

УДК 532.13:532.72-034

К ТЕОРИИ АТОМНОГО ПЕРЕНОСА В ЖИДКИХ 3d-ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ

© 2019 г. В. Г. Постовалов^{a,*}, В. П. Кондратьев^{b,**}, Е. П. Романов^a^aИнститут физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН,
ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия^bУральский технический институт связи и информатики,
ул. Репина, 15, Екатеринбург, 620109 Россия

*e-mail: postovalov@imp.uran.ru

**e-mail: kondratjev43@mail.ru

Поступила в редакцию 19.03.2016

После доработки 30.03.2018

Принята к публикации 08.04.2018

На основе модифицированной модели твердых сфер выполнен расчет коэффициентов самодиффузии и вязкости жидких 3d-переходных металлов. Показано, что эта модель неплохо воспроизводит коэффициенты атомного переноса импульса и массы в расплавах нормальных металлов (Ti, Cu, Zn), сильных парамагнетиков (Cr, Mn) и ферромагнетиков (Fe, Co, Ni). Предсказаны коэффициенты самодиффузии жидких скандия, титана, ванадия и хрома в широком температурном интервале, где они не исследованы экспериментально.

Ключевые слова: жидкий 3d-переходный металл, коэффициент самодиффузии, вязкость.

DOI: 10.1134/S0235010619030083

1. ВВЕДЕНИЕ

Коэффициенты самодиффузии и вязкости – важные технологические параметры, необходимые для проектирования и управления процессами, используемыми в металлургической индустрии, атомной энергетике и в производстве сверхчистых материалов. Кроме того, они позволяют получить информацию о характере межатомного взаимодействия в жидких металлах.

Опытные данные о свойствах атомного переноса в жидких 3d-переходных металлах очень ограничены и противоречивы вследствие трудностей их исследования в условиях высокой температуры [1–3]. Довольно надежную информацию о коэффициентах самодиффузии и вязкости многих жидких металлов можно получить, используя скорректированную теорию Энскога, развитую на основе двухпараметрической модели твердых сфер [4]. Однако основные параметры этой модели: коэффициент упаковки η_m при температуре плавления металла и параметр, зависящий от кривизны межатомного потенциала в точке его минимума, – были определены по опытным данным о коэффициентах самодиффузии только нормальных жидких металлов, на множестве которых они не зависят от порядкового номера элемента периодической системы Д.И. Менделеева. Тем не менее, авторы [5] предположили, что эта модель универсальна, хотя, очевидно, она не отражает особенностей электронной структуры, межатомного взаимодействия и ближнего порядка в металлических расплавах. (Здесь жидкий металл считается нормальным, если его энергия когезии прямо пропорциональна температуре плавления [2].)

Анализируя опытные данные о структуре жидких металлов [6], можно сделать вывод, что величина η_m , равновесное расстояние r_1 между ближайшими атомами и их координационное число K_1 вблизи точек плавления периодически изменяются в зависи-

мости от порядкового номера элемента. Типичные металлы, например, К, Са и Рb имеют относительно большие значения параметров ближнего порядка $\eta_m = 0.456 \pm 0.005$ и $K_1 = 10.8 \pm 0.4$. Наименьшие значения $\eta_m = 0.38 - 0.40$ и $K_1 = 6.4 - 8.8$ наблюдаются в расплавах полуметаллических элементов Si, Ge, Sb и Bi, обладающих рыхлой структурой ближнего порядка, обусловленной неполной металлизацией ковалентных межатомных связей в процессе плавления. Такая структура расплавов приводит к заметным аномалиям их кинетических свойств [2, 7, 8], которые невозможно объяснить с точки зрения теорий [4, 5].

В случае жидких металлов IV периода электроны, последовательно заполняющие 3d-оболочки при увеличении порядкового номера элемента, испытывают сильное притяжение к атомным ядрам, стимулирующее образование очень коротких и прочных металлических связей между ближайшими атомами [9]. Анализ структурных данных [6] показывает, что особенно короткие металлические связи ($r_1 = 0.248 - 0.260$ нм) возникают в расплавах Cr, Mn, Fe, Co и Ni. При этом коэффициент упаковки этих расплавов при температуре плавления, оказывается, значительно больше, чем величина η_m , экспериментально наблюдаемая в жидком скандии. Поэтому модель твердых сфер [4], как уже отмечено [5], неточно воспроизводит коэффициенты вязкости жидких железа и никеля, обладающих сравнительно плотной структурой ближнего порядка вблизи точек плавления.

В настоящей статье мы рассчитали коэффициенты самодиффузии и вязкости жидких 3d-переходных металлов, используя модифицированную модель твердых сфер [8], параметры которой определили по опытным данным о вязкости металлов с учетом особенностей их структурных характеристик и межатомного взаимодействия.

2. ТЕОРИЯ

Следуя теории [8], мы предполагаем, что жидкий переходный металл по теплофизическим свойствам подобен соответствующей ему системе твердых сфер, испытывающих упругие парные соударения друг с другом.

Коэффициент самодиффузии. Коэффициент самодиффузии D плотной текучей среды с потенциалом твердой сферы достаточно точно рассчитан методом молекулярной динамики [10]. В работе [8] его зависимость от абсолютной температуры T и коэффициента упаковки твердых сфер

$$\eta = (\pi/6)n\sigma^3, \quad (1)$$

описывается уравнением

$$D = D_g G_D(\eta), \quad (2)$$

где

$$D_g = \frac{3}{8} (n\sigma^2)^{-1} (kT/\pi m)^{1/2}, \quad (3)$$

D_g – коэффициент самодиффузии системы твердых сфер, подобной разреженному газу, n – число этих сфер в единице объема, σ и m – диаметр и масса твердой сферы соответственно, k – постоянная Больцмана, $G_D(\eta)$ – фактор, учитывающий эффекты ближнего порядка и коррелированного движения (микроскопических вихрей и обратного рассеяния) твердых сфер. Мы рассчитали корреляционный фактор $G_D(\eta) = D/D_g$ для плотной текучей среды, используя данные [10] о величине D , и аппроксимировали его зависимость от коэффициента упаковки линейным полиномом

$$G_D(\eta) = 1.110(1 - \eta/0.538), \quad 0.25 < \eta \leq 0.494, \quad (4)$$

со среднеквадратическим отклонением $\varepsilon = 1.5\%$. Затем, следуя выражениям (1)–(3), получили уравнение для коэффициента самодиффузии реальной текучей среды в терминах ее коэффициента упаковки и массовой плотности $\rho = m\eta$:

$$D = C_g M^{-1/6} \rho^{-1/3} T^{1/2} \eta^{-2/3} G_D(\eta), \quad (5)$$

где

$$C_g = \frac{(36\pi)^{1/6}}{16} R^{1/2} N_A^{-1/3},$$

где $M = N_A m$ – молярная масса атомов, R – молярная газовая постоянная, N_A – постоянная Авогадро. В международной системе единиц (СИ) коэффициент $C_g = 4.693 \cdot 10^{-9} \text{ (Дж/К)}^{1/2} / \text{моль}^{1/6}$.

Динамическая вязкость. Как известно [11], связь между коэффициентами самодиффузии D и вязкости μ жидких металлов описывается уравнением Сузерленда с граничным условием скольжения на поверхностях диффундирующих сферических частиц:

$$\mu D = kT / (2\pi\sigma). \quad (6)$$

Его комбинирование с уравнениями (1)–(3) и (5) приводит к выражению

$$\mu = \frac{4}{3} n\sigma (mkT/\pi)^{1/2} G_D^{-1}(\eta) = C_\mu M^{-1/6} \rho^{2/3} T^{1/2} \eta^{1/3} G_D^{-1}(\eta), \quad (7)$$

где

$$C_\mu = \left(\frac{128}{9}\right)^{1/3} \pi^{-5/6} R^{1/2} N_A^{-1/3}.$$

В системе единиц СИ коэффициент $C_\mu = 3.187 \cdot 10^{-8} \text{ (Дж/К)}^{1/2} / \text{моль}^{1/6}$.

При температуре плавления металла это выражение сводится к равенству Андраде

$$\mu_m = C_A f(T_m), \quad (8)$$

полученному в предположении, что характеристические частоты колебаний атомов металла в жидком и твердом состояниях вблизи точки плавления имеют почти одни и те же значения [12]. Здесь $f(T_m) = M^{-1/6} \rho_m^{2/3} T_m^{1/2}$, μ_m и ρ_m – динамическая вязкость и плотность жидкого металла при температуре плавления T_m соответственно. В модели твердых сфер коэффициент Андраде C_A монотонно возрастает в зависимости от коэффициента упаковки η_m :

$$C_A = C_\mu \eta_m^{1/3} G_D^{-1}(\eta_m). \quad (9)$$

Для нормальных жидких металлов модельный параметр $\eta_m = 0.472$ [4, 8], и теоретическое значение $C_A = 1.82 \cdot 10^{-7} \text{ (Дж/К)}^{1/2} / \text{моль}^{1/6}$ совпадает с опытным $C_A = (1.80–1.83) \cdot 10^{-7} \text{ (Дж/К)}^{1/2} / \text{моль}^{1/6}$ [2, 13].

Диаметр твердых сфер для жидких металлов. Эффективный диаметр твердой сферы для жидких металлов определяется как среднее статистическое значение наименьшего расстояния между атомами при их упругих парных столкновениях [4]. Его температурная зависимость описывается уравнением

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-\alpha\sqrt{T/T_m}), \quad (10)$$

полученным на основе модельного потенциала

$$\varphi(r) = \frac{3}{2} (k T_m / \alpha^2) \ln^2 (r / \sigma_0), \quad 0 < r \leq \sigma_0, \quad (11)$$

который в области малых расстояний качественно согласуется с парным потенциалом, рассчитанным методом погруженного атома [14].

Модельный параметр α связан с жесткостью k_s сил межатомного отталкивания и с радиусом R_c кривизны функции $\varphi(r)$ в точке существования ее минимума ($r = \sigma_0$):

$$k_s \cong R_c^{-1} = \varphi^{(2)}(\sigma_0) = 3k T_m / (\alpha \sigma_0)^2. \quad (12)$$

Кроме того, между параметрами α и η_m существует взаимно-однозначное соответствие

$$(6\eta_m / \pi n_m)^{1/3} \exp(\alpha) = \sigma_0. \quad (13)$$

Как известно [4, 15], величина σ_0 в жидких и твердых металлах вблизи точек плавления почти равна равновесному расстоянию r_1 между ближайшими атомами, которые предпочитают находиться в первом минимуме потенциала $\varphi(r)$ на расстоянии немного большем диаметра твердой сферы. При условии $\sigma_0 \cong r_1$ равенство (13) позволяет оценить значение одного из модельных параметров, если другой уже определен достаточно точно.

Следует отметить, что опытные данные о вязкости для жидкого скандия пока еще не получены, для ванадия ненадежны, а в случае титана имеют погрешность $\pm 20\%$ [3, 13]. В настоящей работе мы предположили, что эти металлы являются нормальными жидкостями с параметрами $\eta_m = 0.472$ и $\alpha = 0.148$, поскольку, в отличие от жидкого хрома, их d -электроны лишь частично заполняют e_g -энергетический уровень и перекрытие $3d$ -оболочек не приводит к возникновению коротких металлических связей [9]. Параметры хрома определили по опытным данным о его структуре [6] и вязкости [13, 16] с помощью равенства (13) при условии $\sigma_0 \cong r_1$. Значения η_m и α для более тяжелых $3d$ -металлов рассчитали по опытной вязкости их расплавов [17–23], используя уравнения (4), (7) и (10).

В табл. 1 представлены значения модельных параметров α и η_m жидких металлов, которые, очевидно, зависят от атомного номера элемента периодической системы. Расплавы Cr, Mn, Fe, Co и Ni при температуре плавления, у которых значения параметров α , σ_0 и, следовательно, $R_c \sim (\alpha \sigma_0)^2$ в формуле (12) очень малы, имеют атомную упаковку, более плотную ($\eta_m > 0.472$), чем упаковка нормальных жидких металлов. При этом экспериментально наблюдается аномальное увеличение коэффициента Андраде (табл. 1) и динамической вязкости μ_m (рис. 1). Такое поведение расплавов, особенно хрома, марганца и железа, не описывается моделью [4], разработанной для нормальных жидких металлов.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Коэффициенты вязкости жидких металлов в точках плавления, рассчитанные по настоящей модели твердых сфер и по унифицированному уравнению [2], сравниваются с имеющимися опытными данными в табл. 2. Используя это уравнение, мы предположили, что расплавы $3d$ -переходных металлов являются нормальными металлическими жидкостями. Из таблицы видно, что для всех $3d$ -элементов, кроме ванадия, модельная величина μ_m хорошо согласуется с опытной. В случае ванадия опытное значение вязкости вызывает сомнение, поскольку оно соответствует неплотной атомной упаковке с параметром $\eta_m = 0.42$, который гораздо меньше величины $\eta_m = 0.44$, полученной методом рентгеноструктурного анализа [6]. Особенно хорошее согласие настоящей теории с экспериментом наблюдается в последовательности всех жидких

Таблица 1

Исходные параметры и коэффициенты Андраде для жидких 3d-переходных металлов

Металл	T_m , К	ρ_m^* , кг/м ³	η_m	α	$C_A \cdot 10^7$, (Дж/К) ^{1/2} /моль ^{1/6}		
					А	В	ссылки**
Sc	1814	2680	0.472	0.148	1.82	—	—
Ti	1941	4140	0.472	0.148	1.82	1.2–2.8	[2, 3]
V	2178	5360	0.472	0.148	1.82	1.02	[2, 13]
Cr	2163	6280	0.485	0.066	2.30	2.19	[2, 13]
Mn	1519	5760	0.486	0.005	2.34	2.31, 2.46	[17, 13]
Fe	1810	7049	0.483	0.100	2.20	2.20, 2.22	[19, 13]
Co	1767	7760	0.480	0.098	2.09	2.04, 2.17	[13, 20]
Ni	1728	7905	0.477	0.075	1.99	1.97, 2.04	[17, 21]
Cu	1358	7992	0.472	0.148	1.82	1.77, 1.88	[22, 13]
Zn	693	6552	0.472	0.148	1.82	1.79, 2.18	[23, 2]

* Данные [24, 25].
Результаты расчетов: А – по формуле (9), В – по формуле (8) из опытных данных о вязкости (**источники этих данных).

Таблица 2

Сравнение теоретических коэффициентов вязкости с опытными данными для жидких металлов в точках плавления*

Металл	μ_m , мПа · с				Металл	μ_m , мПа · с			
	А	В	С	ссылки		А	В	С	ссылки
Sc	2.51	2.57			Fe	5.56	4.73	5.56	[19]
Ti	3.44	3.52	2–5	[2]	Co	5.51	4.94	5.4, 5.7	[13, 20]
V	4.28	4.39	2.4	[13]	Ni	5.26	4.94	5.2, 5.4	[17, 21]
Cr	5.97	4.84	5.7	[13]	Cu	4.25	4.36	4.1, 4.4	[22, 13]
Mn	4.74	3.80	4.68	[17]	Zn	2.65	2.71	2.60	[23]

* Параметры металлов представлены в табл. 1.
Результаты расчетов: А – по настоящей модели твердых сфер, В – по теории [2]. С – опытные данные.

металлов от марганца до цинка. В настоящее время имеется несколько серий довольно надежных опытных данных о вязкости этих металлов [1, 13, 23, 26]. В частности, для жидких марганца и никеля вблизи точек плавления такие данные получены методами вибраций и затухающих крутильных колебаний [17, 18, 21].

Итак, согласие модельной вязкости μ_m с опытными данными оправдывает наш выбор значений параметра η_m (см. табл. 1).

Кроме того, в табл. 2 на примере титана, меди и цинка показано, что теория [2] очень точно предсказывает вязкость нормальных жидких металлов при температуре плавления. Однако в случае расплавов Cr, Mn, Fe, Co и Ni результаты расчета вязкости по этой теории значительно отличаются от опытных данных и результатов расчета μ_m по модели твердых сфер. Особенно большое расхождение (15–20%) между расчетны-

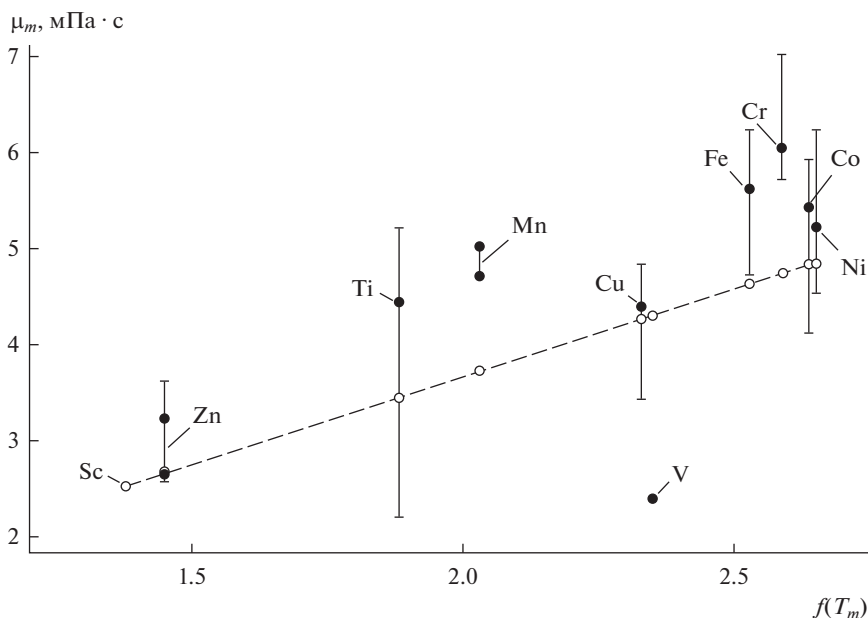


Рис. 1. Зависимость вязкости жидких металлов в точках плавления от величины $f(T_m)$ ($10^4 \text{ кг}^{1/2} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{моль}^{1/6} \cdot \text{К}^{1/2}$) в формуле (8). $\circ$ — результаты расчета по модели твердых сфер [4] с параметром $\eta_m = 0.472$. $\bullet$ — опытные данные [1, 13, 23, 26]. Вертикальные отрезки — эмпирическое расхождение вязкости.

ми и опытными значениями μ_m наблюдается для хрома, марганца и железа. Аномальное поведение этих металлов в жидком состоянии можно объяснить участием d -электронов в образовании межатомных связей и особенностями электронной структуры расплавов. Энергия этих связей и, следовательно, энергия вязкого течения зависит от их длины, числа s - и d -электронов, принимающих участие в образовании связей, и от симметрии $3d$ -орбиталей [9]. Энергия связей сильно увеличивается с уменьшением их длины.

В расплавах марганца и железа вблизи точек плавления существуют не только короткие прочные металлические связи, образованные путем перекрытия сферических $4s$ -оболочек, но и довольно прочные протяженные ковалентные δ -связи, возникающие в результате перекрытия максимально заполненных электронами остоновых $3d(t_{2g})$ -орбиталей соседних атомов [9]. По-видимому, суммарная энергия этих связей приводит к большой избыточной величине вязкости расплавов (рис. 1). Энергия металлических связей в жидком хrome, где длина их мала ($r_1 = 0.258 \text{ нм}$ [6]), возрастает за счет перекрытия максимально заполненных электронами $3d(e_g)$ -орбиталей ближайших атомов. В случае расплавов никеля и кобальта энергия металлических связей увеличивается благодаря перекрытию сферических $4s$ - и некоторых $3d(t_{2g})$ -орбиталей ближайших атомов, стимулирующему формирование структуры ближнего порядка с ГЦК-координацией [9]; при этом образуются короткие и прочные металлические sd -гибридные связи ($r_1 = 0.253\text{--}0.256 \text{ нм}$ [6]).

Короткие металлические связи ($r_1 = 0.257 \text{ нм}$ [6]) экспериментально наблюдаются и в жидкой меди. Однако она не имеет аномальной вязкости, поскольку остоновые $3d$ -оболочки ее атомов не перекрываются и d -электроны почти не участвуют в образовании межатомных связей [9].

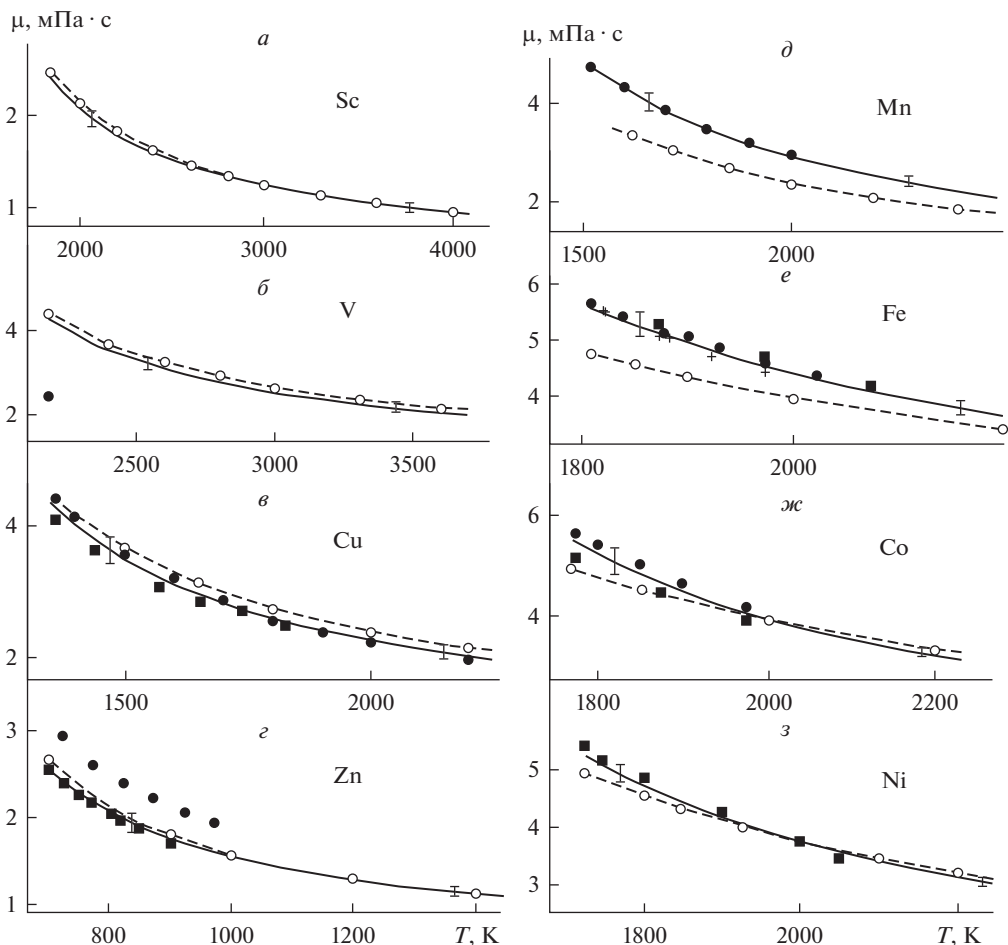


Рис. 2. Температурная зависимость вязкости жидких металлов. — — данные настоящей работы; - - - - результаты расчетов по теории [2]; вертикальные отрезки — отклонение $\pm 6\%$. Опытные данные для расплавов: б) ● — V [13], в) ● — Cu [13], ■ — Cu [27], г) ■ — Zn [23], ● — Zn [28], д) ● — Mn [17, 18], е) + — Fe [19], ■ — Fe [22], ● — Fe [29], ж) ● — Co [20], ■ — Co [22], з) ■ — Ni [21].

Политермы вязкости $3d$ -переходных металлов, рассчитанные по формуле (7), представлены на рис. 2 наряду с опытными данными и результатами, полученными в модели нормальной металлической жидкости [2, 7]. Совпадение этих политерм с опытными значениями вязкости дает основание полагать, что выбранные нами значения α правильны (см. табл. 1). Следует отметить, что вязкость жидкого цинка сильно зависит от содержания в нем неметаллических примесей [1], влияние которых на величину μ малоизученно. Для поиска его модельных параметров мы использовали прецизионные опытные данные о вязкости высокочистого цинка [23].

Необходимым условием адекватности модели твердых сфер является равенство $\sigma_0 \cong r_1$, которое, как известно [4], хорошо соблюдается для нормальных жидких металлов вблизи точек плавления. Более того, это равенство реализуется и для Cr, Mn, Fe, Co и Ni, обладающих в жидком состоянии аномальными коэффициентами вязкости. Значения параметра σ_0 этих металлов, соответственно равные 0.249, 0.246, 0.254, 0.249 и

Таблица 3

Сравнение опытных и теоретических коэффициентов самодиффузии жидких металлов вблизи точек плавления

Металл	T, K	$D \cdot 10^9, \text{м}^2/\text{с}$				
		A	B	C	другие данные	ссылки
Sc	1814	5.42	5.95	5.35		
Ti	1941	4.80	5.27	4.74		
	2000	5.26	5.74	5.16	5.06 ± 0.25^a	[30]
V	2178	4.62	5.07	4.56		
Cr	2163	3.43	4.77	4.29		
Mn	1519	2.87	4.08	3.67	2.91^b	[17, 18]
Fe	1820	3.18	4.24	3.79	$3.34^c, 3.62^c$	[31]
	2023	4.56	6.32	5.09	4.48^b	[29]
Co	1767	3.12	3.94	3.54	$3.14^c, 3.97^c$	[32, 33]
	1973	4.62	5.86	4.82	$4.58^b, 4.94^b$	[20, 22]
Ni	1728	3.22	3.90	3.48	$3.14^b, 3.26^b$	[21, 17]
	1775	3.55	4.62	3.76	3.56 ± 0.04^c	[34]
Cu	1940	4.76	6.00	4.82	4.54 ± 0.23^a	[30, 35]
	1358	3.08	3.40	3.04	4.00^a	[3]
Zn	1423	3.58	3.90	3.47	$3.59^b, 3.58^c$	[36, 14]
	693	2.34	2.55	2.30	2.09 ± 0.13^a	[37]
					2.38^b	[23]

Результаты расчетов: A – по настоящей модели твердых сфер, B и C – по теориям [4, 7], соответственно.

^aОпытные данные. ^bВеличина, полученная из опытных данных о вязкости по уравнению (6).

^cМолекулярно-динамические данные.

0.241 нм, в пределах опытной погрешности совпадают со значениями $r_1 = 0.249, 0.267^*, 0.252, 0.250, 0.249$ нм, полученными для кристаллического состояния металлов методом рентгеноструктурного анализа [4]. (*Значение r_1 взято из [6] для жидкого марганца.)

Настоящая теория и теория [2] приводят почти к одной и той же температурной зависимости вязкости нормального жидкого металла (например, Sc, V, Cu или Zn), хотя они разработаны на основе различных концепций. В работе [2] использована комбинация уравнений Андраде и Аррениуса, чтобы получить унифицированную формулу для вязкости, тогда как мы использовали вышеописанный метод. С другой стороны, полученные в этих теориях значения вязкости марганца, железа, кобальта или никеля в окрестности точки плавления существенно отличаются друг от друга (см. рис. 2). Их расхождение постепенно уменьшается при повышении температуры и полностью исчезает при температуре превращения расплава в статистически неупорядоченную жидкость, атомы которой удерживаются вместе металлическими связями, возникающими вследствие перекрытия только сферических 4s-оболочек. Согласно теории металлической связи [9], такое структурное превращение происходит в расплавах кобальта при 2040 ± 50 К и никеля при 1980 ± 50 К. При более высоких температурах теоретические политермы вязкости попарно совпадают, и транспортные свойства расплавов можно очень точно рассчитать в модели нормальной металлической жидкости [2].

В табл. 3 представлены рассчитанные по уравнению (5) коэффициенты самодиффузии жидких 3d-металлов вблизи точек плавления наряду с литературными данными

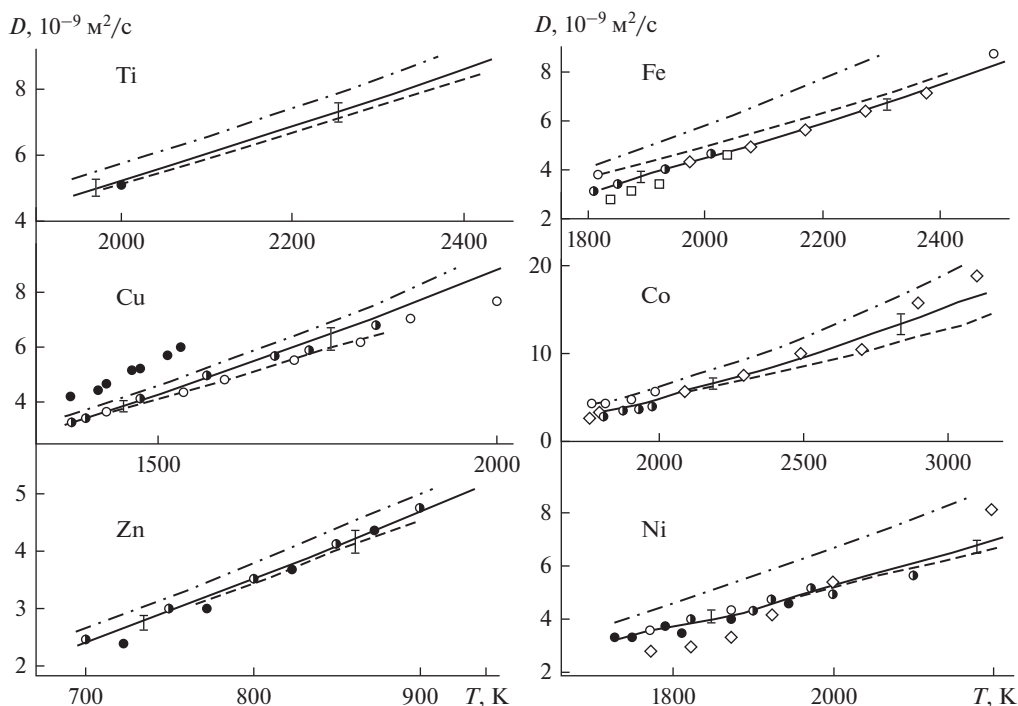


Рис. 3. Температурная зависимость коэффициентов самодиффузии жидких металлов. — — результаты расчетов по настоящей модели твердых сфер; — — по теориям [4]; — — [7]. Вертикальные отрезки — отклонение $\pm 9\%$. Молекулярно-динамические данные: $\circ$ — Cu [14], $\circ$ — Fe [14], $\square$ — Fe [38], $\diamond$ — Fe [39], $\diamond$ — Co [32], $\circ$ — Co [33], $\diamond$ — Ni [32], $\circ$ — Ni [34]; $\bullet$, $\circ$ — полуэмпирические результаты, полученные из опытных данных [1, 23, 26, 40] о вязкости жидких металлов с помощью уравнения (6); $\bullet$ — опытные данные о коэффициентах самодиффузии меди [41], цинка [42], титана и никеля [30, 35].

ми. Хорошее согласие расчетных результатов с величиной D , измеренной довольно точно в расплавах титана и никеля методом нейтронной спектроскопии [30, 35], а также с полуэмпирическими значениями D , полученными с помощью уравнения (6) из опытных коэффициентов вязкости для других металлов, подтверждает правильность выбранных нами значений параметра η_m . Как известно [7, 8], уравнение (6) достаточно точно воспроизводит коэффициенты самодиффузии жидких металлов, если размеры диффундирующих частиц определяются по опытным данным о статических структурных факторах или вязкости.

Из табл. 3 видно, что настоящая теория переноса массы в большинстве случаев неплохо согласуется с теорией [7] и молекулярно-динамическими данными. Ее сравнение с теорией [4], развитой на основе гипотезы о нормальном поведении всех жидких металлов, показывает, что расплавы сильных парамагнетиков (Cr, Mn) и ферромагнетиков (Fe, Co, Ni) вблизи точек плавления обладают аномальными коэффициентами самодиффузии.

На рис. 3 представлены рассчитанные по уравнению (5) политермы коэффициентов самодиффузии жидких $3d$ -металлов в сравнении с литературными данными. Видно, они хорошо согласуются с полуэмпирическими и опытными данными для всех металлов, кроме меди. Полученные в условиях нормальной гравитации опытные данные [41] о величине D жидкой меди, как уже известно [7], очень завышены вследствие эф-

Таблица 4

Предсказанные коэффициенты самодиффузии D жидких скандия, титана, ванадия и хрома

T, K	Sc		Ti		V		Cr	
	$\rho^a, \text{кг/м}^3$	$D \cdot 10^9, \text{м}^2/\text{с}$	$\rho^b, \text{кг/м}^3$	$D \cdot 10^9, \text{м}^2/\text{с}$	$\rho^b, \text{кг/м}^3$	$D \cdot 10^9, \text{м}^2/\text{с}$	$\rho^b, \text{кг/м}^3$	$D \cdot 10^9, \text{м}^2/\text{с}$
2000	2649	7.23	4127	5.26				
2200	2616	9.30	4082	6.87	5353	4.77	6253	3.67
2300	2600	10.39	4059	7.72	5321	5.49	6181	4.33
2400	2583	11.50	4037	8.59	5289	6.23	6109	5.03
2500	2567	12.66	4014	9.48	5257	6.99	6037	5.75
2600	2551	13.84	3991*	10.40	5225*	7.77	5964*	6.52
2700	2534	15.06	3969*	11.34	5193*	8.58	5892*	7.31

^a Величина, рассчитанная по уравнению (П1). ^b Опытные данные [24]. * Экстраполированное значение.

фекта конвекции. Наконец, следует отметить, что наша теория согласуется с экспериментом, теорией [7] и результатами молекулярно-динамических расчетов величины D гораздо лучше, чем теория [4]. (Представленные на рис. 3 молекулярно-динамические данные [39] для железа мы рассчитали со средней ошибкой $\pm 10\%$, используя аппроксимант $D = CM^{-1/6}\rho^{-1/3}T^{1/2}\exp(-BT_m/T)$, где $C = 8.48 \cdot 10^{-9} (\text{Дж/К})^{1/2}/\text{моль}^{1/6}$, $B = 2.16$).

Итак, хорошее согласие настоящей теории с опытными данными о коэффициентах атомного переноса импульса и массы в жидких 3d-переходных металлах дает основание полагать, что разработанные нами модели твердых сфер надежны.

4. ВЫВОДЫ

В настоящей работе развита теория атомного переноса в жидких 3d-переходных металлах с учетом эффектов сильного притяжения d -электронов к атомным ядрам, которое в случае расплавов Cr, Mn, Fe, Co и Ni приводит к избыточной плотности упаковки вблизи точек плавления ($\eta_m > 0.472$), увеличению коэффициента внутреннего трения и, следовательно, к уменьшению подвижности атомов.

Показано, что настоящая теория неплохо предсказывает коэффициенты самодиффузии и вязкости жидких 3d-переходных металлов. Тем не менее, ее адекватность в случаях скандия, ванадия и хрома нуждается в дальнейшей проверке, поскольку надежные опытные данные о кинетических свойствах этих металлов до сих пор не получены.

ПРИЛОЖЕНИЕ

В табл. 4 представлены предсказанные коэффициенты самодиффузии расплавов скандия, титана, ванадия и хрома в широком температурном интервале, где они экспериментально не исследованы. Для расчета коэффициентов D мы использовали опытные данные [24, 25] о температурной зависимости плотности расплавов, которая описывается линейным полиномом

$$\rho = \rho_m + (d\rho/dT)(T - T_m). \quad (\text{П1})$$

Анализируя данные [24, 25, 43] о плотности жидких металлов, измеренной различными методами, мы обнаружили, что ее производная $d\rho/dT$ в работе [25] определена с большой систематической погрешностью ($\varepsilon = 200\text{--}300\%$). Поэтому в табл. 4 представ-

лены скорректированные значения ρ скандия, рассчитанные по уравнению (П1) с параметрами $\rho_m = 2680 \text{ кг/м}^3$, $d\rho/dT = -0.164 \text{ кг/(м}^3 \cdot \text{K)}$.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России по базовой теме “Давление” № АААА-А18-118020190104-3 и проекту УрО РАН № 18-10-2-24.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шпильрайн Э.Э., Фомин В.А., Сковородько С.Н., Сокол Г.Ф. Исследование вязкости жидких металлов. Под ред. Кириллина В.А. М.: Наука, 1983. 244 с.
2. Kaptay G. A unified equation for the viscosity of pure liquid metals // *Z. Metallkd.* 2005. **96**. № 1. P. 1–8.
3. Iida T., Tripathi N., Isac M., Guthrie R.I.L. Models and equations for atomic transport coefficients of liquid metals: viscosity and self-diffusivity // *Mater. Sci. Forum.* 2007. **539–543**. P. 2509–2517.
4. Protopapas P., Andersen H.C., Parlee N.A.D. Theory of transport in liquid metals. I. Calculation of self-diffusion coefficients // *J. Chem. Phys.* 1973. **59**. № 1. P. 15–25.
5. Protopapas P., Andersen H.C., Parlee N.A.D. Theory of transport in liquid metals. II. Calculation of shear viscosity coefficients // *Chem. Phys.* 1975. **8**. № 1. P. 17–26.
6. Waseda Y. The structure of non-crystalline materials: liquid and amorphous solids / Ed. Waseda Y. New York: McGraw-Hill, 1980. 326 p.
7. Kaptay G. A new theoretical equation for temperature dependent self-diffusion coefficients of pure liquid metals // *Int. J. Mat. Res.* 2008. **99**. № 1. P. 14–17.
8. Постовалов В.Г., Саттыбаев И.Ж., Романов Е.П. К теории теплофизических свойств жидких непереходных металлов // *Расплавы*. 2015. № 1. С. 17–28.
9. Григорович В.К. Металлическая связь и структура металлов. Под ред. Гурова К.П. М.: Наука, 1988. 296 с.
10. Speedy R.J. Diffusion in the hard sphere fluid // *Mol. Phys.* 1987. **62**. № 2. P. 509–515.
11. Регель А.Р., Глазов В.М. Закономерности формирования структуры электронных расплавов. Под ред. Герасимова Я.И. М.: Наука, 1982. 320 с.
12. Andrade E.N. A theory of the viscosity of liquids // *Phil. Mag.* 1934. **17**. № 112. P. 497–511.
13. Iida T., Guthrie R., Isac M., Tripathi N. Accurate predictions for the viscosities of several liquid transition metals, plus barium and strontium // *Metal. Mater. Trans. B*. 2006. **37**. P. 403–412.
14. Белашенко Д.К. Компьютерное моделирование жидких металлов // *Успехи физических наук*. 2013. **183**. № 12. С. 1281–1322.
15. Хейне В., Уэйр Д. Теория сил сцепления кристаллических структур в схеме псевдопотенциала. В сб.: *Теория псевдопотенциала*. Под ред. Бонч-Бруевича В.Л. М.: Мир, 1973. С. 295–543.
16. Баум Б.А., Гельд П.В., Кочеров П.В. Вязкость жидких кремния, хрома и его силицидов // *Изв. АН СССР. Металлы*. 1967. № 1. С. 62–69.
17. Каплун А.Б., Авалиани М.И., Крутько М.Ф. Исследование вязкости расплавленных железа, кобальта, никеля и марганца вибрационным методом. В сб.: *Исследование теплофизических свойств растворов и расплавов*. Под ред. Кутателадзе С.С. Новосибирск: Ин-т Теплофизики СО АН СССР, 1974. С. 136–173.
18. Левин Е.С., Замараев В.Н., Гельд П.В. Коэффициенты вязкости, самодиффузии и удельного электросопротивления жидкого марганца // *Изв. АН СССР. Металлы*. 1976. № 2. С. 113–116.
19. Krieger W., Trenkler H. Die Deutung der Schmelzstrukturen von Eisen–Kohlenstoff- und Eisen–Nickel-Legierungen aus dem Viskositätsverhalten // *Arch. Eisenhüttenw.* 1971. **42**. № 3. P. 175–184.
20. Grosse A.V. The empirical relationship between the activation energy of viscosity of liquid metals and their melting points // *J. Inorg. Nucl. Chem.* 1963. **25**. № 3. P. 317–318.
21. Островский О.И., Вьюнов В.М., Григорян В.А. Исследование вязкости жидких железа, кобальта и никеля // *Изв. вузов. Черная металлургия*. 1982. № 3. С. 1–5.

22. Cavalier G. Measurements of the viscosity of undercooled molten-metals // *The Physical Chemistry of Metallic Solutions and Intermetallic Compounds*. London: Her Majesty's Station Office, 1959. 2. № 9. 4D. P. 2–12.
23. Кононенко В. И. Физико-химические исследования свойств сплавов на основе некоторых непереходных металлов: автореф. дис. докт. хим. наук. Киев, 1973. 24 с.
24. Ниженко В. И. Плотность жидких металлов и ее температурная зависимость. В сб.: *Методы исследования и свойства границ раздела контактирующих фаз*. Под ред. Еременко В. Н. Киев: Наукова думка, 1977. С. 125–163.
25. Kononenko V. I., Sukhman A. L., Gruverman S. L., Torokin V. V. Density and surface tension of liquid rare earth metals, scandium and yttrium // *Phys. stat. sol. (a)*. 1984. 84. № 2. P. 429–432.
26. Корчемкина Н. В., Ватолин Н. А., Лисин В. Л., Шуняев К. Ю., Ченцов В. П. Вязкость и диаграмма состояния системы железо–ниобий // *Расплавы*. 2002. № 5. С. 3–9.
27. Вертман А. А., Самарин А. М. Вязкость жидких меди и серебра // *Изв. АН СССР. ОТН. Metallurgia и топливо*. 1960. № 4. С. 95–98.
28. Gebhardt E., Detering K. Die innere Reinburg eutektischer Aluminium Legierungen // *Z. Metallkd.* 1959. 50. № 7. P. 379–385.
29. Арсентьев П. П., Филиппов С. И. Вязкостные характеристики жидкого железа // *Изв. вузов. Черная металлургия*. 1971. № 1. С. 123–125.
30. Stüber S. Diffusion dynamics in liquid and undercooled Al–Ni alloys: Dissertation. München. 2009. 103 p.
31. Mendeleev M. I., Han S., Srolovitz D. J., Askland G. J., Sun D. Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron // *Phil. Mag.* 2003. 83. № 35. P. 3977–3994.
32. Yang S., Su X., Wang J., Yin F., Tang N.-Y. Molecular dynamics analysis of temperature dependence of liquid metal diffusivity // *Metal. Mater. Trans. A*. 2009. 40. № 13. P. 3108–3116.
33. Han X. J., Wang J. Z., Chen M., Guo Z. Y. Molecular dynamics simulation of thermophysical properties of undercooled liquid cobalt: Fifteenth Symposium on Thermophysical Properties. Boulder, Colorado, USA, 2003. P. 1–8.
34. Alemany M. M. G., Rey C., Gallego L. J. Computer simulation study of the dynamic properties of liquid Ni using embedded-atom model // *Phys. Rev. B*. 1998. 58. № 2. P. 685–693.
35. Meyer A., Stüber S., Holland-Moritz D., Heinen O., Unruh T. Determination of self-diffusion coefficients by quasielastic neutron scattering measurements of levitated Ni droplets // *Phys. Rev. B*. 2008. 77. № 9. P. 092201-(1–4).
36. Iida T., Morita Z., Takeuchi S. Viscosity measurements of pure liquid metals by the capillary method // *J. JIM*. 1975. 39. № 11. P. 1169–1175.
37. Lange W., Pippel W., Bendel F. Die Selbstdiffusion in flüssigem Zink // *Z. Phys. Chem.* 1959. 212. № 3–4. P. 238–240.
38. Соболев А. Н., Мирзоев А. А. Структура и свойства жидкого железа: первопринципное компьютерное моделирование // *Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы*. 2009. 12. С. 1–4.
39. Dalgic S. S., Kosoglu I. A molecular dynamics study of the static structure, thermodynamic and transport properties of liquid iron using the modified analytic embedded atom method // *Turk. J. Phys.* 2006. 30. № 4. P. 295–302.
40. Белоусов А. А., Бахвалов С. Г., Алешина С. Н., Пастухов Э. А., Денисов В. М. Физико-химические свойства жидкой меди и ее сплавов. Справочник / Отв. ред. Чумарев В. М. Екатеринбург: Ин-т Металлургии УрО РАН, 1997. 124 с.
41. Henderson J., Yang L. Self-diffusion of copper in molten copper // *Trans. Met. Soc. AIME*. 1961. 221. № 1. P. 72–73.
42. Nachtrieb N. H., Fraga E., Wahl C. Self-diffusion of liquid zinc // *J. Phys. Chem.* 1963. 67. № 11. P. 2353–2355.
43. Stankus S. V., Khairulin R. A. Thermal properties of lanthanoides in liquid and solid states // *Russian J. Engin. Thermophys.* 1991. 1. P. 193–210.

On Theory of Atomic Transport in Liquid 3d-Transition Metals

V. G. Postovalov¹, V. P. Kondratiev², E. P. Romanov¹

¹M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences (IMP UB RAS),
S. Kovalevskaya str., 18, Yekaterinburg, 620108 Russia

²Ural Technical Institute of Telecommunications and Informatics,
Repin str., 15, Yekaterinburg, 620109 Russia

The theory of atomic transfer in liquid 3d-transition metals has been developed in the present article to predict their self-diffusion and viscosity coefficients. It is shown, that the theoretical values of these coefficients are in good agreement with the experimental data. It was discovered that liquid chromium, manganese, iron, cobalt and nickel shows anomalies of transport properties. Self-diffusion coefficients of liquid scandium, titanium, vanadium and chromium are predicted in a wide temperature range.

Keywords: liquid 3d-transition metal, self-diffusion, viscosity

REFERENCES

1. Shpil'rain E.E., Fomin V.A., Skovorod'ko S.N., Sokol G.F. Research of viscosity of liquid metals [*Issledovaniye vyazkosti zhidkikh metallov*]. Ed. Kirillin V.A. Moscow: Nauka, 1983. 244 p. [In Rus.].
2. Kaptay G. A unified equation for the viscosity of pure liquid metals // *Z. Metallkd.* 2005. **96**. № 1. P. 1–8.
3. Iida T., Tripathi N., Isac M., Guthrie R.I.L. Models and equations for atomic transport coefficients of liquid metals: viscosity and self-diffusivity // *Mater. Sci. Forum.* 2007. **539–543**. P. 2509–2517.
4. Protopapas P., Andersen H.C., Parlee N.A.D. Theory of transport in liquid metals. I. Calculation of self-diffusion coefficients // *J. Chem. Phys.* 1973. **59**. № 1. P. 15–25.
5. Protopapas P., Andersen H.C., Parlee N.A.D. Theory of transport in liquid metals. II. Calculation of shear viscosity coefficients // *Chem. Phys.* 1975. **8**. № 1. P. 17–26.
6. Waseda Y. The structure of non-crystalline materials: liquid and amorphous solids / Ed. Waseda Y. New York: McGraw-Hill, 1980. 326 p.
7. Kaptay G. A new theoretical equation for temperature dependent self-diffusion coefficients of pure liquid metals // *Int. J. Mat. Res.* 2008. **99**. № 1. P. 14–17.
8. Postovalov V.G., Sattybaev I.Zh., Romanov E.P. On theory of thermal-physical properties of liquid non-transition metals [*K teorii teplofizicheskikh svoystv zhidkikh neperekhodnykh metallov*] // *Rasplavy*. 2015. № 1. P. 17–28. [In Rus.].
9. Grigorovich V.K. Metallic bond and structure of metals [*Metallicheskaya svyaz' i struktura metallov*]. Ed. Gurov K.P. Moscow: Nauka, 1988. P. 1–296. [In Rus.].
10. Speedy R.J. Diffusion in the hard sphere fluid // *Mol. Phys.* 1987. **62**. № 2. P. 509–515.
11. Regel' A.R., Glazov V.M. Patterns of formation of the structure of electron melts [Zakonomenosti formirovaniya struktury elektronnykh rasplavov]. Ed. Gerasimova Ya.I. Moscow: Nauka, 1982. 320 p. [In Rus.].
12. Andrade E.N. A theory of the viscosity of liquids // *Phil. Mag.* 1934. **17**. № 112. P. 497–511.
13. Iida T., Guthrie R., Isac M., Tripathi N. Accurate predictions for the viscosities of several liquid transition metals, plus barium and strontium // *Metal. Mater. Trans. B.* 2006. **37**. P. 403–412.
14. Belashchenko D.K. Computer simulation of liquid metals [*Komp'yuternoye modelirovaniye zhidkikh metallov*] // *Usp. Fiz. Nauk.* 2013. **183**. № 12. P. 1281–1322. [In Rus.].
15. Heine V., Weaire D. Theory of adhesion forces of crystal structures in the pseudopotential scheme [*Teoriya sil stsepleniya kristallicheskikh struktur v skheme psevdopotentsiala*]. In Proc.: Theory of Pseudopotential. Ed. Bonch-Bruевич V.L. M.: Mir, 1973. P. 295–543. [In Rus.].
16. Baum B.A., Geld P.V., Kocherov P.V. The viscosity of liquid silicon, chromium, and its silicides [*Vyazkost' zhidkikh kremniya, khroma i yego silitsidov*] // *Izv. AN SSSR. Metall.* 1967. № 1. P. 62–69. [In Rus.].
17. Kaplun A.B., Avaliani M.I., Krutiko M.F. Vibratory study of viscosity coefficients of molten iron, cobalt, nickel, and manganese [*Issledovaniye vyazkosti rasplavlennyykh zheleza, kobal'ta, nikelya i*

margantsa vibratsionnym metodom) // Issledovanie Teplofizicheskikh Svoistv Rastvorov i Rasplavov. Ed. Kutateladze S.S. Novosibirsk: Inst. Teplofiz. SO AN SSSR, 1974. P. 136–173. [In Rus.].

18. Levin E.C., Zamaraev V.N., Geld P.V. Viscosity, self-diffusion, and resistivity coefficients of liquid manganese [*Koeffitsiyenty vyazkosti, samodiffuzii i udel'nogo elektrosoprotivleniya zhidkogo margantsa*] // Izv. AN SSSR. Metall. 1976. № 2. P. 113–116 [In Rus.].

19. Krieger W., Trenkler H. Die Deutung der Schmelzstrukturen von Eisen–Kohlenstoff- und Eisen–Nickel-Legierungen aus dem Viskositätsverhalten // Arch. Eisenhüttenw. 1971. **42**. № 3. P. 175–184.

20. Grosse A.V. The empirical relationship between the activation energy of viscosity of liquid metals and their melting points // J. Inorg. Nucl. Chem. 1963. **25**. № 3. P. 317–318.

21. Ostrovskii O.I., Viunov V.M., Grigoryan V.A. Research of viscosity coefficients of liquid iron, cobalt, and nickel [*Issledovaniye vyazkosti zhidkikh zheleza, kobal'ta i nikelya*] // Izv. Vuzov. Chernaya Metallurgiya. 1982. № 3. P. 1–5 [In Rus.].

22. Cavalier G. Measurements of the viscosity of undercooled molten-metals // The Physical Chemistry of Metallic Solutions and Intermetallic Compounds. London: Her Majesty's Station Office, 1959. **2**. № 9. 4D. P. 2–12.

23. Kononenko V.I.: Fiziko-khimicheskie Issledovaniya Svoistv Splavov na Osnove Nekotorykh Neperekhodnykh Metallov [*Fiziko-khimicheskiye issledovaniya svoystv splavov na osnove nekotorykh neperekhodnykh metallov*]: Avtoref. dis. ... dokt. khim. Nauk. Kiev, 1973. P. 1–24 [In Rus.].

24. Nizhenko V.I. Density of liquid metals and its temperature dependence. In book: Research methods and properties of interfaces of contacting phases. [*Plotnost' zhidkikh metallov i yeye temperaturnaya zavisimost'. V sb.: Metody issledovaniya i svoystva granits razdela kontaktiruyushchikh faz*]. Ed. by Eremenko V.N. Kiev: Naukova dumka, 1977. P. 125–163 [In Rus.].

25. Kononenko V.I., Sukhman A.L., Gruverman S.L., Torokin V.V. Density and surface tension of liquid rare earth metals, scandium and yttrium // Phys. stat. sol. (a). 1984. **84**. № 2. P. 429–432.

26. Korchemkina N.V., Vatolin N.A., Lisin V.L., Shunyayev K.Yu., Chentsov V.P. Viscosity and state diagram of the iron–niobium system [*Vyazkost' i diagramma sostoyaniya sistemy zhelezo–niobiy*] // Rasplavy. 2002. № 5. P. 3–9. [In Rus.].

27. Vertman A.A., Samarin A.M. Viscosity of liquid copper and silver [*Vyazkost' zhidkikh medi i srebra*] // Izv. AN SSSR. OTN. Metallurgiya i toplivo. 1960. № 4. P. 95–98. [In Rus.].

28. Gebhardt E., Detering K. Die innere Reinburg eutektischer Aluminium Legierungen // Z. Metallkd. 1959. **50**. № 7. P. 379–385.

29. Arsent'yev P.P., Filippov S.I. Viscous characteristics of liquid iron [*Vyazkostnyye kharakteristiki zhidkogo zheleza*] // Izv. vuzov. Chernaya metallurgiya. 1971. № 1. P. 123–125 [In Rus.].

30. Stüber S. Diffusion dynamics in liquid and undercooled Al–Ni alloys: Dissertation. München. 2009. 103 p.

31. Mendelev M.I., Han S., Srolovitz D.J., Askland G.J., Sun D.Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron // Phil. Mag. 2003. **83**. № 35. P. 3977–3994.

32. Yang S., Su X., Wang J., Yin F., Tang N.-Y. Molecular dynamics analysis of temperature dependence of liquid metal diffusivity // Metal. Mater. Trans. A. 2009. **40**. № 13. P. 3108–3116.

33. Han X.J., Wang J.Z., Chen M., Guo Z.Y. Molecular dynamics simulation of thermophysical properties of undercooled liquid cobalt: Fifteenth Symposium on Thermophysical Properties. Boulder, Colorado, USA, 2003. P. 1–8.

34. Alemany M.M.G., Rey C., Gallego L.J. Computer simulation study of the dynamic properties of liquid Ni using embedded-atom model // Phys. Rev. B. 1998. **58**. № 2. P. 685–693.

35. Meyer A., Stüber S., Holland-Moritz D., Heinen O., Unruh T. Determination of self-diffusion coefficients by quasielastic neutron scattering measurements of levitated Ni droplets // Phys. Rev. B. 2008. **77**. № 9. P. 092201-(1–4).

36. Iida T., Morita Z., Takeuchi S. Viscosity measurements of pure liquid metals by the capillary method // J. JIM. 1975. **39**. № 11. P. 1169–1175.

37. Lange W., Pippel W., Bendel F. Die Selbstdiffusion in flüssigem Zink // Z. Phys. Chem. 1959. **212**. № 3–4. P. 238–240.

38. Sobolev A.N., Mirzoyev A.A. Structure and properties of liquid iron: first-principle computer simulation [*Struktura i svoystva zhidkogo zheleza: pervoprintsipnoye komp'yuternoye modelirovaniye*] // Fazovyye perekhody, uporyadochennyye sostoyaniya i novyye materialy. 2009. **12**. P. 1–4 [In Rus.].

-
39. Dalgic S.S., Kosoglu I. A molecular dynamics study of the static structure, thermodynamic and transport properties of liquid iron using the modified analytic embedded atom method // Turk. J. Phys. 2006. **30**. № 4. P. 295–302.
40. Belousov A.A., Bakhvalov S.G., Aleshina S.N., Pastukhov E.A., Denisov V.M. Physico-chemical properties of liquid copper and its alloys [*Fiziko-khimicheskiye svoystva zhidkoy medi i yeye splavov*]. Ed. Chumarev V.M. Ekaterinburg: Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences Spravochnik, 1997. 124 p. [In Rus.].
41. Henderson J., Yang L. Self-diffusion of copper in molten copper // Trans. Met. Soc. AIME. 1961. **221**. № 1. P. 72–73.
42. Nachtrieb N.H., Fraga E., Wahl C. Self-diffusion of liquid zinc // J. Phys. Chem. 1963. **67**. № 11. P. 2353–2355.
43. Stankus S.V., Khairulin R.A. Thermal properties of lanthanoides in liquid and solid states // Russian J. Engin. Thermophys. 1991. **1**. P. 193–210.