



20

ОБЪЕДИНЕНИЕ ПО РУКОВОДСТВУ
НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИЕЙ
И ПРОПАГАНДЫ В РСФСР
ПРИ ГОСУДАРСТВЕННОМ КОМИТЕТЕ СССР
ПО НАУКЕ И ТЕХНИКЕ

НОВОСИБИРСКИЙ

МЕЖОТРАСЛЕВОЙ ТЕРРИТОРИАЛЬНЫЙ
ЦЕНТР НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ
ИНФОРМАЦИИ И ПРОПАГАНДЫ

ИНФОРМАЦИОННЫЙ
ЛИСТОК № 312-87

УДК 666.1.031

МНОГОФАКТОРНЫЕ МОДЕЛИ РАСЧЁТА ФИЗИКО- ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НИТРИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ КАЧЕСТВА СТЕКЛА

Внедрено в декабре 1986 г.

Все возрастающие требования к качеству изготавливаемых стекол требуют усовершенствования старых и разработки новых технологий производства. Для повышения светотехнических и прочностных характеристик стекол применяют нитриды переходных металлов и материалы на их основе. Целенаправленная оптимизация технологических режимов изготовления и свойств стекол осуществляется с учётом свойств применяемых нитридов: энтальпии образования, плотности, энергии атомизации, энтропии, твёрдости и теплоёмкости. Для ряда нитридов отсутствуют достоверные значения перечисленных свойств. Неполная информация относительно свойств нитридов является сдерживающим фактором при оптимизации технологических режимов производства стекол.

На основе созданного банка данных получены статистические модели для расчёта физико-химических свойств нитридов, позволяющие заменить трудоёмкий процесс измерения свойств решением соответствующего регрессионного уравнения.

© Новосибирский межотраслевой территориальный центр научно-технической информации и пропаганды, 1987

Таблица 1
Уравнения для расчёта физико-химических свойств нитридов Me_nN

Уравнение связи	Единицы измерения
$H_{298}^0 = (170,4 - 645,7 \cdot X_4 - 4070,5 \cdot X_7 - 31168,4 X_8 + 45749,0 X_{12} - 90,0 \cdot X_{13} + 328,2 \cdot \mu)$	кДж/моль
$E_{ат} = (611,7 + 1161,8 \cdot X_7 - 49,2 \cdot X_{13})$	кДж/моль
$H = (12,7 + 51,86 \cdot X_7 - 11,7 \cdot X_{13}) \cdot 10^3$	МПа
$P = (8,88 + 947,88 \cdot X_6 + 102,59 \cdot X_8 - 1,03 \cdot X_{13}) \cdot 10^3$	кг·м ⁻³
$S_{298}^0 = (19,8 + 382,9 \cdot X_4 + 2839,1 \cdot X_5 + 4116,1 \cdot X_9 - 58,1 \cdot X_{10} + 16,4 \cdot \mu)$	Дж/моль·К
$S_{298}^0 = (156,1 + 153,6 \cdot X_1 + 656,1 \cdot X_5 + 1104,4 \cdot X_{11} + 4,85 \cdot X_{13} - 97,7 \cdot \mu^{-1})$	Дж/моль·К

Таблица 2

Экспериментальные и расчетные значения физико-химических свойств нитридов Me_nN

Нитрид	$\rho \cdot 10^{-3}$ кг·м ⁻³		S_{298}^0 Дж/моль·К		S_{298}^0 Дж/моль·К		ΔH_{298}^0 кДж/моль		$E_{ат}$ кДж/моль		$H \cdot 10^{-3}$ МПа	
	Эксп.	Расч.	Эксп.	Расч.	Эксп.	Расч.	Эксп.	Расч.	Эксп.	Расч.	Эксп.	Расч.
TiN	5,4	5,6	37,3	37,3	30,2	30,1	337	336	641	676	20,0	16,9*
ZrN	7,4	7,8	40,6	41,1	39,0	39,0	366	369	721	675	15,2	15,7
HfN	11,7	12,2	39,4	38,3	44,8	45,5*	370	367	733	712	16,0	13,6
VN	6,1	6,3	38,1	38,5	37,3	37,6	251	196*	603	637	15,0	14,9
NbN	8,4	8,5	43,2	43,6	44,0	44,4	238	219	716	670	15,2	15,2
TaN	13,8	12,7	42,3	43,2	50,3	50,7	251	227	754	712	10,6	12,5
CrN	6,1	7,1	48,6	46,5	36,0	35,0	118	136	494	616	10,9	13,2
MnN	8,6	8,5*	-	47,3*	-	49,3*	-	116*	612	620	-	12,8*
WN	12,1	12,8	-	49,4*	-	57,2*	-	123*	704	683	-	11,0*
Nb ₂ N	8,2	8,1	67,5	63,3	79,6	79,2	256	266	725	729	17,2	17,6
Ta ₂ N	15,8	16,4	67,9	62,4	92,2	92,0	272	203	771	817	12,2	12,3
Cr ₂ N	6,5	5,4	71,2	68,7	59,9	60,3	106	101	-	617*	-	13,6*
Mo ₂ N	8,0	8,1	64,1	70,4	87,9	89,4	82	62	628	628	-	12,9*
W ₂ N	-	16,7*	-	74,2*	104,6	104,9	72	75	760	737	-	9,3*

* - Прогнозируемые значения свойств.

Расчёт свойств нитридов производится по регрессионному уравнению:

$$F = A_0 + \sum_{i=1}^{13} A_i X_i$$

где F - свойство нитрида;

A_i - коэффициенты уравнений регрессии, $i = 0, \dots, 13$;

X_i - коэффициенты Чебышева, отражающие электронную

структуру валентных полос атомов металла. Значения коэффициентов приведены в монографии Кутюлина С.А., Чернобровкина Д.И.

В табл.1 приведены регрессионные уравнения для расчёта соответствующих свойств нитридов. Коэффициенты уравнений регрессии определены с доверительным интервалом 95%, относительная ошибка моделей не превышает 10% при доле объяснённой вариации не менее 90%. В табл.2 приведены расчётные значения свойств для некоторых практически важных нитридов.

Использование полученных моделей позволяет уточнить значения свойств исследованных нитридов и рассчитать соответствующие характеристики для малоисследованных соединений данного класса. Полученные модели позволяют снизить на 20% себестоимость и трудоёмкость расчётов по оптимизации технологических режимов варки стекла. Они позволяют рассчитывать прочностные характеристики нитридных покрытий и керамических изделий с использованием соединений данного класса. Модели могут быть использованы при расчёте активности нитридных катализаторов процессов доокисления.

Рекомендуется внедрять в научно-исследовательских институтах и научно-производственных объединениях химической, металлургической и машиностроительной отраслей.

Материал поступил в ЦНТИ 7 мая 1987 г.

Составители Ю.А.Фролов, В.И.Медведев,

С.А.Кутюлин, д-р.хим.наук, проф.

По вопросу получения документации

обращаться в Новосибирский ЦНТИ

Отв. за выпуск

гл.инженер ЦНТИ Н.Е.Комаров

Адрес ЦНТИ: 630050, Новосибирск, Красный проспект, 82

Подписано МН 13624 60x84 1/16

в печать 14.05.87

Печать Уч.-изд.л. 0,25

офсетная.

Тираж 371 экз. Заказ № 1199 Цена 2 коп

Ротاپронт Новосибирского ЦНТИ, 630050, Новосибирск,
Красный проспект, 82