

Thermodynamics and Kinetics of Materials

מרצה: אלי ברוש, ebrosh1@gmail.com

Abstract

תקציר

בקורס זה ילמדו יסודות התרמודינמיקה עם דגש על תרמודינמיקה כימית ומבוא לקינטיקה כימית עם דגש על יישומים בהנדסת חומרים. הקורס מורכב משלושה חלקים. בחלק הראשון נלמדים יסודות התרמודינמיקה: חוקי התרמודינמיקה, הקריטריון לשיווי משקל והקשרים בין גדלים תרמודינמיים. בחלק השני נלמד היישום של חוקי התרמודינמיקה לשיווי משקל כימי ולדיאגרמות פאזות. החלק השלישי הוא מבוא לקינטיקה שבו יילמדו משוואות לקצבי תגובה במערכות הומוגניות אחר כך יידון הכוח המניע לדיפוזיה. יוצגו קירובים שימושיים בהנדסת חומרים: שיווי משקל מטהסטביליים, שיווי משקל מקומי והנחת היעדר-דיפוזיה.

ציונים

הגשת תרגילים: 10%

בוחן אמצע: 30%

מבחן סופי: 60%

ספרי לימוד

Boris S. Bokstein, Mikhail Mendeleev, David J. Srolovitz, Thermodynamics and kinetics in materials science, a short course, Oxford university press 2005

David R. Gaskell, David E. Laughlin, Introduction to the Thermodynamics of materials, 6th Ed
CRC Press 2018

Topics covered

Part 1: Fundamentals of thermodynamics

- Definitions: Types of systems, the concept of thermodynamic state and state functions, the concept of thermodynamic equilibrium.
- The first law of thermodynamics, types of processes, enthalpy state function. Application of enthalpy in description of chemical processes.
- Ideal gas. Types of processes with ideal gas. Reversible and irreversible processes.
- The second law of thermodynamics: The Carnot cycle, the entropy state function, the direction of spontaneous processes, entropy and the criterion for equilibrium.
- Statistical interpretation of entropy, calculation of heat capacity, calculation of the entropy of mixing. The third law of thermodynamics.
- The combined statement of the first and second laws of thermodynamics.
Auxiliary functions: Gibbs and Helmholtz free energy functions. Thermodynamic relations.
- Helmholtz energy dependence of V, T, Gibbs energy, enthalpy and entropy dependence on P and T.

Part 2: Phase equilibria

- Phase equilibria, unary systems: criterion for equilibrium, Clapeyron equation, vapor pressure.
- Thermodynamics of solutions: ideal vs real solution, partial molar properties, the chemical potential, activity, Gibbs-Dohem relation. The regular solution model. Interstitial solution vs substitutional solution.
- Phase equilibria, binary systems: Phase diagrams and Gibbs energy for binary systems, the phase rule.
- Phase equilibria: multicomponent heterogeneous systems, reactions involving gases, Ellingham diagrams.

Part 3: Kinetics and phase transformations

- Kinetics: homogeneous chemical reactions, the concept of activation energy.

- Thermodynamics and kinetics of phase transformations: Metastable equilibria, diffusionless transformations and T₀ curves, the thermodynamic driving force for diffusion. Local thermodynamic equilibrium at interfaces.
- Kinetics: surface energy, nucleation.

חומר נוסף

רוני שנק, חוברת תרגילים ותקצירים למקצוע תרמודינמיקה להנדסת חומרים, אוניברסיטת בן גוריון

אנריקו פרמי, תרמודינמיקה, הוצאת יחדיו 1963

ויס שמואל, תרמודינמיקה, האוניברסיטה הפתוחה 1988

Robert T. DeHoff, Thermodynamics in Materials Science, Thermodynamic in material science.

2nd Ed. CRC Press - Taylor and Francis, 2006.

הרצאות מצולמות:

Chi-Feng Pai

https://www.youtube.com/playlist?list=PLCr_gutW3TyPwcyV-_U1v_QG6jvBZ8lod

תקצירים: קורס של אוניברסיטת וירג'יניה על תרמודינמיקה וקינטיקה בחומרים

<http://www.people.virginia.edu/~lz2n/mse305/>