

**РОЗРАХУНОК ТЕМПЕРАТУРНИХ ЗАЛЕЖНОСТЕЙ ПАРАМЕТРІВ
СТРУКТУРИ РОЗПЛАВІВ ПРОСТИХ МЕТАЛІВ З КРИСТАЛІЧНОЮ
ГРАТКОЮ ОЦК В РАМКАХ КЛАСТЕРНОЇ МОДЕЛІ.**

Анотація: У даній роботі проведено дослідження температурних залежностей параметрів структури розплавів рубідія в інтервалі температур від близьких до точки плавлення - 40°C ($t^{\circ}_{\text{пл}}=38,9^{\circ}\text{C}$), до 400°C . При моделюванні використовувалась форма кластера у вигляді біпіраміди, яка відповідає найбільшим відношенням об'єму до площі поверхні, тобто є найбільш ймовірною. Визначались середні значення міжатомної відстані, оптимальні розміри кластера, середні відстані між кластерами. В інтервалі температур 250°C - 300°C спостерігались стрибкоподібні зміни вищеназаних параметрів. Це є свідченням фазового переходу II роду, який можна зв'язати зі зміною форми кластеру, наприклад, переходу до різновидностей призми, біпризми, яким відповідає менше відношення об'єму до площі поверхні, тобто суттєво більша поверхнева енергія.

Ключові слова: оптимальний розмір кластера.

Annotation: In this work research of temperature dependences of parameters of structure of fusions of rubidium is conducted in the interval of temperatures from near to the melting-point - 40°C ($t^{\circ}_{\text{mp}}=38,9^{\circ}\text{C}$), to 400°C . For a design the form of cluster was used as bipiramydy, which answers most attitude of volume toward the area of surface, id est is most credible. The mean values of between atomic distance, optimal clustersizes, middle distances, were determined between clusters. In the interval of temperatures 250°C - 300°C was observed saltatory changes of afore-named parameters. It is the certificate of phase transition of II of family, which can be bound to the change of form to the cluster, for example, of passing to

the varieties of prism, biprisms which are answered by less attitude of volume toward the area of surface, id est substantially greater superficial energy.

Keywords: optimal clustersize.

Розроблена раніше комп'ютерна програма моделювання кластерної структури розплавів металів з кристалічною ґраткою типу ОЦК для співставлення з експериментальними даними рентгенодифракційного аналізу [1] дозволяє провести дослідження змін структурних параметрів в широкому інтервалі температур.

У роботах по дослідженню фізичних властивостей [2;3] було показано, що зміна структури ближньої координації в розливах лужних металів (Rb, Cs) з температурою відбувається не монотонно, а відбувається стрибкоподібно при певних температурах або в дуже вузькому інтервалі температур.

Ці зміни корелюють з аномальними явищами на залежностях в'язкості і густини від температури. Так, для розплавів рубідія це має місце в інтервалі температур 250°-300°С.

У даній роботі проведено дослідження температурних залежностей параметрів структури розплавів рубідія в інтервалі температур від близьких до точки плавлення - 40°С ($t^{\circ}_{пл}=38,9^{\circ}\text{C}$), до 400°С. Використовувались дані дифракційних досліджень для приведеного об'єкту [4;5]. При моделюванні використовувалась форма кластера у вигляді біпіраміди, яка відповідає найбільшим відношенням об'єму до площі поверхні, тобто є найбільш ймовірною. Визначались середні значення міжатомної відстані, оптимальні розміри кластера, середні відстані між кластерами. В інтервалі температур 250°-300°С спостерігались стрибкоподібні зміни вищеназваних параметрів.

Особливої уваги заслуговує залежність оптимального розміру кластера ($L_{\text{опт}}$) від температури (Т), яка з високою точністю апроксимації відповідає залежності - $L_{\text{опт}} = A \exp\left(\frac{\Delta E}{RT}\right)$.

Енергію активації ΔE слід інтерпретувати зі збільшенням сукупної поверхневої енергії кластерів, розміри яких зменшуються зі збільшенням

температури. У вищеназваному інтервалі температур спостерігалась зміна ΔE від $1,537 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ в інтервалі температур $40^\circ\text{-}240^\circ\text{C}$, до $2,493 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$ в інтервалі температур $300^\circ\text{-}400^\circ\text{C}$. Це є свідченням фазового переходу II роду, який можна зв'язати зі зміною форми кластеру, наприклад, переходу до різновидностей призми, біпризми, яким відповідає менше відношення об'єму до площі поверхні, тобто суттєво більша поверхнева енергія. Але це потребує детального аналізу: виконання моделювання для різних форм кластерів, властивим структурі ОЦК в різних температурних інтервалах. Крім того, екстраполяція залежності $L_{\text{опт}}(T)$ у точку плавлення дає значення середнього розміру кластера $\approx 14\text{\AA}$ для розглянутого випадку біпіраміди. Якщо інтерпретувати теплоту кристалізації – $2,31 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}$, як вивільнену сукупну поверхневу енергію кластерів, є можливість знайти її залежність від розмірів кластерів і від температури, і, нарешті, оцінити величину міжатомного потенціалу, що є окремою задачею.

ДЖЕРЕЛА ТА ЛІТЕРАТУРА

- [1] Дідоборець О. Й. Моделирование процесса кластеризации в расплавах металлов с кристаллической решеткой типа ОЦК. – International Scientific Journal «Internauka». – 2017. Т1. № 4(26). – С.76-78
- [2] Gingrich N.S., Heaton L.P., J. Chem. Phys. vol. 34, p. 873, (1961)
- [3] Black R., Suck J.B., Glaser W. et al – Ber. Bunsen-Gesellschaft, Bd. 80, 8, S. 718, (1976)
- [4] Zei M.S., Rhys. Rev. A, vol. 27, Numb. 1, p. 515 (1983)
- [5] Waseda Y. and Suzuki K. Phys. stat. sol. (B), 49, 643 (1972)

Дідоборець Олександр Йосипович – к.ф.-м.н., доцент кафедри вищої математики та фізики Дніпровського державного аграрно-економічного університету, тел. 0984004931, mathematphysics@gmail.com, сертифікат ТАК, про конференцію дізнався від колег.