

УДК 666.792.34:539.89

**В. З. Туркевич\*, Д. А. Стратийчук, М. А. Тонкошкура,  
Н. П. Беженар** (г. Киев)

\*vturk@ism.kiev.ua

### **Термодинамический расчет диаграммы состояния системы Al–B при давлениях до 8 ГПа**

*С помощью моделей феноменологической термодинамики с параметрами взаимодействия, полученными на основании экспериментальных данных по фазовым равновесиям при высоких давлениях и температурах, изучена эволюция топологии диаграммы состояния системы алюминий–бор при давлениях до 8 ГПа.*

**Ключевые слова:** бориды алюминия, высокие давления, диаграммы состояния.

Система Al–B при атмосферном давлении хорошо изучена [1], выполнен и анализ термодинамики фаз этой системы при 0,1 МПа [2]. Однако информация о диаграмме состояния системы Al–B при высоких давлениях в литературе отсутствует. В настоящей работе впервые путем термодинамического расчета построена диаграмма состояния системы Al–B при 6 и 7,7 ГПа.

Расчет выполнен с помощью пакета программ Thermo-Calc [3]. Термодинамические данные о фазах системы Al–B при атмосферном давлении взяты из [2]. Жидкая фаза описана в приближении субрегулярных растворов [4], твердые растворы на основе алюминия и бора – формализмом энергии соединений (CEF) [5], AlB<sub>2</sub> и AlB<sub>12</sub> рассматривали как стехиометрические соединения.

Высокие давления изменяют свободную энергию Гиббса моля фазы  $m$  на величину  $\int_0^p V_m dp$ , где  $V_m$  – мольный объем. Зависимость мольного объема фаз от давления описана в приближении Мурнагана [6]. Мольные объемы, коэффициенты термического расширения, модули всестороннего сжатия и их производные по давлению для алюминия, бора, боридов алюминия и жидкой фазы взяты из [7–10]. Отсутствующие в литературе величины для AlB<sub>2</sub> и AlB<sub>12</sub> были приняты равными соответствующим величинам для  $\beta$ -B<sub>106</sub>.

Мольный объем жидкой фазы выражен в виде

$$V_L = V_A x_{Al} + V_B x_B + \Delta V x_A x_B, \quad (1)$$

где  $\Delta V = -5,8 \cdot 10^{-6}$  – объем смешения, найденный оптимизацией термодинамических данных по барической зависимости температуры плавления AlB<sub>2</sub> [11].

Эволюция диаграммы состояния системы Al–B с давлением представлена на рисунке. Кроме количественного изменения параметров диаграммы со-

стояния (прежде всего увеличения растворимости бора в жидкой фазе) наблюдается изменение ее топологии: характер плавления боридов алюминия меняется с инконгруэнтного на конгруэнтный, и, соответственно, перитектики  $L + AlB_{12} \rightleftharpoons AlB_2$ ,  $L + \beta\text{-B} \rightleftharpoons AlB_{12}$  сменяются эвтектиками  $L \rightleftharpoons AlB_2 + AlB_{12}$ ,  $L \rightleftharpoons AlB_{12} + \beta\text{-B}$ , появляется линия равновесия  $\gamma\text{-B}_{28}$  и  $\gamma'\text{-B}_{52}$  (рисунок, в, 1120 К).

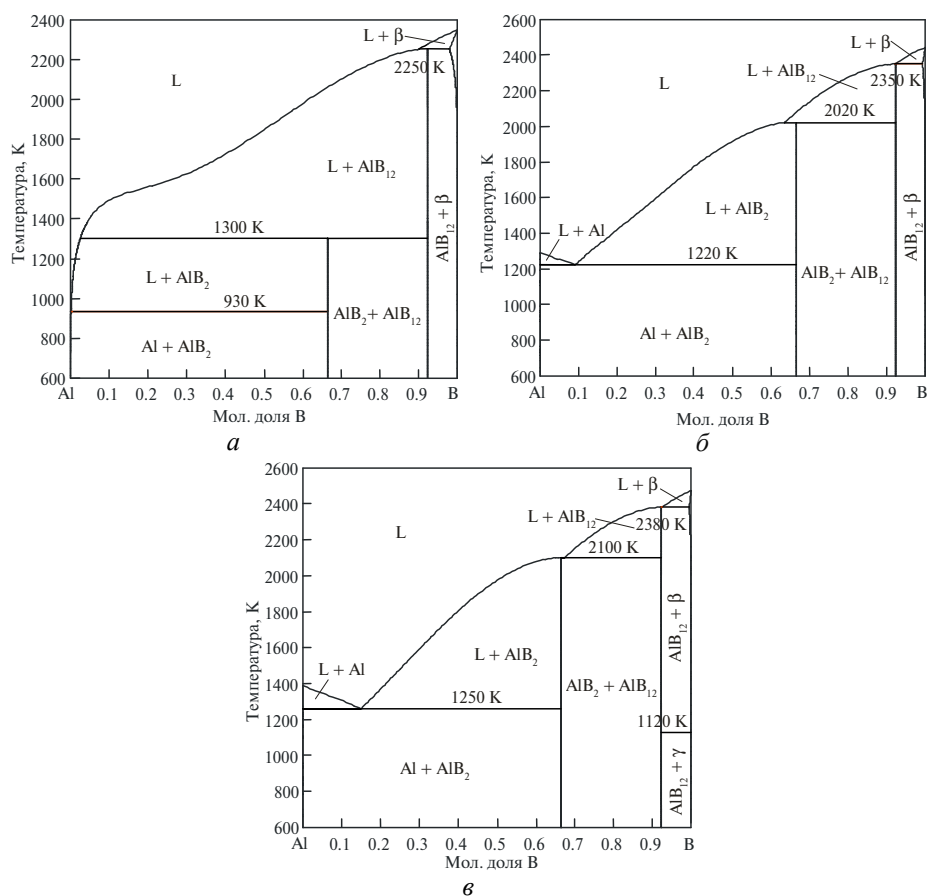


Диаграмма состояния системы Al–B при давлениях 0,1 (а), 6 (б) и 7,7 (в) ГПа;  $\beta$ ,  $\gamma$  – аллотропы бора ( $\beta\text{-B}_{106}$ ,  $\gamma\text{-B}_{28}$  соответственно).

*За допомогою моделей феноменологічної термодинаміки із параметрами взаємодії, що отримано на базі експериментальних даних за фазовими рівновагами при високих тисках та температурах, досліджено еволюцію топології діаграми стану системи алюміній–бор при тисках до 8 ГПа.*

**Ключові слова:** бориди алюмінію, високі тиски, діаграми стану.

*By using models of phenomenological thermodynamics with interaction parameters, which were obtained from the experimental data on phase equilibria at high pressures and temperatures, the topology diagram of the aluminium–boron at pressures up to 8 GPa.*

**Keywords:** aluminum borides, high-pressures, phase diagrams.

1. Кислый П. С., Неронов В. А., Прихна Т. А., Бевза Ю. В. Бориды алюминия. – К.: Наук. думка, 1990. – 190 с.

2. *Campbell C. E., Kattner U. R.* A thermodynamic assessment of the Ni–Al–B system // *J. Phase Equilibria*. – 1999. – **20**, N 5. – P. 485–496.
3. *Andersson J.-O., Helander T., Höglund L., Shi P., Sundman B.* Thermo-Calc & DICTRA, computational tools for materials science // *Calphad*. – 2002. – **26**, N 2. – P. 273–312.
4. *Hardy H. K.* A “sub-regular” solution model and its application to some binary alloy systems // *Acta Metal.* – 1953. – **1**, N 2. – P. 202–209.
5. *Hillert M.* The compound energy formalism // *J. Alloys Comp.* – 2001. – **320**, N 2. – P. 161–176.
6. *Murnaghan F. D.* The compressibility of media under extreme pressures // *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* – 1944. – **30**, N 9. – P. 244–247.
7. *Туркевич В. З., Кулик О. Г., Гаран А. Г. и др.* Диаграмма состояния системы Al–C при давлении 6 ГПа // *Сверхтв. материалы*. – 2004. – № 4. – 29–34.
8. *Solozhenko V. L., Turkevich V. Z., Kurakevych O. O. et al.* Phase equilibria in the B–BN–B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system at 5 GPa // *J. Phys. Chem. C*. – 2013. – **117**, N 36. – P. 18642–18647.
9. *Solozhenko V. L., Kurakevych O. O.*, Equilibrium *p-T* phase diagram of boron: experimental study and thermodynamic analysis // *Sci. Rep.* – 2013. – **3**, art. 2351.
10. *Jahan N., Ali M. A.* A theoretical study of elastic, electronic, optical and thermodynamic properties of AlB<sub>2</sub> and TaB<sub>2</sub> // arXiv:1406.1051 [cond-mat.mtrl-sci].
11. *Беженар Н. П., Божко С. А., Белявина Н. Н. и др.* Фазовый состав поликристаллов, полученных при реакционном спекании кубического нитрида бора с алюминием // *Сверхтв. материалы*. – 2002. – № 1. – С. 37–48.

Ин-т сверхтвердых материалов  
им. В. Н. Бакуля НАН Украины

Поступила 17.09.14