

# A sebességi egyenlet

---

Guldberg és Waage (1864)



$$v = k[A]^x[B]^y$$

A  $k$  állandót az adott reakció **sebességi állandójának** nevezzük.

A hatványkitevőket ( $x$ ,  $y$ ) az adott reaktánsra vonatkoztatott **reakciórendnek** nevezzük. Általánosságban  $x$  és  $y$  nem egyezik meg a sztöchiometria számokkal ( $a$  és  $b$ ).

A sebességi egyenletben szereplő hatványkitevők összegét a **reakció bruttó rendjének** nevezzük.

# Sebességi egyenlet

---

Nulladrendű reakció:

$$v = \left( \frac{d[A]}{dt} \right) = k[A]^0 = k$$

$$[A] = [A]_0 - kt$$

$$t_{1/2} = \frac{[A]_0}{2k}$$

# Sebességi egyenlet

---

Elsőrendű reakció:

$$v = \left( \frac{d[A]}{dt} \right) = k[A]$$

$$\ln \frac{[A]_0}{[A]} = kt$$

$$[A] = [A]_0 e^{-kt}$$

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{0,693}{k}$$

# Sebességi egyenlet

---

Másodrendű reakció:

$$v = \left( \frac{d[A]}{dt} \right) = k[A]^2$$

$$\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0} = kt$$

$$t_{1/2} = \frac{1}{k[A]_0}$$

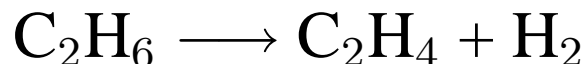
# Molekularitás

---

Elemi reakciónak nevezzük azokat a reakciókat amelyek egy reakciólépésben mennek végbe. A molekularitás azt mutatja meg, hogy egy elemi reakcióban hány molekula vesz részt.

- Monomolekulás reakciók: a reakcióban egy részecske alakul át.

Például az etán bomlása etilénre és hidrogénre:

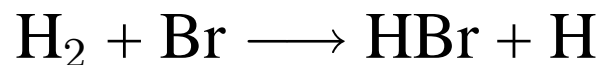


# Molekularitás

---

- Bimolekulás reakciók: a termékek két részecske reakciója során képződnek.

Példák:

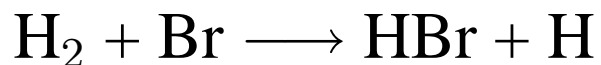


# Molekularitás

---

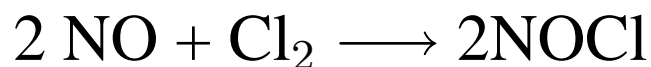
- Bimolekulás reakciók: a termékek két részecske reakciója során képződnek.

Példák:



- Trimolekulás reakciók: ezek nagyon ritkák, mivel három részecske egyidejű ütközésének a valószínűsége igen kicsi.

Példa:

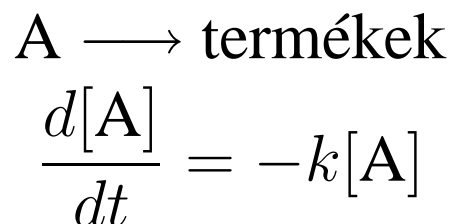


# Elemi reakciók

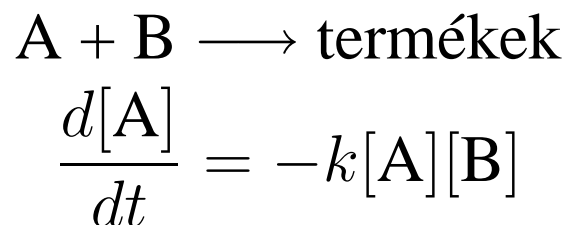
---

Az elemi reakciók sebességi egyenletét a reakcióegyenletből közvetlenül felírhatjuk, de csak ez elemi reakciókét.

Egy unimolekulás elemi reakció egyenlete elsőrendű a reaktánsra:



Hasonlóan, egy bimolekulás elemi reakció másodrendű:





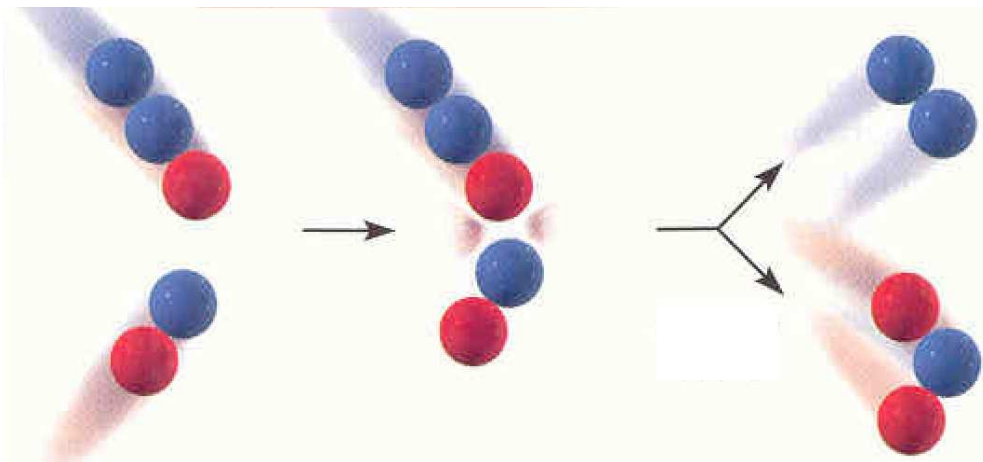
# Ütközési elmélet

---

A kémiai reakció feltétele a molekulák ütközése során jön létre. Csak azok az ütközések hatásosak amelyekben a résztvevő molekulák megfelelő mozgási energiával rendelkeznek és az ütközéskor a molekulák elhelyezkedése is megfelelő.

$$k = Z \exp(-E^0 / RT)$$

ahol  $Z$  az ütközési frekvencia tényező az  $(-E^0 / RT)$  tag megadja azon ütközések hányadát amelyek elegendő energiával rendelkeznek.

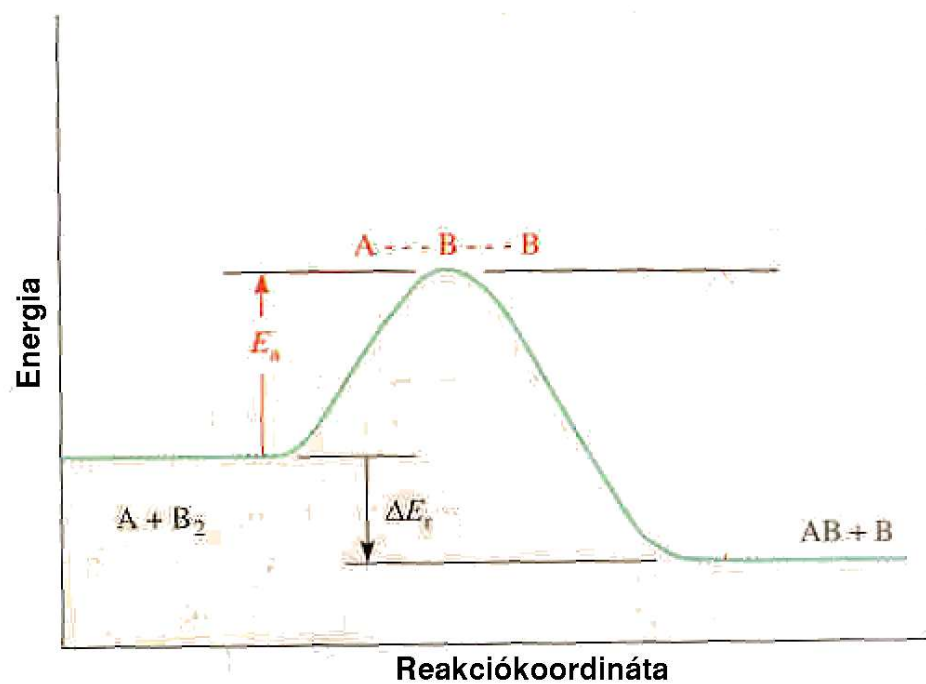
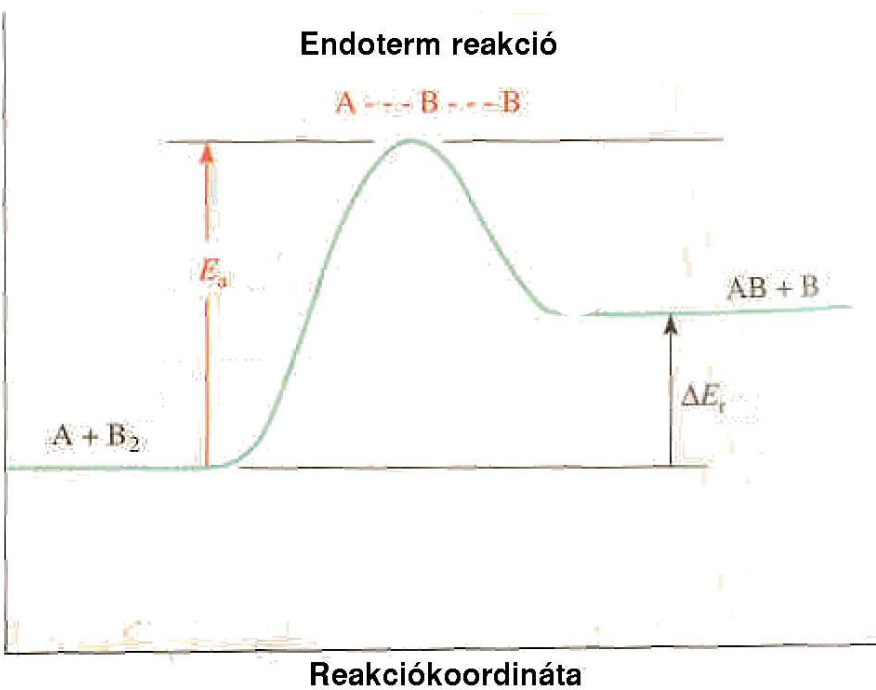


# Átmenetiállapot-elmélet

A reaktánsok egy nagy energiájú átmeneti állapoton keresztül alakulnak át a termékekké. Az aktiválási energia  $E_a$  az átmeneti állapot eléréséhez szükséges energia.

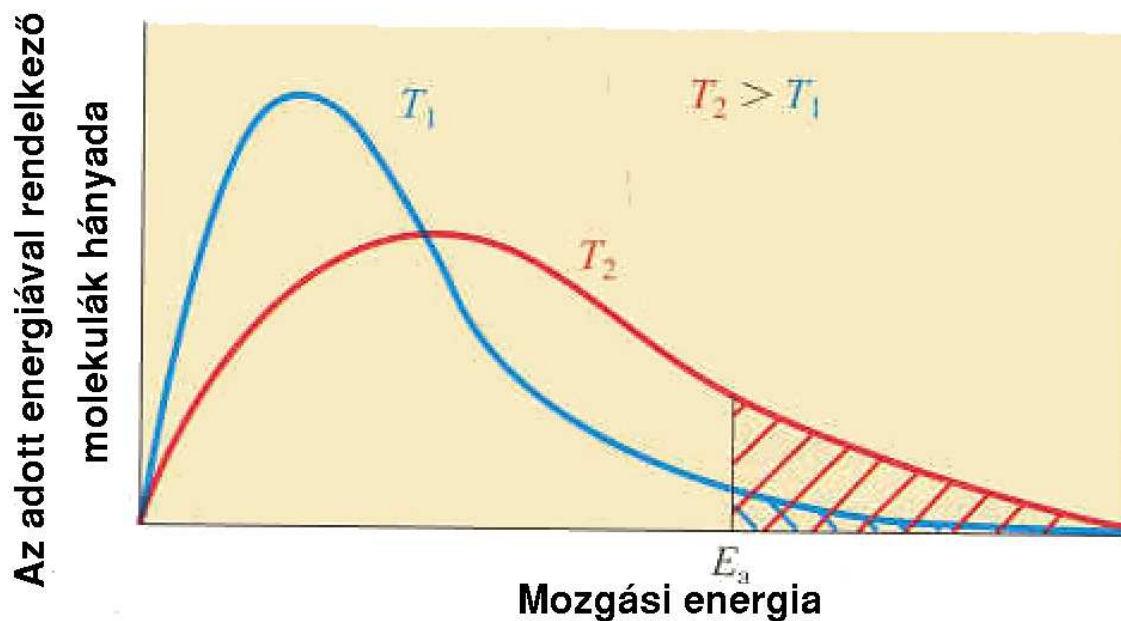


# Átmenetiállapot-elmélet



# A reakciók sebességének hőmérsékletfüggése

A tapasztalat szerint a reakciók sebessége kb. a kétszeresére nő  $10^{\circ}\text{C}$  hőmérséklet növelés hatására. Az átlagos kinetikus energia arányos a az abszolút hőmérséklettel, így magasabb hőmérsékleten több molekula rendelkezik a megfelelő kinetikus energiával ami a reakció sebességének növekedését eredményezi.



# A reakciók sebességének hőmérsékletfüggése

---

Arrhenius egyenlet:

$$k = Ae^{-E_a/RT}$$

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$

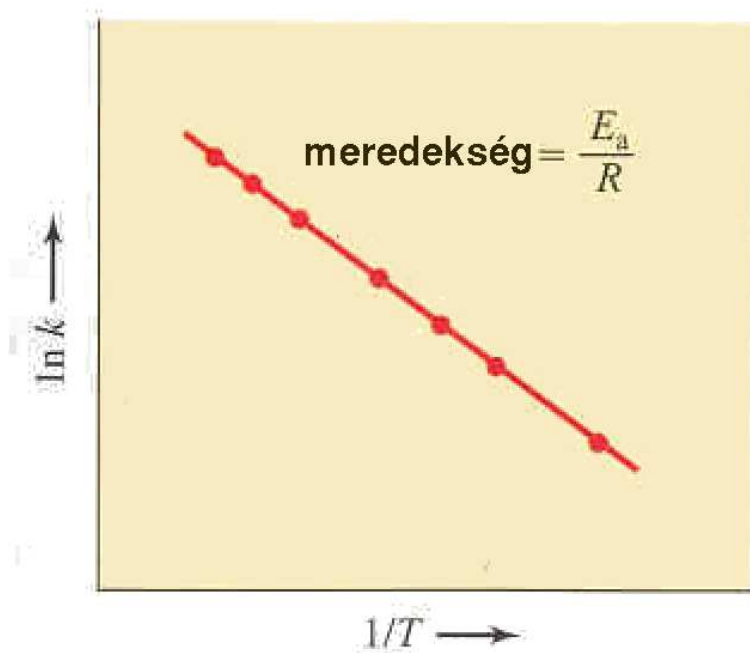
Ha feltételezzük hogy az aktiválási energia és a preexponenciális faktor  $A$  nem függ a hőmérséklettől (ami egy nem túl széles hőmérséklet tartományban megtehető):

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

# A reakciók sebességének hőmérsékletfüggése

Arrhenius egyenlet:

$$\ln k = - \left( \frac{E_a}{R} \right) \frac{1}{T} + \ln A$$



# A reakciók sebességének hőmérsékletfüggése

---

Feladat:

A következő elsőrendű reakció sebességi állandója  $9,16 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$   $0,0^\circ\text{C}$ -on. Az aktiválási energiája  $88,0 \text{ kJ/mol}$ . Mennyi a sebességi állandó értéke  $2,0^\circ\text{C}$ -on.



# A reakciók sebességének hőmérsékletfüggése

---

Feladat:

A következő elsőrendű reakció sebességi állandója  $9,16 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$   $0,0^\circ\text{C}$ -on. Az aktiválási energiája  $88,0 \text{ kJ/mol}$ . Mennyi a sebességi állandó értéke  $2,0^\circ\text{C}$ -on.



$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$



# A reakciók sebességének hőmérsékletfüggése

---

Feladat:

A következő elsőrendű reakció sebességi állandója  $9,16 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$   $0,0^\circ\text{C}$ -on. Az aktiválási energiája  $88,0 \text{ kJ/mol}$ . Mennyi a sebességi állandó értéke  $2,0^\circ\text{C}$ -on.



$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

$$\ln \frac{k_2}{9,16 \times 10^{-3}} = \frac{88,0}{8,314} \left( \frac{1}{273} - \frac{1}{275} \right) = 0,282$$

# A reakciók sebességének hőmérsékletfüggése

---

Feladat:

A következő elsőrendű reakció sebességi állandója  $9,16 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$   $0,0^\circ\text{C}$ -on. Az aktiválási energiája  $88,0 \text{ kJ/mol}$ . Mennyi a sebességi állandó értéke  $2,0^\circ\text{C}$ -on.



$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

$$\ln \frac{k_2}{9,16 \times 10^{-3}} = \frac{88,0}{8,314} \left( \frac{1}{273} - \frac{1}{275} \right) = 0,282$$

$$\frac{k_2}{9,16 \times 10^{-3}} = 1,32$$

# A reakciók sebességének hőmérsékletfüggése

---

Feladat:

A következő elsőrendű reakció sebességi állandója  $9,16 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$   $0,0^\circ\text{C}$ -on. Az aktiválási energiája  $88,0 \text{ kJ/mol}$ . Mennyi a sebességi állandó értéke  $2,0^\circ\text{C}$ -on.



$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

$$\ln \frac{k_2}{9,16 \times 10^{-3}} = \frac{88,0}{8,314} \left( \frac{1}{273} - \frac{1}{275} \right) = 0,282$$

$$\frac{k_2}{9,16 \times 10^{-3}} = 1,32$$

$$k_2 = 1,32(9,16 \times 10^{-3}) = 1,21 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$$

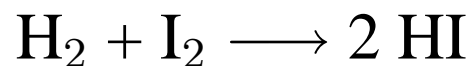
# Reakciómechanizmusok

---

Egy összetett reakció elemi lépések sorozatából építhető fel, ezt nevezzük a reakció mechanizmusának.

1. példa:

A bruttó reakció:



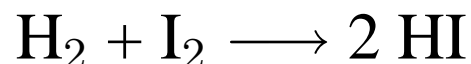
# Reakciómechanizmusok

---

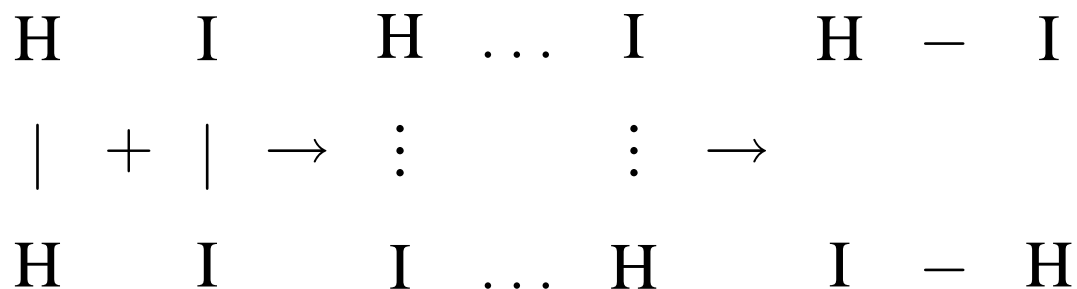
Egy összetett reakció elemi lépések sorozatából építhető fel, ezt nevezzük a reakció mechanizmusának.

1. példa:

A bruttó reakció:



Mechanizmus:

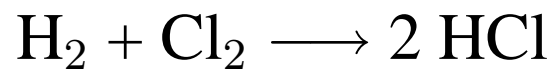


# Reakciómechanizmusok

---

2. példa:

A bruttó reakció:

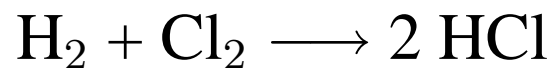


# Reakciómechanizmusok

---

2. példa:

A bruttó reakció:



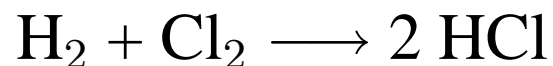
Mechanizmus:

# Reakciómechanizmusok

---

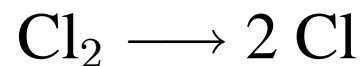
2. példa:

A bruttó reakció:



Mechanizmus:

Láncindító lépés (UV fény):



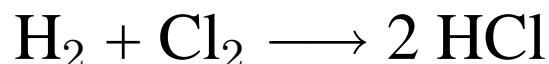


# Reakciómechanizmusok

---

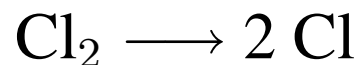
2. példa:

A bruttó reakció:

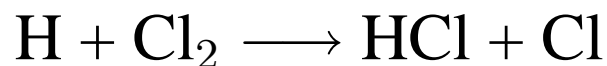
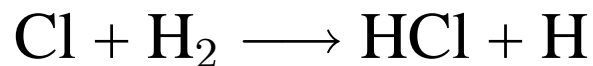


Mechanizmus:

Láncindító lépés (UV fény):



Láncvivő lépések:

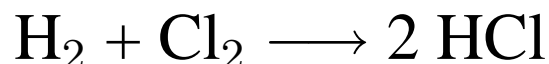


# Reakciómechanizmusok

---

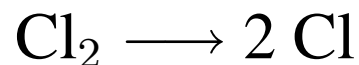
2. példa:

A bruttó reakció:

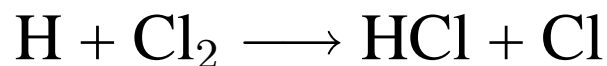
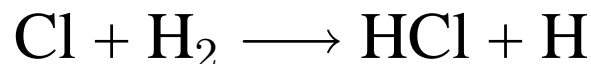


Mechanizmus:

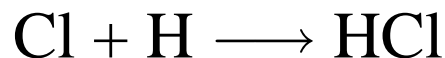
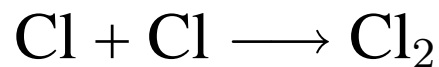
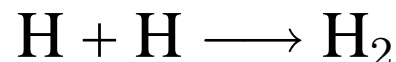
Láncindító lépés (UV fény):



Láncvivő lépések:

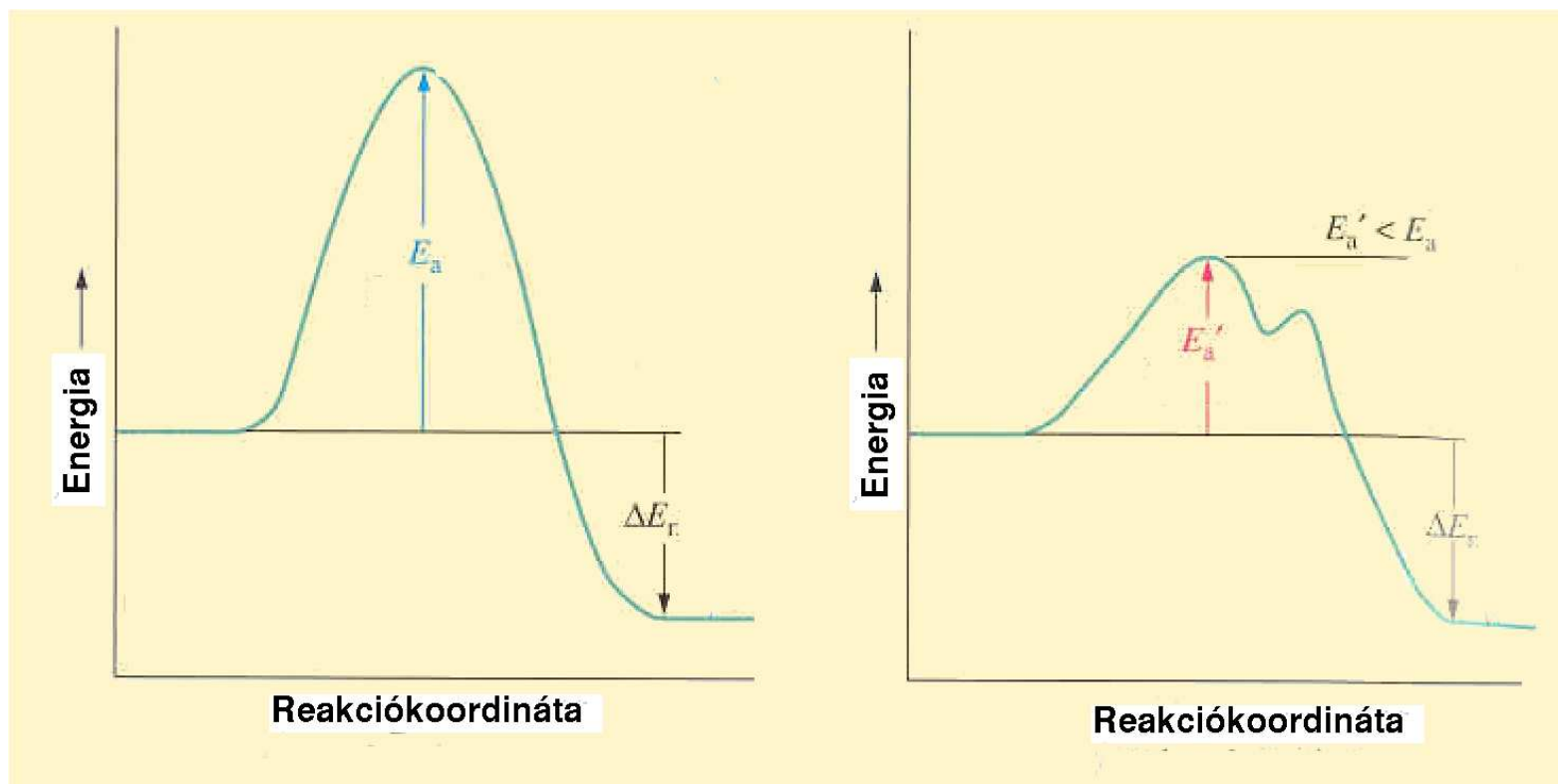


Lánclezáró (lánctörő) lépések:



# Katalízis

A katalizátor olyan anyag amely meggyorsítja a reakció végbemenetelét és a reakció végén változatlan formában és mennyiségben visszamarad. A katalizátor olyan módon éri el ezt a hatást, hogy egy kisebb aktiválási energiával rendelkező reakcióútat nyit meg.



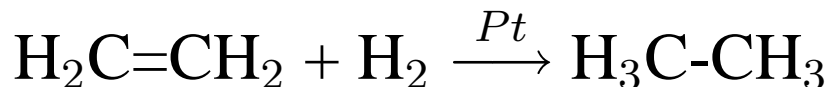
# Katalízis

---

## Heterogén katalízis

A katalizátor és a reaktánsok más fázisban vannak. A leggyakoribb példa a Pt katalizátor használata gázfázisú reakciókban.

Példák:



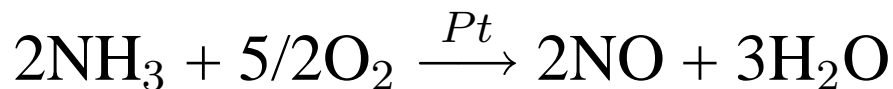
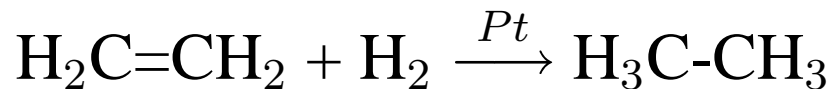
# Katalízis

---

## Heterogén katalízis

A katalizátor és a reaktánsok más fázisban vannak. A leggyakoribb példa a Pt katalizátor használata gázfázisú reakciókban.

Példák:



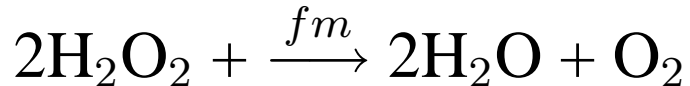
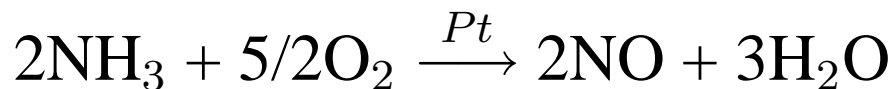
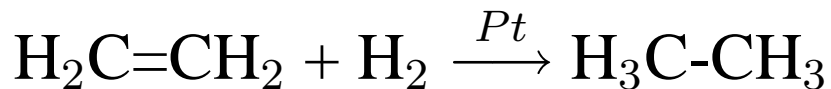
# Katalízis

---

## Heterogén katalízis

A katalizátor és a reaktánsok más fázisban vannak. A leggyakoribb példa a Pt katalizátor használata gázfázisú reakciókban.

Példák:



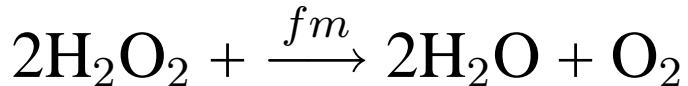
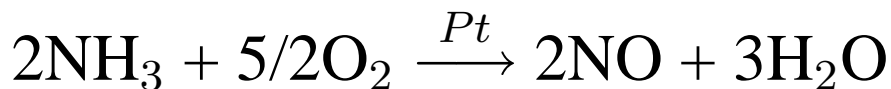
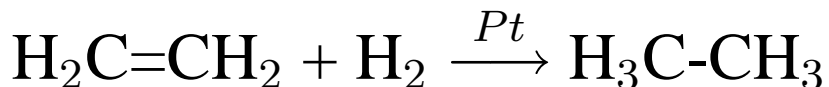
# Katalízis

---

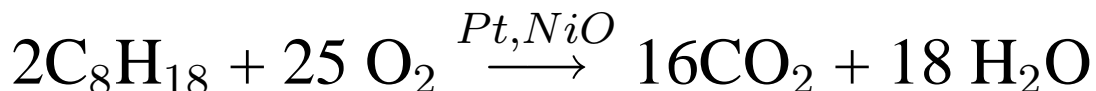
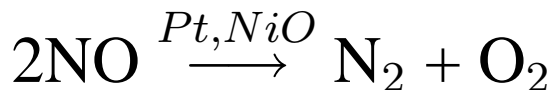
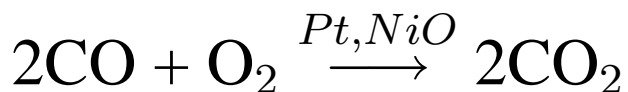
## Heterogén katalízis

A katalizátor és a reaktánsok más fázisban vannak. A leggyakoribb példa a Pt katalizátor használata gázfázisú reakciókban.

Példák:



Gépjárművekben használatos katalizátorok:



# Katalízis

---

## Homogén katalízis

A katalizátor és a reaktánsok azonos fázisban vannak.

1. példa:

Bruttó reakció:





# Katalízis

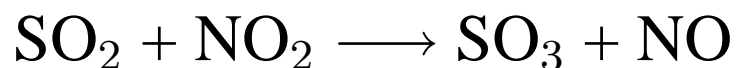
---

## Homogén katalízis

A katalizátor és a reaktánsok azonos fázisban vannak.

1. példa:

Bruttó reakció:



# Katalízis

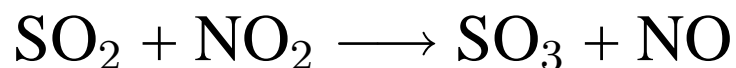
---

## Homogén katalízis

A katalizátor és a reaktánsok azonos fázisban vannak.

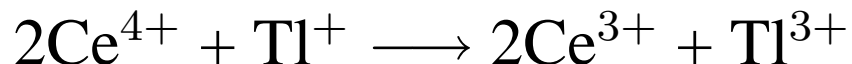
1. példa:

Bruttó reakció:



2. példa:

Bruttó reakció:



# Katalízis

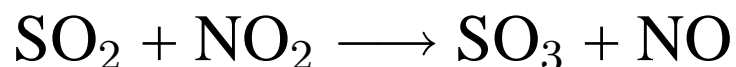
---

## Homogén katalízis

A katalizátor és a reaktánsok azonos fázisban vannak.

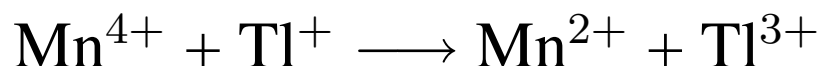
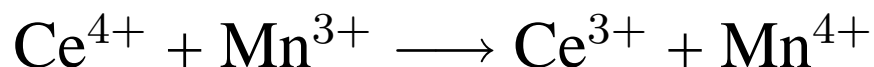
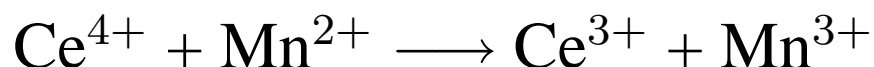
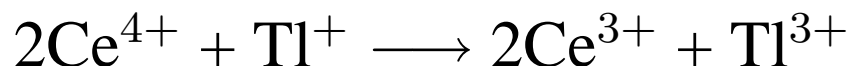
1. példa:

Bruttó reakció:



2. példa:

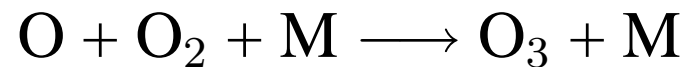
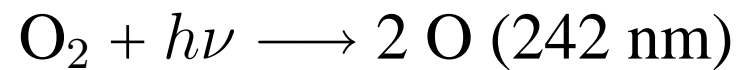
Bruttó reakció:



# Az ózonréteg

---

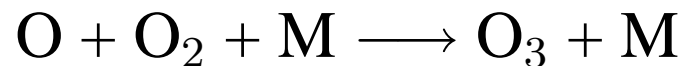
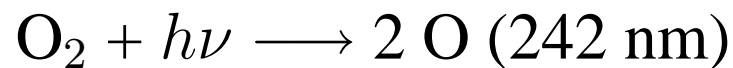
Az ózon termelése:



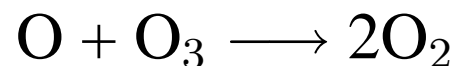
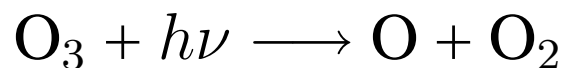
# Az ózonréteg

---

Az ózon termelése:



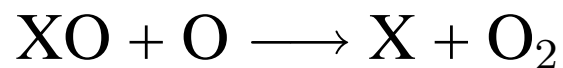
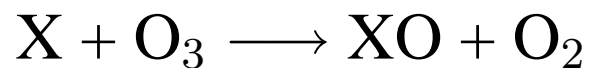
Az ózon természetes fogyása:



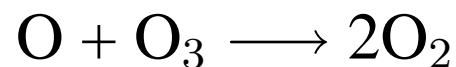
# Az ózonréteg

---

Az ózon katalitikus bomlása:



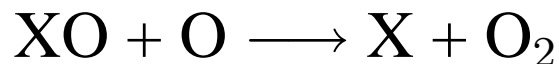
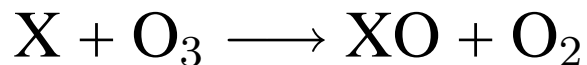
nettó reakció:



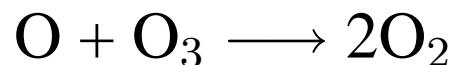
# Az ózonréteg

---

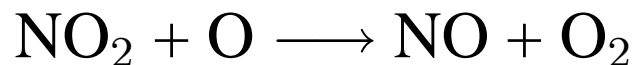
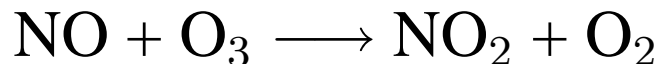
Az ózon katalitikus bomlása:



nettó reakció:



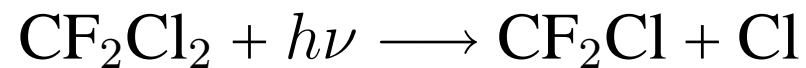
A hangsebességnél gyorsabb repülőgépek nagy mennyiségű NO-ot bocsájtanak ki.



# Az ózonréteg

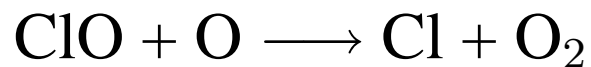
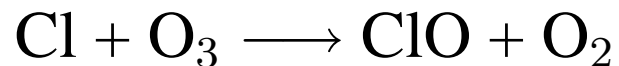
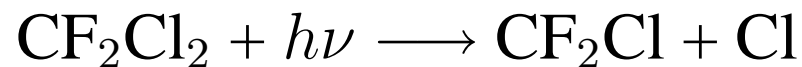
---

A kluoroflurokarbonok (CFC) hatása





A kluoroflurokarbonok (CFC) hatása



# Enzimkatalízis

---

Az enzimek a biológiai reakciók specifikus katalizátorai. Az enzim egy fehérje, amelynek harmadlagos szerkezete egymáshoz közel hoz bizonyos funkciós csoportokat és ezzel egy adott szubsztrátra specifikus kötőhelyet alakít ki.



$$K = \frac{[\text{ES}]}{[\text{E}][\text{S}]}$$

$$v = -\frac{d[\text{S}]}{dt} = k[\text{ES}] = kK[\text{E}][\text{S}]$$

# Enzimbkatalízis

---

$$K = \frac{[\text{ES}]}{[\text{E}][\text{S}]}$$

# Enzimbkatalízis

---

$$K = \frac{[\text{ES}]}{[\text{E}][\text{S}]}$$

$$[\text{ES}] = [\text{E}]_T - [\text{E}]$$

# Enzimmkatalízis

---

$$K = \frac{[\text{ES}]}{[\text{E}][\text{S}]}$$

$$[\text{ES}] = [\text{E}]_T - [\text{E}]$$

$$K = \frac{[\text{E}]_T - [\text{E}]}{[\text{E}][\text{S}]}$$

$$K = \frac{[\text{ES}]}{[\text{E}][\text{S}]}$$

$$[\text{ES}] = [\text{E}]_T - [\text{E}]$$

$$K = \frac{[\text{E}]_T - [\text{E}]}{[\text{E}][\text{S}]}$$

$$K[\text{E}][\text{S}] = [\text{E}]_T - [\text{E}]$$

$$K = \frac{[\text{ES}]}{[\text{E}][\text{S}]}$$

$$[\text{ES}] = [\text{E}]_T - [\text{E}]$$

$$K = \frac{[\text{E}]_T - [\text{E}]}{[\text{E}][\text{S}]}$$

$$K[\text{E}][\text{S}] = [\text{E}]_T - [\text{E}]$$

$$K[\text{E}][\text{S}] + [\text{E}] = [\text{E}]_T$$

$$K = \frac{[\text{ES}]}{[\text{E}][\text{S}]}$$

$$[\text{ES}] = [\text{E}]_T - [\text{E}]$$

$$K = \frac{[\text{E}]_T - [\text{E}]}{[\text{E}][\text{S}]}$$

$$K[\text{E}][\text{S}] = [\text{E}]_T - [\text{E}]$$

$$K[\text{E}][\text{S}] + [\text{E}] = [\text{E}]_T$$

$$[\text{E}] = \frac{[\text{E}]_T}{K[\text{S}] + 1}$$



# Enzimkatalízis

---

$$v = kK[\text{E}][\text{S}]$$

$$[\text{E}] = \frac{[\text{E}]_T}{K[\text{S}] + 1}$$

# Enzimbkatalízis

---

$$v = kK[\text{E}][\text{S}]$$

$$[\text{E}] = \frac{[\text{E}]_T}{K[\text{S}] + 1}$$

$$v = \frac{kK[\text{S}][\text{E}]_T}{K[\text{S}] + 1}$$

# Enzimmkatalízis

---

$$v = kK[\text{E}][\text{S}]$$

$$[\text{E}] = \frac{[\text{E}]_T}{K[\text{S}] + 1}$$

$$v = \frac{kK[\text{S}][\text{E}]_T}{K[\text{S}] + 1}$$

Michaelis-Menten-egyenlet:

$$v = \frac{k[\text{S}][\text{E}]_T}{[\text{S}] + (1/K)}$$

# Enzimkatalízis

---

$$v = kK[\text{E}][\text{S}]$$

$$[\text{E}] = \frac{[\text{E}]_T}{K[\text{S}] + 1}$$

$$v = \frac{kK[\text{S}][\text{E}]_T}{K[\text{S}] + 1}$$

Michaelis-Menten-egyenlet:

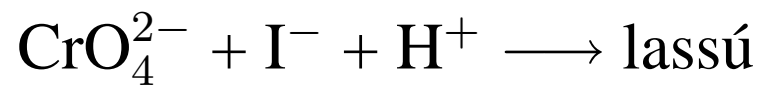
$$v = \frac{k[\text{S}][\text{E}]_T}{[\text{S}] + (1/K)}$$

Ha  $[\text{S}]$  nagy akkor  $v \approx k[\text{E}]_T$  (pszeudo elsőrendű reakció)

Ha  $[\text{S}]$  kicsi akkor  $v \approx kK[\text{E}]_T[\text{S}]$  (másodrendű reakció)

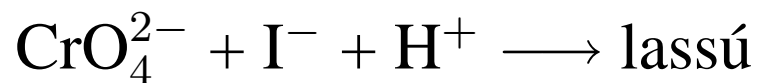
# Indukált reakciók

---

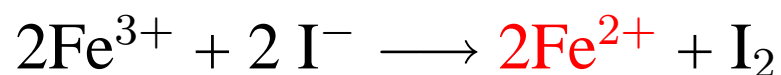
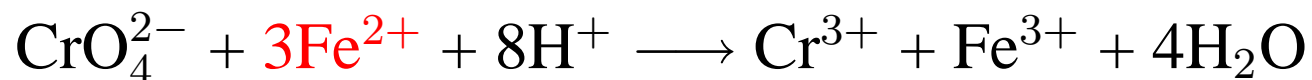


# Indukált reakciók

---



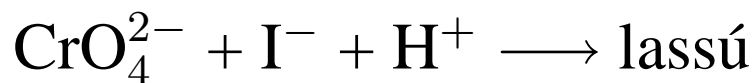
azonban  $\text{Fe}^{2+}$  jelenlétében:



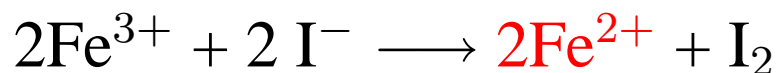
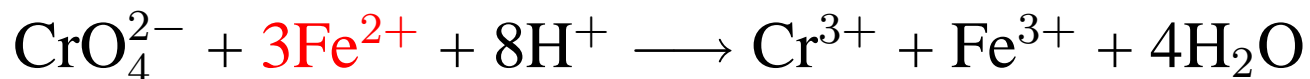
A  $\text{Fe}^{2+}$  nem katalizátor hiszen fogyott a reakcióban.

# Indukált reakciók

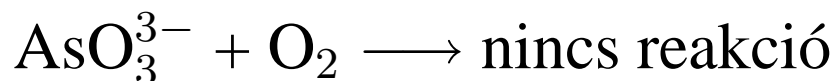
---



azonban  $\text{Fe}^{2+}$  jelenlétében:

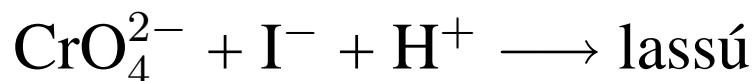


A  $\text{Fe}^{2+}$  nem katalizátor hiszen fogyott a reakcióban.

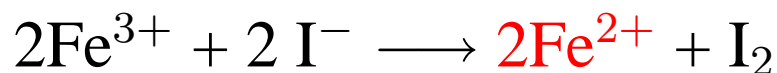
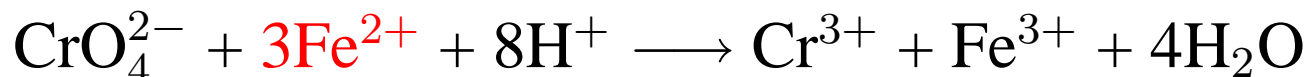


# Indukált reakciók

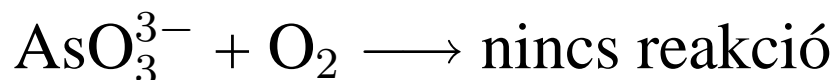
---



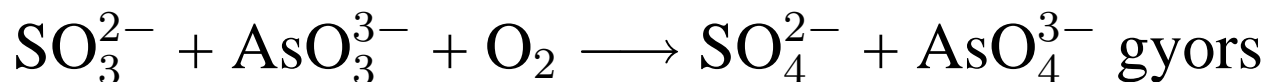
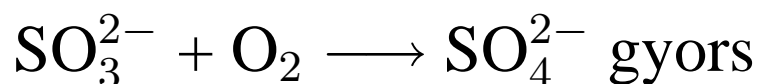
azonban  $\text{Fe}^{2+}$  jelenlétében:



A  $\text{Fe}^{2+}$  nem katalizátor hiszen fogyott a reakcióban.



$\text{SO}_3^{2-}$  jelenlétében:





# Autokatalízis

---

A reakció maga termeli a katalizátorát. Az ilyen reakciók öngyorsuló jelleggel mennek végbe.



# Oscilláló reakciók

---

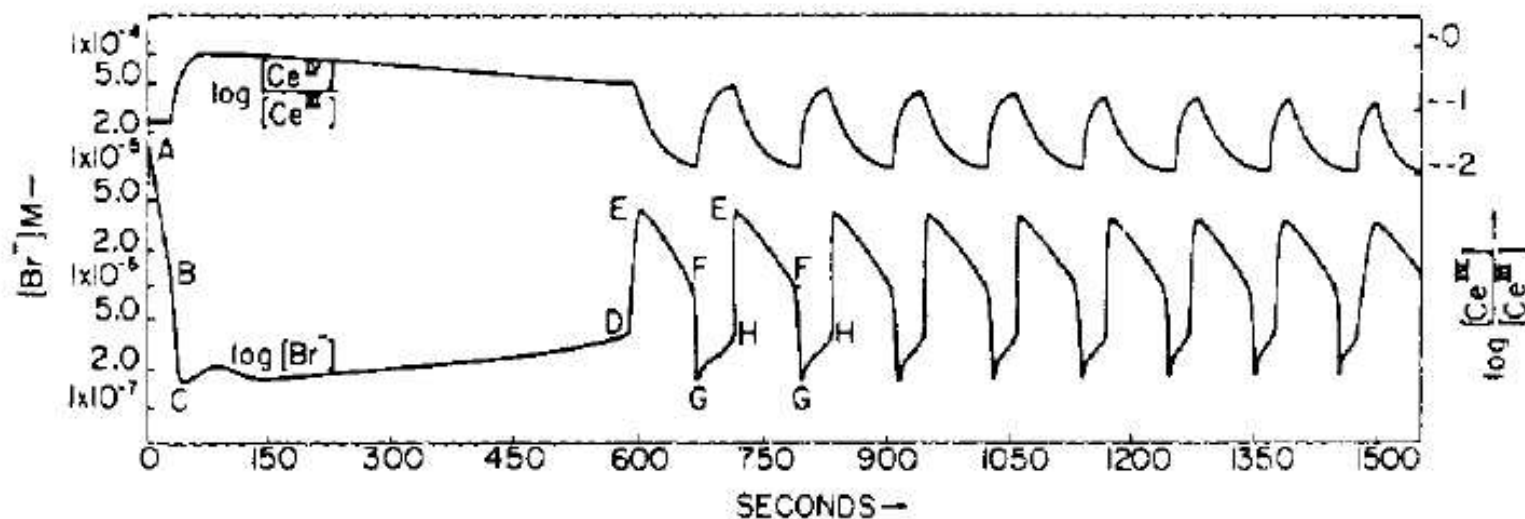
Olyan reakciók amelyek során egy vagy több köztitermék koncentrációja periodikusan változik (oscillál).

# Oscilláló reakciók

Olyan reakciók amelyek során egy vagy több köztitermék koncentrációja periodikusan változik (oszillál).

## A Belouszov-Zsabotyinszkij reakció

A malonsav bromátos oxidációja kénsavas közegben egy megfelelő katalizátor jelenlétében (e.g  $\text{Ce}^{4+}$ , vagy  $\text{Mn}^{3+}$ ).

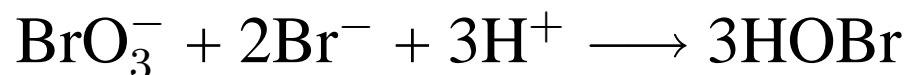


# Oscilláló reakciók

---

A Belouszov Zsabotyinszkij reakció kémiája:

I. részfolyamat:

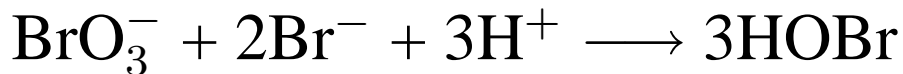


# Oszcilláló reakciók

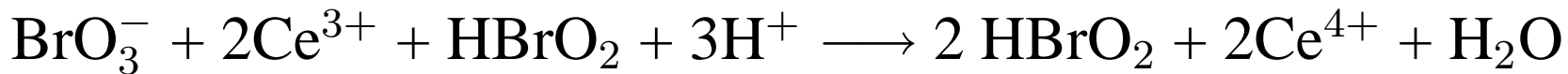
---

A Belouszov Zsabotyinszkij reakció kémiája:

I. részfolyamat:



II. részfolyamat (autokatalízis):

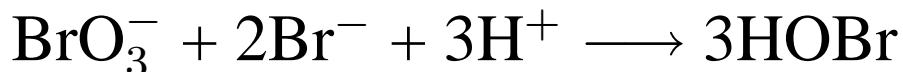


# Oszcilláló reakciók

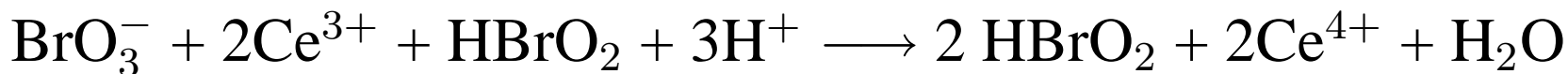
---

A Belouszov Zsabotyinszkij reakció kémiája:

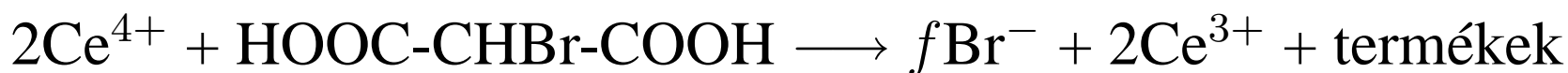
I. részfolyamat:



II. részfolyamat (autokatalízis):



II. részfolyamat (autokatalízis):



# Kémiai hullámok

---

oszcilláló reakciók + diffúzió = kémiai hullámok



# Mintázatképződés

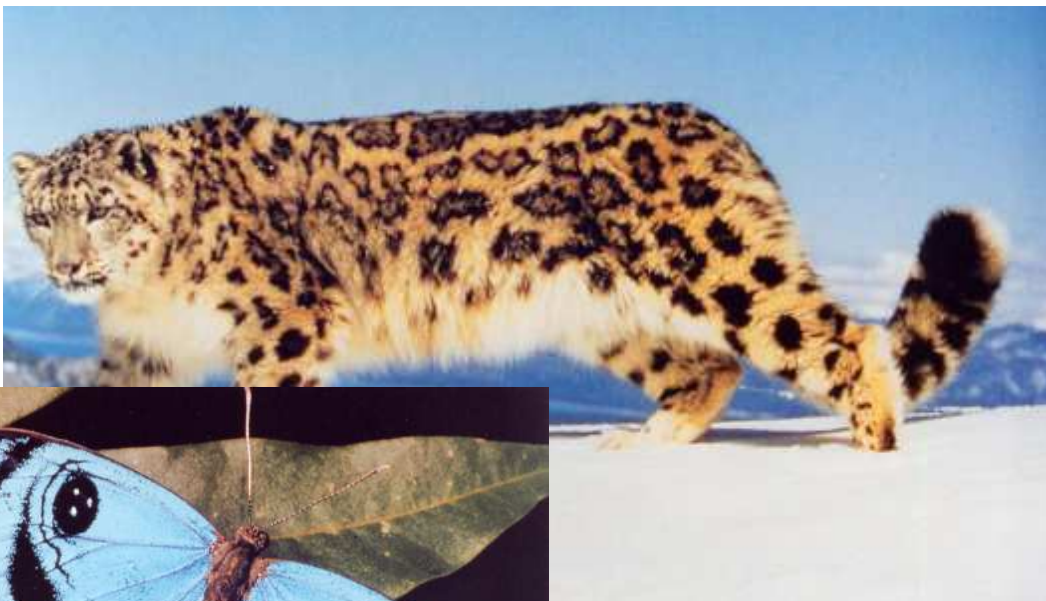
---





# Mintázatképződés

---



# Mintázatképződés

---



# Mintázatképződés

---

Reakció-diffúzió mintázatok kémiai rendszerekben:

