

- rychlost reakcí a závislost na podmínkách
- výpočet složení v závislosti na čase
- reakční mechanismy

Rychlost reakce

$V = \text{konst:}$

$$\frac{1}{V} \frac{dn_i}{d\tau} = \frac{dc_i}{d\tau} \begin{cases} > 0 & \text{pro produkty} \\ < 0 & \text{pro výchozí látky} \end{cases}$$

Rychlost reakce:

$$r_i = \begin{cases} \frac{dc_i}{d\tau} & \text{pro produkty} \\ -\frac{dc_i}{d\tau} & \text{pro výchozí látky} \end{cases}$$

$$r = \frac{1}{\nu_i} \frac{dc_i}{d\tau}$$

Obecně:

$$\frac{dc_1}{d\tau} = f(c_1, c_2, \dots, T)$$

Jednoduchá reakce je dána jednou reakcí a jednou kinetickou rovnicí

Obvykle (A = výchozí látka):

$$r_A = -\frac{dc_A}{d\tau} = k(T) c_A^\alpha c_B^\beta \dots$$

- $k(T)$ = rychlostní konstanta
- α, β = dílčí řády
- $n = \alpha + \beta \dots$ = (celkový) řád reakce

Rozměr: $[k] = (\text{mol dm}^{-3})^{1-n} \text{s}^{-1}$

Poločas reakce: c_A (zvolené látky) klesne na polovinu

stechiometrický zápis vystihuje mechanismus ($\text{Cl}^\bullet + \text{H}_2 \rightarrow \text{HCl} + \text{H}^\bullet$)

- reakce monomolekulární (rozpad molekuly: $\text{N}_2\text{O}_4 \rightarrow 2\text{NO}_2$; radioaktivní rozpad)
- reakce bimolekulární (srážka; nejobvyklejší typ)
- reakce trimolekulární – vzácné

Příklad: Reakce



je 1. řádu vzhledem k A_2 i vzhledem k B_2 . Na začátku jsou v systému o objemu 1 dm^3 dva moly látky A a čtyři moly látky B. Rychlostní konstanta je $k = 5 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Napište rychlostní rovnici.

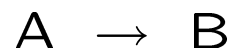
$$[d\xi/d\tau = 5(2 - \xi)(4 - 2\xi) = 10(2 - \xi)^2]$$

Převod koncentrace – parciální tlaky

$V = \text{konst:}$

$$p_i = c_i RT$$

- rozklady, izomerizace
- radioaktivní rozpad



$$-\frac{dc_A}{d\tau} = k c_A$$

$$c_A(\tau) = c_{A0} \exp(-k\tau)$$

Poločas:

$$\tau_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

Reakce pseudoprvního řádu: látky kromě jedné jsou v přebytku

Příklad: Aktivita vzorku benzenu s ^{14}C získaného z lebky je 0.3 Bq, aktivita vzorku získaného stejným způsobem ze současného materiálu je 1.2 Bq. Jak stará je lebka? $\tau_{1/2}(^{14}\text{C}) = 5730 \text{ r.}$ [11460 r]

A → produkty

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = kc_A^2$$

$$\frac{1}{c_A} = \frac{1}{c_{A0}} + k\tau$$

Poločas:

$$\tau_{1/2} = \frac{1}{kc_{A0}}$$

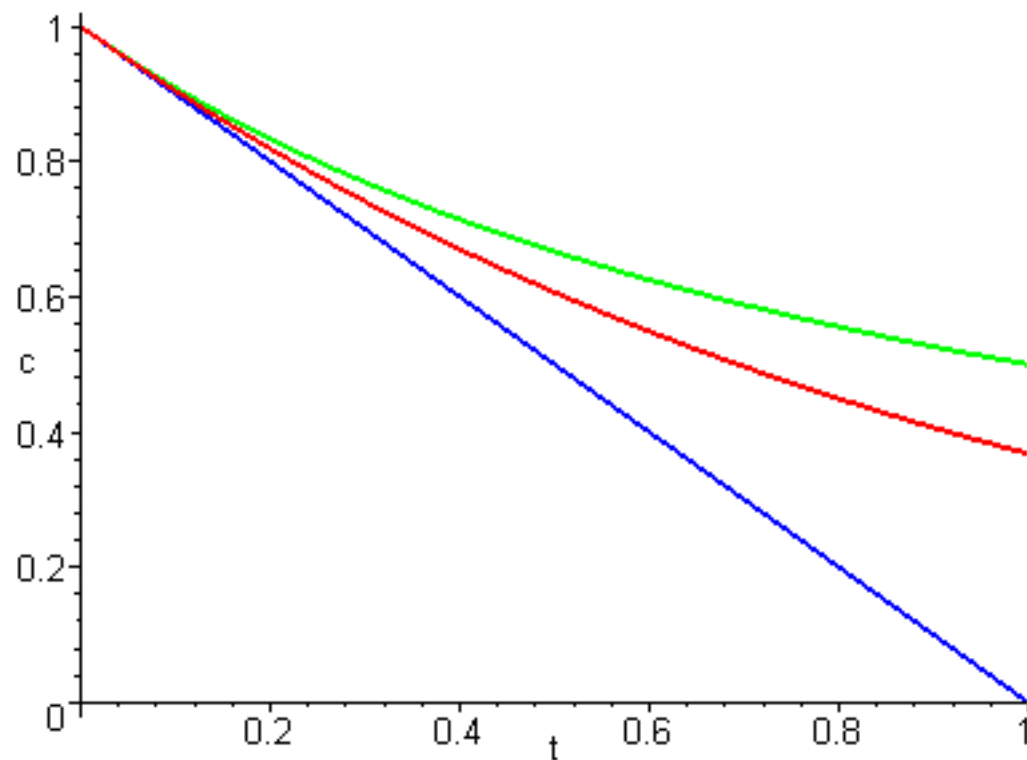
A → produkty

$$-\frac{dc_A}{d\tau} = kc_A^0$$

$$c_A = c_{A0} - k\tau$$

Poločas:

$$\tau_{1/2} = \frac{c_{A0}}{2k}$$



0. řád

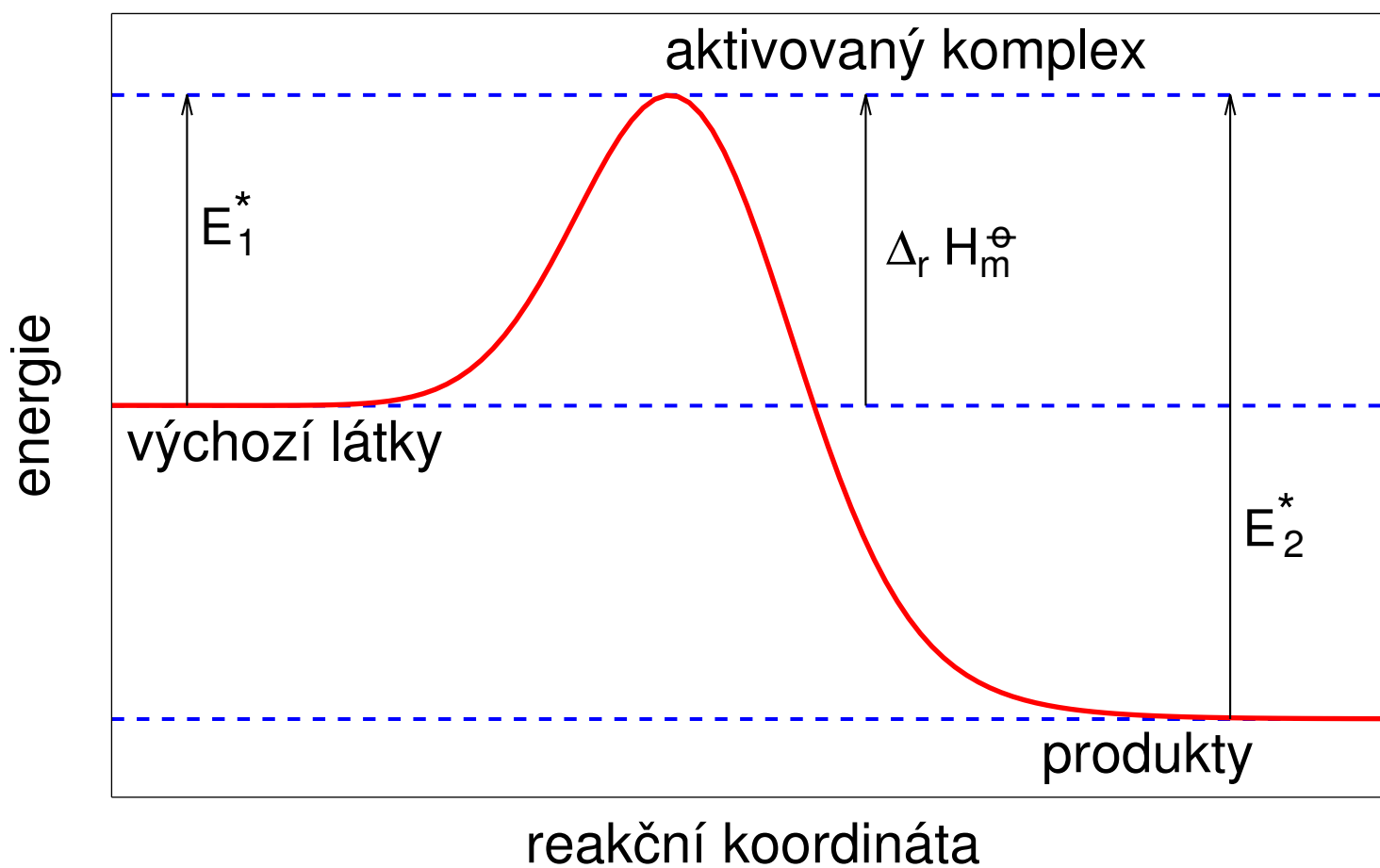
1. řád

2. řád

Závislost rychlosti reakce na teplotě (Arrhenius)

9
12

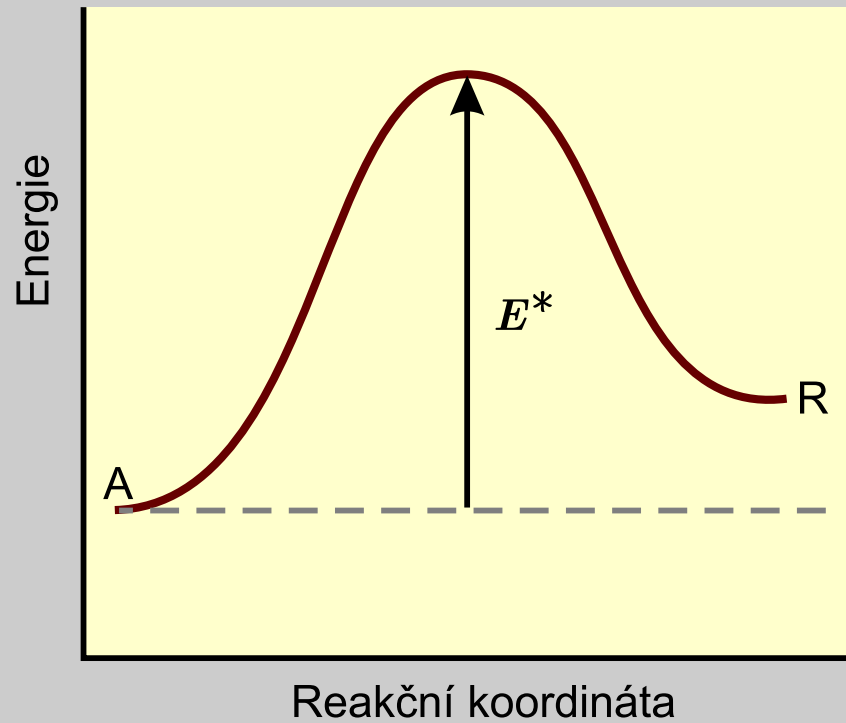
$$k = A \exp\left(-\frac{E^*}{RT}\right)$$



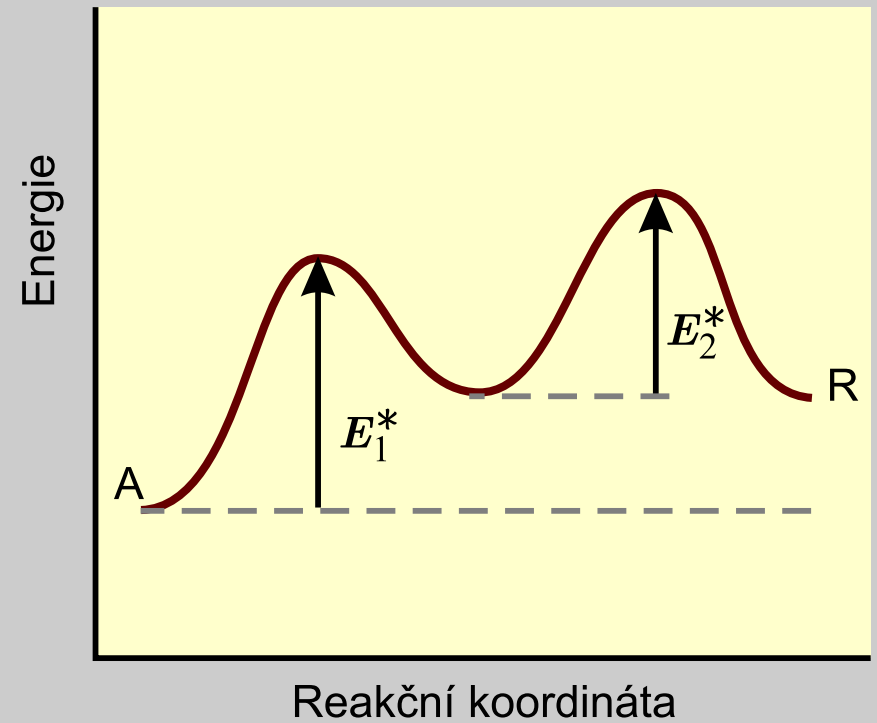
$$\Delta_r H_m^{\text{st}} = E_1^* - E_2^*$$

Pravidlo:
 $\approx 1.5-3 \times$
na 10°C

a) nekatalyzovaně



b) s katalyzátorem



- homogenní katalýza
- heterogenní katalýza
- enzymová katalýza