06

Периодичность и корреляции излучательной способности жидких металлов

© Д.В. Косенков, В.В. Сагадеев

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия
E-mail: dmi-kosenkov@yandex.ru

Поступило в Редакцию 3 июня 2025 г.
В окончательной редакции 1 ноября 2025 г.
Принято к публикации 17 ноября 2025 г.

Проведен систематический анализ излучательной способности жидких металлов в зависимости от температуры плавления, поверхностного натяжения и положения элементов в Периодической системе. Установлены устойчивые корреляции между излучательной способностью и термодинамическими характеристиками, а также периодичность изменения излучательной способности в пределах периодов. На основе анализа предполагается наличие общего фактора, формирующего радиационные и поверхностные свойства в приповерхностной области расплава. Полученные зависимости могут применяться для прогнозирования излучательной способности в условиях, где прямые измерения затруднены, и использоваться при моделировании теплового излучения в высокотемпературных системах.

Ключевые слова: излучательная способность, жидкие металлы, периодичность, поверхностное натяжение, температура плавления, корреляция.

DOI: 10.61011/PJTF.2026.05.62338.20396

Излучательная способность (ИС) жидких металлов представляет научный интерес как для фундаментальной теплофизики, так и для прикладных задач в энергетике и металлургии. Несмотря на наличие большого массива экспериментальных данных [1–3], систематические исследования, направленные на выявление закономерностей изменения ИС в зависимости от положения элементов в Периодической системе (ПС), до настоящего времени ограничены. В то же время вопрос периодичности отдельных теплофизических свойств металлов, включая характеристики, близкие к ИС, получил развитие в ряде фундаментальных исследований [4,5], что создает основу для обобщающих подходов, подобных реализованному в [6].

В настоящей работе выполнен комплексный анализ ИС жидких металлов при температурах, близких к точке плавления, с учетом атомного номера (Z), температуры плавления (T_m) и молярного поверхностного натяжения (σ_m). Выбор интегральной ИС обусловлен ее ключевой ролью в расчетах полного энергетического баланса высокотемпературных систем, а также целью выявить общие закономерности, в меньшей степени зависящие от индивидуальных спектральных особенностей элементов.

Основой для анализа послужил единообразный массив данных, сформированный для обеспечения максимальной сопоставимости. Использованы собственные экспериментальные результаты, полученные в контролируемых условиях и опубликованные ранее [6–10], а для элементов, по которым прямые измерения отсутствуют, ИС рассчитывалась. Такой подход позволяет минимизировать систематические погрешности, неизбежные при сопоставлении данных из разнородных источников.

При анализе корреляций между ИС, T_m и σ_m использованы данные для металлов высокой чистоты, так как эти свойства чувствительны к примесям и состоянию поверхности. Для каждого элемента в таблице приведены Z, T_m [4], σ_m [11] и нормальная интегральная ИС (ε_{tn}^m) жидкой фазы при плавлении. Для элементов, по которым эксперимент отсутствует, использовалось приближение Фута, имеющее вид

$$\varepsilon_{tn} = 5.78\sqrt{\rho T} - 17.9\rho T + 44(\rho T)^{3/2}, \qquad (1)$$

где T — температура [K], ρ — удельное электрическое сопротивление [$\Omega \cdot$ m]. Значения ρ при T_m взяты из источников [12–14].

На рис. 1 представлена зависимость ε_{tn}^m металлов от их атомного номера. Данные сгруппированы по периодам ПС, что позволило выявить устойчивую периодичность: в пределах каждого периода ε_{tn}^m изменяется нелинейно, следуя закономерностям заполнения электронных оболочек.

Максимальные значения ε_{tn}^m наблюдаются у переходных d-металлов, особенно у элементов с полузаполненными подуровнями (например, V, Mo, Re), что согласуется с общими тенденциями электронной плотности и степени локализации электронных состояний в поверхностной области расплава. У щелочных и щелочно-земельных металлов ε_{tn}^m минимальна, что отражает преимущественно делокализованный характер их электронов и низкую плотность состояний вблизи уровня Ферми [13]. Постпереходные металлы и полуметаллы демонстрируют резкое снижение ε_{tn}^m, вероятно из-за усиления ковалентных компонентов связи и снижения эффективности электронного поглощения. Подобная

Численные значения параметров

Металл	Z	T_m, K	ε_{tn}^m	σ_m, kJ/mol	Металл	Z	T_m, K	ε_{tn}^m	σ_m, kJ/mol
Li	3	454	0.060	21.27	Mo	42	2888	0.291*	96.19
Be	4	1560	0.173	37.51	Te	52	723	0.048*	–
Na	11	371	0.046	15.34	Ru	44	2607	0.287*	90.77
Mg	12	923	0.093	33.7	Rh	45	2233	0.240*	81.76
Al	13	934	0.110	42.4	Pd	46	1825	0.204	62.78
K	19	337	0.035	12.33	Ag	47	1234	0.108	43.54
Ca	20	1112	0.105	31.89	Cd	48	594	0.094	33.95
Sc	21	1812	0.202	57.3	In	49	430	0.079	33.77
Ti	22	1941	0.259*	73.68	Sn	50	505	0.098	33.64
V	23	2178	0.266*	77.11	Sb	51	904	0.065*	24.42
Cr	24	2148	0.237*	61.11	Cs	55	302	0.058*	11.16
Mn	25	1517	0.132*	45.96	Ba	56	983	0.130*	30.8
Fe	26	1807	0.243*	68.14	Hf	72	2495	0.280	88.08
Co	27	1768	0.250	67.76	Ta	73	3270	0.317*	102.51
Ni	28	1728	0.200	61.82	W	74	3655	0.328*	106.3
Cu	29	1356	0.138	48.62	Re	75	3453	0.336*	113.61
Zn	30	693	0.108	33.08	Os	76	3300	0.300*	93.51
Ga	31	303	0.083*	33.76	Ir	77	2716	0.270*	91.73
Ge	32	1070	0.077*	30.52	Pt	78	2042	0.210	75.41
Rb	37	312	0.054*	11.93	Au	79	1336	0.125	55.24
Sr	38	1041	0.132*	31.2	Hg	80	234	0.080*	27.77
Y	39	1775	0.214	60.04	Tl	81	577	0.075*	29.86
Zr	40	2123	0.265	82.55	Pb	82	600	0.074	29.96
Nb	41	2770	0.271*	90.95	Bi	83	544	0.069*	–

*Рассчитано по приближению Фута.

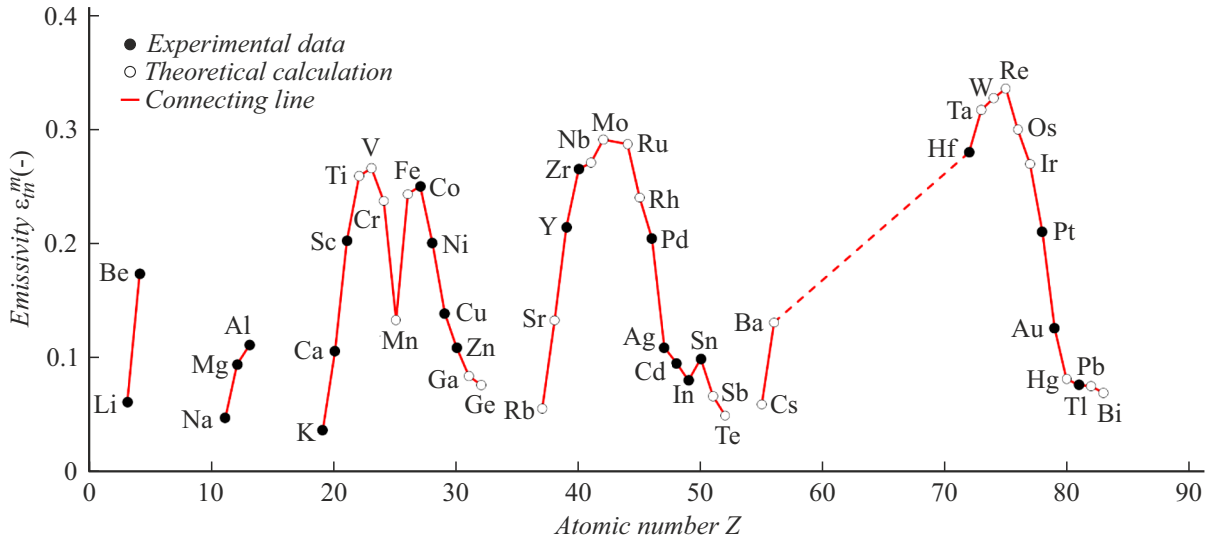


Рис. 1. Периодичность изменения ε_{tn}^m металлов.

картина перекликается с поведением σ_m, которое также демонстрирует выраженную периодичность [11].

Анализ полученной выборки позволяет утверждать, что ИС в жидком состоянии носит не случайный, а закономерный характер, опосредованный строением внешних электронных оболочек. Наблюдаемая периодичность подтверждает, что радиационные свойства металлов сохраняют привязку к атомным характеристикам даже в фазе расплава, где отсутствует дальний порядок. Это может свидетельствовать о сохранении корреляций в приповерхностной области.

На рис. 2 показана зависимость ε_{tn}^m от σ_m. Установленная зависимость аппроксимируется уравнением

$$\varepsilon_{tn}^m = 3.1 \cdot 10^{-3}\sigma_m + 1.1 \cdot 10^{-3}. \qquad (2)$$

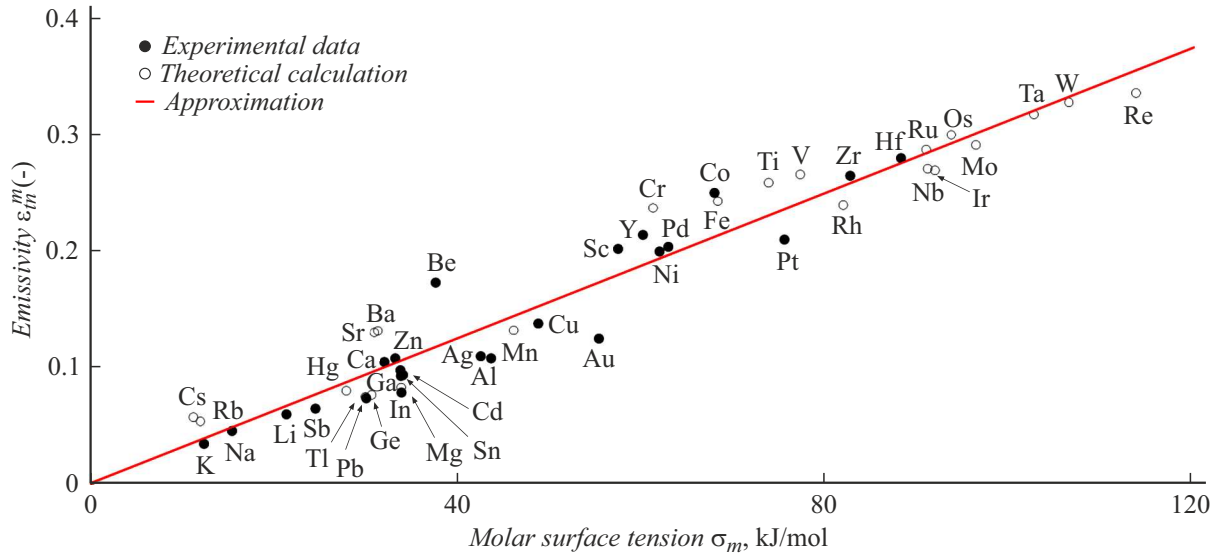


Рис. 2. Корреляция ε_{tn}^m металлов с σ_m.

Высокий коэффициент детерминации ($R^2 = 0.94$) и визуальный анализ рассеяния точек свидетельствуют в пользу линейного характера данной зависимости. Установленная корреляция подкрепляет предположение о физической связи между ε_{tn}^m и σ_m. Зависимость демонстрирует общую линейную тенденцию. При этом данные для щелочных металлов (значения σ_m менее 40) группируются в области низких значений ε_{tn}^m, а для d-металлов (значения σ_m более 80) — в области высоких значений. Такое кластеризованное поведение согласуется с фундаментальными различиями в электронной структуре и характере межатомных взаимодействий в этих группах элементов [15].

На основе этой зависимости предлагается гипотеза: в тонком приповерхностном слое расплава ($\sim 2-3$ межатомных расстояния) одновременно формируются и радиационные, и поверхностные свойства, определяемые плотностью электронного газа, степенью локализации состояний и характером межатомных взаимодействий. Для d-металлов, обладающих высокой электронной плотностью, локализованные состояния могут одновременно усиливать как поверхностное натяжение, так и вероятность переходов, ответственных за тепловое излучение. Это объясняет наблюдаемый рост ε_{tn}^m с увеличением σ_m. У металлов с низким σ_m, как у щелочных, корреляция ослабляется, в этих системах делокализованные электронные облака снижают вклад в ИС. Таким образом, сама структура приповерхностного слоя, меняющаяся при переходе в жидкость, становится ключом к пониманию обеих характеристик.

На рис. 3 показана зависимость ε_{tn}^m от T_m, где также выявлена выраженная линейная корреляция ($R^2 = 0.92$):

$$\varepsilon_{tn}^m = 9.0 \cdot 10^{-5} T_m + 27 \cdot 10^{-3}. \qquad (3)$$

Рост ε_{tn}^m с увеличением T_m может быть объяснен несколькими физическими механизмами. Во-первых, при плавлении происходит разрушение кристаллической решетки, сопровождающееся частичной делокализацией электронов и перераспределением плотности состояний, особенно в области уровня Ферми. Это увеличивает вероятность свободных переходов и уменьшает отражательную способность поверхности, способствуя росту ИС. Во-вторых, повышение температуры приводит к увеличению амплитуды атомных колебаний и возникновению динамических неоднородностей в структуре расплава [15]. Эти факторы изменяют глубину и структуру приповерхностного слоя, влияя на ИС. Металлы с высокой T_m, как правило, обладают прочными металлическими связями и высоким вкладом d-электронов, что обеспечивает им большую плотность состояний и, как следствие, высокую ИС.

Несмотря на высокие коэффициенты детерминации, подтверждающие общую статистическую значимость выявленных корреляций, анализ разброса экспериментальных точек относительно аппроксимирующих линий позволяет выделить элементы, для которых наблюдаются значимые отклонения. В контексте зависимости от σ_m наибольшие расхождения характерны для металлов с аномалиями электронного строения, которые обусловливают специфический характер межатомных взаимодействий в приповерхностном слое. К их числу относится Be, у которого малый атомный радиус и существенная ковалентная составляющая связи [5] приводят к формированию высокопрочной и тугоплавкой оксидной пленки, резко повышающей ИС в эксперименте [16]. Другим примером является Au, аномалии свойств которого связаны с релятивистскими эффектами (сжатием и стабилизацией электронных орбиталей), что влияет на энергию Ферми и радиационные характеристики поверхности [5].

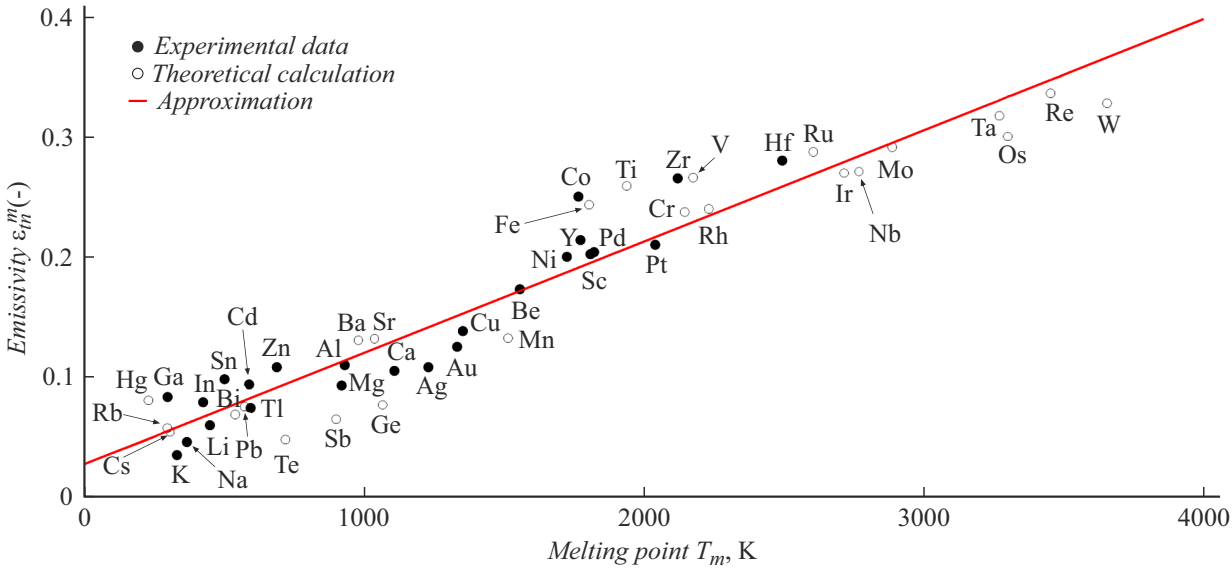


Рис. 3. Корреляция ε_{tn}^{m} металлов с T_m.

Что касается корреляции с T_m, то систематические отклонения, в частности, для Te (около 32 %), по-видимому, связаны с природой самих элементов. Для полуметаллов температура плавления перестает быть однозначным индикатором силы металлической связи в расплаве, так как их свойства в значительной степени определяются ковалентной составляющей и сложной электронной структурой, характерной для жидких полупроводников [17].

Наличие указанных отклонений не отменяет установленных общих закономерностей, но указывает на два типа физических ограничений для предложенных моделей. Во-первых, это специфическое электронное строение, приводящее к аномальным поверхностным свойствам, не полностью описываемым параметром σ_m. Во-вторых, это принципиальное различие в природе химической связи, при котором температура плавления T_m теряет свою однозначность как мера металличности расплава. Учет этих факторов необходим для дальнейшего уточнения прогностических моделей ИС жидких металлов.

Полученные данные подтверждают, что Z, σ_m и T_m могут рассматриваться не только как фундаментальные параметры, но и как индикаторы состояния приповерхностного слоя расплава, определяющего ИС. Предложенная гипотеза, связывающая радиационные и поверхностные свойства через их общую приповерхностную природу, может стать основой для нового подхода к интерпретации теплофизических характеристик жидких металлов. Выдвинутая гипотеза, естественно, требует независимой проверки. Ее верификация может быть осуществлена путем исследования структуры поверхности жидких металлов методом рентгеновской рефлектометрии [18], сопоставления с данными по спектральной зависимости ИС, имеющимися в литературе [2,3], а также проведения компьютерного моделирования границы раздела фаз, которое позволяет непосредственно изучать строение приповерхностного слоя [19].

Таким образом, проведенный анализ позволил выявить характерные зависимости ИС жидких металлов от их термодинамических и поверхностных характеристик. Установлено, что ε_{tn}^{m} металлов в жидком состоянии коррелирует с их атомным номером, поверхностным натяжением и температурой плавления, что подтверждается высоким коэффициентом детерминации соответствующих аппроксимаций. Наблюдаемая периодичность изменения ИС по периодам ПС согласуется с электронной конфигурацией элементов, особенно для переходных металлов, где ε_{tn}^{m} достигает максимума для элементов с полузаполненными d-подуровнями.

Выявленная связь между ИС и σ_m позволяет предположить существование общего приповерхностного механизма, определяющего как радиационные, так и поверхностные свойства металлических расплавов. Полученные результаты важны для более глубокого понимания взаимосвязей между термодинамическими и радиационными свойствами жидких металлов и могут найти применение в теплофизике и металлургии.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] G. Pottlacher, K. Boboridis, C. Cagran, T. Hüpf, A. Seifter, B. Wilthan, AIP Conf. Proc., **1552**, 704 (2013). DOI: 10.1063/1.4819628
[2] M. Watanabe, M. Adachi, H. Fukuyama, J. Mol. Liq., **324**, 115138 (2021). DOI: 10.1016/j.molliq.2020.115138
[3] T. Ishikawa, C. Koyama, Y. Nakata, Y. Watanabe, P. Paradis, J. Chem. Thermodyn., **163**, 106598 (2021). DOI: 10.1016/j.jct.2021.106598

[4] А.Р. Регель, В.М. Глазов, *Периодический закон и физические свойства электронных расплавов* (Наука, М., 1978).
[5] В.К. Григорович, *Металлическая связь и структура металлов* (Наука, М., 1988).
[6] Д.В. Косенков, В.В. Сагадеев, Инж.-физ. журн., **98** (2), 552 (2025). [D.V. Kosenkov, V.V. Sagadeev, J. Eng. Phys. Thermophys., **98**, 560 (2025). DOI: 10.1007/s10891-025-03130-1].
[7] Д.В. Косенков, В.В. Сагадеев, Теплофизика и аэромеханика, **31** (4), 817 (2024). [D.V. Kosenkov, V.V. Sagadeev, Thermophys. Aeromech., **31**, 831 (2024). DOI: 10.1134/S0869864324040218].
[8] Д.В. Косенков, В.В. Сагадеев, В.А. Аляев, ЖТФ, **91** (7), 1090 (2021). DOI: 10.21883/JTF.2021.07.50949.9-21 [D.V. Kosenkov, V.V. Sagadeev, V.A. Alyaev, Tech. Phys., **66**, 1338 (2021). DOI: 10.1134/S1063784221070069].
[9] Д.В. Косенков, В.В. Сагадеев, Инж.-физ. журн., **97** (5), 1402 (2024). [D.V. Kosenkov, V.V. Sagadeev, J. Eng. Phys. Thermophys., **97**, 1401 (2024). DOI: 10.1007/s10891-024-03011-z].
[10] Д.В. Косенков, В.В. Сагадеев, Расплавы, № 1, 35 (2025). DOI: 10.31857/S0235010624050057
[11] *Физическая химия неорганических материалов*, под общ. ред. В.Н. Еременко (Наук. думка, Киев, 1988), т. 2.
[12] G. Pottlacher, High Temp.−High Press., **51** (Suppl. 1), 1 (2022). DOI: 10.32908/hthp.v51.220711
[13] В.Е. Зиновьев, *Теплофизические свойства металлов при высоких температурах* (Металлургия, М., 1989).
[14] Б.А. Баум, *Металлические жидкости* (Наука, М., 1979).
[15] Н.Г. Марч, *Жидкие металлы*, под ред. В.М. Глазова (Металлургия, М., 1972). [N.H. March, *Liquid metals* (Pergamon Press, Oxford, 1968).].
[16] Г.А. Жоров, Р.М. Альтовский, М.И. Уразбаев, Д.С. Горный, ТВТ, **14** (1), 42 (1976).
[17] В.М. Глазов, С.Н. Чижевская, Н.Н. Глагольева, *Жидкие полупроводники* (Наука, М., 1967).
[18] P.S. Pershan, Eur. Phys. J. Spec. Top., **196**, 109 (2011). DOI: 10.1140/epjst/e2011-01422-3
[19] L.E. Gonzalez, D.J. Gonzalez, J. Phys.: Condens. Matter, **18** (48), 11021 (2006). DOI: 10.1088/0953-8984/18/48/030