

ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

---

**МОЛОДЕЖНАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
ТОМСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
УНИВЕРСИТЕТА  
2009 г.**

**ВЫП. II  
ПРОБЛЕМЫ ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ**



ИЗДАТЕЛЬСТВО ТОМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА  
2010

## ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГОСТАДИЙНОСТИ ПРОЦЕССОВ САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА В СИСТЕМЕ Ti-Al

М.А. ДМИТРИЕВА, Т.В. КОЛМАКОВА, Е.В. ШИШКИНА

*Моделировалось поведение реагирующей порошковой среды в системе Ti-Al с учетом многостадийности химических превращений. Исследовалось влияние параметра концентрационной неоднородности и пористости на скорость и характер формирования фаз в рассматриваемой порошковой смеси.*

## RESEARCH OF MULTISTAGING OF PROCESSES OF SELF-PROPAGATING HIGH-TEMPERATURE SYNTHESIS IN Ti-Al SYSTEM

M.A. DMITRIEVA, T.V. KOLMAKOVA, E.V. SHISHKINA

*The behaviour of the reacting powder mixture in system Ti-Al with the account of multistaging of chemical transformations was modelled. Influence of parametre of concentration inhomogeneity and porosity on the speed and character of formation of phases in a concerned powder mixture was investigated.*

Интенсивное развитие науки и техники выдвигает на первый план задачи создания материалов с особыми, подчас уникальными свойствами. Большими потенциальными возможностями в этом плане обладают интерметаллиды. Наиболее перспективным методом получения интерметаллидов является метод самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) [1].

Процессы, протекающие при СВС, характеризуются многостадийностью, многофазностью и широким диапазоном изменения физико-химических параметров, поэтому разработка методов исследования физико-химических процессов синтеза в реагирующих порошковых материалах имеет практическую значимость для развития современных технологий получения материалов.

Использовалась многоуровневая модель поведения реагирующей порошковой среды [2–3]. В рамках модели решается ряд сопряженных задач: теплового баланса реагирующей смеси, макрокинетики химических превращений, фильтрации легкоплавкого компонента. Учитывается изменение концентрации компонентов смеси, пористости и фазового состава.

Реальная структура порошковых тел характеризуется наличием макроскопической структуры концентрационной неоднородности, формируемой в процессе предварительного перемешивания реагирующей смеси и прессования. В качестве представительного объема модельной реагирующей порошковой среды рассматривается элемент макроскопической структуры концентрационной неоднородности – реакционная ячейка с размерами  $a \times b$  (рис.1). Порошковое тело представляется совокупностью элементов концентрационной неоднородности.

По объему элемента макроскопической структуры слоя смеси концентрационная неоднородность смеси задается изменением концентрации компонентов в направлении  $b$  в предположении, что заданная доля легкоплавкого компонента сконцентрирована у левой грани ячейки  $a \times a$  в ее части размером  $d_0$ , определяемым характерным размером агломератов частиц. В этом случае параметр  $b/a$  может служить характеристикой степени концентрационной неоднородности.

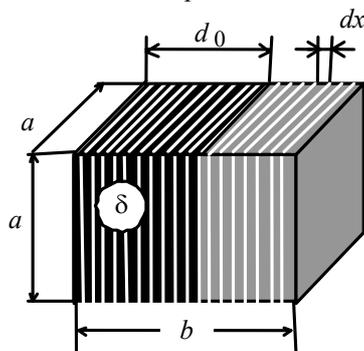


Рис. 1. Элемент структуры концентрационной неоднородности

Моделировалось поведение реагирующей порошковой среды Ti – 55,8 мас. % Al при СВС с учетом многостадийности. Исходным этапом реагирования рассматриваемой смеси является плавление Al, вызванное инициирующим тепловым импульсом, и его растекание по каналам капиллярно пористой среды. Наиболее вероятным механизмом, реализующимся на первом этапе взаимодействия, является зарождение слоя интерметаллического соединения  $TiAl_3$  путем диффузии Al из расплава в твердые частицы Ti [4–5].

При дальнейшем структурообразовании поверхностный слой интерметаллида  $TiAl_3$  лимитирует диффузионный транспорт атомов Al в объем титанового материала. При диффузии атомов Al через образовавшийся на начальном этапе интерметаллидный слой концентрация Al в области контакта с титановым материалом понижается до такой величины, что начинается образование соединения  $TiAl$  [4].

Проведен вычислительный эксперимент по исследованию влияния различных параметров (исходной пористости  $\Pi = 0,25; 0,35; 0,45$ , параметра концентрационной неоднородности  $b/a = 1,1; 1,3; 1,5$ ) на скорость и характер формирования фаз в системе Ti-Al.

На рис. 2 представлены графики изменения степени превращения от заданных значений пористости и параметра концентрационной неоднородности.

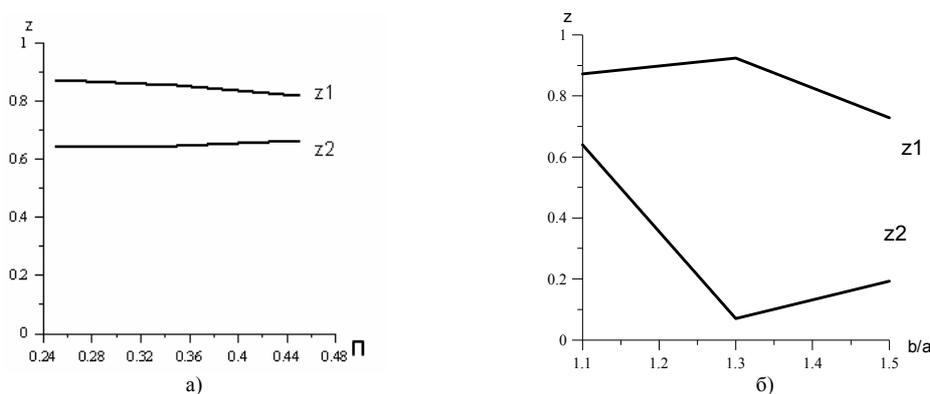


Рис. 2. График зависимости степени превращения фаз:

а – от пористости  $\Pi$ ,  $b/a=1,1$ ; б – от параметра концентрационной неоднородности  $b/a$ ,  $\Pi=0,25$  ( $z_1$  – степень превращения первой фазы  $TiAl_3$ ,  $z_2$  – степень превращения второй фазы –  $TiAl$ )

На рис. 3 представлено распределение скорости формирования фаз  $TiAl_3$  и  $TiAl$  в зависимости от пористости и концентрационной неоднородности образца. Линией 1 показаны зависимости скорости превращения первой фазы, линией 2 – зависимости скорости превращения второй фазы.

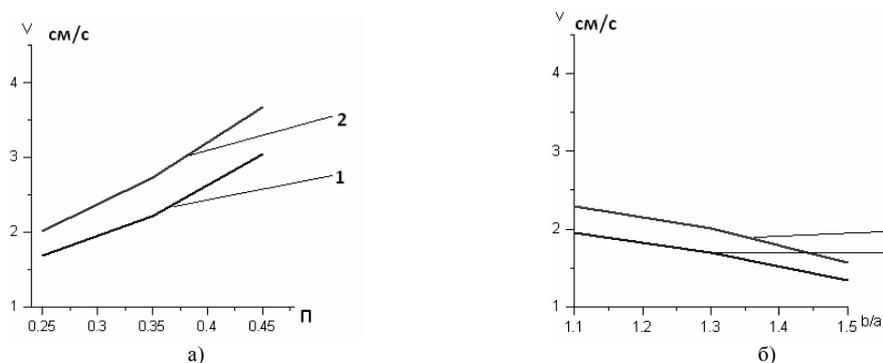


Рис. 3. Распределение скорости образования фаз в зависимости: а – от пористости при  $b/a=1,3$ ; б – от параметра концентрационной неоднородности при  $P=0,25$

Из рисунков видно, что скорость второй фазы выше скорости первой фазы, это можно объяснить тем, что при переходе к образованию второй фазы образец разогрет. Модель реагирующей порошковой среды адаптирована для расчетов процессов СВС в системе  $Ti-Al$  с учетом многостадийности.

В результате проведенных вычислительных экспериментов можно сделать вывод, что с увеличением исходной пористости порошкового компакта скорости реакций образования фаз  $TiAl_3$  и  $TiAl$  увеличиваются, а с увеличением параметра концентрационной неоднородности скорости реакций уменьшаются.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Мержанов А.Г. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез // Физическая химия. 1983. Т. 3, № 44. С. 6–45.
2. Лейцин В.Н., Дмитриева М.А. Моделирование механохимических процессов в реагирующих порошковых средах. Томск, 2006.
3. Лейцин В.Н., Дмитриева М.А., Колмакова Т.В., Кобраль И.В. Моделирование физико-химических процессов в реагирующих порошковых материалах // Изв. вузов. Физика. 2006. № 11. С. 11–17.
4. Вольпе Б.М. Разработка физических основ интегральных технологий самораспространяющегося высокотемпературного синтеза дисперсных материалов на основе легированных интерметаллических соединений никеля и титана: Автореф. дис. ... д-ра техн. наук. Томск, 1998.
5. Filimonov V.Yu., Evstigneev V.V., Afanas'ev A.V., Loginova M.V. Thermal Explosion in  $Ti + 3Al$  Mixture: Mechanism of Phase Formation // International of Self-Propagating Higt-Temperature Synthesis. 2008. Vol. 17, № 2. P. 101–105.