

## Teoretyczne wyznaczenie układu fazowego systemu Mg – Pt.

### Abstrakt

Diagramy fazowe pełnią bardzo ważną rolę w inżynierii materiałowej. Informacje zawarte na tego typu rysunkach pozwalają określić nie tylko zakres homogeniczności poszczególnych faz, ale również stabilności faz jako funkcje temperatury, przemiany fazowe, czy kolejność krystalizacji poszczególnych faz. Eksperymentalne wyznaczenie układu fazowego jest długotrwałe i kosztowne, dlatego też zastosowanie metod obliczeniowych wydaje się być odpowiednim rozwiązaniem, które pozwala na oszczędności czasu i środków. Metoda CALPHAD, która pozwala obliczać diagramy fazowe oraz właściwości termodynamiczne na podstawie zestawu funkcji energii swobodnej Gibbsa jest ogólnie przyjętym podejściem do termodynamicznego modelowania układów metalicznych bądź układów metal – niemetali. Na szczególną uwagę zasługuje łatwość, jaką oferuje metoda CALPHAD, w przypadku przewidywania właściwości termodynamicznych oraz układów fazowych systemów wieloskładnikowych na podstawie układów binarnych. Podstawą modelowania układów fazowych w metodzie CALPHAD jest optymalizacja funkcji energii swobodnych Gibbsa na podstawie dostępnych danych eksperymentalnych. Niestety, w pewnych przypadkach, dane eksperymentalne są praktycznie niedostępne i obliczenia teoretyczne są jedynym sposobem na wyznaczenie diagramu fazowego. Niniejsza prezentacja omawia przykład układu podwójnego magnez – platyna, którego układ fazowy jest niedostępny w literaturze. Na podstawie obliczeń ab initio oraz znikomej ilości danych eksperymentalnych było możliwe zamodelowanie funkcji energii swobodnych Gibbsa i w konsekwencji zaproponowanie układu fazowego systemu magnez – platyna.