

OBSAH

1	ÚVOD.....	7
2	ZÁKLADNÍ POJMY A PRINCIPY.....	9
2.1	Základní principy klasické termodynamiky.....	10
2.2	Základní termodynamické funkce a jejich závislost na stavových proměnných..	12
2.3	Otevřený systém, parciální molární veličiny.....	15
2.4	Chemický potenciál, aktivita.....	20
2.5	Podmínky termodynamické rovnováhy.....	21
2.6	Gibbsovo fázové pravidlo.....	27
3.	STRUKTURA, CHEMICKÁ VAZBA A STAVOVÉ CHOVÁNÍ PEVNÝCH LÁTEK.....	31
3.1	Struktura a chemická vazba pevných látek.....	31
3.1.1	Symetrie krystalů.....	31
3.1.2	Základní strukturální typy.....	33
3.1.3	Poruchy krystalové struktury.....	40
3.1.4	Chemická vazba v pevných látkách.....	42
3.2	Stavové chování pevných látek.....	47
3.2.1	Molární objem pevných látek.....	48
3.2.2	Tepelná roztažnost pevných látek.....	48
3.2.3	Stlačitelnost pevných látek.....	51
4.	TERMODYNAMICKÉ VLASTNOSTI PEVNÝCH LÁTEK.....	55
4.1	Tepelné kapacity.....	55
4.2	Entalpie.....	61
4.3	Entropie.....	68
4.4	Gibbsova energie.....	72
4.5	Termodynamické vlastnosti pevných látek za velmi vysokých tlaků.....	76
5.	FÁZOVÉ ROVNOVÁHY V JEDNOSLOŽKOVÝCH SYSTÉMECH.....	79
5.1	Fázové přeměny a jejich klasifikace.....	79
5.2	Fázové diagramy jednosložkových systémů.....	80
5.3	Kvantitativní popis fázových rovnováh v jednosložkových systémech.....	88
6.	ROVNOVÁHY V SYSTÉMECH IDEÁLNÍ PLYNNÁ FÁZE A JEDNOSLOŽKOVÉ KONDENZOVANÉ FÁZE.....	93
6.1	Homogenní plynné systémy.....	93
6.1.1	Výpočet rovnovážného složení stechiometrickým postupem.....	93
6.1.2	Výpočet rovnovážného složení nestechiometrickým postupem.....	97
6.2	Heterogenní systémy – jednosložkové kondenzované fáze.....	99
6.2.1	Reakce bez účasti plynné fáze.....	99
6.2.2	Rozkladné reakce pevných látek.....	107
6.2.3	Oxidace kovů – Ellinghamovy diagramy.....	112
6.2.4	Stabilita pevných látek – Kelloggovy diagramy.....	122
6.2.5	Výpočet rovnovážného složení stechiometrickým postupem.....	130
6.2.6	Výpočet rovnovážného složení nestechiometrickým postupem.....	134
7.	TERMODYNAMICKÉ VLASTNOSTI ROZTOKŮ.....	137
7.1	Složení vícesložkových fází.....	138

7.2 Směšovací veličiny.....	138
7.3 Model ideálního roztoku.....	142
7.4 Dodatkové veličiny.....	149
7.5 Model regulárního roztoku.....	154
7.5.1 Empirická formulace.....	154
7.5.2 Podmínky termodynamické stability regulárních roztoků.....	158
7.5.3 Odvození modelu regulárního roztoku na základě mřížkové teorie.....	164
7.6 Další vztahy pro vyjádření závislosti dodatkové Gibbsovy energie na složení binárních roztoků.....	169
7.7 Termodynamické vlastnosti ternárních a vícesložkových roztoků.....	173
7.8 Model asociujícího roztoku.....	177
7.9 Podmřížkový model pevných roztoků a tavenin.....	184
7.10 Velmi zředěné roztoky.....	192
7.10.1 Henryho zákon.....	193
7.10.2 Alternativní volba standardních stavů	196
7.10.3 Aktivitní koeficienty příměsí ve zředěných roztocích.....	200
7.10.4 Vodné roztoky elektrolytů.....	206
8. ROVNOVÁHY VE VÍCESLOŽKOVÝCH KONDENZOVANÝCH SYSTÉMECH.....	213
8.1 Rovnováhy v binárních systémech.....	213
8.1.1 Fázové diagramy binárních systémů.....	213
8.1.2 Výpočet rovnovážného složení binárních systémů.....	233
8.1.3 Rovnovážné distribuční koeficienty.....	245
8.2 Rovnováhy v ternárních systémech.....	247
8.3 Rozpustnost plyných látek v kapalinách.....	256
8.4 Rozpustnost pevných látek v kapalinách.....	262
8.5 Krystalochemické rovnováhy.....	265
9. FÁZOVÁ ROZHRAŇÍ A ROVNOVÁHY V NANOSYSTÉMECH.....	269
9.1 Povrchová energie, povrchové napětí a povrchové termodynamické funkce.....	269
9.1.1 Povrchová energie a povrchové napětí.....	269
9.1.2 Gibbsův termodynamický popis fázových rozhraní.....	272
9.1.3 Youngova a Youngova-Laplaceova rovnice.....	275
9.2 Děje na fázových rozhraních.....	278
9.2.1 Adsorpce na pevných látkách.....	278
9.2.2 Povrchová segregace.....	280
9.3 Vliv fázových rozhraní na fázové rovnováhy v jednosložkových nanosystémech.....	281
9.3.1 Podmínky fázové rovnováhy mezi nanočásticí a fluidní fází.....	282
9.3.2 Tenze nasycených par nad zakřiveným rozhraním – Kelvinova rovnice.....	285
9.3.3 Teplota tání nanočástic – Gibbsova-Thomsonova rovnice a Pawlowova rovnice.....	286
9.3.4 Rozpustnost nanočástic – Ostwaldova-Freundlichova rovnice.....	288
10. DODATKY.....	291
10.1 Základní matematický aparát.....	291
10.1.1 Funkce, diferenciály a derivace.....	291
10.1.2 Některé důležité termodynamické vztahy.....	294
10.1.3 Homogenní funkce, intenzivní a extenzivní proměnné.....	295

10.2 Tepelné kapacity pevných látek.....	297
10.2.1 Einsteinův model krystalu.....	297
10.2.2 Debyeův model krystalu.....	298
10.3 Termodynamická data a software pro termodynamické výpočty.....	301
10.4 Vztahy pro přepočet standardních chemických potenciálů, aktivit a aktivitních koeficientů při různé volbě standardních stavů.....	305
11. SEZNAM SYMBOLŮ A ZKRATEK.....	306