

მიხეილ ოქროსაშვილი

ფიზიკური ლიტონმცოდნეობა

„ტექნიკური უნივერსიტეტი“

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

მიხეილ ოქროსაშვილი

ფიზიკური ლითონმცოდნეობა

ლექციების კურსი მასალათმცოდნეობის სპეციალობის
სტუდენტებისათვის



რეკომენდებულია საქართველოს
ტექნიკური უნივერსიტეტის
სარედაქციო-საგამომცემლო საბჭოს
მიერ. 17.05.2017, ოქმი №2

თბილისი
2017

დამხმარე სახელმძღვანელოში ყურადღება ძირითადად გამახვილებულია ლითონის ატომურ-კრისტალურ აგებულებაზე, მყარი ხსნარისა და შუალედური ლითონთშორისი ფაზების ტიპებსა და მათი ჩამოყალიბების პროცესზე მოქმედი ფაქტორების ფიზიკურ ბუნებაზე, ლითონის კრისტალიზაციის თეორიასა და გარდაქმნებზე მყარ მდგომარეობაში გახურება-გაცივების პროცესში, რაც განმსაზღვრელი ფაქტორია ლითონის ფუნქციური მახასიათებლების ჩამოყალიბების პირობებში.

ლექციების კურსი განკუთვნილია მასალათმცოდნეობის საგანმანათლებლო პროგრამის დოქტორანტებისათვის. იგი დიდ დახმარებას გაუწევს მეტალურგიის საგანმანათლებლო პროგრამის სტუდენტებს სპეციალური კურსების მომზადებასა და თეორიული ცოდნის გაღრმავებაში.

რეცენზენტები: სტრუქტურულ კვლევათა რესპუბლიკური ცენტრის ხელმძღვანელი,
ფიზიკა-მათემატიკის მეცნიერებათა დოქტორი, პროფესორი
ელგუჯა ქუთელია,

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის მეტალურგიის,
მასალათმცოდნეობისა და ლითონების დამუშავების დეპარტამენტის
ხელმძღვანელი, ტექნიკის მეცნიერებათა დოქტორი, პროფესორი
დავით ნოზაძე

© საგამომცემლო სახლი „ტექნიკური უნივერსიტეტი“, 2017

ISBN 978-9941-20-944-4 (PDF)

<http://www.gtu.ge>

ყველა უფლება დაცულია. ამ წიგნის არც ერთი ნაწილის (იქნება ეს ტექსტი, ფოტო, ილუსტრაცია თუ სხვა) გამოყენება არანაირი ფორმით და საშუალებით (იქნება ეს ელექტრონული თუ მექანიკური) არ შეიძლება გამოცემლის წერილობითი ნებართვის გარეშე.

საავტორო უფლებების დარღვევა ისჯება კანონით.

წიგნში მოყვანილი ფაქტების სიზუსტეზე პასუხისმგებელია ავტორი/ავტორები.

ავტორის/ავტორთა პოზიციას შეიძლება არ ემთხვეოდეს საგამომცემლო სახლის პოზიცია.



წინასიტყვაობა

ახალი ტექნიკის დარგების უდიდესი ტემპებით განვითარება გაუმჯობესებული ან პრინციპულად ახალი ფიზიკური, ქიმიური და მექანიკური თვისებების მქონე მასალების შექმნის აუცილებლობას თხოულობს. დღეისათვის პერიოდული სისტემის სულ უფრო მეტი ისეთი ელემენტი პოულობს ტექნიკაში გამოყენებას, რომლებიც ახლო წარსულში მხოლოდ სამეცნიერო კვლევის ინტერესის სფეროს მიეკუთვნებოდა. ყოველივე ამან, თავის მხრივ, ბიძგი მისცა მასალათა დამუშავების ახალი ტექნოლოგიების შემუშავებას და პრაქტიკაში გამოყენებას.

XX საუკუნის დასასრულს და XXI საუკუნის დასაწყისში ლითონების შესახებ მეცნიერების განვითარებამ მნიშვნელოვნად გაზარდა ლითონური მასალების შესახებ ფიზიკური წარმოდგენების როლი, რომელიც ლითონთა ფიზიკისა და ფიზიკური ლითონმცოდნეობის შესწავლის საგანს წარმოადგენს.

ტექნიკაში გამოყენებული ელემენტების მრავალფეროვნება და მათი ურთიერთშეხამების ამოუწურავი პირობები უნიკალური თვისებების შენადნობების შექმნის დიდ პერსპექტივებს სახავს, თუმცა სასურველი თვისებების მქონე, ჯერ კიდევ არარსებული შენადნობის შედგენილობის წინასწარი განსაზღვრისათვის აუცილებელია ვისწავლოთ კრისტალში ელექტრონების განაწილების, მათი ურთიერთქმედების ხასიათისა და ატომთშორისი კავშირის ძალების გამოთვლა. სწორედ ამ გზით არის შესაძლებელი ლითონმცოდნეობის გადაყვანა განვითარების აღწერითი ეტაპიდან ახალ საფეხურზე, როდესაც შესაძლებელი გახდება თეორიულად განისაზღვროს სასურველი თვისებების მქონე შენადნობის შედგენილობა და სტრუქტურა. სწორედ აქ იკვეთება ლითონთა ფიზიკისა და ლითონმცოდნისათვის №1 ამოცანა: შეიქმნას შენადნობთა უახლესი თეორია (გამოთვლითი ლითონმცოდნეობა), რომელიც წინასწარ ცნობილი თვისებების მქონე მასალის შექმნის შესაძლებლობებს უზრუნველყოფს.

მეორე გენერალური ამოცანა, ლითონურ მასალაში დღემდე უცნობი თვისებების გამომჟღავნებაა, რამაც შეიძლება საფუძველი ჩაუყაროს ტექნიკის სრულიად ახალ, არაერთ მიმართულებას. ამ მიზნის მისაღწევად აუცილებელია მაღალი სიხუფთავის საწყისი ნივთიერებებისა და ზუსტი მათემატიკური კვლევის მეთოდების გამოყენება; მასალის თვისებათა შესწავლის არეალის მნიშვნელოვანი გაფართოება

– ამჟამად მათი რიცხვი ათამდე ჩამონათვალთ შემოიფარგლება, საჭიროა კი ასობით თვისების შესწავლა; ლითონებისა და შენადნობების მისაღებად ექსტრემალური პირობების (მაღალი და კრიოგენული ტემპერატურები, მაღალი წნევა და ღრმა ვაკუუმი, მძლავრი ელექტრული, მაგნიტური და ულტრაბგერის ველები, უწონადობა და ა.შ) გამოყენება.

მეცნიერული მოთხოვნების ასეთმა გამოწვევებმა განაპირობა სწორედ ლითონთა ფიზიკოსებისა და ლითონმცოდნეების ინტერესთა გადაკვეთა, რამაც მიზანშეწონილი გახადა უმაღლეს სკოლებში ახალი დისციპლის – ფიზიკური ლითონმცოდნეობის შემოტანის აუცილებლობა.

წინამდებარე ლექციების კურსი წარმოადგენს პირველ მცდელობას საფუძველი ჩაუყაროს ქართულ ენაზე ფიზიკურ ლითონმცოდნეობაში სახელმძღვანელოს შექმნის პროცესს მასალათმცოდნეებისათვის, რაც მნიშვნელოვნად აამაღლებს ახალგაზრდა სპეციალისტების მომზადების დონეს მოცემულ სფეროში. ამასთან, კურსის შესწავლა არ მოითხოვს სპეციალურ თეორიულ მომზადებას მყარი სხეულების ფიზიკის სფეროში, რაც ლექციების კურსს ხელმისაწვდომს ხდის მასალათმცოდნეობის სტუდენტების ფართო წრისათვის.

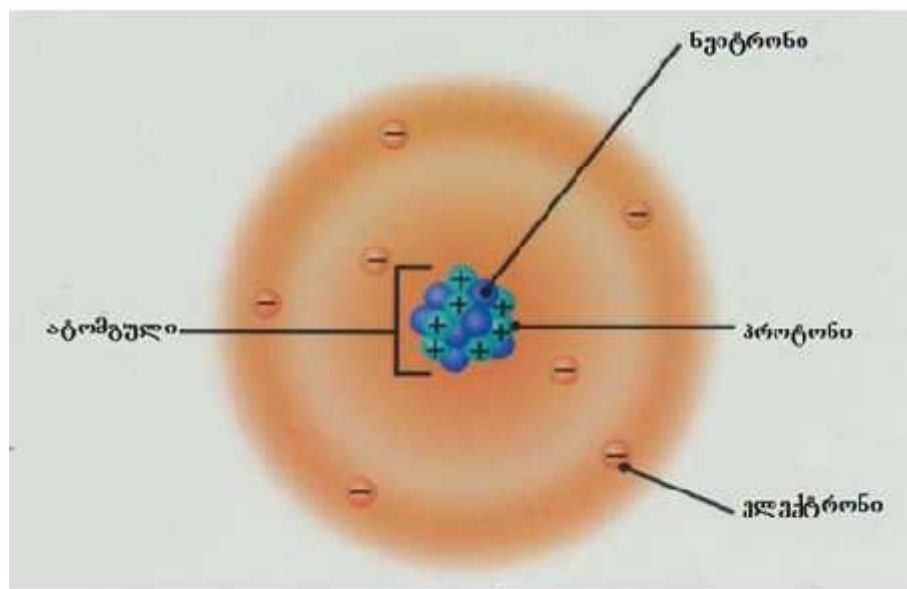
I. სუზთა ლითონის სტრუქტურა

1.1. ელემენტის ელექტრონული სტრუქტურა

ლითონისათვის დამახასიათებელი ფიზიკური და ქიმიური თვისებები, რითაც ის სხვა ელემენტებისგან განსხვავდება, ატომის ელექტრონული სტრუქტურით განისაზღვრება.

რეზერფორდის მოდელის თანახმად, ატომი შეიძლება წარმოვიდგინოთ დადებითად დამუხტული ბირთვის (ატომგულის) სახით, რომელიც გარშემორტყმულია უარყოფითად დამუხტული ელექტრონების ღრუბლით (სურ. 1.1). მიუხედავად იმისა, რომ ბირთვში ატომის თითქმის მთელი მასაა თავმოყრილი, მისი დიამეტრი (დაახლოებით 10^{-13} სმ) საკმაოდ მცირეა მთელი ატომის დიამეტრთან შედარებით (ატომის დიამეტრი 10^{-8} სმ რიგისაა). Z ნომრის მქონე ატომის დადებითი მუხტი, რომელიც ელექტრონის მუხტის ერთეულებითაა გამოსახული ($e=4,8029 \cdot 10^{-10}$ ელ. სტატ. ერთეული), $+Z$ -ის ტოლია. ამ მუხტის მატარებელია Z რაოდენობის პროტონები. ბუნებრივია, ყოველ მათგანს აქვს $+e$ მუხტი და ისეთივე მასა, როგორიც წყალბადის ატომის ბირთვს (იგი 1836-ჯერ აღემატება ელექტრონის მასას).

ატომის ბირთვი უმუხტო ნაწილაკებსაც შეიცავს. მათ ნეიტრონები ეწოდება. ნეიტრონის მასა თითქმის პროტონის მასის თანაზომადია. ვინაიდან ნეიტრონს მუხ-



სურ. 1.1. ატომის ელექტრონული აგებულების მოდელი

ტი არ გააჩნია, ის ატომგულის მუხტს არ ცვლის, სამაგიეროდ დიდი წვლილი შეაქვს ელემენტის ატომურ წონაში.

ელემენტების დიდი ნაწილი ისეთი ატომებისგან შედგება, რომლებსაც ერთნაირი ატომური ნომრები აქვთ, მაგრამ განსხვავდებიან ატომური წონით. ასეთი ატომები პროტონების თანაბარ რაოდენობას შეიცავს (რომელიც ატომური Z ნომრის ტოლია), თუმცა ნეიტრონების რიცხვი განსხვავებულია, რაც ე.წ. იზოტოპების წარმოქმნას განაპირობებს. ამრიგად, იზოტოპი ეწოდება ერთი და იმავე ქიმიური ელემენტის ატომებს, რომლებსაც აქვთ სხვადასხვა ატომური წონა, მაგრამ ერთნაირი ქიმიური ბუნება. იზოტოპები ფიზიკური თვისებებით უმნიშვნელოდ განსხვავდებიან ერთმანეთისგან. მათ ერთი და იგივე ადგილი უჭირავთ პერიოდულ სისტემაში.

ატომგული კიდევ ერთი ბუნების მქონე ნაწილაკებს შეიცავს, რომლებსაც მეზონები ეწოდება. ისინი შეიძლება იყვნენ ან ნეიტრალური, ან როგორც დადებითი, ისე უარყოფითი მუხტის მატარებლები. მეზონები ნეიტრონებსა და პროტონებს შორის კავშირს ასორციელებენ. აღსანიშნავია, რომ ატომგულში თავმოყრილი ნაწილაკების (პროტონების გარდა) გავლენა ელემენტის ქიმიურ თვისებებზე ჯერ კიდევ არ არის შესწავლილი.

ელექტრონულად ნეიტრალურ ატომში ატომგულის Z რაოდენობის პროტონებს იმავე რაოდენობის ორბიტალური ელექტრონები შეესაბამება. ბორის თეორიის თანახმად, ელექტრონი ატომგულიდან საკმაოდ შორ მანძილზე შეიძლება მოძრაობდეს, მაგრამ დროის უდიდეს შუალედში ის უნდა იმყოფებოდეს მკაცრად განსაზღვრულ გარსში და ენერგიის გამოსხივების გარეშე იმ წრიულ ან ელიფსურ ორბიტაზე ბრუნავდეს, რომლის $m_e \vec{r}$ მოძრაობის რაოდენობის მომენტი $\vec{M}$ (ბრუნვის იმპულსი ან კუთხური მომენტი) $h/2\pi$ ფარდობის მთელი რიცხვების ჯერადია, სადაც:

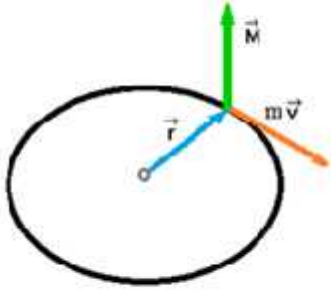
m_e არის მბრუნავი სხეულის ანუ ელექტრონის მასა;

$\vec{r}$ – ორბიტაზე ბრუნვის სიჩქარე;

$\vec{r}$ – ორბიტის რადიუს-ვექტორი, რომელიც ბრუნვის ცენტრს ნაწილაკთან აერთებს;

h – პლანკის უნივერსალური მუდმივა ($h=6,625 \cdot 10^{-27}$ ერგი·წმ).

$\vec{M}$ ვექტორის მიმართულება იმ სიბრტყის პერპენდიკულარულია, რომელშიც $\vec{r}$



სურ. 12. მოძრაობის რადიუსის
ორბიტალური მომენტის არსისათვის

და $\vec{r}$ ვექტორებია განთავსებული (სურ. 12).

აქედან გამომდინარე, ელექტრონულ ორბიტებს შემდეგი კუთხური მომენტები ექნებათ: $h/2\pi$, $2h/2\pi$, $3h/2\pi$ და ა.შ. ანუ მოძრაობის რადიუსის მომენტი

$$m_e \vec{v} \vec{r} = \frac{n\hbar}{2\pi} \quad (1.1)$$

$n=1; 2; 3; 4; 5; 6; 7$ არის მთავარი კვანტური რიცხვი, რომელსაც K; L; M; N; O; P; Q სიმბოლოებით აღნიშნავენ. მთავარი კვანტური რიცხვი n ელექტრონის საერთო ენერგიას და ატომიდან მისი დაშორების ხარისხს განსაზღვრავს.

n კვანტური ორბიტის რადიუსი და ორბიტაზე მოძრავი ელექტრონის სიჩქარე შემდეგი დამოკიდებულებით განისაზღვრება:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{4\pi^2 m_e e^2} \quad (1.2); \quad v_n = \frac{2\pi e^2}{n\hbar} \quad (1.3)$$

(1.2) ტოლობიდან გამომდინარე, კვანტური ორბიტის რადიუსი მთავარი კვანტური რიცხვის კვადრატის პროპორციულია, თუმცა მის სიდიდეს ასევე ატომის ბირთვის მუხტი (e) განსაზღვრავს. წარმოდგენილი ფორმულებით გამოთვლილი წყალბადის ატომის ორბიტის რადიუსი $r_1=0,53 \cdot 10^{-8}$ სმ, ხოლო ელექტრონის მოძრაობის სიჩქარე $v_1=2,2 \cdot 10^8$ სმ/წმ.

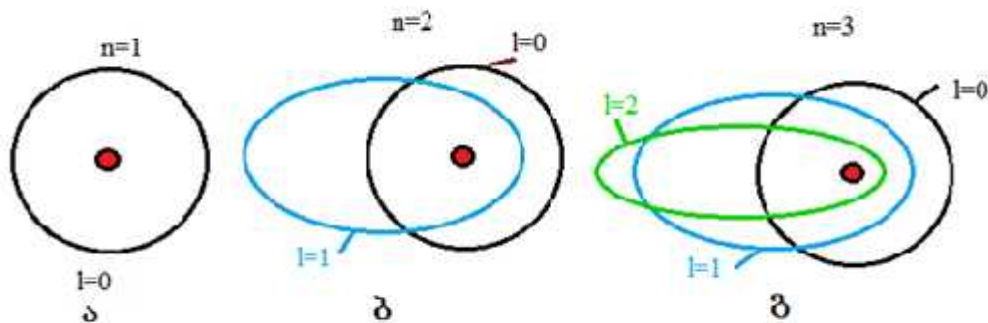
მთავარი კვანტური რიცხვი n დაკავშირებულია აგრეთვე ელექტრონების ენერგიასთან – მთავარ გარსში მოძრავი ელექტრონების უარყოფითი ენერგიის სიდიდე n^2 -ის უკუპროპორციულია:

$$E_n = - \frac{2\pi^2 m_e e^4}{n^2 \hbar^2} \quad (1.4)$$

ელექტრონების რადიუსი ელექტრონულ გარსში განისაზღვრება ტოლობით:

$$N=2n^2 \quad (1.5)$$

ელექტრონულ გარსში ელექტრონები ქვეგარსებად (ქვედონებად) არის განლაგებული. ქვეგარსებში ელექტრონების მდგომარეობა ორბიტალურ ℓ კვანტურ რიცხვს შეესაბამება. ორბიტალური კვანტური რიცხვი იმ ორბიტის ფორმას განსაზღვრავს, რომელზედაც ელექტრონები მოძრაობს. როდესაც $\ell = 0$, ორბიტა წრიუ-



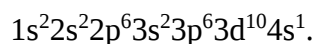
სურ. 13. ელექტრონის ორბიტის ფორმა l კვანტური რიცხვზე დამოკიდებულებით

ლია (სურ. 13, ა). თუ $\ell = 1$, ორბიტის ფორმა ელიფსში გადადის (ბ). ℓ სიდიდის მნიშვნელობის შემდგომი ზრდა ელიფსის სულ უფრო მეტად წაგრძელებას იწვევს (გ). ელიფსური ორბიტა დაახლოებით იმავე ენერგიით ხასიათდება, როგორითაც წრიული ორბიტა, მაგრამ განსხვავებული კუთხური მომენტი აქვს. ორბიტალური კვანტური რიცხვი იღებს მნიშვნელობებს ნულიდან $(n-1)$ -მდე. ამრიგად, მნიშვნელობები $\ell = 0; 1; 2; 3 \dots$ დაკავშირებულია ქვეგარსებთან, რომლებიც $s; p; d; f \dots$ სიმბოლოებით აღინიშნება. ქვეგარსებში ელექტრონების მაქსიმალური რიცხვი $2(2\ell + 1)$ -ის ტოლია.

ზემოთქმულიდან გამომდინარე, K გარსი შეიძლება შეიცავდეს მხოლოდ s ტიპის ორბიტას, L გარსი – s და p ტიპის ორბიტებს, M გარსი – s, p და d ტიპის ორბიტებს და ა.შ., ანუ მთავარი კვანტური რიცხვის ყოველი ერთეულით გაზრდას თან სდევს ახალი ქვეგარსების გაჩენა.

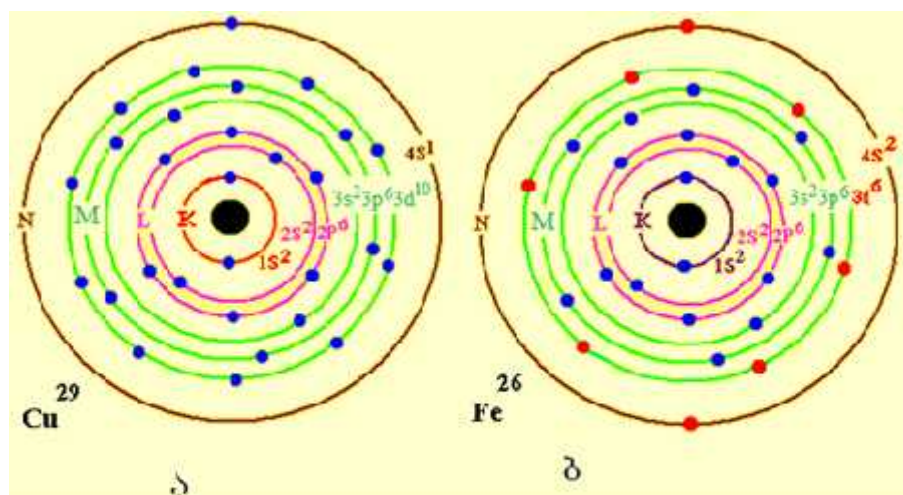
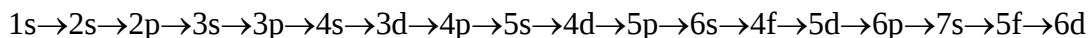
ამრიგად, მენდელეევის პერიოდული სისტემის შესაბამისად, დაბალი რიგითი ნომრის ელემენტიდან მომდევნოზე გადასვლისას მიმდინარეობს ენერგეტიკული ქვედონეების თანდათანობითი შევსება ელექტრონებით. ჯერ ივსება უმცირესი ენერგიის მქონე დონეები, შემდეგ კი შედარებით უფრო მაღალი ენერგიისა.

ელემენტების ელექტრონული კონფიგურაციის, ანუ კვანტური მდგომარეობის აღწერისათვის, სპეციალური აღნიშვნებია შემოღებული: თავდაპირველად იწერება მთავარი კვანტური n რიცხვის აღმნიშვნელი ციფრი, შემდეგ – შესაბამისი ქვედონეების სიმბოლოები $s; p; d; f$, რომლებსაც ზედა რეგისტრში, ხარისხის მაჩვენებლად, მითითებული აქვს ამ ქვედონეზე ელექტრონების რაოდენობა. მაგალითად, სპილენძის ატომისათვის, რომლის რიგითი ნომერია 29, ელექტრონული კონფიგურაცია შემდეგნაირად ჩაიწერება:



1.4 ა სურათზე ნაჩვენებია სპილენძის ატომის ელექტრონული აგებულების მოდელი.

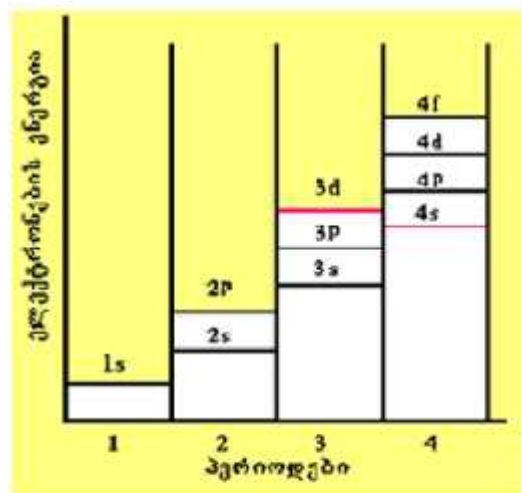
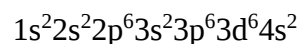
მრავალ ლითონში ელექტრონული გარსის ნორმალურად შევსება 3p დონემდე შეინიშნება, შემდეგ კი ელექტრონებით ქვედონეების შევსების ზემოთ აღწერილი თანმიმდევრობა ირღვევა და ელექტრონების ენერგიის ზრდა 1; 2; 3 . . . 7 დონეებზე და s, p, d, f ქვედონეებზე შემდეგი თანმიმდევრობით მიმდინარეობს:



სურ. 14. სპილენძისა (ა) და რკინის (ბ) ატომების ელექტრონული აგებულების მოდელი

ასეთივე თანმიმდევრობით ხდება ენერგეტიკული დონეებისა და ქვედონეების შევსება ელექტრონებით. ამასთან, ელექტრონების ენერგია იმ ენერგეტიკულ დონეზე, სადაც ელექტრონებით შევსება მიმდინარეობს, უფრო მაღალია შევსებულ დონეებთან შედარებით.

როგორც გამომდინარეობს 1.5 სურათზე წარმოდგენილი სქემიდან, 4s ენერგეტიკული დონე უფრო ნაკლებია 3d დონესთან შედარებით. ამიტომ ახალი, 4s ქვეგარსის შენება იწყება მანამ, სანამ ბოლომდე შეივსება წინამდებარე. აქედან გამომდინარე, ლითონების დიდ ჯგუფს, რომელშიც შედის Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co და Ni, შეუვსებელი აქვთ 3d შრე მაშინ, როდესაც 4s შრეზე ერთი ან ორი ელექტრონი აქვთ. მაგალითად, რკინა, რომლის რიგითი ნომერია 26, 3d შრეზე 10-ის ნაცვლად 6 ელექტრონს შეიცავს (იხ. სურ. 14, ბ):



სურ. 15. ატომში ელექტრონების ენერგეტიკული მდგომარეობის სქემა

შეუვსებელი ქვედონეების შევსება ელექტრონებით მხოლოდ მას შემდეგ მიმდინარეობს, როდესაც უფრო მაღალი ენერგიის, 4s, 5s და 6s ქვედონეები შესაბამისად შეივსებიან ელექტრონებით.

მაქსიმალური n რიცხვის მქონე s და p ქვედონეების ელექტრონები სავალენტო ელექტრონებს წარმოადგენს. თუ s ქვედონე ან s და p ქვედონეები სრულად არის შევსებული ელექტრონებით, ატომი ქიმიურად ნეიტრალურია.

გარე ელექტრონული ორბიტების (ქვედონეების) შევსების ხარისხის მიხედვით ელემენტებს ორ ჯგუფად ყოფენ. ლითონებს, რომლებსაც არ გააჩნიათ d ქვედონე (მცირე ატომური ნომრის ლითონები – Li, Na, K, Al და სხვა) ან აღნიშნული ქვედონე სრულად აქვთ შევსებული ელექტრონებით (Cu, Zn, Cd, Ag და ა.შ.), უბრალო ლითონებს უწოდებენ. ხოლო ლითონებს, რომლებსაც ნაწილობრივ აქვთ შევსებული d ქვედონე მაშინ, როდესაც ჩამოყალიბებულია გარე s ელექტრონული ქვედონე, გარდამავალ ლითონებს უწოდებენ.

შეუვსებელი $3d$ შრე ლითონების მრავალ სპეციფიკურ თვისებას განაპირობებს. მაგალითად, ცვლად ვალენტობას, პოლიმორფიზმს, პარამაგნეტიზმს, ზოგიერთი ლითონის (Fe, Ni, Co, Gd, Er, Tu, Ho) ფერომაგნეტიზმს, კრისტალებში შეჭიდულობის დიდ ძალებს, სუბლიმაციისა და დნობის მაღალ ტემპერატურას, დაბალ ელექტროგამტარობას, მიდრეკილებას კარბიდების წარმოქმნისადმი (ამ შემთხვევაში ნახშირბადის ატომის მიერ გაცემული სავალენტო ელექტრონი $3d$ შრეს ავსებს) და ა.შ. კარბიდების წარმოქმნისადმი მიდრეკილება, კარბიდების მდგრადობა, მათი სისაღე და წარმოქმნის ტემპერატურა მით უფრო მაღალია, რაც უფრო მეტია ელექტრონული ორბიტის შეუვსებლობის ხარისხი.

ატომის ელექტრონული მდგომარეობა კიდევ ორი – ორბიტალური მაგნიტური m_l და სპინური m_s კვანტური რიცხვებით განისაზღვრება.

ორბიტალური მაგნიტური კვანტური რიცხვი ახასიათებს ელიფსური ორბიტის ორიენტაციას და კუთრი მომენტის კომპონენტებს გარკვეული მიმართულებით. იგი წარმოადგენს ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობრივი მომენტის (ბრუნვის იმპულსი ან კუთხური მომენტი) პროექციის ზომას მეტად სუსტი, გარე მაგნიტური ველის მიმართულებით. ორბიტალურმა მაგნიტურმა კვანტურმა რიცხვმა შეიძლება მიიღოს ნებისმიერი მნიშვნელობა $+l$ -დან $-l$ -მდე ნულის ჩათვლით და ზღუდავს ორბიტების რიცხვს s , p , d და f ქვეგარსებში.

ატომგულის გარშემო ელექტრონის ბრუნვა წრიულ დენს და მასთან დაკავშირებულ მაგნიტურ მომენტს წარმოქმნის. ამიტომ ელექტრონს, მიუხედავად მისი ორბიტალური მოძრაობისა, საკუთარი კუთრი მომენტიც აქვს, რომელსაც სპინურ მომენტს, ან უბრალოდ, სპინს უწოდებენ. ბოლოდროინდელი მოსაზრების თანახმად, სპინი შეიძლება განვიხილოთ, როგორც ელექტრონის რაღაც ფუნდამენტური თვისება, რომლის სრულყოფილი ახსნა, სხვა მოვლენებზე დაყრდნობით, თანამედროვე ცოდნის დონეზე შეუძლებელია.

მეოთხე, სპინური კვანტური რიცხვი სწორედ ელექტრონის სპინის მიმართულებასთან არის დაკავშირებული, რომლის განსაზღვრა ასევე მაგნიტური ველის არსებობას მოითხოვს. ამდენად, სპინური კვანტური რიცხვი მაგნიტური მომენტის კომპონენტს წარმოადგენს, რომელიც ელექტრონის მბრუნავი მაგნიტური მომენტით – სპინით აღიძვრება. იგი მხოლოდ ორ მნიშვნელობას ღებულობს – $m_s = \pm 1/2$. მაშასადამე, ყოველი ორბიტა, რომელიც l , m_l და m_s კვანტური რიცხვებით განისაზღვრება, შეიძლება შეიცავდეს ორ ელექტრონს ურთიერთსაპირისპირო სპინებით – $m_s = +1/2$ და $m_s = -1/2$.

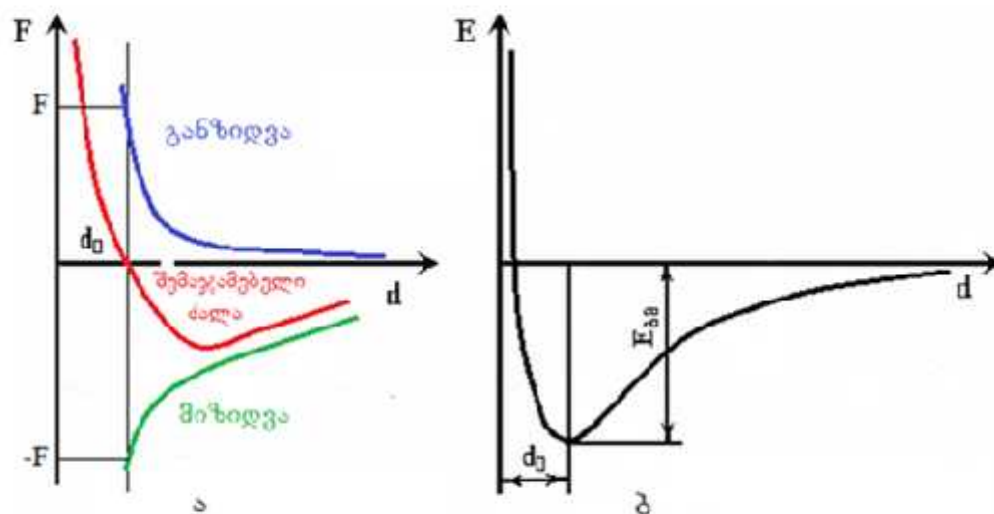
ყოველი ელექტრონული მდგომარეობა გარკვეულ ენერგიასთან არის დაკავშირებული, ამიტომ ატომის სრული ენერგია ორბიტალური Z ელექტრონების ენერგიების შეჯამებით უნდა განისაზღვრებოდეს. თუმცა, როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, ყველა ელექტრონმა არ შეიძლება დაიკავოს უმცირესი ენერგეტიკული მდგომარეობა. პაულის აკრძალვის პრინციპის თანახმად, მოცემულ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში, რომელიც n , l , m_l და m_s ოთხი კვანტური რიცხვით განისაზღვრება, არ შეიძლება არსებობდეს ერთზე მეტი ელექტრონი. ამიტომ ნებისმიერი ელემენტის ატომში Z ელექტრონები ისეთნაირად გადანაწილდება ნებადართულ მდგომარეობაში, რომ ატომის საერთო ენერგია მინიმალური აღმოჩნდეს.

სხვადასხვა ელემენტის ელექტრონული სტრუქტურის გაანალიზების შედეგად მივიღეთ იმ დასკვნამდე, რომ სწორედ მთავარ გარსსა და ქვეგარსებში ელექტრონების კვანტური კანონებით განაწილება განაპირობებს საყოველთაოდ ცნობილი ვალენტობის და თვისებების პერიოდული ცვლილებების ხასიათს ატომური ნომრების თანმიმდევრული მატების შესაბამისად, რომელიც მენდელეევის პერიოდულ სისტემაშია შეჯამებული.

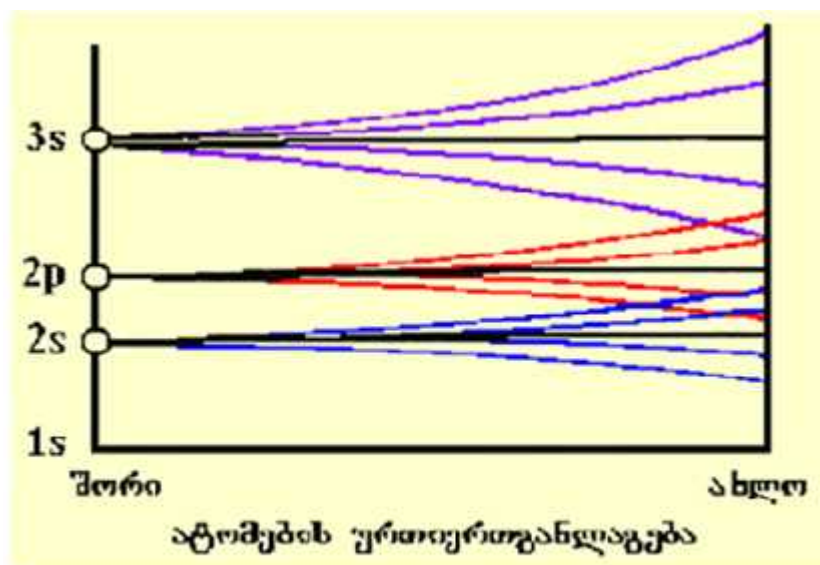
12. ატომთა შორის კავშირი კრისტალებში

კრისტალში ელემენტარულ ნაწილაკებს შორის კავშირის ტიპი ურთიერთქმედებაში მყოფი ატომების ელექტრონულ აგებულებაზეა დამოკიდებული. ელემენტარული ნაწილაკები ერთმანეთს გარკვეულ მანძილზე უახლოვდება, რაც კრისტალს გაზრდილ თერმოდინამიკურ სტაბილურობას ანიჭებს. ნაწილაკებს შორის მანძილს იმ მოქმედი ძალების ბუნება და სიდიდე განსაზღვრავს, რომლებიც იონებს, ატომებსა თუ მოლეკულებს კრისტალური გისოსის კვანძებში აკავებენ. მიზიდვის ძალები ელექტრონებისა და დადებითად დამუხტული ატომის ბირთვებთან ურთიერთქმედების შედეგად აღიძვრება, ხოლო განზიდვისა – დადებითად დამუხტული მეზობელი ატომგულების ურთიერთქმედებით გარკვეულ მანძილზე მათი მიახლოებისას. ატომების მიახლოებასთან ერთად განზიდვის ძალები სულ უფრო მეტი ინტენსივობით იზრდება მიზიდვის ძალებთან შედარებით (სურ. 1.6). ძალების გაწონასწორება ელემენტარული ნაწილაკების რაღაც d_0 მანძილზე მიახლოებისას ხორციელდება, რომელსაც ენერგიის მინიმუმი შეესაბამება და კრისტალი თერმოდინამიკულად სტაბილურ მდგომარეობაში გადადის. მას ბმის ენერგიას (E_b) უწოდებენ. სწორედ ბმის ენერგია განსაზღვრავს ისეთ ფიზიკურ თვისებებს, როგორიცაა დნობისა და აორთქლების ტემპერატურა, დრეკადობის მოდული, ხაზობრივი გაფართოების კოეფიციენტი და ა.შ.

ლითონებში ატომები იმდენად ახლო მანძილზეა განლაგებული, რომ ერთმანეთის ელექტრომაგნიტური ველის ძლიერ ზემოქმედებას განიცდიან, რაც მათი ენერგეტიკული მდგომარეობის შეცვლას იწვევს – ქვედონეები იხლიჩება და ენერგეტიკულ ზონებად გარდაიქმნება (სურ. 1.7). ენერგეტიკული ზონების გადაფარვა სავალენტო ელექტრონების მიმოცვლისა და გაერთიანების შესაძლებლობას იძლევა. სავალენტო ზონების



სურ. 1.6. ურთიერთქმედების ძალისა (ა) და ბმის ენერგიის (ბ) ცვლილების ხასიათი კრისტალში ატომების შიასლოებისას



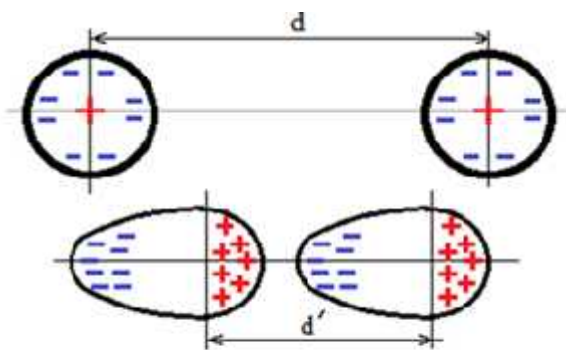
სურ. 1.7. ენერგეტიკული ზონების წარმოქმნის სქემა

ელექტრონებით შევსების ხარისხს ელექტრული და თბური თვისებები განსაზღვრავს.

მეარ სხეულებში ნაწილაკებს შორის კავშირი ელექტრული ხასიათისაა, მაგრამ იგი სხვადასხვა კრისტალში სხვადასხვაგვარად მუდგანდება. ბმის უპირატესი ხასიათის მიხედვით კრისტალები იყოფა მოლეკულურ, კოვალენტურ, იონურ და ლითონურ კრისტალებად. თუმცა ასეთი დაყოფა პირობითია, რადგან ზოგიერთ შემთხვევაში კრისტალებში შეიძლება არა ერთი, არამედ რამდენიმე ტიპის ბმის ძალები მოქმედებდეს.

12.1. მოლეკულური კავშირი. მოლეკულურ კრისტალებში ატომებს შორის კავშირი უპირატესად ვან-დერ-ვაალსის ძალებით არის განპირობებული. ასეთი კავშირი აღიძვრება ნებისმიერ ელემენტარულ ნაწილაკებს (იონებს, ატომებს, მოლეკულებს) შორის, თუმცა კრისტალების უმრავლესობისათვის იგი მცირე სიდიდისაა სხვა, უფრო მნიშვნელოვან ძალებთან შედარებით. მიუხედავად ამისა, ვან-დერ-ვაალსის ძალები მნიშვნელოვან როლს თამაშობს მყარ მდგომარეობაში ინერტული და ორატომიანი აირების სტრუქტურის ჩამოყალიბებაში, აგრეთვე ზოგიერთ ანიზოტროპულ კრისტალებში, მაგალითად, სელენში, სადაც ვან-დერ-ვაალსის კავშირები გარკვეულ კრისტალოგრაფიულ მიმართულებებში ხორციელდება.

ინერტული აირის კრისტალებში ვან-დერ-ვაალსის კავშირი ერთადერთია და, ამდენად, სწორედ იგი განსაზღვრავს კრისტალების სტრუქტურასა და თვისებებს. ინერტული აირის ატომებს ელექტრონული დონეები შეესებული აქვთ, ამიტომ ატომების მიახლოებისას ელექტრონების მიმოცვლა შეუძლებელია. ასეთ შემთხვევაში ატომთა შორის მიზიდვის ძალების აღძვრას ატომების მყისიერ პოლარიზაციას უკავშირებენ (სურ. 1.8).



სურ. 1.8. დიპოლების წარმოქმნა არგონის ატომების მიახლოებისას

ანალოგიური ძალები მოქმედებს გაჯერებული ელექტრონული კავშირების მქონე ორატომიანი აირების (H_2 , N_2 , Cl_2) კრისტალებში, რომლებიც მეტად დაბალ ტემპერატურაზე და დიდი წნევის პირობებში შეიძლება არსებობდნენ, ხოლო I_2 , H_2O , CO_2 , აგრეთვე CH_4 და სხვა ორგანული ნივთიერებების კრისტალებში – ნორმალურ პირობებში.

ვან-დერ-ვაალსის ძალების წვლილი გისოსის u ენერგიაში განისაზღვრება ტოლობით:

$$u = 3h\nu_{\text{e}} - \frac{3}{4d^6} \alpha^2 \quad (1.6)$$

სადაც ν_{e} არის ორი ატომის ან მოლეკულის რხევის სიხშირე;

α – მუდმივა, რომელიც პოლარიზაციასთან არის დაკავშირებული;

h – პლანკის მუდმივა;

d – ატომებს შორის მანძილი.

მოყვანილ გამოსახულებაში პირველი წევრი იზოლირებული ატომების ენერგიას წარმოადგენს, ხოლო მეორე – ახასიათებს მეზობელ ატომებს შორის ურთიერთქმედების ენერგიას კრისტალში. ტოლობიდან გამომდინარეობს, რომ ვან-დერ-ვაალსის ძალები მეტად სწრაფად მცირდება ატომთა შორის მანძილის გაზრდით, რაც მის საკმაოდ დიდ სისუსტეზე მიუთითებს. კავშირების ენერგიის ტიპური მნიშვნელობა 0,2 ევ-ის რიგისაა და იგი, ჩვეულებრივ, ნეიტრალურ ატომებსა და მოლეკულებს შორის რეალიზდება.

რადგან ვან-დერ-ვაალსის კავშირების წარმოქმნისას ელექტრონების მიმოცვლა ან ელექტრონულ აირში მათი გაერთიანება არ მიმდინარეობს, ჩამოყალიბებული მოლეკულური კრისტალების სტრუქტურა ძირითადად გეომეტრიული ფაქტორებით განისაზღვრება. აღძრული ძალები არ არის მიმართულებითი, რადგან მყისიერი დიპოლი ყოველ მეზობელ ატომში წარმოიქმნება, ამიტომ კრისტალურ გისოსში ატომების მჭიდროდ განლაგების ტენდენცია მჟღავნდება. ინერტული აირების კრისტალური გისოსის ტიპურ ფორმას წახნაგდაცენტრებული კუბი წარმოადგენს.

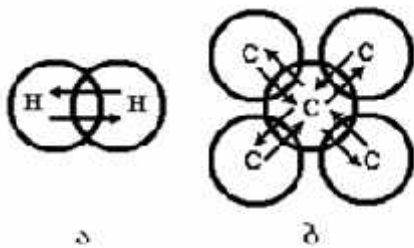
ამგვარად, ვან-დერ-ვაალსის კავშირის ძალები მეტად სუსტია, ამიტომ მოლეკულური კრისტალები დაბალი ღნობისა და აორთქლების ტემპერატურით ხასიათდება და მრავალი მათგანი ნორმალურ პირობებში აირად მდგომარეობაშია. ასეთი კრისტალები დიელექტრიკებს წარმოადგენენ. ამასთან, მათი ელექტრული თვისებები ცალკეული ატომების ან მოლეკულების თვისებებით განისაზღვრება და უმნიშვნელოდ იცვლება მყარი მდგომარეობიდან თხევად ან აირად მდგომარეობაში გადასვლის დროს.

1.2.2. კოვალენტური კავშირი. კოვალენტური კავშირი ხორციელდება ერთი და იგივე ან რამდენიმე ქიმიურ ელემენტს შორის, რომლის გარე გარსის ელექტრონებით შევსების ხარისხი ნახევარი ან ნახევარზე რამდენადმე მეტია.

კოვალენტური კავშირი განიხილება, როგორც ორი ატომის ელექტრონების მიმოცვლითი ურთიერთქმედება, რომლის შედეგადაც რეზონანსული ეფექტი აღიძვრება, ანუ ელექტრონები ნაწილობრივ ორივე ატომის კუთვნილება ხდება, მაგრამ არც ერთ მათგანზე მიბმული არ არის. კოვალენტური კავშირების რიცხვი, რომელიც შეიძლება მოცემულმა ატომმა მეზობელ ატომებთან განახორციელოს, იმ ელე-

ქტრონების რიცხვის ტოლია, რომელიც ($ns+np$) შეუვსებელი ელექტრონული ქვევარსების გაჯერებისათვის არის აუცილებელი. აქედან გამომდინარე, ატომების რიცხვს, რომელთა შორისაც ელექტრონების მიმოცვლა მიმდინარეობს, ელემენტების ვალენტობა განსაზღვრავს და გამოითვლება დამოკიდებულებით ($8-N$), სადაც N არის ელემენტის ვალენტობა.

ამგვარად, კოვალენტური კავშირის განხორციელებისას, მეზობელი ატომების გარე შრის ელექტრონები ერთიანდება და წარმოქმნის ელექტრონების წყვილს ურთიერთსაპირისპირო მიმართულების მაგნიტური მომენტებით. მაგალითად, წყალბადის მოლეკულის შემთხვევაში კოვალენტური ბმა ორი ურთიერთსაპირისპირო სპინის მქონე ელექტრონით ხორციელდება (სურ. 19, ა). მოლეკულის ორივე ელექტრონი წყალბადის ორივე ატომს ეკუთვნის და მუდმივად „ქანაობს“ ერთი ატომიდან მეორეზე, რა დროსაც წარმოიქმნება მიმოცვლითი კოვალენტური ძალები. მაშასადამე, ჩნდება იმის ტენდენცია, რომ ორივე ურთიერთმოქმედი ატომის გარსი გაჯერდეს ელექტრონებით.

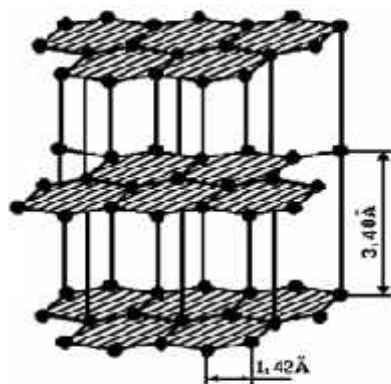


სურ. 19. კოვალენტური კავშირის სქემა წყალბადში (ა) და ალმასში (ბ)

შედარებით უფრო რთულია კოვალენტური კავშირი მრავალელექტრონიან ატომებში, თუმცა ხარისხობრივად სურათი ისეთივეა, როგორიც ზემოთ განვიხილეთ. მაგალითად ალმასში, რომელიც $1s^2 2s^2 2p^2$ ელექტრონული კონფიგურაციის მქონე ნახშირბადის ატომებისგან შედგება, მეზობელ ატომებს შორის კოვალენტური კავშირი იმ სავალენტო ელექტრონების წყვილებით ხორ-

ციელდება, რომლებიც მათ საერთო შემაკავშირებელ ორბიტაზეა განთავსებული. ამდენად, ბმა ოთხ მეზობელ ატომს შორის ოთხი მიმართულებით ოთხი სავალენტო ელექტრონით ხორციელდება (სურ. 19, ბ).

გრაფიტის რთულ ჰექსაგონურ გისოსში (სურ. 1.10) ფუძის სიბრტყეებში სამ ატომს შორის მოქმედებს ბმის კოვალენტური ძალები, ხოლო ფუძეებს შორის კავშირი განხორციელებულია სუსტი ვან-დერ-ვაალსის ძალებით. ამიტომ გრაფიტის დეფორმაციის დროს, უპირველეს ყოვლისა, ფუძეებს შორის სუსტი კავშირი წყდება, რითაც შეიძლება აიხსნას გრაფიტის დაბალი სისაღე. ხაზობრივი გაფართოების კოეფიციენტი მნიშვნელოვნად მაღალია ვან-დერ-ვაალსის ძალების მოქმედების მიმართულებით.



სურ. 1.10. ატომების წყობა
გრაფიტში

უპირატესად კოვალენტური კავშირი მყარდება სხვადასხვა ბუნების ატომებს შორის ისეთ ქიმიურ ნაერთებში, როგორიცაა კარბიდები (Fe_3C , SiC) და ნიტრიდში (AlN).

კოვალენტური კავშირის სიმტკიცე სავალენტო ელექტრონების ორბიტის გადაფარვის ხარისხზე დამოკიდებული. გადაფარვის ხარისხის გაზრდით იზრდება კავშირების სიმტკიცე. ამიტომ კოვალენტური კრისტალების თვისებები შეიძლება ერთმანეთისგან ძლიერ განსხვავდებოდეს. მათთვის დამახასიათებელია მაღალი სიმყიფე და მთელ რიგ შემთხვევებში მეტად მაღალი სისალე (ალმასი, კარბიდები, ნიტრიდები).

მიმართულებითი ატომთშორისი კავშირი განაპირობებს ატომების არაკომპაქტურ განლაგებას გისოსში, რის შედეგადაც წარმოიქმნება სტრუქტურები მცირე საკოორდინაციო რიცხვით. მაგალითად, ალმასის კრისტალური გისოსის საკოორდინაციო რიცხვია 4, ხოლო კომპაქტურობის კოეფიციენტი მხოლოდ 0,34 (34%). ბმის მაღალი ენერგია დნობისა და აორთქლების ასევე მაღალ ტემპერატურას განაპირობებს (ალმასისათვის დნობის ტემპერატურა შეადგენს 5000°C).

კოვალენტურ კრისტალებს წარმოქმნის პერიოდული სისტემის IV, V, VI და VII ჯგუფის B ქვეჯგუფის ელემენტები (C, Si, Ge, Sn, Pb, As, Bi, Se, Te და ა.შ).

12.3. იონური კავშირი. იონური კავშირი ხორციელდება სხვადასხვა ვალენტობის ელემენტებს შორის. ატომების (იონების) საკმაო მანძილზე მიახლოებისას მათი ელექტრონული გარსები მოდის ურთიერთშეხებაში, მაგრამ, პაულის პრინციპის თანახმად, არ ხდება მათი ურთიერთშედწევა (მხოლოდ ერთმა ელექტრონმა შეიძლება დაიკავოს მოცემული მდგომარეობა). ელექტროდადებითი ელემენტი კარგავს სავალენტო ელექტრონს და დადებით იონად გადაიქცევა, ხოლო ელექტროუარყოფითი – იერთებს ამ ელექტრონს და სავალენტო ზონას მდგრად კონფიგურაციამდე (როგორიც ინერტულ აირებს აქვთ) ავსებს, ანუ მიმდინარეობს ელექტრონების გადანაწილება. ამგვარად, იონური კავშირი ხორციელდება დადებითად და უარყოფითად დამუხტულ იონებს შორის ელექტროსტატიკური მიზიდვის ძალებით.

იონური კავშირი მრავალ არაორგანულ დიელექტრიკს ახასიათებს, როგორიცაა, მაგალითად, Al_2O_3 . ამ ჯგუფის ტიპური წარმომადგენელია NaCl , რომლის იონებს შორის კავშირის მოდელი 1.11 სურათზეა წარმოდგენილი. ქლორის უარყოფითად დამუხტული იონი თავის გარშემო არა მარტო „საკუთარ“, მხოლოდ ერთ Na^+ -ის იონს იზიდავს, არამედ სხვა იონებსაც. ამდენად, ნებისმიერი იონის მახლობლობაში აღმოჩნდება



სურ. 1.11. იონური კავშირის მოდელი NaCl -ის კრისტალში

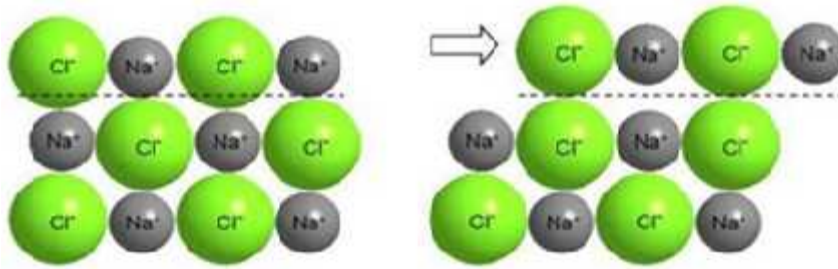
არა მარტო საწინააღმდეგო ნიშნის მქონე ერთი იონი, არამედ რამდენიმე. ფაქტობრივად ქლორის ყოველი იონი გარშემორტყმული აღმოჩნდება ნატრიუმის ექვსი იონით, ხოლო ნატრიუმის ყოველი იონი – ქლორის ასევე ექვსი იონით. ასეთი მოწესრიგებული განლაგების კრისტალს იონურ კრისტალს უწოდებენ.

არალითონური იონის რადიუსი ლითონური იონის რადიუსზე მეტია, ამიტომ ლითონის იონები ავსებს ფორებს არალითონური იონების მიერ ჩამოყალიბებულ კრისტალურ გისოსში.

იონური კავშირის სიმტკიცე, ანუ ბმის ენერგია, მუხტის სიდიდეზე, იონების ზომებზე და სივრცეში მათ ურთიერთგანლაგებაზეა დამოკიდებული. რაც უფრო მცირეა იონების ზომები და რაც უფრო მჭიდროდ არიან ისინი ერთმანეთის მიმართ სივრცეში განლაგებული, მით უფრო მეტია ბმის ენერგია.

იონური კრისტალები თითქმის ყოველთვის გაზრდილი სიმყიფით გამოირჩევა და ადვილად იბოზა გარკვეულ კრისტალოგრაფიულ სიბრტყეებზე. სავალენტო ელექტრონები მტკიცედ არიან დაკავშირებული ატომის ბირთვთან. იონების ერთი შრის დაძვრა მეორის მიმართ ერთნაირი მუხტის მქონე იონების მიახლოებას განაპირობებს (სურ. 1.12), რაც მათ ძლიერ ურთიერთუკუგდებას და კრისტალის ნგრევას იწვევს.

რადგან იონური კრისტალების სავალენტო ზონები სრულად არის შევსებული ელექტრონებით, მყარ მდგომარეობაში ისინი ნახევრად გამტარული ან დიელექტრიკული თვისებებით ხასიათდებიან. თხევად მდგომარეობაში იონური კრისტალები იონურ გამტარებს წარმოადგენს.

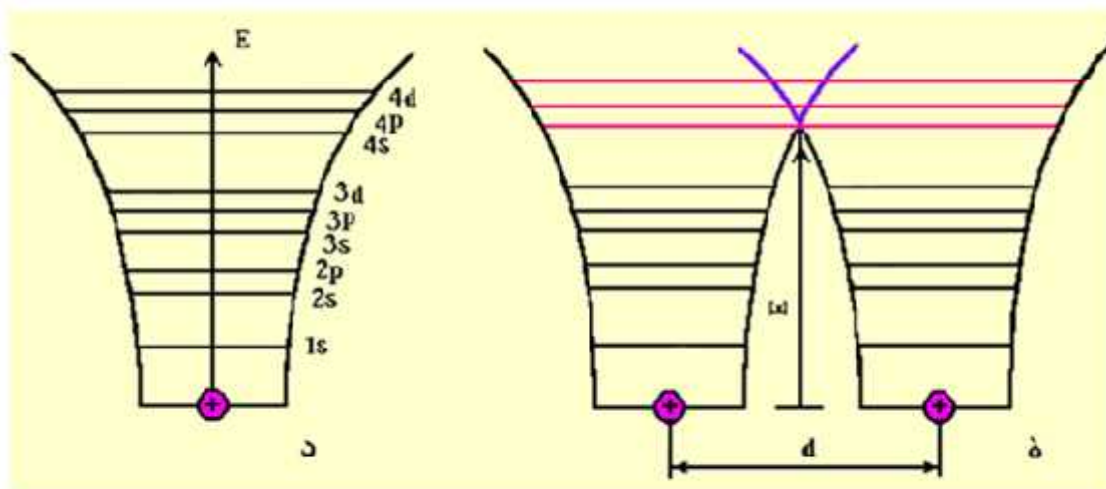


სურ. 1.12. ფენების ძვრის მოდელი იონურ კრისტალებში

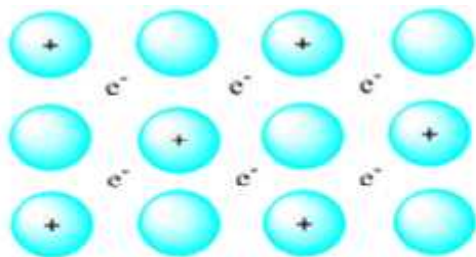
1.2.4. ლითონური კავშირი. ლითონებში კავშირი ერთი და იგივე ან რამდენიმე ელემენტის ატომებს შორის ხორციელდება, რომელთა გარე ელექტრონული შრე ნახევრამდე არ არის შევსებული. მყარ მდგომარეობაში ლითონის ატომები იმდენად ახლოს არიან ერთმანეთთან განლაგებული, რომ ხდება გარე ელექტრონული ორბიტების ურთიერთგადაფარვა, რა დროსაც წარმოიქმნება საერთო ზონა თავისუფალი ქვედონეებით (სურ. 1.13). შედეგად, აირის ატომების მსგავსად, სავალენტო ელექტრონები ადვილად სცილდება საკუთარ ატომს, თავისუფლად მოძრაობს ატომიდან ატომზე აღნიშნული საერთო ზონის ფარგლებში და ყოველი მათგანისათვის საერთონი, კოლექტიური ხდება, ანუ მიმდინარეობს სავალენტო ელექტრონების გაერთიანება კრისტალის მთელ მოცულობაში (აქედან წარმოიშვა ლითონმცოდნეობაში ფართოდ გავრცელებული ტერმინები „ელექტრონული ღრუბელი“, „ელექტრონული აირი“).

თუ არ არსებობს გარე ზემოქმედება, ელექტროსტატიკური ძალების ზეგავლენით, უარყოფითი მუხტის მატარებელი ნაწილაკები ერთმანეთს უკუაგდებს, რის შედეგადაც თავისუფალი ელექტრონების განაწილება კრისტალის მთელ მოცულობაში სტატისტიკურად ერთგვაროვანია. ელექტრონები „ამჭიდროვებს“ დადებით იონებს, რომლებიც, თავის მხრივ, ერთმანეთისგან განიზიდება გარკვეულ მანძილზე მათი მიახლოების შემდეგ. იონები კანონზომიერად ლაგდება სივრცეში ერთმანეთის მიმართ ისე, რომ მიზიდვისა და განზიდვის ძალები გაწონასწორებულია (სურ. 1.14). ატომთა შორის ასეთ კავშირს ლითონურს უწოდებენ.

ამგვარად, ლითონური კავშირი წარმოიქმნება დადებითად დამუხტული იონებისგან ფორმირებულ კრისტალურ გისოსსა და მათ ირგვლივ გარშემორტყმულ „თავისუფალ“ ელექტრონებს შორის აღძრული მიზიდვის ძალებით. კრისტალში ელემენ-



სურ.1.13. იზოლირებული (ა) და ორი ახლოს მდებარე (ბ) ატომების ენერგეტიკული დონეების სქემა



სურ.1.14. ლითონური კრისტალის ელექტრონული აგებულების გამარტივებული მოდელი

ტარული ნაწილაკების ასეთი ურთიერთგანლაგების ხასიათი მაქსიმალურ თერმოდინამიკურ სტაბილურობას უზრუნველყოფს.

ლითონური სტრუქტურებისათვის დამახასიათებელია ატომებს შორის შედარებით გაზრდილი მანძილი და უახლოესი მეზობელი ატომების დიდი რაოდენობა. სხვა ტიპის კავშირებისგან განსხვავებით, ლითონური კავში-

რი არ არის მიმართულებითი, ამიტომ ყოველი ატომი ცდილობს მიიზიდოს მეზობელი ატომების რაც შეიძლება მეტი რაოდენობა. ამის პირდაპირი შედეგია ლითონების კრისტალური სტრუქტურის მაღალი საკოორდინაციო რიცხვი და კომპაქტურობა. ლითონების უმრავლესობაში ასეთი ტიპის კავშირის განხორციელებაში ყოველი ატომის თითო ელექტრონი მონაწილეობს. მაღალი საკოორდინაციო რიცხვით ხასიათდება სივრცით დაცენტრებული კუბური და მჭიდრო ჰექსაგონური გისოსები. მჭიდრო ჰექსაგონური გისოსი მრავალ ლითონს აქვს, მაგრამ პერიოდების შეფარდება $c/a=1,633$, რომელიც ატომების სფერულ სიმეტრიას შეესაბამება, მხოლოდ Mg და Co გააჩნია. $c/a=1,633$ თანაფარდობიდან გადახრას აღნიშნულ კრისტალებში კოვალენტური კავშირების წილის არსებობით ხსნიან, რაც ატომების არასფერულ სიმეტრიას (ატომების წაგრძელებას, გაწეღვას) იწვევს. თუ კრისტალში არასფერული

ატომების წაგრძელების მიმართულება z ღერძის თანხვედრილია, თანაფარდობა c/a აღემატება 1,633–ს და პირიქით, თუ თანხვედრაშია მცირე ღერძი - c/a თანაფარდობა მცირეა 1,633–ზე.

ლითონის ყოველი ატომი მრავალი ტიპის კავშირშია ჩართული. შესაბამის ორატომიან მოლეკულასთან შედარებით ლითონებში ატომთა შორის მანძილი გაზრდილია, რაც იმის მაჩვენებელია, რომ კავშირის ყოველ ტიპზე მოსული ენერგია საკმაოდ მცირეა. ასე მაგალითად, Li-Li კრისტალში ატომებს შორის მანძილი შეადგენს $3,04\text{\AA}$ მაშინ, როდესაც კოვალენტური ბმის სიგრძე Li_2 მოლეკულაში $2,67\text{\AA}$ -ია. მიუხედავად ამისა, კრისტალში ბმის სრული ენერგია უფრო მეტია, ვიდრე მოლეკულაში, რადგან ლითონურ კრისტალში რეალიზებულია შედარებით სუსტი, მაგრამ მნიშვნელოვნად უფრო მეტი კავშირები. მაგალითად, Li_2 მოლეკულაში ერთ ატომზე მოსული ბმის ენერგია 0,6 ევ-დან 1,8 ევ-მდე იზრდება ლითონური ლითიუმისათვის.

ზოგიერთი ელემენტი ხასიათდება კავშირების შერეული ტიპით. მაგალითად, ბისმუტის, სელენისა და დარიშხანის ატომები რიგში ერთიანდებიან კოვალენტური კავშირით, ხოლო რიგებს შორის განხორციელებულია ლითონური ტიპის კავშირი. ამიტომ ასეთი ელემენტები ნაკლებად გამოხატული ლითონური თვისებებით ხასიათდება.

12.5. ლითონური კავშირით განპირობებული ზოგიერთი ფიზიკური თვისება.

ლითონური კავშირის განხილვიდან გამომდინარე, ლითონის მდგრადობა, რომელიც გულისხმობს იონურ-ელექტრონულ სისტემას, დადებითად დამუხტულ იონებსა და კოლექტივიზირებულ ელექტრონებს შორის ურთიერთქმედებით განისაზღვრება. სწორედ იონურ ჩონჩხედსა და ელექტრონულ აირს შორის ასეთ ურთიერთქმედებას უწოდებენ ლითონურ კავშირს. ამდენად, ცნება „ლითონი“ ატომების ისეთ აგრეგატს განსაზღვრავს, სადაც ელექტრონები თავისუფლად შეიძლება გადაადგილდებოდეს თუნდაც მეტად მცირე ელექტრული ველის მოდების შედეგად. ასეთი ელექტრონების რიცხვი ატომების რიცხვის თანაზომადია. ლითონური მდგომარეობის ცნების ასეთი შეფასება მის ერთ-ერთ ყველაზე ტიპურ თვისებას გამოხატავს, თუმცა არსებობს განსხვავებული შემთხვევებიც. მაგალითად, გერმანიუმი, რომელიც ჩვეულებრივ ტემპერატურაზე ნახევრად გამტარს წარმოადგენს, მაღალ ტემპერატურაზე ლითონურ თვისებებს ამჟღავნებს.

ლითონებს მყარ და ზოგჯერ თხევად მდგომარეობაშიც, მთელი რიგი დამახა-

სიათებელი თვისებები გააჩნია:

ა. მაღალი სითბო და ელექტროგამტარობა.

ლითონების მაღალი სითბოგამტარობა, უპირველეს ყოვლისა, განპირობებულია თავისუფალი ელექტრონების დიდი ძვრადობით, უფრო ნაკლები ხარისხით – იონების რხევითი მოძრაობით, რის გამოც ლითონის მთელ მასაში სწრაფად მიმდინარეობს ტემპერატურის გათანაბრება.

მაღალი ელექტროგამტარობა უნდა აიხსნას ასევე თავისუფალი ელექტრონების არსებობით, რომლებიც ადვილად გადაადგილდება გისოსის პოტენციალურ ველში. ტემპერატურის გაზრდით იზრდება იონების (ატომების) რხევითი მოძრაობა, წარმოიქმნება ვაკანსიები და ირღვევა პოტენციური ველის სწორი პერიოდულობა, რაც ამცირებს ელექტრონების გადაადგილების უნარს. შედეგად მცირდება ლითონის ელექტროგამტარობა.

პირიქით, დაბალ ტემპერატურაზე მკვეთრად მცირდება იონების (ატომების) რხევითი მოძრაობა, რაც ელექტროგამტარობის გაზრდას განაპირობებს. უფრო მეტიც, ზოგიერთ ლითონში ელექტრონების აირის წარმოქმნისა და მათი მოწესრიგებული მოძრაობის გამო, მეტად დაბალ ტემპერატურაზე ($<20\text{K}$), ელექტროგამტარობა უსასრულოდ იზრდება, რასაც ზეგამტარობის მოვლენას უწოდებენ.

ბ. ელექტროწინააღობის ტემპერატურული კოეფიციენტის დადებითი მნიშვნელობა.

ტემპერატურის გაზრდით სუფთა ლითონების ელექტროწინააღობა იზრდება. ლითონური მდგომარეობის მთავარ ფიზიკურ კრიტერიუმად მყარი ტანის თეორია სწორედ ელექტროწინააღობის ტემპერატურულ ცვლილებას $\rho(T)$ მიიჩნევს: ლითონებისათვის, როცა $T \rightarrow 0$, $\rho \rightarrow 0$ მაშინ, როდესაც არაალითონებისათვის, ე.ი. ნახევრად გამტარებისა და დიელექტრიკებისათვის (იზოლატორებისათვის) როცა $T \rightarrow 0$, $\rho \rightarrow \infty$.

ზეგამტარობით ლითონების უმრავლესობა (~ 30) ხასიათდება. აღნიშნულ ლითონებში აბსოლუტური ნულის მახლობლობაში ელექტროწინააღობა ნახტომისებურად ეცემა პრაქტიკულად ნულამდე.

გ. თერმოელექტრული ემისია.

თერმოელექტრული ემისია არის ლითონის უნარი, ამოაფრქვიოს ელექტრონები გახურებისას. გარე ელექტრონების კავშირი ატომთან ხასიათდება იონიზაციის პოტენციალით, ანუ იზოლირებული ატომიდან ელექტრონების მოწვევებაზე დახარ-

ჯული მუშაობით. ლითონებისათვის იონიზაციის პოტენციალი 4-9 ევ-ს შეადგენს, არაღლითონებისათვის კი ეს მახასიათებელი 10 ევ-ს აღემატება ერთი და იგივე იონიზაციის ხარისხის (ერთი ელექტრონის მოწყვეტის) შემთხვევაში. აქედანაც ნათლად ჩანს, რომ ლითონებში გარე ელექტრონები ბევრად უფრო სუსტადაა დაკავშირებული ატომთან და უფრო ადვილად წარმოქმნის ელექტრონულ აირს.

დ. კარგი არეკვლის უნარი.

ლითონები გაუმჭირი მასალებია და ახასიათებს ლითონური ბზინვარება, რაც კარგი არეკვლის უნარით არის განპირობებული.

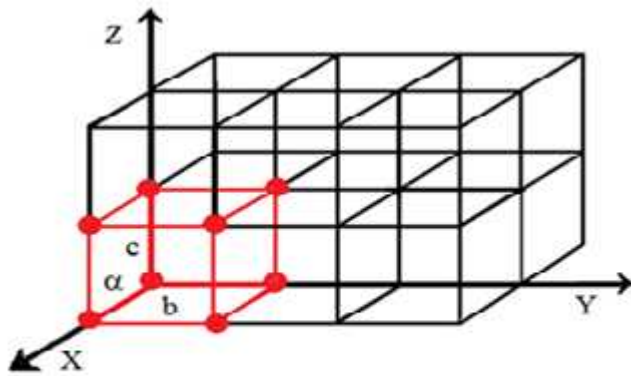
ე. პლასტიკური დეფორმაციისადმი გაზრდილი მიდრეკილება.

მაღალი პლასტიკურობა აიხსნება ლითონის ატომური სტრუქტურის პერიოდულობით და ლითონური კავშირის არამიმართულებითი ხასიათით (ყოველი ატომი ცდილობს თავისთან რაც შეიძლება მეტი მეზობელი ატომი მიიზიდოს). ელექტრონული აირი, რომლითაც ატომებია გარშემორტყმული, არ არის ხისტი და მან შეიძლება შეიცვალოს როგორც ზომები, ისე ფორმა. ამიტომ პლასტიკური დეფორმაციის პროცესში (ჭედვა, გლინვა, და ა.შ.), ე.ი. ლითონის ერთი მოცულობის მეორის მიმართ გადაადგილებისას, იონებს (ატომებს) შორის კავშირი არ ირღვევა და დეფორმირებული ლითონი მთლიანობას ინარჩუნებს.

1.3. სამბანზომილებიანი კრისტალური სისტემები

1.3.1. სიმრცითი ჯგუფები. მეარი ტანის შემადგენელი ატომები (ნაწილაკები) სივრცეში ისეთი განლაგებისკენ მიისწრაფვის, რომ მათი ურთიერთქმედების ენერგია მინიმალური აღმოჩნდეს. ასეთ მდგომარეობას სივრცეში ნაწილაკების გარკვეული წესრიგით განლაგება შეესაბამება, რომელსაც ცნება „კრისტალური გისოსი“ ახასიათებს. კრისტალური გისოსი არის წარმოსახვითი სივრცითი ბადე, რომლის კვანძებში განთავსებული ატომები (ნაწილაკები) მეარ (კრისტალურ) სხეულს წარმოქმნის. მსგავსი წარმოსახვითი მოდელი რთული ფიზიკური რეალობის თვალნათლივ წარმოდგენისა და გამოსაკვლევი ობიექტის გამარტივებული სახით შესწავლის შესაძლებლობას იძლევა. კრისტალური მდგომარეობის უმთავრეს თავისებურებას ნივთიერების ნაწილაკების მოწყობილობა, კანონზომიერი განლაგება წარმოადგენს. 1.15 სურათზე მოცემულია კრისტალური გისოსის სქემა. თუ კრისტალურ

გისოსს კოორდინატთა სისტემაში ჩავწერთ, კრისტალში უახლოეს ნაწილაკებს შორის მანძილით და კოორდინატის ღერძებს შორის კუთხეებით შესაძლებელია ნაწილაკების ურთიერთგანლაგების ხასიათის დადგენა.



სურ. 1.15. კრისტალური გისოსის სქემა

კრისტალური აგებულების შემდგომი შესწავლისათვის კრისტალურ გისოსში შეიძლება გამოიყოს ნაწილაკების (ატომების) მინიმალური რაოდენობით შემოფარგლული მოცულობა, რომლის მრავალჯერადი განმეორებით სივრცეში მთელი კრისტალის აგებაა შესაძლებელი (სურ. 1.15). ატომების მინიმალურ კომპ-

ლექსს, რომელიც მოცემული ტიპის კრისტალის აგებულებას ახასიათებს, ელემენტარული უჯრედი ეწოდება. სიბრტყეებს, რომლებიც კრისტალური გისოსის კვანძებზეა (ატომებზეა) გავლებული, კრისტალოგრაფიულ სიბრტყეებს უწოდებენ, ხოლო გისოსის კვანძებზე გავლებულ წრფეებს – კრისტალოგრაფიულ მიმართულებებს.

ყველაზე ზოგად სახეს სამგანზომილებიან სივრცეში ტრიკლინური გისოსი წარმოადგენს, რომლის ელემენტარულ უჯრედს პარალელეპიპედის ფორმა აქვს. პარალელეპიპედის კუთხეები განსხვავებულია 90° -სგან, ხოლო ყველა წიბო სხვადასხვა სიგრძისაა. მათემატიკურად დადგენილია, რომ სივრცეში წერტილების განლაგების მხოლოდ თოთხმეტი სხვადასხვა შესაძლებლობა არსებობს (იმ პირობის დაცვით, რომ ყოველი წერტილი ერთნაირი გარშემოწერილობის უნდა იყოს). აქედან გამომდინარე, შესაძლებელია არსებობდეს ბრავეს მხოლოდ თოთხმეტი სხვადასხვა ტიპის სამგანზომილებიანი კრისტალური გისოსი. 1.1 ცხრილში წარმოდგენილია მონაცემები, რის მიხედვითაც ხდება გისოსების დაყოფა შვიდ კრისტალოგრაფიულ სისტემადა (სინგონიად).

ლითონებში ყველაზე მეტად სამი სახის კრისტალური გისოსია გავრცელებული: სივრცით დაცენტრებული კუბი (სდკ, სურ. 1.16, ა), წახნაგდაცენტრებული კუბი (წდკ, ბ) და ჰექსაგონური პრიზმა. ეს უკანასკნელი შეიძლება იყოს როგორც პრიმიტიული, ისე მჭიდრო გისოსის მქონე (მპ, $\frac{c}{a} = 1,633$, გ). ნაკლებად არის გავრცე-

შვიდი სამგანზომილებიანი კრისტალური სისტემა და
ბრავეს თოთხმეტი გისოსი

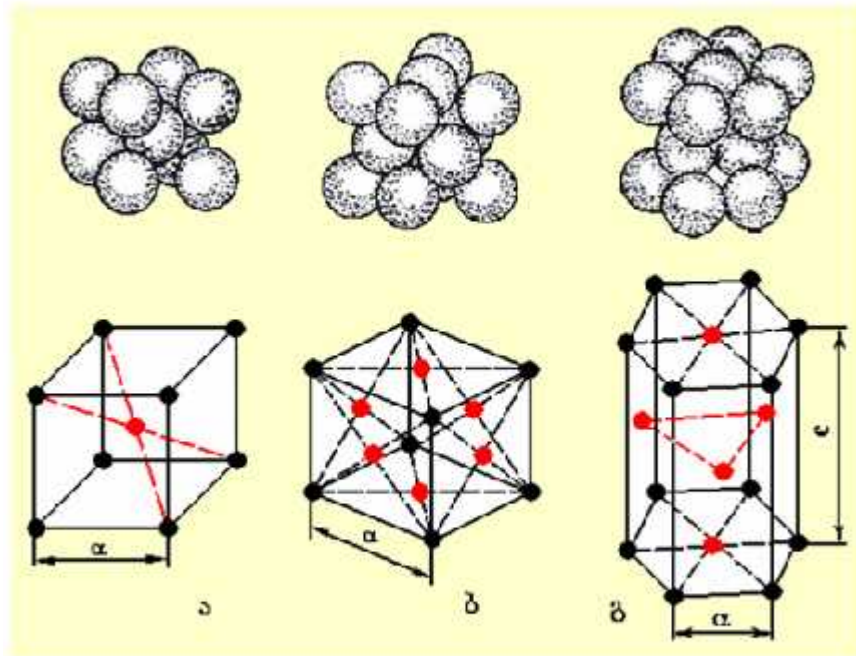
სისტემა	საყოველთაოდ მიღებული ელემენტარული უჯრედის დახასიათება. ზომები და კუთხეები	ბრავეს გისოსი მოცემულ სისტემაში
ტრიკლინური	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	P (პრიმიტიული)
მონოკლინური	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	P (პრიმიტიული) C (ბაზისდაცენტრებული)
რომბული	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P (პრიმიტიული) C (ბაზისდაცენტრებული) I (სივრცითდაცენტრებული) F (წახნაგდაცენტრებული)
ტეტრაგონური	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P (პრიმიტიული) I (სივრცითდაცენტრებული)
კუბური	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P (პრიმიტიული) I (სივრცითდაცენტრებული) F (წახნაგდაცენტრებული)
ტრიგონალური ან რომბოედრული	$a = b = c$ $120^\circ > \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	R (რომბოედრული პრიმიტიული)
ჰექსაგონური	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	P (პრიმიტიული რომბოედრული)

ღებული რომბოედრული, ტეტრაგონური და უფრო რთული გისოსები.

კრისტალური გისოსის ძირითადი პარამეტრებია: გისოსის პერიოდი; ატომის რადიუსი; საკოორდინაციო რიცხვი; ბაზისი; კომპაქტურობის კოეფიციენტი; გისოსის ენერგია;

გისოსის პერიოდი არის ელემენტარულ გისოსში ორ მეზობელ ნაწილაკს (ატომს, იონს) შორის მანძილი (a, b, c , სურ. 1.15). გისოსის პერიოდები გამოისახება ანგსტრემებში ან ნანომეტრებში ($1\text{Å} = 10^{-10}\text{მ} = 10^{-9}\text{სმ}$). კუბურ სისტემებში გისოსის a პერიოდი 0,286-დან 0,607 ნმ-ის ზღვრებში იცვლება, ჰექსაგონურ სისტემებში a იცვლება 0,228-დან 0,398 ნმ, ხოლო c – 0,357-დან 0,652 ნმ-ის ზღვრებში.

ატომის რადიუსში გულისხმობენ ატომთშორისი მანძილის ნახევარს ნორმალური ტემპერატურისა და წნევის პირობებში. ეს მახასიათებელი არ არის მუდმივი სიდიდე, არამედ მრავალი ფაქტორის ზეგავლენით იცვლება. მათგან უმთავრესია



სურ. 1.16. კრისტალური გისოსის ელემენტარული უჯრედის სქემები.
ა-სივრცითდაცენტრებული კუბი; ბ-წახნაგდაცენტრებული კუბი;
გ-ჰექსაგონური პრიზმა

საკოორდინაციო რიცხვი და ატომთა შორის ქიმიური კავშირის ტიპი კრისტალში.

საკოორდინაციო რიცხვი K მიუთითებს კრისტალურ გისოსში ნებისმიერად შერჩეული ატომიდან უახლოეს და თანაბარ მანძილზე დაცილებული ატომების რიცხვს.

გისოსის ბაზისი არის ერთ ელემენტარულ უჯრედზე მოსული ატომების რაოდენობა. ქვემოთ მოცემულია ლითონების ძირითადი კრისტალური გისოსების საკოორდინაციო რიცხვისა და ბაზისის მნიშვნელობები.

გისოსის კომპაქტურობის კოეფიციენტი η განისაზღვრება ატომების მიერ დაკავებული V_a მოცულობის შეფარდებით გისოსის V_g მთელ მოცულობასთან, ანუ $\eta = V_a/V_g$. უბრალო კუბური გისოსისათვის იგი შეადგენს 0,52; სივრცით დაცენტრებული და წახნაგდაცენტრებული კუბებისათვის შესაბამისად 0,68 და 0,74. დარჩენილი მოცულობა ფორებს წარმოქმნის.

კრისტალური გისოსის ენერგია იმ ენერგიით განისაზღვრება, რომელიც იონების, ატომების ან სხვა ნაწილაკებისაგან კრისტალის წარმოქმნის პროცესში გამოიყოფა და ამ ნაწილაკების საწყისი მდგომარეობა აირადია. ლითონური კავშირით

ცხრილი 1.2

ლითონების ძირითადი კრისტალური გისოსების საკოორდინაციო რიცხვისა და ბაზისის მნიშვნელობები

კრისტალური გისოსი	აღნიშვნა	საკოორდინაციო რიცხვი	ბაზისი
უბრალო კუბური	კ	6	1
კუბური სივრცითდაცენტრებული	სდკ	8	2
კუბური წახნაგდაცენტრებული	წდკ	12	4
მჭიდრო პექსაგონური	მპ	12	4

განპირობებულ კრისტალის ენერგიას განსაზღვრავს თავისუფალი ელექტრონების პოტენციური და კინეტიკური ენერგიები, აგრეთვე იმ ელექტრონების კინეტიკური ენერგია, რომლებსაც დაკავებული აქვთ შედარებით უფრო დაბალი ენერგეტიკული მდგომარეობა. გისოსის ენერგია ისეთ მნიშვნელოვან ფიზიკურ მახასიათებლებს განსაზღვრავს, როგორიცაა დნობის ტემპერატურა, დრეკადობის მოდული, სისაღე, სიმტკიცე და სხვა. ატომის ვალენტობის გაზრდა გისოსის ენერგიის ზრდას განაპირობებს.

1.3.2. კრისტალოგრაფიული სიბრტყეებისა და მიმართულებების ინდიცირება.

სხვადასხვა სახის ამოცანების გადასაწყვეტად ხშირად აუცილებელი ხდება რეალურ სამგანზომილებიან კრისტალში რომელიმე კრისტალოგრაფიული სიბრტყის ან მიმართულების მითითება. ამ მიზნით მიღერის ინდექსებით სარგებლობენ.

სიბრტყეთა ინდიცირებისათვის გამოსავალ სიდიდეს იმ მონაკვეთების სიგრძეები წარმოადგენს, რომლებსაც მოცემული სიბრტყე თითოეულ კოორდინატთა ღერძზე მოკვეთს. მოჭრილი მონაკვეთები ღერძის გასწვრივ გისოსის პერიოდებში იზომება.

დავუშვათ, x , y და z ღერძებზე მოჭრილი მონაკვეთების სიგრძეებია m , n და p შესაბამისად. მიღერის ინდექსების გამოსაყვანად საჭიროა მათი წარმოდგენა შებრუნებული რიცხვებით – $1/m$, $1/n$ და $1/p$. უმცირესი საერთო ჯერადის მოძებნის შემდეგ წილადები შეიძლება შემდეგი სახით ჩაიწეროს: h/x , k/x , l/x , სადაც $h=x/m$, $k=x/n$ და $l=x/p$. ბუნებრივია, h , k და l სიდიდეები ნულს ან მთელ რიცხვებს წარმოადგენენ. საერთო მნიშვნელს უკუაგდებავენ, ხოლო მრიცხველში მიღებულ ციფრებს მრგვალ ფრჩხილებში სვამენ ($h\ k\ l$), რაც სწორედ მიღერის ინდექსებს წარმოადგენს.

მაგალითის სახით განვიხილოთ უბრალო, კუბური გისოსის სიბრტყეების ინდიცირების პრინციპი. ამისათვის ელემენტარული გისოსი სივრცეში ისეთნირად უნდა გამოიხაზოს, რომ კოორდინატთა სისტემის საწყისი წერტილი გისოსის ერთ-ერთ წვეროს დაემთხვეს. დაშტრიხული A სიბრტყე (სურ. 1.17, ა) X ღერძზე მოკვეთს კუბის წიბოს სიგრძის ტოლ მონაკვეთს, ხოლო Y და Z ღერძების მიმართ იგი პარალელურია (ანუ მათ უსასრულობაში გადაკვეთს). ამგვარად, მოჭრილი მონაკვეთები ტოლი იქნება:

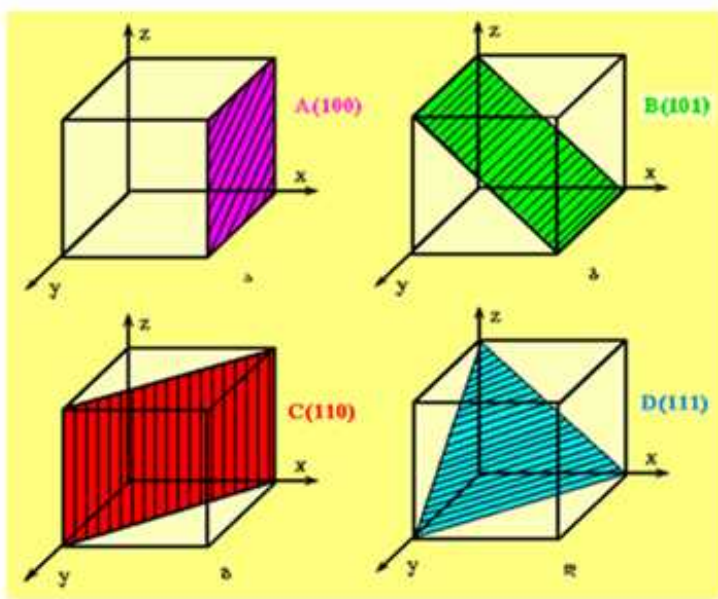
$$m=1; n=\infty, p=\infty.$$

მათი შებრუნებული სიდიდეები შემდეგ მნიშვნელობებს მიიღებს:

$$1; (1/\infty)=0; (1/\infty)=0.$$

მაშასადამე, სიბრტყის ინდექსებია (100).

ანალოგიური გამოთვლებით ვღებულობთ, რომ B სიბრტყის ინდექსებია (101), C სიბრტყისა – (110), ხოლო D სიბრტყისა – (111) (სურ. 1.17, ბ, გ, დ).



სურ. 1.17. კუბური კრისტალური გისოსის ინდიცირების პრინციპი

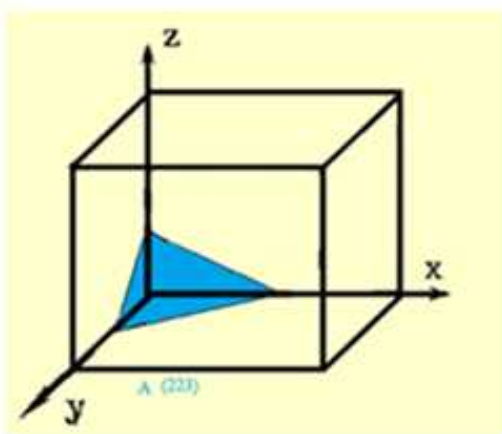
თუ სიბრტყე კოორდინატების ერთ-ერთ ღერძს უარყოფითი მნიშვნელობის მხარეს კვეთს, მაშინ შესაბამისი ინდექსიც უარყოფითი იქნება. სიმარტივისათვის უარყოფით ნიშანს ინდექსის ზემოთ წერენ. მაგალითად, $(\bar{1}00)$, ან $(0\bar{1}0)$.

იდეალურ კრისტალში პარალელურ სიბრტყეთა უსასრულო რაოდენობა არსებობს, რომლებიც კოორდინატა ღერძებს $-na, \dots, -2a, -a, a, 2a, \dots, na$ მანძილებზე კვეთენ. მათ სიბრტყეთა ოჯახში აერთიანებენ და ინდექსებს ფიგურულ ფრჩხილებში სვამენ. მაგალითად, $\{100\}$ სიბრტყეთა ოჯახს მიეკუთვნება (100) , (010) , (001) , $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$ და $(00\bar{1})$ ინდექსების მქონე სიბრტყეები. როგორც ჩანს, იგი კუბის ყველა წახნაგს მოიცავს.

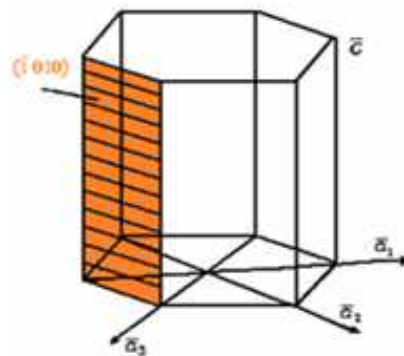
დავუშვათ, სიბრტყის ინდექსებია (223) (სურ. 1.18). ერთიგან განსხვავებული ინდექსები იმაზე მიუთითებს, რომ აღნიშნულმა სიბრტყემ თითოეულ X და Y ღერძებზე მოკვეთა $1/2 a$ სიგრძის მონაკვეთები (ანუ a წიბო შესაბამისი კოორდინატების მიმართულებით ორად გაყო), ხოლო Z ღერძზე მოკვეთილი მონაკვეთის სიგრძეა $1/3 a$ (წიბო მოცემული მიმართულებით სამ ტოლ ნაწილად არის გაყოფილი).

კრისტალოგრაფიული სიბრტყეების აღნიშვნა მიღერის სამნიშნა ინდექსებით შესაძლებელია აგრეთვე როგორც ჰექსაგონურ, ისე ტრიგონალურ კრისტალებშიც განხორციელდეს, თუმცა ამ შემთხვევაში სიბრტყეთა ინდიცირებისათვის უფრო მიზანშეწონილია $\bar{a}_1$, $\bar{a}_2$, $\bar{a}_3$ და $\bar{c}$ ვექტორების (X_1 , X_2 , X_3 და Z ღერძების) პარალელური (hk) ტიპის ინდექსების გამოყენება (სურ. 1.19), რომელსაც მიღერ-ბრავეს ინდექსებს უწოდებენ. მეოთხე ინდექსი c Z ღერძზე ჩამოჭრილი მონაკვეთის სიგრძესთან არის დაკავშირებული.

მიღერ-ბრავეს ინდექსების გამოთვლა იმავე ხერხით წარმოებს, როგორც მიღერის ინდექსების შემთხვევაში განვიხილეთ. მაგალითად, სიბრტყე, რომლის ინდიცირებაც არის საჭირო, X_1 ღერძს კოორდინატა სათავიდან $1/2 a$ მანძილზე კვეთს, X_2



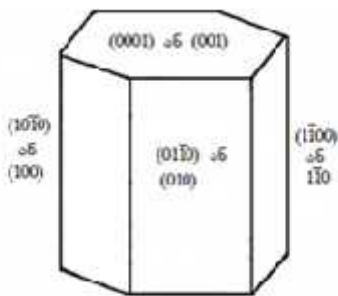
სურ. 1.18. (223) სიბრტყის ინდიცირება



სურ. 1.19. მიღერის ოთხნიშნა ინდექსებით სიბრტყეთა ინდიცირების პრინციპი ჰექსაგონურ კრისტალურ გისოსში

დერძს – $(-1/2 \text{ ა})$ მანძილზე, X_3 დერძის პარალელურია და Z დერძს კვეთს $2c$ მანძილზე იგივე წერტილიდან. შესაბამისად, კოორდინატა დერძებზე მოჭრილი მონაკვეთები გისოსის პერიოდის ერთეულებში ტოლი იქნება $1/2, -1/2, \infty, 2$. მოჭრილი მონაკვეთების შებრუნებული სიდიდეები შესაბამისად არის $2, -2, 0$ და $1/2$, რაც შეიძლება შემდეგი სახით ჩაიწეროს: $\frac{4}{2}, -\frac{4}{2}, \frac{0}{2}, \frac{1}{2}$. აქედან გამომდინარე, განსახილველი სიბრტყისთვის მიღერ-ბრავეს ინდექსები იქნება $[4\bar{4}01]$.

X_1, X_2 და X_3 დერძებს შორის გარკვეული გეომეტრიული თანაფარდობა არსებობს, რომლის თანახმადაც მიღერ-ბრავეს მესამე ინდექსი ყოველთვის პირველი ორი ინდექსის ჯამის ტოლია შებრუნებული ნიშნით. ამდენად, რადგან მიღერ-ბრავეს მესამე ინდექსი სრულად არის განსაზღვრული, როდესაც პირველი ორი ცნობილია, ინდიცირების პროცესში შესაძლებელია მესამის გამოტოვება. მაგალითად, სიბტყე, რომლის ინდექსია $(2\bar{1}\bar{1}0)$, შეიძლება შემდეგნაირადაც ჩაიწეროს: $(2\bar{1}.0)$. ინდექსებს შორის დასმული წერტილი მესამე ინდექსს ასახავს. მაგრამ როდესაც მიღერ-ბრავეს მესამე ინდექსს ტოვებენ, სიბრტყის ინდიცირებისათვის მიღერის ინდექსების გამოყენებას აძლევენ უპირატესობას. ბუნებრივია, ასეთ შემთხვევაში გამოტოვებული იქნება როგორც მესამე კოორდინატა დერძი, ისე მასზე მოკვეთილი მონაკვეთი. მაგალითის სახით 120 სურათზე წარმოდგენილია ჰექსაგონური პრიზმის წახნაგების ინდიცირება ორივე სისტემით.



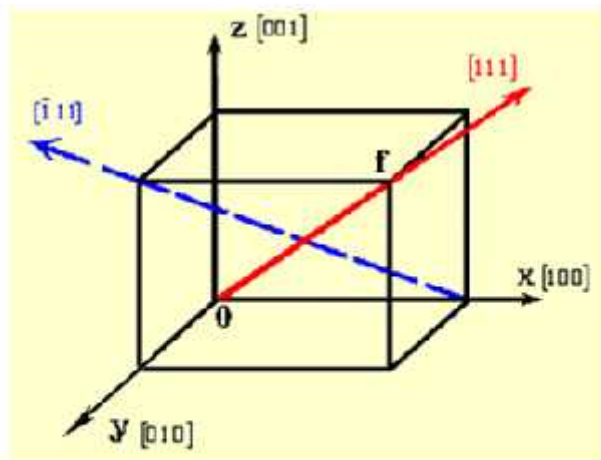
სურ. 120. მიღერ-ბრავეს და მიღერის ინდექსებით ინდიცირებული ჰექსაგონური პრიზმის წახნაგები

ნებისმიერი კრისტალოგრაფიული მიმართულება, რომელიც სივრცით გისოსში ვექტორით აისახება, ასევე შეიძლება მიღერის ინდექსებით $[hk]$ გამოისახოს. საწყის წერტილად კოორდინატა სათავეა მიღებული, ხოლო მეორე, მაგალითად, f წერტილის (სურ. 121) კოორდინატებს გისოსის პერიოდების პროპორციული რიცხვებით გამოსახავენ. კრისტალოგრაფიული სიბრტყეებისა და მიმართულებების ინდექსების ერთმანეთისგან განსხვავების მიზნით, ამ უკანასკნელს კვადრატულ ფრჩხილებში სვამენ. ზემოთქმულიდან გამომდინარე, X დერძის მიმართულება იქნება $[100]$, Y დერძისა $[010]$, ხოლო Z დერძისა – $[001]$.

კრისტალოგრაფიული მიმართულებების ოჯახის ინდექსებს მათი ორიენტაცი-
ისაგან დამოუკიდებლად $\langle \rangle$ ფრჩხილებში სვამენ. $\langle 111 \rangle$ ოჯახი შემდეგ მიმართულებებს

აერთიანებს: $[111]$, $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$, $[11\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}1\bar{1}]$ და $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$.

კრისტალოგრაფიული მიმართულებების აღწერა მიღერ-ბრავეს ინდექსებით გარკვეულ სიძნელეებთანაა დაკავშირებული, ამიტომ კრისტალოგრაფიაში ჰექსაგონურ სისტემებში მიმართულებების აღწერისათვის მიღერის ინდექსები ფართო გამოყენებას პოულობს.



სურ. 121 კრისტალოგრაფიული მიმართულებების ინდიცირება კუბურ გისოსში

13.3. ლითონების ტიპური სტრუქტურები. ელემენტთა პერიოდული სისტემის მიხედვით, ლითონების უმრავლესობა სამ ძირითად კრისტალურ გისოსში კრისტალდება: წახნაგდაცენტრებულ კუბში (A_1^*), სივრცით დაცენტრებულ კუბში (A_2) და მჭიდრო ჰექსაგონურში (A_3) (სურ. 1.16).

კუბურ წახნაგდაცენტრებულ გისოსში (A_1) ელემენტარული უჯრედის წვერო-
ში განთავსებული ყოველი ატომი გარშემორტყმულია თორმეტი უახლოესი, თანაბ-
რად დაცილებული ატომით, რომელთა შორის მანძილი შეადგენს $\frac{a}{\sqrt{2}} = (0,707 a)$. a
ელემენტარული უჯრედის წიბოს სიგრძეა. საკოორდინაციო რიცხვის გამოსათვლე-
ლად უნდა გავითვალისწინოთ, რომ კუბის ნებისმიერ წვეროში განთავსებული ატო-
მი რეალურად 8 ელემენტარულ უჯრედს ეკუთვნის, ხოლო წახნაგების ცენტრში გან-
თავსებული ატომები – ორ ელემენტარულ უჯრედს. აქედან გამომდინარე, წახნაგ-
დაცენტრებული კუბის საკოორდინაციო რიცხვი $K = \frac{8 \times 8}{2} = 12$.

მეორე კოორდინაციულ სფეროში ექვსი ატომია განთავსებული, თუმცა ისინი

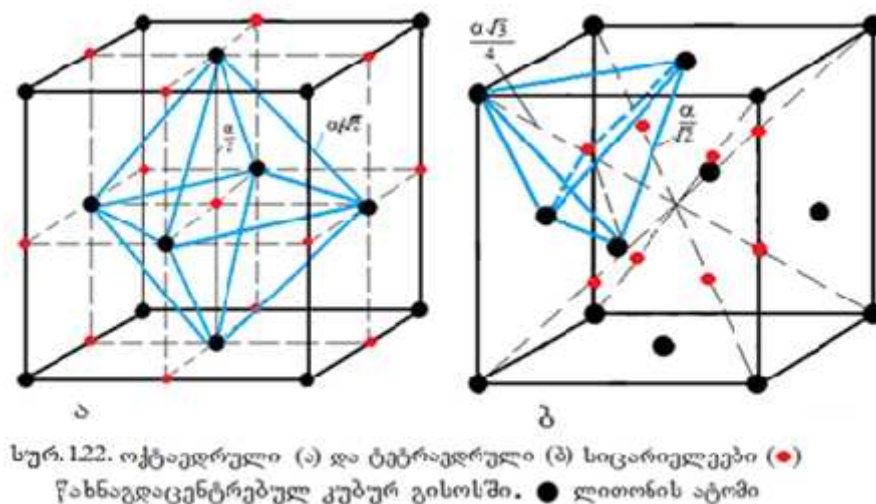
* სიმბოლოები A_1 , A_2 , A_3 და ა.შ. მიღებულია კრისტალური სტრუქტურის ტიპების საერთაშო-
რისო აღნიშვნისათვის

ერთმანეთისგან მნიშვნელოვნად უფრო დიდი მანძილით არიან დაშორებული, რომელიც a პარამეტრის ტოლია.

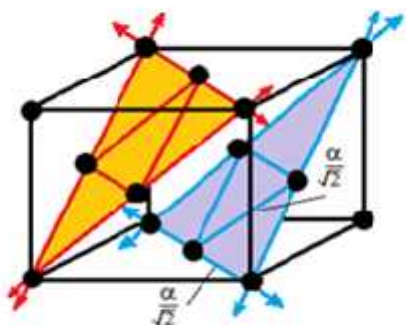
ამგვარად, წახნაგდაცენტრებული გისოსის საკოორდინაციო რიცხვია 12.

განსახილველი სტრუქტურა შეიცავს ორი ტიპის (კვანძებს შორის) სიცარიელეს, რომლებშიც შეიძლება სხვა ელემენტის უფრო მცირე ზომის ატომები განთავსდეს. უდიდესი სიცარიელე კუბის ცენტრსა და წიბოების შუაში მდებარეობს (სურ. 1.22, ა). ყოველი ასეთი სიცარიელე გარშემორტყმულია წდკ გისოსის ექვსი ატომით, რომლებსაც ადგილი უკავია სწორი ოქტაედრის წვეროებში. ამიტომ ამ ფორებს ოქტაედრულს უწოდებენ. აუსტენიტში ნახშირბადის შედარებით უფრო მცირე ზომის ატომებს სწორედ ოქტაედრული კვანძებს შორისი ადგილები (სიცარიელები) უკავია.

წახნაგდაცენტრებულ კუბურ გისოსში უფრო მცირე ზომის სიცარიელებს ტეტ-



რაედრული ფორები ქმნის (სურ. 1.22, ბ). ასეთი ფორა გარშემორტყმულია გისოსის ოთხი ატომით. თუ დავეშვებით, რომ კუბური წახნაგდაცენტრებული გისოსი აგებულია r რადიუსის მქონე ერთმანეთთან შეხებაში მყოფი ხისტი ბურთულებისგან, მაშინ სფეროს მაქსიმალური რადიუსი, რომელიც შეიძლება განთავსდეს ოქტაედრულ და ტეტრაედრულ სიცარიელებში, შესაბამისად ტოლი აღმოჩნდება $0,41 r$ და $0,225 r$ -ის. ყველაზე მჭიდრო სიბრტყეს წახნაგდაცენტრებულ კუბურ სტრუქტურაში (111) სიბრტყე წარმოადგენს, რომელშიც ატომები განთავსებულია ტოლგვერდა სამკუთხედის კუთხეებში, როგორც ეს 1.23 სურათზეა ნაჩვენები. ყოველ ასეთ სიბრტყეს მჭიდროდ წყობილი სამი მიმართულება გააჩნია, სადაც, უნდა ვიგულისხმოთ, რომ ატო-



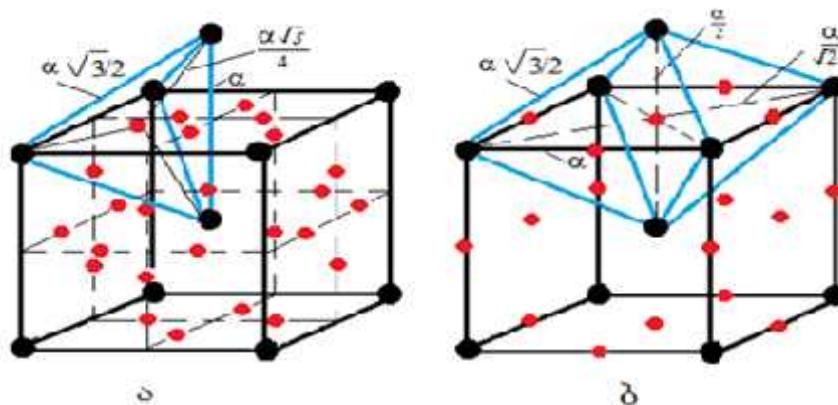
სურ.123. მჭიდროდ წყობილი (III) სიბრტყეები წახნაგდაცენტრებულ კუბურ გისოსში

მეტი ერთმანეთს ეხება.

სივრცით დაცენტრებული კუბის A_2 სტრუქტურა ნაკლებად არის მჭიდროდ წყობილი წახნაგდაცენტრებულ კუბთან შედარებით. ატომები გისოსში განთავსებულია წვეროებში და ელემენტარული უჯრედის ცენტრში (სურ. 1.16, ა). ყოველი ატომი გარშემორტყმულია რვა უახლოესი მეზობელი ატომით, რომლებიც ერთმანეთის მი-

მართ $\frac{a\sqrt{3}}{2}$ ($=0,866 a$) მანძილით არიან დაშორებული (სადაც a არის კუბის წიბოს სიგრძე). ექვსი სხვა მეზობელი ატომი, რომლებიც მეორე კოორდინაციულ სფეროშია, a მანძილით არის დაცილებული. ამიტომ მართალია, მოცემულ სტრუქტურაში საკოორდინაციო რიცხვად მიღებულია 8, მაგრამ ზოგჯერ მას $(8+6)$ -ით აღნიშნავენ.

სდკ სტრუქტურაშიც ორი ტიპის სიცარიელე არსებობს. ყველაზე დიდი სიცარიელეები ადგილს იკავებს ელემენტარული უჯრედის წახნაგებში (სურ. 1.24, ა). ისინი გარშემორტყმულია სწორი ტეტრაედრის წვეროებში განლაგებული ოთხი ატომით. შედარებით მცირე ზომის სიცარიელეებს ადგილი უკავია წიბოებისა და



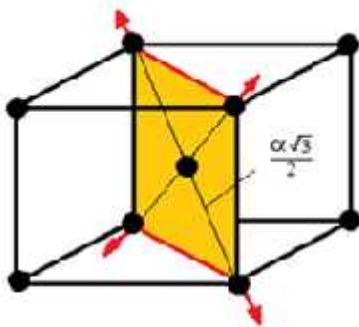
სურ. 124. ტეტრაედრული (ა) და ოქტაედრული (ბ) სიცარიელეები (●) სივრცით დაცენტრებულ კუბურ გისოსში. ● ლითონის ატომი

წახნაგების შუაში. ყოველი ფორა გარშემორტყმულია ექვს-ექვსი ატომით, რომლებიც არაწესიერი ოქტაედრის წვეროებშია განლაგებული (სურ. 1.24, ბ). თუ სდკ-ის სტრუქტურა აგებულია ხისტი ბურთულებისგან, მაშინ ტეტრაედრულ სიცარიელეში შეიძლება მოთავსდეს სფერო, რომლის რადიუსი ტოლი იქნება $0,291 r$ -ის, ხოლო

ოქტაედრულში – $0,154 r$ -ის.

ამრიგად, სფეროს მაქსიმალური დიამეტრი, რომელიც შეიძლება მოთავსდეს კუბური სივრცით დაცენტრებული გისოსის ფორეში, უფრო ნაკლებია იმ სფეროების ზომებთან შედარებით, რომელთა განთავსებაც შესაძლებელია უფრო მჭიდრო წყობის მქონე წახნაგდაცენტრებულ კუბურ გისოსში. საინტერესოა აღინიშნოს, რომ ტეტრაედრულ ფორაში $0,291 r$ -ზე მეტი რადიუსის მქონე ატომის ჩანერგვამ უნდა განაპირობოს მისი გარემომცველი ოთხივე ატომის წანაცვლება მაშინ, როდესაც შესაბამისად უფრო მეტი ზომის ატომის ჩანერგვა ოქტაედრულ ფორაში მხოლოდ ორი ატომის დაძვრას გამოიწვევს ელემენტარული კუბური გისოსის წიბოს პარალელურად. შედეგად, აღძრული ძაბვის რელაქსაცია უნდა განხორციელდეს გისოსის გაფართოებით მხოლოდ აღნიშნული მიმართულებით. სწორედ ამით შეიძლება აიხსნას ნახშირბადის ატომების ტენდენცია, α რკინაში დაიკავოს ოქტაედრული კვანძებს შორის ადგილები. მარტენსიტულ სტრუქტურაში, სადაც ნახშირბადის ატომები მხოლოდ c ღერძის პარალელურ წიბოებზე არსებულ ოქტაედრულ სიცარიელეებში და ამ ღერძის პერპენდიკულარული წახნაგების ცენტრებშია ჩანერგილი, საწყისი α რკინის ტეტრაგონულ დამახინჯებას განაპირობებს.

სივრცით დაცენტრებულ კუბში ყველაზე მჭიდროდ წყობილია $\{110\}$ თორმეტი სიბრტყე (სურ. 1.25). აღნიშნულ სიბრტყეებში არის ორი მიმართულება, რომელთა გასწვრივაც ხისტი ბურთულები ურთიერთშეხებაში აღმოჩნდება.



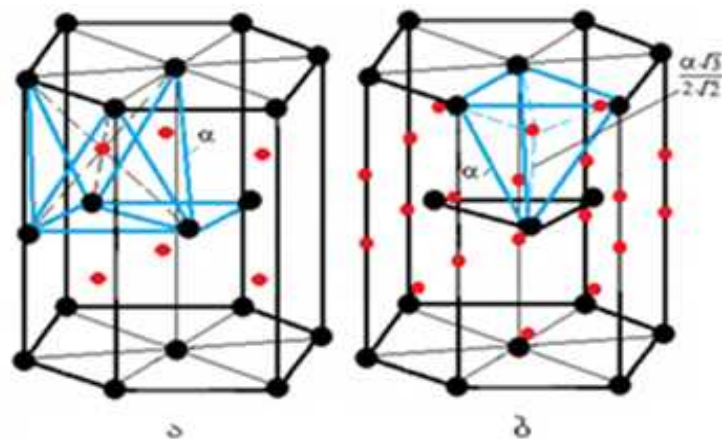
სურ.1.25. მჭიდროდ წყობილი $\{110\}$ სიბრტყე სივრცით დაცენტრებულ კუბურ გისოსში

მჭიდრო პექსაგონური გისოსი A_3 ისეთნაირად არის აგებული, რომ ნებისმიერი შრის ყოველი ატომი თანაბარი მანძილებით დაცილებული ექვსი მეზობელი ატომით არის გარშემორტყმული, რომლებიც იმავე შრეს ეკუთვნის. დამატებით კიდევ სამი უახლოესი ატომი მოცემული შრის ზემოთ და ქვემოთ მდებარეობს (სურ. 1.16, გ). ატომები, რომლებიც მომიჯნავე ფენებშია განთავსებული, მოცემული ატომიდან u მანძილით იმ შემთხვევაში იქნებიან დაცილებული, თუ პარამეტრების შეფარდება $u/a = \sqrt{8/3}$ ($=1,6330$). ასეთ სტრუქტურას იდეალურ მჭიდროდ წყობილს უწოდებენ და მისი საკოორდინა-

ციო რიცხვია 12.

ჰექსაგონური სტრუქტურის მქონე ლითონების უმრავლესობაში $\frac{c}{a}$ ფარდობა ძევს 1,56-1,63 ინტერვალში, ანუ რამდენაღმე მცირეა იდეალურ მნიშვნელობასთან შედარებით. გამონაკლისს თუთია და კადმიუმი წარმოადგენს, სადაც ეს მახასიათებელი გაზრდილია და შესაბამისად უდრის 1,86 და 1,89-ს. ეს იმით არის განპირობებული, რომ თუთიისა და კადმიუმის ელექტრონული ღრუბელი არ ხასიათდება სფერული სიმეტრიით, არამედ გაჭიმულია c ღერძის გასწვრივ. ამ მოვლენას ჰექსაგონურ შრეებში განლაგებულ ატომებს შორის კავშირების კოვალენტურ მდგენელს უკავშირებენ. მართალია, სუფთა ლითონებში პარამეტრებს შორის იდეალური შეფარდება არ არის დაფიქსირებული, მაგრამ შენადნობების ზოგიერთ ფაზაში იგი შეინიშნება.

ჰექსაგონურ მჭიდრო გისოსში ასევე ორი ტიპის სიცარიელე გვხვდება (სურ. 126). ისინი სწორი ოქტაედრის ან ტეტრაედრის ცენტრებში, წახნაგდაცენტრებული კუბური კრისტალური გისოსის ანალოგიურად არიან განთავსებული. ხისტი სფეროების დიამეტრი, რომელიც შესაძლებელია ჰექსაგონური სტრუქტურის ოქტაედრულ სიცარიელეებში მოთავსდეს, ამ შემთხვევაშიც 0,41 r-ის ტოლია, ხოლო ტეტრაედრულში – 0,225 r-ის.



სურ. 126. ოქტაედრული (ა) და ტეტრაედრული (ბ) სიცარიელეები მჭიდრო პექსაგონურ გისოსში.
● ლითონის ატომი. სიცარიელეები (●)

2. მყარი ხსნარების სტრუქტურა

მყარი ხსნარები იმ შემთხვევაში წარმოიქმნება, როდესაც განსხვავებული ელემენტების ატომები, რომლებიც სხვადასხვა თანაფარდობით ირევა (იხსნებიან) ერთმანეთში, საერთო კრისტალურ გისოსს წარმოქმნის. დადგენილია, რომ ყველა ლითონი და ნაერთი ხასიათდება გარკვეული ხსნადობით მყარ მდგომარეობაში, მაგრამ ფრიად საინტერესოა ხსნადობის ხარისხის გარკვევა სხვადასხვა კონკრეტულ შემთხვევაში. ამ თვალსაზრისით დიდ ყურადღებას იმსახურებს ის ფაქტორები, რომლებიც განსაზღვრავს როგორც მყარ მდგომარეობაში ხსნადობის ზღვარს, ისე განსაზღვრული მყარი ხსნარების სტრუქტურას. ასეთებია, მაგალითად, ატომების წყობის ხასიათი კრისტალურ გისოსში, დეფექტები, მოუწესრიგებელი განაწილებიდან ატომების გადახრა კრისტალურ გისოსში, განზომილების ფაქტორი და ა.შ.

2.1. მყარი ხსნარის ტიპები. მყარი ხსნარები ცვალებადი შედგენილობის ფაზებს წარმოადგენს და პრინციპში შესაძლებელია შედნობილი კომპონენტების ნებისმიერი რაოდენობიდან წარმოიქმნას. სიმარტივის მიზნით კურსში უმთავრესად განხილული იქნება ორმაგი (ორკომპონენტიანი) შენადნობები. მაგალითად, სუფთა სპილენძის კრისტალურ გისოსში სპილენძის ატომების გარკვეული რაოდენობა თუ შეიცვლება ნიკელის ატომებით, ჩანაცვლების მყარი ხსნარი მიიღება. იმ შემთხვევაში კი, როდესაც კომპონენტები ნებისმიერი თანაფარდობით ცვლის ერთმანეთს გამხსნელის კრისტალურ გისოსში, განუსაზღვრელი რიგის მყარი ხსნარები წარმოიქმნება.

მყარ ხსნარს, რომლის არსებობის არე არ გამოდის მდგომარეობის დიაგრამის იმ უბნიდან, რომელიც სუფთა კომპონენტს ემიჯნება, განსაზღვრულს უწოდებენ. ბუნებრივია, ასეთი მყარი ხსნარები ისეთივე სტრუქტურით ხასიათდება, როგორც თანაც შესაბამისი კომპონენტები, რომლის ფუძეზეც ისინი არის ჩამოყალიბებული. ყველა დანარჩენ ფაზას, რომელიც სისტემაში წარმოიქმნება, შუალედურს უწოდებენ. შუალედური ფაზები ლითონთშორის (ინტერმეტალურ) ან ვალენტურ ნაერთებად იმ შემთხვევაში განიხილება, როდესაც მყარ მდგომარეობაში ხსნადობის უბანი სტექიომეტრული შედგენილობის მახლობლობაში, მეტად მცირე არით არის შემოსაზღვრული. შუალედური ფაზების სტრუქტურა ხშირად განსხვავებულია შემადგენელი კომპონენტების სტრუქტურისაგან.

თუ მყარი ხსნარის შემადგენელი კომპონენტების ატომის ზომები ერთმანეთისგან მნიშვნელოვნად განსხვავდება, მაშინ მათი შედნობის პროცესში შესაძლებელია ერთ-ერთი მათგანის ატომები იმ სიცარიელეებში (კვანძებს შორის) განთავსდეს, რომელც მეორე, გამხსნელი კომპონენტის გისოსში ფორმირდება. ასეთ შემთხვევაში ჩანერგვის მყარი ხსნარი ჩამოყალიბდება. ანალოგიური ხსნარები ლითონებში არაღლითონური ელემენტების, მაგალითად, ბორის, ქანგბადის, აზოტისა და ნახშირბადის გახსნისას მიიღება.

ჩანაცვლებისა და ჩანერგვის მყარი ხსნარები შეიძლება იყოს როგორც მოუწესრიგებელი (კრისტალურ გისოსში ატომების სტატისტიკური განაწილებით), ისე ნაწილობრივ ან სრულად მოწესრიგებული. ასეთ შემთხვევაში შემადგენელი კომპონენტების ატომები გარკვეული მოწესრიგებით არის ერთმანეთის მიმართ განლაგებული. სრულად მოწესრიგებულ მყარ ხსნარებს ხშირად ზესტრუქტურულს უწოდებენ.

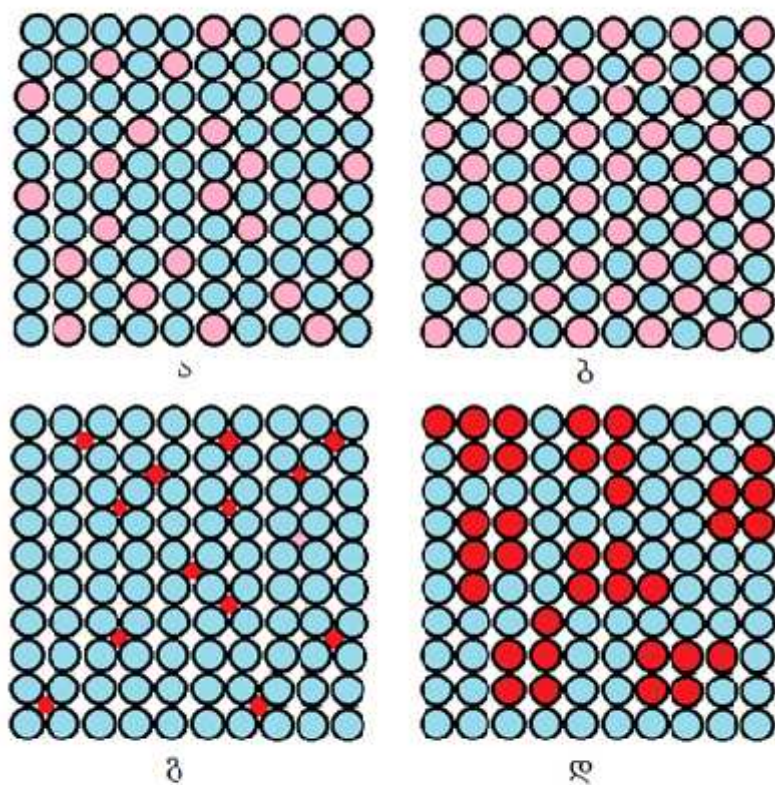
ზოგიერთ შემთხვევაში, შენადნობის შემადგენელი რომელიმე კომპონენტის ატომებს აქვთ მისწრაფება, შეგროვდნენ კრისტალური გისოსის რაღაც მოცულობაში. ასეთი თავმოყრის უბნები შეიძლება განაწილებული იყოს როგორც მოუწესრიგებლად, ისე გარკვეული მოწესრიგებით ან ორიენტირებულად, რის შედეგადაც რთული ზესტრუქტურის ნაირსახეობა მიიღება.

ექსპერიმენტური მონაცემები, რომლებიც ძირითადად რენტგენოსტრუქტურული ანალიზით არის მიღებული, საფუძველს იძლევა დავასკვნათ, რომ სრული მოუწესრიგებლობა (ისევე, როგორც იდეალური კრისტალური აგებულება), ალბათ ბუნებაში არ არსებობს. მყარი ხსნარები, რომლებიც თერმოდინამიკურ წონასწორობაში იმყოფება, მაკროსკოპული მასშტაბით შეიძლება ჭეშმარიტად ჰომოგენურად ჩაითვალოს, თუმცა ატომურ დონეზე მათი განხილვისას არ არის გამორიცხული ჰომოგენურობიდან გადახრა დაფიქსირდეს.

2.1 სურათზე წარმოდგენილია სხვადასხვა ტიპის მყარი ხსნარების სქემები.

2.2. შაჰტორები, რომლებიც მართაჟს მყარი ხსნარების ჩამოყალიბების პროცესს. იმისდა მიხედვით, თუ როგორ არის განლაგებული გახსნილი ელემენტის ატომები გამხსნელის კრისტალურ გისოსში, მყარი ხსნარი ძირითადად ორგვარია: ჩანაცვლებისა და ჩანერგვის.

ჩანაცვლების მყარი ხსნარი იმ შემთხვევაში წარმოიქმნება, როდესაც გამხს-



სურ. 2.1. სხვადასხვა ტიპის მყარი ხსნარების სქემები
 ა - ჩანაცვლების, ატომების მოუწესრიგებელი განლაგებით;
 ბ - ჩანაცვლების, ატომების მოუწესრიგებული განლაგებით;
 გ - ჩანერგვის, ატომების მოუწესრიგებელი განლაგებით;
 დ - ერთსახელა ატომების თანამოყრის უბნებები

ნელის გისოსში ზოგიერთი ატომი (შენადნობის კონცენტრაციის შესაბამისად) შეცვლილია გახსნილი ელემენტის ატომებით. ჩანაცვლების მყარი ხსნარი, თავის მხრივ, შეიძლება იყოს განუსაზღვრელი და განსაზღვრული ხსნადობის.

განუსაზღვრელი ხსნადობის შემთხვევაში გამხსნელის ატომების ნებისმიერი რაოდენობა შეიძლება შეიცვალოს გახსნილი ელემენტის ატომებით. აქედან გამომდინარე, B ელემენტის კონცენტრაციის ზრდასთან ერთად, გამხსნელის სულ უფრო მეტი რაოდენობის ატომები შეიცვლება B კომპონენტის ატომებით, თითქოსდა ხორციელდება A ლითონიდან B-ში თანდათანობითი, მდოვრე გადასვლა. განუსაზღვრელი ხსნადობის ერთ-ერთი ძირითადი პირობა იმაში მდგომარეობს, რომ ორივე ლითონს უნდა გააჩნდეს ერთნაირი, მაგალითად, წახნაგდაცენტრებული კრისტალური სტრუქტურა.

განუსაზღვრელი რიგის მყარი ხსნარების წარმოქმნის პირობები ძირითადად

იუმ-როზერის მიერ არის შესწავლილი. მან ჩამოაყალიბა ზოგადი პრინციპები, რომლებიც მყარ მდგომარეობაში ხსნადობის ზღვართან და ზოგიერთი შუალედური ფაზის სტაბილურობასთან არის დაკავშირებული. ამ პრინციპების თანახმად, ძირითადი ფაქტორები, რომლებიც მართავენ მყარი ხსნარების ჩამოყალიბების პირობებს, არის ურთიერთქმედებაში მყოფი ელემენტების ატომთა რადიუსებს შორის სხვაობა, ელექტროქიმიურ თვისებებს შორის განსხვავება და ვალენტობა.

იუმ-როზერის წესის ფორმულირება შემდეგნაირად არის შესაძლებელი:

1. თუ შენადნობის შემადგენელი კომპონენტების ატომთა ზომებს შორის სხვაობა აღემატება 14-15%-ს, მყარ მდგომარეობაში ხსნადობა შეიძლება შეზღუდული აღმოჩნდეს. დადგენილია, რომ რკინაში განუსაზღვრელი რიგის მყარი ხსნარები წარმოიქმნება იმ შემთხვევაში, როდესაც ატომთა ზომებს შორის სხვაობა არ აღემატება 8%-ს, სპილენძში – 10-11%-ს. თუ გახსნილი ელემენტის ატომის დიამეტრი აღნიშნული დიაპაზონის ზღვარს გარეთ გამოდის, განზომილების ფაქტორი არახელსაყრელი აღმოჩნდება და მყარ მდგომარეობაში ხსნადობა შემცირებას დაიწყებს ელემენტების ატომთა ზომებს შორის სხვაობის ზრდის პროპორციულად. აქვე აღსანიშნავია, რომ იუმ-როზერის 15%-იანი სხვაობის წესი განმსაზღვრელ როლს იმ შემთხვევაში თამაშობს, როდესაც ხსნართა წარმოქმნის პროცესში ძირითად შემზღუდავ ფაქტორს ატომთა ზომებს შორის სხვაობა წარმოადგენს.

2. განუსაზღვრელი რიგის მყარი ხსნარების წარმოქმნის დამატებითი პირობა იმაში მდგომარეობს, რომ მოცემულ სისტემაში არ უნდა ყალიბდებოდეს შუალედური ნაერთი, რადგან იგი ზღუდავს კომპონენტების ურთიერთხსნადობას. ასეთი ნაერთების წარმოქმნის ალბათობას კომპონენტების ქიმიური ნათესაობა განსაზღვრავს და იგი მით უფრო მაღალია, რაც უფრო მეტად არის ერთ-ერთი კომპონენტი ელექტროუარყოფითი, ხოლო მეორე – ელექტროდადებითი. მყარი ხსნარების არე ვიწროვდება შუალედური ფაზის სტაბილურობის გაზრდასთან ერთად. განხილული პრინციპი ცნობილია, როგორც ელექტროუარყოფითი ვალენტობის ეფექტი.

3. ემპირიული კვლევით ნაჩვენებია, რომ შენადნობთა მრავალ სისტემაში ერთ-ერთ უმთავრეს ფაქტორს, რომელიც მყარ მდგომარეობაში ხსნადობის ზღვარს და შუალედური ფაზების მდგრადობას განსაზღვრავს, ელექტრონული კონცენტრაცია წარმოადგენს. მიღებულია, რომ ეს პარამეტრი ელემენტარულ უჯრედზე მოსული ყველა სავალენტო ელექტრონის რიცხვით გამოისახოს იმ პირობის დაცვით,

რომ კრისტალური გისოსის ყველა კვანძი დაკავებულია ატომებით. ელექტრონული კონცენტრაცია შეიძლება განისაზღვროს აგრეთვე ყველა სავალენტო ელექტრონის შეფარდებით ატომების რიცხვთან, ანუ სიდიდით $\frac{e}{a}$.

იუმ-როზერის მიერ ასევე ნაჩვენებია, რომ მყარ მდგომარეობაში ორი ელემენტის ურთიერთხსნადობა დაკავშირებულია მათ ვალენტობასთან. ამასთან, დაბალი ვალენტობის ელემენტში ხსნადობა ყოველთვის უფრო მეტია, ვიდრე მაღალი ვალენტობის ელემენტში. ამ განზოგადებულ შედეგს ფარდობითი ვალენტობის ეფექტს უწოდებენ. წარმოდგენილი დებულება მტკიცდება ერთვალენტიანი ლითონების – სპილენძის, ოქროსა და ვერცხლის შენადნობების ჩამოყალიბებისას პერიოდული სისტემის B ქვეჯგუფის ელემენტებთან, რომელთა ვალენტობა ერთზე მეტია. აღნიშნული მოვლენის არსი დღეისათვის ბოლომდე არ არის ახსნილი.

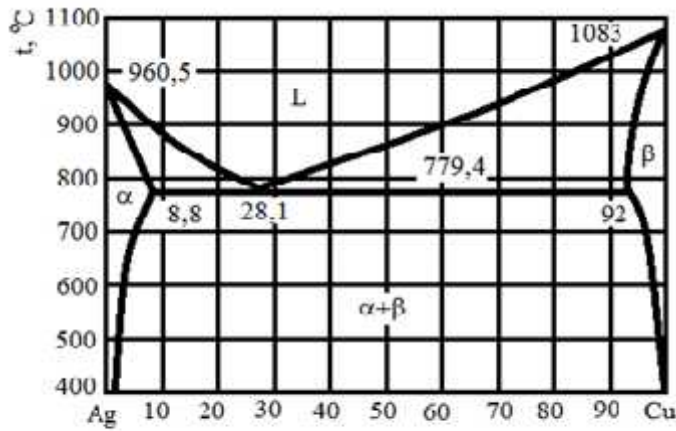
ყოველი ტიპის კრისტალური გისოსისათვის დამახასიათებელია ელექტრონების გარკვეული კრიტიკული კონცენტრაცია, რა დროსაც დგება ხსნადობის ზღვარი. მაგალითად, სივრცით დაცენტრებული და წახნაგდაცენტრებული კუბური კრისტალური გისოსების მქონე ერთვალენტიანი ლითონებისათვის ელექტრონების კრიტიკული კონცენტრაცია შეადგენს შესაბამისად 1,48 და 1,36 ელექტრონს ატომზე. ეს იმას ნიშნავს, რომ წახნაგდაცენტრებული გისოსის მქონე ლითონში განუსაზღვრელად შეიძლება გაიხსნას მხოლოდ ისევე ერთვალენტიანი ლითონი, რომელიც ელექტრონულ კონცენტრაციას არ ცვლის (კონცენტრაცია რჩება ერთის ტოლი, ე.ი. ზღვრულზე ნაკლები). თუ ერთვალენტიან ლითონში იხსნება ორვალენტიანი ლითონი, მაშინ გახსნილი კომპონენტის რაოდენობის ზრდასთან ერთად ელექტრონული კონცენტრაცია შენადნობში თანდათან გაიზრდება და როდესაც იგი მოცემული გისოსისათვის ზღვრულ მნიშვნელობას მიაღწევს, დადგება ხსნადობის ზღვარი.

ფარდობითი ვალენტობის ეფექტი არ წარმოადგენს ზოგად წესს. მაღალი ვალენტობის ორი ელემენტის შედნობისას ხშირად შეუძლებელი ხდება იმის წინასწარ განჭვრეტა, თუ რომელი მათგანის ფუძეზე წარმოიქმნება უფრო ფართო არის მქონე მყარი ხსნარი.

ამრიგად, თუ ხსნადობა არასრულია, იგი შეიძლება განპირობებული იყოს ან კრისტალური გისოსების შეუსაბამობით, ან ატომთა რადიუსებს შორის სხვაობით, ან მეორე (შუალედური) ფაზის წარმოქმნით. მაგალითად, სისტემაში ვერცხლი-სპილენძი (სურ. 2.2) ორივე ელემენტს გააჩნია წახნაგდაცენტრებული კუბური კრისტა-

ლური გისოსი. სპილენძის ატომის დიამეტრი ტოლია $2,55 \text{ \AA}$, ხოლო ვერცხლისა – $2,88 \text{ \AA}$. მათი ელექტრონული აგებულება მსგავსია (ელექტრონების რიცხვი სპილენძის თითოეულ ენერგეტიკულ დონეზე შეადგენს 2; 8; 18; 1; ხოლო ვერცხლის ენერგეტიკულ დონეებზე – 2; 8; 18; 18; 1). ამ მონაცემების საფუძველზე შეიძლება დავასკვნათ, რომ განსაზღვრული ხსნადობის მიზეზს ამ სისტემაში ატომის ზომებს

შორის განსხვავება წარმოადგენს.

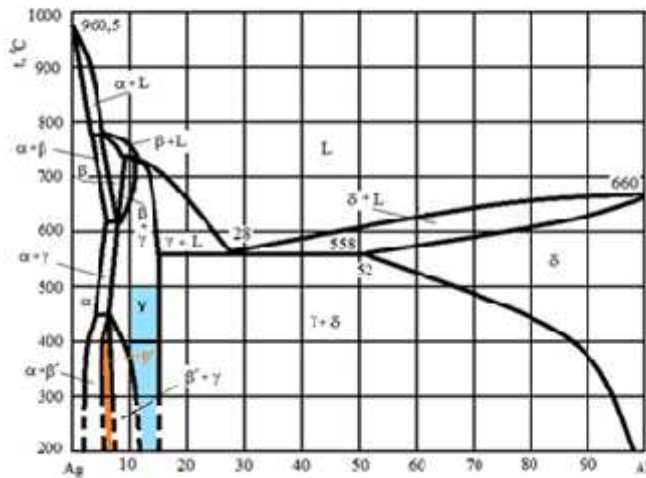


სურ. 2.2. სისტემა ვერცხლი-სპილენძი

ალუმინისა (წდკ, ატომის დიამეტრი $2,85 \text{ \AA}$) და ვერცხლის (წდკ, ატომის დიამეტრი $2,88 \text{ \AA}$) ატომთა ზომებისა და კრისტალური სტრუქტურების ურთიერთშედარება შესაძლებლობას იძლევა დავასკვნათ, რომ თითქოს ამ სისტემაში უნდა წარმოიქმნას განუსაზღვრელი რიგის მყარი ხსნარები, თუმცა ეს ასე

არ არის. ურთიერთშეურევლობის უბნის გაჩენის მიზეზი ორი შუალედური ფაზის ჩამოყალიბებაში მდგომარეობს (სურ. 2.3).

2.3. მყარი ხსნარის მოწესრიგება. სხვადასხვასახელიანი ატომების მიდრეკილება, კრისტალურ გისოსში დაიკაონ მკაცრად განსაზღვრული ადგილები (რაც ზესტრუქტურის წარმოქმნას განაპირობებს), მრავალი მყარი ხსნარის დამახასიათებელ თავისებურებას წარმოადგენს. მოუწესრიგებელ განლაგებასთან შედარებით, ატომების მოწესრიგებული განლაგება უფრო დაბალი შინაგანი ენერგიით ხასიათდება. ეს განსაკუთრებით მკვეთრად მაშინ მჟღავნდება, როდესაც კრისტალური გისოსის გარკვეულ კვანძებში ატომების გადანაწილება შედარებით დაბალ ტემპერატურაზე მიმდინარეობს. ამ დროს ენტროპია, რომელიც ფაზის მოუწესრიგებლობასთან არის დაკავშირებული, განმსაზღვრელ როლს ნაკლებად თამაშობს. სრულყოფილი წესრიგის პირობები, რომლის თანახმადაც ერთსახელა ორი ატომი არ შეიძლება კრისტალურ სტრუქტურაში ერთმანეთის მეზობლად, უახლოეს მანძილზე განთავსდეს, შეიძლება მიღწეულ იქნას მხოლოდ მარტივი გისოსის მქონე სრულყო-



სურ. 2.3. სისტემა ვერცხლი-ალუმინი

ფილ მონოკრისტალებში. ამასთან, მათი შედგენილობა ატომების მკაცრად განსაზღვრულ თანაფარდობას უნდა პასუხობდეს, მაგალითად, AB, AB₂, AB₃ და ა.შ. სინამდვილეში სხვადასხვა სახის დეფექტებისა და მარცვლის საზღვრების არსებობა პრაქტიკულად გამორიცხავს ასეთ შესაძლებლობას. გარდა ამისა ცნობილია, რომ მოწესრიგებული მყარი ხსნარი შეიძლება შედგებოდეს იდეალური

აგებულების, მაგრამ ერთმანეთის მიმართ დეზორიენტირებული დომენებისაგან, რაც განაპირობებს ერთსახელა ატომების უშუალო კონტაქტების რიცხვის გაზრდას დომენების საზღვრებში. მოწესრიგებულ დომენებს ხშირად ანტიფაზურს უწოდებენ და, როგორც წესი, მათი რიცხვი საკმაოდ დიდია მასალის ყოველი მარცვლის ფარგლებში.

მყარი ხსნარების მაქსიმალური წესრიგიდან გადახრის მეორე მიზეზი შედგენილობის ოპტიმალური სტექიომეტრიიდან გადახრაში მდგომარეობს. როგორც წესი, ეს განაპირობებს მოწესრიგების ტემპერატურის ვარდნას და მთელი რიგი თვისებების ცვლილებას, როგორიცაა, მაგალითად, სისაღე, ელექტროწინააღობა და ა. შ.

სხვადასხვასახელიან ატომებს შორის ძლიერი ურთიერთქმედების შემთხვევაში T_c კრიტიკული ტემპერატურა, რომელზედაც მიმდინარეობს მოწესრიგებული მდგომარეობიდან მოუწესრიგებელში გადასვლა, შეიძლება მასალის დნობის ტემპერატურაზე მაღალი აღმოჩნდეს. ასეთ შენადნობებს ქიმიურ ნაერთებთან მსგავსება ახასიათებთ. თუ ურთიერთქმედების ხარისხი ნაკლებად ინტენსიურია, მაშინ მოწესრიგებული მყარი ხსნარი მოუწესრიგებელში გადავა იმ შემთხვევაშიც კი, როდესაც მისი შედგენილობა სტექიომეტრიულ თანაფარდობას მკაცრად პასუხობს. დაბოლოს, თუ მომწესრიგებელი ძალები მეტად უმნიშვნელოა (მაგალითად, მცირე კონცენტრაციის უბნები განსაზღვრული მყარი ხსნარების წარმოქმნისას), მაშინ T_c კრიტიკული ტემპერატურა შეიძლება იმ ტემპერატურის ქვემოთ იყოს, რომელზედაც შესაძლებელია წონასწორობის მიღწევა დროის მისაღებ მონაკვეთში. ასეთ შემთხ-

ვევაში შეიძლება ითქვას, რომ მოუწესრიგებელი მდგომარეობა არის „გაყინული“. მიღებულია, რომ მყარი ხსნარის მოწესრიგებული მდგომარეობიდან მოუწესრიგებელში გადასაყვანად საჭირო აქტივაციის ენერგია იგივე ხარისხისაა, რაც აუცილებელია ლიფუზიის წარმართვის ან ცივად პლასტიკურად დეფორმირებული ლითონის გამობრუნებისათვის, ანუ დაახლოებით 1,5-2 ევ.

ამრიგად, მყარი ხსნარის მოწესრიგება იმ შემთხვევაში მიმდინარეობს, თუ შენადნობის შემადგენელი კომპონენტების ატომების კონცენტრაცია ტოლია, ან ჯერადია 1:3 (იშვიათად 1:2 ან 1:4) ფარდობისა. ამ მნიშვნელობებიდან მცირედენი გადახრა იწვევს მყარი ხსნარის მხოლოდ ნაწილობრივ მოწესრიგებას. თუ გადახრა დიდია, მოწესრიგების პროცესი საერთოდ არ მიმდინარეობს.

მყარი ხსნარის მოწესრიგების ერთ-ერთ ძირითად მიზეზს სხვადასხვასახედიან ატომებს შორის შედარებით უფრო ძლიერი ურთიერთქმედება წარმოადგენს, ერთსახელა ატომებთან შედარებით. მოწესრიგების შედეგად მცირდება ჩამოყალიბებული ფაზის თავისუფალი ენერგია. რაც უფრო ძლიერია ასეთ ატომებს შორის ურთიერთქმედების ძალები, მით უფრო მეტია მოწესრიგების ხარისხი. მოწესრიგების პროცესი მყარ ხსნარებში კრისტალური გისოსის დრეკადი დამახინჯების შემცირებას იწვევს, რომელიც მისი შემადგენელი კომპონენტების ატომების ზომებს შორის სხვაობის გამო წარმოიქმნება. რაც უფრო მეტია ეს სხვაობა, მით უფრო მაღალია მოწესრიგების ტემპერატურა.

მყარი ხსნარის მოწესრიგება იწვევს კანონზომიერად განლაგებული ატომების კრიტიკული ზომის უბნების ჩასახვით. მათი ზრდა მყარი ხსნარის მოუწესრიგებელი და მოწესრიგებული უბნების გამყოფ ზედაპირზე ატომების გადასვლით მიმდინარეობს. პროცესის სიჩქარე, ჩვეულებრივ, არ არის დიდი, ამიტომ აუცილებელია მყარი ხსნარის მცირე სიჩქარით გაცივება ან კურნაკოვის წერტილის ქვემოთ ხანგრძლივი დაყოვნება.

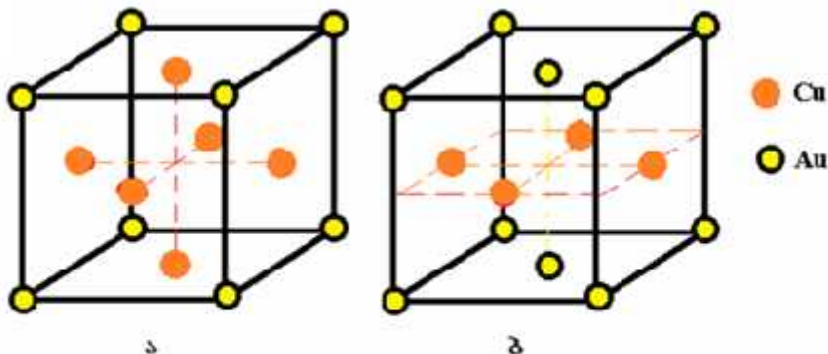
მაღალი ტემპერატურიდან გადიდებული სიჩქარით გაცივება უზრუნველყოფს ატომების მაღალტემპერატურული მდგომარეობის დაფიქსირებას ოთახის ტემპერატურაზე. თუმცა არსებობს ისეთი სისტემები, სადაც მოწესრიგების პროცესი იმდენად დიდი სიჩქარით მიმდინარეობს, რომ შეუძლებელია მისი დამუხრუჭება. ასეთ მყარ ხსნარებს იძლევა, მაგალითად, Cu-Zn სისტემის შენადნობები.

მრავალ მყარ ხსნარში მოწესრიგების პროცესი შეიძლება კრიტიკული ზომის

ჩანასახის წარმოქმნის გარეშეც წარიმართოს. ასეთ შემთხვევაში ატომები თანმიმდევრულად იკავებენ კრისტალური გისოსის გარკვეულ კვანძებს. პროცესი საკმაოდ დიდ ტემპერატურულ დიაპაზონში მიმდინარეობს.

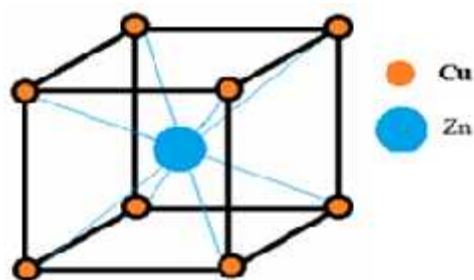
2.4. ზესტრუქტურის ტიპები. არჩევენ უბრალო ზესტრუქტურას და ზესტრუქტურას შორი წესრიგით. უბრალო ზესტრუქტურის ელემენტარული უჯრედი იმდენივე ატომს შეიცავს, რამდენსაც მოუწესრიგებელი მყარი ხსნარი, ხოლო ზესტრუქტურა შორი წესრიგით – რამდენჯერმე უფრო მეტს, ვიდრე უბრალო ზესტრუქტურა. აქედან გამომდინარე, შორი წესრიგის ზესტრუქტურის ელემენტალური უჯრედის ზომები მნიშვნელოვნად აღემატება საწყისი მყარი ხსნარის ელემენტარული უჯრედის ზომებს.

ორმაგ (ორკომპონენტიან) შენადნობებში უბრალო ზესტრუქტურა კუბური გისოსით იმ შემთხვევაში წარმოიქმნება, როდესაც მისი შედგენილობა ახლოს დგას სტეკიომეტრიულ პროპორციასთან A_3B , AB ან AB_3 . მაგალითის სახით შეიძლება გამოდგეს წახნაგდაცენტრებული კუბური გისოსის მქონე Cu-Au სისტემაში კარგად ცნობილი მოწესრიგებული მყარი ხსნარები Cu_3Au , $CuAu$ და $CuAu_3$. Cu_3Au სტრუქტურა დაბალ ტემპერატურაზე წარმოიქმნება (სურ. 2.4, ა). $CuAu$ ნაერთის შემთხვევაში (002) სიბრტყე მონაცვლეობით შეიცავს ან მხოლოდ სპილენძის (სურ. 2.4, ბ), ან მხოლოდ ოქროს ატომებს, რის შედეგადაც c ღერძის მიმართულებით ხდება გისოსის შეკუმშვა. გისოსის შეკუმშვის მიზეზი, დიდი ალბათობით, უნდა იყოს აღნიშნულ სიბრტყეებზე განთავსებულ ატომებს შორის მიზიდვის ძალები, რაც წახნაგდაცენტრებული ტეტრაგონური გისოსის ჩამოყალიბებას განაპირობებს პერიოდების შეფარდებით $c/a=0,92$.



სურ. 2.4. Cu-Au სისტემის მოწესრიგებული მყარი ხსნარების კრისტალური გისოსის სქემა

სივრცით დაცენტრებული კუბური სტრუქტურის მოწესრიგება ასევე მყარი ხსნარის შედგენილობაზეა დამოკიდებული. AB ტიპის მყარი ხსნარის მოწესრიგებისას, სადაც გახსნილი კომპონენტის კონცენტრაცია 50 ატ.%-ს შეადგენს, კარგად ცნობილი CsCl ტიპის სტრუქტურა წარმოიქმნება. ასეთი სტრუქტურის მქონე მოწესრიგებული მყარი ხსნარის მაგალითს β თითბერი წარმოადგენს (სურ. 2.5). თუ გახსნილი კომპონენტის რაოდენობაა 25-50 ატ.%, ზოგჯერ შეიძლება სივრცით დაცენტრებული კუბური გისოსის ბაზაზე მთელი რიგი მოწესრიგებული მყარი ხსნარების სტრუქტურები ჩამოყალიბდეს, მაგალითად, Fe-Al სისტემაში Fe_3Al და FeAl .



სურ. 2.5. β – თითბურის ტიპის მოწესრიგებული სტრუქტურა

კუბური სტრუქტურების ანალოგიურად, მჭიდრო პექსაგონური გისოსის მქონე მყარი ხსნარებშიც ხშირად შეინიშნება მოწესრიგებული ზესტრუქტურების ჩამოყალიბების შესაძლებლობა. მაგალითად, Mg-Cd სისტემაში მაღალ ტემპერატურაზე განუსაზღვრელი რიგის მყარი ხსნარები წარმოიქმნება, დაბალ ტემპერატურაზე კი შეინიშნება ხსნადობის წყვეტა მოწესრი-

გებული სტრუქტურების ჩამოყალიბების გამო, რომლებიც პასუხობენ შედგენილობას MgCd_3 , MgCd და Mg_3Cd . ამასთან, MgCd_3 ხასიათდება დამახინჯებული მჭიდრო პექსაგონური სტრუქტურით, Mg_3Cd – მჭიდრო პექსაგონური გისოსის, ხოლო MgCd მოწესრიგებულ რომბულ სტრუქტურას წარმოქმნის.

2.5. შორი და ახლო წესრიგი. ძირითადი პირობა, რომელიც უზრუნველყოფს გარკვეული შედგენილობის მყარი ხსნარის მოწესრიგებას იმაში მდგომარეობს, რომ სხვადასხვასახელიანი ატომები ერთმანეთს უფრო ძლიერად უნდა იზიდავდეს, ვიდრე ერთსახელიანი ატომები. აქედან გამომდინარე, მოწესრიგების შემდეგ შენადნობის თავისუფალი ენერგია უნდა შემცირდეს. აღნიშნული პირობა შეიძლება გამოისახოს სხვადასხვასახელიანი ატომების ურთიერთქმედების ენერგიებით:

$$E_{AB} < \frac{1}{2}(E_{AA} + E_{BB}) \quad (2.1)$$

სადაც E_{AA} და E_{BB} არის ერთსახელიანი ატომების წყვილს შორის ურთიერთქმედების, ხოლო E_{AB} – სხვადასხვასახელიანი ატომების წყვილს შორის ურთიერთქმე-

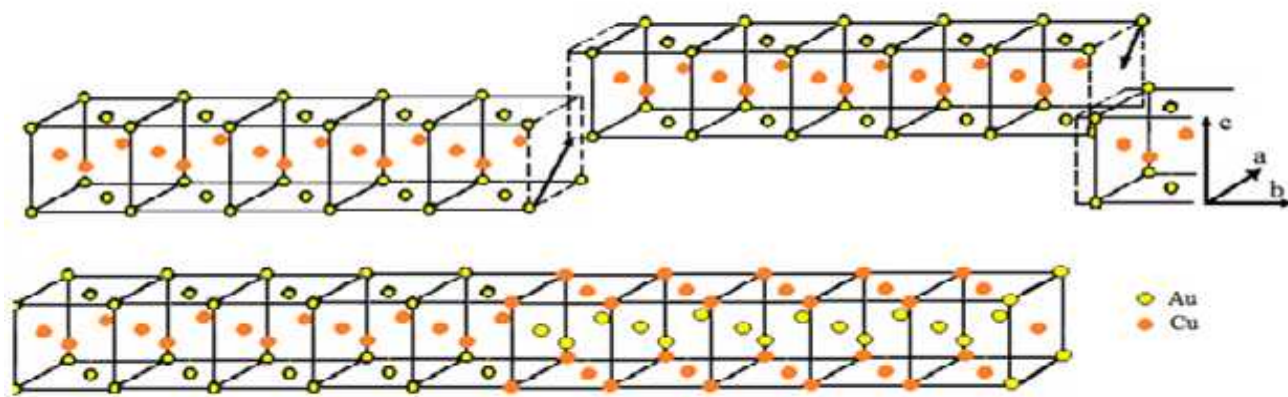
დების ენერგიები. თუ ეს პირობა სრულდება მოცემული სტექიომეტრული პროპორციის მქონე შენადნობისათვის, მაშინ შედარებით დაბალ ტემპერატურაზე სტრუქტურა სრულყოფილად მოუწესრიგებულ მდგომარეობაში გადავა, ანუ A და B ატომები მკაცრად განსაზღვრულ, დაუშვავ, α და β კვანძებს დაიკავებენ კრისტალურ გისოსში. გახურებისას ენერგია, რომელიც სისტემას სითბოს სახით მიეწოდება, ხელს შეუწყობს ატომების მიგრაციას, რის შედეგადაც ზოგიერთი A ატომი მეორე ატომის β კვანძს დაიკავებს და პირიქით. საბოლოო ჯამში ატომების განაწილება კრისტალურ გისოსში სულ უფრო მოუწესრიგებულ მდგომარეობაში გადავა.

დაბალ ტემპერატურაზე სრულყოფილი წესრიგის შემთხვევაში α კვანძის A ატომებით და β კვანძისა – B ატომებით შევსების მათემატიკური აღბათობა ერთის ტოლი აღმოჩნდება.

გარდაქმნა „წესრიგი – მოუწესრიგებლობა“ კოოპერატიულ მოვლენათა რიცხვს მიეკუთვნება. თბური მოძრაობის შედეგად რაც უფრო მეტი ატომი აღმოჩნდება „უცხო“ კვანძში, მით უფრო ნაკლები ხდება 2.1 ტოლობით გამოთვლილ ენერგიებს შორის სხვაობა და მით უფრო ადვილად გადადის შენადნობი მოუწესრიგებულ მდგომარეობაში. საბოლოო ჯამში მიიღწევა რაღაც T_c კრიტიკული ტემპერატურა, რომლის დროსაც სხვადასხვა კვანძებს შორის რაიმე განსხვავება სრულიად ისპობა.

როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, Cu-Au სისტემის დაბალტემპერატურული მოწვა ($<380^\circ\text{C}$) განაპირობებს წახნაგდაცენტრებული ტეტრაგონური სტრუქტურის ჩამოყალიბებას, რომლის ელემენტარული უჯრედის სქემა 2.4 სურათზეა წარმოდგენილი. აღნიშნული სტრუქტურა, ჩვეულებრივ, ცნობილია, როგორც CuAu I. $380-410^\circ\text{C}$ ტემპერატურულ ინტერვალში წარმოიქმნება შორი წესრიგის მქონე განსხვავებული ზესტრუქტურა, რომელსაც ხშირად CuAu II სიმბოლოებით აღნიშნავენ.

CuAu II ზესტრუქტურა წარმოადგენს CuAu I-ის მოდიფიკაციას და აქვს რომბული სტრუქტურა, რომლის ელემენტარული უჯრედის სქემა 2.6 სურათზეა წარმოდგენილი. აღნიშნული სტრუქტურის გაჭიმული უჯრედი მიიღება CuAu I ხუთი ელემენტარული უჯრედის რიგში შეპირაპირების გზით, გრძელი უჯრედის ერთ-ერთი წახნაგის მიმართულებით (პერიოდი b). შემდეგ კვლავ მეორდება ასეთივე უჯრედი, მაგრამ იგი აღმოჩნდება პირველთან შედარებით $1/2(a+c)$ ვექტორის (ნა-



სურ. 2.6. CuAu II ზესტრუქტურის შორი წესრიგი

ხევაი დიაგონალის) სიდიდით დაძრული. CuAu II ზესტრუქტურას ერთგანზომილებიან შორი წესრიგის ზესტრუქტურას უწოდებენ პერიოდით 5. გრძელი ანტიფაზების დომენების შეპირაპირების უბნებში განზიდვის ძალები აღიძვრება, რაც გრძელი ღერძების მიმართულებით გისოსის მცირე, ლოკალურ გაზრდას განაპირობებს.

კუბური სტრუქტურის მქონე შენადნობებში შორი წესრიგის მრავალი ზესტრუქტურაა აღმოჩენილი, განსაკუთრებით A_3B შენადნობებში. შორი წესრიგის ზესტრუქტურა შეიძლება წარმოიქმნას აგრეთვე ჰექსაგონური სტრუქტურის მქონე შენადნობებშიც.

3. შუალედური ფაზები

შუალედურს, ჩვეულებრივ, უწოდებენ ყველა ახალ ფაზას, რომლებიც მრავალკომპონენტიან სისტემებში წარმოიქმნება. უკანასკნელ პერიოდში ამ ტერმინს იმ ფაზების აღსანიშნავადაც იყენებენ, რომლებიც მოუწესრიგებელი მყარი ხსნარების მოწესრიგების შედეგად ყალიბდება, ანუ შორი წესრიგის მქონე ზესტრუქტურებისათვის. შუალედურ ფაზებში, რომელთა კრისტალური სტრუქტურა განსხვავებულია მისი წარმომქმნელი კომპონენტების, ან მათ ფუძეზე ჩამოყალიბებული მყარი ხსნარების სტრუქტურისაგან, გაზრდილ ტემპერატურაზე შორი წესრიგი შეიძლება არ არსებობდეს, მაგრამ მოწესრიგებას განიცდიდეს შედარებით უფრო დაბალ ტემპერატურაზე (მაგალითად, β -თითბერი). უმეტეს შემთხვევაში შუალედური ფაზები შეიძლება გარკვეული კონცენტრაციის ინტერვალში არსებობდეს.

იმ შუალედური ფაზების აღნიშვნისათვის, რომლებიც მათი სტაბილურობის მოელ ტემპერატურულ ინტერვალში შორ წესრიგს ინარჩუნებს, უფრო შეზღუდული ტერმინი გამოიყენება – ლითონთშორისი (ინტერმეტალური) ნაერთები. ეს ფაზები, როგორც წესი, კომპონენტების გარკვეული ატომური თანაფარდობის პირობებში ყალიბდება და უმეტეს შემთხვევაში, ჰომოგენობის ვიწრო ინტერვალით ხასიათდება. ჰომოგენობის ინტერვალში შეიძლება განპირობებული იყოს ან ვაკანსიების წარმოქმნით, ან მყარი ხსნარის მცირეოდენი განწესრიგებით (შორი წესრიგის ხარისხის შემცირებით). ამ ორივე მექანიზმმა შეიძლება ე.წ. არასტექიომეტრული, ანუ ისეთი ნაერთების წარმოქმნა განაპირობოს, რომლებიც მდგრადობას იმ კონცენტრაციულ ინტერვალშიც ინარჩუნებს, რომელიც არ შეესაბამება სრულად მოწესრიგებულ სტრუქტურას. მაგალითად, θ (CuAl_2) წარმოადგენს შუალედურ ფაზას, რომელიც არ პასუხობს სტექიომეტრული პროპორციის იდეალურ თანაფარდობას – იგი წარმოადგენს ნაწილობრივ მოუწესრიგებელ ალუმინის მყარ ხსნარს CuAl_2 -ში.

არსებობს სამი ძირითადი ფაქტორი, რომელიც შენადნობის სტრუქტურას განსაზღვრავს. კერძოდ: ატომების ზომების თანაფარდობა, ფარდობითი ვალენტობა და კომპონენტების ელექტროუარყოფითობა. კიდევ ერთ ფაქტორს კომპონენტების კრისტალური სტრუქტურა წარმოადგენს, რომელიც გადამწყვეტ მნიშვნელობას მხოლოდ განუსაზღვრელი რიგის მყარი ხსნარების წარმოქმნის დროს ღებულობს. ამ შემთხვევაში აუცილებელია, მაგრამ არასაკმარისი კომპონენტების კრისტალური

სტრუქტურების იდენტურობა.

ზომითი ფაქტორი, როგორც წესი, ხასიათდება კომპონენტების ატომთა რადიუსების გარკვეული თანაფარდობით. დადგენილია, რომ შუალედური ფაზების მთელი რიგი ოჯახების (მაგალითად, სტეკიომეტრიით AB_2) წარმოქმნა იმის გამოა გამოვლინებული, რომ ატომების რადიუსების გარკვეული თანაფარდობის შემთხვევაში კრისტალური გისოსის სივრცის ატომებით შევსება ყველაზე ხელსაყრელად მიმდინარეობს.

ფარდობითი ვალენტობის ფაქტორი კომპონენტების ვალენტობების სხვაობით განისაზღვრება. მიუხედავად იმისა, რომ ლავესის ფაზების წარმოქმნის პირობებსა და მდგრადობას უმთავრესად ზომითი ფაქტორი განსაზღვრავს, მთელ რიგ შემთხვევებში, აღნიშნულთან ერთად დიდ როლს ელექტრონული ფაქტორიც თამაშობს.

ელემენტების ელექტროუარყოფითობა განსაზღვრავს ატომების უნარს, მიიღოს სავალენტო ელექტრონები. ამიტომ ელემენტების ელექტროუარყოფითობა ხარისხობრივად შუალედური ფაზების წარმოქმნის ალბათობას და მათში განხორციელებული კავშირების ბუნებას ახასიათებს. შუალედურ ფაზებში ატომებს შორის კავშირის ბუნებას გარკვეული ხარისხით საკოორდინაციო რიცხვიც განაპირობებს. იმ ნივთიერებების საკოორდინაციო რიცხვი, რომლებიც უპირატესად კოვალენტური ან იონური ტიპის კავშირებით ხასიათდება, რვაზე ნაკლებია მაშინ, როდესაც ლითონებში ეს მახასიათებელი თექვსმეტამდე შეიძლება იყოს. იმ სტრუქტურებში, რომლებშიც არსებით როლს ზომითი ფაქტორი თამაშობს, საკოორდინაციო რიცხვი მაქსიმალური უნდა იყოს, ხოლო ატომებს შორის კავშირის ხასიათი – უპირატესად ლითონური.

3.1. იუმ-როზერის ფაზები – ელექტრონული ნაერთები. ელექტრონულ ნაერთებში ფაზების სტრუქტურას მთლიანად ელექტრონული კონცენტრაცია – სავალენტო ელექტრონების შეფარდება ატომების რიცხვთან, ანუ ერთ ატომზე მოსული ელექტრონების რიცხვი განსაზღვრავს. ეს რიცხვი შეიძლება იცვლებოდეს მოცემული ელემენტის ატომების ჩანაცვლებით სხვა, განსხვავებული ვალენტობის მქონე ელემენტის ატომებით. უმრავლეს შემთხვევაში სწორედ ეს გარემოება იძლევა ზოგიერთი შუალედური ფაზის მდგრადობის პირობების ახსნის საფუძველს.

ელექტრონული ნაერთები წარმოიქმნება შემდეგი ორი ჯგუფის ლითონებს

შორის: Cu, Ag, Pt, Au, Fe, Co, Ni, Pd და Be, Zn, Cd, Al, Sn, Si. ინგლისელმა ლითონთა ფიზიკოსმა, იუმ-როზერიმ დაადგინა, რომ ყველა ელექტრონულ ნაერთში დაცულია გარკვეული კანონზომიერება საერთო სავალენტო ელექტრონებისა და ატომთა რიცხვის შეფარდებაში, რომელიც ტოლია $3/2$, $21/13$ და $7/4$. ამასთან, ყოველ შეფარდებას გარკვეული ტიპის კრისტალური გისოსი შეესაბამება. კერძოდ, შეფარდება $3/2$ იძლევა სივრცით დაცენტრებულ კუბს, ე. წ. β ფაზას; შეფარდება $21/13$ – როულ კუბურ გისოსს 52 ატომით ელემენტარულ უჯრედში, ე. წ. γ ფაზას, ხოლო შეფარდება $7/4$ – ჰექსაგონურ გისოსს, ე. წ. ϵ ფაზას.

ელექტრონული ნაერთები მრავალ ტექნიკურ შენადნობში მიიღება, როგორც ბიცაა, მაგალითად Cu-Zn, Cu-Sn, Cu-Si, Fe-Al და სხვა სისტემები. როგორც წესი, ერთ სისტემაში სამივე ფაზა წარმოიქმნება. Cu-Zn სისტემაში β ფაზას CuZn ქიმიური ნაერთი წარმოადგენს (სავალენტო ელექტრონების რაოდენობაა 3 – ერთი სპილენძის, ორი – თუთიის, ხოლო ატომთა რაოდენობა – 2); γ ფაზას – Cu₅Zn₈, ϵ ფაზას კი – CuZn₃.

ასეთი ტიპის შუალედური ნაერთის მაგალითად შეიძლება სპილენძ-თუთია სისტემის სივრცით დაცენტრებული კუბური β ფაზა განვიხილოთ, რომლის კრისტალური სტრუქტურის სტაბილურობა განპირობებულია ელექტრონების განლაგებით შედარებით უფრო დაბალ ენერგეტიკულ დონეებზე. სპილენძში ყოველ ატომს აქვს ერთი ელექტრონი, რომელიც კრისტალური გისოსის ჩამოყალიბებისას საკუთარ ატომს სცილდება და ლითონურ კავშირს განაპირობებს. თუ ელექტრონების რიცხვი იზრდება უფრო მაღალი ვალენტობის ელემენტებით სპილენძის ატომების ჩანაცვლების გამო (მაგალითად, თუთიით 2^+ , ალუმინით 3^+ , კალით 4^+ და ა. შ), მაშინ ერთ ატომზე მოსული ელექტრონების საშუალო რაოდენობა გაიზრდება. როდესაც ეს სიდიდე მიაღწევს დაახლოებით 1,4 ელექტრონს ატომზე, სივრცით დაცენტრებული კუბი ვეღარ მიიღებს ჭარბ ელექტრონებს ენერგიის მნიშვნელოვნად გაზრდის გარეშე. ამავე დროს, როგორც კვლევებით არის ნაჩვენები, სივრცით დაცენტრებულ კუბურ სტრუქტურას აღმოაჩნდება უფრო დაბალი ენერგია მაშინ, როდესაც ერთ ატომზე მოსული ელექტრონების რაოდენობა დაახლოებით 1,5 იქნება. ცნობილია საკმაოდ ბევრი სისტემა, რომლებშიც ელექტრონული კონცენტრაცია შეესაბამება ფარდობას $3/2$, გააჩნიათ სივრცით დაცენტრებული სტრუქტურა და ლითონური

მახასიათებლები, რადგან მათში ელექტრონები არ არის ინდივიდუალურ ატომებთან კავშირში.

ანალოგიური ფაზებია დაფიქსირებული აგრეთვე ელექტრონებისა და ატომების რიცხვს შორის 21/13 და 7/4 თანაფარდობის შემთხვევაშიც. ამ ფაზების თავისებურება იმაში მდგომარეობს, რომ ორივე კომპონენტის ატომების ჭეშმარიტი თანაფარდობა მეტად ფართო ზღვრებში იცვლება, თუმცა ერთ ატომზე მოსული ელექტრონების რაოდენობა მუდმივად არის შენარჩუნებული.

3.1. ცხრილში წარმოდგენილია სისტემები, რომლებშიც β , γ და ε ფაზები წარმოიქმნება.

ცხრილი 3.1

ელექტრონული კონცენტრაციის მნიშვნელობები ზოგიერთ ელექტრონულ ნაერთში

სისტემა	α ფაზა	β ფაზა		γ ფაზა		ε ფაზა	
		შედგენილობა	კონცენტრაცია	შედგენილობა	კონცენტრაცია	შედგენილობა	კონცენტრაცია
Cu-Zn	1,38	CuZn	1,48	Cu ₅ Zn ₈	1,58-1,66	CuZn ₃	1,78-1,87
Cu-Al	1,41	Cu ₃ Al	1,48	Cu ₉ Al ₄	1,63-1,77		
Cu-Ga	1,41	Cu ₃ Ga		Cu ₉ Ga ₄			
Cu-Si	1,42	Cu ₅ Si	1,49				
Cu-Ge	1,36					Cu ₃ Ge	
Cu-Sn	1,27	Cu ₅ Sn	1,49	Cu ₃₁ Sn ₈	1,60-1,63	Cu ₃ Sn	1,73-1,75
Ag-Zn	1,38	AgZn		Ar ₅ Zn ₈	1,58-1,63		1,67-1,90
Ag-Cd	1,42	AgCd	1,50		1,59-1,63	AgCd ₃	1,65-1,82
Ag-Al	1,41	Ar ₃ Al				Ag ₅ Al ₃	1,55-1,80

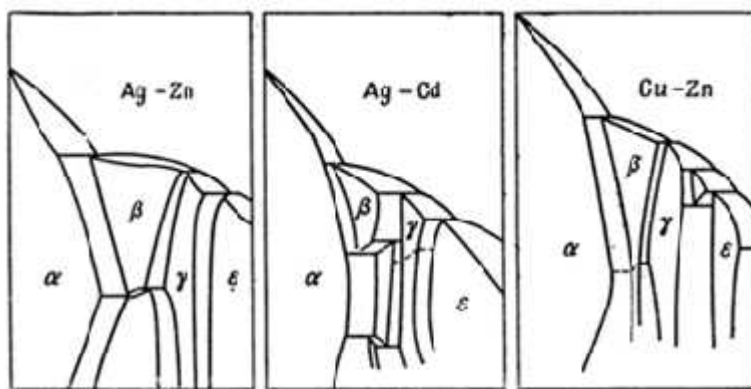
შენიშვნა: მოყვანილი კონცენტრაციები შეესაბამება ფაზათა საზღვრებს

ზემოთ წარმოდგენილი სავალენტო ელექტრონებისა და ატომთა რიცხვს შორის თანაფარდობას, ჩვეულებრივ, იუმ-როზერის თანაფარდობას უწოდებენ.

ფაზების მდგრადობა, რომლებიც იუმ-როზერის, ან ელექტრონული ნაერთების სახელწოდებით არის ცნობილი, არ არის დამოკიდებული იმაზე, უკავიათ თუ არა ატომებს გარკვეული მდგომარეობა კრისტალურ გისოსში. ატომების განლაგება შეიძლება იცვლებოდეს სტრუქტურის მდგრადობის ცვლილების გარეშე. იუმ-როზერის ფაზები შესაძლებელია არსებობდეს კონცენტრაციის საკმაოდ მნიშვნელოვან დიაპა-

ზონში, რომელიც, უმეტეს შემთხვევაში, არ პასუხობს ატომების მარტივ ურთიერთ-შეფარდებას. ამ თვალსაზრისით ასეთი ფაზები მყარ ხსნარებს წარმოადგენს. საკმაოდ დაბალ ტემპერატურაზე ისინი შეიძლება მოწესრიგებულ მდგომარეობაში გადავიდეს.

3.1. სურათზე წარმოდგენილია იმ სისტემების გამარტივებული მდგომარეობის დიაგრამები, რომლებშიც β , γ და ϵ ტიპის სტრუქტურის ფაზები წარმოიქმნება.



სურ. 3.1. Ag-Zn, Ag-Cd და Cu-Zn სისტემების მდგომარეობის დიაგრამები, რომლებიც ელექტრონული კონცენტრაციის ზრდის შესაბამისად β , γ და ϵ ფაზების წარმოქმნის ილუსტრაციის შესაძლებლობას იძლევა

იუმ-როზერის კლასიფიკაციას მიესადაგება აგრეთვე პერიოდული სისტემის VIII გარდამავალი ჯგუფის ელემენტებით ჩამოყალიბებული ზოგიერთი შუალედური ფაზა (ცხრილი 3.2). შენიშვნის სახით უნდა აღინიშნოს, რომ გარდამავალ ელემენტს

ცხრილი 3.2

ზოგიერთი ელექტრონული ნაერთი, რომელიც შეიცავს VIII გარდამავალი ჯგუფის ელემენტებს

β ფაზა $\frac{e}{a}=3/2$	γ ფაზა $\frac{e}{a}=21/13$
CoAl NiAl NiIn PdIn	Mn ₅ Zn ₂₁ Fe ₅ Zn ₂₁ Co ₅ Zn ₂₁ Ni ₅ Zn ₂₁ Ni ₅ Cd ₂₁ Rh ₅ Zn ₂₁ Pd ₅ Zn ₂₁

ნულოვანი ვალენტობა მიეწერება, რადგან მას არ შეაქვს წვლილი თავისუფალი ელექტრონების კონცენტრაციაში. ამიტომ ასეთი ტიპის ნაერთების ელექტრონულ აგებულებაში არ არის აუცილებელი გარდამავალი ლითონების სავალენტო ან გამტარებლობის ელექტრონების გათვალისწინება.

ამრიგად, ელექტრონულ კონცენტრაციას მნიშვნელოვანი როლი ენიჭება იუმ-როზერის ფაზების სტაბილურობის განსაზღვრაში. აღნიშნული ფაზის შედგენილობის ცვლილებამ, ერთი სახის ატომების მეორით შეცვლის გზით, შეიძლება სავალენტო ელექტრონების რიცხვსა და ატომების რიცხვს შორის თანაფარდობის ცვლილება გამოიწვიოს, რაც, თავის მხრივ, თავისუფალი ენერგიის ცვლილებასაც განაპირობებს. NiAl ნაერთის შემთხვევაში (β ფაზა, $e/a = 3/2$), ალუმინის კონცენტრაციის გაზრდა ვაკანსიების გაჩენას განაპირობებს გისოსის იმ კვანძებში, რომლებიც ნიკელს უნდა ჰქონდეს დაკავებული. ამიტომ ელემენტარულ უჯრედზე მოსული ელექტრონების რაოდენობა მუდმივად არის შენარჩუნებული, რაც აუცილებელია მოცემული ფაზის მდგრადობისათვის. ამგვარად ყალიბდება დეფექტური კრისტალური გისოსი. ასეთ შემთხვევაში ელექტრონული კონცენტრაციის ასახვა ელემენტარულ უჯრედზე მოსული ელექტრონების რიცხვით უკეთესად ხსნის მოვლენის ფიზიკურ არსს, ვიდრე თანაფარდობა e/a . მართალია, ხშირად ელემენტარულ უჯრედზე მოსული ელექტრონების რიცხვი e/a ფარდობის ანალოგიურია, მაგრამ დეფექტური გისოსებისათვის აღნიშნული ხერხით ელექტრონული კონცენტრაციის ასახვა უფრო მიზანშეწონილია იმდენად, რამდენადაც სავალენტო ელექტრონების ენერგია ელემენტარულ უჯრედზე მოსული მათი რიცხვით განისაზღვრება.

3.2. ლავესის ფაზები. ლავესის ფაზები აერთიანებს მონათესავე ინტერმეტალური ნაერთების დიდ ჯგუფს, რომელთა შედგენილობა აისახება ფორმულით AB_2 და გააჩნიათ შემდეგი სამი ტიპის სტრუქტურიდან ერთ-ერთი: MgCu_2 , MgZn_2 ან MgNi_2 . MgCu_2 ნაერთის გისოსი კუბურია, ხოლო MgZn_2 და MgNi_2 ნაერთებისა – ჰექსაგონური. ინტერმეტალური ნაერთების დიდი რაოდენობა მაგნიუმის აღნიშნული ნაერთების იზოსტრუქტურულია. 3.3. ცხრილში წარმოდგენილია ზემოთ აღნიშნული ნაერთების ზოგიერთი ტიპი.

ძირითადი ფაქტორი, რომელიც ლავესის ფაზების წარმოქმნას განაპირობებს, არის მენდელეევის პერიოდული სისტემის პრაქტიკულად ნებისმიერ ადგილას გან-

ცხრილი 3.3.

ლავესის ინტერმეტალური ნაერთების ზოგიერთი მაგალითი

სტრუქტურის ტიპი		
MgCu ₂	MgZn ₂	MgNi ₂
MgCu ₂	MgZn ₂	MgNi ₂
CuBe ₂	MnBe ₂	UPt ₂
CeAl ₂	CaMg ₂	U(Fe,Ni) ₂
UAl ₂	NbFe ₂	U(Mn,Ni) ₂
BiAu ₂	ZrCr ₂	CuMg ₂ Zn ₃
KBi ₂	ZrOs ₂	
NaAu ₂	HfMn ₂	
CtCo ₂	TiMn ₂	
UMn ₂	UNi ₂	
YfCo ₂	KNa ₂	
ZrCr ₂	CoCrTa	
TaCr ₂	CoTaTi	
TiCr ₂		
ZrCo ₂		
CdCuZn		
CuTaV		
MgNiZn		

თავსებული კომპონენტების ატომების ზომებს შორის თანაფარდობა. ამასთან, ზოგ ნაერთში მოცემულმა ელემენტმა შეიძლება ითამაშოს A ატომის როლი, სხვებში კი – B ატომისა.

სფეროების მჭიდრო წყობის მოდელიდან გამომდინარე, ლავესის ფაზების წარმოსაქმნელად კომპონენტების ატომის დიამეტრების იდეალური შეფარდება $d_A/d_B=1,225$. თუმცა ნაერთების უმრავლესობისათვის ეს მნიშვნელობა 1,1-1,6 ზღვრებში თავსდება. ლავესის ფაზების ჰომოგენობის არე, როგორც წესი, უმნიშვნელოა.

მიუხედავად იმისა, რომ ლავესის ფაზების წარმოქმნასა და მის სტაბილურობაში მთავარ როლს ზომითი ფაქტორი თამაშობს, მთელ რიგ შემთხვევებში, არანაკლებ მნიშვნელობას ელექტრონული აგებულება თამაშობს. კერძოდ, ელექტრონული კონცენტრაცია განსაზღვრავს, თუ ზემოთ წარმოდგენილი სამი სტრუქტურიდან რომელი მათგანი ჩამოყალიბდება ფსევდობინარულ სისტემებში (MgCu₂, MgZn₂) ალუმინთან, ვერცხლთან და სილიციუმთან. ამის ილუსტრაციას 3.4 ცხრილში წარმოდგენილი მონაცემები იძლევა, სადაც მაგნიუმის ფუძეზე სამმაგი სისტემის ჰომო-

ელექტრონული კონცენტრაციით* გამოსახული $MgCu_2$, $MgNi_2$ და $MgZn_2$ ტიპის სტრუქტურის მქონე ფაზების ჰომოგენობის ინტერვალები სამმაგ მაგნიუმის შენადნობებში

სისტემა	სტრუქტურის ტიპი		
	$MgCu_2$	$MgNi_2$	$MgZn_2$
$MgCu_2$ - $MgZn_2$	1,33-1,75	1,83-1,90	1,98-2,00
$MgCu_2$ - $MgAl_2$	1,33-1,73	1,84-1,95	2,03-2,05
$MgCu_2$ - $MgSi_2$	1,33-1,71	1,81-1,89	1,81-2,01
$MgAr_2$ - $MgZn_2$	1,72-1,75	1,78-1,90	1,98-2,00
*ელექტრონული კონცენტრაციის გამოთვლის დროს მიღებული იყო, რომ ატომები ხასიათდება შემდეგი ვალენტობით: Cu, Ag=1; Mg, Zn=2; Al=3; Si=4			

გენობის ინტერვალი ელექტრონული კონცენტრაციით $MgCu_2$, $MgZn_2$ და $MgNi_2$ ტიპის სტრუქტურებისათვის არის მოცემული.

აღსანიშნავია, რომ ყოველ სისტემაში თითოეული სტრუქტურული ტიპისთვის ელექტრონული კონცენტრაციის მაქსიმალური მნიშვნელობები დაახლოებით თანაბარია. ეს საშუალებას იძლევა ვივარაუდოთ, რომ ენერგეტიკული ზონების შესავსებად ნებადართული მდგომარეობების სრულიად განსაზღვრული რიცხვი არსებობს. ელექტრონების დამატებისას ახალი სტრუქტურის ჩამოყალიბება მოხდება.

ლავის ფაზები წარმოადგენს განმამტკიცებელ ინტერმეტალურ ფაზებს მხურვალმტკიცე ფოლადებში.

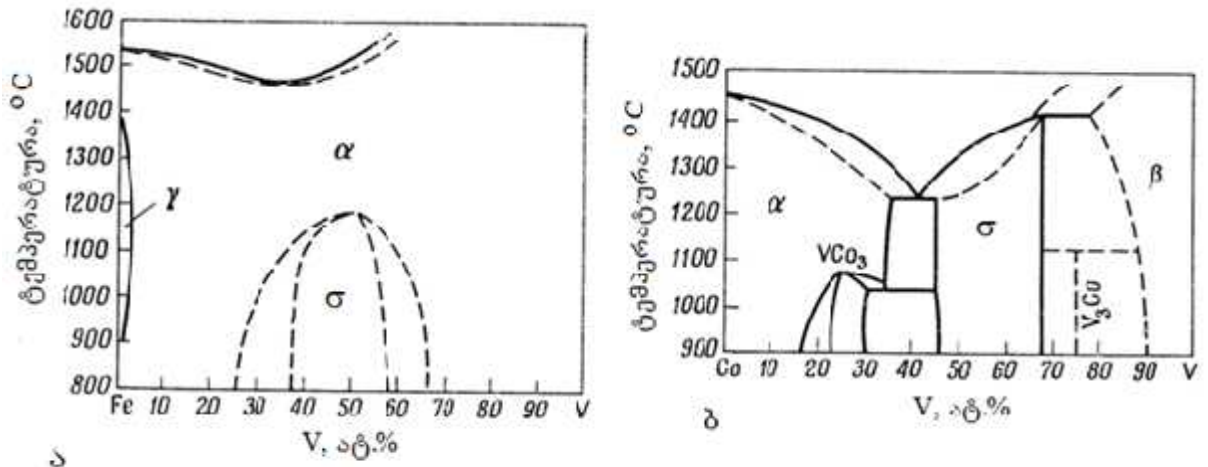
3.3. სიბმა ფაზები. σ -ფაზა რთული ტეტრაგონური გისოსისთ ხასიათდება. იგი ელემენტარულ უჯრედში 30 ატომს შეიცავს და, ჩვეულებრივ, ისეთ სისტემებში წარმოიქმნება, რომლებიც გარდამავალ ლითონებს შეიცავს. σ -ფაზების განსაკუთრებულ თავისებურებას ჰომოგენობის ფართო არის არსებობა წარმოადგენს, თუმცა მათი მდგრადობის ტემპერატურული და კონცენტრაციული ინტერვალი სხვადასხვა სისტემისათვის განსხვავებულია (ცხრილი 3.5, სურ. 3.2).

როგორც 3.2 სურათზე ნაჩვენებია დიაგრამებიდან გამომდინარეობს, σ -ფაზა ერთ შემთხვევაში პირველადი α მყარი ხსნარიდან წარმოიქმნება (ა), ხოლო მეორე

ცხრილი 3.5

ზოგიერთი σ -ფაზის მდგრადობის კონცენტრაციული ინტერვალი

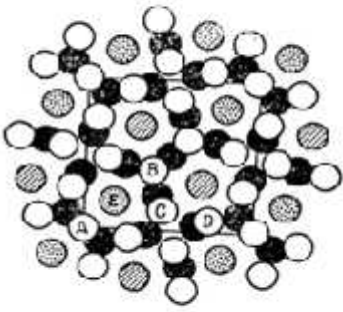
სისტემა	კონცენტრაციული ინტერვალი, ატ%	ტემპერატურა, °C
Cr-Mn	16 - 24 Cr	1000
Cr-Fe	43 - 49 Fe	600
Cr-Co	58,6-63 Cr	1200
Mn-V	13,4-24,5V	1000



სურ. 32. σ -ფაზა Fe-V და Co-V სისტემებში

შემთხვევაში – პერიტექტიკური რეაქციით (ბ) და იგი ოთახის ტემპერატურამდე ინარჩუნებს მდგრადობას. ზოგიერთ სისტემაში კი, როგორცაა, მაგალითად, Nb-Re, დაბალ ტემპერატურაზე იგი დაშლას განიცდის.

σ -ფაზის ელემენტარულ უჯრედში 30 ატომის განსათავსებლად ხუთი არაეკვივალენტური ტიპის მდგომარეობა არსებობს: **a**, **f**, ic, id და. თუ σ -ფაზის გისოსში ამ მდგომარეობებში განთავსებულ ატომებს შესაბამისად A, B, C, D და E სიმბოლოებით აღვნიშნავთ, მაშინ აღმოჩნდება, რომ ორი A ატომი იკავებს **a** მდგომარეობას, ოთხი B ატომი – **f** მდგომარეობას, რვა C ატომი – ic მდგომარეობას, რვა D ატომი – id მდგომარეობას დაბოლოს, რვა E ატომი – j მდგომარეობას. ატომები



სურ. 3.3. σ -ფაზის სტრუქტურის პროექცია (001) სიბრტყეზე

შრეებად არის განლაგებული და სტრუქტურას დიდი მსგავსება აქვს მჭიდრო პექსაგონურ გისოსთან (იხ. სურ. 3.3). თუმცა, მჭიდრო პექსაგონური სტრუქტურის თვალთახედვიდან გამომდინარე, ზოგიერთი ატომი დაძრულია ბაზისის სიბრტყეებიდან ფენებს შორის შუალედურ მდგომარეობაში, რაც ატომების წყობის საერთო გაუმჯობესებას განაპირობებს.

არსებობს რაღაც გაურკვეველობა ზემოთ აღნიშნული ხუთი ტიპის კრისტალოგრაფიულ მდგომარეობებს შორის, ატომების განაწილების თვალსაზრისით. σ -ფაზების ჰომოგენობის ფართო არეების არსებობა საშუალებას იძლევა ვივარაუდოთ, რომ ატომების ნაწილი სტატისტიკურად არის განაწილებული და რომ ზომითი ფაქტორი მნიშვნელოვან როლს თამაშობს ასეთი ფაზების წარმოქმნაში. თუმცა ნეიტრონების დიფრაქციის შესწავლის შედეგებმა დადასტურა ზოგიერთ σ -ფაზაში მოწესრიგებული მდგომარეობა. 3.6 ცხრილში წარმოდგენილია ხუთ სხვადასხვა კრისტალოგრაფიულ სიბრტყეში ატომების განაწილების შესახებ მონაცემები.

ცხრილი 3.6

ატომების მოწესრიგების ხასიათი ზოგიერთ σ -ფაზაში

ატომების მდგომარეობა	Ni-V	Fe-V	Fe-Cr	Co-Cr	Mn-Cr	Mn-Mo	Fe-Mo
A	Ni	Fe	Fe	Co	Mn	Mn	Mo
B	Ni	Fe	Fe	Co	Mn	Mn	Fe
C	V	V	Cr	Cr	Mn, Cr	Mo	Mo
D	Ni, V	Fe, V	Fe, Cr	Co, Cr	Mn, Cr	Mn, Mo	Fe
E	V	Fe, V	Cr	Co, Cr	Mn, Cr	Mn, Mo	Mo

Fe-Cr სისტემის σ -ფაზაში ატომებს შორის მანძილი 2,28 Å შეადგენს, რაც მნიშვნელოვნად მცირეა Fe-Fe უმოკლეს მანძილთან შედარებით α რკინაში (2,48 Å) ან Cr-Cr შორის მანძილი ქრომის გისოსში (2,49 Å). აქედან ცხადი ხდება, რომ აღნიშნული ფაზის წარმოქმნისას კომპონენტების ელექტრონული მდგომარეობა არსებითად იცვლება. ამგვარად, σ -ფაზების წარმოქმნისა და სტაბილიზაციის პროცესზე

როგორც ზომითი, ისე ელექტრონული ფაქტორი ახდენს გავლენას. ამასთან, ერთ შემთხვევაში უპირატეს მნიშვნელობას პირველი მათგანი ღებულობს, ხოლო სხვა შემთხვევაში – მეორე. ექსპერიმენტული მონაცემები ადასტურებს ორივე ფაქტორის არსებით როლს სიგმა ფაზების ჩამოყალიბების პროცესში. აქვე აღსანიშნავია, რომ σ -ფაზა შეიძლება გამოჩნდეს სამმაგ სისტემაში მაშინ, როდესაც იგი არ წარმოიქმნება შემადგენელი კომპონენტების ორმაგ სისტემაში. ზოგიერთი σ -ფაზის სტაბილურობის ტემპერატურული ინტერვალი მცირდება კომპონენტების ატომების რადიუსების გაზრდისას, მაგრამ შეიძლება გაფართოვდეს მესამე კომპონენტის დამატებით.

3.4. ჩანერგვის შუალედური ფაზები. მცირე კოვალენტური რადიუსის მქონე არალითონებმა – წყალბადმა ($0,53 \text{ \AA}$), ბორმა ($0,80 \text{ \AA}$), ნახშირბადმა ($0,77 \text{ \AA}$) და აზოტმა ($0,74 \text{ \AA}$) მრავალ ლითონთან და, განსაკუთრებით გარდამავალ ელემენტებთან ურთიერთქმედებისას, შეიძლება როგორც განსაზღვრული ხსნადობის ჩანერგვის მყარი ხსნარები, ისე შუალედური ფაზები წარმოქმნან. ნაჩვენებია, რომ თუ გარდამავალ ლითონებთან შენადნობებში არალითონისა და ლითონის ატომური რადიუსების თანაფარდობა $r/R < 0,59$, ჩამოყალიბებული მყარი ხსნარები ან შუალედური ფაზები მარტივი სტრუქტურით უნდა ხასიათდებოდეს. შუალედურ ფაზებში ლითონის ატომები M , ჩვეულებრივ, კუბურ წახნაგდაცენტრებულ, კუბურ სივრცით დაცენტრებულ, მჭიდრო პექსაგონურ ან უბრალო პექსაგონურ გისოსებს წარმოქმნიან, ხოლო არალითონის ატომები X ლითონის ატომებს შორის სიცარიელეებში (ფორებში) განთავსდებიან. შედეგად წარმოიქმნება მეტად მჭიდრო, ახალი ტიპის კრისტალური გისოსი დიდი საკოორდინაციო რიცხვით, რომელიც განსხვავებულია ძირითადი ლითონის გისოსისაგან.

ჩანერგვის ფაზების შედგენილობა, რომლებსაც ზემოთ აღნიშნული ერთ-ერთი უბრალო სტრუქტურა გააჩნია, ხასიათდება თანაფარდობით, რომელიც ახლოს დგას სტეკიომეტრიულ პროპორციასთან M_4X , M_2X , MX და MX_2 . თუ ატომების რადიუსების თანაფარდობა აღემატება $0,59$ -ს, უფრო რთული სტრუქტურები წარმოიქმნება, რადგან სიცარიელეების ზომები არასაკმარისი აღმოჩნდება არალითონის ატომების განთავსებისათვის, რაც სტრუქტურის დამახინჯებას განაპირობებს.

წახნაგდაცენტრებულ კუბურ და მჭიდრო პექსაგონურ გისოსებში ორი ხარის-

ხის სიცარიელე არსებობს – ტეტრაედრული და ოქტაედრული (იხ. ქვეთავი 1.3.3). მოცემული ფორის საკოორდინაციო რიცხვს ცენტრიდან თანაბარ მანძილზე განთავსებული მისი გარემომცველი სფეროების რიცხვი წარმოადგენს. თუ ფორას სფეროს სახით წარმოვიდგენთ, მაშინ მისი გარემომცველი სფეროების ჯგუფი საკოორდინაციო პოლიედრს წარმოქმნის. ტეტრაედრული ფორებისათვის საკოორდინაციო პოლიედრი იქნება ტეტრაედრი, ხოლო ოქტაედრული ფორებისათვის – ოქტაედრი. სივრცით დაცენტრებულ კუბში, რომელიც მჭიდრო გისოსს არ მიეკუთვნება, არსებობს ექვსი არაწესიერი ოქტაედრული სიცარიელე, რომლებიც განთავსებულია ელემენტარული უჯრედის კუბის წახნაგების ცენტრში, აგრეთვე რვა არაწესიერი ტეტრაედრული სიცარიელე.

ტიტანი, ცირკონიუმი, ჰაფნიუმი, ვანადიუმი, ნიობიუმი და ტანტალი MX შედგენილობის სტაბილურ კარბიდებსა და ნიტრიდებს იძლევა. ამასთან, ლითონის ატომები წარმოქმნის წახნაგდაცენტრებულ კუბურ გისოსს, ხოლო უფრო მცირე ნახშირბადის ან აზოტის ატომები ადგილს იკავებს ყველა ოქტაედრულ სიცარიელეში. შედეგად წარმოიქმნება NaCl-ის იდენტური სტრუქტურა, ანუ ერთმანეთში ჩადგმული ორი წახნაგდაცენტრებული კუბური გისოსი.

გამოთქმულია ვარაუდი იმის შესახებ, რომ NaCl ტიპის სტრუქტურის მქონე ფაზებში კავშირი ლითონი-მეტალოიდი ნაწილობრივ კოვალენტურია. სისაღისა და დნობის ტემპერატურის მაღალი მნიშვნელობები ადასტურებს ამ ტიპის კავშირების არსებობას.

3.7 ცხრილში წარმოდგენილია ტიპური ჩანერგვის ფაზები და მათი დნობის ტემპერატურები.

ცხრილი 3.7.

ზოგიერთი ჩანერგვის ფაზა

ნაერთი	დნობის ტემპერატურა, °C	ნაერთი	დნობის ტემპერატურა, °C
TiC	3150	NbC	3500
TiN	2940	NbN	2200
VC	2200	HfC	3900
ZrC	3530	TaC	3900
ZrN	2980	TaN	3087

შუალედური ჩანერგვის ფაზების კრისტალური სტრუქტურის ბუნებიდან გამომდინარე, ჰომოგენობის ფართო არეა მოსალოდნელი. მართლაც, მონოკარბიდები შეიძლება ფართო კონცენტრაციის ინტერვალში არსებობდეს. ამ შემთხვევაში წარმოიქმნება დეფექტური სტრუქტურები, რომელშიც მეტალოიდის ატომები მოუწესრიგებლად იკავებენ ადგილებს ოქტაედრულ სიცარიელებში. მაგალითად, TiC ნაერთის ჰომოგენობის არე ვრცელდება $\text{TiC}_{0.8}$ -დან TiC -მდე. ვანადიუმის კარბიდი, რომელსაც NaCl ტიპის სტრუქტურა აქვს, შენარჩუნებულია შემაღლებლობის ზღვრებში $\text{VC}_{0.75}$ -დან VC -მდე.

ცნობილია აგრეთვე მოწესრიგებული შუალედური ჩანერგვის ფაზები, სადაც მეტალოიდის ატომები ადგილს მხოლოდ გარკვეულ ფორმებში იკავებს. მაგალითად, γ -რკინაში, რომელსაც წახნაგდაცენტრებული კუბური კრისტალური გისოსი აქვს, 10%-მდე აზოტი იხსნება, რომლის ატომები მოუწესრიგებლად იკავებს ადგილს ოქტაედრულ ფორმებში. 590°C -ზე აღნიშნული მყარი ხსნარი ევტექტოიდურ დაშლას განიცდის α და γ' ფაზების წარმოქმნით. γ' წარმოადგენს მოწესრიგებულ γ ფაზას, რომლის სტრუქტურაშიც აზოტის ატომები სრულიად განსაზღვრულ ადგილებს იკავებს ოქტაედრულ სიცარიელებში. ეს სიცარიელები ელემენტარული უჯრედების ცენტრში მდებარეობს, ხოლო ასეთ პირობებში ჩამოყალიბებული ნიტრიდი ახლოს დგას შედგენილობასთან Fe_4N და გამოირჩევა ჰომოგენობის ვიწრო ინტერვალით.

ჩანერგილი ატომები (C, N, H) არ მიეკუთვნება ან ძლიერ ელექტროუარყოფით, ან ელექტროდადებით ელემენტებს. აქედან გამომდინარე, უფრო ელექტროდადებით ლითონებთან შეიძლება მათ შუალედური ფაზები წარმოქმნან, რომლებიც თავისი ბუნებით იზოლატორს წარმოადგენენ (მაგალითად, CaC_2). ხოლო იმ ელემენტებთან, რომლებიც არ მიეკუთვნება ძლიერ ელექტროუარყოფით ან ელექტროდადებით ელემენტებს, შეიძლება წარმოქმნან ნახევრად გამტარული თვისებების მქონე ფაზები (მაგალითად, SiC).

4. დეფექტები კრისტალში

გეომეტრიული ნიშნის მიხედვით, კრისტალური აღნაგობის დეფექტებს (არასრულყოფილებებს) წერტილოვან (ნულგანზომილებიან), ხაზოვან (ერთგანზომილებიან), ზედაპირულ (ორგანზომილებიან) და მოცულობით (სამგანზომილებიან) დეფექტებად ყოფენ.

წერტილოვანი დეფექტები მეტად მცირე ზომისაა სამივე განზომილებაში. მათი ზომები ნებისმიერი მიმართულებით ატომის დიამეტერს არ აღემატება. წერტილოვან დეფექტებს მიეკუთვნება ვაკანსია, კვანძებსშორისი ატომი, მინარევი ატომი და მათი კომპლექსები.

ხაზოვანი დეფექტების ზომები ატომის დიამეტრის რიგისაა ორ განზომილებაში, მესამეში კი მათი სიდიდე მნიშვნელოვნად მეტია. იგი შეიძლება კრისტალის სიგრძის თანაზომადიც კი აღმოჩნდეს. ხაზოვან დეფექტებს მიეკუთვნება დისლოკაცია, ვაკანსიებისა და კვანძებსშორისი ატომების ჯაჭვი.

ზედაპირული, კერძო შემთხვევაში ბრტყელი დეფექტები, მცირე ზომას მხოლოდ ერთი მიმართულებით ინარჩუნებენ. ასეთებია მარცვლის, ბლოკებისა და ორეულების საზღვრები, წყობის დეფექტები, დომენების საზღვრები ზესტრუქტურაში.

წერტილოვანი, ხაზოვანი და ზედაპირული დეფექტები მიკროსკოპულს წარმოადგენენ მინიმუმ ერთ განზომილებაში, სადაც მათი განფენილობა ატომური დიამეტრებით იზომება. მათგან განსხვავებით მოცულობითი დეფექტები ატომურ მასშტაბში მაკროსკოპულია – მათ სამივე განზომილებაში შედარებით უფრო დიდი ზომები აქვთ. მოცულობით დეფექტებს ფორები, ბზარები და ნაკაწრები მიეკუთვნება. როდესაც ლითონური კრისტალების არასრულყოფილებაზე მსჯელობენ, უმეტეს შემთხვევაში, მიკროსკოპული დეფექტები აქვთ მხედველობაში.

კრისტალის დამახინჯებას, რაც თბურ რხევებთან ან დრეკად დეფორმაციებთან არის დაკავშირებული, რომლებიც რეალურ კრისტალს იდეალურისგან განასხვავებენ, დეფექტურს არ მიაკუთვნებენ. ამგვარად, საჭიროა ერთმანეთისგან განვასხვავოთ: იდეალური კრისტალი, რომელიც გაყინულ სქემას წარმოადგენს და სადაც უძრავი ატომები წერტილების სწორ სისტემას წარმოქმნიან; რეალური სრულყოფილი კრისტალი, სადაც ყოველი რხევაში მოსული ატომის გარშემო განთავსებული ატომების განლაგება იდეალურს შეესაბამება; რეალური არასრულყოფილი

კრისტალი, რომელიც წერტილოვან, ხაზოვან, ზედაპირულ ან მოცულობით დეფექტებს, ან ერთ-ერთ მათგანს მაინც შეიცავს.

4.1. წერტილოვანი დეფექტები. მყარ სხეულში წერტილოვანი დეფექტები შეიძლება ორ ჯგუფად დაიყოს: მინარევი (უცხო ატომი) და საკუთარი დეფექტები. წერტილოვანს მიეკუთვნება აგრეთვე ისეთი დეფექტები, რომლებიც სხვადასხვასახელიანი რამდენიმე ატომისგან, ან მინარევი ატომებისა და საკუთარი წერტილოვანი დეფექტებისგან არის შედგენილი. აღსანიშნავია, რომ წერტილოვანი დეფექტების მაქსიმალური ზომა ნებისმიერ განზომილებაში არ აღემატება რამდენიმე ატომთშორის მანძილს.

მინარევი ატომები მყარი ტანის ელექტრულ, ოპტიკურ, მაგნიტურ, თბურ და მექანიკურ თვისებებზე ახდენენ გავლენას. საკუთარი დეფექტების წონასწორული კონცენტრაცია, ზოგიერთ შემთხვევაში, მინარევების კონცენტრაციაზეა დამოკიდებული.

ლითონების უმრავლესობაში საკუთარი დეფექტების უმარტივეს და ძირითად სახეს, რომელიც თბურ წონასწორობაში იმყოფება, ვაკანსია მიეკუთვნება. იგი წარმოადგენს სიცარიელეს კრისტალური გისოსის კვანძში. ვაკანსიის წარმოსაქმნელად საჭირო ენერგია ბევრად უფრო მცირეა კვანძებსშორისი ატომების წარმოსაქმნელად საჭირო ენერგიასთან შედარებით, ამიტომ თბურ წონასწორობაში მყოფი სრულყოფილი კრისტალის მოცულობაში ვაკანსია არ შეიძლება უბრალოდ ჩაისახოს „ვაკანსია-კვანძებსშორისი ატომი“ წყვილის წარმოქმნის გზით. მათი ჩასახვა უნდა მოხდეს შესაბამისი წყაროს არსებობის პირობებში და დიფუნდირდებოდეს გისოსის სრულყოფილ მოცულობაში, რათა წყაროსგან მოცილებულ არეებში შენარჩუნდეს ვაკანსიების წონასწორული კონცენტრაცია.

ვაკანსიის წყაროს კრისტალის თავისუფალი ზედაპირი წარმოადგენს, სადაც ატომების ნორმალური რხევა ყველაზე უფრო ნაკლებად არის გაძნელებული. ვაკანსიის ჩასახვის არსებით წყაროს შეიძლება მივაკუთვნოთ აგრეთვე მარცვლის საზღვრები, სადაც ატომების მოწესრიგებული განლაგება ძლიერ არის დამახინჯებული.

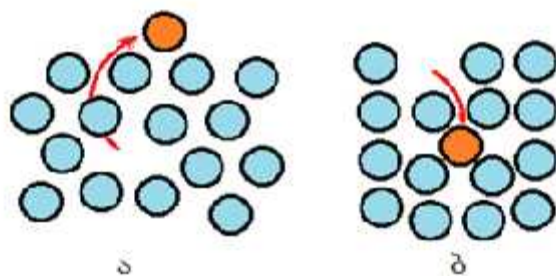
ამჟამად თვლიან, რომ წერტილოვანი დეფექტების წონასწორულ კონცენტრაციას მნიშვნელოვნად განსაზღვრავს დისლოკაციის გადაცოცების უნარი. ამ პროცესის მამოძრავებელი ძალა, რომელიც დისლოკაციის ერთეულ სიგრძეზე მოქმედებს, დაახლოებით $(kT/b^2) \cdot \ln(N/N_0)$ სიდიდეს შეადგენს, სადაც b არის დისლოკაციის

ბიურგერის ვექტორი, N_0 – წონასწორული, ხოლო N – რეალური წერტილოვანი დეფექტების კონცენტრაცია. ვარაუდობენ, რომ როგორც კიდურა, ისე ხრახნული დისლოკაციების გადაცოცებას თან სდევს წერტილოვანი დეფექტების ან გაჩენა, ან შთანთქმა, რაც შესაბამისად იმაზეა დამოკიდებული, გადარიბებულია თუ გადაჯერებული მასალა დეფექტებით. იმ მოსაზრებას, რომ ვაკანსიის წყარო შეიძლება იყოს დისლოკაცია, ზოგიერთი მკვლევარი ეთანხმება, თუმცა დაუდასტურებელი ექსპერიმენტული მონაცემების გამო, ზოგიერთი ამ აზრს უარყოფს.

ვაკანსიის წარმოქმნის დროს ატომი შეიძლება კრისტალის ზედაპირზე (სურ. 4.1. ა) ან კრისტალში არსებულ რომელიმე საზღვარზე გადავიდეს. ასეთ პირობებში წარმოქმნილ ვაკანსიას შოტტკის დეფექტს უწოდებენ. როგორც ჩანს, მოცემულ შემთხვევაში, დეფექტური კრისტალი იგივე რაოდენობის ატომებს შეიცავს, რამდენსაც იდეალური. აღძრული დრეკადი დეფორმაციის გამო, ვაკანსიის გარემომცველი ატომები ფორის ცენტრისკენ იძვრება და ნაწილობრივ ავსებს წარმოქმნილ სიცარიელეს, რაც კრისტალური გისოსის დამახინჯებას იწვევს. დრეკადი დეფორმაცია $1/R^3$ ფარდობის პროპორციულია, სადაც R არის ვაკანსიის ცენტრიდან მეზობელ ატომამდე მანძილი. აქედან გამომდინარე, სივრცით დაცენტრებულ კუბში ვაკანსიის მოცულობა ატომის მოცულობის 50-60%-ს შეადგენს

დაეუშვათ, ატომები კრისტალურ გისოსში ხისტად არიან დამაგრებული და კრისტალის მოცულობიდან ატომის ამოსაგდებად საჭიროა რაღაც E_v ენერგია. ამასთან, ვთქვათ, კრისტალის ზედაპირზე ატომის ამოსვლას თან სდევს E_s ენერგიის გამოყოფა. ასეთ პირობებში ხისტ გისოსში ერთი ვაკანსიის წარმოქმნაზე დაიხარჯება $E_v - E_s \approx 10$ ევ. რადგან გისოსი რეალურად ხისტი არ არის, აღნიშნული ენერგიის ნაწილი კომპენსირდება გისოსის რელაქსაციით – ცარიელი კვანძის მეზობელი ატომები რამდენადმე დაიძვრება და შეამცირებს სიცარიელის მოცულობას.

იონურ ნაერთებში ვაკანსიის წარმოქმნის შემთხვევაში, იმ მოცულობაში, რომელიც გარს ერტყმის ვაკანტურ კვანძს, ელექტროსტატიკური ნეიტრალურობის პირობა უნდა შესრულდეს. ელექტროსტატიკური ნეიტრალურობა კი იმ შემთხვევაში იქნება შენარჩუნებული, თუ ვაკანსიები სხვადასხვა ნიშნის შესაბამისი ატომებით წარმოიქმნება ისეთი თანაფარდობით, რომელიც კრისტალში ქიმიურ სტექიომეტრიულ პროპორციას არ დაარღვევს (განწესრიგება შოტტკის მიხედვით). მაგალითად,



სურ. 4.1. დეფექტების წარმოქმნის სქემა კრისტალში
 ა - ვაკანსია; ბ - კვანძებს შორის ატომი

შოტტკის მიხედვით განწესრიგების დროს RbF -ის კრისტალში Rb^+ იონების ვაკანსიების რიცხვი F^- იონებით წარმოქმნილი ვაკანსიების რიცხვის ტოლია.

დადგენილია, რომ შოტტკის მიხედვით, განწესრიგება რეალიზდება მხოლოდ ისეთ ბინარულ ნაერთებში, რომელთა კომპონენტებს შორის თანაფარდობაა 1:1. ამიტომ ტერმინი „დეფექტი შოტტკის მიხედვით“ გულისხმობს აგრეთვე ვაკანსიის წყვილს ურთიერთსაწინააღმდეგო ნიშნებით. ამასთან, არ არის აუცილებელი დეფექტის კომპონენტები კრისტალში ერთმანეთთან უშუალო მახლობლობაში მდებარეობდეს.

არ არის გამორიცხული, რომ თავისი რეგულარული მდგომარეობიდან ამოვარდნილმა ატომმა კრისტალური გისოსის მოცულობაში, მის კვანძებს შორის დაიკავოს ადგილი. მას კვანძებს შორის ატომი ეწოდება (სურ. 4.1, ბ). კრისტალური გისოსი ამ შემთხვევაშიც დეფორმირდება, რათა მოხდეს კვანძებს შორის სივრცეში ატომის ჩანერგვა. დეფექტების წყვილს – „ვაკანსია+კვანძებს შორის ატომი“, ფრენკელის დეფექტი ეწოდება.

უნდა ვივარაუდოთ, რომ იმ ატომის ენერგია, რომელიც გისოსის კვანძებს შორის განთავსდება, იმდენად მაღალია, რომ თავისთავად ასეთი აქტის განხორციელება მეტად იშვიათად არის შესაძლებელი. ეს იმით აიხსნება, რომ კრისტალური გისოსის კვანძებს შორის სივრცე მეტად მცირეა ატომის ზომებთან შედარებით. აქედან გამომდინარე, ასეთ მცირე მოცულობაში ზედმეტი ატომის ჩანერგვას თანსდევს გისოსის მნიშვნელოვანი ადგილობრივი დამახინჯება. ასეთი ტიპის დამახინჯებისათვის და, ზოგადად, კრისტალში არაწონასწორული დეფექტების შეტანისათვის აუცილებელი ენერგიის წყარო შეიძლება აღმოჩნდეს პლასტიკური დეფორმაცია, ატომების შეჯახება მაღალი ენერგიის ნაწილაკებთან („რადიაციული დაზიანება“),

მაღალი ტემპერატურიდან წრთობა, აგრეთვე სტექიომეტრული შედგენილობიდან გადახრა ზოგიერთ ინტერმეტალურ ნაერთში. თუ დასხივების პროცესში მაღალი ენერგიის ნაწილაკთან შეჯახებისას გისოსის ატომი ღებულობს რაღაც E_p ენერგიას, რომელიც აღემატება ძვრის E_d ენერგიას, ატომი ტოვებს კრისტალურ გისოსში მისთვის განკუთვნილ ადგილს და წარმოიქმნება წყვილი: დაძრული (კვანძებშორისი) ატომი და მის მიერ კრისტალურ გისოსში გამოთავისუფლებული ადგილი – ვაკანსია (ფრენკელის „წყვილი“).

ნეიტრონებითა და პროტონებით დასხივების შემთხვევაში სამართლიანია შემდეგი თანაფარდობა: $E_{p\max} = 4EMm/(M+m)^2$, სადაც E და m არის დაცემული ნაწილაკის ენერგია და მასა, ხოლო M – ატომის მასა. 1 მევ ენერგიის მქონე ერთი ნეიტრონი ალუმინის 10^{-6} მ³ მოცულობაში დაახლოებით 6000 ფრენკელის წყვილს წარმოქმნის.

როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, კრისტალურ გისოსში ატომის გადანაცვლება იმ შემთხვევაში მიმდინარეობს, როდესაც $E_p > E_d$. მყარი სხეულების უმრავლესობისათვის E_d ღებულობს მნიშვნელობებს 10-დან 30 ევ-მდე.

კვანძებშორისი ატომი იმ შემთხვევაშიც წარმოიქმნება, როდესაც ატომი (ან იონი) ზედაპირიდან კრისტალის მოცულობაში, გისოსის კვანძებს შორის დაიკავებს ადგილს (სურ. 4.1, ბ.). კვანძებშორისი ატომის გარშემო კრისტალური გისოსი ან შეიკუმშება, ან გაფართოვდება. პრაქტიკულად შეუძლებელია ატომის განთავსება მჭიდროდწყობილ, მაგალითად, სპილენძის წახნაგდაცენტრებულ კუბურ ან თუთიის მჭიდრო ჰექსაგონურ სტრუქტურაში, თუმცა ალმასის ტიპის ნაკლებად შევსებულ გისოსში რამდენიმე პოზიცია არსებობს, რომელშიც შესაძლებელია საკუთარი ან მინარევი კვანძებშორისი ატომის ჩანერგვა, რაც ახლო მეზობლების უმნიშვნელო გადანაცვლებას გამოიწვევს. კვანძებს შორის დადებითი ან უარყოფითი იონების ერთდროული განთავსება სტექიომეტრული პროპორციის დაცვით ნაკლებად სააღბათოა. მაგალითად, NaCl-ის გისოსის კვანძებს შორის შეიძლება Na^+ იონები ჩაინერგოს, მაგრამ Cl^- იონების ზომები საამისოდ მეტად დიდია.

ვაკანსია და კვანძებშორისი ატომი კრისტალში შეიძლება წარმოიქმნას ატომების თბური რხევების გამო ნებისმიერ ტემპერატურაზე, რომელიც აბსოლუტურ ნულს აღემატება. კრისტალების უმრავლესობისათვის ერთი ვაკანსიის წარმოსაქმნელად 1–2 ევ ენერგიაა საჭირო, ხოლო კვანძებშორისი ატომების წარმოსაქმნელად –

5–6 ევ. ამიტომ მოცემულ ტემპერატურაზე ვაკანსიების რიცხვი ყოველთვის მეტია კვანძებშორის ატომებთან შედარებით. ასე მაგალითად, როდესაც ვაკანსიების რიცხვი ატომების 0,01%-ს შეადგენს, კვანძებშორის ატომი 10^{20} -ჯერ ნაკლებია.

ოთახის ტემპერატურაზე ვაკანსიების რიცხვი მეტად მცირეა ატომების საერთო რიცხვთან შედარებით და 10^{18} ატომზე მხოლოდ ერთი ვაკანსია მოდის. მათი კონცენტრაცია მკვეთრად იზრდება ტემპერატურის მატებასთან ერთად და ღნობის წერტილის მახლობლობაში ერთი ვაკანსია მოდის 10^4 ატომზე. თუ გახურებულ კრისტალს სწრაფად გავაცივებთ, ვაკანსიები „გაიყინება“ და დაბალ ტემპერატურაზე კრისტალში დაფიქსირდება ვაკანსიების ჭარბი რაოდენობა წონასწორულ კონცენტრაციასთან შედარებით.

უცხო, ანუ მინარევის ატომი, ადგილს იკავებს ან კრისტალური გისოსის კვანძებში, სადაც ცვლის ძირითადი ლითონის ატომს, ან კვანძებს შორის ჩაინერგება. უცხო ატომი ყოველთვის არსებობს მინარევის სახით როგორც ტექნიკურად სუფთა, ისე საკმაოდ მაღალი სისუფთავის ლითონებში.

ამგვარად, წერტილოვანი დეფექტები არღვევს როგორც სტრუქტურის პერიოდულობას, ისე ატომებს შორის კავშირის ძალებს და მუხტის ნორმალური განაწილების ხასიათს, რაც იწვევს ლითონის ელექტრული, მაგნიტური და მექანიკური თვისებების შეცვლას.

მაგალითად, საკმარისია ნიკელში 0,005% გოგირდის მინარევის არსებობა, რომ სუფთა მდგომარეობაში ეს პლასტიკური მასალა მყიფედ გადაიქცეს, ხოლო 0,001% წყალბადის ან ნახშირბადის მოხვედრა რკინას გაზრდილ სიმყიფეს ანიჭებს ოთახის ტემპერატურის მახლობლობაში. სუფთა რკინა კი პლასტიკურობას ინარჩუნებს თხევადი ჰელიუმის ($-268,8^{\circ}\text{C}$) ტემპერატურაზეც კი.

მოელ რიგ ნახევრად გამტარებში მინარევების რაოდენობა არ უნდა აღემატებოდეს ერთ მემილიარდედ პროცენტს, ხოლო კრისტალური აგებულება იდეალურს უნდა უახლოვდებოდეს. მაგალითად, თუ გერმანიუმის კრისტალში ყოველ მილიარდ ატომზე მოვა რეგულარული მდგომარეობიდან დაძრული მხოლოდ ერთი ატომი, მაშინ უმარტივესი ტრანზისტორების 80% წუნდებული აღმოჩნდება. საიმედოდ მუშაობს მხოლოდ ის ნახევრად გამტარი, რომლის კრისტალურ გისისში 10^{12} ატომზე უკიდურეს შემთხვევაში ერთი დაძრული ატომი მოვა!

ცნობილია განწესრიგების კიდევ ერთი ტიპი, რომელიც ქიმიური ნაერთის

კრისტალებში გვხვდება. მას ანტისტრუქტურულს უწოდებენ და თავისებურება იმაში მდგომარეობს, რომ კრისტალურ გისოსში ერთსახელა ატომები იკავებს მეორე სახის ატომების ადგილს. ასეთი დეფექტები, მაგალითად, InSb-ის კრისტალში, არ არღვევს სტეკიომეტრიულ პროპორციას იმ შემთხვევაში, თუ ინდიუმის ატომების მიერ დაკავებული სტიბიუმის კვანძების რაოდენობა უტოლდება სტიბიუმის მიერ დაკავებული ინდიუმის კვანძების რაოდენობას. ბუნებრივია, ანტისტრუქტურული დეფექტები მოსალოდნელია მხოლოდ ისეთ კრისტალებში, სადაც შემადგენელი კომპონენტების ატომების ზომები ერთმანეთთან საკმაოდ მიახლოებულია. ამ მოთხოვნის დაკმაყოფილების შემთხვევაში შეიძლება წარმოიქმნას 50-100 ატომისგან შედგენილი, მოუწესრიგებლად განლაგებული კომპლექსები, რომლებიც კრისტალში შედარებით მცირე არეს იკავებენ.

რადგან წერტილოვანი დეფექტის, მაგალითად, ვაკანსიის წარმოსაქმნელად საჭიროა გარკვეული E ენერგიის დახარჯვა, შეიძლება მოგვეჩვენოს, რომ თბური წონასწორობის პირობებში კრისტალში რაღაც რაოდენობით ვაკანსიის არსებობა ენერგეტიკულად არახელსაყრელია. თუმცა ნულისაგან განსხვავებული ვაკანსიების კონცენტრაცია ზრდის სისტემის ენტროპიას და ამცირებს თავისუფალ ენერგიას სრულყოფილ კრისტალთან შედარებით. ვაკანსიების რიცხვი, რომელიც წონასწორობაშია T ტემპერატურაზე, განისაზღვრება ფორმულით:

$$\frac{n}{N-n} = \exp(-E/k) \quad (4.1),$$

სადაც n არის ვაკანსიების წონასწორობითი რაოდენობა; N – კვანძების რიცხვი კრისტალურ გისოსში; E – ერთი ვაკანსიის წარმოსაქმნელად საჭირო ენერგია; k – ბოლცმანის მუდმივა.

თუ n მცირეა N -თან შედარებით, მაშინ (4.1) ტოლობა შემდეგ სახეს მიიღებს:

$$n = N \exp(-E/k) \quad (4.2)$$

ამგვარად, საკუთარი დეფექტების სიმკვრივის ყველა რეალური მნიშვნელობისათვის მათი კონცენტრაცია ექსპონენციალურად არის დამოკიდებული ტემპერატურის შეზღუდულ მნიშვნელობაზე. თუ E -ს მნიშვნელობას 1 ევ-ის ტოლად მივიღებთ (იგი ეფუძნება არაპირდაპირ ექსპერიმენტულ მონაცემებს), მაშინ 1000 K ტემპერატურაზე n/N ფარდობა, ანუ ვაკანსიების კონცენტრაცია, დაახლოებით 10^{-5} შეადგენს. ეს იმას ნიშნავს, რომ კრისტალური გისოსის ყოველ 100000 ადგილზე და-

ახლოებით ერთი ვაკანსია მოდის.

არსებობს საფუძველი ვივარაუდოთ, რომ არ არის გამორიცხული ლითონებში უფრო რთული წერტილოვანი დეფექტების ჩამოყალიბების შესაძლებლობა. მაგალითად, შეიძლება სტაბილურად თანაარსებობდეს ორი ან რამდენიმე სახის ვაკანსია, ან ვაკანსიამ გახსნილ (ჩანერგილ ან ჩანაცვლებულ) ატომებთან ერთობლიობაში მდგრადი დეფექტური წყვილი წარმოქმნას. ასეთი „რთული წერტილოვანი დეფექტების“ დამაჯერებლად არსებობა არ არის დადასტურებული, მაგრამ განიხილება როგორც ფრიად სავარაუდო.

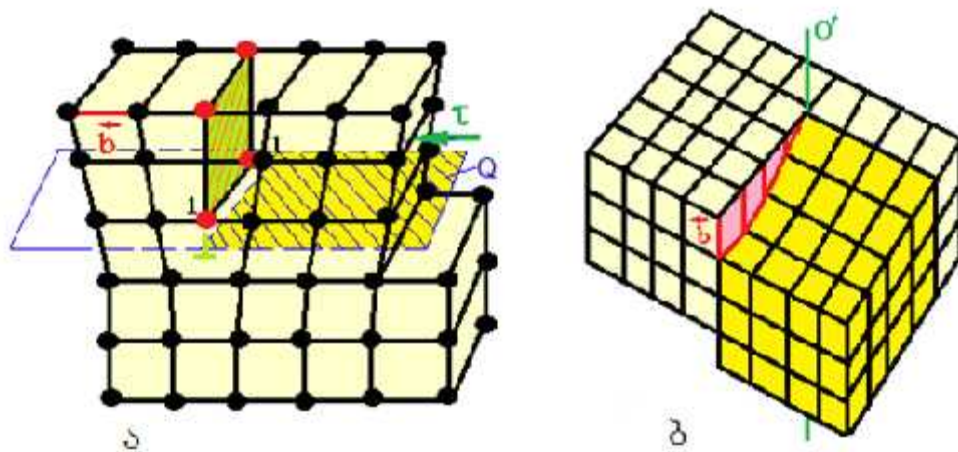
წერტილოვანი დეფექტები მხოლოდ ერთი ან რამდენიმე მეზობელი კვანძის არეში იწვევს კრისტალური გისოსის დამახინჯებას. მართალია, რომელიმე წრფის ან სიბრტყის გასწვრივ შეიძლება ერთდროულად რამდენიმე წერტილოვანი დეფექტი ჩამოყალიბდეს, მაგრამ მათ გააჩნიათ უნარი არსებობდნენ ან გადაადგილდებოდნენ ერთმანეთისგან დამოუკიდებლად. ისინი წერტილოვან დეფექტებად რჩებიან მაშინაც კი, როდესაც რიგში ეწყობიან ან გარკვეული წესრიგით ლაგდებიან ამა თუ იმ სიბრტყეზე.

4.2. დისლოკაცია. დისლოკაცია სტრუქტურის ხაზოვან რღვევას განაპირობებს და არ შეიძლება მისი გაიგივება წერტილოვანი დეფექტებით, მაგალითად, ვაკანსიებით განპირობებულ წრფესთან. დისლოკაციებს კრისტალში ნებისმიერი ფორმა შეიძლება ჰქონდეს, მაგრამ თვალსაჩინოების მიზნით რთული დისლოკაცია განიხილება, როგორც ორი მარტივი, კიდურა და ხრახნული დისლოკაციის ზედდება.

კიდურა დისლოკაციის შემთხვევაში ერთ-ერთი ატომური სიბრტყის (ექსტრასიბრტყის) კიდე კრისტალის შიგნით გადის (სურ. 4.2, ა). კრისტალური გისოსის ძვრის მიმართულება (ბიურგერსის ვექტორი $\vec{b}$) დისლოკაციის წრფის, ანუ ნახევარსიბრტყის ატომების უკანასკნელი რიგის პერპენდიკულარულია. ბიურგერსის ვექტორის სიგრძე გისოსის ვექტორის ერთეულის (პერიოდის) ჯერადია.

ხრახნული დისლოკაციის შემთხვევაში (სურ. 4.2, ბ) გისოსის ერთი ნაწილი მეორის მიმართ დისლოკაციის წრფის პარალელურად არის დაძრული. დაცურების მიმართულება, ბიურგერსის ვექტორი და დისლოკაციის ღერძი ურთიერთპარალელურია.

როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, დისლოკაცია კრისტალში კიდურა და ხრახ-



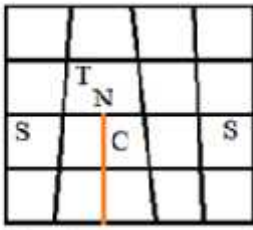
სურ. 4.2. ორი მარტივი ტიპის დისლოკაციის სქემა
ა - კიდეურა; ბ - სრასხნული

ნული კომპონენტების ზედდებით წარმოქმნილი დეფექტია. ამასთან, მათი თანაფარდობა იცვლება დისლოკაციის კიდის გასწვრივ, ბიურგერის ვექტორი კი უცვლელად არის შენარჩუნებული მის მთელ სიგრძეზე. დისლოკაცია არ შეიძლება კრისტალში გაწყდეს. მან შეიძლება მიიღოს შეკრული მარყუჟის ფორმა, დამთავრდეს კრისტალის თავისუფალ ზედაპირზე ან მარცვლის საზღვარზე. მასალების უმრავლესობაში მარცვლის საზღვარზე გამოსული დისლოკაციები არის ერთადერთი ადგილი, სადაც დისლოკაციის „დანახვა“ შესაძლებელია.

დისლოკაციის სიმკვრივე N_D სმ^{-2} კრისტალის სრულყოფილებას ახასიათებს. მთელი რიგი პირობების დაცვით შესაძლებელია, მაგალითად, გერმანიუმისა და სილიციუმის კრისტალების გაზრდა დისლოკაციის სიმკვრივით $N_D < 100 \text{ სმ}^{-2}$, თუმცა მათთვის უფრო ტიპური მნიშვნელობაა $N_D < 10^4 \text{ სმ}^{-2}$. ლითონურ კრისტალებში დისლოკაციის სიმკვრივე, ჩვეულებრივ, არ არის 10^7 სმ^{-2} -ზე ნაკლები.

როგორც ცნობილია, კრისტალური აგებულება ყალიბდება ატომების მოწყობილი განლაგებით კრისტალურ გისოსში, რის გამოც მისი თავისუფალი ენერგია მინიმალურია. აქედან გამომდინარე, დისლოკაციით დამახინჯებული კრისტალის ენერგია მეტი უნდა იყოს იდეალური კრისტალის ენერგიასთან შედარებით. ეს საფუძველს იძლევა ვიმსჯელოთ დისლოკაციის ენერგიაზე. ვარაუდობენ, რომ ეს სიდიდე 1 ევ-ის რიგისაა ყოველი ატომური სიბრტყისათვის.

დისლოკაციის ენერგია კრისტალის დეფორმაციის პროპორციულია. კიდეურა დისლოკაციის შემთხვევაში (სურ. 4.3) კრისტალში არსებობს როგორც შეკუმშული



სურ. 4.3. დრეკადი დეფორმაციის
ქვი კიდურა დისლოკაციის
მახლობლობაში

უბნები C, სადაც ყოველი ატომი ჩვეულებრივ მდგომარეობასთან შედარებით უფრო მცირე სივრცეს იკავებს, ისე გაჭიმული უბნები T, რომელშიც თითოეულ ატომზე მოსული სივრცე უფრო მეტია, ვიდრე არადეფორმირებულ გისოსში. გარდა ამისა, არსებობს ძვრით განპირობებული დეფორმაციის უბნები S, სადაც იცვლება კუთხეების სიდიდე. დაბოლოს, არსე-

ბობს N უბანი, სადაც არ შეიძლება დეფორმაცია შევაფასოთ, როგორც იდეალური კრისტალის დეფორმაცია, რადგან აქ უახლოესი მეზობელი ატომების რაოდენობა და ატომთა შორის მანძილები განსხვავებულია იდეალურ კრისტალთან შედარებით.

დისლოკაციის ენერგია T მისი l სიგრძის პროპორციულადაც იცვლება. ეს დაკავშირებული უნდა იყოს დისლოკაციის გამჭიმავ ძალასთან. აღნიშნული წრფივი გამჭიმავი ძალის სიდიდე განისაზღვრება დამოკიდებულებით:

$$T \approx G\bar{b}^2, \quad (4.3)$$

სადაც G არის ძვრის მოდული, ხოლო $\bar{b}$ – ბიურგერის ვექტორი.

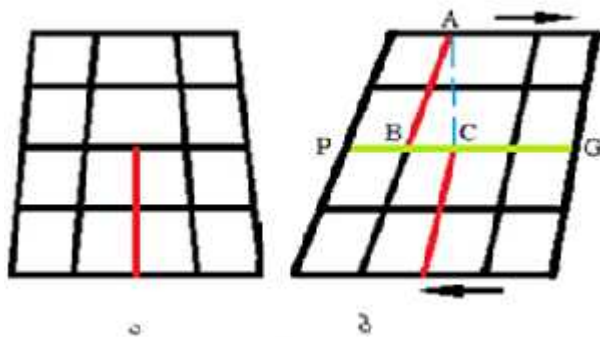
დისლოკაცია განაპირობებს კრისტალური გისოსის დრეკად დამახინჯებას და ზრდის მის ენერგიას. დისლოკაციის ენერგიას განსაზღვრავენ ფორმულით:

$$E_D = a b^2 l, \quad (4.4)$$

სადაც $a=0,5-10$.

მექანიკური დაძაბულობა კრისტალში დისლოკაციის ძვრადობის უნარს განაპირობებს. დისლოკაციის გადაადგილება მანამ გრძელდება, სანამ იგი არ დამუხრუჭდება მინარევ ატომებთან, აგრეთვე სხვა დისლოკაციებთან მისი ურთიერთქმედებით (დეფორმაციული განმტკიცება). კრისტალში დისლოკაციის მდგომარეობის შეცვლის ორი ძირითადი შესაძლებლობა არსებობს: ამხლენი ძალის ზემოქმედება (დაცურება) ან გადაცოცება.

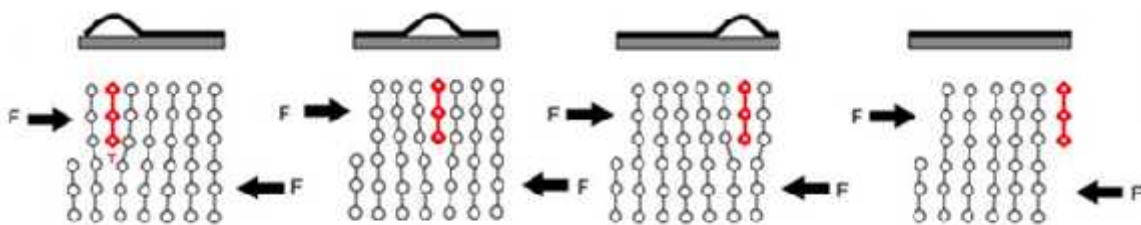
დაცურების მექანიზმში გასარკვევად განვიხილოთ 4.4 სურათზე წარმოდგენილი სქემა. თუ კიდურა დისლოკაციაზე (სურ. 4.4, ა) ამხლენი ძალა მოქმედებს 4.4 ბ სურათზე ისრით ნაჩვენები მიმართულებით, გისოსი დეფორმირდება. როდესაც AB წრფე AC დგომარეობაში გადაადგილდება, დრეკადი დეფორმაცია მოიხსნება. ეს C-დან B მდგომარეობაში დისლოკაციის გადასვლის ტოლფასი აღმოჩნდება, რაც კრი-



სურ. 4.4. დაცურების მექანიზმით დისლოკაციის მოძრაობის სქემა

სტალის ძერის მექანიზმით დეფორმაციას განაპირობებს. 4.5 სურათზე წარმოდგენილია დისლოკაციის გადაადგილებისა და ენერგიის ხარისხობრივი ცლილების სქემა, რაც საბოლოო ჯამში დისლოკაციის კრისტალის გარეთ გამოსვლით მთავრდება.

დაცურების სიბრტყის (Q , სურ. 4.2)

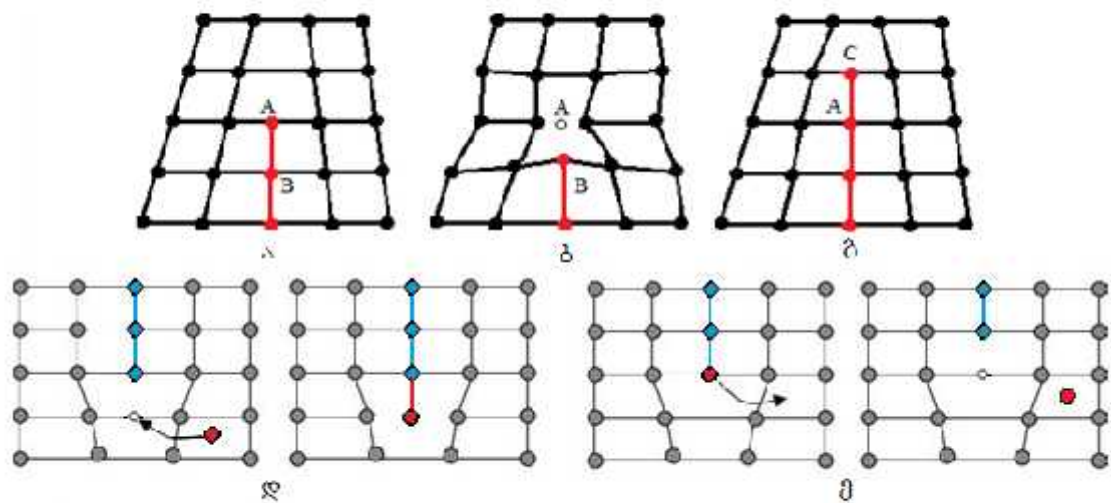


სურ. 4.5. დისლოკაციის გადაადგილების სქემა კრისტალში

პერპენდიკულარულად კიდურა დისლოკაცია მხოლოდ იმ პროცესის რეალიზაციის გზით გადაადგილდება, რომელსაც „გადაცოცებას“ უწოდებენ. გადაცოცების მიზეზი ვაკანსიების შთანთქმა ან წარმოქმნაა. თუ 4.6 სურათზე წარმოდგენილი სქემის მიხედვით, ვაკანსია A წერტილში მოხვდება (სურ. 4.6 ა), ეს დისლოკაციის B წერტილში გადაადგილდებას გამოიწვევს (ბ). თუმცა დისლოკაციის, როგორც ერთი მთლიანი სისტემის გადაცოცებისათვის, ასეთი აქტი ყველა პარალელურ სიბრტყეზე უნდა განხორციელდეს.

პირუკუ პროცესი რეალიზდება იმ შემთხვევაში, როდესაც ატომები ვაკანტურ, C წერტილში (სურ. 4.6, გ) გადავლენ, ანუ მოხდება დისლოკაციის გადაცოცება A წერტილიდან C -ში. 4.6 დ და ე სურათებზე წარმოდგენილია დისლოკაციის გადაცოცების აქტები, რომელიც ვაკანსიისა და დისლოცირებული ატომის ადგილების ურთიერთმონაცვლეობის გზით შეიძლება განხორციელდეს.

დისლოკაციის გადაცოცების გეომეტრია საკმაოდ რთულია. ამიტომ უნდა ვივარაუდოთ, რომ ეს აქტი მეტად ძნელად ხორციელდება განსაკუთრებით მაშინ, როდესაც წყობის დეფექტების ენერგია მცირეა.



სურ. 4.6. გადაცოცების მექანიზმით დისლოკაციის მოძრაობის სქემა

ლითონზე გარე ძალის ზემოქმედებით დისლოკაციები ურთიერთზემოქმედებას განიცდის. აღნიშნული ზემოქმედების უმარტივესი შედეგები ასეთია:

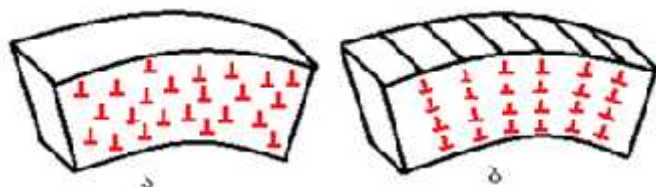
1. ერთსა და იმავე დაცურების სიბრტყეში სხვადასხვა ნიშნის კიდურა დისლოკაციები მიიზიდება, რადგან მათი მიახლოებისას კრისტალური გისოსის დამახინჯების ხარისხი მცირდება. როდესაც ზედა და ქვედა ექსტრასიბრტყეები ერთმანეთს შეუთავსდება, ხდება მათი ანიჰილაცია, ანუ ურთიერთმოსპობა.

2. ერთსა და იმავე დაცურების სიბრტყეში ერთი და იგივე ნიშნის კიდურა დისლოკაციები განიზიდება და ერთმანეთისგან მოშორებით განთავსდება.

3. მოსაზღვრე დაცურების სიბრტყეებში სხვადასხვა ნიშნის კიდურა დისლოკაციები მიიზიდება.

4. ერთი და იგივე ნიშნის დისლოკაციები „კედლებად“ ჯგუფდებიან (სურ. 4.7). ასეთი კედლები წარმოქმნის საზღვრებს მცირე კუთხით, რომლებიც კრისტალს შედარებით უფრო მცირე ზომის ნაწილებად ყოფს. ამ პროცესს პოლიგონიზაციას

უწოდებენ. პოლიგონის შიგნით დისლოკაცია თითქმის არ არის დარჩენილი.



სურ. 4.7. პოლიგონიზაციის სქემა.

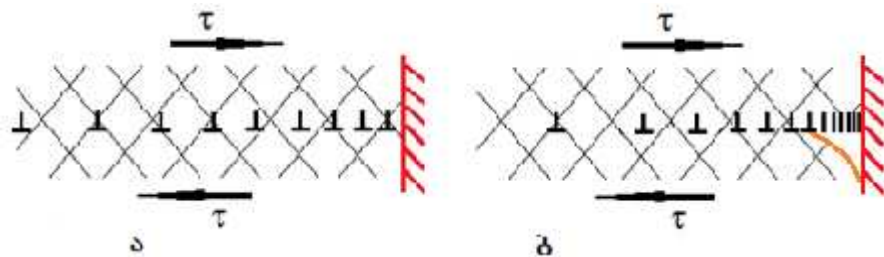
ა - კიდურა დისლოკაციების ქაოსური განლაგება;
ბ - დისლოკაციური კედლები კრისტალში

პოლიგონიზაცია დისლოკაციების „გადაცოცების“ გზით, მათი საკუთარი დაცურების სიბრტყეებიდან უფრო მცირე ენერგიის მქონე მდგო-

მარეობაში გადასვლით მიმდინარეობს. პროცესი საგრძნობი სიჩქარით მხოლოდ იმ ტემპერატურაზე რეალიზდება, რომელზედაც ვაკანსიების საკმაოდ დიდი რაოდენობა არსებობს და მათ საკმარისი ძვრადობის უნარი გააჩნიათ. ბუნებრივია ვივარაუდოთ, რომ პოლიგონიზაციის ტემპერატურა მნიშვნელოვნად უფრო მაღალია, ვიდრე ეს ჭარბი ვაკანსიების ანიჰილაციისათვის არის საჭირო.

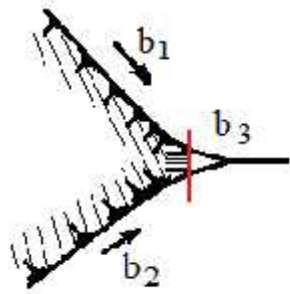
პლასტიკური დეფორმაციის დროს სხვადასხვა სიბრტყეში განლაგებული დისლოკაციები გადაიკეოთება. დისლოკაციების სისტემას, რომელიც დაცურების სიბრტყეს გაჭოლავენ, დისლოკაციის „ტყეს“ უწოდებენ. დისლოკაციების ურთიერთგადაკეოთის ადგილებში დაბრკოლებები წარმოიქმნება, რომლებიც, უმეტეს შემთხვევაში, დისლოკაციის შემდგომ გადაადგილებას აძნელებს. ამიტომ მადეფორმირებელი ძალა დეფორმაციის განვითარებასთან ერთად უნდა გაიზარდოს

სიბრტყეში დიდი რაოდენობის დისლოკაციების დაგროვებამ (რასაც გადაულახავი დაბრკოლებები უწეობს ხელს, (სურ. 4.8, ა) და მათმა შერწყმამ შეიძლება ბზარის ჩასახვა გამოიწვიოს (ბ). ასეთი ბზარი, რომელიც დაბრკოლების კედელთან ჩაისახება, შეიძლება სქემატურად განვიხილოთ, როგორც ერთი „ზედისლოკაცია“.



სურ. 4.8 დისლოკაციების სიბრტყეში თავმოყრის შედეგად ბზარწარმოქმნის სქემა

მეორე, ბზარწარმოქმნის უფრო მეტად სააღბათო მექანიზმში გასარკვევად განვიხილოთ 4.9 სურათზე წარმოდგენილი სქემა. ბზარის ჩასახვის პროცესში ურთიერთქმედებს ორი დაგროვილი, ურთიერთკვეთაში მოსული დისლოკაცია, რომელთაგან თითოეული მეორისათვის დაბრკოლებას წარმოადგენს საკუთარი მოძრაობის გზაზე (სურ. 4.9). ამ ორი დაგროვილი დისლოკაციის ურთიერთქმედებით წარმოიქმნება ახალი დისლოკაცია ბიურგერის ვექტორით $b_3 = b_1 + b_2$. თუ ამ დისლოკაციების გადაადგილება შეუძლებელია ან მათ დაცურების სიბრტყეებში არ არსებობს მხები ძაბვები, ისინი ვერ გამოვლენ თავმოყრის უბნიდან და ერთიანდებიან, რის შედეგადაც ბზარი განვითარდება.



სურ. 1.9. ურთირტოკვეთაში მოსული ორი
დაგროვილი დისლოკაციების ურთიერთქმედებით
ბზარწარმოქმნის სქემა

4.3. ზედაპირული დეფექტები. ზედაპირულ, ანუ ორგანზომილებიან დეფექტებს მიეკუთვნება: კრისტალის თავისუფალი და შიგა სასაზღვრო ზედაპირი, რომელიც წარმოიქმნება როგორც ერთი და იგივე სტრუქტურის, მაგრამ სხვადასხვა ორიენტაციის მქონე კრისტალიტებს შორის (მარცვლების, ბლოკების, ფრაგმენტებისა და ორეულების საზღვრები), ისე განსხვავებული სტრუქტურის კრისტალიტებს შორის (ფაზათაშორისი საზღვრები).

შიგა სასაზღვრო ზედაპირები არსებით გავლენას ახდენს ლითონის ისეთ თვისებებზე, როგორიცაა სიმტკიცე, პლასტიკურობა, სიმეიფე, ცოცვალობა, ბზარწარმოქმნა და კოროზია.

ატომების მოწესრიგებულ განლაგებაში მნიშვნელოვანი დარღვევა შეინიშნება კრისტალიზაციის პროცესში ფორმირებული მარცვლების შეზრდის უბნებში. მათ შორის საზღვარი მარცვლის ზომებთან შედარებით მცირე, 5-10 ატომური სისქის ზონას წარმოადგენს, სადაც ატომების ურთიერთგანლაგების მოწესრიგებული ხასიათი მნიშვნელოვნად არის დარღვეული. ასეთი არასრულყოფილება კლასიფიცირდება, როგორც ზედაპირული, ანუ ორგანზომილებიანი დეფექტები. სასაზღვრო ზონებში თავს იყრის სხვადასხვა სახის მინარევები. თუმცა, როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, არც მარცვლის მოცულობაში შეინიშნება კრისტალური გისოსის იდეალური აგებულება.

თავისთავად იგულისხმება, რომ თუნდაც ერთნაირი აგებულების მქონე ორი კრისტალის ურთიერთშეზრდა შეუძლებელია ისეთნაირად განხორციელდეს, რომ ყოველი ატომი მეზობელი ატომების ისეთ გარემოცვაში აღმოჩნდეს, როგორც ეს იდეალურ კრისტალშია შესაძლებელი. ამიტომ ორი კრისტალის შეზრდა მხოლოდ ისეთ შემთხვევაში მოხდება, თუ დაკმაყოფიებული იქნება შემდეგი პირობები:

ა) ორივე კრისტალს უნდა ჰქონდეს იდეალური აგებულება შეუღლების ზედაპირის ჩათვლით, რომელიც მეორე კრისტალის შეუღლების ზედაპირის იდენტური

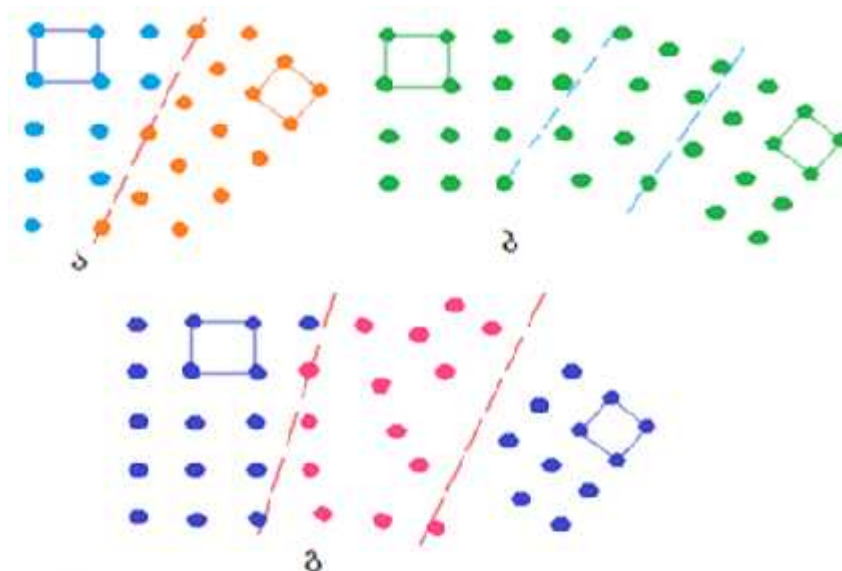
უნდა იყოს;

ბ) ატომებს დაკავებული უნდა ჰქონდეთ ისეთი მდგომარეობა, რომელიც გარდამავალი ზონის ფუნქციას შეასრულებს ერთი კრისტალის აგებულებიდან მეორე კრისტალის აგებულებამდე;

გ) უნდა არსებობდეს ატომების ფენა ისეთი განლაგებით, რომელიც კრისტალოგრაფიულად არ იქნება დაკავშირებული არც ერთ კრისტალთან.

კრისტალების შეუღლების წარმოდგენილი სამი შესაძლებლობის სქემატური გამოსახულება 4.10 სურათზეა წარმოდგენილი.

4.10 ა სურათზე წარმოდგენილი სტრუქტურა შეიძლება მხოლოდ იმ შემთხვევაში ჩამოყალიბდეს, როდესაც ორი კრისტალის ორიენტაციაში და საერთო სიბრტყეებში განსაკუთრებული ურთიერთკავშირი არსებობს. დამაჯერებლად შეიძლება ითქვას, რომ ასეთი აგებულებით ხასიათდება გაორებული კრისტალის საზღვრები. ზოგადად, როდესაც კრისტალების ურთიერთორიენტაციაში ასეთი უბრალო დამოკიდებულება არ არსებობს, სიბრტყეებს შორის შეუღლების ხასიათი არაპირდაპირი კვლევის მეთოდებით უნდა განისაზღვროს. ეს იმით არის განპირობებული, რომ თანამედროვე ექსპერიმენტული მეთოდების გარჩევის უნარი კრისტალთშორის საზღვარზე ცალკეული ატომების მდებარეობის უშუალოდ შესწავლის შესაძლებლობას



სურ. 4.10. მარცვალში ორი კრისტალის საზღვრების აგებულება:
ა - ორივე კრისტალი ინარჩუნებს სრულყოფილ აგებულებას ურთიერთშესხების სიბრტყეებზე;
ბ - გარდამავალი სტრუქტურა;
გ - ამორფული ფენა

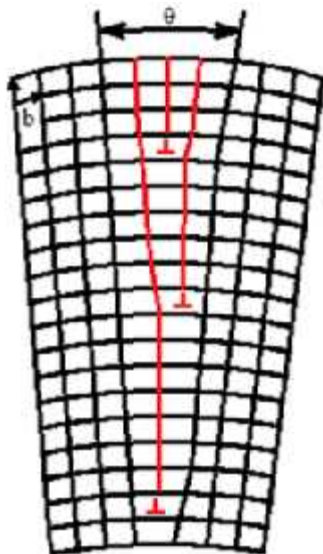
არ იძლევა.

დანარჩენი ორი შემთხვევა „გარდამავალი გისოსის“ და „ამორფული შრის“ თეორიების სახელწოდებითაა ცნობილი.

თუ ორი კრისტალი ერთმანეთისგან ამორფული შრით არის გაყოფილი, რომელშიც ატომებს ესა თუ ის სრულიად შემთხვევითი ადგილები უკავია, მაშინ სასაზღვრო ზონის თვისებები არ უნდა იყოს დამოკიდებული მისი დეზორიენტაციის ხარისხზე. მაგრამ თუ საზღვრის თვისებებს მისი ორიენტაცია განსაზღვრავს, აგებულებაც ასევე მასზე იქნება დამოკიდებული და, აქედან გამომდინარე, იგი არ შეიძლება იყოს შემთხვევითი. ზემოთქმულიდან გამომდინარე, საზღვრის აგებულება მოსაზღვრე კრისტალების სტრუქტურასთან არის დაკავშირებული.

მარცვლის საზღვრის სტრუქტურის ასახსნელად ფართოდ სარგებლობენ დისლოკაციური მოდელით. როგორც მრავალი გამოკვლევის შედეგად არის დადგენილი, მარცვლის საზღვრებში დისლოკაციების განაწილება მოწესრიგებულ ხასიათს ატარებს, რამდენადაც ეს უბნები სტრუქტურული შეუსაბამობის გარკვეული მდგომარეობით ხასიათდება.

დეზორიენტაციის θ კუთხის სიდიდეზე დამოკიდებულებით (სურ. 4.11) ასხვავებენ: საზღვრებს მცირე კუთხით, საზღვრებს საშუალო კუთხითა და საზღვრებს დიდი კუთხით. θ კუთხის სიდიდის მიახლოებითი მნიშვნელობა განისაზღვრება თანაფარდობით: $\bar{E}/h$, სადაც $\bar{E}$ არის ბიურგერის ვექტორის სიგრძე, ხოლო h – დისლოკაციებს შორის მანძილი.



სურ. 4.11. მცირეკუთხისა და საზღვრები

საზღვრები მცირე კუთხით ($\theta=0,3-4^\circ$) ერთგვაროვანი, ვერტიკალური და ურთიერთპარალელური დისლოკაციების დაჯგუფებას წარმოადგენს.

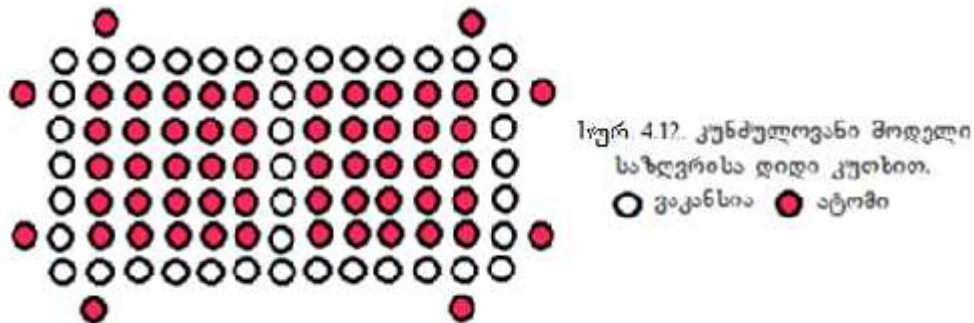
დეზორიენტაციის კუთხის შემცირებასთან ერთად მცირდება დისლოკაციებს შორის მანძილი h :

$$h = \frac{b}{(2 \sin \theta/2)} \quad (4.5),$$

რაც დისლოკაციის სიმკვრივის (ρ) ზრდის ეკვივალენტურია ($\rho = 1/h$). ამასთან, მეტად რთულდება ცალკეული დისლოკაციების გარჩევა. როდესაც $\theta=5-10^\circ$, ყალიბდება საზღვრები საშუალო კუთხით, ხოლო თუ $\theta>10^\circ$ – საზღვრები

დიდი კუთხით.

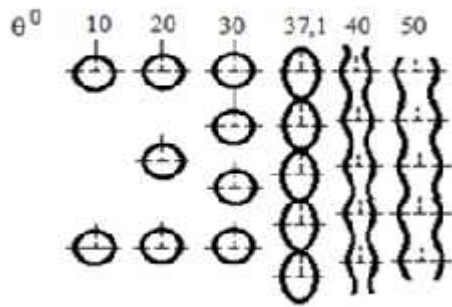
დიდი კუთხით დეზორიენტირებული საზღვრების მოდელი საგარაუდოდ გულისხმობს გისოსების კარგი შესაბამისობის მქონე „კუნძულების“ არსებობას, საზღვრის წარმომქმნელი ორივე მარცვლის ზედაპირზე. ამასთან, „კუნძულები“ გარშემორტყმულია არახელსაყრელი შესაბამისობის მქონე უბნებით. აღნიშნული დეზორიენტირებული უბნები შედგება ვაკანსიების წრფივი სისტემისაგან, რომლებიც საზღვრის სიბრტყეშია განლაგებული (სურ. 4.12).



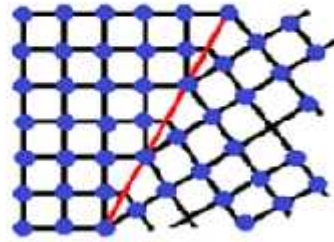
დისლოკაციურ წარმოდგენებზე დამყარებული „კუნძულოვანი“ მოდელის (შემთხვევისათვის საზღვრები დიდი კუთხით) შემდგომ განვითარებას დისლოკაციური ბირთვისა (სურ. 4.13) და დამთხვევის ადგილების (სურ. 4.14) მოდელები წარმოადგენს.

დისლოკაციის ბირთვს უწოდებენ არასრულყოფილი კრისტალური სტრუქტურის არეს, რომელიც პირობითად ცილინდრშია მოქცეული. ცილინდრის ღერძს ექსტრასიბრტყის 1-1 კიდე წარმოადგენს (იხ. სურ. 4.2). პირველი მოდელის თანახმად, დისლოკაციის ბირთვი საკუთარ ინდივიდუალობას ინარჩუნებს იმ შემთხვევაში, თუ შესრულებულია პირობა: $(\pi r_0 / h) \ll 1$, სადაც r_0 არის დისლოკაციის ბირთვის საწყისი რადიუსი ($r_0 = b/2$). როდესაც $(\pi r_0 / h) = 1$, ბირთვები ერთმანეთს ეხება, უწყვეტ შრეს წარმოქმნის და საზღვრის „ბირთვად“ (ფორებად) ყალიბდება (სურ. 4.13).

მოდელში „დამთხვევის ადგილები“ იგულისხმება, რომ ორი მარცვალი, რომლებიც საერთო საზღვარს წარმოქმნის და გარკვეული კუთხით არის ერთმანეთის მიმართ დეზორიენტირებული, შეიცავს ატომების მნიშვნელოვან რაოდენობას, რომლებიც საერთო სამგანზომილებიან, ე.წ. „ზევისოსში“ არის განლაგებული. ამის მაგალითს გაორებული საზღვარი (სურ. 4.14) წარმოადგენს. ასეთი კოპერენტული საზღვრების (შეუღლებული საზღვრები დამთხვევის მაღალი ხარისხით) ენერგია არ არის

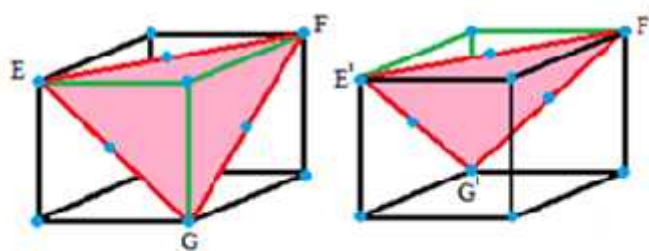


სურ. 4.13. დისლოკაციის ბირთვის სქემა



სურ. 4.14. გაორებული საზღვარი

დიდი და ლითონის ნებისმიერი მარცვლის საზღვრების ენერგიის $\sim 3-10\%$ -ს შეადგენს. ბიკრისტალი ასეთივე ორიენტაციით შეიძლება ჩამოყალიბდეს ორი ერთნაირი, წდკ გისოსის მქონე მონოკრისტალისგან. გაორებული კრისტალის მისაღებად უნდა გაერთიანდეს (შეირწყას) მჭიდროდ წყობილი EFG და E'F'G' სიბრტყეები (სურ. 4.15) და შესაბამისად ერთმანეთს შეუთავსდნენ E და E', F და F' G და G' წერტილები. შედეგად საზღვარს ჩამოსცილდება ზედმეტი კრისტალოგრაფიული სიბრტყე და ერთი კრისტალი მეორის სარკის ანარეკლის ორიენტაციას მიიღებს.



სურ. 4.15. გაორებული ორიენტაცია წდკ კრისტალში

4.1 ცხრილში წარმოდგენილია გაორების სიბრტყეები სხვადასხვა კრისტალური გისოსისათვის.

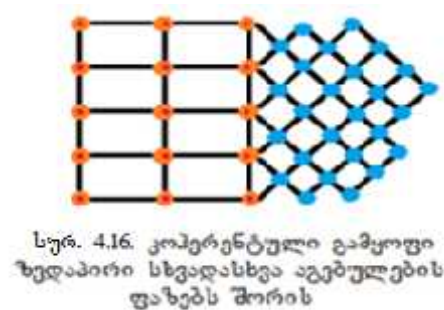
ორეულები შეიძლება წარმოიქმნას, მაგალითად, მარცვლის ზრდის პროცესში (ზრდის ორეულები), მექანიკური ზემოქმედების შედეგად (დეფორმაციული ორეულები), ასევე რეკრისტალიზაციის დროს. რადგან კოჰერენტულ საზღვრებს დაბალი ენერგია აქვთ, მეტად ძნელია მათი გამომჟღავნება რეაქტივით დამუშავებისას.

კრისტალთშორისი საზღვრების მნიშვნელოვან თავისებურებას საკმაოდ მაღალ ტემპერატურაზე მათი გადაადგილების უნარი წარმოადგენს. საზღვრების ძვრადობის უნარი ძლიერ იზღუდება მცირე რაოდენობით მინარევების არსებობის შემთხვევაშიც

გაორების სიბრტყეები	
გისოსის ტიპი	გაორების სიბრტყე
კუბური წახნაგდაცენტრებული	{111}
მჭიდრო პექსაგონური	{10 $\bar{1}$ 2}
კუბური სივრცითდაცენტრებული	{112}
რომბოედრული	{001}
ტეტრაგონური (კალა)	{331}

კი, რითაც დასტურდება ის მოსაზრება, რომ მინარევები სეგრეგაციას განიცდის კრისტალთშორის საზღვრებში. საზღვრების გადაადგილების მამოძრავებელ ძალას თავისუფალი ენერგიის შემცირება წარმოადგენს. ეს უკანასკნელი შეიძლება განპირობებული იყოს ან თვით მარცვლის საზღვრების თავისუფალი ენერგიის ვარდნით მისი საერთო ფართობის შემცირების გამო, ან დისლოკაციის სიმკვრივის შემცირებით, ან ნიშნის ზედაპირის თავისუფალი ენერგიის შემცირებით.

4.4. შახათა შორის ზედაპირი. შახათა შორის ზედაპირი შეიძლება იყოს კოჰერენტული ან არაკოჰერენტული. კოჰერენტულს უწოდებენ ორი კრისტალის გამყოფ ზედაპირს, სადაც კავშირი გისოსების ურთიერთორიენტაციით არის განხორციელებული. ასეთი შეუღლება შეიძლება განპირობებული იყოს სტრუქტურის ამა თუ იმ კონკრეტული თავისებურებით, მაგალითად, სიბრტყეებს შორის მანძილით ან გეომეტრიული შესაბამისობით, მიუხედავად იმისა, რომ მეორე კრისტალის სტრუქტურა პირველისაგან შეიძლება კრისტალოგრაფიულად განსხვავებული აგებულებით ხასიათდებოდეს. ასეთი ორგანოზომილებიანი შეუღლების უმარტივესი მაგალითი 4.16 სურათზეა წარმოდგენილი.

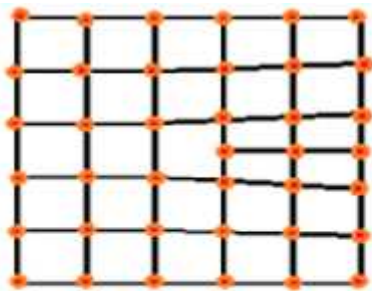


სურ. 4.16. კოჰერენტული გამყოფი ზედაპირი სხვადასხვა აგებულების ფაზებს შორის

სქემიდან გამომდინარე, ერთი კრისტალის სწორკუთხედის გვერდი მეორე კრისტალის სწორკუთხედის დიაგონალთან არის თანხვედრილი. უნდა ვივარაუდოთ, რომ ხარისხოვანი შეუღლების შემთხვევაში ამ ტიპის საზღვრის ენერგია მეტად მცირეა განსაკუთრებით მაშინ, როდესაც შესაუღლებელი კრისტალების ატომების ელექტრონული

კონფიგურაციები დიდად არ განსხვავდება ერთმანეთისგან. უნდა ვივარაუდოთ, რომ ზომების ასეთი შეთავსება მხოლოდ იმ შემთხვევაში მიიღწევა, როდესაც ფაზათა გამყოფ ზედაპირზე გარკვეული ხარისხით მიმდინარეობს გისოსის დრეკადი დამახინჯება, მაგალითად, ერთი კრისტალის შეკუმშვა და მეორის გაჭიმვა, ან ძვრით დეფორმაცია. ბუნებრივია, ასეთ შემთხვევაში საზღვრის ენერგია იზრდება წარმოქმნილი დრეკადი დეფორმაციის სიდიდით, თუმცა კავშირი კოჰერენტული რჩება.

თუ ფაზათა შორის კავშირის განსახორციელებლად ბევრად უფრო მნიშვნელოვანი დრეკადი ენერგიაა საჭირო, მაშინ არაკოჰერენტული საზღვარი ყალიბდება. მართალია, კრისტალების შეუღლებაზე არავითარი დეფორმაციული ენერგია არ იხარჯება, მაგრამ თვით საზღვარი ხასიათდება გაზრდილი ენერგიით, რადგან გამყოფ ზედაპირზე ატომების ენერგია უფო მეტი აღმოჩნდება თითოეული კრისტალის მოცულობაში განთავსებული ატომების ენერგიასთან შედარებით.



სურ. 4.17. ნახევრადკოჰერენტული გამყოფი ზედაპირი სხვადასხვა ატომების ფაზებს შორის

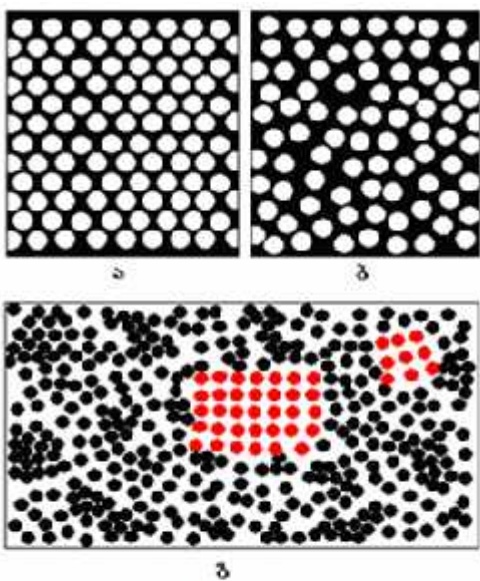
დისლოკაციების ერთობლიობამ შეიძლება ანალოგიური საზღვრების ენერგიის შემცირება გამოიწვიოს. ასეთ დისლოკაციებს შეუსაბამობის დისლოკაციებს უწოდებენ. როგორც 4.17 სურათზე წარმოდგენილი სქემიდან ჩანს, თანაბრად განაწილებული დეფორმაციის ენერგია დისლოკაციის ენერგიით იცვლება.

5. შახური ბარდაქმნები

5.1. თხევადი ლითონის სტრუქტურა

სითხეში ყოველი ატომი გარკვეულ კოორდინაციაში იმყოფება მის უახლოეს მეზობელ ატომებთან. მათ შორის მანძილს სითხის ტემპერატურა განსაზღვრავს. თუმცა ინტენსიური თბური მოძრაობის გამო, ატომთა ჯგუფების ასეთი მოწესრიგებული განლაგება იშლება და იგი სხვა მეზობელი ატომებით იცვლება ახლო კოორდინაციის შენარჩუნებით. თუ განვიხილავთ რომელიმე ატომს და მის უახლოეს ატომებს, როგორც ცალკეულ ჯგუფს, მაშინ დროში, იზოთერმულ პირობებშიც კი, ასეთი ჯგუფები განუწყვეტლივ წარმოქმნა-გაქრობის სტადიაშია და იცვლის თავისი ატომების კონტინგენტს და საკუთარ ორიენტაციას სივრცეში.

სითხის მთელი მოცულობის ასეთ ჯგუფებად დაყოფას და ყოველი ჯგუფის შიგნით ატომების მოწესრიგებულ გეომეტრიულ შენებას ერთი ტერმინით ახასიათებენ – „ახლო წესრიგი“, რომელსაც მყარ კრისტალურ ნივთიერებებში ატომების განლაგების „შორ წესრიგს“ უპირისპირებენ. 5.1 სურათზე ნაჩვენებია ატომების



სურ. 5.1 ატომების წყობა კრისტალურ (ა) და თხევად (ბ) ლითონებში.
გ - შახური ფლუქტუაცია სითხეში

წყობის მოდელი კრისტალურ (ა) და თხევად (ბ) ფაზებში.

დნობის პროცესში თითქმის ყველა ლითონში ატომებს შორის მანძილი იზრდება. 2-6%-ით მატულობს სითხის მოცულობაც. მოცულობითი ეფექტი უფრო შესამჩნევია ისეთ ლითონებში, რომლებიც მაღალი კომპაქტურობით გამოირჩევა (ჰექსაგონურ და კუბურ სივრცით დაცენტრებულ კრისტალებში). ელემენტები, რომლებიც მკვეთრად გამოხატული კოვალენტური ბმით ხასიათდება და არაკომპაქტური კრისტალური გისოსი გააჩნია (Si, Bi, Ge, Ga), დნობის პროცესში იკუმშება. მაშასადამე, თხევად ფაზაში ასეთ ნივთიერებებში ატომები უფ-

რო მჭიდროდ განლაგდება ერთმანეთთან.

დნობის წერტილის ზემოთ უმნიშვნელოდ გადახურებულ ლითონში შეიძლება

გამოიყოს ატომთა მცირე ჯგუფები, რომელთა წყობა კრისტალების ანალოგიურია (სურ. 5.1, გ). ატომთა ასეთ ჯგუფებს ფაზურ, ან ჰეტეროფაზურ ფლუქტუაციებს უწოდებენ. მათი ზომები ერთმანეთისგან განსხვავებული შეიძლება იყოს.

ფართო გაგებით ფლუქტუაცია არის შემთხვევითი სიდიდის მოუწესრიგებელი გადახრა მისი საშუალო მნიშვნელობიდან. ფიზიკურ მოვლენებში ფლუქტუაციის არსებობა ორი ძირითადი ფაქტორით არის განპირობებული: მატერიის წყვეტადობით (ნივთიერების ატომური სტრუქტურით) და ნაწილაკების თბური მოძრაობით.

ფაზური ფლუქტუაციები არამდგრადი წარმონაქმნებია. ზოგი მათგანი გარკვეულ ზომებამდე იზრდება, სხვანი – ატომების თბური მოძრაობის გამო მცირდება და ქრებიან.

სითხის მნიშვნელოვანი გადახურებისას ატომებს შორის მანძილი იზრდება, ხოლო მათი ურთიერთქმედების ძალები იმდენად სუსტდება, რომ ახლო წესრიგიც ქრება. ისპობა ელექტრონების კოლექტივიზაცია და იონები ელექტრულად ნეიტრალურ ატომებად გადაიქცევა. ასეთი მდგომარეობა თხევადი და აირადი ფაზების წონასწორულ წერტილში დგება. ამ მომენტიდან სითხე იწყებს დუდილს და აირში გადასვლას.

5.2. კრისტალიზაცია

თხევადი სისტემის ენერგეტიკული მდგომარეობა, რომელიც მოიცავს უზარმაზარი თბური ენერგიის მქონე მოძრავი ნაწილაკების დიდ რაოდენობას, განსაკუთრებული თერმოდინამიკური ფუნქციით (F) ხასიათდება, რომელსაც თავისუფალი ენერგია ეწოდება:

$$F=U-TS \quad (5.1)$$

სადაც U არის სისტემის შინაგანი ენერგია;

T – აბსოლუტური ტემპერატურა;

S – ენტროპია.

რაც უფრო მეტია თავისუფალი ენერგია, სისტემა მით უფრო არამდგრადია და თუ არსებობს ხელსაყრელი პირობები, იგი გადავა ისეთ მდგომარეობაში, სადაც ენერგიის ნაკლები მარაგი აქვს. ბუნებაში თავისთავად მიმდინარე პროცესები და, მათ შორის, კრისტალიზაცია და დნობა, ამ ზოგად კანონს ემყარება.

კრისტალიზაციის პროცესი გულისხმობს კრისტალების ზრდას უკვე არსებუ-

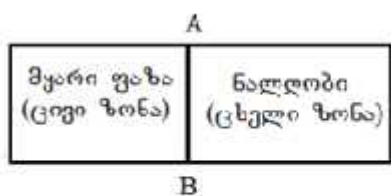
ლი კრისტალის ზედაპირზე (ჩანასახზე) სითხის ცალკეული ატომების (ან ატომთა ჯგუფების) მიერთების გზით. გამყარების ასეთი პროცესის ზომას წარმოადგენს დროის გარკვეულ მონაკვეთში სითხიდან მზარდი კრისტალის ზედაპირზე მიერთებული ატომების რაოდენობასა და იმ ატომების რაოდენობას შორის სხვაობა, რომლებიც ტოვებს კრისტალს და სითხეში უკან ბრუნდება. წონასწორულ პირობებში ამ ორი პროცესის სიჩქარეები ერთმანეთის ტოლია, ანუ მყარ და თხევად ფაზებს შორის ატომების მიმოცვლა კომპენსირებულია. სითბოს მიწოდების შემთხვევაში კრისტალები დაიწყებს დნობას – ისინი ატომების უფრო მეტ რაოდენობას დაკარგავს, ვიდრე სითხიდან შეიძენს. წონასწორული ტემპერატურის ქვემოთ კი, გადაცივების შემთხვევაში, მყარი ფაზის თავისუფალი ენერგია სითხესთან შედარებით უფრო ნაკლები აღმოჩნდება, ატომების გადასვლა კრისტალურ წარმონაქმნებზე უპირატესი გახდება და დაიწყება სითხის დაკრისტალება. აქედან გამომდინარე, სასრული სიჩქარით გამყარების ან გათხევადების პროცესის მიმდინარეობისათვის აუცილებელია ერთი პროცესის სიჩქარე მეორისას აღემატებოდეს და ადგილი ჰქონდეს გადახრას წონასწორული ტემპერატურიდან.

მოუწესრიგებელი თხევადი ფაზის შინაგანი ენერგია მნიშვნელოვნად აღემატება მოწესრიგებული მყარი ფაზის თავისუფალ ენერგიას. აქედან გამომდინარე, ერთი მდგომარეობიდან მეორეში გადასვლა თბური ეფექტით – სითბოს გამოყოფით ან შთანთქმით მიმდინარეობს.

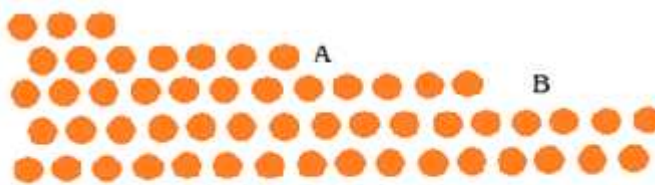
დაუშვათ, კრისტალისა და სითხის შეხების წერტილში ტემპერატურა წონასწორულთან შედარებით რამდენადმე უფრო დაბალია. ბუნებრივია, ასეთ პირობებში კრისტალიზაციის პროცესი რაღაც გარკვეული სიჩქარით წარიმართება. გასათვალისწინებელია ის ფაქტი, რომ თხევადიდან მყარ სხეულში ატომის გადაადგილება დნობის ატომური ფარული სითბოს გამოყოფას და თბურ ენერგიაში მის გადასვლას გამოიწვევს, რომელმაც შეიძლება სისტემის ტემპერატურა წონასწორულ დონემდეც კი აამაღლოს. დნობის ატომური ფარული სითბო ატომის მყარი და თხევადი მდგომარეობების შინაგან ენერგიებს შორის სხვაობას წარმოადგენს. სწორედ სითბოს ამ რაოდენობის მიწოდებაა საკმარისი, რომ ატომი მოსცილდეს მეზობლ ატომებს და სითხეში გადავიდეს. ამიტომ კრისტალიზაციის პროცესი შეუძლებელია გაგრძელდეს, თუ ფაზათა გამყოფ ზედაპირზე არ იქნება შენარჩუნებული წონასწორულთან შედარებით უფრო დაბალი ტემპერატურა. ამის მიღწევა კი შესაძლებელი იქნება მხოლოდ მაშინ, თუ მოხდება სითბოს

გამოტანა ფაზათა გამყოფი ზედაპირიდან მყარ ან თხევად ფაზაში. წინააღმდეგ შემთხვევაში, ზედაპირი სწრაფად გახურდება წონასწორულ ტემპერატურამდე და კრისტალიზაციის პროცესი შეწყდება. ამგვარად, კრისტალიზაციის სიჩქარეს ფარული სითბოს გამოყოფის სიჩქარე განსაზღვრავს.

დაეუშვათ, მზარდი კრისტალის ზედაპირის აღნაგობა მისი შინაგანი აგებულების იდენტურია. ასეთ შემთხვევაში კრისტალის ზედაპირი ვერ მიიღებს ნებისმიერ ფორმას ატომურ მასშტაბებში და გამყარება ჩვეულებრივად, სისტემაში შექმნილი ტემპერატურათა სხვაობის შესაბამისად წარიმართება. იზოთერმული ზედაპირი (კრისტალიზაციის ფრონტი AB, სურ. 5.2) როგორც წესი, არ დაემთხვევა ამა თუ იმ კრისტალოგრაფიულ სიბრტყეს და ზედაპირი „საფეხურებისაგან“ იქნება შედგენილი, რომლის სქემა იდეალური შემთხვევისათვის 5.3 სურათზეა წარმოდგენილი. საფეხურების „სიმაღლე“ ატომების მონოფენის ტოლი უნდა იყოს, თუმცა მათი გვერდითი განფენილობა სხვადასხვაა. აღსანიშნავია, რომ ასეთი კონფიგურაცია მაქსიმალურად არის მიახლოებული ნებისმიერად შერჩეული ზედაპირის იდეალურ სიგლუვესთან. სინამდვილეში კი იგი უნდა შეესაბამებოდეს სქემას, რომელიც 5.4 სურათზეა წარმოდგენილი.



სურ. 5.2. მიმართულებითი გამყარების სქემა

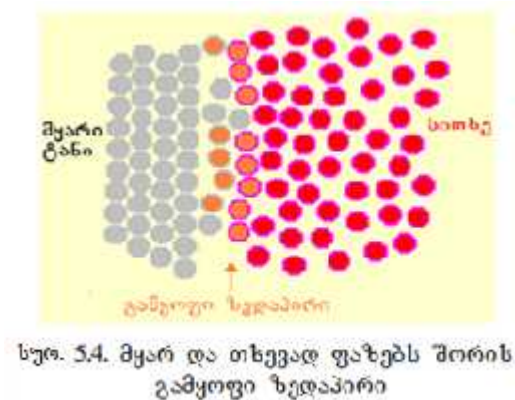


სურ. 5.3. მზარდი კრისტალის იდეალიზირებული ზედაპირი

სავარაუდოა, რომ ატომები ზედაპირის ყველა ადგილს მყარად ვერ დაიკავენ. უმეტეს შემთხვევაში ატომი კრისტალს ისეთ წერტილებში მიუერთდება, სადაც მას მრავალი მეზობელი ატომი დახვდება, მაგალითად, არა B, არამედ A წერტილში (სურ. 5.3). ასეთი მიკედლებული ატომი ენერგიის მარაგის მიხედვით ახლოს დგას მყარი სხეულის ატომებთან, ამიტომ ნაკლებად არის კრისტალის კვლავ დატოვებისა და სითხეში დაბრუნების ალბათობა, რადგან ამისათვის საჭირო იქნება აქტივაციის უფრო მეტი ენერგია. აქედან გამომდინარე, ანალოგიურ პირობებში, კრისტალი უპირატესად ატომური ფენების წრფივი განვითარების გზით უნდა გაიზარდოს, თუმცა არ არის გამორიცხული ახალი ფენების წარმოქმნის შესაძლებლობაც. ამიტომ ყოველთვის უნდა ველოდოთ კრისტალის უპირატესი ზრდის მრავალი მიმართულების არსებობას.

ამგვარად, საბოლოო ჯამში, კრისტალის რეალური ზრდის სიჩქარე დამოკიდებული უნდა იყოს არსებული საფეხურების რაოდენობასა და გვერდითი მიმართულებით მისი ზრდის სიჩქარეზე.

5.3 სურათზე წარმოდგენილი სქემით კრისტალიზაციის შემთხვევაში ისეთი ტემპერატურული გრადიენტი წარმოიქმნება, რომელიც სითბოს გაცემას მხოლოდ მარჯვნიდან მარცხნივ (სურ. 5.4), ანუ მყარი ფაზის გავლით განაპირობებს. ასეთ პირობებში ფაზათა გამყოფი ზედაპირი მარჯვნივ გადაადგილდება ისეთი სიჩქარით, რომელსაც ფარული სითბოს გაცემის სიჩქარე განსაზღვრავს. ეს უკანასკნელი კი, თავის მხრივ, თხევად და მყარ ფაზებს შორის რეალურ ტემპერატურულ გრადიენტზეა დამოკიდებული. გარკვეული სიჩქარით პროცესის მიმდინარეობისათვის საჭიროა კრისტალიზაციის ფრონტზე ტემპერატურა ნაკლები აღმოჩნდეს იმ ტემპერატურასთან შედარებით, რომელზედაც კრისტალი წონასწორობაში იმყოფება ნაღვლობთან. ბუნებრივია, გამყარების სიჩქარე მით უფრო მეტი იქნება, რაც უფრო მეტია გადაცივების ხარისხი. განსახილველ შემთხვევაში მდგრადი აღმოჩნდება „გლუვი“ გამყოფი ზედაპირი. თუ მისი რომელიმე უბანი რაღაც მიზეზის გამო რამდენადმე გაუსწრებს ზრდაში სხვა ზედაპირებს, იგი უფრო მაღალ ტემპერატურულ ზონაში (წონასწოვრული ტემპერატურის მახლობლობაში) აღმოჩნდება შეჭრილი და შემდგომი გადაადგილების შესაძლებლობა შემცირდება.



სრულიად განსხვავებული სიტუაცია წარმოიქმნება, თუ სითხე უფრო მეტად გადაცივებული აღმოჩნდება მყარ ფაზასთან შედარებით. ასეთ შემთხვევაში გამყოფი ზედაპირიდან ფარული სითბოს გატანა სითხის გავლით მოხდება და გლუვი ზედაპირი არა მდგრადი აღმოჩნდება: ყოველი მისი უბანი, რომელიც სხვა უბნებთან შედარებით უფრო სწრაფად გადაადგილდება, შედარებით ცივ ზონაში მოხვდება და შედეგად უფრო სწრაფად გაიზრდება. კრისტალის ზრდა დამოუკიდებლად მიმდინარეობს, რადგან გამოყოფილი ფარული სითბო მისი უშუალოდ გარემომცველი სითხით შთაინთქმება და ამ ზონაში კრისტალების ჩამოყალიბებისთვის არახელსაყრელი პირობები იქმნება.

ამგვარად, ფაზათა გამყოფი ზედაპირი ცალკეული ნემსების, ზოგ შემთხვევაში კი ფირფიტების სახით ვითარდება, რომლებიც სითხეში სულ უფრო ღრმად შეიჭრება. მათი

ზრდის სიჩქარე ბევრად შეიძლება აღემატებოდეს იმ სიჩქარეს, რომელიც ვითარდება მყარი ფაზის გავლით სითბოს გატანის შემთხვევაში. ჩამოყალიბებული დენდრიტული ნემსების გეომეტრია მეტად მჭიდროდ არის დაკავშირებული ლითონის კრისტალოგრაფიასთან. დენდრიტების ღერძი დიდი სიზუსტით თანხვედება იმ კრისტალოგრაფიულ მიმართულებებს, რომლებიც 5.1 ცხრილშია წარმოდგენილი.

ცხრილი 5.1

დენდრიტის ღერძის კრისტალოგრაფიული მიმართულებები

გისოსის ტიპი	მიმართულება
კუბური წახნაგდაცენტრებული	<001>
კუბური სივრცით დაცენტრებული	<001>
მჭიდრო ჰექსაგონური	[0001]
ტეტრაგონური (კალა)	<110>
ალმასის ტიპის კუბური	<112>

პირობები, რომელიც დენდრიტულ ზრდას განაპირობებს (გადაცივების დადებითი გრადიენტი, ანუ სითბოს გაცემა ფაზათა გამყოფი ზედაპირიდან სითხეში) ხელს უწყობს პირველადი დენდრიტებიდან განშტოებების ზრდას. ამასთან, ასეთი განშტოებების ღერძები კრისტალოგრაფიულად პირველადი დენდრიტული ღერძების იდენტურია. თუ არსებობს ხელშემწყობი პირობები, შეიძლება მეორე, მესამე და ა.შ. რიგის განშტოებების ჩამოყალიბებაც.

5.3. ჩანასახის წარმოქმნა

5.3.1. ზენოზენოლოგია. კრისტალების ჩანასახა ზოგადად შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც მოცულობის რაღაც შემოსაზღვრულ უბანში ახალი ფაზის წარმოქმნის პროცესი, რომელიც ნივთიერების დანარჩენი ნაწილისაგან გამყოფი ზედაპირით არის გამოცალკევებული. კრისტალიზაციის პროცესში ასეთ ჩანასახს კრისტალიზაციის ცენტრი წარმოადგენს, რომელიც თხევად ფაზაში აღმოცენდება. თუ თხევადი ლითონი აბსოლუტურად სუფთაა და არც ჭურჭლის კედლები, რომელშიც ლითონი მყარდება, არც რაიმე გარეშე მინარევები (ფუძეშრე) გავლენას არ ახდენს

ჩანასახის წარმოქმნაზე, მას კომოგენური ჩანასახი ეწოდება.

თუ სისტემაში რაიმე სახის გარდაქმნაა დაწყებული, მზარდ და საწყის ფაზებს შორის გამყოფი ზედაპირი წარმოიქმნება. პროცესის შემდგომი განვითარება განიხილება, როგორც საწყისი ფაზიდან ატომების გადასვლა უფრო მდგრად მდგომარეობაში, რომელიც თავისუფალი ენერგიის შემცირებას განაპირობებს. ბუნებრივია, თავისუფალი ენერგიის უფრო დაბალი მნიშვნელობით სწორედ ახლად ჩამოყალიბებული ფაზა უნდა ხასიათებოდეს. თუ ეს მოთხოვნა არ იქნება დაკმაყოფილებული, არც ახალი ფაზა აღმოჩნდება წონასწორული. ამასთან გასათვალისწინებელია, რომ სანამ გამყოფი საზღვარი არ ჩამოყალიბდება, არ იარსებებს არც ისეთი ადგილები, რომელთა შევსება ატომებით მათი თავისუფალი ენერგიის შემცირებას გამოიწვევს. ფაზებს შორის გამყოფი საზღვარი კი მარტივად არ ყალიბდება. ამიტომ მიზანშეწონილია იმ პირობების განხილვა, რომლებიც პირველსაწყისი მდგრადი, ახალი ფაზის ნაწილაკების წარმოქმნას უწყობს ხელს.

დაუშვათ ორი, A და B ფაზა, რაღაც T_p ტემპერატურაზე წონასწორობაში იმყოფება. ეს იმის ტოლფასია, რომ აღნიშნულ წერტილში მათი თავისუფალი ენერგიები ერთმანეთის ტოლია. თუ T_p ტემპერატურის ზემოთ A ფაზას უფრო ნაკლები თავისუფალი ენერგია აქვს, T_p ტემპერატურის ქვემოთ B ფაზა აღმოჩნდება უფრო მდგრადი. ამდენად, განხილულ პირობებში ახალი ფაზის კრისტალიზაციის ცენტრების წარმოქმნა გულისხმობს B ფაზის ჩანასახის ჩამოყალიბებას A ფაზის T_p ტემპერატურის ქვემოთ გადაციების შემთხვევაში. თუმცა ტემპერატურის შემცირებისას B ფაზის წარმოქმნა თვითნებურად არ განხორციელდება, არამედ აუცილებელია მან გაიაროს გარკვეული სტადია მეტად მცირე ზომის ნაწილაკების არსებობიდან დაწყებული, რომლებიც შეიძლება არც კი ხასიათდებოდნენ უფრო მაღალი მდგრადობით A ფაზასთან შედარებით. ეს იმით არის განპირობებული, რომ $A \rightarrow B$ ფაზური გარდაქმნის დროს გამყოფი ზედაპირის წარმოქმნაზე ენერგიის გარკვეული ნაწილი იხარჯება, რაც სისტემის თავისუფალი ენერგიის გაზრდას იწვევს. ჩანასახი კი მდგრადი აღმოჩნდება და შესაძლებელი იქნება მისი გაზრდა მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ სისტემის ჯამური თავისუფალი ენერგია შემცირდება. ამგვარად, სისტემის სრული ენერგია ფაზების კუთრ თავისუფალ ენერგიებთან ერთად ზედაპირის თავისუფალ ენერგიასაც მოიცავს. თუ B ნაწილაკების თავმოყრის უბნები დიდი ზომისაა, მაშინ შესაძლებელია ზედაპირის თავისუფალი ენერგიის უგულებელყოფა ჯამური თავისუფალი ენერგიის სიდიდესთან შედარებით. თუმცა ეს შეუძლებელი იქნება მანამ, სანამ ნაწილაკები მცირე ზომის ინარჩუნებს.

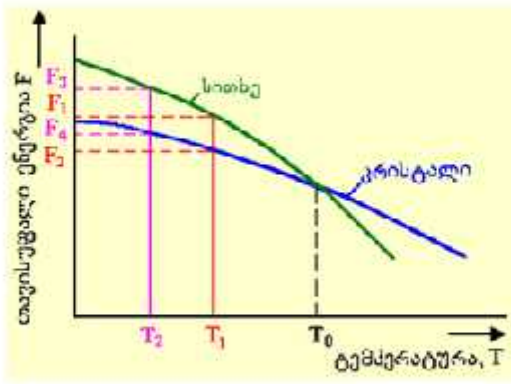
იგივე დასკვნამდე მივალთ საკითხის კინეტიკური თვალსაზრისით განხილვისას. მეტად მცირე ზომის ჩანასახის ზედაპირზე ატომებს დიდი ენერგია გააჩნიათ, რადგან, უმრავლეს შემთხვევაში, ისინი აღვილს იკავენ ახალი წარმონაქმნის წიბოებზე ან კუთხეებში, რაც დიდი ზომის კრისტალების ზედაპირზე არ შეინიშნება. ეს ამცირებს მათი აქტივაციის საშუალო ენერგიას და, შესაბამისად, $B \rightarrow A$ უკუგარდაქმნის საშუალო სიჩქარის ზრდას განაპირობებს.

ამგვარად, წონასწორული ტემპერატურა, რომლის დროსაც ზედაპირი იმდენ ატომს იერთებს, რამდენსაც იგი კარგავს, მით უფრო დაბალი უნდა იყოს, რაც უფრო მცირე ზომისაა კრისტალი.

ჩანასახის წარმოქმნა ფაზური ფლუქტუაციების ბაზაზე ხორციელდება (იხ. სურ. 5.1). ატომების ასეთი ჯგუფები ჩანასახად რომ გადაიქცეს, გარკვეულ ზომამდე უნდა გაიზარდოს თხევადი ფაზის ხარჯზე, რათა წინააღმდეგობა გაუწიოს სითხის ატომების დამანგრეველ ზემოქმედებას. წინააღმდეგ შემთხვევაში, ჩანასახი გაქრება, გაიხსნება სითხეში. აქედან გამომდინარე, კრისტალიზაციის ცენტრები ისეთი გადაცივების პირობებში ყალიბდება, რომლის დროსაც წარმონაქმნების რადიუსი კრიტიკულს აღემატება. გადაცივების ხარისხი, რომელიც აუცილებელია კრიტიკული ზომის ჩანასახის წარმოსაქმნელად, მცირდება სითხეში ისეთი ზედაპირის (ფუძეშრის) არსებობის შემთხვევაში, რომელზედაც წინაჩანასახოვანი წარმონაქმნები აღვილად აღმოცენდება და მავრდება. ამ პროცესს, ჰომოგენურისაგან განსხვავებით, ჩანასახის ჰეტეროგენურ წარმოქმნას უწოდებენ.

5.32. ჩანასახის კრიტიკული ზომა. A და B ფაზების თავისუფალ ენერგიებს შორის სხვაობა რაღაც მოცულობაში ΔF -ით აღვნიშნოთ.

როგორც ზემოთ იყო ნაჩვენები, კრისტალიზაციის პროცესი მხოლოდ იმ შემთხვევაში წარიმართება, თუ უფრო მდგრად მდგომარეობაში გადასვლის შედეგად სისტემის საერთო მოგება ენერგიაში მეტი აღმოჩნდება იმ დანაკარგებთან შედარებით, რომელიც გამყოფი ზედაპირის წარმოქმნაზე იხარჯება. აქედან გამომდინარე, რაც უფრო მეტი იქნება გადაცივების ხარისხი n , მით უფრო მეტი იქნება თხევად და მყარ ფაზებს შორის თავისუფალი ენერგიების სხვაობა $\Delta F = F_L - F_s$ (სურ. 5.5). ეს სიდიდე კრისტალიზაციის მამოძრავებელ ძალას წარმოადგენს.



სურ. 5.5. თხევადი და კრისტალური მდგომარეობების თავისუფალი ენერგიების ცვლილების ხახიათი ტემპერატურაზე დამოკიდებულებით

მეორე მხრივ კი გასათვალისწინებელია, რომ სითხისა და კრისტალის საზღვარზე წარმოიქმნება და იზრდება ზედაპირული ენერგია. ერთ ატომზე მოსული ზედაპირული ენერგია დაახლოებით დნობის ფარული სითბოს ნახევრად არის მიღებული. ამ ფაქტორების გათვალისწინებით სისტემის თავისუფალი ენერგია განისაზღვრება, როგორც ორი წევრის ალგებრული ჯამი, რომელთაგან ერთი ახა-

სიათებს ზედაპირულ $S\sigma$, ხოლო მეორე – მოცულობით $V\Delta F_v$ ენერგიებს:

$$\Delta F = S\sigma - V\Delta F_v \quad (5.2),$$

სადაც S არის ჩანასახის ზედაპირი;

σ – ზედაპირული დაჭიმულობა;

V – მოცულობა;

ΔF_v – თხევადი და კრისტალური მდგომარეობების თავისუფალ ენერგიებს შორის სხვაობა მოცულობის ერთეულზე.

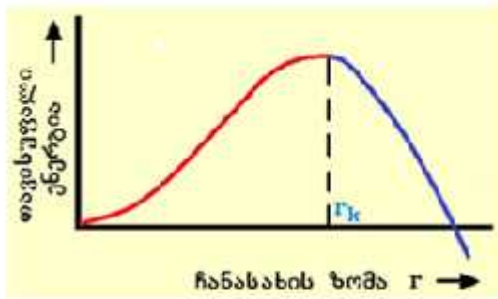
თუ დავუშვებთ, რომ ჩანასახს აქვს სფეროს ფორმა და მის ზედაპირსა და მოცულობას r რადიუსით გამოვსახავთ, მივიღებთ:

$$\Delta F = 4\pi r^2 \sigma - (4/3)\pi r^3 \Delta F_v \quad (5.3)$$

როგორც (5.3) ტოლობიდან გამომდინარეობს, ჩანასახის ზრდასთან ერთად მისი ზედაპირული ენერგია რადიუსის კვადრატის, ხოლო მოცულობითი – რადიუსის კუბის პროპორციულად იზრდება. ამიტომ მცირე რადიუსის მქონე ჩანასახის გაზრდა სისტემის თავისუფალი ენერგიის გაზრდასაც გამოიწვევს, რადგან ამ პირობებში მოცულობა V მცირეა, ხოლო ზედაპირი S – შედარებით უფრო დიდი. რადიუსის რაღაც კრიტიკული მნიშვნელობის ზემოთ კი უპირატესად იზრდება ტოლობის მეორე წევრის აბსოლუტური მნიშვნელობა, რასაც თან სდევს თავისუფალი ენერგიის შემცირება. განტოლების ანალიზიდან გამომდინარე, $\Delta F(r)$ ფუნქციას გააჩნია მაქსიმუმი და იგი ნულის ტოლია, როცა $r=0$.

5.6 სურათზე ნაჩვენებია თავისუფალი ენერგიის ცვლილების გრაფიკი ჩანასახის

ზომაზე დამოკიდებულებით. როგორც გრაფიკიდან გამომდინარეობს, თუ წარმოიქმნება ჩანასახი, რომლის ზომა ნაკლები იქნება r_k -ზე, იგი ვერ გაიზრდება, რადგან ეს გამოიწვევდა სისტემის ენერგიის გაზრდას. ხოლო თუ $r \geq r_k$, მისი ზრდა შესაძლებელია, რადგან უზრუნველყოფილი იქნება სისტემის თავისუფალი ენერგიის შემცირება.



სურ. 5.3. თავისუფალი ენერგიის ცვლილების ხასიათი ჩანასახის რადიუსზე დამოკიდებულებით

ჩანასახის მინიმალურ ზომას, რომლის გაზრდა შესაძლებელია, კრიტიკული ზომა ეწოდება, ხოლო ასეთ ჩანასახს – მდგრადი. კრისტალიზაციის მოცემულ ტემპერატურაზე სხვადასხვა ზომის ჩანასახი წარმოიქმნება, რომელთაგან ისეთები, რომლის რადიუსი $r \geq r_k$ იზრდება, ხოლო დანარჩენები სითხეში იხსნება.

ამგვარად, კრიტიკული r_k რადიუსის განსაზღვრისათვის საჭიროა 5.3 გამოსახულების წარმოებული (რადიუსით) ნულს გაუტოლდეს და ამოიხსნას r -ის მიმართ:

$$\frac{d(\Delta F)}{dr} = 8\pi \sigma - 4\pi r^2 \Delta F_v = 0 \quad (5.4),$$

საიდანაც

$$r_k = \frac{2\sigma}{\Delta F_v} \quad (5.5)$$

თუ გავითვალისწინებთ, რომ $\Delta F_v = nQ/T$, სადაც Q არის მოცულობის ერთეულზე მოსული თბური ენთალპია და ამ გამოსახულებას ჩავსვამთ 5.5 ტოლობაში, მივიღებთ:

$$r_k = \frac{2\sigma}{\Delta F_v} = \frac{1}{n} \frac{2\sigma}{Q} \quad (5.6)$$

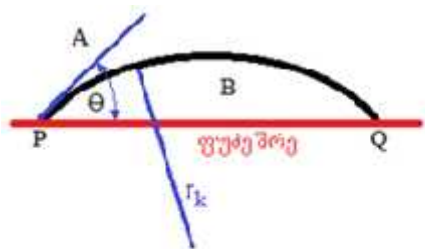
ამგვარად, რაც უფრო მეტია გადაცივების ხარისხი, სხვა თანაბარ პირობებში მით უფრო ნაკლები რადიუსის მქონე ჩანასახი აღმოჩნდება მდგრადი. ამასთან, შემცირდება სისტემის ჯამური თავისუფალი ენერგია.

როგორც (5.5) ტოლობიდან გამომდინარეობს, ჩანასახის კრიტიკულ ზომას განსაზღვრავს აგრეთვე კრისტალისა და სითხის საზღვარზე ზედაპირული დაჭიმულობა σ . სითხის მიდრეკილება გადაცივებისადმი დამოკიდებულია სითხესა და კრისტალში ატომების ახლო წესრიგის მსგავსებაზე. თუ მსგავსება მცირეა, მაშინ

სითხესა და კრისტალს შორის ზედაპირული დაჭიმულობა დიდია, რაც აძნელებს ჩანასახის წარმოქმნას. ასეთ პირობებში გამყოფი ზედაპირის ჩამოყალიბებისათვის ენერგიის დიდი ფლუქტუაციაა საჭირო.

კრიტიკულ რადიუსსა და გადაცივების ხარისხს შორის (5.6) ტოლობით წარმოდგენილი დამოკიდებულება სამართლიანია იმ შემთხვევაში, როდესაც თავისუფალი ენერგია სხვა სახის გარდაქმნებს არ განიცდის. თუ ახალი ფაზის წარმოქმნას იცვლება მისი შედგენილობა ან ენერგია იხარჯება დეფორმაციაზე, რაც შეიძლება განპირობებული იყოს წარმოქმნილი ფაზის განსხვავებული ფორმით ან ზომებით დედა ფაზასთან შედარებით, დამოკიდებულების სახე რთულდება. თუმცა საბოლოო შედეგი მხოლოდ დეტალებში შეიცვლება, ფორმით კი იგივე რჩება.

ზემოთ წარმოდგენილ გამოთვლებში გაკეთებული იყო დაშვება – ჩანასახის ფორმად სფერო განიხილებოდა. სინამდვილეში ტემპერატურა, რომლის დროსაც ამა თუ იმ ზომის რადიუსი კრიტიკულს აღწევს, ზედაპირის სიმრუდის რადიუსზეა დამოკიდებული და მას არ განსაზღვრავს სფეროს სრულყოფილება. იმის ალბათობა, რომ ატომების ესა თუ ის გროვა გარკვეულ მოცულობას აღწევს, თითქმის სრულად არის დამოკიდებული ატომების რაოდენობაზე და მნიშვნელოვნად უფრო ნაკლები ხარისხით – გროვის ზედაპირის ფორმაზე. აქედან გამომდინარე, სავსებით სამართლიანია განვიხილოთ არასფერული ფორმის ატომების ასეთი გროვა, როგორც გარკვეული სიმრუდის მქონე სფეროს ნაწილი. ამ ტიპის ჩანასახის სქემა 5.7 სურათზეა წარმოდგენილი. თუ ასეთი ჩანასახი იმ ტემპერატურაზე არსებობს, რომელიც r_k რადიუსისთვის კრიტიკულს წარმოადგენს, მისი ამოზნექილი ზედაპირის



სურ. 5.7. პეტროგენური ჩანასახის წარმოქმნის სქემა

ნაწილი შეიძლება თანაბარი ალბათობით ან მცირედებოდეს, ან ფართოდებოდეს. თუმცა უბნები PQ პერიფერიაზე, რომელთა რადიუსი კრიტიკულზე მნიშვნელოვნად ნაკლები სიდიდისაა, სწრაფად შემცირდება იმ შემთხვევაში, თუ არ მოხდა რაიმე ხერხით მათი სტაბილიზაცია. ასეთი მდგრადობა მათ შეიძლება მივანიჭოთ შესაბამისი ფუძეშრის

გამოყენებით, რომელიც შედარებით უფრო დაბალი ენერგიის ადგილებს ქმნის B ფაზის ატომებისათვის. ფუძეშრის ეფექტურობა განისაზღვრება θ კუთხის მინიმალური მნიშვნელობით, რომლის დროსაც ატომები მდგრადობას ინარჩუნებს B ფა-

ზაში ადგილების დაკავებისას. ასეთი კუთხის მნიშვნელობა დამოკიდებულია A, B და A-B ზედაპირების თავისუფალი ენერგიების მნიშვნელობებზე – σ_{AS} , σ_{BS} და σ_{AB} შესაბამისად.

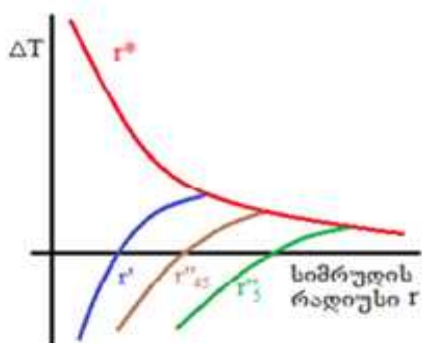
θ კუთხის წონასწორული მნიშვნელობა შემდეგი პირობით განისაზღვრება:

$$\sigma_{AS} = \sigma_{BS} + \sigma_{AB} \cos \theta \quad (5.7)$$

θ კუთხის მცირე სიდიდე ისეთ შემთხვევას შეესაბამება, როდესაც B ფაზისა და ფუძეშრის გამყოფი ზედაპირის თავისუფალი ენერგია ნაკლებია A ფაზისა და ფუძეშრის გამყოფი ზედაპირის თავისუფალ ენერგიაზე. ეს პირობა შესრულდება იმ შემთხვევაში, როდესაც B ფაზის ატომებსა და ფუძეშრეს შორის კავშირია განხორციელებული. მართალია, ორი სტრუქტურის ატომთაშორისი მანძილების კარგი თანხვედრა ხელს უწყობს დაბალი ენერგიის მქონე ზედაპირის ჩამოყალიბებას, მაგრამ ჰეტეროგენური ჩანასახი შეიძლება წარმოიქმნას θ კუთხის ნებისმიერი მნიშვნელობის შემთხვევაშიც, რომელიც ნაკლებია 180° -ზე. აღნიშნული შეესაბამება პირობას:

$$\sigma_{AS} < \sigma_{BS} + \sigma_{AB} \cos \theta \quad (5.8)$$

θ კუთხე r_k რადიუსის მქონე სფერული თაღის მოცულობას და, შესაბამისად, კრიტიკული ზომის ჩანასახში ატომების i რიცხვს განსაზღვრავს. როდესაც θ კუთხე 180° -ზე ნაკლებია, ჰეტეროგენურ ჩანასახში ატომების რიცხვი ნაკლებია ჰომოგენურ ჩანასახთან შედარებით. ფუძეშრეზე საკმარისი მოცულობის კრისტალიზაციის ცენტრების არსებობის მიახლოებითი პირობები 5.8 სურათზეა წარმოდგენილი, სადაც r' არის ყველაზე მსხვილი ჩანასახის სიმრუდის რადიუსი (როგორც ნავარაუდევია



სურ. 5.8. მხები კუთხის გავლენა ჰეტეროგენური ჩანასახის წარმოქმნაზე

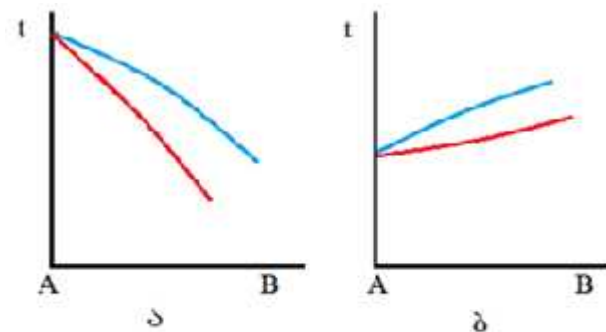
იყო, თუ მას სფეროს ფორმა აქვს), ხოლო r'' - სფეროსებრი თაღის მქონე იგივე ზომის ჩანასახის სიმრუდის რადიუსი, რომელიც θ კუთხით არის განპირობებული (იხ. სურ. 5.7). r'' მრუდები გავლენილია θ კუთხის 45° და 5° მნიშვნელობებისათვის. წარმოდგენილი სქემიდან გამომდინარეობს, რომ შესაბამისი ფუძეშრის შემთხვევაში კრისტალიზაციის ცენტრების ჩანასახისათვის მნიშვნელოვნად უფრო

მცირე გადაცივების ხარისხია საჭირო. θ კუთხის შემცირებასთან ერთად ჩანასახის წარმოქმნის პროცესზე ფუძემდებლის ზედაპირის კატალიზური ეფექტიანობა იზრდება.

5.4. ორკომპონენტური სისტემა.

ჩვენ მიერ ზემოთ განხილულ საკითხებში იგულისხმებოდა, რომ სითხის კრისტალიზაციის პროცესში ყველა ატომი ერთგვაროვანი და ურთიერთშენაცვლებადი იყო. თუ ატომები ნაირგვაროვანია და გახსნილი კომპონენტის ატომების ხსნადობა სითხეში მეტი ან ნაკლებია მყარ ფაზაში ხსნადობასთან შედარებით, პროცესი განსხვავებულად წარიმართება. კერძოდ, თუ გახსნილი ნივთიერების (მინარევის) კონცენტრაცია სითხეში უფრო მეტია, ვიდრე კრისტალში, ლიკვიდუსისა და სოლიდუსის ტემპერატურები დაბლა იწევს (სურ. 5.9, ა) და პირიქით, მყარ ფაზაში უფრო მეტი ხსნადობა ლიკვიდუსისა და სოლიდუსის ხაზების აწევას განაპირობებს (ბ). ამის მიზეზი ხარისხობრივად შეიძლება შემდეგნაირად ჩამოყალიბდეს:

1. თუ გახსნილი, B კომპონენტის კონცენტრაცია მყარ და თხევად ფაზებში თანაბარია, მაშინ წონასწორულ ტემპერატურაზე მყარიდან თხევად ფაზაში ატომების უფრო მეტი რაოდენობა გადადის,



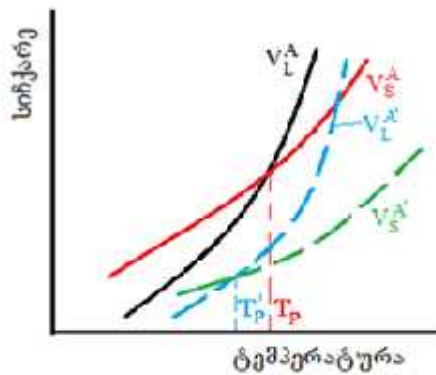
სურ. 5.9. ორმაგი სისტემების მდგომარეობის დიაგრამების ტიპური უბნები

ვიდრე თხევადიდან მყარში. პროცესი გაგრძელდება მანამ, სანამ არ დამყარდება ისეთი კონცენტრაცია, როდესაც ერთი ფაზიდან მეორეში ატომების გადასვლის სიჩქარეები არ გათანაბრდება. ასეთ პირობებში B კომპონენტი ღდობის უფრო დაბალი აქტივაციის ენერგიით ხასიათდება A-თან შედარებით. ენერგიის შემცირება განპირობებულია A ატომების განთავსებით B-ს კრისტალურ გისოსში.

2. სუფთა A ფაზისათვის წონასწორულს წარმოადგენს ისეთი ტემპერატურა, რომლის დროსაც მისი გახსნისა და გამყარების სიჩქარეები ერთმანეთის ტოლია (თუ ორივე ფაზა – როგორც სითხე, ისე მყარი, მხოლოდ A ატომებს შეიცავს).

3. თუ თხევად და მყარ ფაზებს B ნივთიერებით „განვაზავებთ“, მაშინ ღდობისა და გამყარების სიჩქარეები შემცირდება ფაზების „განვაზავების“ ხარისხის პრო-

პორციულად. ამგვარად, სუფთა A ნივთიერების წონასწორული ტემპერატურის პირობებში A და B სითხეების გამყარების პროცესი უფრო მეტი ხარისხით ნელდება, ვიდრე ღღობის პროცესი, რადგან A-ს „განზავების“ ხარისხი თხევად ფაზაში უფრო მეტია, ვიდრე მყარში. შესაბამისად, სისტემის წონასწორული ტემპერატურა დაბლა დაიწევს.



სურ. 5.10. ხსნარში არსებული მინარევების გადელენა გამყარებასა და დნობაზე

5.10 სურათზე წარმოდგენილია A კომპონენტის სიჩქარის მრუდები განსახილველი შემთხვევისათვის, სადაც v_L^A და v_S^A სუფთა A კომპონენტის, ხოლო $v_L^{A'}$ და $v_S^{A'}$ – AB შენადნობის მახასიათებლებია. T_p და T'_p შესაბამისად სუფთა A კომპონენტისა და AB შენადნობის წონასწორული ტემპერატურებია.

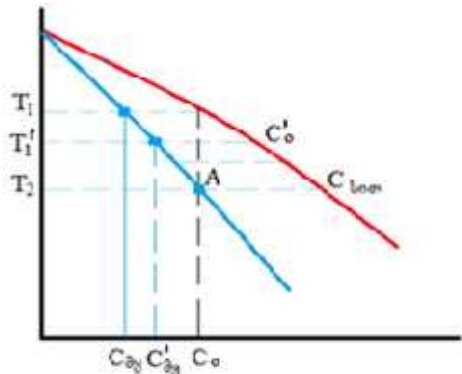
მყარ და თხევად ფაზებში მინარევების კონცენტრაციების ურთიერთშეფარდება (C_S/C_L), უმეტეს შემთხვევაში, მუდმივად არის შენარჩუნებული ტემპერატურათა ფართო დიაპაზონში. ამ თანაფარდობას მინარევების განაწილების კოეფიციენტი (k) ეწოდება. როგორც წესი, შენადნობებისათვის მისი მნიშვნელობა ერთზე ნაკლებია, თუმცა არსებობს არაერთი მაგალითი, როდესაც ეს სიდიდე ერთს აღემატება.

თუ წონასწორულ პირობებში სითხის უმნიშვნელო მოცულობა კრისტალდება, რომელშიც B კომპონენტის კონცენტრაცია შეადგენს C_L -ს, მაშინ მყარი ფაზაც უნდა შეიცავდეს B კომპონენტს რაღაც C_S რაოდენობით ($C_S/C_L = k < 1$). რჩება B კომპონენტის რაღაც გაუთვალისწინებელი წილი ($C_L - C_S$), ანუ $C_L(1-k)$ რაოდენობით, რომელიც მყარი ფაზიდან კვლავ სითხეში განიდევნება. შედეგად B კომპონენტის შემცველობა სითხეში რამდენადმე მატულობს. როგორ აისახება ეს შემდგომში გამოკრისტალებული მყარი ფაზის შედგენილობაზე, დამოკიდებული იქნება ჭარბი მინარევების გადანაწილების ხასიათზე სითხის დარჩენილ მოცულობაში.

აღნიშნული რეალური პირობების სავარაუდო შედეგების განხილვამდე, მიზანშეწონილია სამი მარტივი შემთხვევის გაანალიზება.

1. წონასწორობა მუდმივად არის შენარჩუნებული. განვიხილოთ C_0 შედგენი-

ლობის სითხე (სურ. 5.11). იგი გამყარებას იწყებს T_1 ტემპერატურაზე $C_{\text{ფ}}$ შედგენილობის მეტად მცირე მოცულობის მყარი ფაზის წარმოქმნით. სითხის შედგენილობა მცირედ იცვლება C' -მდე, რის გამოც შემდგომი გამოკრისტალება უმნიშვნელოდ შემცირებულ, T'_1 ტემპერატურაზე განახლდება. მოცემულ ეტაპზე ჩამოყალიბებული

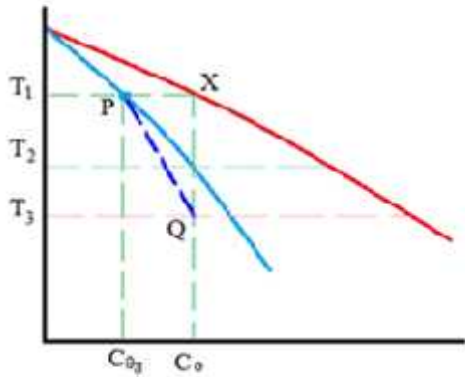


სურ. 5.11. შედგენილობის ცვლილება შენადნობის წონასწორულ პირობებში გაცივებისას

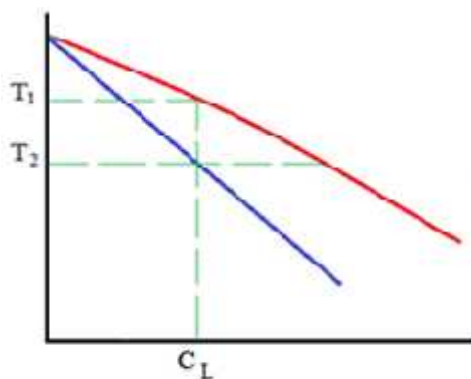
მყარი ფაზა ხასიათდება C' -ზე წერტილის შესაბამისი შედგენილობით. სრული წონასწორობის პირობების თანახმად, ასეთი შემადგენლობა უნდა ჰქონდეს მთელ გამოკრისტალბულ ფაზას, რაც შეიძლება მიღწეული იყოს მხოლოდ მასში მიმდინარე დიფუზიური პროცესებით. სითხის შედგენილობა გადაადგილდება ლიკვიდუსის, ხოლო მყარი ფაზისა – სოლიდუსის ხაზის გასწვრივ. მონაკვეთების წესის თანახმად, აღნიშნული ფაზების რაოდენობა შესაბამისი მონაკვეთების პროპორციულია. როდესაც სითხის ტემპერატურა T_2 -მდე შემცირდება (A წერტილი), ხოლო მყარი და თხევადი ფაზების შედგენილობა C_0 და $C_{\text{სოლ}}$ შესაბამისი აღმოჩნდება, გამყარების პროცესი დამთავრდება, ანუ მთელი ნივთიერება C_0 შედგენილობის მყარ ფაზაში გადასული აღმოჩნდება.

2. სითხე ყოველთვის ინარჩუნებს ერთგვაროვან შედგენილობას, ხოლო მყარ ფაზაში დიფუზია არ მიმდინარეობს. წინა შემთხვევის ანალოგიურად, გამყარების პროცესი იწყება T_1 ტემპერატურაზე (P წერტილი, სურ. 5.12) $C_{\text{ფ}}$ შედგენილობის მყარი ფაზის წარმოქმნით. შემდგომში სითხე შედგენილობას იცვლის ლიკვიდუსის ხაზის შესაბამისად, ხოლო თანმიმდევრულად ჩამოყალიბებული მყარი ფაზის კრისტალების შედგენილობა განუწყვეტლივ იცვლება $C_{\text{ფ}}$ -დან გახსნილი კომპონენტის ზრდის მიმართულებით. მყარი ფაზის საშუალო შედგენილობა სითხის შედგენილობის შესაბამისი კი აღარ იქნება, არამედ იგი პასუხობს PQ წრფის რომელიმე წერტილს. აქედან გამომდინარე, T_2 ტემპერატურაზე სითხე სრულად არ კრისტალდება. მთელი მასა მყარ მდგომარეობაში მხოლოდ მაშინ გადავა, როდესაც მყარი ფაზის საშუალო შედგენილობა C_0 -ს გაუტოლდება, ანუ T_3 ტემპერატურაზე (Q წერტილი).

3. მყარ ფაზაში დიფუზია არ მიმდინარეობს, ხოლო სითხეში შერევა მხო-



სურ. 5.12. შედგენილობის ცვლილება შენადნობის გაცივებისას. დიფუზია მყარ ფაზაში არ მიმდინარეობს.



სურ. 5.13. მდგრადი მდგომარეობა შენადნობის კრისტალიზაციის დროს

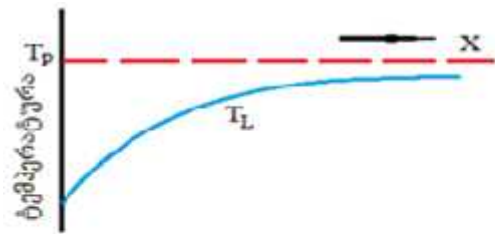
ლოდ დიფუზიით ხორციელდება. ამ შემთხვევაში სითხეში მინარევების განაწილება დამოკიდებული უნდა იყოს გამყარების v სიჩქარეზე, სითხეში დიფუზიის D სიჩქარესა და მინარევის განაწილების k კოეფიციენტზე. დავუშვათ, გამყარება კრისტალიზაციის ფრონტის (ზედაპირის) მუდმივი სიჩქარით გადაადგილების პირობებში მიმდინარეობს. T_1 ტემპერატურაზე (სურ. 5.13), გამყარების პროცესში, კრისტალიზაციის ფრონტის წინ დაგროვილი მინარევები სითხეში დიფუნდირებას დაიწყებს. აღნიშნულ ზონაში მინარევების კონცენტრაცია თითქმის ექსპონენციალური კანონით შეიცვლება მანამ, სანამ გამყარების პროცესში გამოდევნილი მინარევების ჭარბი რაოდენობა არ გაუტოლდება სითხეში უკან დიფუნდირებული მინარევების რაოდენობას. დამყარდება წონასწორობა, რომლის დროსაც კრისტალიზაციის ფრონტის წინ და მის მახლობლობაში ჩამოყალიბებული პირობები თხევადი ფაზის

არსებობის ბოლომდე იქნება შენარჩუნებული. პროცესის შემდგომი განვითარება ხელს შეუწყობს ფაზათა გამყოფ საზღვარზე მინარევების კონცენტრაციის შემდგომ ზრდას, რაც მოვლი სითხის სრულ გამყარებამდე გაგრძელდება. ამიტომ მინარევების კონცენტრაცია ნაღვლობის უკანასკნელ ნარჩებებში შეიძლება საგრძნობლად აღემატებოდეს მის საწყის მნიშვნელობას.

თუ საკითხს ხარისხობრივი თვალსაზრისით განვიხილავთ, იმ დასკვნამდე მივალთ, რომ მინარევების კონცენტრაცია სითხის ზედაპირთან უფრო მეტია, ვიდრე მის დანარჩენ მოცულობაში. ამიტომ ამ უბნების ლიკვიდუსის ტემპერატურა უფრო დაბლა დაიწვეს საწყის თხევად ფაზასთან შედარებით. მაღალი ტემპერატურის პირობებში სითხე მდგრად მდგომარეობაში აღმოჩნდება, შედარებით დაბალ ტემპერატურაზე კი შესაძლებელი გახდება მყარი ფაზის წარმოქმნა. ეს ადასტურებს მოცემული სითხის გადაცივებულ მდგომარეობას. ლიკვიდუსის ტემპერატურასა და სითხის ფაქტობრივ ტემპე-

რატურას შორის სხვაობა ΔT მისი გადაცივების ხარისხის ზომას წარმოადგენს.

ლიკვიდუსის ტემპერატურის ტიპური მრუდი კრისტალიზაციის ფრონტიდან დაცილებასზე დამოკიდებულებით 5.14 სურათზეა წარმოდგენილი. მდგრადი მდგომარეობიდან გამომდინარე, ფაზათა გამყოფი ზედაპირის ტემპერატურა სოლიდუსის ტემპერატურის, ანუ 5.13 სურათზე წარმოდგენილი T_2 ტემპერატურის ტოლი აღმოჩნდება C_L



სურ. 5.14. ლიკვიდუსის ტემპერატურის ცვლილება კრისტალიზაციის ფრონტიდან დაცილებასზე დამოკიდებულებით.

შედგენილობის სითხისათვის და იგი არ იქნება დამოკიდებული გამყარების Ψ სიჩქარეზე. ამგვარად, ლიკვიდუსის ტემპერატურასა და კრისტალიზაციის ფრონტიდან ფაზათა გამყოფი ზედაპირის დაცილებას შორის ურთიერთკავშირი ყოველთვის ექსპონენციალური ხასიათისაა და არ არის დამოკიდებული Ψ სიდიდეზე.

5.5. „კონცენტრაციული“ გადაცივება.

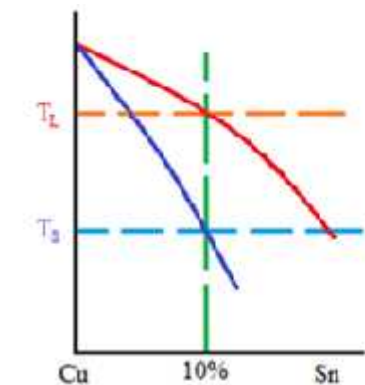
გადაცივება, რომელიც მიიღება ზედაპირის ტემპერატურის შემცირებით (დეპრესიით), „კონცენტრაციული“ გადაცივება ეწოდება.

საკმარისი კონცენტრაციული გადაცივების შემთხვევაში, ახალი კრისტალები შეიძლება ნაღვლობის მოცულობაშიც ჩაისახოს. ისინი დენდრიტების სახით იზრდებიან, რადგან მათი ფორმირება გადაცივებულ სითხეში ხდება. კრისტალების ზრდა მალე მუხრუჭდება, რადგან ფარული სითბოს გამოყოფის შედეგად გარდაუვალია მისი გარემომცველი სითხის ტემპერატურის მატება და გადაცივების ხარისხის ნულამდე დაცემა. ამას ხელს უწყობს აგრეთვე დარჩენილი სითხის გამდიდრება მინარევებით, რომელიც ადაბლებს ლიკვიდუსის ტემპერატურას. ყოველივე ამის შედეგად ნაღვლობაში საკმაოდ მტკიცე დენდრიტული აგებულების კრისტალური კარკასი ყალიბდება. სწორედ ამით აიხსნება ის გარემოება, რომ ზოგიერთი შენადნობი კრისტალიზაციის პროცესში ე.წ. „ცომისებური“ (პასტისებური) მდგომარეობის პერიოდს გადის. დენდრიტებს შორის სივრცეში დარჩენილი სითხე, საბოლოო ჯამში გარემოში სითბოს გაცემის გზით მყარდება.

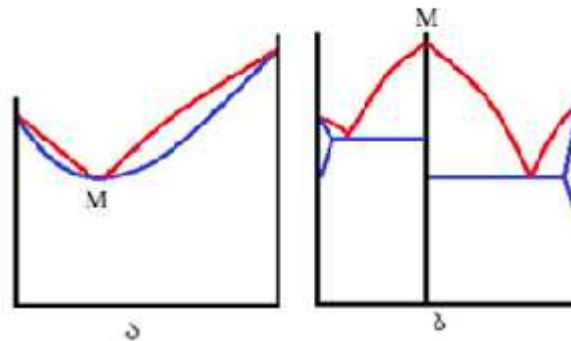
თუ დავუშვებთ, რომ სითხის რაღაც ნაწილი თავის საწყის შედგენილობას

ინარჩუნებს და მისი მთელი მოცულობის ტემპერატურა ფაზათა გამყოფი ზედაპირის შესაბამისია, მიღწევადი „კონცენტრაციული“ გადაცივების ხარისხი შეიძლება მდგომარეობის დიაგრამის მიხედვით განისაზღვროს. ასეთ შემთხვევაში გადაცივების მაქსიმალური ხარისხის ზომას საწყისი შედგენილობის სითხის ლიკვიდუსისა (T_L , საწყისი სითხის ლიკვიდუსის ტემპერატურა) და სოლიდუსის (T_S , ფაზათა გაყოფის ზედაპირის ტემპერატურა წონასწორულ მდგომარეობაში) ტემპერატურებს შორის წვეგის სიდიდე წარმოადგენს ვერტიკალური მიმართულებით (სურ. 5.15). უმეტეს შემთხვევაში ჩანასახი ასეთი გადაცივების მიღწევამდე წარმოიქმნება.

ბუნებრივად იგულისხმება, რომ კონცენტრაციული გადაცივება არ მიიღწევა იმ შემთხვევაში, როდესაც ლიკვიდუსის ხაზი სოლიდუსისას უთავსდება (სუფთა ლითონები, ევტექტიკური შენადნობები და ისეთი შემთხვევები, როდესაც ლიკვიდუსისა და სოლიდუსის ხაზებზე მინიმუმი ან მაქსიმუმი მიიღება (სურ. 5.16). ამ შემთხვევაში სითხე არ გაივლის კრისტალიზაციის ე.წ. „ცომისებური“ (პასტისებური) მდგომარეობის სტადიას, არ განვითარდება აგრეთვე არც დენდრიტული კრისტალიზაცია იმ შემთხვევაში, თუ სითხე არ არის გადაცივებული ფაზათა გამყოფი ზედაპირის ტემპერატურის ქვემოთ, რის მიღწევაც შეუძლებელია აღნიშნული ზედაპირიდან სითბოს გამოტანის შემთხვევაში.



სურ. 5.15. მაქსიმალურად მიღწევადი კონცენტრაციული გადაცივების ხარისხი



სურ. 5.16. განსაკუთრებული შემთხვევები, როდესაც შეუძლებელია კონცენტრაციული გადაცივება

ერთზე მეტი ფაზის ჩამოყალიბების პროცესის გაანალიზებისათვის რამდენიმე შემთხვევის გათვალისწინებაა საჭირო:

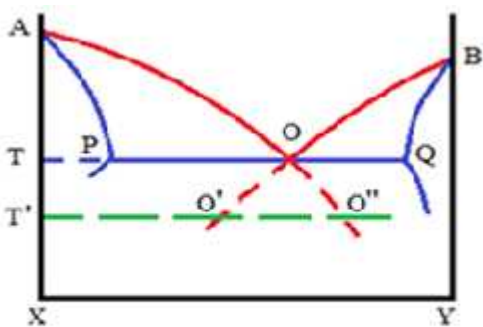
1. სითხის შედგენილობა ევტექტიკურია, ანუ შესაბამის ტემპერატურაზე ორი მყარი ფაზა ერთდროულად იმყოფება წონასწორობაში სითხესთან.

2. სითხე ისეთი შედგენილობისაა, რომ ევტექტიკურ კონცენტრაციას მისი შემადგენელი ერთ-ერთი კომპონენტით გამდიდრების ხარჯზე აღწევს, რაც განპირობებულია ჭარბი მინარევის დაგროვებით ფაზათა გამყოფ ზედაპირზე. ასეთი სისტემებია:

ა - ევტექტიკური, როდესაც საწყისი თხევადი ფაზის შედგენილობა არაევტექტიკურია;

ბ - პერიტექტიკური, როდესაც სათანადო შედგენილობის სითხე რეაგირებს პირველ ეტაპზე გამოყოფილი მყარი ფაზის კრისტალებთან მეორე მყარი ფაზის კრისტალების წარმოქმნით.

5.5.1. ევტექტიკური სისტემა. ევტექტიკური სისტემა წარმოიქმნება, როგორც ორი ლიკვიდუსის მრუდის გადაკვეთის შედეგი (სურ. 5.17). O წერტილში P და Q შედგენილობის ორი მყარი ფაზა წონასწორობაში იმყოფება სითხესთან. როგორც ჩანს, სითხესთან წონასწორობაში მყოფი გამოკრისტალებული მყარი ნივთიერება



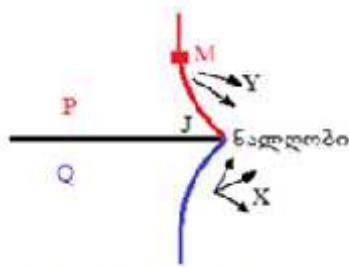
სურ. 5.17. ევტექტიკური კრისტალიზაცია

ორფაზაა და ისეთივე საშუალო შედგენილობით ხასიათდება, როგორითაც სითხე. აქედან გამომდინარე, ასეთი ნაღლობის გამყარება შეიძლება სითხის შედგენილობის ცვლილების გარეშე წარიმართოს. ამიტომ არ არის აუცილებელი მინარევის დიფუზიური გადაადგილება კრისტალიზაციის ფრონტის მიმართულებით მიუხედავად იმისა, რომ ერთმანეთის-

გან სრულიად განსხვავებული შედგენილობის ორი მყარი ფაზა ყალიბდება. ექსპერიმენტულად ნაჩვენებია, რომ აღნიშნული ფაზები ტიპურ შემთხვევებში პრაქტიკულად ერთდროულად წარმოიქმნება.

სითხიდან P და Q წერტილების შედგენილობის კრისტალების წარმოქმნასთან სდევს მათი გარემომცველი სითხის გამდიდრება შესაბამისად Y და X კომპონენტებით. ამიტომ სითხეში გრძივი მიმართულების გარდა, რომელიც ერთფაზა მყარი სხეულის გამყარებისას შეინიშნება, კონცენტრაციული გრადიენტი განივი მიმართულებითაც წარმოიქმნება. ამგვარად, ორივე მყარი ფაზა გარშემორტყმული აღმოჩნდება O წერტილის შედგენილობისაგან განსხვავებული, O' და O'' წერტილების

შესაბამისი შედგენილობის სითხით (სურ. 5.17). ასეთი შედგენილობის თხევადი ფაზა T' ტემპერატურაზე გამოკრისტალდება და ფორმირებული მყარი ფაზები შედგენილობით რამდენადმე განსხვავებული აღმოჩნდება წონასწორული P და Q წერტილებისაგან. წონასწორული მდგომარეობა დადგება მაშინ, როდესაც სითხეში მზარდი ორივე კომპონენტში ჭარბი მინარევების შემცველობა გაწონასწორდება დიფუზიის მიმდინარეობით. ასე მაგალითად, სითხის შედგენილობა M წერტილში (სურ. 5.18) განისაზღვრება Y კომპონენტის ატომების განდევნისა (P კრისტალის ზრდის გამო) და X კომპონენტის ატომებით მისი ჩანაცვლების სიჩქარით. სითხის ფაქტობრივი (ლოკალური) შედგენილობა წერტილიდან წერტილამდე იცვლება, მაგრამ ორი კრისტალის შეპირაპირების ადგილში (J წერტილი, სურ. 5.18), პრაქტიკულად O კონცენტრაციის შესაბამისი რჩება (სურ. 5.17). აღნიშნული შედგენილობიდან გადახრა მით უფრო მეტია, რაც უფრო გრძელია დიფუზიური გზა განივი მიმართულებით.



სურ. 5.18. ორი ფაზის შეპირაპირების სქემა

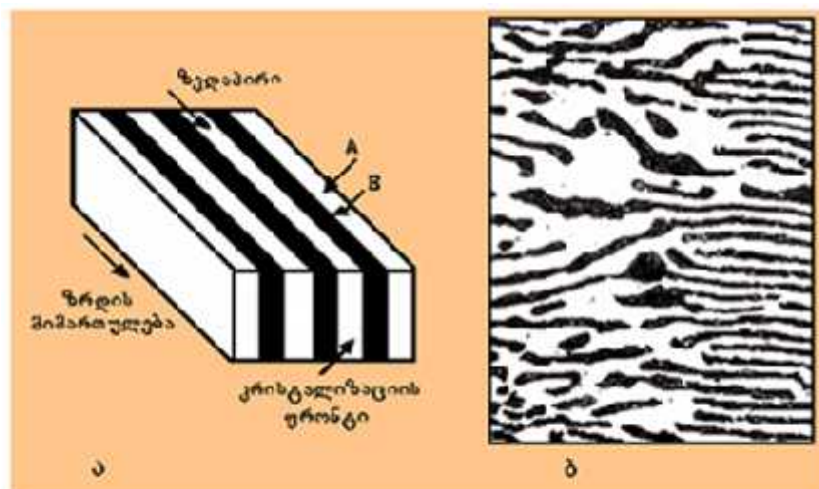
ანალოგიურად იცვლება ფაზათა გაყოფის ზედაპირის ტემპერატურაც, რის გამოც მზარდი კრისტალის ზედაპირი ისეთ ფორმას ღებულობს, როგორიც ეს 5.18 სურათზეა წარმოდგენილი. P კრისტალის წინ სითხის Y კომპონენტით გამდიდრება არ შეიძლება უსაზღვროდ გაგრძელდეს, რადგან ყოველ აქტს გარკვეული გადაცივება შეესაბამება წონასწორულ Q მდგომარეობასთან

შედარებით. თუ გადაცივება საგრძნობლად დიდია, დაიწყება Q კრისტალების ჩანასახის წარმოქმნა და ახალი კრისტალების ზრდა.

ამგვარად, P და Q კრისტალების ზომა განივი მიმართულებით შეზღუდულია. შეზღუდვის ხარისხი მით უფრო მეტია, რაც უფრო დიდია კრისტალების ზრდის სიჩქარე, რადგან ამ შემთხვევაში დიფუზიის მასშტაბები იზღუდება და იზრდება გადაცივების ხარისხი სითხეში J -დან გარკვეულ მანძილზე.

მოსაზღვრე ფაზების კრისტალების გეომეტრიული ფორმა მთელ რიგ ფაქტორებზეა დამოკიდებული, რომელთაგან ყველაზე არსებითია: თითოეული კრისტალური ფაზის მოცულობა და მისი ზრდის სიჩქარეები; კრისტალების მიდრეკილება, გაიზარდოს დიდი ატომური სიმჭიდროვის მქონე კრისტალოგრაფიული სიბრტყის მიმართულებით; მესამე კომპონენტის მცირე მინარევების არსებობა.

ყველაზე ჩვეულებრივ შემთხვევას ორივე ფაზის მოცულობის მიახლოებითი ტოლობა წარმოადგენს. ასეთ შემთხვევაში ევტექტიკა ღებულობს ფირფიტოვან აგებულებას, რომლის სქემა და მიკროსტრუქტურა 5.19 სურათზეა წარმოდგენილი. ასეთი სტრუქტურა A და B ფაზების ურთიერთმონაცვლეობით ხასიათდება. ხშირად



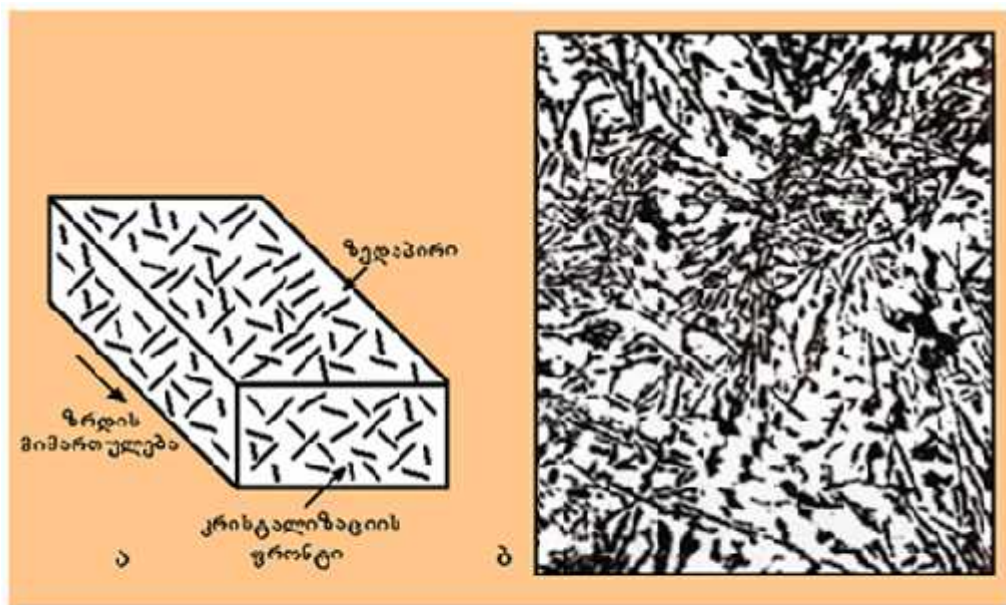
სურ. 5.19. ფირფიტოვანი ევტექტიკის ზრდის სქემა (ა) და ევტექტიკის სტრუქტურა Sn-Pb სისტემის შენადნობებში (ბ, $\times 1000$)

ყოველ ფაზას ისეთი კრისტალოგრაფიული ორიენტაცია გააჩნია, რომელიც ყველა ფირფიტისთვის იდენტურს წარმოადგენს. ეს მათი ერთიანი ჩანასახიდან საერთო წარმომავლობისა და უწყვეტობის (მთლიანობის) დასტურია. არსი იმაში მდგომარეობს, რომ ორივე ფაზის კრისტალი ერთმანეთის გვერდიგვერდ იზრდება. დიფუზიური მანძილი ფაზათა ურთიერთშედწევით იზღუდება და არა ახალ-ახალი ჩანასახების წარმოქმნით. ამ ეტაპზე კრისტალების გეომეტრია მეტად რთულია, თუმცა შესაძლებელია მისი წარმოდგენა იმის გათვალისწინებით, რომ ფაზები უწყვეტად, ერთის მეორეში შედწევით იზრდება.

თუ ერთ-ერთი ფაზა მნიშვნელოვნად მცირე მოცულობას იკავებს მეორესთან შედარებით, მაშინ იგი იზოლირებული ფირფიტების, ღეროების (ნემსების) ან გლობულების სახით ყალიბდება. საჭიროა ერთმანეთისგან განვასხვაოთ მთლიანი, უწყვეტი და წყვეტილი ევტექტიკური სტრუქტურები, რომელთა წარმოქმნისათვის აუცილებელია ერთ-ერთი ფაზის კრისტალიზაციის ცენტრების ხშირი ჩასახვა. აქედან გამომდინარე, უკანასკნელ შემთხვევაში მყარი სხეულის სტრუქტურაში უწყვეტი და წყვეტილი ფაზები თანაარსებობს. როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, წყვეტილი

ფაზა ერთ შემთხვევაში შეიძლება იყოს „ნემსისებრი“ ან ქერცლოვანი (ფირფიტოვანი) აგებულების, ხოლო მეორე შემთხვევაში – გლობულარული.

პირველ შემთხვევაში, რომლის თვალსაჩინო მაგალითს Al-Si სისტემის ევტექტიკური შენადნობები (სურ. 5.20) წარმოადგენს, წყვეტადობა იმით არის განპირობებული, რომ სილიციუმით მდიდარი ნებისმიერი ფაზა იმ მიმართულებით იზრდება, რომელსაც მათი კრისტალოგრაფია და ორიენტაცია განსაზღვრავს ჩასახვის პროცესში. ამიტომ სივრცეში ნემსების განლაგება და მათი მიმართულება არ არის ერთგვაროვანი, რაც აუცილებელია ფაზის უწყვეტი ზრდისათვის.



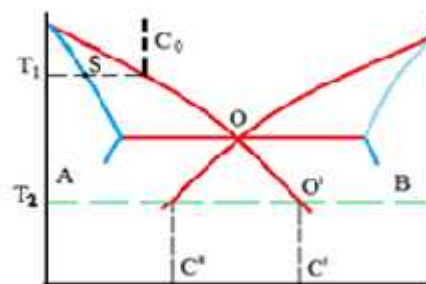
სურ. 5.20. ნემსისებრი ევტექტიკის ზრდის სქემა (ა) და ევტექტიკის სტრუქტურა Al-Si სისტემაში (ბ). x100

წყვეტილი აგებულების მეორე თვალსაჩინო მაგალითს რკინა-ნახშირბადის ევტექტიკის აგებულება წარმოადგენს, რომელიც თუჯებში წარმოიქმნება. ნახშირბადით მდიდარ ფაზას მოცემულ შემთხვევაში გრაფიტი წარმოადგენს, რომელიც თუჯში, უმეტეს შემთხვევაში, ქერცლოვანი აგებულების (ფირფიტოვანი) ფორმას ღებულობს (სურ. 5.21).

ევტექტიკური სისტემის არაევტექტიკური შედგენილობის შენადნობის გამყარების პროცესის გასაანალიზებლად განვიხილოთ C_0 შედგენილობის შენადნობის კრისტალიზაცია (სურ. 5.22). გამყარება იწყება T_1 ტემპერატურაზე S შედგენილობის A ფაზის გამოყოფით. თუ ვივარაუდებთ, რომ შერევა მხოლოდ დიფუზიის გზით მიმ-



სურ. 5.21. თუჯის მიკროსტრუქტურა. 200. ქერცლოვანი (ფირფიტოვანი) გრაფიტი



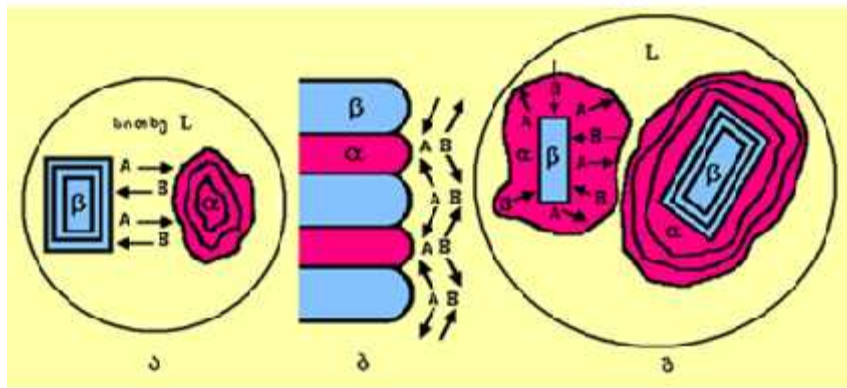
სურ. 5.22. ევტექტიკური სისტემაში არაევტექტიკური შენადნობის გამყარება

დინარეობს, მაშინ A ფაზის პირველადი კრისტალები გაიზრდება მანამ, სანამ მათი გარემომცველი სითხე არ მიაღწევს რაღაც O' წერტილის შედგენილობას და ტემპერატურას, რომლის დროსაც B ფაზის ჩანასახების აღმოცენება დაიწყება.

ზოგადად, პირველად კრისტალებს დენდრიტული აგებულება უნდა ჰქონდეს, რადგან მოცემულ პირობებში შესაძლებელია ადგილი ჰქონდეს მნიშვნელოვან კონცენტრაციულ გადაცივებას. თუ დაიწყება B ფაზის ჩანასახების წარმოქმნა და სითხის მთელ მასას ექნება ერთნაირი ტემპერატურა, მაშინ A ფაზის დენდრიტების გამოყოფა ზედაპირზე სითხის შედგენილობა C' -დან C'' -მდე შეიცვლება. C'' შეიძლება უმნიშვნელოდ განსხვავდებოდეს C' სიდიდისაგან, რის გამოც სითხის საშუალო შედგენილობა ზუსტად ევტექტიკური არ აღმოჩნდება. მიუხედავად ამისა, დარჩენილი სითხე მყარდება, როგორც ევტექტიკური. ამიტომ ფაზების რაოდენობრივი ურთიერთშეფარდება უმნიშვნელოდ იქნება გადახრილი ევტექტიკისათვის დამახასიათებელი თანაფარდობიდან.

ამგვარად, ევტექტიკურ ტემპერატურაზე წონასწორობაში იმყოფება სამი ფაზა – სითხე L, α და β მყარი ხსნარები. რაღაც გადაცივებისას გარდაქმნის თერმოდინამიკური სტიმული წარმოიქმნება და იწყება ევტექტიკური გარდაქმნა – $L \rightarrow \alpha + \beta$. სწორედ გადაცივების ხარისხი განსაზღვრავს სითხის ევტექტიკური დაშლის მიმდინარეობას და შენადნობის საბოლოო სტრუქტურას.

მცირე გადაცივების შემთხვევაში α და β კრისტალების ჩანასახი და მათი ზრდა ცალ-ცალკე ხდება. შედეგად ფორმირდება საკმაოდ მსხვილმარცვლოვანი სტრუქტურა (სურ. 5.23, ა). ასეთ ევტექტიკურ წარმონაქმნს უხეში კონგლომერატის სტრუქტურას უწოდებენ.



სურ. 5.23. უხეში კონგლომერატის (ა), ევტექტიკური კოლონიის ფორმირებისა (ბ) და აბნორმალური კრისტალიზაციის დროს (გ) დიფუზიური ნაკადის მიმართულების სქემა

მართალია, ევტექტიკური ფაზების ჩასახვა ერთდროულად არ ხდება, მაგრამ შემდგომში მათი ზრდა პარალელურად ხორციელდება. ეს შესაძლებელი ხდება იმიტომ, რომ α და β კრისტალების გამოყოფ სითხეში კომპონენტების დიფუზიური გადანაწილება მიმდინარეობს. ევტექტიკური შედგენილობის სითხიდან β მყარი ხსნარის გამოყოფისას სითხის მიმდებარე მოცულობა ღარიბდება B კომპონენტით, ხოლო α -ს გამოყოფისას – A კომპონენტით. თხევად ხსნარში A და B კომპონენტების კონცენტრაციული გრადიენტის წარმოქმნის გამო სითხეში, კრისტალიზაციის ფრონტზე, მიმდინარეობს მათი დიფუზიური გადატანა: B კომპონენტი მოცემულ შემთხვევაში დიფუნდირებს მარჯვნიდან მარცხნივ, ხოლო A კომპონენტი – საწინააღმდეგო მიმართულებით (სურ. 5.23, ა). სწორედ ასეთი პროცესი უზრუნველყოფს α და β ფაზების გამოყოფას სითხეში უკვე არსებულ შესაბამის კრისტალებზე, რაც, თავის მხრივ, ორივე ფაზის ერთდროულ კრისტალიზაციას განაპირობებს ახალი ჩანასახის წარმოქმნის გარეშე. ამიტომ ევტექტიკურ კრისტალიზაციას ხშირად თხევადი ხსნარის დიფუზიურ გაყოფასაც უწოდებენ.

გადაცივების გაზრდის შემთხვევაში ევტექტიკური კრისტალიზაციის მიმდინარეობის ხასიათი იცვლება. მას შემდეგ, როდესაც ჩაისახება და იზრდება ერთ-ერთი, მაგალითად, β ფაზა, მის ზედაპირზე, როგორც ფუძეშრეზე, აღმოცენდება მეორე ფაზის, მოცემულ შემთხვევაში α ფაზის ერთი ან რამდენიმე კრისტალი. ამას ხელს უწყობს სითხის მიმდებარე მოცულობაში A კომპონენტის სიჭარბე. შემდეგ ორივე კრისტალური ფაზა ერთობლივად, კოოპერაციულად იზრდება, რის გამოც ხდება მათი დატოტვა და ურთიერთშეზრდა (სურ. 5.23, ბ). ასეთ შემთხვევაში სითხის დაშ-

ლის შედეგად მიიღება ორი ან მეტი კრისტალის ორფაზა წარმონაქმნი, რომელსაც ევტექტიკურ მარცვალს, ან ევტექტიკურ კოლონიას უწოდებენ. იმისდა მიხედვით, თუ როგორ გადაიკვეთება ეს კოლონიები მეტალოგრაფიული შლიფის სიბრტყით, მიკროსკოპში სხვადასხვა სურათს იძლევა.

ლითონის თვისებებსა და, უპირველეს ყოვლისა, მექანიკურ მახასიათებლებზე, არსებით გავლენას ახდენს ევტექტიკური კოლონიების ფორმა და სიდიდე. კოლონიის ფორმას ის კრისტალი განსაზღვრავს, რომელიც სითხეში პირველად ჩაისახება. მისი დატოტვის ხარისხი რამდენადმე წინ უსწრებს მეორე ფაზის წარმოქმნას, რომელიც მზარდი ფაზის უსწორმასწორობაში ჩაისახება. ფაზას, რომელიც ევტექტიკური მარცვლის ფორმას განსაზღვრავს, წამყვანს უწოდებენ.

ზემოთ განხილული სურათი დამახასიათებელია ნორმალური ევტექტიკური კრისტალიზაციისათვის, რომლის ნიშან-თვისებებს წარმოადგენს ორივე მზარდი ფაზის უშუალო კონტაქტი სითხესთან.

ევტექტიკური კრისტალიზაცია შეიძლება განსხვავებული, აბნორმალური გზითაც წარიმართოს. ასეთ შემთხვევაში სითხესთან უშუალო კონტაქტში მხოლოდ ერთ-ერთი მყარი ფაზა იმყოფება, მაგალითად, α . β ფაზის კრისტალები კი α ფაზით გარშემორტყმული აღმოჩნდება და სითხისაგან იზოლირებულ პირობებში იზრდება (სურ. 5.23, გ). ასეთ შემთხვევაში ევტექტიკური კრისტალიზაცია იწყება ერთ-ერთი მყარი ფაზის, მაგალითად, β -ს ჩასახვით. შემდეგ მის ზედაპირზე წარმოიქმნება α ფაზის მკვრივი გარსი, რის გამოც β ფაზა სითხისგან იზოლირებული აღმოჩნდება. კონცენტრაციული გრადიენტის გამო სითხიდან α ფაზის გავლით მიმდინარეობს B კომპონენტის ატომების დიფუზია β ფაზისაკენ, ხოლო A კომპონენტისა – საპირისპირო მიმართულებით. ეს პროცესი სითხის მოსპობასთან ერთად მთავრდება და შენადნობი ჩვეულებრივ, ტოლდერძა β ფაზისათვის დამახასიათებელ კრისტალურ აგებულებას ღებულობს, რომელიც α ფაზით იქნება გარშემორტყმული. ევტექტიკური შენადნობების ასეთ სტრუქტურას აბნორმალურს უწოდებენ.

Fe-Si-C და Al-Si სისტემის სამსხმელო შენადნობებში აბნორმალური სტრუქტურა აუმაჯობებს მექანიკურ თვისებებს. აბნორმალური ევტექტიკური კრისტალიზაცია მიიღწევა შენადნობების მოდიფიცირებით. Fe-Si-C სისტემის შენადნობებს ამ მიზნით მაგნიუმსა და ცერიუმს, ხოლო Al-Si სისტემის შენადნობებს – ნატრიუმს

უმატებენ.

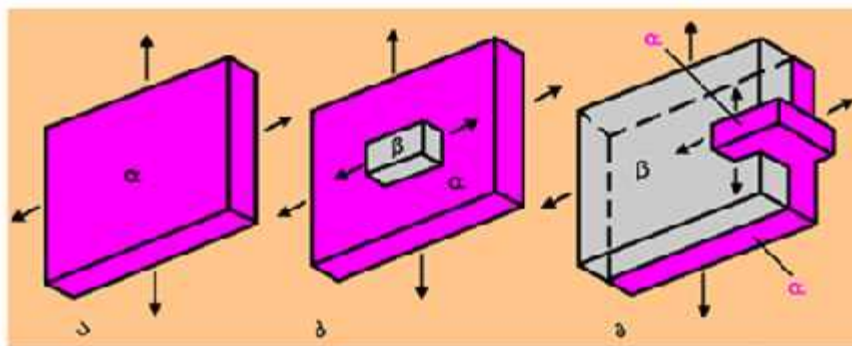
მართალია, ევტექტიკური შენადნობი ყოველთვის ორი მყარი ფაზის მიკრომექანიკურ ნარევს წარმოადგენს, მაგრამ მისი შემადგენელი ფაზების განაწილება და ფორმა (მორფოლოგია) სხვადასხვა ბინარული შენადნობის ევტექტიკის მარცვლებში შეიძლება ერთმანეთისგან არსებითად განსხვავდებოდეს.

სხვადასხვა ბინარულ შენადნობში საკმაო დამაჯერებლობით ევტექტიკის ტიპის წინასწარი განსაზღვრა შეუძლებელია, მაგრამ მაინც არსებობს ზოგიერთი ისეთი ნიშანი, რომელიც გამოკრისტალებული ევტექტიკის სავარაუდო ტიპზე მიუთითებს. მაგალითად, თუ მყარი ფაზების შედგენილობა მდგომარეობის დიაგრამის მიხედვით ეკვიდისტანციურია (თანაბრად დაშორებული) ევტექტიკური წერტილის მიმართ, ან თუ თითოეული მყარი ფაზის მიერ დაკავებული კუთრი მოცულობები მნიშვნელოვნად არ განსხვავდება ერთმანეთისაგან, უმეტეს შემთხვევაში, ფირფიტოვანი ან ღეროვანი სტრუქტურების ჩამოყალიბებას უნდა ველოდოთ. ეს პირობა შესრულებულია Pb-Sn, Al-Sn და Cd-Sn სისტემებში.

ნემსისებრი ტიპის ევტექტიკის ჩამოყალიბება ისეთ სისტემებში შეინიშნება, სადაც ევტექტიკური წერტილი ერთ-ერთი ფაზის მახლობლობაში ძვეს და ფაზა, რომელსაც ევტექტიკური სითხე მცირე რაოდენობით შეიცავს, ზრდის დიდი ანიზოტროპიულობით ხასიათდება.

მიუხედავად იმისა, რომ ზემოაღნიშნული კანონზომიერებანი სამართლიანია რიგი ბინარული სისტემებისათვის, სხვადასხვა ტიპის სტრუქტურების წარმოქმნის სრულყოფილი თეორიის ჩამოსაყალიბებლად აუცილებელია დიდი რაოდენობის ევტექტიკური შენადნობების კრისტალიზაციის მექანიზმის შესწავლა.

როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, ფირფიტოვანი ევტექტიკა შემადგენელი ფაზების ურთიერთმონაცვლე ფირფიტების ერთობლიობას წარმოადგენს. უნდა ვივარაუდოთ, რომ კრისტალიზაციის პროცესი იწყება ევტექტიკის შემადგენელი ერთ-ერთი, მაგალითად, α ფაზის გამოყოფით (სურ. 5.24, ა). ასეთ პირობებში სითხის მიმდებარე უბნები თანდათან გამდიდრდება მეორე კომპონენტის ატომებით და კრისტალიზაციის ფრონტზე მისი კონცენტრაცია ისეთ მნიშვნელობას მიაღწევს, რაც საკმარისი აღმოჩნდება ამ კრისტალების ჩანასახის წარმოსაქმნელად. ჩანასახი შეიძლება უშუალოდ წამყვანი ფაზის კრისტალის ზედაპირზე აღმოცენდეს (ბ), რის შემდეგაც ორივე ფაზის ზრდა როგორც განივი, ისე გრძივი მიმართულებით პრაქ-

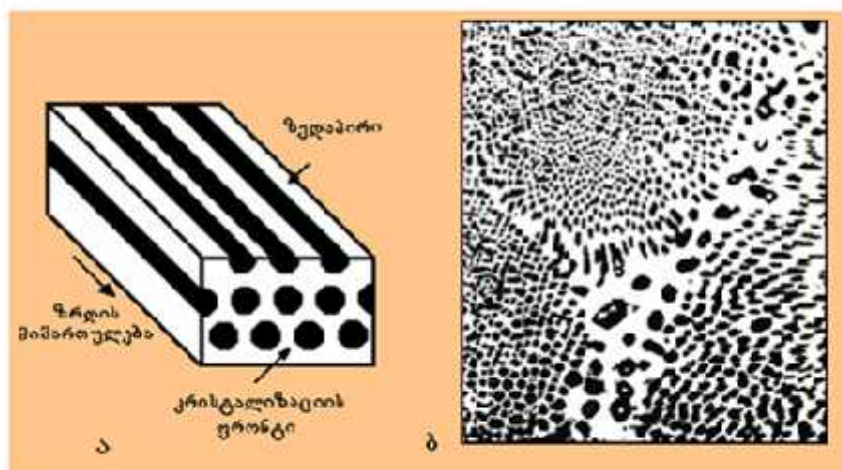


სურ. 5.24. ფირფიტოვანი ევტექტიკის წარმოქმნის სქემა

ა – პირველადი ფაზის ნაწილაკი; ბ – მეორე ფაზის ჩასახვა; გ – ფირფიტის კიდეებთან ზღუდარის (გადაფარვის) წარმოქმნა

ტიკულად ერთდროულად წარიმართება. სითხეში კონცენტრაციული გრადიენტის წარმოქმნის გამო, მზარდ ფირფიტებზე კვლავ გაჩნდება ახალ-ახალი ფენები და საბოლოო ჯამში ჩამოყალიბდება ფირფიტოვანი ევტექტიკისათვის დამახასიათებელი სტრუქტურა, რომლის სქემა 5.19 ა სურათზე იყო ნაჩვენები. ანალოგიური ტიპის ევტექტიკა ყალიბდება, მაგალითად, კალა-ტყვია სისტემის შენადნობებში (ბ). მუქი ფირფიტები მიკროფოტოგრაფიაზე წარმოადგენს ტყვიის ფუძეზე, ხოლო ღია ფერისა – კალის ფუძეზე წარმოქმნილ ფაზებს. არ არის გამორიცხული, რომ ახლად ჩასახული ფაზის ფირფიტამ ადრეულ სტადიაში წარმოქმნილი ფირფიტების კიდე გადაფაროს (იხ. სურ. 5.24, გ).

ღეროვანი ტიპის ევტექტიკა შედგება ერთი ფაზის ღეროების ერთობლიობისაგან, რომელიც ჩანერგილია მეორე, უწყვეტ ფაზაში (სურ. 5.25, ა). ასეთი სტრუქტურა დამახასიათებელია, მაგალითად, Cd-Sn სისტემის შენადნობებისათვის (ბ). მუქი ღეროები წარმოადგენს კადმიუმის ფუძეზე წარმოქმნილ ფაზას, ხოლო ღია, უწყვეტი მატრიცა – ფაზას კალის ფუძეზე. ექსპერიმენტით დადგენილია, რომ როგორც Cd-Sn, ისე Cd-Zn სისტემაში, სითხის გადაცივების ხარისხის გაზრდით ევტექტიკის ღეროვანი აგებულება ფირფიტოვანში გადადის. Cd-Bi და Sn-Bi სისტემებში კი გადაცივების ხარისხი მხოლოდ ევტექტიკური კოლონიების დისპერსიულობაზე მოქმედებს. ამის მიზეზად იმ გარემოებას თვლიან, რომ გადაცივების სხვადასხვა ხარისხის პირობებში ყოველთვის არ ხდება სისტემის შემადგენელი კრისტალების ფორმის ისეთ-ნაირი შეცვლა, რომელიც ევტექტიკური კოლონიების შემადგენელი ფაზების თანაბარი სიჩქარით, კოოპერაციულად ზრდას უზრუნველყოფს. ამიტომ დენდრიტული

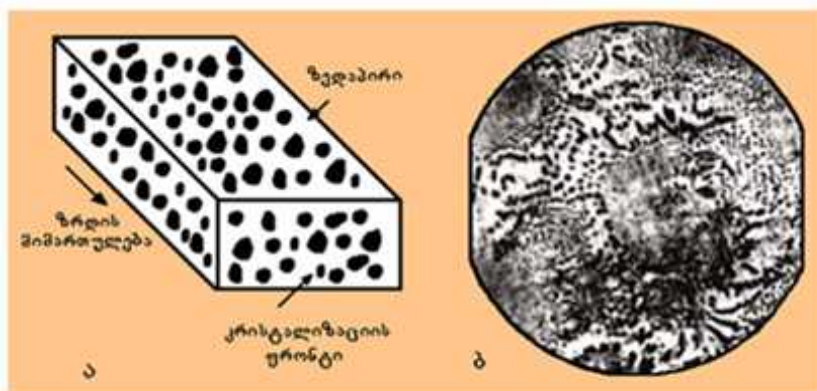


სურ. 5.25. ღეროვანი ევტექტიკის ზრდის სქემა (ა) და სტრუქტურა Cd-Sn სისტემის შენადნობებში. $\times 500$

და სუსტადდატოტვილი ფორმის კრისტალების ურთიერთკონტაქტის პირობებში ღეროვანი სტრუქტურა წარმოიქმნება, ხოლო ორი დენდრიტული კრისტალის შეხამებისას – სტრუქტურა ფირფიტოვანი მიკრომორფოლოგიით. უკანასკნელ შემთხვევაში ორი დენდრიტის კოოპერაციული ზრდა ბრტყელი დენდრიტების პაკეტის ფორმირებას განაპირობებს, დაუტოტველი კრისტალები კი ნებისმიერ შეთანხმებაში უხეში კონგლომერატის წარმოქმნას უწყობს ხელს.

გლობულური ტიპის ევტექტიკა (სურ. 5.26, ა) შედარებით იშვიათ მორფოლოგიას წარმოადგენს, მაგრამ მაინც გვხვდება ზოგიერთ საწარმოო შენადნობში. მაგალითად, $\text{Cu-Cu}_2\text{O}$ სისტემაში Cu_2O ფაზა სფეროს ფორმის ნაწილაკების სახით გამოიყოფა (ბ).

ტერმინი „ნემსისებრი“ ისეთი ტიპის ევტექტიკის აღწერისათვის გამოიყენება,



სურ. 5.26. გლობულური ევტექტიკის ზრდის სქემა (ა) და ევტექტიკის სტრუქტურა $\text{Cu-Cu}_2\text{O}$ სისტემაში (ბ). $\times 24$

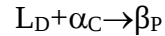
სადაც მეორე ფაზას არარეგულარული, წყვეტილი აგებულება აქვს. ხშირად იგი ნემსის ფორმას ღებულობს და მოუწესრიგებლად არის ორიენტირებული მატრიცის მიმართ (სურ. 5.20, ა). ასეთი ტიპის ევტექტიკა წარმოიქმნება, მაგალითად, Al-Si სისტემის შენადნობებში. სილიციუმი ნემსების სახით გამოიყოფა, რომლებიც გარშემორტყმულია ალუმინის ფუძეზე წარმოქმნილი მყარი ხსნარით (ბ). ევტექტიკაში სილიციუმის ნაწილაკები მთელი მოცულობის 15%-ს იკავებს. რადგან სილიციუმის კრისტალები მატრიცაზე მოუწესრიგებლადაა განლაგებული, მიკროსტრუქტურის სახეს მიკროხეხის სიბრტყის მდებარეობა არ განსაზღვრავს.

გლობულური და ნემსისებრი ტიპის ევტექტიკები შედარებით უფრო რთული წარმონაქმნებია. მათთვის დამახასიათებელი სტრუქტურები, ჩვეულებრივ, სითხეში მეორე ფაზის უწყვეტი, ჰეტეროგენული ჩასახვის შედეგს წარმოადგენს. ევტექტიკის ასეთი მოუწესრიგებელი ორიენტაციის გამო მას „ანომალურს“ უწოდებენ. ხშირ შემთხვევაში მეორე, წყვეტილი, ანუ განცალკევებული ფაზა კრისტალიზაციის პროცესის დასასრულს წარმოიქმნება, რის გამოც მისი გამოყოფა მარცვლის სახეობებში ხორციელდება.

როგორც ალუმინ-სილიციუმის, ისე რკინა-ნახშირბადის ევტექტიკა დაბალი მექანიკური თვისებებით გამოირჩევა, რაც მყიფე (სილიციუმი) ან დაბალი სიმტკიცის (გრაფიტი) სტრუქტურული შემდგენლების არსებობით არის განპირობებული. მათი წარმონაქმნი ძაბვის მნიშვნელოვან კონცენტრატორებს წარმოადგენს. აღნიშნული ევტექტიკების მექანიკური თვისებების, განსაკუთრებით პლასტიკური მახასიათებლების გაუმჯობესება, შესაძლებელია კრისტალიზაციის ისეთი პირობების შექმნით, რომლის დროსაც წყვეტილი ფაზა არა ნემსების ან ფირფიტების, არამედ გლობულების სახით ჩამოყალიბდეს. ამის მიღწევა მცირე რაოდენობით მესამე კომპონენტის დამატებით არის შესაძლებელი. ასეთი დანამატი არ განაპირობებს მესამე ფაზის წარმოქმნას, თუმცა სავარაუდოა, რომ იგი მნიშვნელოვნად აფერხებს წყვეტილი ფაზის ზრდას ნორმალური ევტექტიკური კრისტალიზაციის პროცესთან შედარებით.

ამის მიზეზი, ალბათ, შემდეგი მოსაზრებიდან გამომდინარე უნდა აიხსნას: გამყარების დროს მესამე კომპონენტი (დანამატი) კრისტალიზაციის ფრონტიდან შედარებით უფრო მეტი ხარისხით განიდევნება წყვეტილი ფაზის მიერ, რის შედეგადაც აღნიშნულ ფაზათა გამყოფ ზედაპირზე მნიშვნელოვანი კონცენტრაციული

გენილობის ახალი, β მყარი ხსნარი მიიღება:



განსახილველ შენადნობში სითხისა და α მყარი ფაზის რაოდენობა ისეთია, რომ რეაქციაზე ორივე სრულად იხარჯება.

შენადნობებში, რომელთა კონცენტრაცია C-P ზღვრებში მდებარეობს (მაგალითად, II შენადნობი), რეაქციაში მონაწილე სითხისა და α მყარი ხსნარის თანაფარდობა ისეთია, რომ β მყარი ხსნარის წარმოქმნაზე სითხე მთლიანად იხარჯება, α ფაზა კი – ნაწილობრივ. ამიტომ პერიტექტიკური რეაქციის დამთავრების შემდეგ სტრუქტურაში მიიღება პერიტექტიკური რეაქციის პროდუქტის – β მყარი ხსნარისა და ჭარბი α მყარი ხსნარის მიკრომექანიკური ნარევი $\alpha + \beta$.

პირიქით, P-D კონცენტრაციის შენადნობებში (მაგალითად, III შენადნობში), პერიტექტიკურ რეაქციაზე α მყარი ხსნარი მთლიანად იხარჯება, სითხე კი – ნაწილობრივ. ამიტომ დარჩენილი სითხიდან 2-3 ტემპერატურულ ინტერვალში უშუალოდ β მყარი ხსნარის გამოკრისტალდება მიმდინარეობს.

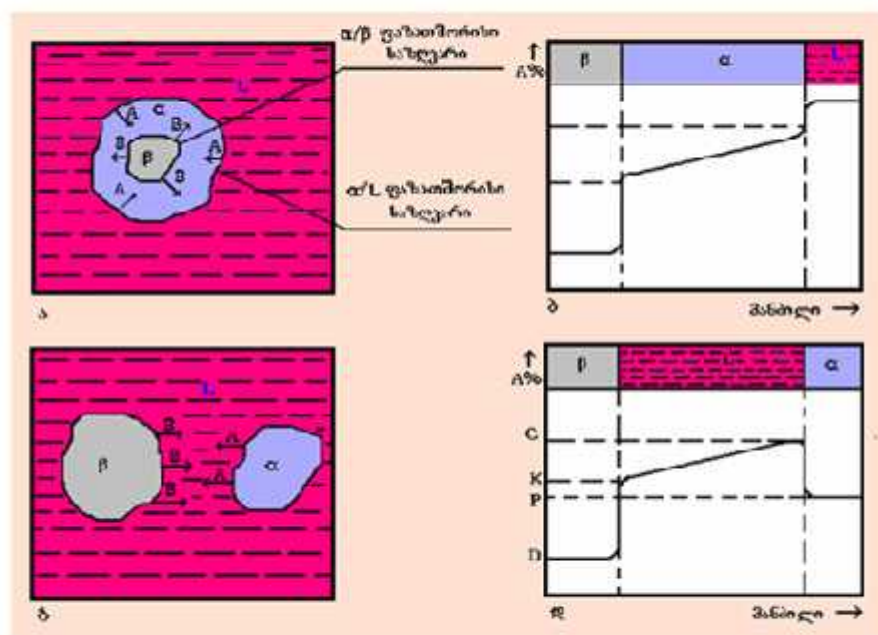
5.28 სურათზე ნაჩვენებია შენადნობის მიკროსტრუქტურა პერიტექტიკური გარდაქმნის შემდეგ.



სურ. 5.28 ორფაზა შენადნობის მიკროსტრუქტურა პერიტექტიკური გარდაქმნის შემდეგ

უმეტეს შემთხვევაში პერიტექტიკური რეაქციის პროდუქტი, მაგალითად, α ფაზა, ჩაისახება და იზრდება β ფაზის ზედაპირზე, რაც ნაწილობრივ ან სრულად განაცალკევებს მას სითხისაგან (სურ. 5.29, ა). შემდგომში α/L ფაზათა საზღვარი გადაადგილებას იწყებს თხევადი ფაზის, ხოლო α/β ფაზათა საზღვარი – β ფაზის შიგნით, რის გამოც α ფაზა თანდათან მსხვილდება. ამგვარად, პერიტექტიკური კრისტალიზაციის დროს α ფაზის რაოდენობა იზრდება, ხოლო სითხისა და β მყარი ხსნარისა – მცირდება.

α მყარი ხსნარი, რომელიც ერთმანეთისგან განაცალკევებს სითხესა და β მყარ ხსნარს, ქიმიურად არაერთგვაროვანია: β ფაზასთან კონტაქტის ადგილას იგი ღარიბია A კომპონენტით, ხოლო სითხესთან კონტაქტის ადგილას – შედარებით უფრო მდიდარი (სურ. 5.29, ბ). ამ არაერთგვაროვ-



სურ. 5.29. პერიტექტიკური კრისტალიზაციის სქემა (ა, გ) და მორეაგირე ფაზების შედგენილობა (ბ, დ)

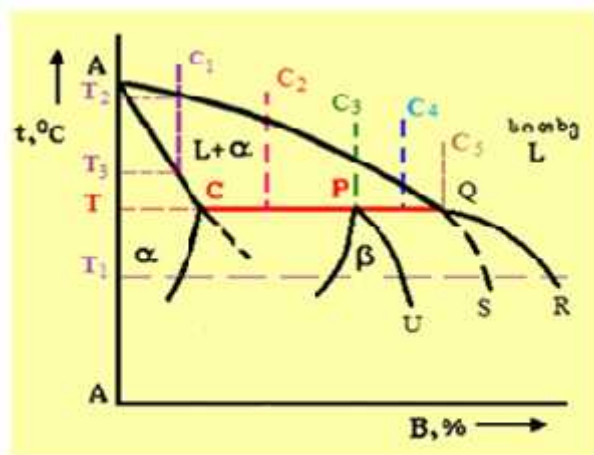
ნებას იგი ინარჩუნებს მანამ, სანამ არსებობს დანარჩენი ორი მორეაგირე ფაზა – სითხე და β მყარი ხსნარი. α ფაზის ქიმიური არაერთგვაროვნების გამო, მასში მიმდინარეობს კომპონენტების დიფუზიური გადატანის პროცესი. კერძოდ, A კომპონენტის ატომები დიფუნდირებენ სითხესთან შეხების ზედაპირიდან β მყარი ხსნარის მიმართულებით, ხოლო B კომპონენტისა – საპირისპიროდ. ამიტომ β ფაზა მდიდრდება A კომპონენტით და იქმნება პირობები $\beta \rightarrow \alpha$ გარდაქმნის მიმდინარეობისათვის. α/L საზღვარზე, საითკენაც განიდევენება B კომპონენტის ატომები, შენარჩუნებულია უშუალოდ სითხიდან α მყარი ხსნარის გამოყოფის პირობები.

პერიტექტიკური გარდაქმნა შეიძლება განსხვავებული მექანიზმითაც წარიმართოს. კერძოდ, შესაძლებელია α ფაზა ჩაისახოს არა β ფაზის კრისტალების ზედაპირზე, არამედ მათგან მოცილებით, სითხეში, პეტეროგენული ან ჰომოგენური გზით. ასეთ შემთხვევაში α ფაზა გაიზრდება სითხის ხარჯზე, ხოლო β – თანდათან გაიხსნება (სურ. 5.29, გ). აღნიშნული მექანიზმის რეალიზაციისას მნიშვნელოვან როლს α და β კრისტალების გამოყოფი სითხის ქიმიური არაერთგვაროვნება თამაშობს. β ფაზასთან საკონტაქტო ზედაპირზე სითხე უფრო ღარიბია A კომპონენტით, ვიდრე α ფაზასთან შეხების უბნებში (სურ. 5.29, დ). სითხეში კონცენტრაცი-

ათა სხვაობა უზრუნველყოფს A კომპონენტის ატომების დიფუზიურ გადატანას სითხისა და α ფაზის სასაზღვრო ზონებიდან სითხისა და β ფაზის სასაზღვრო ზონებისაკენ, ხოლო B კომპონენტის ატომების დიფუზია საპირისპირო მიმართულებით ხდება. ამიტომ L/α სასაზღვრო ზედაპირზე შენარჩუნებულია α ფაზის გამოკრისტალების, ხოლო L/β ფაზების სასაზღვრო ზედაპირზე – β ფაზის გახსნის შესაძლებლობა.

პერიტექტიკური კონცენტრაციის შენადნობში ეს პროცესი მაშინ წყდება, როდესაც მოისპობა ორივე მორეაგირე ფაზა – სითხე L და β მყარი ხსნარი. წონასწორულ მდგომარეობაში შენადნობი შედგენილი აღმოჩნდება მხოლოდ P კონცენტრაციის α მყარი ხსნარის კრისტალებისაგან (სურ. 5.27).

თუ ზემოთ წარმოდგენილ პერიტექტიკური კრისტალიზაციის კანონზომიერებებს 5.30 სურათზე ნაჩვენები სქემის მიხედვით შევაჯამებთ, შესაძლებელი იქნება შემდეგი დასკვნების ჩამოყალიბება:



სურ. 5.30. პერიტექტიკური გარდაქმნის სქემა

პერიტექტიკური კრისტალიზაციის T ტემპერატურის ზემოთ სითხე წონასწორობაში იმყოფება α მყარ ხსნართან. T ტემპერატურის ქვემოთ სხვადასხვა შედგენილობის β ფაზა წონასწორობაშია სითხესთან და α მყარ ხსნართან. წონასწორულ პირობებში C_1 , C_2 , C_3 და C_4 შედგენილობის სითხეების T_1 ტემპერატურამდე გაცივების შედეგად უნდა წარმოიქმნას მყარი ფაზები, რომლებიც შესაბამისად

შედგენილი იქნება მხოლოდ α ფაზისაგან, α და β ფაზებისაგან, მხოლოდ β ფაზისაგან, β ფაზისა და სითხის ნარევისაგან.

არაწონასწორულ პირობებში კრისტალიზაციის შედეგის განხილვისათვის დაგეგმათ, რომ დიფუზია მყარ ფაზაში არ მიმდინარეობს, ხოლო სითხეში შერევა მხოლოდ დიფუზიის გზით ხორციელდება. განვიხილოთ ოთხი სხვადასხვა შემთხვევა.

1. თუ C_1 შედგენილობის შენადნობს T_2 ტემპერატურამდე გავაცივებთ, დაიწყება α ფაზის კრისტალების ჩასახვა. კრისტალების ზრდას თან სდევს სითხის გამ-

დიდრება B კომპონენტით. შედეგად ფაზათა გამყოფი ზედაპირის ტემპერატურა შემცირდება და α ფაზის წარმონაქმნების შედგენილობა მარჯვნივ დაიძვრება. თუ არ იქნება შენარჩუნებული ტემპერატურის მკვეთრი ვარდნა, წარმოიქმნება კონცენტრაციული გადაცივება, რაც α ფაზის კრისტალების ახალი ჩანასახების წარმოქმნას განაპირობებს. კრისტალებს შორის სივრცეში სითხე განუხრელად გამდიდრდება B კომპონენტით, რამაც შეიძლება C_5 კონცენტრაციას მიაღწიოს და შეიქმნას β ფაზის კრისტალების ჩამოყალიბების შესაძლებლობა. აქედან გამომდინარე, საბოლოო ჯამში მყარი ნივთიერება α და β ფაზების კრისტალებისგან აღმოჩნდება შედგენილი.

თუ კონცენტრაციული გადაცივების ხარისხი არ არის საკმარისი კრისტალიზაციის ფრონტის წინ ჩანასახების წარმოსაქმნელად, დადგება წონასწორული მდგომარეობა, რომლის დროსაც T_3 ტემპერატურაზე ჩამოყალიბდება C_1 შედგენილობის α ფაზა. პროცესი გაგრძელდება მანამ, სანამ არ იქნება ისეთი ზღვრული თანაფარდობა მიღწეული, როდესაც სითხე გამყოფ ზედაპირზე და მყარი ფაზა თანდათან არ დაიწყებენ გამდიდრებას B კომპონენტით. β ფაზა მხოლოდ მაშინ წარმოიქმნება, როდესაც სითხის შედგენილობა Q წერტილის კონცენტრაციას მიაღწევს.

2. C_2 საწყისი შედგენილობის შენადნობის მდგრადი მდგომარეობა დგება ორივე, α და β ფაზების წარმოქმნის პროცესში. უნდა ვივარაუდოთ, რომ აღნიშნული ფაზების ერთდროული ზრდა უნდა მიმდინარეობდეს ევტექტიკის მონათესავე სტრუქტურის ფორმირებით.

3. C_3 საწყისი შედგენილობის შენადნობის წონასწორული მდგომარეობა შეიძლება ისეთ პირობებში იქნას მიღწეული, როდესაც ფაზათა გამყოფ ზედაპირზე β ფაზა Q შედგენილობის სითხიდან წარმოიქმნება. გამყარების დამამთავრებელ ეტაპზე მიმდინარე პერიტექტიკური რეაქცია სითხის შედგენილობას მარჯვნივ, ლიკვიდუსის ხაზის QR მონაკვეთის გასწვრივ გადაანაცვლებს. ამგვარად, მყარი ფაზის უკანასკნელი ულუფა T_1 ტემპერატურის ქვემოთ წარმოიქმნება. აღნიშნული ფაზის შედგენილობა PU ხაზის მდგომარეობას პასუხობს.

4. C_4 შედგენილობის სითხიდან გამყარების პროცესის საწყის სტადიაში კვლავ α ფაზის კრისტალები იწყებს გამოყოფას. ფაზის წარმოქმნა მიმდინარეობს ნებისმიერი შედგენილობის სითხიდან, რომელშიც B კომპონენტის კონცენტრაცია მეტია Q წერტილთან შედარებით. საბოლოო სტრუქტურა შედგენილი აღმოჩნდება α ფაზის

პირველადი კრისტალებისაგან, რომელიც β ფაზით იქნება გარშემორტყმული.

მიღებულია, რომ პერიტექტიკურ სისტემაში სითხისა და პირველადი კრისტალების ურთიერთქმედებით მეორადი ფაზა მიიღება. სინამდვილეში ასეთი ურთიერთქმედება შესაძლებელია β ფაზაში დიფუზიის მიმდინარეობის გარეშე, მეტად შეზღუდულ მასშტაბებშიც განხორციელდეს. β ფაზა მყისიერად წარმოიქმნება სითხისა და პირველადი ფაზის გამყოფ ზედაპირზე. თუ გამყარება მეტად ნელი სიჩქარით მიმდინარეობს, სითხესთან ურთიერთქმედებით პირველადი α ფაზა არ უნდა გარდაიქმნას β ფაზად. უმეტეს შემთხვევაში პერიტექტიკურ სისტემაში პირველადი ფაზა ხანგრძლივი დროის განმავლობაშია შემონახული, თუმცა იგი არაწონასწორულია.

კრისტალებში დიფუზია მეტად ნელი სიჩქარით მიმდინარეობს. აქედან გამომდინარე, პროცესები, რომლებიც მყარ მდგომარეობაში დიფუზიის მიმდინარეობაზეა და მოკიდებული, მნიშვნელოვან გავლენას ვერ მოახდენს იმ სტრუქტურის ფორმირებაზე, რომელიც ჩვეულებრივ პირობებში გამყარების დროს ყალიბდება.

6. გარდაქმნები მყარ მდგომარეობაში

მყარ მდგომარეობაში მიმდინარე ფაზური გარდაქმნების რამდენიმე სხვადასხვა ტიპი არსებობს. მათი კლასიფიკაცია შესაძლებელია ახლად ჩამოყალიბებული ფაზების რაოდენობის მიხედვით, აგრეთვე იმ თვალსაზრისით, განსხვავდება თუ არა ისინი საწყისი ფაზისაგან შედგენილობით. აქედან გამომდინარე, შემდეგი ტიპის გარდაქმნებს ასხვავებენ:

1. საწყისი ფაზა ახალ ფაზად გარდაიქმნება შედგენილობის ცვლილების გარეშე; ასეთ გარდაქმნას არადიფუზიურს, ანუ მარტენსიტულს უწოდებენ.

2. ახალი ფაზა შედგენილობითა და სტრუქტურით განსხვავებულია საწყისი ფაზისაგან. საწყისი ფაზა არსებობას განაგრძობს, თუმცა რამდენადმე შეცვლილი შედგენილობით. ასეთ რეაქციებს მიეკუთვნება დაძველება ევტექტოიდური გარდაქმნის შემდეგ და დისპერსიული განმტკიცების რეაქცია.

3. საწყისი ფაზა გარდაიქმნება ორ ახალ ფაზად, რომელთაგან თითოეული შედგენილობის მიხედვით განსხვავდება საწყისი ფაზისაგან. ამ ტიპს მიეკუთვნება ევტექტოიდური გარდაქმნა გაცივების დროს და პერიტექტოიდური გარდაქმნა გახურების პროცესში. ორივე შემთხვევაში ახალი ფაზები საწყისისაგან განსხვავდებიან როგორც სტრუქტურის, ისე შედგენილობის მიხედვით. ამავე ტიპს მიეკუთვნება ისეთი გარდაქმნები, როდესაც ორი ახალი ფაზა ერთმანეთისგან განსხვავდება შედგენილობით, მაგრამ აქვს საწყისი ფაზის სტრუქტურა.

4. მიმდინარეობს სტრუქტურის მოწესრიგება ატომების გადანაწილების გზით, კრისტალურ სისტემაში რაიმე ცვლილებების გარეშე.

5. მყარი სხეული და აირი ურთიერთქმედებენ ახალი ფაზის წარმოქმნით ან მყარი ფაზის შედგენილობის შეცვლით.

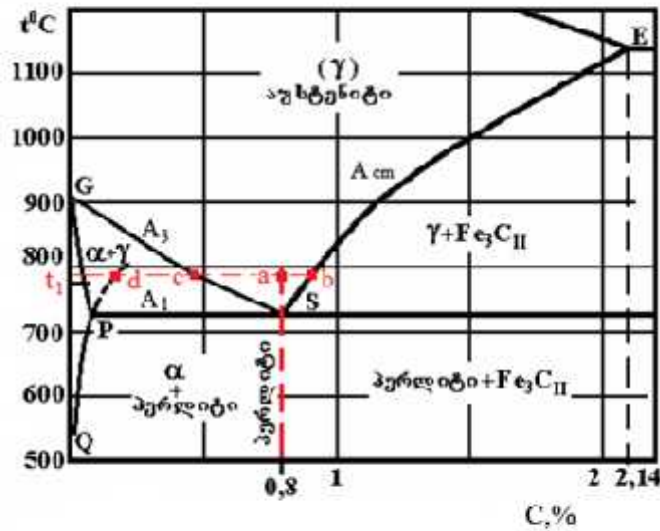
ჩვეულებრივ, დიდი ყურადღება ეთმობა შენადნობის გაცივების პროცესში მიმდინარე გარდაქმნებს, რადგან შენადნობების უმრავლესობა ისეთ ტემპერატურაზე გამოიყენება, რომელიც მნიშვნელოვანი სიჩქარით მიმდინარე რეაქციების ტემპერატურასთან შედარებით საგრძნობლად დაბალია. შესაბამისად, ამ შენადნობების სტრუქტურული მდგომარეობა იმ გარდაქმნების შედეგს წარმოადგენს, რომლებიც ტემპერატურის შემცირების შედეგად მიიღება. შენადნობის თვისებები კი დამოკიდებულია მისი შემადგენელი ფაზების ფორმაზე, ზომაზე, განაწილების ხასიათზე,

რაც ფაზათაშორის საზღვრებით არის განპირობებული. ყოველივე ამას მნიშვნელოვანწილად განსაზღვრავს ახალი ფაზების ჩასახვისა და ზრდის კინეტიკა და, აქედან გამომდინარე, გაცივების დროს მიმდინარე გარდაქმნები. თუმცა უნდა აღინიშნოს, რომ ეს გარდაქმნები, თავის მხრივ, დამოკიდებულია საწყისი ფაზის (ან ფაზების) კონკრეტულ სტრუქტურაზე, რომელიც გახურების დროს ყალიბდება. ამ თვალსაზრისით გახურებისას მიმდინარე გარდაქმნებიც საკმაოდ დიდ ყურადღებას იმსახურებს. გარდა ამისა, არსებობს განსაკუთრებული შემთხვევები, როდესაც საბოლოო შედეგი მაღალ ტემპერატურაზე დაყოვნების დროის რეგულირებით მიიღწევა. აქედან გამომდინარე, მიზანშეწონილია არა მარტო პირდაპირი, არამედ შექცევადი პროცესების განხილვის აუცილებლობაც.

საჭიროა ერთმანეთისგან განვასხვავოთ ორი სახის გარდაქმნა: პირველი, რომლის დროსაც ატომები იმდენად მცირე მანძილზე გადაადგილდება, რომელიც არ აღემატება ატომთშორისი მანძილის რაღაც ნაწილს და მეორე, როდესაც ატომები გადის ბევრად უფრო დიდ მანძილს წინა შემთხვევასთან შედარებით. მეორე ტიპის გარდაქმნები დაკავშირებულია კრისტალურ გისოსში ატომების დიფუზიურ გადანაცვლებასთან.

6.1. ფაზური გარდაქმნები გახურების დროს. აუსტენიტის წარმოქმნა

განვიხილოთ ფერიტო-ცემენტიტური ნარევის (პერლიტის) გარდაქმნა აუსტენიტად ევტექტოიდურ ფოლადში ($0,8\%C$). Ac_1 ტემპერატურამდე გახურებისას ფერიტში იხსნება ცემენტიტის გარკვეული რაოდენობა Fe-C დიაგრამის PQ ხაზის შესაბამისად (სურ. 6.1). Ac_1 -ის ზემოთ ტემპერატურის აწევისას, მაგალითად, t_1 -მდე, ნახშირბადის კონცენტრაცია ფერიტის ცალკეულ უბნებში მატულობს (d წერტილი 6.1 სურათზე). ფერიტის ასეთი უბნები არამდგრადია და განიცდის აუსტენიტში გარდაქმნას, რომელიც მოცემულ ტემპერატურაზე სტაბილურ ფაზას წარმოადგენს. Ac_1 წერტილის ზემოთ უმნიშვნელოდ გადახურებული აუსტენიტი ნახშირბადს შეიცავს $0,8\%$ -ს. ამ რაოდენობით ნახშირბადის შემცველობის შემთხვევაში აუსტენიტის ჩანასახების წარმოქმნა უნდა დავაკავშიროთ ფერიტში ნახშირბადის კონცენტრაციის ფლუქტუაციასთან. აუსტენიტის ჩანასახები ფერიტისა და ცემენტიტის საზღვ-



სურ. 6.1 ფაზური შედგენილობის ცვლილების სქემა გახურებისას

რეზიში წარმოიქმნება, სადაც არსებული დეფექტები აუსტენიტის ჩანასახის წარმოქმნისათვის საჭირო მუშაობას ამცირებს. შესაძლებელია, აუსტენიტის ჩანასახის წარმოქმნაზე გარკვეულ როლს ატომების განლაგების ფლუქტუაციაც თამაშობდეს. თუ ფერიტის მოცულობაში წარმოიქმნება ფლუქტუაციური უბნები აუსტენიტის კრისტალური გისოსით, სასაზღვრო უბნების გავლით მასში დაიწყება ნახშირბადის ატომების მოდინება ცემენტიტიდან. თუ ამ ფლუქტუაციების ზომა არ არის კრიტიკულზე ნაკლები, მაშინ ისინი შეიძლება აუსტენიტის ჩანასახად გარდაიქმნას.

ფერიტისა და ცემენტიტის საზღვრების მოსპობის შემდეგ, სადაც უპირატესად ხდება ჩანასახის აღმოცენება, შეინიშნება აუსტენიტის მარცვლების მხოლოდ ზრდა ახალი ჩანასახების წარმოქმნის გარეშე. წარმოქმნილი აუსტენიტი ნახშირბადის შემცველობის მიხედვით არაერთგვაროვანია: ცემენტიტთან მოსაზღვრე უბნებში ნახშირბადის კონცენტრაცია მეტია (ხ წერტილი 6.1 სურათზე) ფერიტთან მიმდებარე უბნებთან შედარებით (c წერტილი). ასეთი კონცენტრაციული ვარდნილის ზეგავლენით აუსტენიტში მიმდინარეობს ნახშირბადის ატომების დიფუზია ცემენტიტთან მოსაზღვრე ზონებიდან ფერიტთან მოსაზღვრე ზონებამდე, რაც აღნიშნული ფაზებისა და აუსტენიტის ფაზათაშორისი ზედაპირების წონასწორობას არღვევს. წონასწორობის აღდგენა მიიღწევა აუსტენიტში ცემენტიტის შემდგომი გახსნით და ნახშირბადის ატომების გადასვლით ფერიტში, რაც აადვილებს აუსტენიტად მის გარდაქმნას. შესაბამისად, აუსტენიტის უბნების ზრდა ნახშირბადის ატომების დი-

ფუზიით და $\alpha \rightarrow \gamma$ პოლიმორფული გარდაქმნით მიმდინარეობს.

აღნიშნული გარდაქმნების გზით აუსტენიტის უბნების ზრდა უფრო სწრაფად ხდება, ვიდრე ცემენტიტის გახსნა. ამიტომ ფერიტის აუსტენიტად გარდაქმნის შემდეგ ფოლადის სტრუქტურაში ცემენტიტის გარკვეული რაოდენობაა შემონახული. აუსტენიტში მის გასახნელად საჭიროა იზოთერმული დაყოვნების დროის გაზრდა.

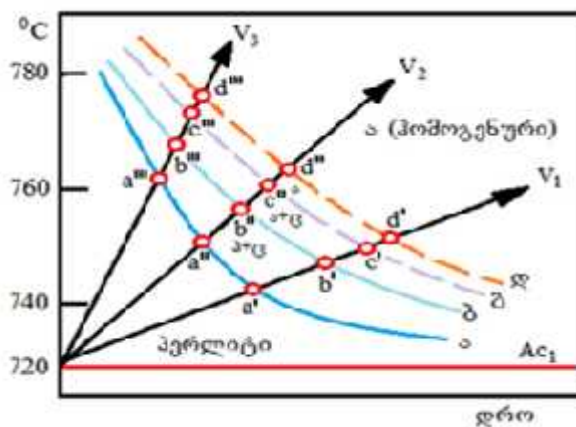
პერლიტის აუსტენიტად გარდაქმნის სიჩქარეზე მრავალი ფაქტორი მოქმედებს: გარდაქმნის ტემპერატურა, გახურების სიჩქარე, საწყისი სტრუქტურის დისპერსიულობის ხარისხი, ცემენტიტის ფორმა (ფირფიტოვანია თუ მომრგვალებული), ფოლადის ქიმიური შედგენილობა.

ტემპერატურისა და გახურების სიჩქარის გავლენა პერლიტის აუსტენიტად გარდაქმნაზე 6.2 სურათზეა წარმოდგენილი. ტემპერატურის გაზრდით პერლიტი $\rightarrow$ აუსტენიტი გარდაქმნის სიჩქარე იზრდება. ეს იმით აიხსნება, რომ გარდაქმნა დიფუზიური ხასიათისაა, ტემპერატურის მატებით კი დიფუზიური პროცესები ჩქარდება.

განუწყვეტელი გახურებისას (სხივები V_1-V_3) გარდაქმნა ტემპერატურულ ინტერვალში, a და b წერტილებს შორის მიმდინარეობს. c' წერტილში (სხივი V_1) ცემენტიტის გახსნა მთავრდება, ხოლო d' წერტილში – აუსტენიტის პომოგენიზაცია.

თუ გახურების სიჩქარე მეტია (სხივები V_2, V_3), $a \rightarrow$ გარდაქმნა იწყება და მთავრდება უფრო მაღალ ტემპერატურაზე. ამგვარად, რაც უფრო მაღალია გახურების სიჩქარე, მით უფრო მაღალ ტემპერატურაზე იწყება და მთავრდება პერლიტის აუსტენიტად გარდაქმნის პროცესი. ამასთან, მცირდება გარდაქმნისათვის საჭირო დრო.

როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, აუსტენიტი ფერიტისა და ცემენტიტის ფაზა-



ხ.რ. 6.2. პერლიტის აუსტენიტად გარდაქმნის სქემა

- ა - აუსტენიტის წარმოქმნის დასაწყისი
- ბ - აუსტენიტის წარმოქმნის დასასრული
- გ - ცემენტიტის გახსნის დასასრული
- დ - პომოგენიზაციის დასასრული

თა გამყოფ საზღვარზე წარმოიქმნება. ამიტომ რაც უფრო წვრილდისპერსიულია პერლიტური სტრუქტურა, მით უფრო მეტია ფერიტისა და ცემენტიტის საზღვრების განფენილობა (სიგრძე) და მით უფრო სწრაფად მთავრდება გარდაქმნა. ყველაზე სწრაფი გარდაქმნით წვრილფირფიტოვანი პერლიტი ხასიათდება; უფრო ნელი სიჩქარით მიმდინარეობს პროცესი წვრილმარცვლოვან პერლიტში, ხოლო კიდევ უფრო ნელი სიჩქარით – მსხვილმარცვლოვანში.

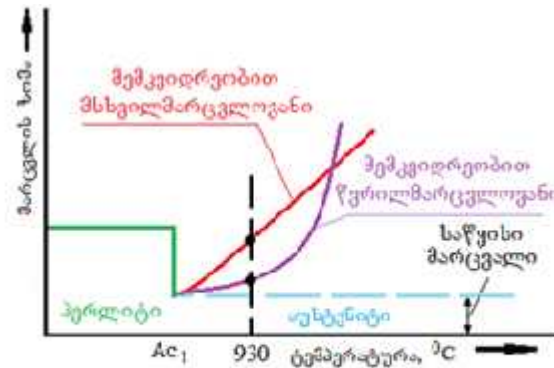
რაც უფრო მეტია ფოლადში ნახშირბადი, მით უფრო სწრაფად მიმდინარეობს აუსტენიზაციის პროცესი. ეს განპირობებულია ცემენტიტის რაოდენობისა და, აქედან გამომდინარე, ფერიტისა და ცემენტიტის საზღვრების ჯამური ზედაპირის გაზრდით.

ფოლადში ქრომის, მოლიბდენის, ვოლფრამის, ვანადიუმისა და სხვა კარბიდშემქმნელი ელემენტების დამატებით ფერხდება აუსტენიზაციის პროცესი ლეგირებული ცემენტიტის ან სპეციალური კარბიდების წარმოქმნის გამო, რომლებიც უფრო ძნელად იხსნება აუსტენიტში. აქედან გამომდინარე, აუსტენიტის ჰომოგენიზაცია უფრო მეტ დროს მოითხოვს.

აუსტენიტის მარცვალი, რომელიც ევტექტოიდური ფოლადის Ac_1 კრიტიკული ტემპერატურის ზემოთ გახურებისას წარმოიქმნება, საკმაოდ წვრილი მიიღება. მას აუსტენიტის საწყის მარცვალს უწოდებენ. ტემპერატურის შემდგომი მატება ან მოცემულ ტემპერატურაზე დაყოვნების ხანგრძლივობის გაზრდა აუსტენიტის მარცვლის ზრდას განაპირობებს. მარცვალი, ჩვეულებრივ, თვითნებურად იზრდება – შერწყმით და მცირე ზომის მარცვლების შთანთქმით უფრო მსხვილი მარცვლების მიერ. ამის მიზეზია სისტემის მიდრეკილება თავისუფალი ენერგიის შემცირებისადმი, რაც მის თერმოდინამიკურ მდგრადობას ზრდის. აუსტენიტის მარცვლის ზრდის მამოძრავებელ ძალას წვრილმარცვლოვან (რომლის ზედაპირული ენერგია მეტად მაღალია) და მსხვილმარცვლოვან სტრუქტურებს შორის თავისუფალი ენერგიების სხვაობა წარმოადგენს.

მიდრეკილება აუსტენიტის მარცვლის ზრდისადმი არაერთგვაროვანია ერთი და იგივე მარკის ფოლადებშიც კი. ამის მიზეზი შეიძლება იყოს მათი გამოდნობის პირობები. მემკვიდრეობითობის თვალსაზრისით (მემკვიდრეობით მარცვლოვნებაში იგულისხმება აუსტენიტის მარცვლის მიდრეკილება ზრდისადმი ტემპერატურის ამაღლების შემთხვევაში), ასხვავებენ მემკვიდრეობით წვრილმარცვლოვან და მემკვიდ-

რეობით მსხვილმარცვლოვან ფოლადებს. მემკვიდრეობით წვრილმარცვლოვან ფოლადში მაღალ ტემპერატურამდე გახურებისას ($1000-1050^{\circ}\text{C}$) მარცვალი უმნიშვნელოდ იზრდება, თუმცა უფრო მაღალ ტემპერატურაზე მარცვლის მკვეთრი ზრდა შეინიშნება. მემკვიდრეობით მსხვილმარცვლოვან ფოლადში პირიქით, მარცვალი განუხრელად იწყებს ზრდას A_1 ტემპერატურის ზემოთ უმნიშვნელო გადახურების შემთხვევაშიც კი (სურ. 6.3). მარცვლის სხვადასხვა მიდრეკილებას ზრდისადმი განუხანგვის პირობები და ფოლადის შედგენილობა განაპირობებს.



სურ. 6.3. აუსტენიტის მარცვლის ზრდა მემკვიდრეობით წვრილმარცვლოვან და მსხვილმარცვლოვან ფოლადებში

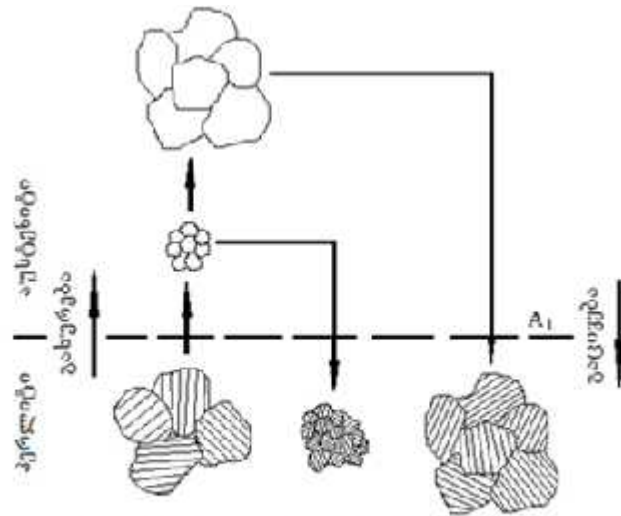
ალუმინით განუხანგული ფოლადები მემკვიდრეობით წვრილმარცვლოვანია. მისი ბუნების შესახებ ყველაზე დამაჯერებელ ახსნას ბარიერების თეორია იძლევა. ალუმინი, რომელიც თხევად ფოლადშია შეყვანილი ბოყვში ჩამოსხმის წინ, ლითონში გახსნილ აზოტთან და ჟანგბადთან ნიტრიდებისა (AlN) და ჟანგბულების (Al_2O_3) ნაწილაკებს წარმოქმნის. აღნიშნული ნაერთები თხევად ფოლადში იხსნება, ხოლო ლითონის კრისტალიზაციისა და მისი შემდგომი გაცივებისას უწვრილესი სუბმიკროსკოპული ნაწილაკების („არალითონური მტვრის“) სახით უპირატესად მარცვლის საზღვრებში გამოიყოფა და ბარიერებს ქმნის, რომელიც აუსტენიტურ მდგომარეობამდე გახურებისას მარცვლის ზრდას ამუხრუჭებს.

აუსტენიტის მარცვლის ზედაპირულ ფენებში თავმოყრილი ალუმინის ნიტრიდის გახსნა საკმაოდ მაღალ ტემპერატურაზე მიმდინარეობს, იხსნება ბარიერები და მარცვალი იწყებს ზრდას.

ორფაზა არეებში, მაგალითად, ზევეტექტოიდურ ფოლადებში, $A_{c1}-A_{cm}$ ტემპერატურულ ინტერვალში აუსტენიტის მარცვლის ზრდა გაუხსნელი კარბიდული ჩა-

ნართების ზეგავლენით არის შეჩერებული. ასეთივე ეფექტს იძლევა ქვევეტექტოიდურ ფოლადებში ფერიტის უბნები Ac_1 - Ac_3 ტემპერატურულ ინტერვალში. კარბიდ-შემქმნელი მალეგირებელი ელემენტები ასევე ანელებენ აუსტენიტის მარცვლის ზრდას. ამ მხრივ მეტად ეფექტურად მოქმედებს აუსტენიტში ძნელად ხსნადი ტიტანის, ვოლფრამის, მოლიბდენის, ცირკონიუმის, ნიობიუმის და ვანადიუმის დისპერსიული კარბიდული ჩანართები, რომლებიც მარცვლის საზღვრებზეა განლაგებული.

ერთი და იგივე ტემპერატურულ პირობებში აუსტენიტი→პერლიტი გარდაქმნის გზით ჩამოყალიბებული პერლიტის მარცვლების ზომას აუსტენიტის მარცვლის სიდიდე განსაზღვრავს. როგორც წესი, რაც უფრო მსხვილმარცვლოვანია აუსტენიტი, მით უფრო დიდი ზომის პერლიტური მარცვალი მიიღება (სურ. 6.4). აუსტენიტის მარცვალი კი მხოლოდ გახურებისას იზრდება. შემდგომი გაცივებისას იგი დაწვრილმანებას არ განიცდის, ამიტომ ფოლადის მარცვლის საბოლოო ზომას მემკვიდრეობითი მარცვლოვნება და აუსტენიტურ მდგომარეობაში ფოლადის გახურების



სურ. 6.4. პერლიტის მარცვლის ზომების ევოლუციის სქემა აუსტენიტურ არეში გახურების ტემპერატურაზე დამოკიდებულებით

მაქსიმალური ტემპერატურა განსაზღვრავს.

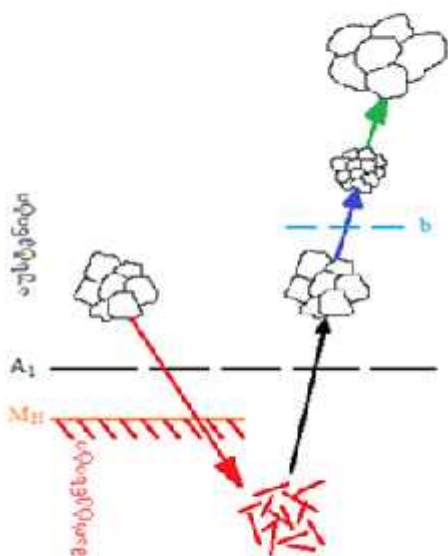
ზემოთ წარმოდგენილი სქემები (იხ. სურ. 6.3, 6.4) ყველაზე ტიპურს მიეკუთვნება, თუმცა შეინიშნება გადახრებიც. თუ ფოლადის საწყისი სტრუქტურა მარტენსიტი ან ბეინიტი, აუსტენიტურ გარდაქმნას თან არ სდევს მარცვლის დაწვრილმანება, არამედ აუსტენიტის მარცვალი იგივე ზომებს ღებულობს, რომელიც მას წრთობამდე ჰქონდა.

საქმე იმაშია, რომ დიფუზიური მექანიზმით მიმდინარე აუსტენიტის პერლიტური გარდაქმნის დროს ახალი ფაზის კრისტალების ზრდა განაპირობებს წყობის დეფექტების განდევნას მარცვლის საზღვრებში, ანუ დეფექტები (დისლოკაციები, ვაკანსიები, მინარევი ატომები), რომლებიც ადრე აუსტენიტის მარცვლის საზღვრებში იყო თავმოყრილი, ფერიტის (პერლიტის) მარცვლის საზღვრებში გადაადგილდება. მარტენსიტული (ბეინიტური) გარდაქმნისას კი დეფექტების ასეთი გადაწევა არ მიმდინარეობს და ისინი იმავე ადგილებზე, ყოფილი აუსტენიტის მარცვლის საზღვრებში რჩება. AC₁ კრიტიკული წერტილის გადალახვისას აღმოცენებული, სუსტად დეზორიენტირებული აუსტენიტის მარცვლები, რომლებსაც საზღვრებში დამცავი დეფექტური ფენები არ გააჩნია, სწრაფად შეირწყმება ერთ მარცვლად, რომლის ფორმას და ზომებს მარცვალთსაზღვრული დეფექტები განაპირობებს, ანუ აღდგება პირველყოფილი აუსტენიტის მარცვალი.

ასეთ პირობებში ჩამოყალიბებული აუსტენიტის მარცვლის მნიშვნელოვან თავისებურებას მისი არასტაბილურობა წარმოადგენს: უფრო მაღალ ტემპერატურამდე გახურებისას ხდება სტრუქტურის დაწვრილმანება (სურ. 6.5). ამ ეფექტის ახსნა შესაძლებელია იმ მოსაზრებიდან გამომდინარე, რომ მარტენსიტის გარდაქმნა აუსტენიტად განსხვავებული მექანიზმით მიმდინარეობს და მას თან სდევს ე.წ. ფაზური ციკლედეა. შემდგომი გახურება და ახალი მარცვლების წარმოქმნა აუსტენიტის რეკრისტალიზაციის ბუნებრივი პროცესია.

6.2. ევტექტოიდური გარდაქმნა

როგორც ჩვენთვის უკვე ცნობილია, ევტექტოიდური გარდაქმნის დროს ერთი მყარი ფაზა ორ ახალ ფაზად იშლება. ორივე ახლად ჩამოყალიბებული ფაზის შედგენილობა და სტრუქტურა განსხვავებულია საწყისი ფაზის შედგენილობისა და სტრუქტურისაგან. აქედან გამომდინარე, ევტექტოიდური გარდაქმნისათვის აუცილებელია დიფუზიის მიმდინარეობა. რადგან მყარ სხეულში დიფუზია ნელი სიჩქარით მიმდინარეობს, ევტექტოიდური გარდაქმნა შეიძლება წონასწორულისაგან მნიშვნელოვნად განსხვავებულ პირობებში და ფართო ტემპერატურულ დიაპაზონში განხორციელდეს. ამდენად, ჩამოყალიბებული ფაზების სტრუქტურა და თვისებები მნიშვნელოვნად განსხვავებული აღმოჩნდება.

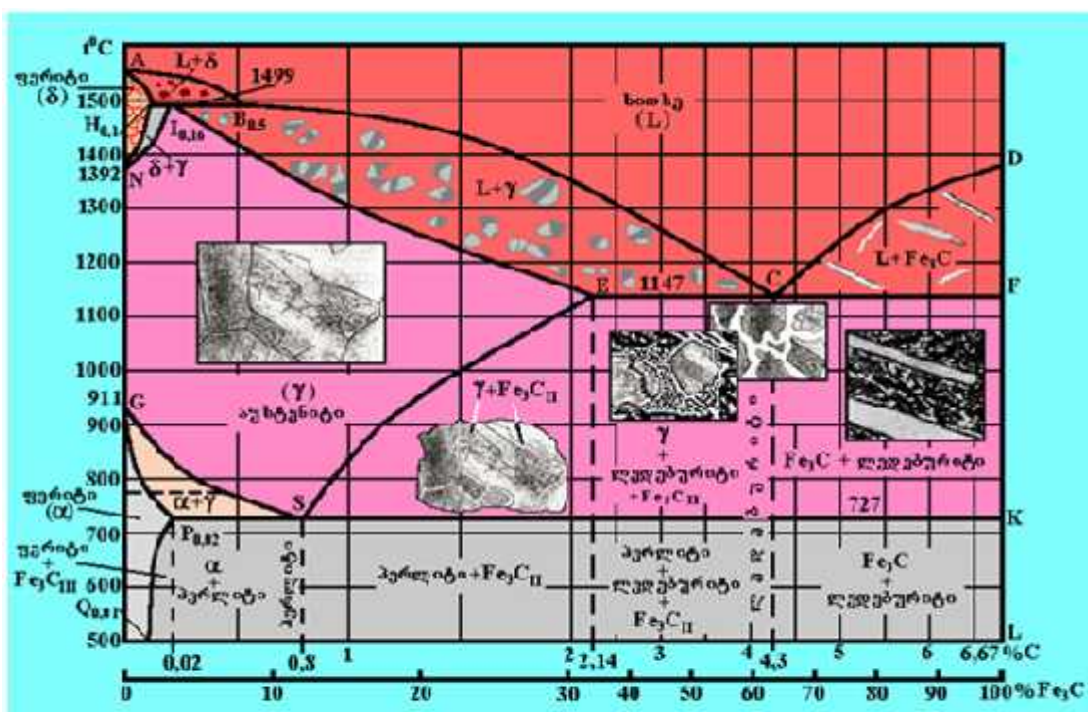


სურ. 6.5. აუსტენიტის წარმოქმნის სქემა
ნაწილის მარტენიტული (ბენიტური)
სტრუქტურის შემთხვევაში

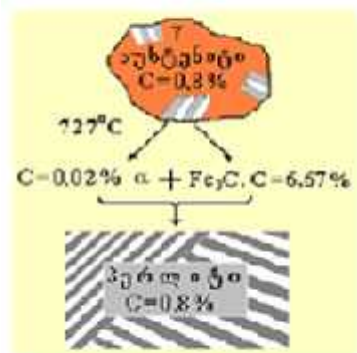
მართალია, ევტექტოიდური რეაქცია მრავალ შენადნობში მიმდინარეობს, მაგრამ ერთადერთ სისტემას, რომელიც საკმაოდ გულდასმით არის გამოკვლეული, რკინა-ნახშირბადის სისტემა მიეკუთვნება. მიუხედავად ამისა, ფოლადებში მიმდინარე ევტექტოიდური გარდაქმნის ძირითადი პრინციპები სამართლიანია პრაქტიკულად ყველა ევტექტოიდური სისტემისთვისაც.

აუსტენიტის ევტექტოიდური დაშლის შედეგად ორი ფაზა წარმოიქმნება – ფერიტი და ცემენტიტი (სურ. 6.6). პირველი 0,02% ნახშირბადს შეიცავს იმ შემთხვევაში, თუ გარდაქმნა წონასწორობულ ტემპერატურაზე მიმდინარეობს და

უფრო მცირე რაოდენობით შედარებით დაბალ ტემპერატურაზე გარდაქმნის შემთხვევაში. ცემენტიტში ნახშირბადის შემცველობა შეადგენს 6,67%-ს. ის ფაქტი, რომ ერთი ფაზიდან, რომელიც ნახშირბადს შეიცავს 0,8%-ს ორი ფაზა წარმოიქმნება, რომელთაგან ერთი თითქმის არ შეიცავს ნახშირბადს, ხოლო მეორეში ნახშირ-

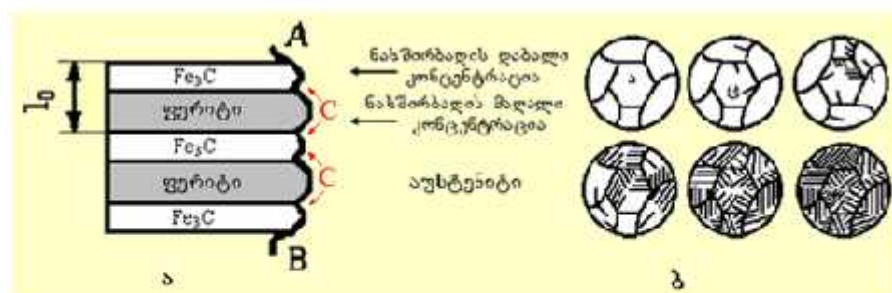


სურ. 6.6. რკინა-ნახშირბადის შენადნობთა სისტემის მდგომარეობის დიაგრამა



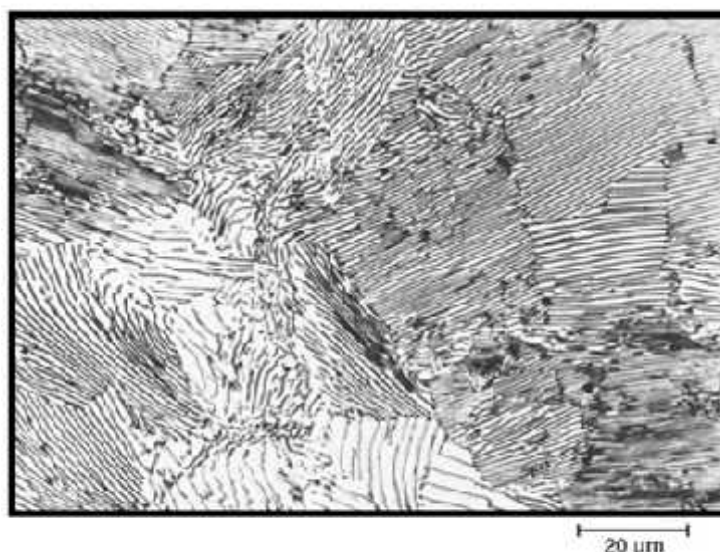
სურ. 6.7. აუსტენიტის პერლიტული გარდაქმნის სქემა

ბადის პრაქტიკულად მთელი რაოდენობაა დაკავებული იმის მაჩვენებელია, რომ გარდაქმნა ნახშირბადის დიფუზიური გადანაწილების გზით მიმდინარეობს. შედეგი ორივე ფაზის ფირფიტების ერთდროული ზრდით მიიღწევა. 6.7. და 6.8 სურათებზე აუსტენიტის პერლიტური გარდაქმნისა და ნახშირბადის გადანაწილების სქემებია წარმოდგენილი. როგორც 6.8 ა სქემიდან გამომდინარეობს, ნახშირბადი განიდევნება ფერიტის მზარდი ფირფიტებიდან იმ უბნებში, სადაც იგი აუცილებელია ცემენტიტის წარმოსაქმნელად. ნახშირბადის დიფუზია გამყოფი ზედაპირის მახლობლობაში, უმთავრესად მის პარალელურად მიმდინარეობს. ზრდის პროცესში პერლიტი წარმოქმნის „კოლონიებს“. ყოველ კოლონიაში ფერიტი და ცემენტიტი ერთნაირადაა ორიენტირებული. ასეთი კოლონია ერთი ჩანასახიდან ვითარდება. 6.9 სურათზე მოცემულია პერლიტის ტიპური მიკროსტრუქტურა. არსებობს იმის დამაჯერებელი დასაბუთება, რომ კოლონიების წარმოქმნის პირველ სტადიაში ხდება ცემენტიტის კრისტალების ჩასახვა. როდესაც კრისტალი იწყებს ზრდას, იგი თავის გარემომომცველ აუსტენიტის უბნებს აღარიბებს ნახშირბადით. შედეგად, იზრდება ფერიტის ჩანასახის წარმოქმნისადმი მისწრაფება, რადგან ეს ადვილად განსახორციელებელია ანომალურად მცირე



სურ. 6.8. ნახშირბადის გადანაწილების (ა) და პერლიტის წარმოქმნის სქემა (ბ) ევტექტოიდური გარდაქმნის დროს

რე ნახშირბადის შემცველ არეებში. ჩვეულებრივ, ფერიტი ცემენტიტის ზედაპირზე ჩაისახება და მასთან კოპერენტულად არის დაკავშირებული. შემდგომში ორივე ფაზა ერთდროულად იზრდება. ამასთან, ჭარბი ნახშირბადი ცემენტიტის მიმართულებით იმ უბნებში დიფუნდირებს, სადაც მათი ზედაპირები ურთიერთშეხებაში იმყოფ



სურ. 6.2. პერლიტის მიკროსტრუქტურა. x1250

ფეხა. აღნიშნული ზედაპირის სხვა უბნებში ნახშირბადის ან სიჭარბე, ან უკმარი-
სობა წარმოიქმნება. ამიტომ ცემენტიტი ფერიტის ზედაპირის, ხოლო ფერიტი – ცე-
მენტიტის ზედაპირის გასწვრივ იზრდება. ზრდის ასეთი მექანიზმი ცემენტიტისა და
ფერიტის ურთიერთმონაცვლე შრეების ჩამოყალიბებას განაპირობებს, რომელთაგან
თითოეული საკუთარი საწყისი ჩანასახის გაგრძელებას წარმოადგენს.

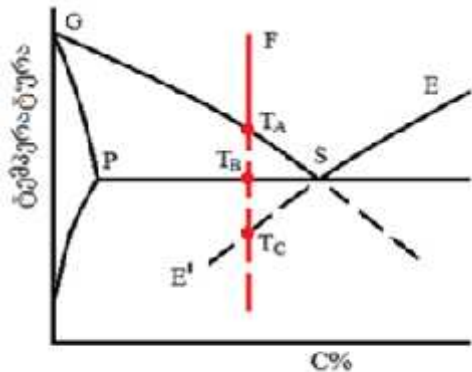
პერლიტური კოლონიის საწყისი ჩანასახი აუსტენიტის მარცვლების საზღე-
რებზე ან ადრე არსებული ცემენტიტის ნაწილაკების მახლობლობაში წარმოიქმნე-
ბა. შემდეგ კოლონია სწრაფად ვითარდება მარცვლების საზღვრების გასწვრივ, უფ-
რო შენელებულად – მართობი მიმართულებით.

შემჩნეულია, რომ ევტექტოიდური გარდაქმნა არ მიეკუთვნება თვითდამამუხ-
რუჭებელ პროცესს, როგორებიცაა, მაგალითად, ქვეევტექტოიდური ფერიტის წარმო-
ქმნა ევტექტოიდური ტემპერატურის ზემოთ ან მარტენსიტის ფორმირება. პერლიტუ-
რი გარდაქმნა მანამ მიმდინარეობს, სანამ არ მოხდება აუსტენიტის სრული დაშლა
(იგულისხმება, რომ ფოლადი შეიცავს 0,8% C და გარდაქმნის ტემპერატურა საკმა-
რისია პროცესის მიმდინარეობისათვის).

თერმული დამუშავების პრაქტიკაში ყველაზე უფრო ხშირად პერლიტი განუ-
წყვეტელი გაცივების პირობებში წარმოიქმნება, თუმცა პროცესის დეტალიზაციისა
და განზოგადებისათვის, უპირველეს ყოვლისა, აუცილებელია იმ ცვლილებების შე-
სწავლა, რომლებიც იზოთერმულ პირობებში მიმდინარეობს.

პერლიტის ჩასახვა რაღაც π დროის შუალედში ხორციელდება და მისი ზრდა თანაბარი სიჩქარით მიმდინარეობს მანამ, სანამ არ მოხდება მზარდი კოლონიების ურთიერთშეჯახება.

თუ გაცივება საკმაოდ სწრაფად ხდება და პერლიტური გარდაქმნის ტემპერატურა პირველადი ფერიტის გამოყოფის დაწყებამდე მიიღწევა, მაშინ პერლიტი შეიძლება საკმაოდ მცირე ნახშირბადის შემცველობის პირობებშიც კი აღმოცენდეს. ასეთი შემთხვევის საილუსტრაციოდ განვიხილოთ 6.10 სურათზე წარმოდგენილ სქემაზე მითითებული F შენაღნობი.



სურ. 6.10. პერლიტის წარმოქმნის არე

T_A ტემპერატურის ზემოთ მდგრად ფაზას აუსტენიტი წარმოადგენს. T_A და T_B ტემპერატურებს შორის წონასწორობაში იმყოფება აუსტენიტი და ფერიტი. T_B -დან T_C ტემპერატურამდე ცემენტიტი ნაკლებად მდგრადია აუსტენიტთან შედარებით, ამიტომ აუსტენიტში ვერ აღმოცენდება ცემენტიტის ჩანასახი. ფერიტის წარმოქმნა გაგრძელდება მანამ, სანამ შენაღნობის ორდინატა არ

გადაკვეთს SE' ხაზს, რომელიც აუსტენიტისა და ცემენტიტის წონასწორობის პირობებს განსაზღვრავს. თუ ეს ტემპერატურა T_C წერტილზე დაბალია, შესაძლებელი გახდება ცემენტიტის ჩასახვა და პერლიტის აღმოცენება. ასეთ პირობებში ჩამოყალიბებული პერლიტი (კვაზიევტექტოიდი) უფრო მეტ ფერიტს და ნაკლებ ცემენტიტს შეიცავს ევტექტოიდთან შედარებით.

თუ ანალოგიურ ანალიზს ჩავატარებთ ზეევტექტოიდურ ფოლადებშიც, შემდეგ დასკვნამდე მივალთ: რადგან ტემპერატურის შემცირებასთან ერთად გამოყოფილი ჭარბი ცემენტიტის (ფერიტის) რაოდენობა მცირდება, კვაზიევტექტოიდში (სორბიტში ან ტროსტიტში) ქვეევტექტოიდურ ფოლადებში ნახშირბადის შემცველობა $<0,8\%$, ხოლო ზეევტექტოიდურ ფოლადებში – $>0,8\%$.

შუალედური, ბეინიტური გარდაქმნა აუსტენიტის იზოთერმული დიაგრამის მუხლს ქვემოთ, საკმაოდ დაბალ ტემპერატურულ პირობებში მიმდინარეობს. ასეთ შემთხვევაში ფერიტის ჩასახვა საკმაოდ სწრაფად ხდება, რაც გადაჯერებული ფერიტის კრისტალებისა და ცემენტიტის ჩამოყალიბებას განაპირობებს. ვარაუდობენ, რომ

ფერიტი კოჰერენტულად აღმოცენდება აუსტენიტის მატრიცაზე და მისი შემდგომი განვითარება ნახშირბადის გამოყოფით (მზარდი ფერიტიდან ნახშირბადის განდევნით) მიმდინარეობს. ამდენად, პროცესი კონტროლირდება ნახშირბადის დიფუზიით ცემენტიტის ჩანასახის მიმართულებით. ბუნებრივია, ცემენტიტი იმ უბნებში წარმოიქმნება, სადაც ნახშირბადის საკმარისი კონცენტრაცია იქნება მიღწეული. ამიტომ ბეინიტის წარმოქმნის რეაქციას ფერიტისა და ცემენტიტის ჩანასახის სიჩქარეები განსაზღვრავს და იგი უფრო შენელებული სიჩქარით მიმდინარეობს პერლიტურ გარდაქმნასთან შედარებით.

6.3. არადიფუზიური (მარტენსიტული) გარდაქმნა

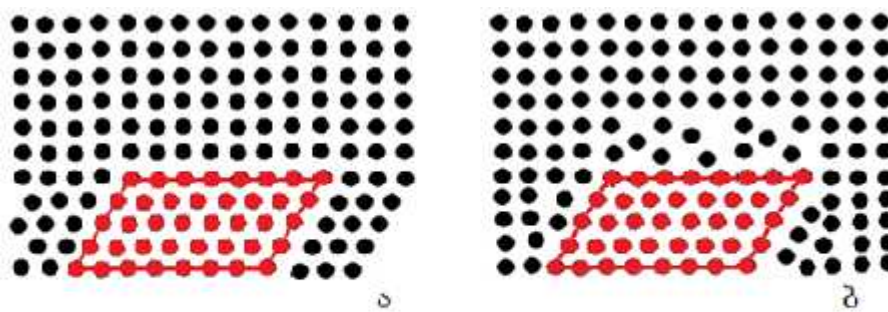
არადიფუზიურს ისეთ გარდაქმნას უწოდებენ, რომლის დროსაც საწყისი ფაზის ატომები ერთდროულად და კოლექტიურად გადაადგილდება ახალი, უფრო მდგრადი ფაზის კრისტალური გისოსის კვანძებში. ყოველი ატომი თავის ახალ მდებარეობაში დეფორმაციის ენერგიის ზემოქმედებით იძვრის, რომელიც მისი მეზობელი ატომების მსგავსი მოძრაობის შედეგად აღიძვრება. ეს თერმულად არააქტივირებული პროცესი ისეთი სიჩქარით მიმდინარეობს, რომელიც დრეკადი ალგზნების გავრცელების, ანუ ბგერის სიჩქარეს შეესაბამება. ატომების კოლექტიური გადაადგილების ერთ-ერთი შედეგია ის, რომ ახლად ჩამოყალიბებული კრისტალი ფორმითა და მოცულობით განსხვავებულია საწყისი ფაზისაგან. კრისტალის ნაწილის ფორმის ასეთი ცვლილება იწვევს დეფორმაციას, რომელიც წინააღმდეგობას უწევს შემდგომი გარდაქმნის მიმდინარეობას. საწყისი პირობების შენარჩუნების შემთხვევაში მარტენსიტული გარდაქმნა ბოლომდე ვერ განხორციელდება. პროცესის გაგრძელებისათვის აუცილებელია ტემპერატურის შემცირება ან გარდაქმნის მამოძრავებელი ძალის გაზრდა.

არადიფუზიური გარდაქმნისას სამ დამახასიათებელ ტემპერატურას განიხილავენ:

1. M_D , რომლის ზემოთ ახალი (მარტენსიტული) ფაზა არ შეიძლება წარმოიქმნას, რადგან ასეთ პირობებში სისტემის თავისუფალი ენერგია არ შემცირდება;
2. M_H , რომლის დროსაც, ტემპერატურის შემცირების შემთხვევაში, იწყება მარტენსიტული ფაზის წარმოქმნა. ბუნებრივია, M_H ნაკლებია M_D -ზე, რადგან ახალი ფაზის ჩანასახის წარმოქმნისათვის გარკვეული გადაცივებაა აუცილებელი;

3. M_K , რომლის მიღწევისას საწყისი ფაზის მაქსიმალური რაოდენობა გარდაიქმნება ახალ, მარტენსიტულ ფაზად.

ატომების კოლექტიური გადაადგილებისათვის აუცილებელია საწყის და მარტენსიტულ ფაზებს შორის კოჰერენტული გამყოფი საზღვრის არსებობა (სურ. 6.11, ა). წინააღმდეგ შემთხვევაში, შეუძლებელი იქნებოდა ფაზურ გარდაქმნაში მონაწილე ატომების ურთიერთმსგავსი გადანაცვლება. აღნიშნული ატომების ეკვივალენტური, ტოლფასი გადაადგილება ექსპერიმენტულად არის დადასტურებული, რომლის თანახმადაც სწორედ საწყის ფაზაში ატომების მოწესრიგებული განლაგება განაპირობებს მათ ასევე მოწესრიგებულ გადაჯგუფებას ახალ, მარტენსიტულ ფაზაში.



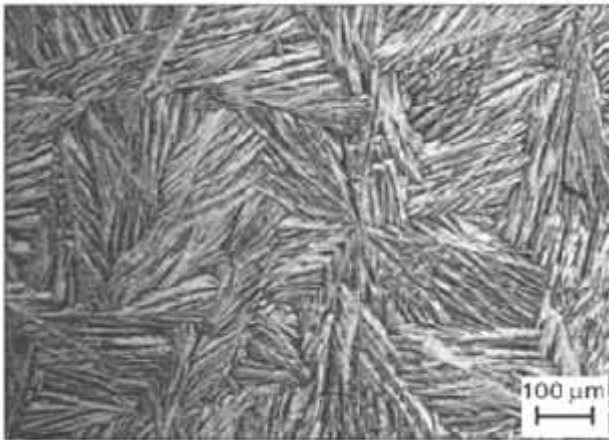
სურ. 6.11. მარტენსიტული გარდაქმნის დროს აუსტენიტისა და მარტენსიტის კრისტალურ გისოსებს შორის შესაბამისობა

აუსტენიტისა და მარტენსიტის მოცულობები ერთმანეთისგან განსხვავებულია. ამიტომ მათ საზღვარზე დაძაბულობა წარმოიქმნება, რომელიც განუხრელად იზრდება მარტენსიტის კრისტალის ზრდასთან ერთად და აუსტენიტის პლასტიკურ დეფორმაციას განაპირობებს. პლასტიკური დეფორმაციის შედეგად ირღვევა აუსტენიტისა და მარტენსიტის კრისტალური გისოსების კოჰერენტულობა, იგი სწრაფად ქრება და ყალიბდება არაკოჰერენტული საზღვარი, სადაც ატომების განლაგების ხასიათი მნიშვნელოვნად არის დამახინჯებული (სურ. 6.11, ბ). ფაზათა გამყოფ ზედაპირს გარკვეული კრისტალოგრაფიული ორიენტაცია აქვს. 6.1 ცხრილში წარმოდგენილია ზოგიერთი არადიფუზიური გარდაქმნის კრისტალოგრაფიული მონაცემი.

მარტენსიტული გარდაქმნის დროს ატომების ორიენტირებული გადანაცვლება სივრცეში ნიმუშის გაპრიალებულ ზედაპირზე დამახასიათებელ რელიეფს წარმოქმნის (სურ. 6.12), რაც აუსტენიტის მოცულობითი ფორმის ცვლილებას კიდევ ერთხელ ადასტურებს.

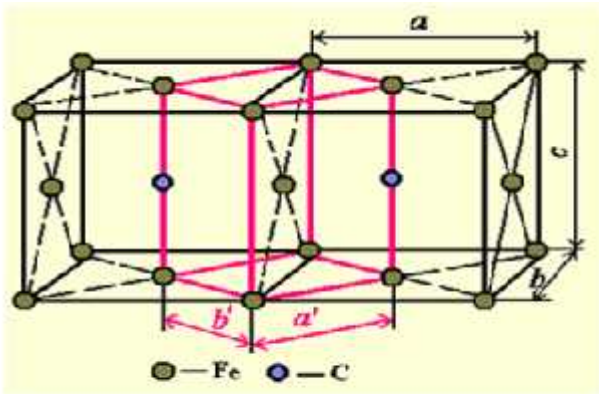
ზოგიერთი არადიფუზიური გარდაქმნის კრისტალოგრაფიული მონაცემები

სისტემა	შემადგენლობა	გარდაქმნა გაცივების დროს	კრისტალოგრაფი- ული სიბრტყეების შესაბამისობა	კრისტალოგრაფიული მიმართულებების შესაბამისობა
Fe-C	0,5-1,4%C	წდკ→სდტ	$\{111\}\gamma \parallel \{110\}\alpha$	$\langle 110 \rangle\gamma \parallel \langle 111 \rangle\alpha$
Fe-Ni	27-34%Ni	წდკ→სდკ	$\{111\}\gamma \parallel \{110\}\alpha$	$\langle 211 \rangle\gamma \parallel \langle 110 \rangle\alpha$
Li		სდკ→მჰ	$\{110\} \parallel \{0001\}$	$\langle 111 \rangle 3^0 \parallel \langle 11\bar{2}0 \rangle$ -დან
Au-Cd	47,5(ატ)%Cd	სდკ→ორთორომბ β'	$\{001\}\beta \parallel \{001\}\beta'$	$[111] \beta \parallel [110] \beta'$
Co		წდკ→მჰ	$\{111\} \parallel \{0001\}$	$\langle 110 \rangle \parallel \langle 11\bar{2}0 \rangle$



სურ. 6.12. Ni-50.3 Ti-2 W შენადნობის პოლირებულ ზედაპირზე წარმოქმნილი მარტენსიტული გარდაქმნისათვის დამახასიათებელი რელიეფური ეფექტი

მარტენსიტული მექანიზმით $\gamma \rightarrow \alpha$ გარდაქმნის ბაზისს საწყისი ფაზის, აუსტენიტის წახნაგდაცენტრებული კუბური გისოსის ორი მეზობელი ელემენტარული უჯრედი წარმოადგენს (სურ. 6.13). უჯრედების აღნიშნულ წყვილში ჩამოყალიბებული



სურ. 6.13. აუსტენიტის მარტენსიტული გარდაქმნის კრისტალოგრაფიული მოდელი

ახალი, სივრცით დაცენტრებული კუბური გისოსის პარამეტრები $a'=b'$ ნაკლები აღმოჩნდება a -ზე. რადგან კუბის ცენტრი დაკავებულია რკინის ატომით, ნახშირბადის ატომი c წიბოზე განთავსდება, რკინის ატომებს შორის. შესაძლებელია მან α -რკინის გისოსის ზედა და ქვედა წახნაგების ცენტრებიც დაიკაოს.

ამგვარად, ყალიბდება მარტენსიტისათვის დამახასიათებელი სივრცით დაცენტრებული ტეტრაგონური გისოსი, რომლის პარამეტრები ოთახის ტემპერატურაზე შეადგენს: $a'=b'=2,845\text{\AA}$; $c=2,96\text{\AA}$. გისოსის ტეტრაგონურობის ხარისხი პირდაპირ დამოკიდებულებაშია ფოლადში ნახშირბადის შემცველობასთან. მარტენსიტული გარდაქმნისათვის დამახასიათებელია აგრეთვე ბლოკების დაწვრილმანება, მარტენსიტის კრისტალში მიკროგაორებული უბნების დიდი რაოდენობით წარმოქმნა და დისლოკაციის სიმკვრივის გაზრდა, რაც ყველა ერთად აღებული მარტენსიტის მაღალ სისაღეს (HRC 60-65) განაპირობებს.

მარტენსიტული გარდაქმნა ფოლადებში ბოლომდე არ მიმდინარეობს გარდაქმნის დამთავრების, M_K ტემპერატურაზეც კი. აუსტენიტის ნაწილი გარდაქმნის გარეშე რჩება და მას ნარჩენ აუსტენიტს უწოდებენ. ამიტომ ნაწრთობ ფოლადებში, რომლებისთვისაც M_K წერტილი 20°C -ზე ქვემოთ მდებარეობს, მარტენსიტთან ერთად, ყოველთვის თანაარსებობს ნარჩენი აუსტენიტის გარკვეული რაოდენობა. ნარჩენი აუსტენიტი მით უფრო მეტია, რაც უფრო დაბლა მდებარეობს M_H და M_K წერტილები.

6.4. შუალედური ბარდაქმნა

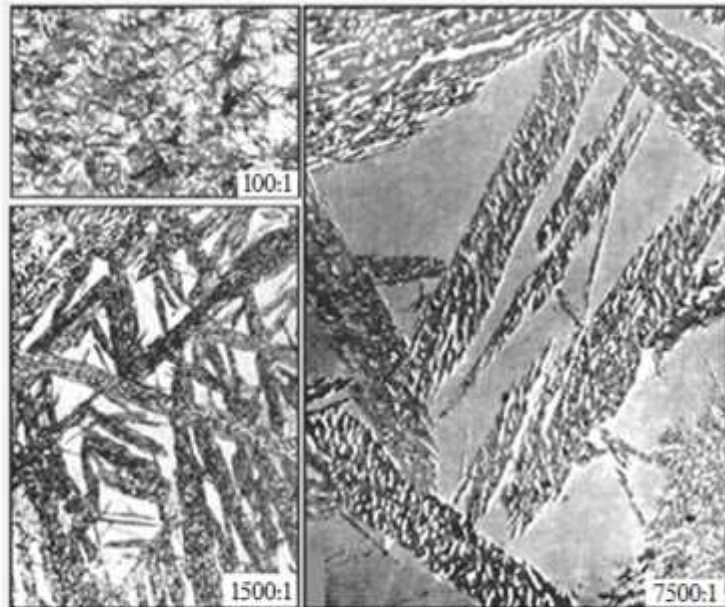
შუალედური გარდაქმნა პერლიტურ და მარტენსიტულ გარდაქმნებს შორის ტემპერატურულ ინტერვალში (C მრუდების მუხლს ქვემოთ M_H წერტილამდე), იზოთერმული დაყოვნების პირობებში მიმდინარეობს. შედეგად ჩამოყალიბდება ბეინიტური სტრუქტურა, რომელიც შედგება ნახშირბადით გადაჯერებული α მყარი ხსნარისაგან, აუსტენიტიდან გამოყოფილი და მარტენსიტის დაშლის შედეგად ჩამოყალიბებული კარბიდების ნაწილაკებისაგან, აგრეთვე საშუალო შედგენილობასთან შედარებით განსხვავებული ნახშირბადის კონცენტრაციის მქონე ნარჩენი აუსტენიტისაგან. აღნიშნული ნარევი მაღალდისპერსიულია და ახასიათებს თხელფირფიტოვანი აგებულება, ამიტომ ჩვეულებრივი გადიდების პირობებში მათი გაჩევა შეუძლებელია.

ასხვავებენ ზედა ბეინიტურ და ქვედა ბეინიტურ სტრუქტურებს. ზედა ბეინიტი, ჩვეულებრივ, $\sim 500-350^\circ\text{C}$ ტემპერატურულ ინტერვალში წარმოიქმნება. მასში კარბიდის ნაწილაკები გამოიყოფა არა ფირფიტების სახით, როგორც პერლიტში, არა-

მედ იზოლირებული, ვიწრო ნაწილაკების სახით (სურ. 6.14). ქვედა ბეინიტი წარმოიქმნება 350°C-დან M_H წარტილამდე ინტერვალში და ხასიათდება ნემსისებრი (ფირფიტოვანი) ან მარტენსიტის მსგავსი აგებულებით (სურ. 6.15). კარბიდული ნაწილაკები ქვედა ბეინიტში α ფაზის ფირფიტებზეა განლაგებული.



სურ. 6.14. ზედა ბეინიტური სტრუქტურა



სურ. 6.15. ქვედა ბეინიტი და ნარჩენი აუსტენიტი.

გადაცივებული აუსტენიტის ბეინიტური გარდაქმნის მექანიზმი აერთიანებს როგორც პერლიტური, ისე მარტენსიტული გარდაქმნისათვის დამახასიათებელ ელემენტებს: ნახშირბადის დიფუზიურ გადანაწილებას აუსტენიტში და კოოპერატიულ (ძვრიტ) $\gamma \rightarrow \alpha$ გარდაქმნას მარტენსიტული მექანიზმით.

ბეინიტური გარდაქმნა ისეთ ტემპერატურულ დიაპაზონში მიმდინარეობს, სადაც რკინის თვითდიფუზია და მალეგირებელი ელემენტების დიფუზია შეუძლებელია, ხოლო ნახშირბადის დიფუზიის სიჩქარე ჯერ კიდევ საკმაოდ მაღალია. სწორედ ეს ფაქტი განაპირობებს ბეინიტური გარდაქმნის თავისებურებას. ბეინიტური გარდაქმნის საწყის ფაზაში მიმდინარეობს ნახშირბადის დიფუზიური გადანაწილება აუსტენიტში, რის შედეგადაც ნახშირბადით გამდიდრებული და გაღარიბებული მოცულობები წარმოიქმნება. აუსტენიტის იმ უბნებში, რომლებიც ნახშირბადის მცირე კონცენტრაციით ხასიათდება და რომელთა M_H წერტილი შუალედური გარდა-

ქმნის ტემპერატურულ ინტერვალში ძვეს, განიცდის $\gamma \rightarrow \alpha$ გარდაქმნას მარტენსიტული მექანიზმით. ნახშირბადით მდიდარი აუსტენიტის მოცულობებში კი იზოთერმული დაყოვნების პროცესში შეიძლება კარბიდის ნაწილაკების გამოყოფა დაიწყოს. ბუნებრივია, ეს გამოიწვევს აუსტენიტის ამ უბნების გადარიბებას ნახშირბადით და $\gamma \rightarrow \alpha$ გარდაქმნას მარტენსიტული მექანიზმით. სწორედ α ფაზის წარმოქმნა მარტენსიტული მექანიზმით განაპირობებს მის ნემსისებურ სტრუქტურას და მიკროხეხის ზედაპირზე დამახასიათებელი რელიეფის წარმოქმნას, რომელიც უფრო მკვეთრად ქვედა ბეინიტის ფორმირების შემდეგ მუდგნდება.

შუალედური გარდაქმნის დროს α ფაზის კრისტალების ზრდის სიჩქარე ტორსული მიმართულებით შედარებით მცირეა და 10^{-3} - 10^{-5} მმ/წმ შეადგენს. ეს იმით არის განპირობებული, რომ α ფაზის კრისტალების ზრდის სიჩქარეს განსაზღვრავს ნახშირბადის ატომების განდევნის სიჩქარე α მზარდი კრისტალის ზედაპირიდან აუსტენიტში.

ბეინიტური გარდაქმნის დროს ჩამოყალიბებული α ფაზა (მარტენსიტი) ნახშირბადით არის გადაჯერებული – ფერიტის კრისტალები 0,1-0,2%-მდე ნახშირბადს შეიცავს. გადაჯერების ხარისხი მით უფრო მეტია, რაც უფრო დაბალია გარდაქმნის ტემპერატურა. ამიტომ $\gamma \rightarrow \alpha$ გარდაქმნის დამთავრებისთანავე, თუ მოცემულ ტემპერატურაზე დიფუზიური ძვრადობა საკმაოდ მაღალია, გადაჯერებული α მყარი ხსნარიდან კარბიდის ნაწილაკების გამოყოფა დაიწყება.

ზედა და ქვედა ბეინიტის ჩამოყალიბების მექანიზმები პრინციპულად იდენტურია. განსხვავება შეიძლება იმაში მდგომარეობდეს, რომ ზედა ბეინიტის წარმოქმნის ტემპერატურულ არეში პროცესის საწყის ეტაპზე ნახშირბადის კონცენტრაციის უფრო მნიშვნელოვანი დიფერენციაცია მიმდინარეობს, რაც აუსტენიტის მარცვლებში ნახშირბადით მნიშვნელოვნად გამდიდრებული უბნების და, შესაბამისად, მარტენსიტული გარდაქმნის გზით ნახშირბადით უფრო გადარიბებული α ფაზის ჩამოყალიბებას განაპირობებს. აქედან გამომდინარე, ბეინიტურ სტრუქტურაში კარბიდების გამოყოფა უპირატესად აუსტენიტის მარცვლებიდან უნდა მიმდინარეობდეს. ქვედა ბეინიტის წარმოქმნის შემთხვევაში კი პირიქით, აუსტენიტში ნახშირბადით გამდიდრებული უბნები შედარებით მცირე აღმოჩნდება, ხოლო α ფაზის გადაჯერების ხარისხი – უფრო მნიშვნელოვანი. ამიტომ კარბიდების გამოყოფა უმთავრესად α ფა-

ზის კრისტალებში ხდება (სურ. 6.15).

მარტენსიტული გარდაქმნის ანალოგიურად, ბეინიტური გარდაქმნაც, უმეტეს შემთხვევაში, ბოლომდე არ მიმდინარეობს. იზოთერმული დაყოვნების პირობებში დაუშვლელად შემონახული აუსტენიტის გარკვეული ნაწილი შემდგომი გაცივებისას შეიძლება ან მარტენსიტად გარდაიქმნას, ან უცვლელად დარჩეს შემონახული ნარჩენი აუსტენიტის სახით.

6.5. დისპერსიული გამონაყოფი

გადაჯერებული ფაზიდან გამონაყოფის ჩამოყალიბების თერმოდინამიკურ პირობას ის წარმოადგენს, რომ ტემპერატურის შეცვლისას სისტემაში შეიძლება წარმართოს გადასვლა მდგომარეობის დიაგრამის ერთფაზა არიდან ორფაზა არეში (ბინარულ შენადნობებში) ან, ზოგად შემთხვევაში, n ფაზიანი არიდან $(n+1)$ -ფაზიან არეში. ჩვენი მსჯელობა შემოფარებული იქნება მხოლოდ ორმაგი სისტემებით.

ტემპერატურის მეტად ნელი ცვლილებისა და „ჩასახვის ბარიერის“ არარსებობის შემთხვევაში ახალი ფაზის გამოყოფა წონასწორულ პირობებში ხორციელდება. თანაარსებული ფაზების რაოდენობა და შედგენილობა ნებისმიერ მომენტში შეიძლება უშუალოდ მდგომარეობის დიაგრამიდან განისაზღვროს. რაც შეეხება დროს, რომელიც სისტემის წონასწორობის დასამყარებლად ან გამოყოფის პროცესის განხორციელებისათვის არის საჭირო, დიფუზიის გზით მატრიცის ერთგვაროვანი შედგენილობის შენარჩუნების აუცილებლობით განისაზღვრება, რადგან გამონაყოფის ზრდა ცვლის შედგენილობას გამონაყოფის ნაწილაკებისა და მატრიცის გამყოფ ზედაპირზე. ასეთი დიფუზია მყარ ფაზაში უფრო მცირე სიჩქარით ხორციელდება, ვიდრე სითხეში და იგი ისევე აკონტროლებს გამოყოფის პროცესს, როგორც დიფუზია თხევადი მდგომარეობიდან შენადნობის გამყარებისას. ამიტომ შეიძლება შემოვიფარგლოთ ისეთი შემთხვევით, როდესაც პროცესი არ არის შექცევადი და კონტროლირდება როგორც დიფუზიის სიჩქარით, ისე ტემპერატურით. ახალი ფაზის გამოყოფის პროცესში წონასწორობის შენარჩუნებას ხელს უშლის აგრეთვე ის გარემოება, რომ უნდა მოხდეს ახალი ფაზის ჩასახვა, რომელიც გარკვეულ გადაჯერებას მოითხოვს.

გამოყოფის პროცესი ორი სტადიისგან შედგება: ახალი ფაზის ჩასახვისა და

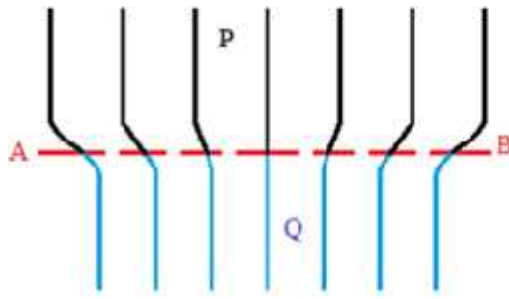
გამოყოფილი ნაწილაკების შემდგომი ზრდისაგან. გამონაყოფის ჩასახვა უფრო რთული პროცესია, ვიდრე კრისტალების ჩანასახის წარმოქმნა სითხიდან. ამის მიზეზს სამი სხვადასხვა გარემოება წარმოადგენს:

1. ფაზათა გამყოფი ზედაპირის ენერგიის დამოკიდებულება გამონაყოფი ფაზისა და მატრიცის გეომეტრიულ შესაბამისობაზე;
2. განსხვავებული კრისტალური სტრუქტურის მქონე ჩანასახის კუთრი მოცულობისა ან ფორმის განსხვავება მატრიცასთან შედარებით, რომელშიც იგი ყალიბდება. ეს განაპირობებს მოცულობით ან ძვრით დეფორმაციას როგორც მატრიცაში, ისე ჩანასახში. ამიტომ ჩანასახის კრიტიკული ზომის განსაზღვრისათვის შედგენილ განტოლებაში ასეთ დეფორმაციასთან დაკავშირებული ენერგია ფაზათაშორისი ზედაპირის ენერგიასთან უნდა შეჯამდეს.

3. მატრიცაში არსებული არასრულყოფილებები, რომლებმაც შეიძლება იმ უპირატესი ადგილების როლი ითამაშოს, სადაც ახალი ფაზის ჩასახვა მოხდება, რადგან ამ უბნებში ჩანასახის წარმოსაქმნელად აუცილებელი გადაჯერების ხარისხი შეიძლება უფრო ნაკლები აღმოჩნდეს, ვიდრე ეს საჭიროა იდეალურ, სრულყოფილ, ჰომოგენურ გარემოში. აქედან გამომდინარე, თუ ასეთი არასრულყოფილებების ენერგიის შემცირება შესაძლებელია ჩანასახის წარმოქმნის გზით, ახალი ფაზის ჩანასახის განმსაზღვრელ განტოლებაში შესაბამისი წევრი უნდა გამოირიცხოს.

აღნიშნული ასპექტებიდან პირველის ჩამოყალიბება შემდეგნაირად შეიძლება:

დაეუშვათ, საწყისი და გამოყოფილი კრისტალების გამყოფი ზედაპირი კოჰერენტულია. ასეთ შემთხვევაში მათი სტრუქტურა გამყოფ ზედაპირზე ურთიერთშესაბამისი აღმოჩნდება. თუ კრისტალური გისოსები არ არის სრულად იდენტური, შეიძლება მათ განიცდონ დრეკადი დეფორმაცია გარკვეული ხარისხით, რაც გისოსების ურთიერთმისადაგებას შეუწყობს ხელს (სურ. 6.16, ა). სქემაზე გამყოფი ზედაპირი AB პუნქტირით არის მითითებული. როდესაც P და Q კრისტალების გისოსის პერიოდები ერთმანეთისგან მცირედ, რამდენიმე პროცენტით განსხვავდება, გამყოფი სიბრტყის მახლობლობაში მეტი ატომთშორისი მანძილის მქონე კრისტალი (მოცემულ შემთხვევაში P) შეიკუმშება, ხოლო მეორე, Q კრისტალი – გაიჭიმება. წარმოქმნილი დამახინჯების ენერგია დრეკადია და იგი კრისტალების განცალკევების შემთხვევაში მოისპობა. ასეთ პირობებში აღძრული დრეკადი ენერგიის სიდიდე ატომთშორისი მანძილების შეუსაბამობის ხარისხზე, კრისტალების დრეკადობის



სურ. 6.16. გისოსის დამახინჯება
კოჰერენტული გამყოფი საზღვრის
მასშტაბობაში

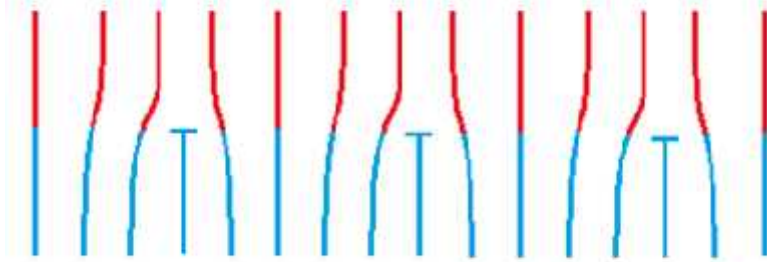
მუდმივებსა და სისტემის გეომეტრიაზე დამოკიდებული.

პროცესის განხილვისას ყველაზე რეალურია ვივარაუდოთ, რომ ახალი, Q ფაზის ჩასახვისათვის, მოცულობა შეზღუდულია. ასეთ შემთხვევაში დეფორმაციის ენერგია მცირეა განსაკუთრებით იმ შემთხვევაში, როდესაც Q კრისტალის დრეკადობის მოდული უფრო დაბალია P კრისტალთან შედარებით. კოჰერენტული გამყოფი ზედაპირის დრეკადი დეფორმაციის ენერგია უფრო მნიშვნელოვნად მცირდება მაშინ, როდესაც გამონაყოფს არა ტოლდება, მაგალითად, სფეროსთან მიახლოებული, არამედ თხელფირფიტოვანი აგებულება აქვს. კოჰერენტული გამყოფი ზედაპირის მთელი ენერგია დეფორმაციის იმ ენერგიად არის მიჩნეული, რომელიც აღნიშნული კავშირის მიღწევას უზრუნველყოფს. თუ კავშირი არაკოჰერენტულია, მაშინ ფაზათაშორისი გამყოფი საზღვრის ენერგია კრისტალთშორისი ენერგიის ანალოგიურია. იგი ზედაპირის ფართობის პროპორციულია, რასაც სფერული ნაწილაკების ჩასახვამდე მივყავართ.

შუალედურს წარმოადგენს ის შემთხვევა, როდესაც ატომთშორისი მანძილების შეუსაბამობა ისეთია, რომ სრული კოჰერენტულობის მისაღწევად საკმაოდ დიდი დრეკადი ენერგიაა საჭირო. ასეთ შემთხვევაში შეიძლება წარმოიქმნას კოჰერენტულობის ლოკალური უბნები, რომლებიც ერთმანეთისგან დისლოკაციებით (ე.წ. შეუსაბამობის დისლოკაციებით) იქნებიან გამოყოფილი (სურ. 6.17).

საკითხი, თუ რამდენად კანონზომიერია არაკოჰერენტული გამყოფი ზედაპირის განხილვა, როგორც დისლოკაციების გარკვეულად განლაგების ზღვრული შემთხვევისა, დიდი კუთხით ორიენტირებული კრისტალების საზღვრების პრობლემის აღწერის ანალოგიურია.

დრეკადი ენერგია გამოყოფადი ნაწილაკებისა და მატრიცის გამყოფ საზღვარზე ძვრით დეფორმაციის გამო აღიძვრება. ასეთი დრეკადი ენერგია იმ შემთხვევაშიც აღიძვრება, როდესაც გამოყოფადი ნაწილაკების მოცულობა განსხვავებულია



სურ. 6.17. ნახევრადკოპერენტული გამყოფი ზედაპირი

იმ მოცულობასთან შედარებით, რომელიც იგივე ატომებს ადრე ჰქონდათ დაკავებული. დეფორმაციის ენერგიის ეს მდგენელი ასევე შემცირდება, თუ გამონაყოფის ნაწილაკები ფირფიტოვანი ფორმისაა.

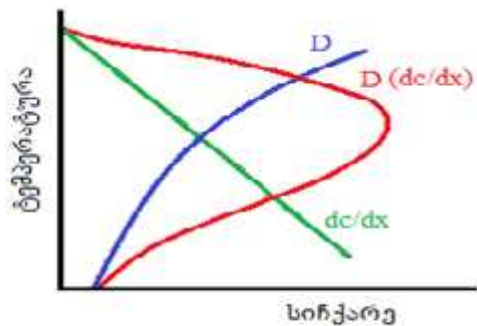
ნებისმიერ შენადნობში, რომელშიც გამოყოფის პროცესი მიმდინარეობს, შემდეგი ტემპერატურებია დამახასიათებელი:

1. წონასწორობის ტემპერატურა;
2. ენერგეტიკული თვალსაზრისით ყველაზე ხელსაყრელ ადგილებში, ანუ კრისტალების საზღვრებში ჩანასახის აღმოცენების ტემპერატურა;
3. სხვა ხელსაყრელ უბნებში (როგორიცაა, მაგალითად, დისლოკაციის ხაზები) ჩანასახის წარმოქმნის ტემპერატურა;
4. ჩანასახების წარმოქმნის ტემპერატურა კრისტალის იდეალური აგებულების უბნებში.

ზემოთ აღნიშნული დამახასიათებელი ტემპერატურები ჩამონათვალის თანმიმდევრობით კლებულობს. აქედან გამომდინარე, ტემპერატურას, რომელზედაც გამოყოფა მიმდინარეობს, მისი ჩანასახის ადგილი (ყველაზე ხელსაყრელი, ნაკლებად ხელსაყრელი ან არახელსაყრელი) განსაზღვრავს. მაღალ ტემპერატურაზე ჩანასახი უმთავრესად მარცვლის საზღვრებში და ზედაპირზე წარმოიქმნება; შედარებით დაბალ ტემპერატურაზე ჩანასახი შეიძლება კრისტალის მოცულობაშიც წარმოიქმნას.

გამონაყოფის ზრდის პირობებში გარკვევისათვის დავუშვათ, რომ ახალი ფაზის გამოყოფა იზოთერმულ პირობებში, ტემპერატურის მკვეთრი ცვლილების (წრთობის) შემდეგ ხორციელდება. გამოყოფილი ფაზის ზრდის სიჩქარე იმ სიჩქარით განისაზღვრება, როგორითაც მიმდინარეობს გამონაყოფის ფორმირებისათვის აუცილებელი შედგენილობის ცვლილება. ჩვეულებრივ, ამისათვის საჭიროა გამხსნელის ატომების ჩანაცვლება გახსნილი კომპონენტის ატომებით და მათი გადანაწილება

ახალ კრისტალურ სტრუქტურაში. სიჩქარე, რომლითაც ეს პროცესი შეიძლება წარმოადგენს, გახსნილი ელემენტის ატომების ძვრადობის (დიფუზიის) უნარი განსაზღვრავს. მართალია, დიფუზიის სიჩქარე ტემპერატურაზე დამოკიდებული, მაგრამ მას კონცენტრაციული გრადიენტიც განაპირობებს, რომელიც მატრიცის საწყის შედგენილობასა და გამოყოფადი ფაზისა და მატრიცის გამოყოფი შედგენილობას შორის სხვაობით განისაზღვრება. ამიტომ კონცენტრაციული გრადიენტი მყარი ხსნარის გადაჯერების ხარისხის პროპორციულია და ტემპერატურის შემცირებასთან ერთად იზრდება. 6.18 სურათზე წარმოდგენილია ტემპერატურის გავლენა გამოყოფილი ნაწილაკების ზრდის სიჩქარეზე. ნახაზზე მითითებულია აგრეთვე დიფუზიის კოეფიციენტისა (D) და კონცენტრაციის გრადიენტის (d/dx) ცვლილების ხასიათი ტემპერატურაზე დამოკიდებულებით. დიფუზიის სიჩქარე კონცენტრაციის გრადიენტისა და დიფუზიის კოეფიციენტის ნამრავლის პროპორციულია.



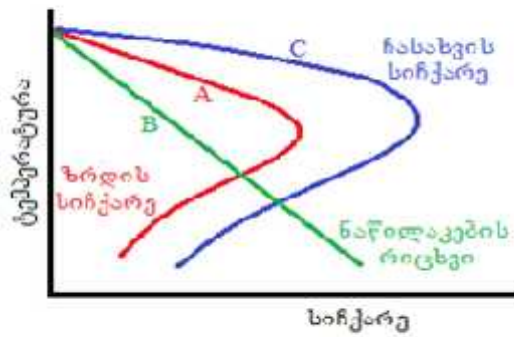
სურ. 6.18. ტემპერატურის გავლენა გამოყოფილი ნაწილაკების ზრდის სიჩქარეზე

შემაჯამებელი მრუდი, რომელიც მყარ მდგომარეობაში მიმდინარე მრავალი რეაქციის მახასიათებელს წარმოადგენს, ტემპერატურის მიხედვით დიფუზიის კოეფიციენტისა და რეაქციის მამოძრავებელი ძალის ცვლილების ურთიერთსაპირისპიროდ მოქმედების შედეგია. გამოყოფის გახსნისას, როდესაც პროცესი ტემპერატურის მატებით მიმდინარეობს, ზემოთ აღნიშნული ორივე ფაქტორი ერთი და იგივე მიმართულებით მოქმედებს და რეაქციის სიჩქარე გა-

ნუხრელად იზრდება.

გამოყოფილი ფაზის ზრდის საერთო სიჩქარე დამოკიდებულია აგრეთვე მზარდი ნაწილაკების რაოდენობაზე. ნაწილაკების რიცხვი იზრდება წონასწორული ტემპერატურიდან დაცილებასთან ერთად, ამიტომ შემაჯამებელი მრუდი A 6.19 სურათზე შესაბამისობაში უნდა იყოს მზარდი ნაწილაკების ცვლილების ხასიათთან (B), რაც გამოყოფის სიჩქარის მრუდის (C) განსაზღვრის შესაძლებლობას იძლევა.

გამოყოფის სიჩქარის ცვლილებას დროის ფაქტორიც განპირობებს. ბუნებრივია, პროცესი გარკვეული პერიოდის განმავლობაში გრძელდება და თანდათან მა-



ნახ. 6.19. ტემპერატურის გავლენა ფაზის გამოყოფის სიჩქარეზე

ტულობს მზარდი ნაწილაკების რაოდენობა, რამაც ბუნებრივად უნდა გაზარდოს გარდაქმნის სიჩქარე.

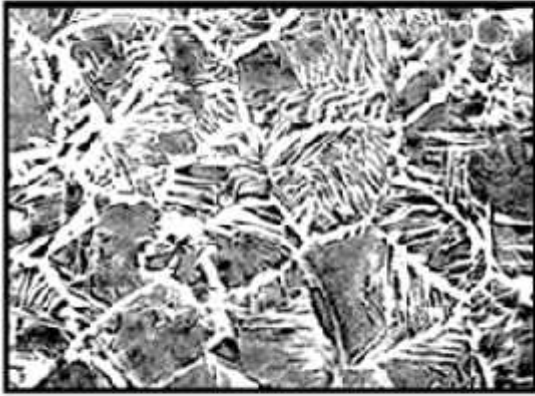
ჩატარებული გამოთვლები და ექსპერიმენტული მონაცემები საფუძველს იძლევა ვივარაუდოთ, რომ გადაჯერებული მყარი ხსნარიდან ახალი ფაზის გამოყოფის პროცესში მეტად მნიშვნელოვანი როლი შეიძლება ითა-

მაშოს დიფუზიამ დისლოკაციების გასწვრივ.

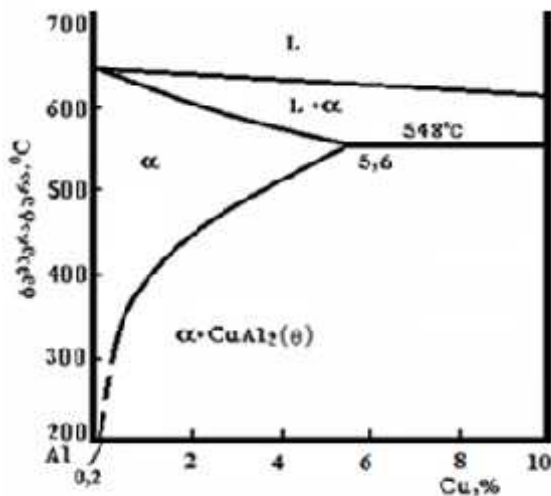
თუ გამოყოფილი ნაწილაკები არაკოჰერენტულია მატრიცის მიმართ, გამონაყოფი ან სფეროიდულ ფორმასღებულობს (როდესაც მისი ზედაპირული ენერგია არ არის დამოკიდებული ზედაპირის კრისტალოგრაფიულ ორიენტაციაზე), ან ისეთი ფორმის წარმონაქმნებად ჩამოყალიბდება, რომლებიც დაბალი თავისუფალი ენერგიის კრისტალოგრაფიულ სიბრტყეებთან იქნება დაკავშირებული. უმეტეს შემთხვევაში, ანალოგიური გამონაყოფები მატრიცის მჭიდროდ წყობილი სიბრტყეების გასწვრივ ყალიბდება, რაც კოჰერენტულ ჩასახვასთან და დაბალი ენერგიის მქონე წახნაგების გასწვრივ ჩანასახის შემდგომ ზრდასთან არის დაკავშირებული. ასეთი ტიპის სტრუქტურა 6.20 ა სურათზეა წარმოდგენილი და ცნობილია, როგორც ვიდმანშტეტური სტრუქტურა.

მეტად მაღალი გადაჯერების პირობებში ახალი ფაზის გამონაყოფმა შეიძლება დენდრიტის ფორმაც მიიღოს. ამის მაგალითად შეიძლება გამოდგეს ცემენტიტის გამონაყოფი აუსტენიტიდან (სურ. 6.20, ბ).

ცნობილია, რომ სისტემების დიდ უმრავლესობაში უკანასკნელი წონასწორული ფაზა არა გამოყოფის პროცესის საწყის სტადიაში, არამედ შემდგომი რთული, თანმიმდევრული, შუალედური მდგომარეობის გავლის შემდეგ ყალიბდება. ამ თვალთახედვით საკმაოდ დეტალურად არის შესწავლილი მეტად მნიშვნელოვანი სისტემა – ალუმინ–სპილენძი, რომლის მდგომარეობის დიაგრამის სპილენძის არე 6.21 სურათზეა მოცემული. ნაჩვენებია, რომ 500°C-დან ნაწრთობი, რამდენიმე პროცენტი სპილენძის შემცველი ალუმინის შენადნობის ~200°C-ზე დაძველებისას მკვეთრად განიზრევა ახალი ფაზის გამოყოფის ოთხი სტადია. პირველ სტადიაში წარმოიქმნე-



სურ. 6.20. ტიპური ფილმანშტეტური სტრუქტურა (ა, $\times 176$) და კარბიდების დენდრიტული წარმონაქმნები, რომლებიც ყალიბდება 740°C -დან ნაწილობრივ ფოლადის 260°C -ზე 3 წუთის განმავლობაში დაძველებისას (ბ, $\times 38500$)



სურ. 6.21. Al-Cu შენადნობის სისტემის მდგომარეობის დიაგრამის ნაწილი

ბა ზონები, რომლებიც გინე-პრესტონის (გპ-1) სახელწოდებითაა ცნობილი. ისინი ხასიათდება სპილენძის გაზრდილი კონცენტრაციით ალუმინის მატრიცის ზოგიერთ $\{001\}$ სიბრტყეში. ამ მეტად უმცირეს ზონებზე (მისი განივი კვეთი ~ 50 ატომური რიგისა) დაკვირვება მხოლოდ მეტად ზუსტი რენტგენოსტრუქტურული ტექნიკის გამოყენებით არის შესაძლებელი.

მეორე სტადიაში ჩამოყალიბებული ზონები (θ'' , ან გპ-2) პირველისგან იმით

განსხვავდება, რომ მათ სტრუქტურაში მოწესრიგება შეინიშნება.

მესამე სტადიაში ყალიბდება მატრიცასთან კოპერენტული CuAl_2 შედგენილობის θ' ფაზა. ბოლო სტადიაში წარმოიქმნება მატრიცის მიმართ არაკოპერენტული, წონასწორული $\text{CuAl}_2(\theta)$ ფაზის ჩანართები.

უნდა ვივარაუდოთ, რომ უკანასკნელ სამ სტადიაში ფაზების თანმიმდევრული ჩამოყალიბების პროცესი არ არის დამოკიდებული წინა სტადიაში გამონაყოფის ბუნებაზე. მაგალითად, θ' არის პირველი გამონაყოფი ფაზა, რომელიც წარმო-

იქმნება 2% სპილენძის შემცველი ალუმინის შენადნობის 220°C-ზე დაძველების პროცესში. ზუსტად ანალოგიურად, გპ-2 არის პირველი ფაზა, რომელიც ყალიბდება Al+4% Cu შენადნობის დაძველებისას 190°C-ზე, ხოლო Al+4,5%Cu შენადნობში 110°C-ზე დაძველებისას წარმოიქმნება გპ-1 ფაზა. გამოთქმულია ვარაუდი, რომ θ ფაზა შეიძლება ჩაისახოს აგრეთვე დამოუკიდებლად θ' ფაზის გარდაქმნის გზით. აქედან შეიძლება გაკეთდეს დასკვნა, რომ ფაზების თანმიმდევრობით წარმოქმნა უმეტეს წილად განპირობებულია პროცესის კინეტიკით და არა თითოეული ფაზის წარმოქმნით მისი წინამორბედისგან.

ზემოთ განხილული გარდაქმნები საკმაოდ რთულია. თუმცა ვარაუდობენ, რომ ყველაზე ხშირად პროცესი ორ სტადიად მიმდინარეობს. პირველი სტადია მდგომარეობს კოჰერენტული გამონაყოფის წარმოქმნაში, ხოლო მეორე – აღნიშნული კოჰერენტულობის მოსპობაში, როდესაც ნაწილაკები კრიტიკულ ზომას მიაღწევს.

გინე-პრესტონის ზონები ისეთ შენადნობებში წარმოიქმნება, რომელთა შემადგენელი კომპონენტების ატომის რადიუსებს შორის განსხვავება მცირეა, ან საწყისი ფაზის დიდი გადაჯერების პირობებში, როდესაც კლასტერების ჩასახვა არ არის დიდ სიძნელეებთან დაკავშირებული. ტიპურ მაგალითს წარმოადგენს კობალტის გადაჯერებული ხსნარი სპილენძში და ვერცხლში, აგრეთვე თუთიის გადაჯერებული მყარი ხსნარი ალუმინში, რომლის შემადგენელი კომპონენტების ატომის ზომებს შორის განსხვავება უმნიშვნელოა. ალუმინში სპილენძის გადაჯერებულ მყარ ხსნარებში ატომების ზომებს შორის განსხვავება მეტია (დაახლოებით 12%), ამიტომ ამ შენადნობებში გინე-პრესტონის ზონები მხოლოდ მნიშვნელოვანი გადაჯერების შემთხვევაში წარმოიქმნება.

1. Б. Чалмерс. Физическое металловедение. Перевод с английского В.А.Алексеева и В.К.Григоровича под редакцией А.К. Натансона. Государственное научно-техническое издательство литературы по черной и цветной металлургии. М, 1963, с.455;
2. К. Мейер. Физико-химическая кристаллография. Перевод с немецкого О.П.Никитина под редакцией Е.Д.Шукина и Б.Д.Сумма. М, «Металлургия», 1972, с. 479;
3. Дж. Блейкмор. Физика твердого состояния. Перевод с английского Д.Г.Андрианова и Н.С. Рытовой. Под редакцией В.И.Фистуля. М, «Металлургия», 1972, с. 486.
4. В.К.Григорович. Металлическая связь и структура металлов. М. «Наука», 1988, с. 294;
5. მ. ოქროსაშვილი. მეტალოგრაფია. თბილისი, „ტექნიკური უნივერსიტეტი“, 2008, გვ. 304;
6. О.М.Барабаш, Ю.Н.Коваль. Кристаллическая структура металлов и сплавов. Киев, «Наукова Думка», 1986, с. 598;
7. Физическое металловедение. Под редакцией Р. Кана. Перевод с английского под редакцией д-ра техн. наук, Н.Т. Чеботарева. Вып. I. Атомное строение металлов и сплавов. М, «Мир», 1967, с. 333;
8. Физическое металловедение. Под редакцией Р. Кана. Перевод с английского под редакцией д-ра техн. наук, И.И. Новикова. Вып. II Фазовые превращения. металлография. М, «Мир», 1968, с. 490;
9. Физическое металловедение. Под редакцией Р. Кана. Перевод с английского под редакцией д-ра техн. наук, В. М. Розенберга. Вып. 3. Дефекты кристаллического строения. Механические свойства металлов и сплавов. М, «Мир», 1968, с. 484.

წინასიტყვაობა	3
1. სუფთა ლითონების სტრუქტურა	5
1.1. ელემენტების ელექტრონული სტრუქტურა	5
1.2. ატომთა შორის კავშირი კრისტალებში	12
1.2.1. მოლეკულური კავშირი	14
1.2.2. კოვალენტური კავშირი	15
1.2.3. იონური კავშირი	17
1.2.4. ლითონური კავშირი	19
1.2.5. ლითონური კავშირით განპირობებული ზოგიერთი ფიზიკური თვისება	21
1.3. სამგანზომილებიანი კრისტალური სისტემები	23
1.3.1. სივრცითი გგუფები	23
1.3.2. კრისტალოგრაფიული სიბრტყეებისა და მიმართულებების ინდიცირება	27
1.3.3. ლითონების ტიპური სტრუქტურები	31
2. მყარი ხსნარების სტრუქტურა	36
2.1. მყარი ხსნარის ტიპები	36
2.2. ფაქტორები, რომლებიც მართავს მყარი ხსნარების ჩამოყალიბების პროცესს	37
2.3. მყარი ხსნარის მოწესრიგება	41
2.4. ზესტრუქტურის ტიპები	44
2.5. შორი და ახლო წესრიგი	45
3. შუალედური ფაზები	48
3.1. იუმ-როზერის ფაზები – ელექტრონული ნაერთები	59
3.2. ლავესის ფაზები	53
3.3. სიგმა ფაზები	55
3.4. ჩანერგვის შუალედური ფაზები	58
4. დეფექტები კრისტალში	61
4.1. წერტილოვანი დეფექტები	62
4.2. დისლოკაცია	68

4.3. ზედაპირული დეფექტები	74
4.4. ფაზათა შორის ზედაპირი	79
5. ფაზური გარდაქმნები	81
5.1. თხევადი ლითონის სტრუქტურა	81
5.2. კრისტალიზაცია	82
5.3. ჩანასახის წარმოქმნა	86
5.3.1. ფენომენოლოგია	86
5.3.2. ჩანასახის კრიტიკული ზომა	88
5.4. ორკომპონენტიანი სისტემა	93
5.5. „კონცენტრაციული“ გადაცივება	97
5.5.1. ევტექტიკური სისტემა	99
5.5.2. პერიტექტიკური სისტემა	110
6. გარდაქმნები მყარ მდგომარეობაში	116
6.1. ფაზური გარდაქმნები გახურების დროს. აუსტენიტის წარმოქმნა . . .	117
6.2. ევტექტოიდური გარდაქმნა	123
6.3. არადიფუზიური (მარტენსიტული) გარდაქმნა	128
6.4. შუალედური გარდაქმნა	131
6.5. დისპერსიული გამონაყოფი	134
გამოყენებული ლიტერატურა	142

რედაქტორი ნ. სუხიტაშვილი

გადაეცა წარმოებას 20.06.2017. ხელმოწერილია დასაბეჭდად 16.10.2017. ქალაქის ზომა 60X84 1/8. პირობითი ნაბეჭდი თაბახი 9.

საგამომცემლო სახლი „ტექნიკური უნივერსიტეტი“, თბილისი, კოსტავას 77



Verba volant,
scripta manent