

## РАЗРАБОТКА МЕЖАТОМНОГО ПОТЕНЦИАЛА МОРЗЕ СИСТЕМЫ Fe–Ni И ОЦЕНКА УПРУГИХ СВОЙСТВ ЖЕЛЕЗНИКЕЛЕВОГО СПЛАВА

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](mailto:Semenov.m.yu@bmstu.ru)

Искали парный потенциал никеля и железа в виде Морзе:

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

где  $U_s$  – энтальпия сублимации;  $d$  – межатомное расстояние;  $d_0$  – равновесное межатомное расстояние;  $\phi$  – константа, равная:  $\phi = 2\gamma$ , где  $\gamma$  – постоянная Грюнайзена. Значение  $d_0$  для Ni и Fe приняли равным 0.248 и 0.252 нм, соответственно.

Энтальпия сублимации никеля при комнатной температуре равна 421 кДж/моль [1], железа – 415 кДж/моль [2]. Энтальпию сублимации нормировали по температуре с использованием температурной зависимости модуля сдвига.

В нашей работе [3] параметр Грюнайзена никеля оценили как 1.72. Согласно [4] при температурах порядка 600-1000 °С параметр Грюнайзена  $\gamma$ -Fe равен примерно 2.20.

Полученные при помощи выражения (1) значения энергий взаимного притяжения и отталкивания атомов никеля и ГЦК-железа использовали для решения асимметричной задачи, т.е. расчета энергий взаимного притяжения и отталкивания пары атомов Fe и Ni ( $U_{b}^{\text{Fe-Ni}}(d)$  и  $U_{r}^{\text{Fe-Ni}}(d)$ , соответственно) при произвольном межатомном расстоянии  $d$  по методике, изложенной в [5].

Межатомный потенциал в системе железо – никель при межатомном расстоянии  $d$  определили как:

$$U^{\text{Fe-Ni}}(d) = U_{b}^{\text{Fe-Ni}}(d) + U_{r}^{\text{Fe-Ni}}(d). \quad (2)$$

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

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

При помощи выражения (3) получили температурную зависимость объемного модуля упругости на интервале от 600 до 1000 °С. Эта зависимость удовлетворительно совпадает со значениями объемного модуля упругости, полученными из экспериментальных значений нормального модуля упругости и коэффициента Пуассона ГЦК сплава, состоящего из 51 % Fe и 49 % Ni [6].

1. Kant A. The Journal of Chemical Physics. 1964. Vol. 41. No. 6. P. 1872.
2. Desai P.D. Journal of Physics and Chemical Reference Data. 1986. Vol. 15. No. 3. P. 967.
3. Semenov M.Yu. Bull. of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2021. Vol. 85. No. 7. P. 728.
4. Dorogokupets P.I. Scientific reports. 2017. Vol. 7. No. 1. P. 1.
5. Pettifor D.G. // Physical Metallurgy / Ed. by R.W. Cahn and P. Haasen. Amsterdam: North-Holland. 1996. Vol. 1. P. 47.
6. Ledbetter H.M. Journal of Physics and Chemical Reference Data. 1973. Vol. 2. No. 3. P. 531.