Оригинальная статья

УДК 621.74:669.7.018

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ НА МЕЖФАЗНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КОМПОНЕНТОВ ЛИТЫХ АЛЮМОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ ПО ИЗМЕНЕНИЮ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ

Е. С. Прусов¹, И. В. Шабалдин¹, В. Б. Деев²

¹Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых (600000, Россия, Владимир, ул. Горького, 87)

²Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» (119991, Россия, Москва, Ленинский пр-т, 4)

Аннотация. Характер межфазного взаимодействия алюминиевых расплавов с экзогенными армирующими компонентами при получении алюмоматричных композиционных материалов литейно-металлургическими методами может существенно изменяться при добавлении различных легирующих элементов. В этой связи учет влияния легирования матричных сплавов на термодинамическую активность компонентов в расплавах может рассматриваться как один из критериев выбора легирующих элементов при проектировании составов литых алюмоматричных композитов. Вместе с тем экспериментальные оценки термодинамической активности компонентов сложных систем сопряжены со значительными затратами времени и материальных ресурсов, характеризуются высокой трудоемкостью и большим разбросом полученных значений. Разработка моделей прогнозирования термодинамического верификация расчетных для многокомпонентных расплавов может рассматриваться как достаточно эффективный подход к определению их термодинамических характеристик. В настоящей работе проведена оценка термодинамической активности легирующих компонентов матричных алюминиевых сплавов при получении литых композиционных материалов на основе тройной системы Al - Si - X (где X = Si, Cu, Mg, Zn, Mn, Ni, Ti, Fe) с использованием уравнения Уилсона и расчетных значений регулируемых параметров по расширенной модели Миедемы. Расчетные формы уравнений для определения коэффициентов активности компонентов реализованы в программном пакете MS Excel. Полученные результаты могут быть полезны при прогнозировании химической стабильности экзогенных армирующих компонентов в матричных алюминиевых расплавах.

Ключевые слова: литые алюмоматричные композиты, межфазное взаимодействие, легирующие элементы, термодинамическая активность

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-08-01169.

Для цитирования: Прусов Е.С., Шабалдин И.В., Деев В.Б. Оценка влияния легирующих элементов на межфазное взаимодействие компонентов литых алюмоматричных композитов по изменению термодинамической активности // Вестник Сибирского государственного индустриального университета. 2022. № 3 (41). С. 37 – 44.

Original article

EVALUATION OF THE INFLUENCE OF ALLOYING ELEMENTS ON THE INTERFACIAL INTERACTION OF THE COMPONENTS OF CAST ALUMINUM MATRIX COMPOSITES BY CHANGING THE THERMODYNAMIC ACTIVITY

E. S. Prusov¹, I. V. Shabaldin¹, V. B. Deev²

¹Vladimir State University named after Alexander and Nikolay Stoletovs (87 Gorky st., Vladimir, 600000, Russian Federation)

²National University of Science and Technology "MISiS" (4 Leninsky Prospekt, Moscow, 119991, Russian Federation)

Abstract. The nature of the interfacial interaction of aluminum melts with exogenous reinforcing components in the production of aluminum matrix composite materials by foundry-metallurgical methods can be significantly changed by adding various alloying elements. In this regard, consideration of the influence of alloying of matrix alloys on the thermodynamic activity of components in melts can be treated as one of the criteria for choosing alloying elements during designing the compositions of cast aluminum matrix composites. At the same time, experimental estimates of the thermodynamic activity of the components of complex systems are associated with significant time and material resources, are characterized by high labor intensity and a large spread of the obtained values. The development and verification of computational models for predicting the thermodynamic behavior of multicomponent melts can be considered as a fairly effective approach to determining their thermodynamic characteristics. In the present work, an assessment of the thermodynamic activity of alloying components of matrix aluminum alloys in the production of cast composite materials based on the Al – Si – X ternary system (where X = Si, Cu, Mg, Zn, Mn, Ni, Ti, Fe) was carried out using the Wilson equation and calculated values of adjustable parameters according to the extended Miedema model. The calculation forms of the equations for determining the activity coefficients of the components are implemented in the MS Excel software package. The results obtained can be useful in predicting the chemical stability of exogenous reinforcing components in matrix aluminum melts.

Keywords: cast aluminum matrix composites, interfacial interaction, alloying elements, thermodynamic activity

Funding: The research was carried out with the financial support of the RFBR as part of the scientific project No. 20-08-01169.

For citation: Prusov E.S., Shabaldin I.V., Deev V.B. Evaluation of the influence of alloying elements on the interfacial interaction of the components of cast aluminum matrix composites by changing the thermodynamic activity. *Bulletin of the Siberian State Industrial University*. 2022, no. 3 (41), pp. 37 – 44. (In Russ.).

Введение

Возрастающий научный и практический интерес к разработке составов и технологий получения литых металломатричных композитов в значительной степени обусловлен широкими функциональными возможностями, предоставляемыми этим сравнительно новым классом перспективных материалов [1-3]. В частности, литые композиционные материалы на основе алюминиевых сплавов, содержащие в качестве армирующих фаз дисперсные частицы высокомодульных тугоплавких соединений, отличаются высокими удельной прочностью, твердостью, жесткостью, износостойкостью в условиях сухого и абразивного изнашивания в широком температурносиловом диапазоне эксплуатации изделий [4, 5]. Вместе с тем увеличение объемов промышленного использования литых алюмоматричных композитов сопряжено с необходимостью решения ряда технологических и методологических проблем, одной из которых является установление особенностей влияния различных легирующих элементов на характер взаимодействия матричных алюминиевых сплавов с экзогенными армирующими компонентами [6-8].

Термодинамические характеристики процессов межфазного взаимодействия армирующих частиц с матричными расплавами важны для понимания механизмов структурообразования при получении литых алюмоматричных композитов [9]. Однако экспериментальные термодинамические исследования многокомпонентных систем сопряжены со значительными затратами

времени и материальных ресурсов, требуют большого числа измерений. Из-за высокой сложности, трудоемкости и недостаточной точности измерений в высокотемпературных экспериментах приводимые в литературе результаты различных научных групп по оценке термодинамических характеристик металлических расплавов имеют, как правило, значительные расхождения [10 – 12]. Именно поэтому разработка теоретических моделей для прогнозирования термодинамического поведения многокомпонентных расплавов может рассматриваться как достаточно эффективный подход к определению их термодинамических характеристик. Несмотря на очевидную приближенность таких моделей и реализующих методик, их применение может приводить к получению полезных результатов при оценке термодинамических параметров сложных систем, в том числе может сформировать теоретические предпосылки для управления процессами межфазного взаимодействия в жидкофазных технологиях получения металломатричных композиционных материалов.

Для прогнозирования термодинамических свойств многокомпонентных систем было разработано множество теоретических, эмпирических и полуэмпирических моделей, каждая из которых имеет свои преимущества и ограничения. В частности, в начале 1990-х гг. Динг с сотрудниками предложили модель для прогнозирования параметров взаимодействия и коэффициентов активности ком-

понентов в разбавленных растворах путем объединения известной модели А.Р. Миедемы и геометрической модели [13]. Последующее развитие данных подходов шло путем объединения модели Чжоу с моделью Миедемы [14], добавления расширенной модели Тупа [15], включения избыточной энтропии [11] и др. Несмотря на многообразие существующих решений, актуальной задачей остается поиск универсальной модели, позволяющей выполнять оценочные расчеты с надежными результатами для прогнозирования термодинамических свойств многокомпонентных металлургических систем. Подбор и верификация такой модели имеют большое методическое значение для решения различных научноисследо-вательских задач и практическое значение для ряда инженерных приложений.

Целью настоящей работы является применение уравнения Уилсона для оценки термодинамической активности легирующих компонентов матричных алюминиевых сплавов при получении литых композиционных материалов с использованием расчетных значений регулируемых параметров по расширенной модели Миедемы.

Методика исследований

В качестве объекта для термодинамических расчетов в настоящей работе выбрана тройная система Al - Si - X (где X = Si, Cu, Mg, Zn, Mn, Ni, Ti, Fe), являющаяся базовой для алюмоматричных композиционных материалов Al/SiC. С кинетической точки зрения взаимодействие карбида кремния с алюминиевым расплавом включает частичное растворение карбида кремния SiC в жидком алюминии, диффузию ионов кремния и углерода с поверхности раздела вглубь матричного расплава и выделение фазы карбида алюминия с увеличением активности углерода в алюминиевом расплаве [16 - 18]. Вместе с тем растворимость углерода в нелегированном алюминии крайне мала даже при высоких перегревах расплава, поэтому модель жидкого раствора тройной системы Al – Si – C и четверной системы Al - Si - C - X (где X - легирующий элемент) для расчетных задач можно аппроксимировать бинарной системой Al – Si и тройной системой Al - Si - X. Целесообразность и обоснованность такой аппроксимации была многократно подтверждена в расчетных работах Т. Фана с сотрудниками, в частности, в основополагающей работе [19].

Большинство систем в металлургии далеки от идеальных, поэтому для описания термодинамических параметров расплавов понятие концентрации заменяют понятием активности. Активность компонентов является важным фактором при определении термодинамической стабильности экзогенных армирующих частиц в

матричном алюминиевом расплаве. Термодинамическая активность i-го компонента в расплаве может быть выражена следующим образом:

$$a_i = x_i \gamma_i, \tag{1}$$

где x_i — молярная доля i-го компонента в расплаве; γ_i — коэффициент активности i-го компонента.

Для определения коэффициентов активности в настоящей работе использован модифицированный метод расчета, изначально представленный Уилсоном в работе [20]:

$$\ln \gamma_i = -\ln \left(1 - \sum_j x_j A_{j/i} \right) +$$

$$+ 1 - \sum_j \left(\frac{x_j (1 - A_{i/j})}{1 - \sum_k x_k A_{k/j}} \right),$$
(2)

где $A_{i/i}$ и $A_{j/i}$ – регулируемые параметры.

Использование уравнения Уилсона позволяет оценивать активность компонентов в тройных системах и в системах более высокого порядка, при этом расчет ведется на основе регулируемых параметров, полученных для двойных систем.

В случае расчета бинарной системы i-j уравнение (2) записывается следующим образом:

$$\ln \gamma_i = 1 - \ln \left(1 - x_j A_{j/i} \right) - \frac{x_i}{1 - x_j A_{j/i}} - \frac{x_j (1 - A_{i/j})}{1 - x_i A_{i/j}}.$$
 (3)

Для тройной системы i-j-k можно записать

$$\ln \gamma_{i} = 1 - \ln \left(1 - x_{j} A_{j/i} - x_{k} A_{k/i} \right) - \frac{x_{i}}{1 - x_{j} A_{j/i} - x_{k} A_{k/i}} - \frac{x_{j} \left(1 - A_{i/j} \right)}{1 - x_{i} A_{i/j} - x_{k} A_{k/j}} - \frac{x_{k} \left(1 - A_{i/k} \right)}{1 - x_{i} A_{i/k} - x_{j} A_{j/k}}$$

$$(4)$$

Таким образом, для нахождения коэффициентов активности компонентов системы Al-X необходимо знать значения регулируемых параметров $A_{i/j}$ и $A_{j/i}$ (где i-Al; j — легирующий элемент X); кроме того, необходимо задать молярные доли x_i и x_j этих веществ. Для расчета тройной системы Al-Si-X, помимо i и j, добавляется компонент k, соответствующий легирующему элементу X.

Парные регулируемые параметры $A_{i/j}$ и $A_{j/i}$ могут быть рассчитаны в приближении бинар-

ных бесконечно разбавленных растворов [21] по формулам:

$$\ln \gamma_i^{x_i \to 0} = -\ln(1 - A_{j/i}) + A_{i/j}; \tag{5}$$

$$\begin{split} & \ln \gamma_i^{x_i \to 0} = - \ln (1 - A_{j/i}) + A_{i/j}; \\ & \ln \gamma_j^{x_j \to 0} = - \ln (1 - A_{i/j}) + A_{j/i}. \end{split} \tag{5}$$

Согласно [22], регулируемый параметр $A_{i/i}$ может быть выражен через $A_{j/i}$ из уравнения (6) следующим образом:

$$A_{i/j} = \exp(1 - A_{j/i} - \ln \gamma_i^{x_i \to 0}).$$
 (7)

Несмотря на то, что значения $\ln \gamma_i^{x_i \to 0}$ и $\ln \gamma_i^{x_j \to 0}$ могут быть получены из экспериментальных данных, с учетом ограниченной доступности последних более предпочтительным для рассматриваемых условий представляется их определение расчетным путем. В работах [19, 23 – 25] уравнение Уилсона в сочетании с расширенной моделью Миедемы [26] использовано для разработки новой методики прогнозирования термодинамической активности компонентов в сложном металлическом расплаве, которая позволяет выполнять непосредственные вычисления регулируемых параметров. В этой связи значения регулируемых параметров при температуре 800 °C для рассматриваемых в настоящей работе легирующих элементов заимствованы из работы [25].

Расчет уравнений (3) и (4) автоматизирован в программном пакете Microsoft Excel, при этом задание системы осуществляется путем изменения значения молярной массы легирующего элемента. К примеру, для двойной системы расчет реализуется при помощи двух таблиц. Первая таблица (рис. 1, а) состоит из вводимых параметров: молярная масса компонента, регулируемые параметры $A_{i/j}$ и $A_{j/i}$. Данная таблица является интерактивной и исходные данные изменяются автоматически в зависимости от выбранной молярной массы за счет функции «ЕСЛИ». Вторая таблица (рис. 1, в) является основной, поскольку именно в ней происходят все вычисления и выводятся их результаты. Данная таблица рассчитывает количество веществ на 100 г сплава с различным процентным соотношением, а также их общее количество, находит молярные доли матрицы и легирующего элемента и вычисляет значение коэффициента активности по уравнению Уилсона. Пример расчетной таблицы для тройной системы Al - Si - Xприведен на рис. $1, \delta$.

Результаты и их обсуждение

На рис. 2 представлены расчетные значения коэффициента активности алюминия при температуре 800 °C в тройной системе Al - Si - X в зависимо-

сти от содержания легирующих элементов. Результаты показывают, что увеличение содержания легирующих элементов (за исключением цинка) сопровождается уменьшением коэффициента активности алюминия. По уменьшению степени влияния на снижение коэффициента активности легирующие элементы можно распределить в следующий ряд: Si > Ti > Ni > Mn > Fe > Cu > Mg. При этом магний в области концентраций до 10 % (по массе) повышает термодинамическую активность алюминия, а при более высоких содержаниях снижает ее.

Модельные прогнозы по опробованной методике могут быть полезны при оценочных расчетах межфазного взаимодействия компонентов литых алюмоматричных композитов, в том числе при прогнозировании химической стабильности экзогенных армирующих компонентов в матричных алюминиевых расплавах при добавлении различных легирующих элементов. В частности, результаты прогнозных расчетов коэффициентов активности могут быть использованы для оценки изменения свободной энергии Гиббса химических реакций между матричным расплавом и армирующими частицами. При этом влияние легирующих элементов на изменение термодинамической активности может быть заложено в качестве одного из критериев на этапе проектирования компонентных составов матричных сплавов. Данный критерий может быть успешно интегрирован в существующую систему синтеза металломатричных композиционных материалов [27], дополняя ранее разработанные термодинамические критерии [28] и позволяя более обоснованно подойти к выбору компонентов легирующего комплекса и концентрационных диапазонов легирования.

Преимущество изложенных расчетных подходов состоит в том, что независимо от наличия экспериментальных данных они могут быть применены к различным металлургическим системам и позволяют прогнозировать термодинамические данные по известным физическим параметрам элементов. Важной особенностью уравнения Уилсона для многокомпонентного раствора является использование параметров, рассчитываемых из данных для бинарных систем, что существенно упрощает решение и сокращает общие объемы требуемых вычислений.

Выводы

Представленные подходы являются универсальными и могут быть использованы для определения термодинамических параметров многокомпонентных систем при разработке новых металлических материалов и технологий их получения, а также при оптимизации производственных процессов с участием жидкой фазы в различных областях, включая металлургические, литейные, сварочные и другие.



а

	Α	В	С	D	E	F	G	Н	I	J	K
1	КОЭФФИЦИЕНТ АКТИВНОСТИ ТРОЙНОЙ СИСТЕМЫ Al-Si- X										
2	Вводимые параметры			Mg	Cu	Mn	Zn	Ti	Fe	Ni	La
3	Молярная масса La	138,9054	Al/X	0,9555	-2,1763	-5,9026	0,0226	-8,7312	-3,1797	-7,0026	-8,5152
4	Регулируемый параметр Al/La	-8,5152	X /Al	-3,7824	-1,3455	-4,4279	0,1608	-8,6617	-2,3570	-5,4411	-14,5021
5	Регулируемый параметр Al/Si	0,9883	Si/X	-1,7964	-2,7409	-9,4600	0,8494	-15,7712	-5,6191	-7,6051	-13,6112
6	Регулируемый параметр La/Al	-14,5021	X /Si	-2,4801	-1,9593	-7,9292	-2,1908	-17,1152	-4,6952	-6,2041	-24,2392
7	Регулируемый параметр La/Si	-24,2392	М	24,3040	63,5460	54,9380	65,3800	47,8670	55,8450	58,6934	138,9054
8	Регулируемый параметр Si/Al	-5,3041	Для автоматического расчета в ячейке В3 нужно выбрать молярную массу необходимого компонента, а также в ячейках С11:C12 задать массовый процент для каждого элемента								
9	Регулируемый параметр Si/La	-13,6112									
10 11 12		Массовый процент	Количество вещества на 100 г	Общее кол- во	Молярная доля	Составляющие уравнения Уилсона				Ln активности	Коэффициент активности
13 14	Al Si	90 5	3,3356 0,1780	3,5496	0,9397 0,0502	0,654227371	0,665004637	0,001850572	0,009963455	-0,022591293	0,977661979
15	La	5	0,0360		0,0101						

б

1	Α	В	С	D	E	F	G	Н	T.	J	K	L
											Натуральный	
	Al	La	Количество вещества Al на 100г сплава	Количество вещества X на 100г сплава	Общее кол-во	Молярная доля Al	Молярная доля X	Уравнение Уилсона			логарифм	Коэффициент
	Al										коэффициента	активности
1											активности	
2	99	1	3,669180735	0,007199144	3,676379879	0,998041784	0,001958216	0,971997518	0,970481812	0,001961653	-0,000445947	0,999554152
3	98	2	3,632118303	0,014398288	3,646516592	0,996051495	0,003948505	0,944317820	0,942105042	0,003962506	-0,001749729	0,998251801
4	97	3	3,595055872	0,021597432	3,616653304	0,994028338	0,005971662	0,916944931	0,914804742	0,006003747	-0,003863558	0,996143896
5	96	4	3,557993440	0,028796577	3,586790017	0,991971491	0,008028509	0,889863688	0,888520798	0,008086609	-0,006743720	0,993278968
6	95	5	3,520931008	0,035995721	3,556926729	0,989880106	0,010119894	0,863059676	0,863197491	0,010212381	-0,010350195	0,989703184
7	94	6	3,483868577	0,043194865	3,527063442	0,987753306	0,012246694	0,836519175	0,838783101	0,012382400	-0,014646326	0,985460410
8	93	7	3,446806145	0,050394009	3,497200154	0,985590184	0,014409816	0,810229103	0,815229556	0,014598064	-0,019598516	0,980592286
9	92	8	3,409743713	0,057593153	3,467336867	0,983389802	0,016610198	0,784176972	0,792492115	0,016860827	-0,025175970	0,975138302
10	91	9	3,372681282	0,064792297	3,437473579	0,981151187	0,018848813	0,758350839	0,770529085	0,019172208	-0,031350454	0,969135876
11	90	10	3,335618850	0,071991442	3,407610292	0,978873335	0,021126665	0,732739273	0,749301564	0,021533791	-0,038096082	0,962620446

в

Рис. 1. Общий вид расчетных таблиц для определения термодинамической активности компонентов в двойной (a) и тройной (b) системах и вывод результатов (b)

Fig. 1. General view of calculation tables for determining the thermodynamic activity of components in a binary (a) and ternary (δ) system and the output of results (a)

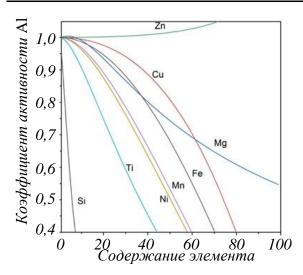


Рис. 2. Влияние легирующих элементов на изменение коэффициента активности алюминия в тройной системе ${\rm Al} - {\rm Si} - X$

Fig. 2. Influence of alloying elements on the change in the aluminum activity coeffi-cient in the ternary Al - Si - X system

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- **1.** Mortensen A., Llorca J. Metal matrix composites // Annual Review of Materials Research. 2010. Vol. 40. No. 1. P. 243–270.
- 2. Rohatgi P.K., Ajay Kumar P., Chelliah N.M., Rajan T.P.D. Solidification processing of cast metal matrix composites over the last 50 years and opportunities for the future // JOM. 2020. Vol. 72. No. 8. P. 2912–2926.
- **3.** Prusov E., Deev V., Rakhuba E. Aluminum matrix in-situ composites reinforced with Mg₂Si and Al₃Ti // Materials Today: Proceedings. 2019. P. 386–391.
- **4.** Samal P., Vundavilli P.R., Meher A., Mahapatra M.M. Recent progress in aluminum metal matrix composites: a review on processing, mechanical and wear properties // Journal of Manufacturing Processes. 2020. Vol. 59. P. 131–152.
- Панфилов А.В., Прусов Е.С. О получении и свойствах комплексно-армированных композиционных материалов с алюминиевой матрицей // Литейное производство. 2008. № 8. С. 1–9.
- **6.** Eustathopoulos N., Voytovych R. The role of reactivity in wetting by liquid metals: A review // Journal of Materials Science. 2016. Vol. 51. P. 425–437.
- 7. Malaki M., Fadaei Tehrani A., Niroumand B., Gupta M. Wettability in metal matrix composites // Metals. 2021. Vol. 11. No. 7. Article 1034.
- **8.** Prusov E.S., Deev V.B., Shurkin P.K., Arakelian S.M. The effect of alloying elements on the interaction of boron carbide with aluminum melt // Non-Ferrous Metals. 2021. Vol. 50. No. 1. P. 27–33.

- 9. Прусов Е.С., Панфилов А.В., Панфилов А.А. Термодинамический анализ и модель взаимодействия компонентов при синтезе композиционных материалов на основе систем Al—TiO₂—B—SiC и Al—TiO₂—C—SiC // Литейщик России. 2009. № 9. С. 30—33.
- **10.** Chatain S., Gonella C., Bordier G., Le Ny J. Thermodynamic activity measurements of the liquid Cu-Gd alloy by high temperature mass spectrometry // Journal of Alloys and Compounds. 1995. Vol. 228. No. 1. P. 112–118.
- **11.** Zhang N., Chen W., Chen X., Ding X., Zhou G. Modeling activity and interaction coefficients of components of multicomponent alloy melts: an example of iron melt // High Temperature Materials and Processes. 2013. Vol. 32. No. 3. P. 215–221.
- **12.** Li H., Zhang S., Chen Y., Cheng M., Song H., Liu J. Estimation of thermodynamic properties of Cu–La binary alloy with modified miedema's theory // Russian Journal of Physical Chemistry A. 2016. Vol. 90. No. 1. P. 11–17.
- **13.** Ding X., Fan P., Han Q. Models of activity and activity interaction parameter in ternary metallic melt // Acta Metallurgica Sinica. 1994. Vol. 30. P. 49–60.
- **14.** Fan P., Chou K.C. A self-consistent model for predicting interaction parameters in multicomponent alloys // Metallurgical and Materials Transactions A. 1999. Vol. 30. P. 3099–3102.
- **15.** Wang F.M., Li X.P., Han Q.Y., Zhang N.X. A model for calculating interaction coefficients between elements in liquid and iron-base alloy // Metallurgical and Materials Transactions B. 1997. Vol. 28. P. 109–113.
- **16.** Viala J.C., Fortier P., Bouix J. Stable and metastable phase equilibria in the chemical interaction between aluminium and silicon carbide // Journal of Materials Science. 1990. Vol. 25. P. 1842–1850.
- **17.** Carotenuto G., Gallo A., Nicolais L. Degradation of SiC particles in aluminium-based composites // Journal of Materials Science. 1994. Vol. 29. P. 4967–4974.
- **18.** Pech-Canul M.I., Katz R.N., Makhlouf M.M. Optimum parameters for wetting silicon carbide by aluminum alloys // Metallurgical and Materials Transactions A. 2000. Vol. 31. P. 565–573.
- 19. Fan T.X., Yang G., Zhang D. Prediction of chemical stability in SiCp/Al composites with alloying element addition using Wilson equation and an extended Miedema model // Materials Science and Engineering A. 2005. Vol. 394. P. 327–338.
- **20.** Wilson G.M. Vapor-Liquid Equilibrium. XI. A New expression for the excess free energy of mixing // Journal of the American Chemical Society. 1964. Vol. 86. No. 2. P. 127–130.

- **21.** Tao D.P. Prediction of the thermodynamic properties of multicomponent liquid alloys by binary infinite dilute activity coefficients // Metallurgical and Materials Transactions B. 2001. Vol. 32. P. 1205–1211.
- **22.** Tao D.P., Yang X.W. Prediction on thermodynamic properties of ternary molten salts from Wilson equation // Metallurgical and Materials Transactions B. 1997. Vol. 28. P. 725–727.
- **23.** Fan T.X., Yang G., Zhang D. Thermodynamic effect of alloying addition on in-situ reinforced TiB₂/Al composites // Metallurgical and Materials Transactions A. 2005. Vol. 36. P. 225–234.
- **24.** Fan T.X., Yang G.J., Chen J.Q., Zhang D. Model prediction of thermodynamics activity in multicomponent liquid alloy // Key Engineering Materials. 2006. Vol. 313. P. 19–24.
- **25.** Fang X., Fan T., Zhang D. Work of Adhesion in Al/SiC composites with alloying element addition // Metallurgical and Materials Transactions A. 2013. Vol. 44. No. 11. P. 5192–5201.
- **26.** Miedema A.R., de Chatel P.F., de Boer F.R. Cohesion in alloys Fundamental of a semi-empirical model // Physica B+C. 1980. Vol. 100. No. 1. P. 1–28.
- 27. Prusov E., Kechin V. General Concept of Cast Metal Matrix Composites Design. In: World Foundry Congress "Creative Foundry", WFC 2018 – Proceedings. Krakow, 2018. P. 199–200.
- **28.** Prusov E., Kechin V., Deev V. Selection of reinforcing phases for aluminum matrix composites using thermodynamic stability criterion. In: METAL 2020 29th International conference on metallurgy and materials. Conference proceedings. Brno, 2020. P. 1067–1072.

REFERENCES

- **1.** Mortensen A., Llorca J. Metal Matrix Composites. *Annual Review of Materials Research*. 2010, vol. 40, no. 1, pp. 243–270.
- 2. Rohatgi P.K., Ajay Kumar P., Chelliah N.M., Rajan T.P.D. Solidification Processing of Cast Metal Matrix Composites Over the Last 50 Years and Opportunities for the Future. JOM. 2020, vol. 72, no. 8, pp. 2912–2926.
- **3.** Prusov E., Deev V., Rakhuba E. Aluminum matrix in-situ composites reinforced with Mg₂Si and Al₃Ti. *Materials Today: Proceedings*. 2019, pp. 386–391.
- **4.** Samal P., Vundavilli P.R., Meher A., Mahapatra M.M. Recent Progress in Aluminum Metal Matrix Composites: A Review on Processing, Mechanical and Wear Properties. *Journal of Manufacturing Processes.* 2020, vol. 59, pp. 131–152.
- **5.** Panfilov A.V., Prusov E.S. On the preparation and properties of complex-reinforced composite

- materials with an aluminum matrix. *Litejnoe proizvodstvo*. 2008, no. 8, pp. 1–9. (In Russ.).
- **6.** Eustathopoulos N., Voytovych R. The role of reactivity in wetting by liquid metals: A review. *Journal of Materials Science*. 2016, vol. 51, pp. 425–437.
- **7.** Malaki M., Fadaei Tehrani A., Niroumand B., Gupta M. Wettability in metal matrix composites. *Metals*. 2021, vol. 11, no. 7, article 1034.
- **8.** Prusov E.S., Deev V.B., Shurkin P.K., Arakelian S.M. The effect of alloying elements on the interaction of boron carbide with aluminum melt. *Non-Ferrous Metals*. 2021, vol. 50, no. 1, pp. 27–33.
- **9.** Prusov E.S., Panfilov A.V., Panfilov A.A. Thermodynamic analysis and the model of interaction of components in the synthesis of composite materials based on Al-TiO₂-B-SiC and Al-TiO₂-C-SiC systems. *Liteishchik Rossii*. 2009, no. 9, pp. 30–33. (In Russ.).
- **10.** Chatain S., Gonella C., Bordier G., Le Ny J. Thermodynamic activity measurements of the liquid Cu-Gd alloy by high temperature mass spectrometry. *Journal of Alloys and Compounds*. 1995, vol. 228, no. 1, pp. 112–118.
- **11.** Zhang N., Chen W., Chen X., Ding X., Zhou G. Modeling activity and interaction coefficients of components of multicomponent alloy melts: an example of iron melt. *High Temperature Materials and Processes*. 2013, vol. 32, no. 3, pp. 215–221.
- **12.** Li H., Zhang S., Chen Y., Cheng M., Song H., Liu J. Estimation of thermodynamic properties of Cu–La binary alloy with modified miedema's theory. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 2016, vol. 90, no. 1, pp. 11–17.
- **13.** Ding X., Fan P., Han Q. Models of activity and activity interaction parameter in ternary metallic melt. *Acta Metallurgica Sinica*. 1994, vol. 30, pp. 49–60.
- **14.** Fan P., Chou K.C. A self-consistent model for predicting interaction parameters in multicomponent alloys. *Metallurgical and Materials Transactions A.* 1999, vol. 30, pp. 3099–3102.
- **15.** Wang F.M., Li X.P., Han Q.Y., Zhang N.X. A model for calculating interaction coefficients between elements in liquid and iron-base alloy. *Metallurgical and Materials Transactions B.* 1997, vol. 28, pp. 109–113.
- **16.** Viala J.C., Fortier P., Bouix J. Stable and metastable phase equilibria in the chemical interaction between aluminium and silicon carbide. *Journal of Materials Science*. 1990, vol. 25, pp. 1842–1850.
- **17.** Carotenuto G., Gallo A., Nicolais L. Degradation of SiC particles in aluminium-based composites. *Journal of Materials Science*. 1994, vol. 29, pp. 4967–4974.

- **18.** Pech-Canul M.I., Katz R.N., Makhlouf M.M. Optimum parameters for wetting silicon carbide by aluminum alloys. *Metallurgical and Materials Transactions A.* 2000, vol. 31, pp. 565–573.
- **19.** Fan T.X., Yang G., Zhang D. Prediction of chemical stability in SiCp/Al composites with alloying element addition using Wilson equation and an extended Miedema model. *Materials Science and Engineering A.* 2005, vol. 394, pp. 327–338.
- **20.** Wilson G. M. Vapor-Liquid Equilibrium. XI. a new expression for the excess free energy of mixing. *Journal of the American Chemical Society*. 1964, vol. 86, no. 2, pp. 127–130.
- **21.** Tao D.P. Prediction of the thermodynamic properties of multicomponent liquid alloys by binary infinite dilute activity coefficients. *Metallurgical and Materials Transactions B.* 2001, vol. 32, pp. 1205–1211.
- **22.** Tao D.P., Yang X.W. Prediction on thermodynamic properties of ternary molten salts from Wilson equation. *Metallurgical and Materials Transactions B.* 1997, vol. 28, pp. 725–727.
- **23.** Fan T.X., Yang G., Zhang D. Thermodynamic effect of alloying addition on in-situ reinforced TiB₂/Al composites. *Metallurgical and Materials Transactions A.* 2005, vol. 36, pp. 225–234.
- **24.** Fan T. X., Yang G. J., Chen J. Q., Zhang D. Model prediction of thermodynamics activity in multicomponent liquid alloy. *Key Engineering Materials*. 2006, vol. 313, pp. 19–24.
- **25.** Fang X., Fan T., Zhang D. Work of adhesion in Al/SiC composites with alloying element addition. *Metallurgical and Materials Transactions A.* 2013, vol. 44, no. 11, pp. 5192–5201.
- **26.** Miedema A.R., de Chatel P.F., de Boer F.R. Cohesion in alloys fundamental of a semi-empirical model. *Physica B+C*. 1980, vol. 100, no. 1, pp. 1–28.
- 27. Prusov E., Kechin V. General Concept of Cast Metal Matrix Composites Design. In: World Foundry Congress "Creative Foundry", WFC 2018 – Proceedings. Krakow, 2018, pp. 199–200.
- **28.** Prusov E., Kechin V., Deev V. Selection of reinforcing phases for aluminum matrix composites using thermodynamic stability criterion. In: METAL 2020 29th International Conference on Metallurgy and Materials. Conference Proceedings. Brno, 2020, pp. 1067–1072.

Сведения об авторах

Евгений Сергеевич Прусов, к.т.н., доцент, доцент кафедры «Технологии функциональных и конструкционных материалов», Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых

E-mail: eprusov@mail.ru *ORCID:* 0000-0003-4189-877X

Иван Владимирович Шабалдин, студент, техник Управления проектными командами, Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых

E-mail: shabaldinivan@mail.ru *ORCID*: 0000-0002-1958-6852

Владислав Борисович Деев, д.т.н., профессор, главный научный сотрудник лаборатории «Ультрамелкозернистые металлические материалы», Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

E-mail: deev.vb@mail.ru *ORCID*: 0000-0002-8349-8072

Information about the authors

Evgeny S. Prusov, Cand. Sci. (Tech.), Assoc. Prof., Associate Professor of the Department of Functional and Constructional Materials Technology, Vladimir State University named after Alexander and Nikolay Stoletovs E-mail: eprusov@mail.ru

ORCID: 0000-0002-1958-6852

Ivan V. Shabaldin, *Student*, *Technician of the Project Team Direction*, Vladimir State University named after Alexander and Nikolay Stoletovs

E-mail: shabaldinivan@mail.ru **ORCID**: 0000-0002-1958-6852

Vladislav B. Deev, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Chief Researcher of the Laboratory "Ultrafine-grained Metallic Materials", National Research Technological University "MISiS"

E-mail: deev.vb@mail.ru *ORCID:* 0000-0002-8349-8072

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

The authors declare that there is no conflict of interest.

Поступила в редакцию 02.09.2022 После доработки 07.09.022 Принята к публикации 15.09.2022

> Received 02.09.2022 Revised 07.09.022 Accepted 15.09.2022