فصل چهارم
شیمی، راهی به سوی آینده‌ای روشن‌تر

نقش دانش شیمی در برطرف کردن چالش‌های زندگی

۱- رشد و پیشرفت هر جامعه تنها در سایهٔ تلاش هدفمند و آگاهانه افراد خبره دست یافتنی است.

- ۲- از جمله پیامدهای رشد و پیشرفت جامعه می‌توان دسترسی آسان و ارزان‌تر به فناوری نو را نام برد. چند نمونه از فناوری‌هایی که در آن‌ها دانش شیمی همراه با انگیزه و تلاش راهی به سوی آینده‌ای روشن‌تر را رقم می‌زند عبارتند از:

الف) بهره‌گیری از مبدل کاتالیستی در خودرو
ب) بهره‌گیری از کود شیمیایی سبز
پ) تبدیل مواد شیمیایی خام به مواد ارزشمند

- ۳- مجموعهٔ تلاش‌های انسان برای حل مشکلات و چالش‌هایی که با آن‌ها روبه‌رو بوده است، در گذر زمان منجر به تولید و انباشت دانش و فناوری شده است. یکی از آن‌ها دانش شیمی و فناوری‌های آن است. برخی از دستاوردهای مهم شیمی برای فناوری شناسایی و تولید مواد بی‌حس‌کننده و آنتی بیوتیک رسیدن به زندگی مدرن امروزی عبارتند از:

۱) فناوری تصفیه آب ۲) فناوری تولید پلاستیک ۳) فناوری شناسایی و تولید مواد بی‌حس‌کننده و آنتی بیوتیک ۴) فناوری شناسایی و تولید کودهای مناسب ۵) فناوری تولید بنزین ۶) فناوری تولید مبدل‌های کاتالیستی ۷) گسترش فناوری‌های صفحه‌های نمایشگر در وسایل الکترونیک

- ۴- پیش‌بینی می‌شود که انسان در آینده چالش‌های تازه و حیاتی پیش‌رو داشته باشد و بدیهی است که برطرف کردن هر یک از آن‌ها به دانش و فناوری‌های پیشرفته‌تری نیاز خواهد داشت. با توجه به کارآمدی علوم تجربی بسیاری بر این باورند که این علوم و از جمله دانش شیمی می‌توانند آیندهٔ روشنی را برای جهان رقم بزنند.

استفادهٔ بهینه و درست از دانش و فناوری، آسایش و رفاه را در زندگی تأمین می‌کند. اما استفادهٔ نادرست از آن آثار مخرب‌تر و زیان‌بارتری به دنبال خواهد داشت.

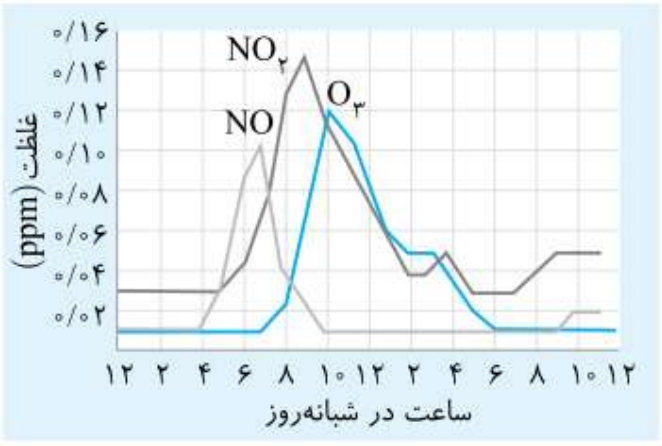
به دنبال هوای پاک

- ۱- داشتن هوای پاک یکی از چالش‌های مهم و اساسی در جهان امروز می‌باشد زیرا هوای آلوده نفس کشیدن را دشوار و مشکلات تنفسی زیادی را ایجاد می‌کند.
- ۲- هوای خشک و پاک مخلوطی از گازهای گوناگون است که به طور یکنواخت در هواکره پخش شده‌اند.
- ۳- هوای آلوده شامل گازهای گوناگونی مانند CO، NO، SO_2، O_3، NO_2 ذره‌های معلق و مواد آلی فرار است.
- ۴- به دلیل وجود آلاینده‌ها هوای آلوده آسیب‌هایی را برای جامعه به همراه خواهد داشت که عبارتند از:

الف) داشتن بوی بد
ب) زشت کردن چهرهٔ شهر
پ) سرعت بخشیدن به فرسودگی ساختمان‌ها و پوسیدگی خودروها
ت) ایجاد و تشدید بیماری‌های تنفسی از جمله برونشیت، آسم، سرطان، ریه و حتی مرگ

@DaneshSad

آلاینده‌های NO، NO_2 و O_3



- ۱- مقدار این آلاینده‌ها در ساعات ابتدایی روز به دلیل افزایش ناگهانی تعداد خودروهای در حال تردد به بیش‌ترین حد خود می‌رسد.
- ۲- گاز NO در هوای آلوده با گاز اکسیژن واکنش داده و به گاز NO_2 که قهوه‌ای رنگ است تبدیل می‌شود:

$$2\,NO(g) + O_2(g) \rightarrow 2NO_2(g)$$

- ۳- اوزون تروپوسفری آلاینده‌ای سمی و خطرناک است که از واکنش میان گازهای NO_2 و O_2 تولید می‌شود:

$$NO_2(g) + O_2(g) \xrightarrow{\text{نور خورشید}} NO(g) + O_3(g)$$

- ۴- در ساعاتی از روز با کاهش مقدار گاز NO_2، مقدار گاز O_3 رو به افزایش است زیرا طی واکنش بالا، نور خورشید موجب می‌شود NO_2 مصرف شده و گاز اوزون (O_3) تولید شود. تولید O_3 با مصرف NO_2 همراه بوده و مجدداً هوا را شفاف می‌کند.

آلاینده‌های خودرو

- ۱- آلاینده‌های موجود در خروجی اگزوز خودروها عبارتند از: CO، SO_2، NO و C_xH_y (البته گاز NO_2 نیز، گاز خروجی از اگزوز خودروهای دیزلی است).
- ۲- چگونگی تشکیل آلاینده‌ها در خودرو

۱) تولید CO: اگر در سوختن هیدروکربن‌ها غلظت گاز اکسیژن موجود کافی باشد (سوختن کامل)، گاز CO_2 تولید می‌گردد و اگر غلظت گاز اکسیژن موجود کافی نباشد (سوختن ناقص)، گاز CO یا دوده (C) تولید می‌شود.

۲) تولید SO_2: در سوخت‌های فسیلی با کیفیت پایین مقداری گوگرد وجود دارد که با سوزاندن این سوخت‌ها در نیروگاه‌ها و خودروها گوگرد موجود در آن‌ها سوخته و تبدیل به گاز SO_2 می‌شود:

$$S(s) + O_2(g) \rightarrow SO_2(g)$$

۳) تولید NO: گاز نیتروژن درون موتور خودروها در دمای بالا با گاز اکسیژن واکنش داده و به گاز NO یا NO_2 تبدیل می‌شود:

$$N_2(g) + O_2(g) \rightarrow 2\,NO(g)$$

۴) تولید هیدروکربن‌ها (C_xH_y): مقداری از هیدروکربن‌های گازی شکل بدون اینکه بسوزند از اگزوز خودروها خارج شده و وارد هواکره می‌شوند

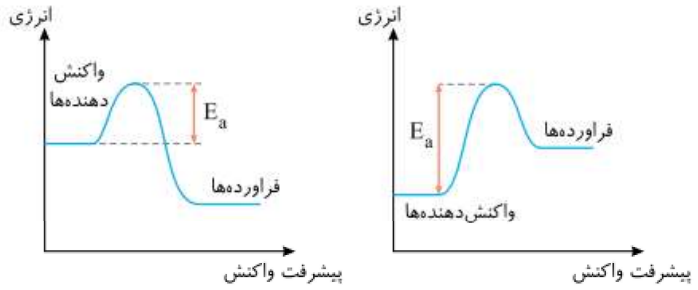
طیف‌سنجی راهی برای شناخت مواد

- طیف‌سنجی به مطالعهٔ برهم‌کنش‌های بین پرتوهای الکترومغناطیسی و ماده می‌پردازد. این طیف‌سنجی می‌تواند نوع و تعداد اتم‌های سازنده مولکول و حتی ساختار لوئیس آن را مشخص کند.
- یکی از رایج‌ترین روش‌های طیف‌سنجی که برای شناسایی گروه‌های عاملی به کار می‌رود، طیف‌سنجی فروسرخ است.
- کاربردهای طیف‌سنجی فروسرخ عبارتند از:
  - الف) تشخیص گروه‌های عاملی
  - ب) شناسایی آلاینده‌هایی مانند CO و NO_x در هواکره
  - پ) شناسایی برخی مولکول‌ها در فضای ستاره‌ای
- با استفاده از طیف سنجی فروسرخ امکان تشخیص ایزومرها با گروه عاملی متفاوت وجود دارد مثل اتانول و دی متیل اتر.
- با استفاده از طیف سنجی فروسرخ نمی‌توان ایزومرهای هم خانواده را تشخیص داد مثل بوتان و متیل پروپان.
- علاوه بر طیف‌سنجی فروسرخ می‌توان از برهم‌کنش پرتوهای فرابنفش، نور مرئی، امواج رادیویی و ... نیز برای شناسایی مواد استفاده کرد.
- دستگاه تصویر برداری ام.آر.آی (MRI) مثالی از کاربرد طیف‌سنجی در علم پزشکی است

@DaneshSad

انرژی فعالسازی در واکنش‌های شیمیایی

- ۱- آشنایی با واکنش‌های شیمیایی و رفتار آلاینده‌ها، انرژی فعال‌سازی و نقش کاتالیزگر در واکنش‌های شیمیایی می‌تواند به ما در حل مسئله «چگونگی کاهش آلاینده‌ها در هواکره» کمک کند.
- ۲- واکنش‌های شیمیایی با سرعت‌های گوناگون انجام می‌شوند، برای نمونه واکنش زنگ زدن آهن کند، در حالی که واکنش سوختن متان تند است.
- ۳- هر واکنش برای انجام شدن به حداقلی از انرژی نیاز دارد. در واقع برای اینکه یک واکنش شیمیایی آغاز شود باید واکنش‌دهنده‌ها مقدار معینی انرژی داشته باشند که به آن انرژی فعال‌سازی (E_a) می‌گوییم یکای E_a کیلوژول است. (توجه کنید که انرژی که به واکنش می‌دهیم صرف تأمین انرژی فعالسازی می‌شود نه صرف تأمین ΔH واکنش)
- ۴- نمودار «انرژی - پیشرفت واکنش» برای واکنش‌های گرماده و گرماگیر:



- ۵- واکنش‌دهنده‌ها برای آغاز واکنش باید حداقلی از انرژی را داشته باشند تا با عبور از سد انرژی به فراورده‌ها تبدیل شوند. واکنش‌های شیمیایی صرف‌نظر از اینکه گرماده یا گرماگیر باشند، برای آغاز شدن به انرژی نیاز دارند.
- ۶- یکی از راه‌های تأمین E_a، گرما دادن به واکنش‌دهنده‌هاست. همچنین افزایش دما سبب افزایش سرعت واکنش‌های شیمیایی می‌شود

رابطهٔ بین E_a و سرعت واکنش

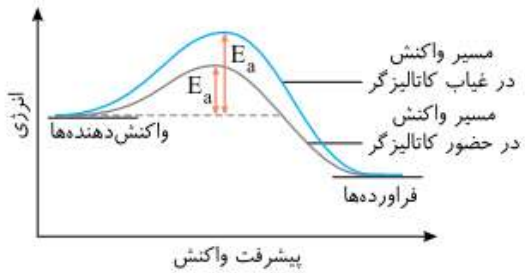
- سرعت واکنش با انرژی فعال‌سازی (E_a) واکنش رابطه عکس دارد:

هرچه انرژی فعال‌سازی واکنشی بیشتر ← سرعت آن کمتر ← واکنش در شرایط دشوارتر و دمای بالاتری انجام می‌شود.

- ۲- بزرگ بودن E_a نشان می‌دهد که واکنش‌دهنده‌ها برای رسیدن به فراورده‌ها باید از سد انرژی بیش‌تری عبور کنند.
- ۳- افزایش دما ← افزایش انرژی واکنش‌دهنده‌ها ← افزایش شمار ذره‌هایی که در واحد زمان به فراورده‌ها تبدیل می‌شوند ← افزایش سرعت واکنش
- ۴- هر چه انرژی فعالسازی واکنش کمتر و واکنش گرماده‌تر باشد آن واکنش آسان‌تر انجام می‌شود.

کاتالیزگر

- ۱- کاتالیزگر ماده‌ای است که با تغییر مسیر واکنش، و پایدار کردن سد انرژی، انرژی فعال‌سازی را کاهش و سرعت واکنش را افزایش می‌دهد، اما آنتالپی واکنش ثابت می‌ماند.
- ۲- کاتالیزگرها در واکنش شرکت می‌کنند، اما در پایان واکنش باقی می‌مانند به همین دلیل می‌توان از آن‌ها بارها استفاده کرد.



@DaneshSad

- ۳- کاتالیزگرها در صنایع گوناگون سبب کاهش آلودگی محیط زیست می‌شوند زیرا کاتالیزگر با کاهش انرژی فعال‌سازی موجب می‌شود واکنش در دمای پایین‌تری (نسبت به حالت انجام واکنش بدون حضور کاتالیزگر) انجام شود که این موضوع مقدار سوخت مورد نیاز را کاهش و موجب می‌شود آلودگی هوا کمتر شود.
- ۴- برخی واکنش‌ها در صنعت انرژی فعال‌سازی زیادی دارند، از این رو فقط در دما و فشار بالا انجام می‌شوند و تولید فراورده‌ها در آن‌ها صرفهٔ اقتصادی ندارد ← برای انجام چنین واکنش‌هایی در دما و فشار پایین و با سرعت مناسب می‌بایست انرژی فعال‌سازی آن‌ها را با استفاده از کاتالیزگر کاهش داد.

کاتالیزگر بر موارد زیر بی‌تأثیر است	کاتالیزگر بر موارد زیر مؤثر است
۱- انجام‌پذیر بودن یا انجام‌ناپذیر بودن واکنش	۱- مسیر انجام واکنش را تغییر می‌دهد.
۲- ΔH واکنش	۲- کاهش (رفت) E_a و (برگشت) E_a به یک اندازه
۳- سطح انرژی واکنش‌دهنده‌ها و فراورده‌ها	۳- افزایش سرعت واکنش
۴- نوع، مقدار و پایداری واکنش‌دهنده‌ها و فراورده‌ها	۴- کاهش زمان انجام واکنش
	۵- شیب نمودار «غلظت - زمان»

واکنش میان گازهای هیدروژن و اکسیژن در شرایط گوناگون

- واکنش گازهای هیدروژن و اکسیژن در دمای اتاق بدون حضور کاتالیزگر انجام نمی‌شود، زیرا انرژی فعال‌سازی این واکنش بسیار زیاد است و در دمای اتاق تأمین نمی‌شود. به همین دلیل سرعت این واکنش بسیار ناچیز است.

$$2H_2(g) + O_2(g) \xrightarrow{\text{در دمای اتاق}} \text{واکنش بسیار کند و تقریباً بی‌اثر}$$

- برای اینکه واکنش گازهای هیدروژن و اکسیژن در دمای اتاق انجام شود می‌توان از دو روش زیر استفاده کرد:

الف) ایجاد جرقه در مخلوط این دو گاز: ایجاد جرقه به طور ناگهانی دمای مخلوط را به شدت افزایش داده و انرژی فعال‌سازی موردنیاز برای آغاز واکنش را تأمین می‌کند به طوری که این واکنش به حالت انفجاری انجام می‌شود.

ب) استفاده از کاتالیزگرها (مانند پودر روی و توری پلاتینی): کاتالیزگرها با کاهش انرژی فعال‌سازی سرعت واکنش را افزایش می‌دهند.

$$2H_2(g) + O_2(g) \xrightarrow[(\text{کاتالیزگر})]{\text{در حضور پودر روی ،توری پلاتینی}} 2H_2O \quad \text{واکنش سریع و انفجاری}$$

- ایجاد جرقه در مخلوط این دوگاز و استفاده از کاتالیزگرها آنتالپی واکنش را تغییر نمی‌دهند.

مبدل‌های کاتالیستی تک مرحله‌ای

- ۱- آلاینده‌ها در کسری از ثانیه از موتور خودرو خارج و وارد هواکره می‌شوند. همچنین دمای آن‌ها در این زمان بسیار کوتاه به سرعت کاهش می‌یابد، بنابراین به دام انداختن و انجام واکنش روی این آلاینده‌ها دشوار است.
- ۲- برای حذف آلاینده‌های CO، NO و C_xH_y قطعه‌ای به نام مبدل کاتالیستی را در مسیر خروج گازها قرار می‌دهند که با انجام واکنش‌هایی می‌تواند باعث حذف یا کاهش آلاینده‌ها شود.
- ۳- با انجام واکنش‌های گرماده زیر آلاینده‌ها به ترکیب‌های بی‌خطر یا کم‌خطرتر تبدیل می‌گردند:

CO مصرف: $2CO(g) + O_2(g) \rightarrow 2CO_2(g)$

C_xH_y مصرف: $C_xH_y(g) + \left(x + \frac{y}{4}\right)O_2(g) \rightarrow xCO_2(g) + \frac{y}{2}H_2O(g)$

NO مصرف: $2NO(g) \rightarrow N_2(g) + O_2(g)$

- ترتیب غلظت آلاینده‌ها در خروجی اگزوز: $CO > C_xH_y > NO$

توجه: این واکنش‌ها به دلیل داشتن انرژی فعال‌سازی بالا، فقط در دماهای بالا انجام می‌شوند و در دماهای پایین انجام نمی‌شوند یا بسیار کند هستند.

- ۴- چند مقایسهٔ مهم در رابطهٔ واکنش‌های مصرف CO و NO در مبدل کاتالیستی:

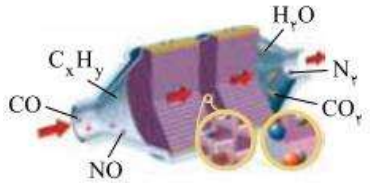
@DaneshSad

مقایسه میزان گرمادهی: $\Delta H(\text{واکنش مصرف } CO) > \Delta H(\text{واکنش مصرف } NO)$

مقایسه انرژی فعال‌سازی: $E_a(\text{واکنش مصرف } NO) > E_a(\text{واکنش مصرف } CO)$

مقایسه سرعت واکنش: $R(\text{واکنش مصرف } CO) > R(\text{واکنش مصرف } NO)$

- ۵- ورودی‌های مبدل کاتالیستی گازهای CO، NO و C_xH_y و خروجی‌های آن گازهای CO_2، N_2، O_2 و بخار آب $(H_2O(g))$ است.



- ۶- کارایی مبدل کاتالیستی به نوع کاتالیزگرهای موجود در آن بستگی دارد. بر روی سطح این قطعهٔ سرامیکی که به شکل توری به کار می‌رود فلزهای رودیم (Rh)، پالادیم (Pd) و پلاتین (Pt) (به عنوان کاتالیزگر) نشانده شده است.

توجه: در سطح سرامیک‌ها درون مبدل کاتالیستی توده‌های فلزی با قطر ۲ تا ۱۰ نانومتر وجود دارند.

- ۷- در برخی از مبدل‌های کاتالیستی سرامیک را به شکل مِش‌های (دانه‌های) ریز درمی‌آورند و کاتالیزگرها را روی سطح آن می‌نشانند. این مبدل‌ها کارایی بالاتری دارند، زیرا سطح تماس مِش‌ها از توری بیشتر است و در نتیجه سرعت واکنش بیشتر خواهد شد.
- ۸- مبدل‌های کاتالیستی در چند حالت کارایی ندارند:

الف) در دماهای پایین: زیرا در دماهای پایین انرژی فعال‌سازی واکنش‌ها تأمین نمی‌شود و همچنان آلاینده‌ها تولید می‌شوند. مثلاً به هنگام روشن و گرم شدن خودرو به ویژه در روزهای سرد زمستان با وجود مبدل کاتالیستی گازهای CO، NO و C_xH_y از اگزوز خودرو خارج می‌شوند.

ب) پس از مدت معینی به دلیل واکنش با برخی مواد شیمیایی کارایی مبدل کاتالیستی کاهش می‌یابد و دیگر قابل استفاده نیست.

ویژگی کاتالیزگرها در مبدل‌های کاتالیستی

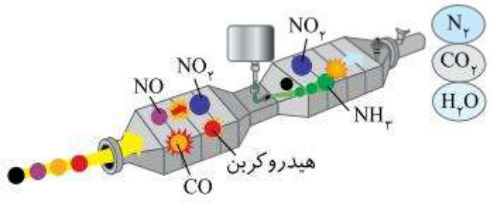
- ۱- هر کاتالیزگر به شمار معدودی واکنش سرعت می‌بخشد، در واقع یک کاتالیزگر نمی‌تواند سرعت همه واکنش‌ها را افزایش دهد. بنابراین کاتالیزگرها انتخابی و اختصاصی عمل می‌کنند.

توجه: کاتالیزگرهای به کار رفته در مبدل کاتالیستی نیز فقط برای سرعت بخشیدن به یکی از سه واکنش مناسب هستند.

- ۲- در حضور کاتالیزگرها نباید واکنش‌های ناخواسته دیگری به جز سه واکنش مطرح شده انجام شود.
- ۳- کاتالیزگرها در شرایط انجام واکنش باید پایداری شیمیایی و گرمایی مناسبی داشته باشند.
- ۴- ترتیب مقدار کاهش آلاینده‌ها بوسیله مبدل کاتالیستی: $CO > C_xH_y > NO$
- ۵- ترتیب درصد کاهش آلاینده‌ها در مبدل کاتالیستی: $NO > C_xH_y > CO$

مبدل کاتالیستی در خودروهای دیزلی

- ۱- بررسی‌ها نشان می‌دهد که با استفاده از مبدل کاتالیستی نمی‌توان گازهای NO و NO_2 خروجی از خودروهای دیزلی را به گاز نیتروژن تبدیل کرد و برای این کار می‌بایست مبدلی نو طراحی کرد.
- ۲- شکل مبدل کاتالیستی در خودروهای دیزلی به صورت روبه‌رو است:



توجه: در خوردروهای دیزلی گازهای ورودی به مبدل کاتالیستی CO، NO، NO_2 و C_xH_y هستند.

- ۳- در مبدل کاتالیستی در خودروهای دیزلی با ورود آمونیاک و انجام واکنش زیر، گازهای NO و NO_2 که در مرحله اول حذف شده‌اند به گاز N_2 تبدیل شده و تا حدود زیادی از ورود آن‌ها به هواکره جلوگیری می‌شود.

$$NO(g) + NO_2(g) + 2NH_3(g) \rightarrow 2N_2(g) + 3H_2O(g)$$

@DaneshSad

واکنش‌های برگشت‌ناپذیر

- واکنش‌هایی که تنها در یک جهت، یعنی در جهت رفت (تولید فراورده‌ها) پیشرفت می‌کنند و امکان انجام آن‌ها در جهت برگشت (تولید واکنش‌دهنده‌ها) وجود ندارد.
- به واکنش‌های برگشت‌ناپذیر واکنش‌های کامل نیز می‌گویند، زیرا تا مصرف شده کامل حداقل یکی از واکنش‌دهنده‌ها و صفر شدن سرعت واکنش پیش می‌روند.
- چند نمونه از واکنش‌های برگشت‌ناپذیر:

۱- واکنش‌های سوختن مانند سوختن گاز شهری: $CH_4(g) + 2O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + 2H_2O(g)$

۲- زنگ زدن آهن: $4\,Fe(s) + 6H_2O(l) + 3O_2(g) \rightarrow 4\,Fe(OH)_3(s)$

واکنش‌های برگشت‌پذیر

- واکنش‌های برگشت‌پذیر، آن‌هایی هستند که می‌توانند در شرایط مناسب در هر دو جهت رفت و برگشت انجام شوند.
- حضور هم‌زمان واکنش‌دهنده‌ها و فرآورده‌ها در مخلوط واکنش را می‌توان نشانه‌ای از برگشت‌پذیر بودن واکنش‌ها دانست.
- چند نمونه از واکنش‌های برگشت‌پذیر:

۱- واکنش تبدیل گوگرد دی‌اکسید به گوگرد تری‌اکسید: $2\,SO_2(g) + O_2(g) \rightleftharpoons 2SO_3(g)$

۲- واکنش تهیهٔ آمونیاک در فرایند هابر: $N_2(g) + 3\,H_2(g) \rightleftharpoons 2\square H_3(g)$

۳- واکنش تجزیهٔ دی نیتروژن تترا اکسید: $N_2O_4(g) \rightleftharpoons 2NO_2(g)$

۴- واکنش یونش اسیدهای ضعیف در آب: $CH_3COOH(aq) \rightleftharpoons CH_3COO^-(aq) + H^+(aq)$

- در واکنش‌های برگشت‌پذیر سرعت واکنش‌های رفت و برگشت لزوماً برابر نیست و به عواملی چون مقدار واکنش‌دهنده‌ها، فرآورده‌ها و نوع واکنش بستگی دارد.

برگشت‌پذیری و تعادل

- واکنش تعادلی یک واکنش برگشت‌پذیر است که دو شرط زیر را دارد:

۱- دید میکروسکوپی: سرعت واکنش‌های رفت و برگشت برابرند. به این مفهوم که سرعت تولید یک ماده با سرعت مصرف همان ماده برابر است.

۲- دید ماکروسکوپی: مقدار یا غلظت واکنش‌دهنده‌ها و فرآورده‌ها و خواص ظاهری مانند رنگ، دما، فشار و ... ثابت بوده و با گذشت زمان تغییری نمی‌کند.

- واکنش‌های تعادلی در سامانه‌ای انجام می‌شوند که امکان خروج ماده از آن وجود نداشته باشد.
- تعادل در سطح میکروسکوپی پویا بوده و واکنش مدام درحال انجام است. (هرچند در ظاهر گویا متوقف شده است ولی درحال انجام است.)
- هر واکنش تعادلی یک واکنش برگشت‌پذیر است اما امکان دارد واکنش برگشت‌پذیری به تعادل نرسد. در واقع واکنش‌هایی که در آن‌ها امکان انجام هر دو واکنش رفت و برگشت با سرعت برابر وجود داشته باشد به تعادل می‌رسند.
- نمونه‌ای از سامانه‌های تعادلی، محلول اسیدها و بازهای ضعیف در آب است. در این محلول‌ها به دلیل یونش ناچیز اسیدهای ضعیف میان اندک یون‌های حاصل از یونش و مولکول‌های یونیده نشده تعادل برقرار می‌شود. مانند: $HF(aq) \rightleftharpoons H^+(aq) + F^-(aq)$

چگونگی برقراری تعادل و نمودارهای تعادلی

- اگر در ابتدای واکنش فقط واکنش‌دهنده‌ها در ظرف واکنش موجود باشند:

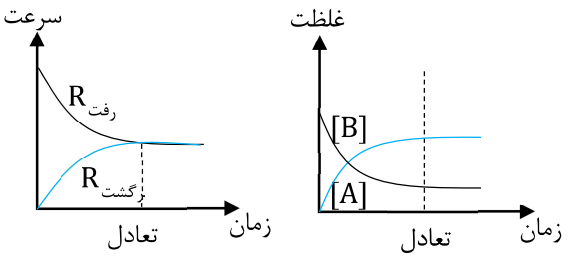
در ابتدا فقط واکنش رفت انجام می‌شود و به دلیل زیاد بودن غلظت واکنش‌دهنده‌ها، سرعت واکنش رفت زیاد است، اما در ابتدای واکنش سرعت واکنش برگشت صفر است، زیرا فرآورده‌ای در ظرف موجود نیست.

@DaneshSad

- با گذشت زمان: غلظت واکنش‌دهنده‌ها کاهش یافته ← سرعت واکنش رفت کاهش می‌یابد← برخورد ذرات واکنش‌دهنده کاهش یافته ← سرعت واکنش رفت کاهش می‌یابد.
- با گذشت زمان: غلظت فراورده‌ها افزایش یافته ← برخورد فراورده‌ها افزایش یافته ← سرعت واکنش برگشت زیاد می‌شود. سرانجام زمانی فرا می‌رسد که سرعت واکنش رفت و برگشت برابر شده و واکنش به تعادل می‌رسد.
- نمودار سرعت – زمان این واکنش و نمودار «غلظت – زمان» برای واکنش‌دهنده‌ها و فرآورده‌ها به صورت روبه‌رو است:

توجه: نمودار «غلظت – زمان» واکنش‌دهنده‌ها نزولی و نمودار «غلظت – زمان» فرآورده‌ها به صورت صعودی است.

- شیب نمودار غلظت زمان هم برای واکنش‌دهنده و هم برای فراورده در حال کم شدن است.
- پس از برقراری تعادل، غلظت مواد موجود در تعادل ثابت مانده و دیگر تغییر نمی‌کند، اما هیچ لزومی ندارد که غلظت آن‌ها با یکدیگر برابر شود.



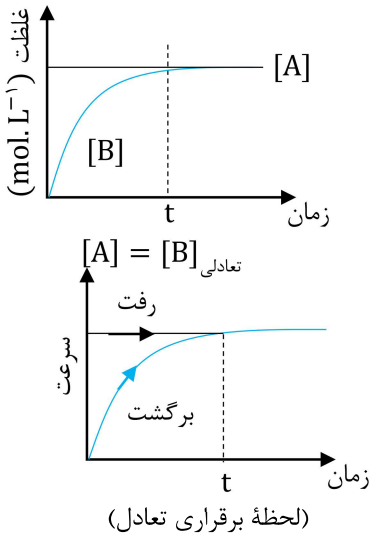
(نمونه‌ای از نمودار غلظت – زمان)

نمودار غلظت – زمان و سرعت – زمان مواد جامد و مایع خالص

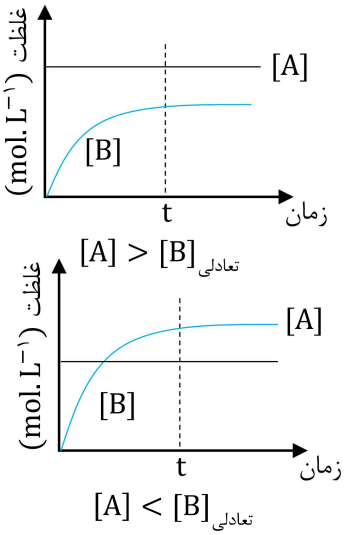
- غلظت مواد جامد یا مایع خالص ثابت بوده و با گذشت زمان و پیشرفت واکنش تغییر نمی‌کند.

$$\text{غلظت محلول ها و گازها} = \frac{n\left(\text{تعداد مول شونده‌حل}\right)}{V\left(\text{حجم محلول یا ظرف برحسب لیتر}\right)} = \frac{\frac{m\left(\text{جرم حل‌شونده}\right)}{M\left(\text{جرم مولی حل‌شونده}\right)}}{V\left(\text{حجم محلول یا ظرف برحسب لیتر}\right)}$$

- نمودار «غلظت – زمان» و «سرعت – زمان» آن در واکنشی مثل $A(l) \rightleftharpoons 2B(g)$، به صورت زیر است (در غلظت – زمان می‌تواند ۳ حالت زیر رخ دهد ولی سرعت زمان فقط دارای یک حالت است)



(لحظهٔ برقراری تعادل)



@DaneshSad

رابطهٔ ثابت تعادل

- برای واکنش تعادلی $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$ در یک دمای معین، ثابت تعادل K برابر است با:

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

- غلظت‌های قرار گرفته در این رابطه باید غلظت‌های تعادلی باشند.
- مقدار ثابت تعادل یک واکنش فقط با تغییر دما تغییر می‌کند و با تغییر غلظت مواد شرکت‌کننده در واکنش تغییر نمی‌کند.
- در رابطهٔ ثابت تعادل فقط غلظت تعادلی گازها (g) و محلول‌های آبی (aq) را می‌نویسیم ولی غلظت مواد جامد (s) و مایع خالص (l) را نمی‌نویسیم.
- هر چند مقدار ثابت تعادل به مقدار مواد جامد یا مایع خالص بستگی ندارد اما حضور آن‌ها برای برقراری تعادل الزامی است.

یکاهای ثابت تعادل

- در واکنش تعادلی $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$ که در آن همه مواد گاز یا محلول هستند:
- اگر $(\text{mol L}^{-1})^{(c+d)-(a+b)}$ = یکای ثابت تعادل (K)
- اگر $a + b = c + d \Leftarrow$ ثابت تعادل فاقد یکا است.
- توان mol و توان L در یکای ثابت تعادل، قرینه هستند.

چند نکته در رابطه با محاسبهٔ ثابت تعادل

- اگر یک تعادل را معکوس کنیم (جای واکنش‌دهنده‌ها و فراورده‌های آن را عوض کنیم) مقدار عددی ثابت تعادل جدید، معکوس مقدار عددی ثابت تعادل اولیه است.
- اگر ضرایب استوکیومتری یک واکنش تعادلی را در عددی مانند n ضرب کنیم، K به توان آن عدد خواهد رسید.

نکات حل مسائل تعادل

- درس مسائل تعادل توجه به این نکته الزامی است که در رابطه ثابت تعادل الزاماً مقادیر لحظه تعادل برحسب مول بر لیتر قرار می‌گیرد.
- در تعادل‌هایی مانند $2HBr(g) \rightleftharpoons H_2(g) + Br_2(g)$ که تعداد مول گازی دو طرف معادلهٔ واکنش برابر است، حجم ظرف از صورت و مخرج عبارت ثابت تعادل ساده شده و می‌توانیم در عبارت ثابت تعادل، فقط مول مواد را قرار دهیم تا از این راه محاسبات ما کمتر شود. حتی می‌توان به جای غلظت یا مول تعداد ذراتی که در لحظه تعادل در شکل رسم شده است را نیز قرار داد به عبارتی:

$K_{\text{غلظت}} = K_{\text{مول}} = K_{\text{ذره}}$ ؛ ثابت تعادل یکا ندارد

آمونیاک و بهره‌وری در کشاورزی

- ۱- بهترین راه‌حل برای حل چالش تأمین غذا، افزایش بهره‌وری در تولید فراورده‌های کشاورزی است. برای این منظور شناسایی، تولید و افزودن کودهای شیمیایی مناسب به خاک راهگشا خواهد بود.
- ۲- گیاهان برای رشد، افزون بر CO_2 و H_2O به عنصرهایی مانند S، N، P، K و ... نیاز دارند.
- ۳- گیاهان نمی‌توانند نیتروژن ضروری برای رشد خود را به طور مستقیم از هوا جذب کنند به همین دلیل باید نیتروژن را به شکل ترکیب‌های نیتروژن‌دار از جمله آمونیاک و اوره به خاک افزود.

توجه: در برخی کشورها برای افزایش بازده فراورده‌های کشاورزی، آمونیاک مایع را به عنوان کود شیمیایی به طور مستقیم به خاک تزریق می‌کنند.

- ۴- تولید فراورده بیشتر در شرایط معین، به میزان پیشرفت واکنش در آن شرایط بستگی دارد. به دیگر سخن هر چه میزان پیشرفت واکنش بیشتر باشد، درصد بیشتری از واکنش‌دهنده‌ها به فراورده‌ها تبدیل می‌شوند.

اصل لوشاتلیه و اثر تغییر غلظت بر جابه‌جایی تعادل

- اصل لوشاتلیه: اگر تغییری سبب به هم خوردن یک سامانهٔ تعادلی شود، تعادل در جهتی جابه‌جا می‌شود که تا حد امکان اثر آن تغییر را جبران کند و به تعادل جدید برسد.

@DaneshSad

توجه: منظور از جابه‌جایی تعادل این است که برای لحظاتی سرعت واکنش رفت و برگشت باهم برابر نخواهد بود، بنابراین واکنش در یک جهت با سرعت بیشتری پیشرفت خواهد کرد.

تغییر غلظت مواد شرکت‌کننده در تعادل

- منظور از تغییر غلظت، تغییر مقدار حل‌شونده محلول، حلال یک محلول یا تغییر مقدار گازها در واکنش تعادلی است.

الف) افزایش غلظت یکی از مواد شرکت‌کننده در دمای ثابت ⟵ واکنش تعادلی تا حد امکان در جهت مصرف آن ماده پیش خواهد رفت.

ب) کاهش غلظت یکی از مواد شرکت‌کننده در دمای ثابت ⟵ واکنش تعادلی تا حد امکان در جهت تولید آن ماده پیش خواهد رفت.

- تغییر مقدار مواد جامد یا مایع در سامانه تعادلی باعث جابه‌جایی تعادل نمی‌شود.
- در اثر تغییر غلظت مواد شرکت‌کننده در واکنش K تغییر نکرده و ثابت می‌ماند.
- برای بررسی غلظت یا مول در تعادل جدید نسبت به تعادل اولیه باید هم به تغییر ناگهانی در تعادل و هم جهت جابجایی تعادل توجه داشت و باید به این نکته دقت کرد که اثر تغییر ناگهانی در پیش‌بینی غلظت و مول در تعادل جدید مهم‌تر از جابجایی است.

تغییر فشار در سامانه تعادلی

- تغییر فشاری که ناشی از تغیر حجم تعادل‌های گازی باشد، باعث جابجایی تعادل می‌شود.
- افزایش فشار تعادل را به سمت مول گازی کمتر و کاهش فشار تعادل را به سمت مول گاری بیشتر جابجا می‌کند.
- در واکنش‌هایی که مول گازی دو سمت برابرند تغییر حجم ظرف (تغییر فشار) باعث جابجایی تعادل نمی‌شود ولی بر تعادل اثر دارد.
- در تعادل‌هایی که مادهٔ گازی در آن‌ها وجود ندارد، تغییر حجم ظرف باعث تغییر فشار نمی‌شود و در نتیجه هیچ تأثیری بر تعادل ندارد.
- ورود گاز نجیب به یک تعادل گازی، باعث افزایش فشار تعادلی می‌شود اما تعادل جابجا نخواهد شد، زیرا غلظت گازها تغییر نخواهند کرد.
- کاهش حجم ظرف باعث افزایش غلظت گازها در لحظه تغییر ناگهانی یا شوک خواهد شد و در نتیجه غلظت گازها در تعادل جدید بیشتر از تعادل قبلی خواهد بود.
- افزایش حجم ظرف باعث کاهش غلظت گازها در لحظه شوک خواهد شد، بنابراین غلظت گازها در تعادل جدید کاهش خواهد یافت.
- افزایش فشار یا همان افزایش غلظت گازها باعث افزایش سرعت در تعادل جدید نسبت به تعادل اولیه خواهد شد، دقیقاً در کاهش فشار یا کاهش غلظت عکس این اتفاق رخ خواهد داد.
- در اثر فشار برای بررسی مول گازها در تعادل جدید به جهت جابجایی تعادل توجه کنید.
- برای بررسی تغییر رنگ در سامانه‌های تعادلی باید به تغییرات غلظت مواد رنگی توجه کنید نه تغییرات مول، به عنوان مثال در واکنش تعادلی تجزیه N_2O_4 با کاهش حجم ظرف غلظت گازها و در نتیجه غلظت N_2 در تعادل جدید افزایش یافته و سامانه پررنگ‌تر خواهد شد.

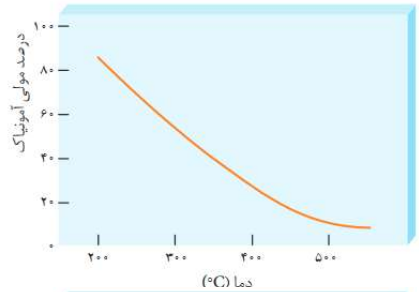
تغییر دما در سامانه‌های تعادلی

- تنها عاملی که هم تعادل را جابجا می‌کند و هم ثابت تعادلی را تغییر می‌دهد.
- در واکنش‌های گرماگیر افزایش دما تعادل را در جهت رفت و تولید فرآورده بیشتر جابجا می‌کند.
- در واکنش‌های گرماده افزایش دما تعادل را در جهت برگشت و مصرف فرآورده‌ها جابجا می‌کند.
- در واکنش‌های گرماگیر دما با ثابت تعادل رابطه مستقیم و در واکنش‌های گرماده رابطه عکس دارد.
- افزایش دما همواره باعث افزایش سرعت واکنش رفت و برگشت می‌شود، بنابراین همواره با افزایش سرعت واکنش در تعادل جدید بیشتر از تعادل اولیه خواهد بود، با کاهش دما دقیقاً عکس این اتفاق رخ خواهد داد.

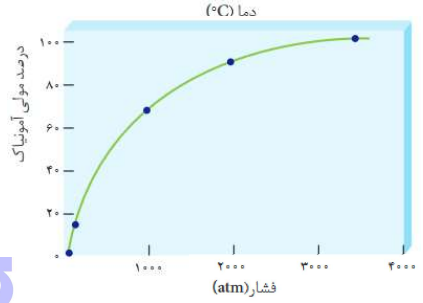
@DaneshSad

فرآیند هابر

- واکنش تولید آمونیاک از گاز H_2 و N_2 یک واکنش تعادلی گرماده است.
- این واکنش به قدری کند است که در دمای اتاق، در حضور کاتالیزگر و با کمک جرقه هم انجام نمی‌شود.
- افزایش دما $450^\circ C$ در حضور کاتالیزگر Fe سرعت وانش را به شکل چشم‌گیری افزایش می‌دهد ولی در تولید آمونیاک بیشتر ثمربخش نیست، زیرا افزایش دما تعادل را در جهت برگشت جابجا می‌کند.



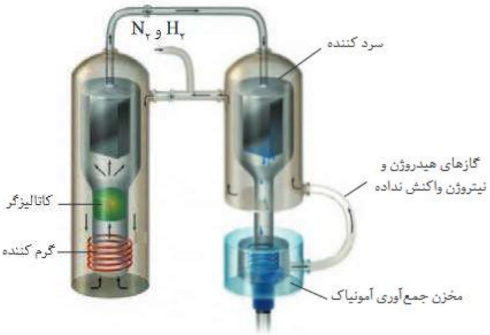
- با افزایش فشار تا ۲۰۰ اتمسفر تعادل در جهت تولید آمونیاک بیشتر جابجا می‌شود و درصد مولی آمونیاک به ۲۸ درصد می‌رسد.



- ثابت تعادل تولید آمونیاک در دماهای مختلف:

دما	۲۵°C	۲۰۰°C	۴۰۰°C
K	6×10^{5}	۲/۲۴	$6/2\times10^{-4}$

- در نهایت با کاهش دما تا $-40^\circ C$ از نقطه جوش آمونیاک رد شده و آن را مایع می‌کنند. گاز H_2 با نقطه جوش ۲۵۳- و گاز N_2 با نقطه جوش ۱۹۶- درجه سانتی‌گراد به شکل گازی برای مصرف مجدد به سیستم بازگردانده می‌شود.



ارزش فناوری های شیمیایی

- نفت خام، گاز طبیعی، زغال سنگ و معدن فلزات و سنگ های قیمتی منابع شیمیایی هستند که به طور یکسان در جهان توزیع نشده اند.
- بعضی کشورها منابع طبیعی را همان طور که از طبیعت به دست می آورند بدون فراوری به فروش می رسانند که به خام فروشی معروف است.
- درصد خلوص مواد شیمیایی کمیتی است که رابطه مستقیم با قیمت تمام شده آنها دارد.
- هر بشکه نفت خام ۱۵۹ لیتر است.

سنتز مولکول‌های آلی

- سنتز یک فرایند شیمیایی هدفمند است که در آن با استفاده از مواد ساده تر، مواد شیمیایی دیگر را تولید می کنند.

یکی C_2H_4اتن از مهمترین خوراک های پتروشیمی

$C_2H_4 + H_2 \rightarrow C_2H_6$ اتان (سوخت)

$C_2H_4 + H_2O \xrightarrow{H_2SO_4} C_2H_5OH$ اتانول (ضدعفونی کننده)

$C_2H_4 + HCl \rightarrow C_2H_5Cl$ کلرو اتان (بی حس کننده موضعی)

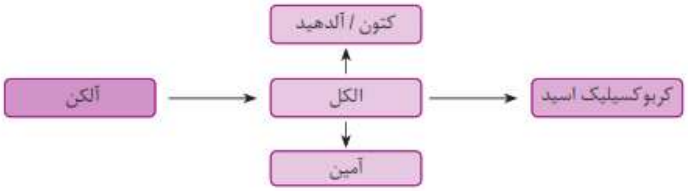
$n[C_2H_4] \xrightarrow{\text{دما و فشار}} [C_2H_4]_n$ پلی اتن یا پلی اتیلن (سازنده اصلی برخی پلاستیک ها)

@DaneshSad

$$\underbrace{C_2H_5OH}_{\text{اتانول}} + \underbrace{CH_3COOH}_{\text{استیک اسید}} \xrightarrow{\text{استری شدن}} \underbrace{CH_3COOCH_2CH_3}_{\text{اتیل استات}} + H_2O$$

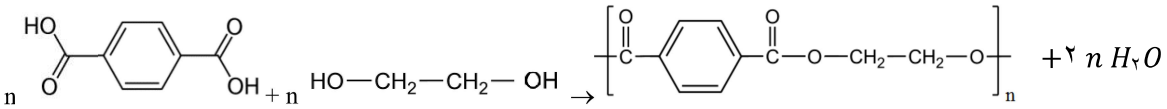
(ضدعفونی کننده) (سرکه) (حلال چسب)

- هرچه نوع و تعداد گروه های عاملی در مولکول هدف بیشتر باشد ساخت آن دشوارتر است.
- بازده واکنش، هزینه مواد و انرژی مصرف شده برای تولید ماده هدف، به نوع واکنش و فناوری به کار رفته در تولید آن ماده بستگی دارد.
- از اکسایش آلکن‌های بالای ۲ کربن در مجاورت محلول آب و اسید می‌توان الکل هم کربن آنها را تهیه کرد.
- اگر کربن گروه عاملی الکل‌ها را دو درجه اکسید کنیم آلدهید یا کتون هم کربن تولید خواهد شد (دقت کنید که آلدهیدها $(n \geq 1)$ و کتون‌ها $(n \geq 3)$ دارند.
- از کربن گروه عاملی الکل‌ها را ۴ درجه در حضور یک اکسنده قوی اکسید کنیم اسید هم کربن آن الکل سنتز خواهد شد.
- از واکنش الکل‌ها با آمونیاک طی یک واکنش سنتز آبدهی آمین هم کربن تولید خواهد شد.



بطری آب (پلیمر پلی اتیلن ترفتالات (PET))

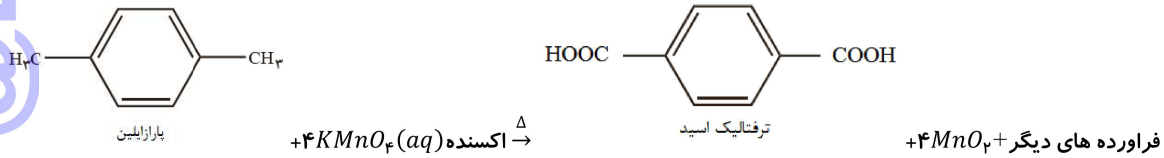
- PET نوعی پلی استر است که از الکل دو عاملی و کربوکسیلیک اسید دو عاملی تهیه شده است.



ترفتالیک اسید $C_8H_6O_4$ — اتیلن گلیکول $C_2H_6O_2$ — $C_{10}H_8O_4$

- اتیلن گلیکول و ترفتالیک اسید در نفت خام وجود ندارند.
- PET مانند دیگر پلیمرهای سنتزی ماندگاری زیادی در طبیعت دارد و به کندی تجزیه می شود.

سنتز ترفتالیک اسید از پارازایلن:



$+4KMnO_4(aq) \xrightarrow{\Delta}$ اکسنده — فراورده های دیگر $+4MnO_2+$

$C_{10}H_8$ — $C_8H_6O_4$

- انجام این واکنش در مقیاس صنعتی حتی در حضور پرمنگنات غلیظ و اکسیژن هوا نیز بسیار دشوار و پیچیده است و نیاز به دمای بالا، کاتالیزگر برای افزایش بازده دارد.
- در این فرآیند کربن متیل ۶ درجه اکسید می‌شود و منگنز پرمنگنات ۳ درجه کاهش خواهد یافت.

@DaneshSad

سنتز اتیلن گلیکول از اتن

$$3H_2C=CH_2 + 2\,KMnO_4(aq) \xrightarrow{\text{اکسنده}} 3\,H_2C(OH)-CH_2(OH) + 2\,MnO_2 + \text{فراورده‌های دیگر}$$

اتیلن گلیکول — محلول رقیق

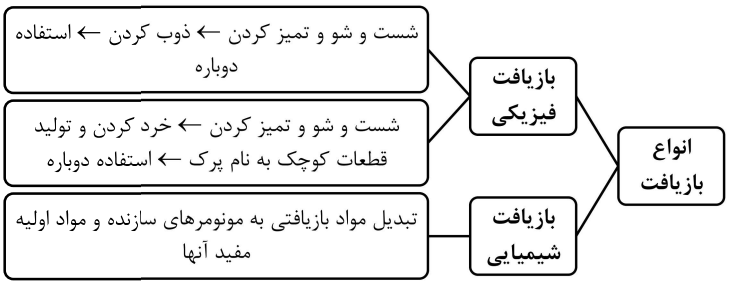
- در این واکنش هر کربن اتن با تبدیل شدن به اتیلن گلیکول یک درجه اکسایش می‌یابد و منگنز پر منگنات ۳ درجه کاهش خواهد یافت.

بازیافت PET:

- چهار ویژگی مهم پلاستیک ها که منجر به کاربرد وسیع و رو به افزایش آنها شده عبارتند از:

۱) چگالی کم ۲) نفوذناپذیری نسبت به آب و هوا ۳) ارزان بودن ۴) مقاومت در برابر خوردگی

- پلاستیک ها به دلیل زیست تخریب ناپذیر بودن باید بازیافت شوند.
- بازیافت فرایندهای فیزیکی و شیمیایی است که می تواند مواد دور ریختنی را به مواد قابل استفاده تبدیل نماید.
- سطح فناوری هر کشور تعیین کننده روش بازیافت است.
- از واکنش PET با متانول می توان مواد مونومری مفیدی تهیه کرد و در ساختن پلیمرها مورد استفاده قرار داد.



متانول در یک نگاه

- مایع بی رنگ، بسیار سمی، قابل تولید در مقیاس صنعتی، ساده ترین عضو خانواده الکل ها، از چوب تهیه می شود، کربن آن دارای عدد اکسایش (۲-) است.
- واکنش تهیه متانول $CO + 2H_2 \xrightarrow[\text{دما و فشار مناسب}]{\text{کاتالیزگر}} CH_3OH$
- گاز H_2 و CO برای تهیه متانول در دسترس نیست برای تهیه آن از معادله $CH_4 + H_2O \xrightarrow[\text{کاتالیزگر}]{} CO + 3H_2$ استفاده می شود.
- مناسب ترین شرایط تولید متان از این واکنش مثل فرایند هابر دما و فشار بالا است.
- گاز متان گازی ارزان و سازنده اصلی گاز طبیعی است که در میدان های نفتی یافت می شود که برای افزایش ایمنی بخش عظیمی از آن را می سوزانند.
- گاز متان واکنش پذیری کمی دارد و تبدیل آن به متانول دشوار است.
- تولید مستقیم متانول از متان مزیت زیادی از جمله ارزان و در دسترس بودن O_2 دارد.

شیمی سبز

- هدف آن طراحی واکنش هایی با کمترین آسیب به محیط زیست و بیشترین بازده است.
- یک واکنش شیمیایی وقتی از دیدگاه اتمی به صرفه تر است که شمار بیشتری از اتم های واکنش دهنده به فراورده های سودمند تبدیل شود.

@DaneshSad