

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ В ПРОЦЕССЕ СПЕКАНИЯ ПОРОШКОВЫХ ПРЕССОВОК Al-Fe₂O₃-Fe и Ti-Fe₂O₃-Fe-C

Сафронова В.С.¹, Князева А.Г.², Коростелева Е.Н.²

¹ТПУ, ИШНПТ, зр. 4АМ4К,

e-mail: vss97@tpu.ru

²ИФПМ СО РАН,

e-mail: anna-knyazeva@mail.ru, elenak@ispms.ru

Введение

Композиционные материалы (КМ) обладают уникальными свойствами, неприсущие отдельным составляющим компонентам. Структурно композиционные материалы – это гетерогенные системы, состоящие из матрицы и армирующих элементов. Матрица под воздействием нагрузок распределяет напряжения, вследствие чего материал более устойчив к возникновению дефектов, чем простые материалы, а упрочняющие составляющие обуславливают повышенные прочностные и жесткостные характеристики. Металломатричные композиты, как правило, содержат в составе интерметаллиды, имеющие упорядоченную структуру и относительно высокую температуру плавления, и тугоплавкие включения, такие как карбиды, оксиды и т. д., из-за которых материал имеет высокую жаропрочность. Например, ключевым вопросом в повышении температуры рабочего тела в газотурбинных двигателях является выбор высокотемпературных материалов, на роль которых подходят композиты на основе Nb-Si [1]. Также в электротехнике важную роль играют разрывные контакты, которые должны обладать высокой стойкостью к эрозии. Для сильноточных разрывных контактов применяются металломатричные композиты с тугоплавкими включениями, в качестве которых используют тугоплавкие металлы (вольфрам, молибден), либо тугоплавкие соединения. Из медноматричных композитов с упрочняющими частицами, наиболее детально исследованы композиты с карбидом титана (TiC-Cu) и диборидом титана (TiB₂-Cu). Они имеют высокую температуру плавления и хорошую совместимость с медной матрицей [2]. При утилизации отходов машиностроительных производств стальную стружку, содержащую оксиды железа, можно использовать как компонент в смеси с титаном и алюминием для получения композитов, когда упрочняющие частицы синтезируются в условиях спекания.

В настоящей работе предложены термо-кинетические модели спекания порошков состава Al-Fe₂O₃-Fe и Ti-Fe₂O₃-Fe-C.

Эксперимент

В условиях эксперимента порошковые компакты, предварительно подвергшиеся шаровому измельчению и прессованию, помещали в вакуумную печь и спекали на протяжении часа. Спекание исследовано на примере порошковых композиций для разных вариантов сочетания компонентов: а) Ti + (Fe + Fe₂O₃ + C) → 40 вес. % Ti + 60 вес. % (Fe + Fe₂O₃ + C); б) Fe + Al + Fe₂O₃ → 25 вес. % Al + 75 вес. % (Fe + Fe₂O₃). Обнаружено, что продукт спекания имеет сложный фазовый состав.

Предварительный анализ [3] показывает, что в смесях термодинамически возможны реакции результатом которых ожидается металломатричный композит с упрочняющими оксидными частицами. В табл. 1 приведены химические реакции, которые вероятнее всего протекают в прессовках.

Таблица 1

Al-Fe ₂ O ₃ -Fe	Ti-Fe ₂ O ₃ -Fe-C
Al + Fe = FeAl (V)	3Ti + 2 Fe ₂ O ₃ = 3TiO ₂ + 4Fe (XI)
FeAl + Al = FeAl ₂ (VI)	Ti + Fe = TiFe (XII)
FeAl + 2Fe = Fe ₃ Al (VII)	TiFe + Ti = Ti ₂ Fe (XIII)
FeAl ₂ + Al = FeAl ₃ (VIII)	TiFe + Fe = TiFe ₂ (XIV)
FeAl ₂ + FeAl ₃ = Fe ₂ Al ₅ (IX)	Ti + C = TiC (XV)
Al + Fe ₂ O ₃ = Al ₂ O ₃ + Fe (X)	

Математическая постановка

В условиях эксперимента [4,5] размер образца пренебрежимо мал по сравнению с объемом печи, поэтому допустимо использовать нульмерную постановку задачи, в которой не учитывается распределение температуры по объему прессовки. В этом случае изменение температуры описывается уравнением баланса тепла, а изменение состава – системой кинетических уравнений, соответствующих выбранным последовательностям стадий.

Предполагается, что скорости реакций зависят от температуры по закону Аррениуса, а от концентраций в соответствии с законом действующих масс. В модели учитывается разная скорость нагрева, плавление и связанное с этим изменение теплоемкости с повышением температуры аналогично [6].

Для расчета термодинамических и кинетических параметров, таких как, энтропия образования, энтальпия, энергия активации, предэкспоненциальный фактор в уравнении Аррениуса, использовались полуэмпирические и теоретические методы, изложенные в [7–9].

Полученные для каждой порошковой смеси дифференциальные уравнения решали неявным методом Эйлера 1-го порядка точности, являющимся абсолютно устойчивым. Примеры расчетов приведены на рис. 1:

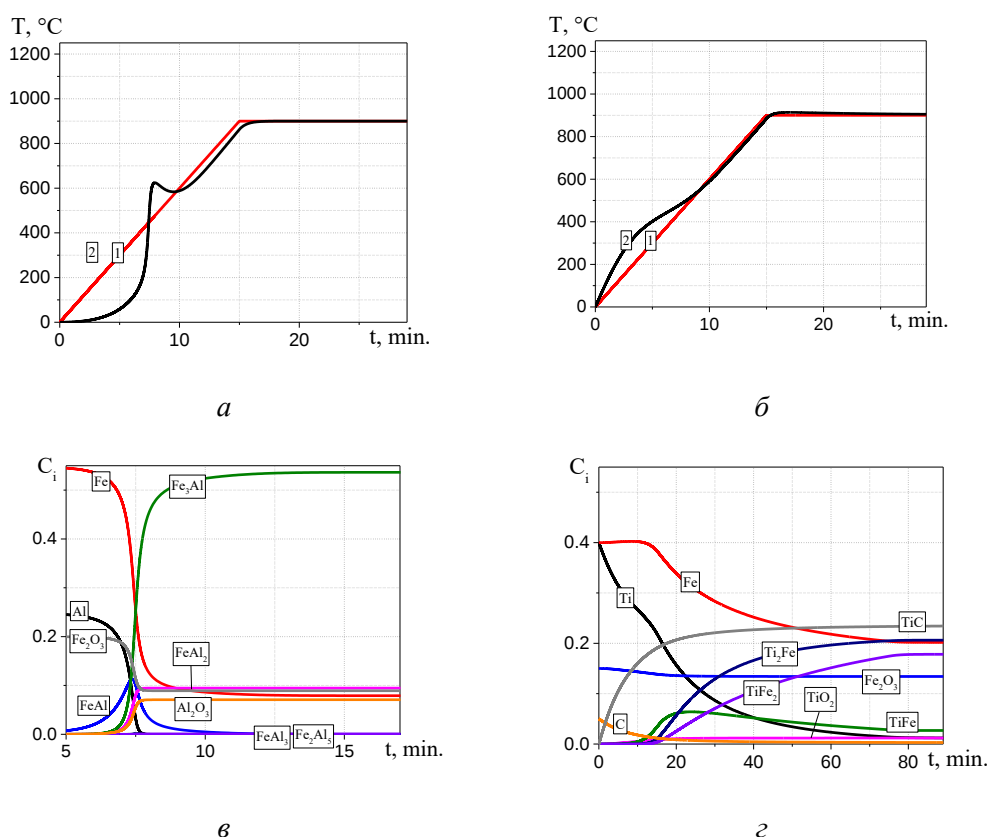


Рисунок 1 – для состава: Fe+Al+Fe₂O₃: (а) – изменение температуры, (в) – изменение концентраций; для состава Ti+(Fe+Fe₂O₃+C): (б) – изменение температуры, (г) – изменение концентраций

Заключение

Полученная численная модель позволяет проследить ход фазообразования в порошковых прессовках выбранного состава. Результаты моделирования можно сравнивать с результатами эксперимента с целью идентификации параметров и последующего предсказания конечного состава.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда и субсидии Администрации Томской области, грант № 22-13-20031, <https://rscf.ru/project/22-13-20031/>

Список литературы

1. Высокотемпературные композиты на основе системы Nb–Si, армированные силицидами ниобия / Каблов Е.Н., Светлов И.Л., Карпов М.И., Нейман А.В., Мин П.Г., Карачевцев Ф.Н. // Материаловедение. – 2017. – № 2. – С. 24–32.
2. Прибытков Г.А. Исследование продуктов синтеза в механоактивированных смесях титанидов меди с углеродом / Г.А. Прибытков, А.В. Барановский, В.В. Коржова, И.А. Фирсина, К.О. Акимов, В.П. Кривопапов // Химическая физика и мезоскопия. – 2024. – Т. 26, № 1. – С. 103–112.
3. Лякишев Н.П. Диаграмма состояния двойных металлических систем: справочник, в 3 т. – Москва: Машиностроение, 1996. – Т. 1. – 992 с.
4. Коростелева Е.Н., Князева А.Г., Анисимова М.А., Николаев И.О. // Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. – 2023. – 17, № 2. – С. 5–13.
5. Коростелева Е.Н., Князева А.Г., Николаев И.О. Особенности фазообразования в условиях реакционного спекания с восстановительной стадией // Физическая мезомеханика. – 2022. – Т. 25, № 5.
6. Сафронова В.С. Исследование фазообразования и сопутствующих процессов при реакционном спекании порошков Ti + CuO / В.С. Сафронова, А.Г. Князева, Е.Н. Коростелева // XI Информационная школа молодого ученого : Сборник научных трудов, Екатеринбург, 18–21 сентября 2023 года. – Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2023. – С. 255–264.
7. Knyazeva, A.G. Simulation of the synthesis of multiphase composites on a substrate, taking into account the staging of chemical reactions / A.G. Knyazeva, O.N. Kryukova // Applied Solid State Chemistry. – 2019. – No. 1(6). – P. 32–44. – DOI: 10.18572/2619-0141-2019-1-32-44.
8. Glesson S., Laidler K., Eyring G. The theory of absolute speeds. Moscow: Publishing house of foreign. lit., 1948. – 600 p.
9. Miedema A.R., Chatel P.F., Boer F.R., de Chatel P.F., de Boer F.R., Cohesion in alloys – fundamental of a semi-empirical model // Physica B. – 1980. – 100. – P. 1–28.