

С.Ю. ЗАГІНАЙЧЕНКО,¹ З.А. МАТИСІНА,¹ АН.Д. ЗОЛОТАРЕНКО,^{1,2}
Н.А. ШВАЧКО,^{1,3} ОЛ.Д. ЗОЛОТАРЕНКО,^{1,2} О.П. РУДАКОВА,^{1,2}
Н.Є. АХАНОВА,^{4,5} М. УАЛХАНОВА,⁵ Д.В. ЩУР,^{1,6} М.Т. ГАБДУЛЛИН,⁴
Т.В. МИРОНЕНКО,¹ О.Д. ЗОЛОТАРЕНКО,¹ М.В. ЧИМБАЙ,^{1,2} О.Є. ДУБРОВА²

¹ Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України
(Вул. Крещатиківського, 3, Київ 03142)

² Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України
(Вул. Генерала Наумова, 17, Київ 03164)

³ Київський національний університет будівництва і архітектури
(Просп. Повітрофлотський, 31, Київ 03037)

⁴ Казахстансько-Британський технічний університет
(Вул. Толе бі, 59, Алмати 050040, Казахстан)

⁵ Національна нанотехнологічна лабораторія відкритого типу,
Казахський національний університет ім. Аль-Фарабі
(Просп. Аль-Фарабі, 71, Алмати 050040, Казахстан)

⁶ Інститут прикладної фізики НАН України
(Вул. Петропавлівська, 58, Суми, 40000)

ДОМІШКИ ВПРОВАДЖЕННЯ У СПЛАВАХ ЗІ СТРУКТУРОЮ В19

УДК 669.25:620.18

У роботі розглянуто метал з гексагональною структурою В19, в міжвузля якого впроваджуються атоми. Методом конфігурацій вивчено розчинність впроваджених домішок та параметри кореляції у заміщенні вузлів і міжвузлів, знайдено їх залежність від складу металу, температури та ступеня дальнього порядку у вузлах. Знання параметрів кореляції дозволяє оцінити багато фізичних характеристик сплавів. Якщо ж параметри кореляції відомі з експериментів, отримані формули дозволяють визначити енергетичні параметри сплавів, що має наукову цінність.

Ключові слова: сплави, розчинність, домішки впровадження, параметри кореляції, домішки заміщення, структура В19.

Цитування: Загінайченко С.Ю., Матисіна З.А., Золотаренко Ан.Д., Швачко Н.А., Золотаренко Ол.Д., Рудакова О.П., Аханова Н.Є., Уалханова М., Щур Д.В., Габдуллин М.Т., Мироненко Т.В., Золотаренко О.Д., Чимбай М.В., Дуброва О.Є. Домішки впровадження у сплавах зі структурою В19. *Укр. фіз. журн.* **68**, №6, 425 (2023).
Citation: Zaginaichenko S.Yu., Matysina Z.A., Zolotarevko An.D., Shvachko N.A., Zolotarevko Ol.D., Rudakova E.P., Akhanova N.Y., Ualkhanova M., Schur D.V., Gabdullin M.T., Myronenko T.V., Zolotarevko A.D., Chymbai M.V., Dubrova O.E. Interstitial impurities in alloys with В19 structure. *Ukr. J. Phys.* **68**, No. 6, 424 (2023). <https://doi.org/10.15407/ujpe68.6.424>.

ISSN 2071-0194. *Укр. фіз. журн.* 2023. Т. 68, № 6

1. Вступ

Дослідження розчинності домішок впровадження та кореляції в кристалічну структуру має значний науковий та практичний інтерес [1–93], оскільки дозволяє визначити концентраційні межі існування гомогенних фаз [14–22] та виявити можливість формування ближнього [22–30] або локального порядку [30–38], що приводить до утворення зародків нової фази [38–44]. Відомо, що введенням домішок впровадження значно змінюють характеристики сплаву та [14–44] матеріалу [1–13, 45–96]. Наприклад: на практиці широко використовують

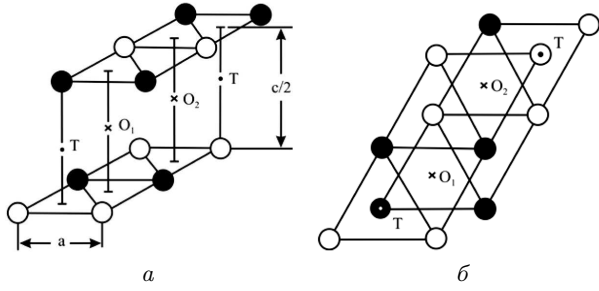


Рис. 1. Зображення структури В19: просторове зображення структури В19 (а); проекційне зображення структури В19 по осі С (б). (● – вузли першого типу для атомів А; ○ – вузли другого типу для атомів В; × – октапори; • – тетрапори)

в інструментальній техніці, при спорудженні металургійних печей, двигунів ракет такі фази впровадження, як карбіди [30, 44, 63, 65, 66, 76, 79], бориди [41], нітриди [15, 18, 19, 20, 25, 26, 29, 47, 58, 60, 66, 75, 74, 78, 81, 84, 87, 89, 90, 92, 93], що мають підвищену твердість, міцність, тугоплавкість і т.д.

2. Розчинність домішки впровадження

Розчинність домішки впровадження вивчали переважно для сплавів з різними структурами [97, 98], кореляція у заміщенні вузлів і міжвузлів – для неупорядкованих сплавів [99]. У цій роботі розглядаємо метал з гексагональною структурою В19, в міжвузля якого вводять атоми впровадження, назовемо їх атоми-С. Структура В19 має два типи октаедричних O_1 , O_2 і один тип тетраедричних Т міжвузлів. На рис. 1 наведено досліджувану структуру в просторовому (рис. 1, а) і проекційному по осі С (рис. 1, б) зображеннях.

Для визначення розчинності та властивостей кореляції потрібно розрахувати вільну енергію металу F. Використовуємо метод конфігурацій, тобто враховуємо всілякі зміни атомів А, для кожного міжвузля. Конфігурацію позначаємо індексом l , який визначає число найближчих атомів навколо пори. Вільна енергія може бути подана у вигляді, зазначеному в формулі (1) [99, 100]:

$$F = \sum_{l=0}^6 (N_{O_1}^l + N_{O_2}^l) v_l - \sum_{l=0}^4 N_T^l v_l' - \kappa \Theta \times \left[\sum_{l=0}^6 Q_{O_1}^l \ln Q_{O_1}^l + \sum_{l=0}^6 Q_{O_2}^l \ln Q_{O_2}^l + \sum_{l=0}^4 Q_T^l \ln Q_T^l - \right.$$

$$\left. - \sum_{l=0}^6 N_{O_1}^l \ln N_{O_1}^l - \sum_{l=0}^6 N_{O_2}^l \ln N_{O_2}^l - \sum_{l=0}^4 N_T^l \ln N_T^l - \sum_{l=0}^6 (Q_{O_1}^l - N_{O_1}^l) \ln(Q_{O_1}^l - N_{O_1}^l) - \sum_{l=0}^6 (Q_{O_2}^l - N_{O_2}^l) \ln(Q_{O_2}^l - N_{O_2}^l) - \sum_{l=0}^4 (Q_T^l - N_T^l) \ln(Q_T^l - N_T^l) \right], \quad (1)$$

де $N_{O_1}^l$, $N_{O_2}^l$, N_T^l – кількість атомів С у порах O_1 , O_2 , Т; $Q_{O_1}^l$, $Q_{O_2}^l$, Q_T^l – кількість цих пор у сплаві; $v_l = l\alpha + (6-l)\beta$, $v_l' = l\alpha' + (4-l)\beta'$ – енергії атома С в окта- і тетрапорах; $\alpha = v_{AC}$, $\beta = v_{BC}$ – $\alpha' = v_{AC}\beta' = v_{BC}$ – енергії взаємодії найближчих пар зазначених атомів; k – постійна Больцмана; Θ – абсолютна температура.

З умов мінімуму вільної енергії знаходимо числа

$$N_{O_1}^l = \frac{DQ_{O_1}^l \exp \frac{v_l}{\kappa\Theta}}{1 + DQ_{O_1}^l \exp \frac{v_l}{\kappa\Theta}}; \quad N_{O_2}^l = \frac{DQ_{O_2}^l \exp \frac{v_l}{\kappa\Theta}}{1 + DQ_{O_2}^l \exp \frac{v_l}{\kappa\Theta}}; \quad (2) \quad N_T^l = \frac{DQ_T^l \exp \frac{v_l'}{\kappa\Theta}}{1 + DQ_T^l \exp \frac{v_l'}{\kappa\Theta}},$$

які пов'язані очевидним співвідношенням

$$\sum_{l=0}^6 (N_{O_1}^l + N_{O_2}^l) + \sum_{l=0}^4 N_T^l = N_C, \quad (3)$$

де N_C – кількість всіх атомів С в сплаві. Коефіцієнт D , що входить у формули (2), є множником, на який збільшується функція стану системи при появі в ній кожного додаткового атома в процесі розчинення домішки. При вивченні кореляції, коли рахуємо $N_C = \text{const}$, коефіцієнт D визначається з умови (3). Формули (2) справедливі будь-яких чисел заповнення міжвузлів атомами С.

У окремому випадку металу А, коли $l = 6$, $v_l = 6\alpha$, $Q_{O_1} = N$ для октапор і $l = 4$, $v_l' = 4\alpha'$, $Q_T = 2N$ для тетрапор (N – число вузлів сплаву), замість дев'ятнадцяти формул (2) маємо дві

$$N_{O_1} = N \left(1 + \frac{1}{D} \exp \frac{-6\alpha}{\kappa\Theta} \right)^{-1};$$

$$N_T = 2N \left(1 + \frac{1}{D} \exp \frac{-4\alpha'}{\kappa\Theta} \right)^{-1}. \quad (4)$$

Підсумовуючи які, знаходимо розчинність компонента:

$$\nu = \frac{N_O + N_T}{3N} = \frac{1}{3} \left[\left(1 + \frac{1}{D} \exp \frac{-6\alpha}{\kappa\Theta} \right)^{-1} + 2 \left(1 + \frac{1}{D} \exp \frac{-4\alpha'}{\kappa\Theta} \right)^{-1} \right]. \quad (5)$$

Якщо атоми С розташовуються тільки в октапорах або тільки в тетрапорах, то розчинності слід визначати відповідно з формулами:

$$\begin{aligned} \nu_O &= \frac{N_O}{N} = \left(1 + \frac{1}{D} \exp \frac{-6\alpha}{\kappa\Theta} \right)^{-1}; \\ \nu_T &= \frac{N_T}{2N} = \left(1 + \frac{1}{D} \exp \frac{-4\alpha'}{\kappa\Theta} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (6)$$

У разі малих концентрацій компонента ці співвідношення спрощуються:

$$\nu_O = D \exp \frac{6\alpha}{\kappa\Theta}; \quad \nu_T = D \exp \frac{4\alpha'}{\kappa\Theta}, \quad (7)$$

тобто, проявляється лінійна залежність натурального логарифма розчинності атомів впровадження від оберненої температури. Залежності $\ln \nu_O$ та $\ln \nu_T$ від $1/\Theta$ (6) не лінійні, але монотонні.

Якщо розчинність описується формулою (5), то можливий прояв її екстремальних властивостей у температурній залежності при

$$\frac{\alpha}{\alpha'} = - \exp \frac{2(3\alpha - 2\alpha')}{\kappa\Theta}; \quad (8)$$

при цьому енергетичні параметри α і α' повинні бути з різними знаками. У цьому випадку розподіл атомів С по окта-і тетрапорах нерівномірний. Його можна оцінити з рівнянь

$$\nu_O + 2\nu_T = 3c; \quad \frac{\nu_O(1 - \nu_T)}{\nu_T(1 - \nu_O)} = \exp \frac{2(3\alpha - 2\alpha')}{\kappa\Theta}, \quad (9)$$

де $c = Nc/3N$. Перше отримано з системи (4) виключенням множника D , друге є умовою (3).

Вирішуючи систему (9), знаходимо

$$\nu_O = \frac{\left[3c(1 - \varepsilon) - 2 - \varepsilon + \sqrt{[3c(1 - \varepsilon) - 2 - \varepsilon]^2 + 12c\varepsilon(1 - \varepsilon)} \right]}{2(1 - \varepsilon)},$$

$$\nu_T = \frac{3}{2}c - \frac{1}{2}\nu_O, \quad (10)$$

де позначено $\varepsilon = \exp \frac{2(3\alpha - 2\alpha')}{\kappa\Theta}$. При $c = 1$ розподіл (10) дає $\nu_O = \nu_T = 1$, тобто, маємо рівномірне заповнення всіх міжвузлів незалежно від температури.

При низьких температурах розподіл атомів визначається співвідношенням енергетичних параметрів α і α' . Якщо $3\alpha - 2\alpha' > 0$, при абсолютному нулі маємо

$$\begin{aligned} \nu_O(0) &= \begin{cases} 3c & \text{при } 0 \leq c \leq \frac{1}{3}, \\ 1 & \text{при } \frac{1}{3} \leq c \leq 1, \end{cases} \\ \nu_T(0) &= \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq c \leq \frac{1}{3}, \\ \frac{3}{2}c - \frac{1}{2} & \text{при } \frac{1}{3} \leq c \leq 1, \end{cases} \end{aligned} \quad (11)$$

тобто атоми впровадження в першу чергу займають октапори, в яких вони мають більш глибокий мінімум потенціальної енергії, і тільки коли октапори виявляються зайнятими, починають заповнюватися тетрапори. Якщо ж $3\alpha - 2\alpha' < 0$, то

$$\begin{aligned} \nu_O(0) &= \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq c \leq \frac{2}{3}, \\ 3c - 2 & \text{при } \frac{2}{3} \leq c \leq 1, \end{cases} \\ \nu_T(0) &= \begin{cases} \frac{3}{2}c & \text{при } 0 \leq c \leq \frac{2}{3}, \\ 1 & \text{при } \frac{2}{3} \leq c \leq 1, \end{cases} \end{aligned} \quad (12)$$

тобто насамперед атоми С заповнюють тетрапори. Залежності (11) та (12) представлені прямими лініями на рис. 2. Кривими лініями на цьому рисунку показано залежності $\nu_O(0)$ і $\nu_T(0)$, побудовані відповідно до розподілу (10) при температурах Θ_1 і Θ_2

$$\Theta_1 = \frac{4(1,5\alpha - \alpha')}{\kappa \ln 10}, \quad (a)$$

$$\Theta_2 = - \frac{4(1,5\alpha - \alpha')}{\kappa \ln 10}. \quad (б)$$

Необхідно розглянути другий окремий випадок – бінарний сплав із низькою концентрацією домішки впровадження. У цьому випадку співвідношення (2) спрощується:

$$N_{O_1}^l = DQ_{O_1}^l \exp \frac{v_l}{\kappa\Theta}; \quad N_{O_2}^l = DQ_{O_2}^l \exp \frac{v_l}{\kappa\Theta};$$

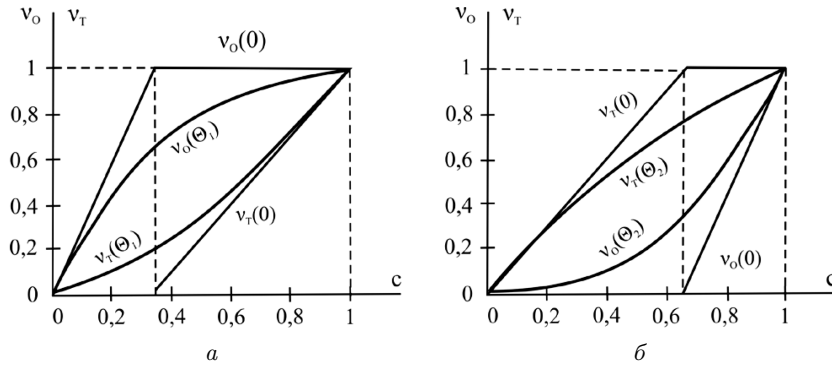


Рис. 2. Графічне зображення залежності (11), (12) та $\nu_{O}(0)$ і $\nu_{T}(0)$ відповідно до розподілу (10) при температурах Θ_1 (а) і Θ_2 (б)

$$N_T^l = DQ_T^l \exp \frac{v_l'}{\kappa\Theta}, \quad (13)$$

а числа $Q_{O_1}^l$, $Q_{O_2}^l$, Q_T^l визначаються конфігурацією атомів А, навколо пустот

$$\begin{aligned} Q_{O_1}^l &= \frac{1}{2} N \frac{4!}{i!(4-i)!} p_A^{(1)i} p_B^{(1)(4-i)} \times \\ &\times \frac{2!}{j!(2-j)!} p_A^{(2)j} p_B^{(2)(2-j)}, \\ Q_{O_2}^l &= \frac{1}{2} N \frac{2!}{i!(2-i)!} p_A^{(1)i} p_B^{(1)(2-i)} \times \\ &\times \frac{4!}{j(4-j)!} p_A^{(2)j} p_B^{(2)(4-j)}, \\ Q_T^l &= 2N \frac{2!}{i!(2-i)!} p_A^{(1)i} p_B^{(1)(2-i)} \times \\ &\times \frac{2!}{j!(2-j)!} p_A^{(2)j} p_B^{(2)(2-j)}. \end{aligned} \quad (14)$$

Тут $l = i + j$, де i і j – кількість атомів А навколо міжвузля відповідно на вузлах першого та другого типу, а $p_A^{(1)}$, $p_A^{(2)}$, $p_B^{(1)}$, $p_B^{(2)}$ – імовірності заміщення вузлів 1, 2 атомами А, В, що залежать від складу a, b бінарного сплаву та ступеня далекого порядку η відповідно до формул [100]:

$$\begin{aligned} p_A^{(1)} &= a + \frac{1}{2}\eta; & p_A^{(2)} &= a - \frac{1}{2}\eta; \\ p_B^{(1)} &= b - \frac{1}{2}\eta; & p_B^{(2)} &= b + \frac{1}{2}\eta. \end{aligned} \quad (15)$$

Підсумовуючи за всіма конфігураціями величини (13) з урахуванням (14), отримуємо числа атомів С у порах O_1 , O_2 , Т:

$$N_C^{O_1} = \frac{1}{2} N D K_1^4 K_2^2,$$

$$N_C^{O_2} = \frac{1}{2} N D K_1^2 K_2^4, \quad (16)$$

$$N_C^{(T)} = 2 N D K_1'^2 K_2'^2,$$

де

$$\begin{aligned} K_1 &= p_A^{(1)} \exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} + p_B^{(1)} \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta}; \\ K_2 &= p_A^{(2)} \exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} + p_B^{(2)} \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta}; \\ K_1' &= p_A^{(2)} \exp \frac{\alpha'}{\kappa\Theta} + p_B^{(1)} \exp \frac{\beta'}{\kappa\Theta}; \\ K_2' &= p_A^{(2)} \exp \frac{\alpha'}{\kappa\Theta} + p_B^{(2)} \exp \frac{\beta'}{\kappa\Theta}. \end{aligned} \quad (17)$$

Розчинність домішки, яка визначається концентрацією атомів С для кожного типу міжвузлів, отримуємо з (16):

$$\nu_O = \frac{N_C^{(O_1)} + N_C^{(O_2)}}{N} = \frac{1}{2} D K_1^2 K_2^2 (K_1^2 + K_2^2), \quad (18)$$

$$\nu_T = \frac{N_C^{(T)}}{2N} = D K_1'^2 K_2'^2.$$

Ці формули в сукупності (17) і (15) визначають залежність розчинності від складу сплаву, температури і параметрів порядку. Перша залежність для неупорядкованого сплаву ($\eta = 0$) виявляється монотонною, друга при $\eta = 0$ може бути екстремальною, якщо

$$\frac{\alpha}{\beta} = -\frac{b}{a} \exp \frac{\beta - \alpha}{\kappa\Theta}$$

для октапор та

$$\frac{\alpha'}{\beta'} = -\frac{b}{a} \exp \frac{\beta' - \alpha'}{\kappa\Theta}$$

для тетрапор (у цьому випадку енергетичні параметри α , β і α' , β' мають бути різних знаків). Вплив атомного порядку на розчинність зручно з'ясувати для відносних величин (рис. 3):

$$\begin{aligned} f_O &= \nu_O / (\nu_O)_{\eta=0} = (1 - \chi_1^2)(1 - \chi_1^4), \\ f_T &= \nu_T / (\nu_T)_{\eta=0} = (1 - \chi_2^2)^2, \end{aligned} \quad (19)$$

де

$$\begin{aligned} \chi_1 &= \frac{1}{2} \eta \frac{\exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta}}{a \exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} + b \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta}}; \\ \chi_2 &= \frac{1}{2} \eta \frac{\exp \frac{\alpha'}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta'}{\kappa\Theta}}{a \exp \frac{\alpha'}{\kappa\Theta} + b \exp \frac{\beta'}{\kappa\Theta}}; \end{aligned} \quad (20)$$

$$-1 \leq \chi_1, \quad \chi_2 < 1.$$

Характер залежності величин f_O , f_T від η однаковий. Упорядкування зменшує розчинність, для октапор це зменшення дещо слабше.

У разі розподілу домішки впровадження одночасно по всіх міжвузлях розчинність визначається формулою

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{N_C^{(O_1)} + N_C^{(O_2)} + N_C^{(T)}}{3N} = \\ &= \frac{1}{6} D [K_1^2 K_2^2 (K_1^2 + K_2^2) + 4K_1'^2 K_2'^2]. \end{aligned} \quad (21)$$

Залежність розчинності від складу при $\eta = 0$ може бути екстремальною, якщо енергії α і β або α' і β' різних знаків. Характер залежності ν від η такий же, як для величин ν_O і ν_T .

Знайдемо параметри кореляції у заміщенні вузлів та міжвузлів, рахуючи $N_C = \text{const}$. З умови (3) з урахуванням (13) знаходимо коефіцієнт D :

$$D = 6c[K_1^2 K_2^2 (K_1^2 + K_2^2) + 4K_1'^2 K_2'^2]^{-1}. \quad (22)$$

Підсумовуючи величини $N_{O_1}^l$, $N_{O_2}^l$, N_T^l (13) по i або j , знайдемо числа атомів С у зазначених порох з відповідною i -ю або j -ю конфігурацією атомів А, на найближчих до міжвузля вузлах одного типу при будь-якому заповненні вузлів іншого типу:

$$\begin{aligned} N_{O_1}^i &= \sum_{j=0}^2 N_{O_1}^l = \frac{1}{2} DN K_2^2 \frac{4!}{i!(4-i)!} p_A^{(l)i} p_B^{(l)(4-i)} \times \\ &\times \exp \frac{i\alpha + (4-i)\beta}{\kappa\Theta}; \end{aligned}$$

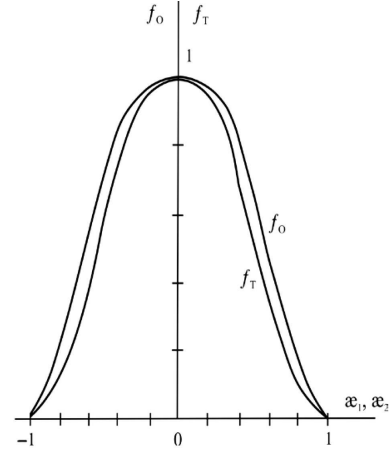


Рис. 3. Вплив атомного порядку на розчинність

$$\begin{aligned} N_{O_1}^j &= \sum_{i=0}^4 N_{O_1}^l = \frac{1}{2} DN K_1^4 \frac{2!}{j!(2-j)!} p_A^{(2)j} p_B^{(2)(2-j)} \times \\ &\times \exp \frac{j\alpha + (2-j)\beta}{\kappa\Theta}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N_{O_2}^i &= \sum_{j=0}^4 N_{O_2}^l = \frac{1}{2} DN K_2^4 \frac{2!}{i!(2-i)!} p_A^{(1)j} p_B^{(1)(2-i)} \times \\ &\times \exp \frac{i\alpha + (2-i)\beta}{\kappa\Theta}; \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} N_{O_2}^j &= \sum_{i=0}^2 N_{O_2}^l = \frac{1}{2} DN K_1^2 \frac{4!}{j!(4-j)!} p_A^{(2)j} p_B^{(2)(4-j)} \times \\ &\times \exp \frac{j\alpha + (4-j)\beta}{\kappa\Theta}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N_T^i &= \sum_{j=0}^2 N_T^l = 2DN K_2'^2 \frac{2!}{i!(2-j)!} p_A^{(1)i} p_B^{(1)(2-i)} \times \\ &\times \exp \frac{i\alpha' + (2-i)\beta'}{\kappa\Theta}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N_T^j &= \sum_{i=0}^2 N_T^l = 2DN K_1'^2 \frac{2!}{j!(2-j)!} p_A^{(2)j} p_B^{(2)(2-j)} \times \\ &\times \exp \frac{j\alpha' + (2-j)\beta'}{\kappa\Theta}. \end{aligned}$$

Апостеріорні та апіорні ймовірності заміщення найближчих пар вузлів і пор атомами А, С відповідно рівні

$$p_{AC}^{(1O_1)} = \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^4 i N_{O_1}^i = DK_1^3 K_2^2 p_A^{(1)} \exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta};$$

$$\begin{aligned}
 p_{AC}^{(1O_1)^0} &= 2p_A^{(1)} N_C^{(O_1)} / N = DK_1^4 K_2^2 p_A^{(1)}; \\
 p_{AC}^{(2O_1)} &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^2 j N_{O_1}^j = DK_1^4 K_2 p_A^{(2)} \exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta}; \\
 p_{AC}^{(2O_1)^0} &= 2p_A^{(2)} N_C^{(O_1)} / N = DK_1^4 K_2^2 p_A^{(2)}; \\
 p_{AC}^{(1O_2)} &= \frac{1}{N} \sum_{i=0}^2 i N_{O_2}^i = DK_1 K_2^4 p_A^{(1)} \exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta}; \\
 p_{AC}^{(1O_2)^0} &= 2p_A^{(1)} N_C^{(O_2)} / N = DK_1^2 K_2^4 p_A^{(1)}; \\
 p_{AC}^{(2O_2)} &= \frac{1}{2N} \sum_{j=0}^4 j N_{O_2}^j = DK_1^2 K_2^3 p_A^{(2)} \exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta}; \\
 p_{AC}^{(2O_2)^0} &= 2p_A^{(2)} N_C^{(O_2)} / N = DK_1^2 K_2^4 p_A^{(2)}; \\
 p_{AC}^{(1T)} &= \frac{1}{4N} \sum_{i=0}^2 i N_T^i = DK_1' K_2'^2 p_A^{(1)} \exp \frac{\alpha'}{\kappa\Theta}; \\
 p_{AC}^{(1T)^0} &= \frac{1}{2} p_A^{(1)} N_C^{(T)} / N = DK_1'^2 K_2'^2 p_A^{(1)}; \\
 p_{AC}^{(2T)} &= \frac{1}{4N} \sum_{j=0}^2 j N_T^j = DK_1'^2 K_2' p_A^{(2)} \exp \frac{\alpha'}{\kappa\Theta}; \\
 p_{AC}^{(2T)^0} &= \frac{1}{2} p_A^{(2)} N_C^{(T)} / N = DK_1'^2 K_2'^2 p_A^{(2)}.
 \end{aligned} \quad (24)$$

Різниці цих можливостей визначають параметри кореляції. Аналогічно можуть бути знайдені параметри кореляції для пар атомів В, С. За допомогою розрахунків знаходимо

$$\begin{aligned}
 \varepsilon^{(1O_1)} &= \varepsilon_{AC}^{(1O_1)} = -\varepsilon_{BC}^{(1O_1)} = \\
 &= DK_1^3 K_2^2 p_A^{(1)} p_B^{(1)} \left(\exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta} \right); \\
 \varepsilon^{(2O_1)} &= \varepsilon_{AC}^{(2O_1)} = -\varepsilon_{BC}^{(2O_1)} = \\
 &= DK_1^4 K_2 p_A^{(2)} p_B^{(2)} \left(\exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta} \right); \\
 \varepsilon^{(1O_2)} &= \varepsilon_{AC}^{(1O_2)} = -\varepsilon_{BC}^{(1O_2)} = \\
 &= DK_1 K_2^4 p_A^{(1)} p_B^{(1)} \left(\exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta} \right); \\
 \varepsilon^{(2O_2)} &= \varepsilon_{AC}^{(2O_2)} = -\varepsilon_{BC}^{(2O_2)} = \\
 &= DK_1^2 K_2^3 p_A^{(2)} p_B^{(2)} \left(\exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta} \right); \\
 \varepsilon^{(1T)} &= \varepsilon_{AC}^{(1T)} = -\varepsilon_{BC}^{(1T)} =
 \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned}
 &= DK_1' K_2'^2 p_A^{(1)} p_B^{(1)} \left(\exp \frac{\alpha'}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta'}{\kappa\Theta} \right); \\
 \varepsilon^{(2T)} &= \varepsilon_{AC}^{(2T)} = -\varepsilon_{BC}^{(2T)} = \\
 &= DK_1'^2 K_2' p_A^{(2)} p_B^{(2)} \left(\exp \frac{\alpha'}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta'}{\kappa\Theta} \right).
 \end{aligned}$$

Отримані формули з урахуванням (22), (17) та (15) визначають залежність параметрів кореляції від складу сплаву, температури та ступеня далекого порядку, знання якого може дозволити визначити формування в сплаві ближнього впорядкування або розшарування атомів. Параметри кореляції для окта- і тетрапор можуть виявитися різних знаків, наприклад, при $\alpha > \beta$ і $\alpha' < \beta'$. Це означає, що атоми С насамперед зосереджуватимуться в октаедричних міжвузлях. Для неупорядкованого сплаву ($\eta = 0$, $K = K_1 = K_2 = a \exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} + b \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta}$, $K' = K_1' = K_2' = a \exp \frac{\alpha'}{\kappa\Theta} + b \exp \frac{\beta'}{\kappa\Theta}$) зберігаються лише два параметри кореляції для пор О і Т:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon^{(O)} &= 3abcK^5 \left(\exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta} \right) / (K^6 + 2K'^4); \\
 \varepsilon^{(T)} &= 3abcK'^3 \left(\exp \frac{\alpha'}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta'}{\kappa\Theta} \right) / (K^6 + 2K'^4).
 \end{aligned} \quad (26)$$

Залежність величин $\varepsilon^{(O)}; \varepsilon^{(T)}$ від складу екстремальна та асиметрична. Максимум цієї залежності проявляється при складі

$$a_* = \left(\exp \frac{\alpha - \beta}{2\kappa\Theta} + 1 \right)^{-1}$$

для $\varepsilon^{(O)}$ і при $a_* = \left(\exp \frac{\alpha' - \beta'}{\kappa\Theta} + 1 \right)^{-1}$ для $\varepsilon^{(T)}$. З підвищенням температури асиметрія концентраційної залежності зменшується, і при дуже високих температурах значення a_* близьке до стехіометричного складу ($a_* \approx 1/2$). При високих температурах формули (26) спростуються

$$\varepsilon^{(O)} = abc \frac{\alpha - \beta}{\kappa\Theta}; \quad \varepsilon^{(T)} = abc \frac{\alpha' - \beta'}{\kappa\Theta}. \quad (27)$$

На завершення випишемо формули для параметрів кореляції у разі розподілу атомів тільки в октапорах або тільки в тетрапорах. У першому випадку $c = Nc/N$, $D = 2[K_1 K_2 (K_1^2 + K_2^2)]^{-1}$ та

$$\varepsilon^{(1O_1)} = 2cp_A^{(1)} p_B^{(1)} \left(\exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta} \right) K_1 / (K_1^2 + K_2^2);$$

$$\varepsilon^{(2O_1)} = 2cp_A^{(2)} p_B^{(2)} \left(\exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta} \right) \times K_1^2 / K_2(K_1^2 + K_2^2); \quad (28)$$

$$\varepsilon^{(1O_2)} = 2cp_A^{(1)} p_B^{(1)} \left(\exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta} \right) \times K_2^2 / K_1(K_1^2 + K_2^2);$$

$$\varepsilon^{(2O_2)} = 2cp_A^{(2)} p_B^{(2)} \left(\exp \frac{\alpha}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta}{\kappa\Theta} \right) K_2 / (K_1^2 + K_2^2);$$

у другому $c = Nc/2N$, $D = (K_1' + K_2')^{-2}$ і

$$\varepsilon^{(1T)} = cp_A^{(1)} p_B^{(1)} \left(\exp \frac{\alpha'}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta'}{\kappa\Theta} \right) / K_1', \quad (29)$$

$$\varepsilon^{(2T)} = cp_A^{(2)} p_B^{(2)} \left(\exp \frac{\alpha'}{\kappa\Theta} - \exp \frac{\beta'}{\kappa\Theta} \right) / K_2'.$$

3. Висновки

Знання параметрів кореляції (25) або (29) та (28) дозволяє оцінити багато фізичних характеристик сплавів. Якщо ж параметри кореляції відомі з експериментів, отримані формули дозволяють визначити енергетичні параметри сплавів, що має високу наукову цінність.

Сплави, що відповідають структурі B19 завдяки наведеним розрахункам можна використовувати, як робоче тіло для сучасних накопичувачів водню, де робоче тіло абсорбує та зберігає водень завдяки дифузії атомів впровадження в об'єм кристалічної структури.

1. З.А. Матусина, С.Ю. Загинайченко, Д.В. Щур, А. Везируглу, Т.Н. Везируглу, М.Т. Габдуллин, Н.Ф. Джавадов, Ан.Д. Золотаренко, Ал.Д. Золотаренко. *Водород в кристалах. Монографія* ("КИМ", 2017) [ISBN: 978-617-628-074-3].
2. V.M. Gun'ko, V.V. Turov, D.V. Schur, V.I. Zarko, G.P. Prykhod'ko, T.V. Krupska, A.P. Golovan, J. Skubiszewska-Zięba, B. Charnas, M.T. Kartel. Unusual interfacial phenomena at a surface of fullerite and carbon nanotubes. *Chem. Phys.* **459**, 172 (2015).
3. M.M. Nishchenko, S.P. Likhtorovich, D.V. Schur, A.G. Dubovoy, T.A. Rashevskaya. Positron annihilation in C₆₀ fullerites and fullerene-like nanovoids. *Carbon* **41** (7), 1381 (2003).
4. A.F. Savenko, V.A. Bogolepov, K.A. Meleshevich, S.Yu. Zaginaichenko, D.V. Schur, M.V. Lototsky, V.K. Pishuk, L.O. Teslenko, V.V. Skorokhod. Structural and methodical features of the installation for the investigations of hydrogen-sorption characteristics of carbon

nanomaterials and their composites. *NATO Security through Science Series A: Chemistry and Biology* (Springer, 2007), p. 365.

5. M. Baibarac, I. Baltog, S. Frunza, A. Magrez, D. Schur, S.Y. Zaginaichenko. Single-walled carbon nanotubes functionalized with polydiphenylamine as active materials for applications in the supercapacitors field. *Diamond and Related Materials* **32** 72, (2013).
6. D.V. Schur, S.Y. Zaginaichenko, A.D. Zolotareno, T.N. Veziroglu. Solubility and transformation of fullerene C₆₀ molecule. *NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security* (Springer, 2008), p. 85.
7. D.V. Schur, S.Y. Zaginaichenko, E.A. Lysenko, T.N. Golovchenko, N.F. Javadov. The forming peculiarities of C₆₀ molecule. *NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security* (Springer, 2008), p. 53.
8. D.V. Schur, S.Y. Zaginaichenko, T.N. Veziroglu. The hydrogenation process as a method of investigation of fullerene C₆₀ molecule. *Int. J. Hydrogen Energ.* **40** (6), 2742 (2015).
9. S.Y. Zaginaichenko, D.V. Schur, Z.A. Matysina. The peculiarities of carbon interaction with catalysts during the synthesis of carbon nanomaterials. *Carbon* **41** (7), 1349 (2003).
10. D.V. Schur, S. Zaginaichenko, T. Nejat Veziroglu. Peculiarities of hydrogenation of pentatomic carbon molecules in the frame of fullerene molecule C₆₀. *Int. J. Hydrogen Energ.* **33** (13), 3330 (2008).
11. D.V. Schur, M.T. Gabdullin, V.A. Bogolepov, A. Veziroglu, S.Y. Zaginaichenko, A.F. Savenko, K.A. Meleshevich. Selection of the hydrogen-sorbing material for hydrogen accumulators. *Int. J. Hydrogen Energ.* **41** (3), 1811 (2016).
12. D.V. Schur, M.T. Gabdullin, S.Yu. Zaginaichenko, T.N. Veziroglu, M.V. Lototsky, V.A. Bogolepov, A.F. Savenko. Experimental set-up for investigations of hydrogen-sorption characteristics of carbon nanomaterials. *Int. J. Hydrogen Energ.* **41** (1), 401 (2016).
13. S.Y. Zaginaichenko, D.V. Schur, Z.A. Matysina. The peculiarities of carbon interaction with catalysts during the synthesis of carbon nanomaterials. *Carbon* **41** (7), 1349 (2003).
14. A.Yu. Ishlinsky. *New Polytechnic Dictionary* (Big Russian Encyclopedia, 2000) [in Russian].
15. Z.A. Matysina, S.Y. Zaginaichenko, D.V. Schur, T.N. Veziroglu, A. Veziroglu, M.T. Gabdullin, A.D. Zolotareno, An.D. Zolotareno. The mixed lithium-magnesium imide Li₂ Mg(NH)₂ a promising and reliable hydrogen storage material. *Int. J. Hydrogen Energ.* **43** (33), 16092 (2018).
16. А.А. Богданов, Д. Дайнингер, Г.А. Дюжев. Перспективы развития промышленных методов производства фуллеренов. *Журнал технической физики* **70** (5), 1 (2000).
17. Д.В. Щур, С.Ю. Загинайченко, А. Везируглу, Т.Н. Везируглу, А.Д. Золотаренко, М.Т. Габдуллин, А.Д. Золотаренко (2019). Особенности изучения систем атомарный водород-металл. *Альтернативная энергетика и экология (ISJAE)* **13–15**, 62 (2019).

18. Z.A. Matysina, S.Y. Zaginaichenko, D.V. Schur, A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno, M.T. Gabduln, L.I. Kopylova, T.I. Shaposhnikova. Phase transformations in the mixed lithium-magnesium imide $\text{Li}_2\text{Mg}(\text{NH})_2$. *Russ. Phys. J.* **61** (12), 2244 (2019).
19. D.V. Schur, A. Veziroglu, S.Y. Zaginaichenko, Z.A. Matysina, T.N. Veziroglu, M.T. Gabdullin, T.S. Ramazanov, A.D. Zolonarenko, A.D. Zolonarenko. Theoretical studies of lithium–aluminum amid and ammonium as perspective hydrogen storage. *Int. J. Hydrogen Energ.* **44** (45), 24810 (2019).
20. З.А. Матисина, С.Ю. Загинайченко, Д.В. Щур, А.Д. Золотаренко, А.Д. Золотаренко, М.Т. Габдулин. Бищелочные и калиевые аланаты—перспективные накопители водорода. *Альтернативная энергетика и экология (ISJAEЕ)* **13–15**, 37 (2017).
21. Z.A. Matysina, S.Y. Zaginaichenko, D.V. Schur, A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno, M.T. Gabduln. Hydrogen Sorption Properties of Potassium Alanate. *Russ. Phys. J.* **61** (2), 253 (2018).
22. A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno, A. Veziroglu, T.N. Veziroglu, N.A. Shvachko, A.P. Pomytkin, D.V. Schur, N.A. Gavrylyuk, T.S. Ramazanov, N.Y. Akhanova, M.T. Gabdullin. Methods of theoretical calculations and of experimental researches of the system atomic hydrogen–metal. *Int. J. Hydrogen Energ.* **47** (11), 7310 (2022).
23. Z.A. Matysina, N.A. Gavrylyuk, M. Kartel, A. Veziroglu, T.N. Veziroglu, A.P. Pomytkin, D. Schur, A.D. Zolotareno, N.A. Shvachko. Hydrogen sorption properties of new magnesium intermetallic compounds with MgSnCu_4 type structure. *Int. J. Hydrogen Energ.* **46** (50), 25520 (2021).
24. A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno, A. Veziroglu, T.N. Veziroglu, N.A. Shvachko, A.P. Pomytkin, N.A. Gavrylyuk, D.V. Schur, T.S. Ramazanov, M.T. Gabdullin. The use of ultrapure molecular hydrogen enriched with atomic hydrogen in apparatuses of artificial lung ventilation in the fight against virus COVID-19. *Int. J. Hydrogen Energ.* **47** (11), 7281 (2022).
25. D.V. Shchur, S.Y. Zaginaichenko, A. Veziroglu, T.N. Veziroglu, N.A. Gavrylyuk, A.D. Zolotareno, M.T. Gabdullin, T.S. Ramazanov, A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno. Prospects of producing hydrogen-ammonia fuel based on lithium aluminum amide. *Russ. Phys. J.* **64** (1), 89 (2021).
26. Д.В. Щур, С.Ю. Загинайченко, А. Везироглу, Т.Н. Везироглу, Н. Гаврылюк, А.Д. Золотаренко, А.Д. Золотаренко. Перспективы получения водородно-аммиачного топлива с использованием литий-алюминиевого амида. *Изв. высших учеб. зав. Физика* **64** (1), 78 (2021).
27. З.А. Матисина, С.Ю. Загинайченко, Д.В. Щур, А.Д. Золотаренко, А.Д. Золотаренко, М.Т. Габдулин. Водородсорбционные свойства аланатов калия. *Изв. высших учеб. зав. Физика* **61** (2), 44 (2018).
28. D.V. Schur, S.Yu. Zaginaichenko, T.N. Veziroglu, A. Veziroglu, A.P. Pomytkin, An.D. Zolonarenko, A.D. Zolonarenko, Al.D. Zolonarenko. *Interaction of Elements with Hydrogen and with Each Other. International Association for Hydrogen Energy* (IAHE, 2018).
29. З.А. Матисина, С.Ю. Загинайченко, Д.В. Щур, А.Д. Золотаренко, А.Д. Золотаренко, М.Т. Габдулин, Т. Шапошникова. Фазовые превращения в смешанном литий-магниево-имиде $\text{Li}_2\text{Mg}(\text{NH})_2$. *Изв. высших учеб. зав. Физика* **61**(12), 90 (2018).
30. Z.A. Matysina, An.D. Zolonarenko, Al.D. Zolonarenko, N.A. Gavrylyuk, A. Veziroglu, T.N. Veziroglu, A.P. Pomytkin, D.V. Schur, M.T. Gabdullin. *Features of the Interaction of Hydrogen With Metals, Alloys and Compounds (Hydrogen Atoms in Crystalline Solids). A Monograph* (KIM Publishing House, 2022) [ISBN 978-617-628-101-6].
31. D.V. Schur, S.Yu. Zaginaichenko, Z.A. Matysina, I. Smityukh, V.K. Pishuk. Hydrogen in lanthan-nickel storage alloys. *J. Alloy. Compd.* **330–332**, 70 (2002).
32. Yu.M. Lytvynenko, D.V. Schur. Utilization the concentrated solar energy for process of deformation of sheet metal. *Renewable Energy* **16** (1–4), 753 (1999).
33. Z.A. Matysina, O.S. Pogorelova, S.Yu. Zaginaichenko, D.V. Schur. The surface energy of crystalline CuZn and FeAl alloys. *J. Phys. Chem. Solids* **56** (1), 9 (1995).
34. Z.A. Matysina, D.V. Shchur. Phase transformations $\alpha \rightarrow \beta \rightarrow \gamma \rightarrow \delta \rightarrow \epsilon$ in titanium hydride with increase in hydrogen concentration. *Russ. Phys. J.* **44** (11), 1237 (2001).
35. Z.A. Matysina, S.Yu. Zaginaichenko, D.V. Schur. Hydrogen solubility in alloys under pressure. *Int. J. Hydrogen Energ.* **21** (11–12 SPEC.ISS.), 1085 (1996).
36. S.Y. Zaginaichenko, Z.A. Matysina, D.V. Schur, A.D. Zolotareno. Li–N–H system – Reversible accumulator and store of hydrogen. *Int. J. Hydrogen Energ.* **37** (9), 7565 (2012).
37. D.V. Schur, A.A. Lyashenko, V.M. Adejev, V.B. Voitovich, S.Yu. Zaginaichenko. Niobium as a construction material for a hydrogen energy system. *Int. J. Hydrogen Energ.* **20** (5), 405 (1995).
38. D.V. Schur, V.A. Lavrenko, V.M. Adejev, I.E. Kirjakova. Studies of the hydride formation mechanism in metals. *Int. J. Hydrogen Energ.* **19** (3), 265 (1994).
39. Z.A. Matysina, S.Y. Zaginaichenko, D.V. Shchur, M.T. Gabdullin. Sorption properties of iron–magnesium and nickel–magnesium Mg_2FeH_6 and Mg_2NiH_4 hydrides. *Russ. Phys. J.* **59** (2), 177 (2016).
40. S.Y. Zaginaichenko, Z.A. Matysina, D.V. Schur, L.O. Teslenko, A. Veziroglu. The structural vacancies in palladium hydride. Phase diagram. *Int. J. Hydrogen Energ.* **36** (1), 1152 (2011).
41. S.Y. Zaginaichenko, D.A. Zaritskii, D.V. Schur, Z.A. Matysina, T.N. Veziroglu, M.V. Chymbai, L.I. Kopylova. Theoretical study of hydrogen-sorption properties of lithium and magnesium borocarbides. *Int. J. Hydrogen Energ.* **40** (24), 7644 (2015).
42. Z.A. Matysina, S.Y. Zaginaichenko, D.V. Shchur. Hydrogen-sorption properties of magnesium and its intermetalli-

- cs with Ca₇Ge-type structure. *Phys. Metal. Metallograph.* **114** (4), 308 (2013).
43. V.I. Trefilov, D.V. Schur, V.K. Pishuk, S.Yu. Zaginai-chenko, A.V. Choba, N.R. Nagornaya. Solar furnaces for scientific and technological investigation. *Renewable Energy* **16** (1–4), 757 (1999).
 44. I. Khidirov, B.B. Mirzaev, N.N. Mukhtarova, K.M. Kholmedov, S.Y. Zaginaiachenko, D.V. Schur. Neutron diffraction investigation of hexagonal and cubic phases of system Ti–C–H. *NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security* (Springer, 2008), p. 663.
 45. R. Tenne, L. Margulis, M. Genut, G. Hodes. Polyhedral and cylindrical structures of tungsten disulphide. *Nature* **360**, 444 (1992).
 46. А.Д. Золотаренко, А.Д. Золотаренко, А.Д. Золотаренко, Г.А. Войчук, Д.В. Щур, С.Ю. Загинайченко. Синтез эндофуллеренов дуговым методом. Депозит. *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии* **3** (4), 1133 (2005).
 47. Y.I. Sementsov, S.L. Revo, K.O. Ivanenko. *Thermoeexpanded graphite* (SPE “Interservice”, 2016) [in Ukrainian].
 48. Н.А. Гаврылюк, Н.Е. Аханова, Д.В. Щур, А.П. Помыткин, А. Везируглу, Т.Н. Везируглу, А.Д. Золотаренко. Иттрий в фуллеренах. *Альтернативная энергетика и экология (ISJAEE)* **01–03**, 47 (2021).
 49. N.Y. Akhanova, D.V. Shchur, A.P. Pomytkin, A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno, N.A. Gavrylyuk, D. Ang. Gadolinium endofullerenes. *J. Nanosci. Nanotechno* **21** (4) 2435, (2021).
 50. N.G. Chopra, R.J. Luyken, K. Cherrey, V.H. Crespi, M.L. Cohen, S.G. Louie, A. Zettl. Boron nitride nanotubes. *Science* **269**, 966 (1995).
 51. N.Y. Akhanova, D.V. Shchur, A.P. Pomytkin, A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno, N.A. Gavrylyuk, D. Ang. Methods for the synthesis of endohedral fullerenes. *J. Nanosci. Nanotechno* **21** (4), 2446 (2021).
 52. Y.R. Nacohen, E. Grunbaum, R. Tenne, J. Sloan, J.L. Hutchison. Cage structures and nanotubes of NiCl₂. *Nature* **395**, 336 (1998).
 53. Н.Е. Аханова, Д.В. Щур, Н.А. Гаврылюк, М.Т. Габдуллин, Н.С. Анікіна, А.Д. Золотаренко, Д.Г. Батришев. Використання спектрів поглинання для ідентифікації ендометалофуллеренів. *Chem., Phys. & Technol of Surface. Khim. Fiz. Tekhnol. Poverkh.* **11** (3) (2020).
 54. M. Cote, M.L. Cohen, D.J. Chadi. Theoretical study of the structural and electronic properties of GaSe nanotubes *Phys. Rev. B* **58**, 4277 (1998).
 55. N.A. Gavrylyuk, N.Y. Akhanova, D.V. Schur, A.P. Pomytkin, A. Veziroglu, T.N. Veziroglu, M.T. Gabdullin, T.S. Ramazanov, A.D. Zolotareno, An.D. Zolotareno. Yttrium in Fullerenes. *Intern. Sci. J. Alternat. Energ. Ecol. (ISJAEE), Scientific Technical Centre “TATA”, 2020–2021* **01–03**, 359 (2021).
 56. I. Melikhov. *Physicochemical evolution of solids* (Binom, 2014) [in Russian].
 57. N.Y. Akhanova, D.V. Schur, N.A. Gavrylyuk, M.T. Gabdullin, N.S. Anikina, An.D. Zolotareno, O.Ya. Krivushchenko, Ol.D. Zolotareno, B.M. Gorelov, E. Erlanuli, D.G. Batrishev. Use of absorption spectra for identification of endometallofullerenes. *Chem., Phys. and Technol. of Surface* **11** (3), 429 (2020).
 58. V.S. Ponomarenko, Y.F. Nazarov, V.P. Svidersky, I.M. Ibragimov. *Nanotechnology and its innovative development: A monograph* (VD “Inzhek”, 2008) [in Ukrainian].
 59. D.V. Schur, A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno, O.P. Zolotareno, M.V. Chimbai, N.Y. Akhanova, E.P. Zolotareno. Analysis and identification of platinum-containing nanoproducs of plasma-chemical synthesis in a gaseous medium. *Current Trends in Chem. Engin. and Technol.* **01**, 1 (2018).
 60. P.N. Dyachkov. *Carbon Nanotubes: Structure, Properties, Application* (Binomial, 2006) [in Russian].
 61. D.V. Schur, A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno, O.P. Zolotareno, M.V. Chimbai, N.Y. Akhanova, E.P. Zolotareno. Analysis and identification of platinum-containing nanoproducs of plasma-chemical synthesis in a gaseous medium. *Phys. Sci. Technol.* **6** (1–2), 46 (2019).
 62. L.S. Polak, A.S. Mikhailov. *Self-Organization in Nonequilibrium Physicochemical Systems* (Nauka, 1983) [in Russian].
 63. A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno, V.A. Lavrenko, S.Y. Zaginaiachenko, N.A. Shvachko, O.V. Milto, Y.A. Tarasenko. Encapsulated ferromagnetic nanoparticles in carbon shells. In: *Carbon Nanomaterials in Clean Energy Hydrogen Systems-II* (Springer, 2011), p. 127.
 64. N. Kobayashi. *Introduction to Nanotechnology* (Binom, 2008) [in Russian].
 65. M. Ualkhanova, A.Y. Perekos, A.G. Dubovoy, D.V. Schur, A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno, S. Orazbayev. The influence of magnetic field on synthesis of iron nanoparticles. *J. Nanosci. Nanotechnol. Appl.* **3** (3), 1 (2019).
 66. G.M. Butyrin. *Highly Porous Carbon Materials* (“Chemistry”, 1976).
 67. Ol.D. Zolotareno, M.N. Ualkhanova, E.P. Rudakova, N.Y. Akhanova, An.D. Zolotareno, D.V. Shchur, M.T. Gabdullin, N.A. Gavrylyuk, A.D. Zolotareno, M.V. Chymbai, I.V. Zagorulko, O.O. Havryliuk. Advantages and disadvantages of electric arc methods for the synthesis of carbon nanostructures. *Him. Fiz. Tehnol. Poverhni.* **13** (2), 209 (2022).
 68. Polak L.S. *Non-Equilibrium Chemical Kinetics and Its Applications* (Nauka, 1979) [in Russian].
 69. O.D. Zolotareno, O.P. Rudakova, M.T. Kartel, H.O. Kaleniuk, A.D. Zolotareno, D.V. Schur, Y.O. Tarasenko. The mechanism of forming carbon nanostructures by electric arc-method. *Surface* **12** (27), 263 (2020).
 70. Yu.L. Klimontovich. *Turbulent Motion and the Structure of Chaos: A New Approach to the Statistical Theory of Open Systems* (Science, 1990) [in Russian].
 71. С.Ю. Загинайченко, Д.В. Щур, М.Т. Габдуллин, Н.Ф. Джавадов, А.Д. Золотаренко, А.Д. Золотаренко, З.Т. Мамедова. Особенности пиролитического синтеза и аттестации углеродных наноструктурных материалов. *Альтерн. энерг. и экол. (ISJAEE)* **19–21**, 72 (2018).

72. Yu.L. Klimontovich. *Kinetic Theory of Electromagnetic Processes* (Science, 1980) [in Russian].
73. V.A. Lavrenko, I.A. Podchernyaeva, D.V. Shchur, A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno. Features of physical and chemical adsorption during interaction of polycrystalline and nanocrystalline materials with gases. *Powder Metall. Met. C* **56** (9), 504 (2018).
74. Ya.V. Zaulichny, S.S. Petrovskaya, E.A. Graivoronskaya, Yu.M. Solonin. *Carbon Nanomaterials: Electronic Structure and Processes of Structure Formation* (Naukova Dumka, 2012) [in Russian].
75. V.P. Tereshchenko, N.T. Kartel. *Medical and Biological Effects of Nanoparticles: Realities and Forecasts* (Naukova Dumka, 2010) [in Russian].
76. А.Г. Дубовой, А.Е. Переко, В.А. Лавренко, Ю.М. Руденко, Т.В. Ефимова, В.П. Залуцкий, А.Д. Золотаренко. Влияние магнитного поля на фазово-структурное состояние и магнитные свойства высокодисперсных порошков Fe, полученных электроискровым диспергированием. *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии* **11** (1), 131 (2013).
77. K.V. Chuistov, A.E. Perekos. Structure and properties of small metal particles. I. Phase-structural state and magnetic characteristics (Review). *Metallophysics and latest technologies* **19** (1), 36 (1997) [in Russian].
78. I.A. Tarkovskaya. *One Hundred "Professions" of Coal* (Naukova Dumka, 1970) [in Russian].
79. A.D. Zolotareno, A.D. Zolotareno, E.P. Rudakova, S.Y. Zaginaichenko, A.G. Dubovoy, D.V. Schur, Y.A. Tarasenko. The Peculiarities of Nanostructures Formation in Liquid Phase. In *Carbon Nanomaterials in Clean Energy Hydrogen Systems-II* (Springer, 2011), p. 137.
80. I.R. Prigogine, D.I. Kondenudi. *Modern Thermodynamics* (Mir, 2002) [in Russian].
81. N.T. Kartel, Yu.A. Taraseko. Zeolites and carbon materials. In: *Surface Physics and Chemistry. Book II. Surface chemistry*. Edited by N.T. Kartel and V. Lobanova (A.A. Chuiko Institute of Surface Chemistry NAS of Ukraine; LLC "NPP Interservice", 2018) **2**, Chap. 22–28. P. 754–967 [in Russian].
82. Ol.D. Zolotareno, E.P. Rudakova, N.Y. Akhanova, An.D. Zolotareno, D.V. Shchur, M.T. Gabdullin, M. Ualkhanova, N.A. Gavrylyuk, M.V. Chymbai, Yu.O. Tarasenko, I.V. Zagorulko, A.D. Zolotareno. Electric conductive composites based on metal oxides and carbon nanostructures. *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.* **43** (10), 1417 (2021).
83. K.V. Chuistov, A.E. Perekos, V.P. Zalutsky *et al.* Influence of production conditions on the structural state, phase composition and dispersion of electroerosive powders of iron and alloys on its basis. *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.* **18** (8), 18 (1996) [in Russian].
84. I.P. Suzdalev. *Nanotechnology: Physicochemistry of Nanoclusters, Nanostructures and Nanomaterials* (КомКнига, 2009) [in Russian].
85. А.А. Володин, А.Д. Золотаренко, А.А. Бельмесов, Е.В. Герасимова, Д.В. Щур, В.Р. Тарасов, А.Д. Золотаренко. Электропроводящие композиционные материалы на основе оксидов металлов и углеродных наноструктур. *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии* **12**, (4), 705 (2014).
86. V.I. Saranchuk, M.A. Ilyashov, V.V. Oshovsky, E.V. Saranchuk. Carbon: unknown about known. In: *Mechanisms of the Realized Crystallization of Carbon Modifications* (UK Center, 2009), p. 22 [in Russian].
87. G.B. Sergeev. *Nanochemistry* (Moscow State University, 2003) [in Russian].
88. V.A. Lavrenko *et al.* Electrochemical synthesis of ammonium persulfate $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$ using oxygen-depolarized porous silver cathodes produced by powder metallurgy methods. *Powder Metall. Met. C* **57** (9), 596 (2019).
89. E.A. Kats. *Fullerenes, Carbon Nanotubes and Nanoclusters: Genealogy of Forms and Ideas* (URSS, Publishing house LCI, 2008) [in Russian].
90. Y.I. Sementsov. *Formation of Structure and Properties of sp^2 -Carbon Nanomaterials and Functional Composites with Their Participation* ("SPE Interservice", 2019) [in Ukrainian].
91. С.А. Баскаков и др. Новые композитные материалы на основе восстановленного оксида графена и полианилина в суперконденсаторах высокой ёмкости. *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии* **13** (1), 37 (2015).
92. D.V. Schur, A.G. Dubovoy, S.Yu. Zaginaichenko, V.M. Adejev, A.V. Kotko, V.A. Bogolepov, A.F. Savenko, A.D. Zolotareno, S.A. Firstov, V.V. Skorokhod. Synthesis of carbon nanostructures ingaseousandliquidmedium. *NATO Security through Science Series A: Chemistry and Biology* (Springer, 2007), p. 199.
93. Ol.D. Zolotareno, E.P. Rudakova, N.Y. Akhanova, An.D. Zolotareno, D.V. Shchur, M.T. Gabdullin, M. Ualkhanova, M. Sultangazina, N.A. Gavrylyuk, M.V. Chymbai, A.D. Zolotareno, I.V. Zagorulko, Yu.O. Tarasenko. Plasmochemical synthesis of platinum-containing carbon nanostructures suitable for CJP 3D-printing. *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.* **44** (3), 343 (2022).
94. A.P. Shpak, Y.A. Kunitsky, V.A. Prokopenko, S.Y. Smyk. *Processes of Self-Organization in Materials of Different Nature* (Kyiv, 2004) [in Ukrainian].
95. D.V. Schur, S.Y. Zaginaichenko, A.F. Savenko, V.A. Bogolepov, N.S. Anikina, A.D. Zolotareno, Z.A. Matysina, T.N. Veziroglu, N.E. Skryabina. Hydrogenation of fullerite C_{60} in gaseous phase. *NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security* **2**, 87 (2011).
96. V.I. Trefilov, D.V. Shchur, B.P. Tarasov, Yu.M. Shulga, A.V. Chernogorenko, V.K. Pishuk, S.Yu. Zaginaichenko. *Fullerenes – the basis of materials of the future* (ADEF-Ukraine, 2001) [in Russian].
97. М.А. Кривоглаз. Растворимость в упорядочивающихся сплавах. *ЖТФ* **24**, 1077 (1954).
98. З.А. Матисіна. Растворимость в упорядочивающихся сплавах. *Изв. вузов. Физика* **8**, 52 (1976).
99. А.А. Смирнов. *Теория сплавов внедрения* (ГРФМЛ, 1979).

100. М.А. Кривоглаз, А.А. Смирнов. *Теория упорядочивающихся сплавов* (Физматгиз, 1958).

Одержано 31.07.22

*S. Yu. Zaginaichenko, Z. A. Matysina,
An. D. Zolotarenko, N. A. Shwachko, Ol. D. Zolotarenko,
E. P. Rudakova, N. Y. Akhanova, M. Ualkhanova,
D. V. Schur, M. T. Gabdullin, T. V. Myronenko,
A. D. Zolotarenko, M. V. Chymbai, O. E. Dubrova*

INTERSTITIAL IMPURITIES
IN ALLOYS WITH B19 STRUCTURE

A metal having hexagonal B19 structure and introduced interstitial atoms has been considered. The solubility of introduced

impurities and the correlation parameters at the substitution of sites and interstitials have been studied, by using the configuration method, and their dependences on the metal composition, temperature, and long-range order degree of the impurity distribution over the sites have been determined. The information about the correlation parameters enables the evaluation of many physical characteristics of alloys. If the correlation parameters are known from experiments, the obtained formulas allow the energy parameters of the alloys to be determined.

Keywords: alloys, solubility, interstitial impurities, correlation parameters, substitutional impurities, B19 structure.