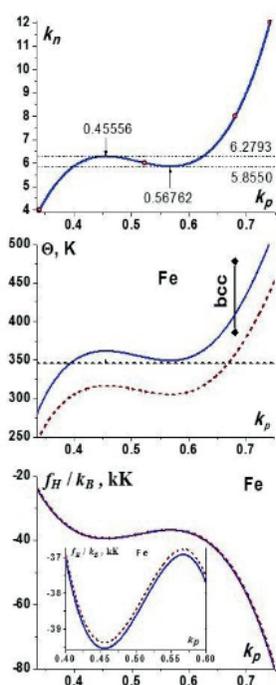


ВЫЧИСЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ДЕБАЯ ДЛЯ АМОРФНЫХ МЕТАЛЛОВ

Магомедов М.Н.

Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра Российской Академии Наук,
367030, г. Махачкала, пр-т Шамиля 39-а, e-mail: mahmag4@mail.ru



Для определения аморфной структуры использована зависимость первого координационного числа (k_n) от коэффициента упаковки (k_p), полученная в¹ (см. Рис. 1):

$$k_n(k_p) = -71.76782 + 467.78914 \cdot k_p - 925.48451 \cdot k_p^2 + 603.01146 \cdot k_p^3 \quad (1)$$

При $5.858 \leq k_n \leq 6.278$ и $0.4 \leq k_p \leq 0.624$, одному значению k_n соответствуют два или три значения k_p . Поэтому эта область в¹ была определена, как область «случайной упаковки» для сферических атомов.

Используя (1) и метод из², были рассчитаны зависимости температуры Дебая (Θ – Рис. 2) и удельной свободной энергии Гельмгольца (f_H – Рис. 3) от k_p для Fe. Расчеты были выполнены при температуре 300 К для двух значений расстояния между ближайшими атомами: $c/r_0 = 1$ (сплошная линия) и $c/r_0 = 1.0265$ (пунктир на Рис. 2 и 3). Здесь $r_0(\text{Fe}) = 0.24775 \text{ nm}$ – координата минимума потенциала из². Для аморфного Fe в этих условиях получено:

$$348.836 \leq \Theta_{\text{am}} \leq 361.322 \text{ K при } c/r_0 = 1;$$

$$305.24 \leq \Theta_{\text{am}} \leq 316.16 \text{ K при } c/r_0 = 1.0265.$$

Это хорошо согласуется с оценками из³: $\Theta_{\text{am}} = 346.2 \text{ K}$ (горизонталь на Рис. 2). Для ОЦК-Fe температура Дебая лежит в интервале: $386 \leq \Theta_{\text{bcc}} \leq 478 \text{ K}$ (вертикаль на Рис. 3). Также были рассчитаны Θ_{am} для других металлов.

Литература

1. Магомедов М.Н. Журнал Структурной Химии, 2008, 49, 1, 164.
2. Магомедов М.Н. Журнал Технической Физики, 2015, 85, 11, 48.
3. Singh R.N., Ali I. International J. of Applied Physics and Mathematics, 2013, 3, 4, 275.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-29-11013_mk) и Программы Президиума РАН (программа № I.13).