

Научная статья
1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)
УДК 536.2.023
doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.04.008

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛАНТАНА, ПРАЗЕОДИМА И ОЦЕНКА ТЕПЛОВЫХ СВОЙСТВ ИХ СПЛАВОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРАВИЛА СМЕШЕНИЯ КОМПОНЕНТОВ

Сергей Владимирович Терехов¹

¹Донецкий физико-технический институт, ул. Розы Люксембург, 72, 283048, Донецк, Россия
¹svlter@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3037-7258>

Аннотация. Предложен новый подход к теоретическому отображению реальных систем. В рамках исследуемой модели был проведен расчет таких теплофизических характеристик лантана и празеодима, как теплоемкость, коэффициент теплового линейного расширения, плотность, теплопроводность, температуропроводность и удельное электросопротивление. Полученные температурные зависимости адекватно описывают экспериментальные данные. С помощью правила смешения компонентов получены оценки тепловых свойств ряда сплавов лантана с празеодимом. Тепловые свойства сплавов ограничены соответствующими характеристиками лантана и празеодима. В процессе расчетов подтвержден эффект наследования сплавами ряда особенностей поведения температурных кривых компонентов. Выдвинуто предположение, что более строгий расчет может привести к нивелированию этого эффекта и к появлению в результате смешения взаимодействующих компонентов новых фазовых превращений и структур.

Ключевые слова: редкоземельный металл, лантан, празеодим, сплав, теплоемкость, плотность, температуропроводность, удельное электросопротивление, правило смешения, компонент

Для цитирования: Терехов С.В. Термофизические характеристики лантана, празеодима и оценка тепловых свойств их сплавов с использованием правила смешения компонентов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2025. Т. 22, № 4. С. 456-468. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.04.008.

Original article

THERMOPHYSICAL CHARACTERISTICS OF LANTHANUM, PRASEODYMIUM AND EVOLUATION OF THERMAL PROPERTIES OF THEIR ALLOYS USING THE RULE OF MIXTURE OF COMPONENTS

Sergey V. Terekhov¹

¹Donetsk Institute of Physics and Technology, Rosa Luxemburg str., 72, 283048, Donetsk, DPR, Russia
¹svlter@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3037-7258>

Abstract. A new approach to the theoretical representation of real systems was proposed. In the frame-work of the studied model, calculations were made for the thermal physical characteristics of lanthanum and praseodymium, such as heat capacity, thermal linear expansion coefficient, density, thermal conductivity, temperature conductivity, and specific electrical resistance. The obtained temperature dependencies adequately describe the experimental data. Using the rule of mixing components, estimates of the thermal properties of several lanthanum alloys with praseodymium have been obtained. The thermal properties of the alloys are limited by the corresponding characteristics of lanthanum and praseodymium. During the calculations, the effect of inheritance of a number of characteristics in the temperature curves of the components by the alloys was confirmed. It has been suggested that a more rigorous calculation could lead to the neutralization of this effect and the emergence of new collective phase transitions and structures as a result of the mixing of interacting components.

Keywords: rare-earth metal, lanthanum, praseodymium, alloy, heat capacity, density, thermal conductivity, electrical resistivity, mixing rule, component.

For citation: Terekhov S.V. (2025). Thermophysical characteristics of lanthanum, praseodymium, and evaluation of the thermal properties of their alloys using the rule of mixture of components. *Fundamental'nye problemy sovremennoego materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 22(4), 456-468. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.04.008.

Введение

Редкоземельные металлы (РЗМ) начали применяться со второй половины XIX века. В на-стоящее время их используют в ядерной технике (регулирующие стержни атомных реакторов, сплавы и краски для защиты от радиации и т.д.), черной и цветной металлургии (раскислители, десульфаторы, для улучшения физико-механических и других свойств), керамической, стекольной и других промышленных отраслях.

Несмотря на широкое использование РЗМ, их теплофизические характеристики изучены недостаточно [1], особенно для двух- и более компонентных сплавов. По мнению автора, наиболее надежные и самосогласованные экспериментальные данные по тепловым свойствам чистых РЗМ лантана La и празеодима Pr приведены в работах [2-7], результаты которых входят и в современные базы термодинамических измерений. Такой отбор данных связан с разбросом значений измеряемых характеристик у разных авторов, причинами которого являются:

- выбор той или иной измерительной аппаратуры и методики проведения опытов;
- состав атмосферы внутри калориметра;
- материал и местоположение используемого тигля;
- предварительная подготовка образца (отжиг, прокатка, вакуумирование и т.д.);
- наличие в образце легколетучих примесей;
- возможность протекания кинетических процессов, – и другие факторы.

Развитие высоконтеллектуальных технологий, автоматизация средств производства и внедрение управляемых компьютерных программ требуют помимо создания баз экспериментальных данных, разработки теоретических подходов для получения аналитических связей между внешними параметрами и свойствами вещества.

Аналитическое описание полученных измерений проводится путем математической аппроксимации массивов данных (в основном экспериментальные данные приближаются полиномами разного порядка на том или ином температурном интервале [8]) или использованием физико-математического моделирования. В первом случае возникают проблемы с количеством используемых полиномов и их сшивкой на концах температурных диапазонов. Во втором случае, например, при использовании модели Дебая для расчета теплоемкости La не удается описать рост теплоемкости металла при повышении температуры. Также модели этого типа не позволяют описать особенности на температурных зависимостях теплофизических характеристик (скачки при структурных и агрегатных превращениях, пики и ямы с разной остротой вершин, их чередование) [9, 10]. Расчет температурной зависимости теплопроводности в рамках современной теории металлов [11] проводится с использованием двух разных формул в низко- и высокотемпературных областях графика.

Приоритетной задачей является разработка такой модели, в рамках которой поведение теплофизической характеристики в области конденсированного состояния металла описывается одной непрерывной функцией. Этому требованию удовлетворяет авторская модель двухфазной локально-равновесной области с различными степенями упорядоченности существующих идеальных фаз [12].

Было предложено разбиение исследуемого образца на совокупность малых областей, которые согласно принципу Пригожина значительно быстрее переходят в состояние термодинамического равновесия, чем образец в целом. В областях существуют идеальные фазы с разной упорядоченностью. Выбрав в качестве параметра порядка разность объемных долей фаз и минимизировав энергию Гиббса по параметру порядка по-

лучают температурную зависимость объемной доли более упорядоченной фазы. Использование классических формул термодинамики Гиббса и разложение некоторых функций в ряд Маклорена позволило получить формулы [12], успешно примененные к расчету теплофизических свойств различных материалов: металлов, оксидов, карбидов, сложных оксидов (см., например, [13-15]) и других.

Основным недостатком модели, как и любого другого феноменологического построения, является определение коэффициентов и параметров модели из сравнения с экспериментальными данными. Устранение основного недостатка модели можно осуществить путем установления взаимосвязей между ее коэффициентами и такими справочными данными, как, например, температуры и энталпии плавления и испарения металлов, а также аналогичными характеристиками структурных, магнитных и других переходов. Достижения модели состоят в: простоте полученных соотношений; возможности описания непрерывными функциями логистического типа широкого круга конденсированных веществ различной физико-химической природы; прогнозирование поведения базисной температурной зависимости теплофизической величины на экспериментально неисследованных температурных интервалах; адекватной аппроксимации таких особенностей на графиках как скачки, пики и ямы с округлыми и острыми вершинами, чередование пиков и ям. Эти особенности отображают протекание структурных превращений, фазовых переходов I и II родов, полиморфных изменений.

В данной работе проведен расчет теплофизических характеристик РЗМ лантана La и празеодима Pr, а также оценка тепловых свойств ряда их бинарных сплавов (La₈₀Pr₂₀, La₅₅Pr₄₅ и La₃₅Pr₆₅) при использовании правила смешения компонентов.

Цель работы. Определение температурных зависимостей теплофизических характеристик лантана La, празеодима Pr и их сплавов с использованием авторской модели вещества.

Квазидвухфазная авторская модель металла

В рамках термодинамики Гиббса чистый металл является однофазной системой. Однако

помимо электронов и атомов реальный образец чистого металла содержит дефекты (вакансию, дислокации, дисклинации, примесные центры и так далее) и разнообразные квазичастицы (фононы, магноны и другие) [16]. Они могут способствовать образованию и существованию в локальных областях хотя бы двух фаз с разными степенями порядка.

Согласно принципу И. Пригожина [17] реальный образец металла можно представить в виде совокупности локально-равновесных областей с существующими фазами порядка. Такое моделирование возможно при плавном изменении термодинамических потенциалов от времени t и пространственных координат r .

С математической точки зрения изменение измеряемой величины в выделенной точке образца и ее малой окрестности описывается частной производной (локальный уровень). Полученную таким образом температурную зависимость теплофизической характеристики будем называть базисной. Перемещение от точки к точке задается полной производной функции, описывающей изменение свойства для образца в целом (субстанциональный уровень).

Пусть в локально-равновесной области с объемом V более упорядоченная фаза 1 занимает объем V_1 , а менее упорядоченная фаза 2 – V_2 . Тогда объемная доля первой фазы $x_1 = V_1 / V = \dots = x$, а второй фазы – $x_2 = V_2 / V = 1 - x$. В качестве параметра порядка η выберем разность этих объемных долей

$$\eta = x_1 - x_2 = 2x - 1, \quad x_1 = x = (1 + \eta) / 2, \\ x_2 = 1 - x = (1 - \eta) / 2. \quad (1)$$

Полагая фазы идеальными, запишем химические потенциалы фаз μ_i ($i=1,2$) при давлении P , температуре T , в точке r и в момент времени t

$$\mu_i = \mu_{i0} + k_B T \ln x_i, \quad (2)$$

где μ_{i0} – стандартные значения химических потенциалов для каждой из фаз, k_B – постоянная Больцмана.

Энергия Гиббса из расчета на единицу объема двухфазной системы с учетом соотношений (1) и (2) равна

$$g = \sum_{i=1}^2 \mu_i x_i = g_0 + \frac{1}{2}(g_1\eta - g_2T), \quad (3)$$

здесь параметры

$$g_0 = (\mu_{10} + \mu_{20} - 2k_B T \ln 2)/2, \quad g_1 = \mu_{10} - \mu_{20},$$

$$g_2 = -k_B [(1+\eta) \ln(1+\eta) + (1-\eta) \ln(1-\eta)].$$

Локальное термодинамическое равновесие малой области соответствует минимуму (3) по параметру порядка η :

$$\left(\frac{\partial g}{\partial \eta}\right)_{\eta=\eta_0} = 0 \Rightarrow$$

$$g_1 + k_B T \ln[(1+\eta_0)/(1-\eta_0)] = 0 \Rightarrow$$

$$\eta_0(T) = -\text{th}(g_1/(2k_B T)). \quad (4)$$

При температуре T_x объемные доли фаз совпадают, т. е. параметр $\eta = 0$, следовательно, функция

$$g_1(T_x) = \mu_{10} - \mu_{20} = 0.$$

Представив $g_1/(2k_B)$ в виде ряда Тейлора в окрестности температуры T_x с ограничением линейным членом разложения, получим

$$g_1/(2k_B) = -b(T - T_x).$$

Таким образом, объемная доля фазы 1 описывается температурной зависимостью

$$x(T) = \{1 + \text{th}[b(1 - (T_x/T))]\}/2. \quad (5)$$

Параметр b связан с температурой T_x , при которой помимо совпадения объемных долей фаз наблюдается экстремум полной первой производной $u_x = (dx(T)/dT)_{T=T_x}$ и перегиб S -образной кривой (5):

$$b = 2 \cdot T_x \cdot u_x. \quad (6)$$

При малых значениях параметра b кривая (5) вытянута вдоль оси абсцисс, а график первой производной от функции (5) описывает пик при положительном значении b (или яму при $b < 0$) с округлой вершиной. При достаточно больших величинах параметра b кривая (5) отображает «ступеньку», т. е. описывает конечный скачок перехода металла в новое состояние. В этом случае график первой производной от (5) принимает вид пика (ямы) с острой вершиной (например, магнитный фазовый переход). Таким образом, величина параметра b указывает на формирование той или иной особенности на температурной кривой.

Температурные зависимости теплофизических характеристик

Рассмотрим расчет теплофизических характеристик: теплоемкости C , коэффициента теплового линейного расширения α_L , плотности d , теплопроводности λ , температуропроводности a и удельного электросопротивления ρ .

Энтропия исследуемого металла как единой системы

$$\sigma = -(dg/dT) = \sigma_x + \varepsilon_T u, \quad (7)$$

где локальная энтропия σ_x по [18] равна

$$\sigma_x = -(\partial g / \partial T)_x = \sigma_1 + \sigma_2 x + \sigma_3(x), \quad (8)$$

здесь функции $\sigma_1 = -\partial \mu_{20} / \partial T$, $\sigma_2 = -\partial g_1 / \partial T$, $\sigma_3(x) = -k_B [x \ln x + (1-x) \ln(1-x)]$ – энтропия смешения субэлементов фаз, $u = dx/dT$, а энергия сосуществования фаз ε_T задается равенством

$$\varepsilon_T = -g_1 - \theta \ln[x/(1-x)]. \quad (9)$$

Локальное равновесие достигается при обращении в нуль энергии сосуществования фаз ε_T (9), при этом связь объемной доли фазы 1 с температурой принимает вид равенства (5).

Теплоемкость образца при достижении локального равновесия определяется формулой

$$C = Td\sigma/dT = k_1(T) + k_2(T)x + k_3(T)Tu, \quad (10)$$

где $k_1(T) = Td\sigma_1/dT$, $k_2(T) = Td\sigma_2/dT$, $k_3(T)T = \sigma_2 + T(d\sigma_3/dT + d\varepsilon_T/dT)$.

Разложим коэффициенты $k_\alpha(T)$ в ряды Маклорена и ограничимся линейными членами, получим

$$k_\alpha(T) = k_{\alpha 1} + k_{\alpha 2}T, \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (11)$$

В предыдущих работах автора для описания массивов экспериментальных данных по теплофизическими характеристикам для конденсированного состояния вещества использовалась модель с постоянными коэффициентами и $k_{11}=k_{22}=k_{32}=0$, а в данной работе – $k_{11}=k_{32}=0$ и $k_{22}\neq 0$. Иными словами, теплоемкость образца вычисляется по формуле

$$C = k_{12}T + k_{21}x + (k_{22}x + k_{31}u)T. \quad (12)$$

Первые два слагаемых описывают базисную линию теплоемкости (локальный уровень), причем коэффициент k_{12} [Дж/(моль· К²)] задает тангенс угла наклона кривой (12) в окрестности абсолютного нуля и в области довольно высоких температур. Первое слагаемое в соотноше-

ни (12) описывает вклад в теплоемкость электронной подсистемы, а второе слагаемое с коэффициентом k_{21} [Дж/(моль·К)] – вклад остальных подсистем. Третье слагаемое с коэффициентом k_{22} [Дж/(моль·К²)] определяет изменение графика при температуре, превышающей T_x . Четвертое слагаемое в (12) с коэффициентом k_{31} [Дж/(моль·К)] отображает вклад в теплоемкость «кинетических процессов» вида фазовых переходов I и II родов как в подсистемах, так и в образце в целом. Аналогичными слагаемыми описываются такие же явления в подсистеме i .

Коэффициент теплового линейного расширения (КТЛР) металла на субстанциональном уровне по второму правилу Грюнайзена [19, ф-ла (1.6)] описывается практически такой же температурной зависимостью, как и теплоемкость (12)

$$\alpha_L \cdot 10^6 = q_{12}T + q_{21}x_\alpha + (q_{22}x_\alpha + q_{31}u_\alpha)T, \quad (13)$$

коэффициенты q_{12} [1/K²], q_{21} [1/K], q_{22} [1/K²] и q_{31} [1/K] – постоянные величины. КТЛР связан с коэффициентом теплового объемного расширения (КТОР) α_V равенством [20]

$$\alpha_V = l \cdot \alpha_L, \quad (14)$$

где $l \approx 3$.

В нижеприведенных формулах и таблицах коэффициенты в слагаемых вычисляемой характеристики имеют размерность, соответствующую расчетной величине.

Плотность d металлической системы была рассчитана по формуле из [21]

$$d = d_0[1 + \alpha_V(293 - T)] + k_d x_d \quad (15)$$

с дополнительным слагаемым $k_d x_d$, учитывающим скачок плотности при фазовом переходе кристалл-жидкость.

Теплопроводность λ вычислялась с использованием данных работы [22], обобщивших равенство Дебая [23]

$$\lambda = Cv l / 3 \quad (16)$$

(l и v – длина свободного пробега и скорость электрона) для конденсированного состояния образца, что позволяет воспользоваться формулой (10) с последующим разложением коэффициентов в ряд Маклорена в линейном приближении

$$\lambda = g_{12}T + g_{21}x_\lambda + (g_{22}x_\lambda + g_{31}u_\lambda)T. \quad (17)$$

Температуропроводность металлов равна [24]

$$a = \lambda / (c \cdot d), \quad (18)$$

где $c = C/M_a$ – удельная теплоемкость, M_a , 10⁻³ [кг/моль] – атомная (молекулярная) масса металла (сплава). Отметим, что формула (18) позволяет проверить как согласованность массивов экспериментальных данных, так и их теоретической аппроксимации вышеприведенными соотношениями.

Удельное электросопротивление ρ лантана (празеодима) в рамках данного подхода вычислим по формуле вида (12), (13) и (17)

$$\rho \cdot 10^8 = h_{12}T + h_{21}x_\rho + (h_{22}x_\rho + h_{31}u_\rho)T. \quad (19)$$

Правило смешения [11] компонентов устанавливает линейное изменение теплофизического свойства A_m образца металлического сплава от значения этой характеристики для первого компонента A_1 до ее величины для второго компонента A_2

$$A_m = n_1 A_1 + n_2 A_2, \quad n_1 + n_2 = 1, \quad (20)$$

здесь n_i ($i=1,2$) – атомная (или массовая) доля компонента.

Результаты расчета и их обсуждение

В табл. 1 и 2 приведены функции для расчета теплофизических характеристик лантана и празеодима соответственно, там же в таблицах показаны параметры для вычисления объемной доли

Таблица 1. Расчетные функции и значения параметров для лантана

Table 1. Calculation functions and parameter values for lanthanum

Характеристика							Ссылка																								
<i>Теплоемкость</i>																															
$C = 0.0001 \cdot T + 37.5 \cdot x + 0.6 \cdot x_{(1)} + 4.2 \cdot x_{(2)} - 6.9 \cdot x_{(3)} + T \cdot [4.7 \cdot u_{(4)} + 0.001 \cdot x_{(5)}]$																															
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>Доля</th><th>x</th><th>$x_{(1)}$</th><th>$x_{(2)}$</th><th>$x_{(3)}$</th><th>$x_{(4)}$</th><th>$x_{(5)}$</th><th></th></tr> </thead> <tbody> <tr> <td>b</td><td>0.57</td><td>2000</td><td>2000</td><td>2000</td><td>2.6</td><td>11</td><td></td></tr> <tr> <td>T_x</td><td>50</td><td>583</td><td>1141</td><td>1199</td><td>1288</td><td>1288</td><td></td></tr> </tbody> </table>								Доля	x	$x_{(1)}$	$x_{(2)}$	$x_{(3)}$	$x_{(4)}$	$x_{(5)}$		b	0.57	2000	2000	2000	2.6	11		T_x	50	583	1141	1199	1288	1288	
Доля	x	$x_{(1)}$	$x_{(2)}$	$x_{(3)}$	$x_{(4)}$	$x_{(5)}$																									
b	0.57	2000	2000	2000	2.6	11																									
T_x	50	583	1141	1199	1288	1288																									
<i>КТЛР</i>																															
$\alpha_L \cdot 10^6 = 5 \cdot x + T \cdot [2.2 \cdot u_{(1)} + 10 \cdot u_{(2)}]$																															
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>Доля</th><th>x</th><th>$x_{(1)}$</th><th>$x_{(2)}$</th><th></th><th></th><th></th><th></th></tr> </thead> <tbody> <tr> <td>b</td><td>1.8</td><td>3.2</td><td>0.5</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr> <td>T_x</td><td>84</td><td>1187</td><td>1570</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> </tbody> </table>								Доля	x	$x_{(1)}$	$x_{(2)}$					b	1.8	3.2	0.5					T_x	84	1187	1570				
Доля	x	$x_{(1)}$	$x_{(2)}$																												
b	1.8	3.2	0.5																												
T_x	84	1187	1570																												
<i>Плотность</i>																															
$d = 6169 \cdot [1 + 2.0 \cdot \alpha_L \cdot 10^{-6} \cdot (293 - T)] - 138 \cdot x_d; x_d : b_d = 2000; T_{xd} = 1193$																															
<i>Теплопроводность</i>																															
$\lambda = 0.0041 \cdot T + 8.6 \cdot x - 8 \cdot x_{(1)} + T \cdot [16.4 \cdot u_{(2)} - 0.7 \cdot u_{(3)} + 0.013 \cdot x_{(4)}]$																															
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>Доля</th><th>x</th><th>$x_{(1)}$</th><th>$x_{(2)}$</th><th>$x_{(3)}$</th><th>$x_{(4)}$</th><th></th><th></th></tr> </thead> <tbody> <tr> <td>b</td><td>1.7</td><td>2000</td><td>1.5</td><td>2.8</td><td>1.8</td><td></td><td></td></tr> <tr> <td>T_x</td><td>1.8</td><td>1193</td><td>15.8</td><td>950</td><td>100</td><td></td><td></td></tr> </tbody> </table>								Доля	x	$x_{(1)}$	$x_{(2)}$	$x_{(3)}$	$x_{(4)}$			b	1.7	2000	1.5	2.8	1.8			T_x	1.8	1193	15.8	950	100		
Доля	x	$x_{(1)}$	$x_{(2)}$	$x_{(3)}$	$x_{(4)}$																										
b	1.7	2000	1.5	2.8	1.8																										
T_x	1.8	1193	15.8	950	100																										
<i>Температуропроводность</i>																															
<i>Удельное электросопротивление</i>																															
$\rho \cdot 10^8 = 0.21 \cdot T + 2.3 \cdot x + 34.8 \cdot x_{(1)} + T \cdot [0.6 \cdot u_{(2)} - 0.15 \cdot x_{(3)}]$																															
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>Доля</th><th>x</th><th>$x_{(1)}$</th><th>$x_{(2)}$</th><th>$x_{(3)}$</th><th></th><th></th><th></th></tr> </thead> <tbody> <tr> <td>b</td><td>1.0</td><td>2000</td><td>9.8</td><td>1.4</td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr> <td>T_x</td><td>154</td><td>1193</td><td>845</td><td>592</td><td></td><td></td><td></td></tr> </tbody> </table>								Доля	x	$x_{(1)}$	$x_{(2)}$	$x_{(3)}$				b	1.0	2000	9.8	1.4				T_x	154	1193	845	592			
Доля	x	$x_{(1)}$	$x_{(2)}$	$x_{(3)}$																											
b	1.0	2000	9.8	1.4																											
T_x	154	1193	845	592																											

Таблица 2. Расчетные функции и значения параметров для празеодима**Table 2.** Calculation functions and parameter values for praseodymium

Характеристика								Ссылка			
<i>Теплоемкость</i>											
$C = 0.0001 \cdot T + 36.6 \cdot x - 2.7 \cdot x_{(1)} + 4.4 \cdot x_{(2)} + T \cdot [-0.2 \cdot u_{(3)} + 8.6 \cdot u_{(4)} + 5 \cdot u_{(5)} + 0.0058 \cdot x_{(6)}]$											
Доля	x	$x_{(1)}$	$x_{(2)}$	$x_{(3)}$	$x_{(4)}$	$x_{(5)}$	$x_{(6)}$	[2,3,6]			
b	0.57	2000	2000	19.4	1.3	3.0	5.2				
T_x	15	1068	1204	298	1092	1204	1400				
<i>КТЛР</i>											
$\alpha_L \cdot 10^6 = 5.14 \cdot x + T \cdot [2.6 \cdot u_{(1)} - 0.17 \cdot u_{(2)} + 0.17 \cdot u_{(3)} + 1.7 \cdot u_{(4)}]$											
Доля	x	$x_{(1)}$	$x_{(2)}$	$x_{(3)}$	$x_{(4)}$	[5]					
b	1.8	1.2	7.5	7.0	3.6						
T_x	14	105	343	670	950						
<i>Плотность</i>											
$d = 6773 \cdot [1 + 2.5 \cdot \alpha_L \cdot 10^{-6} \cdot (293 - T)] - 228 \cdot x_d; x_d : b_d = 2000; T_{xd} = 1204$											
<i>Теплопроводность</i>											
$\lambda = 0.041 \cdot T + 6.9 \cdot z - 4.7 \cdot z_{(1)} + T \cdot [16.4 \cdot u_{(2)} + 2.8 \cdot u_{(3)} + 0.13 \cdot u_{(4)} + 1.5 \cdot u_{(5)} + 0.0094 \cdot x_{(6)} - 0.47 \cdot x_{(7)}]$											
Доля	x	$x_{(1)}$	$x_{(2)}$	$x_{(3)}$	$x_{(4)}$	$x_{(5)}$	$x_{(6)}$	$x_{(7)}$			
b	1.7	2000	1.5	1.2	7.0	2.4	1.8	4.8			
T_x	1.8	1204	15.8	387	500	880	100	1100			
<i>Температуропроводность</i>											
<i>Удельное электросопротивление</i>											
$\rho \cdot 10^8 = 0.43 \cdot T + 1.3 \cdot x + 25.8 \cdot x_{(1)} + T \cdot [-7.8 \cdot u_{(2)} + 5.5 \cdot u_{(3)} - 0.52 \cdot x_{(4)}]$											
Доля	x	$x_{(1)}$	$x_{(2)}$	$x_{(3)}$	$x_{(4)}$	[2,7]					
b	1.0	2000	1.2	2.5	0.4						
T_x	140	1204	230	760	500						

фазы 1 как в самом металле (индекс отсутствует), так и в его подсистемах (индекс присутствует) по формуле (5). В столбце “Ссылка” указаны источники экспериментальных данных. Результаты расчета для лантана отображены в табл. 3, а для празеодима – в табл. 4.

Из табл. 3 и 4 видно, что на всем исследованном интервале температур празеодим обладает большими значениями теплоемкости, КТЛР до температуры 300 К, плотности, удельного электро-

сопротивления, чем лантан. Для него характерны более низкие величины КТЛР при температурах, превышающих 300 К, а на всем интервале температур – тепло- и температуропроводности.

В малых таблицах большим значениям параметра b ($b=2000$) соответствует скачок на температурной зависимости теплофизической характеристики, наблюдаемый при структурном превращении или агрегатном переходе (фазовый переход II рода). При температуре плавления металла T_m теплоемкости лантана и празеодима достигают

максимального значения, при этом их температурные зависимости в окрестности максимума имеют вид пика с округлой вершиной. Для таких характеристик, как плотность, тепло- и температуропроводность, удельное электросопротивление на графиках тепловых свойств появляется конечный скачок функции.

На рис. 1 и 2 изображены температурные изменения теплоемкости и плотности лантана, празеодима, а также их сплавов, теплофизические характеристики которых были оценены с помощью правила смешения (20). Оценки тепловых свойств сплавов La₈₀Pr₂₀, La₅₅Pr₄₅ и La₃₅Pr₆₅ приведены в табл. 5.

Таблица 3. Термофизические свойства лантана

Table 3. Thermophysical properties of lanthanum

T, K	C, Дж/(моль·К)	$\alpha_L \cdot 10^6$, K ⁻¹	d, кг/м ³	λ , Вт/(м·К)	$a \cdot 10^6$, м ² /с	$\rho \cdot 10^8$, Ом·м
10	0.39	0.00	6169	18	1058	2.10
50	18.75	0.40	6170	10.4	12	10.54
100	23.96	3.20	6177	10.1	9	21.58
200	26.33	4.53	6174	11	10	43.29
400	27.44	6.62	6160	14	12	73.37
600	28.54	8.45	6137	18	14	82.04
800	30.11	9.60	6109	21	15.6	91.32
1000	33.42	11.42	6069	23	15.9	98.66
1193	39.50	11.54	5972	21.8	12.84	126.06
1200	32.86	11.50	5902	18	13	143.86
1400	32.75	10.00	5894	21	15	155.58
1600	31.65	8.70	5891	24	18	167.89
1800	30.71	7.86	5885	26	20	180.55
2000	30.16	7.32	5877	29	23	193.46
2200	29.88	6.96	5867	32	25	206.54
2400	29.78	6.69	5857	35	28	219.74
2600	29.78	6.49	5846	38	30	233.03
2800	29.86	6.33	5835	41	32	246.39
3000	29.97	6.20	5824	43	35	259.81
3200	30.11	6.09	5812	46	37	273.26
3400	30.28	6.00	5801	49	39	286.75

Таблица 4. Термофизические свойства празеодима**Table 4.** Thermophysical properties of praseodymium

T, K	$C, \text{Дж}/(\text{моль}\cdot\text{К})$	$\alpha_L \cdot 10^6, \text{K}^{-1}$	$d, \text{кг}/\text{м}^3$	$\lambda, \text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$	$a \cdot 10^6, \text{м}^2/\text{с}$	$\rho \cdot 10^8, \text{Ом}\cdot\text{м}$
10	13.22	0.98	6778	16	26	4.30
50	25.24	5.60	6796	8.4	7	21.50
100	26.54	6.55	6794	8.1	6	39.62
200	27.17	5.57	6782	10	8	57.55
400	28.15	4.98	6764	14	10.1	77.86
600	31.60	5.67	6744	17	10.9	97.35
800	35.79	7.31	6710	19	11.4	111.85
1000	40.17	8.06	6677	20.7	10.9	123.00
1200	38.64	6.71	6670	23	12.5	135.28
1204	40.84	6.69	6556	20.5	10.8	148.44
1400	43.00	5.83	6436	20.9	10.6	174.25
1600	43.44	5.44	6425	24	12	187.87
1800	43.81	5.26	6411	26	13	201.71
2000	44.27	5.17	6395	29	14	215.67
2200	44.89	5.12	6380	31	15	229.70
2400	45.65	5.09	6363	34	16.5	243.78
2600	46.51	5.07	6347	37	17.4	257.89
2800	47.45	5.06	6330	39	18.4	272.03
3000	48.44	5.05	6314	42	19.3	286.18
3200	49.46	5.04	6297	44	20.1	300.35
3400	50.52	5.038	6280	47	20.9	314.53

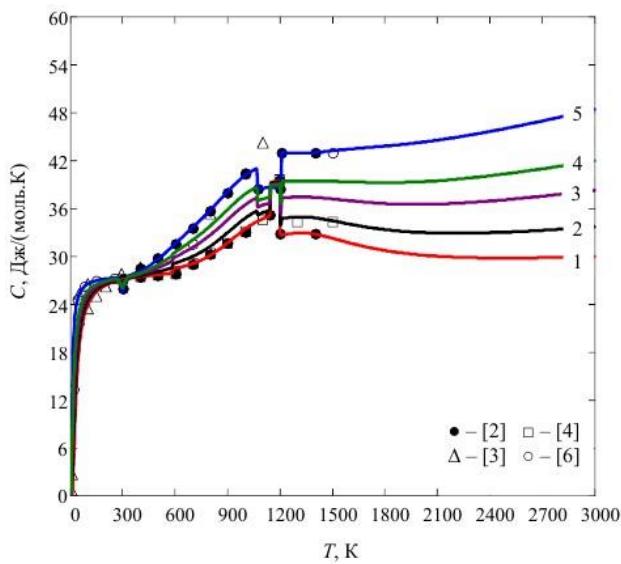


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкостей La (1), La₈₀Pr₂₀ (2), La₅₅Pr₄₅ (3), La₃₅Pr₆₅ (4), Pr (5).

Fig. 1. Temperature dependencies of heat capacities La (1), La₈₀Pr₂₀ (2), La₅₅Pr₄₅ (3), La₃₅Pr₆₅ (4), Pr (5).

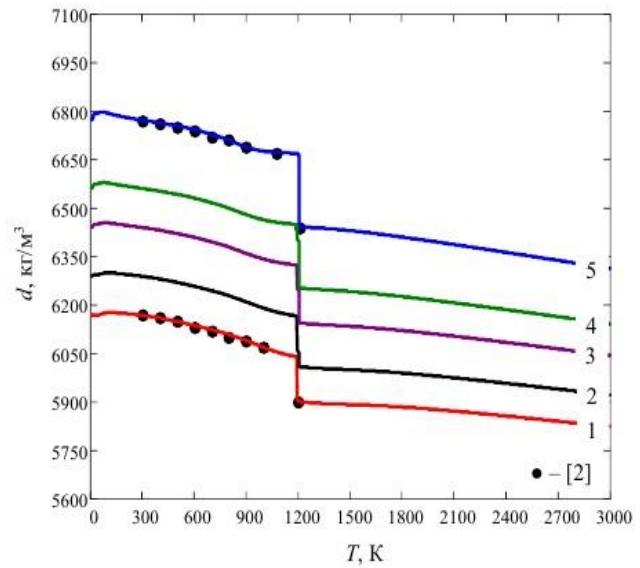


Рис. 2. Изменения плотности La (1), La₈₀Pr₂₀ (2), La₅₅Pr₄₅ (3), La₃₅Pr₆₅ (4), Pr (5) в зависимости от температуры.

Fig. 2. Density changes La (1), La₈₀Pr₂₀ (2), La₅₅Pr₄₅ (3), La₃₅Pr₆₅ (4), Pr (5) depending on the temperature.

Таблица 5. Термофизические свойства сплавов La₈₀Pr₂₀ (1), La₅₅Pr₄₅ (2) и La₃₅Pr₆₅ (3)

Table 5. Thermophysical properties of alloys La₈₀Pr₂₀ (1), La₅₅Pr₄₅ (2) и La₃₅Pr₆₅ (3)

T, K	$\alpha_L \cdot 10^6, \text{K}^{-1}$			$d, \text{кг}/\text{м}^3$			$C, \text{Дж}/(\text{моль}\cdot\text{К})$			$\lambda, \text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
100	3.87	4.71	5.38	6300	6455	6578	24.5	25.1	25.6	9.7	9.2	8.8
200	4.74	5.00	5.20	6296	6448	6569	26.5	26.7	26.9	11.2	11.0	10.8
300	5.32	5.22	5.15	6289	6440	6561	26.8	26.4	26.1	12.8	12.7	12.7
400	6.29	5.89	5.56	6281	6432	6553	27.6	27.8	27.9	14.2	14.0	13.9
500	7.21	6.58	6.07	6270	6422	6543	28.1	28.5	28.9	15.4	15.4	15.3
600	7.90	7.20	6.65	6258	6410	6531	29.1	29.9	30.5	17.4	17.1	16.9
700	8.47	7.84	7.35	6245	6396	6517	30.0	31.1	32.0	19.1	18.8	18.6
800	9.14	8.57	8.11	6229	6380	6500	31.2	32.7	33.8	20.4	20.1	19.9
900	10.04	9.44	8.96	6210	6360	6480	33.0	34.6	35.9	21.6	21.2	20.8
1000	10.75	9.91	9.23	6191	6343	6464	34.8	36.5	37.8	22.7	22.1	21.6
1200	10.54	9.35	8.39	6056	6248	6401	34.0	35.5	36.6	18.9	20.1	21.1
1400	9.17	8.13	7.29	6003	6138	6246	34.8	37.4	39.4	20.7	20.8	20.8
1600	8.05	7.24	6.58	5997	6131	6238	34.0	37.0	39.3	23.5	23.5	23.5
1800	7.34	6.69	6.17	5990	6121	6227	33.3	36.6	39.2	26.3	26.2	26.2
2000	6.89	6.36	5.93	5981	6110	6214	33.0	36.5	39.3	29.1	29.0	28.9

продолжение **Таблицы 5**

continuation of **Table 5**

T, K	$\alpha \cdot 10^6, \text{м}^2/\text{с}$			$\rho \cdot 10^8, \text{Ом}\cdot\text{м}$		
	1	2	3	1	2	3
100	8.8	8.0	7.4	25.2	29.7	33.3
200	9.4	9.0	8.6	46.1	49.7	52.6
300	10.6	10.5	10.4	63.3	65.1	66.5
400	11.5	11.0	10.7	74.3	75.4	76.3
500	12.3	11.8	11.4	80.5	82.6	84.3
600	13.3	12.6	12.0	85.1	88.9	92.0
700	14.3	13.4	12.6	89.5	94.6	98.6
800	14.8	13.7	12.9	95.4	100.6	104.7
900	14.8	13.7	12.8	99.7	105.2	109.6
1000	14.9	13.6	12.6	103.5	109.6	114.5
1200	12.7	12.7	12.6	142.1	140.0	138.3
1400	14.0	13.0	12.1	159.3	164.0	167.7
1600	16.4	15.0	13.9	171.9	176.9	180.9
1800	18.8	17.0	15.6	184.8	190.1	194.3
2000	21.2	19.0	17.3	197.9	203.5	207.9

Полученные в рамках модели непрерывные функции (1)-(19) позволяют адекватно описать

температурные зависимости термофизических свойств лантана и празеодима (см. рис. 1 и 2) в области существования конденсированного со-

стояния с учетом структурных превращений и фазовых переходов. Кроме того, из рис. 1 и 2 видно, что тепловые характеристики сплавов ограничены температурными зависимостями соответствующих свойств компонентов. Значения характеристик возрастает по мере увеличения содержания празеодима в сплаве; на графиках тепловых свойств отображаются графические особенности компонентов. Другими словами, при оценке характеристик сплавов по правилу смешения наблюдается эффект наследования сплавами некоторых особенностей поведения их компонентов. В более совершенной модели при учете взаимодействия субэлементов фаз, или объемной доли, например, вакансий, или другого правила смешения компонентов этот эффект может снижаться [25], а на температурных зависимостях могут появиться индивидуальные особенности того или иного сплава.

Заключение

Из полученных результатов расчета видно, что празеодим для различных характеристик обладает их большими значениями, чем лантан. Численные значения характеристик сплавов ограничены соответствующими значениями компонентов. Увеличение содержания празеодима в сплаве приводит к росту значений тепловых функций.

В силу применения правила смешения компонентов сплавы наследуют особенности изменений теплофизических свойств образующих сплав элементов. Однако этот эффект может подавляться за счет взаимодействия компонентов, возрастаания роли дефектной подсистемы и других явлений, изменяющих правило смешения составляющих сплавов. Усовершенствование правила смешения компонентов и получение более точных оценок возможно путем сравнения расчетных значений с экспериментальными данными для сплавов.

Полученные соотношения могут использоваться в компьютерных программах при создании автоматических устройств управления технологическим процессом.

Список литературы

- Меиков В. В., Гой С. А., Ильин А. Д. Исследование теплофизических свойств сплавов редкоземельных металлов лантан-неодим и лантан-празеодим в твердом состоянии в интервале температур 400 – 1100 К // Вестник СибГУТИ. 2009. № 3. С. 72-78.
- Зиновьев В. Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989. 384 с.
- Лариков Л. Н., Юрченко Ю. Ф. Структура и свойства металлов и сплавов. Тепловые свойства металлов и сплавов. Киев: Наукова думка, 1985. 440 с.
- Гордиенко С. П., Феночка Б. В., Виксман Г. Ш. Термодинамика соединений лантаноидов. Справочник. Киев: Наукова думка, 1979. 373 с.
- Новикова С. И. Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука, 1974. 292 с.
- Физические величины. Справочник. Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1231 с.
- Свойства элементов. Справочник. Под ред. М. Е. Дрица. М.: Металлургия, 1985. 672 с.
- Dinsdale A. T. SGTE data for pure elements. // Calphad. 1991. V. 15, № 4. P. 317-425.
- Алексеев В. А., Андреев А. А., Прохоренко В. Я. Электрические свойства жидкких металлов и полупроводников. // Успехи физических наук. 1972. Т. 106, № 3. С. 393-429.
- Кошман В. С. О температурной зависимости комплекса теплофизических свойств элементов периодической системы Д. И. Менделеева // Пермский аграрный вестник. 2014. № 2(6). С. 35-42.
- Лившиц Б. Г., Крапошин В. С., Липецкий Я. Л. Физические свойства металлов и сплавов. М.: Металлургия, 1980. 320 с.
- Терехов С. В. Термодинамическая модель размытого фазового перехода в металлическом стекле $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$. // Физика и техника высоких давлений. 2018. Т. 28, № 1. С. 54-61.
- Терехов С. В. Тепловые свойства вещества в рамках модели двухфазной системы // Физика твердого тела. 2022. Т. 64, № 8. С. 1077-1083.
- Терехов С. В. Расчет базисной линии теплоемкости вещества в модели двухфазной области при отсутствии фазовых и других переходов // Неорганические материалы. 2023. Т. 59, № 4. С. 468-472. doi: 10.31857/S0002337X230 40127.
- Терехов С. В. Теплофизические свойства металлов в квазидвухфазной модели // Физика металлов и металловедение. 2023. Т. 124. № 12. С. 1261-1270. doi: 10.31857/S0015323023601666.
- Брандт Н. Б., Кульбачинский В. А. Квазичастицы в физике конденсированного состояния. М.: Физматлит, 2005. 631 с.
- Пригожин И. Неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1964. 314 с.

18. Kubo R. Термодинамика. М.: Мир, 1970. 304 с.
19. Stølen S., Grande T. Chemical thermodynamics of materials: macroscopic and microscopic aspects. Chichester West Sussex: John Wiley & Sons Ltd, The Atrium. 2004. Р. 14.
20. Окилов Ш. Ш. Физико-механические и химические свойства свинцово-сурьмяного сплава ССу3 с литием, натрием и калием: Дисс. канд. техн. наук. Душанбе: Институт химии им. В.И. Никитина. 2024. С. 18.
21. Ягодин Д. А. Исследование структурной неоднородности расплавов Ga-Bi и Pd-Si методами акустометрии и гамма-денситометрии: Автореф. дисс. канд. физ.-мат. наук. Екатеринбург: Уральский государственный педагогический университет, 2007. С. 9.
22. Агажанов А. Ш. Экспериментальное исследование теплопроводности и температуропроводности жидких теплоносителей конструкционных материалов ядерной энергетики: Дисс. канд. физ.-мат. наук. Новосибирск: Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, 2016. 171 с.
23. Берман Р. Теплопроводность твердых тел. М.: Мир, 1979. 286 с.
24. Шегудяк Ю. Е., Каширков Л. Я., Малинин Л. А., Цалков В. Н. Термофизические свойства компонентов горючих систем, справочник под ред. Н. А. Силина. М.: НПО «Информация и технико-экономические исследования», 1992. С. 8.
25. Терехов С. В. Полуэмпирический прогностический расчет теплофизических свойств расплавов калия с натрием по данным их компонентов // Известия вузов. Ядерная энергетика. 2025. № 1. С. 37-50. doi: 10.26583/npe.2025.1.03.
2. Zinoviev V. E. Thermophysical properties of metals at high temperatures. Moscow, Metallurgiya, 1989. 384 p. (In Russ.)
3. Larikov L. N., Yurchenko Yu. F. Structure and properties of metals and alloys. Thermal properties of metals and alloys. Kiev, Naukova dumka, 1985. 440 p.
4. Gordienko S. P., Fenochka B. V., Vixman G. S. Thermodynamics of lanthanide compounds. Handbook. Kiev, Naukova dumka, 1979. 373 p.
5. Novikova S. I. Thermal expansion of solids. Handbook. Moscow, Nauka, 1974. 292 p.
6. Physical quantities. Handbook edited by I. S. Grigoriev, E. Z. Meilikhova. Moscow, Energoatomizdat, 1991. 1231 p. (In Russ.)
7. Properties of elements. Handbook edited by M. E. Drits. Moscow, Metallurgiya, 1985. 672 p. (In Russ.)
8. Dinsdale A. T. (1991). SGTE data for pure elements. *Calphad*, 15 (4), 317 – 425.
9. Alekseev V. A., Andreev A. A., Prokhorenko V. Ya. (1972). Electrical properties of liquid metals and semiconductors. *Successes of physical sciences*, 106, (3), 393 – 429. (In Russ.)
10. Koshman V. S. (2014). On the temperature dependence of the complex of thermal properties of the elements of the periodic table of D. I. Mendeleev *Perm agrarian bulletin*, 2(6), 35 – 42.
11. Livshits B. G., Krashenin V. S., Lipetskij Ya. L. Physical properties of metals and alloys. Moscow, Metallurgy, 1980. 320 p. (In Russ.)
12. Terekhov S. V. (2018). Thermodynamic model of a diffuse phase transition in metallic glass Fe₄₀Ni₄₀P₁₄B₆. *Physics and technology of high pressures*, 28 (10). 54 – 61. (In Russ.)
13. Terehov S. V. (2022). Thermal properties of matter within the model of a two-phase system. *Solid state physics*, 64 (8), 1077 – 1083. doi: 10.21883/FTT.2022.08.52710.352. (In Russ.)
14. Terekhov S. V. (2023). Calculation of the heat capacity baseline in a model of a two-phase region in the absence of phase transformations and other transitions. *Inorganic materials*, 59 (4), 468 – 472. doi: 10.1134/S002016852304012X. (In Russ.)
15. Terekhov S. V. (2023). Thermophysical properties of metals in quasi two-phase model *Physics of metals and metal science*, 124 (12), 1291 – 1300. doi: 10.1134/S0031918X23602196. (In Russ.)
16. Brandt N. B., Kulbachinsky V. A. Quasiparticles in condensed matter physics, Moscow, Fizmatlit, 2005. 631 p. (In Russ.)
17. Prigozhin I. Nonequilibrium statistical mechanics, Moscow, Mir Publ., 1964. 314 p. (In Russ.)

Информация об авторах

С. В. Терехов – доктор физико-математических наук, доцент, ведущий научный сотрудник ФГБ НУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина».

References

1. Meshkov V. V., Goj S.A., Ivliev A. D. (2009). Study of the thermophysical properties of rare-earth metal alloys lanthanum-neodymium and lanthanum-praseodymium in the solid state at temperatures between 400 and 1100 K. *Vestnik SibGUTI*, (3), 72 –78. (In Russ.)

18. Kubo R. Thermodynamics. Moscow, Mir Publ., 1970. 304 p. (In Russ.)
19. Stølen S., Grande T. Chemical thermodynamics of materials: macroscopic and microscopic aspects. Chichester West Sussex, John Wiley & Sons Ltd, The Atrium, 2004. P. 14.
20. Okilov Sh. Sh. Physico-mechanical and chemical properties of lead-antimony alloy CCu3 with lithium, sodium and potassium: Diss. candidate of technical sciences, Dushanbe, V. I. Nikitin Institute of Chemistry. 2024. P. 18.
21. Yagodin D. A. Investigation of the structural heterogeneity of Ga-Bi and Pd-Si melts by methods of acoustics and gamma densitometry: Abstract of the dissertation PhD in physics and mathematics sciences, Yekaterinburg, Ural State Pedagogical University, 2007. P. 9. (In Russ.)
22. Agazhanov A. Sh. Experimental study of thermal conductivity and temperature conductivity of liquid heat carriers of structural materials of nuclear power engineering: Diss. candidate of physical and mathematical sciences, Novosibirsk: S. S. Kutateladze Institute of Thermophysics SB RAS, 2016. 171 p. (In Russ.)
23. Berman R. Thermal conductivity of solids, Moscow: Mir Publ., 1979. 286 p. (In Russ.)
24. Sheludyak Yu. E., Kashporov L. Ya., Malinin L. A., Tsalkov V. N. Thermophysical properties of components of combustible systems. Handbook edited by N. A. Silin. Moscow, NPO Information and techno-economic research, 1992. P. 8. (In Russ.)
25. Terekhov S. V. (2025). Semi-empirical predictive calculation of the thermal-physical properties of potassium-sodium melts based on their component data. *Nuclear Energy and Technology*, 11(2), 89 – 95. doi: 10.3897/nucet.11.1600 16. (In Russ.)

Information about the authors

Sergey V. Terekhov — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor, Leading Researcher of the Department of Electronic Properties of Metals, A.A. Galkin Donetsk Institute of Physics and Technology, 72 Roza Luxemburg str., Donetsk, 283048, Russia; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3037-7258>; e-mail: svter@yandex.ru.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 15.10.2025; одобрена после рецензирования 24.11.2025; принятая к публикации 01.12.2025.

The article was received by the editorial board on 15 Oct. 2025; approved after reviewing 24 Nov. 2025; accepted for publication 01 Dec. 2025.