

ТОРАЙҒЫРОВ УНИВЕРСИТЕТІНІҢ
ҒЫЛЫМИ ЖУРНАЛЫ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
ТОРАЙҒЫРОВ УНИВЕРСИТЕТА

**ҚАЗАҚСТАН ҒЫЛЫМЫ
МЕН ТЕХНИКАСЫ**

2001 ЖЫЛДАН БАСТАП ШЫҒАДЫ



**НАУКА И ТЕХНИКА
КАЗАХСТАНА**

ИЗДАЕТСЯ С 2001 ГОДА

ISSN 2788-8770

№ 4 (2023)

ПАВЛОДАР

**НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
ТОРАЙГЫРОВ УНИВЕРСИТЕТ**
выходит 1 раз в квартал

СВИДЕТЕЛЬСТВО

о постановке на переучет периодического печатного издания,
информационного агентства и сетевого издания
№ KZ51VPY00036165

выдано

Министерством информации и общественного развития
Республики Казахстан

Тематическая направленность

Публикация научных исследований по широкому спектру проблем
в области металлургии, машиностроения, транспорта, строительства,
химической и нефтегазовой инженерии, производства продуктов питания

Подписной индекс – 76129

<https://doi.org/10.48081/PWGH3542>

Импакт-фактор РИНЦ – 0,210

Импакт-фактор КазБЦ – 0,406

Абишев Кайратолла Кайроллинович – к.т.н., профессор (главный редактор);
Касенов Асылбек Жумабекович – к.т.н., профессор (заместитель главного редактора);
Мусина Жанара Керейовна – к.т.н., профессор (ответственный секретарь);
Шокубаева Зауреш Жанатовна – технический редактор.

Члены редакционной коллегии:

Калиакпаров Алтай Гиндуллинович – д.т.н., профессор (Нур-Султан, Казахстан);
Клецель Марк Яковлевич – д.т.н., профессор (Павлодар, Казахстан);
Шеров Карибек Тагаевич – д.т.н., профессор (Караганда, Казахстан);
Богомоллов Алексей Витальевич – к.т.н., ассоц. профессор (Павлодар, Казахстан);
Кажыбаева Галия Тулеуевна – к.т.н., профессор (Павлодар, Казахстан);

Зарубежные члены редакционной коллегии:

Vaigang Sun – профессор (Пекин, Китай);
Gabriele Comodi – PhD, профессор (Анкона, Италия);
Jianhui Zhao – профессор (Харбин, Китай);
Khamid Mahkamov – д.т.н., профессор (Ньюкасл, Великобритания);
Magin Lapuerta – д.т.н., профессор (СьюДад Реал, Испания);
Mareks Mezitis – д.т.н., профессор (Рига, Латвия);
Petr Bouchner – PhD, профессор (Прага, Чехия);
Ronny Berndtsson – профессор (Лунд, Швеция);
Барзов Александр Александрович – д.т.н., профессор (Москва, Россия);
Витвицкий Евгений Евгеньевич – д.т.н., профессор (Омск, Россия);
Иванчина Эмилия Дмитриевна – д.т.н., профессор (Томск, Россия);
Лазарев Владислав Евгеньевич – д.т.н., профессор (Челябинск, Россия);
Мягков, Леонид Львович – д.т.н., профессор (Москва, Россия);
Янюшкин Александр Сергеевич – д.т.н., профессор (Чебоксары, Россия);
Ребезов Максим Борисович – д.с/х.н., профессор (Москва, Россия).

За достоверность материалов и рекламы ответственность несут авторы и рекламодатели
Редакция оставляет за собой право на отклонение материалов
При использовании материалов журнала ссылка на журнал «Наука и техника Казахстана» обязательна

© Торайгыров университет

***A. A. Myrzagaliyev¹, S. O. Baisanov², N. Z. Nurgali³,
Ye. U. Zhumagaliyev⁴, N. A. Ulmaganbetov⁵**

^{1,3,5}ERG Research and Engineering Center LLP, Republic of Kazakhstan, Astana;

²Chemical-Metallurgical Institute named after Zh. Abishev,
Republic of Kazakhstan Karaganda;

⁴Aktobe Regional University named after K. Zhubanov,
Republic of Kazakhstan, Aktobe

*e-mail: Aibar.Myrzagaliyev@erg.kz

DETERMINATION OF THE THERMODYNAMIC PARAMETERS OF A-IRON IN BINARY SYSTEMS FE-CR AND FE-TI

This article presents the results of calculations of the thermodynamic parameters of binary Fe-Cr and Fe-Ti systems based on their state diagrams using the Bjerrum-Guggenheim osmotic coefficient, for the region of iron crystallization from the iron activity of an ideal α - γ solution for the above systems.

When calculating the lines of phase equilibrium in the Fe-Cr and Fe-Ti systems, it was established that the Bjerrum-Guggenheim coefficient can serve as an assessment parameter characterizing the role of exchange forces between atoms, and by its dimension ($\Phi_i > < 1$) one can qualitatively judge the nature of the intermolecular interactions in the system. The results of this work made it possible to correctly solve the direct Gibbs problem, namely, to obtain an analytical dependence of phase compositions on temperature at phase equilibria based on the laws of phase formation. It is shown that with the help of the Bjerrum-Guggenheim osmotic coefficient (F_i), the real equilibrium in the system under study can be determined in detail and their correct analytical expression can be obtained.

When calculating phase equilibrium lines in systems with different types of interaction between components, it was established that the Bjerrum-Guggenheim coefficient can serve as an assessment parameter characterizing the role of exchange forces between atoms.

Keywords: thermodynamics; Bjerrum-Guggenheim coefficient; state diagram; osmotic coefficient; binary systems.

Introduction

State diagrams clearly reflect the nature of the interaction of components in the melt, its phase composition and the structure of the alloys under conditions of stable thermodynamic equilibrium. Consequently, they contain all the fundamental and important information about the thermodynamic properties of phases and components.

The solution to the inverse Gibbs problem is to extract the thermodynamic information contained in the phase diagram, subject to the correct solution of the mathematical problem of phase equilibria.

Materials and methods

We have solved the first stage of the inverse Gibbs problem, i.e. a modified Schroeder-Le Chatelier equation was obtained, which allows one to analytically describe the liquidus and solidus lines. In this regard, let us consider the derivation of analytical expressions for the partial excess enthalpy ($\Delta H^{M(E)}$) and entropy (ΔS^E) of mixing of the liquidus component in systems with the relation $\Phi_i = A_i + B_i \cdot a_i$.

The difference between the thermodynamic mixing function G_m for a real solution and the value of this function for an ideal solution G at the same T and p is called the excess thermodynamic function.

$$\Delta G_i^E = RT \ln j_i \quad (1)$$

The relationship between the activity coefficient and the Bjerrum-Guggenheim coefficient is established as follows:

$$\Phi_i = \frac{\Delta G_{mi}^{S \rightarrow L}}{\Delta G_{mi}^{id}} = \frac{\Delta \mu_i^L - \Delta \mu_i^S}{\Delta \mu_{i,id}^L - \Delta \mu_{i,id}^S} = \frac{\ln(a_i^L/a_i^S)}{\ln(x_i^L/x_i^S)} = 1 + \frac{\ln \gamma_i^L / \ln \gamma_i^S}{\ln x_i^L / \ln x_i^S} \quad (2)$$

Where $\Delta G_{mi}^{S \rightarrow L}$ – is the Gibbs energy of melting a component to its ideal component

$$\Delta G_{mi,id}^{S \rightarrow L} = RT \ln X_i^L - RT \ln X_i^S.$$

Let us express the activity coefficient through the Bjerrum-Guggenheim osmotic coefficient. In the physicochemical literature, this coefficient is called the osmotic coefficient [1,2] and it establishes a relationship between the activity and concentration of a component in a solution, which is significantly different from the similar relationship between the activity coefficient and concentration:

$$\ln a_i = \Phi_i \ln x_i. \quad (3)$$

Since we are considering the change in the value of F_i along the line of phase equilibrium, therefore, it depends on both the temperature and the composition of the equilibrium phases. At the same time, as can be seen from expression (2), this quantity is a dimensionless quantity. Its identity with the well-known osmosis is shown below.

Thermodynamic classification of solutions is based on the nature of the equations for the chemical potentials of the solution components. In an ideal solution, the following expression holds true for each component:

$$\mu_i^{id}(T, P, X) = \mu_i^0(T, P) + RT \ln X_i, \quad (4)$$

where μ_i^0 – standard chemical potential of the i -th substance in the standard state;

X_i – molar concentration of the i -component in a given solution;

$RT \ln X_i$ – corresponds to the change in chemical potential as a result of mixing (during the formation of an ideal solution).

By analogy with equation (4), the dependence of the chemical potentials of a non-ideal solution on concentration can be written, according to work [2], in the form:

$$\mu_i(T, P, X) = \mu_i^0(T, P) + RT \ln \gamma_i X_i, \tag{5}$$

where γ_i – activity coefficient.

The general condition for ideality is that for an ideal solution in the entire concentration range the following condition is satisfied:

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

The advantage of using the activity coefficient is that it allows you to maintain the formal similarity of the expressions of the thermodynamic properties of real solutions with the equations for non-ideal solutions [3–5]. The activity coefficient of the solvent, as opposed to the activity coefficients of the dissolved components, is not, for purely arithmetic reasons, the most suitable function for measuring deviations from ideality. Therefore, for a solvent, instead of the activity coefficient, it is more convenient to use another correction factor, called the Bjerrum-Guggenheim osmotic coefficient [6-8], which is introduced as follows:

$$\mu_1(T, P, X) = \mu_1^0(T, P) + \Phi_1 \cdot RT \cdot \ln X_1, \tag{6}$$

where Φ_1 – osmotic coefficient of Bjerrum and Guggenheim of the solvent
 $\Phi \rightarrow 1, X_1 \rightarrow 1$ and $X_{2,3} \dots \rightarrow 0$.

Comparing this expression with equation (5) we find that

$$\Phi - 1 = \frac{\ln \gamma_i}{\ln X_i}, \quad \Phi = \frac{\ln a_i}{\ln X_i}. \tag{7}$$

Therefore, the activity coefficient can be expressed as follows:

$$\ln \gamma_i = (\Phi - 1) \ln x_i$$

Then we have the initial data for calculating the partial excess thermodynamic mixing functions of the liquidus component [9,10]:

$$\Phi_i = A_i + B_i \cdot a_i \tag{8}$$

$$a_i = \exp\left[\frac{\Delta H_{mi}}{R} \left(\frac{1}{T_{m1}} - \frac{1}{T}\right)\right] \tag{9}$$

$$\ln x_i = \frac{\Delta H_{mi}}{R \cdot \Phi_i} \cdot \left(\frac{1}{T_{m1}} - \frac{1}{T}\right)_0 \tag{10}$$

$$\left(\frac{d\Delta G_i^E}{dT}\right)_{x,p} = -\Delta S_i^E; \quad \Delta G_i^E = \Delta H_i^{E(M)} - T\Delta S_i^E \tag{11}$$

When differentiating a function ΔG_i^E , T and x = const

$$\begin{aligned} (\Delta G_i^E)' &= -\Delta S_i^E = [RT(\Phi_i - 1) \ln x]' = R \cdot \ln x(\Phi_i - 1 + T \cdot \Phi_i') = \\ &= R \ln x(\Phi_i - 1 + T \cdot B_i \cdot a_i \cdot \frac{\Delta H_{m,i}}{R} \cdot \frac{1}{T^2}); \end{aligned} \quad (12)$$

$$\Delta S_i^E = -R \ln x(\Phi_i - 1 + B_i \cdot a_i \frac{\Delta H_{m,i}}{RT}); \quad (13)$$

$$\Delta H_i^{E(M)} = -B_i \cdot a_i \cdot \Delta H_{m,i} \cdot \ln x_i. \quad (14)$$

For the Fe-Cr and Fe-Ti systems under consideration, the thermodynamic characteristics of iron were calculated.

Initial data: $\Delta H_{pl, Fe} = 15190.384$ J/mol; Melt, Fe= 1811 K

Calculation of excess thermodynamic mixing functions in Cr-based systems.

Results and discussion

Fe-Cr system

Initial data are taken from [4] and are presented in Table 1.

Table 1 – Input parameters for calculating thermodynamic data in the Fe-Cr system

$\frac{N_i}{n/n}$	T, K	$X_{on, Fe}^L$	$\ln X_{Fe}^L$	Φ'_{Fe}	Φ''_{Fe}	a_{Fe}^L	1/T
1	1812	1	0	0,154	0,104	1	5,518764
2	1803	0,983	-5,4526E-05	0,145415	0,092303	0,99498	5,546312
3	1793	0,959	-0,00013484	0,135827	0,079238	0,989372	5,577245
4	1783	0,935	-0,00024809	0,126186	0,066101	0,983734	5,608525
5	1773	0,905	-0,00041931	0,116492	0,052893	0,978065	5,640158
6	1763	0,88	-0,00070744	0,106745	0,039612	0,972365	5,67215
7	1753	0,855	-0,00129236	0,096944	0,026258	0,966634	5,704507
8	1743	0,825	-0,00311079	0,08709	0,012831	0,960872	5,737235

The crystallization region of α -Fe is described by the equation:

$$\Phi''_{Fe} = -2,226 + 2,33 \cdot a_i$$

Thermodynamic characteristics of iron in the Fe-Cr melt, calculated according to equations (12–14), are presented in figure 1 and table 2.

Table 2 – Calculated thermodynamic α Fe in the Fe-Cr melt

№	T, K	ΔH kJ/g-at.	ΔS kJ/g-at-K	ΔG kJ/mol
1	1812	0	0	0
2	1803	0,00192	319,5202762	-0,03789
3	1793	0,004722	670,7393355	-0,08159
4	1783	0,008638	1017,922868	-0,12702
5	1773	0,014515	1361,037675	-0,17422
6	1763	0,024346	1700,050331	-0,22322
7	1753	0,044214	2034,927181	-0,27408
8	1743	0,105791	2365,63435	-0,32683

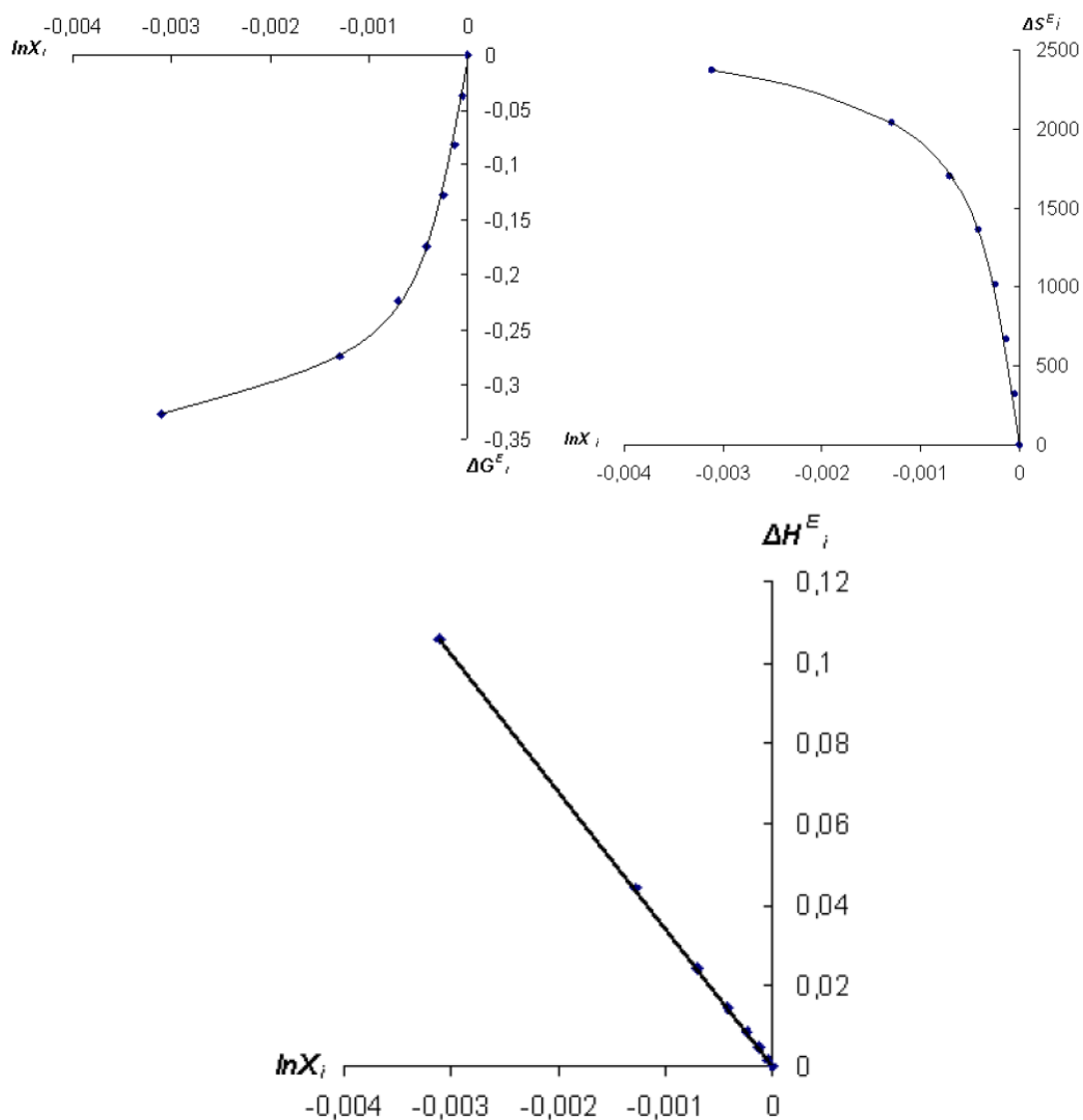


Figure 1 – Partial excess entropy, enthalpy and Gibbs energy of mixing liquidus components in the Fe-Cr system

Fe-Ti system

Initial data are taken from [4] and are presented in Table 3.

Table 3 – Input parameters for calculating thermodynamic data in the Fe-Ti system

<i>N</i> ₂	<i>T, K</i>	<i>X</i> ^{<i>L</i>} _{on Fe}	<i>LnX</i> ^{<i>L</i>} _{Fe}	Φ' _{Fe}	Φ'' _{Fe}	<i>a</i> ^{<i>L</i>} _{Fe}	<i>1/T</i> *10 ⁴
1	1811	1	0	4,5278	2,5202	1	5,521811
2	1783	0,984536	-0,01360942	4,411107	2,460972	0,9864828	5,608525
3	1763	0,969214	-0,02523365	4,312686	2,411017	0,9750821	5,67215
4	1743	0,951754	-0,03712464	4,213183	2,360513	0,963556	5,737235
5	1723	0,933107	-0,04929169	4,112587	2,309455	0,9519034	5,803831
6	1703	0,913146	-0,06174451	4,010888	2,257837	0,940123	5,871991
7	1683	0,887255	-0,07449331	3,908076	2,205654	0,9282137	5,941771
8	1663	0,858974	-0,08754875	3,80414	2,152901	0,9161742	6,013229
9	1643	0,827957	-0,10092203	3,699072	2,099572	0,9040035	6,086427
10	1613	0,764706	-0,12160377	3,539326	2,018492	0,8854992	6,199628

The crystallization region of α -Fe is described by the equation:

$$\Phi''_{Fe} = -1,8615 + 4,3817 \cdot a_i$$

Thermodynamic characteristics of iron in the Fe-Ti melt, calculated using equations (12–14) are presented in Figure 2 and Table 4.

Table 4 – Calculated thermodynamic α -Fe in the Fe-Ti melt

<i>N</i> ₂	<i>T, K</i>	ΔH кДж/г·ат.	ΔS кДж/г·ат·К	ΔG кДж/моль
1	1811	0	0	0
2	1783	422,6884	15932,79	-0,66649
3	1763	739,3679	28872,54	-1,22496
4	1743	1069,333	41500	-1,78596
5	1723	1413,551	53810,04	-2,34922
6	1703	1773,095	65797,46	-2,91445
7	1683	2149,153	77457,02	-3,48133
8	1663	2543,047	88783,38	-4,04953
9	1643	2956,254	99771,17	-4,61864
10	1613	3615,953	115606,2	-5,47313

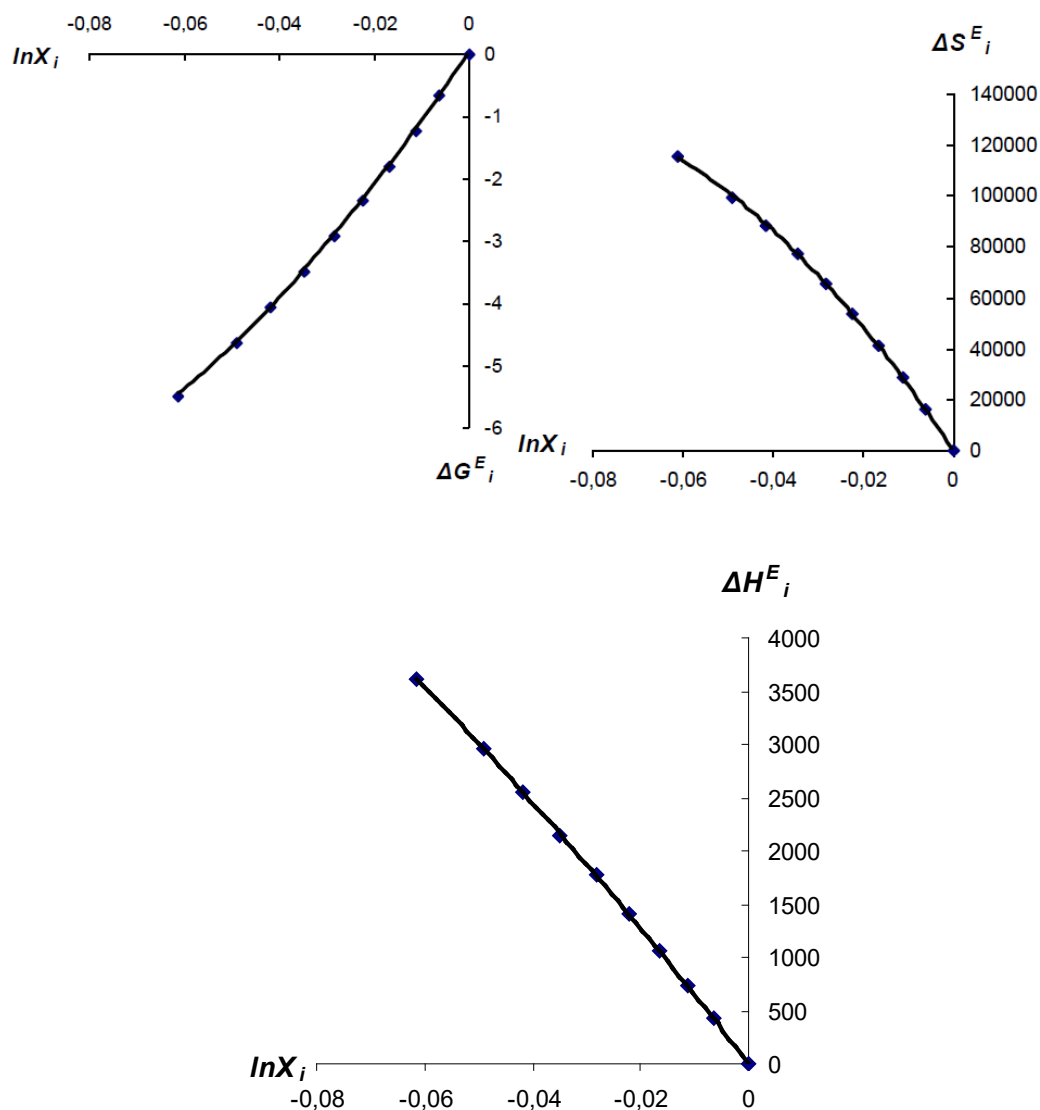


Figure 2 – Partial excess entropy, enthalpy and Gibbs energy of mixing liquidus components in the Fe-Ti system

Conclusions

During the calculating the lines of phase equilibrium in systems with different types of interaction between components, it was established that the Bjerrum-Guggenheim coefficient can serve as an assessment parameter characterizing the role of exchange forces between atoms and by its dimension ($\Phi_i \ll 1$) one can qualitatively judge the nature of the intermolecular interaction in the system and the degree of deviation from regularity.

The applicability of the Bjerrum-Guggenheim coefficient for the region of iron crystallization from the iron activity of an ideal α - γ solution for the calculation of

partial thermodynamic mixing functions of liquid iron based on state diagrams of binary systems Fe-Cr and Fe-Ti is shown.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 **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.
- 2 **Льюис, Д. Ж., Рендалл, М.** Химическая термодинамика : Пер. с англ. А.Н. Лукницкого, под ред. П.А. Ребиндера с доп. Редлиха О. – Л.: ОНТИ, 1936. – С. 532.
- 3 **Гуггенгейм, Е. А.** Современная термодинамика, изложенная по методу Гиббса: Пер. с англ. под ред. С.А. Щукарева. – Л. : Госхимиздат, 1941. – 188 с.
- 4 **Хансен, М., Андерко, К.** Структура двойных сплавов: В 2-х т. – М. : Metallurgia, 1962. – С. 1488.
- 5 **Падерин, С. П., Филиппов, В. В.** Теория и расчеты металлургических систем и процессов. – М. : МИСиС, 2002. – С. 334.
- 6 **Моисеев, Г. К., Вяткин, Г. П., Бардин, Н. М. и др.** Применение термодинамического моделирования для изучения взаимодействий с участием ионных расплавов. – Челябинск: ЮУрГУ, 2002. – С. 165.
- 7 **Поволоцкий Д. Я., Гудим Ю. А.** Производство нержавеющей стали. – Челябинск: ЮУрГУ, 1998. – С. 236.
- 8 **Мирзоев, А. А., Ялалов, М., Мирзаев, Д. А.** Расчет энергии смешения сплавов Fe-Cr первопринципными методами компьютерного моделирования // *Физика металлов и металловедение*, 2004, Т. 97. – № 4. – С. 11 – 16.
- 9 **Рашников, В. Ф., Морозов, А. А., Урцев, В. Н., Горностырев Ю. Н.** Квантовое материаловедение стали // *Сталь*, 2007. – № 2. – С. 104 – 105.
- 10 **Горбатов, О. И., Окатов, С. В., Горностырев, Ю. Н., Коржавый, П. А., Рубан, А. В.** Влияние магнетизма на растворимость 3d элементов в ОЦК Fe. Результаты первопринципных исследований // *Физика металлов и металловедение*, 2013, Т. 114. – № 8. – С. 698 – 710.

REFERENCES

- 1 **Tolokonnikova, V. V., Bajsanov, S. O., Kulikov, I. S.** Obobshhenny`e uravneniya linii solidusa i likvidusa v dvojny`x sistemax na osnove zheleza [Generalized equations of the solidus and liquidus lines in iron-based binary systems] // *Metalls*. – 1989. – № 2. – P. 34–37.
- 2 **L`yuis, D. Zh., Rendall, M.** Himicheskaya termodinamika [Chemical thermodynamics] : Transl. from English by. A. N. Lukniczkogo, Ed. by. P. A. Rebindera s dop. Redlix. O. – L. : ONTI, – 1936. – P. 532.
- 3 **Guggengejm, E. A.** Sovremennaya termodinamika, izlozhennaya po metodu Gibbsa [Modern thermodynamics, expounded by the Gibbs method] : Transl. from English by. Ed. by. S. A. Schukarev. – L. : Goshimizdat, – 1941. – P. 188.

4 Hansen, M., Anderko, K. *Struktura dvojny`x splavov [Dual alloy structure]. In 2 volumes. – Moscow : Metallurgiya, – 1962. – P. 1488.*

5 Paderin, C. П., Filippov, V. V. *Teoriya i raschety` metallurgicheskix sistem i processov [Theory and calculations of metallurgical systems and processes]. – M. : MISiS, – 2002. – P. 334.*

6 Moiseev, G. K., Vyatkin, G. P., Bardin, N. M. i dr. *Primenenie termodinamicheskogo modelirovaniya dlya izucheniya vzaimodejstvij s uchastiem ionny`x rasplavov [Application of thermodynamic modeling to study interactions involving ionic melts]. – Chelyabinsk : YuUrGU, 2002. – P. 165.*

7 Povolockij, D. Ya., Gudim, Yu. A. *Proizvodstvo nerzhaveyushhej stali [Stainless steel production]. – Chelyabinsk: YuUrGU, 1998. – P. 236.*

8 Mirzoev, A. A., Yalalov, M. M., Mirzaev, D. A. *Raschet e`nergii smesheniya splavov Fe-Cr pervoprincipny`mi metodami komp`yuternogo modelirovaniya [Calculation of the mixing energy of Fe-Cr alloys using first-principles computer modeling methods] // Fizika metallov i metallovedenie. – 2004. – T. 97. – № 4. – P. 11–16.*

9 Rashnikov, V. F., Morozov, A. A., Urcev, V. N., Gornosty`revzh Yu. N. *Kvantovoe materialovedenie stali [Quantum materials science of steel] // Steel. – 2007. – № 2. – P. 104–105.*

10 Gorbatov, O. I., Okatov, S. V., Gornosty`rev, Yu. N., Korzhavy`j, P. A., Ruban, A. V. *Vliyanie magnetizma na rastvorimost` 3d e`lementov v OCzK F. Rezul`taty` pervoprincipny`x issledovanij [The influence of magnetism on the solubility of 3d elements in bcc F. Results of first-principles studies] // Fizika metallov i metallovedenie. – 2013. – T. 114. – № 8. – P. 698–710.*

Accepted for publication 07.12.23.

**А. А. Мырзағалиев¹, С. О. Байсанов², Н. З. Нурғали³,*

Е. У. Жумағалиев⁴, Н. А. Улмағанбетов⁵

^{1,3,5}«ERG ғылыми-зерттеу инжинирингтік орталығы» ЖШС,

Қазақстан Республикасы, Астана қ. ;

²Ж. Абишев тындағы химико-металлургиялық институт,

Қазақстан Республикасы, Қарағанды қ. ;

⁴Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті,

Қазақстан Республикасы, Ақтөбе қ.

Басып шығаруға 07.12.23 қабылданды.

FE-CR ЖӘНЕ FE-TI БИНАРЛЫ ЖҮЙЕЛЕРІНДЕ А-ТЕМІРДІҢ ТЕРМОДИНАМИКАЛЫҚ ПАРАМЕТРЛЕРІН АНЫҚТАУ

Бұл мақалада күй диаграммалары негізінде Fe-Cr және Fe-Ti бинарлы жүйелерінің Бьеррум-Гуггенгейм осмостық коэффициентін қолдану арқылы термодинамикалық параметрлерін есептеу нәтижелері келтірілген.

Fe-Cr және Fe-Ti жүйелеріндегі фазалық тепе-теңдік сызықтарын есептеу кезінде Бьеррум-Гуггенгейм коэффициенті атомдар арасындағы алмасу күштерінің ролін сипаттайтын бағалау параметрі бола алатыны анықталды және оның өлшемі бойынша ($\Phi_i > < 1$) жүйедегі молекулааралық әрекеттесулердің табиғатын сапалы түрде бағалауға болады. Бұл жұмыстың нәтижелері тікелей Гиббс есебін дұрыс шешуге мүмкіндік берді, атап айтқанда фазалық құрамдардың фазалық тепе-теңдік кезіндегі температураға аналитикалық тәуелділігін фазалардың пайда болу заңдылықтары негізінде алуға мүмкіндік берді. Бьеррум-Гуггенхайм осмостық коэффициентінің (F_i) көмегімен зерттелетін жүйедегі нақты тепе-теңдікті егжей-тегжейлі анықтауға және олардың дұрыс аналитикалық өрнегін алуға болатыны көрсетілген.

Компоненттер арасындағы өзара әрекеттесудің әртүрлі типтері бар жүйелердегі фазалық тепе-теңдік сызықтарын есептеу кезінде Бьеррум-Гуггенхайм коэффициенті атомдар арасындағы алмасу күштерінің ролін сипаттайтын бағалау параметрі бола алатыны анықталды.

Кілтті сөздер: термодинамика; Бьеррум-Гуггенгейм коэффициенті; күй диаграммасы; осмостық коэффициент; бинарлы жүйелер.

***А. А. Мырзағалиев¹, С. О. Байсанов², Н. З. Нурғали³,**

Е. У. Жумағалиев⁴, Н. А. Улмағанбетов⁵

^{1,3,5}ТОО «Научно-исследовательский инжиниринговый центр ERG»,

Республика Казахстан, г. Астана

²Химико-металлургический институт имени Ж. Абишева,

Республика Казахстан, г. Караганда

³Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова,

Республика Казахстан, г. Ақтобе

Принято к изданию 07.12.23.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ А-ЖЕЛЕЗА В БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ FE-CR И FE-TI

В этой статье приведены результаты расчетов термодинамических параметров бинарных систем Fe-Cr и Fe-Ti на базе их диаграмм состояний с применением осмотического коэффициента Бьеррума-Гуггенгейма, для области кристаллизации железа от активности железа идеального а-у раствора для вышеуказанных систем.

При расчете линий фазовых равновесий в системах Fe-Cr и Fe-Ti установлено, что коэффициент Бьеррума-Гуггенгейма может служить в качестве оценочного параметра характеризующего роль обменных сил

между атомами, и по его размерности ($\Phi_i < 1$) можно качественно судить о характере межмолекулярного взаимодействия в системе. Результаты настоящей работы позволили корректно решить прямую задачу Гиббса, а именно, получить аналитическую зависимость составов фаз от температуры при фазовых равновесиях на основе закономерностей формирования фаз. Показано, что с помощью осмотического коэффициента Бьеррума-Гуггенгейма (Φ_i) детально может быть определено реальное равновесие в изучаемой системе и получено их корректное аналитическое выражение.

При расчете линий фазовых равновесий в системах с различным характером взаимодействия компонентов установлено, что коэффициент Бьеррума-Гуггенгейма может служить в качестве оценочного параметра, характеризующего роль обменных сил между атомами.

Ключевые слова: термодинамика; коэффициент Бьеррума-Гуггенгейма; диаграмма состояния; осмотический коэффициент; бинарные системы.

Теруге 08.12.23 ж. жіберілді. Басуға 29.12.23 ж. қол қойылды.

Электрондық баспа

5,07 Mb RAM

Шартты баспа табағы 17,26 Таралымы 300 дана. Бағасы келісім бойынша.

Компьютерде беттеген: Е. Е. Калихан

Корректор: А. Р. Омарова

Тапсырыс № 4166

«Toraighyrov University» баспасынан басылып шығарылған

Торайғыров университеті

140008, Павлодар қ., Ломов көш., 64, 137 каб.

«Toraighyrov University» баспасы

Торайғыров университеті

140008, Павлодар қ., Ломов к., 64, 137 каб.

67-36-69

e-mail: kereku@tou.edu.kz

nitk.tou.edu.kz