

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕРОГО И БЕЛОГО ОЛОВА

*Сыздыкова А.Б.,^{*1} Белов М.П.,¹ Абрикосов И.А.²*

¹*MMDL НИТУ МИСиС, Москва, Россия, ²LiU, Линчепинг, Швеция*

**syzdykova.aygerym@gmail.com*

Олово обычно встречается в одной из двух аллотропных форм: стабильная низкотемпературная альфа фаза или серое олово, представляет собой полупроводник с узкой запрещенной зоной, имеющий структуру алмаза; при повышении температуры выше $T \sim 13$ °С, кристалл превращается в бета-фазу или белое олово, которое представляет собой металл с объемно-центрированной тетрагональной решеткой [1].

Информация об энтальпии альфа \rightarrow бета фазового превращения в олове отсутствует и имеется широкий разброс в доступных результатах, которые не очень хорошо согласуются между собой [2], [3].

В этой работе мы вычисляем механические и термодинамические свойства: равновесные параметры решетки, объемный модуль, энтропию и энтальпию преобразования, свободную энергию Гиббса.

-
1. Pavone P., Baroni S., Gironcoli S. // Phys.Rev.B. 1998. V. 57. No. 17.
 2. Hultgren R., Desai P.D., Hawkins D.T., Gleiser M., Kelley K.K., Wagman D.D. // American Society For Metals, Metals Park, Ohio. 1973.
 3. Cohen E., van Eijk C. // Phys. Chem. 1899. V. 30. P. 601-622.