

Термодинамическая модель регулярных растворов с учетом параметра взаимодействия компонентов при различных температурах

Юркевич Н.П., Савчук Г.К.

Белорусский национальный технический университет

Целью данной работы является определение параметра взаимодействия атомов алюминия и кремния в термодинамической модели регулярных растворов при различных температурах.

С учетом параметра взаимодействия термодинамический потенциал Гиббса записывался в виде

$$F^m(x, T) = (1-x)F_i^m(T) + xF_j^m(T) + RT(x \ln x + (1-x) \ln(1-x)) + L^m x(1-x),$$

где $F_i^m(T)$, $F_j^m(T)$ – термодинамические потенциалы Гиббса жидких фаз i -го и j -го компонентов в m -ой фазе; x – атомная доля компонента j ; T – температура; R – универсальная газовая постоянная; L^m – параметр взаимодействия компонентов i и j в m -ой фазе. Расчетные данные для L^m приведены в таблице.

Расчетные значения параметров взаимодействия L^m в термодинамической модели расплавов

Si, %	L^m , Дж/моль		
	в твердом состоянии при $T = 500$ К	при температуре эвтектического превращения $T = 850$ К	в расплаве для $T = 1000$ К
0.001	15172.44	7168.25	2602.76
0.002	15173.24	7166.21	2608.88
0.005	15175.63	7160.07	2627.24
0.006	15176.43	7158.03	2633.35
0.007	15177.23	7155.98	2639.47
0.008	15178.82	7153.94	2645.59
0.009	15179.62	7151.89	2651.71
0.010	15179.62	7149.85	2657.83
0.012	15181.23	7145.76	2670.06
0.015	15182.61	7139.63	2688.41
0.016	15184.80	7136.56	2697.59

Представленные данные могут быть использованы для численного расчета и прогнозирования свойств α -твердых растворов при фазовых переходах в системе Al-Si с учетом взаимодействия атомов компонентов в расплаве при различных температурах.