УДК 539.22:548 *Оригинальная статья*

Моделирование термического влияния на поверхностную энергию и работу выхода электрона монокристаллического таллия

И.Г. Шебзухова[1], Л.П. Арефьева[2]

[1] ФБГОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова»

360004, Россия, Нальчик, ул. Чернышевского, 173

[2] ФБГОУ ВО «Донской государственный технический университет»

344003, Россия, Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1

Ludmilochka529@mail.ru, Irina.Shebzukhova@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.289

Аннотация: В данной работе ставилась цель провести численное моделирование термического влияния на энергетические и силовые характеристики монокристаллического таллия. Поверхностная энергии и работа выхода электрона граней кристаллов таллия рассчитаны с использованием электронно-статистического метода с учетом квантовых поправок. Проанализировано влияние полиморфных превращений и температуры на анизотропию этих свойств. Также оценена энергия когезии α- и β- таллия на основе величин поверхностной и межфазной энергий, включающих среднюю конфигурационную энергию и энергию химического взаимодействия между двумя частями металла, и исследована ее зависимость от температуры. Проведен расчет контактной разности потенциалов для пар плотноупакованных граней. В рамках модели Гриффитса проведено компьютерное моделирование механических свойств и получена зависимость предела прочности таллия при деформации растяжения, что позволяет прогнозировать эксплуатационный ресурс материала.

Ключевые слова: поверхностная энергия, работа выхода электрона, анизотропия, полиморфные модификации таллия, энергия когезии, трещиностойкость.

Шебзухова Ирина Гусейновна – д.ф.-м.н., профессор, профессор, кафедра теоретической и экспериментальной физики, Институт математики и естественных наук, ФБГОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова»

Арефьева Людмила Павловна – д.ф.-м.н., доцент, профессор, кафедра «Материаловедение и технологии металлов», факультет «Технология машиностроения», ФБГОУ ВО «Донской государственный технический университет»

Original paper

Modeling the thermal effect on the surface energy and electron work function of a monocrystal thallium

I.G. Shebzukhova[1], L.P. Aref'eva[2]

[1] Kabardino-Balkarian State University named after Kh.M. Berbekov, Nalchik, Russia

[2] Don State Technical University, Rostov-on-Don, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.289

Abstract: The aim of this work was to carry out numerical modeling of thermal influence on energy and force characteristics of monocrystal thallium. The surface energies and work function of faces of thallium crystals are calculated using the electron-statistical method taking into account quantum corrections. The influence of polymorphic transformations and temperature on anisotropy of these properties is analyzed. The cohesive energy of α- and β- thallium has also been estimated based on the values of surface and interfacial energies, which include the average configuration energy and the energy of chemical interaction between two parts of the metal, and the temperature dependence of the chemical interaction energy has been investigated. The contact potential difference for pairs of close-packed faces has been calculated. Computer simulations of the mechanical properties have been performed using the Griffiths model, and the tensile strength of thallium has been obtained, which

© И.Г. Шебзухова, Л.П. Арефьева, 2026

allows for the prediction of the material's service life.
Keywords: surface energy, electron work function, anisotropy, polymorphic modifications of thallium, cohesive energy, crack resistance.

Irina G. Shebzukhova – Dr. Sc., Professor, Professor, Department of Theoretical and Experimental Physics, Institute of Mathematics and Natural Sciences, Kabardino-Balkarian State University named after H.M. Berbekov
Ludmila P. Aref'eva – Dr. Sc., Associate Professor, Professor, Department of Materials Science and Technology of Metals, Faculty of Mechanical Engineering Technology, Don State Technical University, ORCID: 0000-0003-2431-6897

Поступила в редакцию/received: 12.07.2026; после рецензирования/revised: 20.08.2026; принята/accepted: 27.08.2026.

1. Введение

Таллий является тяжелым, рассеянным элементом, который добывается по многостадийной технологии из отходов металлургических производств. Необходимость очистки отходов, воды и почвы от таллия обусловлена его высокой токсичностью – в виде металла и в соединениях относится к веществам 1-го класса опасности [1]. Однако, таллий востребован в некоторых отраслях промышленности. В частности, он входит в состав эвтектических сплавов, используемых в качестве особолегкоплавких припоев для микроэлектроники, теплоносителей в ядерной энергетике [2-5].

Технологические и эксплуатационные свойства припоев и теплоносителей определяются свойствами поверхности – межфазной энергией, поверхностной активностью, температурами фазовых переходов.

В связи со сложностью экспериментального определения [6, 7] поверхностной энергии (ПЭ) твердых металлов, особенно в интервале невысоких температур, остается актуальным моделирование поверхностных свойств. В данной работе использовался успешно апробированный авторами метод расчета ПЭ и работы выхода электрона (РВЭ), основанный на электронно-статистической теории [8, 9].

Несмотря на длительное изучение [10-12], остается актуальной и значимой проблема прогнозирования образования трещин в металлических изделиях при низких температурах обработки и эксплуатации. Трещиностойкость сплавов определяется на практике по модели Гриффитса, связывающей размер критической трещины с удельной ПЭ, модулем упругости и напряжением по нормали к поверхности трещины.

Целью работы является численное моделирование термического влияния на энергетические и силовые характеристики полиморфных фаз таллия и их связи с механическими свойствами. В работе ставились задачи: показать влияние полиморфных превращений и температуры на анизотропию ПЭ и РВЭ $\alpha-$ и $\beta-$таллия, определить разности между РВЭ контакта плотноупакованных граней для каждой фазы и для разных фаз, определить энергию когезии фаз, в модели Гриффитса определить зависимость предела прочности от ПЭ.

2. Методология расчетов

Поверхностная энергия при температуре T:

$$f_\omega(hkl) = f_\omega^0(hkl) + T\, df_\omega(hkl)/dT\,. \quad (1)$$

Здесь $df_\omega(hkl)/dT$ – температурный коэффициент ПЭ грани, $f_\omega^0(hkl)$ – ПЭ грани (ГПУ структуры $(hkil)$) при 0 K:

$$f_\omega^0(hkl) = f_\omega^k(hkl) + f_\omega^g(hkl) + f_\omega^p(hkl) + f_\omega^{osc}(hkl), \quad (2)$$

где $f_\omega^k(hkl)$ – слагаемое, включающее все виды электрон-электронного, ион-ионного и электрон-ионного взаимодействий и вносящее наибольший вклад в ПЭ грани при 0 K, $f_\omega^g(hkl)$, $f_\omega^p(hkl)$, $f_\omega^{osc}(hkl)$ – дисперсионная, поляризационная и осцилляционная поправки к ПЭ соответственно [13].

Аналитическая связь между РВЭ и ПЭ грани (hkl) записывается как:

$$\varphi(hkl) = \varphi_0(1 - f_\omega(hkl)/f_0), \quad (3)$$

где $\varphi_0 = \varphi_R + \left(B(hkl)/z\right)a^2 f_\omega^{liq}$, $f_0 = \phi_0 z/B(hkl)a^2$, φ_R – ричардсоновская РВЭ из поликристаллического образца, f_ω^{liq} – ПЭ жидкого металла при температуре плавления, параметр $B(hkl)$ зависит от типа кристаллической структуры и ориентации грани, $n_V = f_V/\beta a^3$ – число частиц в единице объёма металла, f_V – число частиц в элементарной ячейке, β – численный коэффициент, зависящий от типа кристаллической структуры, a – параметр решетки.

Поверхностную энергию поликристаллов можно оценить по формуле

$$\overline{f_\omega} = \sum_{i=1}^{n} g_i f_{\omega i} \exp(-f_{\omega i}/(n_i kT)) / \sum_{i=1}^{n} g_i \exp(-f_{\omega i}/(n_i kT)), \quad (4)$$

где $f_{\omega i} = f_\omega(hkl)$, $n_i = n(hkl)$, g_i – статистический вес грани. Для РВЭ поликристаллов использовалось выражение, аналогичное (4).

Энергия когезии выражается через ПЭ [14]:

$$-\Delta f_\omega^{coh}(hkl) = 1{,}7 f_\omega(hkl) - f_\omega^{chem}. \quad (5)$$

Для электронной техники важной величиной является контактная разность потенциала (КРП), которую рассчитываем, как разность РВЭ пар граней.

Для плоского деформированного состояния связь между механическими характеристиками (предел прочности σ_c) и ПЭ кристалла выражается равенством Гриффитса

$$\sigma_c\sqrt{\pi l} = \sqrt{2 f_\omega E/(1-\nu^2)}, \quad (6)$$

где l – длина трещины, E – модуль Юнга, ν – коэффициент Пуассона.

3. Анализ результатов и обсуждение

По (1)-(4) проведены численные расчеты ПЭ и РВЭ плотноупакованных граней полиморфных фаз таллия (ГПУ, ОЦК

структур) в интервале температур от 0 K до температуры плавления (см. рис. 1). Рассчитаны усредненные по граням значения ПЭ и РВЭ.

При линейном уменьшении ПЭ граней кристаллов $\alpha-$ и $\beta-$таллия с ростом температуры происходит сглаживание ее анизотропии у $\alpha-$таллия, а у $\beta-$таллия анизотропия остается практически постоянной. Это объясняется тем, что величина температурного коэффициента ПЭ грани (0001) в 2,07 раза больше, чем грани $(10\bar{1}0)$, в 1.8 раз – граней $(11\bar{2}0)$ и $(11\bar{2}1)$. Температурная зависимость ПЭ граней $(10\bar{1}0)$, $(11\bar{2}0)$ и $(11\bar{2}1)$ практически одинакова. Анизотропия ПЭ $\beta-$таллия с ростом температуры постоянна.

Энергия когезии граней также линейно зависит от температуры. Ее величина для $\alpha-$таллия меняется в пределах 50 мДж/м^2 для грани (0001) и до 28 мДж/м^2 остальных граней; для $\beta-$таллия – в пределах всего 7 мДж/м^2.

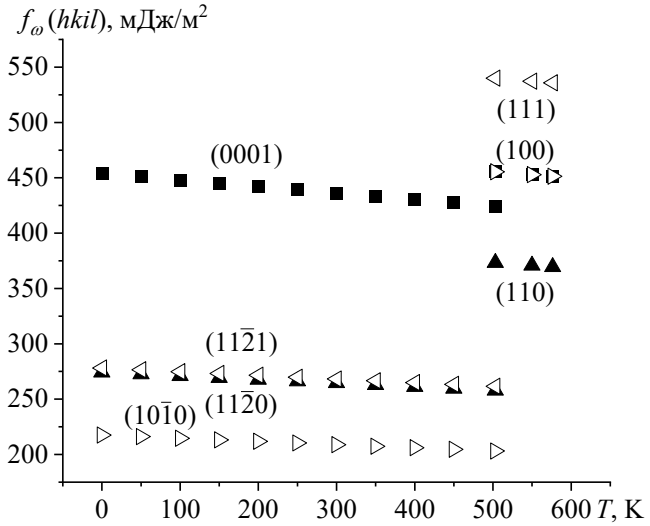

Рис. 1. Температурная зависимость ПЭ граней $\alpha-$ и $\beta-$таллия.

Усредненное значение ПЭ $\beta-$таллия (439,7 мДж/м^2) сравнивалось со справочными данными ПЭ поликристалла (557 мДж/м^2 в среде аргона и 562 мДж/м^2 в вакууме) и поверхностного натяжения (ПН) расплава (461, 513 и 536 мН/м) [15-17]. Видно, что данные по ПН имеют существенный разброс, однако, расчетные значения ПЭ согласуются с ними удовлетворительно (отклонение ~10%).

Работа выхода электрона $\alpha-$ и $\beta-$таллия (4,093 и 3,873 эВ), рассчитанная по (3), отклоняется от известных значений для поликристаллов (3,68 и 3,76 эВ) на 11% и 3%, что показывает достаточную точность расчетов. Данный анализ показывает, что повысить точность оценки ПЭ и моделирования термического влияния на нее возможно при использовании экспериментальных значений РВЭ поли- и монокристаллов

металлов, полученных высокоточными методами. Работа выхода электрона имеет положительный температурный коэффициент (~10^{-5} эВ/К).

Для α – таллия значения КРП составляют: -0,382, -0,308, -0,331, 0,074, 0,051, -0,023 эВ, для β – таллия: -0,131, 0,172, 0,303 эВ.

В модели Гриффитса проведено моделирование поведения свойств таллия при растяжении (см. рис. 2). Так как таллий входит в состав припоев, то в расчетах принимали длину трещины равной минимальной и максимальной возможной толщине паяного слоя (l_1 = 0,05, l_2 = 0,2 мм)

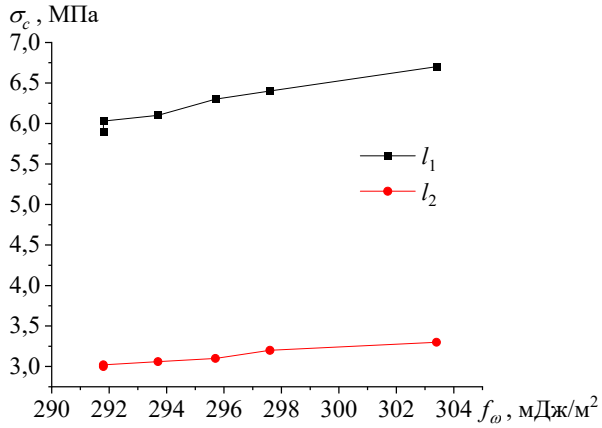

Рис. 2. Зависимость предела прочности таллия от ПЭ.

Получена линейная зависимость предела прочности поликристалла таллия от ПЭ для двух длин трещины (см. рис. 2), что соответствует существующим представлениям о данной зависимости для металлов. Однако увеличение длины трещины в процессе роста здесь не учитывалось. В дальнейших расчетах следует принять во внимание это изменение, что позволит прогнозировать скорость и вид разрушения материала.

Показано, что разработанная методика расчета ПЭ может использоваться для развития аналитической связи между характеристиками поверхности (ПЭ, энергии когезии) и механическими свойствами металлов (например, для определения трещинностойкости материала).

Библиографический список:

1. Таллий. Технические условия: Межгосударственный стандарт. ГОСТ 18337-95; введ. 01.07.1999. – Минск: ИПК Издательство стандартов, 1999. – 11 с.

2. **Алексеев, П.Н.** Использование эвтектического Na-Tl-теплоносителя в модульном быстром реакторе / П.Н. Алексеев, Я.А. Котов, А.Л. Шимкевич // Вопросы атомной науки и техники. Серия: физика ядерных реакторов. – 2022. – Т. 2. – С. 83-89.

3. **Кутуев, Р.А.** Зависимость поверхностного натяжения и плотности расплавов индий-таллий и олово-таллия от состава и температуры / Р.А. Кутуев // Инженерная физика. – 2023. – Т. 3. – С. 57-62. DOI: 10.25791/infizik.3.2023.1319.

4. **Саввин, В.С.** Процессы на границе жидкость/кристалл при контактном плавлении в системе с

промежуточными твердыми фазами / В.С. Саввин, Н.Н. Анохина, А.А. Повзнер // Физика металлов и металловедение. – 2012. – Т. 113. – № 4. – С. 428-431.
5. **Саввин, В.С.** Плотность и молярный объем жидких амальгам таллия, свинца и висмута // Теплофизика высоких температур. – 2023. – Т. 61. - № 3. – С. 370-375. DOI: 10.31857/S0040364423030195.
6. **Chernyshikin, S.V.** Surface tension measurements of NiTi alloy for the melt pool simulation during laser powder bed fusion / S.V. Chernyshikin, S.N. Zhevnenko, A.V. Zakirov et al. // Materials letters. – 2026. – V. 405. – Art. № 139696. – 4 p. DOI: 10.1016/j.matlet.2025.139696.
7. **Гершман, Е.И.** Метод измерения поверхностного натяжения границы раздела «твердое-газ» «in situ» / Е.И. Гершман, С.Н. Жевненко // Физика металлов и металловедение. – 2010. – Т. 110. – № 1. – С. 106-112.
8. **Шебзухова, И.Г.** Анизотропия поверхностной энергии и работы выхода электрона IIB металлов / И.Г. Шебзухова, Л.П. Арефьева // Журнал технической физики. – 2019. – Т. 89. – Вып. 2. – С. 306-309. DOI: 10.21883/JTF.2019.02.47087.188-18.
9. **Шебзухова, И.Г.** Поверхностная энергия и работа выхода электрона полиморфных модификаций титана / И.Г. Шебзухова, Л.П. Арефьева // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – Вып. 15. – С. 288-298. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.288.
10. **Манохин, С.С.** Исследование особенностей структуры микрокристаллического алюминия после испытаний на длительную прочность / С.С. Манохин, В.И. Бетехтин, А.Г. Кадомцев и др. // Физика твердого тела. – 2023. – Т. 65. – № 1. – С. 131-137. DOI: 10.21883/FTT.2023.01.53935.492.
11. **Юров, В.М.** Поверхностная энергия и износостойкость высокоэнтропийных покрытий / В.М. Юров, С.А. Гученко, К.М. Маханов // Тенденция и развития науки и образования. – 2020. – Т. 64. – № 1. – С. 72-77. DOI: 10.18411/lj-08-2020-13.
12. **Русанов, А.И.** Термодинамические аспекты материаловедения / А.И. Русанов // Успехи химии. – 2016. – Т. 85. – № 1. – С. 1-13.
13. **Шебзухова, И.Г.** Оценка поляризационной и дисперсионной поправок к поверхностной энергии граней металлических кристаллов / И.Г. Шебзухова, Л.П. Арефьева // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2020. – Вып. 12. – С. 319-325. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.319.
14. **Li, Y.** Electron work function, adhesion, and friction between 3d transition metals under light loads / Y. Li, D.Y. Li // Wear. – 2005. – V. 259. – I. 7-12. – P. 1432-1436. DOI: 10.1016/j.wear.2005.01.027.
15. **Шебзухова, И.Г.** Поверхностное натяжение твердых металлов в газовых средах / И.Г. Шебзухова, Х.Б. Хоконов // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2012. – Т. 76. – Вып. 13. – С. 86-88.
16. Свойства элементов. Справочник / под общей ред. М.Е. Дрица. - М.: Металлургия, 1985. – 672 с.
17. **Ниженко, В.И.** Поверхностное натяжение металлов и сплавов. Справочник / В.И. Ниженко, Л.И. Флока. – М.: Металлургия, 1981. – 208 с.

References:

1. GOST 18337-95. Interstate Standard. *Tallij. Tekhnicheskie usloviya* [Thallium. Specifications]. Minsk, Publishing standards, 1999, 11 p. (In Russian).
2. Alexeev P.N., Kotov IA.L., Shimkevich A.L. Ispol'zovanie eutekticheskogo Na-Tl-teplonositelya v modul'nom bystro'm reaktore [The use of eutectic Na-Tl coolant in small fast reactor], *Voprosy atomnoj nauki i tekhniki. Seriya: fizika yadernykh reaktorov [Problems of Atomic Science and Engineering. Series: Physics of Nuclear Reactors]* 2022, vol. 2, pp. 83-89. (In Russian).
3. Kutuev R.A. Zavisimost poverkhnostnogo natyazheniya i plotnosti rasplavov indiy-talliy i olovo-talliy ot sostava i temperatury [Dependence of surface tension and density of indium-thallium and tin-thallium melts on composition and temperature], *Inzhenernaya fizika [Engineering Physics],* 2023, 3, pp. 57-62. DOI: 10.25791/infizik.3.2023.1319. (In Russian).
4. Savvin V.S., Anokhina N.N., Povzner A.A. Processes at the liquid/crystal boundary upon contact melting in the system with intermediate solid phases, *Physics of metals and metallography*, 2012, vol. 113, issue 4, pp. 406-410. DOI: 10.1134/S0031918X12040138.
5. Savvin V.S., Density and molar volume of liquid amalgams of thallium, lead, and bismuth, *High Temperature*, 2023, vol. 61, issue 3, pp. 339-343. DOI: 10.1134/s0018151x23030161.
6. Chernyshikin S.V., Zhevnenko S.N., Zakirov A.V. et al. Surface tension measurements of NiTi alloy for the melt pool simulation during laser powder bed fusion, *Materials letters*, 2026, vol. 405, art. no. 139696, 4 p. DOI: 10.1016/j.matlet.2025.139696.
7. Gershman E.I., Zhevnenko S.N. Method of in situ measuring surface tension of a solid-gas interface, *Physics of metals and metallography*, 2010, vol. 110, issue 1, pp. 102-107. DOI: 10.1134/S0031918X10070124.

8. Shebzukhova I.G., Aref'eva L.P. Anisotropy of the surface energy and work function of IIB metals, *Technical Physics*, 2019, vol. 64, issue 2, pp. 274-277. DOI: 10.1134/S1063784119020208.
9. Shebzukhova I.G., Aref'eva L.P. Poverkhnostnaya energiya i rabota vykhoda elektrona polimorfnykh modifikatsij titana [Surface energy and electron work function for polimorphyc modifications of titanium], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials],* 2020, issue 12, pp. 288-298. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.288 (In Russian).
10. Manohin S.S., Betekhtin V.I., Kadomtsev A.G. et al. Study of the structural features of microcrystalline aluminum after tests for long-term strength, *Physics of the solid state*, 2023, vol. 65, issue 1, pp. 126-132. DOI: 10.21883/pss.2023.01.54986.492.
11. Yurov V.M., Guchenko S.A., and K.M. Makhanov Poverkhnostnaya energija i iznosostojkost' vysokojentropijnykh pokrytij [Surface energy and wear resistance of high-entropy coatings], *Tendentsiya i razvitiya nauki i obrazovaniya [Trends and Development of Science and Education]*, 2020, vol. 64, no. 1, pp. 72-77. DOI: 10.18411/lj-08-2020-13. (In Russian).
12. Rusanov A.I. Thermodynamic aspects of materials science, *Russian Chemical Rewiews*, 2016, vol. 85, issue 1, pp. 1-13. DOI: 10.1070/RCR4568.
13. Shebzukhova I.G., Aref'eva L.P. Otsenka polyarizatsionnoj i dispersionnoj popravok k poverkhnostnoj energii granej metallicheskikh kristallov [Estimation of the polarization and dispersion corrections to the surface energy of the faces of metal crystals], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2020, issue 12, pp. 319-325. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.319. (In Russian).
14. Li Y., Li D.Y. Electron work function, adhesion, and friction between 3d transition metals under light loads *Wear*, 2005, vol. 259, issue 7-12, pp. 1432-1436. DOI: 10.1016/j.wear.2005.01.027.
15. Shebzukhova I.G., Khokonov Kh. B. Poverkhnostnoe natyazhenie tverdykh metallov v gazovykh sredakh [Surface tension of solid metals in gas media]*, Izvestiya Rossijskoj akademii nauk. Seriya fizicheskaya [Bulletin of Russian Academy of Sciences: Physics],* 2012, vol. 76, issue 13, pp. 86-88. (In Russian).
16. *Svoystva elementov. Spravochnik* [Properties of elements. Handbook], ed. M.E. Drits, Moscow, Metallurgiya Publ., 1985, 672 p. (In Russian).
17. Nizhenko V.I., Floka L.I. *Poverkhnostnoye natyazheniye metallov i splavov. Spravochnik* [Surface tension of metals and alloys. Handbook], Moscow, Metallurgiya Publ., 1981, 208 p. (In Russian).