

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Л. С. ПАЛАТНИК

**КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ФОРМУЛИРОВКА КРИСТАЛЛО-
ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО СООТВЕТСТВИЯ**

(Представлено академиком Д. С. Белянкиным 20 IV 1951)

Под объемным, плоским или линейным когерентным сопряжением двух кристаллических решеток (кристаллографических плоскостей или направлений) следует понимать такое квазиравновесное их сосуществование, при котором имеет место сохранение „непрерывной“ связи и периодичности в трех, двух или одном измерениях. При этом рассматриваются как однотипные, так и разнотипные кристаллические решетки, с одинаковой или разной симметрией.

Явление когерентного сопряжения наблюдалось: а) при мартенситных превращениях (1,2), б) старении сплавов (3,4), в) электролитическом росте (7), г) вакуумном испарении и конденсации металлов и сплавов (9), д) кристаллизации из пересыщенных растворов на анизотропной подложке (5,6), е) окислении и восстановлении металлов (8,9) и т. п.

Повидимому, это явление имеет также место (по крайней мере, в начальной стадии превращений) при различных процессах химической или химико-термической обработки: цементации, азотировании; разложении кристаллических солей и соединений и пр.; при различных процессах механической деформации (сдвиге, изгибе, двойниковании и пр.) в монокристаллах и т. п.

В развитие формулировки С. Т. Конобеевского (3), П. Д. Данков указал кристалло-химический принцип ориентационного и размерного соответствий (5), относящийся к случаю плоского когерентного сопряжения.

Условиями когерентного сопряжения кристаллографических линий, плоскостей и объемов являются, соответственно, равенства:

$$G'_1 = G'_2; \quad (1a)$$

$$S'_1 = S'_2; \quad (1б)$$

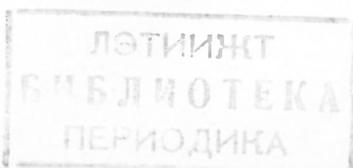
$$V'_1 = V'_2; \quad (1в)$$

$$\frac{D'}{N} = \frac{d'_1}{n_1} = \frac{d'_2}{n_2}. \quad (1г)$$

Кроме того, при объемном сопряжении:

$$D'_1 = D'_2,$$

где G — обобщенный период идентичности линейного сопряжения; $S = [GQ]$ — вектор, перпендикулярный и равный площади обобщенной плоской элементарной ячейки сопряжения; $V = (D [GQ])$ — объем обоб-



щенной элементарной ячейки сопряжения; G, Q — единичные вектора плоской обобщенной ячейки сопряжения; D и d — «обобщенное» и обычное межплоскостные расстояния между соответствующими плоскими элементарными ячейками, параллельными плоскости сопряжения; N и n — числа атомов в обобщенной и обычной элементарных ячейках.

Индексы 1 и 2 относятся, соответственно, к «материнской» и «дочерней» сопрягающимся решеткам (линейной, плоской или объемной); значок ' (штрих) относится к упруго деформированным когерентно сопряженным кристаллографическим элементам*.

Заметим, что величины G', Q', D', S', V' могут быть равными или кратными соответствующим периодам идентичности, межплоскостным расстояниям, площадям и объемам элементарных ячеек обеих решеток (находящихся в сопряженном состоянии).

В зависимости от характера сопряжения (взаимной ориентировки) и симметрии обеих решеток величина и знак деформации различных кристаллографических элементов будут, вообще говоря, различны. Однако в качестве приближенного (усредненного) критерия деформации можно выбрать деформацию среднего радиуса или среднего объема атомов (или же ионов, молекул, их комплексов), возникающую вследствие соответствующего уравнивания кристаллографических элементов при когерентном сопряжении. В общем случае когерентное сопряжение должно оказаться возможным, если в двух разнотипных, но одинаковых или близких по виду химической связи сопрягающихся кристаллических решетках, плоскостях или направлениях приблизительно равны или способны уравниваться (путем упругого сжатия или растяжения решетки) средние атомные радиусы \bar{r} или объемы $\bar{\omega}$, т. е.

$$\bar{r}_{11}' = \bar{r}_{21}', \quad \bar{r}_{12}' = \bar{r}_{22}', \quad \bar{r}_{13}' = \bar{r}_{23}' \quad \text{или} \quad \bar{\omega}_1' \cong \bar{\omega}_2', \quad (1д)$$

где $\bar{r}_{11}, \bar{r}_{12}, \bar{r}_{13}$ — средние эффективные радиусы атомов в трех измерениях (в случае идеальной сферической симметрии в несопряженных решетках эти радиусы равны между собой).

В простейшем случае, для двух разнотипных решеток, но одинаковых или близких по виду химической связи (ионной или металлической), и из приближенного условия всесторонней и равномерной деформации находим**:

$$\frac{G_1}{G_2} = \frac{\bar{r}_1}{\bar{r}_2} \cong \left(\frac{\bar{\omega}_1}{\bar{\omega}_2} \right)^{1/3}, \quad (2)$$

$$\frac{d_1}{d_2} = \frac{n_1}{n_2} \frac{\bar{r}_1}{\bar{r}_2} \cong \frac{n_1}{n_2} \left(\frac{\bar{\omega}_1}{\bar{\omega}_2} \right)^{1/3} \quad \text{***}, \quad (3)$$

$$\frac{V_1}{V_2} \cong \frac{\bar{\omega}_1}{\bar{\omega}_2}. \quad (4)$$

* Упругая деформация указанных элементов решетки (зависящая от упругих констант и от условий когерентного сопряжения) может иметь место как в «дочерней», так и в «материнской» решетке. Например, в случае старения сплавов типа Al — Si, дуралюмин и т. п. наблюдаются аномально малые значения параметра материнской решетки (твердого раствора), повидимому, вследствие когерентного ее сжатия.

** Приближенные равенства, в которые входят средние объемы $\bar{\omega}$ вместо средних радиусов \bar{r} , менее точны. Однако средние радиусы могут быть вычислены только, когда известна тонкая структура сопрягающихся кристаллов.

*** В случае плоского сопряжения деформация решетки в направлении нормали будет иной, чем в плоскости сопряжения. В настоящей статье этот вопрос не рас-

Тип когерентного сопряжения (тип превращения)	Сопрягающиеся решетки: 1 — материнская, 2 — дочерняя	Решетка	Параметры решетки в Å		Средн. атомный радиус в Å или средн. атомный объем в Å ³	Вычисленные значения $\epsilon_a, \eta, \alpha', \eta_c$	Вычисленные (вероятные) ориентировки	
			a	c			[uvw]	(hkl)
Аустенито-мартенситное превращение в углеродистой стали (0,8% C)	1 Аустенит	Кубическая Тетрагональная	3,584	—	1,27 Å 1,25 Å	$\epsilon_a = 0,65 \cong \frac{2}{3}$ $\eta = \frac{3}{8}$	[110]	(111)
	2 Мартенсит		2,854	2,953			[111]	(220)*
Мартенситное превращение в сплаве Cu—Al (13,5—14% Cu)	1 β_1	Кубическая Гексагональная	~5,9	—	1,28 Å 1,30 Å	$\epsilon_a = 0,488 \cong \frac{3}{16}$ $\eta_c = 0,224 \cong \frac{2}{9}$	[111]	(101)
	2 γ		2,60	4,22			[040]*	(003)*
Старение сплава Al—Cu (4,3% Cu)	1 α — твердый раствор меди в алюминии	Кубическая	4,03	—	16,4 Å ³	$\epsilon = 2,07 \cong 2$	[110]	(002)*
	2 θ' = CuAl ₂		5,71	5,80			[100]	(001)

$$\text{Примечание. } \epsilon_a = \frac{\sum d_1^2}{\sum d_2^2} = \left(\frac{a_2}{a_1} \frac{\bar{r}_1}{\bar{r}_2} \right)^2 \cong \left(\frac{a_2}{a_1} \sqrt{\frac{\omega_1}{\omega_2}} \right)^2, \quad (26)$$

$$\eta_a = \frac{\sum h_1^2}{\sum h_2^2} = \left(\frac{n_2}{n_1} \frac{a_1}{a_2} \frac{\bar{r}_1}{\bar{r}_2} \right)^2 \cong \left(\frac{n_2}{n_1} \frac{a_1}{c_2} \sqrt{\frac{\omega_2}{\omega_1}} \right)^2, \quad (36)$$

$$\eta_c = \left(\frac{n_2}{n_1} \frac{c_1}{c_2} \frac{\bar{r}_2}{\bar{r}_1} \right)^2, \text{ и т. д.} \quad (3в)$$

* Звездочкой отмечены "обобщенные" индексы, кратные литературным значениям индексов (2, 4). Заметим, что "обобщенные" индексы дают более ясное представление о сопрягающихся плоскостях и направлениях.

Отсюда, на основании теории обратных решеток, легко найти соотношения между индексами $[uvw]$ и (hkl) сопрягающихся направлений и плоскостей. Например, для ортогональных решеток (кубической, тетрагональной, ромбической) находим:

$$\frac{u_1^2 a_1^2 + v_1^2 b_1^2 + w_1^2 c_1^2}{u_2^2 a_2^2 + v_2^2 b_2^2 + w_2^2 c_2^2} = \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^2 \cong \left(\frac{\omega_1}{\omega_2}\right)^{2/3}, \quad (2a)$$

$$\frac{\left(\frac{h_1^2}{a_1^2} + \frac{k_1^2}{b_1^2} + \frac{l_1^2}{c_1^2}\right)}{\left(\frac{h_2^2}{a_2^2} + \frac{k_2^2}{b_2^2} + \frac{l_2^2}{c_2^2}\right)} = \left(\frac{n_2 r_2}{n_1 r_1}\right)^2 \cong \left(\frac{n_2}{n_1} \sqrt[3]{\frac{\omega_1}{\omega_2}}\right)^2, \quad (3a)$$

$$(\mathbf{G}_1 \mathbf{H}_1) = (\mathbf{G}_2 \mathbf{H}_2) = 0, \quad (4a)$$

$(u_1 \mathbf{a}_1 + v_1 \mathbf{b}_1 + w_1 \mathbf{c}_1, h_1 \mathbf{a}_1^* + k_1 \mathbf{b}_1^* + l_1 \mathbf{c}_1^*) = 0$ и т. д., где $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ — главные оси несопряженной (неискаженной) решетки; $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ и \mathbf{H} — вектора обратной решетки.

Особенно простой вид формулы приобретает при сопряжении между собой решеток: кубической с кубической, кубической с тетрагональной, а также гексагональной и т. п. (см. табл. 1).

Указанные формулы позволяют определять возможные ориентации не только «дочерней» решетки по искусственно заданной ориентации, «материнской» решетки, но и рассчитывать* наиболее вероятные взаимные ориентировки обеих сопряженных решеток, например, при «естественном» объемном когерентном сопряжении (при мартенситных превращениях, старении сплавов и т. п.).

В табл. 1 приводятся примеры вычисления ориентировок в случаях «естественного» объемного сопряжения (мартенситные превращения, старение сплавов). Вычисленные вероятные ориентировки находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными^(2, 4, 8).

Заметим, что для некоординационных решеток и при наличии «разнотипной» химической связи (или при появлении таковой в результате сильного неравномерного искажения симметрии решетки) кристалло-геометрический принцип приближенного объемного соответствия может оказаться недостаточным.

В заключение автор выражает глубокую благодарность проф. Б. Я. Пинесу за интерес к работе.

Харьковский государственный университет
им. А. М. Горького

Поступило
20 XII 1950

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Г. В. Курдюмов и А. Ивенсен, Вестн. металлпрома, № 9—10, 163 (1930).
² Г. В. Курдюмов, ЖТФ, 18, 999 (1948). ³ С. Т. Конобеевский, Изв. АН СССР, сер. хим., № 5, 1209 (1937). ⁴ С. Т. Конобеевский, ЖЭТФ, 13, 185, 418 (1943). ⁵ П. Д. Данков, ДАН, 23, № 6, 548 (1939). ⁶ П. Д. Данков, ЖФХ, 20, 853 (1946).
⁷ G. Finch and C. Sun, Trans. Farad. Soc., 32, 852 (1936). ⁸ Я. С. Уманский, Б. Н. Финкельштейн и М. Е. Блантер, Физические основы металловедения, М., 1949. ⁹ В. И. Архаров, Окисление металлов, М., 1945. ¹⁰ Л. С. Палатник, ЖТФ, 6, 1615 (1936).

считается, как и случаи, когда средние атомные радиусы обеих решеток отличаются между собой более, чем на ~ 15% (они будут рассмотрены в другом сообщении). В структурах внедрения и вычитания наличие элементов с малыми атомными радиусами (например, углерода в аустените и т. п.) или наличие дырок в решетке учитываются при расчете средних «эффективных» радиусов или объемов.

* Для некубических решеток при вычислении $[uvw]$ и (hkl) можно воспользоваться графическим методом индиферования⁽¹⁰⁾.