

试验期间室温由 3°C 变化到 12°C。数据受室温的影响,产生偏离。主要是因为体效应管振荡器在环境温度变化时其频率和输出功率有所改变。为克服这一影响,可将振荡器置于恒温槽内。因振荡器体积不大,实现恒温并不困难。

微波元件及样品因室温引起的测量偏差较小,这一偏差可用补偿法加以克服。采用补偿法还可以避免生产上因原料来源引起的麻烦。

用图 3 的办法解决自动测量和读数,微波对稀土溶液浓度的监测可直接用于生产流水线。

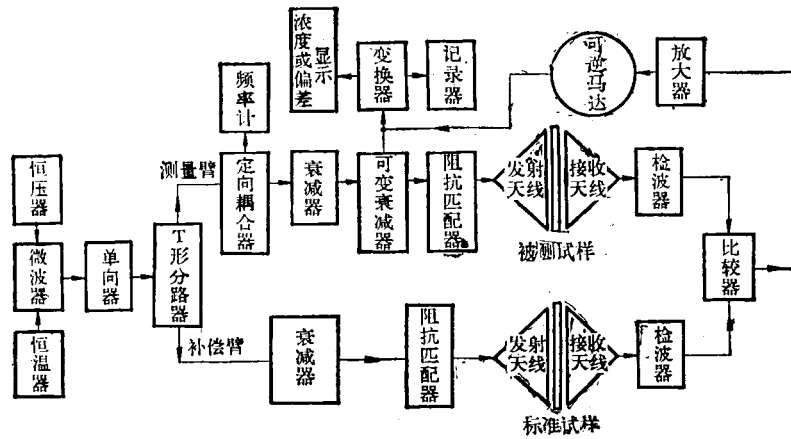


图 3 浓度自动测量法原理框图

### 参 考 文 献

[1] A. Kraszewski, *J. Microwave Power*, 8-3,4 (1973), 323.

[2] Laverghetta, Thomas S., *Microwave Measurement and Techniques*, Dedham, Mass., Artech House, (1976), 93.  
 [3] 谢处方、饶克谨, 电磁场与电磁波, 人民教育出版社, (1980), 36.

## 对非晶态合金结构与成分的一点探讨

张 守 国

(东北工学院物理系)

1981年2月12日收到

在通常的工艺条件下(冷却速度约 10<sup>6</sup>°C/s),人们已从实验上制备出若干非晶态合金系列,并对形成非晶态合金成分范围作了分类<sup>[1]</sup>:对过渡金属与类金属,溶质原子成分在 15—25at% 较容易形成非晶态合金;对金属与金属,溶质原子成分在 25—50at% 亦较容易形成非晶态合金;但溶质原子成分低于 15at% 或高于 50at%, 形成非晶态合金较难。

本工作是在 Polk 和 Bennett<sup>[2,3]</sup> 等人工作

的基础上,提出一种新的结构模型——菱面体单元模型,认为非晶态的结构是以菱面体单元无规堆积而成的结构。本文由菱面体单元模型计算出的合金成分与实验获得的合金成分相吻合,并解释了较易或较难形成非晶态合金的成分范围。文中以 Ni-P 合金为例,由菱面体单元模型计算出非晶态合金密度和径向分布函数与实验测得的结果<sup>[4]</sup>相吻合。

# 一、菱面体单元模型及其合金成分的计算

菱面体单元如图 1 和图 2 所示, 它是由两个正四面体和一个正八面体组成的. 设单元参数——边长为  $a_0$ , 两边之间的夹角为  $\alpha_0(60^\circ)$ , 对角线长为  $L_0(\overline{aa})$ , 体积为  $V_0$ . 菱面体单元还可以看成由垂直  $L_0$  的(111)面有规堆迭成的层状结构, 层间距也是(111)晶面的面间距.

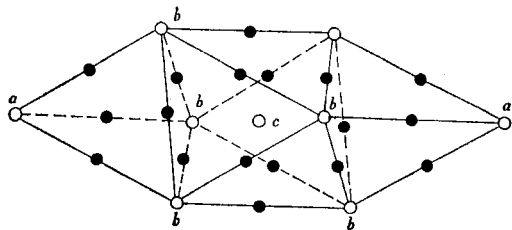


图 1  $A_3B(A_{75}B_{25})$  结构

- 表示溶剂金属原子占据的位置;
- 表示溶质类金属原子可能占据的位置

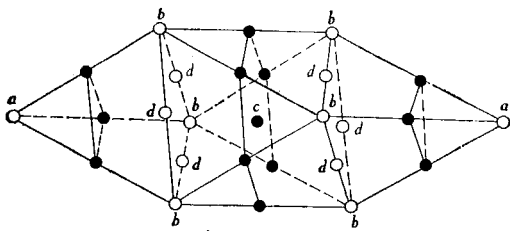


图 2  $AB(A_{50}B_{50})$  结构

- 表示溶剂金属原子占据的位置;
- 表示溶质金属原子可能占据的位置

菱面体单元是由 27 个原子组成的一个原子团, 这些原子分别在单元的八个角顶, 十二个棱中心, 六个面中心和一个体中心的位置. 这些不同位置的原子属于单元内的原子数也不同, 两个角顶的  $a$  位置每个是 0.05, 六个角顶的  $b$  位置每个是 0.15, 体中心的  $c$  位置是 1, 六个面中心的  $d$  位置每个是 0.5, 八面体的六个棱中心的位置每个是 0.3042, 两个四面体六个棱中心的位置每个是 0.1958, 所以属于单元内的原子数为 8 个.

设  $A$  为溶剂原子 (金属原子),  $B$  为溶质原子 (类金属或金属原子), 在形成  $A-B$  非晶态合

金时, 对于金属与类金属非晶态合金由于类金属原子不能成为最近邻, 所以  $B$  原子可能占据的位置只能是单元的八个角顶和一个体中心.  $B$  原子占据一个  $a$  位置, 就是一种结构, 可计算出一种合金成分. 三个  $a$  可进到一个  $b$ , 两个  $a$  加六个  $b$  可进到一个  $c$  或两个  $d$ , 一个  $c$  也可进两个  $d$ . 如图 1 所示, 金属与类金属非晶态合金的  $A_3B$  结构,  $B$  原子把全部不成最近邻的位置都占满了, 形成一种  $2a6bc$  结构, 如果  $B$  原子再增加, 就要破坏类金属原子不能成为最近邻原则, 所以金属与类金属非晶态合金结构是从  $a$  到  $2a6bc$  这些结构, 计算出  $A_{100-x}B_x$  成分在表 1 中  $x = 0.6-25at\%$ . 图 2 表示金属与金属非晶态合金的  $AB$  型结构, 由于  $B$  原子可以成为最近邻, 所以  $B$  原子可能占据所有的  $a, b, c, d$  位置, 但因这类合金的混合熔

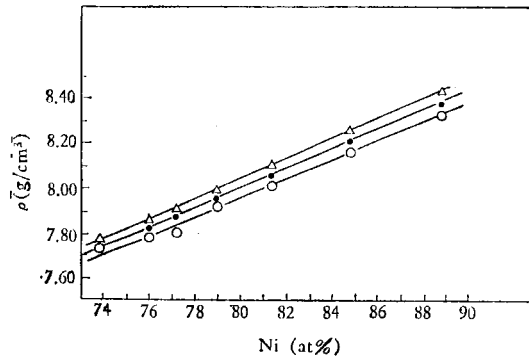


图 3 Ni-P 合金的密度

- 非晶态合金密度的实验值;
- 非晶态合金密度的计算值;
- △ 430°C 退火后合金密度实验值

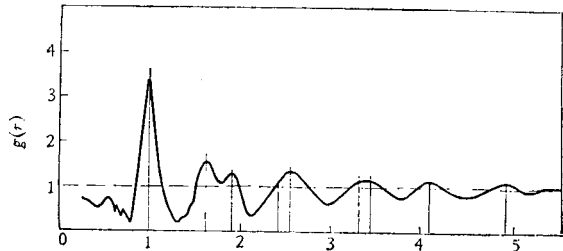


图 4 非晶态 Ni-P 合金  $g(r)$  (配位分布函数) 曲线实验值与计算值(竖直线)的比较 ( $r$  以第一峰位置  $r_1$  为单位)

- 实验值——以曲线表示各峰的位置和高度;
- 计算值——以竖直线表示各峰最大值的位置和高度

表 1 非晶态合金的结构与成分

结构	B 数	$A_{100-x}B_x$	结构	B 数	$A_{100-x}B_x$	结构	B 数	$A_{100-x}B_x$	结构	B 数	$A_{100-x}B_x$
<i>a</i>	0.05	0.6	<i>ac</i>	1.05	13.1	<i>a4d</i>	2.05	25.6	<i>a6d</i>	3.05	38.1
<i>2a</i>	0.10	1.2	<i>2ac</i>	1.10	13.7	<i>2a4d</i>	2.10	26.2	<i>2a6d</i>	3.10	38.7
<i>b</i>	0.15	1.9	<i>bc</i>	1.15	14.4	<i>b4d</i>	2.15	26.9	<i>b6d</i>	3.15	39.4
<i>ab</i>	0.20	2.5	<i>abc</i>	1.20	15.0	<i>ab4d</i>	2.20	27.5	<i>ab6d</i>	3.20	40.0
<i>2ab</i>	0.25	3.1	<i>2abc</i>	1.25	15.6	<i>2ab4d</i>	2.25	28.1	<i>2ab6d</i>	3.25	40.6
<i>2b</i>	0.30	3.7	<i>2bc</i>	1.30	16.2	<i>2b4d</i>	2.30	28.7	<i>2b6d</i>	3.30	41.2
<i>a2b</i>	0.35	4.4	<i>a2bc</i>	1.35	16.9	<i>a2b4d</i>	2.35	29.4	<i>a2b6d</i>	3.35	41.9
<i>2a2b</i>	0.40	5.0	<i>2a2bc</i>	1.40	17.5	<i>2a2b4d</i>	2.40	30.0	<i>2a2b6d</i>	3.40	42.5
<i>3b</i>	0.45	5.6	<i>3bc</i>	1.45	18.1	<i>3b4d</i>	2.45	30.6	<i>3b6d</i>	3.45	43.1
<i>a3b</i>	0.50	6.2	<i>a3bc</i>	1.50	18.7	<i>a3b4d</i>	2.50	31.2	<i>a3b6d</i>	3.50	43.7
<i>2a3b</i>	0.55	6.9	<i>2a3bc</i>	1.55	19.4	<i>2a3b4d</i>	2.55	31.9	<i>2a3b6d</i>	3.55	44.4
<i>4b</i>	0.60	7.5	<i>4bc</i>	1.60	20.0	<i>4b4d</i>	2.60	32.5	<i>4b6d</i>	3.60	45.0
<i>a4b</i>	0.65	8.1	<i>a4bc</i>	1.65	20.6	<i>a4b4d</i>	2.65	33.1	<i>a4b6d</i>	3.65	45.6
<i>2a4b</i>	0.70	8.7	<i>2a4bc</i>	1.70	21.2	<i>2a4b4d</i>	2.70	33.7	<i>2a4b6d</i>	3.70	46.2
<i>5b</i>	0.75	9.4	<i>5bc</i>	1.75	21.9	<i>5b4d</i>	2.75	34.4	<i>5b6d</i>	3.75	46.9
<i>a5b</i>	0.80	10.0	<i>a5bc</i>	1.80	22.5	<i>a5b4d</i>	2.80	35.0	<i>a5b6d</i>	3.80	47.5
<i>2a5b</i>	0.85	10.6	<i>2a5bc</i>	1.85	23.1	<i>2a5b4d</i>	2.85	35.6	<i>2a5b6d</i>	3.85	48.1
<i>6b</i>	0.90	11.2	<i>6bc</i>	1.90	23.7	<i>6b4d</i>	2.90	36.2	<i>6b6d</i>	3.90	48.7
<i>a6b</i>	0.95	11.9	<i>a6bc</i>	1.95	24.4	<i>a6b4d</i>	2.95	36.9	<i>a6b6d</i>	3.95	49.4
<i>2a6b</i>	1.00	12.5	<i>2a6bc</i>	2.00	25.0	<i>2a6b4d</i>	3.00	37.5	<i>2a6b6d</i>	4.00	50.0

点温度较高, B 原子成分也应较高, 所以 B 原子可从占据  $a4d$  位置开始, 一直占满  $a, b, c, d$  所有位置, 即  $2a6bc6d$ , 计算出  $A_{100-x}B_x$  的成分为  $x = 25.6-62.5\text{at}\%$ 。

由菱面体单元模型计算出的表 1 中非晶态合金的结构与成分是互相对应的, 也就是实验上获得某种成分的非晶态合金, 在表 1 中能够查到它的结构, 即各种元素原子在菱面体单元中的位置及个数。菱面体单元的体积  $V_0$ , 可由合金基体原子的直径计算出来。这样非晶态合金的密度就可以计算出来, 图 3 表示出 Ni-P 合金密度的实验值与计算值的比较, 误差在 0.5% 左右。已知合金基体原子直径, 由菱面体单元模型可计算出配位分布函数  $g(r)$ 。图 4 给出 Ni-P 合金  $g(r)$  曲线各峰的位置及相对高度的计算值与实验值的比较, 也是互相吻合的。

## 二、金属与类金属和金属与金属非晶态合金的结构特征

仔细分析表 1 列出的所有结构, 可以分为五个周期四种类型: 第一周期从  $a$  到  $2a6b$  结构, 单元中心没有类金属原子 B; 第二周期从  $ac$  到  $2a6bc$  结构, 单元中心有类金属原子 B; 第三和第四周期从  $a4d$  到  $2a6b6d$  结构, 单元中心没有金属原子 B; 第五周期从  $ac6d$  到  $2a6bc6d$  结构, 单元中心有金属原子 B。我们分析四种类型结构的特征, 只要分析二、三类, 对比可看出一、四类。二类以  $A_3B$  结构为例, 如图 1 所示是一种球面壳层结构, 球心是 B 原子, 第一球面壳层有十二个 A 原子, 第二球面壳层有六个 B 原子, 第三球面壳层有六个 A 原子,

第四球面壳层有二个 B 原子, 形成完全有序的 BABAB 球面壳层结构。三类以 AB 结构为例, 如图 2 所示是一种平面层状结构, 中心六角形平面有七个 A 原子, 正负一层大三角形平面各有六个 B 原子, 正负二层小三角形平面各有三个 A 原子, 正负三层各有一个 B 原子, 形成完全有序的平面层状结构 BABABAB (从一端算起)。  $A_3B$  和 AB 结构是典型的成分短程有序结构。

我们再从化学键合的强弱分析四类结构的稳定性, 由于静电作用和极化作用, 异类原子间存在很强的短程作用力, 使成分短程有序的原子的结合得很紧。二类结构中心与第一壳层是异类原子, 而一类结构是同类原子, 二类比一类结构键合得更强, 因而二类比一类结构更稳定。三类结构的中心与  $d$  层是异类原子, 而四类全是同类原子, 三类比四类键合得更强, 因而三类比四类结构更稳定。因此从结构的稳定性来看, 具有二类结构 (成分为 13.1—25at%) 的金属与类金属非晶态合金形成较容易, 具有三类结构 (成分为 25.6—50at%) 的金属与金属非晶态合金形成也较容易, 而一类结构 (成分低于 13.1at%) 和四类结构 (成分高于 50at%) 形成非晶态合金较难。

## 参 考 文 献

- [1] R. W. Cahn, *Contemp. Phys.*, 21-1 (1980), 43—75.
- [2] C. H. Bennett, D. E. Polk and D. Turnbull, *Acta Met.*, 19-12 (1971), 1295.
- [3] D. E. Polk, AD 738 438, (1972).
- [4] G. S. Cargill III, *J. Appl. Phys.*, 41(1970), 12—19.