

## ВЗАИМНОЕ ВЛИЯНИЕ РАСТВОРИМОСТЕЙ ПРИМЕСЕЙ ВНЕДРЕНИЯ В СПЛАВАХ СО СТРУКТУРОЙ ТИПА БОРИДА ЖЕЛЕЗА

Матысина З.А., \*Загинайченко С.Ю., \*Щур Д.В., Чуприна А.Л.

Днепропетровский государственный университет, Украина

\* Институт проблем материаловедения НАН Украины, Киев, Украина

Легирование металлов и сплавов различными примесями внедрения позволяет значительно регулировать их свойства за счет этих добавок внедрения. По данным экспериментальных работ зависимость растворимости водорода от концентрации кремния, бора и углерода в Ni, Pd и Fe проявляется по-разному, т.е. одна из примесей внедрения может как препятствовать растворимости другой, так и способствовать.

В настоящей работе выполнено теоретическое исследование растворимости водорода, углерода и других элементов в сплавах внедрения типа  $(RD)_2GS$  со структурой типа боридов железа  $Fe_2B$ . В рассматриваемых фазах атомами металлов R, D могут быть атомы Fe, Co, Ni, Cr, Mn, Mo, Au, Al, Ti, Ta, W, Zr и др., атомами неметаллов G, S - атомы H, C, B, P, Ge, Si, Sn и др. Используются модели структуры боридов железа по Шуберту и Юм-Розери. Свободная энергия сплава внедрения рассчитана без учета корреляции в распределении атомов методом конфигураций, учитывающим всевозможные конфигурации атомов металлов R, D вокруг атомов G, S. Не учитываются атомный порядок в распределении атомов R, D по узлам и G, S по междоузлиям. Учитываются взаимодействия ближайших пар атомов G, S между собой и с атомами металлов R, D. Получены формулы, определяющие растворимость водорода, углерода в сплаве в зависимости от температуры, концентраций компонентов R, D и энергетических констант, а также определяющие взаимное влияние растворимостей водорода и углерода в сплаве. Формулы допускают экстремальность температурной зависимости растворимости этих элементов.

Установлено, что примеси внедрения способствуют растворению друг друга в сплаве при взаимодействии их атомов типа притяжения, и наоборот, эти примеси препятствуют растворимости друг другу в случае действия сил отталкивания между их атомами. При исследовании растворимости бора и углерода в бориде железа получены зависимости, соответствующие экспериментальным данным, согласно которым наличие бора в сплаве уменьшает растворимость углерода.

Полученные теоретические формулы по взаимному влиянию растворимости одной примеси внедрения на другую согласуются с экспериментальными данными по влиянию на растворимость водорода таких элементов, как кремний, бор, углерод.

Литература

1. Isayev KB, Schur DV, Study of thermophysical properties of a metal-hydrogen system, International journal of hydrogen energy, 21, 11, 1129-1132, 1996, Pergamon
2. Matysina ZA, Zaginaichenko SYu, Schur DV, Hydrogen solubility in alloys under pressure, International journal of hydrogen energy, 21, 11, 1085-1089, 1996, Pergamon

3. Schur DV, Lavrenko VA, Adejev VM, Kirjakova IE, Studies of the hydride formation mechanism in metals, International journal of hydrogen energy, 19, 3, 265-268, 1994, Elsevier
4. Schur DV, Lyashenko AA, Adejev VM, Voitovich VB, Zaginaichenko S Yu, Niobium as a construction material for a hydrogen energy system, International journal of hydrogen energy, 20, 5, 405-407, 1995, Elsevier
5. Matysina ZA, Pogorelova OS, Zaginaichenko SYu, Schur DV, The surface energy of crystalline CuZn and FeAl alloys, Journal of Physics and Chemistry of Solids, 56, 1, 9-14, 1995, Elsevier