

¹Н.З.Нурғали*, ¹О.Р.Сариев, ²М.С. Алмагамбетов, ²М.С.Досекенов,
¹Б.С. Келаманов, ³Е.Б. Тажиев

¹Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан

²ТОО «Научно-исследовательский инжиниринговый центр ERG», Казахстан

³Satbayev University, Алматы, Казахстан

*e-mail.ru: n.nurgali@yandex.kz

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ЛИНИЙ МОНОВАРИАНТНЫХ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ В БИНАРНОЙ СИСТЕМЕ Cr-Fe

Аннотация. В данной статье показана применимость осмотического коэффициента Бьеррума-Гуттенгейма для расчета особенностей полей кристаллизации бинарной системы Cr-Fe. Для определения применимости осмотического коэффициента Бьеррума-Гуттенгейма на базе диаграммы состояния системы Cr-Fe в дополнение к ранее проведенным расчетам были рассчитаны теплоты растворения и коэффициенты активности хрома и железа в расплаве Cr-Fe с атомным содержанием хрома в интервале 0-100% при температурах от 2103 К до 1780 К (со стороны хрома) и от 1812 К до 1780 К (со стороны железа).

Проведенный расчет предполагает положительные отклонения системы Cr-Fe от закона Рауля, также и в случае применения осмотического коэффициента, что подтверждает достоверность и адекватность подхода с позиции концепции Бьеррума-Гуттенгейма при извлечении информации из диаграмм состояний.

Следует отметить, что расчеты на базе регулярных растворов в основном можно применять для систем, не образующих ряд твердых растворов, что также является одним из недостатков указанной методики.

Ключевые слова: диаграмма Cr-Fe, термодинамика, фаза, коэффициент Бьеррума-Гуттенгейма, закон Рауля, рафинированный феррохром.

Введение. Теория идеальных растворов в применении к жидкому и твердому растворам дает возможность описать только диаграмму состояния типа «сигары» (рисунок 1). Рассмотрение данной фазовой диаграммы показывает, что добавление компонента В к компоненту А приводит к увеличению температуры плавления последнего, тогда как добавление А к В, наоборот снижает температуру плавления.

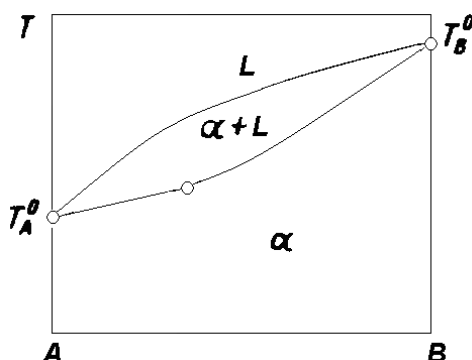


Рисунок 1. Диаграмма состояния бинарной системы с неограниченной растворимостью в жидкой и твердой фазах

Материалы и методы. При условии (а) твердая фаза устойчива в среднем диапазоне концентраций, тогда как жидкая фаза устойчива в областях составов, прилегающих к компонентам А и В [1]. При условии (б) в среднем диапазоне концентраций устойчива

жидкая фаза, а в областях, прилегающих к компонентам А и В, устойчив твердый раствор. В точках max и min составы жидкой и твердой фаз равны, т.е.

$$X_B^L = X_B^S$$

Такие диаграммы ещё называют диаграммами состояния с неограниченной растворимостью, как в жидком, так и в твердом состоянии с точкой равных концентраций. Как известно, термодинамическая классификация растворов основана на характере уравнений для химических потенциалов компонентов раствора. В идеальном растворе для каждого компонента справедливо выражение:

$$\mu_i^{\text{id}}(T, P, X) = \mu_i^0(T, P) + RT \ln X_i, \quad (1)$$

где μ_i^0 - стандартный химический потенциал i -того вещества в стандартном состоянии; X_i - мольная концентрация i -компонента в данном растворе; член $RT \ln X_i$ - соответствует изменению химического потенциала в результате смешения (при образовании идеального раствора).

По аналогии с уравнением (1) зависимость химических потенциалов неидеального (реального) раствора от концентрации можно записать в виде:

$$\mu_i(T, P, X) = \mu_i^0(T, P) + RT \ln \gamma_i X_i, \quad (2)$$

где γ_i - коэффициент активности.

Общее условие идеальности заключается в том, что для идеального раствора во всей области концентраций выполняется условие:

$$\gamma_i(T, P, X_1, \dots, X_{k-1}) = 1 \quad (i = 1, 2, \dots, k) \quad (3)$$

полуэмпирические зависимости для расчета линий ликвидуса и солидуса каждой кристаллизующейся фазы рассматриваемой системы:

$$\ln X_i^L = \frac{\Delta H_{m,i}}{R} \left(\frac{1}{T_{m,i}} - \frac{1}{T} \right) \frac{1}{\Phi_i''} \quad (4)$$

$$\ln X_i^S = \frac{\Delta H_{m,i}}{R} \left(\frac{1}{T_{m,i}} - \frac{1}{T} \right) \cdot \left(\frac{1}{\Phi_i''} - \frac{1}{\Phi_i'} \right) \quad (5)$$

Прямолинейный характер изменения величин Φ_i' и Φ_i'' чаще обнаруживается в системах, в расплавах которых преобладает только ван-дер-ваальсовские силы взаимодействия между элементарными структурными единицами. Когда же в расплавах будет иметь место образование различных группировок (ассоциатов) из исходных элементов или, наоборот, диссоциация изучаемого соединения, то коэффициент Бьеррума-Гуттенгейма описывается зависимостью:

$$\Phi_i = A_i + B_i \cdot a_i^{L(S)} + C_i / (a_0 - a_i^{L(S)}) \quad (6)$$

Аналогично вышеприведенным расчетам на базе диаграммы состояния системы Cr-Fe были рассчитаны коэффициенты активности хрома и железа в расплаве Cr-Fe с позиции концепции Бьеррума-Гутгенгейма [4-6]. Исходные данные приведены в таблицах 1 и 2.

Здесь необходимо отметить, что преимущество использования коэффициента активности состоит в том, что он позволяет сохранить формальное сходство выражений термодинамических свойств реальных растворов с уравнениями для неидеальных растворов. Коэффициент активности растворителя в противоположность коэффициентам активности растворенных компонентов из чисто арифметических соображений не является наиболее подходящей функцией для измерения отклонений от идеальности. Поэтому для растворителя удобнее вместо коэффициента активности использовать другой поправочный фактор, называемый осмотическим коэффициентом Бьеррума – Гутгенгейма.

Таблица 1. Исходные данные железа в системе Fe-Cr вычисленные по уравнениям 4-6

№	$X_{O_{Fe}}^{(L)}$	T, K	$\ln a_{Fe}$	$\ln X_{O_{Fe}}^{(L)}$	Φ_i	$\ln \gamma_i$	γ	a_{Fe}	$X_{Fe} \text{ баз}$	$a_{Fe \text{ баз}}$
1	1	1811	0	0	0	0	1	1	1	1
2	0,983	1803	-0,00448	-0,01715	0,26106	0,01267	1,012751	0,995534	0,9	0,911475
3	0,959	1793	-0,01013	-0,04186	0,24191	0,031736	1,032245	0,989923	0,8	0,825796
4	0,935	1783	-0,01584	-0,06721	0,23572	0,051366	1,052708	0,984282	0,7	0,736896
5	0,905	1773	-0,02162	-0,09982	0,21660	0,078198	1,081337	0,97861	0,6	0,648802
6	0,89	1768	-0,02454	-0,11653	0,21054	0,091998	1,096362	0,975762	0,5	0,548181
7	0,88	1763	-0,02747	-0,12783	0,2148	0,100367	1,105576	0,972907	0,4	0,44223
8	0,869	1758	-0,03041	-0,14041	0,2166	0,109998	1,116276	0,970044	0,3	0,334883
9	0,855	1753	-0,03338	-0,15665	0,21307	0,123275	1,131196	0,967173	0,2	0,226239
10	0,834	1748	-0,03636	-0,18152	0,20030	0,145162	1,156227	0,964294	0,1	0,115623
11	0,825	1743	-0,03936	-0,19237	0,20459	0,153014	1,165341	0,961407	0	0

Основной особенностью системы Cr-Fe, имеющей важную практическую зависимость, является наличие сигма-фазы [7-11]. Хром с железом образует непрерывный ряд твердых и жидких растворов с минимумом при 30 % Fe и 70 % Cr при температуре 1507°C. Область γ -фазы полностью замыкается при 13 % Cr. Как видно из диаграммы (рисунок 3), температуры ликвидуса и солидуса (1505°C) совпадают при 22 % Cr. При $\leq 820^\circ\text{C}$ в интервале 30-60 % Cr существует твердая и хрупкая δ -фаза мольного состава.

Таблица 2. Исходные данные хрома в системе Fe-Cr вычисленные по уравнениям 4-6

№	$X_{O_{Cr}}^{(L)}$	T, K	$\ln a_{Cr}$	$\ln X_{O_{Cr}}^{(L)}$	Φ_i	$\ln \gamma_i$	γ	a_{Fe}	$X_{Cr} \text{ баз}$	$a_{Cr \text{ баз}}$
1	1	2103	0	0	0	0	1	1	1	1
2	0,91	2053	-0,029	-0,09431	0,3089667	0,065172	1,067342	0,971282	0,9	0,960608
3	0,87	2013	-0,053	-0,13926	0,38411157	0,08577	1,089556	0,947913	0,8	0,871644
4	0,81	1973	-0,078	-0,21072	0,37411048	0,131888	1,140981	0,924194	0,7	0,798686
5	0,775	1933	-0,105	-0,25489	0,41281164	0,14967	1,161451	0,900124	0,6	0,69687
6	0,705	1893	-0,132	-0,34956	0,37970086	0,21683	1,242133	0,875704	0,5	0,621067
7	0,67	1853	-0,161	-0,40048	0,4030676	0,239058	1,270052	0,850935	0,4	0,508021
8	0,6	1813	-0,191	-0,51083	0,3746442	0,319448	1,376367	0,82582	0,3	0,41291
9	0,5	1793	-0,206	-0,69315	0,29843341	0,486289	1,62627	0,813135	0,2	0,325254
10	0,33	1783	-0,214	-1,10866	0,19368265	0,893934	2,444728	0,80676	0,1	0,244473
11	0,23	1773	-0,222	-1,46968	0,15152179	1,246988	3,479846	0,800365	0	0

На рисунке 2 и 3 представлены рассчитанные по предлагаемой методике активности железа и хрома в системе Fe-Cr.

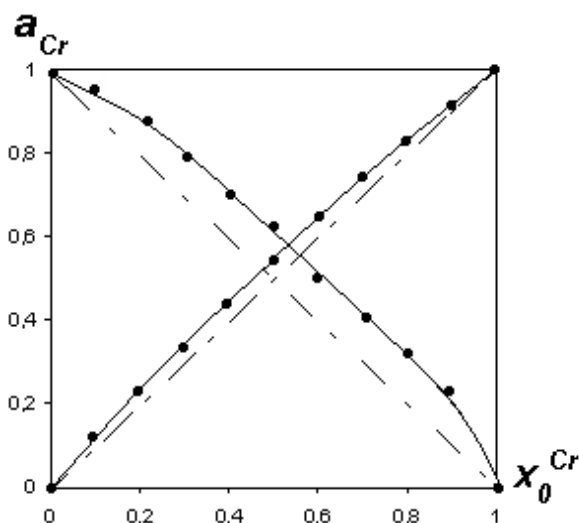


Рисунок 2. Результаты расчета активности железа и хрома

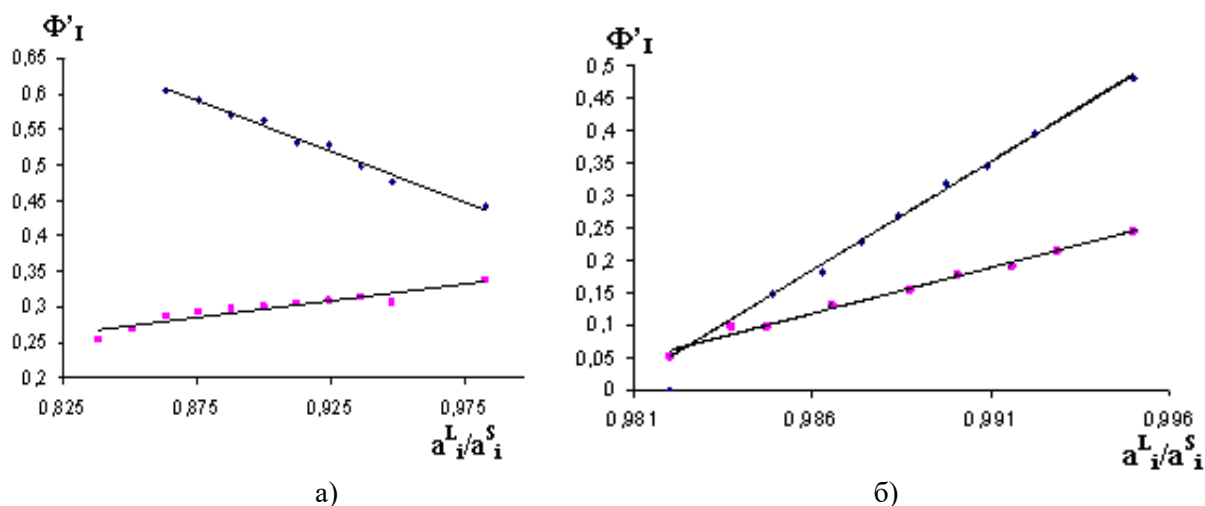


Рисунок 3. Область кристаллизации Cr (а) и Fe (б) в системе Cr-Fe

Для определения применимости осмотического коэффициента Бьеррума-Гуттенгейма на базе диаграммы состояния системы Cr-Fe (рисунок 4) в дополнение к ранее проведенным расчетам были рассчитаны теплоты растворения и коэффициенты активности хрома и железа в расплаве Cr-Fe с атомным содержанием хрома в интервале 0-100% при температурах от 2103 К до 1780 К (со стороны хрома) и от 1812 К до 1780 К (со стороны железа). Расчеты были проведены с помощью математического аппарата теории регулярных растворов.

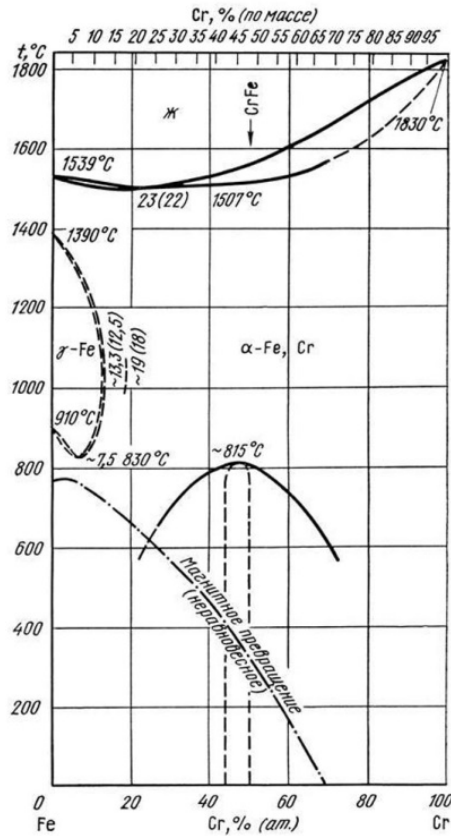


Рисунок 4. Диаграмма состояния системы Cr-Fe [5]

Результаты и обсуждение. Основопологающим допущением теории регулярных растворов является то, что энтропия смешения компонентов в таком растворе описывается уравнением идеальной системы, а энтальпия считается отличной от нуля. В жидко-твердой области химические потенциалы компонентов в жидкой и твердой фазах при температуре T , соответствующие равновесию фаз, одинаковы: $\mu_i^{ст,(ж)} + RT \ln a_i^{(ж)} = \mu_i^{ст,(ТВ)} + RT \ln a_i^{(ТВ)}$. В качестве стандартного состояния выбираем чистый компонент i в жидком и твердом состояниях соответственно для жидкой [$\mu_i^{ст,(ж)} = \mu_i^{о,(ж)}$] и твердой [$\mu_i^{ст,(ТВ)} = \mu_i^{о,(ТВ)}$] фаз. Учитывая, что $\mu_i^{о,(ж)} = \mu_i^{о,(ТВ)} + \Delta H_{пл(i)} - T\Delta S_{пл(i)} = \mu_i^{о,(ТВ)} + \Delta H_{пл(i)} \cdot (1 - T/T_{пл(i)})$ и $a_i = \gamma_i x_i$, получим следующие уравнения для компонентов бинарного сплава:

$$\left. \begin{aligned} \Delta H_{пл(1)}(1 - T/T_{пл(1)}) + RT \ln x_1^{(ж)} + RT\gamma_1^{(ж)} &= RT \ln x_1^{(ТВ)} + RT\gamma_1^{(ТВ)} \\ \Delta H_{пл(2)}(1 - T/T_{пл(2)}) + RT \ln x_2^{(ж)} + RT\gamma_2^{(ж)} &= RT \ln x_2^{(ТВ)} + RT\gamma_2^{(ТВ)} \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Температура T в двухфазной области и соответствующие ей составы равновесных фаз (точки $x_i^{(ж)}$ и $x_i^{(ТВ)}$) определяются из диаграммы состояния. В системе уравнений (1) являются неизвестными четыре величины: коэффициенты активности железа и хрома в жидкой и твердой фазах.

Для их определения необходимы еще два уравнения. Из приближения теории регулярных растворов для каждой равновесной твердой и жидкой фаз парциальные энтальпии смешения компонентов выражается следующими соотношениями [8-12]:

$$\Delta H^{L(S)}_1 = RT^{L(S)} \gamma_1 = (1 - x^{L(S)}_1)^2 \Omega^{L(S)}; \quad (8)$$

$$\Delta H^{L(S)}_2 = RT^{L(S)} \gamma_2 = (1 - x^{L(S)}_2)^2 \Omega^{L(S)}; \quad (9)$$

где Ω - энергия обмена компонентов в соответствующей фазе, которая является основным параметром теории [Дж/моль].

С учетом выражений (8) и (9) уравнение (10) преобразуется к виду:

$$\left. \begin{aligned} \Delta H_{\text{пл}(1)}(1-T/T_{\text{пл}(1)})+RT \ln x_1^{(\text{ж})}+(1-x_1)^2 \Omega^{(\text{ж})} &= RT \ln x_1^{(\text{тв})}+(1-x_1^{(\text{тв})})^2 \Omega^{(\text{тв})} \\ \Delta H_{\text{пл}(2)}(1-T/T_{\text{пл}(2)})+RT \ln x_2^{(\text{ж})}+(1-x_2)^2 \Omega^{(\text{ж})} &= RT \ln x_2^{(\text{тв})}+(1-x_2^{(\text{тв})})^2 \Omega^{(\text{тв})} \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Таблица 3. Расчетные значения (γ) и ΔH железа и хрома по диаграмме Cr-Fe

Исходные данные			Результаты расчета	
для железа				
$X_{\text{Fe}}^{(\text{ж})}$	$X_{\text{Fe}}^{(\text{тв})}$	$\Omega_{\text{Fe}}^{(\text{ж})}$ Дж/моль	(γ_{Fe})	ΔH_{Fe} , Дж/моль
0,98	0,99	4623	1,0000	0,92
0,92	0,97	3120	1,0006	9,36
0,865	0,935	2210	1,001	22,1
для хрома				
$X_{\text{Cr}}^{(\text{ж})}$	$X_{\text{Cr}}^{(\text{тв})}$	$\Omega_{\text{Cr}}^{(\text{ж})}$ Дж/моль	(γ_{Cr})	ΔH_{Cr} , Дж/моль
0,955	0,988	566,6	1,00002	0,4
0,91	0,975	3387,7	1,0006	10,16
0,87	0,96	2391	1,0009	16,74
0,84	0,94	1114	1,0008	13,37
0,81	0,925	2393	1,02	359
0,775	0,9	7716,3	1,01	231,48
0,74	0,88	3553	1,0008	142,12
0,705	0,85	4016	1,02	321,28
0,67	0,825	3434,8	1,01	206
0,635	0,795	2022,2	1,16	242,66
0,6	0,765	6832,7	1,04	683,3
0,55	0,725	9720	1,24	3499,2
0,5	0,685	7207	1,2	2883
0,44	0,63	1041,4	1,15	2083
0,37	0,55	7423,7	1,069	1484,5
0,23	0,35	6751	1,2	3375,5

Система уравнений (7) содержит две неизвестные величины и легко разрешаются относительно $\Omega^{(\text{ж})}$ и $\Omega^{(\text{тв})}$ [13]. Результаты расчетов коэффициентов активностей и теплота растворения согласно системе уравнений (10) приведены в таблице 3.

Выводы. Проведенный расчет предсказывает положительные отклонения системы Cr-Fe от закона Рауля также, как и в случае применения осмотического коэффициента, что подтверждает достоверность и адекватность подхода с позиции концепции Бьеррума-Гуттенгейма при извлечении информации из диаграмм состояний.

Следует отметить, что расчеты на базе регулярных растворов в основном можно применять для систем, не образующих ряд твердых растворов, что также является одним из недостатков указанной методики.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Baisanov S. Phase equilibrium thermodynamics in binary systems // Proceedings of INFACON XIII - 13th International Ferrous Alloys Congress: Efficient Technologies in Ferrous Alloy Industry, 2020, pp. 605-620.
- [2] Агеев Н.В. Расчеты и экспериментальные методы построения диаграмм состояния. - М.: Наука, 1985. - 184 с.
- [3] Морачевский А.Г. Термодинамика расплавленных металлических и солевых систем. - М.: Metallurgiya, 1987. - 240 с.
- [4] Алмагамбетов М.С., Байсанов С.О., Абдулабеков Е.Э. и др. Фазовое состояние процесса плавки рафинированных сортов феррохрома // Межд. научно-практ. конф. посв. 80-летию Е.А. Букетова / «Академик Е.А. Букетов – ученый, педагог, мыслитель» - Караганды, 2005 - Т-3.- С.-314-321.
- [5] Байсанов С.О., Нурумгалиев А.Х., Абишев Д.Н. Закономерности фазового равновесия твердое – жидкость в бинарных неизоморфных системах // ДАН СССР. – 1986. – Т.289, №6. – С.1399-1403.
- [6] Толоконникова В.В., Байсанов С.О., Куликов И.С. Обобщенные уравнения линии солидуса и ликвидуса в двойных системах на основе железа // Металлы. – 1989. – №2. – С.34-37.
- [7] Кубашевски О. Диаграммы состояния двойных систем на основе железа: Справочное издание. Пер. с англ. М., Metallurgiya, 1985, 184 с.
- [8] Григорян В.А., Стомахин А.Я., Пономаренко А.Г. и др. Физико-химические расчеты электросталеплавильных процессов: Уч. пособие для ВУЗов. М., Metallurgiya, 1989, 288 с.
- [9] Акбердин А.А. Балансовый метод расчета равновесного фазового состава многокомпонентных систем // КИМС. - 1995. - №3. - С. 92-93
- [10] Akberdin A., Kim A., Sultangaziyev R., Karbayev M. Thermodynamic modeling of the borbarium ferroalloy smelting technological process // Metalurgija, 2020, 59(3), pp. 333-336
- [11] Oskembekov, I.M., Kasenov, B.K. Calculations of the thermodynamic properties of rare-earth metal ferrites doped with alkaline-earth metals // Russian Journal of Physical Chemistry A, 2002, 76(12), С. 1930-1932.
- [12] Kelamanov, B., Samuratov, Y., Zhumagaliyev, Y., Akuov, A., Sariev, O. Titanium and chrome oxides system thermodynamic diagram analysis // Metalurgija, 2020, 59(1). - pp. 101-104.
- [13] Алмагамбетов М.С., Байсанов С.О., Нурмали Н.З. и др. Расчет термодинамических характеристик сплавов системы Cr-Fe на базе её диаграммы состояния. // Тез. докл. Межд. научно-практическая конференция. «Жидкость на границе раздела фаз - теория и практика» / Караганды, 2006. - С.605-607.

REFERENCES

- [1] Baisanov S. Phase equilibrium thermodynamics in binary systems // Proceedings of INFACON XIII - 13th International Ferrous Alloys Congress: Efficient Technologies in Ferrous Alloy Industry, 2020, pp. 605-620.
- [2] Ageyev N.V. Raschety i eksperimental'nyye metody postroyeniya diagramm sostoyaniya [Calculations and experimental methods for constructing state diagrams]. - M.: Nauka, 1985. - 184 s.
- [3] Morachevskiy A.G. Termodinamika rasplavlennykh metallicheskich i solevykh system [Thermodynamics of molten metal and salt systems]. - M.: Metallurgiya, 1987. - 240 s.
- [4] Almagambetov M.S., Baysanov S.O., Abdulabekov Ye.E. i dr. Fazovoye sostoyaniye protsessa plavki rafinirovannykh sortov ferrokroma [Phase state of the process of smelting refined ferrochrome grades] // Mezhd. nauchno-prakt. konf. posv. 80-letiyu Ye.A. Buketova / «Akademik Ye.A. Buketov – uchenyy, pedagog, myslitel'» - Karagandy, 2005 - T-3.- S.-314-321.
- [5] Baysanov S.O., Nurumgaliyev A.X., Abishev D.N. Zakonomernosti fazovogo ravnovesiya tverdoye - zhidkost' v binarnykh neizomorfnykh sistemakh [Regularities of solid-liquid phase equilibrium in binary non-isomorphic systems] // DAN SSSR. – 1986. – T.289, №6. - S.1399-1403.
- [6] Tolokonnikova V.V., Baysanov S.O., Kulikov I.S. Obobshchennyye uravneniya linii

solidus i likvidusa v dvoynykh sistemakh na osnove zheleza [Generalized equations of the solidus and liquidus lines in binary systems based on iron] // *Metally*. – 1989. – №2. – S.34-37.

[7] Kubashevski O. Diagrammy sostoyaniya dvoynykh sistem na osnove zheleza [Diagrams of Binary Systems Based on Iron]: Spravochnoye izdaniye. Per. s angl. M., Metallurgiya, 1985, 184 s.

[8] Grigoryan V.A., Stomakhin A.YA., Ponomarenko A.G. i dr. Fiziko-khimicheskiye raschety elektrostaleplavil'nykh protsessov [Physical and chemical calculations of electric arc furnace processes]: Uchebnoye-posobiye dlya VUZov. M., Metallurgiya, 1989, 288 s.

[9] Akberdin A.A. Balansovyy metod rascheta ravnovesnogo fazovogo sostava mnogokomponentnykh system [Balance method for calculating the equilibrium phase composition of multicomponent systems] // *KIMS*. - 1995. - №3. - S. 92-93.

[10] Akberdin A., Kim A., Sultangaziyev R., Karbayev M. Thermodynamic modeling of the Pborbarium ferroalloy smelting technological process // *Metalurgija*, 2020, 59(3)- P. 333-336

[11] Oskembekov, I.M., Kasenov, B.K. Calculations of the thermodynamic properties of rare-earth metal ferrites doped with alkaline-earth metals // *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2002, 76(12)- P. 1930-1932

[12] Kelamanov, B., Samuratov, Y., Zhumagaliyev, Y., Akuov, A., Sariev, O. Titanium and chrome oxides system thermodynamic diagram analysis // *Metalurgija*, 2020, 59(1). - pp. 101-104.

[13] Almagambetov M.S., Baysanov S.O., Nurgali N.Z. i dr. Raschet termodinamicheskikh kharakteristik splavov sistemy Cr-Fe na baze yeyo diagrammy sostoyaniya [Calculation of thermodynamic characteristics of alloys of the Cr-Fe system on the basis of its state diagram] // *Tez. dokl. Mezhd. nauchno-prakticheskaya konferentsiya. «Zhidkost' na granitse razdela faza -teoriya i praktika» / Karagandy*, 2006. - S.605-607.

¹Н.З. Нургали*, ¹О.Р. Сариев, ²М.С. Алмагамбетов, ²М.С. Досекенов,

¹Б.С. Келаманов, ³Е.Б. Тажиев

¹Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан

²«ERG- дің ғылыми-зерттеу және инжиниринг орталығы» ЖШС, Қазақстан

³Satbayev University, Алматы, Қазақстан

*e-mail.ru: n.nurgali@yandex.kz

Cr-Fe ЕКІЛІК ЖҮЙЕСІНДЕГІ БІРНҰСҚАЛЫҚ ФАЗАЛЫҚ ТЕПЕ-ТЕҢДІК СЫЗЫҚТАРЫНЫҢ ҚАЛЫПТАСУ ЗАҢДЫЛЫҚТАРЫ

Аңдатпа. Бұл мақалада Cr-Fe екілік жүйесінің кристалдану өрістерінің ерекшеліктерін есептеу үшін Бьеррум-Гуггенгеймнің осмотикалық коэффициентінің қолданылуы көрсетілген. Бьеррум-Гуггенгейм осмотикалық коэффициентінің қолданылуын анықтау үшін Cr-Fe жүйесінің жай-күйінің диаграммасы негізінде бұрын жүргізілген есептеулерге қосымша 2103 К-ден 1780 К-ге дейінгі (хром жағынан) және 1812 К-ден 1780 К-ге дейінгі (темір жағынан) температура кезінде 0-100% аралықтағы хромның атомдық құрамы бар Cr-Fe балқымасындағы хром мен темірдің белсенділік коэффициенттері мен еру жылулары есептелді.

Жүргізілген есептеу Cr-Fe жүйесінің Рауль заңынан оң ауытқуын, сондай-ақ осмотикалық коэффициентті қолдану жағдайында болжайды, бұл мемлекеттік диаграммалардан ақпарат алу кезінде Бьеррум-Гуггенгейм тұжырымдамасы тұрғысынан көзқарастың сенімділігі мен жеткіліктілігін растайды.

Айта кету керек, тұрақты ерітінділерге негізделген есептеулерді негізінен бірқатар қатты ерітінділерді құрмайтын жүйелер үшін қолдануға болады, бұл да осы техниканың кемшіліктерінің бірі болып табылады.

Негізгі сөздер: Cr-Fe диаграммасы, термодинамика, фаза, Бьеррум-Гуггенгейм коэффициенті, Рауль Заңы, тазартылған феррохром.

¹N.Z. Nurgali*, ¹O.R. Sariyev, ²M.S. Almagambetov, ²M.S. Dossekenov,
¹B.S. Kelamanov, ³Ye.B. Tazhiyev

¹Aktobe Regional University named after K. Zhubanov, Aktobe, Kazakhstan

²LLP «ERG Research and Engineering Center», Kazakhstan

³Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

*e-mail.ru: n.nurgali@yandex.kz

REGULARITIES OF FORMATION OF LINES OF MONO-VARIANT PHASE EQUILIBRIA IN THE BINARY Cr-Fe SYSTEM

Abstract. This paper shows the applicability of the Bjerrum-Guggenheim osmotic coefficient for calculating the features of the crystallization fields of the Cr-Fe binary system. To determine the applicability of the Bjerrum-Guggenheim osmotic coefficient, the dissolution heats and activity coefficients of chromium and iron in a Cr-Fe melt with an atomic content of chromium in the range of 0-100% were calculated on the basis of the Cr-Fe system state diagram, in addition to the previously performed calculations, at temperatures from 2103 K to 1780 K (on the chromium side) and from 1812 K to 1780 K (on the iron side).

The calculation predicts positive deviations of the Cr-Fe system from Raoult's law, as well as in the case of the osmotic coefficient, which confirms the reliability and adequacy of the approach from the perspective of the Bjerrum-Guggenheim concept when extracting information from state diagrams.

It should be noted that calculations based on regular solutions can mainly be used for systems that do not form a series of solid solutions, which is also one of the disadvantages of this method.

Keywords: Cr-Fe diagram, thermodynamics, phase, Bjerrum-Guggenheim coefficient, Raoult's law, refined ferrochrome.