

УДК 544.7-022.532

Сравнительные характеристики элемента (β - Ti) в микро- и

наноструктурах

Е Даньдань, Ян Хан, Ши Юй

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

(634050, г. Томск, проспект Ленина, дом 30),

e-mail: 1239201854@qq.com

Научные руководители: Ерофеева Г.В., Гирякова Ю. Л.

Статья посвящена разным свойствам и технологиям промышленности β -титана в обоих микро- и наноструктур. Предлагается классификация β -титана, основанная на структурном факторе и отражающая особенности физических, механических и технологических свойств каждой группы β -титана. Приведены параметры прямой и обратной решеток титана, характерная поверхность Ферми, а также первая зона Бриллюэна. Показано, что порядок величины волновой длины де-Бройля электронов определен. Путем результата расчёта определяют диапазон влияния размерного эффекта. Кроме того, в виде таблицы показано сравнение в микро- и наноструктурах для β -титана. Особенности наноструктурного состояния вещества наиболее заметно проявляются при изучении разделенных наночастиц, когда их размер можно рассматривать как физический параметр наряду с составом, температурой и давлением. Показаны методы получения наноматериалов и применение наноструктурного β -Ti.

Ключевые слова: прямая и обратная решетка, первые зоны Бриллюэна, поверхность Ферми, особенности структуры и свойств, методы получения наноматериалов, применение наноструктурного β -Ti.

Comparative characteristics of the element (β - Ti)

in the micro - and nanostructures

Ye Dandan, Yang Hang, Shi Yu

Tomsk Polytechnic University (634050, Tomsk, Lenin Avenue, 30),

e-mail: 1239201854@qq.com

Scientific advisers: Erofeeva G.V. , Giryakova Yu.L.

The article is devoted to different properties and technologies of β -titanium industry in both micro- and nanostructures. A classification of β -titanium based on the structural factor and reflecting the physical, mechanical and technological properties of each β -titanium group is proposed. The parameters of the direct and inverse titanium gratings, the characteristic Fermi surface, as well as the first Brillouin zone. It is shown that the order of magnitude of the wave length of the de Broglie electrons is determined. By the result of the calculation, the range of the effect of the size effect is determined. In addition, the comparison of micro - and nanostructures for β -titanium in the table. The features of the nanostructural state of matter are most noticeable in the study of separated nanoparticles, when their size can be considered as a physical parameter along with composition, temperature and pressure. Finally, it is shown that the methods of producing nanomaterials and application of nanostructured β -Ti.

Keywords:

direct and reciprocal lattice, the first Brillouin zone, Fermi surface, peculiarities of structure and properties, methods of preparation of nanomaterials, the use of nanostructured β -Ti.

Введение

Титан— элемент четвёртой группы (по старой классификации — побочной подгруппы четвёртой группы), четвёртого периода периодической системы химических элементов Д. И. Менделеева, с атомным номером 22. Простое вещество титан — лёгкий прочный металл серебристо-белого цвета. Существует в двух кристаллических модификациях: α -Ti с гексагональной плотноупакованной решёткой, β -Ti с кубической объёмно-центрированной упаковкой, температурой полиморфного превращения $\alpha \leftrightarrow \beta$ 883 °С.

На рис. 1 и 2 приведены прямая и обратная решетки β -титана, ниже приведены их параметры.

Указать тип решетки и параметр (прямой и обратной).

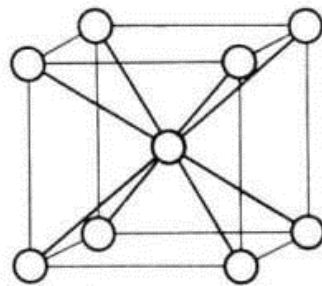


Рис.1 Титан- β в прямом пространстве ОЦК решетка

Прямые параметры:

$$a_1=0,3294\text{nm} \quad a_2=0,3294\text{nm} \quad a_3=0,3294\text{nm}$$

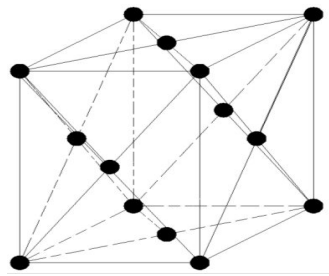


Рис.2 Титан- β в обратном пространстве ГЦК решетка

$$\text{Обратные параметры: } b_1 = 2 \cdot \pi \cdot \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot a_2 \times a_3}$$

$$b_1=19,0746\text{nm} \quad b_2=19,0746\text{nm} \quad b_3=19,0746\text{nm}$$

Вся кристаллографическая или структурная информация β -титана содержится в примитивной ячейке прямой кристаллической решетки, так же вся информация о распространяющихся в кристалле волновых колебаниях содержится в примитивной (Вигнера-Зейтца) ячейке обратной решетки, т.е. в первой зоне Бриллюэна (рис.3)



Рис.3 Первые зоны Бриллюэна для ОЦК-решетки β -титана

Для β -титана поверхность Ферми является открытой.

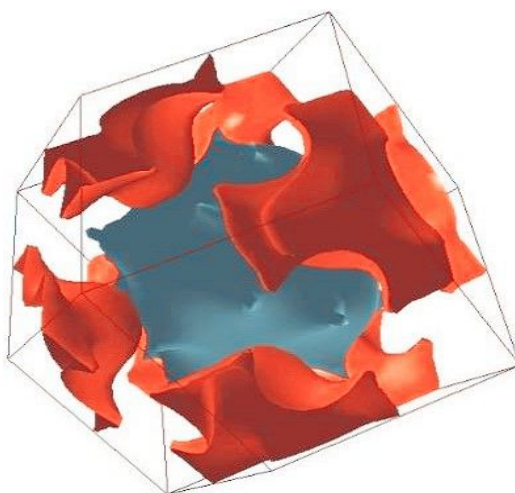


Рис.4 Поверхность Ферми для β -титана

Поверхность Ферми β -титана не является реальной поверхностью, а лишь наглядной иллюстрацией поведения электронов в металлах. Картины поверхностей Ферми β -титана объясняют такие свойства металлов, как блеск, ковкость, электропроводимость и теплопроводность. Собственно металл можно определить как твердое тело, обладающее поверхностью Ферми. Конечно, никак не воздействуя на металл, ничего не изменишь. Воздействуя на металл, например, сжимая его или растягивая, но, не перестраивая кристаллическую решетку, можно изменить его поверхность Ферми.

Изменение структуры материала влечет за собой и изменение его свойств. Сравнительные характеристики микро- и наноструктурных состояний приведены в таблице 1 [1-3].

Таблица 1- Сравнительные характеристики элемента (β - Ti)

Свойства	Микроструктурированное состояние (25мкм)	Наноструктурированное состояние (20нм)
Предел текучести, МПа	240	1100
Температура плавления, °С	1668	обычно 500-1500
Предел прочности, МПа	400	1160
Микротвердость, МПа	1800	3000 – 3200
Плотность, г/см ³	4,32	2,85
Относительное удлинение до разрушения при растяжении, %	23	6
Относительное сужение, %	56	50±2
Относительное удлинение, %	11	12±2
σ_{-1} (предел выносливости), МПа N=10 ⁷ циклов	500	640
Усталостная чувствительность к надрезу (K _{σ})	1.8	2.0

Из таблицы 1, следует, что существуют такие параметры наноструктуры, которые сильно изменяют по сравнению параметров микроструктуры: предел текучести, температура плавления, предел прочности, микротвердость.

Существуют такие параметры наноструктуры, которые мало изменяют по сравнению параметров микроструктуры: плотность, относительное удлинение до разрушения при растяжении, относительное сужение, относительное удлинение, σ_{-1} (предел выносливости), усталостная чувствительность к надрезу.

Изменение размерной структуры β -Титана ведёт к изменению этих свойств.

Энергия поверхности наночастиц увеличивается, соответственно увеличивается количество наночастиц на поверхности. Активность наночастиц на поверхности велика, поэтому для плавления наноструктурированного металла нужна меньшая температура.

Для наноструктурированного состояния характерна меньшая граница зерен, напряжение между границами зерен увеличивается, поэтому предел текучести, предел прочности, микротвердость увеличивается по сравнению с микроструктурированным состоянием.

Особенности структуры и свойств

Особенности наноструктурного состояния вещества наиболее заметно проявляются при изучении разделенных наночастиц, когда их размер можно рассматривать как физический параметр наряду с составом, температурой и давлением. К главным физическим причинам особенностей структуры и свойств наноматериалов можно отнести три: ограничение действия законов классической физики из-за небольшого количества атомов и малого размера, значительный рост удельной поверхностной энергии и экстремальные условия синтеза.

Обобщая многочисленные расчетные и экспериментальные данные, можно отметить, что отличие свойств наноматериалов по сравнению со свойствами аналогичных крупнокристаллических проявляется следующим образом:

-механические: увеличение твердости (из-за отсутствия протяженных дефектов) в сочетании с высокой пластичностью (благодаря развитой сетке границ и зернограничному проскальзыванию), увеличение предела текучести, уменьшение порога хладноломкости. Очень высокая твердость имеется наноструктурированном состоянии β -титана, около 3000Мпа;

-электрические: размерная зависимость работы выхода электронов и электросопротивления, полупроводниковый характер проводимости очень малых наночастиц металлов (из-за ограниченного числа свободных электронов);

-магнитные: суперпарамагнетизм (при размере частиц менее 1 домена), максимальная коэрцитивная сила в монодоменных частицах, гигантское магнетосопротивление;

-термические: уменьшение температур Дебая, плавления, фазовых переходов, спекания на 15-20 % (из-за изменения спектра фононов) при увеличении коэффициента термического расширения и теплоемкости. Температура плавления наноструктурированного состояния β -титана уменьшается до 500°C;

-**оптические**: изменение электромагнитных спектров излучения и поглощения, увеличенное рассеяние, способность реализации «черного тела»;

-**химические**: увеличение растворимости (до 20-25 %) в кислотах, понижение температур химических реакций, отсутствие «индукционного» периода [4].

Наиболее характерными особенностями наноматериалов являются:

-появление нетрадиционных видов симметрии структуры и особых видов сопряжения границ раздела фаз;

-ведущая роль процессов самоорганизации в структурообразовании, доминирующих над процессами искусственного упорядочения;

-высокая полевая активность и каталитическая избирательность поверхности наночастиц и их ансамблей;

-особый характер протекания процессов передачи энергии, заряда и конформационных изменений, отличающихся низким энергопотреблением, высокой скоростью и наличием синергетических признаков [5].

Методы получения наноматериалов (β -титан)

В технологиях получения наноматериалов используют 2 подхода. Эти подходы принято называть технологиями «сверху-вниз» и «снизу-вверх».

Нанотехнологии типа «снизу-вверх» – технология получения наноструктурированных материалов, в которой реализуется образование наночастиц из атомов и молекул, т.е. достигается укрупнение исходных элементов структуры до частиц нанометрового размера.

Нанотехнологии типа «сверху-вниз» – технология получения наноструктурированных материалов, в которой нанометровый размер частиц достигается с помощью измельчения крупных частиц, порошков или зерен твердого тела.

В отдельных случаях используют спектры комбинационного рассеяния (рамановская спектроскопия) (например, для определения диаметра графитовых нанотрубок), мессбауэровскую спектроскопию (для измерения, например, размера кластеров железа по интенсивности линий спектра) и др.

Эти два метода можно использовать для получения наноструктурного β -Ti, но наблюдаются различные физические свойства. [6]

Применение наноструктурного β -Ti

β -титан применяется в авиационной промышленности, судостроении, ракетной технике

и различных отраслях машиностроения. Применение в авиации β -титана определяется их малым удельным весом, высокой прочностью.

Применение β -титана в судостроении объясняется высокой коррозионной устойчивостью титановых сплавов в морской воде; эта отрасль промышленности, возможно, будет основным потребителем титановых сплавов. Кроме того, β -титан находит применение в специальном и особенно химическом машиностроении, где высокая коррозионная устойчивость β -титана особенно ценна.

Список литературы:

1. Наноструктурный технически чистый титан для биомедицины и способ получения прутка из него [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.findpatent.ru/patent/238/2383654.html>
2. Иванов М.Б., Колобов Ю.Р., Голосов Е.В., Кузьменко И.Н., Вейнов В.П., Нечаенко Д.А., Кунгурцев Е.С.. Механические свойства наноструктурного титана серийного производства / Российские нанотехнологии. 2011. –114 с.
3. Титановые деформируемые сплавы [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://libmetal.ru/titan/titan%203.htm>
4. Физические свойства наноструктур и области их применения [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.rusnor.org/pubs/articles/10953.htm>
5. Анищик В.М., Борисенко В.Е., Жданок С.А., Толочко Н.К., Федосюк В.М. Наноматериалы и Нанотехнологии / Пер. с англ., под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. – М.: «Наука и образование». 2008. – 375 с.
6. Машков Ю. К., Малий О. В. Материалы и методы нанотехнологии / Нанотехнологии. 2012. — 431 с.