若干金属间化合物晶格常数和晶格稳定性的规律性

我们用计算机人工神经网络和化学键参数方法相结合，总结金属间化合物晶格常数的规律性：取 141 个已测过晶格常数的金属间化合物(分别属于 $MgCu_2$, $MgZn_2$, $AuCu_2$, CsCl 晶型)为训练集，以 A, B 元素的原子半径(Teatum 值)、价电子数和 Pauling 电负性为人工神经网络的输入值，用 BP 法训练有三层节点的人工神经网络，用交叉检验法考查对未知金属间化合物晶格常数的预报能力．结合表明预报误差(方差值)在 0.01 nm 左右．这说明：金属间化合物的晶格常数是主要取决于原子半径、电负性和价电子数的函数．

金属间化合物的原子常倾向于密堆．例如：理想的 $MgCu_2$ 型或 $MgZn_2$ 型晶格要求 A, B 原子半径比 $R_A/R_B=1.225\,0$ 理想的 $AuCu_3$ 晶格 R_A/R_B 应接近 1.0．但实际情况是 R_A, R_B 在相当大范围都有某一晶格形成．因此通常认为形成晶格时某些原子的尺寸被“压缩”，即产生内形变(Internal strain)．可用实测晶格常数算出 A-A, B-B, A-B 原子间距和 Teatum 原子半径和相减算出代表内形变的差值 δ,δ 代表原子直径在形成晶格时变化的程度．

考查 δ 和晶格稳定性的关系是很有意义的，某一类型晶格的化合物是否形成(Formability)应是该类晶型稳定程度的表现．某一类型晶格的熔化类型(同分熔化或异分熔化．在此同分熔化表示较稳定)也应是稳定程度的表现．用 δ 对上述稳定性表征作单因子考查不能找出明显对应关系．但若以 δ 和电负性差 ΔX 作纵横坐标作图可看出一定规律．这说明电荷迁移对晶格稳定性关系甚大．一种合理的解释是：失去电子的原子半径减小，获得电子的原子半径增大，因而改变了 R_A/R_B 值使接近于密堆要求．由于 δ 计算依据未变化的原子半径值，故仅靠 δ 值不能确定晶格是否稳定．计算表明：AB_n 型化合物中，若 A 为电负性小的大原子，B 为电负性大的小原子，则形成晶格时 A 原子有效半径显著缩小 B 原子有效半径一般变化不大．故从 B 原子的 Teatum 半径作几何论证即能粗略估计这类化合物的晶格常数．

姚树文　钦　佩　陈念贻

(中国科学院上海冶金研究所，上海 200050)

生物活体温升振荡效应的热波解释 *

生物活体组织受热而发生温度振荡的事实是生物传热领域内长期得不到合理解释的经典难题．Roemer 等在其系列文章中详细研讨了这一问题，但实验难圆其说；Tharp 等则人为选定一时间滞后方程描述该现象，但却缺乏严格理论基础．我们将更能反映导热本质的热波理论引入 Pennes 生物传热方程，成功地解决了上述问题．Pennes 方程为

$$-\nabla\cdot\boldsymbol{q}+W_bC_b(T_b-T)+q_m+q_r=\rho C\partial T/\partial t. \quad (1)$$

非 Fourier 效应导热公式为

$$q(r,t+\tau)=-k\nabla T(r,t), \quad (2)$$

将式(2)进行 Tailor 一次展开并结合式(1)可得新的生物传热模型，热流方程：

$$\nabla[\nabla\cdot\boldsymbol{q}]-W_bC_bq/K-\nabla(q_m+q_r)=(\rho C/K).$$

$$[\tau(\partial^2q/\partial t^2)+\partial q/\partial t]+\frac{W_bC_b\tau}{K}\frac{\partial q}{\partial t}, \quad (3)$$

温度方程：

$$\nabla\cdot K\nabla T(r,t)+[W_bC_b(T_b-T)+q_m+q_r+\tau\cdot(-W_bC_b\partial T/\partial t+\partial q_m/\partial t+\partial q_r/\partial t)]=$$

$$\rho C[\tau(\partial^2 T(r,t)/\partial t^2)+\partial T(r,t)/\partial t], \quad (4)$$

其中 W_h —— 血液灌注率，C_h —— 血液比热，T_h —— 动脉血温度，q_m —— 代谢率，q_r —— 外部热源，ρ, C —— 密度、比热，K —— 热导率，τ —— 热松弛时间.

在常热物性及一定边界条件下，可求出式(4)在二维圆柱坐标下之解析解，分析解的形式可得出 T 是否振荡的严格判据；若近似有限差分 $\nabla^2 T(r,t)\approx(T_\infty+T_c-2T)/(\Delta s)^2$ (其中 T_∞, T_c 代表环境参考点和体核处温度，通常较恒定可认为常数；Δs 为体核到参考点距离的一半)，代入式(4)也可得出一维解的粗略但极有意义的振荡判据. 我们分析得到的结论是：

(1)生物热传导的热波效应必须考虑(如肉类的 $\tau\approx 20\sim 30$s 远大于金属等的 $\tau\approx 10^{-10}\sim 10^{-14}$s 而不能忽略)；(2)在生物热物性范围，$W_h$ 的存在可能使振荡判据得以满足；(3)在一定 W_h 范围内热作用可导致温度振荡，否则 T 单调变化，当 $W_h=0$ 时，即使生物组织材料也不出现振荡；(4)诱发温度振荡的本质原因并非外界加热方式，而是生物体独特的血液换热模式及其内的有限热传播速度；(5)更为复杂的振荡模式的研究可在考虑变物性的情况下得到深入；(6)生物体不同部位的温度因其物性、血灌率、代谢率等不同而可体现出振荡或单调变化的情形；(7)上述结论对于涉及到血液换热的生物传热问题均是适用的.

本文理论可在生物组织类材料中人为赋予类似于血管的热传输功能后用实验加以证实.

刘 静 任泽霈 王存诚

(清华大学热能工程系，北京 100084)

*国家自然科学基金资助项目