

РАСЧЕТ ТЕПЛОТЫ ПЛАВЛЕНИЯ ТУГОПЛАВКИХ ГПУ-МЕТАЛЛОВ С ПОМОЩЬЮ ПЕРВОПРИНЦИПНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПРАВИЛО ТРУТОНА

Минаков Д.В., Левашов П.Р.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**minakovd@ihed.ras.ru*

Как известно, связь энтальпии испарения и температуры кипения многих веществ с хорошей точностью описывается универсальной эмпирической линейной зависимостью, предложенной Ф.Т. Трутоном и, как следствие, носящей его имя — правило Трутона. Похожая зависимость зачастую используется для оценки энтальпии плавления металлов в случае отсутствия непротиворечивых экспериментальных данных, что особенно актуально для тугоплавких металлов. В ряде теоретических работ было высказано мнение, что металлы с плотноупакованной кристаллической структурой типа ГПУ и ГЦК должны иметь схожую величину энтропии плавления [1, 2]. В соответствии с этим предположением существующие теоретические оценки энтальпии плавления тугоплавких ГПУ-металлов, рения и осмия, были сделаны на основе анализа экспериментальных значений энтропии плавления тугоплавких ГЦК-металлов — родия, платины и иридия, и составляют 60,4 и 57,9 кДж/моль для рения и осмия, соответственно. Именно эти величины приводятся во многих справочниках, в том числе в популярном сборнике CRC Handbook of Chemistry and Physics [3]. Однако, некоторые эксперименты по быстрому импульсному нагреву образцов рения не подтверждают существующие оценки и демонстрируют значительно более низкую теплоту плавления около 30 кДж/моль [4].

В данной работе представлены прямые расчеты теплоты плавления тугоплавких ГПУ-металлов с использованием первопринципного метода квантовой молекулярной динамики. Результаты наших расчетов не подтверждают высокие значения теплоты плавления рения и осмия, предсказываемые с использованием экстраполяции зависимости теплоты плавления от температуры плавления для тугоплавких ГЦК-металлов, но находятся в хорошем согласии с экспериментами по импульсному нагреву проводников.

-
1. H. Sawamura, Trans. Jpn. Inst. Met. 13, 225 (1972).
 2. V.Ya. Chekhovskoi, and S.A. Kats, High Temp.-High Pressures, 13, 611 (1981).
 3. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 84th ed., edited by D. R. Lide (CRC Press, Boca Raton, Florida, 2003).

4. J.W. Arblaster, *Calphad*, 20, 343 (1996).