

УДК 544.034

<https://doi.org/10.17073/0021-3438-2023-1-75-83>

Научная статья

Research article



## Взаимная диффузия в системах на основе тугоплавких металлов с ОЦК-решеткой: титан–тантал и титан – многокомпонентный (высокоэнтروпийный) сплав

**М.И. Разумовский, А.О. Родин, Б.С. Бокштейн****Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»**

119049, Россия, г. Москва, Ленинский пр-т, 4

✉ Михаил Игоревич Разумовский (razmikhail@gmail.com)

**Аннотация:** Изучены особенности взаимной диффузии в многокомпонентных (высокоэнтропийных) сплавах на основе тугоплавких металлов. В качестве объектов диффузионного исследования были выбраны следующие пары: титан – эквипомный сплав (Hf–Nb–Ta–Ti–Zr–Mo) и, для сравнения, титан–тантал. Рассмотрены вопросы приготовления образцов, исследования микроструктуры, методика подготовки образцов для изучения диффузии и экспериментальные результаты. Диффузионный отжиг был проведен в течение 12 ч в вакууме с остаточным давлением аргона  $6,65 \cdot 10^{-3}$  Па при температуре 1200 °С. Особое внимание уделено методике соединения диффузионных пар (титана с танталом, титана со сплавом) путем термоциклирования вблизи температуры полиморфного превращения в титане (882 °С) в пределах  $\pm 50$  °С. Показано поведение наиболее характерных элементов (Ta, Zr, Ti) в области сварного шва после соединения диффузионной пары титана и сплава. Впервые получены данные о зависимости интенсивности соответствующей линии спектра для титана и элементов многокомпонентного сплава от глубины проникновения. Изменение интенсивности сигнала для элементов систем наблюдается на глубине 150–200 мкм, а резкое падение интенсивности сигнала происходит на глубинах порядка 50 мкм. Рассчитано усредненное по всем элементам системы легирования сплава (за исключением титана) эффективное значение коэффициента диффузии элементов в титан при температуре 1200 °С. Проведено сравнение полученного значения со справочными данными: коэффициентом самодиффузии в  $\beta$ -титане, коэффициентами диффузии в парах титана с легирующими элементами сплава.

**Ключевые слова:** высокоэнтропийные сплавы на основе многих тугоплавких металлов, параметры взаимной диффузии

**Финансирование:** Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20–03–00387).

**Благодарности:** Коллектив авторов выражает благодарность В.К. Портному и Е.А. Колесникову за помощь в проведении экспериментов.

**Для цитирования:** Разумовский М.И., Родин А.О., Бокштейн Б.С. Взаимная диффузия в системах на основе тугоплавких металлов с ОЦК-решеткой: титан–тантал и титан – многокомпонентный (высокоэнтропийный) сплав. *Известия вузов. Цветная металлургия*. 2023; 29 (1): 75–83. <https://doi.org/10.17073/0021-3438-2023-1-75-83>

## Interdiffusion in refractory metal systems with a BCC lattice: titanium–tantalum and titanium–multicomponent (high-entropy) alloy

**M.I. Razumovsky, A.O. Rodin, B.S. Bokstein****National University of Science and Technology “MISIS”**

4 Leninskii pr., Moscow, 119049, Russia

✉ Mikhail I. Razumovsky (razmikhail@gmail.com)

**Abstract:** In this work, the interdiffusion features in multicomponent (high-entropy) alloys of refractory metals were studied. The following pairs were chosen as the diffusion study objects: titanium–equiatomic alloy (Hf–Nb–Ta–Ti–Zr–Mo) and titanium–tantalum for the sake of

comparison. The article covers the issues of sample preparation, microstructure study, sample preparation methodology for diffusion research, and experimental results. Diffusion annealing was carried out for 12 h in a vacuum at a residual argon pressure of  $6.65 \cdot 10^{-3}$  Pa and a temperature of 1200 °C. Particular attention was paid to the method of combining diffusion pairs (titanium with tantalum, titanium with alloy) by thermal cycling near the polymorphic transformation temperature in titanium (882 °C) within  $\pm 50$  °C. The behaviour of the most characteristic elements (Ta, Zr, Ti) in the weld area after the titanium and alloy diffusion pair joining was demonstrated. This is the first time that data on the dependence of the intensity of the corresponding spectral line for titanium and elements of a multicomponent alloy on the penetration depth were obtained. A change in the signal intensity for system elements was observed at a depth of 150–200  $\mu\text{m}$ , whereas a sharp drop in the signal intensity was seen to occur at depths of about 50  $\mu\text{m}$ . The effective value of the coefficient of diffusion of elements into titanium averaged over all elements of the alloying system (except for titanium) at a temperature of 1200 °C was calculated. The obtained value was compared to reference data: the self-diffusion coefficient in  $\beta$ -titanium and diffusion coefficients in titanium pairs with alloy doping elements.

**Keywords:** high-entropy alloys based on multiple refractory metals, interdiffusion parameters

**Funding:** This study was carried out with the financial support of a grant from the Russian Foundation for Basic Research (Project No. 20–03–00387).

**Acknowledgments:** The authors acknowledge V.K. Portnoi and E.A. Kolesnikov for their help with the experiments.

**For citation:** Razumovsky M.I., Rodin A.O., Bokstein B.S. Interdiffusion in refractory metal systems with a BCC lattice: titanium–tantalum and titanium–multicomponent (high-entropy) alloy. *Izvestiya. Non-Ferrous Metallurgy*. 2023; 29 (1): 75–83. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/0021-3438-2023-1-75-83>

## Введение

Для повышения рабочих температур газотурбинных двигателей до 1400 °C необходимы сплавы с температурой плавления более 2000 °C. Среди основных претендентов на эту роль — сплавы на основе тугоплавких металлов. Кроме высокой температуры плавления такие сплавы содержат, как правило, более 5 элементов с концентрацией каждого от 5 до 35 % и, следовательно, характеризуются большой конфигурационной энтропией. По этой причине они и были названы высокоэнтропийными сплавами (ВЭС) (или HEA — High Entropy Alloys) [1, 2].

Поскольку повышение энтропии связано с увеличением беспорядка в системе, было высказано предположение о возможном замедлении диффузии (sluggish effect) [3, 4]. Данных о зависимости коэффициентов взаимной диффузии от состава сплава в бинарных системах тугоплавких металлов, тем более многокомпонентных, очень мало. В настоящей работе были отобраны и проанализированы статьи, опубликованные в журналах с высоким импакт-фактором (*Acta Materialia*, *Journal of Alloys and Compounds*, *Intermetallics* etc.) за 2018–2020 гг. Статьи выбирались по двум критериям: 1) предметом исследования должны были быть многокомпонентные ВЭС; 2) полученные результаты касались диффузионной подвижности компонентов.

Из 47 отобранных статей первому критерию удовлетворяли только 10 работ [5–14], а изучению проблем диффузии в ВЭС тугоплавких металлов с ОЦК-решеткой — лишь 3 [6, 9, 11]. Исследований диффузии в многокомпонентных ВЭС с ГЦК-решеткой значительно больше, чем с ОЦК. По мнению авторов [7], «такие исследования находятся в начале длинного пути».

Общие выводы можно сформулировать следующим образом: замедление диффузии в высокоэнтропийных сплавах (sluggish effect) не носит общего характера для всех ВЭС и зависит от их состава; результаты, полученные методом рентгено-спектрального микроанализа (РСМА), наиболее информативны; эффект замедления сильнее выражен для ОЦК-структур, чем для ГЦК, хотя работ с со структурами ГЦК гораздо больше; некоторые авторы предполагают возможность реализации в ВЭС со структурой ОЦК диссоциативного, или междоузельного, механизма, являющегося следствием разупорядоченности структуры и приводящего к ускорению, а не замедлению диффузии.

В этой связи основная задача настоящего исследования — сравнительный анализ диффузионных процессов в диффузионных парах, в одной из которых присутствует сплав, а в другой — однокомпонентные вещества. Выбор состава сплава основан на анализе, сделанном в нашем обзоре [15], — это многокомпонентный эквивалентный сплав HfNbTaTiZrMo

## Приготовление образцов

Для приготовления исходных смесей использовали порошки компонентов (Hf, Nb, Ta, Ti, Zr и Mo) класса «особой чистоты» (99,96 %) с размерами частиц 40–80 мкм. Помол порошковой смеси<sup>1</sup> проводили в планетарной мельнице P-7 (Fritsch,

<sup>1</sup> Образцы многокомпонентного сплава на основе тугоплавких металлов были получены на оборудовании МГУ им. М.В. Ломоносова.

Германия) в атмосфере аргона при соотношении масс порошка и шаров 1 : 8.

Горячее изостатическое прессование (ГИП) осуществляли в лабораторном газостате при температуре 1200 °С с выдержкой не менее 2 ч, а компактирование порошков — внутри предварительно вакуумированных стальных капсул в процессе ГИП.

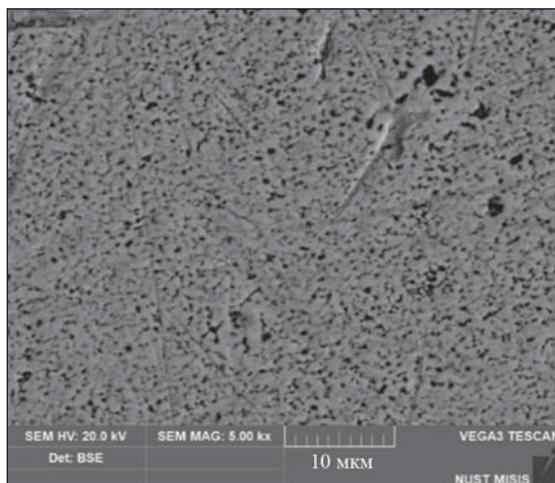
Рентгеноспектральный микроанализ (РСМА) компактированных образцов выполняли с помощью сканирующего электронного микроскопа LEO EVO 50 XVP (Carl Zeiss, Германия) с приставкой INCA ENERGY (Oxford Instruments, Великобритания).

Основной фазой, которая образуется в процессе помола порошковой смеси, является ОЦК твердый раствор с периодом решетки  $a \sim 0,34$  нм [16].

## Микроструктура многокомпонентных сплавов

В рамках представленной работы были изготовлены шлифы чистых титана, тантала и сплава на основе многих тугоплавких металлов. Для выявления зеренной структуры была использована смесь плавиковой и азотной кислот.

Исследование структуры проводили на оптическом микроскопе модели «Axio Vert.A1» (Carl Zeiss, Германия) и электронном микроскопе (SEM) JSM-6480LV (JEOL, Япония) с приставкой для энергодисперсионной спектроскопии INCA ENERGY Dry Cool (Oxford Instruments, Великобритания), а также на микроскопе FEGFEI Nava Nano SEM



**Рис. 1.** Электронное изображение (SEM) структуры образца сплава

**Fig. 1.** SEM image of the alloy sample structure

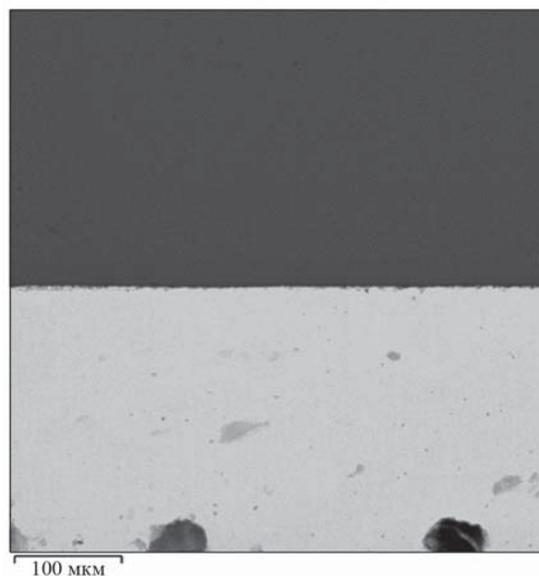
(Field Electron and Ion Company, FEI, США) с приставкой «Bruker» (Германия).

На рис. 1 приведена фотография однородной структуры одного из образцов сплава.

## Методика приготовления образцов для диффузионного исследования

Для диффузионного контакта образцов был использован метод диффузионной сварки. Для обеспечения необходимого для сварки давления  $\sim 2$  МПа применяли струбцину из нержавеющей стали, которую помещали в кварцевый реактор в вертикальной трубчатой печи. Во избежание окисления была обеспечена продувка аргоном внутри реактора.

Режим приготовления диффузионных пар заключался в термоциклировании вблизи температуры полиморфного превращения титана в пределах  $\pm 50$  °С. Один цикл представлял собой нагрев образцов на температуру 930 °С и охлаждение до температуры 830 °С при многократном циклировании или до комнатной температуры при однократном циклировании. Охлаждение осуществляли извлечением кварцевого реактора с образцами из печи с последующей выдержкой при комнатной температуре. Для определения изменения температуры образцов в реакторе использовали термопару ТВР А1.



**Рис. 2.** Электронное изображение (SEM) сварного шва между пластинами титана и тантала

**Fig. 2.** SEM image of a welded joint between titanium and tantalum plates

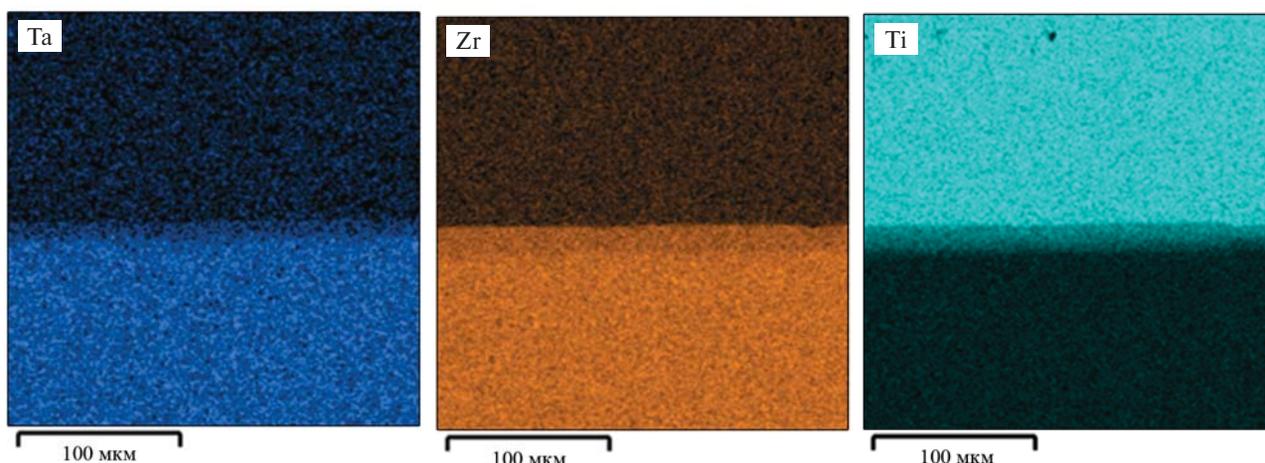


Рис. 3. Изображение SEM-EDS распределения элементов в области сварного шва титана и сплава

Fig. 3. SEM-EDS image showing element distribution in the welded titanium–alloy joint area

После сварки образцы специально обрабатывали для контроля сварного соединения. Для этого части сваренных образцов были удалены с помощью механической обработки шлифовальными кругами, после чего области сварного соединения полировали, а затем исследовали с помощью РСМА. На рис. 2, 3 показаны электронное изображение сварного шва и распределение элементов в области сварного шва.

Переходная зона, сформированная в результате изготовления диффузионной пары, не превышает нескольких микрометров и, по-видимому, является следствием фазовой перекристаллизации. Сварные швы получились сплошными, с отсутствием пор и раковин.

### Экспериментальные результаты и оценочные расчеты коэффициентов диффузии

Диффузионный отжиг проводили в течение 12 ч в вакууме с остаточным давлением аргона  $6,65 \cdot 10^{-3}$  Па при температуре 1200 °С. После отжига образцы разрезали вдоль направления диффузионного проникновения и полученную поверхность шлифовали и полировали. Типичный вид полированной поверхности приведен на рис. 4. Нижняя, более темная, часть соответствует титану, а более светлая — сплаву. Точками показаны области анализа химического состава методом энергодисперсионного анализа. Расстояние между точками составляет около 35 мкм. Типичный спектр приведен на рис. 5.

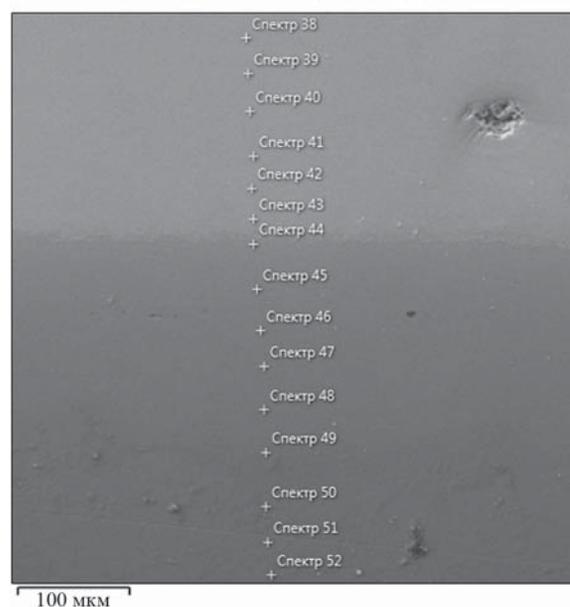


Рис. 4. РСМА зоны взаимной диффузии в паре сплав–титан

Fig. 4. EDX of an interdiffusion zone of a titanium–alloy pair (white crosses accordance each spectrum numbers from 38 to 52)

Видно, что взаимная диффузия связана в основном с проникновением компонентов сплава в титан как в более легкоплавкую часть системы (рис. 6), а изменение интенсивности сигнала наблюдается на расстоянии 150–250 мкм для всех элементов. Резкое же падение интенсивности происходит на глубинах порядка 50 мкм.

Данные о пересчитанных концентрациях компонентов приведены в таблице.

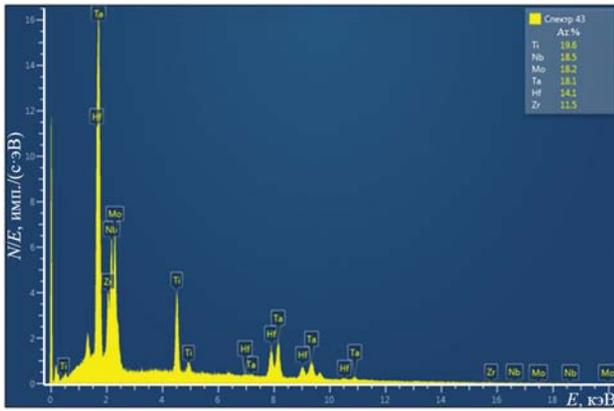
На рис. 7 представлены данные по зависимости интенсивности соответствующей линии спектра для титана и других компонентов сплава.

На рис. 8 показано распределение концентрации всех элементов, кроме Ti, системы легирования ВЭС в зоне взаимной диффузии. Для сравне-

ния приведена линия, соответствующая описанию с помощью erfс-образного решения [17, 18]:

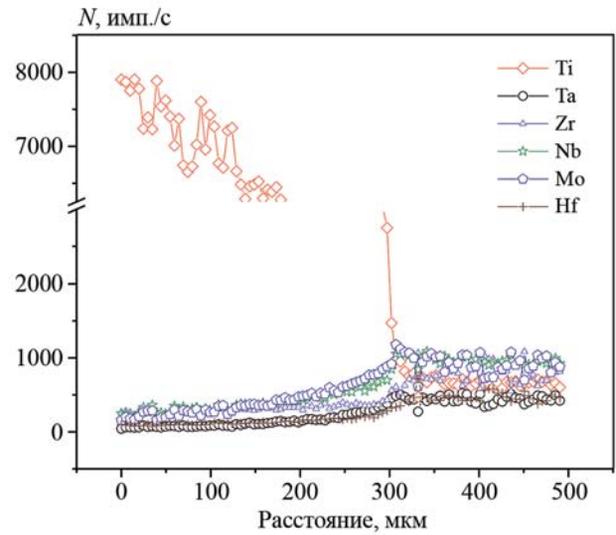
$$C(x, t) = C_{\phi} + \frac{C_0 - C_{\phi}}{2} \left\{ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{x - x_0}{2\sqrt{Dt}} \right) \right\},$$

где  $C_{\phi}$  — принятая за фон минимальная концентрация элемента;  $C_0$  — концентрация элемента в эк-



**Рис. 5.** Типичный спектр РСМА в зоне взаимной диффузии пары титан–сплав вблизи поверхности раздела

**Fig. 5.** Typical EDX spectrum in the interdiffusion zone of a titanium–alloy pair near the interface



**Рис. 6.** Изменение интенсивности линий спектра в зоне взаимной диффузии в паре титан–сплав

**Fig. 6.** Change in intensity of spectral lines in the interdiffusion zone of the titan–alloy pair

### Концентрации элементов в зоне взаимной диффузии, ат.%

Element concentration in the interdiffusion zone, at.%

Номер спектра	Координата, мкм	Ti	Zr	Hf	Mo	Ta	Nb
38	0	15,6	20,6	18,3	14,7	14,7	14,7
39	35	16,6	17,9	16,6	15,6	16,7	16,6
40	70	17,6	9,3	13,5	19,7	19,6	19,4
41	105	17,0	13,4	15,5	18,4	18,4	17,3
42	140	17,8	14,3	15,9	17,3	16,7	18,0
43	175	19,6	11,5	14,1	18,2	18,1	18,5
44	210	60,4	3,6	5,7	9,8	10,0	8,4
45	245	75,6	2,9	3,9	5,2	5,1	4,6
46	280	80,0	2,7	2,7	3,5	3,5	3,3
47	315	83,3	2,5	2,4	2,8	2,7	3,0
48	350	85,5	2,1	2,0	2,1	2,0	2,3
49	385	87,5	2,1	1,9	1,6	1,4	1,7
50	420	87,3	2,2	1,5	1,6	1,1	1,7

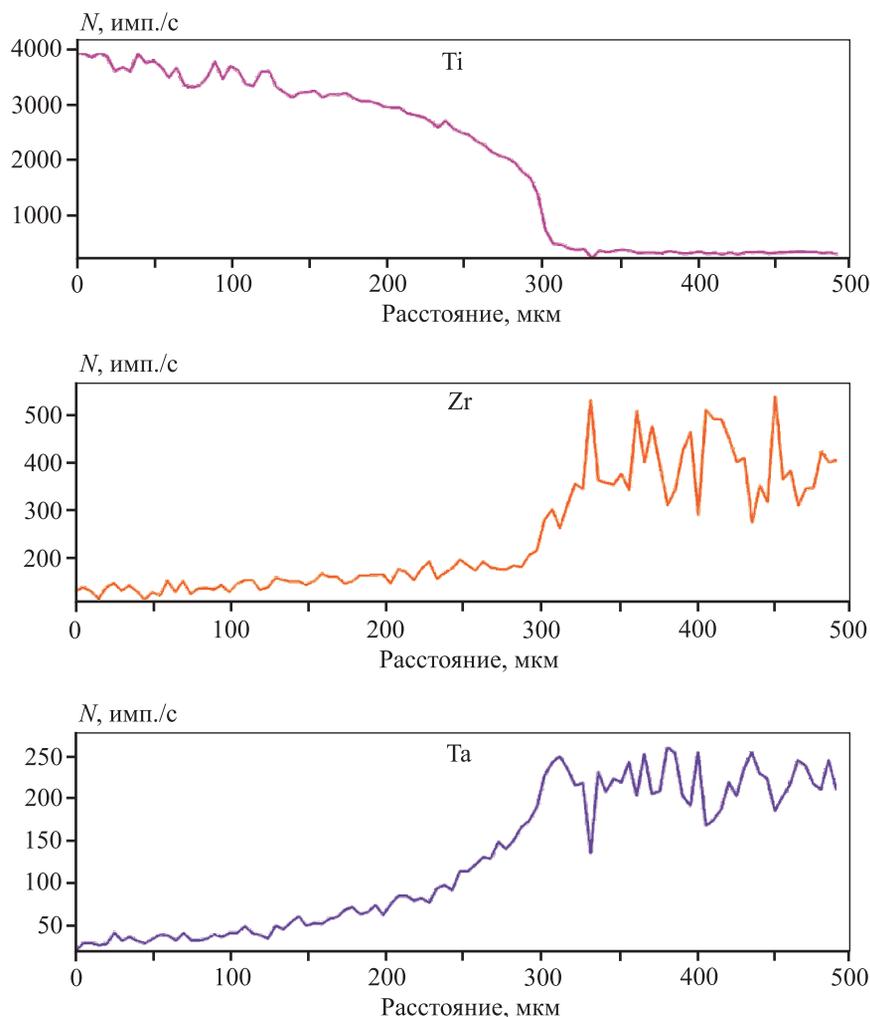


Рис. 7. Профили интенсивности некоторых компонентов сплава в зоне взаимной диффузии

Fig. 7. Intensity profiles of some alloy components in the interdiffusion zone

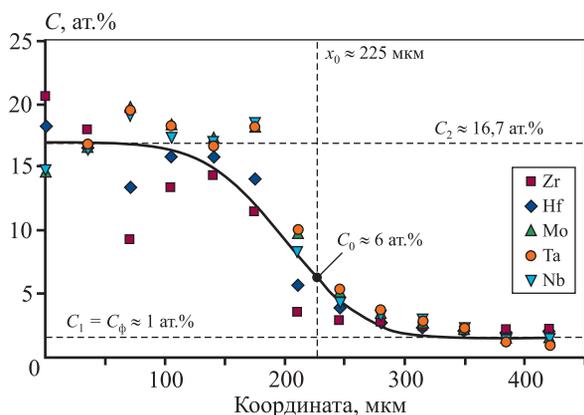


Рис. 8. Распределение элементов в диффузионной зоне пары сплав–титан

Fig. 8. Element distribution in the alloy–titanium diffusion zone

виатомном сплаве;  $D$  — коэффициент диффузии;  $t$  — время;  $x_0$  — координата, соответствующая поверхности раздела.

На рис. 8 слева от плоскости  $x_0$  находится область сплава, а справа — область титана.

Поведение элементов является схожим и может быть хорошо описано предложенным решением. Экспериментальные точки для пары титан–ВЭС соответствуют коэффициенту диффузии  $D = 3,0 \cdot 10^{-14} \text{ м}^2/\text{с}$ .

Аналогичные исследования проведены для пары титан–тантал. На рис. 9 представлены микрофотография и концентрационный профиль для этой пары.

Приведенные результаты показывают существенное различие диффузионных процессов в парах тантал–титан и сплав–титан. Полученным

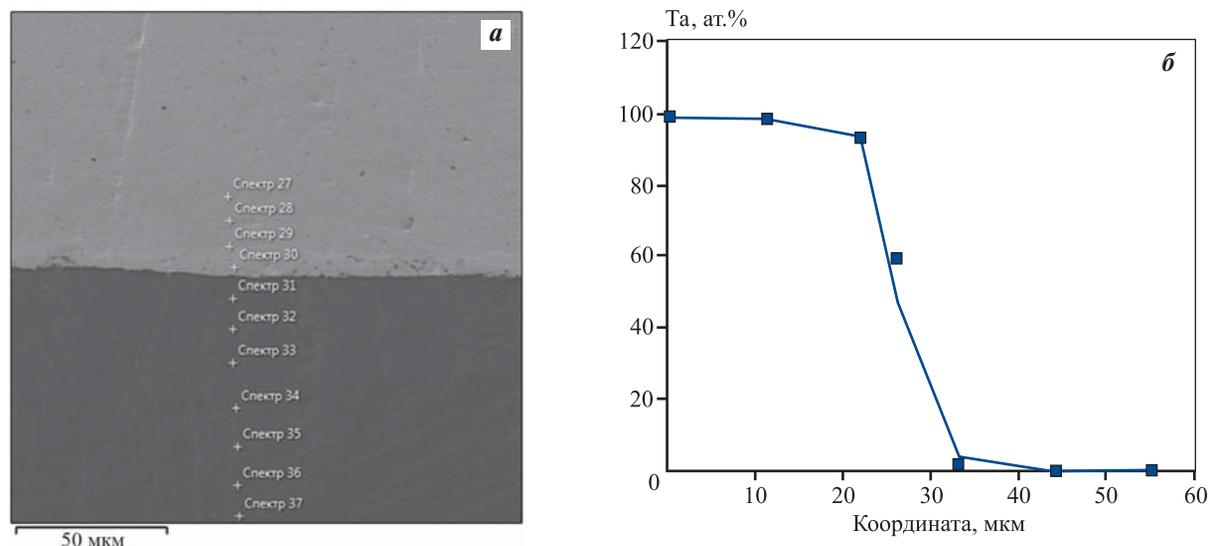


Рис. 9. Микрофотография поверхности среза (а) и распределение концентрации Ta в диффузионной паре Ti–Ta (б)

Fig. 9. Micrograph of the cut surface (a) and distribution of the Ta concentration in the Ti–Ta diffusion pair (b)

данным для пары титан—тантал соответствует коэффициент диффузии  $D = 5,0 \cdot 10^{-16} \text{ м}^2/\text{с}$ , который примерно на 2 порядка ниже, чем для пары титан—ВЭС.

## Заключение

Разработана и опробована методика исследования взаимной диффузии в парах, состоящих из однокомпонентных (титан—тантал), а также одного и многих (титан — высокоэнтропийный сплав) тугоплавких металлов с ОЦК-решеткой.

Диффузионный отжиг проводили в течение 12 ч в вакууме с остаточным давлением аргона  $6,65 \cdot 10^{-3} \text{ Па}$  при температуре  $1200 \text{ }^\circ\text{C}$ . Химический состав в зоне взаимной диффузии определяли с помощью энергодисперсионного анализа. Полученные данные о зависимости интенсивности соответствующей линии спектра для титана и разных элементов многокомпонентных сплавов пересчитаны в концентрации основных элементов в диффузионной зоне.

Взаимная диффузия в паре титан—сплав связана в основном с проникновением компонентов сплава в титан как более легкоплавкую часть системы. Изменение интенсивности сигнала наблюдается на расстоянии 150–250 мкм для всех элементов. Резкое же падение интенсивности сигнала происходит на расстоянии порядка 50 мкм.

Поведение элементов может быть хорошо описано *erfc*-образным решением, что говорит об отсутствии заметной концентрационной зависимости коэффициентов взаимной диффузии. В условиях эксперимента усредненная по всем элементам (за исключением титана) величина коэффициента диффузии составляет  $D = 3,0 \cdot 10^{-14} \text{ м}^2/\text{с}$ , что примерно на порядок меньше, чем коэффициент самодиффузии в  $\beta$ -титане, равный  $2,0 \cdot 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}$  [19]. Также, для сравнения, можно привести значения коэффициентов диффузии в титане при температуре  $1200 \text{ }^\circ\text{C}$  других тугоплавких металлов, а именно: циркония —  $D (\text{Zr}/\text{Ti}) = 2,6 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2/\text{с}$ ; молибдена —  $D (\text{Mo}/\text{Ti}) = 9,3 \cdot 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}$  [20]; ниобия —  $D (\text{Nb}/\text{Ti}) = 7,2 \cdot 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}$  [21] (изотопный метод); тантала —  $D (\text{Ta}/\text{Ti}) = 7,2 \cdot 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}$  [22]; гафния —  $D (\text{Hf}/\text{Ti}) = 1,0 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2/\text{с}$  [23].

Аналогичные исследования для пары титан—тантал показывают существенное различие диффузионных процессов в парах тантал—титан и сплав—титан. Изменение интенсивности сигнала (и, соответственно, концентрации компонентов в диффузионной зоне) наблюдается на расстоянии в 20 мкм. Полученные данные соответствуют коэффициенту взаимной диффузии  $D = 5,0 \cdot 10^{-16} \text{ м}^2/\text{с}$ , что примерно на 2 порядка ниже, чем для пары титан—ВЭС. Отметим, что тантал и многокомпонентные сплавы имеют существенное различие в температурах плавления (области солидус—ликвидус для сплавов), которые равны 3290 К для чистого тантала и 2100–2400 К для сплавов [24].

## Список литературы/References

- Divinski S.V., Lukianova O.A., Wilde G., Dash A., Esakiraja N., Paul A. High-entropy alloys: Diffusion. *Encyclopedia of Materials: Metals and Alloys*. 2020; 1–18. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803581-8.11771-0>
- Yong Zhang, Ting Ting Zuo, Zhi Tang, Michael C. Gao, Karin A. Dahmen, Peter K. Liaw, Zhao Ping Lu. Microstructures and properties of high-entropy alloys. *Progress in Materials Science*. 2014; 61: 1–93. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2013.10.001>
- Yeh J.W., Chen S.K., Lin S.J., Gan J.Y., Chin T.S., Shun T.T., Tsau C.H., Chang S.Y. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes. *Advanced Engineering Materials*. 2004; (6): 299–303.
- Yeh J.W. Recent progress in high-entropy alloys. *European Journal of Control*. 2006; 31: 633–648.
- Kumar P., Avasthi S. Diffusion barrier with 30-fold improved performance using AlCrTaTiZrN high-entropy alloy. *Journal of Alloys and Compounds*. 2020; 814: 151755.
- Dabrowa J., Zajusz M., Kucza W., Cie lak G., Berent K., Czeppe T., Kulik T., Danielewski M. Demystifying the sluggish diffusion effect in high entropy alloys. *Journal of Alloys and Compounds*. 2019; 783: 193–207. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2018.12.300>
- Glienke M., Vaidya M., Gururaj K., Daum L., Tas B., Rogal L., Pradeep K., Divinski S., Wilde G. Grain boundary diffusion in CoCrFeMnNi high entropy alloy: Kinetic hints towards a phase decomposition. *Acta Materialia*. 2020; 195: 304–316.
- Vaidya M., Sen S., Zhang X., Frommeyer L., Rogal L. Phenomenon of ultra-fast tracer diffusion of Co in HCP high entropy alloys. *Acta Materialia*. 2020; 196: 220–230.
- Beke D., Erdélyi G. On the self- and impurity diffusion in high entropy alloys. *Diffusion Foundations*. 2018; 17: 105–114.
- Lacour-Gogny-Goubert A., Huvelin Z., Perrut M., Boivin D., Horezan N., Guillot I., Vermaut Ph., Couzinié J.P. Effect of Mo, Ta, V and Zr on a duplex bcc+orthorhombic refractory complex concentrated alloy using diffusion couples. *Intermetallics*. 2020; 124: 106836.
- Vaidya M., Pradeep K.G., Murty B. S., Wilde G., Divinski S.V. Radioactive isotopes reveal a non sluggish kinetics of grain boundary diffusion in high entropy alloys. *Scientific Reports*. 2017; 7: 12293.
- Kottke J., Daniel Utt, Laurent-Brocq M., Adnan Fareed, Gaertner D., Perrière L., Rogal L., Stukowski A., Able K., Divinski S., Wilde G. Tracer diffusion in the Ni–Co–CrFeMn system: Transition from a dilute solid solution to a high entropy alloy. *Scripta Materialia*. 2018; 159: 94–98.
- Moghaddam A.O., Trofimov E.A. Toward expanding the realm of high entropy materials to platinum group metals: A review. *Journal of Alloys and Compounds*. 2021; 851: 156838.
- Zhenbang Wei, Cuiping Wang, Shiyang Qin, Yong Lu, Xiang Yu, Xingjun Liu. Assessment of atomic mobilities for bcc phase in the Ti–Nb–V system. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. 2020; 41: 191–206.
- Разумовский И.М., Береснев А.Г., Логачева А.И., Разумовский М.И., Бокштейн Б.С., Родин А.О. Сплавы на основе многих тугоплавких металлов — новое поколение жаропрочных композиционных материалов. *Конструкции из композиционных материалов*. 2019; (1): 45–50. Razumovskii I.M., Beresnev A.G., Logacheva A.I., Razumovsky M.I., Bokstein B.S., Rodin A.O. Multi-component refractory metals base alloys — new generation of high-temperature composite materials. *Konstruktsii iz kompozitsionnykh materialov*. 2019; (1): 45–50. (In Russ.).
- Шелехов Е.В., Свиридова Т.А. Программы для рентгеновского анализа поликристаллов. *Металловедение и термическая обработка металлов*. 2000; 42 (8): 309–313. Shelekhov E.V., Sviridova T.A. Programs for X-ray analysis of polycrystals. *Metal Science and Heat Treatment*. 2000; 42 (8): 309–313. <https://doi.org/10.1007/BF02471306>
- Бокштейн Б.С. Диффузия в металлах. 2-е изд. М.: Ленанд, 2019.
- Mehrer H. Diffusion in solids. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2007. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-71488-0>
- Reca N., Libanati Y. Autodifusion de titanio beta y hafnio beta. *Acta Metallurgica*. 1968; 16: 1297–1305.
- Павлинов Л.В. Диффузия металлических примесей в цирконии и титане. *Физика металлов и металловедение*. 1967; 24 (2): 272–277. Pavlinov L.V. Diffusion of metallic impurities into zirconium and titanium. *Fizika metallov i metallovedenie*. 1967; 24 (2): 272–277. (In Russ.).
- Pontau A.E., Lazarus D. Diffusion of titanium and niobium in bcc Ti–Nb alloys. *Physical Review B*. 1979; 19: 4027.
- Ansel I., Thibon M., Debuigne J. Interdiffusion in the body cubic centred  $\beta$ -phase of Ta–Ti alloys. *Acta Materialia*. 1998; 46 (2): 423–430.
- Le Gall G., Ansel D., Debuigne J. Interdiffusion in the body cubic centered  $\beta$ -phase of titanium–hafnium alloys. *Acta Metallurgica*. 1987; 35 (9): 2297–2305.
- Bernstein N., Shabaev A., Lambrakos S.G. First principles study of normal and fast diffusing metallic impurities in hcp titanium. *Computational Materials Science*. 2015; 109: 380–387.

## Информация об авторах

**Михаил Игоревич Разумовский** – аспирант кафедры физической химии Национального исследовательского технологического университета «МИСИС» (НИТУ МИСИС).

<https://orcid.org/0000-0002-0055-4834>

E-mail: razmikhail@gmail.com

**Алексей Олегович Родин** – к.ф.-м.н., доцент кафедры физической химии НИТУ МИСИС.

<https://orcid.org/0000-0003-1209-7594>

E-mail: arodine@mail.ru

**Борис Самуилович Бокштейн** – д.ф.-м.н., профессор кафедры физической химии НИТУ МИСИС.

E-mail: bokstein@mail.ru

## Information about the authors

**Mikhail I. Razumovsky** – Postgraduate Student of the Department of Physical Chemistry, National University of Science and Technology “MISIS” (NUST MISIS).

<https://orcid.org/0000-0002-0055-4834>

E-mail: razmikhail@gmail.com

**Aleksei O. Rodin** – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Prof. of the Department of Physical Chemistry, NUST MISIS.

<https://orcid.org/0000-0003-1209-7594>

E-mail: arodine@mail.ru

**Boris S. Bokstein** – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof. of the Department of Physical Chemistry, NUST MISIS.

E-mail: bokstein@mail.ru

## Вклад авторов

**М.И. Разумовский** – проведение экспериментов, обработка результатов исследований.

**А.О. Родин** – подготовка эксперимента, руководство проведением эксперимента, обеспечение ресурсами.

**Б.С. Бокштейн** – научное руководство, корректировка текста, корректировка выводов.

## Contribution of the authors

**M.I. Razumovsky** – realization of the experiments, processing of the research results.

**A.O. Rodin** – preparation and management of the experiments, provision of the resources.

**B.S. Bokstein** – scientific guidance, correction of the text and conclusions.

*Статья поступила в редакцию 19.04.2022, доработана 28.06.2022, подписана в печать 30.06.2022*

*The article was submitted 19.04.2022, revised 28.06.2022, accepted for publication 30.06.2022*