

МАТЕМАТИЧНА ОБРОБКА ІНФОРМАЦІЇ ТА ОЦІНЕННЯ МЕХАНІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ДОДЕКАБОРИДІВ РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНИХ МЕТАЛІВ

У роботі по відомим співвідношенням та експериментально (статичним і динамічним методами) визначені основні механічні характеристики додекаборидів рідкісноземельних металів, які чисельно збіглися. Встановлено, що механічні властивості додекаборидів значно менші, ніж у чистого бору та інших боридних фаз. Наводиться методика обчислень механічних характеристик досліджуваних матеріалів.

Ключові слова: БОРИДИ, ДОДЕКАБОРИДИ, МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ, КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА, РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНІ ЕЛЕМЕНТИ

Вступ. Сучасна техніка, промисловість все більше потребує нових матеріалів з наперед заданими властивостями: електро- та теплопровідності, магнітними та механічними властивостями, твердістю, крихкістю, зносостійкістю тощо.

Серед таких матеріалів можна виділити тугоплавкі додекаборидні фази зі структурою UB_{12} : YB_{12} , TbB_{12} , DyB_{12} , HoB_{12} , ErB_{12} , TmB_{12} , YbB_{12} , LuB_{12} , ZrB_{12} .

Відомості про властивості цих сполук на сьогодні залишаються недостатньо повними, особливо, що стосується механічних параметрів цих фаз: модуля пружності, модуля зсуву, межі міцності при вигині, розтягу, зносостійкості та інших [1].

Основна частина. В науці, та і на практиці (інженерні потреби), дуже часто параметри, характеристики матеріалів попередньо оцінюють, використовуючи фізичні закони, формули, напівемпіричні співвідношення між величинами і, таким чином, дають можливість на перших порах отримати паспортні дані про речовину.

В даній роботі нами на основі відомих співвідношень і формул, отриманих відомими дослідниками, шляхом розрахунків та обробки інформації про певні характеристики додекаборидних фаз (таблиця 1) були оцінені характеристична температура, модуль Юнга, модуль зсуву, коефіцієнт Пуассона та інші величини [2-4].

Так, користуючись формулою для характеристичної температури

$$\Theta = 10,97 \sqrt{\frac{CN^{\frac{2}{3}}\gamma^{\frac{2}{3}}}{M^{\frac{5}{3}}\alpha}}$$

де C – теплоємність (розраховувалась за правилом адитивності для MeB_{12});

N – число атомів у молекулі MeB_{12} ;

γ – густина;

M – молекулярна вага;

α – термічний коефіцієнт розширення при 300K ($\alpha \approx 10^{-6}K^{-1}$)

Нами було отримане значення характеристичної температури додекаборидів, а за формулами Френкеля [2] та Францевича [3]

$$\alpha = \frac{nk}{nR^3E}; E = \frac{nk}{cnR^3}$$

$$\Theta_D = \frac{1,6818 \cdot 10^3 \sqrt{E}}{M^{\frac{1}{3}} \cdot \gamma^{\frac{1}{6}}}; E = \frac{\Theta^2 M^{\frac{2}{3}} \gamma^{\frac{1}{3}}}{1,6818^2 \cdot 10^6}$$

оцінили модуль Юнга (дивись таблицю 1).

З відомих співвідношень швидкості розповсюдження звуку в речовині і модуля зсуву

$$v = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \text{ знайшли модуль зсуву } G = \rho v^2 \text{ (таблиця 1).}$$

Швидкість розповсюдження звукової хвилі у додекаборидах знайшли з формули

$$\Theta_D = \frac{h}{k} \left(\frac{3nN\gamma}{4\pi m} \right)^{\frac{1}{3}} v; \quad v = \frac{\Theta_D}{\frac{h}{k} \sqrt[3]{\frac{3nN\gamma}{4\pi m}}}$$

Цікаво, що значення розрахованих швидкостей отримались близькими до наведених експериментально визначених. Наприклад, для чистого бору $v_{B \text{ розр}} = 15600 \frac{M}{c}$, експериментальне $v_{B \text{ експ}} = 16200 \frac{M}{c}$.

Значення модуля зсуву і модуля Юнга оцінили за формулою

$$E = 2G(1 + \mu).$$

Користуючись працею Самсонова Г.В., Нешпора В.С. [5], визначили коефіцієнт Пуассона

$$f(\mu) = \frac{3,34 \cdot 10^7 T_{пл}^{\frac{2}{3}}}{M \cdot \alpha^{\frac{1}{3}} C V^{\frac{3}{2}} \Theta^3} \text{ та } f(\mu) = \left[\left(\frac{1 + \mu}{3(1 - \mu)} \right)^{\frac{3}{2}} + 2 \left(\frac{2(1 + \mu)}{3(1 - 2\mu)} \right)^{\frac{3}{2}} \right]$$

Всі отримані розрахункові параметри додекаборидів наведені в таблиці 1 і їх можна порівняти з отриманими нами експериментально як статичним, так і динамічним методами [6]. Результати практично співпали.

Висновки: дуже часто замість складних для виконання експериментальних досліджень фізичних характеристик матеріалів можна успішно користуватися апробованими співвідношеннями, формулами.

Таблиця 1 – Основні механічні характеристики додекаборидів рідкісноземельних металів

Фаза	YB ₁₂	TbB ₁₂	DyB ₁₂	HoB ₁₂	ErB ₁₂	TmB ₁₂	YbB ₁₂	LuB ₁₂	ZrB ₁₂	B
$M \cdot 10^{-3}$, кг/моль	218,732	288,656	292,232	294,732	296,982	298,732	302,732	304,732	220,952	10,811
$\gamma \cdot 10^3$, кг/м ³	3,444	4,540	4,611	4,655	4,706	4,756	4,820	4,868	3,611	2,340
$T_{пл}$, К	2950	2400	2550	2750	2600	2750	–	2650	2750	2075
Θ , К	1052	900	850	872	872	868	845	848	976	1200
$\alpha \cdot 10^{-6}$, 1/К	3,2	3,6	4,6	3,6	3,7	3,8	3,7	3,4	3,5	8,3
v_m , м/с	10400	6000	5740	5880	5900	5820	5700	5900	6520	15600 експ. – 16200

Продовження таблиці 1

Фаза	YbB12	TbB12	DyB12	HoB12	ErB12	TmB12	YbB12	LuB12	ZrB12	B	
μ	0,31	0,36	0,37	0,34	0,30	0,33	0,35	0,36	0,39	0,39	
$G, \text{ГПа}$	$3 \nu_m$	195	160	150	160	160	156	170	154	320	
	$3 E_{\text{розр}}$	180	141	151	166	143	157	154	141	156	–
$E_{\text{розр}}, \text{ГПа}$	Розрахунок	270	200	200	210	220	210	200	220	190	–
	[2]	180	220	210	200	200	200	200	190	–	–
$E_{\text{експ}}, \text{ГПа}$	$E_{\text{стат}}$	250	–	190	190	195	197	198	210	200	–
	$E_{\text{дин}}$	240	–	198	178	165	210	230	230	182	390
$f, \text{Гц}$	1544	–	1300	1960	1500	1300	1500	1324	3000	3540	

ЛІТЕРАТУРА:

1. Одінец В.В. Додекабориди рідкісноземельних металів/ Одінец В.В. – К.: Херсонська міська друкарня, 1992. – 57с.
2. Френкель Я.И. Введение в теорию металлов [Текст] /Френкель Я.И. - ГИТТЛ, 1950. – 384с.
3. Köster W. Metallkunde/ Köster W., Rauscher W.Z. – v.39. - 1948. – P.111-120.
4. Францевич И.Н. Упругие постоянные металлов. В сб. «Вопросы порошковой металлургии и прочности металлов» /Францевич И.Н. - Вып.3. - Изд-во АН УССР, 1958. – 234с.
5. Самсонов Г.В. Некоторые физические характеристики металлоподобных соединений/ Самсонов Г.В., Нешпор В.С.// Вопросы порошковой металлургии и прочности материалов. - Вып.V. – 1950 – С.5-33.
6. Одінец В. В. Вплив кристалічної структури на механічні властивості додекаборидів рідкісноземельних металів та цирконію /Одінец В. В., Корінь О. В.// Фізико-хімічна механіка матеріалів. – Вид-во НАН України, 2015. – Том 51. – Вип.4. – С.125-131.