C – Charakteristika studijního předmětu nebo tématického bloku

Název studijního předmětu	Modelování ve fyzikální chemii
Způsob zakončení	zkouška
Další požadavky na studenta	
Přednášející	prof. Ing. Josef Šedlbauer, Ph.D.

Stručná anotace předmětu

Obsahem kursu je termodynamické modelování: stavové rovnice, modely pro standardní a dodatkový chemický potenciál, termodynamické a transportní vlastnosti disperzních systémů, rovnováha a kinetika dějů v heterogenních soustavách. V průběhu semestru bude zadáno 7-9 aplikačně zaměřených úkolů a projektů. Zkouška proběhne jako debata nad výsledky řešení úkolů a projektu.

Stručný obsah přednášek:

Termodynamické funkce, jejich závislost na stavových proměnných, výpočet na základě znalosti stavového chování a termochemických údajů.

Stavové chování: P-V diagram, kritické veličiny. Stavové rovnice čistých látek a směsí. Výpočty stavového chování, odhadové metody, zdroje dat.

Termochemické vlastnosti: tepelná kapacita, formační veličiny - použití, zdroje dat. Termochemické zákony, entalpické bilance, bilance v reaktorech.

Vlastnosti na mezi sytosti: hustota a tepelná kapacita kapalin, tenze par, entalpie fázových přechodů. Korelační rovnice, zdroje dat.

Termodynamika roztoků: parciální molární veličiny, symetrický a asymetrický standardní stav. Chemický potenciál, fugacita, aktivita, aktivitní koeficient.

Fázové rovnováhy v roztocích: Raoultův zákon, Henryho zákon, rozpustnost tuhých látek. Metody pro odhad aktivitních koeficientů.

Chemické rovnováhy v roztocích: reakční izoterma, rovnovážné konstanty, metody založené na minimalizaci Gibbsovy energie.

Kinetika v heterogenních soustavách: sestavování kinetického modelu, aplikace kinetických principů na heterogenní systémy, enzymová katalýza. Modelování chemických reaktorů.

Termodynamika roztoků polymerů a systémů s fázovým rozhraním: směšovací veličiny, Floryho-Hugginsova teorie a její aplikace, povrchové napětí, Laplaceova-Youngova rovnice, Kelvinova rovnice.

Adsorpce na pevném povrchu a na pohyblivém rozhraní: Gibbsova adsorpční izoterma, empirické adsorpční izotermy.

Transportní vlastnosti v disperzních systémech: osmotický tlak, van'tHoffova rovnice, osmometrie. Difúzní a frikční koeficient, Fickovy zákony, Einsteinova rovnice.