

II. Фізична хімія

ХІМІЧНІ ПРОБЛЕМИ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА

Гриців В.І.

Житомирський державний університет імені Івана Франка

Сплави Ме-Х (де Ме- хімічний елемент періодичної системи, що проявляє металічні властивості, Х- неметал) використовуються в ролі матеріалів для електронної техніки.

Вивчення характеру взаємодії у цих сплавах переслідує дві мети. Перша з них- глибше пізнати фізико-хімічну природу речовини: тип хімічного зв'язку, закономірності утворення сполук, порушення стехіометричного складу. Друга мета полягає у прогнозуванні властивостей матеріалів, що визначають область технічного використання сплавів. Знання характеру взаємодії дає змогу синтезувати речовини із заданими властивостями.

Критичне узагальнення літературних даних для бінарних систем було розпочате М.Хансеном [1936Han], продовжене М.Хансеном спільно з К.Андерко [1958Han]. Ці довідкові видання

перекладені, як на той час, дуже швидко російською мовою [1941Han] і [1962Han], відповідно. Потім Елліот Р.П. [1965Ell] видав перше доповнення, теж згодом перекладене російською мовою [1970 Ell]. Друге доповнення, що включало експериментальні результати, опубліковані у 1962-1964 р.р., виконане Шанком Ф.А [Sha], теж перекладене [1973Sha].

Пізніші узагальнення вчення про діаграми стану бінарних систем є у списках цитованої літератури, що наводяться в довідниках [1986Mas] та [1996Lya]. Аналіз інформації в цих довідниках з діаграм стану систем показав, що у багатьох випадках результати неузгоджуються або навіть заперечують один одного. Тому виникає потреба переглянути всі оригінальні роботи, провести їхній критичний огляд, узагальнити наявний матеріал і взяти все те, що може гідно служити для розвитку сучасного матеріалознавства.

Фазові рівноваги у сплавах вивчають методами фізико-хімічного аналізу, завданням якого є вивчення перетворень в хімічних рівноважних системах з використанням фізичних і геометричних методів. Завдяки піонерським дослідженням академіка М.С. Курнакова і його школи, фізико-хімічний аналіз одержав розвиток в усьому світі. Ідеї висунуті і пророчені Курнаковим, лягли в основу нового для першої половини ХХ століття наукового напрямку “Фізико-хімічний аналіз”, що тепер стрімко розвивається. Більше 200 фахових журналів висвітлюють наукові здобутки вчених усіх країн. Фізико-хімічний аналіз ліг в основу матеріалознавства, завданням якого є створення матеріалів з наперед заданими властивостями. Розвиток окремої вітки фізико хімічного аналізу “Напівпровідникове матеріалознавство” дав змогу одержувати матеріали, що стали основою для конструювання мініатюрних інтегральних схем, здатних до виконання зверхвеликого числа логічних операцій. Оволодіння технологічними процесами конструювання інтегральних схем стало основою для створення персональних комп’ютерів (70 роки ХХ ст., мобільних телефонів, цифрових фото- і кіноапаратів (90 роки ХХ ст.). Це- лише початок впровадження мікроелектроніки в наш побут. Знання основ фізико-хімічного аналізу підготовляють базу для кращого розуміння ідей, що лежать в основі роботи електронної

техніки і допомагають прогнозувати, синтезувати і впроваджувати у практику матеріали з унікальними властивостями.

Технічні досягнення фізико-хімічного аналізу продовжують стрімко входити в наше життя. Вони широко і продуктивно використовуються як у хімії, так і в суміжних з нею теоретичних і прикладних галузях: металургії, хімічній технології, мінералогії, металографії. Спеціалісти цих галузей у своїй повсякденній роботі опираються на принципи і закономірності фізико-хімічного аналізу та грамотно використовують їх.

Проблемою майбутнього людства стануть матеріали та енергія, вирішення якої можливе наступним чином:

- узагальнити літературні дані з температури топлення, хімічного складу і кристалічної структури фаз; провести критичний аналіз і відібрати найбільш надійні значення;

- провести теоретичний розрахунок діаграми стану кожної системи на основі різних моделей, порівняти результати з експериментальними значеннями, знайти величини відхилення, виявити причини відхилення і набрати такий об'єм теоретичного матеріалу, щоб пов'язати величину відхилення з електронною будовою сполук;

- скласти схеми фазових реакцій у системі, встановити температури їхнього рівноважного протікання і оцінити склади нонваріантних точок;

- встановити залежність характеру взаємодії від положення елементів у періодичній системі Д.І. Менделєєва;

- описати фізичні властивості фаз у системі (електропровідність, тип і концентрація носіїв струму, рухливість, характер взаємодії з дефектами) і виявити ті властивості, що визначатимуть галузі використання матеріалів у напівпровідниковій мікроелектроніці;

- розробити оптимальну технологічну схему одержання матеріалів із наперед заданими властивостями та порівняти її з відомими методами одержання.

Досліджуючи характер взаємодії компонентів у бінарних, потрійних і більш складних системах, у комп'ютерному експерименті можна виділити декілька етапів.

1. Есесмент діаграми стану системи. Есесмент (від англ. assessment), як метод критичного аналізу, дає можливість систематизувати розрізнені експериментальні результати і скласти цілісну картину про явища, що протікають у системі. Використання методів хімічної термодинаміки до фазових рівноваг і розгляд в єдності термодинамічних і „фазових параметрів” допомагає створити повну картину про характер фізико-хімічної взаємодії в системі.

2. Аналітичний опис ліній фазових рівноваг. Аналітичний опис ліній фазових рівноваг є актуальною задачею дослідження діаграм стану. Діаграма стану у графічній формі відображає характер фазових рівноваг, проте не дає можливості без похибок передавати інформацію від одного користувача до іншого як тепер, так і з покоління в покоління. Інформація про характер фазових рівноваг, збережена у графічній формі, наближена і недостатньо точна. Геометричний образ діаграми стану у значній мірі лише якісно відображає характер фазових рівноваг. Для введення інформації у розрахункові комп'ютерні програми необхідно використовувати аналітичні рівняння ліній фазових рівноваг.

3. Термодинамічний аналіз ліній фазових рівноваг. Кожна лінія фазових рівноваг у скритій формі несе інформацію про термодинамічні властивості, що характеризують фази. Щоб видобути цю інформацію, необхідно навчитися виконувати термодинамічний аналіз ліній фазових рівноваг. Незважаючи на те, що ця задача виникла майже одночасно з розвитком вчення про фазові рівноваги, до цього часу немає надійних методик термодинамічного аналізу.

4. Комп'ютерне моделювання діаграм стану. Кожному досліднику цікаво дізнатися, що відбувається в системі при зміні умов її існування. Саме тому комп'ютерне моделювання діаграм стану є актуальним для визначення умов фазових рівноваг. Крім того, якщо термодинамічний аналіз ліній фазових рівноваг є прямою задачею хімічної термодинаміки фазових рівноваг, то комп'ютерне моделювання діаграм стану є непрямою задачею і показує рівень

теоретичного розвитку експериментатора в області фізико-хімічного аналізу.

Література

1936Han. Hansen M. Der Aufbau der Zweistofflegierungen. - Berlin: Springer-Verlag, 1936.

1941Han. Хансен М. Структуры бинарных сплавов. Пер. с нем. -М.: Металлургиздат, 1941.

1958Han. Hansen M., Anderko K. Constitution of binary alloys. - New York: McGraw-Hill, 1958.

1962Han-1. Хансен М., Андерко К. Структуры двойных сплавов. -Т.1. -М.: Металлургиздат, 1962. -608 с.

1962Han-2. Хансен М., Андерко К. Структуры двойных сплавов. -Т.2. -М.: Металлургиздат, 1962. -609-1488 с.

1965Ell. Elliot R.P. Constitution of binary alloys. First Supplement. -New York: McGraw-Hill, 1965.

1970Ell-1. Эллиот Р.П. Структуры двойных сплавов. Первое дополнение. -Т.1. -М.: Металлургия, 1970. -456 с.

1970Ell-2. Эллиот Р.П. Структуры двойных сплавов. Первое дополнение. Т.2. -М.: Металлургия, 1970. -Т. 2. -472 с.

Shank F.A. Constitution of binary alloys. Second Supplement. - McGraw-Hill Book company: New York, St.Louis, San Francisco, London, Sydney, Toronto, Mexico, Panama.

1973Sha. Шанк Ф.А. Структуры двойных сплавов. Второе дополнение. -М.: Металлургия, 1973. -760 с.

1986Mas-1. Massalski T.B. Binary alloy phase diagrams. American Society for Metals, Metals Park. 1986. -V. I. P.1100.

1986Mas-2. Massalski T.B. Binary alloy phase diagrams. American Society for Metals, Metals Park. 1986. -V.II. P.1101-2224.

1996Lya-1_3. Лякишев Н.П., Алисова С.П., Банных О.А., Бочвар Н.Р., Будберг П.Б., Добаткина Т.В., Лысова Е.В., Полякова В.П., Поварова К.Б., Рохлин Л.Л., Тылкина М.А., Шелимова Л.Е., Шефтель Е.Н. Диаграммы состояния двойных металлических систем. Справочник в 3 т. Под общей редакцией Лякишева Н.П. -М.: Машиностроение, 1996.