ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДОДЕКАБОРИДОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

Одинцов В.В., Корень Е.В.[(1)]
Херсонский государственный университет, Херсон, ул. 40 лет Октября, 27, 73013, Украина, V.1tsov@mail.ru;
[(1)]Херсонский государственный аграрный университет, Херсон, ул. Розы Люксембург, 23, 73006, Украина, koren2205@yandex.ua

Додекабориды редкоземельных металлов со структурой типа UB_{12} - YB_{12}, TbB_{12}, DyB_{12}, HoB_{12}, ErB_{12}, TmB_{12}, YbB_{12}, LuB_{12}, ZrB_{12} представляют собой малоизученный класс тугоплавких соединений. Механические свойства этих фаз практически не исследованы, что естественно ограничивает их практическое применение, при наличии повышенной химической устойчивости к воздействию кислот и их смесей, высокой температуре плавления (2500÷2900К), малого термического расширения ($4\cdot10^{-6}$ K^{-1}), значительных характеристических температур (800÷1000К), больших радиусов поглощения нейтронов и высокой теплопроводности [1].

В настоящей работе нами по известным соотношениям Френкеля Я.И., улучшенными Францевичем И.Н., Кестером [2,3,4], были оценены модули упругости, сдвига и коэффициент Пуассона, а также экспериментально статическим и динамическим методами определен модуль упругости (модуль Юнга) додекаборидных фаз. Расчетные и экспериментальные значения механических характеристик численно совпадают и составляют: модуль Юнга (E) 250, 200, 190, 190, 195, 197, 198, 190, 200 ГПа; модуль сдвига (G) 195, 160, 150, 160, 160, 160, 156, 170, 154 ГПа; коэффициент Пуассона (μ) 0,31; 0,36; 0,37; 0,34; 0,30; 0,33; 0,35; 0,36; 0,39 соответственно для боридов YB_{12}, TbB_{12}, DyB_{12}, HoB_{12}, ErB_{12}, TmB_{12}, YbB_{12}, LuB_{12}, ZrB_{12}.

Значительно меньшие (в два раза) значения рассматриваемых характеристик в сравнении с таковыми для чистого бора ($E_B=390ГПа$, $G_B=320ГПа$ [5], $\mu=0,39$) можно связать с особенностями электронного строения додекаборидних фаз.

В боридах состава $MeB_{x>2}$ для образования трехмерных структурных комплексов из атомов бора требуется большее число валентных электронов, чем то, которое имеется у бора, в связи с чем связь B-B в боридах этого состава, и что касается додекаборидов редкоземельных металлов, осуществляется за счет валентных sd и даже f-электронов металла. Усложнение структурных элементов из атомов бора, наблюдающееся при переходе от низших боридов к высшим, приводит к возрастанию жесткости кристаллической решетки.

Возможно, механические свойства додекаборидов определяются и их кристаллическим строением. Додекабориды формируются в кубическую структуру $O_n^5 - Fm3m$ типа $NaCl$, где в роли Na – атомы редкоземельных металлов, а в роли атомов Cl группы B_{12}. Наличие двух кубических подрешеток редкоземельного металла и групп B_{12}, по-видимому, снижают прочностные свойства додекаборидов за счет скольжения одной решетки по другой. В чистом боре все определяют жесткие ковалентные связи B-B. В случае додекаборидных фаз атомы редкоземельных металлов представляют собой подобие пластификатора, снижающего основные прочностные, механические характеристики додекаборидных фаз.

Литература:

1. Одінцов В.В. Додекабориди рідкісноземельних металів. – Київ.: Херсонська міська друкарня, 1992. – 57с.
2. Френкель Я.И. Введение в теорію метал лов. ГИТТЛ, 1950.
3. Францевич И.Н. Упругие постоянные металлов. В сб. «Вопросы порошковой металлургии и прочности металлов», т.3. Изд-во АН УССР, 1958.
4. Köster W.Z. Metallkunder, 39, 149, 1948.
5. Цагарейшвили Г.В. Некоторые механические свойства кристаллов β-ромбоэдрического бора. Сб. Бор. Получение, структура и свойства – М.: Наука, 1974. – С.121-125.