

# АВ-INITIО МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СВЕРХВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Ta_xZr_{1-x}C$

*Сиднов К. П.,<sup>\*1,2</sup> Воротыло С. А.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>*МИСиС, Москва, Россия, <sup>2</sup>ИСМАН, Черноголовка, Россия*

*\*sidnov@list.ru*

Благодаря высокой температуре плавления, стойкости к высокотемпературному окислению и высоким механическим свойствам твердые растворы  $Ta_xZr_{1-x}C$  являются перспективными карбидами для применения в качестве сверхвысокотемпературных керамических материалов (СВТК).

Отсутствие достоверных данных о фазовом равновесии в системе Ta-Zr-C препятствует разработке и внедрению соответствующих СВТК. В частности, в литературе имеются противоречивые данные о существовании разрыва области смешиваемости в системе Ta-Zr-C при температурах ниже 900 °C [1–3].

В ходе выполнения данной работы был проведен расчет термодинамических свойств сплавов  $Ta_xZr_{1-x}C$  и показано, что распад твердых растворов на монокарбиды (TaC и ZrC) не должен происходить.

Среди различных методов, позволяющих синтезировать твердые растворы в системе Ta-Zr-C, одним из наиболее перспективных считается самораспространяющийся высокотемпературный синтез [4, 5]. С помощью данного метода были синтезированы однофазные образцы составов  $Ta_xZr_{1-x}C$  ( $x=0.9, 0.8, 0.6, 0.3$ ) и был проведен отжиг в течение 40 часов. По результатам исследований не было выявлено признаков разложения твердого раствора при отжиге, что подтверждает выводы, полученные при теоретическом моделировании.

1. E.I. Gladyshevsky, T.F. Fedorov, L.V. Gorshkova. The zirconium-tantalum-carbon system. Russ. J. Inorg. Chem. 9 (1964), 639–642.
2. A.I. Gusev, Order-Disorder Transformations and Phase Equilibria in Strongly Nonstoichiometric Compounds, Phys.-Uspekhi, 43(1) (2000), 1-37.
3. P. Zhou, Y. Peng, Y. Du, S. Wang, G. Wen, W. Xie, K. Chang, A thermodynamic description of the C-Ta-Zr system. Int. J. Refract. Met. Hard Mater. 41 (2013), 408-415.
4. A.S. Rogachev, A.S. Mukasyan, Combustion for Material Synthesis. CRC Press, Boca Raton, 2014.
5. Concise Encyclopedia of Combustion Synthesis: History, Theory, Technology, and Products (Eds. I. Borovinskaya, A. Gromov, Yu. Maksimov, A. Rogachev, E. Levashov, A. Mukasyan), Elsevier, Toronto, 2017.