

СПОСОБ РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТА АКТИВНОСТИ И АКТИВНОСТИ КОМПОНЕНТОВ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ СПЛАВОВ

Рублинецкая Ю.В., Мощенская Е.Ю., Ростова М.Ю.

ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет»
443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244, Главный корпус,
кафедра «Аналитическая и физическая химия», july_rub@mail.ru

Предложен способ расчета коэффициентов активности и активности компонентов в процессе кристаллизации системы сплавов по параметрам, полученным в процессе моделирования кривой ликвидуса системы:

$$T_l = T_e + \frac{T_i - T_e}{1 + \frac{100 - C_i}{C_i - C_e} \frac{1}{f_{e,i}} \left(1 + \frac{100}{\sigma \sqrt{2\pi}} \frac{C_i - C_e}{100 - C_e} \right)} \quad (1);$$

$$T_l = T_e + \frac{T_i - T_e}{1 + \frac{100 - C_i}{C_i - C_e} \frac{1}{f_{e,i}}} \quad (2);$$

$$f_i = \frac{100 - C_{e,i}}{(C_i - C_{e,i}) + (100 - C_i) \left(\alpha \cdot 100 \cdot \frac{C_i - C_{e,i}}{100 - C_{e,i}} + \beta \right)}; \quad \beta = \frac{1}{f_{e,i}}; \quad \alpha = \frac{\beta}{\sigma \sqrt{2\pi}} \quad (3);$$

$$a_i = \frac{1}{1 + \frac{100 - C_i}{C_i - C_{e,i}}} \cdot f_i \quad (4);$$

где T_l – температура ликвидуса, °С, T_i – температура плавления чистого компонента, °С, T_e – температура эвтектики, °С, C_i , C_j – содержание компонентов в сплаве, % мол., C_e – состав эвтектики, % мол., f_i – активность компонента, σ_i характеризует распределение твердой фазы i -го компонента в жидкой фазе в процессе кристаллизации сплава¹.

Параметры распределения α и β находят методом математического моделирования².

Литература

1. Слепушкин В.В., Рублинецкая Ю.В. Локальный электрохимический анализ. – М.: Физматлит. 2010. – 312 с.
2. Мощенская Е.Ю., Слепушкин В.В. Журнал неорганической химии. 2015, том 60 № 1. с. 78-84.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках базовой части госзадания (проект № 4.7150.2017/ЧБ).