

УДК 534.321.9:537.312.5

О СВЯЗИ ПОСТОЯННОЙ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ С ПОСТОЯННОЙ МАДЕЛУНГА

Т. Сулейменов, В.П. Малышев,

К.С. Какенов, Н.С. Бектурганов

Химико-металлургический институт им. Ж. Абишева,
г. Караганда

Жұқа құрылым тұрақтысы мен Маделунг тұрақтысының арасындағы байланыс Я.И.Френкель теориясы арқылы тағайындалған.

Установлена взаимосвязь постоянной тонкой структуры с постоянной Маделунга, с привлечением теории Я.И.Френкеля.

The interrelation of constant of fine structure with Madelung's constant is established with attraction of the theory of J.I.Frenkel.

Скорость распространения упругих волн в конденсированных средах характеризует прочность межатомных связей. Поэтому изучению этого важного параметра распространения упругой волны уделяется большое внимание. В результате экспериментальных исследований скорости распространения ультразвука в расплавах простых веществ, начатых в конце 40-х годов с жидких металлов [1–4], в настоящее время накоплено большое количество данных. Однако имеющиеся в настоящее время экспериментальные материалы требуют систематизации. Кроме того, их теоретическое обобщение находится пока ещё не на достаточно удовлетворительном уровне. В этой связи целью данной работы явилось дополнительное рассмотрение их в рамках уже существующих теорий, например, на основе теории сжимаемости металлов Я.И. Френкеля, опираясь на данные по скорости распространения ультразвука в расплавах простых веществ, например, для ряда лития, магния, алюминия.

В основу намеченного обобщения положим то обстоятельство, что сжимаемость, атомная масса и ионизационный потенциал простых веществ группы элементов Периодической таблицы Д.И. Менделеева при соответствующих температурах кристаллизации подчиняются определённой закономерности.

Поскольку химические связи в простых телах из атомов одной подгруппы Периодической системы реализуются сходными внешними электронными оболочками атомов, то можно допустить существование некоторой закономерности для указанных групп.

Анализ экспериментальных данных по скорости упругих волн на основе ионизационных потенциалов [5] и атомной массы приводит к следующему выражению

$$v_S^2 = \gamma \frac{W}{M_A}, \quad (1)$$

где $\gamma = 10^8$, v_S – скорость ультразвуковых волн, W – энергия электронной подсистемы, равная

$$W = \frac{1}{2} \frac{R a_0}{\alpha^2} F^{tr} \left[\frac{\alpha}{n^2} \frac{4\pi}{r} z^{*2} e^2 \right]. \quad (2)$$

Здесь b – постоянная тонкой структуры,

r – межионное расстояние,

n – эффективное квантовое число,

z^* – число свободных электронов на один атом,

e – заряд электрона,

a_0 – радиус Бора.

Знак $F^{tr}[\]$ означает оператор функционального преобразования по теореме Бриджмэна.

Известно, что по формуле Лапласа v_S^2 представляется в виде

$$v_S^2 = \frac{1}{\beta_S \rho}, \quad (3)$$

или с учётом $\rho = \frac{m}{V} = \frac{N_A M_A}{N_A V_A}$

$$v_S^2 = \frac{V_A}{\beta_S} \frac{1}{M_A}. \quad (4)$$

Обозначим $\frac{1}{\beta_S} = \frac{V_A}{\beta_S}$ как фактор связи.

С другой стороны, нагревание приводит к увеличению числа свободных электронов и это приводит к изменению структуры ближнего порядка металлических расплавов. Иначе говоря, в расплавленном состоянии разрушаются элементы анизотропии в ближнем порядке, тем самым возникает электронная и ионная подсистема. Рост числа свободных электронов, металлизуя связи, приводит к уменьшению сжимаемости. Поэтому для сжимаемости металлов можно привести формулу Я.И.Френкеля [1]:

$$\beta_S = \frac{18r^4}{Az^{*2}e^2}, \quad (4)$$

где r – межионное расстояние,
 A – постоянная Маделунга,
 z^* – число свободных электронов на один атом,
 e – заряд электрона.

Для удобства дальнейшего анализа формулу (4) с учётом ионного объёма $V' = \frac{\pi}{6} r^3$ представим следующим образом

$$\beta_S = \frac{432 V' r}{4\pi A z^{*2} e^2}. \quad (5)$$

Переходя от β_S к $\frac{1}{b_S}$, можем записать

$$\frac{1}{b_S} = \frac{4\pi A z^{*2} e^2}{432 V' r}. \quad (6)$$

Поскольку $\frac{1}{b_S} = \gamma W = \frac{1}{2} \frac{R a_0}{\alpha^2} F^{tr} \left[\frac{4\pi z^{*2} e^2}{r} \alpha \frac{1}{n^2} \right]$, предполагая мультиплика-

тивность множителей $F^{tr} []$ и приравнявая $\frac{1}{b_S} = \frac{V_A}{V'} \frac{A}{432} \frac{4\pi}{r} z^{*2} e^2$ и

$\frac{1}{b_S} = \frac{1}{2} \frac{R a_0}{\alpha} \frac{4\pi}{r} z^{*2} e^2 F^{tr} \left[\frac{1}{n^2} \right]$, можно установить

$$\frac{R a_0}{\alpha} F^{tr} \left[\frac{1}{n^2} \right] = \frac{A}{216} \frac{V_A}{V'}. \quad (7)$$

Таким образом, можно считать установленной связь между α и постоянной Маделунга. Это говорит о том, что при больших плотностях вещества упругие волны проявляют квантовые свойства, не говоря уже о фоновон-фононных взаимодействиях.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гитис М.Б., Михайлов И.Г. Распространение звука в жидких металлах. // Акустический журнал. – 1966. – Т.12. – №2. – С. 145.
2. Новиков И.И., Рошуплин В.В., Трелин Ю.С. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ. – М.: ИВТ АН СССР, 1981. – №6. – С. 65-98.
3. Blairs S., Toasoo U. // J. inorg. nucl. chem. 1980. V.42. P. 1555.
4. Регель А.Р., Глазов В.М. Периодический закон и физические свойства электронных расплавов. – М.: Наука, 1978. – 307 с.
5. Букетов Е.А., Мальшиев В.П. Термохимия и строение внешних электронных слоёв элементов. 1. Уточнение правила термохимической логарифмики. // Журн. физ. химии. – 1967. – №5. – С. 1057-1064.