

Письма в редакцию

УДК 666.792.34:539.89

В. З. Туркевич*, Д. А. Стратийчук, Д. В. Туркевич

Институт сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля

НАН Украины, г. Киев, Украина

*vturk@ism.kiev.ua

Термодинамический расчет диаграммы состояния системы Al–B–C при давлении 7,7 ГПа

С помощью моделей феноменологической термодинамики с параметрами взаимодействия, полученными на основании экспериментальных данных по фазовым равновесиям при высоких давлениях и температурах, рассчитана диаграмма состояния системы Al–B–C при давлении 7,7 ГПа.

Ключевые слова: диаграмма состояния, высокое давление, высокотвердые композиты

Значительное количество высокотвердой технической керамики с необходимыми функциональными свойствами получают спеканием порошков веществ с ковалентным типом связей: алмаз, кубический нитрид бора, нитриды алюминия и кремния. Соединения системы Al–B–C входят в указанную группу веществ и предоставляют широкие возможности для производства высокотемпературных высокотвердых материалов. Применение высоких давлений позволяет повысить уровень физико-механических свойств этих материалов.

Экспериментальное изучение фазовых равновесий в системе Al–B–C выполнено в [1], а термодинамический расчет – в [2]. Результаты исследований образования фаз в системе Al–B–C при давлениях до 6 ГПа описаны в [3, 4]. Диаграммы состояния двойных систем Al–B, Al–C и B–C при давлении 8 ГПа рассчитаны в [5–7]. Фазовая диаграмма тройной системы Al–B–C при высоких давлениях построена не была.

В настоящей работе с использованием программного пакета Thermo-Calc [8] с помощью моделей феноменологической термодинамики с параметрами взаимодействия, полученными на основании экспериментальных данных по фазовым равновесиям при высоких давлениях и температурах, выполнен термодинамический расчет диаграммы состояния системы Al–B–C при давлении 7,7 ГПа. Используются модели фаз, параметры стабильности и взаимодействия фаз сис-

темы при атмосферном давлении, взятые из [2]. Для расчета фазовых равновесий в двойных системах Al–B, Al–C и B–C при высоких давлениях привлечены результаты [5–7]. Жидкая фаза описана в приближении субрегулярных растворов, объем смешения жидкой фазы тройной системы принят равным нулю. Для описания термодинамического потенциала твердых фаз применен формализм энергии соединений [9]. Барические зависимости мольных объемов фаз представлены приближением Мурнагана [10]. Мольные объемы тройных фаз при стандартных условиях $V_{Al_3B_{48}C_2} = 240,7 \cdot 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$, $V_{Al_{2,1}B_{51}C_8} = 277 \cdot 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$, $V_{AlB_{40}C_4} = 201,2 \cdot 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$, $V_{Al_8B_4C_7} = 145 \cdot 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$ взяты из базы PDF-2 [11]. В связи с отсутствием в литературе данных о модулях всестороннего сжатия, их производных, а также коэффициентах термического расширения для тройных фаз использованы значения для AlB_{12} [5].

Результаты расчета представлены на рис. 1–4.

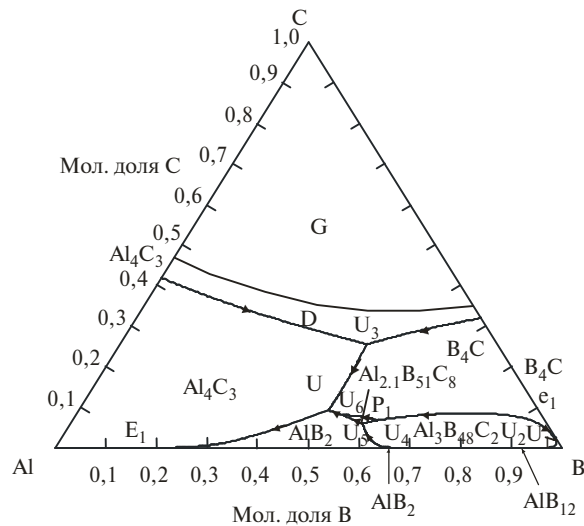


Рис. 1. Проекция поверхности ликвидус диаграммы состояния системы Al–B–C при 7,7 ГПа: G – графит; D – алмаз.

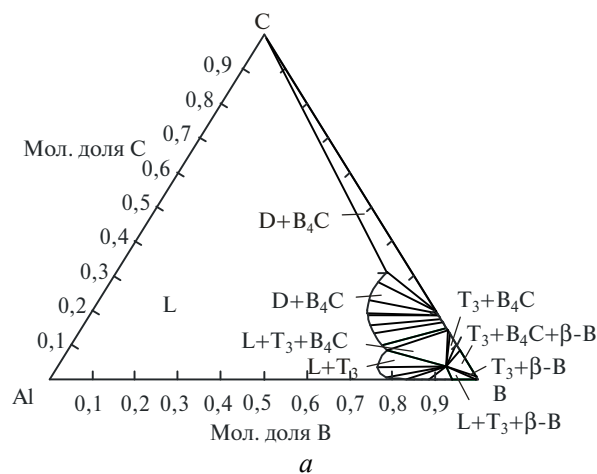


Рис. 2. Изотермические сечения диаграммы состояния системы Al–B–C при 7,7 ГПа и 2400 (а), 2100 (б), 1800 (в) К: T_1 – $Al_{2,1}B_{51}C_8$; T_2 – $AlB_{40}C_4$; T_3 – $Al_3B_{48}C_2$; L – жидкость; G – графит; D – алмаз.

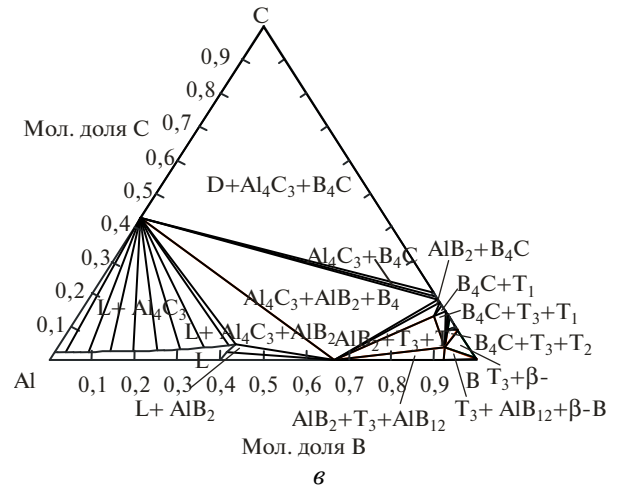
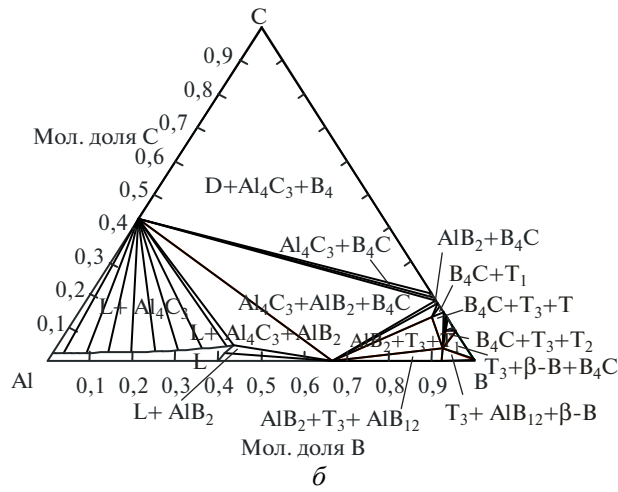


Рис. 2. (Продолжение).

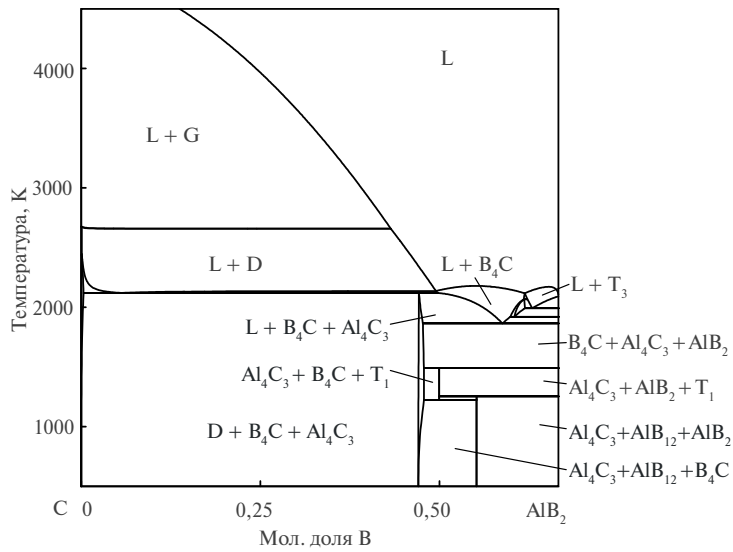


Рис. 3. Политермическое сечение C-AlB₂ диаграммы состояния системы Al-B-C при 7,7 ГПа: T₁ - Al_{2,1}B₅₁C₈; T₃ - Al₃B₄₈C₂; L - жидкость; G - графит; D - алмаз.

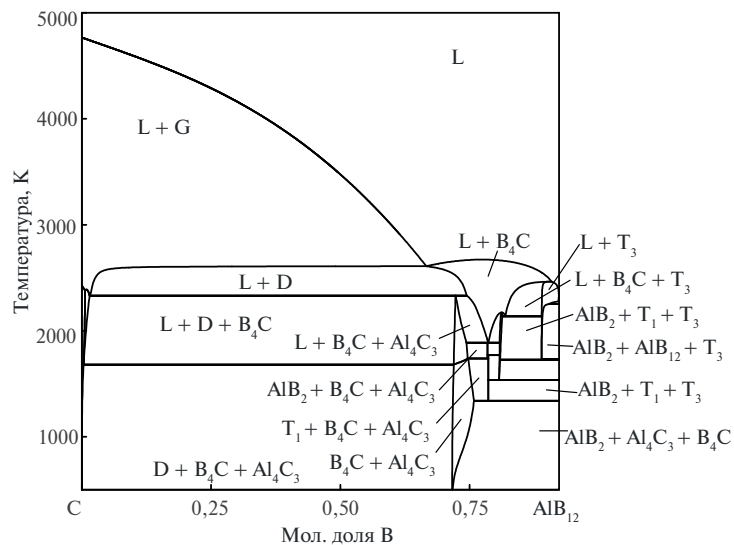


Рис. 4. Политермическое сечение C–AlB₁₂ диаграммы состояния системы Al–B–C при 7,7 ГПа: T₁ – Al_{2,1}B₅₁C₈; T₃ – Al₃B₄₈C₂; L – жидкость; G – графит; D – алмаз.

Анализ изотермических и политермических сечений диаграммы состояния системы Al–B–C при 7,7 ГПа показывает, что спекание алмаза с боридами алюминия будет сопровождаться кристаллизацией карбида Al₄C₃ из жидкой фазы. В случае спекания алмаза с AlB₂ количество образовавшегося Al₄C₃ будет значительным. Поскольку карбид Al₄C₃ является гигроскопичным, трудно ожидать длительного времени жизни спеченных композитов в случае их хранения на воздухе. В то же время в сечении Al–B₄C при содержании бора более 50 % (ат.) равновесие жидкой фазы с карбидом алюминия отсутствует, что делает возможным получение стойких композитов при пропитке порошков карбида бора жидким алюминием.

Исследования проводили при поддержке агентства EASME в рамках EU Framework Programme for Research and Innovation – Horizon 2020, грант 689279 – Flintstone2020.

За допомогою моделей феноменологічної термодинаміки з параметрами взаємодії, отриманими на підставі експериментальних даних з фазових рівноваг при високих тисках і температурах, розрахована діаграма стану системи Al–B–C під тиском 7,7 ГПа.

Ключові слова: діаграма стану, високий тиск, високотверді композити

Phase diagram of the Al–B–C system has been calculated at pressure of 7.7 GPa using models of phenomenological thermodynamics with interaction parameters derived from experimental data on phase equilibria at high pressures and high temperatures.

Keywords: phase diagram, high pressure, high hardness composites

1. *Viala J. C., Bouix J., Gonzalez G., Esnouf C.* Chemical reactivity of aluminium with boron carbide // *J. Mater. Sci.* – 1997. – **32**. – P. 4559–4573.
2. *Wen H.* Thermodynamic calculations and constitution of the Al–B–C–N–Si–Ti system. – Thesis, Univ. Stuttgart, 1993. – P. 1–183 (in German).
3. *Стратийчук Д. А., Тонкошкура М. А., Белявина Н. Н., Туркевич В. З.* Фазообразование в тройной Al–B–C системе в условиях высоких давлений и температур // *Сверхтв. материалы.* – 2011. – № 5. – С. 3–13.

4. Стратийчук Д. А., Туркевич В. З., Тонкошкура М. А. и др. Использование высоких давлений для получения дисперсных композитов в системе Салм-В₄С-АlB₂ // Вісн. Нац. техн. ун-ту "ХПІ". – 2012. – № 59. – С. 127–132.
5. Turkevich V. Z., Stratiichuk D. A., Tonkoshkura M. A., Bezhenar N. P. Thermodynamic calculation of the Al-B system at pressures to 8 GPa // J. Superhard Mater. – 2014. – **36**, N 6. – P. 437–439.
6. Turkevich V., Garan A., Kulik O., Petrusha I. Phase diagram and diamond synthesis in the aluminum-carbon system at a pressure of 8 GPa // NATO Science Series Book "Innovative Superhard Materials and Sustainable Coatings for Advanced Manufacturing" / Ed. by J. Lee and N. Novikov. – Dordrecht: Springer, 2005. – P. 335–343.
7. Туркевич В. З., Соложенко В. Л. Термодинамический расчет диаграммы состояния системы В-С при давлениях до 24 ГПа // Сверхтв. материалы. – 2014. – № 5. – С. 80–82.
8. Andersson J.-O., Helander T., Höglund L. et al. Thermo-Calc & DICTRA, computational tools for materials science // Calphad. – 2002. – **26**, N 2. – P. 273–312.
9. Hillert M. The compound energy formalism // J. Alloys Compd. – 2001. – **320**, N 2. – P. 161–176.
10. Murnaghan F. D. The compressibility of media under extreme pressures // Proc. Nation. Acad. Sci. USA. – 1944. – **30**, N 9. – P. 244–247.
11. JCPDS-ICDD (Joint Committee on Powder Diffraction Standards – International Centre for Diffraction Data). – PDF-2 Database, 1997.

Поступило 02.09.16