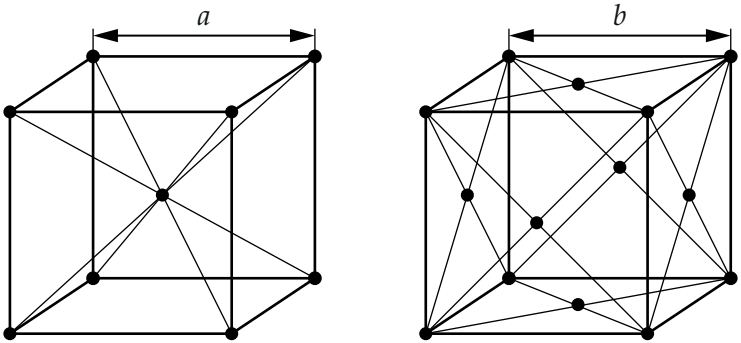
Полиморфное превращение

Задача 2. [МОШ 2024/25, 7 класс, задача 2] Некоторые вещества при определённых температуре давлении могут изменять тип своей кристаллической решётки. Железо при температуре 911 °C проявляет полиморфизм — решётка перестраивается из кубической объемноцентрированной в кубическую гранецентрированную. Ячейки этих решёток изображены на левом и правом рисунках соответственно, чёрными кружками обозначено положение атомов железа.



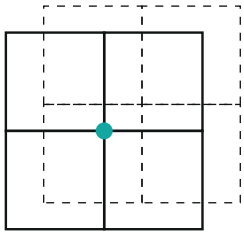
Отношение размеров ячеек равно $\frac{b}{a} = 1{,}247$. На сколько процентов изменяется плотность железа в процессе такого полиморфного превращения?

▲ **Решение. Что происходит.** Это задача на плотность вещества, сложенного из одинаковых ячеек. Плотность всего куска равна плотности одной ячейки: масса атомов, приходящихся на ячейку, делённая на её объём. Хитрость в подсчёте атомов: атом в вершине или на грани принадлежит сразу нескольким соседним ячейкам, и на каждую приходится только его доля.

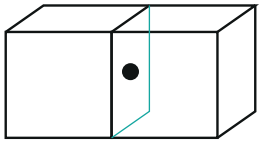
Обозначения. m_0 — масса атома железа; N_1, N_2 — число атомов, приходящихся на одну ячейку первой (объёмноцентрированной) и второй (гранецентрированной) решёток; ρ_1, ρ_2 — плотности железа до и после превращения.

1. Чьи атомы в вершине и на грани. Ячейки заполняют кристалл плотно, без промежутков. В каждой вершине сходятся восемь кубиков

(четыре в одном слое и четыре в соседнем), поэтому атом в вершине делится между восемью ячейками: на каждую приходится $\frac{1}{8}$ атома. Атом в центре грани принадлежит двум ячейкам, по разные стороны грани: на каждую — $\frac{1}{2}$. Атом в центре куба целиком принадлежит своей ячейке.



8 ячеек на вершину



2 ячейки на грань

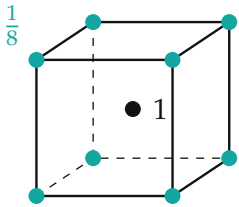
Слева: в вершине сходятся четыре ячейки одного слоя (сплошные) и четыре соседнего (пунктир). Справа: атом в центре общей грани (бирюзовая) принадлежит двум ячейкам.

2. Объёмноцентрированная ячейка. Восемь атомов в вершинах и один в центре:

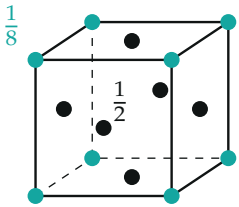
$$N_1 = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2.$$

3. Гранецентрированная ячейка. Восемь атомов в вершинах и шесть в центрах граней:

$$N_2 = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4.$$



$8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$



$8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$

Подсчёт атомов на ячейку. Бирюзовые — атомы в вершинах (по $\frac{1}{8}$ на ячейку), чёрные — в центре куба (целиком, слева) и в центрах граней (по $\frac{1}{2}$, справа).

4. Плотности. Плотность кристалла равна плотности одной ячейки — массе приходящихся на неё атомов, делённой на объём куба:

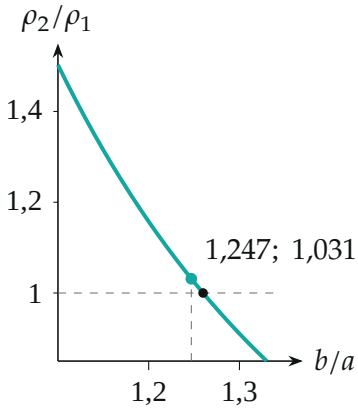
$$\rho_1 = \frac{N_1 m_0}{a^3} = \frac{2m_0}{a^3}, \qquad \rho_2 = \frac{N_2 m_0}{b^3} = \frac{4m_0}{b^3}.$$

5. Отношение плотностей. Масса атома сокращается:

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{4m_0/b^3}{2m_0/a^3} = 2\left(\frac{a}{b}\right)^3 = \frac{2}{1{,}247^3} = \frac{2}{1{,}939} = 1{,}031.$$

Плотность после превращения больше на

$$\frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_1} \cdot 100\,\% = (1{,}031 - 1) \cdot 100\,\% \approx 3\,\%.$$



Отношение плотностей $\rho_2/\rho_1 = 2(a/b)^3$ в зависимости от отношения размеров ячеек. При $b/a = \sqrt[3]{2} \approx 1{,}26$ (чёрная точка) плотности были бы равны; у железа $b/a = 1{,}247$ чуть меньше, и плотность возрастает на 3 %.

Обратите внимание. Ячейка гранецентрированной решётки больше ($b > a$), но атомов в ней вдвое больше. Если не учесть, что атомы вершин и граней принадлежат нескольким ячейкам, и считать 9 и 14 атомов,

получится неверное $\rho_2/\rho_1 = \frac{14}{9}\cdot\frac{1}{1{,}939} = 0{,}80$ — плотность будто бы уменьшилась на 20 %.

Проверка. Размерность: m_0/a^3 — кг/м^3, отношение безразмерно. Второй способ — через объём на один атом: до превращения $a^3/2$, после $b^3/4$; отношение объёмов $\frac{b^3/4}{a^3/2} = \frac{1{,}939}{2} = 0{,}970$, то есть объём на атом уменьшился на 3 %, а плотность обратно пропорциональна этому объёму и выросла на те же $\approx 3\,\%$.

Смысл: гранецентрированная решётка упакована плотнее, поэтому при переходе через 911 °C железо немного сжимается.

Ответ. Плотность возрастает примерно на 3 %: $\rho_2/\rho_1 = 2(a/b)^3 \approx 1{,}031$.