

OBSAH

4	REAKČNÍ (CHEMICKÁ) KINETIKA.....	11
4.1	Základní pojmy.....	11
4.2	Formální reakční kinetika (FRK).....	11
4.2.1	Izolované reakce.....	11
4.2.2	Simultánní reakce.....	12
4.2.3	Reakční rychlost.....	12
4.2.4	Diferenciální kinetické (rychlostní) rovnice.....	13
4.2.4.1	Izolované reakce.....	13
4.2.4.2	Simultánní reakce.....	14
4.2.5	Řád reakce.....	15
4.3	Chemické reaktory.....	16
4.3.1	Vsádkový (batch), ideálně míchaný reaktor.....	16
4.3.2	Průtočný ideálně míchaný reaktor.....	16
4.3.3	Reaktor s pístovým tokem.....	16
4.4	Řešení rychlostních rovnic izolovaných reakcí.....	17
4.4.1	Monomolekulární reakce, reakce 1. řádu.....	17
4.4.2	Bimolekulární reakce, reakce 2. řádu.....	19
4.4.2.1	Velký přebytek jedné z výchozích složek.....	20
4.4.2.2	Stejně počáteční koncentrace A a B.....	21
4.4.2.3	Reakce dvou stejných molekul.....	21
4.4.3	Reakce trimolekulární, reakce 3. řádu.....	22
4.5	Řešení rychlostních rovnic nejjednodušších simultánních reakcí.....	23
4.5.1	Bočné reakce.....	23
4.5.2	Protisměrné (vratné, zvrátané, reverzibilní) reakce.....	25
4.5.3	Následné (konsekutivní) reakce.....	27
4.6	Složitější simultánní reakce.....	30
4.6.1	Řetězové reakce.....	30
4.6.2	Polymerační reakce.....	32
4.6.3	Polykondenzace a polyadice.....	34
4.6.4	Fotochemické reakce.....	35
4.6.5	Spřažené reakce.....	36
4.7	Postup při studiu kinetiky chemické reakce.....	37
4.7.1	Stanovení stechiometrie reakce.....	37
4.7.2	Stanovení rychlostní rovnice.....	38
4.7.2.1	Určování řádu reakce.....	38

4.7.2.1.1	Určení celkového řádu reakce, n	38
4.7.2.1.2	Určení řádu na danou složku.....	39
4.7.2.1.3	Stanovení n , resp. n_i z diferenciální rovnice	39
4.7.2.1.4	Stanovení n , resp. n_i z integrované rovnice.....	39
4.7.2.2	Hledání obecného reakčního schématu (kinetického modelu).....	39
4.8	Teorie rychlostní konstanty	40
4.8.1	Arrheniova teorie.....	40
4.8.2	Srážková teorie.....	41
4.8.3	Teorie aktivovaného komplexu.....	42
4.8.4	Výpočet teoretické hodnoty rychlostní konstanty k	44
4.9	Hlavní vlivy na rychlostní konstantu	46
4.9.1	Vliv skupenství.....	46
4.9.2	Vliv iontové síly	46
4.9.3	Vliv permitivity rozpouštědla (ϵ , viz kap. 5.2.1)	47
4.9.4	Vliv struktury reakčních složek.....	48
4.10	Katalyzátory, princip katalýzy	48
4.10.1	Homogenní katalýza	49
4.10.2	Heterogenní katalýza	51
4.10.3	Enzymatická katalýza.....	52
4.10.3.1	Reakční schéma Michaelis–Mentenové	52
4.10.3.2	Stanovení hodnot K_M a V_m a jejich význam	53
4.11	Neizochorické reakce.....	55
4.12	Neizotermální reakce.....	57
4.12.1	Adiabatická reakce ve vsádkovém ideálně míchaném reaktoru	57
4.13	Základy teorie reaktorů	59
4.13.1	Vsádkový (batch) ideálně míchaný reaktor.....	59
4.13.2	Průtočný ideálně míchaný reaktor	60
4.13.3	Reaktor s pístovým tokem.....	61
4.14	Příloha 4	62
4.14.1	Dvě paralelní konkurenční reakce	62
4.14.2	Kinetika jednoduché enzymatické reakce	64
4.14.3	Kinetika velmi složité reakce	65
4.15	Farmakokinetika, Farmakodynamika	69
4.15.1	Farmakokinetika.....	69
4.15.2	Farmakodynamika.....	72
5	INTERAKCE SOUBORU ČÁSTIC A ELEKTROMAGNETICKÉHO POLE	75
5.1	Základní pojmy.....	75
5.2	Jevy elektrické	75

5.2.1	Relativní permitivita	75
5.2.2	Index lomu	76
5.2.3	Elektrický dipólmoment	77
5.2.4	Molární polarizace P_M a molární refrakce R_M	78
5.2.5	Význam molární refrakce R_M	81
5.2.5.1	Koeficient polarizovatelnosti, α	81
5.2.5.2	Molární refrakce a struktura molekul	82
5.2.5.3	Molární refrakce směsi látek	84
5.2.6	Význam molární polarizace P_M	85
5.2.6.1	Stanovení μ_0 pomocí Clausius–Mossotti–Debyeovy rovnice.....	85
5.2.7	Výpočet μ_0 pomocí známé struktury molekuly a dipólmomentů vazeb.....	87
5.2.8	Rozptyl elektromagnetického pole v souboru částic.....	91
5.2.8.1	Difrakční jevy	91
5.2.8.2	Interakce viditelného záření s heterogenními disperzemi	92
5.2.9	Elektronová mikroskopie	93
5.2.10	Soubor chirálních částic a polarizované EMP: polarimetrie, ORD, CD	93
5.3	Jevy magnetické.....	97
5.4	Jevy spektrální.....	99
5.4.1	Přehled nejdůležitějších absorpčních spekter	100
5.4.2	Vzhled absorpčního spektra.....	100
5.4.3	Princip spektro(foto)metru	101
5.4.4	Lambert–Beerův zákon a jeho význam	102
5.4.4.1	Kvalitativní využití	102
5.4.4.2	Kvantitativní využití	102
5.5	Primární absorpční spektra.....	104
5.5.1	Rotační (mikrovlnná) spektra.....	104
5.5.1.1	Význam rotačních absorpčních spekter	107
5.5.2	Vibrační a rotačně-vibrační spektra	107
5.5.2.1	Význam rotačně-vibračních absorpčních (IČ, IR) spekter	110
5.5.3	Elektronická a elektronicko-vibračně-rotační spektra	111
5.5.3.1	Čistě elektronická absorpční spektra	111
5.5.3.2	Elektronicko-vibračně-rotační absorpční spektra.....	113
5.5.3.3	Význam UV-VIS spektrometrie	115
5.6	Sekundární absorpční spektra.....	116
5.6.1	Luminiscenční spektra.....	116
5.6.2	Spektra Ramanova (kombinačního rozptylu)	116
5.7	Speciální absorpční spektra	118
5.7.1	Nukleární (jaderná) magnetická rezonance (NMR).....	118

5.7.1.1	Princip NMR spektrometru	120
5.7.1.2	Význam NMR spekter	120
5.7.1.2.1	Chemický posun (δ)	120
5.7.1.2.2	Integrální intenzita	121
5.7.1.2.3	Spin-spinové interakce	121
5.7.2	Elektronspinová (elektronová paramagnetická) rezonance (ESR, EPR).....	123
5.8	Hmotová spektrometrie	128
6	KOLOIDNÍ CHEMIE	131
6.1	Základní pojmy.....	131
6.2	Disperzní soustavy	131
6.2.1	Rozdělení disperzních soustav	131
6.2.1.1	Dle velikosti dispergovaných částic	131
6.2.1.2	Dle tvaru dispergovaných částic.....	131
6.2.1.3	Dle skupenství disperzního prostředí a podílu	132
6.2.2	Lyofilní a lyofobní disperzní soustavy	132
6.2.2.1	Lyofilní koloidy.....	132
6.2.2.2	Lyofobní koloidy	133
6.2.2.3	Micely.....	133
6.3	Důležité statické a dynamické vlastnosti disperzních soustav.....	134
6.3.1	Brownův pohyb	134
6.3.2	Difuzivita.....	134
6.3.3	Sedimentace (usazování)	135
6.3.3.1	Sedimentace v gravitačním poli Země	135
6.3.3.2	Sedimentace v ultracentrifuze	138
6.3.3.2.1	Metoda sedimentační rychlosti	139
6.3.3.2.2	Metoda sedimentační rovnováhy	140
6.3.4	Viskozita	141
6.3.5	Osmotický tlak	143
6.4	Základy membránologie	144
6.4.1	Donnanova rovnováha.....	145
6.4.2	Dialýza, elektrodialýza	148
6.4.3	Ultrafiltrace, elektroultrafiltrace	149
6.5	Elektrokinetické jevy.....	149
6.5.1	Elektrokinetický potenciál	149
6.5.1.1	Sternův model elektrické dvojvrstvy.....	150
6.5.1.2	Elektroforéza (elektromigrace).....	151
6.5.1.2.1	Volná (klasická, Tiseliova) elektroforéza	152
6.5.1.2.2	Zónová elektroforéza	152
6.5.1.2.3	Izoelektrická fokusace.....	152
6.5.1.2.4	Izotachoforéza	153
6.5.1.2.5	Kapilární elektroforéza.....	153

6.5.1.3	Sedimentační potenciál	153
6.5.1.4	Elektroosmóza	153
6.5.1.5	Potenciál proudění	154
6.6	Optické vlastnosti disperzních soustav	154
6.6.1	Rozptyl světla.....	154
6.6.2	Některé další optické vlastnosti	158
6.6.3	Hmotnost částic v polydisperzním systému	159
6.7	Fázová rozhraní	160
6.7.1	Kapka kapaliny na rovné, pevné podložce	160
6.7.2	Kapka jedné kapaliny na povrchu druhé kapaliny ve vzduchu	162
6.7.3	Tuhá částice na povrchu kapaliny ve vzduchu, flotace	162
6.7.4	Vlastnosti zakřiveného povrchu	163
6.8	Adsorpce	165
6.8.1	Adsorpce na pohyblivých rozhraních	165
6.8.2	Rozpusťné povrchové filmy	170
6.8.3	Nerozpusťné povrchové filmy	171
6.9	Adsorpce plynů a kapalin na tuhých látkách.....	174
6.9.1	Obecné znaky adsorpce plynů na tuhou látku	174
6.9.1.1	Energetika adsorpce.....	174
6.9.1.2	Mechanismus adsorpce.....	174
6.9.1.2.1	Chemisorpce.....	175
6.9.1.2.2	Fyzikální adsorpce (fyzisorpce)	175
6.9.1.2.3	Kombinace chemické a fyzikální adsorpce	176
6.9.2	Langmuirova adsorpční izoterma	176
6.9.2.1	Systém jeden adsorbát – jeden typ stejných aktivních center.....	176
6.9.2.2	Systém směs adsorbátů – jeden typ stejných aktivních center	178
6.9.3	Freundlichova adsorpční izoterma.....	179
6.9.4	Těmkinova adsorpční izoterma	179
6.9.5	Brunauer–Emmet–Tellerova (BET) adsorpční izoterma.....	180
6.9.6	Adsorpce z roztoku na tuhou látku	183
6.9.6.1	Molekulová adsorpce.....	183
6.9.6.2	Iontová adsorpce	183
7	VÝZNAMNÉ OSOBNOSTI UVEDENÉ V TEXTU 1. A 2. DÍLU	185
	LITERATURA	215