

ЛИНИЯ ПЛАВЛЕНИЯ ТИТАНА: СОГЛАСОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Кулямина Е.Ю., Зицерман В.Ю., Фокин Л.Р.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**kulyamina.elena@gmail.com*

Работа продолжает выполненные в ОИВТ РАН исследования свойств Ti [1], распространив их на линию плавления при давлении до 90 ГПа. На сегодняшний день известны точка плавления $T_m^0 = 1944 \pm 3$ К, соответствующая ОЦК фазе, и теплота плавления с погрешностью 5 %; надежные данные о скачке объема отсутствуют. Впервые опытные данные по кривой плавления в интервале 15–80 ГПа получены в 2001 г. [2] методом алмазных наковален. Экстраполируя их к давлению 1 атм, авторы получили аномально низкое значение наклона кривой плавления ~ 7 К/ГПа, не свойственное тугоплавким металлам.

Здесь проведена обработка данных [3], согласованная с оценкой скачка объема в точке плавления. Неточность в его определении из данных о плотности обеих фаз вынудила нас прибегнуть к анализу зависимости скачка объема от энтропии плавления для 3d элементов, от Ti до Ni. Для Ti получена оценка $\Delta V_m = 0.257 \pm 0.026$ см³/моль, что дало значение начального наклона кривой плавления $(dT_m/dp)_{p \rightarrow 0} = 35 \pm 5$ К/ГПа [4]. Согласованное с этой оценкой и воспроизводящее данные [3] уравнение Симона хорошо передает плавное снижение наклона при высоких давлениях.

Заметим, что без учета данных [3] следовал бы вывод о почти неизменной крутизне линии плавления во всем интервале. Именно это заключение получено в [5], где диаграмма состояния Ti построена без использования результатов [3].

1. Chekhovskoi V.Ya., Fokin L.R., Peletskii V.E. et al. Handbook of Titanium Based Materials: Thermophysical Properties. Data and Studies. NY: Begell House, 2007. 275 p.
2. Errandonea D., Schwager B., Ditz R. et al. Systematics of transition metals melting // Phys. Rev. B. 2001. V. 63. P. 131–134.
3. Stutzmann V., Devaële A., Bouchet J. et al. High-pressure melting curve of titanium // Phys. Rev. B. 2015. V. 92. 224110.
4. Кулямина Е.Ю., Зицерман В.Ю., Фокин Л.Р. Согласование термодинамических свойств на линии плавления титана: проблемы, результаты // ЖТФ. 2018. Т. 88. № 3. С. 380–384.
5. Елькин В.М., Михайлов В.Н., Михайлова Т.Ю. Полуэмпирическое уравнение состояния твердых α, ω, β – фаз титана и жидкости с учетом испарения // ВАНТ. Серия «Теоретическая и прикладная физика». 1977. Вып. 1. С. 28–42.