

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ ДВОЙНЫХ СПЛАВОВ

Ефимова Е.Д.

Руководитель - доцент, к.ф.-м.н. Русаков Г.М.

ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург,

kapitu@mail.ru

В настоящей работе дано описание модели фазовых превращений в двойных сплавах, основанной на концепции неравновесного термодинамического потенциала, и рассмотрены приложения этой модели к описанию плавления и расслоения в бинарных системах.

Удельный неравновесный термодинамический потенциал двойного сплава $G(c, T, \varphi)$ моделируется как сумма избыточной свободной энергии регулярного раствора с положительной энергией (энтальпией) смешения ε и полиномиального выражения от скалярного параметра порядка φ :

$$G(c, T, \varphi) = G_{reg}(c, T) + \varepsilon c(1-c) + \sum_{i=1}^4 g_i \varphi^i$$

Последнее слагаемое описывает фазовый переход первого рода на некоторой линии, заданной условием $p(c, T) = 1/2$, в плоскости температура-концентрация. Таким образом, эта линия является бинодалью двух возможных фаз сплава с замороженным случайным размещением атомов и делит его температурно-концентрационную плоскость на две части: область с равновесным значением $\varphi = 0$ (симметричная фаза) и область с равновесным значением $\varphi = 1$ (несимметричная фаза). Параметр порядка данной модели φ может быть интерпретирован как маркер двух соответствующих состояний гомогенного раствора с подавленным расслоением (распадом). Линии, заданные уравнениями $p(c, T) = 0$ и $p(c, T) = 1$, определяют на температурно-концентрационной плоскости сплава с замороженным составом спинодали (линии потери устойчивости фаз по отношению к изменению параметра порядка φ) симметричной и несимметричной фаз соответственно. Удельные свободные энергии $G_{\varphi=0}(c, T)$ и $G_{\varphi=1}(c, T)$ для этих фаз модели имеют вид:

$$G_{\varphi=0}(c, T) = G_{reg}(c, T), \quad G_{\varphi=1}(c, T) = G_{reg}(c, T) + g(2p(c, T) - 1).$$

В приложении модели к плавлению естественно связать симметричную фазу с жидким состоянием, а несимметричную фазу с кристаллическим. Тогда для «запуска» модели нужно конкретизировать функциональный вид выражения $p(c, T)$. При моделировании сплава с эвтектическим плавлением в простейшем варианте функция $p(c, T)$ может

быть задана соотношением $p(c, T) = 1/2 + a[T - [T_1 + (c_0 - c)^2(T_2 - T_1)]]$.
 Условие $p(c, T) = 1/2$, задает линию бинодали жидкого и твердого раствора на температурно-концентрационной плоскости сплава с подавленным расслоением в виде параболы с вершиной в точке (c_0, T_1) , что проиллюстрировано на рис.1. Для данного типа плавления выбрано $c_0 = 0,3$; $T_1 = 1500$; $T_2 = 2200$.

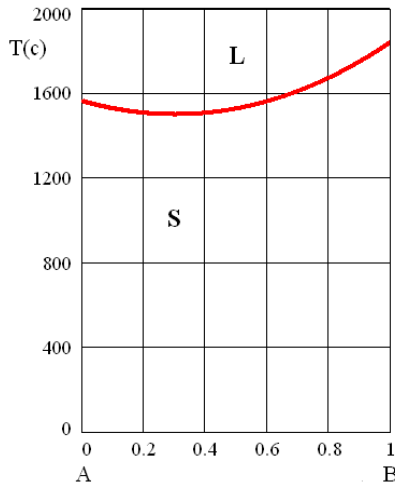


Рис. 1

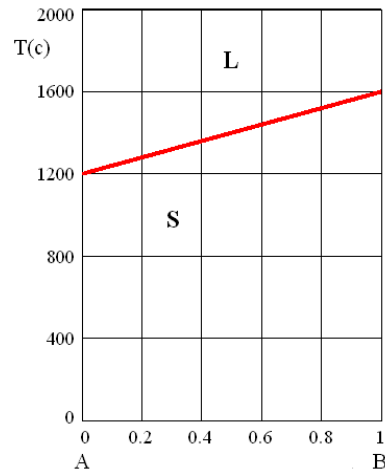


Рис.2

При моделировании сплава с перитектическим плавлением функцию $p(c, T)$ можно выбрать в виде $p(c, T) = 1/2 + a[T - [T_1 + c(T_2 - T_1)]]$.
 Условие $p(c, T) = 1/2$, определяющее области равновесного существования жидкой и твердой фаз на температурно-концентрационной плоскости сплава с подавленным расслоением, дает ее границу в виде наклонной прямой, пересекающей координатные оси в точках $(0, T_1)$ и $(1, T_2)$, как показано на рис.2. Для данного типа плавления выбрано $T_1 = 1200$; $T_2 = 1600$.

Таким образом, для двух рассматриваемых случаев, после фиксации указанных выше параметров, в термодинамическом потенциале модели остаются два независимых параметра. Это энергия смешения ε , которая определяет температуру Курнакова (например, для жидкой фазы всегда выполняется стандартное соотношение $T_K = \varepsilon/2$) и безразмерный параметр $\tilde{g} = ga$, который задает половину скачка энтропии при плавлении. Согласно известному эмпирическому правилу скачок энтропии на атом при плавлении металлов близок к единице ($\Delta S \approx 1$), поэтому параметр \tilde{g} всегда принимался равным 0,5.

Варьируя единственный оставшийся параметр модели ε , в рамках стандартной процедуры расчета равновесия фаз в сплавах удастся получить по три различных типа равновесных фазовых диаграмм (ФД) температура-состав для двух типов плавления двойных систем.

1. ФД состояния системы с непрерывным рядом твердых растворов при высоких температурах и ограниченной растворимостью компонентов в

области низких температур (рис.3). Параметр модели $\varepsilon = 1400$ К.

2. ФД с эвтектическим превращением и ограниченными твердыми растворами (рис.4). Параметр модели $\varepsilon = 3100$ К.

3. ФД с двумя тройными равновесиями - монотектическим и эвтектическим (рис.5). Параметр модели $\varepsilon = 3600$ К.

4. ФД состояния системы с неограниченной растворимостью компонентов при высоких температурах и расслоением твердого раствора при низких температурах (рис.6). Параметр модели $\varepsilon = 1800$ К.

5. ФД состояния системы с перитектическим превращением (рис.7). Параметр модели $\varepsilon = 2800$ К.

6. ФД состояния системы с двумя тройными равновесиями - монотектическим и перитектическим (рис.8). Параметр модели $\varepsilon = 3400$ К.

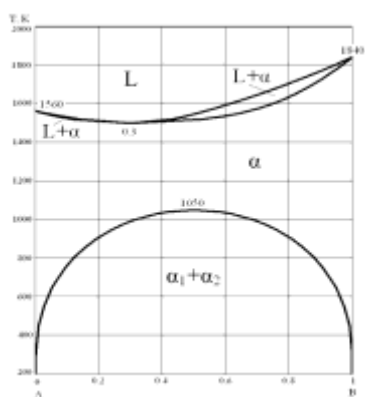


Рис.3

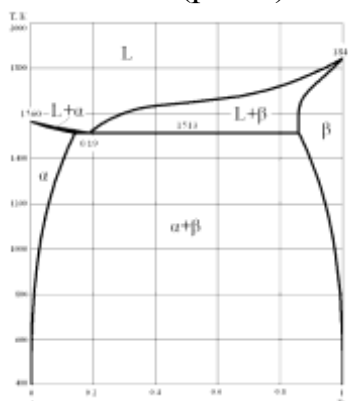


Рис.4

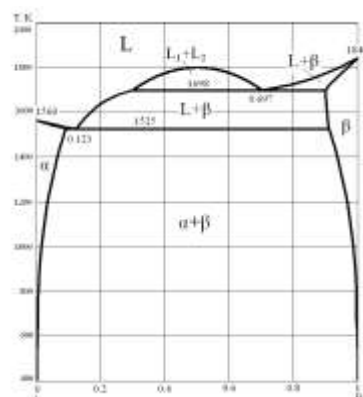


Рис.5

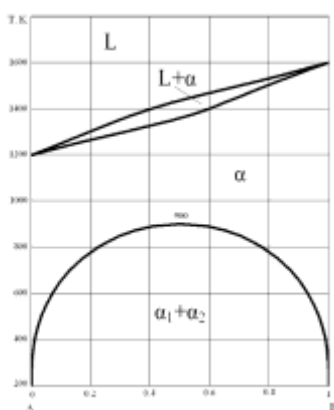


Рис.6

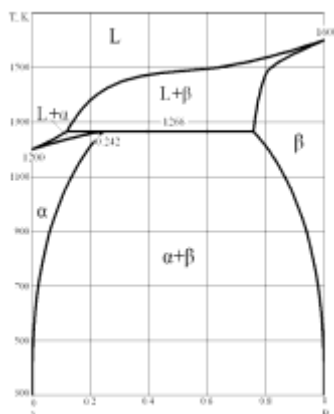


Рис.7

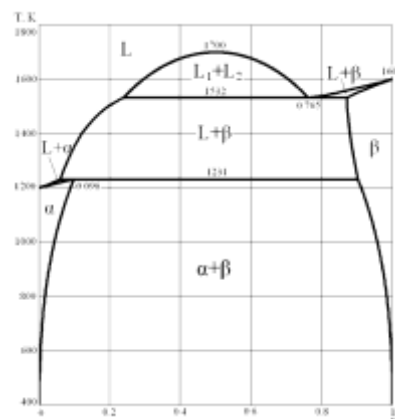


Рис.8

Таким образом, предложена предельно простая модель для описания ФД двойных сплавов, основанная на концепции неравновесного термодинамического потенциала. Модель сочетает стандартную модель регулярного раствора с положительной энергией смешения и вариант модели фазового перехода первого рода со скалярным параметром порядка. В рамках данной модели удастся получить все основные типы ФД бинарных систем с ограниченной растворимостью компонентов и плавлением.