

## ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА РАЗУПОРЯДОЧЕННОГО СПЛАВА МО-W

Ахмедов Э.Н.

*Институт проблем геотермии Дагестанского НЦ РАН,  
367030, Махачкала, проспект И. Шамиля 39а,  
e-mail: aen-code@yandex.ru*

На основе методики<sup>1</sup>, позволяющей исследовать свойства сплава бинарного состава, получена фазовая диаграмма твердого раствора молибдена и вольфрама:  $Mo_{1-C}W_C$ , где  $C$  – атомная концентрация  $W$ . Парное межатомное взаимодействие представлено в виде потенциала Ми-Леннард-Джонса:  $\phi(r) = [D/(b-a)] \cdot [a(r_0/r)^b - b(r_0/r)^a]$ , где  $D$  и  $r_0$  – глубина и координата минимума потенциала,  $b > a > 1$  – параметры, которые определены по методу из<sup>1</sup>. Для  $Mo$ :  $r_{0Mo} = 0.272$  nm,  $a_{Mo} = 1.87$ ,  $b_{Mo} = 6.82$ ,  $D_{Mo}/k_B = 48950$  K; для  $W$ :  $r_{0W} = 0.274$  nm,  $a_W = 2.6$ ,  $b_W = 7.2$ ,  $D_W/k_B = 40000$  K. Здесь  $k_B$  – постоянная Больцмана. Для расчёта температуры солидуса ( $T_s$ ) и температуры ликвидуса ( $T_l$ ) были использованы следующие выражения<sup>1</sup>:

$$T_s(C) = T_m(W)P_W(C) \cdot [m(C)/m_W] \cdot \{ [c(C)\Theta(m)] / [c_W\Theta(m_W)] \} \cdot 2[X_{LW}/X_L(C)]^2 + T_m(Mo)P_{Mo}(C),$$

$$T_l(C) = T_m(Mo)P_{Mo}(C) \cdot [m(C)/m_{Mo}] \cdot \{ [c(C)\Theta(m)] / [c_{Mo}\Theta(m_{Mo})] \} \cdot 2[X_{LMo}/X_L(C)]^2 + T_m(W)P_W(C).$$

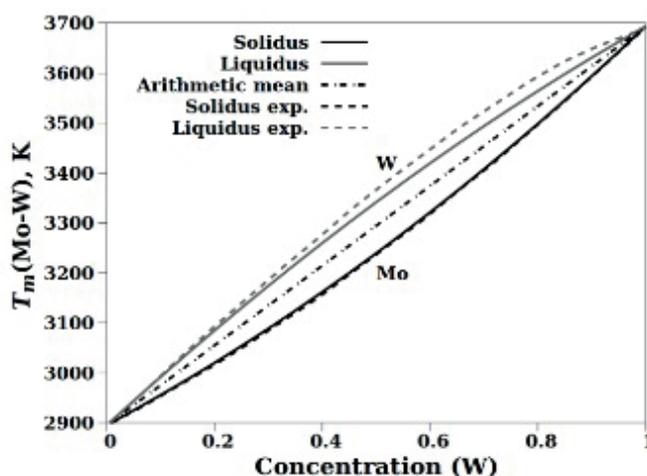


Рисунок 1. Фазовая диаграмма сплава Мо-W

Здесь  $T_m(i)$  — температура плавления чистой решетки для  $i$ -го компонента:  $T_m(Mo) = 2896$  K;  $T_m(W) = 3693$  K<sup>2</sup>,  $c(C)/c_i$ ,  $\Theta(m)/\Theta(m_i)$ ,  $X_L(C)/X_{Li}$  – отношения расстояний между центрами ближайших атомов, температуры Дебая и параметров Линдемманна в решетке раствора и в решетке чистого  $i$ -го компонента. Функции  $P_{Mo}$  и  $P_W = 1 - P_{Mo}$  это геометрические вероятности найти атом  $Mo$  и  $W$  в сплаве<sup>1</sup>. На рис. 1 показаны зависимости температуры солидуса и ликвидуса сплава  $Mo$ - $W$  от атомной концентрации  $W$ . Сплошные линии – наш расчёт, пунктир – экспериментальные значения<sup>2</sup>, штрих-пунктир – среднее арифметическое по концентрации от температур плавления чистых кристаллов  $Mo$  и  $W$ :  $T_m(C) = T_{mW}C + T_{mMo}(1 - C)$ .

### Литература

- Magomedov M.N. Physics of the Solid State, 2018, 60(5), 981.
- Nagender-Naidu S.V. et al. Bulletin of alloy phase diagrams, 1984, 5(2), 177.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, (грант № 18-29-11013\_мк) и программы Президиума Российской академии наук (грант № 1.13).*