

УДК 548.4

А. В. Омелюсик, магистрант (БГТУ)

ТЕОРИЯ ИДЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛОВ

В статье представлены структурные состояния кристаллических решеток металлов, упрочненных различными способами. Проведен анализ механизмов блокировки дислокаций при многократной деформации металла, измельчении структуры и легировании. Обоснованы физическая сущность, особенности и свойства идеальных кристаллов. В результате с учетом влияния степени искаженности кристаллической решетки на прочность и свойства идеальных кристаллов построена зависимость временного сопротивления железа от плотности дислокаций.

The paper presents the structural state of the crystal lattices of metal hardening various ways. The analysis of the locking mechanisms of dislocations in multiplex deformation of the metal, grinding structure and alloying. Substantiated physical essence, characteristics and properties of ideal crystals. As a result, given the influence of the degree of distortion of the crystal lattice on the strength and the properties of ideal crystals, the dependence of tensile strength of iron on the dislocation density.

Введение. В настоящее время все используемые в мире металлы имеют реальные, структурно несовершенные кристаллы. Для изменения структурного состояния, в целях получения желаемых свойств, применяются различные технологические способы. Эти способы являются экстенсивными. Сама же «природа» металлов и других материалов уникальна, но пока еще не изучена до конца. В литературе лишь поверхностно упоминается об идеальных кристаллах.

Основная часть. Прочность – свойство, зависящее от энергии межатомной связи, структуры и химического состава материала. Энергия межатомного взаимодействия непосредственно определяет характеристики упругих свойств (модули нормальной упругости и сдвига), а также так называемую теоретическую прочность.

Модули нормальной упругости и сдвига являются константами материала и структурно нечувствительны.

Теоретическая прочность (сопротивление разрыву межатомных связей) в реальных кристаллах из-за наличия структурных дефектов не достигается. Реальная прочность на два-три порядка ниже теоретической и определяется не столько межатомными силами связи, сколько структурой материала.

Сопротивление пластической деформации зависит главным образом от легкости перемещения дислокаций. В связи с этим современные методы повышения прочности материала основаны на создании такого структурного состояния, которое обеспечивало бы максимальную задержку (блокировку) дислокаций. К методам упрочнения относятся легирование, пластическая деформация, термическая, термомеханическая и химико-термическая обработка. Повышение прочности указанными методами основано на ряде структурных факторов [1].

Рассмотрим различные структурные состояния кристаллических решеток металлов. Кристаллическая решетка (КР) хорошо отожженного металла (рис. 1, б) содержит минимальную плотность дислокаций, приблизительно 10^2 см^{-2} . При попытке сдвинуть верхнюю часть кристалла относительно нижней атом 1 стремится вступить в связь с атомом 2. Когда будет достигнуто определенное усилие, эти атомы соединятся и дислокация сместится на одно межатомное расстояние влево. Легкость скольжения дислокаций является причиной высокой пластичности.

Одним из способов повышения прочности является наклеп. В основе наклепа лежит запутывание и увеличение плотности дислокаций (рис. 1, в). При попытке срезать кристалл атом 1, принадлежащий дислокации с плоскостью скольжения $A-A$, стремится соединиться с атомом 2. Но образовавшаяся дислокация с плоскостью скольжения $B-B$ создает вокруг себя силовое поле и препятствует перемещению атома 1. В свою очередь еще одна новая дислокация, принадлежащая плоскости скольжения $C-C$, препятствует перемещению атома 2 в сторону атома 1. В результате чего дислокация с плоскостью скольжения $A-A$ оказывается заблокированной, что в совокупности приводит к упрочнению металла.

Механизм торможения дислокаций путем измельчения зерен металла продемонстрирован на рис. 1, г. Роль эффективного барьера выполняют границы зерен и субзерен (блоков мозаики). Скользящая дислокация вынуждена останавливаться у этих границ, поскольку в соседних зернах (субзернах) плоскость скольжения имеет другую ориентацию. Это приводит к дополнительному повышению напряжения для продвижения дислокаций и тем самым способствует упрочнению.

Широкое распространение в области упрочнения металлов получил способ легирования.

Данному способу посвящается значительное количество исследований. Существует два принципиальных механизма блокировки дислокаций при легировании. В первом случае (рис. 1, *d*) легирующий элемент (темное пятно) может влиять непосредственно и косвенно. Непосредственное влияние связано с искажением КР путем внедрения кристалла легирующего элемента. Как показано на рисунке, атом 1 стремится сдвинуться влево и вступить в связь с ближайшим атомом. Но на его пути есть зерно легирующего элемента, как правило, тверже материала, в котором он находится. В дополнение внедренный кристалл разрушает некоторую область КР вокруг себя и создает новые дислокации, что еще больше затрудняет движение атома 1. Например, наиболее сильно повышают твердость медленно охлажденного (нормализованного) феррита Si, Mn, Ni, т. е. элементы, имеющие отличную от Fe_α КР. Слабее влияют Mo, V и Cr, решетки которых изоморфны Fe_α. Косвенное влияние связано с тем, что при внедрении карбидообразующих элементов в феррите задерживается углерод, а сами элементы становятся карбидами и образуют твердую фазу. По степени увеличения косвенного влияния на прочность феррита легирующие элементы располагаются в такой последовательности: Cr, Mo, W, Nb, V, Ti. При совместном легировании упрочняющий эффект возрастает.

Во втором случае (рис. 1, *e*) внедренные атомы, такие как C, O, H, N, могут скапливаться

на дислокациях и блокировать их, образуя сегрегации или атмосферы Коттрелла.

Из вышесказанного следует, что все способы упрочнения металлов основаны на искажении КР. И в то же время, глядя на КР идеального кристалла (рис. 1, *a*), которая не имеет никаких дефектов, сложно сказать о том, что металл с такой КР на два-три порядка прочнее металла с искаженной КР. Причиной такой высокой прочности идеального кристалла является то, что из-за отсутствия в КР дефектов вся воспринимаемая нагрузка равномерно распределяется между всеми атомами, а сама прочность определяется только межатомной связью.

Если исходить от обратного, то на практике можно получить металл с чистотой 99,9% и с помощью метода Бриджмена или Чохральского – структуру из одного кристалла (монокристалл). Но все равно из-за наличия дефектов металл не будет иметь идеальную структуру.

Теория дислокаций дает следующую зависимость между временным сопротивлением σ_b и плотностью дислокаций ρ [1]:

$$\sigma_b = \sigma_0 + \alpha b G \sqrt{\rho}, \quad (1)$$

где σ_0 – временное сопротивление до упрочнения; α – коэффициент, учитывающий вклад других механизмов торможения дислокаций; b – вектор Бюргерса; G – модуль сдвига.

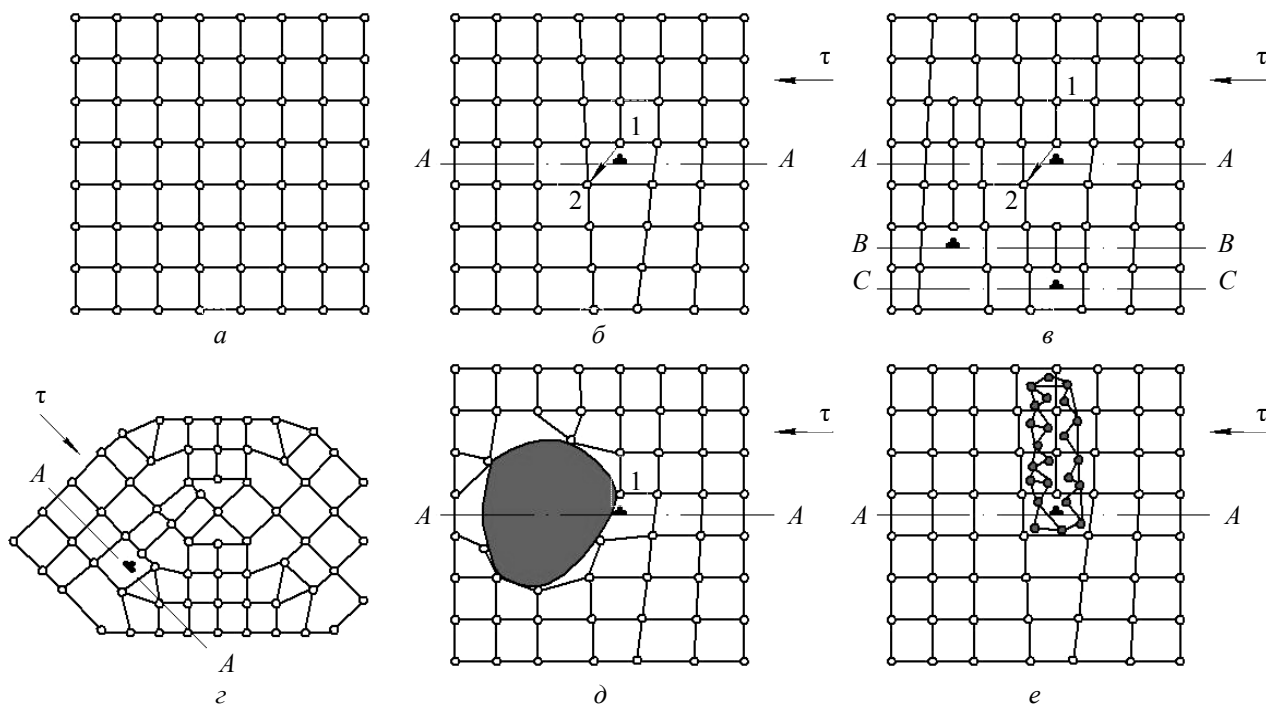


Рис. 1. Структуры кристаллических решеток металлов:

a – КР идеального кристалла; *b* – КР после отжига; *в* – КР после наклепа; *г* – КР металла с мелкозернистой структурой; *д, е* – КР легированных металлов; *A-A, B-B, C-C* – плоскости скольжения

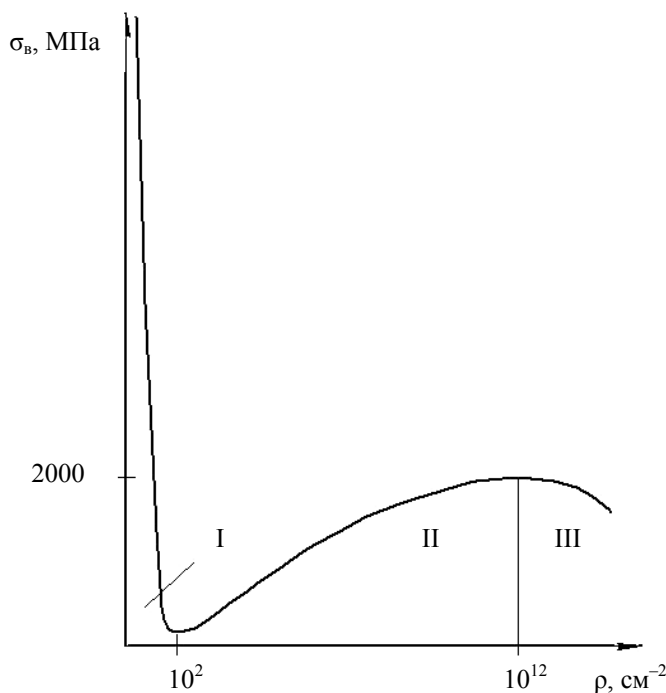


Рис. 2. График зависимости временного сопротивления железа от плотности дислокаций

Так как эта формула относится к реальным кристаллам, то с учетом особенностей идеальных кристаллов график зависимости (для железа) будет иметь показанный на рис. 2 вид.

График зависимости можно разделить на три принципиальных участка:

I – участок резкого снижения прочности из-за возникновения дефектов в КР, в конце которого прочность практически не зависит от энергии межатомных связей, а становится зависимой от структурного состояния;

II – возрастание прочности при увеличении плотности дислокаций. Как было сказано выше, величина плотности дислокаций 10^2 см^{-2} соответствует хорошо отожженному металлу. Получить металл с плотностью дислокаций ниже данного значения в обычных условиях невозможно;

III – участок графика, соответствующий снижению прочности. Согласно источнику [1], целесообразно увеличивать плотность дислокаций до 10^{12} см^{-2} . При большем значении в силу неравномерного распределения структурных дефектов отдельные объемы материала пересыщаются дислокациями. Это вызывает нарушение сплошности в виде

субмикроскопических трещин и снижение прочности.

Закключение. В связи с тем, что в идеальной КР отсутствуют дефекты, для металлов с такой КР не свойственны понятия текучести и наклепа. Кроме прочности, металлы с идеальной КР демонстрировали бы колоссальные показатели и по другим свойствам, таким как электро- и теплопроводность.

В настоящее время созданы нитевидные кристаллы без дефектов, так называемые «усы» длиной до 2 мм и толщиной 0,5–20 мкм. Их прочность близка к теоретической и составляет для железа $\sigma_b = 13\,000 \text{ МПа}$, для меди $\sigma_b = 30\,000 \text{ МПа}$.

Таким образом, если создавать металлы из атомов подобно тому, как дома создаются из кирпичей, то они будут обладать свойствами, показатели которых в десятки-сотни раз превышают показатели любых существующих на земле материалов.

Литература

1. Арзамасов, Б. Н., Макарова В. И., Мухин Г. Г. Материаловедение / М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2005. 648 с.

Поступила 27.02.2014