

раздел ФИЗИКА

УДК 544.225.32

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2024.1.5

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В ДИБОРИДЕ ХРОМА

© С. Р. Самбуева

*Бурятская государственная сельскохозяйственная академия им. В. Р. Филиппова
Россия, Республика Бурятия, 670010 г. Улан-Удэ, ул. Пушкина, 8.**Email: sambueva@mail.ru*

Цель работы – теоретическое и экспериментальное исследование электронного строения CrB_2 . По данным прецизионных рентгенодифракционных экспериментов при комнатной и низких температурах построены распределения деформационной и валентной электронной плотности (РЭП). Рассчитано теоретическое РЭП на основе модифицированного статистического метода. РЭП для двух типов псевдопотенциала показывают достаточно хорошее совпадение как по топологии, так и по численным значениям во всех областях за исключением ионных остовов. Сравнение экспериментального и теоретического распределения показало их согласие в областях химической связи кроме различия на линии Cr–Cr. Обнаруженные особенности РЭП и теплового движения атомов указывают на квазислоистый характер электронной структуры. Высокая степень локализации s , p -состояний бора определяет решеточные свойства диборидов. Полученные результаты могут быть полезны для синтеза сверхтвердых веществ и создания перспективных материалов техники.

Ключевые слова: *распределение электронной плотности; прецизионный рентгенодифракционный метод; диборид хрома.*

Введение

Бориды переходных металлов обладают уникальными физико-химическими характеристиками, обуславливающими их большое технологическое значение. Они отличаются сочетанием высокой твердости, тугоплавкости, химической инертности, хорошей тепло- и электропроводности, специфической электронной структуры [1–2]. Установлено, что по абразивным и прочностным свойствам монокристаллы этих соединений могут превосходить корундовые материалы. С целью повышения срока эксплуатации техники используют боридные покрытия на легированных сталях. Для получения поверхностного слоя деталей с высокими абразивной стойкостью, твердостью и прочностью применяются методы борирования [3–5]. Совершенствование процесса борирования требует исследования структуры и свойств образующихся покрытий. В связи с вышеизложенным, подробное рассмотрение связи между составом, структурой и свойствами боридов является актуальной задачей.

В последние годы российскими учеными [6–7] разработаны алгоритмы компьютерного моделирования кристаллических структур для предсказания потенциальных сверхтвердых соединений, сравнимых по твердости с алмазом. На основе этих алгоритмов составлен список сверхтвердых материалов, которые могли бы использоваться во многих областях техники. Наибольший интерес из них представляют материалы с сочетанием высокой твердости и трещиностойкости, прежде всего, это бориды переходных металлов, производство которых к тому же не требует высоких затрат.

Особый интерес вызывают сверхпроводящие свойства боридов. Для диборида титана сообщалось о высоких температурах сверхпроводящего перехода при больших давлениях, позже высокотемпературная сверхпроводимость была обнаружена в дибориде магния [8–9]. Слоистость кристаллической структуры MgB_2 приводит к анизотропии физических свойств: электрической проводимости, прочности и т.д. Это соединение – первый известный сверхпроводник, обладающий двумя сверхпроводящими щелями (двухщелевая сверхпроводимость). В обзоре [10] обсуждаются методы синтеза MgB_2 , влияние легирования и термомеханической обработки на структуру и свойства [11–14], методы изготовления проводов и кабелей на основе MgB_2 [15–19], а также перспективы их применения в различных областях.

В боридах наблюдаются особенности, характерные для металлической, ионной и ковалентной связи. Однако различные авторы по-разному оценивают вклады ковалентной и металлической составляющих в энергию химической связи. Теоретические и экспериментальные данные сильно расходятся по основным вопросам электронного строения, а иногда прямо противоположны. В связи с этим при дальнейшем исследовании химической связи в бориды переходных металлов важно получить прямые экспериментальные данные об особенностях динамики решетки и распределении электронной плотности в этих соединениях. Последнее может не только представить наглядную картину перераспределения валентных электронов в кристаллах, но и дать количественные характеристики – эффективные заряды, зарядовый перенос, заселенности атомных орбиталей. Целью работы является теоретическое и экспериментальное исследование электронного строения диборида хрома.

Материалы и методы

Проведены прецизионные рентгенодифракционные эксперименты для монокристалла диборида хрома при 293, 230 и 157 К на 4-кружном автоматическом дифрактометре «Syntex-P2» и для монокристалла диборида магния при 293 К на дифрактометре Xcalibur (MoK α -излучение). Массивы интегральных интенсивностей получены в полной сфере отражений до $\sin \theta / \lambda = 1.177 \text{ \AA}^{-1}$; снято порядка 1200–1400 отражений при каждой температуре. Соединения имеют структуру типа AB_2 , пространственная группа симметрии $R\bar{6}/mmm$, $z = 1$, число эквивалентов 88–95. Для CrB_2 параметры решетки $a = 2.9725(3) \text{ \AA}$; $c = 3.0754(2) \text{ \AA}$; $c/a = 1.0346$; $V = 23.533(6) \text{ \AA}^3$; $r(Cr - B) = 2.3043(2) \text{ \AA}$; $r(B - B) = 1.7162(1) \text{ \AA}$. Для MgB_2 $a = 3.0834(1) \text{ \AA}$; $c = 3.5233(2) \text{ \AA}$; $c/a = 1.143$.

Обработка данных проводилась с помощью программ комплекса XTL. Настоящая работа является продолжением работы [20]. Ниже представляются расчеты теоретического распределения электронной плотности (РЭП) на основе модифицированного статистического метода и результаты построения электронной плотности (ЭП) по прецизионным рентгенодифракционным данным при комнатной и низких температурах в дибориде хрома. В работах [21–29] приводится методика проведения и обработки прецизионных рентгенодифракционных экспериментов, а в [20] – детали экспериментов, проведенных нами для диборидов переходных металлов.

Результаты и их обсуждение

Проведено уточнение МНК (метод наименьших квадратов) для нескольких «дальних» областей с различным значением $(\sin \theta / \lambda)_{\min}$ для исследования влияния области обратного пространства (табл. 1). Из табл. 1 видно, что наблюдается зависимость значений структурных параметров от величины $(\sin \theta / \lambda)_{\min}$. При уточнении структурных параметров желательно использовать высокоугловые отражения. В то же время уменьшение числа отражений, участвующих в МНК, снижает количество отражений, приходящихся на один параметр. Наиболее заметное влияние это оказывает на величину масштабного множителя K . Поэтому необходимо определить оптимальную область в обратном пространстве. В качестве $(\sin \theta / \lambda)_{\min}$ взято значение 0.75 \AA^{-1} , так как при этом в уточнение входит достаточно большое число отражений и вклад в амплитуду рассеяния в основном определяется остовными электронами.

Таблица 1

Зависимость структурных параметров CrB_2 при комнатной температуре от области значений $\sin \theta / \lambda$, включаемой в уточнение МНК

$(\frac{\sin \theta}{\lambda})_{\min}, \text{ \AA}^{-1}$	0.00	0.65	0.75	0.85	0.95
Число отражений	90	70	60	49	38
K	0.01227(5)	0.01244(3)	0.01259(5)	0.01272(5)	0.01283(9)
Тепловые параметры $B11(Cr), \text{ \AA}^2$	0.370(6)	0.359(3)	0.349(4)	0.339(4)	0.333(7)
$B33(Cr), \text{ \AA}^2$	0.394(7)	0.375(3)	0.362(4)	0.352(4)	0.344(7)
$B11(B), \text{ \AA}^2$	0.329(17)	0.317(8)	0.306(7)	0.295(7)	0.287(9)
$B33(B), \text{ \AA}^2$	0.485(29)	0.461(13)	0.450(11)	0.441(11)	0.433(12)
Анизотропия $A(Cr)$	0.939	0.957	0.964	0.963	0.968
$A(B)$	1.474	1.454	1.471	1.495	1.509
Фактор расходимости $R, \%$	0.8	0.6	0.5	0.5	0.5
Фактор добротности S	10.1849	4.3318	3.4347	3.1959	3.0879

Экспериментальные карты распределения электронной плотности

Для анализа перераспределения валентных электронов в кристалле при образовании химической связи построены карты деформационной электронной плотности, полученные разностным Фурье-преобразованием с использованием в вычисленных $F_g(\vec{g})$ структурных амплитудах функций атомного рассеяния сферически симметричных атомов Cr и B :

$$\Delta\rho(\vec{r}) = \rho_{\rho}(\vec{r}) - \rho_{\theta}(\vec{r}) = \frac{1}{V_{\text{яч.}} \sum_{\vec{g}} (k F_{\rho}(\vec{g}) - F_{\theta}(\vec{g})) e^{-2\pi i \vec{g} \vec{r}}, \quad (1)$$

где $F_{\rho}(\vec{g})$ – экспериментальные структурные амплитуды, $\rho_{\rho}(\vec{r})$ – экспериментальная плотность. Если в качестве вычисленной плотности $\rho_{\theta}(\vec{r})$ взять суперпозицию распределений, созданных электронами остовов, имеем валентную плотность.

Практически приходится обрывать бесконечный ряд Фурье, что ведет к некоторому искажению распределения: к появлению неравномерности кривой распределения между максимумами и возможному смещению максимумов, соответствующих легким атомам, в присутствии тяжелых атомов. Ряды обрываются до некоторого значения $(\sin \theta / \lambda)_{\text{max}}$, так как вклад валентных электронов при больших значениях $\sin \theta / \lambda$ пренебрежимо мал. В то же время включение членов с $\sin \theta / \lambda > (\sin \theta / \lambda)_{\text{max}}$ увеличивает уровень шумов. Для исследования влияния обрыва ряда рассмотрены линейные сечения ЭП, построенной по отражениям в областях $0 < \sin \theta / \lambda < (\sin \theta / \lambda)_{\text{max}}$, где $(\sin \theta / \lambda)_{\text{max}} = 0.55; 0.75; 0.95; 1.177 \text{ \AA}^{-1}$. Анализ показал, что оптимальным $(\sin \theta / \lambda)_{\text{max}}$ является значение 0.75 \AA^{-1} .

На *рис. 1* показана элементарная ячейка структуры типа AlB_2 с указанием сечений типа 1 (плоскость (110)), типа 2 (плоскость (002)), типа 3 (плоскость (001)), в которых построены карты РЭП.

На распределении деформационной электронной плотности в плоскости (110) (температура 230 К) наблюдаются следующие особенности (*рис. 2*):

1. На середине связи $B-B$ имеется ковалентный максимум ЭП высотой 0.10 e\AA^{-3} .
2. На расстоянии около 0.5 \AA от центра атома B расположен максимум 0.09 e\AA^{-3} .
3. Вблизи атома металла наблюдается мостик положительной ЭП вдоль оси Z со значением 0.35 e\AA^{-3} в центре расстояния $Cr-Cr$.

На распределении валентной электронной плотности в плоскости (110) (температура 157 К) имеются следующие особенности (*рис. 3а*):

1. На линии $B-B$ расположен ковалентный максимум 0.78 e\AA^{-3} .
2. Максимум ЭП высотой 0.67 e\AA^{-3} наблюдается на расстоянии $\sim 0.5 \text{ \AA}$ над атомом B .
3. Вблизи атома металла имеется область положительной ЭП, вытянутая по оси Z , со значением 0.57 e\AA^{-3} в центре расстояния $Cr-Cr$.

На карте валентной электронной плотности в плоскости (002) при температуре 157 К (*рис. 3б*) на середине связи $B-B$ наблюдается максимум ЭП, вытянутый в направлении, перпендикулярном направлению связи.

Распределение деформационной электронной плотности при комнатной и низких температурах совпадают как по топологии, так и по численным значениям во всех областях за исключением остова атома хрома. При этом разница ЭП в областях химических связей не больше $2-3 \text{ \AA}$ ($\bar{\sigma} = 0.05 \text{ e\AA}^{-3}$ – средняя по объему элементарной ячейки ошибка ЭП).

На распределениях валентной плотности при трех температурах различия еще меньше. Все особенности распределения валентной плотности соответствуют особенностям деформационной плотности. Проведенный расчет ошибок ЭП и сопоставление результатов экспериментов при трех температурах свидетельствуют о достоверности и надежности полученных данных зарядового распределения.

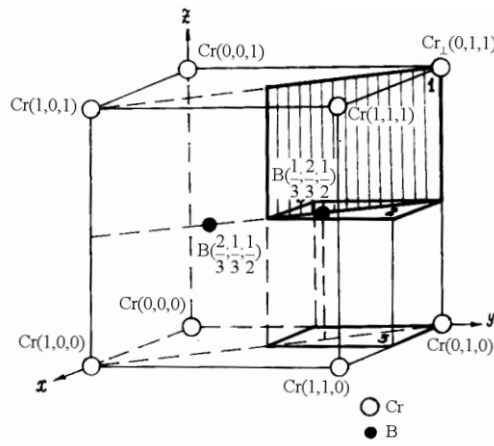


Рис. 1. Элементарная ячейка структуры типа $A1B_2$.

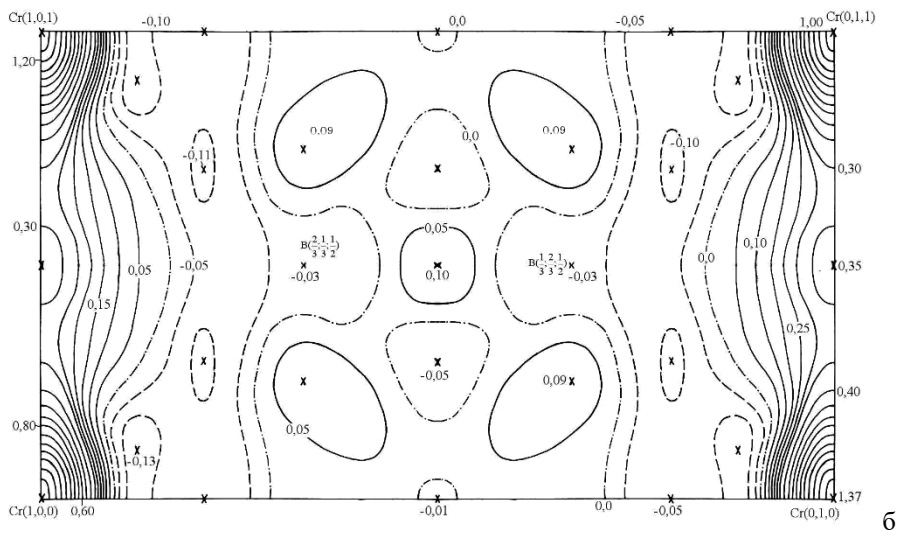
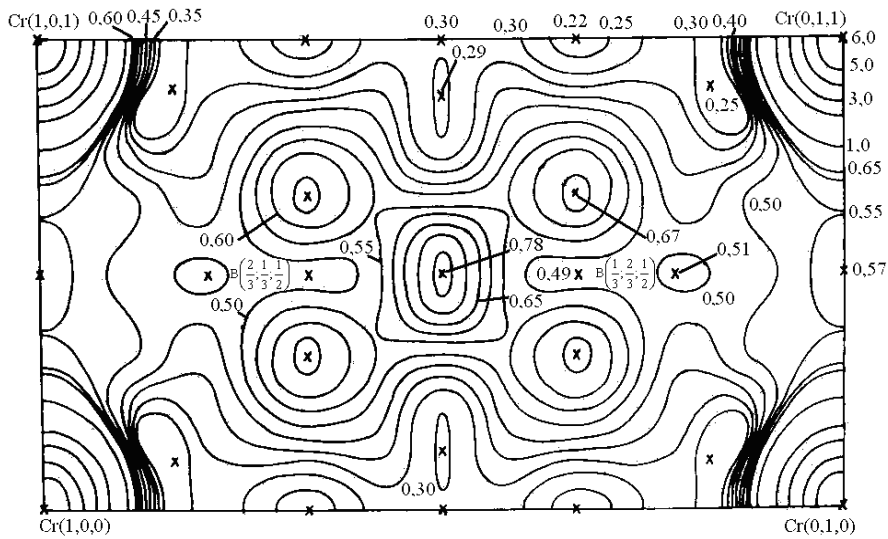


Рис. 2. Распределение экспериментальной деформационной плотности в плоскости (110) при 230 К.



(a)

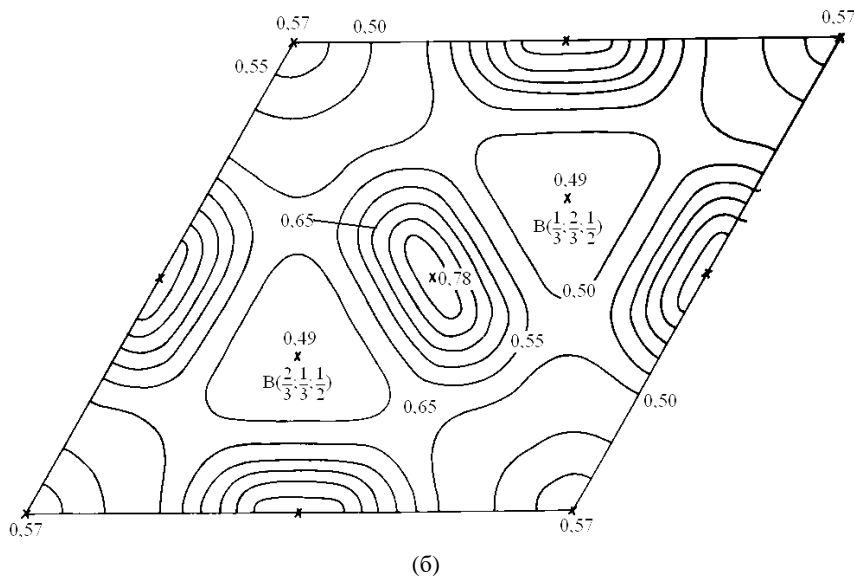


Рис. 3. Распределение экспериментальной валентной плотности: (а) в плоскости (110); (б) в плоскости (002) при 157 К.

Теоретические карты распределения электронной плотности

Рассчитано распределение электронной плотности $\rho(r)$ в CrB_2 на основе модифицированного статистического метода [30], в котором используется выражение, явно связывающее электронную плотность с внешним потенциалом. Используемый метод в некотором смысле объединяет два широко известных: малого потенциала (теория возмущений, простые металлы) и плавно меняющегося, но, возможно, не малого потенциала (статистический метод). Основным является предположение, что внешний потенциал можно представить в виде:

$$V(r) = V_1(r) + V_2(r), \tag{2}$$

где $V_1(r)$ – достаточно плавная функция, а $V_2(r)$ может считаться малой по сравнению с характерными электронными энергиями. В соответствии с (2) $\rho(r)$ представляется в виде: $\rho(r) = \rho_1(r) + \rho_2(r)$. В [16] показано, что

$$\rho_1(r) = \frac{\theta(\tilde{k}^2) \tilde{k}^3}{6\pi^2}, \tag{3}$$

$$\rho_2(r) = -\frac{\theta(\tilde{k}^2)}{4\pi^3} \int \frac{V_2(\tilde{r}') d\tilde{r}'}{|\tilde{r} - \tilde{r}'|} I_1(2\tilde{k}|\tilde{r} - \tilde{r}'|), \tag{4}$$

где $\tilde{k}^2(r) = k_F^2 - 2V_1(r)$, $\theta(x)$ – тета-функция. Выражение (3) полностью совпадает с выражением для теории Томаса-Ферми для $V_1(r)$, а (4) – с линейной теорией возмущений по $V_2(r)$, но с фермиевским импульсом, локально соответствующим $V_1(r)$.

Электронная плотность находилась как самосогласованное решение уравнений (3) и (4) в поле полного эффективного потенциала. Он складывается из внешнего потенциала $V(r)$, равного суперпозиции модельных псевдопотенциалов (о которых будет сказано ниже), потенциала кулоновского взаимодействия между электронами $V_c(g) = 4\pi/g^2 \rho(g)$ и обменно-корреляционного потенциала

$$V_{xc}(g) = -\int Q(\tilde{r} - \tilde{r}') \rho(\tilde{r}') d\tilde{r}', \tag{5}$$

где $Q(x) = \frac{9 (\sin x - x \cos x)^6}{2 x^2}$, $x = k/r - r'$. Преимущества такого выбора для $Q(x)$ были подробно рассмотрены в [31].

Так как используемый метод в своей основе не содержит подгоночных параметров, единственная неопределенность связана с выбором вида модельного псевдопотенциала. Выполнены расчеты ЭП для псевдопотенциалов Хейне-Абаренкова-Анималу (ХАА) и вида:

$$V(r) = -\frac{z}{r} \left(1 - e^{-\lambda r} (1 + \alpha r) \right). \quad (6)$$

Параметры λ и α из (6) выбирались так, чтобы генерируемая ими псевдоволновая функция была максимально близка к волновой функции нижайшего состояния соответствующего иона. Необходимые данные брались из результатов последовательного квантово-механического расчета – таблиц Клементи. Это дало для иона B^{+2} $\lambda = 4.97$; $\alpha = 21.28$; для Cr^{+3} $\lambda = 4.94$; $\alpha = 19.44$.

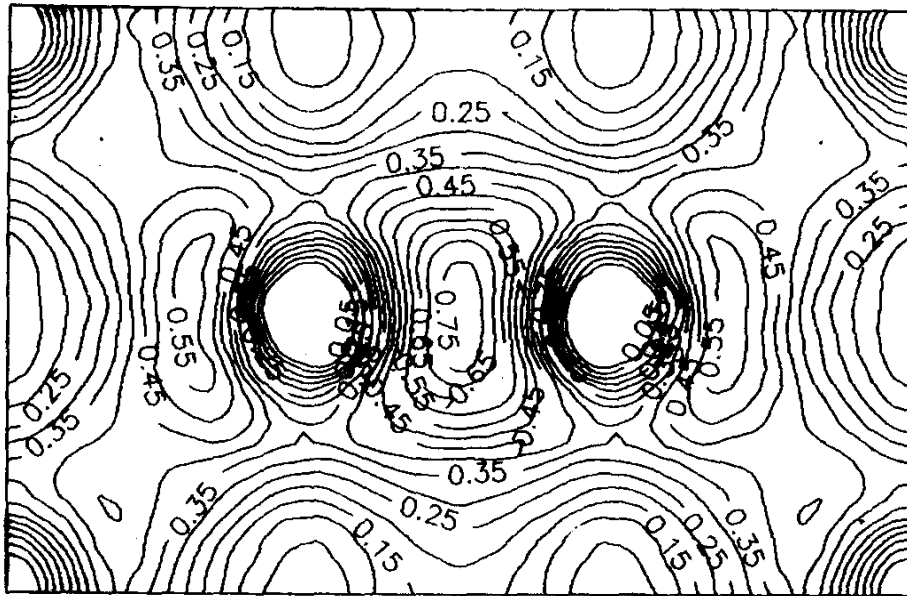
Результаты расчетов электронной плотности для псевдопотенциалов ХАА и типа (6) представлены картами РЭП на *рис. 4б, 5б* и *рис. 4а, 5а* соответственно. Сравнивая их, можно отметить достаточно хорошее совпадение как по топологии, так и по численным значениям во всех областях за исключением ионных остовов, что естественно для идеологии псевдопотенциала.

Расчет с псевдопотенциалом ХАА дает несколько меньший заряд в ковалентных максимумах (0.70 eA^{-3} на линии $B-B$ и 0.40 eA^{-3} на линии $B-Cr$) по сравнению с псевдопотенциалом типа (6) (0.78 eA^{-3} и 0.56 eA^{-3} соответственно), что достаточно хорошо соответствует экспериментальным значениям 0.78 eA^{-3} и 0.67 eA^{-3} (*рис. 3а*) для этих же максимумов.

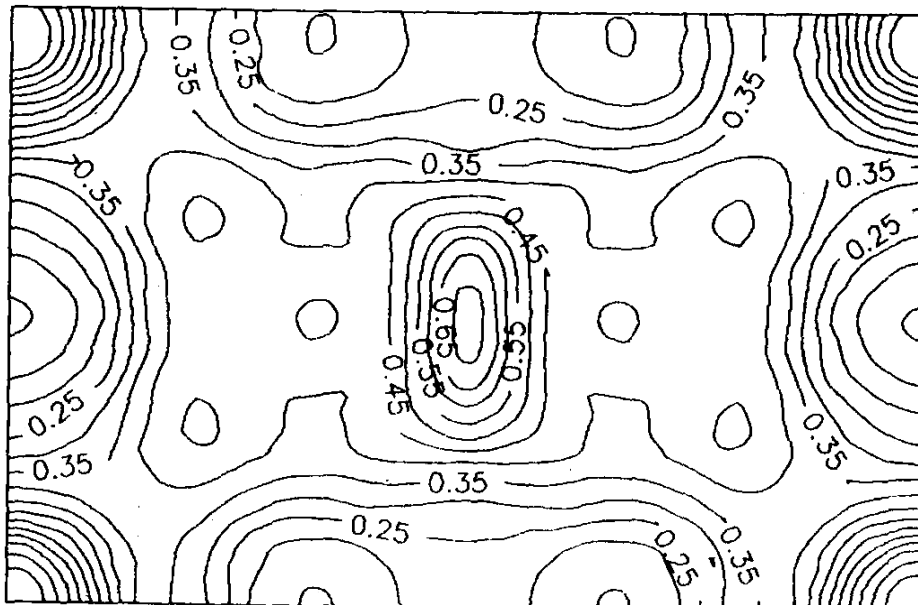
Существенное различие обеих теоретических карт от экспериментальных наблюдается на линии $Cr-Cr$: теория дает $0.10-0.15 \text{ eA}^{-3}$, эксперимент существенно больше – 0.57 eA^{-3} . И наоборот, наблюдаемый на экспериментальной карте *рис. 3а* четкий минимум в ближней области атома Cr (0.25 eA^{-3}) на обеих теоретических картах отсутствует. Кроме того, ковалентный максимум $B-Cr$ в расчетах оказывается строго на линии, соединяющей эти атомы, тогда как на экспериментальной карте он расположен на одной вертикали с атомом B . Эти различия, возможно, объясняются тем, что оба используемых псевдопотенциала являются нелокальными.

Более явно отличия между этими тремя картами проявляются, если из них вычесть плотность валентных электронов свободных атомов, то есть построить карты стандартной деформационной плотности (СДП). Для построения теоретических карт СДП атомные факторы (АФ) валентных электронов получались как разность между АФ всех оболочек нейтрального атома и АФ остовных оболочек того же нейтрального атома (а не АФ оболочек иона). Необходимые данные также брались из таблиц Клементи.

Карты СДП представлены в том же порядке, что и валентные, на *рис. 6-7*. Лучшее согласие теоретических и экспериментальных карт, вероятно, можно получить, если в первых картах учесть тепловое движение атомов или из вторых получить статические мультипольные электронные плотности.

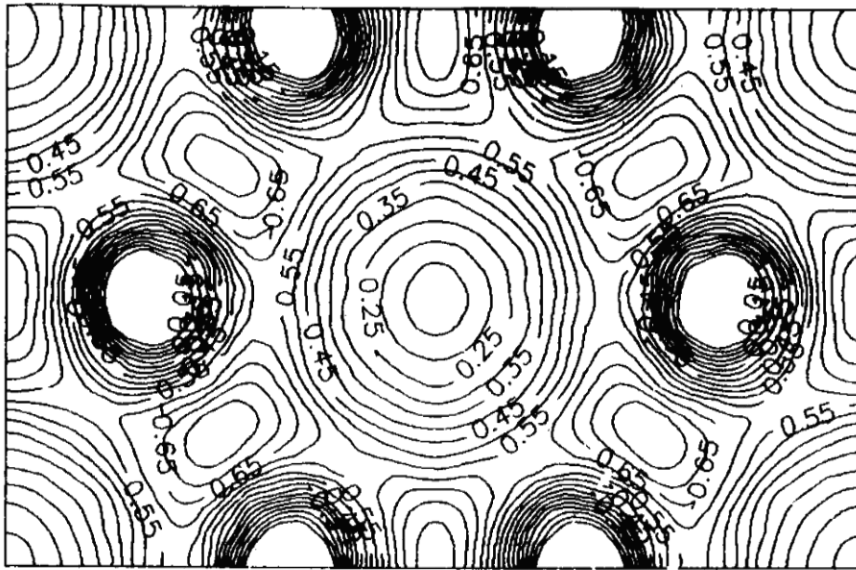


(a)

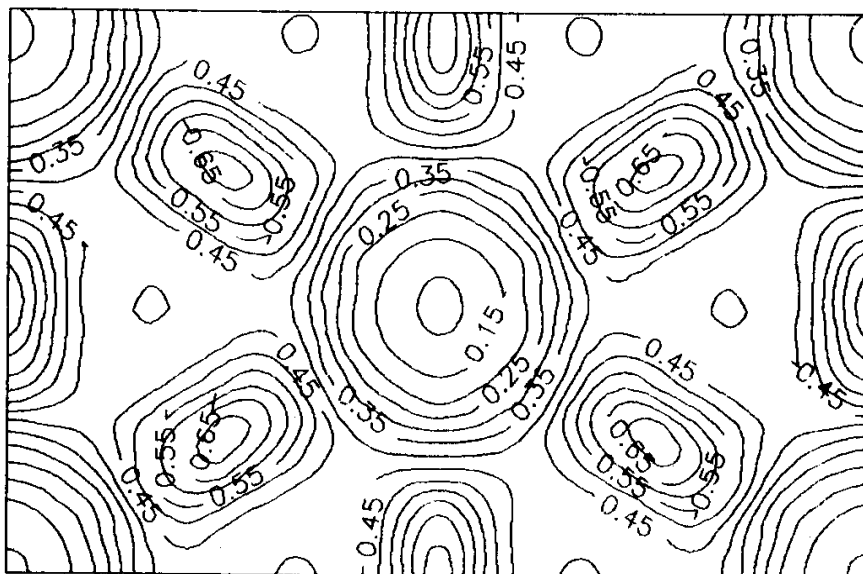


(б)

Рис. 4. Распределение теоретической валентной плотности в плоскости (110):
(а) рассчитанной для псевдопотенциала типа (6);
(б) для псевдопотенциала XAA.

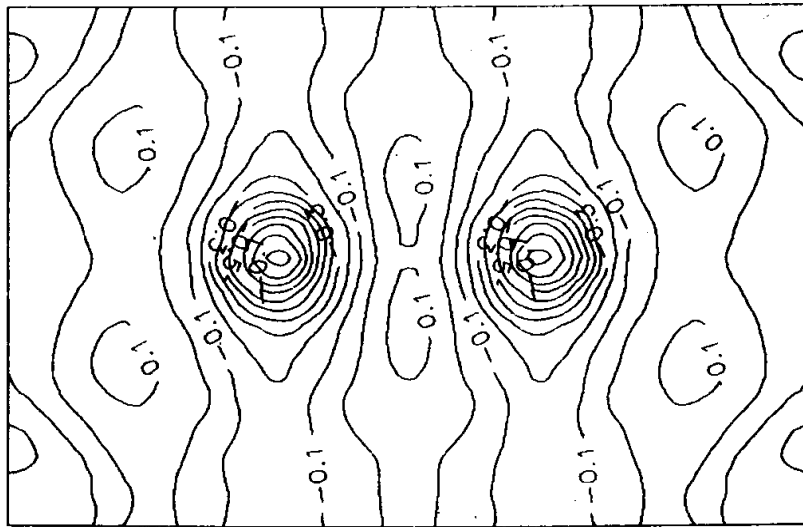


(a)

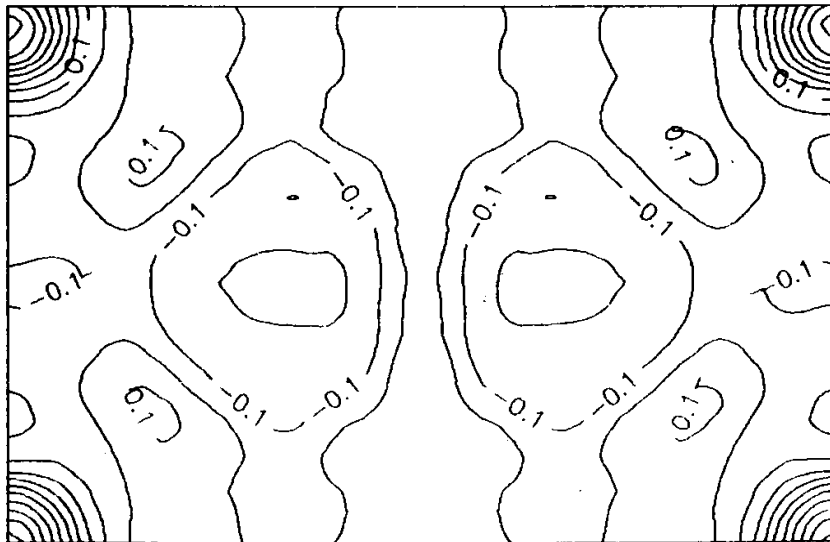


(б)

Рис. 5. Распределение теоретической валентной плотности в плоскости (002):
(а) рассчитанной для псевдопотенциала типа (6);
(б) для псевдопотенциала ХАА.

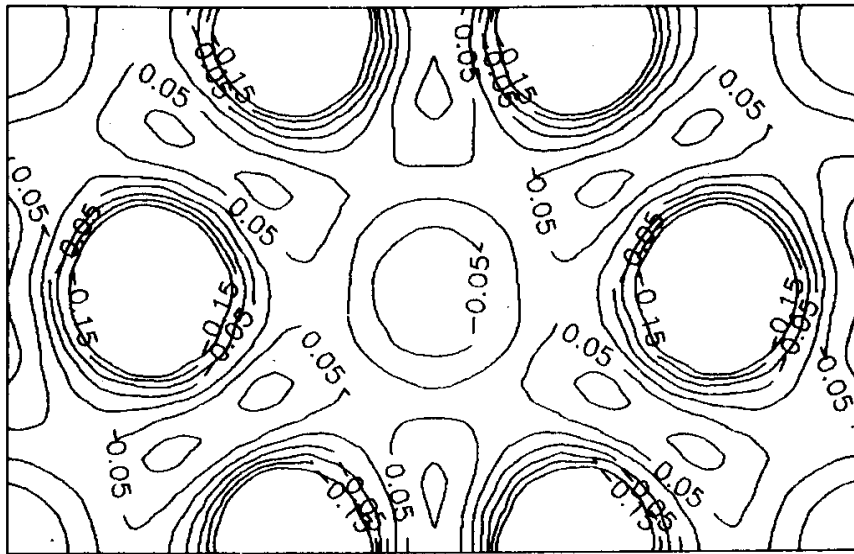


(a)

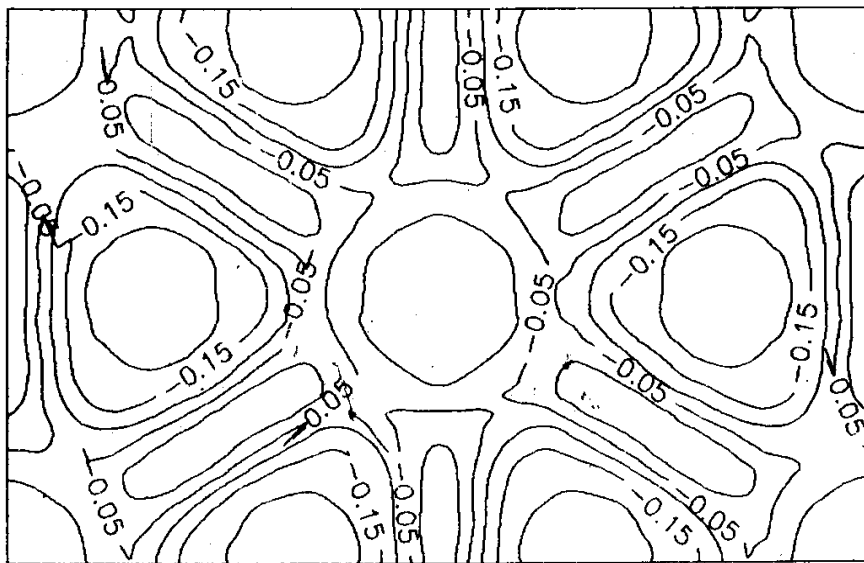


(б)

Рис. 6. Распределение теоретической деформационной плотности в плоскости (110): (а) рассчитанной для псевдопотенциала типа (6); (б) для псевдопотенциала ХАА.



(a)



(б)

Рис. 7. Распределение теоретической деформационной плотности в плоскости (002): (а) рассчитанной для псевдопотенциала типа (6); (б) для псевдопотенциала ХАА.

Заключение

В данной работе впервые построены теоретические и экспериментальные карты разностной электронной плотности в дибориде хрома при комнатной и низких температурах. Сравнение экспериментального и теоретического зарядового распределения показало их согласие в областях химической связи кроме различия на линии $Cr-Cr$.

Обнаруженные особенности РЭП указывают на квазислоистый характер электронной структуры. Для атомов бора получена высокая анизотропия тепловых колебаний 1.50, что свидетельствует о сильной ковалентной связи между ближайшими атомами бора. Этот факт подтверждается полученными картами экспериментального и теоретического РЭП. В слое бора связи существенно ковалентные sp^2 -типа с π -компонентой. Взаимодействие между слоями бора и металла имеет многоцентровый характер. В слое хрома присутствуют химические связи металлического типа. При образовании кристалла перенос заряда происходит от атомов хрома к атомам бора. В исследованном интервале температур не наблюдается перераспределения зарядовой плотности.

Высокая степень локализации s , p -состояний бора определяет решеточные свойства диборидов: высокую твердость, тугоплавкость, прочность при упругой и пластической деформациях. Полученные результаты могут быть использованы для синтеза сверхтвердых веществ и создания перспективных материалов техники.

ЛИТЕРАТУРА

1. Крутский Ю. Л., Черкасова Н. Ю., Гудыма Т. С. и др. Дибориды некоторых переходных металлов: свойства, области применения и методы получения. Ч. 1. Дибориды титана и ванадия (обзор) // Известия высших учебных заведений. Черная металлургия. 2021. Т. 64. №2. С. 149–164.
2. Крутский Ю. Л., Гудыма Т. С., Дюкова К. Д. и др. Дибориды некоторых переходных металлов: свойства, области применения и методы получения. Ч. 2. Дибориды хрома и циркония (обзор) // Известия высших учебных заведений. Черная Металлургия. 2021. №64(6). С. 395–412.
3. Скороходов Д. М., Басов С. С., Денисов В. А., Свиридов А. С. Исследование микротвердости боридных покрытий, полученных на стали 65Г из различных составов борировующих смесей // Технический сервис машин. 2021. №2(143). С. 144–150.
4. Ишков А. В., Кривочуров Н. Т., Мишустин Н. М. и др. Износостойкие боридные покрытия для почвообрабатывающих органов сельхозтехники // Вестник Алтайского гос. аграрного ун-та. 2010. №9(71). С. 71–75.
5. Кисель Ю. Е. Повышение долговечности деталей сельскохозяйственной техники электротермической обработкой композиционных электрохимических покрытий: автореф. ... докт. тех. наук. Саратов: Сарат. гос. аграр. ун-т им. Н. И. Вавилова, 2014. 37 с.
6. Rybkovskiy D. V., Kvashnin A. G., Kvashnina Y. A., Oganov A. R. Structure, Stability, and Mechanical Properties of Boron-Rich Mo–B Phases: A Computational Study // Journal of Physical Chemistry Letters. 2020. Vol. 11. Issue 7. P. 2393–2401.
7. Allahyari Z., Oganov A. R. Coevolutionary search for optimal materials in the space of all possible compounds // Computational Materials. 2020. Vol. 6. No. 55. P. 1–10.
8. Nagamatsu J., Nakagawa N., Muranaka T. et al. Superconductivity at 39 K in magnesium diboride // Nature. 2001. Vol. 410. P. 63–64.
9. Langmann J., Kepenci H., Eickerling G. et al. Experimental X-ray Charge-Density Studies – A Suitable Probe for Superconductivity? A Case Study on MgB_2 // Journal of Physical Chemistry A. 2022. No. 126. P. 8494–8507.
10. Криницина Т. П., Кузнецова Е. И., Дегтярева М. В., Блинова Ю. В. Сверхпроводники на основе MgB_2 : структура и свойства // Физика металлов и металловедение. 2021. Т. 122. №12. С. 1271–1295.
11. Longji Dadiel J., Muralidhar M., Murakami M. Improved superconducting performance of Ag-added nano-diamond doped MgB_2 // Superconductivity and Particle Accelerators. 2018. Art. 1105401.
12. Bhagurkar A. G., Yamamoto A., Wang L. et al. High Trapped Fields in C-doped MgB_2 Bulk Superconductors Fabricated by Infiltration and Growth Process // Scientific Reports. 2018. Vol. 8. P. 13320.
13. Li W., Kang J., Fu S. et al. Rare earth doping effects on superconducting properties of MgB_2 : A review // Journal of Rare Earths. 2019. Vol. 37. P. 124–133.
14. Dyson J., Rinaldi D., Barucca G. et al. Flux Pinning in Y- and Ag-Doped MgB_2 // Advanced Materials Physical Chemistry. 2015. Vol. 5. No. 10. P. 426–438.
15. Magnusson N., Eliassen J. C., Abrahamsen A. B. et al. Fabrication of a Scaled MgB_2 Racetrack Demonstrator Pole for a 10-MW Direct-Drive Wind Turbine Generator // IEEE Transactions on Applied Superconductivity. 2018. Vol. 28. No. 4. P. 5207105.
16. Maekawa K., Takeda M., Namaura T. et al. First experiment on liquid hydrogen transportation by ship inside Osaka bay // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2017. Vol. 278. Art. 012066. P. 1–8.
17. Wang D., Xi D., Wang Q. et al. Fabrication of (6+1)-Structure Superconducting Cable Based on 30-Core MgB_2 Superconducting Wire // IEEE Transactions on Applied Superconductivity. 2020. Vol. 30. No. 4. P. 6200205.
18. Bruzek C. E., Ballarino A., Escamez G. et al. Cable conductor design for the high-power MgB_2 DC superconducting cable project within BEST PATHS // IEEE Transactions on Applied Superconductivity. 2017. Vol. 30. No. 4. P. 1–5.
19. Abdyukhanov I. M., Tsapleva A. S., Borisov A. V. et al. Effect of Synthesis Conditions on the Structure and Phase Composition of Magnesium Diboride // Inorganic Materials: Applied Research. 2019. No. 1. P. 162–167.
20. Самбуева С. Р. Исследование электронного строения износостойких боридных покрытий для упрочнения деталей сельскохозяйственной техники // Вестник БГСХА им. В. Р. Филиппова. 2023. №2(71). С. 157–169.
21. Китайгородский А. И. Рентгеноструктурный анализ. М.: Книга по Требованию, 2012. 652 с.
22. Илюшин А. С., Орешко А. П. Дифракционный структурный анализ в 2-х ч. Ч. 1. М.: Юрайт, 2020. 327 с.
23. Илюшин А. С., Орешко А. П. Дифракционный структурный анализ в 2-х ч. Ч. 2. М.: Юрайт, 2020. 299 с.
24. Анисович А. Г. Рентгеноструктурный анализ в практических вопросах материаловедения. Минск: Белорусская наука, 2017. 207 с.
25. Самбуева С. Р., Кодесс Б. Н. Рентгенодифракционное исследование боридов переходных металлов // Вестник Бурятского гос. ун-та. 2015. Вып. 3/2015. С. 12–17.
26. Носик В. Л. Теоретические аспекты взаимодействия рентгеновского излучения с кристаллами с искаженной решеткой: автореф. ... докт. физ.-мат. наук. М.: Нац. исслед. центр «Курчатовский институт», 2015. 22 с.
27. Винтайкин Б. Е. Физика твердого тела. М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2009. 360 с.
28. Самбуева С. Р., Кодесс Б. Н. Структурные исследования монокристаллов $\langle Mo_2B_5 \rangle$ // Вестник БГСХА им. В. Р. Филиппова. 2015. №2(39). С. 154–160.

29. Самбуева С. Р., Кодесс Б. Н. Распределение электронной плотности в дибориде хрома // Мат-лы Первого Российского кристаллографического конгресса «От конвергенции наук к природоподобным технологиям», 21–26 ноября 2016 г., Москва. М., СПб: НП-Принт, 2016. С. 335.
30. Резник И. М. Частично-локальное приближение для электронной плотности кристаллов // Физика твердого тела. 1988. Т. 30. №11. С. 3496–3498.
31. Разаренова Л. К., Резник И. М. О приближении обменного потенциала полупроводника // Физика и техника полупроводников. 1986. Т. 20. №5. С. 947–950.

Поступила в редакцию 01.03.2024 г.

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2024.1.5

**THEORETICAL AND EXPERIMENTAL ELECTRON DENSITY DISTRIBUTION
IN CHROMIUM DIBORIDE**© **S. R. Sambueva***Buryat State Academy of Agriculture named after V. Philippov
8 Pushkin St., 670034 Ulan-Ude, Russia.**Email: sambueva@mail.ru.*

The aim of the work is theoretical and experimental study of CrB_2 electronic structure. The distributions of deformation and valence electron density (EDD) have been constructed from the data of precision X-ray diffraction experiments at room and low temperatures. The theoretical EDD was calculated based on a modified statistical method. The EDD for the two types of pseudopotential show a reasonably good agreement in both topology and numerical values in all regions except for the ionic cores. Comparison of the experimental and theoretical distributions showed their agreement in the chemical bonding regions except for the difference at the $Cr-Cr$ line. The detected features of EDD and atoms thermal motion indicate the quasi-layer character of the electronic structure. The high degree of localization of boron s , p -states determines the lattice properties of diborides. The results obtained can be useful for the synthesis of superhard substances and the creation of promising technical materials.

Keywords: electron density distribution; precision X-ray diffraction method; chromium diboride.

Received 01.03.2024.