

ДИАГРАММЫ ВОЗМОЖНЫХ СТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ КРИСТАЛЛОВ КАК ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОСНОВА НОВЫХ ВЫСОКИХ ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Таланов В.М.

Южно-Российский государственный технический университет,
Новочеркасск, Россия

В докладе рассмотрены принципы построения диаграмм возможных структурных состояний кристаллов (ДВССК) и их приложение к прогнозу новых фаз вещества, возникающих в результате структурных фазовых переходов второго рода (непрерывных) и так называемых превращений первого рода, "близкого" ко второму (квазинепрерывных). Представление о ДВССК введено в научную литературу в наших работах (см., например, [1,2]). Эти диаграммы представляют собой обобщенные карты структурных и критических состояний вещества, которые возникают из некоторого исходного состояния в результате непрерывных и квазинепрерывных фазовых переходов. Имея перед собой подобные диаграммы, химик-синтетик получает возможность наметить принципиальный путь получения материала с необходимой совокупностью свойств, установить наиболее вероятные фазы при получении материала. Важно подчеркнуть, ДВССК не подменяют собой классические фазовые диаграммы, а дополняют их возможным многообразием низкосимметричных фаз, которые могут возникнуть в результате непрерывных и квазинепрерывных фазовых переходов. Так как непрерывные превращения происходят без теплоты перехода и сопровождаются незначительными смещениями атомов, то обычными экспериментальными методами построения фазовых диаграмм (дифференциальный термический анализ, рентгенофазовый анализ и др.) указанные фазовые переходы зачастую сложно обнаружить.

С целью установления общих правил строения ДВССК рассмотрены принципы обобщенной термодинамики кристаллов с внутренними структурными параметрами и новый метод нахождения низкосимметричных состояний кристаллов (метод фундаментальных областей групп симметрии [3-5]). Иллюстрация теоретических результатов проведена на примере структурного типа шпинели, для которого экспериментально открыто большое число соединений и твердых растворов, проявляющих перспективные для применений свойства, обусловленные изменениями структуры в результате непрерывных и квазинепрерывных фазовых переходов.

Полученные результаты создают теоретическую основу для проектирования материалов с аномальными физико-химическими свойствами, термодинамического модельного исследования фазовых превращений (в частности, построения фазовых диаграмм), могут быть использованы для систематики экспериментально обнаруженных и предсказания новых фаз, анализа данных рентгеноструктурного и нейтронографического экспериментов, разработки микроскопических моделей фазовых переходов, расчета структур низкосимметричных модификаций и т.д.

Литература

1. Таланов В.М. Кристаллография. - 1996. - N6. - С.979 - 997.
2. Таланов В.М. Изв. вузов. Естественные науки. - 1998. - N2. - С.41 - 55.
3. Таланов В.М., Федорова Н.В. Кристаллография. - 1997. - N3. - С.389 - 393.
4. Таланов В.М., Федорова Н.В. Кристаллография. - 1997. - N3. - С.394 - 398.
5. Таланов В.М. Изв. вузов. Химия и хим. технология. - 1998. - в.6. - С.91 - 93.