

***XIII Российская ежегодная конференция
молодых научных сотрудников и аспирантов
"Физико-химия и технология
неорганических материалов"
(с международным участием)***

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ

18-21 октября 2016 г.

ИМЕТ РАН
Москва 2016

УДК 544(063)+66.0(063)
ББК 24.5я431+35я431
Р76

Ф50 XIII Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов». Москва. 18-21 октября 2016 г. / Сборник материалов. – М:ИМЕТ РАН, 2016, 426.

ISBN 978-5-4465-1273-7

В сборнике материалов опубликованы доклады XIII Российской ежегодной конференции молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов», содержащие результаты фундаментальных исследований в области наук о материалах, включающих разработку физико-химических основ создания металлических и композиционных наноматериалов и нанотехнологий, керамики, интерметаллидов. В конференции приняли участие молодые научные сотрудники и аспиранты академических институтов, Государственных научных центров, а также студенты Высших учебных заведений России. Сборник предназначен для научных работников, специалистов, аспирантов, работающих в области наук о материалах, а также может быть полезен студентам старших курсов Высших учебных заведений.

Материалы опубликованы в авторской редакции.

Сборник материалов доступен на сайте www.m.imetran.ru

Проведение конференции поддержано фондом РФФИ (грант 16-38-10330 мол_г).

Организаторы конференции:

Федеральное агентство научных организаций,
Российская академия наук,
Министерство Образования и Науки РФ,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук,
ФНМ МГУ им. М.В. Ломоносова,
Совет молодых ученых РАН,
Совет молодых ученых ИМЕТ РАН

© ИМЕТ РАН 2016

ISBN 978-5-4465-1273-7



9 785446 512737 >

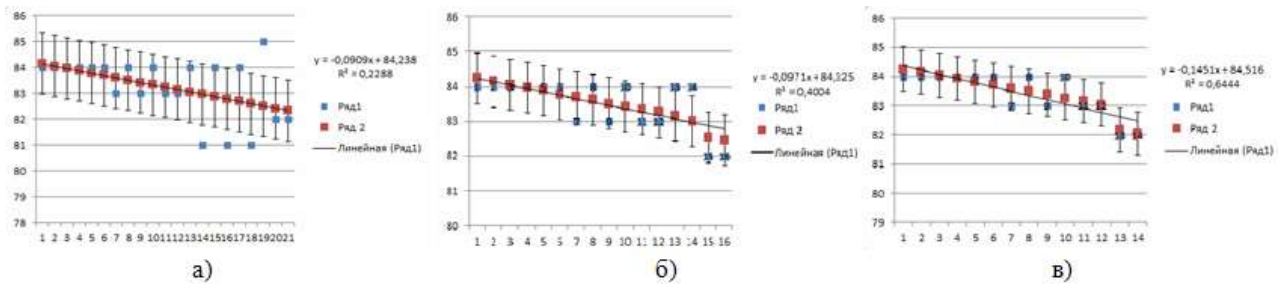


Рис. 2: а) первоначальный данные; б) первый этап выявления аномальных значений; в) второй этап

Однако после внесения изменений в данные остались значения, которые влияют на R^2 регрессии. Таким образом алгоритм с изъятием аномальных значений повторяется заново до того момента, пока все значения наблюдений не попадут в интервал стандартного отклонения (рис.2в).

Автор выражает благодарность своему научному руководителю Гундиной М.А.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ Fe-Y

Саенко И.С.

Россия, Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, *ivan.s.s@bk.ru*

Благодаря своим уникальным свойствам материалы на основе редкоземельных элементов получили широкое применение в ряде областей науки и техники, например, в областях постоянных магнитов, износостойких покрытий, огнеупорных и термоэлектрических материалов, люминофоров и ряд других областей [1, 2]. К примеру, перспективными областями применения сплавов, легированных иттрием, являются авиакосмическая промышленность, атомная техника, автомобилестроение, а также в ядерной энергетике.

Разработка новых материалов и технологии их создания требует полного понимания знания термодинамических свойств данной системы. Знание о равновесном и неравновесном состоянии материалов на основе системы Fe-Y является необходимым для понимания как химических, так и физических свойств сплавов на их основе, а также технологических возможностей и границ применения данных сплавов и соединений. Поэтому, цели настоящей работы состояли в разработке модели, наиболее полно и точно описывающую термодинамику и фазовые равновесия системы железо-иттрий, на основе эмпирических и теоретических данных.

В работе был проведен анализ литературы, и собраны все имеющиеся экспериментальные данные по системе железо иттрий. Основываясь на собранной информации, методом CalPhaD (Calculation Phase Diagram [3]) была проведена оптимизация параметров описывающих энергии Гиббса в системе Fe-Y. Полученное термодинамическое описание может быть экстраполировано на те области фазовой диаграммы, где экспериментальные данные отсутствуют.

Энергии Гиббса i -го элемента ($i = Fe, Y$), относительно энтальпии его стандартного состояния θ при температуре $298,15 K$ была взята согласно полиному (1).

$$GHSE_{i} = \circ G_{i}^{\theta}(T) - \circ H_{i}^{\theta}(298.15K) = a + b \cdot T + c \cdot T \cdot \ln T + d \cdot T^2 + e \cdot T^3 + \dots \quad (1)$$

где $H_{i}^{SER}(298,15 K)$ – молярная энтальпия i -го элемента в стандартном состоянии (для железа ОЦК, для иттрия ГПУ);

Описания чистых компонентов ~~были~~ взяты из открытой базы SGTE (Scientific Group Thermodata Europe), которая составлена согласно работе [4]. Энергии Гиббса интерметаллических соединений типа A_aB_b (где a и b – стехиометрические коэффициенты) были взяты согласно закону Коппа – Неймана (о аддитивности теплоемкости соединений) в виде Ур. (2).

$$G_{A_aB_b} - a \cdot \circ H_A^{\theta}(298.15K) - b \cdot \circ H_B^{\theta}(298.15K) = a \cdot GHSE_A + b \cdot GHSE_B + \alpha + \beta \cdot T \quad (2)$$

где α и β – переменные, оптимизируемые на основании косвенных экспериментальных данных, характеризующие отклонение от правила Коппа – Неймана.

Для описания термодинамики конечных твердых растворов (ОЦК, ГЦК, ГПУ) была выбрана модель замещения с одной подрешеткой типа (A, B), где равнозначно могут находиться оба компонента. Для нестехиометричных соединений была выбрана модель с двумя подрешетками

(A,B)_a(B,A)_b. Выбор данной модели обусловлен кристаллографическими особенностями интерметаллидов. Для описания жидкости была принята модель субрегулярных растворов с двумя параметрами смещения.

В работе был проведен критический обзор научной периодики с целью сбора экспериментальной информации по железоиттриевой системе. Был получен набор параметров, наиболее полно описывающий термодинамические данные и особенности данной системы (термохимические свойства твердых и жидких фаз, магнитный вклад). Данные параметры модели были найдены путем оптимизации собранных экспериментальных данных, используя модуль PARROT программы ThermoCalc. Был проведен анализ и сравнение полученного результата с результатами ранее проведенных моделирований данной системы, что показало наилучший результат в согласовании с экспериментальными данными. Полученное термодинамическое описание имеет хорошее согласование с экспериментальными точками невариантных превращений за исключением области плавления соединения Fe₂₃Y₆, где разница в температурах достигает ~100 °С. Так же присутствует отклонение состава жидкости при плавлении Fe₂Y. При этом данная модель довольно точно описывает избыточную энтальпию смещения и активность железа в жидкой фазе. Активность иттрия в жидкой фазе и энтальпии образования интерметаллидов имеют меньшее согласование с экспериментальными данными, однако согласуются с результатами предшествующих моделирований данной системы. Количество экспериментальных данных мало, что не позволяет собрать какую-либо статистику для оценки их погрешности. Некоторые из точек невариантных равновесий были указаны лишь примерно. Рассчитанная на основании данной модели диаграмма и экспериментальные точки невариантных равновесий представлены на рис. 1.

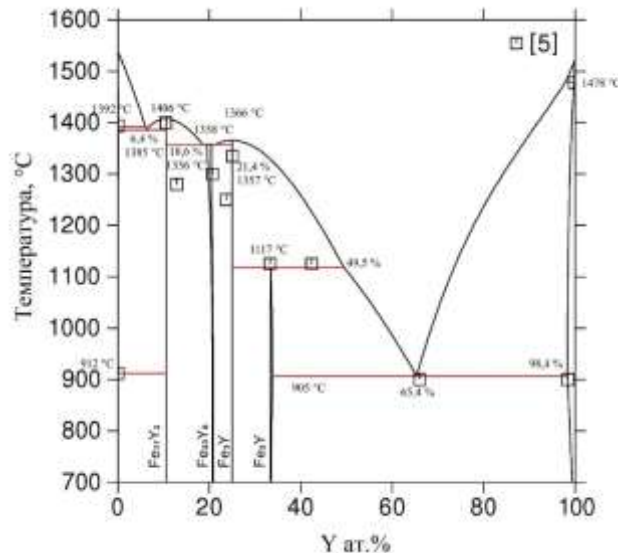


Рис. 1 Диаграмма железо-итрий, рассчитанная согласно полученной модели.

Автор выражает благодарность профессору, д.ф.-м.н. А.Л. Удовскому, и к.х.н. О.Б. Фабричной за помощь в проведении работы и обсуждении ее результатов.

Литература:

1. Lin C.Y., Chin T. S., Soft magnetic (Fe, M)Y-B (M = Co or Ni) bulk metallic glasses. J Alloys Compd, 2007, vol. 437, pp. 191-196.
2. Buschow K. H. J., Decomposition of metastable ternary hydrides. Mat Res Bull, 1984, vol. 19, pp. 935-943.
3. Saunders, N. and Miodovnik, P., Calphad (Calculation of Phase Diagram: a Comprehensive Guide). Pergamon, Oxford, 1998.
4. Dinsdale A. T., SGTE data for pure elements. Calphad, 1991, vol.15, pp. 317-425.
- 5 .T.B. Massalski (Ed.), Binary Alloy Phase Diagrams, vols. 1 and 2, American Society for Metals, Metals Park, Ohio, 1991.
