

СВОЙСТВА ВОЛЬФРАМА В РАЗЛИЧНЫХ Р-Т-УСЛОВИЯХ

Крамынин С.П., Ахмедов Э.Н.

ФГБУН Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН,
367015, Махачкала, ул. М. Ярагского 94
e-mail: kraminin@mail.ru

Для расчетов термодинамических свойств ОЦК вольфрама использован формализм из^{1,2}, апробированный на железе, алмазе, кремнии, германии и молибдене. Для описания парного межатомного взаимодействия был использован 4-х параметрический потенциал Ми–Леннард–Джонса:

$$\phi(r) = D/(b-a) [a(ro/r)b - b(ro/r)a], \quad \text{где } D, ro, b > a > 1 - \text{параметры.} \quad (1)$$

В данной работе параметры (1) определены оптимизацией по изотерме уравнения состояния $P(V/V_0, T = 300 \text{ K})$ и по коэффициенту теплового объемного расширения³: $\alpha_p(P = 0, T = 300 \text{ K}) = 13.01 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Здесь V/V_0 – отношение объемов кристалла при P и T , и при $P = 0$ и $T = 0 \text{ K}$. Полученные таким образом значения параметров для (1): $r_o = 2.7365 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $D/k_B = 40000 \text{ K}$, $a = 2.6$, $b = 7.2$, где k_B – постоянная Больцмана. На рис. 1 показаны наши расчеты (сплошная линия) для $P(V/V_0, T = 300 \text{ K})$ и литературные данные. Также были рассчитаны барические зависимости для: температуры Дебая; трех параметров Грюнайзена; изотермического модуля упругости; удельной поверхностной энергии и $\alpha_p(P)$ (показано на рис. 2) вдоль двух изотерм 300 и 3000 К. Впервые получены барические зависимости производных по давлению для указанных свойств при 300 и 3000 К.

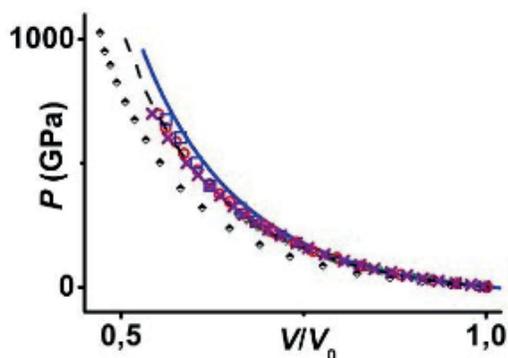


Рисунок 1. Изотерма уравнения состояния вольфрама при $T = 300 \text{ K}$.

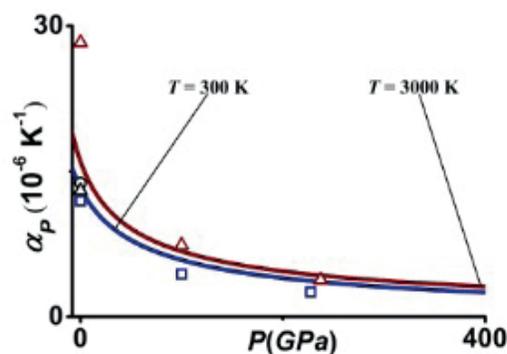


Рисунок 2. Барические зависимости $\alpha_p(P)$. Символы – литературные данные.

Литература

1. Magomedov M.N., Technical Physics, 2015, 60, 11, 1619.
2. Akhmedov E.N., J. Physics and Chemistry of Solids, 2018, 121, 62.
3. Bodryakov V.Yu., High Temperature, 2015, 53, 5, 643.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-29-11013_мк.