

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

ترمودینامیک مولکولی تعادل‌های فازی سیال

ویرایش سوم

نشر نوآور

مؤلفان:

اعظم نجف‌لو
سمانه زارعی

تلفن: ۲-۱۱۱۱۱۱۱-۶۶۴

نشر یارسیا

سرشناسه	پراوسنیتس، جان ام، ۱۹۲۸ - م. Prausnitz, John M.
عنوان و نام پدیدآور	ترمودینامیک مولکولی تعادل‌های فازی سیال / ج. ام. پراوسنیتس، آر. ان. لیش تتنالر، ای. گ. ازودو؛ مترجم اعظم نجف‌لو، سمانه زارعی.
وضعیت ویراست	ویراست ۳.
مشخصات نشر	تهران: پارسیا، ۱۳۹۲.
مشخصات ظاهری	۳۱۲ ص.
شابک	۹۷۸-۶۰۰-۷۰۱۰-۳۰-۳
وضعیت فهرست نویسی	فیفا
یادداشت	عنوان اصلی: of fluid-phase equilibria ,3rd ed,c 1999 Molecular thermodynamics.
یادداشت	واژه‌نامه .
یادداشت	کتابنامه .
موضوع	ترمودینامیک
موضوع	دینامیک مولکولی
موضوع	تعادل مایع مایع
شناسه افزوده	لیشتنتالر، رودیگر، ۱۹۴۱ - م.
شناسه افزوده	Lichtenthaler, Ruediger N.
شناسه افزوده	ازودو، ادمنودو گومیس د، ۱۹۴۹ - م.
شناسه افزوده	Azevedo, Edmundo Gomes de
شناسه افزوده	نجف‌لو، اعظم، ۱۳۶۲ - مترجم
شناسه افزوده	زارعی، سمانه، ۱۳۶۶ - مترجم
رده بندی کنگره	۱۳۹۲ ق ۴/پ ۴/۵۰۴ QD
رده بندی دیویی	۳۶۹/۵۴۱
شماره کتابشناسی ملی	۳۲۶۸۸۹۸

ترمودینامیک مولکولی تعادل‌های فازی سیال

اعظم نجف‌لو - سمانه
زارعی پارسیا
۱۰۰۰ نسخه
محمدرضا نصیرنیا
۹۷۸-۶۰۰-۷۰۱۰-۳۰-۳

مؤلف:
ناشر:
شمارگان:
مدیر تولید:
نوبت چاپ:
شابک:

پارسیا
نشر پارسیا

نمایشگاه دائمی و مرکز فروش:

نوآور: تهران - خ انقلاب، خ فخررازی، خ شهدای ژاندارمری نرسیده به خ دانشگاه ساختمان ایرانیان، پلاک ۵۸.

طبقه دوم، واحد ۶

تلفن: ۶۶۴۸۴۱۸۹ - ۰۹۱۲۶۰۶۲۳۸۳

فروشگاه ۱: تهران خ انقلاب، نبش خ ۱۲ فروردین پلاک ۱۳۱۰، کتابفروشی الیاس تلفن: ۶۶۴۰۵۰۸۴ - ۶۶۹۵۵۸۷۸
فروشگاه ۲: تهران خ انقلاب، بین خ ۱۲ فروردین و اردیبهشت، پلاک ۱۳۱۲، کتابفروشی صناعی تلفن: ۶۶۴۰۹۹۲۴ - ۶۶۴۰۵۳۸۵
فروشگاه ۳: تهران خ انقلاب، مقابل دانشگاه تهران، جنب بانک ملت، پلاک ۱۲۱۲، کتابفروشی گوتنبرگ تلفن: ۶۶۴۰۲۵۷۹ - ۶۶۴۱۳۹۹۸
فروشگاه ۴: اصفهان، م انقلاب، خ چهار باغ عباسی ابتدای خ سید علی خان، کتابفروشی مهرگان تلفن: ۰۳۱۱۲۲۱۳۷۵۱

حق چاپ و نشر برای ناشر محفوظ است.

فهرست مطالب

پیش گفتار

فصل اول: مسأله تعادل فاز

۱-۱- ماهیت مسأله

۱-۲- کاربرد ترمودینامیک در مسائل تعادل فاز

فصل دوم: ترمودینامیک کلاسیک تعادل فاز

۱-۲- سیستم‌های بسته همگن

۲-۲- سیستم‌های باز همگن

۳-۲- تعادل در سیستم بسته ناهمگن

۴-۲- معادله گیبس دوهم

۵-۲- قانون فاز

۶-۲- پتانسیل شیمیایی

۷-۲- فوگاسیته و فعالیت

۸-۲- یک کاربرد ساده: قانون رانولت

مراجع

مسائل

فصل سوم: تعیین خواص ترمودینامیکی از داده‌های حجمی

۱-۳- خواص ترمودینامیکی با متغیرهای مستقل P و T

۲-۳- فوگاسیته هر جزء در مخلوط و فشارهای متوسط

۳-۳- فوگاسیته مایع یا جامد خالص

۴-۳- خواص ترمودینامیکی با متغیرهای مستقل T و V

۵-۳- فوگاسیته یک جزء در مخلوط بر طبق معادله واندروالس

۶-۳- تعیین تعادلات فاز با استفاده از خواص حجمی

مراجع

مسائل

فصل چهارم: نیروهای بین مولکولی، حالات متناظر و سیستم‌های اسمزی

۱-۴- توابع انرژی پتانسیل

۲-۴- نیروهای الکترواستاتیک

۳-۴- قطبیت پذیری و دو قطبی‌های القایی

۴-۴- نیروهای بین مولکولی در مولکولهای غیر قطبی

۵-۴- تابع انرژی پتانسیل "می" برای مولکولهای غیر قطبی

۶-۴- آثار ساختاری

۷-۴- نیروهای (شیمیایی) خاص

۸-۴- پیوندهای هیدروژنی

۹-۴- کمپلکس‌های الکترون‌دهنده-الکترون‌گیرنده

۱۰-۴- برهم‌کنش آبگریزی

۱۱-۴- برهم‌کنش‌های مولکولی در محیط سیال مترکم

تلفن: ۰۲۱-۶۶۴۸۴۱۹۱

- ۴-۱۲- اصل حالات متناظر مولکولی
 ۴-۱۳- تعمیم اصل حالات متناظر به مولکولهای پیچیده‌تر
 ۴-۱۴- خلاصه

مراجع

مسائل

فصل پنجم: فوگاسیته‌ها در مخلوط‌های گازی

- ۵-۱- قانون فوگاسیته لوییس
 ۵-۲- معادله حالت ویریال
 ۵-۳- تعمیم به مخلوط‌ها
 ۵-۴- فوگاسیته‌های معادله ویریال
 ۵-۵- محاسبه ضرایب ویریال از توابع پتانسیل
 ۵-۶- ضرایب سوم ویریال
 ۵-۷- ضرایب ویریال از روابط حالات متناظر
 ۵-۸- تفسیر "شیمیایی" انحرافات از ایده‌الی فاز گاز
 ۵-۹- تشکیل دیمر قوی: کربوکسیلیک اسیدها
 ۵-۱۰- تشکیل دیمر ضعیف و ضرایب دوم ویریال
 ۵-۱۱- فوگاسیته در چگالی‌های بالا
 ۵-۱۲- حلالیت جامدات و مایعات در گازهای متراکم
 ۵-۱۳- خلاصه

مراجع

مسائل

فصل ششم: فوگاسیته در مخلوط‌های مایع

- ۶-۱- محلول ایده‌آل
 ۶-۲- روابط بنیادی توابع اضافی
 ۶-۳- فعالیت و ضرایب فعالیت
 ۶-۴- نرمال‌سازی ضرایب فعالیت
 ۶-۵- تعیین ضرایب فعالیت از توابع اضافی در مخلوط‌های دوتایی
 ۶-۶- تعیین ضرایب فعالیت یک جزء از ضرایب فعالیت سایر اجزاء
 ۶-۷- تعیین فشارهای جزئی از داده‌های فشار کل همدم
 ۶-۸- تعیین فشار جزئی از داده‌های نقطه جوش هم فشار
 ۶-۹- آزمون داده‌های تعادلی از نظر سازگاری ترمودینامیکی
 ۶-۱۰- بسط و هل برای انرژی گیبس اضافی
 ۶-۱۱- معادلات ویلسون، NRTL و UNIQUAC
 ۶-۱۲- توابع اضافی و امتزاج‌پذیری جزئی
 ۶-۱۳- دماهای بحرانی بالایی و پایینی
 ۶-۱۴- توابع اضافی برای مخلوط‌های چند جزئی
 ۶-۱۵- معادلات ویلسون، NRTL و UNIQUAC برای مخلوط‌های چند جزئی
 ۶-۱۶- خلاصه

مراجع

مسائل

پیش‌گفتار

ویرایش اول این کتاب در سال ۱۹۶۹ و ویرایش دوم آن در سال ۱۹۸۶ آماده شده است. اهداف این کتاب بدون تغییر باقی مانده است. در این کتاب برای دانشجویان کارشناسی یا دانشجویان کارشناسی ارشد مهندسی شیمی (و علوم مرتبط) معرفی جامعی از ترمودینامیک تعادلات فازی ارائه می‌شود که معمولاً در طراحی فرایندها و محصولات شیمیایی مخصوصاً در عملیات جداسازی با آن مواجه هستند. ابزارهای ترمودینامیکی که برای طراحی کارآمد و پیشرفت فرایندهای جداسازی جدید و سنتی فراهم شدند شامل مواردی هستند که احتمالاً برای حفاظت محیط زیست مفید هستند.

این کتاب برای دانشجویانی که دوره اولیه ترمودینامیک مهندسی شیمی را به پایان رسانده‌اند یک مرجع درسی مناسب است. اگرچه محتوای این کتاب بر پایه‌ی ترمودینامیک کلاسیک است اما خواص مولکولی برای تسهیل کاربردها در سیستم‌های واقعی معرفی می‌شوند. اگرچه هیچ تلاشی در جهت آموزش ترمودینامیک آماری صورت نگرفته اما از نتایج مفید آن در جهت ارتباط بین ترمودینامیک و خواص مولکولی استفاده شده است.

در ویرایش جدید، مباحث گسترده‌ای از مفاهیم نظری برای تشریح و تفسیر خواص محلول‌ها ارائه می‌شود با تأکید بر مفاهیمی که جنبه‌های کاربردهای عملی را دارند. و مدل‌های مختلفی شامل نظریه سیال شبکه‌ای^۱ و نظریه سیال هم‌پیوندی آماری^۲ بررسی شده است.

فصل جدیدی به محلول‌های پلیمری شامل تعادلات پلیمر-گاز در فشارهای معمولی و بالا، مخلوط‌های پلیمری، غشاهای پلیمری و ژل‌ها اختصاص یافته است. سایر بخش‌های جدید ویرایش سوم شامل مباحث فشار اسمزی و تعادلات دونان است. حذف عمده‌ای در ویرایش‌های قبلی اکنون تصحیح شده و ویرایش سوم حاوی فصل کاملاً جدیدی درباره محلول‌های الکترولیت است. در این فصل جدید، ابتدا پایه ترمودینامیکی برای تشریح فعالیت ترکیبات در محلول‌های الکترولیت و سپس برخی مدل‌های نیمه‌تجربی برای محلول‌های حاوی

۱. Lattice-fluid Theory

۲. Statistical associated-fluid Theory (SAFT)

نمک یا الکترولیت‌های فرار ارائه می‌شوند. همچنین تعدادی از کاربردهای این مدل‌ها در محاسبات تعادلات فازی مربوط به مهندسی شیمی، محیط زیست و بیوشیمی بررسی می‌شوند. تمام فصل‌های کتاب عمدتاً با ارائه مثال‌ها و مسائل جدید به روز شده‌اند. در اینجا از دو همکار نویسنده به دلیل نقش حیاتی آنها تشکر و قدردانی می‌کنم. بدون از خودگذشتگی و توجه آنها به جزئیات بی‌شمار، این ویرایش تکمیل نمی‌شد.

مولفین از همکاران بسیاری به خصوص آلن هاروی، دن کوهنر، هوان لی، گرد ماورر، ون گوین، جان اکنل و جیاژنگ وو^۳ به خاطر توضیحات و نصیحت‌های مفیدشان سپاسگذاری می‌کنند.

از سال ۱۹۸۶، مراجع علمی مربوط به ترمودینامیک فازی سیال رشد چشم‌گیری داشته است. برای نگهداری کتاب در اندازه معقول، حذف قسمت‌های خوب بسیاری ضروری بود. مولفین از بسیاری از همکارانی که کارهای مهم‌شان در این کتاب به دلیل فوق‌نیامده است، عذرخواهی می‌کنند.

ترمودینامیک مهندسی شیمی اکنون در مرحله تحول است. ترمودینامیک کلاسیک بطور فزاینده با ابزارهای جدید در ترمودینامیک آماری کاربردی و شبیه‌سازی مولکولی جایگزین می‌شود. با این حال بسیاری در واقع بیشترین ابزارهای جدید هنوز برای کاربردهای عملی به اندازه کافی پیشرفت نکرده‌اند. برای حال و آینده‌ای نزدیک، ضرورت تکیه عمده بر ترمودینامیک کلاسیک برگرفته و تعمیم از فیزیک مولکولی و شیمی فیزیک است، باقی می‌ماند. ترمودینامیک مولکولی همانگونه که در اینجا ارائه شده با ترکیب روش‌های کلاسیکی توصیف می‌شود که این روش‌ها با علم مولکولی توسعه یافته و با داده‌های آزمایشگاهی بنیادی تأیید می‌شود.

این کتاب مانند ویرایش‌های قبلی با اشتیاق مولفینش در جهت تفسیر و تعمیم دیدگاه ترمودینامیک به سمت کاربردهای مفید در مهندسی شیمی به پیش رفته است. اگر بتوان این اشتیاق را به دانشجویان و مهندسين شاغل منتقل شود، هدف اصلی این کتاب تحقق می‌یابد.

جی. ام. پراونیتز
برکلی - کالیفرنیا

^۳. Allan Harvey, Dan Kuehner, Huen Lee, Gerd Maurer, Van Nguyen, John O'Connell, and Jianzhong Wu.

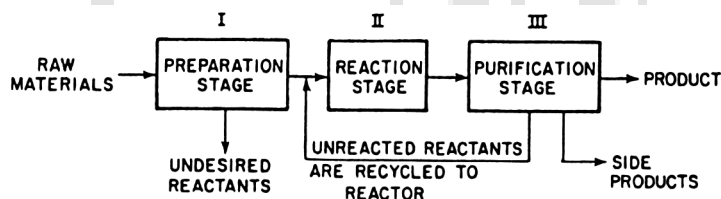
فصل اول

مسأله تعادل فاز

ما در دنیایی از مخلوط‌ها (هوای که تنفس می‌کنیم، غذایی که می‌خوریم، گازئیل اتومبیل‌مان) زندگی می‌کنیم. به هر کجا که نگاه کنیم، متوجه می‌شویم که زندگی‌مان به موادی شامل انواع مواد شیمیایی متصل است. بسیاری از کارهایی که ما انجام می‌دهیم با انتقال مواد از یک مخلوط به مخلوط دیگر مرتبط است، برای مثال در ریه‌هایمان، ما اکسیژن را از هوا می‌گیریم و آنرا در خون حل می‌کنیم؛ در حالیکه دی‌اکسیدکربن خون را ترک کرده و وارد هوا می‌شود، در قهوه ساز، ذرات محلول در آب از دانه‌های قهوه جدا شده و به آب منتقل می‌شوند، افراد به منظور از بین بردن لکه‌های چربی روی لباس خود از مایع شوینده استفاده می‌کنند. در هر یک از این تجربیات روزمره معمول، انتقال ماده از یک فاز به فاز دیگر وجود دارد. این عمل به این دلیل اتفاق می‌افتد که وقتی دو فاز در تماس با یکدیگر قرار می‌گیرند، آنها تمایل به مبادله اجزاء سازنده خود را دارند تا اینکه ترکیب هر فاز به مقدار ثابتی برسد، زمانی که این حالت پیش آید، ما می‌گوئیم فازها در تعادل با یکدیگرند. ترکیبات تعادلی دو فاز اغلب بسیار متفاوت از یکدیگرند و وجود این تفاوت است که ما را قادر به جدایی مخلوط‌ها از طریق تقطیر، استخراج و سایر عملیات‌های تماس فازی می‌نماید.

ترکیبات فازی نهایی یا تعادلی وابسته به چندین متغیر مثل دما، فشار، طبیعت شیمیایی و غلظت‌های مواد در مخلوط است. ترمودینامیک تعادل فازی سعی در یافتن روابطی میان خواص مختلف (به خصوص دما، فشار و ترکیب) دارد و زمانیکه دو یا چند فاز به تعادل می‌رسند و گرایش برای تغییرات بیشتر ندارند، این خواص غالب هستند. از آنجایی که بخش بزرگی از زندگی با برهم کش میان فازهای مختلف مرتبط است، آشکار است که ترمودینامیک تعادل فازی، یک موضوع مهم و اساسی در بسیاری از علوم مانند فیزیک و بیولوژیک است. ترمودینامیک تعادلات فازی دارای

اهمیت خاصی در شیمی و مهندسی شیمی است زیرا در بسیاری از عملیات تولید محصولات شیمیایی، تماس فازی وجود دارد. استخراج، جذب سطحی، تقطیر، استخراج با حلال و جذب، عملیات واحدهای اساسی در صنایع شیمیایی هستند که فهم هر یک از آنها حداقل تا حدودی به علم تعادلات فازی وابسته است. خواص تعادلی نیازمند طراحی عملیات جداسازی هستند که این عملیات‌ها نیز از بخش‌های اساسی یک کارخانه شیمیایی معمولی (همانطور که در شکل ۱-۱ نشان داده شده است) هستند. در این کارخانه قسمت مرکزی (مرحله II) راکتورای شیمیایی است که معمولاً آنرا قلب کارخانه می‌نامند. اما علاوه بر این، یک کارخانه نیازمند یک دهان (مرحله I) و یک سیستم گوارشی (مرحله III) است. پیش از واکنش، واکنشگرها باید برای واکنش آماده شوند زیرا مواد خام موجود در طبیعت معمولاً به صورت مخلوط هستند و اغلب جداسازی واکنش دهنده‌های مطلوب از دیگر ترکیبات نامطلوب ضروری است زیرا ممکن است در واکنش خللی ایجاد کنند. در جریان خروجی از راکتور، جداسازی محصولات مطلوب از نامطلوب ضروری است همچنین از آنجایی که واکنش به ندرت کامل می‌شود، جداسازی واکنش دهنده‌های واکنش نداده، به منظور برگشت به واکنش ضروری است.



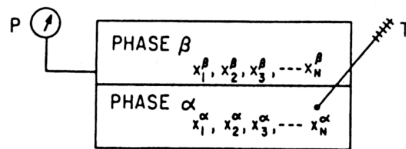
شکل ۱-۱: نمای شماتیک از یک کارخانه شیمیایی

شکل ۱-۱ نشان می‌دهد که چرا جداسازی در مهندسی شیمی بسیار مهم است. در یک کارخانه شیمیایی بزرگ، سرمایه‌گذاری برای عملیات‌های جداسازی حدوداً ۵۰٪ و گاهی اوقات بیشتر نیز است.

۱-۱- ماهیت مسأله

ما می‌خواهیم متغیرهایی که حالت تعادل دو یا چند فاز همگن، که در تبادل انرژی و ماده آزاد هستند، را توصیف می‌کنند را به طور کلی به هم مرتبط سازیم. فاز همگن در تعادل فازی را اینگونه تعریف می‌کنیم که هر ناحیه‌ای از فضا که خواص

شدتی آن در همه جا یکسان باشد^۲. خواص شدتی، خواصی هستند که مستقل از جرم، اندازه و یا شکل فاز هستند. ابتدا خواص شدتی دما، فشار و ترکیب (اغلب بر حسب جزء مولی بیان می شود) را در نظر می گیریم و می خواهیم حالتی که دو یا چند فاز دارای برهم کنش آزاد بوده و به حالت تعادل رسیده اند را توصیف کنیم. سپس وظیفه ما اینست که با داشتن برخی از خواص تعادلی دو فاز، خواص دیگر را پیش گویی کنیم.



Given:

MOLE FRACTIONS $x_1^\alpha, x_2^\alpha, x_3^\alpha, \dots, x_N^\alpha$
and T (or P)

Find:

MOLE FRACTIONS $x_1^\beta, x_2^\beta, x_3^\beta, \dots, x_N^\beta$
and P (or T)

شکل ۱-۲: بیان مسأله

شکل ۱-۲ به طور شماتیک مسأله ای را نشان می دهد که ترمودینامیک تعادل فاز به دنبال حل آن است. فرض می کنیم که دو فاز چند جزئی α و β به حالت تعادل رسیده اند و دمای دو فاز (T) و جزء مولی فاز α ($\dots, x_3^\alpha, x_1^\alpha$) معلوم هستند.

سپس کار ما یافتن اجزاء مولی فاز β ($\dots, x_3^\beta, x_1^\beta$) و فشار (P) سیستم است. در حالت دیگر، ممکن است که $x_3^\alpha, x_1^\alpha, \dots$ را بدانیم و بخواهیم که $x_3^\beta, x_1^\beta, \dots$ را بدست آوریم و یا مسأله ما می تواند ترکیبی از سایر متغیرهای معلوم و مجهول باشد.

تعداد خواص شدتی که برای تعیین دقیق حالت تعادلی باید معلوم باشند، با استفاده از قانون فاز گیبس تعیین می شوند. در غیاب واکنش های شیمیایی قانون فاز به صورت زیر است:

$$۲ + \text{تعداد فازها} - \text{تعداد اجزاء} = \text{تعداد خواص شدتی مستقل}$$

برای مثال، برای یک سیستم دو فازی و دو جزئی تعداد خواص شدتی مستقل، ۲ است. در چنین سیستمی خواص شدتی مورد نظر، معمولاً x_1^α, x_1^β, T و P هستند. دوتای اینها (هر دوتای دلخواهی) باید مشخص شود تا دوتای دیگر بتوانند مشخص شوند.

برای حل مسأله شکل ۱-۲ چگونه باید جلو رویم. چه چارچوب های نظری وجود دارند که به ما یک اساس برای یافتن یک حل می دهند. زمانی که این سوال مطرح می شود، ما به

۴ از تمام نیروهای خاص مانند نیروهای ناشی از میدان مغناطیسی، الکتریکی یا گرانشی، نیروهای بطنی و غیره صرف نظر می کنیم.

ترمودینامیک رجوع می‌کنیم.

۱-۲- کاربرد ترمودینامیک در مسائل تعادل فازی

یکی از مشخصه‌های علم جدید خاصیت انتزاعی آن است. گاهی اوقات با توصیف یک مسأله واقعی و مشکل به صورت انتزاعی و ریاضی، یافتن راه حلی ساده نه بر حسب واقعیت فیزیکی بی‌واسطه بلکه بر حسب کمیت‌های ریاضی امکان پذیر می‌شود. که این با یک بیان انتزاعی از مسأله واقعی پیشنهاد می‌شود.

ترمودینامیک زبانی ریاضی فراهم می‌کند که ما را در یافتن راه حلی انتزاعی از مسأله تعادل فازی قادر می‌سازد. کاربرد ترمودینامیک برای تعادلات فازی در سیستم‌های چند جزئی به طور شماتیک در شکل ۱-۳ نشان داده شده است. دنیای واقعی و مسأله واقعی توسط خط افقی پایین نشان داده شده‌اند، در حالیکه خط افقی بالایی دنیای انتزاعی را نشان می‌دهد.

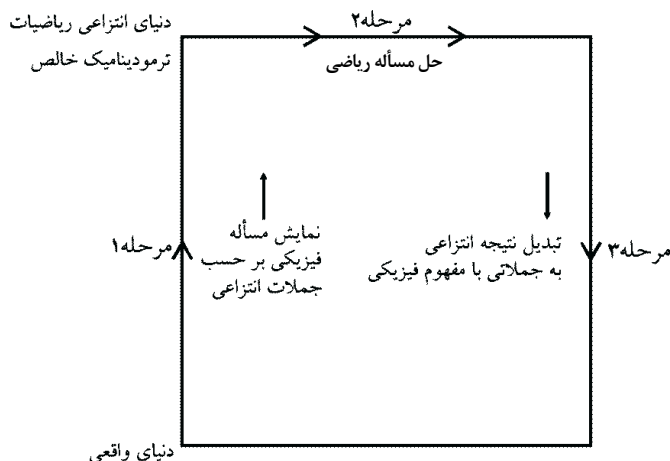
کاربرد سه مرحله‌ای ترمودینامیک برای یک مسأله واقعی شامل یک فرآیند ذهنی غیر مستقیم است؛ به جای توجه به حل مسأله واقعی با دنیای متغیرهای واقعی فیزیکی، ابتدا فرآیند غیر مستقیم، مسأله را در دنیای انتزاعی مطرح می‌کند، سپس به جستجوی راه حلی در این فضا می‌گردد و نهایتاً، این راه حل به مفاهیم فیزیکی واقعی برمی‌گردد. حل مسأله تعادل فازی با استفاده از ترمودینامیک نیازمند سه مرحله زیر است:

۱- مسأله واقعی به یک مسأله ریاضی انتزاعی تبدیل شود.

۲- یک راه حل برای مسأله ریاضی پیدا شود.

۳- حل ریاضی به جملات معنی‌دار فیزیکی تبدیل شود.

مشخصه اصلی مرحله ۱، تعریف توابع ریاضی مفید و مناسب برای ساده سازی مرحله ۲ است. پیش عمیق گیبس (کسی که در سال ۱۸۷۵ چنین تابعی (پتانسیل شیمیایی) را تعریف کرد)، دستیابی به هدف مرحله ۲ را امکان‌پذیر نمود. حل ریاضی مسأله تعادل فازی با این نتیجه بسیار ساده که در تعادل، پتانسیل شیمیایی هر جزء در هر فاز باید برابر باشد، بدست می‌آید. مرحله مشکل‌آفرین مرحله آخر، یعنی مرحله ۳ است. به خاطر تلاش‌های گیبس، مراحل ۱ و ۲ مشکل زیادی ندارد و ضرورتاً اکثر کار در این زمینه (بعد از گیبس) در رابطه با مرحله ۳ است. از دیدگاه یک فیزیکدان نظری، مسأله تعادل فازی با رابطه پتانسیل شیمیایی گیبس کاملاً حل شده است. یک نظریه پرداز محض ممکن است به چیز بیشتری نیاز نداشته باشد، اما کسیکه در پی یافتن جواب‌های عددی مفید برای مسائل واقعیست، باید نتایج انتزاعی مرحله ۲ را به زبان مفاهیم فیزیکی تبدیل نماید.



شکل ۱-۳: کاربرد سه مرحله‌ای ترمودینامیک در مسائل تعادل فازی

در این کتاب، توجه ما تقریباً به طور انحصاری روی مرحله ۳ متمرکز شده است. در فصل ۲، مرور مختصری از برخی از مفاهیم مهمی که منجر به معادله گیبس می‌شود (مانند اینکه برای هر جزء پتانسیل شیمیایی باید در تمام فازهای تعادلی برابر باشد)، داریم. از سوی دیگر، می‌توان فصل ۲ را تاریخی نامید زیرا در این فصل کاری که سالها پیش کامل شده را با واژگان جدید دوباره تکرار می‌کنیم. اما در فصل‌های دیگر، تلاش ما بر روی مشخص کردن این موضوع است که چگونه می‌توان به طور کمکی پتانسیل شیمیایی را به متغیرهای اولیه دما، فشار و ترکیب، ربط داد. بهتر است خاطر نشان کنیم که مسأله‌ای که در مرحله ۳ بیان شده، تقریباً بیرون از محدوده ترمودینامیک کلاسیک است و بنابراین بیشتر مطالب فصل‌های بعدی را نمی‌توان دقیقاً ترمودینامیک نامید. ترمودینامیک کلاسیک به تنهایی اطلاعات مهم اما بسیار محدودی از روابط میان پتانسیل شیمیایی انتزاعی و کمیت‌های تجربی دما، فشار و ترکیب می‌دهد. مرحله ۳، باید از مفاهیم ترمودینامیک آماری، فیزیک مولکولی و شیمی فیزیک، نیز استفاده نماید. برای حل مسائلی از نوع نشان داده شده در شکل ۱-۲، باید از آنچه که داریم (یعنی معادله ترمودینامیکی انتزاعی تعادل) برای پیش‌برد آنچه می‌خواهیم، یعنی اطلاعات کمکی از دما، فشار و ترکیبات فاز استفاده نماییم.

امروزه به خاطر تلاش‌های گیبس معادله ترمودینامیکی تعادل شناخته شده است و نیازی به مشغول کردن ذهنمان به آن، مگر به عنوان نقطه آغاز، نیست. در هر مسأله‌ای که مربوط به توزیع تعادلی چند جزء i بین دو فاز α و β باشد باید همیشه از رابطه زیر شروع کنیم: