

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ, ОПИСЫВАЕМЫХ ДВУХКОМПОНЕНТНЫМ ПАРАМЕТРОМ ПОРЯДКА

**А. А. Муковнин, В. М. Таланов**

*Южно-Российский государственный технический университет  
(Новочеркасский политехнический институт)*

В рамках теории фазовых переходов Ландау проведено моделирование фазовых равновесий в системах, инвариантных относительно преобразований кристаллического класса  $3m$ . Такие превращения характерны для широкого класса веществ: сплавов, сложных оксидов, молекулярных кристаллов и т.д.

На основе сформулированных условий минимума термодинамического потенциала как функции двухкомпонентного параметра порядка, преобразующегося по неприводимому представлению  $E_g$ , разработана методика определения термодинамически устойчивых фаз. На языке Delphi написана компьютерная программа, реализующая эту методику и выводящая результат расчёта на экран в виде двумерной фазовой диаграммы. При этом в областях сосуществования двух фаз отображаются линии фазовых переходов первого рода. Предусмотрена возможность построения сразу нескольких таких сечений, что позволяет проследить эволюцию фазовой диаграммы, вызванную изменением какого-либо третьего коэффициента разложения потенциала.

С использованием созданной программы проведена классификация возможных типов фазовых диаграмм для случая разложения термодинамического потенциала шестой степени по компонентам параметра порядка.