

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРҒЫ БІЛІМ
МИНИСТРЛІГІ

Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті

Ө.А. Байқоңыров атындағы Тау-кен металлургия институты

«Материалтану, нанотехнология және инженерлік физика» кафедрасы

Әбдікәрімова Ұлжан Әмірқызы

«Алюминий негізіндегі көп компонентті системалардың фазалық
диаграммаларын термодинамикалық есептеу және тұрғызу»

ДИПЛОМДЫҚ ЖҰМЫС

6B07109 – «Инженерлік физика және материалтану»
білім беру бағдарламасы

Алматы 2023

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРҒЫ БІЛІМ
МИНИСТРЛІГІ

Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті

Ө.А. Байқоңыров атындағы Тау-кен металлургия институты

«Материалтану, нанотехнология, және инженерлік физика» кафедрасы

ДОПУЩЕН К ЗАЩИТЕ
НАО «КазНТУ им.К.И.Сәтбаева»
Горно-металлургический институт
им. О.А. Байқоңырова

ҚОРҒАУҒА ЖІБЕРІЛДІ
«МНЖИФ» кафедра меңгерушісі

PhD доктор,

Кудайбергенов К.К.

«29» маусым 2023ж.

Дипломдық жұмыс

Тақырыбы: «Алюминий негізіндегі көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын термодинамикалық есептеу және тұрғызу»

6B07109 – «Инженерлік физика және материалтану»

Орындаған:

Әбдікәрімова Ұ.Ә.

Пікір беруші

PhD, қауымдастырылған пофессор

(ғылыми дәрежесі, атауы)

Мұхаметқаримов Е.С.

Аты-жөні



2023ж.

Ғылыми жетекші

т.ғ.д., профессор

(ғылыми дәрежесі, атауы)

Смағұлов Д.У.

Қолы Аты-жөні

«26» маусым 2023ж.

Алматы 2023

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРҒЫ БІЛІМ
МИНИСТРЛІГІ

Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті

Ө.А. Байқоңыров атындағы Тау-кен металлургия институты

«Материалтану, нанотехнология және инженерлік физика» кафедрасы

БЕКІТЕМІН

«МНЖИФ» кафедра меңгерушісі, PhD

Кудайбергенов К.К.

«29» мамыр 2023ж.

Дипломдық жұмыс орындауға

ТАПСЫРМА

Білім алушы: Әбдікәрімова Ұлжан Әмірқызы

Тақырыбы: «Алюминий негізіндегі көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын термодинамикалық есептеу және тұрғызу»

Университет ректорының "23" қараша 2022 жылғы №408-П/Ө бұйрығымен бекітілген

Аяқталған жұмысты тапсыру мерзімі "30" мамыр 2023 ж.

Дипломдық жұмыстың бастапқы берілістері:

1) алюминий негізіндегі көп компонентті қорытпаларда жүретін фазалық өзгерістерді есептеу әдістерін игеру;

2) олардың фазалық күй диаграммаларын тұрғызу.

Дипломдық жұмыста қарастырылған мәселелер:

1) Al-Cu-Si системаларының қорытпаларындағы тепе-теңдіксіз күйде кристалдану процестері талдау;

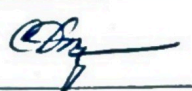
2) Al-Mg-Zn системаларының қорытпаларындағы тепе-теңдіксіз күйде кристалдану процестері талдау.

Ұсынылған негізгі әдебиет 13 атаудан тұрады.

Дипломдық жұмысты дайындау
КЕСТЕСІ

Бөлім атаулары, қарастырылатын мәселелер тізімі	Ғылыми жетекшіге, кеңесшілерге көрсету мерзімдері	Ескерту
Әдеби шолу	15.01.2023-25.02.2023	Әдебиеттерді зерттеу
Тәжірибелік бөлім	01.03.2023-12.04.2023	Зерттеу, нәтиже шығару
Дипломдық жұмысты алдын-ала қорғау	04.05.2023	Қорытынды талдау

Дипломдық жұмыс (жоба) бөлімдерінің кеңесшілері мен норма бақылаушының аяқталған жұмысқа (жобаға) қойған
колтанбалары (жұмысқа қарасты тараулардың нұсқаумен)

Бөлімдер атауы	Ғылыми жетекші, кеңесшілер (аты-жөні, тегі, ғылыми дәрежесі, атағы)	Қолтаңба қойылған мерзімі	Қолы
Әдеби шолу	Смағұлов Д.У т.ғ.д., профессор	26.05.2023	
Тәжірибелік жұмыстар	Смағұлов Д.У т.ғ.д., профессор	26.05.2023	
Норма бақылау	Бейсебаева А.С., ф-м.ғ.к., аға оқытушы	24.05.2023	

Ғылыми жетекшісі



Смағұлов Д.У.

Тапсырманы орындауға алған студент



Әбдікәрімова Ұ.Ә.

Күні « 30 » мамыр 2023 жыл

АННОТАЦИЯ

Дипломдық жұмыста алюминий негізіндегі көп компонентті қорытпаларда жүретін фазалық өзгерістерді есептеу әдістерін игеру және олардың фазалық күй диаграммаларын тұрғызу қарастырылған. Фазалық диаграммалар жаңа материалдар алудың ғылыми негізі болып табылады. Осыған байланысты ұсынылып отырған дипломдық жұмыста металдар мен қорытпаларда жүретін фазалық өзгерістердің заңдылықтарын зерттеу, жаңа металл материалдарды алу, оларды өндіру және өңдеу технологияларының теориялық негіздері көрсетілген.

Жұмыста ыстыққа төзімді, үйкеліске және коррозияға төзімді жаңа алюминий қорытпаларын, оның ішінде Al-Mg-Zn және Al-Cu-Si қорытпаларын жасаудың ғылыми негізделген әдістерін іздеу қажеттілігі көрсетілген. Осы мақсатта көп компонентті металл жүйелерінің фазалық диаграммаларын компьютерлік есептеудің заманауи әдістеріне талдау жасалды: Thermo-Calc интерактивті базасы және компоненттердің таралу коэффициенттерін қолдану әдісі қарастырылды.

Қатты ерітінділердің тепе-теңдіксіз күйде кристалдану процесі есептелді. Есептеу нәтижесінде Al-Mg-Zn және Al-Cu-Si системаларының қорытпасы негізінде көп компонентті жүйелердің фазалық диаграммаларының политермиялық және изотермиялық қималары салынды. Зерттеулер және тиісті жүйелердің қорытпаларының фазалық құрамы мен құрылымы зерттелді.

Зерттеу жұмыстарында Al-Cu-Si, Al-Mg-Zn системаларының қорытпаларындағы тепе-теңдіксіз күйде кристалдану процестері талданған. Жаңа қорытпаларды әзірлеу кезінде компьютерлік бағдарламаларды (Thermo Calc) қолдана отырып, жұмыста ұсынылған есептеу әдістерін қолдану және оларды өңдеу технологиялары дайын өнімді шығаруға материалдық және қаржылық ресурстардың шығындарын едәуір азайтуға, сондай-ақ дипломдық жұмыс жүргізуге қажетті уақытты үнемдеуге мүмкіндік береді.

АННОТАЦИЯ

В дипломной работе рассмотрено освоение методов расчета фазовых изменений, происходящих в многокомпонентных сплавах на основе алюминия, и построение диаграмм их фазового состояния. Фазовые диаграммы являются научной основой для получения новых материалов. В связи с этим в предлагаемой дипломной работе рассмотрены теоретические основы технологии изучения закономерностей фазовых изменений, происходящих в металлах и сплавах, получения новых металлических материалов, их производства и переработки.

В дипломной работе подчеркивается необходимость поиска научно обоснованных методов изготовления новых термостойких, устойчивых к трению и коррозии алюминиевых сплавов Al-Mg-Zn и Al-Cu-Si. С этой целью был проведен анализ современных методов компьютерного расчета фазовых диаграмм многокомпонентных металлических систем: рассмотрена интерактивная база Thermo-Calc и метод применения коэффициентов распределения компонентов.

Рассчитан процесс кристаллизации твердых растворов в несбалансированном состоянии. В результате расчетов на основе сплавов систем Al-Mg-Zn и Al-Cu-Si построены политермические и изотермические сечения фазовых диаграмм многокомпонентных систем. Исследованы фазовый состав и структура сплавов соответствующих систем.

В дипломных работах проанализированы процессы кристаллизации в несбалансированном состоянии в сплавах систем Al-Cu-Si, Al-Mg-Zn. Применение предложенных в работе вычислительных методов и технологий их обработки с использованием компьютерных программ (Thermo Calc) при разработке новых сплавов позволяет существенно снизить затраты материальных и финансовых ресурсов на выпуск готовой продукции, а также сэкономить время, необходимое для проведения дипломной работы.

ABSTRACT

The diploma considers the development of methods for calculating phase changes occurring in multicomponent aluminum-based alloys and the construction of diagrams of their phase state. Phase diagrams are the scientific basis for obtaining new materials. In this regard, the proposed thesis examines the theoretical foundations of technology for studying the laws of phase changes occurring in metals and alloys, obtaining new metal materials, their production and processing.

The diploma emphasizes the need to search for scientifically sound methods for the manufacture of new heat-resistant, friction-resistant and corrosion-resistant aluminum alloys, including Al-Mg-Zn and Al-Cu-Si alloys. To this end, the analysis of modern methods of computer calculation of phase diagrams of multicomponent metal systems was carried out: the Thermo-Calc interactive database and the method of applying component distribution coefficients were considered.

The crystallization process of solid solutions in an unbalanced state is calculated. As a result of calculations based on the alloy systems of the Al-Mg-Zn and Al-Cu-Si systems, polythermal and isothermal cross sections of phase diagrams of multicomponent systems are constructed. The phase composition and structure of alloys of the corresponding systems are investigated.

The diploma analyzes the processes of unbalanced crystallization in alloys of the Al-Cu-Si, Al-Mg-Zn systems. The use of the proposed computational methods and technologies of their processing using computer programs (Thermo Calc) in the development of new alloys can significantly reduce the cost of material and financial resources for the production of finished products, as well as save time required for the thesis.

МАЗМҰНЫ

КІРІСПЕ	9
1 ҒЫЛЫМИ ДЕРЕКТЕРГЕ ШОЛУ	13
1.1 Жаңа металл материалдарын алудың ғылыми негіздері	13
1.2 Фазалық тепе-теңдікті есептеудің термодинамикалық әдістері	14
1.3 Жаңа материалдар мен олардан дайын бұйымдар жасау проблемаларының қазіргі жағдайы	15
2 ЗЕРТТЕУ ӘДІСТЕМЕЛЕРІ	19
2.1 Зерттеуге арналған қорытпа үлгілерін дайындау	19
2.2 Оптикалық және электронды микроскопия	20
2.3 Растрлық электронды микроскопия	21
2.4 Дифференциалды-термиялық анализ	21
2.5 Рентгендік құрылымдық анализ	22
2.6 Thermo-Calc Software термодинамикалық есептеу бағдарламалық құралы	24
3 ЗЕРТТЕУ НӘТИЖЕЛЕРІ	28
3.1 Көп компонентті қорытпалардың тепе-теңдіксіз кристалдануын есептеу	28
3.2 Al-Mg-Zn система қорытпаларындағы дендритті әртектілікті есептеу	32
3.3 Al-Si-Cu негізіндегі көп компонентті системалардың қорытпаларында дендритті әртектілікті есептеу	38
ҚОРЫТЫНДЫ	41
БЕЛГІЛЕР МЕН ҚЫСҚАРТУЛАР	42
ПАЙДАЛАНЫЛҒАН ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ	43
АНЫҚТАМАЛАР	44

КІРІСПЕ

Ғылым мен технологияны дамыту жөніндегі мемлекеттік саясаттың негізгі мақсаты Қазақстанның жеделдетілген индустриялық-инновациялық даму бағдарламасын іске асыру болып табылады, ол отандық, оның ішінде алюминий, шикізаттан қосылған құны жоғары түпкілікті өнім шығаруға бағдарланған өнеркәсіптік кәсіпорындарды құруды көздейді.

Машина жасау, аспап жасау, мұнай-газ саласы, металлургия және химия өнеркәсібі, авиация және ғарыш техникасының жедел дамуына байланысты жақын арада алюминий қорытпаларына деген қажеттілік көп.

Алюминий қорытпалары құрылымдық материалдар арасында ерекше орын алады. Бұл олардың негізгі қасиеттері мен пайдалану сипаттамаларының бірегей үйлесіміне қол жеткізу мүмкіндігіне байланысты.

Құю және деформацияланатын алюминий қорытпалары, тығыздығы төмен, беріктігі жоғары, икемділігі мен өнімділігі арқасында машина жасауда, авиациялық және ғарыштық техникада қолданылатын ең перспективалы құрылымдық материалдар болып табылады.

Сонымен қатар, қазіргі уақытта Қазақстан Республикасында алюминий қорытпалары өндірілмейді, олар шетелден сатып алынады. Қазақстан әлемдік нарыққа алюминий тотығынан басқа А8 маркалы техникалық алюминийді жеткізеді. Бұл ретте қазақстандық алюминий өнеркәсібінің шикізат базасының негізін жоғары карбонатты бокситтердің едәуір қоры құрайды. Барланған қорлардың көп бөлігі (85%) бәсекеге қабілетті және 70 жыл ішінде саланың тұрақты жұмысын қамтамасыз ете алады.

Саланың пайдаланылатын кен орындарының барланған қорларымен қамтамасыз етілуі 36 жылды құрайды. Мұның бәрі Қазақстан Республикасында алюминий қорытпаларының жоғары сапалы, бәсекеге қабілетті маркаларының отандық өндірісін құрудың жақсы перспективалары бар екендігін айғақтайды.

Алюминий кені - бокситтер - негізінен Карьер әдісімен өндіріледі. Бұл кендердің ең ірі өндірушілері-Австралия, Ямайка, Гвинея, Бразилия, Венесуэла, Ресей (Орал). Алюминий өнеркәсібі - металл алюминий өндіретін кәсіпорындарды біріктіретін металлургия саласы.

Алюминий өндірісі үш негізгі процестен тұрады:

- Кендерді өндіру және оларды байыту. Байытудың ең тиімді әдістері: жуу және скрининг.
- Кеннен алюминий оксидін алу-Байер процесі, ол байытылған кенді каустикалық содамен қыздырудан, сүзгіден өткізуден, алюминий гидроксидін тұндырудан, содан кейін таза алюминий тотығын алу үшін оны күйдіруден тұрады.
- Холл-Эру электролизі арқылы алюминий тотығынан металды тотықсыздандыру.

Шешілетін ғылыми-техникалық мәселенің қазіргі жай-күйін бағалау және оның өзектілігі: жаңа металл материалдарын жасаудың ғылыми-техникалық проблемасының ғылыми негізі және оларды өндіру мен өңдеудің прогрессивті

технологияларын әзірлеу тиісті металл системаларының фазалық диаграммалары болып табылады. Барлық ғылыми-техникалық дамыған елдерде көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын зерттеуге көп көңіл бөлінеді.

Ғалымдардың фазалық диаграммалар туралы ақпаратты жинау, өңдеу және сақтау жөніндегі қызметі барған сайын белсенді және орталықтандырылған бола бастады.

Алайда, фазалық диаграммаларды эксперименттік құру айтарлықтай материалдық шығындар мен уақытты қажет етеді. Қорытпалар мен функционалды материалдардың құрамы әр түрлі және күрделі болады, олар жұмыс істеуі керек жағдайлардың ауқымы кеңейеді, бұл зерттеу шығындарының бірнеше есе өсуіне әкеледі. Осыған байланысты фазалардың пайда болу сипаты мен фазалық өзгерістердің ерекшеліктерін теориялық ұстану, сондай-ақ қорытпалардың фазалық құрамын сандық бағалау әдістерін әзірлеу және көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын құру қазіргі материалтану ғылымының өзекті мәселесіне айналды.

Алюминий оксиді Al_2O_3 - ақ түсті, отқа төзімді зат, алюминий мен оттегінің екілік қосындысы. Табиғатта ол алюминий, калий, натрий, магний және т.б. оксидтерінің стехиометриялық емес қоспасы болып табылатын саздың құрамдас бөлігі болып табылатын глинозем түрінде кең таралған. 1960 жылдары (1955 ж.қыркүйек) Қазақстан даласында алюминий оксидін өндіру зауыты-Павлодар алюминий зауыты салынды.

1964 жылы өнімнің алғашқы эшелоны Павлодардан Новокузнецк алюминий зауытына жіберілді. 1995 жылы кәсіпорын "Қазақстан алюминийі" АҚ болып қайта құрылды.

"Қазақстан алюминийі" әлемдегі алюминий тотығының жетекші он өндірушісінің қатарына кіреді. Кәсіпорынның жылдық қуаты 600 мың болатын техникалық жобасын 1960 жылдардың басында Бүкілодақтық алюминий-магний институты дайындады. Кәсіпорынның қуаттылығы - жылына 1,4 млн тонна алюминий тотығы, шикізат Торғай (Арқалық қ.) және Красноярск (Лисаков қ.) боксит кен басқармаларынан, Павлодар облысындағы Керегетас әктас кен орнынан келеді.

Қазіргі уақытта фазалық өзгерістердің бірыңғай теориясы жоқ, әртүрлі фазалардың пайда болу сипаты зерттелмеген және материалдардың фазалық күйін басқару мүмкіндігі жоқ. Қазіргі физикалық теория тіпті таза металдарда да "алғашқы принциптер" негізінде фазалық түрлендірулерді есептеуге мүмкіндік бермейді. Сондықтан металл системаларындағы фазалық өзгерістерді есептеу және тиісті фазалық диаграммаларды құру үшін негізінен термодинамикалық әдістер қолданылған, онда ерітінділердің әртүрлі модельдері және қорытпалардың термодинамикалық қасиеттері бойынша эксперименттік мәліметтердің үлкен көлемі қолданылған.

Алайда, алюминий негізіндегі ең перспективалы көп компонентті системалардың қорытпаларындағы фазалық түрленулер мен құрылымдық өзгерістер зерттелмеген. Бұл системалардағы фазалық тепе-теңдік

зандылықтары зерттелмеген, сәйкес фазалық диаграммалар салынбаған. Фазалық диаграммаларды есептеудің барлық белгілі термодинамикалық әдістері металл фазаларының пайда болу сипатын, олардың химиялық құрамы мен өңдеу режиміне байланысты қорытпалардың фазалық күйі мен құрылымының қалыптасу жағдайларын анықтауға мүмкіндік бермейді. Олар тепе-теңдік және тепе-теңдік емес салқындату жағдайында берілген құрамның көп компонентті қорытпаларының фазалық құрамы мен құрылымын қалыптастыру процесін сандық сипаттау үшін қолданыла алмайды.

Осылайша, жаңа алюминий қорытпаларының құрылымдық жағдайы мен қасиеттерінің қажетті деңгейін қамтамасыз ету үшін олардың оңтайлы құрамдарын, құю мен өңдеудің прогрессивті технологияларын ғылыми негізделген таңдау бойынша кешенді теориялық және эксперименттік зерттеулер жүргізу қажет.

Жоспарланған дамудың негізгі нәтижелері:

- металдар мен қорытпалардағы фазалық түрленулерді, алюминий негізіндегі көп компонентті қатты ерітінділердің тепе-теңдік және тепе-теңдік емес кристалдануын есептеудің жаңа әдістері;
- алюминий қорытпаларының құрылымы мен фазалық құрамын зерттеудің жаңа нәтижелері;
- Thermo-Calc бағдарламаларын қолдана отырып, есептеу арқылы құрылған көп компонентті алюминий негізіндегі системалардың фазалық диаграммаларының политермиялық және изотермиялық бөлімдері;
- Дипломдық жұмысты метрологиялық қамтамасыз ету туралы мәліметтер.

Зерттеулерді орындау кезінде:

- теориялық есептеу және компьютерлік бағдарламалау әдістері;
- оптикалық және электронды микроскопия;
- қорытпалардың химиялық құрамын элементтік талдау үшін растрлық электронды микроскопия;
- дифференциалды-термиялық талдау;
- механикалық қасиеттерді анықтау;
- қорытпалардың коррозиялық қасиеттерін анықтау әдістері қолданылды.

Тепе-теңдік және тепе-теңдік емес салқындату жағдайында фазалық диаграммаларды есептеудің жаңа әдістері мен компьютерлік бағдарламалары қарастырылған. Фазалық диаграммалардың политермиялық және изотермиялық бөлімдері есептелген түрде салынған, системалық - Al-Mg-Zn және Al-Si-Cu қорытпаларының фазалық құрамына сандық талдау жүргізілді.

Меншікті электр төзімділік (МЭТ), беріктік және ыстыққа төзімділік мәндерінің ең жақсы үйлесімі 400-450 °C температурада күйдірілгеннен кейін кемінде 0,3% Zr бар қорытпаларда қол жеткізіледі. Қорытпалардың ыстыққа төзімділігі негізінен L_{12} (Al_3Zr) фазасының нанобөлшектерінің саны мен өлшемдеріне байланысты екені анықталған. Минималды өлшемдері бар Al_3Zr

(L₁₂) фазалық нанобөлшектердің максималды санының түзілуі екі сатылы күйдіру режимін қолданған кезде пайда болады: 300-350 °C, 400-450 °C.

1 Ғылыми деректерге шолу

1.1 Жаңа металл материалдарын алудың ғылыми негіздері

Жаңа металл материалдарын жасаудың және оларды өндіру, құю және термиялық өңдеу технологияларын дамытудың ғылыми негізі тиісті системалардың фазалық диаграммалары болып табылады. Соңғы уақытқа дейін фазалық диаграммалар негізінен эксперименталды түрде зерттелді. Алайда, бұл әдіс көп уақытты қажет етеді және айтарлықтай материалдық шығындар мен уақытты қажет етеді. Фазалық диаграммаларды эксперименттік зерттеу әдісі үш және одан да күрделі системаларды талдау кезінде шектеулі мүмкіндіктерге ие. Сонымен қатар, қорытпалардың құрамы әр түрлі және күрделі болады, олар жұмыс істеуі керек жағдайлардың ауқымы кеңейеді. Өнеркәсіпте қолданылатын материалдардағы компоненттер саны 10-15-ке жетеді, кейде одан да көп. Зерттелетін системалардың құрамдас бөліктерінің саны артқан сайын шығындар бірнеше есе артады. Сондықтан көп компонентті металл системаларындағы фазалық тепе-теңдікті теориялық зерттеу, күй диаграммаларын есептеу және болжау қазіргі уақытта үлкен ауқымға ие болды.

Есептеу әдістері диаграммаларды құруға, теориялық физиканың, есептеу техникасының жетістіктерін және қорытпалардың термодинамикалық және физикалық қасиеттерін зерттеудегі жетістіктерді тартуға мүмкіндік береді. Теория мен тәжірибенің үйлесімі фазалардың термодинамикалық потенциалдарының температура мен құрамға тәуелділігінің аналитикалық түрін анықтауға мүмкіндік береді.

Металл системаларының күй диаграммаларындағы фазалық тепе-теңдіктердің сипаты тепе-теңдік фазаларының табиғатына және фазалық түрленулердің жүру жағдайларына байланысты. Фазалардың табиғаты компоненттер атомдарының электронды құрылымымен, атомаралық өзара әрекеттесу сипатымен және байланыс энергиясымен анықталады. Сондықтан фазалық тепе-теңдіктерді есептеу және күй диаграммаларын құру "бірінші принциптер" негізінде жүзеге асырылған жөн. Алайда, металл теориясының қазіргі жағдайы екі компонентті системалар үшін де фазалық диаграммаларды дәл есептеуге мүмкіндік бермейді. Фазалық түрлендірулердің бірыңғай теориясы болмаса да, металл фазаларының пайда болу сипаты анық емес және қорытпалардың фазалық күйін басқару мүмкіндігі жоқ. Сондықтан күй диаграммаларын есептеу үшін негізінен сұйық және қатты ерітінділердің әртүрлі модельдерін қолданатын термодинамикалық әдістер қолданылады. Бұл жағдайда екі есептеу схемасы мүмкін. Бірінші жағдайда, тепе-теңдік жағдайларына сүйене отырып, екі фазалы аймақтардың барлық шекаралары есептеледі, содан кейін олардан екі, үш және одан да күрделі системалардың тепе-теңдік диаграммалары құрылады. Екінші жағдайда, Гиббстің бос энергиялары барлық мүмкін фазалар үшін берілген температурадағы композиция функциясы ретінде есептеледі. Содан кейін Гиббс энергиясының минималды мәндеріне сәйкес келетін нүктелерде тангенс тобын жүргізу

арқылы тепе-теңдік фазаларының құрамдары табылып, күй диаграммаларындағы екі фазалы аймақтардың шекаралары анықталады. Мұндай әдістерді қолдану компьютерде үлкен көлемдегі есептеулерді жүргізуге байланысты. Сонымен қатар, математикалық модельдердің параметрлерін анықтау үшін қорытпа компоненттерінің термодинамикалық қасиеттері бойынша эксперименттік мәліметтердің жеткілікті үлкен көлемін білу қажет. Жақында кеңінен қолданылатын экспериментті жоспарлау әдістері есептеу мен эксперименттік зерттеулердің көлемін айтарлықтай азайтуға мүмкіндік бермейді.

Барлық қолданыстағы есептеу әдістерін тепе-теңдік және тепе-теңдік емес салқындату жағдайында берілген құрамның көп компонентті қорытпаларының фазалық құрамы мен құрылымын қалыптастыру процесін сандық сипаттау үшін қолдануға болмайтынын атап өткен жөн. Олардың көмегімен қорытпаның құрамы мен температурасына байланысты фазалық түрлендірулердегі тепе-теңдік фазалары мен құрылымдық компоненттердің химиялық құрамы мен салыстырмалы мөлшерінің өзгеруін анықтау мүмкін емес. Сондай-ақ, қорытпалардағы фазалық ауысулардың критикалық нүктелерін, астық қимасы бойынша компоненттер мен қоспалардың таралуын есептеуге, қорытпаның құрамы мен салқындату жылдамдығына байланысты фазалық өзгерістердің көлемдік жылдамдығы мен ұзақтығын бағалауға болмайды.

Сонымен қатар, көп компонентті қорытпалардың термодинамикалық қасиеттері жеткілікті зерттелмеген және көптеген үштік және одан да күрделі системалардың күй диаграммалары туралы мәліметтер жоқ. Сонымен қатар, түсті металдарға негізделген көп компонентті қорытпаларды қолдану аясының кеңеюі қасиеттердің қажетті үйлесімімен қолданыстағы қорытпаларды жетілдіру және жаңа қорытпаларды іздеу бойынша жұмыстардың күшеюіне әкеледі [1].

Күй диаграммаларын есептеу арқылы құру үшін системаның барлық компоненттерінің химиялық потенциалдарының T , P және фазалық құрамға тәуелділігін білу қажет. Мұндай тәуелділіктерді модельдік көріністер мен жаңа компьютерлік технологиялар негізінде ғана бағалауға болады [2, 3].

1.2 Фазалық тепе-теңдікті есептеудің термодинамикалық әдістері

Фазалық және химиялық тепе-теңдіктерді есептеу, әсіресе фазалық диаграммаларды құру үшін қажет маңызды термодинамикалық есептердің бірі болып табылады. Қазіргі уақытта Гиббс энергиясының шартты минимизациясына негізделген фазалық диаграммаларды есептеу әдістері кеңінен қолданылады.

Шартты минимизация Гиббс энергиясы Thermo-Calc, ThermoSuite, FactSage, PANDAT, MTDATA, CaTCalc сияқты әмбебап фазалық тепе-теңдікті

есептеу бағдарламаларында кеңінен қолданылады. Бұл жағдайда фазалық диаграмманы құру сапасы бағдарламада қолданылатын Алгоритммен Гиббс энергиясының Ғаламдық минимумын табудың сенімділігіне, сондай-ақ диаграмма аймақтары арасындағы шекараларды табу тәсіліне байланысты.

Фазалық тепе-теңдікті есептеудің тағы бір кең таралған әдісі қатар өмір сүретін фазалардағы компоненттердің химиялық потенциалдарының мәндерін байланыстыратын теңдеулер системасын шешуге негізделген. Оны өздігінен де, Гиббс энергиясын азайту процедурасының құрамдас бөлігі ретінде де пайдалануға болады. Химиялық потенциалдардың теңдігі тұрақты фазалық тепе-теңдіктің қажетті, бірақ жеткіліксіз шарты болғандықтан (метастабильді жағдай үшін орындалуы мүмкін).

Фазалық тепе-теңдікті есептеудің геометриялық әдістерін де ажыратуға болады. Олардың Гиббс энергиясын азайтудан артықшылығы термодинамикалық потенциалдардың қасиеттерін белсенді пайдалану болып табылады, бұл олардың сенімділігі мен жылдамдығын арттырады, сонымен қатар оларға көрнекілік береді. Фазалық тепе-теңдікті есептеудің геометриялық әдістері системаның сипаттамалық функциялары беттерінің қасиеттерін талдауға негізделген (мысалы, G , F , U , S және т.б.). Олар алғаш рет Дж.В. Гиббс [3,5] сәйкесінше $S(U, V)$, $G(x)$ және $G(x_2, x_3)$ беттеріндегі бір, екі және үш компонентті системаларда.

Гиббс энергиясын азайтудың геометриялық әдістерінің теориялық базасын одан әрі дамыту негізінен дөңес қабықшалар әдісімен байланысты. Жүз жылдан астам уақыт бұрын гетерогенді системаның жеке фазаларының сипаттамалық функцияларының мәндері мен олардың тепе-теңдік шарттары арасындағы байланысты түсіндіре отырып, Гиббс екі компонентті системаның химиялық құрамына байланысты термодинамикалық потенциалдар беттерінің изобар – изотермиялық қималары (қазір Гиббс функциялары) бірге ұсынылатын графиктерді қолдануды ұсынды. жеке фазалардың да, тепе-теңдік системасының де жалпы.

1.3 Фазалық тепе-теңдікті есептеу және диаграмма құрудың компьютерлік бағдарламалары

Қазіргі уақытта көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын есептеуге арналған көптеген бағдарламалар бар, олардың ішінде ең көп таралған және әмбебап-Thermo-Calc, ThermoSuite, FactSage, PANDAT, MTDATA және CalTCalc. Олардың барлығы системаның тепе – теңдік күйін табу үшін Гиббс энергиясының жаһандық шартты минимизациясын пайдаланады, ал диаграмма аймақтарының шекараларын бөлектеу үшін фазаның нөлдік емес үлесінің сызықтарын есептейді (ZPF сызықтары). Системаның әр фазасы өзінің тұрақтылық аймағының шекаралары болып табылатын ZPF сызықтарына сәйкес келеді.

Фазалық тепе-теңдікті есептеу үшін ең көне және ең көп қолданылатын бағдарламалардың бірі-Thermo-Calc, оның алғашқы нұсқасы 1981 жылы пайда болды. Оның жұмысы Гиббс энергиясын жаһандық минимизациялаудың әмбебап алгоритміне негізделген, ол бастапқы жуықтауды орнатпай көп компонентті системаларды есептеуге жарамды. Компоненттердің максималды саны-40, диаграммадағы тәуелсіз осьтер-5. Thermo-Calc демонстрациясын төменде келтірілген веб-сайтан көруге болады - <http://www.thermocalc.com/>.

Фазалық диаграммалардан басқа, сұйық беттерді, фазалардың термодинамикалық қасиеттерін (Гиббс энергиясы, энтальпия, жылу сыйымдылығы және т.б.), метастабильді тепе-теңдіктерді және т. б. есептеуге болады. сәйкесінше мәтіндік және графикалық интерфейстері бар Thermo — Calc-Thermo-Calc classic (TC) және Thermo-CalcWindows (tcw) екі нұсқасы бар.

ThermoCalc-тің ерекшелігі-оның модульділігі мен кеңеюі, сонымен қатар көптеген системалар үшін мәліметтер базасының болуы – металл, тұз, оксид, Сулы электролит ерітінділері және т.б. Thermo-Calc-те тепе-теңдікті есептеуден басқа, parrot модулінің көмегімен системаның термодинамикалық қасиеттері мен фазалық шекаралары туралы қолданыстағы мәліметтер бойынша фазалық диаграмманы оңтайландыруға болады. Thermo-Calc функциялары үшінші тарап, пайдаланушы бағдарламаларынан (мысалы, C, Fortran және MATLAB тілдерінде) TS-API интерфейсі арқылы шақырылуы мүмкін, бұл оның мүмкін қосымшаларын кеңейтеді.

Thermo-Suite бағдарламалық кешені бірқатар заттардың қасиеттері мен химиялық реакциялар бойынша термодинамикалық мәліметтер базасынан (databases және COACH модульдері), фазалық тепе-теңдікті есептеу бағдарламаларынан (Gemini модулі) және бейнелеу құралдарынан (DIAGRAM(DIAGPLOT) және GEMPLOT модульдері) тұрады. Ол екі және үш компонентті системалардың фазалық диаграммаларын, сондай - ақ көп компонентті системалардағы химиялық тепе-теңдіктерді есептеуге мүмкіндік береді. Бағдарламаның демо нұсқасы мына жерде қол жетімді - <http://thermodata.online.fr/>, тегін diagplot фазалық диаграмма визуализация модулі - <http://diagplot.net/> мекен-жайы бойынша.

Thermo-Suite-тегі фазалық тепе-теңдікті есептеу системаның Гиббс энергиясының Ғаламдық минимумын табуға негізделген. Минимизация жасамас бұрын фазалар мен қосылыстар сызықтық тәуелсіз негізге және одан туындыларға бөлінеді, яғни химиялық реакциялар және/немесе фазалық ауысулар арқылы негізден алынуы мүмкін. Бұл минимизация жүргізілетін айнымалылар санын азайтуға мүмкіндік береді, бұл, атап айтқанда, қосылыстар саны көп системалардағы химиялық тең салмақтарды есептеуге мүмкіндік береді.

FactSage бағдарламалық кешені F*A*C*T және ChemSage пакеттерін біріктірудің нәтижесі болып табылады, олардың дамуы XX ғасырдың 70-ші жылдарының ортасында басталды. F * A * C * T жеке заттар мен ерітінділердің термодинамикалық қасиеттерінің дерекқоры болды. ChemSage-Гиббс энергиясын азайту әдісімен фазалық тепе-теңдікті есептеуге арналған

бағдарлама; ол $F \cdot A \cdot C \cdot T$ -мен қиылысатын модельдер мен термодинамикалық мәліметтер базасын қолданды, қазіргі уақытта FactSage көп компонентті системалардағы фазалық және химиялық тепе-теңдіктерді есептеуге, сондай-ақ олардың фазалық диаграммаларын құруға мүмкіндік береді. Ол жеке қосылыстардың термодинамикалық қасиеттері, металл қорытпалары, металлидтер, оксид және тұз системалары, сулы ерітінділер және т. б. туралы кең мәліметтер базасын қамтиды.

FactSage бағдарламалық кешені демонстрациясын төменде келтірілген веб-сайттан көруге болады - <http://www.factsage.com/>.

Pandat бағдарламасы көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын есептеуге және оңтайландыруға арналған. Mtdat бағдарламасы көп компонентті системалардағы фазалық тепе-теңдіктерді, сондай-ақ олардағы фазалардың термодинамикалық қасиеттерін есептеуге арналған. Бағдарламада жеке заттар, металл қорытпалары, ерітінділер, тұз және оксид системалары, атом энергетикасы және т. б. бойынша sgte және NPL дерекқорлары пайдаланылуы мүмкін. Гиббс энергиясын азайту үшін nosl кітапханасы қолданылады (NPL NumericalOptimizationLibrary), оның көмегімен 40 компонентке дейін және 500 фазаға дейінгі системалар жүзеге асырылады.

Көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын есептеуге арналған catcalc бағдарламасы салыстырмалы түрде жаңа бағдарламалық өнім болып табылады. Бағдарламаның демо-нұсқасы мына сілтемеде қол жетімді - http://www.materials-design.co.ip/catcalc/index_E.html.

PhDi бағдарламасы ММУ химиялық термодинамика зертханасында әзірленген, оның демо-нұсқасы мына сілтемеде қолжетімді - <http://td.chem.msu.ru/>. Ол бір және екі компонентті системалардың фазалық диаграммаларын құруға арналған. Жоғарыда қарастырылған барлық басқа бағдарламалардан ол Гиббс энергиясын тікелей азайтудың орнына дөңес қабықшалар әдісін, сондай-ақ сызықтарды таңдаумен салыстырғанда сенімділіктің жоғарылауымен сипатталатын аймақтар арасындағы шекараларды табудың бірегей әдісін қолданумен ерекшеленеді. Есептелген модульден басқа, PhDi қарапайым заттар бойынша sgte дерекқорын, сондай-ақ 100-ден астам жалғыз, қос және квазибинарлық (яғни қосарланған) системалардың термодинамикалық модельдерін қамтиды.

PCEAS бағдарламасы (эвтектикалық және азеотропты системалардың фазалық диаграммалары) әзірленді, ол Сольвация параметрі бойынша Гиббстің артық энергиясын азайту моделі негізінде екілік қоспалардың фазалық диаграммаларын есептеуге және құруға арналған. Бағдарламаның айрықша ерекшеліктері-мәліметтер базасымен жұмыс істеу мүмкіндігі, нәтижелерді кестелер мен графиктер түрінде шығару. Бензол – 2-циклогексан системасы үшін фазалық диаграммаларды есептеу мысалы келтірілген.

PCEAS бағдарламасы (Phase Chart Eutectic and Azeotropic Systems), Сольвация параметрінің артық Гиббс энергиясын азайту моделіне негізделген екілік қоспалардың фазалық диаграммаларын есептеуге және құруға арналған. Бағдарламаның айрықша ерекшеліктері-мәліметтер базасымен жұмыс істеу,

нәтижелерді кестелер мен диаграммалар түрінде көрсету мүмкіндігі. Бензол – 2-циклогексан системасы үшін фазалық диаграммаларды есептеу мысалы келтірілген.

2 Зерттеу әдістемелері

2.1 Зерттеуге арналған қорытпа үлгілерін дайындау

Қазіргі жағдайда алюминий өндірісінің сынықтары мен қалдықтарын тиімді пайдалану және қайта өңдеу өзекті мәселеге айналууда. Перспективалы бағыттардың бірі-мұндай қалдықтарды қайталама алюминий қорытпаларын өндіруде бастапқы шикізат ретінде пайдалану [6-8]. Бұл, ең алдымен, бастапқы алюминий қорытпаларының өзіндік өндірісі жоқ Қазақстанға қатысты.

Алюминий + Мыс + Кремний (Al - Cu - Si). Альбуминдер деп аталатын алюминий үйкеліске қарсы қорытпалар тобы. Қолданудың негізгі саласы-цилиндр блоктары мен втулка типті мойынтіректерді жасау. Материалдардың қатты беті қайта өңдеуді қиындатады.

AL-Cu-Si алюминий қорытпаларын термиялық өңдеу олардың механикалық қасиеттерін жақсартады. Технологиялық операцияны Si мөлшері 15% - дан аспайтын алькусиндермен жүргізу керек. Әйтпесе, қатаю кезінде жарықтар пайда болады.

Алюминий+Мырыш+Магний (Al - Zn - Mg). Дәнекерленген алюминий қорытпаларын жасау кезінде Al - Zn - Mg системасы теориялық және практикалық қызығушылық тудырады.

Бұл системада термиялық күшейтілген қорытпалар тобы бөлме температурасында және жоғары температурада қартаюға қабілетті [2]. Бұл дегеніміз, дәнекерленген қосылыстар біраз уақыттан бері негізгі материалдың қасиеттеріне жақындау арқылы беріктік сипаттамаларын арттыра алады (қосымша жасанды қартаюсыз).

Бұл топтың кейбір қорытпалары термиялық өңдеуден кейінгі жоғары беріктігіне қарамастан (дуралюминийден көп) соңғы уақытқа дейін өнеркәсіпте қолданылмады, өйткені жоғары легирленген Al - Zn - Mg қорытпалары кернеулі коррозияға өте бейім, ал төмен легирленген қорытпалар жоғары легирленген емес термиялық өңдеуден айтарлықтай беріктік артықшылықтарына ие болмады магний түріндегі қорытпалар.

Al - Zn - Mg қорытпаларына тән бұзылу түрі-кернеулі коррозиялық крекинг-бұл системаға деген қызығушылықты төмендеткен жоқ. Al - Zn - Mg қорытпаларының оңтайлы химиялық құрамын іздеу жалғасуда.

Құрылымы. Негізгі материалдың құрылымы қатты ерітінді дәндерінің шекараларында және олардың ішінде артық фазалардың орналасуымен ұсақ түйіршікті. Дәнекерленген қосылыстардың құрылымы кіші топтар бойынша қарастырылды. Бірінші топшаға 1,5% Mg (барлық қорытпаларда) және әртүрлі мырыш құрамы бар қорытпалар кірді: 1,5; 2,5 және 4,5%; екінші топшаға мырыш 1,5 - тен 4,5% - ға дейін өзгерген кезде 5,5% Mg бар қорытпалар кірді.

Ыстық жарықтық. Al - Zn - Mg қорытпалары кристалдану жарықтарының пайда болуына айтарлықтай бейімділікке ие, қорытпалардың зерттелетін аймағындағы жарықтар коэффициенті 20-дан 80% - ға дейін өзгереді.

(Mg + Zn) > 7% болатын қорытпалар жоғары ыстыққа ие. Ыстықтың тұрақты және қанағаттанарлық нәтижелері - қатты ерітінді (Mg және Zn кезінде 1,2% - дан аспайтын) аймағында орналасқан қорытпаларды дәнекерлеу кезінде алынды. Магний мөлшері жоғары + облыста орналасқан қорытпаларды дәнекерлеу кезінде жарықшақтану коэффициентінің ең аз мәндері (К 20%) бар аймақ анықталды (Zn кезінде 3...5% 2% - дан аспайды).

Механикалық қасиеттері. Магний мен мырыштың азаюы беріктіктің жоғарылауына және дәнекерленген қосылыстардың икемділігінің төмендеуіне әкеледі. Al - Zn - Mg қорытпаларының табиғи қартаю күйіндегі максималды беріктікке магний мен мырыштың жалпы мөлшері шамамен 9% (400 МПа), яғни фазалық аймақта жатқан қорытпаларда - + Т, үштік аймаққа жақын - + + Т.

Дәнекерленген қосылыстардың икемділігі негізгі металдың икемділігінен төмен және магний мен мырыш қорытпасының құрамына тікелей байланысты.

Негізгі металдың икемділігі сәйкесінше 1,5 және 3,0%-дан аспайтын Zn және Mg құрамы бар А-қатты ерітінді аймағында орналасқан қорытпалардың бүкіл сериясында тұрақты жоғары (~160) болып қала береді.

Коррозияға төзімділік. Қорытпалардың коррозияға төзімділігі олардың Zn және Mg жиынтық құрамына және олардың арасындағы қатынасқа байланысты. Дәнекерленген қосылыстың коррозияға төзімділігіне әсер етеді, қорытпадағы Zn мазмұны және кейінгі термиялық өңдеу.

2.2 Оптикалық және электронды микроскопия

Құрылымдық зерттеулер жарық (СМ) және сканерлеу (СЭМ) және трансмиссиялық электронды микроскоп (ПЭМ) арқылы жүргізілді.

Микроқұрылымды анықтау тегістеуіштердің бетін фторлы қышқылдың 1% ерітіндісімен (50% HF 50% H₂O) ою арқылы жүргізілді. Қорытпалардың фазалық құрамы мен құрылымын зерттеу Жарық (Neophot-30) және электронды сканерлеу (JSM-35CF) микроскоптарында зерттелді. Соңғы жағдайда максималды фазалық контрастты алу үшін шағылысқан электрондар режимі де, үлкен (20000 есеге дейін) үлкейту кезінде максималды ажыратымдылықты жүзеге асыру үшін екінші реттік электрондар режимі де қолданылды. JSM-35CF микроскопында 4 кристалды толқындық спектрометрдің көмегімен алюминий қатты ерітіндісінің (Al) бастапқы кристалдарының және өлшемі кемінде 5 мкм бөлшектердегі басқа фазалардың құрамына микрорентгеноспектрлік талдау (MRSA) жүргізілді.

Сондай-ақ, Leica+оптикалық микроскопында зерттелетін қорытпалардың микроқұрылымы қарастырылды. Бұл микроскоп х 100-ден X1000 есеге дейін ұлғайтылған кезде металдар мен қорытпалардың фазалық құрамы мен құрылымдық ерекшеліктерін зерттеуге арналған. Жиілігі-50-60 Гц, кернеуі-115 – 230 V, 50 VA. Компьютер: Қуаты-50 Гц. Кернеу-220 V.

Фазалардың көлемдік үлестерінің (Q_v) мәндері көп компонентті системаларды талдаудан туындайтын белгілі заңдылықтарды қолдана отырып,

эксперименттік және есептеу арқылы анықталды. Фазалар мен қорытпадағы барлық компоненттердің концентрациясын біле отырып, массалық лобтардың мәндерін есептеуге болады, ал фазалық тығыздық мәндерін қолдана отырып, құрылымдық компоненттердің (бастапқы кристалдар (Al) және эвтектика) Q_V сызықтық өлшемдерін бағалау үшін жарық микроскопында эксперименталды түрде бағаланды.

2.3 Растрлық электронды микроскопия

Растрлық электронды микроскоп (РЭМ) немесе сканерлеуші электронды микроскоп (СЭМ) (ағылш. scanning electron microscope, SEM) - кеңістіктік ажыратымдылығы жоғары (0,4 нанометрге дейін) объект бетінің бейнесін, сондай-ақ жер бетіне жақын қабаттардың құрамы, құрылымы және кейбір басқа қасиеттері туралы ақпаратты алуға арналған электрондық микроскоп класындағы аспап. Электронды сәуленің зерттелетін объектімен өзара әрекеттесу принципіне негізделген.

Қазіргі заманғы РЭМ кең ауқымды үлкейту диапазонында шамамен 3-10 есе (яғни күшті қол линзасын үлкейтуге тең) 1 000 000 есеге дейін жұмыс істеуге мүмкіндік береді, бұл ең жақсы оптикалық микроскоптардың үлкейту шегінен шамамен 500 есе көп.

Бүгінгі таңда растрлық электронды микроскопия мүмкіндіктері ғылым мен өнеркәсіптің барлық салаларында, биологиядан бастап материалтану ғылымдарына дейін қолданылады. Әр түрлі типтегі детекторлармен жабдықталған әр түрлі дизайндағы және РЭМ типтегі бірқатар фирмалар шығарады.

Элементтік құрамды талдау үшін рентген-спектрлік микроанализ қолданылады, онда үлгінің бетін электрондармен сәулелендіру кезінде пайда болатын заттың сипаттамалық рентгендік сәулеленуі анықталады. Энергия дисперсиясы (EDX) және толқын дисперсиясы (WDX) анализаторлары бар.

Осы уақытқа дейін азотпен салқындатылған энергия дисперсиялық спектрометрлер қолданылады, бірақ соңғы жылдары өндірушілер азотсыз детекторларға көшуде.

2.4 Дифференциалды-термиялық анализ

Дифференциалды термиялық талдау (DTA) — үлгіні белгілі бір жылдамдықпен қыздыру немесе салқындату және зерттелетін үлгі мен салыстыру үлгісі (ЭТАЛОН) арасындағы температура айырмашылығының қарастырылып отырған температура интервалында ешқандай өзгеріске ұшырамайтын уақытша тәуелділігін жазудан тұратын зерттеу әдісі.

Әдіс үлгідегі фазалық түрлендірулерді тіркеу және олардың параметрлерін зерттеу үшін қолданылады.

DTA алынған ақпараттың кең ауқымына байланысты термиялық талдаудың ең кең таралған әдісі болып табылады.

Эталондық үлгі ретінде зерттелетін затқа жақын жылу сыйымдылығы мен жылу өткізгіштік мәндері бар инертті зат қолданылады, ол зерттелетін температура диапазонында құрылымдық және фазалық өзгерістерге ұшырамайды. Осылайша, зерттелетін және анықтамалық үлгілерді бір уақытта қыздыру немесе салқындату кезінде пайда болатын температура айырмашылығы зерттелетін үлгідегі эндо - немесе экзотермиялық түрлендірулерге немесе реакцияларға байланысты.

Дифференциалды-термиялық талдау мыналарды анықтауға мүмкіндік береді:

- фазалық өзгерістердің болуы немесе болмауы;
- системадағы энергия балансының өзгеруімен бірге жүретін кез-келген процестің басталуы мен аяқталу температурасы;
- уақыт бойынша процестің сипаты;
- сыртқы себептердің әсерінен белгілі бір әсердің орын ауыстыруы (қысым, қоршаған орта құрамының өзгеруі)

Бұл әдіс дәрі-дәрмектерді, тамақ өнімдерін және биологиялық заттарды, органикалық және бейорганикалық заттарды зерттеу үшін қолданылады. Келесі шамаларды өлшеуге болады: әйнектің температурасы, кристалдану температурасы, балқу температурасы және сублимация температурасы.

2.5 Рентгендік құрылымдық анализ

Рентгендік құрылымдық талдау бұл рентгендік дифракция құбылысын қолданатын дене құрылымын зерттеу әдісі, талданатын объектіде шашыраңқы рентген сәулелерінің кеңістіктегі таралуы мен қарқындылығы бойынша заттың құрылымын зерттеу әдісі. Дифракция үлгісі қолданылатын рентген сәулелерінің толқын ұзындығына және объектінің құрылымына байланысты. Атом құрылымын зерттеу үшін $\sim 1 \text{ \AA}$ толқын ұзындығы бар сәуле қолданылады, яғни атом мөлшерінің реті.

Рентгендік құрылымды талдау әдістері металдарды, қорытпаларды, минералдарды, Бейорганикалық және органикалық қосылыстарды, полимерлерді, аморфты материалдарды, Сұйықтықтар мен газдарды, ақуыз молекулаларын, нуклеин қышқылдарын және т.б. зерттейді. Кристалдарды зерттеу кезінде ол ең көп ақпарат береді. Бұл кристалдардың құрылымның қатаң жиілігіне ие болуына және рентген сәулелері үшін табиғаттың өзі жасаған дифракциялық торды білдіретіндігіне байланысты. Дегенмен, ол сұйықтықтар, аморфты денелер, сұйық кристалдар, полимерлер және т.б. сияқты құрылымы аз реттелген денелерді зерттеу кезінде де құнды түсініктер береді. Көптеген декодталған Атом құрылымдарының негізінде кері мәселені

шешуге болады: поликристалды заттың рентгенографиясына сәйкес, мысалы, легирленген болат, қорытпа, кен, Ай топырағы, осы заттың кристалдық құрамы орнатылуы мүмкін, яғни фазалық талдау жасалады.

Рентгендік құрылымдық талдау барысында зерттелетін үлгі рентген сәулелерінің жолына орналастырылады және сәулелердің затпен өзара әрекеттесуі нәтижесінде пайда болатын дифракциялық көрініс жазылады. Зерттеудің келесі кезеңінде дифракциялық үлгіні талдап, берілген суреттің пайда болуына себеп болған кеңістіктегі бөлшектердің өзара орналасуын есептеу арқылы орнатылады.

Кристалды заттардың рентгендік құрылымдық талдауы екі кезеңге бөлінеді.

Кристалдың бірлік ұяшығының өлшемдерін, бірлік ұяшығындағы бөлшектердің (атомдардың, молекулалардың) санын және бөлшектердің (кеңістіктік топ деп аталатын) орналасу симметриясын анықтау. Бұл деректер дифракциялық максимумдардың орналасу геометриясын талдау арқылы алынады.

Бірлік ұяшығындағы электронды тығыздықты есептеу және электронды тығыздық максимумдарының орналасуымен анықталатын атомдардың координаттарын анықтау. Бұл деректер дифракциялық максимумдардың қарқындылығын талдау арқылы алынады.

Рентгендік құрылымдық талдауды қолдану. Рентгендік құрылымдық талдау кристалды заттардың құрылымын объективті түрде орнатуға мүмкіндік береді, оның ішінде дәрумендер, антибиотиктер, координациялық қосылыстар және т. б. кристалды толық құрылымдық зерттеу көбінесе химиялық формуланы, байланыс түрін, белгілі тығыздықтағы молекулалық салмақты немесе белгілі молекулалық салмақтағы тығыздықты, симметрияны және т. б. анықтау немесе нақтылау сияқты таза химиялық мәселелерді шешуге мүмкіндік береді. молекулалар мен молекулалық иондардың конфигурациясы.

Полимерлердің кристалдық күйін зерттеу үшін рентгендік құрылымды талдау сәтті қолданылады. Мұндай денелердің Рентгенограммаларында бірнеше дифракциялық сақиналар бар, олардың қарқындылығы q жоғарылауымен тез төмендейді. осы сақиналардың ені, пішіні және қарқындылығы бойынша белгілі бір сұйық немесе аморфты құрылымдағы жақын тәртіптің ерекшеліктері туралы қорытынды жасауға болады.

Рентген сәулелерін қолданудың маңызды саласы-ғылымның жеке саласына айналған металдар мен қорытпалардың рентгенографиясы. "Рентгенография" ұғымы толық немесе ішінара рентгендік құрылымды талдаумен қатар рентген сәулелерін қолданудың басқа тәсілдерін – рентгендік дефектоскопияны (трансмиссия), рентгендік спектрлік талдауды, рентгендік микроскопияны және басқаларын қамтиды. Таза металдар мен көптеген қорытпалардың құрылымдары анықталды. рентгендік құрылымды талдауға негізделген қорытпалардың кристаллохимиясы металлургияның жетекші салаларының бірі болып табылады. Егер бұл қорытпалар рентгендік құрылымдық талдау әдістерімен зерттелмесе, металл қорытпаларының күйінің

бірде-бір диаграммасын сенімді түрде белгілеу мүмкін емес. Рентгендік құрылымдық талдау әдістерін қолдану арқылы металдар мен қорытпаларда олардың пластикалық және термиялық өңдеуінде болатын құрылымдық өзгерістерді терең зерттеуге мүмкіндік туды.

Рентгендік құрылымды талдау әдісі Елеулі шектеулермен де сипатталады. Толық рентгендік құрылымды талдау үшін заттың жақсы кристалдануы және жеткілікті тұрақты кристалдар беруі қажет. Кейде жоғары немесе төмен температурада зерттеу жүргізу қажет. Бұл эксперимент жүргізуді қиындатады. Толық зерттеу өте көп еңбекті қажет етеді, ұзақ мерзімді және есептеу жұмыстарының үлкен көлемін қамтиды. Күрделілігі орташа атомдық құрылымды (бірлік ұяшығындағы $\sim 50 - 100$ Атом) орнату үшін бірнеше жүздеген, тіпті мыңдаған дифракциялық шағылыстардың қарқындылығын өлшеу қажет. Бұл өте көп уақытты қажет ететін және ауыр жұмысты автоматты микроденситомерлер мен компьютермен басқарылатын дифрактометрлер кейде бірнеше апта, тіпті айлар бойы орындайды (мысалы, шағылысу саны жүздеген мыңға жететін акуыз құрылымдарын талдау кезінде). Осыған байланысты соңғы жылдары рентгендік құрылымды талдау мәселелерін шешу үшін жылдам жұмыс істейтін компьютерлер кеңінен қолданылды. Алайда, компьютерлерді қолданудың өзінде құрылымды анықтау қиын және уақытты қажет ететін жұмыс болып қала береді. Дифрактометрде шағылыстарды параллель тіркей алатын бірнеше есептегіштерді қолдану, эксперимент уақытын қысқартуға болады. Дифрактометриялық өлшеулер сезімталдық пен дәлдік бойынша фоторегистрациядан асып түседі. Молекулалардың құрылымын және кристалдағы Молекулалардың өзара әрекеттесуінің жалпы сипатын объективті түрде анықтауға мүмкіндік бере отырып, рентгендік құрылымды талдау арқылы зерттеу молекула ішіндегі Химиялық байланыстардың сипатындағы айырмашылықтарды дұрыс дәрежеде бағалауға әрқашан мүмкіндік бермейді, өйткені байланыс ұзындықтары мен валенттік бұрыштарды анықтау дәлдігі көбінесе бұл мақсат үшін жеткіліксіз. Әдістің маңызды шектеуі-бұл жеңіл атомдардың, әсіресе сутегі атомдарының орналасуын анықтаудағы қиындықтар.

2.6 Thermo-Calc Software термодинамикалық есептеу бағдарламалық құралы

Фазалық тепе-теңдікті есептеу үшін ең көне және кеңінен қолданылатын бағдарламалардың бірі-Thermo Calc, оның алғашқы нұсқасы 1981 жылы пайда болды. Оның жұмысы Гиббс энергиясын жаһандық минимизациялаудың әмбебап алгоритміне негізделген, ол бастапқы жуықтауды орнатпай көп компонентті системаларды есептеуге жарамды. Компоненттердің максималды саны-40, диаграммадағы тәуелсіз осьтер-5.

Фазалық диаграммалардан басқа фазалардың термодинамикалық қасиеттерін (Гиббс энергиясы, энтальпия, жылу сыйымдылығы және т.б.),

метастабильді тепе-теңдіктерді және т. б. есептеуге болады.

Thermo Calc - ке тән қасиет-бұл оның модульділігі, металл, тұз, оксид, сулы электролит ерітінділері және т. б. Системалардың кең ауқымы үшін мәліметтер базасының болуы. Thermo Calc-те тепе-теңдікті есептеуден басқа, PARROT модулінің көмегімен системаның термодинамикалық қасиеттері мен фазалық шекаралары туралы қолданыстағы мәліметтер бойынша фазалық диаграмманы оңтайландыруға болады.

Фазалық тепе-теңдікті есептеуге және күй диаграммаларын құруға арналған барлық бағдарламалар CALPHAD эксперименттік деректерін өңдеу әдісіне негізделген.

CALPHAD тәсілі термодинамикалық мәліметтер базасының күрделі системаларын қолдануға негізделген. Қазіргі уақытта бірнеше коммерциялық (FactSage, MTDATA, PANDAT, Thermo Calc, NUCLEA/GEMINI және т.б.) бағдарламалық өнімдер бар. Олар ғылыми зерттеулер мен өндірісте қолданылады. Бұл бағдарламаларды қолдану көп компонентті системалардың мінез-құлқын термодинамикалық болжау нәтижесінде эксперименттік жұмысты оңтайландыру арқылы уақыт пен материалдық шығындарды едәуір азайтуға мүмкіндік береді (бұл CALPHAD тәсілінсіз мүмкін емес). Фазалық диаграммаларды термодинамикалық модельдеудегі ғылыми жетістіктерді көрсететін CALPHAD журналы бар. CALPHAD әдісін қолдануды сипаттайтын ғылыми еңбектер көптеген басқа журналдарда жарияланған.

CALPHAD (аббр. ағылшын тілінен. CALculation of PHase Diagrams) - фазалық диаграммаларды есептеу әдісі. Фазалық диаграммаларда қосылыстар мен ерітінділердің (яғни фазалардың) және олардың бірге өмір сүру аймақтары көрсетіледі. Олар алғаш рет эксперименттік тепе-теңдік ақпаратын жалпылаудың графикалық әдісі ретінде пайда болды.

CALPHAD тәсілі фазалық диаграмма-бұл фазалық системаны құрайтын системаның тепе-теңдік термодинамикалық қасиеттерінің көрінісі. Осылайша, системаның барлық фазаларының термодинамикалық қасиеттерін бастапқы бағалау арқылы фазалық диаграмманы есептеу мүмкіндігі бар.

CALPHAD әдісі системадағы фазалық тепе-теңдік туралы барлық эксперименттік ақпаратты және термохимиялық термофизикалық зерттеулер жүргізу кезінде алынған барлық термодинамикалық ақпаратты біріктіреді. Содан кейін әр фазаның термодинамикалық қасиеттерінің жиынтығы реттелетін параметрлері бар математикалық модельмен сипатталады. Параметрлер модельдің барлық ақпаратқа, соның ішінде бірге өмір сүретін фазаларға сәйкестігін оңтайландыру арқылы есептеледі. Осыдан кейін фазалық диаграмма мен фазалық системаны құрайтын термодинамикалық қасиеттерді қайта санауға болады. CALPHAD әдісінің тұжырымдамасы фазалық диаграмманың дәйекті сипаттамасын алу және фазалық түрлендірулерді модельдеу арқылы фазалық ақпарат жетіспейтін фазалық аймақтардағы көптеген тұрақты фазалар мен олардың термодинамикалық қасиеттерін, сондай-ақ метастабильді күйлерді сенімді болжау болып табылады.

CALPHAD әдісін сәтті қолданудың екі маңызды факторы бар. Бірінші

фактор - әр фаза үшін Гиббс энергиясының нақты және ыңғайлы математикалық моделін табу. Гиббс энергиясы қолданылу себебі - эксперименттік мәліметтердің көпшілігі белгілі бір температура мен қысым мәндерінде алынады. Сонымен қатар, кез-келген басқа термодинамикалық шаманы Гиббс энергиясынан алуға болады. Көп компонентті системаның Гиббс энергиясының толық сипаттамасын аналитикалық түрде алу мүмкін емес. Сондықтан математикалық модель құрудың негізгі ерекшеліктерін анықтау қажет. Модель мен нақты система арасындағы алшақтық температураның, қысымның және фазаның құрамының дәрежелік қатарына ыдырауымен көрінеді. Модельдік сипаттаманың реттелген параметрлері эксперименттік деректерді қоспас бұрын нақтыланады. CALPHAD әдісінің қуаты - көп компонентті системаны құрайтын ішкі системалардың сипаттамасын оны толық сипаттау үшін біріктіруге болады.

Екінші маңызды фактор - тепе-теңдікті есептеуге арналған компьютерлік бағдарламалардың және сараптамалық ақпараты бар схемалар мен мәліметтер базасының әртүрлі түрлерінің болуы. Қазіргі уақытта әртүрлі фазалар үшін қолданылатын модельдердің көптеген түрлері бар, әртүрлі материалдардың (болаттар, суперқорытпалар, жартылай өткізгіш материалдар, сулы ерітінділер, оксидтер және т.б.) бірнеше термодинамикалық мәліметтер базасы (коммерциялық және еркін таратылатын) бар. Сондай-ақ тепе-теңдікті есептеу алгоритмдерінің әртүрлі түрлерін қолданатын бағдарламалардың бірнеше түрі бар.

Олардың ең дамығандары тепе-теңдікті есептеу кезінде температураны, қысымды және құрылымды ғана емес, сонымен қатар системаның өмір сүру жағдайларының көптеген басқа түрлерін қолдануға мүмкіндік береді, өйткені көбінесе тепе-теңдікті тұрақты көлемде немесе элементтің берілген химиялық потенциалында немесе белгілі бір фазаның құрамында және т.б. анықтауға болады.

Thermo Calc Software - термодинамикалық есептеу бағдарламалық құралы. Пакет идеалды емес фазалары бар системалар үшін арнайы жасалған. Thermo Calc 1981 ж. бері дамып келеді. Корольдік Технологиялық институтының профессоры Бо Сундманның басшылығымен (Bo Sundman, Prof., Head of Division of Computational Thermodynamics in the Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden). Авторлар бұл көп компонентті системалардың бес тәуелсіз айнымалысы бар фазалық диаграммалардың ерікті кесінділерін есептей алатын жалғыз бағдарламалық жасақтама деп санайды. Сондай-ақ, диаграммалардың басқа түрлерін есептеу құралдары кіреді, мысалы, CVD орын ауыстыруы (CVD depositions), Scheil Gulliver бойынша қатаюды модельдеу, газдардағы ішінара қысым және т.б. Thermo Calc - пен системада әр фаза үшін әр түрлі модельдерді қолданатын көптеген дереккөздерден алынған мәліметтер базасын пайдалануға болады. Thermo Calc көмегімен уақыт факторын елемеге болатын процестерді ғана модельдеуге болады. 1997 жылы Thermo Calc Software компаниясы Стокгольм, Швеция (Materials Science and Engineering at KTH, Stockholm, Sweden), Корольдік технологиялық институттың

Материалтану және Инженерия факультетінің еншілес саласы ретінде құрылды, компанияның мақсаты - тепе-теңдік құрамын есептеуге, фазалық диаграммаларды құруға және сатуға арналған бағдарламаларды әзірлеу және сату компанияға қарағанда диффузиялық процестерді модельдеу 15 жылдан астам уақыт айналысады. Компания Thermo Calc бағдарламалық пакеттерін құрайды.

3 Зерттеу нәтижелері

3.1 Көп компонентті қорытпалардың тепе-теңдіксіз кристалдануын есептеу

Көп компонентті қорытпалардың тепе-теңдіксіз кристалдануы кезінде шекаралық қатты ерітінділердің немесе аралық фазалардың бастапқы кристалдарында легирлеуші элементтер мен қоспалардың кристаллитішілік түзілуі пайда болады, артық фазалар пайда болады және эвтектикалық және перитектикалық түрлендірулерде артық фазалық кристалдардың саны артады. Дендритті жою дәрежесі, артық фазалық токтың мөлшері, мөлшері мен формасы қорытпалар құрылымының маңызды сипаттамалары болып табылады, олар көптеген жағдайларда олардың негізгі механикалық және технологиялық қасиеттерін, сондай-ақ құйма бұйымдарын термиялық өңдеу кезінде пайда болатын құрылымдық өзгерістердің кинетикасын анықтайды.

Дендритті жою дәрежесі сұйық және қатты фазалар арасындағы, сондай-ақ осы фазалардың әрқайсысының ішіндегі диффузиялық процестердің толықтығына байланысты. Кристалдану процесінде қатты фазадағы компоненттердің қайта бөлінуі сұйық фазаға қарағанда әлдеқайда баяу жүреді. Балқымадағы және қатты фазадағы диффузиялық процестердің шектелуіне байланысты системаның тепе-теңдік күйінен ауытқуына байланысты әсерлерді есепке алу үшін әртүрлі модельдер қолданылады.

Көп компонентті қорытпалардың тепе-теңдіксіз кристалдануы нәтижесінде пайда болатын артық фазалардың қосындыларының санын, орналасу сипатын және мөлшерін анықтау, кристаллит ішіндегі химиялық гетерогенділікті зерттеу белгілі бір практикалық қызығушылық тудырады. Бұл қорытпалардың көптеген механикалық және технологиялық қасиеттерін бағалауға, құйылған қорытпаларды термиялық өңдеу кезінде пайда болатын құрылымдық түрлендірулердің кинетикасын зерттеуге мүмкіндік береді.

Қорытпалардың тепе-теңдіксіз кристалдану процесінде легирлеуші элементтер мен қоспалардың қайта бөлінуі туралы әдебиеттерде бар идеялар олардың қатты ерітінді кристалдарының ішіндегі концентрациясының ең үлкен және ең кіші мәндерін болжауға мүмкіндік береді. Бұл жағдайда кристалдардың көлденең қимасы бойынша легирлеуші элементтер мен қоспалардың таралу сипаты белгісіз болып қалады. Жеке дәндердегі элементтердің дендритті жойылуын эксперименттік анықтау өте қиын міндет. Сандық микрорентгеноспектральды талдау және микроқаттылықты өлшеу әдісі арқылы алынған мәліметтер системалы емес және кристалл ішілік ликвацияның жалпы заңдылықтарын анықтауға мүмкіндік бермейді.

И.Н.Голиков пен А. Крупковскийдің [9,10] еңбектерінде сұйық және қатты фазаларға арналған әртүрлі диффузиялық модельдерді қолдана отырып, қос қорытпалардағы Кристалл ішіндегі химиялық гетерогенділікті зерттеудің есептік әдістері ұсынылды. Бұл ретте зерттелетін системалар үшін тиісті күй диаграммаларындағы ликвидус және солидус сызықтары, сондай-ақ легирлеуші

элементтердің таралу коэффициенттерінің концентрациялық тәуелділіктері белгілі деп болжанады. Үш және одан да күрделі қорытпалар жағдайында мұндай зерттеулер жүргізілген жоқ.

Осы жұмыста ұсынылған әдіс көп компонентті қорытпалардың біркелкі емес кристалдануы және дендритті жасушалардағы кристалл ішіндегі ликвация кезінде қатты және сұйық ерітінділердің құрамы мен салыстырмалы мөлшерінің өзгеруін есептеуге мүмкіндік береді.

Есептеу әдісін әзірлеу кезінде қорытпаның тепе-теңдіксіз кристалдануының бүкіл процесі құрамы кристалданудың әр кезеңінен кейін қалған сұйық фазаның құрамына сәйкес келетін қорытпалар жиынтығының кристалдануының бастапқы моменттерінің қосындысы ретінде қарастырылады. Бартон теориясына сәйкес, Прим және Сликтор кристалл – сұйық ерітіндінің шекарасында сұйық және қатты фазалар арасында тепе-теңдік болады. Содан кейін кристалдану процесінің кез-келген кезеңіндегі алғашқы қатты фазалық кристалдарда күйдің тепе-теңдік диаграммасына сәйкес келетін қосылыстар болады. Бұл жағдайда тепе-теңдік емес кристалдану процесінің кез-келген сатысы үшін қорытпалардың тепе-теңдік кристалдануы жағдайында алынған теңдеулерді (1-10) қолдануға болады. Бұл жағдайда қорытпа компоненттерінің тепе-теңдік таралу коэффициенттерінің температураға тәуелділігін білу қажет.

Егер $K_i(T)$ бөлу коэффициенттерінің температуралық тәуелділіктері белгілі болса, онда шарттардан (1):

$$\sum K_{(T_l)} \cdot X_{ij} = 1, \quad (1)$$

мұндағы, X_{ij} – қорытпадағы i -ші компоненттің концентрациясы, ликвидус температурасын T_l табуға болады. Бұл температурада қатты ерітіндінің алғашқы кристалдарының құрамы бастапқы қорытпадағы құрамдас бөліктің оның таралу коэффициентіне көбейтіндісі ретінде T_l : $X_i^\alpha = K_{i(T_l)} \cdot X_i$ анықталады. τ_1 уақыт ішінде қорытпаның температурасы $T_i = T_l - \Delta\tau_1$ -ге дейін төмендейді, мұндағы Δ - қорытпаның салқындату жылдамдығы. Бұл жағдайда компоненттердің таралу коэффициенттері $K_i(T_l)$ -ден $K_i(T_1)$ -ге дейін өзгереді және α_{t_1} қатты фазаның белгілі бір үлесі кристалданады. Үш компонентті қорытпалар жағдайында қатты фазаның үлесі өрнектің көмегімен, ал өрнектен кез келген n -компонентті қорытпа үшін анықталады. Әрі қарай, α_{t_1} және $K_i(T_1)$ мәндерін ауыстыра отырып, сұйық және солидус беттерінің теңдеулеріне біз қатты ерітінді $X_i(T_1)$ кристалдарының құрамын табамыз және қалған сұйық фаза $\alpha^{(1-\alpha_{t_1})}$ температурада T_1 °К :

$$X_i^{JK}(T_1) = \frac{X_{io}}{\alpha_{T_1}(K_i(T_1) + 1) + 1}, \quad (2)$$

$$X_{i(T_1)}^\alpha = K \cdot (T_1) \cdot X_{i(T_1)}''' . \quad (3)$$

Температура $T_{\text{л}}$ -ден T_1 -ге дейін төмендеген кезде қатты және сұйық фазалардағы компоненттердің концентрациясы сәйкесінше $X_{ii}^{\text{ж}}(T_{\text{л}})$ және $X_i^\alpha(T_{\text{л}})$ - ден $X_i^{\text{ж}}(T_1)$ және $X_i(T_1)$ - ге дейін үздіксіз өзгереді.

Сұйық және қатты фазалардың құрамын табу үшін кристалдану процесінің екінші кезеңінің соңына қарай температураны қайтадан өзгертеміз.

Содан кейін:

$$T_2 = T_1 - \Delta T = T_1 - \vartheta \cdot \tau_2 \quad (4)$$

T_2 температурасында таралу коэффициенттерінің жаңа мәндерін анықтағаннан кейін, теңдеулерден немесе осы уақыт аралығында кристалданған қатты фазаның α_2 мөлшерін қайтадан табамыз. Содан кейін, α_{t_1} және $K_i(T_2)$ мәндерін (5), (6) теңдеулеріне ауыстыру, сондай-ақ $X_{i0}^{\text{ж}}$ және $X_1^{\text{ж}}$ ауыстыру арқылы біз кристалдану процесінің екінші кезеңінің соңына қарай тепе-теңдік фазаларының құрамдарын табамыз:

$$X_{2i}^{\text{ж}}(T_2) = \frac{X_{ii}^{\text{ж}}(T_1)}{\alpha_2 (K_i(T_2) - 1) + 1} , \quad (5)$$

$$X_{i(T_2)}^\alpha = K_i \cdot (T_2) \cdot X_{i(T_2)}''' . \quad (6)$$

Мұнда келтірілген есептеулер қорытпаның кристалдануы аяқталғанға дейін қайталанады. Кристалдану процесі аяқталған кезде қатты фазаның мөлшері M_α , қорытпаның бастапқы мөлшеріне M_0 -ге тең болуы керек, ал оның үлесі:

$$\alpha = \frac{m_\alpha}{M_0} = 1 . \quad (7)$$

Мұнда сипатталған есептеу схемасынан қорытпаның кристалдану процесінің кез-келген сатысында түскен қатты фазаның мөлшері және әр кезеңнен кейін қалған сұйық фазаның мөлшері сәйкесінше тең болады:

$$\begin{aligned} 1 \text{ кезең} - m_{\alpha_1} &= M_0 \alpha_1, & m_{\text{ж}1} &= M_0 - M_0 \cdot \alpha_1 = M_0 (1 - \alpha_1). \\ 2 \text{ кезең} - m_{\alpha_2} &= M_0 (1 - \alpha_1) \alpha_2, & m_{\text{ж}2} &= M_0 (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2). \\ 3 \text{ кезең} - m_{\alpha_3} &= M_0 (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2) \alpha_3, & m_{\text{ж}3} &= M_0 (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2) (1 - \alpha_3). \\ n\text{-кезең} - m_{\alpha n} &= M_0 (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2) \cdots (1 - \alpha_n), & m_{\text{ж}n} &= M_0 (1 - \alpha_1) (1 - \alpha_2) \cdots (1 - \alpha_n). \end{aligned}$$

Осы жерден біз кристалдану процесінің n -ші сатысынан кейін қатты фазаның $m_{\alpha n}$ жалпы санын N және оның салыстырмалы үлесін S_n есептеу үшін өрнек аламыз:

$$m_{\alpha n} = m_{\alpha 1} + m_{\alpha 2} + \dots + m_{\alpha n}, \quad (8)$$

$$S_n = \alpha_1 + (1 - \alpha_1)\alpha_2 + (1 - \alpha_1)(1 - \alpha_2)\alpha_3 + \dots + (1 - \alpha_1)(1 - \alpha_2) \dots (1 - \alpha_{n-1})\alpha_n. \quad (9)$$

S_n бірлікке тең болатын температураны тепе-теңдіксіз солидус температурасы деп түсінеміз. Берілген салқындату жылдамдығындағы Әбалқыманың кристалдануының жалпы уақыты ($\tau_{\text{кристалдану}}$) -ге тең:

$$\tau_0 = (T_{\text{лик}} - T_{\text{солид}}) \vartheta. \quad (10)$$

Есептеудің болжамды әдісі қорытпаның әртүрлі салқындату жылдамдықтарындағы кристалдану уақыты мен температурасына байланысты кристалдану процесінің кез келген сатысында қатты фазаға (α_n) ауысатын қатты фазаның жалпы салыстырмалы үлесінің (S_n) және сұйық фазаның үлесінің тәуелділігін зерттеуге мүмкіндік беретінін ескеру қажет. Осылайша, көп компонентті қорытпалардың тепе-теңдіксіз кристалдану процесінің кинетикасын зерттеуге болады. Тепе-теңдік емес кристалдануды сипаттаудың ұсынылған әдісі қорытпаның бастапқы кристалдануының барлық аралығындағы сұйық және қатты ерітінділердің мөлшері мен құрамының өзгеруін есептеуге мүмкіндік беретіндіктен, бұл жағдайда болатын көлемдік өзгерістерді, демек, сұйық және қатты ерітінділердің термодинамикалық және басқа қасиеттерінің өзгеруін зерттеуге мүмкіндік бар. Сонымен қатар, сұйық фазаның құрамының өзгеру барысын және қос эвтектикалық сызықтарды талдай отырып, үш фазалы түрлендіру басталған кездегі сұйық фазаның құрамын, мөлшерін және температурасын анықтауға болады (яғни. Қос эвтектиканың тепе-теңдік емес кристалдануының немесе үш фазалы перитектикалық түрленудің басталу температурасы). Осылайша, есептеу әдісі қорытпаның тепе-теңдіксіз кристалдануы кезінде пайда болуы мүмкін артық фазалар мен эвтектиканың жалпы санын анықтауға мүмкіндік береді, яғни тепе-теңдік күйіндегі қорытпалардың фазалық құрамы мен құрылымын сандық бағалауға мүмкіндік береді. Дендритті жасушаның қандай да бір пішінге ие болуына мүмкіндік бере отырып, ұсынылған есептеу әдісін қолдана отырып, қорытпа компоненттері мен қоспалардың бастапқы қатты ерітінді кристалдарының қимасы бойынша таралу қисықтарын құруға болады.

Есептеулер қатты фазадағы диффузия толығымен басылған және сұйық фазада оның құрамын толығымен теңестіруге уақыт болған және сұйық фазамен шектелген және қатты фазада толығымен басылған жағдайларда арнайы бағдарлама бойынша жүргізілді. Бірінші жағдайда K_{10} компоненттерінің таралу коэффициенттерінің температуралық тәуелділігі таза металдардың химиялық потенциалдарының тең шарттарынан анықталады. Екінші жағдайда, сұйық фазадағы диффузияның шектелуіне байланысты кристалдану майданында алюминийдің балқу температурасын төмендететін легирлеуші компоненттермен байытылған сұйықтық қабаты пайда болады. Сондықтан кристалл-сұйық ерітінді шекарасында легирлеуші компоненттердің таралу коэффициенттерінің мәндері олардың тепе-теңдік мәндерінен өзгеше. Осыған

байланысты дендритті жоюды есептеу кезінде қорытпаларда (10) теңдеу бойынша анықталатын легирлеуші компоненттердің белсенді таралу коэффициенттері пайдаланылды.

$$K_{эфф} = \frac{K_0}{K_\sigma + (1 + K_0) \exp\left(-\frac{Sv}{D}\right)} \quad (11)$$

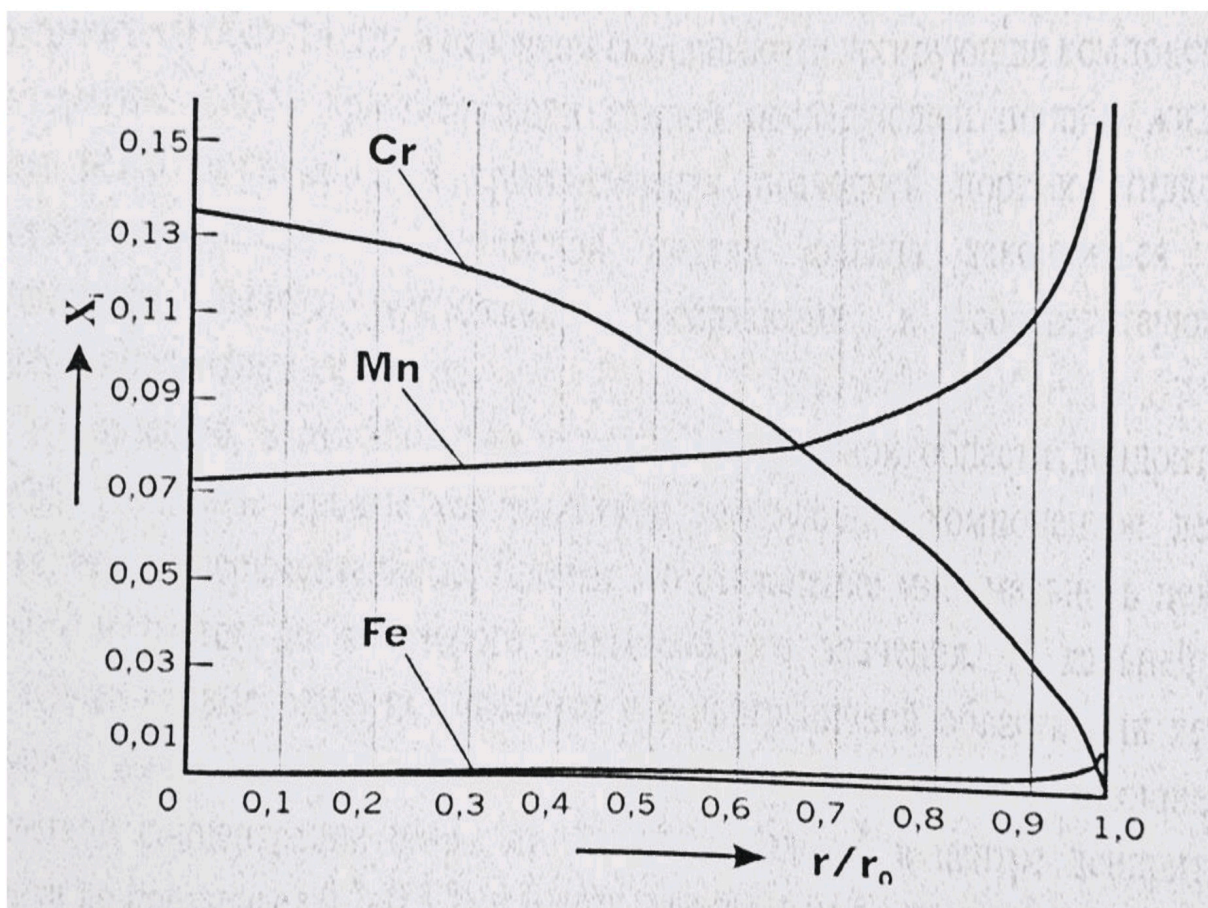
Қоспалардың таралу коэффициенттері (Fe, Si, Cr және т.б.) тұрақты болып қабылданды және сәйкес қос күй диаграммаларынан анықталды. Салқындату жылдамдығы (ζ) 1 градус/сек болды, бұлмыс құймасындағы қорытпалардың салқындату жылдамдығына шамамен сәйкес келеді.

Легирленген заттардың таралуын эксперименттік анықтау қимасы бойынша компоненттер, зерттелетін қорытпалардағы дендритті жасушалар жергілікті микрорентгеноспектралды талдау әдісімен жүргізілді.

3.2 Al-Mg-Zn система қорытпаларындағы дендритті әртектілікті есептеу

1-6 суреттерде біз зерттеген қорытпалардағы дендритті жасушалардың қимасы бойынша легирлеуші компоненттердің таралуының есептік және эксперименттік қисықтары көрсетілген. Al-Mg-Zn үштік системасының қорытпаларын дайындау сипатталған әдіс бойынша жүргізілді. Қорытпалар мыс қалыптарға құйылды (салқындату жылдамдығы $\approx 1-1,5$ градус / сек). Дендритті жасушалардың орташа мөлшері 25 мкм болды.

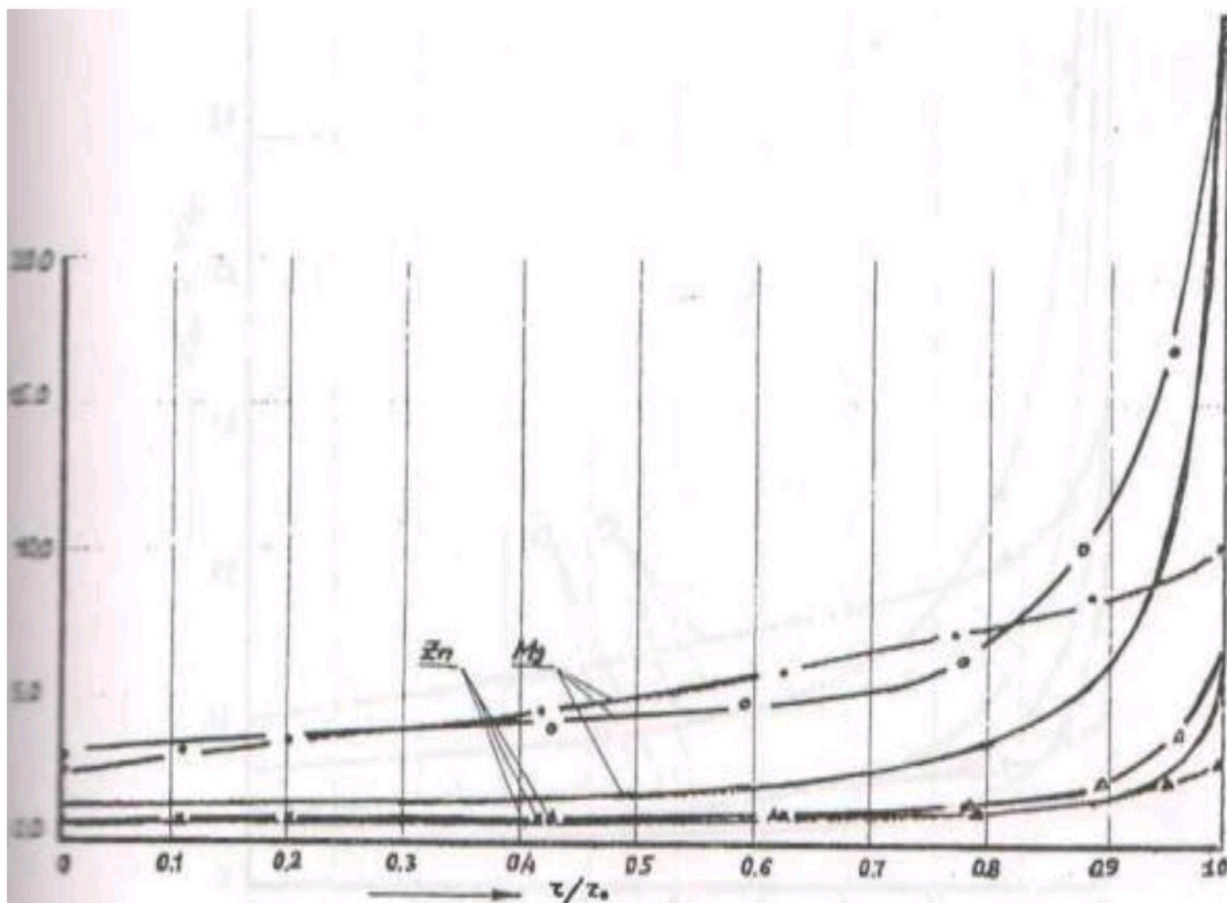
1-6 суреттерден сауын фазасындағы диффузияны толық тежеу және оның сұйық фазада шектеусіз өтуі жағдайында және дендритті жасушалардың орталық аймақтарындағы құрамды эксперименттік анықтау кезінде есептелген мәліметтер эксперимент нәтижелерімен сәйкес келетіндігін көруге болады. Бұл кристалдану процесінің бастапқы кезеңдерінде алғашқы құлаған кристалдардың құрамы тепе-теңдікке өте жақын екенін көрсетеді, бұл жұмыста байқалған жағдайға ұқсас. И. Новикова және В. С. Золоторевский [11], м. в. Пикунова [12], В. М. Глазова [13] және т. б. құрамдас қорытпалардағы жоюды зерттеу кезінде зерттеушілер.



1 сурет - Mg және Zn таралу қисықтары
Al+2,86 at%mg+2,54 at % Zn қорытпасы

Есептеуге сәйкес, дендритті жасушалардың шекаралас аймақтары легирлеуші компоненттермен қатты байытылған және осы учаскелердегі сәйкес есептелген тірі үлестірулер тәжірибелік аймақтарға қарағанда әлдеқайда жоғары. Таралу коэффициентіне сәйкес магний мырышқа қарағанда күшті түрде жойылады. Сонымен қатар, өте тар шекаралық аймақта магний мен мырыштың концентрациясы олардың жасушаның ортасындағы құрамынан әлдеқайда жоғары. Бөлу коэффициенттері бірліктен аз басқа компоненттер ($K < 1$), Мысалы, Si, Fe, Mn, өздерін бірдей ұстайды. Кремний мен темір толығымен дерлік өте тар шекара аймағына вытестырылады, оның ені (0,03-0,05) r_0 , мұндағы r_0 - г-дендритті жасушаның радиусы. Мысалы, орташа мөлшерде Si Fe-жүріс қорытпасы 0,099 және 0,1 ат.%, сәйкесінше, жасушаның ортасындағы кремний мөлшері 0,005 ат құрайды.%, темір-0,001 ат.%.

Бұл жағдайда олардың шекаралас аймақтағы құрамы алюминийдегі ерігіштік шегінен асатын мәндерге жетеді. Уақыт пен темірдің таралуының ұқсас сипаты олардың таралу коэффициенттерінің мәндеріне толық сәйкес келеді ($K_{Si} = 0,1$ $K_{Fe} = 0,003$).



2 сурет - MDI Zn таралу қисықтары
Al+4,84 ат % Mg+1,47 ат.% Zn қорытпасы

Хромның таралу коэффициенті біреуден үлкен ($K_{Cr}=1,75$). Сондықтан оның таралуы керісінше. Орташа алғанда 0,08 ат.%. -қа тең бастапқы қорытпадағы хромды ұстау, оның дендритті жасушаның центріндегі концентрациясы 0,14 ат% жетеді. , ал ұяшық шекарасында шамамен 0,005 ат.%. болады.

Жоғарыда көрсетілген суреттерде сұйық және қатты ерітінділердегі таңдалған диффузиялық модельдегі дендритті жасушаның қимасы бойынша сұйықтықтың температурасының өзгеру қисықтары келтірілген. Мұнда жоғарыда аталған екі тән аймақ айқын көрінеді. Қатты фазалық кристалдардың алғашқы эмбриондары (орталық бөлігі) осы құрамдағы қорытпаның тепе-теңдік сұйықтығының температурасында кристалданады. Қатты ерітінді кристалының кейінгі қабаттарының ликвидус температурасы қорытпа компоненттерінің таралу коэффициенттері өзгерген кезде осы Кристалл қабаттарының құрамдарының өзгеруіне байланысты біртіндеп төмендейді.

Кристалдың перифериясына неғұрлым жақын болса, ликвидус температурасын төмендететін легирлеуші компоненттердің концентрациясы соғұрлым жоғары болады. Сондықтан, негізінен легирлеуші компоненттер жиналатын тар шекаралық аймақта сұйық фазаның әрбір келесі бөлігінің кристалдануының басталу температурасы күрт төмендейді және таңдалған

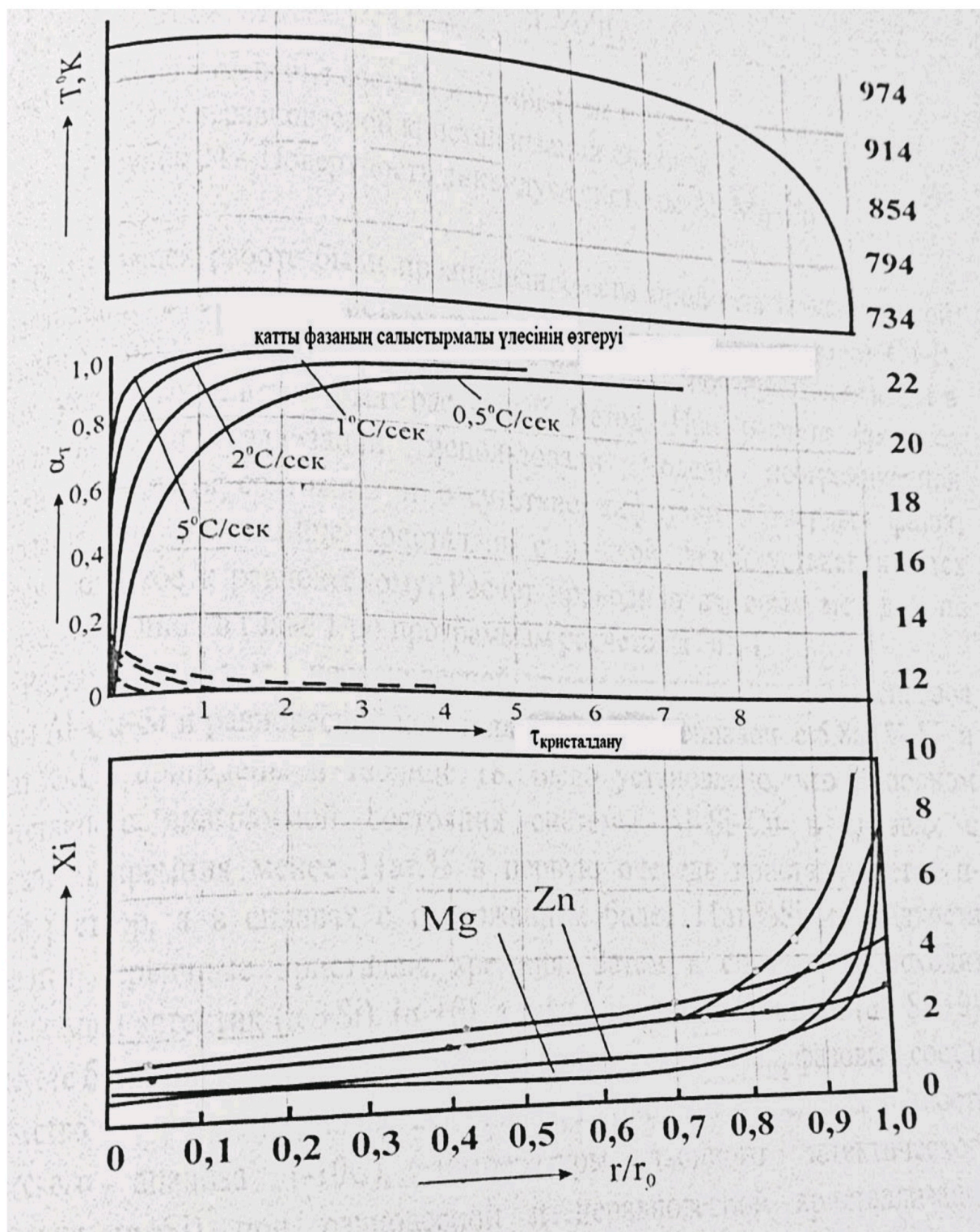
диффузиялық модельге сәйкес сұйықтың соңғы бөлігінің кристалдануы тиісті көп компонентті системалардағы үш фазалы түрленудің басталу температурасында аяқталуы керек.

1-6 суреттерден көріп отырғанымыздай, дендритті жасушаның салыстырмалы түрде кең Орталық аймағында легирленген компоненттердің таралуының қисық сызықтары эксперименталдыға қарағанда төмен орналасқан. Сонымен қатар, бұл ауытқу ұяшықтың центрінде минимум болып табылады және белгілі бір максималды мәнге дейін өседі. Болашақта есептік қисықтар күрт көтеріліп, шекаралас аймақтар эксперименттік аймақтан әлдеқайда жоғары жатыр. Дендритті жасушаның орталығында эксперименттік Zn есептік концентрациясының ауытқуы барлық зерттелген қорытпалар үшін 0,2 -0,3%-дан аспайды және т. б. магнийге қарағанда аз (0,5-0,6 ат.%).

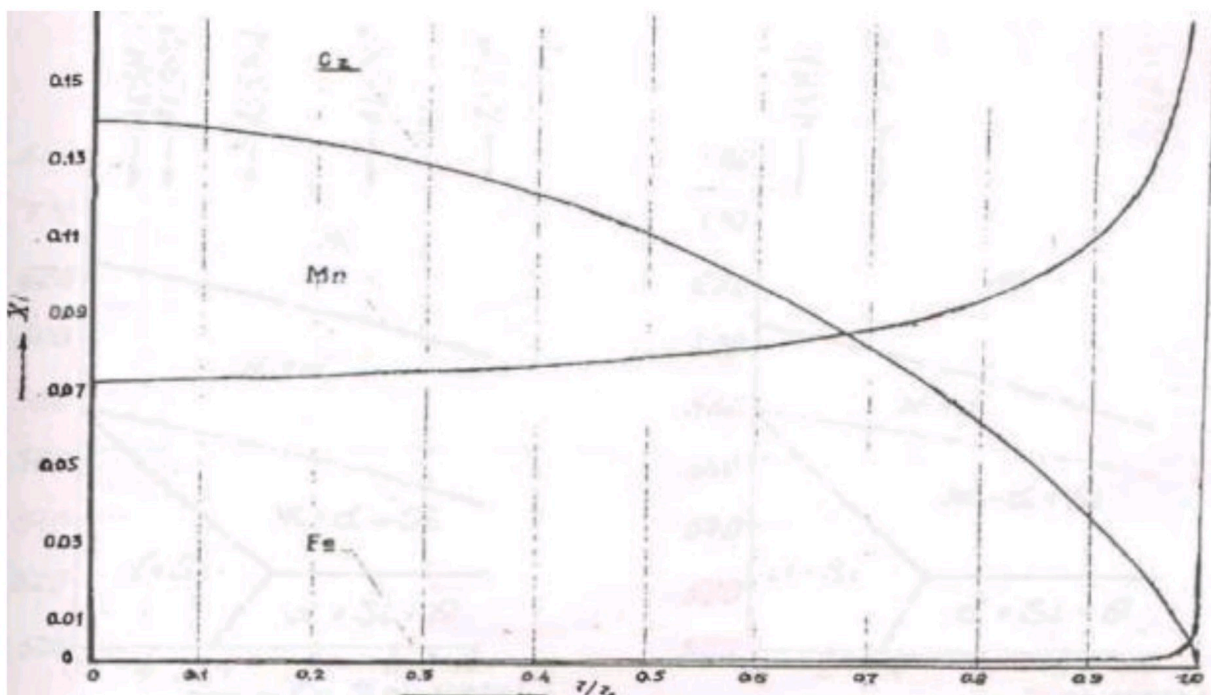
Дендритті жасушаның қимасы бойынша легирленген компоненттердің таралуының есептік қисықтарының эксперименталды түрде салынған ауытқулары сұйық фазадағы диффузияның шектелуімен және қатты фазадағы қорытпа компоненттерінің кейбір диффузиялық қайта бөлінуімен түсіндіріледі, олар біз есептеу кезінде ескермеген.

Бұл жұмыста сұйық фазадағы диффузиялық процестердің шектеулілігін ескере отырып, жоғарыда қарастырылған көп компонентті қорытпаларда дендритті жою есебі жүргізілді. Бұл жағдайда есептеу кезінде компоненттердің тепе-теңдік таралу коэффициенттерінің орнына тиісті тиімді коэффициенттер қолданылды.

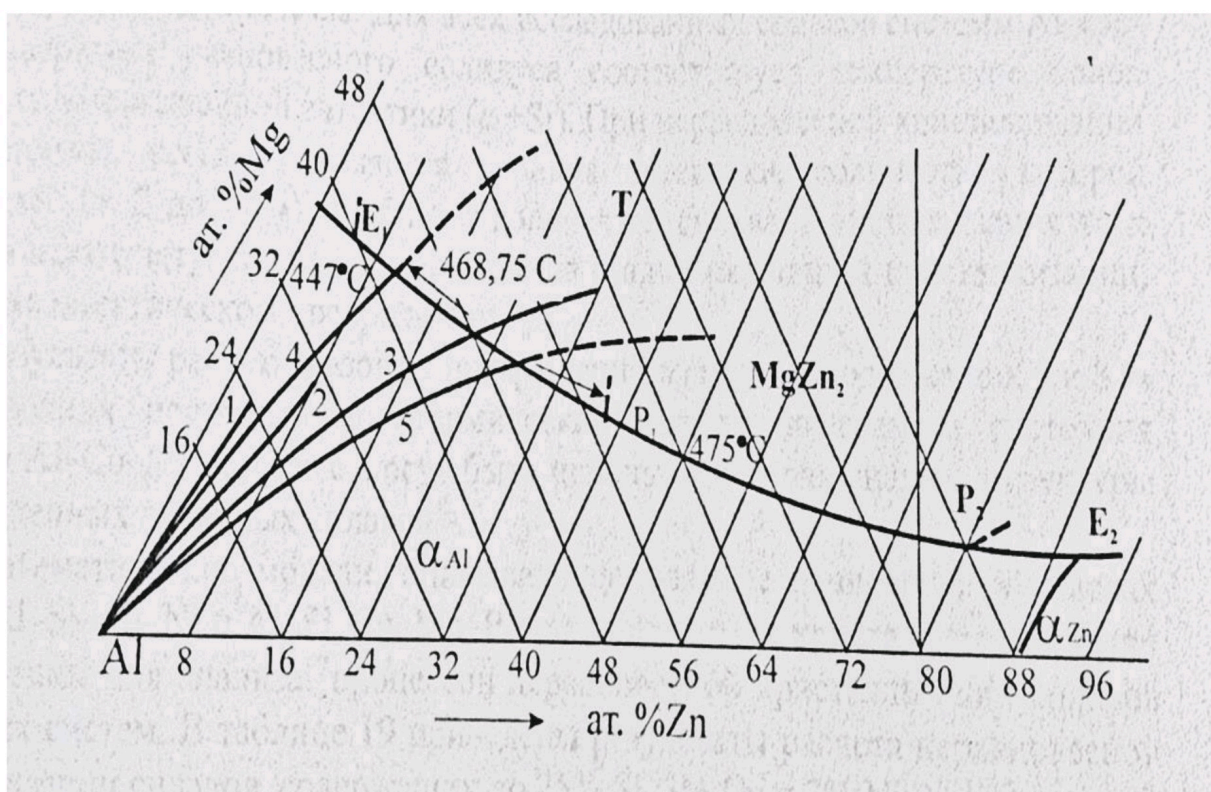
Есептелген және эксперименттік үлестіру қисықтары сәйкес келетінін көруге болады. Тек тар шекара аймағында есептелген қисықтар жоғары болады. Алайда, бұл аймақта үш фазалы эвтектикалық түрлендіру және эксперименталды түрде анықталған өлшемдер бар ($r_{\text{эксп.}}$) дендритті жасушалар r_0 -ден аз болуы керек.



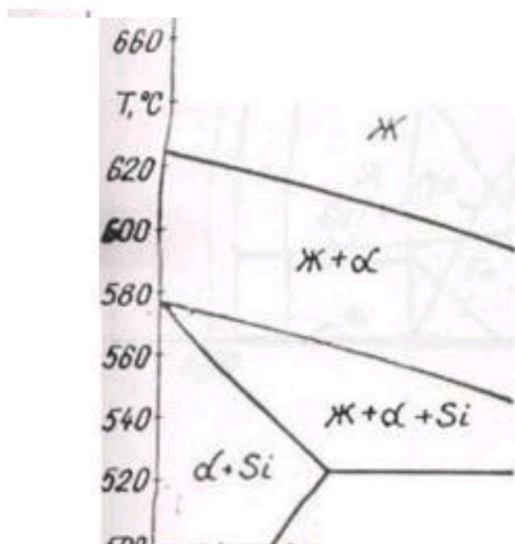
3 сурет - Mg және Zn таралу қисықтары
 $Al + 1,37 \text{ ат. \% Mg} + 2,11 \text{ ат. \% Zn} + 0,099\% \text{ ат.}$



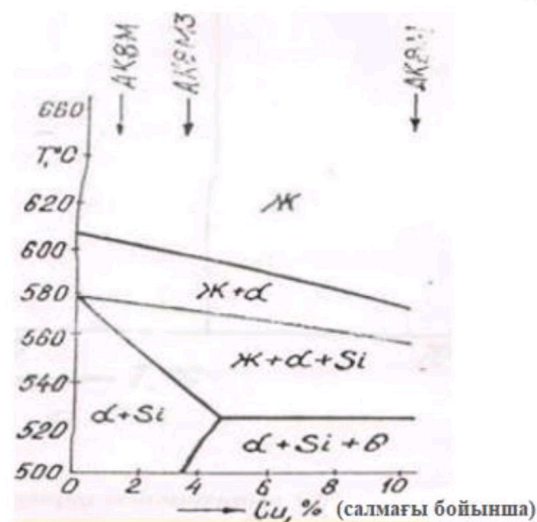
4 сурет - Mn, Cr және Fe есептелген бөлу қисықтары



5 сурет - Al-Mg-Zn системасының ликвидус қисығы
Қорытпалардың тепе-теңдік және тепе-теңдіксіз кристалдану процесінде
сұйық фазаның құрамының өзгеруінің есептік сызықтары.



а)



б)

а-5% Si кезінде; б – 8% Si кезінде.

6 сурет - Al-Cu-Si системаларының
күй диаграммасының политермиялық бөлімдері

3.3 Al-Si-Cu негізіндегі көп компонентті системалардың қорытпаларында дендритті әртектілікті есептеу

Бұл жұмыста Al-Cu-Si, Al-Mg-Zn системаларының қорытпаларындағы тепе-теңдік емес кристалдану процестері талданды.

Осы системалардың қорытпаларындағы тепе-теңдік емес кристалдану процестерін зерттеудің негізгі әдісі есептеу әдісі болды. Тепе-теңдік емес кристалдану процесін есептеу кезінде сұйық күйдегі шектеусіз диффузия моделі және қатты фазалардағы диффузияның болмауы қолданылды, бұл сұйық фазалы кристалдардың шекарасында жақын күйлер орнатылады деп болжайды.

Al-Cu-Si құю қорытпаларының тепе-теңдіксіз кристалдануын және 5,8% Si және Cu-ге дейінгі қорытпалар қатарының тепе-теңдік кристалдануын есептеу нәтижелері 1-кестеде келтірілген. 11% кремний қорытпаларында Al-Si-Cu системасының күй диаграммасына толық сәйкес α – қатты ерітінді бірінші кезекте кристалданатыны, ал 11% - дан астам Si сұйықтығы бар қорытпаларда бастапқы кристалдар бөлінетіні анықталды. Содан кейін қорытпаларда эвтектика (α +Si), (α + θ), сондай-ақ үштік эвтетика (α +Si+ θ) кристалдануы жүреді. Есептеу кезінде критикалық нүктелердің температурасы, фазалық құрамы және кристалданған қорытпаның мөлшері анықталды. Термиялық талдаудың дәлдігі ($\pm 1^\circ\text{C}$) шегінде зерттелген қорытпалардың тепе-теңдік және тепе-теңдік емес кристалдануындағы Қос эвтектикалық түрлену (α +Si) температурасы іс жүзінде сәйкес келетіні байқалады. Алайда, тепе-теңдік емес кристалдану кезінде қос эвтектиканың (α +Si) бөлінуінің басталуы кристалданған қорытпаның аз үлесінде байқалады. Бұл айырмашылық

қорытпаның құрамы үштік системаның күй диаграммасындағы Қос эвтектикалық сызықтан (α +Si) алыстаған сайын артады. Al-Cu-Si системасының зерттелген қорытпалары үшін тепе-теңдік солидус температурасы Қос эвтетиканың (α +Si) кристалдануының соңғы температурасына сәйкес келеді. Бұл қорытпалардың тепе-теңдіксіз кристалдануымен үштік эвтетика әрқашан пайда болады, олардың мөлшері қорытпаның жалпы санының 2-ден 14% - на дейін. Барлық қорытпалардың кристалдануы бастапқы кристалдану сатысында да, эвтектикалық түрленуде де әлсіреу қарқынымен жүреді.

5 және 8% Si бар қорытпалардағы фазалық түрлендірулерді есептеу нәтижелері өнеркәсіптік құю қорытпаларының құрылымын талдау үшін пайдаланылуы мүмкін Al-Cu-Si системасының күй диаграммасының политермиялық бөлімдерін құруға мүмкіндік берді.

Тепе-теңдік кристалдануындағы Al-Si-Cu-Ni, Al-Si-Cu-Mn-P, Al-Si-Cu-Ni-Mn қорытпаларындағы фазалық тепе-теңдікті сипаттайтын математикалық модельдер аталған системалардың қорытпаларының тепе-теңдік емес кристалдану процестерін талдау үшін пайдаланылды. Si-ге дейінгі қорытпалардың тепе-теңдік емес кристалдануын есептеу нәтижелері келтірілген. 3% Si және 3% Ni.

Нақты жағдайларда, AK21M2,5H2,5 тепе-теңдік кристалдануы нәтижесінде құйма құрылымында артық фазалардың саны артады, тепе-теңдік кристалдану кезінде пайда болмайтын жаңа фазалар пайда болады, сонымен қатар осы фазалардың әрқайсысының кристалдары ішінде кристаллішілік экстракция пайда болады. Осы процестерді талдау үшін Al-Si-Cu-Ni-Mn-Mg-Cr-Ti-Fe системасының баланстық емес кристалдануын есептеудің арнайы бағдарламасы жасалды.

AK21M2,5H2,5 құю қорытпаларының тепе-теңдіксіз кристалдануын есептеу жүргізілді, олардың құрамындағы легирлеуші элементтердің мөлшері төменгі, орта және жоғарғы деңгейлерде болды, ал темірдің мөлшері 0,5% - ға тең болды (1-кесте). 6-суретте A21M2,5H2,5 қорытпасының тепе-теңдіксіз кристалдануы кезінде сұйық фазадағы және α -қатты ерітіндідегі компоненттер концентрациясының өзгеру тәуелділіктері көрсетілген.

Кесте 1 – Al-Cu-Si құю қорытпаларының тепе-теңдіксіз кристалдануын есептеу нәтижелері

Қорытпа	Тепе-теңдік күйде кристаллизация			Тепе-теңдіксіз күйде кристаллизация		
	Суы- ну темпе- рату- расы	Фазалар	Қатты фазаның салыс- тырмалы шамасы	Суы- ну темпе- рату- расы	Фазалар	Қатты фазаның салыс- тырмалы шамасы
AK5M	622, 8 574 565	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$	0 0,65 1,00	622, 8 574 524	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + \theta + Si$	0 0,63 0,98
AK5M2	619 569 554	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$	0 0,65 1,00	619 569 524	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + \theta + Si$	0 0,61 0,95- 1,00
AK6M2	614 572 557	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$	0 0,57 1,00	614 572 254	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + \theta + Si$	0 0,54 0,96- 1,00
AK5M7	606 557 524	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si + \theta$	0 0,58 0,95	607 567 524	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + \theta + Si$	0 0,54 0,86- 1,00
AK9M2	597 576 564	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$	0,00 0,31 1,00	597 576 524	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + \theta + Si$	0 0,30 0,98- 100
AK12M2	576 556	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$	0 1,0	576 524	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + \theta + Si$	0 0,97- 1,00
Al+5%Si + 10%Cu	593 547 524	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + \theta + Si$	0 0,48 1,00	593 547 524	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + \theta + Si$	0 0,48 0,8- 1,00
Al+8%Si + 10%Cu	572 556 524	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + \theta + Si$	0 0,18 1,00	572 556 524	$L \rightleftharpoons \alpha$ $L \rightleftharpoons \alpha + Si$ $L \rightleftharpoons \alpha + \theta + Si$	0 0,18 0,79- 1,00

ҚОРЫТЫНДЫ

Есепте ыстыққа төзімді, тозуға және коррозияға төзімді жаңа алюминий қорытпаларын, оның ішінде Al-Mg-Zn және Al-Cu-Si қорытпаларын жасаудың ғылыми негізделген әдістерін іздеу қажеттілігі негізделді. Осы мақсатта көп компонентті металл системаларының фазалық диаграммаларын компьютерлік есептеудің заманауи әдістеріне талдау жасалды: Thermo-Calc интерактивті базасы және компоненттердің таралу коэффициенттерін қолдану әдісі.

Көп компонентті металл системаларындағы фазалық тепе-теңдіктерді есептеу және компоненттердің таралу коэффициенттерінің температуралық және концентрациялық тәуелділіктерін қолдана отырып, фазалық түрленулердің критикалық нүктелерін анықтаудың тұжырымдалған шарттарына негізделген олардың күй диаграммаларын құру әдісі жасалды. Қатты ерітінділердің тепе-теңдік кристалдану процесінің есептеулері орындалды. Есептеу арқылы Al-Mg-Zn және Al-Cu-Si алюминийі және одан да күрделі системалар негізінде көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларының политермиялық және изотермиялық бөлімдері салынды. Зерттеулер және тиісті системалардың қорытпаларының фазалық құрамы мен құрылымы зерттелді.

Қойылған міндеттерді шешудің толықтығын бағалау. Жұмыста қойылған міндеттер толық көлемде шешілді. Алынған ғылыми нәтижелер (теориялық және эксперименттік), техникалық шешімдер және енгізудің практикалық нәтижелері осы ғылыми-техникалық жұмыстың мақсаттары мен міндеттеріне іргелі-қолданбалы сипаттағы зерттеулерге толық сәйкес келеді.

Әзірлеудің техникалық-экономикалық тиімділігін бағалау нәтижелері. Осы жұмыстың тақырыбы бойынша теориялық және эксперименттік зерттеулердің нәтижелері техникалық жұмыс іске асыру барысы бойынша практикада пайдаланылды. Жаңа қорытпаларды әзірлеу кезінде компьютерлік бағдарламаларды қолдана отырып, жұмыста ұсынылған есептеу әдістерін қолдану және оларды өңдеу технологиялары дайын өнімді шығаруға материалдық және қаржылық ресурстардың шығындарын едәуір азайтуға, сондай-ақ дипломдық жұмыс жүргізуге қажетті уақытты үнемдеуге мүмкіндік береді.

БЕЛГІЛЕР МЕН ҚЫСҚАРТУЛАР

Дипломдық жұмыста мына төмендегідей белгілер мен қысқартулар пайдаланылды:

Q_v - Фазалардың көлемдік үлестері

$K_i(T)$ - бөлу коэффициенттерінің температуралық тәуелділіктері

X_{ij} - қорытпадағы i -ші компоненттің концентрациясы

T_l - ликвидус температурасы

ζ - қорытпаның салқындату жылдамдығы

M_α - қатты фазаның мөлшері

M_0 - қорытпаның бастапқы мөлшері

m_{-an} - кристалдану процесінің n -ші сатысынан кейін

N - қатты фазаның жалпы саны

S_n - қатты фазаның жалпы салыстырмалы үлесі

α_n - қатты фаза

DTA - Дифференциалды термиялық талдау

EDX - Энергия дисперсиясы

WDX - толқын дисперсиясы

РЭМ - Растрлық электронды микроскоп

СЭМ - Сканерлеуші электронды микроскоп

ПАЙДАЛАНЫЛҒАН ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ

1. Зеленая А.Е. // Пентатоп проекцияларында бейнелеу және конодты есептеу арқылы изобаралық фазалық диаграммалардың математикалық модельдерінің ақпараттылығын арттыру. Ұлан-Удэ. 149 б.
2. Кауфман Л., Бернштейн Г., // Компьютердің көмегімен күй диаграммаларын есептеу, ағылшын тілінен. ауд., - М., 1972.
3. Smagulov D.U., Amenova A., Dostayeva A. // New method of phase transformations calculation in metals with structural features of the initial and new phases. Key engineering materials—development and application. 2014., pp.148-151.
4. Mailybaeva A.D., Zolotorevskii V.S., Smagulov D.U., Islamkulov K.M. // A study of phase composition and structure of alloys of the Al-Mg-Si-Fe system. Metalscienceandheattreatment, Vol.58, Nos. 11-12, March, 2017, P. 724-728.
5. Майлыбаева А. Д., Смағұлов Д. У. // Қайталама алюминий қорытпасынталдау. I Халықаралық ғылыми-практикалық конференция "машина жасау технологиясы және материалтану", Новокузнецк, Ресей, 2017 ж.
6. Майлыбаева А.Д., Смағұлов Д. У., Кошимбаев Б. Ш. // Қайталама шикізаттан экономикалық қоспаланған алюминий қорытпасының фазалық құрамын есептеу. "Тау-кен металлургия кешенінің инновациялық дамуын ғылыми және кадрлық сүйемелдеу" халықаралық ғылыми-практикалық конференциясы, Алматы қ., ҚазҰТЗУ, 2017.
7. Воронин, Г. Ф. // Термодинамика негіздері. Мәскеудегі басылым. Ун-та, 1987.-192 Б.
8. Гиббс Дж. В. // Термодинамика. Статистикалық механика: Ғылым, 1982. – 584 с
9. Голиков И. Н. // Болаттағы дендритті жою. - М.: Металлургия, 1956.
10. Krupkowski A., Adamcki C. // Bulletin de Academie Polonaise des sciences.ser.sci.,techn., 1961,12,P.723.
11. Новиков И.И., Золоторевский В. С. // Қорытпалардағы дендритті жою: Ғылым, 1966.
12. Пикунов М. В., Деспирин А.И. // КСРО Ғылым академиясының жаңалықтары. Металлургия және тау-кен ісі. №6.1963.
13. Глазов В. М. Лючжен – Юань. // КСРО Ғылым академиясының жаңалықтары. Металлургия және тау-кен ісі. 1961, №2.

АНЫҚТАМАЛАР

Компонент - көп құрылымды дененің құрамдас бөлігі, элементі.

Фаза - заттың термодинамикалық тепе-теңдік күйі, оның қасиеттері бойынша сол заттың басқа тепе-теңдік күйлерінен сапалы түрде ерекшеленеді.

Бөліну коэффициенті - қосылыстың ионданбаған химиялық түрінің концентрациясы.

Энергия - материя қозғалысының әртүрлі формасының жалпы өлшеуіші.

Химиялық потенциал - айнымалы бөлшектер саны бар системалардың күйін сипаттауда қолданылатын термодинамикалық функция.

Металл - қалыпты жағдайда қарапайым заттар түрінде жоғары жылу және электр өткізгіштік, оң температуралық қарсылық коэффициенті, жоғары икемділік және металл жылтырлығы сияқты өзіндік металл қасиеттері бар химиялық элементтер тобы.

Қорытпа - екі немесе одан көп құраушылардан құралған (химиялық дербес заттар) балқымалардың қатаюы нәтижесінде түзілетін денелер.

Металдық қорытпалар - тек қана металдан (мысалы мыс пен мырыштың қорытпасы), не болмаса құрамында аз мөлшерде бейметалдық заттар қоспасы бар металдан (мысалы шойын мен болат — темірдің көміртеппен қорытпасы) тұруы мүмкін.

Бейметалдық қорытпалар - бейметалдық заттардан, мысалы табиғи (гранит, гнейс, базальт) және жасанды силикаттар (шыны, қождар), тұздар мен органикалық заттар қорытпаларынан тұрады.

Фазалық күй диаграммасы - әр түрлі температурада (қысымда) қорытпаның фазалар күйінің тепе-теңдігін, олардың шоғырлануына байланысты етіп көрсететін диаграмма, бұл фазалық диаграмманың бір, екі, үш және көп компонентті бөлімдерін есептеуге, құруға және өңдеуге мүмкіндік беретін жалпыланған модуль, мұнда осьтер T , P , V , құрамы, белсенділігі, химиялық потенциалы және т.б. әртүрлі комбинациялары болуы мүмкін.

Солидус - астында берілген зат толығымен қатты (кристалданған) болатын температураның орналасу қисығы. Заттың балқуы басталатын температураны сандық түрде анықтайды, бірақ зат міндетті түрде толығымен ерімейді, яғни солидус міндетті түрде балқу нүктесі болып табылмайды.

Ликвидус - материалдың толық сұйық болатын температурасының қисығы және кристалдар термодинамикалық тепе-теңдікте балқымамен бірге өмір сүре алатын максималды температура. Ол негізінен шыны, қорытпа және тастар сияқты таза емес заттарды (қоспаларды) өңдеу үшін қолданылады.

**Университеттің жүйе администраторы мен Академиялық мәселелер департаменті
директорының ұқсастық есебіне талдау хаттамасы**

Жүйе администраторы мен Академиялық мәселелер департаментінің директоры көрсетілген еңбекке қатысты дайындалған Плагиаттың алдын алу және анықтау жүйесінің толық ұқсастық есебімен танысқанын мәлімдейді:

Автор: Әбдікәрімова Үлжан

Тақырыбы: Алюминий негізіндегі көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын термодинамикалық есептеу және тұрғызу

Жетекшісі: Смағұлов Д.У

1-ұқсастық коэффициенті (30): 3.6

2-ұқсастық коэффициенті (5): 2.8

Дәйексөз (35): 0.1

Әріптерді ауыстыру: 3

Аралықтар: 0

Шағын кеңістіктер: 0

Ақ белгілер: 0

Ұқсастық есебін талдай отырып, Жүйе администраторы мен Академиялық мәселелер департаментінің директоры келесі шешімдерді мәлімдейді :

☒ Ғылыми еңбекте табылған ұқсастықтар плагиат болып есептелмейді. Осыған байланысты жұмыс өз бетінше жазылған болып санала отырып, қорғауға жіберіледі.

☐ Осы жұмыстағы ұқсастықтар плагиат болып есептелмейді, бірақ олардың шамадан тыс көптігі еңбектің құндылығына және автордың ғылыми жұмысты өзі жазғанына қатысты күмәнтудырады. Осыған байланысты ұқсастықтарды шектеу мақсатында жұмыс қайта өңдеуге жіберілсін.

☐ Еңбекте анықталған ұқсастықтар жосықсыз және плагиаттың белгілері болып саналады немесе мәтіндері қасақана бұрмаланып плагиат белгілері жасырылған. Осыған байланысты жұмыс қорғауға жіберілмейді.

Негіздеме:

Күні

29.05.2023



Кафедра меңгерушісі

Кудайбергенов К.К.

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРҒЫ БІЛІМ МИНИСТРЛІГІ
Қ.И. СӨТБАЕВ АТЫНДАҒЫ ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ ТЕХНИКАЛЫҚ ЗЕРТТЕУ УНИВЕРСИТЕТІ

РЕЦЕНЗИЯ

Дипломдық жұмыс

Әбдікәрімова Ұлжан Әмірқызы

6B07109 – «Инженерлік физика және материалтану» білім беру бағдарламасы

Тақырыбы: «Алюминий негізіндегі көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын термодинамикалық есептеу және тұрғызу»

Әбдікәрімова Ұ.Ә. дипломдық жұмысы жаңа техникада кеңінен қолданылатын көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын термодинамикалық есептеу және тұрғызу қарастырылған.

Дипломдық жұмыс кіріспеден, 3 бөлімнен және қорытындыдан тұрады.

Дипломдық жұмыстың бірінші бөлімінде ғылыми деректерге шолу жасап, жұмысты есептеу әдістерімен таныстырылған.

Дипломдық жұмыстың екінші бөлімінде зерттеу жұмыстарына дайындық жасап, компьютерлік бағдарламалар құралдардың негізі анықтамаларын жүргізіліп, қолданылатын микроскоптық құралдардың және анализдердің анықтамасы берілген.

Дипломдық жұмыстың үшінші бөлімінде зерттеу жүргізіліп, нәтижелерден қорытынды шығарылған, қажетті кестелер тұрғызылып, жұмыстың мақсаты орындалған.

Әбдікәрімова Ұ.Ә. дипломдық жұмысты талапқа сай жасалынған, қорғауға жіберуге болады.

Жұмыстың кемшілігі ретінде орфографиялық, стильдік қателерді көрсетуге болады.

ЖҰМЫСТЫҢ БАҒАСЫ

Дипломдық жоба толығымен аяқталған құрылымды, стандартқа сай ғылыми еңбек болып табылады. Жоба толығымен қойылатын талаптарға сай және 92% (А) бағамен қорғауға жіберіледі.

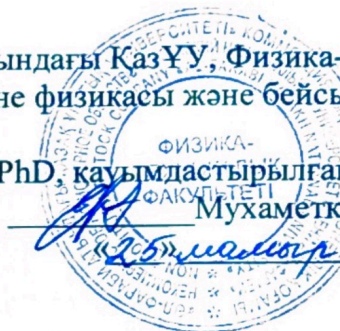
Рецензент:

Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Физика-техникалық
факультет, Қатты дене физикасы және бейсызық физика

кафедрасы
PhD, қауымдастырылған профессор

Мухаметкаримов Е.С.

2023 ж.



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРҒЫ БІЛІМ МИНИСТРЛІГІ

Қ.Н. СӨТБАЕВ АТЫНДАҒЫ ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ ТЕХНИКАЛЫҚ ЗЕРТТЕУ
УНИВЕРСИТЕТІ

Ғылыми жетекшінің пікірі

Дипломдық жұмыс

Әбдікәрімова Ұлжан Әмірқызы

6B07109 – «Инженерлік физика және материалтану» білім беру бағдарламасы

Тақырыбы: «Алюминий негізіндегі көп компонентті системалардың фазалық диаграммаларын термодинамикалық есептеу және тұрғызу»

Дипломдық жұмыста алюминий негізіндегі көп компонентті қорытпаларда жүретін фазалық өзгерістерді есептеу әдістерін игеру және олардың фазалық күй диаграммаларын тұрғызу қарастырылған. Фазалық диаграммалар жаңа металл материалдарын алу үшін ғылыми негізі болып табылады. Осыған байланысты ұсынылып отырған дипломдық жұмыста металлдар мен қорытпаларда жүретін фазалық өзгерістердің заңдылықтарын зерттеу маңызы зор. Жұмыста ыстыққа төзімді, үйкеліске және коррозияға төзімді жаңа алюминий қорытпаларын, оның ішінде Al-Mg-Zn және Al-Cu-Si қорытпаларын алу үшін ғылыми негізделген әдістерін іздеу қажеттілігі көрсетілген. Осы мақсатта көп компонентті металл системаларының фазалық диаграммаларын компьютерлік есептеудің заманауи әдістеріне талдау жасалды: Thermo-Calc интерактивті базасы және компоненттердің таралу коэффициенттерін қолдану әдісі қарастырылды.

Қатты ерітінділердің тепе-теңдіксіз күйде кристалдану процесі есептелді. Есептеу нәтижесінде Al-Mg-Zn және Al-Cu-Si системаларының қорытпасы негізінде көп компонентті жүйелердің фазалық диаграммаларының политермиялық және изотермиялық кривалары тұрғызылды. Зерттеулер және тиісті жүйелердің қорытпаларының фазалық құрамы мен құрылымы зерттелді.

Зерттеу жұмыстарында Al-Cu-Si, Al-Mg-Zn системаларының қорытпаларындағы тепе-теңдіксіз күйде кристалдану процестері талданған. Жаңа қорытпаларды әзірлеу кезінде компьютерлік бағдарламаларды (Thermo Calc) қолдана отырып, жұмыста ұсынылған есептеу әдістерін қолдану және оларды өңдеу технологиялары дайын өнімді шығаруға материалдық және қаржылық ресурстардың шығындарын едәуір азайтуға, сондай-ақ дипломдық жұмыс жүргізуге қажетті уақытты үнемдеуге мүмкіндік береді.

Әбдікәрімова Ұлжан Әмірқызының дипломдық жұмысы жоғары деңгейде орындалған және 92% (А) «өте жақсы» деген бағамен қорғауға жіберіледі. Дипломанттың өзіне 6B07109 "Инженерлік физика және материалтану" білім беру бағдарламасы бойынша академиялық «Бакалавр» дәрежесін беруге болады деп есептеймін.

Ғылыми жетекші

Т.ғ.д., профессор

(лауазымы, ғыл. дәрежесі, атауы)

 Смағұлов Д.У.

(қолы) (аты-жөні)

«26» мамыр 2023 ж.