

УДК 544.344.015.32

DOI 10.26456/vtchem2021.3.12

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДОВ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭВТЕКТИЧЕСКОГО СОСТАВА БИНАРНЫХ СПЛАВОВ

Е.Ю. Мощенская, Б.М. Стифатов

Самарский государственный технический университет, г. Самара

Рассмотрена возможность поиска эвтектического состава бинарных сплавов различными методами теоретическую математического моделирования. Проведена оценка применимости для этих целей методов Шредера-Ле-Шателье, Кордеса, Эпштейна-Хоуланда, А.В. Суворова на примере сплавов Cd-Bi и Sn-Bi.

Ключевые слова: моделирование, диаграмма состояния, эвтектика.

Легкоплавкие сплавы нашли широкое применение в различных областях науки и техники [1-4]. Обычно это сплавы эвтектического состава с температурой плавления ниже олова [5-9].

Поиск эвтектического состава сплавов проводят экспериментальным, экспериментально-теоретическим и теоретическим способами [10-15]. Экспериментальный способ заключается в измерении температуры охлаждения расплавов эталонных образцов исследуемого сплава с различным содержанием компонентов. Точность нахождения наиболее легкоплавкого (эвтектического) состава напрямую связана с числом исследованных образцов, причем число этих образцов с составом близким к приэвтектической области обычно особенно велико, а в некоторых случаях - огромно. Сочетание экспериментального исследования с математическим моделированием позволяет значительно сократить эксперимент, поскольку достаточным является нескольких уточняющих (реперных) экспериментальных точек, относительно которых математическим расчетом находится точка эвтектики как результат пересечения ветвей ликвидуса [15].

В работе рассмотрена эффективность известных методов теоретического моделирования на предмет оценки возможности их прямого использования и в сочетании с экспериментальными данными, а также сравнения с экспериментально-теоретическим методом моделирования, развиваемого сотрудниками кафедры «Аналитическая и физическая химия» Самарского государственного технического университета [16]. В качестве объектов исследования были выбраны бинарные сплавы Cd-Bi и Sn-Bi, диаграммы состояния которых «температура – состав» приведены в справочной литературе [17, 18] и

ранее исследовались методом локального электрохимического анализа (ЛЭА) [19, 20].

Уравнение Шредера – Ле-Шателье [15] используется для расчета ликвидуса двухкомпонентных систем и прогнозирования температуры и состава эвтектики в классическом физико-химическом анализе:

$$\ln x_i = \frac{\Delta H_{пл,i} (T_e - T_{пл,i})}{R \cdot T_e \cdot T_{пл,i}}, \quad i = \overline{1,2}, \quad (1)$$

где x_i – мольная доля i -го вещества в смеси; $\Delta H_{пл,i}$ – энтальпия плавления чистого i -го вещества; $T_{пл,i}$ – температура плавления чистого i -го вещества (°К); T_e – температура эвтектики (°К); R – универсальная газовая постоянная.

Решая систему уравнений Шредера – Ле-Шателье, записанных для каждого из компонентов системы, определяются характеристики эвтектики (температура, состав), затем проводится построение ликвидуса исследуемой системы.

Построение левой ветви ликвидуса с помощью уравнения (1) осуществляется расчетом температуры ликвидуса в интервале составов от 0 до x_e , правой – от x_e до 1 с шагом 0,1, используя термодинамические характеристики [21, 22]. Расчет и графическое отображение расчетных и экспериментальных данных для систем Cd-Vi и Sn-Vi можно видеть в табл. 1,2 и на рис. 1,2.

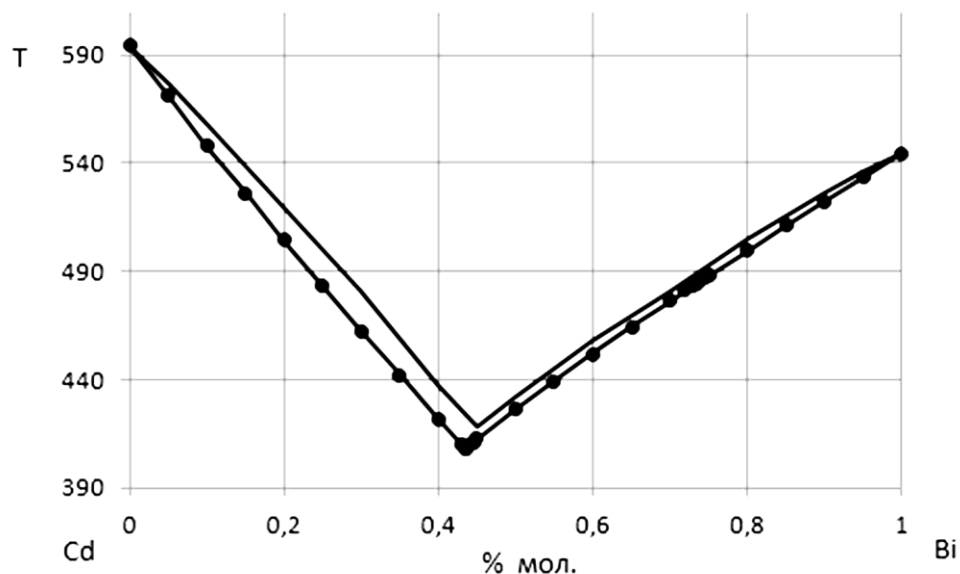


Рис. 1. Экспериментальная (—) и расчетная (●) линии ликвидуса для двухкомпонентной системы Cd-Vi, полученные по уравнениям (1)

Таблица 1

Расчет температур ликвидуса двухкомпонентных сплавов системы Cd-Bi

% мол Cd	t (справочные данные)	t (расчет по уравнению)	δ
0	271,442	271,442	0
5	263,3	260,5	1,06
10	253,3	249,4	1,54
20	232,3	226,7	2,41
30	208,1	203,3	2,31
40	185	178,9	3,3
50	159	153,1	3,71
55	145	139,4	3,86
60	165	149	9,7
70	208,3	189,4	9,07
80	247	231,3	6,36
90	285,5	275	3,68
95	303,3	297,7	1,85
100	321,108	321,108	0
Средняя ошибка аппроксимации, A			3,49

Координаты эвтектики – 43,5 % мол. Bi, $t=135,3$ °C, относительная погрешность по температуре – 6,5 %, абсолютная по составу – 1,5 %.

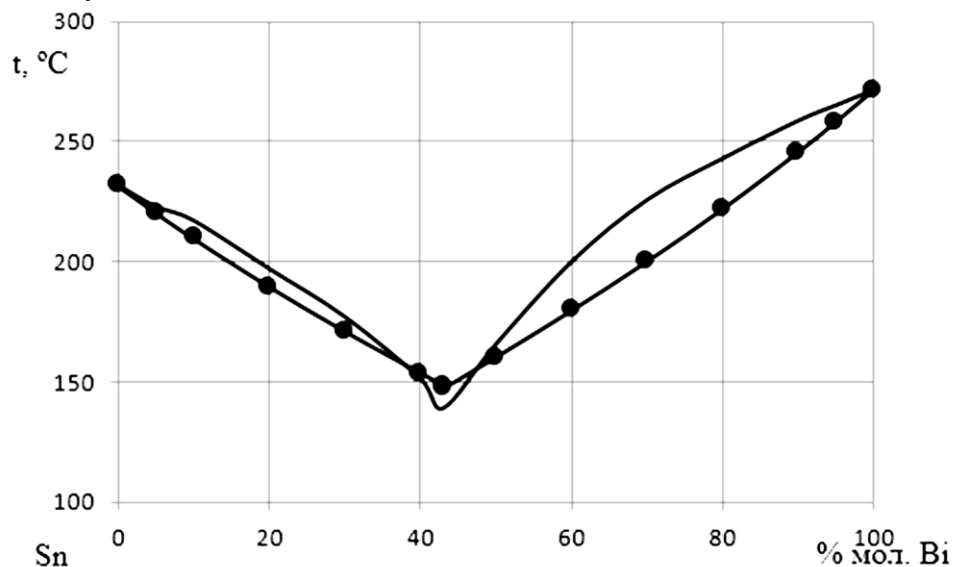


Рис. 2. Экспериментальная (—) и расчетная (●) линии ликвидуса для двухкомпонентной системы Sn-Bi, полученные по уравнениям (1)

Расчет температур ликвидуса двухкомпонентных сплавов системы Sn-Bi

% мол Bi	t (справочные данные)	t (расчет по уравнению)	δ
0	231,9	231,9	0
5	222,9	223,4675	0,25
10	217,1	215,1886	0,88
20	197,1	198,219	0,57
30	177,1	178,5592	0,82
40	151,4	150,8187	0,38
43	139	139	0
50	165,7	167,1419	0,87
60	200	198,7461	0,63
70	225,7	223,2171	1,1
80	242,9	242,6625	0,1
90	258,6	258,4349	0,06
95	265	265,2395	0,09
100	271,442	271,442	0
Средняя ошибка аппроксимации, А			0,41

Координаты эвтектики –38,0 % мол. Bi, $t=119,7$ °С, относительная погрешность по температуре – 13,9 %, абсолютная по составу – 7 %.

Недостатки метода: погрешность больше 5 %, ликвидус отличается.

Согласно эмпирическим формулам Кордеса отношение относительных эвтектических точек замерзания компонентов равно отношению мольных долей в эвтектике [15]:

$$\frac{(T_2 - T_e)/T_2}{(T_1 - T_e)/T_1} = \frac{x_1}{x_2} \quad (2)$$

Данная формула не дает представления о линии ликвидуса, но позволяет определить состав и температуру эвтектики. Расчет координат эвтектик для систем Cd-Bi и Sn-Bi приведены в табл. 3,4.

Таблица 3

Расчет температуры и состава эвтектики двухкомпонентных сплавов системы Cd-Bi по формуле Кордеса

Bi, %	$\frac{(T_2 - T_e)/T_2}{(T_1 - T_e)/T_1}$	x ₁ /x ₂	T _e
0,73	1,205414	0,369863	
0,72	1,207095	0,388889	
0,7	1,210404	0,428571	
0,65	1,218421	0,538462	
0,6	1,226169	0,666667	
0,55	1,233718	0,818182	
0,5	1,241095	1,000000	
0,45	1,248281	1,222222	
0,445	1,248987	1,247191	407,73
0,44	1,24969	1,272727	
0,435	1,25039	1,298851	
0,43	1,251088	1,325581	
0,4	1,255203	1,500000	
0,35	1,261714	1,857143	
0,3	1,267559	2,333333	
0,25	1,272312	3,000000	
0,2	1,275259	4,000000	
0,15	1,27515	5,666667	

Координаты эвтектики – 44,5 % мол. Bi, t=134,7 °C, относительная погрешность по температуре – 7,1 %, абсолютная по составу – 0,5 %.

Таблица 4

Расчет температуры и состава эвтектики двухкомпонентных сплавов системы Sn-Bi по формуле Кордеса

Bi, %	$\frac{(T_2 - T_e)/T_2}{(T_1 - T_e)/T_1}$	x ₁ /x ₂	T _e
0,3	0,810893	0,428571	
0,35	0,807015	0,538462	
0,4	0,803841	0,666667	
0,45	0,801316	0,818182	117,65
0,5	0,799425	1,000000	
0,55	0,798187	1,222222	
0,57	0,797885	1,325581	

Bi, %	$\frac{(T_2 - T_e)/T_2}{(T_1 - T_e)/T_1}$	x_1/x_2	Te
0,58	0,797778	1,380952	
0,59	0,797701	1,439024	
0,6	0,797655	1,500000	
0,62	0,797658	1,631579	
0,65	0,79792	1,857143	
0,7	0,799126	2,333333	
0,75	0,801493	3,00000	
0,8	0,805365	4,000000	
0,85	0,811323	5,666667	
0,9	0,820491	9,000000	
0,95	0,835788	19,00000	

Координаты эвтектики –45,0 % мол. Bi, $t = 117,7$ °С, относит. погрешность по температуре – 15,36 %, абсолютная по составу – 2 %.

Расчет кривых ликвидуса по уравнению Эпштейна – Хоуланда [16]. При отсутствии значений ΔH используется допущение Эпштейна – Хоуланда, выражающее зависимость между энтальпией плавления соединения и числом атомов n в молекуле:

$$T_{xA} = \frac{-T_A \cdot n_A}{\ln x_A - n_A}; T_{xB} = \frac{-T_B \cdot n_B}{\ln x_B - n_B} \quad (3)$$

$$\Delta S = \frac{\Delta H}{T} = n \cdot R \quad (4)$$

ΔH берется со знаком плюс. Подставив выражение (3) в формулу (2), получим уравнение для расчета кривых ликвидуса бинарных систем:

$$\ln x_A = \frac{(T_{xA} - T_A) \cdot n_A}{T_{xA}}; \ln x_B = \frac{(T_{xB} - T_B) \cdot n_B}{T_{xB}} \quad (5)$$

где n_A и n_B – число атомов в молекулярной формуле компонентов А и В соответственно. Вычислив T_{xA} и T_{xB} для заданных значений x_A и x_B , можно рассчитать ориентировочные значения ΔH . На рис. 3,4 и в табл. 5,6 можно видеть расчетные и экспериментальные данные для систем Cd-Bi и Sn-Bi.

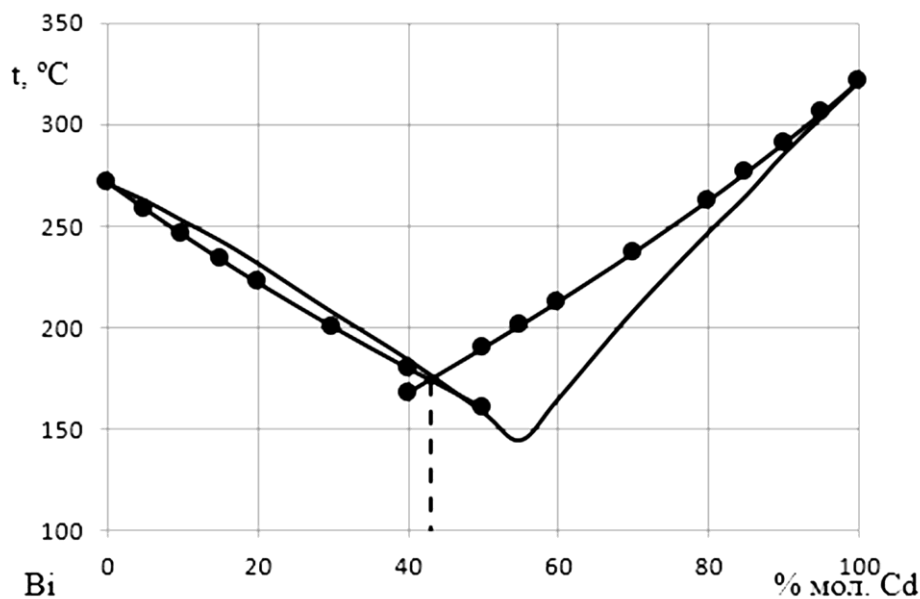


Рис.3. Экспериментальная (—) и расчетная (●) линии ликвидуса для двухкомпонентной системы Cd-Bi, полученные по уравнениям (5)

Таблица 5

Расчет температур ликвидуса двухкомпонентных сплавов системы Cd-Bi по уравнениям (5)

%Cd	$T_{ХCd}$	$T_{ХBi}$	δ	δ
0	-	271,442	0	-
5	80,363	258,198	1,94	-
10	97,229	245,569	3,05	-
15	110,837	233,495	4,11	-
20	123,056	221,922	4,47	-
30	145,695	200,079	3,85	-
40	167,567	179,665	2,88	-
50	189,652	160,318	0,83	-
55	200,964	150,926	4,09	38,6
60	212,538	141,65	-	28,81
70	236,687	123,16	-	13,63
80	262,527	104,023	-	6,29
85	276,217	93,694	-	4,23
90	290,501	82,191	-	1,75
95	305,441	67,933	-	0,71
100	321,108	-	-	0
Средняя ошибка аппроксимации, A			2,8	11,75

Координаты эвтектики – 42,9 % мол. Bi, $t=173$ °C, относительная погрешность по температуре – 19,31 %, абсолютная по составу – 12,1 %.

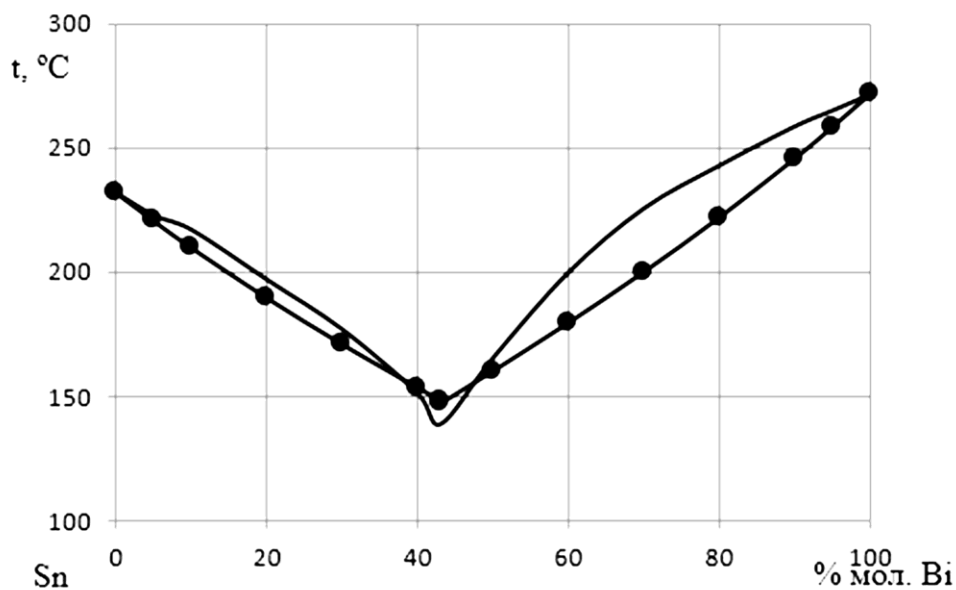


Рис. 4. Экспериментальная (—) и расчетная (●) линии ликвидуса для двухкомпонентной системы Sn-Bi, полученные по уравнениям (5)

Таблица 6

Расчет температур ликвидуса двухкомпонентных сплавов системы Sn-Bi по уравнениям (5)

%Bi	$T_{X_{Bi}}$	$T_{X_{Sn}}$	δ	δ
0	-	231,9	0	-
5	67,933	220,585	1,04	-
10	82,191	209,796	3,36	-
20	104,023	189,593	3,81	-
30	123,16	170,933	3,48	-
40	141,65	153,492	1,38	-
43	147,205	148,452	6,8	5,9
50	160,318	136,964	-	3,25
60	179,665	121,015	-	10,17
70	200,079	105,219	-	11,35
80	221,922	88,87	-	8,64
90	245,569	70,218	-	5,04
95	258,198	58,037	-	2,57
100	271,442	-	-	0
Средняя ошибка аппроксимации, А			2,84	5,87

Координаты эвтектики – 43,0 % мол. Вi, $t=147\text{ }^{\circ}\text{C}$, относительная погрешность по температуре – 5,76 %, абсолютная по составу – 0 %.

Недостатки метода: погрешность велика, ликвидус отличается, ошибка аппроксимации больше 5 %.

Расчет кривых ликвидуса по методу С.А. Суворова [16]. Приближенный расчет температур ликвидуса, состава и температуры эвтектики двухкомпонентной системы можно выполнить, используя эмпирические уравнения Суворова, в основе которых лежит учет соотношений между числом атомов в молекулярной формуле обоих компонентов. Исходными данными для расчета являются температуры плавления чистых компонентов А и В, число атомов в молекулярной формуле компонентов А и В (n_A и n_B) и число атомов N, равная сумме n_A и n_B . Для представленных металлических систем, при $n_A = n_B$, расчет

ведется по формуле:
$$\frac{x_{BE}}{x_{AE}} = \frac{T_A^2}{T_B^2} \quad (6)$$

С большим приближением температуру плавления эвтектики можно вычислить по формуле:
$$T_E = \sqrt{T_A \cdot T_B} - x_{AE} \cdot 1000 \quad (7)$$

Вычислив x_{AE} , x_{BE} и T_E , можно рассчитать значения ΔH_A и ΔH_B :

$$\Delta H_A = \frac{\ln x_{AE} \cdot RT_A T_E}{T_A - T_E}; \quad \Delta H_B = \frac{\ln x_{BE} \cdot RT_B T_E}{T_B - T_E} \quad (8)$$

По полученным данным для ΔH_A и ΔH_B рассчитывается температура ликвидуса для различных значений x_A и x_B . После расчета данные сводятся в таблицу и оформляются графически (рис.5-7, табл. 7-9).

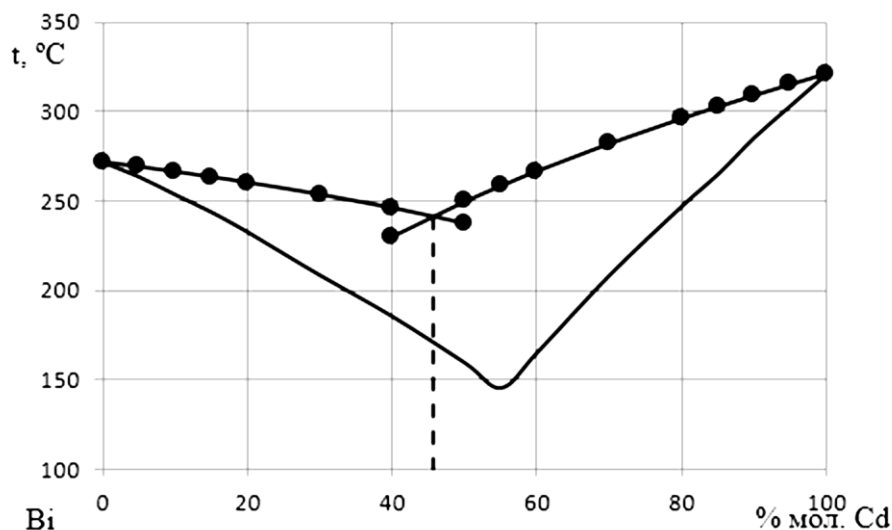


Рис. 5. Экспериментальная (—) и расчетная (●) линии ликвидуса для двухкомпонентной системы Cd-Bi, полученные по уравнениям (6), (7) с множителем 100

Таблица 7

Расчет температур ликвидуса двухкомпонентных сплавов системы Cd-Bi по уравнениям (6), (7) с сомножителем 100

%Cd	T_{Cd}	T_{Bi}	t_{Cd}	t_{Bi}	δ	δ
0	-	544,44	-	271,44	0	-
5	373,062	541,785	100,062	268,785	2,08	-
10	408,203	539,015	135,203	266,015	5,02	-
15	432,008	536,117	159,008	263,117	8,06	-
20	450,653	533,077	177,653	260,077	11,96	-
30	479,843	526,501	206,843	253,501	21,82	-
40	502,957	519,109	229,957	246,109	33,03	-
50	522,479	510,63	249,479	237,63	49,45	21,33
55	531,286	505,855	258,286	232,855	60,59	78,13
60	539,591	500,621	266,591	227,621	-	61,57
70	554,958	488,283	281,958	215,283	-	35,36
80	568,995	471,891	295,995	198,891	-	19,84
85	575,606	460,912	302,606	187,912	-	14,19
90	581,98	446,279	308,98	173,279	-	8,22
95	588,141	423,304	315,141	150,304	-	3,9
100	594,108	-	321,108	-	-	0
Средняя ошибка аппроксимации, А					21,33	27,65

Координаты эвтектики – 54,3 % мол. Bi, $t=241,0$ °С, относительная погрешность по температуре – 66,21 %, абсолютная по составу – 0,7 %.

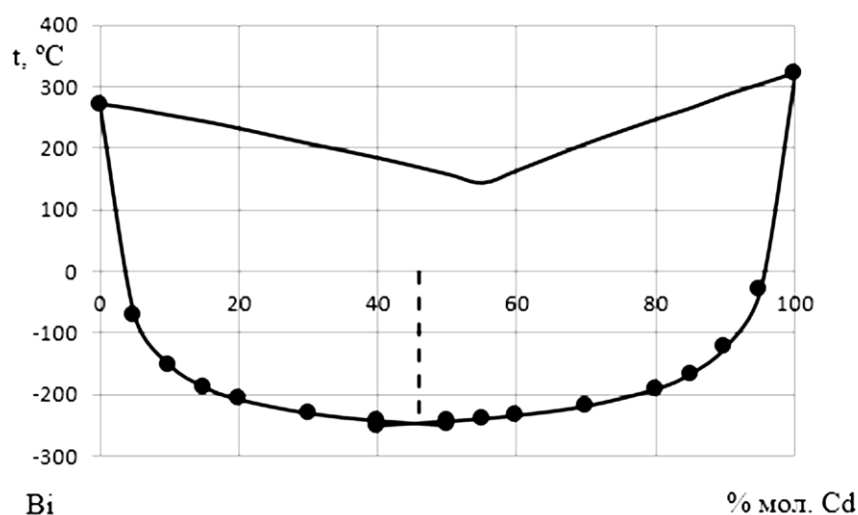


Рис. 6. Экспериментальная (—) и расчетная (●) линии ликвидуса для двухкомпонентной системы Cd-Bi, полученные по уравнениям (6), (7) с сомножителем 1000

Таблица 8

Расчет температур ликвидуса двухкомпонентных сплавов системы Cd-Bi по уравнениям (6), (7) с множителем 1000

%Cd	TCd	TBi	tCd	tBi	δ	δ
0	-	544,44		271,44	0	-
5	6,949	202,15	-266,051	-70,85	126,91	-
10	9,009	121,58	-263,991	-151,42	159,78	-
15	10,899	85,538	-262,101	-187,462	176,99	-
20	12,805	65,076	-260,195	-207,924	189,51	-
30	16,994	42,62	-256,006	-230,38	210,71	-
40	22,13	30,479	-250,87	-242,521	231,09	-
50	28,908	22,798	-244,092	-250,202	257,36	265,34
55	33,259	19,899	-239,741	-253,101	274,55	242,09
60	38,556	17,423	-234,444	-255,577	-	205,27
70	53,713	13,362	-219,287	-259,638	-	177,55
80	81,449	10,058	-191,551	-262,942	-	162,87
85	106,391	8,557	-166,609	-264,443	-	143,23
90	149,577	7,07	-123,423	-265,93	-	109,96
95	242,806	5,45	-30,194	-267,55	-	0
100	594,108	-	321,108		-	265,34
Средняя ошибка аппроксимации, A					180,77	163,29

Координаты эвтектики – 54,1 % мол. Bi, $t=-247,3$ °C, относительная погрешность по температуре – 270,55 %, абсолютная по составу – 0,9 %.

Таблица 9

Расчет температур ликвидуса двухкомпонентных сплавов системы Sn-Bi по уравнениям (6), (7) с множителем 100

%Bi	TBi	TSn	tBi	tSn	δ	δ
0	-	504,9	-	231,9	0	-
5	338,2242	501,8637	65,22424	228,8637	2,68	-
10	370,7131	498,7024	97,71313	225,7024	3,96	-
20	410,1069	491,9518	137,1069	218,9518	11,09	-
30	437,2891	484,5163	164,2891	211,5163	19,43	-
40	458,8684	476,2074	185,8684	203,2074	34,22	-
43	464,6324	473,5054	191,6324	200,5054	44,25	37,87
50	477,1316	466,7405	204,1316	193,7405	-	23,19
60	493,1692	455,6541	220,1692	182,6541	-	10,08
70	507,5945	442,1153	234,5945	169,1153	-	3,94

%Bi	TBi	TSn	tBi	tSn	δ	δ
80	520,7901	424,3446	247,7901	151,3446	-	2,01
90	533,0123	397,0612	260,0123	124,0612	-	0,55
95	538,817	373,0743	265,817	100,0743	-	0,31
100	544,442	-	271,442	-	-	0
Средняя ошибка аппроксимации, A					16,52	9,74

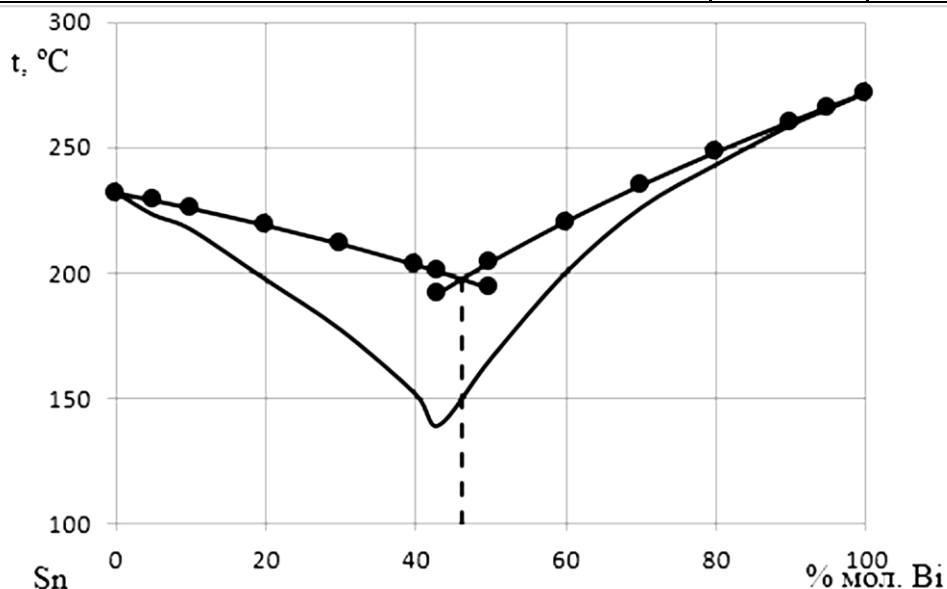


Рис. 7. Экспериментальная (—) и расчетная (●) линии ликвидуса для двухкомпонентной системы Sn-Bi, полученные по уравнениям (5), (6) с множителем 100

Координаты эвтектики – 46,3 % мол. Bi, $t=197,0$ °C, относительная погрешность по температуре – 41,72 %, абсолютная по составу – 10,7 %.

Недостатки метода: метод не подходит для расчета ликвидуса двойных металлических систем, т.к. при вычислении температуры эвтектики используется слагаемое, которое включает в себя произведение мольной доли на 1000, а температуры плавления чистых металлов не превышают 600 градусов Кельвина, поэтому получается отрицательное значение температуры эвтектики. Авторы попробовали сделать расчет, используя множитель 100, но результат все равно получился плохой, может быть нужно подбирать данный множитель для металлических систем в пределах от 300 до 500 для получения удовлетворительного результата.

Для сравнения было проведено моделирование тех же диаграмм состояния экспериментально-расчетным методом, разрабатываемый в течение ряда лет сотрудниками кафедры «Аналитическая и физическая химия» [10-14].

Фазовая диаграмма «состав-температура» двухкомпонентного гетерогенного сплава может быть представлена как зависимость температуры ликвидуса от состава сплава, соответственно для каждой ветви ликвидуса:

для сплавов Cd-Bi, для Cd:

$$t_l = \frac{t_{Cd}}{1 + \frac{C_{Bi}}{C_{Cd}} \cdot (a_{Cd}^{Cd-Bi} \cdot C_{Cd} + b_{Cd}^{Cd-Bi})} \quad (9)$$

$$\text{и для Bi: } t_l = \frac{t_{Bi}}{1 + \frac{C_{Cd}}{C_{Bi}} \cdot (a_{Bi}^{Cd-Bi} \cdot C_{Bi} + b_{Bi}^{Cd-Bi})} ; \quad (10)$$

для сплавов Sn-Bi, для Sn:

$$t_l = \frac{t_{Sn}}{1 + \frac{C_{Bi}}{C_{Sn}} \cdot (a_{Sn}^{Sn-Bi} \cdot C_{Sn} + b_{Sn}^{Sn-Bi})} \quad (11)$$

$$\text{и для Bi: } t_l = \frac{t_{Bi}}{1 + \frac{C_{Sn}}{C_{Bi}} \cdot (a_{Bi}^{Sn-Bi} \cdot C_{Bi} + b_{Bi}^{Sn-Bi})} ; \quad (12)$$

где t_l – температура ликвидуса, °C; C_{Cd} , C_{Sn} , C_{Bi} – содержание компонентов в сплаве (% мол.); t_i – температура плавления i -го компонента, °C; $a_{Me_k}^{Me_i-Me_j}$ (a) и $b_{Me_k}^{Me_i-Me_j}$ (b), $k = \overline{i, j}$ – параметры распределения фаз в матрице двухкомпонентных сплавов $Me_i - Me_j$.

Пересечение этих линий соответствует температуре и составу эвтектики. Решая систему двух уравнений (2)-(3) и (4)-(5), наложив дополнительное условие: сумма концентраций в сплаве всегда равна 100%: $C_{Me_i} + C_{Me_j} = 100, i \neq j; i, j = \overline{1, 2}$, можно определить состав и температуру эвтектики.

Параметры распределения a и b найдены методом математического моделирования: для вычисления значений которых

вычисляются значения функции $f_{Me_i} = \frac{T_{Me_i}}{T_i}, i = \overline{1, 2}$, затем

коэффициент рассеивания $K_{Me_i} = \frac{1 - f_{Me_i}}{f_{Me_i} \cdot \frac{C_{Me_j}}{C_{Me_i}}}, i \neq j; i, j = \overline{1, 2}$, после чего

находятся уравнения прямой регрессии вида: $y + ax + b = 0$ методом наименьших квадратов (сумма расстояний от которой до точек с координатами $M_i (C_i, K_i)$ – минимальна), коэффициенты данного уравнения – искомые a и b .

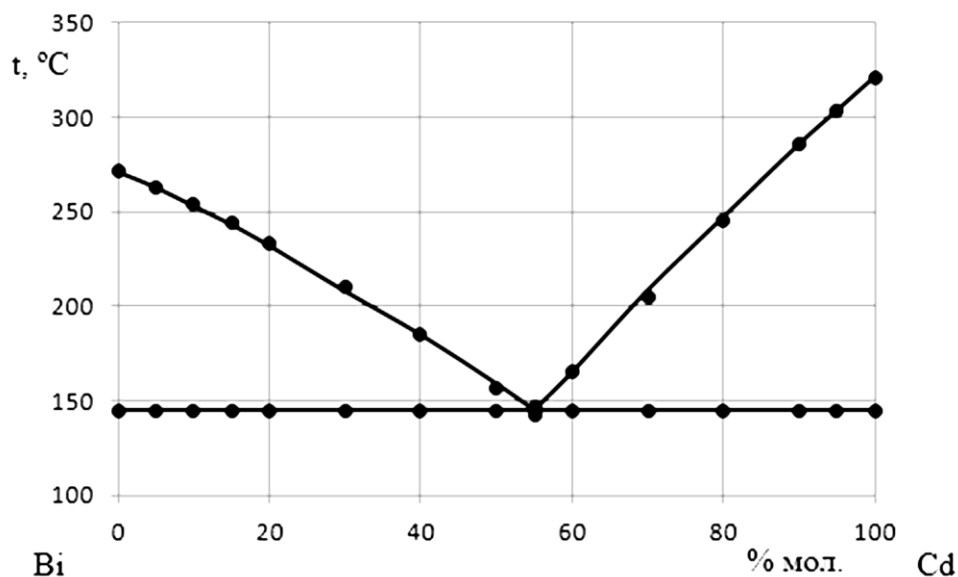


Рис. 8. Экспериментальная (—) и расчетная (●) линии ликвидуса для двухкомпонентной системы Cd-Bi, полученные по уравнениям (9), (10)

Таблица 10
Расчет температур ликвидуса двухкомпонентных сплавов системы Cd-Bi по уравнениям (8), (9)

% мол. Cd	$t_e, ^\circ\text{C}$		
	Справочные данные [2]	Расчет по уравнениям (2)-(3)	Относительная погрешность, %
0	271,442	271,442	0
5	263,3	262,9	0,15
10	253,3	253,7	0,16
20	232,3	233,3	0,43
30	208,1	210,3	1,06
40	185	184,9	0,05
50	159	157,2	1,13
55	145	144,4	0,41
60	165	165,5	0,3
70	208,3	205,2	1,49
80	247	245,9	0,45
90	285,5	285,3	0,07
95	303,3	303,8	0,16
100	321,108	321,108	0
Средняя ошибка аппроксимации, A			0,42

Координаты эвтектики – 45,57 % мол. Bi, $t=144,4$ °C, относительная погрешность по температуре – 0,4 %, абсолютная по составу – 0,57 %.

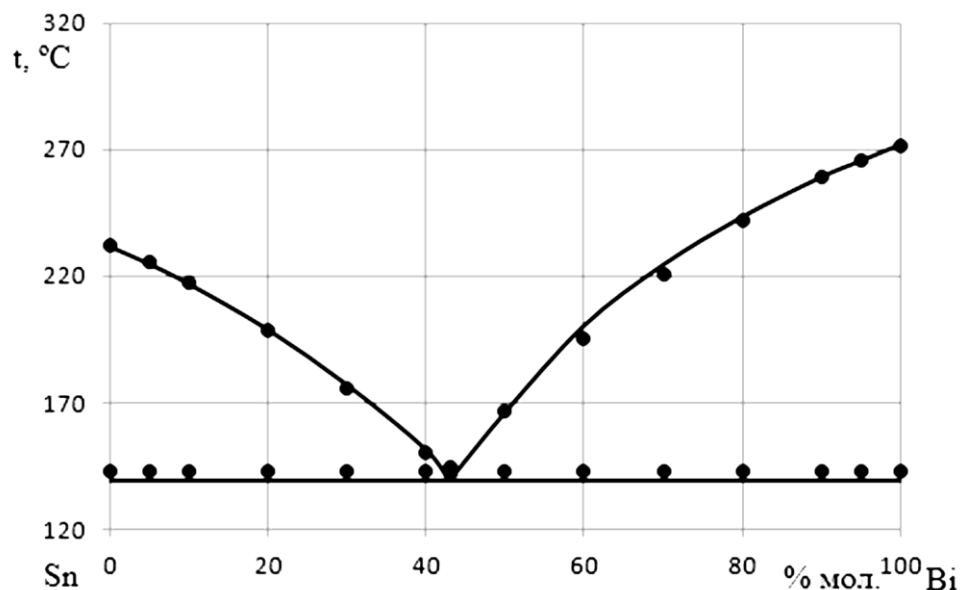


Рис. 9. Экспериментальная (—) и расчетная (●) линии ликвидуса для двухкомпонентной системы Sn-Bi, полученные по уравнениям (11), (12).

Таблица 11

Расчет температур ликвидуса двухкомпонентных сплавов системы Sn-Bi по уравнениям (11), (12)

% мол. Bi	$t_{es}, ^\circ\text{C}$		
	Справочные данные [2]	Расчет по уравнениям (13)-(14)	Относительная погрешность, %
0	231,9	231,9	0
5	222,9	223,9	0,45
10	217,1	215,3	0,83
20	197,1	196,5	0,3
30	177,1	175,6	0,85
40	151,4	152,9	0,99
43	139	145,5	4,68
50	165,7	168,3	1,57
60	200	198	1
70	225,7	223,6	0,93
80	242,9	244,4	0,62
90	258,6	260,3	0,66
95	265	266,4	0,53
100	271,442	271,4	0,02
Средняя ошибка аппроксимации, A			0,96

Координаты эвтектики –43,0 % мол. Bi, $t=145,6$ °C, относительная погрешность по температуре – 4,7 %, абсолютная по составу – 0 %.

Чтобы иметь общее суждение о качестве модели из относительных отклонений по каждому наблюдению была определена

средняя ошибка аппроксимации: $A = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \cdot 100, \%$ (табл. 1-4).

При A до 5%, можно говорить о хорошем качестве модели. Данные параметры были использованы в дальнейших расчетах.

Полученные результаты показывают преимущество расчетно-экспериментального метода перед расчетными методами (табл.12).

Таблица 12

Сравнение расчетных методов двухкомпонентных сплавов систем Sn-Bi и Cd-Bi

Использованные уравнения и экспериментальные данные	Двойная система			
	Cd-Bi		Sn-Bi	
	% мол. Bi	$T_e, ^\circ\text{C}$	% мол. Bi	$T_e, ^\circ\text{C}$
Расчет по уравнению Шредера–Ле-Шателье	38,0	119,7	43,5	135,3
Погрешность, абс.по составу, относит.по температуре	7	13,9	1,5	6,5
Расчет по уравнению Кордеса	44,5	134,7	45	117,7
Погрешность, абс.по составу, относит.по температуре	0,5	7,1	2,0	15,4
Расчет по уравнению Эпштейна – Хоуланда	43,6	175	43,0	147
Погрешность, абс.по составу, относит.по температуре	11,4	20,67	0	5,76
Расчет по методу С. А. Суворова	54,1	241,0	46,3	197,0
Погрешность, абс.по составу, относит.по температуре	0,9	66,21	10,7	41,72
Расчет по уравнениям (8-11)	45,57	144,4	43	145
Погрешность, абс.по составу, относит.по температуре	0,57	0,4	0	4,7
Экспериментальные данные [17,18]	45	145	43	147

Список литературы

1. Скачков В.М., Пасечник Л.А., Яценко С.П. Легкоплавкие нетоксичные сплавы - матрицы композиционных составов для неразъемных соединений разнородных материалов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2019. № 11. С. 654-664
2. Столярова О.О. Обоснование состава и структуры литейных антифрикционных алюминиевых сплавов, легированных легкоплавкими металлами. / Диссертация на соискание учёной степени кандидата технических наук. Москва. 2016. 217 с.
3. Ellwood E.C. Aluminium-tin bearing alloys: a new bouding method. // Tin and its uses. 1956 № 36. pp 9–10.

4. Brenner P. Postwar European. Proddress in wrought Aluminium and its alloys. // Metal Progress. 1954. V. 65, №1 pp 112–115.
5. Wood D.B. Solid Aluminium Bearings. // Prod. Eng., 1960, 31, № 27 pp 42-47.
6. Данилин В.Н., Доценко С.П., Бурцев В.А., Мелехин Л.Ф. Применение легкоплавких сплавов на основе висмута и олова в оборудовании пищевых предприятий// Известия высших учебных заведений. Пищевая технология. 1997. №2-3, С. 73
7. Раджабалиев С.С. Ганиев И.Н., Амонов И.Т., Норова М.Т. Потенциодинамическое исследование сплава $Al+2,18\%Fe$, легированного оловом и висмутом. // Известия СГТИ, 2016, № 35(61), С. 22–25
8. Синявский В.С. и др. Влияние добавок олова на коррозионное и электрохимическое поведение алюминия. // Защита металлов. 1987, Т.23, №5, С.801–805
9. Гребенчиков Р.В., Попов А.Н., Колесников В.А., Угрюмова Е.С. Исследование электроосаждения блестящих покрытий сплавом олово-висмут для процессов производства печатных плат по субтрактивной технологии // Гальванотехника и обработка поверхности. 2017. №1. С.55–59
10. Мощенская Е.Ю., Гаркушин И.К. Расчет характеристик четверных эвтектик // Известия ВУЗов. Химия и химическая технология. Иваново: ИХТУ, 2009. Т.52. № 11. С. 62–65.
11. Мощенская Е.Ю., Гаркушин И.К. Алгоритмы расчета характеристик четверных эвтектик // X Международное Курнаковское совещание по физико-химическому анализу. Пермь. 2010. С. 223
12. Мощенская Е.Ю., Слепушкин В.В. Построение ретроградных кривых ликвидуса двойных эвтектических систем // Журнал неорганической химии, 2016, том 61, № 3, С. 1–5
13. Мощенская Е.Ю., Слепушкин В.В., Рублинецкая Ю.В., Кашкаров Б.И. Способ моделирования диаграмм состояния двухкомпонентных эвтектических систем сплавов // Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология. 2015. т.58 (3), С. 38-42
14. Аносов В.Я., Озерова М.И., Фиалков Ю.Я. Основы физико-химического анализа. М.: Наука, 1976. 504 с.;
15. Мощенская Е.Ю., Слепушкин В.В. Способ построения кривых ликвидуса двойных эвтектических систем// Журнал неорганической химии, 2015, Т. 60, № 1, С. 78–84
16. Альмяшев В. И., Кириллова С. А. Диаграммы состояния – научная основа физико-химического конструирования новых материалов: учеб. пособие. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2018. 78 с
17. Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник: в 3 т.: Т.1 / под общ. Ред. Н.П. Лякишева. – М.: Машиностроение, 1996. 992 с. ISBN 5-217-02688-X.
18. Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник: в 3 т.: Т.2 / под общ. Ред. Н.П. Лякишева. М.: Машиностроение, 1997. 1024 с. ISBN 5-217-01569-1.

19. Рублинецкая Ю.В., Слепушкин В.В., Мощенская Е.Ю., Суськина Е.Л. Локальный электрохимический анализ как метод исследования металлов, сплавов, порошковых и композиционных материалов. // XVI Международная конференция «Физика прочности и пластичности материалов». Самара. 2006 г., С.145.
20. Слепушкин В.В., Рублинецкая Ю.В. Локальный электрохимический анализ. / М.: Физматлит. 2010. 312 с.;
21. Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник: справ.изд./ под ред. А.А. Потехина и А.И. Ефимова. 3-е изд., перераб и доп. Л.: Химия, 1991. 432 с. ISBN 5-7245-0703-Х.
22. John A. Dean Lange's Handbook Of Chemistry. Fifteenth Edition. McGRAW-HILL, INC.1999 ISBN 0-07-016384-7.

Об авторах:

МОЩЕНСКАЯ Елена Юрьевна –кандидат химических наук, доцент, доцент кафедры аналитической и физической химии, Самарский государственный технический университет, г. Самара, Молодогвардейская ул., 244, e-mail: lmos@rambler.ru

СТИФАТОВ Борис Михайлович –кандидат химических наук, доцент, доцент кафедры аналитической и физической химии Самарский государственный технический университет, г. Самара, Молодогвардейская ул., 244, e-mail: stifatov_bm@mail.ru

INVESTIGATION OF THE POSSIBILITY OF USING THEORETICAL MODELING METHODS TO DETERMINE THE EUTECTIC COMPOSITION OF BINARY ALLOYS

E.Yu. Moshchenskaya, B.M. Stifatov

Samara State Technical University, Samara, Russia

The possibility of searching for the eutectic composition of binary alloys by various methods of theoretical mathematical modeling is considered. An assessment of the applicability for these purposes of the methods of Schroeder-Le-Chatelier, Cordes, Epstein-Howland, A.V. Suvorov on the example of alloys Cd-Bi and Sn-Bi.

Keywords: modeling, state diagram, eutectic.