

РЕФЕРАТ

Отчет содержит 378 страниц, 37 таблиц, 371 источник, 136 рисунков, 3 приложения

Целью настоящей работы являлось: проведение калориметрического исследования энтальпий смешения жидких сплавов меди с переходными металлами; исследование характера температурной зависимости энтальпии смешения в системах с различным типом взаимодействия компонентов; установление влияния различного типа взаимодействия компонентов расплавов на характер температурной и концентрационной зависимости избыточных термодинамических функций сплавообразования; привлечение CALPHAD метода для исследования характера температурной зависимости термодинамических свойств; выполнение термодинамической оценки систем и расчет их диаграмм состояния; моделирование метастабильных превращений с участием переохлажденных жидких сплавов; расчет электронного строения металлов и сплавов и установление основных энергетических вкладов валентных электронов в энтальпии смешения.

Энтальпии смешения жидких сплавов систем медь–титан, медь–ванадий, медь–хром, медь–марганец, медь–железо, медь–кобальт, медь–никель и медь–цирконий были изучены при помощи высокотемпературного изопериболического калориметра. Полученные результаты были описаны уравнениями концентрационных зависимостей. Для каждой из систем были выведены уравнения концентрационной зависимости парциальных и интегральной энтальпий смешения. Анализ собственных экспериментальных данных и их обобщение с имеющейся в литературе информацией позволил сделать вывод, что энтальпии смешения жидких сплавов систем медь–титан и медь–цирконий являются экзотермическими величинами, энтальпия смешения жидких сплавов в системе медь–марганец изменяет свой знак на концентрационном интервале, а энтальпии смешения жидких сплавов в

системах медь–ванадий, медь–хром, медь–железо, медь–кобальт, медь–никель являются положительными величинами.

Полученные экспериментальные данные об энтальпиях смешения жидких сплавов были сопоставлены с металлохимическими параметрами систем. В рамках модели Фриделя для плотности электронных состояний и модели сильной связи рассчитаны энергии когезии 3d-металлов и основные энергетические вклады в их энтальпию смешения с медью. Показано, что закономерности энтальпии смешения в данном ряде систем и концентрационная зависимость энтальпии смешения в каждой из систем ряда могут быть объяснены на основе рассмотрения двух вкладов в энергетику сплавообразования. Первый из них связан с переносом электронов при сплавообразовании, второй – с неэквивалентностью ширин d-зон компонентов сплава.

Сопоставление полученных в настоящей работе экспериментальных данных, литературных данных и результаты термодинамической оценки систем в рамках CALPHAD метода указывают на температурную зависимость энтальпии смешения жидких сплавов систем медь–скандий, медь–титан, медь–ванадий, медь–хром, медь–марганец, медь–железо, медь–цинк и медь–цирконий. На основании этой информации были рассчитаны значения избыточной теплоемкости расплавов и проведено моделирование температурно-концентрационной зависимости их термодинамических свойств в широком интервале температур. Это послужило основанием к выделению основных черт температурной и концентрационной зависимостей избыточных термодинамических свойств для расплавов с различным типом взаимодействия компонентов.

С использованием полученных термодинамических моделей фаз в рамках CALPHAD-метода были рассчитаны диаграммы состояния систем медь–титан, медь–ванадий, медь–хром, медь–марганец, медь–железо, медь–кобальт, медь–никель и медь–цирконий и выполнено моделирование метастабильных превращений с участием переохлажденной жидкой фазы,

таких как расслоение переохлажденных расплавов, образование пересыщенных твердых растворов на основе компонентов, моделирование концентрационных интервалов аморфизации жидких сплавов методом быстрой закалки.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФАЗ, ЭНТАЛЬПИИ СМЕШЕНИЯ, ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ КАЛОРИМЕТРИЯ, МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ РАСПЛАВЫ, ПЕРЕХОДНЫЕ МЕТАЛЛЫ, МОДЕЛЬ ИДЕАЛЬНОГО АССОЦИИРОВАННОГО РАСТВОРА, CALPHAD-МЕТОД, ДИАГРАММА СОСТОЯНИЯ, МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ, ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ, ЭНЕРГЕТИКА СПЛАВООБРАЗОВАНИЯ, ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ