



evropský  
sociální  
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,  
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



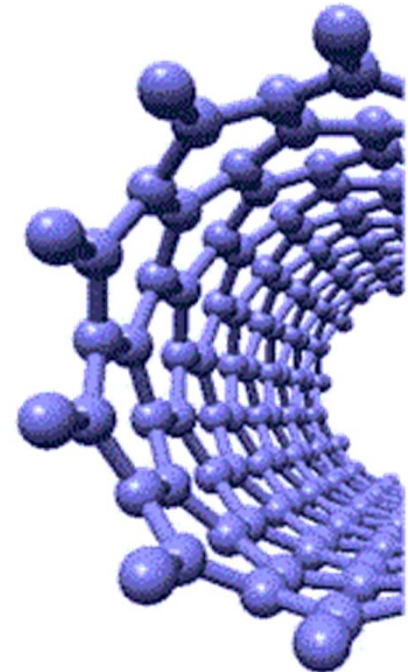
OP Vzdělávání  
pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

# Inovace a rozvoj studia nanomateriálů na TUL

[nano.tul.cz](http://nano.tul.cz)

Tyto materiály byly vytvořeny v rámci projektu  
ESF OP VK: **Inovace a rozvoj studia nanomateriálů**  
na **Technické univerzitě v Liberci**



TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI  
[www.tul.cz](http://www.tul.cz)



# Experimentální postupy

reakční kinetika

# Klasifikace chemických reakcí

chemické reakce lze rozlišovat podle různých hledisek

- podle počtu fází reagujících složek
  - homogenní
  - heterogenní
- podle typu reagujících částic
  - molekulové, radikálové, iontové,...
- podle počtu reagujících částic
  - monomolekulární
  - více molekulární,...

# Klasifikace chemických reakcí

- podle typu reagujících částic
  - molekulové, radikálové, iontové,...
- podle počtu reagujících částic
  - monomolekulární, bimolekulární.....
- podle posloupnosti reakcí
  - izolované - pouze jedna reakce
  - simultánní
    - zvrátané - dvě protisměrné reakce
    - bočné - více souběžných reakcí na různé produkty
    - následné - produkty jedné reakce jsou výchozími látkami pro další reakci

# Molekularita a mechanismus

- molekularita - nejmenší počet částic které musí současně interagovat aby reakce proběhla.
- mechanismus - posloupnost jednotlivých reakčních kroků (elementárních reakcí)
- aktivovaný komplex

# Reakční rychlost

- parametr kvantitativně popisující rychlost průběhu sledované reakce.
- časová změna koncentrace výchozích látek nebo produktů reakce dělená příslušným stechiometrickým koeficientem



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

# Reakční rychlost

- dále je definována rychlost reakce vůči dané složce:

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

- rychlost reakce je vždy kladná, tedy derivace koncentrace výchozích látek je záporná a derivace koncentrace produktů je kladná

# Řád reakce

- Guldbert-Waagův zákon - zákon o působení aktivní hmoty: „okamžitá rychlost reakce je úměrná součinu okamžitých koncentrací výchozích látek umocněných určitými faktory“.
- Tedy může napsat

$$v = k \cdot [A]^a \cdot [B]^b$$



- Exponenty v rovnici mohou, ale NEMUSÍ BÝT shodné se stechiometrickými koeficienty v rovnici. Nazývají se **dílčí řády reakce** (řády reakce vůči daným složkám).
- **Celkový řád reakce** = součet exponentů v rovnici pro rychlost reakce.
- Z řádu reakce ale NELZE jednoznačně usuzovat na její mechanismus.  
např. reakce druhého řádu nemusí být bimolekulární

# Reakce nultého řádu...

- Rychlost reakce je nezávislá na koncentraci reaguujících složek - resp. výchozí látky
- reakce typu:  $A \longrightarrow$  produkty
- z předchozí definice plyne:

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k \cdot [A]^0 = k_0$$

# Reakce nultého řádu

- je-li:

$c_0$  - počáteční koncentrace výchozí látky

$x$  - zreagované množství

- pak můžeme psát:

$$v = \frac{dx}{dt} = -\frac{dc}{dt} = k_0 c^0 = k_0$$

*tedy*

$$x = c_0 - c = k_0 t$$

# Reakce nultého řádu

- koncentrace reaktantu lineárně klesá po celou dobu průběhu reakce
- rychlost reakce není závislá na koncentraci reaktantu
- nejsou příliš běžné, nejčastěji v heterogenní katalýze, biochemii (enzymatické reakce za určitých podmínek),.....

# Reakce prvního řádu...

- opět se jedná o reakci probíhající dle rovnice:



- v tomto případě je rychlost reakce úměrná **první mocině** koncentrace výchozí látky

$$v = -\frac{dc}{dt} = k_1 c$$

*po úpravě :*

$$\ln \frac{c_0}{c} = k_1 t$$

*čili*

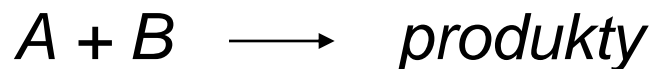
$$c = c_0 e^{-k_1 t}$$

# Reakce prvního řádu

- poločas reakce prvního řádu je nezávislý na výchozí koncentraci reaktantu
- graf závislosti logaritmu koncentrace reaktantu na čase je přímka se zápornou směrnicí
- typickým případem je radioaktivní rozpad

# Reakce druhého řádu

- reakce typu



$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k \cdot [A] \cdot [B] = k_2 (a - x)(b - x)$$

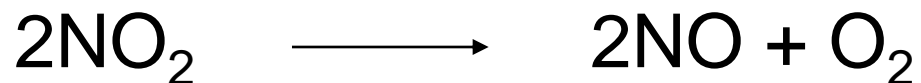
*Za předpokladu stejné koncentrace obou reagujících složek:*

$$v = \frac{dc}{dt} = k_2 c^2$$

# Reakce druhého řádu

- graf závislosti převrácené hodnoty koncentrace výchozích látek na čase je přímka s kladnou směrnici.

- příklad:





# Bočné a následné reakce

- Ve skutečnosti však bývá situace mnohem složitější. V systému často probíhá celá řada reakcí souběžně. V takovém případě rozeznáváme tzv. bočné a následné reakce.
- Bočné reakce jsou reakce mající stejné reaktanty ale jiné produkty.
- O následných reakcích hovoříme v případě, kdy produkty jedné reakce jsou výchozími látkami reakce druhé.

# Bočné a následné reakce

- V takovýchto systémech bývá potom určení řádu reakce často složité.
- Se systémem bočných a následných reakcí se nejčastěji setkáváme v organické chemii, např. při organických syntézách.

# Reakce vratné

- Velká část reakcí neběží pouze jedním směrem, ale současně s námi sledovanou reakcí běží i reakce zpětná (opačná).
- V tom případě hovoříme o reakci vratné.
- Tyto reakce se vyznačují tím, že po určité době se reakce zdánlivě zastaví a systém přejde do rovnováhy. Ve skutečnosti nedojde k zastavení reakce, ale dojde k vyrovnání rychlosti námi sledované reakce s reakcí zpětnou.

# Závislost rychlosti reakce na teplotě

- rychlost **většiny** reakcí roste s teplotou
- kvantitativně popsat Arrhenius:

$$k = Ae^{-\frac{E_A}{RT}}$$

$A$  - frekvenční faktor

$E_A$  - aktivační energie

- empirické pravidlo - při zvýšení teploty reakční směsi o 10°C vzroste rychlost reakce dva až čtyři krát.