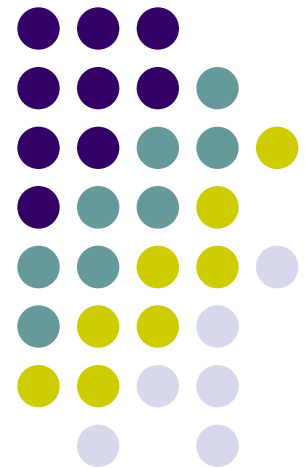


Статистическое и термодинамическое моделирование сигма – фазы

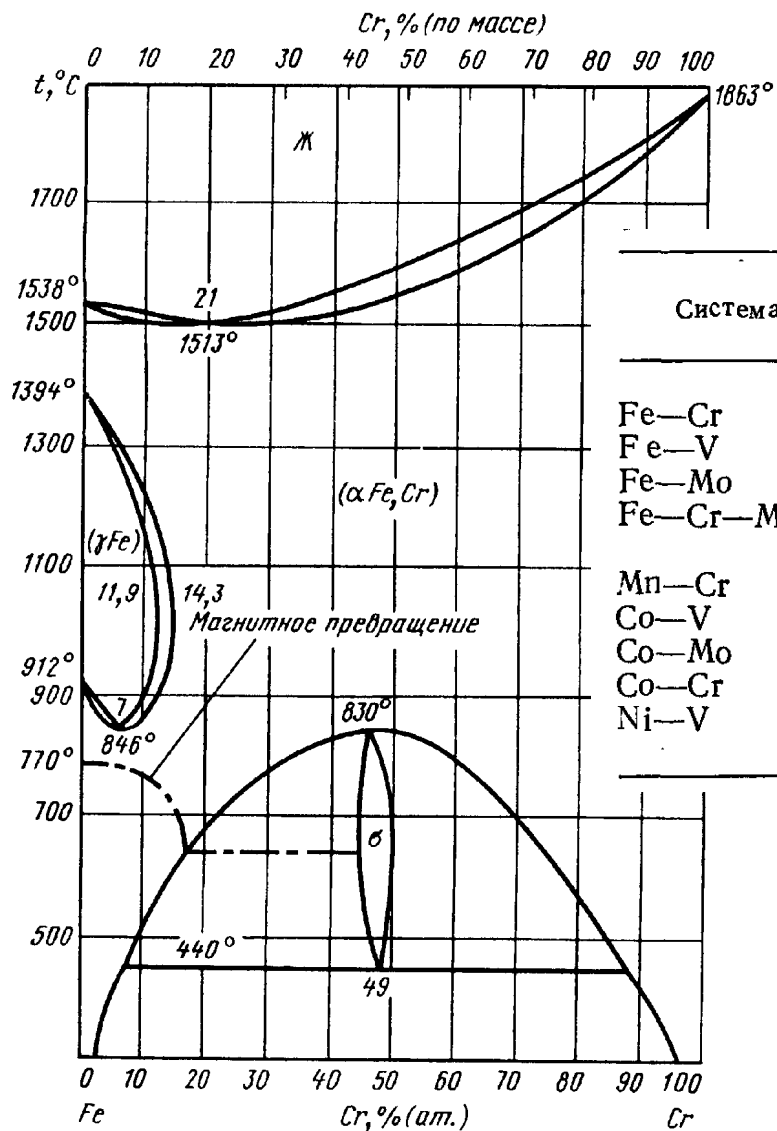
Проблемы физики твердого тела и высоких давлений, Сочи,
10 – 19 сентября 2010

Л.Сон, Г.Русаков, Е.Ефимова, Н.Катков

**Поддержано ФЦП «Научные и научно – педагогические
кадры инновационной России», госконтракт № П895**

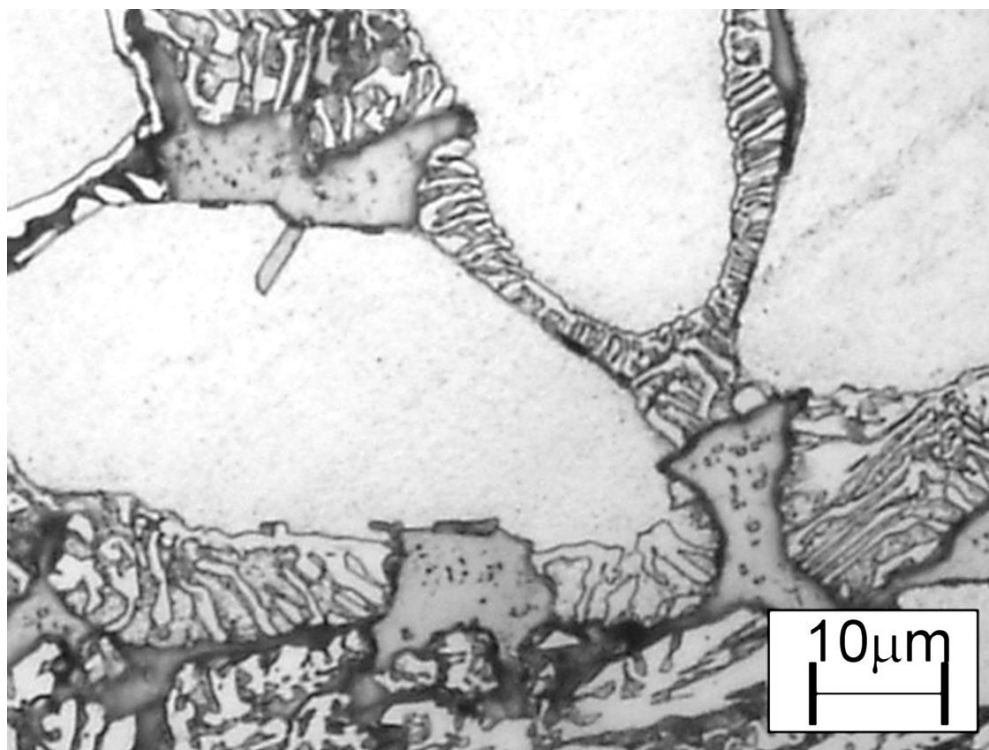
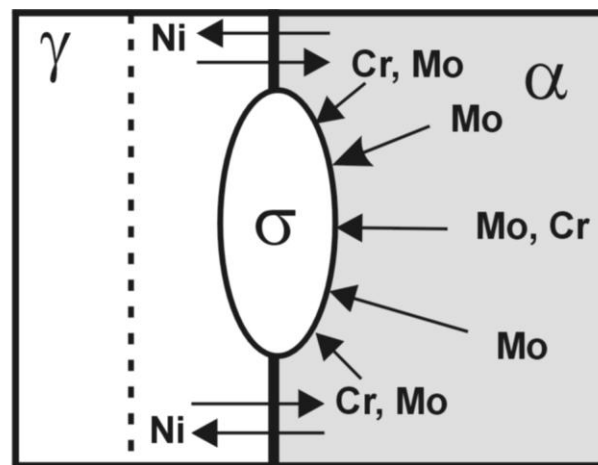
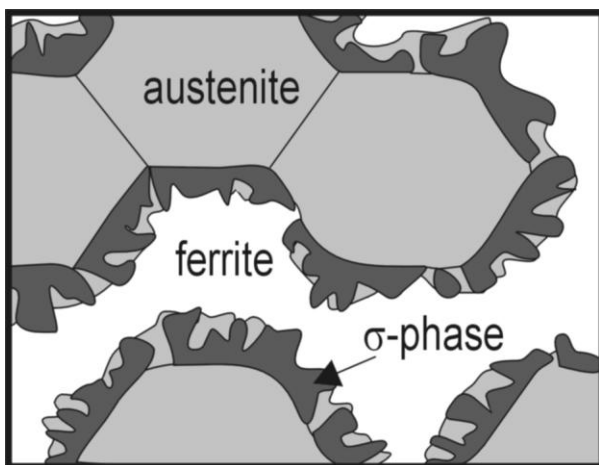


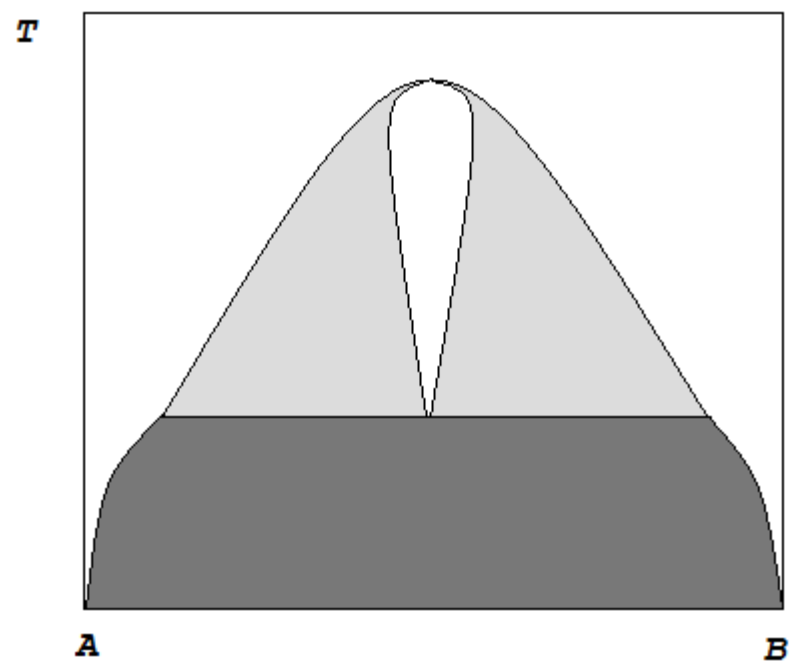
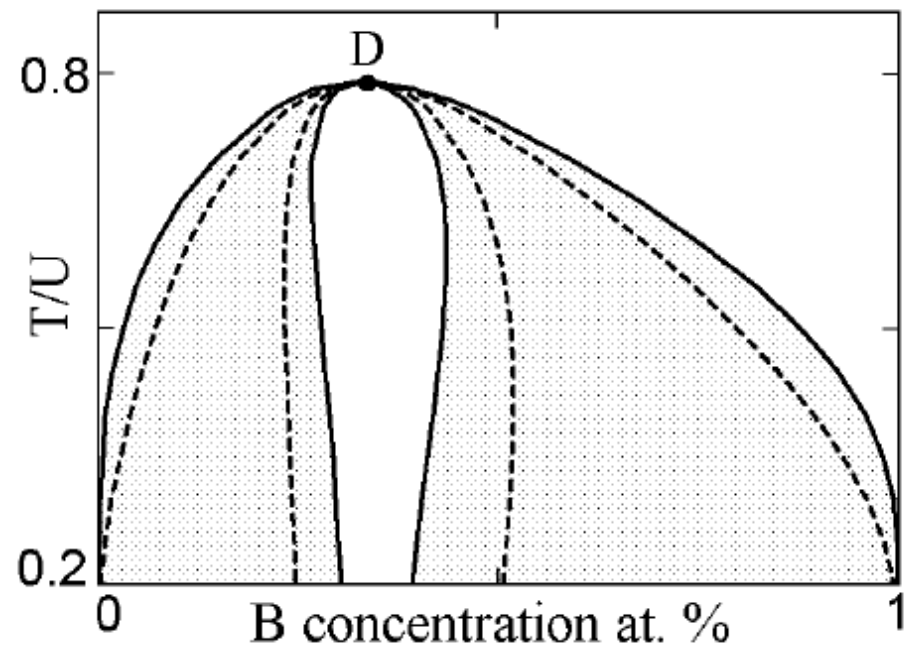
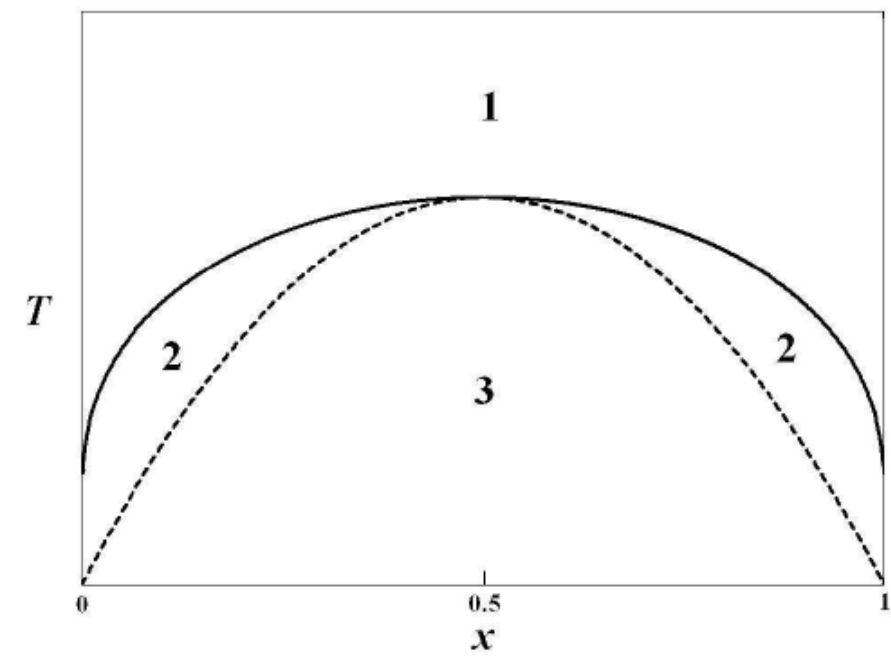
сигма – фаза в сплавах переходных металлов



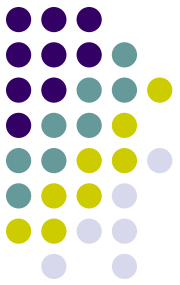
Система	Концентрация элементов, %	Число электронов/число атомов	R_A/R_B	c/a
Fe—Cr	51,0—56,5 Cr	7,0/7,1	1,01	1,462
Fe—V	35,0—57,0 V	6,9/7,3	1,06	1,453
Fe—Mo	47,0—50,0 Mo	7,0/7,1	—	—
Fe—Cr—Mo	40 Fe—40 Cr—20 Mo	—	—	1,458
Mn—Cr	19—24 Cr	6,78/6,84	0,98	—
Co—V	40—54 V	6,8/7,4	1,08	1,455
Co—Mo	59—61 Mo	7,17/7,23	1,12	—
Co—Cr	56—61 Cr	7,2/7,3	1,02	—
Ni—V	55—65 V	6,7/7,2	1,08	1,465

Сигма – фаза в дуплексных сталях





Термодинамическое описание



$$G(c, T, \varphi) = G_{reg}(c, T) + G_{add}(c, T, \varphi)$$

$$G_{reg}(c, T) = \varepsilon c(1-c) + T \{c \ln(c) + (1-c) \ln(1-c)\}$$

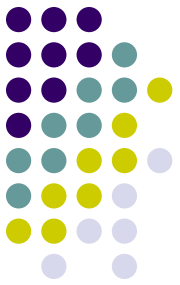
$$G_{add}(c, T, \varphi) = 12g \left(\frac{p(c, T)}{2} \varphi^2 - \frac{p(c, T) + 1}{3} \varphi^3 + \frac{1}{4} \varphi^4 \right)$$

Первое слагаемое – потенциал регулярного (твердого) раствора, второе описывает фазовый переход между состояниями с равновесными значениями $\varphi=0$ (твердый раствор) и $\varphi=1$ (сигма – фаза).

$$\frac{\partial G}{\partial \varphi} = 0$$

$$G_{\varphi=0}(c, T) = G_{reg}(c, T), \quad G_{\varphi=1} = G_{reg}(c, T) + 2g \left(p(c, T) - \frac{1}{2} \right)$$

Выбор параметров модели



$$p(c, T) = 1/2$$

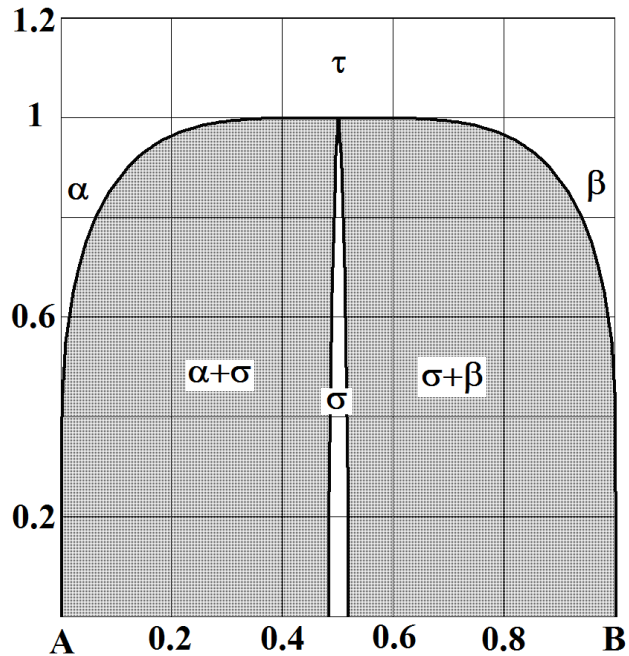
$$p(c, T) = 1/2 + [T - T_0 + k(c_0 - c)^2]$$

$$c_0 = 0.5 \quad 2\sqrt{T_0/k} = 0.4 \quad T_0 = 1 \quad k = 25$$

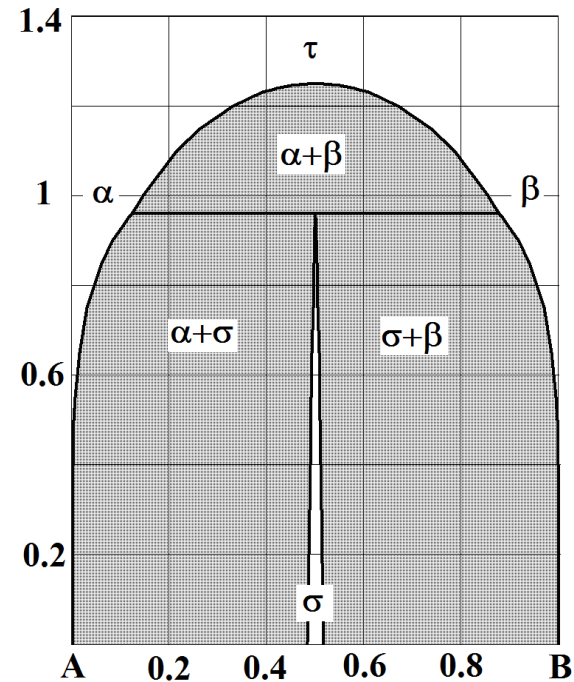
$\varepsilon/2$ температура Курнакова истинного раствора

$2gT_0$ выигрыш в энергии образования сигма-фазы
эквивалентного состава при абсолютном нуле
температуры по отношению к истинному раствору

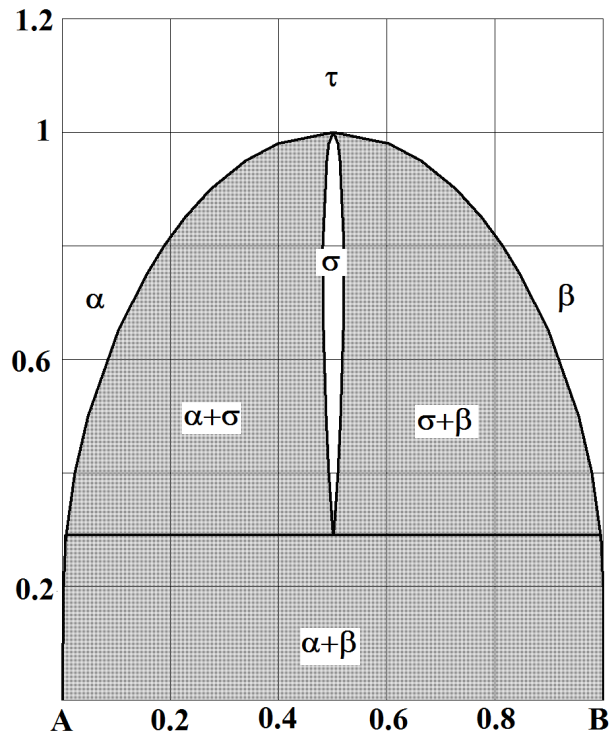
Возможные диаграммы



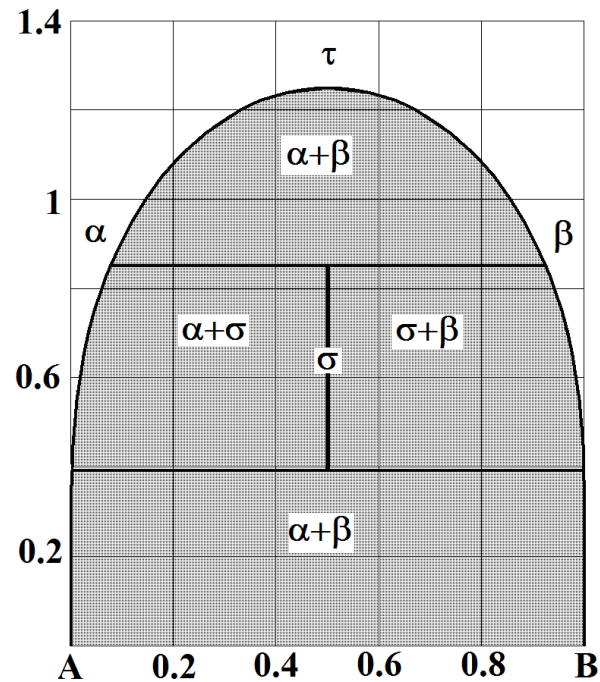
1. Фазовая диаграмма с промежуточной σ - фазой и τ – фазой выше максимальной температуры ее существования. $\varepsilon=2, g=0.125$



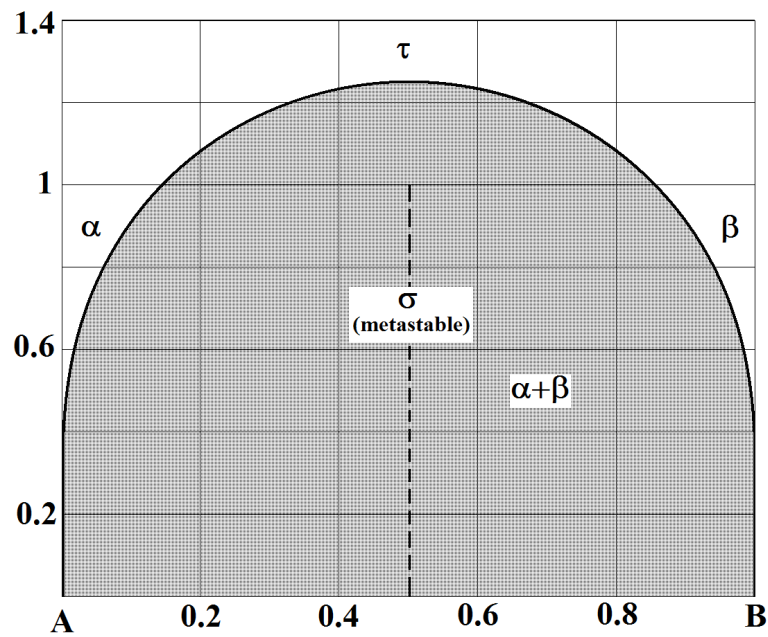
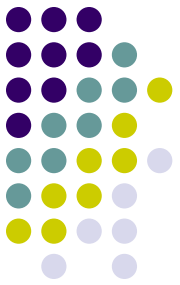
2. Температурный интервал существования σ - фазы ограничен сверху тройным α - σ - β равновесием и куполом расслоения регулярного раствора $\varepsilon=2.5, g=0.5$



3. Температурный интервал σ - фазы сверху ограничен τ - фазой, а снизу - тройным α - σ - β равновесием и областью несмешиваемости α - β
 $\varepsilon=1.5$, $g=0.125$

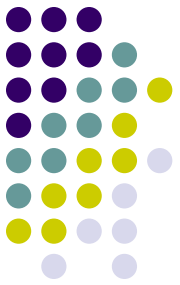


4. Сигма – фаза зажата между двумя тройными α - σ - β точками.
 $\varepsilon=2.5$, $g=0.295$.



5. Фазовая диаграмма регулярного раствора с метастабильной промежуточной сигма – фазой.
 $\varepsilon=2.5, g=0.125$

Представление локальных состояний.



$$H\{\sigma\} = -\frac{1}{2} \sum_{r, r'} \sigma_i(r) M_{ij}(r-r') \sigma_j(r') - \sum_r \alpha_i(r) \sigma_i(r)$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \omega_i(r) = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i(r) \exp\left(-\frac{H\{\sigma\}}{T}\right),$$

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(-\frac{H\{\sigma\}}{T}\right)$$

$$\omega_i(r) = \frac{1}{Z(r)} \exp\left(\frac{E_i(r)}{T}\right),$$

$$E_i(r) = \sum_{r'} M_{ij}(r-r') \omega_j(r') + \alpha_i(r),$$

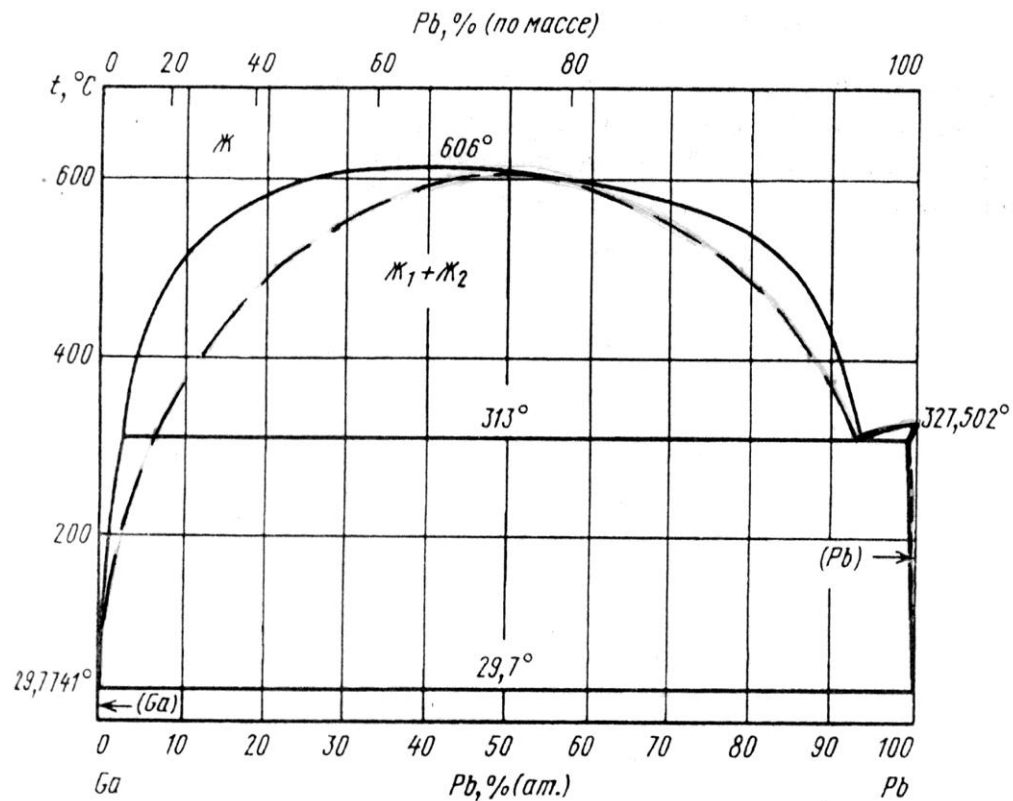
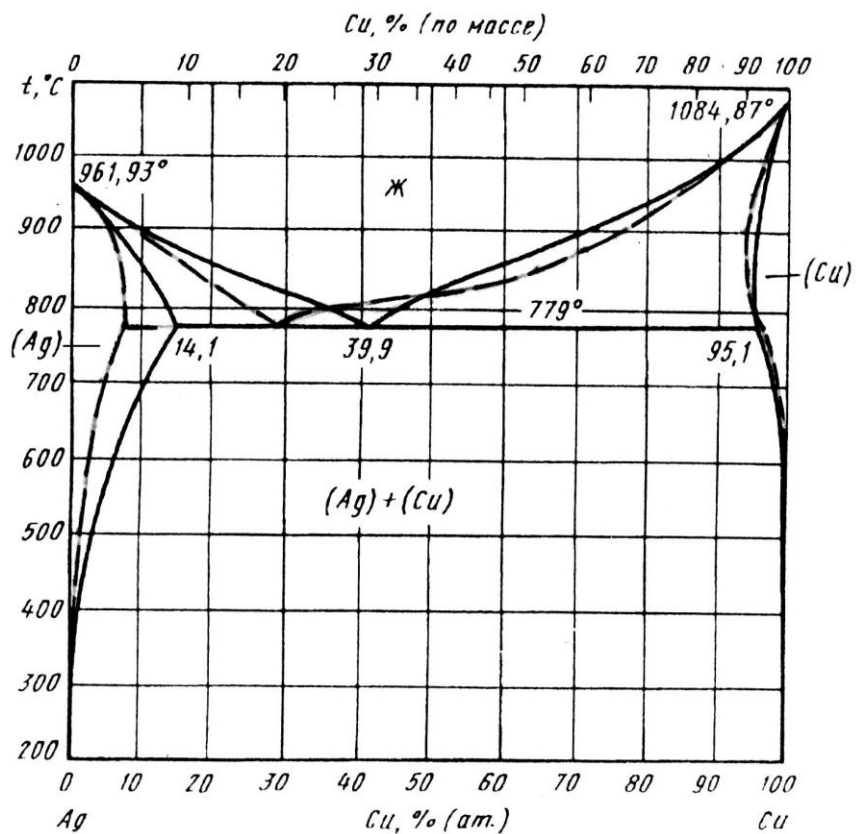
$$Z(r) = \sum_{i=1}^N \exp\left(\frac{E_i(r)}{T}\right)$$

$$G = \sum_r \left(\frac{1}{2} \omega_i(r) E_i(r) - T \ln Z(r) \right)$$



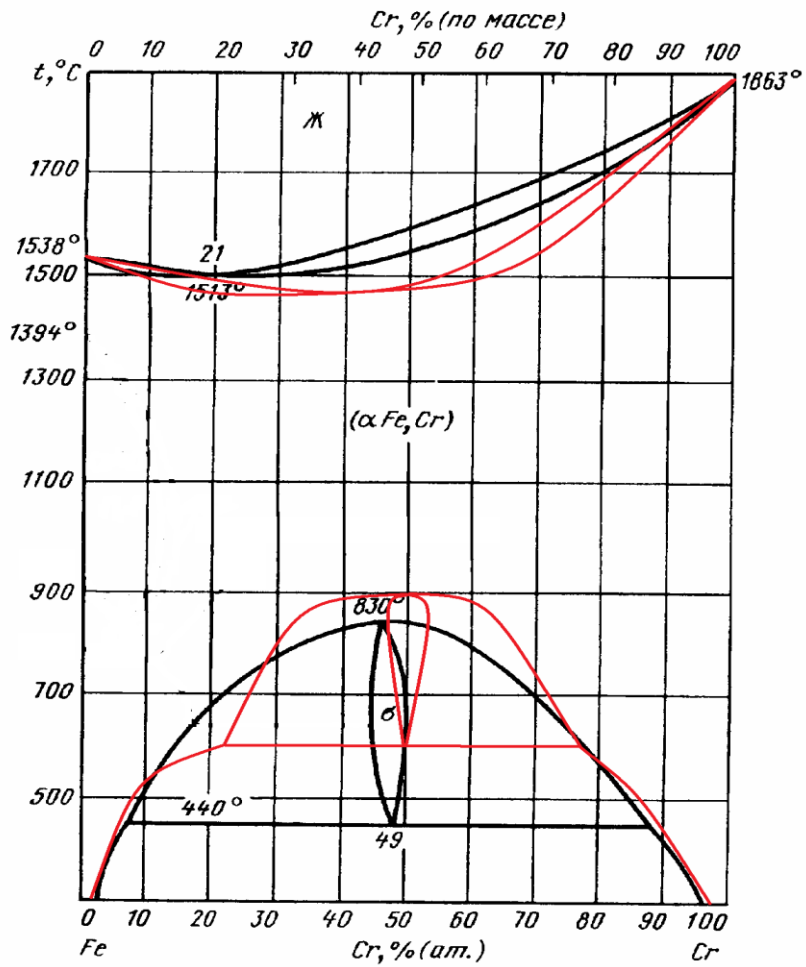
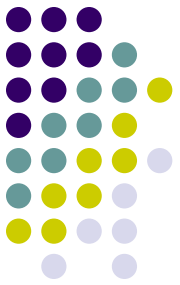
$\mathbf{J_1}$	0	0	ε	ε	ε	ε
0	$\mathbf{J_1}$	0	ε	ε	ε	ε
0	0	$\mathbf{J_1}$	ε	ε	ε	ε
ε	ε	ε	$\mathbf{J_2}$	0	0	0
ε	ε	ε	0	$\mathbf{J_2}$	0	0
ε	ε	ε	0	0	$\mathbf{J_2}$	0
ε	ε	ε	0	0	0	$\mathbf{J_2}$

Плавнение в бинарных системах: успех моделирования.



J ₁	J ₁	J ₁										γ	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε
J ₁	J ₁	J ₁										ε	γ	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε
J ₁	J ₁	J ₁										ε	ε	γ	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε
			J ₁	J ₁	J ₁							ε	ε	ε	γ	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε
			J ₁	J ₁	J ₁							ε	ε	ε	ε	γ	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε
			J ₁	J ₁	J ₁							ε	ε	ε	ε	ε	γ	ε	ε	ε	ε	ε	ε
						J ₁	J ₁	J ₁				ε	ε	ε	ε	ε	ε	γ	ε	ε	ε	ε	ε
						J ₁	J ₁	J ₁				ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	γ	ε	ε	ε	ε
						J ₁	J ₁	J ₁				ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	γ	ε	ε	ε
									J ₁	J ₁	J ₁	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	γ	ε	ε
									J ₁	J ₁	J ₁	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	γ	ε
									J ₁	J ₁	J ₁	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	γ
γ	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	J ₂	J ₂	J ₂									
ε	γ	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	J ₂	J ₂	J ₂									
ε	ε	γ	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	J ₂	J ₂	J ₂									
ε	ε	ε	γ	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε				J ₂	J ₂	J ₂						
ε	ε	ε	ε	γ	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε				J ₂	J ₂	J ₂						
ε	ε	ε	ε	ε	γ	ε	ε	ε	ε	ε	ε				J ₂	J ₂	J ₂						
ε	ε	ε	ε	ε	ε	γ	ε	ε	ε	ε	ε							J ₂	J ₂	J ₂			
ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	γ	ε	ε	ε							J ₂	J ₂	J ₂			
ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	γ	ε	ε									J ₂	J ₂	J ₂
ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	γ	ε									J ₂	J ₂	J ₂
ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	ε	γ										J ₂	J ₂	J ₂





$$J_1 = 5962$$

$$J_2 = 7040$$

$$\varepsilon = 4000$$

$$\gamma = 6000$$

$$n = 4$$

$$m = 5$$