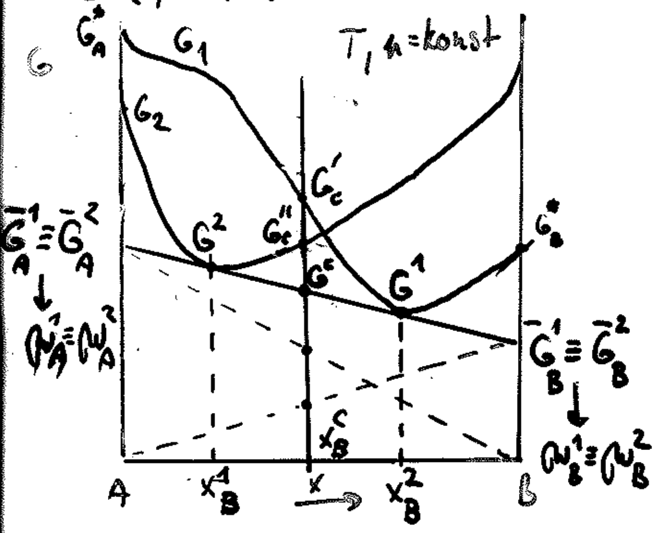
Termodynamické podmínky fázové rovnováhy

úvod (příklad binarní s.):



$$G^c = \frac{G^{total}}{n_g}$$ n_g … celkový počet molů v soustavě

$$G^c = G^2 \cdot p_2 + G^1 \cdot p_1 =$$

$$= G^2 \cdot \frac{x_B^1 - x_B^c}{x_B^2 - x_B^1} + G^1 \cdot \frac{x_B^1 - x_B^c}{x_B^2 - x_B^1} \quad (1)$$

$$G^c = \bar{G}_A^1 \cdot x_A^c + \bar{G}_B^2 \cdot x_B^c \quad (2)$$

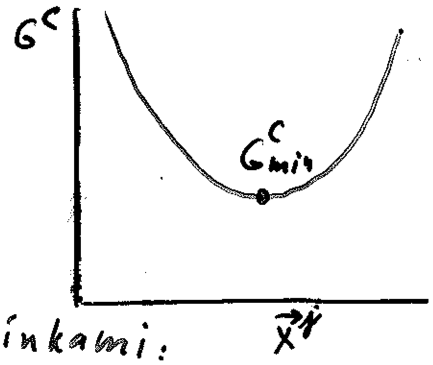
$1 = x_B^c + x_A^c$ atd…

Integrální podmínka fázové rovnováhy (min. energie)

$$\frac{G^{tot}}{n_g \; [J/mol]} = G^c = \sum_{j=1}^{f} \overset{\text{fázový podíl}}{p_f}(\vec{x}^f) \cdot G^f(p, T, \vec{x}^f) \; \overset{!}{\nabla}$$

kde $\vec{x}^f \equiv (x_1^1 \dots x_s^1 \, x_1^j \, x_s^j \, x_1^f \dots x_s^f)$

a $x_i^j = g(\vec{n}^j)$ $\quad \vec{n}^j \equiv (n_1^j, n_2^j, \dots n_s^j)$



$\overset{!}{\nabla}$ hledání minima je vázané podmínkami:

1. zákon zachování hmoty pro každou složku $i = 1, s$

   $n_i^c = n_i^1 + n_i^2 \dots + n_i^j \dots n_i^f$

2. podmínky zachování stechiometrie stechiom. fází

   $\alpha \cdot n_1^j + \beta n_2^j + \dots = 0$ např.: $j = Al_2O_3$: $3 \cdot n_{Al} - 2 n_O = 0$

3. podmínky elektroneutrality $(+) = (-)$ (pokud složky nesou náboj)

Důležitá vlastnost:

$\overset{!}{\nabla}$ vazné podmínky jsou při zvolení látkových mn. jako var. lineární $\overset{!}{\nabla}$