

УДК 669.017.3:51-74

ПРИМЕНЕНИЕ РАВНОВЕСНЫХ ДИАГРАММ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА КИНЕТИКИ ЛИКВАЦИИ ПРИ ОХЛАЖДЕНИИ ДВУХКОМПОНЕНТНОГО РАСПЛАВА*

Дрозин А.Д., д.т.н., профессор кафедры пирометаллургических процессов (drozinad@gmail.com)

Куркина Е.Ю., заместитель директора Центра элитного образования (eykurkina@mail.ru)

Южно-Уральский государственный университет

(454080, Россия, г. Челябинск, пр. Ленина, 76)

Аннотация. Согласно равновесным диаграммам состояния при охлаждении расплава до температуры ниже температуры ликвидуса составы жидкой и твердой фаз однозначно определяются соответствующими кривыми на диаграмме. Чтобы наступило равновесие, необходимо, чтобы расплав выдерживался бесконечно долго при каждой температуре или коэффициенты теплопроводности жидкой и твердой фаз, а также коэффициенты диффузии их компонентов были бесконечно велики. Была предпринята попытка выяснить, как эти процессы происходят в реальности. Рассматривается рост отдельного кристалла при охлаждении двухкомпонентного расплава. Построена математическая модель, базирующаяся на следующих положениях: выделена область расплава с объемом, приходящимся на одно зерно, периферия которого охлаждается по определенному закону; в начальный момент времени в жидкости находится зародыш кристалла некоторого минимального размера; у поверхности кристалла составы жидкой и твердой фаз соответствуют диаграмме состояния для рассматриваемой температуры на его поверхности; изменение температуры и состава в жидкой и твердой фазах происходят по законам теплопроводности и диффузии соответственно. По мере охлаждения расплава и роста кристалла жидкая фаза обогащается одним компонентом и обедняется другим, твердая фаза – наоборот. Коэффициенты диффузии компонентов в твердой фазе малы, поэтому не происходит полного выравнивания состава по его сечению. Предлагаемая в настоящей работе модель позволяет исследовать это явление, рассчитать для каждого режима охлаждения состав кристалла по мере удаления от его центра. Расчеты показали, что выравнивание температуры происходит практически мгновенно, выравнивание состава жидкой фазы значительно медленнее. Выравнивания состава твердой фазы в обозримое время практически не происходит. Результаты работы помогут улучшить технологию получения сплавов с оптимальной структурой.

Ключевые слова: диаграмма состояния, ликвация, рост кристалла, фазовый переход, математическая модель, диффузия, теплопроводность.

DOI: 10.17073/0368-0797-2020-2-129-134

ВВЕДЕНИЕ

Ликвационные процессы оказывают большое влияние на структуру и качество закристаллизовавшегося металла [1 – 12]. Перспективным методом их изучения является математическое моделирование изучаемых явлений.

Целью настоящей работы является детальное изучение механизма ликвации. Рассматривается многокомпонентный жидкий расплав, который подвергается охлаждению с периферии. При охлаждении ниже температуры ликвидуса в расплаве появляются и растут зародыши твердой фазы. По мере охлаждения расплава в соответствии с диаграммой состояния системы равновесный состав каждой твердой частицы и окружающего ее жидкого расплава должен непрерывно меняться. Однако равновесие в реальных металлургических процессах не достигается. Поэтому интересно выяснить, каким будет состав «выросших» частиц твердой фазы – зерен остывшего металла.

* Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках базовой части государственного задания ТЗ 8.9692.2017/8.9 от 17.02.2017 г.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим модельный пример процесса остывания двухкомпонентного расплава компонентов A и B с некоторой диаграммой состояния. Выделим из расплава растущую частицу твердой фазы и рассмотрим (рис. 1) систему, состоящую из этой частицы и окружающего ее расплава (части всего расплава, приходящегося на эту частицу).

По мере остывания всего расплава будет остывать и периферия рассматриваемой системы (рис. 1). Температура ее изменяется по закону $T_{sur} = T_{sur}(t)$. Будем также считать, что, хотя настоящего равновесия в рассматриваемой системе нет, однако непосредственно на поверхности раздела фаз всегда устанавливается локальное равновесие. Поэтому концентрации c_{BF}^L и c_{BF}^S компонента B для жидкой и для твердой фаз для каждой температуры можно определять по равновесной диаграмме состояния.

Математическая модель, описывающая процессы в системе, будет состоять из уравнений теплопроводности и диффузии в обеих фазах, формул, описывающих процессы, происходящие на поверхности раздела жид-

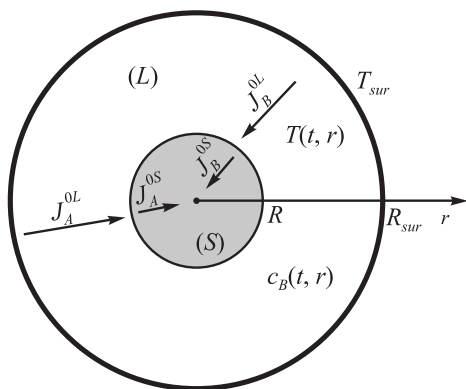


Рис. 1. Схема модели:

S – твердая фаза; L – жидкая фаза; $J_A^{OS}, J_B^{OS}, J_A^{OL}, J_B^{OL}$ – потоки компонентов A, B в фазах S, L ; r – расстояние от текущей точки до центра растущей частицы; T – температура в текущей точке; c_B – концентрация (доля) компонента B в текущей точке; t – время; R – радиус растущей частицы твердой фазы; R_{sur} – радиус периферии раствора

Fig. 1. Model's scheme:

S – solid phase; L – liquid phase; $J_A^{OS}, J_B^{OS}, J_A^{OL}, J_B^{OL}$ – flows of components A, B in phases S, L ; r – distance from the current point to the center of the growing particle; T – temperature at the current point; c_B – concentration (the mass fraction) of the component B at each point; t – time; R – radius of the growing solid particle; R_{sur} – radius of the periphery of the solution

кой L и твердой S фаз, а также из граничных и начальных условий.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СИСТЕМЫ

В соответствии с общей теорией роста частицы продуктов гетерофазных химических реакций, изложенной в работе [13], уравнения теплопроводности и диффузии компонента B имеют следующий вид:

– для твердой фазы S

1) уравнение теплопроводности:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\rho^S c_p^S} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \lambda^S \frac{\partial T}{\partial r} \right); \quad (1)$$

2) уравнение диффузии компонентов фазы:

$$\frac{\partial c^S}{\partial t} = \frac{D^S}{\rho^S} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \rho^S \frac{\partial c^S}{\partial r} \right); \quad (2)$$

– для жидкой фазы L

1) уравнение теплопроводности:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\rho^L c_p^L} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \lambda^L \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\rho^L - \rho^S}{\rho^L} \frac{R^2}{r^2} \frac{dR}{dt} \frac{\partial T}{\partial r}; \quad (3)$$

2) уравнение диффузии компонентов:

$$\frac{\partial c^L}{\partial t} = D^L \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c^L}{\partial r} \right) + \frac{\rho^L - \rho^S}{\rho^L} \frac{R^2}{r^2} \frac{dR}{dt} \frac{\partial c^L}{\partial r}, \quad (4)$$

где c – массовая доля компонента B в рассматриваемой точке; ρ – плотность; λ – коэффициент теплопроводности; c_p – удельная теплоемкость; D – коэффициент диффузии; индекс \mathcal{F} указывает, что величина относится к поверхности раздела фаз.

Вторые слагаемые в правых частях уравнений (3), (4) возникают из-за того, что растущая частица твердой фазы «расталкивает» жидкую фазу, вызывая ее механическое движение. Основные уравнения для поверхности раздела фаз имеют вид:

1) уравнение теплопередачи:

$$\lambda_{\mathcal{F}}^S \frac{\partial}{\partial r} T[t, R(t) - 0] - \lambda_{\mathcal{F}}^L \frac{\partial}{\partial r} T[t, R(t) + 0] + I_A \Delta H_A + I_B \Delta H_B = 0; \quad (5)$$

2) уравнения массопереноса компонентов фаз:

$$\rho_{\mathcal{F}}^S D^S \frac{\partial}{\partial r} c_{\mathcal{F}}^S[t, R(t) - 0] + c_{\mathcal{F}}^S[t, R(t)] \times (I_A + I_B) - I_B = 0; \quad (6)$$

$$\rho_{\mathcal{F}}^L D^L \frac{\partial}{\partial r} c_{\mathcal{F}}^L[t, R(t) + 0] + c_{\mathcal{F}}^L[t, R(t)] \times (I_A + I_B) - I_B = 0; \quad (7)$$

3) условия равновесия:

$$\begin{aligned} c_{\mathcal{F}}^S &= \phi^S [T(t, R(t))]; \\ c_{\mathcal{F}}^L &= \phi^L [T(t, R(t))]; \end{aligned} \quad (8)$$

4) уравнение роста частицы твердой фазы:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{\rho_{\mathcal{F}}^S} (I_A + I_B), \quad (9)$$

где $\Delta H_A, \Delta H_B$ – удельные энтальпии перехода компонентов A, B из твердой фазы в жидкую; I_A, I_B – массовые скорости переходов компонентов из жидкой фазы в твердую в расчете на единицу площади поверхности раздела фаз.

Эти величины определяют рост частицы и заранее неизвестны. Они должны определяться решением этой системы уравнений. Функции $\phi^S(T), \phi^L(T)$ определяются из диаграммы состояния рассматриваемой системы.

МЕТОД РЕШЕНИЯ

Граница раздела фаз L и S является движущейся, что делает решение системы уравнений крайне тяжелой задачей. Чтобы избежать этого, был использован метод выпрямления фронтов [14]. Далее был применен метод конечных разностей [15 – 17]: построена двумерная сетка и все уравнения записывали в разностной форме. Был разработан алгоритм решения полученной разностной задачи и составлена компьютерная программа, позво-

ляющая рассчитывать состояние системы в любой момент времени и выводящая соответствующие графики.

ПРИМЕР РАСЧЕТА

Приведем исходные данные и результаты расчета роста частицы твердой фазы в системе Sn–Bi. Исходные для расчета данные подбирали следующим образом.

По диаграмме (рис. 2) нашли координаты точек A_{Sn} , A_1 , E , A_2 , E_{Sn} , перевели мольные проценты в массовые доли, аппроксимировали эти линии квадратичными зависимостями и получили следующее:

$$\begin{aligned} c^S &= 8,86967 \cdot 10^{-7} T^2 - 2,623 \cdot 10^{-3} T + 0,560578; \\ c^L &= -5,63874 \cdot 10^{-5} T^2 + 1,47735 \cdot 10^{-2} T - 0,39361. \end{aligned} \quad (10)$$

Расчет проводили для расплава с массовой долей висмута 20 % ($c_0 = 0,2$). Температуры ликвидуса T_L и солидуса T_S такой системы равны соответственно 212,4 и 144,5 °C.

Использовали следующие физические характеристики (через косую записаны значения для олова и висмута; ΔH – удельная теплота плавления) компонентов системы [18 – 22]:

ΔH , Дж/кг	-59 000/-11 300
c_p^S , Дж/(кг·К)	243/127
c_p^L , Дж/(кг·К)	240/140
ρ^S , кг/м ³	7280/9800
ρ^L , кг/м ³	6850/10 300
λ^S , Вт/(м·К)	65,80/8,37
λ^L , Вт/(м·К)	31,60/14,65

Коэффициенты диффузии компоненты висмута в жидкой D^L и твердой D^S фазах были приняты [23, 24] $1 \cdot 10^{-9}$ и $1 \cdot 10^{-14}$ м²/с.

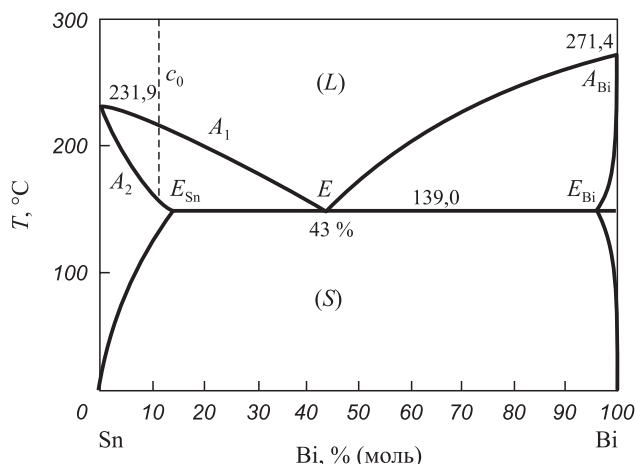


Рис. 2. Диаграмма равновесия системы Sn – Bi

Fig. 2. Equilibrium state diagram of Sn – Bi system

Радиус всей системы приняли, исходя из примерного объема расплава, приходящегося на одно зерно $R_{sur} = 10$ мкм, исходный размер твердой частицы $R_0 = 10$ нм. Считали, что в начальный момент вся система находится при одной и той же температуре $T_0 = T_L$, состав жидкой и твердой фаз везде одинаков и равен c_0 .

Приведем результаты расчета для случая, когда периферию системы охлаждали со скоростью 10 °C/мин.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

На рис. 3 приведены результаты расчета изменения радиуса растущей частицы твердой фазы со временем.

Рост частицы происходит очень быстро. Уже через 0,02 с объем твердой фазы составляет 50,3 % массы всей системы. Далее ее рост несколько замедляется, но через 5 мин он составляет уже 84,6 % от объема выделенной для нее ячейки.

Результаты расчетов показали, что температуры растущей частицы и ее жидкого окружения практически моментально выравниваются по сечению и далее совпадают с внешней температурой системы. Также быстро происходит выравнивание состава жидкой фазы.

В то же время выравнивания состава твердой фазы за обозримое время не происходит. На рис. 4 приведены результаты расчета распределения концентрации висмута по сечению растущей частицы. Это объясня-

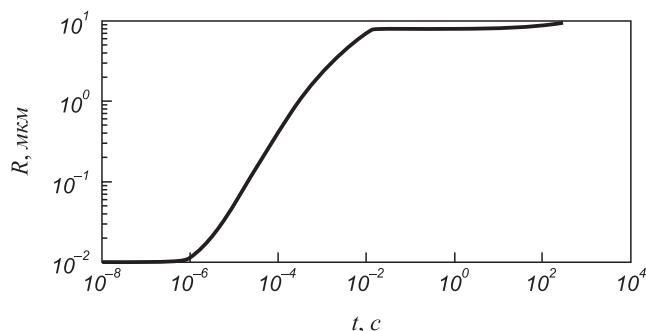


Рис. 3. Рост радиуса частицы твердой фазы

Fig. 3. Growth of radius of the solid phase particle

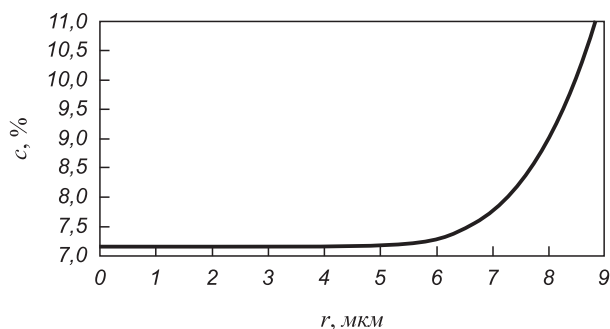


Рис. 4. Распределение концентрации висмута по сечению твердой фазы через 100 с

Fig. 4. Distribution of Bi concentration over the solid phase cross section after 100 s

ется тем, что коэффициент диффузии в твердой фазе на несколько порядков меньше коэффициента диффузии в жидкой фазе.

Выводы

Проведены расчеты для микрообъемов расплава, окружающих растущие частицы твердой фазы. Целью расчетов было выявление возможных неоднородностей в распределении температуры и состава в процессе охлаждения металла. Выравнивание температуры происходит практически мгновенно, а выравнивание состава жидкой фазы значительно медленнее. Однако выравнивания состава твердой фазы в обозримое время практически не происходит. Для более точного изучения этого процесса необходимо более точное знание коэффициентов диффузии компонентов системы в жидкой и особенно в твердых фазах. Значительно улучшило бы точность знание зависимости коэффициентов диффузии от температуры. Однако такие данные в имеющейся на сегодняшний день литературе практически отсутствуют.

Расчеты показали, что определяющее значение в характере протекания процессов тепло- и массопереноса играет температура окружающей систему среды и закон ее изменения. При кристаллизации реального слитка в изложнице или в установке непрерывной разливки, в различных микрообъемах, на различном удалении от краев слитка характер снижения температуры будет различным. По различному будет протекать и рассматриваемый процесс в соответствующих микрообъемах. В дальнейшем планируется рассмотреть системы с большим числом компонентов и учесть случаи ограниченной растворимости или полной нерастворимости некоторых компонентов в твердой фазе.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Turret D., Gandin Ch. A generalized segregation model for concurrent dendritic, peritectic and eutectic solidification // *Acta Materialia*. 2009. Vol. 57. No. 7. P. 2066 – 2079.
2. Ferrandini P.L., Rios C.T., Dutra A.T., Jaime M.A., Mei P.R., Caram R. Solute segregation and microstructure of directionally solidified austenitic stainless steel // *Materials Science and Engineering A*. 2006. Vol. 435-436. P. 139 – 144.
3. Bellmann M.P., Meese E.A., Arnberg L. Impurity Segregation in Directional Solidified Multi-crystalline Silicon // *Journal of Crystal Growth*. 2010. Vol. 312. No. 21. P. 3091 – 3095.
4. Steiner M.A., Garlea E., Agnew S.R. Modeling solute segregation during the solidification of γ -phase U – Mo // *Journal of Nuclear Materials*. 2016. Vol. 474. P. 105 – 112.
5. Gong L., Chen B., Du Zh., Zhang M., Liu R., Liu K. Investigation of Solidification and Segregation Characteristics of Cast Ni-Base Superalloy K417G // *Journal of Materials Science & Technology*. 2018. Vol. 34. No. 3. P. 541 – 550.
6. Gao Zh., Jie W., Liu Yo., Luo H. Solidification Modelling for Coupling Prediction of Porosity and Segregation // *Acta Materialia*. 2017. Vol. 127. P. 277 – 286.
7. Chatelain M., Botton V., Albaric M., Pelletier D., Cariteau B., Abdo D., Borrelli M. Mechanical stirring influence on solute segregation during plane front directional solidification // *International Journal of Thermal Sciences*. 2018. Vol. 126. P. 252 – 262.
8. Hou Z., Guo D., Cao J., Chang Yi. A method based on the centroid of segregation points: A Voronoi polygon application to solidification of alloys // *Journal of Alloys and Compounds*. 2018. Vol. 762. P. 508 – 519.
9. Lianga J., Zhaoa Zh., Tanga D., Yeb N., Yangc Sh. Improved microstructural homogeneity and mechanical property of medium manganese steel with Mn segregation banding by alternating lath // *Materials Science & Engineering A*. 2018. Vol. 711. P. 175 – 181.
10. Martinsen F.A. Purification of melt-spun metallurgical grade silicon micro-flakes through a multi-step segregation procedure // *Journal of Crystal Growth*. 2013. Vol. 363. P. 33 – 39.
11. Robson J.D. Analytical electron microscopy of grain boundary segregation: Application to Al – Zn – Mg – Cu (7xxx) alloys // *Materials Characterization*. 2019. Vol. 154. P. 325 – 334.
12. Li J., Guo Zh. Thermodynamic evaluation of segregation behaviors of metallic impurities in metallurgical grade silicon during Al – Si solvent refining process // *Journal of Crystal Growth*. 2014. Vol. 394. P. 18 – 23.
13. Дрозин А.Д. Рост микрочастиц продуктов химических реакций в жидком растворе. – Челябинск: изд. ЮУрГУ, 2007. – 57 с.
14. Будак Б.М., Гольдман Н.Л., Успенский А.Б. Разностная схема с выпрямлением фронтов для решения многофронтовых задач типа Стефана // *Доклады АН СССР*. 1966. Т. 167. № 4. С. 735 – 738.
15. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1972. – 736 с.
16. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977. – 656 с.
17. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. – М.: Наука, 1978. – 592 с.
18. Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник. Т. 1 / Под ред. Н.П. Лякишева. – М.: Машиностроение, 1996. – 992 с.
19. Захаров А.М. Диаграммы состояния двойных и тройных систем. – М.: Металлургия, 1990. – 250 с.
20. Справочник по пайке / Под ред. И.Е. Петрунина. – М.: Машиностроение, 2003. – 480 с.
21. Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1250 с.
22. Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник. – Л.: Химия, 1978. – 392 с.
23. Хайруллин Р.А., Станкус С.В., Абдуллаев Р.Н., Склярчук В.М. Плотность и коэффициенты взаимной диффузии расплавов висмут – олово эвтектического и околоэвтектического составов // *Теплофизика высоких температур*. 2010. Т. 48. № 2. С. 206 – 209.
24. Махний В.П., Протопопов Е.В., Скрипник Н.В. Механизм диффузии олова в монокристаллах ZnTe // *Неорганические материалы*. 2011. Т. 47. № 9. С. 1044 – 1046.

Поступила в редакцию 23 октября 2019 г.
После доработки 21 ноября 2019 г.
Принята к публикации 22 ноября 2019 г.

APPLICATION OF EQUILIBRIUM PHASE DIAGRAMS FOR CALCULATION OF SEGREGATION KINETICS DURING TWO-COMPONENT MELT COOLING

A.D. Drozin, E.Yu. Kurkina

South Ural State University, Chelyabinsk, Russia

Abstract. According to the equilibrium state diagrams, when the melt is cooled to a certain temperature below liquidus, compositions of liquid and solid phases are uniquely determined by corresponding curves in the diagram. However, it does not happen in reality. For equilibrium (which the diagram describes), it is necessary that the melt is maintained indefinitely at each temperature, or thermal conductivity of liquid and solid phases, and the diffusion coefficients of their components, are infinitely large. We made an attempt to find out how these processes occur in reality. In this work, we consider the growth of individual crystal during cooling of a two-component melt. Mathematical model is constructed based on the following. 1. The melt area with volume corresponding to one grain, the periphery of which is cooled according to a certain law, is considered. 2. At the initial instant of time, a crystal nucleus of a certain minimum size is in the liquid. 3. At the surface of crystal, compositions of liquid and solid phases correspond to equilibrium state diagram at a given temperature on its surface. 4. Changes in temperature and composition in liquid and solid phases occur according to the laws of heat conduction and diffusion, respectively. As the melt gets cold and the crystal grows, the liquid phase is enriched in one component and depleted in another, the solid phase – on the contrary. Since the diffusion coefficients of the components in the solid phase are small, the composition of the crystal does not have time to completely equalize its cross section. The model proposed in the work allows us to study this phenomenon, to calculate for each cooling mode how the composition of the crystal will vary over its cross section. The calculations have shown that the temperature equalization occurs almost instantly, and composition of the liquid phase equalizes much slower. Equalization of the solid phase composition does not occur in the foreseeable time. The results of the work will help to improve technology of generation of alloys with an optimal structure.

Keywords: state diagram, local equilibrium, segregation, crystal growth, phase transition, mathematical model, diffusion, thermal conductivity.

DOI: 10.17073/0368-0797-2020-2-129-134

REFERENCES

1. Tournet D., Gandin Ch. A generalized segregation model for concurrent dendritic, peritectic and eutectic solidification. *Acta Materialia*. 2009, vol. 57, no. 7, pp. 2066–2079.
2. Ferrandini P.L., Rios C.T., Dutra A.T., Jaime M.A., Mei P.R., Caram R. Solute segregation and microstructure of directionally solidified austenitic stainless steel. *Materials Science and Engineering A*. 2006, vol. 435-436, pp. 139–144.
3. Bellmann M.P., Meese E.A., Arnborg L. Impurity segregation in directional solidified multi-crystalline silicon. *Journal of Crystal Growth*. 2010, vol. 312, no. 21, pp. 3091–3095.
4. Steiner M.A., Garlea E., Agnew S.R. Modeling solute segregation during the solidification of g-phase U–Mo. *Journal of Nuclear Materials*. 2016, vol. 474, pp. 105–112.
5. Gong L., Chen B., Du Zh., Zhang M., Liu R., Liu K. Investigation of solidification and segregation characteristics of cast Ni-base superalloy K417G. *Journal of Materials Science & Technology*. 2018, vol. 34, no. 3, pp. 541–550.
6. Gao Zh., Jie W., Liu Yo, Luo H. Solidification modelling for coupling prediction of porosity and segregation. *Acta Materialia*. 2017, vol. 127, pp. 277–286.
7. Chatelain M., Botton V., Albaric M., Pelletier D., Cariteau B., Abdo D., Borrelli M. Mechanical stirring influence on solute segregation during plane front directional solidification. *International Journal of Thermal Sciences*. 2018, vol. 126, pp. 252–262.
8. Hou Z., Guo D., Cao J., Chang Yi. A method based on the centroid of segregation points: A Voronoi polygon application to solidification of alloys. *Journal of Alloys and Compounds*. 2018, vol. 762, pp. 508–519.
9. Lianga J., Zhaoa Zh., Tanga D., Yeb N., Yangc Sh. Improved microstructural homogeneity and mechanical property of medium manganese steel with Mn segregation banding by alternating lath. *Materials Science & Engineering A*. 2018, vol. 711, pp. 175–181.
10. Martinsen F.A. Purification of melt-spun metallurgical grade silicon micro-flakes through a multi-step segregation procedure. *Journal of Crystal Growth*. 2013, vol. 363, pp. 33–39.
11. Robson J.D. Analytical electron microscopy of grain boundary segregation: Application to Al–Zn–Mg–Cu (7xxx) alloys. *Materials Characterization*. 2019, vol. 154, pp. 325–334.
12. Li J., Guo Zh. Thermodynamic evaluation of segregation behaviors of metallic impurities in metallurgical grade silicon during Al–Si solvent refining process. *Journal of Crystal Growth*. 2014, vol. 394, pp. 18–23.
13. Drozin A.D. *Rost mikrochastits produktov khimicheskikh reaktsii v zhidkom rastvore* [Growth of chemical reaction products microparticles in a liquid solution]. Chelyabinsk: izd. YuUrGU, 2007, 57 p. (In Russ.).
14. Budak B.M., Gol'dman N.L., Uspenskii A.B. Difference scheme with front straightening for solving multi-front problems of the Stefan's type. *Doklady AN SSSR*. 1966, vol. 167, no. 4, pp. 735–738. (In Russ.).
15. Tikhonov A.N., Samarskii A.A. *Uravneniya matematicheskoi fiziki* [Equations of mathematical physics]. Moscow: Nauka, 1972, 736 p. (In Russ.).
16. Samarskii A.A. *Teoriya raznostnykh skhem* [Theory of difference schemes]. Moscow: Nauka, 1977, 656 p. (In Russ.).
17. Samarskii A.A., Nikolaev E.S. *Metody resheniya setochnykh uravnenii* [Methods for grid equations solving]. Moscow: Nauka, 1978, 592 p. (In Russ.).
18. Lyakishev N.P. ed. *Diagrammy sostoyaniya dvoynykh metallicheskikh sistem: Spravochnik* [State diagrams of double metal systems: Reference book. Vol. 1]. Lyakishev N.P. ed. Moscow: Mashinostroenie, 1996, 992 p. (In Russ.).
19. Zakharov A.M. *Diagrammy sostoyaniya dvoynykh i troinykh sistem* [State diagrams of binary and ternary systems]. Moscow: Metallurgiya, 1990, 250 p. (In Russ.).
20. Petrunin I.E. ed. *Spravochnik po paie* [Soldering reference]. Petrunin I.E. ed. Moscow: Mashinostroenie, 2003, 480 p. (In Russ.).
21. *Fizicheskie velichiny. Spravochnik* [Physical quantities. Reference book]. Grigor'ev I.S., Meilikhov E.Z. eds. Moscow: Energoatomizdat, 1991, 1250 p. (In Russ.).
22. Rabinovich V.A., Khavin Z.Ya. *Kratkii khimicheskii spravochnik* [Brief chemical reference]. Leningrad: Khimiya, 1978, 392 p. (In Russ.).
23. Khairulin R.A., Stankus S.V., Abdullaev R.N., Sklyarchuk V.M. The density and interdiffusion coefficients of bismuth-tin melts of

eutectic and near-eutectic composition. *High Temperature*. 2010, vol. 48, no. 2, pp. 188–191.

24. Makhniy V.P., Protopopov E.V., Skripnik N.V. Mechanism of tin diffusion in ZnTe single crystals. *Inorganic Materials*. 2011, vol. 47, no. 9, pp. 945–946.

Funding. The work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation according to basic part of the state assignment TDA 8.9692.2017 / 8.9 dated 02.17.2017.

Information about the authors:

A.D. Drozin, Dr. Sci. (Eng.), Professor of the Chair of Pyrometallurgical Processes (drozinad@gmail.com)

E.Yu. Kurkina, Deputy Director of the Honor Education Center (eykurkina@mail.ru)

Received October 23, 2019

Revised November 21, 2019

Accepted November 22, 2019
