

СОДЕРЖАНИЕ

ЧАСТЬ 1	10
ВВЕДЕНИЕ	10
1 АНАЛИЗ ЛИТЕРАТУРНЫХ ДАННЫХ О ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВАХ ФАЗ СИСТЕМ Co–Ni–Zr, Ni–Ti–Zr, Co–Cu–Ti, Co–Cu–Zr, Cu–Ni–Hf, Cu–Fe–Zr, Cu–Fe–Hf И ГРАНИЧНЫХ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ	15
1.1 Фазовые равновесия и термодинамические свойства фаз в тройной системе Co–Ni–Zr	15
1.1.1 Система Co–Ni	15
1.1.2 Система Co–Zr	17
1.1.3 Система Ni–Zr	20
1.1.4 Система Co–Ni–Zr	22
1.2 Фазовые равновесия и термодинамические свойства фаз в тройной системе Ni–Ti–Zr	26
1.2.1 Система Ni–Ti	27
1.2.2 Система Ti–Zr	30
1.2.3 Система Ni–Ti–Zr	31
1.3 Фазовые равновесия и термодинамические свойства фаз в тройной системе Co–Cu–Ti	37
1.3.1 Система Cu–Co	37
1.3.2 Система Co–Ti	41
1.3.3 Система Cu–Ti	43
1.3.4 Система Co–Cu–Ti	46
1.4 Фазовые равновесия и термодинамические свойства фаз в тройной системе Co–Cu–Zr	50
1.4.1 Система Cu–Zr	51
1.4.2 Система Co–Cu–Zr	53
1.5 Фазовые равновесия и термодинамические свойства фаз в тройной системе Cu–Ni–Hf	55

1.5.1 Система Cu–Ni.....	55
1.5.2 Система Cu–Hf.....	57
1.5.3 Система Ni–Hf.....	61
1.5.4 Система Cu–Ni–Hf.....	63
1.6 Фазовые равновесия и термодинамические свойства фаз в тройной системе Cu–Fe–Zr.....	64
1.6.1 Система Cu–Fe.....	64
1.6.2 Система Fe–Zr.....	67
1.6.3 Система Cu–Fe–Zr.....	70
1.7 Фазовые равновесия и термодинамические свойства фаз в тройной системе Cu–Fe–Hf.....	70
1.7.1 Система Fe–Hf.....	72
1.7.2 Система Cu–Fe–Hf.....	73
2 МАТЕРИАЛЫ, ОБОРУДОВАНИЕ, МЕТОДИКИ ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА И ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ.....	75
2.1 Конструкция высокотемпературной изопериболической калориметрической установки.....	75
2.2 Исходные материалы.....	78
2.3 Методики проведения калориметрического эксперимента и обработки его результатов. Справочные данные и условия проведения опытов.....	78
2.4 Аппроксимация результатов эксперимента.....	81
3 ЭНТАЛЬПИИ СМЕШЕНИЯ ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ РАСПЛАВОВ СИСТЕМ Co–Ni–Zr, Ni–Ti–Zr, Co–Cu–Ti и Co–Cu–Zr, Cu–Ni–Hf, Cu–Fe–Zr И Cu–Fe–Hf.....	84
3.1 Результаты калориметрического исследования энтальпии смешения жидких сплавов системы Fe–Hf.....	84
3.2 Результаты калориметрического исследования энтальпии смешения жидких сплавов системы Co–Ni–Zr.....	86
3.2.1 Данные о парциальной энтальпии смешения циркония.....	87
3.2.2 Данные об интегральной энтальпии смешения расплавов.....	91

3.3 Результаты calorиметрического исследования энтальпии смешения жидких сплавов системы Ni–Ti–Zr	95
3.3.1 Данные о парциальной энтальпии смешения циркония и титана.....	95
3.3.2 Данные об интегральной энтальпии смешения расплавов	99
3.4 Результаты calorиметрического исследования энтальпии смешения жидких сплавов системы Co–Cu–Ti.....	103
3.4.1 Данные о парциальной энтальпии смешения титана	103
3.4.2 Данные об интегральной энтальпии смешения расплавов	106
3.5 Результаты calorиметрического исследования энтальпии смешения жидких сплавов системы Co–Cu–Zr	110
3.5.1 Данные о парциальной энтальпии смешения циркония	111
3.5.2 Данные об интегральной энтальпии смешения расплавов	112
3.6 Результаты calorиметрического исследования энтальпии смешения жидких сплавов системы Cu–Ni–Hf.....	118
3.6.1 Данные о парциальной энтальпии смешения гафния.....	118
3.6.2 Данные об интегральной энтальпии смешения расплавов	119
3.7 Результаты calorиметрического исследования энтальпии смешения жидких сплавов системы Cu–Fe–Zr	126
3.7.1 Данные о парциальной энтальпии смешения циркония	126
3.7.2 Данные об интегральной энтальпии смешения расплавов	129
3.8 Результаты calorиметрического исследования энтальпии смешения жидких сплавов системы Cu–Fe–Hf.....	133
3.8.1 Данные о парциальной энтальпии смешения гафния.....	134
3.8.2 Данные об интегральной энтальпии смешения расплавов	136
4 ЗАКОНОМЕРНОСТИ ИЗМЕНЕНИЯ ЭНТАЛЬПИЙ СМЕШЕНИЯ РАСПЛАВОВ АМОРФООБРАЗУЮЩИХ СИСТЕМ ПО ДАННЫМ ИССЛЕДОВАНИЙ И РЕЗУЛЬТАТАМ ИХ ОПИСАНИЯ	142
4.1 Парциальные энтальпии смешения титана, циркония и гафния	142
4.2 Интегральные энтальпии смешения компонентов.....	147
4.3 Вклад тройного взаимодействия в интегральную энтальпию смешения	157

5 ЗАКОНОМЕРНОСТИ ИЗМЕНЕНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСПЛАВОВ АМОРФООБРАЗУЮЩИХ СИСТЕМ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ОПИСАНИЯ В РАМКАХ МОДЕЛИ АССОЦИИРОВАННОГО РАСТВОРА	166
5.1 Общий подход к описанию термодинамических свойств в рамках модели ИАР	166
5.2 Моделирование термодинамических функций смешения расплавов систем Fe–Zr и Fe–Hf	171
5.3 Описание термодинамических функций смешения трехкомпонентных расплавов в рамках модели ИАР	180
5.3.1 Термодинамические функции смешения жидких сплавов системы Cu–Ti–Zr	180
5.3.2 Термодинамические функции смешения жидких сплавов системы Co–Ni–Zr	184
5.3.3 Термодинамические функции смешения жидких сплавов системы Ni–Ti–Zr	187
5.3.4 Термодинамические функции смешения жидких сплавов системы Co–Cu–Ti	192
5.3.5 Термодинамические функции смешения жидких сплавов системы Co–Cu–Zr	195
5.3.6 Термодинамические функции смешения жидких сплавов системы Cu–Ni–Hf	198
5.4 Особенности концентрационной зависимости термодинамических свойств расплавов	201
5.5 Особенности температурной зависимости термодинамических свойств расплавов	207
5.6 Моделирование степени ближнего химического порядка в расплавах трехкомпонентных систем и прогнозирование концентрационных областей аморфизации	222

ЧАСТЬ 2	236
6 МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСНЫХ И МЕТАСТАБИЛЬНЫХ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В АМОРФООБРАЗУЮЩИХ СИСТЕМАХ	236
6.1 Моделирование фазовых равновесий в рамках CALPHAD-метода.....	236
6.1.1 Моделирование энергии Гиббса чистых элементов.....	237
6.1.2 Моделирование энергии Гиббса фаз двухкомпонентных систем.....	241
6.1.3 Моделирование энергии Гиббса фаз трехкомпонентных систем	244
6.1.4 Процедура термодинамического описания двойных и тройных систем	250
6.2 Термодинамическое описание системы Cu–Ti–Zr	255
6.2.1 Термодинамическое описание системы Cu–Ti	255
6.2.2 Термодинамическое описание системы Cu–Zr	260
6.2.3 Термодинамическое описание системы Ti–Zr	265
6.2.4 Данные о фазовых превращениях в системе Cu–Ti–Zr	267
6.2.5 Информация о предшествующих термодинамических описаниях системы Cu–Ti–Zr.....	272
6.2.6 Оптимизация параметров моделей и результаты расчетов фазовых равновесий в системе Cu–Ti–Zr	274
6.3 Расчет метастабильных фазовых превращений с участием переохлажденных расплавов рассмотренных аморфообразующих систем ..	286
6.3.1 Методика расчета метастабильных фазовых превращений с участием переохлажденных расплавов.....	286
6.3.2 Примеры расчета для двухкомпонентных систем Cu–Ti, Cu–Zr, Ni–Ti	291
6.3.3 Пример прогнозирования концентрационных областей аморфизации для расплавов трехкомпонентной системы Cu–Ti–Zr	298
7. ПРИНЦИПЫ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОДХОДА К ПРОГНОЗИРОВАНИЮ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ОБЛАСТЕЙ АМОРФИЗАЦИИ РАСПЛАВОВ	317
ВЫВОДЫ	326
ПЕРЕЧЕНЬ ССЫЛОК.....	330
ПРИЛОЖЕНИЯ.....	352