

THE NEIGHBOR ORDERING AND THE TRANSPORT OF HYDROGEN IN THE AMORPHOUS ALLOY BASED ON IRON

Sidorov N.I.*., Pastukhov E.A., Gabis I.E.⁽¹⁾, Timofeev N.I.⁽²⁾, Rudenko V.K.⁽²⁾.

The Institute of Metallurgy of the Ural Department of the Academy of Sciences of Russia, 101 Amundsena St., 620016 Yekaterinburg, Russia.

¹ The Scientific Research Institute of Physics, 1 Ulyanovskaya St., 198504, Petergoph, Russia.

² The "Yekaterinburg Non-Iron Metals Processing Works" Open Joint-Stock Company, 8 Lenina St., 620014 Yekaterinburg, Russia.

Introduction.

Recently physical phenomena in amorphous materials attract ever increasing attention. That is conditioned by the natural tendency to widen the area of scientific research objects and to contribute to the knowledge on the properties of solid bodies in different structural state. As one of the most significant problems in this area is considered building of complete and complete theory for unordered systems in the same way as in significant degree was made already towards crystal substances.

The process of hydrogen permeability in general along with its solubility and diffusion are depending from the local neighborhood formed by the atoms of amorphous alloy when the hydrogen atoms migrate through it.

The ideas on the mechanism if hydrogen permeability for pure crystal metals are formed already. The actual state of the hydrogen transport problem in unordered materials is presented in the reviews /1, 2, 3/. The deficit of the like research works is considered by the termo0 temporal instability of structure and properties for the said class of materials.

In this work there are fulfilled the complex investigations of the neighbor ordering structure and of the hydrogen migration in the amorphous alloy based on iron in the precrystallization heating mode.

Results and discussion.

In the present investigation with the roentgen diffraction method there was considered and analyzed the structural evolution of the multicomponential Fe_{77,3}; Ni_{1,1}; Si_{7,7}; B_{13,6}; C_{0,2}; P_{0,009} amorphous alloy in the heating mode before and after of its hydrogenisation. Amorphous tape from iron-based alloy was produced by melt spinning. The foil being 0,022 mm thick and at least 20 mm wide was used as the scientific research investigation samples. The

hydrogenisation was fulfilled electrolytically during 15 minutes with ambient temperature and the electrical current density of 40mA per square cm.

The hydrogenised samples of amorphous tape further on were investigated when being heated to 773°K for changing of neighbor ordering parameters and for hydrogen concentration.

The fulfilled analysis of the experimental data resulted in the conclusion on that the amorphous tape both as the initial form and in hydrogenised state too is not homogeneous towards types of atom packing and towards distribution of components; there are atom microgroups that differ with interatomic distances, coordination numbers and with component concentrations.

There was revealed forming of new metastable amorphous and crystal phases, while during that matter it is possible to have in amorphous matrix as the result of multiphase nucleus forming the appearance of cluster-like structures for separate local packings around metalloid atoms with peculiar non-monotonous stochastic changes of structural parameters during relaxation annealing. The structure analysis for thermorelaxation annealing shows that structural changes of form, appearing and disappearing of additional sub-peaks at the a(S) and g(r) curves in the hydrogenised samples can be caused by appearing and disappearing of hydrogen-containing complexes. The effects observed in diffraction experiment allow to presume the existence in the hydrogenized samples of microvolumes (clusters) that are identified as stable hydride extractions hinting on the great degree of existence of dissipative structures of Fe-H, S-H, Ni-H.

In this research work there was investigated also the hydrogen permeability of amorphous and recrystallized Fe-alloys with the use of the installation described in the paper /4/. The experimental curves of phase and frequency characteristics were approximated with the theoretical curves on different models of hydrogen diffusion.

* Fax: (3432) 679-186 E-mail: nik@imet.mplik.ru

The final criterion for choosing of one model from several models is the difference between experimental and model kinetic curves. The later were restored through inverse Fourier-expansion after fulfilling of phase difference minimization procedure for each of possible models.

At the Fig. is presented the experimental curve for hydrogen permeability of amorphous and recrystallized alloys based on iron.

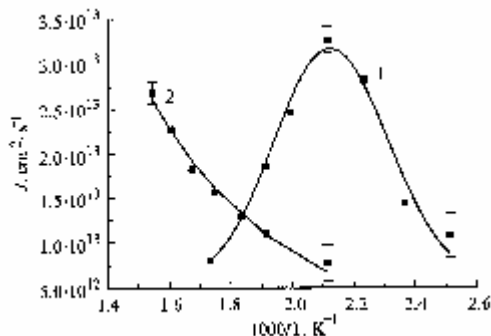


Fig. The hydrogen permeability of amorphous(1) and recrystallized (2) alloys based on iron /5/.

There was established that the surface of both samples is coated with passivating layer preventing introduction of hydrogen atoms. The kinetic of

flow establishment curves in amorphous sample during irradiation with ions

Conclusions.

The fulfilled analysis of hydrogen permeability had shown that near the temperature of 473°K hydrogen permeability of amorphous alloys several times exceeds permeability of crystal material.

The presence of hydrogen in amorphous alloy creates necessary prerequisites for phase transitions based on cooperative diffusion mechanism initiated not be temperature but by hydrogen concentration.

References

1. Kirchheim R. et. Al. // Mat. Sci. Eng. 1988. v99. №2. pp.457-462.
2. Larikov L.N.. //METALLOFIZIKA 1993. v.15.№4. pp. 54-78.
3. Eliaz N., Eliezer D. // Advanced Performant Materials 1999. v6. pp.5-31.
4. Gabis I.E., Kurdyumov A.A., Tichonov N.A. //Bulletin of St. Peterburg Univesity ser.4: Phis.-Chem., 1993.v.2 №11,pp. 77-79.
5. Evard E.A., Sidorov N.I., Gabis I.E. //J.Technical Phisics 2000. №70. v.3. pp. 90-92

БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК И ТРАНСПОРТ ВОДОРОДА В АМОРФНОМ СПЛАВЕ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

Сидоров Н.И.*, Пастухов Э.А., Габис И.Е.⁽¹⁾,
Тимофеев Н.И.⁽²⁾, Руденко В.К.⁽²⁾

Институт металлургии УрО РАН, ул. Амундсена 101, Екатеринбург, 620016, Россия

⁽¹⁾ Научно-исследовательский институт физики, Петергоф, ул. Ульяновская 1, 198504, Россия

⁽²⁾ ОАО Екатеринбургский завод по обработке цветных металлов, ул. Ленина 8, Екатеринбург, 620014, Россия

Введение

Физические явления в аморфных материалах в последнее время привлекают все большее внимание. Это обусловлено естественным стремлением расширить круг объектов исследования и пополнить знания о свойствах твердых тел в различных структурных состояниях. Одной из важнейших задач в этой области является построение полной и последовательной теории неупорядоченных систем, подобно тому как это в значительной степени уже сделано в отношении кристаллических веществ.

Процесс водородоприимности в целом, а также растворимость и диффузия зависят от локального окружения, образуемого атомами аморфного сплава при миграции через него атомов водорода.

Представления о механизме водородоприимности для чистых кристаллических металлов уже сформировались. Современное состояние проблемы транспорта водорода в неупорядоченных материалах отражено в обзорах [1,2,3]. Дефицит подобных исследований обусловлен термовременной нестабильностью структуры и свойств данного класса материалов.

В данной работе проведены комплексные исследования структуры ближнего порядка и миграции водорода в аморфном сплаве на основе железа в режиме предкристаллизационного нагрева.

Результаты и обсуждение

В настоящем исследовании методом рентгеновской дифракции рассмотрена и проанализирована структурная эволюция многокомпонентного аморфного сплава $Fe_{77.3}Ni_{1.1}Si_{7.7}B_{13.6}C_{0.2}P_{0.009}$ в режиме нагрева до и после его гидрирования. Аморфная лента из

сплава на основе железа получена спиннингованием расплава. Фольга толщиной 0.022 мм, шириной не менее 20 мм использовалась в качестве образцов для исследования. Наводороживание велось электролитически в течение 15 минут при комнатной температуре, плотность тока 40 мА/см².

Наводороженные образцы аморфной ленты в дальнейшем исследовали при нагреве до 773⁰ К на изменение параметров ближнего порядка и концентрацию водорода.

В результате проведенного анализа экспериментальных данных установлено, что аморфная лента как исходная, так и гидрированная является неоднородной по типам упаковки атомов и распределению компонентов: имеются атомные микрогруппировки, отличающиеся межатомными расстояниями, координационными числами и концентрацией компонентов.

Обнаружено образование новых метастабильных фаз - аморфных и кристаллических, при этом в аморфной матрице в результате многофазного зародышеобразования возможно возникновение кластероподобной структуры отдельных локальных упаковок вокруг атомов металлоида, с характерными немонотонными стохастическими изменениями структурных параметров при релаксационном отжиге.

Анализ структуры при терморелаксирующем отжиге, показывает, что структурные изменения формы, возникновение и исчезновение дополнительных субпиков на кривых $a(S)$ и $g(R)$ в гидрированных образцах могут быть вызваны появлением и исчезновением водородосодержащих комплексов. Наблюдаемые в дифракционном эксперименте эффекты позволяют сделать предположение о существовании в

*Факс (3432)678196 E-mail: nik@imet.mplik.ru

гидрированных образцах микрообъемов (кластеров), которые идентифицируются как стабильные гидридные выделения, указывающие на высокую степень существования диссипативных структур типа Fe-H, Si-H, Ni-H.

В данной работе была исследована также водородопроницаемость аморфного и рекристаллизованного Fe-сплавов на установке, описанной в работе /4/. Экспериментальные кривые фазочастотных характеристик аппроксимировались теоретическими кривыми по различным моделям диффузии водорода.

Окончательным критерием выбора одной модели из нескольких является невязка между экспериментальной и модельной кинетическими кривыми. Последние восстанавливались путем обратного Фурье-разложения после проведения процедуры минимизации невязки фаз для каждой из возможных моделей.

На рис. приведена экспериментальная кривая водородопроницаемости аморфного и рекристаллизованного сплавов на основе железа.

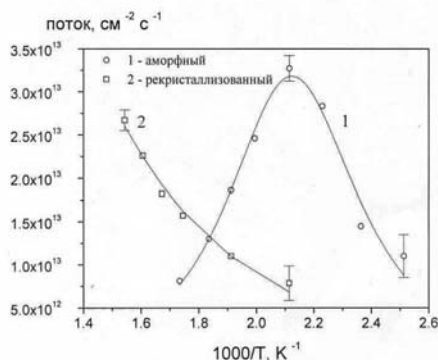


Рис. Водородопроницаемость аморфного и рекристаллизованного сплавов на основе железа /5/.

Установлено, что поверхность обоих образцов покрыта пассивирующим слоем, препятствующим проникновению атомов

водорода. Кинетика кривых установления потока при облучении ионами в аморфном образце показывает наличие ловушек, для которых энергии активации захвата водорода выше энергии высвобождения. Проникающий поток демонстрирует аррениусовскую зависимость от температуры в случае рекристаллизованного образца и немонотонную зависимость от температуры в случае аморфного. Предложена модель проникновения водорода и получены оценки соответствующих кинетических и энергетических параметров.

Выводы

Проведенный анализ водородопроницаемости показал, что в окрестности температуры 473⁰K водородопроницаемость аморфного сплава в несколько раз превосходит проницаемость кристаллического.

Наличие водорода в аморфном сплаве создает предпосылки для фазовых переходов в основе которых лежит кооперативный механизм диффузии, инициируемый градиентом не температуры, а концентрацией водорода.

Литература

1. Kirchheim R. et. Al. Hydrogen in amorphous and nanocrystalline metals // Mat. Sci. Eng. 1988. v99. №2. pp.457-462.
2. Лариков Л.Н. Диффузия в аморфных металлических сплавах //Металлофизика 1993. т.15.№4. стр. 54-78.
3. Eliaz N., Eliezer D. An overview of hydrogen interfection with fvjrphous alloys // Advanced Perfomanct Materials 1999. v6. pp.5-31.
4. Габис И.Е., Курдюмов А.А., Тихонов Н.А. Установка для проведения комплексных исследований по взаимодействию газов с металлами //Вестник СПбУ серия4: Физ.-Хим., 1993. вып.2 №11.стр. 77-79.
5. Евард Е.А., Сидоров Н.И., Габис И.Е. Водородопроницаемость аморфного и рекристаллизованного сплавов на основе железа. //ЖТФ 2000. №70. вып.3. стр. 90-92