

МЕХАНИЗМЫ АТОМНОЙ ДИФФУЗИИ В КАРБИДЕ ТИТАНА

Ehteshami H.,¹ *Смирнова Е.А.*,² *Sun W.*,³
*Коржавый П.А.**^{1,2,4}

¹*КТН, Стокгольм, Швеция,* ²*МИСиС, Москва, Россия,* ³*ORNL, Ок-Ридж, США,* ⁴*ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
*pavelk@kth.se

Карбиды и нитриды переходных металлов сочетают свойства характерные для керамик (высокие температура плавления, твердость и коррозионная стойкость) со свойствами характерными для металлов (высокие электро- и теплопроводность), что делает эти соединения подходящими кандидатами для существующих и появляющихся высокотемпературных приложений [1]. Понимание структуры и динамики атомных дефектов в высокотемпературных соединениях очень важно для управления свойствами материалов в процессе их изготовления и применения [2]. В то время, как моновакансионный механизм вполне достаточен для описания самодиффузии в нитридах металлов IV группы [3], количественное понимание механизмов диффузии атомов металла в соответствующих карбидах затруднено по причине получающейся в первопринципных расчетах сильно завышенной энергии образования металлической вакансии [4,5]. В докладе дается обзор первопринципных исследований точечных дефектов и их кластеров, а также механизмов диффузии, в карбиде титана [4–7]. Особое внимание уделяется механизмам диффузии в TiC задействующим межузельные атомы Ti и их кластеры с углеродными вакансиями и примесными атомами.

-
1. Toth L. E. (ed.) Transition Metal Carbides and Nitrides. Academic Press, New York, 1971.
 2. Андриевский Р. А. // Порошковая металлургия (Киев). Т.50, № 1-2. С. 5.
 3. Gambino D., Sangiovanni D. G., Alling B., Abrikosov I. A. // Phys. Rev. B. 2017. V. 96. Art. No. 104306.
 4. Razumovskiy V. I., Ruban A. V., Odqvist J., Korzhaviy P. A. // Phys. Rev. B. 2013. V. 87. Art. No. 054203.
 5. Razumovskiy V. I., Popov M. N., Ding H., Odqvist J. // Comput. Mater. Sci. 2015. V. 104. P. 147.
 6. Sun W., Ehteshami H., Korzhaviy P. A. // Phys. Rev. B. 2015. V. 91. Art. No. 134111.
 7. Sun W., Ehteshami H., Kent P. R. C., Korzhaviy P. A., to be published.