

OBSAH

I. kapitola. Latentní tepla. Tepelné kapacity	13
1. Teplo, vnitřní energie, entalpie	13
2. Latentní teplo při změně skupenských stavů	14
3. Křivka tlaku nasycených par. Obecná rovnice	14
4. Tepelná kapacita. Tepelná kapacita ideálních plynů Tepelné kapacity plynů a par. Molární a specifická tepla	18
5. Závislost molárních tepel na teplotě	20
Metoda nejmenších čtverců	21
Metoda akademika Čebyševa	23
Průměrová metoda	26
6. Některé rovnice pro výpočet molárních tepel při atmosférickém tlaku ze spektrálních údajů	29
7. Závislost molárních tepel plynů a par na tlaku	39
Literatura	52
II. kapitola. Reakční tepla. Entalpie	53
1. První věta termodynamická. Hessův zákon	53
Stanovení reakčního tepla z kombinace rovnic chemických reakcí	58
2. Stanovení reakčního tepla z rovnovážných konstant reakcí	59
3. Závislost reakčních tepel na teplotě	62
4. Entalpie plynů a par při atmosférickém tlaku	64
5. Entalpie kapalin při vyšších teplotách	66
6. Entalpie plynů a par za tlaku vyššího než atmosférického	67
Literatura	70
III. kapitola. Entropie	72
1. Entropie soustavy. Změny entropie při změně skupenského stavu a při změnách stavových proměnných soustavy	72
2. Entropie látek za standardních podmínek (ve standardním stavu). Způsob výpočtu entropií z termochemických údajů	76
3. Extrapolace molárních tepel organických látek pod teplotu kapalného vzduchu	83
4. Entropie plynů a par za vyšších tlaků	87
Literatura	89
IV. kapitola. Volná energie. Volná entalpie	90
1. Maximální práce a volná energie	90
2. Rovnovážná konstanta a maximální práce chemické reakce	91
3. Gibbsův termodynamický potenciál. Chemické potenciály složek v rovnováze	94
4. Závislost volné entalpie a rovnovážné konstanty na teplotě	98
5. Standardní slučovací volná entalpie organických látek	100
6. Metody stanovení standardní volné entalpie	102
Stanovení ΔG° z třetí věty termodynamické	103
Výpočet ΔG° z rovnovážné konstanty chemických reakcí	110
Stanovení ΔG° z kombinace rovnic chemických reakcí	115
7. Přibližné metody výpočtu	117
Nernstova přibližná rovnice	119
Literatura	125

V. kapitola. Chemické rovnováhy v plynech.	126
1. Obecné vztahy. Konstanty K_p , K_c a vztah mezi nimi	126
2. Rovnovážná konstanta a složení soustavy v rovnovážném stavu.	127
3. Některé praktické příklady řešení rovnic vyšších stupňů	135
Grafická metoda určení kořene	136
Řešení soustavy rovnic.	141
Výpočet kořenů rovnic metodou postupných aproximací	147
4. Výpočet rovnovážného složení heterogenních soustav	149
Literatura	152
VI. kapitola. Chemické rovnováhy v reálných plynných soustavách 153	
1. Obecné vztahy	153
2. Směs ideálních plynů	155
3. Použití fugacity k výpočtu rovnováh v reálných plynných soustavách	156
4. Metody výpočtu fugacity čistých plynů	156
5. Výpočet fugacity plynů a par ve směsi s jinými plyny	158
6. Závislost rovnovážné konstanty K_p na tlaku	160
7. Výpočet rovnovážné konstanty pomocí fugacitních koeficientů	161
8. Příklady výpočtu fugacity	169
9. Příklady výpočtů rovnováh při vyšších tlacích pomocí fugacitních koeficientů	172
Výpočet složení par, jež jsou v rovnováze s kapalinou při vysokých tlacích	172
Výpočet rovnovážné konstanty syntézy methanolu	174
Výpočet výtěžku ethanolu při hydrataci ethylenu při teplotě 350 °C a za tlaku 100 atm.	175
10. Výpočet rovnovážných konstant na základě experimentálních dat o stlačitelnosti	176
Literatura	177
VII. kapitola. Statistické metody výpočtu termodynamických veličin 179	
Úvod	179
1. Jednoatomové molekuly	179
2. Dvouatomové a víceatomové molekuly	180
3. Výpočet momentů setrvačnosti	181
4. Vnitřní rotace skupin atomů v molekule	184
5. Výpočet termodynamických veličin dvouatomových molekul	187
6. Výpočet termodynamických veličin víceatomových molekul	188
7. Výpočet termodynamických veličin víceatomových molekul s brzděnou vnitřní rotací	192
Literatura	196
VIII. kapitola. Přibližné metody výpočtu termodynamických veličin 198	
1. Metoda strukturních skupin	198
2. Kirejejeva metoda (metoda reakcí téhož typu)	202
3. Karapetjanova metoda	203
4. Metody založené na aplikaci teorie podobnosti.	203
Metoda Erdőse a Černého	203
Metoda Vvedenského	207
5. Výpočty termodynamických veličin molekul s vnitřní rotací	212
Metoda Maslova	221
Literatura	226
IX. kapitola. Reakce při hoření a zplyňování uhlí	228
1. Termodynamika procesů při hoření uhlí	228
2. Ostatní reakce probíhající při zplyňování uhlí	230
3. Údaje o reakcích probíhajících při hoření a zplyňování uhlí	233
4. Děje při výrobě generátorového plynu	237
5. Děje při výrobě vodního plynu	240
6. Konverze methanu	240
7. Konverze vodního plynu	243
Literatura	246

X. kapitola. Reakce při hydrogenaci a dehydrogenaci uhlovodíků	248
1. Slučovací reakce uhlovodíků z prvků	248
2. Reakce při hydrogenaci alkenů a při dehydrogenaci alkanů	255
3. Reakce při hydrogenaci aromatických uhlovodíků	267
Literatura	275
XI. kapitola. Reakce při syntézách důležitějších monomerů	276
1. Získávání olefinů	276
2. Výroba dienových uhlovodíků	276
3. Tepelný rozklad nízkomolekulárních uhlovodíků	280
4. Dehydrogenační reakce alkylderivátů benzenu a naftalenu	283
5. Reakce při alkylnaci benzenu a toluenu acetylenem	285
Literatura	286
XII. kapitola. Izomerace uhlovodíků	287
1. Izomerace parafinů	287
2. Teoretické výpočty izomerace parafinů	293
3. Izomerace cykloparafinů	297
4. Izomerace olefinů	299
5. Teoretické výpočty izomeračních rovnováh olefinů	309
6. Teoretické výpočty izomeračních rovnováh acetylenů	309
7. Teoretické výpočty izomeračních rovnováh alkylderivátů benzenu	311
Literatura	314
XIII. kapitola. Polymerace, alkylace a aromatizace (cyklizace)	316
1. Polymerace nenasyčených uhlovodíků	316
2. Alkylace parafinických uhlovodíků olefiny	318
3. Alkylace aromatických uhlovodíků	321
4. Cyklizace (aromatizace)	324
5. Některé přeměny acetylenů na aromatické uhlovodíky	328
Literatura	329
XIV. kapitola. Hydratace alkenů	330
1. Hydratace ethylenu	330
2. Hydratace propylenu	336
3. Hydratace normálních butenů a isobutenu	337
Literatura	340
XV. kapitola. Příprava alkoholů, aldehydů a kyselin z vodíku, kyslíč- níku uhelnatého a olefinů	341
1. Syntéza methanolu	341
2. Syntéza formaldehydu z vodíku a kyslíčnicku uhelnatého	348
3. Syntéza kyseliny mravenčí	351
4. Oxonace	353
Literatura	354
XVI. kapitola. Některé způsoby přípravy esterů a dehydrogenace alkoholů na estery, aldehydy a ketony	356
1. Esterifikace	356
2. Příprava esterů dehydrogenací alkoholů	360
3. Příprava aldehydů a ketonů dehydrogenací alkoholů	364
Literatura	369
XVII. kapitola. Syntéza amoniaku, kyanovodíku, aminů a nitrilů	370
1. Syntéza amoniaku	370
2. Syntéza kyanovodíku	372
3. Některé syntézy nitrilů a aminů	375
Literatura	380

XVIII. kapitola. Hydrohalogenační reakce	382
1. Hydrohalogenace ethylenu	382
2. Hydrohalogenace isobutenu	383
3. Hydrochlorace acetylenu	386
4. Stupeň konverze uhlovodíků při hydrohalogenaci	388
Literatura	389
XIX. kapitola. Přehled pokusně zjištěných a vypočtených hodnot termodynamických veličin	390
Část I. Termodynamické veličiny atomů a jednodušších molekul	391
Část II. Termodynamické veličiny uhlovodíků	447
Termodynamické veličiny:	
alkanů (tab. 1—18)	447
alkenů (tab. 19—32)	464
alkinů (tab. 33—39)	479
dienů (tab. 40—46)	486
radikálů (tab. 47—48)	490
alkylderivátů benzenu (tab. 49—62)	491
cyklobutenu (tab. 63)	501
alkylcyklopentanů (tab. 64—70)	502
alkylcyklopentenů (tab. 71—73)	508
alkylcyklohexanů (tab. 74)	511
spiropentanu (tab. 81)	518
naftalenu (tab. 82—83)	518
dekalinu (tab. 84—86)	519
cyklooktatetraenu (tab. 87—89)	520
Část III. Termodynamické veličiny organických látek obsahujících dusík	521
Část IV. Termodynamické veličiny kyslíkatých organických látek	525
Část V. Termodynamické veličiny organických látek obsahujících síru	532
Část VI. Termodynamické veličiny organických látek obsahujících halogeny	539
Literatura	562
Rejstřík	565