

Algoritmus výpočtu rovn. fáz. složení (technické soustavy Fe-C-C)

složky: Fe, C_c, C ($s=3$)

stabilní fáze:	Uhlíková soust.	nové fáze binátů
(500 - 1800 K) (Fe převládá)	Fe (bcc, fcc, l) Cr (bcc, l) C (grafit)	Fe-C (G) Fe-C M ₃ C Cr-C M ₇ C ₃ , M ₂₃ C ₆
	Nově tvořit: Ø	(viz princip konvergence)

=) 8 možných fází' ($j=8$)

Max. počet koex. fází: $f_{\max} = s+2 = 5$

pokud $\mu, T = \text{konst}$: $f'_{\max} = 5-2 = \underline{\underline{3}}$

Postup „výpočtu fáz. rovnovahy soustavy“ (1. tie-angle)

Metoda:

Integrální podm. fázové rovnovahy
+ více místkový model fází

Představa: 1 mol směsi složek o $x_i = \frac{n_i}{n_c} = c_{hi}$, $\mu = 101325 \text{ Pa}$, $T = x \text{ K}$

a) $G_{\text{celk}} = \sum_i^1 \mu \cdot \overset{1}{h}_i + \sum_i^2 \mu \cdot \overset{2}{h}_i + \sum_i^3 \mu \cdot \overset{3}{h}_i + \dots j=8$

b, start $\sum_i^1 h_i$ \downarrow $\sum_i^2 h_i$ \downarrow $\sum_i^3 h_i$ \downarrow

c, viz model $f(\overset{1}{h}_1, \dots, \overset{1}{h}_s)$ $f(\overset{2}{h}_1, \dots, \overset{2}{h}_s)$ $f(\overset{3}{h}_1, \dots, \overset{3}{h}_s)$

d) hledání vázaného minima (podm: zach. hmoty, stechiom.)

e) Minima G_{celk} $\overset{1}{\mu} \neq 0$ $\overset{2}{\mu} = 0$ $\overset{3}{\mu} \neq 0$
(fáze je stab.) (fáze je nestab.)

f, výpočet $\dot{x}_i = \dot{z}_i n_i$ g, zanesení do diagramu
h, opakování pro jiné x_i i, tedy fáz. diagramu.