

C6730 Fázové rovnováhy (Phase Equilibria)

J. Sopoušek

Kancelář: UKB, A12, M231

Tel: 549497138, E-mail:
sopousek@mail.muni.cz

Osnova

- Info z informačního systému MU
- Práce s interaktivní osnovou
- Syllabus přednášky viz IS
- Studijní materiály
- Časový plán přednášek
- ...
- Diskuse

Studijní materiály

- Učebnice

Atkins' physical chemistry / Peter Atkins, Julio de Paula.. -- 8th ed.. -- Oxford : Oxford University Press, 2006.. -- xxx, 1064 s.

<http://ebooks.bfwpub.com/pchemoup.php>

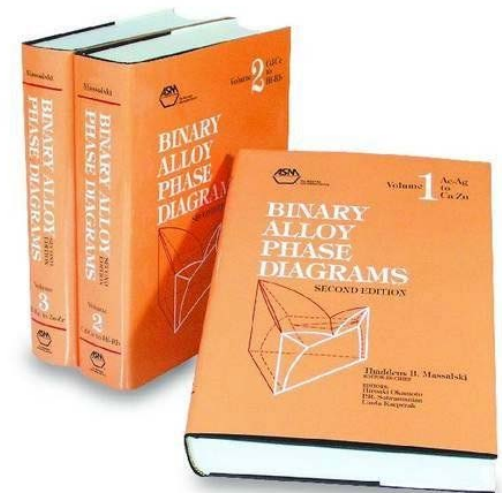
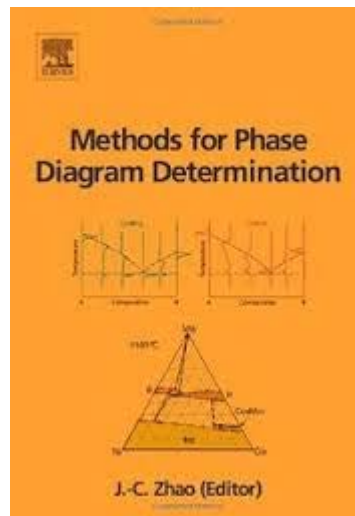
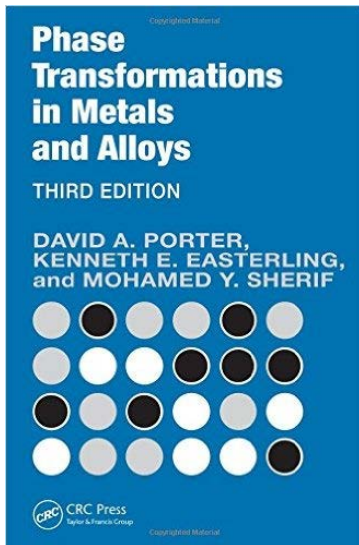
(user: knihovna, heslo: uzivatel1)

- Komentář k fázovým rovnováhám

- Literatura (knihy, časopisy, konference, programy, komentář k HP, internet)

Zahraníční literatura

- PORTER, David A. Phase Transformations in Metal and Alloys. New York: Van Nostrand Reinhol, 1981. 445 s. ISBN 0-442-30439-0. [info](#)
- SAUNDERS, Nigel a Peter A. MIODOWNIK. *Calphad : calculation of phase diagrams : a comprehensive guide*. Oxford: Pergamon, 1998. xvi, 479 s. ISBN 0-08-042129-6. [info](#)
- Atlasy fázových diagramů (knihy a www)
- Mats Hillert: Phase Equilibria, Phase Diagrams and Phase Transformations (Their Thermodynamic Basis), 2nd Edition, ISBN: 9780521853514



Závěrečné hodnocení

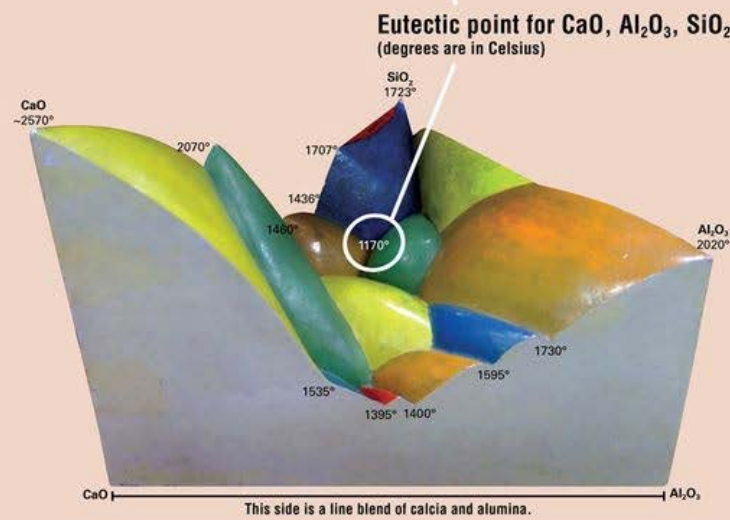
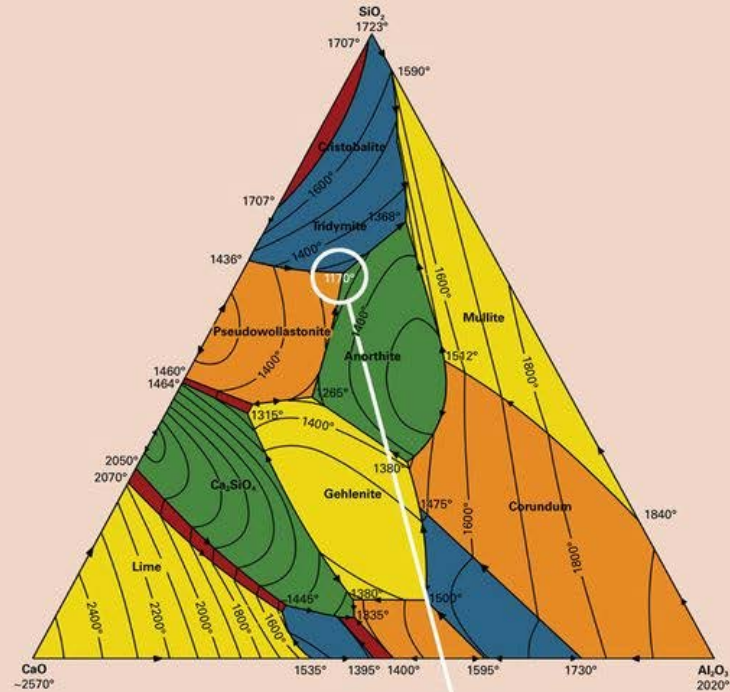
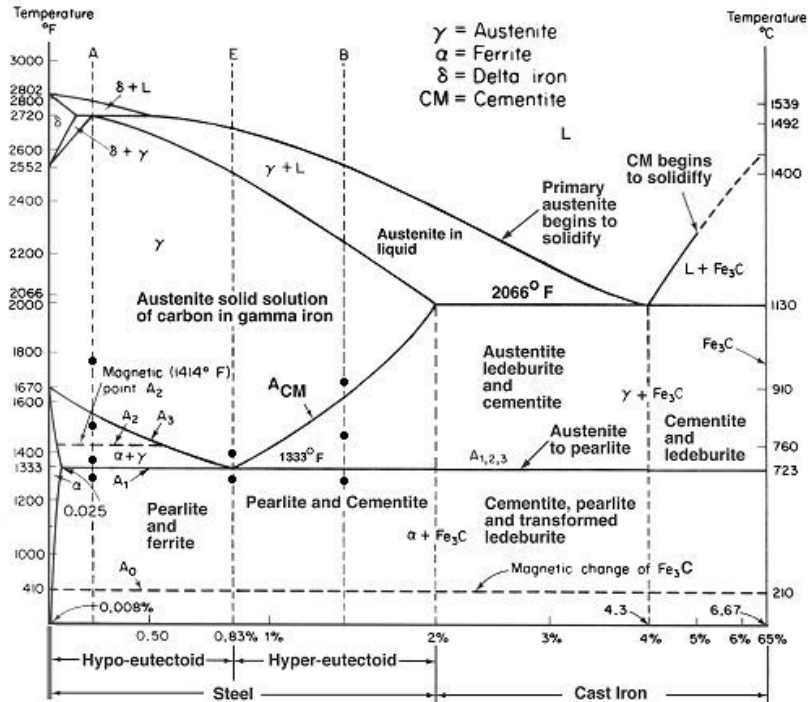
Prerekvizita pro zkoušku:

- presentace cca 10min (použití FD pro výzkum materiálů)

Vlastní zkouška:

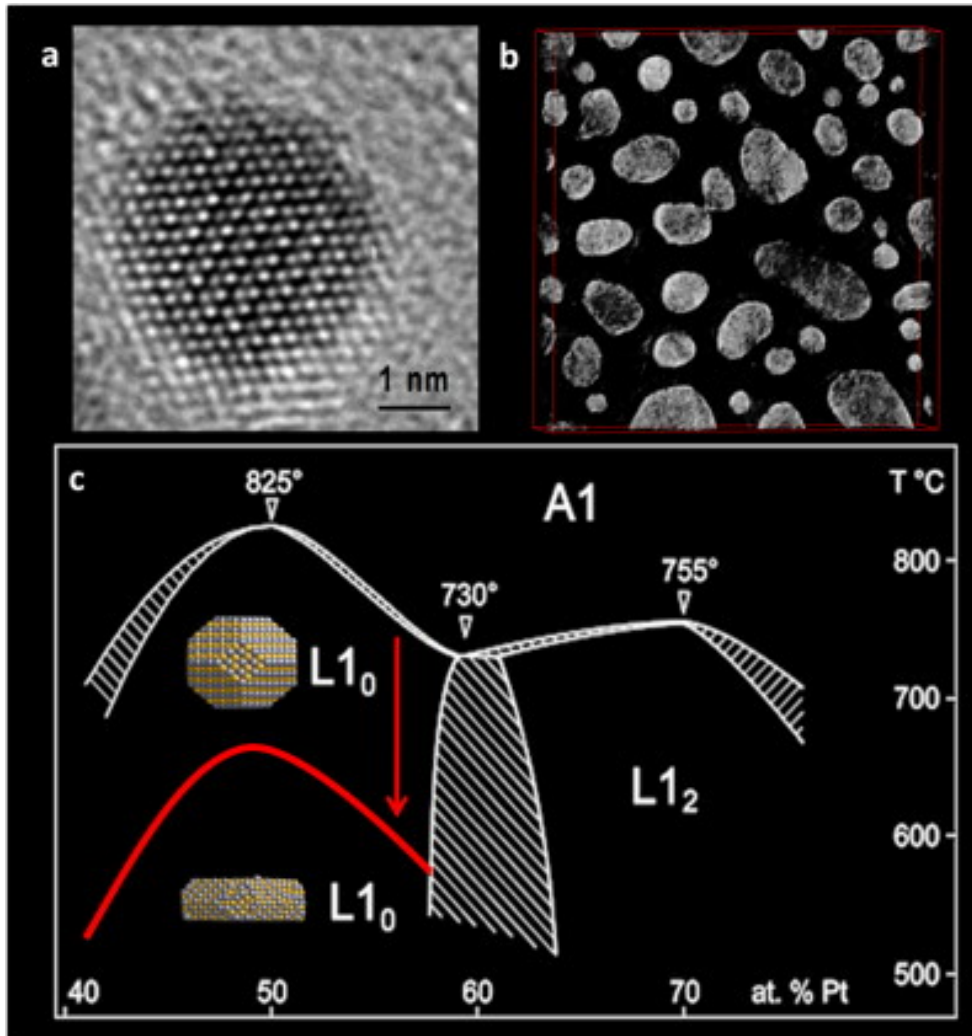
- čtení fázových diagramů (z odborných článků)
- odpovědi na vylosované otázky (temata viz syllabus).

Čtení fázových diagramů



The top diagram is a birds-eye view of the three-dimensional model above. Each side represents a line blend of the components at the corners, with the corners being 100% of that component and 0% of the others. The entire diagram, therefore, is similar to a triaxial blend. The white circles mark the lowest-melting point for calcia, alumina and silica.

FD nanočástic

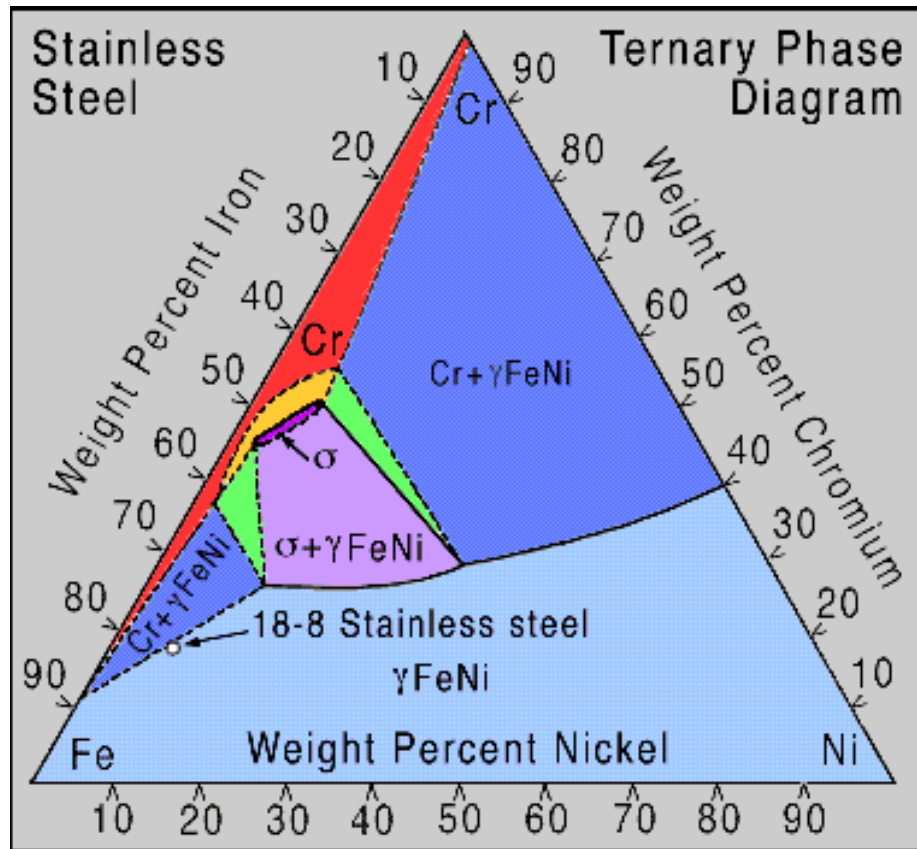


Size and Shape of magnetic nanoparticles influence their phase diagram (Co-Pt)

<https://www.mpq.univ-paris-diderot.fr/Size-and-Shape-of-magnetic-nanoparticles-influence-their-phase-diagram?lang=en>

Získání dovednosti používat fázové diagramy

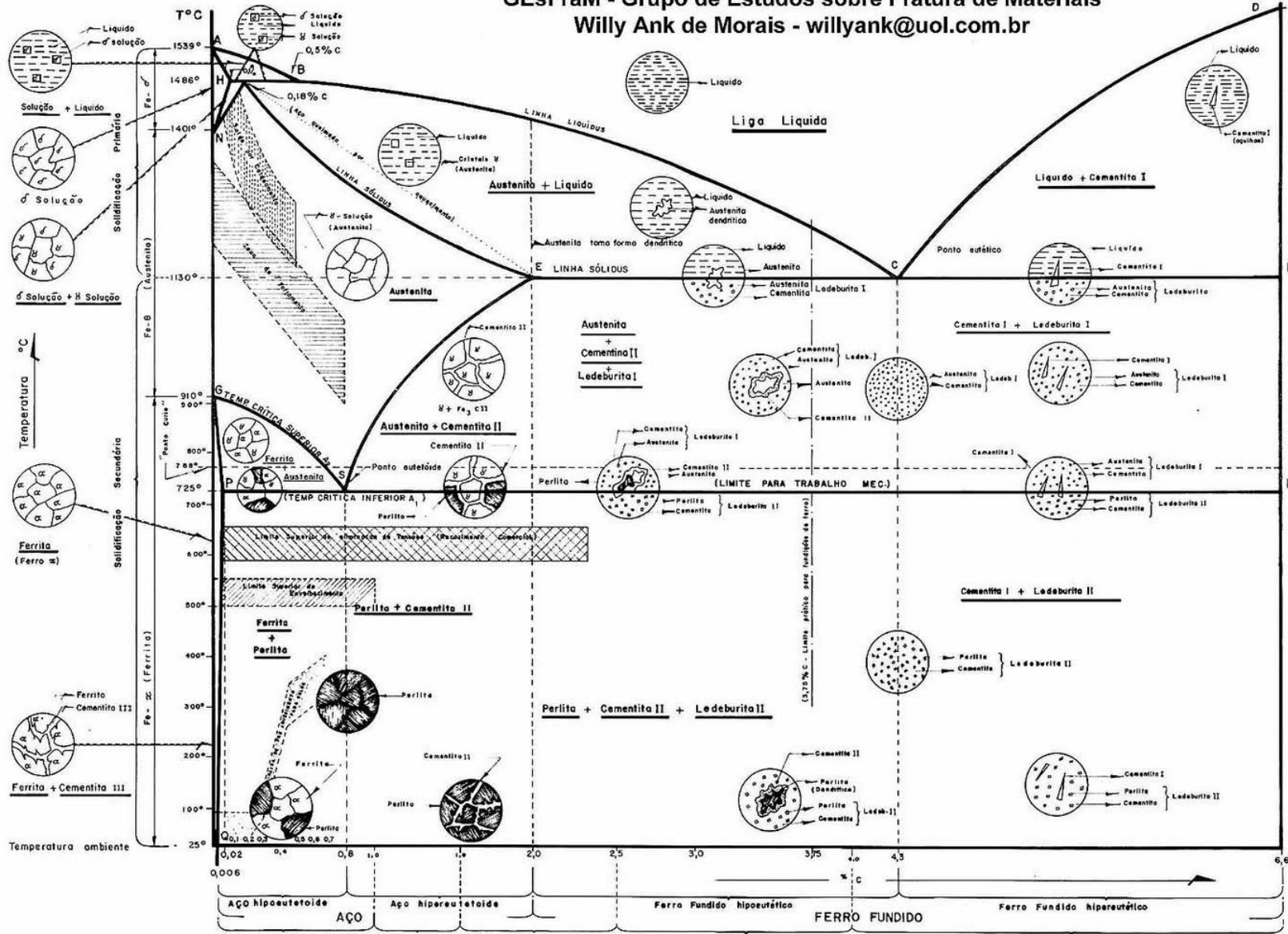
(Např. : odhad vlastností materiálu z fázového diagramu)



Fázový diagram Fe-Cr-Ni (design nerezové oceli)

Fe-C phase diagram

GESFraM - Grupo de Estudos sobre Fratura de Materiais
 Willy Ank de Moraes - willyank@uol.com.br



NOTAS

1) - Redes Atômicas

(Fe - δ) C.C.C.
 $a = 2,93 \text{ \AA}$

(Fe - γ) C.F.C.
 $a = 3,64 \text{ \AA}$

(Fe - α) c.c.c.
 $a = 2,86 \text{ \AA}$

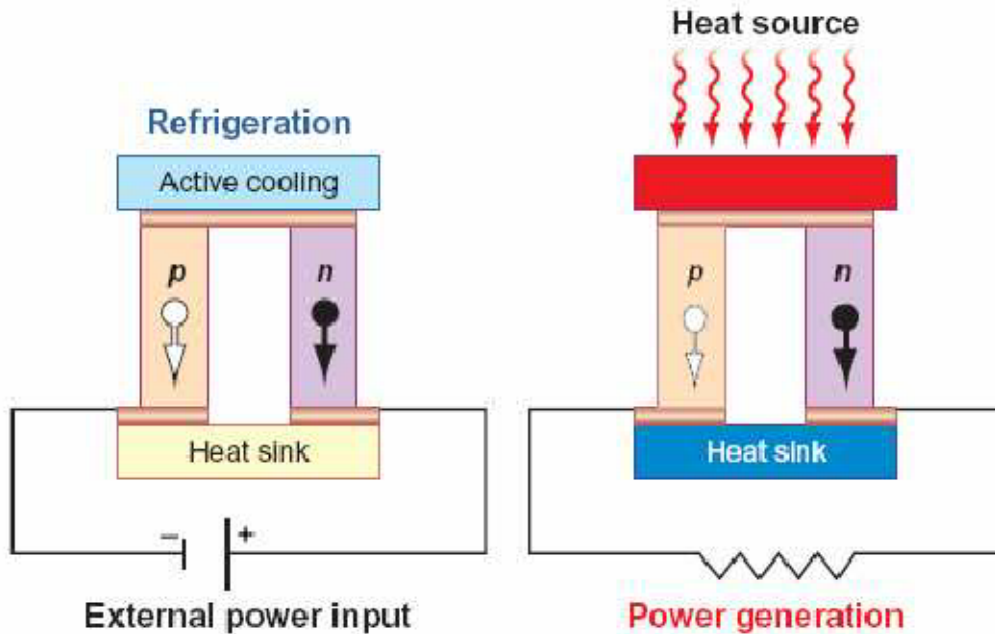
2) Propriedades Mecânicas

FERRITA	DUREZA(HB)	ELONGAÇÃO	ALONGAM.
FERRITA	80	30 kgf/mm ²	40%
PERLITA	200	85 "	10%
CEMENTITA	800	100 "	0%

3) - A dureza da MARTENSITA varia com o % de carbono.

Vybrané projekty na UCh

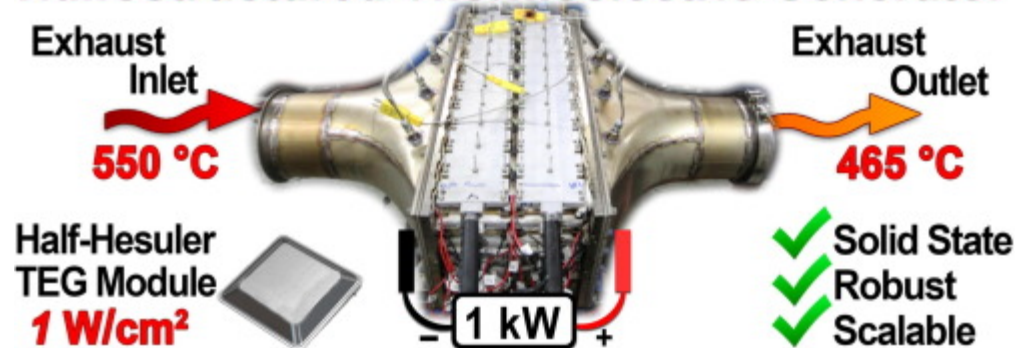
Nanostrukturovaná termoelektrika



2017-2019, GA17-12844S:
Thermal and phase stability of advanced thermoelectric materials (Investigator: P. Brož).
Focused also on nanostructured thermoelectric materials.

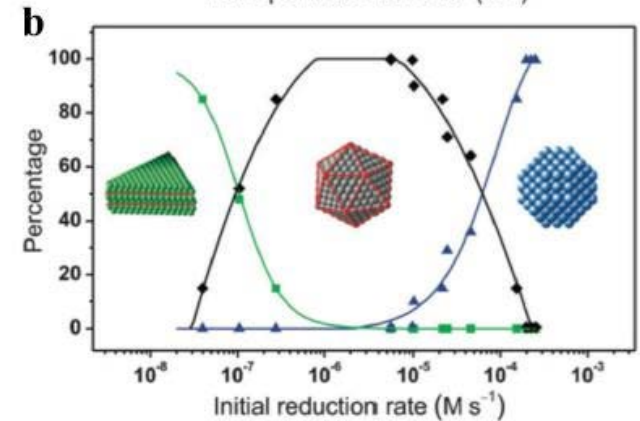
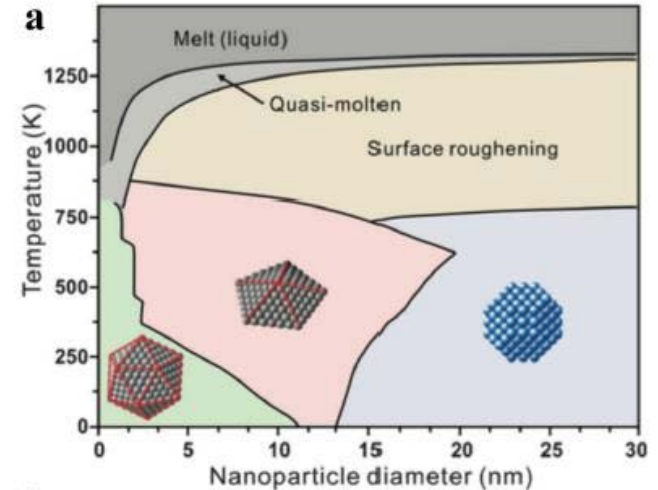
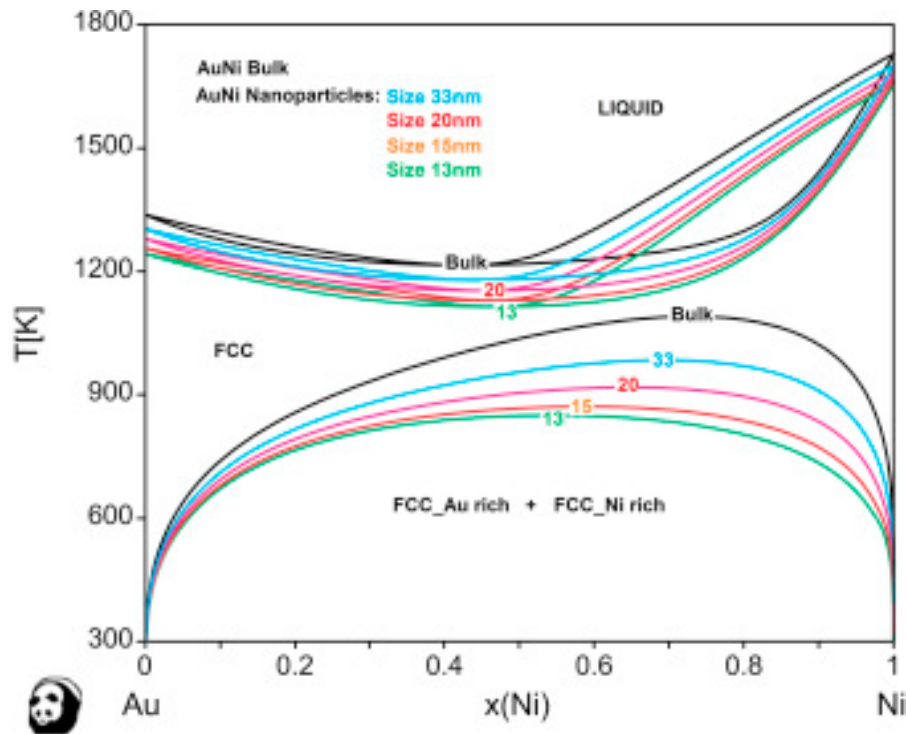
<http://thermoelectrics.matsci.northwestern.edu/thermoelectrics/nanomaterials.html>

Nanostructured Thermoelectric Generator



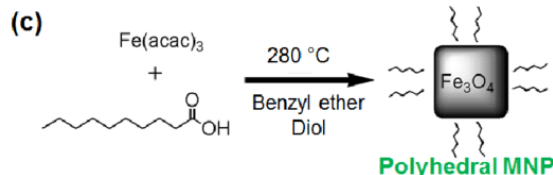
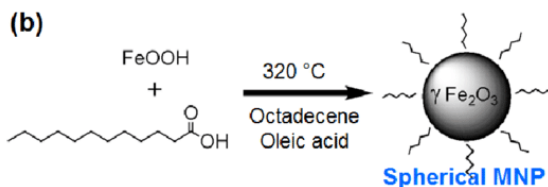
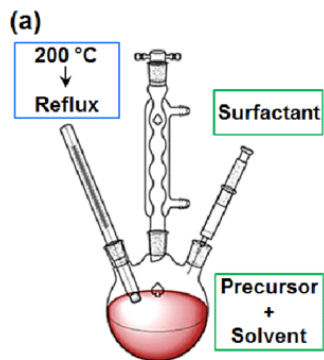
Studium vlastností nanočástic v závislosti na jejich velikosti (Pinkas)

2017-2019, GA17-15405S: **Advanced experimental and theoretical approaches to phase diagrams of nanoalloys including the influence of particle size** (Investigator: J. Pinkas).

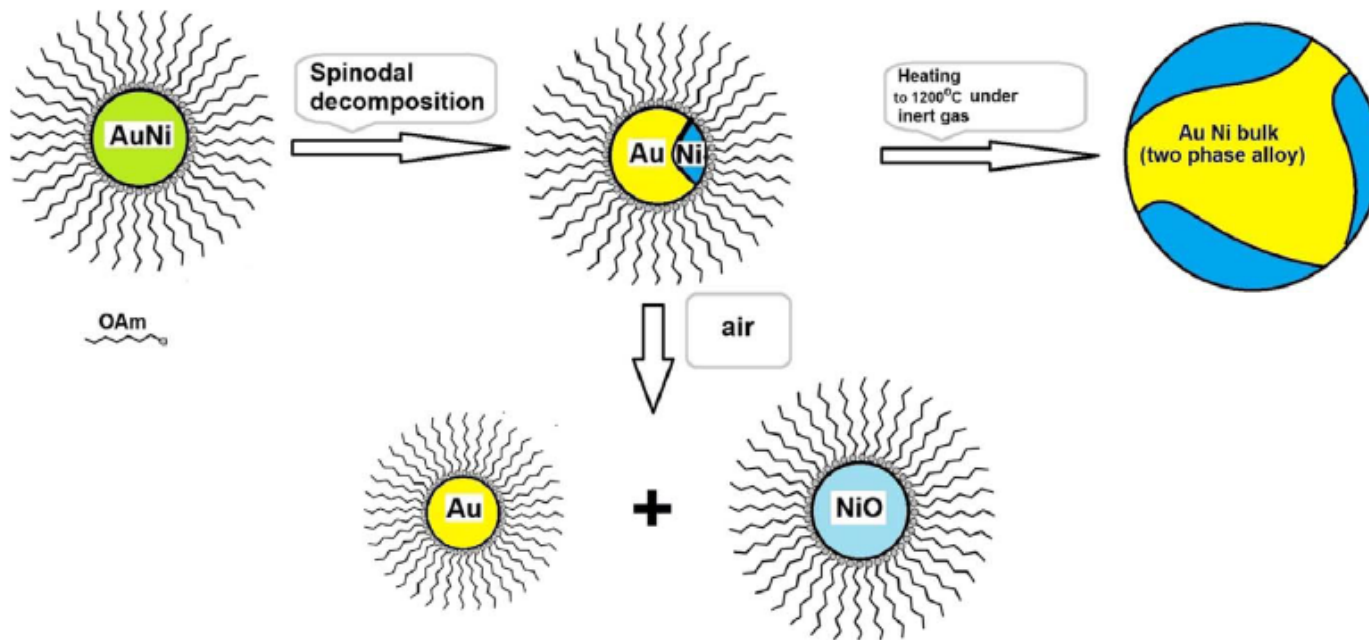


http://www.scielo.br/scielo.php?pid=S0001-37652018000200719&script=sci_arttext

Syntéza a vlastnosti nanočástic a nanostrukturovaných materiálů (Sopoušek)



Batch and continual synthesis



Upřesněný plán přednášek PS 2019

Týden	Program (det. viz anotace)	Týden	Program
1.	Úvod (exkurse po UKB, nebo VUT)	7.	Reálné rovnováhy (destilace, extrakce, oceli, pájky bez olova, ...)
2.	Základy Termodynamiky, opakování fyzikální chemie	8.	Výpočty fázových diagramů (Metoda CALPHAD, ThermoCalc)
3.	Fáze a materiál, základní pravidla. Popis rovnovážných stavů, podmínka fázové rovnováhy	9.	Fázové transformace (poruchy krystalové mříže, nukleace, kinetika)
4.	Fázové diagramy, výpočty, konstrukce použití.	10.	Mechanismy difúze, mobilita, TD+Kin faktor
5.	Experimentální metody sledování FR.	11.	Kinetika reálných soustav technické materiály, svary ocelí
6.	Exkurse (na AVČR UFM)	12.	Souvislosti mezi fáz. a fyz.-mech vlastnostmi reál. soust.

Související přednášky

Bc, Studium:

C6335 Nanočástice (PS, Sopoušek)

Mgr. Studium (materiálová orientace):

C6750 Materiálová chemie kovů (Brož, jaro 2020)

C5303 Pokročilé modelování pevných látek (podzim 2019)

C8888 Nanochemistry (JS, Pinkas)

C8870 Syntéza a analýza nových materiálů (JS, Pinkas, Brož)

Doktorské studium:

**C8965 Rovnovážné stavy a fázové transformace materiálů
(Sopoušek)**

**C9135 Pokročilé fyzikálně-chemické metody studia materiálů
(jaro 2020)**

Oblasti praktického využití výsledků studia fázových rovnováh

Vymezení podmínek:

dosažení termodynamické rovnováhy, vhodný model popisu termodynamických vlastností fáze, dostupnost termodynamických dat k popisu soustavy, dostupnost experimentálních fázových dat, PC

Výpočty fázových rovnováh

Metalurgie (optimalizace tepelného zpracování, stabilita materiálů při dlouhodobé tepelné expozici, svařování slitin,...)

Povrchové úpravy materiálů (nauhlièování, nadusièování,...)

Geologie a Mineralogie (pøedpovídání procesů, ...)

Organická chemie (optimalizace chemických výrob, extrakce, separace plastů, ...)

Chemie oxidů (supravodièe, chemie silikátů,...)

Predikce fázových vlastností materiálu (pevnost, tvrdost, odolnost proti křehkému lomu,...)

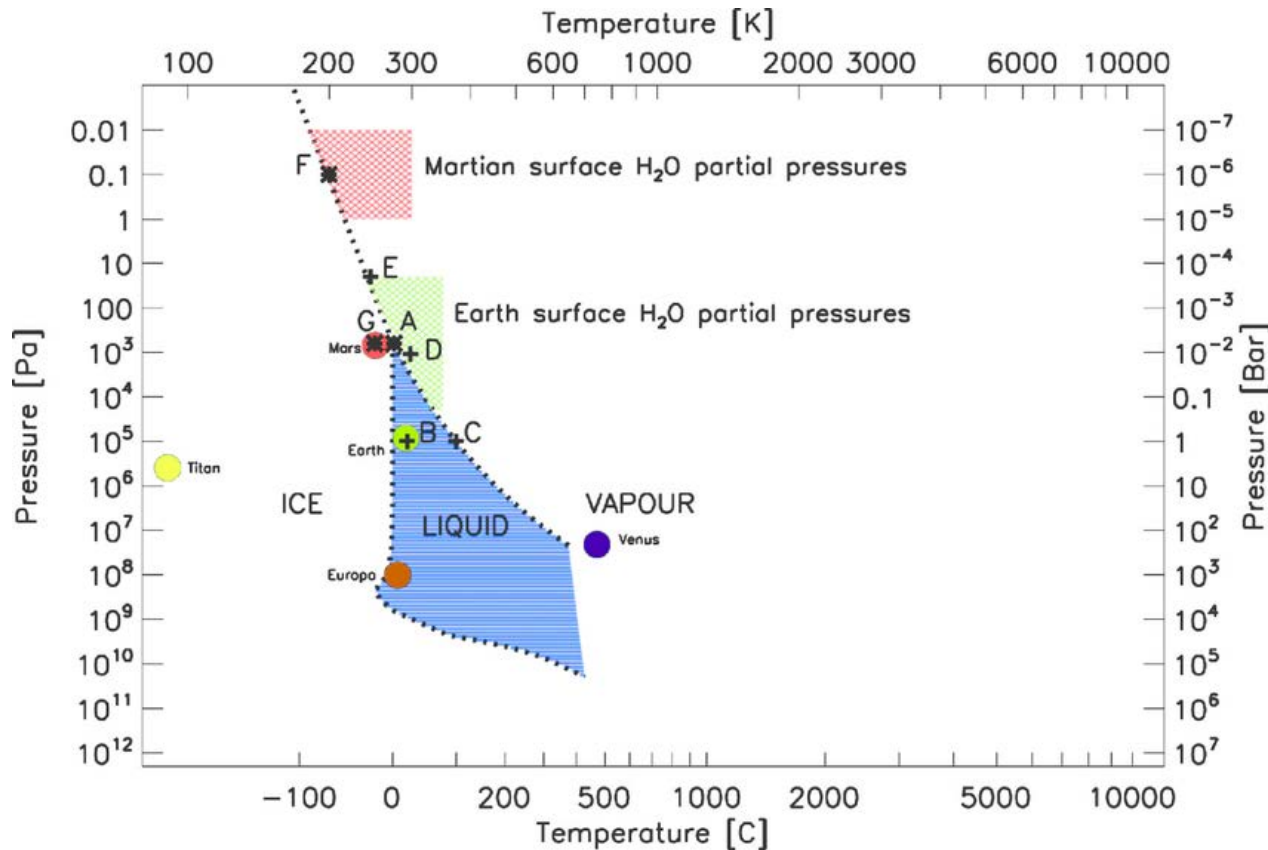
Plánování experimentů

Výpočty chemických rovnováh

Nízkoteplotní plasma, posuzování možných produktů chemických reakcí,

Diskuze

Using the phase diagram of liquid water to search for life



Phase diagram of pure liquid water showing the range of unstable and metastable conditions for liquid water on Earth and Mars. Pressures are P part unless indicated otherwise. A¹/₄triple point, also boiling point at zero elevation on Mars (P sat); B¹/₄sea-level Earth (P tot); C¹/₄boiling point at sea-level Earth (P sat); D¹/₄typical indoor environment; E¹/₄dry Antarctic conditions; F¹/₄typical frost point on Mars; G¹/₄zero elevation on Mars (P tot). Pure liquid water is never stable on the martian surface as the partial pressures (red hatched) are less than the triple point pressure of pure water. Despite the large range in terrestrial surface partial pressures (green hatched) less than the triple point partial pressure, only extremely cold and extremely dry environments will have P part less than the vapour curve. The shape of the hatched regions are bounded on the left by the vapour and sublimation curves. The remainder of the hatched regions correspond to the range of P part of water vapour at the temperatures encountered on the surface of Mars and Earth. This figure is a modified version of figure 2 of Jones & Lineweaver (2010).