

РЕФЕРАТ

Дослідження взаємодії компонентів рідких сплавів системи Ni-Ti-Hf та прогнозування концентраційних областей отримання аморфних сплавів

Кваліфікаційна робота магістра по спеціальності 136 Металургія

Здобувач вищої освіти **Сорокіна Каріна Валентинівна**

Робота складається із вступу, шести розділів, висновків, списку використаних літературних джерел із 56 найменувань. Матеріали роботи викладені на 101 сторінці, нараховують 26 рисунків, 15 таблиць та 15 слайдів.

Основний зміст роботи.

Об'єкти дослідження – рідкі сплави трикомпонентної системи Ni–Ti–Hf.

Предмет дослідження – термодинамічні властивості рідких та твердих сплавів системи, закономірності їх зміни в широких інтервалах концентрацій; метастабільні фазові перетворення за їх участю, теплофізичні властивості розплавів та технологічні умови одержання об'ємних аморфних сплавів.

Мета роботи полягала у одержанні експериментальних даних та проведенні теоретичного аналізу характеру взаємодії компонентів рідких сплавів і аналізу параметрів атомного упорядкування в них, проведенні термодинамічного моделювання метастабільних фазових перетворень за їх участю і прогнозуванні концентраційних областей їх аморфізації, та визначенні технологічних умов їх тверднення в мідному водоохолоджуваному кокілі.

Для досягнення мети був вирішений ряд завдань, основними з яких були: дослідити методом калориметрії концентраційну залежність ентальпії утворення рідких сплавів системи Ni–Ti–Hf за температури 1873 К; моделювати концентраційну залежність термодинамічних властивостей розплавів системи Ni–Ti–Hf рамках моделі асоційованого розчину (МАР); моделювати ступень

ближнього хімічного порядку в розглянутих розплавах і здійснити аналіз його впливу на процес утворення аморфних сплавів; моделювати метастабільні фазові перетворення за участю переохолоджених дво- та трикомпонентних розплавів системи Ni–Ti–Hf та провести теоретичну оцінку концентраційної області утворення швидкозагартованих і об'ємних аморфних сплавів (ОАС); моделювати процеси охолодження розплавів у мідному кокілі.

Методи дослідження – високотемпературна ізоперіболічна калориметрія задля експериментального визначення ентальпії утворення рідких сплавів; модель асоційованого розчину (МАР) для теоретичного визначення температурно-концентраційної залежності термодинамічних властивостей розплавів і аналізу параметрів атомного упорядкування в них; CALPHAD-метод для теоретичних досліджень метастабільних фазових перетворень за участю розплавів системи; пакет Novaflow&Solid CV для моделювання швидкості охолодження розплавів.

Наукова новизна отриманих результатів. Вперше досліджено ентальпію змішування рідких сплавів трикомпонентної системи Ni–Ti–Hf за температури 1873 К і показано, що між компонентами розплавів відбувається інтенсивна хімічна взаємодія, наслідком якої є переважно від'ємні значення парціальних ентальпій змішування титану та гафнію і інтегральної ентальпії змішування; вперше в рамках МАР розраховані термодинамічні функції змішування трикомпонентних розплавів системи Ni–Ti–Hf і показано, що для них властиві від'ємні відхилення від ідеальної поведінки; вперше в рамках МАР для розплавів системи Ni–Ti–Hf оцінено ступінь ближнього хімічного порядку як сумарний вміст асоціатів в них і з використанням емпіричного правила прогнозовані концентраційні області одержання аморфних сплавів методом загартування; вперше в рамках CALPHAD-методу, виконано моделювання метастабільних перетворень за участю переохолоджених розплавів Ni–Ti–Hf і показано, що на підставі подібних розрахунків можуть бути коректно оцінені концентраційні

області утворення багатокомпонентних швидкозагартованих і об'ємних аморфних сплавів; вперше методом моделювання з використанням пакета Novaflow&Solid CV показано, що при охолодженні розплавів системи Ni–Ti–Hf в мідному водоохолоджуваному кокоті вибраного розміру можуть бути досягнуті технологічні умови, необхідні для отримання об'ємних аморфних сплавів.

Практична цінність отриманих результатів. Одержані вперше експериментальні дані по термодинамічній властивості розплавів системи Ni–Ti–Hf доповнюють інформацію з термодинаміки багатокомпонентних рідких сплавів аморфоутворюючих систем, поповнюють бази термодинамічних даних і довідникові матеріали. Отримані в роботі наукові результати можуть бути використані фахівцями в галузях теорії металургійних та ливарних процесів, тонкого металургійного синтезу, фізичного матеріалознавства та фізичної хімії. Прогнозовані концентраційні області аморфізації є основою для спрямованого одержання аморфних сплавів і виробів з них.

Наукова апробація результатів роботи. Основні результати були повідомлені на: «Науково-технічній конференції професорсько-викладацького складу, науково-технічних працівників, аспірантів і студентів ДДМА» (м. Краматорськ, 2019 р.); «Перспективні технології, матеріали та обладнання у ливарному виробництві: матеріали VII Міжнародної науково-технічної конференції» (15–18 жовтня 2019 р, Краматорськ, ДДМА).

Ключові слова: ІЗОПЕРИБОЛІЧНИЙ КАЛОРИМЕТР, ЕНТАЛЬПІЯ ЗМІШУВАННЯ, МОДЕЛЬ АСОЦІЙОВАННОГО РОЗЧИНУ, МЕТАСТАБІЛЬНІ ФАЗОВІ ПЕРЕТВОРЕННЯ, ШВИДКОЗАГАРТОВАНІ АМОРФНІ СПЛАВИ, ОБ'ЄМНІ АМОРФНІ СПЛАВИ

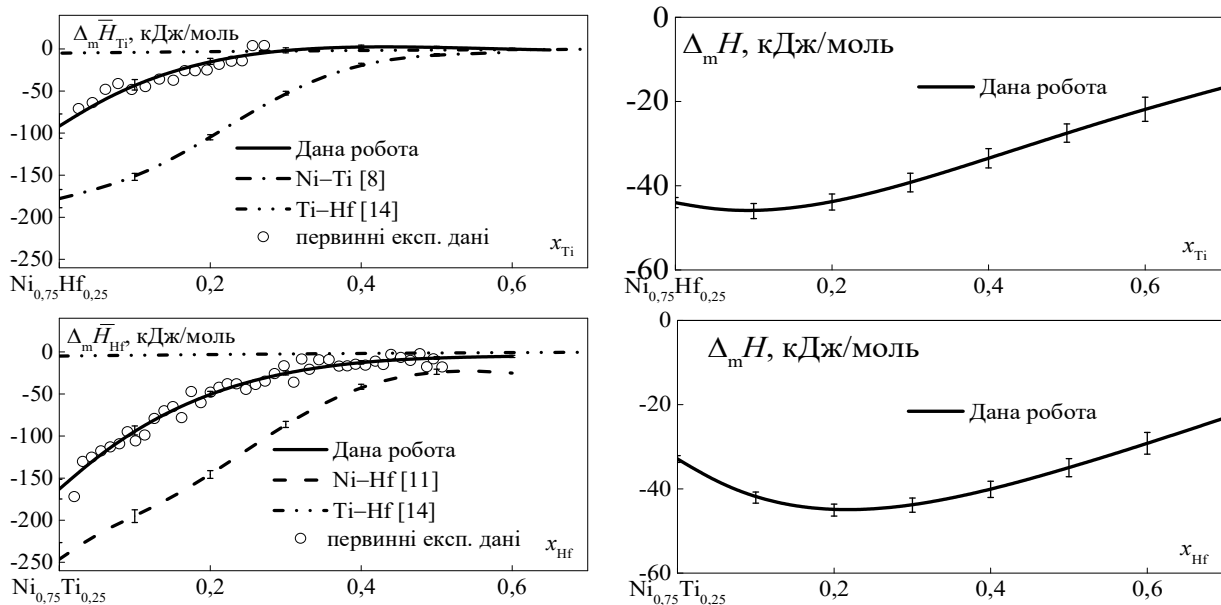


Рисунок 1 – Парціальні ентальпії змішування титану і гафнію (а) та інтегральні ентальпії змішування $\Delta_m H$ (б) рідких сплавів системи Ni–Ti–Hf при температурі 1873 К, кДж/моль

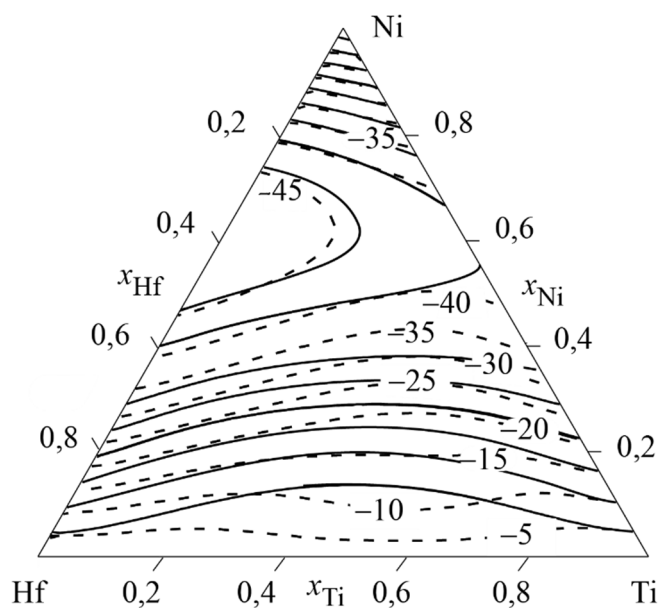


Рисунок 2 – Інтегральна ентальпія змішування розплавів систем Ni–Ti–Hf $\Delta_m H$ (кДж/моль) за 1873 К, розрахована в рамках МАР (штрихові лінії) і експериментальний результат (суцільні лінії)

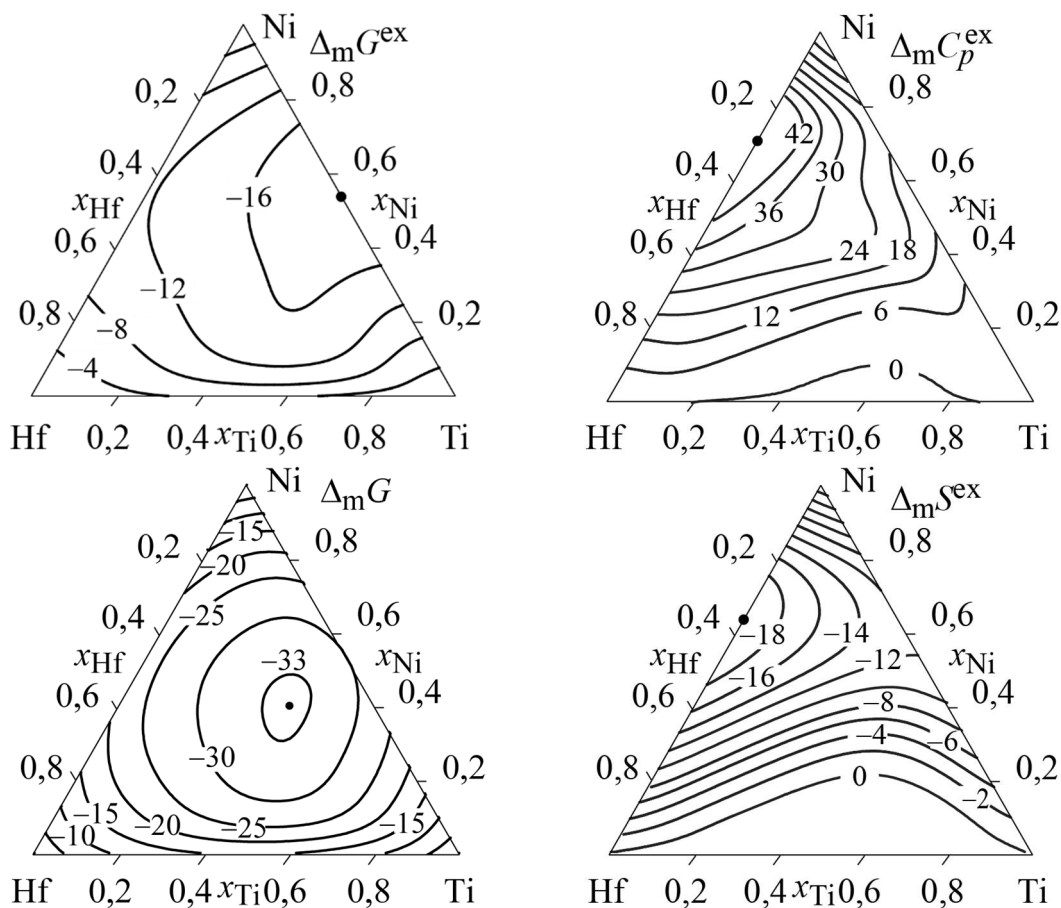


Рисунок 3 – Термодинамічні функції змішування розплавів системи Ni–Ti–Hf, розраховані в рамках МАР за 1873 К: а) $\Delta_m G^{\text{ex}}$, кДж/моль; б) $\Delta_m C_p^{\text{ex}}$, Дж/(моль·К); в) $\Delta_m G$, кДж/моль; г) $\Delta_m S^{\text{ex}}$, Дж/(моль·К)

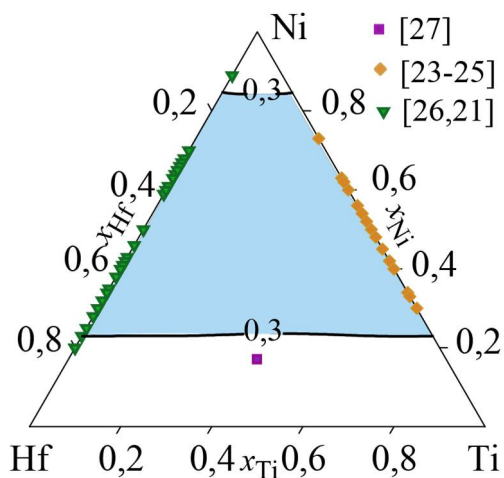


Рисунок 4 – Розраховані при $T = 800$ К ізоконцентрати сумарної долі асоціатів в розплаві $\Sigma x_{\text{as}} = 0,3$ (суцільні лінії) і експериментально встановлені склади аморфних сплавів (різні символи) для системи Ni–Ti–Hf

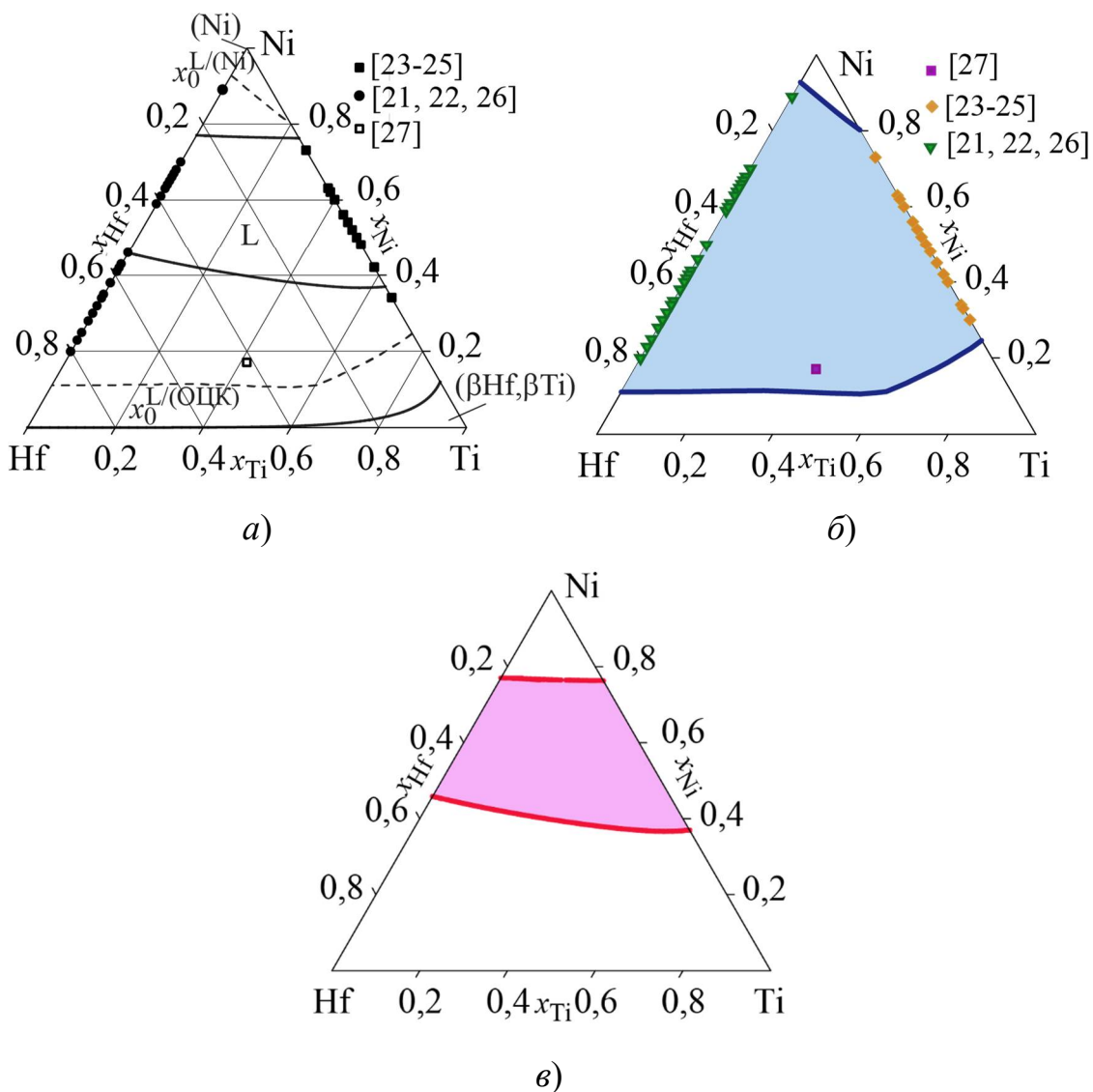


Рисунок 5 – Фазова діаграма метастабільних перетворень за температури 800 К (а), експериментально встановлені склади і прогнозовані концентраційні області отримання швидкозагартованих (б) і об'ємних (в) аморфних сплавів системи Ni–Ti–Hf. Різними символами показані склади аморфних сплавів

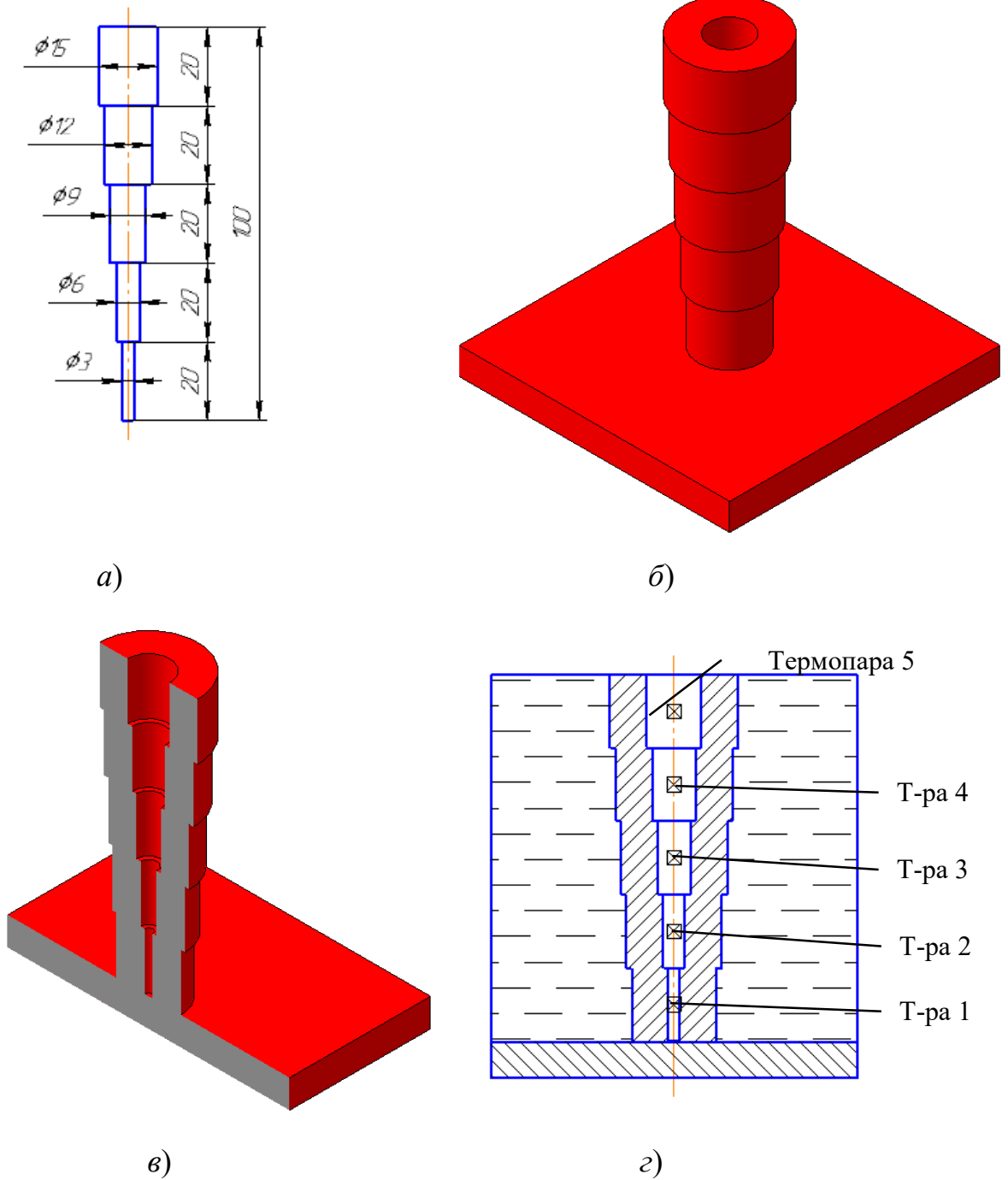


Рисунок 6 – Ескіз моделі виливки «Ступінчаста проба» (а), 3d-модель мідного кокілью з піддоном (б, в), схема області (г), що моделюється

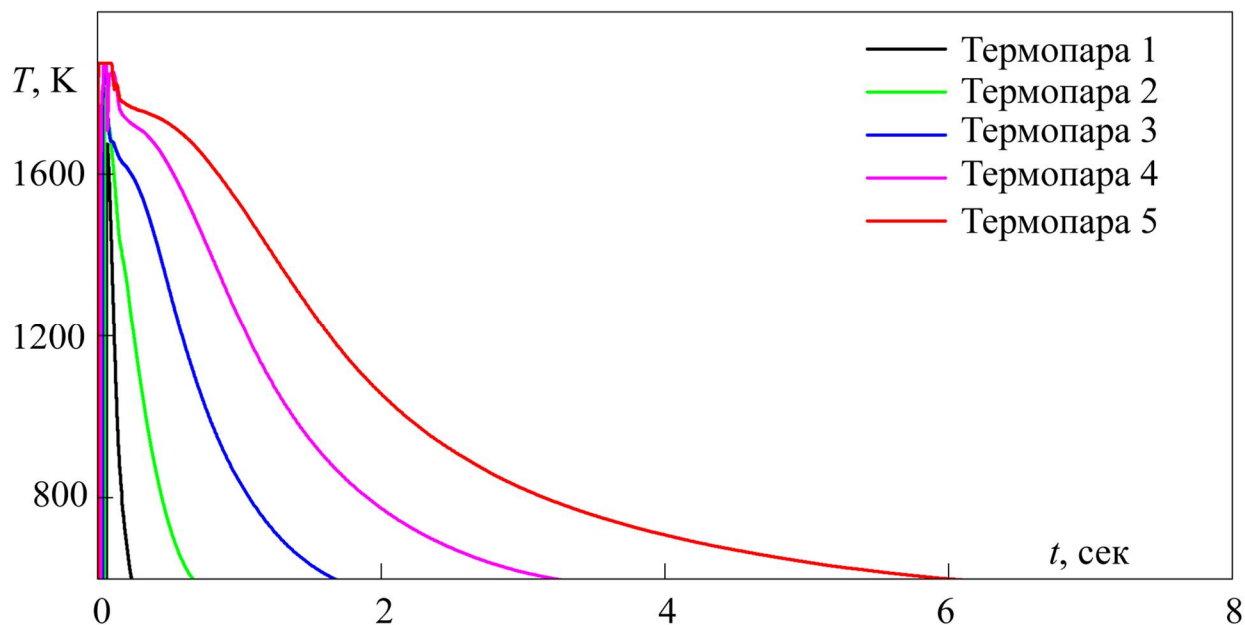


Рисунок 7 – Зміна температури при охолодженні сплаву $\text{Ni}_{60}\text{Ti}_{20}\text{Hf}_{20}$ в мідному водоохолоджуваному кокілі за показаннями віртуальних термопар, розміщених всередині виливки «Ступінчаста проба»

Таблиця 1 – Розраховані миттєва (dT/dt_{\max}) і середня ($\Delta T/dt_{\text{сер}}$, К/с) швидкість охолодження для виливка «Ступінчаста проба»

№ термопар	Діаметр циліндра, мм	dT/dt_{\max} , К/с	$\Delta T/dt_{\text{сер}}$, К/с
1	3	11400	8100
2	6	8500	2500
3	9	4400	1030
4	12	2600	570
5	15	1200	350