

*Хентов В.Я., доктор химических наук, профессор,  
Семченко В.В., кандидат химических наук, доцент,  
Южно-Российский государственный политехнический университет*

## О СВЯЗИ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ С ТЕМПЕРАТУРОЙ ДЕБАЯ

**Аннотация:** в статье описано о взаимосвязи физических свойств металлических элементов с температурой Дебая. Данная взаимосвязь описана для щелочных и щелочноземельных металлов. Ранее это явление наблюдалось для таких параметров как плотность, температура плавления, энтальпия плавления, температура кипения, энтальпия испарения, теплоемкость, энергия связи элементов, коэффициент линейного теплового расширения, коэффициент сжимаемости, объёмный модуль упругости, модуль упругости Юнга, твердость по минералогической шкале, поверхностное натяжение, параметр решётки, межъядерное расстояние, энергия кристаллической решетки, работа выхода электрона, энергия Ферми, атомная концентрация и энергия ионизации. В рамках исследования приведена графическая зависимость атомно-ионного радиуса  $s$ -элементов II группы от температуры Дебая металла. Для данной корреляции наблюдалось следующее значение коэффициента корреляции, равное 0,989. Необходимо отметить, что данная зависимость наблюдается и для значений атомного объема. Величина коэффициента корреляции принимает значение равное 0,993. Рассмотрена взаимосвязь среднего температурного коэффициента линейного расширения металлов от величины температуры Дебая щелочного металла. Данные значения действительны для диапазона температур от 0 до 100°C. Наблюдаемый для приведенной зависимости коэффициент корреляции имеет значение 0,992. Экспериментально определена зависимость энергии атомизации кристаллов  $s$ -элементов I и II группы от температуры Дебая металла. Рассчитанное значение коэффициента корреляции при этом равно 0,992. Описана зависимость энергии сублимации металлов от температуры Дебая для металлов. Значение коэффициента корреляции при этом равно величине 0,987. Полученные корреляционные кривые позволяют наиболее полно охарактеризовать взаимосвязь рассматриваемого параметра и вышеперечисленных величин.

**Ключевые слова:** температура Дебая элемента, атомно-ионный радиус, атомный объем, средний температурный коэффициент линейного расширения металлов, энергия атомизации кристаллов, энергия сублимации

Представление о химической связи является основополагающим в учении о строении вещества. С материаловедческой точки зрения представляется интересным рассмотрение роли химической связи в связи проблемой прочности твердого тела.

Прочность твердого тела является важнейшим свойством материала, используемого человеком для изготовления деталей машин, создания различных механизмов и конструкций. Важнейшие области использования материалов – машиностроение и строительная практика. С прочностью связана эволюция рельефа земной поверхности. Методы механической обработки твердого тела тесным образом связаны с его прочностными характеристиками. С понятием прочность связано создание новых конструкционных и функциональных материалов. Особое значение приобретает проблема сохранения прочностных характеристик поверхности твердого тела при различных физико-химических воздействиях на поверхность (механические, химические, термическое, радиационные и другие воздействия).

Принято все твердые тела подразделять на три класса – кристаллические, аморфные и

нанодисперсные. Для твердых тел характерен порядок в расположении соседних атомов, который может быть ограничен ближним порядком. Это касается окружения данного атома. Для аморфных тел ближний порядок ограничен. Но для подавляющего количества кристаллических решеток существует дальний порядок. То есть, кристаллическая решетка является протяженной.

Для кристаллического состояния характерен структурный порядок в расположении в пространстве узлов кристаллической решетки. Переход от кристаллического состояния в жидкое происходит скачком. Температура изменяется скачкообразно и носит название температуры плавления твердого тела. Для кристаллического состояния характерно пребывание вещества в монокристаллическом или поликристаллическом состоянии. Поликристаллические вещества построены из отдельных мелких кристаллов, соединенных межмолекулярными силами. Монокристаллы характеризуются анизотропией свойств в разных направлениях. Это касается проявления таких свойств как, например, электропроводность, теплопроводность, прочность.

Для аморфного состояния наблюдается неупорядоченное расположение атомов или молекул. Переход аморфного тела в жидкое состояние происходит постепенно. Температура при подводе тепловой энергии к твердому телу изменяется в интервале температур. Для аморфных твердых тел существует интервал плавления. Это важное понятие, имеющее значение для процесса термической переработке кристаллических и аморфных тел. И, наконец, аморфные тела изотропны.

В качестве примеров аморфного тела можно привести стекла, смолы, полимеры и т.д. Такие свойства как внутренняя энергия, теплоемкость и плотность не зависят от направления. Для поликристаллических веществ характерно статистическое усреднение свойств в разных направлениях – проявляется явление изотропии.

Вещество может находиться в аморфном и кристаллическом состоянии [1]. Аморфные соединения менее устойчивы, чем кристаллические. Некоторые аморфные вещества, например полимеры органических веществ, закристаллизовать не возможно. Кристаллизации препятствует высокая вязкость расплава. Обычно аморфные тела рассматривают в качестве переохлажденной жидкости. В качестве примера аморфного тела можно привести силикатные стекла, которые спустя длительное время могут неожиданно закристаллизоваться. Поэтому аморфные тела часто называют стеклообразными. К аморфным телам можно отнести, например, серу, селен, оксиды ряда веществ –  $B_2O_3$ ,  $SiO_2$ ,  $GeO_2$ .

Если размеры частиц твердого тела не превышают 100 нм (наносостояние вещества), то для таких частиц вещества работает так называемый размерный эффект. Наноразмерные кристаллы обладают уникальными физическими и химическими свойствами, которые представляют особый интерес для технологии.

Твердое тело можно характеризовать по форме движения узлов кристаллической решетки. Для твердого агрегатного состояния вещества характерна колебательная форма движения частиц (узлов) решетки твердого тела. С образованием кристаллической решетки на графике зависимости энергии в функции расстояния между узлами появляется кривая с потенциальной ямой. С повышением температуры частица вылезает из потенциальной ямы, амплитуда колебаний увеличивается. Таким образом, твердое агрегатное состояние характеризуется колебательной формой движения частиц. Такая форма движения получила название трансляционного движения или самодиффузии и характерна для жидкого агрегатного состояния вещества. Твердое и жидкое состояние вещества

получило название конденсированного состояния. Дальнейший рост температуры приводит к хаотическому движению частиц, увеличению расстояния между ними. Такая форма движения характерна для газообразного состояния вещества.

Наиболее распространенными твердыми телами являются металлы. На их долю приходится около  $\frac{3}{4}$  всех элементов Периодической системы. Конечно, четких различий между металлами и неметаллами не существует. Тем более что многие неметаллические элементы, при высоком давлении способны переходить в металлическое состояние.

Существует классификация твердых тел, базирующаяся на образовании химических связей. Строение кристалла, а также его физико-химические свойства определяются природой химических связей. Эта область представляет интерес для физиков и химиков и, безусловно, представляет интерес для технологии переработки вещества.

Твердые тела часто классифицируют по типу химической связи. Принято различать пять типов твердых тел: ионные, ковалентные, металлические, молекулярные и соединения с водородными связями. При этом имеют место случаи, когда в твердых веществах сочетается несколько типов химической связи.

Тип химической связи определяет способность кристалла к пластической деформации или хрупкому разрушению.

В кристаллах с ковалентной связью (атомной решеткой) незначительное смещение атомов друг относительно друга приводит к тому, что связи разрушаются быстрее, чем образуются новые. К таким кристаллам относятся алмаз, германий, мышьяк и др. Они после достижения предела упругости подвержены хрупкому разрушению. Такие кристаллы не проявляют пластической деформации.

В кристаллах с металлической связью, не имеющей строгой направленности, проявляется высокая пластичность. Перемещение атомов друг относительно друга в пределах плоскости скольжения не приводит к разрушению металлической связи, а смещение плоскостей может происходить на расстояние до нескольких тысяч атомных расстояний.

Кристаллы с ионной связью занимают промежуточное положение. Они могут быть подвержены как хрупкому разрушению, так и пластической деформации.

При исследовании проявления физических свойств металлических элементов важно найти один параметр, оказывающий влияние на физиче-

ские свойства. Таким параметром оказалась температура Дебая химического элемента.

Ранее, для щелочных и щелочноземельных металлов [2] была отмечена связь плотности, температуры плавления, энтальпии плавления, температуры кипения, энтальпии испарения, теплоемкости, энергии связи элементов, коэффициента линейного теплового расширения, коэффициента сжимаемости, объёмного модуля упругости, модуля упругости Юнга, твердости по минералогической шкале, поверхностного натяжения, параметра

решётки, межъядерного расстояния, энергии кристаллической решетки, работы выхода электрона, энергии Ферми, атомной концентрации и энергии ионизации с температурой Дебая химического элемента [3].

К таким связям можно также отнести атомно-ионные радиусы щелочных [3] и щелочноземельных металлов. На рис. 1 приведена зависимость атомно-ионного радиуса  $s$ -элементов II группы [3].

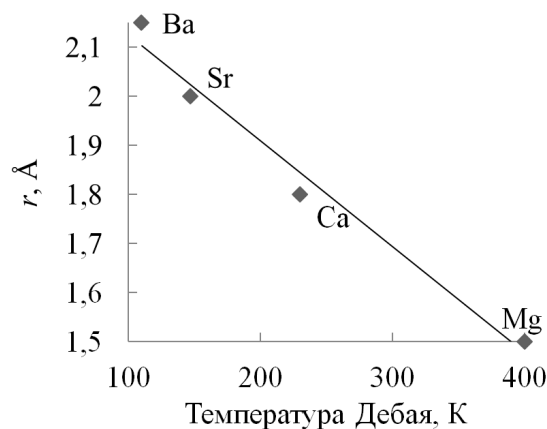


Рис. 1. Зависимость атомно-ионного радиуса  $r$   $s$ -элементов II группы от температуры Дебая металла. Коэффициент корреляции 0,989.

От температуры Дебая щелочноземельного металла зависит атомный объем [4] (рис. 2).

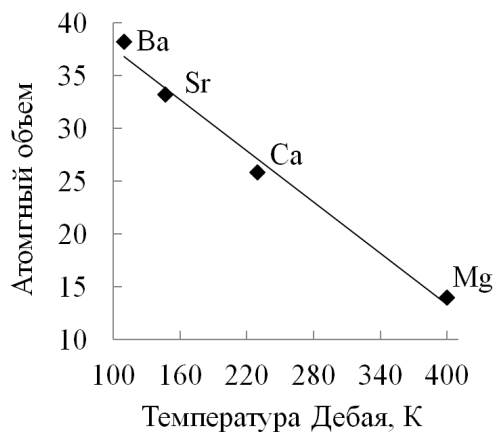


Рис. 2. Зависимость атомного объема от температуры Дебая металла. Коэффициент корреляции 0,993

Средний температурный коэффициент линейного расширения металлов  $\alpha \cdot 10^6 \text{ K}^{-1}$  (при темпера-

турах от 0 до 100°C) [4] надежно связан с температурой Дебая щелочного металла (рис. 3).

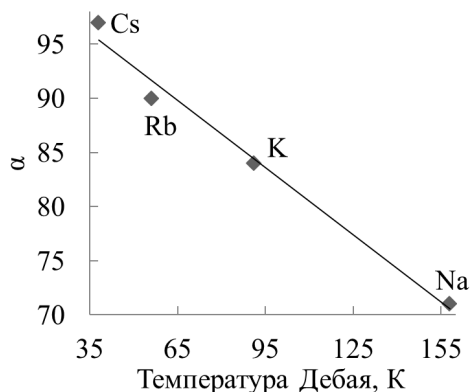


Рис. 3. Зависимость среднего температурного коэффициента линейного расширения металлов  $\alpha$  от температуры Дебая металла. Коэффициент корреляции 0,992

Экспериментально найденная энергия атомизации кристаллов  $U$   $s$ -элементов I и II группы [5]

(рис. 4) также зависит от температуры Дебая металла (рис. 4).

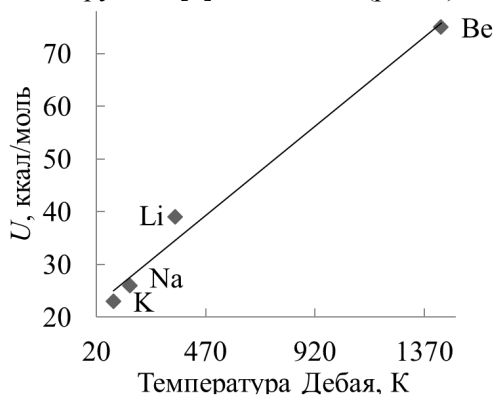


Рис. 4. Зависимость энергии атомизации кристаллов  $U$   $s$ -элементов I и II группы от температуры Дебая металла. Коэффициент корреляции 0,992

С температурой Дебая связана также энергия сублимации металлов  $Q_{субл}$  [6] (рис. 5).

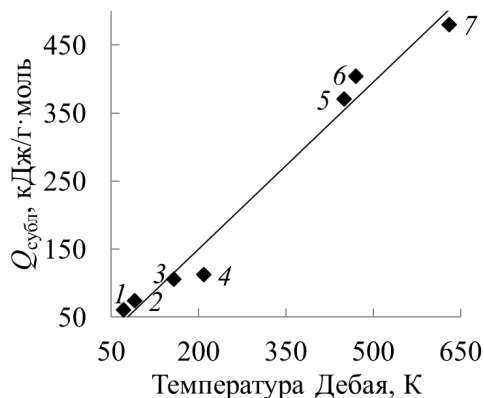


Рис. 5. Зависимость энергии сублимации металлов  $Q_{субл}$  от температуры Дебая металла. 1 – Hg, 2 – K, 3 – Na, 4 – Cd, 5 – Ni, 6 – Fe, 7 – Sr. Коэффициент корреляции 0,987

Таким образом, показано, что ряд важных физико-химических параметров кристаллов металли-

ческих элементов надежно определяется температурой Дебая.

### Литература

1. Карапетянц М.Х., Дракин С.И. Общая и неорганическая химия: Учебник для вузов. 4-е изд., стер. М.: Химия, 2000. 592 с.
2. Хентов В.Я., Гасанов В.М. О связи физических свойств простых веществ (*s*-элементов I и II групп) периодической системы с характеристической температурой твердого тела // Инженерно-физический журнал. 2015. Т. 88. №3. С. 729 – 732.
3. Мейер К. Физико-химическая кристаллография. М.: Металлургия. 1978. 791 с.
4. Лившиц Б.Г., Крапошин В.С., Липецкий Я.Л. Физические свойства металлов и сплавов. М.: Металлургия. 1980. 320 с.
5. Вайнштейн Б.К., Фридкин В.М., Инденбом В.Л. Современная кристаллография. Том 2. Структура кристаллов. М.: Наука. 1979. 367 с.
6. Котречко С.А., Мешков Ю.Я. Предельная прочность. Кристаллы, металлы, конструкции. Киев: Наукова книга. 2007. 295 с.

### References

1. Karapetyanc M.H., Drakin S.I. Obshchaya i neorganicheskaya himiya: Uchebnik dlya vuzov. 4-e izd., ster. M.: Himiya, 2000. 592 s.
2. Hentov V.YA., Gasanov V.M. O svyazi fizicheskikh svojstv prostykh veshchestv (*s*-ehlementov I i II grupp) periodicheskoy sistemy s harakteristicheskoy temperaturoj tverdogo tela // Inzhenerno-fizicheskij zhurnal. 2015. T. 88. №3. S. 729 – 732.
3. Mejer K. Fiziko-himicheskaya kristallografiya. M.: Metallurgiya. 1978. 791 s.
4. Livshic B.G., Kraposhin V.S., Lipeckij YA.L. Fizicheskie svojstva metallov i splavov. M.: Metallurgiya. 1980. 320 s.
5. Vajnshtejn B.K., Fridkin V.M., Indenbom V.L. Sovremennaya kristallografiya. Tom 2. Struktura kristallov. M.: Nauka. 1979. 367 s.
6. Kotrechko S.A., Meshkov YU.YA. Predel'naya prochnost'. Kristally, metally, konstrukcii. Kiev: Naukova kniga. 2007. 295 s.

*Khentov V.Ya., Doctor of Chemical Sciences (Advanced Doctor), Professor,  
Semchenko V.V., Candidate of Chemical Sciences (Ph.D.), Associate Professor,  
Southern Russian State Polytechnical University*

### ON THE CONNECTION OF THE PHYSICAL PROPERTIES OF METAL ELEMENTS WITH THE TEMPERATURE OF DEBAY

**Abstract:** the article describes the relationship between the physical properties of metallic elements and the Debay temperature. This relationship is described for alkaline and alkaline earth metals. Previously, this phenomenon was observed for such parameters as density, melting point, melting enthalpy, boiling point, enthalpy of evaporation, heat capacity, binding energy of elements, coefficient of linear thermal expansion, compressibility coefficient, bulk modulus of elasticity, Young's modulus of elasticity, mineralogical hardness, surface tension, lattice parameter, internuclear distance, crystal lattice energy, electron work function, Fermi energy, atomic concentration and ionization energy. Within the framework of the study, a graphical dependence of the atomic-ion radius of the *s*-elements of group II on the Debay temperature of the metal is shown. For the given correlation, the following value of the correlation coefficient was observed, equal to 0,989. It should be noted that this dependence is also observed for the values of the atomic volume. The value of the correlation coefficient takes the value equal to 0,993. The interrelation between the average temperature coefficient of linear expansion of metals and the Debay temperature of an alkali metal is considered. These values are valid for the temperature range from 0 to 100°C. The correlation coefficient observed for the reduced dependence is 0,992. The dependence of the atomization energy of the crystals of the *s*-elements of the I and II groups on the Debay temperature of the metal is determined experimentally. The calculated value of the correlation coefficient is 0,992. The dependence of the sublimation energy of metals on the Debay temperature for metals is described. The value of the correlation coefficient is equal to the value 0,987. The correlation curves obtained will make it possible to characterize most fully the interrelation of the parameter under consideration and the above-mentioned quantities.

**Keywords:** Debay temperature of the element, atomic-ion radius, atomic volume, mean temperature coefficient of linear expansion of metals, atomization energy of crystals, sublimation energy