

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ, РЕАЛИЗУЮЩИХСЯ В СИСТЕМАХ "ЖИДКИЙ МЕТАЛЛ – СОПРЯЖЁННЫЕ ВЕЩЕСТВА", ЯВЛЯЮЩИХСЯ ОСНОВОЙ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Исследование выполняется при поддержке РФФИ (проект 13-08-00545). Работа включает в себя проведение термодинамического анализа ряда групп систем: систем, являющихся основой перспективного метода синтеза кристаллов GaN; систем, интересных с точки зрения совершенствования технологий создания упрочнённых сплавов на медной основе; систем, являющихся основой технологии выращивания монокристаллов SiC, а также систем, интересных с точки зрения синтеза керамических высокотемпературных сверхпроводников.

Руководитель проекта - д.т.н. Е.А. Трофимов

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Развитие методики анализа высокотемпературных систем посредством построения фазовых диаграмм особого типа, связывающих состав жидкого металла с составом равновесных неметаллических и интерметаллических фаз

ПУБЛИКАЦИИ

1 монография

7 научных статей

8 научных докладов

ИНДЕКСИРОВАНИЕ

7 статей в РИНЦ

Достижение поставленных в работе целей требует решения ряда сложных задач, относящихся к области математического моделирования процессов, происходящих в металлических расплавах, сопряжённых с различными сложными фазами, а также экспериментальных работ по изучению термодинамических характеристик исследуемых систем.

НАУЧНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА

В процессе исследования получены следующие научные результаты:

1. Дальнейшее развитие получила методика и алгоритмы термодинамического анализа фазовых равновесий, реализующихся в ходе технологических процессов создания различных неорганических соединений путём проведения реакций их синтеза в металлических расплавах.

Метод анализа высокотемпературных систем с помощью диаграмм состояния особого типа – поверхностей растворимости компонентов в металле – проанализирован в контексте современного уровня развития методов и приёмов описания фазовых равновесий посредством диаграмм состояния. Показана связь такого рода диаграмм с фазовыми диаграммами других более распространённых типов. Уделено внимание вопросам применения правила фаз Гиббса для описания равновесий, реализующихся в системах "металличес-

кий расплав – сопряжённые сложные фазы".

2. База термодинамических данных, определённых и уточнённых в ходе проведённых работ, включает в себя несколько десятков температурных зависимостей параметров, характеризующих свойства фаз, составляющих исследуемые системы. Для некоторых исследованных систем использована информация баз данных программного пакета "FactSage" (версия 6.4) производства "Thermfact" (Канада) и "GTT Technologies" (Германия).

3. Рассчитаны координаты диаграмм ряда практически значимых систем лития, меди и железа. Примеры представлены на рис. 1–3.

На рис. 1 представлена диаграмма состояния для базовой относительно более сложных систем системы Ga-N. Как следует из результатов расчета, максимальная растворимость азота в жидком галлии составляет 0,073 мол. %. Критическая температура расслоения жидких сплавов составляет 4278 К при содержании азота 32 мол. %.

Другим примером рассчитанных диаграмм являются изотермические разрезы поверхностей растворимости компонентов в металле системы Cu-Al-Mg-O для различных температур из области 1100...1300 °С.

На рассчитанной диаграмме системы Cu-Al-Mg-O для T = 1100 °С (рис. 2) пять областей фазовых равновесий: I – в которой определены составы металла, находящегося в равновесии с твёрдым оксидом меди; II – в которой определены составы металла, находящегося в равновесии с CuAlO₂; III – в которой определены составы металла, находяще-



гося в равновесии с MgO; IV – в которой определены составы металла, находящегося в равновесии со шпинелью ($MgAl_2O_4$) и V – в которой равновесной с металлом фазой является твёрдый оксид алюминия.

Результаты моделирования системы Fe–Ni–Co–Mn–Si–C, которые в виде диаграммы представлены на рис. 3, подтверждают предположение, что для понижения температуры плавления металлического расплава, в ходе реакций компонентов которого может образовываться твёрдый карбид кремния, необходимо использовать металлический расплав сложного состава. Минимальная температура в этом случае (для содержаний никеля, кобальта и марганца, фиксированных на уровне 20 мас. %) составляет величину порядка 850 °C (в сравнении с 1200 °C для системы Fe–Si–C).

4. Получены новые экспериментальные данные по равновесным составам сопряжённых фаз в ряде изученных систем.

К примеру, экспериментальное исследование системы Cu–Al–Mg–O позволило выявить условия образования в металле включений $CuAlO_2$, $MgAl_2O_4$ и Al_2O_3 .

В результате экспериментального исследования системы Cu–Al–Mg–O позволило выбрать оптимальные соотношения алюминия и магния, растворённых в медном расплаве, которые позволяют добиться получения большого количества мелкодисперсных оксидных включений корунда в объёме матрицы на основе медного расплава (рис. 4).

Пример полученных в ходе экспериментального изучения системы Cu–Si–Ni электронных микрофотографий включений в металле представлен на рис. 5. Состав обнаруженных включений, определённых с помощью микро-рентгеноспектрального анализа, подтверждает результаты расчёта для этой системы.

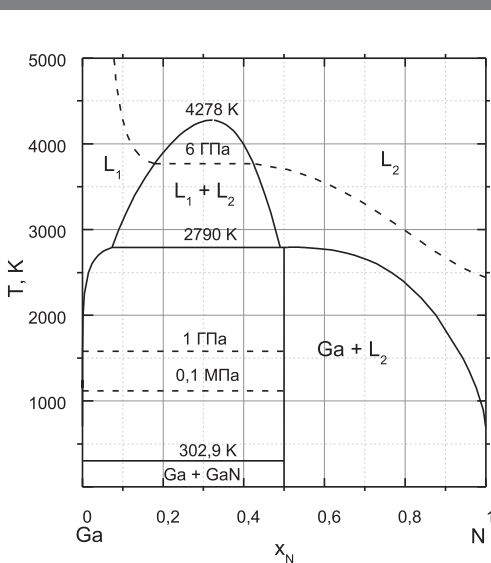


Рис. 1. Проекция диаграммы состояния системы Ga – N в координатах температура – состав (штриховыми линиями показаны изобары азота)

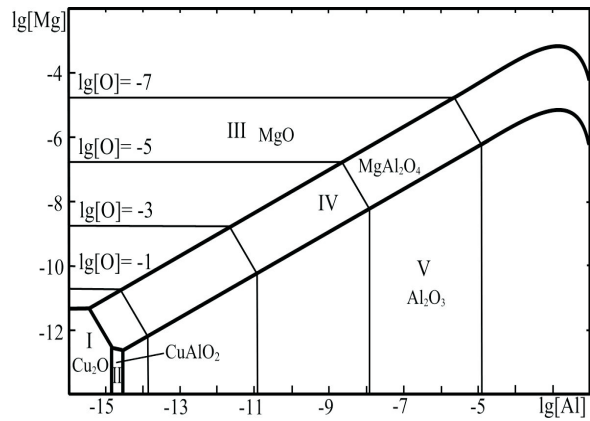


Рис. 2. Изотермический разрез диаграммы системы Cu–Al–Mg–O для $T = 1100\text{ °C}$

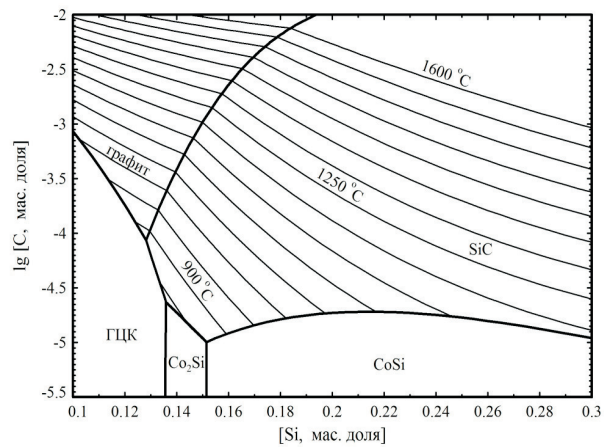


Рис. 3. Диаграмма системы Fe–Ni–Co–Mn–Si–C при содержании никеля, кобальта и марганца по 20 мас. %

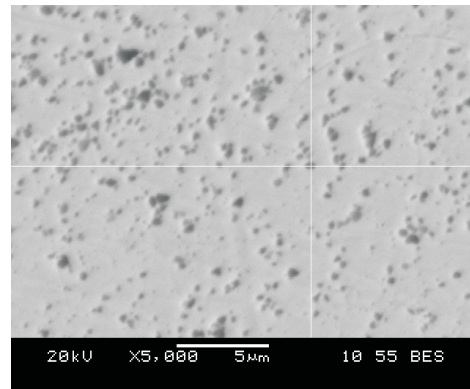


Рис. 4. Микрофотография дисперсных включений корунда в металлической [на основе меди] матрице системы Cu–Al–Mg–O

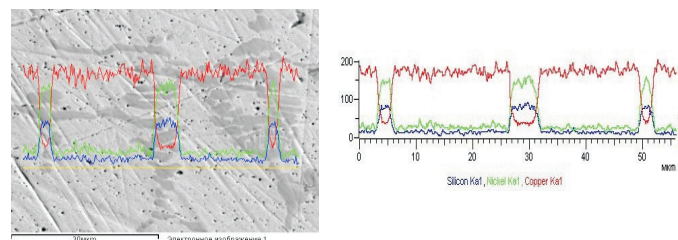


Рис. 5. Микрофотография включений Ni_3Si , образующихся в металле в ходе взаимодействия в системе Cu–Si–Ni: [Si]=1,5 мас. %, [Ni]=11 мас. %