

О СВЯЗЯХ ХАРАКТЕРИСТИК РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ У НЕКОТОРЫХ СИСТЕМ, ВКЛЮЧАЮЩИХ ЭЛЕМЕНТЫ III–VIII ГРУПП

А.Д. Осипов

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
Харьков, Украина*

E-mail: kartmazov.kipt.kharkov.ua; тел. +38(057)335-62-93, +38(057)335-21-94

Исследованы связи между равновесными коэффициентами распределения примесей у систем элементов III–VIII групп и эффективными функциями, содержащими фундаментальные величины. Показано, что имеются определенные корреляции у ряда систем коэффициентов распределения примесей и комплектов функций, включающих характерные значения зарядов, энергий ионизации, атомов.

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 др. [2–4].

Для ряда систем металл А–примесь В установлены корреляции между равновесными коэффициентами распределения K_{0B}^A и максимальной растворимостью примесей $\chi_{S_{max}}^\alpha$, которые имеют вид [2]:

$$K_{0B}^A = K_{B1}^A (\chi_{S_{max}}^\alpha)^\alpha, \quad (1)$$

где K_{B1}^A, α – постоянные для данных систем А–В.

Отмечается, что при изучении растворимости примесей могут быть привлечены такие параметры, как радиусы элементов, значения энтальпий возгонки, электронные потенциалы, диаметры ионов, валентности, атомный номер и др. [2].

У ряда систем металл А–примесь В предельные равновесные коэффициенты распределения примесей определяются выражением [2]:

$$K_{0limB}^A = K_{o1} \exp(C_B T_{MB}), \quad (2)$$

где K_{o1}, C_B – постоянные для данного металл-растворителя; T_{MB} – температуры плавления примесей В.

Для многих примесей используются гипотетические температуры плавления T_{MB}^Γ , которые могут сильно отличаться от фактических температур плавления T_{MB} .

При этом в ряде случаев выбор величин T_{MB}^Γ не имеет достаточных обоснований.

Отмечается также необходимость учета напряжений, деформации кристаллической

решетки, связанной с различием размеров объемов примесей и решетки [4].

Во многих случаях для данных систем металл–примесь трудно установить основные величины и необходимо выделить наиболее существенные.

Наряду с учетом корреляций для температур плавления и других величин представляет интерес рассмотреть различные зависимости от энергий связи систем элементов.

В работе [5] исследовались соотношения между энтальпиями испарения у металлов IV–VI групп и функциями эффективных параметров.

Можно использовать аналогичные зависимости [5] для определения характеристик растворимости примесей в различных системах металл–примесь.

Целью данной работы является установление связей между коэффициентами распределения примесей у ряда систем, включающих элементы III–VIII групп, и комплектами функций, содержащих фундаментальные величины.

Используя зависимости, аналогичные известным [2], учитывая функции, которые применялись в работе [5], и выделяя наиболее существенные величины, выражение для оценки расчетных коэффициентов K_{0limB}^{AP} у ряда систем упрощенно можно представить в виде:

$$K_{0limB}^{AP} = K_{o1} \cdot P_{II}^{AB} / P_{II}^A + K_{o2}, \quad (3)$$

где K_{o1} – функция, включающая постоянные для данных группы В.

Для рассматриваемых систем в функциях P_{II}^{AB} , P_{II}^A значения величины в них такие же или близкие к тем, которые определяют энтальпии сублимации элементов и упрощенно можно записать:

$$P_{II}^{AB} = (Z_b + Z_\alpha) \cdot E_{vi} \cdot d_0 / d_i,$$

Z_b, Z_α – числа электронов связи и зарядовые числа атомов В, $\alpha \approx 0,7$; d_i – межатомные расстояния, нм, $d_0 = 1$ нм; $E_{vi} = E_i / E_{vi}$, E_i – i -й потенциал ионизации атомов В, эВ [6], $E_{o1} = 1$ эВ.

P_{II}^A относится к растворителю А.

В табл. 1 приведены вычисленные по (3) и известные [2,3] предельные равновесные коэффициенты распределения примесей редкоземельных и других элементов в цирконии.

$K_{o1}=1$, K_{o2} – малая величина.

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

Материал	$K_{o \lim B}^{Zr}$		Погрешность, δ %
	(3)	[2,3]	
Ce	0,38	0,41	-9
Sm	0,43	0,31	+39
Gd	0,14	0,13	+8
Du	0,44	0,47	-7
Er	0,46	0,53	-15
Ru	0,16	0,19	-19
Rh	0,16	0,13	+23
Pd	0,18	0,22	-22
Sn	0,28	0,27	+4
Re	0,21	0,27	-29
Os	0,23	0,21	+10
Pb	0,16	0,18	-13

При вычислениях в выражении (3) принимались следующие значения величин: $P_{II}^{Zr} = 550$; для редкоземельных элементов, в основном, $Z_b=3$, $i=4$, для Gd $i=2$. Для других элементов $Z_b=2$, $i=2$, для Sn $i=3$.

В табл. 2 приведены расчетные (3) и известные [2,3] равновесные коэффициенты распределения примесей в ниобии K_{oB}^{Nb} . При вычислениях принимались следующие значения для Z_b и i примеси B: 4, 5 – Ti, Ru, Os; 5, 7 – Ta; 6, 7 – W; 2, 3 – Sm; 3, 4 – Ce; 1,2 – La. $P_{II}^{Nb} = 700$.

Как видно из табл. 1, 2, имеются определенные корреляции между предельными равновесными коэффициентами распределения многих примесей у ряда систем металл–примесь.

Наблюдаемые корреляции могут свидетельствовать о том, что использованные величины, комплекты их функций в значительной мере

определяют коэффициенты распределения примесей у рассмотренных систем.

При этом, не используются гипотетические температуры плавления.

Таблица 2
Расчетные (3) и известные [2] равновесные коэффициенты распределения примесей в ниобии

Материал	K_{oB}^{Nb}		Погрешность, δ %
	(3)	[2,3]	
Ti	0,56	0,68	-21
V	0,88	0,8	+10
Ta	1,21	1,23·1,4	-2, -16
W	1,42	1,61·1,4	-13; +2
Os	0,62	0,6	+3
La	0,07	0,057	+23
Ce	0,26	0,20	+30
Sm	0,17	0,18	-6
Hf	0,98	0,79	+24
Ru	0,55	0,6	-9

ЛИТЕРАТУРА

1. В.Ф. Зеленский, И.М. Неклюдов, Т.П. Черняева. *Радиационные дефекты и набухание металлов*. Киев: «Наукова думка», 1988.
2. И. Бартел, Э. Буринг, К. Хайн, Л. Кухарж. *Кристаллизация из расплавов*: Справ. изд. / Пер. с нем. М.: «Металлургия», 1987, 320 с.
3. Я. Драпала, Л. Кухарж, Г.С. Бурханов. Периодическая зависимость коэффициентов распределения примесей в металлах от атомного номера примеси // *Неорганические материалы*. 1998, т. 34, №2, с.165-178.
4. С.И. Машаров. Растворимость атомов замещения в однородно деформированных ферромагнитных сплавах // *Известия вузов. Физика*. 2011, №4, с. 39-44.
5. А.Д. Осипов. О связях энтальпий плавления и испарения у металлов IV-VI групп // *ВАНТ. Серия «Вакуум, чистые материалы, сверхпроводники»*. 2009, № 6, с. 273-274.
6. *Свойства элементов*. В двух частях. Ч.1. *Физические свойства*: Справочник. М.: «Металлургия», 1976, 400 с.

Статья поступила в редакцию 15.11.2011 г.

ПРО ЗВ'ЯЗКИ ЕНТАЛЬПІЙ ХАРАКТЕРИСТИК РОЗПОДІЛУ ДОМІШОК У ДЕЯКИХ СИСТЕМ, ЩО ВКЛЮЧАЮТЬ ЕЛЕМЕНТИ ІІІ–VІІІ ГРУП

А.Д. Осипов

Досліджені зв'язки між рівноважними коефіцієнтами розподілу домішок у систем елементів ІІІ–VІІІ груп і ефективними функціями, що містять фундаментальні величини. Показано, що є певні кореляції у ряду систем коефіцієнтів розподілу домішок і комплектами функцій, що включають характерні значення зарядів, енергії іонізації атомів.

ON INTERRELATIONS BETWEEN IMPURITY DISTRIBUTION CHARACTERISTICS OF SOME SYSTEMS INCLUDING GROUP III–VIII ELEMENTS

A.A. Osipov

Studies have been made into interrelations between equilibrium coefficients of impurity distributions in the systems of group III-VIII elements and the effective functions comprising fundamental constants. It is demonstrated that a number of systems show certain correlations between impurity distribution coefficients and the sets of functions including characteristic charge, atomic ionization energy values.