

УДК 538.1

Л.Д. Дідух, докт. фіз.-мат. наук, проф.

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

ЗАЛЕЖНІСТЬ ТЕМПЕРАТУРИ ПЛАВЛЕННЯ 3D-МЕТАЛІВ ВІД АТОМНОГО НОМЕРА

L.D. Didukh, Dr., Prof.

DEPENDENCE OF THE MELTING TEMPERATURE 3D-METALS ON ATOMIC NUMBER

В роботі показано, що особливості залежності температури плавлення перехідних 3d-металів від атомного номера, які не знаходять пояснення в рамках теорії валентної зони Фріделя та її узагальнення врахуванням внутрішньоатомних кореляцій в рамках моделі Хаббарда [1], можуть бути проінтерпретовані на основі модифікованої форми полярної моделі [2], поширеної на випадок підсистеми 3d-електронів в 3d-металах. У цьому випадку, як і для орбітально невиродженої моделі [3] враховується корельований перенос електронів (за термінологією, прийнятою у роботі [2] – корельований перенос I роду).

Оскільки температура плавлення, температура кипіння є «похідними» від енергії зв'язку кристала (енергії когезії) то температуру плавлення оцінимо через відповідний вираз для енергії зв'язку:

$$E_{coh} = E_t - \Delta U,$$

де

$$E_t = - \sum_{ijm} t_{im,jm} a_{im}^+ a_{jm}$$

– енергія делокалізації 3d-електронів (забезпечує металічний зв'язок атомів у кристалі), ΔU – пониження енергії делокалізації за рахунок появи «полярних станів», $t_{im,jm}$ – «інтеграл делокалізації» електронів, a_{im}^+ , a_{jm} – оператори народження і знищення електронів на відповідному вузлі кристала (m – магнітне квантове число).

У розглядуваній моделі, як і у випадку орбітального невиродження, ефективний інтеграл переносу $t_{im,jm}$ суттєво залежить, на відміну від фріделівської моделі, від концентрації 3dⁿ-електронів.

Використання емпіричної формули, яка пов'язує енергію зв'язку і температуру плавлення, дозволяє отримати залежність температури плавлення від атомного номера.

Результати роботи пояснюють, зокрема, залежність температури плавлення перехідних 3d-металів від атомного номера, мінімум температури плавлення для Mn і два нееквівалентних максимуми в «областях» зліва і справа від Mn. Оцінка величини енергії когезії дозволяє стверджувати суттєвий внесок 3d-електронів в енергію зв'язку.

Література:

1. Ирхин В.Ю., Ирхин Ю.П. Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в *d*- и *f*-металлах и их соединениях. – Екатеринбург: УрО РАН, 2004. – 472 с.
2. Дідух Л.Д. Модель вузькозонного матеріалу з електронно-дірковою асиметрією / Л.Д. Дідух // Журн. фіз. досл. – 1997. – Т.1. – № 2. – С.241–250; Didukh L. // Condens. Matter Phys. – 1998. – Vol. 1. – № 1 (13). – P. 125–144.
3. Didukh L. A modified form of the polar model of crystals / L. Didukh // Acta Physica Polonica B. – 2000. – Vol. 31. – № 12. – P.1–36.