

1. Úvod	11
2. Klasická termodynamika	13
2.1. Termodynamické principy	13
2.2. Uzavřená jednofázová soustava	14
2.3. Otevřená jednofázová soustava	17
2.3.1. Parciální molární veličiny	17
2.3.2. Chemický potenciál	20
2.4. Podmínky termodynamické rovnováhy	21
2.4.1. Uzavřený adiabatický systém	21
2.4.2. Uzavřený isothermní mechanicky izolovaný systém	22
2.4.3. Uzavřený isothermní isobarický systém	23
2.4.4. Rovnováha v soustavě o více složkách a více fázích	23
2.4.5. Gibbsův fázový zákon	25
2.4.6. Rovnováha v soustavě, jejíž složky chemicky reagují	25
2.5. Přehled vztahů klasické termodynamiky	27
3. Kvantová mechanika	29
3.1. Principy kvantové mechaniky	29
3.2. Aplikace kvantové mechaniky	30
3.2.1. Volná částice	30
3.2.2. Částice v omezeném prostoru	31
3.2.3. Lineární harmonický oscilátor	35
3.2.4. Tuhý rotor	37
4. Statistická termodynamika	41
4.1. Termodynamický stav a možné kvantové stavy systému	41
4.2. Soubory a základní postuláty	42
4.3. Kanonický soubor	43
4.3.1. Statistická analoga termodynamických funkcí (kanonický soubor)	47
4.4. Velký kanonický soubor	53
4.4.1. Statistická analoga termodynamických funkcí (velký kanonický soubor)	57
5. Termodynamické funkce ideálního plynu	62
5.1. Partiční funkce systému identických, vzájemně se neovlivňujících částic	62
5.2. Příspěvek translace k termodynamickým funkcím	67
5.3. Příspěvky vnitřních stupňů volnosti k termodynamickým funkcím	69
5.3.1. Elektronická partiční funkce jednoatomových molekul	69
5.3.2. Vnitřní partiční funkce dvouatomové molekuly	72

5.3.2.1. Rotace dvouatomové molekuly	72
5.3.2.2. Vibrace dvouatomové molekuly	74
5.3.2.3. Vyšší aproximace vnitřní partiční funkce	76
5.3.3. Vnitřní partiční funkce víceatomové molekuly	77
5.3.3.1. Rotace víceatomové molekuly	77
5.3.3.2. Vibrace víceatomové molekuly	80
5.3.3.3. Vnitřní rotace skupiny atomů v molekule	83
5.4. Termodynamické funkce směsi	84
6. Reálný plyn — Viriální rozvoj	86
6.1. Mezimolekulární síly	86
6.2. Viriální rozvoj a partiční funkce velkého kanonického souboru	89
6.3. Viriální rozvoj z kanonické partiční funkce	92
6.4. Viriální rozvoj pro směs reálných plynů	95
6.5. Druhý viriální koeficient pro jednoduché párové potenciály	97
6.6. Třetí a vyšší viriální koeficienty	100
7. Ideální krystal	102
7.1. Partiční funkce ideálního krystalu	102
7.2. Einsteinova teorie	103
7.3. Normální vibrace v ideálním krystalu	104
7.3.1. Debyeova aproximace	106
7.3.2. Termodynamické funkce v Debyeově teorii	107
7.4. Vyšší aproximace rozdělovací funkce frekvencí	111
8. Teorie kapalin	114
8.1. Van der Waalsova rovnice	114
8.2. Teorie buněk	117
8.3. Teorie významných struktur	122
8.4. Metoda radiální distribuční funkce	123
9. Teorie roztoků neelektrolytů	133
9.1. Van der Waalsova rovnice směsí	133
9.2. Buňková teorie roztoků	135
9.3. Metoda radiální distribuční funkce	138
9.4. Mřížková teorie regulárních roztoků	138
9.4.1. Nultá aproximace	138
9.4.2. Quasichemická aproximace	140
9.5. Floryho-Hugginsova teorie	142
9.6. Teorem korespondujících stavů	143
Dodatek 1	148
Hodnoty některých fyzikálních konstant	148
Dodatek 2	149
Vlastnosti úplného diferenciálu, Cauchyho podmínky	149
Dodatek 3	152
Metoda Lagrangeových součinitelů	152
Dodatek 4	155
Diferenciální rovnice $y'' + (a - b^2x^2)y = 0$	155

Dodatek 5	
Parciální diferenciální rovnice $(1/\sin \Theta) (\partial/\partial \Theta) [\sin \Theta (\partial y/\partial \Theta)] + (1/\sin^2 \Theta) \cdot (\partial^2 y/\partial \Phi^2) + \alpha y = 0$	159
Dodatek 6	
Základní vztahy kombinatoriky	163
Dodatek 7	
Metoda maximálního členu	166
Dodatek 8	
Stirlingův vzorec	167
Dodatek 9	
Hodnoty některých integrálů	168
Dodatek 10	
Substituce ve vícenásobném integrálu	169
Dodatek 11	
Kinetická energie rotujícího tělesa	171
Dodatek 12	
Quasiklasická metoda určení partiční funkce	175
Dodatek 13	
Harmonické vibrace víceatomových molekul	178
Dodatek 14	
Vibrační příspěvky k termodynamickým veličinám (Einsteinovy funkce)	183
Dodatek 15	
Hodnoty Debyeovy funkce	192
Literatura	193
Rejstřík	195