

<https://doi.org/10.51301/jemet.2024.i2.03>

Mastering the methods of thermodynamic calculation and construction of phase diagrams of multicomponent systems based on aluminum

U. Abdikarimova*

Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

*Corresponding author: ulzhanabdi01@gmail.com

Abstract. Phase diagrams are the scientific basis for obtaining new materials. In this regard, the proposed thesis examines the theoretical foundations of technology for studying the laws of phase changes occurring in metals and alloys, obtaining new metal materials, their production and processing. The project considers the development of methods for calculating phase changes occurring in multicomponent aluminum-based alloys and the construction of diagrams of their phase state. The project emphasizes the need to search for scientifically sound methods for the manufacture of new heat-resistant, friction-resistant and corrosion-resistant aluminum alloys, including Al-Mg-Zn and Al-Cu-Si alloys. To this end, the analysis of modern methods of computer calculation of phase diagrams of multicomponent metal systems was carried out: The Thermo-Calc interactive database and the method of applying component distribution coefficients were considered. The crystallization process of solid solutions in an unbalanced state is calculated. As a result of calculations based on the alloy systems of the Al-Mg-Zn and Al-Cu-Si systems, polythermal and isothermal cross sections of phase diagrams of multicomponent systems are constructed. The phase composition and structure of alloys of the corresponding systems are investigated. The project analyzes the processes of unbalanced crystallization in alloys of the Al-Cu-Si, Al-Mg-Zn systems. The use of the proposed computational methods and technologies of their processing using computer programs (Thermo Calc) in the development of new alloys can significantly reduce the cost of material and financial resources for the production of finished products, as well as save time required for the thesis.

Keywords: volumetric proportions of phases, solid phase, liquidus temperature, raster electron microscope, cooling rate of alloy, total relative proportion of solid phase.

1. Кіріспе

Машина жасау, аспап жасау, мұнай-газ саласы, металлургия және химия өнеркәсібі, авиация және ғарыш техникасының жедел дамуына байланысты жақын арада алюминий қорытпаларына деген қажеттілік көп. Алюминий қорытпалары құрылымдық материалдар арасында ерекше орын алады. Бұл олардың негізгі қасиеттері мен пайдалану сипаттамаларының бірегей үйлесіміне қол жеткізу мүмкіндігіне байланысты. Құю және деформацияланатын алюминий қорытпалары, тығыздығы төмен, беріктігі жоғары, икемділігі мен өнімділігі арқасында машина жасауда, авиациялық және ғарыштық техникада қолданылатын ең перспективалы құрылымдық материалдар болып табылады. Шешілетін ғылыми-техникалық мәселенің қазіргі жай-күйін бағалау және оның өзектілігі: жаңа металл материалдарын жасаудың ғылыми-техникалық проблемасының ғылыми негізі және оларды өндіру мен өңдеудің прогрессивті технологияларын әзірлеу тиісті металл системаларының фазалық диаграммалары болып табылады. Барлық ғылыми-техникалық дамыған елдерде көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын зерттеуге көп көңіл бөлінеді. Ғалымдардың фазалық диаграммалар туралы ақпаратты жинау, өңдеу және сақтау жөніндегі

қызметі барған сайын белсенді және орталықтандырылған бола бастады. Алайда, фазалық диаграммаларды эксперименттік құру айтарлықтай материалдық шығындар мен уақытты қажет етеді. Қорытпалар мен функционалды материалдардың құрамы әр түрлі және күрделі болады, олар жұмыс істеуі керек жағдайлардың ауқымы кеңейеді, бұл зерттеу шығындарының бірнеше есе өсуіне әкеледі. Осыған байланысты фазалардың пайда болу сипаты мен фазалық өзгерістердің ерекшеліктерін теориялық ұстану, сондай-ақ қорытпалардың фазалық құрамын сандық бағалау әдістерін әзірлеу және көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын құру қазіргі материалтану ғылымының өзекті мәселесіне айналды.

Қазіргі уақытта фазалық өзгерістердің бірыңғай теориясы жоқ, әртүрлі фазалардың пайда болу сипаты зерттелмеген және материалдардың фазалық күйін басқару мүмкіндігі жоқ. Қазіргі физикалық теория тіпті таза металдарда да «алғашқы принциптер» негізінде фазалық түрлендірулерді есептеуге мүмкіндік бермейді. Сондықтан металл системаларындағы фазалық өзгерістерді есептеу және тиісті фазалық диаграммаларды құру үшін негізінен термодинамикалық әдістер қолданылған, онда ерітінділердің әртүрлі модельдері және қорытпалардың термодинамикалық қасиеттері бойынша

эксперименттік мәліметтердің үлкен көлемі қолданылған. Алайда, алюминий негізіндегі ең перспективалы көп компонентті системалардың қорытпаларындағы фазалық түрленулер мен құрылымдық өзгерістер зерттелмеген. Бұл системалардағы фазалық тепе-теңдік заңдылықтары зерттелмеген, сәйкес фазалық диаграммалар салынбаған. Фазалық диаграммаларды есептеудің барлық белгілі термодинамикалық әдістері металл фазаларының пайда болу сипатын, олардың химиялық құрамы мен өңдеу режиміне байланысты қорытпалардың фазалық күйі мен құрылымының қалыптасу жағдайларын анықтауға мүмкіндік бермейді. Олар тепе-теңдік және тепе-теңдік емес салқындату жағдайында берілген құрамның көп компонентті қорытпаларының фазалық құрамы мен құрылымын қалыптастыру процесін сандық сипаттау үшін қолданыла алмайды.

Осылайша, жаңа алюминий қорытпаларының құрылымдық жағдайы мен қасиеттерінің қажетті деңгейін қамтамасыз ету үшін олардың оңтайлы құрамдарын, құю мен өңдеудің прогрессивті технологияларын ғылыми негізделген таңдау бойынша кешенді теориялық және эксперименттік зерттеулер жүргізу қажет.

Жаңа металл материалдарын жасаудың және оларды өндіру, құю және термиялық өңдеу технологияларын дамытудың ғылыми негізі тиісті системалардың фазалық диаграммалары болып табылады. Соңғы уақытқа дейін фазалық диаграммалар негізінен эксперименталды түрде зерттелді. Алайда, бұл әдіс көп уақытты қажет етеді және айтарлықтай материалдық шығындар мен уақытты қажет етеді. Фазалық диаграммаларды эксперименттік зерттеу әдісі үш және одан да күрделі системаларды талдау кезінде шектеулі мүмкіндіктерге ие. Сонымен қатар, қорытпалардың құрамы әр түрлі және күрделі болады, олар жұмыс істеуі керек жағдайлардың ауқымы кеңейеді. Өнеркәсіпте қолданылатын материалдардағы компоненттер саны 10-15-ке жетеді, кейде одан да көп. Зерттелетін системалардың құрамдас бөліктерінің саны артқан сайын шығындар бірнеше есе артады. Сондықтан көп компонентті металл системаларындағы фазалық тепе-теңдікті теориялық зерттеу, күй диаграммаларын есептеу және болжау қазіргі уақытта үлкен ауқымға ие болды.

Есептеу әдістері диаграммаларды құруға, теориялық физиканың, есептеу техникасының жетістіктерін және қорытпалардың термодинамикалық және физикалық қасиеттерін зерттеудегі жетістіктерді тартуға мүмкіндік береді. Теория мен тәжірибенің үйлесімі фазалардың термодинамикалық потенциалдарының температура мен құрамға тәуелділігінің аналитикалық түрін анықтауға мүмкіндік береді.

Металл системаларының күй диаграммаларындағы фазалық тепе-теңдіктердің сипаты тепе-теңдік фазаларының табиғатына және фазалық түрленулердің жүру жағдайларына байланысты. Фазалардың табиғаты компоненттер атомдарының электронды құрылымымен, атомаралық өзара әрекеттесу сипатымен және байланыс энергиясымен анықталады. Сондықтан фазалық тепе-теңдіктерді есептеу және күй диаграммаларын құру «бірінші принциптер» негізінде жүзеге асырылған жөн. Алайда, металл теориясының қазіргі жағдайы екі компонентті системалар үшін де фазалық диаграммаларды дәл есептеуге мүмкіндік бермейді. Фазалық түрлендірулердің бірыңғай теориясы болмаса да, металл фазаларының пайда болу сипаты анық емес және

қорытпалардың фазалық күйін басқару мүмкіндігі жоқ. Сондықтан күй диаграммаларын есептеу үшін негізінен сұйық және қатты ерітінділердің әртүрлі модельдерін қолданатын термодинамикалық әдістер қолданылады. Бұл жағдайда екі есептеу схемасы мүмкін. Бірінші жағдайда, тепе-теңдік жағдайларына сүйене отырып, екі фазалы аймақтардың барлық шекаралары есептеледі, содан кейін олардан екі, үш және одан да күрделі системалардың тепе-теңдік диаграммалары құрылады. Екінші жағдайда, Гиббстің бос энергиялары барлық мүмкін фазалар үшін берілген температурадағы композиция функциясы ретінде есептеледі. Содан кейін Гиббс энергиясының минималды мәндеріне сәйкес келетін нүктелерде тангенс тобын жүргізу арқылы тепе-теңдік фазаларының құрамдары табылып, күй диаграммаларындағы екі фазалы аймақтардың шекаралары анықталады. Мұндай әдістерді қолдану компьютерде үлкен көлемдегі есептеулерді жүргізуге байланысты. Сонымен қатар, математикалық модельдердің параметрлерін анықтау үшін қорытпа компоненттерінің термодинамикалық қасиеттері бойынша эксперименттік мәліметтердің жеткілікті үлкен көлемін білу қажет. Жақында кеңінен қолданылатын эксперименттік жоспарлау әдістері есептеу мен эксперименттік зерттеулердің көлемін айтарлықтай азайтуға мүмкіндік бермейді.

Барлық қолданыстағы есептеу әдістерін тепе-теңдік және тепе-теңдік емес салқындату жағдайында берілген құрамның көп компонентті қорытпаларының фазалық құрамы мен құрылымын қалыптастыру процесін сандық сипаттау үшін қолдануға болмайтынын атап өткен жөн. Олардың көмегімен қорытпаның құрамы мен температурасына байланысты фазалық түрлендірулердегі тепе-теңдік фазалары мен құрылымдық компоненттердің химиялық құрамы мен салыстырмалы мөлшерінің өзгеруін анықтау мүмкін емес. Сондай-ақ, қорытпалардағы фазалық ауысулардың критикалық нүктелерін, астық қимасы бойынша компоненттер мен қоспалардың таралуын есептеуге, қорытпаның құрамы мен салқындату жылдамдығына байланысты фазалық өзгерістердің көлемдік жылдамдығы мен ұзақтығын бағалауға болмайды.

Сонымен қатар, көп компонентті қорытпалардың термодинамикалық қасиеттері жеткілікті зерттелмеген және көптеген үштік және одан да күрделі системалардың күй диаграммалары туралы мәліметтер жоқ. Сонымен қатар, түсті металдарға негізделген көп компонентті қорытпаларды қолдану аясының кеңеюі қасиеттердің қажетті үйлесімімен қолданыстағы қорытпаларды жетілдіру және жаңа қорытпаларды іздеу бойынша жұмыстардың күшеюіне әкеледі.

Күй диаграммаларын есептеу арқылы құру үшін системаның барлық компоненттерінің химиялық потенциалдарының T , P және фазалық құрамға тәуелділігін білу қажет. Мұндай тәуелділіктерді модельдік көріністер мен жаңа компьютерлік технологиялар негізінде ғана бағалауға болады.

2. Зерттеу әдістері мен материалдар

Зерттеулерді орындау кезінде:

- теориялық есептеу және компьютерлік бағдарламалау әдістері;
- оптикалық және электронды микроскопия;

- қорытпалардың химиялық құрамын элементтік талдау үшін растрлық электронды микроскопия;
- дифференциалды-термиялық талдау;
- механикалық қасиеттерді анықтау;
- қорытпалардың коррозиялық қасиеттерін анықтау әдістері қолданылды.

Тепе-теңдік және тепе-теңдік емес салқындату жағдайында фазалық диаграммаларды есептеудің жаңа әдістері мен компьютерлік бағдарламалары қарастырылған. Фазалық диаграммалардың политермиялық және изотермиялық бөлімдері есептелген түрде салынған, системалық - Al-Mg-Zn және Al-Si-Cu қорытпаларының фазалық құрамына сандық талдау жүргізілді.

Меншікті электр төзімділік (МЭТ), беріктік және ыстыққа төзімділік мәндерінің ең жақсы үйлесімі 400-450°C температурада күйдірілгеннен кейін кемінде 0.3% Zr бар қорытпаларда қол жеткізіледі. Қорытпалардың ыстыққа төзімділігі негізінен L_{12} (Al_3Zr) фазасының нанобөлшектерінің саны мен өлшемдеріне байланысты екені анықталған. Минималды өлшемдері бар Al_3Zr (L_{12}) фазалық нанобөлшектердің максималды санының түзілуі екі сатылы күйдіру режимін қолданған кезде пайда болады: 300-350°C, 400-450°C.

Алюминий оксиді Al_2O_3 - ақ түсті, отқа төзімді зат, алюминий мен оттегінің екілік қосындысы. Табиғатта ол алюминий, калий, натрий, магний және т.б. оксидтерінің стехиометриялық емес қоспасы болып табылатын саздың құрамдас бөлігі болып табылатын глинозем түрінде кең таралған.

3. Зерттеу нәтижелері және оларды талқылау

Жоспарланған дамудың негізгі нәтижелері:

- металдар мен қорытпалардағы фазалық түрленулерді, алюминий негізіндегі көп компонентті қатты ерітінділердің тепе-теңдік және тепе-теңдік емес кристалдануын есептеудің жаңа әдістері;
- алюминий қорытпаларының құрылымы мен фазалық құрамын зерттеудің жаңа нәтижелері;
- Thermo-Calc бағдарламаларын қолдана отырып, есептеу арқылы құрылған көп компонентті алюминий негізіндегі системалардың фазалық диаграммаларының политермиялық және изотермиялық бөлімдері;

Көп компонентті қорытпалардың тепе-теңдіксіз кристалдануы кезінде шекаралық қатты ерітінділердің немесе аралық фазалардың бастапқы кристалдарында легирлеуші элементтер мен қоспалардың кристаллитішілік түзілуі пайда болады, артық фазалар пайда болады және эвтектикалық және перитектикалық түрлендірулерде артық фазалық кристалдардың саны артады. Дендритті жою дәрежесі, артық фазалық токтың мөлшері, мөлшері мен формасы қорытпалар құрылымының маңызды сипаттамалары болып табылады, олар көптеген жағдайларда олардың негізгі механикалық және технологиялық қасиеттерін, сондай-ақ құйма бұйымдарын термиялық өңдеу кезінде пайда болатын құрылымдық өзгерістердің кинетикасын анықтайды.

Дендритті жою дәрежесі сұйық және қатты фазалар арасындағы, сондай-ақ осы фазалардың әрқайсысының ішіндегі диффузиялық процестердің толықтығына байланысты. Кристалдану процесінде қатты фазадағы компоненттердің қайта бөлінуі сұйық фазаға қарағанда

әлдеқайда баяу жүреді. Балқымадағы және қатты фазадағы диффузиялық процестердің шектелуіне байланысты системаның тепе-теңдік күйінен ауытқуына байланысты әсерлерді есепке алу үшін әртүрлі модельдер қолданылады.

Көп компонентті қорытпалардың тепе-теңдіксіз кристалдануы нәтижесінде пайда болатын артық фазалардың қосындыларының санын, орналасу сипатын және мөлшерін анықтау, кристаллит ішіндегі химиялық гетерогенділікті зерттеу белгілі бір практикалық қызығушылық тудырады. Бұл қорытпалардың көптеген механикалық және технологиялық қасиеттерін бағалауға, құйылған қорытпаларды термиялық өңдеу кезінде пайда болатын құрылымдық түрлендірулердің кинетикасын зерттеуге мүмкіндік береді.

Қорытпалардың тепе-теңдіксіз кристалдану процесінде легирлеуші элементтер мен қоспалардың қайта бөлінуі туралы әдебиеттерде бар идеялар олардың қатты ерітінді кристалдарының ішіндегі концентрациясының ең үлкен және ең кіші мәндерін болжауға мүмкіндік береді. Бұл жағдайда кристалдардың көлденең кимасы бойынша легирлеуші элементтер мен қоспалардың таралу сипаты белгісіз болып қалады. Жеке дәндердегі элементтердің дендритті жойылуын эксперименттік анықтау өте қиын міндет. Сандық микрорентгеноспектральды талдау және микроқаттылықты өлшеу әдісі арқылы алынған мәліметтер системалы емес және кристалл ішілік ликвацияның жалпы заңдылықтарын анықтауға мүмкіндік бермейді.

Бұл ретте зерттелетін системалар үшін тиісті күй диаграммаларындағы ликвидус және солидус сызықтары, сондай-ақ легирлеуші элементтердің таралу коэффициенттерінің концентрациялық тәуелділіктері белгілі деп болжанады. Үш және одан да күрделі қорытпалар жағдайында мұндай зерттеулер жүргізілген жоқ.

Осы жұмыста ұсынылған әдіс көп компонентті қорытпалардың біркелкі емес кристалдануы және дендритті жасушалардағы кристалл ішіндегі ликвация кезінде қатты және сұйық ерітінділердің құрамы мен салыстырмалы мөлшерінің өзгеруін есептеуге мүмкіндік береді.

Есептеу әдісін әзірлеу кезінде қорытпаның тепе-теңдіксіз кристалдануының бүкіл процесі құрамы кристалданудың әр кезеңінен кейін қалған сұйық фазаның құрамына сәйкес келетін қорытпалар жиынтығының кристалдануының бастапқы моменттерінің қосындысы ретінде қарастырылады. Бартон теориясына сәйкес, Прим және Сливхор кристалл – сұйық ерітіндінің шекарасында сұйық және қатты фазалар арасында тепе-теңдік болады. Содан кейін кристалдану процесінің кез-келген кезеңіндегі алғашқы қатты фазалық кристалдарда күйдің тепе-теңдік диаграммасына сәйкес келетін қосылыстар болады. Бұл жағдайда тепе-теңдік емес кристалдану процесінің кез-келген сатысы үшін қорытпалардың тепе-теңдік кристалдануы жағдайында алынған теңдеулерді (1-10) қолдануға болады. Бұл жағдайда қорытпа компоненттерінің тепе-теңдік таралу коэффициенттерінің температураға тәуелділігін білу қажет.

Егер $K_i(T)$ бөлу коэффициенттерінің температуралық тәуелділіктері белгілі болса, онда шарттардан (1), X_{ij} – қорытпадағы i -ші компоненттің концентрациясы,

ликвидус температурасын $T_{\text{л}}$ табуға болады. Бұл температурада қатты ерітіндінің алғашқы кристалдарының құрамы бастапқы қорытпадағы құрамдас бөліктің оның таралу коэффициентіне көбейтіндісі ретінде $T_{\text{л}}$: $X_i^{\alpha} = K_i(T_{\text{л}}) \cdot X_i$ анықталады. τ_1 уақыт ішінде қорытпаның температурасы $T_i = T_{\text{л}} - \Delta T_1$ -ге дейін төмендейді, мұндағы Δ - қорытпаның салқындату жылдамдығы. Бұл жағдайда компоненттердің таралу коэффициенттері $K_i(T_{\text{л}})$ -ден $K_i(T_1)$ -ге дейін өзгереді және α_1 қатты фазаның белгілі бір үлесі кристалданады. Үш компонентті қорытпалар жағдайында қатты фазаның үлесі өрнектің көмегімен, ал өрнектен кез келген n -компонентті қорытпа үшін анықталады. Әрі қарай, α_1 және $K_i(T_1)$ мәндерін ауыстыра отырып, сұйық және солидус беттерінің теңдеулеріне біз қатты ерітінді $X_i(T_1)$ кристалдарының құрамын табамыз және қалған сұйық фаза $\alpha^{(1-\alpha_1)}$ температурада $T_1^0 \text{K}$:

$$X_i^{\alpha}(T_1) = \frac{X_{i0}}{\alpha_{T_1}(K_i(T_1) + 1) + 1}, \quad (2)$$

$$X_i^{\alpha}(T_1) = K_i(T_1) \cdot X_i(T_1). \quad (3)$$

Температура $T_{\text{л}}$ -ден T_1 -ге дейін төмендеген кезде қатты және сұйық фазалардағы компоненттердің концентрациясы сәйкесінше $X_{i\text{л}}^{\alpha}(T_{\text{л}})$ және $X_i^{\alpha}(T_{\text{л}})$ -ден $X_{i1}^{\alpha}(T_1)$ және $X_i(T_1)$ -ге дейін үздіксіз өзгереді.

Сұйық және қатты фазалардың құрамын табу үшін кристалдану процесінің екінші кезеңінің соңына қарай температураны қайтадан өзгертеміз.

Содан кейін:

$$T_2 = T_1 - \Delta T = T_1 - \theta \cdot \tau_2 \quad (4)$$

T_2 температурасында таралу коэффициенттерінің жаңа мәндерін анықтағаннан кейін, теңдеулерден немесе осы уақыт аралығында кристалданған қатты фазаның α_2 мөлшерін қайтадан табамыз. Содан кейін, α_1 және $K_i(T_2)$ мәндерін (5), (6) теңдеулеріне ауыстыру, сондай-ақ X_{i0}^{α} және X_{i1}^{α} ауыстыру арқылы біз кристалдану процесінің екінші кезеңінің соңына қарай тепе-теңдік фазаларының құрамдарын табамыз:

$$X_{i2}^{\alpha}(T_2) = \frac{X_{i1}^{\alpha}(T_1)}{\alpha_{T_2}(K_i(T_2) - 1) + 1}, \quad (5)$$

$$X_{i2}^{\alpha}(T_2) = K_i(T_2) \cdot X_{i2}(T_2). \quad (6)$$

Мұнда келтірілген есептеулер қорытпаның кристалдануы аяқталғанға дейін қайталанады. Кристалдану процесі аяқталған кезде қатты фазаның мөлшері M_{α} , қорытпаның бастапқы мөлшеріне M_0 -ге тең болуы керек, ал оның үлесі:

$$\alpha = \frac{m_{\alpha}}{M_0} = 1 \quad (7)$$

Мұнда сипатталған есептеу схемасынан қорытпаның кристалдану процесінің кез-келген сатысында түскен қатты фазаның мөлшері және әр кезеңнен кейін қалған сұйық фазаның мөлшері сәйкесінше тең болады:

1 кезең –

$$m_{\alpha_1} = M_0 \alpha_1,$$

$$m_{\text{жс1}} = M_0 - M_0 \alpha_1 = M_0 (1 - \alpha_1).$$

2 кезең –

$$m_{\alpha_2} = M_0 (1 - \alpha_1) \alpha_2,$$

$$m_{\text{жс2}} = M_0 (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2).$$

3 кезең –

$$m_{\alpha_3} = M_0 (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2) \alpha_3,$$

$$m_{\text{жс3}} = M_0 (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2) (1 - \alpha_3).$$

n -кезең –

$$m_{\alpha n} = M_0 (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2) (1 - \alpha_n),$$

$$m_{\text{жс1}} = M_0 (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2) \dots (1 - \alpha_n).$$

Осы жерден біз кристалдану процесінің n -ші сатысынан кейін қатты фазаның $m_{\alpha n}$ жалпы санын N және оның салыстырмалы үлесін S_n есептеу үшін өрнек аламыз:

$$m_{\alpha n} = m_0 \alpha_1 + m_0 \alpha_2 + \dots + m_0 \alpha_n, \quad (8)$$

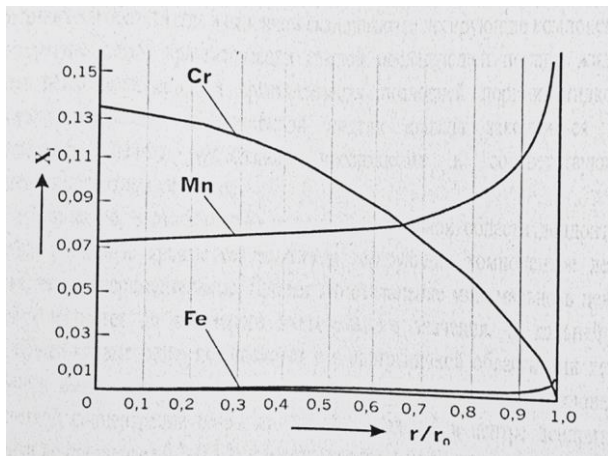
$$S_n = \alpha_1 + (1 - \alpha_1) \alpha_2 + (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2) \alpha_3 + \dots + (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2) \dots (1 - \alpha_{n-1}) \alpha_n \quad (9)$$

S_n бірлікке тең болатын температураны тепе-теңдіксіз солидус температурасы деп түсінеміз. Берілген салқындату жылдамдығындағы 9балқыманың кристалдануының жалпы уақыты ($\tau_{\text{кристалдану}}$) -ге тең:

$$\tau_0 = (T_{\text{лик}} - T_{\text{солид}}) \theta. \quad (10)$$

Есептеудің болжамды әдісі қорытпаның әртүрлі салқындату жылдамдықтарындағы кристалдану уақыты мен температурасына байланысты кристалдану процесінің кез келген сатысында қатты фазаға (α_n) ауысатын қатты фазаның жалпы салыстырмалы үлесінің (S_n) және сұйық фазаның үлесінің тәуелділігін зерттеуге мүмкіндік беретінін ескеру қажет. Осылайша, көп компонентті қорытпалардың тепе-теңдіксіз кристалдану процесінің кинетикасын зерттеуге болады. Тепе-теңдік емес кристалдануды сипаттаудың ұсынылған әдісі қорытпаның бастапқы кристалдануының барлық аралығындағы сұйық және қатты ерітінділердің мөлшері мен құрамының өзгеруін есептеуге мүмкіндік беретіндіктен, бұл жағдайда болатын көлемдік өзгерістерді, демек, сұйық және қатты ерітінділердің термодинамикалық және басқа қасиеттерінің өзгеруін зерттеуге мүмкіндік бар. Сонымен қатар, сұйық фазаның құрамының өзгеру барысын және қос эвтектикалық сызықтарды талдай отырып, үш фазалы түрлендіру басталған кездегі сұйық фазаның құрамын, мөлшерін және температурасын анықтауға болады (яғни. Қос эвтектиканың тепе-теңдік емес кристалдануының немесе үш фазалы перитектикалық түрленудің басталу температурасы). Осылайша, есептеу әдісі қорытпаның тепе-теңдіксіз кристалдануы кезінде пайда болуы мүмкін артық фазалар мен эвтектиканың жалпы санын анықтауға мүмкіндік береді, яғни тепе-теңдік күйіндегі қорытпалардың фазалық құрамы мен құрылымын сандық бағалауға мүмкіндік береді. Дендритті жасушаның қандай да бір пішінге ие болуына мүмкіндік бере отырып, ұсынылған есептеу әдісін қолдана отырып,

корытпа компоненттері мен қоспалардың бастапқы қатты ерітінді кристалдарының қимасы бойынша таралу қисықтарын құруға болады.



Сурет 1. Mg және Zn таралу қисықтары Al+2.86 at%Mg+2.54 at% Zn қорытпасы

1-суретте біз зерттеген қорытпалардағы дендритті жасушалардың қимасы бойынша легирлеуші компоненттердің таралуының есептік және эксперименттік қисықтары көрсетілген. Al-Mg-Zn үштік системасының қорытпаларын дайындау сипатталған әдіс бойынша жүргізілді. Қорытпалар мыс қалыптарға құйылды (салқындату жылдамдығы $\approx 1-1.5$ градус / сек). Дендритті жасушалардың орташа мөлшері 25 мкм болды. 1-суреттен сауын фазасындағы диффузияны толық тежеу және оның сұйық фазада шектеусіз өтуі жағдайында және дендритті жасушалардың орталық аймақтарындағы құрамды эксперименттік анықтау кезінде есептелген мәліметтер эксперимент нәтижелерімен сәйкес келетіндігін көруге болады. Бұл кристалдану процесінің бастапқы кезеңдерінде алғашқы құлаған кристалдардың құрамы тепе-теңдікке өте жақын екенін көрсетеді, бұл жұмыста байқалған жағдайға ұқсас.

1-суреттен көріп отырғанымыздай, дендритті жасушаның салыстырмалы түрде кең Орталық аймағында легирленген компоненттердің таралуының қисық сызықтары эксперименталдыға қарағанда төмен орналасқан. Сонымен қатар, бұл ауытқу ұяшықтың центрінде минимум болып табылады және белгілі бір максимумды мәнге дейін өседі. Болашақта есептік қисықтар күрт көтеріліп, шекаралас аймақтар эксперименттік аймақтан әлдеқайда жоғары жатыр. Дендритті жасушаның орталығында эксперименттік Zn есептік концентрациясының ауытқуы барлық зерттелген қорытпалар үшін 0.2-0.3%-дан аспайды және т.б. магнийге қарағанда аз (0.5-0.6 ат.%).

Дендритті жасушаның қимасы бойынша легирленген компоненттердің таралуының есептік қисықтарының эксперименталды түрде салынған ауытқулары сұйық фазадағы диффузияның шектелуімен және қатты фазадағы қорытпа компоненттерінің кейбір диффузиялық қайта бөлінуімен түсіндіріледі, олар біз есептеу кезінде ескермеген.

Бұл жұмыста сұйық фазадағы диффузиялық процестердің шектеулілігін ескере отырып, жоғарыда қарастырылған көп компонентті қорытпаларда дендритті жою есебі жүргізілді. Бұл жағдайда есептеу кезінде

компоненттердің тепе-теңдік таралу коэффициенттерінің орнына тиісті тиімді коэффициенттер қолданылды.

Есептелген және эксперименттік үлестіру қисықтары сәйкес келетінін көруге болады. Тек тар шекара аймағында есептелген қисықтар жоғары болады. Алайда, бұл аймақта үш фазалы эвтектикалық түрлендіру және эксперименталды түрде анықталған өлшемдер бар ($r_{жсп.}$) дендритті жасушалар r_0 -ден аз болуы керек. Есептеулер қатты фазадағы диффузия толығымен басылған және сұйық фазада оның құрамын толығымен теңестіруге уақыт болған және сұйық фазамен шектелген және қатты фазада толығымен басылған жағдайларда арнайы бағдарлама бойынша жүргізілді. Бірінші жағдайда K_0 компоненттерінің таралу коэффициенттерінің температуралық тәуелділігі таза металдардың химиялық потенциалдарының тең шарттарынан анықталады. Екінші жағдайда, сұйық фазадағы диффузияның шектелуіне байланысты кристалдану майданында алюминийдің балку температурасын төмендететін легирлеуші компоненттермен байытылған сұйықтық қабаты пайда болады. Сондықтан кристалл-сұйық ерітінді шекарасында легирлеуші компоненттердің таралу коэффициенттерінің мәндері олардың тепе-теңдік мәндерінен өзгеше. Осыған байланысты дендритті жоюды есептеу кезінде қорытпаларда (10) теңдеу бойынша анықталатын легирлеуші компоненттердің белсенді таралу коэффициенттері пайдаланылды.

$$K_{эф} = \frac{K_0}{K_0 + (1 + K_0) \exp\left(-\frac{Sg}{D}\right)} \quad (11)$$

Қоспалардың таралу коэффициенттері (Fe, Si, Cr және т.б.) тұрақты болып қабылданды және сәйкес қос күй диаграммаларынан анықталды. Салқындату жылдамдығы (ζ) 1 градус/сек болды, бұл мыс құймасындағы қорытпалардың салқындату жылдамдығына шамамен сәйкес келеді.

Легирленген заттардың таралуын эксперименттік анықтау қимасы бойынша компоненттер, зерттелетін қорытпалардағы дендритті жасушалар жергілікті микрорентгеноспектралды талдау әдісімен жүргізілді. Al-Cu-Si құю қорытпаларының тепе-теңдіксіз кристалдануын және 5.8% Si және Cu-ге дейінгі қорытпалар қатарының тепе-теңдік кристалдануын есептеу нәтижелері 1-кестеде келтірілген. 11% кремний қорытпаларында Al-Si-Cu системасының күй диаграммасына толық сәйкес α – қатты ерітінді бірінші кезекте кристалданатыны, ал 11%-дан астам Si сұйықтығы бар қорытпаларда бастапқы кристалдар бөлінетіні анықталды. Содан кейін қорытпаларда эвтектика (α +Si), (α + θ), сондай-ақ үштік эвтетика (α +Si+ θ) кристалдануы жүреді. Есептеу кезінде критикалық нүктелердің температурасы, фазалық құрамы және кристалданған қорытпаның мөлшері анықталды. Термиялық талдаудың дәлдігі ($\pm 1^\circ\text{C}$) шегінде зерттелген қорытпалардың тепе-теңдік және тепе-теңдік емес кристалдануындағы Қос эвтектикалық түрлену (α +Si) температурасы іс жүзінде сәйкес келетіні байқалады. Алайда, тепе-теңдік емес кристалдану кезінде қос эвтектиканың (α +Si) бөлінуінің басталуы кристалданған қорытпаның аз үлесінде байқалады. Бұл айырмашылық қорытпаның құрамы үштік системаның күй диаграммасындағы Қос эвтектикалық сызықтан

(α +Si) алыстаған сайын артады. Al-Cu-Si системасының зерттелген қорытпалары үшін тепе-теңдік солидус температурасы қос эвтетиканың (α +Si) кристалдануының соңғы температурасына сәйкес келеді. Бұл қорытпалардың тепе-теңдіксіз кристалдануымен үштік эвтетика әрқашан пайда болады, олардың мөлшері қорытпаның жалпы санының 2-ден 14%-на дейін. Барлық қорытпалардың кристалдануы бастапқы кристалдану сатысында да, эвтетикалық түрленуде де әлсіреу қарқынымен жүреді.

Кесте 1. Al-Cu-Si құю қорытпаларының тепе-теңдіксіз кристалдануын есептеу нәтижелері

Қорытпа	Тепе-теңдік күйде кристаллизация			Тепе-теңдіксіз күйде кристаллизация		
	Суыну температурасы	Фазалар	Қатты фазаның салыстырмалы шамасы	Суыну температурасы	Фазалар	Қатты фазаның салыстырмалы шамасы
AK5M	622.8 574 565	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$ $L \leq \alpha + Si$	0 0.65 1.00	622.8 574 524	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$ $L \leq \alpha + \theta + Si$	0 0.63 0.98
AK5M2	619 569 554	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$ $L \leq \alpha + Si$	0 0.65 1.00	619 569 524	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$ $L \leq \alpha + \theta + Si$	0 0.61 0.95-1.00
AK6M2	614 572 557	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$ $L \leq \alpha + Si$	0 0.57 1.00	614 572 254	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$ $L \leq \alpha + \theta + Si$	0 0.54 0.96-1.00
AK5M7	606 557 524	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$ $L \leq \alpha + Si + \theta$	0 0.58 0.95	607 567 524	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$ $L \leq \alpha + \theta + Si$	0 0.54 0.86-1.00
AK9M2	597 576 564	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$ $L \leq \alpha + Si$	0.00 0.31 1.00	597 576 524	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$ $L \leq \alpha + \theta + Si$	0 0.30 0.98-1.00
AK12M2	576 556	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$	0 1.0	576 524	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$ $L \leq \alpha + \theta + Si$	0 0.97-1.00
Al+5%Si	593 547	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$	0 0.48	593 547	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$	0 0.48
+ 10%Cu	524	$L \leq \alpha + \theta + Si$	1.00	524	$L \leq \alpha + \theta + Si$	0.8-1.00
Al+8%Si	572 556	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$	0 0.18	572 556	$L \leq \alpha$ $L \leq \alpha + Si$	0 0.18
+ 10%Cu	524	$L \leq \alpha + \theta + Si$	1.00	524	$L \leq \alpha + \theta + Si$	0.79-1.00

4. Қорытынды

Есепте ыстыққа төзімді, тозуға және коррозияға төзімді жаңа алюминий қорытпаларын, оның ішінде Al-Mg-Zn және Al-Cu-Si қорытпаларын жасаудың ғылыми негізделген әдістерін іздеу қажеттілігі негізделді. Осы мақсатта көп компонентті металл системаларының фазалық диаграммаларын компьютерлік есептеудің заманауи әдістеріне талдау жасалды: Thermo-Calc интерактивті базасы және компоненттердің таралу коэффициенттерін қолдану әдісі. Көп компонентті металл системаларындағы фазалық тепе-теңдіктерді есептеу және компоненттердің таралу

коэффициенттерінің температуралық және концентрациялық тәуелділіктерін қолдана отырып, фазалық түрленулердің критикалық нүктелерін анықтаудың тұжырымдалған шарттарына негізделген олардың күй диаграммаларын құру әдісі жасалды. Қатты ерітінділердің тепе-теңдік кристалдану процесінің есептеулері орындалды. Есептеу арқылы Al-Mg-Zn және Al-Cu-Si алюминийі және одан да күрделі системалар негізінде көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларының политермиялық және изотермиялық бөлімдері салынды. Зерттеулер және тиісті системалардың қорытпаларының фазалық құрамы мен құрылымы зерттелді.

Қойылған міндеттерді шешудің толықтығын бағалау. Жұмыста қойылған міндеттер толық көлемде шешілді. Алынған ғылыми нәтижелер (теориялық және эксперименттік), техникалық шешімдер және енгізудің практикалық нәтижелері осы ғылыми-техникалық жұмыстың мақсаттары мен міндеттеріне іргелі-қолданбалы сипаттағы зерттеулерге толық сәйкес келеді. Әзірлеудің техникалық-экономикалық тиімділігін бағалау нәтижелері. Осы жұмыстың тақырыбы бойынша теориялық және эксперименттік зерттеулердің нәтижелері техникалық жұмыс іске асыру барысы бойынша практикада пайдаланылды. Жаңа қорытпаларды әзірлеу кезінде компьютерлік бағдарламаларды қолдана отырып, жұмыста ұсынылған есептеу әдістерін қолдану және оларды өңдеу технологиялары дайын өнімді шығаруға материалдық және қаржылық ресурстардың шығындарын едәуір азайтуға, сондай-ақ жұмыс жүргізуге қажетті уақытты үнемдеуге мүмкіндік береді.

References / Әдебиеттер

- [1] Zelenaja, A. (2002). Povyshenie informativnosti matematicheskikh modulej izobamyh fazovyh diagramm vizualizatsiej na proekcijah pentatempa i raschetom konod (doctoral dissertation). *Ulan-Udje*
- [2] Kaufman L. & Bernshtejn G. (1972). Raschet diagramm sostojaniya s pomoshh'ju JeVM. *Moskva, Mir*
- [3] Smagulov, D., Amenova, A. & Dostayeva, A. (2014). New Method of Phase Transformations Calculation in Metals with Structural Features of the Initial and New Phases. *Key Engineering Materials - Development and Application*, 911, 148–151. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.911.148>
- [4] Mailybaeva, A., Zolotorevskii, V., Smagulov, D. & Islamkulov, K. (2017). A Study of Phase Composition and Structure of Alloys of the Al – Mg – Si – Fe System. *Metal Structure and Heat Treatment*, 58. <https://doi.org/10.1007/s11041-017-0085-1>
- [5] Mailybaeva, A.D. (2018). Ocenka gorjachelomkosti splavov tipa AD31. Presented at the Mezhdunarodnaja nauchno-prakticheskaja konferencija «Jefferktivnye tehnologii proizvodstva cvetnyh, redkih i blagorodnyh metallov». <https://doi.org/10.31643/2018-7.34>
- [6] Voronin, G. F. (1987). Osnovy termodinamiki. *Moskva, MGU*

Алюминий негізіндегі көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын термодинамикалық есептеу және тұрғызу

Satbayev University, Алматы, Қазақстан

*Корреспонденция үшін автор: ulzhanabdi01@gmail.com

Аңдатпа. Фазалық диаграммалар жаңа материалдар алудың ғылыми негізі болып табылады. Осыған байланысты ұсынылып отырған жұмыста металдар мен қорытпаларда жүретін фазалық өзгерістердің заңдылықтарын зерттеу, жаңа металл материалдарды алу, оларды өндіру және өңдеу технологияларының теориялық негіздері көрсетілген. Жұмыста алюминий негізіндегі көп компонентті қорытпаларда жүретін фазалық өзгерістерді есептеу әдістерін игеру және олардың фазалық күй диаграммаларын тұрғызу қарастырылған. Жұмыста ыстыққа төзімді, үйкеліске және коррозияға төзімді жаңа алюминий қорытпаларын, оның ішінде Al-Mg-Zn және Al-Cu-Si қорытпаларын жасаудың ғылыми негізделген әдістерін іздеу қажеттілігі көрсетілген. Осы мақсатта көп компонентті металл жүйелерінің фазалық диаграммаларын компьютерлік есептеудің заманауи әдістеріне талдау жасалды: Thermo-Calc интерактивті базасы және компоненттердің таралу коэффициенттерін қолдану әдісі қарастырылды. Қатты ерітінділердің тепе-теңдіксіз күйде кристалдану процесі есептелді. Есептеу нәтижесінде Al-Mg-Zn және Al-Cu-Si системаларының қорытпасы негізінде көп компонентті жүйелердің фазалық диаграммаларының политемиялық және изотермиялық қималары салынды. Зерттеулер және тиісті жүйелердің қорытпаларының фазалық құрамы мен құрылымы зерттелді. Зерттеу жұмыстарында Al-Cu-Si, Al-Mg-Zn системаларының қорытпаларындағы тепе-теңдіксіз күйде кристалдану процестері талданған. Жаңа қорытпаларды әзірлеу кезінде компьютерлік бағдарламаларды (Thermo Calc) қолдана отырып, жұмыста ұсынылған есептеу әдістерін қолдану және оларды өңдеу технологиялары дайын өнімді шығаруға материалдық және қаржылық ресурстардың шығындарын едәуір азайтуға, сондай-ақ жұмыс жүргізуге қажетті уақытты үнемдеуге мүмкіндік береді.

Негізгі сөздер: фазалардың көлемдік үлестері, қатты фаза, ликвидус температурасы, растрлық электронды микроскоп, қорытпаның салқындату жылдамдығы, қатты фазаның жалпы салыстырмалы үлесі.

Освоение методики термодинамического расчета и восторении фазовых диаграмм многокомпонентных систем на основе алюминия

У. Абдикаримова*

Satbayev University, Алматы, Казахстан

*Автор для корреспонденции: ulzhanabdi01@gmail.com

Аннотация. Фазовые диаграммы являются научной основой для получения новых материалов. В этой связи в предлагаемой работе изложены теоретические основы технологии изучения закономерностей фазовых изменений, происходящих в металлах и сплавах, получения новых металлических материалов, их производства и переработки. В работе предусмотрено освоение методов расчета фазовых изменений, происходящих в многокомпонентных сплавах на основе алюминия, и построение диаграмм их фазового состояния. В работе подчеркивается необходимость поиска научно обоснованных методов изготовления новых термостойких, устойчивых к трению и коррозии алюминиевых сплавов, в том числе сплавов Al-Mg-Zn и Al-Cu-Si. С этой целью был проведен анализ современных методов компьютерного расчета фазовых диаграмм многокомпонентных металлических систем: рассмотрена интерактивная база Thermo-Calc и метод применения коэффициентов распределения компонентов. Рассчитан процесс кристаллизации твердых растворов в несбалансированном состоянии. В результате расчетов были построены политемические и изотермические сечения фазовых диаграмм многокомпонентных систем на основе сплава систем Al-Mg-Zn и Al-Cu-Si. Исследованы фазовый состав и структура сплавов соответствующих систем. В исследовательских работах проанализированы процессы кристаллизации в несбалансированном состоянии в сплавах систем Al-Cu-Si, Al-Mg-Zn. Применение предложенных в работе вычислительных методов и технологий их обработки с использованием компьютерных программ (Thermo Calc) при разработке новых сплавов позволяет существенно снизить затраты материальных и финансовых ресурсов на выпуск готовой продукции, а также сэкономить время, необходимое для проведения работ.

Ключевые слова: объемные доли фаз, твердая фаза, температура ликвидации, растровый электронный микроскоп, скорость охлаждения сплава, общая относительная доля твердой фазы.

Received: 11 March 2024

Accepted: 15 June 2024

Available online: 30 June 2024