

Термодинамическое моделирование процесса окисления доэвтектического сплава $\text{Mo}_{ss}\text{-Mo}_3\text{Si}$, легированного иттрием

© Ларионов⁺ Алексей Валерьевич, Удоева Людмила Юрьевна
и Чумарев* Владимир Михайлович

Лаборатория пирометаллургии цветных металлов. Институт металлургии УрО РАН.

ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Свердловская область. Россия.

Тел.: (343) 232-90-18. E-mail: a.v.larionov@ua.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: Mo_{ss} , Mo_3Si , иттрий, $\text{Y}_2\text{Si}_2\text{O}_7$, Y_2SiO_5 , *in situ* композиты, термодинамическое моделирование, фазовый состав, окисление, сухой воздух, паровоздушная смесь.

Аннотация

С целью исследования влияния иттрия на процесс окисления силицидных сплавов молибдена выполнено термодинамическое моделирование взаимодействий в системе $\text{Mo-Mo}_3\text{Si-Y}_5\text{Si}_3$ в атмосфере сухого и влажного воздуха в интервале температур 25-2000 °С. Для прогнозирования состава продуктов окисления и последовательности образования фазовых составляющих получены зависимости от температуры процесса и расхода окислителя – кислорода воздуха и водяного пара. Расчеты произведены в программном комплексе HSC Chemistry 6.12, в базу данных которого введены рассчитанные недостающие термодинамические характеристики силикатов $\text{Y}_2\text{Si}_2\text{O}_7$, Y_2SiO_5 и молибдатов иттрия $\text{Y}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$, Y_2MoO_6 . Показано, что в условиях равновесия процесс окисления воздухом и паровоздушной смесью (10-50 мол. % H_2O) протекает практически одинаково, поскольку, с точки зрения термодинамики, взаимодействие компонентов сплава с кислородом воздуха происходит раньше, чем с водяным паром. Согласно полученным термодинамическим моделям, процесс окисления сплава $\text{Mo-5мас.}\% \text{Si}$ доэвтектического состава, легированного иттрием, можно представить как последовательность следующих химических превращений: сначала окисляются силициды Mo и Y с образованием оксидов Y_2O_3 , SiO_2 и металлического Mo , затем происходит окисление молибдена до MoO_2 и взаимодействие Y_2O_3 с SiO_2 с образованием силикатов Y_2SiO_5 и $\text{Y}_2\text{Si}_2\text{O}_7$, и в результате полного окисления сплава в конденсированный продукт добавятся MoO_3 и $\text{Y}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$, а в газовую фазу – пары оксида молибдена $(\text{MoO}_3)_n$. На основании результатов полного термодинамического анализа была установлена возможность образования силикатов и молибдата иттрия при окислении доэвтектического сплава Mo-5Si-3Y (% масс.). Это может повысить его стойкость к окислению за счет образования защитной пленки ограничивающей диффузию кислорода в сплав, что, конечно, требует экспериментального подтверждения.