

**Парциальные термодинамические характеристики элементов
в многокомпонентных аморфных сплавах:
сравнение различных теорий**

¹Хина Б.Б., ²Горанский Г.Г.

¹Физико-технический институт НАН Беларуси, Минск

²Научно-технологический парк БНТУ "Политехник", Минск

В связи с получением новых многокомпонентных аморфных сплавов (металлических стекол), обладающих уникальными физическими и механическими свойствами, и расширением области их применения в промышленности возрастает необходимость теоретического анализа термодинамических характеристик таких сплавов. В настоящее время для оценки энтальпии аморфных фаз и концентрационной области их существования широко применяют полуэмпирическую модель Miedema. Однако устойчивость фаз определяется не энтальпией, а энергией Гиббса. Известна теория Shao, описывающая изменение энергии Гиббса при превращении переохлажденной жидкости l в аморфную фазу $\Delta G_{l \rightarrow am}$. Но обе эти теории ранее не использовались для теоретической оценки парциальных молярных величин компонентов аморфных фаз – химического потенциала μ_i и парциальной молярной энтальпии h_i .

В данной работе предложена термодинамическая теория для определения величин μ_i и h_i компонентов аморфных фаз и проведено сравнений значений, полученных на основе моделей Miedema и Shao. Используются подходы современной вычислительной термодинамики, лежащие в основе CALPHAD-метода (расчет фазовых диаграмм) и базы данных SGTE (термодинамическое описание характеристик чистых веществ в различных фазовых состояниях). Учитывается так называемая энтропия несоответствия атомных размеров по теории Mansoori et al, т.е. избыточная энтропия смешения, присущая только аморфному состоянию. Полученная модель использована также для сравнения теоретических значений парциальных термодинамических характеристик железа с данными, полученными из электрохимических измерений методом мгновенного фиксирования электродвижущей силы (МФЭДС), в многокомпонентных сплавах систем Fe-Si-B-Ni и Fe-Si-B-Ni-Co-Cr-Mo.

Показано, что модели Miedema и Shao дают близкие значения интегральных термодинамических параметров аморфных фаз, но сильно различающиеся значения парциальных величин μ_i и h_i . Значения μ_{Fe} и h_{Fe} в многокомпонентных аморфных фазах, полученных из обеих моделей, сильно отличаются от данных МФЭДС, что связано со структурой самих моделей. Тем самым определены фундаментальные недостатки существующих термодинамических теорий аморфного состояния.