

E – Charakteristika studijního předmětu				
Název studijního předmětu	Modelování ve fyzikální chemii			
Typ předmětu	povinně volitelný		dopor. ročník / semestr	L
Rozsah studijního předmětu	2+1	hod. za týden	3	kreditů 5
Jiný způsob vyjádření rozsahu				
Způsob zakončení	zkouška		Forma výuky	přednáška, seminář
Další požadavky na studenta				
Vypracování všech zadaných úkolů a projektu.				
Vyučující	doc. Ing. Josef Šedlbauer, Ph.D.			
Stručná anotace předmětu				
<p>Obsahem kursu je termodynamické modelování pro inženýrskou praxi: 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 projekt. Zkouška proběhne jako debata nad výsledky řešení úkolů a projektu.</p>				
<p>Stručný obsah přednášek:</p> <p>1. Termodynamické funkce, jejich závislost na stavových proměnných, výpočet na základě znalosti stavového chování a termochemických údajů.</p> <p>2. Stavové chování: P-V diagram, kritické veličiny. Stavové rovnice čistých látek a směsí. Výpočty stavového chování, odhadové metody, zdroje dat.</p> <p>3. Termochemické vlastnosti: tepelná kapacita, formační veličiny - použití, zdroje dat. Termochemické zákony, entalpické bilance, bilance v reaktorech.</p> <p>4. Vlastnosti na mezi sytosti: hustota a tepelná kapacita kapalin, tenze par, entalpie fázových přechodů. Korelační rovnice, zdroje dat.</p> <p>5. Termodynamika roztoků: parciální molární veličiny, symetrický a asymetrický standardní stav. Chemický potenciál, fugacita, aktivita, aktivitní koeficient.</p> <p>6. Fázové rovnováhy v roztocích: Raoultův zákon, Henryho zákon, rozpustnost tuhých látek. Metody pro odhad aktivitních koeficientů.</p> <p>7.-8. Chemické rovnováhy v roztocích: reakční izoterma, rovnovážné konstanty, metody založené na minimalizaci Gibbsovy energie.</p> <p>9.-10. Kinetika v heterogenních soustavách: sestavování kinetického modelu, aplikace kinetických principů na heterogenní systémy, enzymová katalýza. Modelování chemických reaktorů.</p> <p>11. Termodynamika roztoků polymerů a systémů s fázovým rozhraním: směšovací veličiny, Floryho-Hugginsova teorie a její aplikace, povrchové napětí, Laplaceova-Youngova rovnice, Kelvinova rovnice.</p> <p>12.-13. Adsorpce na pevném povrchu a na pohyblivém rozhraní: Gibbsova adsorpční izoterma, empirické adsorpční izotermy.</p> <p>14. Transportní vlastnosti v disperzních systémech: osmotický tlak, van't Hoffova rovnice, osmometrie. Difúzní a frikční koeficient, Fickovy zákony, Einsteinova rovnice.</p>				
Studijní literatura a studijní pomůcky				
<p>Dohnal, V., Novák, J., Matouš, J.: Chemická termodynamika II - Fázové rovnováhy, VŠCHT Praha, 1997.</p> <p>Pouchlý, J.: Fyzikální chemie makromolekulárních a koloidních soustav, VŠCHT Praha, 2001.</p> <p>Malíjevský, A. a kol.: Breviář z fyzikální chemie, VŠCHT Praha, 2000.</p> <p>Prausnitz, J.M., Lichtenthaler, R.N., Azevedo, E.G.: Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria, Prentice-Hall Inc., 1998.</p> <p>Poling, B.E., Prausnitz, J.M., O'Connell, J.P.: The Properties of Gases and Liquids, McGraw-Hill, 2001.</p>				