

Л.Ю. Козак, О.Л. Козак

Поліморфні перетворення і пластичність

*Івано-Франківський державний технічний університет нафти і газу
вул. Карпатська 15, м. Івано-Франківськ, 76000, E-mail: lub531@ukr.net*

На двохмірній дискретній моделі показано, що у залежності від температури кристалічна ґратка може перебувати у стані стійкої або нестійкої рівноваги. Під час кристалізації утворюється стійка кристалічна ґратка. З пониженням температури ґратка переходить в стан нестійкої рівноваги. Зроблено висновок, що процес пластичної деформації, як і у випадку поліморфних перетворень, є наслідком втрати стійкості. Але не зважаючи на те, що в основі пластичної деформації і поліморфного перетворення лежить один і той же процес – переміщення атомів у кристали, причини дестабілізації кристалічної ґратки для цих процесів різні.

Ключові слова: кристалічна ґратка, поліморфне перетворення, мартенситне перетворення, двійникування, нестійкість кристалічної ґратки, пластична деформація.

Стаття поступила до редакції 12.02.2012; прийнята до друку 15.06.2012.

Вступ

Відомо, що процеси поліморфного перетворення (ПП) і процеси пластичної деформації (ПД) твердих тіл залежать від температури. В обох випадках цей вплив проявляється як за низьких так і за високих температур і для одного й того ж металу, чи сплаву ПП можуть відбуватись декілька разів. Наприклад, залізо і його сплави в залежності від температури мають α , δ і γ модифікації.

Пластичність металів та їх сплавів також суттєво залежить від температури. По при те, що за високих температур метали пластичні, у більшості з них, навіть високопластичних, виявили присутність однієї і навіть кілька зон крихкості у проміжку між кімнатною температурою і температурою плавлення. Вважається, що «провали» пластичності є природними властивостями для всіх металів [1-3].

Відомо також про аномальну поведінку пластичності металів та їх сплавів за наднизьких температур [4]. Відповідно до теорії Зегера [5], довгий час вважали, що зі зниженням температури межа текучості повинна зростати. Але виявилось, що у багатьох металів і їх сплавів, а також в інтерметалів [6] за низьких температур межа текучості навпаки знижується.

Подібними для процесів поліморфних перетворень та пластичної деформації є механізми їх протікання - дифузійний (нормальний) і зсувний (мартенситний) [7].

Мартенситне перетворення відбувається шляхом кооперативного координаційного зміщення атомів на відстань менше міжатомної [8,9]. Цей процес є дуже схожим на двійникування, що має місце під час пластичної деформації. Двійникування та ковзання відносяться до механізмів атермічної пластичності,

оскільки ці процеси можуть відбуватися і за температур близьких до абсолютного нуля. У той же час, за високих температур, під час пластичної обробки металів мають місце інші механізми термічної пластичності. Один з них аморфно-дифузійний є подібним до нормального (дифузійного), що має місце у випадку ПП.

Процеси ПП і ПД протікають як в прямому так і зворотному напрямі і відбуваються за однакового механізму – рекристалізації у процесі відпалу деформованих металів та їх сплавів і перекристалізації під час ПП. В обох випадках відбувається зміна структури, а у випадку ПП - форми кристалічної ґратки.

Крім того, ці процеси супроводжуються виділенням енергії підчас протіканні в одному напрямі і поглинанням енергії у випадку протіканні у зворотному напрямі. Перехід із однієї модифікації в іншу супроводжується виділенням тепла, якщо перехід здійснюється під час охолодження, і його поглинанням - під час нагрівання (прихована теплота перетворення). Значна кількість теплоти виділяється в процесі пластичної деформації, і поглинається під час відпалювання.

Метою даної статті є встановлення причин подібності поліморфних перетворень і процесів пластичної деформації.

I. Поліморфні перетворення і нестійкість кристалічної ґратки

Питання щодо поліморфних перетворень, виникнення й стійкості тієї або іншої модифікації може бути вирішене термодинамічним шляхом. Різні кристалічні модифікації з погляду термодинаміки є

різними фазами речовини, що відрізняються значеннями термодинамічних величин. Кристалічні фази можуть переходити одна в іншу, а також перебувати в рівновазі одна з одною за певних умов, аналогічно тому, як це має місце, наприклад, для твердої (кристалічної) і рідкої фаз.

Термодинамічний стан системи повністю описується термодинамічними потенціалами, які є функціями незалежних змінних – макроскопічних параметрів цієї системи. Відомо, що в стані стійкої рівноваги будь-яка система має найменше значення термодинамічного потенціалу. В області стійкого існування будь-якої фази значення термодинамічного потенціалу для неї є меншим, ніж для інших можливих фаз. Причина поліморфних перетворень полягає в тому, що за певних умов кожна поліморфна модифікація речовини стійка в області певних температур і тисків, поза межами цієї області вона нестійка й повинна перетерпіти поліморфне перетворення. Для цілого ряду металів і сплавів за зміни температури або навантаження настає такий момент, коли змінюється тип кристалічної ґратки. Стимулом до такого перетворення є енергетична вигідність існування нової кристалічної структури з меншим значенням термодинамічного потенціалу [8,9]. Поліморфне перетворення протікає внаслідок того, що утворення нової модифікації супроводжується зменшенням енергії Гіббса.

На мікрорівні цей процес ще не є остаточно зрозумілим [10], але загалом можна вважати, що перебудова кристалічної ґратки пов'язана зі зміною потенціалів міжатомної взаємодії.

Стабільність кристалічної ґратки забезпечується незмінністю потенціалу міжатомної взаємодії за постійної величини міжатомної відстані r_0 у деякому інтервалі температур. Поза цим інтервалом зміна температури може викликати суттєві зміни¹ електронної конфігурації у твердих тілах, що пов'язані з встановленням чи втратою зв'язку між електронними оболонками іонних остовів, тобто виникненням чи руйнуванням тих чи інших гібридних конфігурацій, зниженням чи підвищенням ступеня локалізації валентних електронів. В кінцевому результаті ці перетворення призводять до зміни рівноважної відстані r_0 між атомами, що в свою чергу вплине на положення точок з мінімальною потенціальною енергією в просторі (ТМПЕ). Зміна потенціалу міжатомної взаємодії викликає зміщення ТМПЕ з утворенням нової конфігурації. Як тільки змістяться ТМПЕ, попереднє положення атомів стає нестійким і вони переміщуються у нові положення, щоб мінімізувати енергію. В результаті зміниться форма кристалічної

ґратки. Отже причиною ПП є втрата стійкості кристалічною ґраткою через зміну міжатомної взаємодії, а саме - зміну рівноважної відстані r_0 .

Очевидно, що зміна температури у проміжку між температурою кристалізації і температурою ПП, а для металів без ПП - до температури 0К, викликає зміну міжатомної відстані r_0 , що впливає на стійкість кристалічної ґратки.

Через ангармонізм коливань положення вузлів кристалічної ґратки, що є центрами коливання атомів, зміщуються (рис.1). Нові положення центрів коливання за різної їх кінетичної енергії знаходяться на кривій ab . Загалом, рівноважна відстань r_{01} між атомами зменшується до r_0 у випадку зниження температури[11]. Зміна рівноважної відстані від температурного стискання впливає на стійкість кристалічної ґратки. Очевидно, що ці зміни не такі значні як у випадку ПП, коли міняється електронна конфігурація твердих тіл.

Загалом можна припустити, що кристалічна ґратка повинна бути стійкою за високих температур, яка існує в деякому діапазоні температур. Зі зниженням температури кристалічна ґратка втрачає стійкість і перетворюється в нестійку – відбувається поліморфне перетворення. У відсутність поліморфного перетворення кристалічна ґратка під час охолодження втрачає стійкість з причини термічного стискання.

Щоб відтворити цей процес скористаймося моделлю нестійкої кристалічної ґратки.

Нестійку кристалічну ґратку можна одержати у випадку використання парних сферично симетричних потенціалів міжатомної взаємодії - Леннарда-Джонса, Борна та іншими подібними до них (рис. 1). Такі потенціали дозволяють на якісному рівні правильно описувати багато фізичних явищ і властивостей речовин. Разом з тим, добре відомо [12-13], що парні потенціали можуть забезпечити стійкість тільки щільно упакованих кристалічних ґраток. ґратки з нижчою щільністю упаковки, такі як прості кубічні ґратки, виявляються нестійкими відносно зсувних деформацій для більшості парних потенціалів.

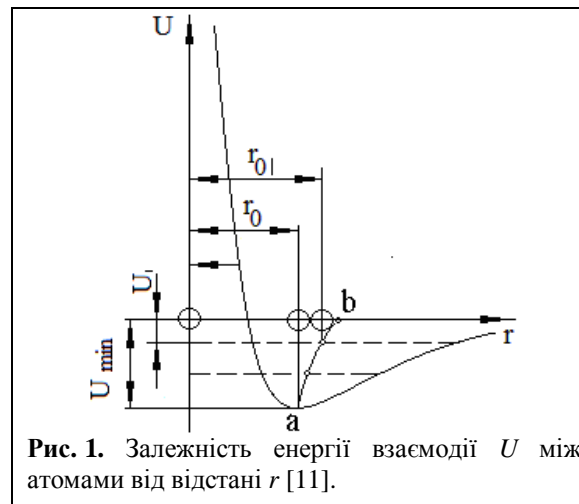


Рис. 1. Залежність енергії взаємодії U між атомами від відстані r [11].

¹ Ці зміни можуть бути настільки суттєвими, що викликають навіть зміну типу хімічного зв'язку як, наприклад, у випадку олова, в якому зі зниженням температури металічний тип хімічного зв'язку змінюється на ковалентний.

Нестійкість кристалічної ґратки характерна у випадку врахування міжатомної взаємодії з дальніми атомами [14]. Вплив дальніх атомів може перетворити положення рівноваги на нестійке, якщо сили взаємодії з дальніми атомами будуть дестабілізуючими. Саме це і відбувається в моделях більшості нещільно упакованих кристалічних ґраток і багатоатомних молекул, оскільки відстані між дальніми сусідніми атомами проявляються на нестійкій ділянці потенціалу взаємодії [13].

II. Методика

Нами розглянуто простий випадок двохмірної кристалічної ґратки з квадратною коміркою (рис.2). У моделі сили міжатомної взаємодії описуються сферично-симетричним потенціалом Леннарда-Джонса. Сили взаємодії поширюються на перших та других сусідів атома і обмежуються відстанню $r=2r_0$, де r_0 рівноважна відстань між атомами у двохатомній моделі твердого тіла. Енергію зв'язку між двома атомами, як і у роботі [15], визначали з загального рівняння:

$$U = \frac{A}{r^m} + \frac{B}{r^n}, \quad (1)$$

де $A = 1$, $B = \frac{m}{n} \times \frac{r_0^{n+1}}{r_0^{m+1}}$ – константи;

r – відстань між атомами; r_0 – рівноважної відстань, коли досягається мінімум потенціальної енергії зв'язку; m і n – показники степені для енергії сил притягання і сил відштовхування відповідно.

Оскільки розрахунки проводяться для встановлення якісних характеристик моделі, то дані у рівнянні (1) вибрані довільно, але є близькими за величинами, що характерні для реальних кристалів. Для нашого випадку вважатимемо константу A і показник степені m рівними одиниці, а показник степені $n=8$ і рівноважну відстань $r_0=2.5 \text{ \AA}$.

Потенціальну енергію кристала одержали шляхом сумування енергій N атомів, з яких складається кристал:

$$E_k = (1/2) \sum_{i,j=1}^N U(\bar{r}_i - \bar{r}_j), \quad (2)$$

де $U(\bar{r}_i - \bar{r}_j)$ – енергія взаємодії пари атомів з координатами r_i і r_j .

Міжатомну відстань визначали з умови мінімальної потенціальної енергії кристала. Розрахунки проведені для кристалів, які утворені різною кількістю атомів, свідчать про зменшення міжатомної відстані зі збільшенням їх розміру [14].

Граничною величиною, до якої вкорочується міжатомна відстань, є відстань для кристала безмежних розмірів. Ця відстань дорівнює $r_l = 2.335 \text{ \AA}$, тоді як рівноважна міжатомна відстань парної взаємодії атомів - $r_0 = 2,5 \text{ \AA}$.

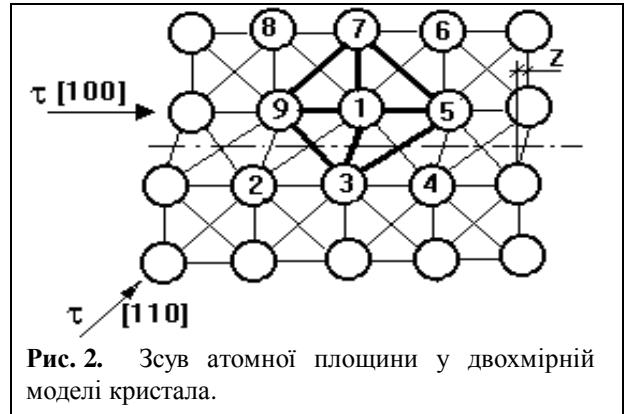


Рис. 2. Зсув атомної площини у двохмірній моделі кристала.

Подібне вкорочення відстані між атомами буде характерним і для трьохмірної ґратки [16].

Загалом, про ефект зближення атомів у кристалічній ґратці до відстаней, що менші рівноважної r_0 для потенціалів їх парної взаємодії, згадується в роботах [17-20].

III. Результати розрахунків

Моделювання зсуву атомних площин.

На моделі двохмірного кристала (рис. 2) досліджували опір зсуву атомних площин [14]. При цьому розраховували зміну потенціальної енергії атома 1. Вважали, що атом 1 рухається у напрямі [100] одночасно з його сусідами 5, 6, 7, 8, 9. У цьому випадку зміна енергії атома 1 обумовлюється тільки взаємодією з трьома сусідніми атомами 2, 3, 4. Розрахунок зміни енергії зсуву атома 1 за малих деформацій проводили в двох напрямках - [100] і в напрямі [110] (рис.3).

Відповідно до отриманих графіків енергії для зміщення атома 1 разом з атомами площини у кристалографічному напрямі [100] (крива 1) знижується, а в напрямі [110] (крива 2) підвищується. Зниження енергії у випадку зміщення атомних площин у напрямі [100] свідчить, що кристалічна ґратка безмежних розмірів знаходиться у стані нестійкої рівноваги відносно зсувних деформацій.

Результати наведені вище стосуються випадку, коли кінетична енергія атомів кристалічної ґратки рівна нулю (0 К).

Моделювання зсуву атомних площин з урахуванням теплової енергії.

На двохмірній кристалічній ґратці (рис. 2) досліджували [21] вплив температури на опір зсуву атомних площин за малих деформацій. Для цього визначали форму рельєфу потенціальної енергії атома у випадку зсуву атомної площини у напрямі [100] за трьох різних температур (рис. 4). Зміну температури моделювали як зміну міжатомної відстані у кристалічній ґратці. Відомо, що збільшення кінетичної енергії атомів створює внутрішній тиск, що обумовлює теплове розширення твердих тіл за рахунок збільшення міжатомної відстані.



Рис. 3. Залежність зміни потенціальної енергії атома 1 від зсуву z атомних площин у напрямі [100] - 1, і у - [110] - 2.

Графік 1 (рис.4) зміни потенціальної енергії атома у випадку зсуву атомної площини відповідає мінімальній температурі (0 К). Графіки 2 і 3 одержані для випадку, коли через підвищення температури міжатомна відстань збільшилась з $r_{01} = 2,335 \text{ \AA}$ за температури T_1 до $r_{02} = 2,45 \text{ \AA}$ за T_2 і до міжатомної відстані $r_{03} = 2,6 \text{ \AA}$ за температури T_3 . В результаті моделювання було встановлено, що збільшення мінімальної відстані між атомами з ростом температури, сприяє стабілізації кристалічної ґратки. Це спостерігається у зменшенні "горба" на дні потенціальної ями кривої 2, яка описує зміну потенціальної енергії атома у кристалічній ґратці (рис. 4, лінія 2). У випадку збільшення відстані до $r_{03} = 2,6 \text{ \AA}$ (лінія 3) "горб" зникає. Така зміна форми кривої потенціальної енергії означає, що для зміщення атома у цьому випадку необхідна затрата енергії. А це є свідченням того, що ґратка за температури T_3 є стійкою.

Отримані результати свідчать про температурну залежність стійкості двомірної ґратки з квадратною коміркою, міжатомна взаємодія в якій описується сферично симетричним потенціалом.

Для нашої моделі зниження температури є дестабілізуючим фактором, у результаті якого квадратна ґратка стає нестійкою і незначні зовнішні зусилля викликають зсуви атомних площин. В результаті ґратка перетворюється з квадратної у трикутну, яка є стійкою за низьких температур. Таке перетворення можна розглядати як процес пластичної деформації [14,20].

Підвищення температури викликає зворотний процес - відновлення ґратки з квадратною коміркою. Відновлення кристалічної ґратки спостерігається в деформованих металах після їх нагрівання - це процес рекристалізації.

IV. Обговорення

На основі одержаних вище результатів можна припустити, що розплавлені метали чи інші речовини перебувають у стані нестійкої рівноваги за відповідної температури, тому кристалізуються і утворюють стійкі кристалічні ґратки, які існують в деякому діапазоні температур. Зі зниженням температури кристалічна ґратка знову втрачає

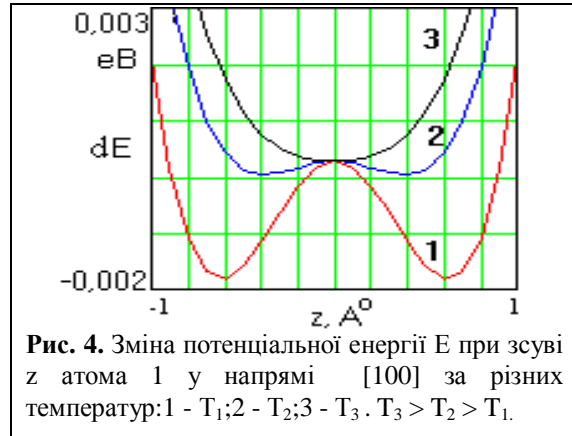


Рис. 4. Зміна потенціальної енергії E при зсуві z атома 1 у напрямі [100] за різних температур: 1 - T_1 ; 2 - T_2 ; 3 - T_3 . $T_3 > T_2 > T_1$.

стійкість і перетворюється в нестійку – відбувається поліморфне перетворення. Поліморфні перетворення спостерігаються не у всіх металів. Якщо поліморфне перетворення відсутнє, кристалічна ґратка під час охолодження все рівно втрачає стійкість (рис.4) і це проявляється у здатності твердих тіл пластично деформуватись під дією зовнішніх сил навіть за низьких температур.

З одержаних теоретичних результатів випливає, що за високих температур пластичність повинна бути низькою оскільки кристалічна ґратка є стійкою. Експериментальні дані, для багатьох випадків підтверджують висновок про падіння пластичності за високих температур [1-3].

Так, наприклад, зростання температури викликає зменшення видовження і відносного звуження у міді, нікелю, заліза та ін., що є свідченням зниження пластичності «...пластичність міді, у якої за 20°C , $\delta = 32 - 62\%$ і $\psi = 56 - 70\%$ (відносне видовження і звуження відповідно, пр. авт.) з підвищенням температури поступово знижується до $\delta = 17 - 29\%$ і $\psi = 17 - 30\%$ за $500 - 600^\circ\text{C}$ » [3, с.11].

Пластичність, яка все ж спостерігається за високих температур для більшості речовин, в тому числі металів, пов'язана з підвищенням рухливості атомів, так званого аморфно-дифузійного механізму пластичності.

За низьких температур кристалічна ґратка переходить у стан нестійкої рівноваги, що сприятиме її пластичності. Це підтверджується експериментальними даними зниження межі течіння і підвищення пластичності за низьких температур. Свого часу, Зегер створив теорію температурної залежності межі течіння, використавши рівняння швидкості пластичної деформації під час термоактивованого руху дислокацій [5].

Відповідно до цієї теорії межа течіння повинна підвищуватися у випадку зниження температури, що в дійсності спостерігається в значному діапазоні температур (рис. 5, діл. 1 - 3). "Але за подальшого пониження температури для більшості металів і сплавів спостерігається відхилення температурних залежностей межі течіння і деформуючого напруження від монотонної кривої Зегера. Ці відхилення довго вважались аномаліями. Вони спостерігались як для моно - так і для полікристалів і

полягають у тому, що починаючи з деякої характерної для даної речовини температури, межа текучості мало змінюється з пониженням температури, деколи від неї не залежить, а у деяких випадках не підвищується так як це витікає з теорії Зегера, а зменшується. Такі відхилення спостерігаються у настільки великого числа металів і сплавів, що їх потрібно швидше всього рахувати закономірностями, аніж аномаліями” [22, с. 36].

Наведені вище розбіжності у теорії Зегера можна пояснити підвищенням нестійкості ґратки у випадку зниження температури. Відповідно до результатів моделювання існує температура, нижче якої ґратка стає нестійкою. Нестійкість пов’язана з виникненням “горба” на дні потенціальної ями (рис.4, крива 2). Пониження температури сприяє цьому процесу (крива 1). Очевидно, за низьких температур, нестійкість ґратки має домінуючий вплив на характер протікання пластичної деформації.

Внаслідок дестабілізації кристалічної ґратки зі зниженням температури текучість міді і її сплавів спостерігається навіть за температури 4 К [4]. У багатьох з них межа текучості за температури 4 К нижче, ніж при 20 К.

За низьких температур домінуючим механізмом ПД є двійникування, яке є дуже подібним на мартенситне перетворення. В обох випадках відбувається одночасний зсув атомних площин на відстань меншу міжатомної.

Таким чином, причиною процесів ПП і ПД є нестійкість кристалічної ґратки. Однак величина рушійних сил у цих процесах різна. У випадку ПП відбуваються зміни у електронній конфігурації твердих тіл, внаслідок цього миттєво за певної температури змінюються потенціали міжатомної взаємодії і рівноважної відстані. В результаті виникають значні внутрішні сили, які переміщують атоми в нові положення змінюючи форму кристалічної ґратки. У випадку відсутності поліморфних перетворень в процесі зниження температури має місце плавне зміщення атомів, у результаті чого кристалічна ґратка за низьких температур переходить у стан нестійкої рівноваги. Через малі величини теплового зміщення атомів дестабілізація ґратки незначна тому внутрішні сили є малими і для переміщення атомів у більш стійкі положення необхідна дія зовнішніх сил. В цьому випадку кристалічна ґратка втрачає стійкість і пластично деформується.



У випадку, коли під час ПП діє зовнішнє зусилля спостерігається інтенсифікація процесу переходу з нестійкого стану у стійкий – процес надпластичності. За температур металів та їх сплавів близьких до температур поліморфного перетворення, прикладення незначних зовнішніх напружень викликає значну пластичну деформацію і це явище відоме як трансформаційна надпластичність. Свідченням цьому є експериментальні дані, які одержані для різних матеріалів під час фазових переходів першого роду [23, с.61]: “Перетворення одної модифікації в іншу відбувається за напружень і температур, які відповідають кривій фазової рівноваги, або близьких до них, і полягає у перебудові кристалічної ґратки, яка у ряді випадків супроводжується змінами характеру сил міжатомної взаємодії. Таким чином, в основі процесів релаксації напружень і поліморфних перетворень лежить один і той же процес - перегрупування атомів у кристалі”.

У роботі [24] явище надпластичності двофазних сплавів пов’язують з метастабільністю їх структури. Суть цієї гіпотези полягає у тому, що явище надпластичності пояснюється поступовим переходом від метастабільного стану до стабільного.

Загалом, модель нестійкої кристалічної ґратки пропонується застосувати для пояснення процесу пластичної деформації твердих тіл.

За нормальної температури кристалічна ґратка перебуває в метастабільному стані. Під дією зовнішньої сили атоми зміщуються в положення з нижчою потенціальною енергією. Це може відбуватись за механізмами ковзання або двійникування. Зсув атомних площин в ідеальній ґратці за деякими кристалографічними напрямками може здійснюватись за дуже низьких значень зсувних напружень або у відсутність їх (рис. 3). Але нестійкість кристалічної ґратки (відсутність опору зсуву), як було зазначено вище, характерна у випадку її безмежних розмірів, коли число частинок нескінченне. В цьому випадку можна визначити можливі періодичні структури (тобто елементарну комірку ідеального кристала). Якщо ж число атомів обмежене, то ідеальна кристалічна ґратка займатиме деякий об’єм в просторі, при цьому періодичне розташування поверхневих атомів вже неможливе. У приповерхневому шарі атоми будуть розташовані менш щільно, ніж в глибині тіла.

Для кристалічної ґратки обмежених розмірів нестійкість є характерною тільки для внутрішніх областей з ідеальною ґраткою у той час, як приповерхневі шари, в силу їх специфічної будови, будуть стійкими і утримуватимуть внутрішні атомні площини від зсуву. Такий кристал буде метастабільним і його слід розглядати як двофазну систему [25, 26]. Стійка фаза – приповерхневі шари, дефекти будови, границі зерен (у полікристалів) і нестійка фаза – внутрішні області кристала правильної будови. Міцність такого кристалу буде залежати від співвідношення цих фаз. Тому металічні монокристали великого поперечного розміру з тонким поверхневим шаром мають низьку межу течіння, в той час як дуже тонкі монокристали,

навпаки, мають дуже високі значення межі текучості.

Загалом, викладені припущення щодо процесу пластичної деформації як наслідку втрати стійкості кристалічної ґраткою, висловлювались раніше. В роботі [27] вважають, що у випадку прикладення зовнішньої сили, в кристалі поряд зі структурним станом існуючої ґратки з'являється можливість виникнення іншої ґратки. Тому під дією навантаження в атомів ґратки виникають нові степені свободи, кристал переходить в стан з низькою стійкістю відносно малих зсувних деформацій, поведінка кристала стає нелінійною.

А.В. Панін взагалі вважає [28], що процес пластичної деформації і руйнування твердих тіл пов'язані з втратою їх стійкості відносно деформації зсуву на різних масштабних рівнях.

Слід зауважити, що ця думка вперше була висловлена, ще А.В. Степановим. Згідно його уявлень [29], втрата пружної стійкості кристалічної ґратки має місце за деякого критичного напруження, яке є нижче теоретичної міцності цієї ґратки. Втрата пружної стійкості сприяє перебудові ґратки кристала, в результаті чого вся система переходить у більш рівноважний стан.

М. Борн в своїх теоретичних дослідженнях [30,31] показав, що деякі кристалічні решітки, типові для металів, нестійкі щодо малих зсувних деформацій за деякими кристалографічними напрямками. Ним же було запропоновано використати ці результати для удосконалення теорії міцності.

Слід зауважити, що дислокаційний механізм пластичної деформації також пов'язаний з нестійкістю кристалічної ґратки. Адже дислокація є

локальною областю нестійкої кристалічної ґратки, оскільки атоми в ній зміщені з положень їх рівноваги [11]. В протигагу локальної нестійкості, в запропонованій моделі процеси пластичної деформації пов'язані з глобальною нестійкістю кристалічної ґратки.

Висновки

1. На основі одержаних результатів з урахуванням відомих фактів можна стверджувати, що схожість процесів поліморфного перетворення і пластичної деформації пов'язана зі зміною характеру міжатомної взаємодії під час зміни температури. Змінюється рівноважна міжатомна відстань і форма потенціалу міжатомної взаємодії. В результаті кристалічна ґратка переходить в стан нестійкої рівноваги.

2. Причиною переміщення атомів в нові положення у процесі поліморфного перетворення є нестійка рівновага кристалічної ґратки, за цієї ж причини відбувається зміщення атомів у процесі пластичної деформації, яке ініціюється зовнішньою силою. Під час поліморфних перетворень діють значно більші внутрішні сили, що дестабілізують кристалічну ґратку, тому процес перебудови кристалічної ґратки відбувається значно інтенсивніше і у відсутність зовнішніх сил.

Козак Л.Ю. – кандидат технічних наук, доцент;
Козак О.Л. – аспірант.

- [1] А.А. Пресняков и В.В. Червякова. *Природа провалов пластичности у металлических сплавов*. Алма-Ата.: Наука, 296с. (1970).
- [2] А.С. Тихонов и др. *Деформируемость металлов и сплавов*. Наука, М. 183 с. (1971).
- [3] А.В. Бобылев *Механические и технологические свойства металлов*. Металлургия, М. 296с. (1980).
- [4] Д.А. Вигли *Механические свойства материалов при низких температурах*. Мир. М.372с. (1974).
- [5] A. Seeger The generation of lattice defects by moving dislocations, and its applications to the temperature dependence of the flow-stress of F.C.C. crystals // *Phil. Mag.* **46**(382), pp.1194-1217 (1955)
- [6] Б.А. Гринберг, М.А. Иванов. Странности деформационного поведения интерметаллидов // *Фазовые превращения и прочность кристаллов. Тезисы III Международной конференции. Черногловка. 20-24.09. 2004*, с.16
- [7] В.А. Лободюк, Э.И. Эстрин. Изотермическое мартенситное превращение // *Успехи физических наук*, 175(7), сс. 745-766 (2005).
- [8] Ю.М. Коваль, В.М. Сліпченко, В.П. Головка. Мартенситні перетворення. Особливості кінетики // *Вісник Черкаського національного університету*, **114**, сс. 39-46 (2007).
- [9] В.Н. Бондарев, Д.В. Тарасевич. Статистическая теория термодинамической устойчивости кристаллических фаз // *Физика твердого тела*, **52**(6), сс.1156-1163 (2010).
- [10] А.Л. Коржевский, Э.Л. Аэро Микроскопическая теория фазовых переходов мартенситного типа // *Фазовые превращения и прочность кристаллов. Тезисы III Международной конференции. Черногловка. 20-24.09. с. 23. (2004)*
- [11] М.В.Белюс, М.П Браун. *Физика металлов*. Вища школа. К. 343 с. (1986).
- [12] Е.А. Иванова. Механические свойства кристаллических решеток и нанокристаллов [http://www.ipme.ru/ipme/labs/dms/prive/ivanova/Home_page Elena Ivanova/](http://www.ipme.ru/ipme/labs/dms/prive/ivanova/Home_page_Elena_Ivanova/)
- [13] А.П. Бызов, Е.А. Иванова. *Современные проблемы механики сплошной среды. Труды IX Международной конференции, посвященной 85-летию со дня рождения академика РАН И.И. Воровича, г.Ростов-на-Дону, 11-15 октября г. Т. 2. сс. 47-51. (110 Kb) (2005).*

- [14] Л.Ю. Козак. Дослідження стійкості двохмірної кристалічної ґратки // *Фізика і хімія твердого тіла*, **2**(2), сс. 289-297 (2001).
- [15] П.И. Полухин, С.С.Горелик, В.К. Воронцов. *Физические основы пластической деформации*. Металлургия. М. 584 с. (1982)
- [16] P. Sandera, J. Pokluda. Ideal strength of cubic crystals under triaxial tension// *Metallic Materials*, **32**(4), pp.180-193 (1994).
- [17] Я.Й. Дугчак та ін. *Фізика металів*. Київ.: НМК ВО, 162с. (1993).
- [18] У. Пирсон. *Кристаллохимия и физика металлов и сплавов*. Мир, М. 419 с. (1977).
- [19] Р. Кан. *Физическое металловедение*. Мир, ч.ІІ. -М. 583с. (1970).
- [20] Л.Ю. Козак. *Пластичність металів і нестійкість кристалічної ґратки*. Факел. Івано-Франківськ.146 с. (2004).
- [21] Л.Ю. Козак. Комп'ютерне моделювання впливу температури на стійкість двомірної кристалічної ґратки // *ФХММ*, **6**, сс.119-120 (1999).
- [22] В.И. Старцев, В.Я. Ильичев, В.В. Пустовалов. Пластичность и прочность металлов и сплавов при низких температурах. Металлургия. М. (1986).
- [23] В.А. Калинин, И.С. Томашевская. О пластичности минералов при фазовых переходах // *Доклады АН СССР*. 268. сс.39-44 (1983).
- [24] А. Пресняков. Сверхпластичность металлов и сплавов.-Алма-Ата, Изд-во, Ан.Каз.ССР, 236с. (1969)
- [25] М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько. Предел текучести и пластическая деформация нанокристаллических материалов // <http://www.ipme.ru/labs/ltdm/ovidko.htm> Март (2003).
- [26] Б.И. Архаров, Ю.Г. Скрипка, Е.С. Мархасин. О значении механизма формирования межатомных связей в сплавах для их прочностных и пластических свойств // *ФХММ*, **2**, сс. 47-50 (1978).
- [27] Е.Е. Селядников. Солитон поля упругой деформации в структурно-неустойчивом кристалле // *Физика твердого тела*, **47**(3), сс. 469-473 (2005).
- [28] В.Е. Панин, В.Е. Егорушкин, Ю.А. Хон, Т.Ф. Елсукова. *Изв.вузов. Физика*, **12**(5) (1982).
- [29] М.В. Классен-Неклюдова и Т.А. Конторова. По поводу дислокационной гипотезы пластичности // *Успехи физических наук*, **11** (1), сс. 142-151 (1954).
- [30] M. Born. On the stability of crystal lattices // *Proc. Camb. Phil. Soc.*(36), pp.160-172 (1940).
- [31] M. Born. On the stability of crystal lattices // *Proc. Camb. Phil. Soc.* (38), pp.82-99.(1942).

L. Kozak, O. Kozak

Thermodynamics Constituent of Crystal Lattice Instability

Ivano-Frankovsk State University of the Oil and Gas, Karpatska Str., 15, 76000, Ukraine

On the two-dimensional model of the crystal it was shown that the crystal lattice can be stable or unstable depending on the temperature. When crystal lattice appears during crystallization it is stable. When the temperature drops crystal lattice stays unstable. The conclusion has been done, that the cause of the process of low temperature plastic deformation is crystal lattice instability, similar to polymorphic transformations. Both the polymorphic transformation and plastic deformation are the identical processes of atomic plane shear. But the reasons of crystal lattice destabilization in both cases are different.