CHEMICKÉ ZVESTI

ROČNÍK XV, ČÍSLO 9
SEPTEMBER 1961

K TEÓRII RACIONÁLNEHO OZNAČOVANIA REZOV A FIGURATÍVNYCH BODOV MNOHOZLOŽKOVÝCH SÚSTAV (II) JEDNODUCHÉ REZY II. DRUHU

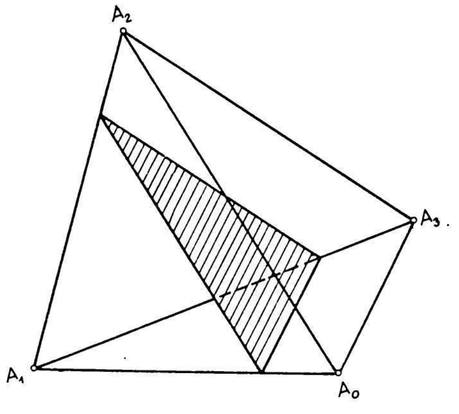
M. MALINOVSKÝ, K. MATIAŠOVSKÝ, C. KUBÍK
Katedra anorganickej technológie Slovenskej vysokej školy technickej v Bratislave
ČSAV, Ústav anorganickej chémie Slovenskej akadémie vied v Bratislave

A. Jednoduché rezy II. druhu

1. Definícia rezov

Jednoduché rezy II. druhu sú množiny figuratívnych bodov zmesí zložiek, v ktorých je relatívna koncentrácia c zložiek konštantná, kým koncentrácia ostatných $k—c$ zložiek je premenná vo variabilnom intervale (0, [100 — — Σc] %); výraz Σc znamená súčet hodnôt koncentrácií zložiek, ktorých relatívna koncentrácia je v danom reze konštantná. Pre vnútorný bod sústavy platí podmienka, že $\Sigma c < 100$ %; ak $\Sigma c = 100$ %, ide o vonkajší (hraničný) bod sústavy [2, 3].

Geometricky sú tieto rezy typické tým, že sú rovnobežné s určitým ohraničujúcim útvarom [2] koncentračného polyédra danej sústavy. Všetky ohraničujúce útvary tohto druhu rezov, pokiaľ majú charakter rezov, sú opäť jednoduché rezy II. druhu (obr. 1). Tieto rezy podobne ako jednoduché



Obr. 1. Rovinný jednoduchý rez II. druhu v koncentračnom štvorstene kvartérnej sústavy A_{0-3}.

rezy I. druhu sa vo všeobecnosti používajú pri experimentálnom štúdiu viaczložkových sústav [1].

2. Variantnosť rezov

Ak je v zmesiach k-zložkovej sústavy relatívna koncentrácia c zložiek stála, tvorí množina figuratívnych bodov týchto zmesí rez, ktorého variantnosť, zhodná s jeho geometrickou rozmernosťou, sa rovná $(k—1)—c$.

Vzťahy medzi rozmernosťou G koncentračného polyédra k-zložkovej sústavy a medzi veličinami c a $g = v$ (variantnosť rezu) sú v tab. 1.

Tabuľka 1

Závislosť rozmernosti jednoduchých rezov II. druhu od počtu zložiek s konštantnou koncentráciou v k-zložkových sústavách

k	G	c	g
3	2	1	1
4	3	1 2	2 1
5	4	1 2 3	3 2 1
k	$k—1$	1 2 . . . $k—2$	$k—2$ $k—3$ . . . 1

3. Celkový počet rezov

Celkový počet rezov jednotlivých rozmerností je $k—2$.

Napríklad desaťzložková sústava obsahuje rezy priamkové, rovinné, priestorové trojrozmerné..., priestorové osemrozmerné. Tieto rezy sa líšia počtom zložiek, ktoré obsahujú v konštantnej koncentrácii; priamkový ich obsahuje osem, rovinný sedem atď.

Rezy rovnakej rozmernosti sa navzájom líšia *kombináciou zložiek*, ktoré obsahujú v konštantnej koncentrácii. Celkový počet týchto *typov rezov* danej rozmernosti je rovný $\binom{k}{c}$.

Napríklad desaťzložková sústava obsahuje 10 kvalitatívne rôznych priamkových rezov, 45 rovinných rezov atď.

Celkový počet všetkých typov jednoduchých rezov II. druhu k-zložkovej sústavy je daný výrazom

$$\sum_{c=1}^{c=k-2} \binom{k}{c} = \binom{k}{1} + \binom{k}{2} + \cdots + \binom{k}{k-2}$$

$$\sum_{c=1}^{c=k-2} \binom{k}{c} = \sum_{c=1}^{c=k} \binom{k}{c} - \binom{k}{k-1} - \binom{k}{k} = 2^k - k - 2$$

Treba zdôrazniť, že najväčší praktický význam majú priamkové a rovinné rezy. Diagramy zostrojujeme na základe údajov získaných pri štúdiu priamkových rezov, t. j. útvarov s jediným nezávisle premenným koncentračným parametrom.

4. Vzájomná orientácia rezov

Jednoduché rezy II. druhu môžu byť navzájom

a) rovnobežné;

b) rôznobežné: *I*. priesečníky sa nachádzajú v koncentračnom polyédri sústavy,

II. priesečníky sa nenachádzajú v koncentračnom polyédri sústavy;

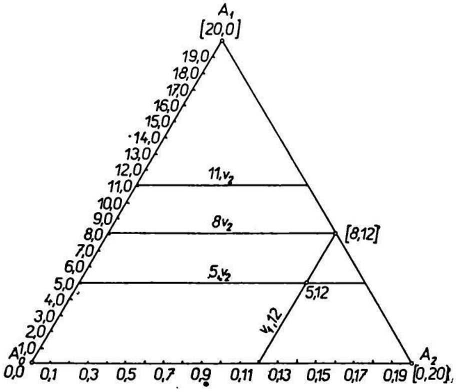
c) mimobežné.

Je zrejmé, že jednoduché rezy II. druhu sa od jednoduchých rezov I. druhu líšia v bodoch *a*) a *b*)-II.

B. Označenie rezov a bodov mnohozložkových sústav

1. Počiatok koordinát, súradnicové osi, jednotka dĺžky. Označenie bodov na osiach

Počiatok koordinát a súradnicové osi volíme rovnako ako pri jednoduchých rezoch I. druhu. Z praktického hľadiska je obyčajne výhodné, aby jednotka dĺžky bola rovnaká pre všetky osi. Body na súradnicovej osi A_0A_i k-zložkovej sústavy označíme $p_i,0_{k-1}$ (obr. 2).



Obr. 2. Označenie bodov na súradnicových osiach a charakter priesečníkov rôznobežných jednoduchých rezov II. druhu v koncentračnom trojuholníku ternárnej sústavy A_{0-2}.

2. Označenie rezov a súradnicová sieť

a) Ternárna sústava A_{0-2}

Existujú dva typy jednoduchých primárnych rezov II. druhu tejto sústavy: rez so stálou koncentráciou zložky A_1, ktorý označíme p_1,v_2, a rez so stálou koncentráciou zložky A_2, ktorého rovnica [3] je v_1,p_2. Ide pritom o rôznobežné rezy, ktoré môžu, avšak nemusia mať spoločný bod v koncentračnom trojuholníku sústavy.

Existuje jednoduché kritérium, pomocou ktorého ľahko určíme, o ktorý prípad ide.

Kvôli zjednodušeniu voľme pre obidve osi rovnakú jednotku dĺžky, napríklad $1/n$ dĺžky osi. Na každej osi máme tieto body s celistvými koordinátami: na osi A_0A_1 sú body 1,0; 2,0;...; n—1,0; na osi A_0A_2 sú body 0,1; 0,2;...; 0,n—1. Rovnice rezov sú p_1,v_2 a v_1,p_2 ($p = 1, 2,\dots n-1$). Obidva rezy sa pretínajú vo vnútornom bode koncentračného trojuholníka len vtedy, keď platí, že $p_1 + p_2 < n$. Ak $p_1 + p_2 = n$, je spoločný bod (priesečník) obidvoch rezov hraničným bodom koncentračného trojuholníka sústavy A_{0-2} a leží na úsečke A_1A_2. Ak je $p_1 + p_2 > n$, priesečník obidvoch rôznobežných rezov v koncentračnom trojuholníku neexistuje. Ak napríklad $n = 20$, pretínajú sa rezy $5,v$ a $v,12$ v bode 5,12. Rezy $8,v$ a $v,12$ majú spoločný hraničný bod [8,12].[1] Rezy $11,v$ a $v,12$ sa nepretínajú (obr. 2).

V zásade rovnaká zákonitosť platí aj vtedy, ak ide o rezy, ktoré vychádzajú z bodov s necelistvými koordinátami. Pre vnútorný priesečník vždy platí: $p_1 + p_2 < 100\ \%$.

b) Kvartérna sústava A_{0-3}

Rovinné primárne jednoduché rezy II. druhu majú rovnice p_1,v_2,v_3; v_1,p_2,v_3; v_1,v_2,p_3 podľa toho, akú zložku o stálej koncentrácii obsahujú.

Priamkové primárne rezy tejto sústavy obsahujú dve zložky o stálej koncentrácii. Ich rovnice sú p_1,p_2,v_3; p_1,v_2,p_3 a v_1,p_2,p_3 podľa toho, či ide o stálu koncentráciu zložiek A_1,A_2; A_1,A_3 alebo A_2A_3.[2]

c) k-zložková sústava

Rovnice rezov sústavy $A_{0-(k-1)}$ sa skladajú z k—1 členov. Rozmernosť rezov závisí od počtu zložiek, ktorých koncentrácie sú v danom reze konštantné.

d) Súradnicová sieť k-zložkovej sústavy

Súradnicovú sieť sústavy $A_{0-(k-1)}$ tvoria (k—2)-rozmerné primárne rezy rôznych typov. Týchto rezov je spolu k—1.

3. Označenie bodov v útvaroch, ktoré neobsahujú zložku A_0, a rezov so stálou koncentráciou A_0

Body, ktoré neobsahujú zložku A_0, označíme obdobne ako pri jednoduchých rezoch I. druhu rovnicou v hranatej zátvorke: $[p_1,p_2,\dots, p_{k-1}]$,[3] pričom $\Sigma(p_1 + p_2 + \dots + p_{k-1}) = 100\ \%$.

---

[1] Hraničné body polyédra, ktoré neobsahujú zložku A_0, odlišujeme rovnako ako v predošlej práci [3] hranatou zátvorkou.

[2] Pri jednoduchých rezoch I. druhu bola koncentrácia zložky A_0 závisle premennou; tejto zásady sa budeme pridržiavať aj pri jednoduchých rezoch II. druhu, hoci tu nemá principiálny význam.

[3] Symbolom p označujeme konštanty, pričom vo všeobecnosti $p_i \neq p_j$.

Všetky body, pre ktoré platí, že $\sum_{1}^{k-1} p_i = konšt. < 100\ \%$, ležia na sekundárnych rezoch, ktoré obsahujú zložku A_0 v konštantnej koncentrácii, rovnej 100—*konšt.* Takéto rezy označíme rovnicou, ktorej prvý člen s indexom nula sa vzťahuje na zložku A_0. Nezávisle premenné zložky označíme indexmi.

Napríklad pri kvartérnej sústave A_{0-3} označíme rovinné sekundárne rezy so stálou koncentráciou A_0 rovnicou p_0,v_i,v_j. Koncentrácia zložky A_0 je stála a rovná p, koncentrácie ďalších dvoch zložiek sú nezávisle premenné v intervale $(0,100—p)\ \%$. Koncentrácia štvrtej zložky je už závislá veličina.

Obdobne rovnica p_0,p_i,v_j $(0 < i,\ j \leq 3)$ znamená priamkový rez kvartérnej sústavy, ktorý obsahuje konštantné koncentrácie zložiek A_0 a A_i. Rovnica p_0,v_{1-2},p_{3-4},v_6 znamená trojrozmerný rez sedemzložkovej sústavy, ktorý obsahuje stále koncentrácie zložiek A_0,A_3 a A_4 (vo všeobecnosti $p_i \neq p_j$). Koncentrácie zložiek A_1,A_2 a A_6 sú nezávisle premenné, koncentrácia zložky A_5 je veličina závisle premenná.

V prípade jednoduchých sekundárnych rezov II. druhu o stálej koncentrácii zložky A_0 volíme za nezávisle premenné veličiny relatívne koncentrácie ľubovoľných $(k—2)$ zložiek; koncentrácia poslednej zložky je už závisle premenná veličina.

Extrapolácia a interpolácia figuratívnych bodov, rovnako ako i prechod k sústavám s väčším počtom zložiek sa uskutočňuje na tom istom princípe ako pri jednoduchých rezoch I. druhu.

C. *Vzájomné vzťahy medzi rezmi a bodmi*

Pravidlá pre určenie útvaru, spoločného dvom vnútorným rezom, sú podobné ako pri jednoduchých rezoch I. druhu [3]. Pri rezoch II. druhu pristupuje naviac podmienka reálnosti priesečníka rôznobežných rezov $\Sigma(p_1 + p_2 + \ldots + p_{k-1}) \leq 100\ \%$.

1. Kvartérna sústava A_{0-3}

Dva rovinné rezy sú alebo rovnobežné, alebo sa pretínajú v priamke.

Príklad 1

Roviny v_1,a_2,v_3 a v_1,b_2,v_3 $(a \neq b)$ sú rovnobežné, ich priesečnica neexistuje.
Roviny v_1,a_2,v_3 a v_1,v_2,b_3 sa pretínajú v priamke v_1,a_2,b_3.

Dva priamkové rezy môžu byť rovnobežné, rôznobežné alebo mimobežné.

Príklad 2

a) Určiť priesečník priamok a_1,v_2,b_3 a a_1,c_2,v_3:

$$\begin{array}{c} a_1,v_2,b_3 \\ a_1,c_2,v_3 \\ \hline a_1,c_2,b_3 \end{array}$$

Priesečník a_1,c_2,b_3 leží vnútri koncentračného štvorstena vtedy, keď $a_1 + c_2 + b_3 < 100\ \%$.

b) Určiť priesečník priamok a_1,v_2,b_3 a a_1,v_2,c_3 $(b \neq c)$:

$$\begin{array}{c} a_1,v_2,b_3 \\ a_1,v_2,c_3 \\ \hline 0 \end{array}$$

Priesečník neexistuje, ide o rovnobežky.

c) Určiť priesečník priamok a_1,v_2,b_3 a v_1,b_2,c_3:

$$\begin{array}{c} a_1,v_2,b_3 \\ v_1,b_2,c_3 \\ \hline 0 \end{array}$$

Priesečník neexistuje, ide o mimobežky.

Dá sa jednoducho zistiť, kedy je nereálnosť priesečníka priamok dôsledkom toho, že sú navzájom rovnobežné, alebo toho, že sú mimobežné. Útvar — jednoduchý rez II. druhu — v ktorom sa obidve nachádzajú, určíme „odčítaním" rovníc obidvoch priamok.

Príklad 3

a) Určiť útvar, ktorý obsahuje priamky a_1,v_2,b_3 a a_1,v_2,c_3. Rovnice priamok odčítame:

$$\begin{array}{r} a_1,v_2,b_3 \\ -\ a_1,v_2,c_3 \\ \hline a_1,v_2,v_3 \end{array}$$

Ide o rovinu a_1,v_2,v_3, v ktorej sa nachádzajú obidve priamky. Ak je ich priesečník nereálny, ide o rovnobežky.

b) Určiť útvar, ktorý obsahuje priamky a_1,v_2,b_3 a v_1,b_2,c_3 sústavy A_{0-3}:

$$\begin{array}{r} a_1,v_2,b_3 \\ -\ v_1,b_2,c_3 \\ \hline v_1,v_2,v_3 \end{array}$$

Výsledná rovnica obsahuje tri premenné veličiny a označuje preto trojrozmerný útvar.[4] Neexistuje dvojrozmerný útvar — jednoduchý rez II. druhu — ktorý by obsahoval obidve priamky. Tieto priamky sú teda mimobežky.

Pre rôznobežky je typické, že v ich rovniciach sú dve dvojice členov rovnakého poradia $p_i + v_i$, $p'_j + v_j$. Rovnice sa dajú vždy formálne riešiť a nereálnosť priesečníkov vyplýva až z nedodržania podmienky $\Sigma(p_i + p'_j) < < 100\ \%$.

Rovnobežky sa vyznačujú tým, že ich *usporiadané rovnice*[5] obsahujú jednu dvojicu typu $v_i + v_i$ a jednu typu $p_i + p'_i$ $(p_i \neq p'_i)$. Usporiadané rovnice mimobežiek obsahujú dve dvojice typu $p_i + v_i$ a naviac jednu dvojicu typu $p_i + p'_i$ $(p_i \neq p'_i)$.

[4] Tento útvar je koncentračný štvorsten pôvodnej sústavy A_{0-3}, ktorá obsahuje obidve priamky.

[5] Rovnice usporiadané tak, aby členy rovnakého poradia tvorili dvojice.

2. Sústavy päťzložkové a vyššie

Príklad 4

Určiť priesečník štyroch priamok a_1,b_2,c_3,v_4; a_1,b_2,v_3,d_4; a_1,v_2,c_3,d_4; v_1,b_2,c_3,d_4 sústavy A_{0-4}:

$$\begin{array}{c} a_1,b_2,c_3,v_4 \\ a_1,b_2,v_3,d_4 \\ a_1,v_2,c_3,d_4 \\ v_1,b_2,c_3,d_4 \\ \hline a_1,b_2,c_3,d_4 \end{array}$$

Prvá a druhá priamka sa nachádzajú v rovine a_1,b_2,v_3,v_4; prvá až tretia sa nachádzajú v trojrozmernom priestore:

$$\begin{array}{r} a_1,b_2,c_3,v_4 \\ -\ a_1,b_2,v_3,d_4 \\ a_1,v_2,c_3,d_4 \\ \hline a_1,v_2,v_3,v_4 \end{array}$$

Najnižší útvar, ktorý obsahuje všetky štyri priamky, má rovnicu v_1,v_2,v_3,v_4. Tento útvar je identický s koncentračným polyédrom päťzložkovej sústavy A_{0-4}.

Príklad 5

Určiť vzájomný vzťah priamok a_1,b_2,c_3,v_4,d_5 a b_1,v_2,c_3,d_4,d_5 šesťzložkovej sústavy A_{0-5}:

Rovnice priamok jednak spočítame, jednak odčítame:

$$\begin{array}{r} a_1,b_2,c_3,v_4,d_5 \\ +\ b_1,v_2,c_3,d_4,d_5 \\ \hline 0 \end{array} \qquad \begin{array}{r} a_1,b_2,c_3,v_4,d_5 \\ -\ b_1,v_2,c_3,d_4,d_5 \\ \hline v_1,v_2,c_3,v_4,d_5 \end{array}$$

Ide o mimobežky, ktoré sa nachádzajú v trojrozmernom reze v_1,v_2,c_3,v_4,d_5 sústavy A_{0-5}.

Obdobne dokážeme, že priamky a_1,b_2,c_3,v_4,d_5 a b_1,v_2,c_3,d_4,e_5 sú mimobežky, ktoré sa nachádzajú v štvorrozmernom reze v_{1-2},c_3,v_{4-5} danej sústavy.

Súhrn

Metóda koordinát sa aplikovala na racionálne označenie jednoduchých rezov II. druhu a bodov ležiacich na ich priesečníkoch v koncentračných polyédroch k-zložkových sústav.

К ТЕОРИИ РАЦИОНАЛЬНОГО ОБОЗНАЧЕНИЯ РАЗРЕЗОВ И ФИГУРАТИВНЫХ ТОЧЕК МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ (II) ПРОСТЫЕ РАЗРЕЗЫ II. РОДА

М. МАЛИНОВСКИ, К. МАТЯШОВСКИ, Ц. КУБИК

Кафедра химической технологии неорганических веществ Словацкой высшей технической школы в Братиславе

ЧСАН, Институт неорганической химии Словацкой академии наук в Братиславе

Выводы

Метод координат был применен для рационального обозначения простых разрезов II. рода и фигуративных точек, которые находятся на местах пересечения разрезов в концентрационных полиэдрах k-компонентных систем.

Поступило в редакцию 15. 9. 1960 г.

ZUR THEORIE DER RATIONALEN BEZEICHNUNG VON SCHNITTEN UND FIGURATIVEN PUNKTEN VON VIELKOMPONENTEN-SYSTEMEN (II) EINFACHE SCHNITTE DER II. ART

M. MALINOVSKÝ, K. MATIAŠOVSKÝ, C. KUBÍK

Lehrstuhl für anorganische Technologie der Slowakischen Technischen Hochschule in Bratislava

ČSAV, Institut für anorganische Chemie an der Slowakischen Akademie der Wissenschaften in Bratislava

Zusammenfassung

Die Methode der Koordinaten wurde für die rationale Bezeichnung von einfachen Schnitten der II. Art, sowie von deren Schnittpunkten, die in den Konzentrationspolyedern von k-Komponentensystemen liegen, verwendet.

In die Redaktion eingelangt den 15. 9. 1960

LITERATÚRA

1. Anosov V. J., Pogodin S. A., *Osnovnyje načala fiziko-chimičeskogo analiza,* Moskva—Leningrad 1947. — 2. Malinovský M., Chem. zvesti *12,* 3 (1958). — 3. Malinovský M., Matiašovský K., Kubík C., Chem. zvesti *15,* 529 (1961).

Do redakcie došlo 15. 9. 1960

Adresa autorov:

Inž. Milan Malinovský, C. Sc., inž. Kamil Matiašovský, C. Sc., inž. Ctirad Kubík, Bratislava, Kollárovo nám. 2, Chemický pavilón SVŠT.