

FCH A

1. Opakování: správná praxe používání a převodu jednotek, různé vyjadřování koncentrací. Základní pojmy fyzikální chemie (systém, skupenství, fáze, veličina, děj, rovnováha, stacionární proces). Nultý termodynamický zákon, empirická teplota. Stavová rovnice obecně (termická); *bonus: trochu historie*. Ideální plyn, odvození stavové rovnice z kinetické teorie plynů, ekvipartiční princip a interpretace teploty. Směs ideálních plynů, parciální tlak. [30]
2. Popis stavového chování (koeficienty roztažnosti/rozpínavosti/stlačitelnosti/modul pružnosti, kompresibilitní faktor). Fázový diagram čisté látky, reálná tekutina, kritický bod, teorém korespondujících stavů, popis (izotermy/izobary/izochory); *bonus: univerzalita kritického bodu*. [19]
3. Hyperplocha potenciální energie, mezimolekulární síly, navození van der Waalsovy rovnice, kubické rovnice. Viriálový rozvoj. Stavové rovnice pro směsi reálných plynů, směšovací a kombinační pravidla. [26]
4. První termodynamický zákon: vnitřní energie (kalorická stavová rovnice), historie. Entalpie, Bonus: Legendreova transformace (graficky). Vnitřní energie ideálního plynu z kinetické teorie, historie, ekvipartiční teorém. Teplo, práce a jejich výpočet, tepelné kapacity, Mayerův vztah, vratný adiabatický děj. [22]
5. Reakční teplo, standardní reakční, slučovací a spalné entalpie a vnitřní energie. Hessův zákon a entalpická bilance, závislost reakční entalpie na teplotě, termochemické výpočty, kalorimetrická rovnice. [22]
6. Matematika: funkce více proměnných a potenciál, totální diferenciál, substituce proměnné. Druhý termodynamický zákon: tepelné stroje, zavedení entropie a absolutní termodynamické teploty pomocí Carnotova cyklu. Statistická interpretace entropie light. Totální diferenciál vnitřní energie, Helmholtzova a Gibbsova energie, Gibbsovy fundamentální rovnice, Maxwellovy vztahy. Změna stavových funkcí S , U , H s teplotou, tlakem a objemem. [30]
7. Interpretace F, G ; extenzivní podmínky rovnováhy. Boltzmannova pravděpodobnost (navození pomocí barometrické rovnice), statisticko-termodynamická interpretace fundamentální rovnice pro vnitřní energii, Boltzmannova rovnice pro entropii, reziduální entropie krystalů. Směšovací entropie. Třetí termodynamický zákon, význam absolutní entropie. *Bonus: H-teorém, informační entropie, Landauerův princip*. (část přednášky 7 přesunout do 8) [30]
8. Termodynamika nevratných dějů. Bonus: zkapalňování plynů, Jouleův–Thompsonův jev. [10]
9. Termodynamika směsí, parciální molární veličiny. Gibbsova–Duhemova rovnice. [21]
10. Fugacita pro čistou složku, fugacitní koeficient. Chemický potenciál, pojem standardního stavu, aktivita, fugacita ve směsi. Intenzivní podmínky rovnováhy. Gibbsův fázový zákon. Fázový diagram čisté látky. [28]
11. Clapeyronova a Clausiova–Clapeyronova rovnice, Antoineova rovnice. Experimentální stanovení tlaku nasycených par. Alotropie a polymorfismus. Rovnováhy ve vícesložkových systémech, fázové diagramy a jejich interpretace. Rovnováha kapalina–pára, Raoultův zákon. [26]
12. Model regulárního roztoku. neideální kapalná směs, azeotrop a heteroazeotrop. Přehánění s vodní parou. Kritéria stability, metastability a nestability, spinodální dekompozice. Koligativní vlastnosti: kryoskopie, ebullioskopie. Rozpustnost plynů v kapalinách, Henryho zákon a jeho různá vyjádření. Pákové pravidlo. [29]
13. Rovnováha kapalina–pevná látka, termodynamický popis, eutektikum a peritektikum, interpretace složitějších diagramů. Křivky chladnutí. Ternární systémy, trojúhelníkové diagramy, kritický bod, konody. Nernstův rozdělovací zákon. [32]

FCH B

14. Chemická rovnováha, reakční Gibbsova energie, směr reakce. Rovnovážná konstanta a různé metody jejího výpočtu, závislost rovnováhy na teplotě a tlaku. [29]
15. Metody výpočtu rovnováh (bilance pro jednu i více reakcí, rovnice či soustava rovnic, minimalizace Gibbsovy energie). Reakce v plynné fázi i s čistou pevnou či kapalnou složkou, rozkladné reakce. Reakce v pevné fázi. [17]
16. Reakce v roztocích elektrolytů, řešení rovnováh. Příklady: silné a slabé kyseliny, hydrolýza solí, pufry, výpočty pH, vícesytné kyseliny a zásady (speciace), rozpustnost solí a její ovlivnění. [27]
17. Formální chemická kinetika, rychlost reakce, kinetická rovnice, poločas, bilance pro jednoduché a simultánní reakce. Následné, boční a vratné reakce, vztah k rovnováze (zákon působení aktivních hmot). Kinetická měření, stanovení řádu reakce z rychlostí nebo integrovaného tvaru kinetické rovnice. [22]
18. Elementární reakce, (hyper)plocha potenciální energie, tranzitní stav, Arrheniův vztah; *bonus: Eyringova rovnice a srážková teorie*. Reakční mechanismy a aproximace stacionárního stavu. Katalýza, enzymatické reakce (mechanismus Michaelise a Mentenové), radikálové reakce. Energie fotonu, kvantový výtěžek fotochemické reakce. [16]
19. Elektrická dvojrstva, Poissonova–Boltzmannova rovnice, Gouyův–Chapmanův model, Debyeovo stínění (řešení linearizované rovnice). Debyeova–Hückelova teorie roztoků elektrolytů (bez odvození), aplikace. Elektrolýza a Faradayův zákon. [23]
20. Beketovova řada (**přesunout do 19.**), elektrolytické a galvanické články, elektrody. Rovnovážné galvanické články, termodynamika reakcí v článku, Nernstova rovnice. Typy elektrod, galvanické články jako zdroje energie. Přepětí, koroze, elektroanalytické techniky. [31]
21. Transportní jevy (obecně), tok (hmoty, náboje atd.) a termodynamická síla. Difuze: Fickovy zákony resp. Fourierův zákon a rovnice vedení tepla. Einsteinova–Smoluchowského a Einsteinova–Stokesova rovnice, Brownův pohyb. *Bonus: Produkce entropie, princip minimální produkce entropie*. Migrace iontů v roztocích elektrolytů, konduktivita, molární vodivost, pohyblivost iontů a vztah k difuzivitě. Kohlrauschův zákon. Měření vodivosti. Převodová čísla, Nernstova vrstva. *Zrušeno: měření převodových čísel*. [24]
22. Elektrické jevy na membránách, Donnanovy rovnováhy. Nerovnovážné jevy, Nernstova–Planckova rovnice, kapalinový potenciál. Osmotický tlak, van 't Hoffova rovnice, osmotický viriálový rozvoj (stručně). [19]
23. Rozhraní. Mezifázová energie a povrchové napětí, zakřivená rozhraní, Laplaceův tlak, kapilární elevace a deprese, Laplaceova–Youngova rovnice, Kelvinova (Gibbsova–Thomsonova, Ostwaldova–Freundlichova) rovnice. Nukleace a spinodální dekompozice. [22]
24. Disperzní systémy: vlastnosti, klasifikace, rozdělovací funkce. Sedimentace. Stabilita disperzí. Surfaktanty, povrchový tlak. Polymery (ideální řetězec). *Bonus: Elektroosmóza, elektroforéza*. Micely, filmy, gely, atmosférické aerosoly. **Změnit pořadí?!** [32]
25. Adsorpce. Fyzikální adsorpce a chemisorpce. Základní adsorpční izotermy (Langmuirova, BET, Freundlichova). Kapilární kondenzace. Disociativní adsorpce, Langmuirův–Hinshelwoodův a Elyeův–Ridealův mechanismus. Gibbsova adsorpční izoterma. [18]
26. *Bonus: Struktura a anomálie vody*. [53]

Aktualizováno 11.09.2021. V [.] je počet slajdů přednášky.