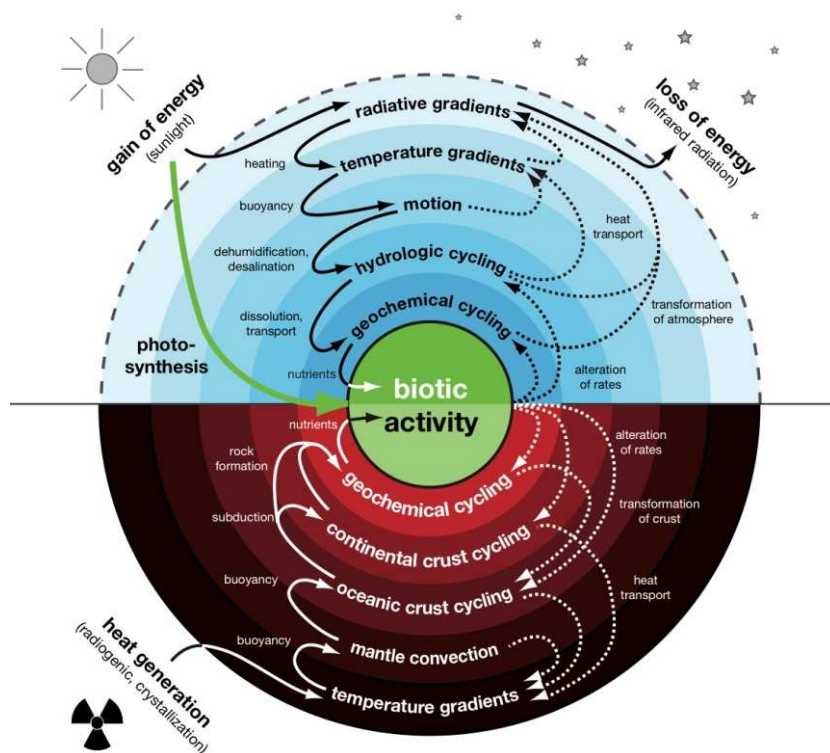
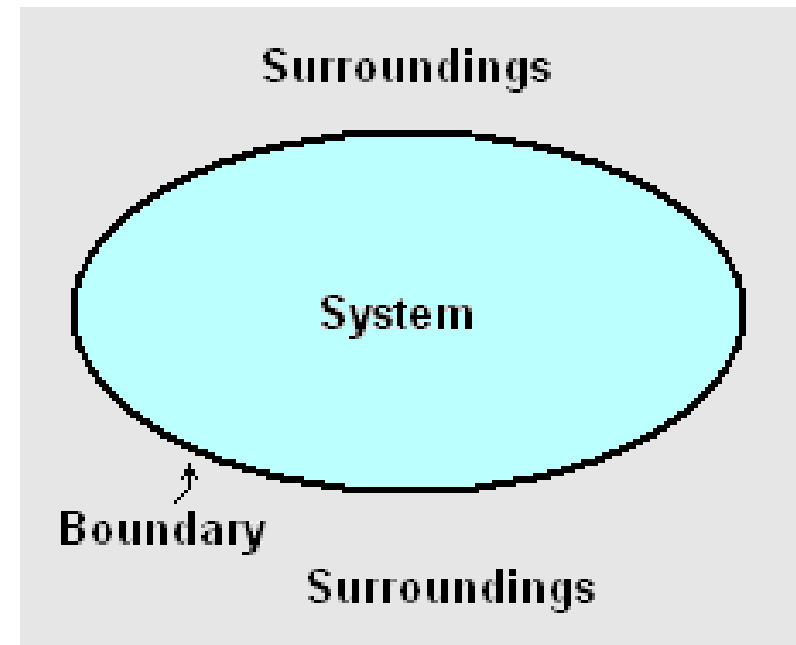


Termodynamická soustava

Skutečný systém



Aproximace

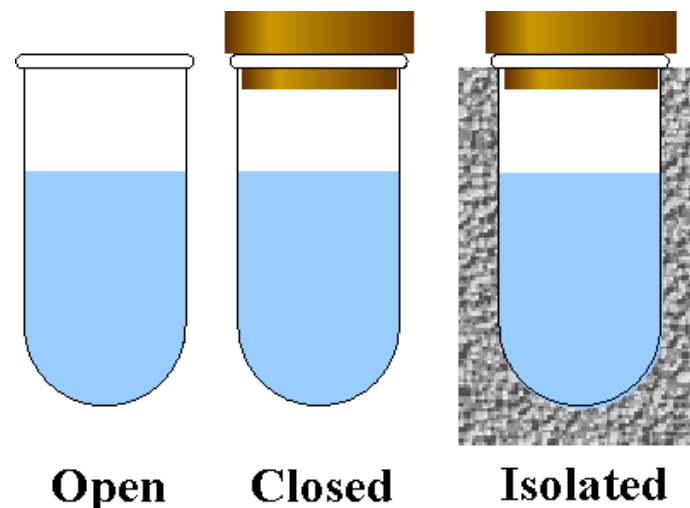


Stavu okrajové podmínky

Otevřená soustava: probíhá výměna hmoty a energie s okolím.

Uzavřená soustava: probíhá výměna energie s okolím (nikoliv hmota).

Isolovaná soustava: neprobíhá výměna hmoty ani energie s okolím.

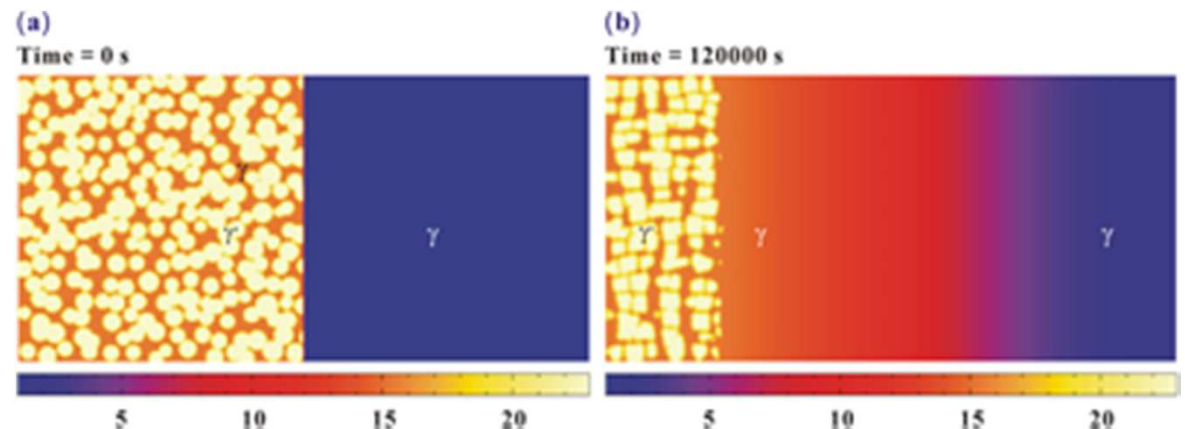
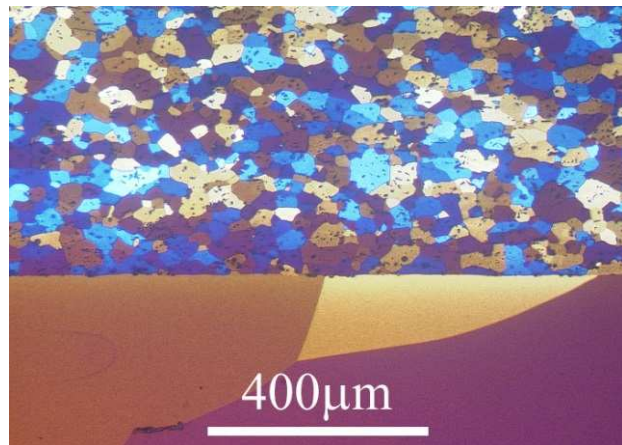


Vnitřní a vnější makroskopické proměnné: teplota, objem, tlak, energie, intenzita elektromagnetického pole (gravitačního, aj.), látkové množství (vyjádření složením), atd.

Lokální fluktuace: viz statistika, obvykle zanedbáváme.

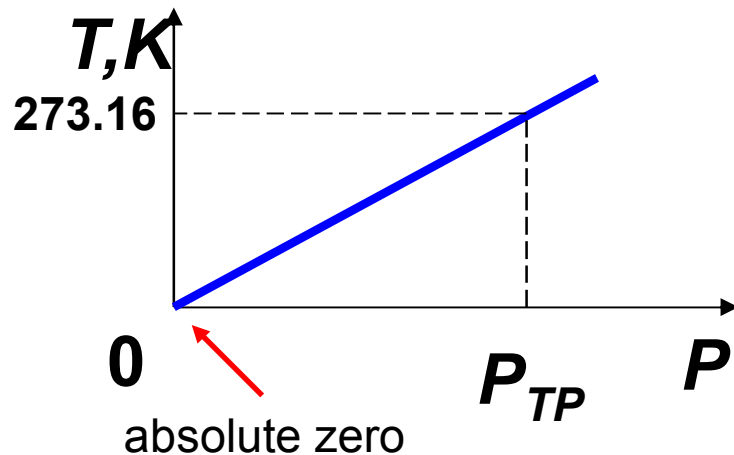
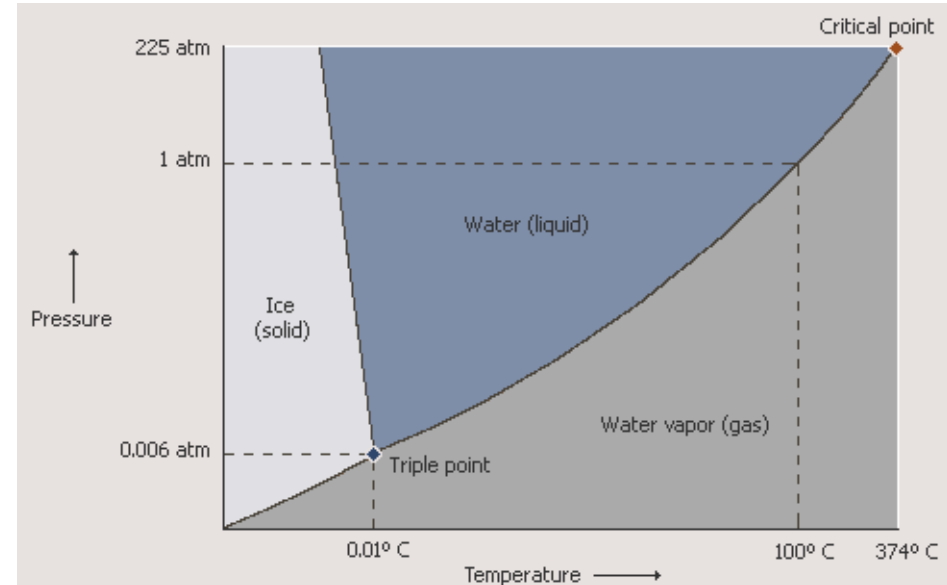
Podmínky (okrajové proměnné)

- Konstantní: teplota, tlak, objem, ...(najděte vhodné konkrétní případy)
- Popište stav a okrajové podmínky: vzorek pro metalografii, vzorek slitiny v ampuli, voda v kádince, voda v PET, mrak, pěna, živý organismus, difúzní pár, elektrochemický článek, ...)
- Závěr: pro popis objektů a simulace jejich chování nutno používat aproximace.



The Absolute (Kelvin) Temperature Scale

The absolute (Kelvin) temperature scale is based on fixing T of the triple point for water (a specific $T = 273.16$ K and $P = 611.73$ Pa where water can coexist in the solid, liquid, and gas phases in equilibrium).



$$T \equiv 273.16 \text{ K} \left(\frac{P}{P_{TP}} \right)$$

- for an ideal gas
constant-volume
thermoscope

P_{TP} – the pressure of the gas in a constant-volume gas thermoscope at $T = 273.16$ K

Vícesložková soustava

Popis chemického složení: celkové složení, fázové složení, složení koexistujících fází, mřížkové složení.

Různé způsoby vyjádření: molární zlomky (termodynamika), wt % (inženýrství), at. % (fyzikové), obj. % (), hm. % ().



Rovnováha

Tlaková (mechanická)

Teplotní (tepelná)

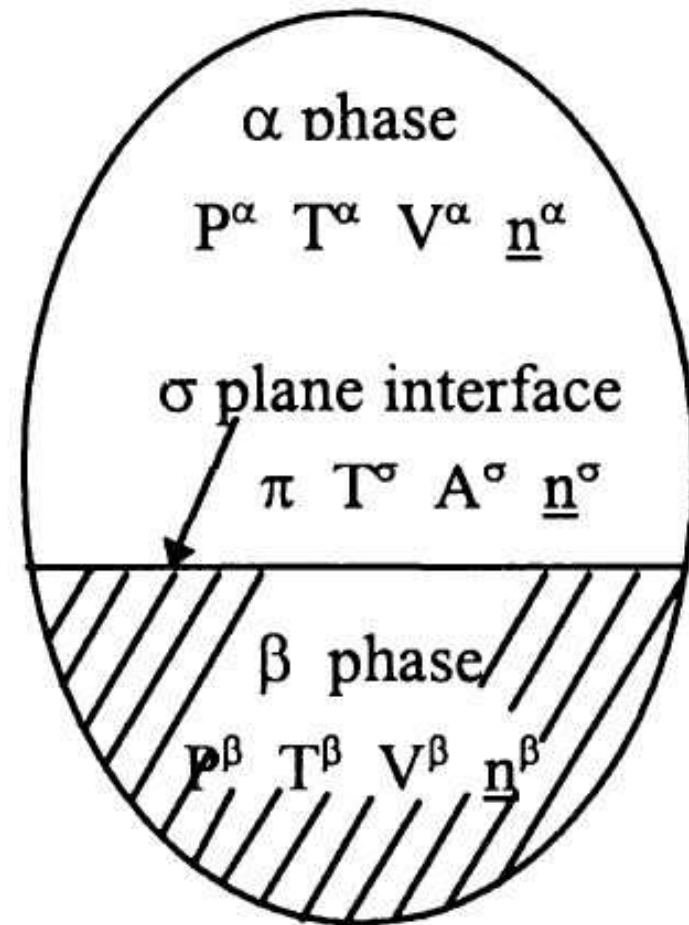
Chemická

Equilibrium

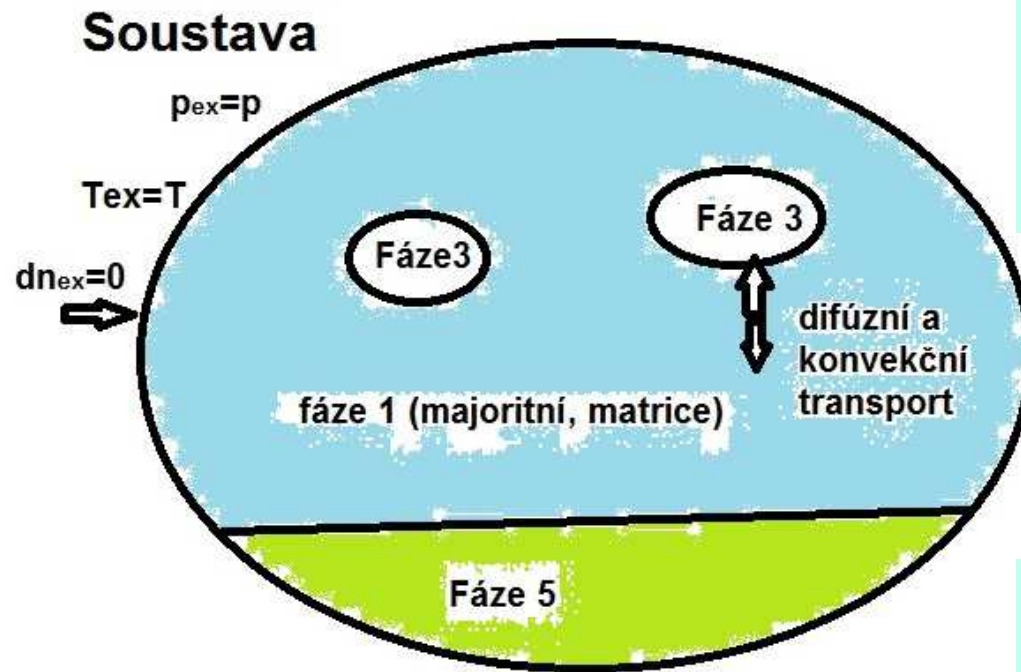
$$P^\alpha = P^\beta$$

$$T^\alpha = T^\beta$$

$$\underline{\mu}^\alpha = \underline{\mu}^\beta$$



Nomenklatura koexistence fází



Struktura (mikrostruktura):

- separované fáze (l+l, l+g)
- rozptýlené fáze (s1+s2, v slitinách, ale i s+1)

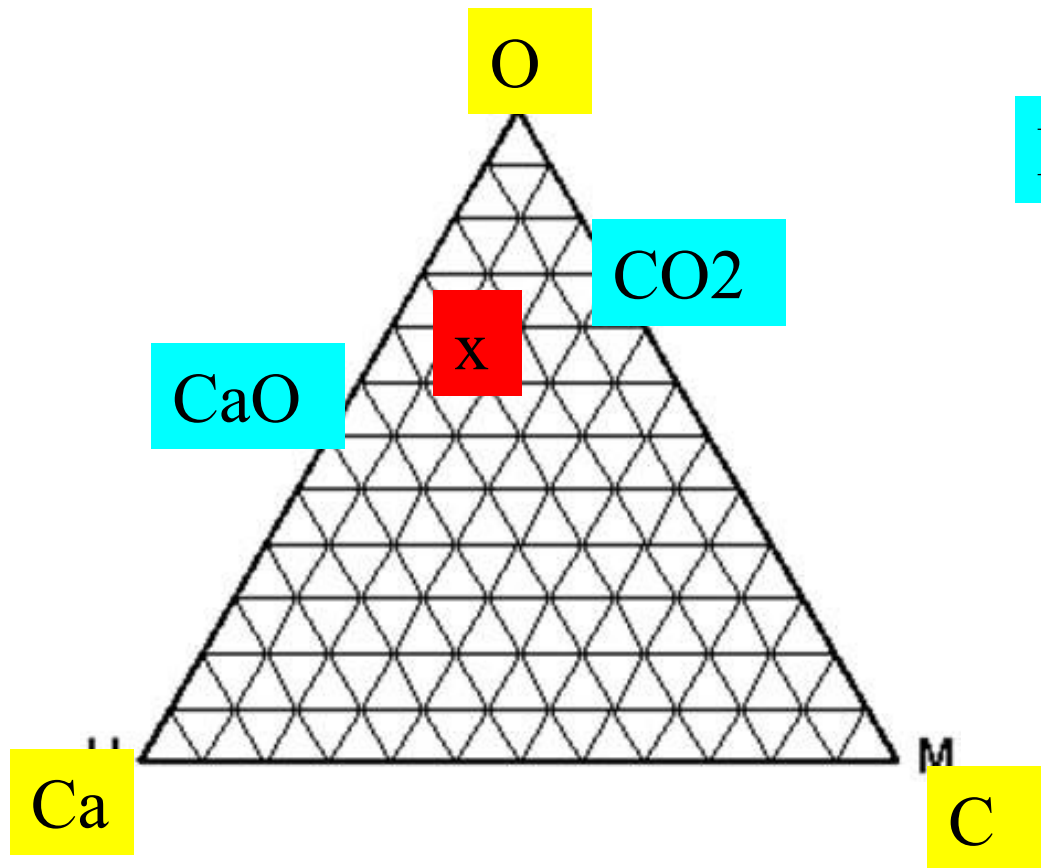
Veličiny určující konečný (rovnovážný) stav: T, p, celkové složení

Veličiny určující cestu k konečnému stavu: μ_i , D_i , A_f , původní struktura τ .

Složky (**Species**): jsou definovány hloubkou pohledu na soustavu. Nejlépe je zvolit co největší objekty, které se za daných podmínek dále nedělí.

Složka (specie)

Ternární soustava Ca-C-O



Binární soustava CaO-CO2

x...CaCO3

A co přírodní vápenec ?

A co elementární částice ?

Fenomenologické popisy

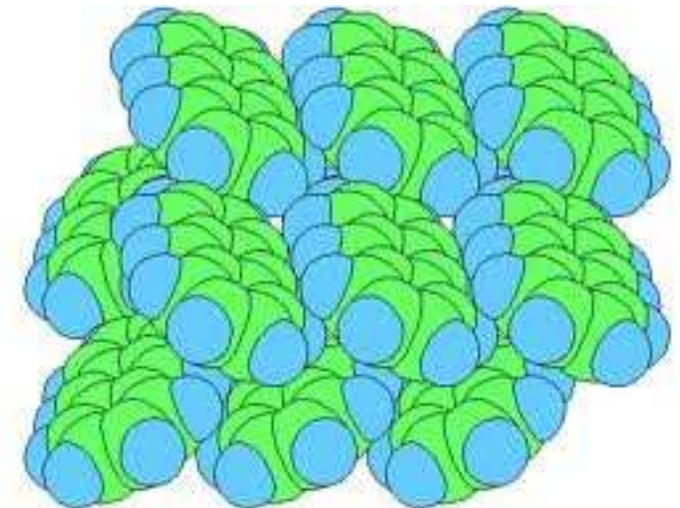
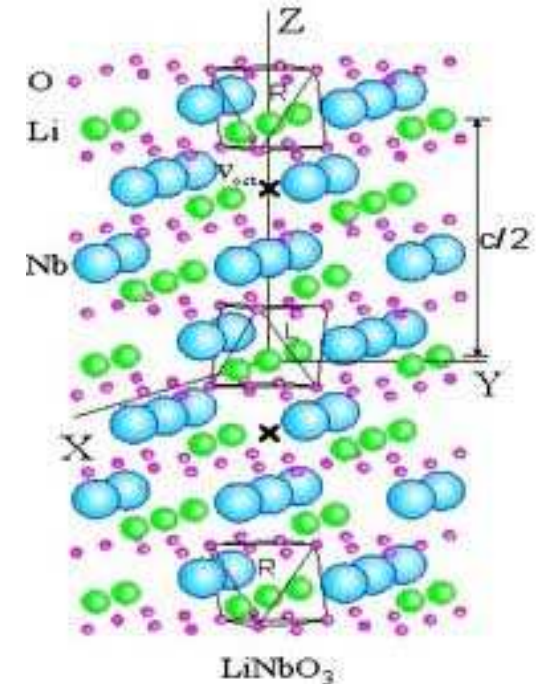
Soustava (system): jednosložková (**unary**),
dvousložková (**binary**), tříložková (**ternary**),
4složky (**quinary**).

Fáze (phase): fyzikálně homogenní části
soustavy oddělené fázovým rozhraním. Liší se
strukturou uspořádání složek (**species**).

-plynná (**gas**). „plazma“ (**plasma**)

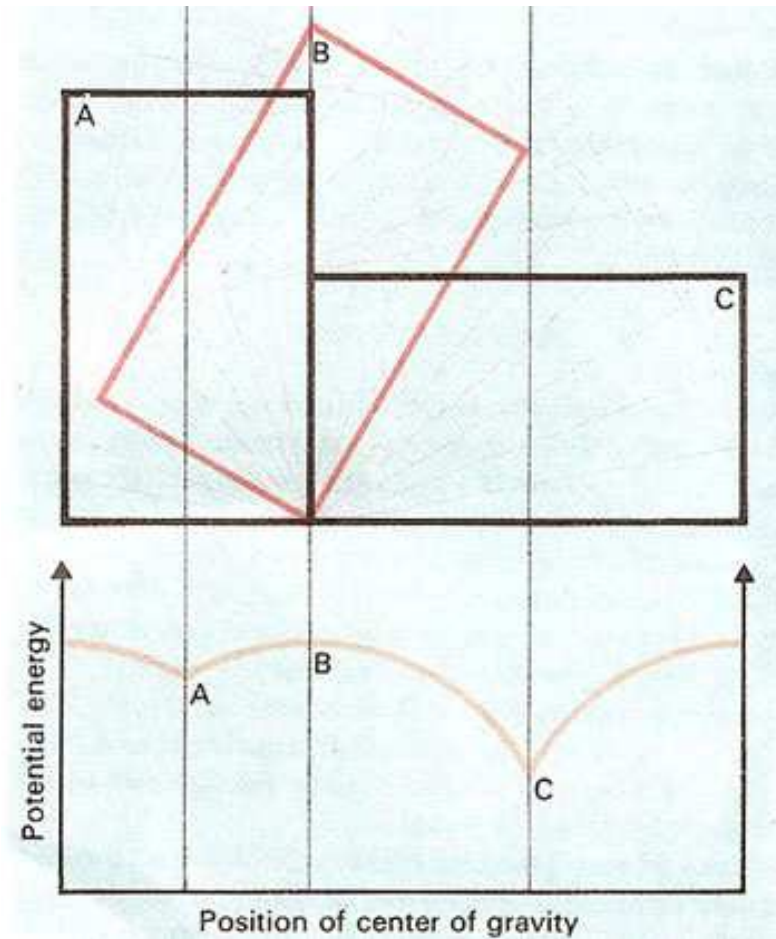
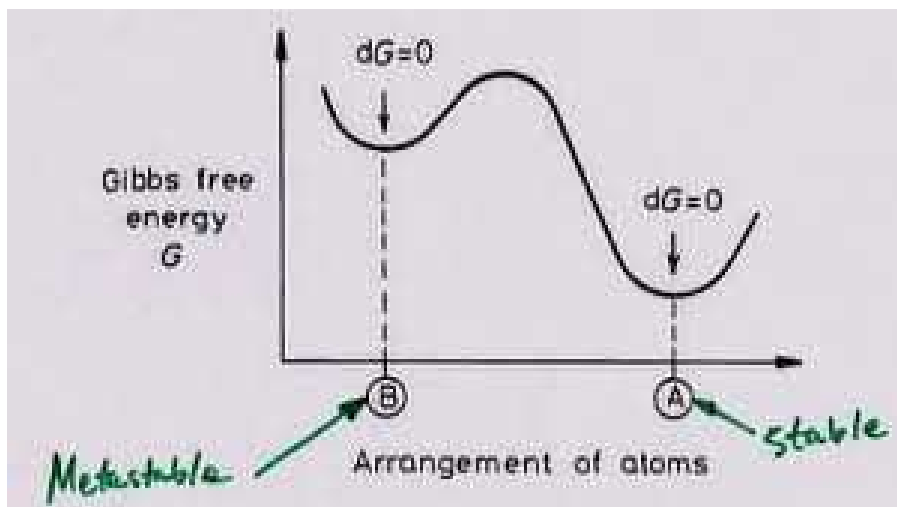
-Kapalné (**liquid**): asociované (**associated**),
iontové (**ionic**)

-Tuhá (**solid**): tuhé roztoky (**solid solutions**),
ne-stechiometrické sloučeniny (**none
stoichiometry compounds**)



Stabilita soustavy

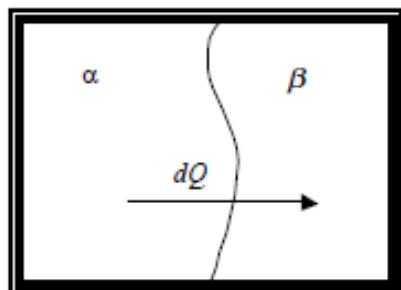
- Stabilní (globální minimum)
- Metastabilní (lokální minimum)
- Nerovnovážný stav



Otevřená soustava – potenciální energie

Rovnováha

Thermal equilibrium



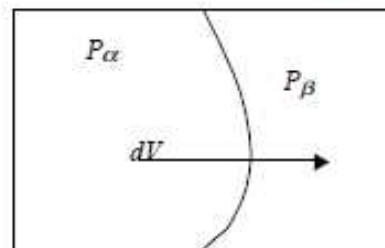
$$dS_{\alpha} + dS_{\beta} \geq 0$$

$$-\frac{dQ}{T_{\alpha}} + \frac{dQ}{T_{\beta}} \geq 0$$

$$T_{\alpha} \geq T_{\beta}$$

Samovolný děj – platí nerovnosti,
které v rovnováze přejdou k rovnostem

Mechanical equilibrium (at $T_{\alpha} = T_{\beta}$)

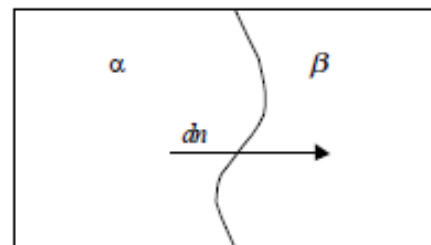


$$dF_{\alpha} + dF_{\beta} \leq 0$$

$$dF = -pdV - SdT \quad (SdT=0)$$

$$-p_{\alpha}dV + p_{\beta}dV \leq 0$$

Chemical equilibrium



At $T, P = \text{const}$ the
two phases exchange
material

$$dG_{\alpha} + dG_{\beta} \leq 0$$

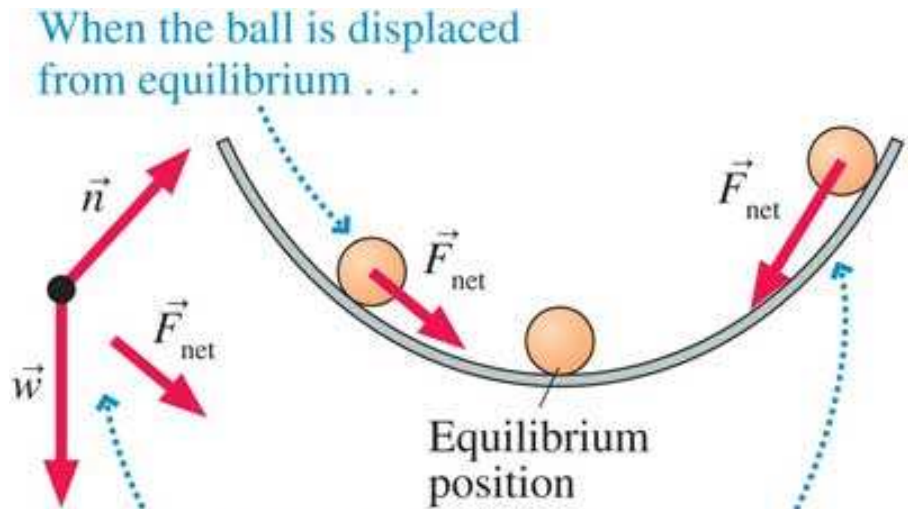
$$dG = vdp - SdT + \sum \mu_i dn_i$$

$$-\mu_i^{\alpha} dn_i + \mu_i^{\beta} dn_i \leq 0$$

$$\mu_i^{\alpha} \geq \mu_i^{\beta}$$

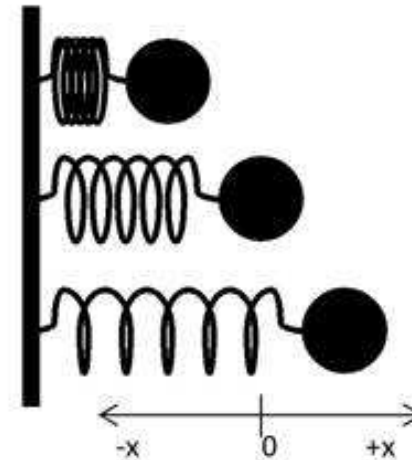
Diskuse

Charakterizujte vybrané praktické příklady



Copyright © 2007, Pearson Education, Inc., publishing as Pearson Addison-Wesley

Zákon zachování součtu potenciální a kinetické energie – ztráty třením



$$F = -kx$$

$$E_p = \frac{1}{2} k x^2$$

$$E_k = \frac{1}{2} m v^2$$

$$E_{osc} = E_p + E_k, E_{osc} = \frac{1}{2} k x_{max}^2$$

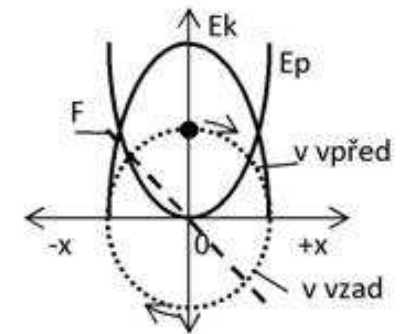
$$v_{max} = (2E_{osc}/m)^{1/2}$$

$$v = \pm v_{max} (1 - (x/x_{max})^2)^{1/2}$$

$$f_{osc} = 1/2\pi (k/m)^{1/2}$$

$$x(t) = x_{max} \sin(2\pi f t)$$

$$v(t) = v_{max} \cos(2\pi f t)$$

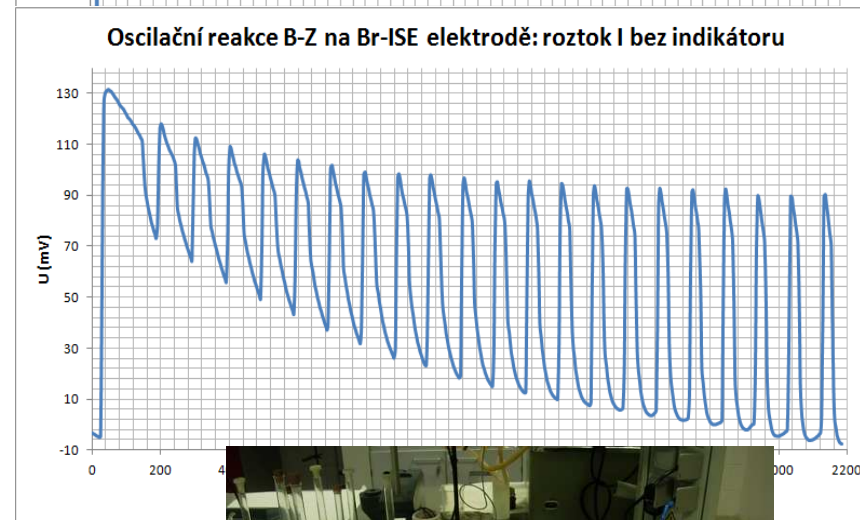
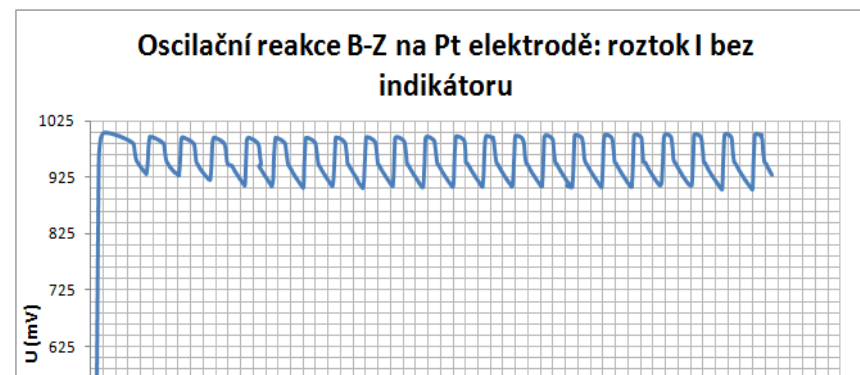
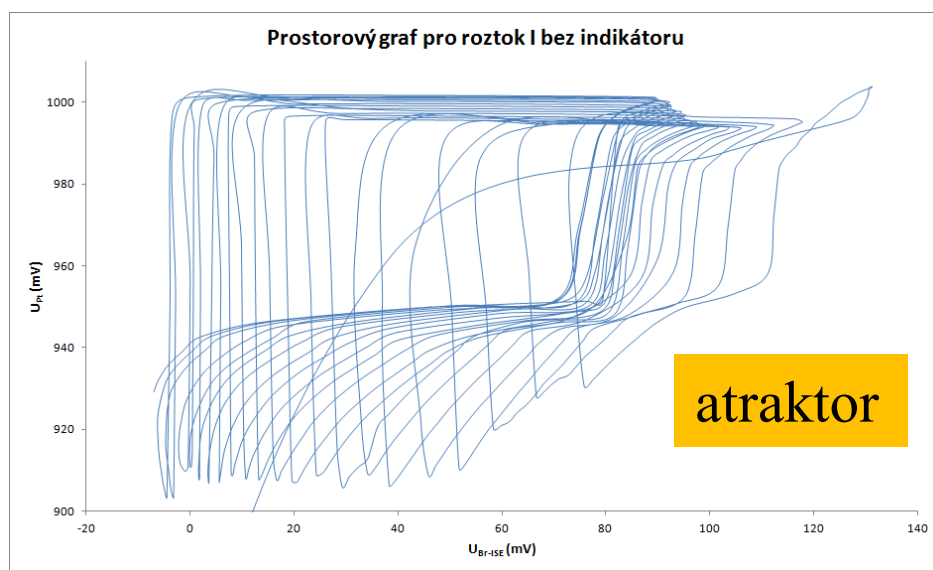


E_p ... potenciální energie [J]
 E_k ... kinetická energie [J]
 F ... síla pružiny [N]
 v ... rychlost [m/s]
 x ... vychýlení [m]
 m ... hmotnost závaží [kg]
 k ... tuhost pružiny [N/m]
 f_{osc} .. frekvence oscilací [Hz]
 t ... čas [s]

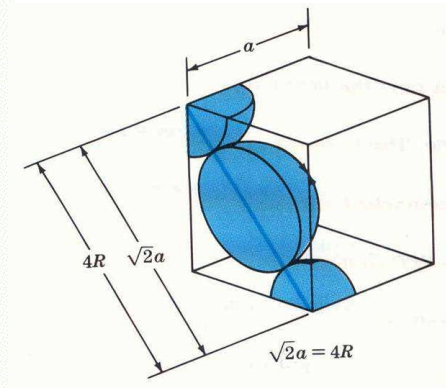
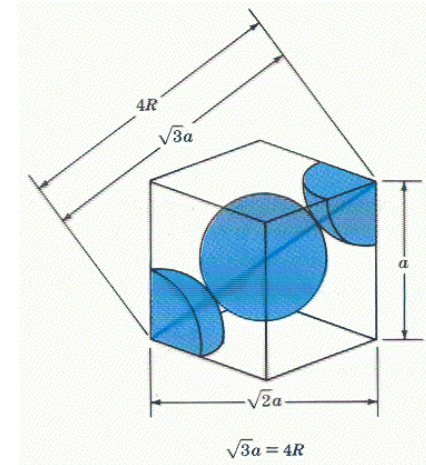
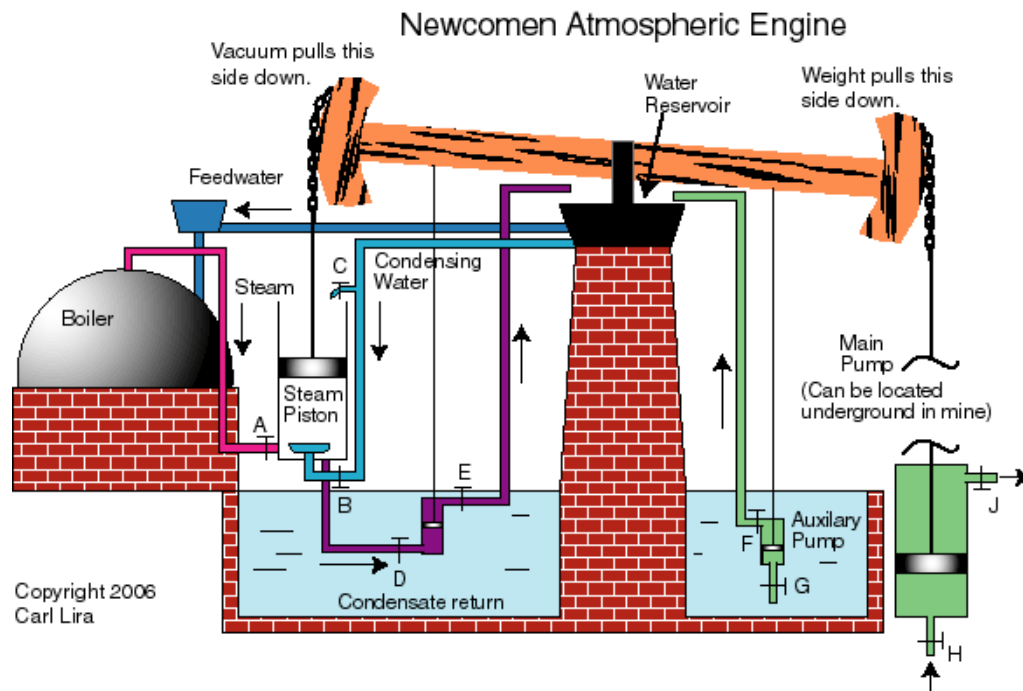
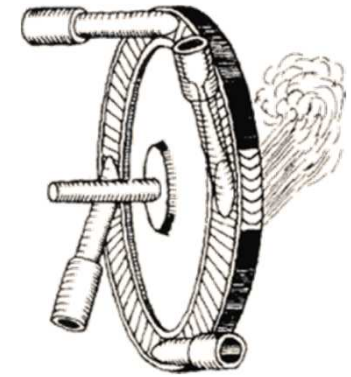
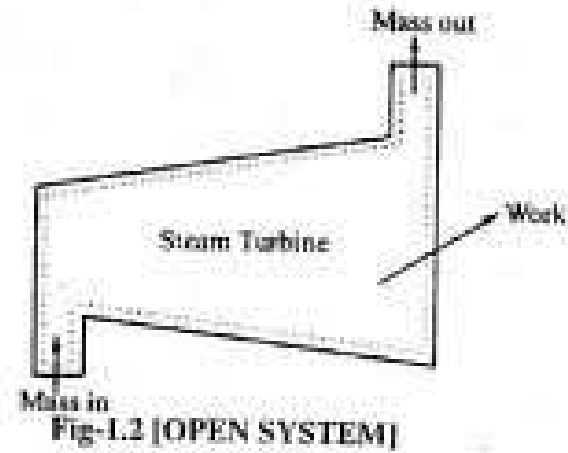
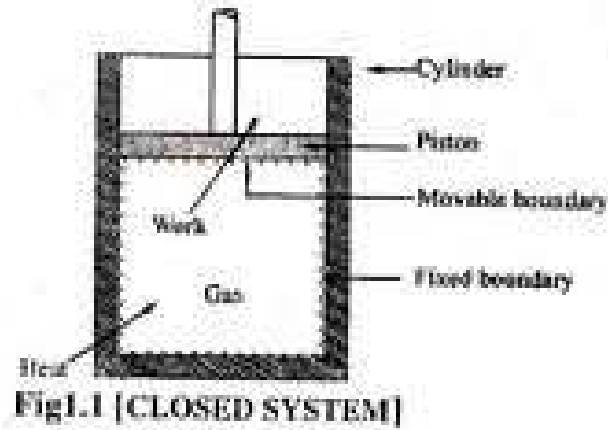
Chemické oscilace



Soustava, složky, G, S



Diskuze



BCC a FCC struktura

