

РАЗРАБОТКА МЕЖАТОМНОГО ПОТЕНЦИАЛА МОРЗЕ СИСТЕМЫ Ni–Cr И АНАЛИЗ ВЗАИМНОГО ВЛИЯНИЯ ХРОМА И НИКЕЛЯ.

Семенов М.Ю., Королев И.П., Панчо-Рамирес В.А.

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана,

Москва, Россия

Semenov.m.yu@bmstu.ru

Никель и хром являются основными компонентами большинства жаропрочных сплавов. Известно, что в присутствии хрома резко снижается как коэффициент самодиффузии никеля, так и коэффициент диффузии примесных атомов никеля в ГЦК-железе [1]. Таким образом, взаимное влияние никеля и хрома приводит к повышению жаропрочности как сплавов на базе никеля, так и сталей аустенитного класса.

Искали парный потенциал никеля и хрома в виде Морзе:

$$U = U_s \left\{ \exp \left[-2\varphi \left(\frac{d}{d_0} - 1 \right) \right] - 2 \exp \left[-\varphi \left(\frac{d}{d_0} - 1 \right) \right] \right\}, \quad (1)$$

где U_s – энтальпия сублимации; d – межатомное расстояние; d_0 – равновесное межатомное расстояние; φ – константа, равная: $\varphi = 2\gamma$, где γ – постоянная Грюнайзена.

Парные межатомные потенциалы для чистых никеля и хрома при помощи выражения (1) разработали в статьях [2, 3]. Полученные значения энергий взаимного притяжения и отталкивания для симметричных пар атомов никеля и хрома (чистых веществ) использовали для решения асимметричной задачи, т.е. расчета энергий взаимного притяжения и отталкивания пары атомов Ni и Cr ($U_b^{\text{Ni-Cr}}(d)$ и $U_r^{\text{Ni-Cr}}(d)$, соответственно) по методике [4].

Межатомный потенциал в системе Ni-Cr при межатомном расстоянии d равен:

$$U^{\text{Ni-Cr}}(d) = U_b^{\text{Ni-Cr}}(d) + U_r^{\text{Ni-Cr}}(d). \quad (2)$$

Из выражения энергии межатомного взаимодействия U (1) путем двукратного дифференцирования по атомному объему Ω получали значения объемного модуля упругости сплава никеля и хрома при равновесном значении межатомного расстояния, равном d_0 :

$$B(d = d_0) = \Omega \frac{\partial^2 U^{\text{Ni-Cr}}(d)}{\partial \Omega^2}. \quad (3)$$

При помощи выражения (3) получили температурную зависимость объемного модуля упругости в системе никель-хром на интервале от 600 до 1000 °С. Установлено, что значения объемного модуля в системе Ni-Cr на всем указанном интервале температур заметно превосходит значения B для чистых Ni и Cr (например, 206, 173 и 178 ГПа при 700 °С, а также 194, 161 и 170 ГПа при 900 °С, соответственно).

Таким образом, выполненные расчеты подтверждают более высокую силу связи между атомами Ni и Cr, по сравнению с энергиями связи в чистых никеле и хrome. Полученные результаты удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

1. Duyananda M.A. // Diffusion in solid metals and alloys. Ed. Mehrer H. // Landolt-Bornstein new series. Vol. III (26). Springer-Verlag, 1990. P. 372.
2. Semenov M.Yu. Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2021. Vol. 85. No. 7. P. 728.
3. Semenov M.Yu. Met. Sci. Heat Treat. 2020. Vol. 62. Nos. 1-2. P. 109.
4. Pettifor D.G. // Physical Metallurgy / Ed. by R.W. Cahn and P. Haasen. Amsterdam: North-Holland. 1996. Vol. 1. P. 47.