

Obsah

Úvod	8
1 Chemická rovnováha	9
1.1 Základní pojmy	9
1.2 Systémy s jednou chemickou reakcí	9
1.2.1 Obecný zápis chemické reakce	9
1.2.2 Látková bilance	10
1.2.3 Gibbsova energie soustavy	12
1.2.4 Podmínka chemické rovnováhy	14
1.2.5 Přehled standardních stavů	15
1.2.6 Rovnovážná konstanta	16
1.2.7 Reakce v plynné a kapalně fázi	16
1.2.8 Reakce v pevné fázi	17
1.2.9 Heterogenní reakce	20
1.3 Závislost rovnovážné konstanty na stavových proměnných	21
1.3.1 Závislost na teplotě	21
1.3.2 Závislost na tlaku	22
1.4 Výpočet rovnovážné konstanty	23
1.4.1 Výpočet z rovnovážného složení	23
1.4.2 Výpočet z tabelovaných údajů	23
1.4.3 Výpočet z rovnovážných konstant jiných reakcí	26
1.4.4 Přepočty	26
1.5 Le Chatelierův princip	27
1.5.1 Vliv počátečního složení na rovnovážný rozsah reakce	27
1.5.2 Vliv tlaku	28
1.5.3 Vliv teploty	28
1.5.4 Vliv inerty	29
1.6 Simultánní reakce	29
1.6.1 Látková bilance	29
1.6.2 Chemická rovnováha složitějšího systému	30
2 Chemická kinetika	31
2.1 Základní pojmy a vztahy	31
2.1.1 Rychlost chemické reakce	31
2.1.2 Kinetická rovnice	33
2.1.3 Jednoduché reakce, řád reakce, rychlostní konstanta	33
2.1.4 Poločas reakce	34
2.1.5 Látková bilance	34

2.1.6	Metody řešení kinetických rovnic	35
2.2	Systematika jednoduchých reakcí	36
2.2.1	Reakce nultého řádu	36
2.2.2	Reakce prvního řádu	38
2.2.3	Reakce druhého řádu	39
2.2.4	Reakce třetího řádu	41
2.2.5	Reakce n -tého řádu s jednou výchozí složkou	43
2.2.6	Reakce n -tého řádu s dvěma a více výchozími složkami	44
2.2.7	Shrnutí vztahů	45
2.3	Metody určování řádů reakcí a rychlostních konstant	45
2.3.1	Formulace problému	45
2.3.2	Integrální metoda	46
2.3.3	Diferenciální metoda	47
2.3.4	Metoda poločasů	48
2.3.5	Zobecněná integrální metoda	48
2.3.6	Ostwaldova izolační metoda	48
2.4	Simultánní průběh chemických reakcí	49
2.4.1	Typy simultánních reakcí	49
2.4.2	Rychlost přírůstku látky u simultánních reakcí	50
2.4.3	Látková bilance u simultánních reakcí	50
2.4.4	Paralelní reakce prvního řádu	51
2.4.5	Paralelní reakce druhého řádu	51
2.4.6	Paralelní reakce prvního a druhého řádu	52
2.4.7	Vratné reakce prvního řádu	53
2.4.8	Vratné reakce a chemická rovnováha	53
2.4.9	Následné reakce prvního řádu	54
2.5	Mechanismy chemických reakcí	55
2.5.1	Elementární reakce, molekularita, mechanismus	55
2.5.2	Kinetické rovnice pro elementární reakce	56
2.5.3	Řešení mechanismů	56
2.5.4	Řídící děj	57
2.5.5	Bodensteinův princip ustáleného stavu	57
2.5.6	Lindemannův mechanismus reakcí prvního řádu	58
2.5.7	Princip předrovnováhy	58
2.5.8	Mechanismus některých reakcí třetího řádu	59
2.5.9	Řetězové reakce	60
2.5.10	Radikálové polymerace	60
2.5.11	Fotochemické reakce	61
2.6	Závislost rychlosti chemické reakce na teplotě	61
2.6.1	Van't Hoffovo pravidlo	62
2.6.2	Arrheniova rovnice	62
2.6.3	Srážková teorie	63
2.6.4	Teorie absolutních reakčních rychlostí	63
2.6.5	Obecný vztah pro závislost rychlostní konstanty na teplotě	64
2.7	Chemické reaktory	64
2.7.1	Typy reaktorů	65
2.7.2	Vsádkový reaktor	65
2.7.3	Průtočný reaktor	65

2.8	Katalýza	67
2.8.1	Základní pojmy	67
2.8.2	Homogenní katalýza	68
2.8.3	Heterogenní katalýza	68
2.8.4	Enzymová katalýza	69
3	Transportní děje	71
3.1	Základní pojmy	71
3.1.1	Pojem transportního děje	71
3.1.2	Tok a hnací síla	71
3.1.3	Základní rovnice transportních dějů	72
3.2	Tok tepla - tepelná vodivost	72
3.2.1	Způsoby přenosu tepla	72
3.2.2	Fourierův zákon	73
3.2.3	Tepelná vodivost	73
3.2.4	Fourierův-Kirchhoffův zákon	74
3.3	Tok hybnosti - viskozita	74
3.3.1	Newtonův zákon	74
3.3.2	Viskozita	75
3.3.3	Poiseuillova rovnice	75
3.4	Tok látky - difúze	76
3.4.1	První Fickův zákon	76
3.4.2	Difúzní koeficient	76
3.4.3	Druhý Fickův zákon	77
3.4.4	Samodifúze	77
3.4.5	Termodifúze	77
3.5	Kinetická teorie transportních dějů ve zředěném plynu	77
3.5.1	Molekulární podstata transportních dějů	78
3.5.2	Ideální plyn	78
3.5.3	Tuhé koule	78
3.5.4	Knudsenova oblast	79
4	Elektrochemie	81
4.1	Základní pojmy	81
4.1.1	Vodiče elektrického proudu	81
4.1.2	Elektrolyt a ionty	81
4.1.3	Nábojové číslo iontu	82
4.1.4	Podmínka elektroneutality	83
4.1.5	Stupeň disociace	83
4.1.6	Nekonečně zředěný roztok elektrolytu	83
4.1.7	Elektrochemická soustava	84
4.2	Elektrolýza	84
4.2.1	Reakce při elektrolýze	84
4.2.2	Faradayův zákon	85
4.2.3	Coulometry	86
4.2.4	Převodová čísla	87
4.2.5	Koncentrační změny při elektrolýze	87
4.2.6	Hittorfova metoda měření převodových čísel	88

4.3	Elektrická vodivost elektrolytů	89
4.3.1	Specifický odpor a specifická vodivost	89
4.3.2	Konstanta vodivostní nádoby	89
4.3.3	Molární elektrická vodivost	90
4.3.4	Kohlrauschův zákon o nezávislém putování iontů	90
4.3.5	Molární vodivost a stupeň disociace	91
4.3.6	Molární vodivost a převodová čísla	91
4.3.7	Závislost molární vodivosti na koncentraci	91
4.4	Chemický potenciál, aktivita a aktivitní koeficient v roztocích elektrolytů	92
4.4.1	Standardní stavy	92
4.4.2	Střední molalita, koncentrace, aktivita a aktivitní koeficient	93
4.4.3	Iontová síla roztoku	94
4.4.4	Debyeův - Hückelův limitní zákon	95
4.4.5	Aktivitní koeficienty při vyšších koncentracích	96
4.5	Disociace v roztocích slabých elektrolytů	96
4.5.1	Některé obecné poznámky	96
4.5.2	Iontový součin vody	96
4.5.3	Disociace slabé jednosytné kyseliny	97
4.5.4	Disociace slabé jednosytné zásady	98
4.5.5	Disociace slabých vícesytných kyselin a zásad	99
4.5.6	Disociace silných vícesytných kyselin a zásad	99
4.5.7	Hydrolýza solí	100
4.5.8	Hydrolýza soli slabé kyseliny a silné zásady	100
4.5.9	Hydrolýza soli slabé zásady a silné kyseliny	101
4.5.10	Hydrolýza soli slabé kyseliny a slabé zásady	101
4.6	Výpočty pH	101
4.6.1	Definice pH	102
4.6.2	pH vody	102
4.6.3	pH neutrálního roztoku	103
4.6.4	pH silné jednosytné kyseliny	103
4.6.5	pH silné jednosytné zásady	104
4.6.6	pH silné dvojsytné kyseliny a silné dvojsytné zásady	104
4.6.7	pH slabé jednosytné kyseliny	104
4.6.8	pH slabé jednosytné zásady	105
4.6.9	pH slabých vícesytných kyselin a zásad	106
4.6.10	pH soli slabé kyseliny a silné zásady	106
4.6.11	pH soli silné kyseliny a slabé zásady	106
4.6.12	pH soli slabé kyseliny a slabé zásady	107
4.6.13	Tlumivé roztoky	107
4.7	Rozpustnost málo rozpustných solí	108
4.8	Termodynamika galvanických článků	109
4.8.1	Základní pojmy	109
4.8.2	Značení galvanických článků	110
4.8.3	Elektrická práce	111
4.8.4	Nernstova rovnice	112
4.8.5	Elektromotorické napětí a termodynamické veličiny	112
4.8.6	Standardní vodíková elektroda	113
4.8.7	Nernstova rovnice pro poločlánek	113

4.8.8	Elektromotorické napětí a potenciály elektrod	114
4.8.9	Členění poločlánků	114
4.8.10	Příklady poločlánků	115
4.8.11	Členění galvanických článků	117
4.8.12	Elektrolytové koncentrační články s převodem	117
4.8.13	Elektrolytové koncentrační články bez převodu	118
4.8.14	Plynové elektrodové koncentrační články	118
4.8.15	Amalgamové elektrodové koncentrační články	118
4.9	Polarizace elektrod	119
5	Základní pojmy chemické fyziky	121
5.1	Interakce systémů s elektrickým a magnetickým polem	121
5.1.1	Permitivita	121
5.1.2	Molární polarizace a refrakce	122
5.1.3	Dipólový moment	122
5.1.4	Polarizovatelnost	123
5.1.5	Claussiova-Mossottiho a Debyeova rovnice	123
5.1.6	Permeabilita a susceptibilita	124
5.1.7	Molární susceptibilita	125
5.1.8	Magnetizovatelnost a magnetický moment	125
5.1.9	Interakce systému se světlem	125
5.2	Základy kvantové mechaniky	126
5.2.1	Schrödingerova rovnice	126
5.2.2	Řešení Schrödingerovy rovnice	126
5.2.3	Translace molekuly	127
5.2.4	Rotace	127
5.2.5	Vibrace	128
5.2.6	Pohyb elektronů kolem jádra	129
5.3	Interakce molekul s elektromagnetickým zářením	130
5.3.1	Vlnové charakteristiky záření	130
5.3.2	Částicové charakteristiky záření	131
5.3.3	Spektrum	131
5.3.4	Elektronová spektra	132
5.3.5	Vibrační a rotační spektra	133
5.3.6	Ramanova spektra	134
5.3.7	Spektra magnetické rezonance	134
6	Fyzikální chemie povrchů	137
6.1	Fázová rozhraní	137
6.1.1	Mezifázové napětí	137
6.1.2	Zobecněné Gibbsovy rovnice	138
6.1.3	Mezifázová energie	138
6.1.4	Povrchové napětí a povrchová energie	139
6.1.5	Kohezní práce, adhezní práce a rozestírací koeficient	139
6.1.6	Úhel smáčení	139
6.1.7	Laplaceova-Youngova rovnice a Kelvinova rovnice	140
6.1.8	Závislost povrchového napětí na teplotě	142
6.1.9	Závislost povrchového napětí na složení roztoku	142

6.1.10	Gibbsova adsorpční izoterma	143
6.1.11	Povrchové filmy	144
6.2	Adsorpční rovnováhy	145
6.2.1	Kvalitativní popis adsorpce	146
6.2.2	Adsorpční teplo	147
6.2.3	Fyzikální adsorpce a chemisorpce	147
6.2.4	Kvantitativní popis adsorpční izotermy u čistých plynů	147
6.2.5	Langmuirova izoterma u směsi plynů	148
6.2.6	Kapilární kondenzace	148
6.2.7	Adsorpce z roztoků na pevných látkách	149
7	Disperzní systémy	151
7.1	Základní rozdělení	151
7.2	Vlastnosti koloidních systémů	152
7.2.1	Rozptyl světla	152
7.2.2	Sedimentace koloidních částic	153
7.2.3	Membránové rovnováhy	154
		156
	Tabulky	157
	Rejstřík	