



Всероссийская научная конференция

**Физика: фундаментальные и прикладные исследования,
образование**

*Тихоокеанский государственный университет,
г. Хабаровск, 2024*



ПОРОШКОВАЯ ТЕХНОЛОГИЯ МЕТАЛЛУРГИИ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ГРАДИЕНТНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ

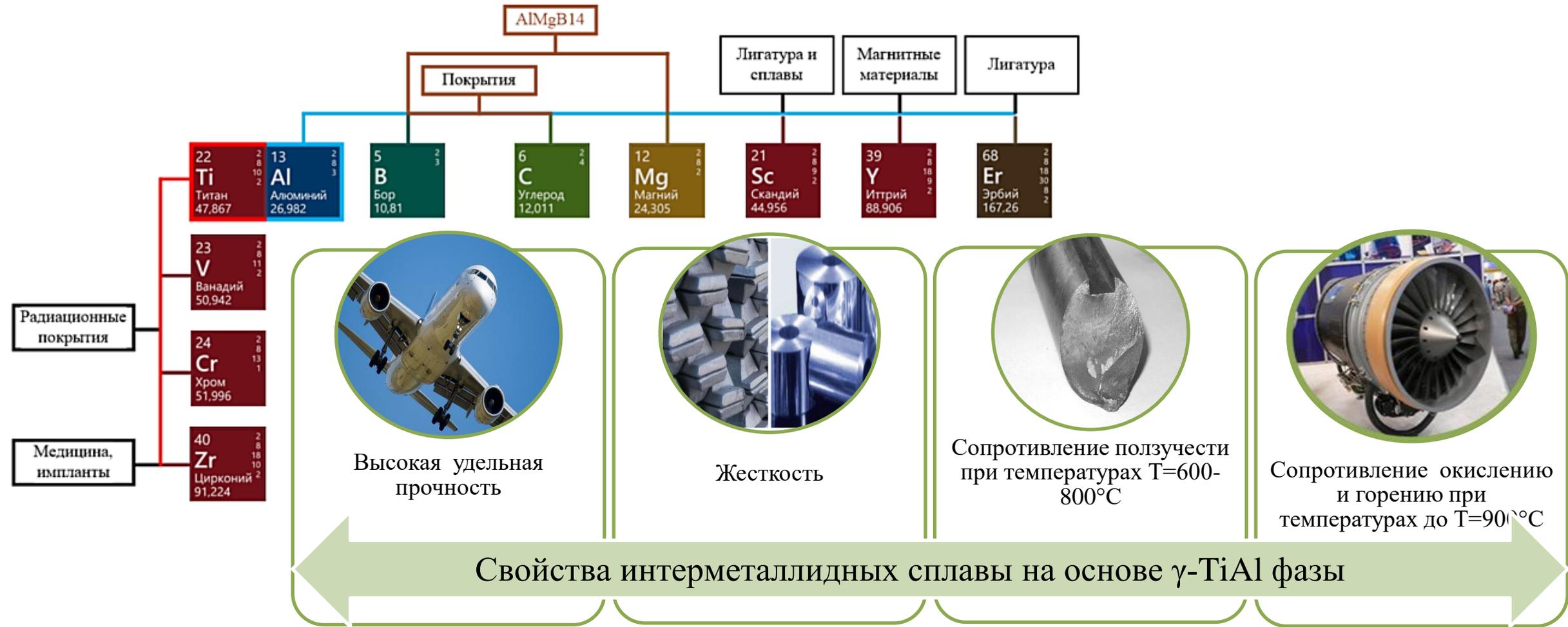


Национальный
исследовательский

**Томский
государственный
университет**

Каракчиева Наталья Ивановна, канд. хим. наук,
снс Лаборатории химических технологий ХФ ТГУ

Материалы / сплавы на основе Ti



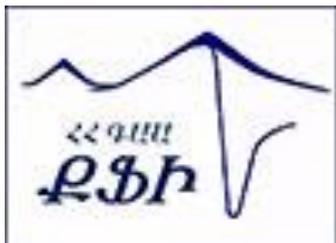
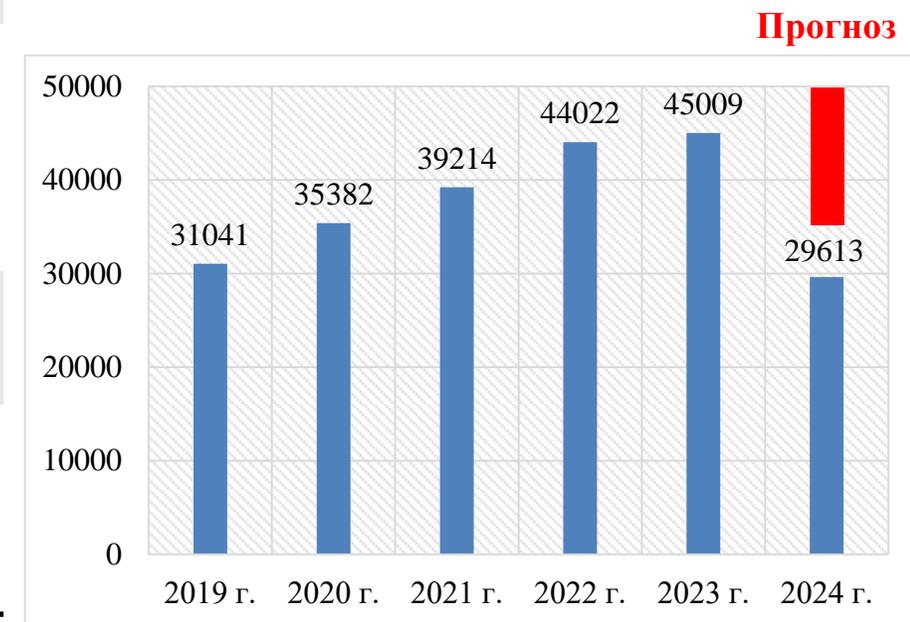
Методы получения титановых сплавов:

- индукционная плавка
- дуговая плавка
- механохимия
- СВС
- **порошковая металлургия**

Достижение оптимальной комбинации функциональных свойств с помощью варьирования элементного состава обуславливает необходимость *разработки новых технологий* получения градиентных материалов на основе титана

Организация, страна	Область исследований	Основные результаты
National Institute of Technology Tiruchirappalli, India	структурно-фазовое состояние в системе Ti/Al.	Зарождение и рост интерметаллической фазы $TiAl_3$ в паре Ti/Al происходит в основном на границе раздела Ti/ $TiAl_3$
Институт металлургии УрО РАН, РФ	Исследование легких сплавов на основе алюминия, легированных скандием, а также элементами из группы (Ti, Zr, Hf и др.)	Определены закономерности затвердевания указанных систем, морфология и состав интерметаллидов при заданном медленном затвердевании в тигле удлиненной формы.
Институт химической физики НАН РА	синтезу гидридов металлов методом СВС.	Установлено, что существует явная зависимость структуры полученных сплавов от состава исходной шихты.
Томский государственный университет, РФ	Исследован и разработан метод получения ванадиевого сплава (вакуумно-дуговая гарнисажная плавка), а также исследованы методы нанесения плакирующего слоя их коррозионностойкого материала (горячая пластическая деформация, кручение под квазигидростатическом давлением).	

Динамика роста научных работ по Ti-Al за период 2019-2024 гг.



Национальный исследовательский
Томский государственный университет

Элемент	Mg	Ti	Al	Ti-Al	4
Sc	Повышает прочностные характеристик, пластичность (до 25-30% масс)	Понижает модуль упругости	Повышает предел прочности	Повышает термостойкость, высокотемпературный предел текучести	
Y	повышает прочностные характеристик при комнатной и повышенной температуре	Улучшает микроструктуру, увеличивает пластичность , пассивируемость , снижение перенапряжение водорода	Повышает микротвердость, температуру кристаллизации, твердость по Виккерсу, электрическое сопротивление, более низкая восприимчивость к растрескиванию	Увеличивает устойчивость к окислению за счет образования оксидной пленки	
Nd		Понижает модуль упругости без потери прочности	Улучшает жаропрочность, повышает твердость с минимальным изменением пластичности		
Dy	Повышает прочностные характеристик, пластичность	Повышает пластичность	повышает прочностные и пластические свойства на сжатие	Увеличивает общую намагниченности , устойчивость к окислению	
Ho		Понижает модуль упругости	Уменьшает газосодержание, снижает удельное сопротивление и повышает прочность		
Er		Улучшает микроструктуры , повышает прочность		Уменьшает размер зерна , повышает напряжение высокотемпературного течения	
Zr	Измельчение зерна, повышение предела текучести и пластичности, уменьшение пористости	Понижает модуль упругости без потери прочности	Уменьшает размер зерна, улучшает механические характеристики при повышенных температурах, повышает прочность	Уменьшает размер зерна, повышает термостойкость , высокотемпературный и низкотемпературный предел текучести	
Hf	Измельчение зерна, повышение микротвердости	Понижает модуль упругости		Уменьшает размер зерна, повышает термостойкость	
M		Улучшает биосовместимость,	Уменьшает температуру воспламенения,	Уменьшает плотность и размер зерна.	

Порядковый номер	Элемент	Электронная конфигурация	Структура решетки, Å	$\Gamma_{\text{ат}}$ нм	Температура, °С			Емкость по водороду, масс. %	Максимальная растворимость в Mg, %масс
					Плавления	Кипения	образования гидрида		
12	Mg	[Ne]3s ²	Гексагональная a=3,203, c=5,200	0,160	650	1090	260-570	7,61	-
13	Al	[Ne]3s ² 3p ¹	Кубическая гранцентрированная a = 4,050	0,124	660	2470	-10-90	10,00	12,6
22	Ti	[Ar]3d ² 4s ²	Гексагональная плотнупакованная, a =2,951, c=4,697 (α)	0,147	1660	3287	300-1000	0,89-4,02	0,045
21	Sc	[Ar]3d ¹ 4s ²	Гексагональная, a=3,309, c=5,268	0,162	1541	2837	450	4,26	29,0-30,0
39	Y	[Kr]4d ¹ 5s ²	Гексагональная, a=3,647, c=5,731	0,178	1522	3338	300-1500	2,20-3,26	12,0-12,7
60	Nd	[Xe]4f ⁶ 6s ²	Гексагональная, a=3,658 c=11,800	0,182	1021	3068	200-1250	1,36-2,04	3,6
66	Dy	[Xe]4f ¹⁰ 6s ²	Гексагональная, a=3,593, c=5,654	0,180	1407	2567	230-1350	1,18-1,81	25,8
67	Ho	[Xe]4f ¹¹ 6s ²	Гексагональная, a=3,577, c=5,616	0,179	1474	2695	230-500	1,17-1,79	28,0
68	Er	[Xe]4f ¹² 6s ²	Гексагональная, a=3,560, c=5,587	0,177	1529	2863	230-500	1,15-1,76	32,7
40	Zr	[Kr]4d ² 5s ²	Гексагональная, a=3,231, c=5,148	0,160	1852	4377	300-1100	1,67-2,14	3,6
72	Hf	[Yb ²⁺]5d ² 6s ²	Гексагональная, a=3,196, c=5,051	0,167	2233	4603	300-1000	0,94-1,11	не смешиваются при P < 4 ГПа

Цель работы - разработать новые металлические материалы на основе системы Ti-Al-Me (Sc, Y, Dy, Ho, Er, Zr, Hf), выявить фундаментальные связи состав-структура-свойства и их влияние на механические свойства магниевых сплавов Mg95.

Для достижения цели работы были поставлены следующие **задачи**:

- **Провести** теоретическое моделирование фазовых равновесий в многокомпонентных системах на основе Ti-Al-Me (Sc, Y, Dy, Ho, Er, Zr, Hf), **определить** термодинамические закономерности устойчивости фаз, их кристаллические структуры и функциональные свойства;
- На основании результатов математического моделирования **разработать** физико-химические основы технологии порошковой металлургии («Гидридной технологии») новых металлических материалов на основе системы Ti-Al-Me (Sc, Y, Dy, Ho, Er, Zr, Hf) и изучить закономерности их формирования;
- **Выявить закономерности** изменения функциональных характеристик металлических материалов на основе системы Ti-Al-Me, обусловленные твердофазными превращениями в условиях их получения;
- **Выявить закономерности** изменения механических свойств магниевых сплавов от состава лигатуры на основе Ti-Al.

- Лигатура Ti₄₉Al₂X (Me= Sc, Y, Nd, Dy, Ho, Er, Zr, Hf; ат.%), полученные «Гидридной технологией»;
- Магнийевый сплав Mg₉₅-лигатура

Исходные материалы для получения сплавов, лигатуры и композиционных материалов

Для получения образцов использовали порошок титана (ПТЭМ-1, ТПП – 8, алюминия (АСД-0, АСД-4), скандия (СкМ-1); иттрия (ИтМ-1), диспрозия (ДиМ-1); гольмия (ГоМ-1); эрбия (ЭрБ-1), порошок кальциетермический циркония; порошок электролитического гафния, магний Mg-95

Предмет исследований

Структура, физико-механические и прочностные свойства лигатур на основе Ti-Al-X (X= Sc, Y, Nd, Dy, Ho, Er, Zr, Hf). Структура и механические свойства магниевого сплава состава Mg₉₅-лигатура.

Методы моделирования

АТАТ, USPEX, в качестве интерфейса использовались ab initio программы Quantum Espresso и VASP;

Параметры решеток, объем элементарной ячейки, пространственная группа, энергия ячейки, геометрическая оптимизация элементарных ячеек вычисляли дополнительно в коде CASTEP;

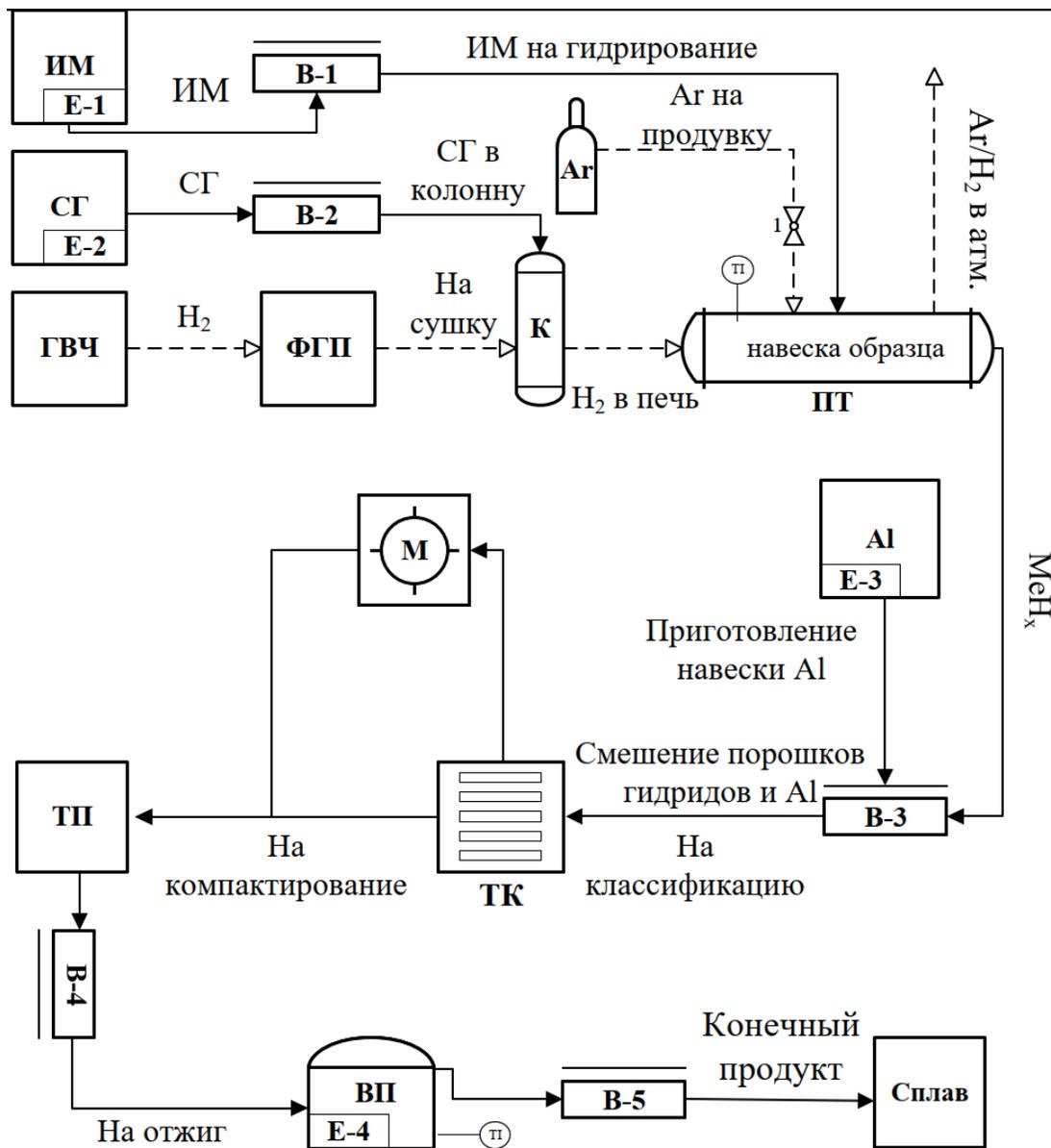
Идентификация структурного состояния и количественного содержания фаз осуществлялось методом Ритвельда с помощью Reflex;

Фазовые диаграммы тройных систем построенные с помощью бесплатных ресурсов, предоставляемых открытой платформой MaterialsProject.

Методы исследований

Растровая и просвечивающая электронная микроскопия с приставками для рентгеноспектрального анализа и EBSD-детектором, рентгенофазовые и рентгеноструктурные исследования с использованием баз данных PDF-4, методы исследования плотности микротвердости по Виккерсу, исследования электросопротивления.

Е – емкость,
 В – весы,
 ИМ – металл,
 СГ – силикагель,
 ГВЧ – генератор
 водорода высокочистого,
 Аг – газ аргон,
 P2 – газ водород,
 ПТ – печь трубчатая,
 ТК – тарельчатый
 классификатор,
 М – мельница,
 ТП – таблетпресс,
 ВП –
 высокотемпературная
 печь



РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



ПАТЕНТ

НА ИЗОБРЕТЕНИЕ
 № 2804402

Способ получения сплавов на основе интерметаллидов

Патентообладатель: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Национальный исследовательский Томский государственный университет" (RU)

Авторы: Сачков Виктор Иванович (RU), Жуков Илья Александрович (RU), Каракчиева Наталья Ивановна (RU), Курзина Ирина Александровна (RU), Хрусталёв Антон Павлович (RU), Соколов Сергей Дмитриевич (RU), Воронцов Александр Борисович (RU)

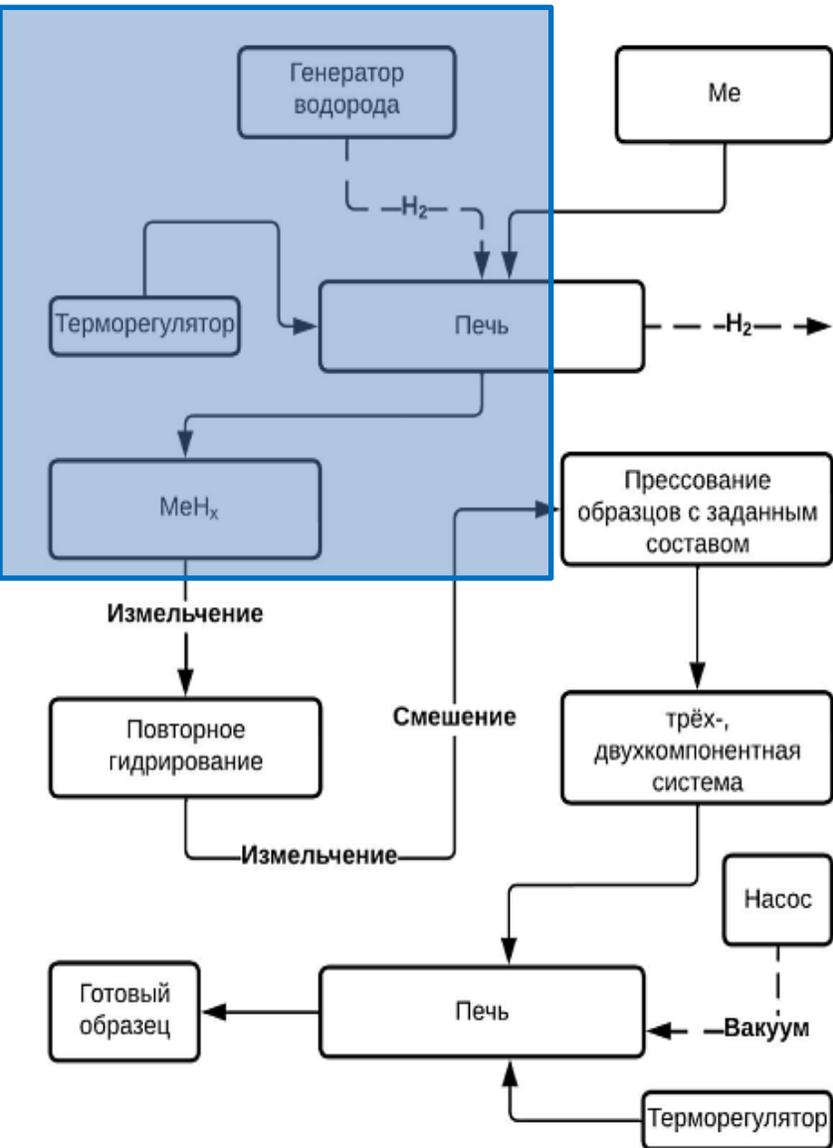
Заявка № 2022122233

Приоритет изобретения 16 августа 2022 г.
 Дата государственной регистрации в Государственном реестре изобретений Российской Федерации 28 сентября 2023 г.
 Срок действия исключительного права на изобретение истекает 16 августа 2042 г.

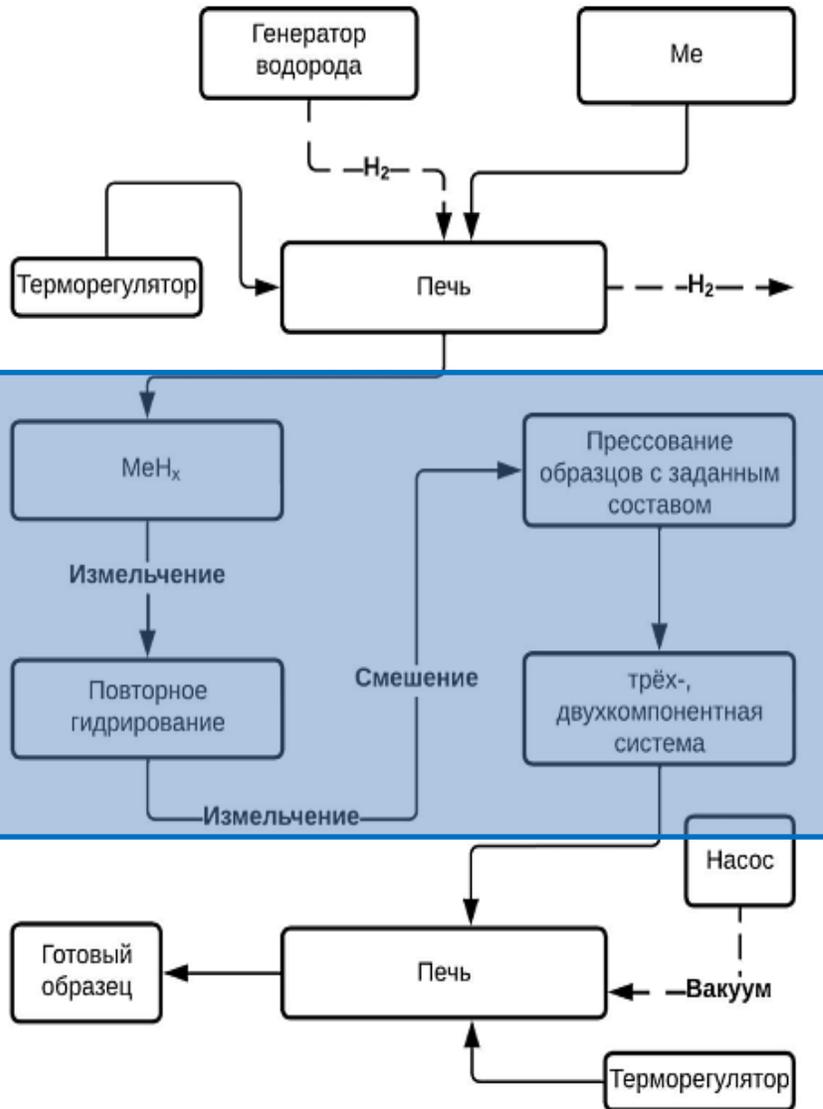
Руководитель Федеральной службы по интеллектуальной собственности

Ю.С. Зубов

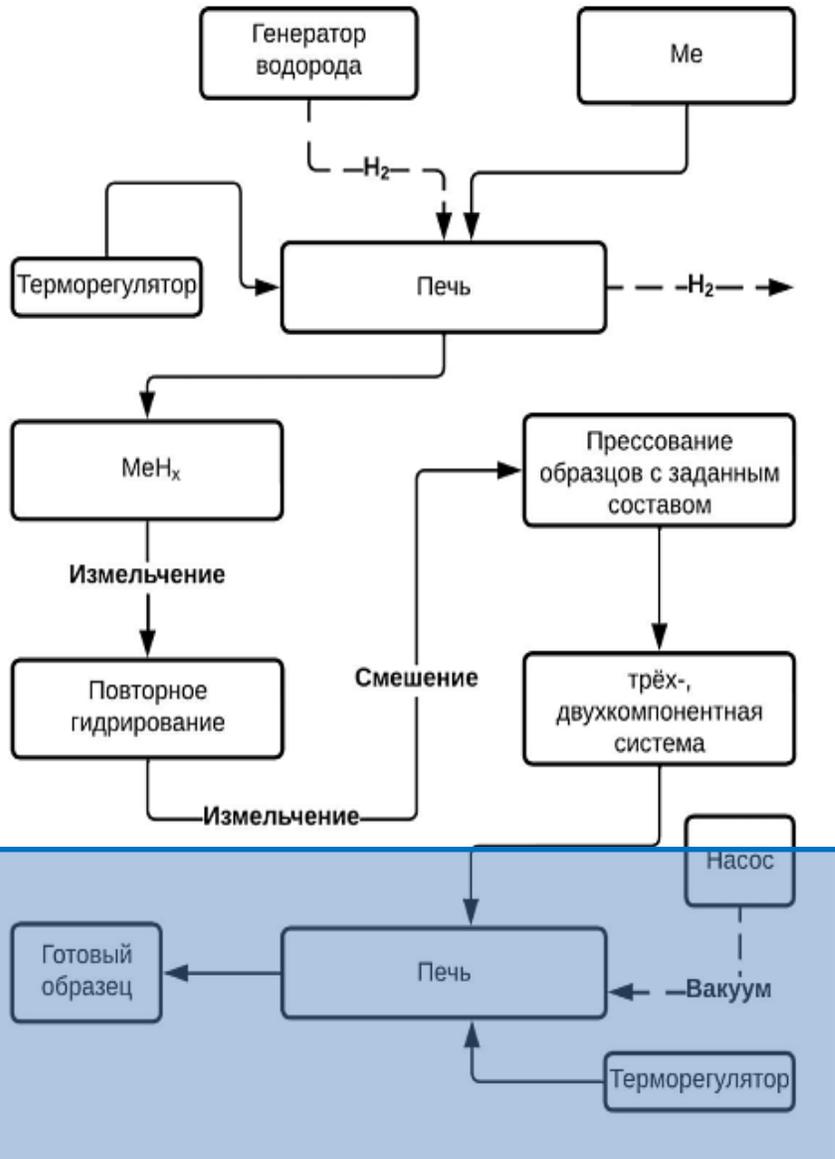
Рисунок — Схема получения образцов по «Гидридной технологии»



БЛОК 1: ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРИДОВ МЕТАЛЛОВ

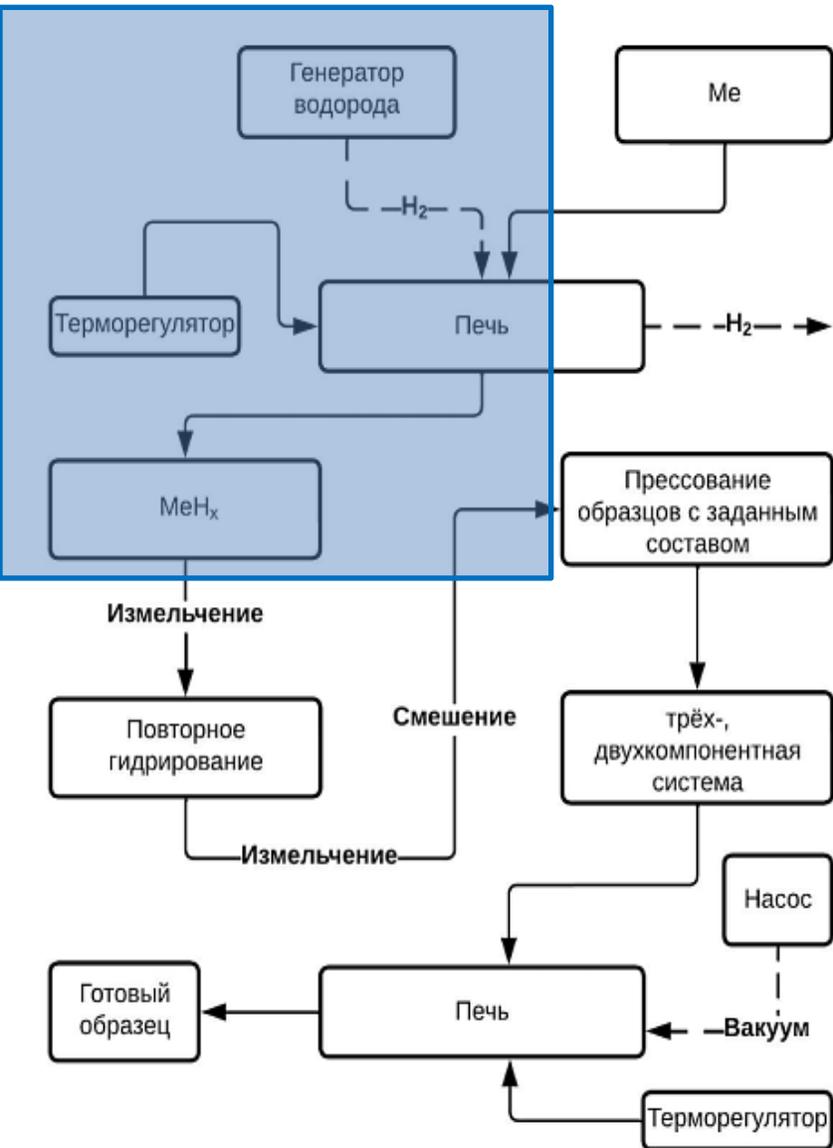


БЛОК 2: КОМПАКТИРОВАНИЕ СМЕСИ

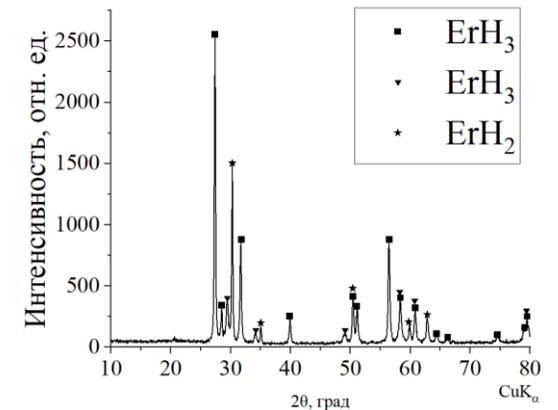
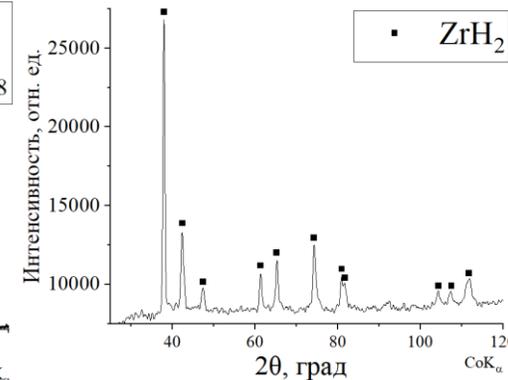
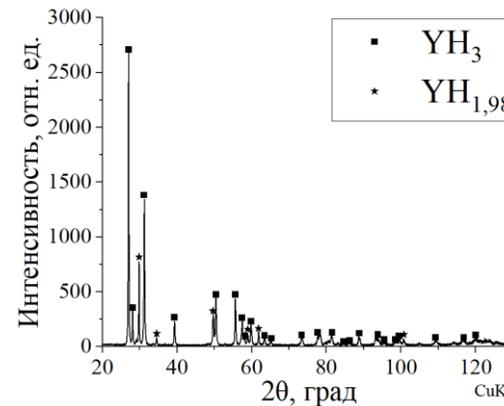
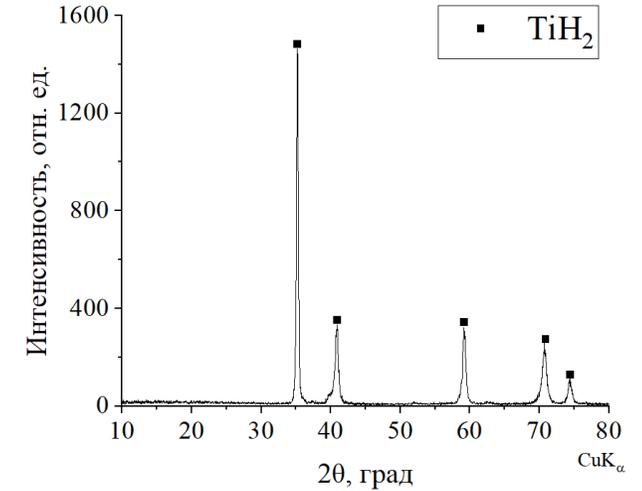


БЛОК 3: ОТЖИГ ОБРАЗЦОВ

БЛОК 1: ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРИДОВ МЕТАЛЛОВ

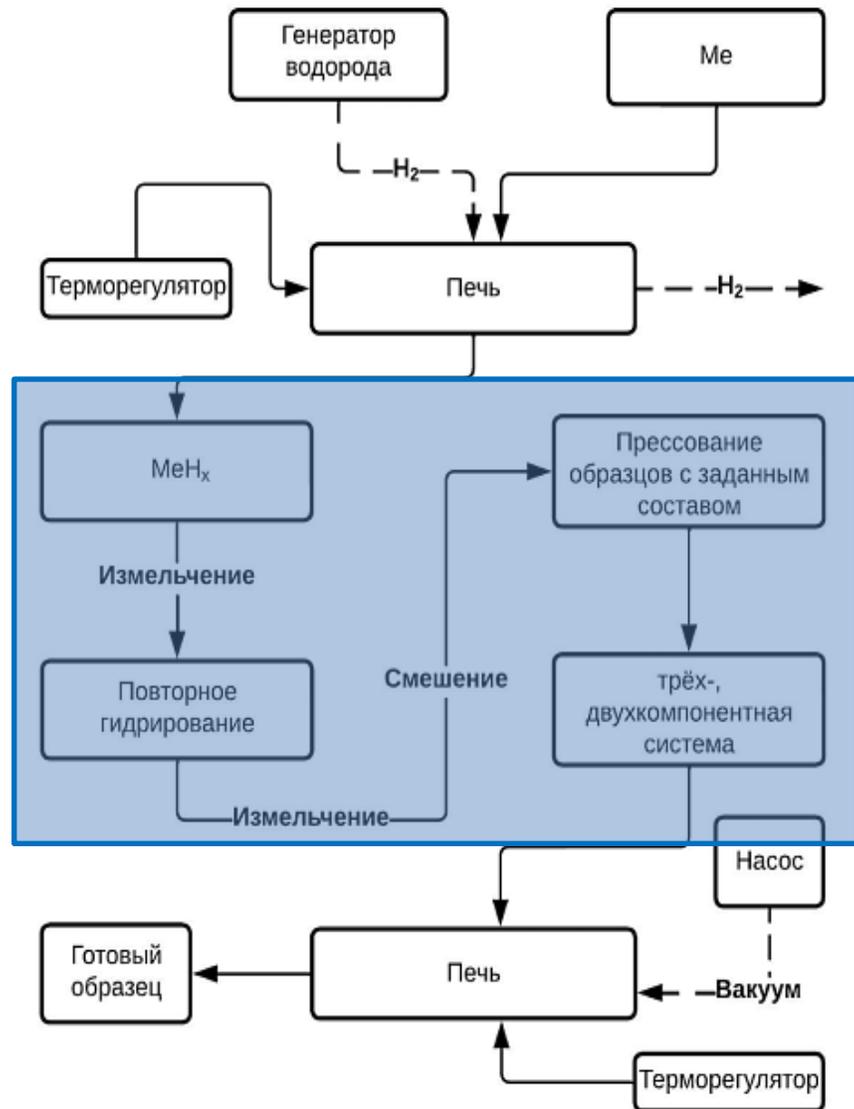


Me	Реакции получения гидридов	Температура гидрирования
Sc, Y	$Ti + H_2 = TiH_2$ $Sc + H_2 = ScH_2$ $Y + H_2 = YH_2$ $2Y + 3H_2 = 2YH_3$	420 550 500
Nd, Dy, Ho, Er	$Me + 3H_2 = 3MeH_3$	380 (Nd), 500(Dy), 420 (Ho), 550 (Er)
Zr, Hf	$Me + H_2 \rightarrow MeH_2$	380 (Zr), 500 (Hf)



Дифрактограммы TiH_2 , YH_x , ZrH_2 , ErH_x

БЛОК 2: КОМПАКТИРОВАНИЕ СМЕСИ

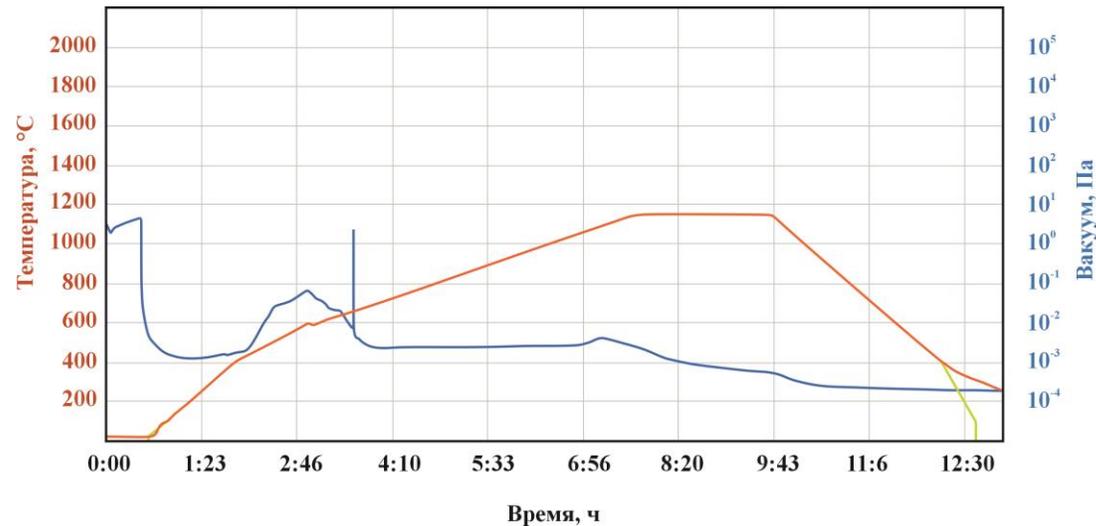
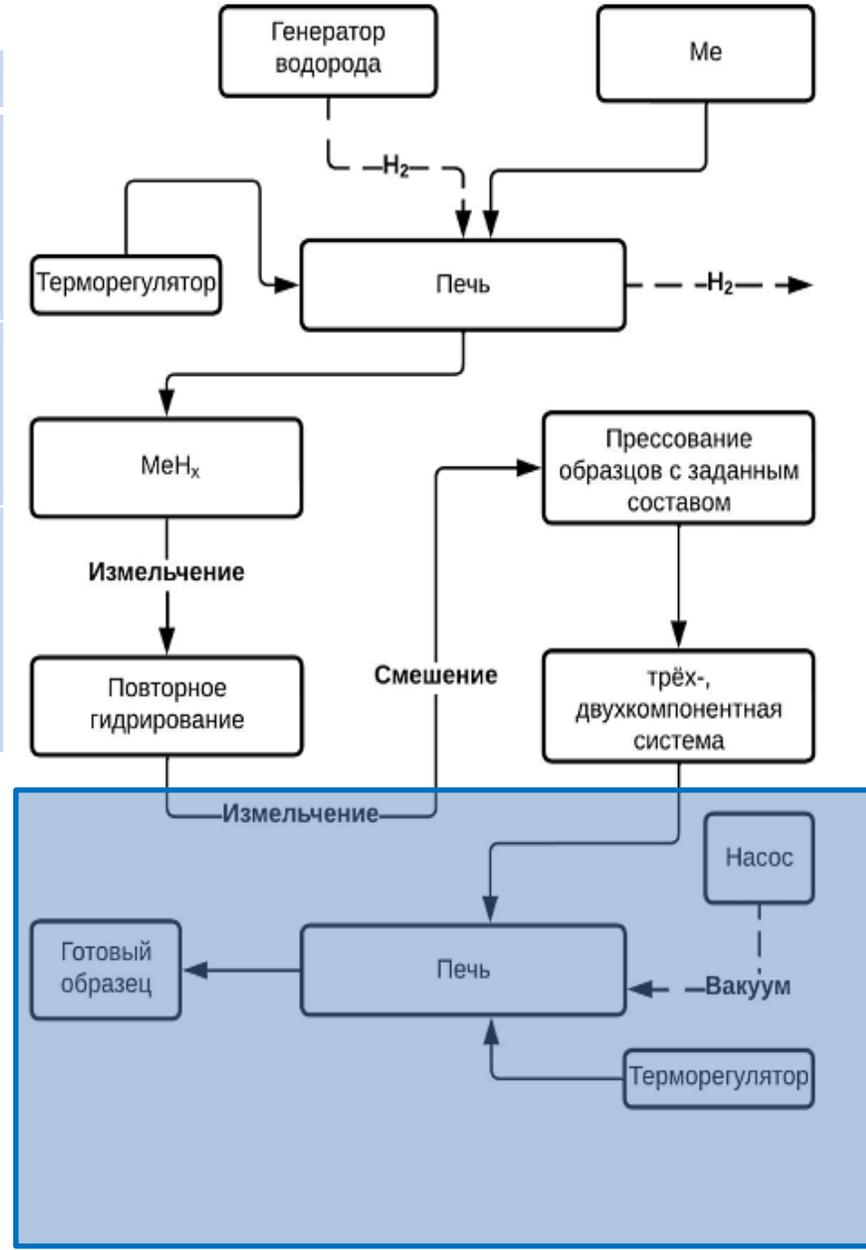


Нагрузка до 4 МПа.
 На выходе - цилиндр с насыпной плотностью $3 \text{ г/см}^3 \pm 0,2$



БЛОК 3: ОТЖИГ (1150 °С)

Металл (Me)	Реакции
Sc, Y	$\text{TiH}_2 + \text{MeH}_{2-3} \rightarrow \text{Ti-Me} + \text{H}_2 \uparrow$ $\text{Al} + \text{MeH}_{2-3} \rightarrow \text{Al-Me} + \text{H}_2 \uparrow$ $\text{TiH}_2 + \text{Al} + \text{MeH}_2 \rightarrow \text{Ti-Al-Me} + 2\text{H}_2 \uparrow$
Nd, Dy, Ho, Er	$\text{TiH}_2 + \text{MeH}_3 \rightarrow \text{Ti-Me} + \text{H}_2 \uparrow$ $\text{Al} + \text{MeH}_3 \rightarrow \text{Al-Me} + \text{H}_2 \uparrow$ $2\text{TiH}_2 + 2\text{Al} + 2\text{MeH}_3 \rightarrow 2\text{Ti-Al-Me} + 5\text{H}_2 \uparrow$
Zr, Hf	$\text{TiH}_2 + \text{MeH}_2 \rightarrow \text{Ti-Me} + 2\text{H}_2 \uparrow$ $\text{Al} + \text{MeH}_3 \rightarrow \text{Al-Me} + \text{H}_2 \uparrow$ $\text{TiH}_2 + \text{Al} + \text{MeH}_2 \rightarrow \text{Ti-Al-Me} + 2\text{H}_2 \uparrow$



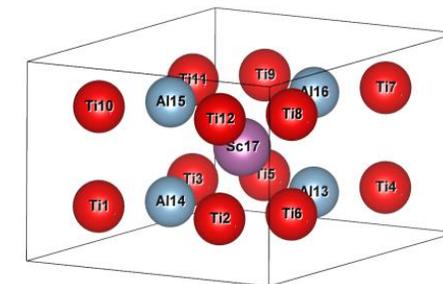
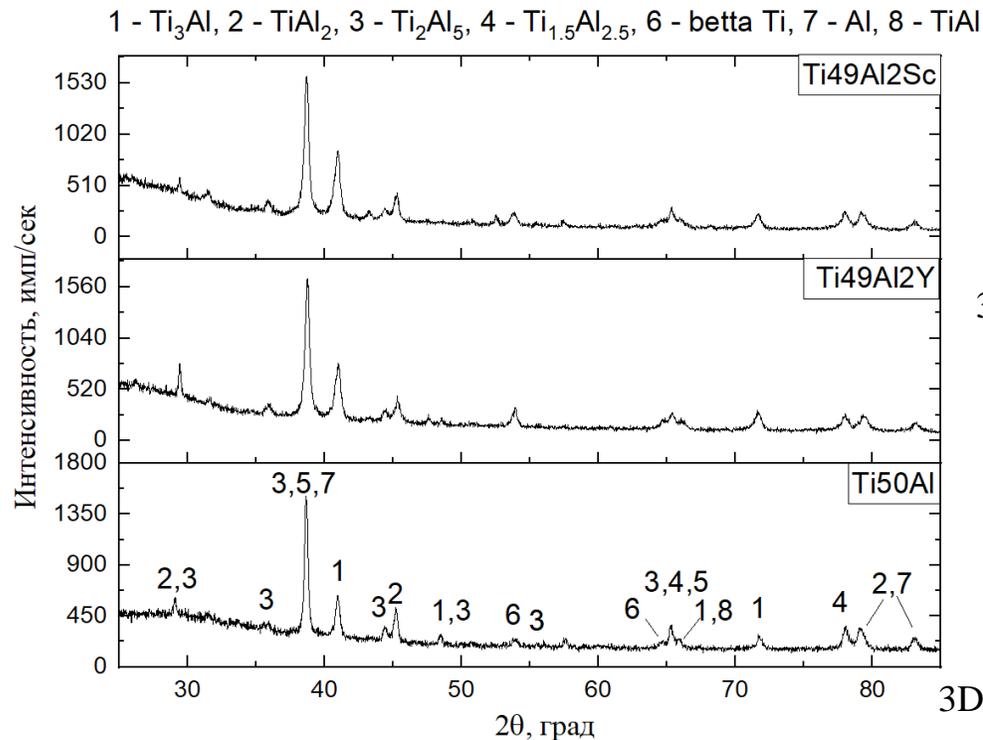
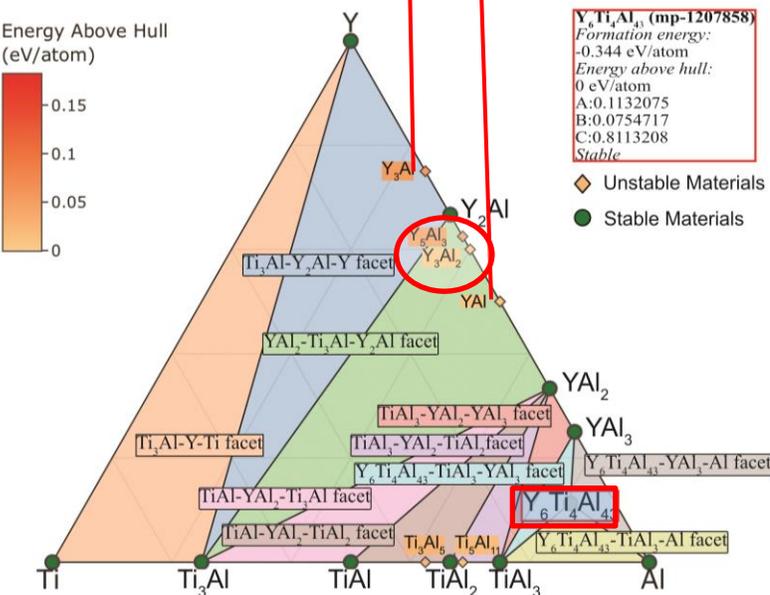
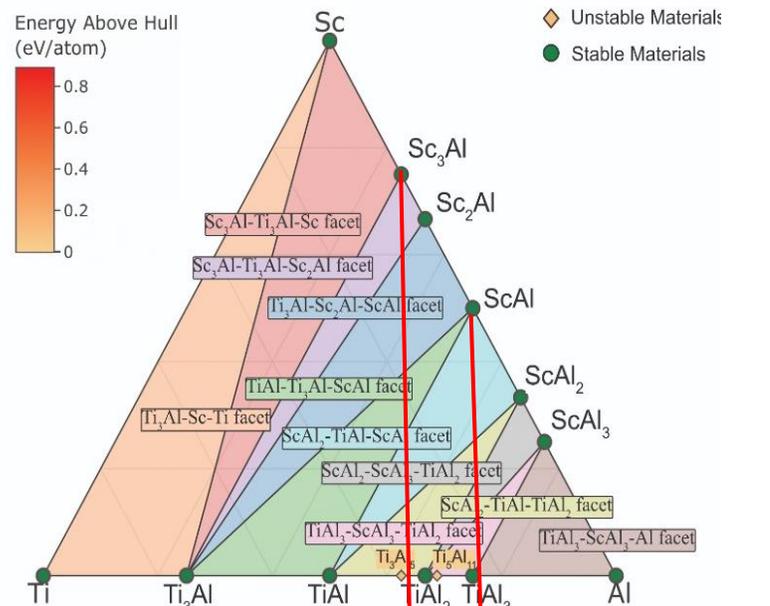
Период	Ряд	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII						
I	1	(H)						H ¹ Водород 1,00797	He ² Гелий 4,0026	Обозначение элемента	Атомный номер				
II	2	Li ³ Литий 6,939	Be ⁴ Бериллий 9,0122	B ⁵ Бор 10,811	C ⁶ Углерод 12,01115	N ⁷ Азот 14,0067	O ⁸ Кислород 15,9994	F ⁹ Фтор 18,9984	Ne ¹⁰ Неон 20,179	Li ³ Литий 6,939					
III	3	Na ¹¹ Натрий 22,9898	Mg ¹² Магний 24,305	Al ¹³ Алюминий 26,9815	Si ¹⁴ Кремний 28,086	P ¹⁵ Фосфор 30,9738	S ¹⁶ Сера 32,064	Cl ¹⁷ Хлор 35,453	Ar ¹⁸ Аргон 39,948	Относительная атомная масса					
IV	4	K ¹⁹ Калий 39,102	Ca ²⁰ Кальций 40,08	21 44,956 Sc Скандий	22 47,90 Ti Титан	23 50,942 V Ванадий	24 51,996 Cr Хром	25 54,9380 Mn Марганец	26 55,847 Fe Железо	27 58,9330 Co Кобальт	28 58,71 Ni Никель				
	5	29 63,546 Cu Медь	30 65,37 Zn Цинк	31 69,72 Ga Галлий	32 72,59 Ge Германий	33 74,9216 As Мышьяк	34 78,96 Se Селен	35 79,904 Br Бром	36 83,80 Kr Криптон						
V	6	Rb ³⁷ Рубидий 85,47	Sr ³⁸ Стронций 87,62	39 88,905 Y Иттрий	40 91,22 Zr Цирконий	41 92,906 Nb Ниобий	42 95,94 Mo Молибден	43 [99] Tc Технеций	44 101,07 Ru Рутений	45 102,905 Rh Родий	46 106,4 Pd Палладий				
	7	47 107,868 Ag Серебро	48 112,40 Cd Кадмий	49 114,82 In Индий	50 118,69 Sn Олово	51 121,75 Sb Сурьма	52 127,60 Te Теллур	53 126,9044 I Иод	54 131,30 Xe Ксенон						
VI	8	Cs ⁵⁵ Цезий 132,905	Ba ⁵⁶ Барий 137,327	57 138,91 La* Лантан	72 178,49 Hf Гафний	73 180,948 Ta Тантал	74 183,85 W Вольфрам	75 186,2 Re Рений	76 190,2 Os Осмий	77 192,2 Ir Иридий	78 195,09 Pt Платина				
	9	79 196,967 Au Золото	80 200,59 Hg Ртуть	81 204,37 Tl Таллий	82 207,19 Pb Свинец	83 208,980 Bi Висмут	84 [210]* Po Полоний	85 [210] At Астат	86 [222] Rn Радон						
VII	10	Fr ⁸⁷ Франций [223]	Ra ⁸⁸ Радий [226]	89 [227] Ac** Актиний	104 [261] Rf Резерфордий	105 [262] Db Дубний	106 [263] Sg Сиборгий	107 [262] Bh Борий	108 [265] Hs Хассий	109 [266] Mt Мейтнерий	110				
		58 140,12 Ce Церий	59 140,907 Pr Празеодим	60 144,24 Nd Неодим	61 [147]* Pm Прометий	62 150,35 Sm Самарий	63 151,96 Eu Европий	64 157,25 Gd Гадолиний	65 158,924 Tb Тербий	66 162,50 Dy Диспрозий	67 164,930 Ho Гольмий	68 167,26 Er Эрбий	69 [168,934] Tm Тулий	70 173,04 Yb Иттербий	71 174,97 Lu Лютеций
		90 232,038 Th Торий	91 [231] Pa Протактиний	92 238,03 U Уран	93 [237] Np Нептуний	94 [244] Pu Плутоний	95 [243] Am Америций	96 [247] Cm Кюрий	97 [247] Bk Берклий	98 [252]* Cf Калифорний	99 [254] Es Эйнштейний	100 [257] Fm Фермий	101 [257] Md Менделевий	102 [255] No Нобелий	103 [256] Lr Лоуренсий

Период	Ряд	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII						
I	1	(H)						H ¹ Водород 1,00797	He ² Гелий 4,0026	Обозначение элемента	Атомный номер				
II	2	Li ³ Литий 6,939	Be ⁴ Бериллий 9,0122	B ⁵ Бор 10,811	C ⁶ Углерод 12,01115	N ⁷ Азот 14,0067	O ⁸ Кислород 15,9994	F ⁹ Фтор 18,9984	Ne ¹⁰ Неон 20,179	Li ³ Литий 6,939					
III	3	Na ¹¹ Натрий 22,9898	Mg ¹² Магний 24,305	Al¹³ Алюминий 26,9815	Si ¹⁴ Кремний 28,086	P ¹⁵ Фосфор 30,9738	S ¹⁶ Сера 32,064	Cl ¹⁷ Хлор 35,453	Ar ¹⁸ Аргон 39,948	Относительная атомная масса					
IV	4	K ¹⁹ Калий 39,102	Ca ²⁰ Кальций 40,08	21 44,956 Sc Скандий	22 47,90 Ti Титан	23 50,942 V Ванадий	24 51,996 Cr Хром	25 54,9380 Mn Марганец	26 55,847 Fe Железо	27 58,9330 Co Кобальт	28 58,71 Ni Никель				
	5	29 63,546 Cu Медь	30 65,37 Zn Цинк	Ga ³¹ Галлий 69,72	Ge ³² Германий 72,59	As ³³ Мышьяк 74,9216	Se ³⁴ Селен 78,96	Br ³⁵ Бром 79,904	Kr ³⁶ Криптон 83,80						
V	6	Rb ³⁷ Рубидий 85,47	Sr ³⁸ Стронций 87,62	39 88,905 Y Иттрий	40 91,22 Zr Цирконий	41 92,906 Nb Ниобий	42 95,94 Mo Молибден	43 [99] Tc Технеций	44 101,07 Ru Рутений	45 102,905 Rh Родий	46 106,4 Pd Палладий				
	7	47 107,868 Ag Серебро	48 112,40 Cd Кадмий	In ⁴⁹ Индий 114,82	Sn ⁵⁰ Олово 118,69	Sb ⁵¹ Сурьма 121,75	Te ⁵² Теллур 127,60	I ⁵³ Иод 126,9044	Xe ⁵⁴ Ксенон 131,30						
VI	8	Cs ⁵⁵ Цезий 132,905	Ba ⁵⁶ Барий 137,33	57 138,91 La* Лантан	72 178,49 Hf Гафний	73 180,948 Ta Тантал	74 183,85 W Вольфрам	75 186,2 Re Рений	76 190,2 Os Осмий	77 192,2 Ir Иридий	78 195,09 Pt Платина				
	9	79 196,967 Au Золото	80 200,59 Hg Ртуть	Tl ⁸¹ Таллий 204,37	Pb ⁸² Свинец 207,19	Bi ⁸³ Висмут 208,980	Po ⁸⁴ Полоний [210]*	At ⁸⁵ Астат [210]	Rn ⁸⁶ Радон [222]						
VII	10	Fr ⁸⁷ Франций [223]	Ra ⁸⁸ Радий [226]	89 [227] Ac** Актиний	104 [261] Rf Резерфордий	105 [262] Db Дубний	106 [263] Sg Сиборгий	107 [262] Bh Борий	108 [265] Hs Хассий	109 [266] Mt Мейтнерий	110				
		58 140,12 Ce Церий	59 140,907 Pr Празеодим	60 144,24 Nd Неодим	61 [147]* Pm Прометий	62 150,35 Sm Самарий	63 151,96 Eu Европий	64 157,25 Gd Гадолиний	65 158,924 Tb Тербий	66 162,50 Dy Диспрозий	67 164,930 Ho Гольмий	68 167,26 Er Эрбий	69 68,934 Tm Тулий	70 173,04 Yb Иттербий	71 174,97 Lu Лютеций
		90 232,038 Th Торий	91 [231] Pa Протактиний	92 238,03 U Уран	93 [237] Np Нептуний	94 [244] Pu Плутоний	95 [243] Am Америций	96 [247] Cm Кюрий	97 [247] Bk Берклий	98 [252]* Cf Калифорний	99 [254] Es Эйнштейний	100 [257] Fm Фермий	101 [257] Md Менделевий	102 [255] No Нобелий	103 [256] Lr Лоуренсий

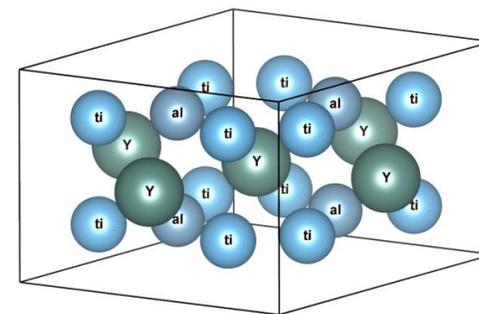
Подгруппа титана

Период	Ряд	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII						
I	1	(H)						H ¹ 1,00797 Водород	He ² 4,0026 Гелий	Обозначение элемента	Атомный номер				
II	2	Li ³ 6,939 Литий	Be ⁴ 9,0122 Бериллий	B ⁵ 10,811 Бор	C ⁶ 12,01115 Углерод	N ⁷ 14,0067 Азот	O ⁸ 15,9994 Кислород	F ⁹ 18,9984 Фтор	Ne ¹⁰ 20,179 Неон	Li ³ 6,939 Литий					
III	3	Na ¹¹ 22,9898 Натрий	Mg ¹² 24,305 Магний	Al ¹³ 26,9815 Алюминий	Si ¹⁴ 28,086 Кремний	P ¹⁵ 30,9738 Фосфор	S ¹⁶ 32,064 Сера	Cl ¹⁷ 35,453 Хлор	Ar ¹⁸ 39,948 Аргон	Относительная атомная масса					
IV	4	K ¹⁹ 39,102 Калий	Ca ²⁰ 40,08 Кальций	21 44,956 Sc Скандий	22 47,90 Ti Титан	23 50,942 V Ванадий	24 51,996 Cr Хром	25 54,9380 Mn Марганец	26 55,847 Fe Железо	27 58,9330 Co Кобальт	28 58,71 Ni Никель				
	5	29 63,546 Cu Медь	30 65,37 Zn Цинк	31 69,72 Ga Галлий	32 72,59 Ge Германий	33 74,9216 As Мышьяк	34 78,96 Se Селен	35 79,904 Br Бром	36 83,80 Kr Криптон						
V	6	Rb ³⁷ 85,47 Рубидий	Sr ³⁸ 87,62 Стронций	39 88,905 Y Иттрий	40 91,22 Zr Цирконий	41 92,906 Nb Ниобий	42 95,94 Mo Молибден	43 [99] Tc Технеций	44 101,07 Ru Рутений	45 102,905 Rh Родий	46 106,4 Pd Палладий				
	7	47 107,868 Ag Серебро	48 112,40 Cd Кадмий	49 114,82 In Индий	50 118,69 Sn Олово	51 121,75 Sb Сурьма	52 127,60 Te Теллур	53 126,9044 I Иод	54 131,30 Xe Ксенон						
VI	8	Cs ⁵⁵ 132,905 Цезий	Ba ⁵⁶ 137,33 Барий	57 138,91 La* Лантан	72 178,49 Hf Гафний	73 180,948 Ta Тантал	74 183,85 W Вольфрам	75 186,2 Re Рений	76 190,2 Os Осмий	77 192,2 Ir Иридий	78 195,09 Pt Платина				
	9	79 196,967 Au Золото	80 200,59 Hg Ртуть	81 204,37 Tl Таллий	82 207,19 Pb Свинец	83 208,980 Bi Висмут	84 [210]* Po Полоний	85 [210] At Астат	86 [222] Rn Радон						
VII	10	Fr ⁸⁷ [223] Франций	Ra ⁸⁸ [226] Радий	89 [227] Ac** Актиний	104 [261] Rf Резерфордий	105 [262] Db Дубний	106 [263] Sg Сиборгий	107 [262] Bh Борий	108 [265] Hs Хассий	109 [266] Mt Мейтнерий	110				
		58 140,12 Ce Церий	59 140,907 Pr Празеодим	60 144,24 Nd Неодим	61 [147]* Pm Прометий	62 150,35 Sm Самарий	63 151,96 Eu Европий	64 157,25 Gd Гадолиний	65 158,924 Tb Тербий	66 162,50 Dy Диспрозий	67 164,930 Ho Гольмий	68 167,26 Er Эрбий	69 [168,934] Tm Тулий	70 173,04 Yb Иттербий	71 174,97 Lu Лютеций
		90 232,038 Th Торий	91 [231] Pa Протактиний	92 238,03 U Уран	93 [237] Np Нептуний	94 [244] Pu Плутоний	95 [243] Am Америций	96 [247] Cm Кюрий	97 [247] Bk Берклий	98 [252]* Cf Калифорний	99 [254] Es Эйнштейний	100 [257] Fm Фермий	101 [257] Md Менделевий	102 [255] No Нобелий	103 [256] Lr Лоуренсий

Период	Ряд	I		II		III		IV		V		VI		VII		VIII	
I	1	(H)												H ¹ Водород 1,00797	He ² Гелий 4,0026	Обозначение элемента Атомный номер	
II	2	Li ³ Литий 6,939	Be ⁴ Бериллий 9,0122	B ⁵ Бор 10,811	C ⁶ Углерод 12,01115	N ⁷ Азот 14,0067	O ⁸ Кислород 15,9994	F ⁹ Фтор 18,9984	Ne ¹⁰ Неон 20,179	Li ³ Литий 6,939							
III	3	Na ¹¹ Натрий 22,9898	Mg ¹² Магний 24,305	Al ¹³ Алюминий 26,9815	Si ¹⁴ Кремний 28,086	P ¹⁵ Фосфор 30,9738	S ¹⁶ Сера 32,064	Cl ¹⁷ Хлор 35,453	Ar ¹⁸ Аргон 39,948							Относительная атомная масса	
IV	4	K ¹⁹ Калий 39,102	Ca ²⁰ Кальций 40,08	21 44,956 Sc Скандий	22 47,90 Ti Титан	23 50,942 V Ванадий	24 51,996 Cr Хром	25 54,9380 Mn Марганец	26 55,847 Fe Железо	27 58,9330 Co Кобальт	28 58,71 Ni Никель						
	5	29 63,546 Cu Медь	30 65,37 Zn Цинк	Ga ³¹ Галлий 69,72	Ge ³² Германий 72,59	As ³³ Мышьяк 74,9216	Se ³⁴ Селен 78,96	Br ³⁵ Бром 79,904	Kr ³⁶ Криптон 83,80								
V	6	Rb ³⁷ Рубидий 85,47	Sr ³⁸ Стронций 87,62	39 88,905 Y Иттрий	40 91,22 Zr Цирконий	41 92,906 Nb Ниобий	42 95,94 Mo Молибден	43 [99] Tc Технеций	44 101,07 Ru Рутений	45 102,905 Rh Родий	46 106,4 Pd Палладий						
	7	47 107,868 Ag Серебро	48 112,40 Cd Кадмий	In ⁴⁹ Индий 114,82	Sn ⁵⁰ Олово 118,69	Sb ⁵¹ Сурьма 121,75	Te ⁵² Теллур 127,60	I ⁵³ Иод 126,9044	Xe ⁵⁴ Ксенон 131,30								
VI	8	Cs ⁵⁵ Цезий 132,905	Ba ⁵⁶ Барий 137,33	57 138,91 La* Лантан	72 178,49 Hf Гафний	73 180,948 Ta Тантал	74 183,85 W Вольфрам	75 186,2 Re Рений	76 190,2 Os Осмий	77 192,2 Ir Иридий	78 195,09 Pt Платина						
	9	79 196,967 Au Золото	80 200,59 Hg Ртуть	Tl ⁸¹ Таллий 204,37	Pb ⁸² Свинец 207,19	Bi ⁸³ Висмут 208,980	Po ⁸⁴ Полоний [210]*	At ⁸⁵ Астат [210]	Rn ⁸⁶ Радон [222]								
VII	10	Fr ⁸⁷ Франций [223]	Ra ⁸⁸ Радий [226]	89 [227] Ac** Актиний	104 [261] Rf Резерфордий	105 [262] Db Дубний	106 [263] Sg Сиборгий	107 [262] Bh Борий	108 [265] Hs Хассий	109 [266] Mt Мейтнерий	110						
		Лантаноиды* 58 140,12 Ce Церий	59 140,907 Pr Празеодим	60 144,24 Nd Неодим	61 [147]* Pm Прометий	62 150,35 Sm Самарий	63 151,96 Eu Европий	64 157,25 Gd Гадолиний	65 158,924 Tb Тербий	66 162,50 Dy Диспрозий	67 164,930 Ho Гольмий	68 167,26 Er Эрбий	69 [168,934] Tm Тулий	70 173,04 Yb Иттербий	71 174,97 Lu Лютеций		
		Актиноиды** 90 232,038 Th Торий	91 [231] Pa Протактиний	92 238,03 U Уран	93 [237] Np Нептуний	94 [244] Pu Плутоний	95 [243] Am Америций	96 [247] Cm Кюрий	97 [247] Bk Берклий	98 [252]* Cf Калифорний	99 [254] Es Эйнштейний	100 [257] Fm Фермий	101 [257] Md Менделевий	102 [255] No Нобелий	103 [256] Lr Лоуренсий		



3D эталонная решетка сплава Ti₃AlSc

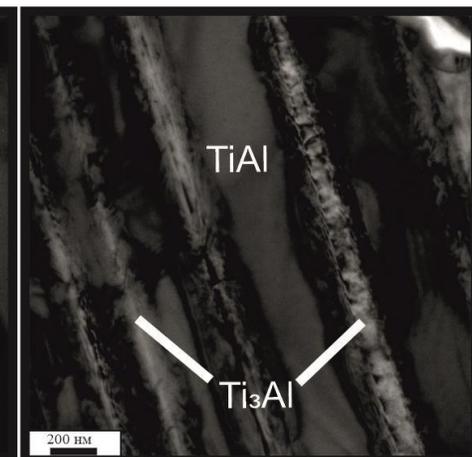
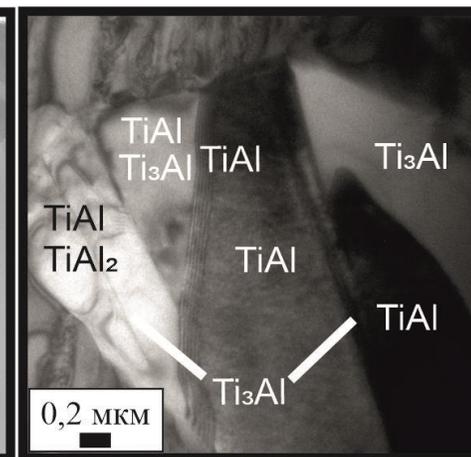
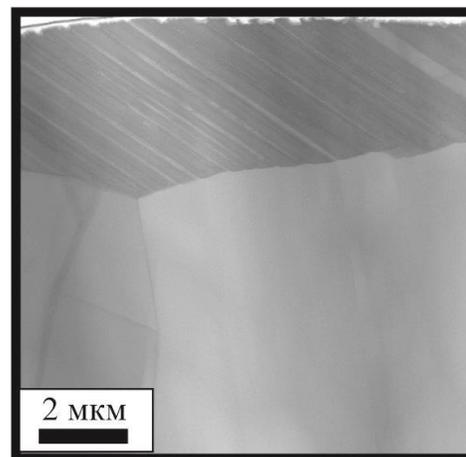


3D эталонная решетка сплава Ti₃AlY

Фаза	Тип решетки	Доля, %		
		Ti50Al	Ti49Al2Sc	Ti49Al2Y
TiAl	<i>P4/mmm</i>	31	42	1,4
Ti ₃ Al	<i>P6₃/mmc</i>	19	26	18,3
Ti _{1.5} Al _{2.5}	<i>Pmmm</i>	3	11	70,3
Ti ₂ Al ₅	<i>P4/mmm</i>	3	4	-
Ti ₅ Al ₁₁	<i>I4/mmm</i>	8	4	-
TiAl ₂	<i>Cmmm</i>	9	3	-
(TiAl ₂) _{1.33}	<i>P4/mmm</i>	2	-	-
Al	<i>Fm-3m</i>	1	2	8,6
α-Ti	<i>Im-3m</i>	19	6	1,4
β-Ti	<i>Im-3m</i>	2	2	-
Итого		100	100	-100

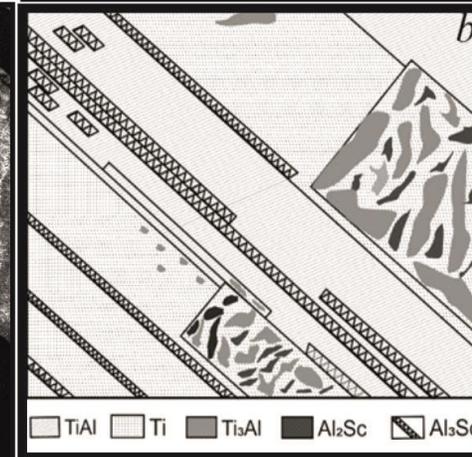
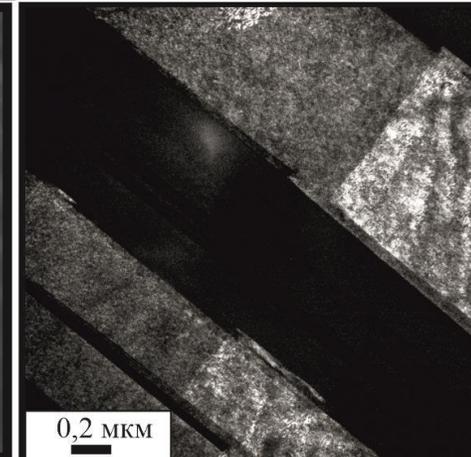
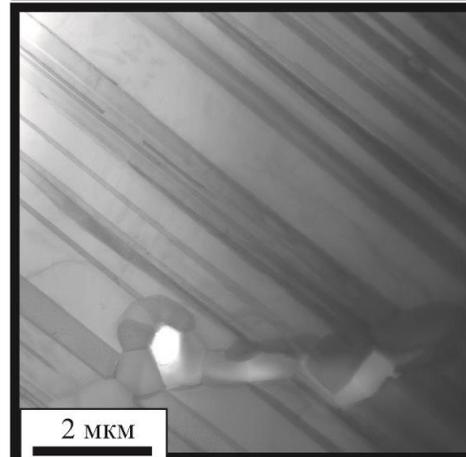
Ti50Al

Основными термодинамически устойчивыми фазами являются интерметаллические соединения $TiAl$, $TiAl_3$, $TiAl_2$ и твердый раствор алюминия в α -Ti



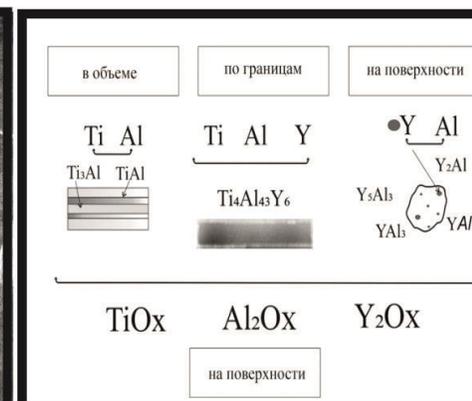
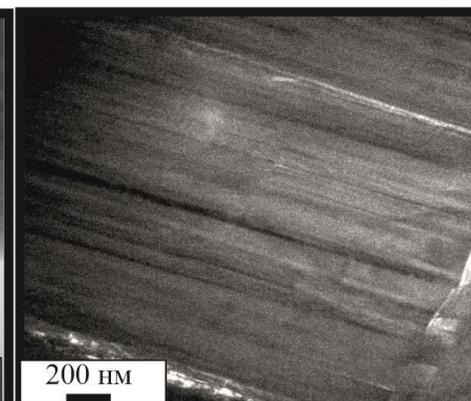
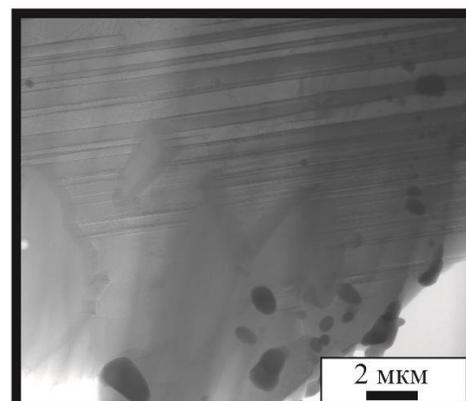
Ti49Al2Sc

Идентифицированы интерметаллидные фазы $TiAl$, Ti_3Al , $TiAl_2$, Ti_5Al_{11} , Ti_3Al_5 и исходные компоненты (α -Ti, β -Ti, Al и Sc), $AlSc$, $AlSc_2$, Al_3Sc содержание исходных металлов составляет не более 7,3%.



Ti49Al2Y

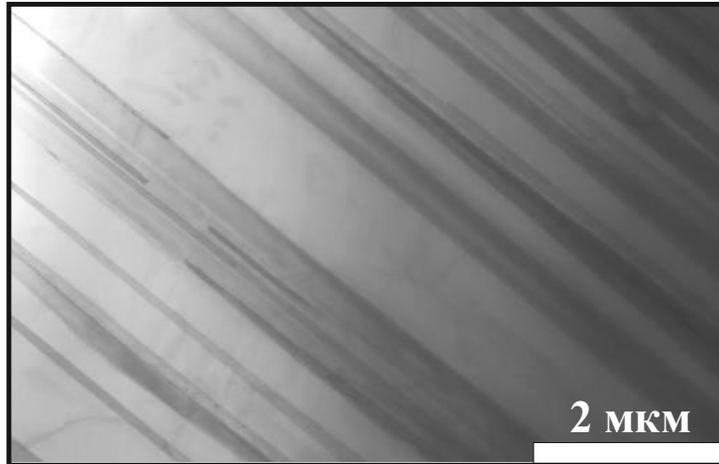
Сформировалась основная фаза Ti_3Al_5 . Наряду с зернами Ti_3Al_5 , в структуре сплава в небольшом количестве присутствуют зерна фазы Ti_3Al , малую долю составляют фазы $TiAl$, Al, α -Ti, Y, YAl_2 , Y_3Al_5 , YAl_3 , Y_3Al , YAl , Y_2Al



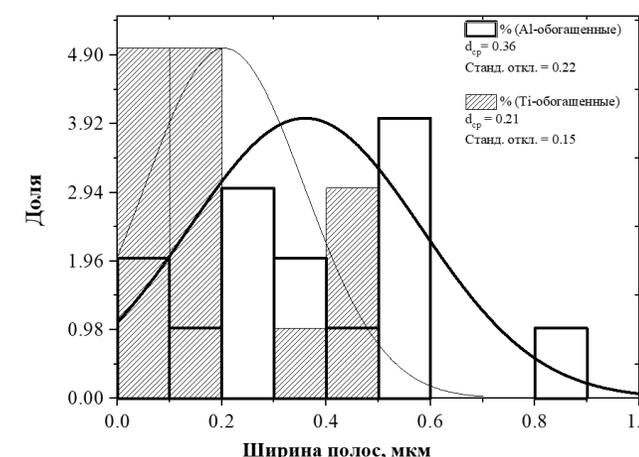
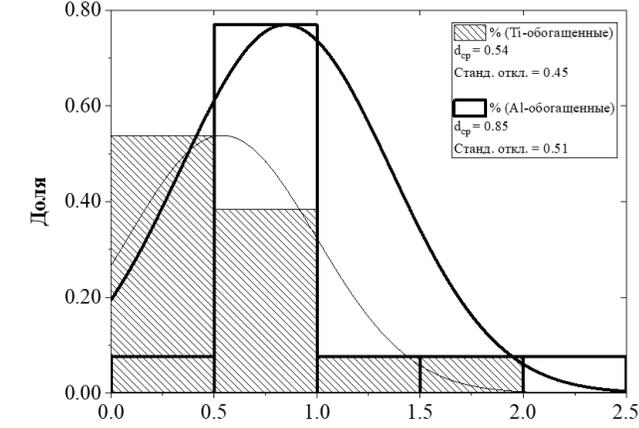
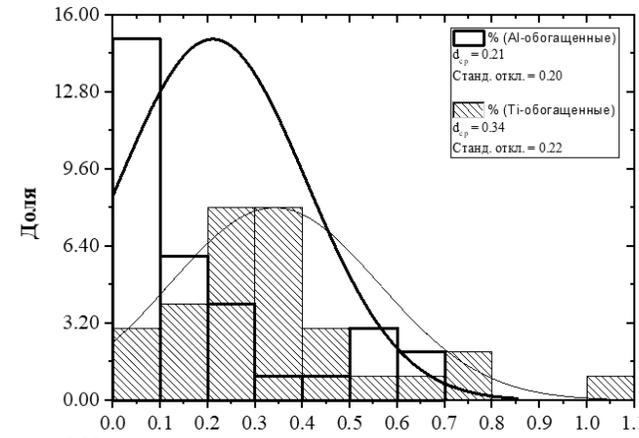
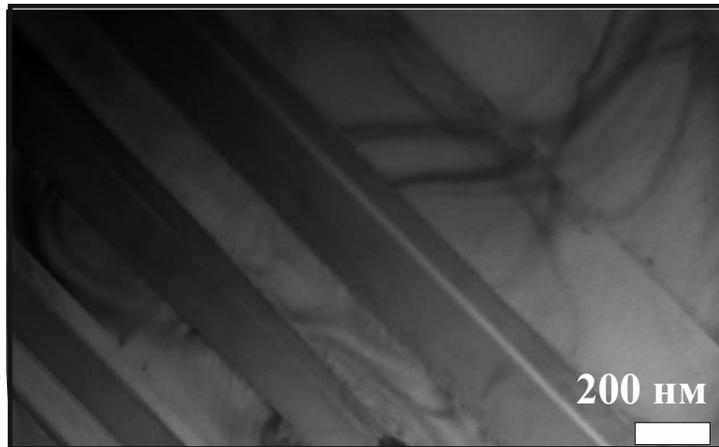
Ti50Al



Ti49Al2Sc



Ti49Al2Y



ЮЖНО-СИБИРСКИЙ НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК DOI 10.25699/SSSB.2022.45.5.006
05.17.01 (2.6.7)

ФАЗОВЫЙ СОСТАВ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ Ti-Al-Me (Me=Sc, Y, Dy, Ho, Ta), ПОЛУЧЕННЫХ «ГИДРИДНОЙ ТЕХНОЛОГИЕЙ»

Н.И. Каракчиева¹, Ю.А. Абзаев², А.С. Князев¹, В.П. Сачков^{1,3}, И.А. Курзина¹
¹ Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск
² Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск
³ Институт проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук (ИХЭТ СО РАН), г. Бийск

International Journal of Hydrogen Energy 51 (2024) 236–245

Contents lists available at ScienceDirect

International Journal of Hydrogen Energy

ELSEVIER journal homepage: www.elsevier.com/locate/ijhe

Promising materials based on Ti–Al for hydrogen energy produced by “Hydride Technology”^{*,*}

N.I. Karakchieva^{a,*}, Yu. A. Abzaev^b, V.V. Norin^{a,c}, A.S. Knyazev^a, V.I. Sachkov^a, I.A. Kurzina^a

^a National Research Tomsk State University, 634050, Tomsk, Lenin Ave., 36, Russian Federation
^b Tomsk State University of Architecture and Civil Engineering, 634003, Tomsk, pl. Solyanaya, 2, Russian Federation
^c OOO “Engineering Chemical Technology Center”, 634050, Tomsk, st. Alkassy Belentina, 9/1, Russian Federation

nanomaterials MDPI

Article

The Influence of Scandium on the Composition and Structure of the Ti-Al Alloy Obtained by “Hydride Technology”

Natalia Karakchieva^{1,*}, Olga Lepakova², Yuri Abzaev³, Victor Sachkov¹ and Irina Kurzina¹

¹ Chemical Technology Laboratory, National Research Tomsk State University, 36 Lenin Avenue, 634050 Tomsk, Russia; nkarak@tpi.tsbu.ru (N.K.); kurzina@mail.tsbu.ru (I.K.)
² Tomsk Scientific Center of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 10/4 Akademicheskii Prospekt, 634055 Tomsk, Russia; klavdievna.k@yandex.ru
³ Material Research Centre for Collective Use, Tomsk State University of Architecture and Building, 2 Solyanaya Square, 634003 Tomsk, Russia; abzaev2010@yandex.ru
^{*} Correspondence: kosovanatalia@yandex.ru; Tel.: +7-3822-412-319

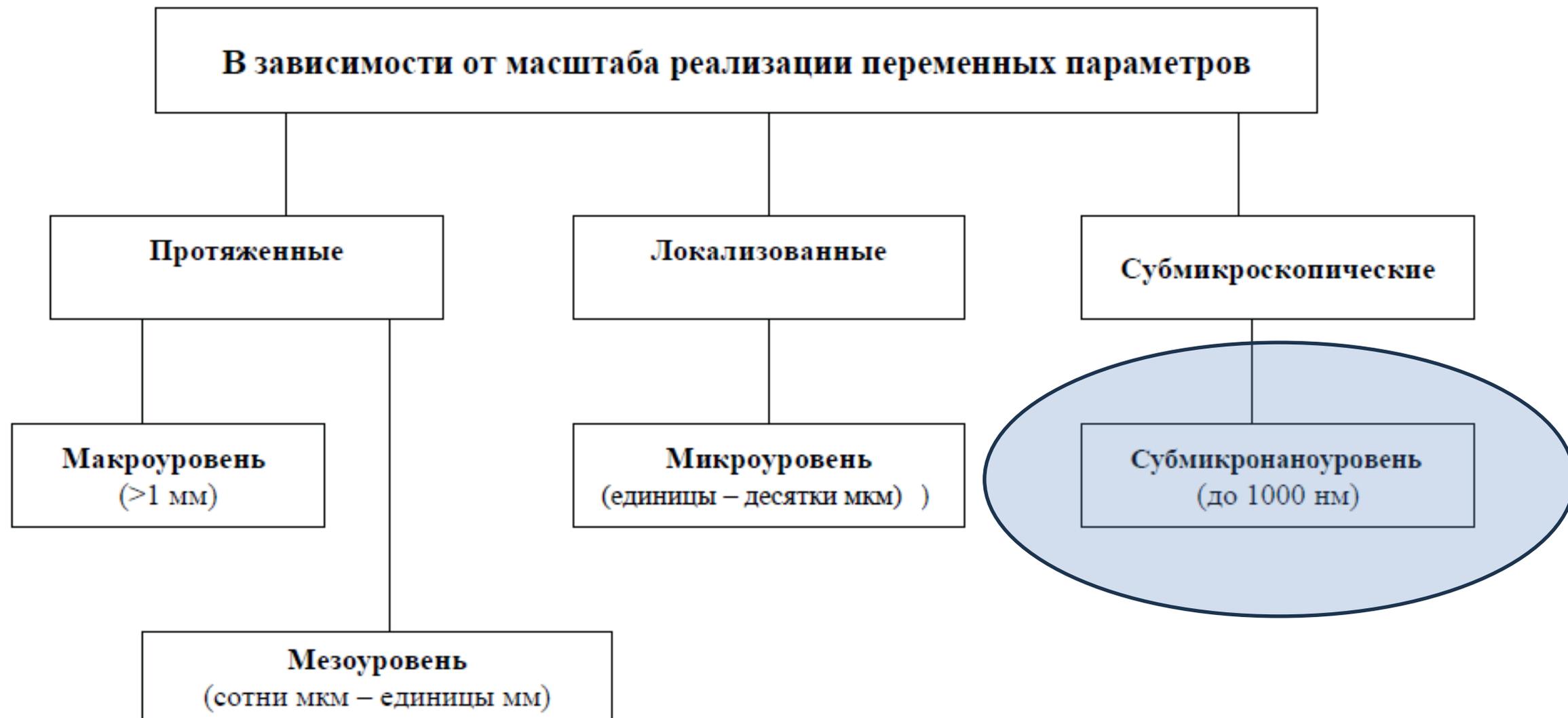
metals MDPI

Article

Influence of Yttrium on the Phase Composition of the Ti-Al System Obtained by the ‘Hydride Technology’

Natalia Karakchieva^{1,*}, Alina Artemenko¹, Olga Lepakova², Victor Sachkov¹ and Irina Kurzina^{3,*}

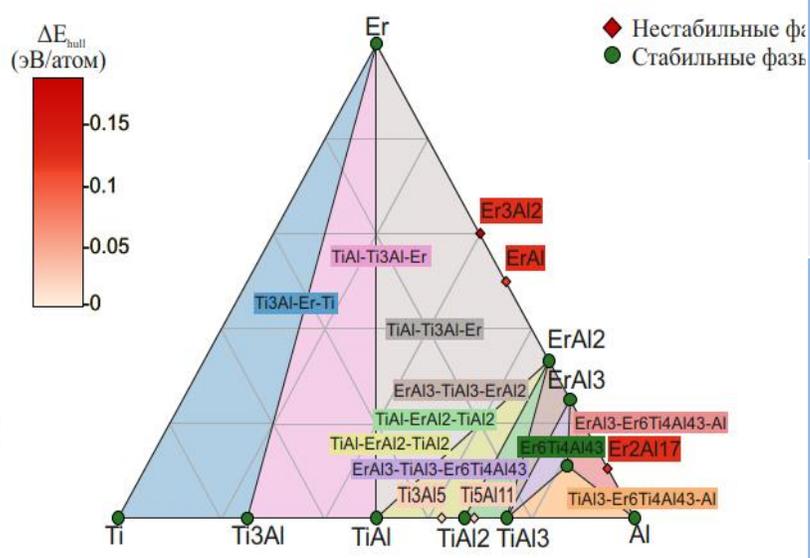
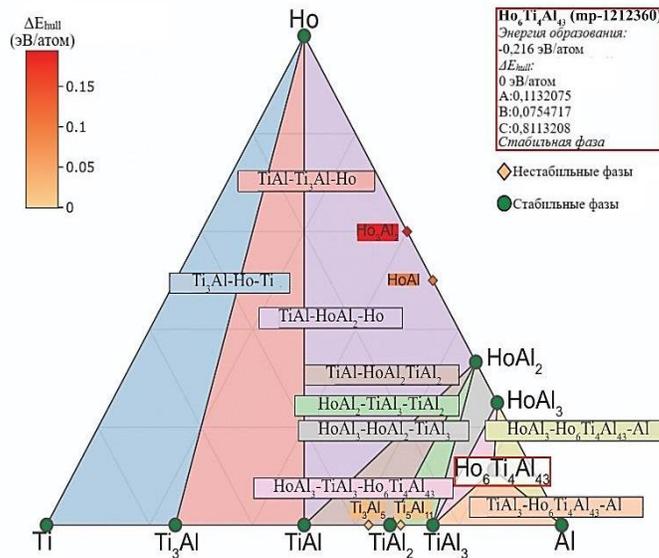
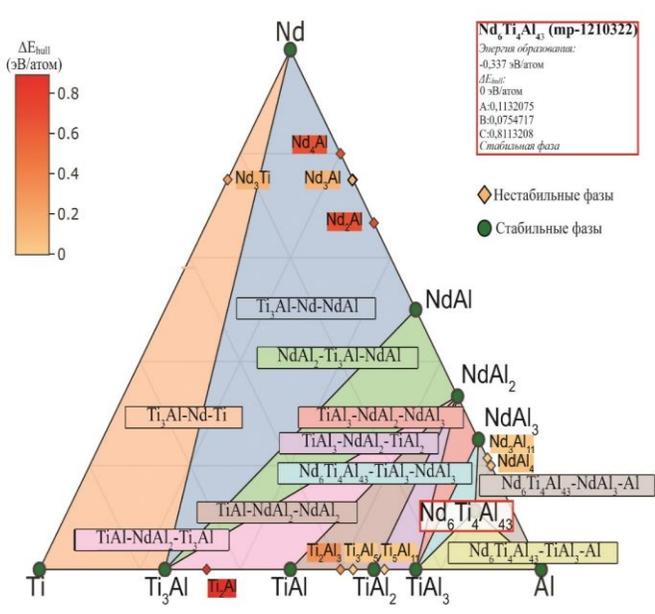
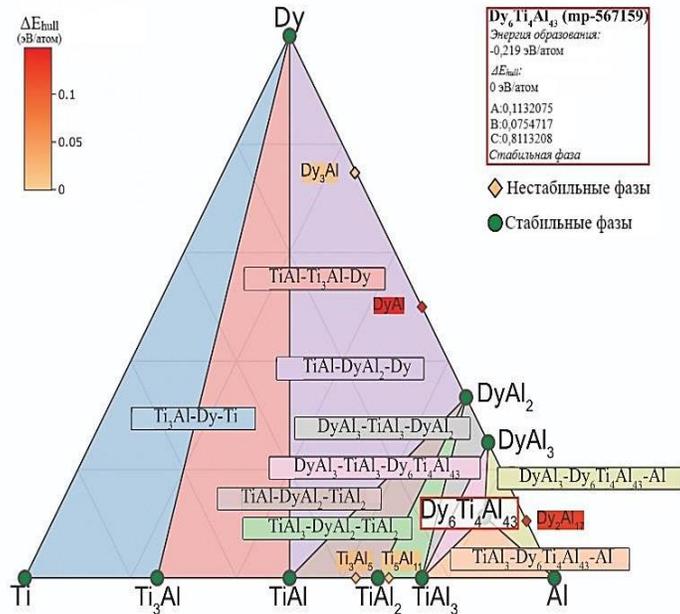
¹ Chemical Technology Laboratory, National Research Tomsk State University, 36 Lenin Avenue, 634050 Tomsk, Russia
² Tomsk Scientific Center of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 10/4 Akademicheskii Prospekt, 634055 Tomsk, Russia
³ Smart Materials and Technologies Institute, National Research Tomsk State University, 36 Lenin Avenue, 634050 Tomsk, Russia
^{*} Correspondence: karakchieva@mail.tsbu.ru (N.K.); kurzina99@mail.ru (I.K.); Tel.: +7-3822-412-319



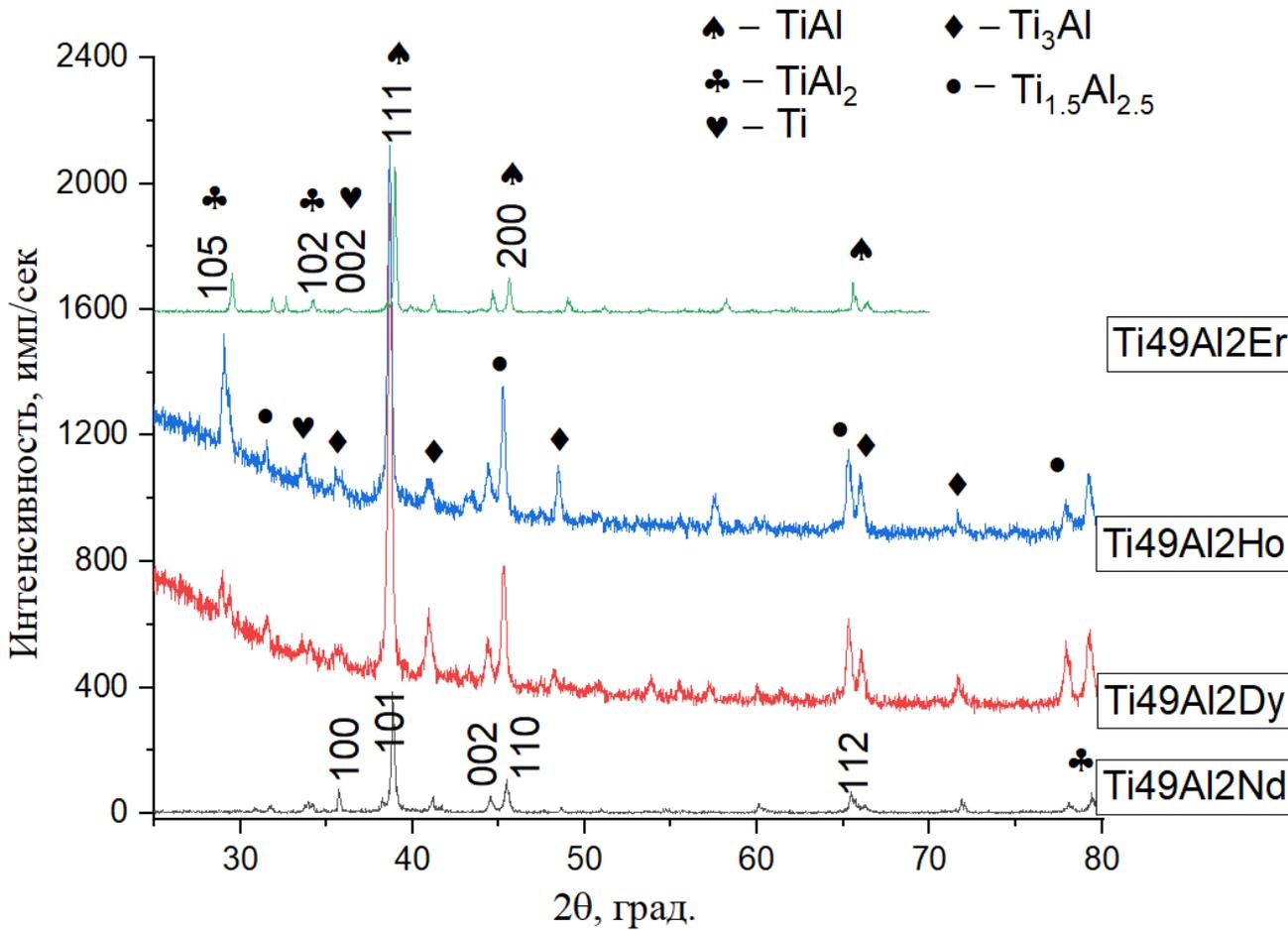
Введение в систему Ti50Al третьего компонента из подгруппы Sc (Sc, Y) приводит к формированию ламельной структуры типа Ti49Al2(Sc, Y), при этом увеличение ширины ламелей, обогащенных Ti и Al в 1,5-3 раза наблюдается только в случае со Sc.

	а	III	б	а	IV	б	а
	B	5		C	6		
	10,81		2s ² 2p ¹	12,011		2s ² 2p ²	
	Бор			Углерод			
	Al	13		Si	14		
	26,98154		3s ² 3p ¹	28,086		3s ² 3p ²	
	Алюминий			Кремний			
		21	Sc		22	Ti	
		3d ¹ 4s ²	44,9559		3d ² 4s ²	47,90	
			Скандий			Титан	
	Ga	31		Ge	32		
	69,72		4s ² 4p ¹	72,59		4s ² 4p ²	
	Галлий			Германий			
		39	Y		40	Zr	
		4d ¹ 5s ²	88,9059		4d ² 5s ²	91,22	
			Иттрий			Цирконий	
	In	49		Sn	50		

Период	Ряд	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII						
I	1	(H)						H ¹ Водород 1,00797	He ² Гелий 4,0026	Обозначение элемента	Атомный номер				
II	2	Li ³ Литий 6,939	Be ⁴ Бериллий 9,0122	B ⁵ Бор 10,811	C ⁶ Углерод 12,01115	N ⁷ Азот 14,0067	O ⁸ Кислород 15,9994	F ⁹ Фтор 18,9984	Ne ¹⁰ Неон 20,179	Li ³ Литий 6,939					
III	3	Na ¹¹ Натрий 22,9898	Mg ¹² Магний 24,305	Al ¹³ Алюминий 26,9815	Si ¹⁴ Кремний 28,086	P ¹⁵ Фосфор 30,9738	S ¹⁶ Сера 32,064	Cl ¹⁷ Хлор 35,453	Ar ¹⁸ Аргон 39,948	Относительная атомная масса					
IV	4	K ¹⁹ Калий 39,102	Ca ²⁰ Кальций 40,08	21 Sc ^{44,956} Скандий	22 Ti ^{47,90} Титан	23 V ^{50,942} Ванадий	24 Cr ^{51,996} Хром	25 Mn ^{54,9380} Марганец	26 Fe ^{55,847} Железо	27 Co ^{58,9330} Кобальт	28 Ni ^{58,71} Никель				
	5	29 Cu ^{63,546} Медь	30 Zn ^{65,37} Цинк	31 Ga ^{69,72} Галлий	32 Ge ^{72,59} Германий	33 As ^{74,9216} Мышьяк	34 Se ^{78,96} Селен	35 Br ^{79,904} Бром	36 Kr ^{83,80} Криптон						
V	6	Rb ³⁷ Рубидий 85,47	Sr ³⁸ Стронций 87,62	39 Y ^{88,905} Иттрий	40 Zr ^{91,22} Цирконий	41 Nb ^{92,906} Ниобий	42 Mo ^{95,94} Молибден	43 Tc ^[99] Технеций	44 Ru ^{101,07} Рутений	45 Rh ^{102,905} Родий	46 Pd ^{106,4} Палладий				
	7	47 Ag ^{107,868} Серебро	48 Cd ^{112,40} Кадмий	49 In ^{114,82} Индий	50 Sn ^{118,69} Олово	51 Sb ^{121,75} Сурьма	52 Te ^{127,60} Теллур	53 I ^{126,9044} Иод	54 Xe ^{131,30} Ксенон						
VI	8	Cs ⁵⁵ Цезий 132,905	Ba ⁵⁶ Барий 137,33	57 La* ^{138,91} Лантан	72 Hf ^{178,49} Гафний	73 Ta ^{180,948} Тантал	74 W ^{183,85} Вольфрам	75 Re ^{186,2} Рений	76 Os ^{190,2} Осмий	77 Ir ^{192,2} Иридий	78 Pt ^{195,09} Платина				
	9	79 Au ^{196,967} Золото	80 Hg ^{200,59} Ртуть	81 Tl ^{204,37} Таллий	82 Pb ^{207,19} Свинец	83 Bi ^{208,980} Висмут	84 Po ^{[210]*} Полоний	85 At ^[210] Астат	86 Rn ^[222] Радон						
VII	10	Fr ⁸⁷ Франций [223]	Ra ⁸⁸ Радий [226]	89 Ac** ^[227] Актиний	104 Rf ^[261] Резерфордий	105 Db ^[262] Дубний	106 Sg ^[263] Сиборгий	107 Bh ^[262] Борий	108 Hs ^[265] Хассий	109 Mt ^[266] Мейтнерий	110				
		58 Ce ^{140,12} Церий	59 Pr ^{140,907} Празеодим	60 Nd ^{144,24} Неодим	61 Pm ^{[147]*} Прометий	62 Sm ^{150,35} Самарий	63 Eu ^{151,96} Европий	64 Gd ^{157,25} Гадолиний	65 Tb ^{158,924} Тербий	66 Dy ^{162,50} Диспрозий	67 Ho ^{164,930} Гольмий	68 Er ^{167,26} Эрбий	69 Tm ^{168,934} Тулий	70 Yb ^{173,04} Иттербий	71 Lu ^{174,97} Лютеций
		90 Th ^{232,038} Торий	91 Pa ^[231] Протактиний	92 U ^{238,03} Уран	93 Np ^[237] Нептуний	94 Pu ^[244] Плутоний	95 Am ^[243] Америций	96 Cm ^[247] Кюрий	97 Bk ^[247] Берклий	98 Cf ^{[252]*} Калифорний	99 Es ^[254] Эйнштейний	100 Fm ^[257] Фермий	101 Md ^[257] Менделевий	102 No ^[255] Нобелий	103 Lr ^[256] Лоуренсий



Фазы		
Общие	стабильные	нестабильные
Стабильные		Nd
Me, Ti, Al, Ti_3Al , TiAl, $TiAl_2$, $TiAl_3$, $MeAl_2$, $MeAl_3$, $(Nd,Dy,Ho)_6Ti_4Al_{43}$	NdAl	Nd ₃ Ti, Nd ₄ Al, Nd ₃ Al, Nd ₂ Al, Nd ₃ Al ₁₁ , NdAl ₄ , Ti_2Al_3 , Ti_2Al
		Dy
		DyAl, Dy ₂ Al ₁₂ , Dy ₃ Al
нестабильные		Ho
		HoAl, Ho ₃ Al ₂
Ti_3Al_5 , Ti_5Al_{11}		Er
		ErAl, Er ₃ Al ₂ , Er ₂ Al ₁₇



49Ti-49Al-2Me, ат.%	Ti50Al	Nd	Dy	Ho	Er
TiAl	38,4	82	74,3	10	68
Ti ₃ Al	25,2	-	7,6	6	-
Ti _{1,5} Al _{2,5}	2,9	-	1,6	72,5	-
Ti ₂ Al ₅	2,5	-	-	-	-
Ti ₅ Al ₁₁	8,3	-	2	-	-
TiAl ₂	11,8	-	6	-	5
Al	1,1	3	3,7	8	
α-Ti	7,4	-	3,5		13
β-Ti	2,4	-	1,3	4	
Er _{1,7} Ti _{0,21} O ₃	-	-	-	-	14
NdAl	-	3	-	-	-



Article
Influence of Dy and Ho on the Phase Composition of the Ti-Al System Obtained by 'Hydride Technology'

Natalia Karakchieva^{1,*}, Alina Artemenko¹, Sergei Sokolov², Ivan Amelichkin¹, Alexey Knyazev³, Alexander Vorozhtsov², Yuri Abzaev⁴, Victor Sachkov¹ and Irina Kurzina⁵

ЮЖНО-СИБИРСКИЙ НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК

2.6.7

ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ Ti-AL-ND, ПОЛУЧЕННОЙ «ГИДРИДНОЙ ТЕХНОЛОГИЕЙ»

Н.И. Каракчиева¹, Ю.А. Абзаев², И. Амеличкин¹, А.С. Князев¹, В.И. Сачков^{1,3}, И.А. Курзина¹

¹ Томский государственный университет, г. Томск
² Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск
³ Институт проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук, г. Бийск

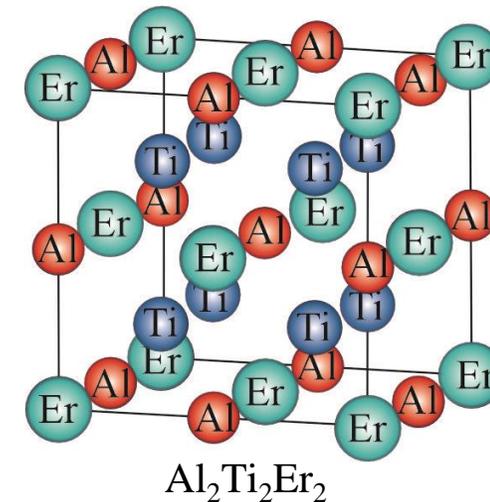
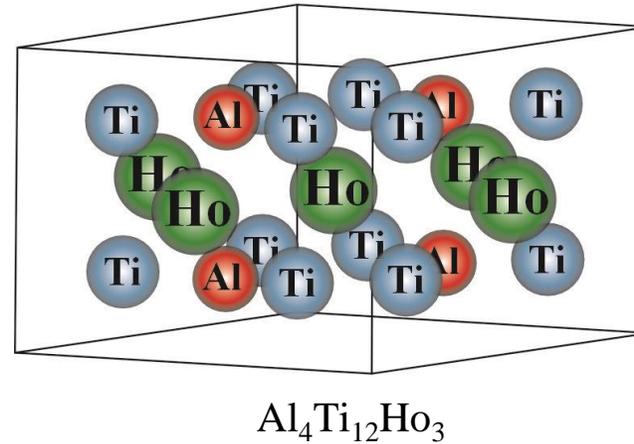
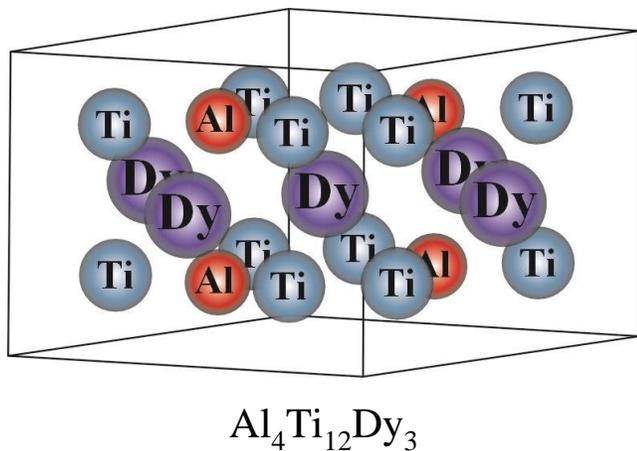
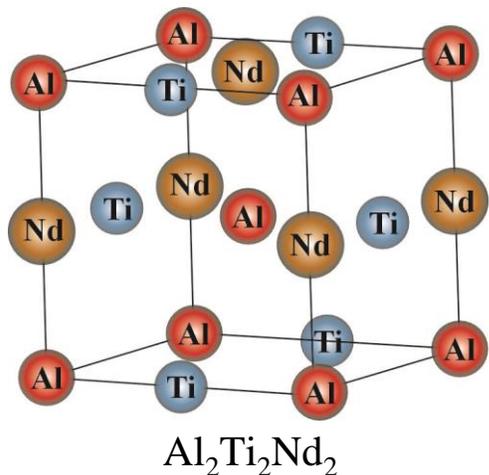
Вестник Томского государственного университета. Химия. 2024. № 34. С. 29–43
 Tomsk State University Journal of Chemistry, 2024, 34, 29–43

Научная статья
 УДК 621.762.2:542.913
 doi: 10.17223/24135542/34/3

Структура, фазовый состав и свойства лигатуры Al₃Er, полученной гидридной технологией и механической обработкой

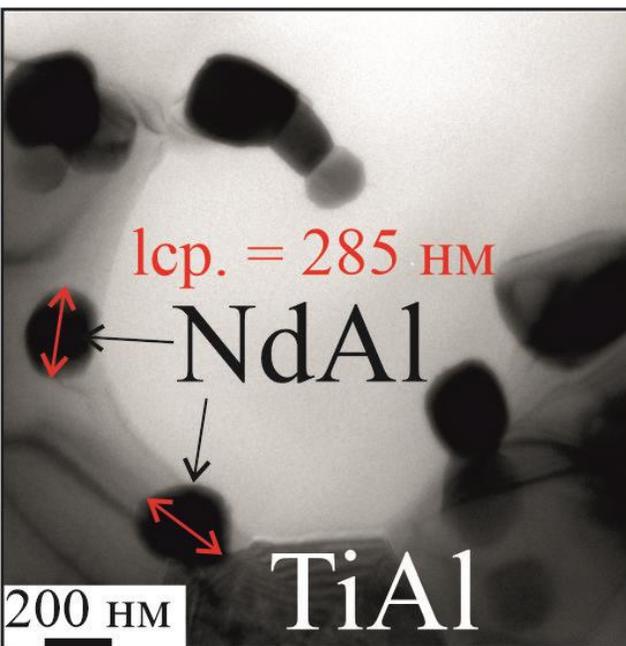
Сергей Дмитриевич Соколов¹, Наталья Ивановна Каракчиева², Юрий Афанасьевич Абзаев³, Николай Еверевич Кахидзе⁴, Илья Александрович Жуков², Виктор Иванович Сачков⁵, Александр Борисович Ворожцов⁷

3D эталонные решетки

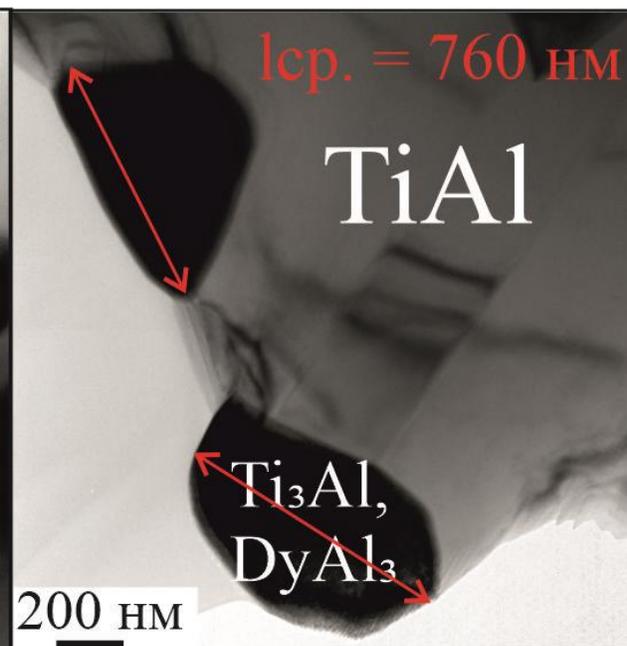


Вклад фазы в интегральную интенсивность, %	Nd	Dy	Ho	Er
TiAl	65	68	1 (+ Ti_3Al_3)	33
TiAl_2	23	-	-	63
Ti_6Al_2	8	-	-	-
$\text{Ti}_2\text{Al}_2\text{Nd}_6$	4	-	-	-
Ti_3Al_3	-	19	1 (+ Ti ₃ Al)	-
$\text{Ti}_1\text{Al}_4\text{Dy}_3$	-	13	-	-
$\text{Al}_4\text{Ti}_{12}\text{Ho}_3$	-	-	0,05	-
$\text{Al}_2\text{Ti}_2\text{Er}_2$	-	-	-	4

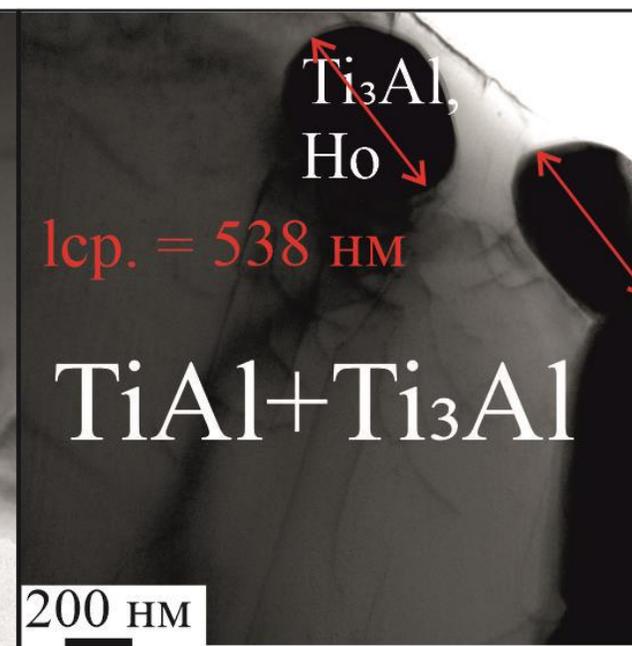
Ti49Al12Nd



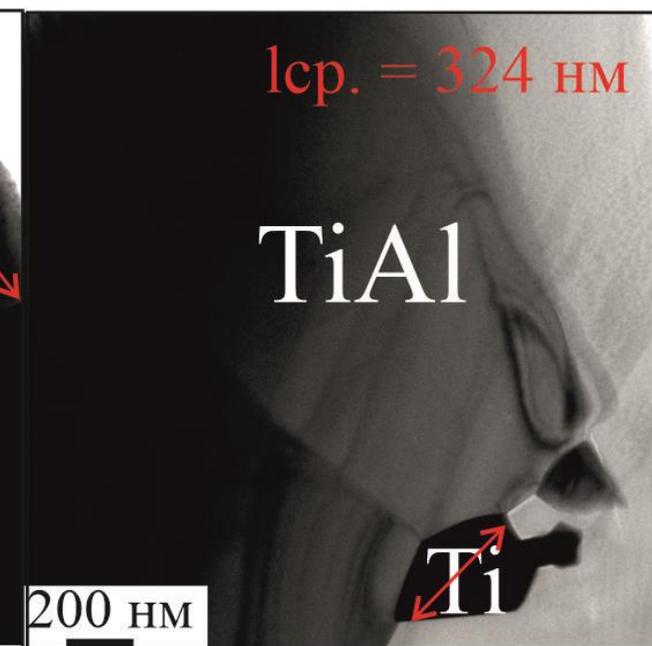
Ti49Al12Dy



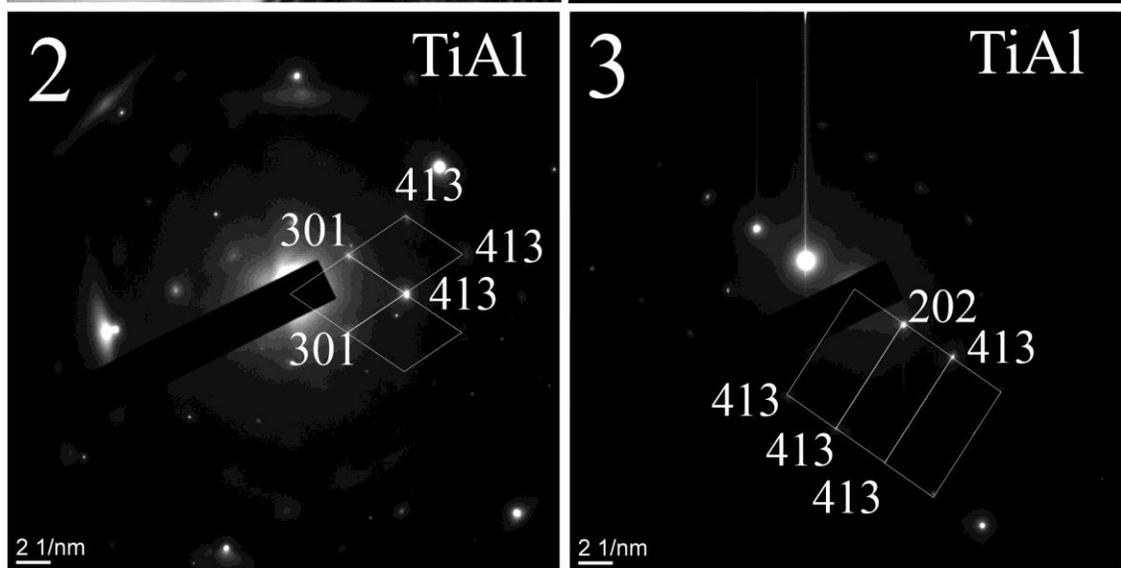
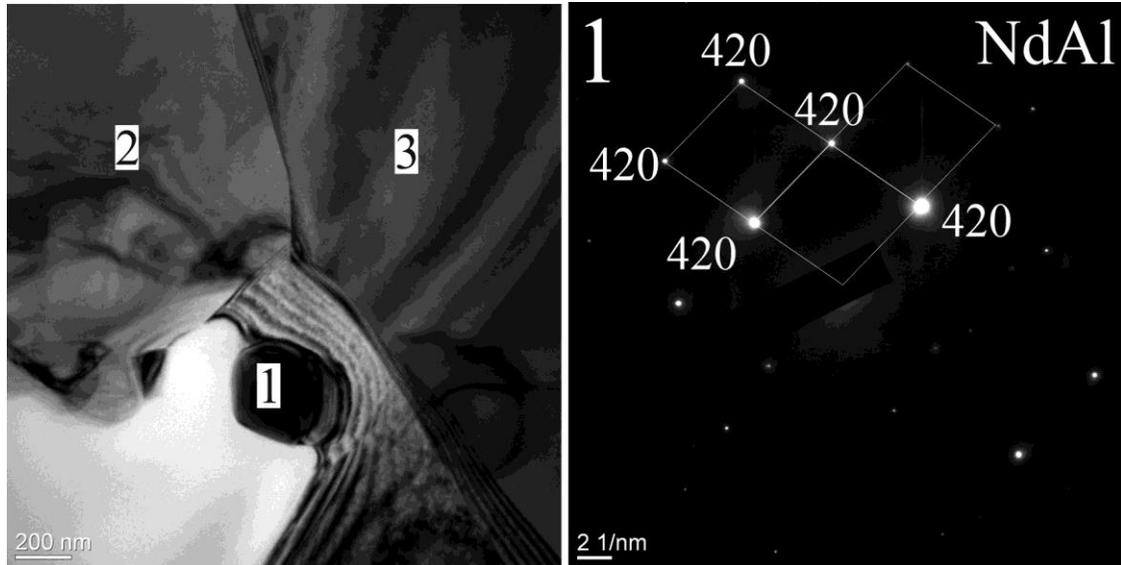
Ti49Al12Ho



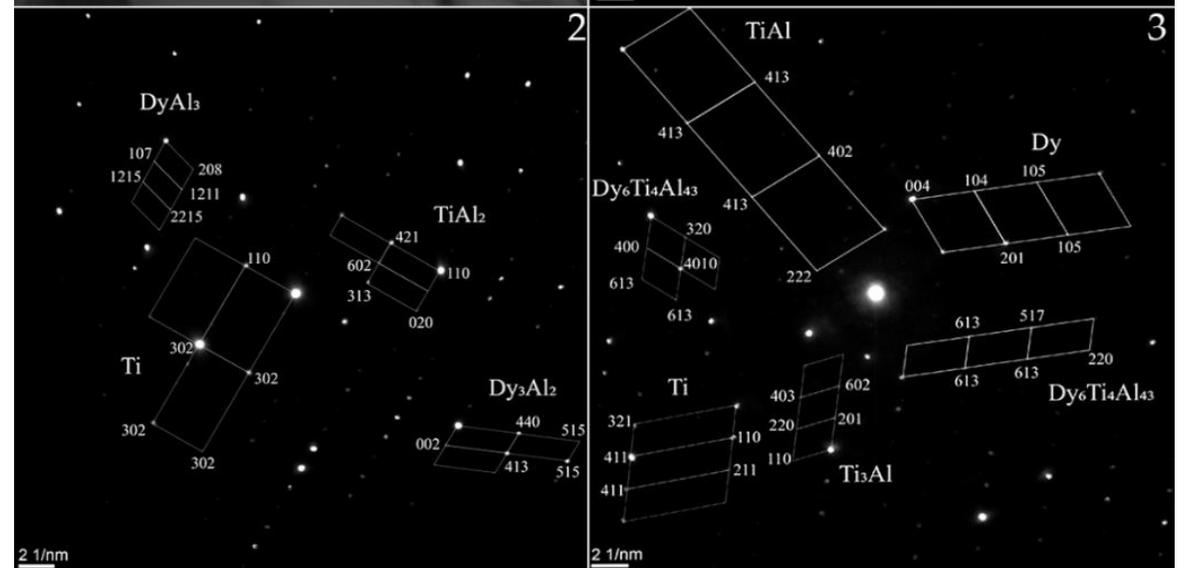
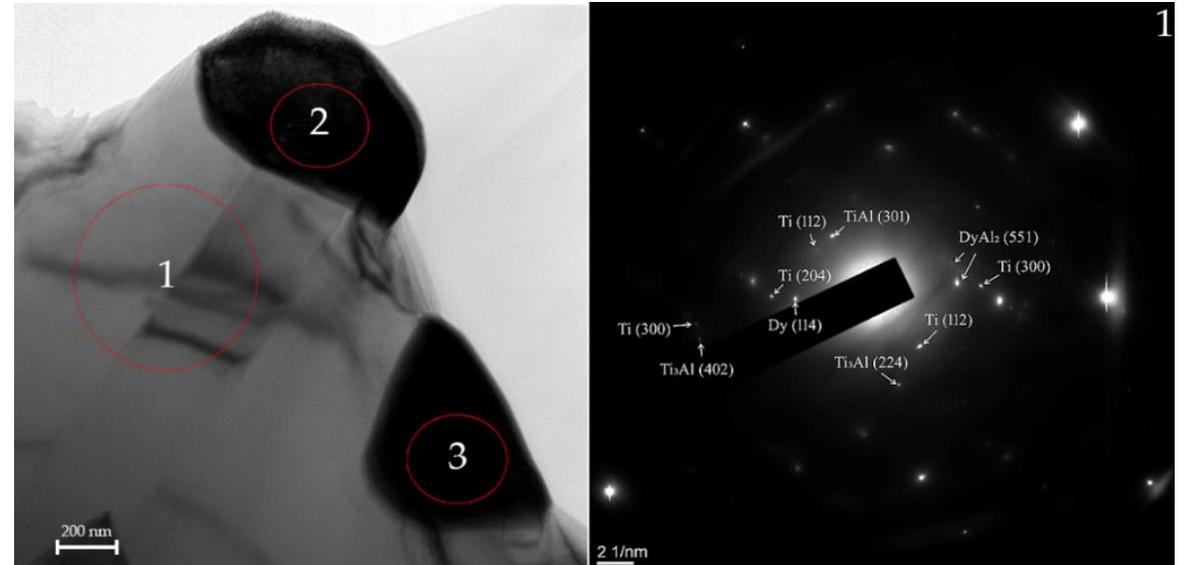
Ti49Al12Er



Ti₄₉Al₁₂Nd

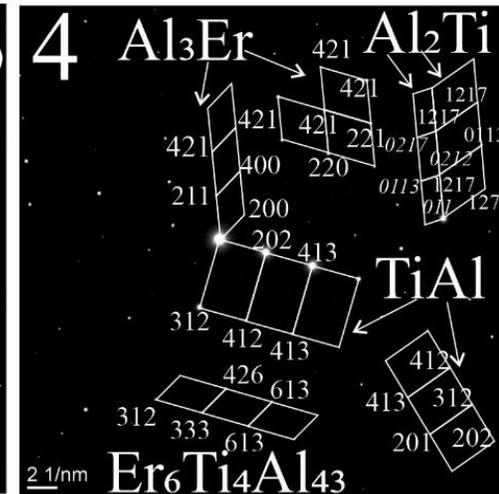
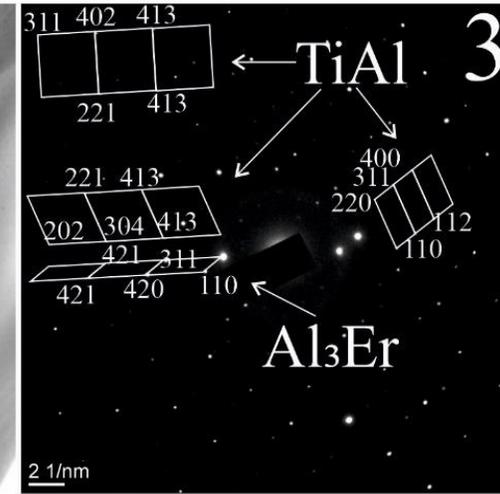
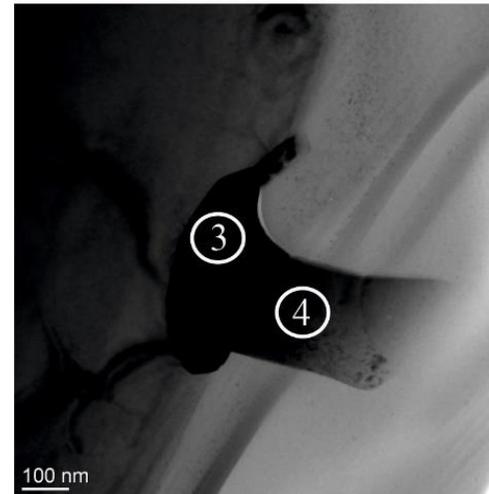
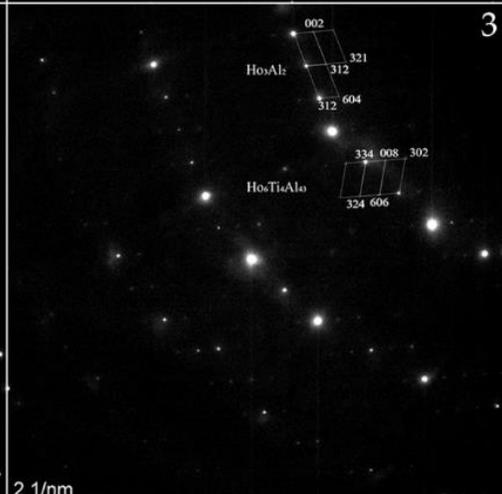
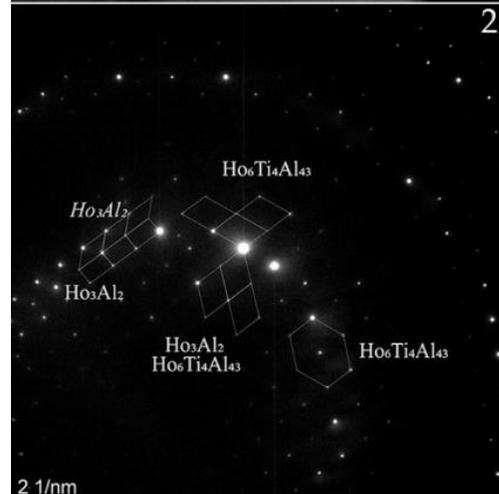
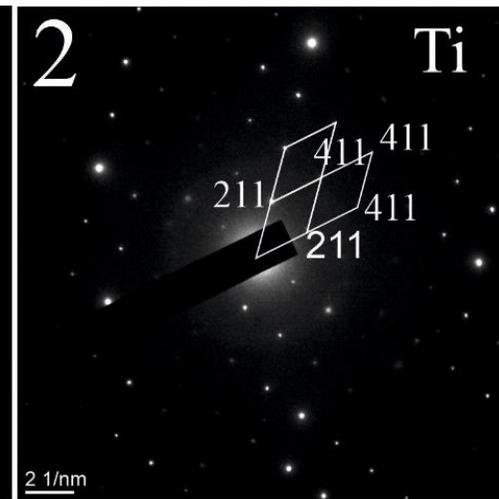
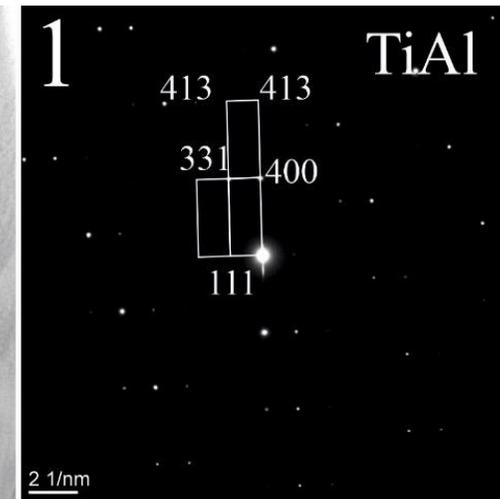
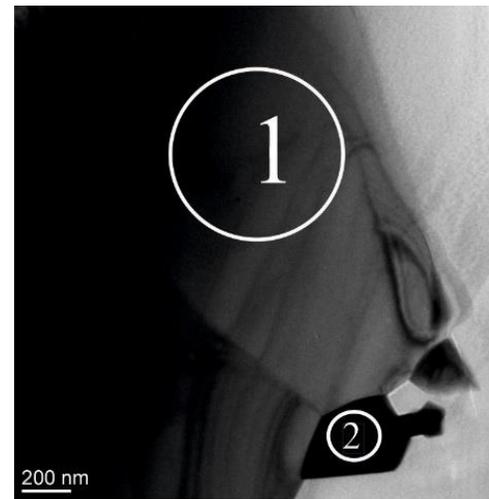
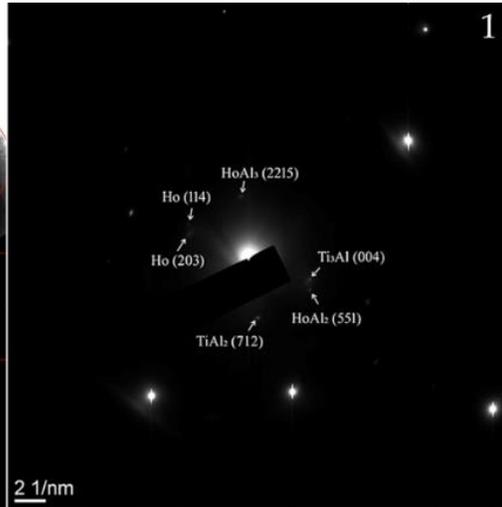
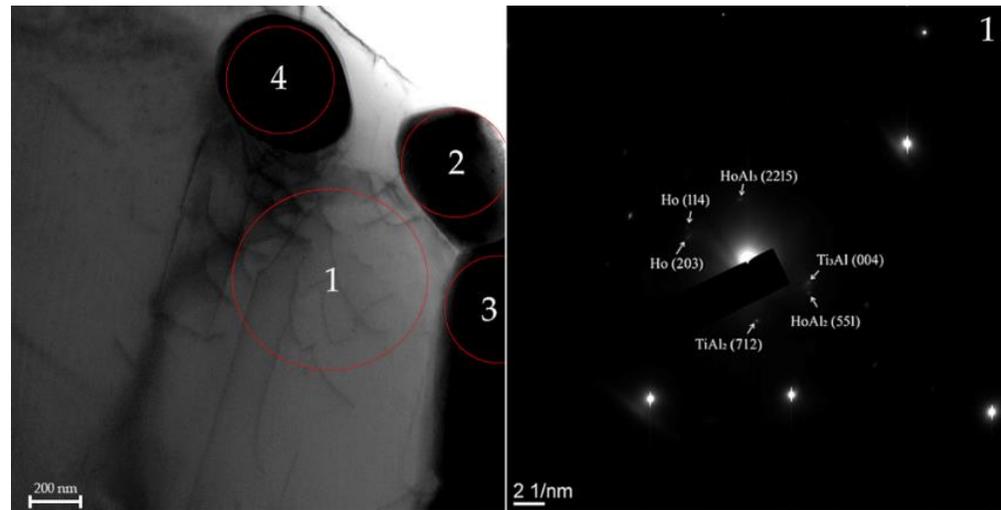


Ti₄₉Al₁₂Dy

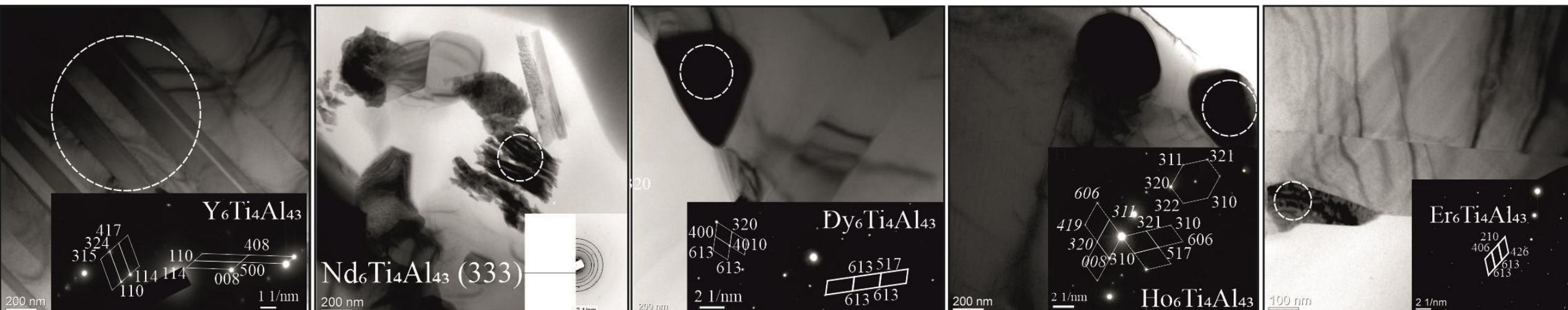


Ti₄₉Al₁₂Ho

Ti₄₉Al₁₂Er

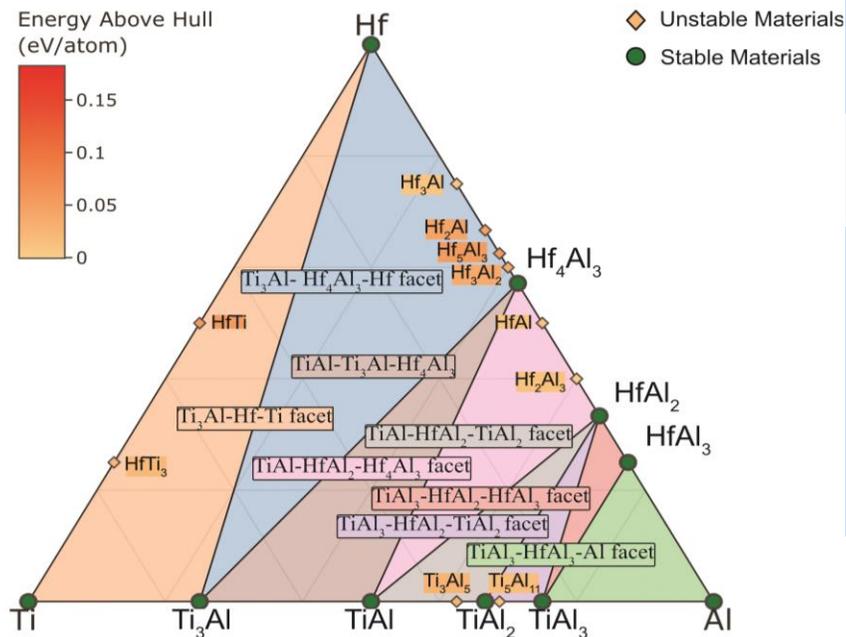
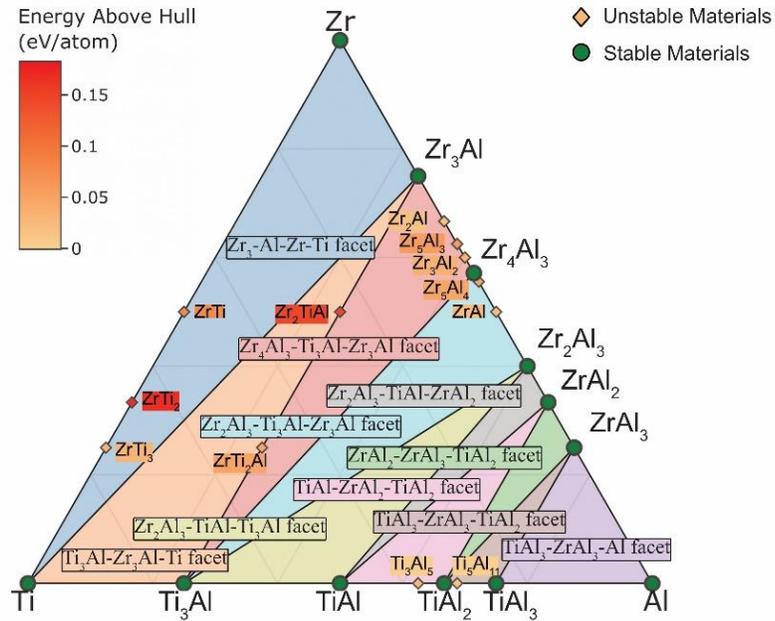


Введение в систему Ti50Al третьего компонента из подгруппы Y (Y, Nd, Dy, Ho, Er) в количестве до 2 ат. % приводит к формированию изотипических соединений со структурой типа $\text{Ho}_6\text{Mo}_4\text{Al}_{43}$



Подгруппа титана

Период	Ряд	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII						
I	1	(H)						H ¹ 1,00797 Водород	He ² 4,0026 Гелий	Обозначение элемента	Атомный номер				
II	2	Li ³ 6,939 Литий	Be ⁴ 9,0122 Бериллий	B ⁵ 10,811 Бор	C ⁶ 12,01115 Углерод	N ⁷ 14,0067 Азот	O ⁸ 15,9994 Кислород	F ⁹ 18,9984 Фтор	Ne ¹⁰ 20,179 Неон	Li ³ 6,939 Литий					
III	3	Na ¹¹ 22,9898 Натрий	Mg ¹² 24,305 Магний	Al ¹³ 26,9815 Алюминий	Si ¹⁴ 28,086 Кремний	P ¹⁵ 30,9738 Фосфор	S ¹⁶ 32,064 Сера	Cl ¹⁷ 35,453 Хлор	Ar ¹⁸ 39,948 Аргон	Относительная атомная масса					
IV	4	K ¹⁹ 39,102 Калий	Ca ²⁰ 40,08 Кальций	21 44,956 Sc Скандий	22 47,90 Ti Титан	23 50,942 V Ванадий	24 51,996 Cr Хром	25 54,9380 Mn Марганец	26 55,847 Fe Железо	27 58,9330 Co Кобальт	28 58,71 Ni Никель				
	5	29 63,546 Cu Медь	30 65,37 Zn Цинк	31 69,72 Ga Галлий	32 72,59 Ge Германий	33 74,9216 As Мышьяк	34 78,96 Se Селен	35 79,904 Br Бром	36 83,80 Kr Криптон						
V	6	Rb ³⁷ 85,47 Рубидий	Sr ³⁸ 87,62 Стронций	39 88,905 Y Иттрий	40 91,22 Zr Цирконий	41 92,906 Nb Ниобий	42 95,94 Mo Молибден	43 [99] Tc Технеций	44 101,07 Ru Рутений	45 102,905 Rh Родий	46 106,4 Pd Палладий				
	7	47 107,868 Ag Серебро	48 112,40 Cd Кадмий	49 114,82 In Индий	50 118,69 Sn Олово	51 121,75 Sb Сурьма	52 127,60 Te Теллур	53 126,9044 I Иод	54 131,30 Xe Ксенон						
VI	8	Cs ⁵⁵ 132,905 Цезий	Ba ⁵⁶ 137,34 Барий	57 138,91 La* Лантан	72 178,49 Hf Гафний	73 180,948 Ta Тантал	74 183,85 W Вольфрам	75 186,2 Re Рений	76 190,2 Os Осмий	77 192,2 Ir Иридий	78 195,09 Pt Платина				
	9	79 196,967 Au Золото	80 200,59 Hg Ртуть	81 204,37 Tl Таллий	82 207,19 Pb Свинец	83 208,980 Bi Висмут	84 [210]* Po Полоний	85 [210] At Астат	86 [222] Rn Радон						
VII	10	Fr ⁸⁷ [223] Франций	Ra ⁸⁸ [226] Радий	89 [227] Ac** Актиний	104 [261] Rf Резерфордий	105 [262] Db Дубний	106 [263] Sg Сиборгий	107 [262] Bh Борий	108 [265] Hs Хассий	109 [266] Mt Мейтнерий	110				
		58 140,12 Ce Церий	59 140,907 Pr Празеодим	60 144,24 Nd Неодим	61 [147]* Pm Прометий	62 150,35 Sm Самарий	63 151,96 Eu Европий	64 157,25 Gd Гадолиний	65 158,924 Tb Тербий	66 162,50 Dy Диспрозий	67 164,930 Ho Гольмий	68 167,26 Er Эрбий	69 [168,934] Tm Тулий	70 173,04 Yb Иттербий	71 174,97 Lu Лютеций
		90 232,038 Th Торий	91 [231] Pa Протактиний	92 238,03 U Уран	93 [237] Np Нептуний	94 [244] Pu Плутоний	95 [243] Am Америций	96 [247] Cm Кюрий	97 [247] Bk Берклий	98 [252]* Cf Калифорний	99 [254] Es Эйнштейний	100 [257] Fm Фермий	101 [257] Md Менделевий	102 [255] No Нобелий	103 [256] Lr Лоуренсий



Фазы		
Общие	стабильные	нестабильные
стабильные	Zr	
Zr(Hf), Ti, Al, Ti ₃ Al, TiAl, TiAl ₂ , TiAl ₃ , Zr(Hf) ₄ Al ₃ , Zr(Hf)Al ₂ , Zr(Hf)Al ₃	Zr ₂ Al ₃	ZrTi ₂ , Zr ₃ Al, Zr ₅ Al ₄ , ZrTi ₂ Al, Zr ₂ TiAl
нестабильные	Hf	
Ti ₃ Al ₅ , Ti ₅ Al ₁₁ , Zr(Hf)Ti ₃ , Zr(Hf)Ti, Zr(Hf) ₂ Al, Zr(Hf) ₅ Al ₃ , Zr(Hf) ₃ Al ₂ , Zr(Hf)Al, Zr(Hf) ₃ Al,	-	Hf ₂ Al ₃

Ti49Al2Zr		Образец	Ti49Al2Hf	
TiAl	65 %		Фазовый состав	TiAl ₃
Ti ₃ Al	32 %	Ti _{0,6} Al _{0,4}		6 %
Ti ₂ Zr (ZrTi ₅ + Zr)	3 %	TiAl		4 %

ISSN 1994-6716 Вопросы материаловедения, 2024, № 3(119)

ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ Ti-Al МАТЕРИАЛОВ С ДОБАВКАМИ Zr, ПОЛУЧЕННЫХ ГИДРИДНОЙ ТЕХНОЛОГИЕЙ

Н. И. КАРАКЧИЕВА^{1,2}, канд. хим. наук, Ю. А. АБЗАЕВ³, д-р физ.-мат. наук,
И. В. АМЕЛИЧКИН¹, И. А. ЖУКОВ¹, д-р техн. наук, А. С. КНЯЗЕВ¹, д-р хим. наук,
В. И. САЧКОВ¹, д-р хим. наук, И. А. КУРЗИНА¹, д-р физ.-мат. наук

¹ ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Томский государственный университет»,
634050, Томск, пр. Ленина, 36. E-mail: karakchieva@mail.tsu.ru

² ФГБОУ ВО «Марийский государственный университет», 424000, Республика Марий Эл,
Йошкар-Ола, пл. Ленина, 1

³ ФГБОУ ВО «Томский государственный архитектурно-строительный университет»,
634003, Томск, Соляная, 2

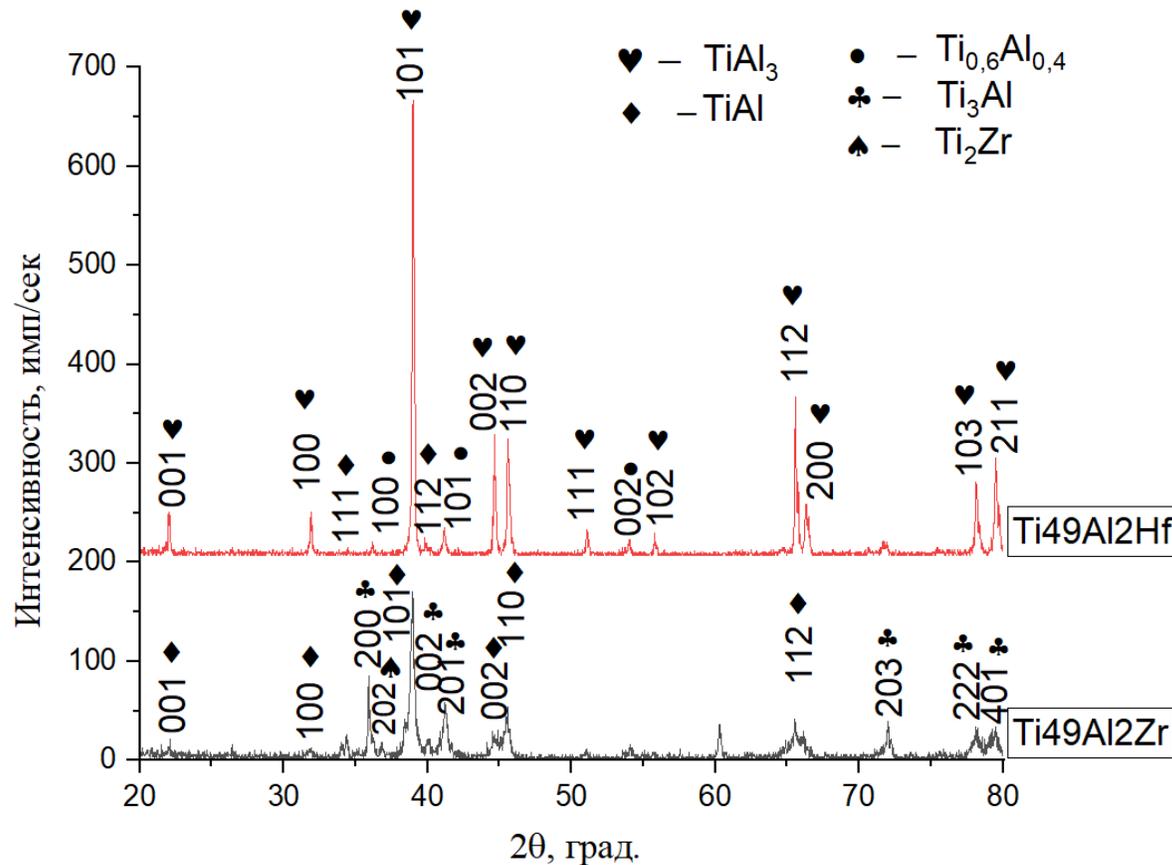
ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ Ti-Al МАТЕРИАЛОВ С ДОБАВКАМИ Hf, ПОЛУЧЕННЫХ ГИДРИДНОЙ ТЕХНОЛОГИЕЙ

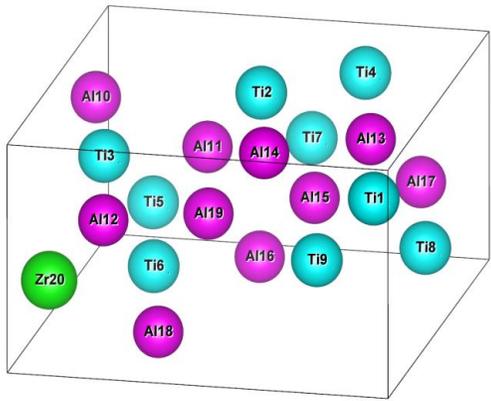
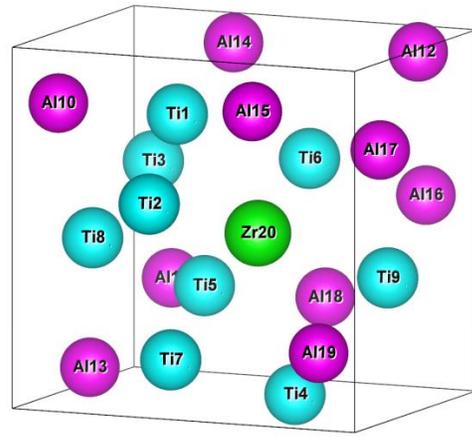
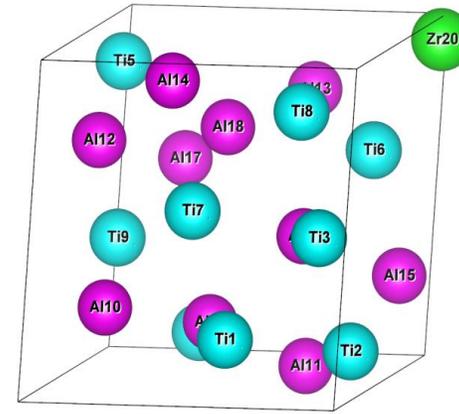
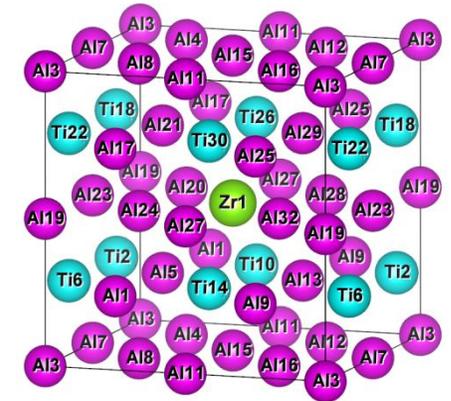
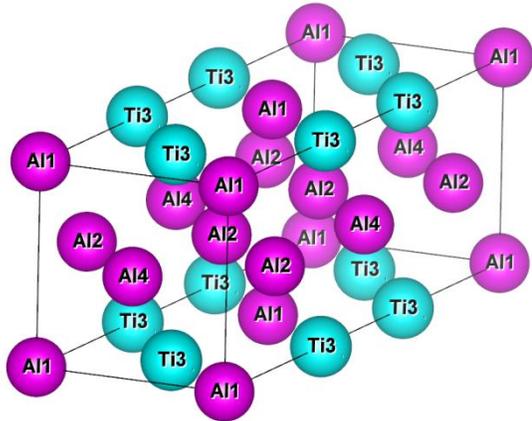
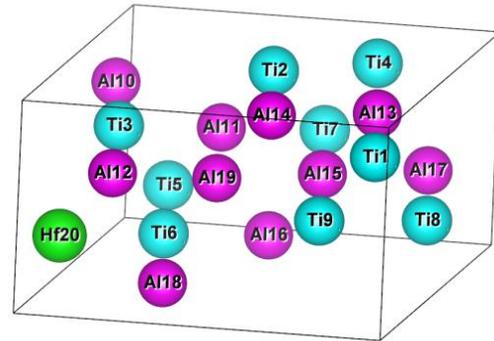
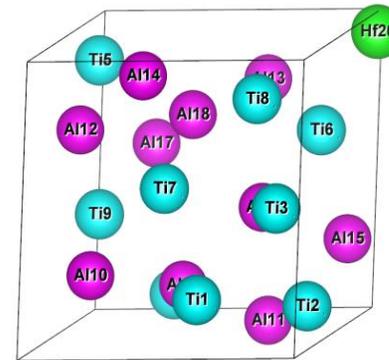
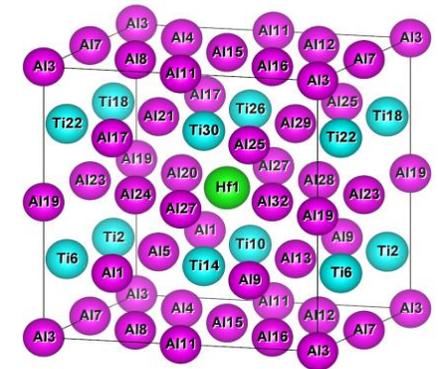
Н. И. КАРАКЧИЕВА^{1,2}, канд. хим. наук, Ю. А. АБЗАЕВ¹, д-р физ.-мат. наук,
И. В. АМЕЛИЧКИН¹, И. А. ЖУКОВ¹, д-р техн. наук, В. В. ПОСКУТОВ¹, канд. физ.-мат. наук,
А. С. КНЯЗЕВ¹, д-р хим. наук, В. И. САЧКОВ¹, д-р хим. наук, И. А. КУРЗИНА¹, д-р физ.-мат. наук

¹ ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Томский государственный университет»,
634050, Томск, пр. Ленина, 36. E-mail: kozovanatalia@yandex.ru

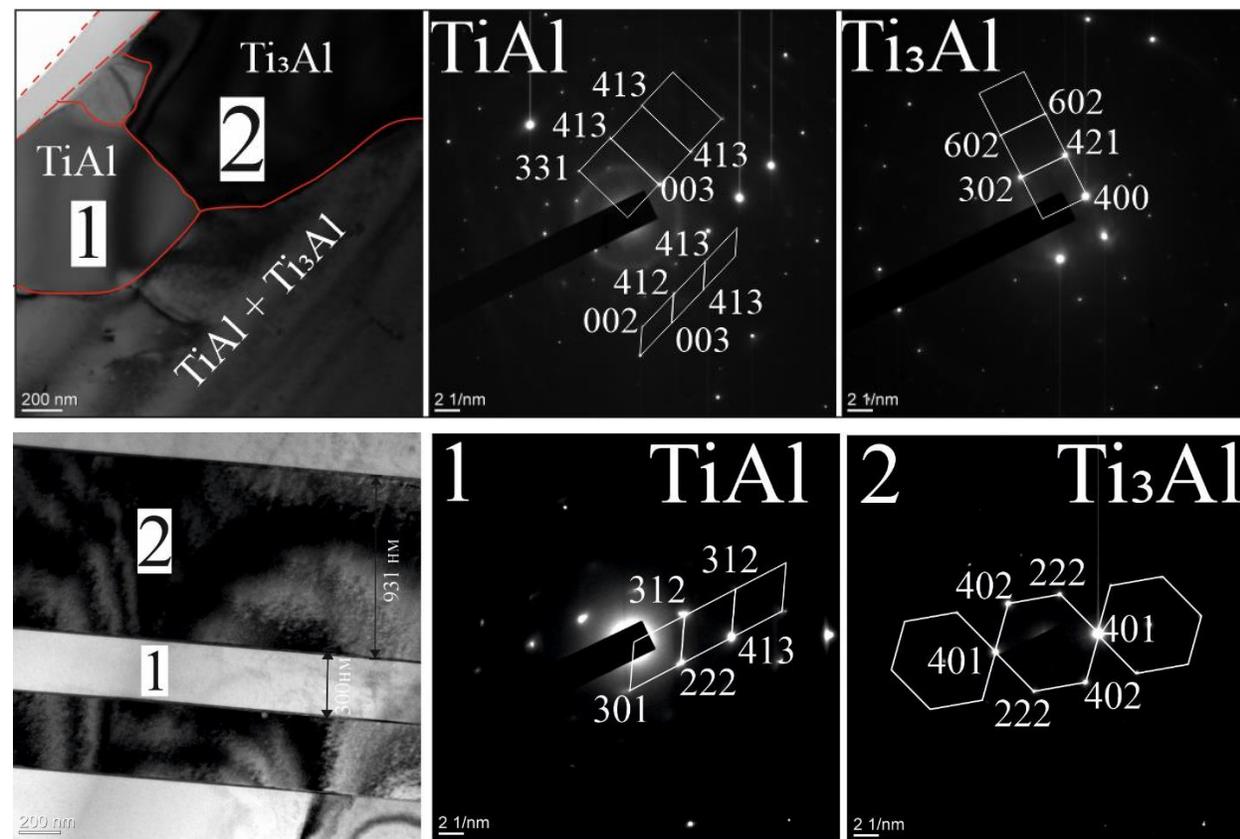
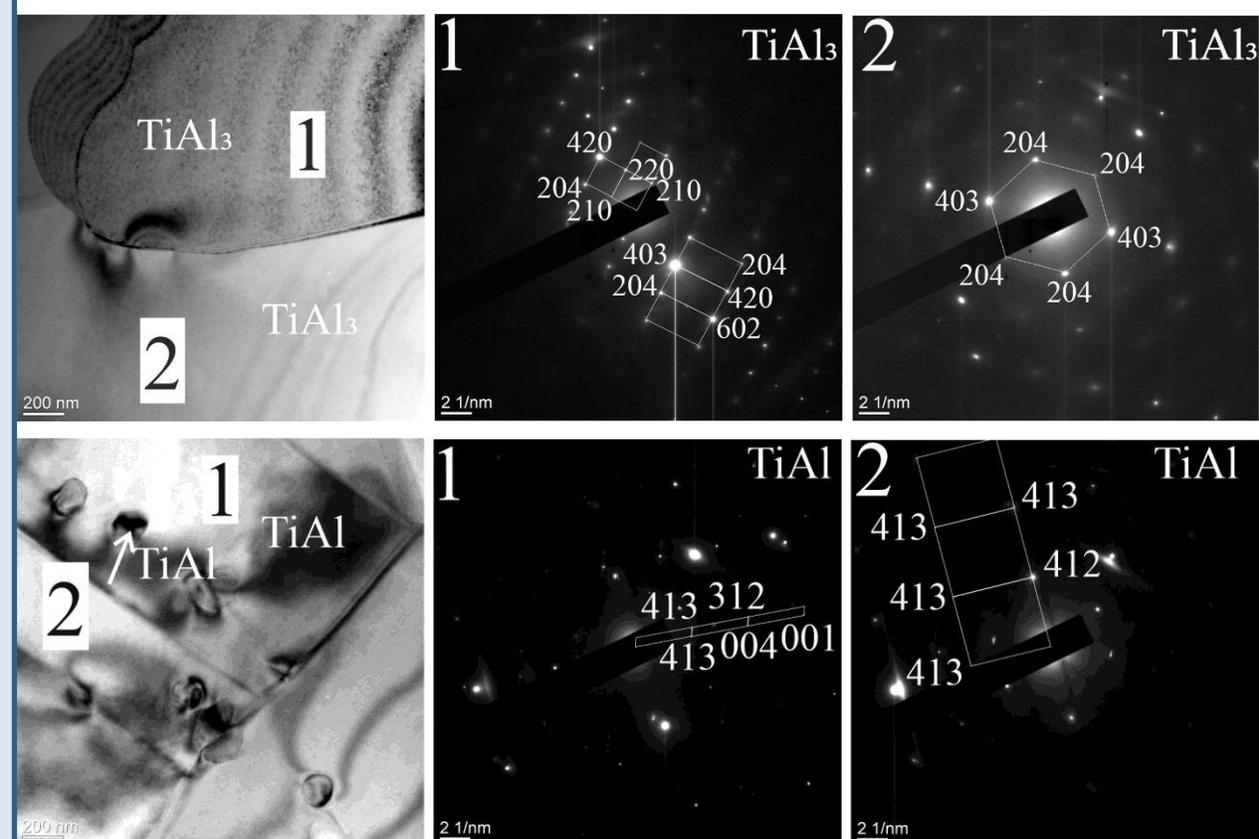
² ФГБОУ ВО «Марийский государственный университет», 424000, Республика Марий Эл,
Йошкар-Ола, пл. Ленина, 1

³ ФГБОУ ВО «Томский государственный архитектурно-строительный университет»,
634003, Томск, пл. Соляная, 2



 $Al_{10}Ti_9Zr$ (16 %) $Al_{10}Ti_9Zr$ (14 %) $Al_{10}Ti_9Zr$ (48 %) $Al_{23}Ti_8Zr$ (22 %) Al_8Ti_4 (8 %) $Al_{10}Ti_9Hf$ (51 %) $Al_{10}Ti_9Hf$ (17 %) $Al_{23}Ti_8Hf$ (24 %)

- доминируют твердые растворы на основе $Al_{10}Ti_9Me$, доля которых превышает 0,677 полного содержания в случае $Ti_{49}Al_{12}Hf$, и 0,745 – $Ti_{49}Al_{12}Zr$.
- параметры уточненных решеток и объем $Al_{10}Ti_9Me$ отличаются незначительно от значений в исходном состоянии.
- в сплаве $Al_{10}Ti_9Zr$ объем решетки увеличивается в основном за счет увеличения базисной плоскости

Ti₄₉Al₁₂ZrTi₄₉Al₁₂HfTi₄₉Al₁₂Zr

TiAl

65 %

Ti₃Al

32 %

Ti₂Zr (ZrTi₅ + Zr)

3 %

Образец

Фазовый состав

Ti₄₉Al₁₂HfTiAl₃

90 %

Ti_{0,6}Al_{0,4}

6 %

TiAl

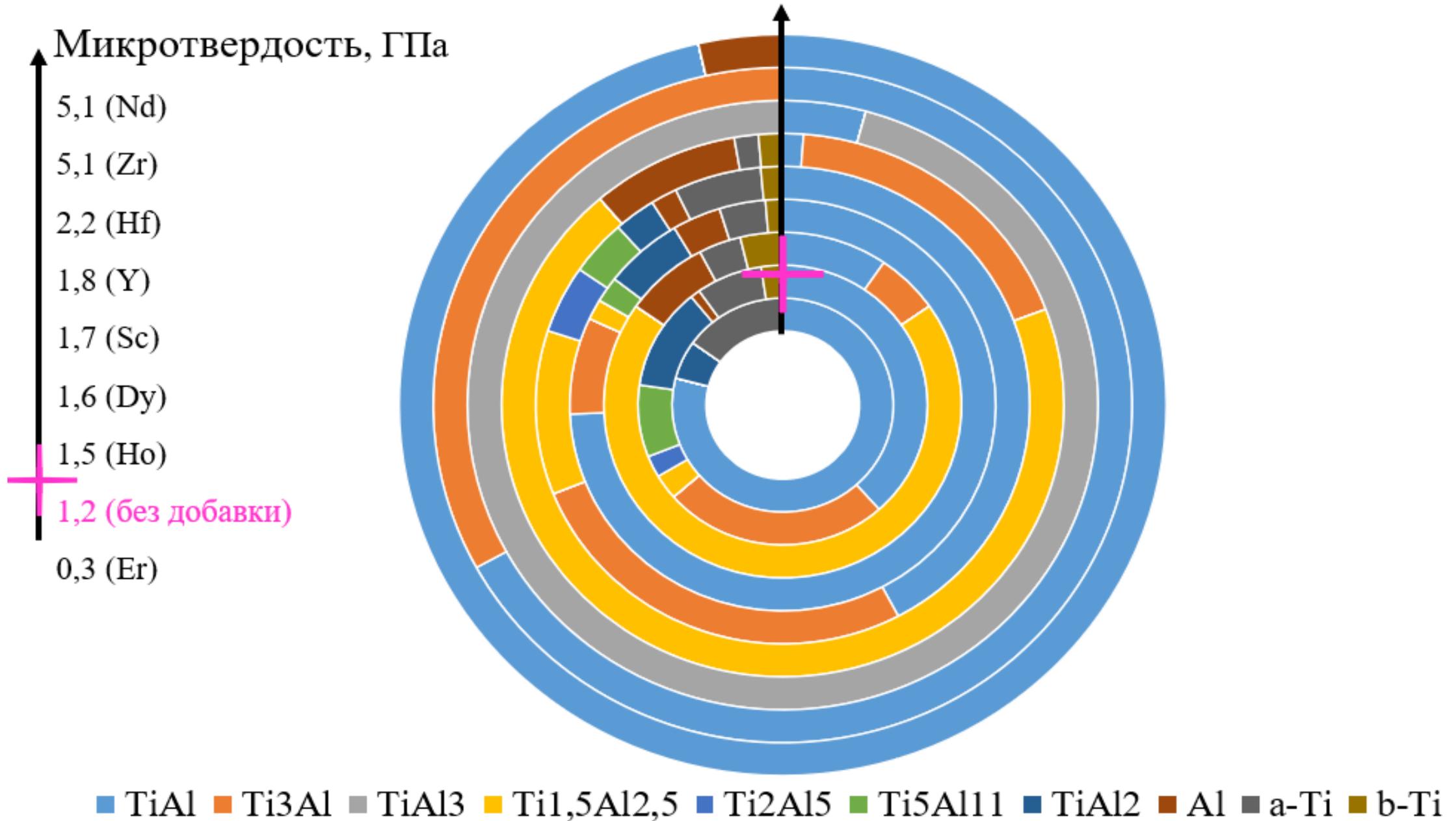
4 %

Введение в систему Ti50Al третьего компонента из подгруппы титана (Zr, Hf) не приводит к образованию ламельной структуры и изотипических соединений. Введение компонентов способствует образованию твердых растворов градиентного состава.

III		IV	
B Бор 5 10,811		C Углерод 6 12,01115	
Al Алюминий 13 26,9815		Si Кремний 14 28,086	
21 44,956 Sc Скандий		22 47,90 Ti Титан	
Ga Галлий 31 69,72		Ge Германий 32 72,59	
39 88,905 Y Иттрий		40 91,22 Zr Цирконий	
In Индий 49 114,82		Sn Олово 50 118,69	
57 138,91 La* Лантан		72 178,49 Hf Гафний	
Tl Таллий 81 204,37		Pb Свинец 82 207,19	
89 [227] Ac**		104 [261] Rf	

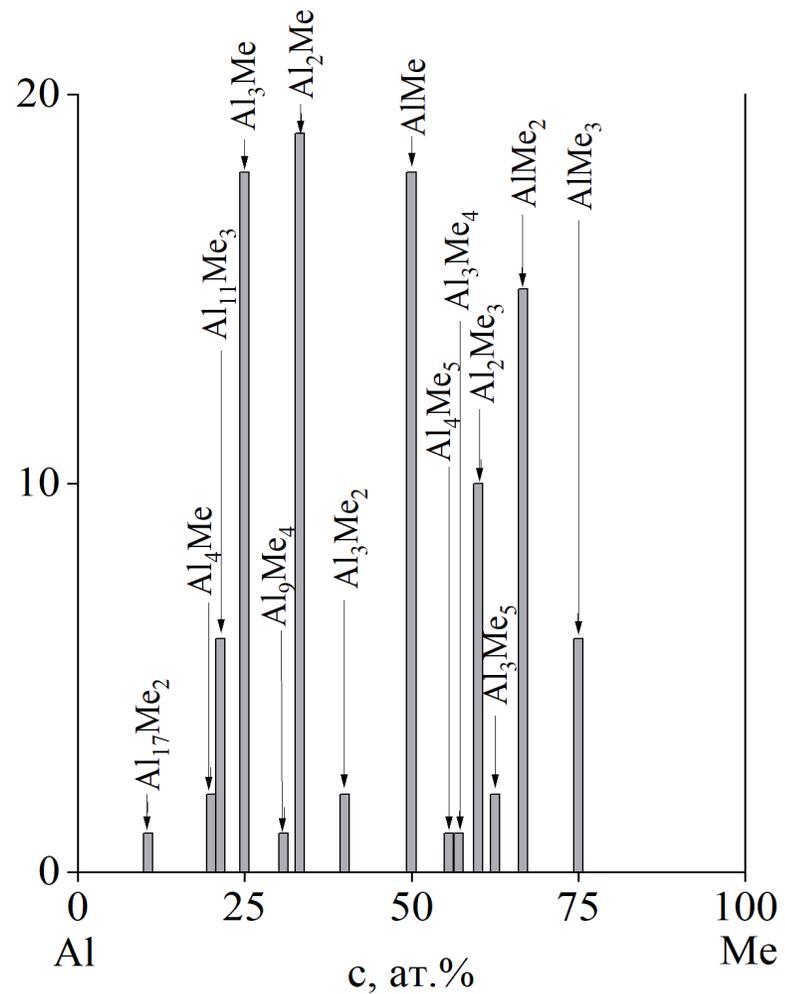
Фазовый состав образцов на основе системы Ti-Al

Образец	$\Delta H^{1423}_{\text{ф}}$, кДж/моль	Ti50Al	Ti49Al2Sc	Ti49Al2Y	Ti49Al2Nd	Ti49Al2Dy	T49Al2Ho	Ti49Al2Er	Ti49Al2Zr	Ti49Al2Hf	
Фазы											
TiAl	-75,8		<i>P4/mmm</i>								
Ti ₃ Al	-92,5		<i>P6₃/mmc</i>			<i>P6₃/mmc</i>					
Ti ₃ Al ₅	-		<i>P/mmm</i>			<i>P/mmm</i>					
Ti ₅ Al ₁₁	-	<i>Pmmm</i>				<i>Pmmm</i>					
β-Ti	-	<i>Im-3m</i>				<i>Im-3m</i>		<i>P6₃/mmc</i>			
α-Ti	-	<i>Im-3m</i>	<i>Fm-3m</i>				<i>Fm-3m</i>	<i>Im-3m</i>			
Ti ₂ Al ₅	-113,7	<i>P4/mmm</i>				<i>P4/mmm</i>					
TiAl ₂	-89,7	<i>Cmmm</i>				<i>Cmmm</i>		<i>Cmmm</i>			
TiAl ₃	-138,1									<i>I4/mmc</i>	
Al	-		<i>Fm3m</i>								
Sc/Y/ Dy/Ho/Hf	-		<i>P4/nmm1</i>	<i>P6₃/mmc</i>		<i>P63/mmc</i>				<i>P6₃/mmc</i>	
AlMe (Me=Nd, Hf)	[Hf] = -60,9				<i>Pm3m</i>					<i>C/mmm</i>	
MeAl ₂ , Me=Dy, Y, Ho, Er	[Y] = -172,6 [Er] = -25,0					<i>Fd3̄m1</i>					
Me ₆ Ti ₄ Al ₄₃ , Me= Y, Nd, Dy, Ho, Er	[Dy] = -21,1 [Ho] = -20,8					<i>P6₃/mcm</i>					
Y ₃ Al ₅	-			<i>P6₃/mmc</i>							
Ti ₂ Zr	-								<i>P6/mmm</i>	<i>P6₃/mmc</i>	
Y ₃ Al, YAl, ScAl	[YAl] = -73,5			<i>Pm3m</i>							
Me ₂ Al (Sc, Y)	[Y ₂ Al] = -146,6		<i>P6₃/mmc</i>	<i>Pnma</i>							
Me ₃ Al ₂ , Me=Dy, Ho, Hf	[Hf] = -128,5					<i>P4₂/mnm</i>				<i>P42-mnm</i>	
MeAl ₃ , Me=Sc, Dy, Y, Er	[Y] = -204,9 [Er] = -316,9		<i>Pm3m</i>	<i>P6₃/mmc</i>		<i>R3̄m</i>		<i>Pm3m</i>			

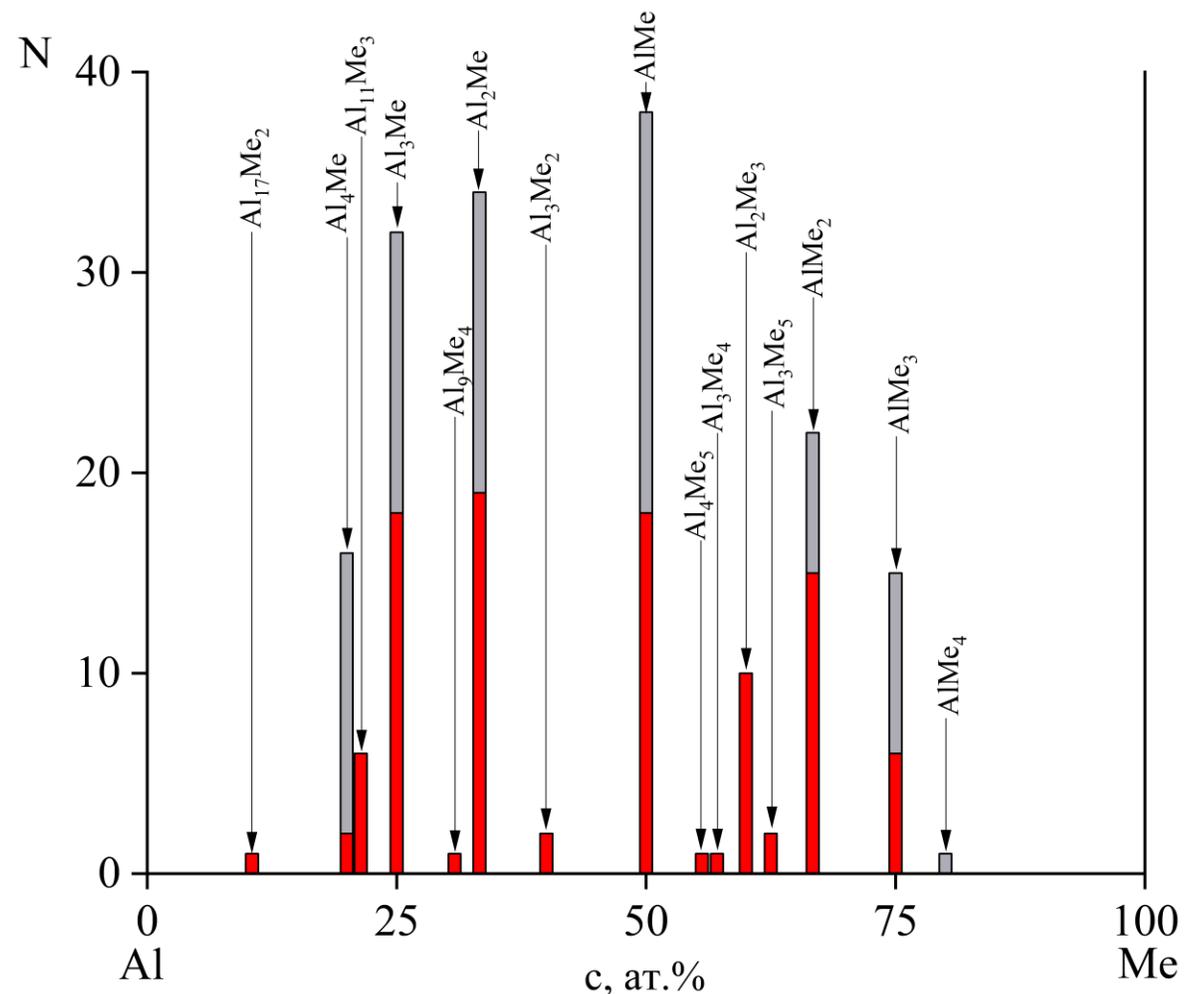


Введение в системы Ti-Al третьего компонента в количестве до 2 ат.% приводит к изменению микроструктуры слоев за счет твердофазного и дисперсионного упрочнения, что способствует в трехкомпонентных материалах типа $Ti_{49}Al_{12}X$, ($X=Sc, Y, Dy, Ho, Er, Zr, Hf$) повышению микротвердости от 1,2 до 1,8 ГПа при легировании элементами IIIВ подгруппы, снижению от 5,1 до 2,2 ГПа при легировании элементами IVВ подгруппы и от 5,1 ГПа до 0,3 ГПа при легировании лантаноидами

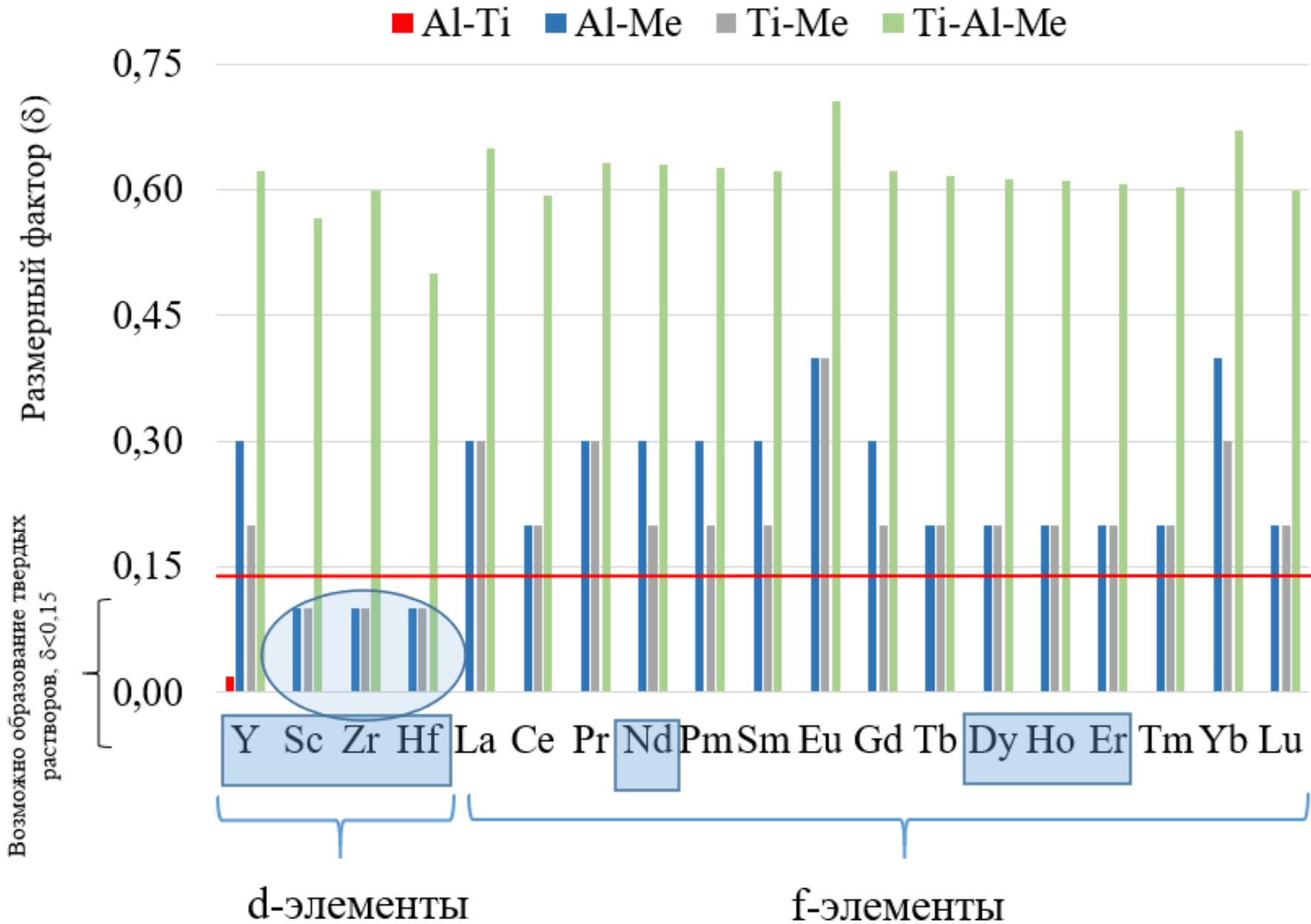
I		II		III		IV		V		VI		VII																									
(H)												H	He																								
												1,00797	4,0026																								
												Водород	Гелий																								
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne																														
3,0006	9,0122	10,811	12,01115	14,0067	15,9994	18,9984	20,179																														
Увеличивается в												Уменьшается в																									
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar																														
22,98977	24,305	26,9815	28,086	30,97376	32,06	35,453	39,948																														
п/г IIIВ												п/г IVВ																									
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe																														
39,102	40,08	44,956	47,90	50,942	51,996	54,9380	55,847																														
Калий												Кальций		Скандий		Титан		Ванадий		Хром		Марганец		Железо													
29	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr																													
63,546	65,37	69,72	72,59	74,9216	78,96	79,904	83,80																														
Медь												Цинк		Галлий		Германий		Мышьяк		Селен		Бром		Криптон													
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru																														
85,47	87,62	88,905	91,22	92,906	95,94	[99]	101,07																														
Рубидий												Стронций		Иттрий		Цирконий		Ниобий		Молибден		Технеций		Рутений													
47	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe																													
107,868	112,40	114,82	118,69	121,75	127,60	126,9044	131,30																														
Серебро												Кадмий		Индий		Олово		Сурьма		Теллур		Йод		Ксенон													
Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os																														
132,905	137,33	138,91	178,49	180,948	183,85	186,2	190,2																														
Цезий												Барий		Лантан		Гафний		Тантал		Вольфрам		Рений		Осмий													
79	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn																													
196,967	200,59	204,37	207,19	208,980	[210]*	[210]*	[210]	[222]																													
Золото												Ртуть		Таллий		Свинец		Висмут		Полоний		Астат		Радон													
Fr	Ra	Ac		Th		Pa		U		Np		Pu		Am		Cm		Bk		Cf		Es		Fm													
[223]	[226]	[227]		[232]		[231]		[238]		[237]		[244]		[243]		[247]		[247]		[252]*		[254]		[257]													
Франций												Радий		Актиний		Торий		Протактиний		Уран		Нептуний		Плутоний		Америций		Курчиум		Берклий		Калифорний		Эйнштейний		Фермиум	
59	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er																											
140,907	144,24	[147]*	150,35	151,96	157,25	158,924	162,50	164,930	167,26	172,04																											
Празеодим												Неодим		Прометий		Самарий		Европий		Гадолиний		Тербий		Диспрозий		Гольмий		Эрбий									
91	Pu	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm																											
[231]	[244]	[238]	[237]	[244]	[243]	[247]	[247]	[252]*	[254]	[257]																											
Плутоний												Уран		Нептуний		Плутоний		Америций		Курчиум		Берклий		Калифорний		Эйнштейний		Фермиум									



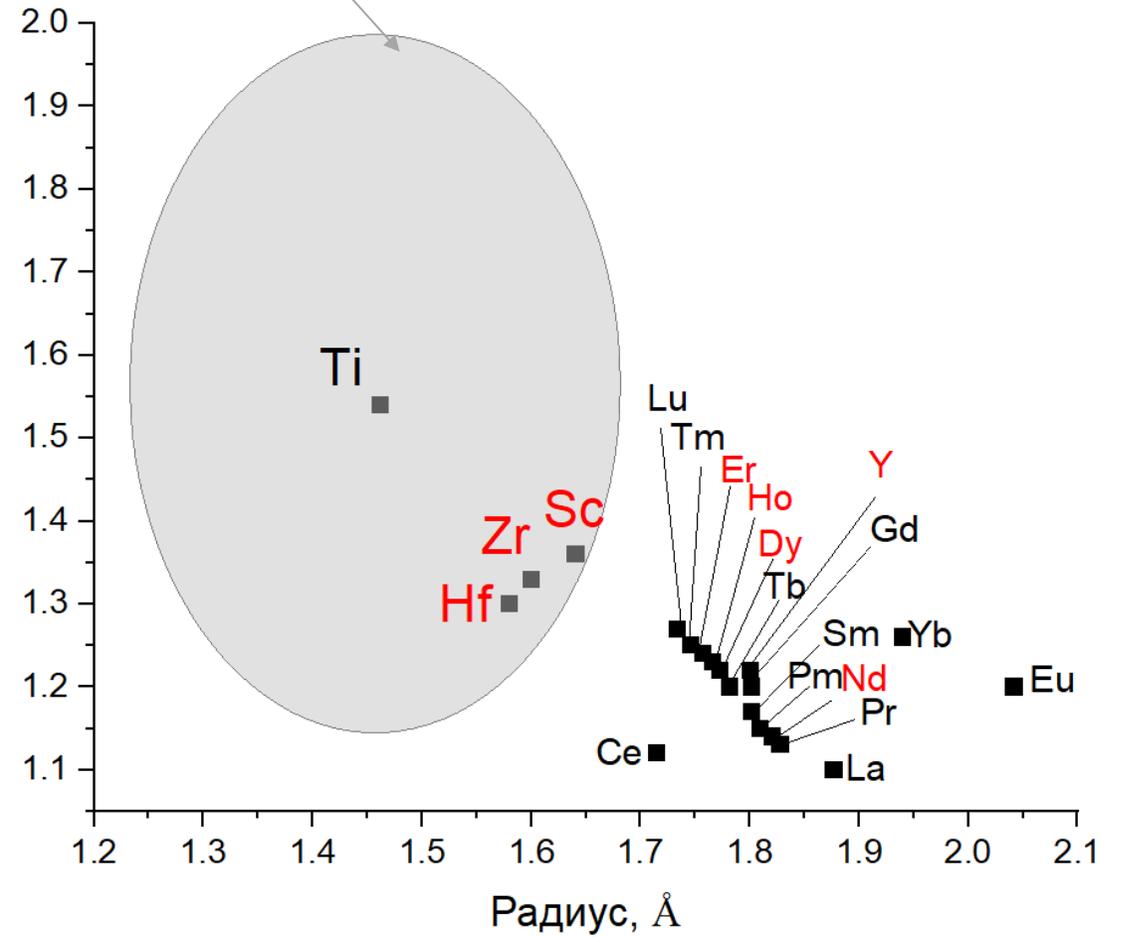
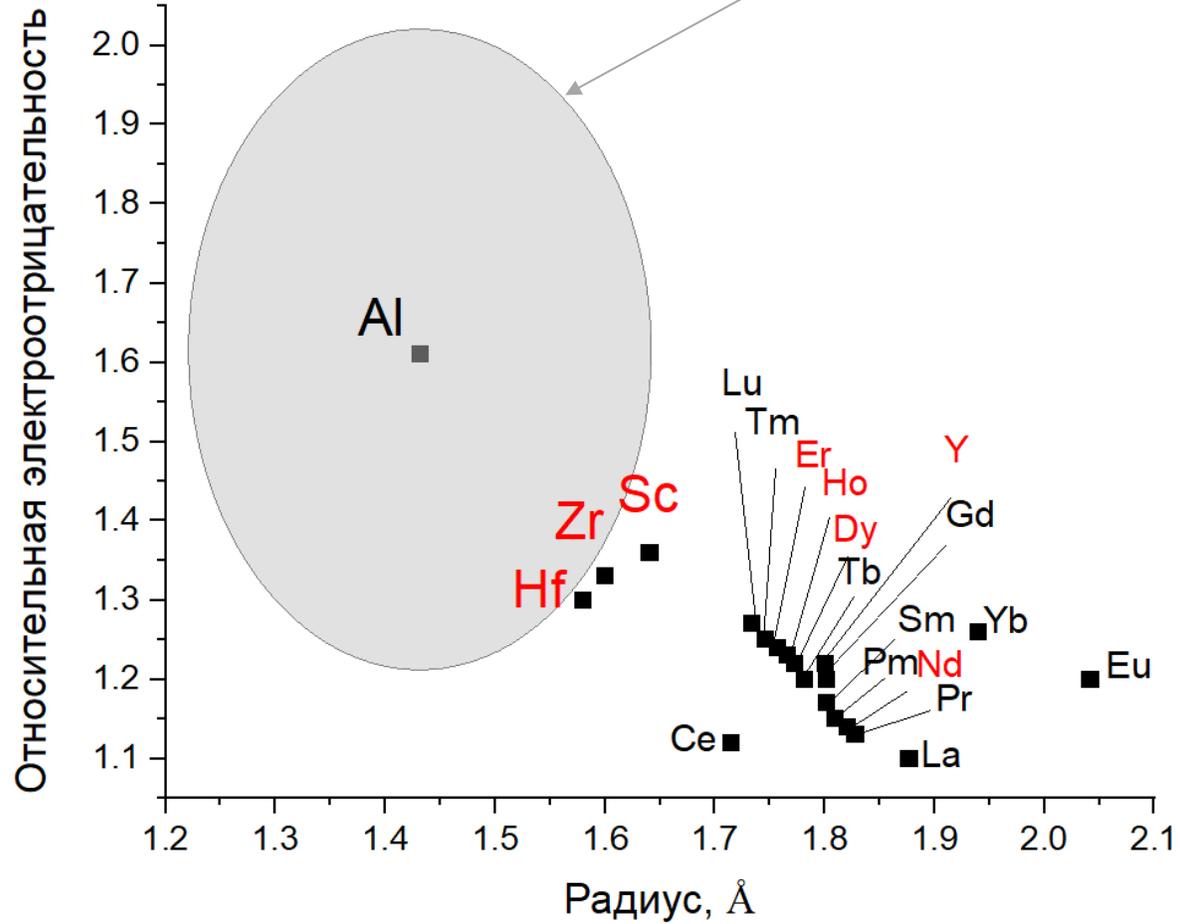
Sc, Y, Nd, Dy, Ho, Er, Zr, Hf



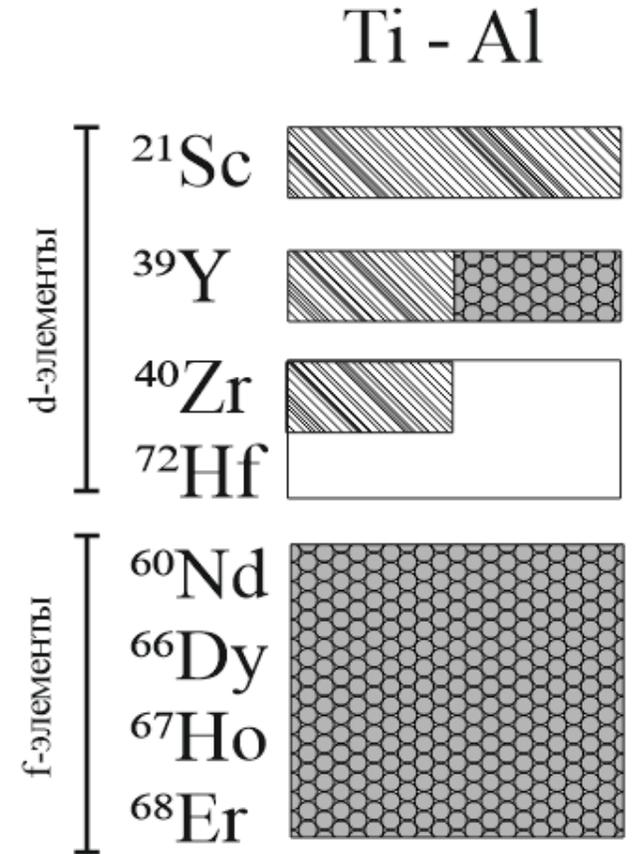
Вклад относительно всех металлов



Возможно образование
твердых растворов



1. Введение третьего легирующего элемента (Sc, Y, Ho, Dy, Er, Zr, Hf) в систему Ti50Al в количестве 2 ат.% приводит к **повышению энергии связи атомов** в кристаллической решетке и существенному **стабилизирующему эффекту** за счет образования твердых растворов элементов в Ti50Al (TiAl, Ti₃Al, Ti₃Al₅, Ti₅Al₁₁, TiAl₂, Ti₂Al₅) и дополнительных фаз ((Dy,Y,Ho)Al₂, (Dy,Y,Ho,Er)₆Ti₄Al₄₃, Y₃Al₅, Y₃Al, (Y,Sc)Al, (Y,Sc)₂Al, (Dy,Ho)₃Al₂), (Sc,Dy,Ho)Al₃).
2. Введение третьего легирующего элемента (Sc,Y) приводит к формированию **ламельной структуры** в системе Ti₄₉Al₄₉(Sc,Y)₂, при этом увеличение ширины Ti- и Al-обогащенных полос в 1,5-3 раза наблюдается только при добавлении скандия. Введение третьего легирующего элемента (Y, Dy, Ho, Er) приводит к формированию **изотипических соединений** типа Ho₆Mo₄Al₄₃ в системе Ti₄₉Al₄₉(Y,Dy,Ho,Er)₂.
3. Введение третьего легирующего элемента в количестве 2 ат.% в систему Ti50Al способом «Гидридной технологии» способствует **изменению микроструктуры** слоев за счет твердофазного и дисперсионного упрочнения, что способствует в трехкомпонентных материалах TiAl₄₉X₂, (X=Sc,Y,Dy,Ho,Er,Zr,Hf) повышению микротвердости от 1,2 (TiAl₅₀) до 1,8 ГПа (Ti₄₉Al₄₉Y₂) в ШВ подгруппе; снижению от 5,1 (TiAl₄₉Zr₂) до 2,2 ГПа (Ti₄₉Al₄₉Hf₂) IVB подгруппе; уменьшению от 1,6 ГПа (Ti₄₉Al₄₉Dy₂) до 0,3 ГПа (Ti₄₉Al₄₉Er₂) в семействе лантаноидов.



- Лигатура $Ti_{49}Al_{2}X$ ($Me = Sc, Y, Nd, Dy, Ho, Er, Zr, Hf$; ат.%), полученные «Гидридной технологией»;

- **Магниевый сплав Mg95-лигатура**

Исходные материалы для получения сплавов, лигатуры и композиционных материалов

Для получения образцов использовали порошок титана (ПТЭМ-1, ТПП – 8, алюминия (АСД-0, АСД-4), скандия (СкМ-1); иттрия (ИтМ-1), диспрозия (ДиМ-1); гольмия (ГоМ-1); эрбия (ЭрБ-1), порошок кальциетермический циркония; порошок электролитического гафния

Предмет исследований

Структура, физико-механические и прочностные свойства лигатур на основе $Ti-Al-X$ ($X = Sc, Y, Nd, Dy, Ho, Er, Zr, Hf$). Структура и механические свойства магниевого сплава состава Mg95-лигатура.

Методы моделирования

АТАТ, USPEX, в качестве интерфейса использовались ab initio программы Quantum Espresso и VASP;

Параметры решеток, объем элементарной ячейки, пространственная группа, энергия ячейки, геометрическая оптимизация элементарных ячеек вычисляли дополнительно в коде CASTEP;

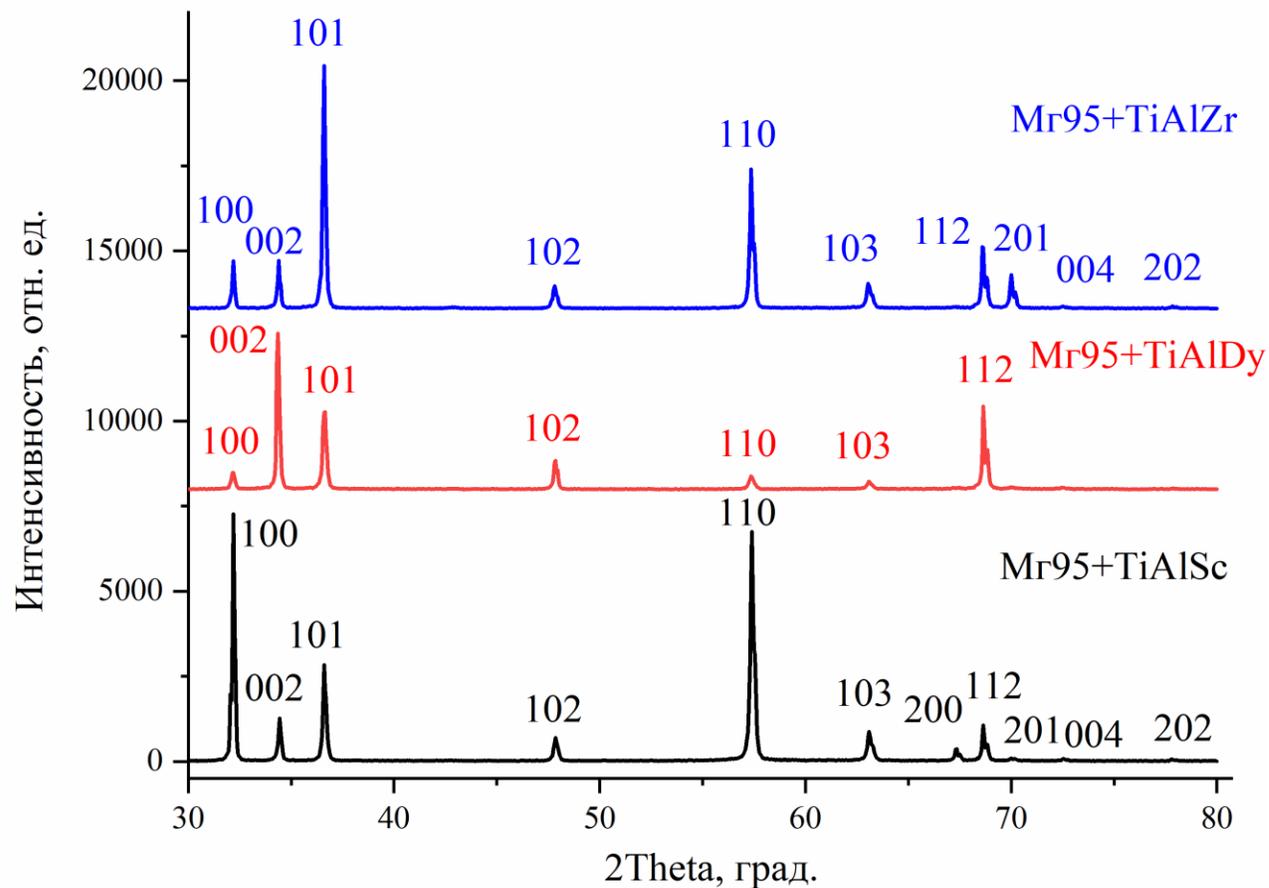
Идентификация структурного состояния и количественного содержания фаз осуществлялось методом Ритвельда с помощью Reflex;

Фазовые диаграммы тройных систем построенные с помощью бесплатных ресурсов, предоставляемых открытой платформой MaterialsProject.

Методы исследований

Растровая и просвечивающая электронная микроскопия с приставками для рентгеноспектрального анализа и EBSD-детектором, рентгенофазовые и рентгеноструктурные исследования с использованием баз данных PDF-4, методы исследования плотности микротвердости по Виккерсу, исследования электросопротивления.

Магниевый сплав Mg95-лигатура (0,1 масс.% лигатуры): Mg95+Ti49Al2Sc, Mg95+Ti49Al2Zr, Mg95+Ti49Al2Dy

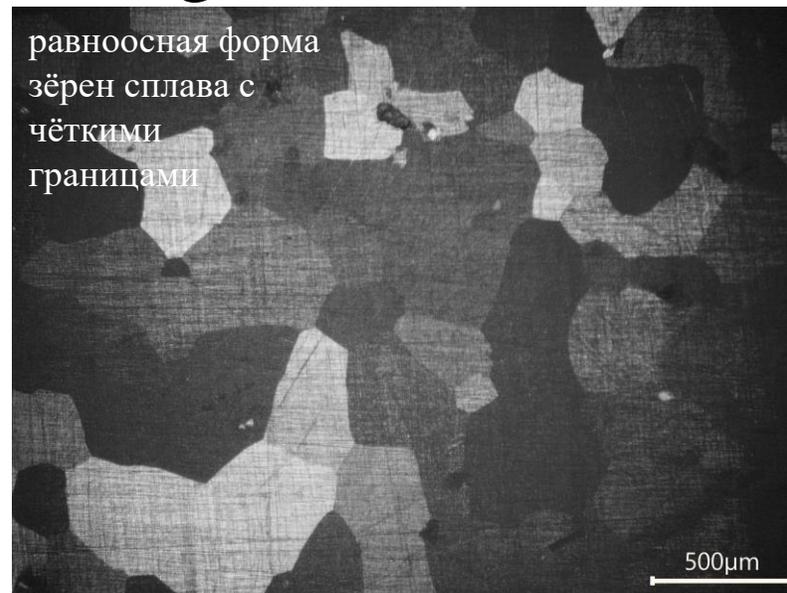


Период	Ряд	I	II	III	IV	V	VI	VII				
I	1	(H)							H Водород	He Гелий		
II	2	Li Литий	Be Бериллий	B Бор	C Углерод	N Азот	O Кислород	F Фтор	Ne Неон			
III	3	Na Натрий	Mg Магний	Al Алюминий	Si Кремний	P Фосфор	S Сера	Cl Хлор	Ar Аргон			
IV	4	K Калий	Ca Кальций	Sc Скандий	Ti Титан	V Ванадий	Cr Хром	Mn Марганец	Fe Железо			
	5	Cu Медь	Zn Цинк	Ga Галлий	Ge Германий	As Мышьяк	Se Селен	Br Бром	Kr Криптон			
V	6	Rb Рубидий	Sr Стронций	Y Иттрий	Zr Цирконий	Nb Ниобий	Mo Молибден	Tc Технеций	Ru Рутений			
	7	Ag Серебро	Cd Кадмий	In Индий	Sn Олово	Sb Сурьма	Te Теллур	I Йод	Xe Ксенон			
VI	8	Cs Цезий	Ba Барий	La* Лантан	Hf Гафний	Ta Тантал	W Вольфрам	Re Рений	Os Осмий			
	9	Au Золото	Hg Ртуть	Tl Таллий	Pb Свинец	Bi Висмут	Po Полоний	At Астат	Rn Радон			
VII	10	Fr Франций	Ra Радий	Ac** Актиний	Rf Резерфордий	Db Дубний	Sg Сиборгий	Bh Борий	Hs Хассий			
Лантаноиды*	58	Ce Церий	Pr Празеодим	Nd Неодим	Pm Прометий	Sm Самарий	Eu Европий	Gd Гадолиний	Tb Тербий	Dy Диспрозий	Ho Гольмий	Er Эрбий
Актиноиды**	90	Th Торий	Pa Протактиний	U Уран	Np Нептуний	Pu Плутоний	Am Америций	Cm Кюрий	Bk Берклий	Cf Калифорний	Es Эйнштейний	Fm Фермий

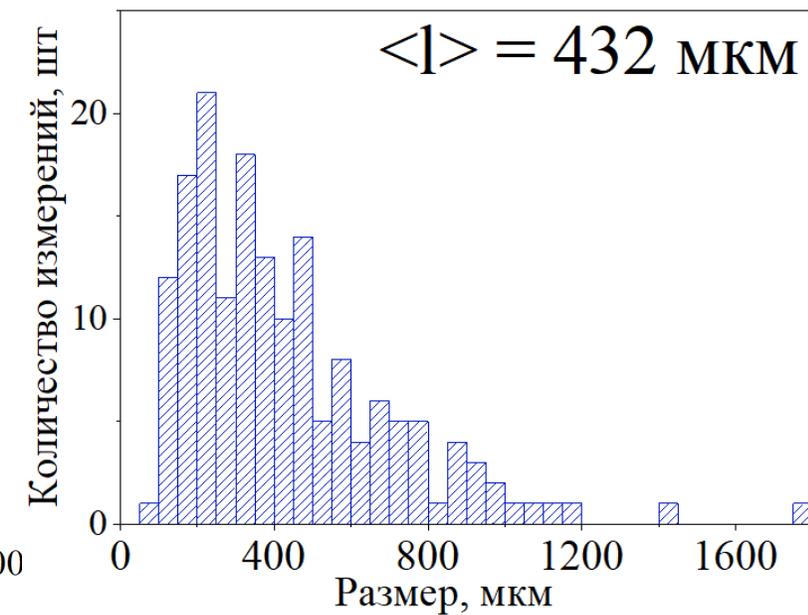
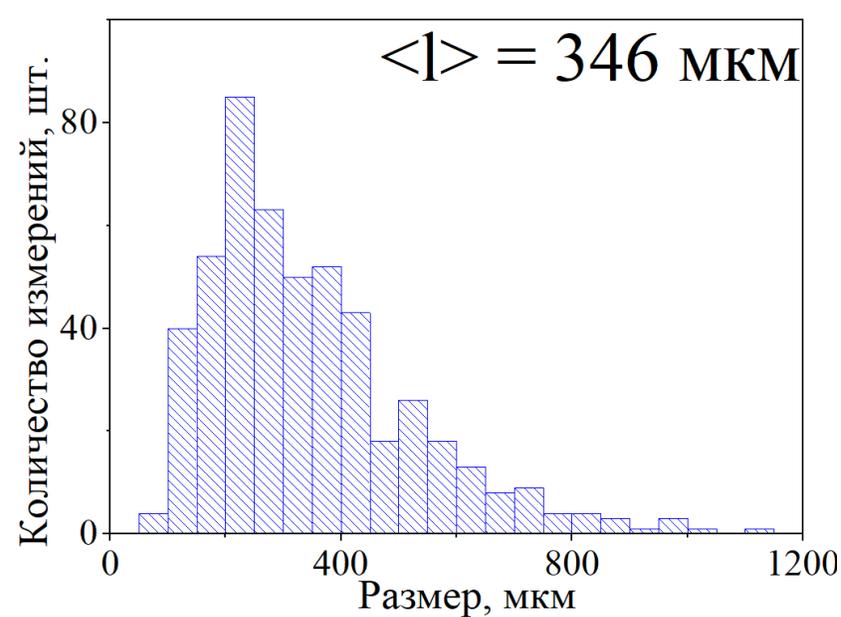
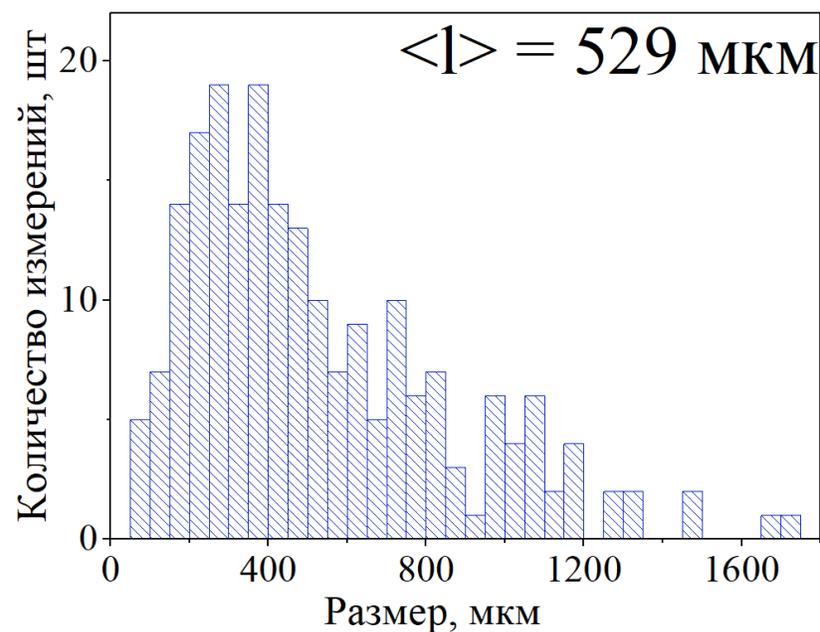
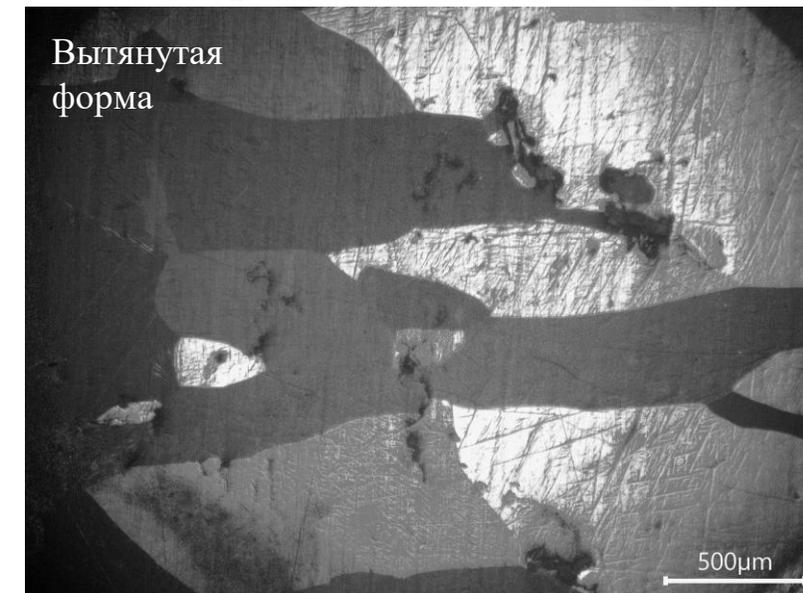
Mg-Ti49Al2Sc



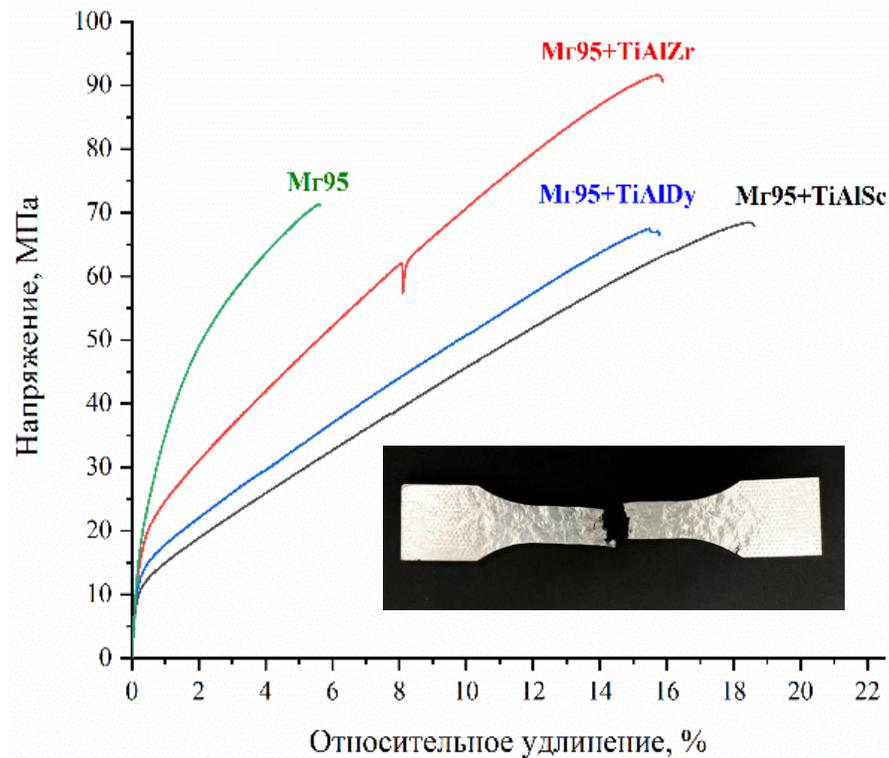
Mg-Ti49Al2Zr



Mg-Ti49Al2Dy



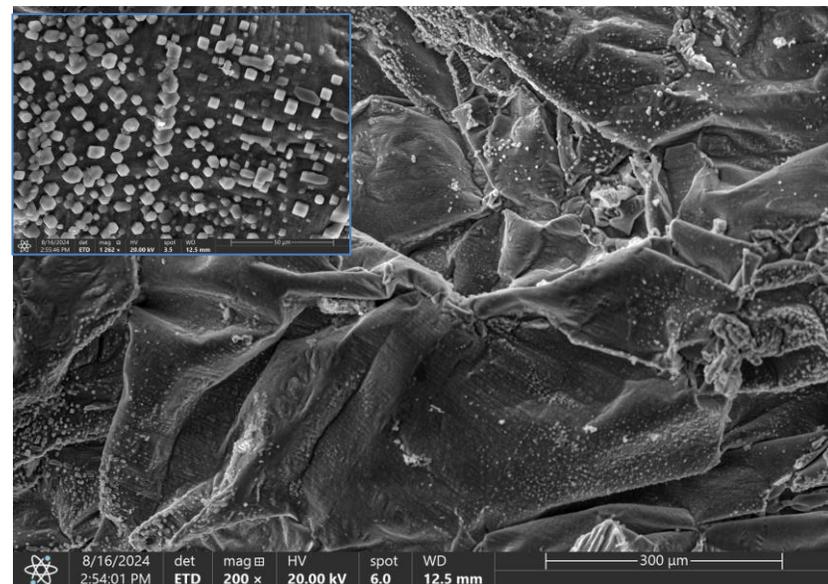




Сплав	Предел текучести, МПа ($\pm 2,0$)	Предел прочности, МПа ($\pm 4,0$)	Относительное удлинение, %	Размер зерна, Мкм ($\pm 25,0$)
Mg95	23	71	5,5 \pm 0,3	700 *
Mg95-TiAlSc	12	68	18 \pm 1,0	529
Mg95-TiAlDy	14	67	15 \pm 1,0	432
Mg95-TiAlZr	17	91	16 \pm 1,0	346

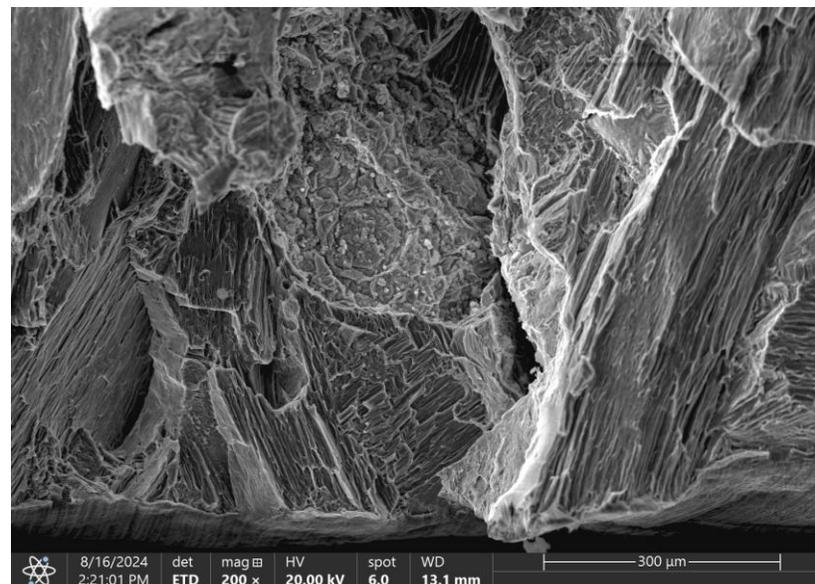
*Tsai, // J Alloys and Comp. –2011. -№. 509

Mg-Ti49Al2Sc



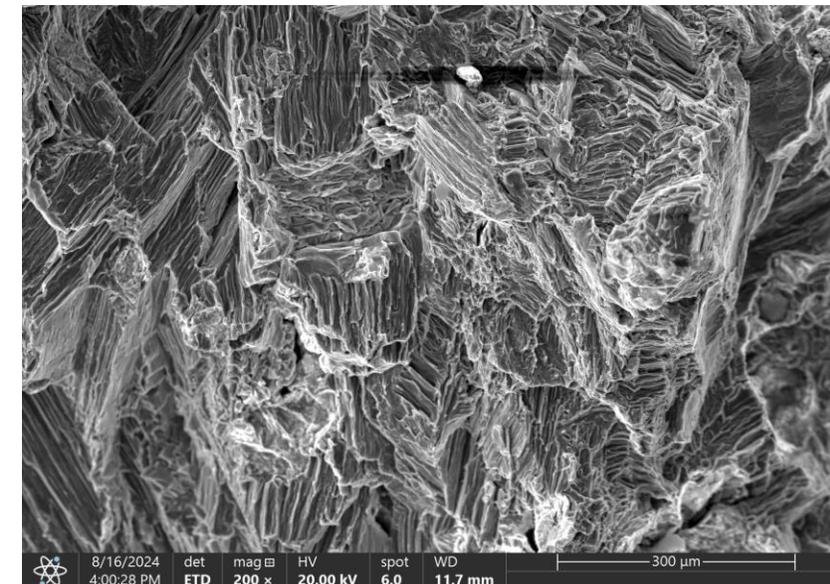
структура, характерная для хрупкого транскристаллитного разрушения, а также поверхностью лигатуры, усеянной множеством гексагональных включений, размером от 8 до 12 мкм

Mg-Ti49Al2Zr



Типичная структура для хрупкого разрушения поверхности. В объеме сплава встречаются нерастворившиеся включения лигатуры TiAlZr. Части лигатуры TiAlZr представляют собой рыхлые агломераты с крупными частицами от 100 до 300 мкм

Mg-Ti49Al2Dy



Структура характерна для квазихрупкого разрушения с редкими частицами лигатуры неправильной формы с размерами 50-80 мкм

Введение лигатуры **TiAlSc** приводит к увеличению относительного удлинения до 18% при пределе прочности 68 МПа. Лигатура **TiAlZr** позволяет повысить предел прочности сплава Mg95 до 91 МПа при значении относительного удлинения 16%. Лигатура **TiAlDy** не приводит к улучшению механических свойств.



Каракчиева Наталья Ивановна,
кандидат химических наук,
старший научный сотрудник НИ ТГУ, Томск



Клопотов Анатолий Анатольевич,
доктор физико-математических наук,
профессор

ТГАСУ, Томск



Курзина Ирина Александровна,
доктор физико-математических наук,
Директор центр исследований в области
материалов и технологий НИ ТГУ, Томск



Абзаев Юрий Афанасьевич,
доктор физико-математических наук,
профессор

ТГАСУ, Томск



Сачков Виктор Иванович,
доктор химических наук,
Заведующий Инновационно-
технологическим центром СФТИ ТГУ,
г.Томск

Стабильность соединений Ti-H с разным содержанием атомов Ti, H оценивалась кластерным методом с помощью программы ATAT и эволюционным кодом в USPEX.

В программах ATAT, USPEX в качестве интерфейса использовались ab initio программы Quantum Espresso и VASP.

Оценки производились при 0K, в этом случае расчеты энергии не осложнены вкладом колебательного спектра. В работе прогноз стабильных кристаллических соединений Ti-H методом кластерного расширения на основе кубической решетки, и аналогичный прогноз в USPEX осуществляется на основе сведений об атомном содержании. В ATAT в начальной конфигурации решетки с заданными параметрами выделяются, парные, триплетные соединения и т.д. атомов, определяемые в узлах решеток переменными занятости. Для всех конфигураций вычисляется энергия решетки. Для Ti-H рассматривались решетки, содержание атомов Ti_xH_y в которых варьировалось в интервале $x, y = (0-8)$ атомов. Поиск кластеров включал в себя соединения всех пространственных групп (230) указанного числа атомов. При расчетах энергии соединений в ATAT учитывалось число эквивалентных конфигураций одинаковой симметрии, а также принадлежность атомов неэквивалентным узлам. Точность оценки соединений определялась сравнением с энергией решеток, вычисляемых кодом Quantum Espresso (QE).

Параметры решеток, объем элементарной ячейки, пространственная группа, энергия ячейки, геометрическая оптимизация элементарных ячеек вычисляли дополнительно в коде CASTEP.

Идентификация структурного состояния и количественного содержания фаз осуществлялось методом Ритвельда с помощью reflex.

Варьировалось максимально возможное количество параметров.

Фоновое излучение на дифрактограммах аппроксимировалась многочленом 20-й степени.

Полнопрофильная интегральная интенсивность эталонных фаз оценивалась самосогласованным образом.

Выбор эталонных решеток осуществлялся из кристаллографической базы данных COD.

Поскольку в COD отсутствовали соединения Ti-Al-Me (Me=Sc,Y,Dy,Ho,Er,Zr,Hf), список эталонов был дополнен предсказанными структурами, полученными в коде USPEX с интерфейсом SIESTA. В USPEX-SIESTA посредством эволюционного кода предсказываются стабильные структуры известного элементного состава, обладающие локальным, или глобальным минимумом свободной энергии (энтальпии) системы. В работе были предсказаны решетки фиксированного состава $TiAl_{49}Me_2$, которые использовались в дальнейшем для качественного анализа фазового состава синтезированных сплавов Ti-Al-Me.

Стабильность эталонных решеток оценивалась как в программе USPEX-SIESTA, так и CASTEP методом выпуклых оболочек на основе *on-line* ресурса [COD, OQMD].

В программе USPEX-SIESTA была создана кристаллографическая база стабильных и квазистабильных структур известного элементного состава.

Оценивали энергию смещения (ΔH) эталонных фаз относительно нулевого уровня, который определяется движущей силой фазового разделения на стабильные интерметаллиды. Расчеты производились на основе кристаллографической базы эталонов *Materials Project*.

Фазовые диаграммы тройных систем были построены с помощью бесплатных ресурсов, предоставляемых открытой платформой *MaterialsProject*.