

УДК 669.715

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАСПЛАВОВ  
БИНАРНОЙ СИСТЕМЫ Al–Y**© 2021 г. И. О. Гилев<sup>а</sup>, \*, А. Б. Шубин<sup>а</sup>, П. В. Котенков<sup>а</sup><sup>а</sup>Институт металлургии Уральского отделения РАН, Екатеринбург, Россия

\*e-mail: i.o.gilev@yandex.ru

Поступила в редакцию 28.04.2021 г.  
После доработки 03.06.2021 г.  
Принята к публикации 07.06.2021 г.

Изучены термодинамические характеристики расплавов системы алюминий–иттрий. Проведен анализ и расчет термодинамических свойств ( $\Delta_f H_{298}^0$ ,  $S_{298}^0$ ,  $(H_{298}^0 - H_0^0)$ ,  $c_p(T)$  и  $c_p(\text{liq})$ ) соединений  $\text{Al}_3\text{Y}$ ,  $\text{Al}_2\text{Y}$ ,  $\text{AlY}$ ,  $\text{Al}_2\text{Y}_3$ ,  $\text{AlY}_2$ . Значения стандартных энтальпий образования интерметаллидов были рассчитаны на основе полуэмпирической модели Миедема, и составили  $-49.4$ ,  $-60$ ,  $-63.4$ ,  $-55$ ,  $-46.5$  кДж/моль · ат. для каждого из интерметаллидов, соответственно. Результаты расчетов были использованы при термодинамическом моделировании (ТМ) расплавов системы Al–Y. В качестве расчетного инструмента при ТМ применялся программный комплекс “TERRA”. При моделировании состава и термодинамических характеристик расплавов в качестве расчетной была использована модель идеальных растворов продуктов взаимодействия (ИРПВ). На основе данной модели была изучена термодинамика жидких растворов в системе алюминий–иттрий. Моделирование проводилось в исходной среде аргона при общем давлении  $10^5$  Па. Исследована область температур и составов, соответствующая жидкому состоянию данной системы (1900–2100 К). Сопоставление полученных результатов с результатами моделирования в приближении идеального раствора, позволило определить избыточные интегральные термодинамические характеристики расплавов данной системы (энтальпия, энтропия, энергия Гиббса). Показано, что энтальпии смешения закономерно уменьшаются по абсолютному значению с ростом температуры. Найденные значения сравнивались с известными экспериментальными данными интегральных энтальпий смешения для расплавов системы Al–Y. Склонность к наиболее сильному взаимодействию компонентов во всей области концентраций демонстрируют данные, полученные на основе расчетных методов, использованных в настоящей работе. При этом значение интегральной энтальпии смешения достигает  $-59.6$  кДж/моль. Полученные в результате ТМ энергетические кривые проходят через экстремум при  $X_Y = 0.46$ , состав в данной точке близок к составу интерметаллида  $\text{AlY}$ . Экспериментальные данные, свидетельствуют о более слабом взаимодействии компонентов, экстремум расположен на уровне  $-49.6$  кДж/моль. Полученные в работе данные находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными, использованная при ТМ модель ИРПВ позволила адекватно описать термодинамические свойства расплава алюминий–иттрий.

**Ключевые слова:** расплав, алюминий, иттрий, ассоциаты, интерметаллиды, стандартная энтальпия образования, избыточные термодинамические функции

DOI: 10.31857/S0235010621050054

## ВВЕДЕНИЕ

Исследование термодинамических свойств сплавов редкоземельных элементов (РЗМ,  $R$ ) с легкоплавкими  $p$ -металлами ( $Me$ ) предъявляет ряд жестких требований к экспериментальному оборудованию [1–5]. Эти сплавы обладают уникальными физико-химическими характеристиками и представляют интерес для различных отраслей промышленности. В частности, подобные сплавы могут применяться при создании систем замкнутого топливного цикла в атомной промышленности [6, 7]. Изучение термодинамических свойств металлических систем дает важные представления о взаимодействии входящих в их состав компонентов, что позволяет решать задачи синтеза и использования сплавов на их основе [8–12]. Наиболее изученными с точки зрения термохимии являются твердые, а также жидкие двухфазные сплавы  $R$ – $Me$ . В то же время, экспериментальные данные по теплотам смешения этих систем весьма ограничены. Кроме того, в ряде литературных источников наблюдаются значительные систематические расхождения термодинамических данных, что требует тщательного анализа: уточнения, обобщения и систематизации представленных результатов. В связи с этим, в некоторых случаях становится необходимым применение расчетных методов, в частности различных полумпирических моделей, например, модель Миедемы [13–16], ИРПВ [17, 18], Викаса–Чандлера–Андерсона (WCA) [19] и другие. Указанные модели могут быть использованы для оценки и сравнения данных различных групп исследователей, а также для расчетов при недостаточности экспериментальных данных по отдельным системам  $R$ – $Me$ .

Повышенный интерес к бинарным системам  $Al$ – $R$  связан (помимо изложенного выше) с возможным практическим применением получаемых на основе этих сплавов нанокристаллических и аморфных материалов [20–22]. Термодинамические характеристики систем  $Al$ – $R$  в твердом состоянии подробно изучены в работах [23–26], однако их свойства в жидком состоянии сравнительно мало исследованы (имеются скудные данные по сплавам отдельных систем и составов). Это обуславливает необходимость проведения критической оценки термохимических свойств фаз и изучения термодинамически жидких растворов  $Al$ –РЗМ.

Данная работа направлена на изучение термодинамических свойств расплавов бинарной системы  $Al$ – $Y$  во всем концентрационном интервале на основе модели идеальных растворов продуктов взаимодействия (ИРПВ), частного случая модели ассоциированных растворов Пригожина и Дефея [27]. Моделирование проводилось с использованием отечественного программного комплекса “TERRA” [28], содержащего в своей базе данных множество полиномов, описывающих температурную зависимость приведенной энергии Гиббса наиболее распространенных веществ.

## РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

В качестве основы была использована диаграмма состояния бинарной системы  $Al$ – $Y$ , предложенная в работе [29], полученная и оптимизированная с учетом наиболее современных данных. В соответствии с фазовой диаграммой в данной системе образуются пять интерметаллидов:  $Al_3Y$ ,  $Al_2Y$ ,  $AlY$ ,  $Al_2Y_3$  и  $AlY_2$ . Соединения  $Al_2Y$  и  $Al_2Y_3$  плавятся конгруэнтно при 1764 и 1377 К, соответственно. Остальные интерметаллиды формируются по перитектическим реакциям:  $Al_3Y$  при температуре 1251 К,  $AlY$  при 1402 К и  $AlY_2$  при 1246 К.

Для оценки полного комплекса термохимических характеристик системы  $Al$ – $Y$ , предварительно был произведен расчет термодинамических свойств индивидуальных веществ и продуктов их взаимодействия: стандартная энтальпия образования при 298.15 К ( $\Delta_f H_{298}^0$ ); стандартная энтропия при 298.15 К ( $S_{298}^0$ ); изменение энтальпии

при нагреве вещества от 0 до 298.15 К ( $H_{298}^0 - H_0^0$ ); температура перехода вещества из твердого состояния в жидкое ( $T_{ф.п}$ ); энтальпия плавления вещества ( $\Delta H_{ф.п}$ ); зависимость удельной теплоемкости от температуры ( $c_p(T)$ ) при давлении  $p = 0.1$  МПа – const; а так же  $c_p(liq)$  при  $T > T_{ф.п}$ . Для металлических Al и Y описанный набор величин содержится в базе данных TERRA и совпадает со справочными значениями.

Величины  $\Delta_f H_{298}^0$  были рассчитаны на основе полуэмпирической модели Миедема [13]. Несмотря на то, что использованная модель позволяет описывать системы R–Me с доверительным интервалом для каждого отдельного значения приблизительно  $\pm 13$  кДж/г · ат. [30], что превышает случайную погрешность экспериментального определения  $\Delta_f H_{298}^0$ , она применима для оценочных расчетов и при анализе сильно различающихся опытных данных [30]. Согласно [13], стандартная энтальпия образования рассчитана по уравнению (1):

$$\Delta_f H_{298}^0 = f(C_{Al}^S, C_Y^S) \cdot g(C_{Al}, C_Y) \cdot F \cdot P \cdot \left[ -(\Delta\phi^*)^2 + \frac{Q_0}{P} \left( \Delta n_{WS}^{\frac{1}{3}} \right)^2 - \frac{R}{P} \right], \quad (\text{Дж/моль} \cdot \text{ат.}), \quad (1)$$

где  $f(C_{Al}^S, C_Y^S)$  и  $g(C_{Al}, C_Y)$  – функция концентрации компонентов,  $C_{Al}$  и  $C_Y$  – атомные концентрации Al и Y в интерметаллическом соединении,  $C_{Al}^S$  и  $C_Y^S$  – поверхностные концентрации Al и Y в интерметаллическом соединении,  $F$  – постоянная Фарадея,  $P$ ,  $\frac{Q_0}{P}$ ,  $\frac{R}{P}$  – эмпирические константы для различных групп сплавов, определенные в работе [13],  $\phi^*$  – параметр электроотрицательности,  $n_{WS}$  – электронная плотность на границах ячеек Вигнера–Зейца.

Поверхностные концентрации Al и Y в интерметаллиде были вычислены из зависимостей (2) и (3) соответственно:

$$C_{Al}^S = \frac{C_{Al} \cdot V_{Al}^{\frac{2}{3}}}{\left( C_{Al} \cdot V_{Al}^{\frac{2}{3}} + C_Y \cdot V_Y^{\frac{2}{3}} \right)}, \quad (2)$$

$$C_Y^S = \frac{C_Y \cdot V_Y^{\frac{2}{3}}}{\left( C_{Al} \cdot V_{Al}^{\frac{2}{3}} + C_Y \cdot V_Y^{\frac{2}{3}} \right)}, \quad (3)$$

где  $V_{Al}$  и  $V_Y$  – молярные объемы компонентов, см<sup>3</sup>/моль.

Функции концентраций были рассчитаны из следующих уравнений (4) и (5):

$$f(C_{Al}^S, C_Y^S) = C_{Al}^S \cdot C_Y^S \cdot \left[ 1 + 8 \cdot (C_{Al}^S \cdot C_Y^S)^2 \right], \quad (4)$$

$$g(C_{Al}, C_Y) = \frac{2 \cdot \left( C_{Al} \cdot V_{Al}^{\frac{2}{3}} + C_Y \cdot V_Y^{\frac{2}{3}} \right)}{\left( V_{Al}^{\frac{2}{3}} + V_Y^{\frac{2}{3}} \right)}. \quad (5)$$

**Таблица 1.** Значения параметров  $V_{Me}^{2/3}$ ,  $n_{WS}^{1/3}$ ,  $\varphi^*$  и  $\frac{R}{P}$ 

Металл	$V_{Me}^{2/3}$ , см <sup>2</sup>	$n_{WS}^{1/3}$ , (ед. пл.) <sup>1/3</sup>	$\varphi^*$ , В	$\frac{R}{P}$ , В <sup>2</sup>
Al	4.6	1.39	4.2	0
Y	7.36	1.22	3.2	–

**Таблица 2.** Стандартные энтальпии образования ( $\Delta_f H_{298}^0$ ) интерметаллических соединений в системе алюминий–иттрий

ИМС	$-\Delta_f H_{298}^0$ , кДж/моль · ат.			
	[32, 33]	[34]	[35]	рассчитанные
Al <sub>3</sub> Y	–	46.4 ± 1.8	42.2 ± 1.2	49.4
Al <sub>2</sub> Y	50.4 ± 1.3 [32]	53.47 ± 2.5	53.6 ± 1.2	60
AlY	–	–	71.0 ± 1.6	63.4
Al <sub>2</sub> Y <sub>3</sub>	40 ± 1.6 [33]	46.88 ± 3.9	81.4 ± 2.1	55
AlY <sub>2</sub>	–	–	73 ± 17	46.5

Значения эмпирических констант  $P$ ,  $\frac{Q_0}{P}$ ,  $\frac{R}{P}$  были найдены методом подбора, подробно изложенным в [31]. Параметры  $n_{WS}$  и  $\varphi^*$  для интерметаллидов были рассчитаны аддитивно. Значения  $n_{WS}$  для чистых металлов определялись по формуле (6):

$$n_{WS} = \left[ \left( \frac{B}{V_{Me}} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot 10^{-2} \right]^{\frac{1}{3}}, \text{ (ед. пл.)}^{1/3}, \quad (6)$$

где  $B$  – модуль упругости чистого металла, кгс/см<sup>2</sup>.

Значения параметров, рассчитанных для чистых компонентов, приведены в табл. 1.

Подставляя полученные значения в ур. (1), были вычислены стандартные энтальпии образования интерметаллидов в системе Al–Y. Результаты расчетов, а так же экспериментально измеренные значения  $\Delta_f H_{298}^0$  представлены в табл. 2.

Экспериментальные данные из источников [32, 33] (дифференциальная сканирующая калориметрия) и [34] (высокотемпературный изопериболический Кальве-калориметр) демонстрируют хорошую согласованность между собой для соединений Al<sub>2</sub>Y и Al<sub>2</sub>Y<sub>3</sub>. Однако для остальных ИМС значения  $\Delta_f H_{298}^0$  не приведены. Величины, полученные в работе [35] (метод измерения ЭДС) значительно отличаются от калориметрических данных. Наличие “пробелов” и большой разброс экспериментальных значений, ограничивают их использование для дальнейших расчетов. Таким образом, для дальнейшего анализа были приняты данные, рассчитанные в настоящей работе на основе модели Миедемы, адаптированной для данной группы сплавов.

На рис. 1 приведены опытные и принятые нами величины энтальпий образования интерметаллидов.

Можно наблюдать, что большинство экспериментальных величин попадают в доверительный интервал значений  $\Delta_f H_{298}^0$ , полученных при описании системы на основе

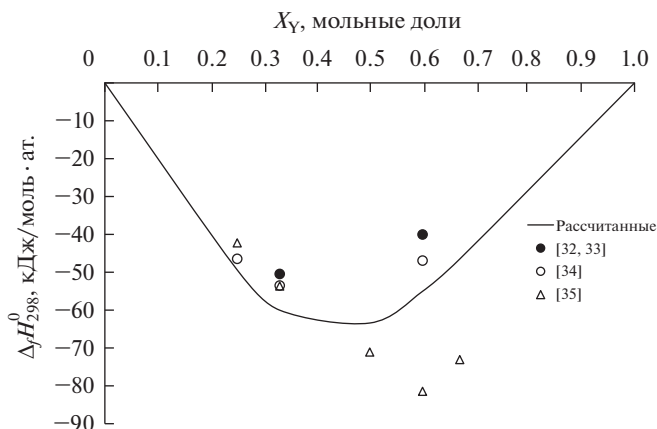


Рис. 1. Стандартные энтальпии образования интерметаллидов: экспериментальные данные (точки), рассчитанные значения (сплошная линия).

модели Миедемы (при одинаковых концентрациях  $Y$ ). Это подтверждает корректность принятых для анализа значений.

Дальнейшая оценка проводилась при помощи расчетных методик, подробно изложенных в работах [36, 37], в соответствии с которыми:

1) Величина  $S_{298}^0$  может быть представлена как аддитивная сумма энтропий составляющих систему исходных компонентов;

2) Для определения значения  $H_{298}^0 - H_0^0$  возможно применение уравнения (7):

$$H_{298}^0 - H_0^0 = 0.5c_{p298}^0 \cdot 298.15, \quad (7)$$

где  $c_{p298}^0$  — удельная теплоемкость при постоянном давлении ( $p - \text{const}$ ) и температуре 298.15 К (рассчитывается аддитивно).

3) Величина  $\Delta H_{\text{ф.п}}$  была оценена на основе соотношения (8):

$$\Delta H_{\text{ф.п}} = T_{\text{ф.п}} \cdot \Delta S_{\text{ф.п}}. \quad (8)$$

При этом, для конгруэнтно плавящихся интерметаллидов  $T_{\text{ф.п}}$  соответствует температуре плавления и определяется исходя из фазовой диаграммы, а  $\Delta S_{\text{ф.п}} = \Delta S$  плавления (на один моль соединения) определяется по формуле (9):

$$\Delta S_{\text{ф.п}} \approx \sum_i N_i \cdot \Delta S_{\text{пл}}(\text{Me}_i), \quad (9)$$

где  $\Delta S_{\text{пл}}(\text{Me}_i)$  — изменение энтропии при плавлении одного моля  $i$ -того металла, входящего в состав интерметаллида;  $N_i$  — количество атомов  $i$ -того металла в формуле интерметаллида.

4) Для определения температурной зависимости удельной теплоемкости применимо правило Нейманна–Коппа. Зависимость  $c_p(T)$  была представлена в виде стандартного полинома (10):

$$c_p(T) = a + by + cy^2 + dy^3 + e \cdot 10^5 T^{-2}, \quad y = T \cdot 10^{-3} \quad (10)$$

Таблица 3. Термохимические свойства соединений системы Al–Y

ИМС	$-\Delta_f H_{298}^0$ , кДж/моль	$S_{298}^0$ , Дж/моль·К	$H_{298}^0 - H_0^0$ , Дж/моль	$T_{ф.п.}$ К	$\Delta H_{ф.п.}$ , Дж/моль	$c_p(T) = a + by + cy^2 + dy^3 + e \cdot 10^5 T^{-2}$ , $y = T \cdot 10^{-3}$					$c_p(\text{liq})$ при $T > T_{пл}$ , Дж/моль·К
						$a$	$b$	$c$	$d$	$e$	
Al <sub>3</sub> Y	197.6	129.48	14845	1251	50869	89.62	-2.02	107.12	-66.18	2.61	135.4
Al <sub>2</sub> Y	180	101.13	11215	1764	51512	20.42	161.87	-117.47	29.31	14.6	109.0
AlY	126.8	72.78	7584	1402	24873	22.11	84.47	-57.92	14.18	7.52	70.6
Al <sub>2</sub> Y <sub>3</sub>	275	189.99	19122	1377	57506	82.73	128.48	-61.44	8.08	11.24	175.3
AlY <sub>2</sub>	139.5	117.21	11538	1246	29930	69.7	12.04	35.69	-22.05	1.39	103.5

5)  $c_p(\text{liq})$  при  $T > T_{ф.п.}$  рассчитывали по уравнению (11) из [36]:

$$c_p(\text{liq}) \approx (c_p(\text{cr}) + (1/4) \cdot \Delta S_{пл}), \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}, \quad (11)$$

где  $c_p(\text{cr})$  – удельная теплоемкость кристаллического соединения (интерметаллида) при  $T_{ф.п.}$

Термохимические свойства соединений системы Al–Y, принятые для дальнейших расчетов, приведены в табл. 3.

### ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

При термодинамическом моделировании была использована модель ИРПВ. В соответствии с данной моделью, состав содержащихся в растворе ассоциатов тождествен составу реально существующих соединений в соответствии с фазовой диаграммой [18]. Избыточные термодинамические функции расплава могут быть вычислены при сравнении результатов с применением модели ИРПВ и результатами моделирования в приближении идеального раствора (ИР) [18, 38].

Моделирование выполнено в атмосфере аргона при общем давлении системы  $p = 10^5$  Па, при температурах от 1900 до 2100 К, в интервале концентраций  $0 \leq x_Y \leq 1$ , где  $x_Y$  – исходное содержание иттрия в расплаве. В соответствии с фазовой диаграммой, в изученном температурном интервале система Al–Y находится в жидком состоянии. При моделировании учитывали термодинамические функции следующих элементов и соединений: газообразных Al, Al<sub>2</sub>, Y, Ar, а так же конденсированных Al, Y, Al<sub>3</sub>Y, Al<sub>2</sub>Y, AlY, Al<sub>2</sub>Y<sub>3</sub> и AlY<sub>2</sub>. В состав идеального раствора были включены только чистые алюминий и иттрий. В модели ИРПВ наряду с Al и Y в состав раствора были включены ассоциаты, соответствующие соединениям Al<sub>3</sub>Y, Al<sub>2</sub>Y, AlY, Al<sub>2</sub>Y<sub>3</sub> и AlY<sub>2</sub>.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 приведены концентрационные зависимости составляющих расплава Al–Y при температурах 1900 и 2100 К по результатам термодинамического моделирования. При повышении температуры количество атомов алюминия и иттрия в расплаве увеличивается, а содержание ассоциатов снижается. Согласно диаграмме состояния максимальные концентрации ассоциатов  $Y_m Al_n$  соответствуют составу отвечающих им интерметаллидов.

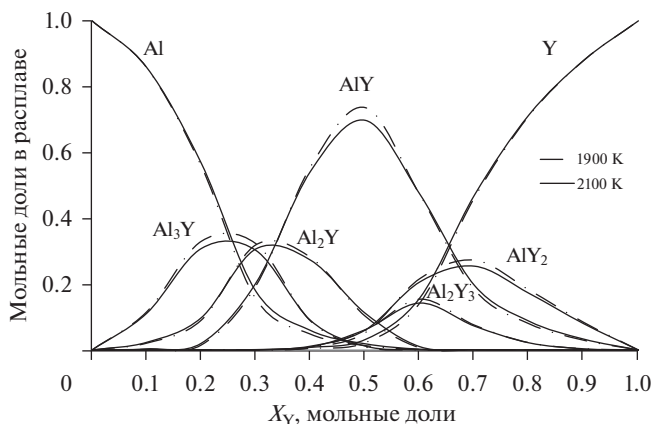


Рис. 2. Концентрационные зависимости составляющих расплавов системы Al–Y в модели ИРПВ: при  $T = 1900$  (---) и  $2100$  К (—).

Интегральные избыточные энтальпия ( $\Delta H_{\text{инт}}^{\text{изб}}$ ) и энтропия ( $\Delta S_{\text{инт}}^{\text{изб}}$ ) смешения, были найдены из данных термодинамического моделирования по ур. (12) и (13) соответственно, как разность величин, рассчитанных в модели ИРПВ и ИР:

$$\Delta H_{\text{инт}}^{\text{изб}} = H_{\text{ИРПВ}} - H_{\text{ИР}}, \tag{12}$$

$$\Delta S_{\text{инт}}^{\text{изб}} = S_{\text{ИРПВ}} - S_{\text{ИР}}. \tag{13}$$

Интегральная избыточная энергия Гиббса была рассчитана по ур. (14):

$$\Delta G_{\text{инт}}^{\text{изб}} = \Delta H_{\text{инт}}^{\text{изб}} - T \Delta S_{\text{инт}}^{\text{изб}}. \tag{14}$$

В табл. 4 приведены расчетные данные об избыточных функциях системы Al–Y при температурах 1900, 2000 и 2100 К.

Таблица 4. Зависимость избыточных интегральных термодинамических функций от температуры и состава в системе Al–Y

$X_Y$	1900 К			2000 К			2100 К		
	$-\Delta H_{\text{инт}}^{\text{изб}}$ , Дж/моль	$-\Delta G_{\text{инт}}^{\text{изб}}$ , Дж/моль	$-\Delta S_{\text{инт}}^{\text{изб}}$ , Дж/моль · К	$-\Delta H_{\text{инт}}^{\text{изб}}$ , Дж/моль	$-\Delta G_{\text{инт}}^{\text{изб}}$ , Дж/моль	$-\Delta S_{\text{инт}}^{\text{изб}}$ , Дж/моль · К	$-\Delta H_{\text{инт}}^{\text{изб}}$ , Дж/моль	$-\Delta G_{\text{инт}}^{\text{изб}}$ , Дж/моль	$-\Delta S_{\text{инт}}^{\text{изб}}$ , Дж/моль · К
0.1	18679	18686	-0.01	18616	18689	-0.04	18551	18694	-0.07
0.2	36789	35394	0.73	36615	35326	0.64	36440	35265	0.56
0.3	49908	46752	1.66	49666	46592	1.54	49429	46444	1.42
0.4	56786	51961	2.54	56518	51714	2.40	56244	51480	2.27
0.5	59619	53127	3.42	59282	52794	3.24	58946	52479	3.08
0.6	54710	49556	2.71	54654	49287	2.68	54581	49019	2.65
0.7	42714	40201	1.32	42738	40067	1.34	42759	39932	1.35
0.8	28919	27943	0.51	28948	27892	0.53	28975	27838	0.54
0.9	14576	14342	0.12	14595	14329	0.13	14613	14316	0.14

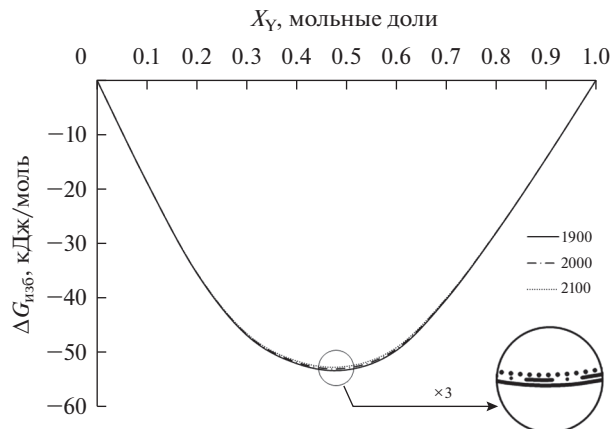


Рис. 3. Интегральная избыточная энергия Гиббса в системе алюминий–иттрий при различных температурах:  $T = 1900$  (—),  $2000$  (---),  $2100$  К (···).

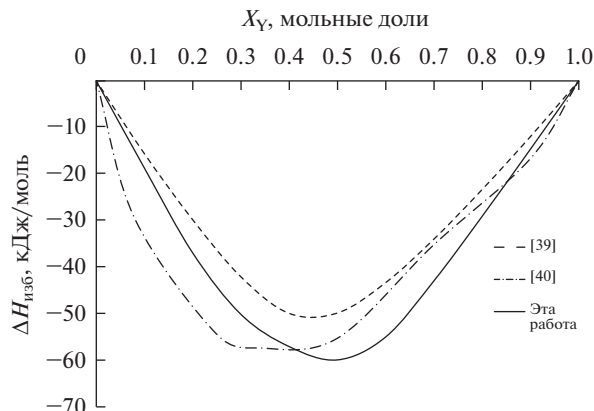
В соответствии с табл. 4, энтальпия смешения и энергия Гиббса закономерно уменьшаются по абсолютному значению с ростом температуры. Высокие по модулю значения  $\Delta G_{\text{инт}}^{\text{изб}}$  свидетельствуют о сильном взаимодействии компонентов расплава. На рис. 3 показаны зависимости интегральной избыточной энергии Гиббса от концентрации и температуры.

Все кривые на рис. 3 проходят через экстремум при  $X_Y = 0.46$ , состав в данной точке близок к составу интерметаллида  $\text{AlY}$ . Полученный результат согласуется с данными термодинамического моделирования (рис. 2): содержание ассоциата  $\text{AlY}$  в расплаве максимально, а значит и его образование вносит наибольший вклад в энергетику. Тем не менее, присутствие других ассоциатов оказывает влияние на энергию, поэтому минимум оказывается незначительно сдвинутым относительно данной точки в сторону меньшей концентрации иттрия. Из рис. 2 следует, что влияние температуры на изменение энергии Гиббса и энтальпии незначительно.

На рис. 4 представлены зависимости интегральных энтальпий смешения ( $\Delta H_{\text{mix}}$ ) от концентрации компонентов в системе  $\text{Al}-\text{Y}$ , рассчитанные в данной работе, в сравнении с экспериментальными данными [39, 40].

Показано, что образование жидких сплавов данной системы сопровождается значительным выделением тепла. Так как влияние температуры на  $\Delta H_{\text{mix}}$  незначительно, следует заключить, что склонность к наиболее сильному взаимодействию компонентов в системе  $\text{Al}-\text{Y}$  во всей области концентраций демонстрируют данные, полученные на основе расчетных методов, использованных в настоящей работе. При этом значение интегральной энтальпии смешения достигает  $-59.6$  кДж/моль. Экспериментальные данные, полученные в работе [39] методом высокотемпературной калориметрии смешения, свидетельствуют о более слабом взаимодействии компонентов, экстремум расположен на уровне  $-49.6$  кДж/моль, однако он в большей степени оказывается смещенным относительно точки  $X_Y = 0.5$  в область с меньшей концентрацией иттрия, по сравнению с данными ТМ. Согласно [3], значения энтальпий образования сплавов в ряду  $\text{Sc}-\text{Y}-\text{La}$ , полученные при помощи высокотемпературной калориметрии смешения, являются систематически заниженными, что согласуется с результатами расчетов, полученными в настоящей работе. Данные масс-спектрометрических измерений энтальпий сплавообразования [40], заметно отличаются от калориметриче-





**Рис. 4.** Энтальпия смешения в системе Al–Y: экспериментальные данные при 1873 К [39], экспериментальные данные [40], данные, полученные в результате моделирования при 1900 К (эта работа).

ских, при этом значение интегральной энтальпии смешения достигает  $-57.1$  кДж/моль, что на 4.2% ниже (по модулю) результатов ТМ. Однако кривая энтальпии смешения, в данном случае, не имеет ярко выраженного максимума. Кроме того, не трудно заметить, что в результате ее сглаживания максимум, как и в случае с данными [39], оказался бы в большей степени сдвинут относительно точки  $X_Y = 0.5$ , в область с меньшей концентрацией иттрия, по сравнению с результатами ТМ. Тем не менее, полученные в результате ТМ значения интегральных энтальпий смешения находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными. В работе [41] проводилось исследование расплавов системы Al–Y методами ТМ. Концентрационные зависимости интегральной энергии Гиббса и энтальпии смешения имели вид немонотонных кривых с экстремумом при  $X_{Al} = 0.5$ , что хорошо согласуется с результатами, полученными в настоящей работе. Так, модель ИРПВ позволила адекватно описать термодинамические свойства расплава алюминий–иттрий.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате литературного анализа на основе полуэмпирической модели Миедымы, адаптированной для данной группы сплавов, были рассчитаны стандартные энтальпии образования интерметаллидов в системе Al–Y. Проведена оценка термодинамических свойств интерметаллидов  $Al_3Y$ ,  $Al_2Y$ ,  $AlY$ ,  $Al_2Y_3$  и  $AlY_2$ . Полученные значения использовались при термодинамическом моделировании равновесных составов и термохимических свойств сплавов алюминий–иттрий в области выше линии ликвидус (1900–2100 К). Определены концентрационные и температурные зависимости компонентов расплава Al–Y, интегральные характеристики смешения, а также состав расплавов по модели ИРПВ. Показано, что образование жидкого сплава системы Al–Y сопровождается значительным выделением тепла ( $\Delta H_{mix} = -59619$  Дж/моль при  $T = 1900$  К). Полученные в результате ТМ значения интегральных энтальпий смешения находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными. Энергетические кривые проходят через экстремум при  $X_Y = 0.46$ , состав в данной точке близок к составу интерметаллида  $AlY$ . Таким образом, использованная при ТМ модель ИРПВ позволила адекватно описать термодинамические свойства расплава алюминий–иттрий.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИМЕТ УрО РАН с использованием оборудования ЦКП “Урал-М”.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Meschel S.V., Kleppa O.J. // *J. Alloys Compd.* 1993. **191**. P. 111–116.  
[https://doi.org/10.1016/0925-8388\(93\)90280-Z](https://doi.org/10.1016/0925-8388(93)90280-Z)
2. Jung W.-G., Kleppa O.J., Topor L. // *J. Alloys Compd.*, 1991. **176**. P. 309–318.  
[https://doi.org/10.1016/0925-8388\(91\)90039-X](https://doi.org/10.1016/0925-8388(91)90039-X)
3. Лебедев В.А., Ямщиков В.И., Ямщиков Л.Ф. Термохимия сплавов редкоземельных и актиноидных элементов. Челябинск: Металлургия. 1989.
4. Semari F., Boulechfar R., Dahmane F., Abdiche A., Ahmed R., Naqib S.H., Bouhemadou A., Khenata R., Wang X.T. // *Inorganic Chemistry Communications*. Available online 22 October 2020, 108304.  
<https://doi.org/10.1016/j.inoche.2020.108304>
5. Kanibolotsky D.S., Bieloborodova O.A., Lisnyak V.V. // *Thermochimica Acta*. 2005. **437**. № 1–2. P. 62–66.  
<https://doi.org/10.1016/j.tca.2005.06.015>
6. Kubaschewski O. Review of alloy Thermodynamics // *Thermodynamics of Nuclear Materials*, IAEA, Vienna. 1968. P. 685–698.
7. Bowergox D.F., Reavis J.G., Mullins L.J. et al. Pyrochemical processing of plutonium and reactor fuels // *Int. Conf. Nucl. and Radiochem.*, Linday, 1984. P. 86–92.
8. Yadav S.K., Lamichhane S., Jha L.N., Adhikari N.P., Adhikari D. // *Physics and Chemistry of Liquids*. 2016. **54**. P. 370–383.  
<https://doi.org/10.1080/00319104.2015.1095640>
9. Dubinin N.E., Vatolin N.A. // *Doklady Physics*, 2016. **61**. P. 527–530.  
<https://doi.org/10.1134/S1028335816110033>
10. Dubinin N.E. // *Acta Physica Polonica A*, 2017. **131**. P. 237–239.  
<https://doi.org/10.12693/APhysPolA.131.237>
11. Trybula M.E., Szafran'ski P.W., Korzhavyi P.A. // *J. Mater. Sci.* 2018. **53**. P. 8285–8301.  
<https://doi.org/10.1007/s10853-018-2116-8>
12. Son L.D., Ryltsev R.E., Sidorov V.E. // *J. Non-Cryst. Solids*. 2007. **353**. P. 3722–3726.  
<https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2007.05.137>
13. Miedema A.R., Boom R., De Boer F.R. // *Journal of the Less Common Metals*. 1975. **41**. № 2. P. 283–298.  
[https://doi.org/10.1016/0022-5088\(75\)90034-X](https://doi.org/10.1016/0022-5088(75)90034-X)
14. Miedema R. // *Journal of the Less Common Metals*. 1976. **46**. № 1. P. 67–83.  
[https://doi.org/10.1016/0022-5088\(76\)90180-6](https://doi.org/10.1016/0022-5088(76)90180-6)
15. Miedema A.R., De Boer F.R. // *Calphad*. 1977. **1**. № 4. P. 341–359.  
[https://doi.org/10.1016/0364-5916\(77\)90011-6](https://doi.org/10.1016/0364-5916(77)90011-6)
16. Boom R., De Boer F.R., Miedema A.R. // *J. Less Common Metals*. 1976. **45**. № 2. P. 237–245.  
[https://doi.org/10.1016/0022-5088\(76\)90270-8](https://doi.org/10.1016/0022-5088(76)90270-8)
17. Ватоллин Н.А., Моисеев Г.К., Трусов Б.Г. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических системах. М.: Металлургия. 1994.
18. Моисеев Г.К., Вяткин Г.П. Термодинамическое моделирование в неорганических системах. Челябинск: Изд-во ЮурГУ. 1999.
19. Ueda S., Morita K. // *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2020. (in press).  
<https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2019.119743>
20. Rachek O.P. // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2006. **352**. № 36–37. P. 3781–3786.  
<https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2006.05.031>
21. Cuevas F.G., Lozano-Perez S., Aranda R.M., Ternero F. // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2019. **512**. P. 15–24.  
<https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2019.02.013>
22. Yongzhi Zh., Gao H., Kuai Y., Han Y., Wang J., Sun B., Gu S., You W. // *Materials Characterization*. 2013. **86**. P. 1–8.  
<https://doi.org/10.1016/j.matchar.2013.09.004>
23. Sacciamani G., Riani P., Borzone G. et al. // *Intermetallics*. 1999. **7**. P. 101–118.  
[https://doi.org/10.1016/S0966-9795\(98\)00022-3](https://doi.org/10.1016/S0966-9795(98)00022-3)
24. Пягай И.Н., Вахобов А.В. Энтальпии образования алюминидов в системе Al–Sc // *Металлы*. 1990. № 5. С. 55–56.
25. Бодряков В.Ю., Замятин В.М., Московских О.П. и др. Энтальпия и теплоемкость многокомпонентных алюминиевых сплавов в твердом и жидком состояниях // *Расплавы*. 1997. № 3. С. 3–9.

26. Ryltsev R.E., Son L.D. // *Physica B*. 2011. **406**. P. 3625–3630.  
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2011.06.056>
27. Prigogine I., Defay R.: *Chemical Thermodynamics*. London: Longmans Green, 1954.
28. Белов Г.В., Трусов Б.Г. Термодинамическое моделирование химически реагирующих систем. М.: МГТУ имени Н.Э. Баумана, 2013.
29. Kang Y.B., Pelton A.D., Chartrand P., Fuerst C.D. // *Calphad*. 2008. **32**. № 2. P. 413–422.  
<https://doi.org/10.1016/j.calphad.2008.03.002>
30. Shubin A.B., Shunyaev K.Yu., Kulikova T.V. // *Russian Metallurgy*. 2008. **5**. P. 364–369.  
<https://doi.org/10.1134/S0036029508050029>
31. Шубин А.Б., Ямщиков Л.Ф., Распопин С.П. Оценка теплот образования сплавов редкоземельных и актиноидных элементов // *Изв. ВУЗов. Цветная металлургия*. 1986. № 4. С. 73–76.
32. Jung W.-G., Kleppa O.J., Topor L. // *J. Alloys and Compounds*. 1991. **176**. № 2. P. 309–318.  
[https://doi.org/10.1016/0925-8388\(91\)90039-X](https://doi.org/10.1016/0925-8388(91)90039-X)
33. Meschel S.V., Kleppa O.J. // *J. of Alloys and Compounds*, 1993. **191**. № 1. P. 111–116.  
[https://doi.org/10.1016/0925-8388\(93\)90280-Z](https://doi.org/10.1016/0925-8388(93)90280-Z)
34. Timofeev V.S., Turchanin A.A., Zubkov A.A., Tomilin I.A. // *Thermochimica Acta*. 1997. **299**. № 1–2. P. 37–41.  
[https://doi.org/10.1016/S0040-6031\(97\)00134-2](https://doi.org/10.1016/S0040-6031(97)00134-2)
35. Кобер В.И., Ничков И.Ф., Распопин С.П., Науман В.Н. Фазовый состав и термодинамические свойства соединений системы Y–Al // *Изв. вузов. Цветная металлургия*. 1979. № 5. С. 40–43.
36. Моисеев Г.К., Ватолин Н.А., Маршук Л.А., Ильиных Н.И. Температурные зависимости приведенной энергии Гиббса некоторых неорганических веществ (альтернативный банк данных АСТРА.OWN). Екатеринбург: УрО РАН, 1997.
37. Моисеев Г.К., Ватолин Н.А. Некоторые закономерности изменения и методы расчета термодинамических свойств неорганических соединений. Екатеринбург: Изд. УрО РАН, 2001.
38. Kulikova T., Mayorova A., Shubin A., Vykov V., Shunyaev K. // *Kovové materiály – Metallic Materials*. 2015. **53**. № 3. P. 133–137.  
[https://doi.org/10.4149/km\\_2015\\_3\\_133](https://doi.org/10.4149/km_2015_3_133)
39. Рысс Г.М., Есин Ю.О., Строганов А.И., Гельд П.В. Энтальпии образования жидких сплавов иттрия с алюминием // *Журн. физич. химии*. 1976. **50**. № 4. С. 985–986.
40. Звиададзе Г.Н., Петров А.А., Казенас Е.К. Термодинамика металлических расплавов скандия, иттрия, лантана и неодима с алюминием // *Тез. докл. IX Всес. конф. по калориметрии и химической свойств термодинамике*. Тбилиси. 1982. С. 356–357.
41. Упорова Н.С., Упоров С.А., Сидоров В.Е., Ильиных Н.И., Куликова Т.В. Магнитные свойства и состав расплавов Al–PЗМ // *Материаловедение*. 2011. № 11. С. 22–27.

## THERMODYNAMIC PROPERTIES OF MELTS OF THE Al–Y BINARY SYSTEM

I. O. Gilev<sup>1</sup>, A. B. Shubin<sup>1</sup>, P. V. Kotenkov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the RAS, Yekaterinburg, Russia*

The thermodynamic characteristics of aluminum–yttrium melts were studied. The thermodynamic properties ( $\Delta_f H_{298}^0$ ,  $S_{298}^0$ ,  $(H_{298}^0 - H_0^0)$ ,  $C_p(T)$ , and  $C_p(\text{liq})$ ) of  $\text{Al}_3\text{Y}$ ,  $\text{Al}_2\text{Y}$ ,  $\text{AlY}$ ,  $\text{Al}_2\text{Y}_3$ ,  $\text{AlY}_2$  compounds were calculated and analyzed. The values of the standard enthalpies of formation for intermetallic compounds were calculated using the semiempirical Miedema model, and were equal to  $-49.4$ ,  $-60$ ,  $-63.4$ ,  $-55$ ,  $-46.5$  (kJ/mol at) for each of the intermetallic compounds, respectively. The calculations results were used in the thermodynamic modeling (TM) of the Al–Y melts. The “TERRA” software package was used as a calculation tool for TM. The model of ideal solutions of interaction products (ISIP) was used as a calculation model in the process of modeling the composition and thermodynamic characteristics of melts. The simulation was carried out in an initial argon atmosphere at a total pressure of  $10^5$  Pa. The range of temperatures and concentrations corresponding to the liquid state of this system (1900–2100 K) were investigated. A comparison of the results obtained with the results of modeling in the approximation of an ideal solution made it possible to determine the excess integral thermodynamic characteristics (enthalpy, entropy, Gibbs energy) of the Al–Y melts. It was shown that the absolute value of enthalpies of mixing regularly decreases with increasing the temperature. The obtained values were compared with the known experimental data on the integral enthalpies of mixing for aluminum–yttrium melts. The tenden-

cy for the strongest interaction of the components in this system in the entire concentration range was demonstrated by the data obtained on the basis of the calculation methods used in this work. The value of the integral enthalpy of mixing reaches  $-59.6$  kJ/mol. The energy curves obtained as a result of TM pass through an extremum at  $X_Y = 0.46$ , the composition at this value is close to the composition of the AIY intermetallic compound. Experimental data indicate a lesser interaction of components, the extremum is located at the level of  $-49.6$  kJ/mol. The data obtained in this work are in satisfactory agreement with the experimental data, the ISIP model used for TM made it possible to adequately describe the thermodynamic properties of the aluminum–yttrium melts.

*Keywords:* melt, aluminum, yttrium, associates, intermetallic compounds, standard enthalpy of formation, excess thermodynamic functions

## REFERENCES

1. Meschel S.V., Kleppa O.J. // *J. Alloys Compd.* 1993. **191**. P. 111–116.  
[https://doi.org/10.1016/0925-8388\(93\)90280-Z](https://doi.org/10.1016/0925-8388(93)90280-Z)
2. Jung W.-G., Kleppa O.J., Topor L. // *J. Alloys Compd.*, 1991. **176**. P. 309–318.  
[https://doi.org/10.1016/0925-8388\(91\)90039-X](https://doi.org/10.1016/0925-8388(91)90039-X)
3. Lebedev V.A., Yamshchikov V.I., Yamshchikov L.F. *Termokhimiya splavov redkozemel'nykh i aktinoidnykh elementov* [Thermochemistry of alloys of rare earth and actinide elements]. Chelyabinsk: Metallurgiya. 1989. [In Russian].
4. Semari F., Boulechfar R., Dahmane F., Abdiche A., Ahmed R., Naqib S.H., Bouhemadou A., Khenata R., Wang X.T. // *Inorganic Chemistry Communications*. Available online 22 October 2020, 108304.  
<https://doi.org/10.1016/j.inoche.2020.108304>
5. Kanibolotsky D.S., Bieloborodova O.A., Lisnyak V.V. // *Thermochimica Acta*. 2005. **437**. № 1–2. P. 62–66.  
<https://doi.org/10.1016/j.tca.2005.06.015>
6. Kubaschewski O. *Review of alloy Thermodynamics // Thermodynamics of Nuclear Materials*, IAEA, Vienna. 1968. P. 685–698.
7. Bowergox D.F., Reavis J.G., Mullins L.J. et al. *Pyrochemical processing of plutonium and reactor fuels // Int. Conf. Nucl. and Radiochem.*, Linday, 1984. P. 86–92.
8. Yadav S.K., Lamichhane S., Jha L.N., Adhikari N.P., Adhikari D. // *Physics and Chemistry of Liquids*. 2016. **54**. P. 370–383.  
<https://doi.org/10.1080/00319104.2015.1095640>
9. Dubinin N.E., Vatolin N.A. // *Doklady Physics*, 2016. **61**. P. 527–530.  
<https://doi.org/10.1134/S1028335816110033>
10. Dubinin N.E. // *Acta Physica Polonica A*, 2017. **131**. P. 237–239.  
<https://doi.org/10.12693/APhysPolA.131.237>
11. Trybula M.E., Szafran'ski P.W., Korzhavyi P.A. // *J. Mater. Sci.* 2018. **53**. P. 8285–8301.  
<https://doi.org/10.1007/s10853-018-2116-8>
12. Son L.D., Ryltsev R.E., Sidorov V.E. // *J. Non-Cryst. Solids*. 2007. **353**. P. 3722–3726.  
<https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2007.05.137>
13. Miedema A.R., Boom R., De Boer F.R. // *J. Less Common Metals*. 1975. **41**. № 2. P. 283–298.  
[https://doi.org/10.1016/0022-5088\(75\)90034-X](https://doi.org/10.1016/0022-5088(75)90034-X)
14. Miedema R. // *Journal of the Less Common Metals*. 1976. **46**. № 1. P. 67–83.  
[https://doi.org/10.1016/0022-5088\(76\)90180-6](https://doi.org/10.1016/0022-5088(76)90180-6)
15. Miedema A.R., De Boer F.R. // *Calphad*. 1977. **1**. № 4. P. 341–359.  
[https://doi.org/10.1016/0364-5916\(77\)90011-6](https://doi.org/10.1016/0364-5916(77)90011-6)
16. Boom R., De Boer F.R., Miedema A.R. // *J. Less Common Metals*. 1976. **45**. № 2. P. 237–245.  
[https://doi.org/10.1016/0022-5088\(76\)90270-8](https://doi.org/10.1016/0022-5088(76)90270-8)
17. Vatolin N.A., Moiseyev G.K., Trusov B.G. *Termodinamicheskoye modelirovaniye v vysokotemperaturnykh neorganicheskikh sistemakh* [Thermodynamic modeling in high-temperature inorganic systems]. M.: Metallurgiya. 1994. [In Russian].
18. Moiseyev G.K., Vyatkin G.P. *Termodinamicheskoye modelirovaniye v neorganicheskikh sistemakh* [Thermodynamic modeling in inorganic systems]. Chelyabinsk: Izd-vo YuurGU. 1999. [In Russian].
19. Ueda S., Morita K. // *J. Non-Crystalline Solids*, 2020. (in press).  
<https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2019.119743>
20. Rachek O.P. // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2006. **352**. № 36–37. P. 3781–3786.  
<https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2006.05.031>

21. Cuevas F.G., Lozano-Perez S., Aranda R.M., Ternero F. // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2019. **512**. P. 15–24.  
<https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2019.02.013>
22. Yongzhi Zh., Gao H., Kuai Y., Han Y., Wang J., Sun B., Gu S., You W. // *Materials Characterization*. 2013. **86**. P. 1–8.  
<https://doi.org/10.1016/j.matchar.2013.09.004>
23. Cacciamani G., Riani P., Borzone G. et al. // *Intermetallics*. 1999. **7**. P. 101–118.  
[https://doi.org/10.1016/S0966-9795\(98\)00022-3](https://doi.org/10.1016/S0966-9795(98)00022-3)
24. Pyagay I.N., Vakhobov A.V. Ental'pii obrazovaniya alyuminidov v sisteme Al–Sc [Enthalpies of formation of aluminides in the Al–Sc system] // *Metally*. 1990. № 5. P. 55–56. [In Russian].
25. Bodryakov V.Yu., Zamyatin V.M., Moskovskikh O.P. Ental'piya i tpeploemkost' mnogokomponentnykh alyuminiyevykh splavov v tverdom i zhidkom sostoyaniyakh [Enthalpy and heat capacity of multicomponent aluminum alloys in solid and liquid states] // *Raspavy*. 1997. № 3. P. 3–9. [In Russian].
26. Ryltsev R.E., Son L.D. // *Physica B*. 2011. **406**. P. 3625–3630.  
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2011.06.056>
27. Prigogine I., Defay R.: *Chemical Thermodynamics*. London: Longmans Green, 1954.
28. Belov G.V., Trusov B.G. Termodinamicheskoye modelirovaniye khimicheskii reaktivnykh sistem [Thermodynamic modeling of chemically reacting systems]. M.: MG TU imeni N.E. Bauman, 2013. [In Russian].
29. Kang Y.B., Pelton A.D., Chartrand P., Fuerst C.D. // *Calphad*. 2008. **32**. № 2. P. 413–422.  
<https://doi.org/10.1016/j.calphad.2008.03.002>
30. Shubin A.B., Shunyaev K.Yu., Kulikova T.V. // *Russian Metallurgy*. 2008. **5**. P. 364–369.  
<https://doi.org/10.1134/S0036029508050029>
31. Shubin A.B., Yamshchikov L.F., Raspopin S.P. Otsenka teplot obrazovaniya splavov redkozemel'nykh i aktinoidnykh elementov [Estimation of heats of formation of alloys of rare-earth and actinide elements] // *Izv. VUZov. Tsvetnaya metallurgiya*. 1986. № 4. P. 73–76. [In Russian].
32. Jung W.-G., Kleppa O.J., Topor L. // *J. Alloys and Compounds*. 1991. **176**. № 2. P. 309–318.  
[https://doi.org/10.1016/0925-8388\(91\)90039-X](https://doi.org/10.1016/0925-8388(91)90039-X)
33. Meschel S.V., Kleppa O.J. // *J. of Alloys and Compounds*, 1993. **191**. № 1. P. 111–116.  
[https://doi.org/10.1016/0925-8388\(93\)90280-Z](https://doi.org/10.1016/0925-8388(93)90280-Z)
34. Timofeev V.S., Turchanin A.A., Zubkov A.A., Tomilin I.A. // *Thermochemica Acta*. 1997. **299**. № 1–2. P. 37–41. [https://doi.org/10.1016/S0040-6031\(97\)00134-2](https://doi.org/10.1016/S0040-6031(97)00134-2)
35. Kober V.I., Nishkov I.F., Raspopin S.P., Nauman V.N. Fazovyy sostav i termodinamicheskiye svoystva soyedineniy sistemy Y–Al [Phase composition and thermodynamic properties of compounds of the Y–Al system] // *Izv. vuzov. Tsvetnaya metallurgiya*. 1979. № 5. P. 40–43. [In Russian].
36. Moiseyev G.K., Vatolin N.A., Marshuk L.A., Il'inykh N.I. Temperaturnyye zavisimosti privedennoy energii Gibbsa nekotorykh neorganicheskikh veshchestv (al'ternativnyy bank dannykh ASTRA.OWN) [Temperature dependences of the reduced Gibbs energy of some inorganic substances (alternative data bank ASTRA.OWN)]. Yekaterinburg: UrO RAN, 1997. [In Russian].
37. Moiseyev G.K., Vatolin N.A. Nekotoryye zakonomernosti izmeneniya i metody rascheta termokhimicheskikh svoystv neorganicheskikh soyedineniy [Some patterns of change and methods for calculating the thermochemical properties of inorganic compounds]. Yekaterinburg: Izd. UrO RAN, 2001. [In Russian].
38. Kulikova T., Mayorova A., Shubin A., Bykov V., Shunyaev K. // *Kovové materiály – Metallic Materials*. 2015. **53**. № 3. P. 133–137.  
[https://doi.org/10.4149/km\\_2015\\_3\\_133](https://doi.org/10.4149/km_2015_3_133)
39. Ryss G.M., Yesin Yu.O., Stroganov A.I., Gel'd P.V. Ental'pii obrazovaniya zhidkikh splavov ittriya s alyuminiyem [Enthalpies of formation of liquid yttrium-aluminum alloys] // *Zhurn. fizich. khimii*. 1976. **50**. № 4. P. 985–986. [In Russian].
40. Zviadadze G.N., Petrov A.A., Kazenas Ye.K. Termodinamika metallicheskh raspavov skandiya, ittriya, lantana i neodima s alyuminiyem [Thermodynamics of metallic melts of scandium, yttrium, lanthanum and neodymium with aluminum] // *Tez. dokl. IX Vses. konf. po kalorimetrii i khimicheskoy termodinamike*. Tbilisi. 1982. P. 356–357. [In Russian].
41. Uporova N.S., Uporov S.A., Sidorov V.Ye., Il'inykh N.I., Kulikova T.V. Magnitnyye svoystva i sostav raspavov Al–RZM [Uporova N.S., Uporov S.A., Sidorov V.E., Ilyinykh N.I., Kulikova T.V. Magnetic properties and composition of Al–REM melts] // *Materialovedeniye*. 2011. № 11. P. 22–27. [In Russian].