

АТОМНАЯ ЭНЕРГЕТИКА

ATOMIC ENERGY

ТЕРМО- И РАДИАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВАХ ВНЕДРЕНИЯ

> THERMO- AND RADIATION-STIMULATED PHASE TRANSFORMATION IN ALLOYS INCORPORATED

Статья поступила в редакцию 31.03.15. Ред. рег. № 2214

The article has entered in publishing office 31.03.15. Ed. reg. No. 2214

УДК 539.27

КОРРЕЛЯЦИЯ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ С КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТЬЮ ПАРАМЕТРОВ РЕШЕТКИ ТВЕРДОГО РАСТВОРА ВНЕДРЕНИЯ TiN_xH_y



Международный издательский дом научной периодики "Спейс

И. Хидиров, В.В. Гетманский, С.Дж. Рахманов, И.А. Эргашев*

Институт ядерной физики АН Республики Узбекистан Узбекистан 100214, Ташкент, ул. Бобура, 14Б-57 тел.: 8-10-998712-289-34-64; e-mail: khidirov@inp.uz * Каршинский Государственний университет Узбекистан 731100, г. Карши, ул. Кучабог, 17 тел.: +99-891-215-59-82

doi: 10.15518/isjaee.2015.07.005

Заключение совета рецензентов: 09.04.15 Заключение совета экспертов: 16.04.15 Принято к публикации: 23.04.15

В работе изучена концентрационная зависимость параметров решетки твердого раствора внедрения $TiN_xH_{0.20}$ (x = 0.12 – 0.50). Установлена нелинейная концентрационная зависимость параметров базисной гексагональной решетки в исследованной области концентрации азота: она претерпевает перегиб в двух местах и состоит из трех частей, что свидетельствует об изменении характера межатомной силы взаимодействия атомов. Обнаружена корреляция между концентрационной зависимостью параметров решетки твердого раствора внедрения и фазовыми превращениями, протекающими при низкотемпературном отжиге.

Ключевые слова: параметр решетки, твердый раствор внедрения TiN_xH_{0.20}, концентрационная зависимость фазовых превращений, корреляция.

PHASE TRANSFORMATION CORRELATION WITH THE CONCENTRATION DEPENDENCE OF THE LATTICE PARAMETERS OF TiNxHy SOLID SOLUTION

I. Khidirov, V.V. Getmanskiy, S.J. Rakhmanov, I.A. Ergaschev*

Institute of Nuclear Physics Uzbekistan Academy of Sciences 14Б-57 Bobur Str., Tashkent, 100214 Uzbekistan Republic ph.: 8-10-998712-289-34-64; e-mail: khidirov@inp.uz *Karshi State University 17 Kuchabog Str., Karshi, 731100 Uzbekistan Republic ph.: +99-891-215-59-82





The paper studies the concentration dependence of the lattice parameters of the $TiN_xH_{0.20}$ interstitial solid solution (x = 0.12 - 0.50) and establishes the nonlinear concentration dependence of the parameters of basic hexagonal lattice in the investigated area of nitrogen concentrations. This one bends in two places and consists of three parts that testifies to change of the character of interatomic interaction force. The paper detects the correlation between the concentration dependence of the lattice parameters of the solid solution and phase transformations taking place in low-temperature annealing.

Keywords: lattice parameter, TiN_xH_{0.20} interstitial solid solution, concentration dependence, phase transformation, correlation.

Хидиров И. Khidirov I.

Сведения об авторе: д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий лабораторией структурных превращений в твердых телах Института ядерной физики АН РУ, Институт ядерной физики АН

Образование: Ташкентский государственный педагогический университет им. Низами (1969).

Область научных интересов: водородное материаловедение и водородная энергетика, аккумулирование водорода в кристаллах, структурные фазовые превращения в сплавах внедрения (в карбидах, нитридах и гидридах металлов).

Публикации: более 200 статьей, 3 монографии, 4 патента.

Information about the author: DSc (physics and mathematics) (1998), professor (2007), Head of the laboratory of the Structural Transformations in Solids States of the Institute of Nuclear Physics of Uzbekistan Academy of Sciences, Institute of Nuclear Physics of Uzbekistan AS.

Education: Tashkent State Pedagogical University (1969).

Research area: hydrogen materials science and hydrogen energy, storage of hydrogen in crystals, structural phase transitions in interstitial alloys (carbides, nitrides, hydrides of metals).

Publications: more than 200 articles, 3 monograph, 4 patents.



Гетманский В.В. Getmanskiy V.V.

Сведения об авторе: старший научный сотрудник Института ядерной физики АН РУз.

Ташкентский Образование: электротехнический институт связи (1982).

Область научных интересов: водородное материаловедение и водородная энергетика, аккумулирование водорода в кристаллах, автоматизация экспериментов.

Публикации: более 30 статей.

Information about the author: Senior Researcher, Institute of Nuclear Physics of Uzbekistan AS.

Tashkent Electrotechnical **Education:** Institute of Communications (1982).

Research area: hydrogen materials science and hydrogen energy, storage of crystals, hydrogen automation experiments.

Международный издательский дом научной периодики "Спейс'

Publications: more than 30 articles.

Введение

Высокая температура плавления, малый удельный вес, высокая прочность, коррозионная стойкость во многих агрессивных средах и морской воде сделали титан почти универсальным и необходимым материалом для многих конструкций в различных отраслях техники [1]. Титан и сплавы на его основе и в настоящее время не потеряли свое практическое значение.

Как известно, водород – одна из самых вредных примесей в титане, которую трудно устранить, и не может служить легирующим для него элементом, поэтому устранение вредного влияния водорода на свойства титана имеет большое значение. Одним из таких методов является вакуумный отжиг титана и его сплавов. В некоторых случаях влияние водорода нейтрализуют, связывая его в фазы более стабильные, чем простые гидриды титана: нитридогидриды

и карбогидриды и др. Они отличаются более высокой стабильностью, чем двойные гидриды титана [1]. В связи с этим представляет интерес исследование структурных характеристик и свойств этих сплавов.

Анализ данных литературы [2–5] показывает, что в твердом растворе внедрения TiN_xH_v при различных концентрациях азота и фиксированной концентрации водорода наблюдается ряд фазовых превращений при понижении температуры ($T < 1~000~^{\circ}$ C), что может свидетельствовать об изменении межатомных сил взаимодействия в зависимости от концентрации азота. Если это так, то данное изменение должно сказываться на характере концентрационной зависимости параметров решетки. Цель настоящей работы установить концентрационную зависимость параметров решетки твердого раствора внедрения TiN_xH_v и корреляцию между ней и фазовыми превращениями в области гомогенности твердого раствора внедрения.





Экспериментальная часть

Для этой цели были определены параметры решетки образцов твердого раствора внедрения $\mathrm{TiN_xH_y}$ с концентрацией атомов азота $0.12 \le x \le 0.50$. Концентрации атомов водорода в образцах имели близкие значения в пределах ошибки их определения методом химического анализа (около 5 %) и в среднем составляли $y \approx 0.20$. Синтез осуществляли методом самораспространяющегося высокотемператур-

ного синтеза [6] из порошков Ті марки ПТМ, содержащего 0,35 мас. % водорода в атмосфере азота. Концентрации атомов неметаллов в сплавах определили методом химического анализа. Согласно результатам рентгенофазового анализа, образцы относятся к гексагональной сингонии (α -фаза, пространственная группа – п. г. P6₃/mmc), являются однофазными и однородными по составу. На рис. 1 представлена рентгенограмма твердого раствора внедрения $TiC_{0.40}H_{0.20}$.

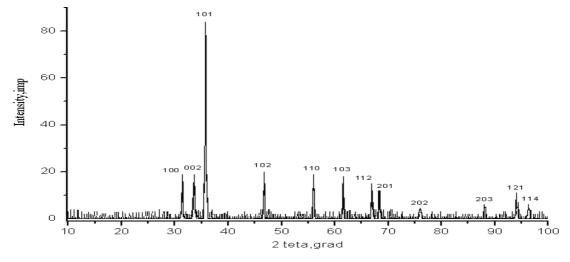


Рис. 1. Рентгенограмма твердого раствора внедрения $TiN_{0,40}H_{0,20}$ **Fig. 1.** X-ray photograph of the $TiN_{0,40}H_{0,20}$ interstitial solid solution

На рис. 2 представлена концентрационная зависимость параметров решетки образцов [6]. Как видно, она имеет нелинейный характер. Для всех составов отношение параметров решетки c/a в пределах ошибки определения остается постоянным: $c/a \approx 1,61$. По-видимому, это можно объяснить тем, что атомы азота и водорода в решетке α -Ті создают упругое изотропное напряжение по всем направлениям, как в решеточном газе. Нелинейную концентрационную зависимость параметров решетки можно объяснить изменением характера межатомных сил взаимодействия в области гомогененности твердого раствора. Как видно на рис. 2, концентрационная зависимость параметров решетки претерпевает перегиб в двух местах и состоит из трех частей.

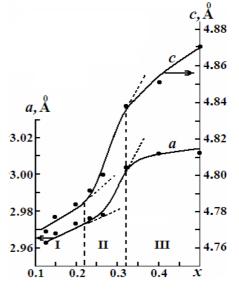


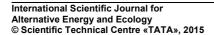
Рис. 2. Зависимость параметров решетки а и с твердого раствора TiN_xH_y от концентрации азота. Вертикальные штрихи показывают концентрационные границы изменения а и с. Касательные штрихи показывают изменение хода концентрационной зависимости а и с

Fig. 2. The dependence of the lattice *a* and *c* parameters of TiN_xH_y interstitial solid solution from nitrogen concentration. Vertical dotted lines show the concentration boundaries of *a* and *c* parameters change. Tangents dotted lines show the variation of the concentration dependence of *a* and *c*





Международный издательский дом научной периодики "Спейс





напряжения при понижении температуры. Судя по концентрационной зависимости параметров решетки и фазовым превращениям, происходящим при понижении температуры, можно предположить, что в области концентрации азота 0,12 ≥ N/Ti < 0,23 в ближайших координационных сферах преобладают силы взаимодействия между одноименными атомами. Это обуславливает ближний порядок с положительным параметром. Следовательно, в этом интервале концентрации азота наблюдается тенденция к распаду. Однако процесс распада сильно замедлен из-за низкой температуры распада, поэтому при этих концентрациях процесс распада не наступает даже после длительного низкотемпературного отжига [5].

Часть I (в интервале $0.12 \le x < 0.23$) соответствует

образованию ближнего порядка с положительным

параметром в первой координационной сфере

 $(q_1 = 0.098 > 0)$, который был определен в [2]. Часть

II (интервал $0.23 \le x < 0.26$) соответствует следую-

щим фазовым превращениям: беспорядок (а-фаза)

 $\stackrel{stan}{\longleftrightarrow}$ α -фаза с ближним порядком ($q_1 <$

 \leftarrow *870K \rightarrow распад (α' -фаза + γ -фаза), которые наблю-

дались в [3]. В этой части параметр ближнего по-

рядка в первой координационной сфере имеет отри-

цательное значение ($q_1 = -0.061$ [2]). Часть III (в интервале $0.26 < x \le 0.50$) соответствует фазовому пе-

реходу: порядок (α' -фаза) $\leftarrow {}^{\approx 1070-970\,K}$ \rightarrow порядок (γ -

фаза), который был обнаружен в [3]. Интересно от-

метить, что даже изменение типа ближнего порядка

для ТіN_xH_y [2] коррелирует с концентрационной за-

висимостью параметров решетки а и с, в которой

наблюдается перегиб примерно с концентрации

зависимость параметров решетки переходит из части

I в части II и III с различной крутизной наклона от-

носительно оси абсциссы. В части II атомы металло-

идов в образовании сплава при понижении темпера-

туры участвуют не как статистически расположен-

ные атомы внедрения в междоузлиях кристалличе-

ской решетки (п.г. Р6₃/mmc) α-Ті (α-фаза), а как пол-

ноценные составляющие компонентов сплава. При

этом они, занимая свои конкретные позиции, приво-

дят к другой фазе, а именно, упорядоченной а'-фазе

(п. г. Р3 m1), отличной от кристаллической решетки

α-Ті. В части III образующаяся моноклинная γ-фаза при дальнейшем понижении температуры описыва-

ется в п. г. C2/m. Пространственные группы P3 m1 и

С2/т фазы генетически связаны с кристаллической

решеткой α-Ті (с α-фазой). Если α'-фаза формиру-

ется как результат упорядочения атомов внедрения в

междоузлиях ГПУ решетки α-Ті, то γ-фаза образу-

ется в результате деформации кристаллической ре-

шетки упорядоченной α'-фазы из-за термоупругого

(рис. 2). Линейная концентрационная

порядок

(α'-фаза)

 $0) \leftarrow {}^{\approx 1020\,K} \rightarrow$ дальний

 $TiN_{0.23}H_{0.20}$

В области концентрации $0.23 \le N/Ti \le 0.26$ силы взаимодействия между разноименными атомами в

достаточной степени преобладают над силами одноименных атомов на дальних расстояниях. Это служит причиной появления дальнего порядка в расположении атомов неметаллов на основе первичной гексагональной решетки. Но длительный отжиг приводит к большой неоднородности концентрации атомов неметаллов из-за их упорядоченного расположения в сильно нестехиометрическом сплаве, что обусловливает распад упорядоченного твердого раствора внедрения на две упорядоченные фазы [3].

В области концентрации $0.26 < N/Ti \le 0.50$ при упорядочении неметаллов распад не происходит изза достаточной концентрации неметаллов для сохранения устойчивости упорядоченной структуры. Однако при увеличении степени дальнего порядка в расположении неметаллов происходит деформация решетки, которая в свою очередь определяет переход порядок-порядок, а именно из гексагональной упорядоченной α -фазы (п.г. P.3m1) в моноклинную упорядоченную γ -фазу (п. г. C2/m).



Международный издательский дом научной периодики "Спейс

Выводы

Обнаружена нелинейная концентрационная зависимость параметров решетки твердого раствора ${\rm TiN_xH_{0,20}}$, коррелирующая с изменением типа ближнего порядка и фазовыми превращениями в области гомогенности при понижении температуры. Установленная закономерность свидетельствует об изменении характера межатомных сил взаимодействия в области гомогенности твердого раствора ${\rm TiN_xH_{0,20}}$.

Список литературы

- 1. Корнилов И.И. Титан. М.: Наука, 1975. 309 с.
- 2. Хватинская Д.Я., Курбонов И.И., Хидиров И. и др. Ближний порядок в системе Ti-N-H // Узб. физ. ж. 1992. № 6. С. 54–56.
- 3. Хидиров И. Процессы упорядочения и распада в твердом растворе азота и водорода в α Ti // Ж. неорг. химии. 2001. Т. 46, № 3. С. 432–438.
- 4. Khidirov I. Neutron diffraction study of isotopic effect in arrangement of hydrogen atoms in solid solutions in of the Ti-N-H, Ti-N-D AND Ti-N-H-D systems. Chapter 2. P. 13–36. In the book "Neutron Diffraction: Instruments, methodologies and applications". Ed. Xinzhe Jin. New York: Nova Science Publishers. USA, 2013. 86 p. Web site: www.novapublishers.com.
- 5. Хидиров И., Каримов И.А., Эм В.Т. и др. Нейтронографическое исследование фазового перехода типа порядок-беспорядок в нитридогидридах титана // Неорг. материалы. 1981. Т. 17, № 8. С. 1416–1420.
- 6. Амосов А.П., Боровинская И.П., Мержанов А.Г. Порошковая технология СВС синтеза материалов. М.: Машиностроение -1, 2007. 471 с.
- 7. Хидиров И. Нейтронографическое исследование систем Ti-C, Ti-N, Ti-C-H и Ti-N-H. Saarbrucken: LAMBERT-Academic Publisher, Германия. 2014. 184 с.



r scientific periodicals "Space" 🕏

References

- 1. Kornilov I.I. Titan. Moscow: Nauka Publ., 1975. 309 p.
- 2. Hvatinskaya D.Ya., Kurbonov I.I., Hidirov I. et al. Bližnij porâdok v sisteme Ti-N-H. *Uzb. fiz. ž.*, 1992, no. 6, pp. 54–56.
- 3. Hidirov I. Processy uporâdočeniâ i raspada v tverdom rastvore azota i vodoroda v α -Ti. \check{Z} . *neorg. himii*, 2001, vol. 46, no. 3, pp. 432–438.
- 4. Khidirov I. Neutron diffraction study of isotopic effect in arrangement of hydrogen atoms in solid solutions in solid solutions of the Ti-N-H, Ti-N-D AND Ti-N-H-D systems; chapter 2, pp. 13–36. In the book
- "Neutron Diffraction: Instruments, methodologies and applications". Ed. Xinzhe Jin. New York: Nova Science Publishers. USA, 2013, 86 p. Web site: www.novapublishers.com.
- 5. Hidirov I., Karimov I.A., Èm V.T. et al. Nejtronografičeskoe issledovanie fazovogo perehoda tipa porâdok-besporâdok v nitridogidridah titana. *Neorg. Materialy*, 1981, vol. 17, no. 8, pp. 1416–1420.
- 6. Amosov A.P., Borovinskaya I.P., Merzhanov A.G. Poroškovaâ tehnologiâ SVS sinteza materialov. Moscow: Mašinostroenie -1 Publ., 2007, 471 p.
- 7. Hidirov I. Nejtronografičeskoe issledovanie sistem Ti-C, Ti-N, Ti-C-H i Ti-N-H. Saarbrucken: LAMBERT-Academic Publisher, Germany, 2014, 184 p.

Транслитерация по ISO 9:1995





19-22 мая 2015

9-я международная научно-техническая конференция «Обеспечение безопасности АЭС с ВВЭР»

В конференции принимают активное участие российские и зарубежные специалисты из конструкторских, проектных организаций, машиностроительных заводов, научно-исследовательских институтов, атомных электростанций.

Цель предстоящей конференции: предоставить специалистам возможность обмена опытом, достижениями и информацией в вопросах, связанных с безопасностью эксплуатации АЭС с ВВЭР, расчетно-теоретическими и экспериментальными работами, направленными на повышение безопасности, модернизацию и продление эксплуатационного срока службы АЭС с ВВЭР.

Место проведения конференции: ОКБ «ГИДРОПРЕСС», город Подольск, Московская область.

Тематика конференции: доклады, представляемые на конференцию, должны быть посвящены решению вопросов обеспечения работоспособности и безопасности АЭС с реакторными установками с ВВЭР в процессе проектирования, проведения НИОКР, эксплуатации и снятия с эксплуатации.

Планируется, что участники представят свои доклады в шести секциях:

- Секция 1: Разработка и верификация расчетных кодов для обоснования безопасности
- **Секция 2**: Вопросы обоснования проектно-технических решений и экспериментальной поддержки при проектировании и вводе в эксплуатацию АЭС
- Секция 3: Топливо и его использование; физика активной зоны
- Секция 4: Проблемы эксплуатации, контроль и управление, диагностика, модернизация и продление ресурса действующих АЭС
- Секция 5: Материаловедение, прочность и водно-химический режим
- Секция 6: Инновационные реакторы четвертого поколения, охлаждаемые водой сверхкритического давления.
- Оргкомитет конференции приглашает заинтересованные организации принять участие в данном мероприятии.

Официальный сайт:

www.gidropress.podolsk.ru/ru/presscenter/news.php?news cid=61&news id=441

www.atomic-energy.ru/GIDROPRESS-VVER-2015

