

O B S A H :

Strana

	Úvod	1
1.	ENERGETIKA FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÝCH DĚJŮ	2
1.1.	Úkoly energetiky fyzikálně-chemických dějů	2
1.2.	Struktura skupenských stavů	2
1.2.1.	Základní zákony ideálního plynu	3
1.2.2.	Stavové rovnice reálných plynů	5
1.3.	Tepelné kapacity látek	6
1.3.1.	Závislost tepelných kapacit plyných, kapalných a tu- hých látek na teplotě	9
1.3.2.	Empirická pravidla o tepelných kapacitách	13
1.3.3.	Způsoby notace chemických reakcí a fyzikálně-chemických vztahů	16
1.3.4.	Změna tepelné kapacity v průběhu chemické reakce	16
1.4.	Aplikace I. hlavní věty termodynamické na fyzikálně- -chemické procesy	17
1.4.1.	Některé termodynamické pojmy	17
1.4.2.	Formulace a rozbor I. věty termodynamické	18
1.4.3.	Práce ideálního plynu	19
1.4.4.	Entalpie. Teplo za stálého tlaku a stálého objemu	21
1.4.5.	Termodynamické definice molových tepel. Rozdíl $C_p - C_v$	22
1.4.6.	Ohřev a ochlazování látek	24
1.4.7.	Reakční tepla	25
1.4.7.1.	Reakční tepla za stálého tlaku a objemu	25
1.4.7.2.	Termochemické zákony. Výpočet reakčních tepel	27
1.4.7.3.	Závislost reakčního tepla na teplotě. Kirchhoffovy rovnice	28
1.4.7.4.	Integrace Kirchhoffových rovnic. Závislost reakčního tepla na teplotě	30
1.4.8.	Teoretická reakční teplota	31
1.4.9.	Příklad tabulace termodynamických dat	32
2.	PODMÍNKY PRŮBĚHU A ROVNOVÁHY FYZIKÁLNĚ-CHEM. PROCESU	34
2.1.	Definice a rozdělení rovnovážných stavů	34
2.2.	Vlastnosti úplného (totálního) diferenciálu	34
2.3.	Aplikace II. hlavní věty termodynamické na fyzikálně-chemické procesy	35
2.3.1.	Význam a formulace II. věty termodynamické	35
2.3.2.	Entropie	37
2.3.2.1.	Změny entropie, výpočet změn entropie	39
2.3.3.	Helmholtzova a Gibbsova energie. Termodynamické potenciály	41

2.3.4.	Vztahy mezi termodynamickými veličinami. Kriteria rovnováhy	43
2.3.5.	Gibbs-Helmholtzovy rovnice	46
2.3.6.	Parciální molární veličiny. Chemický potenciál	46
2.3.7.	Chemické rovnováhy	49
2.3.7.1.	Reakční izoterma	49
2.3.7.2.	Rovnovážná konstanta	51
2.3.7.3.	Vliv vnějších podmínek na rovnováhu	52
2.3.7.3.1.	Princip akce a reakce	52
2.3.7.4.	Vliv teploty na rovnováhu chemické reakce	53
2.3.7.4.1.	Rovnice reakční izobary a izochory	53
2.3.7.4.2.	Integrabilní forma Gibbs-Helmholtzových rovnic	54
2.3.7.4.3.	Výpočet závislosti rovnovážné konstanty, Gibbsovy a Helmholtzovy energie na teplotě	54
2.3.7.5.	Vliv tlaku na rovnováhu chemické reakce	58
2.3.7.5.1.	Posouzení vlivu tlaku, inertních složek a nestechiometrického poměru reagujících látek na rovnováhu	58
2.3.7.5.2.	Výpočet rovnovážného složení u reakcí s účastí plynné fáze	59
2.3.8.	Fázové rovnováhy	61
2.3.8.1.	Termodynamické podmínky fázových rovnováh	61
2.3.8.2.	Gibbsův fázový zákon	62
2.4.	III. hlavní věta termodynamická	63
2.4.1.	Nernstův tepelný teorém	63
2.4.2.	Důsledky Nernstova tepelného teorému	64
3.	ZÁKLADY KINETIKY FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÝCH DĚJŮ	67
3.1.	Úkoly a rozdělení kinetiky	67
3.2.	Základní kinetické pojmy	67
3.2.1.	Reakční rychlost	67
3.2.2.	Zákon účinku hmotnosti (Guldberg-Waageův zákon)	68
3.2.3.	Molekularita a řád reakce	69
3.2.4.	Reakční mechanismus	70
3.3.	Homogenní reakce	71
3.3.1.	Reakce prvního řádu	71
3.3.2.	Reakce vyšších řádů	73
3.3.3.	Simultánní reakce	74
3.3.4.	Závislost reakční rychlosti na tlaku	76
3.3.5.	Závislost reakční rychlosti na teplotě. Arrheniova rovnice	76
3.3.6.	Teorie reakční rychlosti	79
3.4.	Heterogenní reakce	83
3.4.1.	Charakteristika heterogenních procesů	83
3.4.2.	Difúze	83

	Strana	
3.4.2.1.	Charakteristika difúzních pochodů	83
3.4.2.2.	Zákony difúze	84
3.4.3.	Adsorpce na fázovém rozhraní	86
3.4.4.	Jednodušší případy řešení heterogenní kinetiky	89
3.4.4.1.	Difúze dvěma různými fázemi	89
3.4.4.2.	Difúze s následnou chemickou reakcí na mezifázovém rozhraní	91
3.4.4.3.	Adsorpce s následnou reakcí na povrchu tuhé fáze	93
4.	DODATEK (spoluautorkou statí je RNDr. V. Dobrovská, katedra matematiky VŠB)	94
4.1.	Řešení diferenciálních rovnic	94
4.1.1.	Obyčejné diferenciální rovnice	94
4.1.1.1.	Diferenciální rovnice 1. řádu	95
4.1.1.2.	Diferenciální rovnice 2. řádu	99
4.1.1.3.	Souhrn	102
4.1.2.	Parciální diferenciální rovnice	102
4.1.2.1.	Rovnice difúze a vedení tepla. Okrajové podmínky	102
4.1.2.2.	Metody řešení rovnice difúze a vedení tepla	105
4.1.3.	Přibližné řešení diferenciálních rovnic	106
4.1.3.1.	Přibližné řešení obyčejných diferenciálních rovnic	106
4.1.3.1.1.	Metoda postupných aproximací	106
4.1.3.1.2.	Řešení rozvojem v mocninou řadu	107
4.1.3.1.3.	Eulerova metoda	108
4.1.3.1.4.	Rungova-Kuttova metoda	109
4.1.3.1.5.	Adamsova metoda	110
4.1.3.1.6.	Závěr k uvedeným metodám	111
4.1.3.2.	Řešení parciálních diferenciálních rovnic metodou sítí	111
4.1.4.	Příklady fyzikálně-chemických aplikací diferenciálních rovnic	113
4.1.4.1.	Integrace termodynamických rovnic	114
4.1.4.2.	Kinetika reakce 3. řádu	114
4.1.4.3.	Kinetika reakce meziprojektu	115
4.1.4.4.	Indukční perioda reakce	120
4.1.4.5.	Koncentrace páry nad vypařující se kapalinou	124
4.1.4.6.	Koncentrační profily při difúzi fluidního media do tuhé kulové částice	127
4.1.4.7.	Koagulace koloidních částic	131
4.1.4.8.	Rozpouštění plynu v kapalině s rychlou irreverzibilní chemickou reakcí	134
4.1.4.9.	Změna koncentrace látky způsobená difúzí	136
4.2.	Vybrané části z ČSN 01 1303: Veličiny s jednotky v mechanice tekutin a termodynamice	138
	Literatura	152