ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ, 2023, том 97, № 9, с. 1329–1335

ХЕМОИНФОРМАТИКА И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 669.017.13+554.016.2

CALPHAD-РАСЧЕТ ТРОЙНОЙ СИСТЕМЫ Ag–Pd–Sn

© 2023 г. А. С. Павленко[a], Г. П. Жмурко[a], Е. Г. Кабанова[a,], М. А. Карева[a], Е. А. Пташкина[a], В. Н. Кузнецов[a,*]**

[a] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия*

**e-mail: vnk@general.chem.msu.ru*

***e-mail: kabanovaeg@gmail.com*

Поступила в редакцию 03.04.2023 г.
После доработки 03.04.2023 г.
Принята к публикации 07.04.2023 г.

Выполнен CALPHAD-расчет тройной системы Ag–Pd–Sn. Неупорядоченные фазы, расплав и ГЦК-фазу описывали с помощью модели раствора замещения. Для описания интерметаллических соединений и тройной фазы применяли подрешеточные модели. Используемая для тройной фазы двухподрешеточная модель $(Ag, Pd)_4(Ag, Sn)$ позволила воспроизвести экспериментально установленный для нее наклон области гомогенности. Результаты термодинамического расчета системы Ag–Pd–Sn находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными по фазовым равновесиям и энтальпиям образования расплава. Согласие с данными по парциальной энергии Гиббса олова в расплаве несколько хуже.

Ключевые слова: палладиевые сплавы, фазовые равновесия, термодинамическое моделирование

DOI: 10.31857/S0044453723090145, **EDN:** XOYJQW

Сплавы на основе палладия широко используются в химической промышленности, микроэлектронике, медицине и других областях. Компонентами таких сплавов часто являются серебро и легкоплавкие непереходные металлы, которые улучшают как технологические, в частности литейные, так и механические характеристики материалов [1]. При этом непереходные металлы образуют многочисленные интерметаллические соединения с палладием и серебром, которые, с одной стороны, обладают рядом положительных свойств, например, могут быть использованы в качестве высокоэффективных, селективных и стабильных катализаторов [2, 3]. С другой стороны, вызывают нежелательные эффекты. Например, в бессвинцовых припоях, содержащих индий, олово и серебро, серьезно ухудшают механические и проводящие свойства паяных соединений печатных плат [4]. В обоих случаях информация об условиях образования, устойчивости и строении интерметаллических соединений в системах палладия со всеми перечисленными выше металлами оказывается совершенно необходимой.

Для получения такой информации очень полезным может быть термодинамическое моделирование фазовых равновесий (CALPHAD-метод), поскольку оно позволяет получить общее описание системы и прогнозировать фазовые равновесия и фазовые свойства в неисследованных областях диаграммы на основе ограниченного эксперимента [5]. Кроме того, при наличии описания бинарных и тройных граничных подсистем CALPHAD-метод позволяет предсказать строение фазовых диаграмм систем, состоящих из четырех и более компонентов.

Целью настоящего исследования являлось построение термодинамического описания системы Ag–Pd–Sn. В качестве исходных данных были взяты экспериментальные исследования фазовых равновесий, выполненные ранее авторами [6], и измерения термодинамических свойств, выполненные в работах [7, 8].

В работе [6] построены изотермические сечения системы Ag–Pd–Sn при 500 и 800°C. Установлена значительная растворимость серебра (~17 ат. %) в фазах Pd_3Sn и γ-$Pd_{2-x}Sn$, а также наклон областей гомогенности этих фаз в сторону серебряного угла. Такой же наклон имеют фазы на основе соединений Pd_2Sn и $Pd_{20}Sn_{13}$, хотя растворимость серебра в них гораздо меньше. При добавлении серебра к соединению γ-$Pd_{2-x}Sn$ область его гомогенности заметно расширяется в сторону стехиометрического состава соединения. Далее, при 500°C, область гомогенности γ-$Pd_{2-x}Sn$ распространяется в тройную систему по изоконцентрате олова ~33 ат. %. В области, богатой палладием, авторы [6] обнаружили новую

тройную фазу τ_1 с упорядоченной кристаллической структурой, в качестве прототипа которой был указан In.

В работе [7] методом ЭДС с жидким солевым электролитом измерены парциальные энергии Гиббса олова при 1050 K, а также его парциальные энтальпии и энтропии вдоль разрезов с отношением Pd : Ag = 10/90, 20/80, 30/70, 40/60, 60/40 и 80/20. Содержание олова, в зависимости от разреза, варьировалось от 25–45 до ~85 ат. %, интервал температур составлял 370–800°C. Графики температурной зависимости ЭДС содержали изломы, свидетельствующие о пересечении поверхности ликвидуса. Однако никакой информации о природе кристаллизующихся фаз получено не было. В работе [8] приведены энтальпии образования расплава, полученные методом прямой калориметрии реакции при 900°C вдоль восьми разрезов с содержанием олова более 60 ат. %.

Перед проведением термодинамического моделирования тройной системы Ag–Pd–Sn был проведен критический анализ опубликованных термодинамических описаний граничных двойных систем Ag–Pd, Ag–Sn и Pd–Sn, который показал, что:

– Термодинамическое описание системы Ag–Pd, выполненное недавно авторами настоящей статьи [9], использует современные значения энергии Гиббса компонентов [10] и хорошо воспроизводит результаты экспериментальных исследований как фазовых равновесий, так и термодинамических свойств фаз. Несомненным достоинством расчета [9] является то, что он позволяет устранить фиктивную область расслоения в твердом растворе (Ag, Pd), которая возникает при использовании параметров моделей фаз, предложенных в [11].

– Из двух расчетов системы Ag–Sn [12, 13], выполненных с использованием современного значения энергии Гиббса образования олова в ГЦК-структуре [10], предпочтителен вариант, представленный в работе [12], поскольку в [13] неупорядоченная фаза HCP_A3 описана моделью, не соответствующей ее кристаллической структуре.

– Наиболее полное термодинамическое описание системы Pd–Sn предложено в работе [14]. Из двух моделей, предложенных авторами [14] для описания жидкой фазы, – полинома Редлиха–Кистера и модели ассоциированных растворов – выбор был сделан в пользу первой, поскольку она более простая и лучше совместима с моделями жидкости в других двойных системах, описания которых используются в настоящей работе.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

CALPHAD-метод термодинамического описания системы заключается в том, что для каждой фазы строится температурная и концентрационная зависимость энергии Гиббса, называемая термодинамической моделью фазы. Выбор модели определяется составом и структурой фазы. Зависимость энергии Гиббса от температуры и состава содержит параметры, которые необходимо определить по соответствующим экспериментальным или теоретическим данным [5].

Термодинамическое моделирование неупорядоченных фаз

Расплав, ГЦК твердый раствор на основе палладия и серебра, а также ζ-фаза с неупорядоченной ГП-структурой в настоящей работе описывались моделью раствора замещения:

$$G^{\Psi}(x_i,T) = \sum_i x_i^{\circ} G_i^{\psi}(T) + RT\sum_i x_i \ln(x_i) + {}^{Xs}G^{\psi}(\{x_i\},T).$$

Здесь x_i – мольная доля компонента i, G_i^{ψ} – энергия Гиббса компонента i в структуре фазы Ψ, ${}^{Xs}G^{\psi}$ – избыточная энергия Гиббса, которая описывается полиномом Редлиха–Кистера [5, 15]:

$${}^{Xs}G(x_i,x_j) = x_i x_j \sum_{v=0}^{n} {}^{v}L_{i,j}(x_i - x_j)^{v},$$

где $L_{i,j}$ – параметры взаимодействия, которые определяются при оптимизации системы.

Для описания избыточной энергии Гиббса в тройных системах можно использовать несколько методов экстраполяции. В случае системы Ag–Pd–Sn, в которой один из компонентов (Sn) отличается по свойствам от двух других, может быть применен метод Тупа [5, 16]. Однако нами была выбрана модель Редлиха–Кистера–Муггиану (РКМ) с учетом тройных взаимодействий [5, 15, 17], поскольку она более простая и имеет лучшую программную поддержку. В частности, в программном пакете Thermo-Calc® для расчета четырехкомпонентных систем реализована только эта модель. Кроме того, модель РКМ выбрана для согласованности с расчетами других тройных систем Ag–Pd–In и In–Pd–Sn, выполненных нами ранее [17, 18].

Термодинамическое моделирование упорядоченных фаз

Энергии Гиббса упорядоченных фаз описывались подрешеточными моделями [5]:

$$G^{\Psi}(x_i,T) = \sum(\prod y_i^s \Delta_f^0 G_{\mathrm{A}_m\mathrm{B}_n}) + RT\sum_s\sum_i a^s y_i^s \ln y_i^s + {}^{Xs}G^{\psi},$$

где $\Delta_f^0 G_{A_mB_n}$ – энергия Гиббса образования квазикомпонентов (end-members), т.е. соединений, содержащих только один компонент в каждой подрешетке, a^s – стехиометрический коэффициент подрешетки s, y_i^s – доля компонента i в подрешетке s. Избыточная свободная энергия Гиббса ($^{Xs}G^{\psi}$) включает в себя параметры взаимодействий компонентов в подрешетках.

Параметрами подрешеточной модели фазы являются энергии Гиббса образования квазикомпонентов, а также параметры взаимодействий между компонентами, присутствующими в одной и той же подрешетке.

Модели упорядоченных фаз в системе Ag–Pd–Sn

Параметры моделей интерметаллических фаз, растворимость третьего компонента в которых не превышала 2 ат. %, были взяты без изменения из описаний двойных систем [12, 14]. Для фаз, обладающих большей растворимостью третьего компонента, модели были модифицированы.

Поскольку [6] области гомогенности фаз Pd_3Sn и Pd_2Sn распространяются в тройную систему Ag–Pd–Sn не по изоконцентратам Sn (или Pd), а наклонены к стороне Ag–Pd, серебро вводилось как в подрешетку Pd, так и в подрешетку Sn.

Например, двухподрешеточная модель $(Pd,Sn)_{0.25}(Pd,Sn)_{0.75}$ [14], используемая для двойного соединения Pd_3Sn, в тройной системе трансформировалась в модель $(Ag, Pd, Sn)_{0.25}(Ag, Pd, Sn)_{0.75}$. В результате такого изменения потребовался учет довольно большого числа виртуальных квазикомпонентов – $G_{Ag:Ag}^{Pd_3Sn}$, $G_{Ag:Sn}^{Pd_3Sn}$, $G_{Sn:Ag}^{Pd_3Sn}$, $G_{Ag:Pd}^{Pd_3Sn}$ и $G_{Pd:Ag}^{Pd_3Sn}$, значения энергий Гиббса которых первоначально оценивались как стехиометрическая сумма энергий Гиббса компонентов с добавлением +6000 Дж/моль. В процессе оптимизации значения параметров $G_{Ag:Ag}^{Pd_3Sn}$, $G_{Ag:Pd}^{Pd_3Sn}$ и $G_{Pd:Ag}^{Pd_3Sn}$ были скорректированы. Кроме того, для воспроизведения области гомогенности фазы Pd_2Sn потребовалось ввести параметр тройного взаимодействия $L_{Ag,Pd:Ag,Sn}$.

Одноподрешеточная модель $(Pd_2Sn)_1$, используемая в работе [14] для описания фазы Pd_2Sn, была изменена на двухподрешетточную $(Pd)_2(Sn)_1$, которая в тройной системе принимает вид $(Pd)_2(Ag,Sn)$. Значение энергии Гиббса двойного квазикомпонента в этой модели приняли равным соответствующему значению из [14], т.е. $G_{(Pd:Sn)}^{Pd_2Sn} = G_{Pd_2Sn}^{Pd_2Sn}$.

Для фазы γ-$Pd_{2-x}Sn$ со структурой $NiAs/Ni_2In$ применена соответствующая ее кристаллической структуре трехподрешеточная модель (Pd)(Sn)(Pd,Va) [14]. Чтобы воспроизвести экспериментально установленную широкую область гомогенности этой фазы в тройной системе Ag–Pd–Sn, серебро вводилось в первую и третью подрешетки (Ag, Pd) (Sn) (Ag, Pd, Va), при этом двойным квазикомпонентам (Ag)(Sn)(Ag) и (Ag)(Sn)(Va) пришлось присвоить высокие положительные значения. Значение параметра стабильности тройного квазикомпонента (Ag)(Sn)(Pd) было определено в процессе оптимизации.

Согласно результатам [6] область гомогенности тройной фазы τ_1 также наклонена в сторону серебряного угла тройной системы Ag–Pd–Sn. Поскольку достоверно определить структурный тип этой фазы не удалось, для ее описания использовалась формальная двухподрешеточная модель $(Ag, Pd)_4(Ag, Sn)$. При этом, чтобы избежать появления τ_1-фазы в двойных граничных системах, энергиям Гиббса образования двойных квазикомпонентов $(Ag)_4Ag$, $(Ag)_4(Sn)$ и $(Pd)_4(Ag)$ присваивались положительные значения.

Процедура оптимизации

Для расчетов использовали программу Thermo-Calc® (версия 2022b). Энергии Гиббса образования чистых компонентов брали из базы данных PURE5, поставляемой с пакетом программ Thermo-Calc® [10].

Расчет системы Ag–Pd–Sn проводили по методике, успешно примененной ранее при расчете тройных систем In–Pd–Sn и Ag–Pd–In [17, 18]. Параметры моделей фаз определяли под фазовые границы при каждой температуре, 500 и 800°C. Затем по полученным значениям рассчитывали параметры a и b в выражении $L_{ABC}^i = a_{ABC}^i + b_{ABC}^i T$. В заключение, в модуле PARROT пакета Thermo-Calc проводили общую оптимизацию системы. Следует отметить, что поиск оптимальных параметров с помощью PARROT был затруднен из-за сильной тенденции к образованию фиктивных областей расслоения расплава и ГЦК-фазы. Поэтому значения некоторых параметров были оценены методом проб и ошибок.

Исходные данные

Исходными данными для термодинамического расчета тройной системы Ag–Pd–Sn служили результаты изучения фазовых равновесий [6] и данные по энтальпии образования расплава [8]. Предварительная попытка совместного использования результатов измерений активности Sn [7] и энтальпии образования расплава [8] для определения параметров жидкости привела к образованию фиктивных областей расслоения расплава.

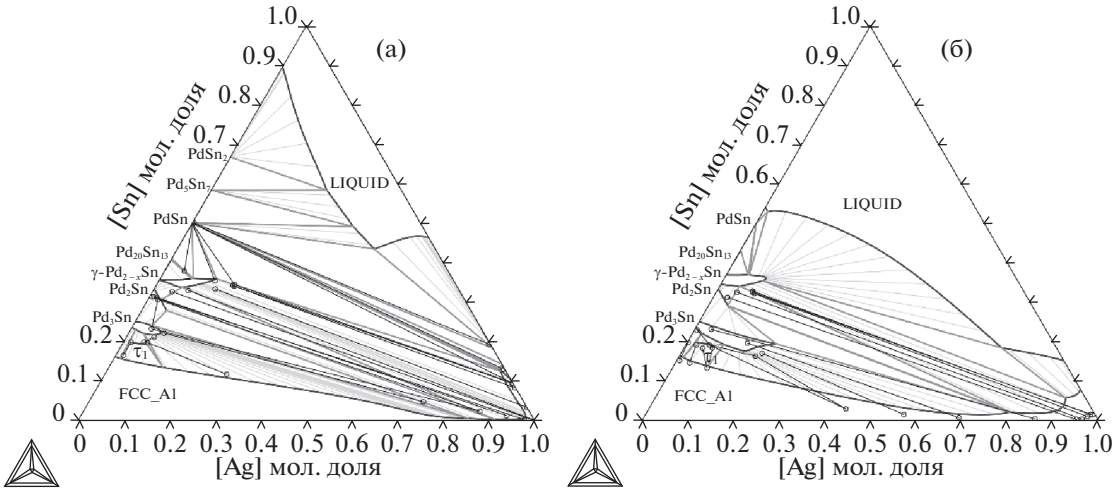

Рис. 1. Рассчитанные изотермические сечения системы Ag–Pd–Sn при 500 (а) and 800°C (б). Жирные линии – коноды, полученные в [6].

Поэтому данные [7] в оптимизацию не включались. Однако, мы сравнили измеренную в [7] активность олова при 1050 K с результатами расчета.

ОБСУЖДЕНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ

Система Ag–Pd–Sn оказалась необычно сложной для расчета. Любые попытки совместного использования энтальпии смешения расплава [8] и парциальной энергии Гиббса олова [7] для нахождения параметров модели расплава оказались безуспешными, поскольку параметры, которые хорошо воспроизводили данные [7, 8] и согласовывались с конодами [6], приводили к появлению на рассчитанной диаграмме фиктивных областей расслоения в расплаве и/или в ГЦК-твердом растворе. В итоге, данные по парциальной энергии Гиббса олова были исключены из используемых при оптимизации, а для некоторых параметров моделей фаз пришлось ограничиться результатами метода проб и ошибок. Несмотря на это, в результате удалось получить в целом удовлетворительное описание системы.

Рассчитанные изотермические сечения системы Ag–Pd–Sn при 500 и 800°C представлены на рис. 1. В целом они хорошо согласуются с экспериментальными фазовыми границами, однако при 800°C расчет дает завышенную растворимость олова в богатой серебром ГЦК-фазе.

Значения используемых параметров моделей фаз приведены в таблице 1. Как видно из рис. 2а они хорошо воспроизводят экспериментальные данные по энтальпиям смешения расплава [8]. Увеличение содержания палладия приводит к уменьшению энтальпии смешения. Экспериментально зафиксированный излом на кривой Pd–$Ag_{50}Sn_{50}$ при ~33 ат. % Pd, соответствующий первичной кристаллизации твердой фазы, при расчете не воспроизводился.

Согласно данным [8] энтальпии смешения расплава по разрезам Ag–Pd_nSn_{100-n} практически линейно увеличиваются при увеличении содержания серебра (рис. 2б). Расчет в целом воспроизводит эту тенденцию, однако для богатых оловом сечений – Ag–$Pd_{10}Sn_{90}$ и Ag–$Pd_{20}Sn_{80}$ – сходимость экспериментальных и расчетных данных несколько хуже.

Нужно также отметить, что хотя результаты определения парциальной энергии Гиббса олова в расплаве [7] не удалось использовать при оптимизации параметров моделей фаз, полученные в настоящей работе параметры моделей довольно удовлетворительно воспроизводят эти экспериментальные данные. На рис. 3 приведено сравнение рассчитанных по шести разрезам парциальных энергий Гиббса расплава при 1050 K. Можно отметить, что по разрезам с преобладающим содержанием серебра сходимость результатов расчета и эксперимента заметно хуже – расчет показывает заниженные значения. Наибольшее расхождение наблюдается в областях с низким содержанием олова.

Рассчитанные политермические сечения системы Ag–Pd–Sn по двум из шести разрезов, исследованных в работе [7], показаны в качестве примера на рис. 4. Можно отметить хорошее согласие расчета с температурами ликвидуса, полученными по изломам на кривых ЭДС [7]. Особенно для богатых палладием разрезов. Поскольку эти данные не были включены в оптимизацию, такое согласие служит дополнительным подтверждением корректности полученного в настоящей работе описания.

Таблица 1. Параметры моделей фаз системы Ag–Pd–Sn

Фаза	Модель	Параметр (Дж/моль)
LIQUID	$(Ag, Pd, Sn)_1$	${}^0L_{Ag,Pd,Sn} = -232895 + 54T$
		${}^1L_{Ag,Pd,Sn} = -145919 + 28T$
		${}^2L_{Ag,Pd,Sn} = -92680 + 35T$
FCC_A1	$(Ag, Pd, Sn)_1(Va)_1$	${}^0L_{Ag,Pd,Sn:Va} = -709200 + 400T$
		${}^1L_{Ag,Pd,Sn:Va} = -709200 + 400T$
		${}^2L_{Ag,Pd,Sn:Va} = +250000$
Pd_3Sn	$(Ag, Pd, Sn)_{0.75}(Ag, Pd, Sn)_{0.25}$	$G_{Ag:Ag} = +13000 + GHSERAG$
		$G_{Ag:Sn} = +6000 + 0.75\ GHSERAG + 0.25\ GHSERSN$
		$G_{Sn:Ag} = +6000 + 0.75\ GHSERSN + 0.25\ GHSERAG$
		$G_{Ag:Pd} = +1000 + 0.75\ GHSERAG + 0.25\ GHSERPD$
		$G_{Pd:Ag} = +4500 + 0.75\ GHSERPD + 0.25\ GHSERAG$
		${}^0L_{Ag,Pd:Sn} = -45440 + 36.67T$
		${}^0L_{Pd:Ag,Sn} = -17100$
		${}^0L_{Ag,Pd:Ag,Sn} = +43800 - 143.33T$
		${}^1L_{Ag,Pd:Ag,Sn} = +195800 - 166.67T$
		${}^2L_{Ag,Pd:Ag,Sn} = +0$
τ_1	$(Ag, Pd)_4(Ag, Sn)_1$	$G_{Ag:Ag} = +1000 + 5\ GHSERAG$
		$G_{Ag:Sn} = +1000 + 4\ GHSERAG + GHSERSN$
		$G_{Pd:Sn} = -40700 + 37.5T + 4\ GHSERPD + GHSERSN$
		${}^0L_{Ag,Pd:Sn} = -161533 + 66.667T$
		${}^1L_{Ag,Pd:Sn} = +83650 - 50T$
		${}^2L_{Ag,Pd:Sn} = +0$
		${}^0L_{Pd:Ag,Sn} = -83650 + 50T$
γ-$Pd_{2-x}Sn$	$(Ag, Pd)_1(Sn)_1(Ag, Pd, Va)_1$	$G_{Ag:Sn:Ag} = +90000 + 2\ GHSERAG + GHSERSN$
		$G_{Ag:Sn:Va} = +90000 + GHSERAG + GHSERSN$
		$G_{Ag:Sn:Pd} = -108650 + 50T + GHSERAG + GHSERSN + GHSERPD$
		${}^0L_{Ag,Pd:Sn:Ag} = -60000$
		${}^0L_{Ag,Pd:Sn:Pd} = -80000$
		${}^0L_{Ag:Sn:Pd,Va} = -60000$
Pd_2Sn	$(Pd)_2(Ag, Sn)_1$	$G_{Pd:Sn} = -218892 + 487.02T - 88.2326772T\ln(T) + 324533.633T^{-1} + 0.0194631T^2 - 6.489984E{-}6T^3$
		$G_{Pd:Ag} = 2\ GHSERPD + GHSERAG$
		${}^0L_{Pd:Ag,Sn} = -93770 + 33.33T$

На основании всего изложенного можно сделать вывод, что наилучшее совпадение расчетных и экспериментальных результатов достигается в системе Ag–Pd–Sn в областях, богатых палладием и оловом. Термодинамические свойства и фазовые равновесия в серебряной части системы описываются несколько хуже.

Появление фиктивных областей расслоения расплава и ГЦК твердого раствора в процессе поиска параметров моделей фаз можно объяснить тем, что в двойной системе Pd–Sn эти фазы описываются полиномами высокой степени. В частности, модель расплава содержит параметр ${}^3L(Pd,Sn)$. Кроме того, когда взаимодействие в

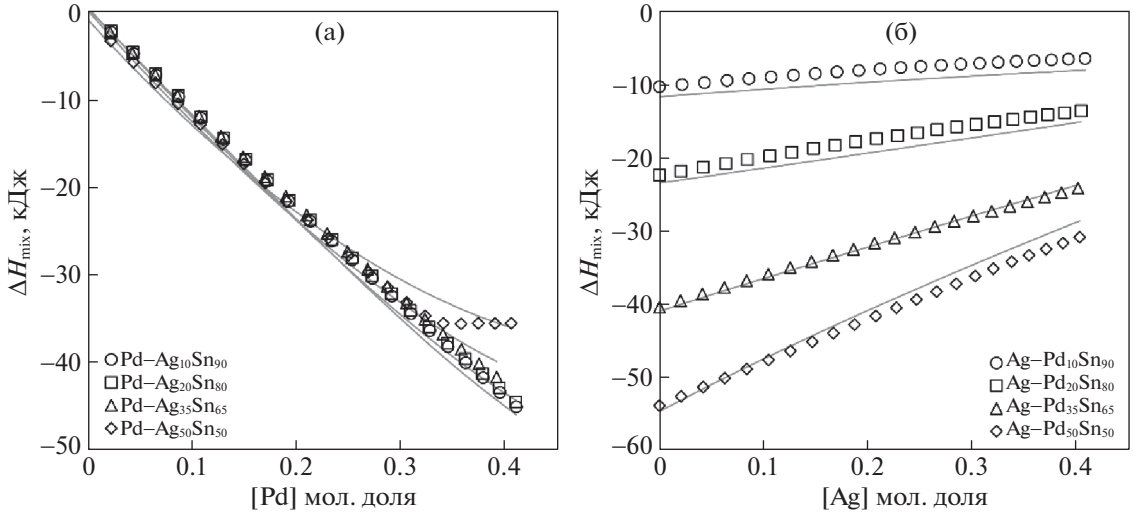

Рис. 2. Сравнение рассчитанных энтальпий образования расплава (линии) с соответствующими экспериментальными данными [8] по разрезам: Pd–Ag$_{10}$Sn$_{90}$, Pd–Ag$_{20}$Sn$_{80}$, Pd–Ag$_{35}$Sn$_{65}$, Pd–Ag$_{50}$Sn$_{50}$ (а); Ag–Pd$_{10}$Sn$_{90}$, Ag–Pd$_{20}$Sn$_{80}$, Ag–Pd$_{35}$Sn$_{65}$, Ag–Pd$_{50}$Sn$_{50}$ (б).

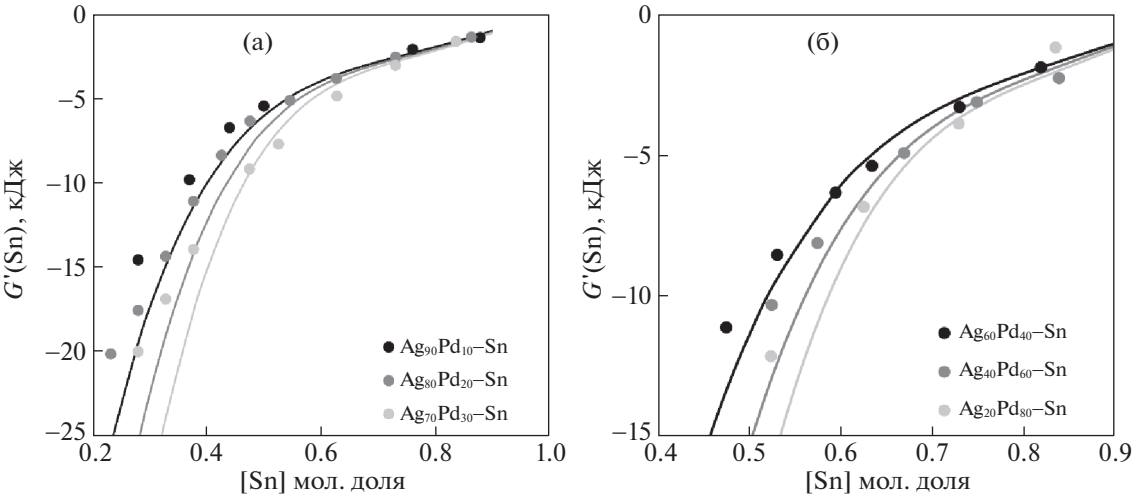

Рис. 3. Экспериментальные [7] (кружки) и рассчитанные (линии) парциальные энергии Гиббса олова по разрезам: Pd/Ag = 10/90, Pd/Ag = 20/80, Pd/Ag = 30/70 (а); Pd/Ag = 40/60, Pd/Ag = 60/40, Pd/Ag = 80/20(б).

одной из двойных систем, ограничивающих тройную, намного сильнее, чем в двух других, избежать появления фиктивного расслоения в рамках модели РКМ очень трудно [20]. Возможно, что использование для расплава модели ассоциированных растворов [14] или модифицированной квазихимической модели [21] позволит улучшить расчет системы.

Таким образом, в настоящем исследовании был выполнен CALPHAD-расчет системы Ag–Pd–Sn на основании экспериментальных данных по фазовым равновесиям [6] и энтальпиям образования расплава [8]. Результаты измерения парциальной энергии Гиббса олова в расплаве [7] пришлось исключить из процесса оптимизации, поскольку это приводило к образованию фиктивных областей расслоения расплава и ГЦК твердого раствора.

Полученные параметры моделей фаз достаточно хорошо воспроизводят экспериментальные изотермические сечения системы Ag–Pd–Sn при 500 и 800°C, а также энтальпии смешения расплава и парциальные энергии Гиббса олова [7, 8]. Несколько худшее согласие расчета с экспериментом как по фазовым равновесиям, так и по термодинамическим свойствам фаз наблюдается в части системы, богатой серебром. Следует отметить, что окончательные значения параметров

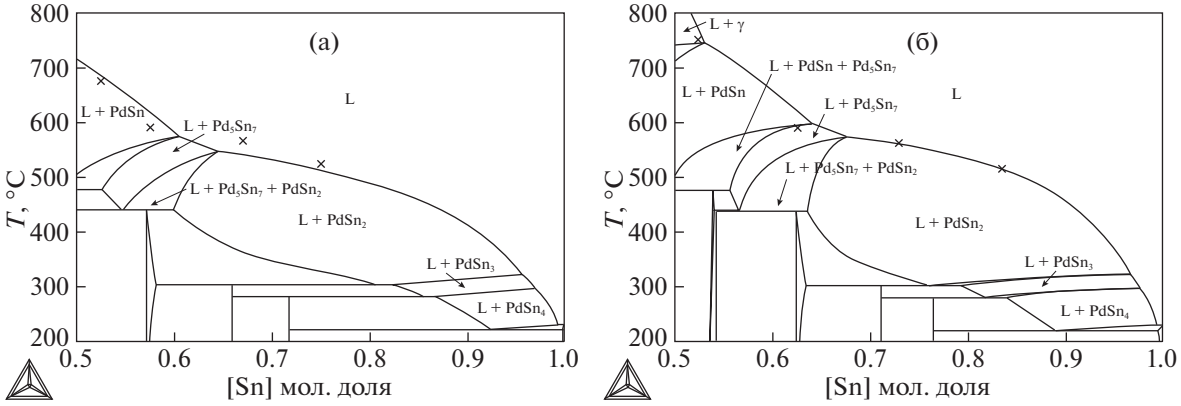

Рис. 4. Рассчитанные политермические разрезы системы Ag–Pd–Sn Pd/Ag = 60/40(а), Pd/Ag = 80/20(б); крестики – экспериментальные данные [7].

моделей фаз являются результатом некоторого компромисса, который позволил добиться в целом хорошего описания системы Ag–Pd–Sn и избежать появления фиктивных областей расслоения в расплаве и ГЦК-фазе.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00565, https://rscf.ru/project/22-23-00565/

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Shin H.-J., Kwon Y.H., Seol H.-J.* // J. Mech. Behav. Biomed. Mater. 2020. V. 107. P. 103728. https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2020.103728
2. *Zhang R., Peng M., Ling L. et al.* // Chem. Eng. Sci. 2019. V. 199. P. 64–78. https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.01.018
3. *Zerdoumi R., Armbrüster M.* // ACS Appl. Energy Mater. 2021. V. 4. № 10. P. 11279. https://doi.org/10.1021/acsaem.1c02119
4. *Lee C.Y., Yang S.P., Yang C.H. et al.* // Surf. Coat. Technol. 2020. V. 395. P. 125879. https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2020.125879
5. *Sundman B., Lukas H.L., Fries S.G.* Computational Thermodynamics: The Calphad Method. New York: Cambridge University Press, 2007. C. 313.
6. *Pavlenko A.S., Ptashkina E.A., Kabanova E.G. et al.* // Calphad. 2023. V. 81. P. 102533. https://doi.org/10.1016/j.calphad.2023.102533
7. *Laurie G.H., Pratt. J.N.* // J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1964. V. 60. P. 1391–1401. https://doi.org/10.1039/TF9646001391
8. *Luef C., Paul A., Flandorfer H. et al.* // J. Alloys Compd. 2005. V. 391. P. 67–76. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2004.08.056
9. *Pavlenko A.S., Kabanova E.G., Kuznetsov V.N.* // Russ. J. Phys. Chem. A. 2020. V. 94. № 13. P. 2691. https://doi.org/10.1134/s0036024420130178
10. Thermo-Calc Software PURE5/SGTE Pure Element Database. https://thermocalc.com/about-us/methodology/the-calphad-methodology/assessment-of-thermodynamic-data/
11. *Ghosh G., Kantner C., Olson G.B.* // J. Phase Equilibria. 1999. V. 20. № 3. 295. https://doi.org/10.1361/105497199770335811
12. *Gierlotka W., Huang Y.C., Chen S.W.* // Metall. Mater. Trans. A. 2008. V. 39. № 13. P. 3199. https://doi.org/10.1007/s11661-008-9671-6
13. *Vassilev G., Gandova V., Milcheva N. et al.* // Calphad. 2013. V. 43. P. 133. https://doi.org/10.1016/j.calphad.2013.03.003
14. *Cui S., Wang J., You Z. et al.* // Intermetallics. 2020. V. 126. P. 106945. https://doi.org/10.1016/j.intermet.2020.106945
15. *Redlich O., Kister A.T.* // Ind. Eng. Chem. 1948. V. 40. № 2. P. 345. https://doi.org/10.1021/ie50458a036
16. *Toop G.W.* // Trans. Metall. Soc. AIME. 1965. V. 233. № 5. P. 850.
17. *Andersson J.-O., Helander T., Höglund L. et al.* // Calphad. 2002. V. 26. № 2. P. 273. https://doi.org/10.1016/s0364-5916(02)00037-8
18. *Pavlenko A.S., Ptashkina E.A., Zhmurko G.P. et al.* // Rus. J. Phys. Chem. A. 2023. V. 97. P. 42. https://doi.org/10.1134/S0036024423010235
19. *Pavlenko A.S., Kabanova E.G., Kareva M.A. et al.* // Materials. 2023. V. 16. № 4. P. 1690. https://doi.org/10.3390/ma16041690
20. *Kuznetsov V.N., Kabanova E.G.* // Calphad. 2015. V. 100. № 51. P. 346. https://doi.org/10.1016/j.calphad.2015.01.011
21. *Cui S., Wang J., Jung I.H.* // Metall. Mater. Trans. A: Phys. Metall. Mater. Sci. 2022. V. 53. № 12. P. 4296. https://doi.org/10.1007/s11661-022-06825-9