

Особенности атомно-кристаллического строения металлов.

Материаловедение - это наука о взаимосвязи электронного строения, структуры материалов с их составом, физическими, химическими, технологическими и эксплуатационными свойствами.

Создание научных основ материаловедения по праву принадлежит Чернову Д.К., который установил критические температуры фазовых превращений в сталях и их связь с количеством углерода в сталях. Этим были заложены основы для важнейшей в материаловедении диаграммы состояния железоуглеродистых сплавов.

Открытием аллотропических превращений в стали, Чернов заложил фундамент термической обработки стали. Критические точки в стали, позволили рационально выбирать температуру ее закалки, отпуска и пластической деформации в производственных условиях.

В своих работах по кристаллизации стали, и строению слитка Чернов изложил основные положения теории литья, не утратившие своего научного и практического значения в настоящее время.

Великий русский металлург Аносов П.П. впервые применил микроскоп для исследования структуры металлов. Ему принадлежит приоритет в создании легированных сталей. Разработал теорию и технологию изготовления клинков из булатной стали. Из его работ стало ясно, что так называемый булатный узор на поверхности стали, непосредственно зависит от ее внутренней структуры.

В 1873-1876 г.г Гиббс изложил основные законы фазового равновесия и, в частности, правило фаз, основываясь на законах термодинамики. Для решения практических задач знание фазового равновесия в той или иной системе необходимо, но не достаточно для определения состава и относительного количества фаз. Обязательно знать структуру сплавов, то есть атомное строение фаз, составляющих сплав, а также распределение, размер и форму кристаллов каждой фазы.

Определение атомного строения фаз стало возможным после открытия Лауэ (1912 г), показавшего, что атомы в кристалле регулярно заполняют пространство, образуя пространственную дифракционную решетку, и что рентгеновские лучи имеют волновую природу. Дифракция рентгеновских лучей на такой решетке дает возможность исследовать строение кристаллов.

В последнее время для структурного анализа, кроме рентгеновских лучей, используют электроны и нейтроны. Соответствующие методы исследования называются электронографией и нейтронографией. Электронная оптика позволила усовершенствовать микроскопию. В настоящее время на электронных микроскопах полезное максимальное увеличение доведено до 100000 раз.

В пятидесятых годах, когда началось исследование природы свойств металлических материалов, было показано, что большинство наиболее важных свойств, в том числе сопротивление пластической деформации и разрушению в различных условиях нагружения, зависит от особенностей тонкого кристаллического строения. Этот вывод способствовал привлечению физических теорий о строении реальных металлов для объяснения многих непонятных явлений и для конструирования сплавов с заданными механическими

свойствами. Благодаря теории дислокаций, удалось получить достоверные сведения об изменениях в металлах при их пластической деформации.

Особенно интенсивно развивается металловедение в последние десятилетия. Это объясняется потребностью в новых материалах для исследования космоса, развития электроники, атомной энергетики.

Основными направлениями в развитии металловедения является разработка способов производства чистых и сверхчистых металлов, свойства которых сильно отличаются от свойств металлов технической чистоты, с которыми преимущественно работают. Генеральной задачей материаловедения является создание материалов с заранее рассчитанными свойствами применительно к заданным параметрам и условиям работы. Большое внимание уделяется изучению металлов в экстремальных условиях (низкие и высокие температуры и давление).

До настоящего времени основной материальной базой машиностроения служит черная металлургия, производящая стали и чугуны. Эти материалы имеют много положительных качеств и в первую очередь обеспечивают высокую конструкционную прочность деталей машин. Однако эти классические материалы имеют такие недостатки как большая плотность, низкая коррозионная стойкость. Потери от коррозии составляют 20% годового производства стали и чугуна. Поэтому, по данным научных исследований, через 20...40 лет все развитые страны перестроятся на массовое использование металлических сплавов на базе титана, магния, алюминия. Эти легкие и прочные сплавы позволяют в 2-3 раза облегчить станки и машины, в 10 раз уменьшить расходы на ремонт.

По данным института имени Байкова А.Н. в нашей стране есть все условия чтобы в течении 10...15 лет машиностроение могло перейти на выпуск алюминиево-титановой подвижной техники, которая отличается легкостью, коррозионной стойкостью и большим безремонтным ресурсом.

Важное значение имеет устранение отставания нашей страны в области использования новых материалов взамен традиционных (металлических) – пластмасс, керамики, материалов порошковой металлургии, особенно композиционных материалов, что экономит дефицитные металлы, снижает затраты энергии на производство материалов, уменьшает массу изделий.

Расчетами установлено, что замена ряда металлических деталей легкового автомобиля на углепластики из эпоксидной смолы, армированной углеродными волокнами, позволит уменьшить массу машины на 40%; она станет более прочной; уменьшится расход топлива, резко возрастет стойкость против коррозии.

Металлы, особенности атомно-кристаллического строения

В огромном ряду материалов, с незапамятных времен известных человеку и широко используемых им в своей жизни и деятельности, металлы всегда занимали особое место.

Подтверждение этому: и в названиях эпох (золотой, серебряный, бронзовый, железный века), на которые греки делили историю человечества: и в археологических находках металлических изделий (кованые медные украшения,

сельскохозяйственные орудия); и в повсеместном использовании металлов и сплавов в современной технике.

Причина этого - в особых свойствах металлов, выгодно отличающих их от других материалов и делающих во многих случаях незаменимыми.

Металлы – один из классов конструкционных материалов, характеризующийся определенным набором свойств:

- «металлический блеск» (хорошая отражательная способность);
- пластичность;
- высокая теплопроводность;
- высокая электропроводность.

Данные свойства обусловлены особенностями строения металлов. Согласно теории металлического состояния, металл представляет собой вещество, состоящее из положительных ядер, вокруг которых по орбитали вращаются электроны. На последнем уровне число электронов невелико и они слабо связаны с ядром. Эти электроны имеют возможность перемещаться по всему объему металла, т.е. принадлежать целой совокупности атомов.

Таким образом, пластичность, теплопроводность и электропроводность обеспечиваются наличием «электронного газа».

Все металлы, затвердевающие в нормальных условиях, представляют собой кристаллические вещества, то есть укладка атомов в них характеризуется определенным порядком – периодичностью, как по различным направлениям, так и по различным плоскостям. Этот порядок определяется понятием *кристаллическая решетка*.

Другими словами, кристаллическая решетка это воображаемая пространственная решетка, в узлах которой располагаются частицы, образующие твердое тело.

Элементарная ячейка – элемент объема из минимального числа атомов, многократным переносом которого в пространстве можно построить весь кристалл.

Элементарная ячейка характеризует особенности строения кристалла. Основными параметрами кристалла являются:

- размеры ребер элементарной ячейки. a, b, c – периоды решетки – расстояния между центрами ближайших атомов. В одном направлении выдерживаются строго определенными.
- углы между осями (α, β, γ).
- координационное число (K) указывает на число атомов, расположенных на ближайшем одинаковом расстоянии от любого атома в решетке.
- базис решетки количество атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку решетки.
- плотность упаковки атомов в кристаллической решетке – объем, занятый атомами, которые условно рассматриваются как жесткие шары. Ее определяют как отношение объема, занятого атомами к объему ячейки (для объемно-центрированной кубической решетки – 0,68, для гранецентрированной кубической решетки – 0,74)

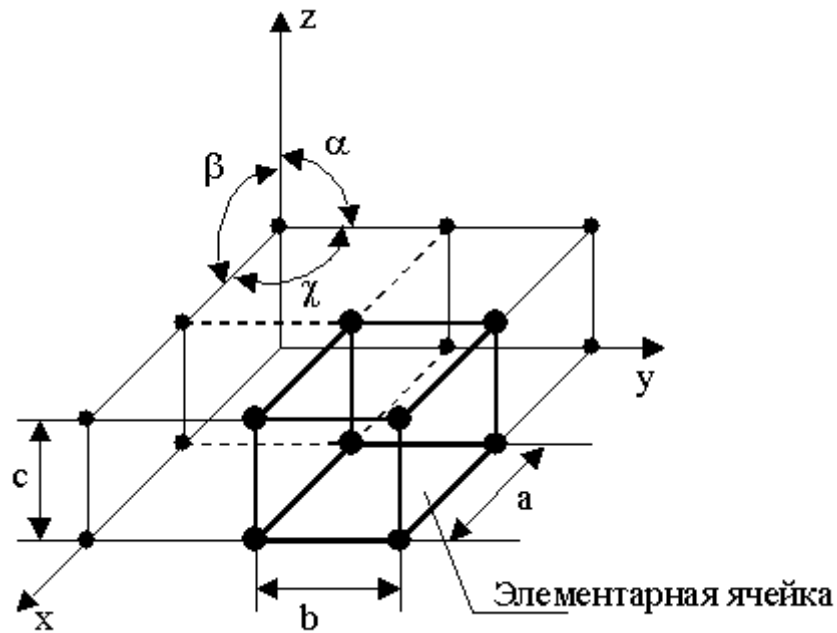


Рис.1.1. Схема кристаллической решетки

Классификация возможных видов кристаллических решеток была проведена французским ученым О. Браве, соответственно они получили название «решетки Браве». Всего для кристаллических тел существует четырнадцать видов решеток, разбитых на четыре типа;

- примитивный – узлы решетки совпадают с вершинами элементарных ячеек;
- базоцентрированный – атомы занимают вершины ячеек и два места в противоположных гранях;
- объемно-центрированный – атомы занимают вершины ячеек и ее центр;
- гранецентрированный – атомы занимают вершины ячейки и центры всех шести граней

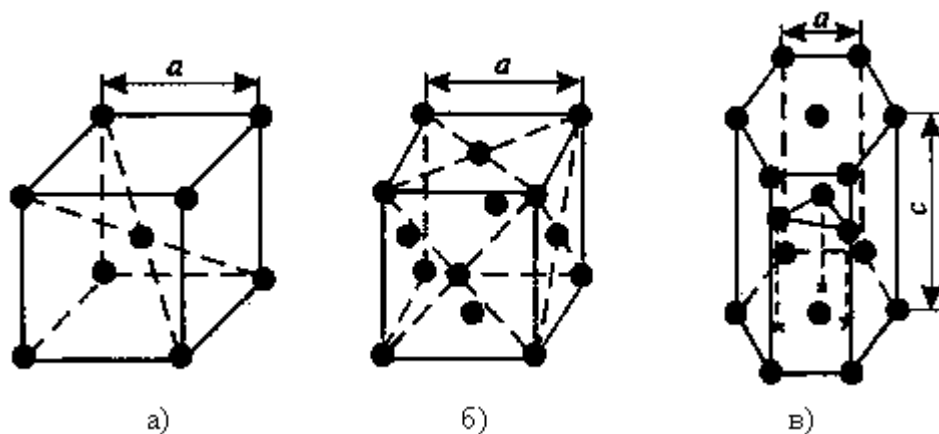


Рис. 1.2. Основные типы кристаллических решеток: а – объемно-центрированная кубическая; б– гранецентрированная кубическая; в – гексагональная плотноупакованная

Основными типами кристаллических решѣток являются:

1. Объемно - центрированная кубическая (ОЦК) (см. рис.1.2а), атомы располагаются в вершинах куба и в его центре (V, W, Ti, Fe_{α})

2. Гранецентрированная кубическая (ГЦК) (см. рис. 1.2б), атомы располагаются в вершинах куба и по центру каждой из 6 граней (Ag, Au, Fe_{γ});
3. Гексагональная, в основании которой лежит шестиугольник:
 - простая – атомы располагаются в вершинах ячейки и по центру 2 оснований (углерод в виде графита);
 - плотноупакованная (ГПУ) – имеется 3 дополнительных атома в средней плоскости (цинк).

Понятие об изотропии и анизотропии

Свойства тела зависят от природы атомов, из которых оно состоит, и от силы взаимодействия между этими атомами. Силы взаимодействия между атомами в значительной степени определяются расстояниями между ними. В аморфных телах с хаотическим расположением атомов в пространстве расстояния между атомами в различных направлениях равны, следовательно, свойства будут одинаковыми, то есть аморфные тела *изотропны*.

В кристаллических телах атомы правильно располагаются в пространстве, причем по разным направлениям расстояния между атомами неодинаковы, что предопределяет существенные различия в силах взаимодействия между ними и, в конечном результате, разные свойства. Зависимость свойств от направления называется *анизотропией*.

Чтобы понять явление анизотропии необходимо выделить кристаллографические плоскости и кристаллографические направления в кристалле.

Плоскость, проходящая через узлы кристаллической решетки, называется *кристаллографической плоскостью*.

Прямая, проходящая через узлы кристаллической решетки, называется *кристаллографическим направлением*.

Для обозначения кристаллографических плоскостей и направлений пользуются *индексами Миллера*. Чтобы установить индексы Миллера, элементарную ячейку вписывают в пространственную систему координат (оси X, Y, Z – кристаллографические оси). За единицу измерения принимается период решетки.

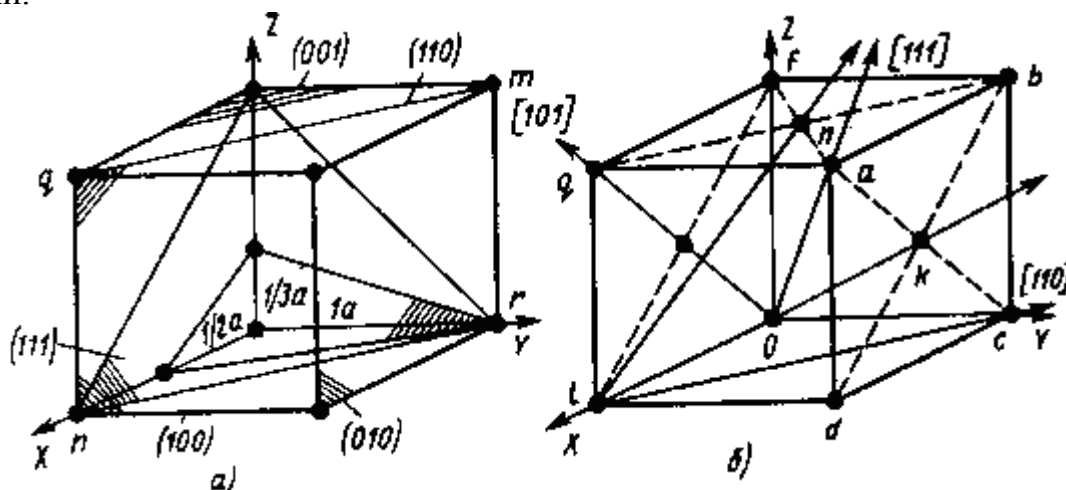


Рис.1.3. Примеры обозначения кристаллографических плоскостей (а) и кристаллографических направлений (б)

Для определения индексов кристаллографической кристаллографической плоскости необходимо:

- установить координаты точек пересечения плоскости с осями координат в единицах периода решетки;
- взять обратные значения этих величин;
- привести их к наименьшему целому кратному, каждому из полученных чисел.

Полученные значения простых целых чисел, не имеющие общего множителя, являются индексами Миллера для плоскости, указываются в круглых скобках. Примеры обозначения кристаллографических плоскостей на рис. 1.3 а.

Другими словами, индекс по оси показывает на сколько частей плоскость делит осевую единицу по данной оси. Плоскости, параллельные оси, имеют по ней индекс 0 (110)

Ориентация прямой определяется координатами двух точек. Для определения индексов кристаллографического направления необходимо:

- одну точку направления совместить с началом координат;
- установить координаты любой другой точки, лежащей на прямой, в единицах периода решетки
- привести отношение этих координат к отношению трех наименьших целых чисел.

Индексы кристаллографических направлений указываются в квадратных скобках [111]

В кубической решетке индексы направления, перпендикулярного плоскости (hkl) имеют те же индексы [hkl].

Аллотропия или полиморфные превращения.

Способность некоторых металлов существовать в различных кристаллических формах в зависимости от внешних условий (давление, температура) называется *аллотропией или полиморфизмом*.

Каждый вид решетки представляет собой *аллотропическое видоизменение или модификацию*.

Примером аллотропического видоизменения в зависимости от температуры является железо (Fe).

$Fe: t < 911^{\circ}C$ – ОЦК - Fe_{α} ;

$911 < t < 1392^{\circ}C$ – ГЦК - Fe_{γ} ;

$1392 < t < 1539^{\circ}C$ – ОЦК - Fe_{δ} ; (высокотемпературное Fe_{α})

Превращение одной модификации в другую протекает при постоянной температуре и сопровождается тепловым эффектом. Видоизменения элемента обозначается буквами греческого алфавита в виде индекса у основного обозначения металла.

Примером аллотропического видоизменения, обусловленного изменением давления, является углерод: при низких давлениях образуется графит, а при высоких – алмаз.

Используя явление полиморфизма, можно упрочнять и разупрочнять сплавы при помощи термической обработки.

Магнитные превращения

Некоторые металлы намагничиваются под действием магнитного поля. После удаления магнитного поля они обладают остаточным магнетизмом. Это явление впервые обнаружено на железе и получило название ферромагнетизма. К ферромагнетикам относятся железо, кобальт, никель и некоторые другие металлы.

При нагреве ферромагнитные свойства металла уменьшаются постепенно: вначале слабо, затем резко, и при определенной температуре (точка Кюри) исчезают (точка Кюри для железа – 768°C). Выше этой температуры металлы становятся парамагнетиками. Магнитные превращения не связаны с изменением кристаллической решетки или микроструктуры, они обусловлены изменениями в характере межэлектронного взаимодействия.