

# ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДОДЕКАБОРИДОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

Одинцов В.В., Корень Е.В.<sup>①</sup>

Херсонский государственный университет, Херсон, ул. 40 лет Октября, 27, 73013, Украина,  
[V.Itsov@mail.ru](mailto:V.Itsov@mail.ru);

<sup>①</sup>Херсонский государственный аграрный университет, Херсон, ул. Розы Люксембург, 23,  
73006, Украина, [koren2205@yandex.ua](mailto: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 ( $2500 \div 2900\text{K}$ ), малого термического расширения ( $4 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$ ), значительных характеристических температур ( $800 \div 1000\text{K}$ ), 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 ( $\mu$ ) 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 ( $E_B=390\text{ГПа}$ ,  $G_B=320\text{ГПа}$  [5],  $\mu=0,39$ ) можно связать с особенностями электронного строения додекаборидных фаз.

В боридных составах  $MeB_{x>2}$  для образования трехмерных структурных комплексов из атомов бора требуется большее число валентных электронов, чем то, которое имеется у бора, в связи с чем связь В-В в боридных фаз этого состава, и что касается додекаборидов редкоземельных металлов, осуществляется за счет валентных sd и даже f-электронов металла. Усложнение струк-

турных 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 В-В. В случае додекаборидных фаз атомы редкоземельных металлов представляют собой подобие пластификатора, снижающего основные прочностные, механические характеристики додекаборидных фаз.

## Литература:

1. Одинцов В.В. Додекабориди рідкісноземельних металів. – Київ.: Херсонська міська друкарня, 1992. – 57с.
2. Френкель Я.И. Введение в теорию металлов. 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. Metallkunde, 39, 149, 1948.
5. Цагарейшвили Г.В. Некоторые механические свойства кристаллов  $\beta$ -ромбодрического бора. Сб. Бор. Получение, структура и свойства – М.: Наука, 1974. – С.121-125.