

УДК 621.785.36:622.1:528.952

## КОМПЬЮТЕРНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПОЛИМОРФНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ ЦИРКОНИЯ

*А.В. Остапов*

*(Научно-технический комплекс «Ядерный топливный цикл» Национального научного центра «Харьковский физико-технический институт», г. Харьков)*

Данная работа посвящена одному из наиболее актуальных вопросов преобразования структуры Zr и сплавов Zr при полиморфном превращении – геометрии перестройки кристаллической решетки в процессе превращения. С использованием представления в программе 3ds Max была представлена геометрия  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -превращения Zr на атомном уровне, задавая искажение исходной ОЦК путем деформации сдвигом в трех направлениях. Построена стереографическая проекция для  $\alpha$ - и  $\beta$ -Zr с представлением на них  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -превращений. Построены видеоролики  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -превращения, как при объемном представлении решеток, так и представления превращения на стереопроекции. Развитие этим методом представление согласуется с результатами имеющихся экспериментальных исследований.

### ВВЕДЕНИЕ

Циркониевые сплавы относятся к основным конструкционным материалам активной зоны водоохлаждаемых ядерных реакторов. Цирконий – полиморфный металл, имеющий несколько модификаций решетки, каждая со своими свойствами, которые в той или иной степени сказываются на эксплуатационных характеристиках, используемых в реакторостроении. Температура полиморфного превращения равна  $862 \pm 3$  °С. Низкотемпературная модификация  $\alpha$ -Zr имеет гексагональную плотно упакованную кристаллическую решетку. Высокотемпературная модификация  $\beta$ -Zr – ОЦК решетку. Большой интерес представляет  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -превращение циркония, связанное с его использованием для получения циркониевых сплавов с определенными свойствами, для последующего их применения.

Полиморфные  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -превращения в цирконии и его сплавах чрезвычайно важны при выборе и реализации технологических режимов получения и обработки циркониевых изделий в ядерной энергетике, в частности активной зоны ядерных реакторов.

Целью данной работы является детальное изучение  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -превращения, представление этого превращения в 3ds Max, использование этого представления для изучения  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -превращения, в рамках полученного представления рассмотреть имеющиеся налицо экспериментальные данные. Использование компьютерных технологий для представления  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -превращения даёт возможность наглядно представлять и легко анализировать любые фазовые превращения и использовать полученные сведения в научных исследованиях.

### АЛЛОТРОПИЧЕСКИЕ МОДИФИКАЦИИ

Три основных фазовых состояния (геометрические параметры представлены в таблице 1) реализуются в цирконии в зависимости от температуры и давления (см. таблица 2) : низкотемпературная аллотропическая модификация циркония, так называемая  $\alpha$ -фаза, имеет гексагональную плотноупакованную структуру (плотность упаковки 0,7405), высокотемпературная модификация циркония, имеет объемно центрированную решетку, так называемая  $\beta$ -фаза, (плотность упаковки 0,6802), фаза

высокого давления, так называемая  $\omega$ -фаза, имеет простую гексагональную решетку (плотность упаковки 0,6046). Схематически преобразование кристаллического строения циркония с изменением температуры и под давлением представлено на рис. 1 и рис. 2.

Число атомов циркония в единице объема  $\alpha_{Zr} = 4,285 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ . Молярный объем – (14,02–14,1)  $\text{см}^3/\text{моль}$ . Критическое давление  $\alpha \rightarrow \omega$ -превращения при гидростатическом сжатии при комнатной температуре около 4 ГПа [1–2]. Критическое давление  $\omega \rightarrow \beta$ -превращения при гидростатическом сжатии при комнатной температуре около 30 ГПа [1].

При фазовом превращении  $\beta \rightarrow \alpha$  соблюдается ориентационное соотношение Бюргера:  $\{011\}_\beta \parallel (0001)_\alpha$  и  $\langle \bar{1}1 \rangle_\beta \langle 1\bar{1}20 \rangle_\alpha$  [3–7]. Зарождающаяся  $\alpha$ -фаза имеет форму пластин (плоскость габитуса  $\alpha$ -пластин с некоторым разбросом близка к  $\{111\}_\beta$ ) [8].

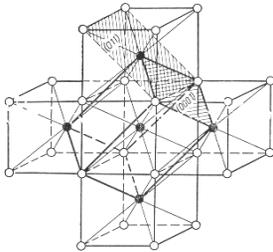


Рис. 1. Положения атомов  $\alpha$ -циркония по отношению к положению атомов  $\beta$ -циркония [7]

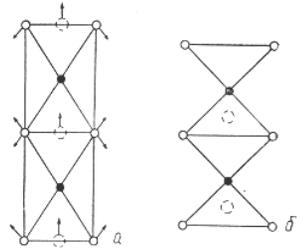


Рис. 2. Сдвиг атомов на плоскости  $\{110\}_\beta$  (а) при переходе от  $\beta$  к  $\alpha$  с плоскостью (0001) (б) [7]

Превращение  $\beta \rightarrow \alpha(\alpha')$  в цирконии и циркониевых сплавах может быть представлено как кооперативное смещение плоскостей  $\{110\}$  в направлении  $[110]$  с сопутствующим поворотом решетки вокруг  $[\bar{1}10]$  и деформацией решетки. При  $\beta \rightarrow \alpha$ -превращении удельный объем циркония увеличивается на  $\sim (0,6-0,666)\%$ .

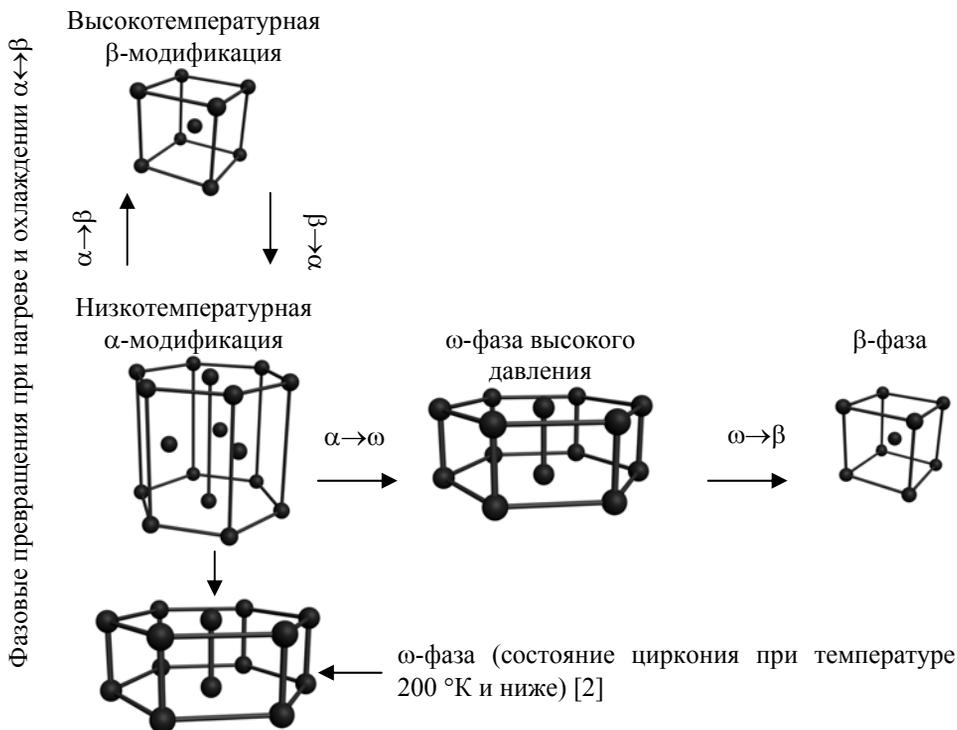
Таблица 1. Геометрические параметры трёх модификаций циркония

Модификация	Тип решетки	Пространственная группа	Число атомов на ячейку	Параметры решетки
$\beta$	ОЦК – $A2 (cI2)$	$Im \bar{3} m$	2	$a_0=0,361 \text{ нм}$ (1143 К) [9]
$\alpha$	ГПУ – $A3 (hP2)$	$P6_3/mmc$	6	$a_0=0,3231 \text{ нм}, c_0=0,5148 \text{ нм},$ $c_0/a_0=1,593$ (298 °К) [10]
$\omega$ [7]	Простая гексагональная – $A_7 (hP1)$	$P6/mmm$	3	близки к $a = \sqrt{2}a_0, c = \sqrt{3}a_0 / 2$ ( $a_0$ – параметр решетки исходной $\beta$ -фазы)

Чтобы подобрать небольшую деформацию, которая превращает одну решетку в другую, при рассмотрении мартенситного превращения в цирконии вначале проводится сравнение решетки ОЦК и ГПУ (гранцентрированная плотноупакованная) фаз. На рис. 1 показана ОЦК решетка с выделенной в ней

искаженной гексагональной ячейкой [11]. Плоскость  $(011)_\beta$  представляет базисную плоскость искаженной гексагональной ячейки, а плотноупакованные направления  $\langle 11\bar{1} \rangle$ , лежащие в этой плоскости, соответствуют плотноупакованным направлениям  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$  в гексагональной решетке.

Таблица 2. Фазовые превращения в Zr в зависимости от давления и температуры



Это дает четыре из шести направлений  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$  в гексагональной решетке. Остальные два направления  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$  получаются из ребер ОЦК-решетки, т. е. из направлений  $[100]$  и  $[\bar{1}00]$  (см. рис.1). В случае идеальной ГПУ-решетки размеры такой гексагональной ячейки могут быть приведены в соответствие с параметрами  $\beta$ -фазы путем сжатия приблизительно на 10% вдоль направления  $[100]_\beta$ , которое превращается в  $[2\bar{1}10]_\beta$ , расширения приблизительно на 10% вдоль  $[01\bar{1}]_\beta$ , которое превращается в  $[01\bar{1}0]_\alpha$ , и расширения на 2% вдоль  $[011]_\beta$ , которое превращается в  $[0001]_\alpha$ . Эту деформацию называют чистой деформацией решетки ( $S_{ij}$ ). Если направления  $[100]_\beta$ ,  $[01\bar{1}]_\beta$  и  $[011]_\beta$  выбрать в качестве осей  $x$ ,  $y$  и  $z$  соответственно, то матрица чистой деформации имеет вид:

$$S = S_{ij} = \begin{bmatrix} -0,10 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \dots & 0 & \dots & 0,10 & \dots & 0 \\ \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0,2 \end{bmatrix}$$

Таким образом, основные деформации решетки  $\beta$ -фазы при  $\beta \rightarrow \alpha$ -превращении – 2% расширение вдоль  $[011]_{\beta}$ , которое становится  $[0001]_{\alpha}$ , 10% расширение вдоль  $[0\bar{1}1]_{\beta}$ , которое становится  $[0110]_{\alpha}$ , и сжатие на 10% вдоль  $[100]_{\beta}$ , которое становится  $[2\bar{1}10]_{\alpha}$  [4].

Для полной подгонки ГПУ-решетки в дополнение к чистому сдвигу требуются дополнительные повороты. Поскольку ось поворота перпендикулярна плоскости  $(011)_{\beta}$ , которая становится плоскостью базиса мартенсита, эти две плоскости остаются строго параллельными друг другу. Поворот отклоняет направление  $[100]_{\beta}$  приблизительно на  $3^{\circ}$  от направления  $[2\bar{1}10]_{\alpha}$ , которому оно отвечает в решетке  $\alpha$ -фазы. Соответствующие плотноупакованные направления, т.е.  $\langle 111 \rangle_{\beta}$ , расходятся приблизительно на  $2^{1/2}^{\circ}$ .

Процесс зарождения и роста  $\alpha$ -фазы при охлаждении из области  $\beta$ -фазы был исследован методом высокотемпературной металлографии [12]. Первые кристаллики  $\alpha$ -фазы возникают непосредственно у границ исходного  $\beta$ -зерна, что свидетельствует о наличии в этих областях кристаллической решетки несовершенств, которые способствуют образованию новой фазы.

Преобразование  $\alpha \rightarrow \beta$  происходит с небольшим уменьшением удельного объема – 0,666. Величина внутренних напряжений, возникающих при превращении, невелика. Для железа это 380 МПа, для титана около 3 МПа. Деформационный наклеп, обусловленный  $\alpha \rightarrow \beta$  переходом способен вызвать процесс рекристаллизации.

Небольшой объемный эффект превращения и близкое ориентационно-размерное соответствие кристаллических решеток  $\alpha$  и  $\beta$ -циркония облегчают перестройку из одной фазы в другую существенно снижая барьер, который надо преодолеть для начала перехода. Это приводит к тому, что прямое превращение начинается при небольшом переохлаждении.

Из-за малого выигрыша в свободной энергии  $\beta \rightarrow \alpha$ -превращение в некоторых  $\beta$ -стабилизированных циркониевых сплавах происходит относительно медленно. Рост зерен в  $\alpha$ -цирконии происходит очень медленно. Напротив, с переходом в  $\beta$ -состояние отмечается резкое ускорение роста зерен.

Многочисленные исследования, проведенные на цирконии различной чистоты, свидетельствуют, что с увеличением содержанием примесей появляется и расширяется интервал  $\alpha \rightarrow \beta$ -превращения. Для циркония, содержащего примеси, и циркониевых сплавов существует область двухфазного ( $\alpha + \beta$ ) в интервале от  $T_{\alpha/\alpha+\beta}$  (нижняя граница) до  $T_{\beta/\alpha+\beta}$  (верхняя граница).

В чистом цирконии как обратное  $\alpha \rightarrow \beta$ -превращение при нагреве, так и прямое превращение  $\beta \rightarrow \alpha$  при охлаждении проходят до конца. Если при этом они и проходят через какие-то переходные фазы, то, в отличие от поведения под давлением, это не фиксируется. Иначе обстоит дело на некоторых циркониевых сплавах, в частности на сплавах системы  $Zr-Nb$ , в которых при закалке можно зафиксировать ряд метастабильных состояний:  $\alpha'$ ,  $\beta$  и  $\omega$ .

$\alpha$ -цирконий – низкотемпературная модификация, плотность при  $20^{\circ}\text{C}$  –  $6,5 \text{ г/см}^3$ . Рентгеновская плотность –  $6,531 \text{ г/см}^3$  [13].

Для идеальной плотноупакованной гексагональной структуры отношение  $c/a = \sqrt{8/3} = 1,633$ . Для  $\alpha$ -Zr отношение  $c/a$  несколько меньше – 1,593. Каждый атом циркония имеет шесть ближайших соседей на расстоянии  $1/6 \cdot \langle 20\bar{2}3 \rangle$ , лежащих в плоскостях, отстоящих на  $c/2$  по обе стороны от плоскости  $(0001)$ , в которой лежит

рассматриваемый атом и параллельных ей. Следующие шесть атомов, лежат в той же плоскости, что и рассматриваемый атом на расстоянии  $1/3 \cdot \langle 1\bar{1}20 \rangle$ , лишь слегка, превышающем расстояние  $1/6 \cdot \langle 20\bar{2}3 \rangle$ , так что координационное число для  $\alpha$ -Zr равно 12. Наибольшее расстояние между плоскостями в  $\alpha$ -цирконии имеют плоскости  $\{10\bar{1}0\}$ . Плотность упаковки ГПУ-структуры ( $\alpha$ -фаза) – 0,7405.

### ИЗМЕНЕНИЕ ОРИЕНТАЦИИ ЦИРКОНИЯ ПРИ ФАЗОВОМ ПРЕВРАЩЕНИИ

Пруток йодидного циркония, имеющий огранку, обычно выращивают путем осаждения металла на усы вольфрама или циркония. Проволока, нагретая путем пропускания тока, находится в холодном сосуде, содержащем пары йодидного циркония (температура осаждения более 900 °C) [14]. В 1934 г Бюргерс [3] заметил, что пруток, полученный методом йодидного рафинирования, имеет грани, каждая из которых параллельна осям решетки с шестью сторонами под углом в 60° или, иногда, 4 гранями под углом 90°. Кристаллографически, эти плоскости не были эквиваленты кристаллографии низкотемпературного состояния, хотя для обоих вариантов огранки грани время от времени представляли собой базисные плоскости (0001). Он предположил, что при высоких температурах они являются плоскостями  $\{110\}$  объёмно-центрированной кубической решетки, которые образуют зону из шести плоскостей под 60° или из четырех под 90° в высокосимметричной кубической решетке. Исходя из этого, он вывел точную ориентацию  $\beta$ -зерен (объёмно-центрированной кубической решетки) и, путем измерения ориентации образующихся  $\alpha$ -зёрен (гексагональной решетки), он пришел к заключению, что ориентационное соотношение для  $\beta \rightarrow \alpha$  фазового превращения было таким: одна из шести плоскостей  $\{110\}$   $\beta$ -структуры стала (0001) плоскостью  $\alpha$ , в то время как одно из  $\langle 111 \rangle$  направлений в  $\beta$ -структуре стало одним из  $\langle 1\bar{1}20 \rangle$  направлений в  $\alpha$ -структуре.

Эти ориентационные соотношения верны, по крайней мере, для лития и титана [14], в то время как для остальных элементов, имеющих обе модификации как гексагональную, так и объёмно-центрированную кубическую (таллий и гафний [14]), можно ожидать, что они следуют этим ориентационным соотношениям.

Если эти ориентационные соотношения определяют ориентации зёрен, появляющихся после превращения, то тогда можно предсказать не только, какие ориентации можно ожидать после заданного числа превращения, стартуя с заданной структуры, но также и их будущее возможное соотношение. Эти предсказанные результаты можно затем сравнить с наблюдаемой текстурой, чтобы получить информацию о правильности предположения, что ориентационные соотношения определяют вновь возникшие ориентации. Предсказание можно также использовать при объяснении текстуры прутков, полученных йодидным методом.

В работе [14] рассмотрены возможные варианты преобразования кристаллографических ориентаций, которые имеют место при одном или двойном превращении, вне зависимости от того, начинать от ОЦК или от ГПУ состояния. Таким образом, 12 возможных гексагональных ориентаций может появиться, каждая из которых равновероятна.

Далее рассмотрены кристаллографические ориентации, которые могут появиться после двойного превращения, начиная от гексагональной решетки. Так как после первого превращения возможно шесть вариантов ориентации кубической решетки, и каждая из них имеет по двенадцать возможных вариантов ориентаций гексагонального кристалла, в общем случае получается 72 возможных различных

вариантов ориентаций; при этом не все они обязательно разные, так как одна гексагональная ориентация может возникнуть от более чем одной заданной кубической ориентации. Так, например, исходная ориентация может появиться от любой из шести кубических ориентаций, и таким образом будет в 6 раз вероятнее, чем ориентация, полученная только одним путём.

Полный анализ показал, что 57 возможных ориентаций может возникнуть. Данные представлены в таблице 3. Подобный анализ можно провести также для возможных ориентаций, которые могут появиться после двойного превращения, начиная от ОЦК структуры. Снова число возможных путей – 72, но некоторые из них ведут к идентичным конечным ориентациям. Полный анализ дает 41 ориентацию, которая может возникнуть. Эти результаты просуммированы в таблице 4.

Таблица 3. Возможные варианты ориентаций после двойного превращения начиная с гексагональной структуры [14]

Категория	Число возможных ориентаций	Число путей с одинаковым конечным состоянием	Общее число путей	Примечания
1	1	6	6	Возвращается к ориентации исходного гексагонального кристалла
2	2	3	6	$(0001) \parallel^I$ исходной $(0001)$ , $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ под $10^\circ 32'$
3	6	2	12	Одно из исходных направлений $\langle 11\bar{2}0 \rangle \parallel^I$ одному из исходных направлений $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ , $(0001)$ под $60^\circ$ к исходной $(0001)$
4	36	1	36	$(0001)$ под $60^\circ$ к исходной $(0001)$
5	12	1	12	$(0001)$ под $90^\circ$ к исходной $(0001)$
Итого	57		72	

Таблица 4. Вероятности возможных ориентаций после двойного превращения, начиная от ОЦК [14]

Категория	Число ориентаций	Число путей с одинаковым конечным состоянием	Общее кол-во путей	Примечания
1	1	12	12	Ориентация исходного ОЦК кристалла
2	12	2	24	Исходная ориентация, повернутая на $60^\circ$ относительно $\langle 110 \rangle$
3	4	3	12	Исходная ориентация, повернутая на $70^\circ 32'$ относительно $\langle 110 \rangle$
4	12	1	12	Исходная ориентация, повернутая на $10^\circ 32'$ относительно $\langle 110 \rangle$
5	12	1	12	Исходная ориентация, повернутая на $40^\circ 28'$ относительно $\langle 110 \rangle$
Итого	41		72	

Последующие превращения приведут к огромному числу возможных ориентаций, и точный анализ становится очень сложным и долгим; однако,

інтересно пронаблюдати, як деякі з важливих орієнтацій акумулюються. Як ми вже відзначали, після подвійного перетворення, починаючи з гексагональної структури, з ймовірністю  $1/12$  (або  $8,3\%$ ), матеріал повертається до первинних орієнтацій.

Наведені дані про зміну орієнтації кристалів при перетвореннях свідчать, що, виходячи з цих допущень, зразок швидко втрачає будь-яку переважну орієнтацію, яка виходно у нього була. Використовуючи результати, наведені вище, можна передбачити зміну переважних орієнтацій, які можуть виникнути при перетворенні.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Дана робота спрямована на досягнення розуміння і наочного комп'ютерного зображення геометрії поліморфного перетворення в цирконії. Для розв'язання поставленої задачі необхідно було:

- провести інформаційно-аналітичний пошук даних про цирконії, їх кристалічну будову і характеристики поліморфного перетворення;
- вибрати комп'ютерну програму для зображення геометрії поліморфного перетворення;
- представити поліморфне перетворення в цирконії в межах вибраної програми;
- представити поліморфне перетворення в цирконії на стереографічній проекції;
- розглянути наявні експериментальні дані.

### МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕНЬ І ОТРИМАНІ РЕЗУЛЬТАТИ

Програма для зображення перетворення повинна задовольняти декільком вимогам. Головні з них це: наочність, легкість використання, зручність візуалізації і здатність створювати анімації, задаючи спотворення в початковій ґратці (вектор зсуву). Цим вимогам відповідає програма *3ds Max*, яку було вибрано для зображення  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -перетворення.

*3ds Max* – повнофункціональна професійна програмна система для роботи з тривимірною графікою, розроблена компанією *Autodesk Media & Entertainment*. Працює в операційних системах *Microsoft Windows* і *Windows NT* (як у 32-бітних, так і у 64-бітних). В жовтні 2007 року випущена десятка версія цього продукту – «*3ds Max 2008*».

Спочатку представимо початкову і кінцеву ґратки в *3ds Max*. Ці ґратки були побудовані і наведені на рис. 3.

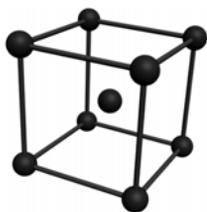


Рис. 3а. Ячейка ОЦК

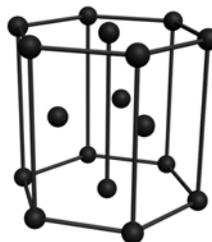


Рис. 3б. Ячейка ГПУ

Далее для получения ГПУ-решетки из ОЦК необходимо создать конструкцию из минимального числа ОЦК-ячеек, которые необходимы для получения в ней ГПУ-ячейки. Для этого была выбрана конструкция из 10 ячеек ОЦК, представленная на рис. 4а. Из этих 10 ячеек далее была получена ГПУ-ячейка. На рис.4б представлена приблизительная модель ГПУ-ячейки, образуемая из 10 ячеек ОЦК. Изображенная модель ГПУ-ячейки приблизительно показывает ГПУ-ячейку без истинных для ГПУ-ячейки параметров, а для получения ГПУ-ячейки с истинными параметрами необходимо задать искажение исходной ОЦК-ячейки путем введения сдвигов (деформации).

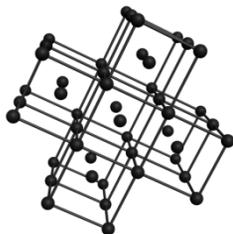


Рис. 4а. 10 ячеек ОЦК

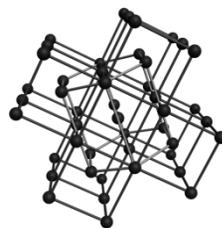


Рис. 4б. 10 ячеек ОЦК совместно с моделью ячейки ГПУ

Для получения правильной ГПУ-решетки из ОЦК необходимо применить деформацию к 10 ячейкам ОЦК: сжатие на 10% вдоль направления  $[100]_{\beta}$ , расширения на 10% вдоль  $[01\bar{1}]_{\beta}$  и расширения на 2% вдоль  $[011]_{\beta}$ . Три направления, в которых проведена деформация, представлены на рис. 5.

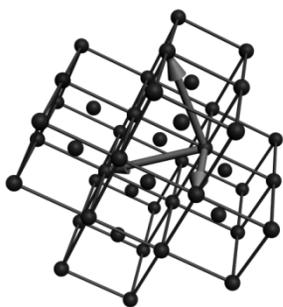
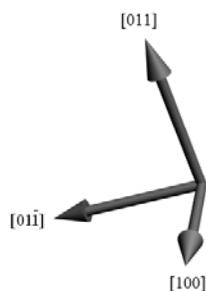


Рис. 5. 10 ячеек ОЦК с указанием направлений сдвига



По этим направлениям была задана деформация и смоделирован вектор деформации (сдвига), что представлено на рис. 6а. Для наглядности на рис. 6б изображен этот же вектор сдвига отдельно для одной ячейки ОЦК. Видно, что данный вектор, если его повернуть на  $3^{\circ}$ , лежит в плоскости  $(112)$ , что согласуется с представлениями Бюргерса о механизме превращения  $\beta \rightarrow \alpha$ : превращение  $\beta \rightarrow \alpha$  в цирконии происходит путем сдвига по плоскостям  $\{112\}$  в направлении  $[1\bar{1}1]$ , приводя к одинаковому удлинению в двух направлениях и сжатию в третьем.

Величина сдвига равна 0,22; направление сдвига  $[1\bar{1}\bar{1}]$ , которое точно параллельно  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$  в образующей при превращении  $\alpha$ -фазе [13].

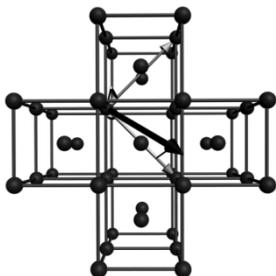


Рис. 6а. 10 ячеек ОЦК с представлением вектора деформации

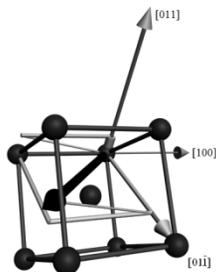


Рис. 6б. Ячейка ОЦК с представлением вектора деформации

Затем деформация была применена к 10 ячейкам ОЦК. На рис. 7 предоставлена модель 10 ячеек ОЦК до превращения (рис. 7а) и ячейка ГПУ после превращения (рис. 7б). На рис. 7б тенью отмечены исходные положения атомов, по центру выделена получившаяся ячейка ГПУ с параметрами  $\alpha$ -Zr.



Рис. 7а. 10 ячеек ОЦК до превращения

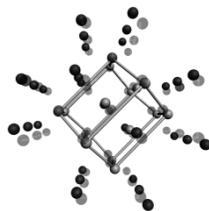
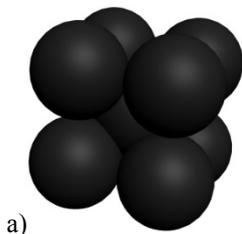
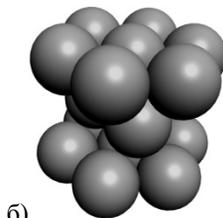


Рис. 7б. Ячейка ГПУ после превращения

Этот же метод был применен для построения моделей ГПУ- и ОЦК-решеток и построения геометрии превращения для атомов с их атомным размером (рис. 8). Результаты представлены на рис. 9.



а)



б)

Рис. 8. Элементарные ячейки: а) ОЦК-решетки; б) ГПУ-решетки



На стереографической проекции можно представить  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -превращение, задавая требуемую для этого превращения деформацию сдвига. Для рис. 10б была задана деформация сдвига, приводящая к переходу от ОЦК к ГПУ-структуре в цирконии. Результат в трёхмерной и двухмерной схеме приведен на рис. 11; тенью отмечены исходные расположения.

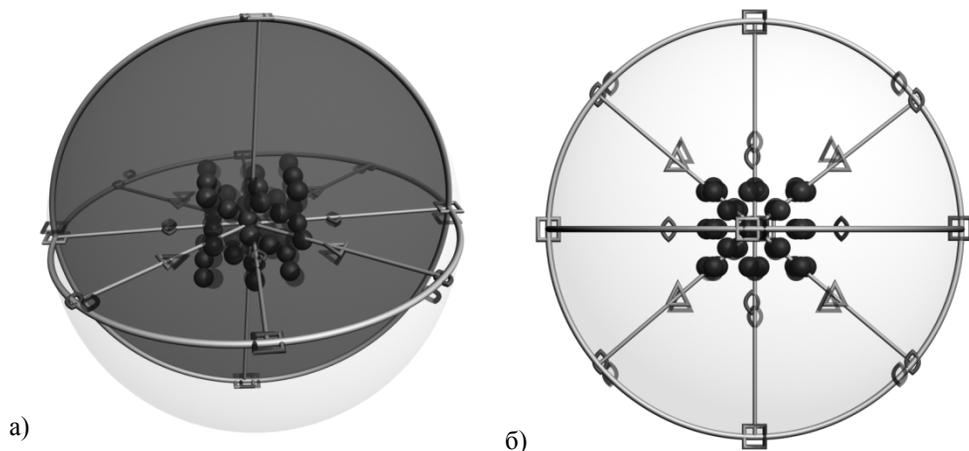


Рис. 11. Стереографическая проекция для  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -превращения: а) в трёх мерном виде; б) в двухмерном виде

## РАССМОТРЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Для проверки данного метода представления для стереографических проекций, было проведено сравнение с экспериментальными данными [15]: на рис. 12 представлена экспериментально полученная стереографическая проекция, на которой изображены полюса ОЦК и ГПУ структур. Для сравнения построим стереографическую проекцию до превращения, как в экспериментальных данных (стереографическая проекция построена для ГПУ, в нашем же случае была построена для ОЦК). Далее наложим ее на рис. 12, и повернём так, чтобы полюса ОЦК на экспериментально полученной стереографической проекции совпадали с полюсами ОЦК на стереографической проекции, полученной в данной работе. Результат представлен на рис. 13. Как видно полюса ОЦК на экспериментально полученной стереографической проекции в точности совпали с полюсами ОЦК на стереографической проекции, полученной в данной работе. Теперь приведем такое же сравнение для уже превращенной решетки ГПУ из ОЦК – рис. 14 – мы наблюдаем такую же картину – полюса ГПУ на экспериментально полученной стереографической проекции в точности совпали с полюсами ГПУ на стереографической проекции, полученной в данной работе. Это свидетельствует о правильности данного метода представления.

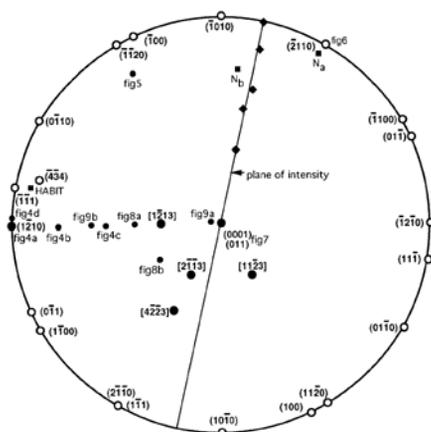


Рис. 12. Экспериментально полученная стереографическая проекция [15]

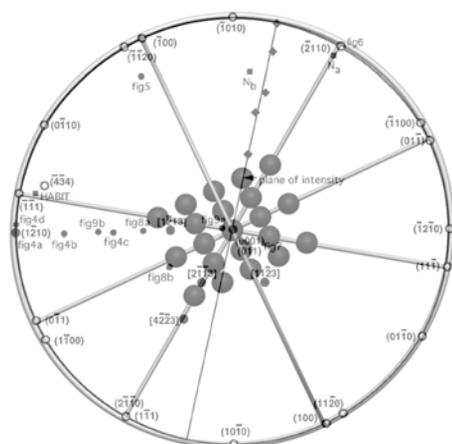


Рис. 13. Экспериментально полученная стереографическая проекция [15] и наложенная на неё стереографическая проекция ОЦК, полученная в данной работе

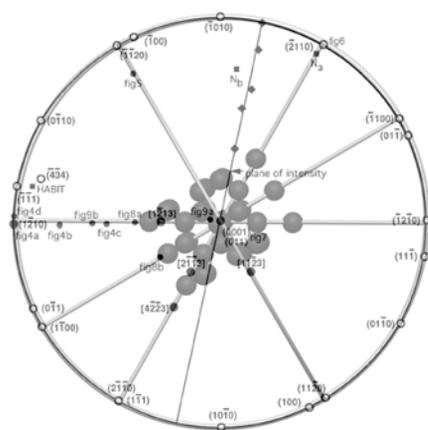


Рис. 14. Экспериментально полученная стереографическая проекция [15] и наложенная на неё стереографическая проекция ГПУ, полученная в данной работе

## ВЫВОДЫ

1. По результатам известных научно-технических данных о структурно-фазовых состояниях циркония и его сплавов, их кристаллическом строении, физико-химических характеристиках и возможных полиморфных превращений в них и проведенного анализа установлено, что компьютерная программа *3ds Max* применима для представления хода и геометрии полиморфного превращения в цирконии.

2. Разработанное геометрическое представление полиморфного превращения в цирконии и построенный видеоролик  $\beta \rightarrow \alpha$  перехода адекватно отражают структурные изменения в цирконии.

3. Изученные свойства и компьютерное построение стереографической проекции  $\alpha$ - и  $\beta$ -фаз циркония могут быть использованы при выборе и реализации

технологических режимов получения и обработки циркониевых изделий в ядерной энергетике, в частности активной зоны ядерных реакторов.

4. Сравнение представлений с экспериментальными данными позволяет констатировать приемлемость использованного математического аппарата и метода обработки данных.

5. Данный метод представления позволяет создавать наглядное геометрическое представление на атомном уровне как полиморфного  $\alpha \leftrightarrow \beta$ -превращения в цирконии и циркониевых сплавах, так и любое другое превращение для любого сплава. Его можно рекомендовать для изучения и развития представления о структурно-фазовых превращениях в различных металлах и сплавах.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Козлов Е.А., Елькин В.М., Бычков И.В. Термодинамическое полное уравнение состояния твердых фаз и фазовые превращения циркония в волнах напряжений // Физика металлов и металловедение. – 1996. – Т. 82, № 4. – С. 22–30.
2. Botstein O., Rabinkin A., Talianker M. The  $\alpha \rightarrow \omega$  polymorphous phase transformation in pure Zr at atmospheric pressure // Scripta Metallurgica. – 1981. – Vol. 15, № 2. – С. 151–155.
3. Burgers W.G. On the process of transition of the cubic body-centered modification into the hexagonal close-packed modification of zirconium // Physic. – 1934. – Vol. 1, № 7. – P. 561–584.
4. Gaunt P., Christian J.W. The crystallography of the  $\beta \rightarrow \alpha$  transformation in zirconium and two titanium-molybdenum alloys // Acta Met. – 1959. – Vol. 7, № 8. – P. 534–543.
5. Hanson C.G., Rivlin V.G., Hatt B.A. The  $\beta$ -phase transformation of some zirconium-thorium alloys // J. Nucl. Mater. – 1964. – Vol. 12, № 1. – P. 83–93.
6. Braichte G., Couterne J.C., Cizeron G. Elaboration de monocristaux de zirconium  $\alpha$  et etude de leur perfection crystalline // J. Nucl. Mater. – 1974. – Vol. 54, № 2. – P. 175–189.
7. Цвиккер У. Титан и его сплавы / Перевод с нем. – М.: Металлургия. – 1979. – 512 с. (С. 94).
8. Delvecchio G.A., Northwood D.O., Rezek J. The influence of aluminum on the stability of quenched  $\beta$ -Zr-Mo // J. Nucl. Mater. – 1970. – Vol. 35, № 1. – P. 67–72.
9. Griffiths M. Microstructure evolution in h.c.p. metals during irradiation // Philosophical Magazine A. – 1991. – Vol. 63, № 5. – P. 835–847.
10. Колачев Б.А., Ливанов В.А., Елагин В.И. Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов. – М.: Металлургия. – 1972. – С. 374–396 (480).
11. Glen J.W., Pugh S.F. The effect of phase transformations on the orientation of zirconium crystals // Acta Metallurgica. – 1954. – Vol. 2, № 3. – P. 520–529.
12. Келли А., Гровс Г., Кристаллография и дефекты в кристаллах / Перевод с англ. Под редакцией Шаскольской М.П. – М.: Мир. – 1974. – 496 с.
13. Newkirk J. B. and Geisler A. H., Crystallographic aspects of beta to alpha transformation in titanium // Acta Metallurgica. – 1953. – Vol. 1, № 3. – P. 370–374.
14. Williams A.J., Cahn R.W. & Barrett C.S., The crystallography of the  $\beta \rightarrow \alpha$  transformation in titanium // Acta Metallurgica. – August 1959. – Vol. 7. – P. 534–543.
15. Banerjee D., Muraleedharan K., Substructure in titanium alloy martensite. Defence Metallurgical Research Laboratory, Hyderabad 500058, India and J. L. Strudel Centre Des Materiaux Pierre-Marie Fourn, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, BP 87, 91003, Evry Cedex, France (Received 9 January 1997 and accepted 28 April 1997) // PHILOSOPHICAL MAGAZINE A. – 1998. – Vol. 77, № 2. – С. 299–323.