

Моделирование диаграмм состояния бинарных растворов эвтектического типа на основе обобщенной решеточной модели

М. А. Захаров

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого,
Великий Новгород, Россия

тел: (8162) 62-75-52, эл. почта: ma_zakharov@list.ru

Предложен метод расчета диаграмм состояния бинарных растворов эвтектического типа при наличии растворимости компонентов в твердом состоянии, основанный на применении обобщенной решеточной модели [1], учитывающей различия в атомных размерах компонентов, образующих раствор. Разработан метод, позволяющий сводить расчет диаграмм состояния бинарных систем с промежуточными фазами при отсутствии диссоциации химических соединений к самосогласованному расчету цепочки диаграмм состояния отдельных подсистем с помощью универсальных нелинейных преобразований концентрационных переменных [2]. При этом химические соединения, образующиеся в растворе, рассматриваются как самостоятельные "молекулярные" компоненты системы. Проведено сравнение с рядом диаграмм состояния реальных бинарных растворов эвтектического типа.

Литература

1. Е. Л. Корзун, С. В. Терехов, ЖФХ 61, 1186 (1987).
2. М. А. Захаров, ФТТ 49, 2204 (2007).