

МЕТОД РАСЧЕТА ЭВТЕКТИЧЕСКИХ КОНЦЕНТРАЦИЙ БИНАРНЫХ СИСТЕМ

А.Р. Халиков, А.А. Ганеев

Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа, Россия

Решение ряда теоретических, технологических и эксплуатационных проблем металлургии, связанных с расплавлением материалов на основе металлических, оксидных и солевых систем, требует знания диаграмм состояния или, по крайней мере, температур эвтектических реакций этих систем. В то же время для многих систем, в особенности многокомпонентных, экспериментальные диаграммы состояния еще не построены. Для компьютерного построения квазибинарных разрезов реальных многокомпонентных систем требуется соответствующее программное обеспечение и банк данных, который пока еще не составлен для большинства систем. Расчет даже двухкомпонентных диаграмм состояния сплавов по термодинамическим критериям связан с большой погрешностью.

Существующие рекомендации и расчетные формулы позволяют провести оценку положения эвтектики только для некоторых систем. В целом, для большинства двухкомпонентных и многокомпонентных систем подходы для расчета эвтектических концентраций являются мало приемлемыми. Важной задачей является метод для определения эвтектических концентраций бинарных систем.

Для прогноза диаграмм состояния эвтектического типа необходимо определить элементы которые образуют многокомпонентную эвтектическую систему. Необходим метод нахождения всех возможных комбинаций многокомпонентных эвтектических систем.

Из рассмотрения диаграмм состояния следует, что для нахождения элементов новой многокомпонентной эвтектической системы необходима база данных (БД) всех изученных эвтектических превращений бинарных систем. Следовательно, подбирая различные эвтектические системы между собой для разных элементов друг с другом по принципу диаграмм состояния систем с двойным конгруэнтно плавляющимся соединением, можно найти все возможные комбинации многокомпонентных эвтектических систем, при усло-

вии, что каждый элемент новой многокомпонентной эвтектической системы будет образовывать эвтектики со всеми остальными элементами образующими сплав эвтектического типа.

Для решения задачи была разработана база данных (БД), «База данных по эвтектическим сплавам двухкомпонентных систем» (свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2008620302).

В базу данных вошли все элементы периодической системы Д.И. Менделеева, образующие двойные диаграммы эвтектического типа (более 700 систем). Для каждой системы указаны эвтектическая концентрация легирующих элементов, температура образования эвтектических точек и температура плавления элементов образующих эвтектику.

На основе БД, построена матрица взаимодействия элементов друг с другом. По горизонтали и вертикали матрицы расположены элементы. При пересечении элементов по горизонтали и вертикали расположены цифры (0) или (1), единица означает, что между двумя данными элементами существует эвтектика, цифра (0) означает отсутствие между элементами эвтектического взаимодействия.

Нахождение комбинаций элементов между собой с образованием эвтектического типа (по цифрам (1) трудоемко, поэтому для нахождения элементов многокомпонентных систем предложен метод рекурсивного алгоритма и разработана программа ЭВМ «Программа генерирования элементов эвтектических сплавов» (свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2008613834).

Разработанная программа позволяет рассчитывать все возможные комбинации элементов от трёх до восьми компонентных эвтектических систем. Результатом программы является определение более 20000 комбинаций элементов образующие многокомпонентные эвтектические системы.

Получено уравнение (1) основанное на эффекте резонанса упругих волн кристалла которое позволяет определять эвтектиче-

ские концентрации с точностью подтвержденной практически результатами.

Для определения эвтектической концентрации бинарной системы *A-B* необходимо знать элемент или соединение *C* которое образует бинарные эвтектические системы с элементом или соединением *A* с образованием системы эвтектического типа *A-C* и с элементом или соединением *B* с образованием системы эвтектического типа *C-B* т.е. тройную систему эвтектического типа *A-B-C*. Зная эвтектические концентрации *A-C* и *C-B* можно найти неизвестную эвтектическую концентрацию системы *A-B*.

$$x_1 = \frac{100 \cdot C_2}{C_1 + C_2} \quad (1)$$

где x_1 - эвтектическая концентрация элемента *A* в системе *A-B*

C_1 - отношение эвтектических атомных концентраций элементов *C* и *B* в системе *C-B* ($C_1 = C / B$)

C_2 - отношение эвтектических атомных концентраций элементов *C* и *A* в системе *C-A* ($C_2 = C / A$)

Уравнение (1) позволяет рассчитывать эвтектические концентрации как для простых так и для вырожденных бинарных эвтектических систем.

Данные проверочных расчетов концентраций эвтектических систем *Al-Si*, *Si-Sn*, *Al-Sn*, *Sn-Pb*, *Bi-Sn*, *Bi-Pb*, *Ge-Zn* представлены в табл. 1.

Расшифровка полей таблицы:

1. – Система эвтектического типа,
2. – Системы, участвующие в расчете,
3. – Эвтектическая концентрация по элементу
4. – Эвтектическая концентрация в ат. % (экс.)
5. – Эвтектическая концентрация в ат. % (рас.)
6. – Абсолютная погрешность расчета, ΔC .

Таблица 1 - Проверочные расчеты эвтектических концентраций бинарных систем

1	2	3	4	5	6
Al-Si	Si-Sn, Al-Sn	Si	12,2	12,21388	-0,01388
Si-Sn	Al-Si, Al-Sn	Si	0,312	0,311597	0,000403
Al-Sn	Al-Si, Si-Sn	Sn	2,2	2,202789	-0,00279
Sn-Pb	Bi-Sn, Bi-Pb	Sn	62,7	62,78521	-0,08521
Bi-Sn	Sn-Pb, Bi-Pb	Bi	43	43,08936	-0,08936
Bi-Pb	Bi-Sn, Sn-Pb	Bi	56	55,91017	0,089835
Ge-Zn	Al-Zn, Al-Ge	Ge	5,5	4,810067	0,689933