

Будова і властивості чистих металів та металічних сплавів. Кристалічні та аморфні тіла. Кристалічна гратка твердого тіла.

Метали і сплави на їх основі наразі набули широкого розповсюдження при виробництві деталей та вузлів машин, обладнання, інструменту тощо. Вони були і залишаються основним конструкційним матеріалом поряд із штучно створеними матеріалами, керамікою, клеями. В природі метали можуть зустрічатися в чистому вигляді (напр. Pt, Au, Ag, Hg, Cu) або в рудах, оксидах чи солях. У Періодичній системі Менделєєва із 111 відкритих хімічних елементів, з яких лише 22 є неметалами, всі інші відносять до металів або напівметалів.

Метали звичайно поділяють на дві групи: чорні метали (залізо, сталь та чавун) і кольорові метали, які в свою чергу можна поділити на такі підгрупи:

- легкі метали (Mg, Be, Al, Ti) з густиною до 5 г/см^3 та важкі метали (Pb, Mo, Ag, Au, Pt, W, Ta, Ir, Os) з густиною більше 10 г/см^3 ;
- легкоплавкі метали (Sn, Pb, Zn) з температурою плавлення 232°C , 327°C , 410°C відпдно та тугоплавкі метали (W, Mo, Ta, Nb), які мають температуру плавлення вище, ніж у заліза ($>1539^\circ\text{C}$)
- благородні метали (Au, Ag, Pt) з високою корозійною стійкістю;
- уранові метали (актиноїди), які використовують в атомній техніці;
- рідкоземельні метали (РЗМ) або лантаноїди, які використовують для модифікування сталі;
- лужні та лужноземельні метали (Li, Na, K, Ca) використовуються як теплоносії в атомних реакторах, крім цього Na використовуються для виробництва каучуку, Li – для легування легких і міцних алюмінієвих сплавів, які використовуються в літакобудуванні.

Властивості металів різноманітні, але всі метали мають високу пластичність, високі тепло- та електропровідність, електричний опір металів

зростає з підвищенням температури, надпровідність металів при температурі близько абсолютного нуля.

Всі метали у визначеному інтервалі температур і тисків можна вважати твердими тілами – кристалічними або аморфними. Кристалічні тіла при температурі вище температури плавлення переходять у рідкий стан, аморфні – не мають чіткої температури плавлення – вони розм'ягчуються в широкому температурному інтервалі, стають вязкими, лише потім переходять в рідкий стан (неорганічне скло, янтар, резина тощо).

Аморфні тіла мають ближній порядок у розміщенні частинок, з яких вони складаються (атомів, молекул), тобто впорядкованість у розміщенні частинок повторюється на відстанях, які можна порівняти з відстанями між частинками.

Кристалічні тіла мають дальній порядок у розташуванні складових частинок (атомів, іонів, молекул), тобто таку впорядкованість у розміщенні атомів, яка повторюється на відстанях, що набагато перевищують міжатомні.

Структуру кристалу можна охарактеризувати електронною будовою атомів, характером взаємодії їх в кристалі, просторовим розподілом та хімічним складом.

Розрізняють тонку структуру, мікро- та макроструктуру. За допомогою тонкої структури можна описати розміщення частинок в кристалі і електронів в атомі шляхом використання дифракційних методів (рентгенографії, електроннографії, нейтронографії), у яких аналізують дифракційну картину при взаємодії атомів кристалу з короткими хвилями ($\lambda = 10^{-10} - 10^{-12}$ м). Дрібні структурні складові більшості матеріалів – кристаліти (зерна) – можна спостерігати за допомогою оптичного (до 10^{-7} м) або електронного (до $2 \cdot 10^{-10}$ м) мікроскопу. За допомогою мікроскопічних методів досліджень можна визначити розміри і форму кристалітів, розподіл і відносну кількість різноманітних за природою кристалів, форму чужорідних включень і мікропустот, орієнтацію кристалів, наявність двійників, ліній ковзання тощо. Вивчення макроструктури неозброєним оком дозволяє виявляти характер

зламу, усадкові раковини, пори, розміри і форму великих кристалів, а також тріщини, хімічну неоднорідність, волокнистість.

Елементарні частинки кристалу (атоми, іони) зближені до дотику і розміщуються закономірно по різних напрямкам. Кристали відрізняються симетрією розміщення частинок. Якщо в кристалі провести три напрямки x , y , z , які не лежать в одній площині, відстані між частинками неоднакові, і дорівнюють відповідно a , b , c .

Площини, що паралельні координатним площинам, та знаходяться на відстані a , b , c , розбивають кристал на множину паралелепіпедів, які рівні між собою та паралельно орієнтовані. Найменший паралелепіпед називають елементарною коміркою, а послідовне його переміщення у трьох напрямках x , y , z , утворює просторову кристалічну ґратку. Вершини паралелепіпеда називають вузлами кристалічної ґратки. В точках перетину прямих ліній (вузлах ґратки) розміщуються атоми. Відстані a , b , c між центрами атомів, що знаходяться в сусідніх вузлах ґратки – параметри або періоди ґратки (для металів їх величина 0,1-0,7 нм). Розміри елементарних комірок 0,2-0,3 нм.

Для описання елементарної комірки використовують шість величин: три відрізки a , b , c та три кути α , β , γ між цими відрізками.

Використовуючи різні співвідношення між цими величинами, які визначаються симетрією, можна виділити сім систем кристалів (рис. 1.1). В простій ґратці на одну комірку відводиться одна частинка, а в складній частинки можуть знаходитися і на гранях, і в центрі ґратки. Для простої ґратки в кожній комірці кожна частинка в вершині відноситься до восьми комірок. Таким чином від вузла на долю кожної комірки відповідає $1/8$ об'єма комірки – тому на комірку відповідає одна частинка.

У 19 ст. Браве на основі вивчених трансляційних структур і елементів симетрії виділив 14 типів кристалічних ґраток. Із 14 ґраток Браве 7 є простими і будуються осьовими трансляціями до вузлів ґратки (рис. 1,1), а 7 – складними, і будуються трансляціями по точкам, що знаходяться або в центрі об'єму

елементарної ґратки (об'ємноцентровані) або в центрі грані комірки (гранецентровані). Для реальних металів найбільш характерні три такі типи елементарних комірок: об'ємноцентрована кубічна (ОЦК), гранецентрована кубічна (ГЦК) і гексагональна щільноупакована (ГЩУ) (рис. 3).

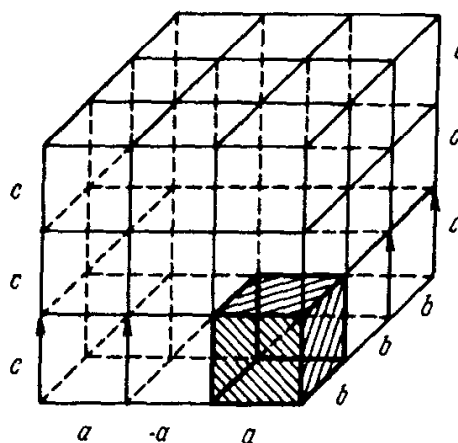


Рис. 1 – Кристалічна ґратка

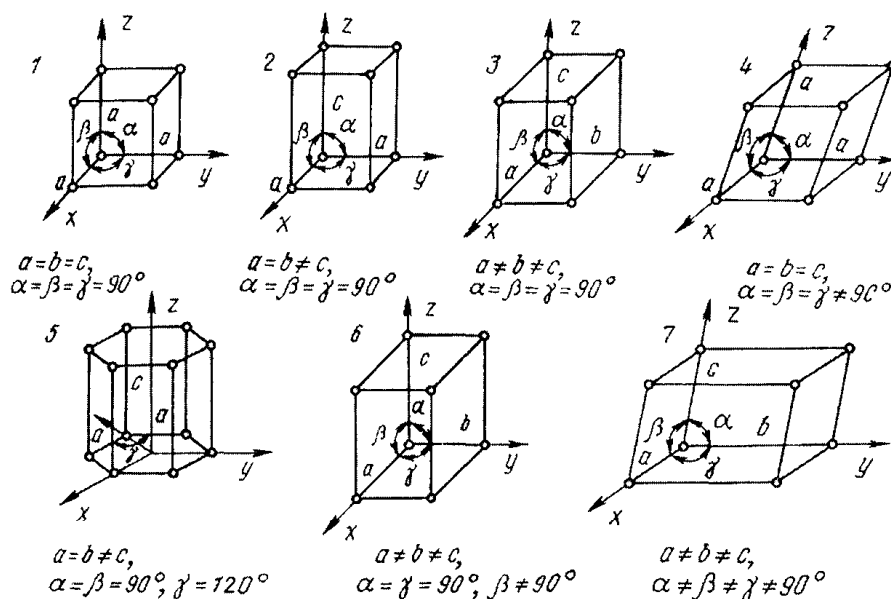


Рис. 2 – Основні типи кристалічних ґраток: 1 – кубічна, 2 – тетрагональна; 3 – ромбічна; 4 – ромбоєдрична; 5 – гексагональна; 6 – моноклінна; 7 – триклінна.

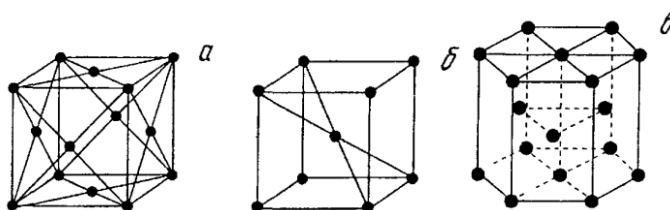


Рис. 3 – Типи елементарних комірок кристалічних ґраток металів: а – гранецентрована (ГЦК), об'ємноцентрована (ОЦК), гексагональна щільноупакована (ГЩУ).

В кубічній об'ємноцентрованій ґратці атоми розміщені в вершинах куба, а один – в центрі його об'єму. В кубічній гранецентрованій ґратці атоми розміщені в вершинах куба і в центрі кожної грані. В гексагональній щільноупакованій ґратці атоми розміщені в вершинах і центрі шестигранних основ призми, а три – в її середній площині.

Координаційним числом називають таку кількість атомів, яка знаходиться на найбільш близькій рівній відстані від даного атома. Для ОЦК воно дорівнює 8, для ГЦК і ГПУ – 12. Якщо вважати, що атоми в ґратці ведуть себе як пружні кульки, що дотикаються, то в ґратці є значна кількість вільного простору. Коефіцієнт компактності Q дорівнює відношенню сумарного об'єму атомів, що входять у ґратку, до об'єму ґратки:

$$Q = \frac{4\pi R^3 n}{3V} \cdot 100\%$$

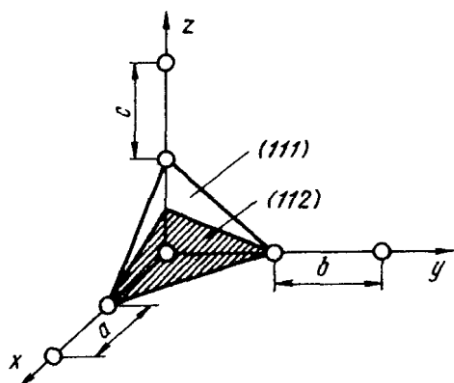
R – радіус атому (іону), n – базис, або число атомів на одну елементарну комірку, V – об'єм елементарної комірки.

Приклад визначення базису n для ОЦК ґратки (рис. 3-б): $n = 1/8 \cdot 8 + 1 = 2$; при цьому параметр ґратки $a = 4R\sqrt{3}$, оскільки атоми дотикаються по діагоналі куба, довжина якої дорівнює чотирьом атомним радіусам.

Коефіцієнт компактності для простої кубічної ґратки становить 52 %, для ОЦК ґратки – 68%, для ГЦК і ГПУ ґраток – 74 % (найбільш компактні).

В кристалографії положення атомних площин визначається відрізками, які відтинають ці площини при їх перетині з осями координат X , Y , Z . Ці відрізки вимірюються цілими числами m , n , p , які дорівнюють довжині ребер

комірки a, b, c , які є одиничними відстанями вздовж осей координат. За індекси площин прийнято брати обернені відрізки $h=1/m$, $k=1/n$, $l=1/p$. Ці числа заключають в круглі скобки. Для простої кубічної ґратки кожна площина перетинає лише одну вісь координат, відрізки, що відтинаються дорівнюють (1,



∞, ∞), $(\infty, 1, \infty)$, $(\infty, \infty, 1)$, а обернені їм величини, відповідно $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, $(0, 0, 1)$. Тоді для площини (100) : $1/1, 1/\infty, 1/\infty$; для площини (110) : $1/1, 1/1, 1/\infty$, для площини (111) : $1/1, 1/1, 1/1$. Приклад графічного зображення площин представлений на рис. 4.

Рис. 4 – Графічне зображення площин

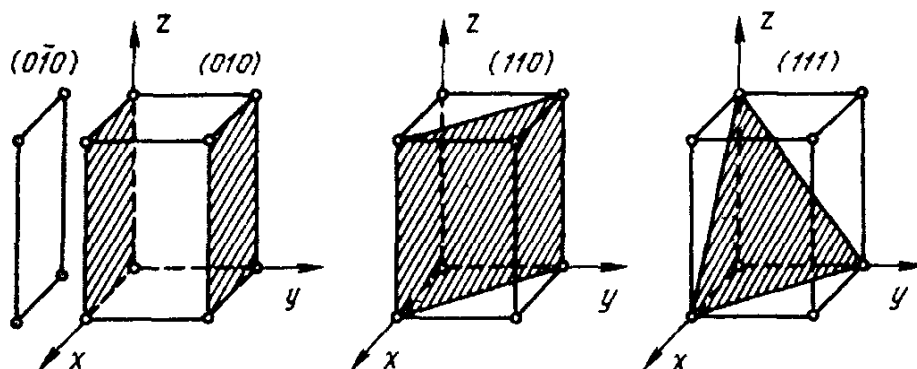
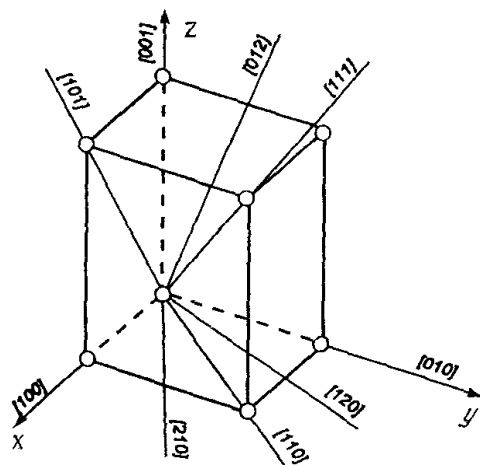


Рис. 5 – Площини (010) , (110) , (111) , $(0\bar{1}0)$ в простій кубічній ґратці

Якщо відрізок якоїсь площини від'ємний, то і індекс її від'ємний, причому у останнього знак мінус пишеться зверху. Найбільш важливі площини кубічної системи: 1) площини кубу з індексами (100) , (010) , (001) тощо, 2) площини октаедру, що проходять через три вершини кубу з індексами (111) , $(\bar{1}\bar{1}1)$, $(1\bar{1}\bar{1})$ тощо., 3) площини ромбододекаедру, що проходять через діагональ і ребра кубу з індексами (110) , (011) , $(1\bar{1}0)$ і т. д. Кожній площині певного типу кристалічної ґратки відповідають свої кристалографічні індекси. Від густини заповнення атомами тієї чи іншої грані в кристалічному тілі залежать властивості окремо взятого кристалу у даному напрямку.

Кристалічні напрямки проходять через початок координат і вузли кристалічної ґратки. Приймаючи за одиницю довжину ребра елементарної комірки (період комірки), визначають координати будь-якої точки цього



напрямку. Їх позначають простими числами, що пропорційні координатам вибраної точки вздовж координатних осей і заключають в квадратні дужки. Кристалічні напрямки і їх індекси для простої кубічної ґратки представлені на рис. 6.

Рис. 6 – Кристалічні напрямки і їх індекси для простої кубічної ґратки

Окрім атомів у кристалічній ґратці є ще вільний простір – пори, які можуть бути октаедричними або тетраедричними (рис. 7).

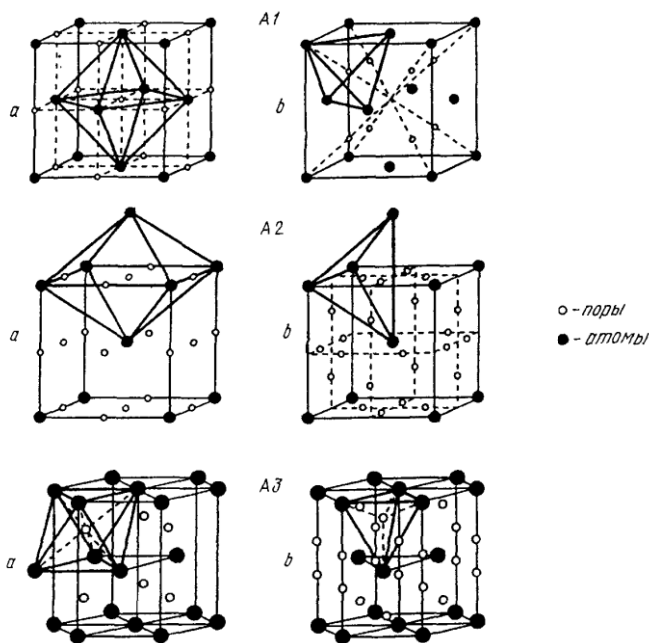


Рис. 7 – Центри октаедричних (а) та тетраедричних (б) пор в А1-ГЦК, А2-ОЦК та А3-ГП ґратці.

Температура перетворення однієї кристалічної модифікації в іншу називається температурою поліморфного перетворення. Зміна форми і типу кристалічної ґратки при визнач

Відомі поліморфні перетворення заліза $Fe_{\alpha} \rightarrow Fe_{\gamma}$, титану $Ti_{\alpha} \rightarrow Ti_{\gamma}$ та ін. Температуру перетворення однієї кристалічної модифікації в іншу називають температурою поліморфного перетворення. Це явище називають перекристалізацією. При температурі 911°C стійким є α -залізо (ОЦК), в інтервалі 911-1392°C стійке γ -залізо (ГЦК), на явищі поліморфізму базується термообробка. При переході з однієї поліморфної модифікації в іншу змінюються властивості, зокрема густина і об'єм речовини (густина Fe_{γ} на 3% більше густини Fe_{α}), що потрібно враховувати при термічному обробленні.

Один тип кристалічної ґратки характерний для таких елементів:

- Ag, Au, Pt, Cu, Al, Pb, Ni – ГЦК;
- Na, K, V, Nb, Cr, Mo, W – ОЦК;
- Be, Mg, Zn, Cd – ГЦУ.

В табл. 1 наведені інтервали існування поліморфних модифікацій металів, які мають поліморфне перетворення.

Метал	Тип ґратки	Алотропна форма	Інтервал тем-р існування даної модифікації
Fe	ОЦК	α	До 911
	ГЦК	γ	911-1392
	ОЦК	δ	1392-1536
Co	ГПУ	α	До 477
	ГЦК	β	477-1430
Sn	Алмазна	α	До 13
	Тетрагональна об'ємоцентрована	β	13-232
Mn	Складна кубічна багатоатомна	α	До 700
	Складна кубічна багатоатомна	β	700-1079
	Тетрагональна гранецентрована	γ	1079-1143
Zr	ОЦК	δ	1143-1244
	ГПУ	α	До 862
	ОЦК	β	862-1852
Ti	ГПУ	α	До 882
	ОЦК	β	882-1668

U	Ромбічна	α	До 663
	Тетрагональна об'ємоцентрована	β	663-764
	ОЦК	γ	764-1130

Аморфні матеріали характеризуються хаотичним розміщенням атомів, тому вони володіють однаковими властивостями у всіх напрямках, тобто є ізотропними. Для будь-якого кристалічного тіла його властивості в різноманітних напрямках по відношенню до його осей неоднакові, але зміна їх проходить закономірно; для кристалів з ГЦК граткою зміна властивостей досягає макс. у напрямку ромбододекаедру, мінімуму – паралельно грані октаедру і навпаки. Всі кристали мають відмінні властивості за різними напрямками по відношенню до осей кристалічної гратки, тобто є анізотропними.

Дослідження механічних властивостей монокристалу чистої міді дозволило встановити, що для зразка, вирізаного перпендикулярно:

- грані куба..... $\sigma_{\epsilon} = 14 \text{ кГ/мм}^2$; $\delta = 10\%$;
- грані октаедру.. $\sigma_{\epsilon} = 35 \text{ кГ/мм}^2$; $\delta = 33\%$;
- грані ромбододекаедру.. $\sigma_{\epsilon} = 20 \text{ кГ/мм}^2$; $\delta = 50\%$;

Для чистої полікристалічної міді $\sigma_{\epsilon} = 22 \text{ кГ/мм}^2$; $\delta = 45\%$;