

PROGRAMA ANALITICĂ A CURSULUI TRANSFORMĂRI DE FAZĂ ÎN ATMOSFERĂ, HIDROSFERĂ ȘI LITOSFERĂ

Specializarea CBH, DSCACM, CCA (2 ani), anul de studii I, Semestrul II, număr de ore curs – 28 (2c/săpt) nr. ore laborator și seminar (2L/săpt)

Anul universitar – 2008-2009

1. Obiectivele cursului

Cursul își propune abordarea și tratarea transformărilor de fază din atmosferă, hidrosferă și litosferă cu ajutorul noțiunilor și ecuațiilor specifice domeniului tranzițiilor de fază. Utilizarea noțiunilor și metodelor de studiu specifice domeniului tranzițiilor de fază oferă posibilitatea tratării într-o concepție unitară a diverselor comportări observate în mediu precum și înțelegerea influenței diverșilor factori (temperatura, presiune, compoziție chimică) asupra acestor fenomene. De asemenea sunt prezentate și discutate unele metode experimentale utilizate în studiul acestor tranziții.

Noțiunile și legăturile stabilite oferă posibilitatea tratării riguroase atât a tranzițiilor de fază clasice, și anume transformările stărilor de agregare, cât și a transformărilor de fază ce au loc în condiții extreme de temperatura și presiune (în ghețari, în oceane la adâncimi mari, în litosferă).

Prima parte a cursului introduce noțiunile teoretice fundamentale pentru studiul termodinamic al comportării unui sistem în care are loc o tranziție de fază, partea a doua fiind rezervată prezentării teoriilor specifice domeniului tranzițiilor de fază, incluzând și descrierea metodelor experimentale specifice domeniului. De asemenea o atenție deosebită se acordă prezentării teoriei nucleației ce stă la baza explicării majorității tranzițiilor de fază. Această teorie introduce și elementele necesare înțelegerii caracterului dinamic al tranzițiilor de fază.

2. Conținutul de bază

1. Noțiuni introductive privind tranzițiile de fază. Clasificarea tranzițiilor de fază.
 - istoricul dezvoltării domeniului tranzițiilor de fază;
 - noțiunile de fază, component, fenomen critic;
 - caracteristicile generale ale tranzițiilor de fază;
 - clasificarea tranzițiilor de fază: Ehrenfest, Fisher, Browt, Pippard.
2. Potențialele termodinamice în cazul sistemelor polivariante cu cantitate variabilă de substanță.
 - noțiunea de sistem polivariant, forțe generalizate, coordonate generalizate;
 - potențialele termodinamice U, H, F și G în cazul sistemelor polivariante.
3. Semnificația fizică a derivatelor parțiale ale potențialelor termodinamice. Utilizarea acestor mărimi în studiul tranzițiilor de fază de ordin I. Ecuațiile Clapeyron-Clausius.
4. Mărimi fizice utile în studiul tranzițiilor de fază de ordin II. Ecuațiile Ehrenfest.
5. Constante de material caracteristice sistemelor polivariante.
 - matricea coeficienților de material;
 - relațiile Maxwell.
6. Evoluția mărimilor termodinamice în vecinătatea punctelor critice. Indici critici.
 - ipoteza universalității comportării critice;
 - definirea indicilor critici;

- comportarea mărimilor termodinamice în regiunea critică.
- 7. Teoria fenomenologică Landau a tranzițiilor de fază.
 - ipotezele teoriei Landau;
 - definirea parametrului de ordine (η);
 - dezvoltarea potențialelor termodinamice în serie de puteri ale η ;
 - cazul tranzițiilor de ordin I;
 - cazul tranzițiilor de ordin II;
 - fenomene multicritice.
- 8. Tranziții de fază în sisteme multicomponent. Regula fazelor a lui Gibbs.
- 9. Tranziții de fază de neechilibru sau departe de echilibrul termodinamic.
 - proprietăți de echilibru, proprietăți de neechilibru.
- 10. Noțiuni de termodinamica interfețelor.
 - tensiunea superficială și energia liberă de suprafață;
 - modelul Gibbs;
 - teoria van der Waals.
- 11. Caracterul dinamic al tranzițiilor de fază. Noțiuni de teoria nucleației.
 - nucleația omogenă;
 - nucleația eterogenă.
- 12. Metode de investigare a tranzițiilor de fază:
 - analiza termică
 - tehnici de difracție (RX, electroni, neutroni)
 - metode electrice și magnetice
 - metode microscopice

3. Sistemul de evaluare a studenților: examen(lucrare scrisă).

4. Discipline care trebuie parcurse în prealabil:

- obligatorii: cursurile de matematică și fizică, cursul de termodinamică chimică, cursul de cinetică chimică, chimie coloidală;
- recomandate: cursurile de chimie anorganică, analitică.

5. Bibliografie curs:

1. M. Hillert, „Phase Equilibria, Phase Diagrams and Phase Transformations – Their Thermodynamic Basis”, Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
2. P. Papon, J. Leblond, “Thermodynamique des etats de la matiere”, Hermann, Paris, 1990.
3. D. Geană, "Termodinamică chimică - Teoria echilibrului între faze și chimic", Ed. Politehnica Press, București, 2003.
4. "Phase Transitions in the Earth's Interior", MIT OpenCourseWare, Massachusetts Institute of Technology, 2005.
5. G.W. vanLoon, S.J. Duffy, "Environmental Chemistry - a global perspective", Oxford University Press, 2000.
6. P. W. Atkins "Tratat de Chimie fizică", Ed. Tehnică, București, 1996.
7. P. W. Atkins C. A. Trapp "Exerciții și probleme de chimie fizică", Ed. Tehnică, București, 1997.
8. V. Georgescu, „Tranziții de fază – Metode de studiu”, Ed. Univ. “Al. I. Cuza”, Iași, 1998.
9. R. Vilcu, „Termodinamica Chimică”, Ed. Tehnică, București, 1975 și 1994.
10. G. Bourceanu, „Fundamentele Termodinamicii Chimice”, Ed. Univ. „Al. I. Cuza”, Iași, 1998.
11. C. Kittel, “Introducere în fizica corpului solid”, Ed. Tehnică, București, 1972.
12. M. Van Meerssche, J. Feneau-Dupont, “Introduction a la Cristallografie et a la Chimie Structurale”, Peeters, Leuven, 1984.

6. Tematica lucrărilor de laborator și a seminarilor

- Metode experimentale de studiu a tranzițiilor de fază.
- Utilizarea analizei termice în studiul tranzițiilor de fază.
- Metode microscopice de analiză (optica, electronica, AFM, STM) .
- Construirea diagramelor de fază. Sisteme binare și ternare.
- Diagrama de fază a apei, polimorfismul apei solide.
- Prezentarea și explicarea anomaliilor apei. Consecințele și importanța acestora.
- Tranziții de fază ale particulelor din atmosferă.
- Dizolvarea și precipitarea mineralelor în mediul acvatic.
- Determinarea entalpiei de topire și a entalpiei de vaporizare a lichidelor pure și a amestecurilor.
- Studiul experimental al tranziției S-L în cazul soluțiilor solide.
- Calculul curbei *liquidus* și *solidus* în cazul soluțiilor solide.
- Studiul experimental al tranziției S-L în cazul sistemelor binare ce formează un eutectic.
- Calculul diagramei de fază pentru sisteme binare ce formează un eutectic.
- Studiul experimental al tranziției L-V în sisteme binare cu azeotrop.
- Obținerea diagramei de fază în sistemul ternar eter etilic – acid acetic – apă.
- Studiul tranzițiilor de fază prin metode de difracție (raze X, neutroni, electroni).
- Proprietățile coligative ale apei. Deviații de la comportarea ideală.
- Hidrații de metan - origine, structură, proprietăți.

7. Bibliografie laborator și seminar:

1. V. Georgescu, „Tranziții de fază – Metode de studiu”, Ed. Univ. “Al. I. Cuza”, Iași, 1998.
2. "Phase Transitions in the Earth's Interior", MIT OpenCourseWare, Massachusetts Institute of Technology, 2005.
3. M. Van Meerssche, J. Feneau-Dupont, “Introduction a la Cristallografie et a la Chimie Structurale”, Peeters, Leuven, 1984.
4. P. Papon, J. Leblond, “Thermodynamique des états de la matière”, Hermann, Paris, 1990.
5. D. Geană, "Termodinamică chimică - Teoria echilibrului între faze și chimic", Ed. Politehnica Press, București, 2003.
6. P. W. Atkins C. A. Trapp "Exerciții și probleme de chimie fizică", Ed. Tehnică, București, 1997.
7. G.W. vanLoon, S.J. Duffy, "Environmental Chemistry - a global perspective", Oxford University Press, 2000.
8. Articole specifice din literatura consacrată domeniului tranzițiilor de fază și chimiei mediului.

Titular disciplină,
Lect.dr. Mircea-Odin APOSTU

Decan,
Conf. dr. Dumitru GÂNJU