Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Б. И. Бертяев, Принципы организации кристаллических систем и фазовые превращения в металлах и сплавах, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2001, выпуск 12, 127–133

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu72>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.198.55.26

26 апреля 2023 г., 07:46:46

Б.И. Бертяев**ПРИНЦИПЫ ОРГАНИЗАЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ**

На примере реакции α/γ - превращения в Fe и углеродистой стали У8 рассмотрены основные физические принципы организации многочастичной системы. Показано, что кристаллическую систему (кристалл и его поверхность или граница) следует рассматривать как систему, состоящую из двух взаимодействующих подсистем. Проведен расчет давлений в подсистемах. На основании уравнения баланса по давлению показано, что в кристалле преобладает положительное давление, а на границе - отрицательное. Это дает основание полагать, что граница может являться зоной проводимости. На основании физических принципов организации системы и уравнения баланса показано, что вид превращения (сдвиговой или процесс зарождения и роста) связан с характером перехода частиц из одной подсистемы в другую.

При классификации фазовых переходов в металлах и сплавах по кинетическим признакам в основном различают два вида превращений: кооперативное (протекающее по сдвиговому механизму) и поатомное (механизм зарождения и роста) [1]. Первый вид превращения происходит в результате согласованного смещения большого числа атомов на незначительные расстояния без термической активации (атермический характер превращения). К этому виду превращений относят мартенситные превращения и процессы двойникования.

Превращения второго вида происходят благодаря изолированным переходам атомов из одной фазы в другую и имеют энергию активации, близкую к энергии активации самодиффузии и являются термически активируемыми процессами.

Любое превращение в металлах и сплавах сопровождается перестройкой атомной структуры, когда определенная конфигурация атомов теряет устойчивость и переходит в новую устойчивую конфигурацию. Поэтому проблема устойчивости кристаллических систем занимает важное место в теории фазовых превращений.

Однако несмотря на большое число работ [2-4], целью которых был поиск методов микроскопического описания устойчивости кристаллических систем из первых принципов, до настоящего времени не получено обнадеживающих результатов. Более того, даже невозможно предсказать стабильность различных структур [1].

Причина этого состоит в том, что в традиционных подходах изначально исходят из модели взаимодействия атомов кристаллической решетки, а уже потом исследуются ее механические свойства. Считается, что связь между атомами полностью обеспечивается силами электростатического взаимодействия отрицательных электронов и положительных ионов в узлах кристаллической решетки. Причем взаимодействие должно быть определенным образом сбалансировано, чтобы обеспечить механическую устойчивость кристалла. Для некоторых твердых веществ такой подход иногда оправдан, однако в случае металлов и сплавов его применение ограничено, так как выбираемое межатомное взаимодействие является неточным приближением к силам связи. Если учесть, что теплота фазового перехода в металлах и сплавах составляет всего несколько процентов от энергии связи в твердом теле (теплота сублимации), то кажется сомнительной реалистичность таких моделей.

При теоретическом анализе фазовых превращений возникает вопрос: почему происходит данное изменение фазы? Чтобы ответить на него обычно исследуются свойства данной системы при возможных расположениях атомов или молекул ее составляющих.

В рамках формальной теории равновесия задача сводится к выражению свойств системы через свойства отдельных атомов или молекул. Такой подход обладает одним существенным недостатком. Он не учитывает роль границы или поверхности в формировании кристаллической фазы. Поэтому мы будем в дальнейшем под физической системой понимать две подсистемы, физические свойства которых существенно отличаются друг от друга. К таким подсистемам относятся кристаллическая фаза и образующая ее поверхность или граница. Такую физическую систему можно рассматривать как замкнутую (в смысле достаточности) для ее описания. Предлагаемая физическая модель позволяет иначе подойти к решению сформулированной выше проблемы.

1 Внутреннее давление, как фактор термического расширения системы кристалл-граница. Принадлежность физических величин к подсистемам будем обозначать индексами a, κ, κ', g (a - фаза, κ, κ' – исходная и новая граница, g - фаза). Рассмотрим каждую подсистему независимо друг от друга. В табл. 1 представлены значения относительной доли свободного объема kT (ОДСО) каждой подсистемы, найденные в работе [6] .

Таблица 1

Значения ОДСО a, g - фаз (подсистем) и границы

Марка стали	$T_{\text{АН}}, \text{K}$	$z_a \cdot 10^2$	$z_{\kappa} \cdot 10^2$	$z_{\kappa'} \cdot 10^2$	$z_g \cdot 10^2$
<i>Fe</i>	1183	1,2	3,87	3,13	1,99
У8 _{отж}	988	1,495	4,57	3,875	2,185
У8 _{деф}	928	1,687	4,86	4,349	2,198

Здесь $T_{\text{АН}}$ – критическая температура $\alpha \rightarrow \gamma$ - превращения, У8_{отж} – отожженное состояние стали, У8_{деф} – деформированное состояние стали.

Опираясь на уравнение вида [9]

$$\zeta = \frac{1}{\frac{E}{e^{kT}} - 1}, \quad (1)$$

где E – энергия на частицу, k – постоянная Больцмана, проведен расчет величин $E_a, E_{\kappa}, E_{\kappa'}$ и E_g . Данные расчета представлены в табл. 2.

Таблица 2

Значения энергий $E_a, E_{\kappa}, E_{\kappa'}$ и E_g

Марка стали	$E_a, 10^{-20} \text{ Дж}$	$E_{\kappa}, 10^{-20} \text{ Дж}$	$E_{\kappa'}, 10^{-20} \text{ Дж}$	$E_g, 10^{-20} \text{ Дж}$
Fe	7,244	5,366	5,708	6,470
У8 _{отж}	5,754	4,270	4,531	5,245
У8 _{отж}	5,252	3,935	4,072	4,919

Расчет показывает, что величины $E_a, E_{\kappa}, E_{\kappa'}$ и E_g оказываются порядка тепловой энергии. Так для α - фазы в Fe, сталях У8_{отж} и У8_{деф} отношение $\frac{E}{kT}$ составляет 4,435; 4,175 и 4,098 еди-

ниц соответственно. Аналогично для границы в Fe, сталях У8_{отж} и У8_{деф} отношение $\frac{E}{kT}$ составляет 3,285; 3,099 и 3,071 единиц. Величины E_a, E_{κ} значительно ниже энергии связи атомов в кристаллической решетке. Между подсистемами существует энергетическая щель DE , которую можно рассматривать как энергию связи подсистем. Для Fe разность $\Delta E_{\kappa a} = E_{\kappa} - E_a = -1,878 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$, для стали У8_{отж} $\Delta E_{\kappa a} = -1,483 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$ и для стали У8_{деф} $\Delta E_{\kappa a} = -1,316 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$. Отношение величины энергетической щели $\Delta E_{\kappa a}$ к kT для Fe составляет 1,15 единиц, для стали У8_{отж} 1,076 и для стали У8_{деф} 1,027, т.е. величина энергетической щели оказывается порядка kT .

Представим энергию E уравнением вида:

$$E = P \cdot v, \quad (2)$$

где P - внутреннее давление в подсистеме, v – объем на частицу.

Для расчета давлений $P_a, P_{\kappa}, P_{\kappa'}$ и P_g в подсистемах необходимо определить соответствующие объемы $v_a, v_{\kappa}, v_{\kappa'}$ и v_g . Примем, что $v_a = \frac{1}{6}pd_a^3, v_{\kappa} = \frac{1}{6}pd_{\kappa}^3, v_{\kappa'} = \frac{1}{6}pd_{\kappa'}^3$ и $v_g = \frac{1}{6}pd_g^3$,

где $d_a, d_{\kappa}, d_{\kappa'}$ и d_g - параметры решеток рассматриваемых подсистем. Здесь допускается, что границу или поверхность можно представить как определенным образом организованную структуру атомов, в которой допустимо введение параметров d_{κ} и $d_{\kappa'}$. Величины d_a и d_g при температуре фазового перехода в Fe и стали У8_{отж} определены в работе [7], причем для расчета d_{κ} и $d_{\kappa'}$ использовались соотношения вида:

$$\frac{d_{\kappa}^1 - d_a}{d_a} = \frac{1}{3} \frac{z_{\kappa} - z_a}{z_a}, \quad (3)$$

$$\frac{d_{\kappa'}^1 - d_g}{d_g} = \frac{1}{3} \frac{z_{\kappa'} - z_g}{z_g}, \quad (4)$$

учитывающие пропорциональность между относительной разностью параметров d и относительной разностью ОДСО подсистем.

Значения параметров d_a , d_{κ} , $d_{\kappa'}$, d_g и соответствующие им объемы v_a , v_{κ} , $v_{\kappa'}$ и v_g представлены в табл. 3

Таблица 3

Параметры d_a , d_{κ} , $d_{\kappa'}$, d_g и объемы v_a , v_{κ} , $v_{\kappa'}$ и v_g

Материал	$d_a, \text{\AA}$	$d_{\kappa}, \text{\AA}$	$d_{\kappa'}, \text{\AA}$	$d_g, \text{\AA}$	$v_a \cdot 10^{29}, \text{\AA}^3$	$v_{\kappa} \cdot 10^{29}, \text{\AA}^3$	$v_{\kappa'} \cdot 10^{29}, \text{\AA}^3$	$v_g \cdot 10^{29}, \text{\AA}^3$
<i>Fe</i>	2,904	4,957	4,3434	3,647	1,28	6,38	4,29	2,54
У8 _{отж}	2,895	4,940	4,6067	3,6625	1,27	6,314	5,12	2,57

Расчет показывает, что объемы на частицу в подсистемах, соответствующих границам кристалла, выше чем в α и γ - фазах. В то же время величина v_{κ} согласуется с объемом $v = b^3 = 6.4 \cdot 10^{-29} \text{\AA}^3$, где $b = 4 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ - величина вектора Бюргерса в Fe.

По уравнению (1) и данным таблиц 2 и 3 проведен расчет величин P_a , P_{κ} , $P_{\kappa'}$ и P_g в подсистемах в Fe и стали У8_{отж}. Данные расчета представлены в табл. 4.

Таблица 4

Величины давлений P_a , P_{κ} , $P_{\kappa'}$ и P_g в подсистемах в Fe и стали У8_{отж} при температурах $T_{\text{АН}}$

Материал	$T_{\text{АН}}, \text{ К}$	$P_a, \text{ МПа}$	$P_{\kappa}, \text{ МПа}$	$P_{\kappa'}, \text{ МПа}$	$P_g, \text{ МПа}$
<i>Fe</i>	1183	5648,78	841,342	1330,5	2547,69
У8 _{отж}	993	4529	676,31	885,24	2040,24

Расчет P_{κ} для стали 20 в отожженном состоянии дает значение $P_{\kappa} = 683,3 \text{ МПа}$., а на стали У8_{деф} $P_{\kappa} = 617 \div 623 \text{ МПа}$.

Расчет показывает, что самое низкое давление наблюдается на границе α - фазы и самое высокое - в α - фазе. С другой стороны смещение исходной границы при $\alpha \rightarrow \gamma$ - превращении [6] сопровождается ростом внутреннего давления $P_{\kappa'}$ и образованием γ - фазы с более низким давлением, чем в α - фазе.

При достижении температуры $T_{\text{АН}}$ в системе кристалл-граница начнется переход частиц из κ - состояния в γ - состояние. Такому переходу будет соответствовать скачек давления величиной

$$\Delta P_{\kappa \rightarrow \gamma} = P_g - P_{\kappa}, \quad (5)$$

что для *Fe* составит $\Delta P_{\kappa \rightarrow \gamma} = 1706,36 \text{ МПа}$, для стали У8_{отж} - $\Delta P_{\kappa \rightarrow \gamma} = 1363,94 \text{ МПа}$, т.е. $\Delta P_{\kappa \rightarrow \gamma} > 0$.

Для переходов частиц из a - состояния в κ' - состояние скачек давления в системе составит величину

$$\Delta P_{a \rightarrow \kappa'} = P_{\kappa'} - P_a, \quad (6)$$

и для Fe - $\Delta P_{a \rightarrow \kappa'} = -4318,3 \text{ МПа}$, для стали У8_{отж} - $\Delta P_{a \rightarrow \kappa'} = -3643,76 \text{ МПа}$.

Суммарный эффект скачка давления при рассматриваемых переходах в системе составит $\Delta P = \Delta P_{a \rightarrow \kappa'} + \Delta P_{\kappa \rightarrow \gamma} = -2612 \text{ МПа}$ для *Fe* и $\Delta P = -2279,82 \text{ МПа}$ для стали У8_{отж}.

Таким образом, переход частиц из одной системы в другую при $\alpha \rightarrow \gamma$ - превращении сопровождается не только отрицательной дилатацией, но и отрицательным скачком давления. Система сжимается под действием отрицательного давления. Поэтому ΔP можно рассматривать как некоторое внутреннее эффективное давление, которое обеспечивает переход системы в новое состояние.

Непосредственное экспериментальное измерение величин P_a , P_{κ} , $P_{\kappa'}$ и P_g не представляется возможным. Поэтому будем опираться на косвенные экспериментальные данные.

С этой целью рассмотрим разность давлений ΔP_{κ} на границах между *Fe* и сталями У8_{отж} и 20. Это позволит сопоставить ΔP_{κ} с характером изменения пределов текучести в сталях при

комнатной температуре. Опираясь на данные таблицы 4 получим $\Delta P_K = P_K^{Y8_{отж}} - P_K^{Fe} = -165$ МПа, $\Delta P_K = P_K^{20} - P_K^{Fe} = -158$ МПа и $\Delta P_K = P_K^{Y8_{деф}} - P_K^{Y8_{отж}} = -53,3 \div -59,3$ МПа. С другой стороны, механическая устойчивость Fe и углеродистой стали при растяжении характеризуется пределом текучести s_T . Согласно данным [8,9] предел текучести у Fe $s_T^{Fe} = 123$ МПа, у стали 20 - $s_T^{20} = 280$ МПа, у стали 30 - $s_T^{30} = 292$ МПа. Из этих данных следует, что $\Delta s_T = s_T^{Fe} - s_T^{20} = -157$ МПа и $\Delta s_T = s_T^{Fe} - s_T^{30} = -169$ МПа. Сравнение величин ΔP_K и Δs_T обнаруживает их согласие.

Этот результат имеет важное значение. Он показывает, что течение металла при пластической деформации обусловлено потерей устойчивости границ зерен металла и подобен фазовому превращению. На глубокую аналогию между процессом пластического течения металла и фазовым переходом указывается и в монографии [1]. Однако в данном случае эта аналогия имеет адресный характер, поскольку показывает, какая подсистема отвечает за процесс течения.

2 Расчет сжимаемости подсистем. Другой важной характеристикой металлов является их сжимаемость B или модуль всестороннего сжатия M . Сжимаемость может быть измерена в эксперименте, что позволяет сравнить данные эксперимента с результатами теоретического расчета.

Дифференцируя уравнение (1) по давлению, получим уравнение для сжимаемости вида:

$$B = \frac{dz}{dP} = -\frac{v}{kT} (z + z^2). \quad (7)$$

Модуль всестороннего сжатия M примет вид:

$$M = \frac{1}{B} = -\frac{kT}{v} (z + z^2)^{-1} \quad (8)$$

Подставляя величины Z_a, Z_K, Z_g и v_a, v_K, v_g из таблиц 2 и 3 в уравнения (7) и (8), получим сжимаемость подсистем и модули всестороннего сжатия. Результаты такого расчета представлены в таблице 5

Таблица 5

Значения B_a, B_K, B_g и M_a, M_K, M_g в Fe и стали У8_{отж}

Материал	$B_a, \text{Па}^{-1}$	$B_K, \text{Па}^{-1}$	$B_g, \text{Па}^{-1}$	$M_a, \text{Па}$	$M_K, \text{Па}$	$M_g, \text{Па}$
Fe	$9,517 \cdot 10^{-12}$	$1,57 \cdot 10^{-10}$	$3,156 \cdot 10^{-11}$	$1,05 \cdot 10^{11}$	$6,37 \cdot 10^9$	$3,168 \cdot 10^{10}$
У8 _{отж}	$1,398 \cdot 10^{-11}$	$2,19 \cdot 10^{-10}$	$4,169 \cdot 10^{-11}$	$7,15 \cdot 10^{10}$	$4,566 \cdot 10^9$	$2,40 \cdot 10^{10}$

Как показывает расчет, сжимаемости подсистем значительно отличаются друг от друга. Например, сжимаемость границы у железа в 16,5 раз выше сжимаемости α - фазы; в 15,6 раза выше для стали У8_{отж}.

Экспериментально подобное различие сжимаемости подсистем обнаружить не удастся. Однако эта особенность границы приобретает важное значение в задачах, связанных с диффузионными процессами в твердых телах.

Проведенный независимый анализ подсистем позволяет перейти к вопросу об устойчивости подсистем и системы «кристалл-граница» в целом.

3 Об устойчивости системы «кристалл-граница». Расчеты показывают, что внутреннее давление в α - фазе значительно превосходит давление на границе. Что удерживает атомы α - фазы при столь высоком положительном давлении? Чтобы ответить на этот вопрос рассмотрим равновесие кристалла по отношению к границе.

Условие равновесия α - фазы можно выразить уравнением баланса по давлению вида

$$P_\alpha + \Delta P_{K\alpha} = P_K > 0. \quad (9)$$

Из уравнения (9) следует, что кристаллическая фаза оказывается неустойчивой, поскольку преобладают силы отталкивания (здесь уместна модель жестких сфер). Причем давление $\Delta P_{K\alpha} = P_K - P_\alpha < 0$ не является внутренним свойством α - фазы, а является реакцией со стороны границы. Подставляя значения P_α и P_K (таблица 4) в уравнение (9), получим $\Delta P_{K\alpha} = -4807,5$ МПа у Fe и $\Delta P_{K\alpha} = -3852,7$ МПа у стали У8_{отж}.

Уравнение баланса (9) противоречит механистической точке зрения на взаимодействие атомов. Процессы разрушения материалов трактуются как акты разрыва межатомных связей.

Расчет показывает, что внутри кристаллической фазы частицы находятся в состоянии отталкивания. Уравнение(9) выполняется при условии, что отсутствуют процессы переброса частиц из одной подсистемы в другую. Это и определяет устойчивость системы, например, к механическому воздействию.

Рассмотрим два варианта процесса течения металла.

1. При наложении на систему внешних растягивающих напряжений атомы α - фазы начнут переходить в состояние атомов границы. Уравнение баланса нарушится ($\Delta E \rightarrow 0$) и граница потеряет устойчивость. Граница начнет смещаться (металл течет при растяжении) с образованием областей новой кристаллической структуры (по типу зарождения и роста) [6], а сам процесс течения металла (пластическая деформация) будет носить термически активируемый характер.

2. При наложении на систему сжимающих напряжений атомы границы начнут переходить в состояние атомов α - фазы и кристалл потеряет устойчивость ($\Delta E \rightarrow 0$). В этом случае превращение будет происходить в объеме кристалла (металл течет при сжатии). Процесс будет носить атермический характер, а сам вид превращения называется двойникованием.

Таким образом, при сжатии системы основной вклад в сопротивление сжатию дает кристаллическая фаза. При растяжении основной вклад в сопротивление дает граница.

Поскольку реакция подсистем на внешнее механическое воздействие зависит от вида напряженного состояния (растяжение или сжатие), это должно проявляться в асимметрии прилагаемых предельных напряжений. Опыт показывает, что механическая устойчивость металла характеризуется пределом текучести S_T (потеря устойчивости при растяжении) и твердостью H_B или микротвердостью (потеря устойчивости при сжатии), причем $H_B > S_T$. В табл. 6 для Fe и ряда углеродистых сталей представлены отношения величин H_B к S_T .

Таблица 6

Отношения твердости H_B к пределу текучести S_T .

Марка стали	Fe	10	20	30	40
H_B / σ_T	5,3-6,13	6,24	5,43	6,0	6,35

Среднее значение отношения величин H_B и S_T составляет 5,85 единиц. Если рассмотреть отношение величин $\Delta P_{ка}$ и P_k для Fe и стали У8_{отж}, то получим $\frac{\Delta P_{ка}}{P_k} = 5,7$. Теоретический расчет хорошо согласуется с данными опыта.

Если рассмотреть равновесие границы по отношению к α - фазе, то условие равновесия можно выразить уравнением баланса по давлению в виде:

$$\Delta P_{к\alpha} = P_k - P_\alpha < 0. \quad (10)$$

Из уравнения (10) следует, что граница является устойчивой подсистемой, поскольку обладает отрицательное давление со стороны кристаллической фазы. Важность этого результата состоит в том, что для границы или поверхности кристаллической фазы вариант жестких сфер неприменим. В такой подсистеме следует ожидать перекрытия сфер, т.е. возможность обобщения или коллективизации внешних электронов и, как следствие, наличие проводимости.

4 О носителях энергии E в металлах. При высоких температурах энергия E оказывается порядка тепловой энергии атомов кристалла (табл. 2). Поэтому внутреннее давление в системе можно было бы рассматривать как тепловое давление фотонов. Однако расчет показывает, что при снижении температуры отношение энергии E к значению kT растет, а не убывает, как этого следовало бы ожидать (по Дебаю теплоемкость $C \sim T^3$ при низких температурах). Можно это показать прямым расчетом на Fe, опираясь на данные о коэффициенте термического расширения (КТР) объема β и уравнение вида [6]:

$$\beta T = \left(\zeta + \zeta^2 \right) \ln \left(1 + \frac{1}{\zeta} \right). \quad (11)$$

Так как при низких температурах ОДСО $\zeta \ll 1$, уравнение (11) можно упростить, представив его в виде:

$$\beta T = \zeta \ln \frac{1}{\zeta}. \quad (12)$$

При $T = 5K$ КТР объема у Fe – $\beta = 5,1 \cdot 10^{-8} \text{ гр}^{-1}$ [10]. Подставляя значения β и T в уравне-

ние (12), получим ОДСО $\zeta = 1,411 \cdot 10^{-8}$, т.е. относительная доля свободного объема очень мала (табл. 1). Подставляя значения T и ζ в уравнение (1), получим, что отношение $E/kT = 18,0764$ единицы, а значение энергии $E = 1,2479 \cdot 10^{-21}$ Дж. Это в 58 раз ниже значения энергии E_α в Fe при $T = 1183$ (табл. 2).

Таким образом, вопрос о природе носителей энергии E (фононы или электроны) приобретает важное значение. В дальнейшем энергию E будем обозначать через E_T , подчеркивая ее зависимость от температуры и величины ОДСО.

Для ответа на поставленный вопрос будем опираться на такие явления в металлах, которые дают детальную информацию о величинах зависящих от универсальных констант и контролируемых в эксперименте переменных (частота, температура, напряженность магнитного поля H , ориентации кристалла). К таким явлениям относится эффект де Гааза – ван Альфена, наблюдаемый в металлах при температурах близких к абсолютному нулю. В этом эффекте магнитная восприимчивость χ зависит от величины $\frac{1}{H}$ периодическим образом. Суть этого явления состоит в том, что орбитальное движение электрона в магнитном поле квантуется в единицах энергии $E_H = \hbar\omega_C$. Представим энергию E_H в ее классическом виде уравнением:

$$E_H = \hbar\omega_C = \frac{\hbar e}{mc} H, \quad (13)$$

где $\hbar$ – постоянная планки; ω_C – частота классического движения электрона (циклотронная частота) в магнитном поле; e – заряд электрона; m – масса электрона; c – скорость света. Энергия E_H и частота ω_C зависят только от универсальных констант и величины напряженности магнитного поля. Поэтому, зная величину H , можно рассчитать частоту ω_C и величину энергии E_H . В табл. 7 представлены экспериментальные значения величины магнитного поля H и отношение собственной частоты электрона ω_e к циклотронной частоте ω_C [11,12], а также рассчитанные значения ω_C и E_H по уравнению (13) для Ag , Au и Cu .

Т а б л и ц а 7

Значения величин $H_{экс}$, $\frac{\omega_e}{\omega_{C\text{экс}}}$, $\omega_{C\text{рас}}$ и $E_{H\text{рас}}$ для Ag , Au и Cu

Металл	$H_{экс}, \Gamma_c$	$\frac{\omega_e}{\omega_{C\text{экс}}}$	$\omega_C, 10^{11} \frac{Rad}{c}$	$E_H \cdot 10^{23}, \text{Дж}$
<i>Ag</i>	13145,7	51	2,316712	2,4431814
<i>Au</i>	22624	29	3,987105	4,204762
<i>Cu</i>	–	27	–	–

Для Cu автору известно только отношение частот. Расчеты, проведенные ниже, позволят заполнить прочерки в таблице 7.

В таблице 8 представлены теоретические значения величины энергии E_T при $T = 5K$ для Ag , Au и Cu . Расчеты проведены по данным о КТР объема этих металлов [10] и по уравнениям (12) и (1). В табл. 8 приводится также отношение энергии E_T к E_H для Ag и Au .

Т а б л и ц а 8

Металл	T, K	$\beta \cdot 10^8, K^{-1}$	$\zeta \cdot 10^8$	$E_T \cdot 10^{21}, \text{Дж}$	E_T/E_H
<i>Ag</i>	5	5,31	1,472	1,244981	50,957
<i>Au</i>	5	7,65	2,162	1,2183477	28,97
<i>Cu</i>	5	2,7	0,720	1,29434	–

Сравнивая величины отношений E_T/E_H и ω_e/ω_C в таблицах 7 и 8 видим, что они совпадают. При этом значение энергии E_T у Fe того же порядка, что и у металлов Ag , Au и Cu . Этот важный результат можно представить уравнением вида:

$$\frac{E_T}{E_H} = \frac{\hbar\omega_e}{\hbar\omega_C}, \quad (14)$$

где ω_e - собственная частота электрона без магнитного поля.

Расчет для *Cu* по уравнению (14) дают следующие значения величин: $H=25794$ Гс, $\omega_C=4,5457 \cdot 10^{11} \frac{rad}{c}$, $E_H=4,79385 \cdot 10^{-23}$ Дж.

Таким образом, энергию электрона в металле, помещенного в магнитное поле при низких температурах, можно представить уравнением вида

$$E = E_T \pm E_H = \hbar(\omega_e \pm \omega_C). \quad (15)$$

В этом случае уравнение (1) с учетом уравнения (15) примет вид

$$\zeta = \frac{1}{e^{\frac{\hbar(\omega_e \pm \omega_C)}{kT}} - 1}. \quad (16)$$

Уравнение (16) позволяет непосредственно рассчитать величину магнитострикционного эффекта в металле, помещенного в магнитное поле при низких температурах. Например, для *Ag* при $T=5K$ и $H=13145,7$ Гс минимальное значение ОДСО ζ_1 составляет $1,03326 \cdot 10^{-8}$, если $E = \hbar(\omega_e + \omega_C)$. Максимальное значение ОДСО $\zeta_1 = 2,09704 \cdot 10^{-8}$, если $E = \hbar(\omega_e - \omega_C)$. Таким образом, за время $t = \frac{\pi}{\omega_C}$ ОДСО изменится на величину $\Delta\zeta = \zeta_2 - \zeta_1 = 1,067 \cdot 10^{-8}$.

Представляет интерес проверка этого результата в эксперименте.

Из уравнения (2) и (14) следует еще одно уравнение вида:

$$\hbar\omega_e = PV. \quad (17)$$

Уравнение (17) позволяет непосредственно связать частоту электрона с давлением в системе. Эксперименты по проводимости металлов в зависимости от внешнего давления могли бы служить основанием для проверки уравнения (17).

Таким образом, комплексный анализ кристаллической системы, изложенный выше, дает возможность сделать ряд следующих выводов, которые можно рассматривать как основные принципы организации многочастичной системы.

1. Кристаллическую систему необходимо рассматривать как систему, состоящую из двух подсистем (двухуровневая модель).
2. Подсистемы качественно и количественно находятся в разных состояниях.
3. Подсистемы не изолированы по отношению друг к другу и могут обмениваться энергией и частицами.
4. Взаимодействие подсистем носит несимметричный характер.
5. Вид превращения определяется характером перехода частиц из одной подсистемы в другую.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Кристиан Д.К. Теория превращений в металлах и сплавах. ч.1. М.: Мир, 1978. 327 с.
2. Хейне В., Козн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М.: Мир, 1973. 295 С.
3. Laves F., Phase Stability in Metals and Alloys, McGraw-Hill, New York, pp. 85, 521, 1967.
4. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1971. 402 с.
5. Ашкрофт Н, Мермин Н. Физика твердого тела. М.: Мир, Т.2. 1979. 360 с.
6. Бертяев Б.И. О природе дилатации при $\alpha \rightarrow \gamma$ - превращения в железе и углеродистых сталях // Вестник Сам-ГТУ. Серия: Физико-математические науки. Вып. 9. Самара: СамГТУ. 2000. с. 191 – 196.
7. Гриднев В.Н., Мешков Ю.Я., Ошкандеров С.П., Трефилов В.И. Физические основы электротермического упрочнения стали. Киев : Наукова думка, 1973. 320 с.
8. Дьяченко С.С. Образование аустенита в железо-углеродистых сплавах. М.: Металлургия, 1982. 260 с.
9. Таблицы физических величин: Справочник / Под ред. И.К. Кикоина.-М.: Атомиздат, 1976. 440 с.
10. Физические величины: справочник / Под ред. Григорьева И.Г., Мейлихова Е.З. М.: Энергоатомиздат, 1991, 1232 с.
11. Ашкрофт Н., Мерлин Н. Физика твердого тела. М.: Мир, Т.1, 1979, стр. 399.
12. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.