

## РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУР ЛИКВИДУС И СОЛИДУС В ТРОЙНЫХ СПЛАВАХ ПРИГРАНИЧНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ

Аникин А.И., Усков Д. И.,  
научный руководитель д-р техн. наук. Беляев С. В.  
Сибирский федеральный университет

Целью настоящей работы является использование методики расчета температур ликвидус и солидус в тройных сплавах приграничных твердых растворов.

Предлагаемое решение основывается на принципе учета степени снижения температуры плавления чистого компонента, составляющего основу сплава ( $\Delta T_i$ ), при введении в него того или иного количества легирующего элемента. [1]

$\Delta T_i$  – величина векторная, определяющая значение и направление изменения температуры плавления в зависимости от количества вводимых в сплав компонентов. Суммирование влияния изменения температуры от введения нескольких компонентов должно производиться по правилу сложения векторов.

Используя диаграммы двухкомпонентных систем в областях кристаллизации приграничных твердых растворов, в которых поверхности, определяющие геометрическое место точек ликвидус и солидус, представляются непрерывными плавными криволинейными поверхностями второго порядка. Предлагается определять в трехкомпонентной системе температурные значения ликвидус и солидус по правилу параллелограмма:

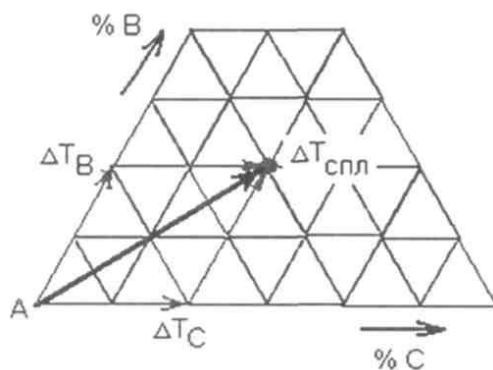
$$\Delta T_{\text{спл}}^2 = \Delta T_{\text{в}}^2 + \Delta T_{\text{с}}^2,$$

где  $\Delta T_{\text{спл}}$  – значение снижения температуры плавления сплава,

$\Delta T_{\text{в}}$  – снижение температуры плавления компонентом В,

$\Delta T_{\text{с}}$  – снижение температуры плавления компонентом С.

$\Delta T_{\text{в}}, \Delta T_{\text{с}}$  – снижения температур, измеренные отдельно по ликвидусу и солидусу двухкомпонентных диаграмм металла основы (А) со вторым (В) и третьим (С) компонентом.



**Рис.1.** Схема расчета суммарного эффекта снижения температур плавления (ликвидус и солидус) в трехкомпонентной системе А-В-С по известным значениям  $\Delta T_{\text{в}}$  и  $\Delta T_{\text{с}}$  в двойных системах (А – основа сплавов)

Отсюда суммарное снижение температуры плавления для сплава заданного состава определяется как:  $\Delta T_{\text{спл}}^2 = \sqrt{\Delta T_{\text{в}}^2 + \Delta T_{\text{с}}^2}$

и температура плавления (отдельным расчетом для ликвидуса и солидуса):

$$T_{\text{пл}} = T_0 - \Delta T_{\text{спл}},$$

где  $T_0$  – температура плавления металла основы.

В многокомпонентной системе совокупность температур ликвидус и солидус так же, как и в трехкомпонентной системе, может быть выражена геометрическим местом точек, соответствующим криволинейной непрерывной поверхности на политермических сечениях диаграммы при фиксированных значениях концентрации иных компонентов, кроме изменяемых в рассматриваемом сечении.

Суммарный геометрический образ пространства многокомпонентной системы можно представить в виде математического выражения:

$$\Delta T_{\text{спл}}^2 = \Delta T_2^2 + \Delta T_3^2 + \dots + \Delta T_{n-1}^2 + \Delta T_n^2,$$

где  $n$  – число компонентов в системе.

Суммарное снижение температуры плавления для сплава заданного состава и температура плавления определяются как:

$$\Delta T_{\text{спл}} = \sqrt{\Delta T_2^2 + \Delta T_3^2 + \dots + \Delta T_{n-1}^2 + \Delta T_n^2},$$

и соответственно:

$$T_{\text{пл}} = T_0 - \Delta T_{\text{спл}}$$

По методике, рассмотренной выше, на основе использования информации из двухкомпонентных диаграмм, были рассчитаны температуры плавления и кристаллизации для некоторых палладиевых сплавов.

С целью получения возможности анализа трехкомпонентных и многокомпонентных систем с использованием расчетных методов авторами работы [1] было разработано программное обеспечение для расчета температур ликвидус и солидус, позволившее построить ряд политермических разрезов трехкомпонентных систем на основе палладия.

В основе программного обеспечения лежит связь между температурами плавления-кристаллизации сплавов в двухкомпонентных, трех- и многокомпонентных системах. Для работы с этой программой требуются исходные данные, которыми являются температуры ликвидус и солидус в зависимости от атомной концентрации легирующего компонента на соответствующей двойной диаграмме металла основы с рассматриваемым легирующим компонентом.

Пример определения зависимости температур ликвидус и солидус от содержания легирующих компонентов в сплавах на основе палладия приведен на рисунке 2. Здесь рассмотрена диаграмма палладий – серебро, где нанесены вертикальные линии через каждые два атомных процента серебра. Точки пересечения этих вертикальных линий с ликвидусом и солидусом диаграммы определяют значения температур, которые перенесены на лист программы Excel и использованы для описания функцией «ТЕНДЕНЦИЯ».

Аналогичным образом обработаны двухкомпонентные диаграммы палладия с медью, кремнием, оловом, которые рассматриваются в работе, как легирующие элементы в сплавах на основе палладия.

В основу расчетов закладываются фактические сведения о положении линий ликвидус и солидус в зависимости от атомной концентрации легирующего компонента на соответствующей двойной диаграмме металла основы с рассматриваемым легирующим компонентом, в пределах тех концентраций на диаграмме, которые позволяющих описать эти зависимости относительно простыми функциями линейного

приближения, которые, в свою очередь, содержатся в составе программного обеспечения Excel. Такими функциями являются функции «РОСТ» и «ТЕНДЕНЦИЯ».

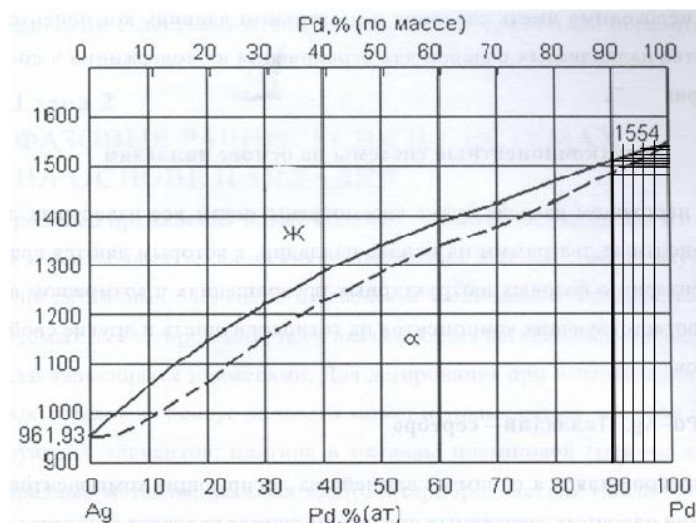


Рис. 2.. Схема обработки линии ликвидус и солидус двухкомпонентной диаграммы системы Pd-Ag [1].

Эти стандартные функции позволяют достаточно точно определять автоматически значение снижения температуры  $\Delta T$  для любого заданного содержания соответствующего компонента, которые затем используются для вычислений температуры линий ликвидус и солидус для заданного химического состава многокомпонентного сплава в соответствии с вышеприведенной методикой.

Программа учитывает, что легирующие элементы могут не только снижать температуру плавления, но и повышать ее. Для этого в программу вводится ряд определенных вычислительных операций, предусматривающих это явление.

Составы сплавов в большинстве случаев на практике выражаются в массовых процентах. Суммирование эффектов снижения векторных температурных эффектов следует выполнять в атомных процентах.

В программу введена подпрограмма для пересчета массовых процентов в атомные, которые затем используются для определения эффекта снижения температур плавления-кристаллизации каждым вводимым в сплав легирующим компонентом.

Подпрограмма построена на вычислениях по формулам, определяющим соответствующие пересчеты.

Пересчет массовых процентов в атомные производится по формуле:

$$a = \frac{\frac{a}{A_1} * 100\%}{\frac{a}{A_1} + \frac{b}{B_1}} \% \text{, атом.}$$

Обратный пересчет атомных % в массовые производится по формуле:

$$a = \frac{A_1}{A_1 \alpha + B_1 \beta} \times 100\% \text{ масс. ,}$$

где  $A_1, B_2$ - атомные веса компонентов  $A$  и  $B$ ;

$\alpha, \beta$  - атомные проценты компонента  $A$  и  $B$ ;

$a, b$  - массовые проценты компонента  $A$  и  $B$ .

Далее реализовано программирование соответствующих ячеек электронных таблиц, позволяющих определять значения снижения температур плавления заданным

количеством каждого из компонентов многокомпонентной системы по отношению к палладию, векторное суммирование этих эффектов в соответствии с вышеописанной схемой и, наконец, определение требуемой температуры ликвидус и солидус.

На рисунке 3 приведен заглавный лист программы для расчета температур ликвидус и солидус конкретных сплавов по заданному их химическому составу.

Верхние строки листа занимают две подпрограммы пересчета атомных процентов в массовые и обратного пересчета массовых процентов в атомные. Выделенная полоса второй подпрограммы является строкой ввода химического состава сплава для определения его температуры ликвидус. Результат расчета сразу высвечивается в ячейке C17 или C19 в зависимости от характера влияния легирующего компонента на температуру плавления (снижение или увеличение).

В строках от 14 до 29 располагаются фактические данные об изменении температуры линий ликвидус в зависимости от содержания каждого из компонентов, в соответствии с двойными диаграммами фазового равновесия, аппроксимированные одной из стандартных функций, имеющихся в распоряжении программного средства Excel. Использование таких функций позволяет автоматически определить степень снижения (увеличения) температуры ликвидус, вызванного каждым легирующим элементом, и просуммировать эффект для совокупности всех легирующих компонентов по вышеописанной методике.

1	Легирующие компоненты в сплавах на основе Pd	Суммы	Pd	Al	Ag	Cu	Au	
2	Содержание компонентов, % (атомных)	100	72	28	0	0	0	
3	Атомный вес компонентов		106,4	26,98	107,87	63,54	196,967	
4	Произведение атомного веса на атомные проценты	8416,24	7699,8	755,44	0	0	0	
5	Содержание компонентов, % (по массе)	100	91,02402	8,97598	0	0	0	
6								
7								
8	Атомный вес компонентов		106,4	26,98	107,87	63,54	196,967	
9	Отношение массовых процентов к атомному весу	0,9182342	0,892887	0	0	0	0,026396	
10	Содержание компонентов, % (атомных)	100	97,23548	0	0	0	2,764517	
11								
12								
13	Значение ликвидуса в двойных системах с Pd	T на Pd	Tлиня	C, % ат.	Tлиня	C, % ат.	Tлиня	C, % ат.
14		1555	1553	0	1555	0	1555	0
15			1512	2	1560	1	1543	2
16				4	1545	2	1532	4
17		1550,369	1432	6	1540	3	1521	6
18		или	1392	8	1535	4	1509	8
19		#ЧИСЛО!	1351	10	1530	5	1499	10
20			1305	12	1524	6	1486	12
21			1254	14	1518,8	7	1474	14
22			1219	16	1513,7	8	1462	16
23			1173	18	1508,5	9	1450	18
24			1133	20	1504	10	1438	20
25			1098	22	1498,9	11	1426	22
26			1070	23,5	1494,5	12	1414	24
27					1489,4	13	1404	26
28					1484	14	1395	28
29					1480	15	1387	30
30					0	0	0	0
31					1554,941	100% 100	1554,973	100% 100

Рис.3. Головной лист программы для расчета температур ликвидус и солидус многокомпонентных систем

Использованное программное обеспечение дает возможность получать большие массивы данных по температурам ликвидус и солидус многокомпонентных сплавов, что является основой для построения политермических и изотермических разрезов и сечений соответствующих трех- и многокомпонентных диаграмм.

#### Список источников

1. Биронт В. С., Довженко Н. Н., Мамонов С. Н., Тихонов И. В., Ходюков Б. П. *Материаловедение. Металловедение палладия и его сплавов: Учебное пособие / ГУЦМиЗ. – Красноярск, 2007. – 152с.*

2. *Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник: В 3т.: Т. 3. Кн. I / Под общ. Ред. Н. П. Лякишева. – М.: Машиностроение, 2001. – 872 с.: ил.*