

TANTÁRGYI TEMATIKA
Anyag- és Kohómérnök MSc
nappali/levelező

Tantárgy neve: Anyagegyensúlyok	Tantárgy neptun kódja: MAKFKT345M(L) Tárgyfelelős intézet: Miskolci Egyetem, Műszaki Anyagtudományi Kar, Fémteni, Képlékenyalakítási és Nanotechnológiai Intézet Tantárgyelem: törzsanyag
Tárgyfelelős prof. dr. Kaptay György, egyetemi tanár	
Közreműködő oktató(k): -	
Javasolt félév: 1/tavaszi	Előfeltétel: Nincs
Óraszám/hét: 2 + 0 Óraszám/félév: 10 + 0	Számonkérés módja: aláírás + kollokvium (= szóbeli vizsga)
Kreditpont: 4	Munkarend: nappali/levelező
<p>Tantárgy feladata és célja: A kezdő MSc hallgatónak elméletileg bemutatni + készségszintté tenni, hogy hogyan lehet egy-, és kétkomponensű rendszerekben termodinamikai alapokon kiszámítani a fázisegyensúlyokat, illetve az azokat reprezentáló fázisdiagramokat, ideértve a fázisaránydiagramokat és a fázisösszetétel diagramokat is.</p> <p>Fejlesztendő kompetenciák: <i>tudás:</i> AT1, KT1 <i>képesség:</i> AK9, KK8 <i>attitűd:</i> AA, KA1 <i>autonómia és felelősség:</i> AF1, KF1</p>	
Tantárgy tematikus leírása	
<p>Az anyagi világ hierarchiája: rendszer, fázis, komponens, móltörtek és fázisarányok, kapcsolatok közöttük. Az állapothatározók és empirikus kapcsolatuk az egyensúlyi állapot jellemzőivel, az anyag tulajdonságaival és a vásárlói elégedettséggel. A stabil elemek száma. A szükséges kísérletek száma és elvégzésük időigénye. Az anyagegyensúlyok számításának objektív igénye.</p>	
<p>A rendszer moláris Gibbs energiája, az egyensúly általános feltétele. A komponensek parciális moláris Gibbs energiája, a fázisok integrális moláris Gibbs energiája és a rendszer moláris Gibbs energiája. A heterogén egyensúly feltétele. A térfogati Gibbs energia összetevői és értelmezésük: a belső energia, a térfogati munka és az entrópia (+ a gravitáció, a centrifugális erő, az elektromos erőtér és a mágneses erőtér hatása). A felületi Gibbs energia említése. A fázis-szabály levezetése: a maximális fázisszám.</p>	
<p>A szabad és kötött értékű állapothatározók száma 1-komponensű rendszerben, szignifikáns paraméternek tekintve a nyomást és a hőmérsékletet. A szabad és kötött értékű állapothatározók száma 2-komponensű rendszerben, csak a hőmérsékletet tekintve szignifikáns paraméternek. A fáziskombinációk száma Az egyensúlyi állapot számításának algoritmusai. A termodinamika három főtörvénye</p>	
<p>Egyes folyamatokat kísérő Gibbs-energia változás A moláris Gibbs energia hőmérsékletfüggése A moláris Gibbs energia nyomásfüggése Egykomponensű rendszer egyensúlyának számítási algoritmusai, az egykomponensű fázisdiagram lényegi részei. Egykomponensű fázisok termodinamikai tulajdonságainak mérése.</p>	
<p>Egykomponensű szilárd, folyékony és gőz halmazállapotú fázisok standard Gibbs energiájának hőmérséklet- és nyomásfüggését leíró képletek.</p>	

<p>Egykomponensű fázisdiagramok grafikus szerkesztése egy allotróp módosulat esetén. A hármasponti nyomás képlete.</p> <p>Egykomponensű fázisdiagramok excel számítási algoritmusai.</p>
<p>A folyékony és vele egyensúlyt tartó gőz fázisok sűrűségének hőmérsékletfüggése. A kritikus pont meghatározása.</p> <p>Egykomponensű fázisdiagram szerkesztése két allotróp módosulat esetén.</p> <p>A köznapi életben szilárd, folyadék, gőz és gáz halmazállapotú egykomponensű anyagok fázisdiagramjai</p> <p>Az olvadáspont és az allotróp átalakulás hőmérsékletének nyomásfüggése</p> <p>Kétkomponensű rendszerek fázisdiagram szerkesztésének alapjai</p> <p>Keverékek Gibbs-energiája.</p> <p>Oldatok Gibbs-energiája. Az oldódási Gibbs energia</p>
<p>Kapcsolat az integrális és parciális moláris Gibbs energiák között. Az érintő módszer.</p> <p>Ideális oldatok oldódási entalpia, entrópia és Gibbs energia változása.</p> <p>Kétkomponensű fázisdiagram szerkesztése, ha mindkét komponens csak egy allotróp módosulatot tartalmaz, vegyület a komponensek között nem keletkezik, a két szilárd fázis azonos kristályrácsú és mind a szilárd, mind a folyékony oldatok ideálisak (= szilárd oldatos fázisdiagram).</p>
<p>Az egymással egyensúlyt tartó ideális szilárd oldat és ideális folyékony oldatok egyensúlyi szolidusz és likvidusz vonalainak képletei.</p> <p>A szilárd oldatos fázisdiagram excel számolási algoritmusai.</p> <p>Az egyensúlyt jellemző paraméterek leolvasása a szilárd oldatos fázisdiagramról.</p> <p>Fázisarány diagram és a fázisösszetétel diagram szerkesztése konstans hőmérsékleteken.</p> <p>Kétkomponensű fázisdiagram szerkesztése, ha mindkét komponens csak egy allotróp módosulatot tartalmaz, vegyület a komponensek között nem keletkezik, a két szilárd fázis különböző kristályrácsú, a komponensek szilárd állapotban nem oldják egymást, de a folyékony oldat ideális (= eutektikus fázisdiagram).</p>
<p>Az egymással egyensúlyt tartó tiszta szilárd kristályok és ideális folyékony oldat egyensúlyi likvidusz vonalainak képletei és az eutektikus fázisdiagram excel számolási algoritmusai.</p> <p>Az egyensúlyt jellemző paraméterek leolvasása az eutektikus fázisdiagramról.</p> <p>Fázisarány és a fázisösszetétel diagramok szerkesztése az eutektikus hőmérséklet alatt és felett.</p> <p>Fázisarány és a fázisösszetétel diagramok szerkesztése az eutektikus hőmérsékleten.</p>
<p>A többlet oldódási Gibbs energia koncentrációfüggése. Integrális és parciális képletek. Kapcsolat a szilárd és folyékony oldatok kölcsönhatási energiái között.</p> <p>A többlet oldódási Gibbs energia hőmérsékletfüggése. Kapcsolat az oldódási entalpia, az oldódási többlet entrópia és az oldódási többlet hőkapacitás között. A termodinamika IV. főtétele.</p> <p>Szilárd oldat szétválás grafikus levezetése a fázisdiagramon. A kritikus hőmérséklet.</p> <p>Szilárd oldat szétválási görbéjének képlete. A kritikus hőmérséklet képlete.</p> <p>Monotektikus rendszerek: fázis-szétválás folyékony rendszerekben.</p> <p>Fázisdiagram típusok a taszító kölcsönhatási energia függvényében</p>
<p>Vegyületek disszociációs hőmérséklete</p> <p>Alacsony stabilitású vegyületet tartalmazó fázisdiagram szerkesztése.</p> <p>Közepes stabilitású vegyületet tartalmazó fázisdiagram szerkesztése.</p> <p>Nagy stabilitású vegyületet tartalmazó fázisdiagram szerkesztése.</p>
ZH (Korózs József)
<p>Fázisdiagram típusok osztályozása a kölcsönhatási energia értéke szerint.</p> <p>Kémiai reakcióegyenletek felírása</p> <p>Homogén kémiai reakciók egyensúlyi számítása</p> <p>Heterogén kémiai reakciók egyensúlyi számítása</p>

Félévközi számonkérés módja:

Egyénre szabott házi feladatok megoldása és egy ZH összesen maximum 100 pontért

Egyénre szabott házi feladatok megoldása és egy ZH összesen maximum 100 pontért. A határidő után napi mínusz 1 pont / házi feladat. Órákon plusz-pontok szerezhetők. Az aláírás feltétele: minimum 50 pont a félév során. Végleges aláírás megtagadás: 10 pontnál kevesebb félévi eredmény esetén. Aláírás pótlás lehetséges 10-49 pont között, ami a házi feladatok, vagy a ZH pótlását jelenti.

A kollokvium teljesítésének módja, értékelése:

Kollokvium 2 kérdéssel maximum 100 pontért. Összesen a félév során szerzett pontokkal maximum 200

pont + plusz-pontok. (50% félévi teljesítmény, 50 % vizsga teljesítmény).

Értékelés, a félévi érdemjegy számítása:

Vizsgajegy értékelése: 100 – 119 pont: elégséges; 120 – 139 pont: közepes; 140 – 159 pont: jó; 160 és felette: jeles.

Kötelező irodalom:

1. Kaptay Gy.: Anyagegyensúlyok makro-, mikro- és nano-méretű rendszerekben. Miskolci Egyetem, 2011.
2. T.B.Massalski (ed): Binary Alloy Phase Diagrams, second ed., 3 volumes, ASM International, 1990.
3. J.W.Gibbs: On the Equilibrium of Heterogeneous Substances, Trans. Conn. Acad. Arts Sci. 1875-1878, vol.3, pp.108-248, pp.343-524

Ajánlott irodalom:

1. Kaufman L, Bernstein H: Computer Calculation of phase diagrams (with special reference to refractory metals) - Academic Press, NY, USA, 1970, 334 pp.
2. N.Saunders, AP Miodownik: CALPHAD, a Comprehensive Guide, Pergamon, 1998, 479 p
3. Lukas HL, Fries SG, Sundman B: Computational Thermodynamics. The Calphad method. Cambridge University Press, 2007, Cambridge, UK, 313 pp.
4. P.W.Atkins: Physical Chemistry (4th ed.), Oxford, University Press, 1990. Fizikai Kémia - Tankönyvkiadó, Budapest, 1992.