

УДК 669.017.16:639.2:620.18

К ВОПРОСУ О НАСЛЕДОВАНИИ БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА ПРИ ПЛАВЛЕНИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОВ

В.И. Большаков д. т. н., проф., Г.М. Воробьев., д. ф-м. н., проф.,

Л.С. Кривуша к. ф-м. н., доц., Н.А. Ротт асп.

Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры, г. Днепротровск

Постановка проблемы в общем виде. Вопрос о наследовании ближнего порядка при плавлении металлических кристаллов является дискуссионным. Одним из первых эту проблему изучал выдающийся экспериментатор Данилов В.И. [1, 2]. Гипотезу о наследовании ближнего порядка при плавлении кристаллов, сопровождающееся исчезновением дальнего порядка впервые высказал Френкель Я.И. [3]. Аналогичных представлений придерживались также авторы работы [4].

Анализ последних исследований. В последнее время представления [1-4] подвергаются критике, в частности, в работе Середы Б.П. [5] отмечается, что такие представления основываются «не на результатах эксперимента, а на различных расчетах и логических построениях». По мнению Арсентьева П.П. и Коледова Л.А. [6] при плавлении различных металлов резко различающихся по структуре и свойствам в твердом состоянии происходит нивелировка характера расположения атомов. После плавления отчетливо выраженного количественного различия в строении металлов не наблюдается. Жидкие металлы имеют качественное отличие от кристаллов в расположение атомов.

Постановка задачи в общем виде. В связи с этим в настоящей работе проводили сопоставление экспериментальной функции атомного распределения жидкого золота, приведенной в [5]. Эта функция показана на рис.1. На этом рисунке также приведены значения функции атомного распределения кристаллического золота в виде штрихов с небольшой площадкой на вершине. Ордината этой вершины численно пропорциональна количеству атомов на каждой координационной сфере кристаллического золота.

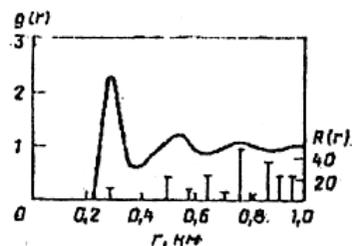


Рис. 1. Относительная парная функция радиального распределения атомов жидкого золота

Как видно из рис.1, первый и второй штрих в порядке возрастания r , где r – расстояние от произвольно выбранного атома, совпадают с первым и вторым максимумами функции радиального распределения атомов. И если первый штрих точно совпадает с расположением первого максимума жидкого золота, то второй штрих немного сдвинут в сторону меньших значений r . Из этого рисунка, как будто бы, следует, что в пределах первой и второй координационных сфер порядок расположения атомов в кристаллическом и жидком золоте одинаковы, то есть этот рисунок, как будто бы, подтверждает гипотезу Френкеля о наследовании ближнего порядка при плавлении кристаллов жидкого золота. Однако, как показали детальные расчеты функции атомного распределения кристаллического золота на штриховой диаграмме (рис.1) пропущен штрих, соответствующий второй координационной сфере кристаллического золота. В действительности, функция атомного распределения кристаллического золота без пропуска штриха второй координационной сферы показана на рис.2.

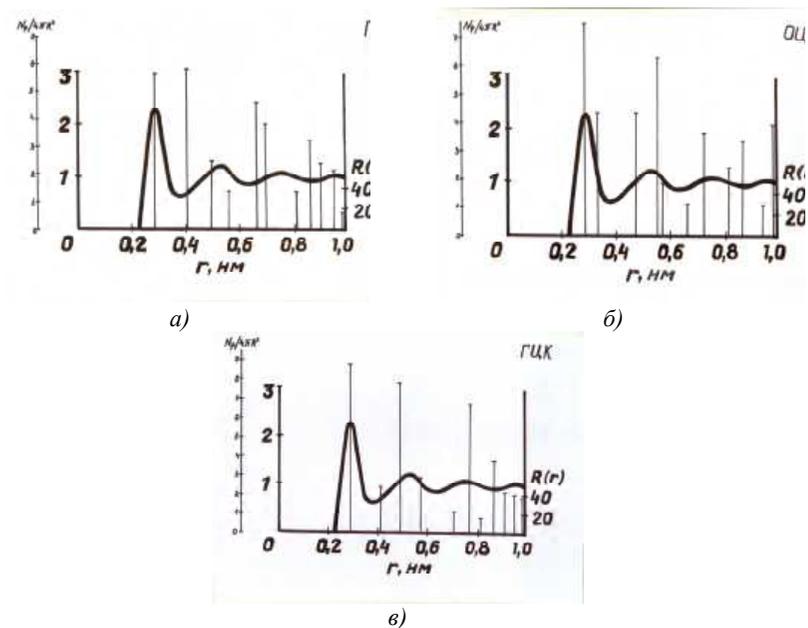


Рис. 2. Функция атомного распределения
а) – для простой кубической решетки;
б) – для о.ц.к. решетки;
в) – для г.ц.к. решетки.

Согласно этого рисунка, вторая координационная сфера кристаллического золота совпадает с минимумом, соседствующим с первым

максимумом функции атомного распределения жидкого золота. Из-за этого вывод о наследовании ближнего порядка при плавлении кристаллов золота не подтверждается. И в тоже время наилучшие совпадения максимумов функций атомного распределения жидкого золота наблюдается для штриховой диаграммы о.ц.к. решетки, для которой ближайшее расстояние между атомами приравнялось к такому же расстоянию кристаллического золота, что можно видеть на рис.2 а, б, в. Функции атомного распределения, представленные на рис.2 а, б, в штриховыми гистограммами, рассчитывали следующим образом.

Для простой решетки функция атомного распределения определяется числом перестановок величины n_1, n_2 и n_3 в формуле

$$r = a\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}, \quad (1)$$

где n_1, n_2, n_3 – целые числа, положительные и отрицательные, а также нуль. Количество атомов равно удаленных от произвольно выбранного атома на расстояние r в соответствие с формулой (1) представлено в таблице 1.

Таблица 1

Количество атомов равноудаленное от произвольно выбранного атома на расстоянии r для кристаллов с простой кубической решеткой

R	$n_1 n_2 n_3$	N_p	$N_p/4\pi R^2$
0.2875	100	6	5.7764
0.4066	110	12	5.7765
0.498	111	8	2.5673
0.575	200	6	1.4441
0.6429	210	24	4.6213
0.7042	211	24	3.851
0.8132	220	12	1.4441
0.8625	221 300	30	3.2092
0.9092	310	24	2.3106
0.9535	311	24	2.1005
0.996	222	8	0.6418

Решетку о.ц.к. можно рассматривать как две простые решетки, вставленные друг в друга, начала которых имеют координаты (000) и $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ по отношению к первой решетке. Для подсчета количества атомов, находящихся на координационных сферах о.ц.к. решетки для каждой тройки цифр n_1, n_2 и n_3 простой решетки, которые являются координатами атомов первой решетки с началом координат (000) добавляли цифры $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$. Результаты этих расчетов приведены в таблице 2.

Таблица 2

Количество атомов равноудаленное от произвольно выбранного атома на расстоянии r для кристаллов о.ц.к. решеткой

R	$n_1 n_2 n_3$	N_p	$N_p/4\pi R^2$
0,29	$\frac{3}{2}\frac{1}{2}0$	8	7,57
0,332	$\frac{3}{2}\frac{3}{2}0$	6	4,33
0,47	$\frac{3}{2}\frac{3}{2}1$	12	4,33
0,55	$\frac{5}{2}\frac{1}{2}0$	24	6,32
0,57	$\frac{5}{2}\frac{3}{2}0$	8	1,96
0,66	$\frac{5}{2}\frac{3}{2}1$	6	1,1
0,72	$\frac{5}{2}\frac{5}{2}0$	24	3,69
0,81	$\frac{5}{2}\frac{5}{2}1$ $\frac{7}{2}\frac{1}{2}0$	24	2,91
0,86	$\frac{7}{2}\frac{3}{2}0$	32	3,44
0,94	$\frac{7}{2}\frac{3}{2}1$	12	1,08
0,98	$\frac{5}{2}\frac{5}{2}2$	48	3,98

По табл.1 и 2 были построены штрих-диаграммы на рис. 2, а и 2,б, соответственно.

Для построения штрих-диаграмм г.ц.к. решетки к координатам атомов простой решетки (табл. 1) n_1, n_2 и n_3 добавляли координаты $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$, $(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$ и $(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$, и зависимость числа атомов от расстояния r до начала координат приведена в таблице 3.

Таблица 3

Количество атомов равноудаленное от произвольно выбранного атома на расстоянии r для кристаллов с г.ц.к. решеткой

R	$n_1 n_2 n_3$	N_p	$N_p/4\pi R^2$
0,289	$\frac{3}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$	9	8,575
0,4066	$\frac{3}{2} \frac{3}{2} \frac{1}{2}$	6	2,888
0,496	$\frac{3}{2} \frac{3}{2} \frac{3}{2}$	24	7,763
0,573	$\frac{5}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$	12	2,908
0,642	$\frac{5}{2} \frac{3}{2} \frac{1}{2}$	24	4,634
0,703	$\frac{5}{2} \frac{3}{2} \frac{3}{2}$	8	1,288
0,76	$\frac{5}{2} \frac{5}{2} \frac{1}{2}$	48	6,613
0,813	$\frac{5}{2} \frac{5}{2} \frac{3}{2}$ $\frac{7}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$	6	0,722
0,862	$\frac{7}{2} \frac{3}{2} \frac{1}{2}$	36	3,855
0,911	$\frac{7}{2} \frac{3}{2} \frac{3}{2}$	24	2,301
0,956	$\frac{5}{2} \frac{5}{2} \frac{5}{2}$	24	2,09

Полученный в нашей работе результат наилучшего совпадения ближнего порядка расплавленного золота с о.ц.к. решеткой совпадает с результатами, представленными на рис. 3, взятом из книги Ч. Баррета «Структура металлов» для жидкого Na [7].

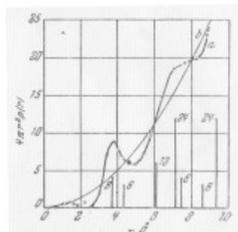


Рис. 3. Функция атомного распределения для жидкого натрия

Выводы. Из рис.2 а, б, в можно сделать компромиссное заключение, учитывая дискуссионность рассматриваемой проблемы.

При плавлении металлических кристаллов ближний порядок не наследуется за исключением, может быть, плавления металлических кристаллов с о.ц.к. решеткой.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Данилов В.И., Радченко А.В. Рентгеноструктурные исследования жидких металлов. // Физика твердого тела. – 1937.-12 С.756.
2. Данилов В.И. Структура и кристаллизация жидкостей. – Киев: АН УССР, 1950. – 392 с.
3. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей, М.-Я., Изд-во АН ССР, 1945.-С. 414.
4. Романова А.В., Мельник Б.А. Рентгеноструктурные исследования расплавов на основе никеля // Докл. АН СССР. – 1969, 159. - №2. – С. 294.
5. Металлические расплавы и их свойства./ П.П. Арсентьев, Л.А. Коледов. – М.: «Металлургия», 1976, С.-375.
6. Ч.С. Барретт. Структура металлов, Изд. первое. Пер. под ред. Я.С. Уманского., Изд-во лит-ры по ч. и цв. металлургии, М., 1948, С.-677.

УДК 669.017.16:639.2:620.18

МОЗАИЧНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ И КЛАСТЕРНАЯ МОДЕЛЬ ЖИДКОСТИ

*В.И. Большаков д.т.н., проф., Г.М. Воробьев д.ф-м.н., проф.,
Л.С. Кривуша к. ф-м. н., доц., Н.А. Ротт асп.*

*Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры,
г. Днепропетровск*

Постановка проблемы в общем виде. В идеальной кристаллической решетке, которая получается параллельным переносом элементарной ячейки вдоль трех направлений, исходящих из одной точки параллельно ребрам элементарной ячейки, плоскости, проходящие через атомы, параллельны. В реальных кристаллах такая параллельность если и наблюдается, то крайне редко. Согласно многочисленным рентгеновским исследованиям [1] реальные кристаллы состоят из блоков, повернутых по отношению друг к другу на небольшой угол (до нескольких градусов). В пределах блоков атомные плоскости практически параллельны. Согласно работам [2], измельчение блоков мозаики металлических кристаллов является важным фактором их упрочнения.

Анализ последних исследований. Мозаичность кристаллов была доказана различными рентгенографическими методами, в частности путём измерения углов отражения.