

液态合金混合热的模式识别的研究^①

李重河 李 明 唐 波 黄世萍 张未名 陈念貽

(中科院上海冶金研究所, 上海 200050)

摘 要

用模式识别或人工神经网络方法和化学键参数方法相结合, 总结液态合金混合热的规律, 探讨了经验规律的物理意义。

关键词: 液态合金 混合热 模式识别

以前我们曾研究了化学键参数和液态合金混合热的规律^[1]。本文中, 我们采用模式识别或人工神经网络方法和化学键参数相结合, 总结液态合金混合热规律的研究结果。

图1表示由非过渡金属元素组成的二元液态合金按混合热 ΔH ^[2] 的符号(放热或吸热)分类的结果。化学键参数采用 $\Delta(Z/R^3)$ 、 ΔX 和 $\sum(n+r)$; 此处 Z 为原子的价电子数, R 为金属半径, $\Delta(Z/R^3)$ 为两组分元素的 Z/R^3 之差, ΔX 为两个组分元素的电负性差, n 和 r 分别为元素在周期表中的行数和列数, $\sum(n+r)$ 为两个组分元素的 $(n+r)$ 值之和。由图1可见: 混合热为正值和混合热为负值的二元液态合金分布在不同区域, 其间有明显分界线。

也可用人工神经网络方法总结非过渡元素液态合金混合热的规律。用有三个隐节点的三层神经网络, 输入参数取 $\Delta(Z/R^3)$ 、 ΔX 、 $\sum(n+r)$, 用 $\tanh$ 函数为传递函数, 采用 Neural Ware Inc 的计算程序。经训练后的人工神经网络对液态合金混合热能正确分类和预报。

含过渡元素的二元系, 其混合热规律与非过渡金属元素的二元系不同。但比较含同一元素的过渡元素的二元系(化学键参数用另一元素的 Z/R^3 、 X 和 Z), 也可得到一定的规律; 此

处 Z 为元素的价电子数, R 为金属半径, X 为元素的电负性。图2为含 Ag 二元系液态合金按混合热的分类图, 由图可发现吸热和放热的二元液态合金也分布在不同区域。

Z/R^3 近似代表价电子的分布密度, ΔX 近

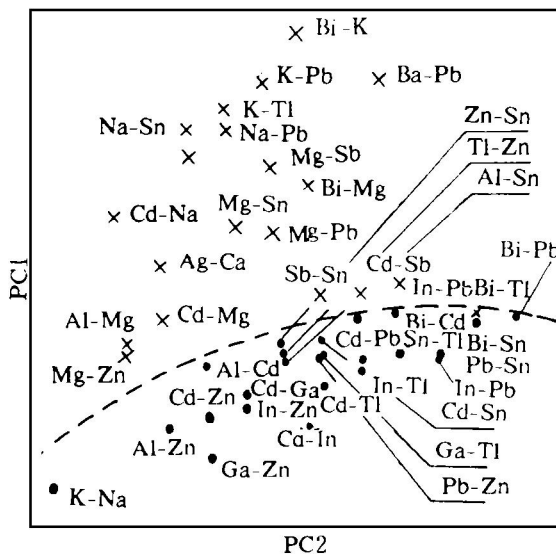


图1 非过渡元素液态混合热和化学键参数的关系(PCA方法)

- —混合热为负值(吸热)的液态合金;
 - × —混合热为正值(放热)且大于 2090 J/mol 的液态合金;
- $PC1 = 0.45 \Delta(Z/R^3) + 0.89 \Delta X - 0.96 \sum(n+r)$;
 $PC2 = 0.89 \Delta(Z/R^3) - 0.84 \Delta X + 0.85 \sum(n+r)$

① 收稿日期: 1993年4月8日; 修回日期: 1993年7月6日

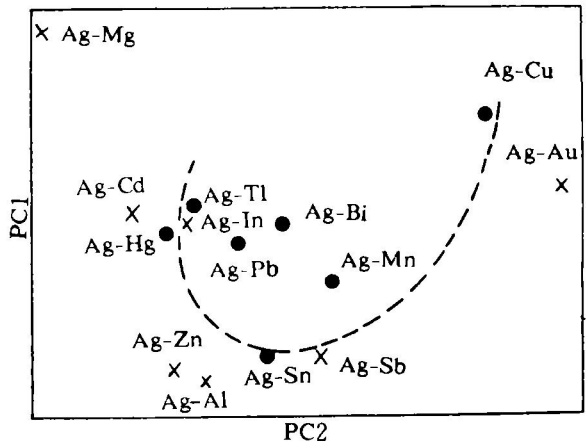


图 2 含 Ag 的二元液态合金按混合热分类的规律(PCA 方法)

• —混合热为负值(吸热)的液态合金;
× —混合热为正值(放热)的液态合金;
 $PC1 = 0.63 (Z/R^3) + 0.50X - 0.592$;
 $PC2 = 0.75 (Z/R^3) - 0.18X + 0.642$

似代表合金形成时的电子迁移程度,这两个参数都与金属或合金的结合能有关。 $\sum (n + r)$ 的物理意义尚不清楚,该参数对重元素起作用,可能与相对论效应有关。

参考文献

1 Jiang Naixiong, Li Qingzhi, Chen Nianyi, Xu Hua. Scientia Sinica, Series B, 1982, 25: 1.
2 Hultgren R *et al.* Selected Values of Thermodynamic Properties of Metals and Alloys. Berkeley: John Wiley & Sons Inc, 1963.