М.В. Ламуева¹, М.Д. Парфенова², А.Э. Зеленая¹, В.И. Луцык^{1,3}

¹*Сектор компьютерного конструирования материалов*

Институт физического материаловедения СО РАН, Улан-Удэ

²*Томский государственный университет систем управления и радио-электроники, Томск, РФ*

³*Бурятский государственный университет, Улан-Удэ, Россия*

КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ Т-Х-У ДИАГРАММЫ LiF-NaF-LaF₃ И АНАЛИЗ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ПОЛЕЙ НА ЕЕ ОСНОВЕ

Фториды металлов имеют широкое практическое применение. Они могут применяться как конструкционные оптические материалы, электролиты, а также использоваться в технологии переработки атомно-энергетического сырья и рассматриваться в качестве топлива для расплавлено-солевого реактора. Представлена компьютерная модель Т-х-у диаграммы системы LiF-NaF-LaF₃ (А-В-Д), как часть ограничения четырёхкомпонентной системы LiF-NaF-CaF₂-LaF₃ (А-В-С-Д).

Бинарная система NaF-LaF₃ содержит инконгруэнтно плавящееся соединение NaLaF₄. В самой тройной системе LiF-NaF-LaF₃ протекает два невариантных превращения: эвтектическое $L_E \rightarrow A_E + B_E + R_E$ и квазиперитектическое $L_Q + D \rightarrow A_Q + R_Q$ [1].

В качестве начальных данных для построения модели задавались температуры и составы бинарных и тройных точек, учитывалось образование бинарного соединения [1]. Построенная компьютерная модель фазовой Т-х-у диаграммы системы LiF-NaF-LaF₃ содержит четыре поля ликвидуса (q), отвечающие трем исходным компонентам и бинарному соединению, 10 линейчатых поверхностей (q') и 2 горизонтальных комплекса (h) при температурах невариантных точек E и Q (рис. 1а). Сформированы 4 двухфазные области (L+A, L+B, L+D, L+R), 5 трехфазных областей с расплавом (L+A+B, L+A+D, L+A+R, L+B+R, L+R+D) и 2 трехфазные области без расплава (A+B+R, A+D+R).

На основе полученной компьютерной модели произведен анализ концентрационных полей и выявлены поля, обладающие уникальной и совпадающими наборами микроструктуры. Такой анализ производится на основе диаграмм вертикального материального баланса, позволяющих проанализировать соотношение фаз для выбранного центра масс [2].

Рис. 1. 3D модель (а) Т-х-у диаграммы системы LiF-NaF-LaF₃, разбиение XY проекции фазовой диаграммы системы LiF-NaF-LaF₃ на концентрационные поля (б)

Так, проекция фазовой диаграммы разбивается на 14 двумерных, 18 одномерных и 5 нульмерных поля (рис. 1б). Из них пять концентрационных полей совпадают по этапам кристаллизации и наборам микроструктурных составляющих с соседними полями большей размерности $R_E-E=R_E$, $E-Q=Q$, $R_E-p_{DR}=7$, $R_E-Q=8$, $A-Q=3$, одномерное поле A_Q-Q совпадает с полем 14 по набору микроструктурных составляющих, но различается этапами кристаллизации.

Для примера, рассмотрим двухмерное поле LaF_3-D_Q-R . Центр масс G (0.166; 0.276; 0.558) (рис. 2а) заданный в этом поле пересекает 3 фазовые области $L+D$, $L+R+D$, $A+D+R$ (рис. 2б). Из диаграммы вертикального материального баланса видно, что заданный центр масс пересекает поверхность ликвидуса q_D и попадает в двухфазную область $L+D$. Где происходит реакция первичной кристал-

лизации $L^1 \rightarrow D^1$. Далее центр масс пересекает линейчатую поверхность q_{DR}^r , проходя через трехфазную область $L+R+D$, в которой происходит перитектическая реакция $L^p+D \rightarrow R^{p(D)}$ с уменьшением доли фазы D и L , и появлением и нарастанием доли фазы R . При попадании состава на горизонтальный комплекс при Q происходит неинвариантная квазиперитектическая реакция $L_Q+D \rightarrow A_Q+R_Q$, ниже этого комплекса находится твердофазная область $A+D+R$. Т.о. для данного центра масс можно составить следующую цепочку фазовых реакций $L^1 \rightarrow D^1$, $L^p+D \rightarrow R^{p(D)}$, $L_Q+D \rightarrow A_Q+R_Q$ (табл.). И оно характеризуется следующим набором микроструктурных элементов: D^1 , $R^{p(D)}$, A_Q , R_Q . Аналогичным образом проводится анализ всех концентрационных полей системы $LiF-NaF-LaF_3$.

Рис. 2. Пути кристаллизации (а) и диаграмма вертикального материального баланса в этой точке (б) для центра масс G

Таблица

Схемы кристаллизации и элементы микроструктуры для центра масс G

Поверхности	Фазовые области	Схема кристаллизации	Микроструктура
q_D	$L+D$	$L^1 \rightarrow D^1$	D^1
q_{DR}^r	$L+R+D$	$L^p+D \rightarrow R^{p(D)}$	$R^{p(D)}$
h_Q	$A+D+R$	$L_Q+D \rightarrow A_Q+R_Q$	A_Q, R_Q

Работа выполнена в соответствии с госзаданием ФГБУН ИФМ СО РАН, проект №0336-2019-0008, и при частичной поддержке РФФИ в рамках научного проекта 19-38-90035(Аспиранты).

Список литературы

1. Beilmann M., Beneš O., Konings R.J.M., Fanghänel Th. // J. Chem. Thermodynamics. 2011. Vol. 43. P. 1515-1524.
2. Lutsyk V.I., Zelenaya A.E., Lamueva M.V. Calculation of Phase Trajectories for Microstructural Analysis in Liquid Fields of Cristobalite and Tridymite for System FeO-SiO₂-Fe₂O₃ // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1441. N 012011.