

05.1; 05.3

© 1992

О ТЕМПЕРАТУРЕ ИЗМЕНЕНИЯ НАПРЯЖЕНИЙ ТЕЧЕНИЯ,
ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ θ_D , T_m
У СИЛИЦИДОВ ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ И ДРУГИХ
МАТЕРИАЛОВ

А.Д. О с и п о в

У многих соединений тугоплавких металлов с кремнием, углеродом и другими материалами в определенных интервалах температур сильно изменяются напряжения течения, при этом наблюдаются изменения упругих, пластических и прочих свойств, хрупкопластичный переход (ХПП) [1-4]. При рассмотрении температурных зависимостей напряжений течения ХПП отмечается влияние многих факторов и представляет интерес выяснить наиболее существенные для данных материалов связи с другими характеристиками. Имеется ряд выражений, определяющих изменение с температурой напряжений течения, упругих свойств, связь их с T_m и другими характеристиками элементов и соединений [1-6].

Ранее [7] исследовался ХПП у силицидов тугоплавких металлов, рассматривались факторы, влияющие на температуру изменения напряжений течений у силицидов и некоторых элементов, имеющих значительную составляющую ковалентной связи.

В данной работе рассмотрена связь температур сильного изменения напряжений течения у некоторых соединений тугоплавких металлов с Si , C , B , N и элементов с параметром, включающим атомные характеристики, а также связь с характеристической температурой θ_D , T_m и температурой полиморфных превращений T_m элементов.

Используем выражения, аналогичные применяемым ранее [7], в которых учитывается связь энергии межатомной связи с зарядом ядер, числом электронов связи, потенциалом ионизации и некоторыми другими факторами. При этом выражения для температуры изменения напряжений течения и других свойств T_{ki} , а также характеристической температуры θ_D представим в виде

$$T_{ki} = C [BZ^{2/3} + (Z_c + a) \cdot F_N] (J_c/J_0)^n \cdot F_k, \quad (1)$$

$$\theta_D = D (T_{ki})^{1/2} \cdot F_D. \quad (2)$$

Для рассматриваемых материалов C, D - величины, принятые равными 22 и 110 $K^{1/2}$ соответственно, $F_N = 15/Z + 0.9$, $F_k = 1/(1 + Kl)^2$, J_c - эффективный потенциал ионизации,

$J_0 = 9$ эВ, K - численный коэффициент, l - безразмерная величина, принятая равной 0.5, $a = 0.1$, $B = 1$, $n = 1$.

В случае элементов Z_c - эффективное число электронов связи [8, 9], Z - заряд ядер, с J_c^a - ($Z_c + 1$)-й потенциал ионизации атомов [8], $F_D = 1/M^{1/2} l_{\sigma}$, M - атомная масса, $l_{\sigma} = 0.62 V_a^{1/3} / l_0$, V_a - атомный объем [10], $l_0 = 10^{-1}$ нм. Для многих элементов, в частности имеющих малые Z_c , используется средний потенциал ионизации $J_{c\sigma}^a$:

$$J_c \rightarrow J_{c\sigma}^a = C_c J_c^a + C_{\sigma} J_{\sigma}^a, \quad (3)$$

где J_{σ}^a - Z_{σ} -й потенциал ионизации атомов [8, 9], $C_c = C_{\sigma} = 0.5$. Число электронов Z_{σ} определяется исходя из рассмотрения состояний электронов в атомах и соответствует в основном первому электрону заполненной подоболочки атомов в пределах $Z_c \leq Z_{\sigma} \leq 12$. Для многих переходных металлов $Z_{\sigma} = Z_s + Z_d + 1$, где Z_s , Z_d - валентные s - и d -электроны [8-10].

В случае соединений $Me_m X_n$ величина J_c определяется эффективным потенциалом ионизации J_c^c :

$$J_c \rightarrow J_c^c = (m J_c^{Me} + n J_c^x) / (m + n). \quad (4)$$

Выражениями, аналогичными (4), определяются также средние значения у соединений Z_c^c , Z_c^x , l_{σ}^c , M^c .

В табл. 1 приведены значения T_{K1} , T_{K2} , рассчитанные по (1) при $K = 1, 2$ соответственно, и значения T , вычисленные по (2) при $K = 1$ с учетом (4) для соединений. Приведены также экспериментальные значения температур сильного изменения напряжений течения T_T , усредненные по данным [1-3, 11], для некоторых соединений тугоплавких металлов с Si , C , B , N , а также характеристические температуры Дебая θ_D [1, 11] и $T_{пл}$ у соединений [11]. Величина J_c^a для W , отсутствующая в [8], определена из зависимости $(J_{\sigma}^a)^{1/2} - Z$.

В табл. 2 приведены значения T_{K1} , T_{K2} , рассчитанные по (1) при $K = 1, 2$ соответственно, и значения T_D , вычисленные по (2) при $K = 1$ с учетом (3) для ряда элементов. Приведены также экспериментальные значения T_T у V , Cr (отмечены в скобках) [2] и температуры полиморфных превращений $T_{пл}$, θ_D , $T_{пл}$ у элементов. На рисунке показана связь T_D и θ_D с Z_N у ряда элементов.

Как видно из таблиц и рисунка, имеется определенная корреляция экспериментальных значений величин T_T , θ_D , $T_{пл}$ у рассматриваемых соединений, а также $T_{пл}$ и T_T , θ_D , $T_{пл}$ у элементов и расчетных значений соответствующих величин T_{K2} , T_D , T_{K1} . Среднее отклонение расчетных значений от экспериментальных у $\sim 70\%$ данных не превышает 30% .

Таблица 1

Расчетные значения T_D , T_{K2} , T_{K1} и экспериментальные значения θ_D , температур изменения напряжений течения T_T , T_{Tn} у соединений

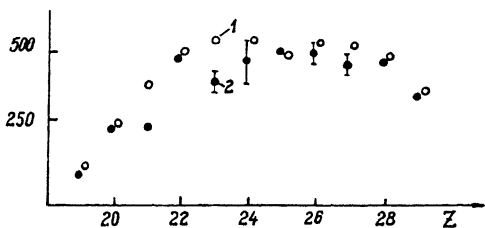
№	Материал	Z^C	Z_C^C	J_C^C , эВ	ζ_C , ом	$\frac{T_D K}{\theta_D K}$	$\frac{T_{K2} K}{T_T K}$	$\frac{T_{K1} K}{T_{Tn} K}$	Примечание
1	$MoSi_2$	23,3	4,67	155 _{7,5}	163,9	482 488	1470 1500-1600	2611 2433	[7]
2	WSt_2	34	4,67	155 _{7,5}	164	400	1600	2838	,
3	VSt_2	17	4,33	154 _{6,5}	162	—	1500-1600	2433	,
4	TiC	14	4	250 _{5,5}	136	557 560	1370 1400-1500	2430 1853	[1-3, 11]
5	ZrC	23	4	237 _{5,5}	143,9	900 740-890	2090 1600-2163	3710 3054	,
6	NiC	23,5	4,5	251 _{6,5}	136,6	650 587-778	2090 2100-2458	3720 3803	,
7	TiB_2	10,7	3,33	202 _{5,4}	135,1	720 500-780	2350 1473-1900	4170 3660	[1, 11]
8	ZrB_2	16,7	3,33	196 _{5,4}	140,4	894 807-1140	1570 1343	2780 3123	,
9	TiN	14,5	4,5	325 _{5,6}	168,5	663 585-810	1520 973	2700 3473	[1, 3, 11]
10	ZrN	29,5	4,5	317 _{5,6}	176,3	790 636-1075	2570 1800-2000	4570 3220	,
						624 515-753	2860 2000-2200	5260 3260	

Расчетные значения J_D , T_{K2} , T_{K1} и экспериментальные значения θ_D , T_{m2} , T_T , T_{m1} у элементов

Z	Элемент	Z_c	J_{CV} , эВ	L_{CPM}	$\frac{T_{DxK}}{\theta_{DxK}}$	$\frac{T_{K2,K}}{T_{m2,K}}$	$\frac{T_{K1,K}}{T_{m1,K}}$	Примечание
19	K	1	31.8 _{2.2}	216.8	$\frac{118}{90}$	$\frac{174.5}{-}$	$\frac{310}{336.4}$	[8, 9]
20	Cd	2	80 _{3.6}	218.1	$\frac{245}{220-230}$	$\frac{530}{720}$	$\frac{943}{1123}$	"
21	Sc	3	107 _{4.7}	177.5	$\frac{354}{231}$	$\frac{823}{1608}$	$\frac{1463}{1803}$	"
22	Ti	4	136 _{5.8}	161.4	$\frac{450}{430-448}$	$\frac{1190}{1158}$	$\frac{2120}{1938}$	"
23	V	5	129 _{6.6}	149.1	$\frac{490}{338-399}$	$\frac{1260}{(800-1000)_T}$	$\frac{2240}{2190}$	"
24	Cr	3	161 ₇	141.9	$\frac{510}{357-485}$	$\frac{1280}{(1000-1300)_T}$	$\frac{2280}{2176}$	"

Z	Элемент	Z _c	J _{ср} эВ	z _{ср} пм	$\frac{T_{D1,K}}{\theta_{D1,K}}$	$\frac{T_{K23,K}}{T_{M23,K}}$	$\frac{T_{K13,K}}{T_{M13,K}}$	Примечание
26	Fe	3	145 4.9	141.0	480 420-478	1185 1183 1663	2110 1811	"
27	Co	2	155 3.10	138.5	470 385-445	1140 700	2030 1768	"
28	Ni	2	130 3.10	137.7	430 375-476	970 —	1730 1728	"
29	Cu	2	92 3.7	141.9	345 315-345	700 —	1250 1356	"

Примечание: (T)_T — T_T.



Связь расчетных значений T_D , характеристической температуры Дебая θ_D с Z элементов. 1 - T_D , 2 - θ_D .

Наблюдаемые корреляции могут свидетельствовать о том, что выражения (1), (2) с учетом (3), (4), введенные в их факторы, в значительной мере определяют величины T_T , $T_{пл}$, θ_D , $T_{пл}$ у рассматриваемых материалов.

Аналогичные корреляции наблюдаются также для ряда других материалов и характеристик.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Андриевский Р.А., Ланин А.Г., Рымашевский Г.А. Прочность тугоплавких соединений. М.: Металлургия, 1974. 232 с.
- [2] Борисенко В.А. Твердость и прочность тугоплавких материалов при высоких температурах. Киев: Наукова думка, 1984. 212 с.
- [3] Хусайнов М.А. // Порошковая металлургия. 1989. В. 7. С. 50-54.
- [4] Трефилов В.И., Мильман Ю.В., Фирстов С.А. Физические основы прочности тугоплавких металлов. Киев: Наукова думка, 1975. 316 с.
- [5] Разрушение металлов. / Пер. с англ. М.: Металлургия. Т. 6. 496 с.
- [6] Никифоров Л.Г., Шувалов В.В. // Изв. АН СССР Неорганические материалы. 1990. Т. 26. В. 7. С. 1556-1558.
- [7] Осипов А.Д. // Письма в ЖТФ. 1991. Т. 17. В. 18. С. 75-80.
- [8] Свойства элементов. Ч. 1. Физические свойства: Справочник. М.: Металлургия, 1976. 600 с.
- [9] Григорович В.К. Металлическая связь и структура металлов. М.: Наука, 1988. 296 с.

[10] Физическое металловедение. В. 6 / Под ред. Р. Кана. М Мир, 1967. 334 с.

[11] Свойства, получение и применение тугоплавких соединений М.: Металлургия, 1986. 928 с.

Харьковский
физико-технический
институт АН Украины

Поступило в Редакцию.
2 августа 1992 г.