

АННОТАЦИЯ

6D060600 – Химия мамандығы бойынша философия докторы (PhD)
дәрежесін алу үшін диссертация

Белгібаева Ақбаян Әшірбекқызы

«Металдар гидридтерін қолданып TiAl жүйесіндегі беріктілігі жоғары құймалардың алынуы»

Диссертациялық жұмыс титан-алюминий жүйелерінің микроқаттылығына, микроқұрылымына және фазалық құрамына Sc, Y, Dy, Ta металдарымен легирлеудің әсерін зерттеуге арналған.

Жұмыста гидридтік технологиямен синтезделген TiAl-Me (Me=Sc, Y, Dy, Ta) жүйесінің физика-химиялық сипаттамалары, микроқаттылығы, құрылымды-фазалық күйі егжей-тегжейлі зерттелген. Ритвельд әдісі арқылы Ti:Al=1:1 бастапқы жүйесіндегі, сонымен қатар 2% Sc, Y, Dy, Ta микроқосындылары бар TiAl-Me жүйелеріндегі негізгі фазалардың үлесі жоғары дәлдікпен анықталды.

Диссертациялық зерттеу тақырыбының өзектілігі.

Ti-Al құймалары төмен тығыздылықпен қатар жоғарғы беріктілік сипатына, жоғары ыстыққа төзімділік пен пассивацияға бейімділік сияқты бірқатар пайдалы қасиеттерге ие. Жоғарыдағы қасиеттерге ие болғандықтан мұндай құймалар аэроғарыштық, химиялық және мұнайхимиялық өнеркәсіпте үлкен сұранысқа ие.

Заманауи қозғалтқыштарды жасап шығару үшін де меншікті ыстыққа беріктілігі, ыстық пен тотығуға төзімділігі, серпімділік модулі жоғары, ал тығыздылығы төмен Ti-Al жүйесінің интерметалдық құймаларын пайдалану маңызы зор ұтымды шешім болып табылады. Ti-Al жүйесінде темірді қыздырып соққанда түсетін қатқал төзімді, ыстыққа берік құймалардың жаңа буынының негізін құрайтын Ti_3Al (α_2 -фаза) және TiAl (γ -фаза) интерметаллидтері түзіледі. Ірі оңтайландырылған өндірістің дамуына орай, алюминий мен титанқұрамдас құймалар бағасы жағынан анағұрлым қолжетімді әрі экономикалық шығындар жағынан ұтымды материалдар болғандықтан, оларды машина жасаудың алуан түрлі саласында қолдануға болады.

γ -TiAl құймаларын жетілдірудегі маңызды мәселе – олардың технологиялық сипаттамаларының нашарлығы болып табылады. Ең алдымен, оларға температураның үлкен интервалында серпімділіктің/жойылу тұтқырлығының төмендігі және механикалық өңдеу мүмкіндігінің жеткіліксіздігі жатады. Серпімділікті жақсартуды микро- және макролегирлеу арқылы, сондай-ақ нақты бір құрылымы бар құйманы жасақтау және химиялық құрамын оңтайландыру арқылы жүзеге асыруға болады. Сол себептен, XXI ғасырдан бастап γ -TiAl құймаларын зерттеумен айналысатын ғалымдардың басты зерттеу нысаны – колония/дән өлшемдері

мен пластиналар қалыңдығының әртүрлі мәндеріне ие микроқұрылым мен элементтік құрамды өзгерте отырып, механикалық сипаттамалардың тиімді жиынтығын алу мәселесі.

Ұнтақты металлургияның жаңадан қолданысқа ақырындап еніп жатқан әдістерінің бірі – гидридтік технология әдісі. Гидридтік технология – жаңа экологиялық таза жолмен әртүрлі мақсатта қолданылатын күрделі функциональді материалдарды алу әдістемесі. Бастапқы шикізат ретінде ұнтақтар мен металл құйындылары қолданылады. Сутегі тогы қатысында қажетті гидридтер өндіріледі. Осылайша алынған гидридтер қоспасы араластырып, жоғарғы қысым жағдайында престеледі. Артынша гидридтер қоспасын таблетка формасына салып, вакуумда жандырады. Бұйымдардың механикалық қасиеттерін жақсарту үшін пісіру үрдісі барысында дегидрленуді толығымен қамтамасыз ету өте маңызды.

Бұл әдіс басқа әдістерге қарағанда экономикалық шығындардың аз болуымен, отқа төзімді материалдардың қолданылуымен, тазалық дәрежесі жоғары мәндерге ие материалдардың өндірілуімен айрықша ерекшеленеді. Функциональді композиционды материалдар өндіруде гидридтік әдісті кеңінен пайдалануға болады және ол тиімді болып саналады.

Проблеманың өңделу дәрежесі. Жұмысты жазу кезінде үш блокқа бөлуге болатын жеткілікті дәрежеде кең көлемді ақпарат көздері қамтылды (Ti-Al құймаларының теориясы мен дамуы туралы көлемді әдебиетке шолу, шетелдік журналдардағы жарияланымдар және конференциялардағы баяндамалар). Зерттеу мен салыстыруларды толықтыру үшін, органикалық және бейорганикалық қосылыстардың құрылымдары туралы мәліметтер қоймасы болып табылатын арнайы бағдарламалар қолданылды. Эталонды торлар ретінде COD мәліметтер қорының кристаллографиялық деректері, сонымен қатар SIESTA сыртқы қабығы бар USPEX бағдарламалық кодымен болжанған Ti-Al жүйесінің модельдік құрылымдары пайдаланылды.

Екі және көпкомпонентті құймалардың заманауи өндірістік әдістері балқыма технологияларына (индукция, электр доғасы немесе электронды сәуле) немесе ұнтақ металлургиясына негізделген. Бұл бағыттардың әрқайсысы едәуір еңбек сыйымдылығымен және аппаратуралық қиындықтармен (терең вакуумды пайдалану және жоғары температурада инертті орта құру, процестердің ұзақтығы мен қайталануы және т.б.) сипатталады. Бастапқы қоспалардағы металдардың өзара әрекеттесу жылдамдығы негізінен қатты күйдегі диффузия жылдамдығымен анықталатындықтан, ұнтақ металлургия әдістері ерекше ұзақтылығымен сипатталады. Жоғары сапалы құймаларды алу кезіндегі арнайы қиындықтар сонымен қатар, отқа төзімді металдар бөлшектерінің беттерінде өзара диффузия процестерін болдырмайтын тығыз пассивті қабықшаның болуына байланысты. Осы орайда, алдын ала белгіленген физика-техникалық қасиеттері бар екі және көпкомпонентті құймаларды жасақтаудың жаңа тиімді әдістерін іздеу өзекті мәселе болып табылады.

Зерттеудің мақсаты – «гидридті технологиямен» алынған титан-алюминий жүйесінің құрылымдық-фазалық күйіне Sc, Y, Dy, Ta қоспаларының әсерін зерттеу.

Қойылған мақсатты жүзеге асыру үшін келесі **міндеттер** анықталған:

- «гидридтік технология» бойынша Ti-Al эквимолярлы арақатынасындағы екі компонентті құйманы алу және тәжірибелердің температуралық режимін таңдау;

- легірлеуші қоспаларды және олардың сандық үлесін, сондай-ақ Ti-Al құймасының механикалық қасиеттерін жақсарту үшін легирлеу шарттарын таңдау;

- растр электронды микроскопия және рентгенспектральді микроанализ әдістерімен құймалар құрылымындағы легірлеуші элементтердің микроқұрылымы мен локализациясын зерттеу;

- Ti - Al құймасының, сондай-ақ Ti₄₉ - Al₄₉ - Sc₂, Ti₄₉ - Al₄₉ - Ta₂, Ti₄₉ - Al₄₉ - Y₂, Ti₄₉ - Al₄₉ - Dy₂ үш компонентті жүйелердің сапалық және сандық құрамына Sc, Y, Dy, Ta қоспаларының әсерін анықтау;

- эволюциялық код арқылы USPEX-SIESTA бағдарламасын қолдана отырып, үш компонентті жүйелердегі термодинамикалық тұрақты кристалдық құрылымдарды анықтауға байланысты модельдік тәжірибелер жүргізу және кристалдық торлардың алынған теориялық параметрлерін тәжірибелік мәліметтермен салыстыру;

- түзілетін фазалардың кристалдық торларының энергиясын есептеу және алынған мәліметтерді фазалық құрамды Ритвельд әдісімен сапалық және сандық талдау үшін пайдалану;

- «гидридті технологиямен» алынған Ti-Al құймаларындағы Sc, Y, Dy, Ta легірлеуші қоспаларының микроқаттылыққа әсерін анықтау.

Зерттеудің ғылыми-тәжірибелік маңызы рентгендік фазалық талдау, растр және трансмиссионды электронды микроскоп, рентгендік спектрлік микроанализ әдістері арқылы ГТ әдісімен алынған Ti-Al жүйесінің құймаларының құрылымы мен қасиеттеріне Sc, Y, Dy, Ta қоспаларының әсері туралы алынған жаңа мәліметтер γ -TiAl құймаларының механикалық қасиеттерін жақсартуда қолданылуы мүмкін.

Осы диссертациялық жұмыста келтірілген зерттеудің **практикалық маңыздылығы** авиациялық технологиялар, материалтану және т.б. салаларда сәтті қолдануға арналған құйманы алуға бағытталған.

Жұмыстың ғылыми жаңалығы мыналармен анықталады:

- алғаш рет «гидридтік технологияны» пайдалана отырып, металдар интерметалдық фазаларға негізделген қатпарлы құрылымға ие құймалар алынды: 2 ат.%-ға дейін Sc, Y Dy, Ta қоспалары бар Ti₅₀ - Al₅₀, Ti₄₉ - Al₄₉ - Sc₂, Ti₄₉ - Al₄₉ - Ta₂, Ti₄₉ - Al₄₉ - Y₂, Ti₄₉ - Al₄₉ - Dy₂;

- алғаш рет ГТ әдісімен алынған Ti-Al жүйесі құймаларының құрылымы мен қасиеттеріне Sc, Y, Dy, Ta қоспаларының әсері рентгенфазалық талдау, растр және трансмиссионды электронды микроскоп, рентгенспектрлік микроанализ әдістерімен зерттелді

- алғаш рет TiAl-СЖМ және TiAl-Ta жүйелеріндегі үшінші легірлеуші элементтің қосылуы TiAl интерметалдық фазасында сирек жер элементтері мен Ta элементтерінің қатты ерітінділері мен ($Ti_3(Al, Sc)$, YAl_2 , $DuAl_2$, $TaTi$, $Ta_{39}Al_{69}$, $Ti_{0,96}Ta_{0,04}$, $Ta_{161,8}Al_{282,2}$, $(TaTi_{66})_{0,33}$, $(Ti,Ta)Al_3$) қосымша фазаларының түзілуі есебінен кристалдық тордағы атомдардың байланыс энергиясының жоғарылауына және анағұрлым тұрақтандыру эффектісіне әкелетіндігі анықталды.

- алғаш рет «гидридті технологиямен» алынған үш компонентті Ti49-Al49-Sc2, Ti49-Al49-Y2 және Ti49-Al49-Ta2 құймаларының микроқаттылығы қатты фазалық және дисперсионды қатаю есебінен жоғарылайтындығы анықталды.

Зерттеу нәтижелері бойынша қорытындылар

1. Алғаш рет «гидридтік технология» бойынша Ti-Al эквимольярлы арақатынасында құйма және TiAl, Ti_3Al , $TiAl_2$, Ti_5Al_{11} , Ti_3Al_5 , Ti_2Al_5 интерметалдық фазалары мен Sc, Y, Du, Ta легірлеуші қосындылары негізінде бірегей қатпарлы композициялар алынды. Гидрлеу мен күйдірудің температуралық интервалдары орнатылды: Sc, Y, Du, Ta металдарының гидрленуін сәйкесінше 450, 420, 420, 550 °C жағдайларында жүргізілді; Ti50-Al50, Ti49-Al49-Sc2, Ti49-Al49-Ta2, Ti49-Al49-Y2, Ti49-Al49-Du2 үлгілері үшін күйдіру температурасы 1150 °C мәнін құрады.

2. Эффективті легірлеуші қосындылар ретінде үлесі 2 ат.%-дан аспайтын Sc, Ta, Y, Du металдарын қолдануға болатындығы анықталды.

3. Легірлеуші элементтердің құйма құрылымының локальді учаскелерінде таралуы зерттелді және легірлеуші элементтердің интерметалдық фазалардың матрицасында қабаттар қалыңдығының артуымен (2 есе) таралатындығы және/немесе дислокацияларда немесе дәндердің шекараларында және/немесе дәндердің көлемінде орналасатын Sc, $Ti_3(Al, Sc)$, YAl_2 , $DuAl_2$, $TaTi$, $Ta_{39}Al_{69}$, $Ti_{0,96}Ta_{0,04}$, $Ta_{161,8}Al_{282,2}$, $(TaTi_{66})_{0,33}$, $(Ta,Ti)Al_3$ жеке фазаларының түзілетіндігі анықталды.

4. Алынған екі және үшкомпонентті жүйелердің фазалық құрамының сандық және сапалық анализі жүргізілді. Бастапқы Ti50-Al50 жүйесінде негізгі фазалар Ti_3Al , TiAl, $TiAl_2$, Ti_5Al_{11} , Ti_3Al_5 , Ti_2Al_5 болатындығы, ал үшінші компонентті қосқанда Ti49-Al49-Sc2, Ti49-Al49-Y2, Ti49-Al49-Du2, Ti49-Al49-Ta2 жүйелерінде $Ti_3(Al, Sc)$, YAl_2 , $DuAl_2$, $TaTi$, $Ta_{39}Al_{69}$, $Ti_{0,96}Ta_{0,04}$, $Ta_{161,8}Al_{282,2}$, $(TaTi_{66})_{0,33}$, $(Ta,Ti)Al_3$ жаңа фазалары түзілетіндігі белгілі болды.

5. Эволюционды код арқылы USPEX-SIESTA бағдарламасының көмегімен параметрлері тәжірибелік мәліметтермен сәйкес келетін Ti-Al жүйелерін легірлеу кезінде пайда болатын, термодинамикалық тұрақты фазалардың кристалдық торларының моделі құрастырылды.

6. Легірлеуші элементтердің қосындыларын түйін аралықтарға енгізу мүмкін екендігі және ол торда атомдар байланысының энергиясының артуы мен TiAl-СЖМ мен TiAl-Ta жүйелерінде едәуір тұрақтандырушы эффектге әкеп соғатындығы анықталды. Бастапқы Ti50-Al50 құймасымен салыстырғанда, Ta, Y қосындылары Ti49-Al49-Ta2, Ti49-Al49-Y2

жүйелерінің тиімді энергиясын едәуір арттыратындығы, ал Dy қосындысы Ti49-Al49-Dy2 жүйесінің айтарлықтай тұрақтандырушы эффектісіне әкелетіндігі көрсетілген.

7. Ti49-Al49-Sc2, Ti49-Al49-Y2 және Ti49-Al49-Ta2 құймалары микроқаттылықтың ең жоғарғы мәндеріне ие болатындығы белгілі болды. Бұл үшкомпонентті жүйелердегі фазалар жиынтығының ұлғаюына, қатты ерітінділердің түзілуіне және қабаттардың морфологиясының өзгеруіне байланысты орын алады.

Қорғауға ұсынылатын негізгі тұжырымдар:

1. «Гидридті технология» әдісін қолдана отырып, интерметалдық фазаларға негізделген қатпарлы құрылымы бар ерекше құймалар алынды: Ti50 - Al50, Ti49 - Al49 - Sc2, Ti49 - Al49 - Ta2, Ti49 - Al49 - Y2, Ti49 - Al49 - Dy2.

2. TiAl-СЖМ және TiAl-Ta жүйелеріндегі үшінші легірлеуші элементтің қосылуы TiAl-де сирек жер элементтері мен Ta элементтерінің қатты ерітінділері мен (Ti₃(Al, Sc), YAl₂, DyAl₂, TaTi, Ta₃₉Al₆₉, Ti_{0,96}Ta_{0,04}, Ta_{161,8}Al_{282,2}, (TaTi₆₆)_{0,33}, (Ti,Ta)Al₃) қосымша фазаларының түзілуі есебінен кристалдық тордағы атомдардың байланыс энергиясының жоғарылауына және анағұрлым тұрақтандыру эффектісіне әкеледі.

3. «Гидридтік технологиямен» алынған үш компонентті Ti49-Al49-Sc2, Ti49-Al49-Y2 және Ti49-Al49-Ta2 құймалары фазалар жиынтығының ұлғаюынан және қабаттардың микроқұрылымының өзгеруінен жүзеге асатын қатты фазалы және дисперсионды қатаю есебінен микроқаттылықтың жоғарылауымен сипатталады.

Жұмыстың мемлекеттік ғылыми бағдарламалар жоспарымен байланысы. Диссертациялық жұмыс Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің химия кафедрасы және Томск мемлекеттік университетінің химиялық технологиялар зертханасында ТМУ бәсекеге қабілеттілік бағдарламасының қаржылай қолдауымен (НИР НУ 8.2.10.2018 Л проекті, 2018-2020 жж.) бірлескен ғылыми-зерттеу жұмыстары аясында жүргізілді.

Жұмыс апробациясы. Диссертациялық жұмыстың нәтижелері келесі конференцияларда баяндалды: «Жаңа материалдар мен технологиялар» VI Ресей-Қазақстан жастарының ғылыми-техникалық конференциясы (Барнаул, Ресей, 2018 ж.), «Іргелі ғылымдардың даму болашағы» XVI Халықаралық конференциясы (Томск, Ресей, 2019 ж.), XVII «Іргелі ғылымдардың даму болашағы» Халықаралық конференциясы (Томск, Ресей, 2020 ж.), «Көпфункционалды химиялық материалдар мен технологиялар» Халықаралық конференциясы (Томск, Ресей, 2019 ж.), «Қазіргі ғылымды дамытудың перспективалық бағыттары» 61-ші Халықаралық ғылыми-зерттеу конференциясы (Мәскеу, Ресей, 2020) және «Конденсацияланған ортадағы ақаулар құрылымдарының эволюциясы» XVI халықаралық мектеп-семинар (Барнаул, Ресей, 2020).

Өтініш берушінің жеке үлесі әдеби мәліметтерді талдаудан, эксперименттік бөлімді құрастырудан және жүзеге асырудан тұрады. Автор

диссертациялық жұмыс шеңберінде зерттеу жоспарын жасақтап, нәтижелерді талқылады және диссертациялық жұмыс тақырыбы бойынша басылымдар дайындады.

Диссертациялық зерттеудің негізгі қорытындылары. Диссертацияның негізгі нәтижелері 10 басылымдарда көрсетілген, оның ішінде: Web of Science Core Collection базасының мәліметтер бойынша нөлдік емес импакт-факторы бар халықаралық ғылыми журналда жарияланған 1 мақалада, Қазақстан Республикасы Білім министрлігінің Комитеті ұсынған журналдарда жарияланған 3 мақалада және халықаралық конференциялардың материалдар жинағында 6 мақалада жарық көрді.

Диссертация көлемі мен құрылымы. Диссертациялық жұмыс компьютерлік мәтіннің 109 бетінде баяндалған, 53 сурет пен 22 кестені қамтиды. Диссертация кіріспе, әдебиеттік шолу, эксперименталды бөлім, эксперименталды деректер талқыланған негізгі бөлім, қорытынды, 191 атаулардан тұратын қолданылған деректер тізімінен тұрады.