

Лекция 2. СТРУКТУРА МАТЕРИАЛОВ

Структура материалов определяется множеством факторов, от которых зависит равновесие процессов и явлений в материалах, – строением атомов, ионов, молекул, распределением в них электронов, типом связей между частицами и т. д.

В материаловедении принято рассматривать три уровня строения материалов: атом–молекула–фаза.

Основное внимание уделено твердым материалам, имеющим наибольшее значение в технике.

Атом – наименьшая частица химического элемента, обладающая его свойствами. Под химической связью понимают взаимодействие между атомными частицами, обусловленное совместным «использованием» их электронов. Полагая движение электронов независимым от движения ядер, можно представить образование химической связи как результат притяжения положительно заряженных ядер к электронному «облаку», сконцентрированному в межъядерном пространстве.

Химическая связь – общее определение сил и взаимодействий, обуславливающих существование двух– и многоатомных соединений – молекул, ионов, радикалов, кристаллов. Главные особенности химической связи: 1) значение полной энергии многоатомной системы меньше, чем сумма энергий несвязанных атомных частиц, из которых она образована; 2) электронные плотности (вероятные количества электронов в элементарном объеме) заметно отличаются в поле сил химической

Лекция 2. СТРУКТУРА МАТЕРИАЛОВ

Ковалентную связь образуют атомы или группы атомов, на валентных орбиталях которых имеются неспаренные электроны.

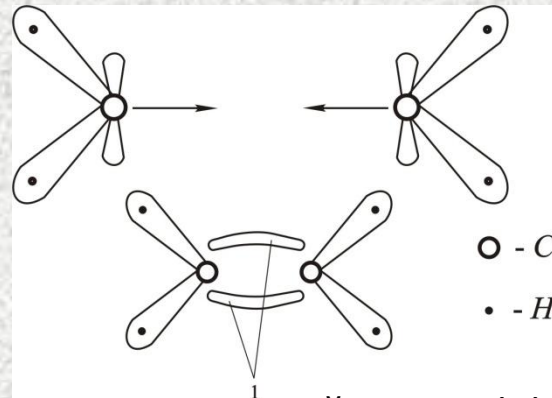


Схема образования ковалентной связи (1) в молекуле этилена C_2H_4

Координационная связь (донорно-акцепторная) – химическая связь, реализуемая в координационных (комплексных) соединениях. Частным случаем координационной связи является водородная связь.

Ионная связь – тип химической связи, энергия которой определяется преимущественно кулоновскими силами притяжения противоположно заряженных ионов. Признаком соединений с ионной связью является свойство разлагаться на ионы в полярных растворителях.

Металлы можно представить в виде ионного упорядоченного каркаса, который погружен в «электронный газ», состоящий из обобществленных электронов. «Газ» компенсирует отталкивание ионов и связывает их в каркас.

Лекция 2. СТРУКТУРА МАТЕРИАЛОВ

С позиций термодинамики физические свойства всех веществ, в том числе материалов, можно изучать на основе анализа происходящих в них преобразований энергии.

Фаза – термодинамически равновесное состояние вещества, отличающееся по свойствам от других возможных равновесных состояний того же вещества.

Иногда неравновесное (метастабильное) состояние вещества также называют фазой (метастабильной).

Всякий однофазный материал характеризуется отсутствием поверхностей раздела между составляющими его структурными образованиями, т. е. является гомогенным.

Гетерогенный материал содержит как минимум две фазы.

Фазовый переход – переход вещества из одной фазы в другую при изменении внешних условий (изменение температуры, давления, напряженности электрического, магнитного полей или другой физической величины, при котором происходит фазовый переход, называется *точкой перехода*).

Лекция 2. СТРУКТУРА МАТЕРИАЛОВ

Вещество в твердом агрегатном состоянии или *твердое тело* характеризуется стабильностью формы, так как образующие его атомы совершают лишь малые (тепловые) колебания вокруг фиксированных положений равновесия.

Твердые тела относят к системам сильно взаимодействующих частиц. Физические свойства твердых тел в значительной мере определяются степенью пространственного упорядочения их частиц.

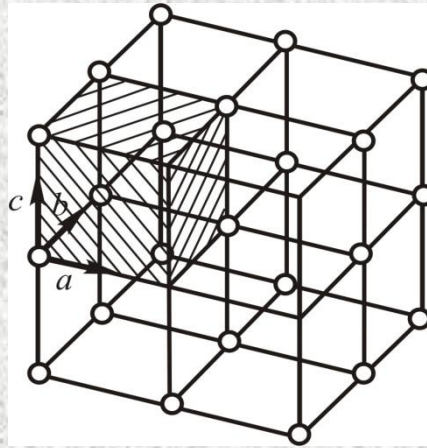
Кристаллы – твердые тела с трехмерной периодической атомной структурой, имеющие при равновесных условиях образования естественную форму правильных симметричных многогранников. **Кристаллизация**, т. е. образование кристаллов, происходит при нарушении термодинамического равновесия в так называемой маточной среде: жидкости (раствор или расплав), газовой фазе (пар) или твердом теле.

Кристаллическая решетка – регулярное расположение в кристаллах частиц (атомов, ионов, молекул), характеризующееся периодической повторяемостью в трех измерениях.

Для веществ в конденсированном состоянии (находящихся в жидком и твердом агрегатных состояниях) характерна согласованность в расположении соседних частиц – *ближний порядок*, который проявляется на расстояниях, сравнимых с межатомными. Кристаллические вещества имеют *дальний порядок* – строгую

Лекция 2. СТРУКТУРА МАТЕРИАЛОВ

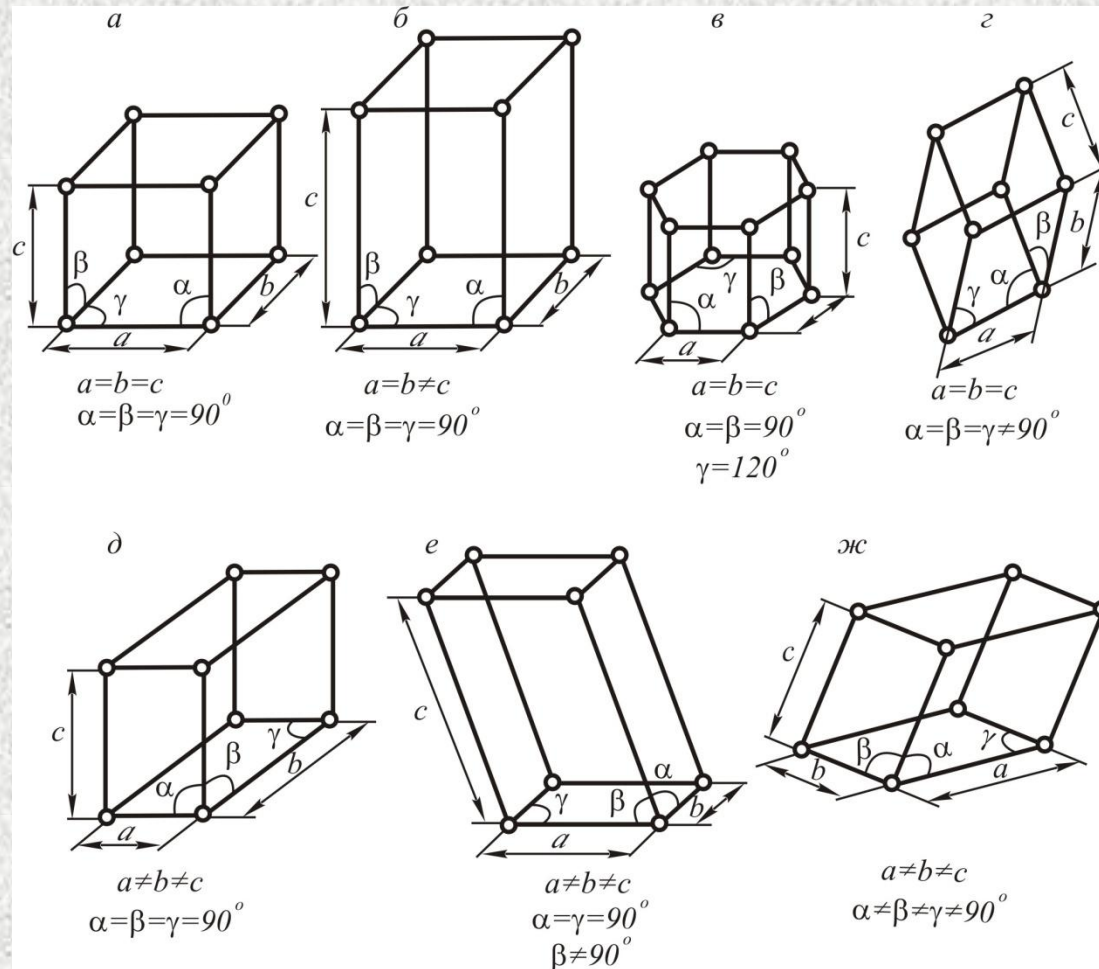
Элементарная ячейка – часть атомной структуры кристалла, путем трансляции которой (т. е. переноса в пространстве параллельно самой себе) можно построить всю кристаллическую решетку. Ребра элементарных ячеек обозначают буквами a , b , c и называют *периодами кристаллической решетки* или (в векторной форме) *векторами трансляций*



Элементарная ячейка (заштрихована) кристаллической решетки

Симметрия кристаллов – их свойством, заключающемся в том, что кристалл может быть совмещен с самим собой путем так называемых преобразований симметрии – поворотов, отражений, параллельных переносов и др. Любому атому в элементарной ячейке кристалла соответствует трансляционно–эквивалентный атом в каждой другой ячейке. По признаку точечной симметрии элементарной ячейки все кристаллы группируют в семь *сингоний* – подразделений кристаллов, различаются формой элементарной ячейки (рис. 2.9). Сингонии характеризуют длинами ребер a , b , c ячейки и углами α , β , γ между ними.

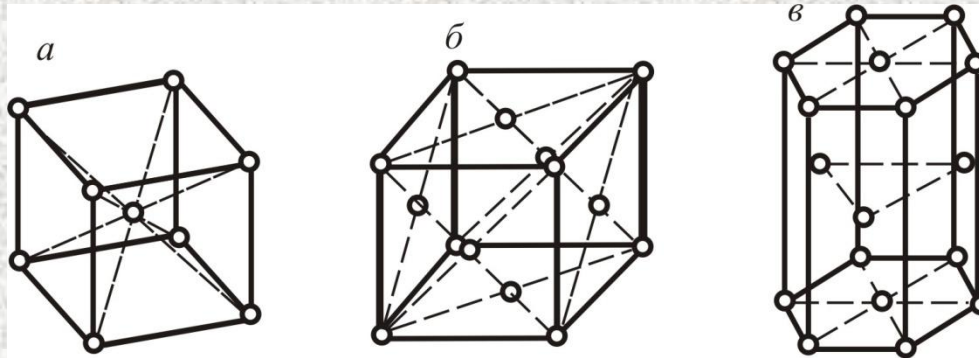
Лекция 2. СТРУКТУРА МАТЕРИАЛОВ



Кристаллографические сингонии: *а* – кубическая; *б* – тетрагональная; *в* – гексагональная; *г* – тригональная (ромбоэдрическая); *д* – ромбическая; *е* – моноклинная; *ж* – триклинная

Лекция 2. СТРУКТУРА МАТЕРИАЛОВ

Примеры элементарных ячеек металлов, принадлежащих к кубической и гексагональной сингониям.



Элементарные кристаллические решетки металлов:

a – объемно-центрированная кубическая; b – гранецентрированная кубическая; c – гексагональная плотноупакованная

Некоторые кристаллические фазы являются метастабильными (относительно устойчивыми). *Полиморфизм* – свойство некоторых веществ существовать в нескольких кристаллических модификациях с разной структурой. Наоборот, разные по химической структуре вещества могут иметь полное подобие кристаллического строения. *Изоморфизм* – свойство различных, но родственных по химическому составу и с одинаковым типом химической связи веществ кристаллизоваться в структурах, имеющих полное подобие атомно-кристаллического строения.

Лекция 2. СТРУКТУРА МАТЕРИАЛОВ

Для кристаллов каждого класса можно указать симметрию свойств. Так, кубические кристаллы *изотропны* (т. е. их свойства не зависят от направления) в отношении прохождения света, электро- и теплопроводности, но обладают *анизотропией* (т. е. зависимостью от направления) упругих, электрооптических, пьезоэлектрических свойств. Наибольшая степень анизотропии характерна для кристаллов низких сингоний. Не являются кристаллами, но обладают некоторыми их свойствами так называемые *жидкие кристаллы* – жидкости с анизотропией свойств (в частности, оптических), связанной с упорядоченностью в ориентации молекул.

Некристаллические вещества характеризуются отсутствием дальнего порядка в расположении атомов, ионов, молекул. Среди них выделяют *стеклообразные вещества*, отличительным признаком которых является наличие температурной области размягчения и обратимость свойств при реверсивном переходе температуры через эту область.

Другую группу некристаллических веществ составляют *аморфные вещества*, которые из твердого неупорядоченного состояния при нагревании переходят в кристаллическое.

ДЕФЕКТЫ В КРИСТАЛЛАХ

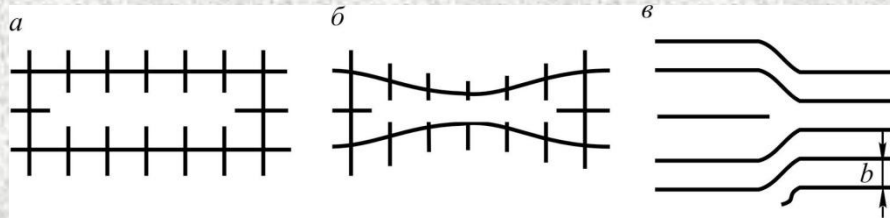
Дефекты в кристаллах – несовершенства кристаллического строения, нарушения строго периодического расположения частиц в узлах кристаллической решетки. Они образуются в процессе кристаллизации, под влиянием электрического и магнитного полей, тепловых и механических воздействий, при введении в кристаллы примесей. Так называемые радиационные дефекты возникают при облучении кристаллических материалов потоками частиц и жестким электромагнитным излучением. Различают точечные, линейные, поверхностные и объемные дефекты. *Точечные дефекты* вызывают искажения кристаллической решетки на расстояниях, соизмеримых с расстояниями между соседними атомами в кристалле. Простейшим точечным дефектом является *вакансия* – узел кристаллической решетки, в котором отсутствует атом или ион.



Смещение атомов в плоскости (001) простой кубической решетки вокруг вакансии (а) и межузельного атома (б)

Лекция 2. СТРУКТУРА МАТЕРИАЛОВ

Линейные дефекты представляют собой нарушение правильного чередования атомных плоскостей в кристаллической решетке и называются *дислокациями*. Они возникают в процессе роста кристаллов и при их пластической деформации. Простейшими видами дислокации являются краевая и винтовая. Образование *краевой дислокации* можно представить следующим образом.



Поперечное сечение кристалла, содержащего линейный дефект:
а – вакансии, находящиеся в соседних атомных плоскостях, не объединены;
б – начало процесса объединения вакансий; в – образовался вакансионный диск D

Винтовая

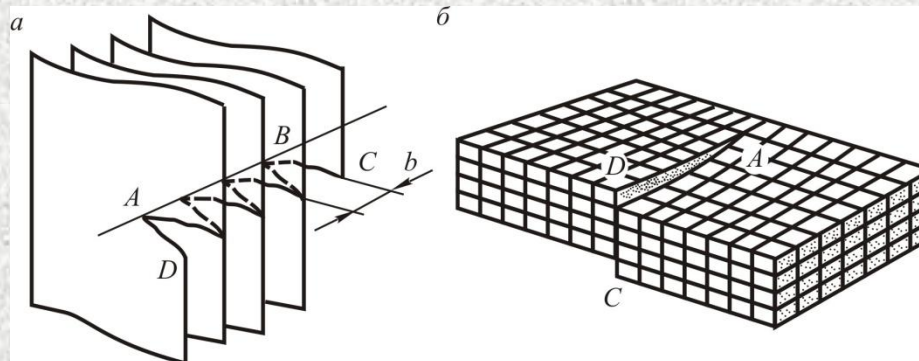


Схема образования винтовой дислокации (а) и расположение ячеек в кристаллической решетке с винтовой дислокацией (б)

Лекция 2. СТРУКТУРА МАТЕРИАЛОВ

Поверхностные дефекты – это границы между разориентированными участками кристалла, в частности, дефекты упаковки, границы двойников и зерен.

Дефекты упаковки – ошибки в порядке чередования плотноупакованных плоскостей кристалла. Они могут образоваться в результате неоднородного распределения вакансий либо межузельных атомов.

Двойникование – образование в монокристалле областей с закономерно измененной ориентацией кристаллической структуры. Структура двойникового образования представляет собой зеркальное отражение структуры материнского кристалла (матрицы) либо получена из нее другими преобразованиями симметрии. Матрица вместе с двойниковым образованием называется *двойником*. Причинами двойникования могут быть быстрое тепловое расширение или сжатие кристаллов, нагревание деформированных кристаллов (двойники рекристаллизации), переход из одной кристаллической модификации в другую (полиморфизм).

Межзеренные границы – поверхности раздела между различно ориентированными областями (зернами) поликристалла. Границы раздела фаз в сплавах и включений в гетерогенных материалах также относят к поверхностным дефектам. Многие из поверхностных дефектов представляют собой сетки дислокации.

Объемные дефекты – скопления вакансий, образующие в кристаллах поры и каналы, включения посторонних фаз, пузырьков газов и маточного раствора, скопления примесей на дислокациях, в зонах роста кристаллов и т. д. Объемные дефекты снижают пластичность, влияют на прочность, электрические и магнитные свойства материалов.

Рассмотренные закономерности структуры материалов помогают понять их природу и найти пути управления их свойствами.

Лекция 2. СТРУКТУРА МАТЕРИАЛОВ