Fázové komplexy rovnovážnych fázových diagramov (II)

V

M. MALINOVSKÝ

Katedra anorganickej technológie Slovenskej vysokej školy technickej, Bratislava

Venované prof. RNDr. PhMr. Stanislavovi Škramovskému, DrSc., k 65. narodeninám

Vypracoval sa všeobecný postup na určenie počtu všetkých základných fázových komplexov a spôsob výpočtu vnútorných fázových komplexov rovnovážnych fázových diagramov. Obidva spôsoby sa aplikovali na sústavy s ľubovoľným počtom zložiek, v ktorých existujú jedna alebo dve binárne chemické zlúčeniny.

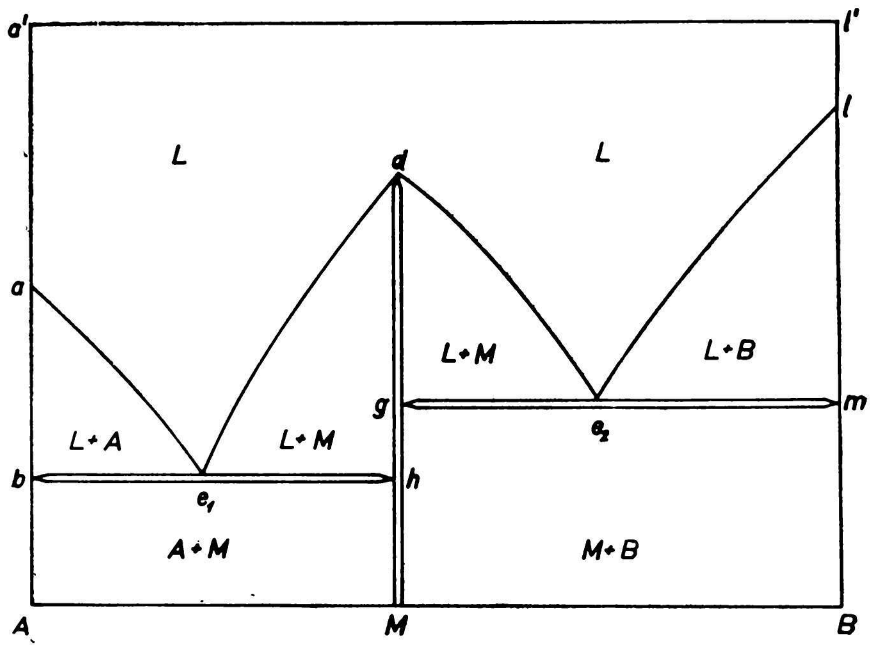
1. Určenie celkového počtu všetkých (vonkajších aj vnútorných) základných fázových komplexov sústav, obsahujúcich jednu chemickú zlúčeninu, ktorá sa taví kongruentne

1.1. Binárna sústava AB (obr. 1)

V tejto sústave sa vyskytujú fázy L, A, B a chemická zlúčenina $M = A_xB_y = xA + yB$. Pri ochladzovaní všetkých tavenín, ktoré zložením zodpovedajú vnútorným bodom sústavy AB, tvorí sa v poslednej etape eutektická zmes dvoch fáz; výnimku tvorí iba izopleta [1, 2], ktorá zložením zodpovedá stabilnej diagonále.[1] Tavenina tohto zloženia poskytuje pri kryštalizácii jedinú tuhú fázu, chemickú zlúčeninu M.

Aby sme určili celkový počet všetkých základných fázových komplexov, treba najprv určiť sumu kombinácií prvej až tretej triedy zo štyroch prvkov, t. j. fáz, ktoré sa vôbec môžu v tejto sústave vyskytovať. Od tejto sumy treba odpočítať všetky kombinácie fáz, obsahujúce súčasne prvky A a B, pretože táto kombinácia sa v dôsledku existencie deliacej diagonály v nijakom fázovom komplexe nevyskytuje. Z tohto dôvodu kombinácie druhej triedy $A + B$ alebo kombinácie vyššej triedy, pokiaľ obsahujú dvojicu $A + B$, sú nereálne. Je preto účelné určiť počet všetkých nereálnych kombinácií fáz danej sústavy. Za tým účelom vytvoríme všetky kombinácie zo všetkých prvkov, s výnimkou prvkov A a B. Ak k ľubovoľnej z týchto kombinácií pripojíme dvojicu $A + B$, stáva sa táto kombinácia nereálnou. Maximálna trieda kombinácie je limitovaná Gibbsovým fázovým zákonom; z toho dôvodu daná kombinácia, zväčšená o dvojicu prvkov $A + B$, musí obsahovať najviac tri fázy. Získaný výsledok treba zvýšiť o jednotku, keďže aj sama dvojica $A + B$ je nereálna. Je teda celkový počet všetkých nereálnych kombinácií fáz v tejto sústave rovný trom. (Sú to kombinácie $L + A + B$, $M + A + B$, $A + B$.) Celkový počet všetkých základných fázových komplexov je preto 11.

[1] Presnejšie označenie by bolo *koncentračná izopleta*, ale v danom prípade nemôže dôjsť k pochybnostiam, na aký parameter sa izopleta vzťahuje.



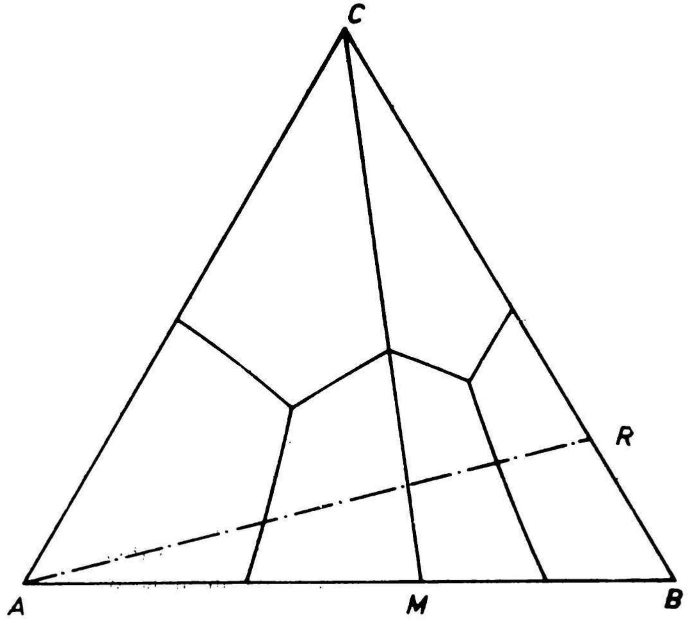
Obr. 1. Izobarický fázový diagram binárnej sústavy AB s podvojnou chemickou zlúčeninou M, ktorá sa taví kongruentne.

Počet vnútorných (reálnych) základných fázových komplexov je daný súčtom kombinácií druhej a tretej triedy zo štyroch prvkov, ktorý treba zväčšiť o dva (fázy L a M) a zmenšiť o všetky nereálne kombinácie, t. j. fázy $A + B$, $L + A + B$ a $M + A + B$. Preto celkový počet všetkých vnútorných základných fázových komplexov je 9.

Pri výpočte sme prijali kombináciu fáz $L + M$ za jeden fázový komplex, aj keď tomuto komplexu zodpovedajú dva fázové útvary, ktoré sú oddelené dvojčiarou [3, 4], t. j. vertikálou dM. Fázy, ktoré sa vyskytujú v jednom i v druhom útvare, zhodujú sa kvalitatívne; fáza M je v obidvoch prípadoch absolútne identická, fáza L sa líši iba kvantitatívne, t. j. pomerom obsahu základných zložiek A a B. Ide tu o inverzný úkaz, na aký sme upozornili v predchádzajúcej práci [5], keď jednému fázovému útvaru zodpovedalo viac než jeden fázový komplex; napríklad eutektikále binárnej sústavy s jednoduchým eutektikom zodpovedá niekoľko fázových komplexov. V tomto prípade naopak viac fázových útvarov zodpovedá jednému a tomu istému fázovému komplexu. Tým sa znova potvrdzuje, že korelácia *fázový útvar*↔*fázový komplex* nie je vo všeobecnosti jednoznačná. Pre stanovisko, že fáza L s obsahom zložky A väčším, než zodpovedá chemickej zlúčenine M, je kvalitatívne totožná s fázou L, obsahujúcou menej zložky A, než je stechiometrický pomer $A : B$ v zlúčenine M, hovorí aj okolnosť, že pri tavení dochádza vždy k väčšej alebo menšej disociácii zlúčeniny M na jej východiskové zložky A a B [6, 7]. Formálne kvalitatívne rozlíšiť tieto dve fázy L by bolo možné iba vtedy, keby chemická zlúčenina M bola pri roztavení absolútne stála, t. j. keby sa ani v najmenšom nerozkladala na pôvodné základné zložky A a B. Iba v tomto prípade by pri roztavení čistej tuhej fázy M vznikla kvapalná fáza L_M a obidve zmienené „modifikácie" fázy L by bolo možné vyjadriť ako $L_M + L_A$ a L_M L_B, t. j. ako taveninu L_M, v prvom prípade s nadbytkom kvapalnej fázy A, v druhom prípade s nadbytkom kvapalnej fázy B.

1.2. Ternárna sústava ABC (obr. 2)

V sústave sa vyskytujú fázy L, A, B, C, $M = xA + yB$. Maximálny počet koexistujúcich fáz je 4. Celkový počet základných fázových komplexov sa rovná sume kombinácií prvej až štvrtej triedy z piatich prvkov mínus počet nereálnych kombinácií, ktorých je dovedna 7. Z tohto dôvodu počet všetkých základných fázových komplexov je 23.



Obr. 2. Koncentračný trojuholník ternárnej sústavy ABC, obsahujúci stabilnú diagonálu CM (a kongruentne sa taviacu chemickú zlúčeninu M) s nanesenými projekciami čiar monovariantnej rovnováhy a s koncentračnou osou jednoduchého rezu *I.* druhu AR.

Počet vnútorných základných fázových komplexov určíme takto: Najprv utvoríme sumu všetkých kombinácií druhej až štvrtej triedy z piatich prvkov; tým vylúčime všetky jednofázové útvary. Potom odpočítame všetky kombinácie druhej a tretej triedy z tuhých fáz a týmto vylúčime komplexy, neobsahujúce fázu L. Ďalej odčítame nereálne kombinácie fáz, počet ktorých musíme zmenšiť o 3 (v opačnom prípade by sme kombinácie $A + B$, $A + B + C$ a $A + B + M$ odpočítali dvakrát). Nakoniec musíme pripočítať 4 (čo zodpovedá jednofázovému útvaru L a trom útvarom z tuhých fáz $A + M + C$, $B + C + M$ a $C + M$). Preto počet vnútorných základných fázových komplexov je 15.

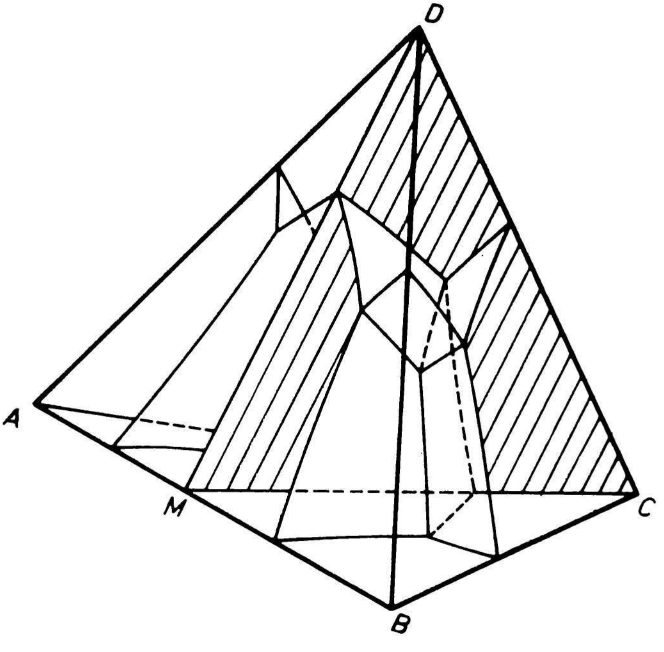
1.3. Kvartérna sústava *ABCD* (obr. 3)

V sústave sa vyskytujú fázy L, A, B, C, D, $M = xA + yB$. Maximálny počet koexistujúcich fáz je 5. Tak ako pri ternárnej sústave aj v tomto prípade platí, že počet všetkých základných fázových komplexov sa rovná:

$$\sum_1^5 F_4^i \,(\text{sum}) = \sum_1^5 C_6^i - \Sigma \textit{ nereálnych kombinácií}, \tag{1}$$

pričom súčet všetkých nereálnych kombinácií je daný výrazom

$$\sum_0^3 C_4^i = 2^4 - 1. \tag{2}$$



Obr. 3. Projekcia izobarického fázového diagramu kvartérnej sústavy *ABCD*, obsahujúca jednu stabilnú diagonálu *CDM*, v smere teplotnej koordináty na koncentračný štvorsten systému.

Preto celkový počet všetkých reálnych základných fázových komplexov je 47. Analogickým postupom ako v prípade ternárnej sústavy dostávame, že počet vnútorných základných fázových komplexov je 27.

1.4. Sústava o *k* zložkách

1.4.1. Určenie počtu všetkých základných fázových komplexov

Najjednoduchší variant výpočtu podľa „priameho spôsobu“ [5] spočíva v tom, že od počtu teoreticky možných základných fázových komplexov odpočítame všetky nereálne fázové komplexy. Počet teoreticky možných fázových komplexov sa rovná súčtu kombinačných čísiel, pre ktoré platí:

a) Počet prvkov p sa rovná celkovému počtu fáz, ktoré sa v sústave vôbec môžu vyskytovať; teda $p = k + 2$.

b) Trieda kombinácií t sa pohybuje v rozmedzí od jednej až do čísla, rovného maximálnemu počtu fáz, ktoré môžu v sústave koexistovať; z Gibbsovho fázového zákona vyplýva, že $\max(t) = \max(f) = k + 1$.

Teda platí:

$$\sum_{1}^{k+1} T_k^i = \sum_{1}^{k+1} C_{k+2}^i = 2^{k+2} - 2. \tag{3}$$

Ďalej určíme počet nereálnych fázových komplexov ΣN_k^i:

N_k^2 je dvojica $A + B$; dá sa napísať:

$$N_k^2 = 1 = C_k^0 .$$

N_k^3 sa rovná kombinačnému číslu prvej triedy z celkového počtu fáz mínus 2 (t. j. dvojica $A + B$); teda $N_k^3 = C_k^1$.

Vo všeobecnosti:

$$N_k^{k+1} = C_k^{k-1}.$$

V tomto prípade platí: $t \leqslant k - 1$, keďže

$$t + (A + B) = t + 2 \leqslant \max(f) = k + 1,$$

$$\sum_{1}^{k+1} N_k^i = \sum_{0}^{k-1} C_k^i = 2^k - 1. \tag{4}$$

Potom pre hľadaný počet reálne existujúcich základných fázových komplexov dostávame:

$$\sum_{1}^{k+1} F_k^i(\text{sum}) = 2^{k+2} - 2 - 2^k + 1 = 3 \,.\, 2^k - 1 . \tag{5}$$

1.4.2. Určenie celkového počtu vnútorných základných fázových komplexov

Na určenie celkového počtu vnútorných základných fázových komplexov existuje viacej postupov; uvedieme jeden z nich.

I. Určíme všetky kombinácie fáz, zodpovedajúce útvarom dvojfázovým a vyšším. Ich počet je daný súčtom kombinácií druhej až $(k + 1)$ triedy z $(k + 2)$ prvkov:

$$\sum_{2}^{k+1} C_{k+2}^i = 2^{k+2} - k - 4. \tag{6}$$

II. Odpočítame všetky kombinácie, v ktorých sa nevyskytuje kvapalná fáza L. Týmto vylúčime jednak okrajové fázové útvary, jednak tri vnútorné útvary, zložené z tuhých fáz. Počet všetkých prvkov je teda $(k + 1)$, trieda kombinácie je druhá až k-ta:

$$\sum_{2}^{k} C_{k+1}^{i} = 2^{k+1} - k - 3. \tag{7}$$

III. Odpočítame všetky nereálne kombinácie, t. j. také, ktoré obsahujú dvojicu fáz $A + B$. Ide o kombinácie triedy nultej až $(k - 1)$ z k prvkov:

$$\sum_{0}^{k-1} C_{k}^{i} = 2^{k} - 1. \tag{8}$$

IV. Pripočítame nereálne kombinácie, ktoré neobsahujú fázu L, pretože inak by sme ich odpočítali dvakrát (sú totiž obsiahnuté jednak v počte kombinácií ad *II* a implicitne v kombináciách ad *III*). Ide o kombinácie, utvorené z úhrnného počtu tuhých fáz, s výnimkou dvojice $A + B$; celkový počet prvkov je teda $k - 1$. Trieda kombinácie je nultá až $k - 2$, preto po pripojení dvojice $A + B$ k predchádzajúcej skupine fáz vznikne útvar minimálne dvojfázový a maximálne k-fázový. V uvedenej sústave podľa fázového zákona počet koexistujúcich tuhých fáz nemôže totiž prevýšiť počet zložiek v sústave. Preto celkový počet týchto kombinácií je:

$$\sum_{0}^{k-2} C_{k-1}^{i} = 2^{k-1} - 1. \tag{9}$$

V. Napokon treba získaný čiastkový výsledok zväčšiť o počet jednofázových vnútorných útvarov, t. j. o jeden útvar, ktorý zodpovedá kvapalnej fáze L, a o tri útvary, ktoré sú vytvorené iba z tuhých fáz. Jeden z týchto troch útvarov zodpovedá deliacej figúre sústavy.

Celkove teda:

$$\sum_{1}^{k+1} F_{k}^{i}(\text{in}) = (2^{k+2} - k - 4) - (2^{k+1} - k - 3) -$$
$$- (2^{k} - 1) + (2^{k-1} - 1) + 4 = 3 \; 2^{k-1} + 3. \tag{10}$$

Prvé štyri etapy výpočtov možno prehľadne znázorniť grafickou schémou (obr. 4). Pomocou určitého „súradnicového systému" rozdelíme rovinu na štyri oblasti. Obidve oblasti vpravo od osi y sa označujú znamienkom plus, oblasti vľavo znamienkom mínus. Obidve oblasti nad osou x sú reálne, oblasti pod osou sú nereálne (t. j. zodpovedajú nereálnym fázovým útvarom). Prvá oblasť zodpovedá reálnym fázovým útvarom, obsahujúcim fázu L. Druhá reprezentuje reálne fázové útvary, v ktorých fáza L chýba. Tretia a štvrtá znázorňujú nereálne fázové útvary, ktoré v jednom prípade (tretia oblasť) neobsahujú fázu L, v druhom (štvrtá oblasť) obsahujú. Všetky oblasti sa vzťahujú k fázovým útvarom o $k \geqslant 2$.

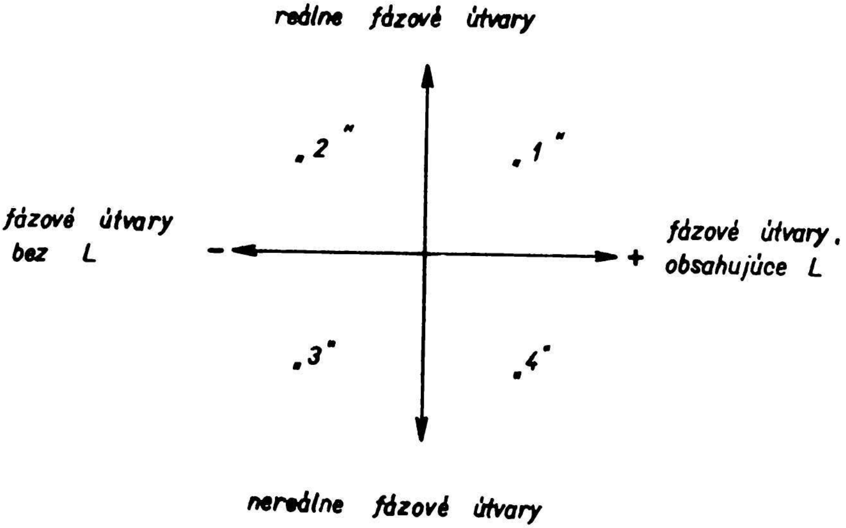
Potom pre jednotlivé etapy výpočtu platí:

I. etapa zodpovedá súčtu všetkých 4 oblastí: „1“ + „2“ + „3“ + „4“·

II. etapa zodpovedá oblastiam: „2“ + „3“;

III. etapa zodpovedá oblasti: „3“ + „4“;

IV etapa zodpovedá oblasti: „3“.



Obr. 4. Schéma na určenie počtu základných vnútorných fázových komplexov sústav s jednou stabilnou diagonálou.

Teda ak spočítame oblasti *I.* a *IV* etapy a ak odpočítame od čiastkového výsledku oblasti *II.* a *III.* etapy, zostane nám oblasť „1“, v ktorej je $3 \,.\, 2^{k-1} - 1$ reálnych fázových útvarov. Po pripočítaní čísla 4 dostávame hľadaný výsledok.

Získané výsledky, obsiahnuté v rovniciach (*5*) a (*10*), môžeme preveriť na správnosť napríklad tak, že určíme hraničnú (okrajovú) hodnotu k, pre ktorú je ešte zachovaný vzťah

$$3 \,.\, 2^k - 1 \geqslant 3 \,.\, 2^{k-1} + 3. \qquad (11)$$

Ľahko sa presvedčíme, že pre $k \geqslant 2$ platí:

$$3 \,.\, 2^k - 1 > 3 \,.\, 2^{k-1} + 3. \qquad (12)$$

Fyzikálny zmysel je zrejmý, pretože najjednoduchšia možná sústava uvedeného typu je práve dvojzložková.

Ľahko sa môžeme presvedčiť, že výsledné vzorce na určenie základných fázových komplexov (*5*) a (*10*) ostávajú v platnosti aj pre sústavy, obsahujúce jednu binárnu chemickú zlúčeninu, ktorá sa taví inkongruentne.

2. Určenie počtu základných fázových komplexov sústav, ktoré obsahujú dve binárne chemické zlúčeniny, taviace sa kongruentne

2.1. Vonkajšie a vnútorné fázové komplexy[1]

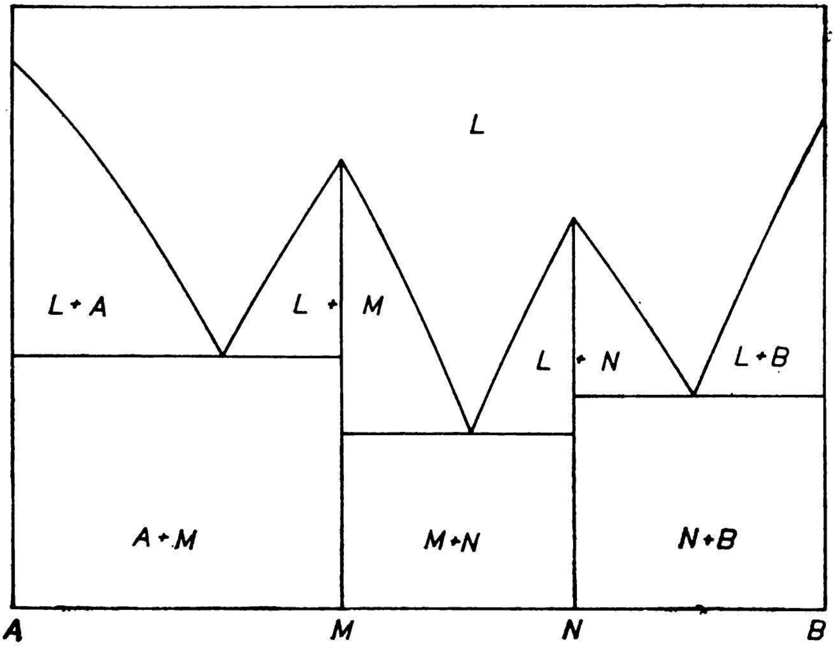
Vo všeobecnosti platí vzťah

$$\Sigma F(\text{sum}) = \Sigma T - \Sigma N, \tag{13}$$

kde ΣF(sum) = súčet všetkých vonkajších aj vnútorných základných fázových komplexov, ktoré v sústave reálne existujú,

ΣT = súčet všetkých teoreticky možných kombinácií z počtu prvkov, rovného počtu všetkých fáz, ktoré sa v sústave vyskytujú; trieda kombinácií je prvá až $(k + 1)$,

ΣN = súčet všetkých nereálnych fázových komplexov, t. j. kombinácií fáz, prítomnosť ktorých by nebola v rozpore s Gibbsovým fázovým zákonom, ale ktoré sa v sústave nevyskytujú v dôsledku existencie stabilných diagonál.



Obr. 5. Izobarický fázový diagram binárnej sústavy AB s dvoma chemickými zlúčeninami, ktoré sa tavia kongruentne.

[1] Najjednoduchším predstaviteľom sústav daného typu je binárna sústava AB, obsahujúca chemické zlúčeniny M a N, ktoré sa tavia kongruentne (obr. 5).

2.1.1. Určenie ΣT

Táto veličina sa rovná súčtu kombinačných čísiel, pre ktoré platí:

a) Počet prvkov p sa rovná úhrnnému počtu fáz, ktoré môžu v sústave existovať, teda $p = k + 3$.

b) Trieda kombinácie t sa pohybuje od jednej do $(k + 1)$; potom dostávame:

$$\Sigma T = \sum_{1}^{k+1} C_{k+3}^{i}$$

keďže je známe, že

$$\sum_{1}^{k+1} C_{k+3}^{i} = \sum_{1}^{k+3} C_{k+3}^{i} - C_{k+3}^{k+2} - C_{k+3}^{k+3},$$

a teda

$$\Sigma T = 2^{k+3} - 1 - (k + 3) - 1 = 2^{k+3} - k - 5. \tag{14}$$

2.1.2. Určenie ΣN

Pre dvojzložkovú sústavu daného typu platí:

$$\sum_{1}^{3} N_{2}^{i} = C_{3}^{0} + C_{3}^{1} + 2C_{2}^{0} + 2C_{2}^{1} = \sum_{0}^{1} C_{3}^{i} + 2\sum_{0}^{1} C_{2}^{i}$$

(Sú to skupiny fáz $A + N$, $A + B$, $M + B$, $A + N + M$, $A + N + B$, $A + N + L$, $A + B + M$, $A + B + L$, $M + B + N$, $M + B + L$.)

Pre trojzložkovú sústavu platí:

$$\sum_{1}^{4} N_{3}^{i} = \sum_{0}^{2} C_{4}^{i} + 2\sum_{0}^{2} C_{3}^{i}.$$

Vo všeobecnosti:

$$\sum_{1}^{k+1} N_{k}^{i} = \sum_{0}^{r} C_{m}^{i} + 2 \sum_{0}^{r} C_{n}^{i}$$

Koeficient m sa rovná úhrnnému počtu fáz, schopných existencie v danej sústave, ktorý zmenšíme o jednu nereálnu dvojicu fáz, teda $m = (k + 3) - 2 = k + 1$.

Koeficient $n = m - 1$; pre r platí: $r = \max(f) - 2 = k - 1$.

Dovedna teda platí:

$$\sum_{1}^{k+1} N_{k}^{i} = \sum_{0}^{k-1} C_{k+1}^{i} + 2\sum_{0}^{k-1} C_{k}^{i},$$

$$\sum_{1}^{k+1} N_{k}^{i} = 2^{k+1} - k - 2 + 2(2^{k} - 1) = 2^{k+2} - k - 4. \tag{15}$$

2.1.3. Určenie ΣF(sum)

Dosadením z (*14*) a (*15*) do (*13*) dostávame definitívne:

$$\sum_1^{k+1} F_k^i(\text{sum}) = 2^{k+2} - 1. \tag{16}$$

2.2. Vnútorné fázové komplexy

Postupujeme obdobne ako v prípade sústavy s jednou chemickou zlúčeninou:

I. Počet kombinácií fáz, ktoré zodpovedajú útvarom dvojfázovým až $(k+1)$ fázovým, je:

$$\sum_2^{k+1} C_{k+3}^i = \sum_1^{k+3} C_{k+3}^i - C_{k+3}^1 - C_{k+3}^{k+2} - C_{k+3}^{k+3},$$

$$\sum_2^{k+1} C_{k+3}^i = 2^{k+3} - 2k - 8. \tag{17}$$

II. Počet kombinácií fáz, ktoré neobsahujú fázu L (útvary dvojfázové a vyššie), je:

$$\sum_2^{k+1} C_{k+2}^i = \sum_1^{k+2} C_{k+2}^i - C_{k+2}^1 - C_{k+2}^{k+2},$$

$$\sum_2^{k+1} C_{k+2}^i = 2^{k+2} - k - 4. \tag{18}$$

III. Počet nereálnych fázových komplexov (pozri *2.1.2.*) je:

$$\sum_1^{k+1} N_k^i = 2^{k+2} - k - 4. \qquad (15)^1$$

IV. Počet nereálnych kombinácií, neobsahujúcich fázu L.

Pre sústavy o $k = 2, 3, 4$ platí:

$$\sum_1^3 N_2^i(\text{solid.}) = \sum_0^1 C_2^i + 2\sum_0^1 C_1^i,$$

[1]Porovnaním (*15*) a (*18*) dochádzame k identite:

$$\sum_0^{k-1} C_{k+1}^i + 2\sum_0^{k-1} C_k^i = \sum_2^{k+1} C_{k+2}^i.$$

$$\sum_{1}^{4} N_3^i(\text{solid.}) = \sum_{0}^{2} C_3^i + 2\sum_{0}^{2} C_2^i\,,$$

$$\sum_{1}^{5} N_4^i(\text{solid.}) = \sum_{0}^{3} C_4^i + 2\sum_{0}^{3} C_3^i$$

Vo všeobecnosti:

$$\sum_{1}^{k+1} N_k^i(\text{solid.}) = \sum_{0}^{k-1} C_k^i + 2\sum_{0}^{k-1} C_{k-1}^i\,,$$

$$\sum_{1}^{k+1} N_k^i(\text{solid.}) = 2^k - 1 + 2\,.\,2^{k-1} = 2^{k+1} - 1. \qquad (19)$$

V. Počet fázových komplexov, pozostávajúcich iba z tuhých fáz, je 5 (sú to skupiny fáz $A + M + C + \ldots$; $M + N + C + \ldots$; $N + B + C + \ldots$; $M + C + D + \ldots$; $N + C + D + \ldots$); nakoniec treba uvažovať fázu L, ktorá takisto patrí k vnútorným základným fázovým komplexom. Je preto potrebné čiastkový výsledok zväčšiť o číslo 6.

Celkove teda platí:

$$\sum_{1}^{k+1} F_k^i(\text{in}) = „I“ - „II“ - „III“ + „IV“ + „V“.$$

Po dosadení a úprave:

$$\sum_{1}^{k+1} F_k^i(\text{in}) = 2^{k+1} + 5. \qquad (20)$$

Napríklad v sústave daného typu (obr. 5) sú to fázové komplexy L, M, N; $L + A$, $L + M$, $L + N$, $L + B$, $A + M$, $M + N$, $N + B$; $L + A + M$, $L + M + N$, $L + N + B$.

Porovnaním (*16*) a (*20*) sa ľahko presvedčíme, že pre $k \geqslant 2$ platí:

$$2^{k+2} - 1 > 2^{k+1} + 5,$$

čo je v zhode s fyzikálnym zmyslom týchto rovníc.

Získané vzťahy (*16*) a (*20*) ostávajú v platnosti aj pre sústavy, obsahujúce dve binárne chemické zlúčeniny, ktoré sa tavia inkongruentne.

ФАЗОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ РАВНОВЕСНЫХ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ (II)

М. Малиновски

Кафедра неорганической технологии Словацкого политехнического института, Братислава

Был разработан общий метод для определения числа всех основных фазовых комплексов и способ расчета внутренних фазовых комплексов равновесных фазовых диаграмм. Оба способа применились в системах с любым числом компонентов, в которых

существуют одна или две бинарные химические соединения, плавлящиеся так конгруэнтно, как и инконгруэнтно.

Дла системы с одним химическим соединением имеет силу

$$\Sigma F_k(\text{sum}) = 3 \,.\, 2^k - 1, \qquad \Sigma F_k(\text{in}) = 3 \,.\, 2^{k-1} + 3.$$

Для системы с двумя химическими соединениями вывелись отношения

$$\Sigma F_k(\text{sum}) = 2^{k+2} - 1, \qquad \Sigma F_k(\text{in}) = 2^{k+1} + 5.$$

В этих уравнениях $\Sigma F_k(\text{sum})$ означает число всех (внешних и внутренних) фазовых комплексов, $\Sigma F_k(\text{in})$ число внутренних фазовых комплексов, k число компонентов системы.

Preložil M. Fedoroňko

PHASENKOMPLEXE VON GLEICHGEWICHTSPHASENDIAGRAMMEN (II)

M. Malinovský

Lehrstuhl für anorganische Technologie an der Slowakischen Technischen Hochschule, Bratislava

Es wurde ein allgemeines Verfahren zur Bestimmung der Anzahl aller Grundphasenkomplexe und ein Verfahren zur Berechnung der Anzahl von inneren Phasenkomplexen der Gleichgewichtsphasendiagramme ausgearbeitet. Beide Methoden wurden für Systeme mit beliebiger Komponentenzahl verwendet, die eine oder zwei binäre, kongruent oder inkongruent schmelzende chemische Verbindungen enthalten.

Für Systeme mit einer chemischen Verbindung gilt

$$\Sigma F_k(\text{sum}) = 3 \,.\, 2^k - 1 \,, \qquad \Sigma F_k(\text{in}) = 3 \,.\, 2^{k-1} + 3$$

Für Systeme mit zwei chemischen Verbindungen wurden Gleichungen

$$\Sigma F_k(\text{sum}) = 2^{k+2} - 1 \,, \qquad \Sigma F_k(\text{in}) = 2^{k+1} + 5$$

abgeleitet, wobei $\Sigma F_k(\text{sum})$ die Anzahl aller Phasenkomplexe (äußerer und innerer), $\Sigma F_k(\text{in})$ die Anzahl innerer Phasenkomplexe, und k die Komponentenzahl des Systems darstellt.

Preložil M. Liška

LITERATÚRA

1. Fanderlik M., *Diagramy fázových rovnováh pro sklářství I. Všeobecná část*, 10, 29. *Příloha Sklářských rozhledů* ***XXVI*** (1950).
2. Hruška V., *Počet grafický a graficko-mechanický*, 218. Přírodovědecké vydavatelství, Praha 1952.
3. Palatnik L. S., Landau A. I., *Ž. fiz. chim.* ***29***, 1784, 2054 (1955); ***30***, 2399 (1956).
4. Palatnik L. S., Landau A. I., *Fazovyje ravnovesija v mnogokomponentnych sistemach*, 220. Izdateľstvo Charkovskogo universiteta, Charkov 1961.
5. Malinovský M., *Chem. zvesti* ***17***, 695 (1963).

6. Anosov V. J., Pogodin S. A., *Osnovnyje načala fiziko-chimičeskogo analiza*, 396. Izdateľstvo Akademii nauk SSSR, Moskva—Leningrad 1947.
7. Petrov D. A., *Trojnyje sistemy*, 60. Izdateľstvo Akademii nauk SSSR, Moskva 1953.

Do redakcie došlo 27. 5. 1966

Adresa autora:

Doc. inž. Milan Malinovský, CSc., Katedra anorganickej technológie SVŠT, Bratislava, Jánska 1.