



Сагоревање М



Сагоревање с гледишта физике и хемије ✓

- Реакције сагоревања су процеси у којима атоми у реактантама врше прегруписавање стварајући продукте.
- Прегруписавање и спајање се врши како би спојени атоми прешли у стабилније енергетско стање.
- Молекули реактанта реагују само уколико су у довољно блиском контакту.



Хемијска кинетика

- Део физичке хемије који се односи на начин одигравања реакције од почетног до крајњег стања.
- Хемијска кинетика проучава брзину и механизме хемијских процеса.



Значај хемијске кинетике

- **Физичка хемија – омогућава:**
 - сагледавање природе реактанта (гориво и оксидатор),
 - схватање настајања и кидања хемијских веза, процењивање њихових енергија, начина настајања продукта,
- **Хемијска кинетика указује на брзину одвијања процеса, брзину настајања одговарајућих продукта.**



Хемијске везе

- Хемијске везе су привлачне силе које држе честице у хемијском елементу/једињењу на окупу.
- Врста и јачина хемијских веза одређује особине једињења.



Хемијске везе

Три основне врсте хемијских веза:

- **Ковалентне (неметал-неметал, електрони се деле између атома, долази до укрштања орбита приликом изградње везе):**
 - једноструке (молекул водоника),
 - двоструке (молекул кисеоника),
 - троструке (молекул азота).
- **Јонске (неметал-метал потпуни пренос електрона са једног на други атом),**
- **Металне (метал-метал).**



Хемијске реакције

- Најопштија подела (према агрегатном стању реактанта):
 - хомогене (само једна фаза) и
 - нехомогене (две или више фаза).
- И једне и друге се деле на (према природи хемијске реакције):
 - коначне (неповратне),
 - равнотежне (повратне),
 - узастопне, ланчане, каталитичке.



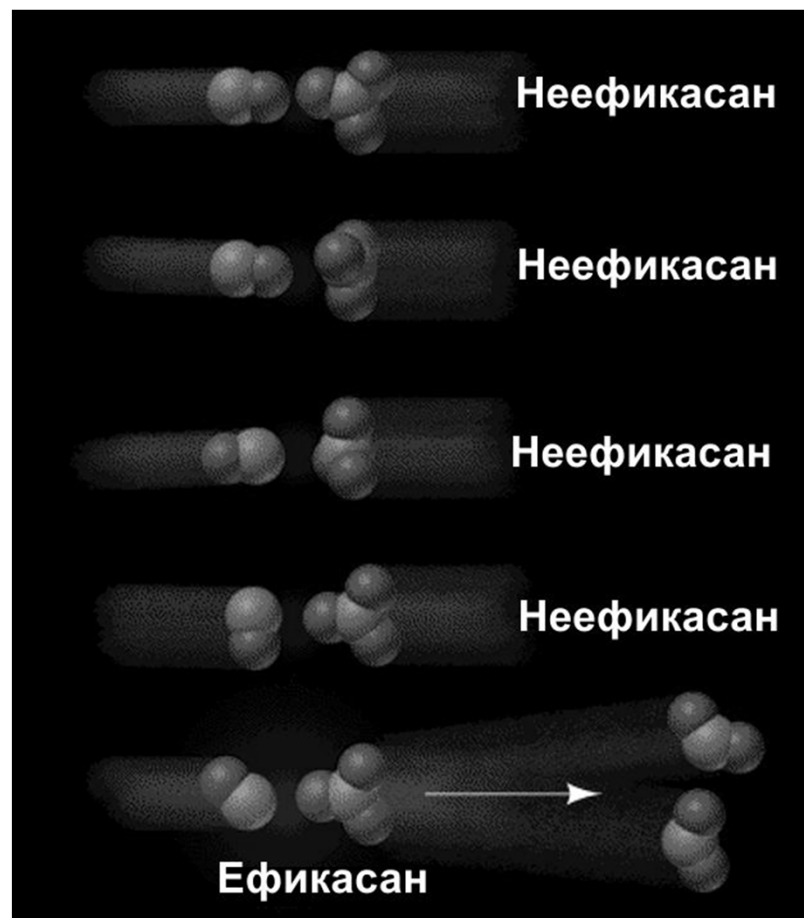
Хемијске реакције

- Svante Arrhenius је 1889. дефинисао да у хемијској реакцији могу да учествују само молекули који су у активираним стању које се постиже апсорпцијом топлоте.
- Теорија судара:
 - За одигравање хемијске реакције неопходно је да се **СУДАРЕ** два молекула.
 - Судар ће бити ЕФИКАСАН само ако се одигра када су честице реактанта у ОДГОВАРАЈУЋОЈ ОРИЈЕНТАЦИЈИ и са ДОВОЉНОМ КИНЕТИЧКОМ ЕНЕРГИЈОМ.



✓...

Неефикасан и ефикасан судар



Сагоревање М, школска 2025/26,
2. предавање



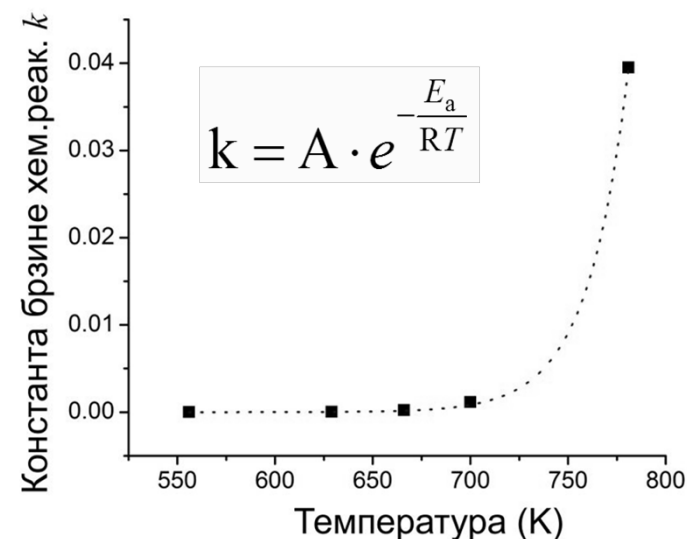
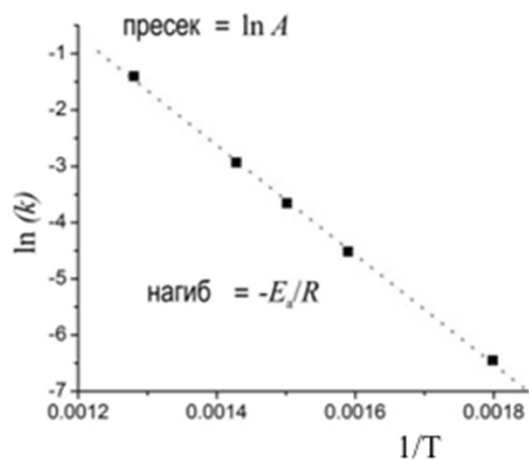
Шта се дешава уочи и током хемијске реакције?

- При судару молекули се толико зближе тако да атоми и електрони једног молекула доспеју у област дејства електричних поља другог молекула стварајући услове за прегрупписавање атома и као резултат насталих прегрупписавања настају нови молекули.
- **Учестаност судара одређује брзину хемијске реакције која зависи од брзине молекула и њиховог броја у јединици запремине.**



Arrhenius-ова једначина

Пораст брзине
реакције не зависи
линеарно од
промене температуре.



A је предекспоненцијални фактор који обухвата учестаност судара и вероватноћу да судар доведе до реакције.

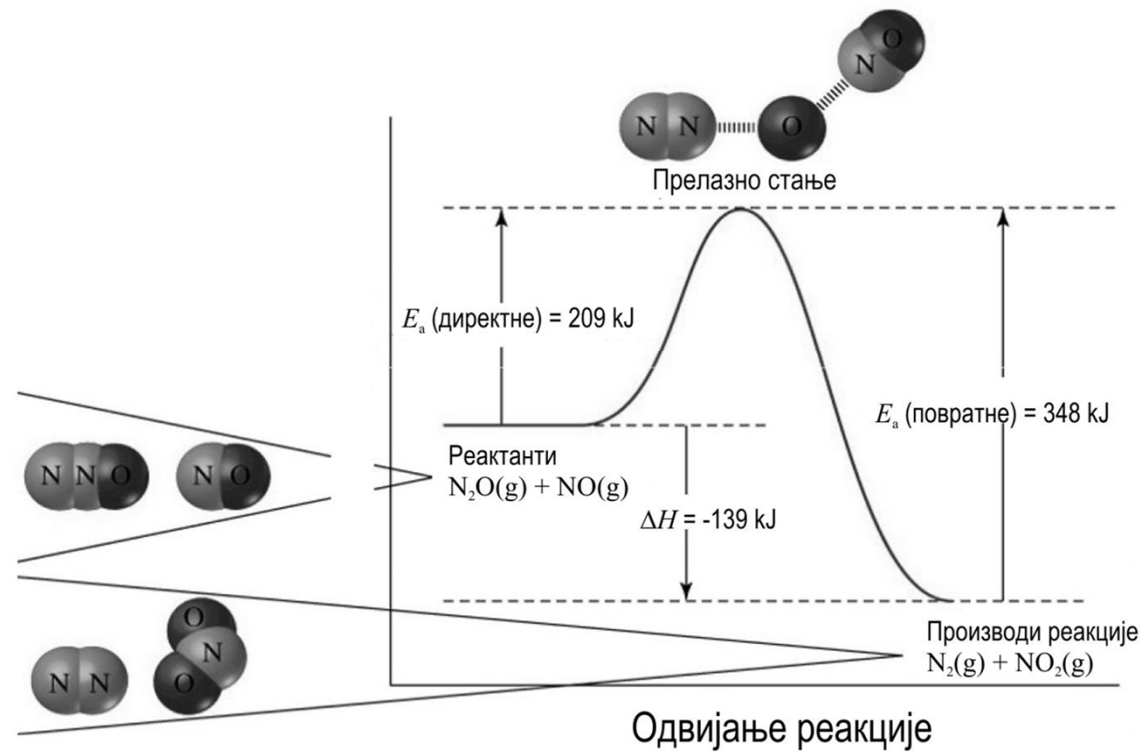


Енергија активације

- Молекули морају да поседују минимум енергије да би реаговали.
- Та енергија потиче од кинетичке енергије молекула који се сударају.
- После судара она се користи за истезање, савијање, раскидање веза, водећи до хемијске реакције. **Да би реаговали, молекули морају да имају укупну кинетичку енергију, већу од неког неопходног минимума.**
- **Тај минимум енергије назива се енергија активације.**



Енергија активације





Брзина хемијске реакције

- Брзина хемијске реакције је промена концентрације реактаната или производа реакције у јединици времена.
- Концентрација неке материје је њена количина у јединици запремине.
- На брзину хемијске реакције утичу:
 - концентрације реактаната,
 - температура,
 - природа реактаната и производа реакције (специф. површина) и
 - присуство катализатора.

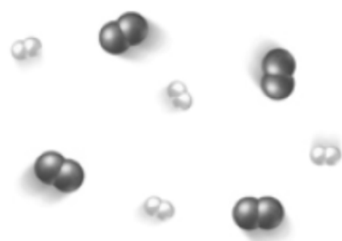


Брзина хемијске реакције

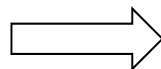
- **Утицај концентрације реактанта:**
 - Повећањем концентрације реактанта повећава се број ефикасних судара, па је и брзина реакције већа.
 - Брзина хемијске реакције се повећава **сразмерно** повећању концентрације реактанта.
- **Утицај температуре:**
 - Са порастом температуре брзина хемијске реакције расте експоненцијално.



Брзина хемијске реакције - утицај концентрације реактанта

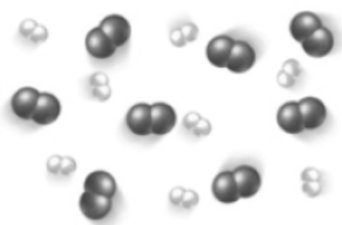


Ниска почетна концентрација

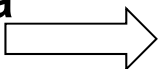


Мала почетна брзина реакције

Ниска концентрација реактанта.
Мали број ефикасних судара.



Висока почетна концентрација



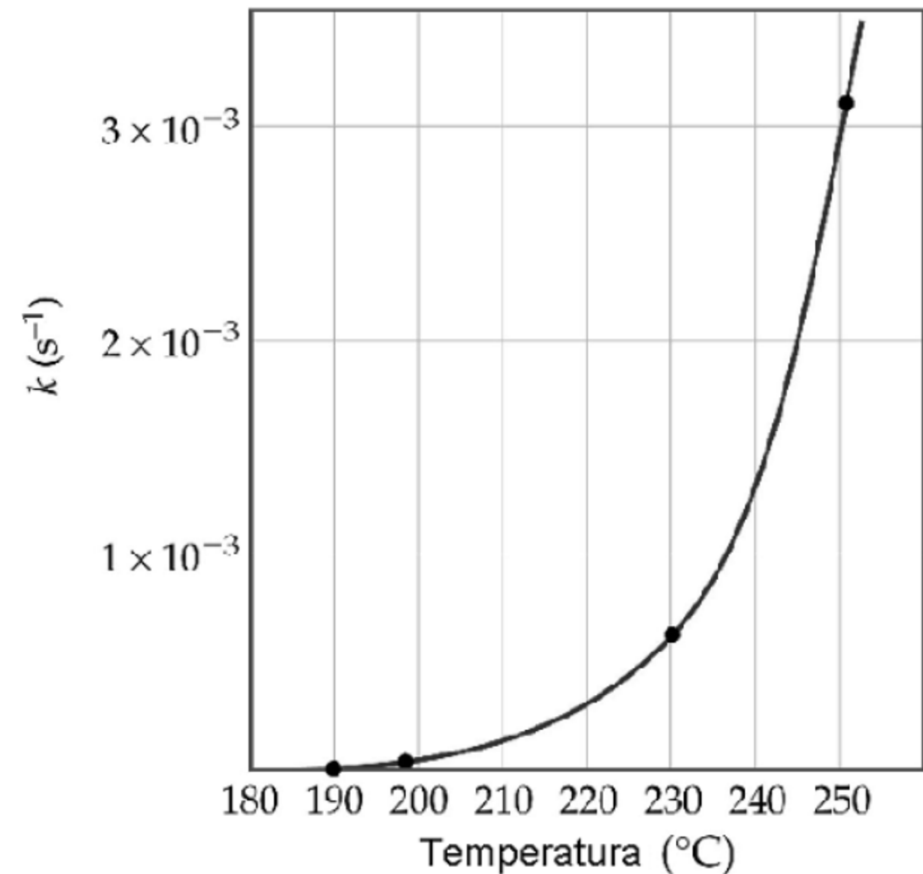
Велика почетна брзина реакције

Висока концентрација реактанта.
Велики број ефикасних судара.



Брзина хемијске реакције - утицај температуре

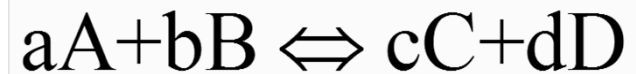
С порастом температуре брзина хемијске реакције расте експоненцијално!
(зато што расте удео молекула с енергијом већом од енергије активације – E_a)





Брзина хемијске реакције

- За хемијску реакцију:



брзина хемијске реакције се дефинише (преко концентрација):

$$w = k \cdot c_A^a \cdot c_B^b$$

где су:

w – брзина хемијске реакције

k – константа брзине хемијске реакције

c_i – концентрација i -те компоненте



Брзина хемијске реакције

- Брзина хемијске реакције може да се дефинише и преко промене концентрације у јединици времена:

$$w = \pm \frac{dc}{dt}$$

- где је концентрација број молова по јединици запремине

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



Брзина хемијске реакције

- Брзина хемијске реакције може да се дефинише и на следећи начин (преко реда реакције):

$$w = k \cdot c^n$$

- где је n – ред хемијске реакције (одређује се експериментално)
- Јединице мере:
 - w ($\text{mol/dm}^3\text{s}$)
 - k – $(\text{dm}^3/\text{mol})^{(a+b-1)}/\text{s}$; $(\text{dm}^3/\text{mol})^{(n-1)}/\text{s}$
 - c - (mol/dm^3)



Утицај притиска

- За успостављање зависности између брзине хемијске реакције и притиска, потребно је сагледати зависност концентрације од притиска.

$$c_i = \frac{p_i}{R_0 T} = \frac{r_i p}{R_0 T}$$



Утицај притиска

Реакција првог реда

$$\frac{dc_A}{dt} = -kc_A = -kr_A \frac{p}{R_0T}$$

$$\frac{dc}{dt} \approx p$$

Реакција другог реда

$$\frac{dc}{dt} = -kc_Ac_B = -k \left(\frac{r_A p}{R_0T} \right) \left(\frac{r_B p}{R_0T} \right) = -kr_A r_B \left(\frac{p}{R_0T} \right)^2$$

$$\frac{dc}{dt} \approx p^2$$

Реакција n-тог реда

$$\frac{dc}{dt} = -k \left(\frac{p}{R_0T} \right)^n$$

$$\frac{dc}{dt} \approx p^n$$

Степен зависности од притиска, одређује ред реакције.

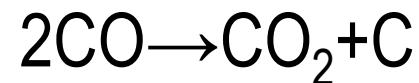


Хемијске реакције

- **Просте** хемијске реакције
- **Сложене** хемијске реакције - у систему истовремено одвија неколико реакција, свака од њих се одвија независно једна од друге
 - Наизменичне хемијске реакције
 - Паралелне хемијске реакције
 - Повратне хемијске реакције
 - Ланчане хемијске реакције



Хемијске реакције првог реда



$$w = \frac{dc}{dt} = -k \cdot c$$

$$\frac{dc}{c} = -k \cdot dt$$

$$\ln c = -k \cdot t + \text{const}$$

$$t = 0$$

$$c = c_0$$

$$\ln c = \text{const}$$

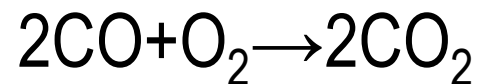
$$\ln c = -k \cdot t + \ln c_0$$

$$\ln \frac{c_0}{c} = k \cdot t$$

$$c = c_0 e^{-k \cdot t}$$



Хемијске реакције другог реда



$$\frac{dc}{dt} = -k \cdot c^2$$

$$\frac{dc}{c^2} = -k \cdot dt$$

$$\frac{1}{c} = k \cdot t + \text{const}$$

$$t = 0$$

$$c = c_0$$

$$\frac{1}{c_0} = \text{const}$$

$$\frac{1}{c} = k \cdot t + \frac{1}{c_0}$$

$$k = \frac{1}{t} \frac{1}{c_0} \left(\frac{c_0}{c} - 1 \right)$$



Повратне хемијске реакције

- Општи облик повратне реакције



- Ефективна брзина повратне реакције дефинише се преко брзина директне и повратне хемијске реакције

$$\frac{dc}{dt} = \vec{w} - \overset{\leftarrow}{w} = \vec{k} \cdot c_A \cdot c_B - \overset{\leftarrow}{k} \cdot c_E \cdot c_F$$



Повратне хемијске реакције

- Све гасне реакције су повратне.
- При нижим температурама многе гасне реакције се одвијају само у једном смеру до краја, па практично постају неповратне. При доста високим температурама реакције се практично одвијају у супротном смеру.
- О повратности хемијских реакција може се говорити условно, у зависности од услова под којима се реакције одвијају.



Хемијска равнотежа

- За повратну хемијску реакцију



када се брзина директне (w_1) и повратне (w_2) реакције изједначе, наступа стање равнотеже и престаје даља промена концентрација свих материја које учествују у реакцији.

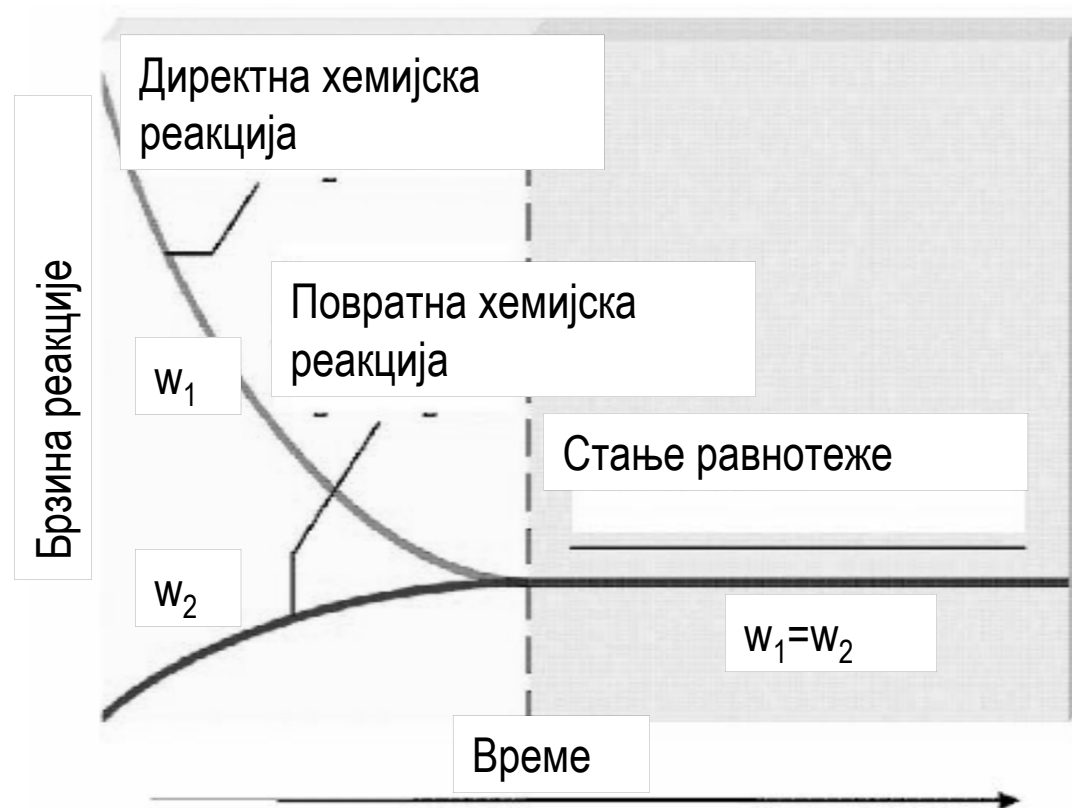


Хемијска равнотежа

- Када се успостави хемијска равнотежа, **нема промене концентрација у систему**, али постоје локалне промене у концентрацији и зато је то стање динамичке равнотеже.



Хемијска равнотежа





Хемијска равнотежа

- Константу равнотеже дефинише однос концентрација у равнотежном стању добијен из једнакости брзина хемијских реакција

$$K = \frac{c_C^c c_D^d}{c_A^a c_B^b} = \frac{k_1}{k_2}$$

где су:

- K (mol/dm^3)^{(c+d)-(a+b)} – константа хемијске равнотеже

- k_1, k_2 – константе брзине хемијске реакције



Хемијска равнотежа

- Константа хемијске равнотеже зависи од:
 - природе хемијске реакције,
 - температуре,
- а не зависи од:
 - притиска.



Природа хемијске реакције - дефиниција ✓

- Природа хемијске реакције је скуп **унутрашњих карактеристика супстанци које реагују** (њихова електронска структура, јачина веза и стабилност), који **одређује енергетску разлику између почетног и крајњег стања система.**



Природа хемијске реакције

- Огледа се у три нивоа:
 - термодинамичком (енергетски „потпис“),
 - структурном (интеракција молекула),
 - стехиометријском.



Трeмодинамички ниво хемијске реакције ✓...

- Дефинисан је променом стандардне Гибсове слободне енергије:

$$\Delta G^{\circ} = -RT \ln K$$

- Промена енталпије дефинише колико је енергије потребно да се раскину старе везе и колико се ослободи при формирању нових.
- Промена ентропије дефинише промену уређености система.



Структурни ниво хемијске реакције

- **Врста хемијских веза** – јаче везе у реактантима значе да ће константа равнотеже бити мања (теже се раскидају).
- **Геометрију молекула** – величина и облик молекула) директно утичу на то колико се лако молекули могу сударити и реаговати.
- **Електронегативност** – како атоми „вуку“ електроне одређује стабилност међупроизвода.



Стехиометријски ниво хемијске реакције ✓...

- Већ је дефинисан раније:

$$K = \frac{c_C^c c_D^d}{c_A^a c_B^b} = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b}$$

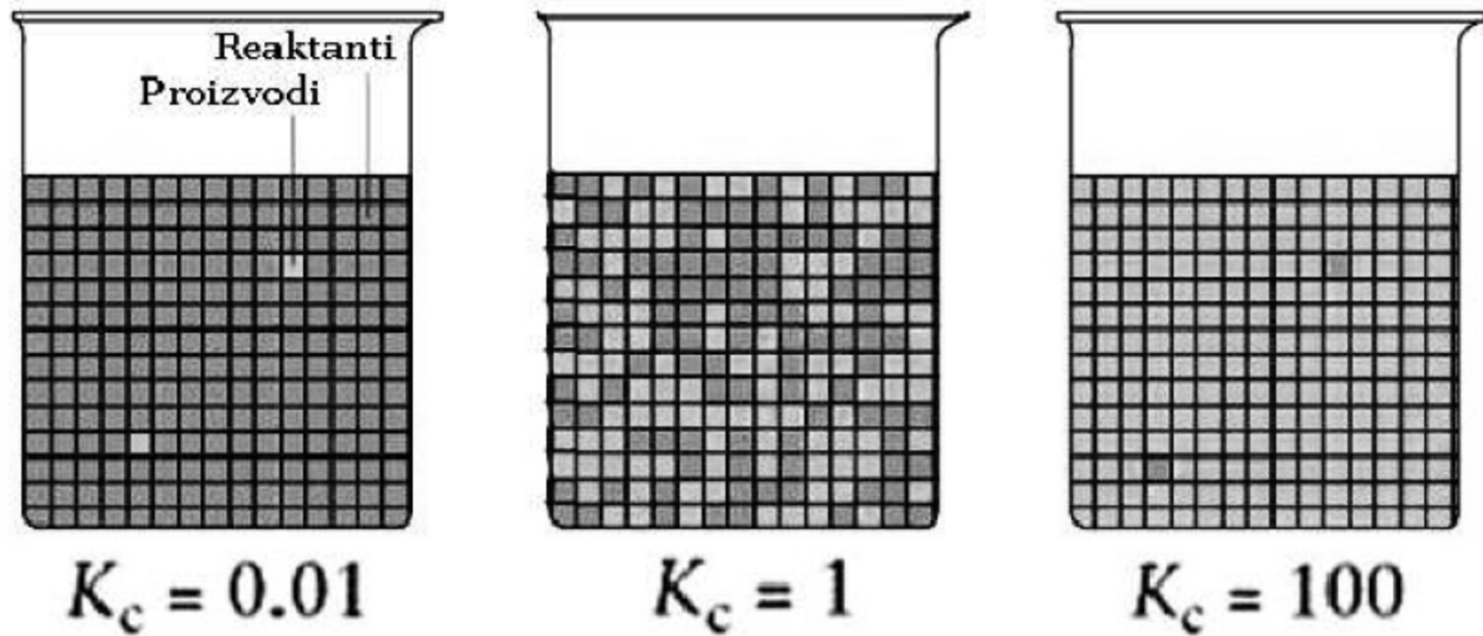


Хемијска равнотежа

- $K \gg 1$ – концентрација продукта је већа од концентрације реактанта, што значи да преовлађује **директна хемијска реакција**.
- $K \ll 1$ – концентрација реактанта је већа од концентрације продукта, што значи да преовлађује **повратна хемијска реакција**.



Хемијска равнотежа





Константе хемијске равнотеже

- Константа хемијске равнотеже може бити дефинисана на три начина:

- преко концентрације

$$K_c = \frac{c_C^c c_D^d}{c_A^a c_B^b}$$

- преко парцијалних притисака

$$K_p = \frac{p_C^c p_D^d}{p_A^a p_B^b}$$

- преко моларних удела

$$K_r = \frac{r_C^c r_D^d}{r_A^a r_B^b}$$



Константе хемијске равнотеже

- Могуће је успоставити везе између константи хемијске равнотеже

$$K_c = \left(\frac{1}{R_0 T} \right)^{\Delta n} K_p$$

$$K_c = \left(\frac{p}{R_0 T} \right)^{\Delta n} K_r$$

где су:

- p – укупни притисак
- T - температура
- R_0 – универзална гасна константа
- Δn – промена броја молова при хемијској реакцији ($\Delta n = (c+d) - (a+b)$)

$$K_p = (p)^{\Delta n} K_r$$