

В. И. НОСЫШАЙКО, Е. А. АЛЕКСЕЕВА, В. Н. ПЕРВИКОВА,  
А. Г. КРАЕВА, Л. С. ДАВЫДОВА

**РАЗВИТИЕ МЕТОДА ТРИАНГУЛЯЦИИ ДИАГРАММ СОСТАВА  
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ВЗАИМНЫХ СИСТЕМ  
С КОМПЛЕКСНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ  
С ПРИМЕНЕНИЕМ ГРАФОВ И ЭВМ**

(Представлено академиком И. В. Таланцевым 20 III 1972)

Авторами был предложен общий метод триангуляции \* диаграмм состава многокомпонентных систем с комплексными соединениями с использованием теории графов и ЭВМ (1).

С целью дальнейшего развития этого метод нами рассмотрена триангуляция ряда диаграмм состава экспериментально исследованных пяттерных взаимных систем из 8 и 9 солей с комплексными соединениями. В результате выведены общие простые правила, позволяющие без использования приемов многомерной геометрии произвести разбиение диаграмм состава взаимных систем практически с любым числом компонентов и соединений.

На рис. 1 изображены проекции диаграмм состава (с нанесенными стабильными диагоналями) пяттерных взаимных систем: а) из 8 солей  $Li, K \parallel Cl, SO_4, WO_4, BO_2$  с 2 комплексными соединениями:  $Li_2WO_4 \cdot K_2WO_4$  ( $D_1$ ) и  $Li_2SO_4 \cdot K_2SO_4$  ( $D_2$ ) (2); б) из 9 солей  $Li, K, Na \parallel Cl, BO_2, WO_4$  с двумя соединениями  $Li_2WO_4 \cdot K_2WO_4$  ( $D_1$ ) и  $2NaCl \cdot Na_2WO_4$  ( $D_2$ ) (5).

В результате разбиения диаграмм состава этих систем на основе развиемого метода с применением теории графов и использованнем стабильных диагоналей для каждой системы выведены стабильные ячейки — пентатопы с определенным составом и химическим взаимодействием \*\*. На их основе построены схемы сингулярных звезд рассматриваемых многокомпонентных систем из 8 и 9 солей с комплексными соединениями, участвующими в разбиении и увеличивающими число стабильных ячеек в каждой системе (рис. 2).

Результаты разбиения диаграмм состава указанных систем подтверждаются экспериментальными исследованиями различных авторов (2-5). Все это позволило нам вывести простые правила, дающие возможность производить разбиение диаграмм состава взаимных систем практически с любым числом компонентов и соединений.

Правила триангуляции диаграмм состава многокомпонентных взаимных систем с комплексными соединениями.

1. Изображаем диаграмму состава  $n$ -компонентной взаимной системы в виде  $n - 1$ -мерного политопа с числом вершин, отвечающим числу солей по методу Р. И. Радищева (6).

\* Триангуляция  $n$ -мерного политопа, изображающего диаграмму состава при исследовании многокомпонентных систем, позволяет вывести элементы сингулярной звезды (отражающей комбинацию солей, не реагирующих между собой, — продукты реакции) и неравновесной звезды (исходные химические вещества, реагирующие между собой с образованием солей сингулярной звезды).

\*\* Получение симплексов (носителей эвтектик) с заданными свойствами по составу, температурам плавления, химическому взаимодействию играет большую роль при выборе того или иного участка диаграммы состава многокомпонентной системы при ее изучении в технологических целях.

2. Каждую вершину политопа условно обозначаем символами  $X_1, X_2, X_3$  и т. д. по числу солей и комплексных соединений (рис. 1), что необходимо для упрощения дальнейших расчетов.

3. Сопоставляем произведение сумм символов вершин (см. (4)). Каждая сумма образуется сочетанием каждой вершины политопа со всеми остальными вершинами, не связанными с ней геометрическими элементами (стабильными диагоналями, дополнительными триангулирующими секущими и ребрами призмы). Такие вершины называются несмежными. Вершины политопа, имеющие геометрическую связь со всеми остальными вершинами (например, вершина  $X_1$ , рис. 1), в произведение сумм не включа-

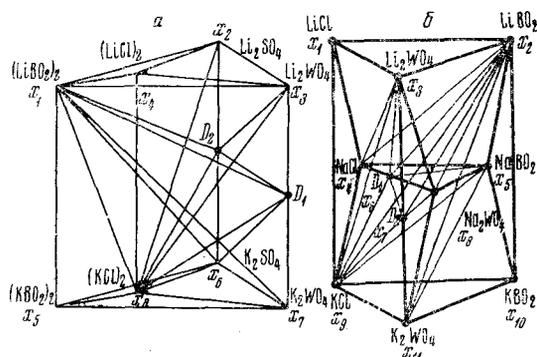


Рис. 1. Проекция диаграмм состава пьтерных взаимных систем: *a* — из 8 солей с двумя соединениями Li, K || Cl, SO<sub>4</sub>, WO<sub>4</sub>, BO<sub>2</sub>; *b* — из 9 солей с двумя соединениями Li, Na, K || Cl, BO<sub>2</sub>, WO<sub>4</sub>.

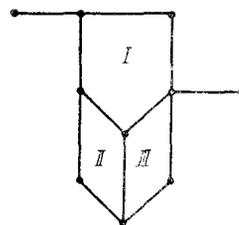


Рис. 2. Схема сингулярной звезды системы из 9 солей: Li, Na, K || Cl, BO<sub>2</sub>, WO<sub>4</sub>.

ются и в расчетах не участвуют. В результате таких сочетаний получаем произведение сумм символов вершин, число которых зависит от количества компонентов и химических соединений в системе.

4. Производим перемножение сумм в произведении в строгой последовательности. При этом учитывается закон поглощения, т. е. если из двух полученных произведений одно полностью входит во второе, то произведение с большим числом символов (вершин) исключается и в дальнейших расчетах не участвует.

5. В результате получаем сумму некоторых произведений символов вершин. Для каждого произведения выписываем не входящие в него символы вершин из общего числа вершин политопа. Получаем символы вершин ячеек (в данном примере стабильных), отражающих соли изучаемой системы.

6. На основе полученных ячеек строим схему сингулярной звезды, в которую входят также секущие и базисные элементы, связанные в определенной последовательности в каждом типе разбиения (на схеме (рис. 2) стабильные ячейки-симплексы обозначены точками, секущие симплексы — отрезками прямых; 10 пентагонов образуют 3 цикла (2 — четырех- и 1 — пятичленный) сингулярной звезды с двумя отрезками). Сингулярные ячейки являются носителями эвтектик, определяющих парагенезы солей.

7. Аналогичным путем на основе нестабильных диагоналей проводят неравновесное разбиение и выводят нестабильные ячейки неравновесной звезды.

Всесоюзный заочный политехнический институт  
Москва

Поступило  
20 III 1972

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- <sup>1</sup> А. Г. Краева, В. Н. Первикова и др., ДАН, 202, № 4 (1972). <sup>2</sup> В. И. Посьпайко, Н. С. Домбровская, ЖНХ, 7, 645 (1962). <sup>3</sup> Г. А. Бухалова, З. А. Матейко, Сборн. изданий Ростовск. гос. ун-в., 1964, стр. 24. <sup>4</sup> Е. А. Алексеева, Н. С. Домбровская, ЖНХ, 7, 1659 (1962). <sup>5</sup> Р. А. Ларина, А. Г. Бергман и др., ЖНХ, 16, 1752 (1971). <sup>6</sup> В. П. Радичев, Многокомпонентные системы. Монография, ИОНХ АН СССР, 1964.