

А.Д. ОСИПОВ, науч. сотруд., ННЦ ХФТИ, Харьков

О ЗАВИСИМОСТЯХ ХАРАКТЕРИСТИК РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ В НЕКОТОРЫХ СИСТЕМАХ, СОДЕРЖАЩИХ ЭЛЕМЕНТЫ IV – VI ГРУПП

Показано, что равновесные коэффициенты распределения примесей у ряда систем, содержащих элементы IV – VI групп, в значительной мере определяются комплектами функции эффективных потенциалов, включающих характерные значения зарядовых чисел и потенциалов ионизации атомов.

Ключевые слова: характеристики распределения примесей, элементы IV – VI групп, эффективные потенциалы.

Вступление. При получении материалов высокой чистоты, изучении влияния на их свойства термомеханических воздействий, облучения необходимо учитывать много факторов, в частности, связанных с растворимостью различных примесей, их распределением, выделениями на границах зерен и др. [1].

Установлены разные зависимости, полуэмпирические соотношения для характеристик распределения примесей, связей их с атомными величинами, температурами плавления и другие [2 – 4].

Для ряда систем «металл А – примесь В» установлены корреляции между равновесными коэффициентами распределения K_{0B}^A и максимальной растворимостью примесей $\chi_{S \max}^\alpha$.

Отмечается, что при изучении растворимости примесей могут быть привлечены такие параметры, как радиусы элементов, значения энтальпий возгонки, электронные потенциалы, диаметры ионов, валентность, атомный номер и другие [2]. У ряда систем «металл А – примесь В» предельные равновесные коэффициенты распределения примесей определяются выражениями, которые имеют вид [2]:

$$K_{0\lim B}^A = K_{01} \exp(C_B T_{MB}) \quad (1)$$

где K_{01} , C_B – постоянные для данного металла-растворителя; T_{MB} – температуры плавления примесей В.

© А.Д. Осипов, 2014

Для многих примесей используются гипотетические температуры плавления T_{MB}^G , которые могут сильно отличаться от фактических температур плавления T_{MB} . При этом в ряде случаев выбор величин T_{MB}^G не имеет достаточных обоснований.

Отмечается также необходимость учета напряжений, деформации кристаллической решетки, связанной с различием размеров объемов примесей и решетки [4].

Из ряда зависимостей величин во многих случаях трудно установить основные, и необходимо выделить наиболее существенные факторы для данных систем с примесями.

При изучении температур сильного изменения напряжений течения T_m , у некоторых соединений элементов IV–VI групп, связей с температурами плавления T_m , в работе [5] и других, использованы соотношения приближенного метода эффективных потенциалов (ЭП), в которых учитываются комплекты функционалов атомных величин.

Математическая модель. Использование зависимостей, отмеченных и аналогичных работе [5], позволяет определить также характеристики распределения примесей, связи их с T_m .

Целью данной работы является установление связей между коэффициентами распределения примесей у ряда систем, включающих элементы IV – VI групп и комплектами функций атомно-электронных величин.

При этом применяются определяющие функционалы, в частности, модельные, зарядовые и энергоимпульсные.

Используются основные величины для данных характеристик, степени их влияния, характерные значения. Используя комплекты функций, аналогичных применяемым в работах [1 – 5] и других, расчетные температуры плавления T_m^t , у многих элементов можно оценить из упрощенного выражения:

$$T_m^t = T_{ml} C_{ml} V_{ml} + \Delta T \quad (2)$$

где T_{ml} – постоянная, К; $V_m = V_d \cdot V_z \cdot V_p \cdot V_e$, $V_d = d_0/d_e$, где d_e – межатомные расстояния, нм [6]; $d_0 = 0,1$ нм; $V_z = \sum_i C_{zi} V_{zi}$; $V_{z1} = C_{za} Z_a^\alpha$; $V_{z2} = C_{z2} Z_b$;

Z_a, Z_b – зарядовые числа и числа электронов связи атомов; $\alpha \approx 0,7$; $C_{ml}, C_{za}, C_{zb}, C_{li}$ – функции, учитывающие степени влияния соответствующих величин; $V_p = \sum_i C_{li} I_{vi} / I_{ki}$, $I_{vi} \approx I_i$, I_i – i -ый потенциал ионизации атомов; eV , I_{ki} – величина, аналогичная I_{vi} ; $\Delta T_m, V_e$, – дополнительные составляющие.

При вычислениях T_m^t по (2) использованы значения величин, в основном такие же, как и в работе [5].

Для металлов IV – VI групп $I_i = I_7$, Z_b соответствуют электронным конфигурациям элементов. При этом для указанных элементов T_m^t отличается от известных T_m [6], в основном, в пределах $\sim 20\%$.

Следует отметить, что использование функций величин в выражении (2) позволяет оценить также некоторые другие характеристики веществ, в частности, температуры сильного изменения напряжения течения, влияющих на хрупко-вязкий переход и другие температурные особенности, связанные с хрупким разрушением.

Зависимости эффективных потенциалов, аналогичные применяемым в (2), определяют также равновесные коэффициенты распределения примесей у ряда систем.

Выделяя основные величины, расчетные значения ${}^t K_{OB}^A$ у многих систем А – В можно оценить из выражения:

$${}^t K_{OB}^A = K_{O1} C_{II} V_{II}^{AB} / V_{II}^A + K_{O2} \quad (3)$$

где K_{O1} – постоянная; $V_{II}^{AB} = (V_{II}^A \cdot V_{II}^B)^{0,5} \cdot V_d$. Функции V_{II}^A, V_{II}^B, V_d содержат величины такие же или близкие к использованным в (2), относящиеся к атомам А и В.

В табл. 1 приведены вычисленные по формуле (3) ${}^t K_{OB}^A$ и известные [2, 3] равновесные коэффициенты распределения примесей в вольфраме. K_{O2} – малая величина, $K_{O1} = 1$.

В табл. 2 приведены расчетные (3) и известные [2, 3] равновесные коэффициенты распределения примесей в кремнии K_{OB}^{Si} . При вычислениях использованы значения величин, в основном, такие же, как и в работах [5, 6].

Таблица 1 – Расчетные (3) и известные [2, 3] равновесные коэффициенты распределения примесей в вольфраме

Материал	${}^t K_{0B}^W$ (1)	K_{0B}^W [2 – 3]	δ , %
Ti	0,43	0,388	+10
Zr	0,21	0,249	-19
Hf	0,25	0,335	-32
V	0,59	0,588	~1
Nb	0,71	0,817	-15
Ta	0,73	0,808	-14
Cr	0,75	0,623	+20
Mo	0,84	0,881	-5
W	1	1	0

Таблица 2 – Расчетные (${}^t K_{0B}^{Si}$) и известные [2, 3] равновесные коэффициенты распределения примесей в кремнии

Материал	${}^t K_{0B}^{Si}$ (3)	K_{0B}^{Si} [2, 3]	δ , %	Материал	${}^t K_{0B}^{Si}$ (3)	K_{0B}^{Si} [2, 3]	δ , %
B	0,61	0,80	-31	Al	0,018	0,015 – 0,019	+20; -6
C	0,07	0,07	~1	P	0,44	0,35	+26
O	1,3	1,25	+4	Ge	0,33	0,33 – 0,39	~1; -18
F	1,3	1,4	-8	–	–	–	–

Как видно из табл. 1 и 2, имеются определенные корреляции для равновесных коэффициентов распределения многих примесей у ряда систем металл-примесь.

Выводы.

Полученные соотношения могут свидетельствовать о том, что использованные величины эффективных потенциалов, комплекты их функций в значительной мере определяют коэффициенты распределения примесей у рассмотренных систем.

При этом не используются гипотетические температуры плавления.

Предложенные выражения позволяют определять характеристики распределения примесей также у ряда других систем.

Список литературы: 1. Зеленский В.Ф. Радиационные дефекты и набухание металлов / В.Ф. Зеленский, И.М. Неклюдов, Т.П. Черняева. – К.: Наук. думка, 1988. – 549 с. 2. Бартел И. Кристаллизация из расплава: справочник / [И. Бартел, Э. Буринг, К. Хайн, Л. Кухарж]; [пер. с нем. Е.К. Бухмана] – М.: Металлургия, 1987. – 320 с. 3. Драпала Я. Периодическая зависимость коэффициентов распределения приме-

сей в металлах от атомного номера примеси / Я. Дрпала, Л. Кухарж, Г.С. Бурханов // Неорганические материалы. – 1998. – Т. 34, № 2. – С. 165 – 178. **4.** Машаров С.И. Растворимость атомов замещения в однородно деформированных ферромагнитных сплавах / С.И. Машаров // Известия ВУЗов. Физика. – 2011. – № 4. – С. 39 – 44. **5.** Осипов А.Д. Хрупкопластичный переход у силицидов тугоплавких металлов / А.Д. Осипов // Порошковая металлургия. – 1992. – № 9. – С. 88 – 91. **6.** Свойства элементов: справочник в 2-х ч. / Под ред. Г.В. Самсонова. – [2-е изд., доп. и перераб.]. – М.: Металлургия, 1976. – Ч. 1: Физические свойства. – 1976. – 600 с.

References: **1.** Zelenskii V.F. Irradiation-induced defects and metal swelling / V.F. Zelenskii, I.M. Nekliudov, T.P. Cherniaeva. – Kyiv: Naukova dumka, 1988. – 498 p. **2.** Bartel I. Kristallisation aus Schmelzen: handbuch / [I. Bartel, E. Buhrig, K. Hein, L. Kucharz]; [aus d. Deutsch. von E.K. Buchmann übersetzt]. – Moscow: Metallurgii, 1987. – 320 p. **3.** Drapala I. Periodic dependence of distribution coefficients of admixtures in metals on atomic number of admixture / I. Drapala, L. Kucharz, G.S. Burkhanov // Neorganicheskie materialy. – 1998. – Vol. 34, № 2. – P. 165 – 178. **4.** Masharov S.I. Resolvalubility of substitutional atoms into uniformly deformed ferromagnetic alloys / S.I. Masharov // Izvestiia VUZov. Physics. – 2011. – № 4. – P. 39 – 44. **5.** Osipov A.D. Embrittle-ductile transition in silicides of refractory metals / A.D. Osipov // Powder metallurgy. – 1992. – № 9. – P. 88 – 91. **6.** Properties of elements: ref. book: in 2 parts / Ed. by G.V. Samsonov. – [2nd ed., enlarged and corr.] – Moscow: Metallurgii, 1976. – Part 1. Physical properties – 1976. – 600 p.

Поступила в редколлегию (Received by the editorial board) 23.05.14

УДК 536.548

О зависимостях характеристик распределения примесей в некоторых системах, содержащих элементы IV – VI групп / О.Д. ОСИПОВ // Вісник НТУ «ХПІ». – 2014. – № 28 (1071). – (Серія: Хімія, хімічна технологія та екологія). – С. 98 – 102. – Бібліогр.: 6 назв. – ISSN 2079-0821.

Показано, що рівноважні коефіцієнти розподілу домішок у низці систем, що містять елементи IV – VI груп, значною мірою визначаються комплектами ефективних потенціалів, що включають характерні значення зарядових чисел та потенціалів іонізації атомів.

Ключові слова: характеристики розподілу домішок, елементи IV – VI груп, ефективні потенціали.

UDC 536.548

On dependancy of impurity distribution characteristics in some systems containing elements of IV – VI groups / A.D. OSIPOV // Visnyk NTU “KhPI”. – 2014. – № 28 (1071). – (Seriya: Khimiya, khimichna tekhnologiya ta ekologiya). – P. 98 – 102. – Bibliogr.: 6 names. – ISSN 2079-0821.

It is shown that equilibrium coefficients of impurities distribution in the systems containing elements of IV – VI groups are mainly determined by complete series of effective potentials including characteristics values of charges and energies of atoms ionization.

Key words: characteristics of impurity distribution, elements of the IV – VI groups, effective potentials.