

OBSAH

Předmluva	7
1. Termodynamika vícefázových soustav	9
1.1. Podmínky fázové rovnováhy	9
1.2. Fázová rovnováha v soustavě o jedné složce	10
1.2.1. Závislost tlaku nasycených par kapalin na teplotě - Clausiusova-Clapeyronova rovnice	11
1.2.2. Antoineova a Calingaertova-Davisova rovnice	12
2. Fázová rovnováha v soustavě o více složkách	13
2.1. Fugacita	13
2.2. Ideální soustava	14
2.2.1. Definice ideálního roztoku	15
2.2.2. Rovnováha mezi kapalnou a plynnou fází v ideální vícesložkové soustavě	15
2.3. Reálná soustava	18
2.3.1. Aktivita a aktivitní koeficient	18
2.3.2. Rovnováha kapalina-pára v reálných soustavách - - plynná fáze ideální	22
2.4. Dodatková změna Gibbsovy funkce	23
2.4.1. Závislost aktivitních koeficientů komponent na složení roztoku - klasické rovnice	24
2.4.2. Závislost aktivitních koeficientů komponent na složení roztoku - neklasické rovnice	32
2.4.3. Závislost aktivitních koeficientů komponent na složení roztoku - metody "skupinových příspěvků".	32
2.4.4. Závislost aktivitních koeficientů komponent na teplotě	36
2.5. Soustavy s omezenou mísitelností složek	37
2.6. Korekce na reálné chování plynné fáze	39
3. Zpracování experimentálních dat a výpočet rovnováhy mezi kapalnou a plynnou fází	43
3.1. Jednosložková soustava - korelace tenzních dat Antoineovou rovnicí	44
3.2. Dvousložková soustava	47

3.2.1.	Předběžné posouzení souboru dat	48
3.2.2.	Volba korelačního vztahu	50
3.2.3.	Volba statistické a optimalizační metody	50
3.2.3.1.	Metoda maximální věrohodnosti	51
3.2.3.2.	Optimalizační algoritmus	53
3.2.4.	Vyhodnocení odchylek a spolehlivost parametrů ...	54
3.3.	Vícesložkové soustavy	55
Dodatek DI.	Wilsonova rovnice a soustavy s omezenou mísitelností složek	58
Dodatek DII.	Program pro vyhodnocení konstant Antoineovy rovnice .	59
Dodatek DIII.	Program pro vyhodnocování parametrů dvousložkové rovnováhy kapalina-pára z experimentálních dat	64
Dodatek DIV.	Program pro výpočet rovnováhy kapalina-pára ve více-složkových soustavách z binárních parametrů	138
Dodatek DV.	Tabulka parametrů čistých složek pro rovnici UNIQUAC.	183
Literatura	191