

# REAKTIOT JA ENERGIA

# Kurssin sisältö ja tavoitteet K2020

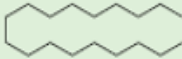
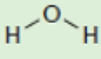
- Luennot ja materiaali ped.net:ssa ja Classroomissa
  - ▣ Laitoin eilen wilma -viestiä (Kaikki OK?)
- Keskustelua työalustoista
- Kurssin keskeiset asiat + osallistuminen + arviointi
- Kokeen tekeminen askarruttaa

# Mitä kemia on?

Kemia on rakennetta, ominaisuuksia, kemiallisia reaktioita, ainemääriä ja aineiden pitoisuuksia

Kemia on elektronien liikkumista tai/ja siirtymistä

**Esimerkki** Sytytetään kynttilä. Mitä tapahtuu?

|                                       | Lähtöaineet                                                                                                          |                         | Tuotteet                        |                                                                                                     |
|---------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|---------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                       | oktadekaani<br>$C_{18}H_{38}$<br> | happi<br>$O_2$<br>$O=O$ | hiilidioksidi $CO_2$<br>$O=C=O$ | vesi $H_2O$<br> |
| olomuoto<br>$0\text{ °C}$ ; 101,3 kPa | kiinteä                                                                                                              | kaasu                   | kaasu                           | neste                                                                                               |
| sulamispiste, °C                      | 28                                                                                                                   | -219                    | –                               | 0                                                                                                   |
| kiehumispiste, °C                     | 316                                                                                                                  | -183                    | -79*                            | 100                                                                                                 |
| tiheys, g/dm <sup>3</sup>             | 776,8                                                                                                                | 1,31                    | 1,799                           | 1000                                                                                                |

\* sublimoituu eli muuttuu suoraan kiinteästä kaasuksi

# Määritelmiä sekä käsitteitä

## Kemialliseen reaktioon liittyviä käsitteitä ja määritelmiä:

**Reaktiomekanismi** tarkoittaa mallia, joka selittää atomi- ja elektronitasolla, miten reaktio tapahtuu (erityisesti orgaanisen kemian reaktiot). Reaktiomekanismin kuvaamiseen käytetään *mahdollisimman tarkkoja rakennekaavoja sekä erilaisia nuolia*, jotka kuvaavat elektronien liikettä.

→ Fysikaalinen kemia, laskennallinen kemia, synteettinen kemia

Kemiallista reaktiota kuvataan **tasapainotetulla reaktioyhtälöllä**, josta nähdään lähtöaineiden ja reaktiotuotteiden kemiallisten kaavojen lisäksi myös näiden aineiden olomuodot ja reaktioyhtälön (ns. stoikiometriset) kertoimet. Stoikiometria tulee kreikasta: *stoikhein* = alkuaine ja *metrein* = mittaaminen.

**Kinetiikka** on reaktionopeuksia tutkiva ja niitä matemaattisesti mallintava kemian osa-alue. Tästä lisää kemian 5.-kurssilla.

**Kemiallisia reaktioita ovat:** hapettuminen ja pelkistyminen (palaminen), protolyysi- eli protonin siirtoreaktiot (neutraloituminen), saostuminen, hajoaminen. Orgaanisessa kemiassa lisäksi: substituutio- eli korvautumisreaktiot, additio- eli lisäysreaktiot, eliminaatio- eli poistoreaktiot, kondensaatio eli lohkeaminen, hydrolyysi (saippuan valmistus) ja polymeroitumisreaktiot.

# Keskeiset sisällöt(lähde opetusTV+OPS)

## Opetettavat asiat / keskeiset sisällöt

- kemian merkitys energiaratkaisujen ja ympäristön kannalta
- kemiallisen reaktion symbolinen ilmaisu ja tasapainottaminen
- epäorgaanisten ja orgaanisten yhdisteiden reaktioita sekä niiden sovelluksia
- aineen häviämättömyys kemiallisessa reaktiossa ja sen yksinkertainen laskennallinen käsittely
- energian häviämättömyys kemiallisessa reaktiossa, sidosenergia ja Hessin laki

## keskeiset sisällöt (jatkuu)

- kaasujen ominaisuudet ja yleinen tilanyhtälö
- reaktioiden tutkiminen kokeellisesti, titrausanalyysimenetelmänä, tutkimustulosten käsitteleminen, tulkitseminen ja esittäminen
- Energianmuutokset kemiallisessa reaktiossa
  - endo- ja eksotermiset reaktiot
  - entalpia – kuvaajat
- KE 5 → Reaktionopeus ja siihen vaikuttavat tekijät

# Kurssin tavoitteet

Kurssin tavoitteena on, että opiskelija

- osaa käyttää ja soveltaa reaktioihin liittyviä käsitteitä jokapäiväisen elämän, ympäristön, yhteiskunnan ja teknologian ilmiöissä
- osaa tutkia kokeellisesti ja erilaisia malleja käyttäen reaktioihin liittyviä ilmiöitä
- ymmärtää aineen ja energian häviämättömyyden merkityksen kemiassa.

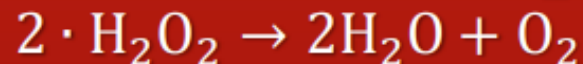
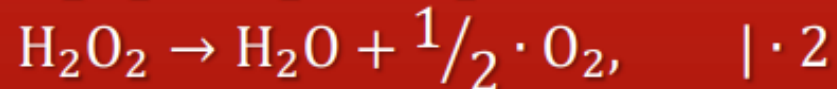
# Matemaattinen osa

## Matematiikka ei ole vaikeaa

Esimerkki vetyperoksidin hajoaminen vedeksi ja hapeksi:

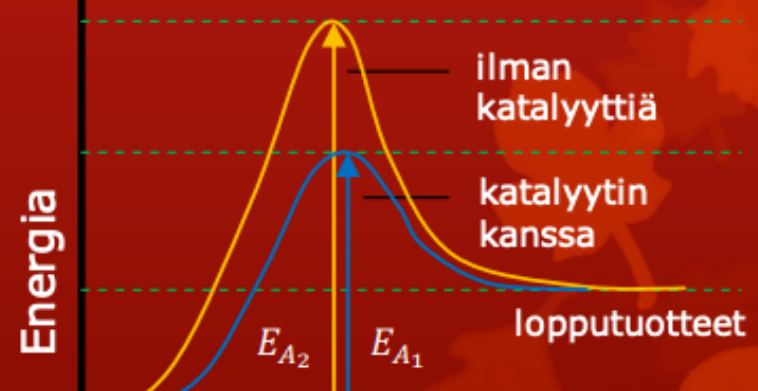
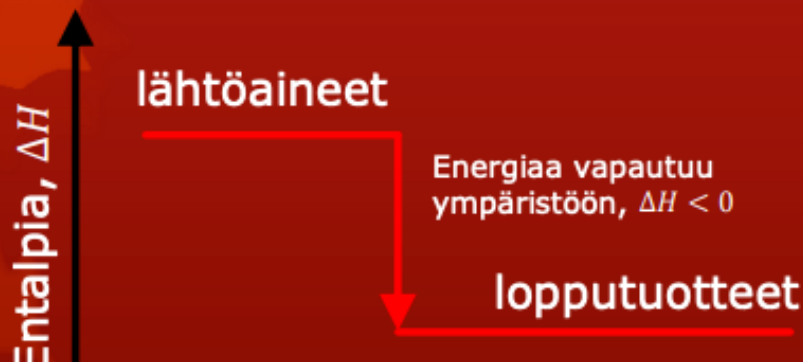


REAKTIOYHTÄLÖ



TASAPAINOTETTU  
REAKTIOYHTÄLÖ

## Kuvaajien tulkintaa KE 3 ja KE 5



# Laskennallisuus & matemaattisuus

## Yhtälöparien ratkaisemista

$$\begin{array}{lcl} x + y = 10 & & y = 10 - x \\ 2 \cdot x + 3 \cdot y = 27,4 & \longrightarrow & 2x + 3(10 - x) = 27,4 \end{array}$$

Nyt yhtälöparin muuttujat eivät ole  $x$  ja  $y$ , vaan:

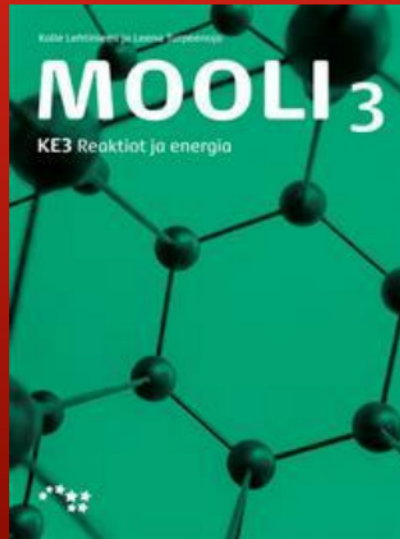
$$\begin{array}{l} V(\text{etaani}) + V(\text{propaani}) = 10,0 \text{ cm}^3 \\ 2 \cdot V(\text{etaani}) + 3 \cdot V(\text{propaani}) = 27,4 \text{ cm}^3 \end{array}$$

# Välitehtävinä tehtävät 6 ja 9.

□ Aloitamme kappaletta yksi

## 1. Kemiallisen reaktion perusteita

Kurssikirja, Mooli 3 OTAVA



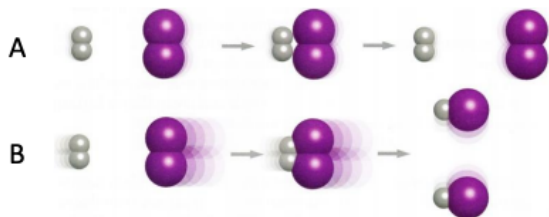
# 1.1 Miksi kemiallinen reaktio tapahtuu

## Miksi reaktio tapahtuu?

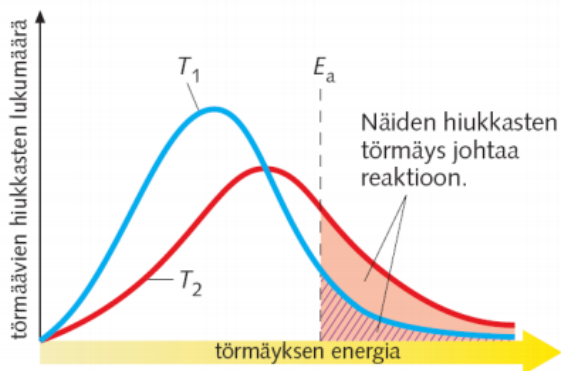
REAKTIOT JA  
ENERGIA, KE3

### Miten kemiallinen reaktio tapahtuu? Törmäysteoria

Kemiallinen reaktio voi tapahtua vain silloin, kun lähtöainemolekyylit, -atomit tai -ionit törmäävät toisiinsa riittävän voimakkaasti ja törmäys osuu oikeasta suunnasta molekyylin, atomin tai ionin reaktioherkkään kohtaan.

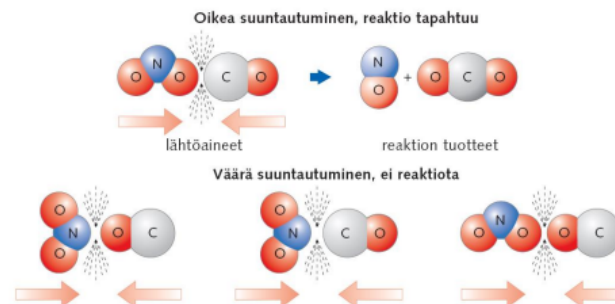


- A: Lähtöaineet liikkuvat liian hitaasti, eli niiden liike-energia on pieni → törmäys on kimmoisin ja reaktiota ei tapahdu.
- B: Lähtöaineet liikkuvat nopeasti, liike-energia on suuri → jos törmäys osuu oikeaan kohtaan, tapahtuu reaktio.



$T_1$  ja  $T_2$  kuvaavat lämpötiloja ja  $E_A$  ns. aktivoitumisenergiaa.

### Siis milloin kemiallinen reaktio tapahtuu?



Havaitaan, että kemiallisen reaktion edellytyksiä ovat:

- Reaktiokykyiset lähtöaineet
- Oikea suuntautuminen
- Riittävä törmäysenergia eli riittävän korkea lämpötila

### **Määritelmä, kemiallinen reaktio:**

*Kemiallinen reaktio* on tapahtuma, jossa <sup>1)</sup>ensimmäisessä vaiheessa lähtöaineiden sisäiset sidokset katkeavat ja <sup>2)</sup>tämän jälkeen hiukkaset sitoutuvat uusilla kemiallisilla sidoksilla samalla, kun atomit järjestyvät uudelleen muodostaen reaktiotuotteita. Toisin sanoen syntyvät reaktiotuotteet ovat eri aineita kuin lähtöaineet.

→ Ovatko olomuodon muutokset kemiallisia reaktioita? Vertaa heikkojen ja vahvojen sidosten katkeamista ja uusien syntymisiä.

Kemiallisessa reaktiossa ainetta ei häviä → **Aineen häviämättömyyden laki.**

**Huomautus** Muista 1.-kurssilta, että sidoksen katkaisemiseen tarvitaan aina energiaa (endoterminen vaihe) ja vastaavasti sidoksen muodostuminen vapauttaa aina energiaa (eksoterminen vaihe).

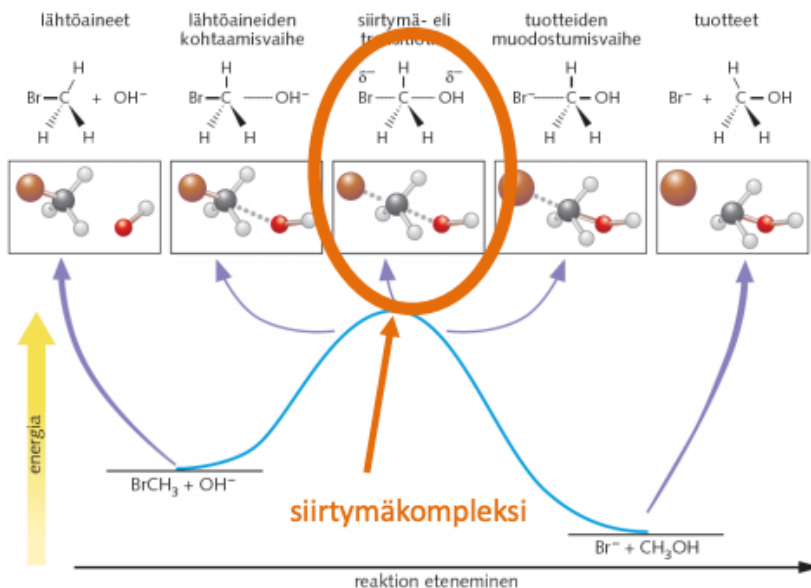
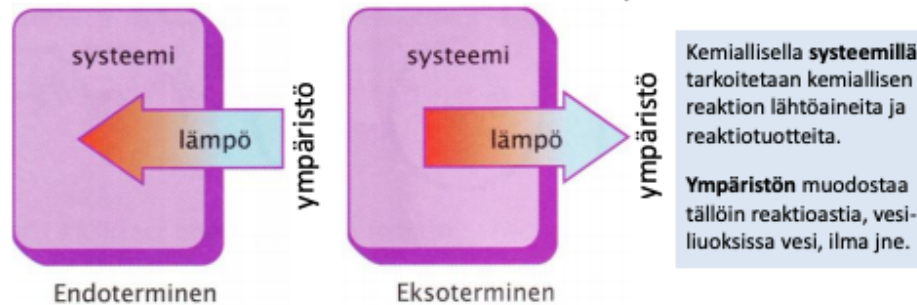
#### **Vahvat sidokset**

- Ionisidos
- Metallisidos
- Kovalenttinen sidos

#### **Heikot sidokset**

- Ioni-dipoli-sidos
- Dipoli-dipoli-sidos (vetysidos erikoistapauksena)
- Dispersiovoimat (van Der Waals, Londonin voimat)

# Ekso- vai endoterminen reaktio



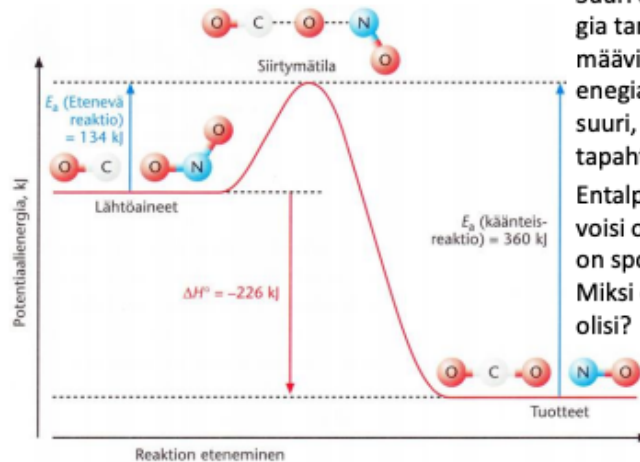
*Sidosten katkeaminen* on aina energiaa sitova eli endoterminen vaihe. Uusien *sidosten muodostuminen* puolestaan aina vapauttaa energiaa eli tämä on eksoterminen vaihe.

→ Kemialliseen reaktioon liittyvä kokonaisenergian muutos voidaan siis ajatella näiden kahden vaiheen summana.

# Aktivoitumisenergia

## Määritelmä, aktivoitumisenergia:

Aktivoitumisenergia  $E_a$  on pienin energia, joka reaktion lähtöaineilla on oltava, jotta reaktio voi tapahtua. Energiakaaviossa  $E_a$  on *siirtymätilan energian* ja *lähtöaineiden energian erotus*. Aktivoitumisenergian suuruus on kullekin reaktiolle tyypillinen ja aina positiivinen.

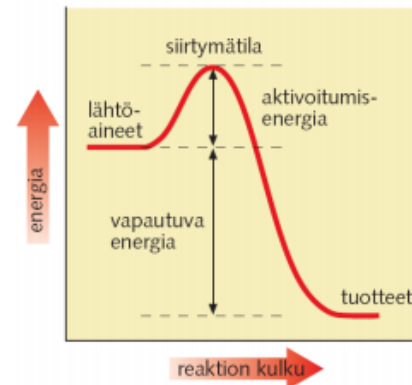


Suuri aktivoitumisenergia tarkoittaa, että törmäävien hiukkasten liike-energian on oltava hyvin suuri, jotta reaktio voisi tapahtua.

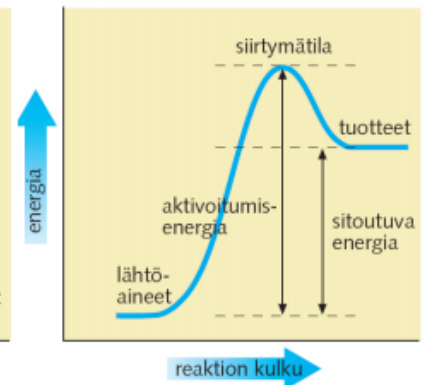
Entalpia  $\Delta H^\circ < 0$ , joten voisi olettaa, että reaktio on spontaani.

Miksi ei ole? Entä jos olisi?

## A eksotermisen



## B endotermisen



# Entalpia H

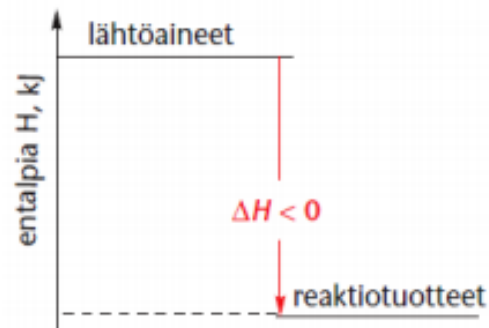
## Määritelmä, entalpia $H$ "lämpösisältö":

Entalpia kuvaa aineen sisäenergiaa vakiopaineessa. Entalpia koostuu sidosten potentiaalienergiasta ja hiukkasten liike-energiasta.

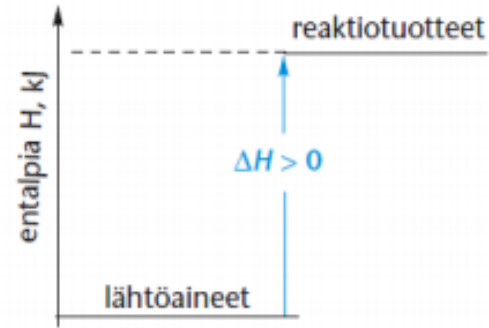
Reaktion entalpiamuutoksella eli lämpösisällön muutoksella, merkitään  $\Delta H$ , tarkoitetaan reaktiotuotteiden ja lähtöaineiden entalpia-arvojen erotusta, eli

$$\Delta H = H_{\text{reaktiotuotteet}} - H_{\text{lähtöaineet}} = H_{\text{lopputila}} - H_{\text{alkutila}}$$

# Plus- vai miinusmerkkinen



**Eksotermisen** reaktion energiakaavio. Entalpia pienenee ja energiaa vapautuu.



**Endotermisen** reaktion energiakaavio. Entalpia kasvaa ja energiaa sitoutuu.

Eksotermisen reaktion entalpian muutoksen etumerkki on  $-$ . Miinusmerkki ilmoittaa, että energiaa vapautuu.

Endotermisen reaktion entalpian muutoksen etumerkki on  $+$ . Plusmerkki ilmoittaa, että energiaa sitoutuu.

# Spontaani reaktio

## **Määritelmä, spontaani reaktio:**

Sanotaan, että reaktio on *spontaani*, eli tapahtuu ilman ulkoista energiaa, jos reaktion tapahtuessa systeemin kokonaisenergia pienenee.

Mikä on systeemi? **Mikä on kokonaisenergia?**

Kokonaisenergialla tai oikeammin energian muutoksella kuvataan systeemiin tuodun ja systeemin antaman energian välistä erotusta. Mikäli erotus on negatiivinen, niin systeemi tekee työtä ympäristölle tai luovuttaa lämpöä ympäristölle (tai valoa). Vastaavasti, jos erotus on positiivinen, niin ympäristö tekee työtä systeemille tai luovuttaa lämpöä systeemille.

Systeemistä vapautuva energia havaitaan siis lämpönä tai valona tai entropian kasvuna. (Mitä on entropia?)

Kemiallisen reaktion spontaanisuus tietyssä lämpötilassa siis riippuu kahdesta pyrkimyksestä:

1. Kemiallisen systeemin pyrkimys energiaminimiin
2. Kemiallisen systeemin pyrkimys sellaiseen suuntaan, jossa sen epäjärjestys eli entropia kasvaa

# Entropia S

## Määritelmä, entropia:

Entropia  $\rightarrow$  systeemi = reaktio + ympäristö!

Entropia  $S$  on ns. tilafunktio, joka kuvaa systeemin epäjärjestystä. Spontaanin reaktion seurauksena systeemin epäjärjestys kasvaa.

Esimerkiksi kaasu pyrkii leviämään kaikkialle säiliöön, kotona vaatteet leviävät pitkin poikin lattialle, olomuodon muutokset...odottaako meitä lopulta ns. lämpökuolema.  $\rightarrow$  Termo-dynamiikan toinen pääsääntö.

| tapahtuma                                             | entropian muutos | $\Delta S$ :n etumerkki | esimerkkejä                                                                                                       |
|-------------------------------------------------------|------------------|-------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| sulaminen                                             | kasvaa           | +                       | $\text{H}_2\text{O(s)} \rightarrow \text{H}_2\text{O(l)}$                                                         |
| höyrystyminen                                         | kasvaa           | +                       | $\text{H}_2\text{O(l)} \rightarrow \text{H}_2\text{O(g)}$                                                         |
| tiivistyminen                                         | pienenee         | -                       | $\text{H}_2\text{O(g)} \rightarrow \text{H}_2\text{O(l)}$                                                         |
| kiinteän aineen liukeneminen                          | kasvaa           | +                       | $\text{NaCl(s)} + \text{H}_2\text{O(l)} \rightarrow \text{Na}^+(\text{aq}) + \text{Cl}^-(\text{aq})$              |
| aineen saostuminen                                    | pienenee         | -                       | $\text{Ca}^{2+}(\text{aq}) + \text{CO}_3^{2-}(\text{aq}) \rightarrow \text{CaCO}_3(\text{s})$                     |
| aineen hajoaminen<br>esimerkiksi lämmön vaikutuksesta | kasvaa           | +                       | $2 \text{NaHCO}_3(\text{s}) \rightarrow \text{Na}_2\text{O(s)} + \text{H}_2\text{O(g)} + 2 \text{CO}_2(\text{g})$ |

Kun tiedetään lähtöaineiden ja reaktiotuotteiden entropia-arvot (miten mitattu?) voidaan kemiallisen reaktion entropiamuutos  $\Delta S$  laskea samalla tapaa kuin entalpiamuutoksen  $\Delta H$  tapauksessa.

$$\Delta S = S_{\text{reaktiotuotteet}} - S_{\text{lähtöaineet}} = S_{\text{lopputila}} - S_{\text{alkutila}}$$

# Gibbsin energiamuutos

## Määritelmä, reaktion spontaanisuus ja Gibbsin energiamuutos:

Reaktio on spontaani tietyssä lämpötilassa ja paineessa, kun sen Gibbsin energiamuutos

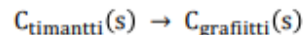
$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

on negatiivinen. Vastaavasti jos  $\Delta G > 0$ , niin reaktio ei ole spontaani.

|                | $\Delta H < 0$                   | $\Delta H > 0$       |
|----------------|----------------------------------|----------------------|
| $\Delta S > 0$ | spontaani kaikissa lämpötiloissa | riippuu lämpötilasta |
| $\Delta S < 0$ | riippuu lämpötilasta             | ei koskaan spontaani |

**Huomautus** Luonnossa spontaanisti tapahtuvilla muutoksilla on pyrkimys energiaminimiin ja entropiamaksimiin.

**Esimerkki** (wikipediasta) Reaktion



Gibbsin energiamuutos on negatiivinen ja siten spontaani, kun  $T = 25^{\circ}\text{C}$  ja  $p = 1 \text{ atm}$ . Kuitenkin, vaikka spontaani, reaktio on niin hidas, että sitä ei voi havaita. Huomaa, että reaktion termodynaaminen spontaanisuus ei määrää reaktion nopeutta.