

## FÁZOVÉ PŘECHODY A JEJICH APLIKACE V PORÉZNÍM PROSTŘEDÍ

DOC. ING. JIŘÍ MIKYŠKA, PH.D.

### Popis tématu

Termodynamika fázových přechodů slouží k popisu rovnovážného stavu systému tvořeného čistou látkou nebo směsí více látek za určitých vnějších podmínek (typicky tlak, teplota a chemické složení směsi). Je možno zjistit, zda za daných podmínek bude směs stabilní nebo se rozloží na dvě nebo více fází. To umožňuje popisovat procesy jako vypařování kapalin, kondenzaci plynu, tuhnutí krystalů, stanovovat rozpustnost různých látek v kapalinách, apod. Termodynamika fázových rovnováh má tedy bohaté aplikace ve fyzikální chemii a chemickém inženýrství. V nedávné době jsme se zabývali zejména systémy popsané alternativními proměnnými (např. objem, teplota, složení, nebo objem, vnitřní energie, složení). Daná problematika stále není uzavřena a poskytuje mnoho příležitostí pro studenty FJFI. Určitě využijete své znalosti téměř všech disciplín, se kterými jste se setkali v prvních dvou letech studia. KM FJFI v této oblasti spolupracuje s předními světovými pracovišti, zejména v USA - Yale University (New Haven, Connecticut) a Reservoir Engineering Research Institute (Palo Alto, California). Výsledky výzkumu jsou prezentovány v prestižních impaktovaných časopisech a na vědeckých konferencích po celém světě.

### Příklad řešené úlohy

Uvažme systém  $n$  chemických komponent s molárními koncentracemi  $c_1, \dots, c_n$  při teplotě  $T$ . Hustota Helmholtzovy energie v hypotetickém jednofázovém systému je

$$a(c_1, \dots, c_n, T) = -p(c_1, \dots, c_n, T) + \sum_{i=1}^n c_i \mu_i(c_1, \dots, c_n, T),$$

$p$  je tlak a  $\mu_1, \dots, \mu_n$  jsou i jsou chemické potenciály jednotlivých složek směsi. Funkce  $p$  a  $\mu_1, \dots, \mu_n$  jsou zadané funkce koncentrací a teploty, které lze odvodit z dané stavové rovnice. Pro jednofázový systém je hustota energie hypotetického dvoufázového stavu dána rovnicí

$$a' = a(c_1, \dots, c_n, T) = -p(c_1, \dots, c_n, T) + \sum_{i=1}^n c_i \mu_i(c_1, \dots, c_n, T),$$

zatímco pro dvoufázový systém platí

$$a'' = S' a(c'_1, \dots, c'_n, T) + S'' a(c''_1, \dots, c''_n, T),$$

za omezujících podmínek

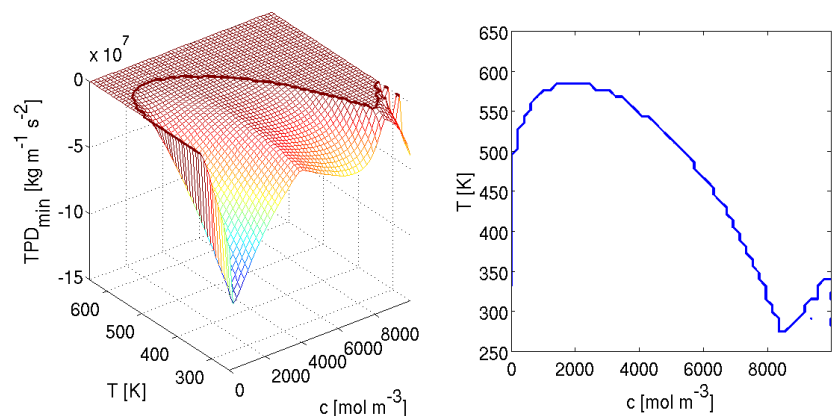
$$\begin{aligned} S' c'_i + S'' c''_i &= c_i, & i \in \hat{n}, \\ S' + S'' &= 1. \end{aligned}$$

Zde  $S'$ , resp.  $S''$  označují objemové zlomky (saturace) příslušné fáze. Odtud lze odvodit následující variantu Gibbsova kritéria fázové stability: Fáze popsaná koncentracemi  $c_1, \dots, c_n$  je při teplotě  $T$  stabilní, právě když

$$\begin{aligned} D(c'_1, \dots, c'_n) &:= \sum_{i=1}^n (\mu_i(c'_1, \dots, c'_n, T) - \mu_i(c_1, \dots, c_n, T)) c'_i \\ &\quad - (p(c'_1, \dots, c'_n, T) - p(c_1, \dots, c_n, T)) \geq 0 \end{aligned}$$

pro všechny přípustné koncentrace  $c'_1, \dots, c'_n$ . K ověření stability směsi tedy stačí zjišťovat znaménko globálního minima funkce  $D$ .

### Numerické řešení



Zobrazena je hodnota minima funkce  $D$  jako funkce koncentrací teploty  $T$  a celkové molární koncentrace  $c$  v systému s konstantními hodnotami molárních zlomků  $z_1$  a  $z_2$  pro směs  $\text{CO}_2$  a  $n$ -dekanu (vlevo). Vpravo je znázorněna hranice mezi jednofázovou a vícefázovou oblastí.

### Čím se budete zabývat

- ▶ Formulace vybraného problému
- ▶ Studium a implementace numerických metod
- ▶ Testování programu na modelových úlohách, příp. reálných datech
- ▶ Prezentace výsledků

### Upozornění

Téma je vhodné pro zvědavé jaderňáky se solidním matematicko-fyzikálním základem, kteří se neobávají toho, že výsledkem jejich výzkumného úkolu může být článek v prestižním impaktovaném časopise.

