

PA 47



AT9800056

### Die Zusammensetzung von PtCo Oberflächen (Thermodyn. Modellrechnungen)

W. HOFER<sup>1</sup> und L. Z. MEZEY<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institut für Allgemeine Physik, TU Wien, Wiedner Hauptstr. 8-10/134, A-1040 Wien.

<sup>2</sup> Institute of Physics, Budapest TU, Budafoki út 8-10, H-1111, Budapest.

Eine früher entwickelte thermodynamische Theorie von Grenzflächen (MTCIP: Modern Thermodynamic Calculation of Interface Properties) beschreibt unter anderem auch das Konzentrationsprofil im Gleichgewichtszustand durch ein System nicht-linearer, gekoppelter Gleichungen. Erste Modellrechnungen (MTCIP-1A, erste Approximation) lösten dieses Gleichungssystem für den Fall verdünnter binärer Lösungen.

Kürzlich wurde eine verbesserte und verallgemeinerte zweite Version (MTCIP-2A) entwickelt, die binäre Legierungen beliebiger Volumszusammensetzung in einem mehrlagigen Modell beschreibt. Die bisher durchgeführten Rechnungen für PtNi, PtCo und PtRh sind in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Werten.

Hier werden die thermodynamischen Rechnungen für PtCo Legierungseinkristalle unterschiedlicher Volumszusammensetzung und unterschiedlicher Oberflächenorientierung gezeigt und mit experimentellen Daten verglichen.

(Unterstützt durch die FWF Projekte Nr. P8147 und P10492 sowie durch OTKA Projekt Nr. T016161.)

PA 48



AT9800057

### Segregation an PtRh Oberflächen (Thermodynamische Modellrechnungen)

W. HOFER<sup>1</sup> und L. Z. MEZEY<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institut für Allgemeine Physik, TU Wien, Wiedner Hauptstr. 8-10/134, A-1040 Wien.

<sup>2</sup> Institute of Physics, Budapest TU, Budafoki út 8-10, H-1111, Budapest.

Eine früher entwickelte thermodynamische Theorie von Grenzflächen (MTCIP: Modern Thermodynamic Calculation of Interface Properties) beschreibt unter anderem auch das Konzentrationsprofil im Gleichgewichtszustand durch ein System nicht-linearer, gekoppelter Gleichungen. Erste Modellrechnungen (MTCIP-1A, erste Approximation) lösten dieses Gleichungssystem für den Fall verdünnter binärer Lösungen.

Kürzlich wurde eine verbesserte und verallgemeinerte zweite Version (MTCIP-2A) entwickelt, die binäre Legierungen beliebiger Volumszusammensetzung in einem mehrlagigen Modell beschreibt. Die bisher durchgeführten Rechnungen für PtNi, PtCo und PtRh sind in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Werten.

Am Beispiel von PtRh Legierungen - für die thermodynamische Daten über das Mischverhalten (Exzeßgrößen) nicht verfügbar sind - werden die erweiterten Modellrechnungen präsentiert.

(Unterstützt durch die FWF Projekte Nr. P8147 und P10492 sowie durch OTKA Projekt Nr. T016161.)