

Новые корреляционные соотношения для прогноза характеристик фазовых диаграмм двойных смесей компонентов энергетических материалов

© Попок*⁺ Владимир Николаевич и Шандаков Владимир Алексеевич
Акционерное общество «Федеральный научно-производственный центр «Алтай».
ул. Социалистическая, 1. г. Бийск, 659322. Алтайский край, Россия.
Тел.: (3854) 30-19-37. E-mail: vnpopok@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: компоненты смесевых энергетических материалов, эвтектики, сокристаллизаты, фазовые диаграммы, корреляционные соотношения, температура плавления, соотношение компонентов.

Аннотация

Особые точки фазовых диаграмм (эвтектики, перитектики, сокристаллизаты) двойных (в общем случае многокомпонентных) смесей компонентов энергетических материалов характеризуют состояния и свойства смесей, представляющие определенный интерес для разработчиков смесевых энергетических материалов. Построение фазовых диаграмм в виде зависимости температуры плавления от содержания компонентов в смеси проводится на основе экспериментальных данных. Для прогноза особых точек (температура плавления и содержания компонентов в точках эвтектик, перитектик, сокристаллизатов) и аппроксимации экспериментальных данных традиционно используется уравнение Шредера. Применение экспериментальных методов и уравнений Шредера ограничено рядом условий и требований, связанных с растворимостью и термической стойкостью компонентов и смесей, конгруэнтностью плавления, кинетическими особенностями процессов плавления и кристаллизации. Кроме этого, использование уравнения Шредера предполагает в общем случае наличие экспериментальных данных по температуре и энтальпии плавления компонентов и смесей в особых точках. В совокупности это определяет предпринимаемые попытки построения для прогноза свойств смесей в особых точках линии ликвидуса относительно простых корреляционных соотношений или использования модифицированного уравнения Шредера при аппроксимации экспериментальных данных. При этом предполагается использование минимального объема информации для индивидуальных компонентов, например, по температуре их плавления. К настоящему времени опубликованы положительные результаты такого похода к определению соотношения компонентов в двойных смесях при наличии одной особой точки (эвтектики) на линии ликвидуса.

В настоящем исследовании получены новые корреляционные соотношения для прогноза температуры плавления двойных смесей в особых точках линии ликвидуса, содержащей эвтектику, эвтектику и перитектику, две эвтектики и точку сокристаллизации компонентов. При этом используются данные только по температуре плавления индивидуальных компонентов смесей. Полученные высокие значения коэффициентов корреляции (R) $R^2 \approx 0.94$ соответствуют результатам использования уравнений Шредера с данными по температуре и энтальпии плавления компонентов и смесей. Кроме этого, проведена оценка устойчивости корреляций, приведенных в публикациях, при расширении объема выборки компонентов за счет соединений других классов.