

OBSAH

Úvod	3
Obsah	4
Seznam hlavních symbolů	10
1. Odhad kritických veličin	13
1-1 Aplikace Riedelovy a Lydersenovy metody	13
1-2 Výpočet T_k a p_k nasycených alifatických uhlovodíků podle Formana - Thodose	14
1-3 Výpočet p_k a T_k nenasyčených alifatických uhlovodíků podle Formana - Thodose	15
1-4 Aplikace Formanovy a Thodosovy metody u cykloalifatických uhlovodíků	15
1-5 Aplikace Formanovy - Thodosovy metody u aromatických uhlovodíků	16
1-6 Výpočet p_k a T_k podle Formana a Thodose u ostatních organických sloučenin	16
2. Stavové chování čistých plynů a kapalin	19
2-1 Přepočet Amagatových jednotek	19
2-2 Určení druhého a třetího viriálního koeficientu z experimentálních dat	20
2-3 Výpočet druhého viriálního koeficientu na základě Lennard - Jonesova potenciálu	21
2-4 Výpočet druhého viriálního koeficientu u polárních látek pomocí Stockmayerova potenciálu	23
2-5 Určení parametrů Lennard - Jonesova potenciálu z $B = B(T)$	23
2-6 Výpočet viriálního koeficientu na základě semiempirických a empirických vztahů	24
2-7 Výpočet tlaku z různých stavových rovnic reálného plynu (zadána teplota a molární objem)	26
2-8 Výpočet molárního objemu ze stavové rovnice	26
2-9 Výpočet molárního objemu v kapalně i parní fázi podle stavové rovnice reálné tekutiny pro zadanou teplotu a tlak	27
2-10 Odhad konstant BWR rovnice	29
2-11 Výpočet objemu plynu pomocí Lydersenových nebo Lee - Keslerových tabulek	30
2-12 Výpočet tlaku plynu pomocí Lydersenových nebo Lee - Keslerových tabulek (zadána teplota a molární objem plynu)	31

2-13	Výpočet kompresibilitního faktoru plynu při aplikaci teorému korespondujících stavů se dvěma referenčními látkami	33
2-14	Různé způsoby odhadu molárního objemu nasycené kapaliny	33
2-15	Odhad hustoty kapaliny při vyšším tlaku	35
2-16	Diskuze závislosti tlaku v autoklávu na látkovém množství náplně	36
2-17	Výpočet látkového množství v kapalné a plynné fázi v autoklávu při podkritické teplotě	37
2-18	Výpočet rovnovážných molárních objemů kapalné a parní fáze a tenze par při zadané teplotě pomocí stavové rovnice	38
3.	Stavové chování plyných a kapalných směsí	44
3-1	Aplikace viriální stavové rovnice s druhým viriálním koeficientem u směsí plynů	44
3-2	Odhad smíšeného viriálního koeficientu podle empirických pravidel	45
3-3	Relace mezi druhými viriálními koeficienty a dodatkovým objemem u binární směsi za nízkých tlaků	46
3-4	Výpočet tlaku směsi podle teorému korespondujících stavů	46
3-5	Aplikace "dvoukapalinové" aproximace při odhadu objemu směsí plynů	49
3-6	Výpočet tlaku směsi podle stavové rovnice	50
3-7	Určení molárního objemu směsi na základě stavové rovnice	51
3-8	Aplikace stavové rovnice na směsi s vodíkem	52
3-9	Aplikace Amagatova zákona a výpočet dodatkového objemu směsi	53
3-10	Výpočet tlaku směsi podle Daltonova zákona, Amagatova zákona a Bartlettova pravidla	54
3-11	Aplikace Joffeho pravidla na výpočet objemu směsi	55
3-12	Odhad objemu směsi podle Daltonova a Amagatova zákona a Bartlettova pravidla (chování čistých látek je popsáno stavovou rovnicí Redlichova a Kwonga)	56
3-13	Výpočet dodatkového objemu u kapalně směsi za vyššího tlaku	58
3-14	Určení hustoty kapalně směsi v nasyceném stavu podle Amagatova zákona a Joffeho pravidla	58
3-15	Určení hustoty kapalně směsi obsahující složku (složky) při nadkritické teplotě	60
3-16	Rozbor stanovení smíšeného viriálního koeficientu na základě rozpustnosti kapalně (tuhé) látky v plynu	60

4.	Termodynamické veličiny čistých plynů a kapalin	65
4-1	Výpočet doplňkové entalpie a entropie z tabelovaných dat H, S	65
4-2	Sestavení tabulek $H(T,p)$ a $S(T,p)$ na základě doplňkových veličin	67
4-3	Výpočet doplňkových veličin na základě experimentálních dat o stavovém chování	69
4-4	Výpočet doplňkových veličin za nízkého tlaku pomocí empirické vztahu pro druhý viriální koeficient	70
4-5	Výpočet doplňkových veličin za nízkého tlaku pomocí relace pro druhý viriální koeficient plyneací s Lennard - Jonesova potenciálu	72
4-6	Výpočet doplňkových veličin podle stavové rovnice Redlichovy - Kwongovy	72
4-7	Výpočet doplňkových termodynamických veličin podle teorému korespondujících stavů	74
4-8	Změna fugacitního koeficientu s teplotou za konstantního tlaku	75
4-9	Aplikace van der Waalsovy rovnice na Carnotův cyklus	76
4-10	Stanovení tenze par a výparného tepla podle stavové rovnice	78
4-11	Výpočet tepla u izobarického děje	80
4-12	Výpočet tepla a práce u izotermního děje	83
4-13	Výpočet tepla u izochorického děje s fázovou přeměnou	86
4-14	Výpočet konečného stavu systému při vratném adiabatickém ději	89
4-15	Určení objemové a technické práce při adiabatickém ději	91
5.	Termodynamické vlastnosti směsí	97
5-1	Tabelární a grafické vyjádření závislosti $H = H(T,p)$ u směsi	97
5-2	Výpočet entalpie a entropie směsi podle stavové rovnice	99
5-3	Výpočet entalpie a entropie směsi pomocí teorému korespondujících stavů	101
5-4	Výpočet entalpie směsi podle Amagatova zákona a Joffeho pravidla	102
5-5	Výpočet entalpie směsi podle Daltonova a Amagatova zákona, Bartlettova pravidla. Chování čistých látek je podchyceno stavovou rovnicí Redlicha a Kwonga	103
5-6	Výpočet tepla při izobarickém ději u ideální směsi	104
5-7	Výpočet tepla u izobarického děje určeného pomocí teorému korespondujících stavů	106

5-8	Výpočet tepla a práce u isetermního vratného děje pomocí stavové rovnice	106
5-9	Určení konečného stavu po vratném adiabatickém ději specifikovaném konečným stavem. Řešení pomocí stavové rovnice Redlichova a Kwonga	108
5-10	Určení konečného stavu po isentalpické (volné) expansi specifikované konečným tlakem. Řešení pomocí stavové rovnice Redlichova a Kwonga	111
5-11	Výpočet doplňkové a dodatkové entalpie podle stavové rovnice	114
5-12	Výpočet parciální molární směšovací entalpie složky na základě dat o dodatkové (směšovací) entalpii	116
5-13	Výpočet fugacitního koeficientu složky ve směsi na základě experimentálních dat $z = z(T, p, x_1)$	117
5-14	Výpočet fugacitních koeficientů složek na základě viriálního rozvoje	118
5-15	Výpočet fugacity složky ve směsi pomocí stavové rovnice (Redlichovy - Kwongovy) a K_p u syntézy amoniaku	118
5-16	Výpočet fugacity složky ve směsi podle Gamsonova pravidla	121
5-17	Výpočet aktivity složek ve směsi pro různě definované standardní stavy	123
5-18	Výpočet aktivního koeficientu v kapalně fázi na základě měření rovnováhy kapalina - pára	125
5-19	Rozpustnost kapalně látky v plynné směsi	127
5-20	Výpočet rovnováhy kapalina - pára pomocí stavové rovnice	128
5-21	Výpočet diferenciálního výparného a kondenzačního tepla a doplňkové entalpie pro kapalnou a parní fázi	132
6.	Viskozita plynů a kapalin	137
6-1	Viskozita plynů při normálním tlaku - aplikace teoretických metod	137
6-2	Výpočet molekulárních parametrů na základě experimentálních dat pro viskozitu	139
6-3	Výpočet viskozity plynů při normálním tlaku - aplikace metody korespondujících stavů	140
6-4	Výpočet viskozity ethanolu různými metodami	142
6-5	Viskozita plynů při zvýšeném tlaku v závislosti na hustotě	142
6-6	Viskozita plynů při zvýšeném tlaku v závislosti na teplotě a tlaku	144
6-7	Viskozita směsi plynů za normálního tlaku	145

6-8	Viskozita směsi plynů při vyšším tlaku	147
6-9	Korelace viskozity plynů s teplotou za normálního tlaku	147
6-10	Viskozita kapalin při normální teplotě	148
6-11	Výpočet poloměru kapiláry z Poiseuillovy rovnice	149
6-12	Aplikace Andradeho rovnice	149
6-13	Závislost viskozity kapalin na složení kapalně fáze	150
6-14	Korelace koncentrační závislosti viskozity směsí kapalin jed- nokonstantovými rovnicemi	151
6-15	Odhad viskozity směsí kapalin při normální teplotě	152
6-16	Viskozita roztoku elektrolytu	153
7.	Tepelná vodivost plynů a kapalin	156
7-1	Výpočet vycházející z kinetické teorie plynů - Euckenova rovnice	156
7-2	Aproximace vycházející z molekulární teorie plynů	157
7-3	Metody založené na teorému korespondujících stavů	158
7-4	Odhad tepelné vodivosti ethanolu v parní fázi	161
7-5	Tepelná vodivost plynů při vyšších tlacích	162
7-6	Tepelná vodivost plynu při velmi nízkém tlaku	163
7-7	Tepelná vodivost směsi plynů při normálním tlaku	163
7-8	Tepelná vodivost směsi plynů při vyšším tlaku	166
7-9	Tepelná vodivost kapalin	166
7-10	Korelace tepelné vodivosti roztoků neelektrolytů	167
7-11	Odhad tepelné vodivosti roztoků elektrolytů	168
8.	Difusní koeficienty v binárních systémech	171
8-1	Přepočet dat	171
8-2	Koeficient difuze v binární směsi plynů. Aplikace různých aproximačních vztahů	172
8-3	Porovnání hodnot D_{12} z korelace resp. aproximace s přímým experimentálním údajem	174
8-4	Ovlivnění přesnosti výpočtu difusního koeficientu odchylkami v hodnotách molekulárních parametrů	174
8-5	Označení difusních koeficientů v kapalně fázi	175
8-6	Koeficient difuze u binární směsi kapalin. Aproximace z ruz- ných koncentračních závislostí	176
8-7	Odhad difusního koeficientu složky v roztoku při nekonečném zředění	177
8-8	Odhad koeficientu samodifuze v kapalně fázi	178

8-9 Odhad koeficientu difuze v binární kapalně směsi podle Lefflera a Cullinana	180
8-10 Aproximace závislosti $D = f(T)$ kapalin v úzkém teplotním intervalu	180
8-11 Stanovení extrémní hodnoty difusního koeficientu v kapalně fázi	181
8-12 Koeficient difuze ve vodném roztoku elektrolytu	181
Literatura	184