

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

© Ларионов<sup>+</sup> 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; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:**  $\text{Mo}_{\text{ss}}$ ,  $\text{Mo}_3\text{Si}$ , иттрий,  $\text{Y}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ ,  $\text{Y}_2\text{SiO}_5$ , *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  $\text{Y}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ ,  $\text{Y}_2\text{SiO}_5$  и молибдатов иттрия  $\text{Y}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ ,  $\text{Y}_2\text{MoO}_6$ . Показано, что в условиях равновесия процесс окисления воздухом и паровоздушной смесью (10-50 мол. %  $\text{H}_2\text{O}$ ) 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  $\text{Mo-5масс.}\% \text{Si}$  доэвтектического состава, легированного иттрием, можно представить как последовательность следующих химических превращений: сначала окисляются силициды  $\text{Mo}$  и  $\text{Y}$  с образованием оксидов  $\text{Y}_2\text{O}_3$ ,  $\text{SiO}_2$  и металлического  $\text{Mo}$ , затем происходит окисление молибдена до  $\text{MoO}_2$  и взаимодействие  $\text{Y}_2\text{O}_3$  с  $\text{SiO}_2$  с образованием силикатов  $\text{Y}_2\text{SiO}_5$  и  $\text{Y}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ , и в результате полного окисления сплава в конденсированный продукт добавятся  $\text{MoO}_3$  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  $\text{Mo-5Si-3Y}$  (% масс.). Это может повысить его стойкость к окислению за счет образования защитной пленки ограничивающей диффузию кислорода в сплав, что, конечно, требует экспериментального подтверждения.