Раздел 1
Строение и свойства металлов.

Тема 1.1 Кристаллическое строение металлов и сплавов

Аморфные и кристаллические тела

В твердых телах атомы могут размещаться в пространстве двумя способами:

Беспорядочное расположение атомов, когда они не занимают определенного места друг относительно друга. Такие тела называются *аморфными*.

Аморфные вещества обладают формальными признаками твердых тел, т.е. они способны сохранять постоянный объем и форму. Однако они не имеют определенной температуры плавления или кристаллизации.

Упорядоченное расположение атомов, когда атомы занимают в пространстве вполне определенные места, Такие вещества называются *кристаллическими*.

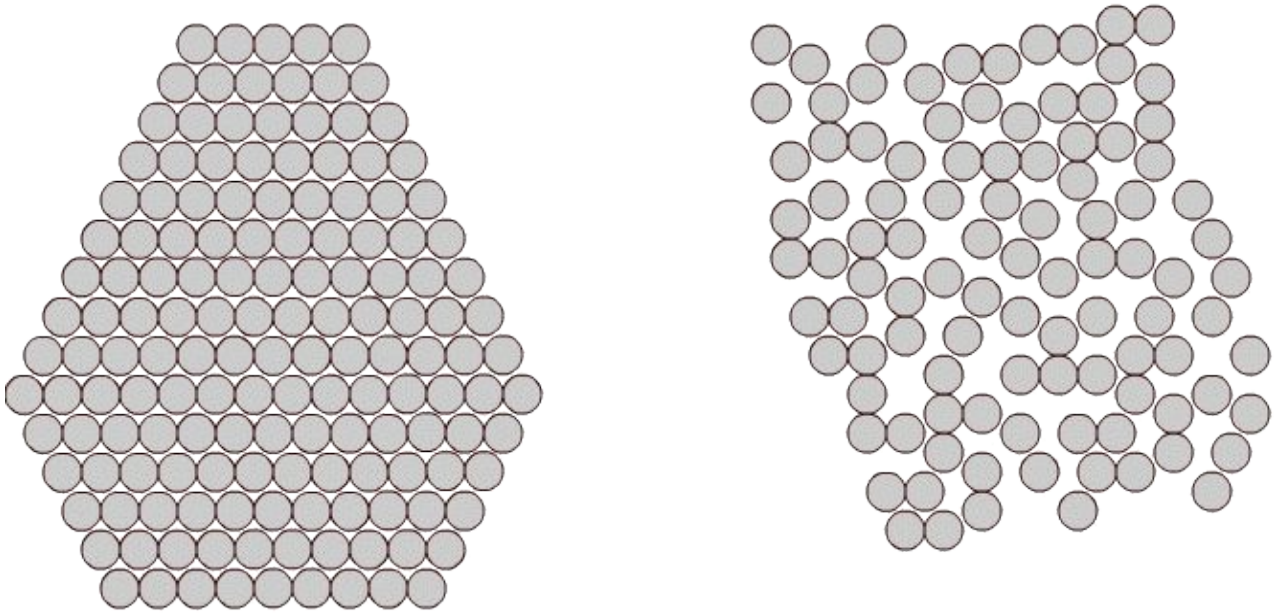
Атомы совершают относительно своего среднего положения колебания с частотой около 10^{13} Гц. Амплитуда этих колебаний пропорциональна температуре.

Благодаря упорядоченному расположению атомов в пространстве, их центры можно соединить воображаемыми прямыми линиями. Совокупность таких пересекающихся линий представляет пространственную решетку, которую называют *кристаллической решеткой*.

Внешние электронные орбиты атомов соприкасаются, так что *плотность упаковки* атомов в кристаллической решетке весьма велика.

Кристаллические твердые тела состоят из кристаллических зерен - кристаллитов. В соседних зернах кристаллические решетки повернуты относительно друг друга на некоторый угол.

В кристаллитах соблюдаются ближний и дальний порядки. Это означает наличие упорядоченного расположения и стабильности как окружающих данный атом ближайших его соседей (*ближний порядок*), так и атомов, находящихся от него на значительных расстояниях вплоть до границ зерен (*дальний порядок*).



а *б*

Рис. 1.1. Расположение атомов в кристаллическом (а) и аморфном (б) веществе

Вследствие *диффузии* отдельные атомы могут покидать свои места в узлах кристаллической решетки, однако при этом упорядоченность кристаллического строения в целом не нарушается.

Внешние электронные орбиты атомов соприкасаются, так что *плотность упаковки* атомов в кристаллической решетке весьма велика.

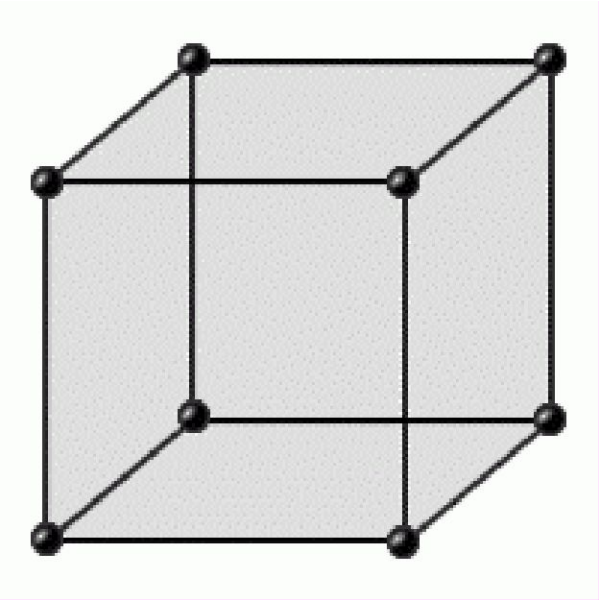
Кристаллические твердые тела состоят из кристаллических зерен - кристаллитов. В соседних зернах кристаллические решетки повернуты относительно друг друга на некоторый угол.

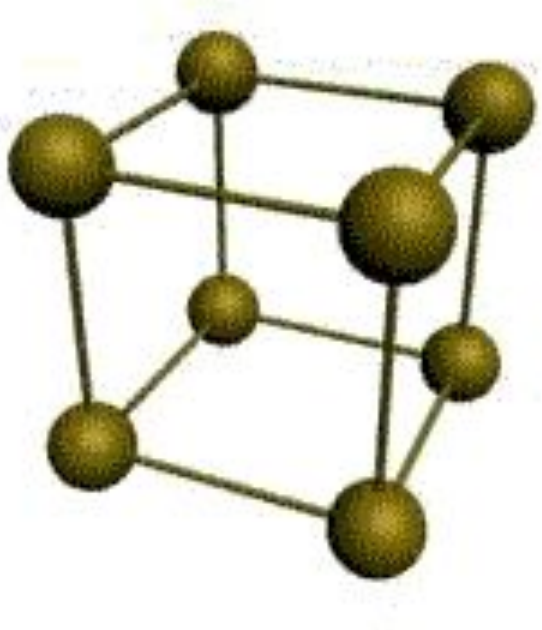
1.1.2. Основные типы кристаллических решеток

Все металлы являются кристаллическими телами, имеющими определенный тип кристаллической решетки, состоящей из малоподвижных положительно заряженных ионов, между которыми движутся свободные электроны (так называемый *электронный газ*). Такой тип структуры называется *металлической связью*.

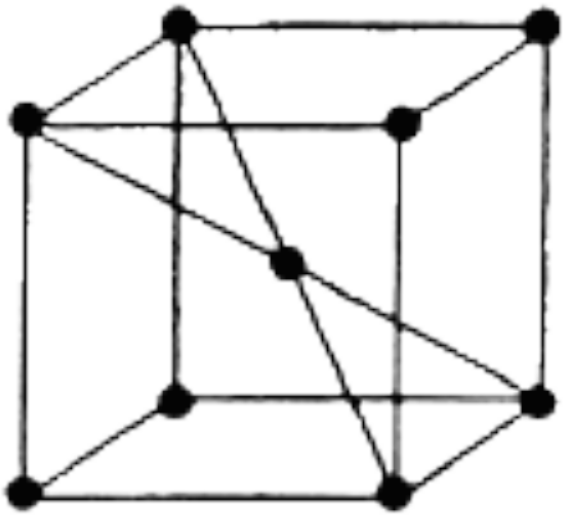
Тип решетки определяется формой элементарного геометрического тела, многократное повторение которого по трем пространственным осям образует решетку данного кристаллического тела.

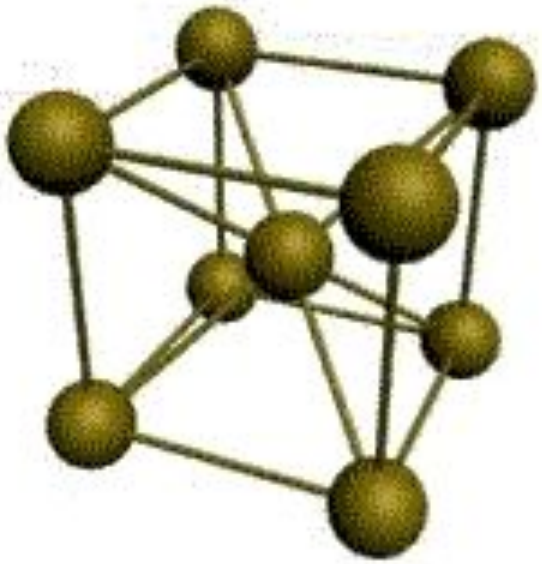
Рис. 1.2. Основные типы кристаллических решеток металлов



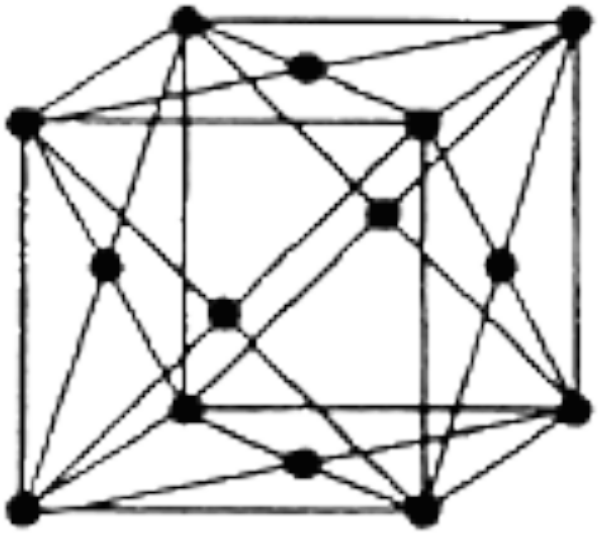


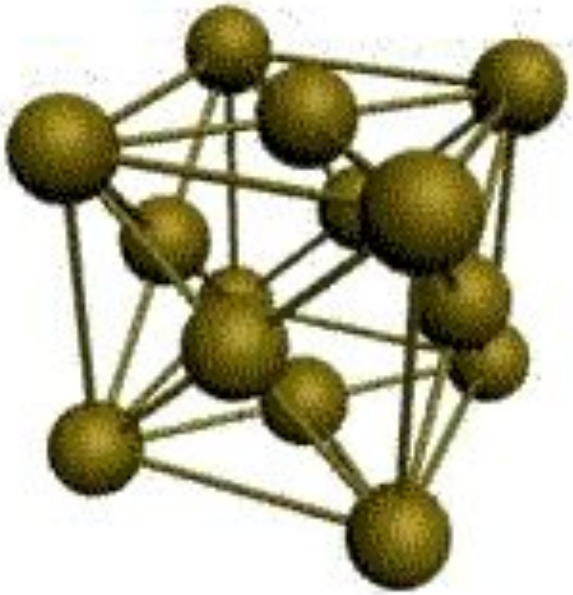
а) кубическая
(1 атом на ячейку)



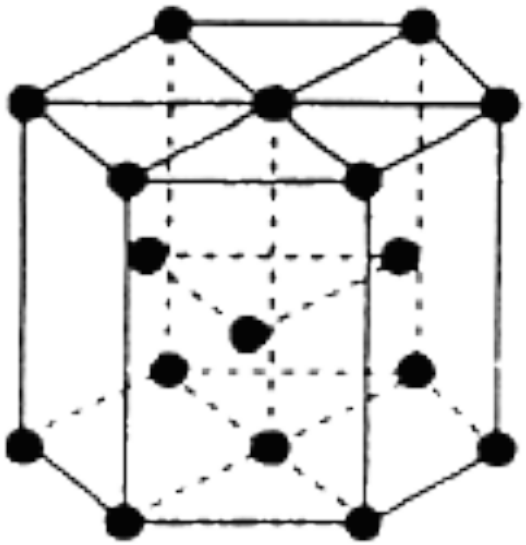


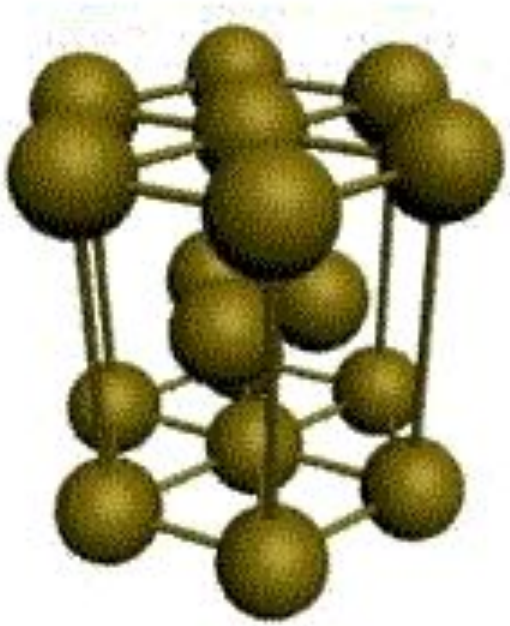
б) объемно-центрированная кубическая (ОЦК)
(2 атома на ячейку)





в) гранецентрированная
кубическая (ГЦК)
(4 атома на ячейку)





г) гексагональная плотноупакованная (ГП) (6 атомов на ячейку)

Металлы имеют относительно сложные типы кубических решеток - объемно центрированная (ОЦК) и гранецентрированная (ГЦК) кубические решетки.

Основу ОЦК-решетки составляет элементарная кубическая ячейка (рис.1.2,б), в которой положительно заряженные ионы металла находятся в вершинах куба, и еще один атом в центре его объема, т. е. на пересечении его диагоналей. Такой тип решетки в определенных диапазонах температур имеют железо, хром, ванадий, вольфрам, молибден и др. металлы.

У ГЦК-решетки (рис. 1.2, в) элементарной ячейкой служит куб с центрированными гранями. Подобную решетку имеют железо, алюминий, медь, никель, свинец и др. металлы.

Третьей распространенной разновидностью плотноупакованных решеток является гексагональная плотноупакованная (ГПУ, рис. 1.2, г). ГПУ-ячейка состоит из отстоящих друг от друга на параметр *c* параллельных центрированных гексагональных оснований. Три иона (атома) находятся на средней плоскости между основаниями.

У гексагональных решеток отношение параметра *c*/*a* всегда больше единицы. Такую решетку имеют магний, цинк, кадмий, берилий, титан и др.

Компактность кристаллической решетки или степень заполненности ее объема атомами является важной характеристикой. Она определяется такими показателями как параметр решетки, число атомов в каждой элементарной ячейке, координационное число и плотность упаковки.

Параметр решетки - это расстояние между атомами по ребру элементарной ячейки. Параметры решетки измеряется в нанометрах (1 нм = 10^{-9} м = 10 Å). Параметры кубических решеток характеризуются длиной ребра куба и обозначаются буквой *а.*

Для характеристики гексагональной решетки принимают два параметра - сторону шестигранника *a* и высоту призмы *c*. Когда отношение *c/a* = 1,633, то атомы упакованы наиболее плотно, и решетка называется гек сагональной плотноупакованной (рис. 1.2 г). Некоторые металлы имеют гексагональную решетку с менее плотной упаковкой атомов (*c/a* > 1,633). Например, для цинка *c/a* = 1,86, для кадмия *c/a* = 1,88.

Параметры *а* кубических решеток металлов находятся в пределах от 0,286 до 0,607 нм. Для металлов с гексагональной решеткой *а* лежит в пределах 0,228-0,398 нм, а *с* в пределах 0,357- 0,652 нм.

Параметры кристаллических решеток металлов могут быть измерены с помощью рентгеноструктурного анализа.

При подсчете числа атомов в каждой элементарной ячейке следует иметь в виду, что каждый атом входит одновременно в несколько ячеек. Например, для ГЦК-решетки, каждый атом, находящийся в вершине куба, принадлежит 8 ячейкам, а атом, центрирующий грань, двум. И лишь атом, находящийся в центре куба, полностью принадлежит данной ячейке.

Таким образом, ОЦК- и ГЦК-ячейки содержат соответственно 2 и 4 атома.

Анизотропия в кристаллах

Под *анизотропией* понимается неодинаковость механических и других свойств в кристаллических телах вдоль различных кристаллографических направлений. Она является естественным следствием кристаллического строения, так как на различных кристаллографических плоскостях и вдоль различных направлений плотность атомов различна.

Например, в кубических решетках (см. рис. 1.2, б, в) по направлениям вдоль ребер насчитывается меньше атомов, чем вдоль диагоналей куба в ОЦК-решетке или диагоналей граней в ГЦК-решетке. На плоскостях, проходящих через грани ОЦК- и ГЦК-решеток, находится меньше атомов, чем на диагональных плоскостях.

Поскольку механические, физические и химические свойства вдоль различных направлений зависят от плотности находящихся на них атомов, то перечисленные свойства вдоль различных направлений в кристаллических телах должны быть неодинаковыми.

Анизотропия проявляется только в пределах одного монокристалла или зернакристаллита. В поликристаллических телах она не наблюдается из-за усреднения свойств по каждому направлению для огромного количества произвольно ориентированных друг относительно друга зерен. Поэтому реальные металлы являются квазиизотропными телами, т. е. псевдоизотропными.

Сдвиг в кристалле происходит наиболее легко вдоль атомных плоскостей с наиболее плотной упаковкой атомов. Рассмотрим объемно-центрическую кубическую решетку (ОЦК) (рис. 1.5):

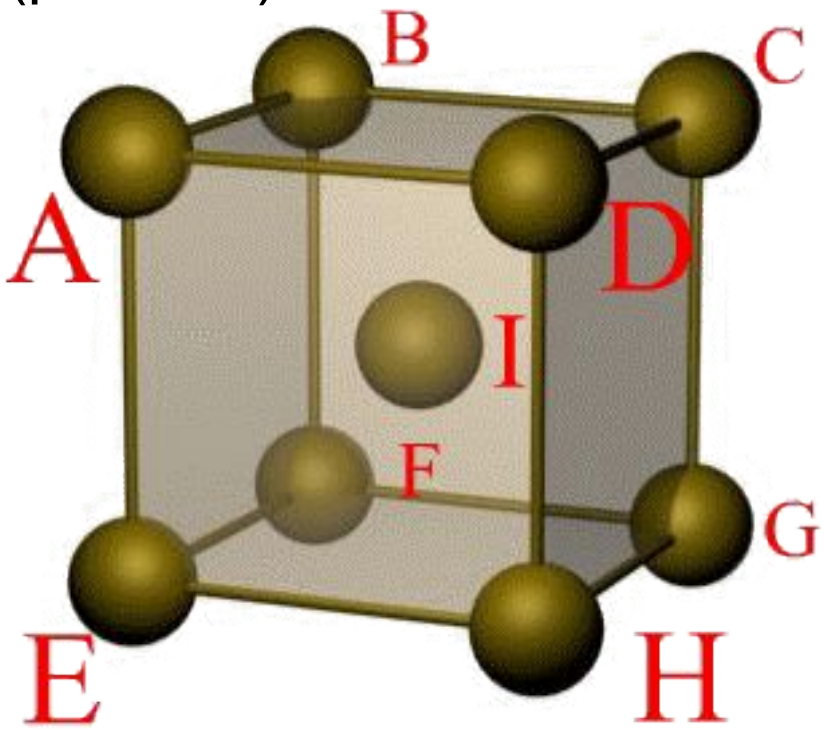


Рис. 1.5. Элементарная ячейка решетки ОЦК

1) Плоскость ABCD (рис 1.6 а). Количество атомов в плоскости ABCD – 1; площадь ABCD = a^2; площадь, приходящаяся на 1 атом – удельная площадь:

$$S = \frac{a^2}{1} = a^2$$ – мера плотности упаковки

2) Плоскость ABGH (рис 1.6 б). Количество атомов в плоскости ABGH – 2; площадь ABGH = $a^2\sqrt{2}$

$$S = a^2\frac{\sqrt{2}}{2} \approx 0{,}7a^2 < a^2$$

В плоскости ABGH плотность упаковки больше чем в ABCD. Наиболее вероятен сдвиг вдоль диагональных плоскостей.

Аллотропия металлов

Некоторые металлы, например, железо, титан, олово и др. способны по достижении определенных температур изменять кристаллическое строение, т. е. изменять тип элементарной ячейки своей кристаллической решетки. Это явление получило название *аллотропии* или *полиморфизма*, а сами переходы от одного кристаллического строения к другому называются аллотропическими или полиморфными.

На рис. 1.7 показано изменение *свободной энергии F* от температуры *t* для двух вариантов кристаллического строения железа: ОЦК (кривая *1*) и ГЦК (кривая *2).*

В интервале температур 911-1392°С железо имеет решетку ГЦК, так как при этом его свободная энергия меньше. При t<911°С и t>1392°С, у него должна быть решетка ОЦК, обладающая меньшей свободной энергией.

Разные аллотропические формы металлов обозначаются буквами греческого алфавита, при этом низкотемпературные модификации обозначаются буквой *a*, а последующие в порядке роста температур - буквами *b, g ,d* и т. д. Аллотропическими формами железа являются: до 911°С - альфа-железо (*a*-Fe), имеющее ОЦК-решетку, от 911°С до 1392 °С -гамма-железо (*g* -Fe) с решеткой ГЦК и от 1392°С до 1539 °С т. е. до температуры плавления-снова *a*-Fe с решеткой ОЦК, однако, чтобы отличить его от низкотемпературной модификации, его принято называть дельта-железом (*d* Fe).

Известное в практике так называемое немагнитное бета-железо (*b* -Fe) самостоятельной аллотропической формой не является, так как имеет такую же, как у *a*-Fe ОЦК-решетку и отличается от него только отсутствием магнитных свойств, которые оно теряет при 768°С (*точка Кюри*).

Дефекты кристаллической решетки металла

Кристаллическая решетка, в которой отсутствуют нарушения сплошности и все узлы заполнены однородными атомами называется идеальной кристаллической решеткой металла.

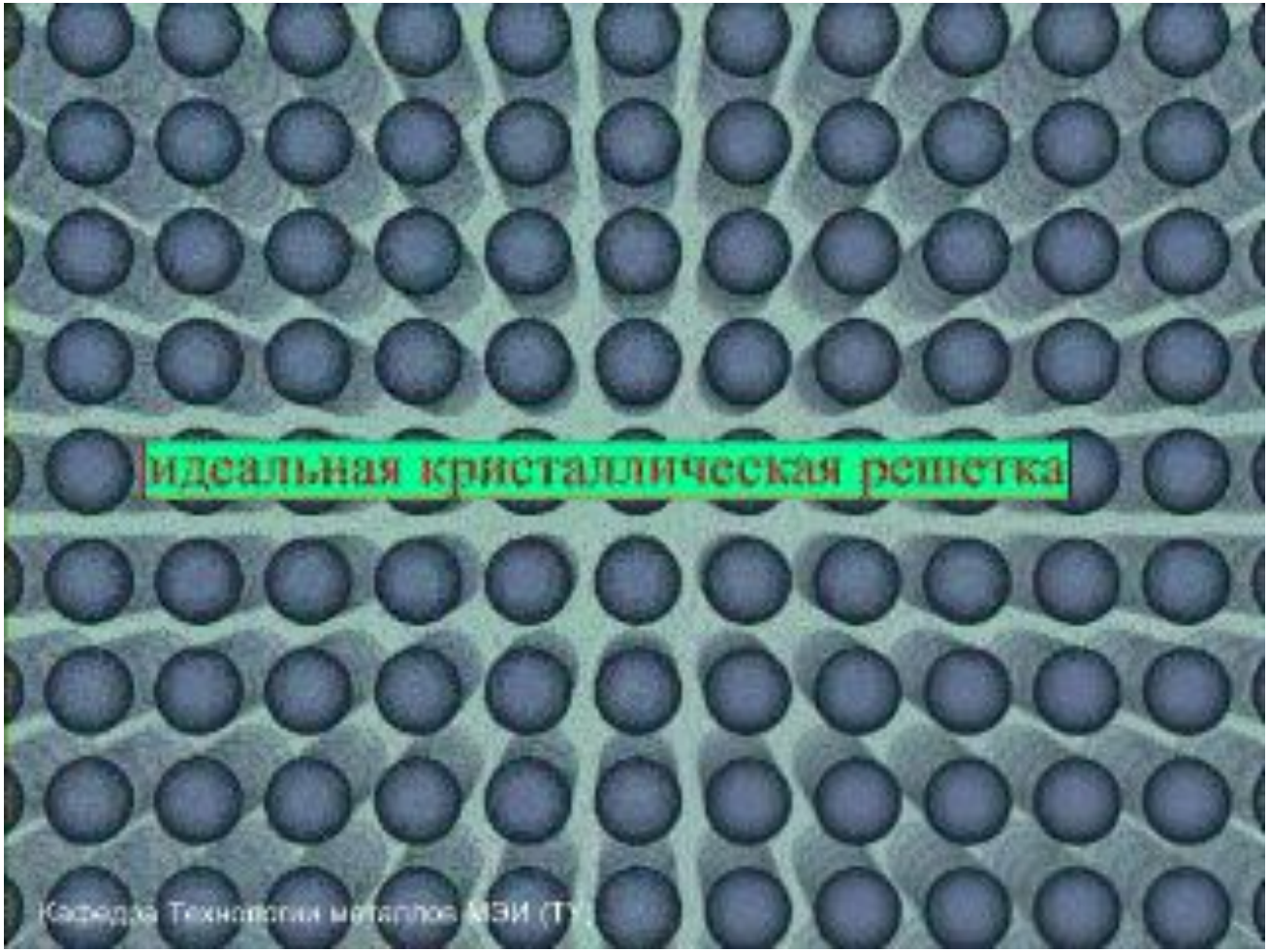
В решетке реального металла могут находиться различные дефекты.

Все дефекты кристаллической решетки принято делить на точечные, линейные, поверхностные и объемные.

Точечные дефекты соизмеримы с размерами атомов. К ним относятся вакансии, т. е. незаполненные узлы решетки, межузельные атомы данного металла (рис 1.8), примесные атомы замещения, т. е. атомы, по диаметру соизмеримые с атомами данного металла и примесные атомы внедрения, имеющие очень малые размеры и поэтому находящиеся в междоузлиях (рис 1.9).

Влияние этих дефектов на прочность металла может быть различным в зависимости от их количества в единице объема и характера.

Рис. 1.8. Схема образования пары вакансия-внедренный атом



Линейные дефекты имеют длину, значительно превышающую их поперечные размеры. К ним относятся *дислокации*, т. е. дефекты, образующиеся в решетке в результате смещений кристаллографических плоскостей.

Дислокации бывают двух видов.

Наиболее характерной является *краевая дислокация* (рис. 1.10). Она образуется в результате возникновения в решетке так называемой полуплоскости или экстраплоскости.

Нижний ряд экстраплоскости собственно и принято называть дислокацией

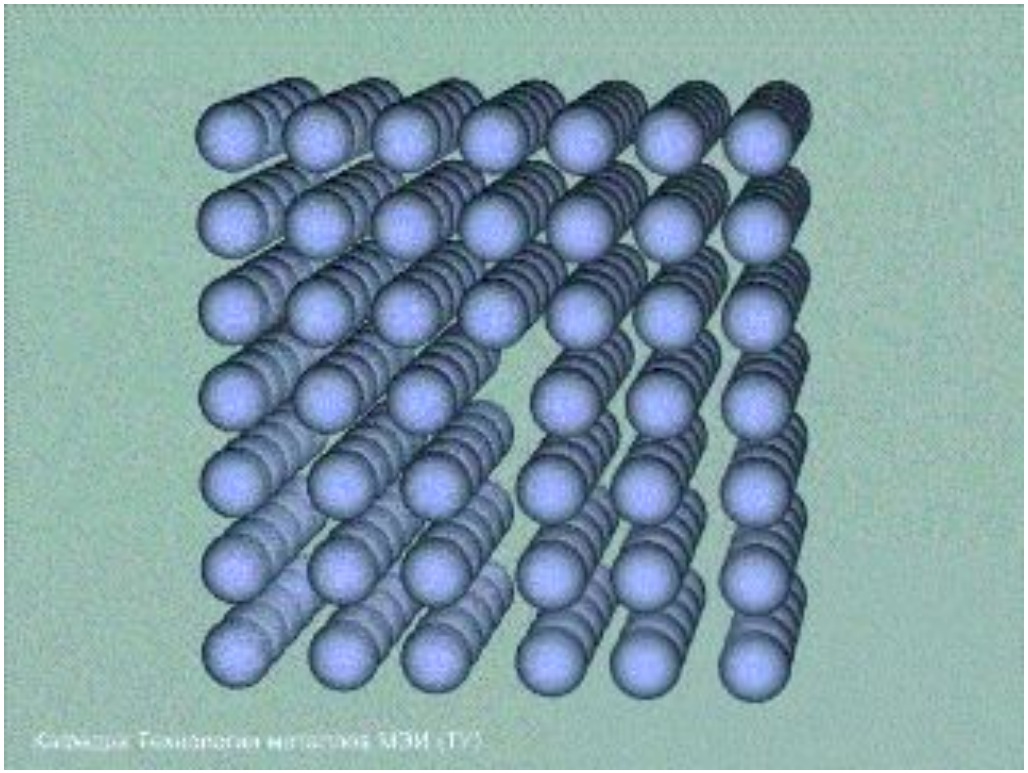


Рис. 1.10. Схема краевой дислокации в идеальном кристалле

Другим типом дислокации является *винтовая дислокация*, которая представляет собой некоторую условную ось внутри кристалла, вокруг которой закручены атомные плоскости (рис.1.11).

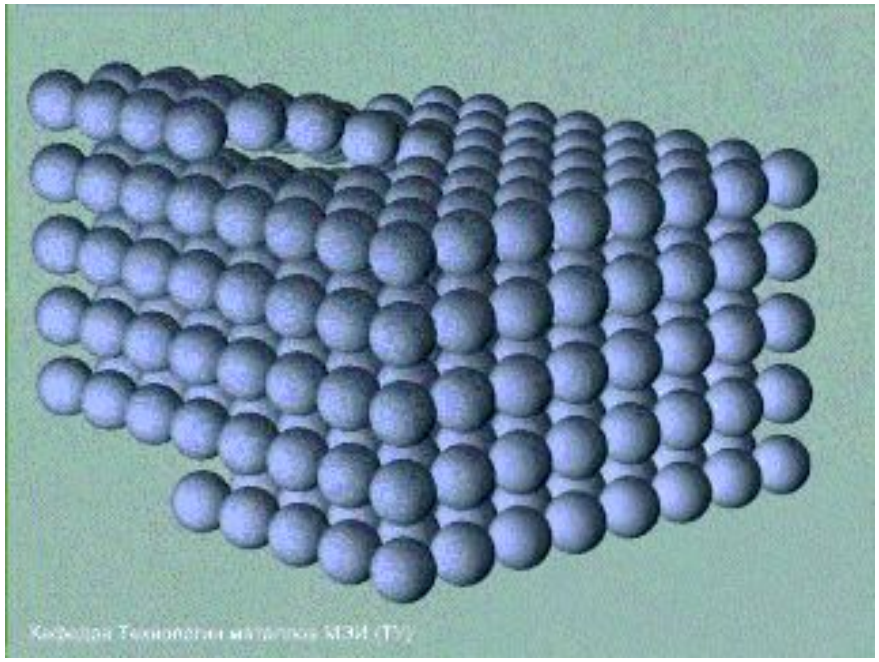
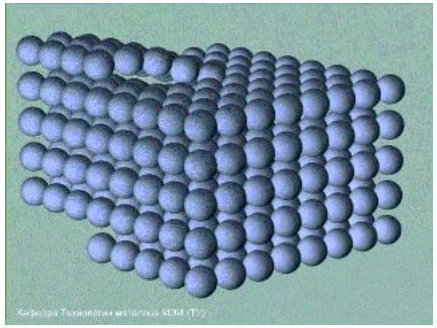


Рис. 1.11. Схема винтовой дислокация



В винтовой дислокации, так же как в краевой, существенные искажения кристаллической решетки наблюдаются только вблизи оси, поэтому такой дефект может быть отнесен к линейным.

Дислокации обладают высокой подвижностью, поэтому существенно уменьшают прочность металла, так как облегчают образование сдвигов в зернах-кристаллитах под действием приложенных напряжений.

Дислокационный механизм сдвиговой *пластической деформации* внутри кристаллов может привести к разрушению изделия. Таким образом, дислокации непосредственно влияют на прочностные характеристики металла.

Для оценки этого влияния используется плотность дислокаций, под которой принято понимать отношение суммарной длины дислокаций к объему содержащего их металла. Плотности дислокаций измеряется в $см^{-2}$ или $м^{-2}$.

На рис. 1.12 в виде кривой *ABC* схематически показана зависимость прочности металла от плотности дислокаций. Точка *A* соответствует теоретической прочности металла, обусловленной необходимостью одновременного разрыва всех межатомных связей, проходящих через плоскость сдвига, в случае отсутствия дислокаций.

При увеличении количества дислокаций (см. участок *AB)* прочность резко снижается, так как на несколько порядков уменьшаются усилия, необходимые для осуществления сдвигов в зернах металла при его деформировании и разрушении

При плотности дислокаций $10^{6-}10^{7}$ см-2 (точка *B* на кривой), прочности минимальна, и на участке *BC* происходит ее рост. Это объясняется тем, что с ростом плотности дислокаций их передвижение происходит не только по параллельным, но и по пересекающимся плоскостям, что существенно затрудняет процесс деформирования зерен.

Поэтому начиная с точки *B* прочность металла возрастает.

Максимальная плотность дислокаций, может составить 10^{13} см$^{-2}$. При дальнейшем росте плотности дислокаций происходит разрушение металла.

Поверхностные дефекты включают в себя главным образом границы зерен (рис.1.13).

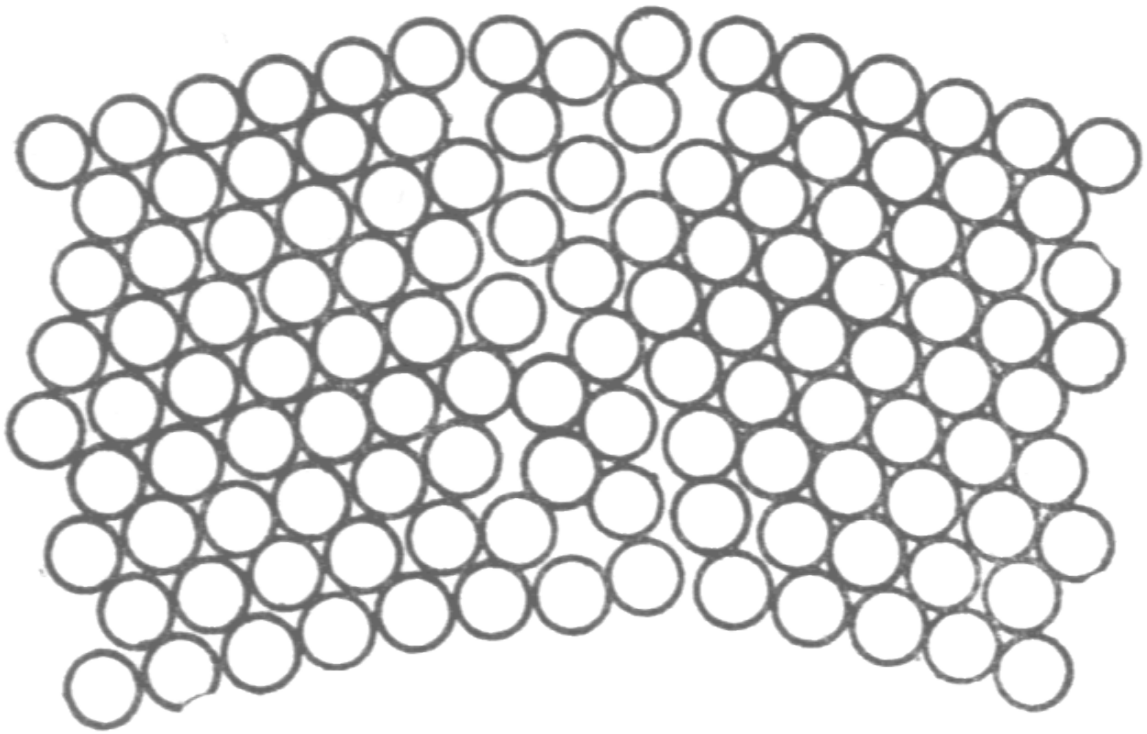


Рис.1.13. Структура границы двух соседних кристаллических зерен

На границах кристаллическая решетка сильно искажена. В них скапливаются перемещающиеся изнутри зерен дислокации.

Из практики известно, что мелкозернистый металл прочнее крупнозернистого. Так как у последнего меньше суммарная протяженность (площадь) границ. То можно сделать вывод, что поверхностные дефекты способствуют повышению прочности металла. Поэтому создано несколько технологических способов получения мелкозернистых сплавов.

Объемные дефекты кристаллической решетки включают трещины и поры. Наличие данных дефектов, уменьшая плотность металла, снижает его прочность.

Кроме того, трещины являются сильными концентраторами напряжений, в десятки и более раз повышающими напряжения создаваемые в металле рабочими нагрузками. Последнее обстоятельство наиболее существенно влияет на прочность металла

Контрольные вопросы

1. В чем состоит существенная разница между строением аморфных и кристаллических тел? Что такое кристаллическая решетка?
2. Перечислите основные типы ячеек кристаллических решеток металлов. Что такое параметры решеток?
3. Что такое анизотропия свойств в кристаллах, чем она обусловлена? Привести пример.
4. Почему поликристаллические тела являются изотропными? Что такое квазиизотропия (псевдоизотропия)?
5. Что такое аллотропия (полиморфизм) металлов и каково ее практическое значение?
6. Что представляют собой краевые дислокации, какова их роль в протекании пластической деформации металла и как они влияют на его прочность?
7. Что такое плотность дислокаций и как она влияет на характер изменения прочности металла?