

СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ БИНАРНЫХ АМОРФИЗУЮЩИХСЯ РАСПЛАВОВ

Л.Д. Сон (1), Р.Е. Рыльцев (2)
e-mail: ldson@yandex.ru (1), rrylcev@mail.ru (2)

Уральский государственный педагогический университет, г. Екатеринбург, Россия

В данной работе предлагается новая статистическая модель, предназначенная для описания жидкостей (расплавов) с наличием направленного взаимодействия. Существование направленных и насыщенных связей, как известно, приводит в возможности образования ассоциатов молекул, подобно тому как это происходит в полимерных системах. В отличие от известных подходов, применяемых к описанию ассоциированных систем, (модель идеальных ассоциированных растворов, теория Флори) наша модель позволяет учитывать произвольные степени полимеризации благодаря наличию универсальной структурной единицы, из которой формируются ассоциаты любого размера.

В данной работе предложенная модель применяется к описанию бинарных аморфизирующихся расплавов металл–металлоид. Необходимость учета направленного взаимодействия в таких расплавах обсуждается уже в течение длительного времени. Основное предположение заключается в том, что атомы металлоида B , помещенные в металлическую матрицу, формируют устойчивые соединения (квазимолекулы) вида Me_2B , в которых, благодаря перераспределению плотности заряда, возникает возможность образования направленных связей и, как следствие, способность к полимеризации. Указанные образования выступают в роли структурных единиц, формирующих произвольные ассоциаты (полимерные цепочки).

Модель позволяет рассчитывать концентрационные и температурные зависимости различных термодинамических свойств аморфизирующихся расплавов, а также качественно объясняет некоторые универсальные особенности их поведения в жидком и аморфном состояниях.

Ключевые слова: направленные связи, полимеризация, аморфизирующиеся расплавы, активности.

Страниц — 6, **рисунков** — 4.