

СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФУЗИЯ

УДК 536.4

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ В КВАЗИДВУХФАЗНОЙ МОДЕЛИ

© 2023 г. С. В. Терехов*

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, ул. Р. Люксембург, 72, Донецк, 283048 Россия
*e-mail: svlter@yandex.ru

Поступила в редакцию 24.08.2023 г.
После доработки 28.09.2023 г.
Принята к публикации 29.09.2023 г.

Продемонстрирована применимость модели двухфазной локально-равновесной области для расчета температурных зависимостей теплоемкости, коэффициентов линейного теплового расширения и температуропроводности различных металлов. Показано, что предложенные соотношения позволяют описывать возрастание термической характеристики при увеличении температуры и ее изменения, связанные с реализацией фазового перехода. Указано на возможность экстраполяции установленных зависимостей в экспериментально неисследованные области. Относительная простота установленных соотношений, определенный универсализм модели при описании различных твердых веществ и наглядность полученных теоретических результатов позволяют надеяться на использование модели в инженерно-технических расчетах.

Ключевые слова: потенциал Гиббса, фазовый состав, химический потенциал, теплоемкость, металл
DOI: 10.31857/S0015323023601666, **EDN:** ZHWYVT

ВВЕДЕНИЕ

Свойства металлов изменяются при уменьшении хотя бы одного из геометрических размеров до нанометрового уровня; легировании; применении механических, тепловых и других внешних воздействий [1–4]. Помимо этого, необходимость снижения материальных, энергетических и временных затрат при разработке оптимальных технологий термической обработки и эксплуатации готовых изделий в условиях смены температурных режимов требует теоретических знаний о теплофизических свойствах металлов. К ним относятся: теплоемкость C_p , коэффициент линейного (объемного) теплового расширения α , теплопроводность λ и температуропроводность a .

Достоверный теоретический расчет этих величин должен базироваться на использовании согласующихся между собой экспериментальных данных [5–13]. Это позволит в дальнейшем экстраполировать построенные кривые на интервалы температур, для которых измерения не проводили. Кроме того, используемая модель должна адекватно описывать металлы с различными физическими свойствами в диапазонах низких [5, 14] и высоких [6] температур.

Экспериментальные значения той или иной характеристики существенно зависят от используемого измерительного прибора, атмосферы в нем, чистоты образца, его предварительной обработки, наличия в нем летучих примесей, зарожде-

ния метастабильных фаз в подсистемах квазичастиц металла и т.д. Помимо этого в исследуемом металле могут протекать кинетические процессы [15], которые связаны с атомными перестройками, неоднородностями в распределении вакансий и дефектов, эффектами в диффузионной зоне, подвижностью межзеренных границ и т.п. Указанные явления и процессы могут сопровождаться тепловыми эффектами, которые суммируются измерительным прибором, что приводит к различиям в массивах данных, полученных разными авторами (см., напр., для вольфрама [12] или железа [16]). Теоретическое описание температурного поведения, в частности, теплоемкости с использованием фоновых моделей Эйнштейна и Дебая (см. для меди [17, с. 234 и с. 242]) приводит к существенным расхождениям между экспериментальными данными и теоретической кривой. Модели расчета тепловых характеристик с применением функций Эйнштейна и Дебая [18] используют на разных температурных интервалах отличающиеся друг от друга функциональные зависимости [19]. Аналогичные действия выполняют экспериментаторы: для сглаживания данных они применяют аппроксимационные полиномы по температуре [20, 21]. С физической точки зрения такие подходы к обозначенной проблеме нельзя считать удовлетворительными.

В этой связи была предложена модель двухфазной локально-равновесной области, которая впервые была применена к описанию темпера-

турной зависимости объемной доли кристаллической фазы аморфного сплава [22], а затем для расчета различных характеристик и тепловых свойств твердых веществ [23–25]. Универсальность полученных соотношений, адекватно описывающих поведение различных характеристик, позволяет определить цели данной работы:

– расчет теплофизических свойств металлов из разных групп Периодической системы;

– экстраполяция полученных зависимостей на экспериментально неисследованные температурные диапазоны.

Отметим, что все чистые металлы являются однофазными системами. Однако наличие в них помимо электронной и атомарной подсистем квазичастиц различного вида (вакансии, фононы, магноны и т.п.) может приводить к образованию в локальной области (кристаллите) сосуществующих квазифаз. Они отличаются друг от друга некоторым параметром порядка, например, разностью объемных долей квазифаз. Это позволяет использовать математический аппарат работы [22] для аппроксимации тепловых свойств металлов.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛА

В дальнейшем под локальными характеристиками будем понимать значения термодинамических величин в выбранной точке и ее малой окрестности. Субстанциональные свойства определяются совокупностью всех точек с учетом перехода от точки к точке. В первом случае величины вычисляются с использованием частных производных, а во втором – с применением полной производной от характеристической функции. Множество точек, в которых термодинамические величины имеют практически неразличимые значения, образуют локальные области.

В силу того, что ряд необратимых процессов в металлическом образце протекают с очень малой скоростью, то он в целом находится в термодинамически неравновесном состоянии. Однако это не препятствует установлению равновесия в локальных областях. Пусть измеряется характеристика b , которая переносится (квази-) частицей с объемом ω и изменяется на расстоянии $L \sim b/|db/dr|$. Тогда характерный размер l_e локально-равновесной области удовлетворяет неравенству $\sqrt[3]{\omega} \ll l_e \ll L$. Обозначив через t_1 время протекания самого быстрого релаксационного процесса, через t_2 – время перехода образца к состоянию термодинамического равновесия, получим для времени установления локального равновесия t_e оценку: $t_1 \ll t_e \ll t_2$. Так как для твердых тел t_1 порядка 10^{-8} секунды, а время t_2 может исчисляться годами, то достижение локального равновесия малы-

ми областями происходит достаточно быстро. Поэтому к равновесным областям можно применить все соотношения классической термодинамики, при этом термодинамические величины и функции могут зависеть от времени и выбранной точки внутри системы.

Согласно модели [22], в локально-равновесной области сосуществуют две фазы, каждая из которых разбивается на N_i ($i = 1, 2$) ячеек с объемами ω_i ($i = 1, 2$). Ячейки (фазовые компоненты) между собой не взаимодействуют, что соответствует сосуществованию идеальных фаз. Если фаза 1 занимает объем V_1 , фаза 2 – V_2 , то объем системы V равен

$$\omega_1 N_1 + \omega_2 N_2 = V. \quad (1)$$

Разделив (1) на объем V , получим равенство

$$x_1 + x_2 = 1, \quad (2)$$

где $x_i = \omega_i N_i / V$ – объемная доля фазы $i = 1, 2$.

В работе [23] показано, что введение параметра порядка (равен разности между объемными долями фаз 1 и 2), минимизация по нему энергии Гиббса:

$$g = \mu_1 x_1 + \mu_2 x_2, \quad (3)$$

а также введение ряда вспомогательных ограничений приводит к следующему выражению для объемной доли $x_1 = x$ ($x_2 = 1 - x$) фазы 1:

$$x = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{th} \left(a \frac{T - T_x}{T} \right) \right]. \quad (4)$$

В формулах (3) и (4) использованы обозначения: μ_i – химические потенциалы идеальных фаз, которые задаются формулами:

$$\mu_i = \mu_{i0} + \theta \ln x_i, \quad (5)$$

μ_{i0} – стандартные значения химических потенциалов для каждой из фаз, $\theta = k_B T$, k_B – постоянная Больцмана, T – температура по шкале Кельвина, a и T_x – параметры модели.

1. Локальная теплоемкость. Классическое определение энтропии [26] при постоянном фазовом составе x приводит к выражению:

$$\sigma_x = -(\partial g / \partial T)_x = \sigma_1 + \sigma_2 x + \sigma_3, \quad (6)$$

где энтропии: стандартного состояния фазы 2 $\sigma_1 = -\partial \mu_{20} / \partial T$, различия стандартных состояний фаз $\sigma_2 = -\partial (\Delta \mu_0) / \partial T$ ($\Delta \mu_0 = \mu_{01} - \mu_{02}$) и смешения фаз $\sigma_3 = -k_B [x \ln x + (1 - x) \ln(1 - x)]$.

Локальная теплоемкость системы:

$$C_b = T(\partial \sigma_x / \partial T)_x = k_1 T + k_2 x. \quad (7)$$

В дальнейшем коэффициенты $k_1 = (\partial \sigma_1 / \partial T)_x$ и $k_2 = T(\partial \sigma_2 / \partial T)_x$ будем считать постоянными величинами. Формула (7) в пределах экспериментальной погрешности описывает температурную зависимость локальной теплоемкости вещества при учете вкладов “электронной” подсистемы

Таблица 1. Параметры и коэффициенты модели для расчета температурных зависимостей теплоемкостей металлов

Параметр	Металл								
	Al(III)	Bi(V)	W(VI)	Mg(II)	Cu(I)	Mo(VI)	Sn(IV)	Pb(IV)	Zn(II)
	Базисная линия								
a_0	0.56	0.73	0.85	0.68	0.74	0.83	0.45	0.79	0.56
T_x, K	148	43	98	112	99	112	64	29	88
$k_1 \times 10^4$	30	86	13	43	23	35	10	40	44
k_2	36.7	31.8	32.2	33.7	32.4	30.4	38.8	31.7	35.0
	Фазовый переход								
a_{01}	5.3	9.9	3.2	3.7	3.4	2.8	5.8	6.6	3.8
T_{x1}, K	900	426	3800	1112	1482	2895	460	601	830
k_{31}	1.5	1.2	12.9	2.2	2.1	10.4	1.9	0.3	1.23

(первое слагаемое в (7)) и изменения фазового состава образца. График локальной теплоемкости C_b будем называть базисной линией теплоемкости. Отметим, что слагаемые второго вида описывают также структурные переходы в подсистемах, которые приводят к появлению конечных скачков на базисной линии.

2. Субстанциональная теплоемкость. Применение полной производной позволяет вычислить субстанциональную энтропию σ образца, т.е.

$$\sigma = -(dg/dT) = -[(\partial g/\partial T)_x - (\partial g/\partial x)_T \partial(dx/dT)] = \sigma_x + \varepsilon_T u, \quad (8)$$

где энергия сосуществования фаз

$$\varepsilon_T = -\Delta\mu_0 - k_B T \ln[x/(1-x)], \quad (9)$$

$u = dx/dT$ – “скорость” изменения фазового состава x при тепловом переходе в новое состояние. Локальная энтропия (6) совпадает с ее субстанциональным аналогом (8) при выполнении равенства $\varepsilon_T = 0$, которое порождает формулу (4), т.е. при достижении локального равновесия с нулевым значением параметра порядка и равными составами фаз.

Таким образом, субстанциональная теплоемкость

$$C_p = T d\sigma/dT = T[(\partial\sigma/\partial T)_{x,u} + (\partial\sigma/\partial x)_{T,u} (dx/dT) + (\partial\sigma/\partial u)_{T,x} (du/dT)] = C_b + C_k + C_d, \quad (10)$$

Здесь C_b – локальная теплоемкость; “кинетическая” составляющая теплоемкости, отображающая перестройки подсистем,

$$C_k = \{2\xi_T - Tu/[x(1-x)]\} Tu = k_3 Tu, \quad (11)$$

$\xi_T = (\partial\varepsilon_T/\partial T)_{x,u}$, $k_3 = 2\xi_T - Tu/[x(1-x)]$ – “динамическая” компонента теплоемкости

$$C_d = T\varepsilon_T w, \quad (12)$$

где $w = du/dT$. При достижении локального равновесия ($\varepsilon_T = 0$) величина (12) обращается в нуль и расчетная формула приобретает вид:

$$C_p = C_b + C_k. \quad (13)$$

Отметим, что формула (11) при постоянном значении коэффициента k_3 описывает полиморфные превращения, агрегатные, магнитные и другие переходы. Они отображаются на температурной зависимости субстанциональной теплоемкости в виде пиков ($k_3 > 0$) или ям ($k_3 < 0$).

3. Коэффициент теплового расширения. Учитывая правило смешения [27, с. 325] и второе правило Грюнайзена [17, с. 14, формула (1.6)], которое устанавливает связь между теплоемкостью (13) и коэффициентом линейного теплового расширения (КЛТР) α_L двухфазной локально-равновесной области, получим при отсутствии фазовых переходов выражение:

$$\alpha_L \times 10^6 = q_1 T + q_2 x, \quad (14)$$

а при их наличии –

$$\alpha_L \times 10^6 = q_1 T + q_2 x + q_3 T u, \quad (15)$$

где коэффициенты q_1 , q_2 и q_3 считаем постоянными величинами.

4. Температуропроводность. Температуропроводность твердых тел a ($\text{м}^2/\text{с}$) вычисляется по формуле [28, формула (8.40)]:

$$a = \lambda/(c_p \rho), \quad (16)$$

где λ ($\text{Вт}/(\text{м К}) = \text{кг м}/(\text{с}^3 \text{К})$) – теплопроводность; $c_p = C_p/m_a$ ($\text{Дж}/(\text{кг К}) = \text{м}^2/(\text{с}^2 \text{К})$) – изобарная удельная теплоемкость; m_a ($\text{г}/\text{моль} = 10^{-3} \text{ кг}/\text{моль}$) – атомная масса металла; ρ ($\text{кг}/\text{м}^3$) – плотность.

СРАВНЕНИЕ ТЕОРИИ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Применим формулу (13) для расчета субстанциональных теплоемкостей металлов из разных групп (указаны в скобках ниже символа металла в табл. 1) Периодической системы. В табл. 1 приведены данные теоретической модели, а на рис. 1 и рис. 2 – графики теплоемкостей. Из рисунков видно, что предлагаемая модель адекватно описывает массивы экспериментальных данных по

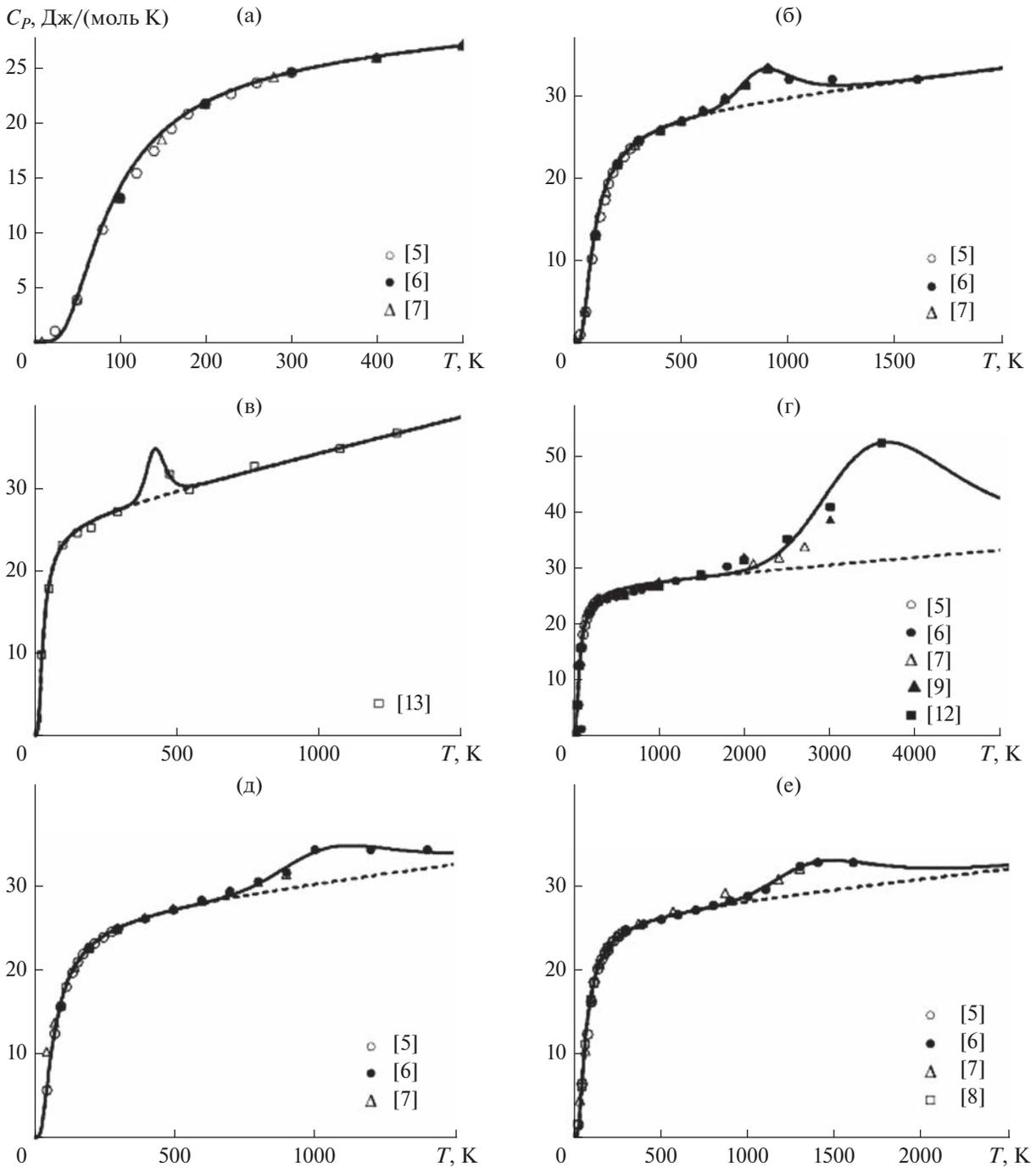


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости металлов: алюминий Al (а, б), висмут Bi (в), вольфрам W (г), магний Mg (д), медь Cu (е) (здесь и далее: штриховая – базисная линия, сплошная – кривая теплоемкости).

теплоемкостям различных металлов в диапазоне температур от 0 К до температуры плавления. Кроме того, с помощью модели проведена экстраполяция кривых на температурные интервалы, на которых экспериментальные исследования не проводили. Этот момент представляет интерес с целью проверки прогностических возможностей предлагаемой модели.

В табл. 2 приведены числовые значения величин, входящих в формулы (14) и (15), а на рис. 3 и рис. 4 – температурные зависимости коэффициентов линейного теплового расширения различных металлов Периодической системы.

Рисунки 1–4 демонстрируют достаточно хорошее совпадение теоретических и экспериментальных данных как в низко- (от 0 до 300 К,

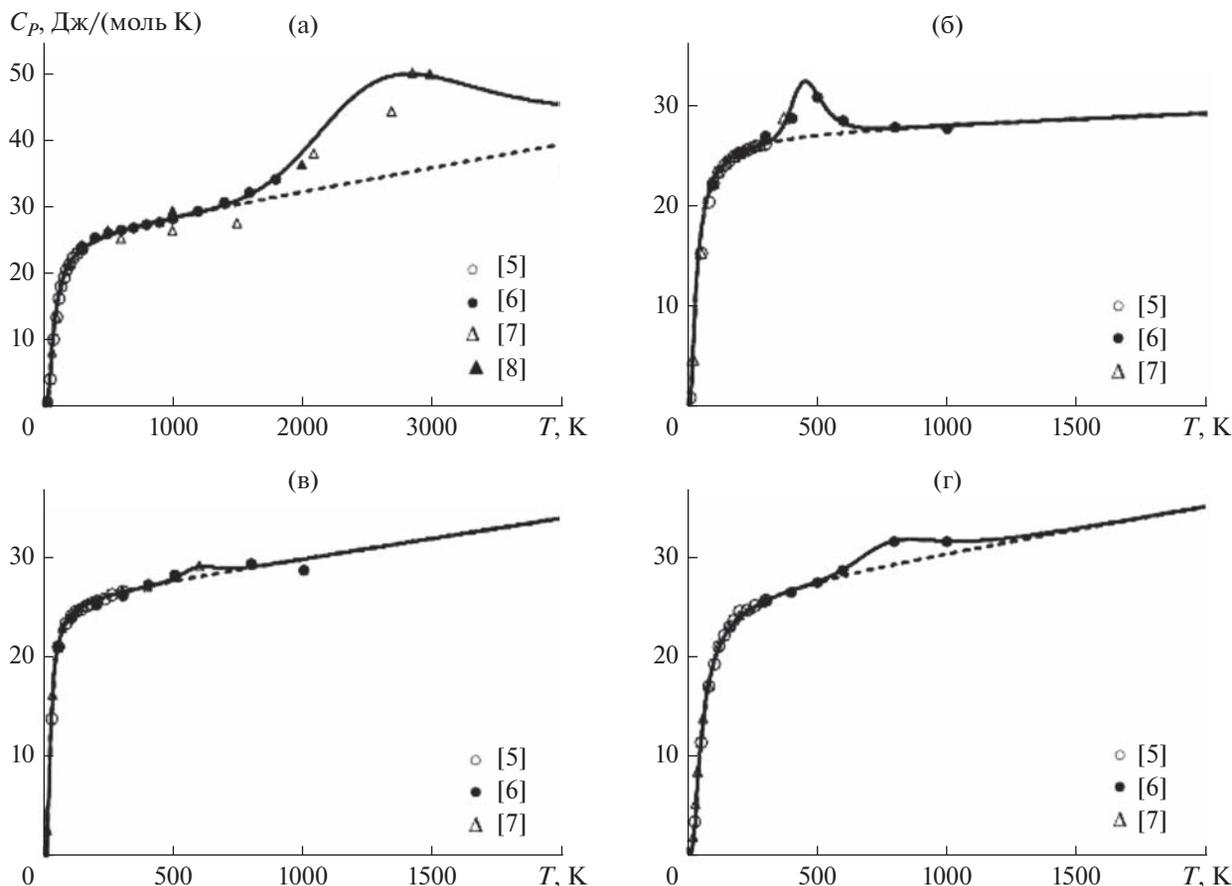


Рис. 2. Зависимости теплоемкости от температуры для металлов: молибден Mo (а), олово Sn (б), свинец Pb (в), цинк Zn (г).

рис. 1а), так и высокотемпературных (свыше 300 К) диапазонах (рис. 1б–1е, рис. 2–4). Они показывают возможность модели описывать температурные зависимости теплоемкостей и КЛТР металлов из различных групп Периодической системы как при наличии, так и при отсутствии фазовых переходов.

Таблица 3 (см. также [31, 32]) содержит в качестве примера сведения о теплофизических свойствах меди ($m_a = 63.55 \times 10^{-3}$ кг/моль; $\rho(293 \text{ К}) = 8960$ кг/м³ [29]) и ее температуропроводности, вычисленной по известным значениям теплопроводности меди при температурах от 100 до 1200 К. Три последних столбца в табл. 3 показывают сла-

Таблица 2. Теоретические параметры для расчета изобарических коэффициентов линейного теплового расширения металлов

Параметр	Металл								
	Al	Bi	W	Mg	Cu	Mo	Sn	Pb	Zn
Базисная линия									
a_0	0.6	0.78	0.78	0.73	0.76	1.03	0.81	0.85	0.85
T_{x0} , К	154	44	114	115	105	108	110	26	47
$q_1 \times 10^4$	90	0.7	0.7	67	20	15.6	80	90	170
q_2	32.0	17.1	6.1	32.99	22	5.9	31.6	31.6	31.6
Фазовый переход									
a_{01}	5.1	—	1.0	—	2.1	2.2	—	5.1	—
T_{x1} , К	900	—	4940	—	1463	2895	—	601	—
q_{31}	1.2	—	6.0	—	3.8	0.5	—	0.9	—

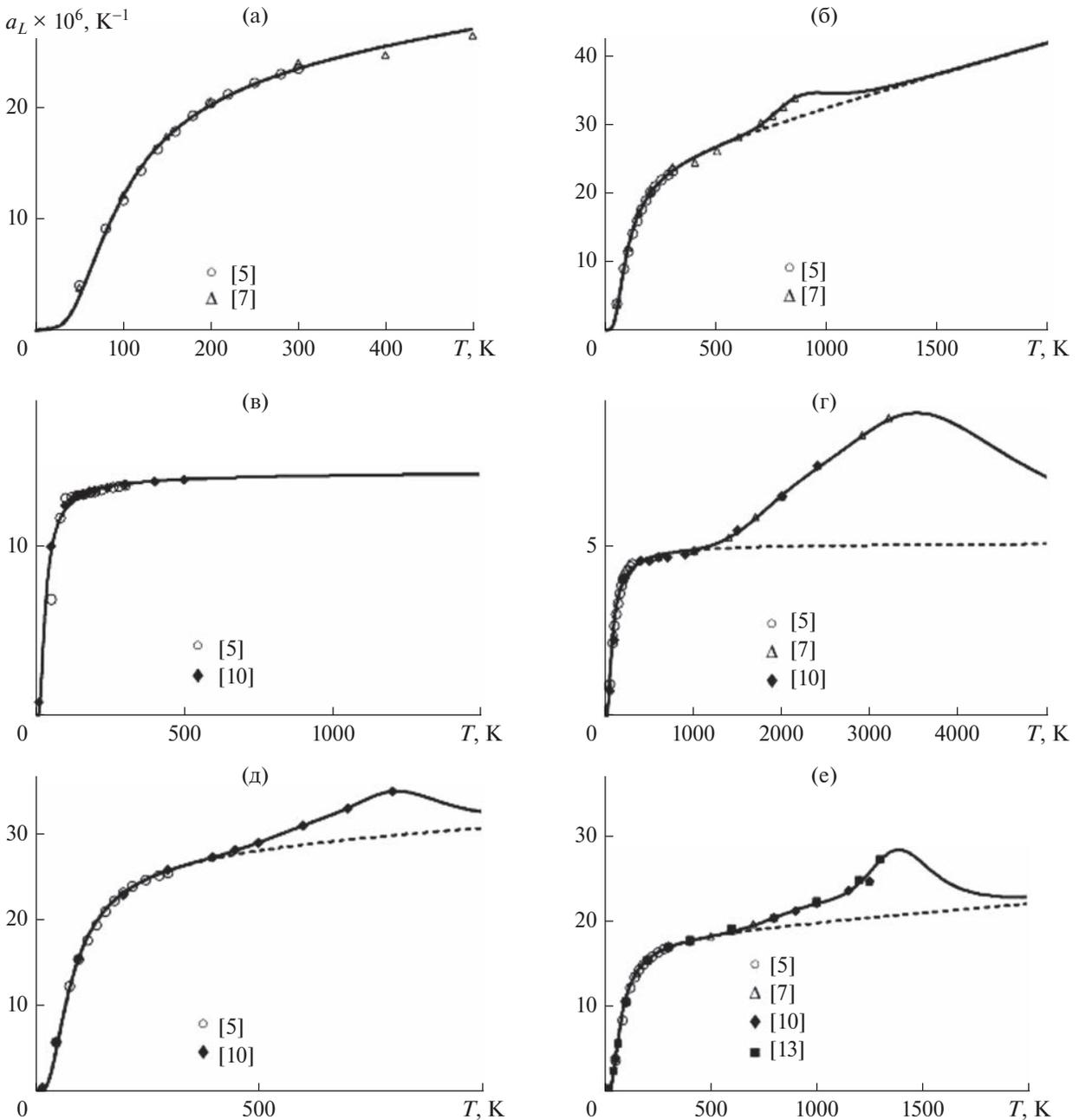


Рис. 3. Поведение коэффициентов линейного теплового расширения при изменении температуры металлов: алюминий Al (а, б), висмут Bi (в), вольфрам W (г), магний Mg (д), медь Cu (е).

бое отклонение вычисленных величин температуропроводности от приведенных в справочной литературе.

Несмотря на разброс экспериментальных данных для теплоемкости вольфрама (рис. 2г, табл. 4) и молибдена (рис. 3а, табл. 5), расчет их температуропроводности демонстрирует не только качественно верное поведение температурной зависимости, но и практически близкие значения теоретических и экспериментальных данных. Таким

образом, модель описывает температурное поведение теплоемкости, коэффициентов линейного теплового расширения и температуропроводности.

ВЫВОДЫ

1. Достаточно адекватное описание экспериментальных данных по температурной зависимости теплоемкости, коэффициентов линейного теплового расширения и температуропроводности металлов из различных групп Периодической

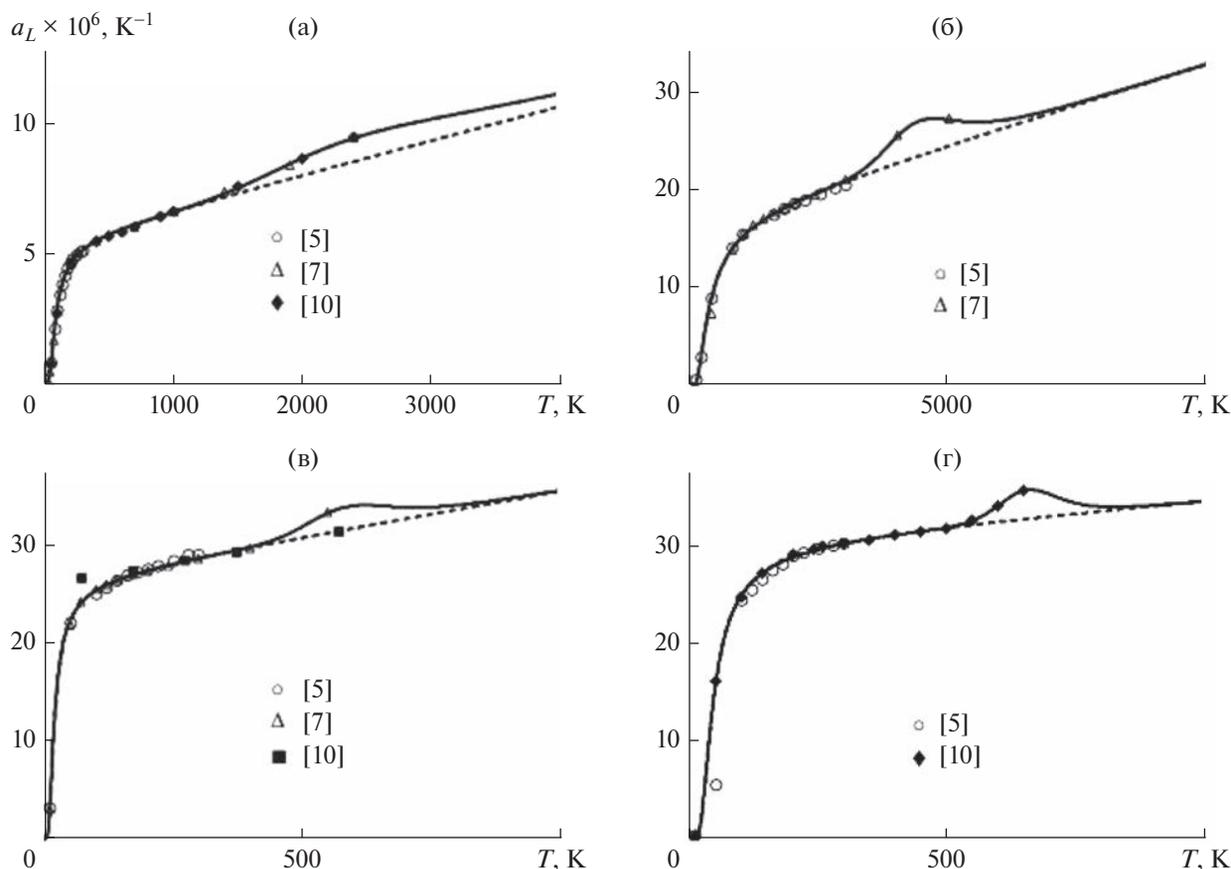


Рис. 4. Графики функциональной зависимости коэффициентов линейного теплового расширения от температуры для металлов: молибден Mo (а), олово Sn (б), свинец Pb (в), цинк Zn (г).

системы при наличии или отсутствии фазовых переходов показывает, что изменения в фоновой подсистеме не являются доминирующими. Эволюция внутреннего состояния образца определяется перестройками во всех подсистемах (ва-

кансионной, дефектной, магнетной и т.д.) металла и изменениями его фазового состава.

2. Реализация структурных, агрегатных и других переходов отображается с использованием не только частной, но и полной производной по

Таблица 3. Теплофизические свойства меди

T, K	λ [6]	c_p	$\alpha \times 10^6, K^{-1}$	ρ	$a \times 10^6$	$a \times 10^6$ [6]	$a \times 10^6$ [29]
100	482	261	10.78	9016	205.2	—	209
200	413	353	15.21	8998	129.9	130	129
300	401.9	383	16.63	8957	117.2	117	116
400	391.5	399	17.39	8910	110.3	111	112
500	385.4	409	17.94	8861	106.3	107	107
600	376.9	417	18.49	8810	102.6	103	103
700	369.7	424	19.21	8755	99.6	99.7	100
800	360.8	431	20.1	8694	96.3	96.3	97
900	355.3	439	21.02	8630	93.7	93.3	94
1000	349.2	452	21.76	8565	90.3	90.3	91
1200	327.5	488	24.13	8408	79.8	80.6	86

Таблица 4. Теплофизические свойства вольфрама $m_a = 183.85 \times 10^{-3}$ кг/моль; $\rho(293 \text{ К}) = 19350$ кг/м³ [30]

$T, \text{ К}$	λ [6]	c_p	$\alpha \times 10^6, \text{ К}^{-1}$	ρ	$a \times 10^6$	$a \times 10^6$ [6]	$a \times 10^6$ [29]
50	290 [10]	29	0.97	19364	516.44	—	—
100	208 [7]	90	2.74	19381	119.56	—	121
200	186 [7]	125	3.97	19371	76.98	—	77
300	162.8	135	4.38	19348	62.34	64	67
400	155.9	140	4.57	19322	57.64	59.6	61
500	145.9	143	4.69	19294	52.84	54.9	55
600	137.1	145	4.77	19265	48.96	51	51
700	130.2	147	4.82	19237	46	47.9	—
800	124.2	149	4.87	19208	43.5	45.2	45
900	120.2	150	4.9	19179	41.8	43.2	—
1000	116.6	151	4.94	19149	40.29	41.4	42
1200	113.5	153	5.06	19087	38.8	38.6	—
1400	111.2	155	5.29	19016	37.68	36.4	—
1600	110.1	157	5.64	18932	37.02	34.5	—

Таблица 5. Теплофизические свойства молибдена $m_a = 95.94 \times 10^{-3}$ кг/моль; $\rho(293 \text{ К}) = 10220$ кг/м³ [30]

$T, \text{ К}$	λ [6]	c_p	$\alpha \times 10^6, \text{ К}^{-1}$	ρ	$a \times 10^6$	$a \times 10^6$ [29]
50	—	38	0.71	10225	—	—
100	205 [10]	146	2.89	10237	136.83	—
200	169 [10]	221	4.55	10233	74.68	60
300	139.8	245	5.12	10219	55.82	54.8
400	136.1	258	5.46	10202	51.74	50.6
500	131.3	267	5.7	10184	48.36	47.6
600	126.1	274	5.9	10165	45.35	45
700	122.2	279	6.09	10145	43.11	43
800	118.2	285	6.25	10124	41	41
900	114.2	290	6.41	10102	39.03	38.8
1000	110.3	294	6.57	10079	37.18	37.2
1200	103.1	304	6.9	10032	33.85	33.6
1400	98.5	315	7.28	9979	31.38	30.8
1600	95.9	331	7.7	9920	29.2	28.5

температуре от фазовых составов подсистем. Отметим, что наличие на графиках асимметричных пиков может указывать на возникновение последовательности переходов в разных подсистемах.

3. Наличие в чистых металлах подсистем различных квазичастиц позволило ввести понятие сосуществующих квазифаз и реализовать удачную математическую аппроксимацию экспериментальных данных. Дальнейшее развитие предло-

женной модели должно установить связи указанных величин с такими справочными данными, как температуры и энтальпии переходов [31], температурой Дебая и т.п. Однако уже на данном этапе развития модели ее применимость для описания тепловых свойств металлов и неметаллов, оксидов и карбидов, кристаллических и аморфных сплавов [32] позволяет указать на некоторый универсализм модели.

4. В силу простоты полученных соотношений и возможности применения к расчету тепловых свойств широкого круга чистых компонентов и систем из них модель можно использовать при создании автоматизированных расчетных комплексов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Памятных Е.А.* Электронные квантовые волны в металлических нанопроволоках // ФММ. 2020. Т. 121. № 5. С. 451–453.
2. *Ганиев И.Н., Норова М.Т., Эшов Б.Б., Иброхимов Н.Ф., Иброхимов С.Ж.* Влияние добавок скандия на температурную зависимость теплоемкости и термодинамических функций алюминиево-магниевого сплава // ФММ. 2020. Т. 121. № 1. С. 25–31.
3. *Порсев В.Е., Улянов А.Л., Дорофеев Г.А.* Эволюция ближнего порядка в нанокристаллических механически активированных сплавах Fe–Cr в процессе отжига // ФММ. 2020. Т. 121. № 8. С. 862–869.
4. *Воскобойников Р.Е.* Моделирование первичных радиационных повреждений в никеле // ФММ. 2020. Т. 121. № 1. С. 18–24.
5. *Новицкий Л.А., Кожевников И.Г.* Теплофизические свойства материалов при низких температурах. Справочник. М.: Машиностроение, 1975. 216 с.
6. *Зиновьев В.Е.* Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989. 384 с.
7. *Лариков Л.Н., Юрченко Ю.Ф.* Структура и свойства металлов и сплавов. Тепловые свойства металлов и сплавов. Киев: Наукова думка, 1985. 437 с.
8. *Giauque W.F., Meads P.F.* The heat capacities and entropies of aluminum and copper from 15 to 300 K // J. Amer. Chem. Soc. 1941. V. 63. № 7. P. 1897–1901.
9. *Дорогокупец П.И., Соколова Т.С., Данилов Б.С., Литасов К.Д.* Почти абсолютные уравнения состояния алмаза, Ag, Al, Au, Cu, Mo, Nb, Pt, Ta, W для квазигидростатических условий // Геодинамика и тектонофизика. 2012. Т. 3. № 2. С. 129–166.
10. *Новикова С.И.* Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука, 1974. 292 с.
11. *Казанцев Е.И.* Промышленные печи. Справочное руководство для расчетов и проектирования. М.: Металлургия, 1975. 367 с.
12. *Бодряков В.Ю.* О корреляции температурных зависимостей теплового расширения и теплоемкости вплоть до точки плавления тугоплавкого металла: вольфрам // Теплофиз. высок. температур. 2015. Т. 53. № 5. С. 676.
13. *Свойства элементов.* Справочник. М.Е. Дриц (ред.). М.: Металлургия, 1985. 671 с.
14. *Gopal E.S.R.* Specific heats at low temperatures. New York: Plenum Press. 1966. 240 p.
15. *Бубнова Р.С., Филатов С.К.* Терморентгенография поликристаллов. Часть II. Определение количественных характеристик тензора термического расширения. Санкт-Петербург: С.-Пб. гос. ун-т, 2013. 142 с.
16. *Desai P.D.* Thermodynamic properties of iron and silicon // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1986. V. 15. № 3. P. 967–983.
17. *Stölen S., Grande T.* Chemical thermodynamics of materials: macroscopic and microscopic aspects. Chichester West Sussex: John Wiley & Sons Ltd, The Atrium. 2004. 396 p.
18. *Barron T.H.K., White G.K.* Heat capacity and thermal expansion at low temperatures. New York: Springer Science + Business Media, LLC. 1999. 338 p.
19. *Li Z., Mao H., Selleby M.* Thermodynamic modeling of pure Co accounting two magnetic states for the fcc phase // J. Phase Equil. Diffusion. 2018. № 39. P. 502–509.
20. *Ходаковский И.Л.* О новых полуэмпирических уравнениях температурной зависимости теплоемкости и объемного коэффициента термического расширения минералов // Вестник ОНЗ РАН. 2012. Т. 4. NZ9001.
21. *Денисова Л.Т., Каргин Ю.Ф., Иртыго Л.А., Белоусова Н.В., Белецкий В.В., Денисов В.М.* Теплоемкость $\text{In}_2\text{Ge}_2\text{O}_7$ и YInGe_2O_7 в области температур 320–1000 K // Неорганич. материалы. 2018. Т. 54. № 12. С. 1315–1320.
22. *Терехов С.В.* Термодинамическая модель размытого фазового перехода в металлическом стекле $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{V}_6$ // Физ. и техн. высоких давлений. 2018. Т. 28. № 1. С. 54–61.
23. *Терехов С.В.* Моно- и мультстадийная кристаллизация аморфных сплавов // ФММ. 2020. Т. 121. № 7. С. 731–736.
24. *Терехов С.В.* Тепловые свойства вещества в рамках модели двухфазной системы // ФТТ. 2022. Т. 64. № 8. С. 1077–1083.
25. *Терехов С.В.* Размытый фазовый переход и теплоемкость твердого тела // Физ. и техн. высок. давлений. 2022. Т. 32. № 2. С. 36–51.
26. *Кубо Р.* Термодинамика. М.: Мир, 1970. 304 с.
27. *Кингери У.Д.* Введение в керамику. М.: Стройиздат, 1967. 499 с.
28. *Чертов А.Г.* Единицы физических величин. М.: Высш. школа, 1977. 287 с.
29. *Шелудяк Ю.Е., Кашипов Л.Я., Малинин Л.А., Цалков В.Н.* Теплофизические свойства компонентов горючих систем / Справочник под ред. Н.А. Силина. М.: НПО “Информация и технико-экономические исследования”, 1992. 184 с.
30. *Физические величины.* Справочник / А.П. Бабищев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др. / Под. ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
31. *Терехов С.В.* Влияние фазовых переходов на температурные зависимости тепловых свойств вещества // Физ. и техн. высоких давлений. 2022. Т. 32. № 4. С. 41–50.
32. *Терехов С.В.* Теплоемкость и тепловое расширение вещества / Справочник. Донецк: ДонФТИ им. А.А. Галкина, 2022. 168 с.

Thermal Physical Properties of Metals in a Quasi-Two-Phase Model

S. V. Terekhov*

Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering, Donetsk, 283048 Russia

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

Abstract—The applicability of the model of a two-phase locally equilibrium region for calculating the temperature dependences of heat capacities, linear thermal expansion coefficients, and thermal diffusivities of various metals is demonstrated. It is shown that the proposed relations make it possible to describe the increase in the thermal characteristic with increasing temperature and its changes associated with the implementation of the phase transition. The possibility of extrapolating the established dependences to experimentally unexplored areas is indicated. The relative simplicity of the established relationships, a certain universality of the model in describing various solids, and the visibility of the theoretical results obtained give hope for the use of the model in engineering and technical calculations.

Keywords: Gibbs potential, phase composition, chemical potential, heat capacity, metal