Общероссийский математический портал

О. С. Афанасьева, Г. Ф. Егорова, О. Е. Моргунова, А. С. Трунин, Методика расчета тройных эвтектик по данным об элементах ограничения систем низшей мерности, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2007, выпуск 1(), 182–183

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu514>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.91.87.62

26 апреля 2023 г., 13:09:17

**МЕТОДИКА РАСЧЕТА ТРОЙНЫХ ЭВТЕКТИК ПО ДАННЫМ
ОБ ЭЛЕМЕНТАХ ОГРАНИЧЕНИЯ СИСТЕМ НИЗШЕЙ МЕРНОСТИ**

Рассматривается методика расчета характеристик (состава и температуры) эвтектик трехкомпонентных физико-химических систем. Проведен сравнительный анализ расчетных и справочных данных по характеристикам трехкомпонентных систем.

В современном физико-химическом анализе для расчета характеристик эвтектик активно используются методы моделирования, что значительно упрощает исследование физико-химических систем, снижает эксперимент до единичного или вообще позволяет обходиться без тако-го.

Ранее в [1] была использована методика расчета Сусарева М. П. и Мартыновой Н. С. Расхождение экспериментальных и расчетных данных составляет 5% по температуре и составу

Для расчетов необходимо знать температуры плавления каждого компонента (T_i , °К), температуры ($T_{эв}^{i-j}$, °К) и состав ($x_{i,j}^{i-j}$, молекулярные %) эвтектик двухкомпонентных систем ограничения, образующих тройную систему. Исходные данные можно представить на треугольнике Гиббса (рисунок). В настоящей работе предлагается следующий алгоритм.

1. Располагаем температуры плавления в порядке возрастания:

$$T_1 < T_2 < T_3.$$

2. Находим максимум разности между температурой плавления T_i и противолежащей эвтектикой $T_{эв}^{i-j}$, отвечающей наиболее устойчивой складке.

Известно, что точка тройной эвтектики будет находится в $VT_{эв}^{1-2}T_{эв}^{2-3}T_{эв}^{1-3}$. Наибольшее влияние на температуру тройной эвтектики будет оказывать мольная доля самого тугоплавкого вещества.

Будем считать, что легкоплавкое и самое легкоплавкое вещества соединены в заданной пропорции с известной температурой эвтектики двухкомпонентной системы. Предположим, что максимально возможное понижение температуры тройной эвтектики будет пропорционально мольной доле содержания самого тугоплавкого вещества в двухкомпонентной системе с самым легкоплавким. Исходя из этого предположения, найдем мольную долю содержания самого тугоплавкого вещества в тройной системе. Для этого из подобия треугольников $VT_1T_2T_{эв}^{2-3}$ и $VT_1T_{эв}^{1-2}O'$ находим $h_3 = T_{эв}^{1-2}O'$ — мольная доля третьего вещества в тройной системе.

Далее находим мольные доли содержания в тройной эвтектики первого и второго вещества по формулам:

$$h_2 = x_2^{1-2} - x_2^{1-2}h_3, \quad h_1 = x_1^{1-2} - x_1^{1-2}h_3.$$

Из подобия треугольников $VT_1T_2T_{эв}^{1-3}$ и $VT_{эв}^{1-2}T_2O$ находим $h'_3 = T_{эв}^{1-2}O$. Предполагаем, что температура эвтектики тройной системы будет близка по значению к минимальной температуре эвтектики из трех температур эвтектик двухкомпонентных систем. Поэтому находим поправку для температуры эвтектики трехкомпонентной системы по формуле

$$T_{эв}^{1-2-3} = T_{эв}^{1-2} - \exp(\text{abs}(h'_3 - h_3) \ln T_{эв}^{1-2})$$

для случая, когда $\text{abs}(h'_3 - h_3) < h_3$, и по формуле —

$$T_{эв}^{1-2-3} = T_{эв}^{1-2} - \exp(h_3 \ln T_{эв}^{1-2})$$

в случае, когда $h_3 < abs(h'_3 - h_3)$.

С целью исследования валидности методики расчета, был произведен расчет 12 физико-химических трехкомпонентных эвтектических систем по данной методике.

Как видно из таблицы, расчет по предложенному алгоритму не противоречит расчетным данным, полученным по методу Мартыновой–Сусарева. Погрешность вычислений по температуре эвтектики не превышает 2%.

Сравнение расчетных и справочных данных по характеристикам трехкомпонентных систем

Расчет				Справочные данные [1]				Погрешность по температуре ДТА, %	Погрешность по температуре, %
Содержание компонента, мол. %			T, °K	Содержание компонента, мол. %			T, °K		
1	2	3		1	2	3			
KCl K ₂ SO ₄ K ₂ WO ₄									
0,558	0,126	0,315	892,7	0,626	0,311	0,243	888,6	1,76	0,45
NaBr NaNO ₃ NaCNS									
0,039	0,557	0,403	497	0,042	0,556	0,402	496	0,1	0,38
NaBr NaNO ₃ Na ₂ MoO ₄									
0,015	0,936	0,049	567	0,03	0,921	0,49	576	1,41	1,41
NaBr NaCHS CH ₃ COON									
0,052	0,526	0,422	508	0,034	0,536	0,43	506,48	0,29	0,59
NaBO ₂ NaF NaCl									
0,201	0,268	0,531	951,9	0,2893	0,096	0,6147	965	0,94	1,36
NH ₄ NO ₃ CONH ₂₂ KNO ₃									
0,482	0,46	0,058	312,9	0,459	0,482	0,059	306,83	0,22	1,72
NH ₄ NO ₃ NaNO ₃ KNO ₃									
0,728	0,182	0,09	391	0,774	0,194	0,032	391,5	0,13	0,03
KNO ₃ H ₂ O NH ₄ NO ₃									
0,003	0,854	0,144	255,1	0,051	0,813	0,137	254,5	0,2	0,23
NaNO ₃ H ₂ O NH ₄ NO ₃									
0,029	0,831	0,14	254,9	0,035	0,826	0,139	251,16	0,9	1,48
KNO ₃ H ₂ O NaNO ₃									
0,018	0,869	0,113	255	0,054	0,838	0,109	256,1	0,37	0,49
CaF ₂ BaF ₂ KCl									
0,035	0,067	0,898	1000	0,0463	0,0663	0,8874	999	0,02	0,1
NaF KCl K ₂ WO ₄									
0,171	0,53	0,299	890,8	0,202	0,574	0,225	874	0,81	1,89

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Моргунова О. Е., Трунин А. С. Электронный генератор фазовых диаграмм физико-химических систем. Самара: СамГТУ, 2006. 132 с.

Поступила 07.07.2006 г.