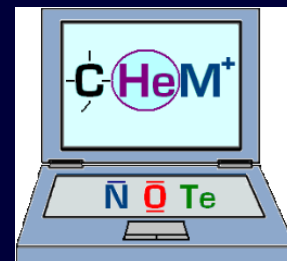


9. Chemické reakce

Kinetika

- **Základní pojmy**
- **Kinetické rovnice pro celistvé řády**
- **Katalýza**



Evropský sociální fond
Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti

9. Chemické reakce

Kinetika

- reakční mechanismus
 - elementární reakce a molekulárta reakce
- reakční rychlost
- kinetická rovnice
- řád reakce
- rychlostní konstanta – závislost na teplotě
- katalýza, inhibice
- izolovaná reakce x simultánní reakce
- homogenní reakce x heterogenní reakce

9. Chemické reakce

Kinetika

- elementární reakce a molekularita reakce
 - elementární reakce v celkovém reakčním mechanismu
 - počet molekul, které se musí srazit

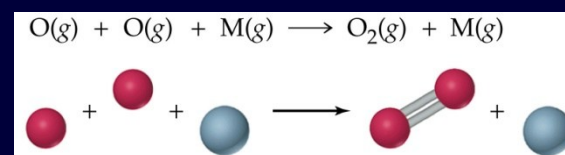
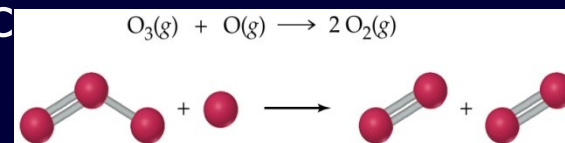
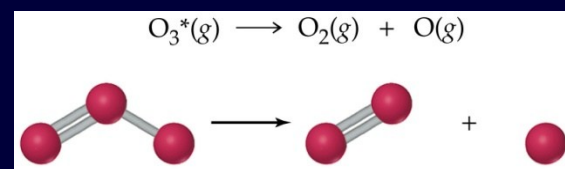
- **monomolekulární**
samovolný rozklad molekuly

- (často jen zdánlivé)

- **bimolekulární** – srážka dvou částic
 - nejčastější případ

- **trimolekulární** – **současná** srážka tří částic

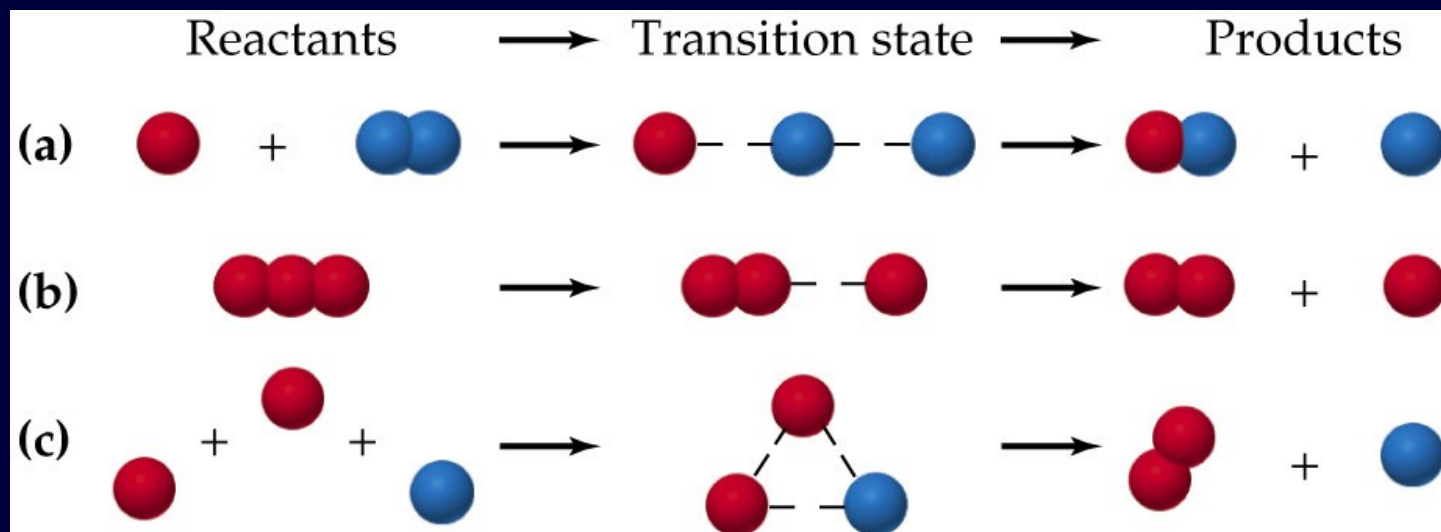
- mnohdy zdánlivé,
spíše sled bimolekulárních dějů



9. Chemické reakce

Kinetika

- elementární reakce a molekularita reakce
 - tranzitní (přechodový) stav



9. Chemické reakce

Kinetika

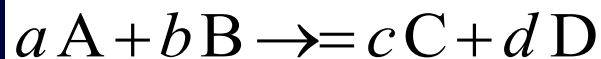
- homogenní reakce – v jedné fázi
- heterogenní reakce – na fázovém rozhraní
- simultánní reakce
 - zvrtné reakce (přímá a zpětná)
 - bočné reakce (vedlejší produkty)
 - následné reakce (konsekutivní)
 - řetězové – mnohé radikálové, mnohé polymerace

9. Chemické reakce

Kinetika

- reakční rychlost – **okamžitá rychlost**
 - časový úbytek látkového množství reaktantu, přírůstek látkového množství produktu dělený příslušným stechiometrickým faktorem
 - pro reakce **za konstantního objemu** (např. v roztocích) časová změna koncentrace

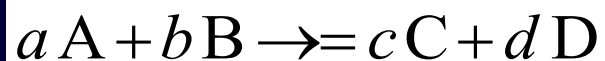
$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt}$$



9. Chemické reakce

Kinetika

- **kinetická rovnice** – diferenciální rovnice mezi koncentracemi látek v reakční směsi a časem



$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = f([A], [B], [C], [D])$$

- kinetická rovnice jednoduché reakce

$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = k[A]^\alpha [B]^\beta$$

9. Chemické reakce

Kinetika

- kinetická rovnice jednoduché reakce

$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = k[A]^\alpha [B]^\beta$$

- celkový řád reakce $n = \alpha + \beta$
- řád reakce vzhledem ke složce A α – reálné číslo
- jednoduché případy (vůči složce)
 - nultý řád (nezávislost rychlosti na koncentraci složky)
 - první řád (rychlost přímo úměrná koncentraci složky)
 - druhý řád (rychlost úměrná kvadrátu koncentrace složky)

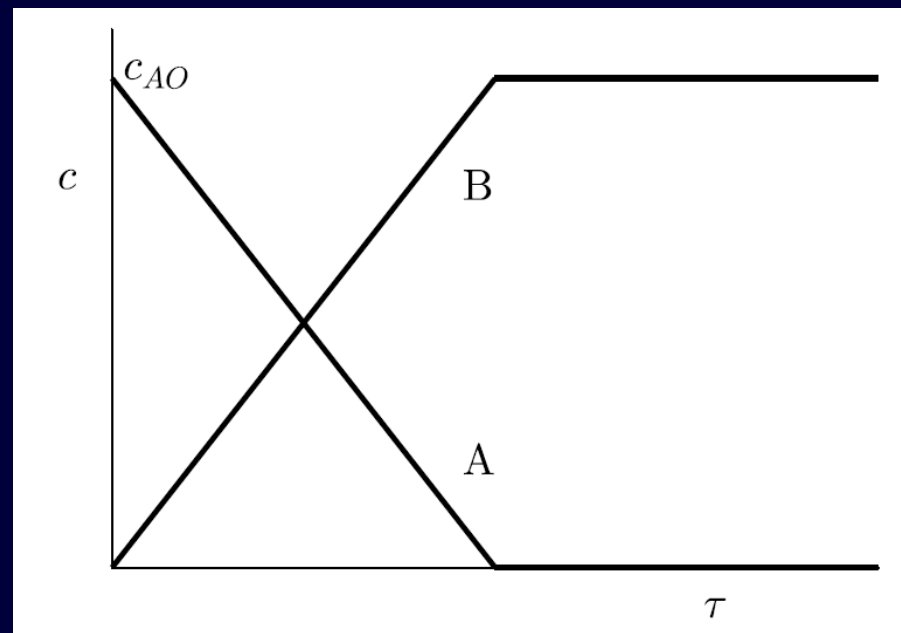
9. Chemické reakce

Kinetika

- kinetická rovnice
 - jednoduché případy (vůči složce)
 - nultý řád (nezávislost rychlosti na koncentraci složky)

$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[\mathbf{A}]}{dt} = k[\mathbf{A}]^0 = k$$

$$[\mathbf{A}] = [\mathbf{A}]_0 - k\tau$$



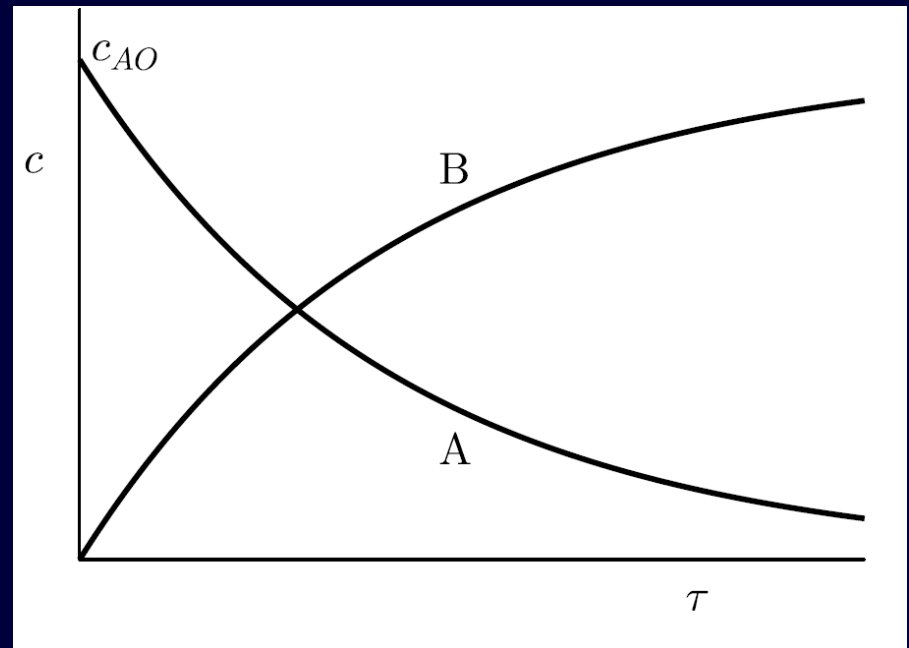
9. Chemické reakce

Kinetika

- kinetická rovnice
 - jednoduché případy (vůči složce)
 - první řád (rychlost přímo úměrná koncentraci složky)

$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[\mathbf{A}]}{dt} = k[\mathbf{A}]$$

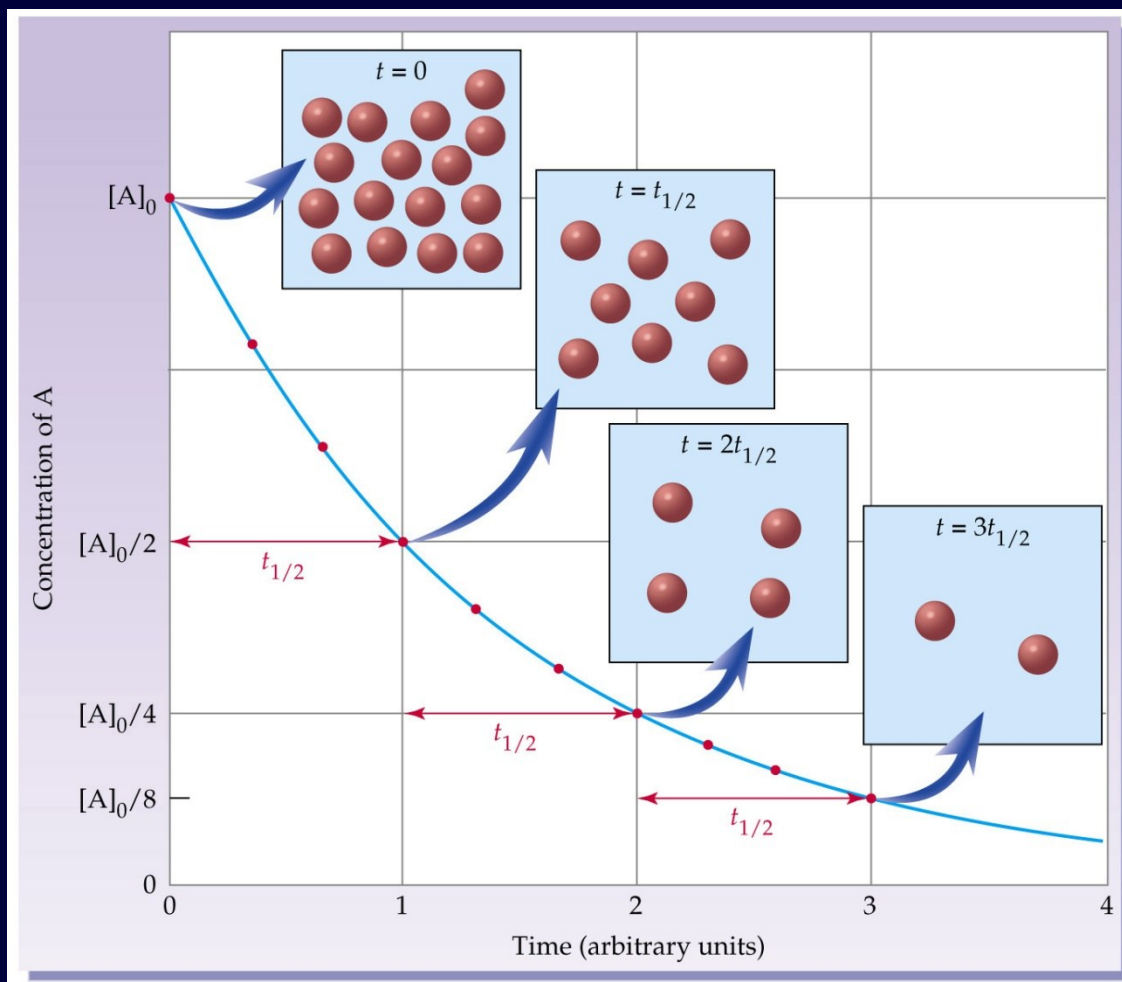
$$[\mathbf{A}] = [\mathbf{A}]_0 \exp(-k\tau)$$



9. Chemické reakce

Kinetika

- první řád
 - poločas



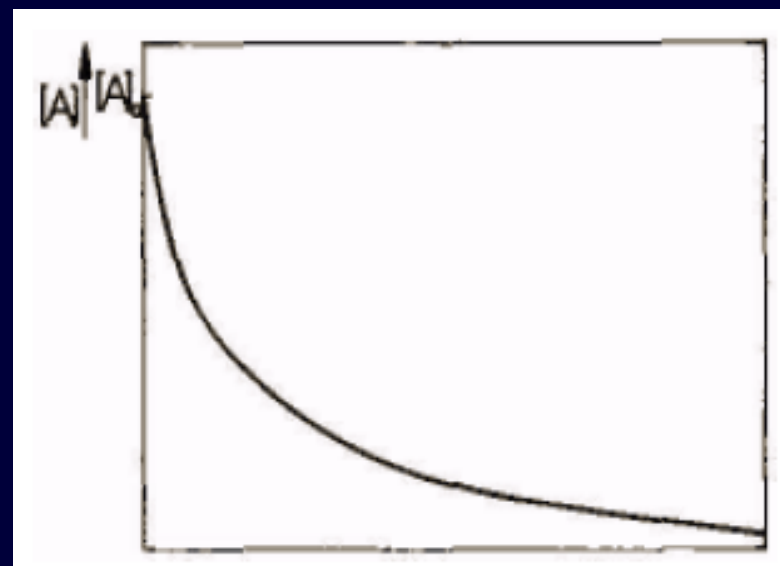
9. Chemické reakce

Kinetika

- kinetická rovnice
 - jednoduché případy (vůči složce)
 - druhý řád (rychlost úměrná kvadrátu koncentrace složky)

$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[\mathbf{A}]}{dt} = k[\mathbf{A}]^2$$

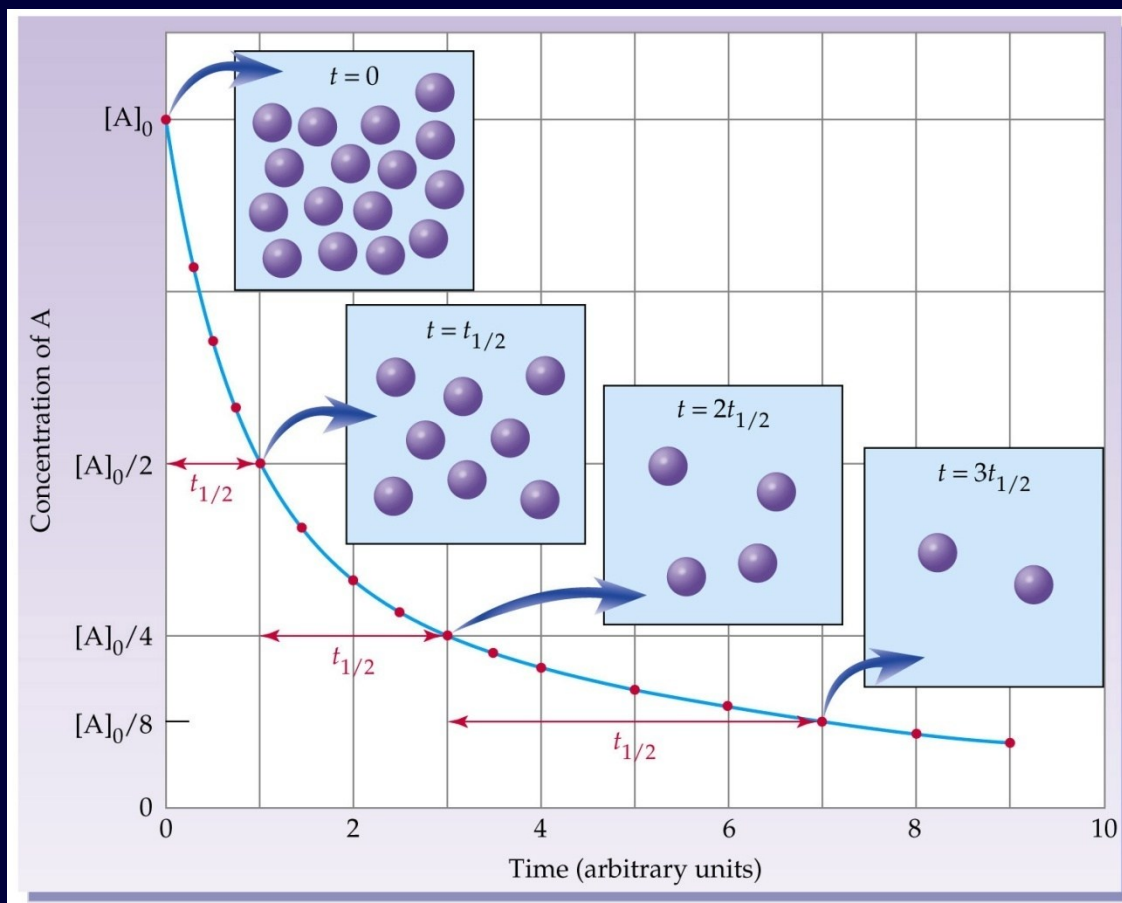
$$[\mathbf{A}] = [\mathbf{A}]_0 / (1 + [\mathbf{A}]_0 k \tau)$$



9. Chemické reakce

Kinetika

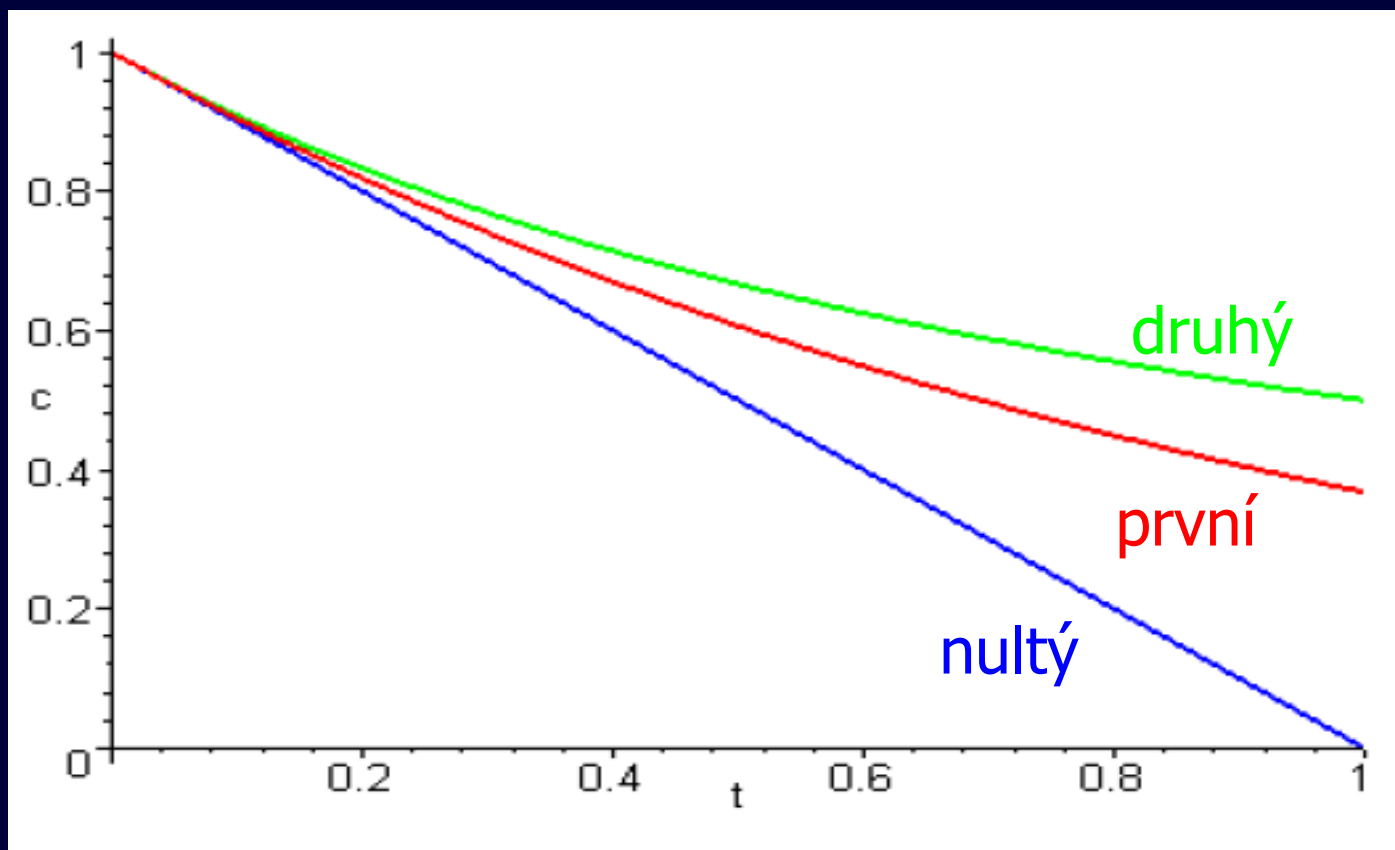
- druhý řád
 - poločas



9. Chemické reakce

Kinetika

- nultý, první a druhý řád - porovnání



9. Chemické reakce

Kinetika

- kinetická rovnice jednoduché reakce

$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = k[A]^\alpha [B]^\beta$$

– rychlostní „konstanta“

- pro danou teplotu
- závislost na teplotě – Arrheniova rovnice
- teplota, aktivační energie, (frekvenční) faktor

$$k = Ae^{-E_a/RT}$$



9. Chemické reakce

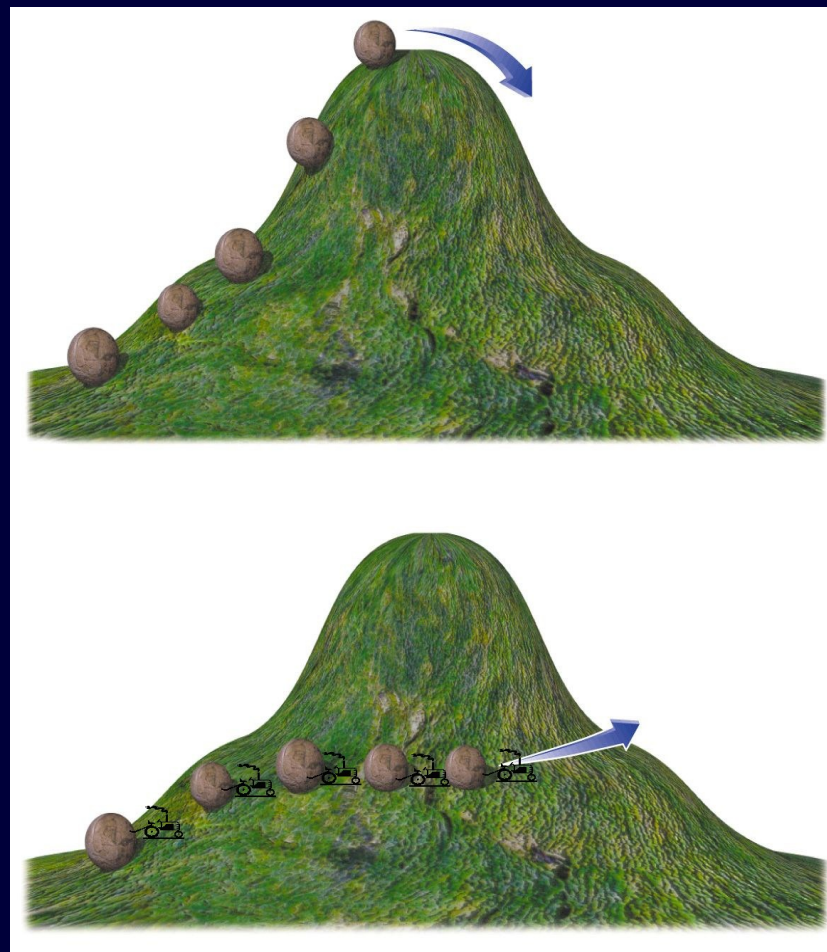
Kinetika

- srážková teorie – navržena pro rychlost reakcí v plynné fázi
 - frekvence srážek a pravděpodobnost, že při srážce dojde k reakci
- teorie absolutních reakčních rychlostí
 - teorie aktivovaného komplexu
 - teorie přechodového stavu

9. Chemické reakce

Kinetika

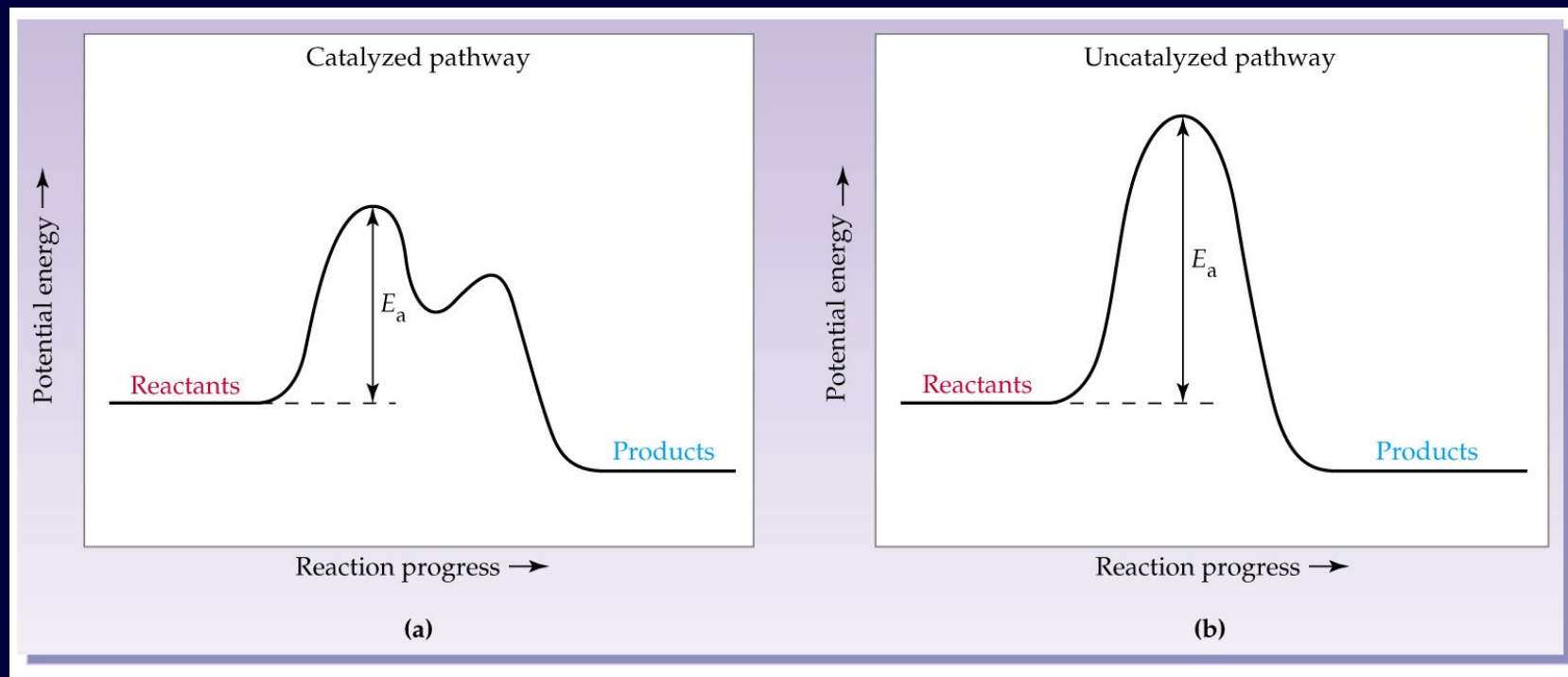
- katalýza a inhibice
 - katalyzátor mění cestu děje
 - „převede“ výchozí látky na produkty „pohodlnější“ cestou



9. Chemické reakce

Kinetika

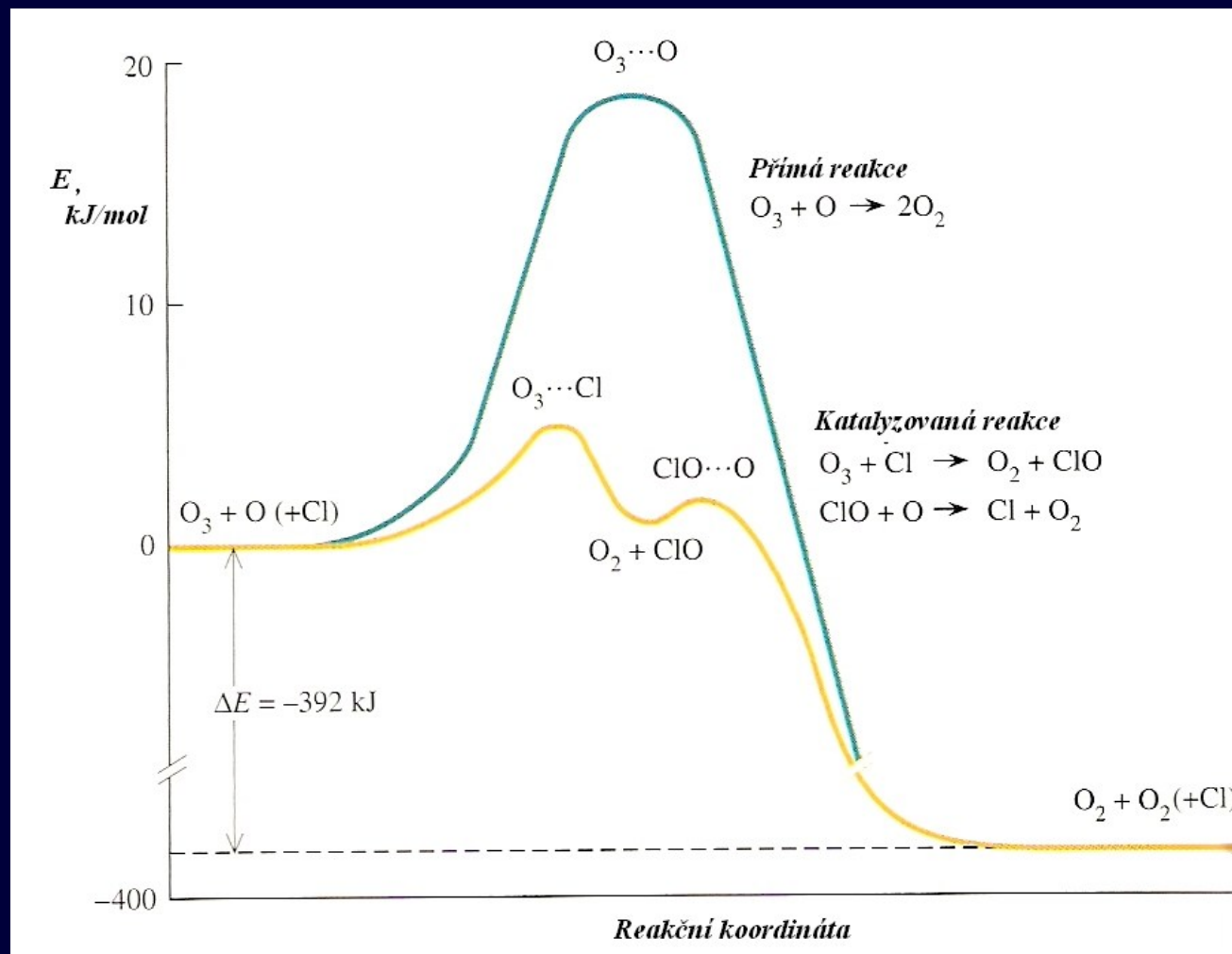
- katalýza a inhibice
 - katalyzátor mění mechanismus reakce (mění cestu děje – „cesta přes nižší bariéru“)



9. Chemické reakce

Kinetika

- katalýza
– příklad
rozklad ozonu



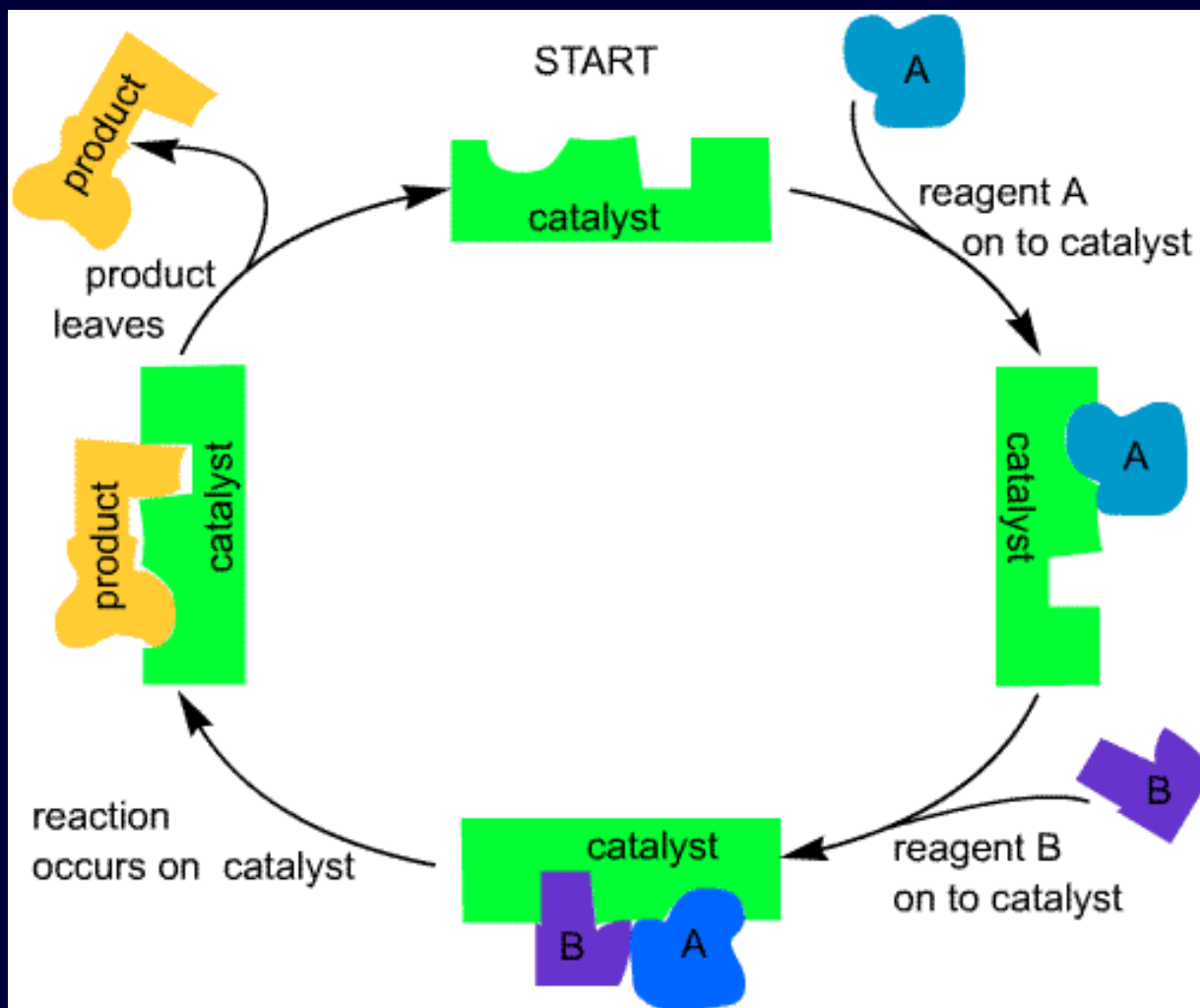
9. Chemické reakce

Kinetika

- katalýza a inhibice
 - katalyzátory neselektivní x selektivní
 - autokatalýza
- homogenní – obvykle v roztocích
- heterogenní – na fázovém rozhraní
 - transportní jevy, sorpce, vlastní reakce
- enzymová
 - mechanismus Michaelisův-Mentenové – komplex enzym-substrát

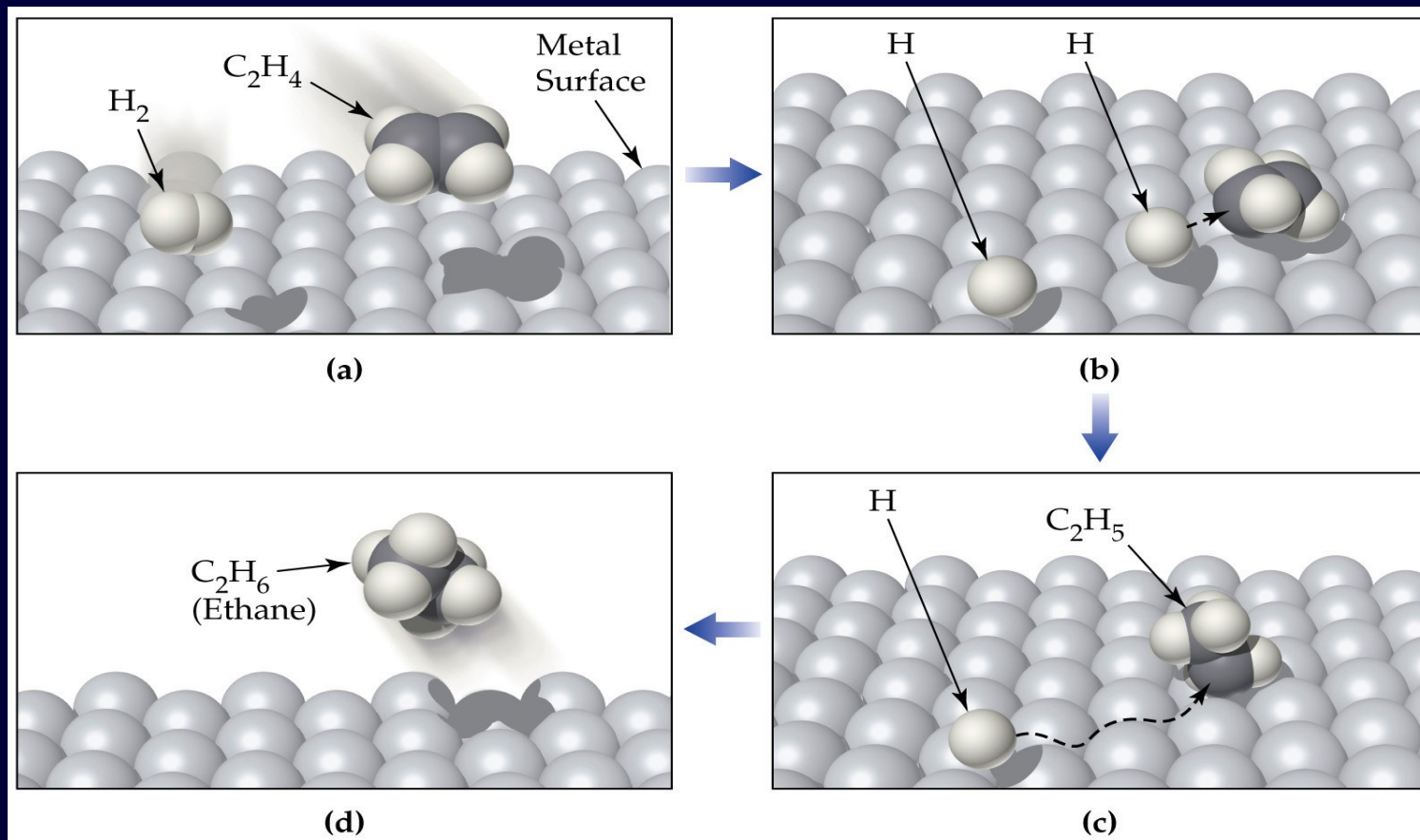
9. Chemické reakce Kinetika

- katalýza – katalytický cyklus



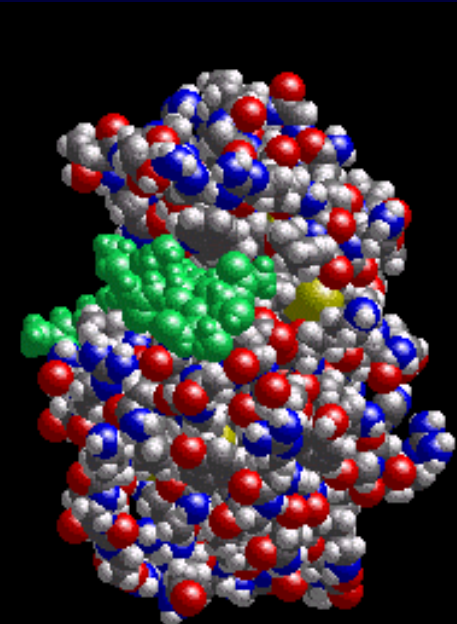
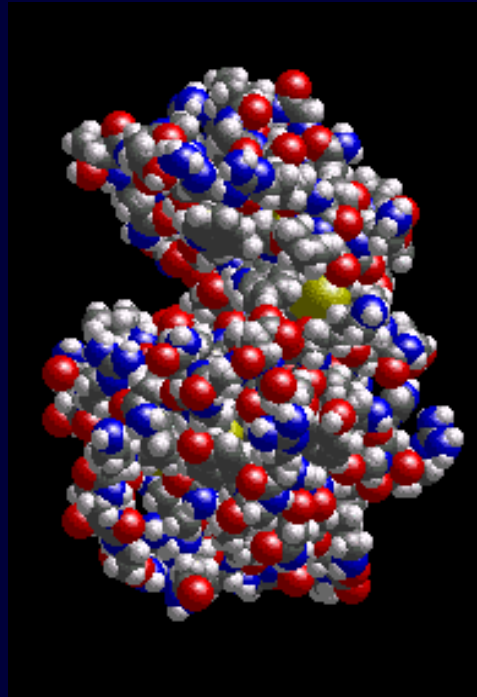
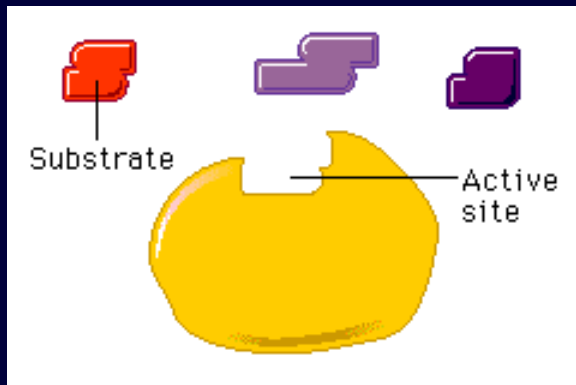
9. Chemické reakce Kinetika

- heterogenní katalýza – na fázovém rozhraní
 - transportní jevy, sorpce, vlastní reakce



9. Chemické reakce Kinetika

- enzymová katalýza – selektivita



9. Chemické reakce Kinetika

- enzymová katalýza – kroky

