

Spis treści

Przedmowa	7
1. Podstawy termodynamiki roztworów i równowag fazowych	9
1.1. Pojęcia podstawowe – przypomnienie i podsumowanie	9
1.1.1. Zasady ogólne	9
1.1.2. Opis termodynamiczny układów	9
1.1.3. Funkcje termodynamiczne i podstawowe relacje	11
1.1.4. Opis termodynamiczny faz czystych	15
1.2. Opis termodynamiczny roztworów	20
1.2.1. Funkcje molowe cząstkowe i potencjał chemiczny składnika roztworu	20
1.2.2. Podstawowe relacje między wielkościami molowymi cząstkowymi	22
1.2.3. Funkcje mieszania i nadmiarowe funkcje mieszania	24
1.2.4. Aktywność składnika i symetryczny układ odniesienia	30
1.2.5. Model roztworu prostego	32
1.3. Opis termodynamiczny równowag fazowych	34
1.3.1. Warunki równowagi fazowej	34
1.3.2. Reguła faz Gibbsa	36
2. Równowaga ciecz–ciecz w układach dwuskładnikowych	39
2.1. Fakty doświadczalne i ich teoretyczne uzasadnienie	39
2.1.1. Wzajemna mieszalność cieczy – fakty doświadczalne	39
2.1.2. Izobaryczne diagramy fazowe LLE i ich interpretacja	41
2.1.3. Wpływ ciśnienia na LLE	46
2.1.4. Termodynamiczny opis LLE	50
2.2. Symulacje komputerowe diagramów fazowych ciecz–ciecz modelem roztworu prostego	57
2.2.1. Podstawowe relacje i wzory obliczeniowe	57
2.2.2. Przykładowe symulacje	62
3. Równowaga ciecz–para w układach dwuskładnikowych	65
3.1. Podstawy teoretyczne i fakty doświadczalne	65
3.1.1. Analiza termodynamiczna i przyjęte uproszczenia	65
3.1.2. Prężność pary nasyconej czystej cieczy	66
3.1.3. Izotermy VLE cieczy mieszających się bez ograniczeń – analiza teoretyczna	68
3.1.4. Izotermy VLE cieczy mających ograniczoną mieszalność – analiza teoretyczna	77
3.1.5. Izotermy VLE – diagramy fazowe i ich interpretacja	78
3.1.6. Izobary VLE cieczy mieszających się bez ograniczeń – analiza teoretyczna	82

3.1.7. Izobary VLE cieczy mających ograniczoną mieszalność – analiza teoretyczna	86
3.1.8. Izobary VLE – diagramy fazowe i ich interpretacja	87
3.2. Symulacje komputerowe diagramów fazowych ciecz–para modelem roztworu prostego	91
3.2.1. Izotermy – podstawowe relacje i wzory obliczeniowe	91
3.2.2. Izobary – podstawowe relacje i wzory obliczeniowe	93
3.2.3. Izotermy – przykładowe symulacje	96
3.2.4. Izobary – przykładowe symulacje	106
4. Równowaga ciecz–kryształ w układach dwuskładnikowych	120
4.1. Podstawy teoretyczne i fakty doświadczalne	120
4.1.1. Analiza termodynamiczna, przyjęte uproszczenia i klasyfikacja SLE	120
4.1.2. Układy z całkowitą mieszalnością w fazie ciekłej i brakiem mieszalności w fazie stałej	122
4.1.3. Układy z luką mieszalności w fazie ciekłej i brakiem mieszalności w fazie stałej	140
4.1.4. Układy z całkowitą mieszalnością w fazie ciekłej i całkowitą mieszalnością w fazie stałej	145
4.1.5. Układy z całkowitą mieszalnością w fazie ciekłej i ograniczoną mieszalnością w fazie stałej	149
4.1.6. Układy z ograniczoną mieszalnością w fazie ciekłej i ograniczoną mieszalnością w fazie stałej	154
4.1.7. Krystalizacja w układach wybranych typów	155
4.2. Symulacje komputerowe diagramów fazowych ciecz–kryształ modelem roztworu prostego	161
4.2.1. Układy z doskonałą fazą ciekłą i brakiem mieszalności w fazie stałej	161
4.2.2. Układy składników biernych chemicznie z niedoskonałą fazą ciekłą i brakiem mieszalności w fazie stałej	172
4.2.3. Układy składników tworzących związek D z niedoskonałą fazą ciekłą i brakiem mieszalności w fazie stałej	174
4.2.4. Układy składników biernych chemicznie z całkowitą lub ograniczoną mieszalnością faz stałych oraz całkowitą mieszalnością w fazie ciekłej	175
5. Równowaga ciecz–ciecz w układach trójskładnikowych	178
5.1. Fakty doświadczalne i ich teoretyczne uzasadnienie	178
5.1.1. Typy diagramów LLE – fakty doświadczalne	178
5.1.2. Termodynamiczny opis LLE w układach trójskładnikowych modelem roztworu prostego	184
5.2. Symulacje komputerowe diagramów fazowych ciecz–ciecz modelem roztworu prostego	187
6. Równowaga ciecz–para w układach trójskładnikowych doskonałych	196
6.1. Relacje termodynamiczne i diagramy fazowe	196
6.1.1. Izotermy równowagi	196
6.1.2. Izobary równowagi	200
6.2. Symulacje komputerowe diagramów fazowych ciecz–para modelem roztworu doskonałego	204

7. Równowaga ciecz–kryształ w układach trójskładnikowych	206
7.1. Relacje termodynamiczne i diagramy fazowe	206
7.1.1. Eutektyk prosty doskonały	206
7.1.2. Układ eutektyczny doskonały ze związkiem D topiącym się kongruentnie	212
7.1.3. Układ eutektyczny doskonały ze związkiem D topiącym się niekongruentnie	219
7.2. Symulacje komputerowe diagramów fazowych ciecz–kryształ modelem roztworu doskonałego	226
A. Oprogramowanie – wymagania sprzętowe i instalacja	231
A.1. Informacje ogólne	231
A.2. Oprogramowanie dla arkusza kalkulacyjnego MS Excel	231
A.3. Program RAOULT dla środowiska Windows	234
B. Podstawowe metody numeryczne zastosowane w programach	236
B.1. Rozwiązywanie układów równań liniowych niejednorodnych	236
B.2. Rozwiązywanie równań nieliniowych	239
B.3. Rozwiązywanie układów równań nieliniowych	243
B.4. Całkowanie funkcji jednej zmiennej	247
B.5. Rozwiązywanie równań różniczkowych zwyczajnych	249
B.6. Wyznaczanie pierwiastków wielomianu trzeciego stopnia	251
C. Skośnokątny układ współrzędnych – trójkąt Gibbsa	254
Literatura	260