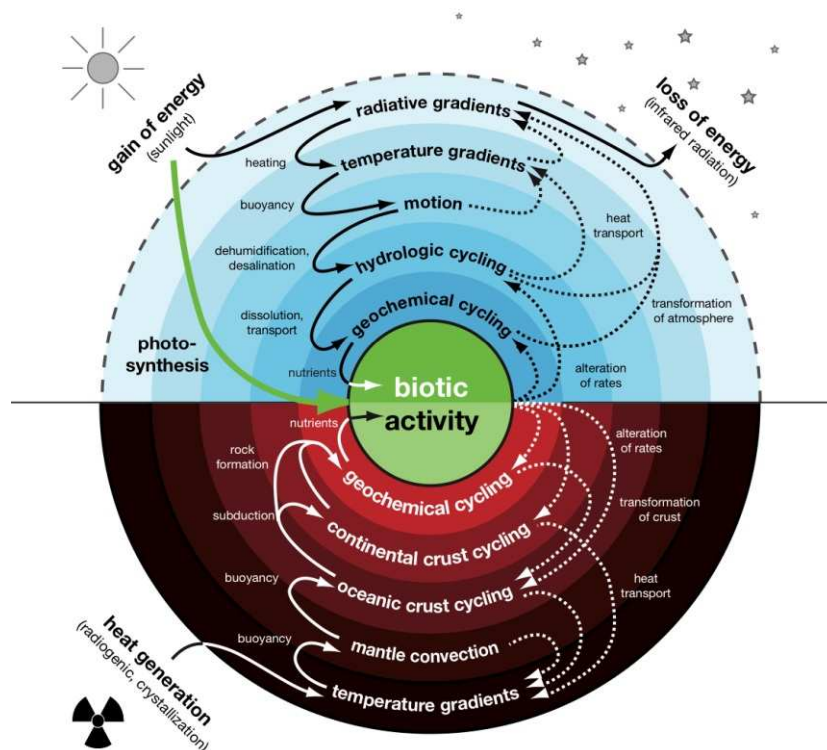
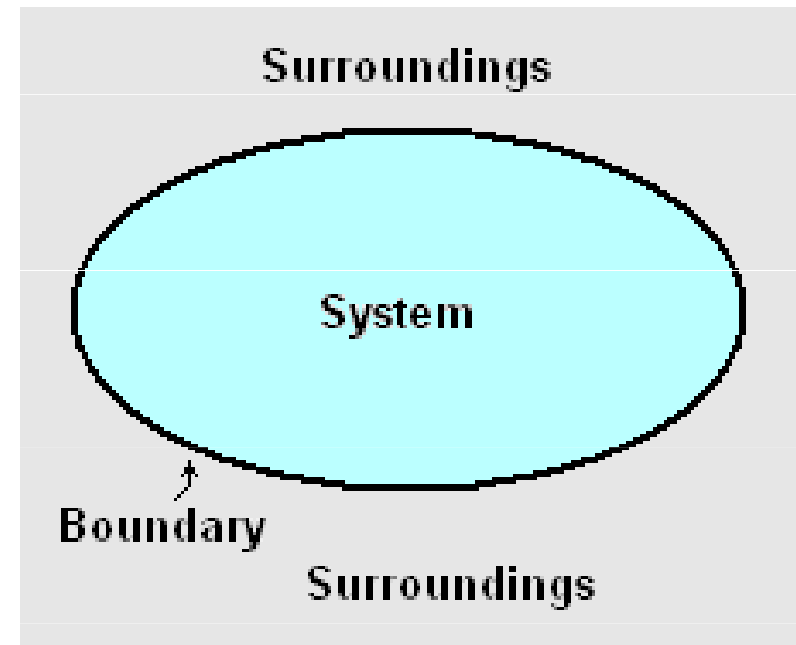


# Termodynamická soustava

Skutečný systém



Aproximace



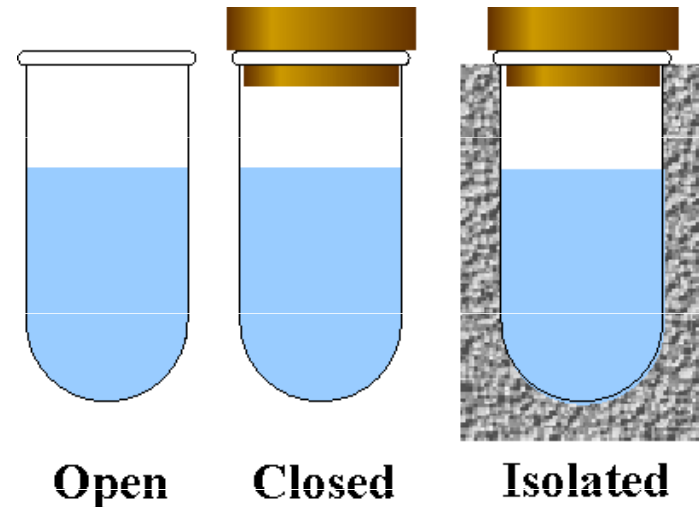
Video Lávová lampa: <https://www.youtube.com/watch?v=XwUEo67Gn0g>

# Stavu 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.

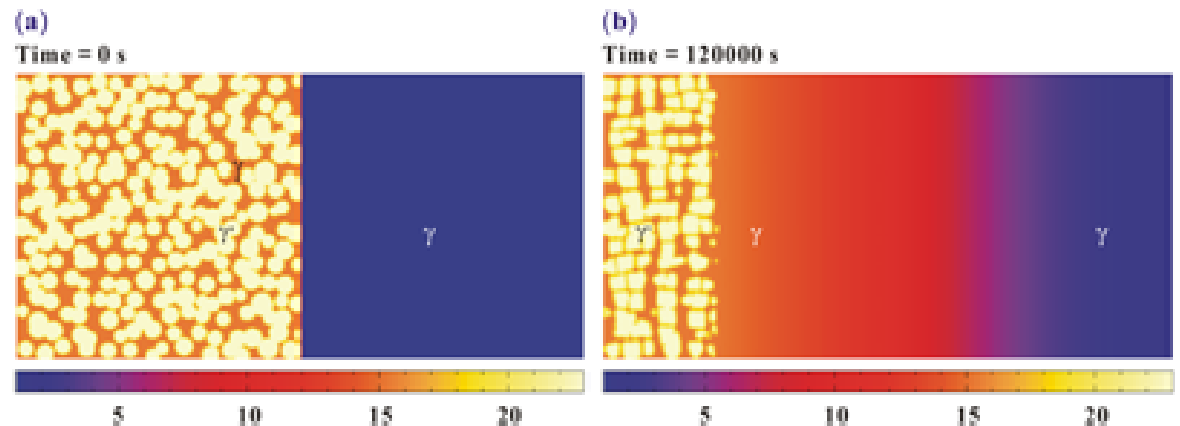
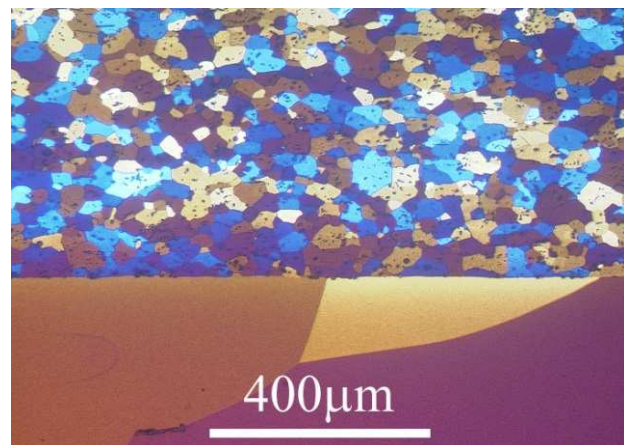


**Vnitřní a vnější makroskopické proměnné:** teplota, objem, tlak, energie, intenzita elektromagnetického pole (gravitačního, aj.), látkové množství (vyjádření složením), atd.

**Lokální fluktuace:** viz statistika, obvykle zanedbáváme.

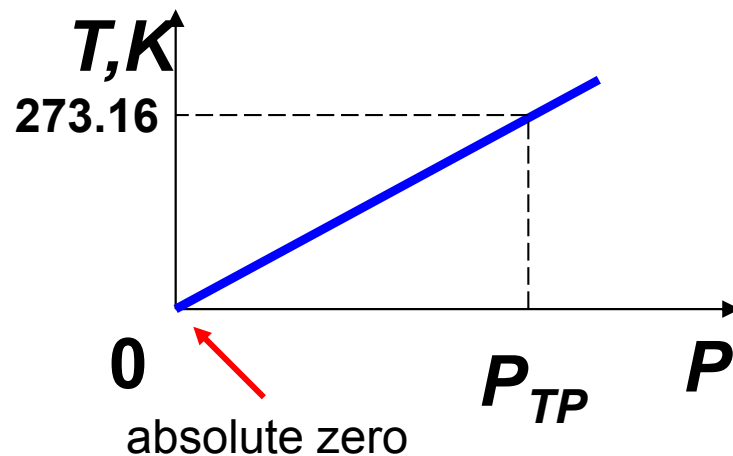
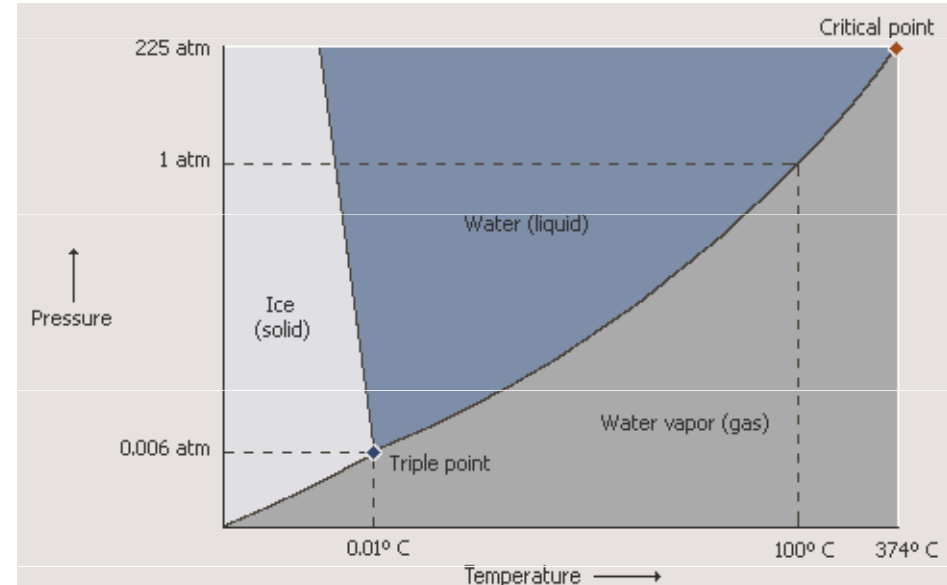
# Podmínky (okrajové proměnné)

- Konstantní: teplota, tlak, objem, ... (najděte vhodné konkrétní případy)
- Popište stav a okrajové podmínky: vzorek pro metalografii, vzorek slitiny v ampuli, voda v kádince, voda v PET, 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



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 (termodynamika), wt % (inženýrství), at. % (fyzikové), obj. % ( ), hm. % ( ).

# Rovnovážný stav

## Rovnováha

Tlaková (mechanická)

Teplotní (tepelná)

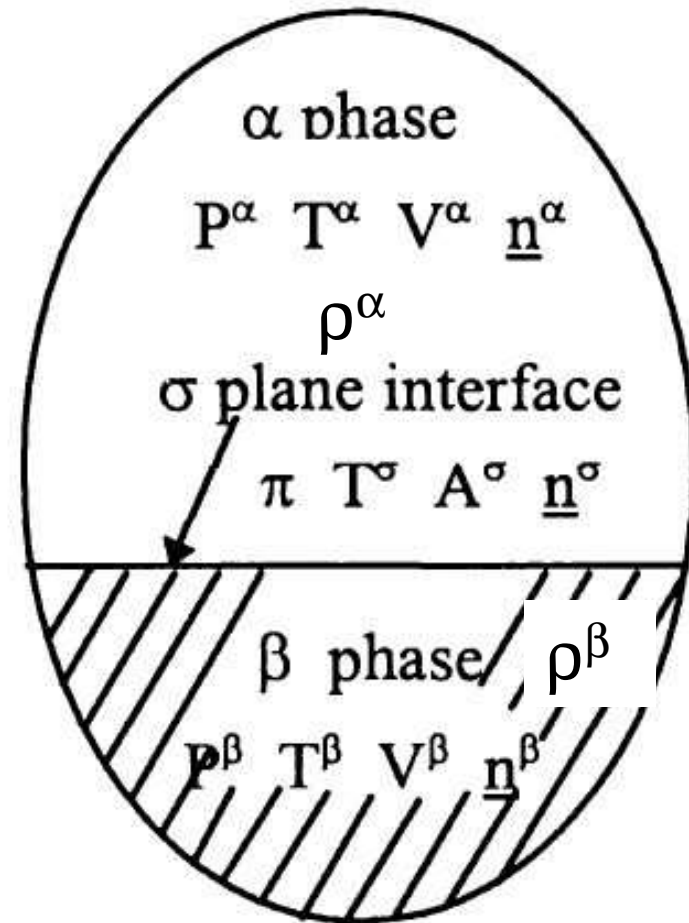
Chemická

## Equilibrium

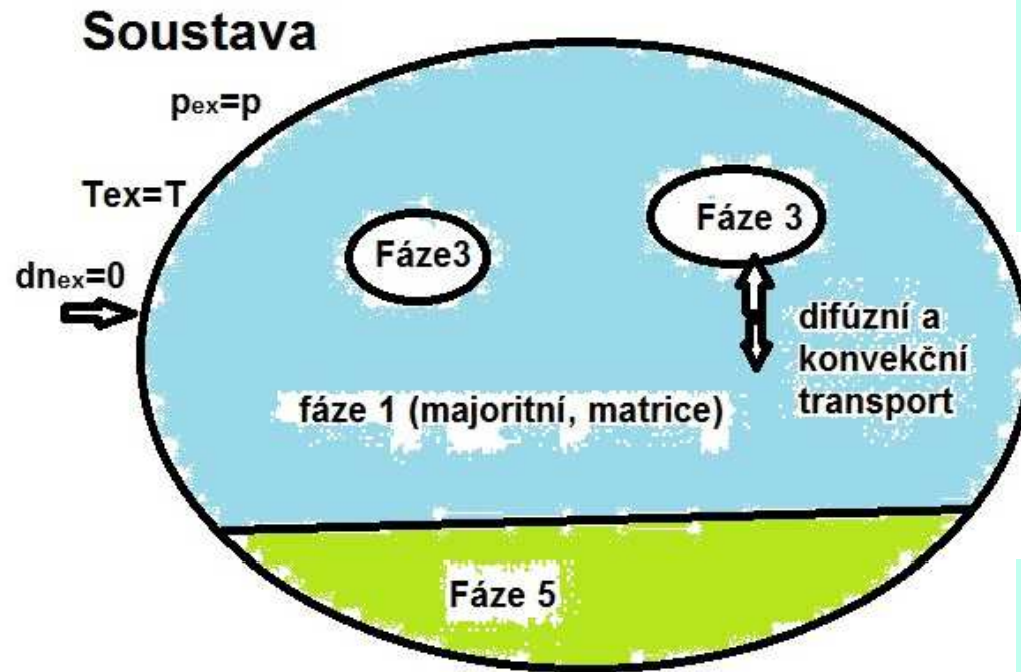
$$P^\alpha = P^\beta$$

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

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



# Nomenklatura koexistence fází



Struktura (mikrostruktura):

- separované fáze (l+l, l+g)
- rozptýlené fáze (s1+s2, v slitinách, ale i s+1)

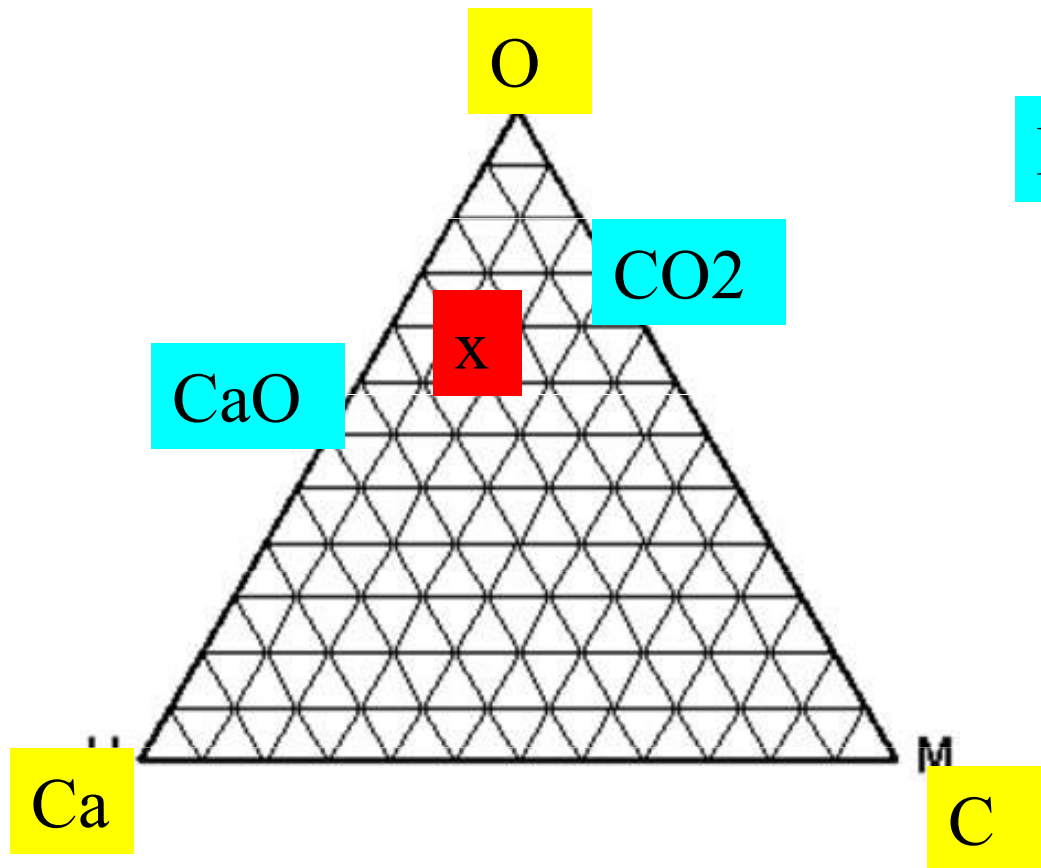
Veličiny určující konečný (rovnovážný) stav: T, p, celkové složení

Veličiny určující cestu k konečnému stavu:  $\mu_i$ ,  $D_i$ ,  $A_f$ , původní struktura  $\tau$ .

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

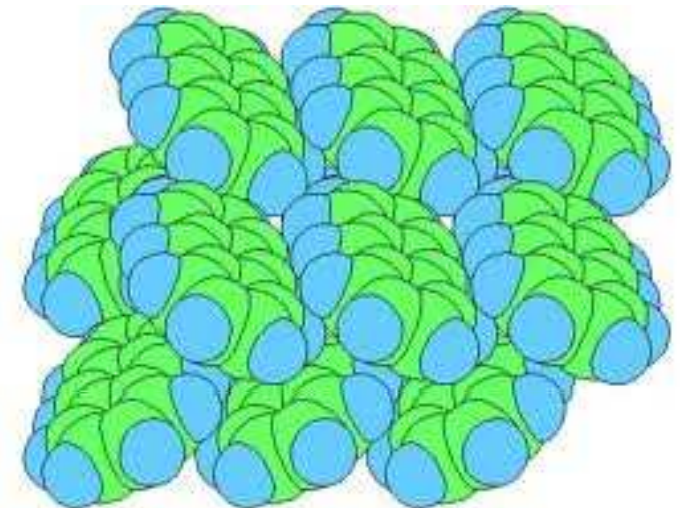
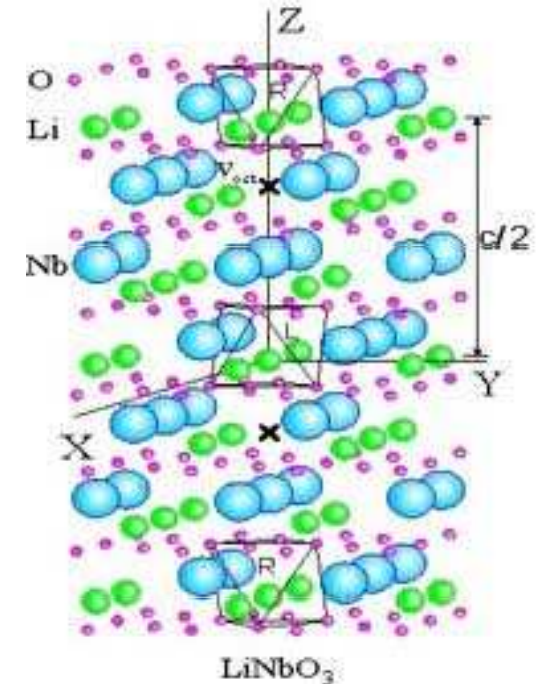
**Soustava (system):** jednosložková (**unary**),  
dvousložková (**binary**), třísložková (**ternary**),  
4složky (**quinary**).

**Fáze (phase):** fyzikálně homogenní části  
soustavy oddělené fázovým rozhraním. Liší se  
strukturou uspořádání složek (**species**).

-plynná (**gas**). „plazma“ (**plasma**)

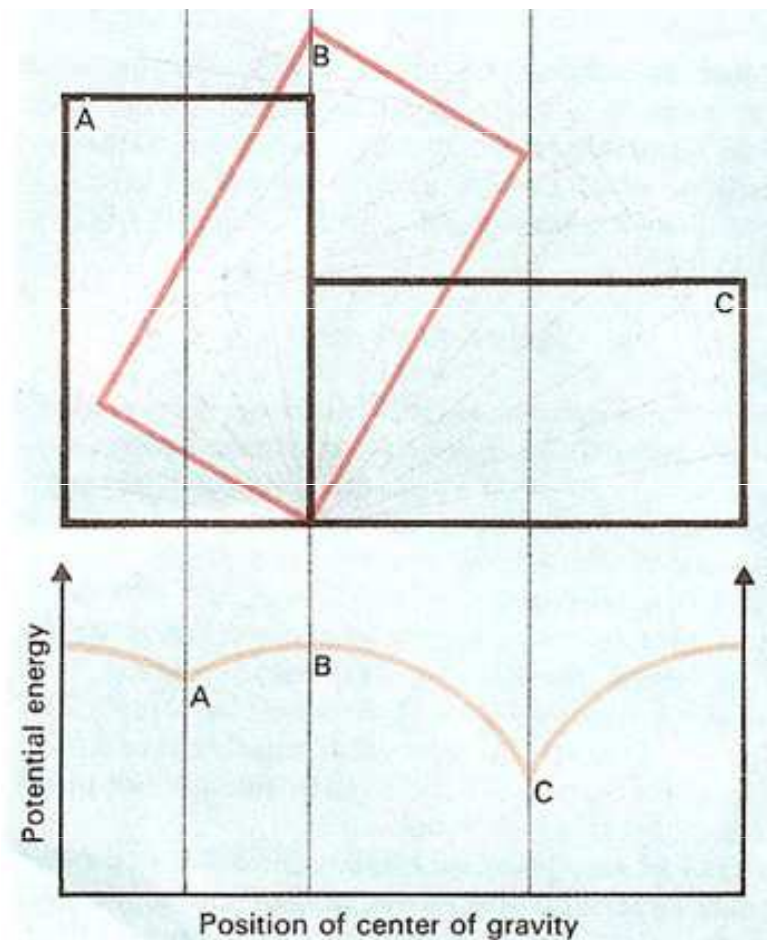
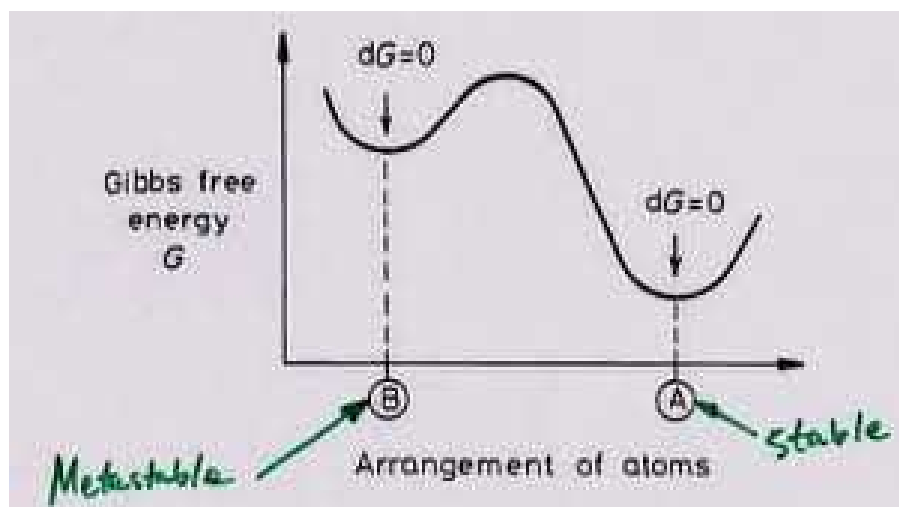
-Kapalné (**liquid**): asociované (**associated**),  
iontové (**ionic**)

-Tuhá (**solid**): tuhé roztoky (**solid solutions**),  
ne-stechiometrické sloučeniny (**none  
stoichiometry compounds**)



# Stabilita soustavy

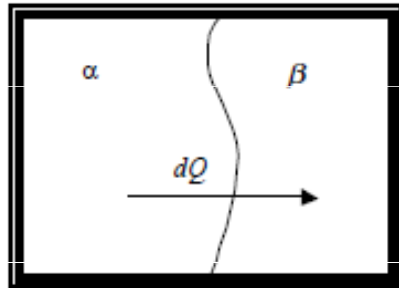
- Stabilní (globální minimum)
- Metastabilní (lokální minimum)
- Nerovnovážný stav



Otevřená soustava – potenciální energie

# Rovnováha

## Thermal equilibrium



entropie

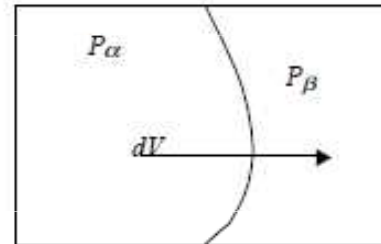
$$dS_\alpha + dS_\beta \geq 0$$

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

$$T_\alpha \geq T_\beta$$

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

## Mechanical equilibrium (at $T_\alpha = T_\beta$ )



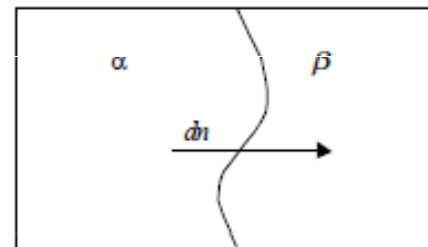
Helm. en.

$$dF_\alpha + dF_\beta \leq 0$$

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

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

## Chemical equilibrium



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

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

Gibbs. en.

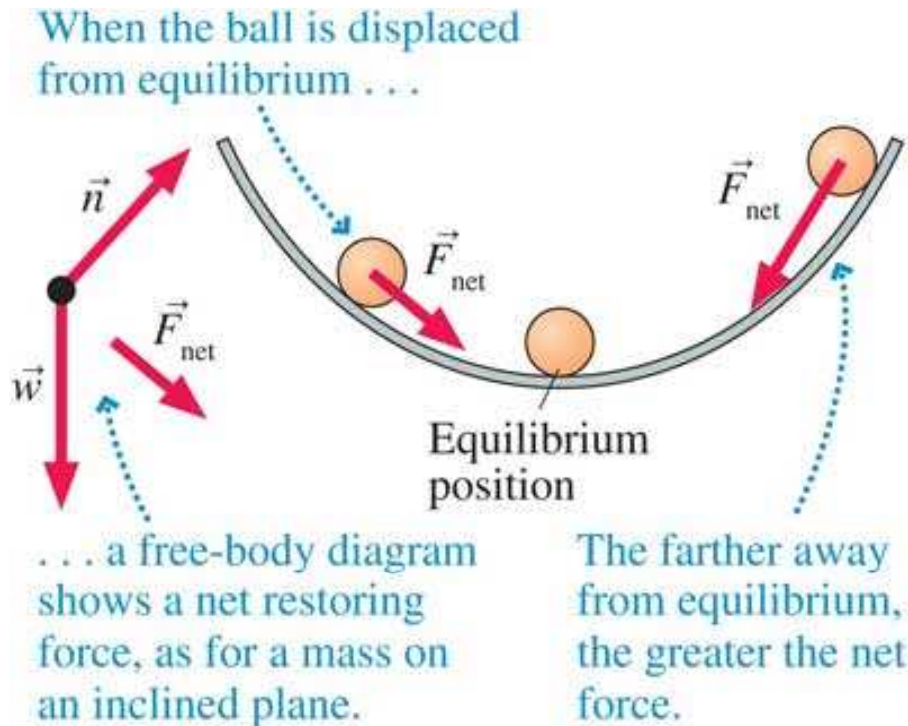
$$dG = vdp - SdT + \sum \mu_i dn_i$$

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

$$\mu_i^\alpha \geq \mu_i^\beta$$

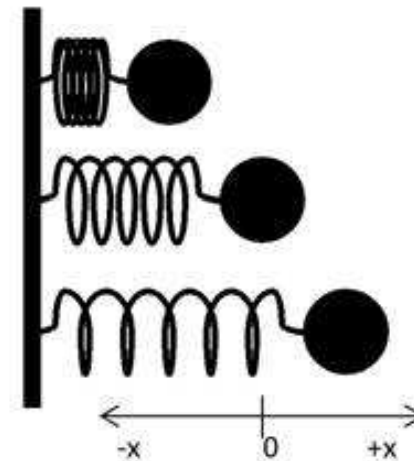
# Diskuse

Charakterizujte vybrané praktické příklady



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

Zákon zachování součtu potenciální a kinetické energie – ztráty třením



$$F = -kx$$

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

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

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

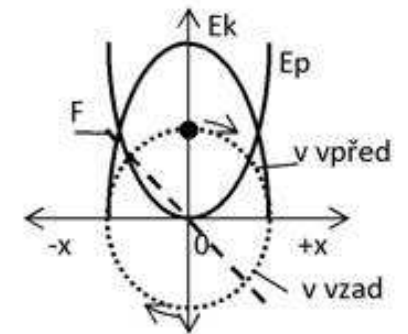
$$v_{max} = (2E_{osc}/m)^{1/2}$$

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

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

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

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

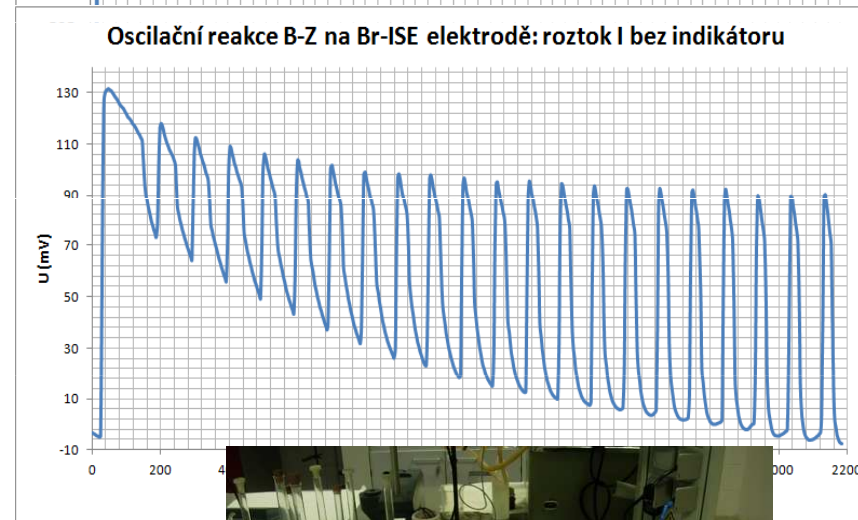
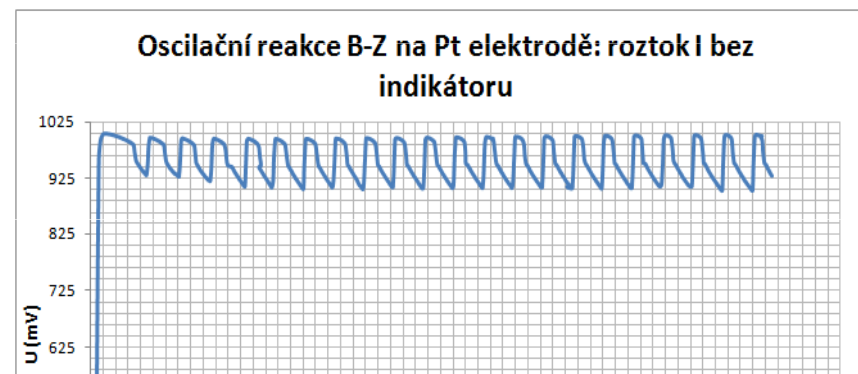
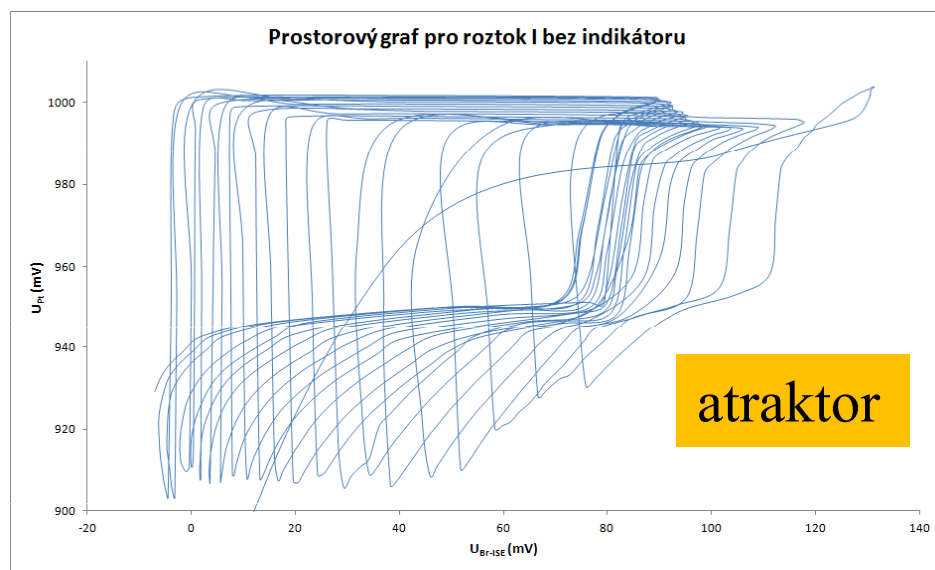


$E_p$  ... potenciální energie [J]  
 $E_k$  ... kinetická energie [J]  
 $F$  ... síla pružiny [N]  
 $v$  ... rychlost [m/s]  
 $x$  ... vychýlení [m]  
 $m$  ... hmotnost závaží [kg]  
 $k$  ... tuhost pružiny [N/m]  
 $f_{osc}$  ... frekvence oscilací [Hz]  
 $t$  ... čas [s]

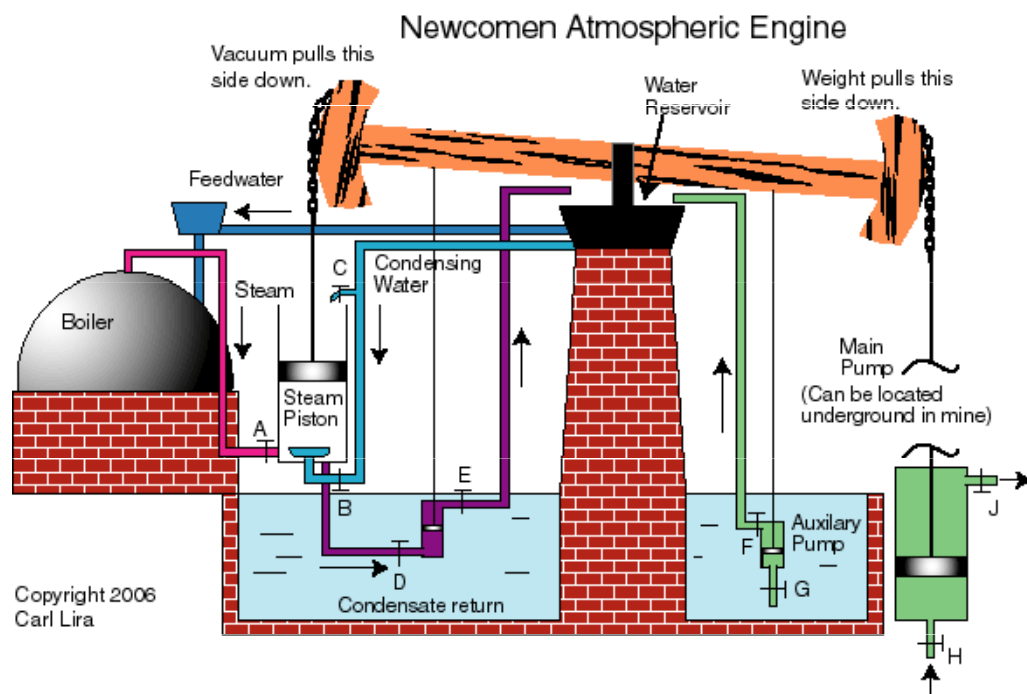
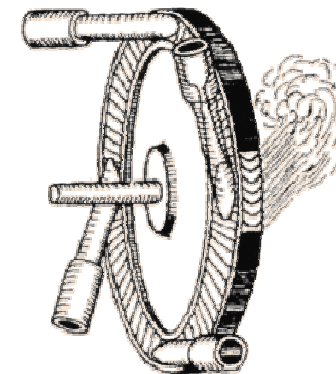
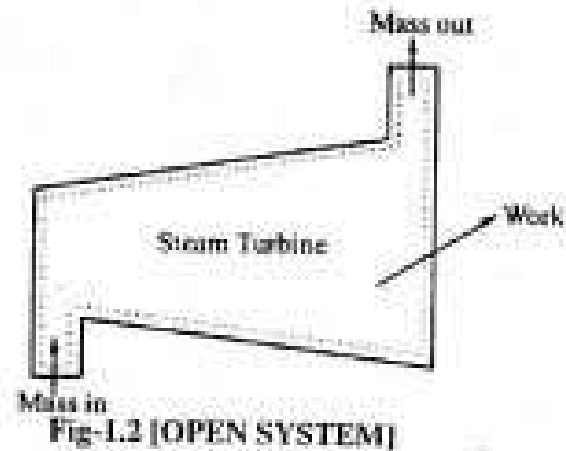
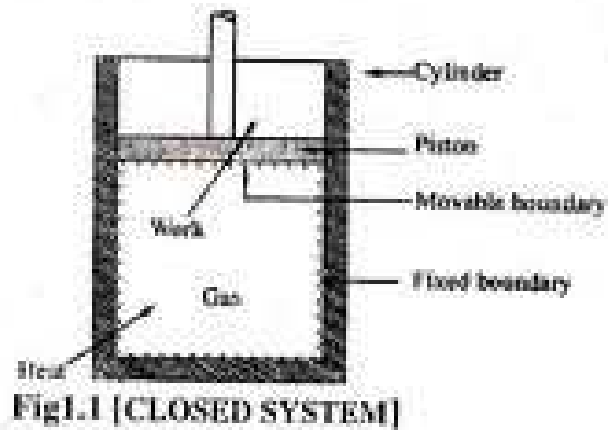
# Chemické oscilace



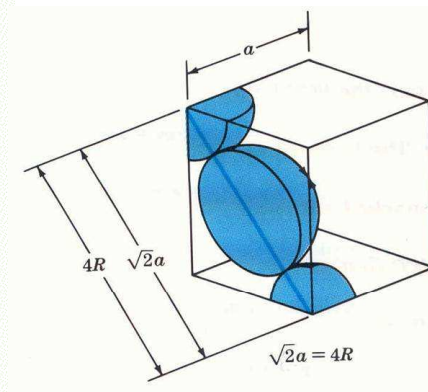
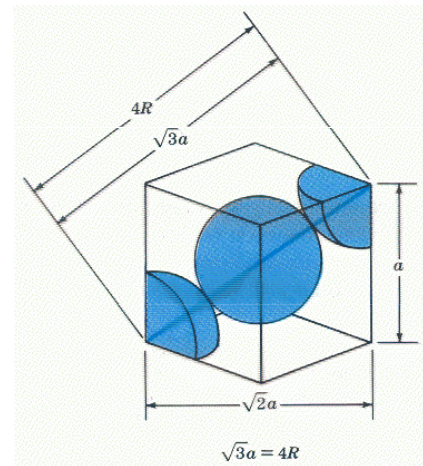
Soustava, složky, G, S



# Diskuze



Copyright 2006  
Carl Lira



BCC a FCC struktura

