

O b s a h

| | | |
|----------|---|-------|
| 1. | ÚVOD (Šolc) | str.3 |
| 1.1. | Chemickotechnologický proces | 3 |
| 1.2. | Chemické reakce, jejich klasifikace | 4 |
| 1.3. | Složitý děje v chemickotechnologické praxi. Dílčí děj limitující celkovou reakční rychlost | 8 |
| 2. | FYZIKÁLNÍ DĚJE NEJČASTĚJI LIMITUJÍCÍ KINETIKU TECHNOLOGICKÝCH POCHODŮ (Šolc) | 11 |
| 2.1. | <u>Difúzní pochody</u> | 11 |
| 2.1.1. | Fickův zákon difuze a jeho aplikace | 11 |
| 2.1.2. | Aplikace Fickova zákona v časově ustálených podmínkách, koncentrační profil při ustálené difuzi | 13 |
| 2.1.2.1. | Noyes-Nernstova rovnice | 16 |
| 2.1.2.2. | Hixon-Crowelova rovnice | 18 |
| 2.1.2.3. | Charakter řídicího děje | 19 |
| 2.1.3. | Difuze v neustálených podmínkách. Řešení 2.Fickova zákona | 22 |
| 2.1.3.1. | Řešení Fickovy rovnice substitucí $y = x/\sqrt{t}$ | 24 |
| 2.1.3.2. | Řešení difuzní rovnice ve formě nekonečné řady | 34 |
| 2.1.3.3. | Řešení difuzní rovnice diferenční metodou | 38 |
| 2.1.4. | Difuzní pochody v pevných látkách | 44 |
| 2.1.5. | Objemový tok při difuzi, zdánlivé anomálie | 48 |
| 2.2. | <u>Vznik nové fáze</u> | 50 |
| 2.2.1. | Nukleace | 50 |
| 2.2.2. | Růst nové fáze | 54 |
| 2.3. | <u>Adsorpce</u> | 59 |
| 2.3.1. | Fyzikální a chemická adsorpce, základní adsorpční izotermy | 59 |
| 2.3.2. | Vícevrstvá fyzikální adsorpce, rovnice BET | 61 |
| 2.3.3. | Vliv teploty na adsorpci | 66 |
| 3. | KINETIKA CHEMICKÝCH REAKCÍ (Velich) | 67 |
| 3.1. | <u>Homogenní reakce v uzavřené soustavě</u> | 67 |
| 3.1.1. | Reakční rychlost izolované reakce | 67 |
| 3.1.2. | Reakční rychlost v soustavě simultánních reakcí | 69 |
| 3.1.3. | Integrované formy kinetických rovnic izolovaných reakcí | 72 |
| 3.1.3.1. | Reakce I. řádu | 72 |
| 3.1.3.2. | Reakce II. řádu | 74 |
| 3.1.3.3. | Reakce III. řádu | 76 |
| 3.1.3.4. | Reakce multého řádu | 77 |
| 3.1.3.5. | Reakce zlomkových řádů | 78 |
| 3.1.4. | Integrované formy kinetických rovnic jednoduchých simultánních reakcí | 78 |

| | | |
|----------|---|-----|
| 3.1.4.1. | Reakce bočné (paralelní) (Velich, Šolc) | 79 |
| 3.1.4.2. | Reakce zvrtné (protisměrné) | 84 |
| 3.1.4.3. | Reakce následné (konsekutivní) | 86 |
| 3.1.4.4. | Reakce řetězové | 91 |
| 3.1.4.5. | Teorie ustáleného stavu (Velich, Šolc) | 94 |
| 3.2. | <u>Teorie rychlostní konstanty</u> | 98 |
| 3.2.1. | Teplotní závislost rychlosti chemické reakce (Velich, Šolc) | 98 |
| 3.2.1.1. | Srážková teorie rychlostní konstanty | 100 |
| 3.2.1.2. | Teorie aktivovaného komplexu | 102 |
| 3.3. | <u>Experimentální metody chemické kinetiky</u> | 103 |
| 3.3.1. | Měření reakční rychlosti | 104 |
| 3.3.2. | Měření celkového tlaku plyných reakčních soustav | 104 |
| 3.3.3. | Měření objemových změn kapalných soustav - dilatometrie | 104 |
| 3.3.4. | Měření optických vlastností | 105 |
| 3.3.5. | Elektrochemické metody | 105 |
| 3.3.6. | Měření reakčních tepel | 105 |
| 3.3.7. | Stanovení stechiometrie reakce a reakčního mechanismu | 109 |
| 3.3.8. | Určení reakčního řádu | 110 |
| 3.3.9. | Určení kinetických parametrů reakce neizotermním postupem (Šolc) | 113 |
| 3.4. | <u>Závislost reakční rychlosti na stupni konverze (Šolc)</u> | 116 |
| 3.5. | <u>Oxidace NO při výrobě HNO₃, vysvětlení teplotní závislosti rychlosti této reakce (Šolc)</u> | 123 |
| 3.6. | <u>Základy výpočtů reaktorů, kinetika reakcí v průtokových systémech (Šolc)</u> | 125 |
| 3.6.1. | Vsádkový, dokonale promíchávaný reaktor | 126 |
| 3.6.2. | Průtokový reaktor s pístovým tokem za izotermních podmínek | 130 |
| 3.6.3. | Průtokový, dokonale míchaný reaktor | 131 |
| 3.6.4. | Neizotermní režim reaktorů | 137 |
| 4. | <u>KINETIKA HETEROGENNÍCH KATALYZOVANÝCH REAKCÍ (Šolc)</u> | 141 |
| 4.1. | <u>Heterogenní katalýza, základní představa</u> | 142 |
| 4.1.1. | Složení katalyzátoru a požadavky na jeho vlastnosti | 143 |
| 4.1.2. | Metody přípravy katalyzátorů | 146 |
| 4.2. | <u>Kinetika heterogenní katalyzované reakce</u> | 147 |
| 4.2.1. | Modelové rovnice dílčích dějů pro systém v kinetické oblasti | 149 |
| 4.2.2. | Rychlostní rovnice katalyzované reakce jako celku | 152 |
| 4.2.3. | Závislost reakční rychlosti na stupni konverze | 158 |
| 4.2.4. | Vliv teploty na heterogenní katalyzovanou reakci | 160 |
| 4.3. | <u>Mechanismus katalyzovaného účinku</u> | 162 |
| 4.3.1. | Katalytický účinek kovů | 164 |
| 4.3.2. | Katalytický účinek polovodičů | 165 |
| 4.4. | <u>Přenos hmoty difuzí</u> | 167 |
| 4.4.1. | Aktivační energie difuzně řízené katalyzované reakce | 175 |

| | | |
|--------|---|-----|
| 4.4.2. | Experimentální určení faktoru účinnosti E | 176 |
| 4.5. | <u>Příklady uspořádání reaktorů pro typické heterogenně katalyzované reakce</u> | 177 |
| 5. | HETEROGENNÍ NEKATALYZOVANÉ REAKCE (Šolc) | 179 |
| 5.1. | Model zmenšujícího se nezreagovaného jádra | 180 |
| 5.1.1. | Popis dílčích kroků | 181 |
| 5.1.2. | Kinetika reakcí u částic pevné fáze neměnné velikosti | 182 |
| 5.1.3. | Kinetika reakcí u částic se zmenšující se velikostí | 187 |
| 5.1.4. | Model kontinuální reakce | 188 |
| 6. | POUŽITÁ A DOPORUČENÁ LITERATURA | 189 |
| 7. | PŘÍLOHY | 191 |
| | Příloha I. Řešení 2.Fickova zákona pro typické úlohy jednodimenzionální difuze (Šolc) | 192 |
| | Příloha II. Studium kinetiky chemických reakcí termometric- kou metodou s použitím izoperibolického zdvojeného reakční- ho kalorimetru (Velich) | 194 |