

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Администрация Правительства Кузбасса

Научно-образовательный центр мирового уровня «Кузбасс»

Сибирский государственный индустриальный университет

**МЕТАЛЛУРГИЯ:
ТЕХНОЛОГИИ, ИННОВАЦИИ, КАЧЕСТВО
*«Металлургия – 2022»***

***Труды
XXIII Международной научно-практической конференции
23– 25 ноября 2022 г.***

Часть 1

**Новокузнецк
2022**

Редакционная коллегия

д.т.н., академик РАН Л.А. Смирнов, д.т.н., доцент А.Б. Юрьев,
д.т.н., профессор С.В. Коновалов, д.т.н., профессор Е.В. Протопопов,
д.т.н., профессор А.Р. Фастыковский, д.т.н., доцент Д.А. Чинахов,
к.т.н. Р.А. Шевченко, к.т.н., доцент О.А. Полях,
к.т.н. Е.Н. Темлянцева, д.т.н., доцент В.В. Зимин

М 540 Металлургия : технологии, инновации, качество : труды
XXIII Международной научно-практической конференции.
В 2 частях. Часть 1 / под общ. ред. А.Б. Юрьева, Сиб. гос. индустр.
ун-т. – Новокузнецк : Изд. центр СибГИУ, 2022. – 390 с. : ил.

Труды конференции включают доклады по актуальным вопросам теории и практики металлургических процессов, технологий обработки материалов, автоматизации, ресурсо- и энергосбережения, экологии и утилизации отходов металлургического производства.

Конференция проводится ежегодно.

ОРГАНИЗАТОРЫ И ПАРТНЕРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

АДМИНИСТРАЦИЯ ПРАВИТЕЛЬСТВА КУЗБАССА
ФГБОУ ВО «СИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ИНДУСТРИАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

АО «ЕВРАЗ ЗСМК»

АО «РУСАЛ-НОВОКУЗНЕЦК»

АО «КУЗНЕЦКИЕ ФЕРРОСПЛАВЫ»

АО «НЗРМК им. Н.Е. КРЮКОВА»

ЛЯОНИНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИИ, Г. АНЫШАНЬ, КНР

ОАО «ЧЕРМЕТИНФОРМАЦИЯ»

ИЗДАТЕЛЬСТВО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РАН

ЖУРНАЛ «ИЗВЕСТИЯ ВУЗОВ. ЧЕРНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ»

ЖУРНАЛ «ВЕСТНИК СИБГИУ»

НАУЧНО-ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР МИРОВОГО УРОВНЯ «КУЗБАСС»

АО «КУЗБАССКИЙ ТЕХНОПАРК»

high silica boehmite–kaolinite bauxite by hydrochloric acid leaching, Transactions of Nonferrous Metals Society of China, Vol. 31 (10), (2021), 3128–3149.

3. R.K. Khamizov et al. Feasibility of Acid–Salt Processing of Alumina-containing Raw Materials in a Closed-Loop Process, Russian Journal of Applied Chemistry, Vol. 93 (7), (2020), 1059–1067.

4. D.H. Hu A new process of extracting alumina from high-alumina coal fly ash in $\text{NH}_4\text{HSO}_4 + \text{H}_2\text{SO}_4$ mixed solution, Hydrometallurgy, Vol 165, (2016), 336–344.

5. Y.S. Wu Synthesis of alumina with coarse particle by precipitating aluminum ammonium sulfate solution with ammonia, Advanced Powder Technology, Vol 27, (2016), 124–129.

УДК 669-117

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ФАЗОВОГО СОСТАВА ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ CoCrFeMnNi ПРИ ИЗМЕНЕНИИ СОДЕРЖАНИЯ Fe И Mn

**Панченко И. А., Гостевская А. Н., Коновалов С. В.,
Безродная Е.А., Бессонов Д.А.**

¹ *Сибирский государственный индустриальный университет,
Новокузнецк, Россия, i.r.i.ss@yandex.ru*

Аннотация. В ходе исследования были проведено прогнозирование фазового состава сплавов системы CoCrFeMnNi при помощи расчетов термодинамических параметров при изменении содержания железа и марганца. Проводилось исследование прогнозирования образования твердого раствора, было определено, образование ТПУ фаз при содержании Mn $20 \leq x < 60$ ат. % и Fe $0 \leq x < 30$ ат. %. Фаза ГЦК была спрогнозирована при содержании CoCrFe_xMnNi $0 \leq x < 100$ ат. % и CoCrFeMn_xNi $0 \leq x < 20$ ат. %.

Ключевые слова. CoCrFeMnNi, высокоэнтропийные сплавы, концентрация валентных электронов, термодинамические критерии.

PREDICTION OF THE FORMATION OF THE PHASE COMPOSITION OF HIGH-ENTROPY ALLOYS OF THE CoCrFeMnNi SYSTEM WHEN THE CONTENT OF Fe and Mn VARIES

**Panchenko I.A., Gostevskaya A.N. Konovalov S.V.,
Bezrodnaya E.A., Bessonov D.A.**

¹ *Siberian State Industrial University,
Novokuznetsk, Russia, i.r.i.ss@yandex.ru*

Abstract. In the course of the study, the phase composition of alloys of the CoCrFeMnNi system was predicted by calculating thermodynamic parameters

with a change in the content of iron and manganese. A study was carried out to predict the formation of a solid solution, it was determined that the formation of TPU phases with a content of Mn $20 \leq x < 60$ at. % and Fe $0 \leq x < 30$ at. %. The fcc phase was predicted at a CoCrFeMnNi content of $0 \leq x < 100$ at. % and CoCrFeMnNi $0 \leq x < 20$ at. %.

Keywords. CoCrFeMnNi, high-entropy alloys, valence electron concentration, thermodynamic criteria.

Введение

Сплавы в виде твердых растворов, состоящие из нескольких основных элементов в Сплавы в виде твердых растворов, состоящие из нескольких основных элементов в примерно эквиатомных концентрациях, стали предметом быстро растущего числа исследований. Сплав в виде твердого раствора, состоящий из пяти или более элементов в эквиатомных соотношениях, представляет интерес из-за его потенциала для упрочнения твердого раствора (высокая прочность) в сочетании с хорошей пластичностью, если фаза твердого раствора обладает простой кристаллической структурой. Поскольку высокая прочность и пластичность важны для конструкционных материалов, исследовательские усилия, как правило, ориентированы на применение и направлены на поиск новых составов сплавов с многообещающими механическими свойствами.

Исследование высокоэнтروпийных сплавов, формирующих структуру, состоящую из нескольких фаз с большой объемной долей, является актуальной темой исследований. К сплавам с однофазной структурой твердого раствора с ГЦК решеткой можно отнести высокоэнтропийный сплав CoCrFeMnNi [1]. В работе [2] исследователи выдвигали предположение, что такой сплав состоит из двух фаз, но данная теория была опровергнута так как авторы исследования [3] доказали, наличие в CoCrFeMnNi другие фазы. ВЭС системы CoCrFeMnNi интересен тем, что обладает хорошей комбинацией свойств (высокая твердость, прочностные характеристики, износостойкость и коррозионную стойкость).

Эквиатомный сплав Кантора CoCrFeMnNi демонстрирует прекрасное сочетание механических свойств, таких как предельная пластичность [4], высокая прочность на растяжение [5], твердость [6] и высокая стойкость к разрушению при криогенных температурах [7]. Среди интересных свойств является наблюдение, что сплав демонстрирует сильное увеличение предела текучести при понижении температуры [8, 9], особенно в криогенном диапазоне, что характерно для чистых объемно-центрированных кубических (ОЦК) металлов и некоторых бинарных ГЦК-сплавов, но не чистые ГЦК металлы.

Целью работы является прогнозирование фазового состава высокоэнтропийного сплава Co-Cr-Fe-Mn-Ni при изменении состава Fe и Mn при помощи феноменологических критериев в диапазоне x от 0 до 100 ат. %.

Материал и методика исследования

В качестве материалов исследования были выбраны эквиатомные высокоэнтропийные сплавы композиции CoCrFeMnNi.

Для описания сплавов в зависимости от их состава, были использованы следующие параметры:

$$\Delta H_{\text{смеш}} = \sum \Omega_{ij} c_i c_j, \text{ где}$$

где $\Omega_{ij} = (4\Delta H_{AB}^{\text{смеш}})$ – зависящий от концентрации параметр, характеризующий взаимодействие между элементами в твердом растворе;

c_i и c_j – содержание (ат. %) соответственно i -того и j -того элемента в сплаве;

$H_{AB}^{\text{смеш}}$ – энтальпия смешения компонентов А и В в жидком бинарном сплаве.

– средняя разность атомных радиусов:

$$\delta_r = 100\% \sqrt{\sum c_i \left(1 - \frac{r_i}{\bar{r}}\right)^2},$$

где c_i – содержание (ат. %) i -того элемента в сплаве;

r_i – атомный радиус i -того элемента в сплаве;

$\bar{r} = \sum c_i r_i$ – средний атомный радиус сплава.

Идея заключалась в том, чтобы определить условия, регулирующие стабильность фаз в ВЭСх путем статистического анализа общего поведения составляющих элементов в многокомпонентных высокоэнтропийных сплавах.

В работе [10] авторы утверждают, что твердые растворы формируются, когда разница атомных размеров не велика, энтальпия смешения имеет значения близкие к нулю, а энтропия смешения имеет высокие величины.

В исследование, представленное в работе [10] показано, что для предсказания формирования структуры ВЭС авторы использовали дополнительный термодинамический параметр:

$$\Omega = \frac{T_{\text{пл}} \Delta S_{\text{смеш}}}{|\Delta H_{\text{смеш}}|},$$

где $T_{\text{пл}} = \sum c_i T_{\text{пл}}$ и $T_{\text{пл}}$ – температура плавления элементов;

c_i – молярная доля i -го компонента сплава;

$\Delta S_{\text{смеш}}$ – конфигурационная энтропия смешения n -компонентного идеального раствора.

Стоит также отметить, что энтальпия смешения, которая использовалась для прогнозирования структур ВЭСов, зависит от электронной концентрации. Соотношение между общим количеством электронов (концентрация валентных электронов (КВЭ) и типом решетки в сплаве CoCrFeNiAlCu: ОЦК структура наблюдается при низких значениях КВЭ, в то время как ГЦК решетка образуется при более высоких величинах КВЭ.

Концентрация валентных электронов определяется как:

$$\sum c_i(\text{КВЭ})_i$$

где c_i – молярная доля i -го компонента и $(\text{КВЭ})_i$ – концентрация валентных электронов i -го компонента.

Результаты и их обсуждение

При прогнозировании фазового состава были определены зависимости энтальпии смешивания, параметра Ω и разности в атомных радиусах δ_r от изменения содержания железа и марганца в высокоэнтропийных сплавах системы CoCrFeMnNi при изменении содержания железа и марганца.

Исходя из полученных данных было установлено, что твердый раствор высокоэнтропийных сплавов системы CoCrFeMnNi образуется при содержании Fe $0 \leq x < 100$ ат. % и при Mn $0 \leq x < 100$ ат. %.

Было определено, что образование ГЦК фазы происходит при изменении содержания железа в сплаве от $40 \leq x < 100$ ат. %. При изменении в системе CoCrFeMnNi образование ГЦК фазы замечено при изменении содержания Mn $0 \leq x < 10$ ат. %. Так, в сплаве CoCrFeMn $_x$ Ni на диапазоне $30 \leq x < 100$ ат. % значений x прогнозируется образование смеси ОЦК и ГЦК фаз. А в сплаве CoCrFe $_x$ MnNi прогнозируется образование ТПУ фазы при $0 \leq x < 30$ ат. % значений x .

Следует отметить, что наличие Fe в сплаве не способствует изменению в концентрации валентных электронов формированию и образованию ОЦК фазы. Сведения, которые были получены при влиянии железа и марганца в высокоэнтропийном сплаве системы CoCrZrMnNi представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Прогнозирование результатов фазового состава сплава CoCrFeMnNi

	Твердый раствор	ОЦК	ГЦК	ОЦК+ГЦК	ТПУ	σ -фаза в сплавах
CoCrFe $_x$ MnNi	$0 \leq x < 100$ ат. %.	–	$0 \leq x < 100$ ат. %.	–	$0 \leq x < 30$ ат. %.	–
CoCrFeMn $_x$ Ni	$0 \leq x < 100$ ат. %.	–	$0 \leq x < 20$ ат. %.	$30 \leq x < 100$ ат. %.	$20 \leq x < 60$ ат. %.	$30 \leq x < 100$ ат. %.

Выводы

Было проведено исследование влияния Fe и Mn на фазовый состав высокоэнтропийного сплава Co-Cr-Fe-Mn-Ni. Было выявлено изменение содержания железа в сплаве CoCrFeMnNi не оказывает влияния на изменение концентрации валентных электронов и установлено, что твердый раствор сплава образуется в случае содержания Fe и Mn $0 \leq x < 100$ ат. %.

Работа выполнена в рамках государственного задания № 0809-2021-0013.

Библиографический список

1. Yeh J., Chen S., Lin S.- J., Gan J.- Y., Chin T., Shun T., Tsau C., Chang S.- Y. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes // *Adv. Eng. Mater.* 2004. Vol. 6, № 5. Pp. 299–303.
2. Wang Y.P., Li B. Sh., Heng Zh. F. Solid Solution or Intermetallics in a HighEntropy Alloy // *Advanced Engineering Materials*. 2009. Vol. 11. № 8, Pp. 641-644.
3. Otto F., Dlouhy A., Somsen Ch., Bei H., Eggeler G., George E.P. The influence of temperature and microstructure on the tensile properties of a CoCrFeMnNi high-entropy alloy // *Acta Materialia*, 2013, 61. Pp. 5743-5755.
4. Schuh B., Mendez M.F., Bernhard V. Mechanical properties, microstructure and thermal stability of a nanocrystalline CoCrFeMnNi high-entropy alloy after severe plastic deformation // *Acta Mater. Acta Materialia Inc.*, 2015. Vol. 96. Pp. 258-268.
5. Salishchev G.A., Tikhonovsky M.A., Shaysultanov D.G., Stepanov N.D., Kuznetsov A.V., Kolodiy I.V., Tortika A.S., Senkov O.N. Thermodynamic Modelling of the Stability of Sigma Phase in the Cr-Fe-Ni-V High-Entropy Alloy System // *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. 2018. № 11. Pp. 694–701.
6. Gali A., Gali A., George E., George E. Tensile properties of high- and medium-entropy alloys // *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. 2013. 39. P. 74.
7. B. Gludovatz A., Hohenwarter D., Catoor E.H., Chang E.P., George R.O., A fracture-resistant high-entropy alloy for cryogenic applications // *Science*. 2014. Vol. 345, Iss. 6201. Pp. 1153-1158.
8. A. Gali, E.P. George, Tensile properties of high- and medium-entropy alloys. // *Intermetallics*. 2013. 39. Pp. 74 – 78.
9. Cantor B., Chang I.T.H., Knight P., Vincent A.J.B. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys // *Materials Science and Engineering A*, 2004. Pp. 213–218.
10. Guo S., Ng C., Lu J., Liu C. T. Effect of valence electron concentration on stability of FCC or bcc phase in high entropy alloys // *Journal of Applied Physics*. 2011. P. 109.

Научное издание

**МЕТАЛЛУРГИЯ:
ТЕХНОЛОГИИ, ИННОВАЦИИ, КАЧЕСТВО**
«Металлургия – 2022»

Труды XXIII Международной научно-практической конференции

Часть 1

Под общей редакцией А.Б. Юрьева

Технический редактор

Г.А. Морина

Компьютерная верстка

Н.В. Ознобихина

Подписано в печать 16.11.2022 г.

Формат бумаги 60x84 1/16. Бумага офисная. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 22,8 Уч.-изд. л. 25,2 Тираж 300 экз. Заказ № 295

Сибирский государственный индустриальный университет
654007, Кемеровская область – Кузбасс, г. Новокузнецк, ул. Кирова, 42
Издательский центр СибГИУ