

НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ КЛАСТЕРНОЙ МОДЕЛИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ

В.Б. Деев, С.А. Цецорина, И.Ф. Селянин, О.Г. Приходько

Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия

Известно, что различные внешние воздействия на металлические расплавы приводят к изменению их структурного состояния. Оптимизация режимов внешних воздействий невозможна без расчета параметров, ответственных за структурные перестройки в расплавах.

В соответствии с кластерной моделью жидких расплавов основными структурными составляющими жидкости считаются отдельные разобщенные кластеры, окруженные трехмерной сеткой разупорядоченной зоны, обладающей хаотической атомной структурой. Внутренняя атомная структура кластеров близка к структуре исходного твердого тела. Характерный размер кластера ($r_{кл}$) имеет нанопорядок, который не превышает размеры критического зародыша при дальнейшей кристаллизации расплава. По данной модели плавление сопровождается распадом твердого тела на кластеры, кристаллизация – ассоциацией кластеров в зародыши и далее в кристаллы.

Кластеры, как твердотельные образования имеют зонную структуру электронного энергетического спектра. На рисунке 1 показана условная зонная схема трех взаимодействующих объектов, возникающих при плавлении и кристаллизации.

Работа выхода электрона из конденсированной фазы определяется соотношением:

$$W = e\phi = V_0 - \bar{E}_f,$$

где V_0 , \bar{E}_f – минимальная потенциальная энергия и энергия Ферми электронов, соответственно.

В модели свободных электронов

$$\bar{E}_f = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3N}{8\pi V} \right)^{2/3} \quad (1)$$

где m – масса электрона; h – постоянная Планка; N , V – число электронов в кг-моле металла и его объем.

При плавлении металлических сплавов объем увеличивается на ΔV , следовательно, средняя работа выхода электрона из расплава с учетом (1) также увеличивается. Раз-

ность работ выхода $\Delta \bar{W}_{ТЖ} = \bar{W}_T - \bar{W}_Ж$ равна при $V_0^Ж = V_0^T$

$$\Delta \bar{W}_{ТЖ} = e(\phi_T - \phi_Ж) = -(E_f^T - E_f^Ж) = -\frac{h^2}{2m} \left(\frac{3N}{8\pi} \right)^{2/3} \left[\left(\frac{1}{V} \right)^{2/3} - \left(\frac{1}{V+\Delta V} \right)^{2/3} \right], \quad (2)$$

где ΔV – изменение объема при плавлении.

Между кластерами имеются зазоры (Δr), куда попадают свободные атомы после разрыва связей с поверхностью кластера. В работе [4] по кластерной модели определена относительная величина объема разупорядоченной зоны (V_P) по соотношению

$$V_P = \frac{3\Delta r}{2r_{кл} + \Delta r} \cdot 100\% \quad (3)$$

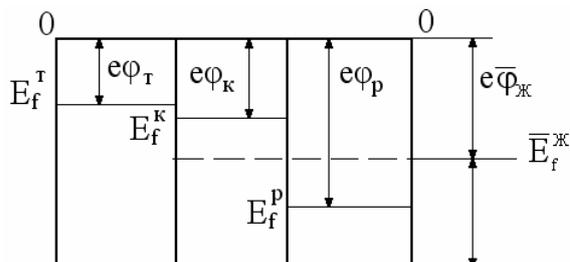


Рисунок 1 – Зонная схема взаимодействующих твердого кристалла (индекс «т»), кластера жидкости (индекс «к»), разупорядоченной зоны жидкости (индекс «р»): E_f – уровень Ферми; $e\phi$ – работа выхода электрона; $\bar{E}_f^Ж$ – средний уровень Ферми жидкости; $e\phi_Ж$ – средняя работа выхода электрона из жидкости

Следуя идеологии кластерной модели, необходимо определить вместо числа разорванных связей число (n) полностью свободных атомов расплава, которые находятся в межкластерном пространстве. Их относительная доля (g_n) определяется из простого соотношения

$$\frac{n}{N_0} \Delta H_{кип} = \Delta H_{пл}, \quad (4)$$

где N_0 – число Авогадро; $\Delta H_{кип}$, $\Delta H_{пл}$ – атомные теплоты кипения и плавления металлов, Дж/моль.

Тогда

$$g_n = \frac{n}{N_0} = \frac{\Delta H_{пл}}{\Delta H_{кпл}} \cdot 100\% \quad (5)$$

В табл. 1 приведены расчеты V_p по (3) и g_n по (5) для некоторых элементов. Данные расчетов показывают явное хорошее соответствие между V_p и g_n .

Таблица 1 – Параметры разупорядоченной зоны для металлов

Металл	Sb	Cu	Au	Zn	Cd	Pb	Ni	Al	Li	Bi	Fe
V_p , % [4]	5	4,75	5,1	6,0	3,9	2,95	5,6	4,65	3,3	5,0	4,7
g_n , % (5)	9,9	3,87	3,44	5,58	5,6	2,48	4,08	3,28	1,9	5,17	3,3

Предложенная методика определения g_n может быть применима для расчетов структурных параметров металлического расплава, необходимых для оптимизации

температурных режимов плавки и интенсификации различных внешних воздействий, приводящих к изменению микронеоднородного состояния расплава.