

ФОРМИРОВАНИЕ ЧАСТИЦ WTa В СПЛАВЕ CrTaW: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ

Неласов И.В.¹, Колобов Ю.Р.¹, Манохин С.С.¹ Гусаков М.С.²

¹ Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

² АО «Композит», г. Королёв, Россия

nelasov@icp.ac.ru

Стабильность многокомпонентных сплавов определяется энтальпией образования фаз и диффузией, которая определяет время в течении которого физико-механически свойства сплава не изменяются за счёт локального перераспределения компонент сплава. Знание коэффициентов диффузии компонент, входящих в сплав и термодинамически равновесных фаз, позволяют прогнозировать его эволюцию. Наряду с экспериментальными методами исследования в многокомпонентных сплавах для определения диффузионных характеристик в металлических системах используются методы молекулярно-динамического моделирования.

В рамках метода погруженного атома, методом Монте-Карло, проведено компьютерное моделирование перехода в термодинамически равновесное состояние эквивалентных сплавов WTa и WCr. Рассчитаны коэффициенты диффузии в данных сплавах как при случайном расположении атомов элементов в сплаве, так и в термодинамически равновесном состоянии. Расслоение системы WCr и образование решетки типа CsCl для сплава WTa в сочетании со снижением коэффициента диффузии тантала на два порядка при образовании упорядоченного сплава WTa позволяет предположить формирование включений WTa в сплавах типа CrTaW. Проведенное исследование методом ПЭМ позволили однозначно идентифицировать обогащённые W частицы внутри фазы Cr₂Ta сплава системы CrTaW как частицы WTa (рисунок).

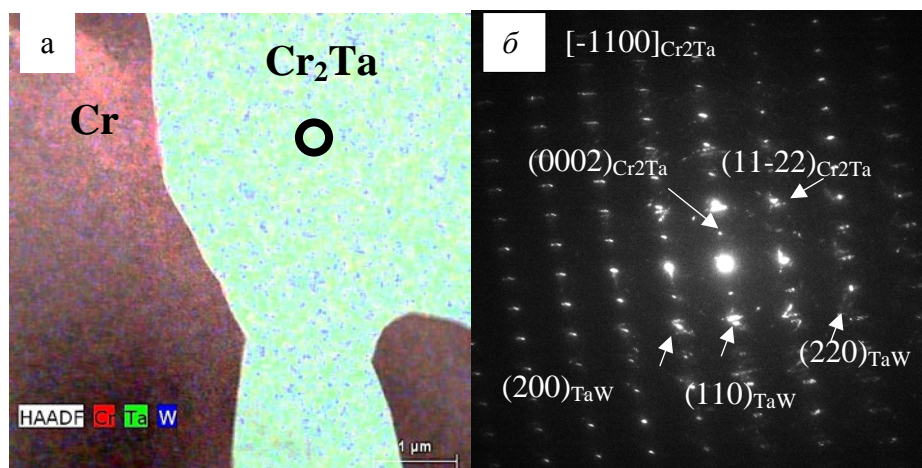


Рис. Микроструктура образца сплава системы Cr–Ta–W: *a* – картирование по элементам методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии в ПЭМ (результат наложение карт Cr, Ta, W в одну картинку); *б* – микродифракционная картина, полученная с фазы Cr₂Ta с области порядка 0,4 мкм². Просвечивающая растровая электронная микроскопия

Данная работа выполнена при финансовой поддержке гос задания. № госрегистрации АААА-А19-119022690098-3. Структурные исследования проводились с использованием научного оборудования ЦКП ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН (г. Москва).