

OBSAH

1	ZÁKLADNÍ POJMY, VELIČINY A KLASIFIKACE	7
1.1	<u>Chemické reakce a rovnice</u>	8
1.2	<u>Klasifikace chemických reakcí</u>	11
1.3	<u>Reakční rychlost a rychlostní rovnice</u>	19
2	ŘEŠENÍ KINETICKÝCH SCHÉMAT	23
2.1	<u>Konkurenční a protisměrné elementární reakce</u>	23
2.2	<u>Následné reakce – aproximace stacionárního stavu</u>	24
2.3	<u>Kdy lze použít aproximaci stacionárního stavu ?</u>	27
2.4	<u>Lineární řetězové reakce</u>	34
2.4.1	Lineární řetězové reakce probíhající bez terminace	34
2.4.2	Lineární řetězové reakce probíhající s terminací	36
2.5	<u>Kinetické charakteristiky řetězových reakcí</u>	39
2.5.1	Střední doba života aktivních center	39
2.5.2	Střední délka kinetického řetězce	41
2.6	<u>Rozvětvené řetězové reakce</u>	44
2.6.1	Reakce vodíku s kyslíkem v plynné fázi	44
2.6.2	Explosní limity	45
2.6.3	Obecné řešení kinetiky rozvětvených řetězových reakcí	48
3	EXPERIMENTÁLNÍ METODY	51
3.1	<u>Dokonale promíchávaný vsádkový reaktor</u>	51
3.2	<u>Trubkový reaktor s pístovým tokem</u>	59
3.3	<u>Dokonale promíchávaný průtokový reaktor</u>	64
3.4	<u>Relaxační metody</u>	66
3.5	<u>Další metody studia rychlých reakcí</u>	70
4	TEORIE ELEMENTÁRNÍCH REAKCÍ	73
4.1	<u>Kinetická teorie plynů</u>	73
4.1.1	Tlak a energie ideálního plynu	74
4.1.2	Ekvipartiční princip	76
4.1.3	Rovnovážné rozdělení rychlostí molekul plynu	78
4.1.4	Rovnovážné rozdělení energií molekul plynu	82

4.2	<u>Srážková teorie elementárních reakcí</u>	83
4.2.1	Frekvence srážek v jednotkovém objemu reakční směsi	84
4.2.2	Energeticky a stéricky účinné srážky	87
4.3	<u>Teorie aktivovaného komplexu (tranzitního stavu)</u>	90
4.3.1	Plocha potenciální energie, reakční koordináta	90
4.3.2	Odvození vztahu pro rychlostní konstantu	92
4.3.3	Partiční funkce a rovnovážná konstanta	97
4.3.4	Výpočty rychlostních konstant a stérických faktorů	100
4.4	<u>Stochastické odvození rychlostní rovnice</u>	105
5	ELEMENTÁRNÍ REAKCE V ROZTOCÍCH	107
5.1	<u>Reakce řízené (kontrolované) difusí</u>	109
5.1.1	Difuze, brownův pohyb, mikrobrownův pohyb	110
5.1.2	Zákony difuze	112
5.1.3	Výpočet rychlostní konstanty k_d	113
5.1.4	Difusí kontrolované reakce iontů	116
5.2	<u>Reakce v roztocích řízené chemickým dějem</u>	119
5.2.1	Vliv tlaku na elementární reakce v roztocích	119
5.2.2	Vliv elektrostatických interakcí reaktantů	121
5.2.3	Specifické vlivy reakčního prostředí.	122
6	KATALÝZA A INHIBICE CHEMICKÝCH REAKCÍ	127
6.1	<u>Principy funkce a klasifikace katalyzátorů a inhibitorů</u>	127
6.1.1	Principy katalýzy	127
6.1.2	Katalýza, katalyzátory - klasifikace	128
6.1.3	Principy inhibice	135
6.1.4	Inhibice, inhibitory - klasifikace	136
6.2	<u>Acidobazická katalýza.</u>	139
6.2.1	Kinetika kyselých katalyzovaných reakcí	142
6.2.2	Kinetika bazických katalyzovaných reakcí	144
6.3	<u>Enzymová katalýza</u>	145
6.3.1	Základní kinetika enzymových reakcí	146
6.3.2	Kompetitivní inhibice enzymových reakcí	149
6.3.3	Nekompetitivní inhibice enzymových reakcí	152
6.3.4	Antikompetitivní inhibice enzymových reakcí	154
6.4	<u>Heterogenní katalýza</u>	155
6.4.1	Adsorpční rovnováha	156
6.4.2	Langmuirova adsorpční izoterma.	157
6.4.3	Izotermy pro disociativní adsorpci a pro koadsorpci	160
6.4.4	Izoterma BET - vícevrstvá adsorpce	162
6.4.5	Rychlostní rovnice heterogenně katalyzovaných reakcí	167

7	STRUKTURA A REAKTIVITA, CHEMICKÉ OSCILACE	171
7.1	<u>Lineární korelace Gibbsových energií ΔG^\ddagger a ΔG_r</u>	171
7.1.1	Hammettova rovnice	171
7.1.2	Taftova rovnice	174
7.1.3	Lineární korelace Gibbsových energií	176
7.2	<u>Kinetické izotopové efekty</u>	177
7.3	<u>Chemické oscilace</u>	180
7.3.1	Mechanismus chemických oscilací	180
7.3.2	Formální kinetický popis oscilačních reakcí	184