Thermodynamics

Relation with Materials Science

Byeong-Joo Lee

POSTECH - MSE
calphad@postech.ac.kr

2003년 정부가 선정한
10대 차세대 성장동력 산업의 경우,

디스플레이, 차세대 반도체, 차세대 전지 등은 그 자체가 부품·소재에 해당되며, 미래형 자동차, 디지털 TV 등의 기술 수준은 핵심 부품 소재에 좌우되고 있다.

2008년 신성장동력

- ▲무공해 석탄에너지
- ▲해양 바이오 연료
- ▲태양전지
- ▲연료전지 발전시스템
- ▲원전플랜트
- ▲그린카
- ▲선박·해양시스템
- ▲디스플레이
- ▲차세대 무선통신
- ▲LED조명
- ▲로봇
- ▲신소재·나노 융합
- ▲문화 콘텐츠
- ▲헬스 케어

포항공과대학교
Pohang University of Science and Technology

《 10대 성장동력산업의 현재와 미래 》

산업	전략적 의미	추진 과제	시장 추이 (억원) (세계시장 / 국내생산 / 국내시장)	목표 (2012년)
차세대 반도체	다양한 시스템과 융합하면서 새로운 기기 및 사업을 창출하는 선구산업 디지털기기 운영시스템의 90% 이상이 지능형 복합칩(SoC)으로 구현	나노기술을 적용한 고집적·초정밀 공정기술 개발 텔레매틱스 기반사회 구현용 시스템 집적회로 개발	2004년: 200 / 9 2007년: 580 / 18	메모리 세계 1위 지능형 복합칩 세계 3위 달성 수출 500억달러
디스플레이	엘시디·피디피·유기발광다이오드(OLED)·전자종이 등 평판디스플레이 세계수요 급팽창 이동통신단말기·디지털티브이 등 전방산업과 신소재 분야 후방산업에 막대한 파급효과	30인치 텔레비전용 유기발광다이오드 모듈 출시 초저가·초고정세 피디피와 엘시디 출시	2005년: 589 / 236 2010년: 791 / 396	세계 1위의 디스플레이 강국으로 도약 수출 370억달러
디지털TV/방송	디지털방송 본격화와 디지털 컨버전스 가속화 2012년까지 세계시장 연평균 25.7% 성장	양방향·다기능 디지털 멀티미디어 방송(DMB) 단말기 개발 지상파 디지털방송 송수신시스템 구축	2005년: 355 / 106 2007년: 589 / 190	세계시장의 20% 석권 고용 58만명
지능형 홈네트워크	가전과 첨단통신기술의 융합으로 2012년까지 연평균 22.4% 고성장 전망 중국 등 동북아 거대시장을 겨냥한 전략산업으로서 중요성	유·무선 통합, 통신·방송 융합 홈서버 보급 고기능 정보처리 능력 갖춘 지능형 정보가전제품 개발	2005년: 768 / 71 2007년: 1026 / 116	국제 표준화 주도로 세계 1위 확보 수출 822억달러
차세대 이동통신	광대역 유무선 통합망 구조로 통신환경 진화 세계 정보기술(IT)산업을 선도할 핵심산업으로 부상	무선초고속인터넷(와이브로) 단말기 상용화 전자식별(RFID)/유비쿼터스 네트워킹 기술 개발	2005년: 1557 / 291 2007년: 1748 / 358	차세대 무선통신 분야에서 세계시장 선점 고용 89만명
디지털콘텐츠/소프트웨어솔루션	한계비용이 0에 가까운 대표적인 고부가가치 신산업 지식정보화사회에서 관련 하드웨어산업의 경쟁력 보완	주연급·조연급 디지털배우 개발 및 보급 전자식별 기반의 소프트웨어 물류시스템 구축	2005년: 897 / 68 2007년: 1267 / 125	세계 5대 디지털콘텐츠 강국으로 도약 고용 67만명
미래형 자동차	움직이는 생활공간으로 발전 가능성 무궁무진 에너지 절감 및 환경규제에 대응함으로써 전략적인 선행기술 확보 산업	연료전지 시스템과 하이브리드 자동차 개발 인공지능 및 정보기술(IT)을 결합한 지능형 자동차 개발	2003년: 42 / 1.8 2009년: 436 / 20	세계 4대 자동차 강국으로 도약, 수출 365억달러
차세대 전지	자동차 환경규제 극복 등 연관산업의 경쟁력 확보에 결정적 구실 에너지 수입국으로서 대체에너지에 대한 미래투자	소형 리튬 2차전지 출시 하이브리드 자동차용 2차전지 개발	2003년: 50 / 5 2008년: 230 / 23	2차전지 세계 1위 확보 및 연료전지 분야 15% 점유율 달성 수출 255억달러
지능형 로봇	기존 산업용 로봇에 모바일 기능과 인공지능 기능이 융합된 메카트로닉스의 총아 자동차 이상의 전후방효과를 가진 산업으로 2020년께에는 자동차시장 규모를 능가	인간생활 지원 기능로봇, 재난극복 및 인명구조용 로봇 등 개발 지능형 제어시스템과 인간-로봇간 상호작용기술 개발	2004년: 200 / 2.5 2008년: 866 / 53.7	세계 3위 경쟁력 확보로 세계시장 10% 점유 국내 부가가치생산액 8조원
바이오신약/장기	보건·환경·농업 등 전산업의 부가가치 증대와 기술파급효과 막대 동물 복제기술 등에 대한 핵심기술역량과 풍부한 임상경험이 있어 세계시장 선도 잠재력 큼	바이오신약 6종, 바이오장기 3종 이상 발굴 진단용 유전자칩, 단백질칩 개발	2003년: 740 / ? 2008년: 1250 / ?	세계일류상품 20개 개발로 바이오산업 세계 7위권 진입 수출 100억달러

부품소재산업 동향

자료제공 : 지식경제부

명칭 : 부품소재산업

소개 : 완제품 중심의 경쟁구조가 부품·소재 중심의 경쟁구조로 전환됨에 따라 부품·소재가 신기술·신제품 부가가치 창출의 원천이 되고 있으며, 부품,소재 산업의 경쟁력이 산업전체의 경쟁력을 좌우하고 제조업 성장과 수출의 견인차 역할을 수행

발전전략 : 기업 특성별 혁신역량 강화, 전략적 핵심기술 확보, 개발된 부품·소재의 사업화 촉진, 부품·소재기업의 수출기업화 지원, 부품·소재 혁신클러스터 확산, 부품·소재산업 혁신촉진형 제도 정비 › | 자세히보기

관련정보 : 기술개발사업 , 전문기업기술지원사업 , 자료마당 , 부품소재기술전문강좌

[부품소재 발전 비전과 정책과제]

– 부품 · 소재 발전 비전과 정책과제 –

비전

원천기술확보를 통한
글로벌 부품소재강국 도약

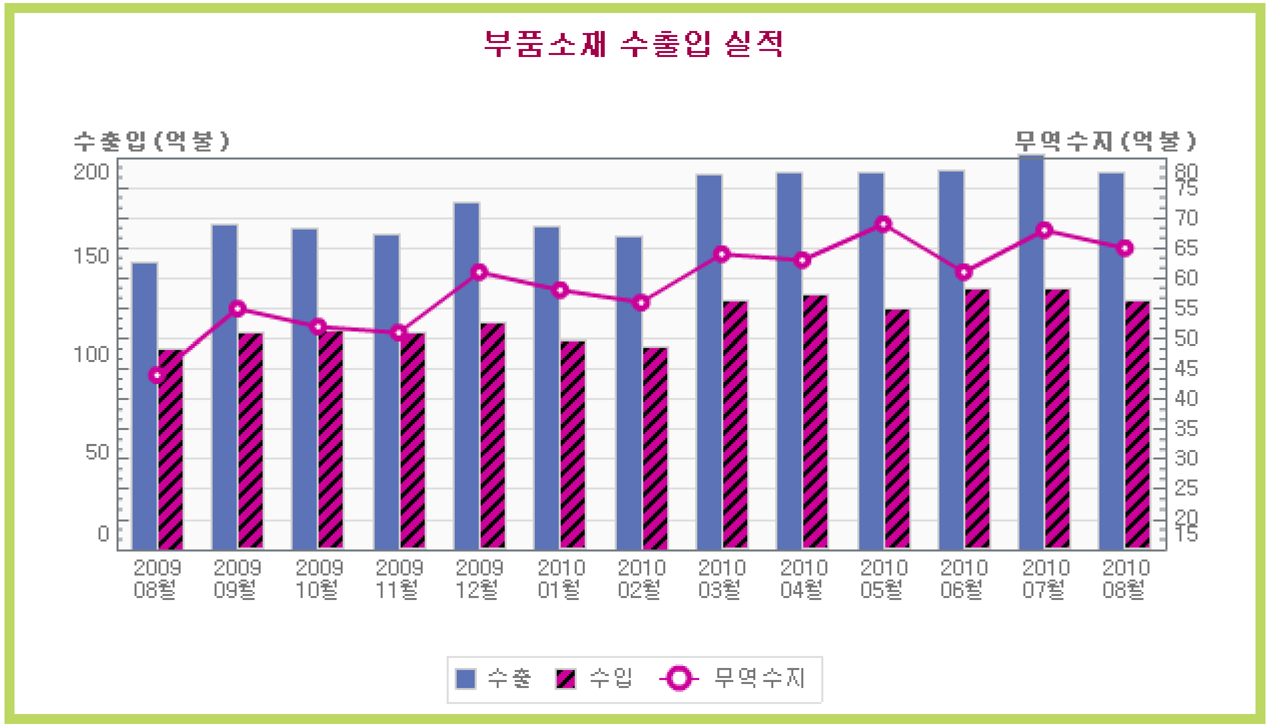
부품소재산업 현황

<표 1> 우리나라 부품소재산업의 현황

		2000년	2001년	2002년	2003년
생산액 (조 원)	부품소재(A)	214.3	217.7	243.3	257.0
	제조업(B)	564.8	583.8	634.2	676.3
	A/B	37.9%	37.3%	38.4%	38.0%
월평균종사자수 (만 명)	부품소재(A)	121.3	120.5	122.9	126.0
	제조업(B)	265.3	264.8	269.6	272.1
	A/B	45.7%	45.5%	45.6%	46.3%
수출액 (억 달러)	부품소재(A)	799.0	619.7	678.1	820.1
	전산업(B)	1,722.7	1,504.4	1,624.7	1,938.2
	A/B	46.4%	41.2%	41.7%	42.3%
무역수지 (억 달러)	부품소재(A)	93	27	29	62
	전산업(B)	118	93	103	150
	A/B	79.2%	29.2%	27.9%	41.4%

자료: 1) 한국기계산업진흥회 부품소재통계시스템
2) 통계청, 광업・제조업통계조사

부품소재산업 현황


부품소재 수출입 실적
수출입(억불)
무역수지(억불)
200
150
100
50
0
80
75
70
65
60
55
50
45
40
35
30
25
20
15
2009 08월
2009 09월
2009 10월
2009 11월
2009 12월
2010 01월
2010 02월
2010 03월
2010 04월
2010 05월
2010 06월
2010 07월
2010 08월
수출
수입
무역수지

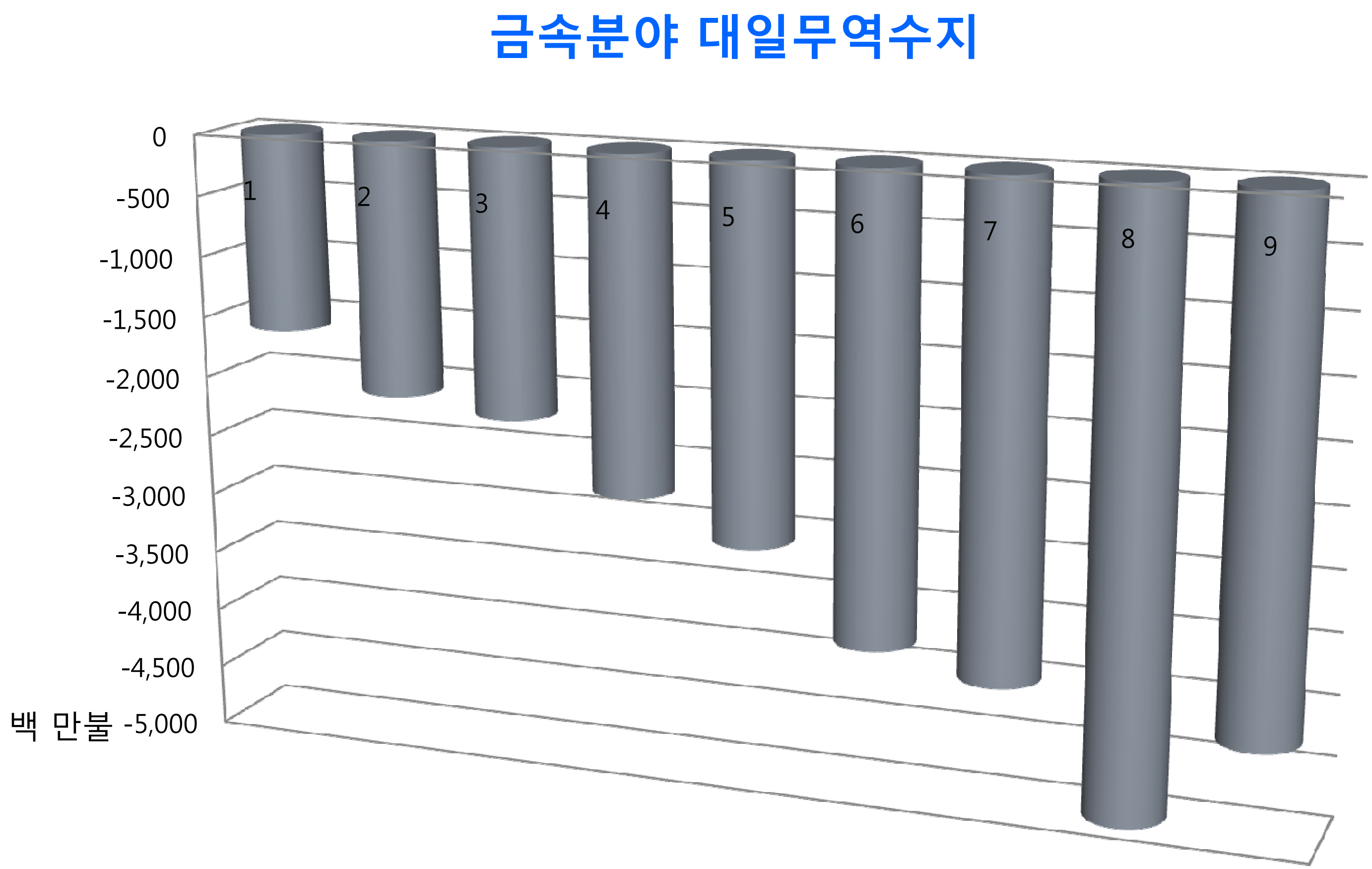

생산 '08
480조원
(50.6%)


고용 '08
129만명
(61.5%)


수출 '09
1,710억불
(47.0%)


수입 '09
1,197억불
(37.1%)

금속소재산업 현황


금속분야 대일무역수지
0
-500
-1,000
-1,500
-2,000
-2,500
-3,000
-3,500
-4,000
-4,500
백 만불 -5,000
1
2
3
4
5
6
7
8
9

금속소재산업 현황

소재분야 대일무역수지 (2006)

소재	세부분야	원천기술개발을 통한 수입대체 품목	무역수지 (백만달러)
금속	철강	고강도 박강판재, 고강도 중후판재, 고강도 고인성 봉재 및 선재, 고기능성 스테인리스강재, 특수합금강재, 고투자율 전기강판, 고강도 내식 표면처리강판 등 8대 품목	-1,806
	알루미늄	고강도 박판재, 고강도 중후판재, 고장력 극박재 등 3대품목	-82
	동합금	고강도 고전도 박판재, 고전도성 극박재, 고전도성 극세선, 고순도 동합금 등 4대 품목	-408
	소계	**고강도 박강판재 등 15대 품목**	**-2,296**
화학	합성수지, 감광재료, 플라스틱 기타화합물	정밀구조제어 아크릴 등 13대 품목	-1,675
세라믹	무기산화물 계 Class 계 고온용 소재	고순도 고기능성 원료 SiO2 등 20대 품목	-930
계	**18**	고강도 박강판재, 정밀구조제어 아크릴, 고순도 고기능성 원료 SiO2 등 48대 품목	**-4,901**

‘부품소재선진화포럼’ 출범

10일, 메리어트호텔서 창립총회 가져

2010-03-10 14:00:00

인쇄하기

비철금속, 자동차용 부품 등 부품소재산업 육성을 위한 정책 싱크탱크가 발족됐다.

지식경제부는 부품소재산업 발전을 위한 각계각층 인사의 토론장인 ‘부품소재선진화포럼’이 10일, 메리어트호텔서 창립총회를 열고 출범했다고 밝혔다.

포럼은 그동안 지식경제부가 추진한 부품소재 분야 정책지원의 성과를 점검하는 동시에 사회 각계의 의견을 수렴해 정책 수립에 활용할 수 있도록 지원한다. 위원은 국회, 정부, 언론, 관련업계, 대학, 연구 소 등 22명으로 구성됐다.

지경부에 따르면 부품소재산업은 무역수지 흑자가 지속 확대되는 등 외형적으로는 비약적으로 성장했으나 핵심 기술의 대외 의존 현상이 지속되고 있으며 중국과의 격차도 빠른 속도로 축소되는 상황이다.

이에 따라 지경부는 지난해 11월 ‘부품소재 경쟁력 제고 종합대책’을 수립해 세계시장 선점 10대 소재(WPM: World Premier Material) 개발, 20대 핵심 부품소재 개발 등을 추진 중이다.

지경부 관계자는 “세계 부품소재 조달시장의 확대 추세에 대응하고 동북아 분업구조 하에서 유리한 위치를 점하기 위해서는 부품소재 산업의 경쟁력 제고가 시급하다”고 밝혔다.

2010년 업종별 산업기술인력 수급 전망 (단위: 명)

업종	구분	2006~2010년(연평균)		
		수요(A)	공급(B)	B-A
기계 자동차	박사 석사 학사	560 3,620 20,600	220 1,960 10,500	△340 △1,640 △10,100
조선	박사 석사 학사	20 160 450	20 110 600	- △50 150
섬유	박사 석사 학사	150 150 1,500	10 120 5,400	△140 △30 3,900
철강	박사 석사 학사	200 920 760	110 660 3,500	△90 △260 2,740
화학	박사 석사 학사	220 440 1,290	100 790 3,460	△120 350 2,170
반도체 전자	박사 석사 학사	1,720 9,700 20,000	580 5,200 22,500	△1,140 △4,500 2,500
에너지	박사 석사 학사	45 110 480	30 100 170	△15 △10 △310

산업자원부 <산업기술인력 수급 종합대책> 2005. 06

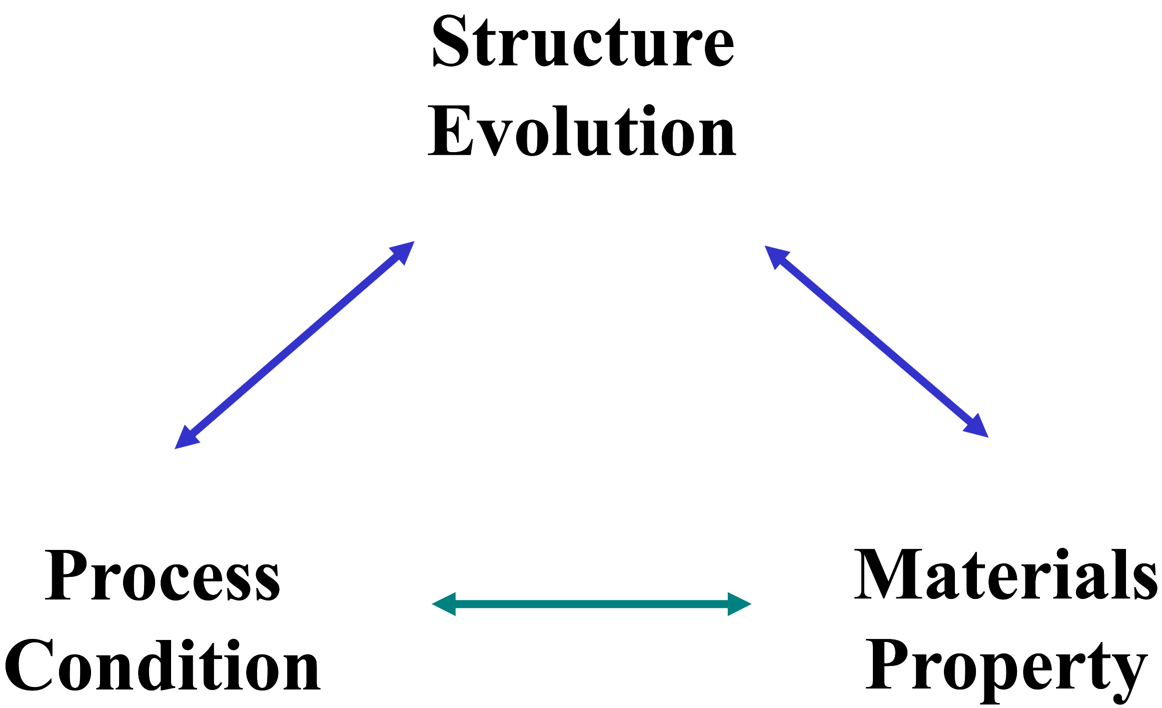
What makes a Material Scientist a Genuine Materials Scientist

인문사회학자 vs. Medical Doctor

Thinking & Simulation based on Scientific Knowledge

Byeong-Joo Lee
www.postech.ac.kr/~calphad

Materials Science and Engineering - What & How-to-Do



Research Type I : experiments first, then thinking

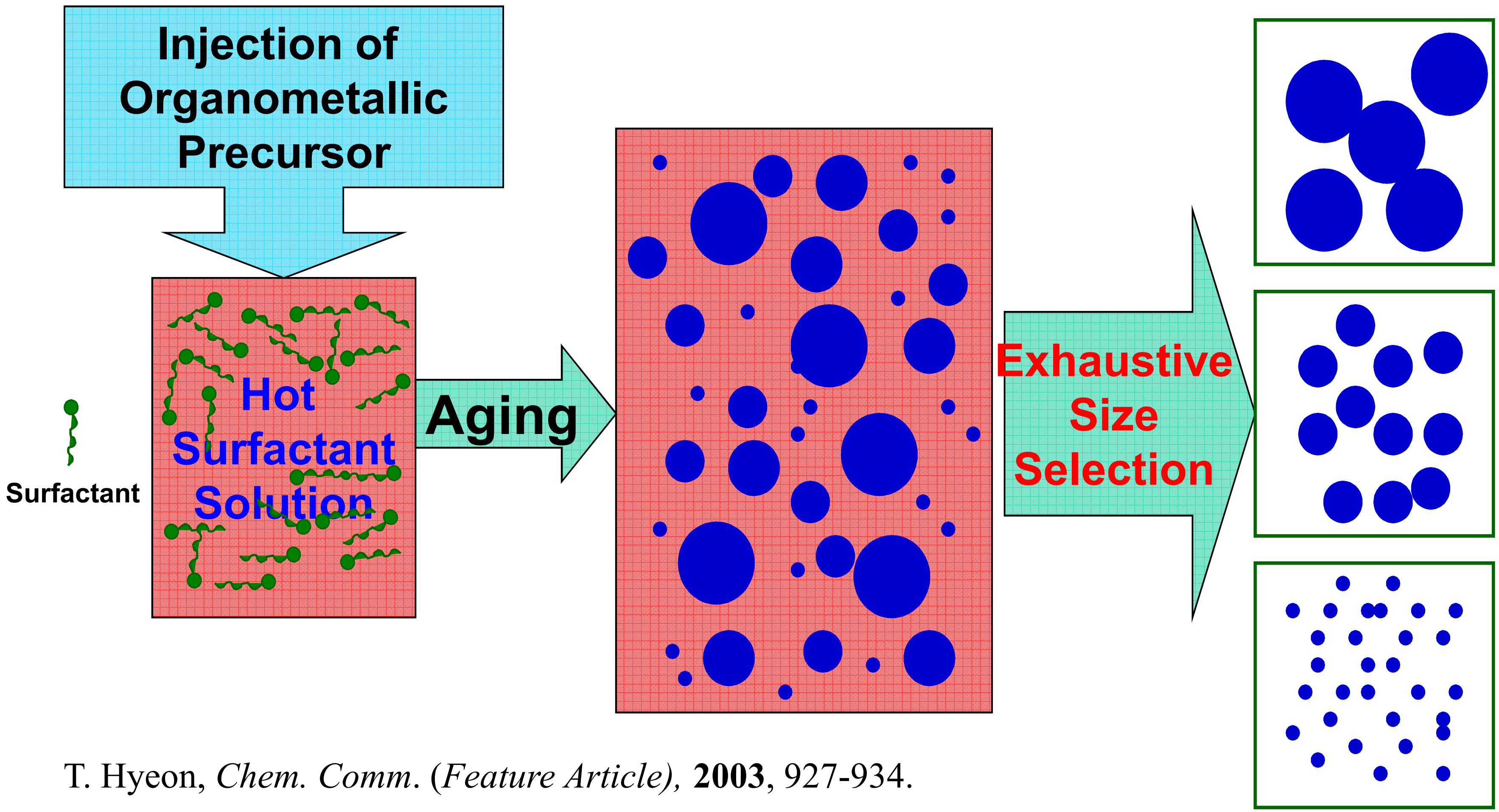
Research Type II: think first, then do experiments

Theory of Monosize Distribution of Nanoparticles

황농문[1], 고동균[1], 박성일[1], 김도연[1], 현택환[2]

[1]미세조직연구단, 재료공학부, 서울대학교
[2]산화물나노재료연구단, 응용화학부, 서울대학교

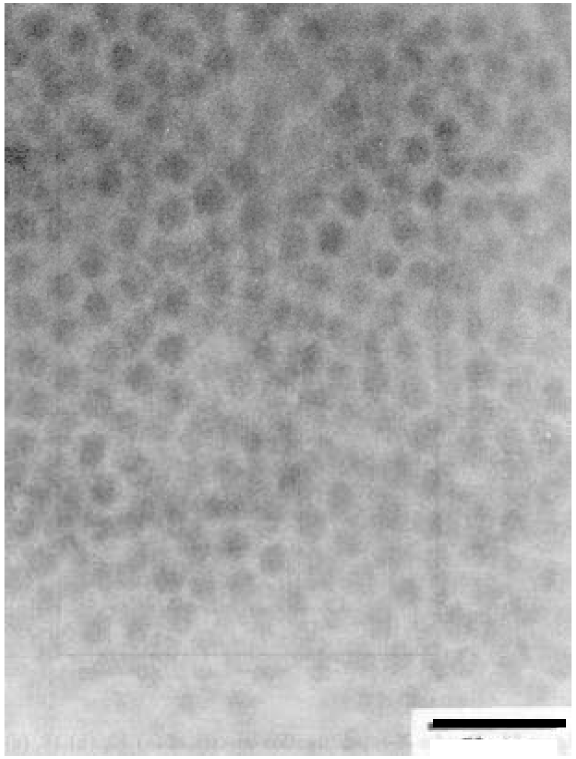
General Fabrication of Monodisperse Nanoparticles



T. Hyeon, *Chem. Comm. (Feature Article),* **2003**, 927-934.

Synthesis of Monodisperse Semiconductor Nanospheres
through Burst Nucleation & Size Selection

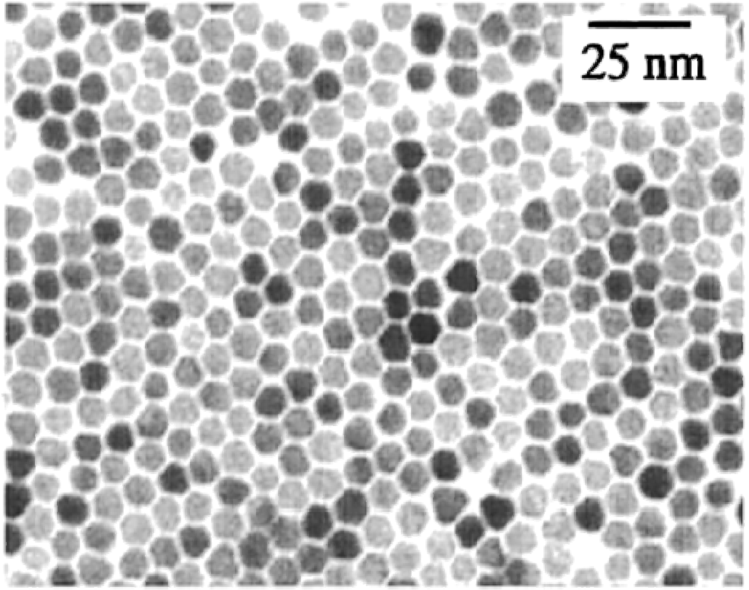
5.1 nm CdSe **MIT**



Bawendi, *J. Am. Chem. Soc.* **1993**, 115, 8706

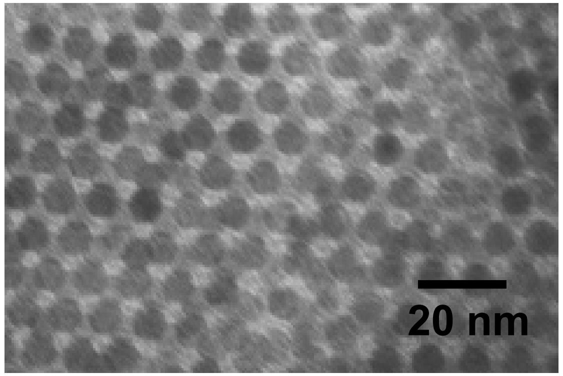
8.5 nm CdSe

UC-Berkeley

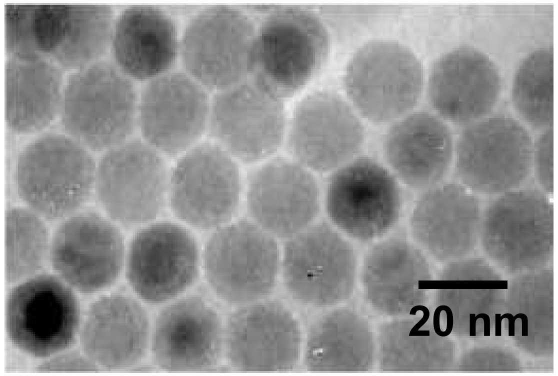


Alivisatos, *J. Am. Chem. Soc.* **1998**, 120, 5343

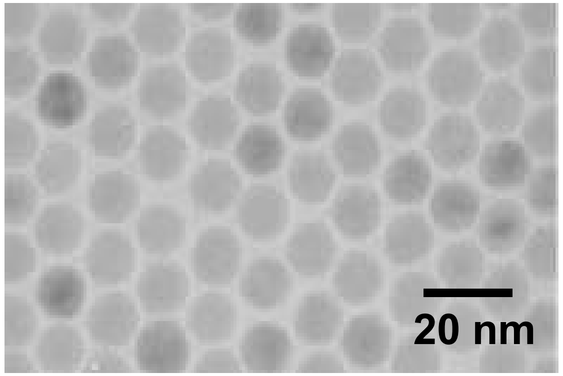
Direct Synthesis of Monodisperse Iron Nanoparticles *without a Size Selection Process!!!*



7 nm Fe Nanoparticles



18 nm Fe Nanoparticles



11 nm Fe Nanoparticles

T. Hyeon, *Chem. Comm.* (*Feature Article)* **2003**, 927-934.

EDITORS' CHOICE

edited by Gilbert Chin

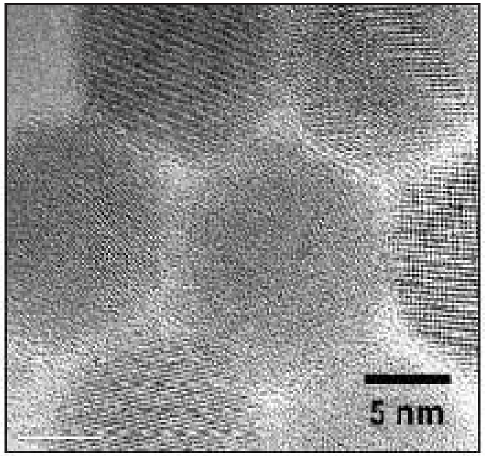
reveals a shallow surface that could accommodate just such a tilted domain, which would bring the NADPH close to the glutamate-binding pocket. The reactive semialdehyde intermediate serves as a metabolic link between the enzymes GluTR and GSAM. The latter also forms a dimer, and that dimer can be modeled snugly into the cleft of the "V". Strikingly, this complex reveals a conduit between the peripheral glutamate binding pocket in GluTR and the central active site in GSAM, enabling transfer of the semialdehyde without exposure to the aqueous environment. — VV

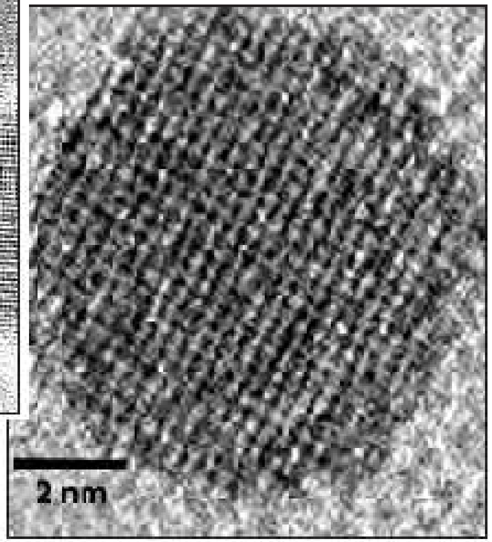
EMBO J. 20, 6583 (2001)

CHEMISTRY

Monodisperse Metal Oxide Nanoparticles

The practicality of using nanoparticles in technological applications will depend in part on avoiding costly and time-consuming separation steps and on expanding the range of materials that can be made into nanoparticles to include complex oxides. Hyeon *et al*. synthesized highly crystalline, monodisperse nanoparticles of maghemite (γ-Fe_2O_3) through the high-temperature aging (300°C) of an iron–oleic acid complex. The particles, whose size could be varied from 4 to 16 nanometers (nm), may find a use in magnetic recording or in ferrofluids. O'Brien *et al*. synthesized monodisperse nanoparticles of ferroelectric barium titanate ($BaTiO_3$). Particle sizes ranged from 4 to 12 nm, depending on conditions in their sol-gel route. Such particles not only could be used in devices but also could help resolve fundamental mechanistic questions concerning the suppression of ferroelectricity (spontaneous polarizability) in nanoparticles. — PDS





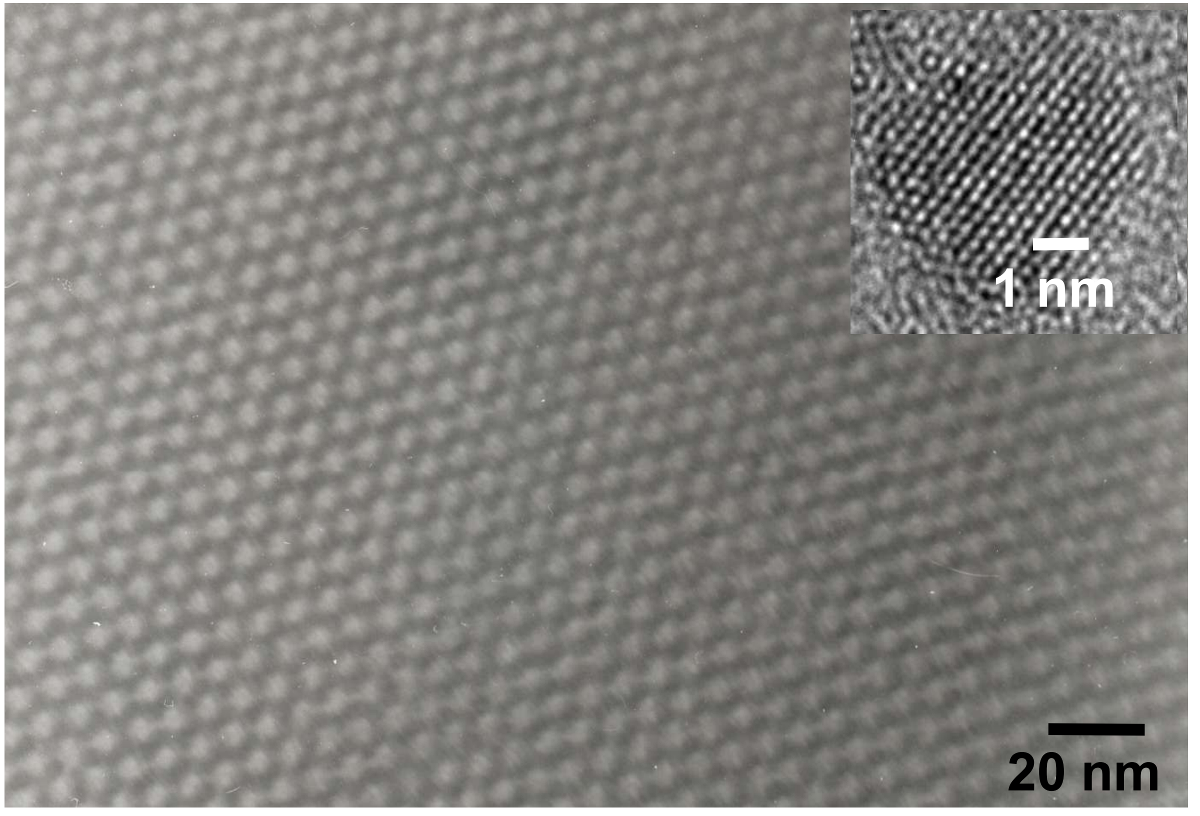
Transmission electron micrographs of (left) 11-nm γ-Fe_2O_3 and (right) 8-nm $BaTiO_3$ nanoparticles.

J. Am. Chem. Soc. 10.1021/ja016812s; *J. Am. Chem. Soc.* **123**, 12085 (2001).

MICROBIOLOGY

Promoting Prion Propagation

Monodisperse 3.5 nm Pd nanoparticles



Why Monosize Distribution of Nanoparticles?

Byeong-Joo Lee
www.postech.ac.kr/~calphad

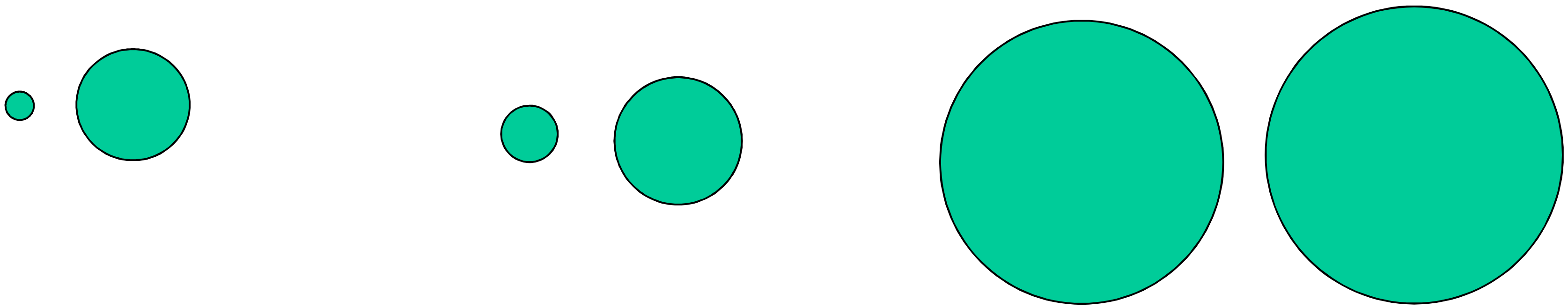
Principle of Monosize Distribution

When small and large particles grow at the same rate,

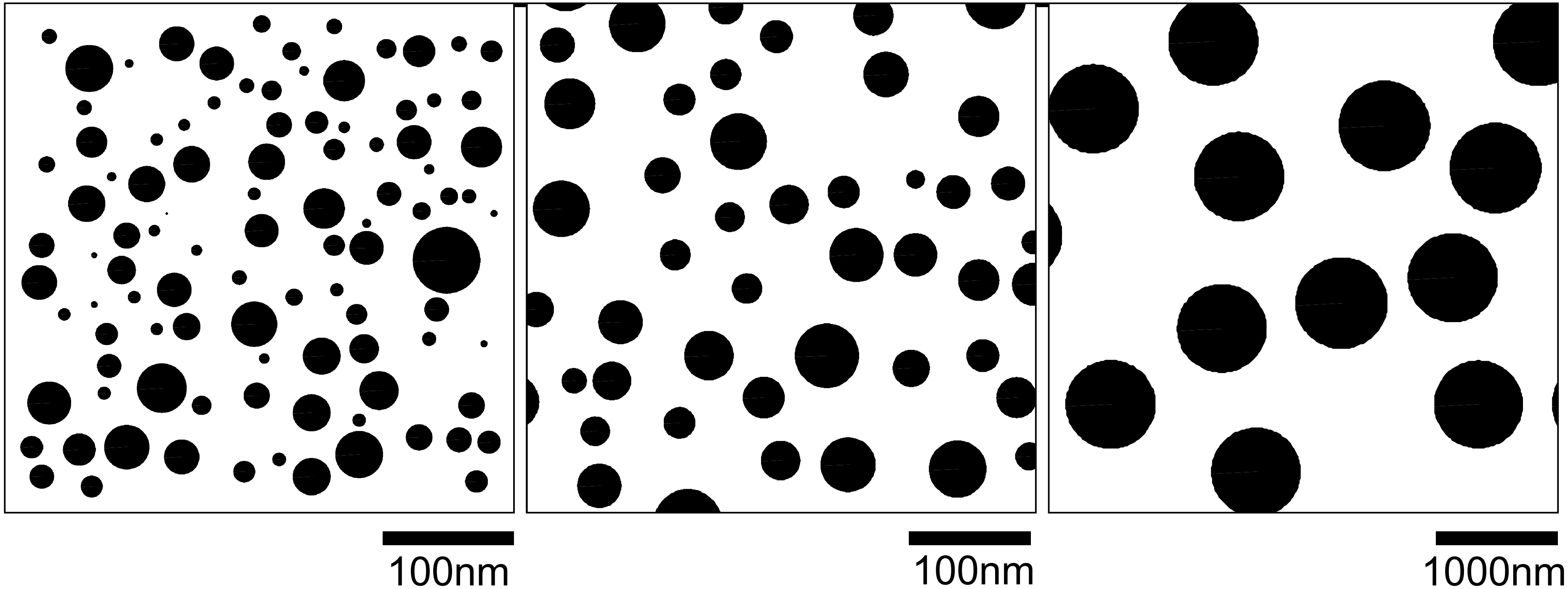
$$1\ \text{nm} \xrightarrow{+1} 2\ \text{nm} \xrightarrow{+98} 100\ \text{nm}$$

$$5\ \text{nm} \xrightarrow{+1} 6\ \text{nm} \xrightarrow{+98} 104\ \text{nm}$$

$$\frac{R}{r} = 5 \qquad \frac{R}{r} = 3 \qquad \mathbf{\frac{R}{r} = 1.04}$$



Growth simply leads to monodisperse particles.

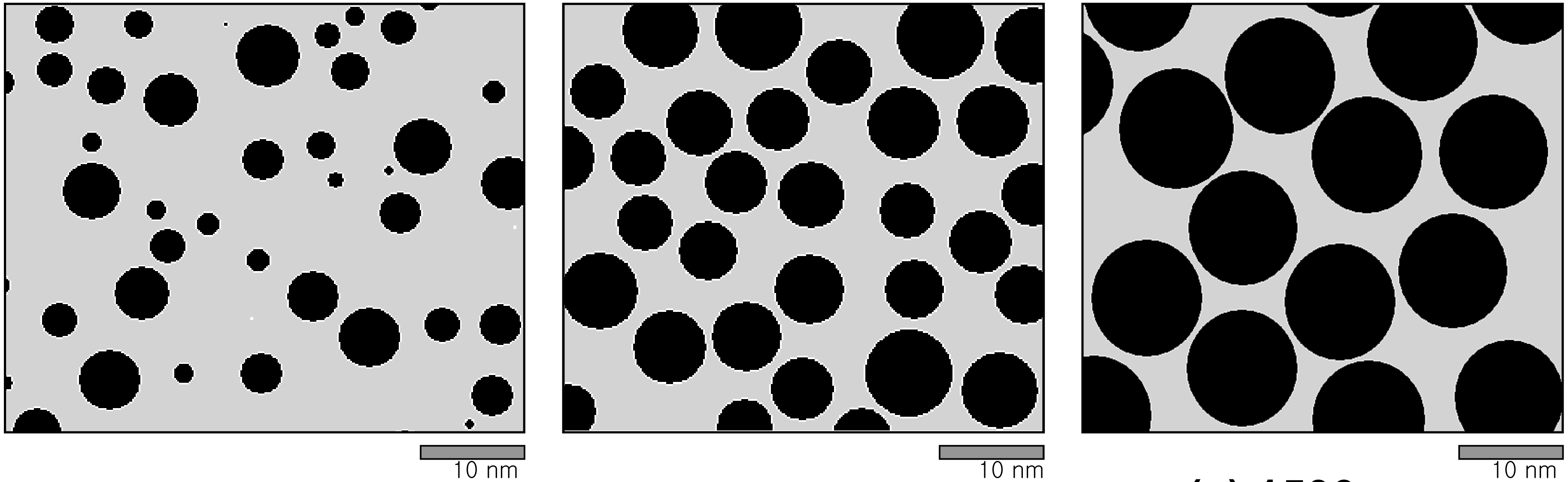


$(a)\ \frac{r_{max}}{\bar{r}} = 2.83$ $(b)\ \frac{r_{max}}{\bar{r}} = 1.97$ $(c)\ \frac{r_{max}}{\bar{r}} = 1.05$

This approach cannot explain the monodisperse nanoparticles of 4 ~ 10 nm.

$$\frac{dr}{dt} = const$$

Diffusion-Controlled Growth $\frac{dr}{dt} \propto \frac{1}{r}$



(a) initial state **(b) 100 sec** **(c) 1500 sec**

(a) initial state	(b) 100 sec	(c) 1500 sec
$\bar{r} = 0.5\ nm$	$\bar{r} = 1.4\ nm$	$\bar{r} = 4.8\ nm$
$\frac{r_{max}}{\bar{r}} = 3.13$	$\frac{r_{max}}{\bar{r}} = 1.53$	$\frac{r_{max}}{\bar{r}} = 1.05$

Necessary Conditions for Monosize Distribution

1. No Coagulation (Surfactant)

2. No Ostwald Ripening

3. No Nucleation during Growth

Synthesis of Monodisperse Nanoparticles without Size Section Requires that Growth Source should be different from Nucleation source.

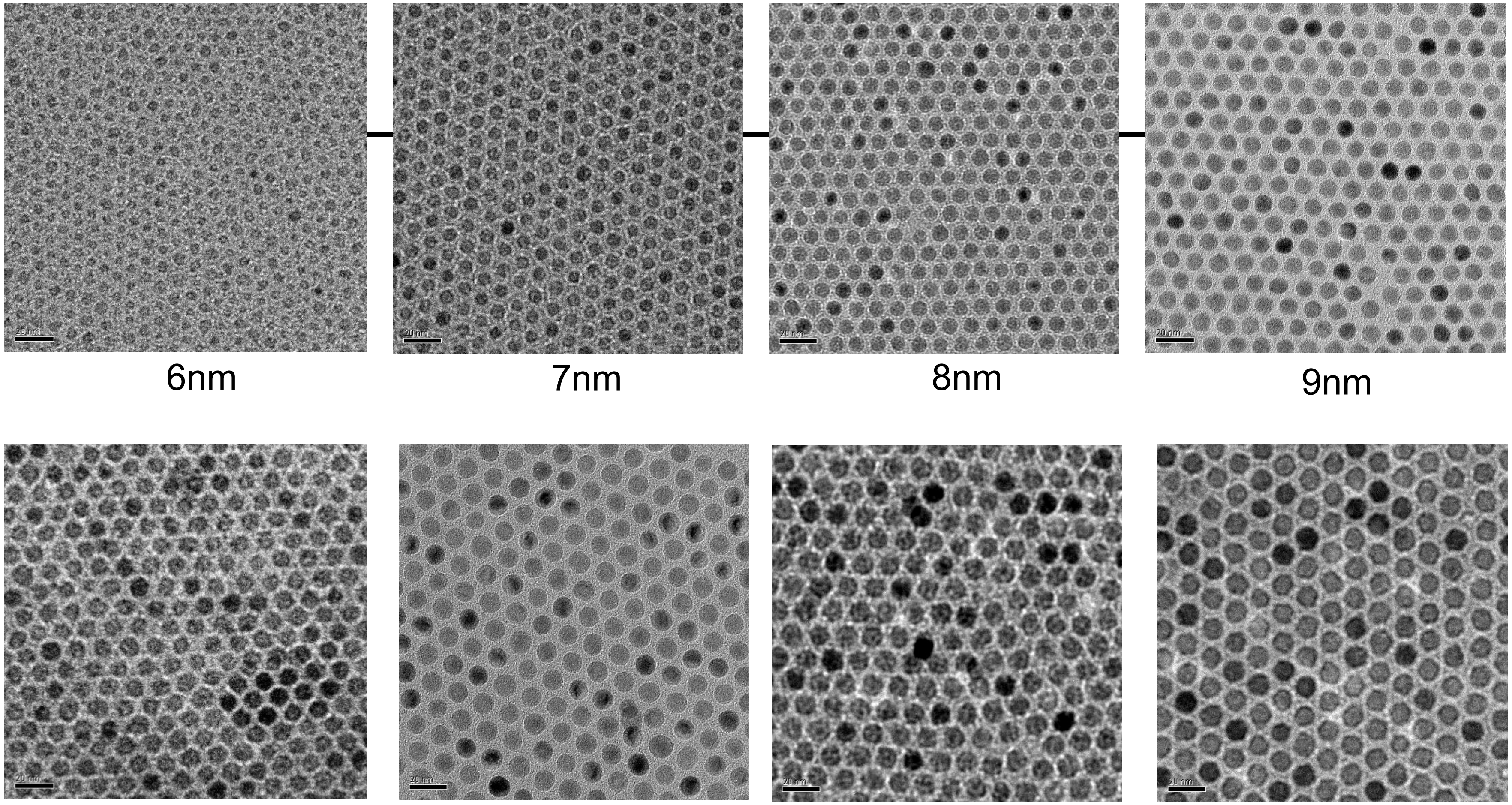
Identification of Nucleation and Growth Sources

Nucleation Source

$\rightarrow Fe(CO)_5$

Growth Source

$\rightarrow$ Fe-oleic complex

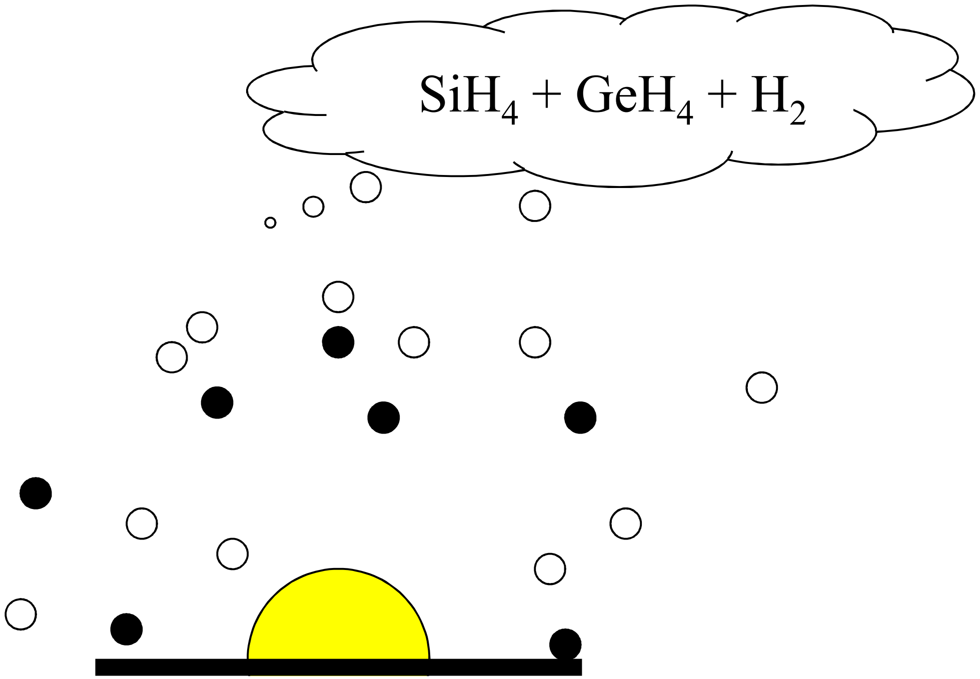


Ultra-large-scale syntheses of monodisperse nanocrystals	Park, J., An, K., Hwang, Y., Park, J.E.-G., Noh, H.-J., Kim, J.-Y., Park, J.-H., (...), Hyeon, T.	2004	*Nature Materials* 3 (12), pp. 891-895	823

View at publisher | POSTECH WebBridge | Show abstract | Related documents

One-nanometer-scale size-controlled synthesis of monodisperse magnetic iron oxide nanoparticles	Park, J., Lee, E., Hwang, N.-M., Kang, M., Sung, C.K., Hwang, Y., Park, J.-G., (...), Hyeon, T.	2005	*Angewandte Chemie - International Edition* 44 (19), pp. 2872-2877	160

Reactions during the VLS Process



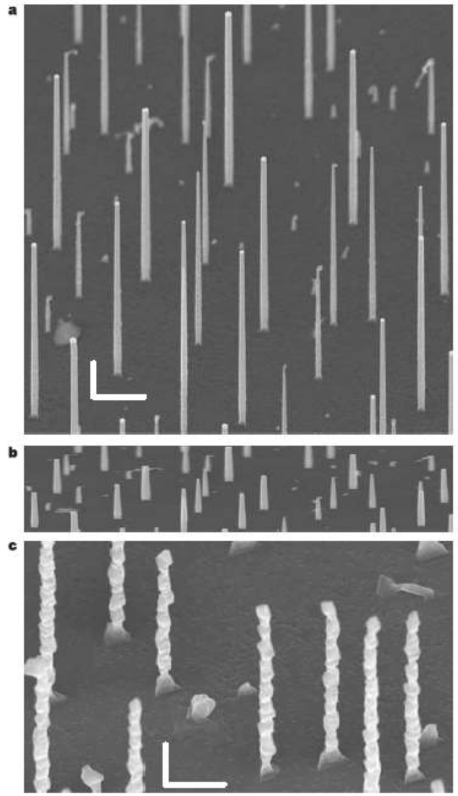
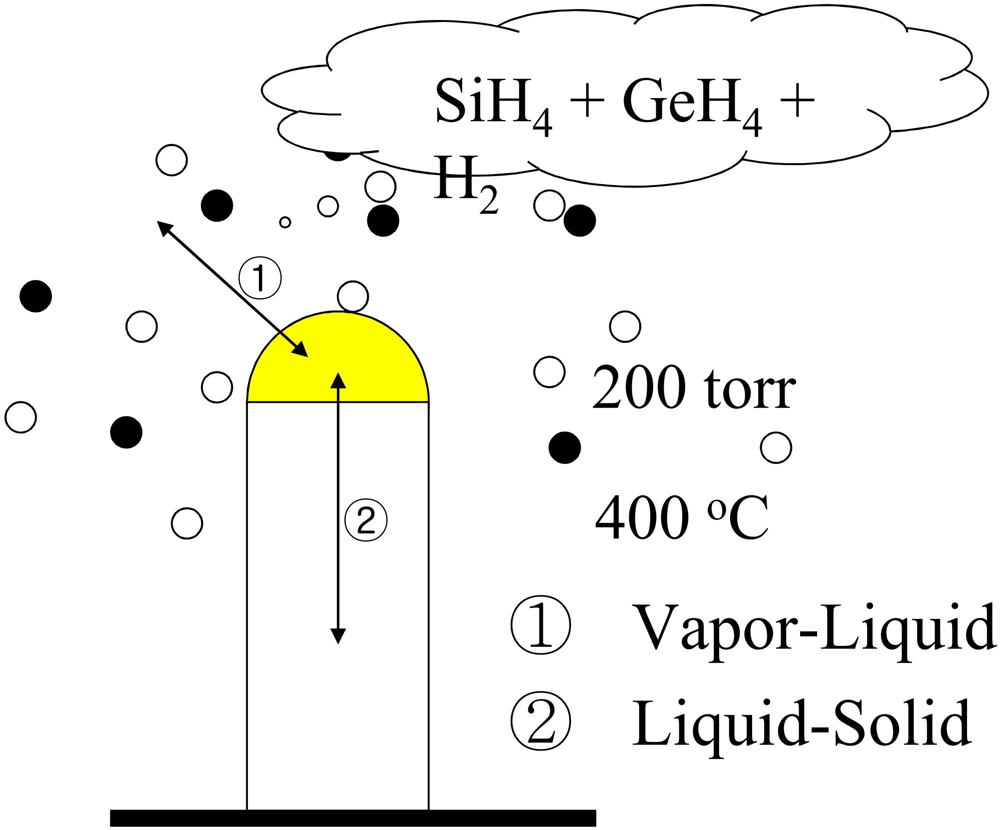


Figure 4 | SEM images of Si nanowires. **a**, Si nanowires grown for 1 h at 600 °C in a 20% disilane and 80% He solution at a pressure of 5×10^{-4} torr. **b**, Same image with vertical scaling reduced by a factor of five to highlight the sidewall tapering. **c**, Nanowires grown for 2 h at 600 °C at a pressure of 5×10^{-4} torr. Scale bars: 1 µm.

NATURE|Vol 440|2 March 2006

J. B. Hannon[1], S. Kodambaka[1], F. M. Ross[1] & R. M. Tromp[1]

VLS Growth of Nanowires



200 torr

400 °C

① Vapor-Liquid

② Liquid-Solid

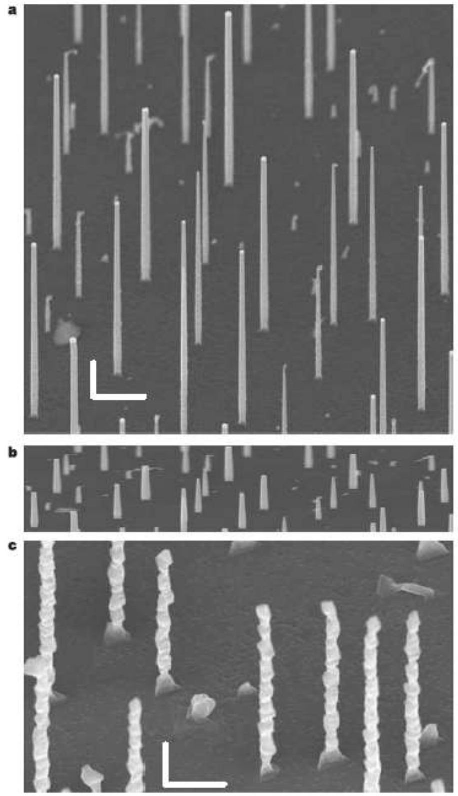
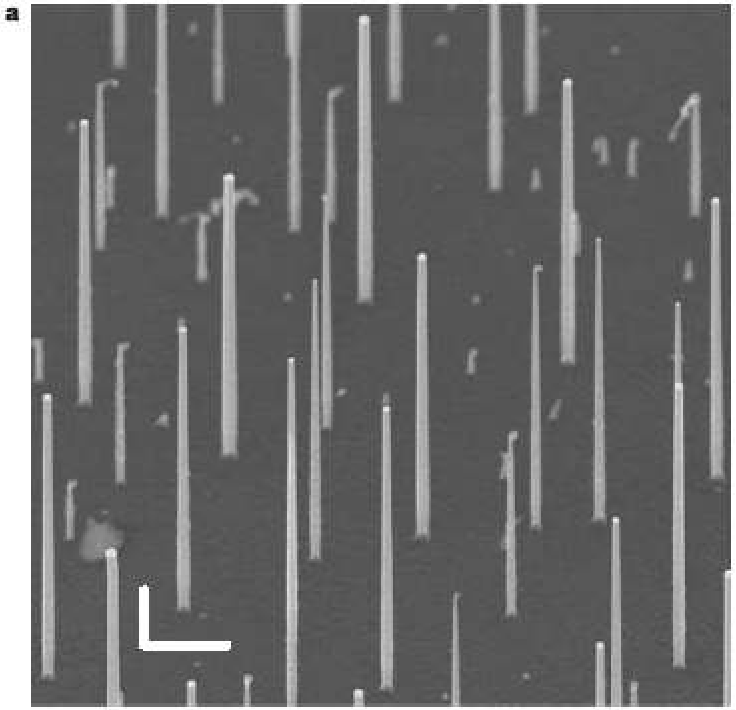


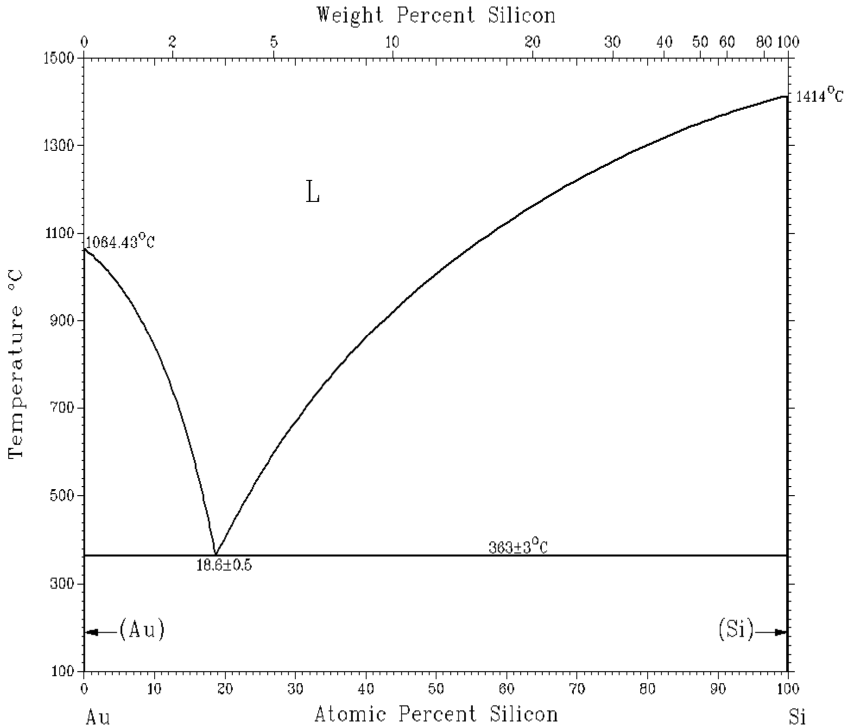
Figure 4 | SEM images of Si nanowires. **a**, Si nanowires grown for 1 h at 600 °C in a 20% disilane and 80% He solution at a pressure of 5×10^{-4} torr. **b**, Same image with vertical scaling reduced by a factor of five to highlight the sidewall tapering. **c**, Nanowires grown for 2 h at 600 °C at a pressure of 5×10^{-4} torr. Scale bars: 1 μm.

NATURE|Vol 440|2 March 2006

J. B. Hannon[1], S. Kodambaka[1], F. M. Ross[1] & R. M. Tromp[1]

Nanowire Growth





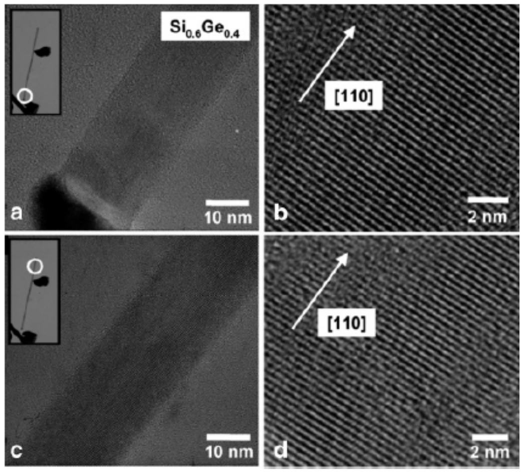
Motivation - in Collaboration with M.-H. Jo, POSTECH

Xi Zhang, Kok-Keong Lew,† Pramod Nimmatoori, Joan M. Redwing, Elizabeth C. Dickey*

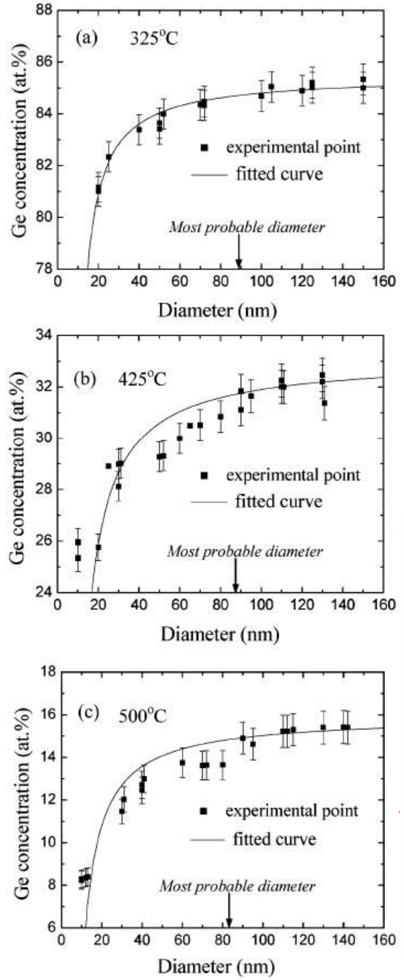
Band-Gap Modulation in Single-Crystalline $Si_{1-x}Ge_x$ Nanowires

Jee-Eun Yang, Chang-Beom Jin, Cheol-Joo Kim, and Moon-Ho Jo*

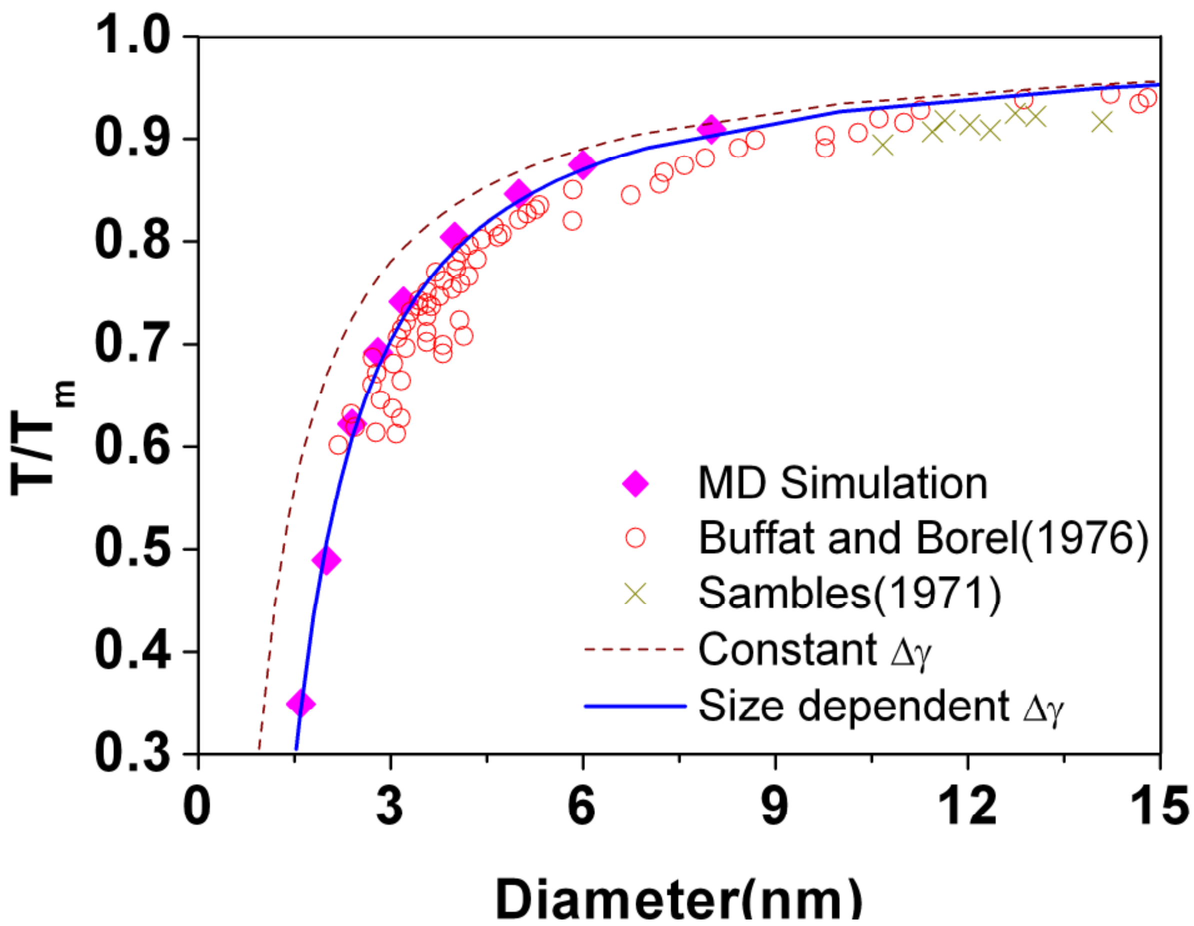
Department of Materials Science and Engineering, Pohang University of Science and Technology (POSTECH), San 31, Hyoja-Dong, Nam-Gu, Pohang, Gyungbuk, Korea 790-784



tional alloy nanowires. We note that
distribution in a batch of the nano
size variation of the Au catalysts, a
the systematic variation by small an
of $Si_{1-x}Ge_x$ nanowires for different
there is slightly higher Ge conten
nanowires within a sample batch, a
to different kinetics of the therma
precursors on catalysts of differen



Melting point depression of Nano particles - Capillarity : Thermodynamics

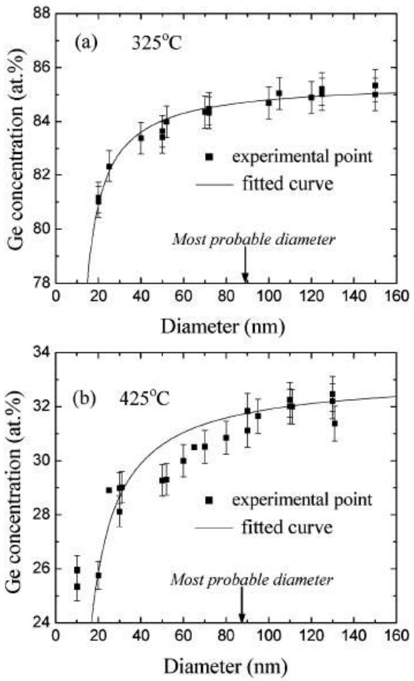


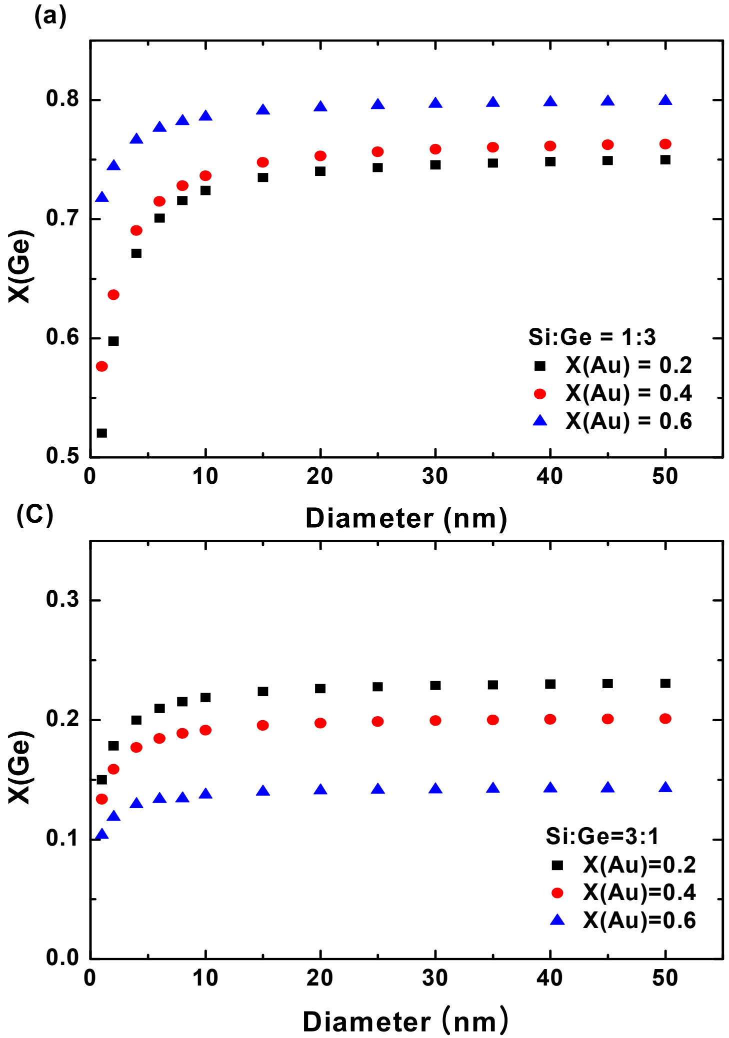
Thermodynamic Calculation – Application to Nano Materials

NANO LETTERS
xxxx
Vol. 0, No. 0
A−E

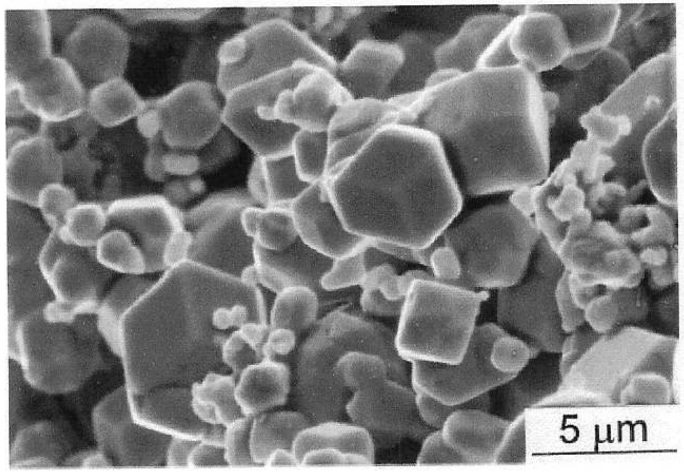
Diameter-Dependent Composition of Vapor–Liquid–Solid Grown $Si_{1-x}Ge_x$ Nanowires

Xi Zhang, Kok-Keong Lew,† Pramod Nimmatoori, Joan M. Redwing, and Elizabeth C. Dickey*

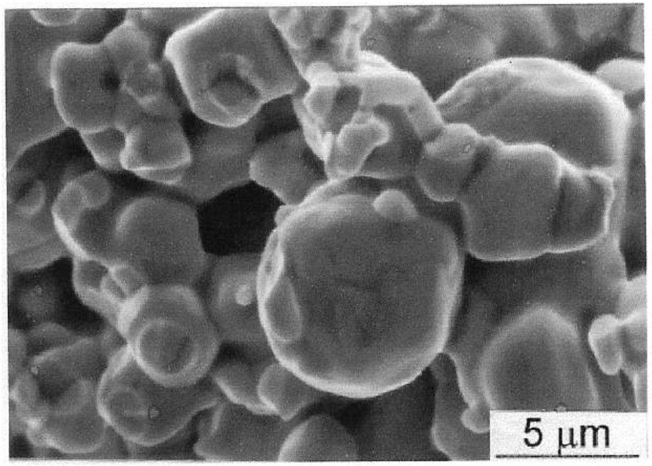




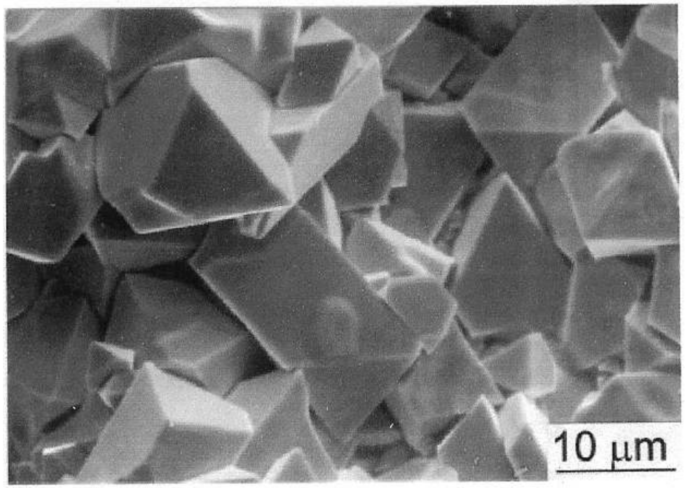
Surface Transition and Alloying Effect – N.M. Hwang et al., 2000.



Pure W

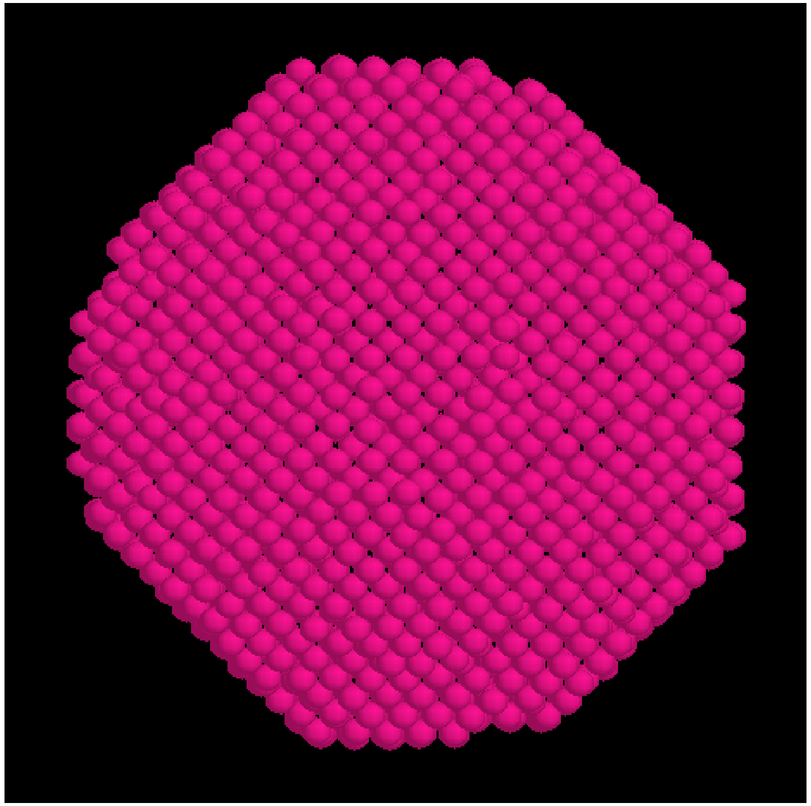


W + 0.4wt% Ni

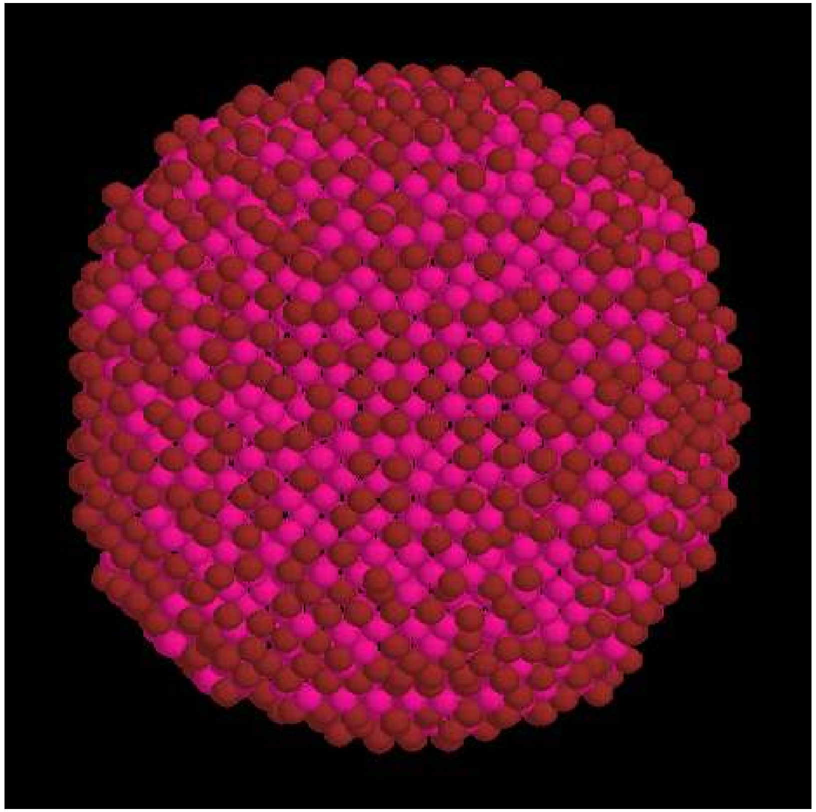


Vaccum Annealing

Surface Transition and Alloying Effect

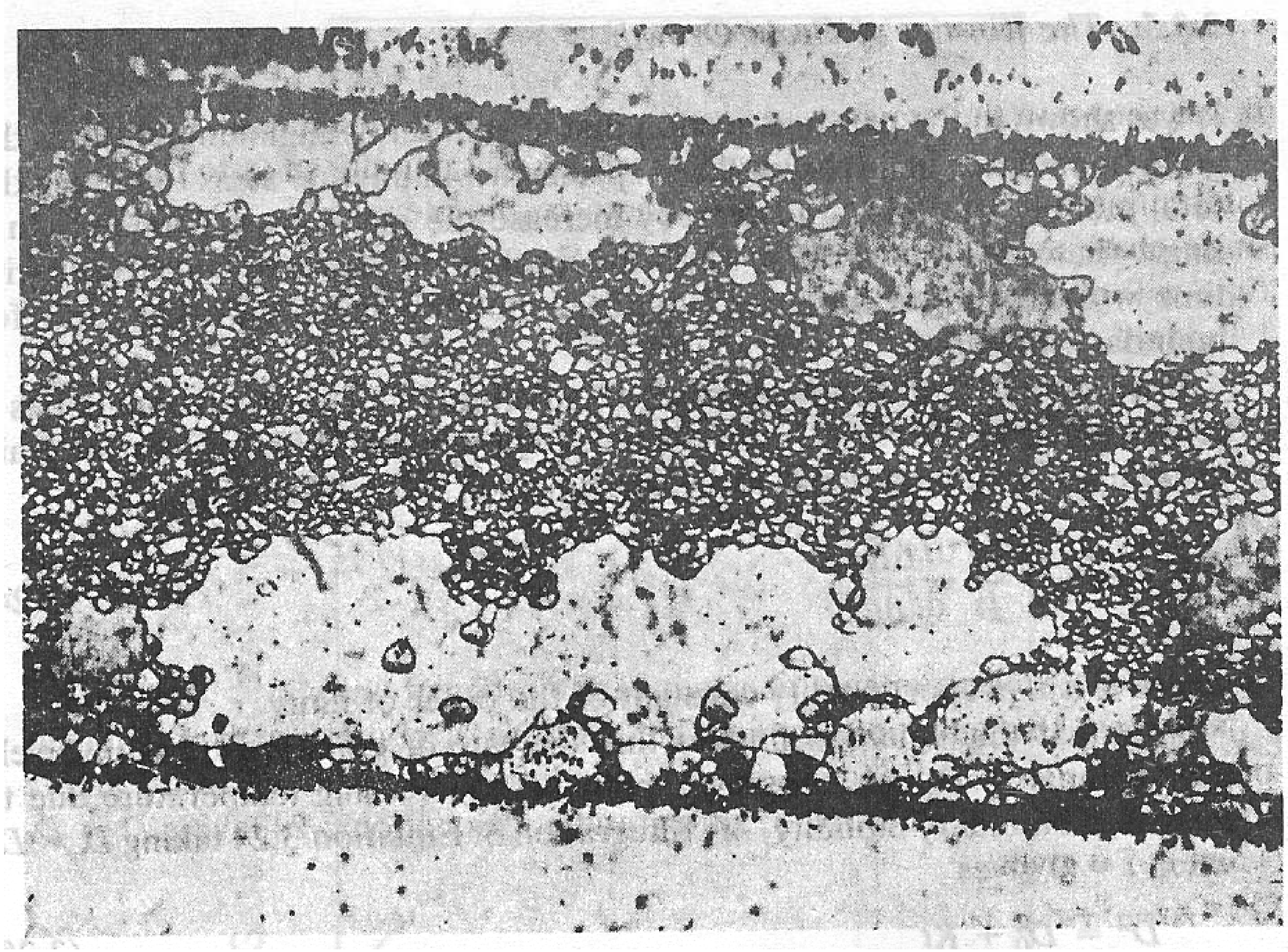


Pure W

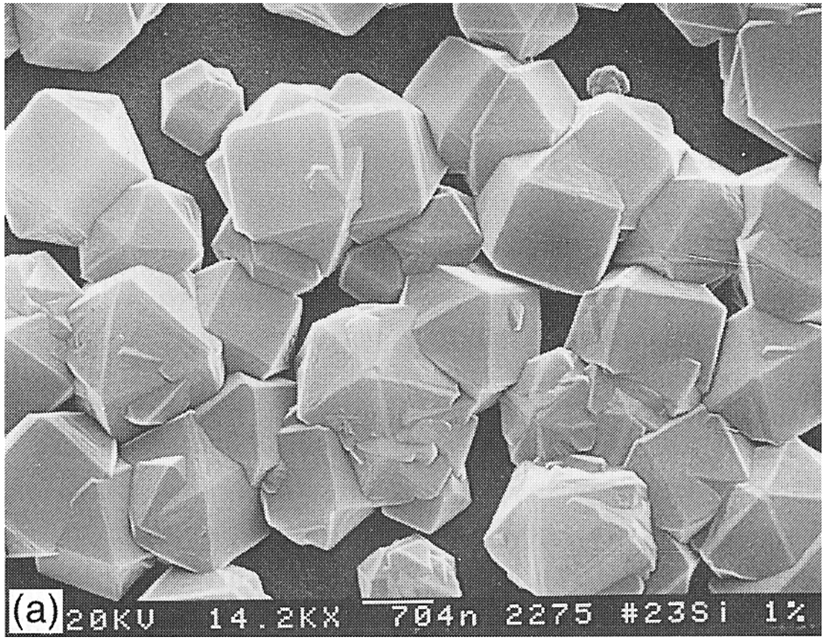


W-14at%Ni

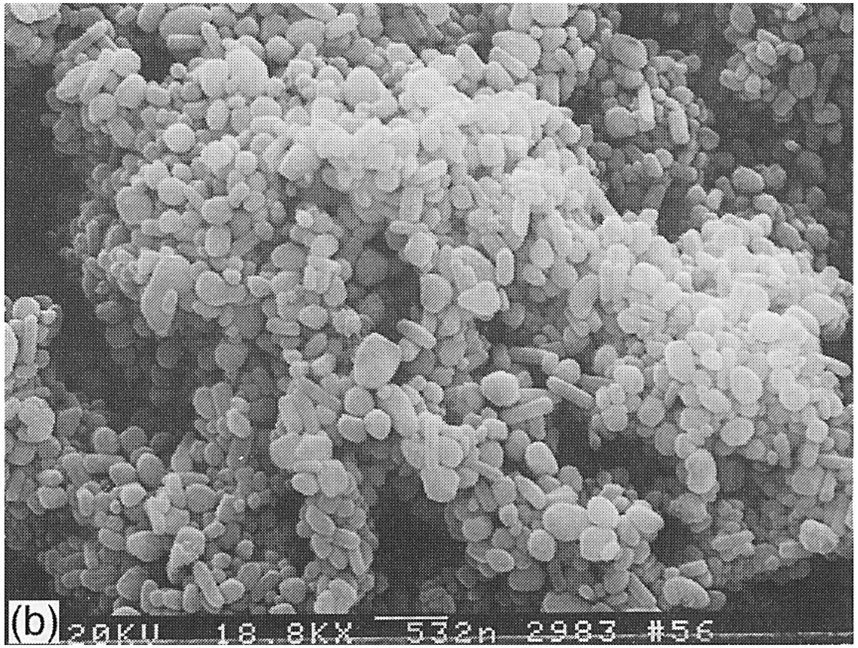
Abnormal Grain Growth – A 60 years old unsolved problem



CVD Diamond - N.M. Hwang et al., J. Crystal Growth 162, 55 (1996)



Diamond deposited on silicon substrate



Soot deposited on the iron substrate

CVD Si - N.M. Hwang et al., J. Crystal Growth 218, 27 (2000)

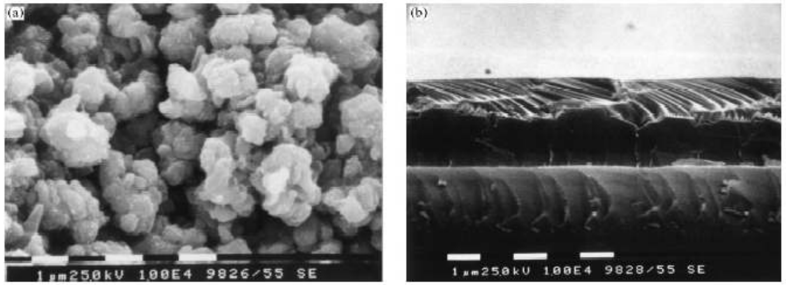


Fig. 1. SEM photographs of silicon deposits on (a) Fe and (b) Si substrates with the $SiH_4:HCl:H_2$ gas ratio of 1:1:98 under a reacto pressure of 1333 Pa at a substrate temperature of 1123 K.

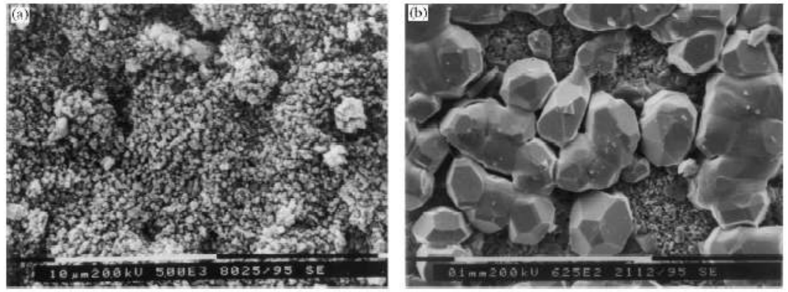


Fig. 4. SEM photographs of silicon deposits after (a) 3 and (b) 30 min on the Ni substrate with other conditions being the same as those for Fig. 1.

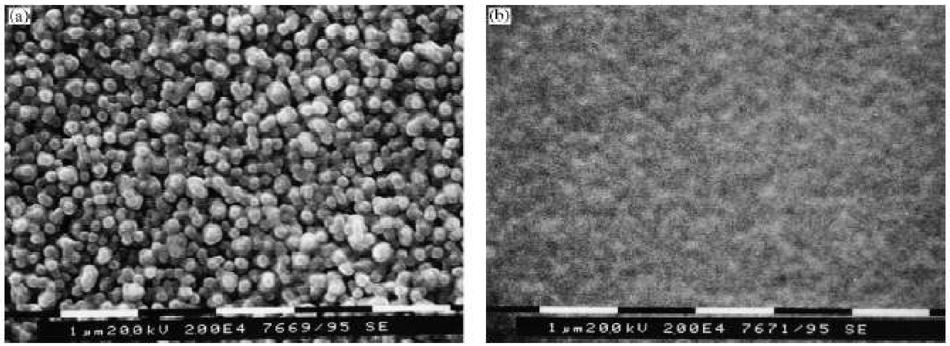


Fig. 3. SEM photographs of sputtered Al_2O_3 films on (a) Fe and (b) Si substrates with a RF power of 100 W at a substrate temperature of 873 K under a reactor pressure of 2.7 Pa.

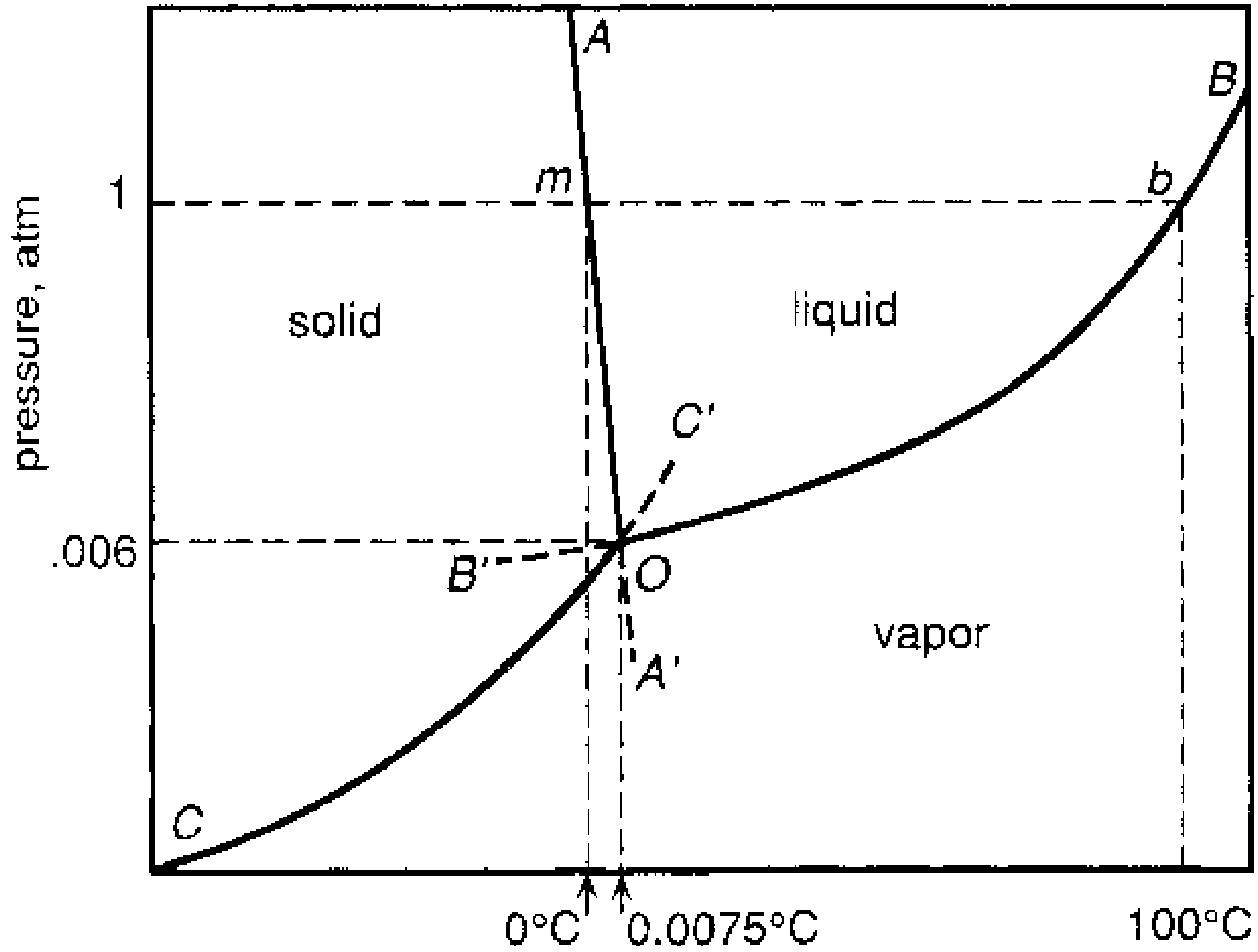
연구를 어떻게 할 것인가?

How to DO RESEARCH

Thinking is important

But, thinking
without scientific background
is nothing (空想)

Phase Diagram for H_2O



Course Outline

- Basic concepts of classical and statistical thermodynamics
- Thermodynamics of Defects, Surfaces and Interfaces
- Thermodynamics of CVD
- Introduction to atomistic and micro simulation: Monte Carlo Simulation

- Examination + Term Report 70%
- Home Assignment 20%
- Attendance 10%

1. Lecture Note (ppt)
2. Thermodynamics of Materials, Volume II (MIT Series in Materials Science & Engineering) David V. Ragone, 1995, John Wiley & Sons.
3. Thermodynamics of Materials: A Classical and Statistical Synthesis John B. Hudson, 1996, John Wiley & Sons.

Time Schedule

1st week : Introduction (Basic Concept)
2nd week : First & Second Law of Thermodynamics
3rd week : Thermodynamic Functions and Relations
4th week : Solution Thermodynamics and Phase Diagram
5th week : Basic Concept of Statistical Thermodynamics
6th week : Basic Concept of Statistical Thermodynamics
7th week : Applications of Statistical Thermodynamics
8th week : Mid-term exam.
9th week : Applications of Statistical Thermodynamics
10th week: Thermodynamics of Defects
11th week: Thermodynamics of Surfaces and Interfaces
12th week: Thermodynamics of CVD
13th week: Fundamentals in Monte Carlo Simulation
14th week: Micro Monte Carlo Simulation
15th week: Atomistic Monte Carlo Simulation
16th week: Final Exam

Thermodynamics

Introduction

Byeong-Joo Lee

POSTECH - MSE
calphad@postech.ac.kr

Introduction – Historical Background

Maxwell

· **Newton → Classical Mechanics → Electromagnetism → Quantum Mechanics**

- · Lagrangian
- · Hamiltonian

- · Rationalism
- · Time Reversible

· **Experimental fact (**Industrial Revolution**)** **→ Thermodynamics**

- · Heat → Concept of Temperature
- · PV work → Concept of Pressure

- · Empirical Rule
- · Time irreversible

- · Thompson → Rumford
- · Davy
- · Mayor
- · Carnot
- · Joule
- · Thomson → Kelvin
- · Clausius
- · Maxwell
- · Gibbs

※ Expansion in scope has been made to embrace not only thermal, mechanical and chemical effects, but also the kinetic energy and the complete set of potentials energies: gravitational, electrical, magnetic and body forces, (with the exception of atomic energy).

※ J. Willard Gibbs, 1883
: On the Equilibrium of Heterogeneous Substances

Introduction - Microscopic vs. Macroscopic Point of View

· macroscopic : no special assumption on the structure of matter,
directly measured

· microscopic : assumption on the structure of matter (molecules),
unmeasurable.
can only be justified by comparing some
deduction with that from macroscopic
point of view.

· quantum mechanics

· Foundation of materials science

· Phase Diagrams, Chemical Reactions, Adsorption, Capillarity effects and Electrochemistry, …, etc.

Introduction - Basic Terminology

· System / Surrounding (reservoir)

· State (Properties: description of state),
Change of state (properties) during a process

· Measurable and unmeasurable properties :
Unmeasurable properties can be determined from other measurable properties through thermodynamic relations between properties

※ Thermodynamic systems,
thermodynamic properties,
thermodynamic relationships

· Unary / multicomponent

· Homogeneous / Heterogeneous

· **Closed / Open**

· Non-reacting / reacting

· Exchange of energies / No exchange
(※ **Isolated**)

· Thermodynamics State or State of Thermodynamic Equilibrium

Mechanical, Chemical and Thermal Equilibrium

Uniform and well defined thermodynamic coordinates

No tendency to change with time of thermodynamic coordinates

· path independence

$$\rightarrow \qquad dV = \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T dP + \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P dT$$

· Extensive and Intensive Properties

· Process variable (*only have meaning for changing systems*)

· work & heat