

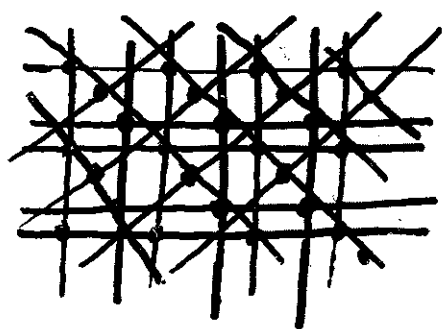
# Více mřížkový model fáze

(1980, Švédsko): Bo Sundman, J. Ågren: J. Phys. Chem. Solids, vol. 42, 297-301, 1981

Př.: soustava Fe-Cr-Ni-C, fáze - sigma (G)

Kryst. mřížka:

polohy trojitého druhu  $(Fe, Ni)_3 Cr_4 (Fe, Ni)_{18}$



podmíčka složka stech. koef.

|   |    |    |    |    |
|---|----|----|----|----|
| 1 | Fe | Ni |    | 8  |
| 2 |    | Cr |    | 4  |
| 3 | Fe | Cr | Ni | 18 |

obecný vztah vyjadřující Gibbsovou energii libovolní fáze:

$$G(T, slož) = \sum_I G_I^p(Y) + RT \sum_P \sum_j \gamma_j^p \ln \gamma_j^p + \sum_{z \geq 0} \sum_I L_{zI} P_{zI}(Y) + G_{mag.} \quad (2)$$

referenční hladina  
Gibbsovy energie

id. entropie míšení  
složek v podmřížkách

G<sup>E</sup>

příspěvek daný mg.  
vlastnostmi fáze

Y,  $\gamma$  ... určují chem. složení fáze (Y - matice mřížkových molárních podílů  $\gamma$ )

$G_I, L_{zI}, L_{12}$  ... termod. parametry fáze závislé jen na teplotě fáze

Integrovaná podmínka fázové rovnováhy

$$G^{soust.} = \sum_{i=1}^F p_i G^i(T, slož) \quad (1) \quad \begin{array}{l} \text{podmíněná} \\ \text{minimalizace } G^{soust.} \\ \text{(vhodná num. metoda + PC)} \end{array}$$

za dodržení podmínky: zachování hmoty a stechiometrie  
hledáme takovou kombinaci proměnných (složení fází) tak,  
aby  $G^{soust.}$  byla minimální.

Výsledkem je:  $p_i$  a složení fází ( $p_i = 0$  pokud ex. fáze  $k=i$  není  
v soustavě za daných podmínek  $T, slož.$  možná)

## Vlastnosti teoretického modelu

1. Princip hierarchie: úplný soubor t. p. všech fází existujících v dané soustavě ( $G_1, L_1, L_2$ ) obsahuje t. p. podsoustav doplněný o specifické t. p. soustavy.
2. Princip predikce: již znalost t. p. podsoustav postačuje k provedení kvalitní predikce hranic fázových oblastí soustavy vyššího řádu.
3. Fenomenologický princip: pokud se predikované hodnoty liší od experimentálních, je možné je odstranit zavedením specifických t. p. soustav (měření či optimalizací).
4. Princip omezení konvergence: s ~~přibývajícím~~ počtem složek roste počet možných fází, ale snižují se příspěvky interakcí vyššího řádu.

### Programové vybavení

Soubor programů "FD<sup>tt</sup>-pp" pro výpočty fázových rovnováh:

uživatelské  
prostředí  
(C++)

+

Vlastní program  
- int. p. f. rovnováhy,  
- (vicemřížkový model  
(F77))

+

Numerická  
metoda  
(systém  
"UFO")

Lit:

"TDCOMP" (manuál), VZ 822/691, ÚFM, 1991

(Sopoušek, Kroupa)  
Dojiva