07,11

Структурные фазовые переходы в *а*-титане, содержащем неметаллические микропримеси

© В.И. Савенко¹, Л.И. Куксенова^{1,2}, Р.Р. Хасбиуллин¹, А.А. Ширяев¹

¹ Институт физической химии и электрохимии им. А.Н.Фрумкина РАН, Москва, Россия ² Институт машиноведения им. А.А. Благонравова РАН, Москва, Россия

E-mail: visavenko@phyche.ac.ru

Поступила в Редакцию 12 ноября 2019 г. В окончательной редакции 24 декабря 2019 г. Принята к публикации 9 января 2020 г.

> Методами дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), дифференциальной термогравиметрии (ДТГА), массспектрометрии и рентгеноструктурного анализа (РСА) исследованы структурные фазовые переходы в содержащем неметаллические микропримеси порошковом *α*-титане при повышенных температурах. Определены микроструктурные и энергетические характеристики этих переходов.

> Ключевые слова: титан, нестехиометрические фазы внедрения, структурные фазовые переходы, дифференциальная сканирующая калориметрия, рентгеноструктурный анализ.

DOI: 10.21883/FTT.2020.07.49474.626

1. Введение

Частицы порошкового титана промышленного производства, как правило, содержат сравнительно небольшое количество неметаллических примесей [1]. Такие примеси могут входить в решетку *α*-титана конгруэнтно — как внедренные атомы, образуя твердый раствор. Они также могут выделяться в титановой матрице в виде микровключений инородных фаз $Ti_x A_y$ и $Ti_x B_y Cz$ нестехиометрического состава [2]. Очевидно, что наличие указанных структурных особенностей не может не влиять на температурное поведение данного материала. В частности, в такой системе при температурных вариациях возможны структурные фазовые переходы, оставляющие неизменной кристаллическую решетку металла [3-6]. Учет упомянутых переходов особенно важен при разработке технологий аэрокосмического и медицинского назначения, использующих порошковый титан в качестве исходного сырья [7,8]. Вместе с тем, в научной литературе имеются лишь публикации, посвященные исследованию структурных фазовых переходов ($\alpha \rightarrow \beta$, или $\alpha \rightarrow \omega$), меняющих кристаллическую решетку α-титана при повышенных температурах, давлениях или ударных нагрузках [9–15], а также исследования $\alpha \to \omega$ переходов, происходящих при большом содержании кислородной примеси в титане [16]. Согласно известным авторам литературным данным, исследования влияния микропримесей на структурные фазовые переходы, оставляющие неизменной кристаллическую решетку α-титана, до настоящего времени не проводились.

Настоящая работа посвящена обнаружению и анализу структурных фазовых переходов, возможных в содержащем неметаллические микропримеси порошковом титане при температурных вариациях, не выходящих за пределы области температурной стабильности его α -фазы.

2. Образцы и методика

Анализировали титановый порошок промышленного производства марки ПТМ-1 (ТУ 14-22-57-92), полученный восстановлением оксидов металла гидридом кальция. Элементный состав порошка представлен в табл. 1.

Температурное поведение образцов исследовали при помощи дифференциального сканирующего калориметра NETZSCH DSC 204 F1 Phoenix в проточной атмосфере очищенного и осушенного аргона (скорость потока 30-50 ml/min). Скорость нагрева и охлаждения образцов варьировали в интервале $2.5-20^{\circ}/\text{min}$. Микроструктуру и фазовый состав порошковых частиц анализировали с применением рентгеновских дифрактометров Empyrean и Stoe Huber G670, позволявших проводить высокотемпературные испытания материалов в условиях вакуума при давлении не более 10^{-3} Pa. Опыты проводили в высокотемпературной вакуумной камере HTK-1200N, оборудованной турбомолекулярным насосом и системой автоматической подстройки положения образца отно-

Таблица 1. Элементный состав порошковых частиц α-титана

Ti	Примеси внедрения, масс.%				Примеси замещения, масс.%				
Основа	Н	C	0	N	Ca	Fe	Ni	Si	Al
	0.30	0.12	0.25	0.10	0.1	0.05	0.06	0.04	0.01

сительно оси гониометра в геометрии "на отражение" (CuK_{α} -излучение, никелевый фильтр, держатель образца — корундовая подложка).

Температура образца при нагреве и охлаждении изменялась ступенчато с шагом 20°, скорость изменения температуры между ступенями составляла 10°/тіп, длительность экспозиции при съемке каждой дифрактограммы при фиксированной температуре — 30 тіп. При расчетах дифрактограмм учитывали две длины волны $K_{\alpha 1} = 1.540598$ и $K_{\alpha 2} = 0.1544426$ пт с соотношением интенсивностей линий в дублете 2 : 1. Измерения осуществляли в диапазоне углов отражения $2\theta = 25-120^{\circ}$ с шагом 0.0334°.

Для обнаружения гетерофазных реакций окисления (и/или разложения), которые предположительно могли бы протекать в порошке при его термоциклировании и для синхронного контроля возможных газообразных продуктов этих реакций, а также для анализа процессов десорбции газов из порошкового материала использовали методику дифференциального термогравиметрического анализа (ДТГА), дополненную масс-спектрометрическим определением состава газовой атмосферы в ТГА-камере. Эти исследования проводили с применением анализатора NetzschTG 209 F1 Iris, сопряженного с квадрупольным масс-спектрометром QMS 403 D Aeolos. Характеристики процесса ДТГ-анализа были следующие: диапазон температур 25-500°C скорость нагрева 10 и 20°/min; эксперименты выполняли в инертной атмосфере очищенного и осушенного аргона при скорости его потока 30 ml/min. Рабочие параметры QMS-анализатора: детектор CH-TRON, напряжени 1.2 kV, режим сканирования — MID (Multiple Ion Detection), время накопления сигнала (dwell time) — 1 s. Нижний концентрационный предел детектирования — 10 ppm. Особое внимание уделялось детектированию следующих масс: 1, 2, 12, 14, 16, 17, 18, 28, 32, 44.

3. Результаты и их обсуждение

На рис. 1 в качестве типичного примера представлены результаты ДСК-термоанализа титанового порошка при его последовательном нагреве и охлаждении в интервале температур 50–500°С.

Обнаружено наличие двух взаимно смещенных по шкале температур благодаря гистерезису эндо- и экзоэнергетических пиков, имеющих сложную структуру и соответствующих фазовым переходам 1 рода в системе. Во врезке к рис. 1 представлено разложение эндопика на 4 элементарных составляющих в приближении Лоренца. Значения пиковых температур T_i этих составляющих, а также соответствующие им энтальпий ΔH_i (в расчете на единицу массы титана) приведены в табл. 2.

Анализ результатов ДТГ-экспериментов показал полное отсутствие каких-либо гетерофазных реакций в материале, включая процессы его окисления и термодеструкции при термоциклировании. Масс-спектромет-



Рис. 1. ДСК-диаграммы, полученные при нагреве (1) и охлаждении (2) порошкового титана. Скорость изменения температуры 10°/min.



Рис. 2. Октаэдрические (a) и тетраэдрические (b) междоузельные пустоты (обозначены белыми сферами) в ГПУ-кристаллической решетке α -титана (показаны не все тетраэдрические пустоты).

рический анализ также не обнаружил десорбцию атомов, или молекул водорода, углерода, азота, кислорода, воды и углекислого газа из порошкового материала в температурном интервале локализации ДСК-эндопика $\Delta T = 300-400^{\circ}$ С. Таким образом, можно полагать, что вышеуказанный эндопик, равно как и сопряженный ему экзопик, обусловлены структурными фазовыми переходами в материале порошковых частиц при их нагреве и охлаждении.

Как известно, примеси, внедрения в ГПУ-решетке α -титана могут располагаться в ее октаэдрических (O) и тетраэдрических (T) междоузельных пустотах (O- и T-нанопорах — рис. 2).

Таблица 2. Энергетические характеристики элементарных эндопиков

і — № пика	1	2	3	4	ΔT_{tr}	
T_i , °C	300.9	328.6	328.7	339.2	270-370	
ΔH_i , J/g	1.5	1.5	2.7	13.3	$\sum_i \Delta H_i$	
.,8					19	

В элементарной ячейке титана на 6 атомов металла (радиусом R_m) приходится $N_O = 6$ октаэдрических $(r_O = 0.41R_m)$, и $N_T = 12$ тетраэдрических $(r_T = 0.228R_m)$ нанопор. Они образуют в кристаллической решетке титана две О- и Т-подрешетки, заполненные атомами примесей лишь частично благодаря весьма незначительным их концентрациям, суммарно не превышающим величину, равную нескольким атомным процентам (см. табл. 1). В таком случае подсистема "примесные атомы-вакансии" в каждой из подрешеток может рассматриваться в качестве твердого раствора замещения, в котором возможно установление дальнего порядка с образованием сверхструктурных фаз [3-6]. Учитывая, что в данном порошковом материале имеется четыре вида примесей внедрения (см. табл. 1), в соответствующих О- и Т-подрешетках при достаточно низких температурах может образоваться четыре типа сверхструктур [4], характеризующихся четырьмя параметрами дальнего порядка η_i , где $i = \{H; C; N; O\}$.

Поскольку внедренные атомы занимают в О- и Т-подрешетках наборы геометрически и энергетически неэквивалентных положений, различающиеся для каждого сорта примесей, структурные фазовые переходы в них происходят при различных температурах (см. табл. 2). Однако из-за относительной близости энергий взаимодействия u_{ii}^O и u_{ii}^T между внедренными в соответствующие подрешетки атомами сорта і, а также благодаря выравниванию энергий взаимодействия $U_{M_i}^k$ (где k = O, или T) между внедренными атомами сорта і и атомами титановой матрицы М, температуры этих переходов различаются незначительно. Это дает возможность использовать при оценке энергетических характеристик системы приближение среднего поля, не требующее конкретизации вида внедренных атомов. Полученная в рамках указанного приближения оценка энергии взаимодействия $\overline{u_i}$ таких "обезличенных" атомов между собой (без дифференциации числа межатомных связей *i-i*, приходящихся на один внедренный атом і в соответствующих подрешетках) дает значение $\overline{u_i} \approx \left(\sum_{i=1}^4 \Delta H_i\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^4 \Delta m_i\right)/4 \cdot \sum_{i=1}^4 C_i$ $\approx -0.283 \,\mathrm{eV}$. (Здесь m_i — атомная масса *i*-го примесного элемента, C_i — его массовая доля в частицах порошка). Учет геометрического и энергетического различия положений примесных атомов, внедренных в Ои Т-подрешетки, позволяет оценить в локально-координационном приближении энергии их индивидуальных межатомных связей u_{ij}^k (где k = O или T).

Действительно, пусть P_{ij}^k есть вероятность заполнения междоузлия, находящегося вблизи "обезличенного" атома *i* в подрешетке вида *k*, однотипным и внедренным в ту же подрешетку атомом *j*. Тогда из очевидного соот-

ношения
$$\overline{u_i} = [0.5/(N^O + N^T)] \cdot \sum_{k=O,T} [\sum_{i,j=1}^{N^O + N^T}] u_{ij}^k p_{ij}^k$$
, свя-

зывающего в локально-координационном приближении среднюю энергию взаимодействия между однотипными внедренными атомами $\overline{u_i}$ с энергией индивидуальных межатомных связей между ними u_{ij}^k , можно получить оценку значений энергии связи между "обезличенными" атомами i-i, соседствующими в первой координационной сфере радиуса r_1 в *O*- и *T*-подрешетках α -титана: $u_{ii}^O(r_1) \approx 0.5 u_{ii}^T(r_1) \approx (1/7.44) \overline{u_i} = -3.8 \cdot 10^{-2}$ eV

В данном расчете было учтено взаимодействие между внедренными атомами, локализованными лишь в первых двух (с радиусами r_1 и r_2) координационных сферах *О*- и *T*-подрешеток При этом были использованы следующие приближенные соотношения $u_{ii}^O(r_1) \approx 3u_{ii}^O(r_2)$, $u_{ii}^T(r_1) \approx 2u_{ii}^T(r_2)$ и $u_{ii}^O(r_1) \approx 0.5u_{ii}^T(r_1)$, допустимые при оценке энергий взаимодействия между однотипными (обезличенными) атомами *i* в структурах рассматриваемого типа.

В рамках вышеуказанного приближения можно также получить оценочное соотношение для энергий взаимодействия однотипных атомов, располагающихся в первой и второй координационных сферах октаэдрической ГПУ-подрешетки: $u_{ii}^{O}(r_{2}) \approx 0.33 u_{ii}^{O}(r_{1})$ $\approx -1.27\cdot 10^{-2}\,\mathrm{eV}$. Их сумма в данном случае оказывается равной $u_{ii}^{O}(r_1) + u_{ii}^{O}(r_2) = -5.07 \cdot 10^{-2}$ eV, т.е. приближается к значению, которое при заданной точности структурно-энергетических оценок определяет величину поглощенной при фазовом переходе удельной тепловой энергии $Q \cong -k_{\rm B} \cdot \overline{T}_{tr} = -5.14 \cdot 10^{-2} \, {\rm eV}.$ (Здесь $k_{\rm B}$ — константа Больцмана, а величина $\overline{T}_{tr} = (1/4) \sum_{i=1}^{4} T_i$ = 597.5° K). Близость значений этих энергетических характеристик является косвенным указанием на то обстоятельство, что при наблюдаемом фазовом переходе в ГПУ-структуре происходит одновременный разрыв связей между атомами, внедренными в О-подрешетку, и их передислокация в конфигурации, связанные с Т-подрешеткой.

Очевидно, что рассматриваемые фазовые переходы должны отражаться также и на температурном поведении параметров решетки *α*-фазы титана. На рис. 3



Рис. 3. Температурная зависимость параметров кристаллической решетки α -титана, полученная при последовательном нагреве порошкового образца. Горизонтальной линией отмечен температурный интервал ΔT_{tr} фазовых переходов.

приведена зависимость параметров элементарной ячейки α-титана, полученная при ступенчатом нагреве порошковой пробы. Обнаружено существенно немонотонное изменение этих параметров в температурном интервале $\Delta T_{tr} = 300 - 400^{\circ}$ С, покрывающем область температур, соответствующих вышеупомянутым структурным фазовым переходам на ДСК-диаграммах. При возрастании температуры в указанном температурном интервале базисный параметр *а*[1010] решетки Браве α-титана после кратковременного спада продолжает увеличивается, а призматический параметр с[0001] претерпевает заметный спад (что свидетельствует об отрицательном значении соответствующей компоненты тензора коэффициентов термического расширения). Отношение с/а при этом уменьшается от стандартного значения c/a = 1.588 [17] при 25°C до значения c/a = 1.585 в начале фазового перехода и принимает значение c/a = 1.582 к его концу. Это свидетельствует о появлении тетраэдрических искажений элементарной ячейки кристаллической решетки α-титана, которые вызваны перемещением части ведренных атомов, локализованных ранее преимущественно в принадлежащих призматическим плоскостям более крупных октадрических нанопорах, в лежащие в базисных плоскостях малоразмерные тетраэдрические нанопоры.

Проведенный по методике [4] структурно-энергетический анализ уравнений термодинамического равновесия системы, построенных в приближении среднего поля для различных значений $q = n/(N^O + N^T)$, (где $n = \sum_{i=1}^{r} n_i$ — суммарная атомная концентрация примесей внедрения, приходящаяся на элементарную ячейку ГПУ-решетки α-титана) приводит к заключению, что распределение примесных атомов в микроструктуре α-титана носит существенно неоднородный характер. Структурные фазовые переходы в α -титане оказываются возможными лишь в том случае, если при достаточно низких гомологических температурах в решетке α-титана имеются области субмикрометрических размеров, образующие в матрице α-титана ультрамикродисперсную фазу (микрофазу), значительно обогащенную примесными атомами. Эту микрофазу можно рассматривать в качестве совокупности выделений коллоидных размеров в матричной ГПУ решетке α-титана, которая служит для такой микрофазы дисперсионной средой. С металловедческой точки зрения эта микрофаза является аналогом совокупности наноразмерных зон Гинье-Престона, наблюдаемых в алюминиевых и некоторых других сплавах при их старении [18].

Относительная концентрация примесных атомов в междоузлиях этих микрообластей может достигать величины q = 0.25 - 0.3, приближаясь к концентрации междоузлий $v = N^O/(N^O + N^T) = 1/3$ в *О*-подрешетке α -титана. Именно в микрообъемах этой коллоиднодисперсной микрофазы в соответствующих *О*- и *T*-подрешетках ГПУ-структуры при нагреве и охлаждении материала происходят вышеупомянутые структурные фазовые переходы 1 рода.



Рис. 4. Графоаналитическое решение трансцендентного уравнения (1): 1 — функция $L(\eta)$, 2 — функция $y = (R_1\eta + R_2)/k_B\overline{T}_{tr}$.

Уравнение термодинамического равновесия для системы для случая q = v = 1/3 является трансцендентным относительно параметров дальнего порядка η_i . Записанное в рамках локально-координационного приближения при вышеуказанных энергетических ограничениях, но без учета деформационного взаимодействия и ближнего порядка в системе [4,5] оно имеет вид [4]:

$$L(\eta) \equiv \ln\left[\frac{(1+2\eta)(2+\eta)}{2(1-\eta)^2}\right] = (R_1\eta + R_2)/k_{\rm B}\overline{T}_{tr}, \quad (1)$$

где

$$R_{1} = -(1 - \nu) \sum_{i,j} (u_{ij}^{O} p_{ij}^{O} + u_{ij}^{O} p_{ij}^{O} + u_{ij}^{O} p_{ij}^{O}) = +0.308 \text{ eV}.$$

$$R_{2} = q \left\{ \sum_{i,j} \left[(u_{ij}^{T} p_{ij}^{T} + u_{ij}^{T} p_{ij}^{T}) - (u_{ij}^{O} p_{ij}^{O} + u_{ij}^{O} p_{ij}^{O}) \right] \right\}$$

$$+ (E_{T} - E_{O}) = -0.225 \text{ eV}.$$

Здесь E_O и E_T — энергии межатомного взаимодействия внедренных атомов с атомами титана, соответственно, в *O*- и *T*-подрешетках, полученные в рамках приближения среднего поля; $\eta = \langle \eta_i \rangle$ в этом же приближении.

Графоаналитическое решение уравнения (1) показано на рис. 4.

Численное решение уравнение (1), найденное методом последовательных приближений, показывает, что фазовые переходы в *O*- и *T*-подрешетках сопровождаются резким изменением величины η от положительных значений $\eta_O \approx +(0.65-0.70)$, характеризующих распределение внедренных атомов и вакансий в *O*-подрешетке, к отрицательным значениям $\eta_T \approx (0.45-0.46)$, описывающим распределение тех же структурных составляющих в *T*-подрешетке. Поскольку $|\overline{\eta}_O > |\overline{\eta}_T|$, то при таких фазовых переходах происходит заметное энергопоглощение в системе. Дальнейшее повышение температуры при $T > T_{tr}$ приводит к постепенному разупорядочению во взаимном расположении внедренных атомов, локализованных теперь преимущественно в *T*-подрешетке, и вакансий в ней (т. е. $\overline{\eta}_T \rightarrow 0$. При этом энергопоглощение в системе при росте температуры становится незначительным, или может вовсе отсутствовать. Благодаря тому, что энергия взаимодействия между однотипными атомами i-i, внедренными в соответствующие *O*- и *T*-подрешетки, оказывается отрицательной, $\overline{u_i^k} < 0$ (где по-прежнему k = O, или *T*), внедренные атомы в состоянии упорядочения в указанных подрешетках находятся в окружении преимущественно однотипных с ними атомов (но не вакансий). При этом фазовые переходы "порядок– беспорядок" сопровождаются процессами, формально аналогичными плавлению.

Противоположные изменения параметров решетки α -титана наблюдаются при охлаждении образца в диапазоне температур, соответствующих экзопику на рис. 1. Очевидно, что при этом в O- и T-подрешетках происходят структурные переходы, противоположные вышеописанным.

Кроме вышерассмотренной коллоидно-дисперсной микрофазы, наноразмерные объемы которой когерентно включены в кристаллическую решетку α-фазы титана, в порошковых частицах имеются микровключения состава $Ti_x A_y$ и $Ti_x B_y C_z$, содержащие атомы внедрения $\{A; B; C\} = \{H; C; N; O\}$. Эти инородные по отношению к а-фазе титана микрофазы имеют кристаллические решетки, отличные от ГПУ-решетки α-титана. Благодаря отклонениям элементного состава этих микрофаз от стехиометрического, в них могут, в свою очередь, происходить структурные фазовые переходы, также оставляющие неизменной тип их кристаллической решетки [3-5]. Очевидно, что эти переходы обусловлены недостаточной концентрацией атомов внедрения, входящих в кристаллическую решетку соответствующих инородных микрофаз. В качестве примера на рис. 5 приведены температурные зависимости параметров кристаллической решетки обнаруженных в порошковых частицах кубических микрофаз нестехиометрического состава: мононитрида титана TiN_{1-x} и карбонитрида титана $Ti_2C_{1-y}N_{1-x}\Box_x$, где \Box_x , \Box_y — концентрации структурных вакансий в подрешетках азота и углерода соответственно. (В химических формулах микрофаз символом "П" (пустой квадрат) обозначены, как это общепринято в литературе, структурные вакансии в соответствующих подрешетках).

Полученные результаты свидетельствуют об аномалиях изменения параметров решетки вышеуказанных инородных микрофаз в интервале температур $\Delta T_{tr} = 200-500^{\circ}$ С, которые также можно связать с обратимыми (и почти безгистерезисными) изменениями параметров дальнего порядка при структурных фазовых переходах в подрешетках соответствующих микрофаз.

Как следует из теоретического анализа [3–5], в нестехиометрическом кубическом нитриде титана при варьировании температуры должен наблюдаться лишь



Рис. 5. Изменение параметра кристаллической решетки мононитрида $\operatorname{TiN}_{1-x} \Box_x$ (*a*) и карбонитрида титана $\operatorname{Ti}_2 \operatorname{C}_{1-x} \Box_x \operatorname{N}_{1-y} \Box_y$ (*b*) при нагреве (*1*) и охлаждении (*2*) порошкового образца. Горизонтальными линиями отмечены температурные интервалы ΔT_{tr} соответствующих фазовых переходов. Символ \Box обозначает структурную вакансию.

один тип сверхструктуры и один параметр дальнего порядка, соответствующий единственному структурному фазовому переходу в подрешетке азота. В то же время, нестехиометрический карбонитрид титана характеризуется двумя сверхструктурными типами, двумя параметрами дальнего порядка ($\eta_{\rm C}, \eta_{\rm N}$) и двумя структурными переходами в подрешетках азота и углерода. Однако во всех случаях при таких переходах внедренные атомы перераспределяются между геометрически и энергетически однотипными октаэдрическими междоузлиями в элементарной ячейке соответствующей ГЦК-подрешетки титана. Поэтому можно полагать, что в этих, а также других, обнаруженных в порошковом α-титане ГЦК-микровключениях, структурные превращения указанного типа не будут вносить заметный вклад в энергопоглощение/энерговыделение на ДСК-графиках, поскольку они являются размытыми фазовыми переходами, близкими к безгистерезисным фазовым переходам второго рода [4,18,19]. Их температурное размытие связано с большими структурными флуктуациями, относительная стабилизация которых обусловлена значительными временами релаксации системы при не слишком высоких гомологических температурах перехода [19].

Вместе с тем, необходимо отметить, что результаты рентгеноструктурного анализа в данном случае не могут содержать сведения о наличии сверхтруктурных линий на соответствующих дифрактограммах из-за весьма малой суммарной брутто-концентрации участвующих в фазовых переходах микрофазных включений, а также из-за существенного различия в значениях атомных факторов титана и образующих сверхструктурные подрешетки примесных атомов [20]. Поэтому заключения о существовании сверхструктурных переходов в α -титане и сопутствующих инофазных микроструктурных включениях в данном случае базируются лишь на косвенных доказательствах. Для прямого и надежного обнаружения структурных фазовых переходов в микропримесном α -титане необходимо проведение дополнительных высокотемпературных нейтронографических исследований.

4. Выводы

1. Методами термоанализа (ДСК, ТГА, РСА) и масспектрометрии показана возможность существования упорядоченных (сверхструктурных) микрообластей коллоидных размеров в твердом растворе примесей внедрения в α -титане, а также в инородных микрофазах, содержащихся в микропримесном порошковом α -титане.

2. Определены термодинамические и микроструктурные характеристики сверхструктурных фазовых переходов, происходящих в микрообластях и микрофазах порошкового α-титана при его термоциклировании.

3. В рамках приближения среднего поля получены оценки энергий межатомного взаимодействия примесных атомов, внедренных в *O*- и *T*-подрешетках α -титана и локализованных в первой и второй координационных сферах этих подрешеток: $\overline{u}_{ii}^{O} \approx 0.5 \overline{u}_{ii}^{T} \approx -0.02$ eV.

Благодарности

Авторы выражают благодарность А.И. Малкину за предложенную тему и ее финансирование.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП ФМИ ИФХЭ РАН.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов

Список литературы

- Металлические порошки и порошковые материалы. Справочник / Под ред. М.И. Алымова, Ю.В. Левинского. Научный мир, М. (2018). 610 с.
- [2] А.М. Захаров. Диаграммы состояния двойных и тройных систем. Металлургия, М. (1990). 240 с.
- [3] А.А. Ремпель, А.И. Гусев. Нестехиометрия в твердом теле. Физматлит, М. (2018). 604 с.
- [4] А.А. Смирнов. Теория фазовых превращений и размещения атомов в сплавах внедрения. Наук. думка, Киев (1992). 280 с.
- [5] В.Н. Бугаев, В.А. Татаренко. Взаимодействие и распределение атомов в сплавах внедрения на основе плотноупакованных металлов. Наук. думка, Киев (1989). 184 с.

- [6] M. Fudjimoto. The physics of structural phase transitions. 2 ed. Springer Sci. Publ. N.Y. (2005). 283 p.
- [7] Е.Н. Каблов. Вестн. РАН 82, 6, 520 (2012).
- [8] М.Ю. Колеров, В.С. Спектор, С.В. Скворцова, А.М. Мамонов, Д.Е. Гусев, Г.В. Гуртова. Титан, 2, 48, 42 (2015).
- [9] G. Lutjering, J.C. William. Titanium. Springer–Verlag, Berlin (2007). 431 p.
- [10] А.П. Бровко, И.Н. Бекман. Изв. АН СССР. Металлы 1, 95 (1982).
- [11] C.W. Greff, D.R. Trinkle, R.C. Albers. J. Appl. Phys. 90, 2221 (2001).
- [12] D. Errandonea, Y. Meng, M. Somayazulu. Physica B 355, 116 (2005).
- [13] G.S. Bezruchko, S.V. Razorenov, G.I. Kanel, V.E. Fortov. In: Shock compression of condensed matter / Ed. M. Furnish. Mellville, N.Y. (2006). P. 92.
- [14] Жиляев, В.А. Попов, А.Р. Шарафутдинов, В.Н. Даниленко. Письма о материалах 1, 203 (2011).
- [15] В.А. Борисенок, М.В. Жерноклетов, А.Е. Ковалев, А.М. Подурец, В.Г. Симаков, М.И. Ткаченко. Физика горения и взрыва 50, 13 (2014).
- [16] E. Correta, G.T. Gray III, A.C. Lawson. J. Appl. Phys. 100, 013530 (2006).
- [17] Т.П. Черняева, В.М. Грицина. Вопросы атомной науки и техники, **2**, 15 (2008).
- [18] А.Г. Хачатурян. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. Наука, М. (1974). 384 с.
- [19] Б.Н. Ролов, В.Э. Юркевич. Физика размытых фазовых переходов. Изд-во Ростовского ун-та, Ростов (1983). 320 с.
- [20] Л.И. Миркин. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. Физматгиз, М. (1961). 863 с.

Редактор К.В. Емцев