

**Трансформации кубической ячейки при полиморфных превращениях**

Студенты гр. МЦМск-16 Трубухин В.О. Колодин И.И.

Научный руководитель Корицкий Г.Г.

Донецкий национальный технический университет

г. Донецк.

Все металлы являются кристаллическими телами, имеющими определенный тип кристаллической решетки. Различают несколько типов решеток. Наиболее привлекательными для описания и анализа являются кубические решетки. Металлы, чаще всего, кристаллизуются в относительно сложных кубических решетках - объемно центрированной (ОЦК) и графцентрированной (ГЦК).

Сами по себе эти кристаллические решетки особого интереса не представляют. Но, претерпевая полиморфные превращения, задают ряд вопросов. Например, как перестраивается решетка одного и того же металла с изменением базиса (количества атомов, приходящихся на одну ячейку) ровно вдвое? Насколько изменяются параметр и объем решетки в процессе такого полиморфного превращения?

Для ответа на эти вопросы выбрали данные о полиморфных превращениях металлов, включающих схемы переходов ОЦК-ГЦК или ГЦК-ОЦК, а также ГЦК-Гексагон. Источником информации служил пятитомник «Химическая энциклопедия» [1]. Исходные данные были сгруппированы таким образом, чтобы сохранить характер изменения базиса ячейки. Оценивали величину параметра «а» элементарной ячейки и ее объем. Отмечено, что отношение «с/а» у всех гексагональных ячеек выборки составляет величину 1,57...1,63.

Результаты анализа собранных данных приведены на рисунке. Были сопоставлены значения параметров «а» исходных (кубических) ячеек и конечных (после полиморфного превращения), а также объемы указанных ячеек. Для графического представления результатов анализа использовали программу «Advanced Grapher».

Представленные данные показывают, что в результате полиморфного превращения ОЦК-ГЦК параметр кристаллической решетки увеличивается в среднем на 25%, что приводит к увеличению объема ячейки в среднем на 89%...98% - почти вдвое. В результате полиморфного превращения ГЦК-ОЦК параметр кристаллической решетки уменьшается в среднем на 25%, что приводит к снижению объема ячейки в среднем на 89%...98% - почти вдвое. В итоге следует ожидать соответствующего изменения объема металлического образца в момент полиморфного превращения. Однако, как известно, такого эффекта не наблюдают, хотя расчетная плотность ячейки при этом изменяется всего лишь на 1%...6% несмотря на то, что базис в каждом из этих процессов изменяется вдвое (на 100%).

Полиморфный переход кубической ячейки в гексагональную сопровождается значительным уменьшением величины параметра «а» при практически постоянном объеме. Величина базиса ячейки в этих случаях не изменяется.

Исходя из конструкции решеток ОЦК, ГЦК и гексагональной, эффект полиморфного превращения должен сопровождаться значительным переносом массы, отображающим, с одной стороны, изменение конфигурации решетки и увеличение ее базиса вдвое, а с другой – увеличение ее объема тоже почти вдвое. Противоречие между ожидаемым эффектом и реальным поведением материала можно объяснить переориентацией связей между атомами в кристаллической решетке, которые остаются на своих прежних местах, а изменения объема ячейки могут быть связаны с возможным поворотом атомов, очертания которых наверняка отличаются от сферических.

На рисунке показана связь между значениями параметров кристаллических решеток ОЦК, ГЦК и Гексагональной, принимающих участие в полиморфных превращениях. Между начальными и конечными значениями параметра «а» решетки, а также между значениями параметра и объема сохраняется практически линейная зависимость во всех рассмотренных случаях.

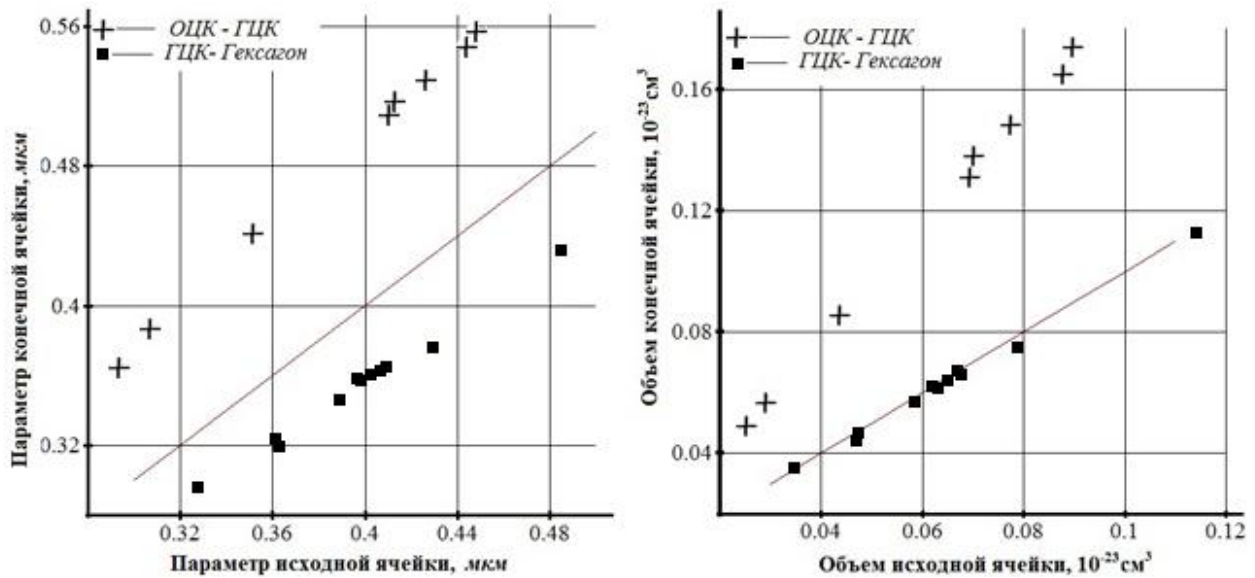


Рисунок 1- Трансформации кристаллических ячеек металлов в результате полиморфных превращений

Выводы.

1. Вне зависимости от природы металла, параметр кристаллической ячейки в результате полиморфного превращения ГЦК-ОЦК увеличивается на 24...26%, а при переходе ГЦК-Гексагон уменьшается на 9...11%;
2. Объем кристаллической ячейки при переходах ОЦК-ГЦК изменяется на 89...97%; а при переходе ГЦК-Гексагон остается практически неизменным
3. Отмеченные изменения параметров ячейки не могут свидетельствовать о наличии массопереноса во время полиморфного превращения.