

ОПРЕДЕЛЕНИЕ УСЛОВИЙ УДАРНОГО СЖАТИЯ ПОРИСТЫХ ОБРАЗЦОВ NiAl НИЖЕ КРИВОЙ ПЛАВЛЕНИЯ

Якушев В.В.¹, Булатов К.М.², Жуков А.Н.¹, Хоробрых Ф.С.², Уткин А.В.¹,
Зинин П. В.², Попов М.Ю.³

¹*ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, г. Черноголовка*

²*НТЦ уникального приборостроения РАН, г. Москва*

³*Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, г. Москва*



ФИЦ ПХФ и МХ РАН



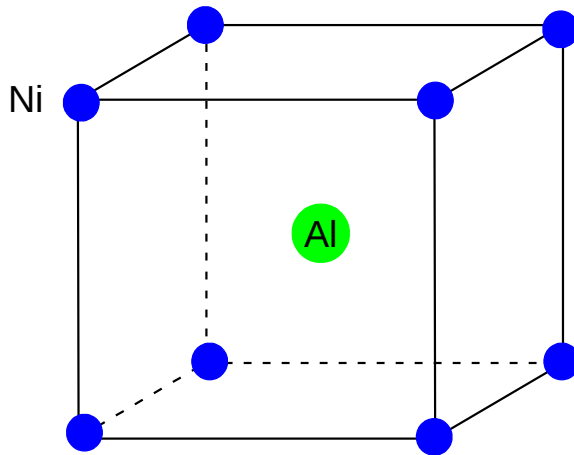
НТЦ УП РАН



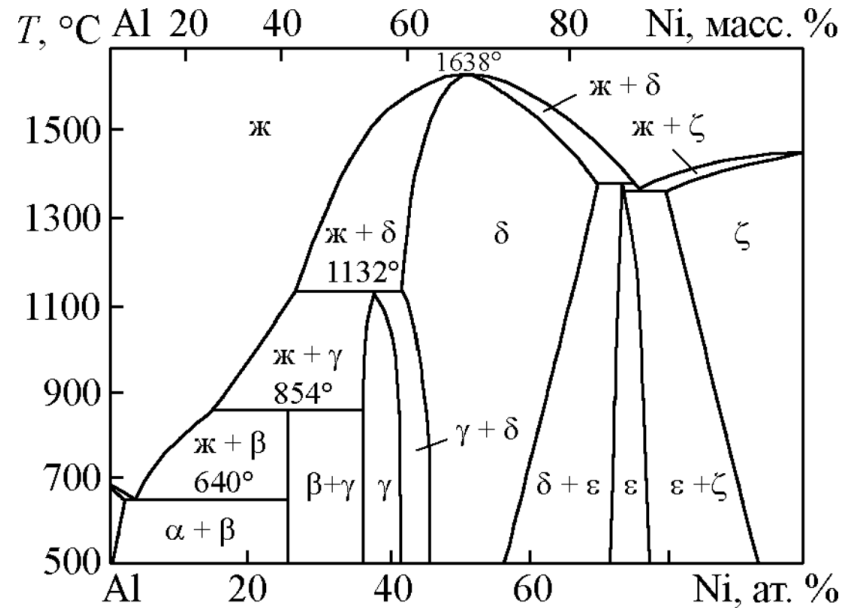
ИОФ РАН

АЛЮМИНИД НИКЕЛЯ (NiAl)

ОЦК - структура



NiAl



Плотность – 5.91 г/см^3

Температура плавления – 1638°C

Теплота образования – 133.7 кДж/моль

α – твердый раствор на основе Al,

β – NiAl_3 ,

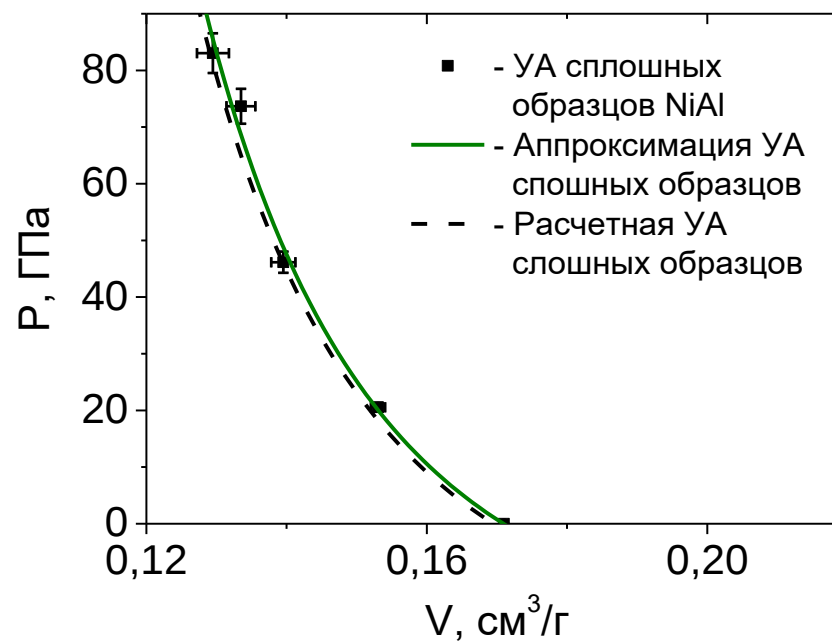
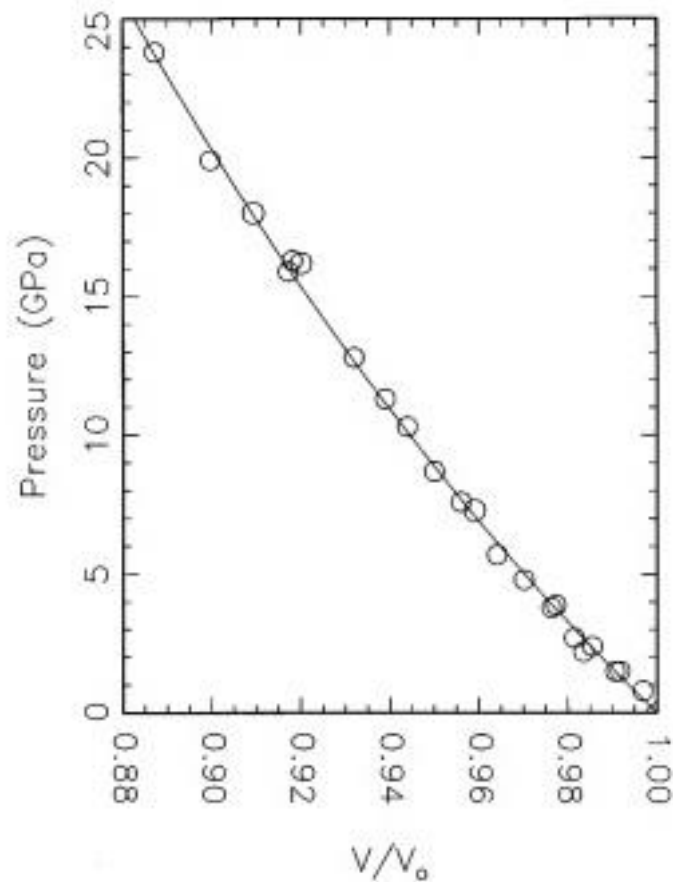
γ – Ni_2Al_3 ,

δ – **NiAl**,

ϵ – Ni_3Al ,

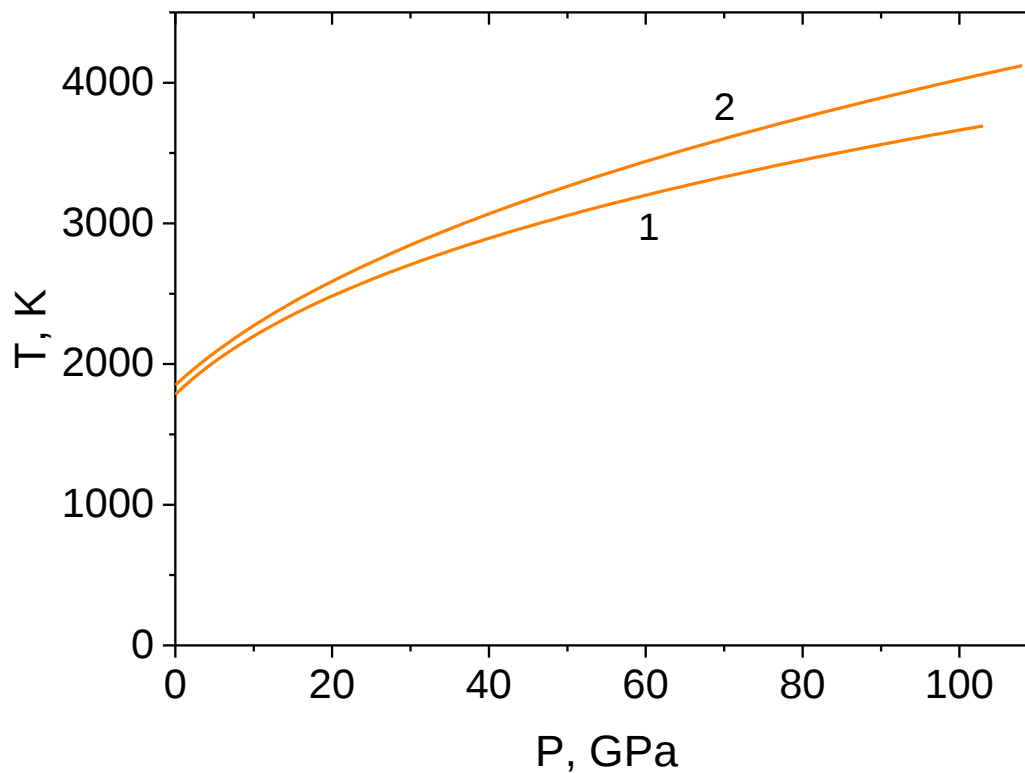
ζ – твердый раствор на основе Ni

ИЗОТЕРМА И УДАРНАЯ АДИАБАТА NiAl



Otto, J. W., Vassiliou, J. K., & Frommeyer, G. (1997).
Equation of state of polycrystalline Ni₅₀Al₅₀.
Journal of materials research, 12(11), 3106-3108.

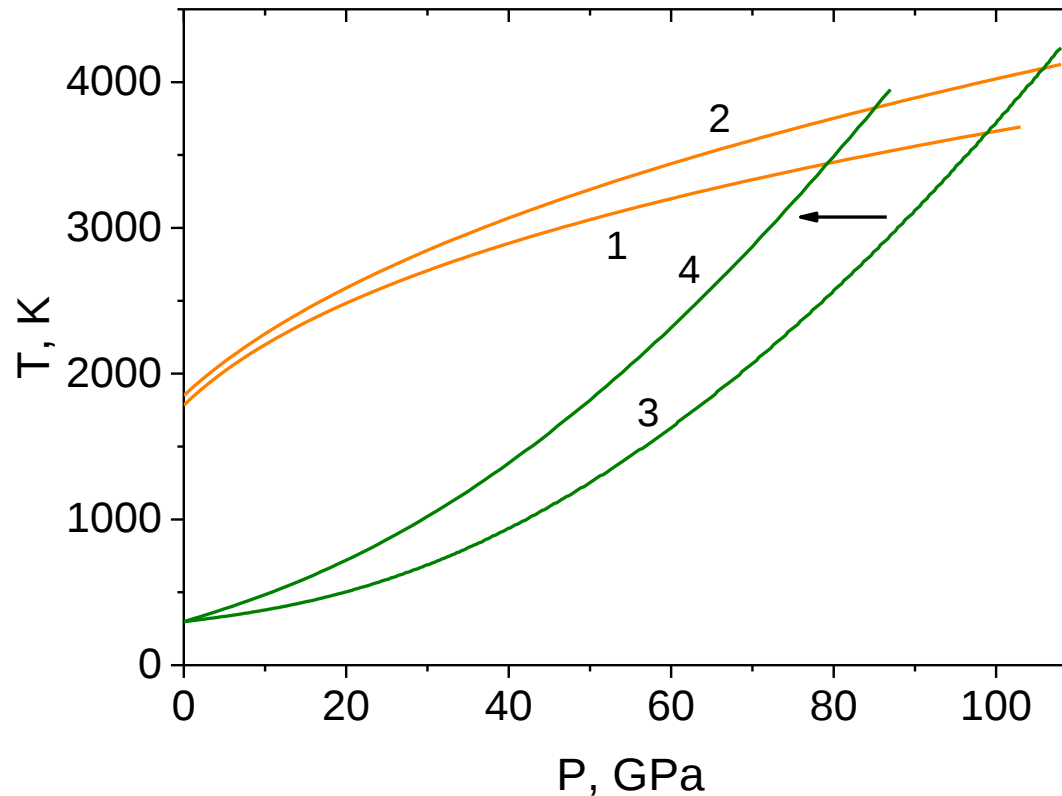
РАСЧЕТНАЯ ЛИНИЯ ПЛАВЛЕНИЯ NiAl



1 – расчет ММД в рамках однофазного подхода,
2 – расчет ММД в рамках двухфазного подхода.

Zhang, W., Peng, Y., & Liu, Z. (2014). Molecular dynamics simulations of the melting curve of NiAl alloy under pressure. AIP Advances, 4(5).

РАСЧЕТНАЯ ЛИНИЯ ПЛАВЛЕНИЯ И РАСЧЕТНЫЕ УДАРНЫЕ АДИАБАТЫ СПЛОШНЫХ И ПОРИСТЫХ ОБРАЗЦОВ NiAl



1 — линия плавления, расчет ММД в рамках однофазного подхода, 2 — линия плавления, расчет ММД в рамках двухфазного подхода, 3 — ударная адиабата сплошных образцов, 4 — ударная адиабата образцов с пористостью 3%.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ NiAl

Уравнение состояния Ми-Грюнайзена с изотермой в качестве опорной кривой:

$$p_H(V, E_T) = p_T(V) + \frac{\Gamma}{V} (E_H(V) - E_T(V))$$

p_H – давление на ударной адиабате,
 p_T – давление на изотерме,
 Γ – параметр Грюнайзена,
 E_H – энергия на ударной адиабате,
 E_T – энергия на изотерме,
 V – текущий удельный объем.

$$\begin{aligned} K_0 &= 157,0 \text{ ГПа} \\ K_1 &= 4,0 \\ \Gamma &= 1,8 \end{aligned}$$

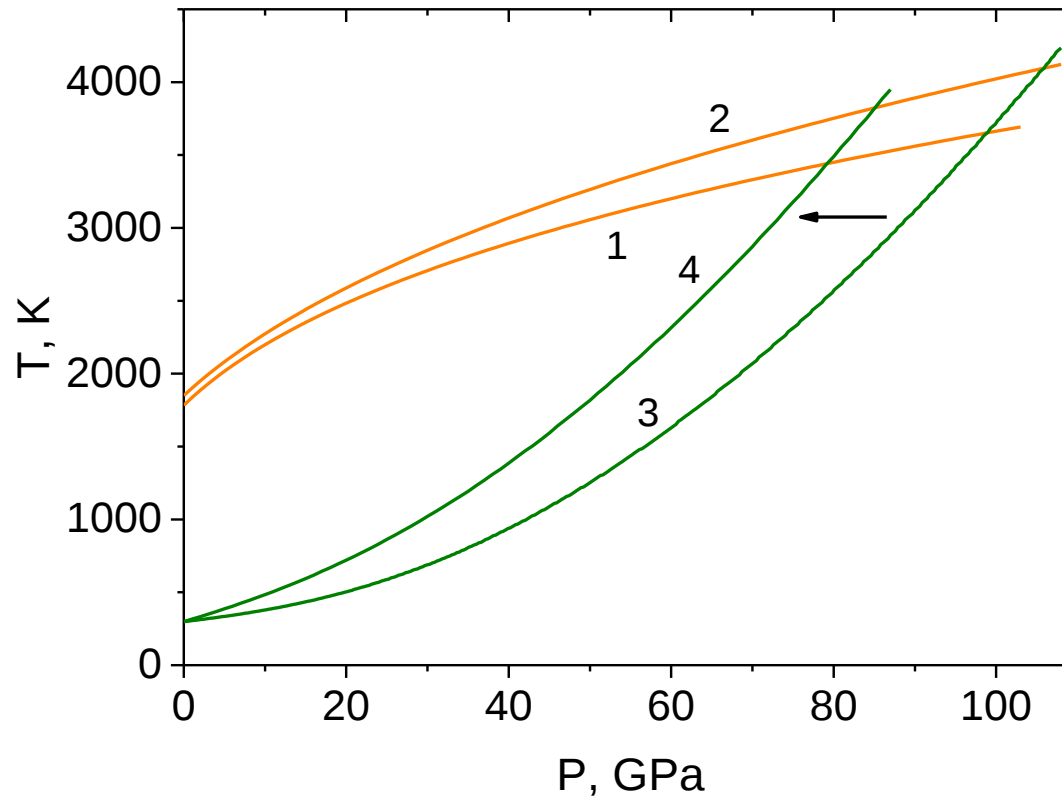
Аппроксимация экспериментальной изотермы [*] выражением Мурнагана-Берча:

$$p_T = \frac{3}{2} K_0 \left[\left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{7}{3}} - \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{5}{3}} \right] \left[1 - \frac{3}{4} (4 - K_1) \left(\left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{2}{3}} - 1 \right) \right]$$

K_0 – модуль объемного сжатия,
 $K_1 = dK_0/dp$ – первая производная модуля объемного сжатия по давлению;
 V_0 – начальный удельный объем;
 V – текущий удельный объем.

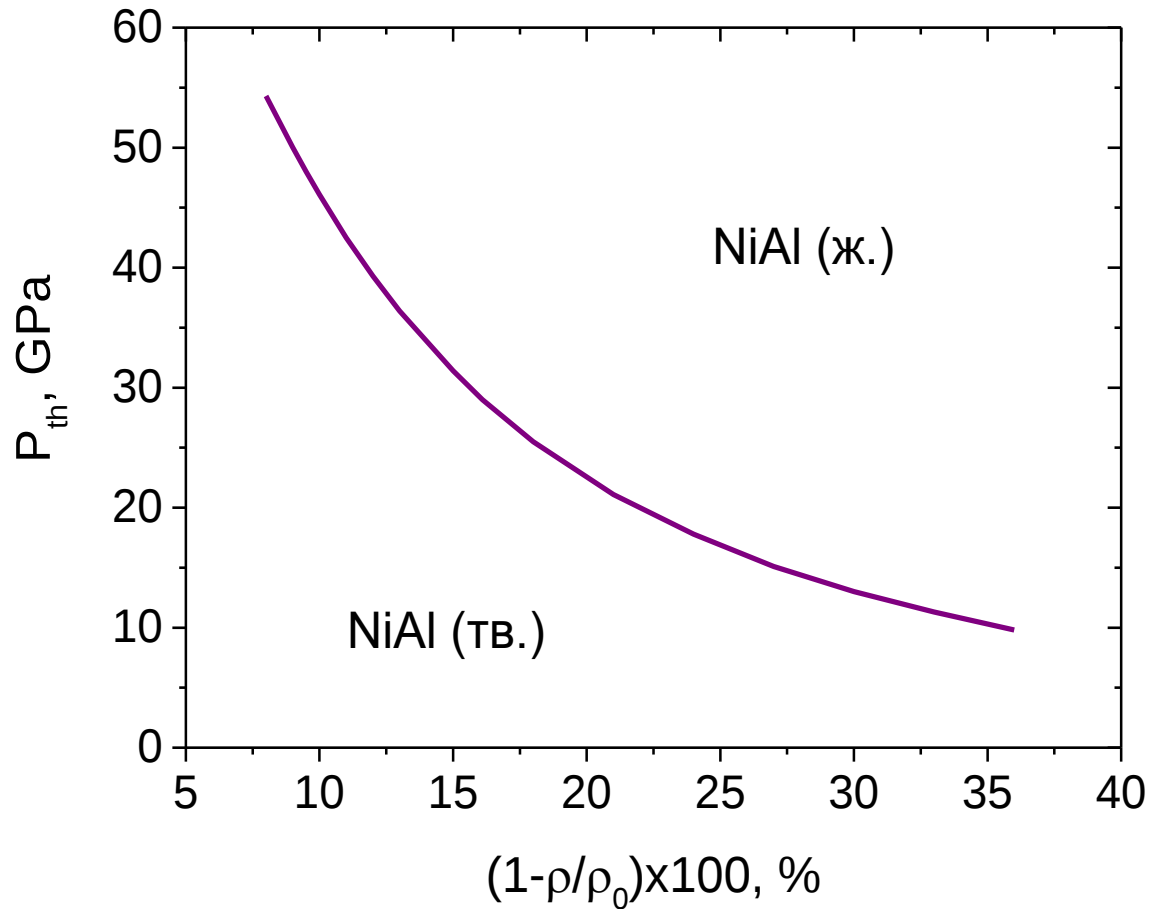
*Otto J. W., Vassiliou J. K., Frommeyer G. Equation of state of polycrystalline Ni 50 Al 50. J Mater Res. 1997; 12: 3106-3108.

РАСЧЕТНАЯ ЛИНИЯ ПЛАВЛЕНИЯ И РАСЧЕТНЫЕ УДАРНЫЕ АДИАБАТЫ СПЛОШНЫХ И ПОРИСТЫХ ОБРАЗЦОВ NiAl

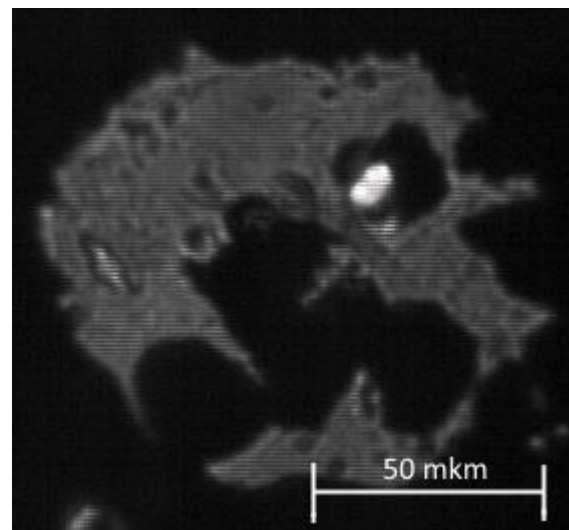
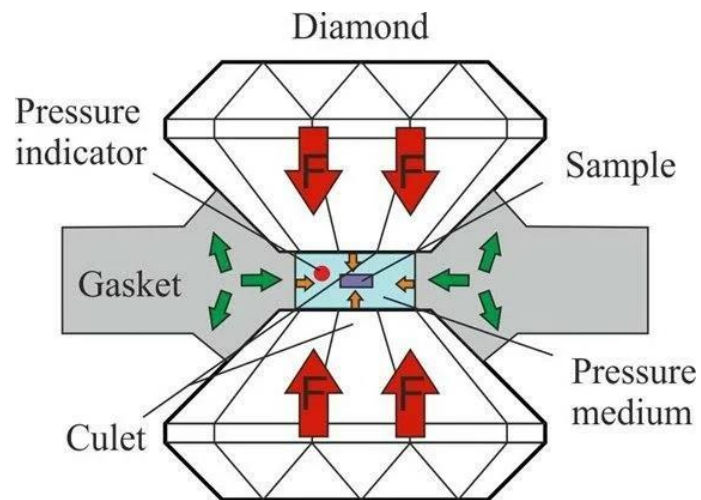


1 — линия плавления, расчет ММД в рамках однофазного подхода, 2 — линия плавления, расчет ММД в рамках двухфазного подхода, 3 — ударная адиабата сплошных образцов, 4 — ударная адиабата образцов с пористостью 3%.

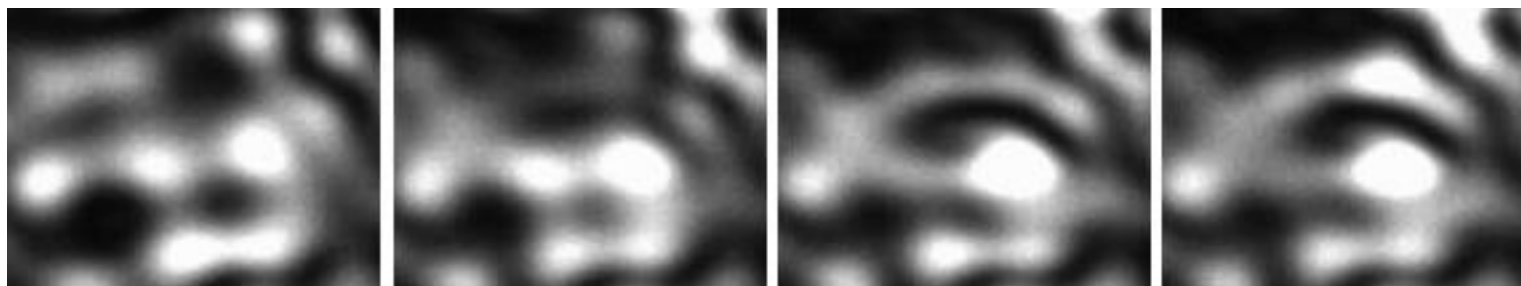
ЗАВИСИМОСТЬ ПОРОГОВОГО ДАВЛЕНИЯ УДАРНОГО СЖАТИЯ ОТ НАЧАЛЬНОЙ ПОРИСТОСТИ ОБРАЗЦОВ NiAl



ЛАЗЕРНАЯ СПЕКЛ-МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ В АЛМАЗНЫХ НАКОВАЛЬНЯХ

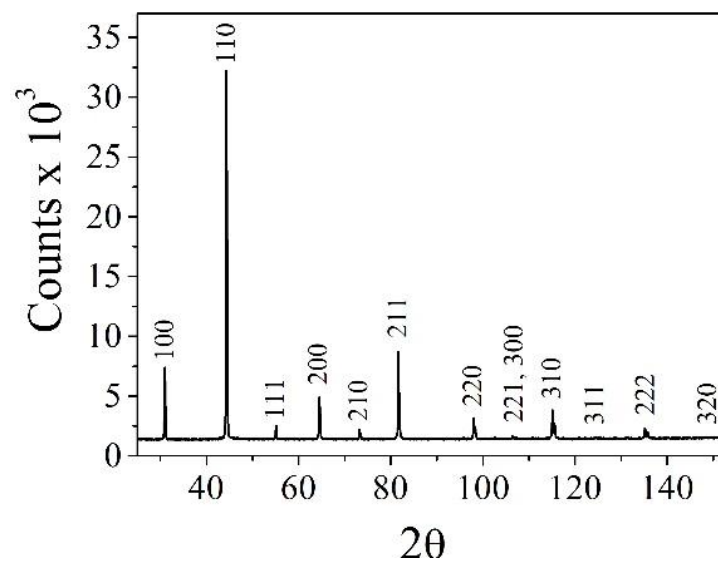
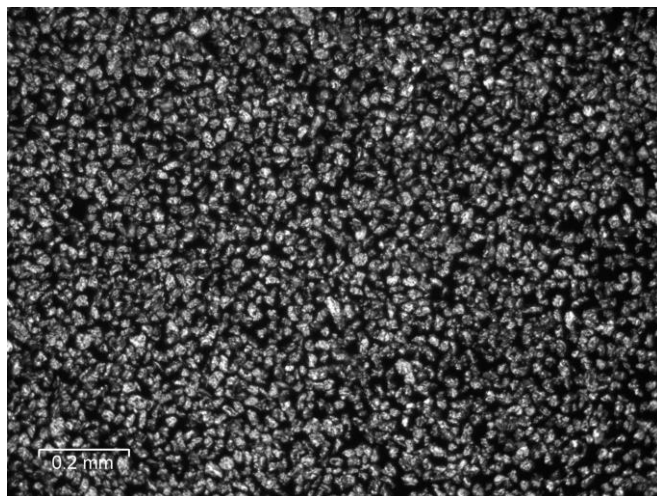


<https://xoptics.ru/2020/04/06/высокоразрешающая-рентгеновская-мик.>



ОБРАЗЦЫ NiAl

Изготовление: синтез из порошков Al и Ni при нагреве в вакууме, измельчение в шаровой мельнице, фракционирование, отжиг.

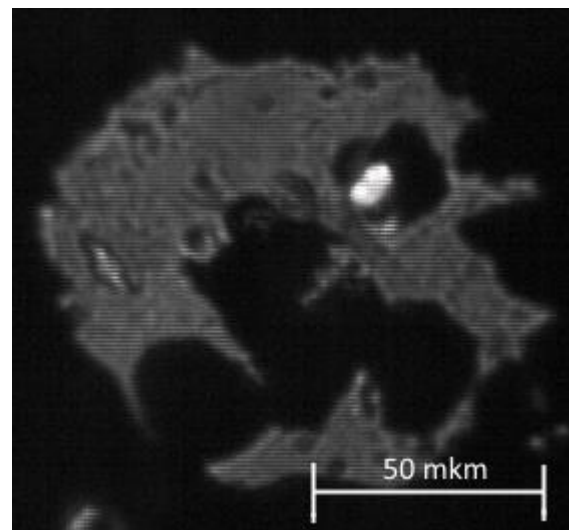
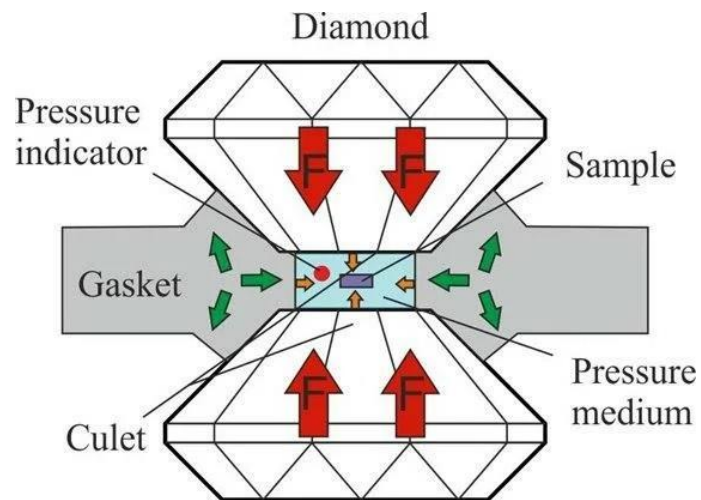


Средний размер частиц – 25 мкм

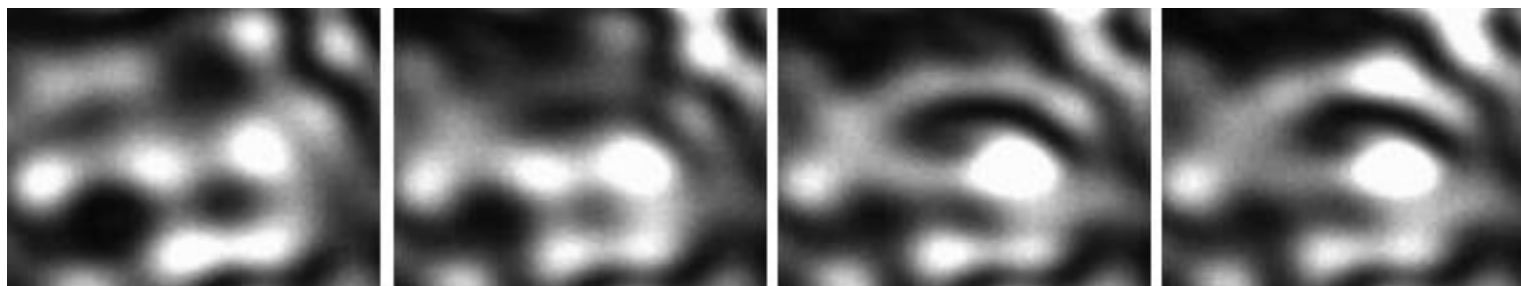
Параметр кристаллической решетки $a = 2.8864(1) \text{ \AA}$,

Плотность $\rho_{\text{рентг.}} = 5.918(1) \text{ г/см}^3$.

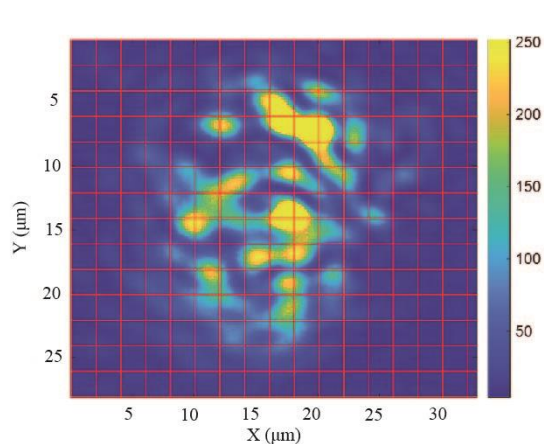
ЛАЗЕРНАЯ СПЕКЛ-МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ В АЛМАЗНЫХ НАКОВАЛЬНЯХ



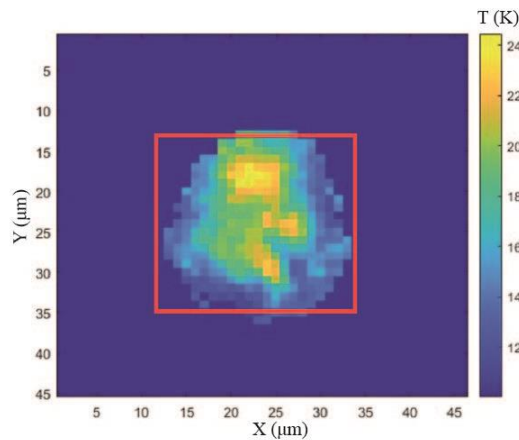
<https://xoptics.ru/2020/04/06/высокоразрешающая-рентгеновская-мик.>



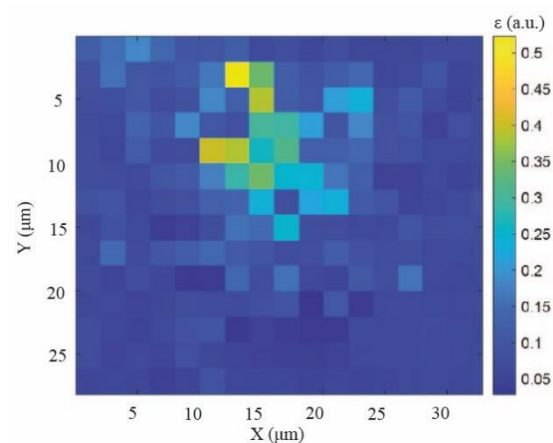
ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ РАБОТЫ АЛГОРИТМА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОБЛАСТИ И ТЕМПЕРАТУРЫ НАЧАЛА ПЛАВЛЕНИЯ



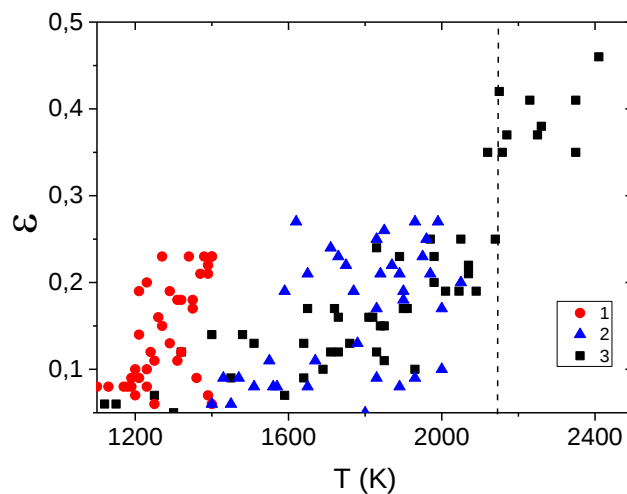
Распределение интенсивности
в спекл-картине и разбиение ее
на области



Определение температуры областей

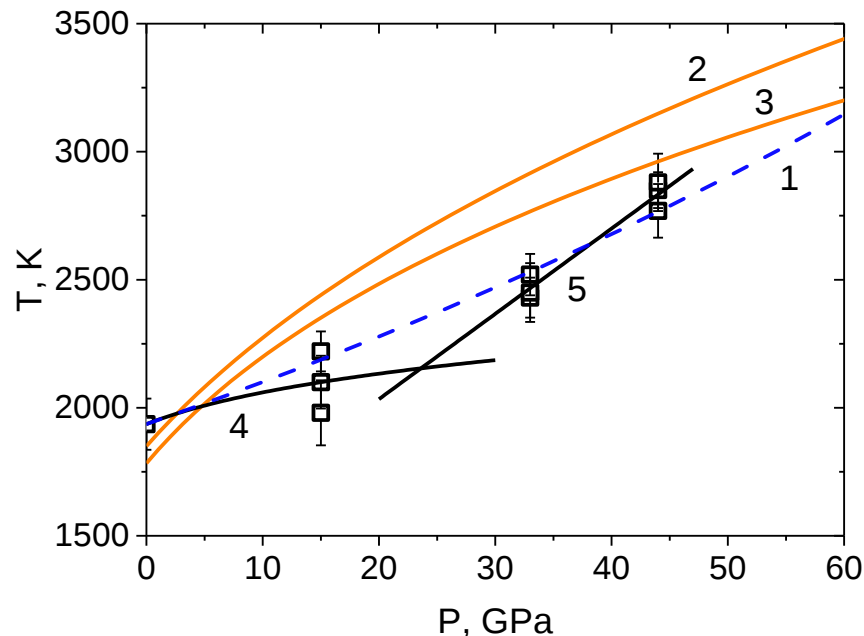
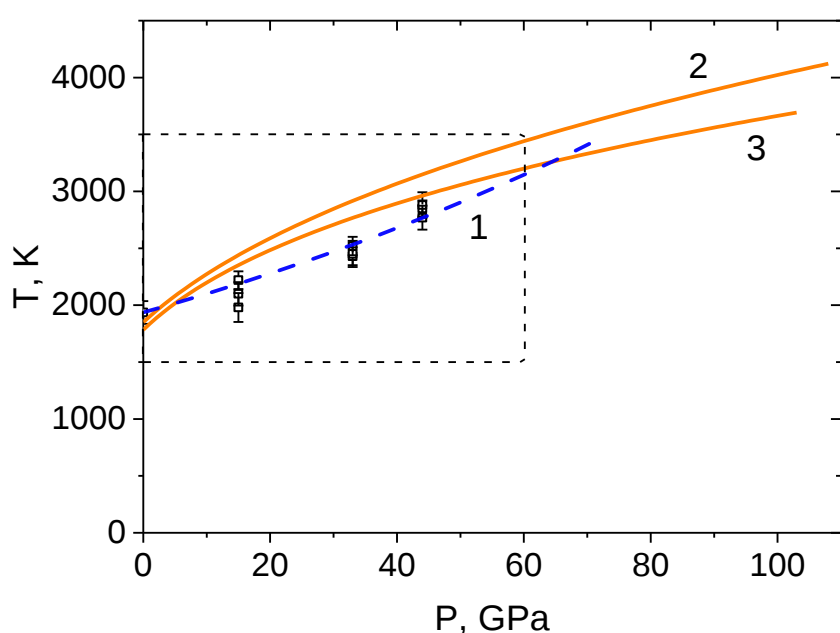


Распределение критерия плавления –
параметра ε - по всем областям



Зависимость ε от мощности нагрева (1) $P=17$ Вт, (1) $P=23$ Вт, (1) $P=28$ Вт.

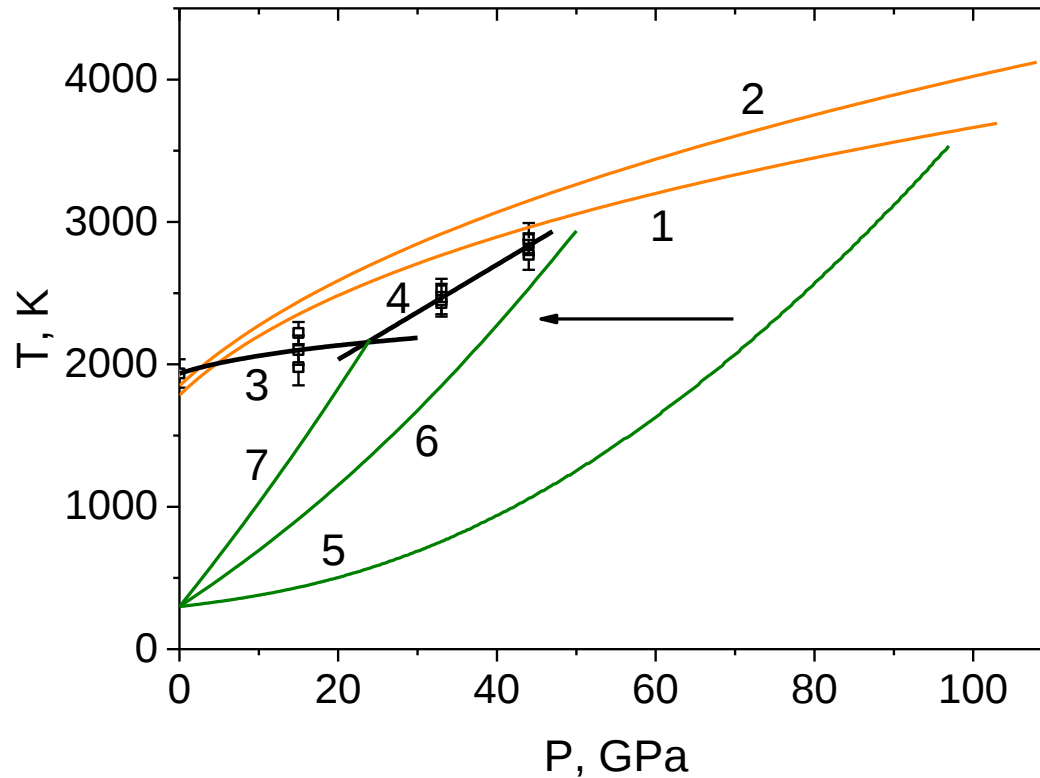
АППРОКСИМАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ТОЧЕК ЛИНИИ ПЛАВЛЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ УРАВНЕНИЯ СИМОНА



- 1 – аппроксимация экспериментальных точек на участке 0-44 ГПа (уравнение Симона),
 2 – расчет ММД в рамках однофазного подхода, 3 – расчет ММД в рамках двухфазного
 подхода, 4 – аппроксимация экспериментальных точек на участке 0-15 ГПа (уравнение Симона),
 5 – аппроксимация экспериментальных точек на участке 33-44 ГПа прямой линией.

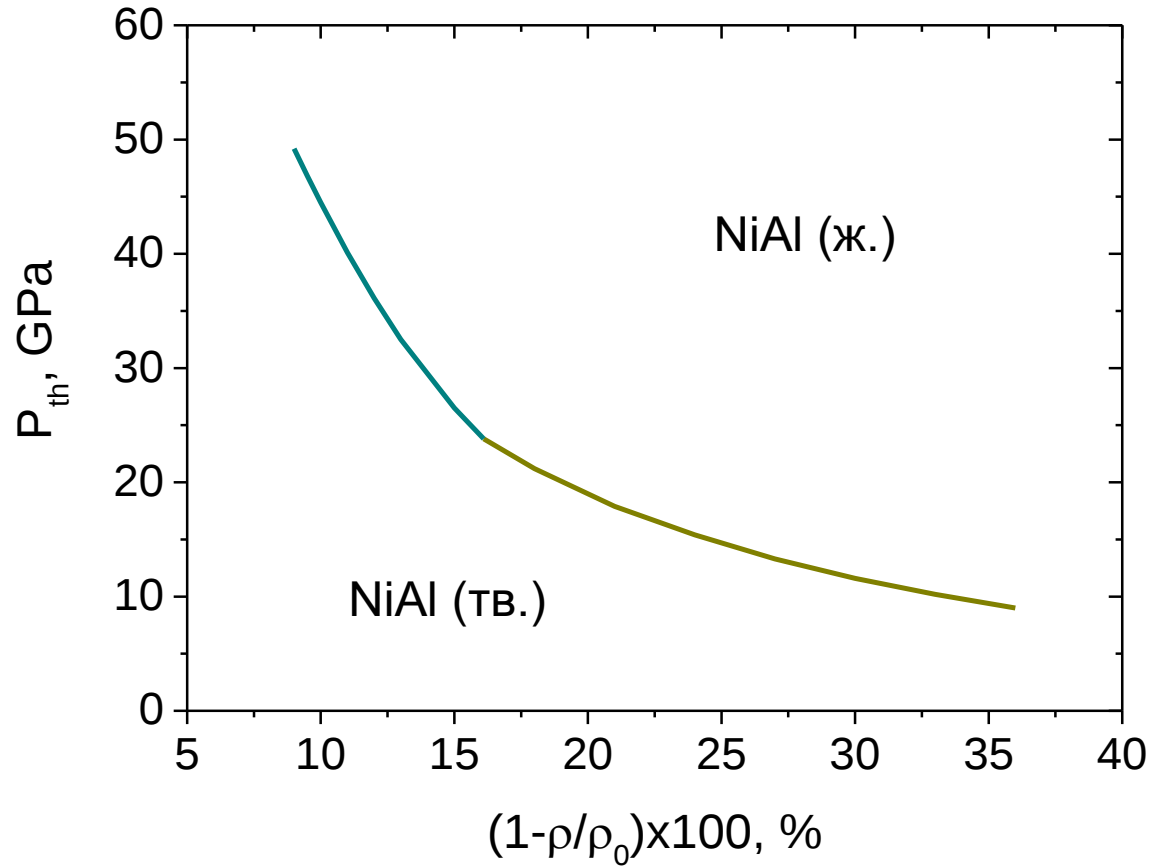
Уравнение Симона:
$$T = T_0(P/a + 1)^{\frac{1}{c}}$$

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЛИНИЯ ПЛАВЛЕНИЯ И РАСЧЕТНЫЕ УДАРНЫЕ АДИАБАТЫ СПЛОШНЫХ И ПОРИСТЫХ ОБРАЗЦОВ NiAl

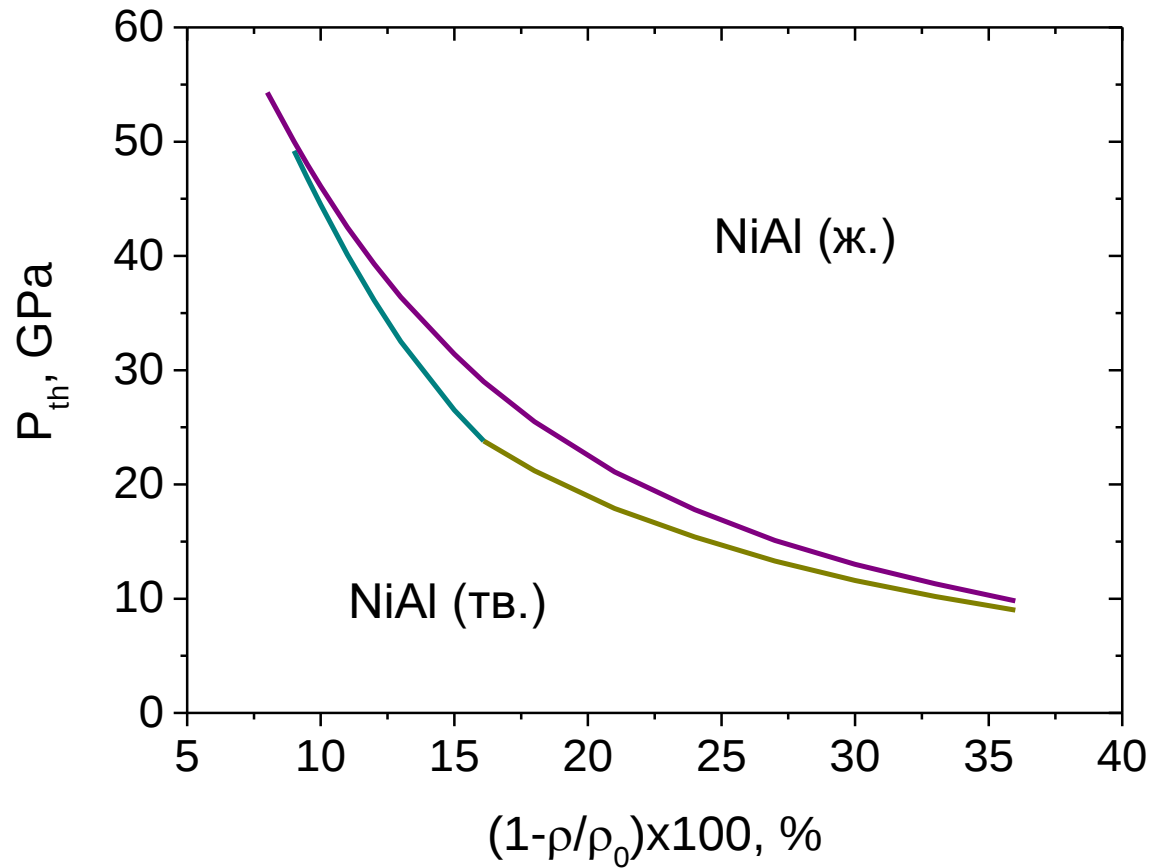


1 – расчет ММД в рамках однофазного подхода, 2 – расчет ММД в рамках двухфазного подхода, 3 – аппроксимация экспериментальных точек на участке 0-15 ГПа (уравнение Симона), 4 – аппроксимация экспериментальных точек на участке 33-44 ГПа прямой линией, 5 — ударная адиабата сплошных образцов, 6 — ударная адиабата образцов с пористостью 8,5%.

ЗАВИСИМОСТЬ ПОРОГОВОГО ДАВЛЕНИЯ УДАРНОГО СЖАТИЯ ОТ НАЧАЛЬНОЙ ПОРИСТОСТИ ОБРАЗЦОВ NiAl



ЗАВИСИМОСТЬ ПОРОГОВОГО ДАВЛЕНИЯ УДАРНОГО СЖАТИЯ ОТ НАЧАЛЬНОЙ ПОРИСТОСТИ ОБРАЗЦОВ NiAl



ВЫВОДЫ

- Впервые измерена температура плавления NiAl при высоком давлении. Показано, что в диапазоне 0 - 44 ГПа линия плавления проходит ниже расчетных зависимостей.
- Установлено, что для наблюдения в эксперименте перехода NiAl в фазу высокого давления пористость образцов не должна превышать 16%.
- Выдвинуто предположение о том, что полиморфный переход в NiAl кинетически затруднен и активируется при повышении температуры.