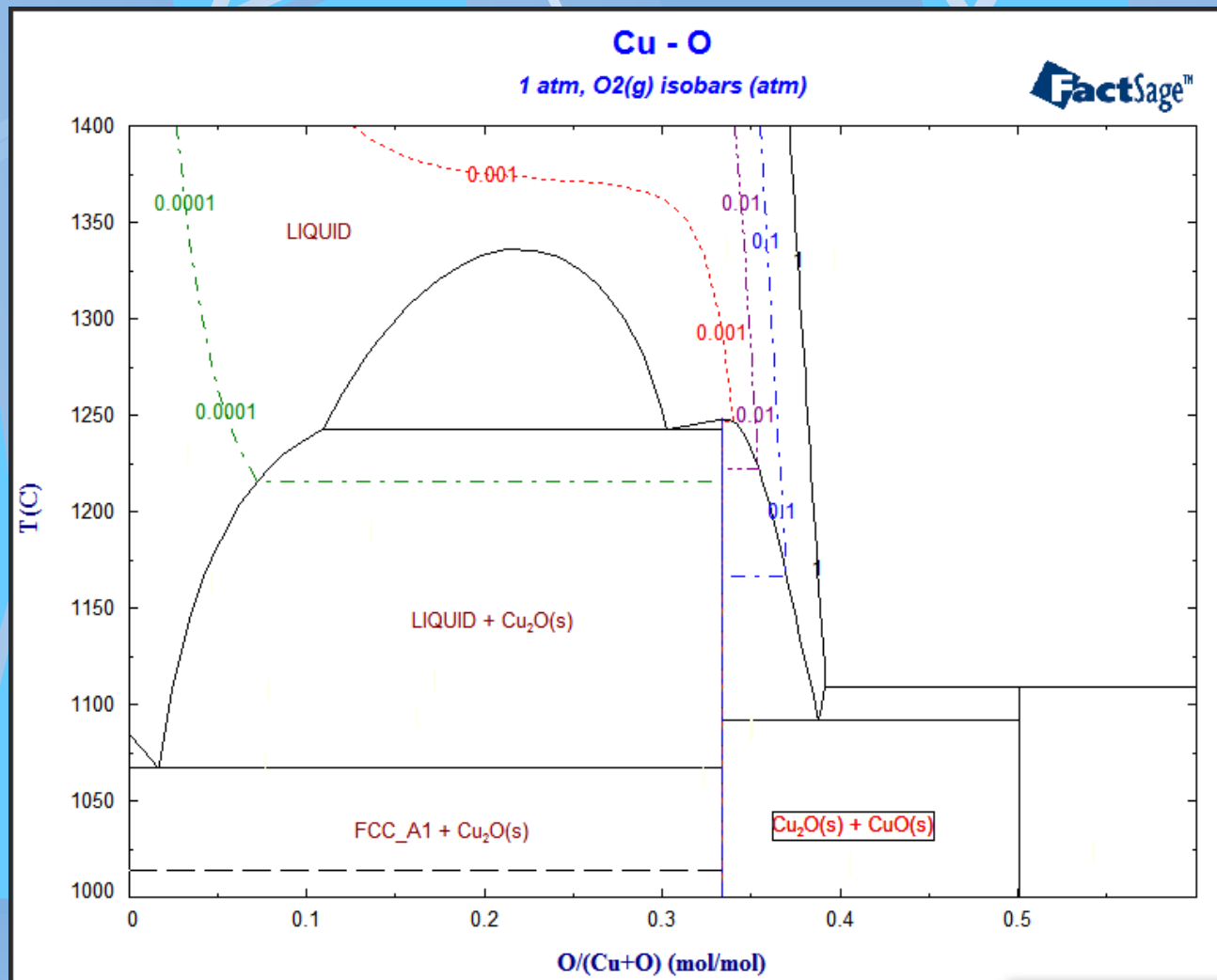


# Aktivita a chemický potenciál numericky



Isoaktivitní linie kyslíku

# Přechod od integrálního k diferenciálnímu tvaru podmínky fázové rovnováhy

$$\min(G) = \min \left( \sum n_i^{\alpha} G_{\text{m}}^{\alpha}(T, p, x_i^{\alpha}) \right)$$

$$\mu_i = \left( \frac{\partial G^{\alpha}}{\partial x_i} \right)_{T, P, x_k} = \left( \frac{\partial G^{\beta}}{\partial x_i} \right)_{T, P, x_k} \quad \forall i \in \{1, \dots, c\}$$

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

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

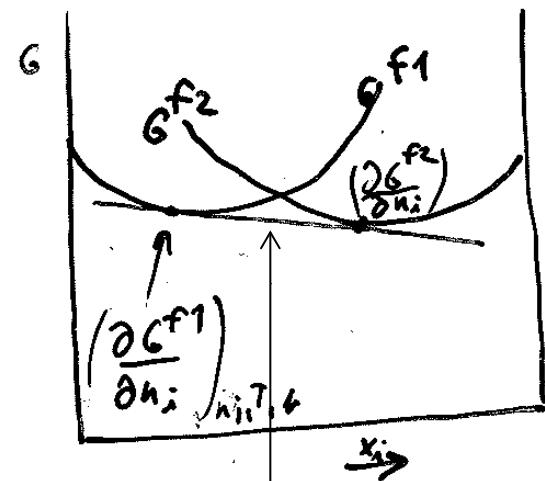
platí pro každou složku  $i = 1, \dots, s$

z \*

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

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

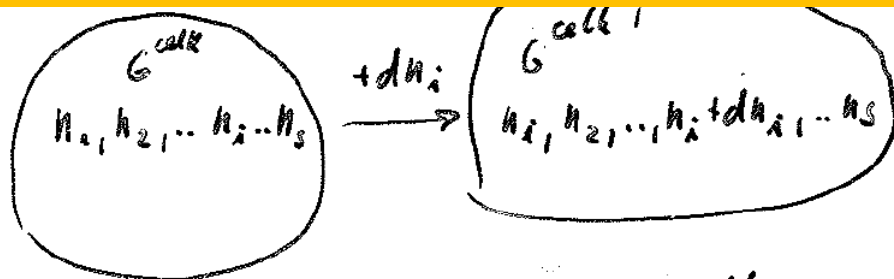
$$\parallel \quad \mu_{\text{SEZ}}^{\circ} + RT a_i = \mu_{\text{SEZ}}^{\circ} + RT a_i^{f1} = \dots$$



$G_c$

# Numerický výpočet chemického potenciálu

Nezávisí na použitém modelu

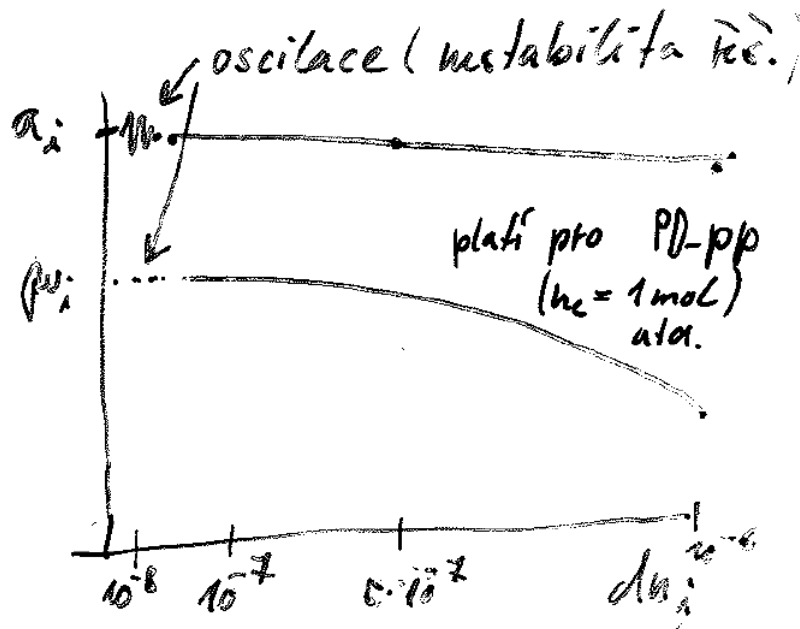


Výhody: - využití algoritmu  $G^{cell}$   
 - nezávisí na počtu fází  
 v rovnováze

Nevýhody -  $\nabla$  oscilace

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

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



# Analytická výpočet chemického potenciálu

Závisí na použitém modelu

General compound-energy formalism model

$$G^f(T, x) = \sum_{i_0} P(y) G_{i_0} + \dots$$

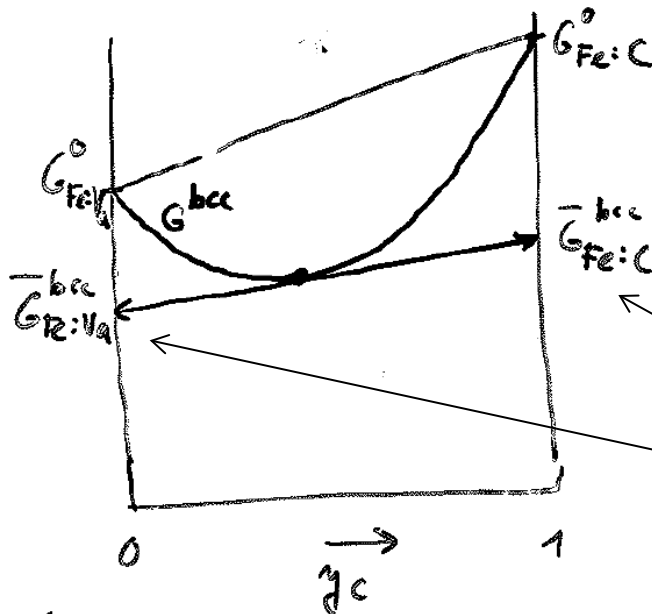
např.:

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

Gibbsova en. *parciálních složek*

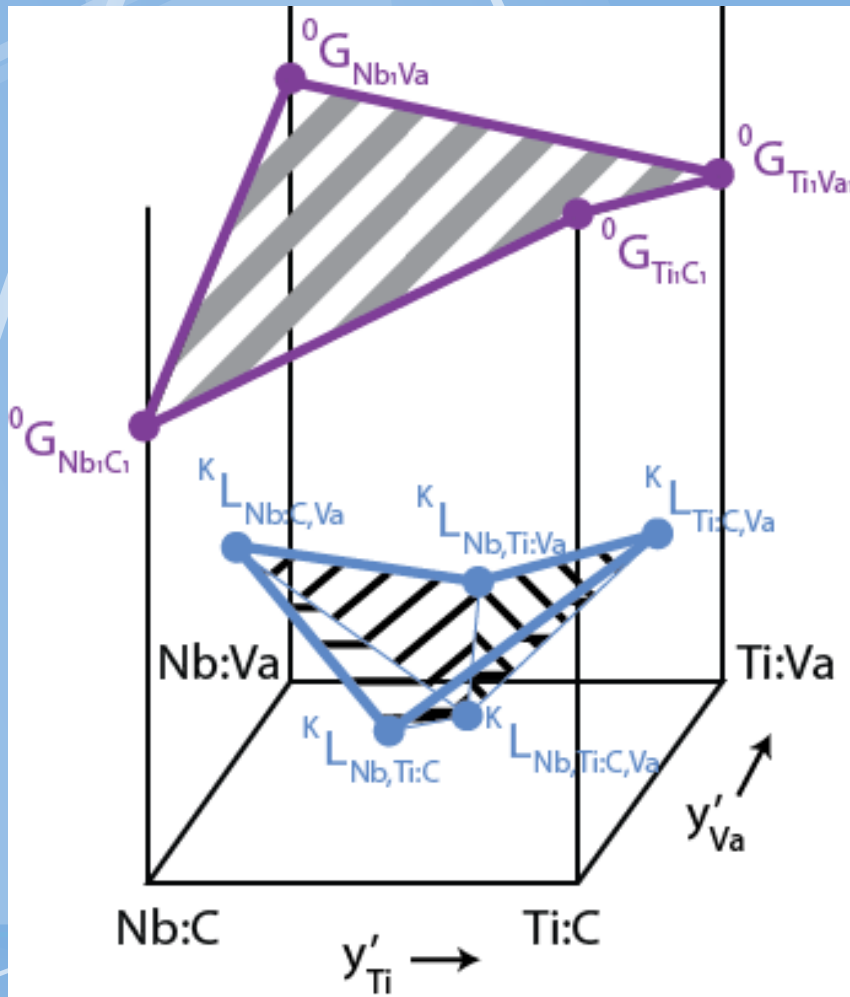
$$= y_C G_{Fe:C}^{bcc} + y_{Va} G_{Fe:Va}^{bcc}$$

*parciální* Gibbsova en. *parc. složek*



Endmembry  
vícemřížkového  
modelu

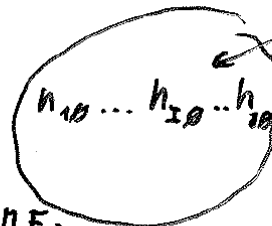
# Endnembry fáze fcc soustavy Nb-Ti-V (Va) dvoumřížkového modelu



$(Nb,Ti)_1(C,Va)_1$  ....FCC crystal

# Výpočet chem. potenciálu limitní sloučeniny

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



např.:  $dn_{I\theta} (= dn_{Fe} + dn_C) = 2 dn_x$

tzv. endmember-ů

bylo zjištěno a odvozeno pro VNFNF:

$$\bar{G}_{I\theta} = G_{I\theta}^f + \sum_{s \text{ podjiny}} \left( \frac{\partial G^f}{\partial y_{j\theta}^s} - \sum_j y_{ji}^s \cdot \frac{\partial G^f}{\partial y_{ji}^s} \right) = \bar{G}_{I\theta} = D \times G^f$$

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

$$D = 1 + \sum_s \left( \frac{\partial}{\partial y_{j\theta}^s} - \sum_j y_{ji}^s \cdot \frac{\partial}{\partial y_{ji}^s} \right)$$

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

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

např.:

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

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

získání aktivit:

$$\bar{\mu}_C^f = \bar{\mu}_C^{SER} + RT \ln a_C^f$$

# Diskuse

The image features a solid blue background with several white, semi-transparent lines of varying thicknesses and orientations crisscrossing across it. A single, thin, bright cyan horizontal line runs across the bottom portion of the image, just above the bottom edge.