

А.А. Ащеулов, О.М. Маник, Т.О. Маник, В.Р. Білінський-Слотило

Особливості структури хімічного зв'язку заліза

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 58000, вул. Коцюбинського 2,
Чернівці, Україна, e-mail: AshcheulovAA@rambler.ru, manykto@rambler.ru

Представлені математичні моделі, що пояснюють механізм формування хімічного зв'язку деяких модифікацій заліза. Визначені силові та енергетичні характеристики цього елемента, які дозволили виявити границі його поліморфних перетворень, що значно розширює можливості створення нових матеріалів електронної техніки.

Ключові слова: залізо, математичні моделі, хімічний зв'язок, силові постійні, характеристичні частоти та температури, поліморфізм.

Стаття поступила до редакції 22.08.2011; прийнята до друку 15.09.2011.

Вступ

Зростаючі запити електронної техніки по створенню нових матеріалів із заданим комплексом фізико-хімічних властивостей [1] ставлять перед матеріалознавством завдання створення теорії, що відкриває можливість обґрунтованого вирішення цієї проблеми з позицій хімічного зв'язку. Особливого значення набуває розробка методів дослідження речовин, що характеризуються декількома співіснуючими властивостями. Останнім часом все більшої актуальності набувають дослідження напівпровідникових, високотемпературних надпровідних та магнітних матеріалів на основі заліза [2 - 5].

У зв'язку з цим представлена робота присвячена комплексному дослідженню особливостей структури хімічного зв'язку заліза, як базового елемента нових матеріалів.

Для вирішення поставленої задачі необхідно поєднання сучасного формалізму теорії металевого зв'язку з останніми результатами експериментальних рентгеноструктурних досліджень, що дозволяє у подальшому визначити реальне відхилення кристалічної структури заліза від ідеальної загальноприйнятої моделі та пояснити природу його поліморфних перетворень.

I. Кристалічна структура та хімічний зв'язок заліза

Залізо – типовий метал сріблясто-білого кольору з сірватим відтінком. У чистому вигляді він пластичний, а різні домішки (зокрема – вуглець)

підвищують його твердість і крихкість. Характеризується чітко вираженими магнітними властивостями. Для цього елемента характерний поліморфізм. В даний час розрізняють чотири кристалічних модифікації:

- до $T = 1043\text{ K}$ існує $\alpha\text{-Fe}$ (ферит) із об'ємноцентрованою кубічною (ОЦК) граткою ($a = 2,86645\text{ \AA}$) з властивостями феромагнетика (точка Кюрі - $T_k = 1043\text{ K}$)

- у температурному інтервалі $T = 1043 - 1190\text{ K}$ існує $\beta\text{-Fe}$, що відрізняється від $\alpha\text{-Fe}$ параметрами ОЦК-гратки ($a = 2,895\text{ \AA}$) та парамагнітними властивостями;

- у температурному інтервалі $T = 1190 - 1667\text{ K}$ існує $\gamma\text{-Fe}$ (аустеніт) з гранецентрованою кубічною (ГЦК) граткою ($a = 3,637\text{ \AA}$);

- вище $T = 1667\text{ K}$ виникає стійкий $\delta\text{-Fe}$ з ОЦК-граткою ($a = 2,925\text{ \AA}$).

Сучасне матеріалознавство не виділяє $\beta\text{-Fe}$ як окрему фазу [6], а розглядає її як різновид $\alpha\text{-Fe}$. При нагріванні заліза вище $T = 1043\text{ K}$ тепловий рух іонів «розстроює» орієнтацію спінових магнітних моментів електронів і феромагнетик переходить в парамагнетик – відбувається фазовий перехід другого роду, однак фазового переходу першого роду при цьому, зі зміною основних фізичних параметрів, не спостерігається. В області високих тисків (понад 104 МПа , 10^5 атм.) виникає $\varepsilon\text{-Fe}$ з гексагональною щільно упакованою (ГЩУ) кристалічною граткою.

У матеріалознавстві надзвичайно важливі явища поліморфізму. Саме завдяки цим переходам здійснюється термообробка матеріалів на основі заліза. Без цього явища залізо як основа сталі і багатьох інших матеріалів не отримало б такого широкого розповсюдження.

У хімічному відношенні залізо – метал середньої активності. Зовнішня електронна оболонка атома заліза має $3d^6 4s^2$ електронів. Наявність незаповненого $3d$ шару і його відносні розміри зумовлюють багато фізичних і хімічних властивостей цього елемента. Так, взаємодія некомпенсованих спінів чотирьох з шести електронів сусідніх атомів на великих відстанях, властивих α -Fe, створює області спонтанної намагніченості (домени), що визначають феромагнетизм. Зі збільшенням міжатомних відстаней обмінна взаємодія послаблюється, що призводить до розупорядкування областей спонтанної намагніченості та зникнення феромагнетизму ($T = 1042 K$). Зосередження чотирьох електронів на зв'язках в металі і їх взаємодія з катіонами веде до перекриття d^6 -орбіталей і появи направлених зв'язків, властивих ОЦК гратці α - і δ - заліза. Якщо перекриття в γ -Fe відсутнє, то координаційне число збільшується до 12.

Таке уявлення про хімічний зв'язок цього елемента дає можливість пояснити його деякі властивості. Однак, для створення нових матеріалів на основі заліза необхідна додаткова інформація про механізми формування хімічного зв'язку.

Для комплексних досліджень особливостей хімічних зв'язків, а також різних видів поліморфізму заліза був обраний підхід [7], що дозволяє розраховувати компоненти силових матриць мікроскопічної теорії кристалічних ґраток шляхом застосування моделей хімічних зв'язків і розв'язання оберненої задачі теорії пружності. Методи теорії пружності [8] і мікроскопічної теорії кристалічних ґраток [9] протягом тривалого часу розвивалися незалежно один від одного. У той же час для з'ясування суті процесів, що відбуваються в досліджуваній речовині необхідне розуміння закономірностей, що зв'язують різні властивості, які подаються різними теоріями. Існує цілий ряд методів переходу від теорії ґратки до теорії пружності. Характерним для них є визначення пружних постійних за допомогою мікроскопічної теорії. У представленій роботі вирішена обернена задача: за експериментальними даними визначені основні параметри теорії пружності - пружні модулі - а потім, шляхом складання системи алгебраїчних рівнянь обчислені компоненти силових матриць кристалічних ґраток.

II. Силові та енергетичні характеристики хімічних зв'язків заліза

Теорія пружності розглядає кристал як континуум з постійною густиною ρ в недеформованому рівноважному стані. При цьому стан кристалу описується векторним полем зміщення $S(R, t)$, що задає зміщення в момент t деякої точки, що має в рівновазі координату R . Деформація континууму при цьому задається симетричним тензором деформації:

$$e_{mn} = \frac{1}{2} (S_{m/n} + S_{n/m}), \quad (1)$$

де $S_{m/n} = \partial S_m / \partial x_n$ характеризує зміну x_n компонент вектора зміщення. Співвідношення між напруженнями і деформаціями, відповідно до закону Гука [8], виражається тензором четвертого рангу:

$$s_{ik} = \sum_{m,n} C_{ik,mn} e_{mn}, \quad (2)$$

де σ_{ik} – тензор напружень; $C_{ik,mn}$ – тензор пружних постійних.

Рівняння руху теорії пружності за умови рівності сил інерції та сил, заданих напруженнями має вигляд:

$$r \mathbb{S}_i^{\mathbb{R}} = \sum C_{ik,mn} S_{m/nk}, \quad (3)$$

яке порівнюється з рівнянням руху теорії ґратки [9]:

$$M \mathbb{S}_i^{\mathbb{R}n} = - \sum_{n,k} \Phi_{ik}^{mn} S_i^n, \quad (4)$$

$$\text{де } \Phi_{ik}^{mn} = \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^m \partial x_k^n} \right|_{R=R_0} - \text{ сила, що діє на атом } m$$

у напрямку (i), коли атом n зміщений на відстань S в напрямку k , в той час, як всі інші атоми перебувають у стані рівноваги $R = R_0$.

Замінюючи в (4) S_i^m полем зміщень $S_i(R, t)$ [9]

$$S_i^m = S(Am, t), \quad (5)$$

де A – матриця, що задає положення ядра в ґратці та розкладаючи S_k^n в ряд біля точки $R=Am$, а також вводячи густина $\rho = M/V_z$, де M - усереднена маса, а V_z – об'єм елементарної комірки, отримаємо:

$$r \mathbb{S}_i^{\mathbb{R}} = \sum_{kmn} \mathcal{C}_{ik,mn}^{\mathbb{R}} S_{k/mn}, \quad (6)$$

при цьому

$$\mathcal{C}_{ik,mn}^{\mathbb{R}} = - \frac{1}{2V_z} \sum_h \Phi_{ik}^h (Ah)_m (Ah)_n. \quad (7)$$

Таким чином, за допомогою (7) здійснюється взаємозв'язок між теоріями пружності і кристалічної ґратки: тензор пружних постійних $\mathcal{C}_{ik,mn}^{\mathbb{R}}$

виражається силовими матрицями Φ_{ik}^h для різних h напрямків кристалу, матрицею базисних векторів A , що задає структуру його елементарної комірки та операції симетрії, що залишають h інваріантним. У кубічній ґратці тензор $\mathcal{C}_{ik,mn}^{\mathbb{R}}$ (7) містить три незалежні компоненти: $\mathcal{C}_{11}^{\mathbb{R}}, \mathcal{C}_{12}^{\mathbb{R}}, \mathcal{C}_{44}^{\mathbb{R}}$.

Спочатку розглянемо ГЦК- ґратку, в якій взаємодіють тільки найближчі сусіди. Її силова матриця представляється наступним чином:

$$\left\| \Phi_{ik}^{(110)} \right\| = \left\| \begin{matrix} b' & g' & 0 \\ g' & b' & 0 \\ 0 & 0 & a' \end{matrix} \right\|, \quad (8)$$

де α', β', γ' - силові константи.

Сумування в (7) поширюється на всі дванадцять найближчих сусідів розглянутого атома, $V_z = a^3/4$, де a - постійна ґратки і призводить до результату:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{11}^{\%} &= -\frac{4b'}{a}; & \mathcal{C}_{12}^{\%} &= -\frac{2(a'+b')}{a}; \\ \mathcal{C}_{44}^{\%} &= -\frac{2g'}{a}. \end{aligned} \quad (9)$$

Слід зазначити, що $C_{ik,mn}$ і $\mathcal{C}_{ik,mn}^{\%}$ ((3) і (6)), не можуть бути ідентифіковані, так як вони входять в обидва рівняння різним чином. У рівняння пружності входить тільки симетрична по mn частина $C_{ik,mn}$, при цьому між $\mathcal{C}_{ab}^{\%}$ і C_{ab} спостерігається наступний зв'язок [9]:

$$C_{11} = \mathcal{C}_{11}^{\%}; \quad C_{12} = 2\mathcal{C}_{44}^{\%} - \mathcal{C}_{12}^{\%}; \quad C_{44} = \mathcal{C}_{12}^{\%} \quad (10)$$

а пружні постійні C_{ab} та силові константи пов'язані співвідношенням:

$$\begin{aligned} -b' &= \frac{a}{4}C_{11}; & -a' &= \frac{a}{4}(2C_{44} - C_{11}); \\ -g' &= \frac{a}{4}(C_{12} + C_{44}). \end{aligned} \quad (11)$$

У випадку взаємодії тільки найближчих сусідів (модель пружинного зв'язку з коефіцієнтом пружності f) [9] ($\beta' = \gamma' = -f/2$; $\alpha' = 0$):

$$\begin{cases} C_{11} = \frac{2f}{a}, \\ C_{12} = C_{44} = \frac{f}{a}, \end{cases} \quad (12)$$

а при чисто пружинному зв'язку між першими (f) і другими (f') сусідами маємо:

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{2f}{a} + \frac{4f'}{a}, & f &= a \cdot C_{44}, & C_{12} &= C_{44} = \frac{f}{a}, \\ f' &= \frac{a}{2}(C_{11} - C_{12} - C_{44}) \end{aligned} \quad (13)$$

Аналогічно, у випадку перших та других сусідів ОЦК- ґратки маємо наступні результати:

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{2}{a} \left(\frac{f}{3} + f' \right), & f &= \frac{3}{2} a \cdot C_{44}, \\ C_{12} &= C_{44} = \frac{2f}{3a}, & f' &= \frac{a}{2}(C_{11} - C_{12}), \end{aligned} \quad (14)$$

що дають можливість провести оцінку f і f' ідеальних ОЦК- і ГЦК- ґраток заліза.

Найменші міжатомні відстані реальних кристалічних ґраток цього елемента не відповідають найменшим міжатомним відстаням ідеальних ґраток, що призводить до деформації елементарної комірки, а отже до порушення симетрії ідеальних ОЦК- і ГЦК- ґраток. У цьому випадку складна кристалічна ґратка заліза представляється у вигляді зсунутих одна відносно одної простих підґраток. При цьому їх силові матриці мають додаткові індекси μ і ν , які

означають, що $\Phi_{ik}^{mn} \cdot S$ є сила, що діє на атом m підґратки μ у напрямку (i) у разі, коли атом n підґратки ν зміщений на відстань S в напрямку k , в той час, коли всі інші атоми перебувають у рівноважному стані. Загальний вид силових констант, в цьому випадку, наступний:

$$\begin{aligned} \Phi_{ik}^{mn} &= -j_{ik}^{mn} (R_m^m - R_n^n) \quad \text{для } R_m^m \neq R_n^n, \\ j_{ik} &= \frac{\partial^2 j}{\partial x_i \cdot \partial x_k}. \end{aligned} \quad (15)$$

Якщо взаємодіють тільки найближчі сусіди, що знаходяться на відстані ℓ , а зв'язки представляються моделлю пружин з постійною $f = F(\ell) \cdot \ell^2$, то потенціал $\varphi(R)$ становить:

$$j(R) = \frac{1}{2} f (|R| - 1)^2, \quad (16)$$

і згідно [10]

$$j_{ik}(R) = d_{ik} f \frac{|R| - 1}{|R|} + f \mathbf{1} \frac{X_i X_k}{\mathbf{1}^2}. \quad (17)$$

При рівновазі $|R|$ дорівнює відстані ℓ між найближчими сусідами і член із δ_{ik} зникає

$$j_{ik}(R) = f \frac{\bar{X}_i \bar{X}_k}{\mathbf{1}^2}. \quad (18)$$

Загальний вигляд силових констант також може бути отриманий за допомогою моделі пружин, натягнутих в положенні рівноваги, причому умови рівноваги (і відсутності напружень) пов'язують між собою натяги різних пружин. Таким чином, моделі потенціалу у вигляді (16 - 18) дозволяють здійснювати оцінку силових постійних як перших (f), так і других (f') сусідів у випадку різних міжатомних відстаней реальних ґраток заліза.

Ідеальна та реальна ГЦК- модифікації заліза приведені на рис. 1, а відповідні міжатомні відстані - в табл. 1. Оцінка силових постійних проводилася згідно [11 - 13] з використанням (13) і (18), а також чисельних значень пружних постійних [10]:

$$\begin{aligned} C_{11} &= 2,331 \cdot 10^{11} \text{ Н/м}^2; & C_{12} &= 1,3544 \cdot 10^{11} \text{ Н/м}^2; \\ C_{44} &= 1,1781 \cdot 10^{11} \text{ Н/м}^2. \end{aligned} \quad (19)$$

Особливої уваги заслуговує γ -Fe. У випадку ідеальної моделі міжатомні відстані перших і других

сусідів складають: $r_1 = \frac{a\sqrt{3}}{2} = 3,15 \text{ \AA}$ і

$r_2 = a = 3,637 \text{ \AA}$. Врахування найменших відстаней $r_1 = 2,41 \text{ \AA}$ і $r_2 = 2,508 \text{ \AA}$ [6] у разі реального γ -Fe (див. рис. 1.) призвело до необхідності врахування не двох класичних міжатомних відстаней, а дев'яти. Чисельні значення силових постійних, що відповідають цим відстаням, наведені в табл. 1.

Розрахунок енергетичних характеристик хімічного зв'язку проводився за методикою [7] і зводився до розрахунку динамічної матриці D_{ij} та секулярних рівнянь:

Особливості структури хімічного зв'язку заліза

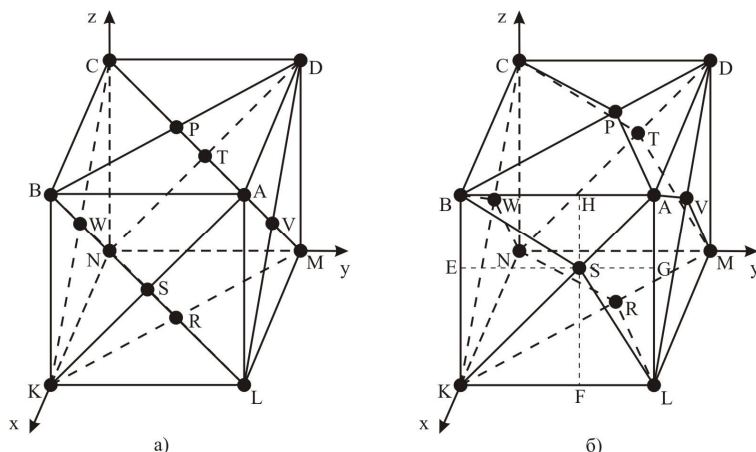


Рис. 1. Схема міжатомних відстаней і хімічних зв'язків перших і других сусідів: а) ідеальної ГЦК- гратки заліза; б) реальної ГЦК- гратки заліза (перших сусідів – $r_1 = SA, r_2 = SB, r_3 = SL, r_4 = SK$ та других сусідів – $r_5 = 2 \cdot SH, r_6 = 2 \cdot SG, r_7 = AB, r_8 = 2 \cdot SE, r_9 = 2 \cdot SF$).

Таблиця 1

Міжатомні віддалі, силові постійні, характеристичні частоти і температури γ -Fe з ГЦК - граткою

Параметри <i>i</i>	$r_i, \text{Å}$	$f_i, \text{Н/м}$	$\omega_i \cdot 10^{13}, \text{с}^{-1}$	T_i, K
1	2,41	56	4,91	1600
2	2,508	53,8	4,817	1570
3	2,6458	51	4,69	1528
4	2,7354	49,34	4,613	1503
5	3,3092	21,45	3,042	991
6	3,50448	19,13	2,8726	936
7	3,637	17,76	2,7678	902
8	3,76952	17,1	2,716	885
9	3,9648	16,3	2,65	864

Таблиця 2

Міжатомні віддалі, силові постійні, характеристичні частоти і температури α -Fe з ОЦК - граткою

Параметри <i>i</i>	$r_i, \text{Å}$	$f_i, \text{Н/м}$	$\omega_i \cdot 10^{13}, \text{с}^{-1}$	T_i, K
1	2,41	71,6	5,5575	1800
2	2,508	66	5,3357	1727
3	2,4598	68,63	5,441	1761
4	2,5559	63,416	5,23	1693
5	2,47	68	5,416	1753
6	2,526865	65,1	5,3	1716
7	2,435	70	5,495	1779
8	2,532	64,8	5,287	1711,62
9	3,99394	7,21	1,764	571
10	4,1136	6,8	1,713	554
11	2,69831	15,8	2,61	845
12	3,03459	12,5	2,322	751,7
13	2,86645	14	2,457	795,43

$$|D_{ij} - d_{ij} w^2| = 0, \text{ де } d_{ij} = \begin{cases} 1 \text{ аєү } i = j \\ 0 \text{ аєү } i \neq j \end{cases} \quad (20)$$

Результати розрахунків характеристичних частот [14] наведені в табл. 1.

Користуючись моделлю коливань гратки з єдиною характеристичною частотою ν_E , Ліндемманн отримав рівняння для температури плавлення

$$T_{\tilde{e}i \tilde{e}} = c n \frac{2}{E} V_n^{2/3} M, \quad (21)$$

що зв'язує характеристичну частоту коливань кристалу з температурою коливального плавлення $T_{кол}$, молярним об'ємом V_n і атомною масою M . Використання такої моделі дозволило знайти «ефективні» характеристичні температури нееквівалентних хімічних зв'язків, чисельні значення яких також наведено в таблиці 1.

Аналогічно проведено оцінку силових та енергетичних параметрів хімічного зв'язку α - заліза (табл. 2). Слід відмітити, що при розгляді γ - Fe,

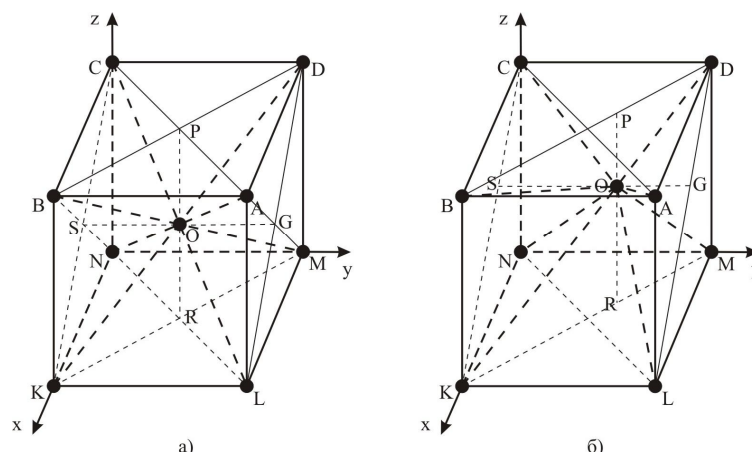


Рис. 2. Схема міжатомних відстаней і хімічних зв'язків перших і других сусідів: а) ідеальної ОЦК- гратки заліза; б) реальної ОЦК- гратки заліза (перших сусідів – $r_1 = OD$, $r_2 = OC$, $r_3 = OL$, $r_4 = OK$, $r_5 = OA$, $r_6 = OB$, $r_7 = OM$, $r_8 = ON$ та других сусідів – $r_9 = 2 \cdot OP$, $r_{10} = 2 \cdot OR$, $r_{11} = 2 \cdot OG$, $r_{12} = 2 \cdot OS$, $r_{13} = AB$).

визначну роль у формуванні хімічного зв'язку відіграють дві найменші відстані r_1 і r_2 , врахування яких призводить до відповідної деформації ідеальної ГЦК- гратки і розщеплення цих двох класичних міжатомних відстаней на дев'ять нееквівалентних відстаней реальної гратки.

Врахування двох найменших міжатомних відстаней α -Fe не дало очікуваного результату, оскільки специфічні особливості формування хімічного зв'язку його гратки обумовлені появою трьох найменших відстаней r_1 , r_2 і r_3 (див. рис. 2.), що призводять до деформації його ідеальної гратки з двома міжатомними відстанями (у наближенні перших і других сусідів) та їх розщепленню на тринадцять нееквівалентних відстаней реальної ОЦК- гратки. Це веде до значного розширення температурного інтервалу поліморфних перетворень заліза.

Таким чином, отримані результати дають можливість дослідити динаміку поліморфізму заліза і його взаємозв'язки зі структурою хімічного зв'язку з одного боку значно розширюють можливості сучасної мікро- та нанотехнологій при створенні нових матеріалів електронної техніки, з іншого – призводять до появи оригінальних технологічних підходів названих нами пікотехнологіями.

Висновки

1. Розроблено математичну модель хімічного зв'язку заліза, що пояснює механізм формування його поліморфних перетворень.
2. Приведені результати розрахунків міжатомних відстаней, силових і енергетичних характеристик заліза з ОЦК- і ГЦК- гратками.
3. Встановлено, що поліморфні перетворення заліза пов'язані зі зміною кристалічної структури, електронної густини, які відображають зміни міжатомних відстаней, силових і енергетичних характеристик хімічного зв'язку та призводять до формування необхідних властивостей створюваних нових матеріалів на його основі.
4. Отримані результати значно розширюють технологічні можливості мікро- і нанотехнологій при створенні різних напівпровідникових, надпровідних і магнітних матеріалів електронної техніки на основі заліза.

Ащеулов А.А. - д.т.н., г.н.с. Чернівецького національного університету ім. Юрія Федьковича;
Маник О.М. - к.ф.-м.н., доцент;
Маник Т.О. - аспірантка Чернівецького національного університету ім. Юрія Федьковича;
Білінський-Слотило В.Р. - аспірант Чернівецького національного університету ім. Юрія Федьковича.

- [1] П.И. Баранский, В.П. Клочков, И.В. Потыкевич. Полупроводниковая электроника. Справочник. Научная думка, К. 704 с. (1975).
- [2] А.А. Ащеулов, Н.К. Воронка, С.Ф. Маренкин, И.М. Раренко. Получение и использование оптимизированных материалов из антимонида кадмия // *Неорганические материалы*, **32**(9), сс. 049-1060 (1996).
- [3] М.В. Садовский. Высокотемпературная сверхпроводимость в слоистых соединениях на основе железа // *УФН*, **178**(12), сс. 1243-1271 (2008).
- [4] Э.Л. Нараив. *Физика магнитных полупроводников*. Наука, М. 432 с. (1979).
- [5] M.D. Andriichuk, V.R. Belinskii-Slotilo, I.V. Ivanchenko et al. Magnetic ordering in $CrxHg_{1-x}Se$ crystals grown by solid-state recrystallization // *Inorganic Materials*, **45**(11), pp. 1230-1233 (2009).
- [6] Н.Е. Дриц. *Свойства элементов*. Металлургия, М. 672 с. (1985).

- [7] О.М. Маник. *Багатофакторний підхід в теоретичному матеріалознавстві*. Прут, Чернівці. 432 с. (1999).
- [8] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости*. Наука, М. 248 с. (1965).
- [9] Г. Лейбфрід. *Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов*. Госиздат, М.-Л. 312 с. (1963).
- [10] И.Н. Францевич, Ф.Ф. Воронов, С.А. Бакута *Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов*. Справочник. Наукова думка, К. 288 с. (1982).
- [11] А.А. Ащеулов, И.В. Гуцул, О.Н. Маник, Т.О. Маник Особенности оптимизации материалов на основе CdSb // *Сенсорна електроніка і мікросистемні технології*, **1(7)(2)**, сс.64-70 (2010).
- [12] А.А. Ащеулов, И.В. Гуцул, О.Н. Маник, Т.О. Маник, С.Ф. Маренкин Химическая связь в низкосимметричных кристаллах CdSb, ZnSb, CdxZn1-xSb и особенности их технологии // *Неорганические материалы*, **46(6)**, сс. 649 - 655 (2010).
- [13] А.А. Ащеулов, О.Н. Маник, Т.О. Маник, В.Р. Билинский-Слотыло Молекулярная модель и химическая связь теллура // *ТКЭА*, **5-6(89)**, сс. 46-50 (2010).
- [14] А.Р. Уббелоде. Расплавленное состояние вещества. Металлургия, М. 375с. (1982).

А.А. Ashcheulov, О.М. Manyk, Т.О. Manyk, V.R. Bilynskyj-Slotylo

Peculiarities of the Structure of Chemical Bond of Iron

*Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University,
58000, Kotsyubinskogo St. 2, Chernivtsi, Ukraine
e-mail: AshcheulovAA@rambler.ru, manykto@rambler.ru*

The mathematical models are represented which explain the formation of chemical bonds of different iron modifications. Force bearing and energy characteristics of this element are proposed which allow identifying its polymorphic transformations boundaries significantly extend the capabilities of create new materials for electronic engineering.

Key words: iron, mathematical models, chemical bond, force coefficients, characteristic frequencies and temperatures, polymorphism.