

УДК 621.793

**Расчет фазового состава покрытия на основе  
высокоэнтропийного сплава,  
осаждаемого в среде реакционного газа**

**Сечко И. А., магистрант**

*Белорусский национальный технический университет*

*г. Минск, Республика Беларусь*

*Научный руководитель: к.т.н., доцент Комаровская В. М.,*

*Зав. лаб. Вакуумно-плазменных покрытий ГНУ «ФТИ НАН*

*Беларуси», к.т.н., доцент Латушкина С. Д.*

Аннотация:

В данной работе проводится расчет и анализ данных для покрытия из высокоэнтропийного сплава (ВЭС) TiAlFeCrNi, на основе которого прогнозируется фазовый состав получаемой пленки.

Свойства покрытий, получаемые в вакууме ионно-плазменными методами с применением реакционного газа, зависят от самого газа и его концентрации, материала катода и других факторов. Для прогнозирования этих свойств необходимо проводить термодинамический анализ. В случае с покрытиями, состоящими из двух и более металлов, необходимо учитывать вероятность образования соединений с каждым из них.

В работе будут проводиться исследования покрытий на основе высокоэнтропийного сплава, наносимых в среде азота ( $N_2$ ). Материалы покрытия могут реагировать с каждым активным компонентом газовой среды. Чтобы прогнозировать свойства получаемой пленки, необходимо знать или предполагать возможный ее состав, в связи с чем проводится термодинамический анализ реакции получения соединений. В состав покрытия входят следующие металлы: Al, Ti, Cr, Fe, Ni. Расчет и анализ свойств осуществляется путем анализа свободной энергии Гиббса соединения на диаграмме Эллингема.

Кроме анализа диаграммы провели термодинамический анализ образования нитридов металлов (Al, Ni, Cr, Fe, Ni), методика которого описана в работе [1], при различных давлениях реакционного газа для следующей реакции:



где Me – металл, вступающий в реакцию.

Рассматриваются два случая: когда покрытие состоит из нитрида металла и металла ( $a\text{TiN} = a\text{Ti}$ ), и когда формирующиеся слои в основном однофазные и состоят из нитрида ( $a\text{TiN} = 100 a\text{Ti}$ ). Результаты расчетов при  $P_{\text{N}_2} = 0,46$  представлены в таблице 1.

Таблица 1. – Максимальные значения температур равновесия реакции образования нитридов при различных соотношениях активностей  $a\text{MeN}$  и  $a\text{Me}$

MeN	t, °C	$\Delta G_t$	T ( $a\text{MeN} = a\text{Me}$ )	T ( $a\text{MeN} = 100 a\text{Me}$ )
AlN	298–933	$-318612+105,98T$	2995,367103	3130,918949
	933–2793	$-327190+115,35T$	2826,982085	2944,127511
TiN	298–1944	$-336910+93,26T$	3597,610721	3783,673546
	1944–3223	$-351790+101,21T$	3462,55915	3626,959248
	$\geq 3223$	$-300550+85,31T$	3507,072192	3706,234211
Cr2N	...	$-99200+46,98T$	2094,229148	2319,757301
CrN	...	$-113390+73,22T$	1540,452026	1643,259644
Fe4N	298–1184 ( $\alpha$ – Fe)	$-4707+40,38T$	115,4574537	130,1603224
	1184–1665 ( $\gamma$ – Fe)	$-8435+43,51T$	192,1488268	214,6687648
	1665–1809 ( $\delta$ – Fe)	$-8577+43,60T$	194,9838239	217,7838022
	1809–2500 (Feж)	$-75410+80,54T$	931,8128909	988,0364624
MeN	t, °C	$\Delta G_t$	T ( $a\text{MeN} = a\text{Me}$ )	T ( $a\text{MeN} = 100 a\text{Me}$ )
Fe8N	298–1184 ( $\alpha$ – Fe)	$-11340+80,54T$	140,1240974	148,5788819
	1184–1665 ( $\gamma$ – Fe)	$-18910+73,93T$	254,4462005	271,2546361
	1665–1809 ( $\delta$ – Fe)	$-26440+78,45T$	335,370143	356,1753727
	1809–2500 (Feж)	$-150710+147,15T$	1021,497715	1054,409413
NiжN	1823–1973	$-44770+57,32T$	775,7987607	843,0770498

Исходя из полученных в ходе расчета температур равновесия можно сделать вывод, что при данных давлениях газа в рабочей камере невозможно образование нитридов алюминия, железа, никеля. Возможно образование следующих оксидов: TiN, Cr<sub>2</sub>N, CrN.

Анализ диаграммы Эллингема для реакции образования нитридов хрома показал, что при рабочей температуре будет образовываться только Cr<sub>2</sub>N (см. рисунок 1).

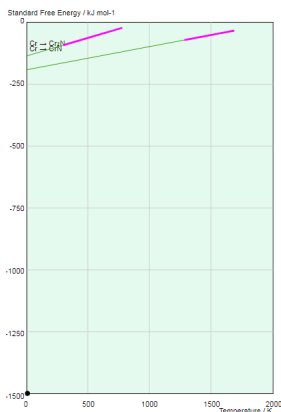


Рис. 1 – диаграмма Эллингема для нитридов хрома

Таким образом, после проведения расчетов и анализа диаграммы Эллингема, можно сделать вывод, что в состав предполагаемого покрытия из металлов Al, Ni, Cr, Fe, Ni в среде N<sub>2</sub> при рабочей температуре (500–1000 K) могут образовываться следующие соединения: TiN, Cr<sub>2</sub>N. Никель Ni, алюминий Al и железо Fe при таких условиях не должен образовывать нитридных соединений, следовательно эти элементы будет присутствовать в составе покрытия в фазе чистого металла.

### Список использованных источников

1. Кусков В. Н., Парфенов В. Д., Ковенский И. М. Формирование и износостойкость нитридных ионно-плазменных покрытий на

твердосплавных режущих пластинах // М.: Физика и химия обработки материалов, 1992. – С. 76–81.

УДК 621.793

### **Расчет вероятности получения высокоэнтропийного сплава**

**Сечко И. А., магистрант**

*Белорусский национальный технический университет*

*г. Минск, Республика Беларусь*

*Научный руководитель: к.т.н., доцент Комаровская В. М.*

**Аннотация:**

В данной статье описываются данные, полученные в результате расчета высокоэнтропийного сплава (ВЭС) TiAlFeCrNi, на основании которого делается прогноз о его структуре.

Как известно из практики, свойства полученного высокоэнтропийного сплава (ВЭС) во многом зависят от их фазового состава, стабильности и типа кристаллической решетки. Эти параметры можно предсказать с высокой точностью с помощью расчета термодинамических характеристик и соотношений физических свойств элементов сплава [1].

Необходимыми для расчета параметрами являются  $\Omega$ -параметр, соотношение атомных радиусов элементов в сплаве  $\delta$  и концентрация валентных электронов VEC [1–2].

Расчеты производились для ВЭС с составом TiAlFeCrNi. В представленных источниках мишень из высокоэнтропийного сплава является цельной. В нашем случае имеется два катода, один из которых составной из алюминия со вставками из нихрома и нержавеющей стали, а другой – из титана. В связи с этим легче контролировать количество элементов, подбирая режимы проведения технологического процесса.

В таблице 1 и 2 приведены необходимые для расчетов исходные данные.