

Обобщённая решёточная модель гетерогенных состояний в многокомпонентных растворах

Н. М. Потапова

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, Великий Новгород,
Россия

эл. почта: nadpotapova@gmail.com

Работа посвящена построению теории гетерогенных состояний в многокомпонентных конденсированных системах с учётом различия атомных размеров компонентов и дальнедействующих плавных межатомных потенциалов. Для этой цели использована обобщённая решёточная модель [1], в явном виде учитывающая как различия атомных размеров компонентов (т.е. короткодействующих частей межатомных потенциалов), так и дальнедействующие части межатомных потенциалов. Выведена система интегро-дифференциальных уравнений, описывающая равновесное распределение компонентов. В предположении, что характерные масштабы неоднородностей значительно меньше радиуса действия дальнедействующих частей межатомных потенциалов, эта система уравнений сведена к системе дифференциальных уравнений, содержащих в качестве параметров атомные объёмы всех компонентов и интегральные характеристики потенциалов взаимодействий всех компонентов (приближение типа Кана-Хильярда [2]).

Подробно рассмотрена модельная задача о плоской границе раздела в бинарных системах. Исследовано влияние температуры на толщину границы раздела фаз ξ .

Установлено, что в окрестности критической температуры $\xi \approx |T_c - T|^{-1/2}$, а при низких температурах $T \ll T_c$ величина ξ выходит на константу.

Основные результаты, полученные в данной работе, состоят в следующем:

- Выведены уравнения, связывающие распределение компонентов в конденсированных системах с характеристиками компонентов и их взаимодействий.
- Получено точное решение уравнения равновесного распределения компонентов бинарного раствора для случая плоской границы раздела фаз [3].
- Установлена связь между характеристиками межатомных потенциалов компонентов бинарного раствора и толщиной переходного слоя между фазами, как в окрестности критической точки, так и в пределе низких температур.

Литература:

1. Захаров А. Ю., Удовский А. Л. // Физика и химия обработки материалов. 2005. №1. С. 5—14.
2. Sahn J. W., Hilliard J. E. // J. Chem. Phys. 1958. Vol. 28. No. 2. P. 253-257.
3. Захаров А. Ю., Потапова Н. М., Пузанов В. П. // Вестник НовГУ. Сер.: Техн. Науки. 2008. № 46. С. 7-9