

УДК 541.11

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ
АМОРФНЫХ СПЛАВОВ $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ И $\text{La}_{80}\text{Al}_{20}$
ПО СВОЙСТВАМ МЕТАЛЛОВ**

© 2023 г. С. В. Терехов*

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк, ДНР

**e-mail: svlter@yandex.ru*

Поступила в редакцию 26.05.2023 г.

После доработки 07.06.2023 г.

Принята к публикации 09.06.2023 г.

Аморфные сплавы (металлические стекла) получают путем сверхбыстрого охлаждения расплавов. В результате этого процесса “замораживается” хаотическое распределение атомов в пространстве при сохранении ближнего порядка, характерного для жидкостей. Высокая однородность твердого состояния приводит к уникальным механическим, магнитным и другим физическим свойствам. Изделия из разработанных дешевых металлических стекол заменили на некоторых производствах ряд аналогов из дорогих традиционных материалов. С другой стороны, существенными недостатками неупорядоченных сред являются температурная и временная нестабильности. Решение этой проблемы возможна при знании теплофизических свойств аморфных сплавов: теплоемкости, коэффициента теплового расширения, теплопроводности и температуропроводности. Но даже оценка их температурных зависимостей представляет собой сложную и актуальную задачу. Поэтому в данной работе предложено использовать правило смешения компонентов, теплофизические свойства которых известны. Это позволяет предсказать температурные зависимости теплоемкости, коэффициента теплового расширения и температуропроводности металлических стекол при известных значениях их теплопроводности для разных температур. Отметим, что на рассчитанные кривые для теплоемкости аморфного сплава $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ достаточно хорошо укладываются известные из научной литературы экспериментальные данные в низкотемпературной области.

Ключевые слова: аморфные сплавы, Ni, Zr, La, Al, диаграмма состояния, интерметаллид, теплоемкость, коэффициент теплового линейного расширения, теплопроводность, температуропроводность

DOI: 10.31857/S0235010623050109, **EDN:** VTDPRY

ВВЕДЕНИЕ

Закаленные с очень высокой скоростью расплавы из двух и более металлов с определенным типом диаграммы состояния образуют аморфный сплав (металлическое стекло). Он сохраняет все свойства жидкого состояния: неупорядоченное расположение атомов при наличии ближнего порядка. Зачастую в таких системах формируется механическая смесь компонентов, фаз или фаз компонентов с интерметаллидами (соединениями металлов). Многие металлические стекла обладают уникальными характеристиками: изотропны, высокопрочны, достаточно пластичны, коррозионно- и износостойки [1], их электросопротивление выше, чем у кристаллических аналогов, а самое главное, их производство достаточно дешево. Поэтому в ряде случаев ими заменяют традиционные материалы. В частности, сплав типа металл–металлоид $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$

используют для изготовления маховиков в двигателях внутреннего сгорания, а также сердечников трансформаторов. Аморфные сплавы типа металл–металл применяют, например, в мембранных технологиях водородной [2–4] и ядерной энергетики.

Широкое применение металлических стекол сдерживается их температурной и временной нестабильностью. С термодинамической точки зрения они являются неравновесными системами, склонными к температурному и временному старению [5, 6], а также к кристаллизации при достаточно сильных воздействиях со стороны внешней среды [7, 8]. Поэтому стабильная работа изделия возможна при температуре и других условиях, не выше заданных, причем в течении строго определенного промежутка времени.

В этой связи важным вопросом теории неупорядоченных сред является исследование теплофизических и других свойств аморфных сплавов (см., например, термодинамические свойства стекол Ni_2B [9] и $\text{Ni}_{44}\text{Nb}_{56}$, $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$, $\text{Cu}_{33}\text{Zr}_{67}$ [10], аморфной системы $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ [11]; сплава Гейслера, легированного алюминием, $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{37}\text{Al}_2\text{Sn}_{13}$ [12] и др.). Для решения проблемы температурной устойчивости аморфного металлического сплава надо знать такие теплофизические характеристики, как тепло- и температуропроводность, теплоемкость и коэффициент теплового расширения [13]. Для аморфных сплавов их можно измерить или рассчитать в рамках той или иной модели, что связано с меньшими материальными и временными затратами. Одним из подходов к прогностической оценке теплофизических свойств аморфных сплавов является их вычисление по аналогичным данным для их компонентов [11, 14].

Целью данной работы является проведение расчета теплофизических свойств аморфных сплавов $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ и $\text{La}_{80}\text{Al}_{20}$ в рамках модели двухфазной локально-равновесной области [15], используя вычисленные по ее соотношениям теплоемкостям и коэффициентам теплового расширения компонентов [16], а также правило смещения [17] компонентов для расчета теплофизических характеристик металлических стекол.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Время перехода неравновесного аморфного сплава в состояние термодинамического равновесия достаточно велико по сравнению с временами установления равновесия в локальных областях. Кроме того, их размеры малы по сравнению с наименьшим линейным размером образца, что обеспечивает медленное и плавное изменение термодинамических величин при переходе от одной локально-равновесной области к другой. Следовательно, к отдельно взятой области можно применить все соотношения равновесной термодинамики. Следующей гипотезой в модели [15] было принято сосуществование при температуре T двух не взаимодействующих между собой фаз с объемными долями $x_1 = x$ и $x_2 = 1 - x$.

Разность этих величин определяет параметр порядка, по которому была проведена минимизация энергии Гиббса фаз g

$$g = \sum_{i=1}^2 \mu_i x_i = \mu_{20} + \Delta\mu \cdot x + k_B T [x \ln x + (1 - x) \ln(1 - x)], \quad (1)$$

здесь $\mu_{i0} = \mu_{i0} + k_B T \ln x_i$ – химический потенциал фазы i ($i = 1, 2$), μ_{i0} – стандартные значения химических потенциалов, k_B – постоянная Больцмана, $\Delta\mu = \mu_{10} - \mu_{20}$. В результате принятых приближений было получено выражение для температурной зависимости фазового состава

$$x = [1 - \text{th}\{a_0[(T_{x0}/T) - 1]\}]/2, \quad (2)$$

где a_0 и T_{x0} – теоретические параметры.

Воспользовавшись классическим определением теплоемкости, были получены температурные зависимости теплоемкости как при отсутствии фазовых (структурных, полиморфных, магнитных и агрегатных) переходов [18]

$$C_b = k_1 T + k_2 x, \quad (3)$$

так и при их наличии [19] –

$$C_p = C_b + k_3 T u, \quad (4)$$

где k_i ($i = 1, 2, 3$) – постоянные коэффициенты, $u = dx/dT$ – первая производная по температуре от фазового состава. В формуле (3) первое слагаемое описывает вклад в теплоемкость электронной и ей подобных подсистем, а второе слагаемое – вклад подсистем, ответственных за упорядочение и структурные переходы. Известно, что частные производные функции характеризуют поведение функции в точке и некоторой ее малой окрестности. Поэтому формула (3) описывает температурное поведение локальной теплоемкости, так как ее вычисление проводилось с использованием частных производных от (1) при неизменном фазовом составе x . Формула (4) получена с использованием полных производных по температуре от (1), т.е. при изменяющемся фазовом составе от области к области. В формуле (4) дополнительное слагаемое описывает ямы и пики других фазовых переходов.

Использование второго правила Грюнайзена (см., например, [20, с.13]) позволяет вычислять коэффициент теплового линейного расширения металла по формулам вида (3) и (4): при отсутствии фазовых переходов

$$\alpha_b \cdot 10^6 = q_1 T + q_2 x, \quad (5)$$

а при их наличии –

$$\alpha \cdot 10^6 = \alpha_b \cdot 10^6 + q_3 T u, \quad (6)$$

где q_i ($i = 1, 2, 3$) – постоянные коэффициенты.

Данные по теплопроводности λ элемента при разных температурах дают возможность рассчитать его температуропроводность a по формуле (см., например, [21, с. 58])

$$a = \lambda / (c_p \cdot \rho), \quad (7)$$

где λ , Вт/(м · К) = кг · м/(с³ · К) – теплопроводность; $c_p = C_p/m_a$, Дж/(кг · К) = м²/(с² · К) – изобарная удельная теплоемкость; m_a , г/моль = 10⁻³ кг/моль – атомная масса металла; ρ , кг/м³ – плотность.

Для оценки характеристики A сплава по аналогичным величинам A_i ($i = 1, 2$) компонентов воспользуемся правилом смешения [17]

$$A = n_1 A_1 + n_2 A_2, \quad (8)$$

где n_i ($i = 1, 2$) – массовые доли компонентов. Параметры и коэффициенты модели, а также теплофизические свойства металлов Ni, Zr, La, Al приведены в [16].

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АМОРФНЫХ СПЛАВОВ

1. Сплав Ni_{0,333}Zr_{0,667}. По диаграмме состояния Ni–Zr [22, с. 672] состав аморфного сплава Ni_{0,333}Zr_{0,667} соответствует образованию интерметаллического соединения NiZr₂ [11]. Расплав компонентов стекла имеет низкую склонность к аморфизации и для его перевода в твердое неупорядоченное состояние применяют скорости охлаждения порядка 10⁴ К/с. Образующаяся переохлажденная жидкость обладает определенными теплофизическими свойствами.

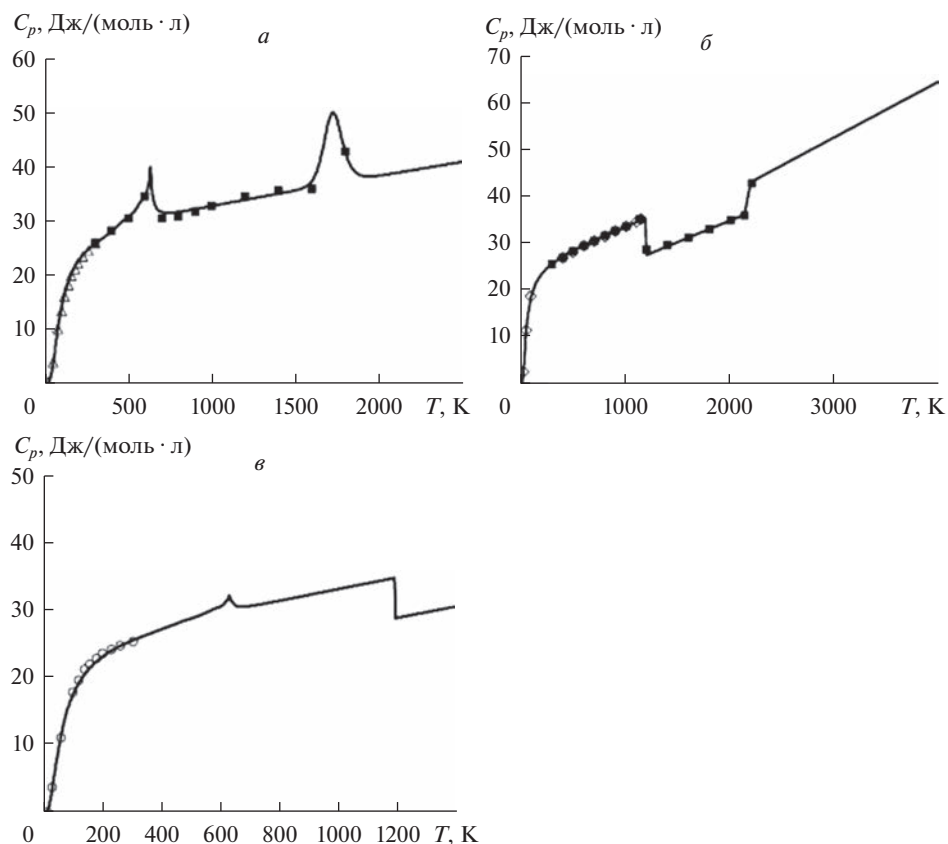


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкостей никеля Ni (а), циркония Zr (б) и аморфного сплава $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ (в) (белые треугольники – [23], черные квадраты – [24], белые ромбики – [25], белые кружки – [11]).

На рис. 1 продемонстрированы теоретические температурные зависимости теплоемкостей металлов Ni (рис. 1а) и Zr (рис. 1б) [16], а также вычисленная с использованием (8) теплоемкость аморфного сплава $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ ($n_1 = 0.392$, $n_2 = 0.608$). Из рис. 1в видно, что в низкотемпературной области экспериментальные данные [11] хорошо укладываются на расчетную кривую. Отметим, что подобные (а на некоторых температурных интервалах и совпадающие) кривые можно получить при использовании для вычисления массовых долей компонентов не формулы сплава, а формулы интерметаллида NiZr_2 (рис. 1в; $n_1 = 0.243$, $n_2 = 0.757$).

На рис. 2 показаны зависимости от температуры коэффициентов теплового линейного расширения никеля Ni (рис. 2а) и циркония Zr (рис. 2б) [16], а также аморфного сплава $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ (рис. 2в). Отметим тот факт, что аморфный сплав $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ наследует магнитный переход в никеле и структурный переход в цирконии (см. рис. 1в и 2в). Поэтому термическую нестабильность металлического стекла можно связать не только с наличием температуры стеклования, но и с реализацией фазовых переходов как в системе, так и в ее подсистемах.

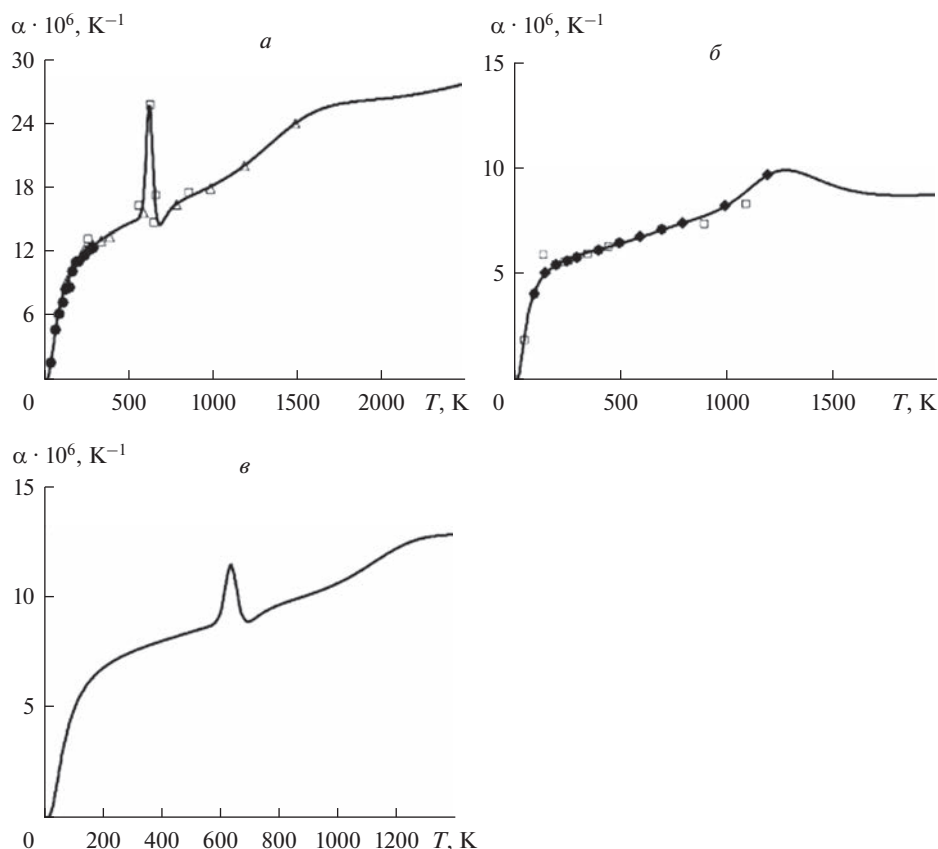


Рис. 2. Зависимости коэффициентов теплового расширения никеля Ni (*a*), циркония Zr (*b*) и аморфного сплава $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ (*v*) от температуры (черные кружки – [26], белые квадраты – [13], белые треугольники – [23], черные ромбики – [20]).

В табл. 1 и 2 приведены теплофизические свойства компонентов сплава [16], а в табл. 3 – прогностические данные для самого сплава.

2. Сплав $\text{La}_{80}\text{Al}_{20}$. Сплав обладает низкой механической прочностью, парамагнитен, способен переходить в сверхпроводящее состояние. По диаграмме состояния [27, с.243] состав сплава не соответствует ни эвтектике, ни интерметаллическому соединению. Вычисления массовых долей компонентов по формуле сплава $\text{La}_{80}\text{Al}_{20}$ и химической формуле виртуального интерметаллида La_4Al приводят к одному и тому же результату: $n_1 = 0.954$, $n_2 = 0.046$. На рис. 3 отображены температурное поведение теплоемкости (рис. 3*a*) и коэффициента теплового расширения (рис. 3*б*) металлического стекла $\text{La}_{80}\text{Al}_{20}$. Рис. 3*a* показывает наличие структурного перехода на температурном интервале 550–600 К. Из рис. 3*б* видно, что в районе 5 К наблюдается особенность в виде небольшого пика, физическая природа которого определяется изменением теплового поведения лантана в окрестности этой точки.

Таблица 1. Теплофизические свойства никеля Ni

T, K	λ [24]	c_p	$\alpha \cdot 10^6$	ρ	$a \cdot 10^6$	$a \cdot 10^6$ [24]	$a \cdot 10^6$ [13]
50	193 [25]	60	1.53	8920	358.2	—	—
100	164 [13]	238	6.61	8944	77.01	—	78.9
200	107 [13]	387	11.04	8938	30.92	—	31.3
300	90.4	442	12.8	8908	22.95	22.9	22.9
400	79.7	482	13.91	8870	18.65	18.7	18.9
500	72.1	528	14.78	8829	15.46	15.6	15.5
600	63.3	593	17.14	8772	12.18	12.2	12.6
700	60.9	543	14.75	8752	12.81	13.3	14.3
800	64.3	544	16.75	8689	13.61	14	14.5
900	66.2	552	17.6	8633	13.89	14.1	14.6
1000	71.5	562	18.36	8576	14.84	14.8	14.9
1200	75.6	582	20.32	8443	15.39	15	15.2
1400	76.7	601	22.99	8278	15.41	15	15.5
1600	77.3	642	25.23	8108	14.86	15.1	—

Таблица 2. Теплофизические свойства циркония Zr

T, K	λ [24]	c_p	$\alpha \cdot 10^6$	ρ	$a \cdot 10^6$	$a \cdot 10^6$ [24]	$a \cdot 10^6$ [13]
50	41.9 [25]	114	1.9	6459	56.85	—	—
100	33.2 [13]	203	4.17	6466	25.36	—	24.9
200	25.2 [13]	256	5.41	6460	15.24	14.1	14.7
300	22.7 [13]	280	5.86	6449	12.59	12.7	12.5
400	21.9	296	6.15	6437	11.49	11.5	11.1
500	21.4	310	6.42	6424	10.76	10.7	10.3
600	21.1	322	6.73	6410	10.22	10.2	9.8
700	21.4	334	7.07	6395	10.03	10	9.7
800	22.1	345	7.4	6378	10.05	10	9.7
900	22.7	356	7.73	6360	10.04	10	10
1000	22.9	366	8.19	6340	9.87	9.8	10.3
1200	27	300	9.65	6285	14.31	13.2	12.6
1400	30	321	9.62	6250	14.97	14.2	13.7
1600	34	341	8.93	6232	16.01	14.7	14.6

Таблица 3. Теплофизические свойства аморфного сплава $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$

T, K	λ	c_p	$\alpha \cdot 10^6$	ρ	$a \cdot 10^6$
50	78.6	101	1.81	7057	110.3
100	65	211	4.76	7068	43.6
200	45.1	288	6.78	7062	22.2
300	39.2	319	7.55	7047	17.4
400	35.9	341	8.03	7029	15
500	33.7	363	8.45	7009	13.2
600	31.4	388	9.26	6984	11.59
700	31	385	8.94	6968	11.56
800	32.4	393	9.67	6940	11.88
900	33.3	403	10.13	6913	11.95
1000	34.7	414	10.66	6883	12.18
1200	38.8	369	12.24	6809	15.44
1400	41.3	389	12.87	6743	15.75
1600	44.5	414	12.89	6688	16.07

В табл. 4 и 5 приведены теплофизические характеристики лантана La и алюминия Al [16] соответственно, а в табл. 6 — оценки свойств аморфного сплава. Данные таблиц показывают, что температуропроводность сплава на интервале 0–1000 К меньше температуропроводности алюминия, но может превышать или быть меньше этой характеристики для лантана.

Таким образом, теплофизические свойства аморфных сплавов можно оценивать по аналогичным характеристикам их компонентов.

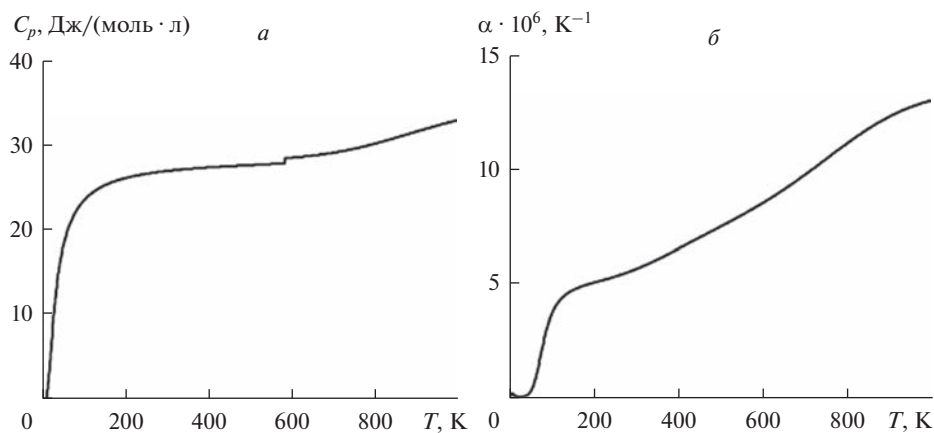


Рис. 3. Изменения теплоемкости (а) и коэффициента теплового линейного расширения (б) аморфного сплава $\text{La}_{80}\text{Al}_{20}$.

Таблица 4. Теплофизические свойства лантана La

T, K	λ [24]	c_p	$\alpha \cdot 10^6, K^{-1}$	ρ	$a \cdot 10^6$	$a \cdot 10^6$ [24]
50	9.43 [25]	135	0.14	6146	11.33	—
100	9.8 [25]	173	3.27	6157	9.2	—
200	11.8 [25]	190	4.39	6153	10.09	—
300	13.1	195	4.86	6145	10.91	10.9
400	15	198	5.68	6134	12.35	12.3
500	17	200	6.63	6120	13.9	12.7
600	18.5	206	7.64	6103	14.71	14
700	21.3	210	8.86	6080	16.68	15.1
800	23.5	217	10.18	6052	12.69	15.4
900	25.5	227.5	11.34	6022	18.61	15.7
1000	27	238.1	12.08	5993	18.93	16.1
1200	—	246.3	12.24	5948	—	—
1400	—	233.1	11.4	5922	—	—
1600	—	224.3	10.38	5905	—	—

Таблица 5. Теплофизические свойства алюминия Al

T, K	λ [24]	c_p	$\alpha \cdot 10^6, K^{-1}$	ρ	$a \cdot 10^6$	$a \cdot 10^6$ [24]	$a \cdot 10^6$ [13]
50	1350	142	2.89	2695	3532.5	358	—
100	300.4	513	11.89	2708	216.4	228	186
200	236.8	801	19.99	2704	109.4	109	111
300	235.9	901	23.24	2688	97.4	93.8	90
400	238.2	955	25.25	2667	93.5	93.6	83
500	234.7	991	26.79	2645	89.5	88.8	76
600	230.1	1022	28.21	2621	85.9	83.7	71
700	224.4	1073	30.05	2594	80.6	78.4	67
800	220.4	1170	32.75	2561	73.6	73.6	64
900	217.6	1224	34.52	2530	70.2	69.2	62
1000	100.6	1195	34.64	2505	33.6	36.4	24
1200	106.4	1150	35.10	2455	37.7	39.5	25
1400	—	1159	36.61	2398	—	42.4	—
1600	—	1180	38.39	2337	—	44.8	—
1800	—	1203	40.23	2275	—	46.8	—

Таблица 6. Теплофизические свойства аморфного сплава $\text{La}_{80}\text{Al}_{20}$

T, K	λ	c_p	$\alpha \cdot 10^6$	ρ	$a \cdot 10^6$
50	71.1	136	0.27	5987	96.5
100	23.2	189	3.66	5998	20.5
200	22.2	218	5.11	5994	17
300	23.3	228	5.7	5986	17.1
400	25.3	233	6.58	5975	18.2
500	27	236	7.55	5961	19.2
600	28.2	244	8.59	5943	19.45
700	30.6	250	9.83	5920	20.68
800	32.6	261	11.22	5892	21.20
900	34.3	273	12.4	5861	21.44
1000	30.4	282	13.12	5832	18.48
1200	—	288	13.29	5787	—
1400	—	276	12.56	5760	—
1600	—	268	11.67	5741	—

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработка подходов, способных прогнозировать свойства аморфных металлических сплавов, приводит к существенному снижению временных, материальных и энергетических затрат на производство металлических стекол. Проведенный расчет теплофизических свойств сплавов $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ и $\text{La}_{80}\text{Al}_{20}$ демонстрирует достаточно хорошую оценку характеристик, по крайней мере, теплоемкости сплава $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ в низкотемпературной области. Предложенная модель предсказывает наследование аморфным сплавом фазовых переходов в кристаллическом состоянии компонентов, что требует экспериментальной проверки. Протекание фазовых превращений может привести к необратимым изменениям состояния сплава и способствовать его временной и тепловой нестабильности. В свою очередь, следствием этих явлений будет выход из строя технического изделия. Таким образом, определение условий эксплуатации коренным образом зависит от неизменности свойств использованного материала. В этой связи прогностический расчет его поведения в изменяющихся внешних условиях приобретает первостепенное значение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Карфидов Э.А., Русанов Б.А., Сидоров В.Е., Никитина Е.В., Яничкович Д., Швеиц П. Ст. Коррозионно-электрохимическое поведение аморфных сплавов Al-Ni-Co-Nd // Расплавы. 2022. № 2. С. 189–195.
2. Сидоров Н.И., Эстемирова С.Х., Курбанова Э.Д., Полухин В.А. Кинетика водорода в мембранных сплавах на основе Fe-Ni , Nb-Ni , V-Ni // Расплавы. 2022. № 2. С. 196–213.
3. Полухин В.А., Сидоров Н.И., Курбанова Э.Д., Белякова Р.М. Характеристики мембранных аморфных, нано- и кристаллических сплавов // Расплавы. 2022. № 3. С. 152–171.
4. Белякова Р.М., Курбанова Э.Д., Сидоров Н.И., Полухин В.А. Мембраны на основе Nb-Ni и V-Ni для получения сверхчистого водорода // Расплавы. 2022. № 3. С. 124–140.
5. Buschow K.H.J., Beekmans N.M. Thermal stability of amorphous alloys // Solid State Commun. 1980. 35. № 3. P. 233–236.
[https://doi.org/10.1016/0038-1098\(80\)90487-1](https://doi.org/10.1016/0038-1098(80)90487-1)
6. Лысов В.И., Цареградская Т.Л., Турков О.В., Саенко Г.В. Исследование закономерностей процесса старения металлических стекол // Ученые записки Таврического национального университета им. В.И. Вернадского. Серия “Физика”. 2009. 22 (61). № 1. С. 142–148.

7. Попель П.С., Сидорова В.Е., Кальво-Дальборг М. и др. Влияние термической обработки жидкого сплава на его свойства в расплавленном состоянии и после аморфизации // *Расплавы*. 2020. № 3. С. 223–245.
8. Абрисимова Г.Е., Аронин А.С., Добаткин С.В. и др. Нанокристаллизация аморфного сплава $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ под действием интенсивной пластической деформации // *Физика твердого тела*. 2007. **49**. № 6. С. 983–989.
9. Панова Г.Х., Сырых Г.Ф., Черноплеков Н.А., Шиков А.А. Влияние аморфизации на электронную и колебательную теплоемкость сплава Ni_2B // *Физика твердого тела*. 2002. **44**. № 7. С. 1168–1173.
10. Панова Г.Х., Сырых Г.Ф., Хлопкин М.Н., Шиков А.А. Колебательные и электронные свойства аморфных систем $\text{Ni}_{44}\text{Nb}_{56}$, $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ и $\text{Cu}_{33}\text{Zr}_{67}$ (из измерений теплоемкости) // *Физика твердого тела*. 2003. **45**. № 4. С. 577–581.
11. Гавричев К.С., Горбунов В.Е., Шарпатая Г.А. и др. Термодинамические свойства сплава $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ в аморфном и кристаллическом состоянии // *Неорганические материалы*. 2004. **40**. № 6. С. 703–708.
12. Хизриев Ш.К., Гамзатов А.Г., Батдалов А.Б. и др. Тепловые, магнитные и магнитотранспортные свойства быстроокаленного ленточного образца $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Al}_2\text{Sn}_{13}$ // *Физика твердого тела*. 2020. **62**. № 7. С. 1132–1136.
13. Шелудяк Ю.Е., Кашпоров Л.Я., Малинин Л.А., Цалков В.Н. Теплофизические свойства компонентов горючих систем. Москва: НПО “Информация и технико-экономические исследования”, 1992.
14. Dinsdale A.T. SGTE data for pure elements. *Calphad*. 1991. **15**. № 4. P. 317–425. [https://doi.org/10.1016/0364-5916\(91\)90030-N](https://doi.org/10.1016/0364-5916(91)90030-N)
15. Терехов С.В. Термодинамическая модель размытого фазового перехода в металлическом стекле $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ // *Физика и техника высоких давлений*. 2018. **28**. № 1. С. 54–61.
16. Терехов С.В. Тепловые свойства металлов. Справочник. Донецк: ДонФТИ им. А.А. Галкина, 2023.
17. Кингери У.Д. Введение в керамику. М.: Стройиздат, 1967.
18. Terehov S.V. Thermal properties of matter within the model of a two-phase system // *Physics of the Solid State*. 2022. **64**. № 8. P. 1089–1095. <https://doi.org/10.21883/PSS.2022.08.54631.352>
19. Терехов С.В. Тепловые свойства вещества // *Физика и техника высоких давлений*. 2022. **32**. № 3. С. 21–34.
20. Новикова С.И. Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука, 1974.
21. Пелецкий В.Э., Чеховской В.Я., Бельская и Э.А. др. Теплофизические свойства титана и его сплавов. Справочник. М.: Металлургия, 1985.
22. Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник: В 3 т.: Т. 3. Кн. 1 / Под общ. ред. Н.П. Лякишева. М.: Машиностроение, 2001.
23. Новицкий Л.А., Кожевников И.Г. Теплофизические свойства материалов при низких температурах. Справочник. М.: Машиностроение, 1975.
24. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989.
25. Лариков Л.Н., Юрченко Ю.Ф. Структура и свойства металлов и сплавов. Тепловые свойства металлов и сплавов. Киев: Наукова думка, 1985.
26. Свойства элементов. Справочник. Под ред. М.Е. Дрица. М.: Металлургия, 1985.
27. Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник: В 3 т.: Т. 1. / Под общ. ред. Н.П. Лякишева. М.: Машиностроение, 1996.

**PREDICTION OF THE THERMOPHYSICAL BEHAVIOR
OF AMORPHOUS OF ALLOYS $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ AND $\text{La}_{80}\text{Al}_{20}$
ACCORDING TO PROPERTIES OF METALS**

S. V. Terekhov

Donetsk Institute of Physics and Technology A.A. Galkina, Donetsk, DPR

Amorphous alloys (metallic glasses) are obtained by ultrafast cooling of melts. As a result of this process, the chaotic distribution of atoms in space is “frozen” while maintaining the short-range order characteristic of liquids. The high homogeneity of the solid state leads to unique mechanical, magnetic and other physical properties. This has led to the fact that cheaper metallic glasses have replaced a number of traditional materials in some industries. On the other hand, significant disadvantages of disordered media are temperature and time

instabilities. The solution to this problem is possible with knowledge of the thermophysical properties of amorphous alloys: heat capacity, thermal expansion coefficient, thermal conductivity and thermal diffusivity. Even estimating, for example, their temperature dependences is a complex and urgent task. Therefore, in this paper, it is proposed to use the mixing rule for components whose thermophysical properties are known. This makes it possible to predict the temperature dependences of heat capacity, thermal expansion coefficient and thermal diffusivity at known values of thermal conductivity for different temperatures. Note that the obtained curves for the $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ and $\text{La}_{80}\text{Al}_{20}$ amorphous alloys are in good agreement with the experimental data.

Keywords: amorphous alloys, Ni, Zr, La, Al, phase diagram, intermetallic lead, heat capacity, thermal linear expansion coefficient, thermal conductivity, thermal diffusivity

REFERENCES

1. Karfidov E.A., Rusanov B.A., Sidorov V.E., Nikitina E.V., Yanichkovich D., Shvets P. St. Korrozionno-elektrokhimicheskoye povedeniye amorfnykh splavov Al–Ni–Co–Nd [Corrosion-electrochemical behavior of amorphous alloys Al–Ni–Co–Nd] // *Rasplavy*. 2022. № 2. P. 189–195.
2. Sidorov N.I., Estemirova S.Kh., Kurbanova E.D., Polukhin V.A. Kinetika vodoroda v membrannykh splavakh na osnove Fe–Ni, Nb–Ni, V–Ni [Kinetics of hydrogen in membrane alloys based on Fe–Ni, Nb–Ni, V–Ni] // *Rasplavy*. 2022. № 2. P. 196–213. [In Russian].
3. Polukhin V.A., Sidorov N.I., Kurbanova E.D., Belyakova R.M. Kharakteristiki mem-brannykh amorfnykh, nano- i kristallicheskiykh splavov [Characteristics of membrane amorphous, nano- and crystalline alloys] // 2022. № 3. P. 152–171. [In Russian].
4. Belyakova R.M., Kurbanova E.D., Sidorov N.I., Polukhin V.A. Membrany na osnove Nb–Ni i V–Ni dlya polucheniya sverkhchistogo vodoroda [Membranes based on Nb–Ni and V–Ni for obtaining ultrapure hydrogen] // *Rasplavy*. 2022. № 3. P. 124–140. [In Russian].
5. Buschow K.H.J., Beekmans N.M. Thermal stability of amorphous alloys // *Solid State Commun.* 1980. **35**. № 3. P. 233–236.
[https://doi.org/10.1016/0038-1098\(80\)90487-1](https://doi.org/10.1016/0038-1098(80)90487-1)
6. Lysov V.I., Tsaregradskaya T.L., Turkov O.V., Saenko G.V. Issledovaniye zakonmer-nostey protsessa stareniya metallicheskiykh stekol [Investigation of the regularities of the aging process of metallic glasses] // *Uchenye zapiski Taurida National University im. V.I. Vernadsky. Series “Physics”*. 2009. **22** (61). № 1. P. 142–148. [In Russian].
7. Popel P.S., Sidorov V.E., Kalvo-Dalborg M. et al. Vliyaniye termicheskoy obrabotki zhidkogo splava na yego svoystva v rasplavlennom sostoyanii i posle amorfi-zatsii [Influence of heat treatment of a liquid alloy on its properties in the molten state and after amorphization] // *Rasplavy*. 2020. № 3. P. 223–245. [In Russian].
8. Abrosimova G.E., Aronin A.S., Dobatkin S.V. Nanokristallizatsiya amorfnoy splava $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ pod deystviyem intensivnoy plasticheskoy deformatsii [Nanocrystallization of $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ amorphous alloy under the action of severe plastic deformation] // *Solid State Physics*. 2007. **49**. № 6. P. 983–989. [In Russian].
9. Panova G.Kh., Syrykh G.F., Chernoplekov N.A., Shikov A.A. Vliyaniye amorfizatsii na elektron-nuyu i kolebatel’nyuyu teployemkost’ splava Ni_2B [Influence of amorphization on the electronic and vibrational heat capacity of the Ni_2B alloy] // *Fizika tverdogo tela*. 2002. **44**. № 7. P. 1168–1173. [In Russian].
10. Panova G.Kh., Syrykh G.F., Khlopkin M.N., Shikov A.A. Kolebatel’nyye i elektron-nyye svoystva amorfnykh sistem $\text{Ni}_{44}\text{Nb}_{56}$, $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ i $\text{Cu}_{33}\text{Zr}_{67}$ (iz izmereniy teployem-kosti) [Vibrational and electronic properties of amorphous systems $\text{Ni}_{44}\text{Nb}_{56}$, $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ and $\text{Cu}_{33}\text{Zr}_{67}$ (from heat capacity measurements)] // *Fizika tverdogo tela*. 2003. **45**. № 4. P. 577–581. [In Russian].
11. Gavrichiev K.S., Gorbunov V.E., Sharpataya G.A. et al. Termodinamicheskiye svoystva splava $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ v amorfnoy i kristallicheskom sostoyanii [Thermodynamic properties of the $\text{Ni}_{0.333}\text{Zr}_{0.667}$ alloy in the amorphous and crystalline state] // *Neorganicheskiye ma-terialy*. 2004. **40**. № 6. P. 703–708. [In Russian].
12. Khizriev Sh.K., Gamzatov A.G., Batdalov A.B. et al. Teplovyeye, magnitnyye i magnito-transport-nyye svoystva bystrozakalennogo lentochnoy obraztsa $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Al}_2\text{Sn}_{13}$ [Thermal, magnetic and magnetotransport properties of the rapidly quenched tape sample $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Al}_2\text{Sn}_{13}$] // *Fizika tverdogo tela*. 2020. **62**. № 7. P. 1132–1136. [In Russian].
13. Sheludyak Yu.E., Kashporov L.Ya., Malinin L.A., Tsalkov V.N. Teplofizicheskiye svoystva komponentov goryuchikh sistem [Thermophysical properties of combustible system components]. Moscow: NPO “Informatsiya i tekhniko-ekonomicheskoye issledovaniya”, 1992. [In Russian].

14. Dinsdale A. T. SGTE data for pure elements. *Calphad*. 1991. **15**. № 4. P. 317–425.
[https://doi.org/10.1016/0364-5916\(91\)90030-N](https://doi.org/10.1016/0364-5916(91)90030-N)
15. Terekhov S.V. Termodinamicheskaya model' razmytogo fazovogo perekhoda v metalliche-skomp stele $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ [Thermodynamic model of diffuse phase transition in $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ metallic glass] // *Fizika i tekhnika vysokikh davleniy*. 2018. **28**. № 1. P. 54–61. [In Russian].
16. Terekhov S.V. Teplovyie svoystva metallov. Spravochnik [Thermal properties of metals. Directory]. Donetsk: DonFTI im. A.A. Galkina, 2023. [In Russian].
17. Kingeri W.D. Vvedeniye v keramiku [Introduction to ceramics]. Moscow: Stroyizdat, 1967. [In Russian].
18. Terekhov S.V. Thermal properties of matter within the model of a two-phase system // *Physics of the Solid State*. 2022. **64**. № 8. P. 1089–1095.
<https://doi.org/10.21883/PSS.2022.08.54631.352>
19. Terekhov S.V. Teplovyie svoystva veshchestva [Thermal properties of matter] // *Fizika i tekhnika vysokikh davleniy*. 2022. **32**. № 3. P. 21–34. [In Russian].
20. Novikova S.I. Teplovoye rasshireniye tverdykh tel [Thermal expansion of solids]. Moscow: Nauka, 1974. [In Russian].
21. Peletsky V.E., Chekhovskaya V.Ya., Belskaya E.A. et al. Teplofizicheskiye svoystva titana i yego splavov. Spravochnik [Thermophysical properties of titanium and its alloys. Directory]. M.: Metallurgiya, 1985. [In Russian].
22. Diagrammy sostoyaniya dvoynykh metallicheskh sistem: Spravochnik [Diagrams of the state of binary metal systems: Handbook] Vol. 3. Book 1 / Under the general ed. N.P. Lyakishev. Moscow: Mashinostroenie, 2001. [In Russian].
23. Novitsky L.A., Kozhevnikov I.G. Teplofizicheskiye svoystva materialov pri nizkikh temperaturakh. Spravochnik [Thermophysical properties of materials at low temperatures. Directory]. Moscow: Mashinostroenie, 1975. [In Russian].
24. Zinoviev V.E. Teplofizicheskiye svoystva metallov pri vysokikh temperaturakh [Thermophysical properties of metals at high temperatures]. Moscow: Metallurgiya, 1989. [In Russian].
25. Larikov L.N., Yurchenko Yu.F. Struktura i svoystva metallov i splavov. Teplovyie svoystva metallov i splavov [Structure and properties of metals and alloys. Thermal properties of metals and alloys]. Kyiv: Naukova Dumka, 1985. [In Russian].
26. Svoystva elementov. Spravochnik [Properties of elements. Directory]. Ed. M.E. Dritz. M.: Metallurgy, 1985. [In Russian].
27. Diagrammy sostoyaniya dvoynykh metallicheskh sistem: Spravochnik [Diagrams of the state of binary metal systems: Handbook]. Vol. 1. / Under the general. ed. N.P. Lyakishev. Moscow: Mashinostroenie, 1996. [In Russian].