 \dots \text{ mol}$$

Välitulosta ei pyöristetä!

► 3) Ratkaistaan typpikaasun ainemäärä.

- Reaktioyhtälöstä nähdään, että kolmea CuO :ta kohden muodostuu yksi N_2 -molekyyli.

$$\frac{n(CuO)}{n(N_2)} = \frac{3}{1} \Rightarrow n(N_2) = \frac{1}{3}n(CuO)$$
$$n(N_2) = \frac{1}{3} \cdot 1,25707 \dots mol = 0,4190236 \dots mol$$
$$\underline{n(N_2) \approx 0,42 mol}$$

- Typpikaasua muodostuu noin 0,42 moolia.

- ▶ Reaktiossa muodostui vain 10,0g typpeä. Ratkaise reaktion saantoprosentti.
 - ▶ Huom!

$$\text{saanto} - \% = \frac{\text{saanto}}{\text{teoreettinen saanto}} \cdot 100\%$$

- ▶ Teoriassa typpeä muodostuu noin 0,42 moolia. Lasketaan teoreettisen saannon massa.

$$n = \frac{m}{M} \Rightarrow m = n \cdot M$$

$$M(N_2) = 2 \cdot 14,01 \text{ g/mol} = 28,02 \text{ g/mol}$$

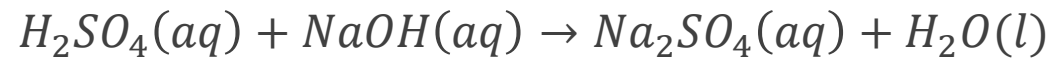
↑
Typen moolimassa

$$m(N_2) = 0,4190236 \dots \text{ mol} \cdot 28,02 \text{ g/mol} = 11,74104127 \dots \text{ g}$$

$$\text{saanto} - \% = \frac{10,0g}{11,74104127 \dots g} \cdot 100\% = 85,17132142 \dots \%$$

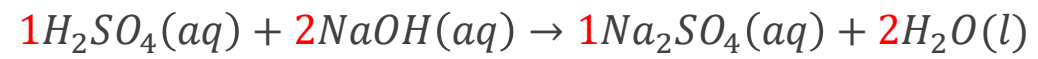
$$\underline{\text{saanto} - \% \approx 85,2\%}$$

- ▶ Rikkihappoliuosta on 50ml. Liuosta titrataan $NaOH$ -liuoksella, jonka konsentraatio on $0,100 \text{ mol/l}$. $NaOH$ -liuosta kului 12,3ml rikkihapon neutralisoitumiseen. Laske rikkihappoliuoksen konsentraatio.
- ▶ 1) Tasapainotetaan reaktioyhtälö



► 1) Tasapainotetaan reaktioyhtälö.

► Tasapainotettu reaktioyhtälö:



- 2) Ratkaistaan natriumhydroksidin ainemäärä.

$$c = \frac{n}{V} \Rightarrow n = c \cdot V$$

$$n(\text{NaOH}) = c(\text{NaOH}) \cdot V(\text{NaOH}) = 0,100\text{M} \cdot 12,3 \cdot 10^{-3}\text{l}$$

M = molaarisuus = mol/l

Yksiköt litroina

$$n(\text{NaOH}) = 0,00123\text{mol}$$

► 3) Ratkaistaan rikkihapon ainemäärä.

- Reaktioyhtälöstä nähdään, että rikkihapon ainemäärä on puolet $NaOH$:n ainemäärästä.

$$n(H_2SO_4) = \frac{1}{2} \cdot n(NaOH) = \frac{1}{2} \cdot 0,00123\text{mol} = 0,000615\text{mol}$$

- 4) Ratkaistaan rikkihapon konsentraatio.

$$c(H_2SO_4) = \frac{n(H_2SO_4)}{V(H_2SO_4)} = \frac{0,000615mol}{50 \cdot 10^{-3}l} = 0,0123M$$

$$\underline{c(H_2SO_4) \approx 0,012 mol/l}$$