ОПРЕДЕЛЕНИЕ СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОГО СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ В СПЛАВЕ $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ МЕТОДОМ ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ

И. Хидиров*, С.ДЖ. Рахманов, А.С. Парпиев, Ш.А. Махмудов, В.В. Гетманский

Институт ядерной физики АН РУз, Улугбек, 100214, Ташкент, Узбекистан

(Получена 06.07.2020)

* Corresponding author: e-mail khidirov@inp.uz. Phone: +00 999 999 999

В работе определено среднеквадратичное смещение атомов в новом кубическом тугоплавком сплаве $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ методами наименьших квадратов и полнопрофильного анализа по данным дифракции нейтронов. Данный сплав получен методом порошковой металлургии спеканием мелких порошков кубических карбидов титана TiC и молибдена MoC. Среднеквадратичные смещения атомов в сплаве определены двумя способами по данным дифракции нейтронов (методом наименьших квадратов и методом полнопрофильного анализа дифрактограмм) и оказались идентичными. Их значения оказались значительно больше, чем в стехиометрических сплавах TiC и TiN, имеющих аналогичную кубическую структуру и близкие геометрические параметры атомов со сплавом $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$. Такая же тенденция наблюдается и для сплавов $TiC_{0.50}N_{0.50}$ и $TiC_{0.30}N_{0.70}$ относительно тех же бинарных сплавов. Обнаруженное различие в значениях среднеквадратичного смещения атомов объяснено возникновением больших статических искажений в решетке сплава $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ из-за различия в конфигурациях внешних валентных электронов Ti ($3d^24s^2$) и Mo ($4d^55s^1$), а в сплавах $TiC_{0.50}N_{0.50}$ и $TiC_{0.30}N_{0.70}$ из-за различия в конфигурациях внешних валентных электронов атомов C ($2s^22p^2$) и N ($2s^22p^3$).

Ключевые слова: карбид титана TiC и молибдена MoC, сплав $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$, кристаллическая структура, полное среднеквадратичное смещение атома, динамическое и статическое искажение решетки, дифракция нейтронов, метод наименьших квадратов, полнопрофильный анализ дифрактограмм, внешние валентные электроны.

The root-mean-square displacement of atoms in the new cubic refractory alloy $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ has been determined by the methods of least squares and full-profile analysis based on neutron diffraction data. The values of the root-mean-square displacements of atoms in this alloy, obtained by two methods, are identical. They turned out to be much higher than in similar cubic stoichiometric TiC and TiN alloys. It is shown that the same tendency is also observed for the $TiC_{0.50}N_{0.50}$ and $TiC_{0.30}N_{0.70}$ alloys. The observed difference in the values of the root-mean-square values of the atoms is explained by the appearance of large static distortions in the lat-lattice of the $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ alloy due to the difference in configurations of the outer valence elec electrons Ti ($3d^24s^2$) and Mo ($4d^55s_1$), and in the $TiC_{0.50}N_{0.50}$ and $TiC_{0.30}N_{0.70}$ alloys due to the difference in configurations of the outer valence electrons of C ($2s^22p^2$) and N ($2s^22p^3$) atoms.

Keywords: titanium TiC and molybdenum carbide MoC, $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ alloy, crystal structure, total rms atomic displacement, dynamic and static lattice distortion, neutron diffraction, least squares method, full-profile diffraction pattern analysis, external valence electrons

I. Введение

В последнее время в связи с острым дефицитом вольфрама возникла необходимость нахождения сплавов, замещающих вольфрам. Одним из таких сплавов может быть сплав системы Ti-Mo-C [1-3]. Получению и изучению свойств однофазных сплавов системы Ti-Mo-C посвящен ряд работ [4-9]. Однако получение однофазных сплавов системы Ti-Mo-C с большим содержанием Mo затруднительно из-за резкого отличия термодинамических параметров компонентов [7, 8]. Если до настоящего времени был получен однофазный кубический сплав данной системы состава $Ti_{0.90}Mo_{0.10}C$ [8], то в работе [10] показали, что способом порошковой металлургии можно получить сплав с содержанием компонентов $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$. Этот сплав имеет кристаллическую структуру типа NaCl с параметром решетки a = 4.338±0.001 Å. Поскольку химический состав полученного сплава является новым, представляет интерес изучить его свойства.

Одним из фундаментальных свойств твердого тела является среднеквадратичное смещение (СКС) его атомов из равновесного положения из-за тепловых колебаний. Согласно [10], кристаллическая структура $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ является кубической с четко выраженными и сильными интенсивностями дифракционных максимумов на нейтронограмме. Это позволяет определить среднеквадратичное смещение атомов в данном сплаве с большой надежностью методом дифракции нейтронов. Целью работы является определение среднеквадратичного смещения атомов в сплаве $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ методом дифракции нейтронов.

II. Методика эксперимента

Образец $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ получили методом порошковой металлургии спеканием перемешанных порошков кубических карбидов TiC и MoC в соответствующих пропорциях. Кубические карбиды титана TiC и молибдена MoC получены методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза [11]. Порошки кубических карбидов титана и молибдена тщательно перемешивали в течение 4 ч в агатовой ступке. Средний размер частиц порошков $\overline{r}$ = 40 мкм. Далее из перемещанных порошков готовили цилиндрический брикет под давлением 3×10^6 Н/м^2. Приготовленный брикет отжигали в высокотемпературной вакуумной печи типа СШВ 1.2.5/25 И1 при температуре 2200°C в графитовом стаканчике в течение 8 ч, затем охлаждали вместе с печью [10]. Образец представляет собой спеченный сплав цилиндрической формы размером 8×70 мм^2.

Химический состав синтезированных образцов определили методом химического анализа, а также минимизацией факторов расходимости экспериментальных и расчетных интенсивностей дифракционных отражений на нейтронограмме образца. Точность химического анализа составляет 0.3%.

Для оценки однородности образцов по кристаллической структуре использовали рентгенографию из-за ее более высокого углового разрешения [12]. Для этого рентгенограммы образцов снимали на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3М с использованием Cu K_α-излучения в интервале углов Брэгга 2θ=10°–110° со скоростью вращения детектора 1 град/мин (Ni-фильтр, $\lambda_{ср}$ = 1.5418 Å). Для определения параметров решетки по рентгенограмме использовали съемку узкого интервала углов около дифракционного максимума со скоростью вращения детектора 1/4 град/мин при 2θ>101°. Согласно рентгенограмме, синтезированный образец однофазный и однородный, о последнем свидетельствует четкое разделение α_1 и α_2 дублета Cu K-излучения при углах Брэгга 2θ>60° на рентгенограмме, соответствующей ГЦК-решетке со структурой типа NaCl. Параметр решетки образца a_0=4.335±0.002 Å.

В качестве основного метода определения СКС атомов в сплаве $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ выбрана дифракция нейтронов, одинаково позволяющая получить более достоверную информацию о положении тяжелых и лёгких атомов (неметаллов) в кристаллической решетке [13, 14].

Нейтронограмммы образца снимали при комнатной температуре на нейтронном дифрактометре DN-500, установленном на тепловой колонне ядерного реактора ВВР-СМ ИЯФ АН РУз (λ=1.085 Å) [15]. Отношение интенсивностей самого сильного дифракционного максимума от плоскости с индексами Миллера (111) и фона эталонного образца Ni с кубической структурой при полной ванадиевой кассете размером 8×70 мм^2 равно 22. Измерения нейтронограммы проводили так, чтобы статистическая ошибка в определении

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

интегральной интенсивности дифракционных максимумов составляла от 3 до 5% в зависимости от положения максимумов по оси угла Брэгга. Нейтронограмму образца снимали по три раза, чтобы исключить случайную ошибку. Кроме того, до и после измере-ния нейтронограммы образца измеряли нейтронограмму эталонного образца Ni для проверки достоверности нейтронографических данных.

Для обработки нейтронограммы использовали метод полнопрофильного анализа дифрактограмм, предложенный Международной ассоциацией кристаллографов [16]. СКС атомов в сплаве определяли как линейным, так и нелинейным методами наименьших квадратов. Последний в кристаллографии получил название полнопрофильного анализа дифрактограмм (метод Ритвелда). Он привлекателен тем, что в нем все уточняемые структурные, профильные и инструментальные параметры входят в формулу профильной функции нелинейно. Методы оценки нелинейных параметров представляют собой итерационный процесс. Параметры функций, включающие структурные, приборные и другие характеристики, также уточняются с помощью нелинейного метода наименьших квадратов [17].

III. Результаты эксперимента и обсуждение

Нейтронограмма исследуемого сплава приведена на рис. 1. Она индицируется в рамках пространственной группы (пр. гр.) $Fm\,\bar{3}\,m$, подробно описанной в [18], где атомы Ti и Mo взаимозамещены и статистически расположены в позициях 4(*b*), а атомы C расположены в позициях 4(*a*). Параметр решетки a = 4.338±0.001 Å. Над дифракционными максимумами проставлены индексы Миллера отражающих плоскостей в пр. гр. $Fm\,\bar{3}\,m$. Результаты нейтроноструктурного анализа согласуются с данными работы [10].

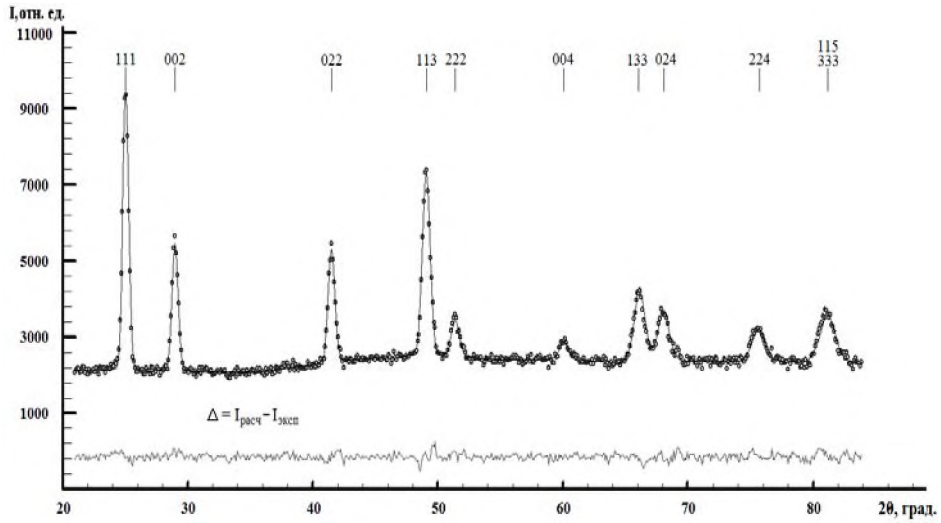


Рисунок 1. Нейтронограммы сплава $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$: точки – эксперимент, сплошная линия – расчет в рамках пр. гр. $Fm\,\bar{3}\,m$, Δ – разность экспериментальных и расчетных значений интенсивностей дифрактограмм. Над дифракционными максимумами проставлены индексы Миллера отражающих плоскостей в рамках пр. гр. $Fm\,\bar{3}\,m$.

Для поликристаллического образца цилиндрической формы экспериментально наблюдаемая интенсивность нейтроно-дифракционного отражения для кубической структуры, как вытекает из выражения структурного фактора, приведенного для пр. гр. $Fm\,\bar{3}\,m$ в [19], в конечном итоге определяется следующим выражением:

$$I_{эксп} = kI_0 \exp\left(-\frac{16\pi^2 \overline{u_\Sigma^2}}{3}\frac{\sin^2\theta}{\lambda^2}\right) \qquad (1)$$

где I_0 – расчетная интенсивность дифракционного максимума без учета теплового фактора (СКС атомов), k – коэффициент, зависящий от геометрии прибора и образца; $\overline{u_\Sigma^2} = (\overline{u_{Ti}^2} + \overline{u_{Mo}^2} + \overline{u_C^2})/3$ – усредненое среднеквадратичное смещение атом-

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

ного комплекса (в дальнейшем атома), причем каждый $\overline{u_i^2}$ состоит из среднеквадратичной амплитуды тепловых колебаний атомов и статических искажений решетки: $\overline{u_i^2} = \overline{u_{дин}^2} + \overline{u_{ст}^2}$ [20]. Статическое смещение атомов из идеального положения возникает из-за различия в размерах атомов и отклонения состава сплава от стехиометрии. Согласно выражению (1), график зависимости $\ln(I_{экс}/I_{расч})$ от $\sin^2\theta/\lambda^2$ является прямой линией, по наклону которой можно определить тепловой фактор:

$$2B = (-16\pi^2 \overline{u_\Sigma^2})/3, \qquad (2)$$

а затем $\overline{u_\Sigma^2}$ по формуле (2). Для построения данной зависимости использовали наиболее сильные дифракционные максимумы. Такой метод определения СКС атомов в кубических кристаллах в последнее время широко применяется в нейтронографии и стал общепризнанным методом [14, 21]. В принципе среднеквадратичное смещение атомов в кубических кристаллах можно определить также и другими методами: рентгенографией, калориметрией, через механические свойства. Однако нейтронографический метод определения СКС по сравнению с другими методами имеют ряд преимуществ. Во-первых, этот метод привлекателен тем, что $\overline{u^2}$ определяется непосредственно из эксперимента без всяких промежуточных расчетов. Во-вторых, амплитуда рассеяния нейтронов не зависит от угла Брэгга, поглощение нейтронов в веществах незначительно, эффектом экстинкции можно пренебречь, рассеяние нейтронов происходит непосредственно на ядрах [22]. Все эти факторы позволяют существенно повысить точность и достоверность определения значения $\overline{u^2}$. Преимущества нейтронографического метода определения СКС отмечали также в работе [23]. Зависимость прямой линии $\ln(I_{эксп}/I_0)$ от $\sin^2\theta/\lambda^2$ приведена на рис. 2. Наклон прямой линии $\ln(I_{экс.}/I_{расч.})$ в функции $\sin^2\theta/\lambda^2$ определили методом наименьших квадратов. В табл. 1 приведено полученное значение $\overline{u_\Sigma^2}$ для данного сплава.

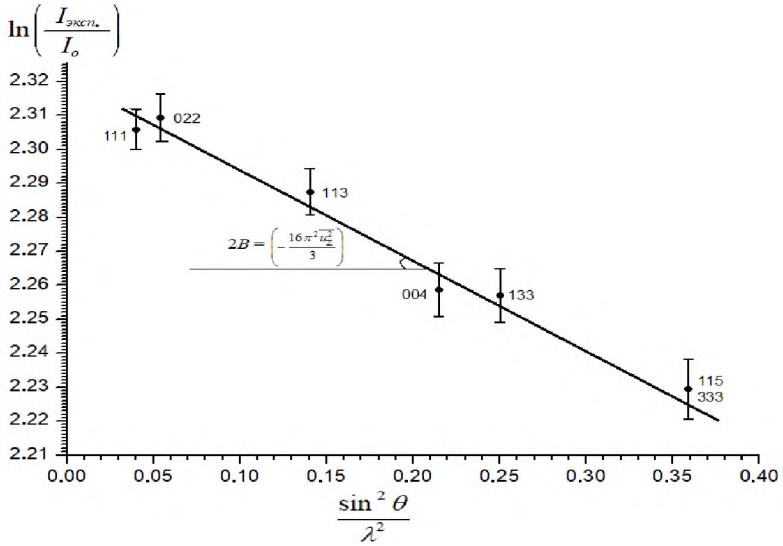


Рисунок 2. Зависимость $\ln(I_{эксп}/I_0)$ от $\sin^2\theta/\lambda^2$ для сплава $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$. Над точками указаны индексы Миллера отражающих плоскостей *hkl* в рамках пр. гр. $Fm\bar{3}m$.

В работе [10] для теплового фактора B в сплаве $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ методом польнопрофильного анализа было получено значение $B = 0.32\pm0.03$ Å^2, из которого, согласно формуле (2), вытекает, что для данного сплава $\sqrt{\overline{u_\Sigma^2}} = 0.110\pm0.001$ Å. Как видно из таблицы, оно практически точно совпадает со значением $\sqrt{\overline{u_\Sigma^2}}$, полученным методом наименьших квадратов. В таблице также приведены значения среднеквадратичного смещения атома в ряде изоструктурных родственных сплавов, полученные в [24, 25]. Как видно из таблицы,

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

$\sqrt{u_\Sigma^2}$ для атомов в сплаве $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ не сильно отличается от значений для атомов стехиометрических карбонитрида титана $TiC_{0.50}N_{0.50}$ и $TiC_{0.30}N_{0.70}$. Разница между этими величинами не более 5%, т.е. лежит в пределах ошибок определения этих величин.

Таблица. Среднеквадратичное смещение атомов в решетке и параметры решетки ряда кубических тугоплавких сплавов на основе титана.

№	Образец	$\sqrt{u_\Sigma^2}$, Å	Параметр решетки a, Å
1	$Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$	0.110±0.003	4.338±0.001
2	$TiC_{0.97}$ [24]	0.084±0.003	4.326±0.001
3	$TiN_{0.97}$ [25]	0.089±0.002	4.226±0.003
4	$TiC_{0.50}N_{0.50}$ [25]	0.105±0.003	4.302±0.002
5	$TiC_{0.30}N_{0.70}$ [25]	0.105±0.002	4.302±0.002

В то же время разница этих величин по сравнению со среднеквадратичным смещением бинарных сплавов $TiC_{0.97}$ и $TiN_{0.97}$ больше на 31% и 24% соответственно. Увеличение усредненного полного СКС атомов в сплаве $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ не может быть объяснено увеличением амплитуды тепловых колебаний $\sqrt{u_{дин}^2}$, так как она обратно пропорциональна массе элемента, а в данном случае значительная часть атомов Ti с относительно легкой массой заменена тяжелыми атомами Mo. Наблюдаемую закономерность можно объяснить возникновением статических искажений в решетке систем Ti-Mo-C и Ti-C-N. Согласно работе [24], в стехиометрическом бинарном кубическом сплаве TiC статическое смещение $\sqrt{u_{ст}^2}$ практически отсутствует. Можно предположить, что оно отсутствует и в изоструктурном с карбидом титана TiC стехиометрическом кубическом нитриде титана TiN. Однако в рассматриваемых тройных соединениях, хотя они являются стехиометрическими, и атомные радиусы Ti и Mo близки [26] (у Ti 1.47 Å, а у Mo 1.40 Å), *a* также близки и у углерода C (0.77 Å) и азота N (0.71 Å) [26] (менее 10% , т.е. удовлетворяется условие Вегарда образования твердого раствора), в трехкомпонентных сплавах, по-видимому, появляются статические искажения из-за различия во внешних электронных конфигурациях составляющих элементов Ti и Mo. Они существенно различаются; имеют вид $3d^24s^2$ для Ti и $4d^55s^1$ для Mo [26]. Они также различны для C ($2s^22p^2$) и N ($2s^22p^3$) [26]. Поскольку стехиометрические сплавы TiC и TiN имеют весьма близкие значения СКС (см. таблицу), и в них отсутствуют статические искажения, то следует предположить, что в стехиометрических трехкомпонентных сплавах различие в конфигурациях валентных внешних электронов приводит к появлению статических искажений в решетке. Из-за этих различий возникают неоднородные силы притяжения, приводящие к искажению кристаллической решетки. Об этом также свидетельствует завышенное значение параметра решетки сплава $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ по сравнению с другими сплавами (см. таблицу).

IV. Заключение

Определено усредненное полное среднеквадратичное смещение атомов в сплаве $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ по данным дифракции нейтронов методами наименьших квадратов и полнопрофильного анализа дифрактограмм. Показано, что замена в кубическом карбиде титана TiC части атомов металла (Ti) или части атомов неметалла (C) одного сорта другим, отличающимся внешней валентной электронной конфигурацией, приводит к возникновению статических искажений в подрешетках кубических трехкомпонентных сплавов $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$, $TiC_{0.50}N_{0.50}$ и $TiC_{0.30}N_{0.70}$. Это приводит к увеличению полного среднеквадратичного смещения атомов сплава по сравнению с кубическими бинарными сплавами TiC и TiN. Следовательно, заменой части атомов Ti на Mo или же части атомов C на N в решетке карбида титана TiC можно менять динамические характеристики его кристаллической решетки.

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

Метаданные

Determination of the root mean-square displacement of atoms in $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ alloy by the methods of neutron diffraction

Khidirov, S.Dj. Rakhmanov, A.S. Parpiev, Sh.A. Makhmudov, V.V. Getmanskii

Institute of Nuclear physics, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, 100214, Tashkent, Uzbekistan

The root-mean-square displacement of atoms in the new cubic refractory alloy $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ has been determined by the methods of least squares and full-profile analysis based on neutron diffraction data. The values of the root-mean-square displacements of atoms in this alloy, obtained by two methods, are identical. They turned out to be much higher than in similar cubic stoichiometric TiC and TiN alloys. It is shown that the same tendency is also observed for the $TiC_{0.50}N_{0.50}$ and $TiC_{0.30}N_{0.70}$ alloys. The observed difference in the values of the root-mean-square values of the atoms is explained by the appearance of large static distortions in the lattice of the $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ alloy due to the difference in configurations of the outer valence electrons Ti ($3d^24s^2$) and Mo ($4d^55s_1$), and in the $TiC_{0.50}N_{0.50}$ and $TiC_{0.30}N_{0.70}$ alloys due to the difference in configurations of the outer valence electrons of C ($2s^22p^2$) and N ($2s^22p^3$) atoms.

Keywords: titanium TiC and molybdenum MoC carbide, $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ alloy, crystal structure, NaCl-type structure, total rms atomic displacement, dynamic and static lattice distortion, neutron diffraction, least squares method, full-profile diffraction pattern analysis, external valence electrons.

References

[1] P.V. Burkov, C.N. Kul'kov, Polzynovskiy vestnik No.2 (part 2), 55-61 (2005)
[2] D. Bandyopadhyay, B. Haldar, R.C. Sharma,N. Chakraborti, Journal of Phase Equilibria **20**, No.3, 332-336 (1999).
[3] L. Cheng, Q. Cai, W. Yu, L.J. Yu, H. Mimura, Materials Characterization **142**, 195-202 (2018).
[4] Z. Wang, H. Zhang, C. Guo, Z.Leng, Z. Yang, X. Sun, Ch. Yao, Z. Zhang, F. Jiang, Materials and Design **109**, 361-366 (2016).
[5] S.H. Koutzaki, J.E. Krzanowski, J.J. Nianaparampil, Metall. Mater. Trans. A **33**, 1579-1588 (2002).
[6] X. Wang, M. Zhang, S. Qu, Optics and Lasers in Engineering **48**, No.9, 893-898 (2010).
[7] J.H. Shim, C.S. Oh, D.N. Lee, Metallurgical and Materials Transactions B **27,** No.6, 955-966 (1996).
[8] P.V. Burkov. Strukturoobrazovanie, fazovy sostav i svoystva kompozitsionnykh materialov na osnove karbida titana (Tomsk, TPU, 2011).
[9] P.V. Burkov, Perspektivnye materially No.3, 61-66 (2002).
[10] I. Khidirov, S.D. Rakhmanov, Sh.A. Makhmudov, V.V. Getmanskiy, Uzbek J. Phys. **21,** No. 2, 111-114 (2019).
[11] A.P. Amosov, I.P. Borovinskaya, A.G. Merzhanov. Poroshkovaya tekhnologiya samorasprostranya-yushegosya vysokotemperaturnogo sinteza materialov (Moskva, Mashinostroenie, 2007)
[12] S.S. Gorelik, L.N. Rastorguev, Yu.A. Skakov. Rentgenograficheskiy i elektronoopticheskiy analiz (Mockva, MISIS, 1994).
[13] Yu. Nozik, K.P. Ozerov, K. Khennig. Neytrony i tverdoe telo. Strukturnaya neytronografiya. T. 1 (Moskva, Atomizdat, 1979).
[14] A.I. Gusev, A.A. Rempel'. Strukturnie fazovie perekhodi v nestekhiometricheskikh soedineniyakh (Moskva, Nauka, 1988).
[15] Sh. Shoyusupov, V.V. Getmanskiy, I. Khidirov i drygie, Uzbekskiy zhurnal problem energetiki i informatiki № 2, 11-16 (2002).
[16] G. Will. Powder Diffraction: The Rietveld Method and the Two Stage Method of Determine and Refine Crystal Structures from Powder Diffraction Data (New York, Springer, 2005).
[17] M.G. Krzhizhanovskaya, V.A. Firsova, R.S. Bubnova. Primenenie metoda Ritvelda dlya resheniya zadach poroshkovoy difraktometrii. Uchebnoe posobie (Sankt-Peterburgskiy universitet, 2016).
[18] International Tables for Crystallography. Vol. A: Space-Group Symmetry. Ed. Theo Hahn (Dordrecht, The Netherlands, Springer, 2005).
[19] International Tables for Crystallography. Vol. C: Mathematical, Physical and Chemical Tables. Ed. Prince E. (Dordrecht, The Netherlands, 2004).
[20] G.S. Zhdanov, A.G. Khundzhua. Lektsii po fizike tverdogo tela (Moskva, MGU, 1988).
[21] A.I. Gusev. Nestekhiometriya, besporyadok, blizhniy i dal'niy poryadok v tverdom tele (Moskva, Fizmatlit, 2007).
[22] Z.P. Ozerov, Poverkhnost' No. 7, 8-19 (1997).
[23] Yu.M.Tsipenyuk, Physics Uspekhi **55**, No.8, 855-867 (2012).
[24] I. Khidirov, A.S. Parpiev, Kristallografiya **56**, No.3, 504-508 (2011).
[25] I. Khidirov, S.D. Rakhmanov, Al'ternativnaya energetika i ekologiya No.13-15, 68-76 (2017).
[26] V.M. Kamishov, E.G. Miroshnikova, V.P. Tataurov. Stroenie veshestva (SPb, Lan', 2017).

$Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ қотишмаси атомларининг ўртача квадратик силжишини нейтронлар дифракцияси методи билан аниқлаш

И. Хидиров, С.ДЖ. Рахманов, А.С. Парпиев, Ш.А. Махмудов, В.В. Гетманский

Ўзбекистон Республикаси ФА Ядро физикаси институти, Улугбек, 100214 Ташкент, Ўзбекистон

Коррозияга чидамли янги $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ куб структурали қотишмасида атомларнинг ўртача квадратик силжиши нейтронлар дифракцияси маълумотларидан фойдаланилиб икки хил усулдан – энг кичик квадратлар ва дифрактограммани тўла

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

профилли таҳлил усулларидан фойдаланиб аниқланди. Бу катталик кристалл структураси айнан бир хил ва атомларининг геометрик параметр-лари мазкур қотишманикига ўхшаш бўлган куб структурали стехиометриявий TiC ва TiN қотишмаларига қараганда анча катта эканлиги аниқланди. Аниқланган ушбу фарқ Ti ($3d^2 4s^2$) ва Mo ($4d^5 5s^1$) ташқи валент электронлари конфигурацияларининг турлича эканлиги туфайли кристалл панжарада катта статик бузилишларнинг пайдо бўлиши билан тушунтирилди. Шунингдек, $TiC_{0.50}N_{0.50}$ ва $TiC_{0.30}N_{0.70}$ қотишмаларда ҳам бинар қотишмаларга нисбатан шундай қонуният кузатилди. Кузатилган қонуният $Ti_{0.70}Mo_{0.30}$, $TiC_{0.50}N_{0.50}$ ва $TiC_{0.30}N_{070}$ қотишмаларининг таркибидаги Ti ($3d^2 4s^2$) ва Mo ($4d^5 5s^1$) ҳамда C ($2s^2 2p^2$) ва N ($2s^2 2p^3$) атомларнинг ташқи валент электронларнинг кон-фигурацияси ҳар хил эканлиги сабабли атомлар орасидаги таъсир кучларининг анизотропияси туфайли кристалл панжаранинг бузилиши деб тушунтирилди.

Қалит сўзлар: титан TiC ва молибден MoC карбиди, $Ti_{0.70}Mo_{0.30}C$ қотишмаси, кристалл структураси, атомнинг тўла ўртача квадратик силжиши, панжаранинг динамик бузилиши ва статик бузилиши, нейтронлар дифракцияси, энг кичик квадратлар усули, дифрактограмманинг тўла профилли таҳлил усули, ташқи валент электронлар тузилиши.

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.