

О РАВНОВЕСНЫХ КОЭФФИЦИЕНТАХ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ В НИОБИИ И ТАНТАЛЕ

А.Д. Осипов, Б.М. Широков

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
61108, г. Харьков, ул. Академическая, 1, Украина*

При использовании параметров, содержащих энергии ионизации атомов, числа электронов связи, определены равновесные коэффициенты распределения ряда примесей металлов в ниобии и тантале. При этом применяются выражения, аналогичные известным, но без введения температур плавления элементов.

При изучении растворимости примесей в металлах отмечаются зависимости от многих факторов, таких как энергия кристаллической решетки, валентность, атомные и ионные разряды, зарядовые числа примесей и др. [1,2].

Для характеристик растворимости примесей установлены различные соотношения, корреляции, например, в которых учитываются фактические и гипотетические температуры плавления, энтальпии возгонки, плавления и др. [2].

Известные выражения содержат много величин и в ряде случаев трудно выделить наиболее существенные для данных систем металл-примесь.

Представляет интерес установить связи для характеристик растворимости, зависимости их от основных атомно-электронных величин, потенциалов межатомных взаимодействий.

Важной характеристикой растворимости примесей В в металле А является равновесный коэффициент распределения примесей $K_{ОВ}^A$, который определяется выражением [2]:

$$K_{ОВ}^A = C_{SB} / C_{LB}, \quad (1)$$

где C_{SB} , C_{LB} - концентрация примесей в твердой и жидкой фазах соответственно.

Для ряда систем металл-примесь установлены различные корреляционные соотношения, в частности, имеющие вид [2]:

$$K_{ОВ}^A = K_1 \cdot \exp(K_2 T_{МВ}^{ОЦК}), \quad (2)$$

где K_1 и K_2 - постоянные, $T_{МВ}^{ОЦК}$ - температуры плавления элементов примесей В для ОЦК-кристалла, включая гипотетические температуры плавления $T_{МВ}^Г$.

Значения постоянных в (2) сильно различаются для разных металлов-растворителей.

Для ниобия в (2) $K_1=0,1623$; $K_2=5,931 \cdot 10^{-4}$ [2].

Для тантала зависимости аналогичные (2).

Ранее [3] были установлены зависимости от параметров эффективного потенциала взаимодействий P_B характеристик материалов, влияющих на хрупкое разрушение.

Использование аналогичных параметров позволяет также определить зависимости от атомно-электронных величин ряда других характеристик, в частности, связанных с растворимостью примесей в металлах.

Целью данной работы является установление соотношений между параметрами, содержащими энергии ионизации атомов, зарядовые числа, и равновесными коэффициентами распределения примесей в ниобии и тантале.

При использовании параметров P_B , содержащих энергии ионизации атомов и другие величины, с учетом известных соотношений, получено выражение, определяющее равновесные коэффициенты распределения ряда примесей в ниобии $K_{ОВ}^{Nb}$ без учета введения температур плавления. Выделяя наиболее существенные величины значения, $K_{ОВ}^{Nb}$ можно представить в виде, аналогичном (1):

$$K_{ОВ}^A = K_{ВР} \exp(C_{P1} P_B^B), \quad (3)$$

где $P_B^B \sim E_K (Z_b + Z^{0,7})$; $K_{ВР}$, C_{P1} - постоянные, Z_b - число электронов связи, Z - зарядовое число.

$E_K \cong E_i$ E_i - i -е значение энергии ионизации атомов примеси [4].

Используя формулу (3), вычислены равновесные коэффициенты распределения $K_{ОВ}^{Nb}$ ряда примесей в ниобии. Для металлов V - VI групп ПСЭ приняты следующие значения величин в (3): $E_K = E_7$ [4], $Z_b = N_r$, N_r - номер группы элементов в ПСЭ, для Cr $Z_b=3$, $K_{ВР}=0,2$, $C_{P1}=6,6 \cdot 10^{-4}$.

В табл. 1 приведены значения $K_{ОВ}^{Nb}$, вычисленные по формулам (2) из [2] - F1, (3) - F2 и экспериментальные данные [2].

В табл. 2 изображены значения $K_{ОВ}^{Ta}$ для тантала, вычисленные по формуле, аналогичной (3) при следующих значениях величин: $K_{ВР}=0,2$; $C_{P1}=5,5 \cdot 10^{-4}$, $E_K=E_7$, для хрома лучшее приближение получено при $Z_b=3$; $E_K=E_4$.

Как видно из табл.1 и 2, имеются определенные соответствия расчетных данных, вычисленных по (2), и экспериментальных значений $K_{ОВ}^A$. При этом не используются параметры, содержащие температуры плавления элементов примесей. Выражения для Nb и Ta определяются близкими величинами.

Таблица 1

Расчетные и экспериментальные значения
равновесных коэффициентов распределения при-
месей в ниобии

Z	Элемент	Z _b	K ^{Nb} _{ОВ}		
			F1	F2	Exp[2]
24	Cr	3	0,59	0,74	0,82
42	Mo	6	0,90	1,1	0,73
74	W	6	1,44	1,61	1,4-1,61
23	V	5	0,6	0,81	0,8
41	Nb	5	0,83	0,91	1
73	Ta	5	1,13	1,24	1,23

Таблица 2

Расчетные и экспериментальные значения
равновесных коэффициентов распределения при-
месей в тантале

Z	Элемент	Z _b	K ^{Ta} _{ОВ}	
			F1	F2
24	Cr	3	0,28	0,33
42	Mo	6	0,83	0,8
74	W	6	1,14	1,25
23	V	5	0,72	0,4
41	Nb	5	0,67	0,9
73	Ta	5	0,99	1

Наблюдаемые корреляции могут свидетельствовать о том, что величины, введенные в (2), в значительной мере определяют равновесные коэффициенты распределения примесей у рассмотренных систем металл-примесь.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.И.Трефилов, Ю.В.Мильман, С.А.Фирстов. *Физические основы прочности тугоплавких металлов*. Киев: «Наукова думка», 1975, 316 с.
2. М.Бартел, Э.Буринг, К.Хайн, Л.Кухарж / Пер.с нем. *Кристаллизация из расплавов*: Справ. изд. М.: «Металлургия», 1987, 320 с.
3. А.Д.Осипов. Хрупкопластичный переход у силицидов тугоплавких металлов // *Порошковая металлургия*. 1992, №9, с.88-91.
4. *Свойства элементов*. В двух частях. Ч.1 Физические свойства: Справочник. 2-е изд. М.: «Металлургия», 1976, 600 с.

ПРО РІВНОВАЖНІ КОЕФІЦІЄНТИ РОЗПОДІЛУ ДОМІШОК У НІОБІЇ І ТАНТАЛІ

О.Д.Осіпов, Б.М.Широков

При використанні параметрів, включаючих енергії іонізації атомів, числа електронів зв'язку, визначено рівноважні коефіцієнти розподілу ряду домішок металів в ніобії і танталі. При цьому використовуються вирази, аналогічні відомим, але без включення температур плавлення елементів.

ABOUT EQUILIBRIUM FACTORS OF IMPURITI DISTRIBUTION IN NIOBIUM AND TANTALUM

A.D.Osipov, B.M.Shirokov

The parameter involving atomic ionization energies, the number of bonding electrons were used to determine equilibrium distribution coefficients for a variety of metallic impurities in niobium and tantalum. In so doing, expression similar to the known ones, but without introducing melting of elements, were used.