

УДК 546.30:538.9+544.146.3

## КООРДИНАЦИОННЫЕ ЧИСЛА АТОМОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В ТВЕРДОЙ И ЖИДКОЙ ФАЗАХ ПО УЗ-ДАНЫМ

© 2019 г. В. В. Текучев<sup>а,\*</sup>, Д. П. Калинин<sup>а</sup>, И. В. Иванова<sup>б</sup>, А. М. Каунов<sup>б</sup><sup>а</sup> Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия<sup>б</sup> Волгоградский государственный социально-педагогический университет, Волгоград, Россия

\*e-mail: p25dm@list.ru

Поступила в редакцию 08.08.2018 г.

После доработки 11.10.2018 г.

Принята к публикации 11.10.2018 г.

На основе акустических данных рассчитаны значения координационного числа атомов переходных металлов (Hf, Nb, Cr, Mo, W, Re, Ru, Rh, Os, Ir, Pt) от 0 К до температур, близких к температурам кипения. Сделан вывод, что координационные числа атомов переходных металлов в твердой фазе близки к ОЦК-структуре (координационное число – 8), в жидкой – между ОЦК и простой кубической решеткой – 6.

*Ключевые слова:* переходные металлы, координационное число, температурный коэффициент координационного числа, акустическое исследование

DOI: 10.1134/S0044453719060311

Дифракционные эксперименты относятся к прямым методам изучения структуры жидкости. Однако для определения параметров ближнего порядка (межатомных расстояний, координационных чисел) по экспериментальной кривой интенсивности или структурному фактору необходимо построить функцию радиального распределения атомов (ФРРА), что связано с рядом трудностей. Одна из них – ограниченность экспериментальной информации об интенсивности рассеяния рентгеновских лучей [1, 2]. Результаты расчета координационного числа в значительной степени зависят от методики вычисления и интерпретации ФРРА. Все это приводит к существенному расхождению структурных характеристик, полученных разными авторами [3, 4].

В работах [5, 6] рассчитаны полимеры адиабатической  $\beta_S$  и изотермической  $\beta_T$  сжимаемостей ( $\beta_S = 1/(\rho a^2)$ , где  $\rho$  – плотность расплава,  $a$  – скорость ультразвука;  $\beta_T = \gamma\beta_S$ , где  $\gamma = 1 + \alpha^2 T/(\rho\beta_S C_p)$  – коэффициент Пуассона,  $\alpha$  – температурный коэффициент объемного расширения,  $C_p$  – удельная теплоемкость при постоянном давлении), структурного фактора  $S(0)$  ( $\lim_{q \rightarrow 0} S(q) = k_B T \beta_T / v$ , где  $v = V/N_A$  – объем, приходящийся на атом,  $k_B$  – постоянная Больцмана),

плотности упаковки  $n$  ( $S(0) = (1-n)^4(1+2n)^{-2}$ ), координационного числа  $k$  ( $k = 36\sqrt{2n/\pi}$ ) в переходных металлах от точки плавления до температур, близких температурам кипения.

Полимеры координационного числа переходных металлов поддаются линейной интерпретации.

Параметры линейного уравнения

$$k = k_{\text{пл}} - \frac{\Delta k}{\Delta T} (T - T_{\text{пл}}) \quad (1)$$

приведены в табл. 1, где

$$\Delta k / \Delta T = (k_{\text{пл}} - k_{\text{м}}) / (T_{\text{пл}} - T_{\text{м}}) \quad (2)$$

температурный коэффициент координационного числа,  $k_{\text{пл}}$  – координационное число при температуре плавления  $T_{\text{пл}}$ ,  $k_{\text{м}}$  – при максимальной температуре исследования  $T_{\text{м}}$  (табл. 2).

При переходе металла из твердой фазы в жидкую координационное число остается практически неизменным, либо близким; например, железо в твердой фазе – 8, в жидкой – 8.2 [7]. Отсюда следует справедливость соотношения (1) и в твердой фазе.

Координационные числа переходных металлов в твердой фазе находятся в интервале 8/7.8 (осмий) – 9.04/8.8 (платина), в жидкой при температуре плавления – 5.5 (осмий) – 7.1 (платина):

**Таблица 1.** Координационное число переходных металлов при температурах 0 и 293 К

Металл	Z	$T_{пл}, K$	$k_{пл}$	$-\frac{\Delta k}{\Delta T}, 10^{-3} K^{-1}$	k
Hf	IV	2500	6.2	0.86	8.4/8.1
Nb	V	2740	6.2	0.83	8.5/8.2
Cr	VI	2176	6.5	1.0	8.7/8.4
Mo	VI	2895	6.2	0.8	8.5/8.3
W	VI	3650	5.8	0.7	8.4/8.2
Re	VII	3453	6.1	0.75	8.7/8.5
Ru	VIII	2700	6.4	0.9	8.8/8.6
Rh	VIII	2239	6.8	0.94	8.9/8.6
Os	VIII	3300	5.5	0.75	8.0/7.8
Ir	VIII	2727	6.1	0.89	8.5/8.3
Pt	VIII	2045	7.1	0.95	9.04/8.8

Примечание. Числитель – координационное число при 0 К, знаменатель – при комнатной температуре – 293 К.

**Таблица 2.** Температурный коэффициент координационного числа ( $-\Delta k/\Delta T$ ) по формуле (2)

Металл	$T_{пл}, K$	$k_{пл}$	$k_m$	$T_m, K$	$-\frac{\Delta k}{\Delta T}, 10^{-3} K^{-1}$
Hf	2500	6.2	4.3	4700	0.86
Nb	2740	6.2	4.7	4540	0.83
Cr	2176	6.5	5.8	2876	1.0
Mo	2895	6.2	4.6	4895	0.8
W	3650	5.8	4.4	5650	0.7
Re	3453	6.1	4.3	5853	0.75
Ru	2700	6.4	5.0	4300	0.9
Rh	2239	6.8	5.3	3839	0.94
Os	3300	5.5	4.6	4500	0.75
Ir	2727	6.1	4.5	4527	0.89
Pt	2045	7.1	5.2	4045	0.95

расположение металлов по координационному числу в обеих фазах сохраняется (табл. 1).

По величине координационного числа в твердой фазе переходные металлы близки к ОЦК-структуре (координационное число – 8); в жидкой фазе при  $T_{пл}$  несколько меньше в силу теплового движения атомов (координационные числа находятся между ОЦК и простой кубической решеткой – 6).

Настоящее исследование в силу однозначности результатов устанавливает связь координационного числа в твердой и жидкой фазах металлов, что очень важно для прогнозирования свойств новых материалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Белащенко Д.К., Менделеев М.И., Момчев М.П.* // Расплавы. 1995. № 3. С. 72.
2. *Слуховский О.Н., Романова А.В.* // Металлофизика. 1991. 13. № 4. С. 55.
3. *Островский О.Н., Григорян В.А., Вишкарев А.Ф.* Свойства металлических расплавов. М.: Металлургия, 1988. 303 с.
4. *Еланский Г.Н., Кудрин В.А.* Строение и свойства жидкого металла – технология – качество. М.: Металлургия, 1984. 240 с.
5. *Текучев В.В.* Акустические и физико-химические свойства металлических расплавов. Волгоград: ИУНЛ ВолгГТУ, 2011. 240 с.
6. *Текучев В.В.* Акустические и физико-химические свойства электронных расплавов. Волгоград: ИУНЛ ВолгГТУ, 2016. 276 с.
7. *Регель А.Р., Глазов В.М.* Физические свойства электронных расплавов. М.: Наука, 1980. 296 с.