

# Rozsah chemickej reakcie

Ing. Miroslav Tatarko, PhD.

Katedra anorganickej chémie FChPT STU Bratislava

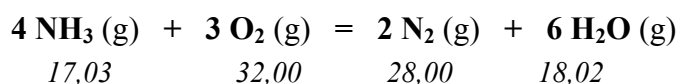
---

## 1. Jednoduché stechiometrické výpočty

Chémia je exaktná veda. Preto k nej patria aj presné a jednoznačné definície. Má aj svoj vlastný pojmový aparát a spôsoby popisu javov, ktorými sa zaoberá. Častokrát sa však v hovorovej reči dopúšťame prehreškov voči krásnej logike prírodovedy. Zamyslime sa napr. nad obsahom takejto vety:

**“Spaľovaním amoniaku v prúde kyslíka vzniká dusík a vodná para.”**

Táto veta sama o sebe síce opisuje chemický dej, nie však úplne. Nie je z nej napr. jasné, či nevzniká ešte nejaký iný produkt, a tiež nám nehovorí nič o tom, koľko kyslíka je potrebné použiť na spálenie daného množstva amoniaku, ani aké množstvo dusíka a vodnej pary pri tom vzniká. Chemik preto potrebuje chemický dej popísať presnejšie – **chemickou rovnicou**. Tá podáva úplnú informáciu; **kvalitatívnu** (všetky látky, ktoré reagujú a všetky látky, ktoré z nich vznikajú), aj **semikvantitatívnu** (pomery látkových množstiev všetkých reaktantov a produktov). Vyjadruje zároveň, že **nielen počet, ale aj druh atómov**, zúčastňujúcich sa chemického deja, **ostáva vždy rovnaký**. Zápis ľubovoľného chemického deja preto možno nazvať chemickou reakciou len ak spĺňa túto dôležitú podmienku. Ináč je to len schéma, resp. veta z úvodu, prepísaná pomocou vzorcov reaktantov a produktov. Chemická rovnica môže obsahovať aj ďalšie doplňujúce informácie o podmienkach, pri ktorých reakcia prebieha, napr. skupenské stavy látok, stavové podmienky (napr. tlak, teplotu), katalyzátor, bez ktorého by reakcia neprebíhala, hodnotu reakčného tepla atď. Býva tiež zvykom uviesť pod jednotlivé látky, vystupujúce v chemickej rovnici, aj číselné hodnoty ich mólových hmotností. Vetu, uvedenú v úvode, preto chemik napíše napr. takto



Položme si napr. otázku: Aká je hmotnosť kyslíka, ktorý sa spotrebuje na spálenie 50,0 g amoniaku a aká je hmotnosť dusíka a vodnej pary, ktoré touto reakciou vzniknú?

Chemická rovnica jasne hovorí, že na spálenie 4 mólov amoniaku sú potrebné tri móly kyslíka, pričom vznikajú len dva móly dusíka a 6 mólov vody.

Takýto **pomer zostáva vždy rovnaký**, nech reakcia prebieha v malej laboratórnej aparatúre, alebo vo veľkom priemyselnom reaktore. Podľa známeho vzťahu jednoducho zistíme, akú hmotnosť predstavujú 4 móly zreagovaného amoniaku

$$m(\text{NH}_3) = n(\text{NH}_3) M(\text{NH}_3) = 4 \text{ mol} \cdot 17,03 \text{ g mol}^{-1} = 68,12 \text{ g}$$

Podobne zistíme, akú hmotnosť predstavujú 3 móly zreagovaného kyslíka, 2 móly vzniknutého dusíka a 6 mólov vzniknutej vody

$$m(\text{O}_2) = n(\text{O}_2) M(\text{O}_2) = 3 \text{ mol} \cdot 32,00 \text{ g mol}^{-1} = 96,00 \text{ g}$$

$$m(\text{N}_2) = n(\text{N}_2) M(\text{N}_2) = 2 \text{ mol} \cdot 28,00 \text{ g mol}^{-1} = 56,00 \text{ g}$$

$$m(\text{H}_2\text{O}) = n(\text{H}_2\text{O}) M(\text{H}_2\text{O}) = 6 \text{ mol} \cdot 18,02 \text{ g mol}^{-1} = 108,12 \text{ g}$$

Použijeme najprv postup, používaný na základných a stredných školách – tzv. „trojčlenku“.

Zo spomínaného pomeru ľahko zistíme hmotnosť zreagovaného kyslíka,  $m(\text{O}_2)$

tj.	$4 \text{ mol} \cdot 17,03 \text{ g mol}^{-1} \text{ NH}_3$ $68,12 \text{ g NH}_3$ $50,0 \text{ g NH}_3$	$\dots\dots\dots$ $\dots\dots\dots$ $\dots\dots\dots$	$3 \text{ mol} \cdot 16,00 \text{ g mol}^{-1} \text{ O}_2$ $96,00 \text{ g O}_2$ $x$	(z chemickej rovnice)  (zo zadania príkladu)
-----	--	---	--	--

$$m(\text{O}_2) \equiv x = \frac{50,0 \text{ g}}{68,12 \text{ g}} \cdot 96,00 \text{ g} = \underline{70,46 \text{ g}}$$

Podobne zistíme hmotnosť vzniknutého dusíka,  $m(\text{N}_2)$

tj.	$4 \text{ mol} \cdot 17,03 \text{ g mol}^{-1} \text{ NH}_3$ $68,12 \text{ g NH}_3$ $50,0 \text{ g NH}_3$	$\dots\dots\dots$ $\dots\dots\dots$ $\dots\dots\dots$	$2 \text{ mol} \cdot 28,00 \text{ g mol}^{-1} \text{ N}_2$ $56,00 \text{ g N}_2$ $x$	(z chemickej rovnice)  (zo zadania príkladu)
-----	--	---	--	--

$$m(\text{N}_2) \equiv x = \frac{50,0 \text{ g}}{68,12 \text{ g}} \cdot 56,00 \text{ g} = \underline{41,10 \text{ g}}$$

a hmotnosť vzniknutej vody,  $m(\text{H}_2\text{O})$

tj.	$4 \text{ mol} \cdot 17,03 \text{ g mol}^{-1} \text{ NH}_3$ $68,12 \text{ g NH}_3$ $50,0 \text{ g NH}_3$	$\dots\dots\dots$ $\dots\dots\dots$ $\dots\dots\dots$	$6 \text{ mol} \cdot 18,02 \text{ g mol}^{-1} \text{ H}_2\text{O}$ $108,12 \text{ g H}_2\text{O}$ $x$	(z chemickej rovnice)  (zo zadania príkladu)
-----	--	---	---	--

$$m(\text{H}_2\text{O}) \equiv x = \frac{50,0 \text{ g}}{68,12 \text{ g}} \cdot 108,12 \text{ g} = \underline{79,36 \text{ g}}$$

Vyriešili sme tak zadanie úlohy: Na spálenie 50,0 g amoniaku je potrebných 70,46 g kyslíka, pričom vznikne 41,10 g dusíka a 79,36 g vodnej pary.

## 2. Rozsah chemickej reakcie

Všimnime si pozornejšie posledné tri výpočty. Opakuje sa v nich výraz 50,0 g / 68,12 g. Hodnota 50,0 g predstavuje hmotnosť zreagovaného amoniaku. Hodnota 68,12 g je hmotnosť amoniaku, ktorý by musel zreagovať, aby prebehol **1 mól reakcií**, tj. aby zreagovali presne 4 móly amoniaku s 3 mólmí kyslíka za vzniku 2 mólov dusíka a 6 mólov vody. Pomer 50,0 g / 68,12 g tak vyjadruje, koľko mólov reakcií prebehlo počas uvažovaného chemického deja. Tento pomer udáva **rozsah chemickej reakcie**, ktorý značíme  $\Delta\xi$ .

$$\Delta\xi = \frac{50 \text{ g}}{68,12 \text{ g}} = \frac{50,0 \text{ g}}{4 \cdot 17,03 \text{ g mol}^{-1}} = \frac{\Delta m(\text{NH}_3)}{\nu(\text{NH}_3) M(\text{NH}_3)} = \frac{\Delta n(\text{NH}_3)}{\nu(\text{NH}_3)} = 0,7340 \text{ mol}$$

Ako vidíme, rozsah chemickej reakcie sa všeobecne definuje vzťahom.

$$\Delta\xi = \frac{\Delta n(\text{L})}{\nu(\text{L})} = \frac{\Delta m(\text{L})}{M(\text{L}) \nu(\text{L})}$$

kde  $\Delta n(\text{L})$  je zmena látkového množstva ľubovoľnej látky L, zúčastňujúcej sa chemického deja a  $\nu(\text{L})$  je jej stechiometrický koeficient. **Jednotkou rozsahu chemickej reakcie je mól** (zn. mol).

☺ *Znak  $\Delta$  používame pre korektnosť. Nikde nie je uvedené, či v reaktore bolo práve spomínaných 50,0 g amoniaku, resp. či po reakcii neostala nejaká časť amoniaku nezreagovaná. Zadanie príkladu hovorí, že zreagovalo 50,0 g amoniaku. Nič viac. Nezaujímá nás preto, koľko ho tam bolo pred reakciou a po nej. Zaujímá nás, koľko sa ho zúčastnilo chemického deja, tj. aká je **zmena** ( $\Delta$ ) jeho množstva. Na druhej strane, otázka znie “koľko dusíka a vodnej pary vznikne počas uvedeného chemického deja” a nie “koľko dusíka a vodnej pary bolo pred reakciou, či po reakcii v reaktore?”. Vidíme, že je dôležité aj správne sformulovať otázku. Na druhú otázku sa v tomto prípade jednoducho nedá odpovedať.*

☺ *Zmysel rozsahu chemickej reakcie môžeme ilustrovať aj na takomto príklade: Predstavme si, že v triede je 20 žiakov. Je tam teda 20 hláv, 40 rúk, 40 nôh, 400 prstov atď. Ak uvedieme hociktorý z týchto údajov, bude každému zrejmé, koľko žiakov je v triede, predsa sa však bežne používa práve výraz “počet žiakov”. Tak aj v našom príklade môžeme – namiesto vyššie uvedenej odpovede – uviesť, že reakcia sa uskutočnila s rozsahom 0,7340 mol.*

Je treba si ešte uvedomiť toto: symbolom  $\Delta n$  označujeme **zmenu** látkového množstva, tj. rozdiel jeho hodnôt na konci a na začiatku uvažovaného chemického deja,  $\Delta n = n_{\text{koniec}} - n_{\text{začiatok}}$ . Keďže reaktanty počas reakcie zanikajú je ich na konci menej ako na začiatku. To ale znamená, že hodnota  $\Delta n$  je záporná. Potom by bola záporná aj hodnota rozsahu chemickej reakcie. Ak by sa rozsah chemickej reakcie vyjadroval pomocou produktov reakcie, bola by jeho hodnota kladná. Tá však musí byť vždy rovnaká, nezávislá na tom, ktorú z látok v reakcii použijeme na jej výpočet. Preto sa prijala konvencia, že **hodnoty stechiometrických koeficientov reaktantov sú záporné, a produktov kladné**. Teda,  $\Delta m(\text{NH}_3) = -50,0 \text{ g}$  a  $\nu(\text{NH}_3) = -4$ . Pri bežných výpočtoch sa však – kvôli zjednodušeniu – používajú absolútne hodnoty týchto veličín.

Použitím definičného vzťahu pre rozsah chemickej reakcie už ľahko vypočítame hmotnosť zreagovaného kyslíka  $\Delta m(\text{O}_2)$ ,

$$\Delta m(\text{O}_2) = \Delta \xi M(\text{O}_2) \nu(\text{O}_2) = 0,7340 \text{ mol} \cdot 32,00 \text{ g mol}^{-1} \cdot (-3) = \underline{\underline{-70,46 \text{ g}}}$$

hmotnosť vzniknutého dusíka  $\Delta m(\text{N}_2)$ ,

$$\Delta m(\text{N}_2) = \Delta \xi M(\text{N}_2) \nu(\text{N}_2) = 0,7340 \text{ mol} \cdot 28,00 \text{ g mol}^{-1} \cdot 2 = \underline{\underline{41,10 \text{ g}}}$$

a hmotnosť vzniknutej vody  $\Delta m(\text{H}_2\text{O})$

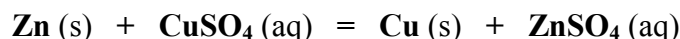
$$\Delta m(\text{H}_2\text{O}) = \Delta \xi M(\text{H}_2\text{O}) \nu(\text{H}_2\text{O}) = 0,7340 \text{ mol} \cdot 18,02 \text{ g mol}^{-1} \cdot 6 = \underline{\underline{79,36 \text{ g}}}$$

Tento výpočet nás, samozrejme, priviedol k tej istej odpovedi.

### 3. Nestechiometrické množstva reaktantov

Je zrejmé, že reakcia prebieha, kým sa nespotrebuje niektorý z reaktantov. Na konci tohto deja je teda látkové množstvo tohto reaktanta  $n_{\text{koniec}} = 0 \text{ mol}$ , teda  $\Delta n = -n_{\text{začiatok}}$ . Tento reaktant nazývame **limitujúcou zložkou**. Ak však bolo niektorého iného reaktanta viac, ako bolo potrebné na chemickú reakciu, zostalo z neho nejaké množstvo nezreagované. Hovoríme, že ho bolo **nstechiometrické množstvo**. Veľakrát je potrebné vedieť, koľko nezreagovaného reaktanta zostalo v reakčnej zmesi. Ukážeme si to na príklade.

*Príklad:* Práškový zinok nasypaý do roztoku (modrého) síranu meďnatého vyredukuje z neho kovovú meď, čo vyjadruje chemická rovnica



Odfarbí sa roztok, obsahujúci 5,0 g síranu meďnatého, ak k nemu pridáme 1,5 g práškového zinku?

*Riešenie:* Je potrebné zistiť, ktorý z reaktantov je v nadbytku teda v nestechiometrickom množstve.

- Ak je v nadbytku práškový zinok, potom zreaguje so všetkým síranom meďnatým a ešte ostane na dne kadičky jeho nezreagovaná časť – roztok sa teda úplne odfarbí. Limitujúcou zložkou je v tomto prípade síran meďnatý.
- Ak je v nadbytku síran meďnatý, potom sa spotrebuje všetok zinok, pričom časť síranu ostane v roztoku nezreagovaná a teda roztok bude naďalej modrý. Limitujúcou zložkou je tu zinok.

Ak by zreagoval všetok nasypaý síran meďnatý, bol by rozsah tejto chemickej reakcie

$$\Delta\xi = \frac{\Delta n(\text{CuSO}_4)}{\nu(\text{CuSO}_4)} = \frac{\Delta m(\text{CuSO}_4)}{\nu(\text{CuSO}_4) M(\text{CuSO}_4)} = \frac{-5,0 \text{ g}}{-1 \cdot 159,61 \text{ g mol}^{-1}} = 0,0313 \text{ mol}$$

Naopak, ak by zreagoval všetok zinok, rozsah reakcie by bol

$$\Delta\xi = \frac{\Delta n(\text{Zn})}{\nu(\text{Zn})} = \frac{\Delta m(\text{Zn})}{\nu(\text{Zn}) M(\text{Zn})} = \frac{-1,5 \text{ g}}{-1 \cdot 65,39 \text{ g mol}^{-1}} = 0,0229 \text{ mol}$$

*Odpoveď:* Aj keď síranu meďnatého je toľko, že by mohol reagovať až do rozsahu 0,0313 mol, reakcia bude prebiehať len kým jej rozsah bude 0,0229 mol. Vtedy sa totiž minie všetok zinok. Roztok bude obsahovať nezreagovaný síran meďnatý a preto sa úplne neodfarbí.

☺ *Všimnime si, že skutočným rozsahom reakcie je vždy najmenší z vypočítaných rozsahov, tak ako celkovú rýchlosť výroby na bežiacom páse určuje jej najpomalší článok.*

Veličina „rozsah chemickej reakcie“ nebola do chémie vnesená umelo, jej potreba vyplynula z praktických dôvodov. Množstvo vzťahov v chémii obsahuje túto veličinu, ktorá jednoznačne popisuje prebiehajúci chemický dej. Jej potreba pri výpočtoch sa však ukáže až pri hlbšom štúdiu chemických procesov, ale je správne zoznámiť s ňou už študentov základných a stredných škôl a to aj napriek tomu, že na tomto stupni vzdelávania ju nepotrebujú nevyhnutne používať.