



Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 544.344.3+546.831.4

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/10551>

Компьютерная модель изобарной фазовой диаграммы Cu–Ni–Mn: верификация интервалов кристаллизации и смены типа трехфазной реакции

А. Э. Зеленая✉, В. И. Луцык, В. Д. Балданов

Институт физического материаловедения Сибирского отделения РАН,
ул. Сахьяновой, 6, Улан-Удэ 670047, Россия

Аннотация

Цель статьи – показать возможности пространственных компьютерных моделей фазовых диаграмм в решении задач цифровизации материаловедения. Проведено исследование высокотемпературной части изобарной фазовой диаграммы системы Cu–Ni–Mn с учетом двух полиморфных модификаций марганца (δMn и γMn). Для лучшего понимания строения фазовой диаграммы на первом этапе разработан ее прототип с увеличенными температурными и концентрационными интервалами между бинарными точками с сохранением топологического строения, который затем модифицирован в модель фазовой диаграммы, соответствующей реальной системе. Фазовая диаграмма Cu–Mn–Ni выше 800 °C сформирована тремя парами поверхностей ликвидуса, солидуса и трансуса (верхняя «ликвидусная» и нижняя «солидусная» поверхности) и тремя линейчатыми поверхностями с горизонтальным расположением образующего сегмента.

Выявлен эффект смены перитектического ($L + \delta\text{Mn} \rightarrow \gamma\text{Mn}$) равновесия на метатектическое ($\delta\text{Mn} \rightarrow L + \gamma\text{Mn}$). Рассмотрены особенности кристаллизации при смене типа трехфазного превращения, построена поверхность смены знака приращения массы расплава и вертикальные материальные балансы для трехфазной области $L + \delta\text{Mn} + \gamma\text{Mn}$. Поверхность двухфазной реакции, на которой происходит смена типа трехфазного превращения, является линейчатой и определяется при помощи алгоритма расчета смены знака приращения массы жидкой фазы. При проецировании на треугольник составов трехфазная область с учетом поверхности смены типа трехфазной реакции разбивается на шесть концентрационных полей, четыре из которых различаются этапами кристаллизации и формируемым набором микроструктуры. Рассчитаны изотермические разрезы в диапазоне температур между двумя точками минимума, расположенными в системах Cu–Mn и Mn–Ni при нулевом интервале кристаллизации между долинами ликвидусной и солидусной поверхностей и с учетом интервала кристаллизации.

Пространственная модель фазовой диаграммы значительно расширяет возможности компьютерного дизайна материалов. В частности, получено решение задачи о смене типа трехфазной реакции, которое невозможно реализовать ни термодинамическими расчетами, ни расчетами из первых принципов.

Ключевые слова: фазовая диаграмма, компьютерное моделирование, система Cu–Ni–Mn, смена типа трехфазного превращения, интервал кристаллизации, микроструктура

Источник финансирования: исследование выполнено в соответствии с госзаданием ФГБУН ИФМ СО РАН, проект № 0270-2021-0002.

Для цитирования: Зеленая А. Э., Луцык В. И., Балданов В. Д. Компьютерная модель изобарной фазовой диаграммы Cu–Ni–Mn: верификация интервалов кристаллизации и смены типа трехфазной реакции. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2022;24(4): 466–474. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/10551>

For citation: Zelenaya A. E., Lutsyk V. I., Baldanov V. D. Computer model of Cu–Ni–Mn isobaric phase diagram: verification of crystallisation intervals and change of three-phase reaction type. *Condensed Matter and Interphases*. 2022;24(4): 466–474. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/10551>

✉ Зеленая Анна Эдуардовна, e-mail: zel_ann@mail.ru

© Зеленая А. Э., Луцык В. И., Балданов В. Д., 2022



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.

1. Введение

Информация о фазовых равновесиях в системе Cu–Mn–Ni имеет большое значение для создания высококачественных материалов и сплавов, обладающих высокими физико-механическими свойствами и коррозионной стойкостью. В работах [1–2] исследуется влияние добавления меди, никеля и марганца для создания сплавов с памятью формы, а также улучшения физических свойств таких сплавов при добавлении марганца. В работе [3] изучаются термоэлектрические свойства сплавов, основанных на системе Cu–Ni–Mn.

Высокотемпературная часть фазовых диаграмм бинарных систем Cu–Mn, Mn–Ni и Cu–Ni является достаточно хорошо изученной. Согласно обобщенным экспериментальным данным [4–5] в системе Cu–Mn образуется минимум на линиях ликвидуса и солидуса при 871 °C и 33.7 вес. % Mn. Также система характеризуется протеканием метатектической реакции с участием двух высокотемпературных полиморфных модификаций марганца δMn и γMn при 1099 °C: $\delta\text{Mn} \rightarrow \text{L} + \gamma\text{Mn}$. В работах [6–7] подробно проведено исследование в высокотемпературной части диаграммы, богатой марганцем, направленное на установление границ фазовых областей с δMn и γMn . Фазовые диаграммы, полученные при помощи методов термодинамического расчета [8–14], хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Система Mn–Ni имеет схожее строение в высокотемпературной части и также содержит точку минимума на линиях ликвидуса и солидуса при 1020 °C и 58.4 вес. % Mn, но в отличие от системы Cu–Mn переход от полиморфной формы δMn к γMn происходит по перитектической схеме при 1170 °C: $\text{L} + \delta\text{Mn} \rightarrow \gamma\text{Mn}$ [6, 15–16]. Данные экспериментального исследования подтверждаются результатами термодинамического расчета [8, 17–18]. Система Cu–Ni имеет самое простое топологическое строение и характеризуется образованием непрерывных рядов твердых растворов без экстремумов на линиях ликвидуса и солидуса [4–5, 8, 19–21].

Для тройной системы Cu–Mn–Ni в наиболее ранних работах [22–25] получены изотермы для поверхностей ликвидуса и солидуса в диапазоне температур 1440–800 °C и шесть изоэвтектик. Показан упрощенный вариант диаграммы с образованием непрерывных рядов твердых растворов между всеми компонентами и с отсутствием моновариантной линии, разделяющей поля начала

непрерывной кристаллизации твердых растворов на основе различных полиморфных модификаций марганца. При этом утверждается, что если провести линию, соединяющую точки минимума в бинарных системах Cu–Mn и Mn–Ni, то поверхности ликвидуса и солидуса будут соприкасаться вдоль этой линии [24].

Это предположение также было проанализировано графически на основе гипотетических фазовых диаграмм с неограниченной растворимостью компонентов и тройными точками минимума и максимума и соответствующими экстремумами во всех бинарных системах [26]. Показано, что в системах есть линии соприкосновения поверхностей ликвидуса и солидуса в направлении от бинарных экстремумов к тройному. Показаны изотермические разрезы с касанием изотерм ликвидуса и солидуса вдоль этих линий. При этом в точке касания изотерм ликвидуса и солидуса граничат как два фрагмента двухфазной области L + S, так и две однофазные области (L и S). Подобные разрезы характерны при сечении седловых поверхностей [27–28]. В [28] при обсуждении аналогичной диаграммы с максимумами автор говорит о соприкосновении поверхностей только в бинарных точках максимума и в тройной точке максимума. И на разрезе соприкосновению изотерм ликвидуса и солидуса соответствуют только бинарные точки максимума.

В работе [29] на примере системы Cu–Mn–Ni соприкосновение поверхностей ликвидуса и солидуса вдоль линии, соединяющей точки бинарных минимумов, было доказано при помощи правила фаз Гиббса. На примере изотермического сечения двухфазной области без учета касания поверхностей показано, что при допущении двух степеней свободы в равновесии находится две пары фаз, что противоречит правилу фаз Гиббса. В случае если изотермы ликвидуса и солидуса имеют точку касания с нулевым интервалом кристаллизации, то по утверждению авторов, нарушение правила фаз не происходит. Согласно расчетам [30] показано, что данная линия соприкосновения ликвидуса и солидуса между двумя точками минимума не является прямой. Экспериментальное подтверждение линии, соответствующей сплавам с нулевым интервалом кристаллизации в диапазоне концентраций (35–44 % Mn, 0–15 % Ni), проведено в работе [31]. Тогда как в более поздних исследованиях [32–33] доказана ошибочность утверждения о существовании линии соприкосновения поверхностей ликвидуса и солидуса на диаграмме Cu–Mn–Ni.

На основе данных ДТА с использованием метода регрессионного анализа рассчитаны уравнения поверхностей ликвидуса и солидуса для области фазовой диаграммы Cu–Ni–Mn от 0 до 20 % Ni и от 30 до 50 % Mn, показаны изотермы поверхностей и значения интервала кристаллизации для выбранного участка диаграммы. При этом разница температур между поверхностями ликвидуса и солидуса нарастает по мере удаления от бинарной системы Cu–Mn к центру диаграммы.

При помощи методов термодинамического расчета получена поверхность начала первичной кристаллизации на основе твердого раствора Cu(Ni) и изоплета, проведенная из Cu через середину системы Mn–Ni [34]. Авторами [25] проведен расчет уже обоих поверхностей ликвидуса, соответствующих Mn и Cu(Ni) и шести изоплет для высокотемпературной части диаграммы. Разрезы располагаются попарно параллельно бинарным сторонам. При этом на двух разрезах, расположенных параллельно бинарным системам Mn–Ni (при 20 % Cu) и Cu–Mn (при 20 % Ni), фиксируется соприкосновение линий разреза поверхностей ликвидуса и солидуса, на двух других аналогичных разрезах касания линий нет. Стоит отметить, что при обсуждении систем Cu–Ti–Zr [35] и Ti–TiMn₂–ZrMn₂–Zr [36], содержащих бинарные системы с минимумом, на изоплетах выявлены точки касания линий разреза на границе трехфазных областей с расплавом.

2. Компьютерная модель фазовой диаграммы системы Cu–Mn–Ni с учетом нулевого интервала кристаллизации

Разработана компьютерная модель высокотемпературной части фазовой диаграммы выше

800 °C. При построении компьютерной модели системы Cu–Mn–Ni (A–B–C) учитывалось образование двух высокотемпературных полиморфных модификаций марганца ($\delta\text{Mn} = \text{B}$, $\gamma\text{Mn} = \text{B1}$) и точек минимума в бинарных системах Cu–Mn (min_{AB}) и Mn–Ni (min_{BC}). Использовались данные о строении бинарных систем согласно справочнику [5] (табл. 1) и предположение о соприкосновении поверхностей ликвидуса и солидуса по линии, соединяющей бинарные минимумы [22–24, 26, 29–31]. В системе отсутствуют невариантные тройные точки с участием расплава, поэтому схема фазовых реакций имеет упрощенный вид (схема 1).

Разработка модели производилась на основе методологии сборки ее из фазовых областей и поверхностей с использованием авторских программных продуктов [37–38].

Высокотемпературная часть фазовой диаграммы системы Cu–Mn–Ni выше 800 °C сформирована тремя парами поверхностей ликвидуса, солидуса и трансуса (верхняя «ликвидусная» поверхность t_{B1}^{q} и нижняя «солидусная» поверхность t_{B1}^{s}), и тремя линейчатыми поверхностями с горизонтальным расположением образующего сегмента (табл. 2). Включает две однофазные (B, B1), три двухфазные (L + B(TP), L + B1(TP), B + B1) и одну трехфазную (L + B + B1) области (табл. 3). Обозначения B и B1 отвечают двум формам высокотемпературной аллотропии марганца. Поскольку точки на горизонтальных отрезках, соответствующие метатектической и перитектической реакциям, расположены очень близко, то первоначально был разработан прототип фазовой диаграммы, в котором точки разнесены по составам и температурам с сохранением топо-

Схема 1. Схема фазовых реакций с участием высокотемпературных аллотропов марганца

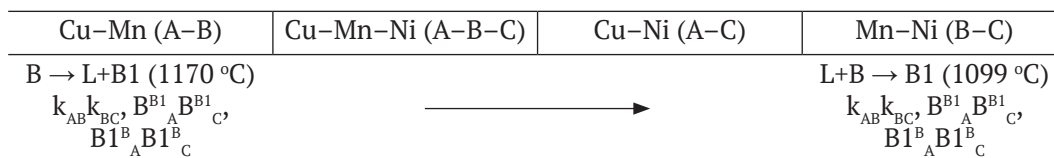


Таблица 1. Координаты точек на контуре поверхностей (z_i – весовые доли компонентов A, B и C)

	z_1	z_2	z_3	T		z_1	z_2	z_3	T
A = Cu	1	0	0	1084.87	k_{AB}	0.27	0.73	0	1099
B = Mn	0	1	0	1246	B_A^{B1}	0.142	0.858	0	1099
C = Ni	0	0	1	1455	B1_A^{B}	0.132	0.868	0	1099
B1	0	1	0	1143	k_{BC}	0	0.902	0.098	1170
min_{AB}	0.663	0.337	0	871	B_C^{B1}	0	0.963	0.037	1170
min_{BC}	0	0.584	0.416	1020	B1_C^{B}	0	0.942	0.058	1170

Таблица 2. Контурные поверхности

Символ	Контур	Символ	Контур
Ликвидус			
q_B	$Mn-k_{AB}-k_{BC}$	q_{AC}	$Cu-min_{AB}-k_{AB}-k_{BC}-min_{BC}-Ni$
Солидус			
s_B	$Mn-B_C^{B1}-B_A^{B1}$	s_{AC}	$Cu-min_{AB}-B_A^B-B_C^B-min_{BC}-Ni$
Трансус			
t_{B1}^q	$B1-B_C^{B1}-B_A^{B1}$	t_{B1}^s	$B1-B_A^B-B_C^B$
Линейчатые поверхности			
q_{AB}^r	$k_{AB}-k_{BC}-B_C^B-B_A^B$	s^r	$B1_A^B-B1_C^B-B_C^{B1}-B_A^{B1}$
q_{BA}^r	$k_{AB}-k_{BC}-B_C^{B1}-B_A$		

Таблица 3. Структура фазовых областей

Фазовые области	Поверхности	Фазовые области	Поверхности
L + B(TP)	q_B, s_B, q_{BA}^r	B	t_{B1}^q, t_B^s
L + B1(TP)	q_{AC}, s_{AC}, q_{AB}^r	B1	s_{AC}, t_B^s
L + B + B1	q_{AB}^r, q_{BA}^r, s^r	B + B1	t_B^q, t_B^s, s^r

логического строения (рис. 1а–б). Такой прототип дает возможность для более наглядного представления фазовой диаграммы, понимания строения фазовых областей и расшифровки разрезов. При введении в прототип координат реальных точек [5] (табл. 1) получаем окончательную модель фазовой диаграммы системы Cu–Mn–Ni (рис. 1в–г).

3. Результаты и обсуждение

3.1. Смена типа трехфазной реакции

На основе компьютерной модели в трехфазной области L + B + B1 выявлена смена перитектического превращения (L + B → B1) на метатектическое (B → L + B1). Трехфазная область L + B + B1 ограничена тремя линейчатыми поверхностями q_{AB}^r, q_{BA}^r и s^r (рис. 2а, в), при этом в проекции происходит перекрещивание их направляющих кривых линий $B_A^{B1}B_C^{B1}$ и $B_A^B B1_C^B$. Поверхность двухфазной реакции abc, на которой происходит смена типа трехфазного превращения, является линейчатой и определяется при помощи алгоритма расчета смены знака приращения массы фазы L [39–40]. На рис. 2 показана трехфазная область L + B + B1 с поверхностью смены типа трехфазного превращения abc для прототипа фазовой диаграммы (рис. 2а–б) и реальной системы Cu–Mn–Ni (рис. 2в–г). Эта поверхность разбивает фазовую область L + B + B1 на две части, в «верхней» ее части протекает перитектическая реакция L + B → B1, в «нижней» – метатектическая реакция B → L + B1 (рис. 2б, г).

Этот процесс наглядно демонстрируют диаграммы вертикального материального баланса (рис. 2д–е). Для прототипа центр масс обозначен как G_1 , для реальной системы – G_2 . Для обоих центров масс в трехфазной области L + B + B1 сначала происходит нарастание доли фаз B1 и уменьшение долей фаз L и B, что соответствует перитектической реакции L + B → B1. При 501.6 °C (рис. 2д) и 1130.71 °C (рис. 2е) происходит изменение знака приращения массы фазы L, то есть прекращается уменьшение доли фазы L и начинается ее рост, что отвечает уже метатектической реакции B → L+B1.

Концентрационная проекция трехфазной области L + B + B1, включающая поверхность смены типа трехфазного превращения abc, делится на шесть полей, четыре из которых различаются протекающими фазовыми превращениями и элементами микроструктуры (рис. 3, табл. 4). Поля 2, 3 и 6 характеризуются образованием первичных кристаллов B¹ и кристаллов B1^p, являющиеся результатом перитектической реакции. Поля 1 и 4 содержат первичные кристаллы B¹ и кристаллы B1^m, выделившиеся в результате метатектической реакции. Но поскольку эти два поля отличаются этапами кристаллизации, то поле 1 дополнительно включает первичные кристаллы B1^{ln}. Поле 5 помимо B¹, включает в свой набор микроструктуры как B1^p, так и B1^m, т. к. является поверхностью на которой происходит смена трехфазного превращения.

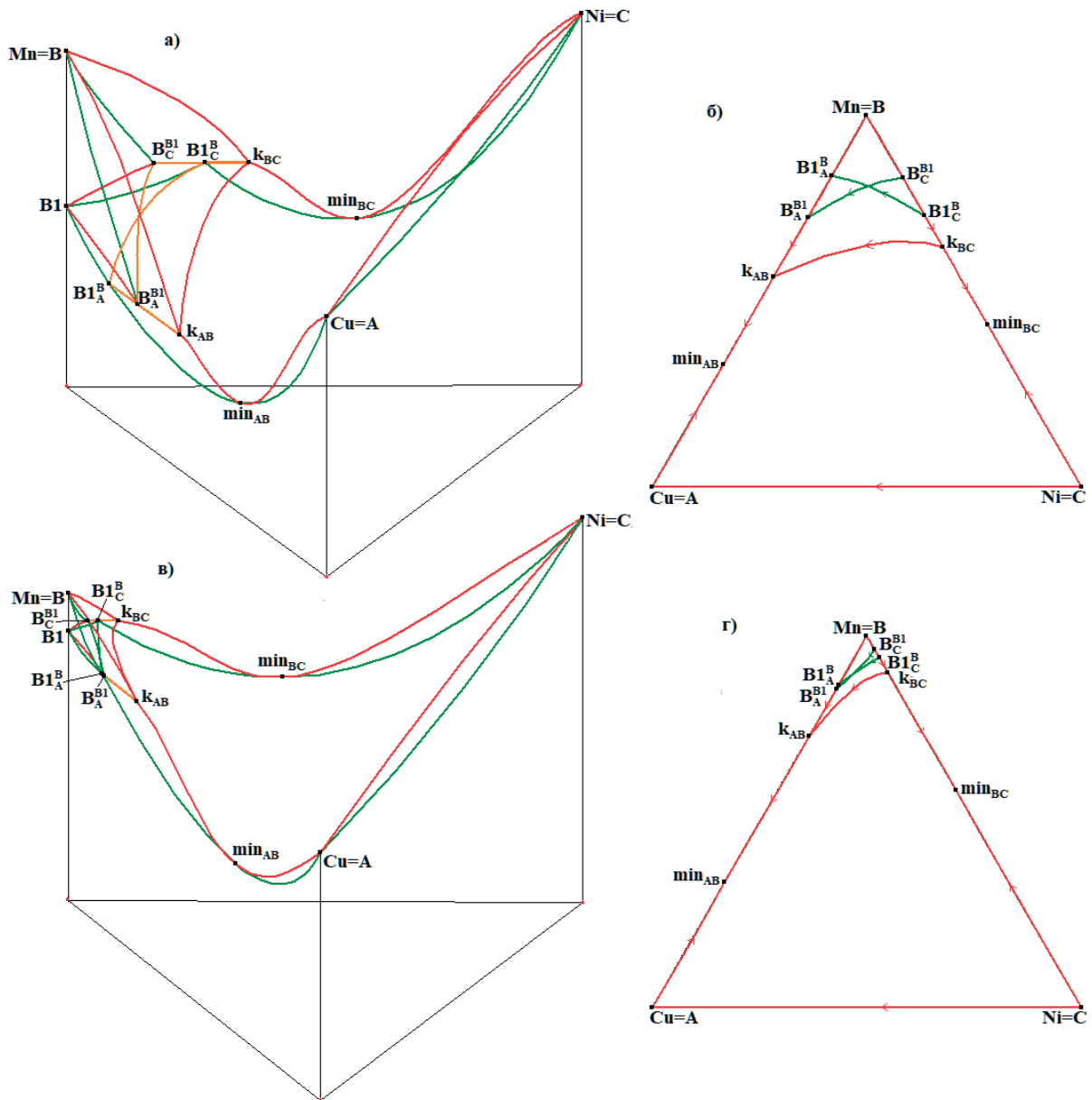


Рис. 1. 3D-модель и XY проекция прототипа (а-б) и реальной диаграммы Cu–Mn–Ni (в-г)

Таблица 4. Микроструктура, формирующаяся в трехфазной области L+B+B1*

Поле	Фазовые области	Схема фазовых реакций	Микроструктура
1	L + B(ТР)	$L^1 \rightarrow B^1$,	B^1 ,
	B	$B^1 \rightarrow B1^{1n}$,	$B1^{1n}$,
	B + B1	$B^m \rightarrow L^m + B1^m$	$B1^m$
2, 3, 6	L + B(ТР)	$L^1 \rightarrow B^1$,	B^1 ,
	L + B + B1	$L^p + B \rightarrow B1^p$	$B1^p$
4	L + B(ТР)	$L^1 \rightarrow B^1$,	B^1 ,
	L + B + B1	$B^m \rightarrow L^m + B1^m$	$B1^m$
5	L + B(ТР)	$L^1 \rightarrow B^1$,	B^1 ,
	L + B + B1	$L^p + B \rightarrow B1^p$	$B1^p$,
		$B^m \rightarrow L^m + B1^m$	$B1^m$

* 1 – первичная кристаллизация, 1n – первичная постперитектическая кристаллизация, p – перитектическая реакция, m – метатектическая реакция.

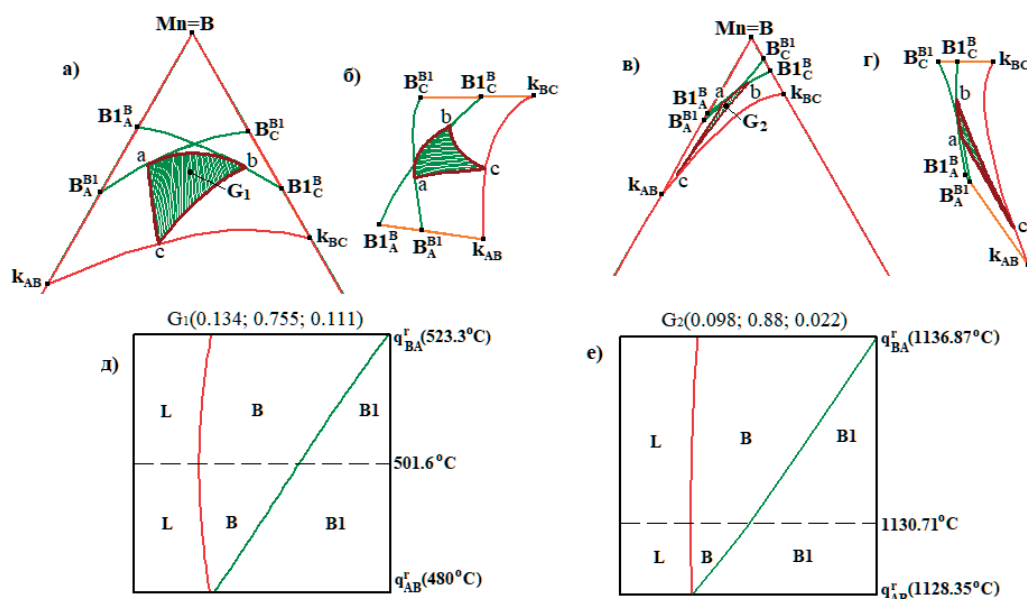


Рис. 2. XY проекция и 3D модель поверхности смены типа трехфазного превращения в фазовой области L+B+V1 для прототипа (а-б) и реальной системы (в-г); расчет диаграмм вертикального материального баланса для центров масс G₁(д) и G₂(е)

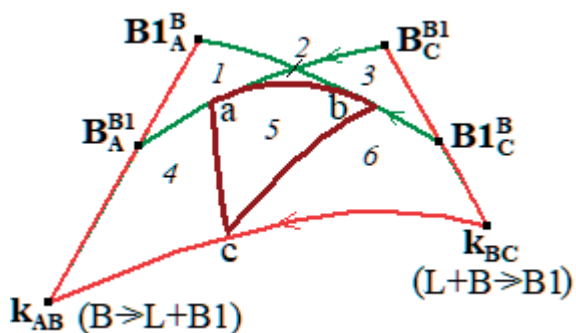


Рис. 3. Проекция трехфазной области L+B+V1 с разбиением на концентрационные поля

3.2. Расчет изотермических разрезов

Расчет изотермических разрезов на основе прототипа в интервале температур между двумя точками минимума \min_{AB} и \min_{BC} показан на рис. 4. На разрезе, совпадающем с температурой точки минимума \min_{BC} (рис. 4а), изотермы ликвидуса и солидуса соприкасаются в этой точке. По мере понижения температуры изотермы ликвидуса и солидуса постепенно приближаются к минимуму \min_{AB} . Поскольку модель строилась с учетом нулевого интервала кристаллизации, то происходит касание изотерм вдоль линии $\min_{AB} \min_{BC}$ (рис. 4б-д). Точка соприкосновения изотерм ликвидуса и солидуса является общей границей между однофазными областями L и B1 и двумя фрагментами двухфазной обла-

сти L+B1(ТР). При температуре минимума \min_{AB} изотермы сольются в точку, и на разрезе останется только одна фаза B1.

Поскольку остается спорным вопрос об интервале кристаллизации вдоль линии соединяющей точки минимума, то была разработана дополнительно модель фазовой диаграммы системы Cu-Mn-Ni с не нулевым значением интервалом кристаллизации вдоль линии $\min_{AB} \min_{BC}$. Изотермический разрез для такого варианта диаграммы представлен на рис. 4е. При этом однофазные области, отвечающие расплаву L и твердой фазе B1 разделяются двухфазной областью L+B1(ТР).

4. Выводы

Разработана компьютерная модель фазовой диаграммы системы Cu-Mn-Ni выше 800 °С. Высокотемпературная часть диаграммы включает 9 поверхностей и 6 фазовых областей. Выявлено, что в трехфазной области L+B+V1 происходит смена перитектического равновесия на монотектическое, подтверждаемая расчетом диаграмм материального баланса. При проецировании на треугольник составов трехфазная область с учетом поверхности смены типа трехфазной реакции разбивается на шесть концентрационных полей, четыре из которых различаются этапами кристаллизации и формируемым набором микроструктуры. На основе прототипа фазовой

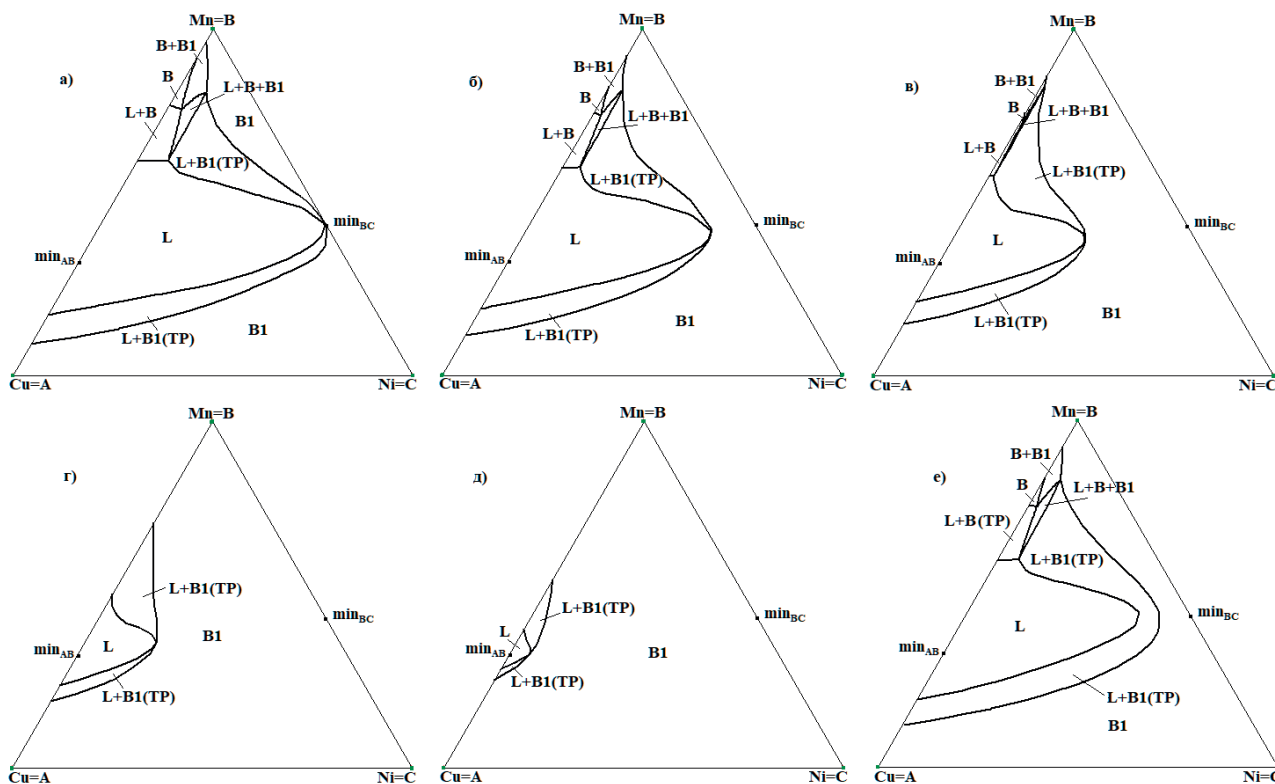


Рис. 4. Изотермические разрезы для прототипа фазовой диаграммы с нулевым интервалом кристаллизации вдоль линии $\min_{AB} \min_{BC}$ при $T_{\min_{BC}} = 450$ °C (а), 414 °C (б), 376 °C (в), 338 °C (г), 310 °C (д); изотермический разрез при 414 °C при наличии интервала кристаллизации (е)

диаграммы проведен расчет изотермических разрезов в диапазоне температур между двумя точками минимума в бинарных системах Cu–Mn и Mn–Ni. С учетом интервала кристаллизации на разрезах двухфазная область $L + B1(TP)$ разделяет однофазные области L и $B1$. При нулевом интервале кристаллизации вдоль линии, соединяющей точки минимума, на разрезах возникает точка касания изотерм ликвидуса и солидуса. В этой точке соприкасаются однофазные области L и $B1$ и две части двухфазной области $L + B1(TP)$.

Пространственная компьютерная модель позволила получить решение задачи, которую невозможно достичь при термодинамических расчетах и расчетах из первых принципов. Представленная методология может быть применима и для других систем с Mn, в которых может быть выявлен эффект смены типа фазовой реакции в трехфазной области с двумя высокотемпературными модификациями Mn [41–44].

Заявленный вклад авторов

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Список литературы

1. Akash K., Mani Prabu S. S., Gustmann T., Jayachandran S., Pauly S., Palani I. A. Enhancing the life cycle behaviour of Cu–Al–Ni shape memory alloy bimorph by Mn addition. *Materials Letters*. 2018;226: 55–58. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2018.05.008>
2. Gera D., Santos J., Kiminami C. S., Gargarella P. Comparison of Cu–Al–Ni–Mn–Zr shape memory alloy prepared by selective laser melting and conventional powder metallurgy. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. 2020;30(12): 3322–3332. [https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(20\)65464-4](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(20)65464-4)
3. Kang H., Yang Z., Yang X., Li J., He W., Chen Z., Guo E., Zhao L.-D., Wang T. Preparing bulk Cu–Ni–Mn based thermoelectric alloys and synergistically improving their thermoelectric and mechanical properties using nanotwins and nanoprecipitates. *Materials Today Physics*. 2021;17: 100332. <https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2020.100332>

4. *Binary alloy phase diagrams*. Vol. 1. Massalski T. B. (ed.). Ohio: American Society for Metals, Metals Park; 1986. 1100 p.
5. *Диаграммы состояния двойных металлических систем*. Т. 2. Лякишев Н. П. (ред.). М.: Машиностроение; 1997. 1024 с.
6. Hellawell A., Hume-Rothery W. The construction of alloys of iron and manganese with transition elements of the first long period. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*. 1957;249: 417–459. <http://doi.org/10.1098/rsta.1957.0004>
7. Wachtel E., Terzieff P., Bahle J. Aufbau und magnetische Eigenschaften manganreicher Cu-Mn- und Mn-Sn-Legierungen. *Monatshefte für Chemie*. 1986;117(12): 1349–1366. <http://doi.org/10.1007/bf00810745>
8. Kaufman L. Coupled phase diagrams and thermochemical data for transition metal binary systems-VI. *Calphad*. 1979;3(1): 45–76. [https://doi.org/10.1016/0364-5916\(79\)90020-8](https://doi.org/10.1016/0364-5916(79)90020-8)
9. Lewin K., Sichen D., Seetharaman S. Thermodynamic study of the Cu-Mn system. *Scandinavian Journal of Metallurgy*. 1993;22(6): 310–316. Режим доступа: https://www.researchgate.net/publication/262068679_Thermodynamic_study_of_the_Cu-Mn_system
10. Miettinen J. Thermodynamic description of the Cu–Mn–Zn system in the copper-rich corner. *Calphad*. 2004;28(3): 313–320. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2004.09.003>
11. Turchanin M. A., Agraval P. G., Abdulov A. R. Phase equilibria and thermodynamics of binary copper systems with 3d-metals. IV. Copper - Manganese system. *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*. 2006;45(11-12): 569–581. <https://doi.org/10.1007/s11106-006-0121-y>
12. Wang C. P., Liu X. J., Ohnuma I., Kainuma R., Ishida K. Thermodynamic assessments of the Cu–Mn–X (X: Fe, Co) systems. *Journal of Alloys and Compounds*. 2007;438(1–2): 129–141. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2006.08.018>
13. He C., Du Y., Chen H.-L., Liu S., Xu H., Ouyang Y., Liu Z.-K. Thermodynamic modeling of the Cu–Mn system supported by key experiments. *Journal of Alloys and Compounds*. 2008;457(1–2): 233–238. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2007.03.041>
14. Cui S., Jung I.-H. Thermodynamic modeling of the Cu–Fe–Cr and Cu–Fe–Mn systems. *Calphad*. 2017;56: 241–259. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2017.01.004>
15. *Binary Alloy Phase Diagrams*. Vol. 2. Massalski T. B. (ed.). Ohio: American Society for Metals, Metals Park; 1986. 2224 p.
16. Gokcen N. A. The Mn-Ni (manganese-nickel) system. *Journal of Phase Equilibria*. 1991;12(3): 313–321. <https://doi.org/10.1007/BF02649919>
17. Miettinen J. Thermodynamic solution phase data for binary Mn-based systems. *Calphad*. 2001;25(1): 43–58. [https://doi.org/10.1016/S0364-5916\(01\)00029-3](https://doi.org/10.1016/S0364-5916(01)00029-3)
18. Guo C., Du Z. Thermodynamic optimization of the Mn–Ni system. *Intermetallics*. 2005;13(5): 525–534. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2004.09.002>
19. an Mey S. Thermodynamic re-evaluation of the Cu–Ni system. *Calphad*. 1992;16(3): 255–260. [https://doi.org/10.1016/0364-5916\(92\)90022-P](https://doi.org/10.1016/0364-5916(92)90022-P)
20. Turchanin M. A., Agraval P. G., Abdulov A. R. Phase equilibria and thermodynamics of binary copper systems with 3d-metals. VI. Copper-nickel system. *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*. 2007;46: 467–477. <https://doi.org/10.1007/s11106-007-0073-x>
21. Tesfaye F., Vaajamo I., Hamuyuni J., Lindberg D., Taskinen P., Hupa L. Experimental investigation and thermodynamic re-assessment of the ternary copper-nickel-lead system. *Calphad*. 2018;61: 148–156. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2018.03.006>
22. Parravano N. Alloys of nickel, manganese, and copper. *Gazzetta Chimica Italiana*. 1913;42: 385–394.
23. Parravano N. Ternary alloys of iron-nickel-manganese, nickel-manganese-copper, and iron-manganese-copper. *Intern. Z. Metallog.* 1913;4: 171–202.
24. Аносов В. Я., Погодин С. А. *Основы физико-химического анализа*. М: Наука; 1976. 504 с.
25. Sun W., Xu H., Du Y., Liu S., Chen H., Zhang L., Huang B.-Y. Experimental investigation and thermodynamic modeling of the Cu–Mn–Ni system. *Calphad*. 2009;33(4): 642–649. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2009.07.003>
26. Pikunov M. V., Sidorov E. V. Phase diagrams of three-component systems corresponding to unbounded solid solutions with a temperature extremum. *Steel in Translation*. 2008;38(1): 1–4. <https://doi.org/10.3103/S0967091208010014>
27. Палатник Л. С., Ландау А. И. *Фазовые равновесия в многокомпонентных системах*. Харьков: Издательство Харьковского ордена Красного знамени государственного университета им. А. М. Горького; 1961. 405 с.
28. Петров Д. А. *Двойные и тройные системы*. М.: Металлургия; 1986. 256 с.
29. Pikunov M. V., Sidorov E. V. Structure of the phase diagram of the Cu–Ni–Mn system. *Steel in Translation*. 2008;38(5): 351–354. <https://doi.org/10.3103/S096709120805001X>
30. Bazhenov V. E., Pikunov M. V. Temperature-minimum line in the Cu–Ni–Mn phase diagram. *Steel in Translation*. 2010;40(3): 225–228. <https://doi.org/10.3103/S0967091210030071>
31. Пашков А. И. *Исследование и разработка технологии получения сплавов системы Cu–Mn–Ni*

методом механического легирования для высокотемпературной пайки: автореф. дис. ... канд. тех. наук: 05.16.04. М.: 2009. 28 с. Режим доступа: <https://www.dissertcat.com/content/issledovanie-i-razrabotka-tehnologii-polucheniya-splavov-sistemy-cu-mn-ni-metodom-mekhanich>

32. Баженов В. Е. Изучение кристаллизационных процессов тройных сплавов с целью оценки их склонности к неравновесной кристаллизации: автореф. дис. ... канд. тех. наук: 05.16.04. М.: 2013. 25 с. Режим доступа: <https://www.dissertcat.com/content/izuchenie-kristallizatsionnykh-protsessov-troinykh-splavov-s-tselyu-otsenki-ikh-sklonnosti-k>

33. Баженов В. Е. О диаграмме состояния системы Cu–Ni–Mn. *Известия ВУЗов. Цветная металлургия*. 2013;(1): 49–55. <https://doi.org/10.17073/0021-3438-2013-1-49-55>

34. Miettinen J. Thermodynamic description of the Cu–Mn–Ni system at the Cu–Ni side. *Calphad*. 2003;27(2): 147–152. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2003.08.003>

35. Turchanin M. A., Velikanova T. Y., Agraval P. G., Abdulov A. R., Dreval' L. A. Thermodynamic assessment of the Cu–Ti–Zr system. III. Cu–Ti–Zr system. *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*. 2008;47: 586–606. <https://doi.org/10.1007/s11106-008-9062-y>

36. Ivanchenko V. G., Pryadko T. V., Gavrylenko I. S., Pogorelaya V. V. Phase equilibria in the Ti–TiMn₂–ZrMn₂–Zr partial system. *Chemistry of Metals and Alloys*. 2008;1: 67–72. <https://doi.org/10.30970/cma1.0004>

37. Lutsyk V. I., Zelenaya A. E., Zyryanov A. M. Multicomponent systems simulation by the software of “Diagrams Designer”. *Journal of International Scientific Publications: Materials, Methods & Technologies*. 2008;2: 176–184. Режим доступа: <https://www.scientific-publications.net/download/materials-methods-and-technologies-2008.pdf>

38. Воробьева В. П., Зеленая А. Э., Луцык В. И., Ламуева М. В. 3D компьютерная модель T-x-у диаграммы CaO–MgO–Al₂O₃ при температурах выше 1300 °С. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2021;23(3): 380–386. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2021.23/3529>

39. Луцык В. И., Воробьева В. П. Исследование условий смены типа трехфазного превращения в системе Ti–Ir–Ru. *Перспективные материалы*. 2011;(S13): 191–198. Режим доступа: <https://elibrary.ru/item.asp?id=17635587>

40. Lutsyk V. I., Zelenaya A. E., Zyryanov A. M. Specific features of the crystallization of melts in systems with a transition from syntectic equilibrium to monotectic equilibrium. *Crystallography Reports*. 2009;54(7): 1300–1307. <https://doi.org/10.1134/S1063774509070281>

41. Kainzbauer P., Richter K. W., Effenberger H. S., Giester G., Ipseret H. The ternary Bi–Mn–Sb phase diagram and the crystal structure of the ternary T phase Bi_{0.8}MnSb_{0.2}. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. 2019;40: 462–481. <https://doi.org/10.1007/s11669-019-00719-x>

42. Florian G., Gabor A. R., Nicolae C. A. ... Rotaru P. Thermomechanical, calorimetric and magnetic properties of a Ni–Ti shape-memory alloy wire. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. 2020;140(2): 147–527. <https://doi.org/10.1007/s10973-019-08869-3>

43. Li H., Ruan J., Ueshima N., Oikawa K. Experimental investigations of fcc/bcc phase equilibria in the Cr–Mn–Ni ternary system. *Intermetallics*. 2020;127: 106994. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2020.106994>

44. Ruan J., Ueshima N., Li H., Oikawa K. Phase equilibria, martensitic transformations and deformation behaviors of the subsystem of Cantor alloy-low-cost Fe–Mn–Cr alloys. *Materialia*. 2021;20: 101231. <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2021.101231>

Информация об авторах

Зеленая Анна Эдуардовна, к. ф.-м. н., с. н. с. сектора компьютерного конструирования материалов, Институт физического материаловедения СО РАН (Улан-Удэ, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0001-5232-8567>
zel_ann@mail.ru

Луцык Василий Иванович, д. х. н., заведующий сектором компьютерного конструирования материалов, Институт физического материаловедения СО РАН (Улан-Удэ, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0002-6175-0329>
vluts@ipms.bscnet.ru

Виктор Дашиевич Балданов, аспирант сектора компьютерного конструирования материалов, Институт физического материаловедения СО РАН (Улан-Удэ, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0002-3946-9565>
victor_baldanov@mail.ru

Поступила в редакцию 08.06.2022; одобрена после рецензирования 12.07.2022; принята к публикации 15.09.2022; опубликована онлайн 25.12.2022.