

<b>Kód</b>	<b>C6730 Termodynamika fázových rovnováh</b>
Období	<a href="#">podzim 2005</a>
<b>Název</b>	<b>Termodynamika fázových rovnováh</b>
Úprava	<a href="#">základních</a> , <a href="#">doplňujících</a> údajů, <a href="#">atributů</a> předmětu. <a href="#">Stručný výpis</a> .
	<b>Předmět se nevypisuje!</b>
Krátký název	Fázové rovnováhy
Název anglicky	Phase Equilibria
Krátký název angl.	Phase Equilibria
Vyučovací jazyk	cze čeština
Zařazení na fakultě	143130 Chemická sekce
Garant	doc. RNDr. Jiří Sopoušek, CSc. (KFPPF PřF MU), učo 2405
Garantní oddělení	143130 Chemická sekce
Kontaktní osoba	doc. RNDr. Jiří Sopoušek, CSc. (KFPPF PřF MU), učo 2405
Učitel	doc. RNDr. Jiří Sopoušek, CSc. (KFPPF PřF MU), učo 2405, přednášející, <i>pořadí neurčeno</i>
Ukončení	zk zkouška (doporučené)
	k kolokvium (možné)
Poznámka k ukončení	
Je ukončení odložené?	ne
Rozsah	přednáška 2, cvičení 0, jiné 0
Četnost	každý týden
Četnost - poznámka	
Periodicita	každoročně
Periodicita - poznámka	
Počet kreditů	2
Kreditová funkce	Při ukončení předmětu zkouškou jsou přidány 2 kredity navíc, při ukončení klasifikovaným započtem jeden navíc. Pokud má předmět implicitní počet kreditů větší než 4, přidává se u těchto dvou ukončení ještě jeden kredit. (příf plus uk plus > 4)
Kredity - poznámka	
Prerekvizity	
Limit - max. studentů	
Limit - poznámka	
Evidovat zápočet	Ano, musí se zadávat zápočet do poznámkového bloku (21. 11. 2005)

	09:46, doc. RNDr. Jiří Sopoušek, CSc.)
Poznámka	
Mateřské obory	M Analytická chemie mgr prez jednooborové (PřF, M-CH) M Anorganická chemie mgr prez jednooborové (PřF, M-CH) M Biochemie mgr prez jednooborové (PřF, M-CH) M Fyzikální chemie mgr prez jednooborové (PřF, M-CH) M Chemie odborná mgr prez jednooborové (PřF, M-CH) M Chemie životního prostředí mgr prez jednooborové (PřF, M-CH) M Makromolekulární chemie mgr prez jednooborové (PřF, M-CH) M Organická chemie mgr prez jednooborové (PřF, M-CH) M Učitelství chemie pro SŠ mgr prez dvouoborové (PřF, M-CH) N Fyzikální chemie mgr nav prez jednooborové (PřF, N-CH) D Analytická chemie pgs kombinované (PřF, D-CH) D Analytická chemie pgs prezenční (PřF, D-CH) D Anorganická chemie pgs kombinované (PřF, D-CH) D Anorganická chemie pgs prezenční (PřF, D-CH) D Fyzikální chemie pgs kombinované (PřF, D-CH) D Fyzikální chemie pgs prezenční (PřF, D-CH) D Chemie makromolekul.látek pgs kombinované (PřF, D-CH) D Chemie makromolekul.látek pgs prezenční (PřF, D-CH) D Chemie životního prostředí pgs kombinované (PřF, D-CH) D Chemie životního prostředí pgs prezenční (PřF, D-CH) D Organická chemie pgs kombinované (PřF, D-CH) D Organická chemie pgs prezenční (PřF, D-CH) <i>Změněno: 21. 11. 2005 09:46, doc. RNDr. Jiří Sopoušek, CSc.</i>
Nabízet mimo obory	ano
Atributy	<i>nezadány</i>
Hlavní údaje změněny	16. 11. 2005 13:52, doc. RNDr. Jiří Sopoušek, CSc.
Další údaje změněny	16. 11. 2005 13:52, doc. RNDr. Jiří Sopoušek, CSc.
Předpoklady slovně	Doporučena znalost fyzikální chemie a matematiky (například v rozsahu studia na Přírodovědecké fakultě MU nebo VUT).
Předpoklady anglicky	It is recommended knowledge of physical chemistry and mathematics (for example in scope of study on Faculty of Sciences MU or Brno University of Technology).
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 doplněna o praktické příklady (nap. 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 i při přípravě nových materiálů.
Anotace anglicky	The course is especially designed for students of chemistry and material engineering. The contents consists chiefly of following items: thermodynamics of non-ideal several-component systems, essential conditions for phase coexistence, phase diagrams, phase transformations, kinetics of phase formation and disappearing, diffusion inside solid state, methods of calculations and predictions of phase diagrams, and potency of kinetic simulations. The themes are complemented by examples (rectification, extraction, material heat treatment, separation, material microstructures, nucleation, optimisation of mechanical properties, material design, life-time of materials, ). An attained knowledge allows to understand correctly and to solve a great group of practical problems, which occurs in chemical laboratory, technical practice or during new material production qualifiedly.
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. Mízkové defekty. Termodynamika stechiometrických a nestechiometrických fází a chemických sloučenin. Zákony zachování hmoty, náboje a stechiometrie v~termodynamických soustavách. Fázové pravidlo a stabilita fází. 3. Gigsova 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 výpotů fázových rovnováh a fázových diagramů v~reálných soustavách. Souvislosti mezi fázovými, fyzikálními a mechanickými vlastnostmi. 9. Fázové transformace. Stabilní a metastabilní 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, transformaních diagramy,...
Osnova anglicky	1. Basic terms. Thermodynamic functions of pure substance and several component mixtures. Standard state. Phase nomenclature. Gibbs-Duhem equation. Gibbs energy of real system. Excess functions. 2. Phase structures and their crystallography. Lattice defects. Thermodynamics of stoichiometry and non-stoichiometry phases and chemical compounds. Conservation laws of mass, charge, and stoichiometry in thermodynamic systems. Phase rule and phase stability. 3. Gibbs energy of system. Chemical potential and activity. Differential equations of phase equilibrium, integral equation of phase equilibrium. Phase equilibrium formation. 4. Mathematical solution of phase equilibrium. Calculations and predictions of phase diagrams. Methods, programmes and thermodynamic databases for phase equilibrium calculations. CALPHAD approach. 5. Phase diagrams. Fundamental types of phase diagrams, visualisation, possible phase boundaries, and phase diagram cross-sections. Use of phase diagrams. 6. Experimental methods of phase equilibria study. Gain of phase data and thermodynamic data. Measurements of thermodynamic functions. Data sources and their accuracy. 7. Real phase equilibria. Unary systems, binary systems (coexistence of gas, liquid, and solid phases; mixture of volatile liquids; distillation; sublimation; dissolutions). Phase diagrams of several component systems (coexistence of solid phases; extraction; purification; chemical compounds inside phase diagram; intermetallics). 8. Examples of phase equilibrium and phase diagram calculations for systems. Relationship between phase, physical, and mechanical properties. 9. Phase transformations. Stable and metastable phase equilibria. Diffusionless phase transformations. Role of diffusion and nucleation at equilibrium establishing. 10. Diffusion. Essentials. Atomic mechanisms of diffusion. Fick's laws of diffusion. Boundary conditions. Analytical and numerical solutions of diffusion equations. 11. Diffusion in real systems. Atomic mobility. Mass fluxes. Kinetic and thermodynamic factors of diffusion. 12. Diffusion controlled phase transformations. Heterogeneous real systems. Diffusion and equilibrium at high and low temperatures. Simulation programmes (DICTRA). 13. Phase equilibria and diffusion controlled processes in chemical laboratory and technology. Coarsening and dissolving of phases, optimisation of material technology treatment, homogenization, nitriding, weld stability, protective layers, transformation diagrams, ...
Typ výuky a zkoušky	
Sylabus změněn	21. 11. 2005 10:15, doc. RNDr. Jiří Sopoušek, CSc.
URL	
Informace učitele	Přednáška je určena pro posluchače Přírodovědecké fakulty MU. Je však navštěvována i posluchači materiálových oborů VUT.
Informace změnil	21. 11. 2005 10:15, doc. RNDr. Jiří Sopoušek, CSc.
Literatura	Saunders, Nigel - Miodownik, Peter A. <i>Calphad : calculation of phase</i>

	<p><i>diagrams : a comprehensive guide</i>. Oxford : Pergamon, 1998. xvi, 479 s. Pergamon materials series; vol. 1. ISBN 0-08-042129-6.  Změněno: 21. 11. 2005 10:17, doc. RNDr. Jiří Sopoušek, CSc.</p>
Navazující předměty	<i>nezadány</i>
Potvrzena správnost	21. 11. 2005 10:19, doc. RNDr. Jiří Sopoušek, CSc.
Rozvrhové informace	<i>nezadány</i>
Členění na seminární/paralelní výuku	<i>žádné seminární skupiny</i>