

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	9
1 Анализ литературных данных о фазовых превращениях и термодинамических свойствах фаз систем Cu–Fe–V, Cu–Fe–Cr, Cu–Fe–Co, Cu–Fe–Ni и граничных двухкомпонентных систем .....	12
1.1 Граничные двухкомпонентные системы.....	12
1.1.1 Система Cu–Fe .....	12
1.1.2 Система Cu–V.....	15
1.1.3 Система Cu–Cr.....	16
1.1.4 Система Cu–Co .....	19
1.1.5 Система Cu–Ni.....	23
1.1.6 Система Fe–V.....	24
1.1.7 Система Fe–Cr.....	26
1.1.8 Система Fe–Co .....	30
1.1.9 Система Fe–Ni.....	33
1.2 Трехкомпонентные системы.....	34
1.2.1 Система Cu–Fe–V .....	34
1.2.2 Система Cu–Fe–Cr.....	37
1.2.3 Система Cu–Fe–Co .....	41
1.2.4 Система Cu–Fe–Ni.....	47
1.3 Анализ литературной информации о специфических структурах, формирующихся при затвердевании расслоившихся жидких сплавов, и об условиях их образования .....	57
2 Оборудование, методика проведения и обработка результатов экспериментов .....	64
2.1 Высокотемпературная калориметрия.....	64
2.1.1 Конструкция высокотемпературной изопериболической калориметрической установки .....	64

2.1.2	Методика проведения калориметрического эксперимента и обработки его результатов.....	71
2.1.3	Аппроксимация результатов эксперимента .....	75
2.2	Методы изучения микроструктуры, фазового состава и кристаллической структуры фаз сплавов и температур фазовых превращений .....	77
3	Энтальпии смешения жидких сплавов трехкомпонентных систем Cu–Fe–(V, Cr, Co, Ni) и фазовые превращения в сплавах систем Cu–Fe–V и Cu–Fe–Cr.....	81
3.1	Использованные материалы, справочные данные и условия проведения экспериментов .....	81
3.2	Результаты калориметрического исследования энтальпий смешения жидких сплавов систем Cu–Fe–V, Cu–Fe–Cr, Cu–Fe–Co и Cu–Fe–Ni.....	84
3.2.1	Энтальпии смешения жидких сплавов системы Cu–Fe–V .....	84
3.2.2	Энтальпии смешения жидких сплавов системы Cu–Fe–Cr .....	88
3.2.3	Энтальпии смешения жидких сплавов системы Cu–Fe–Co.....	90
3.2.4	Энтальпии смешения жидких сплавов системы Cu–Fe–Ni .....	95
3.3	Результаты исследования микроструктуры, состава, кристаллической структуры фаз и температур фазовых превращений сплавов систем Cu–Fe–V и Cu–Fe–Cr.....	99
4	Термодинамическое описание трехкомпонентных систем Cu–Fe–V, Cu–Fe–Cr, Cu–Fe–Co, Cu–Fe–Ni и граничной двухкомпонентной системы Fe–Co.....	111
4.1	Формализм CALPHAD-метода.....	112
4.1.1	Модели энергии Гиббса чистых элементов .....	112
4.1.2	Модели энергии Гиббса фаз двухкомпонентных систем .....	114
4.1.3	Модели энергии Гиббса фаз трехкомпонентных систем .....	116
4.1.4	Процедура термодинамического описания двухкомпонентных и трехкомпонентных систем.....	118

4.1.5	Некоторые аспекты расчета равновесных и метастабильных превращений с участием расслоившихся фаз в трехкомпонентной системе.....	124
4.2	Термодинамическое описание трехкомпонентной системы Cu–Fe–V .....	135
4.2.1	Ранние термодинамические описания системы Cu–Fe–V.....	135
4.2.2	Процедура оптимизации параметров моделей энергии Гиббса фаз системы Cu–Fe–V .....	136
4.2.3	Результаты расчетов для системы Cu–Fe–V и их обсуждение .....	138
4.3	Термодинамическое описание трехкомпонентной системы Cu–Fe–Cr.....	151
4.3.1	Ранние термодинамические описания системы Cu–Fe–Cr.....	151
4.3.2	Процедура оптимизации параметров моделей энергии Гиббса фаз системы Cu–Fe–Cr .....	152
4.3.3	Результаты расчетов для системы Cu–Fe–Cr и их обсуждение .....	153
4.4	Термодинамическое описание трехкомпонентной системы Cu–Fe–Co .....	166
4.4.1	Термодинамическое описание двухкомпонентной системы Fe–Co.....	166
4.4.2	Ранние термодинамические описания системы Cu–Fe–Co.....	169
4.4.3	Процедура оптимизации параметров моделей энергии Гиббса фаз системы Cu–Fe–Co.....	170
4.4.4	Результаты расчетов для системы Cu–Fe–Co и их обсуждение.....	171
4.5	Термодинамическое описание трехкомпонентной системы Cu–Fe–Ni.....	183
4.5.1	Ранние термодинамические описания системы Cu–Fe–Ni.....	183
4.5.2	Процедура оптимизации параметров моделей энергии Гиббса фаз системы Cu–Fe–Ni .....	184
4.5.3	Результаты расчетов для системы Cu–Fe–Ni и их обсуждение .....	185

4.6 Моделирование температурно-концентрационных границ превращений с участием расслоившихся расплавов.....	200
5 Анализ характера температурно-концентрационной зависимости термодинамических свойств жидких сплавов.....	217
5.1 Концентрационная зависимость парциальной энтальпии смешения.....	217
5.2 Концентрационная зависимость интегральной энтальпии смешения.....	221
5.3 Концентрационная зависимость термодинамических активностей компонентов.....	226
5.4 Температурно-концентрационная зависимость энергии Гиббса смешения и проблема расслоения расплавов.....	231
ВЫВОДЫ.....	244
ПЕРЕЧЕНЬ ССЫЛОК.....	246
ПРИЛОЖЕНИЯ.....	258
Приложение А. Протокол опыта от 21.06.2008 по калориметрическому определению концентрационной зависимости парциальной энтальпий смешения никеля в тройной системе Cu–Fe–Ni вдоль разреза $x_{Cu}/x_{Fe} = 3$ .....	258
Приложение Б. Коэффициенты уравнений температурной зависимости энергии Гиббса чистых V, Cr, Fe, Co, Ni и Cu.....	261
Приложение В. Термодинамическая база, описывающая энергию Гиббса фаз трехкомпонентной системы Cu–Fe–V.....	263
Приложение Г. Термодинамическая база, описывающая энергию Гиббса фаз трехкомпонентной системы Cu–Fe–Cr.....	267
Приложение Д. Термодинамическая база, описывающая энергию Гиббса фаз трехкомпонентной системы Cu–Fe–Co.....	271
Приложение Е. Термодинамическая база, описывающая энергию Гиббса фаз трехкомпонентной системы Cu–Fe–Ni.....	275