

## РЕФЕРАТ

Отчет содержит 195 страниц, 17 таблиц, 158 источников, 54 рисунка, 1 приложение

Целью проделанной работы является: исследование методом высокотемпературной калориметрии теплот образования жидких сплавов железа и кобальта с медью и жидких сплавов кобальта, никеля и меди с цирконием; установление на основе полученных результатов и имеющихся в литературе информации закономерностей энергетики сплавообразования в жидком состоянии; сопоставление термодинамических свойств с видом диаграммы состояния; моделирование температурно-концентрационной зависимости термодинамических свойств сплавообразования в рамках математических и феноменологических моделей; моделирование стабильных и метастабильных фазовых равновесий в исследованных системах.

Исследования теплот образования металлических расплавов были проведены при помощи высокотемпературного изопериболического калориметра собственной конструкции. Для решения поставленных задач авторы предприняли калориметрическое исследование теплот образования сплавов в бинарных системах: медь-железо, медь-кобальт, кобальт-цирконий, никель-цирконий, медь-цирконий. Все полученные результаты описаны уравнениями концентрационных зависимостей и представлены в виде, удобном для хранения в компьютерном банке данных.

Сопоставление между собой собственных результатов и литературных данных указывает на то, что с ростом температуры энтальпии смешения в системах с Cu-Fe и Cu-Co уменьшаются, а в системах Co-Zr, Ni-Zr и Cu-Zr – становятся больше. Избыточная теплоемкость смешения отрицательна в системах с преимущественным взаимодействием однотипных атомов и положительна в системах, в которых в основном взаимодействуют атомы разного типа.

В системе Cu-Fe для построения моделей температурно-концентрационной зависимости термодинамических свойств компонентов использованы модели с термодинамически адаптированными полиномиальными функциями. Параметры моделей были найдены с использованием собственных экспериментальных результатов и литературных данных. Полученные модели позволили с высокой точностью описать стабильные и метастабильные фазовые равновесия и термодинамические свойства жидких и твердых растворов. Показано, что концентрационные границы образования пересыщенных твердых растворов, получаемых при закалке из жидкости, могут быть объяснены в рамках термодинамического анализа.

В системах Co-Zr, Ni-Zr, Cu-Zr для построения моделей температурно-концентрационной зависимости термодинамических свойств жидких сплавов использована теория идеального ассоциированного раствора. Полученные модели не только описывают известные экспериментальные данные, но и позволяют провести экстраполяцию термодинамических свойств расплавов на не изученные экспериментально интервалы температур и концентраций, в том числе и на температуры, соответствующие сильному переохлаждению расплавов.

Полученные модели температурно-концентрационной зависимости избыточных термодинамических свойств расплавов Co-Zr, Ni-Zr, Cu-Zr были использованы при расчете метастабильных фазовых равновесий переохлажденной жидкости с твердыми растворами на основе чистых компонентов. Для проведения этих расчетов в рамках CALPHAD-метода были построены модели свободной энергии Гиббса ГЦК, ОЦК и ГПУ твердых растворов с использованием литературных данных о фазовых равновесиях. Установлено, что концентрационные границы аморфизации определяются положением метастабильных линий ликвидус и линий  $T_0^{\text{ж/ГЦК}}$  и  $T_0^{\text{ж/ОЦК}}$  при температурах стеклования.

Результаты работы могут быть использованы в справочных изданиях, банках термодинамических данных, в работе специалистов в области направленного поиска материалов, обладающих определенным комплексом физико-химических свойств. Результаты работы также представляют интерес в теоретическом плане, так как позволяют понять природу взаимодействия компонентов расплавов на основе переходных металлов.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, ЭНТАЛЬПИИ СМЕШЕНИЯ,  
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ КАЛОРИМЕТРИЯ, МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ  
РАСПЛАВЫ, ТЕОРИЯ ИДЕАЛЬНОГО АССОЦИИРОВАННОГО  
РАСТВОРА, CALPHAD-МЕТОД, ДИАГРАММА СОСТОЯНИЯ,  
МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ