

(«Химико-металлургический институт им. Ж.Абишева» г. Караганда)

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ЛИНИЙ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ В СИСТЕМЕ Fe-Mn С ПОМОЩЬЮ КОЭФФИЦИЕНТОВ БЬЕРРУМА-ГУГГЕНГЕЙМА

Аннотация

В работе представлен универсальный метод математического описания линий фазовых равновесий на примере диаграммы состояния железо - марганец. На единой аналитической основе представлены линии кристаллизации фаз данной системы.

Ключевые слова: марганец, железо, линии ликвидуса и солидуса, осмотический коэффициент Бьеррума-Гуггенгейма.

Тірек сөздер: марганец, темір, солидус және ликвидус сызықтары, Бьеррум-Гуггенгейм осмостық коэффициенті.

Key words: manganese, iron, liquidus and solidus lines, the osmotic coefficient of Bjerrum-Guggenheim.

Для ускорения внедрения достижений физической химии сложных систем в промышленную технологию важным представляется необходимость теоретического обобщения накопленных экспериментальных данных с установлением взаимосвязи между термодинамическими и физико-химическими свойствами многокомпонентных гетерогенных систем (составом и температурой) с получением зависимостей в виде обобщенных математических моделей. В первую очередь, это касается диаграмм состояния, фазового состава и состав-свойство сложных систем, поскольку, именно, на их основе наиболее эффективно прогнозируются рациональные составы и способы получения новых высокоэффективных сплавов и материалов. Поэтому решение данной проблемы имеет важное значение не только с позиции практики, но и с общенаучной точки зрения.

До сих пор проблема гетерогенного фазового равновесия не нашла универсального решения, результаты которого были бы пригодны для расчета и построения диаграмм состояния и фазового состава различного типа систем. Из-за этого каждая система требует индивидуального решения, что сопряжено со значительными затратами труда, особенно в случае изучения многокомпонентных систем.

В последнее время достигнуты существенные успехи в развитии термодинамических теорий металлических расплавов. В частности, наряду с теориями регулярных и субрегулярных растворов, развиты усложненная квазихимическая [1], теория «окруженного атома» [2] и кластерная теория растворов [3-5]. В основе всех этих теорий лежит предположение, что свойства (и структура) расплавов определяется в основном размерами частиц и силами межчастичного взаимодействия.

Все перечисленные направления имеют один общий недостаток, а именно требуют предварительного определения условных параметров взаимодействия и, довольно часто, энтальпии смешения расплавов, что обуславливает постановку специальных исследований [6]. Кроме этого, математический аппарат каждого направления и их разновидностей зачастую пригоден только к определенным группам систем, а для других возникает необходимость разработки специального математического аппарата или введения сложных поправочных коэффициентов.

Проблема решения обратной задачи Гиббса связана с расшифровкой диаграмм состояния и получением термодинамической информации из нее, а именно относительных и избыточных функций смешения компонентов в расплаве. Фактически задача состоит из двух частей: создания корректных математических моделей диаграмм состояния в аналитической форме, а дальше, на базе основных законов термодинамики, преобразования их на термодинамические функции равновесных фаз. На основе корреляционной зависимости осмотического коэффициента Бьеррума-Гуттенгейма и классического уравнения Шредера-Ле-Шателье получены полуэмпирические уравнения кривых моновариантного равновесия в двухкомпонентных системах, адекватно описывающие линии фазовых равновесий: [7]

$$\ln X_{i,i0}^L = \frac{\ln a_{i,i0}^L / a_{i,i0}^S}{\Phi_{1,2}''}, \quad (1)$$

$$\ln X_{i,i0}^S = \ln \frac{a_{i,i0}^L}{a_{i,i0}^S} \left(\frac{1}{\Phi_{1,2}''} - \frac{1}{\Phi_{1,2}'} \right) \quad (2)$$

$$\ln \frac{a_{i,i0}^L}{a_{i,i0}^S} = \frac{\Delta H_{m,i,1(2)}}{R} \left(\frac{1}{T_{m,i,1(2)}} - \frac{1}{T} \right) \quad (3)$$

$$\Phi_{1,2}' = \frac{\frac{\Delta H_{m,i,1(2)}}{R} \left(\frac{1}{T_{m,i,1(2)}} - \frac{1}{T} \right)}{\ln \frac{X_{i,i0}^L}{X_{i,i0}^S}} \quad (4)$$

$$\Phi_{1,2}'' = \frac{\frac{\Delta H_{m,i,1(2)}}{R} \left(\frac{1}{T_{m,i,1(2)}} - \frac{1}{T} \right)}{X_{i,i0}^L} \quad (5)$$

где, $\Phi''_{1,2}$ - коэффициенты Бьеррума-Гуггенгейма 1- и 2 – компонентов в жидкой (L) фазе; $\Phi'_{1,2}$ – коэффициенты Бьеррума-Гуггенгейма 1- и 2-компонентов в твердой (S) фазе; $\Delta H_{m,i,1(2)}$ – энтальпия плавления 1 и 2 – го компонентов, Дж/моль; R – универсальная газовая постоянная, Дж/моль·К; $T_{m,1(2)}$ и T – температура плавления 1 и 2 – го компонентов и кристаллизации расплавов, К; (3) является фундаментальным уравнением Шредера-Лешателлье для идеальной системы.

Разработанный нами подход математического описания линий моновариантных фазовых равновесий на основе концепции Бьеррума-Гуггенгейма показал, что вдоль линии ликвидуса и солидуса ход изменения Φ_i имеет различный вид, т.е. если по линии ликвидуса будут преобладать только ван-дер-ваальсовские силы взаимодействия между компонентами, то наблюдается прямолинейная зависимость Φ_i от $a_{i,i0}^L/a_{i,i0}^S$. В случае образования различных группировок из исходных элементов диссоциация (ассоциация) изучаемого соединения в расплаве, обработка исходных данных проходит по криволинейной зависимости:

$$\Phi_i = A_i + B_i (a_{i,i0}^L/a_{i,i0}^S) + C_i / (a_{i,i0}^L/a_{i,i0}^S) \quad (6)$$

где A , B и C – константы, определяемые природой компонентов и характером межчастичного взаимодействия.

Диаграмма состояния системы Fe-Mn [8] характеризуется наличием обширной области твердых растворов, простирающейся от г.ц.к. и γ (Fe) до г.ц.к. γ (Mn) и фазовых областей стабильных твердых растворов, а именно: о.ц.к. α -Fe, δ -Fe, α -Mn, β -Mn и δ -Mn. Диаграмма состояния представлена на рисунке 1.

В сплавах данной системы существуют следующие области: область кристаллизации δ -Fe, γ -Fe и область кристаллизации Mn. Обширный обзор работ о влиянии марганца на δ – γ превращения железа сделан в работах [8,9]. С учетом важности этой системы для практики ферросплавного производства и разработки технологий она нами рассматривается более подробно.

Для получения данных о характере межчастичного взаимодействия в расплавах и вывода аналитических выражений линий ликвидус и солидус были обработаны экспериментальные данные с целью получения зависимостей Бьеррума-Гуггенгейма от отношения активности компонентов для жидких и твердых фаз идеального расплава.

При обработке этих данных по специально составленной программе, использовали значения энтальпии и температуры плавления железа и марганца $\Delta H_{m,Fe}=15190,384$ Дж/моль, ($T_{m,Fe}=1811$ К). $\Delta H_{m,Mn}=12049,92$ Дж/моль, ($T_{m,Mn}=1519$) К [8].

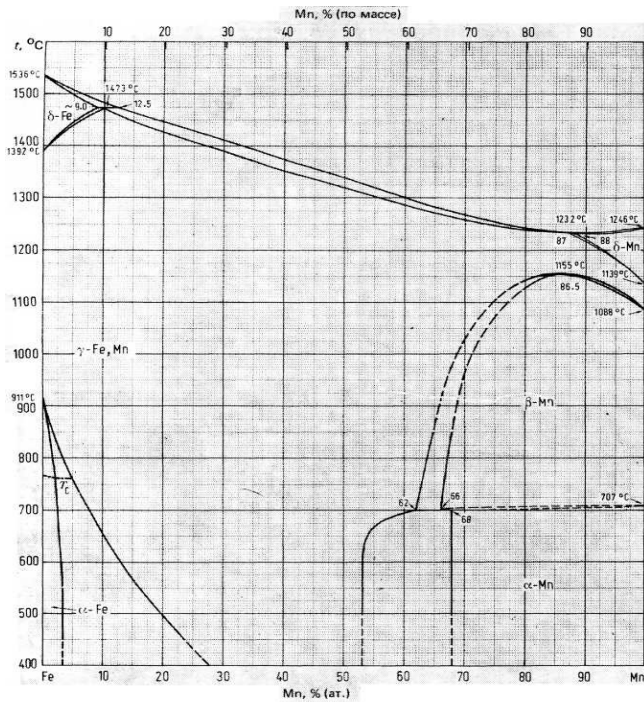


Рисунок 1 – Диаграмма состояния Fe-Mn

1. Область кристаллизации δ -Fe до точки эвтектики 12,5 ат. %.

Самые ранние данные, предположенных в работе [9], показывают характеристику наличия большой области богатых железом сплавов при 1473 К – твердый раствор δ -Fe (9% Mn) + жидкость (12,5%Mn) \Leftrightarrow твердый раствор γ -Fe (9,8% Mn).

Для области кристаллизации δ -Fe зависимости коэффициента Бьеррума-Гуттенгейма Φ'_{Fe} , Φ''_{Fe} и Φ'_{Mn} , Φ''_{Mn} от отношения $a^L_{Fe,ид} / a^S_{Fe,ид}$ и $a^L_{Mn,ид} / a^S_{Mn,ид}$ приведены на рисунке 2 (а, б, в, г), из которого нетрудно убедиться, что идеальная корреляция дает превосходную сходимость экспериментальных данных с расчетными, которые приведены ниже в таблицах 1 и 2. Как видно, на рисунках все графики (для первого и второго компонента) прямолинейны, это говорит о присутствии в расплаве только частиц двух сортов, то есть Fe и Mn, а также о наличии только ван-дер-ваальсовских сил взаимодействия между ними.

$$X^L_{Fe} = \exp\left[\frac{\frac{15190,384}{8,3144} * \left(\frac{1}{1811} - \frac{1}{T}\right)}{-1,2993 + 1,6550 * a^L_{Fe} / a^S_{Fe}}\right]$$

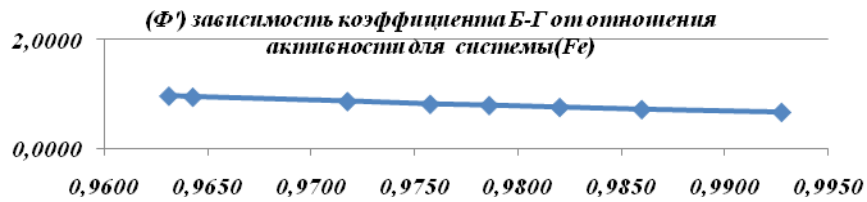
$$X^L_{Mn} = \exp\left[\frac{\frac{12049,92}{8,3144} * \left(\frac{1}{1519} - \frac{1}{T}\right)}{-0,8949 + 0,7358 a^L_{Mn} / a^S_{Mn}}\right]$$

Таблица 1- **Область кристаллизации δ -Fe в Fe-Mn.** Сравнительные опытные и расчетные данные для железа.

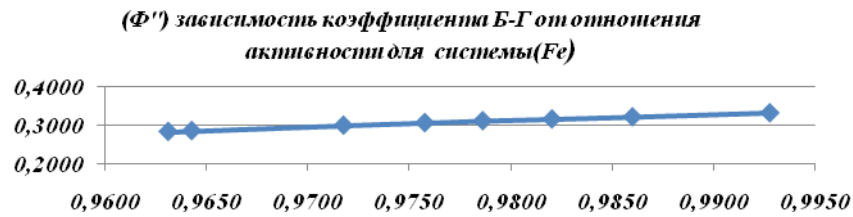
N_2	T, K	$X^L_{Fe,on.}$	$X^L_{Fe,расч.}$	$\Phi''_{Fe,on.}$	$\Phi''_{Fe,расч.}$	$X^S_{Fe,on.}$	$X^S_{Fe,расч.}$	$\Phi'_{Fe,on.}$	$\Phi'_{Fe,расч.}$
1	1798	0,978	0,978	0,331	0,339	0,989	0,990	0,664	0,662
2	1786	0,957	0,957	0,321	0,328	0,976	0,977	0,718	0,732
3	1779	0,944	0,944	0,315	0,321	0,967	0,968	0,757	0,773
4	1773	0,933	0,932	0,310	0,316	0,959	0,960	0,792	0,808
5	1768	0,923	0,923	0,305	0,310	0,951	0,952	0,815	0,838
6	1761	0,909	0,908	0,299	0,304	0,939	0,941	0,867	0,880
7	1748	0,880	0,880	0,284	0,292	0,914	0,917	0,948	0,957
8	1746	0,875	0,876	0,282	0,290	0,910	0,913	0,969	0,969

Таблица 2- **Область кристаллизации Mn в Fe-Mn.** Сравнительные опытные и расчетные данные для марганца.

N_2	T, K	$X^L_{Fe,on.}$	$X^L_{Fe,расч.}$	$\Phi''_{Fe,on.}$	$\Phi''_{Fe,расч.}$	$X^S_{Fe,on.}$	$X^S_{Fe,расч.}$	$\Phi'_{Fe,on.}$	$\Phi'_{Fe,расч.}$
1	1798	0,978	0,978	0,331	0,339	0,989	0,990	0,664	0,662
2	1786	0,957	0,957	0,321	0,328	0,976	0,977	0,718	0,732
3	1779	0,944	0,944	0,315	0,321	0,967	0,968	0,757	0,773
4	1773	0,933	0,932	0,310	0,316	0,959	0,960	0,792	0,808
5	1768	0,923	0,923	0,305	0,310	0,951	0,952	0,815	0,838
6	1761	0,909	0,908	0,299	0,304	0,939	0,941	0,867	0,880
7	1748	0,880	0,880	0,284	0,292	0,914	0,917	0,948	0,957
8	1746	0,875	0,876	0,282	0,290	0,910	0,913	0,969	0,969



б)



в)



г)

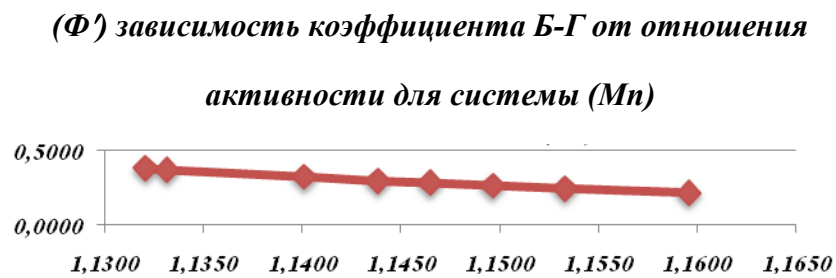


Рисунок 2

$$X_{Mn}^S = \exp\left[\frac{12049,92}{8,3144} * \left(\frac{1}{1519} - \frac{1}{T}\right) * \left(\frac{1}{-0,8949 + 0,7358 a_{Mn}^L / a_{Mn}^S} - \frac{1}{7,2981 - 6,1052 a_{Mn}^L / a_{Mn}^S}\right)\right]$$

Таким образом, область кристаллизации δ - Fe от $T_{m,Fe}=1811K$ до $T=1746K$ описывается сравнительно простыми уравнениями. Подставив в них текущую температуру, получим искомый состав.

2. Область кристаллизации γ – Fe.

В области кристаллизации γ – Fe линии ликвидус и солидус плавно опускаются от перетектической горизонтали (1746К) до минимального значения при 87% (ат.) Mn и температуре 1505К.

В области кристаллизации γ – Fe осмотические коэффициенты Бьеррума-Гуггенгейма Φ'_{Fe}, Φ''_{Fe} от отношения a^L_{Fe}/a^S_{Fe} представлены корреляционными зависимостями на рисунке 3 (а, б). Результаты указывают на хорошую сходимость опытных данных с расчетными и об этом же свидетельствуют коэффициенты корреляции.

$$\Phi''_{Fe, расч.} = -0,8025 + 1,1335 a^L_{Fe} / a^S_{Fe} \quad R_{x,y} = 0,9988$$

$$\Phi'_{Fe, расч.} = 13,2286 - 12,3287 a^L_{Fe} / a^S_{Fe} \quad R_{x,y} = 0,9985$$

Прямолинейный ход зависимости говорит о присутствии в расплаве только частиц двух сортов, так же Fe и Mn, а также о наличии только ван-дер-ваальсовских сил взаимодействия между ними.

Полученные данные по второму компоненту Φ'_{Mn}, Φ''_{Mn} были обработаны методом наименьших квадратов [10] (таблицы 3 и 4). В результате получены уравнения зависимости осмотического коэффициента Бьеррума-Гуггенгейма от активности в виде трехчленной зависимости:

$$\Phi''_{Mn, расч.} = -20,8027 + 9,5815 \frac{a^L_{Mn}}{a^S_{Mn}} - \frac{11,206}{a^L_{Mn}/a^S_{Mn}} \quad \delta=0,00518$$

$$\Phi'_{Mn, расч.} = 87,198 - 41,741 \frac{a^L_{Mn}}{a^S_{Mn}} - \frac{44,603}{a^L_{Mn}/a^S_{Mn}} \quad \delta=0,0058$$

На основании полученных расчетов о поведении кристаллизующихся компонентов исследуемой области можно заключить, что в них в полной мере выявляются наличие закономерных связей между степенью неидеальности в поведении кристаллизующейся фазы Φ_i с ее активностью в расплаве вдоль линии фазового равновесия в двух формах: в виде прямолинейной зависимости и в виде криволинейной зависимости с вогнутостью (Φ''_{Mn}) и выпуклостью (Φ'_{Mn}). График $\Phi''_{Mn} = f(a^L_{Mn}/a^S_{Mn})$ имеет вогнутую форму (рисунок 3в). Это, как было отмечено выше, говорит об образовании в расплавах ассоциированных комплексов. Отсюда фактическая концентрация марганца, взятая на линии ликвидус, не отражает его реальной атомной доли в расплаве. В результате наблюдается отклонение осмотических коэффициентов Бьеррума-Гуггенгейма от линейности. $\Phi'_{Mn} = f(a^L_{Mn}/a^S_{Mn})$ имеет выпуклую форму (рисунок 3г). Это говорит о том, что в области кристаллизации данной фазы в расплаве, кроме ван-дер-ваальсовских сил взаимодействия между частицами, существуют и направленные связи между компонентами.

3. Область кристаллизации δ -Mn в системе Fe - Mn.

Область кристаллизации Mn характеризуется небольшим участком на диаграмм состояния (рисунок 1) от температуры плавления 1519К до 1507К. Для сравнительного анализа экспериментальных и расчетных данных по системе Mn - Fe были рассчитаны линии ликвидуса и солидуса с учетом сведений об индивидуальных характеристиках марганца и железа:

В области кристаллизации δ -Mn в системе Mn-Fe обнаруживается наличие тесной корреляционной связи между термодинамическими свойствами вдоль кривых моновариантного фазового равновесия. Эта связь проявляется в виде прямолинейной (рисунок 4а, б, в) зависимости осмотического коэффициента Бьеррума-Гуггенгейма, кристаллизующегося компонента Φ_i , от отношения его активности $a_{Mn,i\delta}^L/a_{Mn,i\delta}^S$ и $a_{Fe,i\delta}^L/a_{Fe,i\delta}^S$ в жидкой и твердой фазах в форме

$$\Phi_{Mn,расч.}'' = -22,1814 + 22,4145 a_{Mn}^L/a_{Mn}^S \quad R_{x,y} = 0,9999$$

$$\Phi_{Fe,расч.}'' = 6,5845 - 7,9926 a_{Fe}^L/a_{Fe}^S \quad R_{x,y} = 0,9909$$

$$\Phi_{Mn,расч.}' = 33,1573 - 32,9559 a_{Mn}^L/a_{Mn}^S \quad R_{x,y} = 0,9998$$

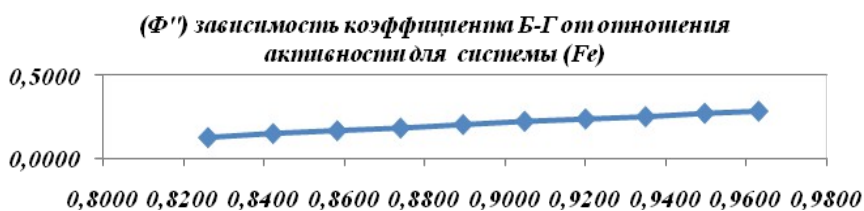
Таблица 3. Область кристаллизации γ -Fe в Fe-Mn. Сравнительные опытные и расчетные данные для железа.

№	T, K	$X_{Fe,оп}^L$	$X_{Fe,расч}^L$	$\Phi_{Fe,оп}''$	$\Phi_{Fe,расч}''$	$X_{Fe,оп}^S$	$X_{Fe,расч}^S$	$\Phi_{Fe,оп}'$	$\Phi_{Fe,расч}'$
1	1746	0,875	0,878	0,282	0,289	0,902	0,903	1,255	1,363
2	1723	0,826	0,829	0,270	0,274	0,855	0,857	1,493	1,530
3	1698	0,764	0,770	0,249	0,257	0,795	0,801	1,688	1,713
4	1673	0,702	0,707	0,235	0,240	0,735	0,739	1,812	1,898
5	1648	0,637	0,640	0,221	0,223	0,669	0,671	2,036	2,087
6	1623	0,561	0,567	0,202	0,206	0,592	0,597	2,207	2,277
7	1598	0,476	0,490	0,181	0,188	0,504	0,517	2,394	2,471
8	1573	0,398	0,408	0,166	0,170	0,422	0,433	2,607	2,667
9	1548	0,315	0,325	0,148	0,152	0,335	0,345	2,854	2,865
10	1523	0,216	0,241	0,125	0,134	0,230	0,257	3,060	3,067

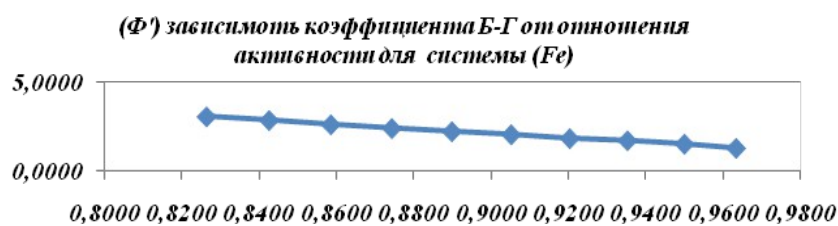
Таблица 4. Область кристаллизации γ -Fe в Fe-Mn. Сравнительные опытные и расчетные данные для марганца.

$X_{Mn,оп}^L$	$X_{Mn,расч}^L$	$\Phi''_{Mn,оп}$	$\Phi''_{Mn,расч}$	$X_{Mn,оп}^S$	$X_{Mn,расч}^S$	$\Phi'_{Mn,оп}$	$\Phi'_{Mn,расч}$
0,125	0,114	-0,060	-0,057	0,098	0,090	0,517	0,545
0,174	0,182	-0,065	-0,066	0,145	0,152	0,620	0,626
0,236	0,255	-0,070	-0,074	0,205	0,222	0,714	0,705
0,298	0,324	-0,073	-0,078	0,265	0,288	0,748	0,772
0,363	0,387	-0,074	-0,079	0,331	0,353	0,809	0,827
0,439	0,446	-0,074	-0,076	0,409	0,415	0,849	0,868
0,524	0,503	-0,073	-0,069	0,497	0,477	0,875	0,893
0,602	0,564	-0,065	-0,057	0,578	0,542	0,805	0,901
0,685	0,646	-0,047	-0,041	0,666	0,628	0,752	0,891
0,784	0,878	-0,010	-0,019	0,770	0,862	0,670	0,861

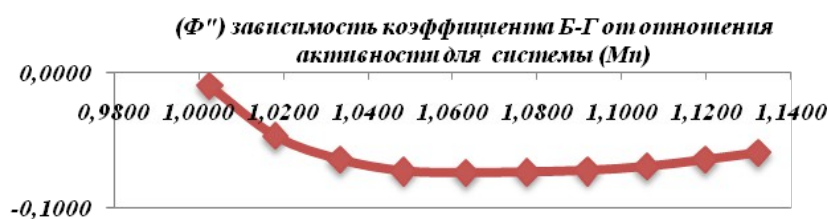
а)



б)



в)



г)

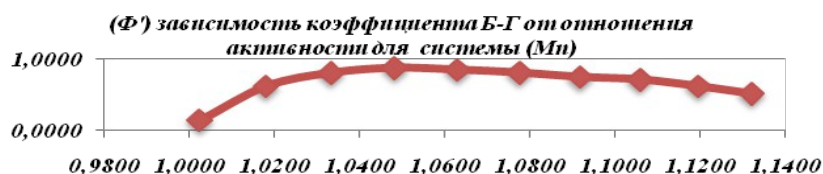


Рисунок 3

На рисунке 4(г) показан слабовогнутый ход кривой Φ'_{Fe} . Учитывая, что коэффициент Бьеррума-Гуггенгейма характеризует степень отклонения энергетического состояния системы от идеального, можно сказать, что в области кристаллизации данной фазы в расплаве кроме ван-дер-ваальсовских сил взаимодействия между частицами существуют и направленные связи между компонентами.

$$\Phi'_{Fe,расч.} = 39165,61 - 23912,62 * \frac{a_{Fe}^L}{a_{Fe}^S} - \frac{16037,13}{a_{Fe}^L/a_{Fe}^S} \delta=0,00396$$

В таблицах 5 и 6 приведены опытные и расчетные значения концентрации кристаллизующегося δ -Mn, полученные из диаграммы состояния Mn-Fe. Как показали полученные при этом результаты: расчетные (сплошные линии) и опытные (точки) данные для области кристаллизации имеют очень хорошую сходимость.

Таким образом, на основании выше изложенного можно сделать основополагающий вывод: осмотический коэффициент Бьеррума-Гуггенгейма может служить критерием структуры расплавов вдоль линий моновариантных фазовых равновесий. Его «выпрямление» от первоначальных значений (выпуклость-диссоциация, вогнутость-ассоциация) при учете степени диссоциации химических соединений предполагает наличие лишь слабых сил межмолекулярного взаимодействия (ван-дер-ваальсовских).

Таблица 5 – Область кристаллизаций δ -Mn в Mn-Fe. Сравнительные опытные и расчетные данные для марганца.

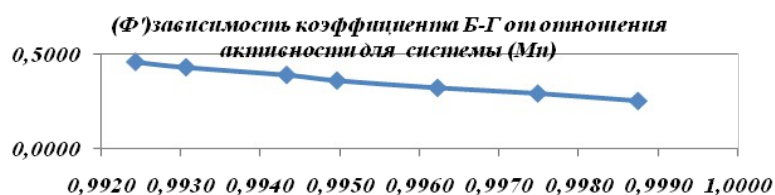
№	T, К	$X_{Mn,o}^L$	$X_{Mn,расч}^L$	$\Phi''_{Mn,оп.}$	$\Phi''_{Mn,расч}$	$X_{Mn,оп}^S$	$X_{Mn,расч}^S$	$\Phi'_{Mn,оп.}$	$\Phi'_{Mn,расч}$
1	1517	0,994	0,994	0,209	0,205	0,999	0,999	0,251	0,243
2	151	0,986	0,986	0,179	0,177	0,995	0,995	0,290	0,284

	5								
3	151 3	0,975	0,975	0,149	0,149	0,987	0,986	0,319	0,326
4	151 1	0,958	0,958	0,118	0,120	0,972	0,972	0,358	0,368
5	151 0	0,947	0,947	0,104	0,106	0,961	0,962	0,388	0,388
6	150 8	0,915	0,915	0,078	0,078	0,930	0,929	0,428	0,430
7	150 7	0,893	0,893	0,067	0,064	0,908	0,902	0,456	0,451

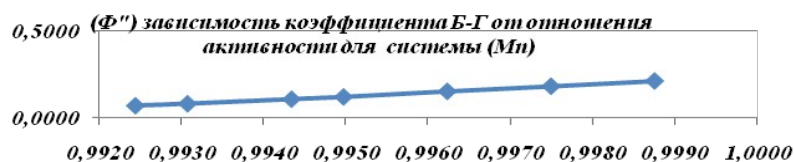
Таблица 6. Область кристаллизаций δ -Mn в Mn-Fe. Сравнительные опытные и расчетные данные для железа.

$X_{Fe,оп}^L$	$X_{Fe,расч}^L$	$\Phi''_{Fe,оп}$	$\Phi''_{Fe,расч}$	$X_{Fe,оп}^S$	$X_{Fe,расч}^S$	$\Phi'_{Fe,оп}$	$\Phi'_{Fe,расч}$
0,006	0,004	0,039	0,036	0,001	0,001	-0,111	-0,185
0,014	0,013	0,047	0,046	0,005	0,005	-0,211	-0,206
0,025	0,029	0,055	0,057	0,013	0,016	-0,325	-0,329
0,042	0,049	0,064	0,068	0,028	0,034	-0,522	-0,556
0,053	0,060	0,069	0,073	0,039	0,045	-0,668	-0,709
0,085	0,085	0,084	0,084	0,070	0,070	-1,064	-1,094
0,107	0,097	0,093	0,89	0,092	0,083	-1,373	-1,326

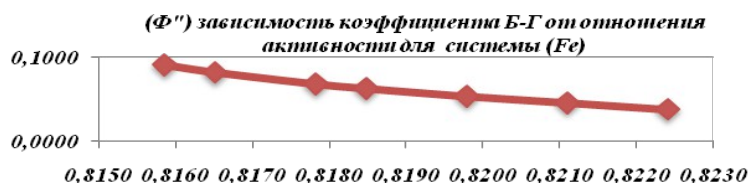
а)



б)



в)



г)

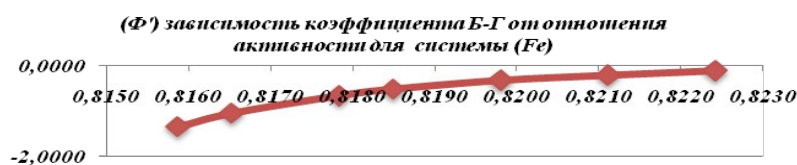


Рисунок 4

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Срывагин И.Т., Есин О.А./Изв. ВУЗов. Черная металлургия. -1961. №9, -С13. 1962. №9,10; 1963, №5,5.
- 2 Richter P., Mathien I., Durand F./Bonnier E. /Advances in Physics. -1967. -16. -523; I. Chem. Phys., 1967, 64, 261.
- 3 Богданович М.П., Мень А.Н., Чуфаров Г.И.// ДАН СССР. -1968. -181. №5, -С1160.
- 4 Сергин Б.И., Ватолин Н.А., Мень А.Н. ДАН СССР, 1971, №2, 400; ЖФХ 1971, 45, №10, 2635, 1972, 46, №6, 1569.
- 5 Мень А.Н., Богданович М.П., Воробьев Ю.П., Чуфаров Г.Н. //Изв. АН СССР. Металлы. 1970. №2. -С135.
- 6 Глазов В.М., Павлова Л.М. Химическая термодинамика и фазовые равновесия. - М.: Металлургия, 1988. - 559 с.
- 7 Толоконникова В.В. Физико – химическое модели фазовых равновесий двойных систем на основе концепции Бьеррума-Гуггенгейма. Дисс...канд. Хим. Наук.: 02.00.04. – Караганда.: ХМИ, 1995. – 155с.
- 8 О. Кубашевски. Диаграммы состояния двойных систем на основе железа. Справочник. Перев.с англ. – М.: Металлургия, 1985. 184 с.
- 9 Вол А.Е. Структура и свойства двойных металлических систем. В 2-х т. М. :Физматиз, 1962.
- 10 Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами. - М: Мир, 1973. - 959 с.

REFERENCES

- 1 Sryvalin I.T., Esin O.A. *Chernaya metallurgiya*. -1961. №9, -С13. 1962. №9,10; **1963**, №5,5.
- 2 Richter P., Mathien I., Durand F. Bonnier E. *Advances in Physics*. -1967. -16. -523; I. Chem. Phys., **1967**, 64, 261.
- 3 Bogdanovich M.P., Men' A.N., Chufarov G.I. *DANSSSR*. -**1968**. -181. №5, -S1160.
- 4 Sergin B.I., Vatolin N.A., Men' A.N. *DANSSSR*, **1971**, №2, 400; ЖФХ 1971, 45, №10, 2635, 1972, 46, №6, 1569.
- 5 Men' A.N., Bogdanovich M.P., Vorob'ev Y.P., Chufarov G.N. *Izv. AN SSSR. Metally*. **1970**. №2. -С135.
- 6 Glazov V.M., Pavlova L.M. *Himicheskaya termodinamika i fazovye ravnovesiya*. - M.: Metallurgiya, **1988**. - 559 s.
- 7 Tolokonnikova V.V. *Fiziko-himicheskoe modeli fazovyh ravnovesij dvojnyh system na osnove koncepcii B'erruma-Guggengejma*. Diss...kond. Him. Nauk.: 02.00.04. – Karaganda.: HMI, **1995**. – 155s.
- 8 O. Kubashevski. *Diagrammi sostoyaniya dvoynyh sistem na osnove zheleza*. Spravochnik. Perv. S angl. – M.: Metallurgiya, **1985**. 184 s.
- 9 Vol A.E. *Stroenie i svoystva dvojnyh metallicheskih system*. V 2-h t. M. :Fizmatiz, **1962**.
- 10 Himmel'blau D. *Analiz processov staticheskimi metodami*. - M: Mir, **1973**.–959s.

С.О. Байсанов, В.В. Толоконникова, А.С. Сүгірлина, Г.И. Нәрікбаева

(Ж. Әбішев атындағы Химия-металлургия институты, Қарағанды қ.)

БЪЕРРУМ-ГУГГЕНГЕЙМ КОЭФФИЦИЕНТІ КӨМЕГІМЕН Fe-Mn ЖҮЙЕСІНДЕГІ ФАЗАЛЫҚ ТЕПЕ-ТЕНДІК СЫЗЫҚТАРЫН МАТЕМАТИКАЛЫҚ ӨНДЕУ

Резюме

Бұл жұмыста темір-марганец күй диаграммасының фазалық тепе-теңдік сызықтарының математикалық сипаттамасының әмбебап әдісі ұсынылған.

Біртұтас талдау негізінде берілген жүйе фазасының кристалдану сызығы келтірілген.

Тірек сөздер: марганец, темір, солидус және ликвидус сызықтары, Бьеррум-Гуггенгейм осмостық коэффициенті.

S. BAISANOV, V. TOLOKONNIKOVA, A. SUGRALINA, G. NARIKBAEVA

("Chemical and Metallurgical Institute named of Zh.Abisheva" Karaganda city)

MATHEMATICAL PROCESSING OF PHASE EQUILIBRIUM LINES IN THE Fe-Mn
SYSTEM BY COEFFICIENTS OF BJERRUM-GUGGENHEIM

Summary

A general method of mathematical description of phase equilibrium lines on the example of the iron - manganese phase diagram is presented in this work. The lines of phases' crystallization of this system are presented on a common analytical basis. Keywords: manganese, iron, liquidus and solidus lines, the osmotic coefficient of Bjerrum Guggenheim.

Key words: manganese, iron, liquidus and solidus lines, the osmotic coefficient of Bjerrum-Guggenheim.

Поступила 31.09.2013 г.