

В. П. МАЛЬШЕВ, А. М. МАКАШЕВА

(Представлена член-корр. НАН РК М. Ж. Толымбековым)

(Химико-металлургический институт, Караганда, Казахстан)

СВЯЗЬ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ САМОДИФФУЗИИ С КОНЦЕПЦИЕЙ ХАОТИЗИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ

Аннотация. На основе анализа справочных данных по теплотам плавления, кипения и энергии активации самодиффузии по типичным металлам установлено, что энергия активации самодиффузии остается выше теплоты плавления и ниже теплоты испарения этих металлов. Это соответствует диапазону существования жидкоподвижных частиц по классификации на основе концепции хаотизированных частиц.

Тот факт, что частицы, способные на самодиффузию в твердом состоянии, по энергетике соответствуют диапазону существования жидкоподвижных частиц, свидетельствует о дополнительном важном физическом смысле этого класса хаотизированных частиц. Помимо обеспечения пластичности и растворимости металлов, жидкоподвижные частицы, будучи к тому же и диффундирующими, на этом основании более конкретно раскрывают свою мобильную природу и механизм реализации пластичности и растворимости при переходе от равновесного термодинамического состояния к неравновесному кинетическому.

Предложена формула для оценки энергии активации самодиффузии, согласно которой она составляет около половины от теплоты испарения вещества. Выведена температурная зависимость для доли самодиффундирующих частиц.

Ключевые слова: теплота плавления, теплота кипения, самодиффузия, хаотизированные частицы, металлы.

Тірек сөздер: балқу жылуы, қайнау жылуы, өздігінен диффузиялану, бейберекеттенген бөлшектер.

Keywords: heat of melting, heat of boiling, self-diffusion, randomized particles, metals.

Введение. Тепловое состояние вещества описывается распределением Больцмана по кинетической энергии хаотического движения частиц с уровнями энергии от нуля до бесконечно большого. В связи с этим представляет интерес определить место самодиффундирующих частиц в современной градации энергии хаотизированных частиц по ответственности их за стабилизацию твердого, жидкого и газообразного состояний вещества.

Расчетная часть. Теплоты плавления, кипения и энергия активации самодиффузии простых веществ, также как и их температуры плавления и кипения приведены в справочнике [1], из которого взяты данные для типичных металлов при наличии всех этих характеристик (таблица 1).

Как видно из полученных данных, для самых различных металлов с температурами плавления от 429 до 3653 К и кипения от 1180 до 5640 К, с теплотой плавления от 2,81 до 35,30 кДж/моль и теплотой кипения от 99,6 до 770,18 кДж/моль энергия активации самодиффузии остается выше теплоты плавления и ниже теплоты испарения этих металлов. Это позволяет отнести частицы, преодолевающие барьер активации самодиффузии, к классу жидкоподвижных частиц в рамках концепции хаотизированных частиц.

Эта концепция базируется на распределении Больцмана [2], которое относительно кинетической энергии хаотического теплового движения частиц справедливо не только для газообразного, но и конденсированного состояний вещества [3]. Согласно данной концепции [4-7], частицы, имеющие энергию не выше теплоты плавления, отвечают за дальний порядок связи несмотря на виртуальный характер пребывания их в узлах кристаллической решетки в твердом состоянии или во фрагментах этой решетки (кластерах) в жидком или газообразном состояниях. Эти частицы названы *кристаллоподвижными*, а их доля при любой температуре согласно распределения Больцмана выражается зависимостью

Таблица 1 – Справочные данные по теплоте плавления (ΔH_m), испарения (ΔH_{ev}) и энергии активации самодиффузии (E_{sd}), кДж/моль, по температурам плавления (T_m , К) и кипения (T_b , К) типичных металлов

Me	T_m	T_b	ΔH_m	E_{sd}	ΔH_{ev}	$E_{sd}/\Delta H_{ev}$
Ag	1233	2437	11,28	192,17	254,30	0,758
Au	1337	3081	12,68	164,96	335,06	0,492
Be	1560	2723	14,64	147,5	314,76	0,469
Cd	594	1039	6,41	76,2	99,6	0,765
Ce	1071	3530	5,18	85,7	435,1	0,197
Co	1767	3230	15,51	259,58	383,2	0,677
Cr	2150	2945	13,81	247,86	343,98	0,721
Cu	1356	2846	13,05	205	304,4	0,674
Fe	1811	3145	15,19	239,48	340,4	0,704
Hf	2503	4876	21,78	183	575,14	0,318
In	429	2323	3,27	88,6	232,67	0,381
La	1193	3727	6,21	171	430,90	0,397
Li	453	1615	2,887	53,8	147,753	0,364
Mo	2895	4883	27,6	386,02	593,96	0,650
Nb	2742	5115	27,56	397,75	683,73	0,582
Pa	1848	4503	14,64	266,3	460,54	0,578
Pb	600	2018	4,848	116,81	183,5	0,637
Pd	1827	3150	16,69	266,3	361,65	0,736
Pr	1204	3485	6,92	169,5	338,2	0,501
Pt	2045	4100	19,68	278,4	502,80	0,554
Pu	912	3508	2,81	65,7	382,02	0,172
Ra	973	1593	8,38	92,11	162,02	0,569
Ta	3270	5560	31,43	413,2	770,18	0,537
Th	1999	4315	15,64	349,6	585,44	0,597
Ti	1941	3442	17,163	122,67	468,94	0,262
Tl	576	1730	4,312	83,74	162,50	0,515
U	1406	4407	8,518	111,4	446,54	0,205
V	2190	3665	17,59	255,2	457,18	0,558
W	3653	5640	35,30	398	736,69	0,540
Y	1793	3610	17,17	256	392,98	0,651
Zn	692	1180	7,19	92,11	115,38	0,798
Zr	2125	3923	20,07	100,48	579,88	0,173
Среднее	–	–	13,92	198,01	383,17	0,524

$$P_{сrm} = 1 - \exp\left(-\frac{\Delta H_m}{RT}\right). \quad (1)$$

Частицы с энергией выше теплоты кипения являются максимально хаотизированными, разоб-
щенными, и они названы *пароподвижными*. Для них характерен нулевой порядок связи, а их доля
подчиняется зависимости

$$P_{vm} = \exp\left(-\frac{\Delta H_{ev}}{RT}\right). \quad (2)$$

Частицы, имеющие энергию хаотического движения выше теплоты плавления, но ниже тепло-
ты испарения, отвечают за ближний бесструктурный порядок связи, названы *жидкоподвижными*.

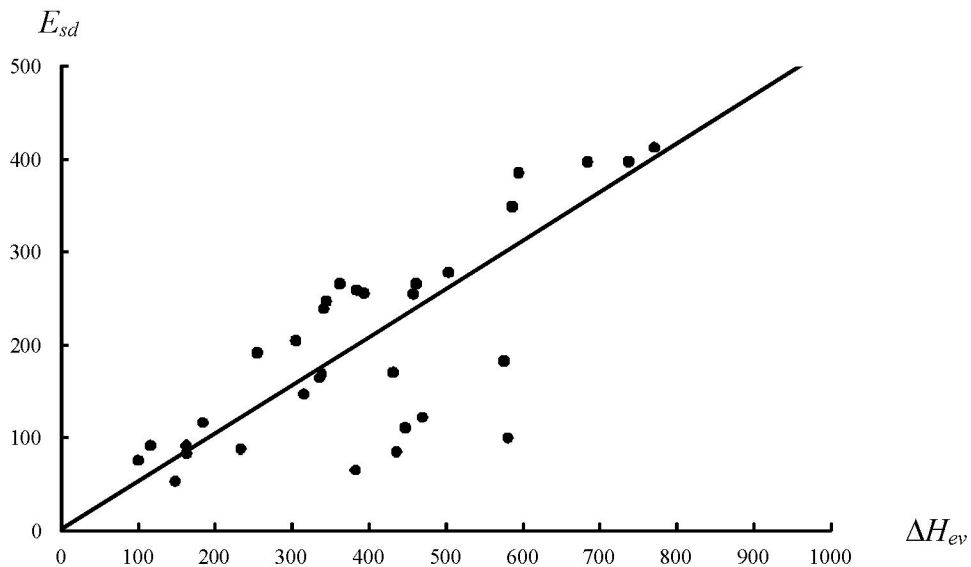
Их доля находится по разности между единицей и долями кристаллоподвижных и пароподвижных частиц

$$P_{lqm} = 1 - (P_{crm} - P_{vm}) = \exp\left(-\frac{\Delta H_m}{RT}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta H_{ev}}{RT}\right). \quad (3)$$

Поскольку сумма долей кристаллоподвижных, жидкоподвижных и пароподвижных частиц согласно распределения Больцмана строго равна единице, эти частицы всегда существуют вместе при любых температурах (кроме 0 и ∞), а следовательно, в любых агрегатных состояниях – твердом, жидком и газообразном, меняя в них лишь свое соотношение и постоянно обмениваясь энергией.

Тот факт, что частицы, способные на самодиффузию в твердом состоянии, по энергетике соответствуют диапазону существования жидкоподвижных частиц, свидетельствует о дополнительном важном физическом смысле этого класса хаотизированных частиц. Помимо обеспечения пластичности и растворимости металлов, которые рассмотрены в монографии [8], жидкоподвижные частицы, будучи к тому же и диффундирующими, на этом основании более конкретно раскрывают свою мобильную природу и механизм реализации пластичности и растворимости при переходе от равновесного термодинамического состояния к неравновесному кинетическому.

Закономерная взаимосвязь энергии активации самодиффузии с теплотой плавления и кипения может быть проиллюстрирована статистической обработкой данных таблицы 1. Так, связь $E_{sd} = f(\Delta H_{ev})$ может быть найдена как прямолинейная по графическому характеру размещения соответствующих данных (рисунок 1).



Точки – справочные данные [1], линия – по уравнению (8)

Рисунок 1 – Зависимость энергии активации самодиффузии от теплоты испарения для типичных металлов (кДж/моль)

Для выражения прямолинейного характера этой зависимости необходимо прежде всего удостовериться в однородности множества $E_{sd}/\Delta H_{ev}$ (см. таблицу 1). Она может быть установлена по критерию Налимова [9, 10]

$$r_{\min}^{\max} = \frac{|\bar{x} - x_{\min}^{\max}|}{S(x)\sqrt{\frac{n-1}{n}}} \leq r_{cr}, \quad (4)$$

$$S(x) = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}, \quad (5)$$

где X_{\min}^{\max} – минимаксная величина множества, \bar{X} – среднее значение, $S(x)$ – среднеквадратическая

ошибка, n – объем множества. Нормативные табличные значения критерия Налимова r_{cr} для 5% уровня значимости приведены в работе [10], которые аппроксимированы в [8] с точностью до 5% к уравнению

$$r_{cr} = 1,483(n-2)^{0,187}. \quad (6)$$

Здесь $f = n - 2$ – число степеней свободы критерия Налимова.

Для рассматриваемого множества $E_{sd}/\Delta H_{ev}$ наиболее отклоняющееся значение 0,173 относится к плутонию, и тогда

$$r_{\min}^{\max} = \frac{|0,524 - 0,172|}{0,1812\sqrt{31/32}} = 1,974 < r_{cr} = 1,483 \cdot 30^{0,187} = 2,773.$$

Таким образом, неравенство удовлетворяется, множество однородно, а его среднее значение является представительным.

В данном случае важно также обосновать необходимость выхода прямолинейной зависимости из начала координат, поскольку по физическим соображениям очевидно, что при сколь угодно малой теплоте кипения энергия активации самодиффузии становится близкой нулю. Условие выхода прямой из начала координат при обработке любого множества соблюдается, если совпадают или практически равны два способа усреднения

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{x_i} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{\sum_{i=1}^n x_i}. \quad (7)$$

В рассматриваемом случае

$$\frac{1}{32} \sum_{i=1}^{32} \frac{E_{sd,i}}{\Delta H_{ev,i}} = 0,524, \quad \frac{\sum_{i=1}^{32} E_{sd,i}}{\sum_{i=1}^{32} \Delta H_{ev,i}} = \frac{6336,32}{12261,44} = 0,517.$$

С округлением до второй значащей цифры получаем в обоих вариантах величину среднего 0,52, что позволяет представить уравнение, связывающее энергию активации самодиффузии с теплотой испарения в виде

$$E_{sd} = 0,52\Delta H_{ev}. \quad (8)$$

Коэффициент нелинейной множественной корреляции расчетных значений со справочными данными составил $R = 0,727$, при значимости его для 95% уровня достоверности [12] $t_R = 8,43 > 2$. При этом коэффициент корреляции, по Р. Шеннону [13], определяет степень детерминации любой модели согласно выражению $D = R^2$. В данном случае $D = 0,528$, что указывает на определяющую роль функциональной связи в сравнении с воздействием случайных или неучтенных факторов при определении энергии активации самодиффузии как функции теплоты испарения. Имеется возможность также определить доверительный интервал этой функции, как рекомендовано в работе [14]

$$\delta = \pm |y_{\max} - y_{\min}| / t_R, \quad (9)$$

где y_{\max} и y_{\min} – максимальное и минимальное значения в экспериментальном массиве данных. Для данного случая

$$\delta = \pm |398 - 53,8| / 8,43 = \pm 40,8 \text{ кДж/моль},$$

что составляет $\pm 20,6\%$ от среднего значения функции. Такая точность характерна для определения энергии активации самодиффузии как усредненной для различных диапазонов температур в пределах твердого состояния вещества, сильно отличающихся для различных металлов.

Исходя из представления о природе жидкоподвижных частиц, потенциально способных к выходу из узлов кристаллической решетки при превышении ими энергии теплового движения, равной ΔH_m , оказывается, что для обеспечения самодиффузии, т.е. броуновского самодвижения атомов в объеме кристалла требуется дополнительная энергия активации. Следовательно, такие

частицы должны обладать энергией $\Delta H_m + E_{sd}$ и составлять лишь некоторую часть от общей доли жидкоподвижных частиц. Эту долю по аналогии с выражением для общей доли жидкоподвижных частиц (3) можно выразить как

$$P_{sd} = \exp\left(-\frac{\Delta H_m + E_{sd}}{RT}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta H_{ev}}{RT}\right). \quad (10)$$

Для иллюстрации приведем сравнительные расчеты по (3) и (10) для точки плавления металлов, чтобы иметь представление об общей доле жидкоподвижных частиц и той их части, которой обеспечивается самодиффузия, при наибольшем развитии процессов образования этих частиц в твердом теле (таблица 2).

Таблица 2 – Доли жидкоподвижных (P_{lqm}), самодиффундирующих (P_{sd}) и пароподвижных (P_{vm}) частиц при температуре плавления типичных металлов

Me	P_{lqm}	P_{sd}	P_{vm}	Me	P_{lqm}	P_{sd}	P_{vm}
Ag	0,333	$2,39 \cdot 10^{-9}$	$1,61 \cdot 10^{-11}$	Pb	0,378	$2,56 \cdot 10^{-11}$	$1,06 \cdot 10^{-16}$
Au	0,320	$1,15 \cdot 10^{-7}$	$8,16 \cdot 10^{-14}$	Pd	0,333	$7,07 \cdot 10^{-9}$	$4,58 \cdot 10^{-11}$
Be	0,323	$3,72 \cdot 10^{-6}$	$6,04 \cdot 10^{-12}$	Pr	0,501	$2,22 \cdot 10^{-8}$	$2,13 \cdot 10^{-15}$
Cd	0,273	$5,27 \cdot 10^{-7}$	$1,74 \cdot 10^{-9}$	Pt	0,368	$2,85 \cdot 10^{-8}$	$1,44 \cdot 10^{-13}$
Ce	0,559	$3,70 \cdot 10^{-5}$	$6,02 \cdot 10^{-22}$	Pu	0,690	$1,19 \cdot 10^{-4}$	$1,16 \cdot 10^{-22}$
Co	0,348	$7,38 \cdot 10^{-9}$	$4,70 \cdot 10^{-12}$	Ra	0,355	$4,03 \cdot 10^{-6}$	$2,01 \cdot 10^{-9}$
Cr	0,462	$4,35 \cdot 10^{-7}$	$4,40 \cdot 10^{-9}$	Ta	0,315	$7,90 \cdot 10^{-8}$	$4,38 \cdot 10^{-13}$
Cu	0,314	$3,99 \cdot 10^{-9}$	$1,88 \cdot 10^{-12}$	Th	0,390	$2,86 \cdot 10^{-10}$	$5,04 \cdot 10^{-16}$
Fe	0,365	$4,50 \cdot 10^{-8}$	$1,52 \cdot 10^{-10}$	Ti	0,345	$9,26 \cdot 10^{-5}$	$2,40 \cdot 10^{-13}$
Hf	0,351	$5,33 \cdot 10^{-5}$	$9,95 \cdot 10^{-13}$	Tl	0,406	$1,04 \cdot 10^{-8}$	$1,84 \cdot 10^{-15}$
In	0,400	$6,52 \cdot 10^{-12}$	$4,69 \cdot 10^{-29}$	U	0,483	$3,51 \cdot 10^{-5}$	$2,58 \cdot 10^{-17}$
La	0,535	$1,74 \cdot 10^{-8}$	$1,36 \cdot 10^{-19}$	V	0,381	$3,12 \cdot 10^{-7}$	$1,25 \cdot 10^{-11}$
Li	0,465	$2,91 \cdot 10^{-7}$	$9,19 \cdot 10^{-18}$	W	0,313	$6,37 \cdot 10^{-7}$	$2,93 \cdot 10^{-11}$
Mo	0,318	$3,44 \cdot 10^{-8}$	$1,92 \cdot 10^{-11}$	Y	0,316	$1,10 \cdot 10^{-8}$	$3,56 \cdot 10^{-12}$
Nb	0,299	$7,91 \cdot 10^{-9}$	$9,45 \cdot 10^{-14}$	Zn	0,287	$3,00 \cdot 10^{-8}$	$1,95 \cdot 10^{-9}$
Pa	0,386	$1,15 \cdot 10^{-8}$	$9,61 \cdot 10^{-14}$	Zr	0,321	$1,09 \cdot 10^{-3}$	$5,57 \cdot 10^{-15}$

Здесь в первую очередь обращает внимание сопоставимость долей жидкоподвижных частиц для различных металлов при среднем значении этого показателя 0,382. Поскольку вклад пароподвижных частиц при температуре плавления (а следовательно, и при более низких) пренебрежимо мал, не превышая 10^{-9} , то доля кристаллоподвижных частиц составит по разности с единицей величину $P_{crm} = 0,612$. Как показано в работе [8], близость отношения $P_{crm} \cdot P_{lqm}$ именно в точке разрушения кристалла при плавлении к пропорции золотого сечения (1,618) отнюдь не случайная и раскрывает природу этого фазового перехода: выше температуры плавления доля кристаллоподвижных частиц, отвечающих за дальний порядок связи, а тем самым и за целостность кристалла, становится меньше этой критической доли, и они не способны удерживать кристалл в связанном состоянии. По-видимому, пропорция золотого сечения относится к таким общесистемным критериям, которые характеризуют предельную идеальную устойчивость целого по такому соотношению внутренних частей, когда одна из них обеспечивает структурную определенность, а другая – оптимальную адаптивность, приспособляемость [15].

Однако прежде всего необходимо проверить однородность множества P_{lqm} . В нем наибольшие отклонения характерны опять-таки для плутония, имеющего $P_{lqm} = 0,690$.

Проверка по критерию Налимова дает следующие результаты:

$$r_{\min}^{\max} = \frac{|0,382 - 0,690|}{9,14 \cdot 10^{-2} \sqrt{31/32}} = 3,424 > r_{cr} = 1,483 \cdot 30^{0,187} = 2,773.$$

Следовательно, неравенство не удовлетворяется, и «выскакивающее» значение должно быть исключено из рассматриваемого множества. Следует отметить, что при всей востребованности плутония он является искусственным радиоактивным элементом, трудно поддающимся надежной очистке [1].

В исключенном от плутония множестве среднее значение $P_{lqm} = 0,372$, а наиболее отклоняющаяся величина P_{lqm} относится к церию, составляя 0,559. При этом получается вполне однородное множество:

$$r_{\min}^{\max} = \frac{|0,372 - 0,559|}{7,21 \cdot 10^{-2} \sqrt{30/31}} = 2,636 < r_{cr} = 1,483 \cdot 29^{0,187} = 2,784,$$

и новое среднее значение в пределах среднеквадратической ошибки

$$\overline{P_{lqm}} = 0,372 \pm 7,21 \cdot 10^{-2} = 0,300 \div 0,444$$

включает пропорцию золотого сечения по бесструктурной составляющей (0,382) с отличием от уточненного среднего значения всего на 2,6%.

Обсуждение результатов. Что касается доли самодиффундирующих частиц, то она, конечно, намного меньше общей доли жидкоподвижных частиц, которые служат своеобразным резервуаром для всех более энергичных частиц. Благодаря им происходит отклонение твердого тела от равновесного состояния при быстром нагреве, при упругой и пластической деформации, а также разрушение кристалла, с одной стороны, и восстановление равновесного состояния, с другой. Для инициирования этих процессов достаточно лишь небольшой доли жидкоподвижных частиц, наиболее близкой к тепловой энергии испарения, составляя от нее около половины. Сама же доля самодиффундирующих частиц превышает долю пароподвижных на два и более порядков. С этим согласуется весьма слабая испаряемость твердых тел в сравнении с их свойствами, определяемыми существованием жидкоподвижных частиц (растворимость, пластичность), которые, как и другие характеристики твердого, жидкого и газообразного состояний, раскрываются с единых позиций в рамках концепции хаотизированных частиц [16, 17].

Ввиду большого разнообразия диапазонов изменения долей самодиффундирующих частиц для различных металлов ограничимся примером температурной зависимости P_{sd} для железа (рисунок 2) по формуле (10).

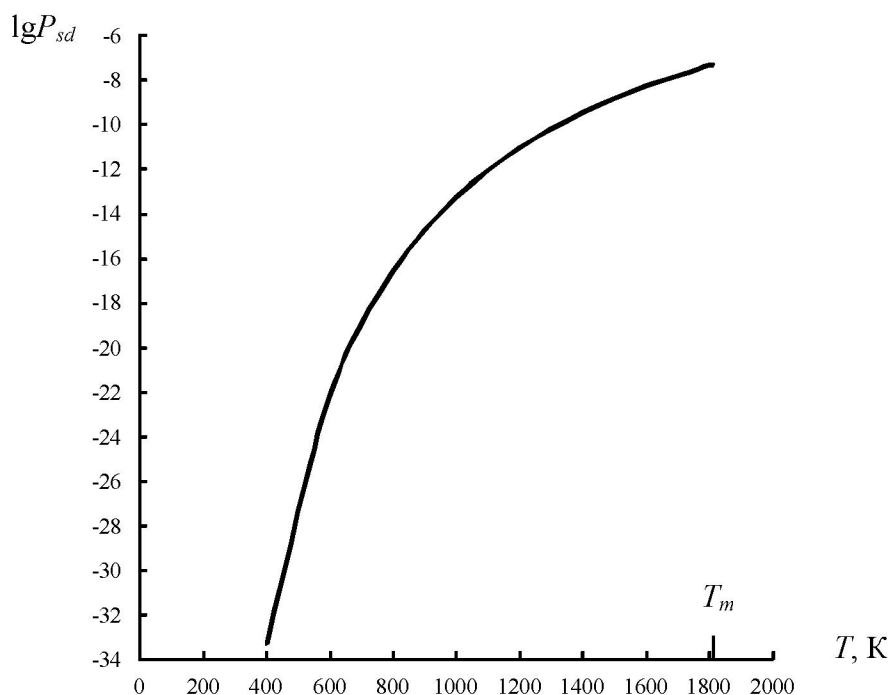


Рисунок 2 – Зависимость доли самодиффундирующих частиц от температуры для железа

Выводы:

1. На примере типичных металлов установлено, что энергия активации самодиффузии выше теплоты плавления и ниже теплоты испарения. Это соответствует диапазону существования жидкоподвижных частиц по классификации на основе концепции хаотизированных частиц.

2. Предложена формула для оценки энергии активации самодиффузии, согласно которой она составляет около половины от теплоты испарения вещества.

3. С помощью температурной зависимости для доли жидкоподвижных частиц выражена аналогичная закономерность для доли самодиффундирующих частиц. Показано, что в точке плавления эта доля, как правило, не превышает 10^{-5} .

4. Принадлежность самодиффундирующих частиц к классу жидкоподвижных частиц дополняет представление о последних как о резервуаре для реализации равновесных и неравновесных состояний кристаллического вещества, таких как предрасположенность к растворению и плавлению, к упругой и пластической деформации, в которых роль самодиффундирующих частиц по их наиболее высокому энергетическому статусу сводится к инициированию соответствующих изменений этих состояний.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Свойства элементов: Справ, изд. / Под ред. М. Е. Дрица. – М.: Металлургия, 1985. – 672 с.
- 2 Больцман Л. Избранные труды. Молекулярно-кинетическая теория газов. Термодинамика. Статистическая механика. Теория излучения. Общие вопросы физики. – М.: Наука, 1984. – 590 с.
- 3 Леонтович М.А. Введение в термодинамику. Статистическая физика. – М.: Высш. школа, 1983. – 416 с.
- 4 Malyshev V.P., Nurmagambetova (Makasheva) A.M. United interpretation of aggregate substance conditions by degree of its chaotization // Eurasian Physical technical journal. – 2004. – Vol. 1, N 2. – P. 10-14.
- 5 Мальшев В.П., Бектурганов Н.С., Турдукожаева (Макашева) А.М., Сулейменов Т. Основные понятия и зависимости в концепции хаотизированных частиц // Вестник Национальной инженерной академии РК. – 2009. – № 1. – С. 71-85.
- 6 Мальшев В.П., Турдукожаева А.М., Сулейменов Т. Виртуальность твердого, жидкого и газообразного состояний вещества // Энциклопедия инженера-химика. – 2009. – № 12. – С. 13-23.
- 7 Malyshev V.P., Turdukozhaeva A.M. Boltzmann distribution as a basis of the concept of randomized particles // Industrial technology and engineering. – 2011. – № 1. – P. 61-76.
- 8 Мальшев В.П., Абдрахманов Б.Т., Нурмагамбетова А.М. Плавкость и пластичность металлов. – М.: Научный мир, 2004. – 148 с.
- 9 Налимов В.В. Теория эксперимента. – М.: Наука, 1977. – 207 с.
- 10 Рузинов Л.П. Статистические методы оптимизации химических процессов. – М.: Химия, 1972. – 486 с.
- 11 Дукарский О.М., Закурдаев А.Г. Статистический анализ и обработка данных на ЭВМ «Минск-22». – М.: Статистика, 1971. – 179 с.
- 12 Сиськов В.И. Корреляционный анализ в экономических исследованиях. – М.: Статистика, 1975. – 168 с.
- 13 Шеннон К.Э. Имитационное моделирование систем – искусство и наука. – М.: Мир, 1978. – 418 с.
- 14 Мальшев В.П. К определению ошибки эксперимента, адекватности и доверительного интервала аппроксимирующих функций // Вестник НАН РК. – 2000. – № 4. – С. 22-30.
- 15 Сороко Э.М. Управление развитием социально-экономических структур. – Минск: наука и техника, 1985. – 144 с.
- 16 Мальшев В.П., Турдукожаева А.М., Оспанов Е.А., Саркенов Б. Испаряемость и кипение простых веществ. – М.: Научный мир, 2010. – 304 с.
- 17 Мальшев В.П., Бектурганов Н.С., Турдукожаева А.М. Вязкость, текучесть и плотность веществ как мера их хаотизации. – М.: Научный мир, 2012. – 288 с.

REFERENCES

- 1 Svoystva jelementov: Sprav, izd. Pod red. M. E. Drica. M.: Metallurgija, 1985. 672 s.
- 2 Bol'cman L. Izbrannye trudy. Molekuljarno-kineticheskaja teorija gazov. Termodinamika. Statisticheskaja mehanika. Teorija izlucheniya. Obshhie voprosy fiziki. M.: Nauka, 1984. 590 s.
- 3 Leontovich M.A. Vvedenie v termodinamiku. Statisticheskaja fizika. M.: Vyssh. shkola, 1983. 416 s.
- 4 Malyshev V.P., Nurmagambetova (Makasheva) A.M. United interpretation of aggregate substance conditions by degree of its chaotization. Eurasian Physical technical journal. 2004. Vol. 1, N 2. R. 10-14.
- 5 Malyshev V.P., Bekturganov N.S., Turdukozhaeva (Makasheva) A.M., Sulejmenov T. Osnovnye ponjatija i zavisimosti v koncepcii haotizirovannyh chastic. Vestnik Nacional'noj inzhenernoj akademii RK. 2009. № 1. S. 71-85.
- 6 Malyshev V.P., Turdukozhaeva A.M., Sulejmenov T. Virtual'nost' tverdogo, zhidkogo i gazoobraznogo sostojanij veshhestva. Jenciklopedija inzhenera-himika. 2009. № 12. S. 13-23.
- 7 Malyshev V.P., Turdukozhaeva A.M. Boltzmann distribution as a basis of the concept of randomized particles. Industrial technology and engineering. 2011. № 1. P. 61-76.
- 8 Malyshev V.P., Abdrahmanov B.T., Nurmagambetova A.M. Plavkost' i plastichnost' metallov. M.: Nauchnyj mir, 2004. 148 s.
- 9 Nalimov V.V. Teorija jeksperimenta. M.: Nauka, 1977. 207 s.

- 10 Ruzinov L.P. Statisticheskie metody optimizacii himicheskikh processov. M.: Himija, 1972. 486 s.
- 11 Dukarskij O.M., Zakurdaev A.G. Statisticheskij analiz i obrabotka dannyh na JeVM «Minsk-22». M.: Statistika, 1971. 179 s.
- 12 Sis'kov V.I. Korreljacionnyj analiz v jekonomicheskikh issledovanijah. M.: Statistika, 1975. 168 s.
- 13 Shannon K.Je. Imitacionnoe modelirovanie sistem – iskusstvo i nauka. M.: Mir, 1978. 418 s.
- 14 Malyshev V.P. K opredeleniju oshibki jeksperimenta, adekvatnosti i doveritel'nogo intervala approksimirujushhih funkcij. Vestnik NAN RK. 2000. № 4. S. 22-30.
- 15 Soroko Je.M. Upravlenie razvitiem social'no-jekonomicheskikh struktur. Minsk: nauka i tehnika, 1985. 144 s.
- 16 Malyshev V.P., Turdukozhaeva A.M., Ospanov E.A., Sarkenov B. Isparjaemost' i kipenie prostyh veshhestv. M.: Nauchnyj mir, 2010. 304 s.
- 17 Malyshev V.P., Bekturganov N.S., Turdukozhaeva A.M. Vjazkost', tekuchest' i plotnost' veshhestv kak mera ih haotizacii. M.: Nauchnyj mir, 2012. 288 s.

Резюме

В. П. Мальшев, А. М. Мақашева

(Химия-металлургия институты, Қарағанда, Қазақстан)

ӨЗДІГІНЕН ДИФFUЗИЯЛАНУДАҒЫ БЕЛСЕНДІРІЛУ ЭНЕРГИЯСЫНЫҢ БЕЙБЕРЕКЕТТЕНГЕН БӨЛШЕКТЕР ТҰЖЫРЫМДАМАСЫМЕН БАЙЛАНЫСЫ

Типтес металдар бойынша өздігінен диффузиялану белсенділігінің энергиясы және қайнау, балқу жылулары бойынша анықтамалық мәліметтерге талдау жасау негізінде өздігінен диффузияланудың белсендіру энергиясы, осы металдардың балқу жылуынан жоғары және булану жылуынан төмен болып қалатыны анықталды. Бұл бейберекеттенген бөлшектер тұжырымдамасы негізінде топтастыру бойынша сұйық қозғалысты бөлшектер болатын диапазонға сәйкес келеді.

Қатты күйде өздігінен диффузиялануға қабілетті бөлшектердің энергетикасы бойынша сұйыққозғалысты бөлшектер болатын диапазонға сәйкес келу факті, бейберекеттенген бөлшектердің осы класының қосымша маңызды физикалық мағынасын дәлелдейді. Металдардың ерігіштігі мен иілгіштігін қамтамасыз етумен қатар, сұйық қозғалысты бөлшектер әрі диффузияға қабілетті бола тұрып, осы негізде өзінің ұтқыр табиғатын және тепе-теңдіктегі термодинамикалық күйден тепе-тең емес кинетикалыққа ауысқанда иілгіштік пен ерігіштіктің іске асу механизмін барынша дәлдікпен айқындайды.

Өздігінен диффузияланудың белсендіру энергиясына бағалау жасау үшін формула ұсынылды, оған сәйкес ол, заттың булану жылуының жартысына жақынын құрайды. Өздігінен диффузияланатын бөлшектердің үлесі үшін температуралық тәуелділік шығарылып алынды.

Тірек сөздер: балқу жылуы, қайнау жылуы, өздігінен диффузиялану, бейберекеттенген бөлшектер.

Summary

V. P. Malyshev, A. M. Makasheva

(Chemical-metallurgical institute, Karaganda, Kazakhstan)

CONTACT THE ACTIVATION ENERGY OF SELF-DIFFUSION OF THE CONCEPT OF RANDOMIZED PARTICLES

Based on the analysis of reference data for the heat of melting, the heat of boiling and the activation energy of self-diffusion for typical metals found that the activation energy of self-diffusion remains above the melting heat and lower heat of evaporation of these metals. This corresponds to the existence of liquid-mobile particles by classification based on the concept of randomized particles.

The fact that the particles are able to self-diffusion in the solid state, the energy correspond to the range of the existence liquid-mobile particles, indicating a further important physical sense of this class of randomized particles. In addition to providing plasticity and solubility of metals, liquid-mobile particles being also diffusing and, on this basis more specifically reveal its mobile nature and implementation mechanism of the plasticity and solubility of the transition from the state of thermodynamic equilibrium to a nonequilibrium kinetic.

A formula for estimating the activation energy of self-diffusion is proposed by which it is approximately half of the heat of evaporation of the substance. The temperature dependence of the proportion of self-diffusion of the particles is derived.

Keywords: heat of melting, heat of boiling, self-diffusion, randomized particles, metals.

Поступила 10.03.2014г.