

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].

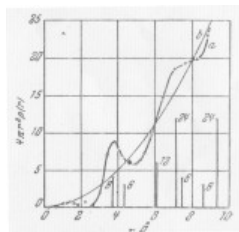


Рис. 3. Функция атомного распределения для жидкого натрия

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.

Идеальный кристалл должен давать дифракционные линии шириной от 3 до 6 дуговых секунд, что наблюдается на отборных образцах алмаза, кварца и кальцита. Для большинства кристаллов эта ширина составляет несколько сот секунд. В металлах наблюдали следующее значение: вольфрам – 360 сек, железо – 840 сек, никель – 1500 сек, алюминий – 1500 сек [1].

Очень четко мозаичность кристаллов проявляется при измерениях интенсивности отражений от реальных кристаллов, где проявляется эффект экстинкции, который ведет к сильному уменьшению первых дифракционных максимумов с увеличением среднего размера блока мозаики. Опытным путем установлено, что угол мозаичности кристаллов, т.е. средний угол разворота соседних блоков возрастает с увеличением скорости роста кристаллов, а также с увеличением количества примесей [3].

Однако, до настоящего времени отсутствует механизм образования мозаичности кристаллов, и, в частности, металлических, в процессе их кристаллизации из жидких расплавов.

Поэтому **целью настоящей работы** была разработка возможного механизма возникновения мозаичности кристаллов в процессе кристаллизации жидкости.

Выделение нерешенных ранее частей. Классическая модель гомогенной кристаллизации жидкости [4], гетерогенного образования зародышей и атомной теории роста кристаллов из жидкостей не рассматривают возможности образования несовершенств кристаллического строения типа мозаичной структуры.

Поэтому в настоящей работе сделана попытка использования кластерной модели жидкости для рассмотрения возможных механизмов образования дислокаций, исходя из определения блока мозаики кристаллов как ячейки трёхмерной сетки дислокаций.

При такой трактовке блоков углы поворота между соседними блоками обеспечиваются дислокациями. В пределах ячейки трёхмерной сетки дислокаций атомные плоскости должны быть параллельными.

Кластерная модель жидкости еще не получила достаточно широкого признания [5, 6]. Более того, нет четкого определения понятия «кластер жидкости» – выдвигается явно физически неоправданное определение, как частицы кристаллов, на которые они распадаются под действием внутреннего давления газа вакансий при плавлении [5]. (Вакансии не могут создавать давление, поскольку их масса равна нулю.)

Поэтому, чтобы исключить трактование кластерной модели как некое двухфазное состояние, в настоящей работе использовали понятие кластера жидкости как субмикроболасты жидкости, в пределах которой тепловые колебания атомов согласованы. При таком определении кластера соприкосновение двух кластеров жидкости может приводить к постепенному уменьшению амплитуды колебаний атомов в случае одинаковой частоты с наибольшей разностью фаз. В этих условиях при уменьшении скорости

колеблющихся частиц наблюдаемой при приближении к максимуму потенциальной энергии может реализоваться ситуация, когда скорости движения колеблющихся атомов в обоих кластерах будут равны, но противоположны по знаку, и сравнительно небольшие по абсолютной величине, т.е. значительно меньше, чем в случае, когда вся энергия колебательного движения будет кинетической. В этом случае атомы в обоих кластерах после взаимодействия колеблющихся атомов будут иметь меньшую амплитуду колебаний. Уменьшения амплитуды колебаний равносильно уменьшению их температуры. Таким образом, при соприкосновении кластеров может наблюдаться местное переохлаждение жидкости, и автоматически могут возникнуть условия для превращения соприкасающихся атомов в зародыши кристаллизации с отводом тепла, выделяющемся при кристаллизации электрическим газом и внешней поверхностью жидкости.

Если кластеры представлять как прямоугольный параллелепипед, то при их соприкосновении может реализоваться два основных варианта расположения, которые соответствуют границам наклона и кручения (рис. 1 а и 1 б).

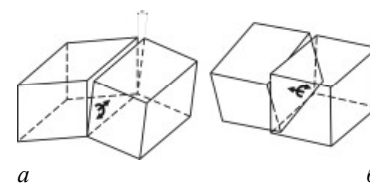


Рис. 1. Границы наклона (а) и скручивания (б)

На рис. 2 а и б показаны основные типы дислокаций: краевой и винтовой.

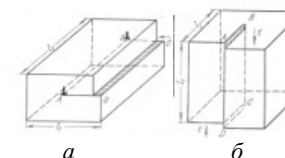


Рис. 2. Основные типы дислокаций: краевая (а) и винтовая (б) [7]

На рис. 3 последовательно показано как границы кручения двух кластеров могут перестраиваться в винтовую дислокацию за счет весьма сильных тепловых колебаний атомов вблизи точки кристаллизации жидкости.

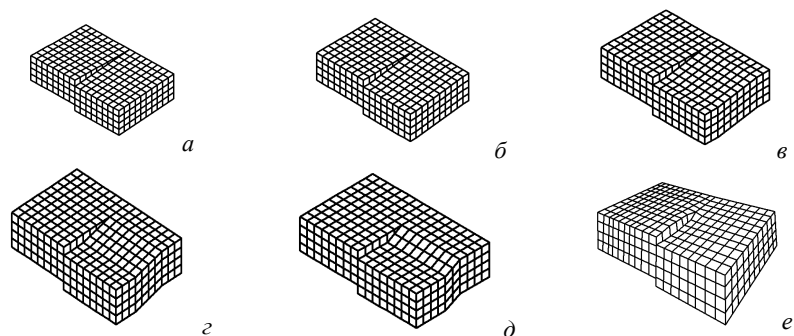


Рис. 3. Поэтапна схема образования винтовой дислокации

На рис. 4 последовательно показано как по границе двух кластеров образуется краевая дислокацию за счет весьма сильных тепловых колебаний атомов вблизи точки кристаллизации жидкости.

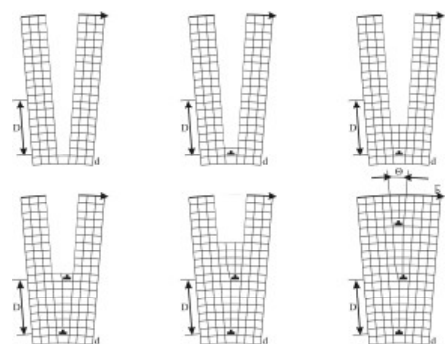


Рис. 4. Поэтапна схема образования краевой дислокации

Выводы

1. Предложен механизм формирования зародышей кристаллизации при соприкосновении двух кластеров, в которых атомы колеблются согласовано с одинаковой частотой и небольшой разностью фаз.

2. Показано, что при формировании таких зародышей на границе кручения по плоскости соприкосновения двух кластеров может образоваться винтовая дислокация, а по границе наклона краевые дислокации.

3. Поскольку при таком механизме образования зародышей кристаллизации не требуется очень больших переохлаждений, вытекающих из классической теории гомогенной кристаллизации, то предложенным механизмом образования дислокаций может возникнуть трехмерная сетка дислокаций, определяющая мозаичности кристаллов.

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Барретт Ч.С. Структура металлов, Изд. первое. Пер. под ред. Я.С. Уманского., Изд-во лит-ры по ч. и цв. металлургии, М., 1948. – 677с.
2. Воробьев Г.М. Анализ изменений интенсивности и ширины рентгеновских интерференционных линий сплавов Fe-Co при деформации // Известия ВУЗов. Черная металлургия. – 1959. – №9. – с. 101-110.
3. Гогоберидзе Д.Б. Некоторые объёмные дефекты кристаллических металлов и результаты их изучения, Ленинград, ЛНГУ, 1952. – 196 с.
4. Уманский Я.С., Скаков Ю.А. Физика металлов и сплавов: Учебник для вузов. – М.: Атомиздат, 1978. – 325 с.
5. Гаврилин В.И. Плавление и кристаллизация металлов и сплавов/ Владим. гос.ун-т. Владимир, 2000. – 260с.
6. Серета Б.П. Теорія будови рідкого, кристалічного та аморфного стану речовини. Учебний посібник з грифом МОНУ/ Запоріжжя: ЗДІА, 2008. – 326 с.
7. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов: Учебное пособие для вузов. М.: Металлургия, 1983. – 232 с.

УДК 519.21

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ОСНОВНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КАЧЕСТВА ЦЕЛЕВОГО ПРОДУКТА НА СТАДИИ ЕГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ

В.И. Большаков д.т.н., проф., Ю.И. Дубров д.т.н., проф., Е.Ю. Жевтило студ. Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры, г. Днепропетровск

Согласно известному постулату теории катастроф, для сложных систем, относительно малые изменения одного из определяющих параметров могут привести систему к «катастрофе» [1]. К сложным системам следует, прежде всего, отнести системы с относительно большим числом переменных, сильно взаимосвязанных между собой, часть из которых может изменяться случайным или непредсказуемым образом. До настоящего времени, предсказания подобных явлений базировались в основном на специально поставленных экспериментах, что приводило к относительно большим временным и материальным затратам. Во избежание этого, нами предлагается применение эмпирического прогнозирования, базирующегося на информации, являющейся откликами экспертов¹, на поставленные по специально сформированному плану вопросы. В качестве плана, по которому формируются вопросы к экспертам, предлагается рассматривать строки матрицы планирования [2], каждая из которых, представляет исходные данные для проведения экспертом мысленного опыта² с предсказанием им результатов этого опыта, например, в виде численного значения какого-либо механического свойства присущего исследуемому металлу. Такой подход позволяет получать гипотетические

¹ Специалистов в заданной предметной области.

² Например, в каждой строке матрицы указывается процентное содержание компонент металла и технологический режим его производства.