

ТЕМПЕРАТУРА ПЛАВЛЕНИЯ ПРОСТЫХ КРИСТАЛЛОВ

Д. М. Штейнград, М. Д. Коваленко

УДК 536.412.1

Предложен механизм плавления простых кристаллов, основанный на теории межплоскостных сдвигов. Рассчитана кривая плавления аргона.

В настоящей работе мы исходим из предложения, что плавление простых кристаллов соответствует срыв части поперечных колебаний из-за появления межплоскостных сдвигов [1]. Температура плавления в этом случае определяется из условия равенства энергии поперечных колебаний, вызывающих появление сдвига, и энергии активации самого сдвига  $\omega$ .

Энергию поперечных колебаний несложно оценить из следующих соображений: данным колебаниям соответствуют одно из трех возможных направлений и одна из трех возможных поляризаций. В итоге энергия тепловых колебаний, вызывающих межплоскостной сдвиг, равна одной девятой от  $3 kT$ , и условие плавления имеет вид:

$$kT/3 = \omega. \quad (I)$$

Вычислим энергию  $\omega$  для кристалла аргона: ГЦК решетка, потенциал типа Леннарда - Джонса "12-6". Энергия, необходимая для сдвига, будет наименьшей при сдвиге  $/2/ a/6 \langle 112 \rangle \{111\}$ , где  $a$  - параметр решетки. Рассматривая плоскость скольжения  $(111)$ , сдвиг  $\vec{\Delta} = a/12 [11\bar{2}]$  и используя ромбоэдрическую систему координат с осями  $a/2 [01\bar{1}]$ ,  $a/2 [\bar{1}10]$   $a/2 [011]$ , получим:

$$\omega = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} l \{U(b|\vec{r} + \vec{\delta}l) - U(b|\vec{r}l)\},$$

где  $\bar{\delta} = \bar{\Delta}/b$ ,  $b = a/\sqrt{2}$  - кратчайшее расстояние между атомами,  $|\bar{r}| = \sqrt{m^2 + n^2 + 1^2 + n(m+1)}$ ,  $|\bar{r} + \bar{\delta}| = \sqrt{|\bar{r}|^2 + m/2 + 1/3 + 1/12}$ .  
 Для потенциала "12-6" имеем:

$$\omega = 4\epsilon \left[ \alpha_{12} (\sigma/b)^{12} - \alpha_6 (\sigma/b)^6 \right], \quad (2)$$

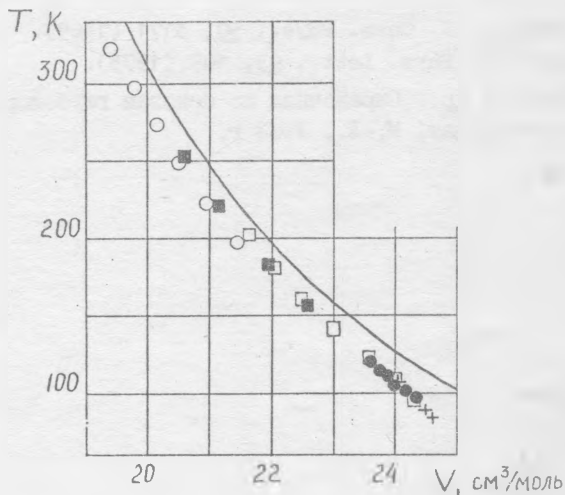
где

$$\alpha_6 = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} l \{ |\bar{r} + \bar{\delta}|^{-6} - |\bar{r}|^{-6} \}.$$

Суммирование на ЭМ до  $|\bar{r}| \leq 20$  дает  $\alpha_{12} = 0,5877$ ;  $\alpha_6 = 0,1122$ . Пренебрегая вакансиями, можно записать  $b = (\sqrt{2}V/N_A)^{1/3}$ , где  $V$  - молярный объем,  $N_A$  - число Авогадро. Подставляя это выражение в (2), а (2), соответственно, в (1), получим выражение для кривой плавления:

$$T = A/V^4 - B/V^2, \quad (3)$$

где  $A = 3\alpha_{12}(\epsilon/k)(N_A \sigma^3)^4$ ,  $B = 6\alpha_6(\epsilon/k)(N_A \sigma^3)^2$ .



Р и с. 1. Кривая плавления аргона. Сплошная линия - данная работа; о - /3/, ● - /4/, □ - /5/, ■ - /6/, + - /7/

Для аргона  $\varepsilon/k = 119,5$  К,  $\sigma = 3,409 \text{ \AA} / 3/$ . Рассчитанная с этими параметрами по (3) кривая плавления приведена на рис. 1. Как видно, последняя лежит на 10% выше экспериментальных точек, что, возможно, связано с неучтенным влиянием ангармонизма тепловых колебаний.

В заключение авторы выражают свою благодарность Е. С. Фрадкину за поддержку, В. Е. Люстернику за полезные обсуждения, В. Я. Чеховскому за интерес к работе.

Поступила в редакцию  
20 апреля 1983 г.

#### Л и т е р а т у р а

1. J. L. Tallon, W. H. Robinson, S. I. Smedley, *Nature*, **266**, 377 (1977).
2. Дж. Хирт, И. Лоте, Теория дислокаций, Атомиздат, М., 1972 г.
3. С. М. Стишов, В. И. Федосимов, И. Н. Макаренко, Препринт ИКАН, М., 1972 г.
4. W. van Witzenburg, J. C. Stryland, *Canad. J. Phys.*, **46**, 811 (1968).
5. R. K. Crawford, *J. Chem. Phys.*, **50**, 3171 (1969).
6. R. K. Crawford, *Phys. Lett.*, **43**, 109 (1973).
7. М. И. Малков и др., Справочник по основам глубокого охлаждения, Гостехиздат, М.-Л., 1963 г.