

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті

ӘОЖ 669.017.13

Қолжазба құқығында

БЕЛГІБАЕВА АҚБАЯН ӘШІРБЕКҚЫЗЫ

**Металдар гидридтерін қолданып TiAl жүйесіндегі беріктілігі жоғары
құймалардың алынуы**

6D060600 – Химия

Философия докторы (PhD)
дәрежесін алу үшін диссертациясы

Ғылыми жетекші
химия ғылымдарының докторы,
профессор
Р.Ш. Еркасов

Шетелдік ғылыми жетекші
физика-математика ғылымдарының докторы,
профессор
И.А. Курзина
Томск мемлекеттік
ұлттық ғылыми
университеті

Қазақстан Республикасы
Нұр-Сұлтан, 2020

МАЗМҰНЫ

НОРМАТИВТІК СІЛТЕМЕЛЕР	4
БЕЛГІЛЕУЛЕР МЕН ҚЫСҚАРТУЛАР	5
КІРІСПЕ	6
1 ӘДЕБИ ШОЛУ	
1.1 Ti-Al бинарлы жүйесі негізіндегі құймалардың негізгі сипаттамалары.....	11
1.1.1 Ұнтақты металлургия әдісімен құймалардың алынуы.....	12
1.1.2 Ti-Al жүйесі негізіндегі құймалардың қолданылуы.....	15
1.2 Ti-Al жүйесінің тұрақты фазаларының сипаттамасы.....	17
1.3 Ti-Al жүйесі құймаларының құрылымы мен қасиеттеріне Sc, Y, Dy, Ta қосындыларының әсері.....	21
1.4 Ti-Al-СМЖ және Ti-Al-Ta жүйелері құймаларының қолданылуы.....	35
1.5 Металдар гидридтерін, СМ, СЖМ және олардың негізіндегі құймаларды алу технологиясы мен қолданылуы.....	36
1.6 Құймаларды алудың гидридтік технологиясы.....	38
2 ТӘЖІРИБЕЛІК БӨЛІМ	
2.1 Бастапқы заттар мен реактивтер.....	40
2.1.1 Бастапқы металдардың сипаттамасы.....	40
2.1.2 Металдар гидридтерінің сипаттамасы.....	41
2.2 Металдар гидридтерін алу әдістемесі.....	42
2.2.1 Металл мен металл гидридтінің бөлшектерінің өлшеміне гидрлеу шарттарының әсері.....	42
2.2.2 Металдар гидридтерінің алынуы.....	44
2.3 «Гидридтік технология» әдісімен СМ мен СЖМ қосындылары бар титан алюминийлік құймаларды алу әдістемесі.....	45
2.4 Алынған γ -TiAl құймаларын зерттеудің физика-химиялық әдістері..	48
2.4.1 Рентгенқұрылымдық анализ.....	48
2.4.2 Растр электронды микроскопия.....	49
2.4.3 Трансмиссиялық электронды микроскопия.....	50
2.4.4 Титан алюминийлік құймалардың микроқаттылығын өлшеу.....	51
3 НӘТИЖЕЛЕР ЖӘНЕ ТАЛҚЫЛАУ	
3.1 Құйманың модифицирлеуге дейінгі және одан кейінгі құрылымды-фазалық күйіне Та мен СЖМ әсері.....	52
3.1.1 «Гидридтік технологиямен» алынған Ti50-Al50 құймасының құрылымды-фазалық күйі.....	52
3.1.2 TiAl құймасының құрылымды-фазалық құрамына Sc әсерін зерттеу нәтижелерін талқылау.....	61
3.1.3 TiAl құймасының құрылымды-фазалық құрамына Y әсерін зерттеу нәтижелерін талқылау.....	71
3.1.4 TiAl құймасының құрылымды-фазалық құрамына Dy әсерін зерттеу нәтижелерін талқылау.....	79
3.1.5 TiAl құймасының құрылымды-фазалық құрамына Ta әсерін зерттеу нәтижелерін талқылау.....	87

3.2 Титан алюминийлік құймаларының микроқаттылығын өлшеу нәтижелерін талқылау.....	94
ҚОРЫТЫНДЫ.....	97
ҚОЛДАНЫЛҒАН ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ.....	98

НОРМАТИВТІК СІЛТЕМЕЛЕР

Бұл докторлық диссертацияда келесідей стандарттарға сілтемелер қолданылды:

ГОСТ 6.38-90. Құжаттама жүйесін біріздендіру. Ұйымдастыру-тарату құжаттамасының схемасы. Іс қағаздарын жүргізуге қойылатын талаптар.

ГОСТ 7.1-84. Ақпарат, кітапханалық және баспа ісі бойынша стандарттар жүйесі. Библиографиялық жазба. Жалпы талаптар мен ережелер.

ГОСТ 7.9-95 (ИСО 214-76). Ақпарат, кітапханалық және баспа ісі бойынша стандарттар жүйесі. Реферат пен аннотация. Жалпы талаптар.

ГОСТ 7.12-93. Ақпарат, кітапханалық және баспа ісі бойынша стандарттар жүйесі. Библиографиялық жазба. Жалпы талаптар мен ережелер.

ГОСТ 7.54-88. Ақпарат, кітапханалық және баспа ісі бойынша стандарттар жүйесі. Библиографиялық жазба. Жалпы талаптар мен ережелер.

ГОСТ 8.417-81. Өлшем бірлігін қамтамасыз етудің мемлекеттік жүйесі. Физикалық шамалардың өлшем бірлігі.

ГОСТ 1770-74. Зертханалық шыны өлшеуіш ыдыс. Цилиндрлер, стакандар, колбалар, пробиркалар. Жалпы техникалық шарттары.

ГОСТ 3885-73. Реактивтер мен өте таза заттар. Сынамалар алу, орау, орау және маркирлеу.

ГОСТ 25336-82. Ыдыстар мен жабдықтар, зертханалық шынылар. Типтері, негізгі параметрлері және өлшемдері.

ГОСТ 23932-90. Ыдыстар мен жабдықтар, зертханалық шынылар. Жалпы техникалық шарттар.

ГОСТ 27025-86. Реактивтер. Сынақ жүргізу бойынша жалпы нұсқаулар.

БЕЛГІЛЕУЛЕР МЕН ҚЫСҚАРТУЛАР

МГ	– металлгидридтер
ҰМ	– ұнтақты металлургия
ИМК	– интерметалдық қосылыстар
СМ	– сирек металдар
СЖМ	– сирек жер металдары
ГТҚ	– газтурбинді қозғалтқыш
ГТ	– гидридтітехнология
Dy	– диспрозий, сирек жер металы
Y	– иттрий, сирек жер металы
Ta	– тантал, сирек жер металы
Sc	– скандий, сирек жер металы
No	– гольмий, сирек жер металы
нм	– нанометр
мкм	– микрометр
ҚОК	– кубтік қырынан орталықтандырылған
КОК	– кубтік көлемнен орталықтандырылған
L1 ₀	– қырынан орталықтандырылған тетрагональді
ГТО	– гексагональді тығыздалған орауыш
ӨЖС	– өздігінен тұтанатын жоғары температуралық синтез
S _{менш}	– меншікті беттің ауданы, м ² /г
РФА	– рентгенфазалық анализ
РЭМ	– растр электронды микроскопиясы
ТЭМ	– трансмиссиялық электронды микроскопиясы
ЖӨ	– жарық өрісті кескін
ҚӨ	– қараңғы өрісті кескін
МДК	– микродифракциялық сурет
TNM	– Ti-(43-44)Al-(4-5)Nb-1Mo-0.1B, ат. %),
TNTZ	– Ti-29Nb-13Ta-4,6Zr
ГТ	– гидридтік технология

КІРІСПЕ

Диссертациялық зерттеудің жалпы сипаттамасы. Диссертациялық жұмыс титан-алюминий жүйелерінің микроқаттылығына, микроқұрылымына және фазалық құрамына Sc, Y, Dy, Ta металдарымен легирлеудің әсерін зерттеуге арналған. Жұмыста гидридтік технологиямен синтезделген TiAl-Me (Me=Sc, Y, Dy, Ta) жүйесінің физика-химиялық сипаттамалары, микроқаттылығы, құрылымды-фазалық күйі егжей-тегжейлі зерттелген. Ритвелд әдісі арқылы Ti:Al=1:1 бастапқы жүйесіндегі, сонымен қатар 2% Sc, Y, Dy, Ta микроқосындылары бар TiAl-Me жүйелеріндегі негізгі фазалардың үлесі жоғары дәлдікпен анықталды.

Диссертациялық жұмыста зерттеудің негізгі физика-химиялық әдістері ретінде келесі әдістер қолданылды: элементтік анализ, рентгенфазалық анализ, трансмиссиялық электронды микроскопия, легирлеуші элементтердің таралуын зерттеуге арналған растр электронды микроскопиясы мен құрылымның локальді учаскелерінің рентгенспектральді микроанализінің заманауи әдістері.

Зерттеу тақырыбының өзектілігі. Бүгінгі таңда γ -TiAl фазасы негізіндегі интерметаллидтер жоғары меншікті беріктілікке, қаттылыққа, $T = 600-800$ °C температура аралығында аққыштыққа төзімділігі, $T = 900$ °C дейінгі температура мәндерінде тотығуға мен жануға төзімділігі секілді қасиеттердің үйлескен жиынтығына ие болғандықтан, оларды әуе техникасы бөлшектерін жасақтауда қолдануға болады. $T = 20-800$ °C температуралық диапазонда бұл интерметалдық құймалардың меншікті серпімділік модулі никель құймаларына қарағанда 30-50% үлкен мәндерге ие [1]. Титан алюминидтері негізіндегі құймалар газтурбинді қозғалтқышта (ГТК) кеңінен қолданылып жүрген ыстыққа төзімді никель құймаларының бір бөлігінің орнын алмастырып, ұшақтың «күш-салмақ» арақатынасын сапалы түрде арттырады және қозғалтқыштың көрсеткіштерін жалпылама жақсартады деп күтілуде [2].

«Гидридтік» технология (ГТ) деп аталатын екі және көп компонентті құймаларды жасақтаудың жаңа әдісі қолданбалы бағытта үлкен қызығушылық тудырып отыр. Құймаларды жасақтаудың заманауи технологиялары (механикалық легирлеу, доғаны балқыту, ұнтақты металлургия және т.б.) нақты технологиялық қиындықтармен шартталған, ал ГТ әдісі олардың көпшілігін болдырмайды (атап айтқанда, ол балқуды болдырмайды).

γ -TiAl құймаларын сирек жер металдарымен легирлеу – титан алюминидтерінің механикалық қасиеттерін жоғарылату үшін қолданылатын перспективті әдістердің бірі. Титан және интерметаллидтік γ -TiAl құймаларына сирек жер металдарын (La, Er, Dy) енгізу құйылған күйдегі құрылымның ұсақталуы есебінен механикалық өңделу мүмкіндігінің артуына, ыстыққа тұрақтылық пен ыстыққа беріктіліктің жақсаруына, ал кейбір шарттарда γ -TiAl құймаларында температураның жоғары мәндерінде технологиялық серпімділіктің ұлғаюына әкелуі мүмкін екендігі белгілі [4-6].

Бірқатар жұмыстарда иттрийді қосу [7] TiAl құймаларының дәнінің өлшемдері мен пластинкалы саңылауларын едәуір кішірейтіп, бөлме температурасында беріктік пен созылғыштығын, сондай-ақ жоғары температураларда тұтқырлыққа қарсылықты арттыратындығы көрсетілген. Алайда сирек жер металдарымен модифицирленген TiAl құймаларының микроқұрылымының ұсақталу механизмдері термиялық өңдеу және салқындату кезіндегі катаюддың күрделі жүйелері мен TiAl қатты фазалық түрлендірулеріне байланысты жеткіліксіз зерттелген [8]. γ -TiAl құймаларының механикалық қасиеттеріне мен құрылымына сирек жер элементтерінің қосындыларының әсері туралы жүйелі мәліметтер әдебиетте келтірілмеген.

Берілген зерттеуде біз TiAl-Me (Me = Sc, Y, Dy, Ta) жүйесіне негізделген материалдарды алудың жаңа әдісін ұсындық. Ритвельд әдісі арқылы бастапқы Ti50Al50, сондай-ақ Sc, Y, Dy, Ta қосындылары бар Ti49Al49-Me жүйелеріндегі негізгі фазалардың үлесі анықталды. «Гидридтік технология» әдісімен алынған титан-алюминий жүйесінің микроқұрылымы мен фазалық құрамына легирлеуші Sc, Y, Dy, Ta қосындыларының әсері зерттелді.

Мәселенің даму деңгейі. Жұмысты жазу кезінде үш блокқа бөлуге болатын жеткілікті дәрежеде кең көлемді ақпарат көздері қамтылды (Ti-Al құймаларының теориясы мен дамуы туралы көлемді әдебиетке шолу, шетелдік журналдардағы жарияланымдар және конференциялардағы баяндамалар). Зерттеу мен салыстыруларды толықтыру үшін, органикалық және бейорганикалық қосылыстардың құрылымдары туралы мәліметтер қоймасы болып табылатын арнайы бағдарламалар қолданылды. Эталонды торлар ретінде COD мәліметтер қорының кристаллографиялық деректері [9], сонымен қатар SIESTA сыртқы қабығы бар USPEX бағдарламалық кодымен болжанған Ti-Al жүйесінің модельдік құрылымдары пайдаланылды [10].

Екі және көпкомпонентті құймалардың заманауи өндірістік әдістері балқыма технологияларына (индукция, электр доғасы немесе электронды сәуле) немесе ұнтақ металлургиясына негізделген. Бұл бағыттардың әрқайсысы едәуір еңбек сыйымдылығымен және аппаратуралық қиындықтармен (терең вакуумды пайдалану және жоғары температурада инертті орта құру, процестердің ұзақтығы мен қайталануы және т.б.) сипатталады. Бастапқы қоспалардағы металдардың өзара әрекеттесу жылдамдығы негізінен қатты күйдегі диффузия жылдамдығымен анықталатындықтан, ұнтақ металлургия әдістері ерекше ұзақтылығымен сипатталады. Жоғары сапалы құймаларды алу кезіндегі арнайы қиындықтар сонымен қатар, отқа төзімді металдар бөлшектерінің беттерінде өзара диффузия процестерін болдырмайтын тығыз пассивті қабықшаның болуына байланысты. Осы орайда, алдын ала белгіленген физика-техникалық қасиеттері бар екі және көпкомпонентті құймаларды жасақтаудың жаңа тиімді әдістерін іздеу өзекті мәселе болып табылады.

Жұмыстың мемлекеттік ғылыми бағдарламалар жоспарымен байланысы. Диссертациялық жұмыс Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің химия кафедрасы және Томск мемлекеттік университетінің химиялық технологиялар зертханасында ТМУ бәсекеге

кабілеттілік бағдарламасының қаржылай қолдауымен (НИР НУ 8.2.10.2018 Л проекті, 2018-2020 жж.) бірлескен ғылыми-зерттеу жұмыстары аясында жүргізілді.

Жұмыстың мақсаттары мен міндеттері. Жұмыстың мақсаты – «гидридті технологиямен» алынған титан-алюминий жүйесінің құрылымдық-фазалық күйіне Sc, Y, Dy, Ta қоспаларының әсерін зерттеу.

Дәлірек айтсақ, диссертацияда келесідей зерттеу міндеттері қойылды:

- «гидридтік технология» бойынша Ti-Al эквимолярлы арақатынасындағы екі компонентті құйманы алу және тәжірибелердің температуралық режимін таңдау;

- легірлеуші қоспаларды және олардың сандық үлесін, сондай-ақ Ti-Al құймасының механикалық қасиеттерін жақсарту үшін легирлеу шарттарын таңдау;

- растр электронды микроскопия және рентгенспектральді микроанализ әдістерімен құймалар құрылымындағы легірлеуші элементтердің микроқұрылымы мен локализациясын зерттеу;

- Ti - Al құймасының, сондай-ақ Ti₄₉ - Al₄₉ - Sc₂, Ti₄₉ - Al₄₉ - Ta₂, Ti₄₉ - Al₄₉ - Y₂, Ti₄₉ - Al₄₉ - Dy₂ үш компонентті жүйелердің сапалық және сандық құрамына Sc, Y, Dy, Ta қоспаларының әсерін анықтау;

- эволюциялық код арқылы USPEX-SIESTA бағдарламасын қолдана отырып, үш компонентті жүйелердегі термодинамикалық тұрақты кристалдық құрылымдарды анықтауға байланысты модельдік тәжірибелер жүргізу және кристалдық торлардың алынған теориялық параметрлерін тәжірибелік мәліметтермен салыстыру;

- түзілетін фазалардың кристалдық торларының энергиясын есептеу және алынған мәліметтерді фазалық құрамды Ритвельд әдісімен сапалық және сандық талдау үшін пайдалану;

- «гидридті технологиямен» алынған Ti-Al құймаларындағы Sc, Y, Dy, Ta легірлеуші қоспаларының микроқаттылыққа әсерін анықтау.

Зерттеу нысаны. Берілген диссертациялық жұмыста TiAl жүйесінің құймалары және Ti-Al жүйесі құймаларының құрылымы мен қасиеттеріне Sc, Y, Dy, Ta қоспаларының әсері зерттелген. Легирлеу TiAl құймаларының механикалық қасиеттерін микроқұрылымды жақсарту арқылы жоғарылатудың тиімді тәсілі ретінде көрсетілген.

Зерттеу пәні. TiAl және TiAl-Me (Me=Sc, Y, Dy, Ta) жүйесі құймаларының микроқұрылымы және фазалық құрамы және физика-механикалық қасиеттері.

Зерттеу жұмысының ғылыми жаңалығына мыналарды жатқызуға болады:

- алғаш рет «гидридтік технологияны» пайдалана отырып, металдар интерметалдық фазаларға негізделген қатпарлы құрылымға ие құймалар алынды: 2 ат.%-ға дейін Sc, Y Dy, Ta қоспалары бар Ti₅₀ - Al₅₀, Ti₄₉ - Al₄₉ - Sc₂, Ti₄₉ - Al₄₉ - Ta₂, Ti₄₉ - Al₄₉ - Y₂, Ti₄₉ - Al₄₉ - Dy₂;

- ГТ әдісімен алынған Ti-Al жүйесі құймаларының құрылымы мен қасиеттеріне Sc, Y, Dy, Ta қоспаларының әсері рентгенфазалық талдау, растр

және трансмиссионды электронды микроскоп, рентгенспектрлік микроанализ әдістерімен зерттелді

- TiAl-СЖМ және TiAl-Ta жүйелеріндегі үшінші легірлеуші элементтің қосылуы TiAl интерметалдық фазасында сирек жер элементтері мен Ta элементтерінің қатты ерітінділері мен $(Ti_3(Al, Sc), YAl_2, DyAl_2, TaTi, Ta_{39}Al_{69}, Ti_{0,96}Ta_{0,04}, Ta_{161,8}Al_{282,2}, (TaTi_{66})_{0,33}, (Ti, Ta)Al_3)$ қосымша фазаларының түзілуі есебінен кристалдық тордағы атомдардың байланыс энергиясының жоғарылауына және анағұрлым тұрақтандыру эффектісіне әкелетіндігі анықталды.

- «гидридті технологиямен» алынған үш компонентті Ti49-Al49-Sc2, Ti49-Al49-Y2 және Ti49-Al49-Ta2 құймаларының микроқаттылығы қатты фазалық және дисперсионды қатаю есебінен жоғарылайтындығы анықталды.

Нәтижелердің теориялық маңызы: рентгендік фазалық талдау, растр және трансмиссионды электронды микроскоп, рентгендік спектрлік микроанализ әдістері арқылы ГТ әдісімен алынған Ti-Al жүйесінің құймаларының құрылымы мен қасиеттеріне Sc, Y, Dy, Ta қоспаларының әсері туралы алынған жаңа мәліметтер γ -TiAl құймаларының механикалық қасиеттерін жақсартуда қолданылуы мүмкін.

Осы диссертациялық жұмыста келтірілген зерттеудің **практикалық маңыздылығы** авиациялық технологиялар, материалтану және т.б. салаларда сәтті қолдануға арналған құйманы алуға бағытталған.

Қорғауға ұсынылатын негізгі тұжырымдар:

1. «Гидридті технология» әдісін қолдана отырып, интерметалдық фазаларға негізделген қатпарлы құрылымы бар ерекше құймалар алынды: Ti50 - Al50, Ti49 - Al49 - Sc2, Ti49 - Al49 - Ta2, Ti49 - Al49 - Y2, Ti49 - Al49 - Dy2.

2. TiAl-СЖМ және TiAl-Ta жүйелеріндегі үшінші легірлеуші элементтің қосылуы TiAl-де сирек жер элементтері мен Ta элементтерінің қатты ерітінділері мен $(Ti_3(Al, Sc), YAl_2, DyAl_2, TaTi, Ta_{39}Al_{69}, Ti_{0,96}Ta_{0,04}, Ta_{161,8}Al_{282,2}, (TaTi_{66})_{0,33}, (Ti, Ta)Al_3)$ қосымша фазаларының түзілуі есебінен кристалдық тордағы атомдардың байланыс энергиясының жоғарылауына және анағұрлым тұрақтандыру эффектісіне әкеледі.

3. «Гидридтік технологиямен» алынған үш компонентті Ti49-Al49-Sc2, Ti49-Al49-Y2 және Ti49-Al49-Ta2 құймалары фазалар жиынтығының ұлғаюынан және қабаттардың микроқұрылымының өзгеруінен жүзеге асатын қатты фазалы және дисперсиялық қатаю есебінен микроқаттылықтың жоғарылауымен сипатталады.

Жұмыстың апробациясы. Диссертациялық жұмыстың нәтижелері келесі конференцияларда баяндалды: «Жаңа материалдар мен технологиялар» VI Ресей-Қазақстан жастарының ғылыми-техникалық конференциясы (Барнаул, Ресей, 2018 ж.), «Іргелі ғылымдардың даму болашағы» XVI Халықаралық конференциясы (Томск, Ресей, 2019 ж.), XVII «Іргелі ғылымдардың даму болашағы» Халықаралық конференциясы (Томск, Ресей, 2020 ж.), «Көпфункционалды химиялық материалдар мен технологиялар» Халықаралық конференциясы (Томск, Ресей, 2019 ж.),

«Қазіргі ғылымды дамытудың перспективалық бағыттары» 61-ші Халықаралық ғылыми-зерттеу конференциясы (Мәскеу, Ресей, 2020) және «Конденсацияланған ортадағы ақаулар құрылымдарының эволюциясы» XVI халықаралық мектеп-семинар (Барнаул, Ресей, 2020).

Өтініш берушінің **жеке үлесі** әдеби мәліметтерді талдаудан, эксперименттік бөлімді құрастырудан және жүзеге асырудан тұрады. Автор диссертациялық жұмыс шеңберінде зерттеу жоспарын жасақтап, нәтижелерді талқылады және диссертациялық жұмыс тақырыбы бойынша басылымдар дайындады.

Басылымдар. Диссертацияның негізгі нәтижелері 10 басылымдарда көрсетілген, оның ішінде: Web of Science Core Collection базасының мәліметтер бойынша нөлдік емес импакт-факторы бар халықаралық ғылыми журналда жарияланған 1 мақалада, Қазақстан Республикасы Білім министрлігінің білім және ғылым саласындағы бақылау Комитеті ұсынған журналдарда жарияланған 3 мақалада және халықаралық конференциялардың материалдар жинағында 6 мақалада жарық көрді.

Диссертацияның құрылымы мен көлемі. Диссертация кіріспеден, негізгі бөлімнен, қорытындыдан, пайдаланылған әдебиеттер тізімінен тұрады. Диссертациялық жұмыстың жалпы көлемі 109 бет.

1 ӘДЕБИ ШОЛУ

1.1 Ti-Al бинарлы жүйесінің негізіндегі құймалардың басты сипаттамалары

Титан мен алюминий негізіндегі құймалар маңыздылығы аса жоғары негізгі конструкционды материалдар болып табылады [11].

Құймалардың жіктелуі

Құймалардың жіктелуі [12,13]:

- эзірлеу әдісі бойынша (құйылған және ұнтақты құймалар);
- бұйымдарды дайындау әдісі бойынша (құйылған, деформацияланатын және ұнтақты құймалар);
- құрамы бойынша (гомогенді және гетерогенді құймалар);
- металл-негіздің сипаттамасы бойынша (қара құймалар – негізі Fe, түсті құймалар – негізі түсті металдар және сирек металдар құймалары – негізі радиоактивті элементтер);
- бастапқы заттар саны бойынша (екеулік, үшеулік және т.б.);
- оларға тән қасиеттері бойынша (отқа төзімді, оңай балқитын, беріктілігі жоғары, ыстыққа төзімді, қатты, антифрикционды, коррозияға тұрақты және т.б.);
- қолданылатын бағыты бойынша (конструкционды, инструментальді және арнайы).

Ti-Al құймалары төмен тығыздылықпен қатар жоғарғы беріктілік сипатына, жоғары ыстыққа төзімділік пен пассивацияға бейімділік сияқты бірқатар пайдалы қасиеттерге ие. Жоғарыдағы қасиеттерге ие болғандықтан мұндай құймалар аэроғарыштық, химиялық және мұнайхимиялық өнеркәсіпте үлкен сұранысқа ие. Титан-алюминий құймалары суытылған және шыңдалған күйдегі құрылымдық ерекшеліктеріне қарай бірнеше классификацияға жіктелген.

Шыңдалған құймалар шыңдалуда қататын, яғни α' -мартенситті құрылымды алатын кезде және шыңдалудан кейін жұмсақ, тепе-теңдіксіз күй α'' -фаза болатын құймалар болып екі топшаға жіктеледі. Титан құймаларында фазалық өзгерістер жүретіндіктен, беріктілігі артатын ескіруші құймалар және термиялық қатаймайтын құймаларды ерекше атап өтуге болады.

Күрделі құймаларды шыңдау арқылы жасақталатын β -фазалы құймалар термиялық тұрақты β -құймалар және механикалық тұрақты β -құймалар болып бөлінеді. Пайдаланылатын бағыты бойынша титан құймалары конструкционды, ыстыққа төзімді, ыстыққа берік және ерекше қасиеттері бар болып жіктеледі.

Өндірісте алу әдісі бойынша құйылған және деформацияланатын құймалар болып бөлінеді. Қаттылық дәрежесі бойынша барлық құймаларды үш топқа топтастыруға болады: беріктілігі аз құймалар, беріктілігі орташа құймалар және беріктілігі жоғары титан құймалары.

Заманауи қозғалтқыштарды жасап шығару үшін меншікті ыстыққа беріктілігі, ыстық пен тотығуға төзімділігі, серпімділік модулі жоғары, ал тығыздылығы төмен Ti-Al жүйесінің интерметалдық құймаларын пайдалану маңызы зор ұтымды шешім болып табылады [15]. Ti-Al жүйесінде темірді

қыздырып соққанда түсетін қакқа төзімді, ыстыққа берік құймалардың жаңа буынының негізін құрайтын Ti_3Al (α_2 -фаза) және $TiAl$ (γ -фаза) интерметаллидтері түзіледі [16]. Ірі оңтайландырылған өндірістің дамуына орай, алюминий мен титанқұрамдас құймалар бағасы жағынан анағұрлым қолжетімді әрі экономикалық шығындар жағынан ұтымды материалдар болғандықтан, оларды машина жасаудың алуан түрлі саласында қолдануға болады [17-19].

Құймалардың қасиеттері олардың құрылымына тікелей байланысты. Құймаларға екі түрлі қасиеттер тән. Бірінші түрі құйманың құрамындағы элементтердің табиғатымен және концентрациясымен анықталып, құрылымы сезімтал емес қасиеттер деп аталады. Екіншісі, яғни құйманың құрылымы сезімтал қасиеттер құйманың микроқұрылымына байланысты болады. Құймалардың құрылымы сезімтал емес қасиеттеріне тығыздық, балқу температурасы, булану температурасы, жылулық және серпімділік қасиеттері, термиялық кеңею коэффициенті жатады. Барлық құймалар металдық жылтыр, электр мен жылуөткізгіштік, майысқыштық секілді металдық сипаттамалармен сипатталады.

Сонымен қатар, құймаларға тән барлық қасиеттерді химиялық және механикалық деп екі топқа жіктеуге болады. Химиялық қасиеттер құймалардың активті орталармен – сумен, ауамен, қышқылдармен және т.б. әсерлесу нәтижесінде, құймаларды агрессивті ортаға енгізгенде анықталады. Ал механикалық қасиеттер құймалардың сыртқы күштермен әсерлесуінің табиғатына негізделген және оларды анықтау үшін арнайы тәжірибелер жүргізеді. Мысалы, беріктік, қаттылық, серпімділік, майысқыштық және басқа механикалық қасиеттерін анықтау үшін аққыштыққа, созылғыштыққа, соққылық тұтқырлық пен т.б. анықтайтын тәжірибелер жүргізіледі [13].

γ - $TiAl$ құймаларының деформациялануы қиын және технологиялық өңделуі нашар болуы себебінен, ұнтақтық γ - $TiAl$ құймаларын дамыту (ыстыққа төзімді никель құймалары секілді) іс тәжірибе жүзінде өте перспективті болып табылады. Ұнтақты γ - $TiAl$ құймаларының органикалық жетіспеушілігіне қатты ластануы, ең бірінші қосындылармен (оттегімен, азотпен и т.б.) ластануы және механикалық қабілеттерін нашарлататын интерметаллидтердегі диффузионды процестердің жүруі күрделі болып, толық кеуексіз материал алу қиынға соғады. Егер құрамында қоспалардың үлесі төмен, құрылымы біртекті әрі химиялық құрамы оңтайландырылған толық кеуексіз материал алу мүмкін болғанда, құю мәселелерін, еңбекті көп қажет ететін термомеханикалық және механикалық өңдеуді болдырмай, керек қасиеттері бар бұйым алуға болар еді. Бірақ кейбір зерттеулерде γ - $TiAl$ құймаларынан жартылай фабрикаттар даярлауда ұнтақты технологияны қолданудың перспективті екендігі туралы баяндалып, сол арқылы олардың механикалық қасиеттері артқандығына қатысты нәтижелер келтірілген [19-21].

1.1.1. Құймалардың ұнтақты металлургия әдісімен алынуы

Ұнтақты металлургия әдісі – қазіргі таңда құймаларды алуға көптеген алуан түрлі әдістердің ішінде үлкен қызығушылық тудырып отырған әдіс. Металдардың ұнтақтарын нығыздап, балқытпай қақтау арқылы алынатын құймаларды ұнтақты, алу әдісін — ұнтақты металлургия деп атайды.

ҰМ әдісінің технологиясы таза металдардың ұнтақтары мен көпкомпонентті құймаларды алуға және оларды сатылай қалдықсыз өңдеу арқылы олардан дайын қолданылатын материалдар, қажетті функциональді бұйымдар мен жабындылар өндіруге негізделген [22]. Жалпы технологиялық процесс төмендегідей сатылардан тұрады:

- ұнтақтарды өндіру;
- алдын ала ұнтақты қоспаны даярлау;
- пішіндеу;
- пісіру;
- қосымша процестер [22-25].

ҰМ қарапайым құю және қысыммен өңдеу әдістері арқылы өндірілмейтін немесе алыну барысында көптеген қиындықтар туындайтын дайын бұйымдарды алуға мүмкіндік береді. Осы әдіспен отқа төзімділігі жоғары металдардан бұйымдар, бір-бірінде ерімейтін металдардан (вольфрам мен мыс, темір мен қорғасын) құймалар мен бұйымдар, бейметалдық композициялары бар металдар композицияларынан бұйымдар алуға болады [25].

Металдық ұнтақтар өндірісінің әдістерін екі топқа жіктеуге болады: физика-химиялық – нәтижесінде бастапқы заттың физика-химиялық өзгерісі орын алады және химиялық құрамы бастапқы заттардан өзгеше металдық ұнтақтар алынатын технологиялық процестер; физика-механикалық – қатты және сұйық металдарды майдалау немесе құймаларды олардың химиялық құрамын өзгертпей металдық ұнтақтарға айналдыратын технологиялық процестер [26].

Физика-механикалық майдалауды келесі жолдармен жүзеге асырады [27-28]:

- ұсату және ұнтақтау;
- үгу және грануляция.

Бастапқы қатты шикізатты ұсақтау мен ұнтақтау кезінде бөлшектердің бастапқы өлшемдері қажетті өлшемдерге дейін кішірейеді. Аталған әдісті сынғыштығы жоғары материалдарды майдалағанда, атап айтқанда, Si, Sb, Cr, Mn, Al+Mg құймасын, Fe негізіндегі ферроқұйманы ұсақтағанда пайдаланған тиімді.

Механикалық ұсақтау келесідей әдістермен жүзеге асады [27, 28]:

- сығу (статикалық майдалау);
- соғу, мыжу, үгу, қыздырып соғу және т.б.

Біріншілік майдалау – конустық майдалау аппаратында өлшемі 1 см-ден аспайтын ұсақ металл бөлшектерін алуға негізделген ұнтақтар өндірісінің аралық сатысы. Майдалау процесі қолданылатын технологияға қарай бір сағаттан 3-4 тәулік ұзақтығын қамтуы мүмкін. Бұл операцияға жұмсалатын

уақытты қысқарту қажет болғанда шар тәрізді диірмен емес, процестің интенсивтілігін кесу күштері мен ауыспалы кернеудің пайда болуы есебінен ұлғаятын вибрационды ұсақтағыш пайдаланылады. Нәтижесінде ұнтақты бөлшектердің өлшемдері 0,009 мм мен 1 мм аралығында жатады.

Майдалау үрдісінің өнімділігін ұлғайту мақсатында металдар ыдырап кетпес үшін, майдалауды сұйықтықтармен әрекеттестіру жағдайында жүргізеді. Жұмсалған сұйықтықтың көлемі майдаланатын бөлшектердің 40% үлесін құрауы қажет. Қатты құймалардың бөлшектерін майдалау үшін планетарлы ортадан тепкіш ұсақтағыштар пайдаланылады. Бірақ мұндай қондырғының бір кемшілігі – оның жұмысының периодтылығы болып табылады [28].

Металдық ұнтақтар қандай әдіспен алынса да, олар келесі сатыда арнайы пресс-формалармен қысымның астында белгілі пішінге келтіріледі. Бұйымдарды пішіндеу үшін оларды пресс-формамен престейді, шликермен формалайды және жұқартады.

Ұнтақтарды пішіндеу – престоудің алдындағы үлгілерді жоғары температура жағдайында күйдіру, қоспаны әзірлеу және мөлшерін белгілеуден тұратын процесс. Ұнтақтардың серпімділігін термиялық өңдеу арқылы жоғарылатады [29].

Термоөңдеу процесі қорғаныш газдарының қатысында металдың балку температурасының 40 пен 60 процентін құрайтын температура мәндерінде жүреді. Құрамы бірыңғай ұнтақтарды алу үшін оларды сепарация операциясынан: металдарды белгілі бір өлшемді үккіштерден өткізеді. Содан соң, ұнтақтарды үккіштен өткізгеннен соң ғана, қажет құрамды ұнтақтардың қоспасын даярлауға кірісуге болады [30].

Престеу процесі металдар бөлшектерінің бір бірімен тығыз байланысуына негізделген. Механикалық престің жұмыс жасау қысымының шаршы сантиметрге шаққандағы мәндері 1-ден 6 мың кг аралығын құрайды. Престеліп пішінделген бұйымдардың қаттылық сипаттамалары жоғары мәндерге ие болмайтындықтан, ұнтақтарды пісіру үшін термиялық өңделуді жүргізу керек. Металдарды балқытқан кезде металл бөлшектерінің арасында өте күшті атомаралық байланыстар орнап, алынатын бұйымның құрылымы бірыңғай болып келеді [31-33].

Ұнтақты металлургия әдісі ХХІ ғасырдан бастап техниканың көптеген салаларында кеңінен таралуда. ҰМ әдісін қолданып, әр түрлі салаға қажетті функциональді материалдарды алады. Қазіргі таңда олардан көліктер мен механизмдердің конструкционды элементтері, металл кесетін және кенді бұзатын құралдар, электртехникалық құрылғылар мен атомдық реакторларды жабдықтайтын бөлшектер, магниттер, көптеген орны алмастырылмайтын өндірісте қолданып жүрген бұйымдарды жасайды. Соңғы жылдары металдардың беттеріне қорғаныш қабаттарын тозандандыру мен балқыту арқылы отырғызу әдісі көптеп сұранысқа ие болуда [28-33].

ҰМ саласындағы технологиялық жетістіктер деп экономикалық тиімді шарттар кезінде ресурстар пен энергияны ұтымды пайдалануға мүмкіндік беретін, толығымен функциональді қасиеттері бар ұнтақты өнімнің алынуы

түсіндіріледі. Қазіргі уақытта ҰМ инновациялық технологиялар мен жаңа ұнтақ материалдар алу бағытында қарқынды дамып келе жатыр [28-31].

Заманауи ұнтақты материалдар пайдалану мақсатына қарай келесі функциональді топтарға жіктеледі [31]:

- конструкционды (металдық қатарлар мен олардың сәйкес құймаларын, металкерамикалық қатты құймалармен минералкерамиканы бірге есептегенде);
- кеуекті (фильтрлейтін, триботехникалық, көбікматериалдарды есептегенде);
- электр техникалық қолданысқа арналған;
- ядролық энергетика мен т.б. арналған арнайы материалдар.

[12,13] классификациясына сәйкес, осы жұмыста келесідей құймалар алынды:

- даярлау әдісі бойынша – ұнтақты құймалар;
- бұйымды алу әдісі бойынша – ұнтақты құймалар;
- құрамы бойынша – гетерогенді құймалар;
- металдың сипаттамасы бойынша – сирек және сирек жер металдарының құймалары;
- компоненттер саны бойынша – үшеулік;
- оларға тән қасиеттер бойынша – жоғары беріктілікке ие;
- қолданылуы бойынша – конструкционды

1.1.2. Ti-Al жүйесі негізіндегі құймалардың қолданылуы

Авиақозғалтқыштар мен энергетикалық қондырғылардың эффективтілігінің артуы жоғары температура мәндерінде ($T=600\dots 850^{\circ}\text{C}$) меншікті беріктіліктің, қаттылықтың, аққыштыққа тұрақтылық пен ыстыққа төзімділіктің жоғары көрсеткіштеріне ие $\gamma\text{-TiAl}$ және $\alpha_2\text{-Ti}_3\text{Al}$ фазалары негізіндегі интерметалдық құймалар ($\gamma\text{-TiAl}$ құймалары) секілді жаңа конструкциялық материалдардың көмегімен ғана жүзеге асады [34].

Қазіргі уақытта алдыңғы қатарлы әуе және қондырғы орнататын корпорацияларда (Boeing, Rolls–Royce) титанның интерметалдық қосылыстары негізіндегі турбореактивті күректер мен турбовинтті қондырғылар даярлау үшін жаңадан құйылған материалдарды қолдану мәселесі үлкен қызығушылық тудыруда [35]. Мұндай құймалардың меншікті салмағы $3,7\text{-}4\text{ г/см}^3$ болса, ал пайдаланудың потенциалды температурасы $600\text{-}900^{\circ}\text{C}$ аралығында жатады. Аталған температура аралығында интерметаллидтер ыстыққа беріктілік пен ыстыққа төзімділіктің жоғары мәндеріне ие, ал меншікті беріктілік пен серпімділіктің меншікті модулі жағынан қазіргі таңда белгілі ыстыққа төзімді барлық никель құймаларынан асып түсетіндіктен, газтурбинді қондырғы жасау барысында ауыр ыстыққа төзімді Ni-құймаларының ($\rho\approx 8,5\text{ г/см}^3$) бір бөлігінің орнын алмастырып, ұшатын қондырғының жүк-масса қатынасын сапалы түрде арттырады әрі қондырғының жалпы сипаттамаларын жақсартады [36].

Соңғы жылдары барлық елдерде жанармай шығындары, қалдықтары мен көліктердегі шулардың көрсеткіштерін төмендетуге деген қажеттілік

жоғары деңгейде тұр. Мысалы, ортадан ірі өлшемді дизельді жанармай қондырғыларының қалдықтарына шектеу қоятын ережелер көп ұзамай Еуропа мен АҚШ-та жүзеге асады. Еуропалық автокөлік өнеркәсібі бұл проблеманың шешімін өздері өндіретін іштен жанатын қондырғылардың санын азайтумен іске асырып отыр. Сондай-ақ, қондырғының тиімділігі мен өнімділігі газ қысымы мен қондырғы жасайтын айналымдар санының артуымен қатар, жану температурасының 850°C (дизельді қондырғы) пен 1050°C -ге дейін (бензинді қондырғы) артуы есебінен жоғарылайтын болады. Бұдан шығатын қорытынды: температураның жоғары мәндерінде жұмыс жасайтын айналым және тербелмелі материалдар бөлшектеріне қойылатын шарттар көбеюде [1, 37-40]. Яғни, жаңа салмағы аз, температураның жоғары деңгейлерінде қолданылатын материалдар мен бағасы тиімді технологиялар құрастырылып, кеңінен қолданыс табуы тиіс. Бұл тұрғыдан алғанда, γ -TiAl негізіндегі құймалар температураның жоғары мәндерінде төмен тығыздық пен жоғары беріктіліктің тиімді үйлесімін көрсетеді.

Жеңіл γ -(TiAl) құймаларын турбокомпрессорлы дөңгелектерде пайдалану келесідей артықшылықтарға ие [37,38]: ең біріншіден, қалдықтардың азаюы, әсіресе жану процесі үшін таза ауаның едәуір жылдам зарядталуының нәтижесінде күлдің азаюының орын алуы. Транспорттық құралдың жауап беру икемділігі артады, яғни «турбо-артта қалу» төмендейді. Шу мен вибрацияның деңгейінің төмендеуі резонанстық жиіліктердің едәуір жоғары деңгейге ығысуымен түсіндіріледі. Тағы да, турбинаның роторының максималды жылдамдығы шегінің артуы және сол арқылы турбокомпрессор мен қондырғының эффективтілігінің артуына негіз болады. Сондай-ақ, подшипниктер үйкелуінің азаюының нәтижесінде бүкіл турбоайдағыш жүйесі анағұрлым жоғары эффективтілік пен ұзақ мерзімге жарамдылықты қамтамасыз етеді.

Заманауи әуе қондырғылары мен газ турбиналарында пайдаланылатын γ -(TiAl) негізіндегі құймалардың кем дегенде 3 негізгі артықшылығы бар [37, 41]: (а) әуе қондырғыларындағы γ -(TiAl) құймаларының арнайы серпімді қаттылығы әдетте қолданылатын конструкционды материалдарға қарағанда 50%-ға жоғары; (б) $600-800^{\circ}\text{C}$ температура режиміндегі γ -(TiAl) негізіндегі заманауи құймалардың тұтқырлыққа тұрақтылығы кейбір қолдану салаларында Ni негізіндегі құймалардың (γ -TiAl құймаларына қарағанда екі есе ауыр) орнын алмастырады. (с) γ -(TiAl) негізіндегі құймалардың отқа тұрақтылығы жоғары болып (никель негізіндегі тұрақты құймалар сияқты), ауыр әрі қымбат отқа төзімді конструкциялардың орнын басуға мүмкіндік береді.

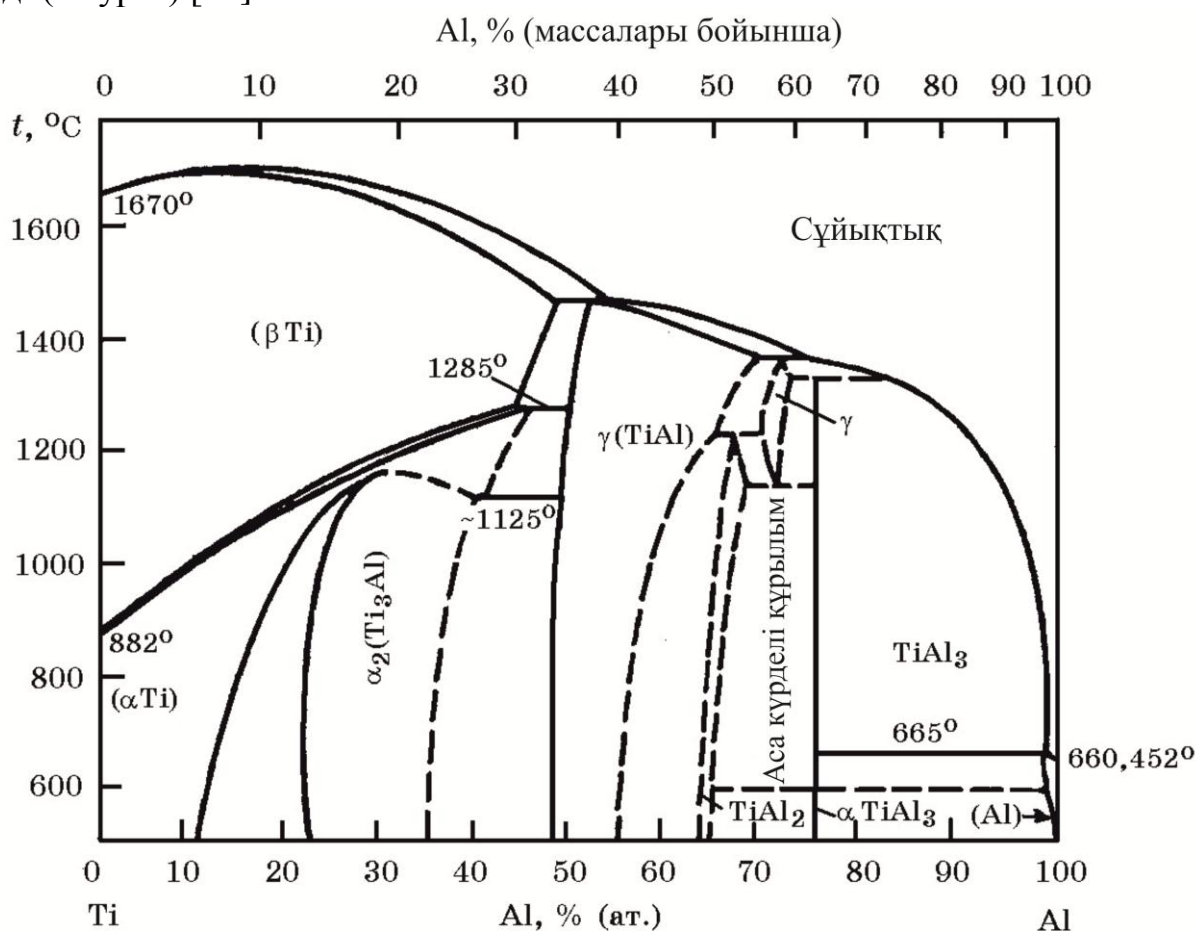
Титан құймаларының көп бөлігі әуе, ғарыш, зымыран техникасы, машина жасау салаларында қолданылады. Барлық дерлік заманауи конструкцияларда ең маңызды рөлді титан құймалары атқарады. Титан құймалары беріктілігінің жоғарылығы, тығыздығының төмендігі, меншікті тығыздығының жоғарылығы мен қолданылуының температуралық аралығының кең болуы конструкциялардың массасын азайтып, жұмысының тиімділігін арттырады. Конструкциялар массасының жеңіл болатындығы мен

тиімділігінің көрінісі – ВТ23 құймасынан жасалған бронезилеттер. Осы құйма мен басқа да конструкционды титан құймаларынан жасалған спорттық құралдар ерекше жеңіл әрі тиімділігі жоғары болады [41,42].

Коррозияға тұрақтылық жоғары болғандықтан титан құймалары корпустарды жабдықтауда таптырмас материалдар болып, теңіз авиациясы мен кеме жасауда кенінен пайдаланылады. Титан қасиеттерінің жоғары көрсеткіштері есебінен химиялық өнеркәсіп, құрылғы жасау, медицина салаларында көптеп қолданылады [43-47].

1.2 Ti-Al жүйесінің тұрақты фазаларының сипаттамасы

Ti-Al жүйесінде титан жағынан гомогенділіктің едәуір үлкен облыстарына ие Ti_3Al (α_2 -фаза) және $TiAl$ (γ -фаза) интерметаллидтері түзіледі (1 сурет) [48].



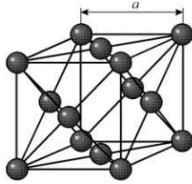
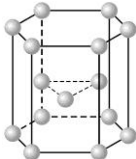
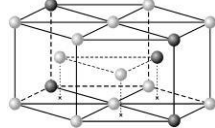
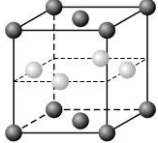
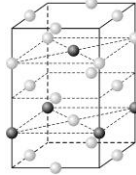
1 сурет - Ti-Al жүйесінің тепе-теңдік күй диаграммасы

γ -TiAl негізіндегі құймалар – болашақта қолданылу аясы кең, құрамы бойынша титан алюминидтер құрамдас құймалар болып табылады [49-54]. Титан алюминидтері құрамдас құймалардың біршамасы тек жоғары құйылған қасиеттерге ғана емес, сонымен қатар беріктілік, серпімділік және ең маңыздысы, ыстыққа беріктілік сияқты механикалық сипаттамалар кешеніне ие [53-63]. Бірақ, 650°C-тан жоғары температура мәндерінде олардың ыстық пен жылулық соққыларға тұрақтылығының мәндері технологиялық талаптарды қанағаттандырмайды [64].

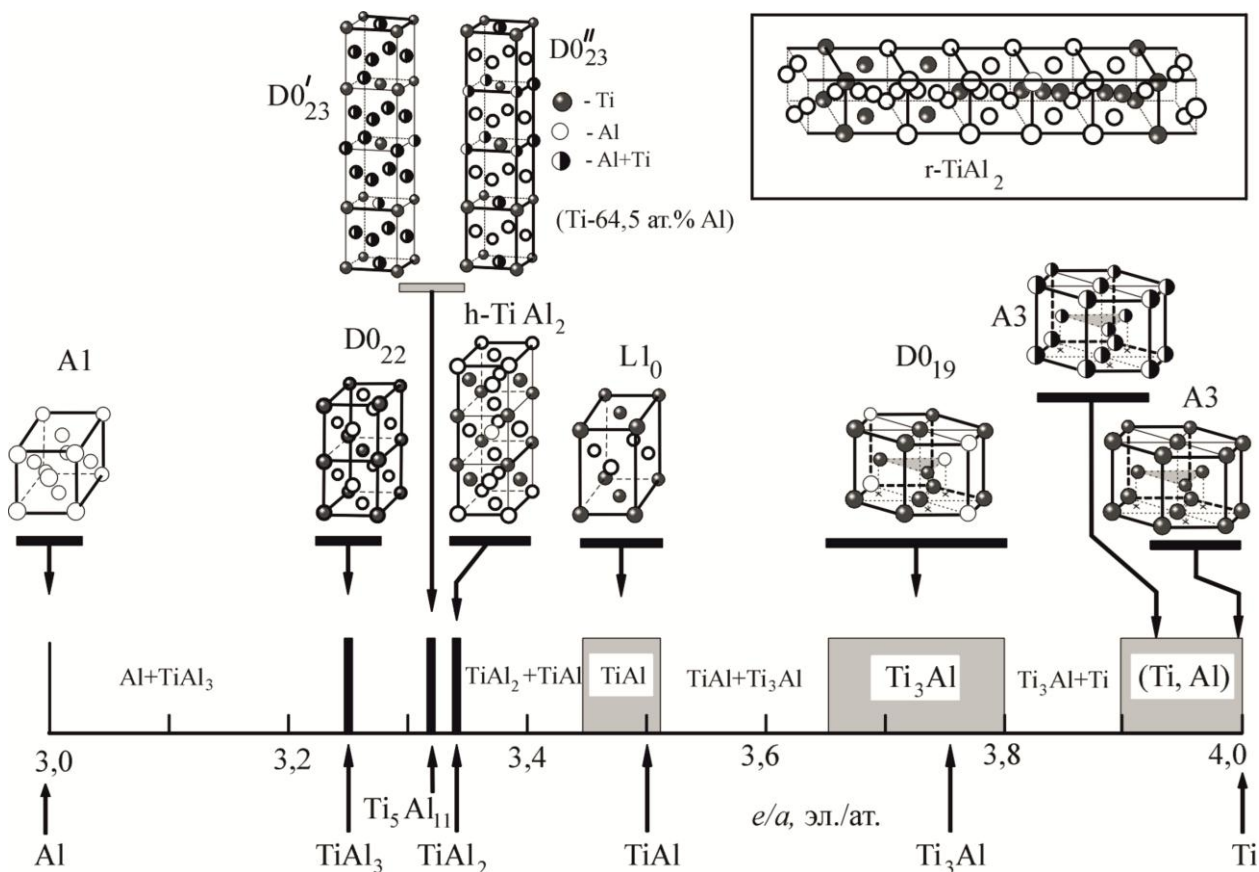
Титан алюминиді (γ -TiAl) CuAu жоғары құрылымы секілді $L1_0$ типті, яғни титан атомдарымен қапталған қабаттар алюминий атомдарымен кезектесіп орналасқан, реттелген тетрагональді-бұрмаланған қырынан орталықтандырылған құрылымға ие (1 кесте). γ -фазаның торының периоды: $a=0,3949-0,3984$ нм; $c=0,4065-0,4089$ нм; $c/a=1,020-1,035$. Алюминийдің пайыздық үлесі артқан сайын торлардың периодтары мен c/a арақатынасы артады [65]. γ -фазасының диаграммадағы орналасқан аумағы едәуір үлкен және қалыпты бөлме температурасы жағдайында 50-ден 66 ат.%-ға дейінгі аралықты қамтиды (1 сурет).

TiAl интерметаллидінің реттеліп бағытталған құрылымы балқу температурасына ($\sim 1450^\circ\text{C}$) дейін жойылмайды [25]. Құрамында алюминийдің пайыздық үлесі үлкен болғандықтан, TiAl алюминидінің тығыздығы төмен мәнге ие ($3,8$ г/см³).

1 кесте - Ti-Al жүйесіндегі металдар мен интерметалдық қосылыстардың физика-химиялық қасиеттері [66].

Қасиеттері	Фазалар				
	Al	Ti (α -фаза)	Ti ₃ Al (α_2 -фаза)	TiAl (γ -фаза)	TiAl ₃
Al үлесі, ат.%	0,0	0,0	25,0	50,0	75,0
Кристалдық құрылымы ● – Ti ● – Al	ҚОК 	A3 Гексагональді тығыз қаптау (ГТК) 	D0 ₁₉ (ГТК) 	L1 ₀ (қырынан орталандырылған тетрагональді) 	D0 ₂₂ (қырынан орталандырылған тетрагональді) 
Тордың параметрлері, нм	$a = 0,4041$	$a = 0,2951,$ $c = 0,4689$	$a = 0,5782,$ $c = 0,4629$	$a = 0,4005,$ $c = 0,4070$	$a = 0,5436,$ $c = 0,8596$
Тығыздығы, г/см ³	2,70	4,50	4,1–4,7	3,874	2,74
Балқу температурасы, °C	660	1668	1180	1460	1355
Қайнау температурасы, °C	2500	3210	–	–	–
Түзілу энтальпиясы ΔH , кДж/моль	4,565	0,0	-100,5	-73,3	-142,4
Микроқаттылық, МПа	191	1420	–	2800	5020
Меншікті электркедергі, мкОм*см	26	55	–	27	15

Ti–Al жүйесінің күй диаграммасына сүйенсек, келесідей заңдылықтар орын алады. Аталған жүйеде интерметаллдық фазалардың бірқатар спектрі пайда болады (2 сурет): гомогенділік аумағы кең екі фаза (Ti_3Al , $TiAl$); гомогенділік облысы жіңішке екі фаза ($TiAl_2$ және $TiAl_3$); құймалардың аумағында түзілетін Ti_5Al_3 , Ti_9Al_{23} және Ti_5Al_{11} метатұрақты қосылыстар [58-76].



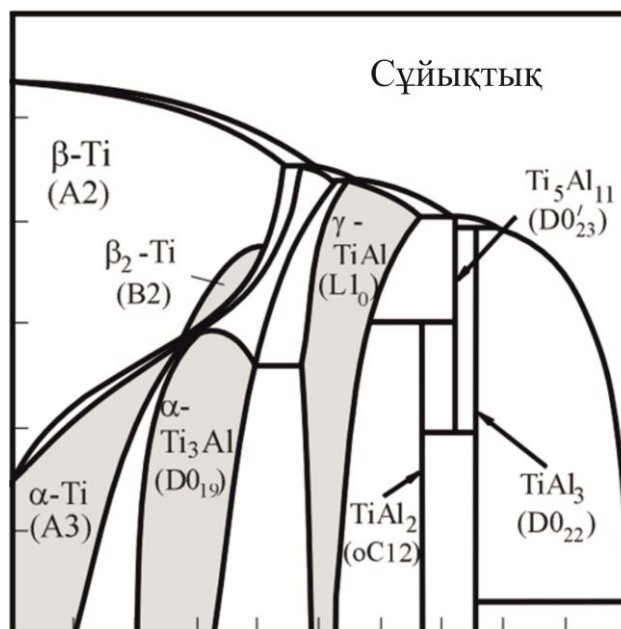
2 сурет - Ti-Al бинарлы жүйесі құймалары кристалдық құрылымдары элементарлы ұяшықтарының интерметаллдық қосылыстарының гомогенділік облысы мен электрондық концентрациясына тәуелді орналасу диаграммасы

Солдан оңға қарай электрондардың концентрациясының өзгерісімен бірге жүретін морфотропты ауысулардың тізбегі: $A1(Al) \rightarrow D0_{22}(TiAl_3) \rightarrow D0'_{23}(Ti_5Al_{11}) \rightarrow h-TiAl_2(oC12) \rightarrow L1_0(TiAl) \rightarrow D0_{19}(Ti_3Al) \rightarrow (A3)$. $D0_{23}$ және $D0'_{23}$ құрылымдары негізіндегі $D0''_{23}$ құрылымы.

Электронды факторға қатысты келесідей жағдай ерекше маңызға ие. Ti-Al жүйесіндегі құйма түзетін элементтер электронды конфигурациясының өзгеше болуымен ерекшеленеді: Al - $[Ne]3s^23p^1$ және Ti - $[Ar]4s^23d^2$. Бұл интерметаллдік фазалардың пайда болуы мен тұрақтылығы мәселесіндегі электронды факторлардың маңыздығын аңғартады. Қарапайым диаграмма бір атомға келетін (s+d) электрондар санына қарай Ti-Al жүйесіндегі кристалдық құрылымдар эволюциясының күрделілігі мен гомогенді аймақтардың кеңдігін көрсетеді (2 сурет). Электрондардың концентрациясы 3.5 эл./ат-нан кіші болғанда Ti-Al жүйесінде біртектілік облысы жіңішке және ұзынпериодты

кристалдық құрылымдары бар қосылыстар түзіледі. Ал концентрация мәні 3.5 эл./ат. мәніне жеткенде Ti-Al жүйесінде біртектілік облыстар аумағы кеңейіп, мұндай қосылыстардың құрылымдары гексагональді сингония құрылымына ауысады. Ti-Al жүйесіндегі біртектілік облыстарының ені мен металдық фазалардың құрылымындағы орын алатын өзгерістер металдардың қосылыстарына тән екі спецификалық ерекшеліктерді көрсетеді. Бірінші, құрылымда жақын қосылыстардың координациялық саны элементарлы ұяшыққа сәйкес келетін валентті электрондардың санынан үлкен болған жағдай. Екінші, әртүрлі компоненттердің атомдары кристалдық тордың бұрышында қалай орналасатындығына байланысты: я реттелген, я статистикалық түрде (2 сурет) [77]. Екі аспект те электрондардың концентрациясының артуымен атомаралық байланыстардың делокализациясы жүретіндігін растайды. Іс жүзінде де электрондық концентрациясы төмен құймаларда металдық фазалардағы химиялық байланыстарға коваленттік құрылымның үлесінің үлкен әсері ететіндігі байқалады. Электрондық концентрацияның жоғары мәндерінде Ti-Al жүйесінің фазаларында делокализация артады және бұл ГТҚ торы негізінде реттелген $D0_{19}$ тығыз қапталған құрылымның түзілуінен, сосын ГТҚ торы негізінде қатты ерітіндінің электрондық концентрацияның артуынан байқалады.

Ti-Al жүйесінде бір облыста бірнеше фазаның болуы фазалардың кристалдық құрылымдарын айқындауда айтарлықтай қиындық тудырады [68-70]. Бұл Ti_5Al_{11} метатұрақты қосылыстың пайда болуы кезіндегі фазаның орналасу аймағын нақты белгілеудің қиынға соғуынан байқалады (3 сурет).



3 сурет - [69] жұмыста ұсынылған Ti-Al жүйесінің күй диаграммасының үлгісі

1.3 Ti-Al жүйесі құймаларының құрылымы мен қасиеттеріне СЖМ қосындыларының әсері

Тығыздығы төмен (4 г/см^3), қорғаныш жабындылары бар титан алюминидтерінен тұратын жоғары температураларда пайдаланылатын материалдарды пайдалану, тығыздығы 9 г/см^3 никель құймалары карағанда "жүк-салмақ" қатынасын 50 %-ға дейін жоғарылатуға мүмкіндік береді [34]. Мұндай құймалардың меншікті серпімділік модулі титан мен никель негізіндегі құймалардың көрсеткіштерінен 50-70%-ға жоғары және бұл қатынас температураның жоғары деңгейлерінде де жойылмайды. γ -TiAl құймалары меншікті тығыздық бойынша $T=600\text{...}850^\circ\text{C}$ жағдайларында қолданыста жүрген барлық әуе және машина жасауға қажетті материалдарды (құрылымдық күйіне қарай) басып озады. γ -TiAl құймалары газтурбинді қондырғыда ыстыққа төзімді никель құймаларының бір бөлігінің орнын ығыстыра алады. γ -TiAl құймаларының негізінде күрекшелер, дисктер, басқа да ұшақтың бөліктері жасалынады.

Алайда серпімділіктің төмендігі мен тұтқырлықтың нашарлығы осы құймалардың қолданылу аясын шектейді. Микро және макролегирлеу, құйманың химиялық құрамын оңтайландыру мен қажетті құрылымын алу арқылы серпімділікті арттыруға болады [77]. Сонымен қатар, γ -TiAl құймаларынан жасалған бұйымдардың тиімділігін арттыру үшін, нақтылай айтқанда, авиационды газтурбинді қондырғылардың турбинді күрекшелерін жақсарту үшін олардың ескіруге тұрақтылығын жоғарылату керек.

650°C -тан едәуір жоғары температураларда беріктіліктің жоғары шегі мен аққыштық төменгі деңгейіне ие γ -TiAl негізіндегі құймалар жасақталған [78]. γ -TiAl негізіндегі құймалардың ыстыққа төзімділігін арттыру үшін оларды әр түрлі элементтермен, соның ішінде валенттілігі титаннан жоғары элементтермен, нақтысын айтқанда Nb легирлейді [64, 79]; беттік қабаттарын модифицирлейді; кешенді түрде қорғайды – легирлеп беттік қабатын модифицирлейді [80].

γ -TiAl құймаларының беттік қабаттарын модифицирлеудің ең перспективті әдісі – құрамында оттегі бар, газ атмосферасында әрекеттесуші компоненттердің диффузиондық өтімділігі төмен қабыршағын түзетін элементтермен қанықтыру болып табылады. Осы орайда, γ -TiAl алюминидтерінің беттік қабаттарын қанықтырудың бірнеше әдісі бар: алюминий немесе кремниймен диффузионды қанықтыру, ұнтақ алюминиймен қанықтыру, активатор ретінде галогенидтерді қолдану арқылы; осы қабаттарға Al, Si, W, Nb сияқты элементтерді енгізетін ионды имплантация; магнетронды тозаңдандыру, атап айтқанда, $800 - 900^\circ\text{C}$ жағдайында жоғары температуралық тотығу процесі кезінде құйманың бетіне орнығатын $\text{Zr}(\text{Ni}) - \text{Cr} - \text{Al} - \text{Y}$ элементтерін отырғызу; силумин балқымасына құйманы батыру (ыстық әдіс); электрлік доғаны қолданып құймаларды кремниймен өңдеу және вакуумда үлгілерді жандыру [80, 81]. Температураның жоғары мәндерінде тозуға тұрақтылықты жоғарылату үшін γ -TiAl құймаларын алдын ала азоттайды [82]. Беріктілігі артқан, модифицирленген арнайы микроқұрылымға ие немесе тиімді

қорғаныш жабындылары бар температураның үлкен мәндерінде пайдаланылатын алюминидтерді даярлау жақын уақытта оларды анағұрлым қатаң жағдайларда пайдалануға жағдай жасайды.

Қазіргі таңда металдарды алу мен жаңа айрықша қасиеттерге ие функциональді материалдарды жасақтау үшін пайдаланылатын сирек жер металдарының көлемі қарқынды өсіп келеді. Өндірістік сала жақсы жетілдірілген елдерде СЖМ алу өндірісі мен пайдаланылуының деңгейі соңғы онжылдықтарда экономикалық даму көрсеткіші болып табылады [83]. СЖМ металл өндірісінде пайдаланылуы оның оттегімен, күкіртпен, азотпен және сутегімен, сонымен қатар құймалар көрсеткіштерін төмендететін қоспалармен әрекеттесіп, химиялық қосылыс түзуге бейім болуына негізделген. СЖМ аталған элементтермен әрекеттескенде химиялық байланысы берік, балқуы күрделі қосылыстар түзіп, балқыманы тазартады. Көрсетілген металдар қатары модифицирлеуші қасиетке ие. СЖМ өте аз мөлшерін қосқан жағдайдың өзінде құйма кристалдық құрылымының параметрлерінің кішіреюі орын алады.

Алюминий құймаларына даярлауда сирек жер металдарын пайдалану бастапқы құймалардың құрамы, құрылысы мен көрсететін қасиеттерінің ауысуымен сипатталады. СЖМ алюминийдегі ерігіштігі тым төмен болғандықтан, көбінде құймаларға $>0,5$ масс.% мөлшеріне дейінгі СЖМ енгізеді. Алайда осындай мөлшердегі қосындылардың өзі алюминий құймаларының сипаттамаларын айтарлықтай жақсартады. Сирек жер металдары – көп мөлшер қоспаған жағдайдың өзінде фазалардың түйісу аралығындағы мөлшері жоғары болуы ықтимал гидрофильді элементтер [84].

СЖМ бөлшектердің шекарасында концентрацияланып, бөлшек мен сұйықтық арасында кедергі орнатып, ары қарай ұлғаюына кедергі келтіреді. Құрамында эвтект түзуші легирлеуші элементтері бар титан құймаларындағы микроөлшемді қоспалар интерметалдық қосылыстардың пайда болу жылдамдығын бәсеңдетеді. Микроқоспа беттік энергияны төмендетіп, матрицалық β -фаза мен айқын көрінетін α -фазаның арасы шекарасындағы аймақта таралуы мүмкін. Микроқоспа қосқанда беттік энергия мәні азаятындықтан, ыдырау өнімдерінің іріленуінің термодинамикалық стимулы да төмендейді [85].

Тұрақты β -фазасы бар құймалар басқа β -құймаларымен салыстырғанда айтарлықтай жоғары сипаттамаларға ие болмағандықтан, өнеркәсіпте конструкционды материалдар ретінде үлкен сұранысқа ие болмады. Сондай-ақ, олар құрамында бағалы легирлеуші элементтердің болуы және қаттылану қабілеттерінің жоқтығы секілді лимиттеуші шектеулерге ие [45]. Бұл құймалар класы өнеркәсіпте кеңінен таралмаса да, кейбір арнайы шарттарда үлкен сұраныс тудыруы мүмкін.

Осы кластағы құймалардың жоғары температуралар кезіндегі беріктілігін арттыратын ұтымды әдіс – беріктілікті дисперсті жолмен арттыру әдісі болып саналады. Дисперсті жолмен қатайған құймалар үшін n дәреже көрсеткіші жоғары мәнге ие, $n > 7$ [86]. Яғни, кернеу мен температура жоғары мәндерінде

бұл құймалардың беріктілігі күрт артады және деформация жылдамдығы төмендейді.

Ыстыққа төзімді никель құймалары [87], титан мен бинарлы TiAl құймаларының қасиеттері мен микроқұрылымына СЖМ әсері зерттелгенімен, β -тұрақтандырылған құймаларға қатысты мәліметтер жоқтың қасы. Қазіргі таңда γ -TiAl құймаларының ішінде ниобий, молибден, бормен легирленген, β -фаза арқылы қататын TNM құймалары (Ti-(43-44)Al-(4-5)Nb-1Mo-0.1B, ат. %) механикалық қасиеттерінің едәуір тиімді жиынтығына ие. TNM құймаларын СЖМ модифицирлеу арқылы олардың механикалық сипаттамаларын жоғарылатады.

СЖМ арқылы құймаларды дисперсті нығайту әдісінің көрінісі ретінде VT38 құймасын атап өтуге болады [85]. Олар 600 °С температура жағдайында 100 сағат ішінде беріктілік пен аққыштықтың жоғарғы мәндеріне ие болған: 240 мен 60 МПа сәйкесінше, яғни ыстыққа берік VT20 жайма құймасының көрсеткіштерінен 3-6 есе артық мәндерге ие.

TiAl алюминидтерін сирек жер металдарымен легирлеудегі ең маңызды мақсат – олардың құрылымдық морфологиясын жетілдіру. Скандийдің аздаған мөлшерін (5 ат.%-ға дейін) қосып легирлеген кезде бөлме температурасы мен жоғары температураларда беріктілік шамасы 2-3 есе ұлғайып, механикалық сипаттамаларына жақсы әсер ететіндігі белгілі болды. СЖМ қосудың әсерінен алюминийдің сұйық күйде аққыштығының артуы, құрылымының ұсақталуы оларды құйылған алюминий құймаларына да енгізуге жағдай жасады [88]. Лигатуралар (мысалы, Al+Y, Al+Sc) [89] мен түсті металлургияда жалпылама қолданыс тапқан мишталдардан бөлек, Al+СЖМ құймалары беріктілігі жоғары электр өткізгіштерді дайындауда қолданылады [90-92]. Ауыспалы және сирек жер металдары (Sc) алюминийде аздаған мөлшерде ерісе де, оның электрөткізгіштік қасиеті жойылмайды. Бірақ құймадағы интерметаллидтердің $Al_{11}R_3$ (Al_3R) майда дисперсті фазасы беріктіліктің температураның кең аралығында (200°С-қа дейін) едәуір артуына үлес қосады [93].

Оттегімен легирленген құймалардың құрамына СЖМ енгізгенде құймалардың сипаттамалары айтарлықтай дәрежеде артады. Себебі құймалардың қолданыс көрсеткіштеріне оттегінің зиянды әсері азаяды. СЖМ құрамында жеңіл балқитын қоспалары бар отқа төзімді қосылыстар түзіп, тотық қабыршағының құрылысын жетілдіреді. Тотыққан қабыршақтың құрылымының берік болуы жоғары температураларда қолданылатын конструкционды титан құймалары үшін аса маңызды. Сонымен қатар, СЖМ өсетін фазаның бетінде беттік керілуді ұлғайтып әрі жұқа бүркеуіш қабыршақтар түзіп, өсетін фазаның өлшемдерінің артуын болдырмайды. СЖМ пісіру барысында пісіретін тігістердің сапасын арттырып, оң әсер етеді. Бұл СЖМ модифицирлегіш әсері және шекара мен шекарааралық аймақта оттегі мөлшерінің төмендеуі есебінен жүреді.

Дериватография әдісі арқылы жүргізілген [93] зерттеулер, алюминийге аздаған (0,1 ат. %) Sc, Y бөлшектерін қосу дисперсті алюминийдің стандартты маркаларына (АСД-4) қарағанда тотығудың максимальді жылдамдығына сәйкес

келетін температура көрсеткішін төмендететіндігін көрсетті. Тотығудың максималды жылдамдығы кейбір СЖМ легирленгенде бірнеше есе жоғарылайтындығы анықталды.

Зерттеулер макро-, микро- және нанокұрылымдардың жетілуі барысында құймалардың балқымасы мен конструкцияны жасақтау аралығында, яғни өндірістік сатылардың кез келген бөлімінде СЖМ әсері тиімді екендігін дәлелдеді (2 кесте). Нанокұрылымдар модифицирленген құймаларда тек өнімнің басым бөлігін құраған кезде ғана емес, сонымен қатар өндірістік үрдістерде аралық өнім ретінде қалыптасса да соңғы өнімге ықпал етеді. Нанокұрылымды құйманың беріктілігі мен серпімділігі үлкен мәндерге ие болса да, жарылуға тұрақтылығы төмен болып, құйма зымыран-ғарыштық және әуе құрылғыларын бөлшектерін жасауда пайдалану үшін жарамсыз болуы мүмкін.

2 кесте - Ti-Al жүйесі құймаларының құрылымы мен қасиеттеріне СЖМ қосындыларының әсері

СЖМ	Мөлшері	Құймалар	Әсер ету сипаттамасы	Қолданылған әдебиет
Sc	5 ат.%-ға дейін	Құйылған алюминий құймалары	Беріктілігінің жоғарғы көрсеткішін 2-3 есе жоғарылатып, механикалық сипаттамаларына оң әсер етеді	[88]
		γ-титан алюминидтері	Жоғары температураға тұрақтылығы артады, дисперсия түзілуі нәтижесінде құрылымы нығайған құйма түзіледі	[94]
	0,3-0,5 мас. %	Ti-6Al-4V (α+β)-титан құймасы	850°C температурасында тәжірибе жүргізгенде (α+β)-облысында Sc ₂ O ₃ оксидтерінің бөлшектерінің дислокациялар қозғалысының тежелуінен, деформацияға тұрақтылық күшейеді	[95]
	0,4% Sc	Ti-Al және Ti-48Al негізіндегі құймалар	Температураның жоғары мәндеріндегі аққыштықтың көрсеткішін едәуір жоғарылатады	[96]
		Ti-Al негізіндегі құймалар	Алюминий құймаларының матрицасының торымен құрылымдық және өлшемдік жоғары сәйкестікті қамтамасыз ететін L12 типті кубтік торға ие Al ₃ (Sc _{1-x} Ti _x)	[97]

			алюминидтері бар үштік Al-Sc-Ti құймалары алынды	
Dy	0,1 мас.%	BT15 псевдо-β титан құймасы	Жасытылған күйде жаймалардың орташа ұзаруы 12-ден 22%-ға дейін жоғарылайды	[98]
	1 ат.%	Ti-45Al-6(Nb,Mo)-0,2B β-қатаятын γ-TiAl интерметаллдік құйма	Материалдың фазалық құрамының өзгерісіне әкеледі, температураның жоғары мәндерінде беріктілік пен серпімділік сипаттамалары жоғары мәндерге ие	[99]
Y, Dy		BT15 құймасы	750°C температурасында 1 сағат бойы ұстаған кезде тотығу қабілеті 1,5-2 есе нашарлайды	[99]
Y		Ti-Al-V-Cr-Zr-Sn жүйесінің псевдо-β титан құймасы (BT35 типті)	Y ₂ O ₃ бөлшектерінің түзілуі есебінен ескіру процесі кезінде қатаю эффектісінің азаюына әкеледі	[100]
		BT18Y псевдо-α титан құймасы	Жоғары температураларда ұзақ мерзім сыналғанда β-фазасы дәндерінің өсуінің төмендеуіне әкеп соғады	[101]
	0,1 мас.%-ға дейін	Медициналық TNTZ (Ti-29Nb-13Ta-4,6Zr) β-құймасы	Y ₂ O ₃ оксидтерімен дисперсиялық қатаюы есебінен аққыштыққа қарсылықтың жоғарылауына әкеледі	[102, 103].
	0,1 мас.%	Медициналық TNTZ (Ti-29Nb-13Ta-4,6Zr) β-құймасы	Серпімділік модулінің өзгеріссіз аққыштық шегінің 11%-ға ұлғаюына әкеледі	[102, 103].
		Ti-45Al-5Nb-0.3Y гамма-құймасы	Деформацияға қарсылық пен деформациялық активация энергиясының төмендеуі, динамикалық рекристаллизация процесінің жылдамдауы байқалады	[104]
	0,3 ат.%	Ti-43Al-9V гамма-құймасы	Біріншілік β-дәндерінің майдалануына, α ₂ /γ-ламелдерінің қалыңдығының азаюына, деформацияға қарсылықтың төмендеуі мен құйманың беріктілік пен серпімділік қасиеттерінің артуына	[105]

			әкелді	
	0,1 мен 1,0 ат.% аралығы	Ti-45Al-8Nb гамма-құймасы	Екі типтің, яғни изотермиялық пен циклдіктің тотығуға деген тұрақтылығын ұлғайтады	[106]
	0,5-ден 10 ат.%-ға дейін	Титан құймасы	20 және 300 °С кезінде беріктіліктің жоғарғы көрсеткішінің мәнін арттырады	[103]
		Интерметалдық TiAl	Дәнді қайта өңдеу нәтижесінде γ құрамдас жабындылар едәуір жоғары микроқаттылық пен шытынауға деген бейімділіктің төмендігін көрсетеді	[104]
		Титан құймасы	Құймалардың микроқұрылымын едәуір жоғарылатуы мүмкін	[98, 100, 101]
	0,02-0,1 мас.%	BT15 псевдо- β титан құймасы	Серпімділік екі есе артады	[98]
Ta		Интерметалдық титан құймасы	Тығыздық пен аққыштық шегі, B2-фазасының (B2/ β transus) реттелу температурасы артады	[107]

Ti-Al-Sc үшкомпонентті жүйесі

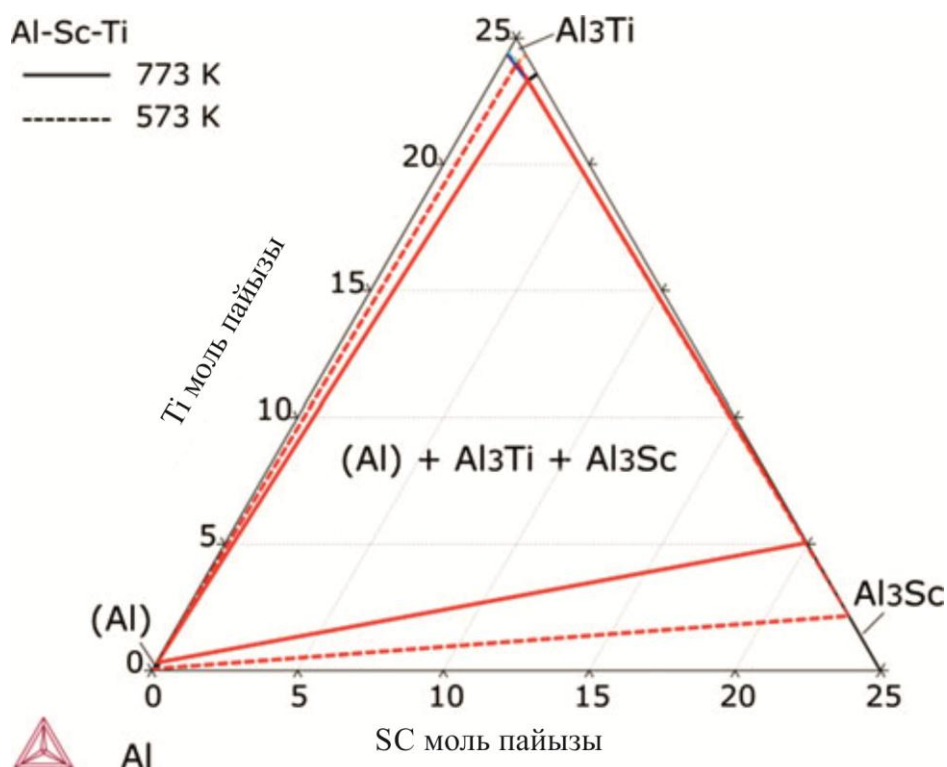
Скандий – алюминий құймаларына енгізілетін, басқа металдарға қарағанда едәуір көп зерттелген легирлеуші компонент [108]. Скандий модификатор ретіндегі көрсеткіші бойынша тек титаннан ғана төмен мәнге ие, сәйкесінше құйманың құрамына енгенде құйылған құрылымын ұсақтайды. Эвтектикалық температура кезінде, 0,23 ат.% (0,38 мас.%) ерігіштіктің жоғарғы деңгейінде скандийдің бөлшектері алюминийдің құрамында қатты ерітіндінің асақаныққан фазасының ескіруі кезінде бірыңғай түрде түзілетін L12 құрылымды, наноөлшемді Al_3Sc бөлшектерін қалыптастырады. Скандий алюминиймен өлшемдері 10÷30 нм, беріктілікке оң әсер ететін Al_3Sc фазасын түзе отырып байланысады. Бұл бастапқы бұйым аққыштығының жоғарғы көрсеткішінің 30-50 % үлесін құрайды.

Ti-6Al-4V ($\alpha+\beta$)-титан құймасына скандийдің 0,3-0,5 мас.% қоспасын қосу 850°C температурасында сығылуды анықтау барысында Sc₂O₃ оксидтері бөлшектерінің есебінен дислокация қозғалысы тежелетіндіктен, ($\alpha+\beta$)-облысында деформацияға қарсылықтың өсуіне әкелетіндігі белгілі болды [95]. Ti-Al-Sc жүйесінде зерттелген фазалық тепе-теңдік бойынша тәжірибелік мәліметтер жоқ деп айтуға болады. Алдыңғы тәжірибелік зерттеулер «Al-байытылған» аймаққа негізделген және Гузеймен қарастырылған болатын [109]. Al₃Sc 6 ат.%-ға дейін Ti мен Al₃Ti фазаларын ерітетіндігі және 500°C температурасында шамамен 5 ат.% Sc ерітетіндігі анықталды.

Харада и Дананд [110] доғамен балқытылған және 1200°C температурасында 2 сағат бойы біртекті фазаға ауысқан Al₃(Sc_{1-y}Ti_y) y = 0,25, 0,50, 0,75 құймаларын қарастырған болатын. Al₃Sc құрамындағы Sc атомдарының шамамен 50% Ti атомдарымен орын алмастырылатындығы және Al₃(Sc_{0.5}Ti_{0.5}) құймасының көп бөлігін Al₃Sc құрап, өте аз мөлшері Al₃Ti фазасынан тұратындығы белгілі болды. Al₃Ti құрылымының үлесі өте аз болғандықтан анықталмайды. Бір фазалық Al₃(Sc_{0.25}Ti_{0.75}) құймасында Al₃Ti фазасының 4,7 ат.% шамасындағы бөлігін Sc құрайтындығы анықталды. Құймадағы Al₃(Ti, Sc) фазасының параметрлері белгілі болғанымен, тор параметрлері бойынша Ti үлесін анықтау күрделі мәселе болып келеді.

Ван Дален мен басқа ғалымдар [111] 300°C температурасында бапталған үш компонентті Al-0,06Sc-0,06Ti (ат.%) диаграммасын зерттеген. Al₃Sc тұнбалары Ti атомдарының өте кішкентай үлесін еріткендігі белгілі болды. Құймаларды 24 сағат бойы ұстағанда Al₃Sc тұнбаларындағы Ti үлесі шамамен 0,7 ат.% мәніне, 96 сағат бойы ұсталғанда 0,9 ат.% Ti мәніне жуықтаған. Дален мен басқалар кейінгі жұмыстарында [97] 300°C кезінде 16 тәулік бойы ұсталғанда Al₃Sc тұнбалары 1,5 ат.% Ti еріткендігі, ал 64 тәулік бойында ол көрсеткіш 1,75 ат.% Ti көрсеткішіне жеткендігін мәлімдеді. 300°C 1 тәулік пен 400°C 5 тәулік бойы титанның үлесі 2,5 ат.%-ға көтерілген. Үш компонентті фазалық диаграммаларды Ван Дален мен басқа ғалымдар зерттеп [97], Al-0.06Sc-0.06Ti құймасы 300°C температурасында (Al) + Al₃(Sc,Ti) + Al₃Ti үш фазалар облысында орналасатынын және 350°C кезінде Al₃Ti өте аз мөлшерде еритіндігін көрсетті.

4 суретте 500 және 300°C температураларындағы Al-Sc-Ti жүйесіндегі (Al), Al₃Sc мен Al₃Ti арасындағы фазалық тепе-теңдіктер көрсетілген. Мұнда алдыңғы Гузейдің жұмыстарына қарағанда Al₃Ti фазасындағы Sc ерігіштігі едәуір мөлшерде азайған [109].



4 сурет - Ti-Al-Sc жүйесіндегі Al-байытылған фазалық тепе-теңдіктер:
Түзу сызық 500°C кезінде; пунктир сызығы 300°C кезінде [109]

Соңғы заманауи алюминийлитий құймаларының көбісінің құрамында материалдардың коррозияға тұрақтылығын арттыратын скандий элементі болады. Скандий мен басқа СЖМ алюминий құймаларында қайта кристалдану процестерін тиімді түрде болдырмайды. Аздаған мөлшердегі СЖМ құймалардың дәндерінің орташа өлшемін азайтып, ал басқа элементтер құймаларында қайта кристалданбаған құрылымды сол күйінде қалдыруға көмектеседі.

Балқыма кезінде металдарды рафинирлеп авиациялық ГТҚ даярлауда құймаларды алумен қатар, СЖМ (иттрий, скандий) микролегирлеу әдісі – ыстыққа берік құймалардың құйылған қасиеттерін арттыратын, тиімділігі одан кем емес технологиялық әдіс. Конструкциялық материалдарды микролегирлеуге жұмсалатын СЖМ мөлшері соншалықты көп емес (10% дейін), бірақ оларды қолданбаса қажетті қасиеттерге ие бұйымдар алу мен олардың қасиеттерін тиімді түрде арттыру мүмкін емес.

[94] жұмыста γ -титан алюминидтерін скандиймен легирлеу термотұрақтылықты арттыратындығы, матрица мен қатайтатын фазалар арасында когерентті байланыспен, дисперсиямен нығайған құрылымның түзілуі мен беріктілігінің жоғарылайтындығы анықталды. Осылайша, температураның кең аумағында беріктілік қасиеттерінің артуы байқалады. Скандийдің әсері Ti:Al термодинамикалық активтілік қатынасының құйманың бетінде алюминий оксидінің түзілуіне қарай бағытталаындығына негізделген. Нәтижесінде алюминий құйманың ішкі қабаттарында оксидтер түзілмейді.

Құйылған ыстыққа берік құймаларда СЖМ легирлеуші қосындылары екі түрлі рөл атқаратындығы белгілі. Біріншіден, СЖМ реакцияға түсу белсенділігі жоғары болғандықтан, олар оттегі мен күкірттің қоспаларымен қиын балқытын қосылыстар түзіп кері әсерін жояды да, тиімді рафинирлеуші қоспалар болып табылады. Екіншіден, олар беттік активті заттар секілді фазааралық беттерде (дәндер шекарасы, блоктар шекарасы, (γ/γ') -фазаларының фазааралық шекаралары мен т.б.) орналасып, осы беттерді қатайтып олардағы диффузиялық құбылыстардың жылдамдығын төмендетеді және дәндердің шекараларының катаюына үлесін қосады. Яғни СЖМ құймалардың құрылымының сақталуына қолайлы жағдай жасап, олардың біртектілігін арттырады, құймалардың қасиеттеріне кері әсер ететін түзінділердің (ТПУ фазалары, μ -фазалары және т.б.) түзілуіне жол бермейді. СЖМ жан-жақты әсері қазіргі құймалардың көрсеткіштерін біршама арттыруға және көптеген сипаттамаларға ие жаңа құймаларды даярлауға мүмкіндік береді.

[96] жұмыста құрамында Sc бар және Sc жоқ Ti-Al негізіндегі екі құйманың микроқұрылымы мен беріктілігі зерттелген. Скандийдің аздаған мөлшері (0,4 ат.% Sc) дуплексті немесе толық пластиналық құрылымға ие Ti-Al және Ti-48Al негізіндегі құймалардың аққыштығының жоғарғы температуралық шегін едәуір арттыратындығы анықталды. Кристалдардағы аздаған Sc мөлшері $Ti_3(Al, Sc)$ күйінде болады. $Ti_3(Al, Sc)$ тұнуы ламеляраралық және дислокациялық сырғанауға кедергі келтіріп, Sc бар Ti-Al құймаларының аққыштығының шекті мәніне тура келеді.

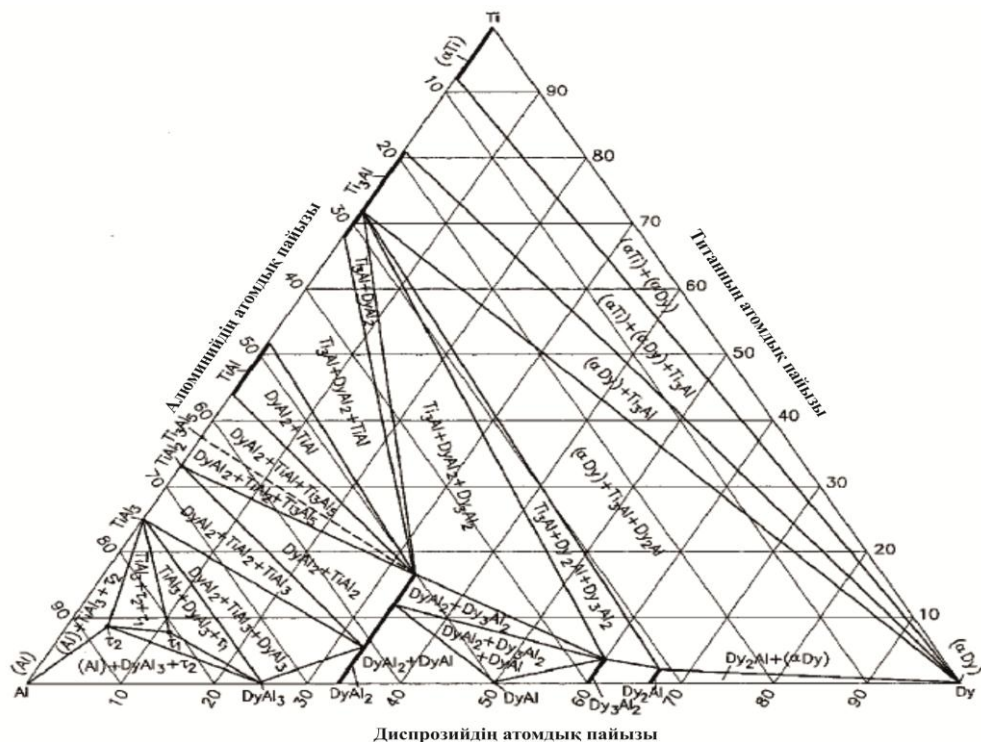
[97] алюминий құймаларының матрицасының торымен құрылымдық және өлшемдік жоғары сәйкестікті қамтамасыз ететін $L1_2$ типті кубтік торға ие $Al_3(Sc_{1-x}Ti_x)$ алюминидтері бар үш компоненттік Al-Sc-Ti құймалары алынды. $Al_3(Sc_{1-x}Ti_x)$ алюминидтерінде Sc титанды 50 ат.%-ға дейін алмастырады. Sc мен Ti-ның атомдық үлестерінің қатынасы бірден төмен Al-Sc-Ti лигатураларында кубтік $L1_2$ және тетрагональді DO_{22} тордың екі типіне ие алюминидтер түзіледі.

300 мен $450^\circ C$ аралығында дәндері ірі Al-0.06ат.% Sc-0.06ат.% Ti құймаларындағы наноөлшемді, когерентті $Al_3(Sc_{1-x}Ti_x)$ ($L1_2$ құрылым) кристаллиттерді зерттеу үшін үшөлшемді атомды-зондты томография, жарық түсіруші электронды микроскопия мен микроқаттылық қолданылды. $300^\circ C$ кезінде скандийдің көп атомдары бір тәулік ішінде фазалар түзсе, титан атомдары 64 тәулік бойы матрицада қатты ерітінді күйінде қалып, орташа құрамы $Al_3(Sc_{0,94}Ti_{0,06})$ болатын тұнбалардың пайда болуына әкелді. Титан тұнбалардың үлкею жылдамдығының төмендеуіне қолайлы болғанымен, Al-0.06ат.%Sc бинарлы құймасына қарағанда титанның мардымсыз бөлігі ғана скандиймен алмастырылатындықтан, қаттылықтың аздап артуына ғана әкеледі [97].

Ti-Al-Dy үшкомпонентті жүйесі

Бастапқы металдарының тазалығы $>99,9\%$, 140 құйма үлгілерін оттегі атмосферасында доғалық пеште балқытқан [113]. $500^\circ C$ кезінде 170 сағат

мерзімінде әбден күйдірген соң, үлгілерді мұзды су қоспасында суытқан. Фазалық тепе-теңдіктер электронды микроскопия және рентген ұнтақты дифракция әдістерімен зерттелген (5 сурет). 500°C кезінде $Dy_6Ti_4Al_{43}$ (t1) мен $DyTi_2Al_{20}$ (t2) екі тұрақты фазалардың болуы мүмкін. Dy_2Al , Dy_3Al_2 және $DyAl_2$ сәйкесінше 2,1, 3,6 және 16,5 ат.% Тi ерітеді. Тi-Al фазасындағы Dy ерігіштігі 1 ат.%-дан төмен [113], онда 1000°C температурасында изотермиялық қисықтың бір бөлігі көрсетілген.



5 сурет - 500°C кезіндегі Ti-Al-Dy изотермиялық бөлігі [113]
Үшбұрыштар айналасындағы жіңішке екі фазалы облыстар

BT15 псевдо- β титан құймасына 0,1 мас.% мөлшеріндегі Dy енгізгенде жаймалардың қақталу жағдайындағы орташа ұзаруы 12-ден 22% артса, ал (0,02-0,1) мас.% мөлшеріндегі Y қосқанда серпімділіктің екі есе артуы орын алды. Иттрий және диспрозиймен модифицирлеу 750°C температурасында 1 сағат бойы ұстау процесінде BT15 құймасының тотығуын 1,5-2 есе төмендетеді [98].

[99] жұмыста интерметаллдік β -қатаятын γ -TiAl құйманың микроқұрылымы мен сығуға қатысты механикалық қасиеттеріне диспрозиймен легирлеудің әсері зерттелген. Ti-45Al-6(Nb,Mo)-0,2V құймасын 1 ат.% диспрозиймен легирлеу материалдың фазалық құрамының ауысуына әкелетіндігі белгілі болды: құймада бастапқы γ , α_2 және β (B2)-фазаларынан бөлек $DyAl_2$ фазасы табылды. Диспрозий құрамдас құймалардың құрамында Dy_2O_3 оксидтік бөлшектері анықталды. Диспрозиймен легирленген құймалар жоғары температураларда өңделген күйінде құрамында диспрозий жоқ құймалармен салыстырғанда, бөлме температурасында беріктілік пен серпімділіктің жоғары көрсеткіштеріне ие болады.

Акашев және басқа ғалымдар эллипсометрия әдісімен [114] СЖМ кішкене мөлшерін қосқанда (1-2,5 ат.%) оксидті қабыршақтың енінің қалыңдығы өсетіндігін анықтаған.

Ti-Al-Y үшкомпонентті жүйесі

Алюминий үшін тиімді СЖМ бірі иттрий болып табылады [115]. Оның алюминийге әсері қазіргі уақытта толық зерттеліп бітпесе де, ол алюминиймен дисперсті фазалар түзе отырып қайта кристалдануға кедергі болатындығы белгілі. Иттрийдің нығаюға әсерін зерттеу барысында иттрий титан мен оның құймаларының жақсы нығайтқыш компоненті болатындығы анықталды. 0,5 ат.% мөлшеріндегі Y қосқанда бөлме температурасында титанның беріктілігі біршама артады. Құрамында 10 ат.% Y бар құйманың беріктілік қасиеттері жоғары көрсеткіштерге ие болады. Мұндай құйма 400⁰C температурасынан жоғары температураларда өтетін процестерде қолдануға жарамды. 0,3 ат.% Y қосындысы 20 мен 300⁰C кезіндегі беріктіліктің шегін арттырады. Құймалардың микроқұрылымын зерттей келе, иттрийдің әсері оның модифицирлеуші әрекеті мен эвтетиканың балқу температурасының жоғарылауына негізделген екені анықталды. Иттрий және басқа СЖМ қосқанда құйманың негізінің бірден ұсақталатындығы жалпылама белгілі.

Y сияқты СЖМ физикалық және химиялық қасиеттері өзгеше болғандықтан, балқытылған құймаларға оң әсер ететіндігі белгілі. Алуан түрлі құймаларға Y әсерін зерттеу мақсатында көптеген тәжірибелер жүргізілді [116-118].

Термонығайтып өңдеу барысында түзілетін Ti-Al-V-Cr-Zr-Sn жүйесі псевдо-β (BT35 типті) титан құймасының құрылымы мен фазалық құрамына иттрийдің микробөлшектерін қосудың әсерін зерттеу барысында, Y₂O₃ бөлшектерінің түзілуі есебінен жүретін ыдырау процестерін жылдамдататын оттегі бойынша рафинирлеу – ескіру процесінде нығаю эффектісінің төмендеуіне әкелетіндігін көрсетті [100].

BT18Y псевдо-α титан құймасын иттрий қосындыларымен қосымша легирлеу жоғары температураларда ұсталу кезінде β-фазасының дәндерінің өсуін болдырмайды. Ол иттрийдің β-шекараларды байытатын горофильді қасиеттерінің салдарынан орын алса, ал хром мен гафний қосындылары ешқандай модифицирлеуші әрекет етпейді [101]. Медициналық қолданысқа бағытталған TNTZ (Ti-29Nb-13Ta-4,6Zr) β-құймасына СЖМ микро өлшемді қоспаларын (0,1 мас.% Y дейін) қосу Y₂O₃ оксидтерінің түзілуі есебінен дисперстік нығаюдың артып, құймалардың аққыштыққа қарсылығын арттырды. 0,1 мас.% мөлшеріндегі Y легирлеу серпімділік модулін өзгертпей, аққыштық шегін 11% арттырса, ал Y үлесін 0,2 мас.%-дан жоғары мөлшерде қосу қасиеттердің нашарлауына әкеледі [102, 103].

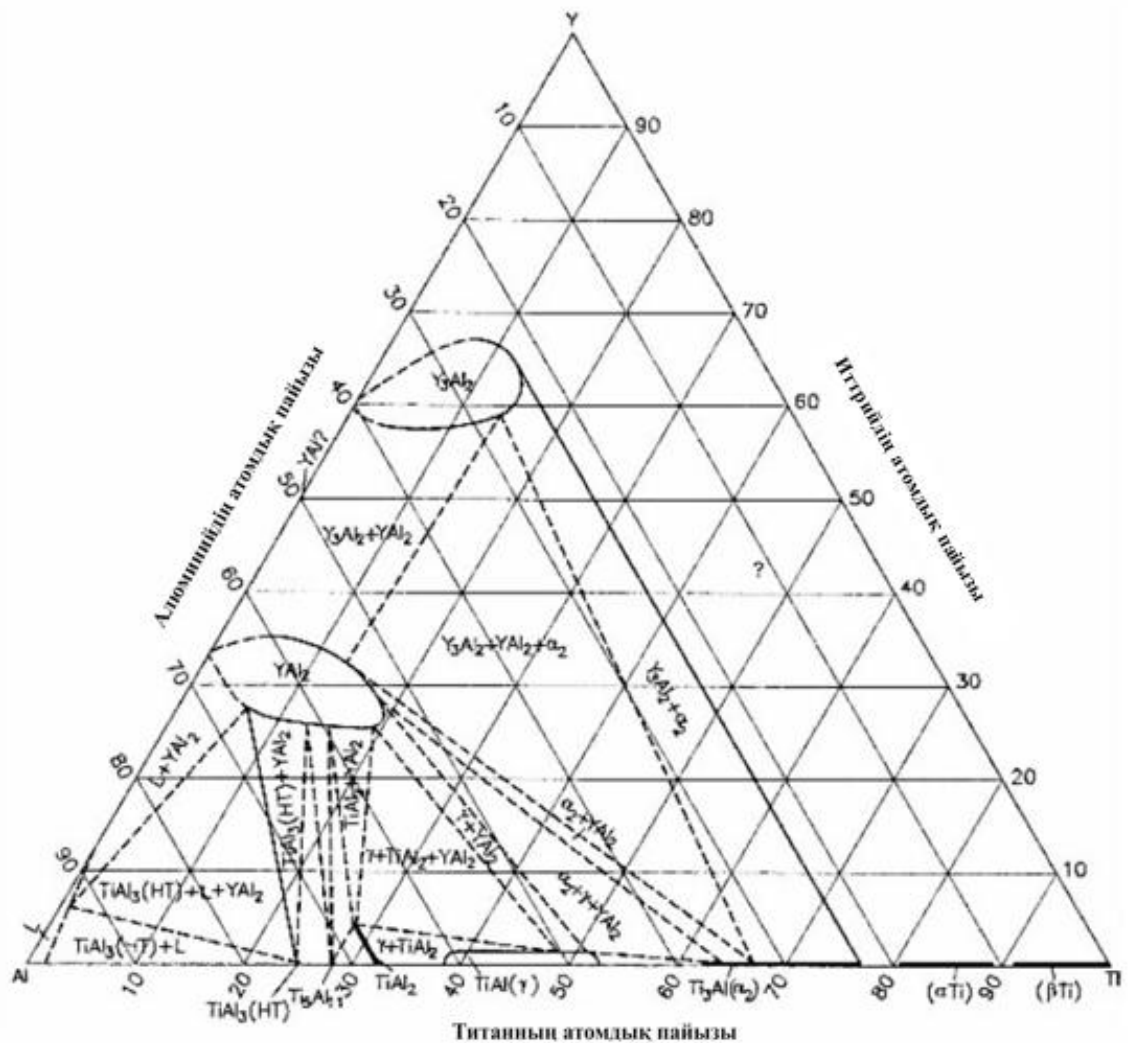
Ti-45Al-5Nb-0.3Y гамма-құймасының деформацияланғыштығының артуы микроөлшемді иттрий бөлшектерінің қатысымен материалдың құрылымында анағұрлым жіңішке пластинкалы бағаналардың пайда болуымен түсіндіріледі. Нәтижесінде деформацияға тұрақтылық пен деформацияның активация

энергиясының төмендеуімен (Ti-45Al-5Nb және Ti-45Al-5Nb-0.3Y құймалары үшін сәйкесінше 448,6 және 399,5 кДж/моль), динамикалық қайта кристалдану процестерінің жылдамдауына байланысты деформацияға ұшырау ықтималдығы артады [105]. Осыған ұқсас мәліметтер Ti-43Al-9V гамма-құймасы үшін де алынған [96]: 0,3 ат.% мөлшеріндегі Y енгізу біріншілік β -дәндерінің өлшемдері мен α_2/γ -ламелдерінің енінің кішіреюіне, деформацияға қарсылық мәнінің құлдырауына және қаттылық пен серпімділік көрсеткіштерінің жоғарылауына әкелді.

[106] жұмыста Ti-45Al-8Nb гамма-құймасын 900°C кезінде ұзақ уақыт бойы изотермиялық және циклді тотықтыруға 0,1-ден 1,0 ат.% -ға дейінгі Y мөлшерінің әсерін зерттеген. Нәтижелер бойынша аталған мөлшерде Y легирлеу екі типтің де, яғни изотермиялық және циклдіктің тотығуға тұрақтылығын жоғарылататындығын анықтады. Изотермиялық жағдайда ұстағанда құрамында СЖМ жоқ құймаға қарағанда 0,3 ат.% Y қосу оксидтік беттің жіңішке болуына себеп болған. Сонымен қатар, иттрийді қосу үлгінің беткі қабатында TiO₂ төменгі қабатының қабысуы мен Al₂O₃ қорғаныш қабатының енінің артуына әкелген. Құрамында 0,1 ат.% Y бар құйманы циклді қыздырғанда бетінде түзілетін қақ әдеттегідей емес, қатпарлы құрылымға ие болады, ал «қақ-негізгі металл» шекарасында оксидтік ұстағыштар түзіледі. Оксидтік ұстағыштар қабыршақтың жабысуына негіз болып, сол арқылы тотығуға тұрақтылықты 1,6 есе арттырған. Иттрийдің үлесі 0,3 ат.%-дан астам болғанда ыстыққа төзімділік күрт төмендейді.

Y қосу интерметалдық TiAl құймасының құрылымының дәндерінің жақсаруына себеп болып, оның механикалық сипаттамаларын арттырады [119]. Li және басқалар [120] жұмыста лазермен капталған Al/V4C/Y композиционды материалдардың микроқұрылымы, микроқаттылық пен шытынауға деген бейімділігіне Y әсерін зерттеген. Нәтижесінде Y жабындыда тұрақты дербес күйінде емес, Y₂O₃ фазасы түрінде жүретіндігі белгілі болды. Дәнді қайта өңдеп қосымша нығайтулардың санын арттырғандықтан, Y құрамдас жабындылар құрамында Y жоқ жабындыларға қарағанда микроқаттылықтың едәуір жоғарылайтындығын, шытынауға деген бейімділіктің төмендейтіндігін көрсетті.

Бастапқы металдардың тазалығы >99,8% [121] құйманың балқытылған композициялары 1000°C кезінде 150 сағат бойы жасатылды. Фазалық тепе-теңдіктер металлография, электронды зондты микросараптама және диффузионды қабықша техникасымен зерттелді. 1000°C кезіндегі изотермиялық кескін [121], 6 суретте көрініп тұрғандай, екі фазалық облыстардың бар екендігін нақтылап отыр. YAl₂ мен Y₃Al₂ негізіндегі үштік фазалар шамамен 20 және 15 ат.% дейінгі Ti мөлшерін ерітеді. Олардың аумағы үштік облыста бинарлы қосылыстың белгіленген құрамынан бастап әрі қарай созылады (6 сурет). TiAl (γ) мен TiAl₂ сәйкесінше 1,25 және 4,2 ат.% Y мөлшерін ерітеді.

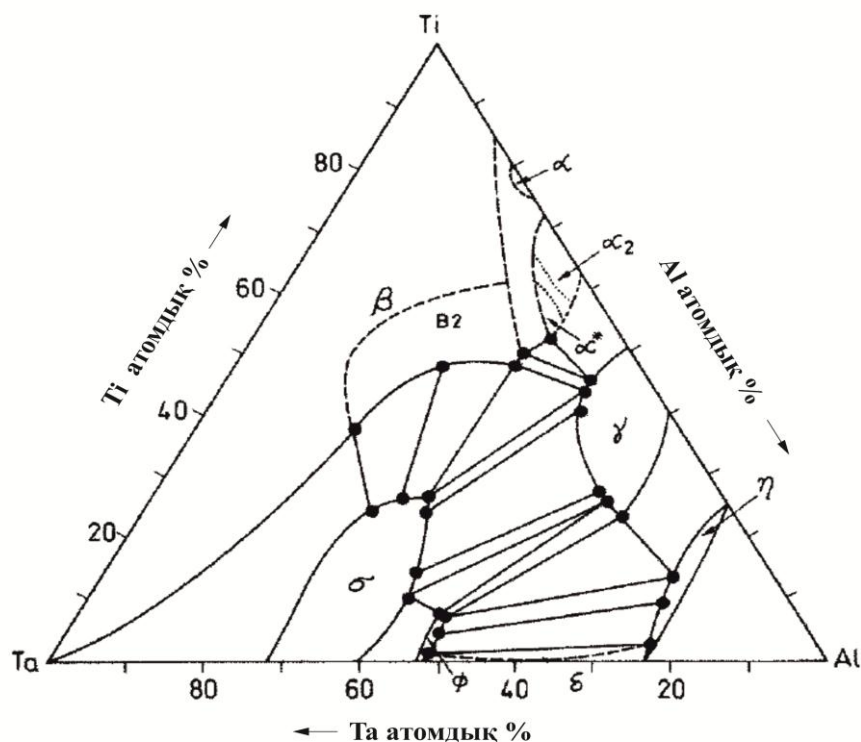


6 сурет - Ti-Al-Y 1000°C кезіндегі жекешелей изотермиялық кескіні [121]

Қазіргі таңда СЖМ көп жағдайда лазерлі балқыма қаптамасы секілді металдық материалдардың беттік қабаттарын модификациялау әдістерінде қолданылады. Лазерлі балқыма титан құймаларының беттік қабаттын модификациялаушы әдіс ретінде тозуға төзімділігі жақсартылған, тотығуға тұрақтылығы жоғары және биосәйкестілігі жақсы жабындылар алу үшін қолданылады. Y және оның оксидтері секілді элементтер лазерлі қабыршаққа отырғызылды [98, 100, 101]. Y және оның оксидтері құймалардың құрылымын үш механизм арқылы күшейте алады. Біріншісі, адсорбционды эффект күші есебінен беттік активті заттар секілді туынды түзілуінің критикалық энергиясын азайта отырып, кристалдық фазалардың шекарасында оңай шоғырланады. Екіншіден, Y атомдары дәндердің шекараларында орналасуға бейім болып келеді де, дәндердің шекарасы қозғалыс барысында ауысқанда қайта көшіру эффектісін тудыруы мүмкін. Үшіншіден, қайта балқытылған Y оксидтері ядролар секілді әрекет етіп, туынды түзілу жылдамдығының артуына оң әсерін береді.

Ti-Al-Ta үшкомпонентті ж үйесі

Құйманың көлемді үлгілері мен диффузионды будың тәжірибелік зерттеулеріне негізделген 1100°C кезіндегі Ti-Al-Ta жүйесінің изотермиялық кескіні 7 суретте көрсетілген [123].



7 сурет - 1100°C кезіндегі Ti-Al-Ta жүйесінің изотермиялық кескіні [123]

7 суретте β , B2, α_2 , γ , δ және η фазаларының үш фазалық облыстардағы жоғарғы ерігіштігі көрсетілген. α , δ және ϕ (TaAl) секілді фазалардың осы температурадағы ерігіштігі жоғарыда аталған фазаларға қарағанда төменірек. 7 суреттегі өзара байланысқан үшбұрыштар келесідей үш фазалық тепе-теңдікті көрсетеді: $\alpha_2 + B2 + \gamma$; $\eta + \gamma + \phi$; $\phi + \delta + \gamma$; $\delta + \gamma + \phi$; және $\delta + B2 + \gamma$. $\phi + \gamma$ екі фазалық облысы $\eta + \gamma + \phi$ және $\gamma + \delta + \phi$ үш фазалық облыстарының арасында жатады. Сол секілді, $\delta + \phi$ екі фазалық облыс осы облыстың үлгілерімен бекітілген байланыстырушы сызықтармен емес, басқа фазалық облыстардың шекарасымен анықталады. $\delta + \phi$ фазалық облысы Al-Ta бинарлы жүйесі және $\phi + \gamma + \delta$ үш фазалық облыспен шектелген. B2 + γ екі фазалық аумақ $\delta + \gamma + B2$ және $\gamma + B2 + \alpha_2$ үш фазалық облыстарының арасында жатады. $\gamma + \alpha_2$, β (B2) + α_2 , $\beta + \alpha_2 + \alpha$, $\alpha_2 + \alpha$ немесе $\beta + \alpha$ фазалық облыстарына қатысты мәліметтердің көпшілігі көлемді диффузионды булардан алынды. Нәтижелер α_2 фазасы үштік жүйеге таралатынын көрсетсе, ал α фазасы үштік жүйеде шекті түрде ғана ериді.

Фазалық тепе-теңдік зерттеулері [123] 7 суретте көрсетілгендей Ti-25Al-25Ta құрамының жанында үштік фазаның (B2) бар екендігін көрсетті. 7 суреттен көрініп тұрғандай, B2 фазасы Ti-30Al-20Ta құрамына дейін таралатыны белгілі болды. ТЭМ анализінен үштік фаза bcc, B2 реттіліктеріне ие болатындығы анықталды.

$\alpha+\gamma$ және $\alpha_2+\gamma$ екі фазалық облыстардың фазалық шекараларын зерттеу 7 суретте алдын ала α^* ретінде белгіленген [123] және шамамен Ti_4Al_3Ta құрамына ие арал тәрізді облыстың анықталуына әкелді. Жеке тәжірибелерге келетін болсақ, α^* фазасының бар екендігі туралы дәлелдер жоқ. Бірақ мәліметтер жаңа бірфазалы облыстың пайда болуы жөнінде хабарлайды. α^* фазасы тек шыныққан көлемді үлгілерде ғана емес, кейбір диффузионды буларда да түзілген.

1.4 Ti-Al-CЖМ жүйесі құймаларының қолданылуы

Заманауи ГТҚ жұмыс температураларын жоғарылату қозғалтқыш құрылғыларына қапталатын ыстыққа төзімді және жылудан қорғайтын жабындыларды қолдануға негізделген. Ыстыққа төзімді жабындыларды ионды-плазмалы қаптау әдісімен алады [125, 126]. Бұл әдісте иттрий кеңінен қолданылады. Ыстыққа төзімді жабындылардың құрамында иттрийдің болуы күрекшелер жоғары температуралар облысында (1000-1150°C) жұмыс істегенде түзілетін жабындымен күрекшенің термоциклирленуі кезіндегі қорғаныштық оксидтік қабыршақтың адгезиясының артуына жәрдем етеді.

Соңғы онжылдықтарда жаңа дәуір құймаларын жасақтауда сирек жер металдары маңызды рөл атқаруда. Мысалы, ыстыққа төзімді конструкционды жайма титан құймаларын жасақтау барысында гадолиний беттік активті элемент ретінде қатысады [85, 98].

Сондай-ақ, псевдо- α -құймаларына жататын, бірақ микролегирлеуші және модифицирлеуші элемент ретінде гадолиний қоспалары қолданылатын VT38 ыстыққа берік конструкционды титан құймасы БАМИ-да жасақталған. VT38 құймасы 500 және 600 °C температура мәндерінде механикалық қасиеттерінің көрсеткіштері бойынша ресейлік ең озық VT20 құймасынан 40-50%-ға асып түседі. Жаймалардың қалыңдығы 0,8 мм емес 3 мм құрап, конструкциялардың салмақ бойынша тиімділігі 4 есе артқан. VT38 құймасын 600°C температура мәніне дейін қолданылатын конструкционды мұрындық конустарында, қаптамаларда, басқару рөлдері мен ұшақтың басқа да планер модульдерінде, құрастырмалы қозғалғыштар мен ғарыштық аппараттарда, композиционды материалдар мен конструкцияларда кеңінен қолдануға болады.

Алюминий құймаларының жұмыс барысындағы сипаттамаларына скандийдің әсерін зерттей келе, скандийдің микроқосындыларымен модифицирленген жаңа заманауи құймалар қатары өңделді. Аталған құймалар буыны сызатқа беріктіліктің жоғары көрсеткіштерімен қоса беріктіліктің анағұрлым жоғарғы көрсеткіштеріне ие болған. Бұл мұндай құймаларды ұшақтың корпусы мен қанаттарының элементтерін құрастыруда негізгі материал ретінде қолдануға болатындығын білдіреді.

Болашақта деформацияланатын алюминий құймаларын жақсарту мақсатында әуе техникасының жеңіл пісірілген құрастырылымдарын өңдеу үшін қазіргі таңда қолданыста жүрген құймалар негізіндегі конструкция тектес элементтердің прототипін пісіруді қолданып даярлау бойынша зерттеулер жүргізіледі [126].

Титанның интерметалдық қосылыстарынан жасалған ыстыққа берік келетін құймалардың механикалық қасиеттерін, соның ішінде ыстыққа беріктілігін арттырудың анағұрлым тиімді әдісі – сирек жер металдарымен микролегирлеу болып табылады [87]. Жоғарыда айтылған мысалдар ұшақтың құрастырылымдарына қажетті материалдарды өндіру барысында сирек жер металдары аса маңызды рөл атқаратындығын аңғартады. Ұшақтар планерінің аэродинамикалық көрсеткіштерін жақсарту мен тиімділігін едәуір арттыру үшін көп жағдайларда перспективті композиционды материалдарды қолданады.

1.5 Металдар (СМ мен СЖМ) гидридтері, олардың негізіндегі құймаларды алу технологиясы және олардың практикада қолданылуы

Қазіргі уақытта металдар гидридтерін алудың тікелей синтез сияқты бұрыннан белгілі әдістері, гидридтер мен олардың туындыларын ерітінділердегі немесе металдар тұздарымен химиялық әрекеттестіріп алу секілді бірнеше жолдары бар [127, 128]. Электрохимиялық, пироликалық, плазмалық, ионды бомбардировка, жоғарғы қысымдардағы синтез, өздігінен тұтанатын жоғары температуралық синтез секілді т.б. әдістер бар [119].

Қазіргі күнде гидридтер алудың басты әдісі ретінде металл мен газ тәріздес сутекті тікелей әрекеттестіру әдісі қолданылады [127]. Реакция екі фазалы жүйеде өтетіндіктен, үрдіс гетерогенді тепе-теңдіктің ережелеріне бағынады. Қысым, температура, уақыт секілді басты көрсеткіштерден бөлек, метал гидридтерін алу процесі көптеген шарттарға тәуелді. [127,130-136] жұмыстарда сутек пен металл арасындағы әрекеттесуді физикалық химия тұрғысынан қарастырып, сутек – металл әрекеттесу табиғаты, адсорбция, рекомбинация, химиялық байланыс тұрақтылығы теориялары түсіндірілген, гидридтердің химиялық және физикалық қасиеттері алдын ала болжанған. Металдар гидридтерін өндіру технологиясын құрастыру кезінде алынатын гидридтердің қасиеттеріне едәуір әсер ететін арнайы факторларды қарастырған жөн [127-136]:

- 1) металдағы қоспалардың бар болуы;
- 2) металдың беттік қабатының химиялық құрамы (оксидтік және нитридтік қабыршақтар, т.б.);
- 3) сутектің тазалық дәрежесі;
- 4) гидрленетін металдың күйі (ұнтақ, бөлшектенген, көлемді бұйымдар, сұйықтық);
- 5) алдын ала және кейінгі термоөңдеуден өткізу.

Көп жағдайларда ауыспалы металдарды тікелей гидрлейді де шығым 100% құрайды, алайда өнімнің химиялық құрамы стехиометрияға жетпейді [107]. Гидридтерді алудың жақсы жетілдірілмеген әдістеріне тотықтарды немесе тұздарды белсенді металдармен я болмаса олардың гидридтерімен тотықсыздандыру, гидридтерді электролитикалық жолмен алу және органикалық еріткіштерден бөліп алу әдістері жатады [133].

Титан, цирконий, ванадий, ниобий және т.б ауыспалы металл гидридтерін осы металл тотықтарын металдық кальций, магний немесе олардың

гидридтерімен тотықсыздандыру арқылы алады. Негізгі тотықсыздандырушы агент бу секілді күйдегі реакцияда ұсталынатын металл болады; сутек тотықсыздандыру үрдісінің жылдамдығын арттырып, өнімнің тотығуын болдырмайды. Бұл үрдіс шамамен 1000-1100⁰С температурасында тот баспайтын болаттан жасалған аппаратта жүзеге асады. Алынған гидридті әлсіз қышқыл ерітіндісімен өңдеп, тотықтардан тазартады [137].

Металды сутекпен электролиттік байыту әдісі сутекті эндотермиялық эффектісімен сіңіретін металдар үшін қолданылады. Гидридтерді электролиттік жолмен алуда ең көп зерттелгені хром гидридінің алынуы, ең аз зерттелгені – темір және басқа металдар гидридтері [132].

Фенилмагнийбромидтің эфирлі ерітінділері мен металдардың сусыз галогенидтерін әрекеттестіру арқылы алынған никель, темір, кобальт, хром, ниобий, тантал, вольфрам гидридтерінің құрамында сутегінің үлесі жоғары болатындығы анықталған. гидридтер еріткіштер не болмаса басқа да реакция өнімдері болмаған жағдайда түзілмеген, қалыпты температура жағдайында оңай ыдырап, реакцияға түсу активтілігі жоғары болған. Гидридтерді өндірудің бұл әдістемесі практикалық тұрғыда жүзеге асырылмайды. Осы жолмен алынған өнімнің химиялық құрамын анықтау қиынға соғады, себебі өнім тантал мен магний секілді бірнеше металдардың гидридтері болуы ықтимал [138, 139].

Гидридтер алудың өздігінен тұтанатын жоғары температуралық синтез әдістерінің ішінде соңғы жылдары үлкен қызығушылық тудырып жүрген бағытының бірі – металдар ұнтақтарының, құймаларының және қосылыстарының сутегіде жану процесі. ӨТЖС әдісі басқа әдістерге қарағанда энергетикалық шығындардың жоқтығымен, өнімділігінің жоғарылығымен, құрамында сутегінің үлесі көп, ал қосындыларының пайыздық үлесі аз гидридтік фазаларды алу мүмкіндігімен ерекшеленеді. ӨТЖС әдісін Мержанов А.Г. басшылығымен бірқатар ғалымдар жасақтаған. Бастапқыда зерттеулерді жүргізу үшін екі түрлі қосылыстар класы: ауыспалы металдардың (Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta) ұнтақтарының көміртегіде жануы және сол металдардан жасалған престелген үлгілердің азотта жануы таңдалды. Гидридтерге байланысты маңызды нәтижелер Армения Республикасы Ұлттық ғылым академиясының Химиялық физика институты Бейорганикалық қосылыстар синтезі мен технологиясы зертханасында алынған [133]. Ұнтақтарды алудың қарапайым жолдарына қарағанда ӨТЖС әдісі энергетикалық тиімді жолмен өтетіндігімен қатар, құрамында сутегінің пайыздық көрсеткіші өте жоғары, қоспаларсыз анағұрлым таза материал алу мүмкіндігін қамтамасыз етеді [140].

Қысымның жоғары мәндерінде гидридтерді тек зертхана жағдайларында ғана алады әрі бұл мәселе бойынша қазір көптеген ғылыми зерттеулер жүргізіліп жатыр. Жоғарғы қысым шарттарындағы зерттеулер аса жоғары стехиометриялық фазаларды зерттеуге әрі гидридтік қосылыстардың жаңа класын алуға бағытталған [141]. Сутегінің жоғары температуралық техникасы Барановский Б. мен Понятовский Е.Г. ғылыми мақалаларында келтірілген [142]. Сутегінің сығылуының жоғарылығы, тұтқырлығының төмендігі, көптеген металдар мен құймаларға қатысты агрессивтілігінің жоғарылығы сияқты

қасиеттерінің бар болуы олармен үлкен қысым және температура мәндерінде зерттеулер тобын жүргізуде кедергілер тудырады.

Тікелей байыту. Берілген әдіс гидридтерді тікелей синтездеп алуға негізделген, алу процесінің мерзімі қысқа және кинетикамен шектелетін болса, бөлшектердің бірыңғай тұтас болуы мен сызаттардың жоқтығы маңызды емес болса, тікелей байыту арқылы гидридтерді алуда процестің жүру мерзімі тек гомогенизация қажеттілігінен бөлек, бөлшектердің бүтін болып сызат түрінде дефекттердің болмауымен де анықталады [143].

Ұнтақты металлургия. Ұнтақты металлургия әдістері гидридтерді өндіру технологиясында ерекше маңызға ие. Бұл ұнтақ материалдар түріндегі синтездердің көп таралғандығымен әрі басқа әдістермен алуға мүмкін бола бермейтін, тек ұнтақ металлургия әдістемелерін әр түрлі композициялардан бұйымдарды дайындауға негізделген [130,131].

1.6 Құймаларды алудың гидридтік технологиясы

Ұнтақты металлургияның жаңадан қолданысқа ақырындап еніп жатқан әдістерінің бірі – гидридтік технология әдісі [144]. Гидридтік технология – жаңа экологиялық таза жолмен әртүрлі мақсатта қолданылатын күрделі функциональді материалдарды алу әдістемесі. Бастапқы шикізат ретінде ұнтақтар мен металл құйындылары қолданылады. Сутегі тогы қатысында қажетті гидридтер өндіріледі. Осылайша алынған гидридтер қоспасы араластырып, жоғарғы қысым жағдайында престеледі. Артынша гидридтер қоспасын таблетка формасына салып, вакуумда жандырады. Бұйымдардың механикалық қасиеттерін жақсарту үшін пісіру үрдісі барысында дегидрленуді толығымен қамтамасыз ету өте маңызды [145].

Бұл әдіс басқа әдістерге қарағанда экономикалық шығындардың аз болуымен, отқа төзімді материалдардың қолданылуымен, тазалық дәрежесі жоғары мәндерге ие материалдардың өндірілуімен айрықша ерекшеленеді [146]. Функциональді композиционды материалдар өндіруде гидридтік әдісті кеңінен пайдалануға болады және ол тиімді болып саналады.

Гидридтік әдісте жүргізілетін тәжірибелер айналымы – металдардың жоғарғы тотығу дәрежелеріндегі гидридтерін ӨТЖС әдісімен алу, компактирлеу мен дегидрлеу α - және γ - фазалы құймаларды алуға жағдай жасайды [145-147]. Бастапқы компоненттер құрамы мен өндірілген құймалардың құрылымдық ерекшеліктері арасында тікелей байланыс бар екендігі зерттелді. Гидридтік әдістемемен алынған γ фазалы құймалар басқа жоғары қысым жағдайында өндірілген құймаларға қарағанда жоғары өңдеу температураларында шыдамды келеді.

Металдар құймаларын жасақтауға қатысты зерттеулер нәтижелерінен шығатын жалпылама қорытынды: металдар құрамындағы байланыстарға қарағанда гидридтердегі химиялық байланыстар беріктілігі төмен болғандықтан, метал құймаларын гидридтерден алу процестері анағұрлым оңай жүреді.

2 ТӘЖІРИБЕЛІК БӨЛІМ

Металдар қосындыларымен легирленген Ti-Al жүйелерінің физика-химиялық қасиеттерінің перспективті болуына байланысты [163-181], атомдық құрамы келесідей үлгілер алынды: 50Ti–50Al, 49Ti–49Al–2Sc, 49Ti–49Al–2Y, 49Ti–49Al–2Dy, 49Ti–49Al–2Ta, мұндағы $\omega_{Me}=2$ ат.%. Жұмыста Ti-Al жүйесінің стандарттарын іздестіру SIESTA сыртқы қабыршағы бар USPEX бағдарламасымен толықтырылды [177, 182, 183].

2.1 Бастапқы заттар мен реактивтер

Sc, Y, Dy, Ta металдарын гидрлеуді жүргізу барысында келесідей реагенттер қолданылды: АСД-4 алюминий ұнтағы (алюминий сфералық дисперсті ұнтақ), ПТЭМ-1 титан ұнтағы (титанның электролиттік ұнтағы, ұсақ), металдық скандий, ИтМ-1 металдық иттрийі, ДиМ-1 металдық диспрозийі, металдық тантал.

2.1.1 Бастапқы металдардың сипаттамалары

1. *АСД-4 алюминий ұнтағын* құймаларды алу үшін тікелей пайдаландық. АСД-4 – құрамында 99,7% алюминий мен 0,3% қоспалары бар сфералық ұсақ дисперсті ұнтақ. Атомдық массасы 26,98 г/моль. АСД-4 ылғалдылығы <0,2%. АСД-4 жеңіл металдық жылтыры бар ашық-сұр түсті сусымалы зат болып келеді [127].

2. *ПТЭМ-1 титан ұнтағы* титан гидридін синтездеу үшін тікелей қолданылды. Ұнтақтың үйінділік тығыздығы 0,9-1,4 г/см³ аралығында болады. 200 Мпа қысым кезінде ұнтақтың тығыздығы 2,5-2,8 г/см³, 600 Мпа қысымы кезінде – 3,3-3,5 г/см³ құрайды. ПТЭМ-1 титаны 0,18 мм ұсақ фракциясы бар кара ұнтақ болып келеді [128].

3. *Металдық скандийді* скандий гидридіннің синтезі үшін тікелей пайдаландық. Элементтің атомдық массасы 44,95 г/моль. Екі түрлі кристалдық модификацияда болады: α -Sc 1336°C температурасына дейін Mg типті гексагональді торы бар тұрақты формасы, $a=3,3085$ Å, $c=5,2680$ Å, $z=2$, кеңістіктік тобы $R\bar{6}_3/mmc$, тығыздығы 2,989 г/см³; 1336 °C-тан жоғары болғанда кубтік көлемнен орталықтандырылған торы бар β -формасында болады. Балқу температурасы 1541°C, қайнау температурасы 2837°C. Скандий тазалығы 99,5%, өзіне тән сары жарқырауы бар күміс түстес жеңіл металл болып саналады. Механикалық өңдеуге оңай беріледі [129].

4. *Металдық тантал* танталдың гидридіннің синтезі үшін тікелей қолданылды. Элементтің атомдық массасы 180,94 г/моль. Торы кубтік көлемнен орталықтандырылған ($a=3,310$ Å); тығыздығы 16,65 г/м³; балқу температурасы 2014°C, қайнау температурасы шамамен 5500°C. Жақсы беріктілікке, қаттылыққа ие бола отырып, жеткілікті дәрежеде созылмалы. Тантал қорғасын сияқты солғын реңі бар сұр түсті металл болып келеді, қиын балқитын металдар класына жатады [130].

5. *ИтМ-1 металдық иттрийі* – иттрийдің гидридін синтездеу үшін тікелей қолданылды. Екі түрлі кристалдық модификацияда болады: Mg типті

гексагональді торы бар α -Y формасы, α -Fe типті кубтік көлемнен орталықтандырылған торы бар β -Y формасы, $\alpha \leftrightarrow \beta$ ауысу температурасы 1482°C . Элементтің атомдық массасы $88,81$ г/моль. Тығыздығы $4,47$ г/м³, балқу температурасы 1528°C , қайнау температурасы — шамамен 3320°C . Ашық-сұр түсті металл болып саналады, механикалық өңдеуге оңай беріледі [131].

6. *ДиМ-1 металдық диспрозий* диспрозий гидридін синтездеу үшін тікелей қолданылады. Элементтің атомдық массасы $162,50$ г/моль. Тығыздығы $8,55$ г/м³, балқу температурасы – 1412°C , қайнау температурасы – 2562°C . 1384°C -тан төмен температурада гексагональді торы бар α -Dy тұрақты болады, $a=3,593$ Å, $c=5,654$ Å, 1384°C -тан жоғары болғанда — кубтік торы бар β -Dy күйінде болады. ДиМ-1 диспрозийі тазалығы $99-99,9\%$ күміс секілді сұр түсті металл болып келеді [132].

2.1.2 Металдар гидридтерінің сипаттамасы

1. Титан құймаларын жасақтауда Ti-Al жүйесі негіз болып табылатындықтан, барлық Ti-Al-Me (Me = Sc, Y, Dy, Ta) жүйелерін алу үшін *TiH_{1,63–2,00} титан гидриді* қолданылды. Титан гидридi сұр-қара түсті ұнтақ болып келеді, морт сынғыш. Тығыздығы $3,76$ г/см³, магниттік өтімділігі $4,58 \cdot 10^{-6}$ тең. Екі түрлі кристалдық модификацияда болады: а) 37°C -тан төмен температурада тордың параметрлері $a=0,4528$ нм, $c=0,4279$ нм болатын кеңістіктік тобы *I4/mmm* тетрагональді формасы; б) 37°C -тан жоғары температурада тордың параметрлері $a=0,4454$ нм болатын кеңістіктік тобы *Fm3m*, кубтік қырынан орталықтандырылған формасы. Түзілу жылуы $27,3-29,5$ ккал/моль, ыдырау температурасы 300°C . Титан гидридi ерітіндіде бейорганкалық қышқылдармен Ti^{4+} және Ti^{3+} иондарын түзіп, сілтілермен титанаттар түзіп ыдырайды [133, 136, 138].

2. *ScH₂ скандий гидридi* Ti-Al-Sc жүйесінің құймаларын алу үшін тікелей қолданылады. Молекулалық массасы $46,95$; сутегінің үлесі $4,26$ мас.%; ақ кристалдық ұнтақ; тығыздығы $2,851$ г/см³; $a=4,783$ Å периоды бар CaF₂ типті кубтік қырынан орталықтандырылған тор; 600°C кезінде едәуір ыдырайды [133, 136].

3. *YH_n иттрий гидридтері* Ti-Al-Y жүйелерін алуда тікелей қолданылды. *YH₂*, молекулалық массасы $90,92$; сутегінің үлесі $2,20$ мас.%; қою-көк түсті зат; тығыздығы $4,29$ г/см³; $a=5,209$ Å периоды бар кубтік қырынан орталықтандырылған тор; түзілу жылуы 56 ккал/моль; 400°C -тан жоғары температурада ыдырайды; *YH₃*, молекулалық массасы $91,92$; сутегінің үлесі $3,26$ мас.%; қара ұнтақ; тығыздығы $3,94$ г/см³; $a=3,672$ Å, $c=6,599$ Å периоды бар гексагональді тығыз қапталған тор; түзілу жылуы $21,5$ ккал/моль; 300°C -тан жоғары температурада ыдырайды [137, 139, 145].

4. *TaH_{0,5–0,8} тантал гидридi* Ti-Al-Ta жүйесін алу үшін қолданылады. Сұр-қара түсті, қатты, морт сынғыш зат болып келеді. Молекулалық салмағы $181,45-181,75$; сутегінің үлесі $0,27-0,44$ мас.%; *TaH_{0,76}* үшін тығыздығы $15,1$ г/см³; $a=4,728$ Å, $b=4,778$ Å, $c=3,428$ Å периодтары бар орторомбалық тор;

TaH_{0,50} үшін түзілу жылуы 4,31 ккал/моль; 300°C температурасы мәнінде едәуір диссоциацияланады. Ыдырау температурасы – 800°C.

5. *DyH_n диспрозий гидридтері.* DyH_{1,94–2,08} гидридін Ti-Al-Dy жүйесін алу үшін пайдаландық. Қара кристалдар болып келеді, молекулалық массасы 164,44-164,58. Сутегінің үлесі 1,18-1,26 мас.%, тығыздығы 7,76 г/см³, периодының размері $a=5,201 \text{ \AA}$ қырынан орталықтандырылған тор. DyH_{2,68–3,0} – қара кристалдар, молекулалық массасы 165,18-165,50, сутегінің үлесі 1,62-1,81 мас.%, тығыздығы 7,12 г/см³, периодының өлшемдері $a=5,201 \text{ \AA}$, $c=6,560 \text{ \AA}$ гексагональді тығызқапталған тор [130,136, 138, 145, 146].

2.2 Металдар гидридтерін алудың әдістемесі

2.2.1 Металл мен метал гидридтерінің бөлшектерінің өлшемдеріне гидрлеу процесінің ұзақтылығының әсерін зерттеу

Металл мен метал гидридтерінің бөлшектерінің өлшемдеріне гидрлеу процесінің ұзақтылығының әсеріне байланысты тәжірибені келесідей бірінен соң бірі жүзеге асатын алты сатыда жүргіздік:

1 саты: титанның гидрленуі (Ti_{баст}) (ГТ-1 үлгісі).

2 саты: ГТ-1 титан гидридіннің ыдырауы (Т-1 үлгісі).

3 саты: Т-1 титанның гидрленуі (ГТ-2 үлгісі).

4 саты: ГТ-2 титан гидридіннің ыдырауы (Т-2 үлгісі).

5 саты: Т-2 титанның гидрленуі (ГТ-3 үлгісі).

6 саты: ГТ-3 титан гидридіннің ыдырауы (Т-3 үлгісі).

Әр сатыдан соң сынама алынды. Фазалық құрамы мен бөлшектердің өлшемдері анықталды.

Өлшеуді сұйық ортада диспергациялау блогы бар В ANALYSETTE 22 MicroTecplus (Fritsch GmbH, 2014, Германия) құрылғысында жүргіздік. Үлгіні айналып жүретін сұйықтығы (дисперсант) бар сәулеленуге ұшырайтын жабық контурға енгіздік.

Үлгілердегі титан мен титан гидридін ұнтақтары бөлшектерінің өлшемдері бойынша интегралды және дифференциалды түрде көлемдік таралулары 8-9 суреттерде көрсетілген.

Кеуекті денелер үшін кеуектер қалыпты жағдайда радиус бойынша таралатындықтан, таралудың интегралды қисығы кеуектердің жалпы көлемінің радиусқа тәуелділігін сипаттайды [154]:

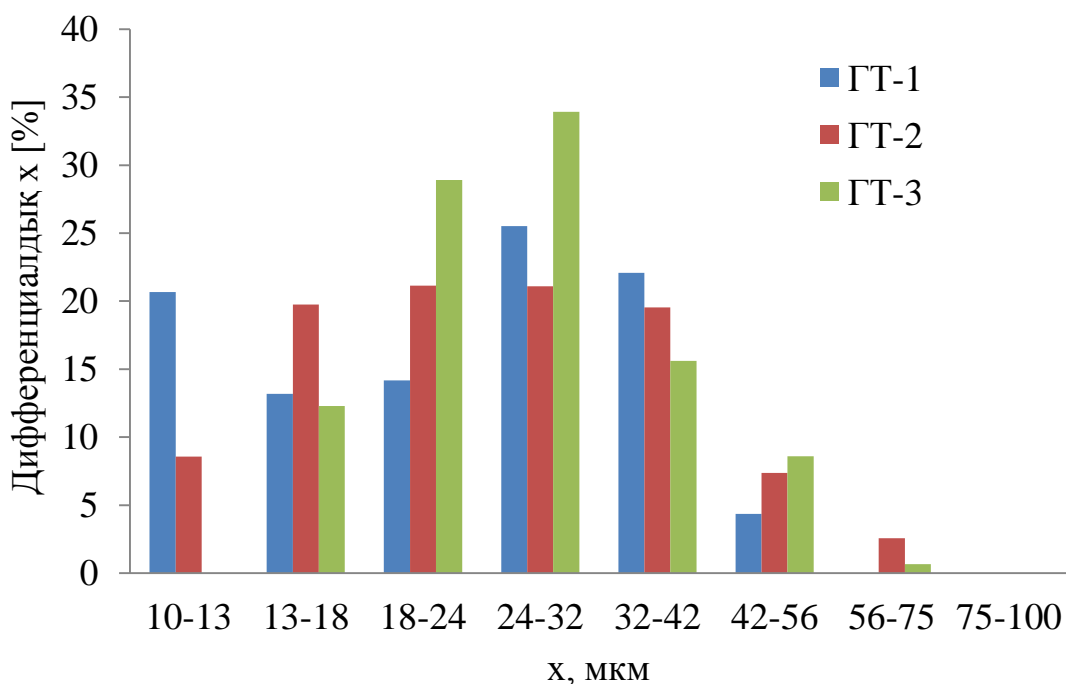
$$V_n = f(r). \quad (1)$$

r -ден $r+dr$ -ға дейінгі аралықта жататын радиусы бар кеуектердің жалпы көлемінің немесе кеуектердің көлемінің дифференциалы мынаған тең [154]:

$$dV_n = f'(r) dr. \quad (2)$$

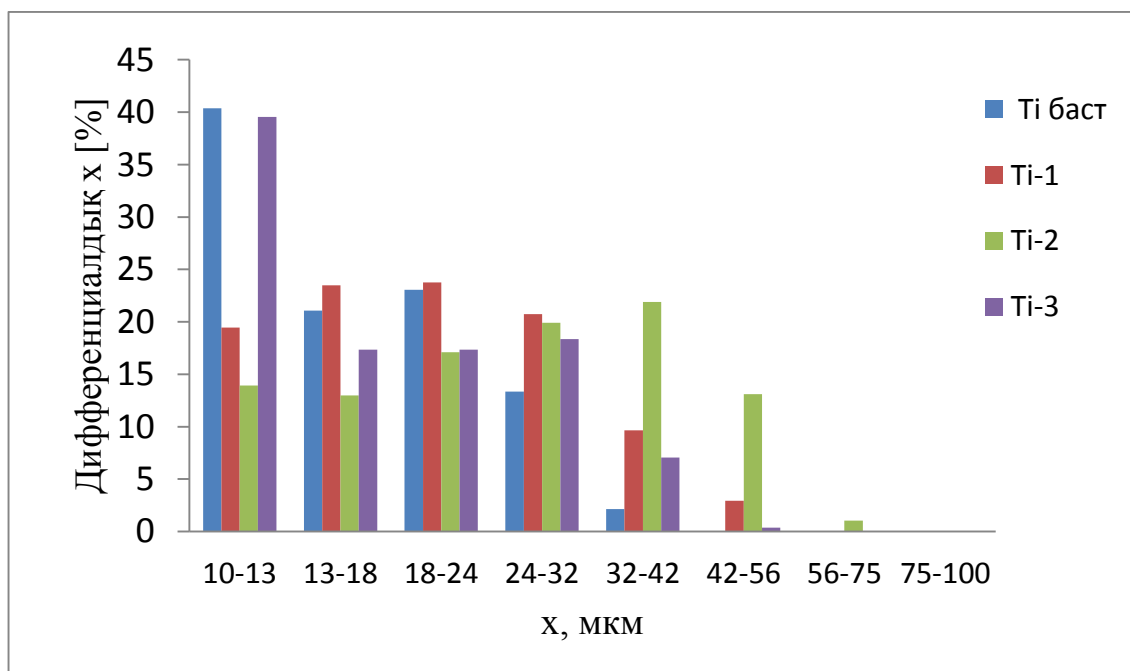
$r=0$ мен r =шексіздік аралығында осы функцияны интегралдау арқылы берілген үлгідегі немесе кеуекті дененің бірлігіндегі кеуектердің жалпы көлемін табады. Таралу қисығын тұрғызу барысында бұл кеуектердің көлемі бірлікке немесе 100% тең деп есептелінеді [155].

Титан мен титан гидридтері бөлшектерінің өлшемдері бойынша үш әр түрлі сатыларда таралу графиктері келтірілген (8 және 9 сурет)



8 сурет - Үш сатыдағы титан гидридтері бөлшектерінің өлшемдері бойынша таралуы (χ , мкм)

8 суреттегі көрсеткіштерден келесідей қорытынды шығаруға болады: титан гидридiнiң ыдырауының үш әр түрлi сатыларында бөлшектердiң орташа өлшемі 13-24 мкм аралығында болса, ал гидрлеу кезінде титанның орташа өлшемі 14-24 мкм аралығында жатады. Бұдан бөлшектердiң өлшемдері бастапқы титанмен салыстырғанда анағұрлым кiшiрейетiнi көрiнедi.



9 сурет - Үш сатыдағы титан бөлшектерінің өлшемдері бойынша таралуы (χ , мкм)

9 суреттен көрініп тұрғандай, гидрид алудың үшінші сатысының қисығы (Ti-3) кіші өлшемдер облысына ығысады. Ал гидрид алудың екінші сатысының қисығы (Ti-2), керісінше, үлкен бөлшектер облысында шоғырланады.

Ti және TiH₂ бөлшектерінің өлшемдерін өлшеу нәтижелері 3 кестеде келтірілген.

3 кесте - Ti және TiH₂ бөлшектерінің өлшемдерін өлшеудің нәтижелері

Үлгі	Өлшенетін бөлшектер саны, дана	Бөлшектер d _{max} , мкм	Бөлшектер d _{min} , мкм	S _{менш.} , м ² /г Δ=±10%	Бөлшектердің ені, Δ=±10%
Ti-1	436	56	10	0,20	1,12
Ti-2	96	64	3	0,16	1,19
Ti-3	380	38	3	0,28	1,25
ГТ-1	112	51	3	0,19	1,23
ГТ-2	268	65	10	0,16	1,18
ГТ-3	232	61	14	0,18	0,95

8 және 9 суретте келтірілген графиктерден қисықтардың сипаты гидрлеу процестерінен соң да, дегидрлеу процестерінен кейін де өзгермейтіндігі байқалып тұр. Бұл – титан гидридiнiң алыну мен ыдырау сатыларында титанның бөлшектерінің өлшемдерінде едәуір өзгерістер орын алмайтындығын көрсетеді.

2.2.2. Металдар гидридтерінің алынуы

Титан, алюминий және Sc, Y, Dy, Ta металдарының гидридтерін сәйкес металдарынан алдық. Процесті кварцты реакторда сутектің үздіксіз ағынында жүзеге асырдық. Титанның (ПТЭМ-1) және дисперстілігі 100-150 мкм алюминийдің (АСД-4) металдық ұнтағының нақты мөлшерлерін, сонымен қатар металдық Sc, Y, Dy, Ta металдарын жекелеп кварцты қайықшаға салып, температуралық-бағдарланған режимде сутегінің (99,9% сутегі) үздіксіз ағынында өтпелі пеште жандырдық. Қыздырудың режимін анықтамалық мәліметтерден алынған гидридтердің түзілу және ыдырау температуралары бойынша жүргіздік. Қыздыруды 10°С/мин жылдамдығымен 350°С температурасына дейін жүргіздік, сутегінің берілу жылдамдығы 150 мл/мин құрады. Содан соң 1°С/мин қыздыру жылдамдығымен әр металға сәйкес келетін түзілу температурасына дейін (5 кесте) ақырындап қыздыруды жүзеге асырып, соңғы температурада 1,5-нан 2 сағатқа дейін ұсталды.

4 кестеде берiктiлiгi жоғары құймаларды алу барысындағы металдардың гидрленуі мен жүйелердің дегидрлену реакциялары келтірілген [156]:

4 кесте - Металдар гидридтерінің алыну температуралары

Гидридтердің түзілу реакциялары	Гидридтердің түзілу температуралары, °С	ΔQ , кДж/моль [147]
TiH_2 $Ti + H_2 = TiH_2$	450	114,2
YH_{2-3} $Y + H_2 = YH_2$ $2Y + 3H_2 = 2YH_3$	420	234,3 89,96
TaH $2Ta + H_2 = 2TaH$	550	234,3
ScH_2 $Sc + H_2 = ScH_2$	450	209,2
DyH_{2-3} $2Dy + 3H_2 = 2DyH_3$	420	

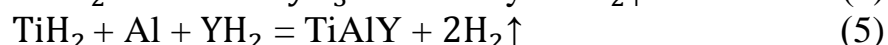
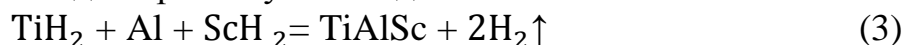
Металдармен сутегінің сіңірілу процесі бірқалыпты жүреді. 385-398 °С кезінде титан гидридіннің түзілу жағдайында сутегінің сіңірілуі жоғары температура есебінен қарқынды жүреді, бұл сутегінің қарқынды сіңірілетіндігін растайды. Сонымен қатар, сутегінің берілу жылдамдығы металл қаныққанға дейін жоғарылайды. Содан соң жылдамдық 150 мг/мин құрайды. Соңғы температурада біраз уақыт ұсталғаннан кейін, металдар гидридтерінің үлгілерін 5 °С/мин суыту жылдамдығымен бөлме температурасына дейін суыттық.

2.3 СМ мен СЖМ бар титан алюминийлік құймаларының алыну әдістемесі

1 БЛОК

1) Құйманың ат.% үлестері бойынша атомдық құрамын $Ti:Al=1:1$ эквимолярлығын ескере отырып, $Ti-Al$ жүйесінің фазалық диаграммасы арқылы анықтадық. Құйманың негізі ретінде 2 ат.% Sc , Y , Dy , Ta қосындылары бар 49Ti-49Al жүйесі алынды.

2) Үлгілердің сандық құрамы 46 бетте келтірілген. Қоспалардың сәйкес келетін құрамдарын алу үшін нақты мөлшерлердің есептелген массалары 5 кестеде келтірілген. $Ti-Al-Me$ жүйесінің құймаларын синтездеудің реакция теңдеулерін келесідей өрнектеуге болады:



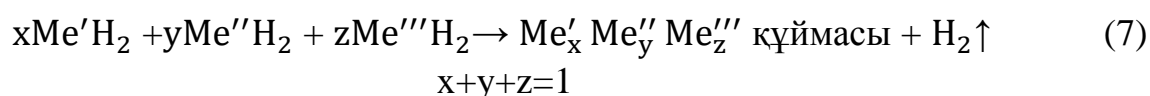
3) 5 кестеде $Ti-Al-Me$ жүйесінің таблеткаларын престоуге қажетті металдар массаларының есептеу деректері жүйенің жалпы массасы 4 г құрайды деген есеппен келтірілген.

5 кесте - Ti-Al-Me жүйесі негізіндегі таблеткаларды престоуге қажетті металдар массаларының есеп деректері

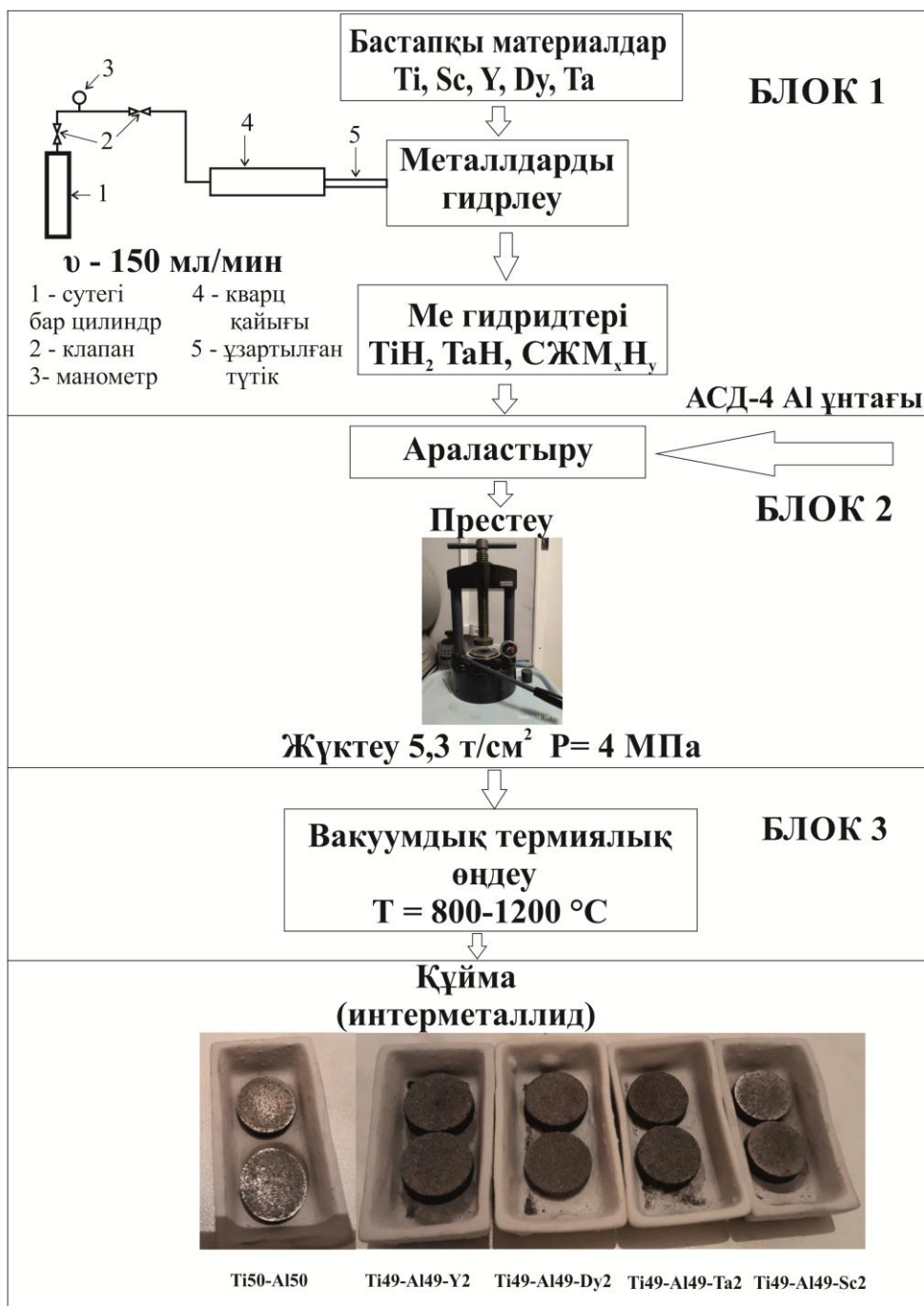
Металдар m, г	Ti	Al	Sc	Y	Dy	Ta
Атомдық құрамы, %	49	49	2	2	2	2
TiAlSc	2,56	1,44	0,09	-	-	-
TiAlY	2,44	1,37	-	0,18	-	-
TiAlDy	2,35	1,32	-	-	0,33	-
TiAlTa	2,33	1,31	-	-	-	0,36

5 кестеде құрамында титан, алюминий және сирек жер металдары бар үлгілер келтірілген, гидрлегеннен соң алдын ала дайындалған формада престедік.

4) Алынған гидридтерді алюминийдің ұсақ дисперсті ұнтағымен (бөлшектердің орташа өлшемі (115 ± 10) нм, меншікті аудан мәні (19 ± 3) м²/г, алюминийдің үлесі – $(80 \pm 0,6)$ % араластырып, 5,3 т/см² жүктемесіне дейін престедік. Дегидрлеудің процестерін шамамен келесі схема түрінде көрсетуге болады:



5) Беріктілігі жоғары титан-алюминий құймаларын алу әдістемесінің принципияльді схемасы 10 суретте келтірілген.



10 сурет - Беріктілігі жоғары титан-алюминий құймаларын алу әдістемесінің принципіальді схемасы

2 БЛОК

Дайындалған массаларды компактирлеу

Құймалардың сынамаларын дайындау үшін диаметрі (d)=13мм дөңгелек қимасы бар пресс-форманы пайдаландық. Престеу барысындағы жүктеме 5,3 тонна/см² құрады. Нәтижесінде сынама барлық құрамдар үшін үйінділік тығыздығының мәні 3 г/см³±0,2 құрайтын цилиндр түрінде болып келеді.

3 БЛОК

Қыздыру кезіндегі вакуумда күйдіру

Күйдіру үшін таблеткаларды кварцты қайықшаға орналастырып, зертханалық вакуумдық пешке салдық.

Гидридтердің компактирленген қоспасының вакуумдық пеште қыздыру процесінде Me-H байланысының ыдырауы есебінен металдардың күшті активациясы жүзеге асады. Бос байланыстар металдық компоненттердің диффузиясына және бір-бірінде өзара еруіне мүмкіндік жасайды. Сонымен қатар, гидридтер қоспасын қысымның қатысында компактирлегенде бастапқы гидридтер ұнтақтарының морт сынғыштығы жоғары болғандықтан, ұнтақтың ұсақ дисперсті бөлшектерінің тығыз механикалық әсерлесуі қамтамасыз етіледі. Мысалы, қолданылатын гидридтер ұнтақтарының кристаллиттерінің микромасштабты өлшемдері (3-65 мкм) өз кезегінде салыстырмалы төмен температураларда диффузия есебінен құймалардың түзілуіне белсенді түрде жағдай жасайды [153].

Ауаны ығыстырып шығардық, қыздыру режимін орнаттық (6 кесте).

6 кесте - Үлгілерді күйдірудегі қыздыру режимі

Режим	Температура, °С	Қыздыру жылдамдығы, °С/мин	Уақыт, сағ
Қыздыру	25-тен 400-ге дейін	5	1,25
Қыздыру	400-ден 600-ге дейін	1	3,33
Қыздыру	600-ден 1150-ге дейін	5	1,83
Ұсталу	1150	-	1
Суыту	1150-ден 25-ге дейін	5	3,75

Металдар гидридтері (Ti, Ta және СЖМ) мен Al металдық ұнтағының компактирленген қоспасын қыздырғанда, гидридтердің диссоциация температурасынан жоғары, бірақ сәйкес металдардың балқу температураларынан әлдеқайда төмен температураларда сутектің компактi шихтадан жойылуы көрiнiс табады.

2.4 Құймалардың химиялық құрамы мен құрылымды-фазалық күйін зерттеу әдістері

2.4.1. Рентгенқұрылымдық анализ

TiAl-Me (Me=Sc, Y, Dy, Ta) жүйесінің рентгенқұрылымдық және рентгенфазалық зерттеулерін сигналды сандық өңдейтін ДРОН4 – 07 құрылғысында жүргіздік. Спектрлерді 0.02° қадаммен, нүктедегі 1 сек экспозиция уақыты мен 10°–86° бұрыштық диапозонында Брегга–Бретано схемасы бойынша мыс сәулеленуде (K_{α}) алдық. Рентген түтігіндегі кернеу 30

кВ, шоқ тоғы 25 мА құрады. Фазалардың құрылымдық күйі мен сандық құрамының идентификациясы reflex көмегімен Ритвельд әдісімен жүзеге асырылды [158-161]. Ритвельд әдісінде құрылымның параметрлерінің вариациясына, рефлекстердің профильдеріне, анизотропияға, фон және т.б. тәуелді сызықты емес әдіспен интегральді (модельді) және тәжірибелік дифрактограммалардың салыстырмалы айырмашылығы минимизицияланады. Әдісте интегральді интенсивтіліктің параметрлерінің максималды мүмкін мөлшері вариацияланды. Дифрактограммаларда фондық сәулелену деңгейдің 20-лық көпмүшелігімен жуықталды. Жеке фазалардың эталондық торлардан рентгендік шағылысуының толық профильді интегральді интенсивтілігі өзіндік үйлесімді түрде бағаланды. Эталонды торлар ретінде COD базасының кристаллографиялық мәліметтері [158], сонымен қатар SIESTA интерфейсті қабыршағы бар USPEX бағдарламалық кодымен алдын ала болжанған Ti-Al жүйесінің модельді құрылымдары пайдаланылды [162]. Эволюционды кодтың көмегімен USPEX-SIESTA бағдарламасы арқылы элементтік құрамы белгілі тұрақты құрылымдар анықталады. Ол кеңістіктік топтар ішінде жүйенің энтальпиясының глобальді минимумы бар құрылымдар да анықталады. Берілген жұмыста Ti-Al жүйесінің анықталған құрылымдары сандық фазадық анализ үшін қолданылды (СФА). Толық құрылымды ақпарат негізінде анықталған құрылымдар үшін (шамамен 30) бірінші принциптерден торлардың энергияларының есептеулері жүргізілді. Барлық торлар тұрақты екендігі анықталды, және олар келесі сатыда Ритвельд әдісімен сапалық және сандық фазалық анализ үшін қолданылды. TiAl-Struct2, AlTi3-2768 шартты белгіленуі бар құймалар үшін энергия есептеулері электронды тығыздықтың градиентті псевдопотенциалы функционалы (GGA) шеңберінде жүргізілді. Кодтың детальдары жұмыста келтірілген [158]. Торлардың толық энергиясы 0 К жағдайында анықталды. Электронды күйлердің орбитальдары, бірэлектронды тығыздықтың таралуы мен негізгі күйдің энергиясының есептеулері өзіндік үйлесімдік жолымен табылды. TiAl-Struct2 атомдарының валентті электрондарының толқындық функциялары кинетикалық энергияны 330 эВ дейін қысқарту радиусымен жазық толқындар базисінде анализденді. Бұл жағдайда толық энергияның сәйкес келуі $\sim 0.5 \cdot 10^{-6}$ эВ/атом құрады. Sc, Y, Dy, Ta ендірілген атомдары бар TiAl құймаларының СФА анализі TiAl-Me (Me=Sc, Y, Dy, Ta) жүйесінде қосындылардың үлесін анықтауға мүмкіндік беретін COD базасындағы кристаллографиялық мәліметтер мен әдебиеттердің жоқтығына байланысты қиындықтармен сипатталады.

2.4.3. Растр электронды микроскопиясы

Құрылымда легірілеуші элементтердің таралуын зерттеу үшін беттік қабаттың микроқұрылымы мен морфологиясын растр электронды микроскопия (РЭМ) әдісімен анализдеу кезінде локальді деңгейде бетке жақын қабаттың сандық рентгенспектральді микроанализін жүргіздік. РЭМ-зерттеулері кері шашыраған электрондардың энергодисперсиялық және толқындисперсті микрорентгенспектральді анализдері мен дифракциясын жүргізу мүмкіндігі бар

LEO EVO 50 (Zeiss, 2007, Германия) электронды микроскопында жүргізілді. Зерттелетін үлгілердегі химиялық элементтердің таралу сипаты мен жеке фазалардың құрамын анықтау үшін S4 Pioneer рентгенфлуоресцентті спектральді анализаторын (Bruker, 2003, Германия) пайдаландық.

2.4.2. Трансмиссионды электронды микроскопия

Үлгілер микроқұрылымының электронды-микроскопиялық зерттеулері трансмиссиялық электронды микроскопия әдісімен энергодисперсионды спектральді анализін жүргізетін «JEOL» қосымшасы бар «JEM-2100F» құрылғысында 200 кВ үдеткіш кернеу жағдайында жүргізілді.

Электрондардың ағыны зерттелетін объект арқылы өтеді. Электронды микроскоптың көзге көрінетін аймағында объектіде электрондардың бірыңғай емес шашырау облыстары анықталды. Облыстардың суреттері жарық- (ЖӨ) және қараңғыөрістік (ҚӨ) кескіндер режимінде суретке түсірілді. Қосымша фазалық анализ үшін микродифракциялық суреттер (МДС) түсірілді.

Үлгіні электронды-микроскопиялық зерттеулерге дайындау бірнеше сатыда жүргізілді. Электрлік ұшқын станогында модифицирленген бетпен қоса, қалыңдығы 300 мкм (өлшемдер $\pm 0,01$ мкм дәлдігімен микрометр көмегімен) табақша кесілді. Электр ұшқындық кесу режимі материалдың құрылымында қосымша бұрмалануларды болдырмайтындай етіп таңдалынды. Осы табақшадан фольга әзірленді. Кесілгеннен соңғы алынған табақшаның бір беті модифицирленген үлгінің беті болды.

«JEOL» қосымшасы бар «JEM-2100F» энергодисперсиялық спектральді анализ құрылғысы үшін фольгалар иондық жұқару әдісімен дайындалды. Бұл әдісте жұқару жоғары кернеумен жылдамдатылған иондар мен нейтральді атомдардың атқылауы есебінен жүргізілді. Сонымен қатар, бұл кезде иондардың энергиясы мен олардың құлау бұрышына тәуелді беттің иондармен тозуы немесе беттің иондық тазаруы жүзеге асырылуы мүмкін. Үлгінің орталығына бағытталған иондық шоқ беттен атомдарды құлатып, олардың орнын алмастырады. Иондық жұқару кезінде үлгінің кедір-бұдырлығы азаяды.

Фазалық анализді сақиналық микродифракциялық кескіндер анализі бойынша жүргіздік. Анализ жазықтық аралық қашықтықты анықтауға негізделген болатын. Ол үшін әрбір нүктелік рефлексден орталық даққа дейінгі қашықтықты өлшедік. Я болмаса, сақиналық рефлексстер жағдайында дифракциялық сақиналардың радиусын өлшедік, сосын жазықтық аралық қашықтықты 8 белгілі формуласы бойынша есептедік:

$$d_{hkl} = c_m \cdot r^{-1} \quad (8)$$

Мұндағы c_m – электронды микроскоптың дифракциялық тұрақтысы; r – дифракциялық сақинаның радиусы немесе нүктелік рефлексден орталық даққа дейінгі қашықтық; d_{hkl} жазықтық аралық қашықтықтар анықталады. Осы жолмен табылған жазықтық аралық қашықтықтарды болжамды фазалардың әрбірінің кестелік мәліметтерімен салыстырдық және микродифракционды суреттерді анықтадық (микродифракционды суреттерді шифрлеу үшін дифракционды кескіндердің халықаралық базалары қолданылады).

ТЭМ нәтижелерін РФА және РЭМ нәтижелерімен салыстырдық.

2.4.4 Құймалардың микроқаттылығын өлшеу

Құймалар үлгілерінің микроқаттылығы Виккерс әдісі бойынша ПМТ-3М микротвердомерінің (ЛОМО, 2016, Россия) көмегімен өлшенді. Зерттелетін үлгіге төрт қырлы алмаз Виккерс пирамидасы формасында индентор батырылды. Индентормен қалдырылған таңбаның өлшемі бойынша микроқаттылықтың мәні анықталады. Виккерс пирамидасын қолданған кезде микроқаттылықты H_v инденторға түсірілген жүктеменің P алынған таңбаның диагоналінің квадратына қатынасымен байланыстыратын формула бойынша есептейді [157]:

$$H = \frac{1,854 \cdot P}{d^2} \quad (9)$$

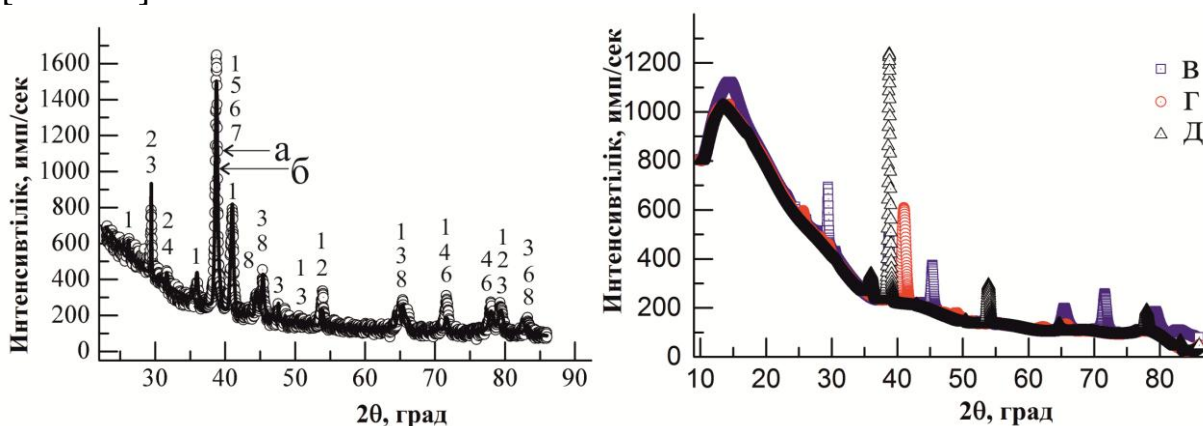
Әрбір үлгіге 30 таңба бастырылып, алынған микроқаттылықтың мәндерінің орташа арифметикалық мәнін есептедік.

3 НӘТИЖЕЛЕР ЖӘНЕ ТАЛҚЫЛАУ

3.1 Ti-Al негізіндегі құйманың құрылымды-фазалық күйіне СЖМ мен Та әсері

3.1.1 «Гидридтік технологиямен» алынған Ti50-Al50 құймасының құрылымды-фазалық күйі

Рентгенфазалық анализ нәтижелері негізгі термодинамикалық тұрақты фазалар TiAl₃, TiAl, TiAl₂ интерметалдық қосылыстары мен алюминийдің α-Ti-дағы қатты ерітіндісі екендігін көрсетті. 11 суретте байқалмалы және есептік интенсивтіліктерді ескере отырып, Ti50-Al50 бастапқы интерметаллидтік құймасының РФА спектрлері, сондай-ақ мәні ($R_{wp}=8.655$) нәтижелердің қанағаттанарлық сәйкестігін растайтын олардың айырымы келтірілген. Жеке фазалардың есептік интенсивтілікке қосатын үлесі Ритвельд әдісімен бағаланды [158-161].



(а – тәжірибе, б – жалпы модельді интенсивтілік. в, г – жеке фазалардың есептік интенсивтілікке қосатын үлестері (мәтінді қараңыз).

Ескерту: 1 - Ti₃Al, 2- TiAl₂, 3 - Ti₂Al₅, 4 - Ti₃Al₅, 5 - Ti₅Al₁₁, 6 – Ti, 7 – Al, 8 – TiAl.

11 сурет - Ti50-Al50 бастапқы интерметаллидтік құймасының дифрактограммалары

Ti50-Al50 үлгісінде келесі фазалар анықталды: торының параметрлері $a=b=2,8234 \text{ \AA}$, $c=4,0768 \text{ \AA}$ және когеренттік шашырау облысының өлшемдері (КШО) $33 \pm 5 \text{ \AA}$, тетрагональді сингонияға ие ($P4/mmm$ кеңістіктік тобы) құрамы TiAl 38,4% титан алюминиді; параметрлері $a=b=5,7671 \text{ \AA}$, $c=4,64646 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $P63/mmc$ және КШО өлшемдері $134 \pm 5 \text{ \AA}$ тетрагональді сингониялы көлемдікорталықтандырылған торға ие 25,2% Ti₃Al фазасы; параметрлері $a=b=2,9253 \text{ \AA}$, $c=4,6184 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $P63/mmc$ және КШО өлшемі $34 \pm 5 \text{ \AA}$ гексагональді сингонияға ие 12% α-Ti (титандағы алюминийдің қатты ерітіндісі); торының параметрлері $a=12,0187 \text{ \AA}$, $b=4,0232 \text{ \AA}$, $c=4,0253 \text{ \AA}$, КШО өлшемі шамамен $195 \pm 5 \text{ \AA}$ (кеңістіктік тобы C/mmm) 8,8% TiAl₂ фазасы.

Үлгі құрамының аз бөлігін келесі фазалар құрайды: торының параметрлері $a=b=3,9522 \text{ \AA}$, $c=16,7089 \text{ \AA}$, КШО өлшемі $261 \pm 5 \text{ \AA}$ 5,6% Ti₅Al₁₁ фазасы (кеңістіктік тобы P/mmm); торының параметрлері $a=3,8675 \text{ \AA}$, $b=3,8212 \text{ \AA}$, $c=4,1445 \text{ \AA}$, КШО өлшемі $61 \pm 5 \text{ \AA}$ 3,9% Ti₃Al₅ фазасы (кеңістіктік тобы

P/mmm); торының параметрлері $a=b=c=4,1121 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы *Fm-3m*, КШО өлшемі $70 \pm 5 \text{ \AA}$ 2,6% Al фазасы; торының параметрлері $a=b=c=3,2496 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы *I m-3m*, КШО өлшемі $34 \pm 5 \text{ \AA}$ 2,0% β -Ti (882 °C-тан жоғары температураларда түзіледі); торының параметрлері $a=b=3,8164 \text{ \AA}$, $c=30,1785 \text{ \AA}$, КШО өлшемі $440 \pm 5 \text{ \AA}$ 1,5% Ti_2Al_5 (кеңістіктік тобы *P4/mmm*).

Геометриялық оптимизациядан соң тордың энергиясы $E_{\text{TiAl-Struct1}} = -4978.555 \text{ eV}$, ал бастапқы күйде -4976.099 eV құрағаны тіркелді. Екі жағдайда да *TiAl-Struct2* құрылымының соңғы энтальпиясы оның тұрақтылығын дәлелдейді. 7 кестеде *TiAl-Struct2* бастапқы оптимизирленген күйдегі қосылысының кеңістіктік тобы, тор параметрлері көрсетілген. 7 кестеде негізгі фазалардың құрылымдық параметрлерінен бөлек, торлардың көлемі, жеке фазалардың интегральді интенсивтілікке қосатын үлесі мен есептік интегральді интенсивтіліктердің тәжірибелік дифрактограммаларға сәйкестену критерийлері келтірілген.

7 кесте - Торларының құрылымдық параметрлері мен фазалардың үлесі, *Ti50-Al50* құймасының сәйкестік критерийі

Фаза	Күй	a, Å	b, Å	c, Å	альфа	бета	гамма	V, Å ³	Кеңістіктік топ	Үлес, %	E, eV	Rwp, %
AlTi ₃ -2768	Исход.	5.764	5.764	4.664	90.00	90.00	120.00	132.56	P6/mmm, Hexagonal	25.23	-19,317.484	7.193
	Уточн.	5.763	5.763	4.645	90.00	90.00	120.00	131.996				
TiAl-Struct2-GeomOpt	Исход.	6.339	4.150	4.234	113.36	93.36	92.52	132.56	P1, Triclinic	49.80	-4810.6263	7.193
	Уточн.	6.129	4.237	4.017	113.62	88.24	92.42	133.711				
TiAl-Struct2	Исход.	6.339	4.150	4.234	113.36	93.36	92.52	101.791	P1, Triclinic	24.97	-4975.776	7.193
	Уточн.	6.194	4.119	4.215	113.07	92.88	91.97	98.64				

Зерттелген жүйелердегі фазалардың сандық үлесінің нәтижелері 7 кестеде келтірілген. Кестеде фазалар, тәжірибелік дифрактограммаларды Ритвельд әдісімен анықтағанға дейінгі (Init) және кейінгі (Spec) фазалардың құрылымдық күйі, торлардың сәйкес параметрлері, торлардың көлемі, кеңістіктік топ, фазалардың үлесі, Ритвельд әдісімен ұсақтағаннан кейінгі тордың энергиясы (E) келтірілген. Сонымен қатар, кестелерде тәжірибелік дифрактограммада есептелген интегральды интенсивтіліктің үлесі (Rwp) көрсетілген. Жеке фазалардың интегральді интенсивтілікке қосатын үлесінің анализі (7 кесте) сенімділіктің жоғары дәрежесімен ($R_{wp} < 7.2\%$) негізгі фазалар AlTi₃, AlTi₃-PЗМ, AlTi интерметаллидтері, бастапқы және оптимизирленген күйлердегі *TiAl-Struct2* болып табылатындығын көрсетті. *Ti50-Al50* жүйелерінің тәжірибелік дифрактограммалары есептік интегральді интенсивтілікке жақсы жуықтайды, олардың арасындағы айырмашылық елеусіз мәнге ие. Ритвельд әдісімен *Ti50-Al50* жүйесінде *TiAl* жүйесінің триклинді үлесі басым (73%-дан жоғары) болатындығы тіркелді. Екі тор да параметрлерімен, атомдарының координаталарымен, сонымен қатар көлемдерімен ерекшеленеді, 7 кесте.

Сондай-ақ, негізгі жүйелердің қатарына $AlTi_3$ (22.33%) гексагональді торы да кіреді.

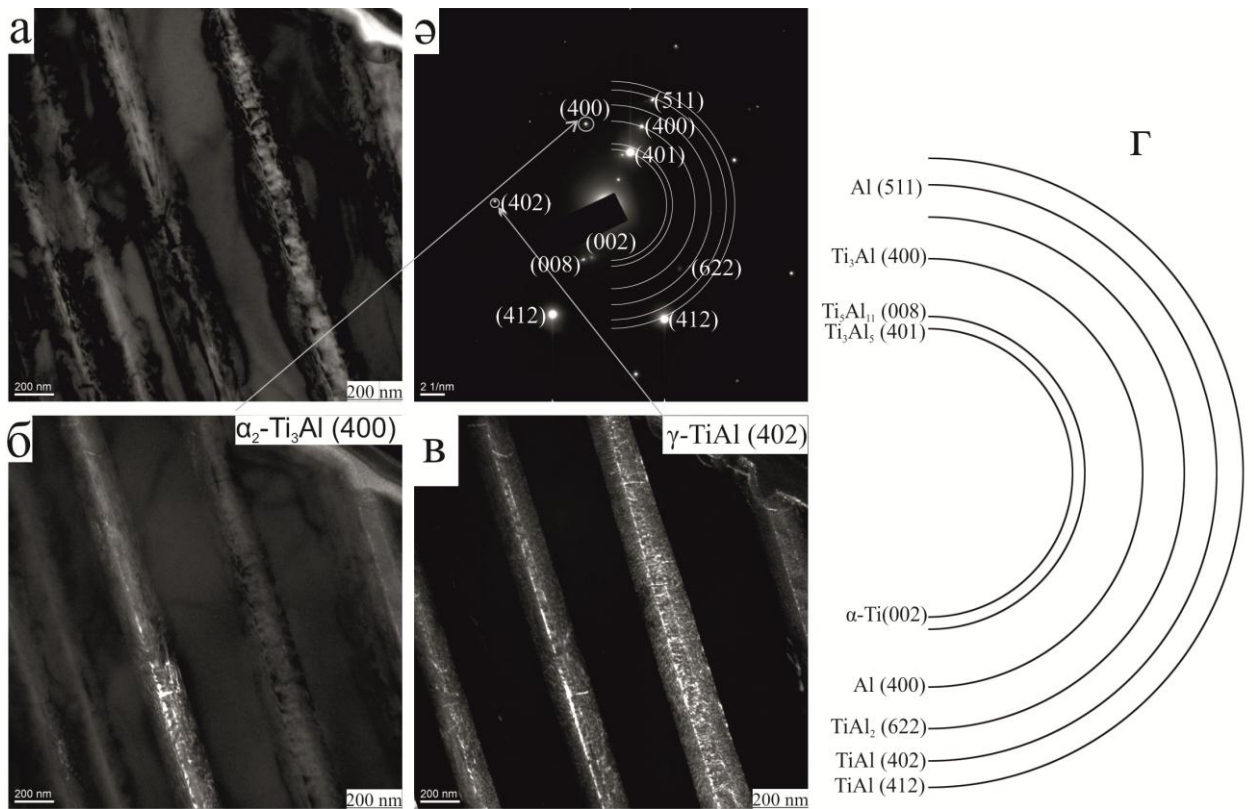
Атомдардың салыстырмалы координаталары, ығысулардың изотропты параметрлері 8 кестеде келтірілген.

8 кесте - TiAl-Struct2 торындағы атомдардың салыстырмалы координаталары

Атом символы	x	y	z	Ығысу параметрлері, (U_iso)	Жүктелуі
Ti1	0.31043	0.35931	0.67816	0.01267	1.0
Ti2	0.50011	0.33364	0.66695	0.01267	1.0
Ti3	0.31068	0.02662	0.01209	0.01267	1.0
Ti4	0.22677	0.01688	0.03612	0.01267	1.0
Al5	0.00021	0.33383	0.33274	0.01267	1.0
Al6	0.22700	0.31579	0.37008	0.01267	1.0

РФА нәтижелері ТЭМ әдісімен алынған мәліметтермен сәйкес келді. Ti50-Al50 үлгісінің құрамы Ti_3Al , TiAl, $TiAl_2$, α -Ti, Ti_5Al_{11} , Ti_3Al_5 фазаларынан тұрады (12г сурет). Осылайша, алынған Ti50-Al50 құймасы әр түрлі кристалдық торларға ие фазалардың жиынтығын құрайтындықтан, күрделі көпфазалы құрылымға ие. Алынған нәтижелер «гидридтік технология» бойынша интерметаллидтік құймаларды алу мүмкіндігін растайды.

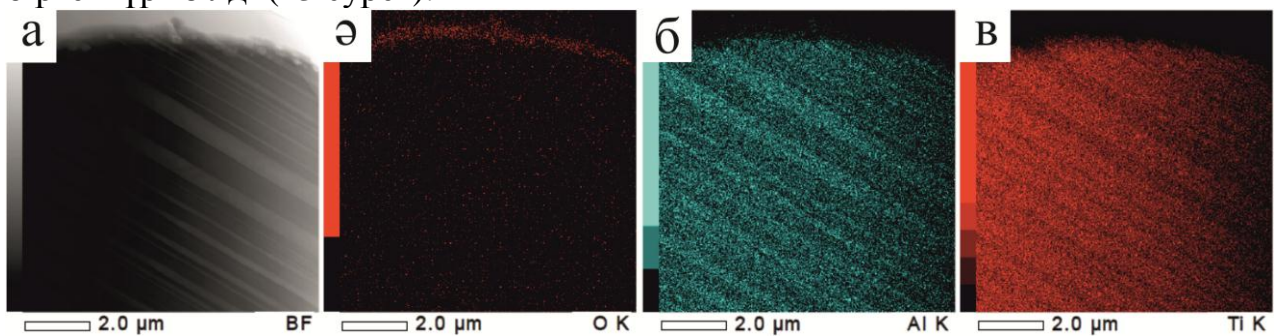
ТЭМ әдісімен микроқұрылымды зерттеуді жүргізу барысында алынған нәтижелер Ti_3Al және TiAl фазаларының түзілетіндігін дәлелдеді. Ti_3Al фазасы - гексагональді тығызқапталған (ГТҚ) кристалдық торы бар, кеңістіктік тобы - $R\bar{6}3/mmc$, D_{019} суперқұрылымына ие реттелген фаза. Ti_3Al енінің өлшемі 250 нм параллель орналасқан пластиналық бөлінділер түрінде түзіледі (12а сурет). Түзілетін Ti_3Al және TiAl интерметаллидтік фазалары микроөлшемді болып келеді, ол қараңғыөрісті суреттерден жақсы көрініп тұр (12б, в суреттері). Ti_3Al және TiAl фазаларының түзілуі термодинамикалық негізделген және Гиббс энергиясының минимумымен сипатталады [189]. Үлгілерде берілген интерметаллидтік фазалардың болуы құймалардың беріктілігін айтарлықтай арттырады [39, 182, 183].



a – жарықкөрісті сурет; *ә* – микродифракционды сурет; *б*, *в* – көрсеткішпен белгіленген рефлекстердегі қараңғыөрісті суреттер; *г* – микродифракционды суреттің идентификациясы

12 сурет - Бастапқы Ti50-Al50 құймасының матрицасының электронды-микроскоптық кескіні

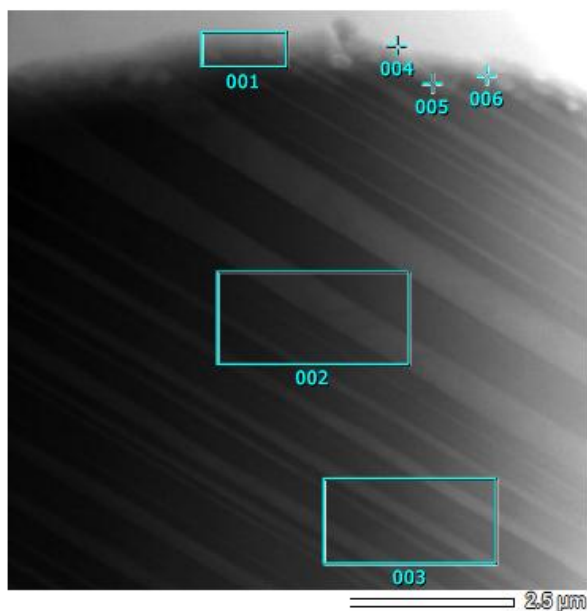
Интерметаллидтік фазаларға сәйкес келетін рефлекстердегі ҚӨ жолақ құрылымдардың көп бөлігі бір фазадан – TiAl немесе Ti₃Al фазаларынан тұратындығы байқалып тұр. Облыстардың фазалық құрамын анықтау үшін ТЭМ анализі энергодисперсиялық спектральді микроанализ қосымшасымен бірге жүргізілді (13 сурет).



a) жарықкөрісті сурет; *ә* - *в*) учаскідегі картирлеу

13 сурет - Электронды-микроскопиялық сурет

Оттегі аз мөлшерде болады және оның көп бөлігі үлгілердің беттерінде шоғырланған. Титан мен алюминий негізіндегі материалдардың беткі қабатында әрқашан оксидтік қабаршақ болатындығы белгілі. Қабаттың қалыңдығы 1 мкм-ден аспайды, яғни бұл құйманың тотығуға бейімділігі төмен екендігін растайды (14 сурет, 9 кесте, 4, 5, 6 спектрлері).



14 сурет - Фазалық контраст режиміндегі ТЭМ кескіні

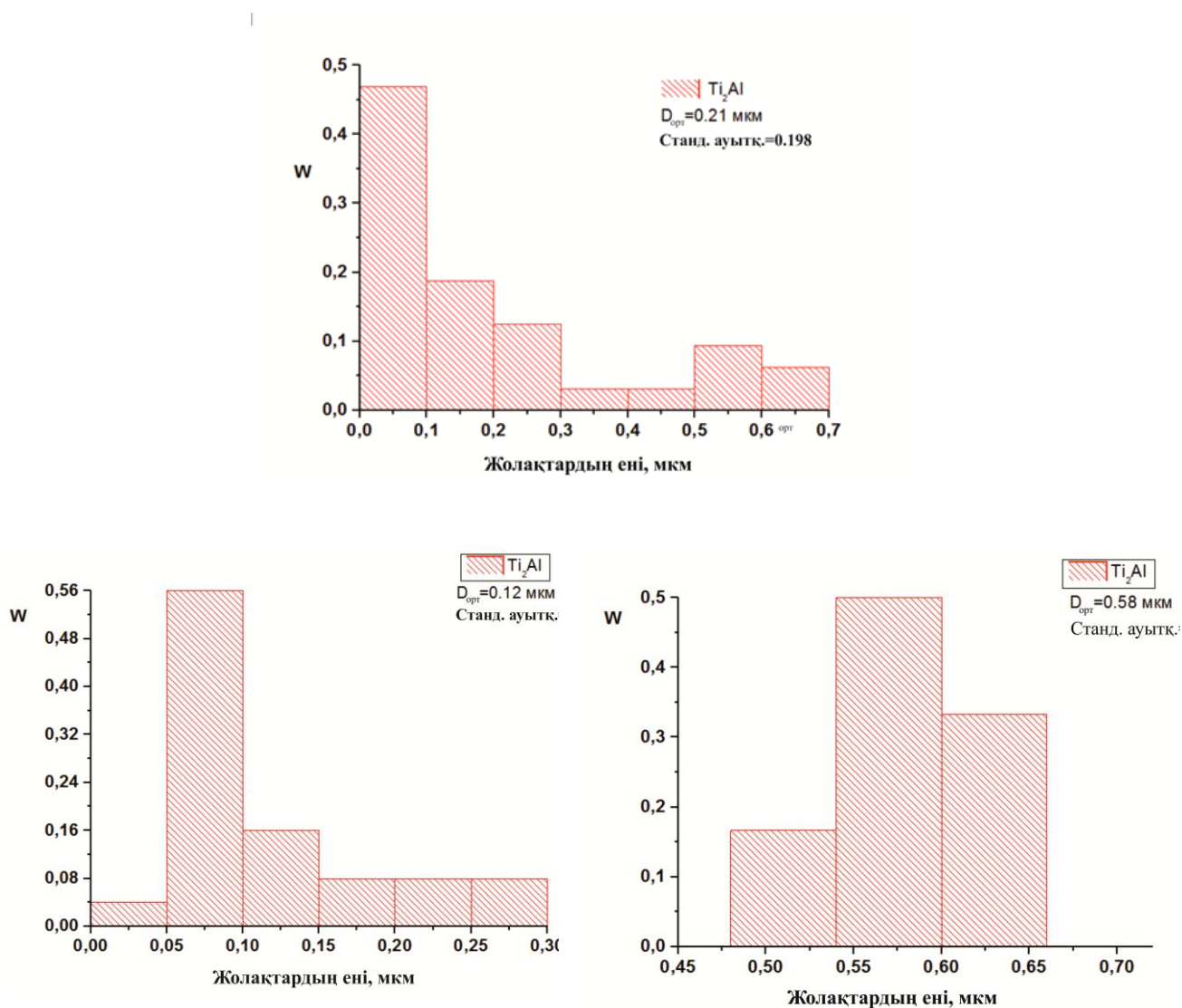
Энергодисперсиялық микроанализ көмегімен микроқұрылымның локальді анализін жүргізу барысында жолақ дәндердің құрамында алюминий мен титанның әр түрлі қатынасы болатындығы, сәйкесінше титан-алюминий құймасының интерметаллидтік фазаларының кристаллизациясы қабаттар бойынша жүзеге асатындығы анықталды (14 сурет, 9 кесте).

Сандық анализ нәтижесінде γ -TiAl құймасының матрицасының (сұр облыс) құрамы орташа алғанда келесідей массалық процентке ие: 34,59% Al және 63,55% Ti, бұл α_2 – интерметаллидтік Ti₂Al фазасына сәйкес келеді. Пластиналық форманың бөлшектерінде көміртегі жоқ деп айтуға болады, бірақ оттегі аз мөлшерде кездеседі.

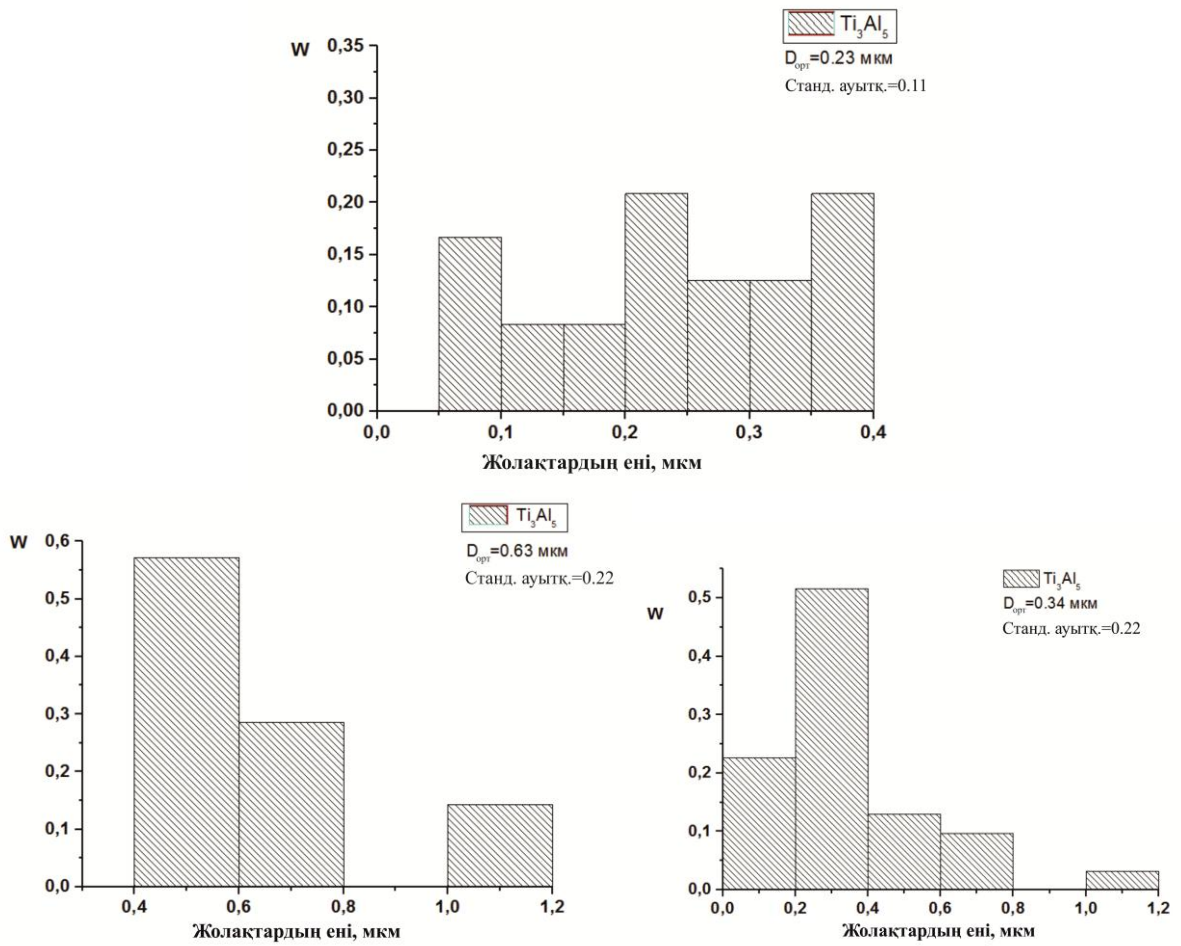
9 кесте - Локальді учаскелердегі элементтік құрам

	Атомдық құрамы, %					
	001	002	003	004	005	006
O	53.34	1.51	2.22	88.08	11.21	58.99
Ti	27.94	65.28	61.81	1.28	58.79	25.44
Al	18.72	33.20	35.97	10.64	30.01	15.57
Фаза	Оксидтік қабат	Ti ₂ Al	Ti ₂ Al	Алюминий оксиді		

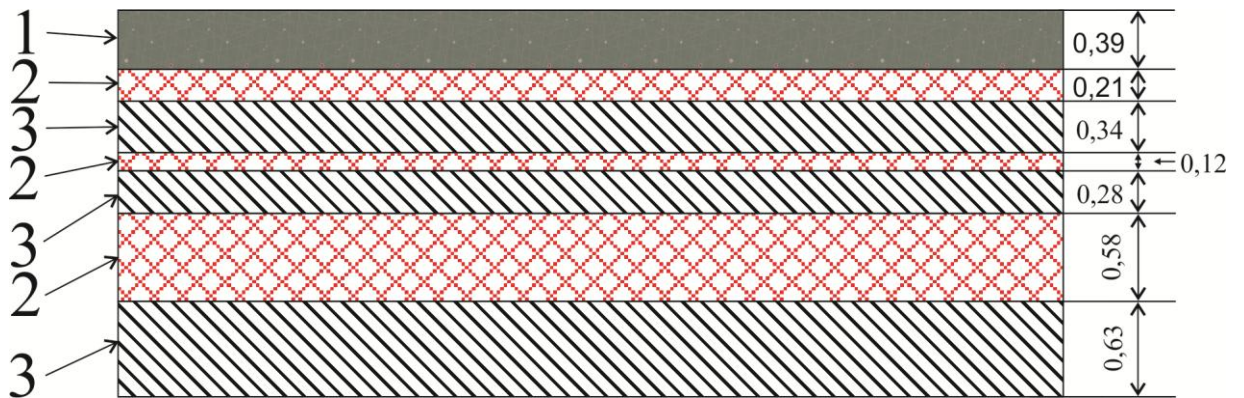
Үш әр түрлі спектрлердегі титан-алюминий пластинасындағы ашық жолақтардың орташа ені 0,21 мкм, 0,12 мкм және 0,58 мкм құрайды. Ал қара жолақтардың орташа ені 0,34 мкм, 0,23 мкм және 0,63 мкм тең (15, 16 сурет). Қабаттар бойынша құйма құрылымының схемасы 17 суретте көрсетілген.



15 сурет - Орташа өлшемдердің таралу гистограммасы

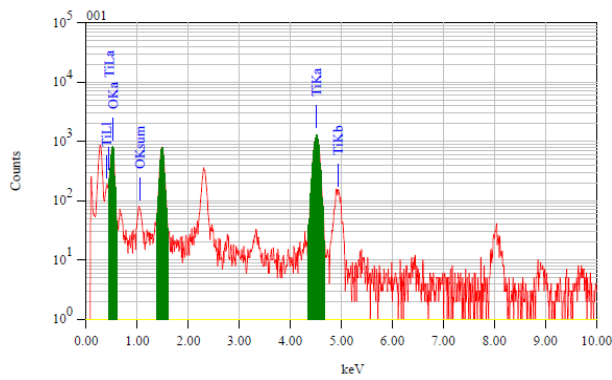


16 сурет - Орташа өлшемдердің таралу гистограммасы

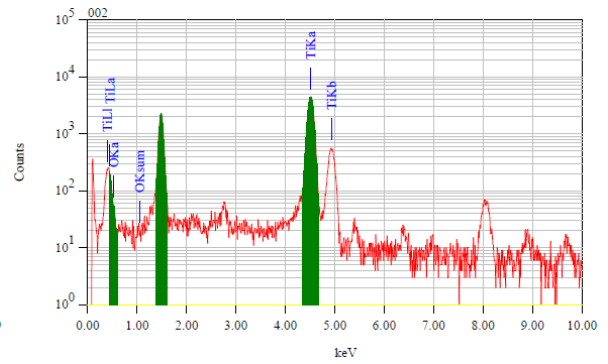


17 сурет - Қабаттар бойынша құйма құрылымының схемасы

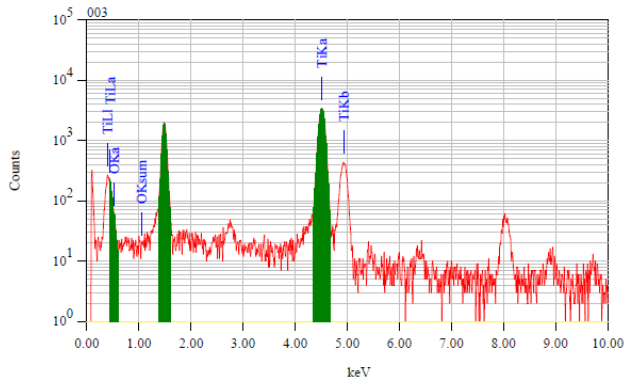
$Ti_{50}Al_{50}$ үлгісінің локальді учаскелерінің спектрлері 18 суретте келтірілген.



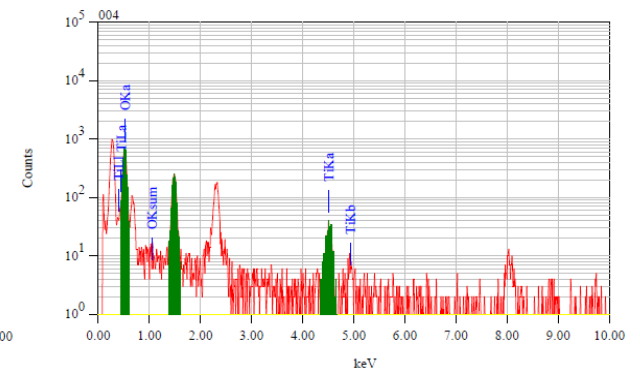
а)



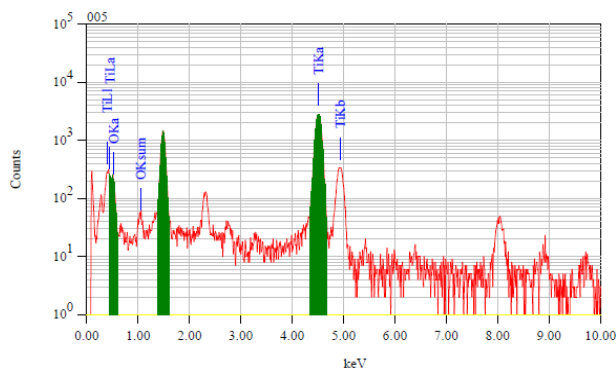
ә)



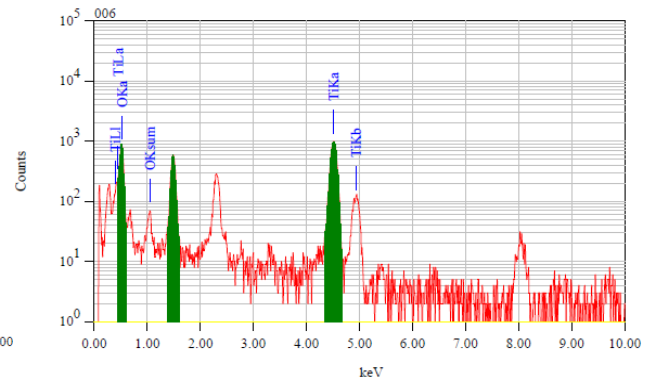
б)



в)



г)



ғ)

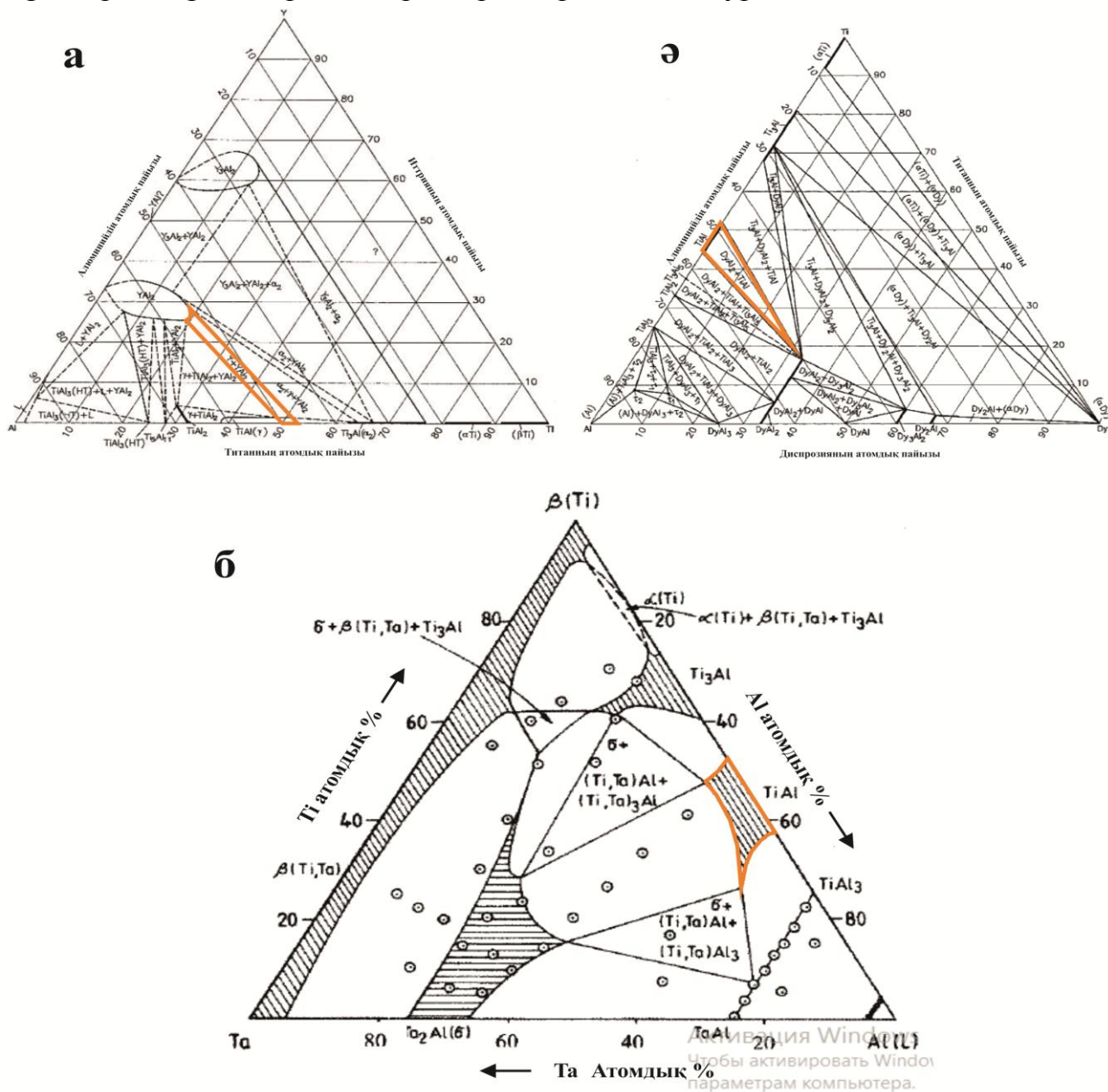
001 (а), 002 (ә), 003 (б), 004 (в), 005 (г), 006 (ғ)

18 сурет - Ti50-Al50 үлгісінің локальді учаскелерінің спектрлері

Осылайша, жүргізілген зерттеулер нәтижесінде «гидридтік технологиямен» алынған Ti50-Al50 құймасының матрицасы әр түрлі кристалдық торларға ие Ti₃Al, TiAl, TiAl₂, α-Ti, Ti₅Al₁₁ және Ti₃Al₅ фазаларын қамтитындығы анықталды. Облыстардың - интерметаллидтік фазалардың қабаттар бойынша, яғни құймада құрам бойынша кезектесіп орналасуы мүмкін. Осылайша, гидридтік технологияның көмегімен әрбір қабаты алдыңғы қабатты қатайтатын жоғары беріктілік сипаттамалары бар күрделі сэндвичтік құрылымдарды алуға болады.

Келтірілген жұмыс нәтижелері [183] басылымда жарияланған. Жұмыста TiAl құймаларын алудың зертханалық гидридтік технологиясының негіздері

жасақталған. Алайда әдеби мәліметтерге сүйенсек, СЖМ қосындысы физика-механикалық қасиеттердің жақсаруына қолайлы жағдай жасайды. ГТ әдісімен алынған титан–алюминий бинарлы жүйесінің микроқұрылымы мен фазалық құрамына Sc, Y, Dy, Ta легирлеуші қосындыларының әсерін зерттеу ұсынылды. Sc, Y, Dy, Ta қосындылары бар Ti-Al жүйесі негізіндегі үлгілердің құрамы мен құрылымының түзілуінің кейінгі зерттеулерін көрсетілген әдістермен жүргіздік. TiAl құймаларын сирек және сирек жер металдарымен легирлеу барысында керекті фазалардың мөлшерін белгілеу үшін үш компонентті жүйелердің күй диаграммалары қарастырылды (19 сурет).



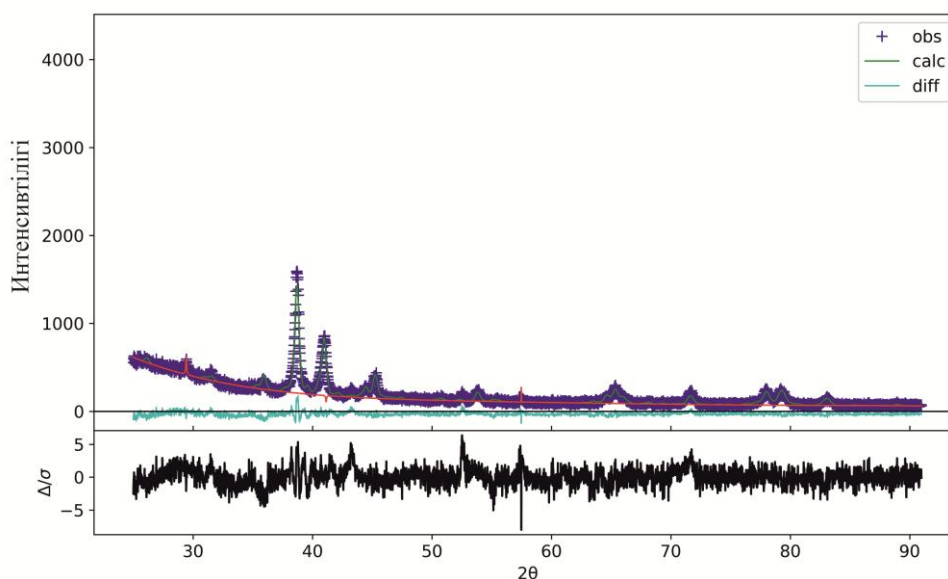
а – 1000°C кезінде TiAl-Y жүйесі [184], ә – 500°C кезінде Ti-Al-Dy жүйесі [185], б – 1100°C кезінде Ti-Al-Ta жүйесі [186]

19 сурет - Жүйелердің изотермиялық кескіні

Ti49-Al49-Y2 компоненттерінің қатынасы γ -TiAl + YAl_2 фазалары түзілетін белгіленген облысқа сәйкес келеді (19а сурет) [184]. 1100°C кезіндегі Ti-Al-Ta жүйесінің үштік диаграммасына сүйенсек, Ti49-Al49-Ta2 компоненттерінің қатынасында TiAl фазасы түзіледі (19ә сурет). Ti-Al-Dy үштік диаграммасына сәйкес, Ti49-Al49-Dy2 компоненттерінің қатынасында $DyAl_2$ + TiAl фазалары бар облыс түзіледі деп күтіледі (19б сурет).

3.1.2 TiAl құймасының құрылымды-фазалық құрамына Sc қосындыларының әсерін зерттеудің нәтижелерін талқылау

Ti49-Al49-Sc2 үлгілерінің рентгенфазалық анализі олардың күрделі көпфазалы құрылымға ие екендігін көрсетті: бастапқы компоненттер (α -Ti, β -Ti, Al мен Sc) және TiAl, Ti_3Al , $TiAl_2$, Ti_5Al_{11} , Ti_3Al_5 интерметаллидтік фазалары идентифицирленді. Бастапқы металдардың үлесі 7,3%-дан аспайды. Бастапқы Ti50-Al50 үлгісімен салыстырғанда скандийді қосқаннан соң жаңа Ti_2Al_5 фазасы түзілді, бірақ Ti_2Al фазасы байқалмады. Сәйкесінше, скандий бұл құйманың фазалық құрамын өзгертті. Скандий дисперсті фаза ретінде қолданылады және ол металдық матрицаға отқа төзімді металды екінші фаза түрінде енгізу арқылы құйманың құрылымын қатайтады [94, 95]. 20 суреттен байқалмалы және есептік интенсивтіліктердің айырмашылығы $R_{wp} = 9.856$ тең екендігі көрініп тұр.



1 – тәжірибе, 2 – жалпы модельді интенсивтілік, 3 – интенсивтіліктер арасындағы айырмашылық

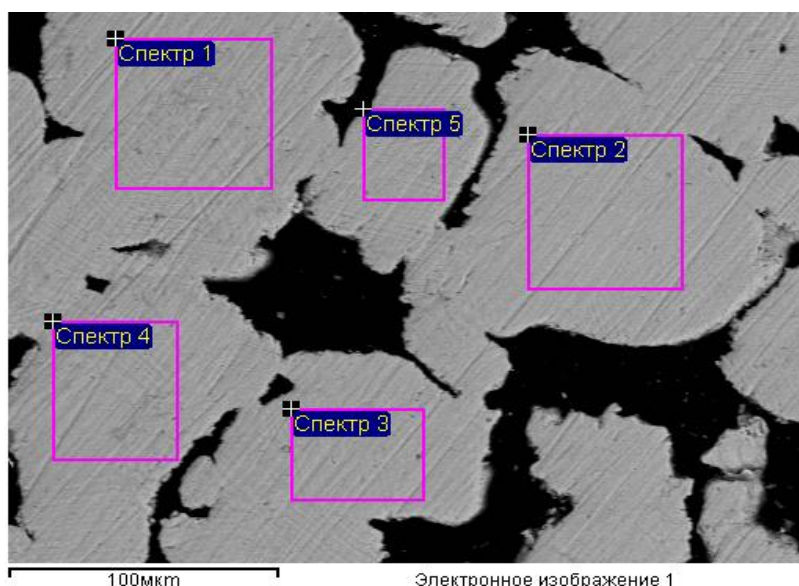
20 сурет - Алынған Ti49-Al49-Sc2 интерметаллидтік материалының дифрактограммасы

Ti49-Al49-Sc2 үлгісінде келесідей интерметаллидтік фазалар идентифицирленген: тор параметрлері $a=b=2,8295 \text{ \AA}$, $c=4,0696 \text{ \AA}$ және КШО

өлшемі $33 \pm 5 \text{ \AA}$, құрамы TiAl тетрагональді сингониялы (кеңістіктік тобы $P4/mmm$) 41,5% титан алюминиді; тор параметрлері $a=b=5,7619 \text{ \AA}$, $c=4,6497 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $P63/mmc$ және КШО өлшемі $134 \pm 5 \text{ \AA}$ тетрагональді сингониялы көлемненорталықтандырылған торы бар 26,2% Ti_3Al фазасы; тор параметрлері $a=4,1083 \text{ \AA}$, $b=4,0005 \text{ \AA}$, $c=3,9522 \text{ \AA}$, КШО өлшемі $65 \pm 5 \text{ \AA}$ 10,9% Ti_3Al_5 фазасы (кеңістіктік тобы P/mmm). Ең аз үлесті тор параметрлері $a=b=3,8331 \text{ \AA}$, $c=29,2450 \text{ \AA}$, КШО өлшемі $430 \pm 5 \text{ \AA}$ 4,5% Ti_2Al_5 (кеңістіктік тобы $P4/mmm$); тор параметрлері $a=b=3,9096 \text{ \AA}$, $c=17,3119 \text{ \AA}$, КШО өлшемі $265 \pm 5 \text{ \AA}$ 3,7% Ti_5Al_{11} (кеңістіктік тобы P/mmm); тор параметрлері $a=12,0187 \text{ \AA}$, $b=4,0232 \text{ \AA}$, $c=4,0253 \text{ \AA}$, КШО өлшемі шамамен $195 \pm 5 \text{ \AA}$ 2,7% TiAl₂ фазасы (кеңістіктік тобы C/mmm); фазалары құрайды

α -Ti фазасы (алюминийдің титандағы қатты ерітіндісі) тор параметрлері $a=b=2,9278 \text{ \AA}$, $c=4,6006 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $P63/mmc$, салмақтық үлесі 2,4% гексагональді сингонияның қарапайым торына ие. КШО өлшемі $31 \pm 5 \text{ \AA}$ құрайды. β -Ti фазасының (882 °C-тан жоғары температураларда түзіледі) тор параметрлері $a=b=c=3,3687 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $I m-3m$, салмақтық үлесі 1,1%. КШО өлшемі $38 \pm 5 \text{ \AA}$ құрайды. Сонымен қатар, параметрлері $a=b=c=3,8818 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $Fm-3m$, КШО өлшемі $59 \pm 5 \text{ \AA}$ 1,7% Al фазасы мен параметрлері $a=b=4,7092 \text{ \AA}$, $c=3,1032 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $P4/nmm$ және КШО өлшемі $69 \pm 5 \text{ \AA}$ тетрагональді сингониялы 1,8% Sc фазасы да бар.

Микрорентгенспектральді анализдің көмегімен беттік қабат микрошлифінің әр түрлі учаскелердегі құйманың химиялық құрамын анықтадық (21 сурет). Компоненттердің құрамын атомдық және массалық проценттерде анықтадық. Микрорентгенспектральді анализ мәліметтеріне сүйенсек, концентрациялық өзгерістер зонасының жалпы ені шамамен 100 мкм құрайды.



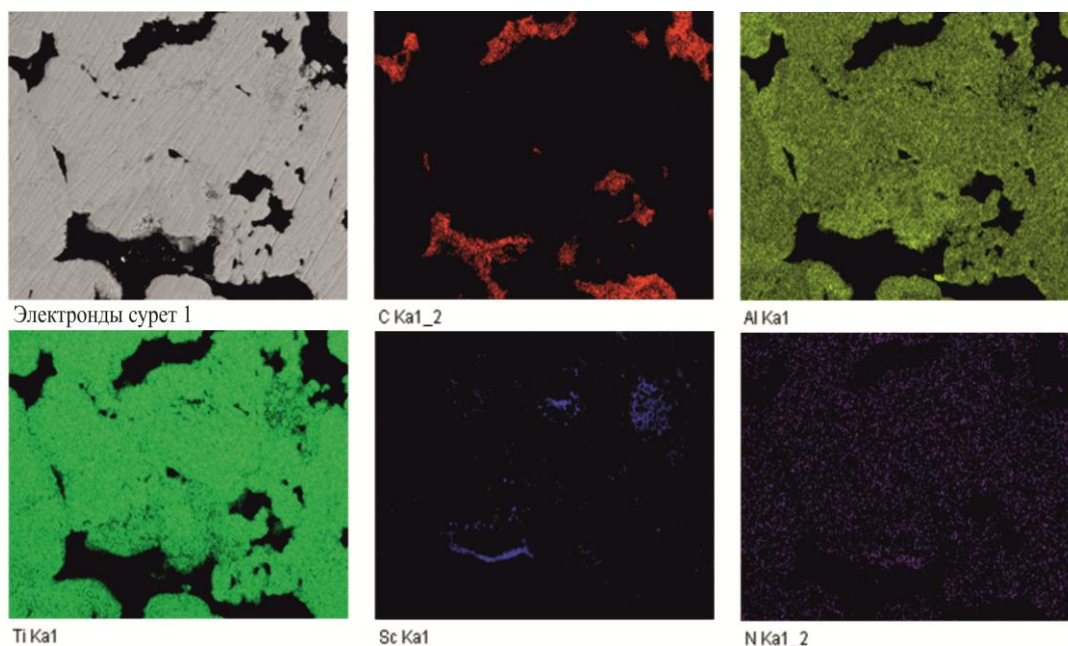
21 сурет - Алынған Ti49-Al49-Sc2 құймасының микроқұрылымдық анализінің нәтижелері

РФА нәтижелері РЭМ зерттеулерімен сәйкес келеді. РЭМ көмегімен алынған фазалардың элементтік анализі 10 кестеде келтірілген.

10 кесте - Локальді учаскелердегі элементтік құрам

Спектрлер	Al	Sc	Ti
	ат. %	ат. %	ат. %
1	39,49±10%	1,48±10%	59,03±10%
2	36,25±10%	0,01±10%	63,76±10%
3	39,29±10%	0,12±10%	60,60±10%
4	39,30±10%	1,79±10%	58,91±10%
5	39,63±10%	0,14±10%	60,22±10%
Орташа мәнi	38,79±10%	0,70±10%	60,50±10%

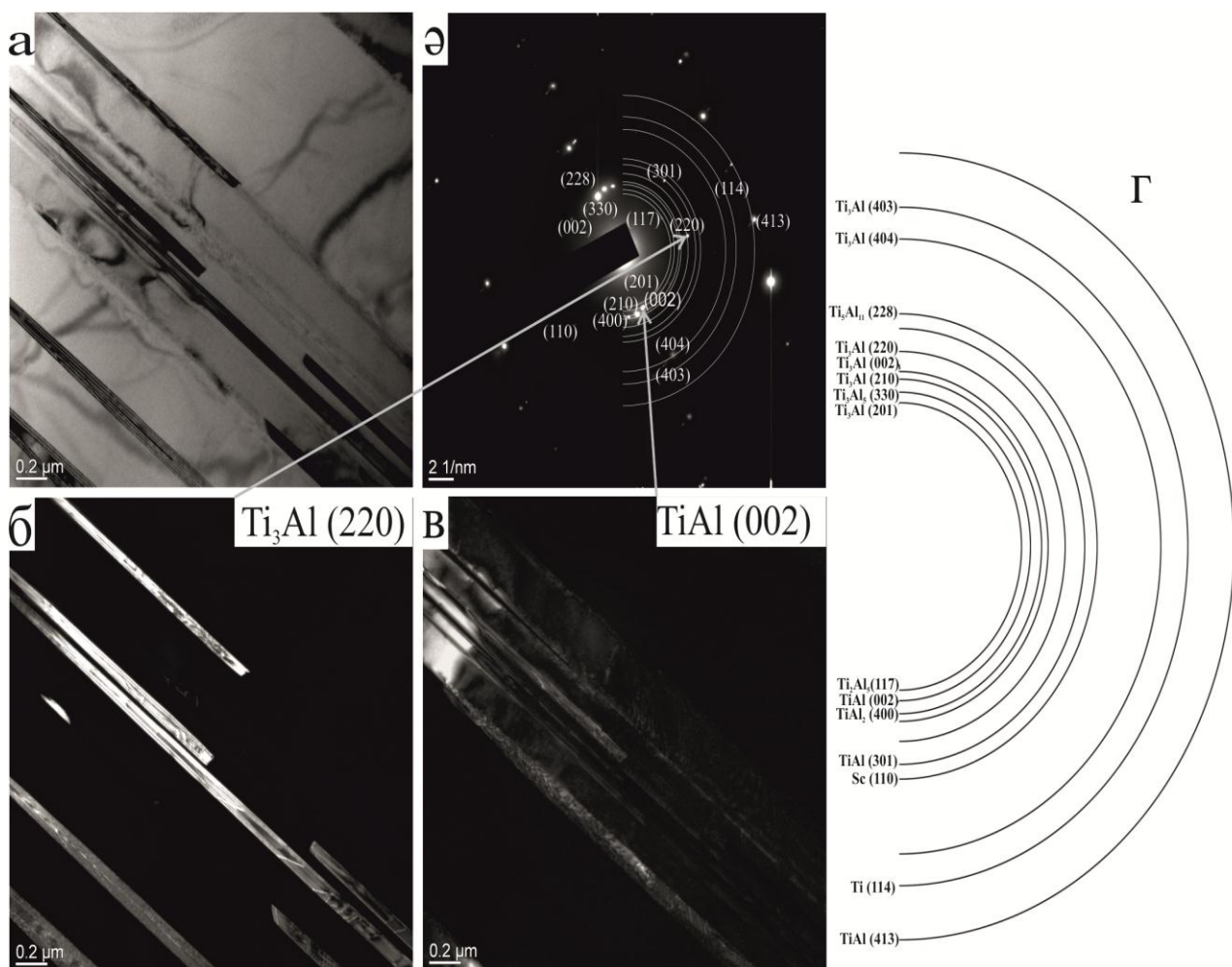
Сандық анализ нәтижесінде γ -TiAl құймасының матрицасы (сұр облыс) орташа келесідей атомдық пайыздағы құрамға ие: 38,79% Al мен 60,50% Ti, бұл α_2 -Ti₃Al интерметаллдік фазасына сәйкес келеді. Бұл мәліметтер [186, 187] жұмыстарында алынған нәтижелермен сәйкес келеді. Бұл қосулардың жанында, кейбір жағдайларда ішкі бетінде Sc дисперсті қатайтатын фазалар табылған (22 сурет). Осылайша, микроанализ нәтижелері Ti₃Al титан алюминидінің бірыңғай әрі ұсақ дисперсті түрде таралатындығын анықтаған.



22 сурет - Ti₄₉-Al₄₉-Sc₂ құймасындағы элементтердің таралу картасы

Рентгенқұрылымды анализ бен энергодисперсиялық анализаторы бар растр электронды микроскопиясы трансмиссиялық электронды микроскопия нәтижелерімен сәйкес келеді. Индицирленген схемада (403), (404), (002), (201) және (220) Ti₃Al; (413), (301) және (002) TiAl; (228) Ti₅Al₁₁; (330) Ti₃Al₅; (117) Ti₂Al₅; (440) TiAl₂; (114) Ti; (110) Sc жазықтықтарына тиесілі рефлексстер

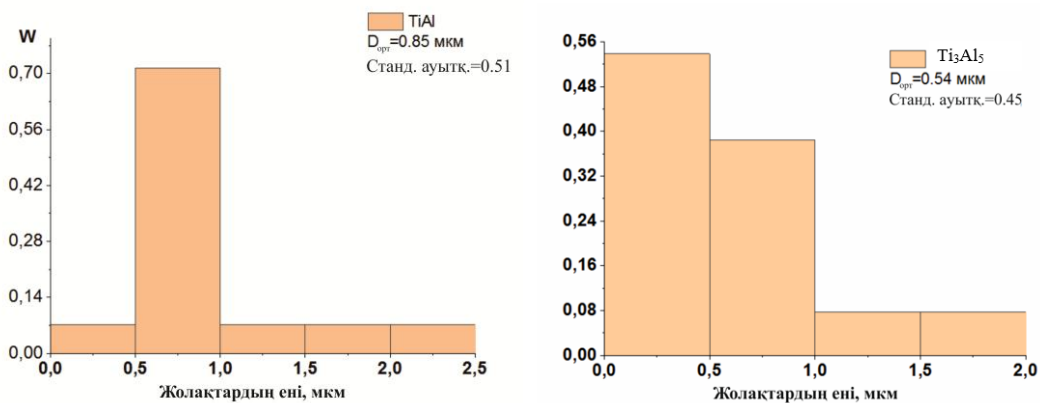
анықталған (23 сурет). Осылайша, ТЭМ әдісі де $Ti_{49}Al_{49}Sc_2$ құймасының күрделі көпфазалы құрылымдық құрылысын растайды.



a – жарық өрісті кескін; *б* – микродифракциялық сурет; *в* – көрсеткішпен белгіленген рефлексстердегі қараңғы өрісті кескін; *г* – микродифракциялық кескіннің идентификациясы

23 сурет - $Ti_{49}Al_{49}Sc_2$ құймасының электронды-микроскопиялық суреті

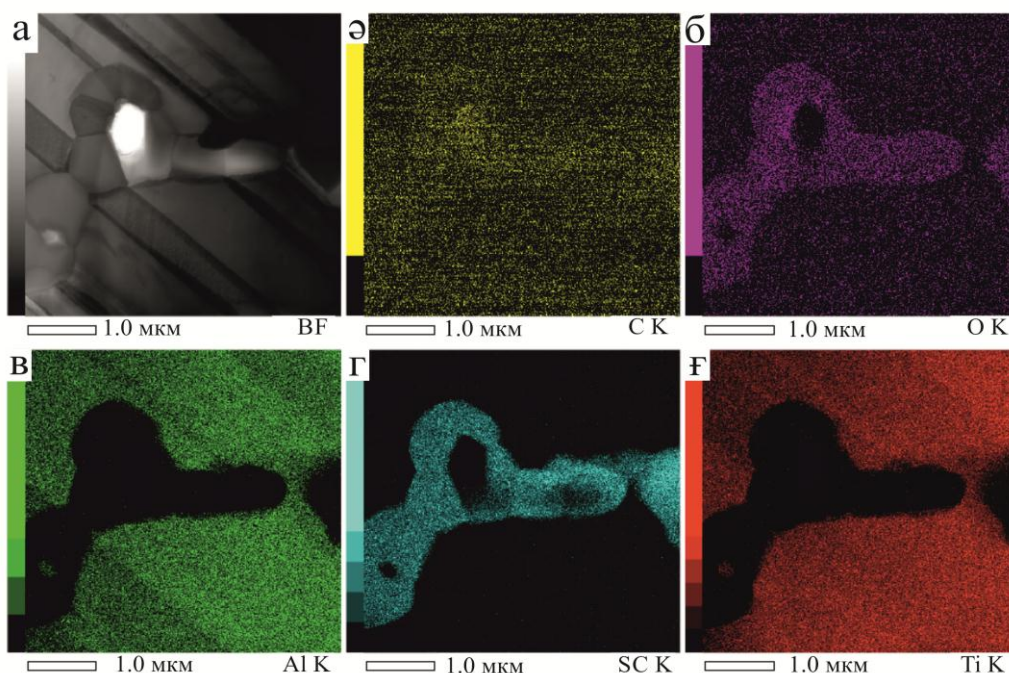
Ашық жолақтардың енінің орташа өлшемі 0,85 мкм-ге тең. Ал қара жолақтардың орташа ені 0,54 мкм-ге тең (24 сурет).



24 сурет - Орташа өлшемдердің таралу гистограммасы

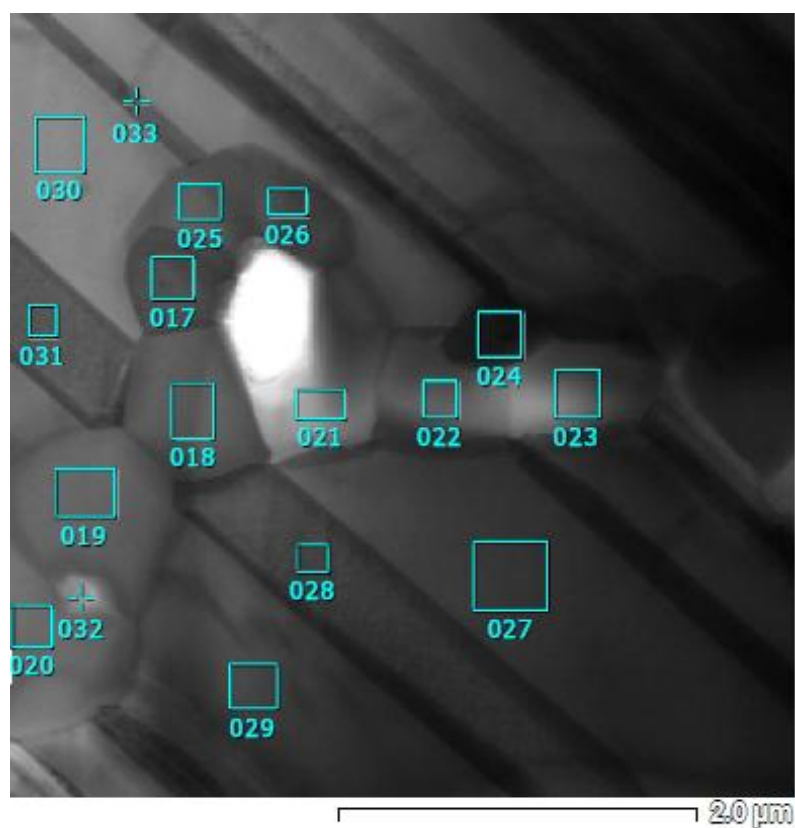
Құйманың микроқұрылымы зерттеліп, 25 және 26 суреттерде көрсетілген. Облыстардың фазалық құрамын идентификациялау үшін матрицалық дәндердің шекаралары мен дислокациялардың шоғырланған орындарында энергодисперсиялық спектральді микроанализ қосымшасымен бірге ТЭМ анализі жүргізілді.

Скандий қатты ерітінділерде интерметаллидтік фазалардағы титанды ығыстыра отырып ериді. Сонымен қатар, скандий интерметаллидтік фазаларда ерімеген жеке бөлшектер түрінде де кездеседі (26 сурет). Скандий дисперсті фаза ретінде қолданылады және ол металдық матрицаға қиын балқитын металды екінші фаза түрінде ендіре отырып, құйманың құрылымын қатайтады [186, 187].



а) жарықкөрісті кескін; ә-Ғ) жарықкөрісті кескінге сәйкес элементтердің материал бойынша таралуы (а);

25 сурет - Электронды-микроскопиялық сурет



26 сурет - Фазалық контраст режиміндегі ТЭМ кескіні

Ti50-Al50 үлгісімен салыстырғанда, параллельді орналасқан пластиналық бөлінділердің ені 1 мкм-ге жетеді, яғни Ti50-Al50 үлгісінің жолақтарының енінен 4 есе үлкен.

26 суреттен көрініп тұрғандай, құйма құрамы бойынша ерекшеленетін және кезектесіп орналасатын пластиналық дәндердің жиынтығы болып келеді. Бір-бірімен байланысқан дөңгелек бөлшектер бар.

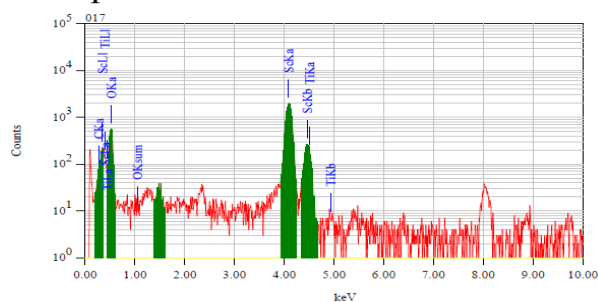
Энергодисперсиялық микроанализ әдісімен пластиналық дәндердің құрамында титан мен алюминий болатындығы және олар құрамында аз мөлшерде (1,5 ат.%-дан кем) скандий титан-алюминий құймасының дәндері болып табылатындығы белгілі болды (11 кесте). Бөлек дөңгелек бөлшектер құймамен әрекеттеспеген және көлденең орташа өлшемі 400 нм мен 1 мкм аралығында болатын скандийдің жеке бөлшектеріне сәйкес келеді.

Жүргізілген энергодисперсиялық анализ пластиналық сұр облыстар – Ti-Al негізіндегі матрицаның дәндері екендігін, бірақ дәндердің ішінде O, C екіншілік фазалардың бөлшектері мен күйдіру шарттарында байланыспаған Sc болатындығын, ал дөңгелек тізбек – Sc негізіндегі қатты ерітінді болып келетіндігін көрсетті.

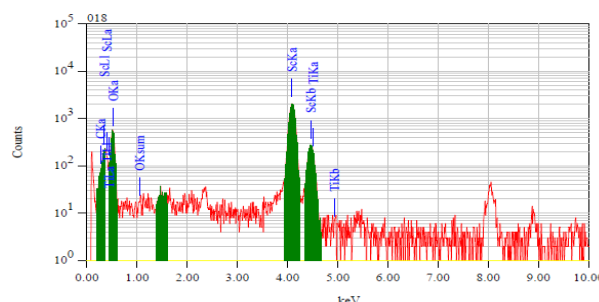
11 кесте - Локальді учаскелердегі элементтік құрам

Спектр нөмері	Элементтік құрамы				
	Атомдық құрамы, %				
	Ti	Al	Sc	C	O
017	0,31±10%	0,56±10%	53,69±10%	-	45,45±10%
018	0,04±10%	0,23±10%	56,69±10%	-	43,03±10%
019	0,30±10%	0,53±10%	57,77±10%	-	41,40±10%
020	-	0,15±10%	56,65±10%	-	43,50±10%
021	0,87±10%	0,72±10%	25,88±10%	38,43±10%	34,09±10%
022	0,65±10%	0,66±10%	54,85±10%	1,47±10%	42,37±10%
023	0,56±10%	0,78±10%	48,80±10%	4,47±10%	45,39±10%
024	10,39±10%	9,10±10%	61,00±10%	-	19,51±10%
025	0,26±10%	0,53±10%	57,59±10%	-	41,61±10%
026	0,04±10%	0,51±10%	59,76±10%	-	39,68±10%
027	53,97±10%	42,44±10%	1,48±10%	-	2,11±10%
028	52,92±10%	43,17±10%	1,37±10%	1,45±10%	1,10±10%
029	62,06±10%	34,02±10%	1,05±10%	-	2,86±10%
030	45,58±10%	43,57±10%	1,00±10%	6,02±10%	3,84±10%
031	48,30±10%	40,60±10%	1,22±10%	7,49±10%	2,38±10%
032	9,84±10%	6,21±10%	0,38±10%	80,06±10%	3,50±10%
033	18,14±10%	15,73±10%	0,35±10%	62,71±10%	3,07±10%

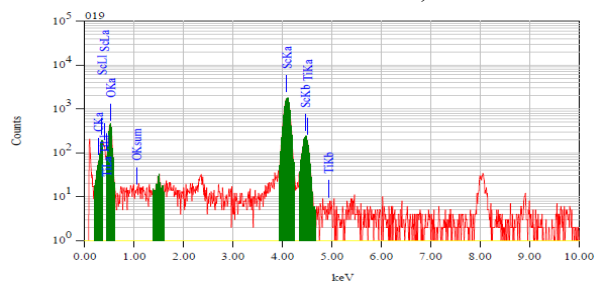
Ti49-Al49-Sc2 үлгісінің локальді учаскелерінің спектрлері 27 суретте келтірілген.



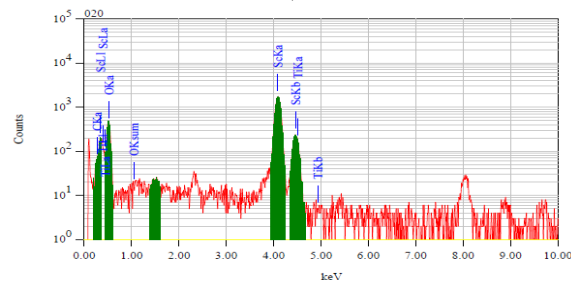
а)



ә)



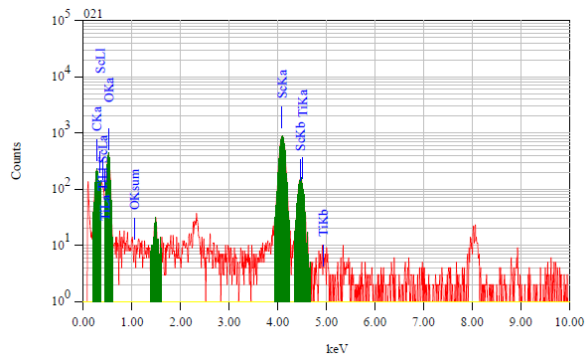
б)



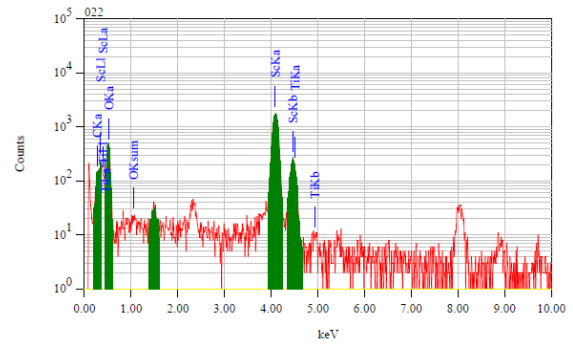
в)

017 (а), 018 (ә), 019 (б), 020 (в)

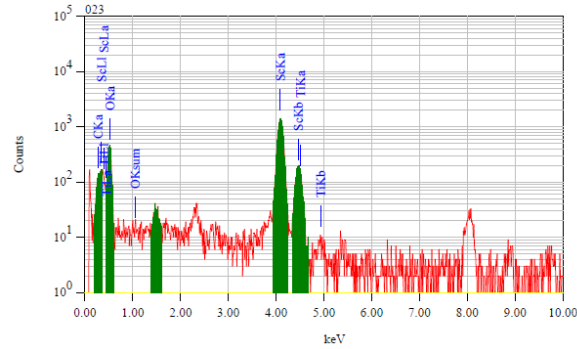
27 сурет - Ti49-Al49-Sc2 үлгісінің локальді учаскелерінің спектрлері, 1 парақ



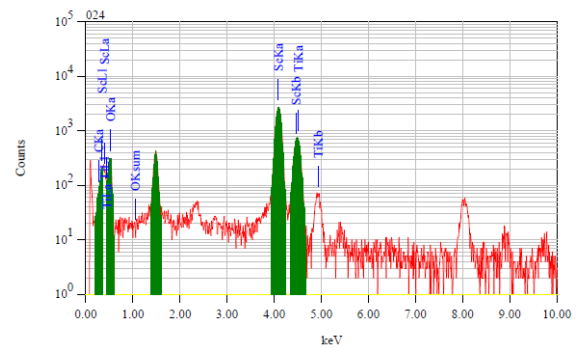
а)



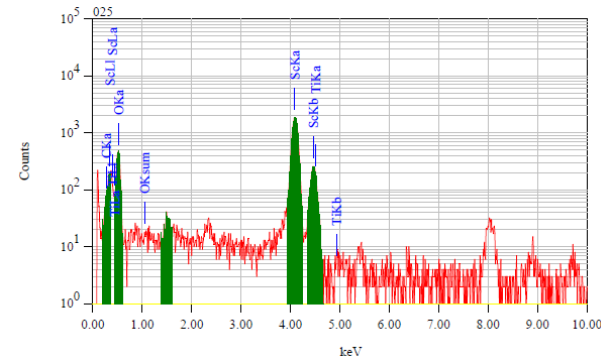
а)



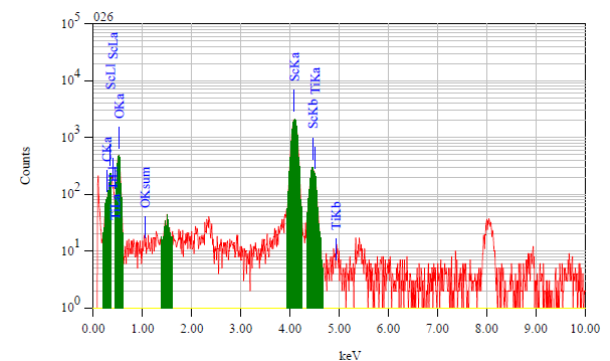
б)



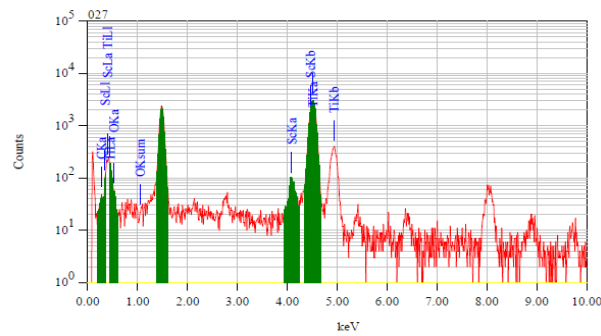
в)



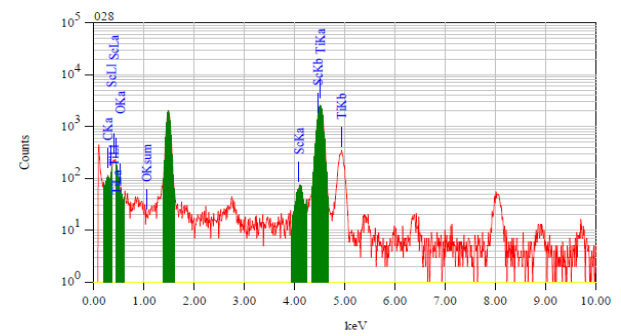
г)



д)



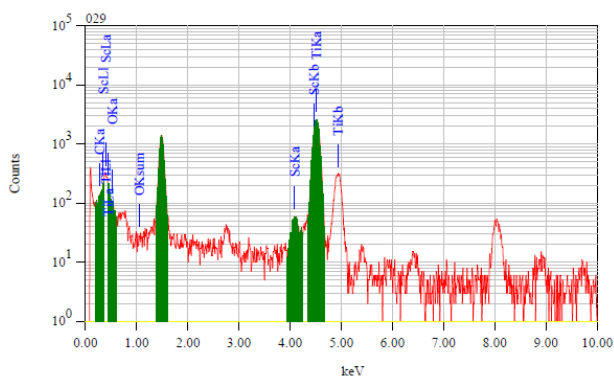
е)



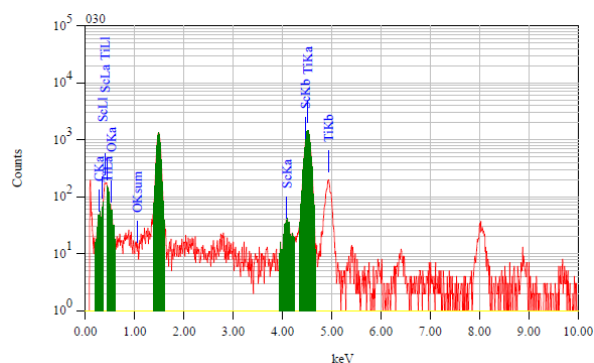
ж)

021 (а), 022 (а), 023 (б), 024 (в), 025 (г), 026 (д), 027 (е), 028 (ж)

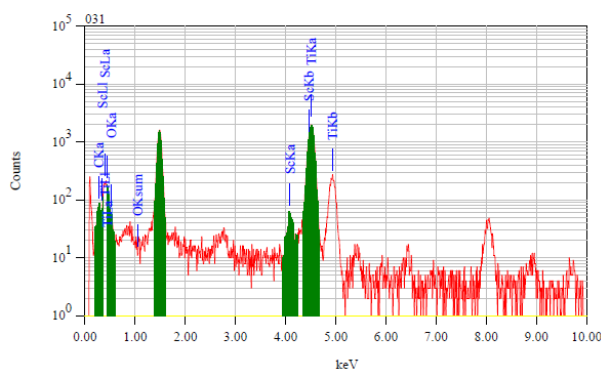
27 сурет, 2 парақ



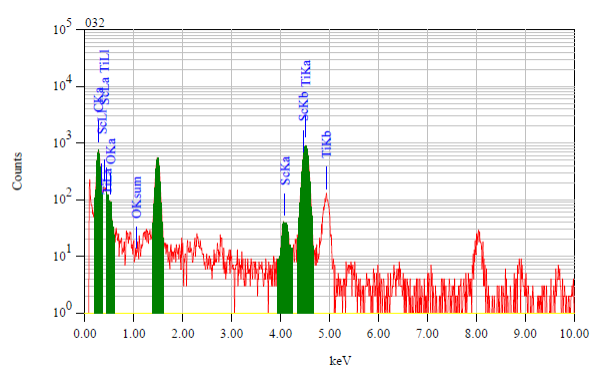
a)



ә)



б)



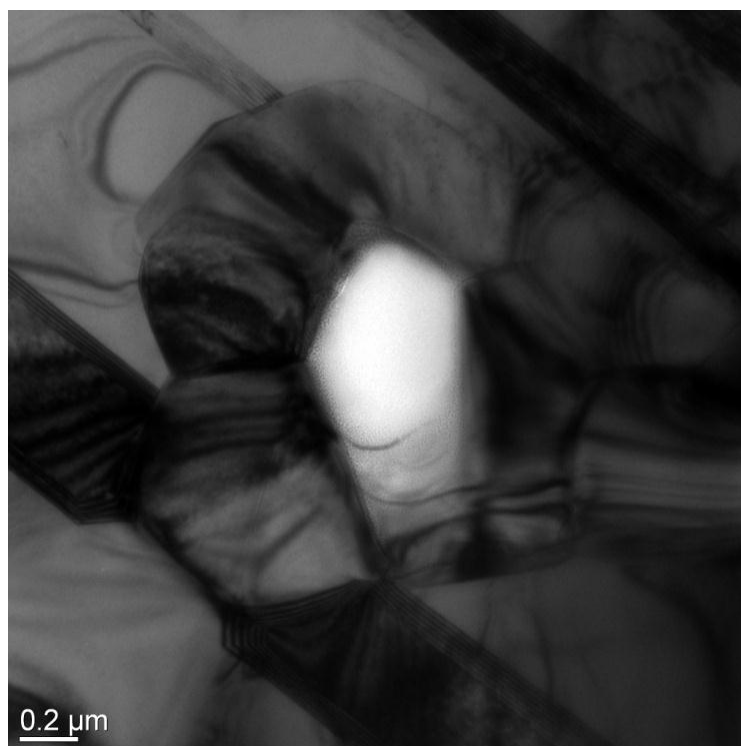
в)

029 (a), 030 (ә), 031 (б), 032 (в)

27 сурет, 3 парақ

Локальді нүктелерде элементті анализді жүргізу барысында тізбектегі скандий бөлінділерінің массалық үлесі 49-60 ат.% құрайтындығы көрсетілді (12 кесте). Тізбектегі Тi үлесі 10,39 ат.%-нан аспайды, ал Al – 9,10 ат.% -нан аспайды. Сонымен қатар, үлкен мөлшерлерде O элементі бар және оның үлесі шамамен 45 ат.% құрайды.

Сұр пластиналық облыстарда көлемдік үлесі 62,06 ат.%-дан асатын Тi элементінен бөлек, Al (43,57 ат.%-ға дейін), O (3,84 ат.%) және жеке облыстарда мөлшері 80,06 ат. %-ға дейін жететін C болады. Осылайша, анализден сұр пластиналық облыстар титан және алюминиймен байытылған, ал тізбек скандиймен байытылған деген қорытынды шығаруға болады. Скандий бөлінділерінің өлшемдері 0,6-0,8 мкм құрайды (28 сурет). Бөлшектердің түзілуі құрылымда үлкен кернеу тудырады, бірақ дөрекі макродефектілер, ойыстар болмайды.



28 сурет - Дислокациялардың реттеліп таралуы көрсетілген электронды-микроскопиялық сурет

Sc ендірілуі пластикалық деформацияның жетілуін тежейтін және сол арқылы материалдың беріктілігін арттыратын дислокациялардың пайда болуына және шиеленіскен күйдің түзілуіне әкеп соғуы мүмкін.

Энергодисперсиялық анализ мәліметтеріне сүйенсек, құйма матрицасының әр түрлі дәндерінде (027 мен 033 спектр алалығында) Sc концентрациясы 0,35 ат.%-ден 61,00 ат.%-ға дейін өзгертіндігі, Ti концентрациясы 0,04 ат.%-ден 62,06 ат.%-ға дейін, ал Al концентрациясы 0,15 ат.%-ден 43,57 ат.%-ға дейін өзгертіндігі белгілі болды.

Скандийдің атомдық радиусы (2,09 Е) титанның атомдық радиусынан (2 Е) 4%-ға ерекшеленетіндіктен, Sc титанның орнын басып қатты ерітінділер түзеді әрі фазалардың қараңғы және жарық учаскелері бар химиялық құрамы шамамен бірдей видманштет микроқұрылымының түзілуіне жағдай жасайды (30 сурет). ТЭМ әдісінің зерттеулерінің нәтижелері Sc өте аздаған мөлшері Ti_3Al кристаллиттерінде ериді және $Ti_3(Al, Sc)$ қосылысы күйінде болады делінген рентгенфазалық анализ мәліметтерімен сәйкес келеді. Алынған нәтижелер [96, 97] жұмыстарының мәліметтерімен сәйкес келеді. Скандийдің титан-алюминий матрицасында бірыңғай таралуы үшкомпонентті жүйенің түзілгендігін растайды.

Осылайша, жүргізілген зерттеулер зерттелетін құйма қатты ерітіндісінің құрылымында жаңа фазаның бөлшектері болатындығын көрсетті. Сонымен қатар, құймаларды Sc металдарымен легирлегеннен кейін жаңа Ti_2Al_5 фазасы пайда болатындығы және Ti_3Al мен $TiAl$ фазаларының массалық үлесі едәуір жоғарылайтындығы (>52%) белгілі. Титан-алюминий матрицасында скандийдің

біркелкі таралуы $Ti_3(Al,Sc)$ үш компонентті жүйенің пайда болу мүмкіндігін көрсетеді [187].

3.1.3 TiAl құймасының құрылымды-фазалық құрамына Y әсерін зерттеу нәтижелерін талқылау

12 кестеде негізгі фазалардың құрылымдық параметрлерінен бөлек, торлардың көлемдері, интегралды интенсивтілікке жекелеген фазалардың үлестері және есептелген интегралды интенсивтіліктің эксперименттік дифрактограммаларға ұқсастық критерийі келтірілген.

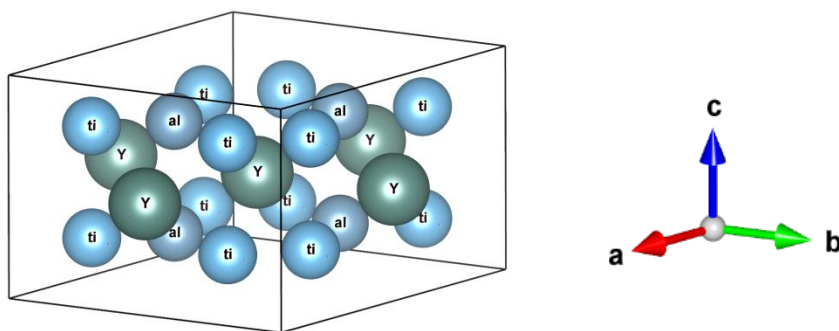
12 кесте - Торлардың құрылымдық параметрлері мен фазалар үлесі, Ti49-Al49-Y2 құймасының ұқсастық критерийі

Фаза	Күй	a, Å	b, Å	c, Å	альфа	бета	гамма	V, Å ³	Кеңістіктік топ	Үлес %	E, eV	Rwp, %
AlTi ₃ -2768	Init.	5.764	5.764	4.664	90.00	90.00	120.00	132.56	P6/mmm,	28.99	-19,603.151	6.317
	Spec.	5.736	5.736	4.626	90.00	90.00	120.00	131.828	Hexagonal			
AlTi-2770	Init.	2.837	2.837	4.059	90.00	90.00	90.00	32.677	P4/mmm,	41.04	-1660.340	
	Spec.	2.824	2.824	4.070	90.00	90.00	90.00	32.466	Tetragonal			
TiAl-Struct2	Init.	6.339	4.150	4.234	113.36	93.36	92.52	101.791	P1, Triclinic	29.97	-4954.073	
	Spec.	6.245	4.128	4.319	114.67	91.27	93.84	100.802				

Y қосындылары бар TiAl (AlTi₃-2768) торлары (кесте 12) тұрақты, тор энергиясы айтарлықтай теріс. Бұл жұмыста Ti-Al-Y жүйесінің сапалы фазалық анализінің нәтижелері негізінде, Y қосындылары AlTi₃ құймасының [0,5 0,5 0,5] аралық түйініне енеді деп болжанды. Бастапқы күйдегі AlTi₃, сондай-ақ көрсетілген түйінге ендірілген қосындылары бар кездегі AlTi₃ энергиясының кванттық-химиялық есептеулері жүргізілді.

$E_{AlTi_3-Y} = -19712.792$ эВ екендігі анықталды. Есептеулер көрсетілген түйін аралығына қосындыларды енгізу мүмкін екенін көрсетті және бұл TiAl-Y жүйесіндегі торларды тұрақтандыру эффектісіне әкеледі. Y қосындылары бар торлардағы атомдардың байланыс энергиясы ($|E_{AlTi_3}|$) едәуір жоғарылағаны анықталды. Байланыс энергиясының жоғарылауы Милликен зарядтарының едәуір поляризациясымен қатар жүретіндігін атап өту керек [177, 178]. Y қоспаларындағы Милликен зарядтары $[(-5.96) Y]$, ал Ti49-Al49-Y2 үштік қосылыстарындағы негізгі элементтер атомдарында $[(-0.16) Al, (+1.540) Ti]$ тең. Зарядтар Кулон бірліктерінде келтірілген, бірдей типтегі атомдарда зарядтардың таралуы біркелкі. Көрсетілген жүйелердегі зарядтардың поляризациясы индивидуальді, себебі қосындыларда мөлшерден тыс болған теріс зарядтар да, Милликеннің оң зарядтары да концентрленуі мүмкін. Негізгі Ti, Al элементтері мен Y қосындылары атомдарының арасындағы арақашықтық талдауы көрсеткендей, бұл арақашықтықтар сәйкесінше 1,6, 1,21, 1,90 тең бос Ti, Al және Y элементтері ковалентті радиустарының қосындысынан едәуір аз [172]. Зарядтың поляризациясы Y қоспасын енгізу нәтижесінде ковалентті байланыс үлесінің жоғарылағандығын көрсетеді.

Ti49-Al49-Y2 жүйелерінің тәжірибелік дифрактограммалары есептелген интегралды қарқындылықпен жақсы жуықталған, олардың арасындағы айырмашылық елеусіз мәнге ие (29 сурет). Y қосындыларын енгізу гексагональді, триклинді жүйелер үлестерінің қайта бөлінуіне әкеледі. TiAl-Y жүйелерінде геометриялық оңтайландырылған тордың (TiAl-Struct2-GeomOpt) үлесі жоғалды және тетрагоналды торы бар AlTi фазасы пайда болды (кесте 12). Ti49-Al49-Y2 жүйесінде Y қосу сәйкесінше AlTi₃ үлесінің 16,66% дейін төмендеуіне әкеледі. Фазалар үлесі мен торлар энергиясы Ti49-Al49-Y2 жүйесінің тиімді энергиясын $\alpha E1 + \beta E2 + \gamma E3$ формуласы бойынша бағалауға мүмкіндік береді, мұндағы α, β, γ – фазалардың үлесі, E1, E2, E3 – жеке фазалардың торларының энергиясы. Көрсетілген жүйелердің энергиясы сәйкесінше -7341.104 эВ тең болатыны анықталды. Алынған нәтижелерден Y қосындысын енгізу TiAl торының тиімді энергиясын едәуір арттырады деген қорытынды шығады. Енгізілген Y атомы бар AlTi торындағы атомдардың салыстырмалы координаталары 13 кестеде келтірілген.



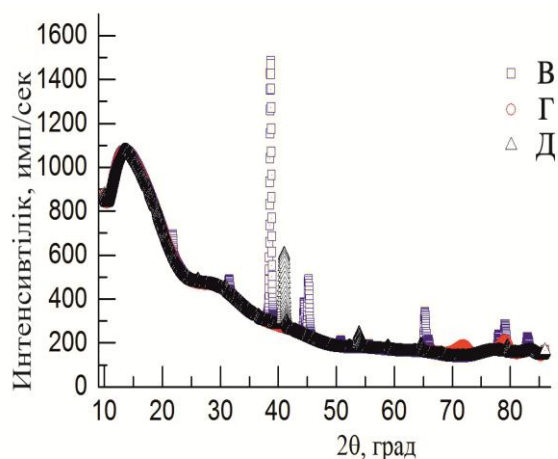
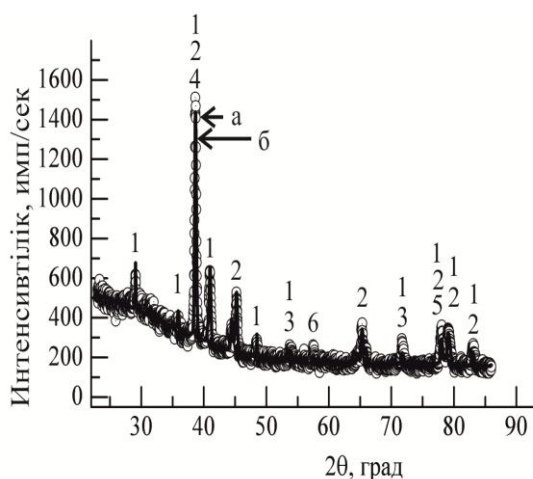
29 сурет - [0.5 0.5 0.5] түйініне ендірілген Y атомы бар AlTi₃ құймасының 3 D торы.

13 кесте - Енгізілген Y атомы бар AlTi (AlTi₃-2768 – гексагональді сингониялы Ti₃Al фазасы) торындағы атомдардың салыстырмалы координаталары.

Элемент	x	y	z	U_iso	Жүктеме
Ti	0.833	0.167	0.25	0.0127	1
Al	0.333	0.667	0.25	0.0127	1
Y	0.5	0.5	0.5	0.0127	1

РФА деректері бойынша Ti49-Al49-Y2 құймасының негізгі фазасы Ti₃Al₅. Ti₃Al₅ фазасы ромбалық кристалды тор және P/mmm кеңістіктік тобына ие. Құйманың құрылымында Ti₃Al₅ дәндерімен қоса ГТҚ кристалды торы мен R63/mmc кеңістіктік тобына ие Ti₃Al фазасының дәндерінің аз мөлшері бар. Аз бөлігін TiAl, Al, α -Ti, Y фазалары құрайды.

Иттриймен легирлеу нәтижесінде алынған үлгілердің (Ti49-Al49-Y2) рентгенфазалық анализі 30-суретте көрсетілген.



а – тәжірибе, ә – жалпы модельді интенсивтілік. б, в, г - жеке фазалардың интегральді интенсивтілікке қосатын үлесі

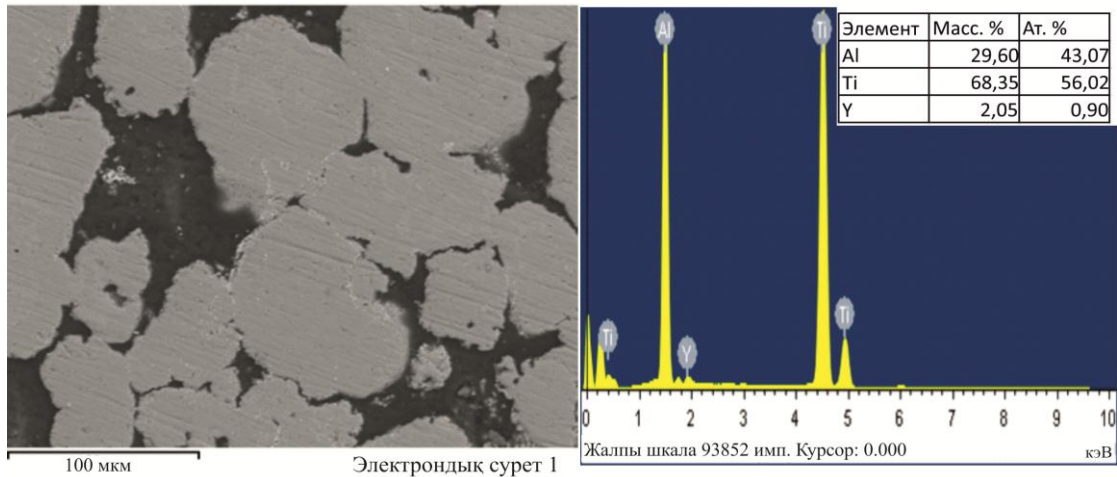
Ескерту: 1 - Ti_3Al , 2- Ti_3Al_5 , 3 - Ti , 4 – Al , 5 – $TiAl$, 6 – Y .

30 сурет - Алынған $Ti_{49}Al_{49}Y_2$ композиционды материалының дифрактограммасы

$Ti_{49}Al_{49}Y_2$ үлгісінде келесідей интерметаллидтік фазалар идентифицирленген: тор параметрлері $a=4,0040 \text{ \AA}$, $b=4,0049 \text{ \AA}$, $c=4,0710 \text{ \AA}$ және КШО өлшемі $134 \pm 5 \text{ \AA}$, 70,3% Ti_3Al_5 фазасы (кеңістіктік тобы P/mmm); тор параметрлері $a=b=5,7661 \text{ \AA}$, $c=4,6371 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $R\bar{6}3/mmc$ және КШО өлшемі $134 \pm 5 \text{ \AA}$ тетрагональді сингониялы көлемненорталықтандырылған торы бар 18,3% Ti_3Al фазасы; тор параметрлері $a=b=2,8295 \text{ \AA}$, $c=4,0696 \text{ \AA}$ және КШО өлшемі $33 \pm 5 \text{ \AA}$, құрамы $TiAl$ тетрагональді сингониялы (кеңістіктік тобы $P4/mmm$) 1,3% титан алюминиді; параметрлері $a=b=2,8900 \text{ \AA}$, $c=4,6461 \text{ \AA}$ кеңістіктік тобы $R\bar{6}3/mmc$, КШО өлшемі $34 \pm 5 \text{ \AA}$ құрайтын гексагональді сингониялы 1,2% $\alpha-Ti$ фазасы; тор параметрлері $a=b=c=4,0311 \text{ \AA}$, $b=4,0232 \text{ \AA}$, $c=4,0253 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $Fm\bar{3}m$, КШО өлшемі $66 \pm 5 \text{ \AA}$ 8,6% Al фазасы; тор параметрлері $a=b=3,6689 \text{ \AA}$, $c=5,7302 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $R\bar{6}3/mmc$ және КШО өлшемі $67 \pm 5 \text{ \AA}$ 0,3% Y .

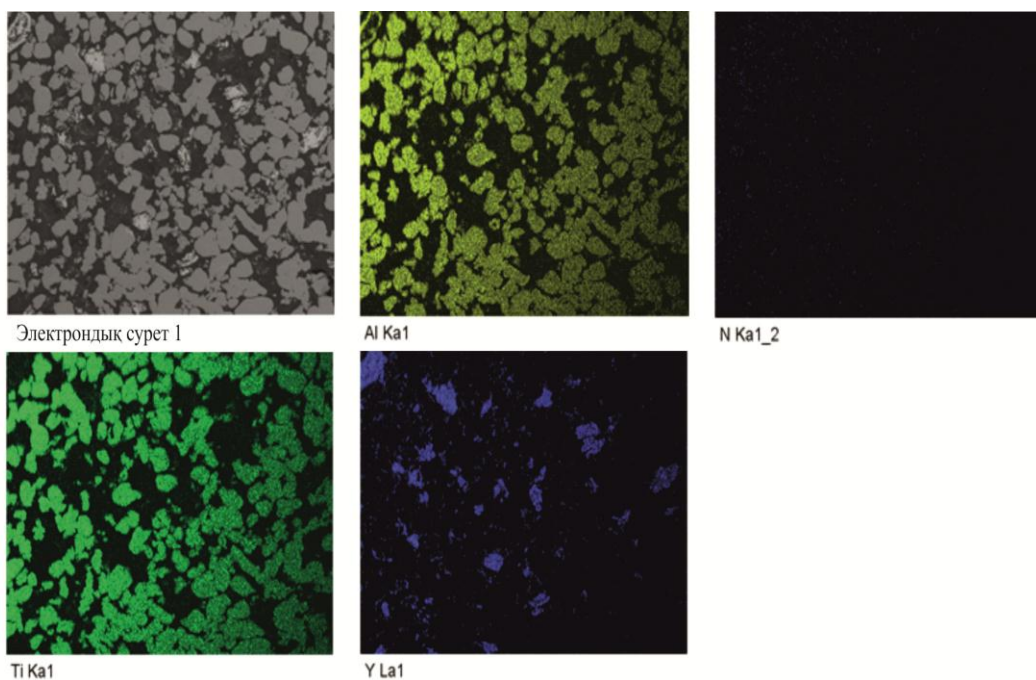
Микрорентгенспектральді анализдің көмегімен беттік қабат микрошлифінің әр түрлі учаскелеріндегі құйманың химиялық құрамын анықтадық (31 сурет). Компоненттердің құрамын атомдық және массалық проценттерде анықтадық. Микрорентгенспектральді анализ мәліметтеріне сүйенсек, концентрациялық өзгерістер зонасының жалпы ені шамамен 100 мкм құрайды.

Сипаттамалық өзіне тән рентгендік сәулеленуі бар $Ti_{49}Al_{49}Y_2$ құймаларының микроқұрылымы 31 суретте көрсетілген.



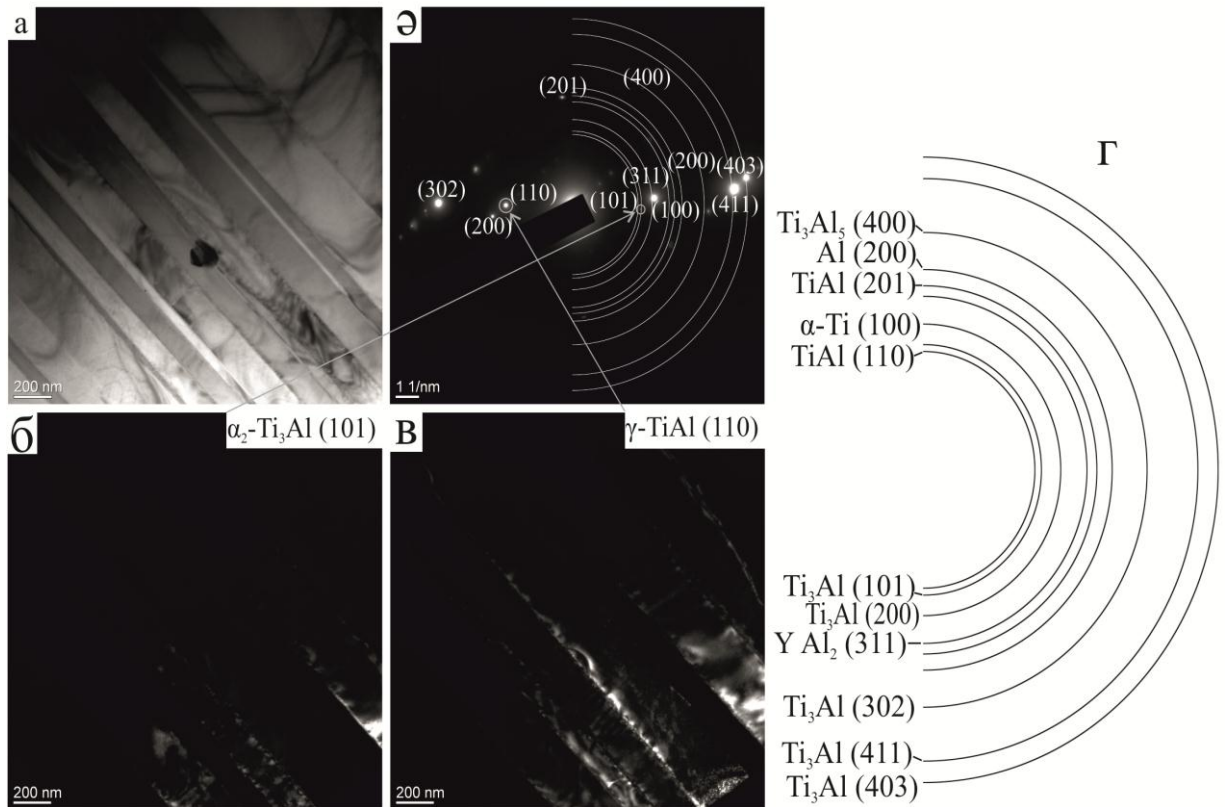
31 сурет - Ti49-Al49-Y2 құймасының микроқұрылымы, EDX спектрлері және элементтік құрамы

Сандық талдау Ti49-Al49-Y2 құймасының мынадай орташа атомдық проценттік құрамы бар екендігін көрсетті: 43,07% Al және 56,02% Ti, бұл стехиометриялық қатынас α_2 -Ti₃Al интерметаллидтік фазасына сәйкес келеді (31 сурет). α_2 - Ti₃Al фазасы жарық қосындыларымен көрсетілген. Үлгі кеукті, сондықтан дөңгелек пішінді. Ti₃Al дәндері едәуір ликвациямен сипатталады: олардың орталық бөлігі иттрийдің анағұрлым жоғары концентрациясымен байытылған және оларға жарық аймақтар сәйкес келеді, ал фаза шекаралары отқа төзімді төменірек Ti-мен байытылған (32 сурет).



32 сурет - Ti49-Al49-Y2 i49-Al49-Y2 құймасындағы элементтердің таралу картасы

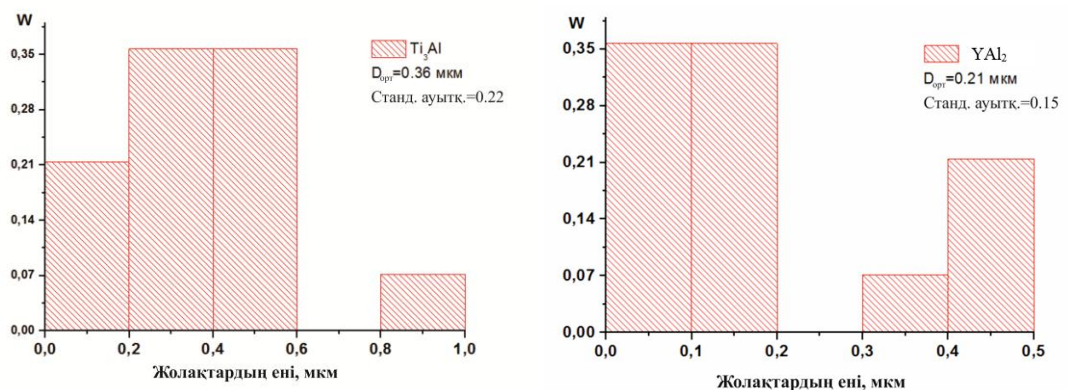
33-суретте Ti49-Al49-Y2 құймасының электронды микроскопиялық суреттері көрсетілген. Микродифракциялық суретте (33ә-сурет) (110) және (201) TiAl, (101), (200), (302), (411) Ti₃Al, (400) Ti₃Al₅, (311) YAl₂, (100) α-Ti және (200) Al жазықтықтарына тиесілі рефлексстер бар. Осылайша, РФА нәтижелерін ТЭМ растайды.



a – жарық өрісті кескін; *ә* – микродифракциялық сурет; *б*, *в* – көрсеткішпен белгіленген рефлексстердегі қараңғы өрісті кескін; *г* – микродифракциялық суреттің идентификациясы

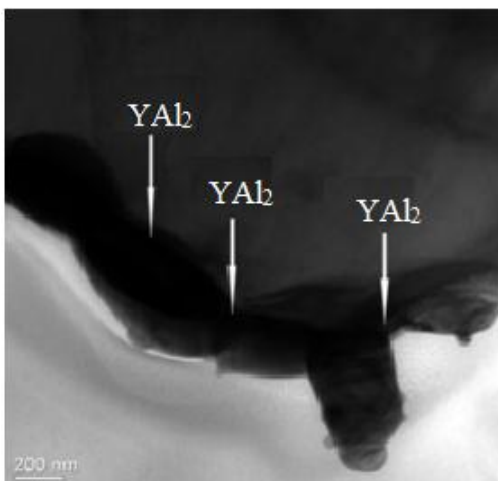
33 сурет - Ti49-Al49-Y2 құймасының электронды-микроскопиялық суреті

ТЭМ деректері бойынша жарық жолақтардың ені 0,36 мкм, ал қараңғы жолақтардың ені 0,21 мкм тең (34 сурет).



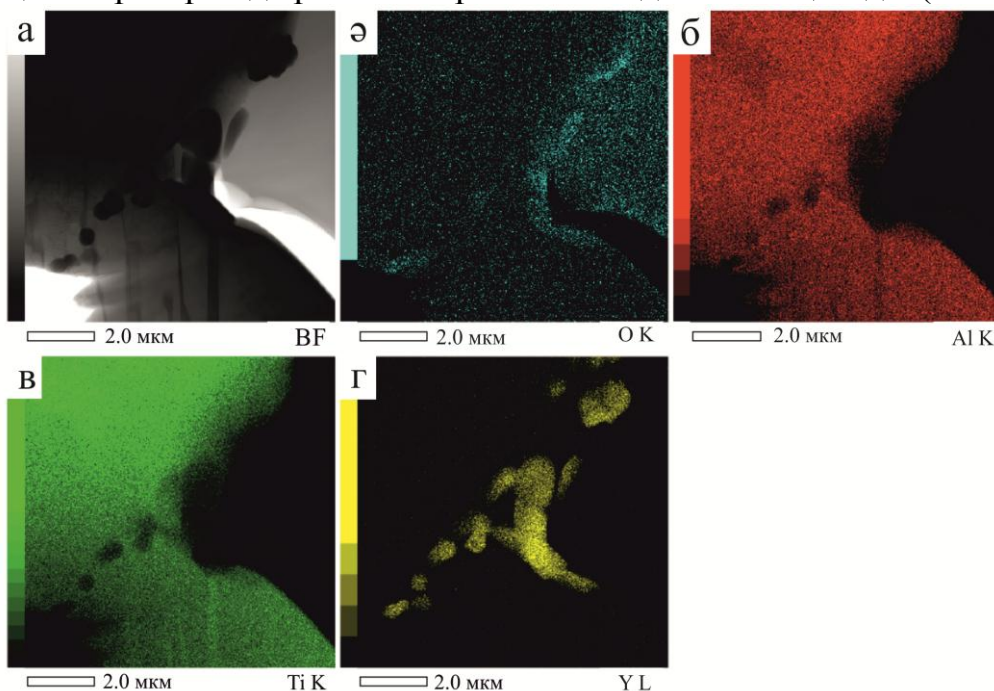
34 сурет - Орташа өлшемдердің таралу гистограммасы

35 суретте титан алюминиді дәнінің ішіндегі әр түрлі формадағы иттрий бөлшектерінің тұнбаларының ТЭМ суреттері көрсетілген. ТЭМ нәтижелері бойынша иттрий интерметаллидік фазаларда Al-мен YAl_2 интерметаллидің түзеді және олар дислокацияларда немесе дәндер шекараларында орналасады. Алынған нәтижелер [184] жұмыстың мәліметтерімен сәйкес келеді. YAl_2 негізіндегі фазалар шамамен 20 %-ға дейін Ti ериді, $TiAl$ (γ) 1.25% Y ерітетіні көрсетілген (19а сурет).



35 сурет - $Ti_{49}-Al_{49}-Y_2$ құймасының микроқұрылымы

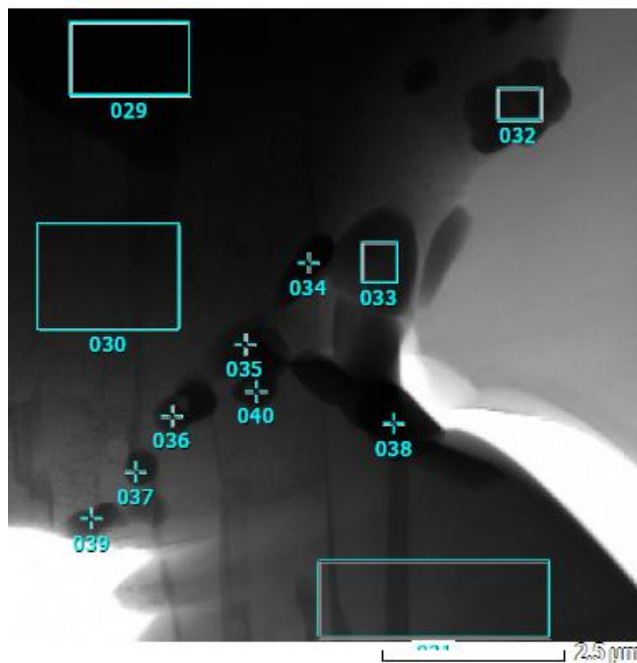
Энергодисперсиялық спектральды микроанализді қосымшасымен ТЭМ анализін жүргізген кезде иттрий бөлінділері дән көлемінде хаостық түрде таралмайтындығы, бірақ дислокацияда немесе отқа төзімді қосылыс түрінде дәндердің шекараларында реттеліп орналасатындығы анықталды (36 сурет).



а) жарықкөрісті кескін; б-г) жарықкөрісті кескінге сәйкес элементтердің материал бойынша таралуы (а);

36 сурет - Электронды микроскопиялық кескін

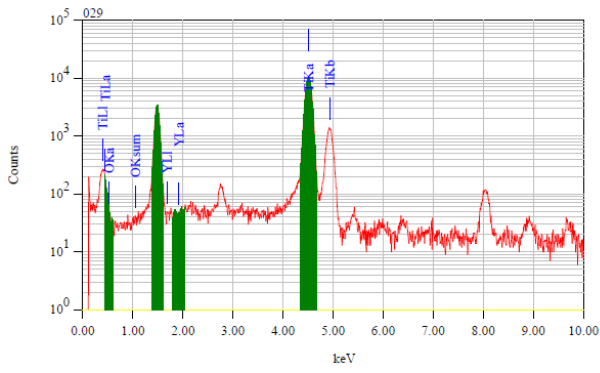
Энергодисперсиялық микроанализ көмегімен микроқұрылымның локальді анализін жүргізгенде пластиналық дәндер массалық құрамы α_2 -Ti₃Al фазасына сәйкес келетін титан мен алюминийден тұратындығы анықталды. Иттрий бөлшектері 039-040 спектрлерінде ең көп үлесті құрайтындықтан, дәлірек айтқанда шамамен 12,77 ат.%-дан 72,58 ат.%-ға дейін болғандықтан, қараңғы облыстарға иттрий бөлшектері сәйкес келеді (37, 38 сурет және 14 кесте).



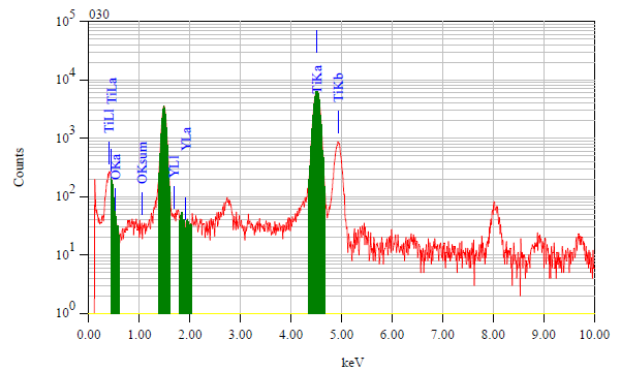
37 сурет - Фазалық контраст режиміндегі ТЭМ кескіні

14 кесте - Ti49-Al49-Y2 құймасының элементтік құрамы

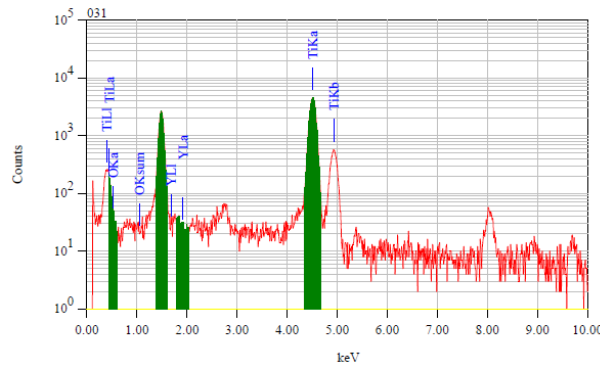
Спектр нөмері	Элементтік құрам			
	Атомдық үлесі, %			
	Ti	Al	Y	O
029	75,45±10%	24,19±10%	-	0,36±10%
030	65,07±10%	34,70±10%	0	0,23±10%
031	62,93±10%	36,16±10%	0	0,92±10%
032	38,17±10%	27,52±10%	20,09±10%	14,22±10%
033	27,14±10%	21,92±10%	39,65±10%	11,28±10%
034	46,37±10%	28,25±10%	24,00±10%	1,38±10%
035	51,57±10%	34,48±10%	12,77±10%	1,18±10%
036	43,14±10%	32,55±10%	21,97±10%	2,34±10%
037	34,01±10%	26,96±10%	35,19±10%	3,84±10%
038	8,55±10%	3,32±10%	72,58±10%	15,55±10%
039	3,23±10%	1,70±10%	60,99±10%	34,08±10%
040	40,13±10%	19,05±10%	28,08±10%	12,74±10%



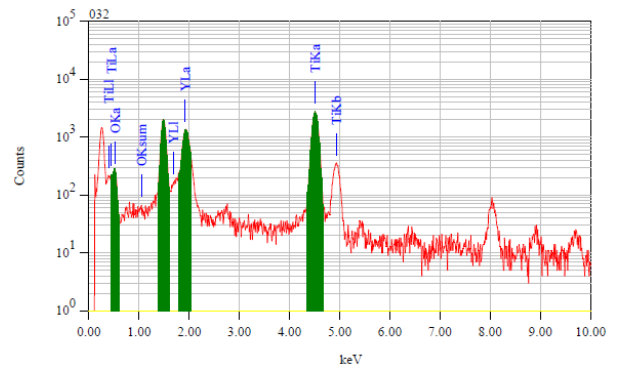
а)



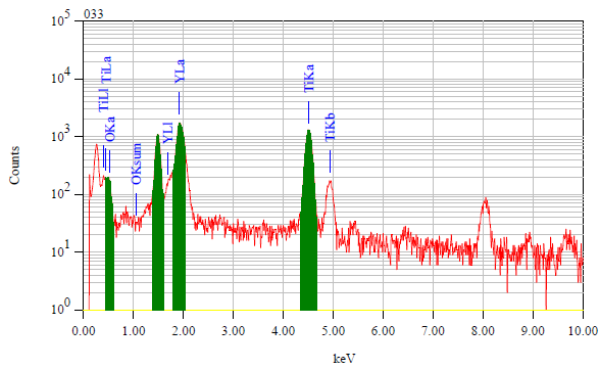
ә)



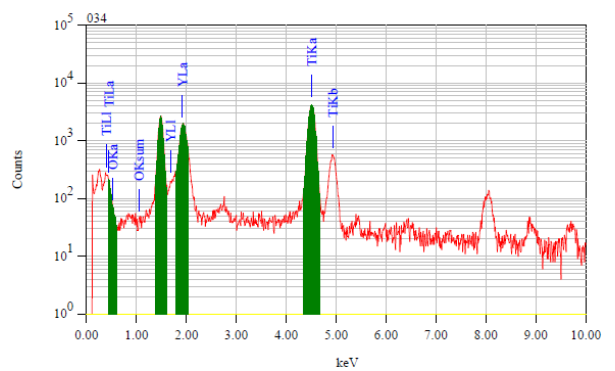
б)



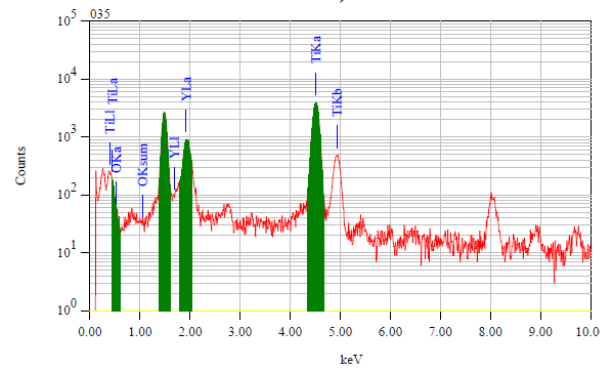
в)



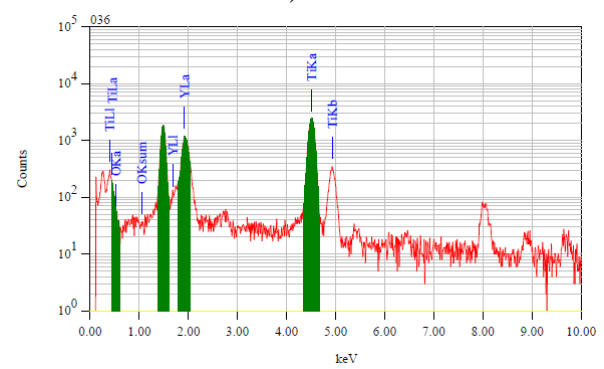
г)



ф)



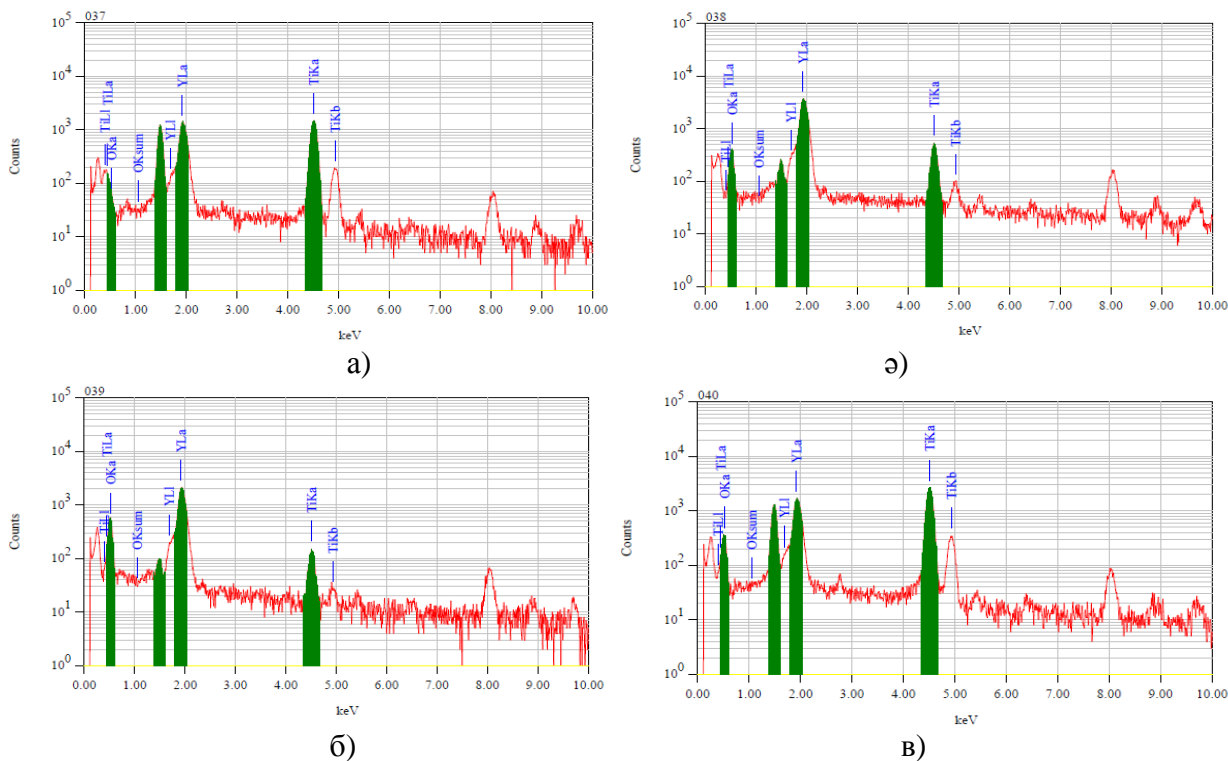
д)



ж)

029 (а), 030 (ә), 031 (б), 032 (в), 033 (г), 034 (ф), 035 (д), 036 (ж)

38 сурет - $Ti49-A149-Y2$ үлгісінің локальді учаскелерінің спектрлері, 1 парақ



037 (а), 038 (ә), 039 (б), 040 (в)

38 сурет, 2 парак

Сонымен бастапқы Ti50-Al50 үлгісімен салыстырғанда, Ti49-Al49-Y2 құймасының құрамында Ti₅Al₁₁ және TiAl₂ фазалары болмайды. Сонымен қатар, Ti49-Al49-Y2 құймасының негізгі фазасы – Ti₃Al₅ фазасы. Дислокацияларда немесе дәндрдің шекарасында реттеліп орналасатын YAl₂ жаңа фазасы қалыптасады.

3.1.4 TiAl құймасының құрылымдық-фазалық құрамына Dy әсерін зерттеу нәтижелерін талқылау

Негізгі фазалардың құрылымдық параметрлері, торлардың көлемдері, интегралды интенсивтілікке жекелеген фазалардың үлестері және есептелген интегралды интенсивтіліктің эксперименттік дифрактограммаларға ұқсастық критерийі 15 кестеде келтірілген.

15 кесте - Торлардың құрылымдық параметрлері мен фазалар үлесі, Ti49-Al49-Dy2 құймасының ұқсастық критерийі

Фаза	Күй	a, Å	b, Å	c, Å	альфа	бета	гамма	V, Å ³	Кеңістіктік топ	Үлес, %	E, eV	Rwp, %
AlTi ₃ -2768	Init.	5.764	5.764	4.664	90.00	90.00	120.00	132.56	P6/mmm,	14.64	-	31,228.526
	Spec.	5.771	5.771	4.657	90.00	90.00	120.00	134.34	Hexagonal			
AlTi-2770	Init.	2.837	2.837	4.059	90.00	90.00	90.00	32.677	P4/mmm,	65.04	-1660.341	6.504
	Spec.	2.826	2.826	4.074	90.00	90.00	90.00	32.537	Tetragonal			
TiAl-Struct2-GeomOpt	Init.	6.339	4.145	4.234	113.36	93.36	92.52	101.79	P1, Triclinic	20.32	-4978.606	
	Spec.	6.294	4.139	4.260	115.23	92.72	91.94	100.09				

Ду қосындылары бар TiAl (AlTi₃-2768) торлары (15 кесте) тұрақты, тор энергиясы айтарлықтай теріс. Бұл жұмыста Ti-Al-Y жүйесінің сапалы фазалық анализінің нәтижелері негізінде, Ду қосындылары AlTi₃ құймасының [0,5 0,5 0,5] аралық түйініне енеді деп болжанды. Бастапқы күйдегі AlTi₃, сондай-ақ көрсетілген түйінге ендірілген қосындылары бар кездегі AlTi₃ энергиясының кванттық-химиялық есептеулері жүргізілді. $E_{\text{AlTi}_3-\text{Y}} = -31227.561$ эВ екендігі анықталды. Есептеулер көрсетілген түйінаралығына қосындыларды енгізу мүмкін екенін көрсетті және бұл TiAl-Y жүйесіндегі торларды тұрақтандыру эффектісіне әкеледі. Ду қосындылары бар торлардағы атомдардың байланыс энергиясы ($|E_{\text{AlTi}_3}|$) едәуір жоғарылағаны анықталды. Байланыс энергиясының жоғарылауы Милликен зарядтарының едәуір поляризациясымен қатар жүретіндігін атап өту керек [177, 178]. Y қоспаларындағы Милликен зарядтары [(+0.73)Du], ал Ti49-Al49-Du2 үштік қосылыстарындағы негізгі элементтер атомдарында [(-0.17)Al, (-0.13)Ti] тең. Зарядтар Кулон бірліктерінде келтірілген, бірдей типтегі атомдарда зарядтардың таралуы біркелкі. Көрсетілген жүйелердегі зарядтардың поляризациясы индивидуальді, себебі қосындыларда мөлшерден тыс болған теріс зарядтар да, Милликеннің оң зарядтары да концентрленуі мүмкін. Негізгі Ti, Al элементтері мен Ду қосындылары атомдарының арасындағы арақашықтық талдауы көрсеткендей, бұл арақашықтықтар сәйкесінше 1.6, 1.21, 1.92 Å тең бос Ti, Al және Y элементтері ковалентті радиустарының қосындысынан едәуір аз [179]. Зарядтың поляризациясы Y қоспасын енгізу нәтижесінде ковалентті байланыс үлесінің жоғарылағандығын көрсетеді.

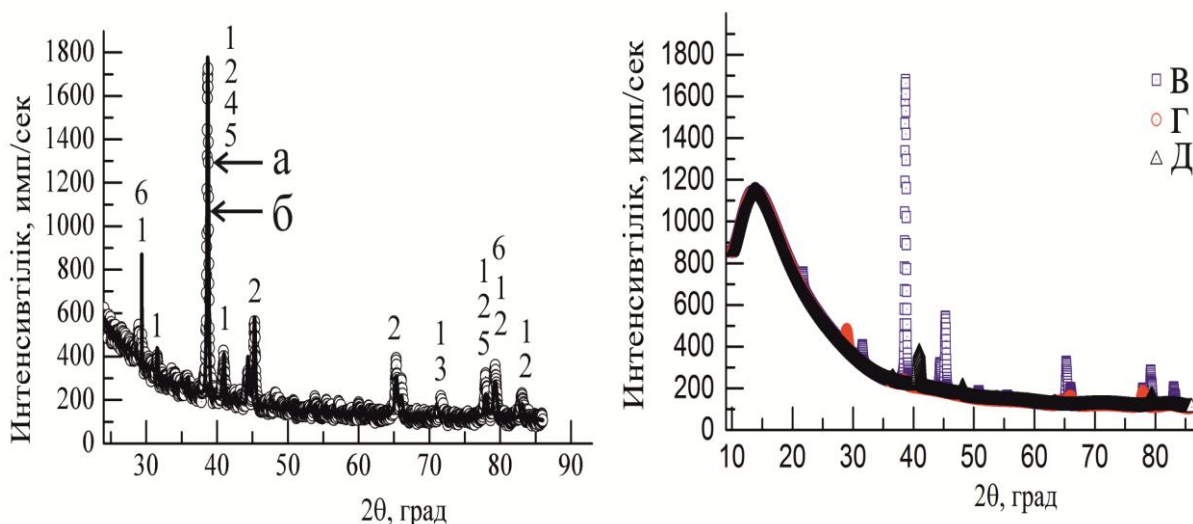
Ti49-Al49-Du2 жүйелерінің тәжірибелік дифрактограммалары есептелген интегралды интенсивтілікпен жақсы жуықталған, олардың арасындағы айырмашылық елеусіз мәнге ие (39 сурет). Y қосындыларын енгізу гексагональді, триклинді жүйелер үлестерінің қайта бөлінуіне әкеледі. TiAl-Du жүйелерінде геометриялық оңтайландырылған тордың (TiAl-Struct2-GeomOpt) үлесі жоғалды және тетрагоналды торы бар AlTi фазасы пайда болды (15 кесте). Ti49-Al49-Du2 жүйесінде Y қосу сәйкесінше AlTi₃ үлесінің 11,20% дейін төмендеуіне әкеледі. Фазалар үлесі мен торлар энергиясы Ti49-Al49-Y2 жүйесінің тиімді энергиясын $\alpha E_1 + \beta E_2 + \gamma E_3$ формуласы бойынша бағалауға мүмкіндік береді, мұндағы α , β , γ – фазалардың үлесі, E_1 , E_2 , E_3 – жеке фазалардың торларының энергиясы. Көрсетілген жүйелердің энергиясы сәйкесінше -15920.023 эВ тең болатыны анықталды. Алынған нәтижелерден Y қосындысын енгізу TiAl торының тиімді энергиясын едәуір арттырады деген қорытынды шығады. Енгізілген Ду атомы бар AlTi торындағы атомдардың салыстырмалы координаталары 16 кестеде келтірілген.

16 кесте - Енгізілген Dy атомы бар AlTi (AlTi₃-2768–гексагональді сингониялы Ti₃Al фазасы) торындағы атомдардың салыстырмалы координаталары

Элемент	x	y	z	U_iso	Жүктеме
Ti	0.833	0.167	0.25	0.0127	1
Al	0.333	0.667	0.25	0.0127	1
Dy	0.5	0.5	0.5	0.0127	1

Ti49-Al49-Dy2 үлгілерінің рентгенфазалық зерттеу көрсеткіштері олардың күрделі көпфазалы құрылымға ие екендігін көрсетті: Al, α -Ti бастапқы компоненттері және жаңа фазалар - TiAl, Ti₃Al, Ti₅Al₁₁, Ti₃Al₅ интерметалдық фазалары анықталды. Ti49-Al49-Dy2 құймасының негізгі фазасы TiAl фазасы болып табылады, оның реттелген тетрагональді бұрмаланған қырынанорталықтандырылған құрылымы мен P4/mmm кеңістіктік тобы бар.

Диспрозиймен легирлеу нәтижесінде алынған үлгілердің (Ti49-Al49-Dy2) рентгенфазалық анализі 39-суретте көрсетілген.



а – тәжірибе, б – жалпы модельді интенсивтілік. в, г, д - жеке фазалардың интегральді интенсивтілікке қосатын үлесі

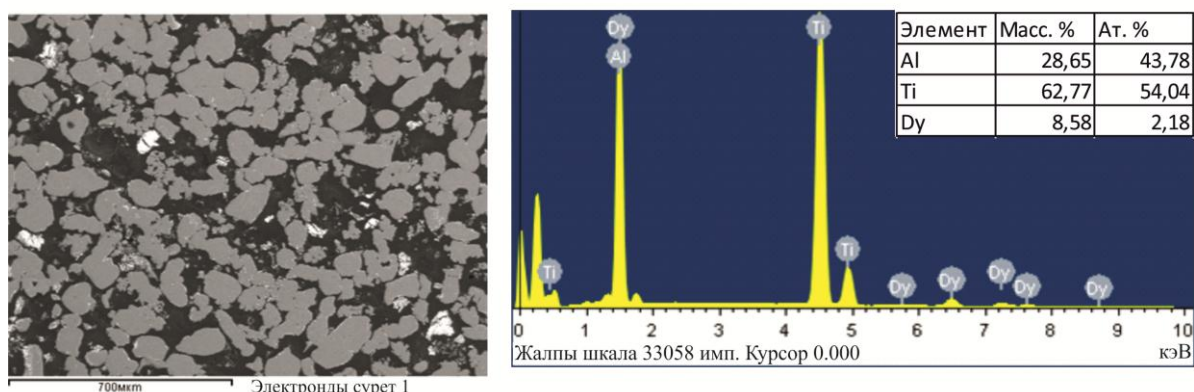
Ескерту: 1 – TiAl, 2 - Ti₃Al₅, 3 – TiAl₂, 4 – Ti₅Al₁₁, 5 – Ti₃Al, 6 – Dy.

39 сурет - Алынған Ti49-Al49- Dy2 композициялық материалының дифрактограммасы

Ti49-Al49-Dy2 үлгісінде келесідей фазалар анықталған: 74,3% торының параметрлері $a=b=2,8256 \text{ \AA}$, $c=4,0746 \text{ \AA}$ және КШО өлшемі $33 \pm 5 \text{ \AA}$ тетрагональді сингониялы TiAl титан алюминиді (кеңістіктік тобы $P4/mmm$); параметрлері $a=b=5,7574 \text{ \AA}$, $c=4,6468 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $P63/mmc$ және КШО өлшемі $133 \pm 5 \text{ \AA}$ тетрагональді сингониялы көлемнен орталықтандырылған торы бар 7,6% Ti₃Al фазасы. Азырақ үлесті торының параметрлері $a=12,0930 \text{ \AA}$, $b=4,0129 \text{ \AA}$, $c=3,9650 \text{ \AA}$, КШО өлшемі шамамен $192 \pm 5 \text{ \AA}$ тең 5% TiAl₂ фазасы (кеңістіктік тобы C/mmm); параметрлері $a=b=2,8900 \text{ \AA}$, $c=4,6461 \text{ \AA}$ кеңістіктік

тобы $R\bar{6}3/mmc$, КШО өлшемі $34 \pm 5 \text{ \AA}$ құрайтын гексагональді сингониялы α -Ti фазасы; тор параметрлері $a=b=c=4.0311 \text{ \AA}$, $b=4,0232 \text{ \AA}$, $c=4,0253 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $Fm\bar{3}m$, КШО өлшемі $66 \pm 5 \text{ \AA}$ 4,9% Al фазасы; торының параметрлері $a=3,7274 \text{ \AA}$, $b=3,9184 \text{ \AA}$, $c=4,1906 \text{ \AA}$, КШО өлшемі $61 \pm 5 \text{ \AA}$ 1,6% Ti_3Al_5 фазасы (кеңістіктік тобы P/mmm); торының параметрлері $a=b=3,8803 \text{ \AA}$, $c=16,6366 \text{ \AA}$, КШО өлшемі $265 \pm 5 \text{ \AA}$ 2,8% Ti_5Al_{11} (кеңістіктік тобы P/mmm); торының параметрлері $a=b=c=3,3007 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $Im\bar{3}m$, КШО өлшемі $36 \pm 5 \text{ \AA}$ 1,3% β -Ti фазасы; параметрлері $a=3,593 \text{ \AA}$, $c=5,654 \text{ \AA}$, гексагональді торы 1,1% Dy фазасы.

Сипаттамалық рентгендік сәулелену спектрлері бар Ti49-Al49-Dy2 құймасының микроқұрылымы 40 суретте көрсетілген.



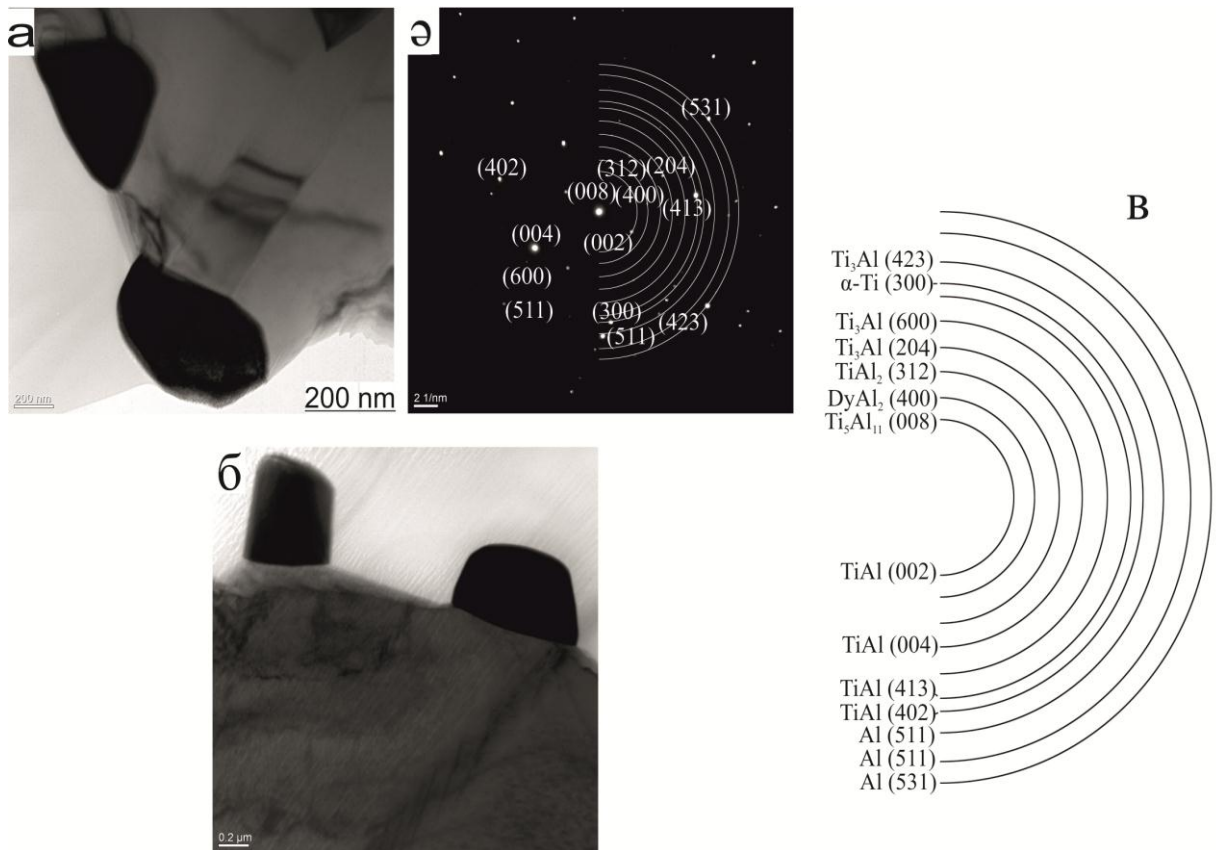
40 сурет - Ti49-Al49-Dy2 құймасының микроқұрылымы, EDX-спектрлері және элементтік құрамы

Материалда кеуектер бар, сондықтан РЭМ кескіндерінде түс градиенті байқалады. Сұр облыстар құймаға, қараңғы облыстар кеуекті кеңістікке сәйкес келеді. Кейде материалда СЖМ бар учаскелер (300 мкм дейін) пайда болып таралады. Жарық түсті облыстар сирек жер металдарына сәйкес келеді.

Dy-дің модификациялық әсерінің нәтижесі болып Sc және Y қосындылары бар құймаларға (100 мкм) қарағанда айырмашылығы зерттелетін Dy-құрамдас гамма құймалардың дәнінің орташа мөлшері (150 мкм) салыстырмалы түрде үлкен болып табылады.

Осылайша, құрамында 2% Sc, Y бар TiAl құймалары Dy-құрамдас TiAl құймаларымен салыстырғанда тиімді морфологияға ие. Sc, Y элементтері α_2 - Ti_3Al фазасының едәуір ұсақталуына әкеледі. Бұл жағдайда соңғысының едәуір бөлігі үлгі бойынша біркелкі таралған, өлшемді 100 мкм ірі дисперсті тұнбалар күйінде кристалданады.

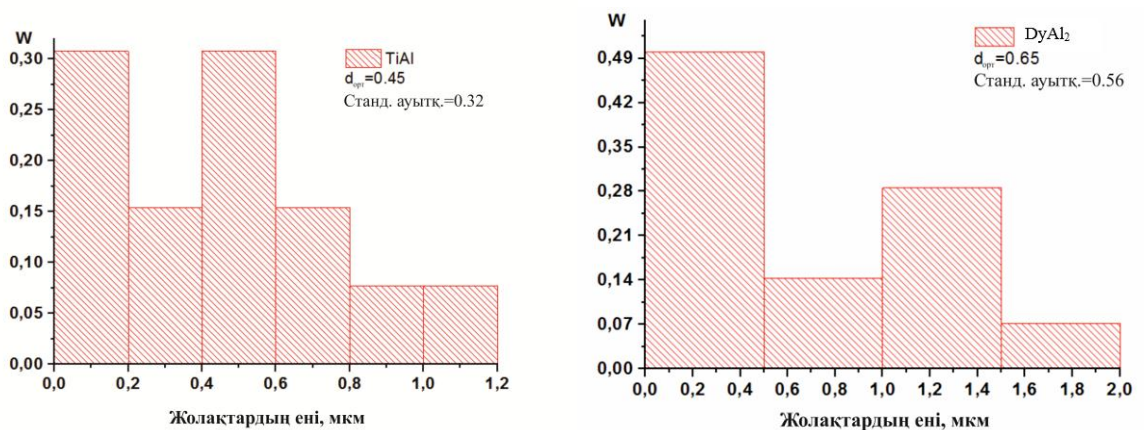
Ti49-Al49-Dy2 құймасының рентгенфазалық анализі ТЭМ нәтижелерімен сәйкес келеді. Микродифракционды суретте (002), (004), (402), (413) TiAl, (600), (203) и (423) Ti_3Al , (312) $TiAl_2$, (008) Ti_5Al_{11} , (511) Al, (300) α -Ti и (551) $DyAl_2$ жазықтықтарына тиесілі рефлексстер бар (41 сурет).



a – жарық өрісті кескін; *ә* – микродифракциялық кескін; *б* – көрсеткішпен белгіленген рефлекстердегі қараңғы өрісті кескін; *в* – микродифракциялық суреттің идентификациясы

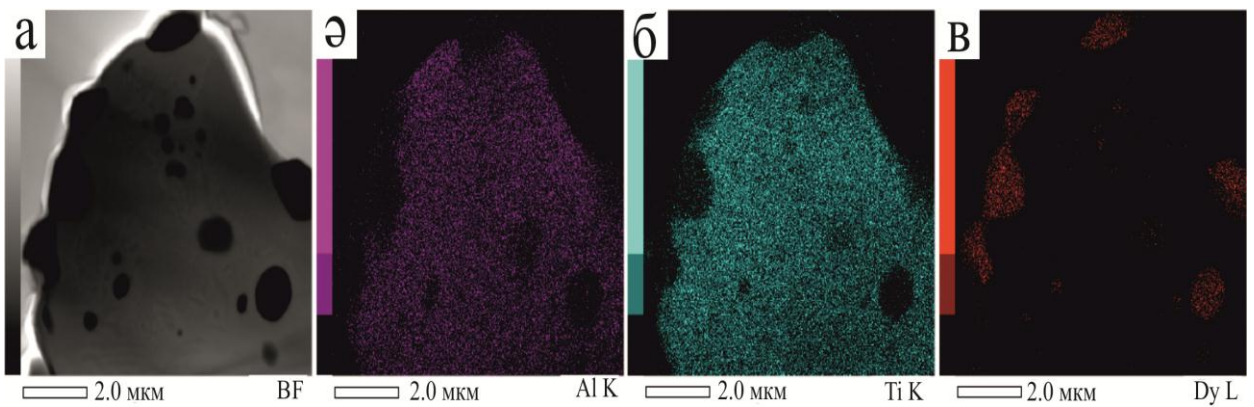
41 сурет - $Ti_{49}-Al_{49}-Dy_2$ құймасының электронды-микроскопиялық суреті

Орташа өлшемдері бойынша таралу гистограммасы 42 суретте көрсетілген.



42 сурет - Орташа өлшемдері бойынша таралу гистограммасы

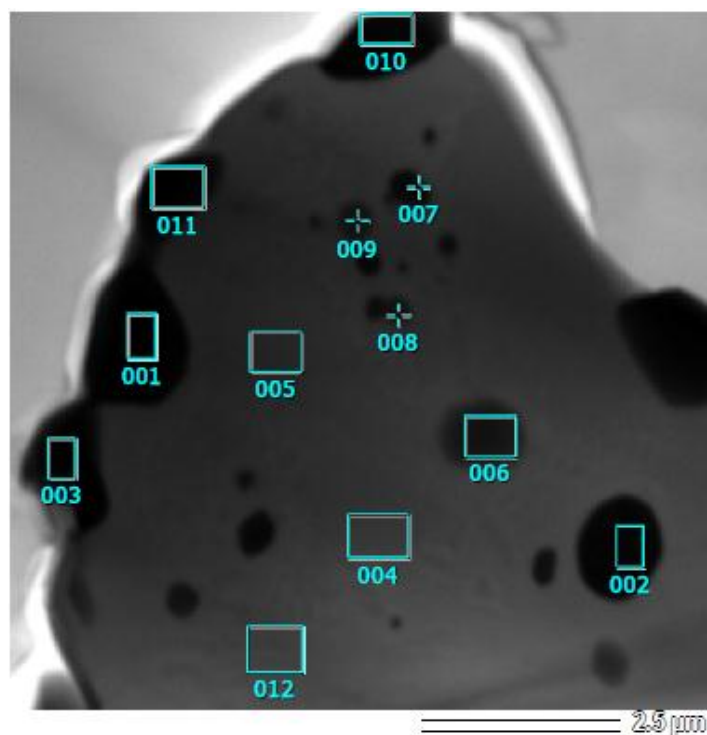
Әр түрлі бөлінділердің шоғырланған аймақтарында тікелей энергодисперсиялық спектральді анализді жүргізу барысында, матрицаның әр түрлі аймақтарында дөңгелек формалы құрамында Dy бар фазалар анықталды (43 сурет).



а) жарықөрісті кескін; б - в) (а) учаскесіндегі картаға түсіру

43 сурет - Электронды микроскопиялық кескін

Энергодисперсиялық микроанализді қолдана отырып, микроқұрылымға локальді талдау жүргізген кезде Ti49-Al49-Dy2 құймасының матрицасы тек алюминий мен титан бөлшектерінен тұратындығы анықталды. Дән шекараларында өлшемі 1,7 мкм болатын жеке дөңгелек бөлшектер, ал матрицаның бетінде өлшемі 0,7 мкм аз мөлшердегі бөлшектер DyAl₂ жеке бөлшектеріне сәйкес келеді (44 сурет, 17 кесте). Алынған нәтижелер [185] жұмысының мәліметтерімен сәйкес келеді. Диспрозийді құймаға енгізу материалдың фазалық құрамының өзгеруіне әкелетіні көрсетілді: құймада негізгі γ , α_2 фазаларынан бөлек DyAl₂ фазасы табылды.

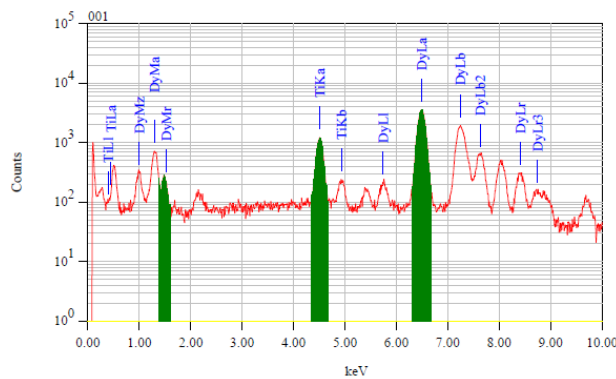


44 сурет - Фазалық контраст режиміндегі ТЭМ кескіні

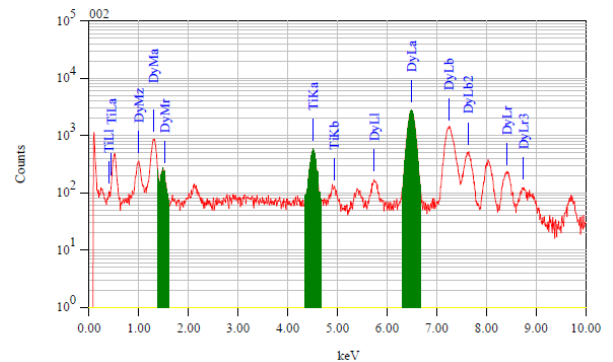
17 кесте - Ti49-Al49-Dy2 құймасының элементтік құрамы

Спектр нөмірі	Элементтік құрамы		
	Атомдық үлесі, %		
	Ti	Al	Dy
01	21,21±10	3,01±10	75,78±10
02	13,28±10	4,02±10	82,71±10
03	13,11±10	1,87±10	85,02±10
04	59,12±10	40,82±10	0,06±10
05	62,22±10	37,69±10	0,09±10
06	58,36±10	26,74±10	14,90±10
07	51,90±10	28,81±10	19,28±10
08	65,26±10	34,51±10	0,23±10
09	56,87±10	37,05±10	6,08±10
10	12,66±10	3,30±10	84,04±10
11	35,25±10	10,53±10	53,22±10
12	56,82±10	43,18±10	0

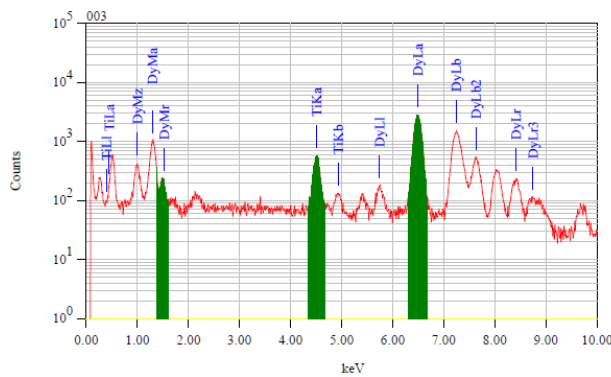
Ti49-Al49-Dy2 үлгісінің локальді учаскелерінің спектрлері 45 суретте келтірілген.



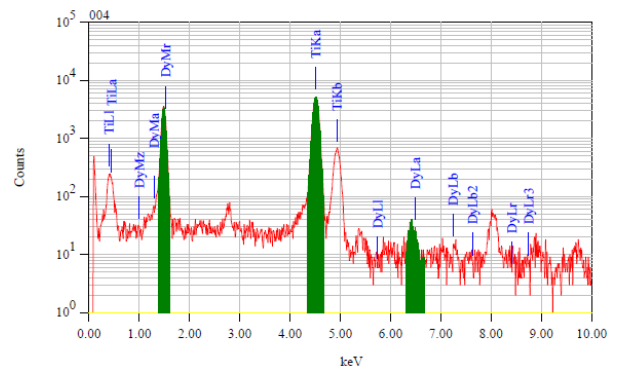
а)



ә)



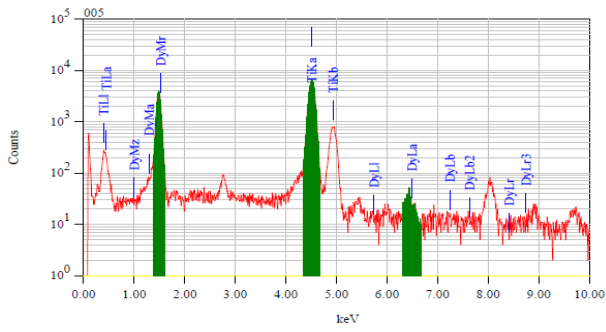
б)



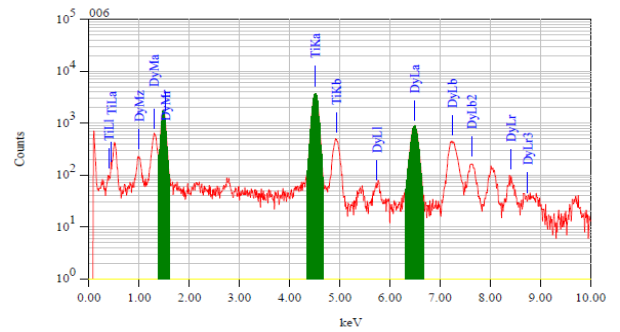
в)

001 (а), 002 (ә), 003 (б), 004 (в)

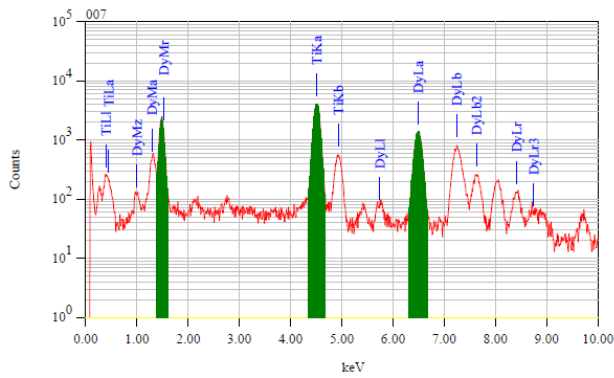
45 сурет - Ti49-Al49-Dy2 үлгісінің локальді учаскелерінің спектрлері, 1 парақ



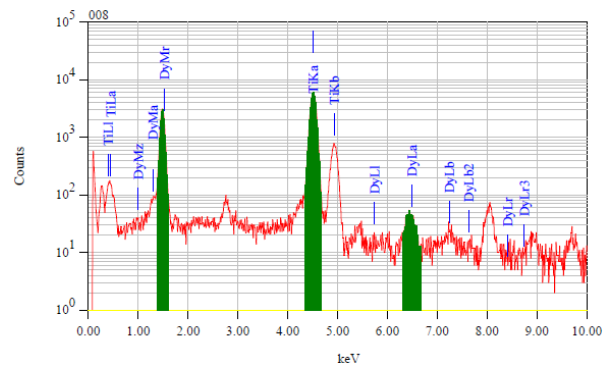
а)



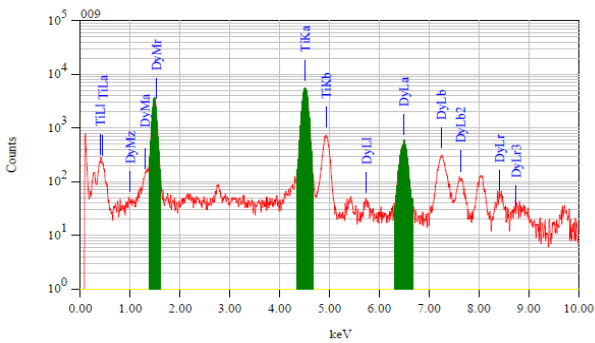
а)



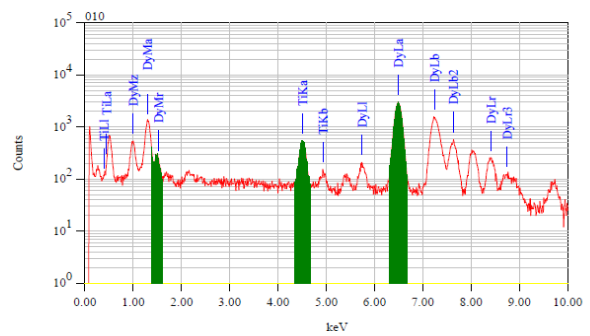
б)



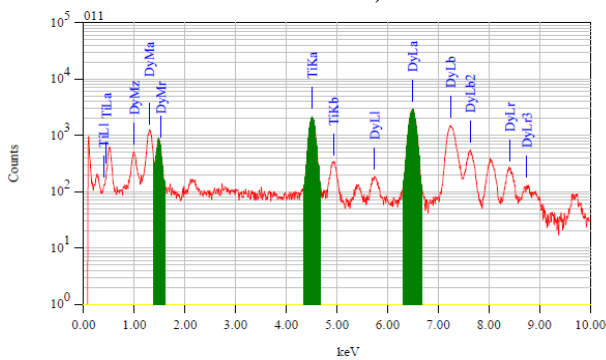
в)



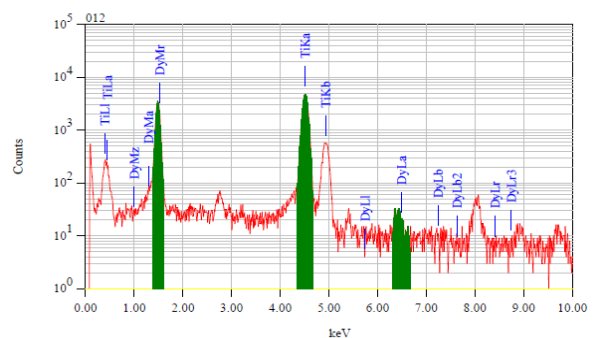
г)



д)



е)



ж)

005 (а), 006 (а), 007 (б), 008 (в), 009 (г), 010 (д), 011 (е), 012 (ж)
45 сурет, 2 парақ

Ti50-Al50 құймасымен салыстырғанда алынған құймада жаңа фаза пайда болды. 45 суреттен берілген құйманың құрамында жеке бөлшектер бар екендігі көрініп тұр. Локальді учаскелердің элементтік анализі 001, 002, 003, 010, 011 спектрлері Dy негізіндегі Ti-Al-Dy дәндері екендігін көрсеткенімен, бірақ олардың химиялық құрамы жағынан бір-бірінен ерекшеленетіндігі белгілі болды. 001, 002, 003, 010, 011 спектрлерінде Ti құрамы сәйкесінше 21%, 13%, 13%, 13%, 35%, ал Al мөлшері 3%, 4%, 2%, 3%, 11% құрайды. 004, 005 және 008 спектрлерінде элементтердің үлесінің қатынасы бірдей деуге болады: сәйкесінше 59% Ti, 41% Al, 0,1% Dy; 62% Ti, 38% Al, 0,1% Dy; 65% Ti, 35% Al, 0,2% Dy. 006, 007 және 009 спектрлеріндегі элементтердің мөлшері сәйкесінше 58% Ti, 27% Al, 15% Dy; 52% Ti, 29% Al, 19% Dy; 57% Ti, 37% Al, 6% Dy тең және Ti-Al-Dy дәндері болып табылады. Спектр 012 - Ti-Al дәні, құрамында 57% Ti, 43% Al бар. Аталған спектрлерде (001, 002, 003, 010, 011) Ti мөлшері 35%-дан, ал Al мөлшері 11%-дан аспайды.

Сонымен, анализден жекелеген бөлшектер диспрозиймен байытылып, алюминийдің аз мөлшерін қамтыса, ал жеңіл аймақтар, керісінше, құрамында диспрозийі аз, титанмен байытылған деген қорытынды шығады.

3.1.5 TiAl құймасының құрылымды-фазалық құрамына Та әсерінің нәтижелерін талқылау

18 кестеде негізгі фазалардың құрылымдық параметрлері, торлардың көлемдері мен интегралды интенсивтілікке жекелеген фазалардың үлестері, сондай-ақ, есептелген интегралды интенсивтіліктің эксперименттік дифрактограммаларға ұқсастық критерийі келтірілген.

18 кесте - Ti49-Al49-Ta2 құймасының торларының құрылымдық параметрлері мен фазалар үлесі, ұқсастық критерийі

Фаза	Күй	a, Å	b, Å	c, Å	альфа	бета	гамма	V, Å ³	Кеңістікті к топ	Үлес, %	E, eV	Rwp, %
AlTi ₃ -2768	Init.	5.764	5.764	4.664	90.00	90.00	120.00	132.56	P6/mmm, Hexagonal	20.66	-19,705.872	6.701
	Spec.	5.791	5.791	4.736	90.00	90.00	120.00	137.565				
AlTi-2770	Init.	2.837	2.837	4.059	90.00	90.00	90.00	32.677	P4/mmm, Tetragonal	50.61	-1660.341	
	Spec.	2.831	2.831	4.067	90.00	90.00	90.00	32.609				
TiAl-Struct2	Init.	6.339	4.150	4.234	113.36	93.36	92.52	101.791	P1, Triclinic	28.73	-4978.726	
	Spec.	6.568	4.133	4.093	160.27	95.85	92.64	33.821				

Та қосындылары бар TiAl (AlTi₃-2768) торлары (18 кесте) тұрақты, тор энергиясы айтарлықтай теріс. Бұл жұмыста Ti-Al-Ta жүйесінің сапалы фазалық анализінің нәтижелері негізінде, Та қосындылары AlTi₃ құймасының [0,5 0,5 0,5] аралық түйініне енеді деп болжанды. Бастапқы күйдегі AlTi₃, сондай-ақ көрсетілген түйінге ендірілген қосындылары бар кездегі AlTi₃ энергиясының кванттық-химиялық есептеулері жүргізілді. E_{AlTi₃-Ta} = -19613.620 эВ екендігі анықталды. Есептеулер көрсетілген түйінаралығына қосындыларды енгізу

мүмкін екенін көрсетті және бұл TiAl-Ta жүйесіндегі торларды тұрақтандыру эффектісіне әкеледі. Та қосындылары бар торлардағы атомдардың байланыс энергиясы ($|E_{\text{AlTi}_3}|$) едәуір жоғарылағаны анықталды. Байланыс энергиясының жоғарылауы Милликен зарядтарының едәуір поляризациясымен қатар жүретіндігін атап өту керек [177, 178]. Та қоспаларындағы Милликен зарядтары: $[(-4.42)\text{Ta}]$, ал Ti49-Al49-Ta2 үштік қосылыстарындағы негізгі элементтер атомдарында $[(-0.35)\text{Al}, (+1.22)\text{Ti}]$ тең. Зарядтар Кулон бірліктерінде келтірілген, бірдей типтегі атомдарда зарядтардың таралуы біркелкі. Көрсетілген жүйелердегі зарядтардың поляризациясы индивидуальді, себебі қосындыларда мөлшерден тыс болған теріс зарядтар да, Милликеннің оң зарядтары да концентрленуі мүмкін. Негізгі Ti, Al элементтері мен Dy қосындылары атомдарының арасындағы арақашықтық талдауы көрсеткендей, бұл арақашықтықтар сәйкесінше 1.6, 1.21, 1.7 Å тең бос Ti, Al және Ta элементтері ковалентті радиустарының қосындысынан едәуір аз [179]. Зарядтың поляризациясы Та қоспасын енгізу нәтижесінде ковалентті байланыс үлесінің жоғарылағандығын көрсетеді.

Ti49-Al49-Ta2 жүйелерінің тәжірибелік дифрактограммалары есептелген интегралды интенсивтілікпен жақсы жуықталған, олардың арасындағы айырмашылық елеусіз мәнге ие. Та қосындыларын енгізу гексагональді, триклинді жүйелер үлестерінің қайта бөлінуіне әкеледі. TiAl-Ta жүйелерінде геометриялық оңтайландырылған тордың (TiAl-Struct2-GeomOpt) үлесі жоғалды және тетрагоналды торы бар AlTi фазасы пайда болды, 19 кесте. Ti49-Al49-Ta2 жүйесінде Та қосу сәйкесінше AlTi₃ үлесінің 26.99% дейін төмендеуіне әкеледі. Фазалар үлесі мен торлар энергиясы Ti49-Al49-Ta2 жүйесінің тиімді энергиясын $\alpha E1 + \beta E2 + \gamma E3$ формуласы бойынша бағалауға мүмкіндік береді, мұндағы α, β, γ - фазалардың үлесі, E1, E2, E3 - жеке фазалардың торларының энергиясы. Көрсетілген жүйелердің энергиясы сәйкесінше -5407.31, эВ тең болатыны анықталды. Алынған нәтижелерден Та қосындысын енгізу TiAl торының тиімді энергиясын едәуір арттырады деген қорытынды шығады.

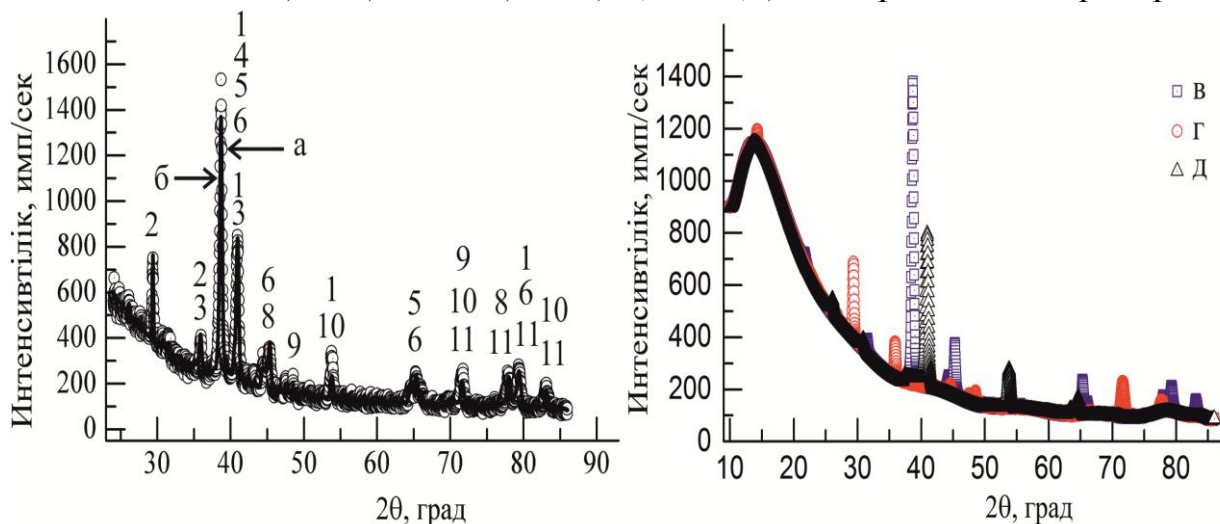
19 кесте - Енгізілген Та атомы бар AlTi торындағы (AlTi₃-2768 – гексагональді сингониялы Ti₃Al фазасы) атомдардың салыстырмалы координаталары

Элемент	x	y	z	U_iso	Жүктеме
Ti	0.833	0.167	0.25	0.0127	1
Al	0.333	0.667	0.25	0.0127	1
Ta	0.5	0.5	0.5	0.0127	1

Ti49-Al49-Ta2 үлгілерінің рентгенфазалық талдауы олардың күрделі көпфазалы құрылымға ие екендігін көрсетті: Al, α -Ti бастапқы компоненттері

және жаңа фазалар - $TiAl$, Ti_3Al , Ti_5Al_{11} , Ti_3Al_5 интерметалдық фазалары анықталды.

46 суретте $Ti_{49}Al_{49}Ta_2$ интерметалдық құймасының байқалмалы және есептік интенсивтіліктерінің нәтижелері көрсетілген. Сондай-ақ, үлгінің құрамында танталдың алюминиймен және титанмен әрекеттескендегі түзілетін $TaTi$, $Ta_{39}Al_{69}$, $Ti_{0,96}Ta_{0,04}$, $Ta_{161,8}Al_{282,2}$, $(TaTi_{66})_{0,33}$ интерметаллидтері бар.



а – тәжірибе, б – жалпы модельді интенсивтілік. в, г, д - жеке фазалардың интегральді интенсивтілікке қосатын үлесі

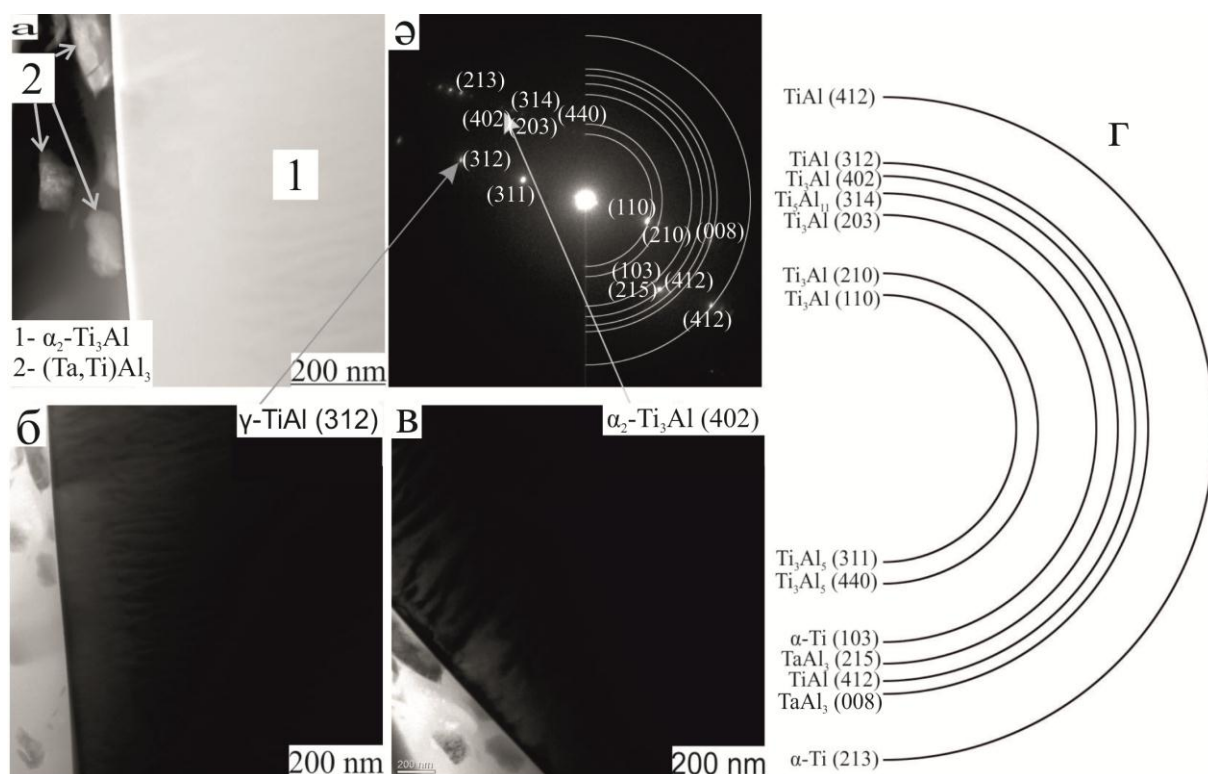
Ескеру: 1 - Ti_3Al , 2- Ti_2Al_5 , 3 – Ti , 4 - Ti_5Al_{11} , 5- Ti_3Al_5 , 6 - $TiAl$, 7 – Al , 8 – $\beta-Ti$, 9 - $(TaTi_{66})_{0,33}$, 10 - $Ta_{161,8}Al_{282,2}$, 11 - $Ta_{39}Al_{69}$

46 сурет - Алынған $Ti_{49}Al_{49}Ta_2$ композициялық материалының дифрактограммасы

$Ti_{49}Al_{49}Ta_2$ үлгісінің құрамында келесідей интерметалдық фазалар идентифицирленді: торының параметрлері $a=b=2,8229 \text{ \AA}$, $c=4,0795 \text{ \AA}$ және КШО өлшемі $33 \pm 5 \text{ \AA}$ құрамы $TiAl$ тетрагональді сингониялы 30,1% титан алюминиді (кеңістіктік тобы $P4/mmm$); торының параметрлері $a=b=5,7551 \text{ \AA}$, $c=4,6450 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $P63/mmc$ және КШО өлшемі $133 \pm 5 \text{ нм}$ тетрагональді сингонияның көлемнен орталықтандырылған торы бар 22,9% Ti_3Al фазасы; торының параметрлері $a=3,9895 \text{ \AA}$, $b=4,0499 \text{ \AA}$, $c=4,0194 \text{ \AA}$, КШО өлшемі $65 \pm 5 \text{ \AA}$ 26,4% Ti_3Al_5 фазасы (кеңістіктік тобы P/mmm). Азырақ үлесті торының параметрлері $a=b=2,8900 \text{ \AA}$, $c=4,6461 \text{ \AA}$ кеңістіктік тобы $P63/mmc$, КШО өлшемі $34 \pm 5 \text{ \AA}$ құрайтын гексагональді сингониялы 5,4% $\alpha-Ti$ фазасы; торының параметрлері $a=b=3,9471 \text{ \AA}$, $c=16,6765 \text{ \AA}$, КШО өлшемі $260 \pm 5 \text{ \AA}$ 3,9% Ti_5Al_{11} (кеңістіктік тобы P/mmm); торының параметрлері $a=b=c=14,8583 \text{ \AA}$ 0,9% $Ta_{39}Al_{69}$ фазасы, кеңістіктік тобы $F-43m$, КШО өлшемі $3280 \pm 5 \text{ \AA}$; торының параметрлері $a=b=c=19,4603 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $F-43m$, КШО өлшемі $7370 \pm 5 \text{ \AA}$ 2,8% $Ta_{161,8}Al_{282,2}$ фазасы; торының параметрлері $a=b=c=2,9277 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $P63/mmc$, КШО өлшемі $34 \pm 5 \text{ нм}$ 1,9% $Ti_{0,96}Ta_{0,04}$ фазасы; торының параметрлері $a=b=c=3,0052 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $P63/mmc$, КШО өлшемі $42 \pm 5 \text{ \AA}$ 0,9% $(TaTi_{66})_{0,33}$ фазасы.

Сонымен қатар, үлгінің құрамында бастапқы компоненттер де табылды: параметрлері $a=b=2,8900 \text{ \AA}$, $c=4,6461 \text{ \AA}$ кеңістіктік тобы $P63/mmc$, КШО өлшемі $34 \pm 5 \text{ \AA}$ құрайтын гексагональді сингониялы 3,9% α -Ti фазасы; торының параметрлері $a=b=c=3,3007 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $Im-3m$, КШО өлшемі $36 \pm 5 \text{ \AA}$ 2,9% β -Ti фазасы; торының параметрлері $a=b=c=4,0607 \text{ \AA}$, кеңістіктік тобы $Im-3m$, КШО өлшемі $67 \pm 5 \text{ \AA}$ 1,6% Ti.

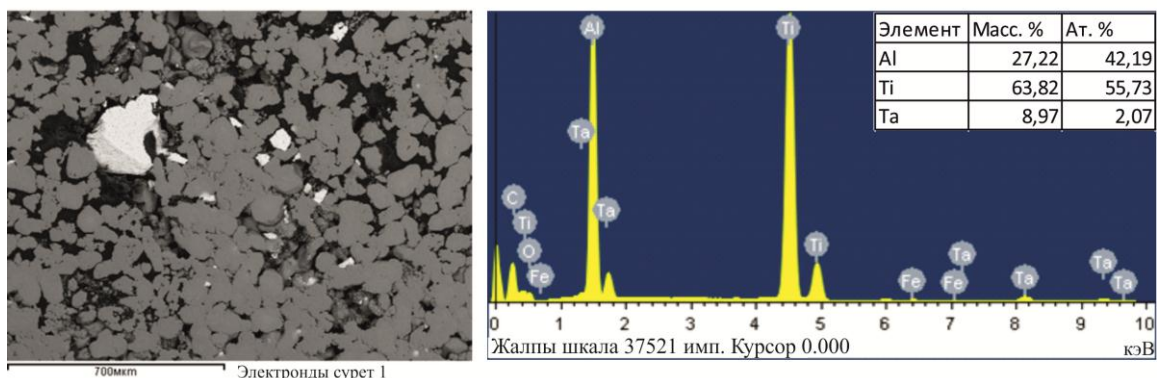
47 суретте Ti49-Al49-Ta2 құймасының электронды-микроскопиялық кескіні келтірілген. Микродифракционды анализге сәйкес Ti49-Al49-Ta2 құймасының қабаттарында (312), (412) TiAl, (110), (402) и (210) Ti₃Al, (311), (440) Ti₃Al₅, (314) Ti₅Al₁₁, (103) α -Ti, (008) и (215) TaAl₃ жазықтықтарына тиесілі рефлекстері бар интерметаллидтік фазалар бар.



a – жарық өрісті кескін; b – микродифракциялық кескін; c, d – көрсеткішпен белгіленген рефлекстердегі қараңғы өрісті кескін; e – микродифракциялық кескіннің идентификациясы

47 сурет - Ti49-Al49-Ta2 құймасының электронды-микроскопиялық суреті

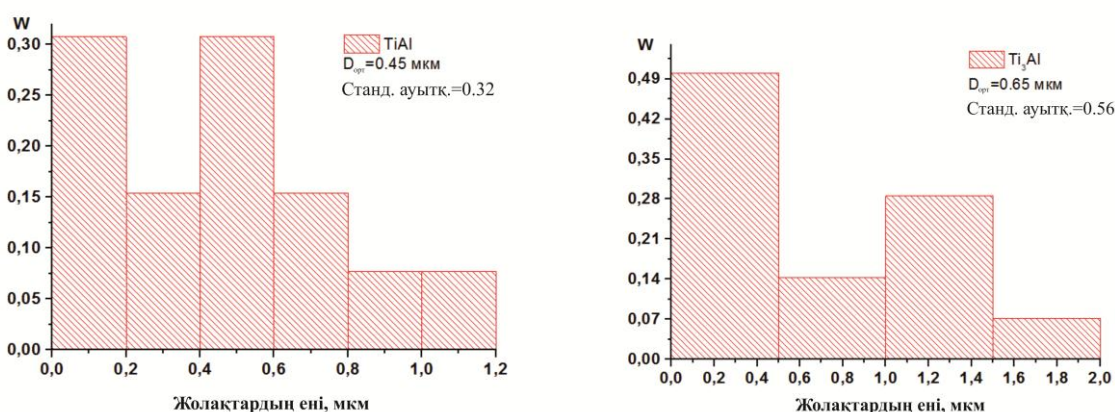
Рентгендік сәулеленуі бар Ti49-Al49-Ta2 құймасының микроқұрылымы 48 суретте келтірілген.



48 сурет - Ti49-Al49-Ta2 құймасының микроқұрылымы, EDX-спектрлері мен элементтік құрамы

Металлографиялық зерттеудің нәтижелері рентгенфазалық анализ мәліметтерімен сәйкес келеді. Одан негізгі фазалардың бірі α - Ti_3Al , ал Ta бөлшектері негізінен матрицада және дәндердің шекаралары бойында орналасқан және құйманың құрамында дисперсті қосынды түрінде болады деген қорытынды жасалды.

Жарық түсті жолақтардың орташа ені 0,45 мкм, ал қараңғы жолақтардың орташа ені 0,65 мкм құрайды (49 сурет).



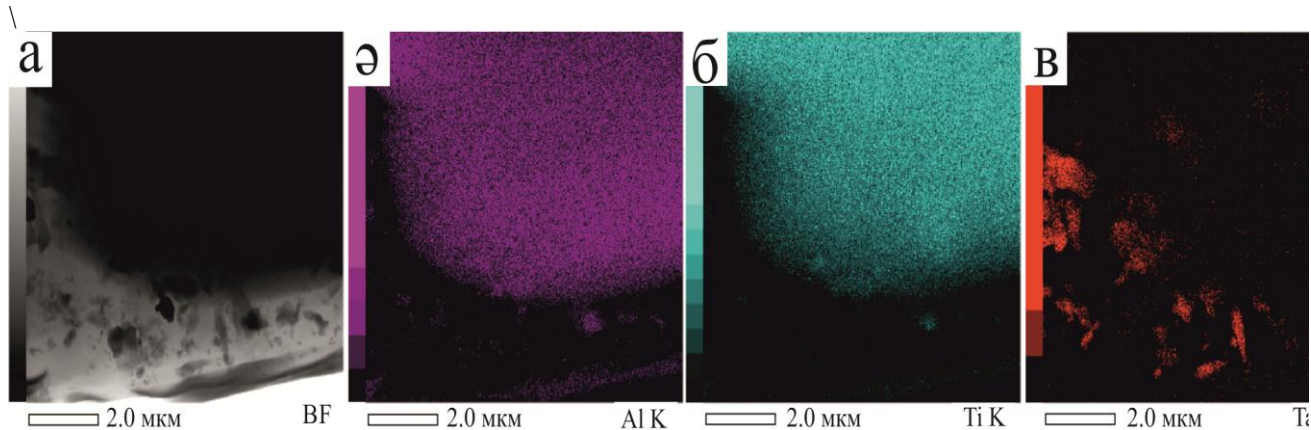
49 сурет - Орташа өлшемдердің таралу гистограммалары

Осылайша, жүргізілген ТЭМ зерттеулері титан алюминидтері фазаларының жиынтығының қалыптасуын растады. РФА әдісімен анықталған тантал қосылыстары үлгінің негізгі бөлігінде қалып, ал зерттелетін пленканың құрылымында өлшемдері 1-2 мкм құрайтын тек $TaAl_3$ бөлшектері болуы мүмкін.

Ti мен Ta Al-да айтарлықтай ерігіштікке ие болғандықтан, Ta титанда орынбасушы қатты ерітінді түзіп, Видманстет микроқұрылымының қалыптасуына ықпал ете алады. Сонымен қатар, Ta-Al жүйесі 60%-ға дейін Ti (Ti алюминидін) ерітетіндігі белгілі. TiAl және Ti_3Al титан алюминидтері тиісінше 10 және 15%-ке дейін Ta (Ta алюминидін) ерітеді. Бұл жұмыстың

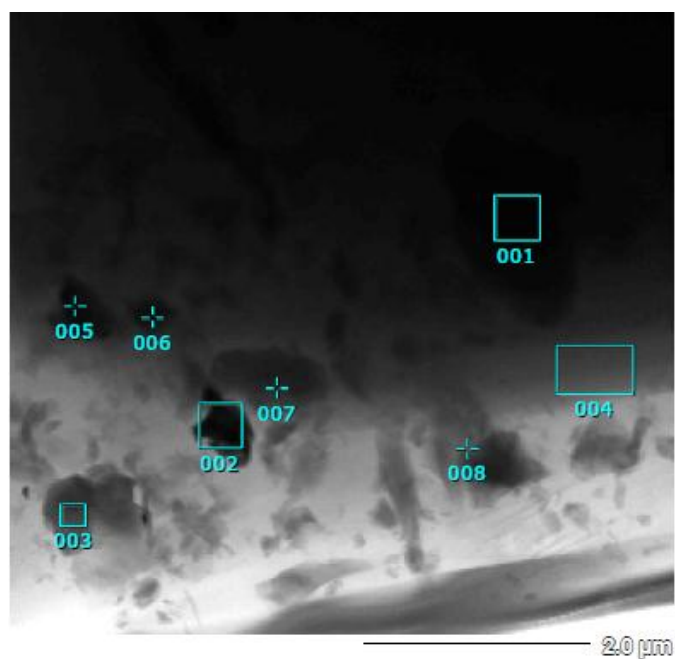
нәтижелері [186, 190, 191] жұмыстардың мәліметтерімен сәйкес келеді. ТЭМ әдісімен жүргізілген зерттеу нәтижелері рентгенфазалық анализ мәліметтерімен сәйкес келеді және одан Ti шамасында Ta өте аз мөлшері TiAl, Ti₃Al кристалдарында ериді және (Ti,Ta)Al₃ фазасы түрінде болады деген қорытынды шығады.

Ti49-Al49-Ta2 құймасының беткі қабатының кескіні 50, 51 суреттерде көрсетілген. Ti49-Al49-Sc2 үлгісіндегідей, танталдың құйма матрицасының көлемінде таралуы және тік төртбұрышты тұнбалар түрінде үш компонентті фазаның түзілуі байқалады.



а) өрістің жарқын бейнесі; б - г) (а) учаскесіндегі картаға түсіру

50 сурет - Электронды микроскопиялық кескін

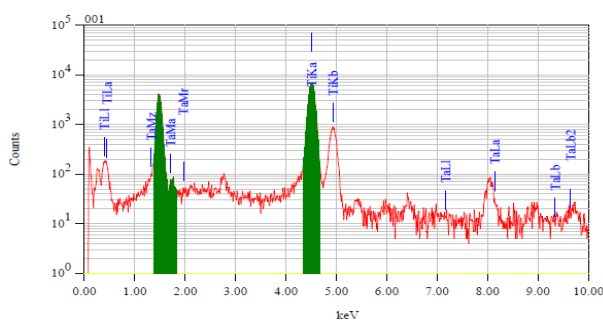


51 сурет - Фазалық контраст режиміндегі ТЭМ кескіні

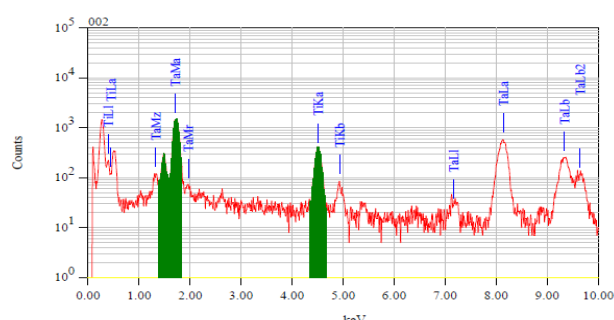
Сонымен, локальді учаскелердің элементтік анализінен жеке бөлшектердің барлығы дерлік Ti-Al-Ta дәндері деген қорытынды шығады (20 кесте, 52 сурет).

20 кесте - Ti49-Al49-Ta2 құймасының элементтік құрамы

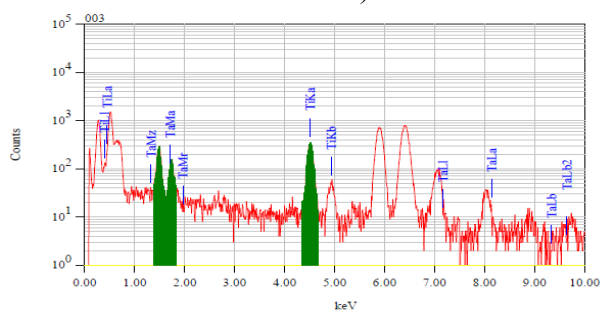
Спектр нөмірі	Элементтік құрамы		
	Атомдық үлесі, %		
	Ti	Al	Ta
001	62,79±10	37,21±10	0
002	31,82±10	19,40±10	48,78±10
003	51,01±10	42,14±10	6,85±10
004	48,58±10	51,42±10	0
005	45,34±10	41,66±10	13,00±10
006	51,84±10	47,47±10	0,69±10
007	48,10±10	46,03±10	5,87±10
008	48,68±10	51,32±10	0



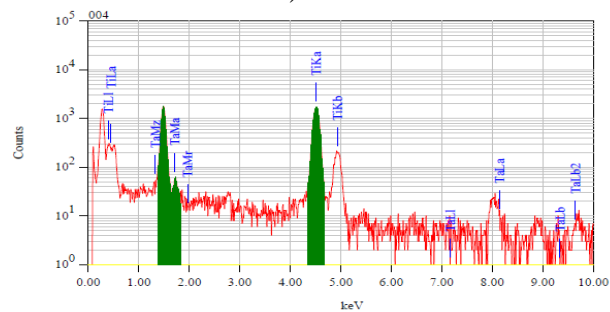
а)



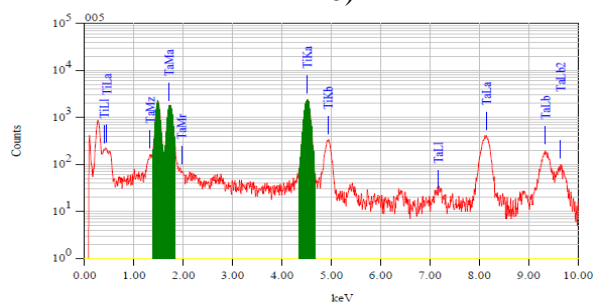
ә)



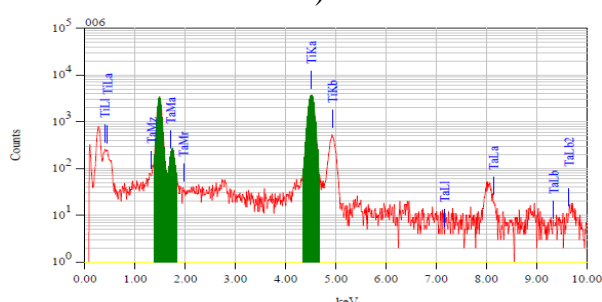
б)



в)



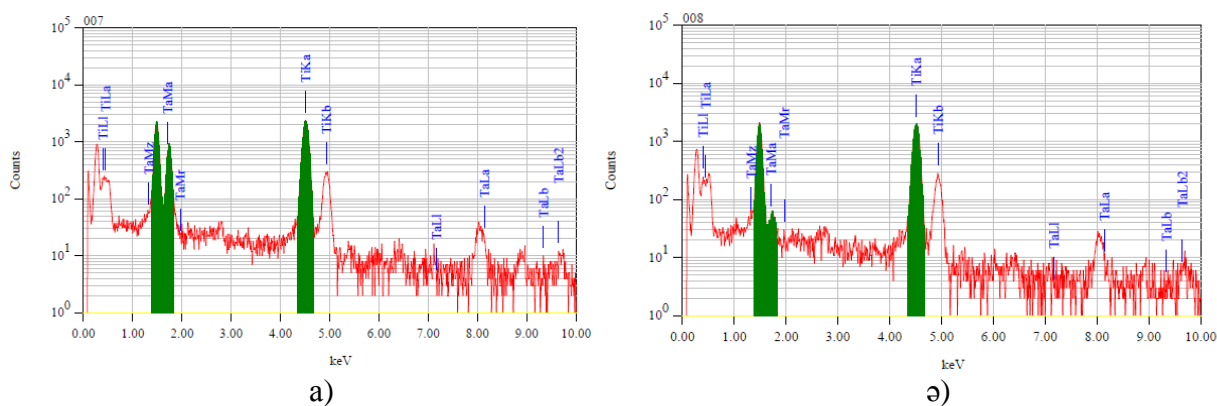
г)



д)

001 (а), 002 (ә), 003 (б), 004 (в), 005 (г), 006 (д)

53 сурет - Ti49-Al49-Ta2 үлгісінің локальді учаскелерінің спектрлері, 1 парақ



007 (a), 008 (ә)

52 сурет, 2 парақ

001 спектрі 63% Ti және 37% Al-дан тұрады, бұл α_2 -Ti₃Al интерметалдық фазасына сәйкес келеді. 002 спектрінде Ti құрамы 32%, Al - 19%, Ta - 49% құрайды. Стандартты анализ көрсеткендей, 003, 005, 007 спектрлері Ti-Al-Ta дәндері болғанымен, химиялық құрамы жағынан олар біршама ерекшеленеді. 003 спектрінде элементтердің құрамы 51% Ti, 42% Al және 6,9% Ta сәйкес келеді. 005 спектрінде Ti мазмұны шамамен 2 есе жоғары (13%-ға дейін), Ti - 45% және Al - 42%, бұл үш компонентті жүйенің (Ti, Ta) Al₃ фазасына сәйкес келеді. 007 спектрінде 48% Ti, 46% Al, 6% Ta бар.

Ti50-Al50 құймасымен салыстырғанда Ti49-Al49-Ta2 құймасында жаңа TaAl₃ фазасы түзіледі. Титан-алюминий матрицасында танталдың біркелкі таралуы үш компонентті жүйенің (Ti,Ta)Al₃ түзілу мүмкіндігін көрсетеді.

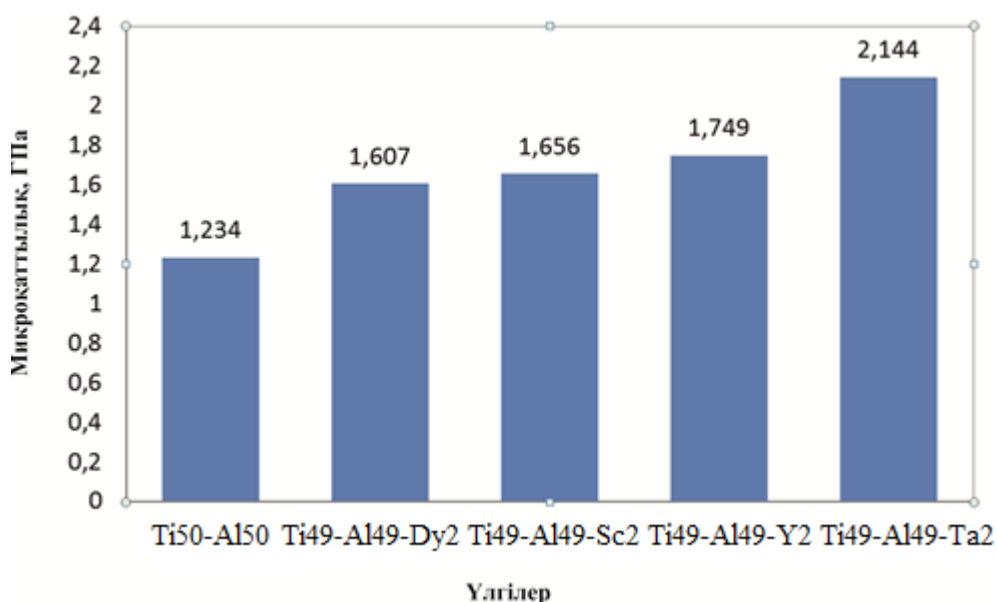
Y, Dy легирлеуші металдары алюминиймен қосылыс түзеді және дисперсті фаза ретінде қолданылып, метал матрицасына отқа төзімді қосылыс түріндегі екінші фазаны енгізу арқылы құйма құрылымын нығайтады. Егер YAl₂ дислокацияларда немесе дәндер шекарасында орналасса, онда DyAl₂ дәннің көлемінде ретсіз таралады.

3.2 Құймалардың микроқаттылығын өлшеу нәтижелерін талқылау

200 г жүктеме кезіндегі әр түрлі құрамды құймалардың микроқаттылығының алынған мәндері 21 кестеде көрсетілген. Сонымен қатар, 53 суретте СЖМ және Та-мен легирленгеннен кейін микроқаттылықтың көрсеткіштерін салыстыру үшін TiAl (Ti50-Al50) жүйесі құймасының микроқаттылығының орташа мәні көрсетілген. СЖМ және Та қосқаннан кейін, барлық Ti49-Al49-Dy₂, Ti49-Al49-Sc₂, Ti49-Al49-Y₂, Ti49-Al49-Ta₂ жүйелерінде Ti50-Al50 құймасымен салыстырғанда микроқаттылық мәндері жоғарылағаны көрініп тұр.

21 кесте - Құймалардың микроқаттылығының жүктемеге тәуелділігі

Жүйелер	Ti50-Al50	Ti49-Al49-Dy ₂	Ti49-Al49-Sc ₂	Ti49-Al49-Y ₂	Ti49-Al49-Ta ₂
H _v , ГПа	1,234	1,607	1,656	1,749	2,144



53 сурет - Ti50-Al50, Ti49-Al49-Dy2, Ti49-Al49-Sc2, Ti49-Al49-Y2, Ti49-Al49-Ta2 жүйелері құймаларының микроқаттылық тәуелділігі

Микроқаттылық мәндерінің нәтижелері бойынша Ti49-Al49-Sc2, Ti49-Al49-Y2 және Ti49-Al49-Ta2 құймаларының қаттылығы ең жоғары көрсеткіштерге ие екендігі анықталды. Нақтырақ айтқанда сәйкесінше $H_v=1.656$ ГПа, $H_v=1.749$ ГПа және $H_v=2.15$ ГПа мәндеріне тең. Дәннің орташа мөлшері кішірейетіндіктен, құйманың қатаюы және осы құймалардың қаттылығының мәнінің жоғарылауы бар екендігі интерметалдық фазалардың пайда болуымен байланысты. Сондай-ақ, әдебиеттерден Sc, Y, Ta легирлеуде негізгі қолданылатын және перспективті металдар екендігі және механикалық қасиеттердің 10-50% жоғарылауын қамтамасыз ететіндігі белгілі [84, 108, 115].

Микроқаттылықтың осылай ұлғаюы қатты ерітіндіден скандий, иттрий, диспрозий және танталдың бөлініп, дисперсті интерметалдық бөлшектер түзілуі жағдайында ғана алынуы мүмкін. Бұл жағдайда құйманың механикалық қасиеттерінің жоғарылауы дәндердің ұсақталуы және құйманың қатты ерітінділік қатаюы есебінен қамтамасыз етіледі.

Беріктік қасиеттері бойынша бұл құймалар қазіргі уақытта өнеркәсіпте өндірілетін инвар класындағы (36N типті) көпфункционалды құймалардан 2-4 есе асып түседі. Алынған құймалар модификацияланған беріктілігі жоғары интерметалдық құймаларға жатады.

22 кесте – Құймалардың фазалық құрамы

	Ti-Al	Ti-Al-Ta	Ti-Al-Sc	Ti-Al-Dy	Ti-Al-Y
TiAl	P4/mmm				
α -Ti	P63/mmc				
Ti ₃ Al ₅	P/mmm				
Ti ₃ Al	P63/mmc				
Ti ₅ Al ₁₁	P/mmm				
β -Ti	Im-3m				
α -Ti	Im-3m		Fm-3m		
Ti ₂ Al ₅	P4/mmm				
TiAl ₂	C/mmm		C/mmm		
Al	Fm-3m		Fm-3m		
Sc			P4/nmm		
Al ₆₉ Ta ₃₉		F-43m			
Al _{282.23} Ta _{161.77}		F-43m			
(Ti ₆₆ Ta) _{0.03}		P63/mmc			
Ta _{0.045} Ti _{0.955}		P63/mmc			
TaTi		Im-3m			
Y					P63/mmc

ҚОРЫТЫНДЫ

1 Алғаш рет «гидридтік технология» бойынша Ti–Al эквимольарлы арақатынасында құйма және TiAl, Ti₃Al, TiAl₂, Ti₅Al₁₁, Ti₃Al₅, Ti₂Al₅ интерметалдық фазалары мен Sc, Y, Dy, Ta легирлеуші қосындылары негізінде бірегей қатпарлы композициялар алынды. Гидрлеу мен күйдірудің температуралық интервалдары орнатылды: Sc, Y, Dy, Ta металдарының гидрленуін сәйкесінше 450, 420, 420, 550 °C жағдайларында жүргізілді; Ti50–Al50, Ti49–Al49–Sc2, Ti49–Al49–Ta2, Ti49–Al49–Y2, Ti49–Al49–Dy2 үлгілері үшін күйдіру температурасы 1150 °C мәнін құрады.

2 Эффективті легирлеуші қосындылар ретінде үлесі 2 ат.%-дан аспайтын Sc, Ta, Y, Dy металдарын қолдануға болатындығы анықталды.

3 Легирлеуші элементтердің құйма құрылымының локальді учаскелерінде таралуы зерттелді және легирлеуші элементтердің интерметалдық фазалардың матрицасында қабаттар қалыңдығының артуымен (2 есе) таралатындығы және/немесе дислокацияларда немесе дәндердің шекараларында және/немесе дәндердің көлемінде орналасатын Sc, Ti₃(Al, Sc), YAl₂, DyAl₂, TaTi, Ta₃₉Al₆₉, Ti_{0,96}Ta_{0,04}, Ta_{161,8}Al_{282,2}, (TaTi₆₆)_{0,33}, (Ta,Ti)Al₃ жеке фазаларының түзілетіндігі анықталды.

4 Алынған екі және үшкомпонентті жүйелердің фазалық құрамының сандық және сапалық анализі жүргізілді. Бастапқы Ti50–Al50 жүйесінде негізгі фазалар Ti₃Al, TiAl, TiAl₂, Ti₅Al₁₁, Ti₃Al₅, Ti₂Al₅ болатындығы, ал үшінші компонентті қосқанда Ti49–Al49–Sc2, Ti49–Al49–Y2, Ti49–Al49–Dy2, Ti49–Al49–Ta2 жүйелерінде Ti₃(Al, Sc), YAl₂, DyAl₂, TaTi, Ta₃₉Al₆₉, Ti_{0,96}Ta_{0,04}, Ta_{161,8}Al_{282,2}, (TaTi₆₆)_{0,33}, (Ta,Ti)Al₃ жаңа фазалары түзілетіндігі белгілі болды.

5 Эволюциялық код арқылы USPEX-SIESTA бағдарламасының көмегімен параметрлері тәжірибелік мәліметтермен сәйкес келетін Ti–Al жүйелерін легирлеу кезінде пайда болатын, термодинамикалық тұрақты фазалардың кристалдық торларының моделі құрастырылды.

6 Легирлеуші элементтердің қосындыларын түйін аралықтарға енгізу мүмкін екендігі және ол торда атомдар байланысының энергиясының артуы мен TiAl–СЖМ мен TiAl–Ta жүйелерінде едәуір тұрақтандырушы эффектiге әкеп соғатындығы анықталды. Бастапқы Ti50–Al50 құймасымен салыстырғанда, Ta, Y қосындылары Ti49–Al49–Ta2, Ti49–Al49–Y2 жүйелерінің тиімді энергиясын едәуір арттыратындығы, ал Dy қосындысы Ti49–Al49–Dy2 жүйесінің айтарлықтай тұрақтандырушы эффектiсіне әкелетіндігі көрсетілген.

7 Ti49–Al49–Sc2, Ti49–Al49–Y2 және Ti49–Al49–Ta2 құймалары микроқаттылықтың ең жоғарғы мәндеріне ие болатындығы белгілі болды. Бұл үшкомпонентті жүйелердегі фазалар жиынтығының ұлғаюына, қатты ерітінділердің түзілуіне және қабаттардың морфологиясының өзгеруіне байланысты орын алады.

ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ

- 1 Clemens H., Smarsly W. Light-Weight Intermetallic Titanium Aluminides – Status of Research and Development // *Adv. Mater. Res.* – 2011. – V. 278. – P. 551-556.
- 2 Appel F., Ohring M., Paul J.D.H., Lorenz U. Design, Properties and Processing of Novel TiAl Alloys. – Warrendale: the Minerals Metals and Materials Society, 2001. – P. 63-72.
- 3 Appel F., Clemens H., Fischer F.D. Modeling concepts for intermetallic titanium aluminides // *Progress in Mater. Sci.* – 2016. – V. 81. – P. 55-124.
- 4 Hadi M., Shafyei A., Meratian M. A comparative study of microstructure and high temperature mechanical properties of a β -stabilized TiAl alloy modified by lanthanum and erbium // *Mater. Sci. and Eng.* – 2015. – Vol. A. 624. – P. 1-8.
- 5 Bulanova M., Fartushna I., Meleshevich K., Samelyuk A. Isothermal section at 850°C of the Ti–Dy–Al system in the Ti–TiAl–DyAl₂–Dy region // *Journal of Alloys and Compounds.* – 2014. – Vol. 598. – P. 61-67.
- 6 Hadi M., Shafyei A., Meratian M., Bayat O., Ebrahimzadeh I. Oxidation Properties of a Beta-Stabilized TiAl Alloy // *Oxid. of Metals.* – 2018. – Vol. 90. – P. 421-434.
- 7 Liu Z.G., Chai L.H., Chen Y.Y., Kong F.T., Davies H.A., Figueroa I.A. Microstructure evolution in rapidly solidified Y added TiAl ribbons // *Intermetallics.* – 2011. – Vol. 19. – P. 160-164.
- 8 Schwaighofer E., Staron P., Rashkova B., Stark A., Schell N., Clemens H., Mayer S. Hot-working behavior of an advanced intermetallic multi-phase γ -TiAl based alloy // *Acta Mater.* – 2014. – Vol. 77. – P. 297-310.
- 9 Abzaev Yu. A., Syzrantsev V. V., Bardakhanov S. P. Simulation of the Structural State of Amorphous Phases in Nanoscale SiO₂ Synthesized via Different Methods // *Physics of the Solid State.* – 2017. – Vol. 59. – №9. – P. 1874-1878.
- 10 Crystallography Open Database <http://www.crystallography.net/cod/search.html>; 2019 (accessed 13 March 2019).
- 11 Лахтин Ю. М. *Металловедение и термическая обработка металлов: учебник для вузов.* – Изд. 3-е перер. и доп. – М.: *Металлургия*, 1983. – 360 с.
- 12 Геллер Ю. А., Рахштадт А. Г. *Материаловедение.* – М.: *Металлургия*, 1975. – 445 с.
- 13 Колачев Б. А., Ливанов В. А., Елагин В. И. *Металловедение и термическая обработка цветных металлов и сплавов.* – М.: *Металлургия*, 1972. – 480 с.
- 14 Крайнов В. И., Кропачев В.С. Технологическая деформируемость титановых сплавов // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия».* – 2015. – Т. 15, № 2. – С.115-119.
- 15 Пат. 2244135 РФ. Клапан двигателя внутреннего сгорания, способ его изготовления и жаропрочный титановый сплав для него / Борбашов В. М., Дрогалин К. О., Москвичев Ю. П., Панин В. И.; опубл. 10.01.2005, Бюл. № 1, – 4 с.

- 16 Фишер Д., Зибум Х. Применение перспективных титановых сплавов в автомобилестроении // Титан. – 1993, №1. – С. 82-85.
- 17 Ильин А. А., Колачев Б. А., Полькин И. С. Титановые сплавы. Состав, структура, свойства. – М.: ВИЛС-МАТИ, 2009. – 520 с.
- 18 Zhou L., Chang H., Lu Y., Xu D. Titanium'. Sci. and Technol. Mat. of Inter. conf. «12th World Conf. on Titanium, 2011». – Beijing, 2011. – Vol. 1-3.
- 19 M. Niinomi. Titanium'. Sci. and Technol. Mat. of Inter. conf. «11th World Conf. on Titanium, 2007». - Kyoto, 2007. – Vol. 1-2. – P. 1765.
- 20 Clemens H., Kestler H., Eberhardt N. and Knabl W. Gamma Titanium Aluminides. – Warrendale: the Minerals Metals and Materials Society, 1999. – P. 209-223.
- 21 Gerling R., Schimansky F.P., Clemens H. Gamma Titanium Aluminides. – Warrendale: the Minerals Metals and Materials Society, 2003. – P.249-255.
- 22 Кипарисов С. С., Либенсон Г.А., Порошковая металлургия. – М., 1980. – 26 с.
- 23 Порошковая металлургия в СССР История. Современное состояние. Перспективы / под ред. И. Н Францевича и В. И. Трефилова. – М., 1986. – 132 с.
- 24 Ленинский Ю.В., Анциферов В.Н. и др. Порошковая металлургия и напыленные покрытия / под ред. Б. С. Митина. – М.: Металлургия, 1987. – 142 с.
- 25 Порошковая металлургия титановых сплавов: сборник научных трудов / пер. с англ. – М.: Металлургия, 1985. – 36 с.
- 26 Теплухин Г.Н. Порошковые материалы. – Л., 1984, – С. 54-57.
- 27 Бальшин М.Ю., Кипарисов С.С. – М.: Металлургия, 1978. – 124 с.
- 28 Раковский В.С., Саклинский В.В. Порошковая металлургия в машиностроении. – М.: Машиностроение, 1973. – 45 с.
- 29 Либенсон Г.А. Основы порошковой металлургии. – М.: Металлургия, 1975. – 46 с.
- 30 Федорченко И.М., Андриевский Р.А. Основы порошковой металлургии; –К.: Наука думка, 1961. – 102 с.
- 31 Бальшин М.Ю. Научные основы порошковой металлургии и металлургии волокна. – М.: Наука, 1972. – 45 с.
- 32 Еськов Б.Б., Лагунов Д.В., Лагунов В.С. Пористые материалы. – М.: Воронеж, 1995. – 201 с.
- 33 Вязников Н.Ф. Ермаков С.С. Металлокерамические материалы и изделия. - Л.: 1967. – 102 с.
- 34 Dimiduk D. M. Gamma titanium aluminides alloys – an assessment within the competition of aerospace structural materials // Mater. Sci. Eng. A. – 1999. – Vol. 263. – P.281-288.
- 35 Ржевская, С.В. Материаловедение / 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Изд-во Моск. гос. горного ун-та, 2003. – 456 с.
- 36 Колтыгин А.В., Белов В.Д., Петровский П.В., Павлинич С.П., Аликин П.В. Использование компьютерного моделирования при разработке

литниковых систем для изготовления отливок типа "лопатка" из сплавов на основе титана // Литейщик России. – 2011. №12. – С. 22-24.

37 Baur H., Wortberg D. B., Clemens H. Gamma Titanium Aluminides. – Warrendale: TMS, 2003. – P. 23.

38 Smarsly W., Baur H., Glitz G., Clemens H., Khan T., Thomas M. Structural Intermetallics. – Warrendale: TMS, 2001. – P. 25.

39 Оленёва Т.И., Имаев В.М., Имаев Р.М. Микроструктура и механические свойства интерметаллидного γ -TiAl сплава // Литейное производство. – 2011. №12. – С. 31-34.

40 H. Clemens, H. Kestler. Processing and Applications of Intermetallic γ -TiAl-Based Alloys // Adv. Eng. Mater. – 2000. – Vol.9. – P.551.

41 Bewlay B., Weimer M, Kelly T, Suzuki A, Subramanian P. Intermetallic-based alloys-science, technology and applications. – Warrendale (PA): MRS, 2013. – P. 49.

42 Б.Б. Чечулин, С.С. Ушков. Титановые сплавы в машиностроении. – Л.: «Машиностроение», 1977. – С. 378-380.

43 Петрунько А.Н., Олесов Ю.Г., Дрозденко В.А. Титан в новой технике. – М.: Металлургия, 1979. – С. 102-133.

44 Глазунов С. Г., Моисеев В. Н., Конструкционные титановые сплавы, – М.: Металлургия, 1972. – 76 с.

45 Солонина О. П., Глазунов С. Г. Жаропрочные титановые сплавы. – М.: Металлургия, 1976. – 134 с.

46 Металлография титана, под ред. С. Г. Глазунова и Б. А. Колачева, М., 1980;

47 Колачев Б. А., Ливанов В. А., Елагин В. И. Металловедение и термическая обработка цветных металлов и сплавов. – М.: Металлургия, 1981. – 204 с.

48 Диаграммы состояния двойных металлических систем: справочник в 3 Т.: под. ред. Н.П. Лякишева. – М.: Машиностроение, 1996.– 992 с.

49 Ильин А.А., Колачев Б.А., Полькин И.С. Титановые сплавы. Состав, структура, свойства. – М.: ВИЛС – МАТИ, 2009. – 520 с.

50 Appel F., Heaton-Paul J. D. Oehring M. Gamma Titanium Aluminide Alloys. – New York: Metals & Alloys, 2011. – P. 739.

51 Boyer R., Welsch G., Collings E.W. Titanium Alloys. – New York, ASM International, 1994. – P. 1176.

52 Yong Shen, Xiaofei Ding, Fugang Wang, Tan Y., Yang J.-M. High temperature oxidation behavior of Ti-Al-Nb ternary alloys // Materials Science. – 2004. – Vol.39. – P.6583-6589.

53 Белов Н.А., Чупахин И.С. Количественный анализ фазового состава сплава TiAl-Ni на основе алюминидов титана TiAl (γ). – М.: Фолиум, 2013. – с. 32-37.

54 Белов Н.А., Белов В.Д. Анализ формирования литой микроструктуры гамма (TiAl) – сплава TiAl-Ni // Литейщик России. – 2012, № 6. – С. 43-46.

- 55 Si-Young Sung, Young-Jig Kim. Modeling of titanium aluminides turbo-charger casting // *Intermetallics*. – 2007. – Vol. 15. – P.468-474.
- 56 Liu K., Ma Y.C., Gao M., Rao G.B., Li Y.Y., Wei K., Xinhua Wu, Loretto M.H. Single step centrifugal casting TiAl automotive valves // *Intermetallics*. – 2005. – Vol.13. – P.925-928.
- 57 Barbosa J, Ribeiro C., Monteiro A. Influence of superheating on casting of γ -TiAl // *Intermetallics*. – 2007. – Vol.15. – P.945-955.
- 58 Kuang J. P., Harding R. A., Campbell J. Microstructures and properties of investment castings of γ -titanium aluminide // *Materials Science and Engineering: A*. – 2002. – Vols.329-331. – P.31-37.
- 59 Simpkins R., Rourke M., Bieler T., McQuay P.A. The effects of HIP pore closure and age hardening on primary creep and tensile property variations in a TiAl XD™ alloy with 0.1 wt.% carbon // *Materials Science and Engineering: A*. – 2007. – Vol.463 (1-2). – P.208-215.
- 60 Harding R.A., Wickins M., Wang H., Djambazov G., Pericleous K.A. Development of a turbulence-free casting technique for titanium aluminides // *Intermetallics*. – 2011. – Vol.19. – P.805-813.
- 61 Beddoes J., Seo D.Y., Chen W.R., Zhao L. Relationship between tensile and primary creep properties of near γ -TiAl intermetallics // *Intermetallics*. – 2001. – Vol.9. – P.915-922.
- 62 Hodge A.M., Hsiung L.M., Nieh T.G. Creep of nearly lamellar TiAl alloy containing W // *Scripta Materialia*. – 2004. – Vol.51. – P.411-415.
- 63 Hu D., Wu X., Loretto M.H. Advances in optimisation of mechanical properties in cast TiAl alloys // *Intermetallics*. – 2005. – Vol.9. – P.914-919.
- 64 Lin J.P., Zhao L.L., Li G.Y., Zhang L.Q., Song X.P., Ye F., Chen G.L. Effect of Nb on oxidation behavior of high Nb containing TiAl alloys // *Intermetallics*. – 2011. – Vol.19. – P.131-136.
- 65 Меркулова Г.А. Металловедение и термическая обработка цветных сплавов. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, – 2008. – 312 с.
- 66 Курзина И.А., Козлов Э.В., Шаркеев Ю.П., Фортуна С.В., Конева Н.А., Божко И.А., Калашников М.П. Нанокристаллические интерметаллидные и нитридные структуры, формирующиеся при ионно-плазменном воздействии. – Томск: Изд-во НТЛ, 2008. – 324 с.
- 67 Диаграммы состояния двойных металлических систем / под ред. Лякишева Н.П. – М.: Машиностроение. – 1996. – 201 с.
- 68 Xie Y.Q., Peng H.J., Liu X.B., Peng K. Atomic states, potential energies, volumes, stability and brittleness of ordered FCC Ti₃Al-type alloys // *Physica*. – 2005. – Vol.362. – P.1-17.
- 69 Kainuma R., Sato J., Ohnuma I., Ishida K. Phase stability and interdiffusivity of the L1₀-based ordered phases in Al-rich portion of the Ti–Al binary system // *Intermetallics*. – 2005. – Vol.13. – P.784-791.
- 70 Sahu P. Lattice imperfections in intermetallic Ti–Al alloys: an X-ray diffraction study of the microstructure by the Rietveld method // *Intermetallics*. – 2006. – Vol.14. – P.180-188.

- 71 K. Hayashi, T. Nakano, Y. Umakoshi. Meta-stable region of Al_5Ti_3 single-phase in time-temperature transformation (TTT) diagram of Ti-62.5 at.% Al single crystal // *Intermetallics*. – 2002. – Vol.10. – P.771-781.
- 72 Барабаш О.М., Коваль Ю.Н. Кристаллическая структура металлов и сплавов. – Киев: Наукова думка. 1986. – 598 с.
- 73 Ding J.J., Rogl P., Schmidt H. Phase relations in the Al-rich corner of the Ti-Ni-Al system // *J. Alloys and Compounds*. – 2001. – Vol.317-318. – P. 379-384.
- 74 Stein F., Zhang L. C., Sauthoff G., Palm M. Tem and DTA study on the stability of Al_5Ti_3 - and h- Al_2Ti -superstructures in aluminium-rich TiAl alloys // *Acta mater*. – 2001. – Vol.49. – P.2919-2932.
- 75 Zhang L.C., Palm M., Stein F., Sauthoff G. Formation of lamellar microstructures in Al-rich TiAl alloys between 900 and 1100°C // *Intermetallics*. – 2001. – Vol.9. – P.229-238.
- 76 Вол А.Е. Строение и свойства двойных металлических систем. – М.: Физ.-Мат. Лит. – 1959. – 360 с.
- 77 Деменок А.О., Ганеев А.А., Деменок О.Б., Кулаков Б.А. Выбор легирующих элементов для сплавов на основе алюминиды титана // *Вестник ЮУрГУ*. – 2013. Т. 13, № 1, – С. 94-97.
- 78 Simpkins R., Rourke M., Bieler T., McQuay P.A. The effects of HIP pore closure and age hardening on primary creep and tensile property variations in a TiAl XD™ alloy with 0.1 wt.% carbon // *Materials Science and Engineering: A*. – 2007. – Vol.463 (1-2). – P.208-215.
- 79 Datta P.K., Du H.L., Burnell-Gray J.S., Ricker R.E. Corrosion of intermetallics *Corrosion Materials*. – New York, ASM Handbook, 2005. – Vol. 13B. – P. 490-512.
- 80 Goral M., Swadzba L., Moskal G., Jarczyk G., Aguilar J. Diffusion aluminide coatings for TiAl intermetallic turbine blades // *Intermetallics*. – 2011. – Vol.19. –P.744-747.
- 81 Картавых А.В., Калошкин С.Д., Чердынцев В.В., Горшенков М.В., Свиридова Т.А., Борисова Ю.В., Сенатов Ф.С., Максимкин А.В. Применение микроструктурированных интерметаллидов в турбостроении. – М.: Наука и технологии, 2012. – С. 3-13.
- 82 Sopunna K., Thongtem T., McNallan M., Thongtem S. Formation of titanium nitride on γ -TiAl alloys by direct metal-gas reaction // *Materials Science*. – 2006. – Vol.41. – P.4654-4662.
- 83 Каблов Е.Н., Оспенникова О.Г., Вершков А.В. Редкие металлы и редкоземельные элементы – материалы современных и будущих высоких технологий // *Труды ВИАМ*. – 2013. № 2. – С. 11.
- 84 Ключкова Ю.Ю., Грушко О.Е., Ланцова Л.П. Освоение в промышленном производстве полуфабрикатов из перспективного алюминийлитиевого сплава В-1469 // *Авиационные материалы и технологии*. – 2011. №1. – С. 8-12.

- 85 А.И. Хорев Фундаментальные исследования легирования титановых сплавов редкоземельными элементами // Вестник машиностроения. – 2011. № 11. – С. 15.
- 86 Gogia A.K. High-temperature Titanium Alloys // *Defence Science Journal*. –2005. – Vol.55, №2, – P.143-173.
- 87 Кашук В.А., Черкашин А.И. Титан с добавками переходных металлов 4-6-го периодов. В сб.: Легирование и термическая обработка титановых сплавов. – М.: ВИАМ. 1977. – С.113-118.
- 88 Белов Н.А., Алабин А.Н. Перспективные алюминиевые сплавы с добавками циркония и скандия // Цветные металлы. – 2007, № 2. – С. 99-106.
- 89 Яценко С.П., Федорова Е.Г. Редкоземельные элементы. Взаимодействие с р-металлами. – М.: Наука, 1990. – 280 с.
- 90 Пат. 2044096 РФ. Сплав на основе алюминия / Шмаков Ю.В и др.; опубл. 20.09.1995, Бюл. № 2, – 5 с.
- 91 Пат. 2458170 РФ. Алюминиевый сплав / Баранов В.Н., Биронт В.С., Галиев Р.И. и др.; опубл. 10.08.2012, Бюл. №2, – 4 с.
- 92 Matveeva I., Dovzhenko N., Sidelnikov S. Development and Research of New Aluminium Alloys with Transition and Rare-Earth Metals and Equipment for Production of Wire for Electrotechnical Applications by Methods of Combined Processing. – New Jersey: John Wiley & Sons Inc., 2013. – P. 443-447.
- 93 В.И. Кононенко, В.Г Шевченко. Физикохимия активации дисперсных систем на основе алюминия. – Екатеринбург: УрО РАН, 2006. – 238 с.
- 94 Olikier V. E., Trefilov V. I., Kresanov V. S., Gridasova T. Ya. Effect of scandium and chromium on the structure and heat resistance of alloys based on γ -TiAl // *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*. – 2000. – Vol. 39. – P.9-10.
- 95 Liu H.-Q. Influence of Sc on High Temperature Strengthening Behavior of Ti-6Al-4V Alloy // *Transactions on Nonferrous Metals Society of China*. – 2007. – Vol.17. – P.1212-1219.
- 96 Songbo Y., Boyun H., Zhimin Y. Effect of minor Sc on high temperature mechanical properties of Ti–Al based alloys // *Materials Science and Engineering*. – 2000. – Vol.280. – P.204-207.
- 97 Dalen M., Dunand D., Seidman D. Effects of Ti additions on the nanostructure and creep properties of precipitation strengthened Al–Sc alloys // *Acta Materialia*. –2005. – Vol. 53. – P.4225-4235.
- 98 Хорев А.И., Мухина Г.П., Жегина И.П. Влияние редкоземельных элементов на свойства титановых сплавов. В сб.: Легирование и термическая обработка титановых сплавов. – М.: ВИАМ. 1977. – С.106-113.
- 99 Nazarova T. I., Nazarov K. S., Sergeev S. N., Imayev V. M., Imayev R. M. Microstructure and mechanical properties of intermetallic γ -TiAl alloy alloyed with dysprosium // *Letters on materials*. – 2017. – Vol.7. – P.307-311.
- 100 Илларионова С.М., Елкина О.А., Илларионов А.Г. Фазовые превращения в метастабильном β -твердом растворе при термической обработке псевдо- β титанового сплава с РЗМ // Титан. – 2016. № 3(52). – С.14-18.

- 101 Илларионов А.Г. Влияние микродобавок хрома, гафния и иттрия на структуру и свойства жаропрочного титанового сплава ВТ18У // *Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures*. - 2017. № 3. - С. 15-22.
- 102 Hieda J. et al. Mechanical Properties of Biomedical β -type Titanium Alloy with Rare-Earth Metal Oxide Particles Formed by Rare-Earth Metal Addition. – Wiley: TMS, 2014. – P. 129-135.
- 103 Hieda J. et al. Effect of Oxide Particles Formed through Addition of Rare-Earth Metal on Mechanical Properties of Biomedical β -type Titanium Alloy // *Transactions*. -2013. - Vol.54. №8. -P.1361-1367.
- 104 Chen Y.-Y., Li B.-H., Kong F.-T. Effects of Minor Yttrium Addition on Hot Deformability of Lamellar Ti-45Al-5Nb Alloy // *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. – 2007. – Vol.17. №1. – P.58-63.
- 105 Chen et al. Influence of Yttrium on Microstructure, Mechanical Properties and Deformability of Ti-43Al-9V Alloy // *Intermetallics*. – 2005. – Vol.13. – P.263-266.
- 106 Zhao L.L. et al. Influence of Y Addition on the Long Time Oxidation Behaviors of High Nb Containing TiAl Alloys at 900 °C // *Intermetallics*. – 2010. – Vol.18. №8. – P.1586-1596.
- 107 Mao Y. et al. Microstructure and Tensile Properties of Orthorhombic Ti-Al-Nb-Ta Alloys // *Intermetallics*. – 2000. – Vol.8. – P.659-662.
- 108 Оглодков М.С., Хохлатова Л.Б., Колобнев Н.И. и др. Влияние термомеханической обработки на свойства и структуру сплава системы Al-Cu-Mg-Li-Zn // *Авиационные материалы и технологии*. – 2010. № 4. – С. 7-12.
- 109 Guzei L. Aluminium-Scandium Titanium, Ternary Alloys // *VCH*. – 1993. - Vol.8. – P.248–249.
- 110 Harada Y, Dunand D. Microstructure of Al₃Sc with ternary transition-metal additions // *Mater. Sci. Eng. A*. – 2002. – Vol. 329-331. – P.686-695.
- 111 Dalen M., Dunand D., Seidman D. Precipitation Strengthening in Al₃(Sc,Ti) Alloys // *Materials Science and Technology*. -2003. -P.195–201.
- 112 Zhang F., Yang Z., Ren L., Zhou R., Yu Z. Determination of Partial Ti-Al-Dy Ternary Phase Diagram at 1000 °C // *Zhongguo Xitu Xuebao*. -1996. - Vol.14, №3. -P.211-214.
- 113 Zhou H., Liu W., Yuan S., Yan J. The 500 °C Isothermal Section of the Al-Dy-Ti Ternary System // *J. Alloys Compd*. -2002. - Vol 336. №1. -P.218-221.
- 114 Akashev L. A., Popov N. A., Kuznetsov M. V., Shevchenko V. G. Thermal Oxidation of the Surface of Binary Aluminum Alloys with Rare-Earth Metals // *Russian Journal of Physical Chemistry*. -2015. - Vol.89. №5. -P.852–856.
- 115 Ри Х., Ри Э.Х., Химухин С.Н., Калугин М.Е. Влияние температурных режимов плавки и легирования сплавов алюминия на свойства отливок // *Литейное производство*. - 2010. № 8. - С. 7-8.
- 116 Cheng X., Xie C. Effect of rare earth elements on the erosion resistance of nitrided 40Cr steel // *Wear*. – 2003. – Vol.254. – P.415-20.

- 117 Stanford N., Atwell D., Beer A., Davies C., Barnett M. Effect of microalloying with rare-earth elements on the texture of extruded magnesium-based alloys // *Scripta Mater.* – 2008. – Vol.59. – P.772–775.
- 118 Choi J., Kim J., Choi C., Kim J., Rohatgi P. Effect of rare earth element on microstructure formation and mechanical properties of thin wall ductile iron castings // *Mater Sci Eng A.* -2004. - Vol.383. -P.323–333.
- 119 Kong F., Chen Y., Li B. Influence of yttrium on the high temperature deformability of TiAl alloys // *Mater. Sci. Eng. A.* -2009. - Vol.499. -P.53.
- 120 Li J., Wang H., Li M., Yu Z. Effect of yttrium on microstructure and mechanical properties of laser clad coatings reinforced by in situ synthesized TiB and TiC // *J Rare Earth.* -2011. - Vol.29. -P.477-483.
- 121 Raghavan V. Al-Ti-Y (Aluminum-Titanium-Yttrium) // *Journal of Phase Equilibria and Diffusion.* -2005. - Vol.26. №2. -P.191.
- 122 Yang Z., Ren L., Zhang F., Zhou R., Yu Z. Redetermination of 1000 °C Partial Isothermal Section of the Ti-Al-Y Ternary System // *J. Univ. Sci. Technol. Beijing.* -1995. - Vol.17. №6. -P.512-516.
- 123 Das S., Jewett T., Perepezko J. High Temperature Phase Equilibria of Some Ternary Titanium Aluminides. – Warrendale: The Materials Society, 1993. – P. 35-43.
- 124 Каблов Е.Н., Мубояджян С.А., Будиновский С.А., Луценко А.Н. Ионно-плазменные защитные покрытия для лопаток газотурбинных двигателей // *Металлы.* - 2007. № 5. - С. 23–34.
- 125 Каблов Е.Н., Мубояджян С.А. Защитные покрытия лопаток турбин перспективных ГТД // *ГТТ.* - 2001. № 3(12). - С. 30-32.
- 126 Антипов В.В. Стратегия развития титановых, магниевых, бериллиевых и алюминиевых сплавов // *Авиационные материалы и технологии.* - 2012. - С.157-167.
- 127 Описание порошка алюминия АСД-4 <https://russkijmetall.ru/poroshok-alyuminiya-asd-4/> 18.05.20
- 128 Описание порошка титана ПТЭМ-1 https://www.ural-atom.ru/goods/71613758-poroshok_titanovy_ptem_1_tu_48_10_22_85 18.05.20
- 129 Коган. Б. И., Названова. В. А. Скандий. – М.: Изд-во АН УССР, 1963. – 304 с.
- 130 Химическая энциклопедия: в 5 т / под ред. Н. С. Зефирова. – М.: Советская энциклопедия, 1995. – 639 с.
- 131 Описание иттрия металлического ИТМ-1 <https://industrial.kz/catalog/rare-earth-metals/yttrium-metal-itm-1.html> 10.05.2020.
- 132 Описание диспрозия металлического ДиМ-1 <https://industrial.kz/catalog/rare-earth-metals/dysprosium-dim-1-dim-2-dim-3.html> 10.05.2020.
- 133 Михеева В.И. Гидриды переходных металлов. – М.: Изд-во АН СССР, 1960. – 125 с.
- 134 Мержанов А.Г. Проблемы технического горения. – Черноголовка: ГКНТ АН СССР, 1981. – 154 с.

- 135 М.М. Антонова, Р.А. Морозова. Препаративная химия гидридов. – Наук. думка, 1976, - С. 69-93.
- 136 Маккей К. Водородные соединения металлов. – М.: Мир, 1968. – 206 с.
- 137 Мюллер В. Блекледж Д., Либовиц Дж. Гидриды металлов., М.: Атомиздат, 1973. – 165 с.
- 138 Самсонов Г.В. 0 состоянии водорода в гидридах переходных металлов // ДАН СССР. – 1973. – №208. – С.621-623.
- 139 Жигач А.Ф. Стасиневич Д.С. Химия гидридов. – Л.: Химия, 1969. – 189 с.
- 140 Галактионова Н.А. Водород в металлах. – М.: Metallurgy, 1967. – 167 с.
- 141 Guire J.c.M., Kempter C.P. Preparation and Properties of Scandium Dihydride // J. Chem. Phys. – 1960. – Vol. 33. – P. 5.
- 142 Грушина В.В., Родин А.М. Роль интенсивности перемешивания в процессе зонной плавки // Журн. физ. Химии. – 1968. – №42. – С. 2.
- 143 Arita M., Shimizu K., Ichinose Y. Calculations of Mixing Enthalpy and Entropy for Ternary Amorphous Alloys // Met. Trans. – 1982. – V. 13A. – №8. – P. 1329-1336.
- 144 Андриевский Р.А. Материаловедение гидридов. – М., Metallurgy, 1986, - С. 94-107.
- 145 Алефельд Г.Е., Фелькель И. Водород в металлах (в 2 т.). – М.: Наука, 1981. – 181 с.
- 146 Зенин А.А., Нарсенян Г.А., Нарсенян М.Д. Механизм и макрокинетика образования гидридов титана и циркония в волне СВЧ // Физика горения и взрыва. – 1982. – №4. – С. 66-70.
- 147 Водород в металлах. Под ред. Алефельда Г., Фелькля И. / пер. с англ. – М.: Москва, 1981. - С. 475-430.
- 148 Понятковский Е.Г., Антонов В.Е, Балаш И.Т. Получение гидрида молибдена при высоком давлении водорода // УФН. – 1982. – №4. – С. 167-705.
- 149 Fukai Y. The Metal-Hydrogen System. Basic Bulk Properties. – Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005. – P. 497.
- 150 Kazantseva L.A., Kurzina I.A., Kosova N.I., Pichugina A.A., Sachkov V.I., Vladimirov A.A., Sachkova A.S. Synthesis of titanium hydrides and obtaining alloys based on them // Bulletin of Tomsk State University. Chemistry. – 2015. №2. – P.69-75.
- 151 Dolukhanyan S. K., Aleksanyan A. G., Ter-Galstyan O. P., Mailyan D. G., Shekhtman V. Sh., Sakharov M. K. In Carbon Nanomaterials in Clean Energy Hydrogen Systems // Springer. – New York, 2008. – P. 733-741.
- 152 H. Hakobyan, A. Aleksanyan, S. Dolukhanyan, N. Mnatsakanyan, and V. Shekhtman. In Solid state phenomena // ed. Trans Tech Publications. – 2011. – P. 354.
- 153 Aleksanyan A.G., Dolukhanyan S.K., Shekhtman V.Sh., Khasanov S.S., Ter-Galstyan O.P., Martirosyan M.V. Formation of alloys in the TiNb system by

hydride cycle method and synthesis of their hydrides in self-propagating high-temperature synthesis // *Int J Hydrogen Energy*. – 2012. – Vol.37. – P.14234-14239.

154 Бибик Е.Е., Кожевников Н.М. Расчеты и задачи по коллоидной химии. - М.: Высш. Школа, 1989. – 213 с.

155 Карнаухов А.П. Адсорбция. Текстура дисперсных и пористых материалов. Новосибирск: Наука, 1999. – 471 с.

156 К.П. Мищенко и А.А. Равделя. «Краткий справочник физико-химических величин. – Л.: Химия, 1974. – 189 с.

157 Боярская Ю.С. Деформирование кристаллов при испытаниях на микротвердость. Кишинев: Штиинца, 1972. – 235 с.

158 Abzaev Yu.A., Syzrantsev V.V., Bardakhanov S.P. Simulation of the Structural State of Amorphous Phases in Nanoscale SiO₂ Synthesized via Different Methods // *Physics of the Solid State*. – 2017. – Vol.59. – P.1850.

159 Pecharsky V, Zavalij P. Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials // Springer. – New York, 2005. – P. 713.

160 Toby, B.H. R factors in Rietveld analysis: How good is good enough? // *Powder Diffraction*. – 2006. – Vol. 21. – P. 67-70.

161 Young R.A. The Rietveld method // Oxford University Press. – Oxford, 1996. – P. 145.

162 Abdel-hamid A.A. Influence of Ta, Zr, V and Mo on the growth-morphology of Ti-aluminide crystals// *Zeitschrift fur metallkunde*. – 1991. – Vol.82. – P.383-386.

163 Белгибаева А.А., Еркасов Р.Ш., Курзина И.А., Косова Н.И., Сачков В.И., Абзаев Ю.А. Получение высокопрочных сплавов системы Ti-Al по «гидридной технологии» // Тез. докл. молод. науч.-техн. конф. «Новые материалы и технологии», - Барнаул, 2018. – С. 62-68

164 Белгибаева А.А., Еркасов Р.Ш., Курзина И.А., Косова Н.И., Сачков В.И., Абзаев Ю.А. Получение высокопрочных сплавов системы Ti-Al с использованием гидридов металлов // Мат. междунар. научная конференция «Полуфункциональные химические материалы и технологии», - Томск, 2019. – С. 23-26.

165 Белгибаева А.А., Еркасов Р.Ш., Курзина И.А., Косова Н.И. Получение высокопрочных сплавов системы Ti-Al с использованием гидридов металлов // Мат. междунар. научная конференция «Перспективы развития фундаментальных наук», - Томск, 2019 г. – С. 33-35.

166 Белгибаева А.А., Еркасов Р.Ш., Курзина И.А., Косова Н.И. Изучение влияния микролегирования иттрием на структуру сплава системы Ti-Al // Мат. междунар. научная конференция «Перспективы развития фундаментальных наук», - Томск, 2020 г. – С. 26-28.

167 Белгибаева А.А., Еркасов Р.Ш., Курзина И.А., Косова Н.И. Изучение влияния микролегирования диспрозием на структуру сплава системы Ti-Al // Мат. междунар. научная конференция «Перспективы развития фундаментальных наук» - Москва, 2020 г. – С. 370-371.

168 Белгибаева А.А., Еркасов Р.Ш., Курзина И.А., Косова Н.И., Сачков В.И., Абзаев Ю.А. Изучение влияния микролегирования диспрозием на структуру сплава системы Ti-Al // Мат. междунар. научная конференция «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (ЭДС – 2020), - Барнаул, 2020. – С. 165-169.

169 Белгибаева А.Ә., Еркасов Р.Ш. Металдар гидридтерін қолданып TiAl жүйесіндегі беріктілігі жоғары құймалардың алынуы // ЕҰУ Хабаршысы. Жаратылыстану және техникалық ғылымдар сериясы. – Астана: Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, 2017. - №2 (117). – 146-151 б.

170 Белгибаева А.А., Еркасов Р.Ш., Курзина И.А., Косова Н.И., Сачков В.И., Абзаев Ю.А. Получение высокопрочных сплавов системы Ti-Al используя гидриды металлов // Вестник. Серия Химия. География. Экология. – Астана: ЕНУ им. Л.Н. Гумилева, 2019. - №1 (126). – С. 21-28.

171 Белгибаева А.А., Еркасов Р.Ш., Курзина И.А., Косова Н.И., Сачков В.И., Абзаев Ю.А. Влияние микролегирования скандием на структуру сплавов на основе алюминидов титана // Вестник. Серия Химия. География. Экология. – Астана: ЕНУ им. Л.Н. Гумилева, 2020. - №2 (131). – С. 23-30.

172 Braun J., Ellner M., Predel B., Splat Z. Splat-cooling investigations in the binary-system Ti-Al // Metallkd. – 1994. – Vol.82. – P.355-362.

173 Xie Y.Q., Peng H.J., Liu X.B., Peng K. Atomic states, potential energies, volumes, stability and brittleness of ordered FCC Ti_3Al -type alloys // Physica. -2005. – Vol.B 362. -P.1-17.

174 Wang H.Y., Hu Q.K., Yang W.P., Li X.Sh. Influence of metal element doping on the mechanical properties of TiAl alloy // Acta physica sinica. – 2016. – Vol.65. –P.176101.

175 Lyakhov A.O., Oganov A.R., Stokes H.T., Zhu Q. New developments in evolutionary structure prediction algorithm USPEX // Computer Physics Communication. – 2013. – Vol.184. – P.1172-1182.

176 Abzaev Yu.A., Starostenkov M.D., Klopotov A.I. First-principles calculations of the concentration dependence of elastic modules in monocrystals $Ni_3(Ge_{1-x},Al_x)$ // Fundamental problems of modern materials science. – 2014. – Vol.11. – P.56.

177 Segall M. D., Pickard C. J., Shah R., Payne M. C. Population analysis in plane wave electronic structure calculations // Mol. Phys. – 2010. – Vol.89. – P.571-577.

178 Segall M. D., Shah R., Pickard C. J., Payne M. C. Population analysis of plane-wave electronic structure calculations of bulk materials" // Phys. Rev. –1996. – Vol.B. №54. – P.16317-16320.

179 Oganov A.R., Glass C.W., Lyakhov A.O., Zhu Q., Qian G.-R., Stokes H.T., Bushlanov P., Allahyari Z., Lepeshkin S. Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography. Manual. 9.7. Appendices.P.108. Electronic access: <http://han.ess.sunysb.edu/>

180 Kurzina I.A., Kozlov E.V., Sharkeev Yu.P., Ryabchikov A.I., Stepanov I.B., Bozhko I.A., Kalashnikov M.P., Sivin, D.O., Fortuna S.V. Influence of ion

implantation on nanoscale intermetallic-phase formation in Ti–Al, Ni–Al and Ni–Ti systems // *Surf. Coat. Technol.* – 2007. – Vol.201. – P.8463.

181 Kurzina I.A. Physical Base of the Metallic Gradient Surface Layers of Titanium Alloys Formed under Ion Implantation // *Adv. Mater. Res.* – 2014. – Vol.872. – P.184-190.

182 Cordell T. Titanium Aluminide Intermetallics. Advanced Materials and Processes Technology // *The AMPTIAC Newsletter.* – 2000. – Vol.4. – P.9.

183 Belgibayeva A., Abzaev Y., Karakchieva N., Erkasov R., Sachkov V., Kurzina I. The Structural and Phase State of the TiAl System Alloyed with Rare-Earth Metals of the Controlled Composition Synthesized by the “Hydride Technology” // *Metals.* – 2020. – Vol.10. – P.859.

184 Raghavan V. Al-Ti-Y (Aluminum-Titanium-Yttrium) // *Phase Equilibria and Diffusion.* – 2005. – Vol.26. – P.191.

185 Zhou H., Liu W., Yuan S., Yan J. The 500°C Isothermal Section of the Al-Dy-Ti Ternary System // *Alloys and Compd.* – 2002. – Vol.336. – P.218-222.

186 Das K., Das S. A Review of the Ti-Al-Ta (Titanium-Aluminum-Tantalum) System // *Phase Equilibria and Diffusion.* – 2005. – Vol.26. – P.323-324.

187 Sereda B., Zherebtsov A., Belokon Y. The Modeling and Processes Research of Titan Aluminides Structurization Received by SHS Technology. – Washington: TMS, 2010. – P.99-108.

188 B. Sereda, I. Kruglyak, A. Zherebtsov, Y. Belokon'. The Processes Research of Structurization of Titan Aluminides Received by SHS. – Pittsburg: Materials Science & Technology, 2009. – P.2069-2073.

189 Курзина И.А. Градиентные поверхностные слои на основе наноразмерных металлических частиц: синтез, структура, свойства: дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.07. – Барнаул.: ИФПМ Сиб.отд. Рос. акад. наук, 2011. – 402 с.

190 Sridharan S., Nowotny H. Studies in the Ternary System Ti-Ta-Al and in the Quaternary System Ti-Ta-Al-C // *Z. Metallkd.* – 1983. – Vol.74. – P.468-472.

191 McCullough C., Valencia J.J., Levi C.G., Mehrabian, R., Maloney M., Hecht R. Solidification Paths of Ti-Ta-Al Alloys // *Acta Metall.* – 1991. – Vol. 39. – P.2745-2758.