

УНИВЕРСАЛЬНЫЕ МЕЖАТОМНЫЕ СВЯЗИ И РАЗНООБРАЗНЫЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

Свойства сталей, сплавов, композитов и других неорганических и органических материалов зависят от химического состава и структуры макро-, микро-, наномасштабов и, в конечном счете, от атомарной структуры, т.е. от того, как непосредственно атомы расположены относительно друг друга в веществе.

Экспериментальные результаты, полученные при использовании рентгеноструктурного анализа уже в первой трети XX в., убедили исследователей в том, что атомы в конденсированных веществах, занимают совершенно определенные позиции относительно друг друга.

Однако о механизме, который обеспечивает четкое позиционирование атомов относительно друг друга и формирования различных кристаллических решеток, понимания до сих пор нет.

Заполнение пространства и формирование атомарных структур

При заполнении пространства плотной упаковкой твердых шаров их центры совпадают с узлами ГЦК и ГПУ кристаллических структур. Между шарами остаются пустоты. Чтобы их не было, шарам надо проникнуть друг в друга. Решение задачи редчайшего заполнения пространства [1], т.е. полное заполнения с минимальным взаимопроникновением, оказалось возможным за счет парного взаимного проникновения сфер [2; 3] (рис. 1).

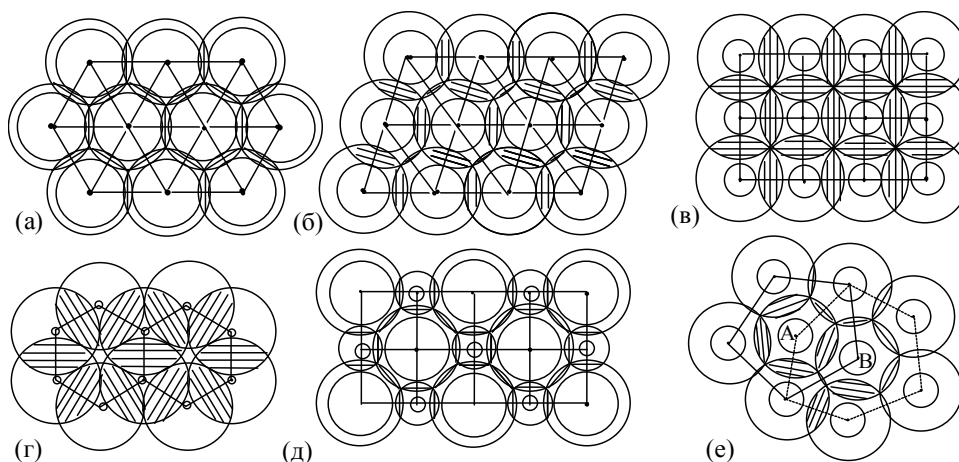


Рис. 1. Структуры из взаимно проникающих сферических тел.

Заштрихованы области парного взаимного проникновения (ОПВП). $\Gamma_{\text{п}}/P_{\text{с}}$ – соотношения глубины проникновения и радиуса сферы: а) $\Gamma_{\text{п}}/P_{\text{с}} = 0,268$, решетка ГЦК - кристаллографическая плоскость (111); б) $\Gamma_{\text{п}}/P_{\text{с}} = 0,366$, ОЦК – (011); в) $\Gamma_{\text{п}}/P_{\text{с}} = 0,586$, ПК – (001); г) $\Gamma_{\text{п}}/P_{\text{с}} = 0,845$ – графен; д) ионный кристалл типа NaCl; е) аморфная структура

Оказалось, что положение центров сферических тел в результате парного взаимного проникновения соответствует положению узлов кристаллических решеток, разных в зависимости от отношения глубины проникновения и радиуса сферы ($\Gamma_{\text{п}}/P_{\text{с}}$), рис. 1. Это могут быть решетки веществ с разными, как считается в настоящее время, типами химической связи (металлической, ковалентной, ионной и др. [2–4]). Следовательно, в качестве классических моделей атомов больше оснований рассматривать взаимно проникающие сферические тела, но не твердые шары.

Квантово-классическая модель атомов

Внутренняя область и оболочка. Согласно современной электронной модели атома (СЭМА), квантовый принцип Паули предписывает наличие определенного набора внутренних (остовных) электронов и запрещает существование других. Тем самым принцип Паули предписывает, во-первых, определенность геометрических размеров области внутренних электронов и, во-вторых, запрещает взаимное проникновение атомов глубже, чем до внутренних областей.

У многих атомов не все, разрешенные Паули уровни, заняты внешними электронами и могут быть дополнены. Следовательно, в-третьих, принцип Паули допускает взаимное проникновение атомов. Но, в соответствии с принципом Паули у электронов на одном квантовом уровне должны быть разные спины, а их только два (2). Поэтому, в-четвертых, принцип Паули предписывает парность взаимного проникновения атомов.

Нейтральность атомов. В соответствии с принципом неопределенности Гейзенберга положение электронов в атоме не может быть определено. Но результат взаимодействия электронов с протонами ядра и между собой известен. Атом нейтрален. Нейтральность атома означает, что вне объема атома полей его протонов и электронов нет. Поля отрицательных зарядов электронов и положительных зарядов протонов атома самосогласованы внутри атома¹. Заряд внешних электронов равномерно распределен по сферической оболочке и нейтрализует положительный заряд протонов, не нейтрализованный внутренними электронами. Следовательно, нейтральность атома свидетельствует об определенности формы и размеров атома.

¹ Туннельные эффекты – это отклонения, подтверждающие правило.

Таким образом, классическая определенность формы, размеров и нейтральность квантово классической модели атомов соответствуют базовым принципам Паули и Гейзенберга квантовой физики.

Универсальные межатомные связи

При взаимном проникновении не нейтрализованные внутренними электронами заряды протонов одних атомов притягивают проникающие в них атомы, притягивая части сфер (купола) проникших в них атомов. Так возникают межатомные связи между любыми атомами.

Пространственные электронные структуры и свойства.

У областей парного взаимного проникновения (ОПВП) на рис. 1 заштрихованных, из-за различий атомов и их колебаний, разные размеры, наполнение электронами и удаленность от ядер и друг от друга. Это влияет на пространственную электронную структуру конденсированных веществ и атомов в них и, следовательно, на свойства материалов.

Изотропия и анизотропия свойств. В ГЦК и ОЦК структурах у каждого атома большое число равномерно распределенных ОПВП в первой координационной сфере: двенадцать и восемь, соответственно, в графене только три (рис. 1), а в алмазе – четыре [3]. Так как атомы в конденсированных веществах соединяются этими областями, то уже из их расположения следует, что механические свойства металлов должны быть более однородными по направлениям, чем свойства алмазных кристаллов и тем более графена. В то же время у ОЦК металлов анизотропия свойств должна быть выражена в большей степени, чем у металлов с ГЦК структурой. И первое, и второе соответствуют реальности. Для других свойств материалов тоже характерно распределение свойств по направлениям, соответствующее пространственной форме электронной структуры.

Сжатие при упругом растяжении. Сужение металлических образцов при растяжении в области упругих деформаций с точки зрения классической механики необъяснимо. Чтобы образец сужался, необходимы силы, перпендикулярные вектору силы растяжения. Но такие силы, согласно классической механике, возникнуть не могут. Попытки обсуждения этого важного свойства металлических и других материалов с позиций квантовой механики автору неизвестны. Применение квантово-классической модели атомов и их парного взаимного проникновения позволяет понять это явление и просто его объяснить.

На рис. 3 представлен фрагмент ячейки конденсированного вещества из взаимно проникающих атомов.

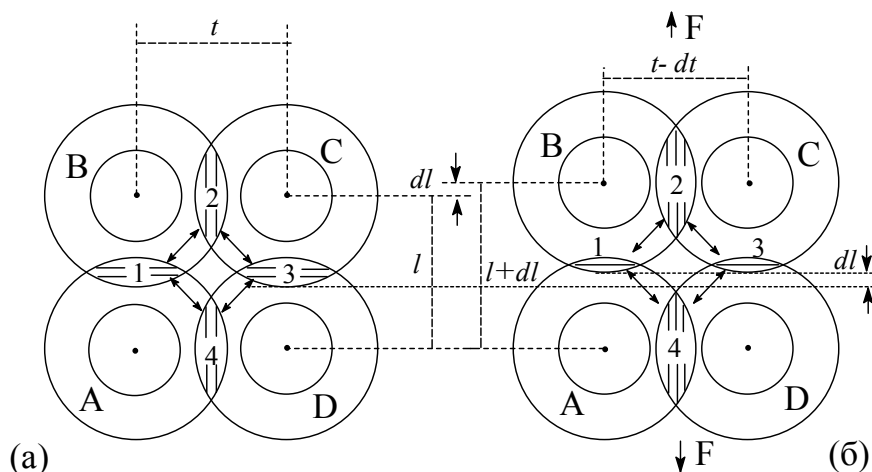


Рис. 3. Исходная ячейка (а) шириной t и длиной l растянута (б) силой F до длины $l+dl$. Ширина ячейки уменьшается до $t-dt$

При растяжении силой F перпендикулярные направлению растяжения области парного взаимного проникновения и их купола 1 и 3 удаляются от ядер пар атомов АВ и CD и становятся меньше. Силы отталкивания ими куполов 2 и 4 тоже уменьшаются. Следовательно, ядра пар атомов AD, как и BC могут ближе притянуть к себе купола 2 и 4 и таким образом сблизиться между собой в перпендикулярном растяжению направлении. Если сила F исчезнет, исходные размеры восстановятся.

Электропроводимость. Электроны проводимости в модели взаимопроникновения атомов могут перемещаться по пространству материала через ОПВП (рис. 1).

У веществ от диэлектриков до высокотемпературных сверхпроводников существует четкая корреляция между уровнем электропроводимости и характеристиками ОПВП: количеством электронов в них, размерами ОПВП, их расположением [5]. Чем меньше электронов в ОПВП, тем легче электронам двигаться через них. Если в ОПВП может быть 8 электронов, т.е. максимальное значение для них в атомах, то проводимости практически нет, как в диэлектрике алмазе. Если такие ОПВП удалены от ядер, например, как у кремния в сравнении алмазом, то электроны слабее связаны с ядром. При возбуждении они частично покидают ОПВП и кремний проявляет свойства полупроводника.

При понижении температуры атомы сближаются, а ОПВП увеличиваются. Плотность электронов в ОПВП снижается и поэтому электропроводимость увеличивается. С уменьшением температуры между атомами и ОПВП расстояние уменьшается, поэтому электропроводимость повышается. При сближении ОПВП до соприкосновения (рис. 1), внешние электроны могут перемещаться без затрат энергии на преодоление расстояний между областями парного взаимного проникновения – возникает сверхпроводимость. Чем выше температура, при которой ОПВП смыкаются (рис. 1), тем выше температура сверхпроводимости (T_c).

Заключение

При использовании модели парного взаимного проникновения можно просто и наглядно объяснить формирование структуры и свойств материалов и конденсированных веществ на атомном уровне.

Развитие этой модели, надеется автор, позволит существенно уменьшить объемы натурных исследований и испытаний при выборе направлений инноваций для улучшения существующих и создания новых материалов с заданными функциональными свойствами.

Список использованных источников

1. *Галиулин Р.В.* Кристаллографическая геометрия. М.: Наука. 1984. 136 с.
2. *Титоров Д.Б.* Кристаллография. 2001. № 1. С. 25–27.
3. *Титоров Д.Б.* Поверхность. 2003. № 6. С. 93–98.
4. *Титоров Д.Б.* ФММ. 2007. № 4. С. 413–419.
5. *Титоров Д.Б.* Научное обозрение. 2005. № 5. С. 4–7.