

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЛАВОВ СИСТЕМ In-Sb И In-Bi

Ильиных Н.И.,^{1,2} Гельчинский Б.Р.¹*

¹ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург, Россия, ²ЮУрГУ, Челябинск,
Россия

**ninail@bk.ru*

Целью настоящей работы является исследование равновесного состава и термодинамических характеристик бинарных расплавов систем In-Sb и In-Bi в широком интервале температур.

Исследование выполнено с использованием методики термодинамического моделирования, программного комплекса TERRA и модели идеальных растворов продуктов взаимодействия (ИРПВ) [1].

Моделирование выполнено в исходной среде аргона при общем давлении $P = 10^5$ Па. Исследовалась область температур и составов, соответствующая жидкому состоянию, согласно [2]: система In-Sb: $T = 1000\text{--}1600$ К, In-Bi: $T = 400\text{--}1000$ К, $0 \leq x_{\text{In}} \leq 1$, где x_{In} — исходное содержание индия в расплаве (мол. доли). При моделировании учитывались термодинамические функции следующих элементов и соединений: газообразных In, Bi, Sb, Sb₂, Sb₃, Sb₄, Ar, Ar⁺, In⁺, Bi⁺, Sb⁺, e⁻ (электронный газ) и конденсированных In, Bi, Sb, In, InSb, InBi, In₂Bi, In₅Bi₃. В число компонентов расплавов, наряду атомами In, Bi, Sb, были включены соответствующие ассоциаты: GaSb, InSb, InBi, In₂Bi, In₅Bi₃.

Рассчитаны концентрационные и температурные зависимости содержания компонентов и термодинамических характеристик расплавов. Показано, что для всех соединений, входящих в состав расплавов, наблюдаются немонотонные зависимости с максимумами при определенных атомных отношениях In:Bi и In:Sb, характерных для образования данных соединений. Активности компонентов обоих расплавов характеризуются отрицательными отклонениями от закона Рауля, что типично для систем с сильным взаимодействием компонентов. С ростом температуры активности In, Bi, Sb уменьшаются. Концентрационные зависимости избыточных интегральных характеристики расплавов являются немонотонными с экстремумами при эквимольном содержании компонентов для расплавов In-Sb и при $x_{\text{In}} \sim 0.6$ для расплавов In-Bi.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН.

-
1. Ватолин Н.А., Моисеев Г.К., Трусов Б.Г. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических системах. - М.: Металлургия, 1994. - 353 с.

2. Диаграммы состояния двойных металлических систем / Под ред. Лякишева Н.П. – М.: Машиностроение, 1996-2000 г.г.