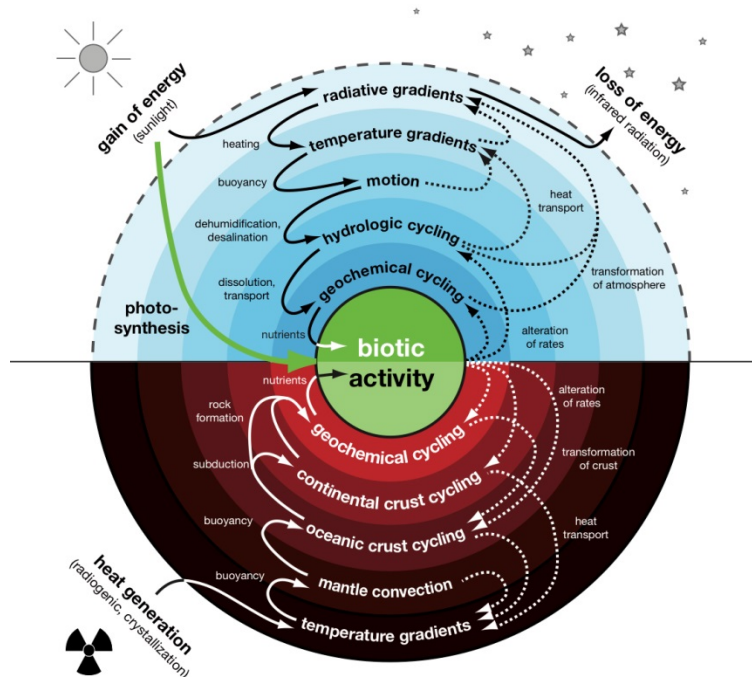
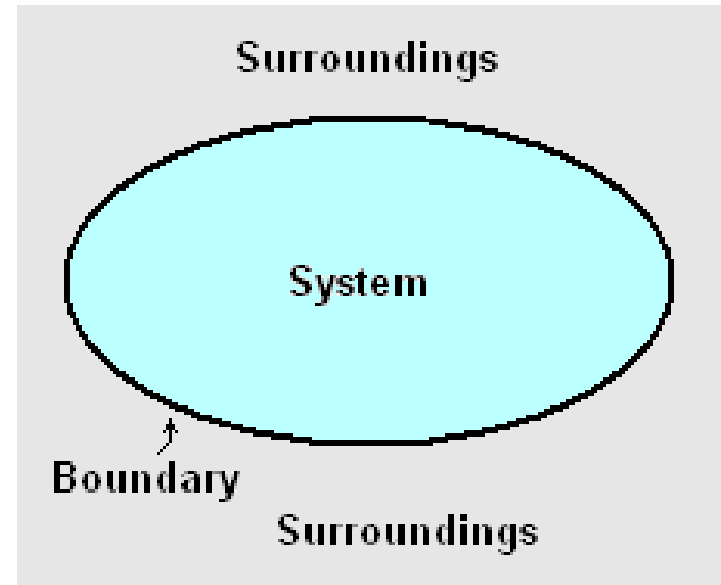


Termodynamická soustava

Skutečný systém



Aproximace



Video Lávová lampa: <https://www.youtube.com/watch?v=XwUEo67Gn0g>

Soustava a okrajové podmínky

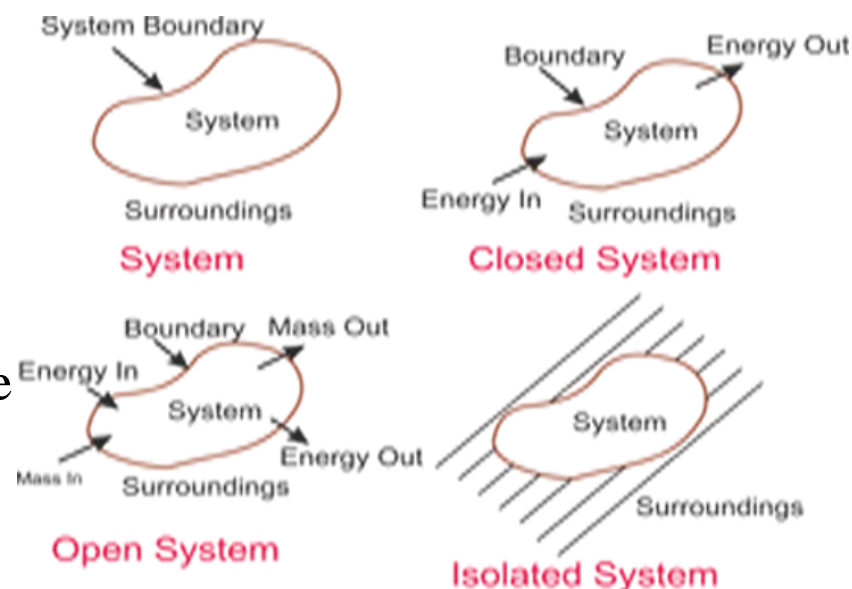
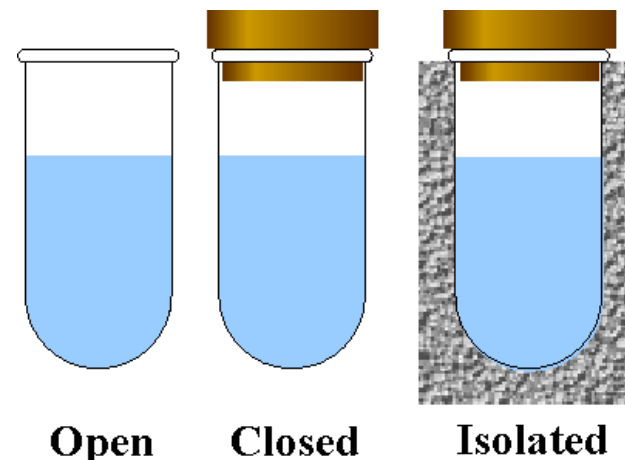
Otevřená soustava: probíhá výměna hmoty a energie s okolím.

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

Isolovaná soustava: neprobíhá výměna hmoty ani energie s okolím.

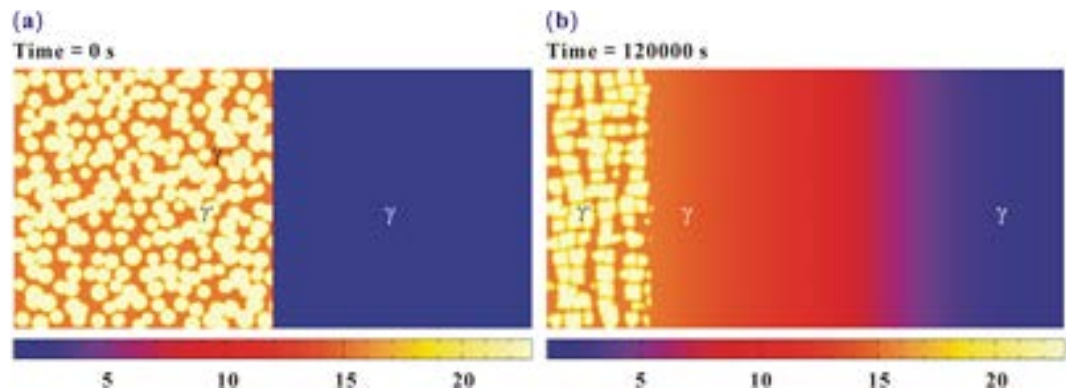
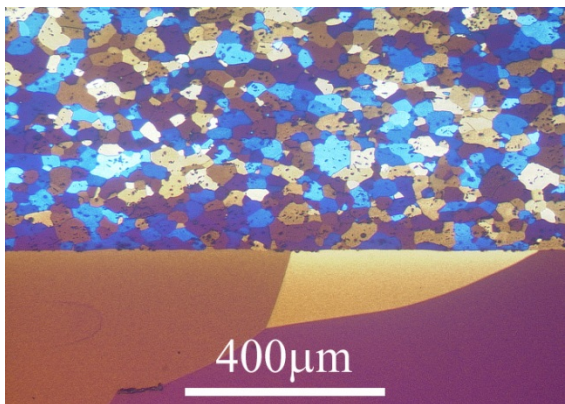
Vnitřní a vnější makroskopické proměnné: teplota, objem, tlak, energie, intenzita elektromagnetického pole (gravitačního, aj.), látkové množství (vyjádření složením), atd.

Lokální fluktuace: viz statistika, obvykle zanedbáváme.



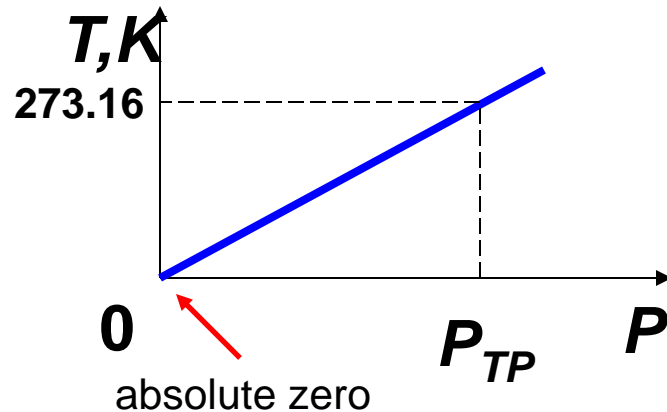
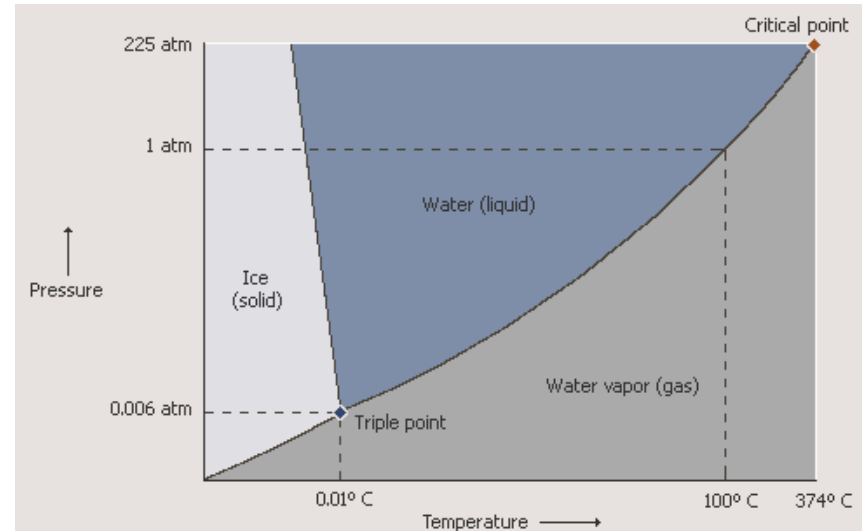
Podmínky (Matematicky: okrajové proměnné)

- Konstantní nebo variabilní: teplota, tlak, objem, látkové množství, ... (najděte vhodné konkrétní případy)
- Popište fázový stav a okrajové podmínky: vzorek pro metalografii, vzorek slitiny v ampuli pod vakuem, voda v kádince, voda v skleněné lahvi, 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

Lávová lampa



Chladnutí

Zahřívání

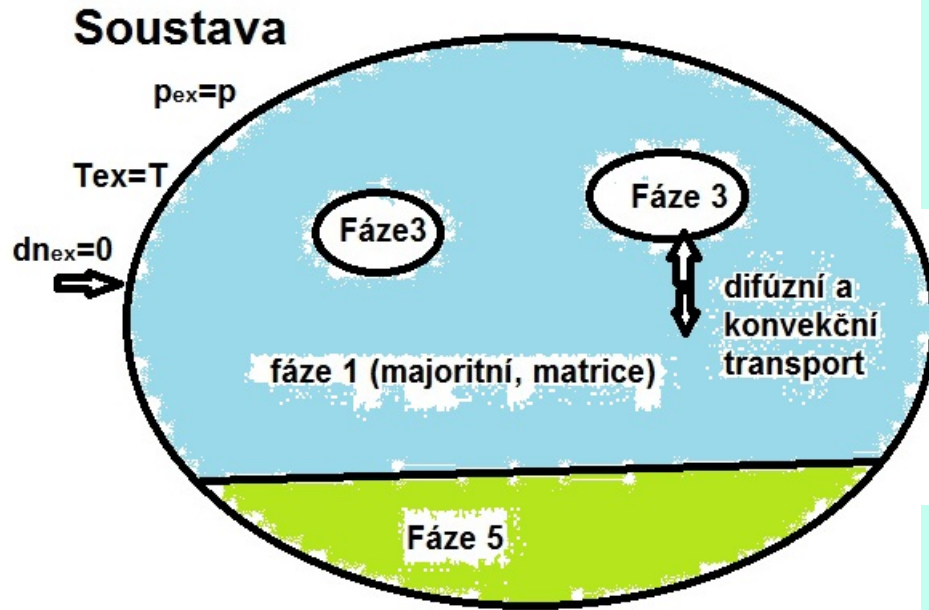
A lava lamp is made by mixing alcohol and water and mineral oil and dyes (barvivo), combining each separately. By mixing water and alcohol in the correct proportions, the mineral oil can be made to float. The correct ratio is about six parts 90% isopropyl alcohol to 13 parts of 70% isopropyl alcohol. Dyes, salt, etc. are then mixed into the water phase, and the oils and waxes (vosky) are added to the second liquid.

Toky tepla, změna hustoty ohřevem

Popište složení: celkové složení, fázové složení, složení koexistujících fází, mřížkové složení.

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

Nomenklatura koexistence fází



Struktura (mikrostruktura):

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

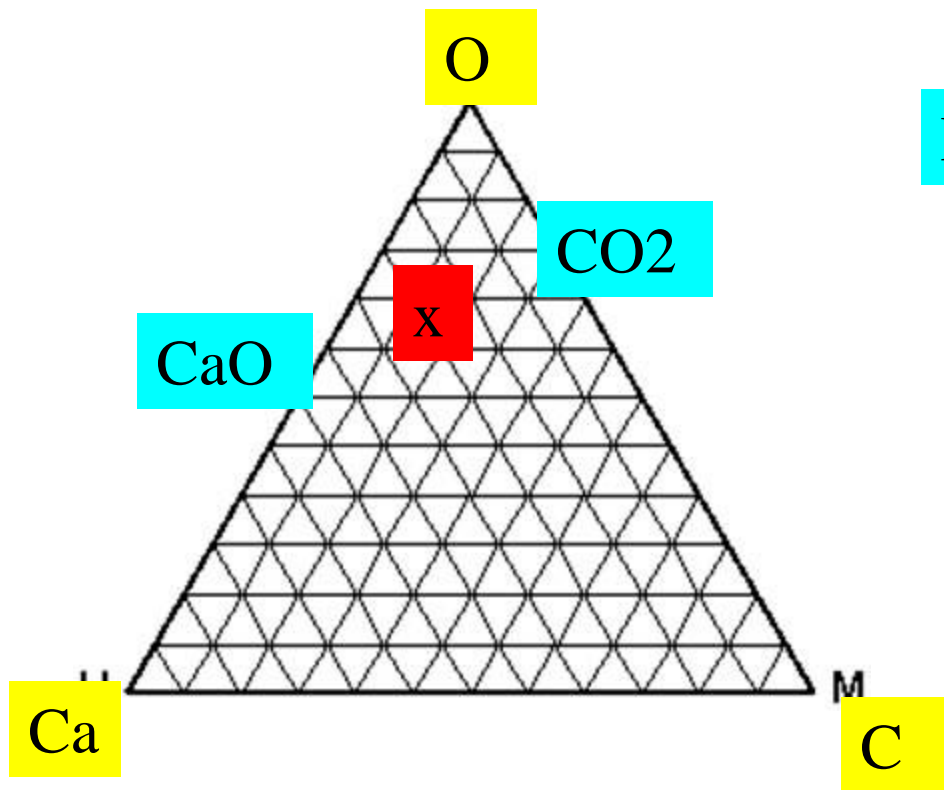
Veličiny určující konečný (rovnovážný) stav: T , p , celkové složení)

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

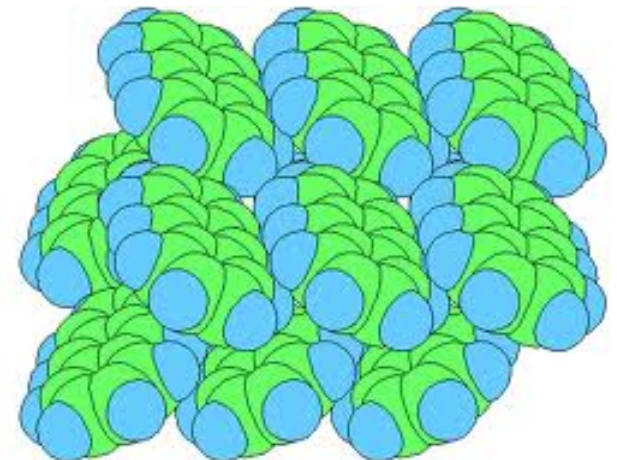
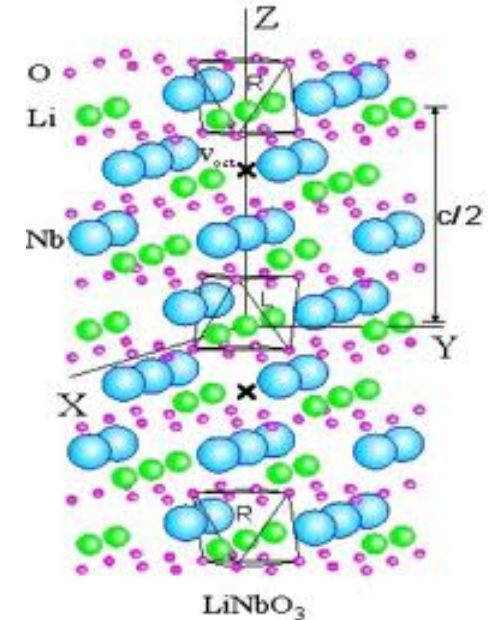
Soustava (system): jednosložková (**unary**),
dvousložková (**binary**), třísložková (**ternary**),
4složky (**quinary**).

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**)



Rovnovážný stav

Rovnováha

Tlaková (mechanická)

Teplotní (tepelná)

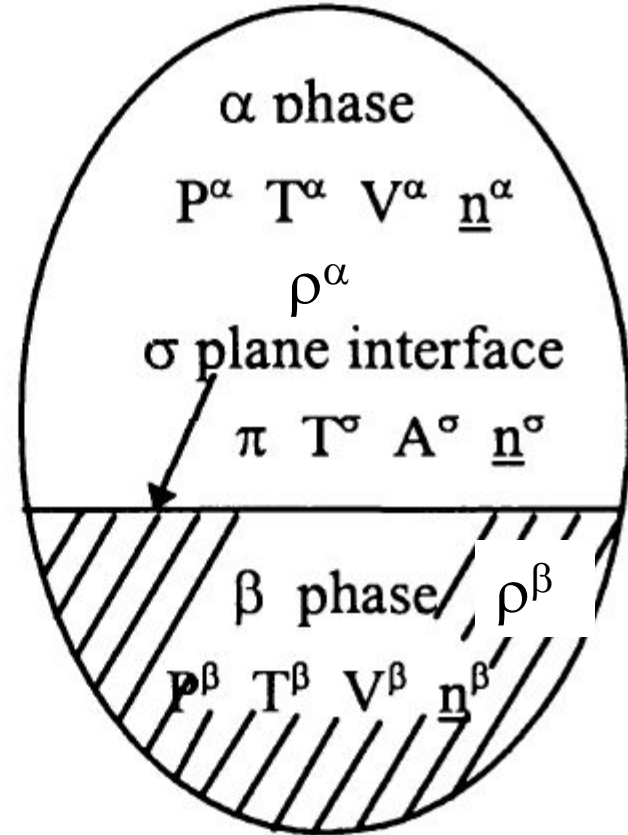
Chemická

Equilibrium

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

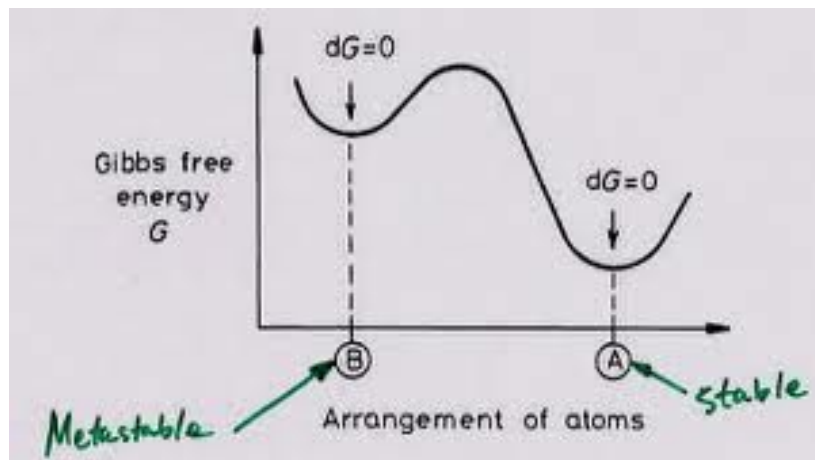
$$T^\alpha = T^\beta$$

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

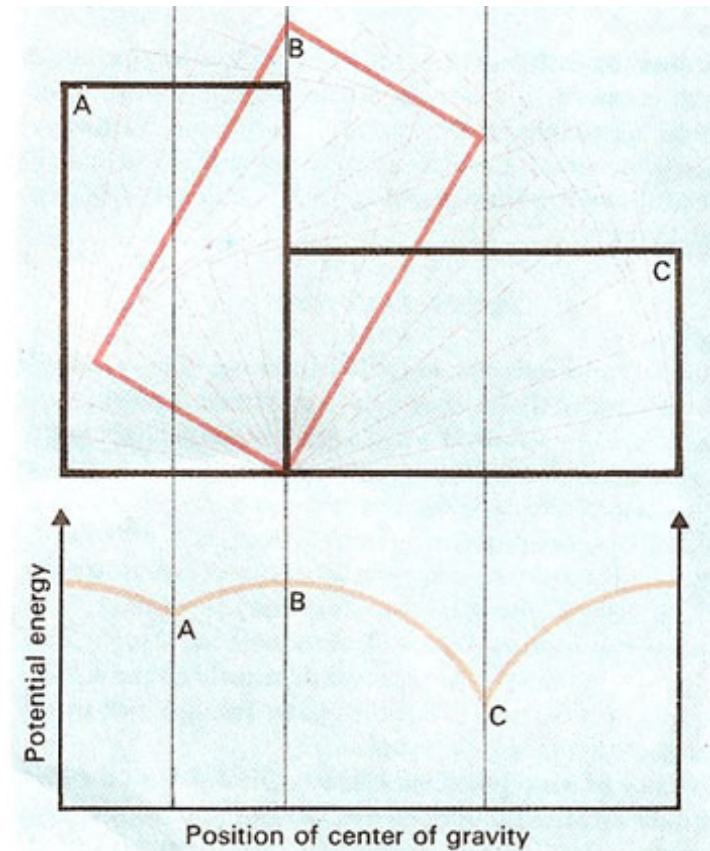


Stabilita soustavy

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



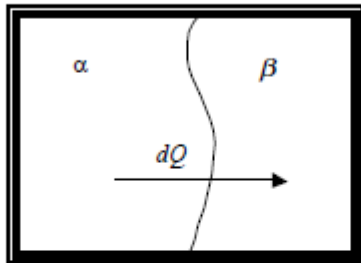
Změny Gibbsovy energie soustavy



Změny potenciální energie soustavy

Rovnováha

Thermal equilibrium



entropie

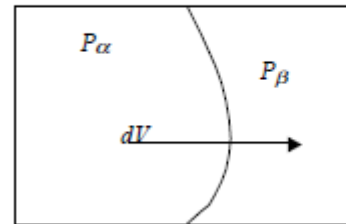
$$dS_{\alpha} + dS_{\beta} \geq 0$$

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

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

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

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

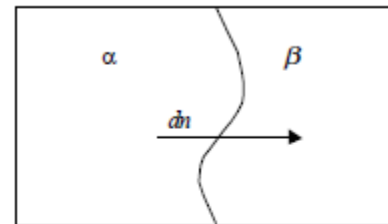


Helm. en. $dF_{\alpha} + dF_{\beta} \leq 0$

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

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

Chemical equilibrium



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

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

Gibbs. en.

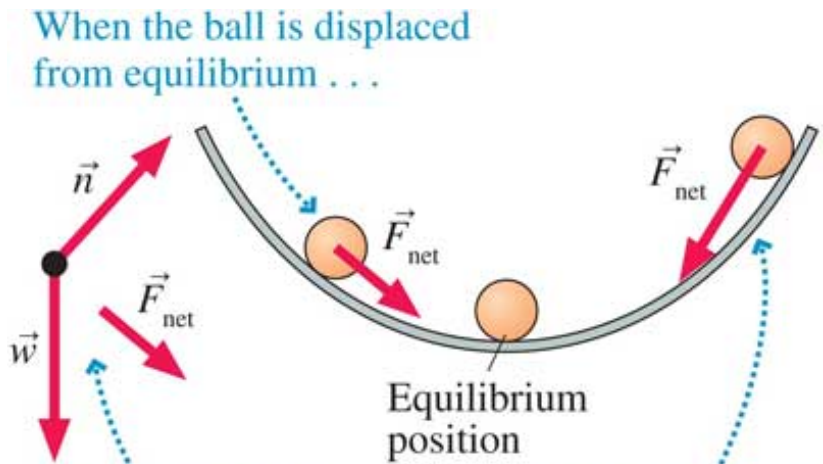
$$dG = vdp - SdT + \sum \mu_i dn_i$$

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

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

Diskuse

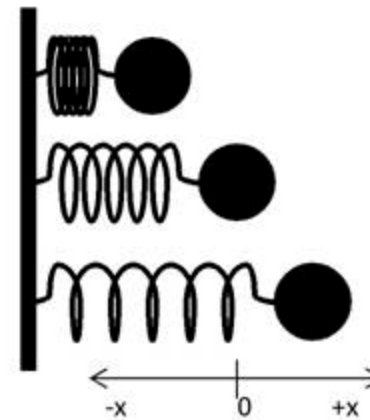
Charakterizujte vybrané praktické příklady



... a free-body diagram shows a net restoring force, as for a mass on an inclined plane.

The farther away from equilibrium, the greater the net force.

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



$$F = -kx$$

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

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

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

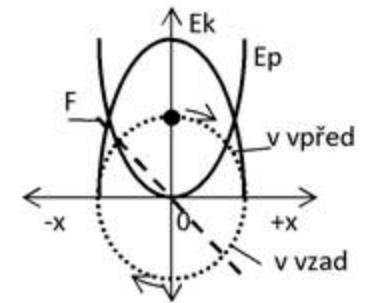
$$v_{max} = (2E_{osc}/m)^{1/2}$$

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

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

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

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



Ep ... potenciální energie [J]
 Ek ... 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]

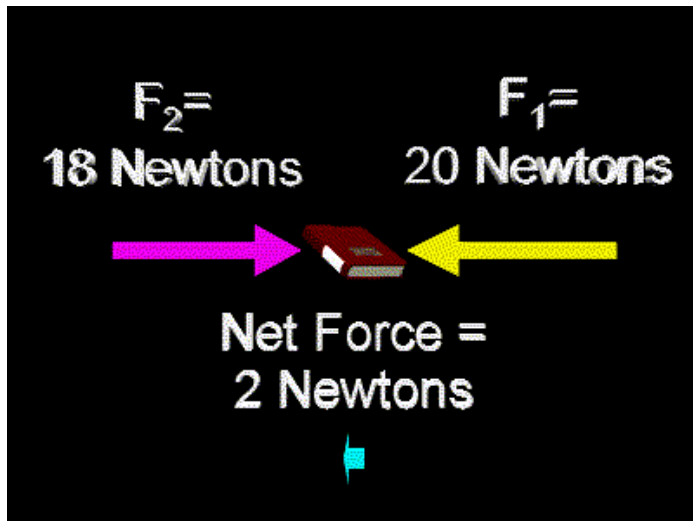
Zákon zachování součtu potenciální a kinetické energie – ztráty třením

Equilibrium

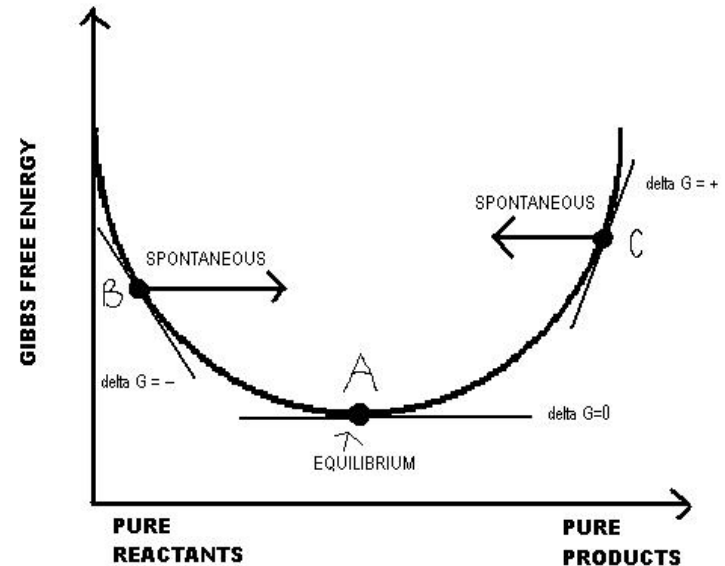
Mechanical equilibrium

$$dF_s=0.$$

In classical mechanics, a particle is in mechanical equilibrium if the net force on that particle is zero. By extension, a physical system made up of many parts is in mechanical equilibrium if the net force on each of its individual parts is zero.[1]:45–46[2]



Chemical equilibrium $dG_r=0$.

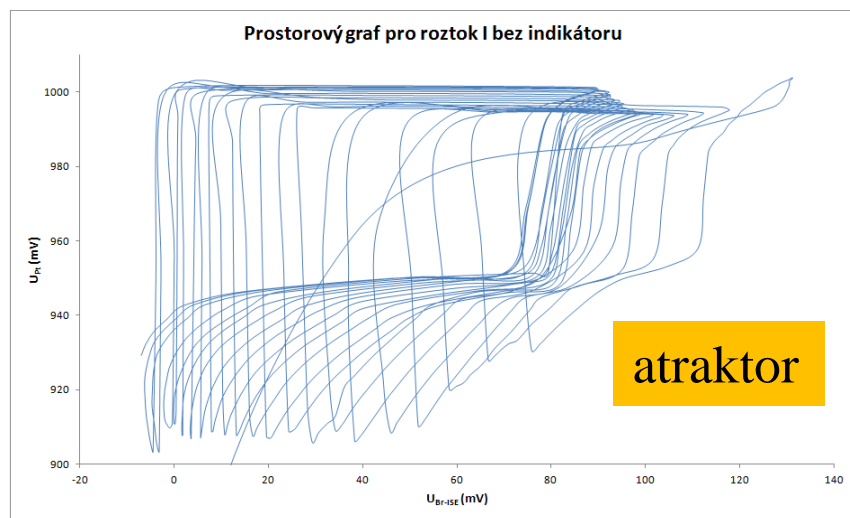
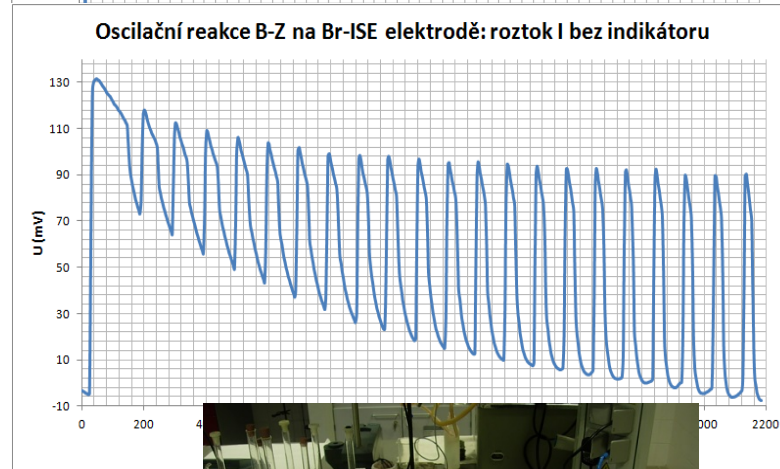
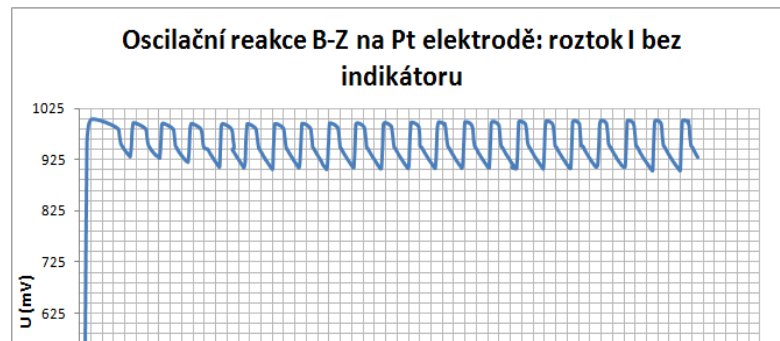


At point A, the system is in equilibrium; therefore, $Q=K$ and $dG_r=0$.

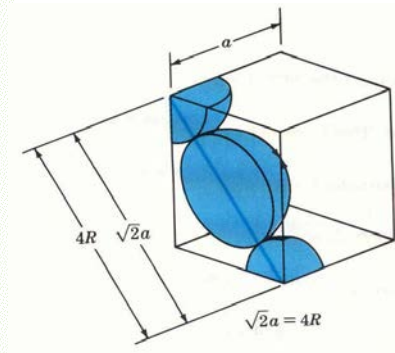
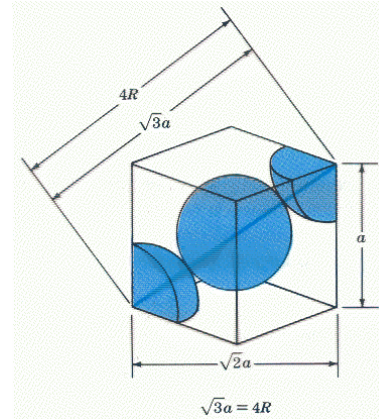
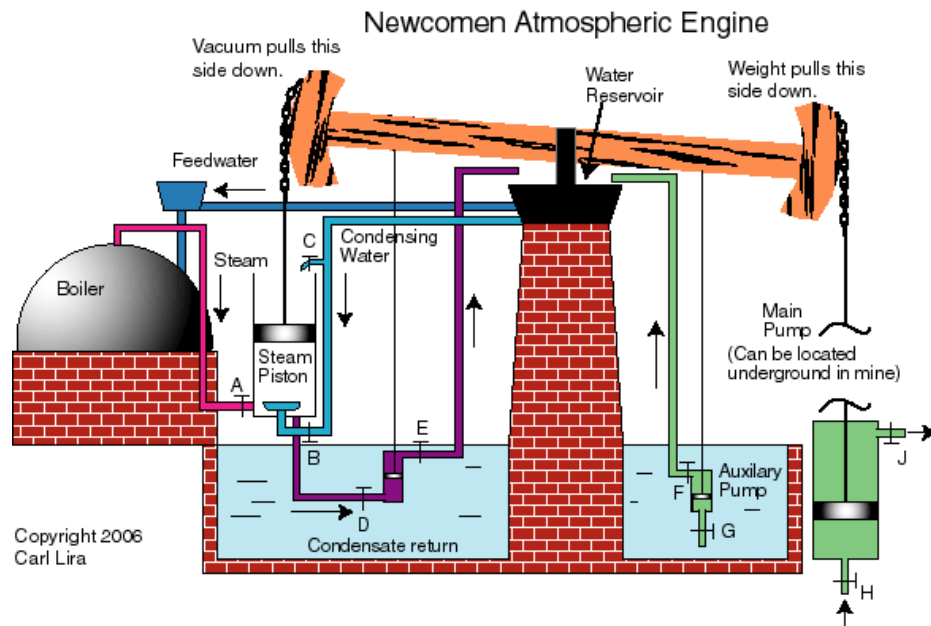
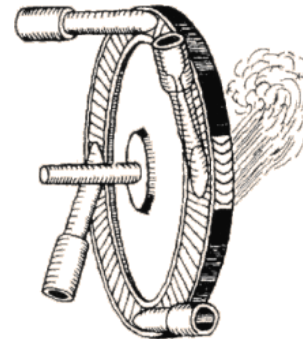
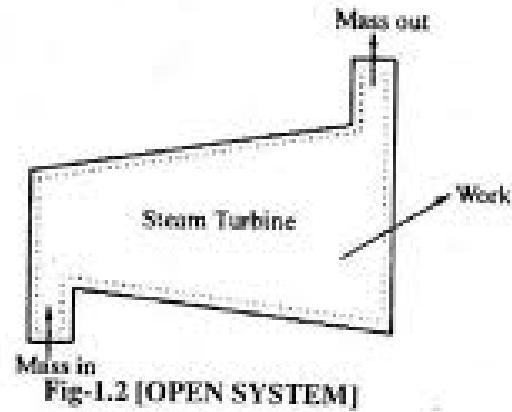
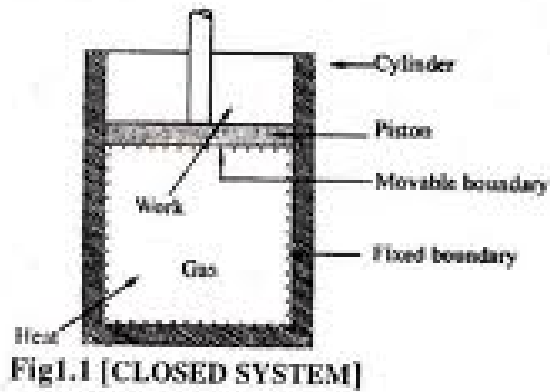
Chemické oscilace



Soustava, složky, G, S



Diskuze



BCC a FCC struktura

