

Głównym celem projektu jest zbadanie właściwości termodynamicznych i struktury ciekłych stopów srebro-lit-antymon i dwuskładnikowych stopów lit-antymon, oraz srebro-lit i srebro-antymon. Mówiąc o strukturze cieczy mamy na myśli tylko najbliższe sąsiedztwo, dotyczy to pierwszej strefy koordynacji, z uwagi na utratę periodyczności komórki elementarnej spowodowane luźniejszym ułożeniem atomów. Dlatego interesujące jest poznanie natury oddziaływania między atomami w celu zrozumienia i poznania lokalnego otoczenia atomów, to jest jakie jest najbliższe otoczenie atomu centralnego, czy atomy jednego pierwiastka mają tendencję do ustawiania się razem z atomami tego samego pierwiastka czy raczej z atomami innego pierwiastka. Takie ustawienia różnych atomów w cieczy nazywane są 'asocjatami' i często ich chemiczny skład odpowiada składowi chemicznemu fazy międzymetalicznej, która jest najbardziej stabilna energetycznie – ma najbardziej ujemną entalpię tworzenia. Odpowiednikiem tej wielkości dla stanu ciekłego jest entalpia mieszania, którą wyznacza się w funkcji ułamka molowego jednego ze składników w celu znalezienia minimum funkcji, której właśnie odpowiada położenie fazy międzymetalicznej występującej w stanie stałym. Tak więc właściwości termodynamiczne – cząstkowe i molowe funkcje pozwalają przewidzieć czy asocjaty istnieją w fazie ciekłej oraz wskazać ich rodzaj.

Analizowane trzy stopy dwuskładnikowe z układu Ag-Li-Sb mają w stanie stałym kilka związków międzymetalicznych, zbudowanych z odpowiednio wzajemnie ułożonych różnych pierwiastków. O stopach srebro-lit-antymon nie wiadomo prawie nic poza tym, że w stanie stałym mają jeden związek międzymetaliczny złożony z trzech pierwiastków. Wiedząc, że postać asocjatyw występujących w cieczy może być związana ze związkami międzymetalicznymi, istotne jest by zrozumieć i opisać trójskładnikowe oddziaływania w fazie ciekłej, które mogą pozwolić na wykrycie innych faz międzymetalicznych obecnych w stanie stałym. Dlatego planowane jest wykonanie szeregu doświadczeń, obejmujących zmierzenie właściwości termodynamicznych, oraz wielu obliczeń, opartych o zmierzone właściwości termodynamiczne, które to obliczenia pozwolą stwierdzić czy asocjaty istnieją. Jednocześnie otrzymany zostanie pełny opis termodynamiczny ciekłych stopów srebro-lit-antymon. Generalnie, znajomość opisu cieczy jest bardzo cenna dlatego, że z ciekłymi stopami mamy do czynienia w różnych procesach produkcyjnych takich jak na przykład odlewanie. Po za tym, opis termodynamiczny znany jest dla bardzo niewielu ciekłych stopów trójskładnikowych. Z kolei stopy srebro-lit-antymon są bardzo ciekawym obiektem badań dlatego, że podobnie jak inne trójskładnikowe stopy litu mogą zostać w przyszłości zastosowane do produkcji elektrod w nowoczesnych akumulatorach litowo-jonowych.