

СОДЕРЖАНИЕ

	Стр.
ВВЕДЕНИЕ	10
1 Анализ литературных данных о фазовых превращениях, термодинамических свойствах и склонности к аморфизации расплавов систем Cu–Ti–Zr, Cu–Ni–Ti, Cu–Fe–Ti, Cu–Ni–Zr, Ni–Ti–Zr и граничных двухкомпонентных систем	14
1.1 Граничные двухкомпонентные системы	14
1.1.1 Система Cu–Ti	14
1.1.2 Система Cu–Zr	17
1.1.3 Система Fe–Ti	20
1.1.4 Система Fe–Zr	23
1.1.5 Система Ni–Ti	25
1.1.6 Система Ni–Zr	28
1.1.7 Система Ti–Zr	30
1.1.8 Система Cu–Fe	32
1.1.9 Система Cu–Ni	35
1.2 Трехкомпонентные системы	37
1.2.1 Система Cu–Ti–Zr	37
1.2.2 Система Cu–Ni–Ti	41
1.2.3 Система Cu–Fe–Ti	44
1.2.4 Система Ni–Ti–Zr	47
1.2.5 Система Cu–Ni–Zr	50
2 Оборудование, методика проведения и обработка результатов экспериментов	53
2.1 Теоретические основы изопериболической калориметрии	53
2.2 Методы определения тепловых эффектов по результатам калориметрического эксперимента и сравнение их эффективности	58

2.3	Конструкция высокотемпературной изопериболической калориметрической установки	62
2.4	Методика проведения калориметрического эксперимента и обработки его результатов	70
2.5	Аппроксимация результатов эксперимента	74
3	Энтальпии смешения двух- и трехкомпонентных жидких сплавов, исследование характера взаимодействия металлов-добавок с тройными расплавами	79
3.1	Использованные материалы, справочные данные и условия проведения экспериментов	79
3.2	Калориметрическое исследование концентрационной зависимости энтальпии смешения в расплавах двухкомпонентных систем.	82
3.2.1	Энтальпии смешения жидких сплавов системы Fe–Ti	82
3.2.2	Энтальпии смешения жидких сплавов системы Fe–Zr	84
3.3	Калориметрическое исследование концентрационной зависимости энтальпии смешения в расплавах трехкомпонентных систем.....	86
3.3.1	Энтальпии смешения жидких сплавов системы Cu–Ti–Zr	86
3.3.2	Энтальпии смешения жидких сплавов системы Cu–Ni–Ti	94
3.3.3	Энтальпии смешения жидких сплавов системы Cu–Fe–Ti	100
3.3.4	Энтальпии смешения жидких сплавов системы Cu–Ni–Zr	105
3.4	Энтальпии смешения металлов-добавок, повышающих склонность к аморфизации, с расплавами систем Cu–Ti–Zr, Cu–Ni–Ti и Cu–Fe–Ti.....	107
4	Анализ характера концентрационной зависимости и моделирование термодинамических свойств расплавов	113
4.1	Моделирование термодинамических функций смешения расплавов систем Fe–Ti и Fe–Zr.....	113
4.2	Анализ концентрационной зависимости термодинамических	

функций смешения трехкомпонентных расплавов в рамках математических моделей	127
4.3 Моделирование термодинамических функций смешения трехкомпонентных расплавов в рамках модели ИАР	134
4.3.1 Общий подход к моделированию термодинамических свойств в рамках модели ИАР	134
4.3.2 Термодинамические функции смешения жидких сплавов системы Cu–Ti–Zr	138
4.3.3 Термодинамические функции смешения жидких сплавов системы Cu–Ni–Ti	144
4.3.4 Термодинамические функции смешения жидких сплавов системы Cu–Fe–Ti	149
4.3.5 Термодинамические функции смешения жидких сплавов системы Cu–Ni–Zr	154
4.3.6 Термодинамические функции смешения жидких сплавов системы Ni–Ti–Zr	159
4.4 Особенности термодинамических свойств расплавов, рассчитанных в рамках модели ИАР	164
4.5 Моделирование степени ближнего химического порядка в расплавах изученных трехкомпонентных систем в рамках модели ИАР	168
5 Моделирование фазовых превращений в аморфообразующих двух- и трехкомпонентных системах	175
5.1 Моделирование фазовых равновесий в рамках CALPHAD-метода	175
5.1.1 Моделирование энергии Гиббса чистых элементов.....	175
5.1.2 Моделирование энергии Гиббса фаз двухкомпонентных систем.....	179
5.1.3 Моделирование энергии Гиббса фаз трехкомпонентных	

систем.	182
5.1.4 Процедура термодинамического описания двухкомпонентных и трехкомпонентных систем	188
5.2 Термодинамическое описание системы Cu–Ti.	193
5.2.1 Данные о фазовых превращениях и термодинамических свойствах фаз системы Cu–Ti.	193
5.2.2 Оптимизация параметров моделей термодинамических свойств фаз системы Cu–Ti.	206
5.2.3 Результаты расчетов фазовых равновесий в системе Cu–Ti	210
5.3 Термодинамическое описание системы Cu–Zr.	213
5.3.1 Данные о фазовых превращениях и термодинамических свойствах фаз системы Cu–Zr.	213
5.3.2 Оптимизация параметров моделей термодинамических свойств фаз системы Cu–Zr.	227
5.3.3 Результаты расчетов фазовых равновесий в системе Cu–Zr	228
5.4 Термодинамическое описание системы Ti–Zr.	233
5.4.1 Данные о фазовых превращениях и термодинамических свойствах фаз системы Ti–Zr.	233
5.4.2 Оптимизация параметров моделей термодинамических свойств фаз системы Ti–Zr.	236
5.4.3 Результаты расчетов фазовых равновесий в системе Ti–Zr	236
5.5 Термодинамическое описание системы Ni–Ti.	238
5.5.1 Данные о фазовых превращениях и термодинамических свойствах фаз системы Ni–Ti.	238
5.5.2 Оптимизация параметров моделей термодинамических свойств фаз системы Ni–Ti.	246
5.5.3 Результаты расчетов фазовых равновесий в системе Ni–Ti	251
5.6 Термодинамическое описание системы Cu–Ti–Zr.	253
5.6.1 Данные о фазовых превращениях и термодинамических свойствах фаз системы Cu–Ti–Zr.	253

5.6.2 Оптимизация параметров моделей термодинамических свойств фаз системы Cu–Ti–Zr.	259
5.6.3 Результаты расчетов фазовых равновесий в системе Cu–Ti–Zr.	262
5.7 Моделирование метастабильных фазовых превращений в аморфообразующих системах.	274
5.7.1 Методика расчета метастабильных фазовых превращений с участием переохлажденных расплавов.	276
5.7.2 Двухкомпонентные системы Cu–Ti, Cu–Zr, Ni–Ti.	283
5.7.3 Трехкомпонентные системы.	290
ВЫВОДЫ.	301
ПЕРЕЧЕНЬ ССЫЛОК.	304
ПРИЛОЖЕНИЯ.	336
Приложение А. Протокол опыта по калориметрическому определению концентрационной зависимости парциальной энтальпий смешения Zr в тройной системе Cu–Ti–Zr вдоль разреза $x_{Ti}/x_{Cu} = 3/7$ и первой парциальной энтальпии смешения Si, Al и Sn с тройными расплавами.	336
Приложение Б. Избыточные термодинамические функции смешения расплавов систем Cu–Ti–Zr, Cu–Ni–Ti, Cu–Fe–Ti и Cu–Ni–Zr, рассчитанные в рамках модели идеального ассоциированного раствора.	339