

ОРИГИНАЛЬНЫЕ СТАТЬИ / ORIGINAL PAPERS

DOI: 10.17073/2500-0632-2019-2-111-121

**Моделирование закономерности изменения энтальпии плавления  
интерметаллидов систем магний-лантаноиды, богатых магнием**

**Исмоилов И. Р.<sup>1</sup>, Додхоев Э. С.<sup>1</sup>, Исмоилов Р. А.<sup>2</sup>, Нажмуудинов Ш. З.<sup>3</sup>, Бадалов А. Б.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Таджикский технический университет имени академика М. С. Осими,  
Душанбе, Республика Таджикистан;

<sup>2</sup>Государственное научное учреждение «Центр исследования инновационных технологий» при  
Академии наук Республики Таджикистан, Душанбе, Республика Таджикистан;

<sup>3</sup>Академия наук Республики Таджикистан, Душанбе, Республика Таджикистан,  
✉ Najmiddinovsh2018@mail.ru

**Аннотация:** Обеспечение обоснованного прогноза необходимых свойств интерметаллидов (ИМ), являющегося важным направлением науки и определенных отраслей промышленности, достигается научно-исследовательскими работами и постоянной генерацией знаний в этом направлении. Проводимые до сегодняшнего дня исследования по химии и физике ИМ развиваются эмпирически по простой причине – в связи со сложностью описания взаимосвязи между кристаллическим строением и химическими связями, а следовательно, и между всеми свойствами ИМ. Для ИМ в основном характерны металлический тип химической связи, а также специфические металлические свойства. В то же время среди ИМ имеются также солеобразные соединения с ионной связью, т.е. валентные соединения, образующиеся из элементов различной химической природы, представляющие собой стехиометрические соединения. Примером таких соединений являются соединения с промежуточным характером связи, т.е. ионно-металлической и ковалентно-металлической, а также с ковалентной (например, NaAu). В ряду соединений Mg с элементами IV подгруппы вместе с уменьшением различия в электрохимических характеристиках компонентов наблюдается и изменение свойств ИМ – от характерных для ионных соединений (например, Mg<sub>2</sub>Si, Mg<sub>2</sub>Ge) до свойств, типичных для металлов (Mg<sub>2</sub>Pb), и т.д. В связи с тем что лантаноиды образуют самую большую группу элементов периодической системы, находящихся в природе, а элемент Mg является относительно активным химическим элементом по образованию ИМ (например, с кадмием образует три ИМ – Mg<sub>3</sub>Cd, MgCd и MgCd<sub>3</sub>), – его оксиды в шлаке обеспечивают снижение среднего значения и повышение устойчивости содержания кремния в чугуне, – а это важный технологический показатель в ходе физико-химических реакций, происходящих в горне доменной печи (например, при выплавке чугуна). Наличие его примеси (наряду с O, Au, Ti, V, Zr) оказывает наибольшее влияние на эффективность солнечных элементов и т.д. [1–3]. Исходя из изложенного весьма важным является исследование функции состояния, т.е. энтальпии систем магний–лантаноиды, богатых магнием, и на основе полученных путем компьютерного моделирования результатов, с учетом метода молекулярной динамики и других подобных исследований [4–8], моделирование закономерности изменения энтальпии плавления ИМ упомянутых систем. Рассматривается вопрос моделирования закономерности изменения энтальпии плавления ИМ систем магний–лантаноиды (Mg–Ln), богатых магнием, путем системного анализа энтальпии плавления ИМ систем Mg–Ln, богатых магнием составов Mg<sub>2</sub>Ln, Mg<sub>3</sub>Ln и эквимольного состава MgLn, проведенного с помощью полуэмпирического метода, разработанного Н.С.Полуэктовым.

**Ключевые слова:** закономерность, интерметаллиды, корреляция, лантаноиды, магний, состав лантанидов, энтальпия плавления, электронное строение, полуэмпирический метод.

**Для цитирования:** Исмоилов И. Р., Додхоев Э. С., Исмоилов Р. А., Нажмуудинов Ш. З., Бадалов А. Б. Моделирование закономерности изменения энтальпии плавления интерметаллидов систем магний-лантаноиды, богатых магнием. *Горные науки и технологии*. 2019;4(2):111-121. DOI: 10.17073/2500-0632-2019-2-111-121.

## The Study of Regularities of Changing Melting Enthalpy of Intermetallides of Magnesium–Lantanoids Systems Rich in Magnesium

I. R. Ismoilov<sup>1</sup>, E. S. Dodkhoev<sup>1</sup>, R. A. Ismoilov<sup>2</sup>, S. Z. Nazhmudinov<sup>3</sup>, A. B. Badalov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Tajik Technical University named after academician M. S. Osimi,  
Dushanbe, Republic of Tajikistan;

<sup>2</sup>State Scientific Institution "Center for the Study of Innovative Technologies" at the Academy of  
Sciences of the Republic of Tajikistan, Dushanbe, Republic of Tajikistan;

<sup>3</sup>Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan, Dushanbe, Republic of Tajikistan,  
✉ Najmiddinovsh2018@mail.ru.

**Abstract:** Providing a reasonable forecast of the required properties of intermetallic compounds (hereinafter also referred as intermetallides or IM) is an important scientific and commercial problem, which may be solved by focusing scientific researches and permanent generation of knowledge in this field. To date, researches in chemistry and physics of IM have been developing empirically for a simple reason, due to the complexity of describing the relationship between the crystal structure and chemical bonds, and, therefore, between all the properties of IM. IM is mainly characterized by metal type of chemical bond, as well as specific metallic properties. At the same time, among IM, there are also salt-like compounds with ionic bond, i.e. valency compounds formed from elements of different chemical nature, being stoichiometric compounds. The examples of such compounds are compounds with intermediate bond type, i.e. ion-metal and covalently-metal, as well as covalent bond types (e.g., NaAu). In the series of compounds of Mg with elements of the IV subgroup, along with decreasing the difference in the electrochemical characteristics of the components, the change in the IM properties is observed, from those peculiar to ionic compounds (for example, Mg<sub>2</sub>Si, Mg<sub>2</sub>Ge) to the properties typical of metals (Mg<sub>2</sub>Pb), etc. Due to the fact that lanthanides form the largest group of elements of the periodic system occurring in nature, and Mg is a relatively active chemical element in terms of IM formation (for example, it forms three IM with cadmium - Mg<sub>3</sub>Cd, MgCd and MgCd<sub>3</sub>), its oxides in slag provide decreasing average silicon content and increasing the stability of the silicon content in iron, being an important process indicator in the course of physico-chemical reactions occurring in a blast furnace (for example, in the process of iron production). The presence of Si impurity (along with O, Au, Ti, V, Zr) produces the greatest effect on efficiency of solar cells, etc. [1–3]. Based on the foregoing, it is very important to study the state function, i.e. enthalpy of magnesium-lanthanide systems, rich in magnesium, and, based on the results of computer simulation, taking into account molecular dynamics method and other similar studies [4–8], to model regularities of changes in melting enthalpy of IM of the mentioned systems. The issue of modeling the pattern of change in melting enthalpy of IM of magnesium-lanthanide (Mg-Ln) magnesium-rich systems is considered based on systematic analyzing melting enthalpy of IM of Mg-Ln magnesium-rich system, including Mg<sub>2</sub>Ln, Mg<sub>3</sub>Ln and equimolar compound MgLn, implemented using semi-empirical method developed by N.S. Poluektov.

**Keywords:** regularity, intermetallides, correlation, lanthanides, magnesium, lanthanide composition, enthalpy of melting, electronic structure, semi-empirical method.

**For citation:** Ismoilov I. R., Dodkhoev E. S., Ismoilov R. A., Nazhmudinov S. Z., Badalov A. B. The study of regularities of changing melting enthalpy of intermetallides of magnesium–lanthanoids systems rich in magnesium. *Mining Science and Technology*. 2019;4(2):111-121 (In Russ.). DOI: 10.17073/2500-0632-2019-2-111-121.

**Введение.** Для ИМ – важнейших минералов редкоземельных металлов (элементов) природы – характерна преимущественно металлическая связь между атомами в решетке, но в то же время существуют интерметаллиды с ионным и ковалентным типами химиче-

ской связи, а также промежуточные случаи, т.е. ионно-металлическая и ковалентно-металлическая связь. Достаточно разнообразная связь между атомами в решетке ИМ, обеспечивает им: твердость от низкой до высокой; химическую стойкость, а также актив-

ное химическое реагирование (например, реакция цинка и никеля, при температуре выше 1000 °С носит взрывной характер); более высокую температуру плавления, чем исходные металлы, в диапазоне, отличающемся более чем в 2 раза (804 °С – церий и 1700 °С – лютеций); образование эвтектического сплава (на основе мельчайших кристалликов двух металлов, каждый из которых имеет самостоятельную кристаллическую решетку), который плавится при более низких температурах, чем чистые металлы (например, эвтектический сплав, состоящий из 24,4 атомного % Pb ( $T_{пл.}$  327 °С) и 75,6 атомного % Sn ( $T_{пл.}$  232 °С), плавится при 181 °С); относительно более низкую пластичность, чем исходные металлы, но доступную ковкость; повышенную хрупкость сплавам, в структуру которых они входят; полупроводниковые свойства; владение памятью формы (после закалки изделие может быть деформировано механически, но примет исходную форму при небольшом нагреве); свойство ослабления механической прочности контакта и ухудшение электрических характеристик (например, в паяных соединениях); разделение на две группы по показателю плотности (легкие – ниже 8 г/см<sup>3</sup> и тяжелые – от 8,272 до 9,482 г/см<sup>3</sup>) и т.д. [9–15].

**Обоснование темы.** Несмотря на то что термин *лантаноиды* появился около века назад (в 1925 г. впервые употреблен В. Гольдшмидтом), значение и актуальность использования лантаноидов (Ln) по-прежнему связываются с обеспечением расширения и углубления исследований по выявлению их термомеханических и термодинамических характеристик, а также факта достаточности количества месторождений для получения концентратов Ln, и возможности реального применения в производстве продукции некоторых отраслей промышленности, развитие которых за последние 40 лет больше всего наблюдается в таких странах, как Япония, Китай и другие промышленно развитые страны. Данные открытой печати показывают,

что спрос на редкоземельные элементы за период с 1980 г. по настоящее время вырос с 30 000 до 120 000 т и ежегодный средний показатель роста объемов потребления прогнозируется в 4 %, что в свою очередь обосновывает актуальность дальнейших исследований в этом направлении.

Анализ исследований показывает, что лёгкие сплавы на основе магния, дозированные редкоземельными металлами, в частности лантаноидами, имеют важные прикладные характеристики. В свою очередь, достоверные сведения о физико-химических и термических характеристиках этих сплавов способствуют их широкому применению в современных отраслях науки, техники и технологии. Диаграммы состояния систем на основе магния (силикатных систем), а также систем Mg–Ln изучены многими исследователями [16–30]. Результаты этих и других исследований, обобщённые в работе [31], указывают, что в системах Mg–Ln образуются ИМ составов MgLn, Mg<sub>2</sub>Ln, Mg<sub>3</sub>Ln, Mg<sub>12</sub>Ln и Mg<sub>24</sub>Ln<sub>5</sub>. В настоящее время в литературе отсутствуют сведения по важному показателю внутренней энергии (функция состояния) системы – энтальпии плавления (ЭП) этих ИМ, характеризующей тепловой эффект процесса, протекающего при постоянном давлении.

В данной работе приведены результаты системного анализа ЭП ИМ систем Mg–Ln, богатых магнием составов Mg<sub>2</sub>Ln, Mg<sub>3</sub>Ln и эквимольного состава MgLn. Анализ проведен с помощью полуэмпирического метода, разработанного Н. С. Полуэктовым с сотрудниками [32, 33]. Расчёт (далее расчёт 1) произведён по следующему корреляционному уравнению:

$$A_{(Mg \times Ln)_y} = A_{(Mg \times Lay)} + \alpha N_f + \beta S + \gamma' L_{(Ce-Eu)} (\gamma'' L_{(Tb-Yb)}), \quad (1)$$

где коэффициент  $\alpha$  – учитывает доленое влияние 4f-электронов,  $\beta$ -спиновых ( $S$ ) и  $\gamma$ -орбитальных ( $L$ ) моментов движения атомов Ln ( $\gamma'$  – для Ln цериевой и  $\gamma''$  – для Ln иттриевой подгрупп) на значения ЭП ( $\Delta H_{пл}$ ) ИМ.

Упомянутый метод широко используется, и нами также успешно применён для многих соединений Ln [34–36].

Определённые и/или уточнённые нами величины температуры плавления ИМ систем Mg–Ln позволили определить ЭП ИМ указанных составов (далее расчёт 2) по следующему уравнению [37, 38]:

$$\Delta H_{\text{пл.}, \text{Mg}_x \text{Ln}_y}^0 = T_{\text{пл. ИМ}} (n \Delta H_{\text{пл. Ln}}^0 / T_{\text{пл. Ln}}^0 + m \Delta H_{\text{пл. Mg}}^0 / T_{\text{пл. Mg}}^0) / (n+m). \quad (2)$$

Значения коэффициентов корреляционного уравнения (1), приведенные в табл. 1, позволяют по их величине установить долевое влия-

ние каждого компонента уравнения на величины ЭП ИМ систем Mg–Ln.

Полученные наиболее полные сведения по ЭП ИМ изученных составов приведены в табл. 2.

Данные табл. 2 показывают удовлетворительную сходимость величин ЭП ИМ, полученных двумя методами. Это свидетельствует о правомочности применяемых полуэмпирических методов и достоверности полученных результатов. Исключение составляют данные для немногих ИМ. Возможно, это связано с условиями экспериментов и недостаточно чистыми реагентами.

Таблица 1

Значения коэффициентов уравнения (1) по определению ЭП ИМ

The values of the coefficients of equation (1) for the determination of melting enthalpy of intermetallides

ИМ	Параметр	$\alpha$	$\beta$	$\gamma'$	$\gamma''$
MgLn	$\Delta H_{\text{пл}}^0$	-0,096	0,02	-0,127	0,410
Mg <sub>2</sub> Ln	$\Delta H_{\text{пл}}^0$	-0,26	0,43	-0,09	0,005
Mg <sub>3</sub> Ln	$\Delta H_{\text{пл}}^0$	-0,018	-0,365	0,1652	0,062

Таблица 2

Полученные наиболее полные сведения по ЭП ИМ изученных составов

The most complete information obtained on melting enthalpy of intermetallides of the studied compositions

ИМ	Mg <sub>3</sub> Ln			Mg <sub>2</sub> Ln			MgLn		
	$\Delta H_{\text{пл.}}^0$		Расхождение, %	$\Delta H_{\text{пл.}}^0$		Расхождение, %	$\Delta H_{\text{пл.}}^0$		Расхождение, %
Ln	Расчет 1	Расчет 2		Расчет 1	Расчет 2		Расчет 1	Расчет 2	
La	10190	10190	–	9950	9950	–	10610	10610	–
Ce	10670	10410	2,4	9550	9370	1,9	9000	9560	5,8
Pr	10290	10520	2,1	8530	9130	6,6	8779	8910	1,47
Nd	9870	10560	6,5	8530	9000	5,2	8466	8530	0,75
Pm	9954	10360	3,91	9270	8590	7,3	9010	8440	6,3
Sm	9080	9990	9,1	9420	9000	4,4	8333	8640	3,55
Eu	7800	8110	3,8	9520	9520	–	7080	7140	0,8
Gd	9040	9040	–	9650	9650	–	10010	10010	–
Tb	9024	9120	1,0	8150	8900	8,4	11140	11140	–
Dy	9073	9400	3,4	9330	8410	9,8	11220	11750	4,5
Ho	9260	9630	3,8	8020	7930	1,1	11170	12050	7,5
Er	10190	9800	3,9	8260	7450	9,8	10906	11950	8,37
Tm	9260	9900	6,46	6820	6980	2,2	10767	11430	5,80
Yb	8156	8420	3,13	8980	8980	–	6790	7020	3,27
Lu	9940	9940	–	6530	6530	–	9270	9270	–



Полученные наиболее полные значения ЭП ИМ изученных составов позволили установить закономерности изменения данной характеристики ИМ в зависимости от природы Ln. Как видно из рис. 1–3, закономерности имеют сложный характер изменения в пределах всей группы и делятся по подгруппам Ln – цериевой и иттриевой, с проявлением «тетрад-эффект»-а. При этом отмечаются следующие особенности:

– для ИМ составов MgLn и Mg<sub>2</sub>Ln (цериевой подгруппы) наблюдается одинаковый характер изменения кривых. С ростом порядкового номера Ln в пределах подгрупп происходит уменьшение ЭП ИМ с минимумом для соединения Pm.

Для ИМ состава Mg<sub>2</sub>Ln (иттриевой подгруппы) с ростом порядкового номера Ln наблюдается почти линейное уменьшение ЭП ИМ, за исключением соединения иттербия;

– общий характер хода кривых наблюдается для ИМ составов MgLn (иттриевой подгруппы) и Mg<sub>3</sub>Ln (обеих подгрупп). Кривые имеют выпуклость вверх с максимумом в середине подгрупп;

– отклонение характеристики ИМ европия и иттербия от общих закономерностей обусловлено частичным и полным заполнением электронами 4f-орбиталей атомов этих элементов.

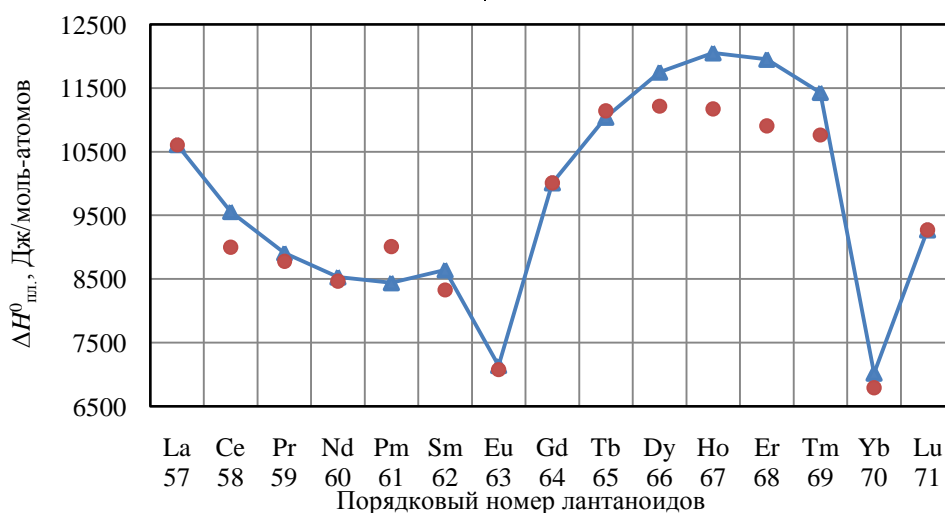


Рис. 1. Зависимость изменения ЭП ИМ состава MgLn от порядкового номера Ln. Здесь и далее ● – расчёт 1, ▲ – расчёт 2

Fig. 1. Plot of melting enthalpy of intermetallides of MgLn composition as function of Ln sequence number. Hereinafter ● – calculation 1, ▲ – calculation 2

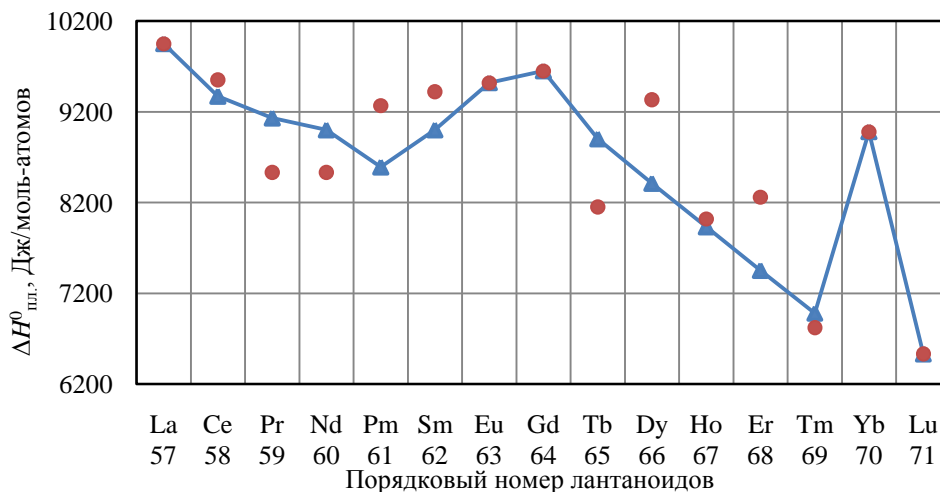


Рис. 2. Зависимость изменения ЭП ИМ состава Mg<sub>2</sub>Ln от порядкового номера Ln

Fig. 2. Plot of melting enthalpy of intermetallides of Mg<sub>2</sub>Ln composition as function of Ln sequence number

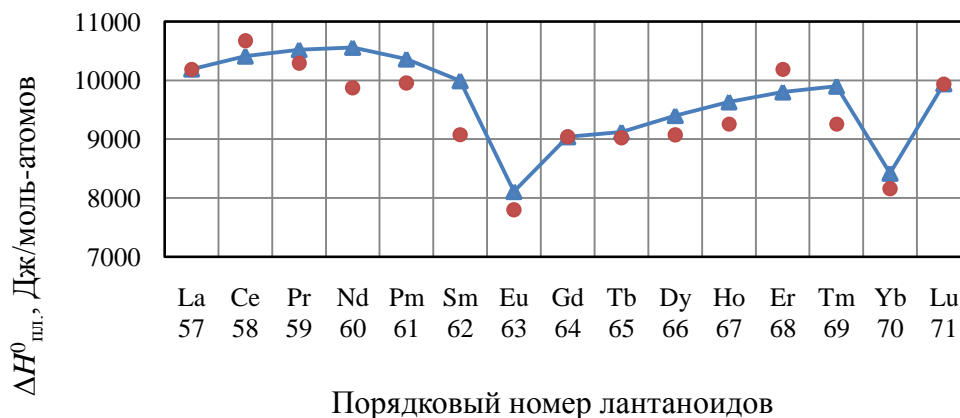


Рис. 3. Зависимость изменения ЭП ИМ состава  $Mg_3Ln$  от порядкового номера Ln

Fig. 3. Plot of melting enthalpy of intermetallides of  $Mg_3Ln$  composition as function of Ln sequence number

Таблица 3

Уравнения закономерности изменения термических характеристик ИМ от природы лантаноидов

The equations describing change of thermal characteristics of intermetallides depending on nature of lanthanides

Состав ИМ	Функция	Вид уравнений	$R^{2*}$	
$MgLn$	$\Delta H^0_{пл.}$	(а)	$y = 0,1516x^2 - 1,4495x + 11,889$	0,9994
		(б)	$y = -0,2726x^2 + 2,1367x + 7,9771$	0,9412
$Mg_2Ln$	$\Delta H^0_{пл.}$	(а)	$y = 0,0763x^2 - 0,74x + 10,607$	0,9211
		(б)	$y = 0,019x^2 - 0,6581x + 10,23$	0,998
$Mg_3Ln$	$\Delta H^0_{пл.}$	(а)	$y = -0,0748x^2 + 0,492x + 9,751$	0,9806
		(б)	$y = -0,0145x^2 + 0,2826x + 8,7071$	0,9782

Примечания: (а) – цериевой; (б) – иттриевой подгрупп;  $R^2$  – степень достоверности;  $x$  – порядковый номер металла;  $y$  – энтальпия плавления ИМ.

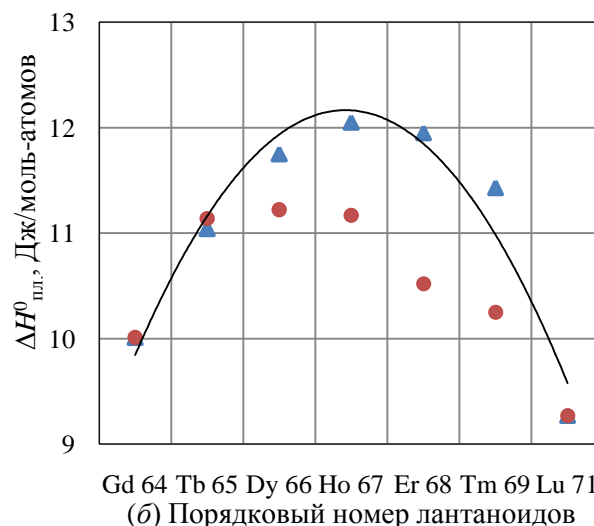
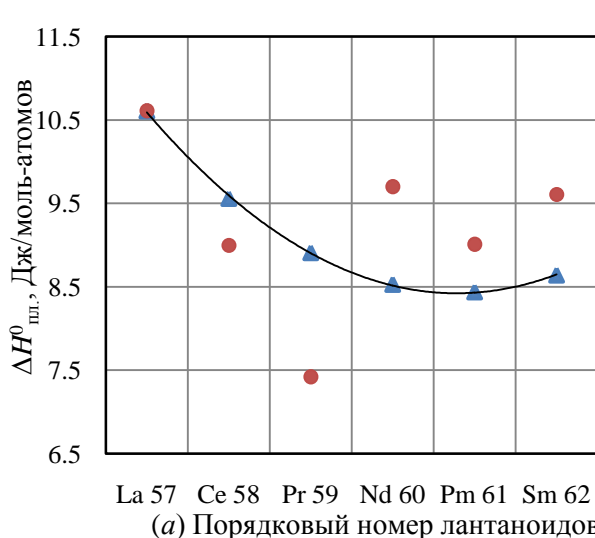


Рис. 4. Графики закономерности изменения энтальпии плавления ИМ от природы лантаноидов:  
— линия тренда

Fig. 4. Plot of melting enthalpy of intermetallides as function of the nature of lanthanides: – trend line

Таблица 4

Уравнения закономерности изменения  $\Delta H_{пл}^0$  ИМ от их состава  
The equations describing change of  $\Delta H_{melt}^0$  of intermetallides depending on their composition

Ln	Уравнения тренда	Ln	Уравнения тренда
La	$y = 450x^2 - 2010x + 12170$	Gd	$y = -125x^2 + 15x + 10120$
Ce	$y = 285x^2 - 305x + 9020$	Tb	$y = 740x^2 - 5210x + 15610$
Pr	$y = 325x^2 + 135x + 6960$	Dy	$y = -230x^2 - 1200x + 12650$
Nd	$y = 1255x^2 - 4935x + 13380$	Ho	$y = 2195x^2 - 9735x + 18710$
Pm	$y = -340x^2 + 1280x + 8070$	Er	$y = 2095x^2 - 8545x + 16970$
Sm	$y = -75x^2 + 35x + 9650$	Tm	$y = 2715x^2 - 11575x + 19110$
Eu	$y = -2080x^2 + 8680x + 480$	Yb	$y = -2250x^2 + 8940x + 100$
		Lu	$y = 3075x^2 - 11965x + 18160$

\*Примечания к табл. 4:  $R^2 = 1$  – для всех ИМ;  $x = m : n$  и определяется из состава ИМ  $Mg_{(m)}Ln_{(n)}$ ;  $y$  – энтальпия плавления ИМ.

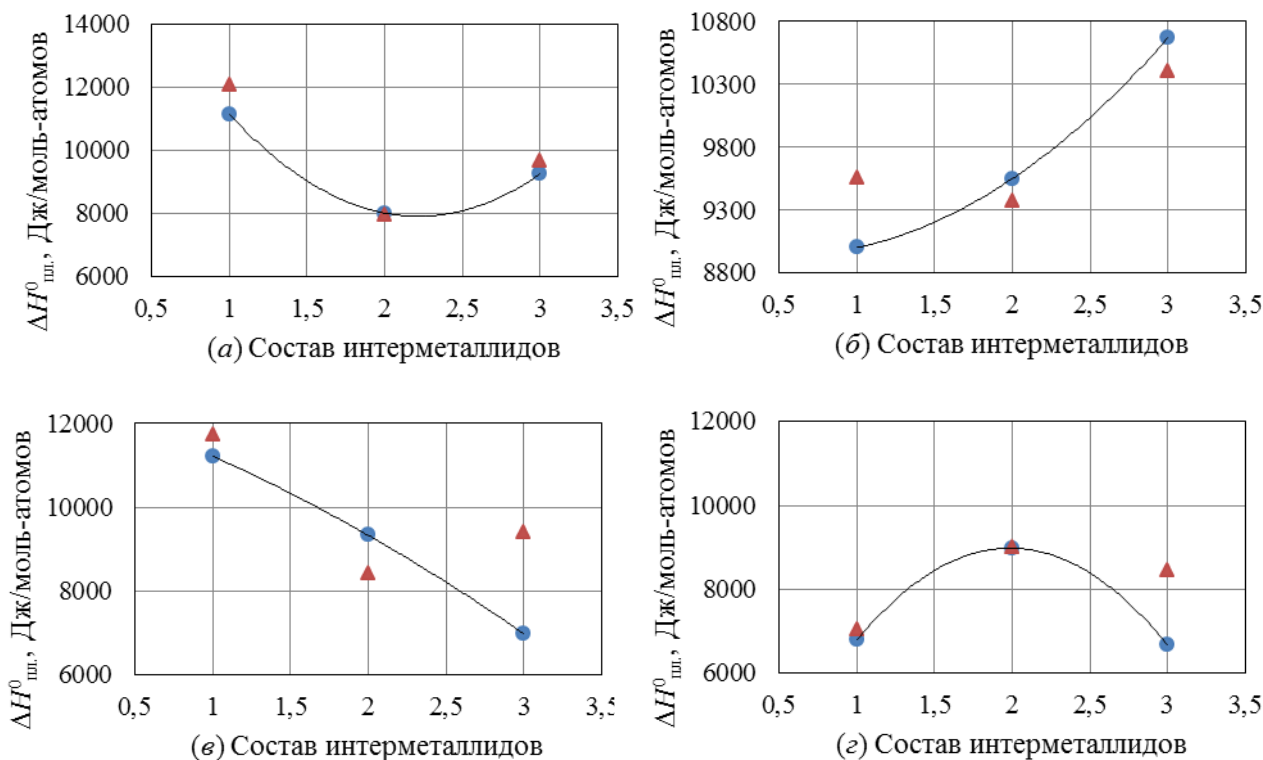


Рис. 5. Графики закономерности изменения  $\Delta H_{пл}^0$  ИМ систем  $Mg_{(m)}-Ln_{(n)}$  от их состава (m/n):  
— линия тренда

Fig. 5. Plot of melting enthalpy ( $\Delta H_{melt}^0$ ) of intermetallides of  $Mg_{(m)}Ln_{(n)}$  system as function of their composition (m/n): — trend line

Математическое моделирование закономерностей изменения ЭП ИМ систем Mg–Ln изученных составов проведено по стандартной программе Microsoft Excel Результаты расчётов приведены в табл. 3. Обработка данных проведена отдельно для цериевой и

иттриевой подгрупп Ln. При расчётах не учтены значения ЭП для ИМ европия и иттербия.

На рис. 4 приведены характерные кривые закономерности изменения энтальпии плавления ИМ в зависимости от природы Ln

по их подгруппам: 4(а) – цериевая, 4(б) – иттриевая.

Уравнения закономерности изменения  $\Delta H_{\text{пл}}^0$  ИМ в зависимости от их состава и характерные кривые, отражающие закономерность изменения энтальпии плавления ИМ систем Mg–Ln от их состава, приведены соответственно в табл. 4 и на рис. 5.

Графики соответствуют ИМ лантаноидов подгрупп иттриевой 5(а), 5(б) – Ce, Pr и Nd; 5(в) – Pm, Sm и Eu; 5(г) – La, Gd и Lu. На изменение свойств ИМ La, Gd и Lu оказывают доминирующее влияние линейный характер пополнения электронами 4f-орбиталей ( $N_f$  уравн. (1)), схожести электронного строения и возможности у этих атомов перехода 4f-электронов на 5d-орбиталей. В других подгруппах определяющее влияние имеют спин (S)-орбитальные (L) взаимодействия.

#### Заключение

Аналитические и графические интерпретации результатов исследования с использованием вышеприведенных методов и математического моделирования закономерностей изменения энтальпии плавления ИМ позволили сделать следующие **выводы**:

1. На основе использования полуэмпирического метода определены значения коэффициентов корреляционного уравнения, величины которых позволяют установить долевое влияние каждого компонента на величины ЭП ИМ систем Mg–Ln.

2. Получены наиболее полные сведения ЭП ИМ изученных составов, показывающие достаточно удовлетворительную сходимость величин ЭП ИМ, полученных двумя метода-

ми, свидетельствующую о правомочности применяемых полуэмпирических методов и достоверности полученных результатов исследования (за исключением немногих ИМ, связанных, возможно, с условиями экспериментов и недостаточно чистыми реагентами).

3. На основе полученных наиболее полных значений ЭП ИМ изученных составов установлены закономерности изменения данной характеристики ИМ в зависимости от природы Ln: в пределах всей группы закономерности имеют сложный характер и делятся по группам Ln – цериевой и иттриевой, с проявлением «тетрад-эффект»-а со следующими особенностями: для цериевой группы (ИМ составов MgLn и Mg<sub>2</sub>Ln) наблюдается одинаковый характер изменения кривых. При росте порядкового номера Ln в пределах подгрупп происходит уменьшение ЭП ИМ с минимумом для соединения Pm.

3.1. Для ИМ составов Mg<sub>2</sub>Ln иттриевой подгруппы с ростом порядкового номера Ln наблюдается почти линейное уменьшение ЭП ИМ (за исключением соединения иттербия).

4. Установление закономерности изменения ЭП ИМ систем Mg–Ln, богатых магнием, с учетом важных их прикладных характеристик, является важным направлением для науки, поскольку расширяется база данных: прогностических свойств ИМ между их структурами и составами; физико-химических и термических характеристик ИМ; а также для упрощения и уточнения системных анализов и решения других важных прикладных задач.

#### Библиографический список

1. Гончаров Б. Ф., Соломахин И. С. Производства чугуна. М.: Metallurgy, 1965. 368 с.
2. Васильев В. Е. Доменная плавка на устойчивых шлаках. Киев: Государственное издательство техн. литературы, 1956. 260 с.
3. Пархоменко Ю. Н. Физика и технология приборов фотоники: солнечная энергетика и нанотехнологии: учеб. пособие / Ю. Н. Пархоменко, А. А. Полисан. М.: Изд. Дом МИСиС, 2013. 142 с.
4. Anastasiou N., Fiuchaur D. Programs for the dynamic simulations of liquids and solids. II MDIONS: Rigid ions using the Evalid sum // Comp. Phys. Commun, 1982, no. 25, pp. 158–176.
5. Woodcock L. V., Angell K. A., Cheeseman P. Molecular dynamics studies of the vitreous state: Simple ionic systems and silica // The Journal of Chemical Physics, 1976, no. 65, pp. 1565–1577.



6. Belashchenko D. K., Ostrovski O. I., Skvortsov L. V. Molecular dynamics simulation of binary CaO–FeO, MgO–SiO<sub>2</sub>, FeO–SiO<sub>2</sub>, CaO–SiO<sub>2</sub> and ternary CaO–FeO–SiO<sub>2</sub> systems // *Termochimica Acta*, 2001, Vol. 372, pp. 153–163.
7. Zhang L., Jahanshahi S. Review and modeling of viscosity of silicate melts. Part I. Viscosity of binary and ternary silicates containing CaO, MgO and MnO // *Meter. Trans. B.* 1998, vol. 29, no. 1, pp. 177–186.
8. Gutierrez J., Romero-Serrano A., Plascencia G., Chaves F., Vargas R. Thermodynamical model of ternary silicate systems // *ISIJ Int.* 2000, vol. 40, no. 7, pp. 664–669.
9. Корнилов И. И., Матвеева Н. М., Пряхина Л. И., Полякова Р. С. Металлохимические свойства элементов периодической системы. М.: Наука, 1966. 272 с.
10. Скаков Ю. А. Интерметаллиды // *Химическая энциклопедия: в 5 т / И. Л. Кнунянц (гл. ред.). М.: Советская энциклопедия. 1990. Т. 2: Даффа–Меди. 671 с.*
11. Интерметаллиды // *Казахстан. Национальная энциклопедия. Алматы: Қазақ энциклопедиясы, 2005. Т. II.*
12. Крипьякевич П. И. Структурные типы интерметаллических соединений. М., 1977.
13. О механизме образования интерметаллидов и их превращения в процессе приготовления и использования лигатур Al–Ti–В и Al–Ti / Ф. К. Тепляков, А. П. Оскольских, Н. А. Калужский [и др.] // *Цветные металлы*, 1991. № 9. С. 54.
14. Исследование структуры металла и оценка свойств опытных образцов из сплава системы Al–P<sub>3</sub>M, полученных совмещенными методами литья и обработки давлением / С. Б. Сидельников, Н. Н. Довженко, Д. С. Ворошилов [и др.] // *Вестник Магнитогр. гос. техн. ун-та имени Г.И. Носова. Магнитогорск, 2012. № 1. С. 51-55.*
15. Белопухов С. Л., Старых С. Э. Физическая и коллоидная химия. Основные термины и определения: учеб. пособие. М.: Проспект, 2018. 256 с.
16. Ключаров Я. В., Чен-Ди-Цзянь. О фазовом равновесии в системе MgO–Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.
17. Strott A. J. *Prod. Engng*, 1960. No. 43
18. Ryschkewitsch E. *Oxide ceramics: Physical chemistry and Technology. New-Jork–London*, 1960.
19. Atlas L., *Journal. Geol.*, 1952, vol. 60, no. 2, p. 127.
20. Boyd F. R., J. L. England, *Carnegie Inst. Washington, year book* 59, 47, 1959–1960.
21. Boyd F. R., J. L. England, *Carnegie Inst. Washington, year book* 60, 115, 1960–1961.
22. Davis B. T. C., J. L. England, *Carnegie Inst. Washington, year book* 62, 119, 1962–1963.
23. Morimoto N., *Carnegie Inst. Washington, year book* 58, 197, 1958–1959.
24. Ringwood A.E., *Journal. Geophysics Rea.*, 67, № 10, 4005, 1962.
25. Ringwood A.E., M. Seabrook, *Nature*, 196, № 4857, 883, 1962.
26. Физико-химические свойства элементов. Справочник / Под ред. Г.В. Самсонова. Киев, 1965. 806 с.
27. Воздвиженский В. М. Прогноз двойных диаграмм состояния. М.: Металлургия, 1975. 224 с.
28. Бурьлёв Б. П. Термодинамика металлических растворов внедрения. Ростов-на-Дону: Ростовский университет, 1984. 160 с.
29. Воздвиженский В. М. Общие закономерности в строении диаграмм состояния металлических систем. М.: Наука, 1973. 144 с.
30. Буданова Г. М., Володарская Р. С., Канаев Н. А. Анализ алюминиевых и магниевых сплавов. М.: Металлургия, 1966. 360 с.
31. Диаграммы состояния двойных металлических систем / Под ред. Н.П. Лякишева. М.: Машиностроение, 1996, 1997, 2001, т.1–3, 992 с., 1024 с., 1320 с.
32. Полуэктов Н. С., Мешкова С. Б., Коровин Ю. В., Оксиненко И. И. Корреляционный анализ в физикохимии соединений трёхвалентных ионов лантаноидов. ДАН СССР, 1982. Т. 266. № 5. С. 1157-1159.
33. Мешкова С. Б., Полуэктов Н. С., Топилова З. М., Данилкович М. М. Гадолиниевый излом в ряду трёхвалентных лантаноидов. Коорд. химия, 1986. Т. 12. Вып. 4. С. 481-484.
34. Badalov A. V., Gafurov B. A., Mirsaidov I. U., Hakerov I. Thermal stability and thermodynamic properties of this tetrahydrofuranates lanthanide boro-hydrides. *Inter. J. of Hydrogen energy*, 2011, vol. 36, iss. I, pp. 1217-1219.
35. Исмоилов И. Р., Умедов Ш. Т., Акрамов М. Ю., Бадалов А. Термохимические свойства интерметаллидов состава Mg<sub>2</sub>Ln (Ln-лантаноиды). Материалы респ. науч.-практ. конф., посвященной 10-летию Горно-металлургического института Таджикистана. Чкаловск, 25.02.2016. С. 36-37.
36. Исмоилов И. Р., Додхоев Э. С., Обидов З. Р., Бадалов А. Закономерности изменения температуры и энтальпии плавления интерметаллидов составов MgLn и Mg<sub>2</sub>Ln (Ln-лантаноиды). – Сб. матер. респ. науч.-практ. конф. «Проблемы материаловедения в Республике Таджикистан». ИХ АН РТ, 2016. С. 149-152.

37. Баянов А. П., Славкина В. И. К термодинамике жидких сплавов редкоземельных металлов с сильным химическим взаимодействием компонентов. Материалы конф., посвященной столетию Всесоюзного химического общества им. Д.И. Менделеева. Новокузнецк, 1969. С. 25-39.

38. Баянов А. П. Расчет энтальпии образования соединений редкоземельных элементов на основе кристаллохимических характеристик. Известия АН СССР, Неорган. матер. 1973. Том 9. № 6. С. 959-963.

## References

1. Goncharov B. F., Solomakhin I. S. Production of pig iron. Moscow, Metallurgy Publ., 1965, 368 p. (in Russ.).

2. Vasiliev V. E. Blast furnace smelting based on stable slags. Kiev, State Publishing House for Technical Literature, 1956, 260 p. (in Russ.).

3. Parkhomenko Yu. N. Physics and technology of photonics instruments: solar energy and nanotechnologies. Textbook. / Parkhomenko Yu. N. Polisan A. A. Moscow, MISiS Publishing House, 2013, 142 p. (in Russ.).

4. Anastasiou N., Fiuchaur D. Programs for the dynamic simulations of liquids and solids. II MDIONS: Rigid ions using the Evalid sum // Comp. Phys. Commun. 1982, no. 25, pp. 158–176.

5. Woodcock L. V., Angell K. A., Cheeseman P. Molecular dynamics studies of the vitreous state: Simple ionic systems and silica // The Journal of Chemical Physics, 1976, no. 65, pp. 1565–1577.

6. Belashchenko D. K., Ostrovski O. I., Skvortsov L. V. Molecular dynamics simulation of binary CaO–FeO, MgO–SiO<sub>2</sub>, FeO–SiO<sub>2</sub>, CaO–SiO<sub>2</sub> and ternary CaO–FeO–SiO<sub>2</sub> systems // Thermochimica Acta. 2001, vol. 372, pp. 153–163.

7. Zhang L., Jahanshahi S. Review and modeling of viscosity of silicate melts. Part I. Viscosity of binary and ternary silicates containing CaO, MgO and MnO // Meter. Trans. B. 1998. vol. 29, no. 1, pp. 177–186.

8. Gutierrez J., Romero-Serrano A., Plascencia G., Chaves F., Vargas R. Thermodynamical model of ternary silicate systems // ISIJ Int. 2000, vol. 40, no. 7, pp. 664–669.

9. Kornilov I. I., Matveeva N. M., Pryakhina L. I., Polyakova R. S. Metallochemical properties of the periodic system elements. Moscow, Nauka Publ., 1966, 272 p. (in Russ.).

10. Skakov Yu. A. Intermetallides. Chemical Encyclopedia in 5 volumes. Knunyants, I. L. (Ch. Ed.). M., Soviet Encyclopedia Publ., 1990, v. 2: Duff-Copper, 671 p. (in Russ.).

11. Intermetallides. Kazakhstan, National Encyclopedia. Almaty, *Kazakh encyclopediyasy* [Kazakh Encyclopedia] Publ., 2005, v. II (in Russ.).

12. Kripyakevich P. I. Structural types of intermetallic compounds. Moscow, 1977 (in Russ.).

13. Teplyakov F. K., Oskolskikh A. P., Kaluzhsky N. A. [et al.]. About mechanism of formation of intermetallic compounds and their transformation in the process of preparation and use of Al – Ti – B and Al – Ti master alloys. Tsvetnye Metally [Nonferrous Metals], 1991, no. 9, p. 54. (in Russ.).

14. Sidelnikov S. B., Dovzhenko N. N., Voroshilov D. S. [et al.]. The study of the metal structure and evaluation of the properties of test samples of Al – REM system alloy, obtained by combined casting/pressing methods. Bulletin of Magnitogorsk State Technical University named after G.I. Nosov, Magnitogorsk, 2012, no. 1, pp. 51-55. (in Russ.).

15. Belopukhov S. L., Starykh S. E. Physical and colloidal chemistry. Basic terms and definitions. Textbook. M., Prospect, 2018, 256 p. (in Russ.).

16. Klyucharov Ya. V., Chen-Di-Jian. On phase equilibrium in MgO – Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system. (in Russ.).

17. Strott A. J. Prod. Engng, 1960, no. 43.

18. Ryschkewitsch E. Oxide ceramics: Physical chemistry and Technology. New-Jork–London, 1960.

19. Atlas L., Journal. Geol., 1952, vol. 60, no. 2, p. 127.

20. Boyd F. R., J. L. England, Carnegie Inst. Washington, year book 59, 47, 1959–1960.

21. Boyd F. R., J. L. England, Carnegie Inst. Washington, year book 60, 115, 1960–1961.

22. Davis B. T. C., J. L. England, Carnegie Inst. Washington, year book 62, 119, 1962–1963.

23. Morimoto N., Carnegie Inst. Washington, year book 58, 197, 1958 – 1959.

24. Ringwood A.E., Journal. Geophysics Rea., 67, № 10, 4005, 1962.

25. Ringwood A.E., M. Seabrook, Nature, 196, № 4857, 883, 1962.

26. Physico-chemical properties of elements. Handbook. Ed. Samsonova G. V. Kiev, 1965, 806 p. (in Russ.).

27. Vozdvizhensky V. M. Forecast of binary phase equilibrium diagrams. M., Metallurgy Publ., 1975, 222 p. (in Russ.).

28. Burylyov B. P. Thermodynamics of metallic interstitial metal solutions. Rostov-on-Don, Rostov University Publ., 1984, 160 p. (in Russ.).

29. Vozdvizhensky V. M. General patterns in the structure of phase equilibrium diagrams of metal systems. M., Nauka Publ., 1973, 144 p. (in Russ.).

30. Budanova G. M., Volodarskaya, R. S., Kanaev, N. A. Analysis of aluminum and magnesium alloys. Moscow, Metallurgy Publ., 1966, 360 p. (in Russ.).
31. Phase equilibrium diagrams of binary metal systems / Ed. N. P. Lyakisheva. Moscow: Mashinostroenie (Machine Building) Publ., 1996, 1997, 2001, v. 1-3, 992 p., 1024 p., 1320 p. (in Russ.).
32. Poluektov N. S., Meshkova S. B., Korovin Yu. V., Oksinenko, I. I. Correlation analysis in physical chemistry of compounds of trivalent lanthanide ions. DAN USSR, 1982, v. 266, no. 5, pp. 1157-1159. (in Russ.).
33. Meshkova S. B., Poluektov N. S., Topilova Z. M., Danilkovich M. M. Gadolinium "dog-leg" in row of trivalent lanthanides. Coord. Chemistry, 1986, v. 12, Issue. 4, pp. 481-484 (in Russ.).
34. Badalov A. B., Gafurov B. A., Mirsaidov I. U., Hakerov I. Thermal stability and thermodynamic properties of this tetrahydrofuranates lanthanide boro-hydrides. Inter. J. of Hydrogen energy, 2011, vol. 36, iss. I, pp. 1217-1219.
35. Ismoilov I. R., Umedov Sh. T., Akramov M. Yu., Badalov A. Thermochemical properties of intermetallic compounds of  $Mg_2Ln$  composition (Ln-lanthanides). Proceedings of Tajikistan scientific-practical conference devoted to the 10th anniversary of Mining and Metallurgical Institute of Tajikistan. Chkalovsk, 2016, pp. 36-37 (in Russ.).
36. Ismoilov I. R., Dodkhoev E. S., Obidov Z. R., Badalov A. Regularities of changing temperature and enthalpy of melting of intermetallic compounds of  $MgLn$  and  $Mg_2Ln$  composition (Ln-lanthanides). Proceedings of Tajikistan scientific-practical conference "Problems of Materials Science in the Republic of Tajikistan." IKh AN RT Publ., 2016, pp. 149-152 (in Russ.).
37. Bayanov A. P., Slavkina V. I. On thermodynamics of liquid rare-earth metal alloys with strong chemical interaction of components. Proceedings of the conference devoted to the centenary of the All-Union Chemical Society named after D.I. Mendeleev. Novokuznetsk, 1969, pp. 25-39 (in Russ.).
38. Bayanov A. P. Calculation of formation enthalpy of rare-earth elements compounds based on crystallochemical characteristics. Proceedings of the USSR Academy of Sciences, Neorgan. Mater., 1973, vol. 9, no. 6, pp. 959-963 (in Russ.).

### Информация об авторах

**Исмоилов Исмоил Ризоевич** – ст. преподаватель кафедры «Металлургия» Таджикского технического университета имени академика М.С. Осими, Душанбе, Республика Таджикистан, krypton\_89@bk.ru;

**Додхоев Эрадж Саробекович** – ст. преподаватель кафедры «Электроэнергетика» Технического колледжа Таджикского технического университета имени академика М.С. Осими, Душанбе, Республика Таджикистан, dodkhoev1984@mail.ru;

**Исмоилов Ризо Ахмадович** – научный сотрудник государственного научного учреждения «Центр исследования инновационных технологий» при Академии наук Республики Таджикистан. Соискатель, +992 935 60 67 69, e-mail: rizo.ismoilov@mail.ru;

**Нажмуудинов Шарофидин Зоирович** – канд. техн. наук, зав. лабораторией Энергетики и энергосбережения Института водных проблем, гидроэнергетики и экологии Академии наук Республики Таджикистан, Душанбе, Республика Таджикистан, Najmiddinovsh2018@mail.ru;

**Бадалов Абдулхайр** – д-р хим. наук, проф. каф. «Общая и неорганическая химия» Таджикского технического университета им. акад. М.С. Осими, Душанбе, Республика Таджикистан, badalovab@mail.ru.

### Information about the authors

**Ismoil R. Ismoilov** – senior lecturer of the Department of Metallurgy of Tajik Technical University named after academician M. S. Osimi, Dushanbe, Republic of Tajikistan, krypton\_89@bk.ru;

**Eradzh S. Dodkhoev** – senior lecturer of the Department of Electric Power Engineering of the Technical College of the Tajik Technical University named after academician M.S. Osimi, Dushanbe, Republic of Tajikistan, dodkhoev1984@mail.ru;

**Rizo A. Ismoilov** – researcher of the state scientific institution "Center for research of innovative technologies" at the Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan, Dushanbe, Republic of Tajikistan, rizo.ismoilov@mail.ru;

**Sarafidin Z. Nazhmudinov** – Cand Sci. (Tech.), Head of the laboratory of Energy and energy saving of the Institute of water problems, hydropower and ecology of the Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan. Najmiddinovsh2018@mail.ru;

**Badalov Abdulhair** – Dr. Sci. (Chem.), prof., Department "General and inorganic chemistry" of the Tajik Technical University named after academician M.S. Osimi, Dushanbe, Republic of Tajikistan, badalovab@mail.ru.