

C6730 Fázové rovnováhy

(přednášející: doc. RNDr. Jiří Sopoušek, CSc., KTFCh Př.F. MU)

Anotace

Přednáška je určena zejména pro posluchače chemie a materiálového inženýrství. Obsahem jsou zejména následující témata: termodynamika vícesložkových neideálních soustav, podmínky nutné pro koexistenci fází, fázové diagramy, fázové transformace, kinetika vzniku a zániku fází, difúze v tuhé fázi, metody výpočtů a predikcí fázových diagramů a možnosti kinetických simulací. Témata jsou doplněná o praktické příklady (např. rektifikace, extrakce, tepelné zpracování materiálů, separace, mikrostruktura materiálů, nukleační mechanismy, optimalizace mechanických vlastnosti a materiálový design, materiálová životnost, ...). Získané znalosti umožňují posluchačům správně porozumět a kvalifikovaně řešit výraznou skupinu praktických problémů, které se objevují v chemické laboratoři, technologické praxi či při přípravě nových materiálů.

Osnova

1. Základní pojmy. Termodynamické stavové funkce čisté látky a vícesložkové směsi. Standardní stavy. Fázová terminologie. Gibbsova-Duhemova rovnice. Gibbsova energie reálné soustavy, dodatkové funkce.
2. Uspořádání fází a jejich krystalová mřížka. Mřížkové defekty. Termodynamika stechiometrických a nestechiometrických fází a chemických sloučenin. Zákony zachování hmoty, náboje a stechiometrie v termodynamických soustavách. Fázové pravidlo a stabilita fází.
3. Gibbsova energie soustavy, chemický potenciál a aktivita. Diferenciální podmínka fázové rovnováhy, integrální podmínka fázové rovnováhy. Vznik fázové rovnováhy.
4. Matematické řešení problému fázové rovnováhy. Výpočty a predikce fázových diagramů. Metody, programy a databáze pro výpočty fázových rovnováh. Metoda CALPHAD.
5. Fázové diagramy. Základní typy fázových diagramů, znázornění fázových diagramů, možné průběhy fázových hranic. Řezy fázovými diagramy. Použití fázových diagramů.
6. Metody experimentálního studia fázových rovnováh: Získávání fázových dat, získávání termodynamických dat, měřitelné termodynamické veličiny. Zdroje dat a jejich přesnost.
7. Reálné fázové rovnováhy: jednosložkové soustavy, binární soustavy (koexistence kapalné, plynné a tuhé fáze, směsi těkavých kapalin, destilace, sublimace, roztoky, ...). Fázové diagramy vícesložkových soustav (koexistence tuhých fází, extrakce, odstraňování nečistot, chemické sloučeniny ve fázových diagramech, intermetalika, ...).
8. Příklady výpočtů fázových rovnováh a fázových diagramů v reálných systémech. Souvislosti mezi fázovými, fyzikálními a mechanickými vlastnosti.
9. Fázové transformace. Stablní a metastablní fázové rovnováhy, bezdifúzní fázové přeměny, role difúze a nukleace při ustavování rovnovážných stavů.

10. Difúze: Základní pojmy. Atomární mechanismy difúze. Fickovy zákony. Okrajové podmínky. Analytické a numerické řešení difúzních rovnic.
11. Difúze v reálných soustavách. Atomární mobilita, látkové toky, kinetický a termodynamický faktor difúze.
12. Difúzně řízené fázové transformace. Heterogenní reálné soustavy. Difúze a rovnováha za vysokých a nízkých teplot. Simulační výpočetní programy (DICTRA).
13. Fázové rovnováhy a difúzi řízené děje v chemické laboratoři a technologické praxi: Hrubnutí a rozpouštění fází, optimalizace technologického zpracování materiálů, homogenizace, nitridace, stabilita svarů, ochranné vrstvy, transformačních diagramy,...

Doporučená literatura

- ❑ **Atkins P.W.: Physical Chemistry, Oxford Univ.Press, Oxford 1990**
- ❑ **Porter D. A., Easterling K. E. : Phase transformations in Metals and Alloys, The Thetford Press Ltd. (1986), Englang**
- ❑ **N. Saunders, and A. P. Miodovnik: 'CALPHAD (Calculation of Phase Diagram) - A Comprehensive Guide', Pergamon Materials Series, Vol. 1, Elsevier Science, Amsterodam, 1998.**
- ❑ Leitner a kol.: Fázové rovnováhy, scripta VŠChT Praha
- ❑ Holub R., Voňka P.: Chemická rovnováha heterogenních a kondenzovaných soustav, Academia Praha 1985
- ❑ Vřešťál J., Kuchař L.: Hutnické Listy, vol 45, yr 1990, 286
- ❑ Dinsdale A.T.: Calphad, vol 15, yr 1991, 317
- ❑ Užitečné linky: <http://www.uic.edu:80/~mansoori/Thermodynamic.Data.and.Property.html>
- ❑ **Stránka přednášky: http://sci.muni.cz/~sopousek/vyuka/TD_faz_rov/indexFKR.html**

Možné doplňující přednášky a exkurse:

- Vybrané oborové semináře Katedry teoretické a fyzikální chemie, PřF MU. Viz program seminářů katedry
- Elektronová a světelná mikroskopie ÚFM AVČR nebo VUT
- Vybrané technologie (dle možností a zájmu)