

**Міністерство освіти і науки України  
Донбаська державна машинобудівна академія  
Асоціація ливарників України  
Фізико-технологічний інститут металів та сплавів НАН України  
Донецька державна обласна адміністрація  
ПрАТ «Новокраматорський машинобудівний завод»  
ПАТ «Енергомашспецсталь»**

# **ПЕРСПЕКТИВНІ ТЕХНОЛОГІЇ, МАТЕРІАЛИ Й ОБЛАДНАННЯ В ЛИВАРНОМУ ВИРОБНИЦТВІ**

## **МАТЕРІАЛИ**

**IX міжнародної  
науково-технічної конференції  
25–27 вересня 2023 року**

Краматорськ  
ДДМА  
2023

<b>Трембач І. О., Гринь О. Г.</b> Обґрунтування можливості використання манганової руди в складі самозахисного порошкового дроту.....	118
<b>Турчанін М. А., Корнієнко К.Є., Великанова Т. Я.</b> Діяльність української комісії з діаграм стану та термодинаміки у 2021–2022 роках.....	120
<b>Турчанін М. А., Агравал П. Г., Древаль Л. О.</b> Фазові діаграми системи Со–Ті.....	122
<b>Турчанін М. А., Корсун В. А., Агравал П. Г., Водоп'янова Г. О., Древаль Л. О.</b> Термодинамічні властивості рідких сплавів трикомпонентної аморфоутворюючої системи Со–Ті–Zr.....	124
<b>Турчанін М. А., Агравал П. Г., Корсун В. А., Водоп'янова Г. О., Сарана К. С., Древаль Л. О.</b> Ентальпії змішування рідких сплавів трикомпонентної аморфоутворюючої системи Со–Ni–Ті при 1873 К .....	127
<b>Турчанін М. А., Агравал П. Г., Водоп'янова Г. О., Корсун В. А., Древаль Л. О.</b> Температурно-концентраційна залежність термодинамічних властивостей аморфоутворюючих розплавів Со–Cu–Ni–Ті–Zr та Со–Cu–Ni–Ті–Hf.....	129
<b>Турчанін М. А., Агравал П. Г., Водоп'янова Г. О., Корсун В. А., Древаль Л. О.</b> Близький хімічний порядок у розплавах Со–Cu–Ni–Ті–Zr, Со–Cu–Ni–Ті–Hf і прогнозовані концентраційні області їх аморфізації .....	131
<b>Уткін С. В., Кублій В. З., Бондар А. А., Слепцов С. В.</b> Фазові рівноваги у кобальтовому куті системи Мо–Со–В при субсолідусних температурах .....	133
<b>Федоров М. М., Дьяченко Ю. Г.</b> Дослідження впливу мікродобавок холоднонабухаючого крохмалю на властивості піщано-бентонітових сумішей для формування «по-сирому» .....	134
<b>Фесенко А. М., Фесенко М. А.</b> Способи виготовлення чавунних виливків із функціонально-градієнтною структурою .....	136
<b>Фесенко М. А., Фесенко А. М.</b> Застосування технології модифікувального оброблення розплаву чавуну для отримання потрібної структури й підвищення експлуатаційних властивостей виливків.....	139
<b>Фон Прусс М. А.</b> Вплив комплексного модифікування на нейтралізацію залізовмісних фаз ливарного сплаву AlSi9Cu3 з підвищеним вмістом заліза до 2 % мас.....	141
<b>Хричиков В. Є., Білий О. П., Меньяло О. В., Стовба В. М.</b> Кристалізація та властивості чавуну у виливках.....	143
<b>Царюк Д. В., Прядко Т. В., Носенко В. К., Носенко А. В., Судацова В. С.</b> Енергія міжатомної взаємодії в розплавах систем Mg–Si і Al–Mg–Si.....	145
<b>Царюк Д. В., Прядко Т. В., Носенко В. К., Носенко А. В., Судацова В. С.</b> Термодинамічні властивості і фазові рівноваги у сплавах системи Al–Mg–Ge і подвійних граничних підсистемах.....	147

## ЛІТЕРАТУРА

1. Guillermet F. *Assessment of the thermodynamic properties of the Ni-Co system* // *Z. Metallkd.* 1987. Vol. 78, No. 9. P. 639–647.
2. Dreval L. A., Agraval P. G., Turchanin M. A. *Calorimetric investigation of the mixing enthalpy of liquid Co–Cu–Ti alloys at 1873 K* // *Phys. Chem. Liq.* 2018. Vol. 56, No. 5. P. 674–684.
3. Agraval P., Dreval L., Turchanin M., e.a. *Enthalpy of mixing of liquid Ni–Ti–Zr alloys at 1873 K* // *J. Chem. Thermodyn.* 2017. Vol. 106. P. 309–316.

### ТЕМПЕРАТУРНО-КОНЦЕНТРАЦІЙНА ЗАЛЕЖНІСТЬ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ АМОРФОУТВОРЮЮЧИХ РОЗПЛАВІВ Co–Cu–Ni–Ti–Zr ТА Co–Cu–Ni–Ti–Hf

Турчанін М. А., Агравал П. Г., Водоп'янова Г. О., Корсун В. А.,  
(м. Краматорськ, ДДМА), Древаль Л. О. (м. Штутгарт, MSI)

Для встановлення фундаментальних фізико-хімічних факторів, що визначають здатність багатоконцентних розплавів до аморфізації, важливою є інформація про особливості температурно-концентраційної залежності їх термодинамічних властивостей. Для її одержання нами була розроблена термодинамічна база даних, що спирається на параметри взаємодії компонентів в розплавах граничних дво- і трикомпонентних систем [1] і використовує як ефективний засіб розрахунків модель асоційованого розчину (МАР). При цьому, положення МАР гармонійно поєднуються із загальним уявленням про аморфоутворюючі розплави, як про систему частинок, що сильно взаємодіють.

Термодинамічні властивості розплавів аморфоутворюючих систем Co–Cu–Ni–Ti–Zr і Co–Cu–Ni–Ti–Hf і чотирикомпонентних систем, що входять до їх складу, були розраховані нами в інтервалі температур 800–2073 К. На рис. 1 показані результати розрахунків при 1873 К вздовж перерізів, які з'єднують чисті метали з еквіатомними сплавами в граничних чотирикомпонентних системах NiCuTiZr–Co, CoCuTiZr–Ni, CoNiTiZr–Cu, CoNiCuZr–Ti і CoNiCuTi–Zr. Результати розрахунків для еквіатомних розплавів при 800 і 1873 К наведені в табл. 1.

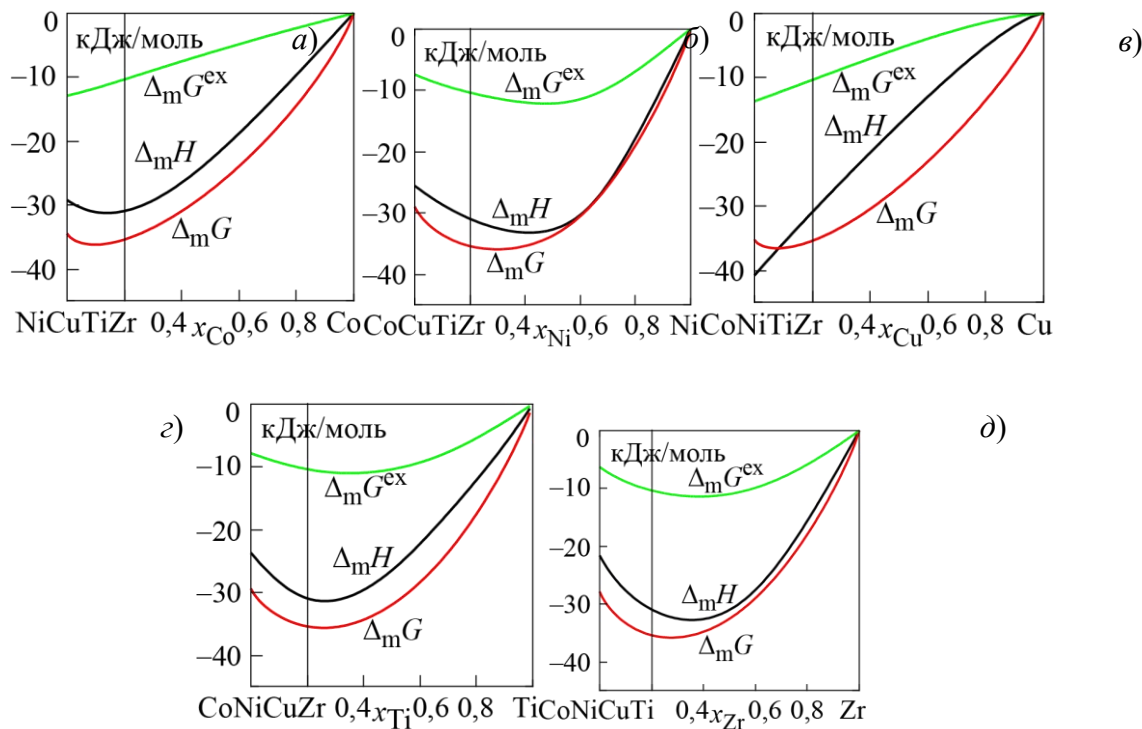


Рис. 1. Термодинамічні функції змішування розплавів системи Cu–Co–Ni–Ti–Zr, розраховані при 1873 К вздовж променевих перерізів

Таблиця 1. Термодинамічні властивості еквіатомних рідких сплавів систем Co–Cu–Ni–Ti–Zr та Co–Cu–Ni–Ti–Hf при 800 та 1873 К

Сплав	$\Delta_m H$		$\Delta_m S^{ex}$		$\Delta_m G^{ex}$		$\Delta_m S$		$\Delta_m G$	
	кДж/моль		Дж/(моль К)		кДж/моль		Дж/(моль К)		кДж/моль	
	800 К	1873 К	800 К	1873 К	800 К	1873 К	800 К	1873 К	800 К	1873 К
CoNiCuTi	-36,3	-21,8	-19,5	-8,2	-20,8	-6,4	-7,9	3,3	-30,0	-28,0
CoNiCuZr	-37,8	-23,7	-19,4	-8,5	-22,4	-7,8	-7,8	3,0	-31,6	-29,4
CoNiCuHf	-46,2	-23,7	-25,4	-9,6	-25,8	-5,7	-13,9	1,9	-35,1	-27,3
CoNiTiZr	-59,3	-40,8	-28,5	-14,5	-36,5	-13,8	-16,9	-2,9	-45,7	-35,3
CoNiTiHf	-59,0	-40,8	-28,0	-14,8	-36,6	-13,1	-16,5	-3,2	-45,8	-34,7
CoCuTiZr	-42,4	-25,6	-22,4	-9,7	-24,5	-7,5	-10,9	1,9	-33,7	-29,1
CoCuTiHf	-41,2	-24,4	-20,5	-8,4	-24,8	-8,7	-9,0	3,1	-34,1	-30,3
NiCuTiZr	-42,1	-29,2	-19,2	-8,7	-26,8	-12,9	-7,6	2,8	-36,0	-34,5
NiCuTiHf	-40,1	-27,5	-17,4	-8,4	-26,1	-11,7	-5,9	3,1	-35,4	-33,3
CoNiCuTiHf	-47,5	-31,3	-23,2	-11,4	-29,9	-10,0	-9,9	2,0	-39,6	-35,0
CoNiCuTiZr	-48,2	-31,0	-24,0	-11,0	-28,9	-10,4	-10,7	2,4	-39,7	-35,5

Як видно з результатів проведених розрахунків, аморфоутворюючі розплави в широкому інтервалі температур від значного перегріву до значного переохолодження демонструють високу термодинамічну стабільність, про що свідчать суттєві від'ємні значення енергії Гіббса змішування  $\Delta_m G$ , які для еквіатомних складів змінюються в межах  $-27 \dots -46$  кДж/моль. Основний внесок в термодинамічну стабільність надає інтегральна ентальпія

змішування розплавів  $\Delta_m H$ , яка в широкому інтервалі температур зберігає великі від'ємні значення. При цьому, відносний внесок ідеальної складової  $\Delta_m G^{id}$  в енергію Гіббса змішування змінюється в межах 71...92 % при 1873 К і 23...36 % при 800 К. Розраховані значення надлишкової ентропії змішування  $\Delta_m S^{ex}$  вказують на значне упорядкування в аморфоутворюючих розплавах, яке збільшується зі зниженням температури. Також показано, що еквіатомні багатоконпонентні розплави або близькі до них за складом композиції мають найвищу термодинамічну стабільність в відповідних системах і зберігають її в широкому інтервалі температур.

## ЛІТЕРАТУРА

1. Турчанін М. А., Агравал П. Г., Водоп'янова А. А. Термодинамические свойства многокомпонентных аморфообразующих жидких сплавов // УХЖ. 2018. Т. 84, № 5 С. 34–49.

## БЛИЖНІЙ ХІМІЧНИЙ ПОРЯДОК У РОЗПЛАВАХ Co–Cu–Ni–Ti–Zr, Co–Cu–Ni–Ti–Hf І ПРОГНОЗОВАНІ КОНЦЕНТРАЦІЙНІ ОБЛАСТІ ЇХ АМОРФІЗАЦІЇ

Турчанін М. А., Агравал П. Г., Водоп'янова Г. О., Корсун В. А.  
(м. Краматорськ, ДДМА), Древаль Л. О. (м. Штутгарт, MSI)

Для пошуку складів нових аморфних металевих матеріалів може бути використане розроблене нами емпіричне правило, що пов'язує концентраційну область аморфізації загартуванням з рідини з уявленнями феноменологічної моделі асоційованого розчину (МАР) про ближній хімічний порядок в них. Згідно з цим правилом, аморфізація загартуванням з рідини перебігає успішно для розплавів, сумарна молярна частка асоціатів  $\Sigma x_{assoc}$  в яких, при температурах близьких до температури склування, перевищує 0,3.

У даній роботі для розрахунку складу асоційованого розчину в розплавах Co–Cu–Ni–Ti–Zr та Co–Cu–Ni–Ti–Hf була використана термодинамічна база даних [1], що спирається на параметри взаємодії компонентів в розплавах граничних дво- і трикомпонентних систем і описує термодинамічні властивості розплавів з використанням МАР.

Приклади розрахунку складу асоційованого розчину, виконані для сплавів Co–Cu–Ni–Ti–Zr при 800 К для перерізів між чистими металами і еквіатомними сплавами в граничних чотирикомпонентних системах, представлені на рис. 1. Як видно з рисунку, в розплавах п'ятикомпонентних систем наявна інтенсивна взаємодія компонентів, властива граничним дво-, три- і чотирикомпонентним системам. Вона обумовлена різницею хімічних



**ДОНБАСЬКА ДЕРЖАВНА МАШИНОБУДІВНА  
АКАДЕМІЯ**

**Materials Science International**



**Лабораторія «Фізико-хімічні властивості металевих  
розплавів»**

**ТЕМПЕРАТУРНО-КОНЦЕНТРАЦІЙНА  
ЗАЛЕЖНІСТЬ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ  
ВЛАСТИВОСТЕЙ АМОРФООУТВОРЮЮЧИХ  
РОЗПЛАВІВ Co–Cu–Ni–Ti–Zr ТА Co–Cu–Ni–Ti–Hf**

**Турчанін М. А., Агравал П. Г., Водоп'янова Г. О., Корсун В.А.,  
Древаль Л. О.**

**E-mail: [phch@dgma.donetsk.ua](mailto:phch@dgma.donetsk.ua)**

# СКЛАДИ АМОΡΦΝΙΧ СПЛАВІВ В СИСТЕМАХ Co–Cu–Ni–Ti–Zr ТА Co–Cu–Ni–Ti–Hf

трикомпонентні аморфні сплави	<p>Cu–Ti–Zr (127 compositions), Cu–Ni–Ti (33 compositions), Cu–Ni–Zr (52 compositions), Cu–Ni–Hf (68 compositions), Ni–Ti–Zr (26 compositions), Ni–Zr–Hf (11 compositions)</p>
чотирикомпонентні аморфні сплави	<p>Cu–Ti–Zr–Hf (<math>\text{Cu}_{25}\text{Hf}_{25}\text{Ti}_{25}\text{Zr}_{25}</math>, <math>\text{Cu}_{60}\text{Hf}_{10}\text{Ti}_{10}\text{Zr}_{20}</math>), Cu–Ni–Ti–Zr (<math>\text{Cu}_{47}\text{Ni}_8\text{Ti}_{34}\text{Zr}_{11}</math>), Cu–Ni–Ti–Hf (<math>\text{Cu}_{25}\text{Hf}_{25}\text{Ni}_{25}\text{Ti}_{25}</math>), Fe–Ti–Zr–Hf (<math>\text{Fe}_{25}\text{Ni}_{25}\text{Ti}_{25}\text{Zr}_{25}</math>), Ni–Ti–Zr–Hf (<math>\text{Ni}_{25}\text{Hf}_{25}\text{Ti}_{25}\text{Zr}_{25}</math>), <math>\text{Al}_8\text{Ni}_{45}\text{Ti}_{20}\text{Zr}_{27}</math>, <math>\text{Al}_{10}\text{Ni}_{45}\text{Ti}_{20}\text{Zr}_{25}</math>, <math>\text{Ni}_{57}\text{Pd}_5\text{Ti}_{18}\text{Zr}_{20}</math>, <math>\text{Ni}_{57}\text{Pd}_{10}\text{Ti}_{13}\text{Zr}_{20}</math>, <math>\text{Hf}_5\text{Nb}_{20}\text{Ni}_{60}\text{Ti}_{15}</math>, <math>\text{Hf}_{10}\text{Nb}_{20}\text{Ni}_{60}\text{Ti}_{10}</math>, <math>\text{Hf}_5\text{Nb}_{10}\text{Ni}_{60}\text{Ti}_{25}</math>.</p>
п'ятикомпонентні аморфні сплави	<p>CoCuTiZrHf (<math>\text{Co}_{20}\text{Cu}_{20}\text{Hf}_{20}\text{Ti}_{20}\text{Zr}_{20}</math>), CuFeTiZrHf (<math>\text{Cu}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Hf}_{20}\text{Ti}_{20}\text{Zr}_{20}</math>), CuCrTiZrHf (<math>\text{Cr}_{20}\text{Cu}_{20}\text{Hf}_{20}\text{Ti}_{20}\text{Zr}_{20}</math>), CuMnTiZrHf (<math>\text{Cu}_{20}\text{Mn}_{20}\text{Hf}_{20}\text{Ti}_{20}\text{Zr}_{20}</math>), CuNiTiZrHf (<math>\text{Cu}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Hf}_{20}\text{Ti}_{20}\text{Zr}_{20}</math>), CuVTiZrHf (<math>\text{Cu}_{20}\text{V}_{20}\text{Hf}_{20}\text{Ti}_{20}\text{Zr}_{20}</math>), FeNiTiZrHf (<math>\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Hf}_{20}\text{Ti}_{20}\text{Zr}_{20}</math>), <math>\text{Cu}_{47}\text{Si}_1\text{Ti}_{11}\text{Zr}_{11}\text{Ni}_8</math>, <math>\text{B}_{20}\text{Co}_7\text{Fe}_{56}\text{Ni}_7\text{Zr}_{10}</math>, <math>\text{Al}_{10}\text{Cu}_5\text{Ti}_{17}\text{Ni}_{40}\text{Zr}_{28}</math>, <math>\text{Al}_{10}\text{Cu}_{20}\text{Ti}_5\text{Ni}_8\text{Zr}_{57}</math>, <math>\text{Be}_{25}\text{Cu}_{10}\text{Ti}_{11}\text{Ni}_{10}\text{Zr}_{44}</math>, <math>\text{Be}_{20}\text{Cu}_{20}\text{Ti}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Zr}_{20}</math>.</p>
шестикомпонентні аморфні сплави	<p><math>\text{B}_{20}\text{Co}_7\text{Fe}_{56}\text{Nb}_2\text{Ni}_7\text{Zr}_8</math>, <math>\text{B}_{15}\text{Co}_7\text{Fe}_{61}\text{Nb}_2\text{Ni}_7\text{Zr}_8</math>, <math>\text{B}_{20}\text{Co}_7\text{Fe}_{56}\text{Ni}_7\text{Ta}_2\text{Zr}_8</math>, <math>\text{Al}_{10}\text{Cu}_6\text{Si}_1\text{Ti}_{15}\text{Ni}_{39}\text{Zr}_{29}</math>.</p>

## МЕТА І ЗАДАЧІ РОБОТИ

Мета роботи полягає в моделюванні термодинамічних властивостей розплавів систем  $\text{Co-Cu-Ni-Ti-Zr}$  і  $\text{Co-Cu-Ni-Ti-Hf}$  і чотирикомпонентних систем, що входять до їх складу.

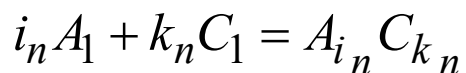
Задачі, поставлені в роботі:

1. Моделювання термодинамічних властивостей розплавів систем  $\text{Co-Cu-Ni-Ti-Zr}$  і  $\text{Co-Cu-Ni-Ti-Hf}$ .
2. Розрахунок складу асоційованого розчину в розплавах  $\text{Co-Cu-Ni-Ti-Zr}$  та  $\text{Co-Cu-Ni-Ti-Hf}$  та оцінка ближнього хімічного порядку в них.
3. Прогнозування концентраційних областей аморфізації розплавів систем  $\text{Co-Cu-Ni-Ti-Zr}$  і  $\text{Co-Cu-Ni-Ti-Hf}$  з використанням розробленого нами емпіричного правила, що пов'язує концентраційну область аморфізації загартуванням з рідини з уявленнями феноменологічної моделі асоційованого розчину (МАР) про ближній хімічний порядок в них.

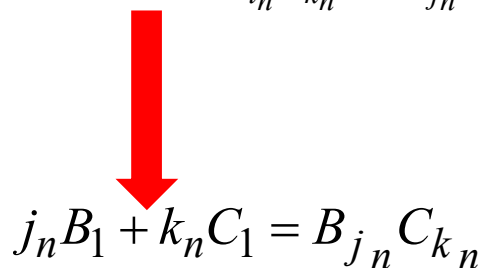


# МОДЕЛЬ АСОЦІЙОВАНОГО РОЗЧИНУ ДЛЯ ТРИКОМПОНЕНТНИХ СИСТЕМ

**ДЛЯ СИСТЕМ З СИЛЬНОЮ МІЖЧАСТИНКОВОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ**



Компоненти асоційованого розчину складу  $x_A, x_B, x_C$ ;  
Мономери  $A_1, B_1$  та  $C_1$ ;  
Асоціати  $A_{i_n} C_{k_n}$  та  $B_{j_n} C_{k_n}$



**Параметри МІАР:**

$N$  – число асоціатів;  
 $i_n, j_n, k_n$  – стехіометричні коефіцієнти асоціатів;  
 $\Delta_m H_n, \Delta_m S_n$  – ентальпія та ентропія утворення асоціату  $n$

**ДЛЯ СИСТЕМ ЗІ СЛАБОЮ МІЖЧАСТИНКОВОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ**

$$\Delta_m G^{\text{ex}} = x_A x_B \sum_{i=0}^m i L_{A-B}^L (x_A - x_B)^i$$

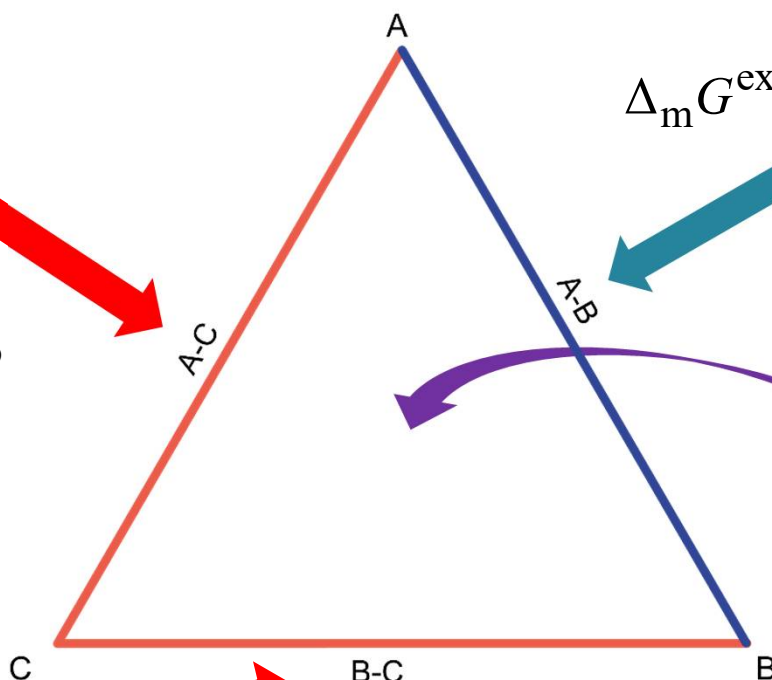
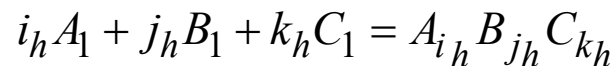
$i L_{A-B}^L$  – параметр, що характеризує подвійну взаємодію в розчинах А–В

**ВНЕСОК ПОТРІЙНОЇ ВЗАЄМОДІЇ:  
РКМ**

$$\Delta_m G_{A-B-C}^{\text{ex},L}(x_A, x_B, x_C, T) = x_A x_B x_C (x_A L_A + x_B L_B + x_C L_C)$$

$L_A, L_B$  і  $L_C$  – коефіцієнти моделі, що описують внесок відповідного металу Me

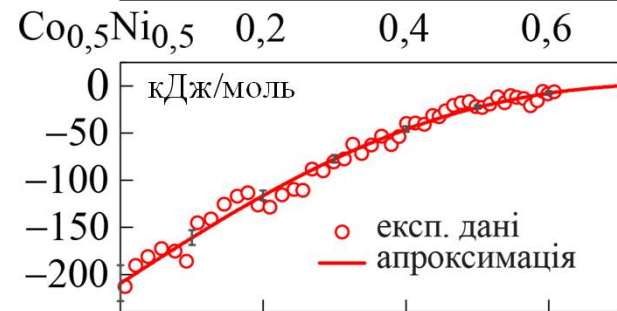
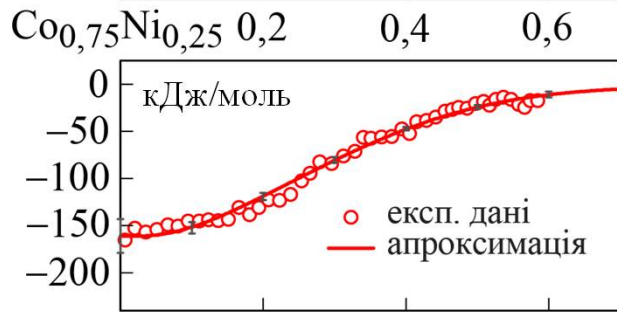
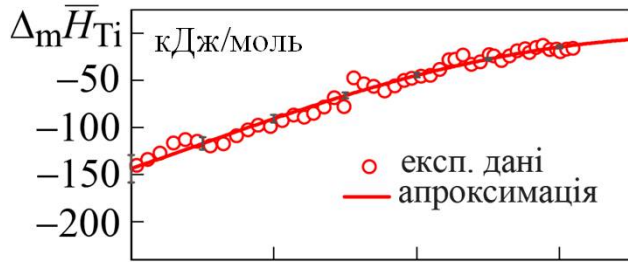
**МАР з потрійним асоціатом**  $A_{i_h} B_{j_h} C_{k_h}$



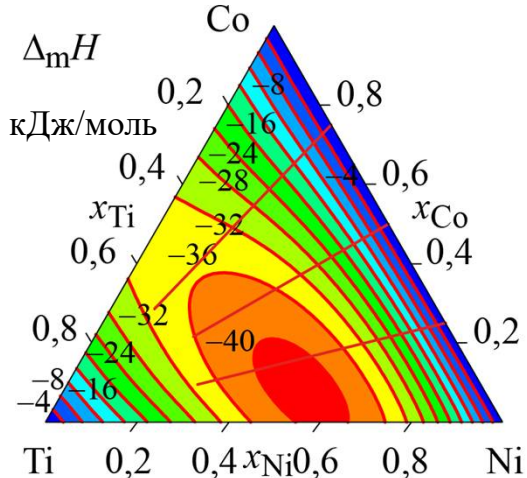
# ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ РОЗПЛАВІВ Co–Ni–Ti ПРИ 1873 К

5

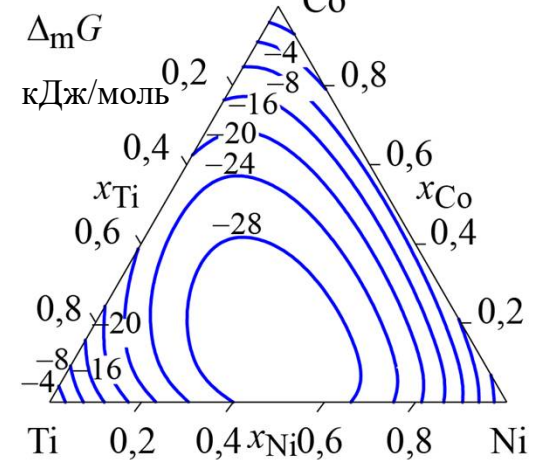
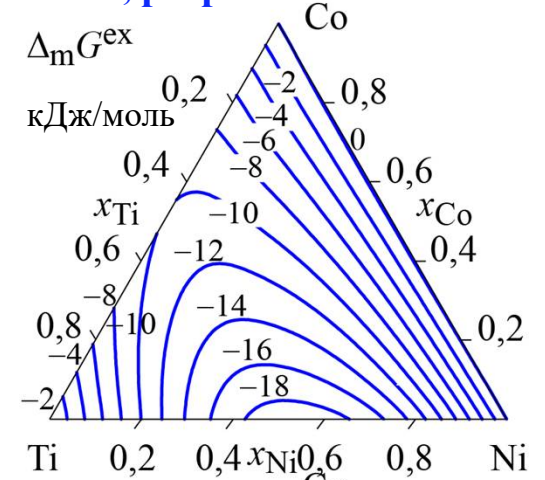
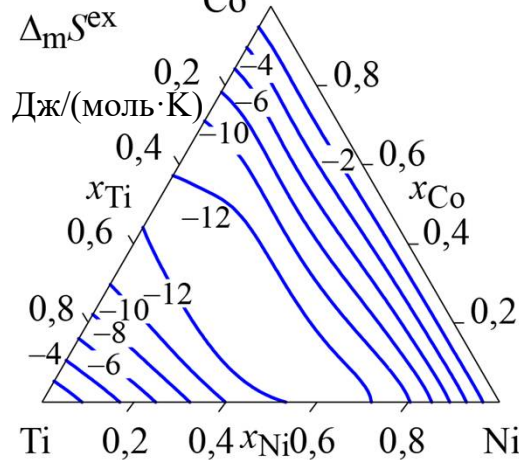
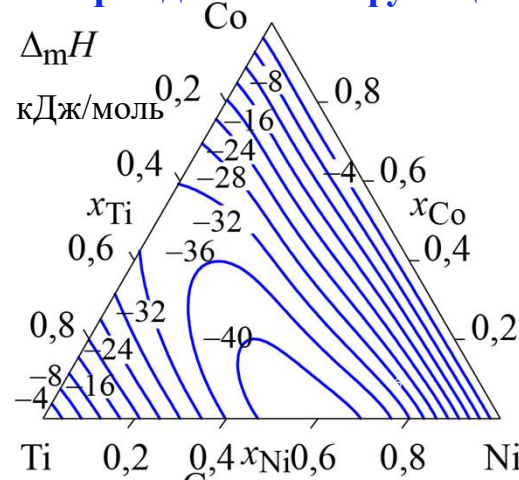
## Парціальна ентальпія змішування Ti



## Інтегральна ентальпія змішування



## Термодинамічні функції змішування, розраховані за МАР



## Параметри моделі асоційованого розчину $\Delta_{assoc}H$ (kJ/mol), $\Delta_{assoc}S$ (J/(mol·K)) та $L_{Me}$ (J/mol)

<b>Co–Ti</b>	$\Delta_{assoc}H_{Co2Ti} = -123,2$ ; $\Delta_{assoc}S_{Co2Ti} = -50,5$ ; $\Delta_{assoc}H_{CoTi} = -115,2$ ; $\Delta_{assoc}S_{CoTi} = -51,6$ ; $\Delta_{assoc}H_{CoTi2} = -123,2$ ; $\Delta_{assoc}S_{CoTi2} = -50,5$ ;
<b>Ni–Ti</b>	$\Delta_{assoc}H_{Ni3Ti} = -201,0$ ; $\Delta_{assoc}S_{Ni3Ti} = -71,0$ ; $\Delta_{assoc}H_{NiTi} = -100,8$ ; $\Delta_{assoc}S_{NiTi} = -31,2$
<b>Co–Ni</b>	$L^0_{Co-Ni} = 1331$
<b>Co–Ni–Ti</b>	$L_{Co} = 798200$ ; $L_{Ni} = 1331300$ ; $L_{Ti} = -331700$

# СТРУКТУРА БАЗИ ДАНИХ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ РОЗПЛАВІВ АМОРФООТВОРЮЮЧИХ СИСТЕМ Co–Cu–Ni–Ti–Zr ТА Co–Cu–Ni–Ti–Hf

Енергія Гіббса змішування рідкого сплаву багатокомпонентної системи

$$\Delta_m G^L(x_A, x_B, x_C, \dots, T) = RT \sum_{i=A, \dots} x_i \ln x_i +$$

<p><b>двокомпонентна складова</b></p>	{	$  \begin{aligned}  & +\Delta_m G_{A-B}^{\text{ex},L}(x_A, x_B, T) + \Delta_m G_{A-C}^{\text{ex},L}(x_A, x_C, T) + \Delta_m G_{A-D}^{\text{ex},L}(x_A, x_D, T) + \Delta_m G_{A-E}^{\text{ex},L}(x_A, x_E, T) + \\  & +\Delta_m G_{B-C}^{\text{ex},L}(x_B, x_C, T) + \Delta_m G_{B-D}^{\text{ex},L}(x_B, x_D, T) + \Delta_m G_{B-E}^{\text{ex},L}(x_B, x_E, T) + \Delta_m G_{C-D}^{\text{ex},L}(x_C, x_D, T) + \\  & +\Delta_m G_{C-E}^{\text{ex},L}(x_C, x_E, T) + \Delta_m G_{D-E}^{\text{ex},L}(x_D, x_E, T) + \dots +  \end{aligned}  $
<p><b>трикомпонентна складова</b></p>	{	$  \begin{aligned}  & +\Delta_m G_{A-B-C}^{\text{ex},L}(x_A, x_B, x_C, T) + \Delta_m G_{A-B-D}^{\text{ex},L}(x_A, x_B, x_D, T) + \\  & +\Delta_m G_{A-B-E}^{\text{ex},L}(x_A, x_B, x_E, T) + \Delta_m G_{A-C-D}^{\text{ex},L}(x_A, x_C, x_D, T) + \\  & +\Delta_m G_{A-C-E}^{\text{ex},L}(x_A, x_C, x_E, T) + \Delta_m G_{A-D-E}^{\text{ex},L}(x_A, x_D, x_E, T) + \\  & +\Delta_m G_{B-C-D}^{\text{ex},L}(x_B, x_C, x_D, T) + \Delta_m G_{B-C-E}^{\text{ex},L}(x_B, x_C, x_E, T) + \\  & +\Delta_m G_{B-D-E}^{\text{ex},L}(x_B, x_D, x_E, T) + \Delta_m G_{C-D-E}^{\text{ex},L}(x_C, x_D, x_E, T) + \dots  \end{aligned}  $

В базу даних включено параметри термодинамічної моделі для рідких сплавів:

15 двокомпонентних систем, з яких

9 систем з сильною взаємодією компонентів:

Co–Ti, Co–Zr, Co–Hf, Cu–Ti, Cu–Zr, Cu–Hf,  
Ni–Ti, Ni–Zr, Ni–Hf,

представлені параметрами MAP;

6 систем з слабкою взаємодією компонентів:

Co–Ni, Co–Cu, Cu–Ni, Hf–Ti, Hf–Zr,  
Ti–Zr, представлені

параметрами поліноміальних рівнянь

Редліха-Кістера

14 трикомпонентних систем:

13 систем з сильною взаємодією компонентів:

Co–Cu–Ti, Co–Cu–Zr, Cu–Ni–Ti, Cu–Ni–Zr, Cu–Ni–Hf,  
Cu–Ti–Zr, Cu–Ti–Hf, Ni–Ti–Zr, Ni–Ti–Hf, Co–Cu–Hf,

Co–Ni–Ti, Co–Ti–Zr, Co–Ti–Hf, представлені  
параметрами MAP;

1 система зі слабкою взаємодією компонентів:

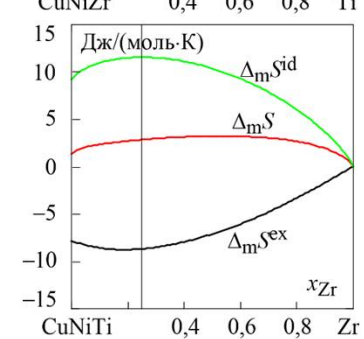
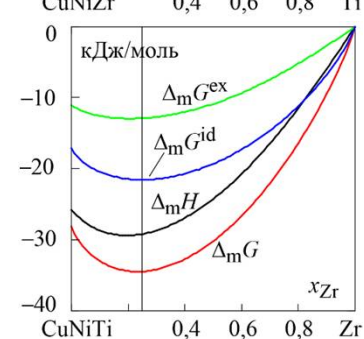
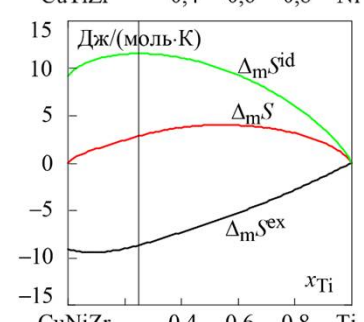
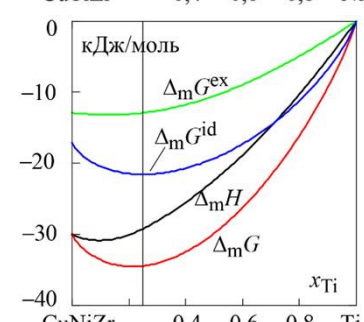
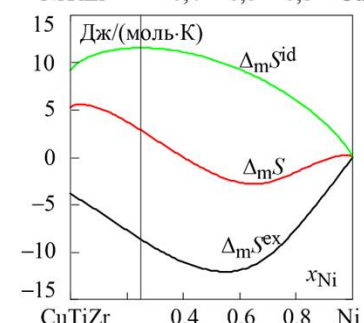
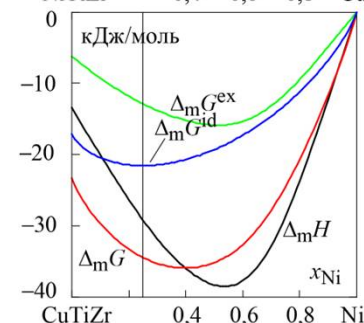
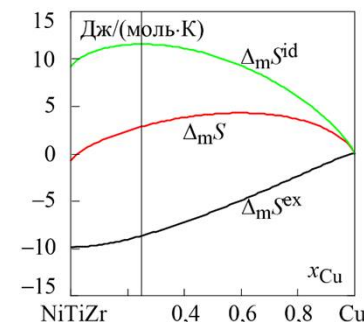
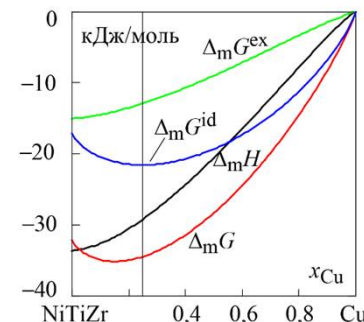
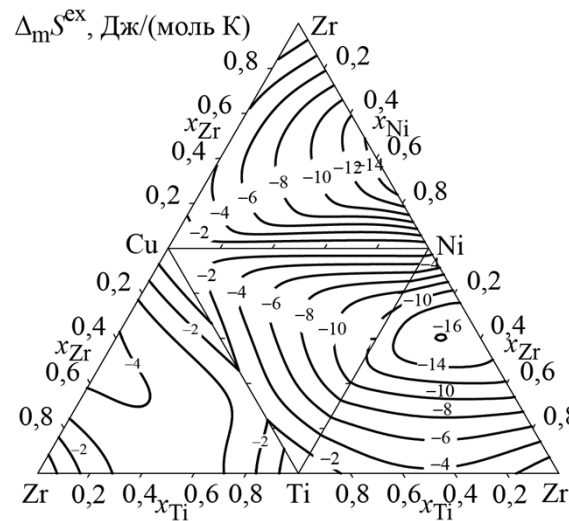
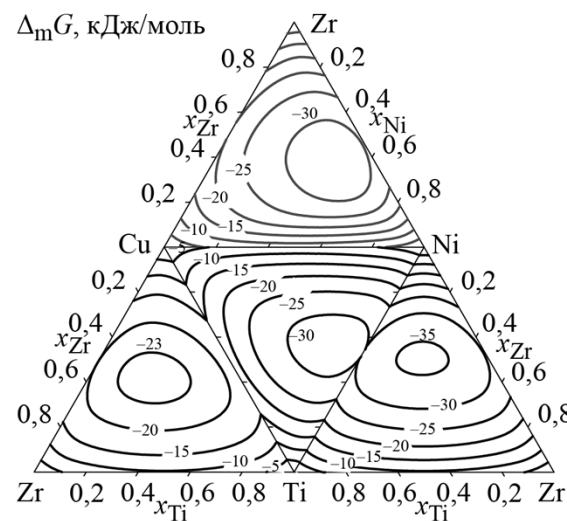
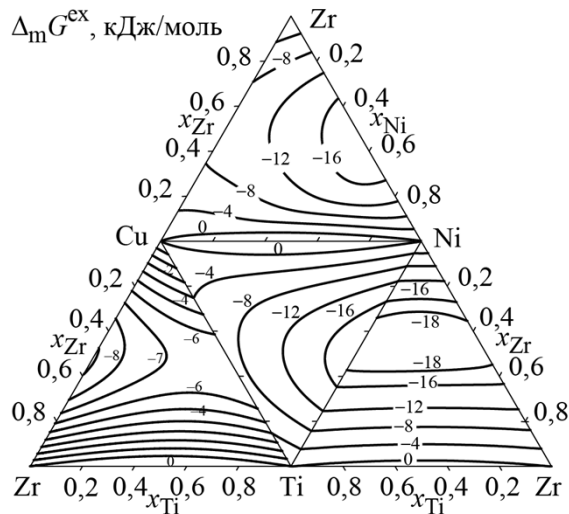
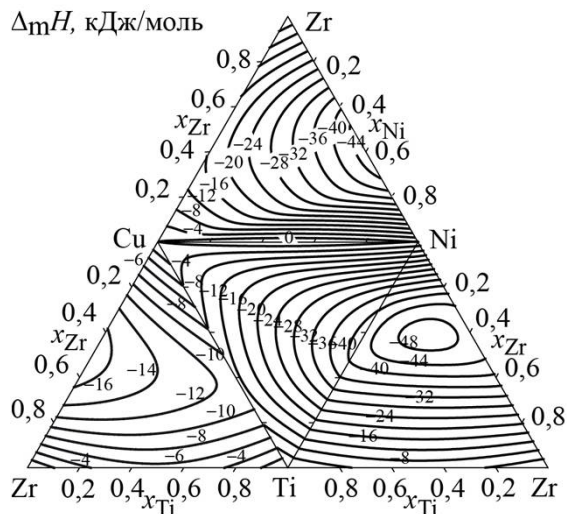
Co–Cu–Ni, яка представлена параметрами РКМ.

Всі описані трикомпонентні системи спираються на загальний набір параметрів для граничних двокомпонентних розплавів



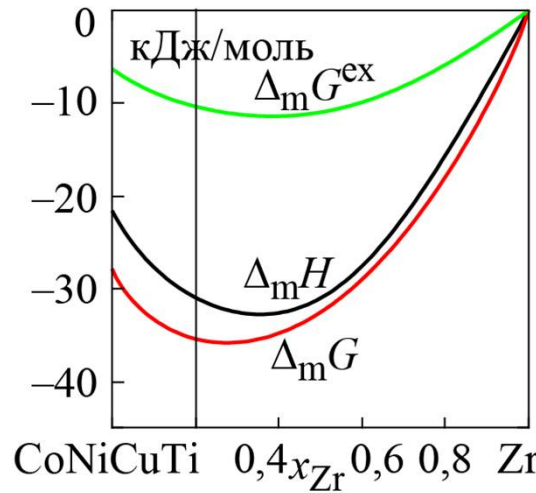
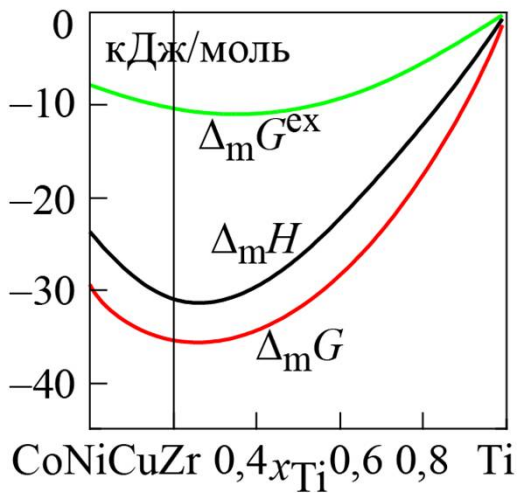
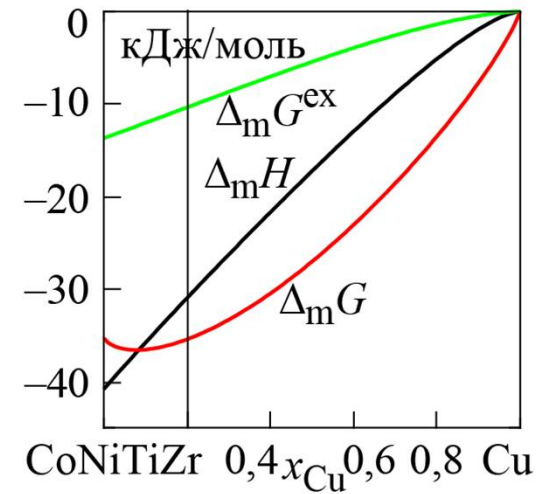
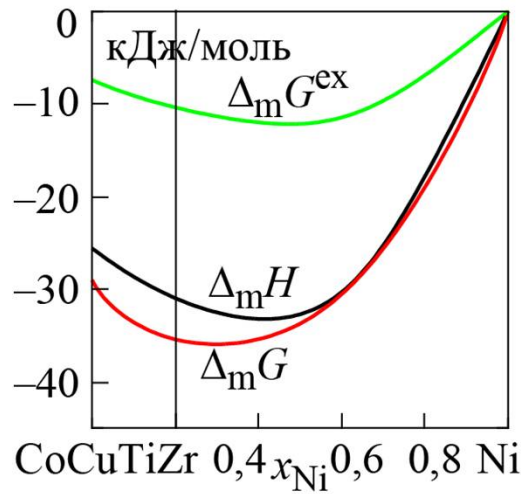
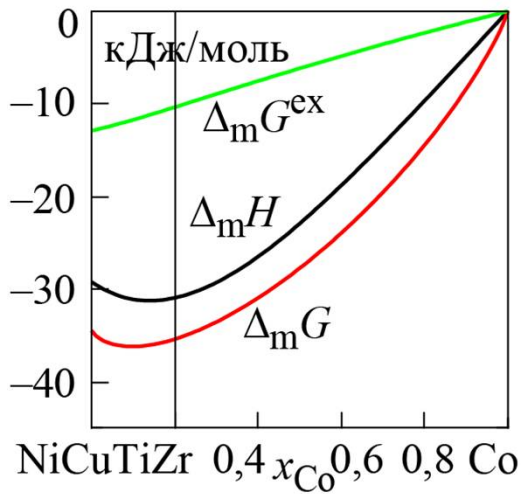
# ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ РОЗПЛАВІВ ЧОТИРИКОМПОНЕНТНОЇ СИСТЕМИ Cu–Ni–Ti–Zr ПРИ 1873 К

7



- для сплавів переважної частини концентраційного тетраедра властиві від'ємні відхилення від ідеальності;
- функція  $\Delta_m G$  досягає мінімуму поблизу еквіатомного сплаву;
- відносний внесок  $\Delta_m G^{id}$  зменшується з 60...75% при 1873 К до 25...40% при 800 К.

# ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ РОЗПЛАВІВ П'ЯТИКОМПОНЕНТНОЇ СИСТЕМИ Cu–Co–Ni–Ti–Zr ПРИ 1873 К



- Розплави в широкому інтервалі температур від значного перегріву до значного переохолодження демонструють високу термодинамічну стабільність, про що свідчать суттєві від'ємні значення енергії Гіббса змішування  $\Delta_m G$ , які для еквіатомних складів змінюються в межах  $-27 \dots -46$  кДж/моль.
- Відносний внесок ідеальної складової енергії Гіббса змішування  $\Delta_m G^{id}$  еквіатомних розплавів систем Co–Cu–Ni–Ti–Zr і Co–Cu–Ni–Ti–Hf зменшується з 71...92 % при 1873 К до 23...36 % при 800 К, але при цьому залишається помітним і робить суттєвий внесок в їх термодинамічну стабільність.

1. Вперше розроблена самоузгоджена база даних для надлишкової енергії Гіббса розплавів Co–Cu–Ni–Ti–Zr і Co–Cu–Ni–Ti–Hf та розраховані їх термодинамічні функції змішування.
2. За результатами розрахунків показано, що аморфоутворюючим розплавом Co–Cu–Ni–Ti–Zr і Co–Cu–Ni–Ti–Hf в широкому інтервалі температур від значного перегріву до значного переохолодження притаманна висока термодинамічна стабільність, про що свідчать суттєві від'ємні значення енергії Гіббса змішування  $\Delta_m G$ .
3. Основний внесок в термодинамічну стабільність надає інтегральна ентальпія змішування розплавів  $\Delta_m H$ , яка в широкому інтервалі температур зберігає великі від'ємні значення. Встановлено, що внесок ідеальної складової в енергію Гіббса змішування для чотири- і п'ятикомпонентних еквіатомних рідких сплавів аморфоутворюючих систем на основі перехідних металів при 1873 К змінюється в межах 71...92%, а при 800 К зменшується до 23...36 %.