

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Термодинамические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/19-57-2-90 Подраздел: Технология неорганических веществ.
Цифровой идентификатор объекта – <https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/19-57-2-90>
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 669.28*782*793*857: 541.121. Поступила в редакцию 16 января 2019 г.

Термодинамическое моделирование процесса окисления доэвтектического сплава $Mo_{ss}-Mo_3Si$, легированного скандием или неодимом

© 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@ya.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: Mo_{ss} , Mo_3Si , скандий, неодим, силикаты, молибдаты, *in situ* композиты, термодинамическое моделирование, фазовый состав, окисление, сухой воздух, паровоздушная смесь.

Аннотация

С целью исследования влияния скандия и неодима на процесс окисления силицидных сплавов молибдена выполнено термодинамическое моделирование равновесий в системах $Mo-Mo_3Si-Sc_5Si_3$ и $Mo-Mo_3Si-NdSi$, содержащих сухой или влажный воздух, в интервале температур 25-2000 °С. Расчеты произведены в программном комплексе HSC Chemistry 6.12, в базу данных которого введены рассчитанные недостающие термодинамические характеристики силикатов, молибдатов скандия и неодима. На основании полученных зависимостей изменения состава фаз от температуры и расхода окислителя (воздух или паровоздушная смесь), определена последовательность фазообразования и оценены составы продуктов окисления. Показано, что в условиях равновесия процесс окисления сухим и влажным воздухом протекает практически одинаково, поскольку взаимодействие компонентов сплава термодинамически предпочтительнее с кислородом, чем с водяным паром. В соответствии с полученными моделями, ход окисления сплавов $Mo-5Si-3(Sc, Nd)$ (% масс.) сухим воздухом предполагает следующую последовательность химических превращений: сначала окисляются силициды Mo и Sc (Nd) с образованием Sc_2O_3 (Nd_2O_3), SiO_2 и элементного Mo , затем происходит окисление молибдена до MoO_2 и взаимодействие Sc_2O_3 (Nd_2O_3) с SiO_2 с образованием соответствующих силикатов состава $Sc_2Si_2O_7$ или $Nd_2Si_2O_7$, и в результате полного окисления сплавов в конденсированный продукт добавятся MoO_3 и молибдаты $Sc_2(MoO_4)_3$ или $Nd_2Mo_4O_{15}$, а в газовую фазу – пары оксида молибдена $(MoO_3)_n$. Образование молибдатов неодима $Nd_2Mo_2O_7$ и $Nd_2(MoO_4)_3$ также термодинамически вероятно. При окислении сплава $Mo-5Si-3Nd$ при $T > 1700$ °С в конденсированных продуктах взаимодействия возможно образование $Nd(OH)_3$. Согласно результатам полного термодинамического анализа, при окислении сплавов $Mo-5Si-3(Sc, Nd)$ (% масс.) возможно образование силикатов и молибдатов скандия и неодима, что может способствовать формированию на поверхности сплавов защитной пленки, лимитирующей диффузию в них кислорода, вследствие чего, резистентность сплавов к окислению должна возрасти.