

УДК 536.21

DOI: [https://doi.org/10.52754/16948645_2026_1\(8\)_74](https://doi.org/10.52754/16948645_2026_1(8)_74)

**ПРОГНОСТИЧЕСКИЙ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ
ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ ЗОЛОТА С КРЕМНИЕМ
ПО ДАННЫМ КОМПОНЕНТОВ**

Терехов Сергей Владимирович

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник, доцент

svlter@yandex.ru

ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», ул. Розы

Люксембург, 72, Донецк, 283048, ДНР, Россия

<https://orcid.org/0000-0003-3037-7258>

Аннотация. Обнаружение хаотичного пространственного распределения (при сохранении ближнего порядка) атомов в сплаве золота с кремнием положило начало не только интенсивному развитию технологических приемов получения сплавов в аморфном состоянии и их широкому практическому применению, но и теоретическому исследованию неупорядоченных систем. Широкий ассортимент аморфных сплавов и уникальность их теплофизических характеристик требуют предварительной оценки свойств сплавов с целью снижения материальных, энергетических и экономических затрат. Со временем или при повышении температуры аморфный металлический сплав подвергается процессу кристаллизации. Этот процесс приводит к формированию упорядоченного распределения атомов в пространстве, что приводит к восстановлению дальнего порядка. Из-за тепловой и временной нестабильности таких материалов возникают проблемы как с определением температурных зависимостей тепловых и других физических свойств, так и с коэффициентами кинетических уравнений. В данной работе предлагается использование модели двухфазной области локального равновесия и эмпирических аппроксимирующих функций для описания теплофизических характеристик сплавов золото-кремний. Применение этой модели основано на том факте, что, согласно принципу Пригожина, термодинамическое равновесие устанавливается гораздо быстрее в небольших локальных областях, чем в массивной выборке в целом. Было установлено, что теоретическое описание адекватно массивам экспериментальных данных для золота и кремния. Расчеты проводились с использованием непрерывных аппроксимирующих функций, которые могут быть использованы для решения других тепловых задач. Тепловые свойства сплавов вычислены с использованием правила смешения компонентов. Показано, что свойства сплавов располагаются в температурных полосах, ограниченных температурными зависимостями компонентов, и наследуют свойства составляющих элементов. Установлено наличие точек неразличимости значений теплопроводностей и температуропроводностей компонентов и сплавов любого состава.

Ключевые слова: золото, кремний, теплоемкость, плотность, коэффициент теплового линейного расширения, теплопроводность, температуропроводность.

**PROGNOSTIC SEMI-EMPIRICAL CALCULATION OF THE
THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF GOLD-SILICON ALLOYS BASED
ON COMPONENT DATA**

Terekhov Sergey Vladimirovich

Dr. of Physics and Mathevfics, Leading Researcher, Associate Professor

svlter@yandex.ru

*A.A. Galkin Donetsk Physics and Technology Institute, 72 Roza Lyuksemburg Street, Donetsk,
283048, DPR, Russia*

<https://orcid.org/0000-0003-3037-7258>

Annotation. The discovery of a chaotic spatial distribution (while maintaining short-range order) of atoms in a gold-silicon alloy marked the beginning of not only the intensive development of technological methods for producing amorphous alloys and their widespread practical application, but also the theoretical study of disordered systems. The wide range of amorphous alloys and the uniqueness of their thermophysical characteristics require a preliminary assessment of the alloys' properties in order to reduce material, energy, and economic costs. Over time or with increasing temperature, an amorphous metal alloy undergoes a crystallization process. This process leads to the formation of a well-ordered distribution of atoms in space, resulting in the restoration of long-range order. Due to the

thermal and temporal instability of such alloys, there are problems of both determining the temperature dependencies of thermal and other physical properties, as well as the coefficients of kinetic equations. In this work, the use of a two-phase locally-equilibrium region model and empirical approximating functions is proposed to describe the thermo-physical characteristics of gold-silicon alloys. The application of this model is based on the fact that, according to Prigogine's principle, thermodynamic equilibrium is established much faster in small local regions than in a massive sample as a whole. It has been established that the theoretical description is adequate to the experimental data arrays for gold and silicon. The calculations were performed using continuous approximating functions, which can be used to solve other thermal problems. The continuous functions obtained within the framework of the model allow us to describe such features of the temperature curves of thermophysical properties as jumps, peaks, and pits. Their appearance is associated with the occurrence of structural and polymorphic transformations, as well as phase transitions of the first and second kinds, in the systems. The thermal properties of the alloys are calculated using the component mixing rule. It is shown that the properties of alloys are located in temperature bands limited by the temperature dependencies of the components, and inherit the properties of the constituent elements. Additional theoretical studies conducted on other amorphous alloys demonstrated the possibility of sup-pressing the inheritance effect through the interaction of the alloy components. The presence of points of indistinguishability of the values of thermal conductivity and thermal diffusivity of components and alloys of any composition is established.

Key words: gold, silicon, heat capacity, density, coefficient of thermal linear expansion, thermal conductivity, thermal diffusivity.

Введение

Неупорядоченные структуры в веществе были впервые обнаружены при исследовании сверхпроводимости в тонких пленках после воздействия лазерного луча [1-3]. Затем хаотические распределения атомов при наличии ближнего порядка получили путем быстрой закалки расплавов металлических сплавов [4]. Наиболее интенсивно это научное направление начало развиваться после исследований аморфного сплава золота Au-кремний Si [5,6], относящегося к группе металл-полупроводник. В настоящее время изучают диаграммы состояния сплавов Au-Si [7, с. 397; 8], их поверхностные [9, 10] и объемные структуры, тепловые свойства [11, 12], формирование метастабильных фаз [13], явления и кинетические процессы в кристаллических и аморфных сплавах, а также в жидких расплавах [14-18]. Бинарные сплавы Au-Si вызывают интерес как с научной, так и с технологической точек зрения. Он связан с практическим применением этих сплавов при производстве интегральных микросхем и пайке кристаллов к подложкам.

Сплавы вида $Au_{100-x}Si_x$ при $x = 18$ ат. % (18.6; 19 и др.; перевод ат. % в масс. % см. в [19, с. 48]) имеют эвтектическую температуру $T_e = 643$ К. Эта температура гораздо меньше температур плавления золота Au ($T_m = 1336$ К) и кремния Si ($T_m = 1667$ К) [7]. В работе [15] показано, что сплав $Au_{81.4}Si_{18.6}$ может плавиться при температурах 567 К, 585 К, 625 К и 640 К. Так как кремний обладает более низким поверхностным натяжением, чем золото, то поверхность расплавов обогащается атомами Si [9]. Поэтому при температурах ниже T_e компоненты в твердом состоянии аморфных сплавов не растворяются друг в друге, не образуют стабильных соединений и могут порождать метастабильные фазы [10].

Моделирование жидких и переохлажденных сплавов $Au_{81}Si_{19}$ методом молекулярной динамики (ММД) [16] показало влияние кремния на атомно-масштабную структуру с разрушением ближнего порядка и атомных икосаэдрических объединений.

В затвердевших каплях нанометрового размера сплава $Au_{74}Si_{26}$ наблюдали образование метастабильной фазы с b-центрированной орторомбической структурой [14]. Наиболее устойчивая структура сплава $Au_{100-x}Si_x$ установлена при квантово-механическом моделировании [17], она возникает при $x = 40-50$ ат. %, а при $x = 60$ ат. % наблюдается минимум изменений объема и энтальпии смешения компонентов. Стабильность в сочетании с хрупкостью сплава обеспечивается локальным упорядочением атомов в достаточно малых областях как жидкого расплава, так и на существующих межфазных поверхностях [17].

Незначительное внимание исследователями уделяется теплофизическим характеристикам сплавов золота с кремнием. К ним относятся: теплоемкость C [Дж/(моль К)] при постоянном давлении [12, 13, 20]; коэффициенты теплового линейного α_L [K⁻¹] и объемного α_V [K⁻¹] расширения (КТЛР и КТОР); плотность ρ [кг/м³]; теплопроводность λ [Вт/(м К)] и температуропроводность a [м²/с]. Ввиду недостатка сведений о тепловых свойствах сплавов золота с кремнием возникает необходимость в разработке нового подхода к их моделированию.

Больше информации известно о компонентах Au и Si, она содержится в справочной [21-25] и научной [26-35] литературе. Применение ММД с использованием межатомных потенциалов Стиллинджера-Вебера для расчета теплофизических характеристик золота и кремния [26-27, 34, 35] имеет ряд недостатков. К ним относятся: приближенный характер потенциалов, накопление определенного количества численных экспериментов для статистической обработки результатов, сглаживание полученных данных полиномами и т. д. В результате область агрегатного перехода кристалл-жидкость для теплоемкости золота описывается в виде скачка, а не округлого пика, характерного для фазового перехода I рода [36, с. 37]. Кроме того, этот метод не описывает скачки коэффициентов теплового расширения золота и кремния, скачок плотности золота при температуре плавления, наличие пиков на температурных зависимостях теплопроводностей металла и полупроводника для интервала температур в окрестности абсолютного нуля.

Современные физико-математические модели тепловых свойств элементов [37] дают лишь качественное, но не количественное совпадение теоретических расчетов с экспериментальными данными [38,39]. Например, при описании температурной зависимости теплоемкости вещества модели Эйнштейна, Дебая и их модификации не описывают: рост теплоемкости при увеличении температуры, скачки базисной линии (структурные перестроения), округлые (фазовые переходы I рода) и острые (фазовые переходы II рода) пики и ямы, а также их чередование (полиморфные превращения), вклады упорядочения и кинетических процессов (перестройка структуры, перераспределение атомов по позициям в элементарной ячейке, тепловое расширение, переход летучих примесей в атмосферу калориметра и другие [39]). Тепловые эффекты при внутреннем переустройстве образца суммируются измерительной аппаратурой, что приводит к разбросу экспериментальных данных разных авторов (см., например, [30,31]). Модели температурной зависимости теплопроводности лишь фиксируют наличие пика при приближении к абсолютному нулю и указывают причиной его существования присутствие в металле примесей [37]. Указанные трудности описания теплофизических свойств вещества были успешно преодолены в рамках модели двухфазной локально-равновесной области [40-42].

Оценку теплофизических величин бинарного сплава можно провести с использованием совокупности данных о их составляющих элементах. Для получения сплава заданного состава из компонентов с характеристиками A_i и массовыми долями n_i ($i = 1,2$) применяют правило смешения [37, 43, 44]:

$$A_s(T) = n_1 A_1(T) + n_2 A_2(T), \quad (1)$$

где $A_s(T)$ – свойство системы в целом.

Таким образом, целью работы является оценочный расчет температурных зависимостей теплофизических величин сплавов золота с кремнием с использованием данных о компонентах, правила смешения и соотношений модели двухфазной локально-равновесной области.

Теплофизические свойства золота и кремния: результаты и обсуждение

Золото: а) *теплоемкость.* В рамках модели двухфазной локально-равновесной области [40-42] тепловая характеристика вычисляется по формуле

$$C = C_b + C_k. \quad (2)$$

Первое слагаемое в равенстве (2)

$$C_b = k_1 T + \sum_j k_{2j} x_{1j} \quad (3)$$

определяет вклад в теплоемкость электрон подобных и кристалл подобных подсистем соответственно, описывает базисную линию теплоемкости, при этом второе слагаемое в (3) задает также возможные скачки (структурные превращения) на кривой теплоемкости; k_1 [Дж/(моль K²)] и k_{2j} [Дж/(моль K)] – постоянные коэффициенты, T [K] – температура, x_{1j} – объемная доля упорядочивающейся фазы в подсистеме j , равная

$$x_{1j} = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{th} \left(b_j \frac{T_{xj} - T}{T} \right) \right], \quad (4)$$

b_j – параметр, связанный с изменением химического потенциала фазы 1 в подсистеме j , T_{xj} – температура сосуществования двух фаз с равными объемными долями. Второе слагаемое в (2)

$$C_k = T \sum_j k_{3j} u_j \quad (5)$$

связано с вкладом в теплоемкость процессов упорядочения, внутренней перестройки и реализацией фазовых переходов (округлые и острые пики и ямы на температурной кривой); k_{3j} [Дж/(моль K)] – константы, $u_j = \partial x_{1j} / \partial T$. Параметры модели без индекса j относятся к системе, а с ним – к подсистемам, они приведены в таблице 1.

В таблице 2 продемонстрированы экспериментальные и рассчитанные по формулам (2)-(5) значения теплоемкости золота Au. Из таблицы 2 видно, что при температурах больше 40 K относительная погрешность вычислений не превышает 6 %, что свидетельствует об адекватности используемой модели экспериментальным данным.

б) *коэффициент теплового линейного (объемного) расширения* (КТЛР и КТОР).

Таблица 1. Параметры модели двухфазной локально-равновесной области для расчета теплофизических характеристик золота Au

Теплоемкость									
	$k_1 \times 10^3$	k_2	T_x	b	k_{31}	T_{x1}	b_1	–	–
	2.8	29.3	52.2	0.98	1.05	1375	6.6	–	–
КТЛР									
$q_1 \times 10^3$	q_2	T_x	b	q_{21}	T_{x1}	b_1	q_{31}	T_{x2}	b_2
3.0	17.4	58.0	0.70	19.0	1350	310	1.0	1290	3.0
Теплопроводность									
$g_1 \times 10^3$	g_{31}	T_{x1}	b_1	g_{32}	T_{x2}	b_2	g_{33}	T_{x3}	b_3
–58	3137.5	6.542	1.4	2028.6	13.4608	2.6	–82	80	1.44

Таблица 2. Сравнение экспериментальных (индекс *exp*) и теоретических (*theor*) значений теплофизических величин золота Au при различных температурах

T, K	C_{exp} [22]	C_{theor}	$\rho_{exp} \times 10^{-3}$ [22]	$\rho_{theor} \times 10^{-3}$	λ_{exp} [21]	λ_{theor}	a_{exp} [22]	a_{theor}
4	—	0.01	—	19.30	2100	2100	—	—
10	—	0.04	—	19.30	3200	3200	—	—
20	3.21 [23]	1.25	—	19.32	1580	1580.1	—	12852.5
40	11.20 [23]	10.51	—	19.38	520	519.9	—	502.7
80	19.63 [23]	19.68	—	19.42	332	331.8	—	171
150	23.49 [23]	23.34	—	19.40	325	327.1	—	142.3
200	24.42 [24]	24.29	—	19.37	323	323.8	—	135.6
300	25.35	25.30	19.30	19.30	317	315.9	128	127.5
400	25.78	25.91	19.22	19.22	311	308.5	123	122
500	26.22	26.38	19.13	19.14	302.9 [22]	301.6	119	117.6
600	26.65	26.79	19.04	19.06	298	295	115	113.8
700	27.08	27.15	18.95	18.97	289.2 [22]	288.6	111	110.3
800	27.52	27.50	18.85	18.88	284	282.3	107	107.1
900	27.99	27.85	18.75	18.77	272.9 [22]	276.1	103	104.1
1000	28.58	28.28	18.65	18.65	270	270	98.9	100.8
1100	29.43	29.05	18.54	18.53	263.1 [22]	264	94.9	96.6
1200	30.19	30.53	18.43	18.41	260.7 [22]	258	91.1	90.4
1300	32.18	32.25	18.32	18.30	257.0 [22]	252	85.9	84.1

Использование второго правила Грюнайзена [45, с.14], устанавливающего связь между теплоемкостью (2) и КТЛР α_L , позволяет рассчитать КТЛР по формуле

$$\alpha_L \cdot 10^6 = q_1 T + \sum_j q_{2j} x_{1j} + T \sum_j q_{3j} u_j, \quad (6)$$

где q_1 , q_{2j} и q_{3j} – постоянные коэффициенты. В таблице 1 приведены параметры модели для золота, а на рисунке 1 представлена зависимость его КТЛР от температуры. Отметим, что КТОР α_V связан с КТЛР α_L приближенным равенством (см., например, [47, с.18])

$$\alpha_V \approx 3\alpha_L. \quad (7)$$

Из рисунка 1 видно, что на температурной зависимости КТЛР переход кристалл-расплав для золота Au отображается в виде скачка (структурное превращение). Отметим, что на графике теплоемкости этот переход имеет вид округлого пика (фазовый переход I рода).

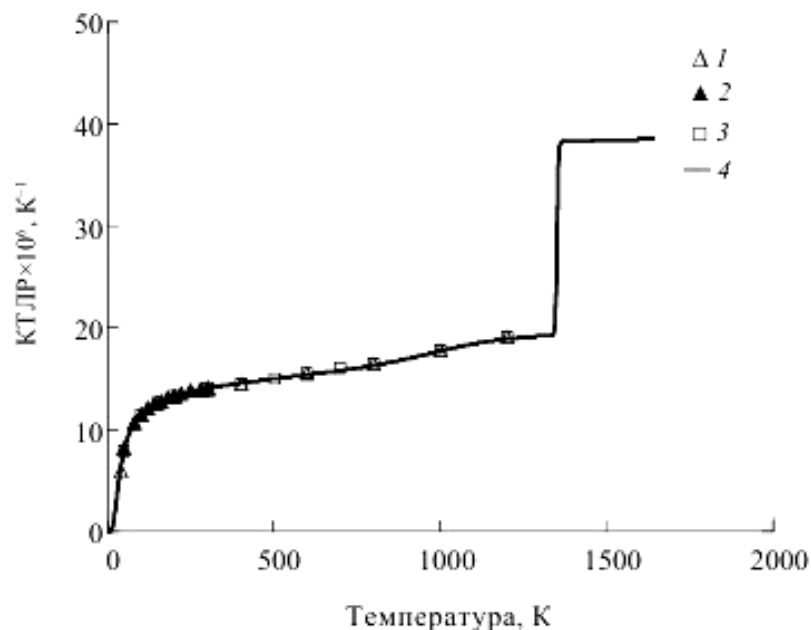


Рисунок 1. Температурная зависимость коэффициента теплового линейного расширения (КТЛР) золота Au: 1 – [23], 2 – [24], 3 – [46], 4 – уравнение (6).

в) *плотность*. Вычисления плотности Au проводились по формуле

$$\rho = \rho_0 [1 + \alpha_V (300 - T)], \quad (8)$$

где $\rho_0 = 19300 \text{ кг/м}^3$, $\alpha_V = 2.7 \alpha_L$ (соответствует формуле (7)).

Расчетные значения плотности золота по формуле (8) с учетом формул (6) и (7) в сравнении с экспериментальными результатами [22] приведены в таблице 2.

г) *теплопроводность*. Аппроксимирующая экспериментальные данные [21,22,24] функция для описания температурной зависимости теплопроводности золота имеет вид

$$\lambda = g_1 T + T \sum_j g_{3j} u_j + 325.2, \quad (9)$$

параметры которой приведены в таблице 1, а вычисленные по формуле (9) значения – в таблице 2.

д) *температуропроводность*. Эта теплофизическая характеристика рассчитывалась по формуле [25, с. 8]

$$a = \lambda / (c \cdot \rho), \quad (10)$$

где λ – теплопроводность, $c = C/M_a$ – удельная теплоемкость, $M_a, 10^{-3} \text{ [кг/моль]}$ – атомная (молекулярная) масса металла (расплава), ρ – плотность.

Сравнение расчетных значений (10) с экспериментальными данными [22] в таблице 2 показывает хорошую сходимость модельных и экспериментальных величин.

Кремний: Теплоемкость полупроводника рассчитывалась по формулам (2)–(5) с параметрами, приведенными в таблице 3, а сравнение с экспериментальными данными [25] – в таблице 4. Значения КТЛР α_L кремния Si вычислялись по формуле (6) с параметрами из таблицы 3, температурная зависимость КТЛР α_L продемонстрирована на рисунке 2. Из рисунка 2 видно, что агрегатный фазовый переход в кремнии при температуре 1650 К отображается на графике КТЛР в виде скачка (структурное превращение), но с противоположным, чем у золота, тепловым эффектом.

Таблица 3. Параметры модели двухфазной локально-равновесной области для расчета теплофизических свойств кремния Si

Теплоемкость									
$k_1 \times 10^3$	k_2	T_x	b	–	–	–	–	–	–
2.6	30	192.0	0.83	–	–	–	–	–	–
КТЛР									
$q_1 \times 10^3$	q_2	T_x	b	q_{21}	T_{x1}	b_1	q_{31}	T_{x2}	b_2
1.5	4.2	310	0.77	–33.1	1703	2000	–0.95	80	2.0
Теплопроводность									
$g_1 \times 10^3$	g_{31}	T_{x1}	b_1	g_{32}	T_{x2}	b_2	g_{33}	T_{x3}	b_3
23	3280.6	12.76	0.9	7169.0	31.66	1.0	856.0	59.8	1.0
g_{34}	T_{x4}	b_4	g_{35}	T_{x5}	b_5	–	–	–	–
–178.8	148.0	1.7	–52.7	360.0	1.2	–	–	–	–

Таблица 4. Сравнение экспериментальных (индекс exp) и теоретических (theor) значений теплофизических величин кремния Si при различных температурах

T, K	C_{exp} [25]	C_{theor}	$\rho_{exp} \times 10^{-3}$ [29]	$\rho_{theor} \times 10^{-3}$	λ_{exp} [21]	λ_{theor}	$\alpha_{exp} \times 10^6$ [25]	$\alpha_{theor} \times 10^6$
4	–	0.01	–	2.3299	300	300.0	–	–
10	–	0.03	2.3306	2.3298	2300	2302.0	–	–
20	–	0.05	–	2.3297	5000	5000.4	–	–
40	–	0.16	–	2.3308	3500	3502.0	–	–
80	–	2.88	–	2.3380	1340	1338.1	–	5060.4
150	–	11.97	2.3308	2.3234	410	410.2	412	392.1
200	15.62	16.02	2.3304	2.3163	260	264.8	204	193.8
300	20.05	20.13	–	2.3084	150	146.1	89	87.5
400	22.27	22.14	2.3269	2.3051	99	99.3	54	54.7
500	23.51	23.36	2.3245	2.3041	76.2 [25]	74.7	39	39.2
600	24.29	24.23	2.3219	2.3041	62	59.1	31	29.9
700	24.86	24.90	2.3192	2.3048	50.8 [25]	48.3	25	23.7
800	25.30	25.46	2.3164	2.3061	42	40.7	20	19.4
900	25.67	25.94	2.3135	2.3077	35.9 [25]	35.1	17	16.3
1000	26.01	26.38	2.3106	2.3096	31	31.0	14.5	14.1
1100	–	26.78	2.3076	2.3118	–	28.0	–	12.5
1200	–	27.16	2.3046	2.3142	–	25.9	–	11.3
1300	–	27.52	2.3015	2.3169	–	24.4	–	10.4

Плотность кремния описывается формулой

$$\rho = \rho_0 [1 + \alpha_V (T - 1703)] + 0.22x_{11}, \quad (11)$$

здесь $\rho_0 = 2330 \text{ кг/м}^3$, $\alpha_V = 2.7 \alpha_L$ (см. формулу (7)), x_{11} вычислялась по формуле (4) с параметрами $T_{x1} = 1703 \text{ K}$, $b_1 = 2000$.

Функция (11) достаточно адекватно описывает экспериментальные данные [29] (см. таблицу 4).

Расчет температурной зависимости теплопроводности кремния проводился по формуле типа (9) с коэффициентами из таблицы 3.

$$\lambda = g_1 T + T \sum_j g_{3j} u_j - 52.0. \quad (12)$$

В таблице 4 приведены значения функции (12) и экспериментальные данные из [21, 25]. Температуропроводность Si определялась по формуле (10) и ее величина сравнивалась с экспериментальным значением из [25] (см. таблицу 4).

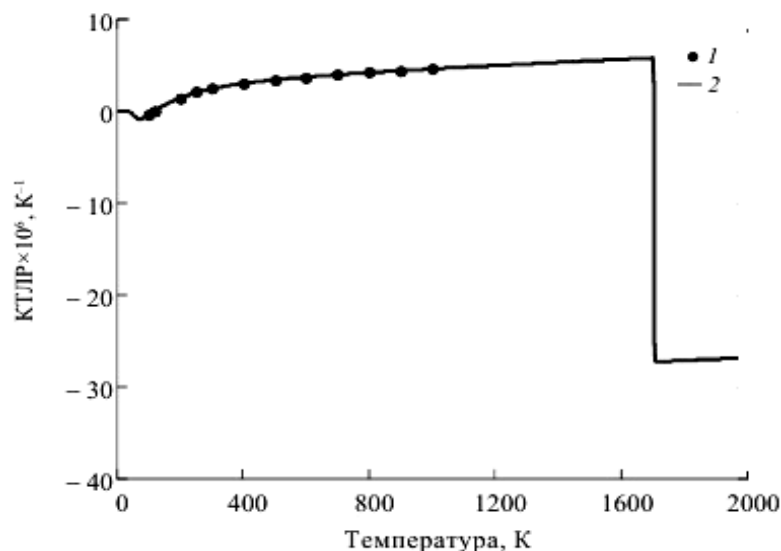


Рисунок 2. Изменения коэффициента теплового линейного расширения (КТЛР) кремния Si в зависимости от температуры: 1 – [25], 2 – уравнение (6).

Тепловые свойства сплавов $\text{Au}_{100-x}\text{Si}_x$: результаты и обсуждение

Оценочный расчет теплофизических свойств сплавов $\text{Au}_{100-x}\text{Si}_x$ проводился при $x = 18.6$ и $x = 75$ с использованием правила смешения (1) [37]. В первом случае массовые доли компонентов равны $n_1 = 0.9688$ и $n_2 = 0.0312$, а во втором – $n_1 = 0.7004$ и $n_2 = 0.2996$. Результаты вычислений приведены на рисунке 3, там же для сравнения приведены теплофизические характеристики компонентов сплавов. Из рисунка 3 видно, что теплофизические свойства сплавов $\text{Au}_{100-x}\text{Si}_x$ наследуют особенности поведения температурных кривых компонентов, что было экспериментально подтверждено на других сплавах [48-50]. Тепловые характеристики сплавов располагаются внутри полос, ограниченных аналогичными температурными зависимостями золота Au и кремния Si.

В процессе расчетов были установлены по две точки на графиках теплопроводностей (A(13.89, 3487.31); B(173.89, 325.69)) и температуропроводностей (C(8.09, 1.095×10^6); D(243.73, 131.496)). В этих точках, например, B и D (см. рисунок 3 в, г), соответствующие теплофизические характеристики компонентов Au, Si и сплавов вне зависимости от значения x принимают одно и то же значение. Другими словами, в точках A и B происходит отождествление Au, Si и сплавов по теплопроводности, а в точках C и D – по температуропроводности. Следует отметить, что абсцисса точки B температура $T_i = 173.89$ K близка к характеристической температуре Дебая $\theta_D = 170$ K, вычисленной по теплоемкости [37].

Заключение

Применение соотношений модели двухфазной локально-равновесной области и эмпирических аппроксимирующих функций в сочетании с правилом смешения позволяет проводить оценочный расчет теплофизических свойств золота, кремния и их сплавов.

Вычисления проводились с помощью непрерывных функций, адекватно описывающих экспериментальные данные для конденсированного состояния вещества. Отметим, что использование непрерывных функций позволит аналитически исследовать теплофизические величины с помощью производных. Поэтому предложенные выражения могут дополнить экспериментальные исследования.

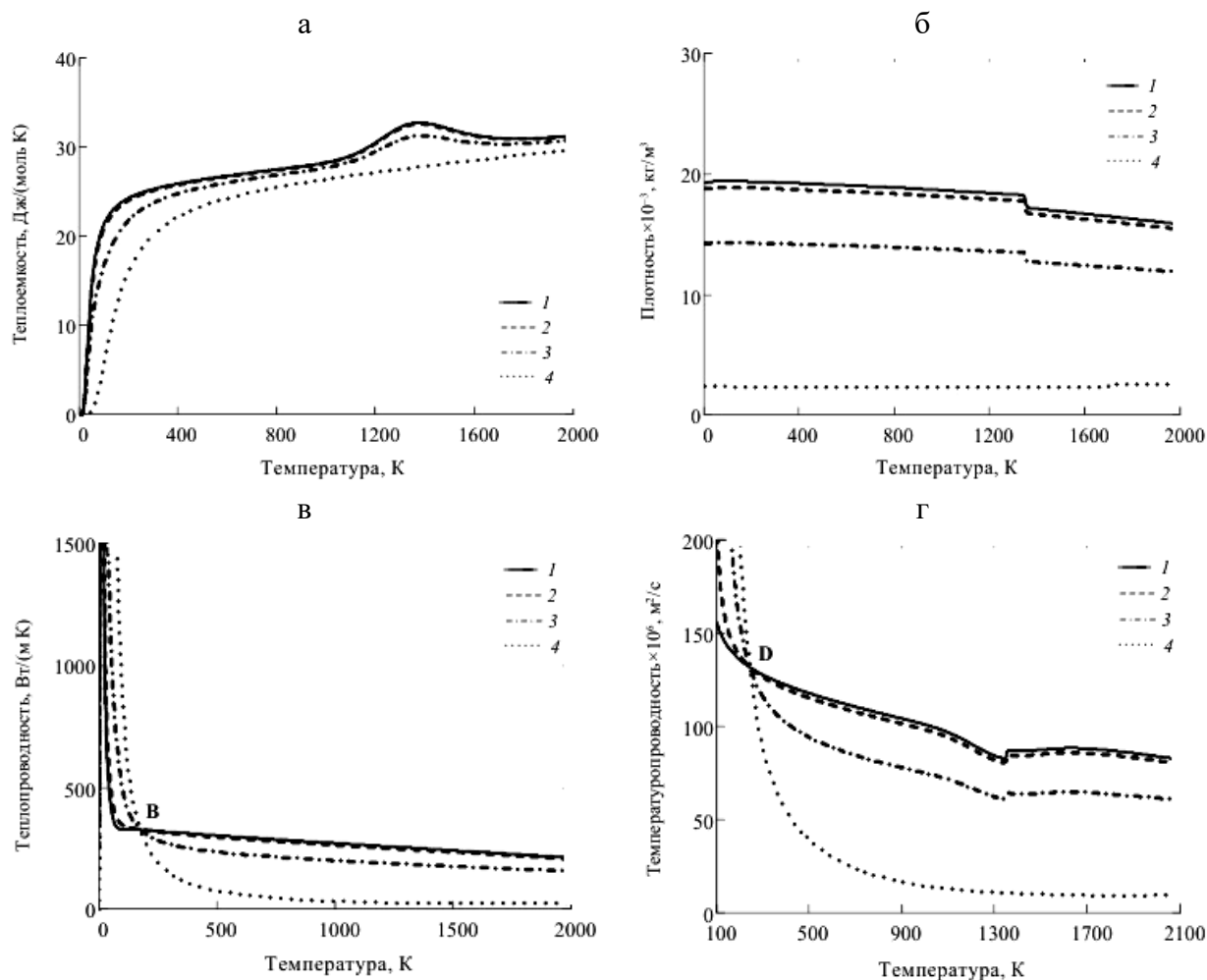


Рисунок 3. Температурные зависимости теплоемкостей (а), плотностей (б), теплопроводностей (в) и температуропроводностей (г) золота и кремния, а также их сплавов:

1 – Au, 2 – $\text{Au}_{81.4}\text{Si}_{18.6}$, 3 – $\text{Au}_{25}\text{Si}_{75}$, 4 – Si.

Проведенные прогностические вычисления показали, что температурные зависимости теплофизических характеристик сплавов золота с кремнием располагаются внутри полосы, ограниченной кривыми соответствующих свойств компонентов сплава. В процессе вычислений установлено, что сплавы не только наследуют особенности поведения компонентов, но и имеют особые точки, в которых все сплавы и их компоненты принимают одинаковые значения теплопроводности и температуропроводности.

Литература

1. Shalnikov A. Superconducting thin films // Nature. 1938. V. 142. P. 74.

2. Шальников А.И. Сверхпроводящие свойства тонких металлических слоев. // ЖЭТФ. 1940. Т. 10. № 6. С. 629-640.
3. Золотухин И.В., Калинин Ю.Е. Аморфные металлические сплавы // Успехи физических наук. 1990. Т. 160, № 9. С. 75-110.
4. Салли И.В. Физические основы формирования структуры. М.: Металлургиздат, 1963. 219 с.
5. Klement W., Willens R.H., Duwez P. Non-crystalline structure in solidifies Gold-Silicon alloys // Nature. 1960. V. 187 (4740). P. 869–870. doi: 10.1038/187869b0.
6. Duwez P., Willens R.H., Klement W. Continuous series of metastable solid solutions in Silver-Copper alloys // J. Appl. Phys. 1960. V. 31(6). P. 1136-1137. doi: 10.1063/1.1735777.
7. Диаграммы состояния двойных металлических систем. Справочник. В 3-х т. Т. 1 / Под общ. ред. Н.П. Лякишева. М.: Машиностроение, 1996. 992 с.
8. Okamoto H., Massalski T.B. The Au-Si (Gold-Silicon) system // Bull. Alloy Phase Diagr. 1983, V. 4 (2). 190-198. doi: 10.1007/BF02884878.
9. Shpyrko O.G., Streitel R. Surface crystallization in a liquid AuSi alloy // [Электронный ресурс] arXiv: cond-mat/0607178v1 [cond-mat.soft] 7 Jul 2006. doi: 10.1126/science.1128314 (Дата обращения 29.06.2024).
10. Panciera F., Terso J., Gamalski A.D., Reuter M.C., Zakharov D., Stach E.A., Hofmann S., Ross F.M. Surface crystallization in a liquid AuSi and its impact on catalysis // Advanced Materials. 2019. V. 31. № 5. P. 1806544. 10.1002/adma.201806544. <https://hal.science/hal-02403349>.
11. Waghorne R.M., Rivlin V.G., Williams G.I. Structure of liquid alloys of the Au-Si and Au-Ge systems // J. Phys. F: Metal Phys., 1976. V. 6, №. 2. P. 147-156.
12. Chen H.S., Turnbull D. Thermal properties of Gold-Silicon binary alloy near the eutectic composition // J. Appl. Phys. 1967. V. 38. P. 3646-3650. doi: 10.1063/1.1710186.
13. Hübner J.-M., Bierman B.C., Wallenberg R., Fredrickson D.C. Temporary cohabitation: the metastable phase Au₄Si. Код доступа: https://figshare.com/articles/journal_contribution/Temporary_Cohabitation_The_Metastable_Phase_Au_sub_4_sub_Si/21552117/1,ja2c10306_si_001.pdf (Дата обращения 29.06.2024).
14. Zhang M., Wen J. G., Efremov M.Y., Olson E.A., Zhang Z.S., Hu L., de la Rama L.P., Kumamuru R., Kavanagh K.L., Ma Z., Allen L.H. Metastable phase formation in the Au-Si system via ultrafast nanocalorimetry // J. Appl. Phys. 2012. 111.093516(1-7). doi: 10.1063/1.4712342.
15. Kurtuldu G., Löffler J.F. Multistep crystallization and melting pathways in the free-energy landscape of a Au–Si eutectic alloy // Adv. Sci. 2020, 7(12), 1903544 (1-7). doi:10.1002/advs.201903544.
16. Pasturel A., Tasci E.S., Sluiter M.H.F., Jakse N. Structural and dynamic evolution in liquid Au-Si eutectic alloy by ab initio molecular dynamics // Phys. Rev. B. 2010. 81(14). doi:10.1103/physrevb.81.140202.
17. Lee S.-H., Hwang G.S. Structure, energetics, and bonding of amorphous Au–Si alloys // J. Chem. Phys. 2007. V. 127, 224710 (1-5). doi: 10.1063/1.2815326.
18. Evenson Z., Yang F., Simeoni G.G., Meyer A. Self-diffusion and microscopic dynamics in a gold-silicon liquid investigated with quasielastic neutron scattering // Appl. Phys. Lett. 2016. V. 108. 121902 (1-4). doi:10.1063/1.4944814.
19. Сидоров Е.В. Физико-химические основы литейного производства. Процессы кристаллизации и структурообразования. Владимир : Изд-во Владим. гос. ун-та, 2011. 230 с.

20. Терехов С.В. Размытый фазовый переход и теплоемкость твердого тела // Физика и техника высоких давлений, 2022. Т. 32, № 2. С. 36-51.
21. Физические величины. Справочник / Под. ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
22. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989. 384 с.
23. Благородные металлы / Справ. изд. под ред. Савицкого Е.М. М.: Металлургия, 1984. 592 с.
24. Новицкий Л.А., Кожевников И.Г. Теплофизические свойства материалов при низких температурах. Справочник. М.: Машиностроение, 1975. 216 с.
25. Шелудяк Ю.Е., Кашпоров Л.Я., Малинин Л.А., Цалков В.Н. Теплофизические свойства компонентов горючих систем / Справочник под ред. Н.А. Силина. М.: НПО «Информация и технико-экономические исследования», 1992. 184 с.
26. Демин М.М., Алексашкина А.А., Королева О.Н. Атомистическое моделирование характеристик золота в области фазового перехода плавление-кристаллизация // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2020. № 1. 18 с. <http://doi.org/10.20948/prepr-2020-1>.
27. Мажукин В.И., Королева О.Н., Шапранов А.В., Демин М.М., Алексашкина А.А. Определение теплофизических свойств золота в области фазового перехода плавление-кристаллизация. Молекулярно-динамический подход // Математическое моделирование. 2022. Т. 34, № 1. С. 59-80. doi:10.20948/mm-2022-01-05.
28. Магомедов М.Н. Изучение свойств ГЦК-Au в широком диапазоне температур и давлений // Физика твердого тела. 2022. Т. 64, № 7. С. 765-779. doi: 10.21883/FTT.2022.07.52559.319.
29. Станкус С.В., Хайрулин Р.А., Тягельский П.В. Термические свойства германия и кремния в конденсированном состоянии // Теплофизика высоких температур. 1999. Т. 37, № 4. С. 559-564.
30. Глазов В.М., Щеликов О.Д. Объемные изменения при плавлении и нагреве расплавов кремния и германия // Теплофизика высоких температур. 2000. Т. 38, № 3. С. 429-436. doi: 10.1007/BF02756000.
31. Глазов В.М., Щеликов О.Д. Температурная зависимость удельного объема кремния и германия в окрестности фазовых переходов кристалл-расплав // Журнал физической химии. 2000. Т. 74, № 7. С. 1258-1265.
32. Магомедов Я.Б., Гаджиев Г.Г., Омаров З.М. Высокотемпературная теплопроводность и электропроводность германия, кремния и их расплавов. Физика. 2007. Т. 13. № 1-2. С. 91-94.
33. Червоний И.Ф. Эффект ускоренной кристаллизации кремния и германия // Технологический аудит и резервы производства. 2014. № 1/3(15). С. 46-48.
34. Королева О.Н., Мажукин А.В. Атомистическое моделирование теплофизических характеристик кремния в области фазового перехода полупроводник-металл // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2018. № 74. 24 с. doi:10.20948/prepr-2018-74.
35. Хвесюк В.И., Цяо В., Баринов А.А. Определение теплопроводности кремния с детальным учетом кинетики взаимодействия фононов. Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2022. № 3 (102). С. 57-68. doi:10.18698/1812-3368-2022-3-57-68.
36. Терехов С.В. Тепловые свойства металлов. Справочник. Донецк: ДонФТИ им. А.А. Галкина, 2023. 184 с.

37. Лившиц Б.Г., Крапошин В.С., Липецкий Я.Л. Физические свойства металлов и сплавов. М.: Металлургия, 1980. 320 с.
38. Кошман В.С. Об одном подходе к обобщению опытных данных по теплофизическим свойствам элементов Периодической системы Д.И. Менделеева // Пермский аграрный вестник. 2014. № 2 (6). С. 35-42.
39. Успенская И.А., Дружинина А.И., Жирякова М.В., Тифлова Л.А., Скворцова Е.Г., Блудова Н.Г. Задачи практикума по физической химии. Расчет термодинамических функций по результатам измерений теплоемкости методом адиабатической вакуумной калориметрии. МГУ, М. (2019). 29 с.
40. Терехов С.В. Термодинамическая модель размытого фазового перехода в металлическом стекле $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ // Физика и техника высоких давлений. 2018. Т. 28, № 1. С. 54-61.
41. Terekhov S.V. Calculation of heat capacity and coefficients of linear thermal expansion of light and heavy platinum triad metals // High Temperature. 2023. V. 61, № 5. P. 617-622. doi: 10.1134/S0018151X23050188.
42. Терехов С.В. Температурные зависимости теплоемкостей Fe, Co и Ni при наличии структурных и магнитных переходов // Письма в ЖТФ. 2024. Т. 50, № 10. С. 18-21. doi: 10.61011/PJTF.2024.10.57704.19331.
43. Кингери У.Д. Введение в керамику. М.: Стройиздат, 1967. С. 325.
44. Герасимов Я.И., Гейдерих В.А. Термодинамика растворов. М.: МГУ. 1980. 184 с.
45. Stølen S., Grande T. Chemical thermodynamics of materials: macroscopic and microscopic aspects. Chichester West Sussex. John Wiley & Sons Ltd, The Atrium. 2004. 396 p.
46. Ларионов Л.Н., Юрченко Ю.Ф. Структура и свойства металлов и сплавов. Тепловые свойства металлов и сплавов. Справочник. Киев: Наукова думка, 1985. 437 с.
47. Петрунин Г.И., Попов В.Г. Теплофизические свойства вещества Земли. Ч. 1. М.: МГУ, 2011. 68 с.
48. Попель П.С., Сидоров В.Е., Бродова И.Г., Кальво-Дальборг М., Дальборг У. Влияние термической обработки исходного расплава на структуру и свойства кристаллических слитков или отливок // Расплавы. 2020. № 1. С. 3-36. doi:10.31857/S0235010620010065.
49. Попель П.С., Сидоров В.Е., Кальво-Дальборг М., Дальборг У., Молоканов В.В. Влияние термической обработки жидкого сплава на его свойства в расплавленном состоянии и после аморфизации // Расплавы. 2020. № 3. С. 223-245. doi:10.31857/S023501062003007X.
50. Бельтюков А.Л., Русанов Б.А., Ягодин Д.А., Мороз А.И., Стерхов Е.В., Сон Л.Д., Ладьянов В.И. Релаксация в аморфизирующемся расплаве Al-La // Расплавы. 2022. № 5. С. 485-493. doi:10.31857/S0235010622050024.

References

1. Shalnikov A. Superconducting thin films // Nature. 1938. V. 142. P. 74.
2. Shal'nikov A.I. Sverkhprovodyashchie svoistva tonkikh metallicheskih sloev. // ZhETF. 1940. T. 10. № 6. S. 629-640.
3. Zolotukhin I.V., Kalinin Yu.E. Amorfnye metallicheskie splavy // Uspekhi fizicheskikh nauk. 1990. T. 160, № 9. S. 75-110.
4. Salli I.V. Fizicheskie osnovy formirovaniya struktury. M.: Metallurgizdat, 1963. 219 s.

5. Klement W., Willens R.H., Duwez P. Non-crystalline structure in solidifies Gold-Silicon alloys // *Nature*. 1960. V. 187 (4740). P. 869-870. doi: 10.1038/187869b0.
6. Duwez P., Willens R.H., Klement W. Continuous series of metastable solid solutions in Silver-Copper alloys // *J. Appl. Phys.* 1960. V. 31(6). P. 1136-1137. doi: 10.1063/1.1735 777.
7. Diagrammy sostoyaniya dvoynykh metallicheskih sistem. Spravochnik. V 3-kh t. T. 1 / Pod obshch. red. N.P. Lyakisheva. M.: Mashinostroenie, 1996. 992 s.
8. Okamoto H., Massalski T.B. The Au-Si (Gold-Silicon) system // *Bull. Alloy Phase Diagr.* 1983, V. 4 (2). 190-198. doi: 10.1007/BF02884878.
9. Shpyrko O.G., Streitel R. Surface crystallization in a liquid AuSi alloy // [Электронный ресурс] arXiv: cond-mat/0607178v1 [cond-mat.soft] 7 Jul 2006. doi: 10.1126/science.1128314 (Дата обращения 29.06.2024).
10. Panciera F., Terso J., Gamalski A.D., Reuter M.C., Zakharov D., Stach E.A., Hofmann S., Ross F.M. Surface crystallization in a liquid AuSi and its impact on catalysis // *Advanced Materials*. 2019. V. 31. № 5. P. 1806544.10.1002/ad-ma.20 1806544. <https://hal.science/hal-02403349>.
11. Waghorne R.M., Rivlin V.G., Williams G.I. Structure of liquid alloys of the Au-Si and Au-Ge systems // *J. Phys. F: Metal Phys.*, 1976. V. 6, №. 2. P. 147-156.
12. Chen H.S., Turnbull D. Thermal properties of Gold-Silicon binary alloy near the eutectic composition // *J. Appl. Phys.* 1967. V. 38. P. 3646-3650. doi: 10.1063/1.1710186.
13. Hübner J.-M., Bierman B.C., Wallenberg R., Fredrickson D.C. Temporary cohabitation: the metastable phase Au₄Si. Код доступа: https://figshare.com/articles/journal_contribution/Temporary_Co-habitation_The_Metastable_Phase_Au_sub_4_sub_Si/21552117/1, ja2c10306_s i_001.pdf (Дата обращения 29.06.2024).
14. Zhang M., Wen J. G., Efremov M.Y., Olson E.A., Zhang Z.S., Hu L., de la Rama L.P., Kumamuru R., Kavanagh K.L., Ma Z., Allen L.H. Metastable phase formation in the Au-Si system via ultrafast nanocalorimetry // *J. Appl. Phys.* 2012. 111.093516(1-7). doi: 10.1063/1.4712342.
15. Kurtuldu G., Löffler J.F. Multistep crystallization and melting pathways in the free-energy landscape of a Au–Si eutectic alloy // *Adv. Sci.* 2020, 7(12), 1903544 (1-7). doi: 10.1002/advs. 201903544.
16. Pasturel A., Tasci E.S., Sluiter M.H.F., Jakse N. Structural and dynamic evolution in liquid Au-Si eutectic alloy by ab initio molecular dynamics // *Phys. Rev. B*. 2010. 81(14). doi: 10.1103/physrevb. 81.140202.
17. Lee S.-H., Hwang G.S. Structure, energetics, and bonding of amorphous Au–Si alloys // *J. Chem. Phys.* 2007. V. 127, 224710 (1-5). doi: 10.1063/1.2815326.
18. Evenson Z., Yang F., Simeoni G.G., Meyer A. Self-diffusion and microscopic dynamics in a gold-silicon liquid investigated with quasielastic neutron scattering // *Appl. Phys. Lett.* 2016. V. 108. 121902 (1-4). doi: 10.1063/1.4944814.
19. Sidorov E.V. Fiziko-khimicheskie osnovy liteinogo proizvodstva. Protsessy kristallizatsii i strukturoobrazovaniya. Vladimir : Izd-vo Vladim. gos. un-ta, 2011. 230 s.
20. Terekhov S.V. Razmytyi fazovyi perekhod i teploemkost' tverdogo tela // *Fizika i tekhnika vysokikh davlenii*, 2022. T. 32, № 2. S. 36-51.
21. Fizicheskie velichiny. Spravochnik / Pod. red. I.S. Grigor'eva, E.3. Meilikhova. M.: Energoatomizdat, 1991. 1232 s.

22. Zinov'ev V.E. Teplofizicheskie svoistva metallov pri vysokikh temperaturakh. M.: Metallurgiya, 1989. 384 s.
23. Blagorodnye metally / Sprav. izd. pod red. Savitskogo E.M. M.: Metallurgiya, 1984. 592 s.
24. Novitskii L.A., Kozhevnikov I.G. Teplofizicheskie svoistva materialov pri nizkikh temperaturakh. Spravochnik. M.: Mashinostroenie, 1975. 216 s.
25. Sheludyak Yu.E., Kashporov L.Ya., Malinin L.A., Tsalkov V.N. Teplofizicheskie svoistva komponentov goryuchikh sistem / Spravochnik pod red. N.A. Silina. M.: NPO «Informatsiya i tekhniko-ekonomicheskie issledovaniya», 1992. 184 s.
26. Demin M.M., Aleksashkina A.A., Koroleva O.N. Atomisticheskoe modelirovanie kharakteristik zolota v oblasti fazovogo perekhoda plavlenie-kristallizatsiya // Preprinty IPM im. M.V. Keldysha. 2020. № 1. 18 s. doi: 10.20948/prepr-2020-1.
27. Mazhukin V.I., Koroleva O.N., Shapranov A.V., Demin M.M., Aleksashkina A.A. Opredelenie teplofizicheskikh svoistv zolota v oblasti fazovogo perekhoda plavlenie-kristallizatsiya. Molekulyarno-dinamicheskii podkhod // Matematicheskoe modelirovanie. 2022. T. 34, № 1. S. 59-80. doi: 10.20948/mm-2022-01-05.
28. Magomedov M.N. Izuchenie svoistv GTsK-Au v shirokom diapazone temperatur i davlenii // Fizika tverdogo tela. 2022. T. 64, № 7. S. 765-779. doi: 10.21883/FTT.2022.07.52559.319.
29. Stankus S.V., Khairulin R.A., Tyagel'skii P.V. Termicheskie svoistva germaniya i kremniya v kondensirovannom sostoyanii // Teplofizika vysokikh temperatur. 1999. T. 37, № 4. S. 559-564.
30. Glazov V.M., Shchelikov O.D. Ob'emnye izmeneniya pri plavlenii i nagreve rasplavov kremniya i germaniya // Teplofizika vysokikh temperatur. 2000. T. 38, № 3. S. 429-436. doi: 10.1007/BF02756000
31. Glazov V.M., Shchelikov O.D. Temperaturnaya zavisimost' udel'nogo ob'ema kremniya i germaniya v okrestnosti fazovykh perekhodov kristall-rasplav // Zhurnal fizicheskoi khimii. 2000. T. 74, № 7. S. 1258-1265.
32. Magomedov Ya.B., Gadzhiev G.G., Omarov Z.M. Vysokotemperaturnaya teploprovodnost' i elektroprovodnost' germaniya, kremniya i ikh rasplavov. Fizika. 2007. T. 13. № 1-2. S. 91-94.
33. Chervonyi I.F. Effekt uskorennoi kristallizatsii kremniya i germaniya // Tekhnologicheskii audit i rezervy proizvodstva. 2014. № 1/3(15). S. 46-48.
34. Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Atomisticheskoe modelirovanie teplofizicheskikh kharakteristik kremniya v oblasti fazovogo perekhoda poluprovodnik-metall // Preprinty IPM im. M.V. Keldysha. 2018. № 74. 24 s. doi: 10.20948/prepr-2018-74.
35. Khvesyuk V.I., Tsyao V., Barinov A.A. Opredelenie teploprovodnosti kremniya s detal'nym uchetom kinetiki vzaimodeistviya fononov. Vestnik MGTU im. N.E. Bauman. Ser. Estestvennye nauki. 2022. № 3 (102). S. 57-68. doi: 10.18698/1812-3368-2022-3-57-68.
36. Terekhov S.V. Teplovye svoistva metallov. Spravochnik. Donetsk: DonFTI im. A.A. Galkina, 2023. 184 s.
37. Livshits B.G., Kraposhin V.S., Lipetskii Ya.L. Fizicheskie svoistva metallov i splavov. M.: Metallurgiya, 1980. 320 s.
38. Koshman V.S. Ob odnom podkhode k obobshcheniyu opytnykh dannykh po teplofizicheskim svoistvam elementov Periodicheskoi sistemy D.I. Mendeleeva // Permskii agrarnyi vestnik. 2014. № 2 (6). S. 35-42.

39. Uspenskaya I.A., Druzhinina A.I., Zhiryakova M.V., Tiflova L.A., Skvortsova E.G., Bludova N.G. Zadachi praktikuma po fizicheskoi khimii. Raschet termodinamicheskikh funktsii po rezul'tatam izmerenii teploemkosti metodom adiabaticheskoi vakuumnoi kalorimetrii. MGU, M. (2019). 29 s.
40. Terekhov S.V. Termodinamicheskaya model' razmytogo fazovogo perekhoda v metallicheskom stekle $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ // Fizika i tekhnika vysokikh davlenii. 2018. T. 28, № 1. S. 54-61.
41. Terekhov S.V. Calculation of heat capacity and coefficients of linear thermal expansion of light and heavy platinum triad metals // High Temperature. 2023. V. 61, № 5. P. 617-622. doi: 10.1134/S0018151X23050188.
42. Terekhov S.V. Temperaturnye zavisimosti teploemkosti Fe, Co i Ni pri nalichii strukturnykh i magnitnykh perekhodov // Pis'ma v ZhTF. 2024. T. 50, № 10. S. 18-21. doi: 10.61011/PJTF.2024.10.57704.19331.
43. Kingeri U.D. Vvedenie v keramiku. M.: Stroiizdat, 1967. S. 325.
44. Gerasimov Ya.I., Geiderikh V.A. Termodinamika rastvorov. M.: MGU. 1980. 184 s.
45. Stølen S., Grande T. Chemical thermodynamics of materials: macroscopic and microscopic aspects. Chichester West Sussex. John Wiley & Sons Ltd, The Atrium. 2004. 396 p.
46. Larikov L.N., Yurchenko Yu.F. Struktura i svoistva metallov i splavov. Teplovye svoistva metallov i splavov. Spravochnik. Kiev: Naukova dumka, 1985. 437 s.
47. Petrunin G.I., Popov V.G. Teplofizicheskie svoistva veshchestva Zemli. Ch. 1. M.: MGU, 2011. 68 s.
48. Popel' P.S., Sidorov V.E., Brodova I.G., Kal'vo-Dal'borg M., Dal'borg U. Vliyanie termicheskoi obrabotki iskhodnogo raspava na strukturu i svoistva kristallicheskikh slitkov ili otlivok // Rasplavy. 2020. № 1. S. 3-36. doi: 10.31857/S0235010620010065.
49. Popel' P.S., Sidorov V.E., Kal'vo-Dal'borg M., Dal'borg U., Molokanov V.V. Vliyanie termicheskoi obrabotki zhidkogo splava na ego svoistva v rasplavlennom sostoyanii i posle amorfizatsii // Rasplavy. 2020. № 3. S. 223-245. doi: 10.31857/S023501062003007X.
50. Bel'tyukov A.L., Rusanov B.A., Yagodin D.A., Moroz A.I., Sterkhov E.V., Son L.D., Lad'yanov V.I. Relaksatsiya v amorfiziruyushchemsya raspave Al–La // Rasplavy. 2022. № 5. S. 485-493. doi: 10.31857/S0235010622050024.