РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИИ СМЕШЕНИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Al-Fe-Zn-Cu

Терехова А.А.⁽¹⁾, *Олейник К.И.*^(1,2)
⁽¹⁾ Уральский федеральный университет 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19
⁽²⁾ Институт металлургии УрО РАН 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101

Пайка является широко применяемым методом соединения благодаря своим уникальным свойствам. Актуальным направлением является создание новых материалов, обладающих требуемыми прочностными характеристиками, при этом их стоимость должна быть низкой, а износостойкость высокой.

В данной работе исследовано изменение термодинамических характеристик сплава Al-Fe-Zn-Cu в зависимости от изменения количества Zn от 1 до 94 ат. %. В программном пакете HSC Chemistry 6.0 был произведен расчет энтальпии смешения в температурном интервале от 0 до 2000 К. Определение энтальпии смешения производилось для сечения Al-Fe-Cu в соотношении $x_{\rm Al}/x_{\rm Fe}/x_{\rm Cu}$ =1:1:1. Шаг изменения цинка варьировался. В интервале от 1 до 34 ат. % Zn был взят шаг 3 ат. %, так как этот диапазон соответствует высокоэнтропийным сплавам (ВЭС), не имеющим основного компонента. Дальше шаг был увеличен до 6 ат. % в связи с несоответствием определению ВЭС. При определении энтальпии смешения были учтены все возможные соединения, как с высокой, так и с низкой энергией образования. Для их учета в базу данных добавлены характеристики соединений, которые могут образоваться в данной системе. Информация о соединениях была взята из Open Quantum Material Database.

После получения значений во всем концентрационном диапазоне был построен график теплоты смешения. Все исследуемые изотермы находятся в экзотермической области, что говорит о сродстве компонентов друг к другу.