

SEZNAM SYMBOLŮ	9
ÚVOD	15
1 POSTULÁTY A SOUBORY	17
1.1 Kanonický soubor	18
1.1.1 Praviděpodobnost kvantového stavu	18
1.1.2 Termodynamické funkce z partiční funkce Q	24
1.2 Velký kanonický soubor	25
1.2.1 Praviděpodobnost ve velkém kanonickém souboru	25
1.2.2 Termodynamické funkce z partiční funkce Ξ	29
1.3 Mikrokanonický soubor	30
1.4 Fluktuace	31
1.5 Soustava identických částic	33
1.5.1 Statistická termodynamika Maxwellova-Boltzmannova	33
1.5.2 Statistická termodynamika Fermiho-Diracova a Boseova-Einsteinova	34
2 IDEÁLNÍ PLYN	37
2.1 Soustava identických vzájemně se neovlivňujících molekul	37
2.2 Soustava jednoatomových molekul	39
2.2.1 Elektronová partiční funkce jednoatomových molekul	42
2.3 Partiční funkce dvouatomových molekul	44
2.3.1 Vibrační pohyb dvouatomové molekuly	44
2.3.2 Rotační pohyb dvouatomové molekuly	45
2.4 Partiční funkce víceatomových molekul	49
2.4.1 Rotační partiční funkce víceatomové molekuly	49
2.4.2 Vibrační partiční funkce víceatomové molekuly	52

2.4.3	Vnitřní rotace skupin atomů v molekule	53
2.4.4	Přesnější výrazy pro energii rotačně-vibračního pohybu	54
2.5	Termodynamické funkce směsí	55
2.6	Chemické rovnováhy v ideálním plynu	56
3	IDEÁLNÍ KRYSTAL	59
3.1	Einsteinova teorie	61
3.2	Debyeova teorie	63
3.2.1	Distribuční funkce frekvencí	63
3.2.2	Termodynamické funkce	65
3.3	Jednodimenzionální model	67
3.4	Fonony	70
3.5	Elektronový plyn	71
4	SOUSTAVY INTERAGUJÍCÍCH ČÁSTIC	75
4.1	Mezimolekulární interakce	75
4.1.1	Potenciály jednoduchých tekutin	75
4.1.2	Potenciály polárních molekul	81
4.1.3	Potenciály nepolárních nesférických molekul	82
4.1.4	Potenciály nesférických polárních molekul	83
4.1.5	Tripletní potenciál	83
4.2	Kvaziklasická statistická termodynamika	84
4.2.1	Translační partiční funkce	85
4.2.2	Lineární tuhý rotor	85
4.2.3	Nelineární tuhý rotor	86
4.2.4	Kvantově-mechanický postup	86
5	REÁLNÉ PLYNY	89
5.1	Viriální rozvoj v hustotě částic	90
5.2	Druhý viriální koeficient jednoduchých tekutin	94
5.2.1	Potenciál tuhých koulí	95
5.2.2	Pravoúhelníkový potenciál	96
5.2.3	Sutherlandův potenciál	96
5.2.4	Lennard-Jonesův 12-6 potenciál	97
5.2.5	Kiharův sférický potenciál	98
5.3	Druhý viriální koeficient molekulárních tekutin	99
5.4	Třetí viriální koeficient	102
5.5	Vyšší viriální koeficienty	103

5.6	Viriální rozvoj směsi	106
6	TEORIE KAPALIN	107
6.1	Rovnice van der Waalsova	108
6.2	Mřížkové teorie tekutin	111
6.2.1	Buňková teorie	111
6.2.2	Modifikace mřížkové teorie	117
6.2.3	Teorém korespondujících stavů	118
6.3	Simulační metody	119
6.3.1	Metoda Monte Carlo	120
6.3.2	Metoda molekulární dynamiky	123
6.4	Distribuční funkce tekutin	124
6.4.1	Obecné formulace	124
6.4.2	Postupy vedoucí k integro-diferenciálním rovnicím . .	130
6.4.3	Postupy vedoucí k integrálním rovnicím	131
6.4.4	Postupy vycházející z výrazu pro chemický potenciál .	134
6.5	Poruchové teorie tekutin	137
7	ROZTOKY NEELEKTROLYTŮ	143
7.1	Mřížkové teorie roztoků	144
7.1.1	Buňková teorie roztoků	144
7.1.2	Mřížková teorie regulárních roztoků	144
7.1.3	Mřížková teorie roztoků polymerů (Floryho–Hugginse)	147
7.1.4	Teorém korespondujících stavů pro roztoky	149
7.2	Strukturní teorie roztoků	149
7.2.1	Radiální distribuční funkce roztoků jednoduchých tekutin	149
7.2.2	Směs tuhých koulí	151
7.2.3	Jedno- a dvoutekutinová van der Waalsova aproximace	152
7.3	Poruchové rozvoje pro roztoky	154
7.3.1	Soustavy s pravoúhelníkovým potenciálem	154
7.3.2	Soustavy s měkkými repulsními silami	155
7.4	Roztoky molekulárních tekutin	156
8	ROZTOKY SILNÝCH ELEKTROLYTŮ	161
8.1	McMillanova–Mayerova teorie roztoků	161
8.2	Teorie Debyeova–Hückelova	164
8.2.1	Distribuční funkce	164

8.2.2	Termodynamické funkce	167
8.3	Integrální rovnice pro primitivní model	169
8.3.1	Odvození Debyeovy–Hückelovy rovnice	169
8.3.2	Aproximace MSA	170
8.3.3	Aproximace HNC	173
8.4	Poruchové postupy	174
9	ADSORPCE	177
9.1	Rovnice Langmuirova a BET	178
9.1.1	Langmuirova izoterma	178
9.1.2	Izoterma BET	180
9.2	Interakce mezi plynem a povrchem	182
9.3	Strukturní teorie adsorpce	185
9.3.1	Soustava tuhých koulí u tuhé stěny	186
9.3.2	Realistický model adsorpce	188
	DODATKY	189
D.1.	Hodnoty některých fyzikálních konstant	189
D.2.	Hodnoty některých určitých integrálů	189
D.3.	Stirlingův vzorec	189
D.4.	Pravděpodobnost a rozdělení	190
D.5.	Funkce $\Gamma(x)$	191
D.6.	Laplaceova a Fourierova transformace	192
D.7.	Geometrie konvexních těles	193
	REJSTŘÍK	195