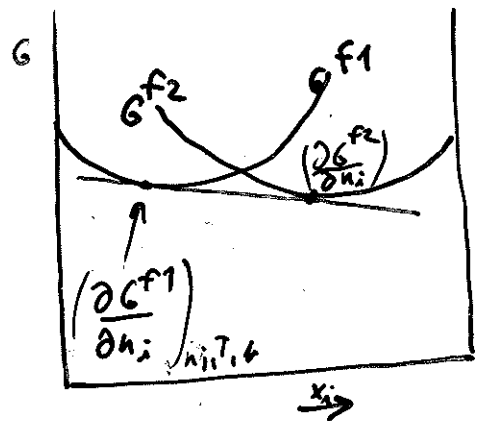


Přechod od integračního k diferenciálnímu anal. popisu podmínky fáz. rovn. pro vícetřížkový model fáze

int. podm.:  $G^{celk} = \sum_{j=1}^f n_j G^f$

jestli soustava v termodyn. rovnováze  $G^{celk}$  je minimální

platí pro každou složku  $i=1, \dots, s$



2 \*

$$\left(\frac{\partial G^{celk}}{\partial n_i}\right)_{T, P, n_j} = \left(\frac{\partial G^{f1}}{\partial n_i}\right) = \left(\frac{\partial G^{f2}}{\partial n_i}\right) = \dots = \left(\frac{\partial G^{ff}}{\partial n_i}\right)$$

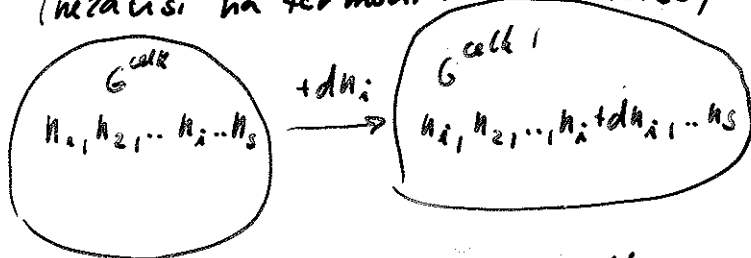
$$\parallel \quad \parallel \quad \parallel \quad \parallel$$

$$\mu_i = \mu_i^{f1} = \mu_i^{f2} = \dots = \mu_i^{ff}$$

$$\parallel \quad \parallel \quad \parallel \quad \parallel$$

$$\mu_{i, SEZ}^0 + RTa_i = \mu_{i, SEZ}^0 + RTa_i = \dots$$

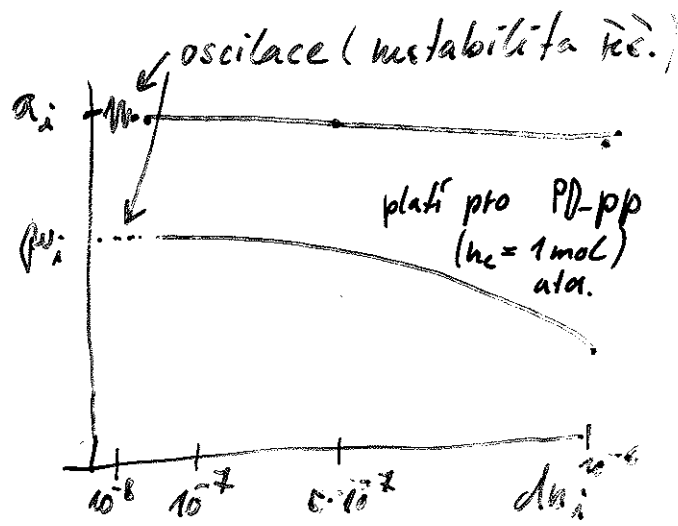
A, Numerický výpočet chem. potenciálu a aktivity (nezávisí na termod. modelu fáze)



$$\mu_i = \frac{G^{celk'} - G^{celk}}{dn_i}$$

- Výhody: - využívá algoritmu  $G^{celk}$   
 - nezávisí na počtu fází v rovnováze

- Nevýhody -  $\nabla$  oscilace  
 - nutno zvolit optimální  $dn_i$  pro PD-PP  $dn_i \approx (10^{-8} - 10^{-6}) \text{ mol}$



# B, analytický výpočet chem. potenciálu a aktivity (závisí na termod. modelu fáze)

$$G^f(T, x) = \sum_{i0} P(y) G_{i0} + \dots$$

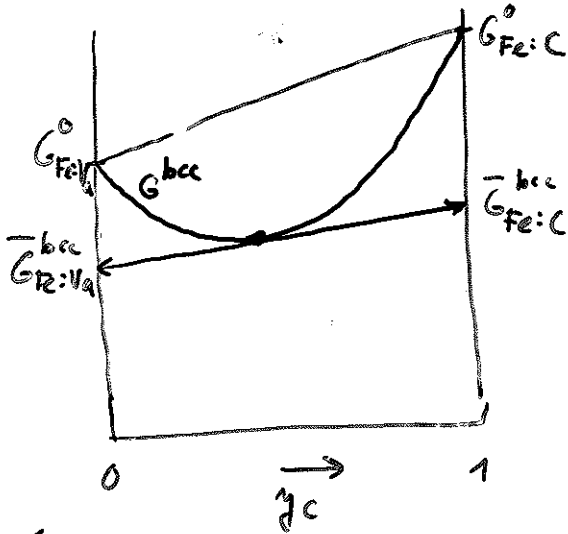
např.:

$$G^{bcc} = y_{Fe} y_C G_{Fe:C} + y_{Fe} y_{Va} G_{Fe:Va} + \dots$$

Gibbsova en. parciálních složek

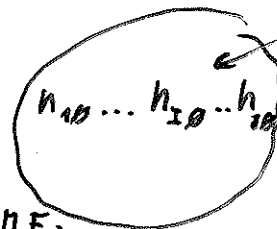
$$= y_C G_{Fe:C}^{bcc} + y_{Va} G_{Fe:Va}^{bcc}$$

parciální Gibbsova en. parc. složek



výpočet chemického potenciálu parciální sloučeniny:

$$\bar{G}_{i0} = \left( \frac{\partial G^f}{\partial n_{i0}} \right)_{T, p, n_{j0}}$$



např.:

$$dn_{i0} (= dn_{Fe} + dn_C) = 2 dn_x$$

bylo zjištěno a odvozeno pro VMFF:

$$\bar{G}_{i0} = G_{i0}^f + \sum_s \left( \frac{\partial G^f}{\partial y_{is}^s} - \sum_j y_{ij}^s \frac{\partial G^f}{\partial y_{ij}^s} \right) = \bar{G}_{i0} = D \times G^f$$

⇒ nutno působit operátorem D na funkci  $G^f$

$$D = 1 + \sum_s \left( \frac{\partial}{\partial y_{is}^s} - \sum_j y_{ij}^s \frac{\partial}{\partial y_{ij}^s} \right)$$

tak lze získat parciální G.en. parc. složek (např.  $\bar{G}_{Fe:C}$ ,  $\bar{G}_{Fe:Va}$ )  
+ ypu

získání chem. potenciálu: vhodná lin. kombinace  $\bar{G}_{i0}$

např.:

$$\mu_C^f = \bar{G}_{Fe:C}^f - \bar{G}_{Fe:Va}^f$$

$$\mu_{Fe}^f = \bar{G}_{Fe:Va}^f$$

získání aktivity:

$$\mu_C^f = \mu_C^{SER} + RT \ln a_C^f$$