

УДК 669.715

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ ТРОЙНОЙ СИСТЕМЫ FE-TI-SB
МЕТОДОМ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ**

Тукмакова А.С. (Университет ИТМО), Бондаренко К.С. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – к.т.н., доцент, Новотельноа А.В.

(Университет ИТМО)

Аннотация Методом вычислительной термодинамики рассчитана фазовая диаграмма тройной системы Ti-Fe-Sb. Объектом исследования является фаза полугейслера с составом $TiFe_{1.5}Sb$, представляющая интерес в качестве потенциально эффективного и стабильного термоэлектрического среднетемпературного материала. Определены три равновесные области, содержащие фазу $TiFe_{1.5}Sb$ в температурном диапазоне от 970 до 1070 К.

Введение Сплавы Гейслера (и полугейслера) являются перспективными термоэлектрическими материалами. К их основным достоинствам можно отнести низкую стоимость, стабильность, высокий уровень экологической безопасности. Тройная система Fe-Ti-Sb, ее фазовая диаграмма и фазовое равновесие при разных температурах являются объектом данного исследования.

Основная часть Вычисления проведены в коммерческой программе Pandat, основанной на методах вычислительной термодинамики, позволяющих рассчитывать фазовые диаграммы (CALPHAD, CALculations of PHase Diagrams). Представлены значения энтропии образования для описания энергии Гиббса. Построены диаграммы для сечений 970, 1020 и 1070 К. Определены три равновесные области, содержащие фазу $TiFe_{1.5}Sb$ в температурном диапазоне от 970 до 1070 К: 1) $BCC_A2+TiFe_{1.5}Sb$, 2) $BCC_A2+Fe_2Ti+TiFe_{1.5}Sb$, 3) $Fe_2Ti+TiFeSb+TiFe_{1.5}Sb$.

Выводы Полученные результаты могут быть использованы в технологии создания термоэлектрических материалов на основе железа, титана и олова, в частности, при подборе режимов температурной обработки.