

Министерство образования и науки Республики Казахстан
Карагандинский государственный индустриальный университет



**Г.И.Султамурат, С.Н.Лежнев,
Б.М.Боранбаева, В.А.Андреященко**

ТОНКАЯ СТРУКТУРА РЕАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Учебное пособие

Темиртау
2013

УДК 669.0(0758)
ББК 34.316я73
Т 57

Рекомендовано к изданию учебно-методической секцией
по специальности «Металлургия» (Протокол № 1 от 07.02.2013 г.)

Т 57 **Тонкая структура реальных материалов:** Учеб. пособие / Г.И.Султамурат, С.Н.Лежнев, Б.М.Боранбаева, В.А.Андрейченко. — Темиртау, 2013. — 90 с.

ISBN 978-601-7369-13-2

Учебное пособие освещает вопросы реальной структуры кристаллических материалов в 7 основных разделах. Глубоко и строго на доступном уровне, без сложных математических выкладок, изложена современная теория дефектов кристаллического строения.

Пособие представляет практический интерес, так как: во-первых, отсутствие полноценных учебников затрудняет процесс обучения многочисленных дисциплин, которые являются сложными для восприятия и усвоения; во-вторых, эти знания необходимы при использовании современных физических методов и инструментов исследователей (электронная микроскопия и др.); в-третьих, понимание вопросов тонкой структуры материалов играет немаловажную роль и при создании материалов по современным технологиям, в частности нанотехнологии.

Предназначено для бакалавров и магистрантов металлургических специальностей.

УДК 669.0(075.8)
ББК 34.316я73

ISBN 978-601-7369-13-2

© **Министерство образования и науки РК, 2013**
© **Карагандинский государственный
индустриальный университет, 2013**
© **Султамурат Г.И., Лежнев С.Н.,
Боранбаева Б.М., Андрейченко В.А., 2013**

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	4
Глава 1. Классификация дефектов кристаллического строения материалов	5
1.1. Равновесные и неравновесные дефекты решетки	5
1.2. Геометрическая классификация дефектов решетки	6
Глава 2. Точечные дефекты кристаллического строения	7
2.1. Классификация точечных дефектов.....	7
2.2. Термодинамика точечных дефектов.....	9
2.3. Концентрация точечных дефектов.....	10
2.4. Комплексы точечных дефектов.....	11
2.5. Возникновение точечных дефектов	14
2.6. Методы экспериментального изучения точечных дефектов.....	15
Глава 3. Линейные дефекты кристаллического строения.....	21
3.1. Понятие о дислокациях.....	21
3.2. Системы скольжения в кристаллах чистых металлов.....	25
3.3. Скольжение краевой дислокации.....	28
3.4. Скольжение винтовой дислокации.....	30
3.5. Перемещение дислокаций в новые плоскости скольжения	31
3.6. Качественные и количественные характеристики дислокаций	32
3.7. Смешанные и криволинейные дислокации.....	35
3.8. Призматические дислокации	35
Глава 4. Упругие свойства дислокаций в сплошной среде	38
4.1. Энергия дислокаций.....	38
4.2. Линейное натяжение	39
4.3. Силы, действующие на дислокацию.....	39
4.4. Упругое взаимодействие краевых и винтовых дислокаций.....	40
Глава 5. Образование и размножение дислокаций.....	43
5.1. Плотность дислокаций в равновесном состоянии	43
5.2. Механизм размножения дислокаций. Источник Франка-Рида.....	44
Глава 6. Дислокации в типичных металлических структурах.....	47
6.1. Полные и частичные дислокации.....	47
6.2. Дислокационные реакции и энергетический критерий для определения направления реакций.....	48
6.3. Характерные полные и частичные дислокации в ГЦК решетке	49
6.4. Характерные полные и частичные дислокации в металлах с ГП решеткой.....	57
6.5. Характерные полные и частичные дислокации в кристаллах с ОЦК решеткой	63
Глава 7. Поверхностные дефекты кристаллического строения.....	68
7.1. Кристаллографические параметры границ зерен.....	68
7.2. Структура совершенных границ	70
7.3. Дислокационные и дисклинационные модели строения границ зерен.....	71
7.4. Модели решеток совпадающих узлов.....	74
7.5. Дефекты структуры границ зерна	78
7.6. Методы изучения линейных и поверхностных дефектов.....	81
Заключение.....	87
Список использованной литературы	89

Введение

Прогресс человечества был и остается неразрывно связанным с его умением производить и обрабатывать жизненно важные материалы. Развитие различных отраслей техники требуют материалы с самыми разнообразными физико-химическими и механическими свойствами. В этой связи, металлы и многочисленные сплавы на их основе, играют определяющую роль.

К металлам и сплавам предъявляют особые требования: в условиях их эксплуатации они должны обладать определенными свойствами.

В одних случаях они должны быть износостойкими, например, при работе двух трущихся друг об друга деталей машин, в других — коррозионностойкими для всевозможных емкостей, работающих в агрессивных средах, для изготовления котлов и паропроводов нужны жаростойкие сплавы, способные долговременно работать в условиях высокого давления и температур и т.д.

Очевидно, что многообразие свойств металлов и сплавов обусловлено их природой, внутренним строением или структурой. Атомы металлов при затвердевании образуют кристаллы (фазы), совокупность кристаллов (фаз) образует микроструктуру сплавов. Форма, взаимное расположение и размер кристаллитов оказывают существенное влияние на механические свойства сплавов.

Представление об идеальном взаимном расположении материальных частиц в пространстве кристалла не всегда состоятельно. Тонкая структура реальных материалов имеет ряд нарушений или дефектов строения. Эти дефекты оказывают решающее влияние не только на физические свойства, такие как, электропроводность, электросопротивление и др., но и на механические свойства — прочность, пластичность металлов и сплавов.

Таким образом, каждый из уровней структуры, начиная со строения атомов, кристаллического строения отдельных фаз, микроструктуры, дефектов микроструктуры, макрострук-

туры, оказывает влияние на свойства сплавов. Любые изменения на любом уровне структуры отражаются на свойствах сплава и это дает, возможность создавать сплавы с самыми разнообразными свойствами.

Деятельность специалиста, связанного с выбором материала для различных нужд техники сводится к разработке: либо технологии его создания или получения, либо к технологии различного на него воздействия для создания определенной структуры, обеспечивающей необходимый комплекс свойств. И здесь определяющую роль играют понимание зависимостей свойств от тонкой структуры реальных материалов: их атомно-кристаллической решетки со всеми присущими ей дефектами строения, умения воздействовать на структуру с целью ее изменения в соответствии с поставленной задачей.

Изучение тонкой структуры реальных кристаллических материалов предоставляет возможность использовать приемы управления составом и структурой, тем самым дает возможность совершенствовать процессы их получения с заданными необходимыми свойствам.

Изучение тонкой структуры реальных кристаллических материалов необходимо не только для понимания и управления такими процессами, как старение, наклеп, упрочнение, но и современных инновационных технологий, например, нанотехнологий. Именно тонкая реальная структура материалов оказывают непосредственное влияние на окончательное качество изделий.

Знание механизмов возникновения и размножения дефектов строения позволяет управлять и прогнозировать многие механические и физические свойства кристаллических материалов.

Таким образом, изучение основных понятий тонкой структуры и знание законов теории дефектов кристаллических тел необходимы для понимания строения реальных материалов и позволяют управлять и прогнозировать их свойства.

Глава 1. КЛАССИФИКАЦИЯ ДЕФЕКТОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ

1.1 Равновесные и неравновесные дефекты решетки

Регулярное строго периодическое строение кристалла является идеализированной схемой.

Даже по условиям идеального термодинамического равновесия в кристаллах существуют различного рода отклонения от этой схемы, называемыми дефектами кристаллического строения*.

В тонкой структуре кристаллического строения реальных материалов, кроме равновесных дефектов решетки, существуют неравновесные дефекты, обусловленные неидеальными условиями кристаллизации и внешних воздействий на кристаллиты.

За счет только теплового движения эти дефекты не могут полностью покинуть кристалл даже за весьма длительное время и оказываются как бы «замороженными».

Зачастую неравновесные дефекты решетки стабилизируются электрическими, магнитными или упругими полями, возникающими при росте кристалла, фазовых превращениях или внешних воздействиях.

Плотность неравновесных дефектов решетки можно существенно снизить путем совершенствования методов получения и обработки кристаллических веществ.

Таким образом, тонкая структура кристаллических материалов не обладают идеальной кристаллической решеткой.

Даже монокристаллы, выращенные по специальной технологии со структурой почти идеальной кристаллической решетки, достигают всего лишь размеров 1–2 см в длину при диаметре от нескольких до 10–20 микрон**.

В технике такие нитевидные кристаллы называют «усаами». Они имеют чрезвычайно высокую прочность. Их прочность приближается к пределу теоретически рассчитанной прочности (Френкель, 1926 г.) — силе связи между атомами в идеальной кристаллической решетке.

Так, теоретическая прочность железа на одновременный сдвиг равна 13500 МПа, в реальных условиях при механических испытаниях пластическая деформация технического чистого железа начинается при напряжении ~15 МПа, то есть при величине в ~103 раз меньше, а для чистой меди, например, эти характеристики составляют 7400 и 0,50 МПа соответственно.

Если бы кристаллические материалы имели совершенную кристаллическую структуру, они не обладали бы пластичностью, не поддавались бы механической обработке и при нагрузках, соответствующих пределу прочности, атомы материалов должны были бы просто «разлетаться».

Значительные расхождения между теоретическими расчетами и наблюдаемыми значениями свойств объяснялись (Орован, Поляни, Тэйлор, 1934 г.) представлениями о неидеальности кристаллической решетки и гораздо позднее было экспериментально подтверждено (1947 г. — существование дислокаций) с развитием электронной микроскопии (1956 г. — существование дислокационной структуры).

Эти значительные расхождения и наблюдаемые на опыте значения интенсивностей

* Равновесные дефекты кристаллических решеток не могут трактоваться как дефекты кристалла при рассмотрении его как объекта (дефект решетки).

**1 микрон = 10^{-4} см = 10^{-6} м

отраженных рентгеновских лучей подтвердила гипотезу о блочности (мозаичности) структуры кристалла.

Помимо дислокаций, в кристаллических решетках имеются другие виды дефектов: вакансии. Понятие о вакансиях было введено

для объяснения механизма диффузии в кристаллической решетке вещества.

Наличие равновесных и неравновесных дефектов решетки обуславливают все так называемые структурно чувствительные свойства кристаллических материалов.

1.2 Геометрическая классификация дефектов решетки

Дефект кристаллической структуры классифицируют по числу отклонений от идеального строения кристалла в котором значительно (N) превышают межатомные расстояния.

Различают дефект: нульмерный ($N=0$, точечный), одномерный ($N=1$, линейный), двумерный ($N=2$, поверхностный) и трехмерный ($N=3$, объемный)*.

Кристалл откликается на внешние воздействия изменением своей реальной структуры (рождением, движением, перестройкой и аннигиляцией дефектов решетки) и, как следствие, — своих физических и механических свойств.

Несовершенства кристаллической структуры играют очень важную роль, определяя многие свойства металлов и сплавов.

Тепловое расширение кристаллов вызывается не только ангармонизмом** колебаний атомов, но и возрастанием плотности дефектов решетки.

Электрический ток в ионных кристаллах обусловлен в основном миграцией заряженных дефектов решетки, важнейшие свойства полупроводников определяются содержанием электрически активных дефектов решетки.

Пластическая деформация кристаллов (по сдвиговому механизму) сводится к движению различных дефектов решетки и т.д.

К таким дефектам относят вакансии в решетке, атомы в межузлиях, чужеродные (примесные) атомы в позициях замещения и внедрения, а также различные их комбинации (рис. 1.1).

1. Точечный дефект кристаллической решетки имеет искажение в трех направлениях

пространства, но они соизмеримые с межатомными расстояниями, т.е. они нульмерные.

2. Линейные дефекты имеют искажения в двух направлениях пространства решетки, соизмеримые с межатомными расстояниями и несоизмеримые (то есть макроскопические размеры) в одном направлении (одномерные). К ним относятся цепочки точечных дефектов (вакансий и внедренных атомов), а также дислокации — специфические дефекты, нарушающие правильное чередование атомных плоскостей (рис. 1.2).

3. Поверхностные или двумерные дефекты имеют макроскопические размеры в двух направлениях пространства (рис. 1.3). К ним относятся поверхность кристалла, дефекты упаковки (неправильно уложенные слои атомов, границы зерен (фаз), субзерен (блоков), двойников, доменов и т.д.).

Точечные, линейные, поверхностные дефекты являются микроскопическими — минимум в одном измерении их протяженность измеряется атомными диаметрами. В отличие от них объемные дефекты в атомном масштабе макроскопические. Они имеют во всех трех направлениях пространства большие размеры, несоизмеримые с атомным диаметром. К объемным дефектам относятся поры, включения, выделения и другие макроскопические образования, как трещины, царапины и т.д.

Говоря о несовершенстве кристаллической структуры в дальнейшем, мы будем иметь в виду микроскопические дефекты.

* Объемный дефект не является дефектом тонкой структуры, это не дефект кристаллической решетки.

**Ангармонизм — отличие колебаний от гармонических колебаний.

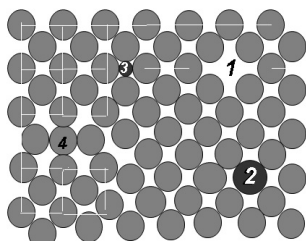


Рис. 1.1. Точечные дефекты кристаллического строения на двумерной модели. 1 — вакансия, 2 — примесный атом замещения, 3 — примесный атом внедрения, 4 — собственный межузельный атом

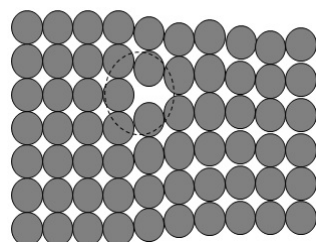


Рис. 1.2. Линейный дефект (выделена пунктирной линией) — дислокация, расположенная перпендикулярно плоскости двумерной модели кристаллической решетки атома

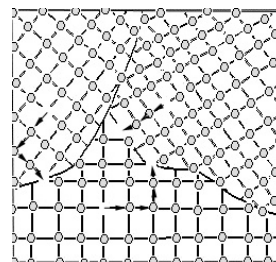


Рис. 1.3. Поверхностные дефекты — граница зерен в двумерной модели кристаллической решетки. Механизм образования вакансий по Шоттки. Стрелки показывают возможные позиции перемещения атомов

Глава 2. ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ

2.1 Классификация точечных дефектов

Точечные дефекты, характерные для большинства кристаллов, могут быть собственными (структурными) и примесными (рис. 1.1). К собственным дефектам относятся вакансии и межузельные атомы.

Вакансией называют свободный узел решетки, который в идеальной решетке занят атомом. Например, в идеальной решетке алмаза (рис. 2.1) из восьми тетраэдрических межузлий атомами — заняты только

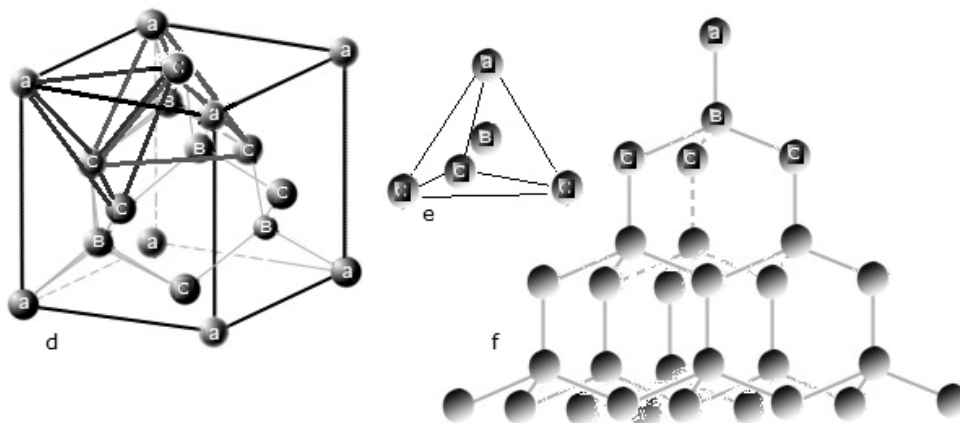


Рис. 2.1 Структурный тип алмаза. d) Показаны 2 из 8 тетраэдрических межузлия. Серыми кружочками (B) выделены атомы углерода, расположенные в позиции межузлий. Атомы углерода, выделенные (a), расположены по вершинам кубической ячейки, а атомы углерода типа (c), располагаются в центре, каждой грани ячейки; e) схема образования тетраэдрического межузлия с занятого атомом типа (b); f) схема межатомных связей углерода в кристаллической решетке алмаза

четыре. Остальные 4 междоузлия — не заняты атомами, но не являются вакансиями.

В чистом виде вакансии могут возникать в результате теплового возбуждения, смещающего атомы из их мест в идеальной решетке.

Каждой данной температуре отвечает некоторая средняя энергия колебаний атомов. Однако энергия отдельного атома из-за флуктуаций* может существенно отличаться от средней величины. Такие атомы в кристаллической решетке могут преодолеть потенциальный барьер, покинуть равновесную позицию, уходя из своего нормального положения на поверхность зерен или поглотиться дислокацией (рис. 1.3).

Место ушедшего на поверхность атома может занять атом из более глубокого слоя. Этот процесс может продолжаться, пока вакансия не поглотится дислокацией или выйдет на поверхность.

Такой механизм образования вакансий получили название механизма образования по Шоттки, а образовавшиеся дефекты — дефектами Шоттки.

Образование вакансий сопровождается упругой релаксацией локальных напряжений вокруг вакансии, которая проявляется в смещении атомов, окружающих вакансию в направлении ее центра (центра поры).

При этом возникают локальные искажения решетки и уменьшение эффективного радиуса поры. Расчеты показывают, что в алмаз подобных решетках эффективный радиус вакансии составляет примерно 0,8 ковалентного радиуса атома, в решетках с металлической связью — он еще меньше и составляет примерно 0,5–0,6 радиуса атома.

Поэтому вакансии приводят в большинстве случаев к уменьшению среднего периода решетки так же, как примеси замещения, если их атомный радиус меньше, чем у собственных атомов решетки.

Межузельным атомом называют атом (ион), внедренный в межатомной поре (рис. 1.1). В результате перехода атома из сво-

его нормального положения в междоузлие образуется вакансия, то есть по такому механизму образуется сразу два дефекта — вакансия и межузельный атом.

Вокруг возникших при этом точечных дефектов образуются искажения, вследствие смещения их ближайших соседей. Искажения эти по мере удаления от дефекта ослабевают.

Образовавшаяся вакансия и межузельный атом известны в теории как *дефект или пара Френкеля*. Вакансия и межузельный атом являются дефектами — антиподами: аннигиляция вакансий и межузельного атома восстанавливает правильность кристаллической решетки. В чистом виде межузельный атом образуется, если в междоузлие переходит атом из поверхностного слоя. Для возникновения межузельного атома существенное значение имеет плотность упаковки.

В металлах с плотной упаковкой в равновесном состоянии образование собственных межузельных атомов практически исключено, в них обычно встречаются только примесные атомы с малым радиусом в пустотах решетки.

Посторонние воздействия, например облучение, может существенно увеличить количество межузельных атомов и вакансий.

Межузельный атом вызывает локальные упругие искажения за счет симметричного смещения окружающих атомов в направлении от центра межузельного атома, то есть напряжения противоположные по знаку, вызываемому вакансией.

В результате наличие межузельных атомов приводит к увеличению среднего периода решетки. В веществах с алмаз подобной решеткой эффект от увеличения периода решетки собственными межузельными атомами больше, чем эффект уменьшения периода решетки от вакансий.

Поэтому эффект образования дефекта Френкеля сопровождается увеличением периода решетки. Это важно учитывать при изучении природы точечных дефектов.

* Отклонение от среднего значения

К *примесным дефектам* относятся атомы примеси, растворенным по способу замещения или внедрения. Атомы примесей вносят искажения в решетку матрицы потому, что их размеры всегда отличаются от размеров атомов матрицы (при растворении по принципу замещения) или размера междоузлия, в которое они внедряются (при растворении по типу внедрения).

Поэтому средний период решетки матрицы в случае растворов внедрения всегда увеличивается с увеличением концентрации примесей.

В случае растворов замещения он увеличивается или уменьшается в зависимости от соотношения атомных радиусов матрицы и примеси.

Вакансии и примесные атомы замещения могут находиться в любых узлах кристаллической решетки.

Межузельные и примесные атомы внедрения размещаются в окта- и тетраэдрических пустотах кристаллической решетки.

В таблице 2.1 приведены числа октаэдрических и тетраэдрических пустот, приходящихся на 1 атом, их размерные и другие характеристики некоторых присущих металлам типов кристаллических решеток.

Размеры самых крупных пустот не превышают 0,41 радиуса основного металла.

Какая из пустот является наиболее благоприятной для размещения в ней примесного атома, определяется его размерами, количеством соседних атомов, которые при этом должны претерпевать смещение из равновесного положения.

Если это тетраэдрическая пустота, внедренный атом должен «раздвигать» 4 атома, то вокруг октаэдрической — смещать 2 атома вдоль направления с малой плотностью упаковки атомов. В кубической решетке это ребро ячейки.

Поэтому примесные атомы внедрения в ОЦК решетке могут размещаться в меньших по размеру октаэдрических пустотах.

Так размещаются атомы углерода в ОЦК решетке феррита.

Таблица 2.1

Характеристики типичных кристаллических решеток металлов

Тип решетки	Плотность упаковки, %	Число атомов ячейки	Координационное число	Число пустот на 1 атом		Размеры пустот	
				октаэдрических	тетраэдрических	октаэдрических	тетраэдрических
ГЦК	74,05	4	12	1	2	0,41R	0,22 R
ОЦК	68,0	2	8	3	6	0,15R	0,291R

2.2 Термодинамика точечных дефектов

Точечные дефекты повышают энергию кристалла, так как образование каждого дефекта связано с затратами энергии. Точечный расчет этой энергии затруднителен и должен учитывать все явления, возникающие при образовании дефекта.

Энергия образования вакансии определяется работой по переносу атома из узла кри-

сталлической решетки на поверхность кристалла и оказывается порядка 1–2 эВ.

Энергия образования межузельного атома определяется работой по переносу атома с поверхности кристалла в междоузлие кристалла и достигает 3–4 эВ из-за большого вклада энергии локальных искажений, возникающих при внедрении атома в междоузлие.

Несмотря на увеличение внутренней энергии при образовании вакансий и межузельных атомов, кристаллы в равновесном состоянии содержат определенное количество собственных точечных дефектов. Это объясняется тем, что образование точечных дефектов намного повышает энтропию кристалла.

Как известно из курса физической химии, энтропия системы есть функция вероятности ее состояния:

$$S = k \ln(W), \quad (2.1)$$

где k — константа Больцмана; W — число микросостояний или термодинамическая вероятность данного макросостояния.

Заменив всего лишь один атом на вакансию, мы имеем число возможных структурных конфигураций от 1 до N , так как вакансия может находиться в любом из N узлов решетки.

Из кристалла, содержащего N одинаковых атомов, можно удалить « n » атомов различными способами:

$$C_N^n = \frac{N!}{n!(N-n)!}. \quad (2.2)$$

По формуле Больцмана соответствующее приращение конфигурационной энтропии равно:

$$S_k = k \ln \frac{N!}{n!(N-n)!}. \quad (2.3)$$

Так как вблизи точечных дефектов атомы колеблются с измененными частотами и амплитудами, что повышает колебательную энтропию S_0 на некоторую величину, пропорционально числу дефектов nS_0 . Если энергия образования одного дефекта равна E_0 , то образование « n » дефектов увеличивает внутреннюю энергию на

$$U = nE_0.$$

При этом общее увеличение энтропии при температуре T составит величину:

$$S = S_k + nS_0. \quad (2.4)$$

Равновесное состояние характеризуется минимумом свободной энергии кристалла:

$$F = nE_0 - TS. \quad (2.5)$$

Рост энтропийного члена TS перекрывает увеличение внутренней энергии системы U , и свободная энергия оказывается пониженной при определенной концентрации собственных дефектов, характерной для конкретной температуры.

То есть, кристаллы в условиях термодинамического равновесия содержат определенное количество собственных точечных дефектов.

2.3 Концентрация точечных дефектов

Используя для оценки факториалов больших чисел в выражении (2.3) формулу Стирлинга

$$\ln(a!) \approx a \ln(a)$$

получим уравнение свободной энергии в виде:

$$S_k = k [N \ln(N) - (N-n) \ln(N-n) - n \ln(n)]. \quad (2.6)$$

Для расчета равновесной концентрации вакансий необходимо минимизировать свободную энергию (2.5) относительно числа вакансий, то есть приравнять к нулю ее первую производную:

$$\frac{F}{n} = E_0 - kT \ln \frac{N-n}{n} - TS_0 = 0. \quad (2.7)$$

Тогда

$$\frac{n}{N-n} = \exp \frac{E_0}{kT} \exp \frac{S_0}{k}. \quad (2.8)$$

Так как число узлов кристаллической решетки значительно превышает количество вакансий ($N \gg n$), то можно считать:

$$\frac{n}{N} = C_v = \exp \frac{E_0}{kT} \exp \frac{S_0}{k}, \quad (2.9)$$

где C_v — равновесная концентрация (атомная доля) вакансий.

В металлах с ГЦК решеткой отношение S_0 / k близко к единице. Поэтому многие оценочные расчеты равновесной концентрации вакансий можно вести по упрощенной формуле, пренебрегая энтропией:

$$C_v \approx \exp \frac{E_0}{kT} . \quad (2.10)$$

Экспоненциальная зависимость (2.10) свидетельствует о том, что концентрация вакансий сильно зависит от температуры.

Например, по экспериментальным данным энергия образования вакансий меди имеет значение 1,1 эВ, тогда расчетные величины концентраций вакансий, определенные

Металл	Au	Ag	Cu	Al	Pt	-Fe	W	Mo
E_0 , эВ	0,95	1,13	1,28	0,67	1,51	1,14	~3,6	~3,2

по формуле (2.10), составят при разных температурах значения:

T , К	300	700	1100	1350
C_v	10^{-19}	10^{-8}	10^{-5}	10^{-4}

Формула (2.10) справедлива для расчета концентраций любых собственных дефектов решетки при известных значениях энергии образования соответствующих дефектов разных металлов, то есть применима и для расчета концентрации межузельных атомов.

Ниже приведены экспериментальные значения энергии образования вакансий (E_0) разных металлов.

2.4 Комплексы точечных дефектов

Комплексы точечных дефектов представляют собой группы соседствующих в решетке точечных несовершенств одного или разных типов, связанных между собой силами взаимодействия. Они могут быть устойчивы, только если свободная энергия системы и ее энтальпия при этом понижаются.

Простейшим и часто встречающимся комплексом является дивакансия. Образование и устойчивость такого комплекса обеспечивается уменьшением суммарной поверхности дефекта и соответствующим выигрышем в поверхностной энергии.

Энергия связи у дивакансий в разных металлах колеблется от 0,06 до 0,5 эВ. Отсюда энергия образования дивакансий равна ($2E_0 - E_{св}$). Зная значения этих энергий, можно рассчитать концентрацию дивакансий.

Дивакансия легко мигрирует путем поочередного перехода в нее одного из соседних атомов (рис. 2.3). Например, атом 3 переходит в положение 1, и дивакансия окажется в положении 2–3; в положение 2 может перейти атом 4, тогда дивакансия сместится в положение 3–4 и т.д.

Считается, что дивакансии вносят заметный вклад в диффузионные процессы из-за своей высокой подвижности.

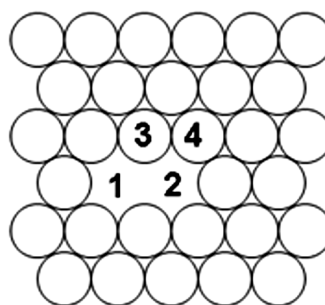


Рис. 2.3. Дивакансия в слое плотнейшей упаковки

Еще более подвижны тривакансии. Так, например, энергия активации миграции моно-, ди-, тривакансий в золоте составляет 0,83; 0,70; 0,53 эВ соответственно.

Образование комплекса из 4 вакансий энергетически выгодно в ГЦК решетке по вершинам тетраэдра, в центре которого име-

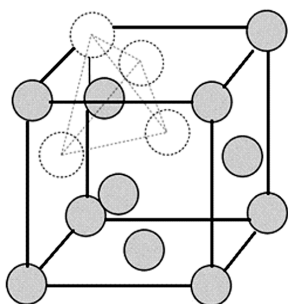


Рис. 2.4. Тетраэдрический комплекс вакансий

ется атом, попавший туда при смещении его из узла решетки (рис. 2.4).

Тетраэдрический комплекс как бы включает в свою структуру тривакансии (как грани тетраэдра), но, тем не менее, теряет подвижность.

Миграция такого комплекса возможна при смещении атома из центра тетраэдра в свободный узел и одновременном смещении атома из другого узла решетки в центр вновь образующегося тетраэдра.

Поэтому тетраэдрические комплексы как бы закрепляются и перестают быть подвижными.

Говоря о комплексах межузельных атомов, следует оговорить, что это название само по себе не очень удачно.

Межузельные атомы далеко не всегда располагаются в характерных для решетки данного металла межузлиях.

В ГЦК металлах, например, межузельные атомы не внедряются ни в $[[1/4 \ 1/4 \ 1/4]]$ — тетраэдрические, ни в $[[1/2 \ 1/2 \ 1/2]]$ — октаэдрические межузлия, а вытесняют из узла какой-нибудь атом и образуют с ним пару (гантель), ориентированную вдоль одного из направлений d .

Расчеты показывают, энергетически более выгодна такая конфигурация двух межузельных атомов, называемая расщеплением по d или гантелью d (рис. 2.5, a).

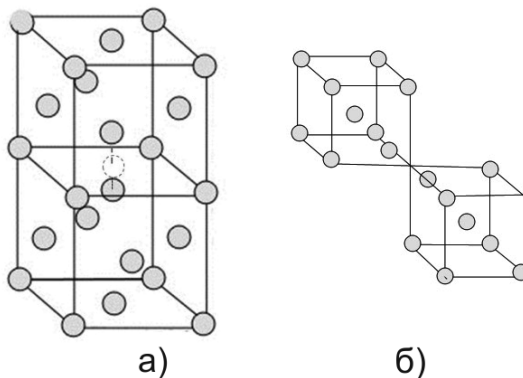


Рис. 2.5. Гантель d в ГЦК (a), гантель n — ОЦК (b) решетках

При этом избыточным является один атом. Центр гантели оказывается в узле решетки. В ГЦК решетке устойчивой является пара соседних параллельных гантелей d .

Энергия связи в такой паре около 1 эВ. Энергия активации миграции этих пар такая же низкая, как у одиночных гантелей.

В ОЦК решетке (рис. 2.5, b) наиболее устойчива по сравнению с одиночным межузельным атомом гантель типа n .

Атом в вершине элементарной ячейки как бы «расщепляется» на два атома вдоль направления n .

Возможно образование *плоских кластеров* из большого числа параллельных гантелей.

Такие кластеры представляют собой как бы плоские включения из межузельных атомов. Существование гантелей как основных конфигураций межузельных атомов и кристаллографическая ориентация их осей экспериментально подтверждены рентгеноструктурным анализом.

Избыточный атом может создать также уплотненную цепочку атомов «краудион» (рис. 2.6). В краудионе цепочка из $n+1$ атомов располагается на отрезке ab . В идеальной кристаллической решетке на таком отрезке находится n атомов. «Избыточный» атом как бы размазывается на этом отрезке.

Межузельные атомы могут образовывать устойчивые комплексы с атомами растворен-

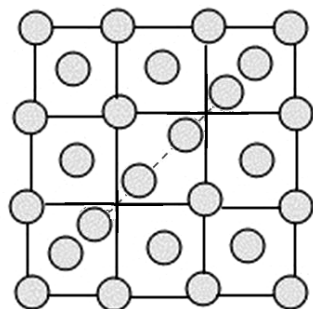


Рис. 2.6. Краудион в ГЦК решетке

ных примесей «*межузельный атом – примесный атом*». Комплекс «*межузельный атом – примесный атом*» образуется в виде смешанной гантельной конфигурации: на одном конце гантели находится атом основного металла, а на другом — атом примеси замещения.

Вакансии также могут образовывать с атомами растворенных примесей комплексы типа «*вакансия – примесный атом*». Упругое притяжение атома растворенного элемента к вакансии или гантели обусловлено частичной взаимной компенсацией упругих деформаций разного знака вокруг точечных дефектов разного вида. Так, например, взаимное упругое притяжение вакансии и примесного атома — это результат того, что пустота, оказавшись вблизи примесного атома, частично компенсирует поле упругих деформаций вокруг него.

Энергию связи «*вакансия – примесный атом*» расчетными способами оценить очень сложно. Определенные косвенными методами значения энергии связи вакансий с раз-

личными атомами лежат в интервале 0,01–0,03 эВ.

Компоненты, малорастворимые в данном металле в твердом состоянии, характеризуются более высокими значениями связи с вакансиями по сравнению с элементами, образующими широкие области твердых растворов. Это вытекает из того, что атомы малорастворимых элементов вносят сильные искажения в решетку растворителя. Искажения релаксируют, когда рядом с таким атомом оказывается вакансия, обуславливающая повышенную энергию связи комплекса «*вакансия – примесный атом*».

Равновесная концентрация комплексов «*примесный атом – вакансия*» в случае разбавленных растворов замещения:

$$C_k = AzC_n \exp \frac{E_0 - E_{св}}{kT}, \quad (2.11)$$

где A — энтропийный фактор; z — координационное число; C_n — концентрация примеси (в атомных долях); E_0 — энергия образования моновакансии; $E_{св}$ — энергия связи вакансии с примесным атомом.

Чем выше температура и больше энергия связи $E_{св}$, тем выше равновесная концентрация комплексов «*вакансия – примесный атом*». Комплекс «*вакансия – примесный атом*» значительно более подвижен, чем просто точечный дефект «*примесный атом*».

Примесный атом мигрирует в кристалле, перескакивая в вакантный узел, который может оказаться рядом. Комплекс же может мигрировать на сколь угодно большое расстояние при участии в его движении атомов основного металла.

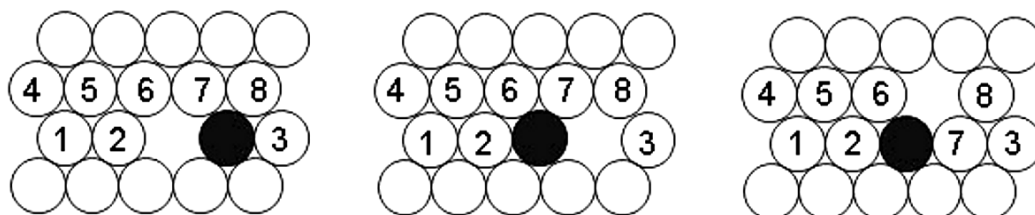


Рис. 2.7. Миграция комплекса «вакансия-примесный атом» в слое плотнейшей упаковки. Нумерацией показаны атомы основного металла, обменивающихся с вакансией местами

Образование комплексов «*атом растворенного металла – вакансия*» играет двоякую роль. Во-первых, обеспечивается быстрая диффузия атомов растворенного элемента. Во-вторых, уменьшается доля свободных вакансий и, соответственно, их участие в других диффузионных процессах. Например, в стареющем сплаве Al–Cu атомы основного легирующего элемента (меди) обладают сравни-

тельно низкой энергией связи с вакансиями, а атомы добавок Cd, In и др. — более высокой.

Эти добавки, служа ловушками для вакансий в закаленном сплаве, уменьшают их участие в транспортировке атомов меди к образующимся в твердом растворе зонам Гинье-Престона, то есть замедляют процесс старения.

2.5 Возникновение точечных дефектов

Источниками образования точечных дефектов служат явления и процессы:

- нагрева на высокие температуры (образующиеся при этом точечные дефекты называют тепловыми или термическими);
- радиационное воздействие;
- пластическая деформация (пересечение движущихся дислокаций) и процессы отжига деформированных материалов;
- отклонения состава соединений от стехиометрического;
- встречная диффузия с разными парциальными коэффициентами диффузии (так называемый *эффект Киркендала*).

Отметим основные возможности получения вакансий, с концентрацией на много порядков превышающих равновесную, и может быть достигнута на практике.

2.5.1 Возникновение точечных дефектов в результате закалки. Равновесная концентрация точечных дефектов есть функция температуры и достигает максимальных значений [$\sim 0,01\%$ (ат.)] при температурах, близких к температуре плавления. Однако на практике высокие концентрации, значительно превышающие равновесную (на много порядков) достижимы и для низких температур.

Избыточная концентрация вакансий возникает в результате быстрого охлаждения с температур, близких к температурам плавления, так как время, за которое вакансия может пройти до мест стоков (границ зерен, дислокаций, границ фаз, внешней поверхности), значительно превышает скорость охлаждения.

Таким образом в образце будет зафиксирована неравновесная избыточная концентрация вакансий.

2.5.2 Возникновение точечных дефектов при облучении. Неравновесные точечные дефекты могут возникнуть за счет облучения быстрыми нейтральными частицами (нейтронами), заряженными тяжелыми и легкими частицами (протонами, электронами и др.), рентгеновскими лучами.

При взаимодействии быстрых частиц с атомами кристалла они теряют часть кинетической энергии, которая зависит от энергии частицы, массы взаимодействующих частиц и условия взаимодействия. При достаточной энергии частицы она может выбить атом из узла. При этом образуется дефект Френкеля. Так как масса частицы значительно меньше массы атома, облучение тяжелыми частицами более эффективно поражает решетку дефектами. Электроны менее эффективны.

Предельная энергия излучения, при которой могут образовываться устойчивые дефекты, называется *пороговой энергией* (E_0). Для электронов $E_0 \sim 1-15$ МэВ. На 1 бомбардирующий электрон с энергией ~ 1 МэВ возникает 1 френкелевская пара.

Тяжелые частицы смещают значительно больше атомов. 1 нейтрон с энергией в 1 МэВ в 1 см^3 алюминия смещает в среднем несколько тысяч атомов; заряженные тяжелые частицы — в 10-100 раз меньше, чем нейтроны.

Последние в отличие от электронов приводят не к однородному образованию дефек-

тов, а к возникновению «сгустков дефектов».

2.5.3 Образование точечных дефектов при холодной деформации. Точечные дефекты возникают и в результате пластической деформации. Этот эффект можно обнаружить, если производить деформацию при низкой температуре, например в жидком азоте. Последующее последовательное измерение изменения электросопротивления при нагреве до температур ниже той, при которой происходит сколько-нибудь заметный возврат механических свойств.

Механизм возникновения вакансий при пластической деформации связан с увеличением плотности дислокаций и их движением. Это теория также подтверждается измерением плотности металла, которые показали, что после деформации $\sim 10\%$ в 1 см^3 возникает $3 \cdot 10^{17}$ вакансий. Это эффект снимается при $300\text{--}350^\circ\text{C}$.

2.5.4 Образование вакансий в твердых растворах при отклонении от стехиометрического состава. Вакансии возникают в твердых растворах ионных кристаллов — интерметаллидах.

Это связано с необходимостью сохранения электронейтральности твердого раствора, при этом число вакансий пропорционально отклонению от стехиометрического состава соединения.

Например, при добавке в NiAl (упорядоченный твердый раствор с решеткой ОЦК) избытка алюминия в подрешетке никеля образуются вакансии, концентрация которых равна избыточной концентрации алюминия.

При этом число валентных электронов на элементарную ячейку сохраняется постоянным. Образование вакансий в соединении NiAl происходит при уменьшении содержания Ni вплоть до 40 %, когда из тех мест, занимаемых атомами никеля в элементарной ячейке, одно свободно, а образующиеся пустоты частично ликвидируются за счет сжатия.

Образование вакансий наблюдается в соединениях Ni₃Al, FeAl, CoAl, AgAl, Cu₃Au и др. При этом с увеличением отклонения от стехиометрического состава наблюдается увеличение твердости (за исключением FeAl) при испытаниях ниже 400°C и уменьшение — выше 400°C .

2.5.5 Образование вакансий при взаимной диффузии. Избыток вакансий может также возникать при наличии встречных диффузионных потоков, если скорость диффундирующих атомов неодинакова (*эффект Киркендала*). Если в диффузионной паре А-В скорость диффузии атомов компонента В больше, чем компонента А, то в В должен возникнуть избыток вакансий, поскольку уход атомов В не компенсируется в достаточной мере приходом атомов А; это сопровождается сжатием образцов.

Если при этом или ином воздействии образуется количество точечных дефектов, превышающее равновесную концентрацию, то при наличии благоприятных температурно-временных условий избыточная концентрация точечных дефектов, по сравнению с равновесной, устраняется стоком к внешним поверхностям кристалла или внутренним стокам — границам зерен, дислокациям и др.

2.6 Методы экспериментального изучения точечных дефектов

Существующие методы экспериментального исследования точечных дефектов в металлических материалах можно классифицировать следующим образом:

- основанные на изучении физических свойств металлов в тепловом равновесии при высоких температурах (равновесные методы);

- основанные на изучении физических свойств металлов после резкой закалки с высоких температур (закалочные методы);

- релаксационные (импульсные и модуляционные) методы.

2.6.1 Равновесные методы. Равновесные методы заключаются в измерении темпе-

ратурной зависимости какого-либо физического свойства металла, находящегося в тепловом равновесии в области высоких температур, и определении равновесного вклада вакансий в значение физического свойства. Как отмечалось выше, равновесная концентрация вакансий экспоненциально растет с температурой, что при достаточно высоких температурах может привести к заметному изменению свойств.

Температурную зависимость физических свойств совершенной решетки (идеальной без наличия вакансий) определяют путем экстраполяции зависимости значений физических величин из области низких и средних температур, при которых концентрация вакансий еще пренебрежительно мала, в область высоких температур. По величине отклонений равновесных высокотемпературных значений физических свойств от значений, получаемых экстраполяцией, можно оценить термически равновесные концентрации вакансий и определить энергию их образования.

В наиболее распространенных равновесных методах измеряются температурные зависимости электросопротивления, теплоемкости, коэффициента теплового расширения.

Дилатометрические измерения температурной зависимости теплового удлинения образца ($\Delta L/L$) совместно с рентгеновским определением изменения параметров решетки ($\Delta a/a$) позволяют оценить прирост объема металла, обусловленный равновесными вакансиями. Величина $\Delta a/a$ будет характеризовать

тепловое расширение совершенной решетки, а $\Delta L/L$ — решетки с вакансиями.

Дело в том, что рентгеноструктурный анализ дает сведения о среднестатистическом изменении периода элементарной ячейки, вызванном действием двух факторов:

- *увеличением межатомных расстояний за счет повышения амплитуды колебания атомов при повышении температуры;*
- *атомной релаксацией вокруг вакансий.*

Изменение длины образца определяется действием указанных факторов и, кроме того, увеличением объема образца из-за повышения концентрации тепловых вакансий.

Разница между относительным увеличением длины образца и относительным удлинением периода решетки (рис. 2.8) должна отражать только увеличение концентрации вакансий.

Таким образом, длина (L), следовательно, и удельный объем образца (V/V_0), возрастают с увеличением концентрации вакансий.

И если рассматривать кристалл как изотропную упругую среду, относительное изменение периода решетки ($\Delta a/a$), вызванное релаксацией атомов вокруг равномерно распределенных точечных дефектов, равно относительному изменению объема кристалла, обусловленный этой же релаксацией.

Для кристаллов с кубической решеткой (а таковыми является основная масса металлов и сплавов):

$$\Delta a/a = \frac{1}{3} \frac{n V}{NV} , \quad (2.12)$$

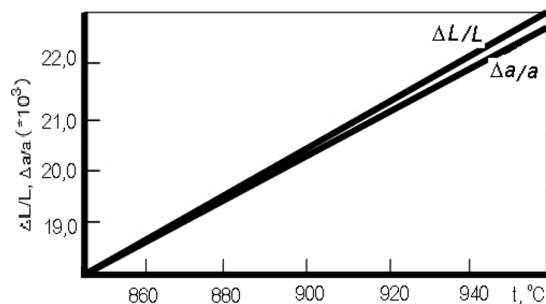


Рис. 2.8. Изменение длины образца $\Delta L/L$ и периода решетки $\Delta a/a$ при термическом расширении серебра

где NV — исходный объем совершенного кристалла, содержащего N узлов решетки; nV — релаксированный объем кристалла из-за наличия n -вакансий; $1/3$ — коэффициент, введенный для перехода от объемных (малых) величин к линейным.

Так как отношение величин n/N представляет собой концентрацию вакансий C_v :

$$a/a = C_v/3 (V/V) \quad (2.13)$$

Полное изменение объема при образовании вакансий будет:

$$U/U = \frac{n(V - V)}{NV}, \quad (2.14)$$

где $(V+V)$ — объем 1 вакансии с учетом ее релаксированного объема.

От малых объемных изменений можно перейти к изменениям длины образца, которые осуществимы dilatометрическими методами исследования металлов:

$$U/U = 3 L/L. \quad (2.15)$$

Тогда из соотношения (2.14) следует:

$$3(L/L) = C_v(1 + V/V). \quad (2.16)$$

Подставляя значение V/V из формулы (2.13), получим:

$$3(L/L) = C_v(1 + 3 a/C_v a), \quad (2.17)$$

$$C_v = 3(L/L - a/a), \quad (2.18)$$

Таким образом, можно вычислить *концентрацию вакансий* по замерам изменения длины образца (L/L) при нагревании до заданной температуры и периода решетки.

Зная равновесную концентрацию вакансий, легко вычислить *энергию образования вакансий*.

Так как абсолютные величины концентраций вакансий очень малы, то точность эксперимента по установлению разницы $(L/L - a/a)$ должна быть чрезвычайно высокой.

В настоящее время величину L/L можно измерить с точностью до 10^{-7} , однако, точность рентгеновского измерения не превышает $5 \cdot 10^{-5}$.

Следовательно, рассматриваемой методикой можно определять концентрацию вакансий $C_v > 5 \cdot 10^{-5}$.

Такие концентрации тепловых вакансий в условиях термодинамического равновесия наблюдаются в интервале температур недалеко от точек плавления.

Это обстоятельство — основной недостаток метода, так как при высоких температурах становится существенной доля вакансионных комплексов, влияющих на результаты измерений.

К другим недостаткам равновесных методов определения концентрации вакансий относится влияние других видов дефектов на изменение параметров кристаллической решетки.

Если основными точечными дефектами были межузельные атомы, то при нагревании из-за уменьшения числа узлов решетки разность $(L/L - a/a)$ должна быть отрицательной, что в экспериментах с металлами никогда не наблюдалось. Это свидетельствует о том, что в условиях термодинамического равновесия концентрация межузельных атомов несравнимо меньше концентрации вакансий.

2.6.2 Закалочные методы. Определение энергии образования и концентрации вакансий. Физическая идея закалочных методов состоит в том, что при быстром охлаждении металлов можно зафиксировать в решетке высокотемпературную концентрацию вакансий. Избыточные вакансии вызывают изменение некоторых физических свойств закаленных металлов. Эти изменения должны быть пропорциональны концентрации вакансий, а скорость восстановления свойств в процессе отжига избыточных вакансий характеризует подвижность вакансий.

В большинстве работ, посвященных исследованию вакансий в металлах, используется метод измерения электросопротивления металлических проволок, закаленных с высоких температур.

Избыточные вакансии в решетке закаленного металла приводят к появлению добавочного электросопротивления (ρ_v) , пропорционально равновесной концентрации вакансий при температуре закалки ($T_{зак}$):

$$\rho_v = A - \exp(E_0/kT_{зак}). \quad (2.19)$$

Представим эту зависимость в линейном виде:

$$\ln \nu = \ln A - \frac{E_0}{kT_{\text{закал}}} \quad (2.20)$$

Тогда из данных о зависимости добавочного электросопротивления от температуры закалки можно легко определить *энергию образования вакансий* (E_0) в исследуемом металле, а по значению E_0 рассчитать *концентрацию вакансий* (C_v) при разных температурах.

Достоинство закалочных экспериментов: высокая точность измерения электросопротивления при низких температурах. Однако возможны значительные искажения данных в результате высокой подвижности вакансий и поглощения их границами зерен, дислокациями, аннигиляцией межузельных атомов в период времени закалки образца. Ошибка в данных эксперимента возрастает с увеличением температуры нагрева под закалку и уменьшением скорости охлаждения.

Кроме этого, при комнатной температуре прирост электросопротивления, обусловленный закалочными вакансиями, составляет лишь сотые доли от общей величины измеряемого электросопротивления закаленного образца.

Поэтому в хорошо подготовленных экспериментах закалку и измерения образцов проводят в жидком гелии (4,2 К), азоте (78 К), что обеспечивает высокую скорость охлаждения, а величина ν составляет при этом основную долю от общего электросопротивления.

2.6.3 Определение энергии активации миграции вакансий. Сведения о подвижности вакансий в решетке и, соответственно, об энергии активации их движения могут быть получены из кинетики восстановления электросопротивления закаленных проволочных образцов в условиях изотермического отжига.

При этом предполагают, что падение электросопротивления пропорционально снижению концентрации вакансий:

$$\frac{\rho}{\rho_0} \sim \frac{C_v}{C_{v0}}, \quad (2.21)$$

где t — время отжига.

Если считать, что снижение электросопротивления обусловлено только термоактивизированным процессом миграции вакансий с постоянной энергией активации (E_M), то скорость падения электросопротивления будет:

$$\frac{d\rho}{dt} = -f(\nu) K_0 \exp\left(-\frac{E_M}{kT}\right), \quad (2.22)$$

где $f(\nu)$ — поправка, учитывающая изменение типа и числа стоков во время отжига; K_0 — кинетический коэффициент; $\exp(-E_M/kT)$ — фактор Больцмана.

2.6.4 Метод определения энергии активации по кинетике отжига. С помощью выражения (2.22) по данным о кинетике отжига при нескольких температурах можно определить энергию активации процесса миграции вакансий.

Для чего по экспериментальным данным строят кривые зависимости электросопротивления от времени отжига (рис. 2.9), быстро нагревая образцы до разных температур.

Время достижения произвольно выбранного значения электросопротивления с зависит от температуры отжига. Интегрируя уравнение (2.22), получаем:

$$\rho = \rho_0 \exp(-K_0 t \exp(-E_M/kT)). \quad (2.23)$$

Для $\rho/\rho_0 = \text{const}$ можно считать:

$$K_0 t_1 \exp\left(-\frac{E_M}{kT_1}\right) = K_0 t_2 \exp\left(-\frac{E_M}{kT_2}\right) = K_0 t_3 \exp\left(-\frac{E_M}{kT_3}\right). \quad (2.24)$$

Откуда:

$$\ln \frac{t_1}{t_2} = \frac{E_M}{k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right). \quad (2.25)$$

Энергия активации E_M определится:

$$E_M = k \ln \frac{t_1}{t_2} \left/ \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right. . \quad (2.26)$$

2.6.5 Метод скачкообразного повышения отжига. Можно измерять изменение электросопротивления, нагревая образец сначала до температуры отжига T_1 , а затем после резкого повышения температуры до T_2 (рис. 2.10).

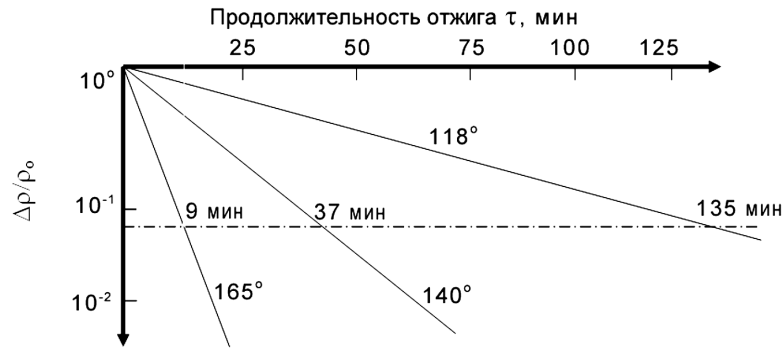


Рис. 2.9. Зависимость электросопротивления от времени отжига

Допуская, что при резком изменении температуры отжига тип и число стоков остаются неизменными, можно считать:

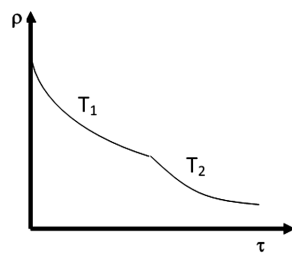
$$\frac{1}{t_1} = f(K_0) \exp \frac{E_M}{kT_1} \quad (2.27)$$

$$\frac{1}{t_2} = f(K_0) \exp \frac{E_M}{kT_2} \quad (2.28)$$

Отсюда:

$$\frac{1/t_1}{1/t_2} = \exp \frac{E_M}{kT_2} \frac{1}{T_1} \frac{1}{T_2} \quad (2.29)$$

Известно, что тангенс угла к касательной есть скорость изменения функции. По наклону двух касательных (в точке перелома на рис. 2.10) определяют соотношение истинных скоростей измерения электросопротивления при двух температурах и по формуле (2.29) рассчитывают энергию активации миграции вакансий E_M .

Рис. 2.10 Зависимость электросопротивления ρ закаленного образца от времени отжига t при температуре T_1 и после резкого повышения температуры отжига до T_2

2.6.6 Метод измерения энергии, аккумулированной вакансиями. Избыточные вакансии в закаленном металле повышают энергию кристаллической решетки, пропорционально энергии образования и концентрации вакансий.

Эта энергия выделяется и может быть измерена калориметрически.

Энергия образования вакансий определяется по данным о зависимости аккумулированной энергии от температуры закалки, а концентрация вакансий — из отношения аккумулированной энергии к энергии образования единичной вакансии.

Следует подчеркнуть, что информация о вакансиях, получаемая с помощью закалочных методов, в каждом конкретном случае требует тщательного критического анализа.

Необходимость такого анализа обусловлена сложностью явлений, происходящих в металлах при резкой закалке с высоких температур, а также при отжиге закаленных металлов.

Во-первых, из-за высокой степени насыщения решетки вакансиями могут образовываться различные комплексы с вакансиями.

Во-вторых, при реальных скоростях охлаждения (несколько десятков тысяч градусов в секунду) трудно гарантировать полное сохранение высокотемпературных вакансий.

В-третьих, при быстром охлаждении, как правило, развивается пластическая деформация.

ция исследуемых образцов вследствие термических напряжений.

Кроме того, при быстром охлаждении может быть зафиксирована высокотемпературная концентрация газообразных примесей.

Все эти факторы могут существенно искажать значения определяемых характеристик вакансий в исследуемом материале.

2.6.7 Релаксационные импульсные и модуляционные методы. В импульсных и модуляционных методах процесс установления равновесной концентрации вакансий изучается в области предплавильных температур.

В этих условиях имеются небольшие отклонения на несколько градусов от равновесия, возникающие в импульсных и модуляционных методах при нагреве.

При этом пересыщение (или недосыщение) решетки вакансиями незначительно, что позволяет избавиться от многих осложнений закалочных методов.

Вместе с тем возможность изучения кинетики установления равновесной концентрации вакансий расширяет рамки обычных равновесных методов. Появляется возможность экспериментально определять вклад вакансий в значение физического свойства (без экстраполяции данных из области средних температур), время релаксации, энергию образования и энергию активации движения вакансий.

Наиболее подходящим физическим свойством при изучении вакансий релаксационными методами является теплоемкость.

Поскольку хорошо разработаны методы измерения высокотемпературной теплоемкости металлов при импульсном и периодическом нагреве на несколько градусов выше предплавильных температур, вклад вакансий в теплоемкость достигает до 10 % для металлов с ОЦК решеткой и до 30 % — для металлов с ГЦК решеткой.

На рисунке 2.11 приведены зависимости теплоемкости алюминиевого образца от температуры. В условиях эксперимента измеряли теплоемкость при различных длительностях

нагрева (t), то есть при пропускании импульса тока различной продолжительности.

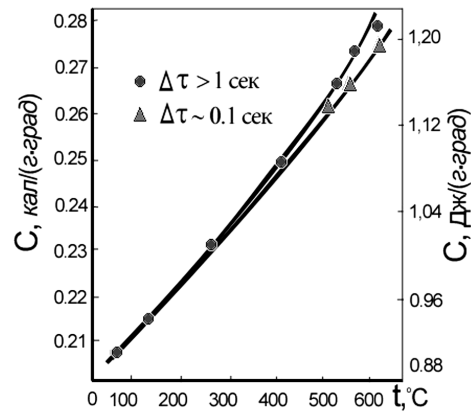


Рис. 2.11. Зависимость теплоемкости алюминиевого образца от температуры

В случае продолжительного нагрева ($t > t_v$) в образце успевает установиться равновесная концентрация вакансий C_v , и теплоемкость равна сумме теплоемкостей решетки и вакансий.

При кратковременном нагреве ($t < t_v$) вакансии не успевают образоваться, поэтому теплоемкость образца характеризуют теплоемкостью решетки без вакансий.

При $t \sim 0,1$ сек точки, описывающие зависимость теплоемкости от температуры, ложатся на прямую; а при $t > 1$ сек — отклоняются вверх. Полученные данные позволяют оценить концентрацию, энергию образования и время релаксации вакансий:

$$C_v = C_v^p \left(1 - \exp \left(-\frac{t}{t_v} \right) \right) \quad (2.30)$$

Время релаксации вакансий определяется:

$$t_v = L^2 / 40D_v, \quad (2.31)$$

где L — расстояние между источниками и стоками вакансий; D_v — коэффициент диффузии вакансий.

2.6.8 Время жизни вакансий. Время жизни вакансий ($1/\Gamma$) можно оценить по числу перескоков вакансий (Γ) в единицу времени.

Частота перескоков в новое положение, совершаемое дефектом в 1 сек:

$$\Gamma = V_0 \exp \frac{S_M}{kT} \exp \frac{E_M}{kT}, \quad (2.32)$$

где V_0 — частота колебаний в направлении перевальной точки, то есть «частота попыток» перехода в соседний узел $\sim 10^{13}$ сек⁻¹; S_M , E_M — энтропия и энергия активации миграции вакансий.

Расчет дает $\Gamma = 10^8 \cdot 10^{10}$ сек⁻¹. Таким образом, время жизни вакансий при высокой температуре достаточна, для того, чтобы зафиксировать их закалкой.

Зная величину $\Gamma \sim 10^9$, можно приблизительно оценить толщину поверхностного слоя, из которого вакансии могут выходить на поверхность при закалке $\sim 10^{-3}$ см.

Поэтому вклад границ зерен в процессе исчезновения избыточных вакансий в крупнозернистом материале при закалке относительно невелик.

В отожженном металле одна атомная позиция, находящаяся в центре дислокации, приходится на каждые 10^8 атомов и, следовательно, беспорядочно перемещающаяся вакансия должна совершить 10^8 перескоков, прежде чем достигнет такой позиции.

Эти соображения в сопоставлении с величиной $\Gamma \sim 10^9$ подтверждают точку зрения о

том, что большинство вакансий при отжиге поглощаются дислокациями.

Этому соответствуют экспериментальные данные, согласно которым скорость процесса отжига избыточных вакансий значительно ускоряется, если сразу после закалки металл подвергнуть наклепу и провести отжигом.

Оценки показывают, что в алюминии с размером зерен 1 см при температурах, близких к плавильным, время жизни вакансий могло составлять минуты, а в сплавах — даже часы (при отсутствии деформации).

Этот результат, по-видимому, имеет существенное значение для диффузионных процессов, протекающих при повышенных температурах в условиях, когда есть избыточная концентрация вакансий. В закалочных методах в области предплавильных температур время релаксации вакансий t_r составляет $10^{-2} \cdot 10^{-4}$ сек.

В импульсных методах вблизи температуры плавления t_r составляет $1,0 \pm 0,3$ сек для образцов алюминия толщиной 0,27 мм.

Очевидно, что в условиях опыта играют важное значение источники и стоки вакансий. В закалочных методах это могут быть дислокации, в импульсных — свободная поверхность и границы зерен.

Глава 3. ЛИНЕЙНЫЕ ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ

3.1 Понятие о дислокациях

Под дислокациями понимают особый вид линейных несовершенств в кристаллической решетке, нарушающее правильное чередование атомных плоскостей.

Дислокации являются важнейшим типом несовершенств кристаллической решетки, определяющим механические свойства металлов и сплавов: пластичность, прочность и т.д.

Учение о дислокациях получило в настоящее время широкое развитие, подробно разрабатываются вопросы теории, методы выявления несовершенств этого типа и приложения теории дислокаций к различным вопросам металловедения: кристаллизации из расплава, фазовым и структурным превращениям в твердом состоянии, прочности, пластичности и др.

К научно обоснованному представлению существования дислокации привело развитие теории пластической деформации. Эрвинг и Розентайн (1899 г.) считали, что пластическая деформация, в отличие от упругой, действующей по всему объему, протекает по избранным плоскостям скольжения кристалла (рис. 3.0).

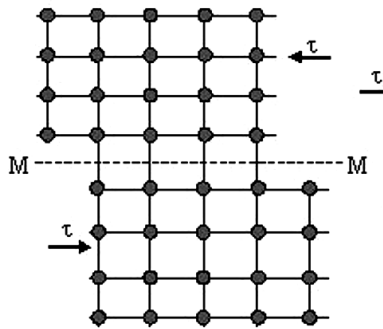


Рис. 3.0. Элементарная схема, поясняющая механизм пластической деформации

Этому способствовало и появление рентгеноструктурного анализа (Лауэ, 1912 г.). Который показал, что после любой пластической деформации решетка кристалла, сохраняется.

Кристаллографические индексы плоскостей скольжения и направления сдвига в них оказались для данного металла постоянными (Карпентер и Элам, 1920 г.).

Значит, элементарный акт скольжения — это сдвиг части кристалла по какой-то атомной плоскости в определенном направлении.

Однако расчет, выполненный Я.И. Френкелем (1925 г.) показал, что теоретическое значение напряжения сдвига на 3–4 порядка выше экспериментально установленных значений.

Представление об одновременном смещении всех атомов одного слоя кристалла относительно атомов другого оказалось несостоятельным.

Для того, чтобы объяснить несоответствие в 10^3 – 10^4 раза между теоретической и наблю-

даемой на практике прочностью, описать атомный механизм скольжения при пластической деформации кристаллов, было введено понятие о дислокациях (1934 г.).

Позднее, в 1947 г., научное предсказание существования дислокации было подтверждено с помощью электронного микроскопа.

Таким образом, дислокации являются особым видом дефекта среди различных дефектов кристаллического строения.

Их поведение определяет механические свойства кристаллических тел.

Кроме того, дислокации играют значительную роль при фазовых превращениях в твердом состоянии и ряде других явлений.

Вот почему, знание теории дислокаций является совершенно необходимым для всех, кто имеет дело с металлами и сплавами, а именно: прокатчиков и кузнецов, металлургов и материаловедов.

3.1.1 Краевая дислокация. Наиболее простой способ представить дислокацию в кристаллической решетке — рассмотреть структуру кристалла после деформации.

На рисунке 3.1 показан кристалл в двухмерном пространстве с примитивной кубической решеткой. Верхняя часть кристалла сдвинута по горизонтальной плоскости скольжения на 1 полный период, ячейки нижней части кристалла сохраняют свою первоначальную структуру.

При развитии процесса скольжения, когда элементарные ячейки верхней части кристалла смещаются, сдвиг охватывает не всю плоскость скольжения MM от правой грани до левой (рис. 3.1, а), а лишь часть объема кристалла — участок, выделенный пунктирной линией (рис. 3.1, б).

В результате между частями кристалла, претерпевшим скольжение, и сохранившим участком перемещается вертикальная плоскость, не имеющая продолжения в нижней части кристалла.

Такую неполную атомную плоскость называют *экстраплоскостью*.

Внутри кристалла вдоль края экстраплоскости решетка имеет движущуюся область

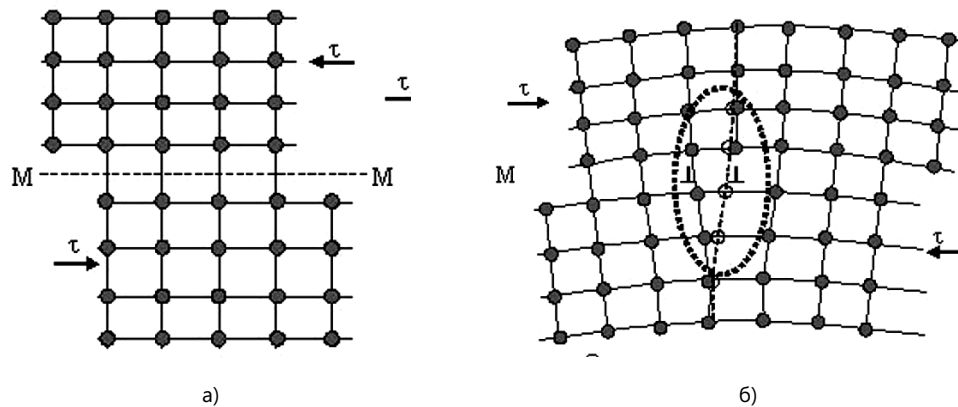


Рис. 3.1. Схема пластической деформации: (а) путем сдвига в кристалле по всей плоскости MM; (б) по такой же плоскости MM, но на одно межатомное расстояние

несовершенства (\perp — границу сдвига), называемой *краевой дислокацией*.

Протяженность этого несовершенства определяется длиной края экстраплоскости, в двух других направлениях пространства искажения кристаллической решетки охватывают область от двух до десяти атомных периодов, соизмеримые с межатомным расстоянием.

То есть область несовершенства кристаллической решетки представляет собой протяженный цилиндр (на рис. 3.1 штриховой овал), осью которого является край экстраплоскости.

Вне этого цилиндра строение кристалла близко к идеальному, а внутри (ядро дислокации) сильно искажено. В ядре дислокации выше края экстраплоскости образуется область сгущения атомов, а ниже — область разрежения.

Положение центра ядра дислокации в кристаллографической плоскости, являющейся плоскостью чертежа, обозначается значком \perp .

Если экстраплоскость находится в верхней части кристалла, то дислокацию называют *положительной* (\perp), а если в нижней — *отрицательной*. Положение ядра отрицательной дислокации обозначают значком (\top), в верхней части ядра такой дислокации будет об-

ласть разрежения, в нижней — сгущения атомов.

Плоскость, вдоль которой происходит смещение дислокаций, называется *плоскостью скольжения*, в которой лежит (или параллелен) вектор сдвига (τ).

Сама линия краевой дислокации всегда перпендикулярна τ .

Таким образом, *дислокацией называется линейное несовершенство, образующее внутри кристалла границу зоны сдвига*.

Эта граница отделяет ту часть плоскости скольжения, где сдвиг уже прошел, от той части, где он еще не начинался.

3.1.2 Винтовая дислокация. Если сделать в кристалле надрез по плоскости ABCD (рис. 3.2), сдвиг части кристалла на один период решетки можно произвести, приложив усилие параллельно линии BC. Верхняя атомная плоскость справа от точки A сливается со второй от верха плоскости слева от точки A.

Величина смещения правой части кристалла по отношению к левой уменьшается по направлению от точки A к точке B.

Если кристалл до сдвига состоял из нескольких параллельных плоскостей, теперь он превратился в одну атомную плоскость, закрученную в виде геликоида (винтовой лестницы).

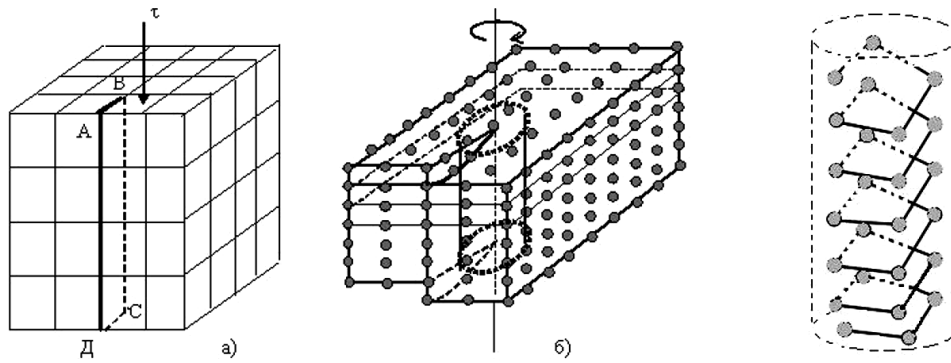


Рис. 3.2. Сдвиг, создающий винтовую дислокацию.
 а) — кристалл до сдвига надрезан по плоскости $ABCD$;
 б) — ядро винтовой дислокации представляет собой дефект кристалла (выделен на рисунке как цилиндр), где все атомные плоскости закручены в виде геликоида (в)

На рисунке 3.2 показано расположение атомов в кристалле, находящихся непосредственно по обе стороны от плоскости сдвига $ABCD$.

Таким образом, после сдвига по плоскости $ABCD$ вдоль линии BC образуется область несовершенства кристаллической решетки (выделена в виде штрихового цилиндра), которая имеет макроскопическую протяженность; в двух других направлениях кристаллической решетки она составляет всего несколько периодов решетки.

Сама линия BC , перемещаясь внутри кристалла, является границей зоны сдвига, отделяя своей плоскостью скольжения ту часть кристалла, где произошел сдвиг.

Дефект (упаковка атомов в объеме цилиндра на рис. 3.2, б), в результате которого в кристалле атомные параллельные плоскости закручиваются в винтовую, называется *винтовой дислокацией*. Точное расположение атомов в ядре винтовой дислокации неизвестно.

Винтовые дислокации различаются на правые и левые. Если при обходе линии дислокации по часовой стрелке плоскость закручивается от верхнего горизонта к нижнему, дислокация *правая*.

Если при обходе линии дислокации против часовой линии дислокации плоскость закручивается от левого горизонта к нижнему, то винтовая дислокация *левая*.

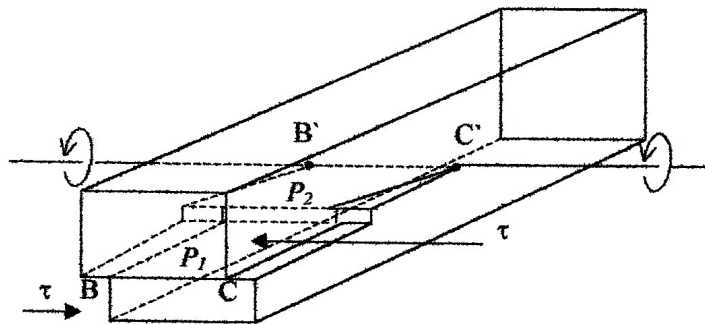


Рис. 3.3. Дислокация BC испытывает двойное поперечное скольжение ($B'C'$)

Отличие краевой дислокации от винтовой состоит в том, что *линия краевой дислокации всегда перпендикулярна вектору сдвига* (), а *линия винтовой дислокации всегда параллельна*.

Другое принципиальное отличие краевой дислокации от винтовой состоит в том, что краевая дислокация может испытывать сдвиг в определенной плоскости скольжения, а

винтовая — сдвиг по любой кристаллографической плоскости. Например, если в кристалле сделать надрез по любой плоскости по линии ВС, то после сдвига в направлении (), параллельном линии ВС, дислокация (В'С) может, как на рис. 3.3, двойным (множественным) поперечным скольжением переходить из плоскости P_1 в плоскость скольжения P_2 , сохраняя свою винтовую ориентацию.

3.2. Системы скольжения в кристаллах чистых металлов

Изменение формы кристалла при пластической деформации происходит путем скольжения (перемещения) дислокаций по определенным плоскостям и сопровождается повышением концентрации дефектов.

Несмотря на это, в целом, кристаллическая решетка деформированного металла сохраняется.

Например, в ГЦК решетке скольжение осуществляется преимущественно по плоскостям $\{111\}$, а в кристаллах с гексагональной решеткой — $\{0001\}$.

Изучение физико-механических явлений всегда начинают с исследования на модельных образцах, чаще всего это монокристаллы или чистейшие материалы.

На рисунке 3.4 схематически изображен монокристаллический пруток металла с ГПУ решеткой (цинк), так как он имеет всего одну плоскость скольжения — плоскость базиса.

На поверхности такого образца, подвергаемом растяжению, отчетливо выявляются плоскости скольжения.

Дислокации могут перемещаться по плоскости скольжения в одном из трех плотноупакованных направлений $\langle 1120 \rangle$, совпадающего с плоскостью базиса (рис. 3.4, а), и осуществляются в направлении той диагонали, для которой фактор Боаса-Шмидта будет максимальным.

Рентгеноструктурный анализ такого образца подтверждает, что деформация происходит путем скольжения плоскостей $\{0001\}$.

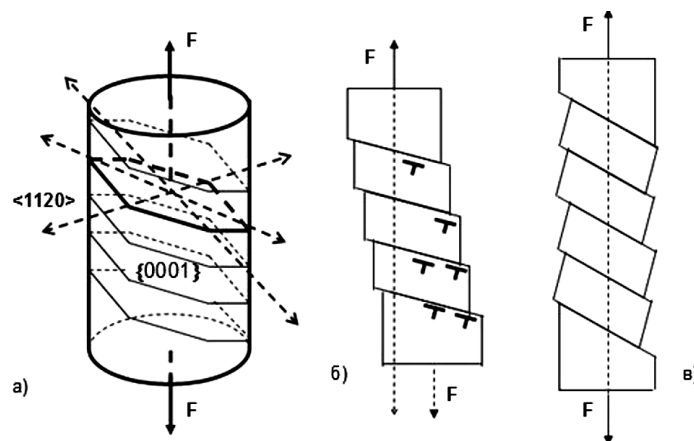


Рис. 3.4. Схема пластической деформации в ГПУ решетке путем (а) скольжения плоскости $\{0001\}$ вдоль направления наибольшей упаковки (б) и вращения вокруг направления приложения нагрузки (в) отдельных частей кристалла

Системы скольжения в металлах

Решетка	Металл	Плоскость	Направление	Число систем
ОЦК	-Fe, Mo, Na, W, V, Cr, Nb, Ta	{101}	<111>	12
		{211}	<111>	12
ГЦК	Ag, Al, Au, Cu, -Fe, Pb, Ni	{111}	<110>	12
ГПУ	Cd, Mg, -Ti, Zn, Co, Z	{0001}	<1120>	3
		{1010}	<1120>	6

Теоретические расчеты и эксперименты позволили сделать выводы:

1) что скольжение легче всего происходит по наиболее плотноупакованной плоскости в направлении с наибольшей линейной плотностью частиц;

2) плоскостями скольжения являются плоскости с наибольшими межплоскостными расстояниями;

3) чем больше совокупность идентичных плотноупакованных плоскостей скольжения, тем более пластичен металл (табл. 3.1).

3.2.1 Приведенное напряжение сдвига.

Скольжение плоскостей одна относительно другой становится возможным, когда напряжение сдвига достигает некоторой критической величины.

Очевидно, что скольжение не может возникнуть, если плоскость скольжения (или направление скольжения) перпендикулярна направлению приложенного напряжения.

Наибольшее напряжение сдвига создается, если плоскость скольжения и направление скольжения расположены под углом 45° к направлению растягивающего (сжимающего) напряжения.

На рисунке 3.5 приведена схема цилиндрического образца с площадью поперечного сечения S , вдоль оси которого приложено растягивающее усилие F , угол между направлением одноосного напряжения ($\sigma = F/S$) и нормалью к плоскости скольжения — α , а угол между направлением скольжения и одноосного напряжения — ϕ .

Площадь плоскости скольжения составит:

$$S' = S / \cos \alpha. \quad (3.1)$$

Вдоль направления скольжения усилие сдвига будет соответствовать:

$$F \cos(\phi). \quad (3.2)$$

Тогда приведенное напряжение сдвига может быть выражено через одноосное напряжение:

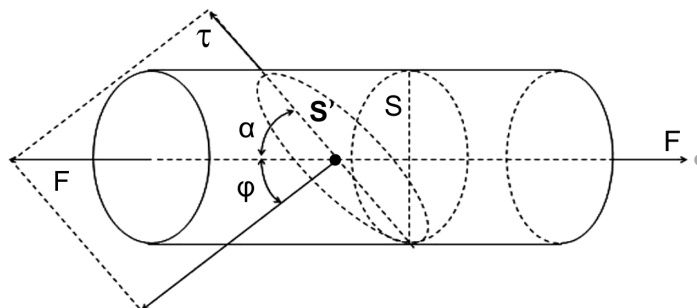


Рис. 3.5. Схема определения критического скалывающего напряжения при одноосном растяжении

$$\frac{F \cos(\alpha)}{\cos(\beta)} = \frac{S}{\cos(\gamma)} \quad (3.3)$$

Скольжение возникает при превышении критического напряжения сдвига $\tau_{кр}$, то есть:

$$\tau_{кр} = \cos(\alpha) \cos(\beta). \quad (3.4)$$

Это соотношение (3.4) известно как *закон Боаса-Шмидта*, а произведение $\cos(\alpha) \cos(\beta)$ — как *фактор Боаса-Шмидта* и обозначается m .

Тогда уравнение (3.3) примет вид:

$$\tau = m \cdot S. \quad (3.5)$$

Следовательно, при приложении внешней нагрузки на кристалл, в первую очередь дислокации начнут перемещаться по тем плоскостям скольжения, для которых значение m максимально.

Так как сумма углов $(\alpha + \beta)$ может быть равна или больше 90° , произведение косинусов этих углов принимает максимальное значение, когда $\alpha = \beta$ и равны 45° .

Если в кристалле есть плоскости скольжения, расположенные под углом 45° , то дислокации начнут скользить по этим плоскостям.

Таким образом, *пластическая деформация в поликристаллическом материале протекает неравномерно по объему* (одновременно не во всех зернах), *а только в благоприятно ориентированных кристаллитах.*

3.2.2 Теоретическая прочность при сдвиге. Если представить механизм пласти-

ческой деформации в виде смещения одной части кристалла относительно другой, то по бездислокационной теории должно произойти смещение всех атомов вдоль плоскости скольжения.

При этом приложенное напряжение должно быть достаточным, чтобы преодолеть взаимное притяжение между всеми граничащими атомами соседних слоев.

Можно оценить порядок величины усилия (критического скальвающего напряжения), соответствующей этой модели скольжения.

На рисунке 3.6 приведена плоскость скольжения MM и граничащие атомы соседних слоев (по схеме рис. 3.1, а). В начальный момент смещение плоскости 1 относительно 2 будет $x=0$.

Для смещения всех атомов плоскости 1 относительно неподвижной плоскости 2 из положения $(x=0)$ в положение $(x=a/2)$ необходимо напряжение сдвига τ .

При этом $(x=a/2)$ атомы слоя 1 попадают в положение равновесия, так как сила взаимодействия с атомами второго слоя при смещении до значений $x < a/2$ противодействует скольжению, а при достижении $x > a/2$ способствует дальнейшему скольжению в положение $x=a$, которое должно осуществиться без приложения усилия.

Можно считать, период изменения напряжения скольжения равным a .

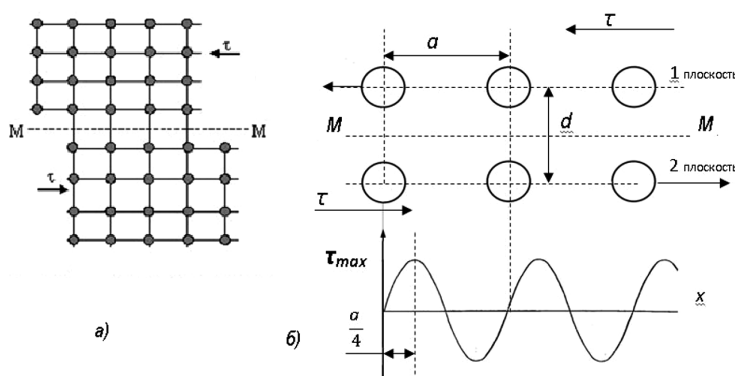


Рис. 3.6. Схема определения критического скальвающего напряжения при одновременном сдвиге частей кристалла по всей плоскости скольжения

Так как одновременно смещение испытывают и 1 и 2 плоскости, сила сдвига проходит через максимум при $x=a/4$, который соответствует критическому скалывающему напряжению.

Откуда, предполагая синусоидальную зависимость изменения касательного напряжения от смещения:

$$\tau_{\max} \sin 2 \frac{x}{a}. \quad (3.6)$$

В области малых смещений ($x \ll a$), когда можно считать $\sin 2 \frac{x}{a} \sim 2 \frac{x}{a}$, уравнение примет вид:

$$\tau_{\max} 2 \frac{x}{a}. \quad (3.7)$$

Зависимость касательных напряжений от смещения при $x \ll a$ подчиняется закону Гука: $\tau = G \gamma$, где γ — относительный сдвиг $\gamma = x/d$.

Следовательно, в области малых смещений

$$\tau_{\max} 2 \frac{x}{a} = G \frac{x}{d} \quad \tau_{\text{кр}} = \tau_{\max} \frac{G}{2} \frac{a}{d}. \quad (3.8)$$

Межплоскостное расстояние в направлении сдвига по порядку величины равно величине a , поэтому для смещения всех атомов одного слоя относительно другого слоя необходимо приложить касательное напряжение, равное:

$$\tau_{\text{кр}} \sim G/2 \sim G/6. \quad (3.9)$$

Учет более точного закона изменения межатомных сил в зависимости от смещения плоскостей дает меньшие величины:

$$\tau_{\text{кр}} \sim G/30.$$

Однако экспериментально полученные величины напряжения сдвига на 3–4 порядка ниже теоретически рассчитанных значений.

Таким образом, эксперименты доказывают, что процесс деформации осуществляется путем скольжения по определенным плоскостям кристалла, однако, модель одновременного смещения атомов одного слоя вдоль другого несостоятельна, так как данные теоретического расчета ($\tau_{\text{кр}}$) несопоставимы с реальными значениями критического скалывающего напряжения.

Для объяснения низких значений скалывающего напряжения было сделано предположение, что процесс скольжения реализуется не путем одновременного смещения всех атомов одного слоя, а сравнительно небольшой группой атомов, которая не стабильна во времени и пространстве плоскости скольжения.

Для описания такого механизма и было предложено (Оровани, Поляни, Френкель, Тейлор, 1934 г.) представление об особом типе несовершенства кристаллической решетки — дислокациях.

3.3 Скольжение краевой дислокации

Атомный механизм перемещения краевой дислокации при сдвиге на одно межатомное расстояние можно рассмотреть на схеме примитивной кристаллической решетки (рис. 3.7), в структуре которой присутствует краевая дислокация.

Чтобы дислокация из исходного положения А переместилась в соседнее положение В, достаточно, чтобы произошли смещения атомов 1 в положение 1', 2 в 2', 3 в 3' в экстраплоскости, перпендикулярной плоскости чертежа.

Незначительные перемещения атомов в ядре дислокации приводят к тому, что плоскость В разрывается на две части.

Ее нижняя часть объединяется с исходной экстраплоскостью в целую плоскость А, а верхняя часть превращается в новую экстраплоскость.

При таком механизме смещения необходимое напряжение сдвига составит лишь некоторую долю, теоретически рассчитанную по уравнению (3.9).

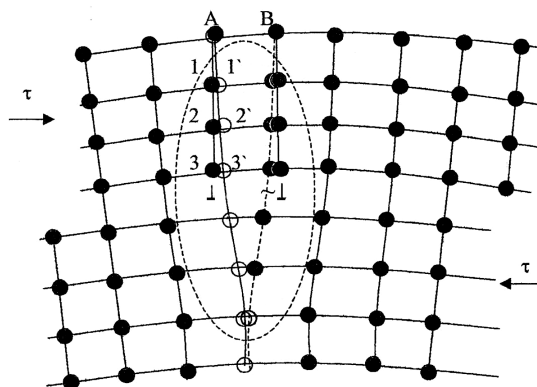


Рис. 3.7. Атомный механизм перемещения краевой дислокации

Под действием касательного напряжения дислокация поэтапно перемещается на одно межатомное расстояние в плоскости скольжения и выходит на поверхность зерна, образуя ступеньку.

Если число дислокаций будет значительным, то, очевидно, значительным будет и изменение формы кристалла.

Такое перемещение дислокаций называется скольжением или консервативным движением, так как механизм перемещения дислокации не связан с диффузионными процессами и массопереносом.

Скольжение дислокации может происходить при любых температурах.

Таким образом:

- дислокация перемещается на один период решетки в результате перемещения атомов только внутри области несовершенства, атомы вне области несовершенства остаются на своих местах;
- для скольжения дислокации на один период решетки достаточно смещения атомов в ядре дислокации всего на долю периода решетки;
- в области ядра дислокации атомы претерпевают смещение в направлении действующих на них сил, и сама дислокация скользит параллельно этому направлению.

Таков механизм пластической деформации путем перемещения краевой дислокации вдоль плоскости скольжения.

3.3.1 Скорость перемещения краевой дислокации. Легкость скольжения дислокации не означает высокую скорость их движения. При низких приложенных напряжениях дислокации скользят очень медленно, со скоростями порядка 10^{-7} см/с и менее.

Скорость скольжения дислокаций не может превышать скорости распространения в данном кристалле упругой деформации, то есть скорости звука.

Скорость скольжения изменяется в очень широком диапазоне в зависимости от приложенных напряжения, температуры и других факторов.

Теория этого вопроса разработана слабо. Эмпирически найдена следующая зависимость скорости скольжения дислокации от приложенного касательного напряжения :

$$v = \tau^n / \tau_0^{n-1}, \quad (3.10)$$

где τ_0 — касательное напряжение, при котором скорость скольжения дислокации $v_0 = 1$ см/с; n — константа материала.

Измерения v требуют большой статистики: наблюдаемые скорости отдельных дислокации могут в идентичных условиях различаться в несколько раз из-за изменения плотности дислокации, зависящие от кривизны и плотности ступенек, сегрегации примесей, взаимодействия с другими дислокациями и т.д.

Поэтому две независимые константы σ_0 и τ_0 , которые существенно зависят от температуры, задаются произвольно при выводе такого уравнения.

В литературе имеются и другие эмпирические зависимости, полученные при исследовании разных по природе кристаллических веществ.

Скорость скольжения дислокаций возрастает с повышением приложенного напряжения и зависит от природы материалов, то есть у разных материалов показатель n может сильно отличаться.

Так, у ковалентного кристалла Ge $n=2$; у многих кристаллов с ОЦК решеткой $n \sim 10-40$.

Например, у сплава железа с 3,25 % кремния (ОЦК решетка) при сравнительно небольшом увеличении касательного напряжения обнаружено резкое возрастание скорости движения краевых дислокаций от очень малых значений (порядка $10^{-7}-10^{-8}$ см/с) до больших (порядка 10^{-2} см/с).

Задачи такого рода (влияние различных барьеров, частоты их преодоления и т.д.) решаются с применением вычислительных экспериментов, хотя на сегодняшний день удается лишь численно сводить по порядку величины в результирующую зависимость v с константами $m(T)$ и $\sigma_0(T)$.

3.4 Скольжение винтовой дислокации

Схема атомного скольжения винтовой дислокации приведена на рис. 3.8. Плоскость скольжения совпадает с плоскостью чертежа, белыми кружками показаны атомы, расположенные за плоскостью чертежа, а серыми — впереди от плоскости чертежа.

Верхняя (правая) стрелка показывает направление действия сдвигающего напряжения, действующего на часть кристалла, которая расположена глубже от нас, то есть за плоскостью чертежа.

Левая стрелка — это направление напряжения сдвига, действующего на часть кристалла над плоскостью чертежа. Серые атомы

образуют возникающую при сдвиге атомарную ступеньку на поверхности кристалла.

Ядро дислокации образует область кристалла, выделенную штриховым цилиндром.

На схеме показано перемещение винтовой дислокации вниз вдоль плоскости скольжения на один период решетки.

Таким образом:

- дислокация перемещается на один период решетки вниз в результате перемещения атомов только внутри области несовершенства (ядра дислокации), атомы вне области несовершенства остаются на своих местах;

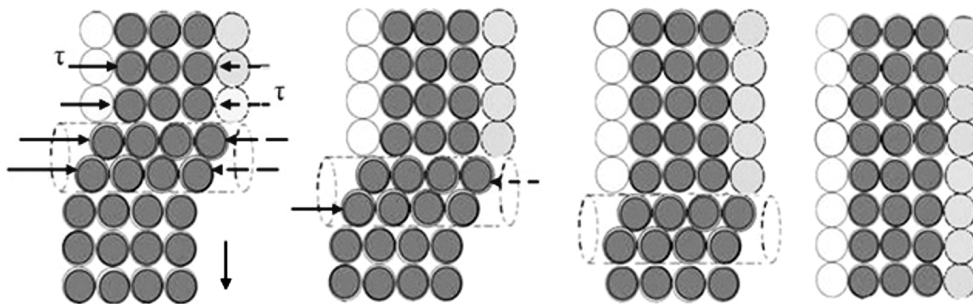


Рис. 3.8. Схема атомного скольжения винтовой дислокации

- для скольжения дислокации на один период решетки достаточно смещения атомов в ядре дислокации всего на долю периода решетки;

- в области ядра дислокации атомы претерпевают смещение в направлении действующих на них сил (справа и слева), а сама дислокация скользит перпендикулярно этому направлению (вниз);

- при скольжении дислокации вниз увеличивается протяженность области сдвига (длина ступеньки).

Скольжение винтовой дислокации увеличивает зону сдвига. В исходном состоянии

зона сдвига (часть плоскости скольжения, где сдвиг уже совершен) располагается на рисунке выше ядра дислокации.

После перемещения дислокации (вниз) зона сдвига занимает площадь, увеличенную на один период решетки.

При скольжении винтовой дислокации через весь кристалл последний претерпевает сдвиг.

Таков механизм пластической деформации путем перемещения винтовой дислокации.

3.5 Перемещение дислокаций в новые плоскости скольжения

3.5.1 Переползание краевой дислокации. Краевая дислокация может перемещаться не только консервативным движением под действием касательного напряжения в плоскости ее скольжения. Она может перемещаться перпендикулярно плоскости скольжения.

Механизм перемещения краевой дислокации при этом осуществляется диффузионным путем и может иметь несколько вариантов:

- 1) взаимодействие вакансий с краевой дислокацией, когда атомы с кромки экстраплоскости перемещаются в соседние вакантные места (рис. 3.9);

- 2) диффузия атомов от края экстраплоскости (дислокация) с образованием межузельных атомов;

- 3) диффузия межузельных атомов с присоединением к дислокации;

- 4) присоединение регулярно расположенных атомов решетки к экстраплоскости с одновременным образованием вакансий, мигрирующих вглубь кристалла.

Так как перемещение положительной краевой дислокации из своей плоскости скольжения в вышележащую (положительное переползание, рис. 3.9) или в нижележащую (отрицательное переползание) плос-

кость осуществляется путем диффузионного процесса и сопровождается переносом массы, оно является *неконсервативным движением дислокации*.

Наименее вероятным механизмом переползания дислокации в новую плоскость скольжения является диффузия атомов от края экстраплоскости с образованием межузельных атомов, так как энергия образования межузельных атомов относительно велика.

В то время как скольжение дислокации протекает при любых температурах, *переползание дислокаций — термически активируемый процесс* и протекает с заметной скоростью при сравнительно высоких температурах.

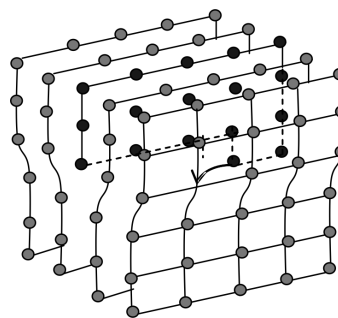


Рис. 3.9. Схема атомного механизма переползания краевой дислокации. Атомы экстраплоскости выделены темными шарами

Переползание дислокаций состоит в зарождении порогов и движении их вдоль линии дислокаций.

Когда, например, к образовавшемуся порогу присоединяется вакансия, порог смещается вдоль кромки экстраплоскости.

В условиях термодинамического равновесия при данной температуре T число порогов на единице длины дислокации:

$$n = n_0 \exp \frac{E_n}{kT} \quad (3.11)$$

где E_n — энергия образования порога (1 эВ для порога высотой в одно межатомное расстояние); n_0 — число атомов на единице длины дислокаций.

Энергия активации переползания равна $E = E_n + E_d$, где E_d — энергия активации самодиффузии.

При значительных степенях деформации (высокая плотность дислокаций приводит к их пересечению, в результате чего на них образуется большое число порогов) энергия активации переползания равна энергии активации самодиффузии $E = E_d$.

Таким образом, дислокационная структура кристаллов может самопроизвольно изменяться при нагреве.

3.5.2 Перемещение винтовой дислокации в новую плоскость. В отличие от краевой дислокации винтовая дислокация переходит из одной атомной плоскости в другую консервативным путем, без переноса массы — скольжением.

Если при движении винтовой дислокации в плоскости скольжения P встречается какой-нибудь барьер или произойдет изменение

вектора приложенного напряжения, то дислокация начнет скользить в другой атомной плоскости R , находящейся под углом к начальной плоскости скольжения.

Такой процесс назван *поперечным скольжением*.

Пройдя некоторый путь в плоскости поперечного скольжения R и удалившись от барьера, винтовая дислокация может перейти в другую атомную плоскость, параллельную первоначальной плоскости скольжения P .

Такой процесс называют *двойным поперечным скольжением*.

Множественное его повторение называют *множественным поперечным скольжением*.

Например, на рисунке 3.10 приведена схема множественного поперечного скольжения, типичного для ГЦК металлов.

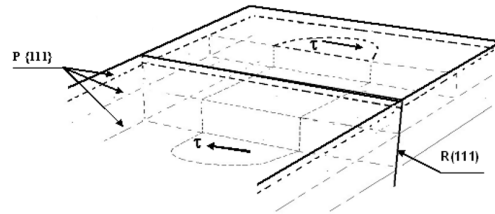


Рис. 3.10. Схема множественного поперечного скольжения в ГЦК металле

В ГЦК решетке винтовая дислокация, скользящая в плоскости (111), легко переходит в плоскость поперечного скольжения (111), затем вновь скользит в одной из параллельных плоскостей (111), снова совершает поперечное скольжение по плоскости (111) и т.д.

3.6. Качественные и количественные характеристики дислокаций

Основной геометрической характеристикой дислокации служит *вектор Бюргерса* \vec{b} .

Чтобы определить вектор Бюргерса, необходимо из векторов трансляции составить замкнутый контур произвольной формы в идеальной области решетки.

Аналогичный контур Бюргерса строится вокруг линии дислокации (рис. 3.11).

Неувязка в контуре Бюргерса — вектор трансляции — является вектором Бюргерса. Вектор Бюргерса не зависит от конкретного выбора контура Бюргерса.

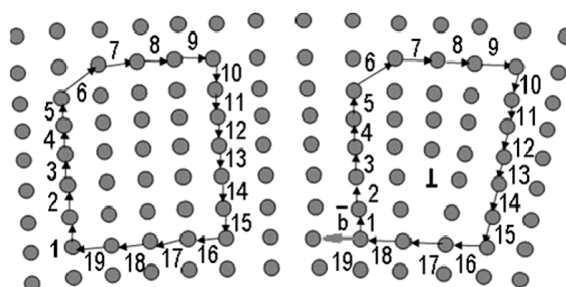


Рис. 3.11. Схема определения вектора Бюргерса \vec{b} . Выбрав в без дислокационной области любой узел за исходный (1), начинаем выполнять по шагам произвольный контур Бюргерса: 5 шагов вверх, шаг 6 — вверх-направо, еще 3 шага вправо (7–8–9), 10–15 шаги вниз и замыкаем контур шагами 16–19. Затем аналогичный контур строим вокруг линии дислокации. Неувязка в контуре и есть мера искажения кристаллической решетки — вектор Бюргерса

Вектор Бюргерса, как качественная характеристика, однозначно определяет вид дислокации:

- вектор Бюргерса краевой дислокации перпендикулярен линии дислокации и лежит в плоскости скольжения;
- вектор Бюргерса винтовой дислокации параллелен линии дислокации и перпендикулярен направлению ее перемещения.
- вектор Бюргерса у дефектов недислокационного типа равен нулю.

Таким образом вектор Бюргерса и линия дислокации однозначно определяют возможную плоскость скольжения.

Выбор направления вектора Бюргерса является условным и зависит от направления обхода по контуру Бюргерса. Как правило, обход производится по часовой стрелке.

Величина вектора Бюргерса не зависит от того, насколько контур Бюргерса удален от линии дислокации.

Чем дальше от дислокации расположен контур, тем меньше упругие смещения атомов в совершенной области, тем протяженнее контур, но сумма всех упругих смещений, накапливаемая при его обходе, неизменна.

Поскольку вектор Бюргерса — важнейшая количественная характеристика дислокации, его условное обозначение отражает направление и величину искаженности кристаллической решетки.

При описании кристаллической решетки используются пространственная система координат, где за направления осей x , y и z обычно принимают кристаллографические направления ребер элементарной ячейки данной решетки.

Если вектор \vec{b} по трем координатным осям X , Y , Z имеет составляющие: b_x , b_y и b_z , то это записывается так: $\vec{b} = [b_x b_y b_z]$.

Мощность вектора Бюргерса, как мера искаженности решетки, характеризуется его величиной и определяется:

$$|\vec{b}| = \sqrt{b_x^2 + b_y^2 + b_z^2}. \quad (3.12)$$

Любой вектор — направление в кристаллической решетке, описывается с помощью кристаллографических параметров u , v , w .

Составляющие вектора Бюргерса по осям b_x , b_y и b_z представляют собой отрезки:

$$b_x = (nu)a; \quad b_y = (nv)b; \quad b_z = (nw)c.$$

В случае кубической решетки единичные параметры $a = b = c$, и тогда:

$$b = na[uvw]. \quad (3.13)$$

Здесь u , v и w — целые числа; $a[uvw]$ — является символом кристаллографического направления вектора Бюргерса.

Мощность же его составляет:

$$|\vec{b}| = na\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}. \quad (3.14)$$

Пример: Рассмотрим форму записи трех векторов Бюргерса \bar{b}_1 , \bar{b}_2 и \bar{b}_3 в примитивной кубической решетке (рис. 3.12) и определим их мощность.

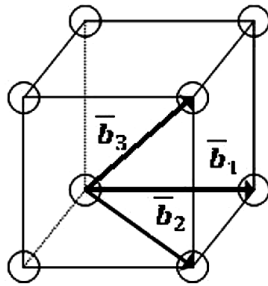


Рис. 3.12. Векторы Бюргерса в примитивной кубической решетке

Для вектора \bar{b}_1 составляющие по осям будут: $b_{1x} = 0$, $b_{1y} = a$ и $b_{1z} = 0$.

Следовательно, $\bar{b}_1 = [0\ 1a\ 0] = a [010]$.

Это значит, что направлением вектора \bar{b}_1 является кристаллографическое направление $[010]$, а мощность его равна:

$$a\sqrt{0^2 + 1^2 + 0^2} = a \quad (3.15)$$

Для вектора \bar{b}_2 : $b_{2x} = a$, $b_{2y} = a$ и $b_{2z} = 0$. $\bar{b}_2 = [1a\ 1a\ 0] = a [110]$.

Его величина равна (или мощность):

$$a\sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2} = a\sqrt{2} \quad (3.16)$$

Для вектора \bar{b}_3 имеем: $\bar{b}_3 = [1a\ 1a\ 1a] = a [111]$.

Его мощность равна:

$$a\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2} = a\sqrt{3} \quad (3.17)$$

3.6.1 Плотность дислокаций. Важнейшая характеристика дислокационной структуры — *плотность дислокаций, суммарная длина всех линий дислокаций в единице объема.*

Плотность дислокаций:

$$\ell/V \text{ см}^{-2} \quad (3.18)$$

где ℓ — суммарная длина всех линий дислокаций в кристалле, см; V — объем кристалла, см³.

В монокристаллических усах дислокации или совсем отсутствуют, или в монокристалле может находиться только одна дислокация.

Полупроводниковые кристаллы кремния и германия, даже массового промышленного производства, имеют сравнительно низкую плотность дислокаций (10^3 – 10^4 см⁻²).

Плотность дислокаций зависит от способа и режима обработки металла.

Ниже для металлов в разных состояниях приведены типичные значения плотности дислокаций, см⁻²:

Отожжённый обычный монокристалл	10^4 – 10^6
Отожжённый поликристалл	10^7 – 10^8
Металл после сильной холодной деформации	10^{11} – 10^{12}
Тщательно выращенный массивный монокристалл очень высокой чистоты	$<10^3$

Экспериментально суммарная длина дислокаций в единице объема (ℓ/V) определяется методом счета выхода линий дислокации на плоскость исследуемого образца.

От плотности дислокаций зависит большинство технически важных свойств металлов и сплавов.

Плотность дислокаций, которая может быть разной в различных микроучастках материала, влияет на величину пластической деформации, механизмы упрочнения и разрушения металлов.

Количественная оценка структуры, получаемой с помощью: *оптических микроскопов, электронной микроскопии, рентгенографии* относится к двумерным и представляют собой отражение среза (оптическая микроскопия) или проекции (электронная просвечивающая микроскопия) трехмерной структуры.

То есть анализ дислокационной структуры сводится к преобразованию стереологической реконструкции: характеристик двумерной в характеристики трехмерной структуры.

Важно отметить, что на поверхность могут выйти дислокации не всех систем скольжения, характерных для пластической деформации материала данного образца.

Из этого следует, что любое корректное определение плотности дислокации требует тщательного изучения микроструктур в одной и той же области образца. Для полной

и надежной оценки плотности дислокации требуется весьма трудоемкая экспериментальная работа.

3.7 Смешанные дислокации и криволинейные дислокации

Помимо предельных случаев, когда вектор Бюргерса перпендикулярен линии дислокации (краевая ориентация) либо параллелен ей (винтовая ориентация), возможна любая промежуточная ориентация, когда угол между вектором Бюргерса \vec{b}_1 и линией дислокации AC не равен 90° или 0° (рис. 3.13). Такие дислокации называются *дислокациями со смешанной ориентацией*.

В общем случае смешанная дислокация представляет собой произвольную пространственную кривую (рис. 3.13, а).

Если выделить контур Бюргерса 1–2–3–4–5–1 в идеальном кристалле (рис. 3.13, б) и повторить его, охватывая линию дислокации (рис. 3.13, а), то неувязка:

- в контуре Бюргерса 1–1' будет перпендикулярна линии дислокации;
- неувязка контура Бюргерса 1–2–6–7–5–1, охватывающего линию дислокации, будет параллельна линии дислокации.

Таким образом, вектор Бюргерса остается постоянным по величине и своей ориентации вдоль линии смешанной дислокации.

А сама дислокация изменяет свой характер от точки к точке: от краевой к винтовой и наоборот (рис. 3.13, в).

Величина относительного смещения двух частей кристалла остается неизменной, что обуславливает непрерывность линии дислокации.

Из этого следует, что:

- дислокация не может оканчиваться или начинаться внутри кристалла, в том числе и на включении;
- дислокация может замыкаться сама на себя, образуя петлю, выходить на свободную поверхность или разветвляться на другие дислокации.

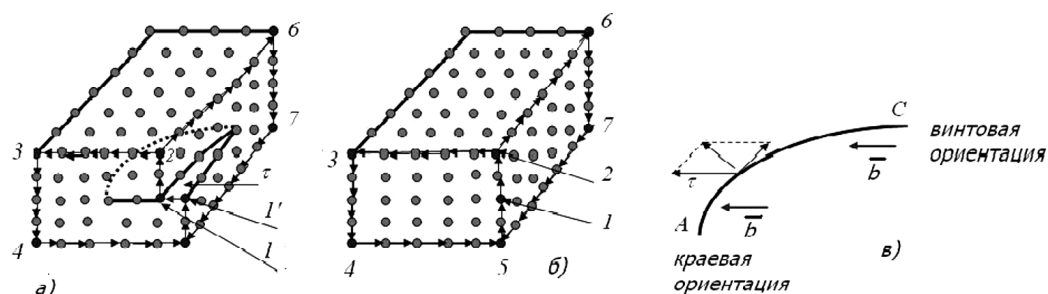


Рис. 3.13. Схема определение вектора Бюргерса смешанной дислокации

3.8 Призматические дислокации

Призматические дислокации появляются при формировании внутри кристалла атомной экстраплоскости в виде круглого диска или многоугольника.

Они могут быть вакансионного или межузельного происхождения.

Например, это наблюдается при ядерном облучении металлов, когда образовавшиеся в избытке межузельные атомы образуют плоские скопления.

Граница плоского скопления и представляет собой линию призматической дислокации.

На рисунке 3.14 приведена схема вертикального (а) и горизонтального (б) сечений кристалла через такую экстраплоскость из межузельных атомов.

Другой часто встречающийся механизм образования призматических дислокаций — это результат скопления вакансий в кристаллографической плоскости, которые образуют форму вакансионных дисков.

Такой диск пустоты в кристаллической решетке может расти только до определенных критических диаметров, при превышении которых под действием сил межатомного притяжения диск вакансий захлопывается (рис. 3.15).

Существуют несколько типов дислокационных петель. Если вектор Бюргерса лежит в плоскости петли, то ее называют *скользящей*, так как дислокация может скользить по плос-

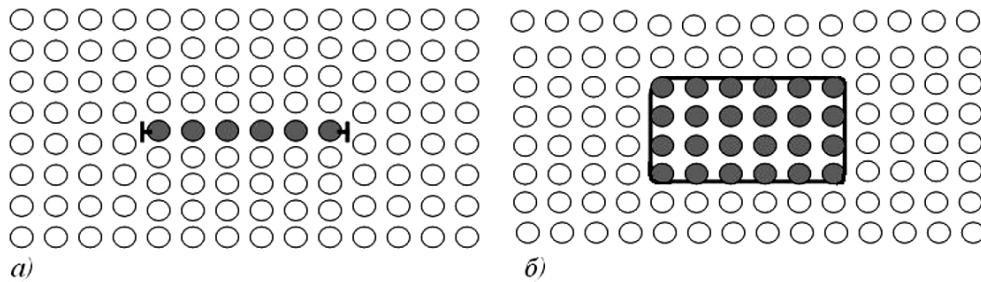


Рис. 3.14. Линия призматической дислокационной петли, являющаяся границей плоского скопления межузельных атомов

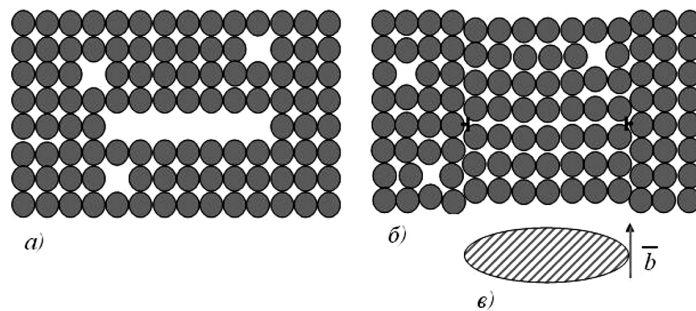


Рис. 3.15. Захлопывание вакансионного диска (а) с образованием призматической дислокационной петли (б), вектор Бюргерса которой перпендикулярен линии самой дислокации (в)

кости, если эта плоскость содержит и линию дислокации и вектор Бюргерса.

Если же вектор Бюргерса не лежит в плоскости петли (в частности, перпендикулярен), то такую петлю именуют *призматической*.

На рисунке 3.15 показано вертикальное сечение кристалла, в горизонтальной плоскости которого расположен вакансионный диск (а), кромка которого при захлопывании представляет собой петлю призматической дислокации (выделена значками дислокаций).

Пусть вектор сдвига будет перпендикулярен линии дислокации, тогда при ее скольжении образуется поверхность скольжения, которая представляет собой боковую поверхность призмы.

Такое скольжение назвали *призматическим*, а дислокации с краевой ориентацией вдоль всей линии, независимо от формы петли (окружность, шестиугольник и т.д.) — *призматическими*.

Призматическая дислокационная петля может перемещаться в своей плоскости неконсервативным путем (переползанием).

При образовании призматической петли межузельного происхождения петля будет сужаться при «растворении» кромок диска, то есть при уходе межузельных атомов, из которых состоит диск, в окружающий объем кристалла (рис. 3.14).

Этому процессу способствуют вакансионные стоки (источники) рядом с призматической дислокацией.

На рисунке 3.15 призматическая петля может сужаться при подходе атомов, достраивающих изнутри кольцевую дислокационную плоскость. Переползание может свести призматическую петлю в точку, т.е. устранить ее.

При неравновесном же избытке вакансий в решетке (рис. 3.15, б) призматическая петля будет увеличиваться в диаметре из-за подхода к ней вакансий.

Дислокационная петля может иметь форму многоугольника. Такая гексагональная призматическая петля с вектором Бюргерса $\frac{1}{2}[110]$ в плоскости (111) может образоваться в ГЦК металлах (рис. 3.16).

Вектор Бюргерса расположен под углом к плоскости петли. Так как вектор Бюргерса постоянен вдоль линии дислокации, то стороны EF , FA , DC , CB этой петли имеют винтовую компоненту.

Таким образом, основной характеристикой дислокационной петли является вектор Бюргерса, позволяющий определить вид дислокационной петли.

Они могут быть скользящими и призматическими.

Призматические петли могут перемещаться как консервативным путем — скольжением, так и неконсервативным — переползанием.

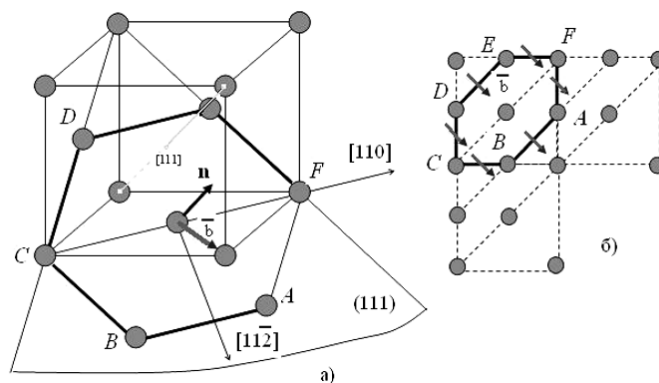


Рис. 3.16. Схема изображения гексагональной призматической петли (а) в плоскости (111) ГЦК металла. n — нормаль к плоскости петли; б) проекция петли на плоскость (001)

Глава 4. УПРУГИЕ СВОЙСТВА ДИСЛОКАЦИЙ В СПЛОШНОЙ СРЕДЕ

4.1 Энергия дислокаций

Наличие дислокаций в кристалле приводит к упругому искажению кристаллической решетки. Так, при краевой дислокации (рис. 4.1) атомы выше плоскости скольжения упруго сжаты, атомы ниже плоскости скольжения упруго растянуты.

Величина этих напряжений убывает с увеличением расстояния от ядра дислокации.

Вокруг оси винтовой дислокации также имеется поле упругих искажений кристаллической решетки.

Поэтому образование дислокаций связано с работой, совершаемой касательными напряжениями, которая приводит к повышению энергии кристаллической решетки.

Энергия винтовой (E_v) и краевой (E_k) дислокаций зависят от величины модуля сдвига (G), которая является характеристикой межатомных сил связи, от величины искаженности кристаллической решетки, вызываемой дислокацией, и может быть определена по формулам:

$$E_v = \frac{Gb^2\ell}{4} \ln \frac{R}{r_0}; E_k = \frac{Gb^2\ell}{4(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0}, \quad (4.1)$$

где ℓ — длина дислокации; r_0 — радиус ядра дислокации; R — расстояние, на которое распространяется упругая деформация от ядра дислокации; ν — коэффициент Пуассона; \vec{b} — вектор Бюргерса.

Так как в реальных кристаллах большинство дислокаций смешанного типа, то энергия таких дислокаций является промежуточной между значениями энергии краевой и винтовой дислокаций:

$$E_{см} = \frac{Gb^2\ell}{4(1-\nu)} \cos^2 \alpha \ln \frac{R}{r_0}, \quad (4.2)$$

где α — угол между вектором Бюргерса и линией дислокации. Для наиболее типичных интервалов значений R , r_0 и α энергия дислокации любого типа может быть определена по формуле:

$$E_d = Gb^2\ell, \quad (4.3)$$

где $\alpha = 0,5 \dots 1,0$

Уравнения (4.2, 4.3) описывают область напряжений в кристаллической решетке вне ядра кристаллической дислокации (r_0).

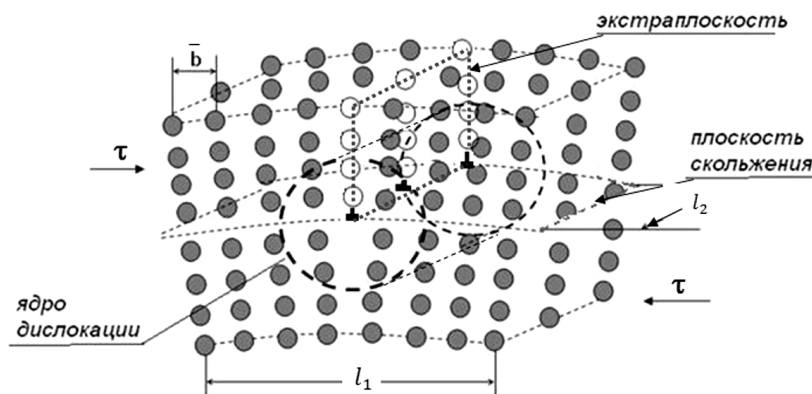


Рис. 4.1. Схема краевой дислокации

Предполагается, что радиус ядра дислокаций составляет $5 \cdot 10 \text{ см}^{-8}$.

Однако в ядре дислокаций сконцентрировано, как показывает оценка, всего $\sim 10\%$ энергии искажения.

Энергия дислокации зависит также от скорости движения дислокации. С приближением скорости дислокации к скорости звука c энергия E_d бесконечно возрастает.

При скоростях порядка $v=c/10$ и менее энергия дислокации примерно равна энергии покоя, при повышении скорости v ($c\sqrt{3}$)/2 энергия дислокации удваивается.

При этом энергия дислокаций значительно больше энергии теплового колебания $E_d \gg kT$;

Это означает, что дислокации самопроизвольно образовываться не могут.

Таким образом, энергия дислокации сильно зависит от межатомных сил связи, чем больше модуль сдвига G , тем сильнее сопротивление смещению атомов, больше накапливается упругая энергия искажений решетки и для дислокаций любого типа она пропорциональна квадрату вектора Бюргерса.

4.2 Линейное натяжение

Так как дислокация создает внутри кристалла искажения, вдоль линии дислокации тянется область кристалла с повышенной энергией:

$$T = \frac{G\bar{b}^2 \ell}{\ell} = G\bar{b}^2. \quad (4.4)$$

Увеличение длины линии дислокаций приводит к росту ее упругой энергии.

Поэтому линия дислокации всегда стремится выпрямиться, чтобы сократить свою длину.

4.3 Силы, действующие на дислокацию

При движении дислокации происходит деформация кристаллов, то есть выполняется работа. Для выполнения этой работы на дислокацию должна действовать сила.

На дислокацию действуют силы разного происхождения: внешние — приложенные извне к кристаллу, внутренние — от действия поля напряжений вокруг дислокации, создаваемые соседними дислокациями, инородными атомами и другими несовершенствами кристаллической решетки.

Силу, действующую на дислокацию, можно определить.

Рассмотрим схему образования краевой дислокации (рис. 4.1). Пусть F — величина внешней силы, обеспечивающая необходимое сдвиговое напряжение τ , которое действует на площади $\ell_1 \ell_2$, т.е. сила $F = \tau \ell_1 \ell_2$.

Когда дислокация (экстраплоскость) пройдет через весь кристалл, верхняя ее часть

сместится относительно нижней на величину \bar{b} . При этом будет совершена работа:

$$A = F\bar{b} = (\tau \ell_1 \ell_2) \bar{b}. \quad (4.5)$$

С другой стороны, если сила, действующая на единицу длины дислокации f , то сила F_d , действующая на всю длину линии дислокации ℓ_2 , будет $F_d = f \ell_2$.

Тогда работа A_d силы F_d при перемещении дислокации через весь кристалл, то есть на расстояние ℓ_1 , будет $A_d = F_d \ell_1$.

Приравнявая $A_d = A$, то есть $f \ell_1 \ell_2 = (\tau \ell_1 \ell_2) \bar{b}$, получим:

$$f = \tau \bar{b}. \quad (4.6)$$

Сила, действующая на единицу длины дислокации, равна произведению вектора Бюргерса на касательное напряжение в плоскости скольжения.

Можно аналогично доказать, что и в случае винтовой дислокации сила, действующая

на единицу длины дислокации, направлена перпендикулярно к линии дислокации и равна:

$$f = \bar{b}. \quad (4.7)$$

В случае смешанной криволинейной дислокации сила, действующая на единицу длины, равна произведению вектора Бюргерса на касательное напряжение и направлена перпендикулярно в любой точке линии дислокации участка плоскости скольжения, еще не охваченного сдвигом (рис. 4.2).

Так как пластическая деформация осуществляется путем перемещения дислокаций, в процессе которого они приобретают сложную криволинейную форму, важно знать величину напряжения, изгибающую линию дислокации.

С одной стороны, на дислокацию действует сила $f = \bar{b}$ (\bar{b} — смещение линии дислокации в данном поле касательных напряжений), и, с другой стороны, линейное натяжение дислокации, стремящееся выпрямить дислокацию $T = Gb^2$ (b — вектор Бюргерса).

Отсюда величина напряжения, изгибающего линию дислокации в дугу радиусом r , определится как:

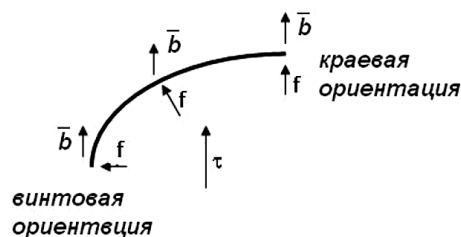


Рис. 4.2. Схема действия силы на единицу длины дислокации

$$\frac{aG\bar{b}}{r}. \quad (4.8)$$

Таким образом, дислокация — это линейный дефект в кристаллической решетке, существенно влияющий на распределение напряжений в кристалле.

Перемещение дислокации под влиянием внешних напряжений происходит исключительно потому, что результирующее напряжение сдвига позволяет внешним силам совершить работу над объемом кристалла, содержащего дислокацию.

4.4 Упругое взаимодействие краевых и винтовых дислокаций

Наличие дислокаций в кристалле увеличивает его энергию и создает поля упругих искажений.

Поэтому они вызывают некоторые взаимодействия с элементами структуры.

Их можно рассматривать с точки зрения того, как изменяется энергия кристаллической решетки от такого взаимодействия. Естественно, самопроизвольно будут протекать процессы, которые будут уменьшать искажения и энергию решетки.

Взаимодействие краевых дислокаций разных знаков в одной плоскости скольжения (рис. 4.3, а, б). Такие дислокации будут притягиваться, так как сближение их уменьшает искажения кристаллической решетки.

Когда верхняя и нижняя экстраплоскости совпадут, дислокации взаимно уничтожаются — аннигилируют.

Очевидно, краевые дислокации одинаковых знаков в одной плоскости скольжения, будут отталкиваться, так как их сближение должно приводить к усилению искажения кристаллической решетки, увеличению ее энергии (рис. 4.3, в).

Две параллельные краевые дислокации, расположенные в разных плоскостях на расстоянии b , притягиваются, если $b < d$, и отталкиваются при $b > d$ (рис. 4.4).

Краевые дислокации разных знаков в разных параллельных плоскостях скольжения будут притягиваться, и в месте их слияния могут

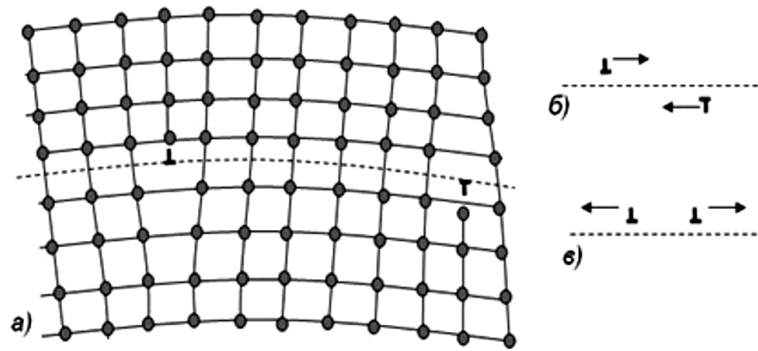


Рис. 4.3. Схема взаимодействия краевых дислокаций разного знака, расположенных в смежных плоскостях (а, б) и одного знака — в плоскости скольжения (в)

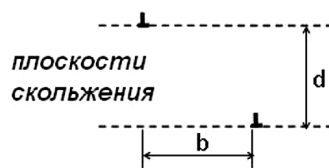


Рис. 4.4. Краевые дислокации в параллельных плоскостях, удаленных друг от друга на расстояние d

образоваться цепочки вакансий или межузельных атомов.

Если несколько дислокаций одного знака расположены в разных плоскостях (рис. 4.6, а), то они стремятся расположиться друг на другом, образуя дислокационную стенку.

При таком расположении дислокаций образуется малоугловая разориентировка между двумя частями кристалла (рис. 4.6, б) — блоками.

Если дислокации имеют разные знаки, то они стремятся принять устойчивую конфигурацию, приведенную на рис. 4.6 (в), когда ра-

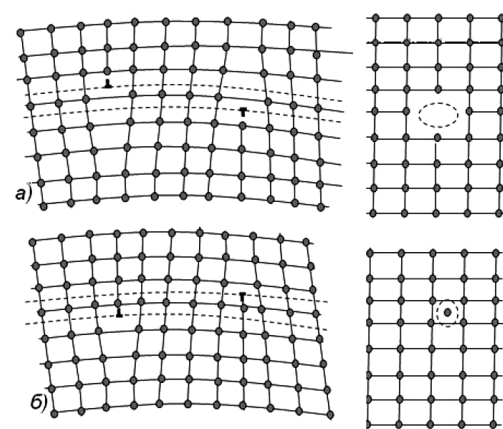


Рис. 4.5. Схема образования цепочек вакансий (а) и межузельных атомов (б) при взаимодействии краевых дислокаций разного знака

диус-вектор, соединяющий ядра дислокаций, образует с плоскостью скольжения угол 45° .

Взаимодействие винтовых дислокаций. Известно, две любые параллельные винтовые дислокации всегда лежат в одной плоскости.

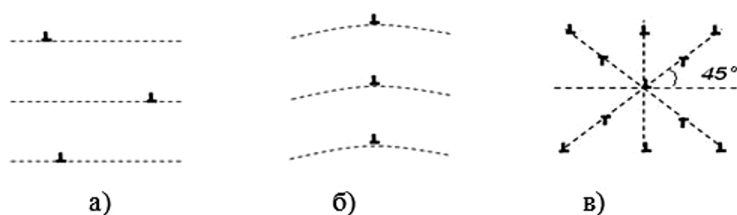


Рис. 4.6. Перераспределение дислокаций под действием полей внутренних напряжений

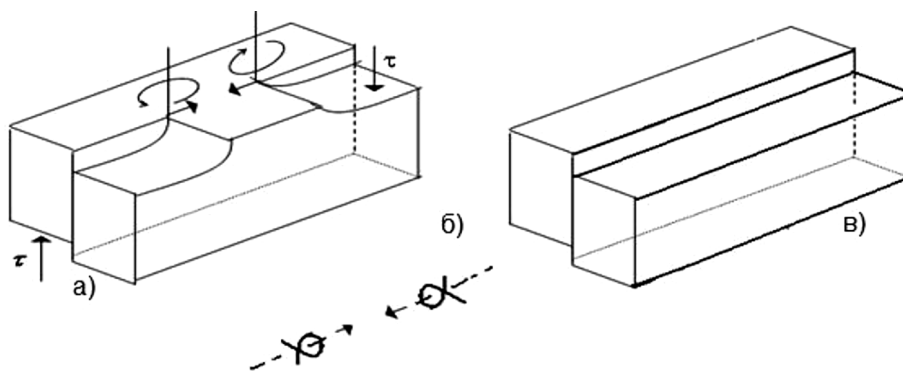


Рис. 4.7. Схема взаимодействия винтовых дислокаций разных знаков.
 а) кристалл с правой П и левой Л винтовыми дислокациями, скользящими в плоскости ABCD;
 б) условное схематичное обозначение винтовых дислокаций;
 в) сдвиг части кристалла при встрече П и Л дислокаций и их аннигиляции

При этом они могут быть одноименными или разноименными (рис. 4.7).

Винтовые дислокации имеют осевую симметрию поля напряжения. Сила взаимодействия f таких винтовых дислокаций на расстоянии R друг от друга равна:

$$f = \frac{Gb^2}{2R}. \quad (4.9)$$

Знаки «плюс» и «минус» относятся к дислокациям разного вращения (разноименным дислокациям). Из этого следует, что одноименные винтовые дислокации должны отталкиваться, разноименные — притягиваться и аннигилировать.

Параллельные краевая и винтовая дислокации не взаимодействуют. На рисунке 4.8 приведена схема образования винтовой и краевой параллельных дислокаций. Краевая

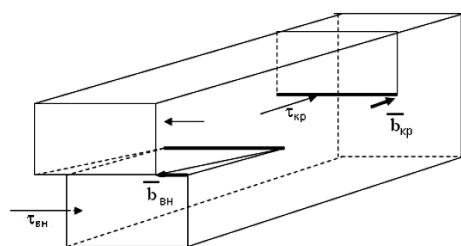


Рис. 4.8. Схема образования винтовой и краевой параллельных дислокаций

вая дислокация может перемещаться при воздействии касательного напряжения, направленного перпендикулярно линии дислокации.

Винтовая дислокация перемещается при воздействии касательного напряжения, направленного параллельно линии дислокации.

Поэтому образовавшиеся при пластической деформации кристалла параллельные краевые и винтовые дислокации не могут самопроизвольно взаимодействовать.

Таким образом, образующиеся при различных видах обработок материалов, дефекты создают поля внутренних напряжений в объеме кристаллитов металлов и сплавов.

Это приводит к самопроизвольному взаимодействию между ними и возникновению более стабильных характерных структур обработок:

- цепочек вакансий,
- межузельных атомов,
- блочности структуры зерен.

Глава 5. ОБРАЗОВАНИЕ И РАЗМНОЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ

5.1 Плотность дислокаций в равновесном состоянии

Известно, что в кристаллах, находящихся в равновесном состоянии, когда на них не действуют напряжения, плотность дислокаций составляет $10^6 - 10^7 \text{ см}^{-2}$, что даже в тщательно выращенных монокристаллах очень высокой чистоты плотность дислокаций порядка $10^3 - 10^4 \text{ см}^{-2}$.

Следовательно, механизм образования дислокаций в результате местного сдвига в кристалле, когда дислокация определяется как граница незавершенного сдвига, является не единственным. Должны быть еще и другие причины и механизмы образования дислокаций.

5.1.1 Дислокации, образующиеся при росте кристаллов. Процессы кристаллизации в реальных условиях протекают при относительно ускоренном охлаждении. При этом рост кристаллов осуществляется путем пристройки атомов к образовавшейся в кристаллическом зародыше ступеньке. Благодаря этому может осуществляться спиралевидное перемещение атомной плоскости в направлении роста. Выросший таким образом кристалл содержит винтовую дислокацию (рис. 5.1).

Известно также, что кристаллы могут состоять из блоков, разориентированных друг относительно друга, малоугловые границы которых являются внутренними дефектами структуры.

Одним из возможных путей образования такой структуры является процесс кристаллизации, когда каждый блок представлял самостоятельным росший кристаллик, который по сравнению с соседним на стадии образования зародыша имел малую степень разориентировки.

При срастании блоков поверхность стыка состоит из множества незавершенных кристаллографических плоскостей, которые можно классифицировать как экстраплоскости, а края таких экстраплоскостей есть не что иное как краевые дислокации.

Образование блоков в кристаллах может происходить и при дендритном росте кристаллов.

Так, действие конвекционных потоков атомов на ветки растущих дендритов приводит к изгибу последних, которые зарастая образуют блочную структуру.

5.1.2 Вакансионный механизм образования дислокаций. Образование точечных дефектов значительно повышает энтропию кристалла, поэтому в кристаллах всегда присутствуют точечные дефекты.

Их концентрация резко возрастает при повышенных температурах. Перемещаясь внутри кристалла, вакансии могут концентрироваться, образуя в кристаллографических плоскостях плоскости в форме вакансионных дисков.

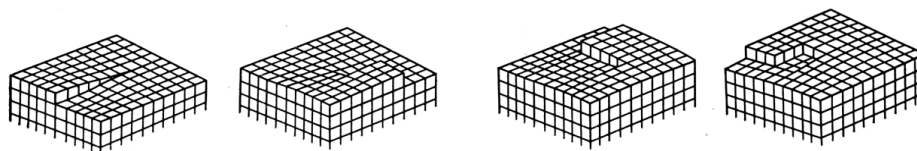


Рис. 5.1. Спиральный рост кристалла, осуществляемый путем присоединения частицы к не зарастающей ступеньке на выходе винтовой дислокации

Такие диски могут расти в результате поглощения диффузионных вакансий до определенных критических размеров, когда энер-

гетически выгодно «захлопывание» их с образованием по краю диска краевой дислокации.

5.2 Механизм размножения дислокаций. Источник Франка-Рида

Дислокации в процессе деформации перемещаются, могут взаимодействовать между собой и с дефектами, выйти на поверхность кристалла.

Но при этом плотность дислокаций в некоторых реальных условиях обработок, наоборот, увеличивается.

Например, степень пластической деформации прямо пропорционально связана с плотностью дислокаций:

$$\bar{b} \quad (5.1)$$

Появление новых дислокаций связано с тем, что движущиеся дислокации производят новые дислокации

В настоящее время известны два способа размножения дислокаций в процессе их движения. Первый способ был предложен Франком и Ридом (1962 г.).

Традиционно в учебной литературе рассматривают этот случай. Согласно этому механизму дислокации генерируются в результате движения закрепившейся в одной или двух точках (по тем или иным причинам) краевого участка дислокации.

Такая закрепленная дислокация называется *источником Франка-Рида*.

Источник состоит из отрезка AB линии краевого участка дислокации, которая закреплена с обоих концов другими дислокациями (рис. 5.3, а).

Этот отрезок лежит в плоскости скольжения и имеет вектор Бюргера, перпендикулярный линии дислокации и лежащий в плоскости чертежа.

Отрезки FA , EA , BC , BD относятся к другим дислокациям, и потому такого вектора Бюргера не имеют.

Плоскость чертежа соответствует плоскости скольжения.

Приложенное напряжение, которое действует с силой f , выгибает дислокацию в направлении вектора Бюргера (рис. 5.3, б).

Поскольку энергия дислокации возрастает в результате ее удлинения при изгибе, линия дислокации действует как упругая струна и оказывает сопротивление силе f .

Величина напряжения, необходимая для изгиба линии дислокации в дугу, составляет:

$$\sigma G\bar{b} / r, \quad (5.2)$$

где r — радиус кривизны.

Дальнейший изгиб линии дислокации (рис. 5.3, в) требует возрастания приложенно-

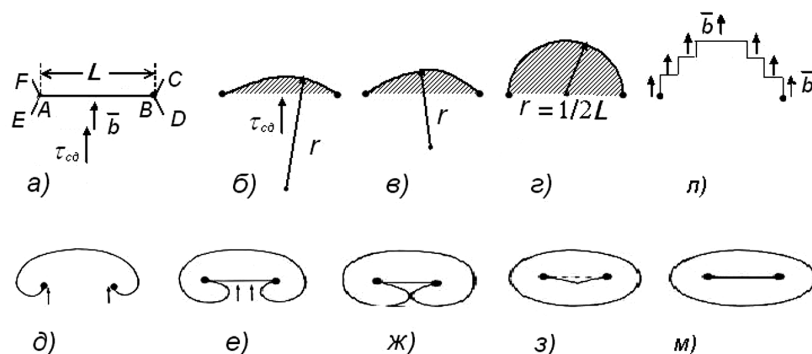


Рис. 5.3. Схема работы источника Франка-Рида

го напряжения сдвига, так как радиус кривизны при этом уменьшается.

Это приложенное напряжение сдвига достигает максимума при $r = 0,5 L$ (рис. 5.3, з).

Таким образом, натяжение линии дислокации уравнивает приложенную силу до тех пор, пока напряжение не достигнет критической величины:

$$\sigma_{\max} = aGb / (0,5L), \quad (5.3)$$

где L — размер источника.

Дальнейшее расширение петли дислокации требует меньшего напряжения, так как может осуществляться самопроизвольно.

Так как, линия дислокации проходит через кристаллическую решетку и при изгибе она приобретает смешанную ориентацию (рис. 5.3, к), то на линии дислокации имеются участки параллельных краевых и винтовых ориентаций одного знака.

Известно, что две одноименные краевые дислокации должны отталкиваться, поэтому дислокационная петля испытывает дальнейшее самопроизвольное расширение, так как разные ее участки будут скользить в разные стороны.

Необходимое напряжение для расширения петли σ_{\max} , так как радиус кривизны дислокации увеличивается.

Дислокационная петля при этом закручивается вокруг точек закрепления в виде двух симметричных спиралей (рис. 5.3, е) винтовых дислокаций разного вращения.

Известно, что одноименные винтовые дислокации отталкиваются, разноименные — притягиваются и аннигилируют.

Поэтому винтовые составляющие разного вращения движутся навстречу друг другу (рис. 5.3, ж). Как только они соприкоснутся, дислокации аннигилируют.

Таким образом, происходит сдвиг. Огромная кривизна приводит к тому, что отрезок AB выпрямляется и восстанавливается вновь (рис. 5.3, з).

По такому механизму источник Франка-Рида может породить неограниченное число дислокационных петель.

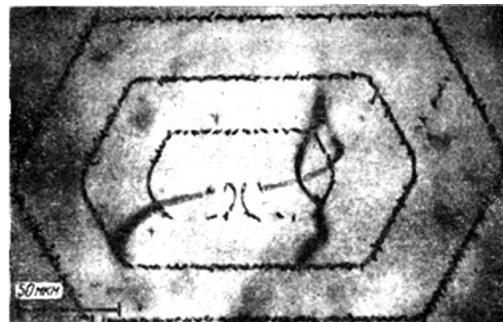


Рис. 5.4. Дислокационные петли в пластине кремния в инфракрасном микроскопе. Дислокационные петли декорированы медью

Это происходит при условии, что узлы остаются фиксированными в пространстве, а локальное напряжение, действующее на источник, превосходит критическое.

Источники Франка-Рида экспериментально были обнаружены в кремнии, нержавеющей стали, кадмии и других материалах, наблюдали в электронном микроскопе (рис. 5.4).

Считая, что каждый источник может выпустить от 10 до 20 петель, а длина петли больше источника, длина дислокации по протяженности возрастает в 100 раз.

Однако на практике такие дислокации редки, и наблюдаемые дислокации в основном они размножаются по другим механизмам.

Источники Франка-Рида обеспечивают пластическую деформацию скольжением краевых дислокаций в одной плоскости скольжения.

Известна вторая схема размножения дислокаций с участием поперечного скольжения винтовых дислокаций (рис. 5.5, а), способствующих появлению и размножению дислокаций в соседних плоскостях, параллельных исходным плоскостям скольжения.

Рассмотрим схему размножения дислокаций в параллельных плоскостях (рис. 5.5, б).

Исходная винтовая дислокация OP движется в горизонтальной плоскости.

Независимо от формы дислокации (вектор Бюргера постоянен по всей ее линии) могут двигаться только в плоскости сколь-

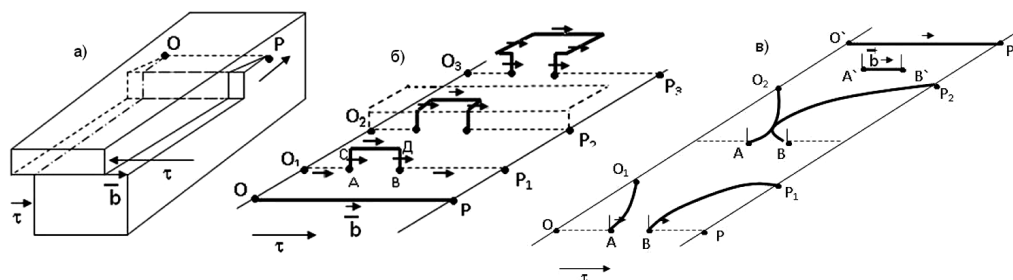


Рис. 5.5. Схема размножения дислокаций в параллельных плоскостях

жения под действием напряжения τ , перпендикулярного вектору Бюргера.

Встретив на своем пути препятствие или за счет каких-нибудь внутренних напряжений, один участок винтовой дислокации AB переходит в поперечную плоскость скольжения, и на винтовой дислокации O_1P_1 появляется участок дислокации, лежащий в поперечной плоскости скольжения.

Участки AC и BD не могут перемещаться в направлении движения винтовой дислокации, так как они имеют краевую ориентацию.

При дальнейшем скольжении дислокация OP перемещается не по всей длине, а лишь участками (выделенными жирными линиями на рис. 5.5, б, в) в разных плоскостях, в результате чего конфигурация линии дислокации постоянно меняется.

Участок CD вместе с участками AC и BD , удерживаемыми его концы, может действовать подобно источнику Франка-Рида (рис. 5.5, б, проекции O_2P_2 , O_3P_3), расположенного в новой плоскости скольжения дислокации.

Точно также как при работе источника Франка-Рида, участок CD может стать отдельной дислокацией.

Петля, порожденная участком CD , может испытать новое поперечное скольжение, и таким образом процесс возобновится в новой плоскости скольжения.

Одновременно с этими процессами участки OA , BP , оставшиеся позади O_1P_1 (рис. 5.5, в), испытывают скольжение в первоначальной плоскости скольжения.

Дислокации AO_1 и BP_1 имеют смешанную ориентацию и при дальнейшем движении аннигилируют в точке соприкосновения (рис. 5.5, в, проекции AO_2 и BP_2), в результате чего образуются две новые дислокации $A'B'$ и $O'P'$, которые могут работать как новые источники Франка-Рида.

В настоящее время получены многочисленные доказательства действия этого механизма размножения в реальных кристаллах.

Этим механизмом объяснили и образование пачек линий скольжения или полос скольжения (1958 г.).

Есть и другой механизм размножения, причины действия которого пока неизвестны, наблюдаемый на начальных стадиях деформации.

При этом дислокации, закрепленные атмосферами, не перемещаются внутри кристалла, а появляющиеся новые дислокации, которые как бы впрыскиваются со свободной поверхности границ зерен, то есть границы являются поставщиками дислокаций.

Таким образом, пластическая деформация осуществляется не только движением дислокаций, а сопровождается взаимодействием дислокаций между собой и их размножением.

Энергия дислокации:

$$E_A = G\bar{b}^2L \quad (5.4)$$

Энергия дислокации меньше, если меньше величина (\bar{b}) критического расстояния между атомами.

Чисто алгебраически любой вектор можно заменить суммой векторов. То есть, можно подобрать условия когда

$$(\bar{b}_1)^2 + (\bar{b}_2)^2 = (\bar{b}_3)^2,$$

тогда \bar{b}_2, \bar{b}_3 — будут расстояния меньше, чем межатомные, это будут параметры, характеризующие дефекты упаковок в решетке кристаллического вещества.

Энергия, связанная с дефектом упаковки:

$$G(\bar{b}_1)^2 + G(\bar{b}_2)^2 + G(\bar{b}_3)^2 = L. \quad (5.5)$$

Такие металлы, как чистые Ag, Cu, сплавы аустенита, нержавеющие стали, сплавы Ni-Co, латуни, бронзы, имеют низкую энергию упаковки, поэтому образующиеся в них дислокации всегда расщеплены.

В процессе деформации при перемещении дислокации стягиваются в полные, а затем вновь расщепляются.

Поэтому во многих случаях поперечное скольжение не наблюдается.

В ГЦК кристаллах наблюдается расщепление:

$$\bar{b}_1 = \bar{b}_2 + \bar{b}_3.$$

Запись дислокации в общем виде:

\bar{b}_1	1/2a	1/2a	0	\bar{b}_1	a/2	110
\bar{b}_2	1/6a	1/6a	2/6a	\bar{b}_2	a/6	112
\bar{b}_3	1/6a	2/6a	1/6a	\bar{b}_3	a/6	121

Таким образом, кристаллические материалы, подвергаемые различным внешним воздействиям (технологическим процессам), реагируют изменениями в своей тонкой структуре. Схемы и механизмы образования, размножения дислокаций, которые перемещаются и взаимодействуют между собой и с другими дефектами, имеют различные причины и пока не все еще объяснены.

Глава 6. ДИСЛОКАЦИИ В ТИПИЧНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

6.1 Полные и частичные дислокации

Если подразделение дислокаций на краевые, винтовые и смешанные основано на отношении ориентации вектора Бюргера к линии дислокации, то в основу классификации дислокаций на полные и частичные положена величина вектора Бюргера, которая сопоставляется с единичным вектором тождественной трансляции кристаллической решетки.

Дислокацией *единичной мощности* называются дислокации, при пробеге которой в зоне сдвига кристаллической решетки сохраняется исходная конфигурация атомов.

В простой кубической решетке (рис. 6.1), к единичным относятся дислокации, имеющие векторы Бюргера $\mathbf{a}\langle 100 \rangle$, $\mathbf{a}\langle 110 \rangle$ либо $\mathbf{a}\langle 111 \rangle$.

Исходная структура кристалла сохраняется не только при пробеге дислокаций единичной мощности.

Дислокация, у которых вектор Бюргера равен трансляционному вектору, называется *полной дислокацией*. Полные дислокации могут быть единичными ($n=1$) и n -кратной мощности. Полные дислокации могут быть как краевыми, так и винтовыми или смешанными.

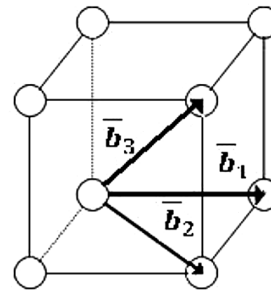


Рис. 6.1. Векторы Бюргера дислокаций единичной мощности в простой кубической решетке: \bar{b}_i $a\langle uvw \rangle$

Помимо полных дислокаций важную роль в процессах деформации, упрочнения, разупрочнения, взаимодействия с примесями и др. играют так называемые *неполные* или *частичные дислокации* с векторами Бюргерса, не являющимися векторами тождественной трансляции, и связанные с ними *дефекты упаковки*.

Смешанная дислокация может быть и полной и частичной. При этом каждый тип кри-

сталлической структуры (ОЦК, ГПУ или ГЦК и др.) характеризуется своими единичными и частичными дислокациями. Эти характерные или типичные дислокации играют исключительно важную роль в разнообразных процессах в металлах, определяя их механические и другие свойства.

6.2 Дислокационные реакции и энергетический критерий для определения направления реакций

Упругая энергия дислокаций по порядку величины составляет несколько электрон-вольт на одно межатомное расстояние. Она пропорциональна модулю сдвига кристалла и степени искаженности решетки, характеризуемой вектором Бюргерса, и на 1 см длины дислокации равна:

$$E \sim 0,5G\bar{b}^2. \quad (6.3)$$

Отсюда вытекает простое правило оценки энергетической выгоды образования дислокаций различных типов.

Пусть, например, дислокация обладает вектором Бюргерса \bar{b}_3 : $(\bar{b}_1 \bar{b}_2)$, где \bar{b}_1 и \bar{b}_2 образуют острый угол, то есть $\bar{b}_1 \bar{b}_2 < 90^\circ$.

Тогда $E_1 \sim (\bar{b}_1^2)$, $E_2 \sim (\bar{b}_2^2)$, $E_3 \sim (\bar{b}_3^2)$ — суммарная энергия двух дислокаций с векторами Бюргерса \bar{b}_1 и \bar{b}_2 оказывается меньше, чем энергия исходной дислокации.

Следовательно, дислокациям с большим вектором Бюргерса энергетически выгодно расщепляться на несколько единичных дислокаций с векторами Бюргерса, равными одному из минимальных векторов трансляции.

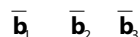
Хотя при росте кристаллов иногда возникают гигантские дислокации с вектором Бюргерса в несколько десятков и сотен параметров решетки, основная масса дислокаций в кристаллах состоит из единичных дислокаций, и специфика дислокационной структуры данного кристалла во многом определяется набором минимальных векторов трансляции.

При этом все дислокационные реакции должны подчиняться простому *критерию Франка*: *реакция возможна в том случае, если сумма квадратов векторов Бюргерса исходных дислокаций больше суммы квадратов векторов Бюргерса дислокаций, образующихся в результате реакции.*

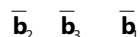
Критерий Франка или правило квадратов основано на двух положениях:

- энергия дислокаций пропорциональна квадрату вектора Бюргерса;
- реакция должна приводить к уменьшению энергии системы.

Полная дислокация может *расщепляться* — *диссоциировать* на частичные:



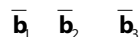
Частичные дислокации могут объединяться в полную:



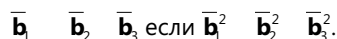
Частичные дислокации могут *рекомбинировать*, давая другие частичные дислокации:



Полная и частичная дислокации могут дать частичную дислокацию:



Возможны и другие варианты дислокационных реакций. Дислокация может диссоциировать на две:



Если $\bar{b}_1^2 \bar{b}_2^2 \bar{b}_3^2$, то реакция диссоциации невозможна.

Если же $\bar{b}_1^2 \bar{b}_2^2 \bar{b}_3^2$, то возникает неопределенность: критерий Франка не позволяет предсказать, возможна ли диссоциация. Однако учитывая рост энтропии при диссоциации, следует признать возможность этой реакции.

Неустойчивость полной дислокации n -кратной мощности и распад ее на n дислокаций с единичным вектором Бюргерса также согласуется с критерием Франка.

Объединение двух дислокаций в одну $\bar{b}_1 \bar{b}_2 \bar{b}_3$ возможно в том случае, если $\bar{b}_1^2 \bar{b}_2^2 \bar{b}_3^2$.

При анализе дислокационных реакций с записью в кристаллографических индексах полезно помнить следующее правило:

Сумма векторов Бюргерса исходных дислокаций равна сумме векторов Бюргерса дислокаций, получающихся в результате реакции.

Например, реакция диссоциации полной дислокации на две частичные может быть записана:

- в векторной форме — $(\bar{b}_1 \bar{b}_2 \bar{b}_3)$;
- в кристаллографических символах — $(a/n_1 \langle u_1 v_1 w_1 \rangle + a/n_2 \langle u_2 v_2 w_2 \rangle = a/n_3 \langle u_3 v_3 w_3 \rangle)$.

Анализ правильности записи реакции в кристаллографических символах векторов Бюргерса:

$$(a/n_1)u_1 = (a/n_2)u_2 + (a/n_3)u_3;$$

$$(a/n_1)v_1 = (a/n_2)v_2 + (a/n_3)v_3;$$

$$(a/n_1)w_1 = (a/n_2)w_2 + (a/n_3)w_3.$$

6.3 Характерные полные и частичные дислокации в ГЦК решетке

Почти все сравнительно мягкие, пластичные, легко обрабатываемые металлы кристаллизуются в ГЦК решетке: медь, золото, серебро, свинец, никель, алюминий, -кобальт и другие.

Многие из них образуют непрерывные ряды твердых растворов, например, Ag-Au, Cu-Au.

ГЦК структурой обладают также интерметаллические соединения AuSb, Au₂Bi, TiH, Cu₂Mg и др.

В ГЦК решетке плоскость плотнейшей упаковки {111}, а наиболее плотноупакованное направление n .

На рисунке 6.2 показано три слоя шаров, образующих плотноупакованные плоскости типа (111), а одно из плотноупакованных направлений показано стрелкой.

Плоскости плотнейшей упаковки в ГЦК решетки чередуются, образуя последовательность ABCABCABC...

Каждый атом в слое плотнейшей упаковке окружен 6 соседними атомами.

В лунки между тремя атомами первого слоя А ложатся атомы второго слоя В.

Слой атомов В заполняет часть лунок слоя А.

Слой С не повторяет характер расположения атомов слоя А.

Атомы располагаются в лунках второго слоя В, при этом закрывая открытые пустоты первого слоя атомов А.

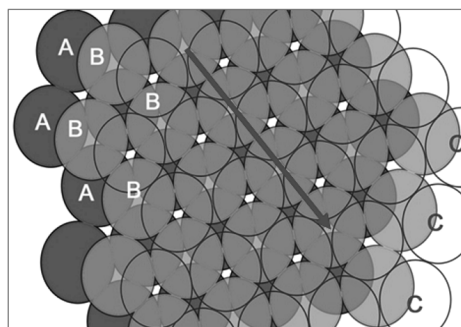


Рис. 6.2. Плотнейшая шаровая упаковка ABC (темные шары — слой А, светло-серые — слой В, прозрачные шары — слой С)

Таким образом образуется кубическая плотнейшая трехслойная упаковка в ГЦК решетке металлов, упаковка атомов типа ABCABC....

Единицами трансляции в ГЦК решетке являются векторы $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ (рис. 6.3).

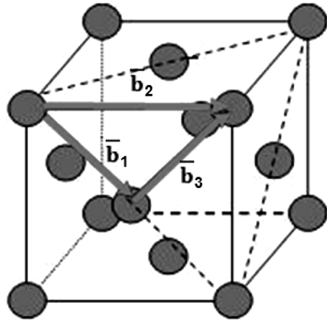


Рис. 6.3. Элементарная ячейка ГЦК решетки с векторами Бюргера единичных полных дислокаций

Минимальный единичный вектор Бюргера тождественной трансляции — это вектор типа $\vec{b}_1 = a/2n$, соединяющий два соседних атома, расположенных в плоскости плотнейшей упаковки {111}.

Мощность такой дислокации

$$|\vec{b}_1| = \frac{a}{2}\sqrt{2}^2.$$

Единичный вектор тождественной трансляции вектор $\vec{b}_2 = a\langle 100 \rangle$ с мощностью a может диссоциировать по реакции $\vec{b}_2 = \vec{b}_1 + \vec{b}_3$ полных дислокаций.

Однако энергетический критерий Франка не дает определенного ответа, так как:

$$a^2 = \left(\frac{a}{2}\sqrt{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\sqrt{2}\right)^2.$$

Учитывая рост энтропии при диссоциации, можно считать эту реакцию вполне вероятной.

Единичная краевая дислокация, лежащая в плоскости (111) ГЦК решетки с вектором Бюргера \vec{b}_1 всегда содержит две экстраплоскости, такая дислокация называется *нерасщепленной*.

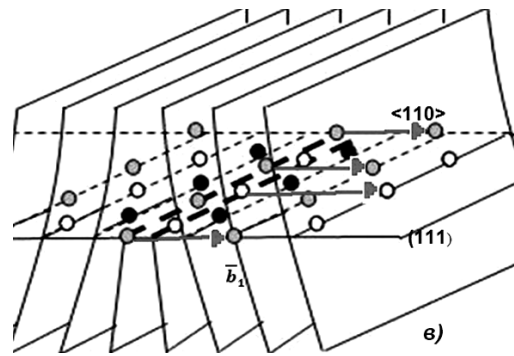
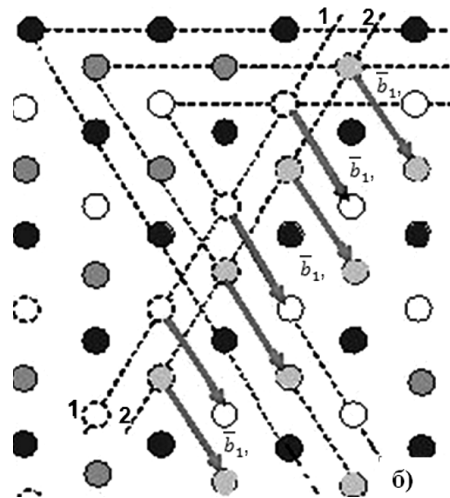
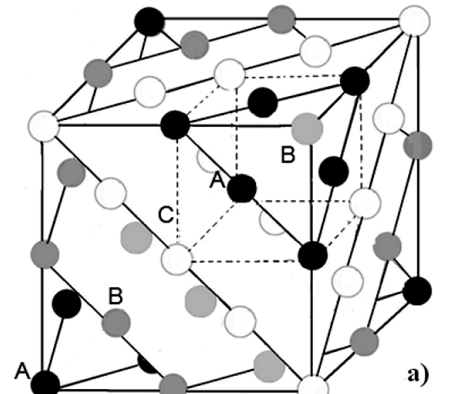


Рис. 6.4. Схема возникновения нерасщепленной дислокации в ГЦК решетке: а) упаковка последовательно расположенных слоев атомов в позициях ABCABC; б) показаны проекции всех слоев A, B и C на плоскости (001); в) дефект, состоящий из двух полуплоскостей

Энергия полной единичной нерасщепленной дислокации с вектором Бюргера типа $\bar{\mathbf{b}}_1 \frac{a}{2}\langle 110 \rangle$ в гранецентрированной кубической решетке может понизиться вследствие расщепления в плоскости $\{111\}$ на две дислокации с векторами Бюргера в направлениях $\langle 121 \rangle$, лежащих в той же плоскости.

На рисунке 6.4, а показаны параллельные слои плоскостей плотнейшей упаковки:

- темные шары А — атомы нижнего слоя,
- серые шары В — атомы второго слоя, светлые шары С — атомы третьего слоя и т.д.

Допустим, слой атомов А — плоскость скольжения, в ней лежит линия краевой дислокации 1–1 (рис. 6.4, б) с вектором Бюргера $\bar{\mathbf{b}}_1 \frac{a}{2}\langle 110 \rangle$.

При сдвиге в направлении вектора атомы В, С и всех остальных вышележащих слоев должны смещаться вправо как указано на рис. 6.4, б стрелками.

Такое же скольжение, равное мощности вектора Бюргера, испытывает и линия дислокации.

Очевидно, что при скольжении линии дислокации в направлении минимального единичного вектора Бюргера $\bar{\mathbf{b}}_1 \frac{a}{2}\langle 110 \rangle$ ниже плоскости скольжения остаются две полуплоскости 1 и 2 (рис. 6.4, в).

Таким образом, единичная дислокация $\bar{\mathbf{b}}_1$ в ГЦК решетке образует дефект, состоящий из двух полуплоскостей, краевая отрицательная дислокация с вектором Бюргера $\bar{\mathbf{b}}_1$ проходит по границе двух экстраплоскостей.

На рисунке 6.5 показаны векторы Бюргера возможной реакции расщепления на две дислокации:

$$a/2[01\bar{1}] \quad a/6[\bar{1}2\bar{1}] \quad a/6[\bar{1}12].$$

Такие дислокации с векторами Бюргера, меньшими, чем параметр решетки, называются *частичными* или *неполными*.

Согласно схеме реакция соответствует $\bar{\mathbf{b}}_1 = \bar{\mathbf{b}}_2 + \bar{\mathbf{b}}_3$, где $\bar{\mathbf{b}}_2$ и $\bar{\mathbf{b}}_3$ — векторы Бюргера частичных дислокаций с мощностью:

$$|\bar{\mathbf{b}}_1| \frac{a}{2}\sqrt{0^2 + 1^2 + 0^2} = \frac{a}{2}\sqrt{2};$$

$$|\bar{\mathbf{b}}_2| \frac{a}{6}\sqrt{1^2 + 2^2 + 1^2} = \frac{a}{6}\sqrt{6};$$

$$|\bar{\mathbf{b}}_3| \frac{a}{6}\sqrt{1^2 + 1^2 + 2^2} = \frac{a}{6}\sqrt{6}$$

Такая реакция расщепления согласно критерию Франка энергетически выгодна: $a^2/2 > a^2/3$.

На рисунке 6.6 показан слой атомов плоскости (111) , по которой происходит такое скольжение. Полному сдвигу слоев, лежащих выше этой плоскости, соответствует дислокация с вектором

$$\bar{\mathbf{b}}_1 \frac{a}{2}\langle 110 \rangle \quad |\bar{\mathbf{b}}_1| \frac{a}{2}\sqrt{2}$$

такой сдвиг энергетически не выгоден.

Атомам верхнего слоя, если представить их в виде шаров, легче переместиться из лунки В в лунку С, а затем снова в В, как показано на рис. 6.6 стрелками.

При скольжении из лунки В в С в кристалле возникает прослойка, в которой нарушено

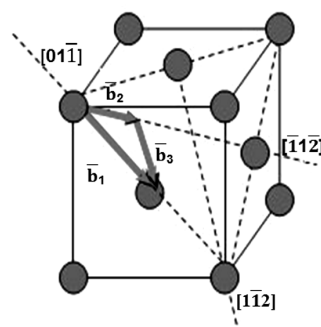


Рис. 6.5. Схема расщепления полной $\bar{\mathbf{b}}_1$ дислокации на две частичные дислокации $\bar{\mathbf{b}}_2$ и $\bar{\mathbf{b}}_3$

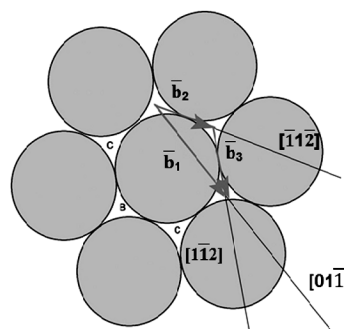


Рис. 6.6. Вектор Бюргера полной и двух частичных дислокаций в плоскости (111) ГЦК решетки

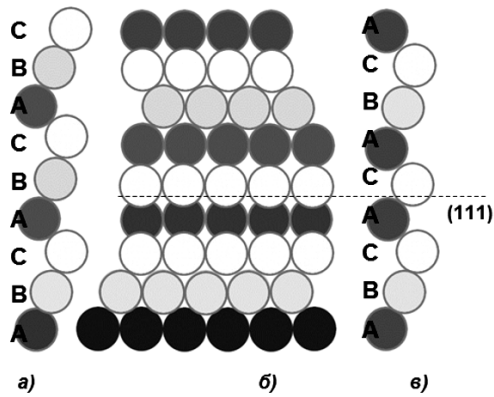


Рис. 6.7. Образование дефекта упаковки типа вычитания при пластической деформации, происходящей путем сдвига в направлении вектора $\mathbf{b}_2 = \frac{1}{6}[011]$ по плоскости $\{111\}$. а) исходное расположение атомов в плоскости (111) ; б) расположение атомов после сдвига в плоскости (111) ; в) расположение атомов после сдвига в плоскости (110)

нормальное чередование плотноупакованных слоев. Такая прослойка называется *дефектом упаковки* (рис. 6.7).

Граница дефекта упаковки образует частичную дислокацию с вектором Бюргерса $\mathbf{b}_2 = \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$, $|\mathbf{b}_2| = \frac{a}{6}\sqrt{1^2 + 2^2 + 1^2} = \frac{a}{6}\sqrt{6}$, который не транслирует решетку в исходное состояние, то есть позиции атомов до сдвига и после него не совпадают. Ее вектор Бюргерса меньше трансляционного вектора \mathbf{b}_1 .

Сдвиг атомов дефектного слоя снова в позиции B исправляет последствия образования дефекта упаковки. Это дает вторую частичную дислокацию, с вектором Бюргерса равным $\mathbf{b}_3 = \frac{a}{6}[11\bar{2}]$ и такой же мощностью $|\mathbf{b}_3| = \frac{a}{6}\sqrt{1^2 + 2^2 + 1^2} = \frac{a}{6}\sqrt{6}$.

Таким образом, вместо прямого скольжения $B \rightarrow B$ реализуется зигзагообразное скольжение $B \rightarrow C \rightarrow B$.

Комплекс, состоящий из таких двух частичных дислокаций, связанных между собой дефектом упаковки, называется *расщепленной (растянутой) дислокацией*.

Такое расщепление энергетически выгодно, как было показано выше, так как суммар-

ная энергия двух частичных дислокаций \mathbf{b}_2 и \mathbf{b}_3 меньше энергии одной полной \mathbf{b}_1 .

В ГЦК кристаллах различают два типа дефектов упаковок, возникающих при сдвиге:

- один из них эквивалентен удалению атомной плоскости (...ABCBCA...) и назван поэтому *дефектом упаковки вычитания*;
- другой эквивалентен введению дополнительной плоскости (...ABCACBCA...) и назван *дефектом внедрения*.

На рисунке 6.7 приведен пример образования дефекта упаковки.

Край дефекта упаковки образует либо *дислокации Шокли*, либо *дислокации Франка*.

Частичная дислокация Шокли является границей дефекта упаковки и находится в плоскости дефекта упаковки, то есть линия дислокации Шокли — плоская кривая или прямая. Вектор Бюргерса частичной дислокации Шокли $\mathbf{b} = \frac{a}{6}\langle 112 \rangle$ находится в плоскости дефекта упаковки.

Частичная дислокация Шокли, как и растянутая дислокация, является скользящей, причем плоскость скольжения совпадает с плоскостью дефекта упаковки.

При скольжении растянутой дислокации головная частичная дислокация, передвигаясь, смещает атомы перед собой в неправильные положения.

Замыкающая частичная дислокация смещает атомы в области бывшего дефекта в нормальные положения. У дислокаций Франка вектор Бюргерса $\frac{a}{3}\langle 111 \rangle$ перпендикулярен плоскости дефекта упаковки, а, значит, и линии дислокации, таким образом, дислокация Франка — *краевая*.

Так как вектор Бюргерса дислокации Франка не лежит в плоскости дефекта упаковки, то она не может скользить. Перемещается дислокация Франка по диффузионному механизму, переползанием (путем смещения) края дефекта упаковки в своей плоскости.

Поэтому такую петлю, внутри которой заключен дефект упаковки, называют *сидячей дислокационной петлей Франка*.

Петли Франка образуются при закалке, радиационном облучении металлов. При закал-

ке ГЦК металлов закалочные вакансии образуют на плоскостях $\{111\}$ вакансионные диски, захлопывание которых приводит к созданию дискообразных дефектов упаковки, чьи контуры являются дислокационными петлями Франка с вектором Бюргерса $a/3\langle 111 \rangle$.

Минимуму энергии соответствует не круглая (овальная), а кристаллографически правильная гексагональная форма дислокационной петли (см. рис. 3.16) со сторонами вдоль направлений $\langle 110 \rangle$, залегающих в плоскостях $\{111\}$ ГЦК кристаллов и имеющих вектор Бюргерса $1/2\langle 110 \rangle$, наклонный к плоскости петли.

При ядерном облучении ГЦК металлов сильное пересыщение кристалла межузельными атомами приводит к их конденсации в виде внедренных дисков на плоскостях $\{111\}$. Контур возникающего таким путем дефекта упаковки внедрения является сидячей дислокацией Франка с вектором Бюргерса $a/3\langle 111 \rangle$ (рис. 3.14).

При вакансионных стоках вокруг дислокационной петли Франка, включающей дефект упаковки вычитания, во время отжига петля сужается, испуская вакансии. Сужению петли радиусом R способствуют линейное натяжение дислокации, пропорциональное $Gb^2/2R$, и энергия окруженного петлей дефекта упаковки, равная R^2 .

Внутри больших петель Франка, например в закаленном алюминии, часто видны петли Франка меньшего размера.

На рисунке 6.8 показана схема чередования атомных плоскостей $\{111\}$ в области двойной петли в ГЦК решетке. Удаление части плоскости A приводит к образованию большой петли Франка, являющейся границей дефекта упаковки вычитания с чередованием плоскостей $BCBC$, свойственным ГП решетке.

Последующее удаление части плоскости C создает новый дефект упаковки вычитания с чередованием плоскостей VAB , свойственным ГП решетке. Край этого дефекта — малая дислокационная петля Франка, расположенная внутри большой петли.

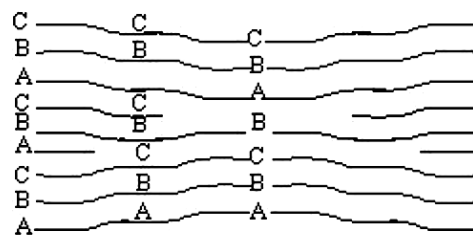


Рис. 6.8. Двойная дислокационная петля Франка в ГЦК решетке. Нормальное чередование плоскостей в ГЦК решетке: ...ABCABCABC... Нарушение закономерного чередования атомных плоскостей приводит к образованию дефектов упаковки. Например, в случае ...ABCBCABC... образовался дефект упаковки вычитания (петля Франка), в ...ABCBAABC... — внедрения

Видно, что два дефекта упаковки вычитания на соседних плоскостях $\{111\}$ эквивалентны одному дефекту упаковки внедрения (рис. 6.8-центр, плоскость B оказывается как бы внедренной в идеальное ...ABCABC... чередование плоскостей для ГЦК решетки).

Таким образом, ГЦК решеткам свойственно наличие дислокаций Франка, Шокли, которые наряду с единичными дислокациями участвуют в разнообразных дислокационных реакциях при различных внешних воздействиях. Эти дислокационные реакции в ГЦК решетках быстро и безошибочно можно описать с помощью тетраэдра Томпсона.

6.3.1 Стандартный тетраэдр Томпсона.

Стандартный тетраэдр Томпсона — это специальное геометрическое построение векторов Бюргерса всех характерных дислокаций в ГЦК решетке.

Тетраэдр Томпсона строится следующим образом. Боковые грани тетраэдра представляют собой плоскости скольжения $\{111\}$ в ГЦК решетке, а каждое ребро (AB , BC , AC , AD , BD , CD) тетраэдра соответствует линии простой дислокации с вектором Бюргерса единичной дислокации \vec{b} , $a/2\langle 110 \rangle$.

Развертка полученного таким образом тетраэдра Томпсона приведена на рис. 6.10.

Центры граней тетраэдра, соответствующие противоположным вершинам A , B , C , D

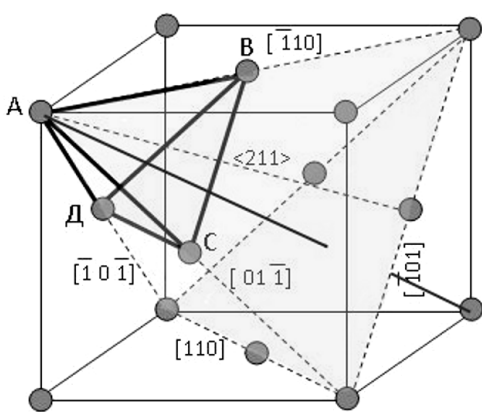


Рис. 6.9. Тетраэдр Томпсона ABCD образован плоскостями {111}, при этом его ребра совпадают с направлениями $\langle 110 \rangle$. Прямая, соединяющая любую вершину тетраэдра с центром противоположной грани, — это направление типа $\langle 111 \rangle$. Лежащие в плоскости {111} медианы, они же являются биссектрисами углов и высотами равносторонних треугольных граней — направления $\langle 211 \rangle$

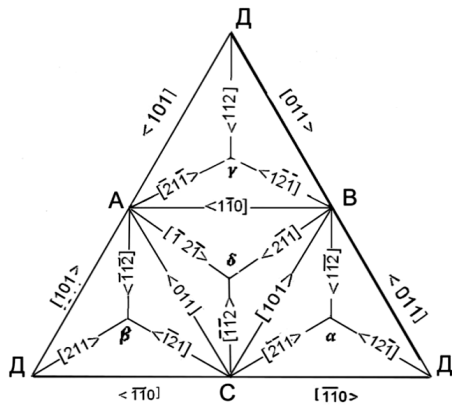


Рис. 6.10. Развертка тетраэдра Томпсона. На развертке указаны направления векторов: $\langle 110 \rangle$ и $\langle 211 \rangle$

тетраэдра (на рис. 6.10), обозначены буквами греческого алфавита — $\alpha, \beta, \gamma, \delta$.

Таким образом, отрезки соединяющие вершины тетраэдра с центрами противоположных граней, A, C, B, D представляют собой всевозможные векторы Бюргерса $a/6\langle 211 \rangle$ частичных дислокаций Шокли.

Отрезки типа D , соединяющие вершину и центр тяжести противоположной грани, то есть нормали к плоскостям {111}, представляют собой всевозможные вектора Бюргерса $a/3\langle 111 \rangle$ частичных дислокаций Франка.

При работе с тетраэдром Томпсона важно соблюдать следующие правила:

- Кристаллографическая форма записи направления [211], совпадающим с направлением вектора на тетраэдре Томпсона, указывается как $\langle 211 \rangle$.
- Если вектор не совпадает с этим направлением, знак каждого индекса изменяется на противоположный — $\bar{2}\bar{1}\bar{1}$.
- По той же причине при записи дислокационных реакций в символах Томпсона необходимо правильно указывать направление векторов.

• Если, например, вектор Бюргерса $A = a/6[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$, то вектор $A = a/6[\bar{1}\bar{2}\bar{1}]$.

Рассмотренная ранее реакция расщепления (см. рис. 6.5) единичной дислокации

$$a/2[01\bar{1}] = a/6[\bar{1}\bar{2}\bar{1}] + a/6[1\bar{1}\bar{2}]$$

может быть записана с помощью тетраэдра в символах Томпсона как расщепление дислокации AC (вектор Бюргерса на тетраэдре CA $a/2[01\bar{1}]$) на две дислокации Шокли A и C, то есть $AC=A + C$.

6.3.2 Дислокационные реакции в ГЦК решетке. Дислокационные реакции в ГЦК решетке описывают, используя тетраэдр Томпсона. Рассмотрим две реакции, протекающие в ГЦК решетке:

$$D + C = DC \tag{6.4}$$

$$DA + A = D \tag{6.5}$$

Первая реакция (6.4) описывает объединение дислокаций Франка и дислокации Шокли с образованием единичной дислокации. Линия дислокации Франка с вектором Бюргерса D и связанный с ней дефект упаковки находятся в плоскости ABC.

В этой же плоскости находится линия дислокации Шокли с вектором Бюргерса C и связанный с ней дефект упаковки.

Вектор Бюргерса DC , образовавшийся по реакции (6.4) единичной дислокации, не ле-

жит в плоскости ABC (111), следовательно, дислокация с вектором δC не может скользить в этой плоскости. Она может скользить в плоскостях ADC ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) или CDB ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$).

В кристаллографических индексах реакция (6.4) будет иметь вид:

$$a/3[111] + a/6[\bar{1}\bar{1}\bar{2}] = a/2[110].$$

Проверим правильность расстановки индексов в реакции:

$$a/3(+1) + a/6(+1) = a/2(+1)$$

$$a/3(+1) + a/6(+1) = a/2(+1)$$

$$a/3(+1) + a/6(-2) = a/2(0)$$

Используя энергетический критерий Франка, определим возможность протекания реакции:

$$\begin{array}{ccc} a/3 \sqrt{3}^2 & a/6 \sqrt{6}^2 & a/2 \sqrt{2}^2 \\ a^2/2 & a^2/2 & \end{array} \quad (6.6)$$

Критерий Франка не позволяет предсказать, возможно ли это взаимодействие.

Однако, учитывая, что рассматриваемая реакция устраняет дефект упаковки, следует считать ее энергетически выгодной.

Именно такой возможностью объяснен многократно наблюдавшийся факт превращения сидячих петель Франка в призматические дислокационные петли (рис. 6.11).

Допустим, что внутри петли Франка под действием приложенных или закалочных напряжений зарождается петля частичной дислокации Шокли.

Распространяясь внутри петли Франка, дислокация Шокли полностью ликвидирует

дефект упаковки, что энергетически выгодно. Объединяясь с дислокацией Франка, они образуют полную призматическую дислокационную петлю с вектором Бюргерса, наклоненным к плоскости петли.

Такую петлю называют *результатирующей дислокацией* или *R-дислокацией*.

Реакция $DA+A=D$ описывает объединение единичной дислокации и дислокации Шокли из разных плоскостей скольжения в дислокацию Франка.

Дислокация DA может скользить в плоскостях ABD ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) или ADC ($1\bar{1}\bar{1}$).

Линия дислокации Шокли с вектором Бюргерса A и связанный с ним дефект упаковки находятся в плоскости ABC (111).

Образующаяся по реакции (6.5) дислокация Франка также находится в плоскости ABC . В обычных кристаллографических символах реакция (6.5) имеет вид:

$$a/2[101] + a/6[\bar{1}\bar{2}\bar{1}] = a/3[111].$$

Из критерия Франка вытекает, что такая реакция вдвое снижает энергию

$$a/2 \sqrt{2}^2 + a/6 \sqrt{6}^2 = a/3 \sqrt{3}^2$$

или

$$2a^2/3 + a^2/3 = a^2/3. \quad (6.6)$$

Если дислокация Шокли является частью растянутой дислокации Шокли-Шокли, то объединение ее с частичной дислокацией по указанной реакции дает растянутую дислокацию Шокли-Франка.

Но, как было показано выше, поверхностное натяжение дефекта упаковки внутри та-

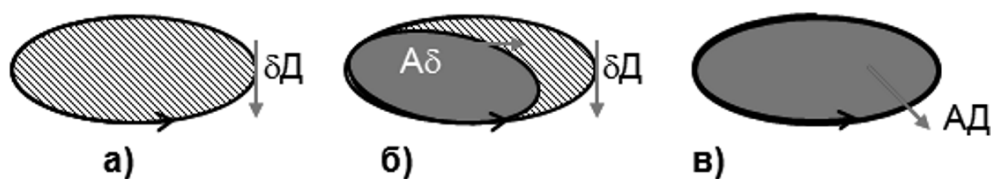


Рис. 6.11. Превращение сидячей петли Франка в призматическую дислокационную петлю. а) — дефект упаковки, образующий петлю Франка, заштрихован, край дефекта образует линию дислокации; б) — скользящая дислокация Шокли при своем движении внутри петли Франка приводит к уничтожению дефекта упаковки; в) — образованная призматическая петля Франка

кой пары стягивает дислокации Шокли и Франка в нерасщепленную единичную дислокацию.

Следовательно, если в исходном состоянии в пересекающихся плоскостях скольжения находились единичная дислокация DA и растянутая дислокация $A - C$, то при их встрече вначале протекает реакция (6.5), а затем (6.4).

Среди всевозможных взаимодействий между дислокациями в металлах с ГЦК решетками играет очень важную роль реакция, приводящая к образованию так называемой *сидячей дислокации Ломер-Коттрелла*.

Такая реакция происходит, когда две расщепленные дислокации с векторами Бюргерса, расположенными под 120° , встречаются на пересечении своих плоскостей скольжения.

То есть во взаимодействии участвуют растянутые дислокации, состоящие из дефекта упаковки и ограниченные двумя частичными дислокациями Шокли, которые скользят в

плоскостях типа $\{111\}$ как целые. Возможны различные варианты таких реакций, которые зависят от комбинации векторов Бюргерса и плоскостей скольжения.

Пример образования дислокации Ломер-Коттрелла приведен на рис. 6.12.

Допустим, что в плоскости ABC (111) ГЦК решетки скользит растянутая дислокация AB , состоящая из частичных дислокаций Шокли $A + B$, соединенных дефектом упаковки (или в кристаллографических индексах: $a/6[\bar{1}2\bar{1}] + a/6[\bar{2}11]$), а в плоскости DVC ($1\bar{1}1$) сверху, навстречу ей — растянутая дислокация VD , так же состоящая из частичных дислокаций $V + D$ и дефекта упаковки (в кристаллографических индексах): $a/6[1\bar{1}\bar{2}] + a/6[\bar{2}11]$.

Поэтому при своем движении головные каждой из растянутой дислокации могут встретиться на линии пересечения плоскостей скольжения и образовать в месте встречи новую (вершинную) частичную дислокацию по реакции $V+B$.

В кристаллографических индексах, это уравнение будет иметь вид:

$$a/6[1\bar{1}\bar{2}] + a/6[\bar{2}11] = a/6[\bar{1}0\bar{1}]$$

Критерий Франка для этой реакции $a^2/3 > a^2/18$, то есть реакция энергетически выгодна.

Вектор Бюргерса дислокации встречи равен $a/6[\bar{1}0\bar{1}]$ и соответствует отрезку, соединяющего центры двух граней тетраэдра Томпсона и параллелен ребру AD с индексами $[\bar{1}0\bar{1}]$, при этом равен $1/3$ отрезка AD .

Линия дислокации и вектор Бюргерса лежат в плоскости $\{100\}$. Дислокации с вектором Бюргерса $a/6\langle 011 \rangle$, образующиеся в результате встречи двух частичных дислокаций Шокли, называются *вершинными*.

Плоскость $\{100\}$, в которой лежат линия и вектор Бюргерса вершинной дислокации, не является плоскостью скольжения в ГЦК решетке и в ней не находятся хвостовые дислокации Шокли $a/6\langle 112 \rangle$.

Таким образом, в результате встречи в пересекающихся плоскостях двух растянутых дислокаций образуется новая неподвижная

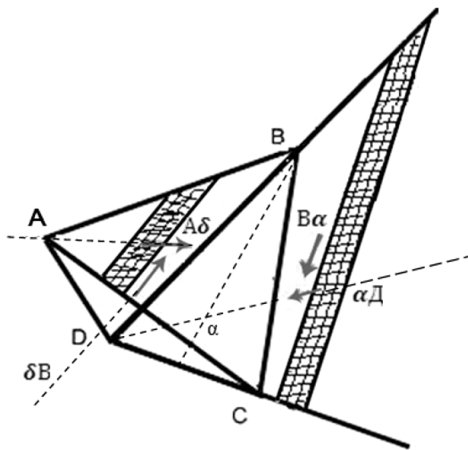


Рис. 6.12. Схема образования сидячей дислокации Ломер-Коттрелла, представленная с помощью стандартного тетраэдра Томпсона. В плоскости ABC (111) скользит дислокация AB , которая перемещается, образуя 2 расщепленные дислокации $A\delta + \delta B$. А в плоскости DVC ($1\bar{1}1$) — DV , также образуя области дефектов упаковки при своем скольжении, как расщепленные дислокации $V\alpha + \alpha D$. Плоскости ABC и DVC пересекаются по прямой BC с индексами $[\bar{1}0\bar{1}]$

ная частичная (вершинная дислокация) с вектором Бюргерса $a/6\langle 011 \rangle$.

Кроме этого, по линии пересечения плоскостей скольжения образуется клинообразный дефект упаковки.

Так как в каждой из плоскостей скольжения остаются хвостовые частичные дислокации Шокли D и A с векторами Бюргерса $a/6\langle 112 \rangle$.

Такую совокупность трех частичных дислокаций и клинообразного дефекта упаковки называют дислокацией Ломер-Коттрелла.

Все три дислокации D и A , связаны клинообразным дефектом упаковки, неподвижны, прочно закреплены по всей длине.

Дислокация Ломер-Коттрелла прочно привязана к линии пересечения двух плоскостей скольжения и ее называют *сидячей*.

Реакцию образования дислокации Ломер-Коттрелла можно записать в следующей форме, используя символику Томпсона:

$$AB+VD=(A+B)+(V+D)=A+(B+V)+D=A+D \quad (6.7).$$

В результате реакции получилась дислокация, включающая три частичных:

$$A + D$$

или в кристаллографических символах:

$$a/6[\bar{1}2\bar{1}] + a/6[\bar{1}0\bar{1}] + a/6[\bar{2}11]$$

Дислокация Ломер-Коттрелла может образоваться при встрече других растянутых дислокаций в тех же плоскостях скольжения.

Конфигурация из одной вершинной дислокации и двух дислокаций Шокли, соединенных клинообразным дефектом упаковки, в принципе может возникнуть не только при встрече растянутых дислокаций, но и при диссоциации единичной дислокации.

Основные сведения о всех рассмотренных характерных дислокациях в ГЦК решетке приведены в таблице 6.1.

Важно отметить, что *сидячие дислокации Ломер-Коттрелла, по своей физической сущности, являются одной из основных причин процессов деформационного упрочнения.*

Таблица 6.1

Характерные дислокации в ГЦК решетке

Характеристики дислокаций	Полные		Частичные		
			Шокли	Франка	вершинная
	AB	----	A	D	
Вектор Бюргерса	$a/2\langle 110 \rangle$	$a\langle 100 \rangle$	$a/6\langle 112 \rangle$	$a/3\langle 111 \rangle$	$a/6\langle 110 \rangle$
Квадрат вектора	$a^2/2$	a^2	$a^2/6$	$a^2/3$	$a^2/18$

6.4 Характерные полные и частичные дислокации в металлах с ГП решеткой

В гексагональной плотноупакованной (ГП) решетке кристаллизуются многие элементы, среди которых: Mg, Ba, Cd, -Co, Hf, -Ti, Zn, Os, Re, Sr.

Для ГП решетки характерна двухслойная упаковка атомов типа ...ABABAB...

Темные шары образуют слой атомов типа A, серые шары покрывая лунки слоя A, обра-

зуют слой типа B. Третий слой атомов повторяет характер расположения атомов как в слое A, четвертый — B и т.д.

Плоскостью плотнейшей упаковки в ГП решетке служит плоскость базиса {0001}, а наиболее плотно упакованное направление — $\langle 1120 \rangle$ (рис. 6.14).

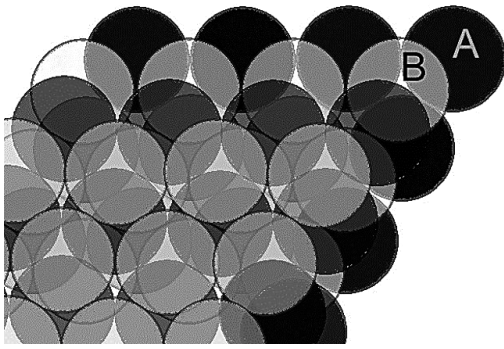


Рис. 6.13. Двухслойная упаковка атомов ГП решетки ...ABABAB...

В чередовании плотноупакованных слоев возможны отступления от этого порядка, то есть возможно образование *дефектов упаковки*.

Как известно, дефект упаковки — это плоский двумерный дефект кристаллического строения, представляющий собой нарушение порядка атомных плоскостей.

Система скольжения $\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$, называемая *базисным скольжением*, является наиболее распространенной системой скольжения в гексагональных кристаллах.

Такая запись означает, что указанная в системе плоскость является плоскостью скольжения дислокации, которая перемещается в указанном направлении.

Единичными векторами тождественной трансляции в ГП решетке являются векторы \bar{b}_1 , \bar{b}_2 , \bar{b}_3 , приведенные на рис. 6.14.

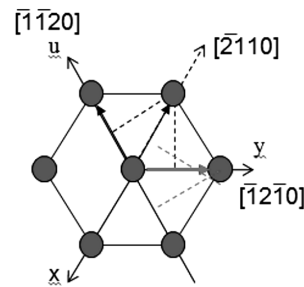
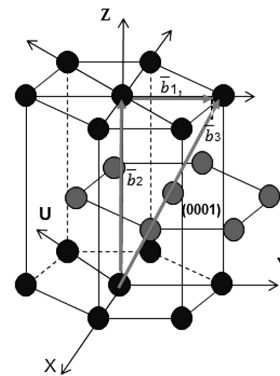


Рис. 6.14. Плоскости плотнейшей упаковки $\{0001\}$ и плотноупакованные направления $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ в ГП решетке. Единичными векторами тождественной трансляции в ГП решетке являются направления векторов \bar{b}_1 , \bar{b}_2 , \bar{b}_3

Кроме того, возможно пирамидальное скольжение по системам $(10\bar{1}1) \bar{1}2\bar{1}0$ и $(11\bar{2}2) \bar{1}1\bar{2}3$, а также призматическое скольжение по системе $(10\bar{1}0) \bar{1}2\bar{1}0$ (рис. 6.15).

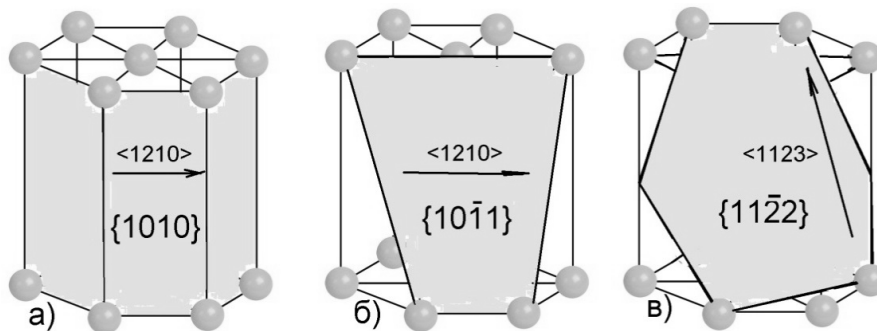
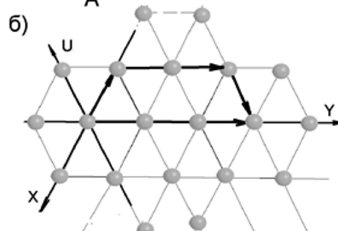
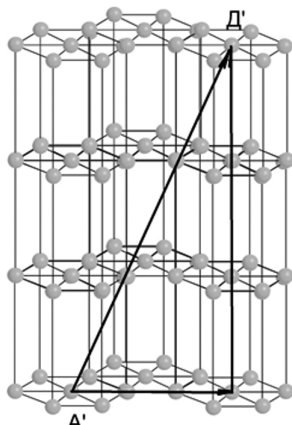
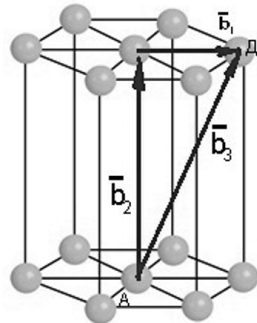
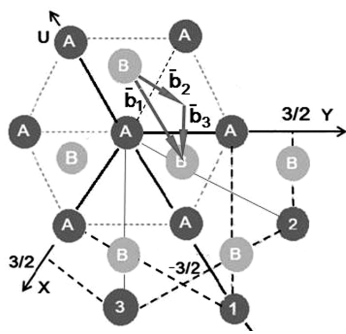


Рис. 6.15. Возможные плоскости скольжения дислокаций в ГП решетке



При индцировании вектора дислокации в ГП решетке:

1) направление вектора переносят в начало координат;

2) определяют индексы узла ближайшего к началу координат, лежащего на направлении.

Так вектор \vec{b}_1 параллелен направлению, проходящему через начало координат и узел 1 с индексами $[11\bar{2}0]$. Таким образом, направление \vec{b}_1 — $[11\bar{2}0]$.

Вектор \vec{b}_2 параллелен направлению проходящему через узел 2, составляющие которого по осям координат: $b_x=0$; $b_y=3/2$; $b_u=-3/2$; $b_z=0$, и соответственно индексы $[01\bar{1}0]$.

Аналогично определяем координаты узла 3, который определит направление \vec{b}_3 — $[10\bar{1}0]$.

Единичными векторами тождественной трансляции в ГП решетке являются направления векторов \vec{b}_1 , \vec{b}_2 , \vec{b}_3 , приведенные на рисунке слева.

Рассмотрим вектор дислокации \vec{b}_1 с мощностью a . В четырех индексном пространстве вектор разлагается на составляющие по осям: $b_x=-1/2$; $b_y=1$; $b_u=-1/2$; $b_z=0$.

Тогда вектор $\vec{b}_1 = na[b_x b_y b_u b_z] = na[\bar{1}2\bar{1}0]$.

Мощность вектора равна a . И при перемещении дислокации мощность вектора \vec{b}_1 должна сохраняться равной a .

В ГП решетке идентичный узлу A' узел D' повторяется через кратное число равное 3 параметрам трансляции, поэтому в кристаллографической записи вектора Бюргера для сохранения его мощности равной a коэффициент n принимается равным $1/3$. Вектор Бюргера для ГП решетки запишется как $\vec{b}_1 = 1/3[\bar{1}2\bar{1}0]$.

Вектор Бюргера $\vec{b}_2 = [0001]$

Вектор Бюргера \vec{b}_3 проходящий через идентичную точку A точку D' (составляющие которой по осям координат $b_x = -1/2$; $b_y=1$; $b_u=-1/2$; $b_z=3$) имеет индексы направления $[\bar{1}2\bar{1}3]$.

Вектор равен сумме векторов $\vec{b}_1 + \vec{b}_2$ и в кристаллографических индексах имеет вид $\vec{b}_3 = 1/3[\bar{1}2\bar{1}3]$

В базисной плоскости ГП решетки $(0001)[\bar{1}2\bar{1}0]$ вектор Бюргера запишется как $\vec{b}_1 = 1/3[\bar{1}2\bar{1}0]$.

Если в ГП решетке в плоскости скольжения (0001) скользит краевая дислокация с вектором тождественной трансляции \vec{b}_1 , это озна-

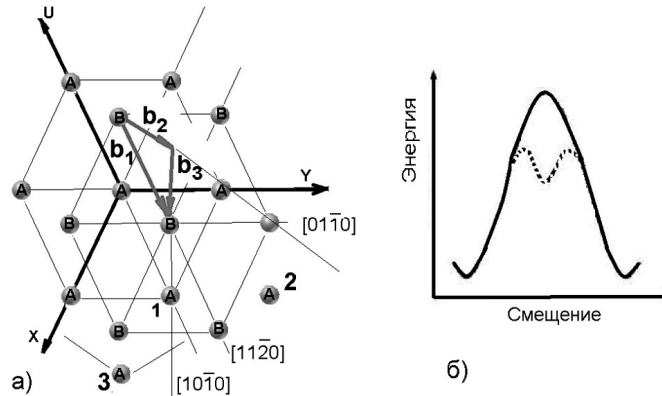


Рис. 6.16. Индексы векторов трансляции при скольжении атомной плоскости (0001) с образованием частичных дислокаций \mathbf{b}_2 , \mathbf{b}_3 (а); б) изменение энергии при смещении атомов в слое плотнейшей упаковки двумя путями: сплошная линия — смещение из лунки В в соседнюю лунку В в направлении вектора \mathbf{b}_1 (а), пунктирная — то же, но через промежуточную лунку С вдоль векторов Бюргера частичных дислокаций \mathbf{b}_2 , \mathbf{b}_3

чают, что атомы второго слоя из положения В, смещаясь при сдвиге вдоль направления $\bar{\mathbf{b}}_1$, вновь занимают положения В (рис. 6.16, а), проходя через высокий энергетический барьер (рис. 6.16, б). Атомам второго слоя В значительно легче попасть в соседнюю лунку В не прямым путем вдоль вектора $\bar{\mathbf{b}}_1$, а сначала вдоль вектора $\bar{\mathbf{b}}_2$ (в позицию С), а затем вдоль вектора $\bar{\mathbf{b}}_3$ (в позицию В).

Положение атомов второго слоя в позиции С не характерно для ГП решетки, так в решетке появляется дефект упаковки. В результате ниже плоскости сдвига сохраняется чередование ...АВАВ..., а выше образуется новая последовательность слоев ...САСАС..., которая так же, как и ...АВАВ..., характеризует двухслойную структуру ГП решетки.

Граница между областью кристалла с исходным чередованием плотноупакованных слоев и возникшим является дефектом упаковки.

Плоскость дефекта упаковки разделяет кристалл на две части, сдвинутые одна относительно другой на некоторую величину b_2 , не кратную трансляционному вектору решетки и постоянную для всей плоскости дефекта.

Если дефект упаковки не выходит на поверхность кристалла, то он окаймляется по контуру частичной дислокацией. Её вектор

Бюргера $\bar{\mathbf{b}}_2 = 1/3[01\bar{1}0]$ меньше минимального единичного вектора тождественной трансляции $\bar{\mathbf{b}}_1 = 1/3[11\bar{2}0]$. То есть образуется частичная дислокация Шокли.

Две частичные дислокации Шокли ($\bar{\mathbf{b}}_2$, $\bar{\mathbf{b}}_3$), связанные между собой полосой дефекта упаковки, образуют растянутую дислокацию.

Таким образом, в ГП решетках перемещение атомов не вдоль единичного вектора тождественной трансляции, а вдоль вектора меньшей мощности приводит к образованию не полной, а частичной дислокации Шокли.

Частичная дислокация Шокли является границей дефекта упаковки и находится в плоскости дефекта упаковки. Единичная дислокация может быть любой пространственной кривой, а частичная дислокация Шокли должна быть плоской кривой или прямой. Вектор Бюргера частичной дислокации Шокли находится в плоскости дефекта упаковки.

Частичная дислокация Шокли, как и растянутая дислокация, является скользящей, причем плоскость скольжения совпадает с плоскостью дефекта упаковки.

В ГП решетке единичная и растянутая дислокации лежат в плоскости базиса (0001) и скользят в этой плоскости в направлении плотнейшей упаковки $\langle 12\bar{1}0 \rangle$.

Существуют также дефекты упаковки, окаймленные частичными дислокациями Франка.

В ГП решетке такие дефекты могут возникнуть либо при внедрении участка плотноупакованной плоскости (0001) в решетку (тогда образуется дефект внедрения), либо при частичном удалении плотноупакованного слоя (0001), возникает при этом дефект упаковки вычитания.

Например, при внедрении в чередование слоя ...ABABAB... образуется дефект упаковки (аналогично, как и в случае с ГЦК решеткой, границей которого является частичная краевая дислокация Франка с вектором Бюргерса $1/2\langle 0001 \rangle$), перпендикулярный плоскости базиса (0001) с величиной вектора Бюргерса равным $c/2$ или для случая идеального отношения $c/a = \sqrt{8/3}$ $2\sqrt{2/3} = 1,633$.

То есть величина вектора дислокации Франка равна $a\sqrt{2/3}$.

Независимо от типа решетки, закалка, радиационное воздействие приводят к возникновению вакансий, которые, конденсируясь в некоторых плоскостях, образуют скопления, захлопывание которых приводит к образованию дискообразных дефектов упаковки — дислокационных петель Франка. Их вектор Бюргерса перпендикулярен плоскости петли.

Таким образом, в ГП решетках (как и в ГЦК решетках) образуются сидячие или полузакрепленные дислокации Франка, и кроме скользящих полных дислокаций, скользящие частичные дислокации Шокли.

6.4.1 Стандартная бипирамида. Для упрощения анализа поведения дислокаций в ГП решетке, аналогично стандартному тетраэдру, в ГЦК решетке используют геометрический образ — стандартную бипирамиду.

Основанием бипирамиды служит равносторонний треугольник ABC. Вдоль его сторон AB, BC, AC в базисной плоскости (0001) лежат векторы $\bar{b}_i = 1/3\langle 1120 \rangle$. Эти векторы соответствуют полным дислокациям с мощностью \mathbf{a} , поэтому их называют *a-дислокациями*.

Полным дислокациям с вектором Бюргерса, перпендикулярным базисной плоскости и

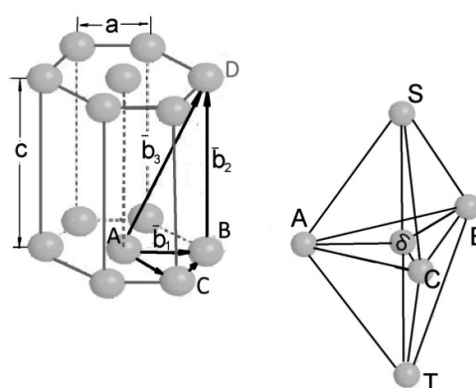


Рис. 6.18. Построение стандартной бипирамиды для гексагональной плотноупакованной структуры. Все элементы такой бипирамиды являются геометрическими образами характерных векторов Бюргерса, возможных для гексагональной решетки металлов

равным $c[0001]$, отвечает отрезок ST. Такие дислокации называются *c-дислокациями* или *-дислокациями*.

Полным дислокациям с векторами Бюргерса типа AD, находящихся в призматических плоскостях, отвечают суммы отрезков $AB+BD$, что соответствует на стандартной пирамиде $AB+ST$ (рис. 6.18). Так как вектор Бюргерса типа AD равен сумме векторов \mathbf{c} и \mathbf{a} , то дислокации называют $(c+a)$ -дислокациями. Вектор Бюргерса в кристаллографических символах будет иметь вид: $1/3 \ 1213$.

Частичным скользящим дислокациям Шокли в плоскости скольжения (0001) с векторами Бюргерса $1/3 \ 0110$ соответствуют векторы A, B, C стандартной бипирамиды. Условно принятое наименование их *p-дислокации*.

Частичные сидячие дислокации Франка или *c/2-дислокации* с векторами Бюргерса $1/2\langle 0001 \rangle$, перпендикулярными базисной плоскости (0001), представлены отрезками S и T.

Ребра бипирамиды AS, BS, CS, AT, BT и CT тождественны векторам Бюргерса частичных $(c/2+p)$ дислокаций или $\bar{b}_i = 1/6 \ 0223$.

Характерные дислокации в ГП решетках ($c/a = 1,633$)

Параметры дислокаций	Полные дислокации			Частичные дислокации		
	a	c	$c+a$	Шокли	Франка	
				p	$c/2$	$c/2+p$
Вектор Бюргерса	AB	ST	AD	A	S	AS
	$1/3\langle 1210 \rangle$	$\langle 0001 \rangle$	$1/3\langle 1213 \rangle$	$1/3\langle 0110 \rangle$	$1/2\langle 0001 \rangle$	$1/6\langle 0223 \rangle$
Величина $ \bar{b}_i $	a	c	$\sqrt{a^2 + c^2}$	$a/\sqrt{3}$	$c/2$	$\sqrt{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}}$
Мощность	a^2	$c^2 = 8a^2/3$	$11a^2/3$	$a^2/3$	$2a^2/3$	a^2

Таким образом, все элементы стандартной бипирамиды являются векторами Бюргерса дислокаций. При записи дислокационных реакций в символах дипирамиды следует учитывать направление векторов.

Например, векторы Бюргерса AB, ST, A, B имеют противоположное направление соответственно векторам Бюргерса BA, TA, A, B .

Используя стандартную бипирамиду можно легко и безошибочно описать все дислокационные реакции, протекающие в гексагональной решетке.

Все характерные типы дислокаций в гексагональной плотноупакованной решетке с их векторами Бюргерса в символах бипирамиды и кристаллографических индексах, а также мощности дислокаций приведены в таблице 6.2.

6.4.2 Дислокационные реакции в ГП решетке. С помощью стандартной бипирамиды легко проанализировать возможность протекания дислокационных реакций: расщепления или диссоциации, объединения или рекомбинации.

Например, как видно из бипирамиды (рис. 6.18), в результате расщепления в базисной плоскости (0001) полных дислокаций (AB, BC, AC) возникают частичные дислокации Шокли A, B, C .

Эта реакция одна из наиболее важных, так как плоскость базиса (0001) является плоскостью легкого скольжения во многих ГП металлах.

Одна из возможных реакций расщепления записывается в следующей форме: $AB = A + B$ или при другой форме записи:

$$a/3[\bar{1}2\bar{1}0] = a/3[01\bar{1}0] + a/3[\bar{1}100]. \quad (6.8)$$

В этой же плоскости возможны реакции расщепления:

$$AC = A + C, \quad CB = C + B.$$

Для записи реакций можно использовать только символы бипирамиды. Эти символы легко перевести в обычные кристаллографические.

При таком переводе важно для каждого вектора Бюргерса правильно расставить индексы и их знаки. Используя соотношение (п. 6.2.), необходимо проверить правильность записи кристаллографических индексов векторов Бюргерса.

Так, для реакции расщепления (6.8) это будет:

$$\begin{aligned} a/3(-1) &= a/3(0) + a/3(-1), \\ a/3(2) &= a/3(1) + a/3(1), \\ a/3(-1) &= a/3(-1) + a/3(0), \\ a/3(0) &= a/3(0) + a/3(0). \end{aligned}$$

Следовательно, уравнение в кристаллических индексах записано правильно.

Используя энергетический критерий Франка (правило квадратов), можно сделать вывод о возможности протекания реакции.

Реакция расщепления энергетически выгодна, так как

$$a^2 > (a^2/3 + a^2/3).$$

Полная дислокация AD также может диссоциировать на частичные:

$$AD = AS + SD$$

или

$$1/3[\bar{1}2\bar{1}3] = 1/6[02\bar{2}3] + 1/6[\bar{2}203].$$

Эта реакция энергетически выгодна, так как

$$(11a^2/3) > (a^2 + a^2).$$

Дислокация $1/3 \bar{1}2\bar{1}3$ может совершать пирамидальное скольжение. Диссоциация по указанной реакции приводит к образованию сидячих дислокаций Франка, то есть к закреплению скользящей дислокации.

Полная дислокация TS может расщепиться на две частичные по схеме:

$$TS = TA + AS$$

или

$$[0001] = 1/6[0\bar{2}23] + 1/6[02\bar{2}3].$$

Реакция энергетически выгодна, так как $(8a^2/3) > (a^2 + a^2)$.

При встрече скользящих полных дислокаций BA и AD энергетически выгодно образование полной дислокации BD (то же, что и TS):

$$BA + AD = BD$$

или

$$1/3[\bar{1}2\bar{1}0] + 1/3[\bar{1}2\bar{1}3] = [0001],$$

так как

$$(11a^2/3 + a^2) > 8a^2/3.$$

6.5 Характерные полные и частичные дислокации в кристаллах с ОЦК решеткой

6.5.1 Характерные полные дислокации в ОЦК решетке. В ОЦК решетке возможны единичные дислокации с векторами Бюргерса $\underline{b}_1 = a/2\langle 111 \rangle$, $\underline{b}_2 = a\langle 100 \rangle$ и $\underline{b}_3 = a\langle 110 \rangle$ (рис. 6.19).

Наименьшим вектором тождественной трансляции является вектор $a/2\langle 111 \rangle$. Дислокации $a/2\langle 111 \rangle$, имеющие среди всех полных дислокаций самую низкую энергию, встречаются чаще всего.

В металлах с ОЦК решеткой скольжение обычно идет по плоскостям $\{110\}$ и $\{112\}$ в на-

правлениях наиболее плотной упаковки атомов $\langle 111 \rangle$.

Геометрию образования характерных дислокаций в ОЦК решетке представить себе труднее, так как в ней нет такого простого чередования атомных слоев, как в плотнейших упаковках.

Например, последовательность упаковки атомных слоев $\{112\}$ в ОЦК решетке —

$$\dots ABCDEFAB CDEF \dots,$$

то есть позиции атомов повторяются через пять слоев.

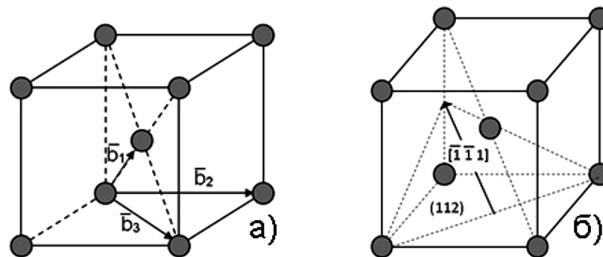


Рис. 6.19. Векторы тождественной трансляции в ОЦК решетке: а) — единичные дислокации $\underline{b}_1 = a/2[111]$, $\underline{b}_2 = a[010]$, $\underline{b}_3 = a[110]$; б) — плоскость скольжения (112) и вектор дислокации $a/2[111]$

В отличие от ГЦК и ГП решеток частичные дислокации в ОЦК решетке могут возникнуть при движении винтовых дислокаций.

Рассмотрим единичную винтовую дислокацию с вектором $a/2[\bar{1}\bar{1}1]$ в плоскости (112) (индексы плоскости и направления см. на рис. 6.19, б).

На рисунке 6.20 показано расположение атомов в трех соседних слоях, параллельных плоскости (112). Эта плоскость совпадает с плоскостью чертежа.

В левой части рисунка три слоя чередуются в области, не охваченной сдвигом. В правой части рисунка атомы верхнего слоя смещены на величину единичного вектора тождественной трансляции $a/2[\bar{1}\bar{1}1]$. Поэтому здесь после сдвига решетка становится совершенной. В средней же части рис. 6.20 смещение атомов верхнего слоя в направлении $[\bar{1}\bar{1}1]$ меньше, чем $a/2[\bar{1}\bar{1}1]$, и в этой части находится дислокация. Ее линия параллельна вектору сдвига, и, следовательно, показанная единичная дислокация имеет чисто винтовую ориентацию.

Если атомы верхнего слоя в ядре дислокации сместятся в направлении $[\bar{1}\bar{1}1]$, то линия дислокации передвинется влево — зона сдвига расширится.

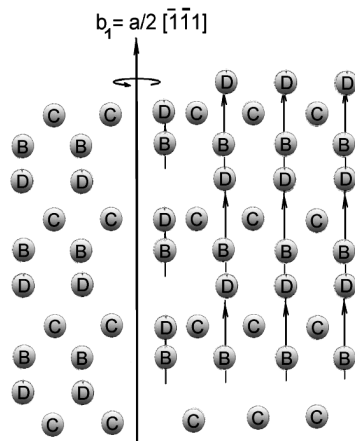


Рис. 6.20. Единичная винтовая дислокация в плоскости (112) ОЦК решетки: D — атомы верхнего слоя; C — атомы среднего слоя; B — атомы нижнего слоя

6.5.2 Характерные частичные дислокации в ОЦК решетке. Расщепление единичной винтовой дислокации на две частичные в ОЦК решетке показано на рис. 6.21.

Как и на рис. 6.20, видны три атомных слоя, параллельных кристаллографической плоскости (112), являющейся плоскостью чертежа рис. 6.21 (см. также рис. 6.19, б): D — атомы нижнего слоя; C — верхнего и B — среднего слоя.

На левой стороне рис. 6.21 изображен участок, не претерпевающий сдвига. В средней области рис. 6.21 атомы верхнего слоя 2 смещены по направлению $[\bar{1}\bar{1}1]$, но не на величину единичного вектора тождественной трансляции $a/2[\bar{1}\bar{1}1]$, как на рис. 6.20, а на одну треть его, то есть на $a/6[\bar{1}\bar{1}1]$.

При этом атомы верхнего слоя 2 попадают в механически устойчивое положение над атомами нижнего слоя 1, образуя дефект упаковки.

Левая граница дефекта упаковки на рис. 6.21 — частичная дислокация с вектором Бюргерса $a/6[1]$.

На правой стороне рис. 6.21 атомы верхнего слоя смещены из положений над атомами нижнего слоя в полностью стабильные положения.

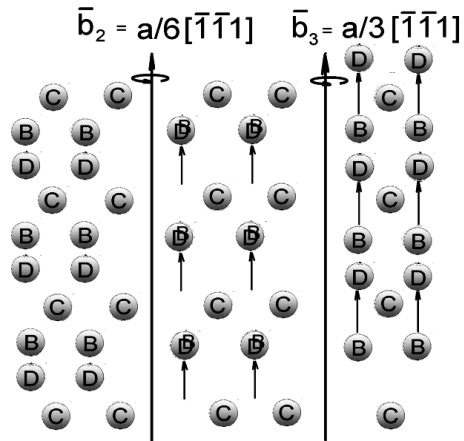


Рис. 6.21. Растянутая винтовая дислокация в плоскости (112) ОЦК решетки. Между частичными дислокациями Шокли с векторами Бюргерса b_2 и b_3 находится дефект упаковки

Эти смещения произошли на величину, равную двум третям единичного вектора тождественной трансляции, то есть на $(2/3)(a/2[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]) = a/3[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$.

В результате сдвига сначала на $a/6[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, а затем на $a/3[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, образовалось чередование слоев (112), свойственное идеальной ОЦК решетке.

Правой границей дефекта упаковки на рис. 6.21 является частичная дислокация с вектором Бюргерса $a/3[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$.

Образование двух частичных дислокаций Шокли в ОЦК решетке при расщеплении единичной дислокации можно описать следующей реакцией:

$$a/2[\bar{1}\bar{1}\bar{1}] = a/6[\bar{1}\bar{1}\bar{1}] + a/3[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]. \quad (6.9)$$

Согласно критерию Франка, эта реакция энергетически выгодна, так как

$$a\sqrt{3}/2^2 > a\sqrt{3}/6^2 + a\sqrt{3}/3^2$$

или

$$3a^2/4 > 5a^2/12.$$

Практически такое расщепление будет реализоваться только в том случае, если энергия образующегося дефекта упаковки мала.

6.5.3 Дислокационные реакции в ОЦК решетке. Для ОЦК решетки не предложено простого векторного построения, аналогичного тетраэдру Томпсона для ГЦК или стандартной бипирамиде для ГП металлов, которое могло бы помочь проанализировать в наглядной форме все дислокационные реакции.

Дислокации в ОЦК решетке могут скользить в плоскостях {110} и {112}.

1. *Рассмотрим реакции объединения двух дислокаций в плоскостях {110}.* Две полные дислокации $a/2\langle 111 \rangle$, скользящие в плоскостях {110}, при встрече объединяются, образуя полную дислокацию $a\langle 100 \rangle$. Такое объединение энергетически выгодно, так как

$$a\sqrt{3}/2^2 + a\sqrt{3}/2^2 > a^2$$

или

$$3a^2/2 > a^2.$$

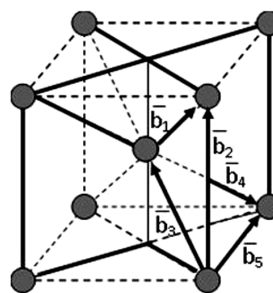


Рис. 6.22. Векторы Бюргерса единичных дислокаций $\mathbf{b}_1 = a/2[111]$, $\mathbf{b}_2 = a[001]$, $\mathbf{b}_3 = a/2[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ лежащих в плоскости $(\bar{1}\bar{1}\bar{0})$; $\mathbf{b}_4 = a/2[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ — (110) ; $\mathbf{b}_5 = a[\bar{1}\bar{0}\bar{0}]$ — (001)

Если встречающиеся дислокации $a/2\langle 111 \rangle$ скользят в одной плоскости, то образующаяся дислокация $a\langle 100 \rangle$ может скользить в этой же плоскости.

Например, на рис. 6.22 как (6.10):

$$a/2[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]_{(110)} + a/2[111]_{(110)} = a[001]_{(110)}$$

В том случае, когда дислокации $a/2\langle 111 \rangle$ скользят во взаимно перпендикулярных плоскостях {110}, образующаяся при их встрече дислокация $a\langle 100 \rangle$ может скользить только в плоскости {100} и поэтому служит барьером для других дислокаций $a/2\langle 111 \rangle$ во взаимно перпендикулярных плоскостях скольжения {110}.

Допустим, что дислокация $a/2[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ скользит в плоскости $(\bar{1}\bar{1}\bar{0})$, а дислокация $a/2[111]$ — в плоскости (110) (см. рис. 6.22). Эти дислокации могут встретиться только на линии пересечения $00'$ плоскостей $(\bar{1}\bar{1}\bar{0})$ и (110) , то есть на прямой $[001]$, где и возникает дислокация с вектором Бюргерса $a[\bar{1}\bar{0}\bar{0}]$:

$$a/2[\bar{1}\bar{1}\bar{1}] + a/2[111] = a[\bar{1}\bar{0}\bar{0}] \quad (6.11)$$

Поскольку вектор Бюргерса $a[\bar{1}\bar{0}\bar{0}]$ образовавшейся дислокации перпендикулярен плоскости (001) , в которой лежит ее линия $[001]$, то дислокация $a[\bar{1}\bar{0}\bar{0}]$ является краевой.

Она может скользить только в плоскости, в которой находятся ее линия и вектор Бюргерса, то есть в плоскости (010) .

Поэтому дислокация $a[\bar{1}\bar{0}\bar{0}]$ может быть эффективным барьером для дислокаций

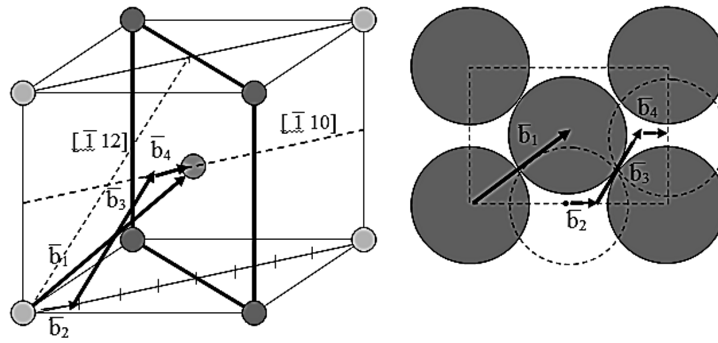


Рис. 6.23. Реакция разложения полной дислокации $\bar{\mathbf{b}}_1 = a/2[\bar{1}11]$ на частичные $\bar{\mathbf{b}}_2 = \bar{\mathbf{b}}_4 = a/8[\bar{1}10]$, $\bar{\mathbf{b}}_3 = a/4[\bar{1}12]$

$a/2[\bar{1}11]$ и $a/2[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, скользящих в плоскостях $\{110\}$ и $\{\bar{1}\bar{1}0\}$.

2. Рассмотрим реакции расщепления полных дислокаций $a/2\langle 111 \rangle$ с образованием частичных в плоскостях $\{110\}$. Последовательность упаковки атомных слоев $\{110\}$ АВАВАВ... Эти слои можно рассматривать как несколько нарушенную плотнейшую упаковку (рис. 6.23).

Вектор тождественной трансляции $\bar{\mathbf{b}}_1 = a/2\langle 111 \rangle$ переводит шары верхнего слоя В в идентичные положения, в результате чего после смещения верхнего слоя В относительно нижнего слоя А полностью восстанавливается исходная упаковка.

Точно такое же смещение слоя В легче осуществить по ломанному пути вдоль векторов $\bar{\mathbf{b}}_2$, $\bar{\mathbf{b}}_3$ и $\bar{\mathbf{b}}_4$. Векторы $\bar{\mathbf{b}}_2 = \bar{\mathbf{b}}_4 = a/8\langle 110 \rangle$ и $\bar{\mathbf{b}}_3 = a/4\langle 112 \rangle$ не являются векторами тождественной трансляции и характеризуют частичные дислокации.

Следовательно, в плоскости $\{110\}$ возможна реакция диссоциации:

$$a/2\langle 111 \rangle = a/8\langle 110 \rangle + a/4\langle 112 \rangle + a/8\langle 110 \rangle \quad (6.12)$$

Эта реакция энергетически выгодна, так как:

$$(a\sqrt{3}/2)^2 > (a\sqrt{2}/8)^2 + (a\sqrt{6}/4)^2 + (a\sqrt{2}/8)^2$$

или

$$3a^2/4 > 7a^2/16.$$

Образующаяся дислокационная конфигурация из трех частичных дислокаций, соединенных дефектами упаковки, находится в одной плоскости и является скользящей.

Смещение атомов вдоль вектора $a/8\langle 110 \rangle$ создает дефект упаковки в плоскости $\{110\}$. При этом нарушается взаимное расположение соседей в одном слое и поэтому энергия дефекта упаковки очень высокая; при образовании дефектов упаковки в слоях $\{111\}$ ГЦК и (0001) ГП решеток взаимное расположение ближайших соседей не изменяется.

Из-за высокой энергии дефектов упаковки в ОЦК решетке ширина расщепленных дислокаций столь мала, что расщепление экспериментально прямыми структурными методами не обнаруживается.

При очень малом расщеплении с помощью анализа расщепленных дислокаций в ОЦК решетке мы фактически лишь формально и приближенно описываем структуру ядра дислокаций.

Линия винтовой дислокации с вектором Бюргера $a/2\langle 111 \rangle$ проходит вдоль прямой $\langle 111 \rangle$.

Эта прямая является линией пересечения трех плоскостей $\{110\}$.

Например, на рис. 6.24 по прямой $[111]$ пересекаются плоскости $(\bar{1}10)$, $(10\bar{1})$ и $(0\bar{1}1)$.

Поэтому винтовая дислокация $a/2[111]$ может расщепляться сразу в трех этих плоскостях:

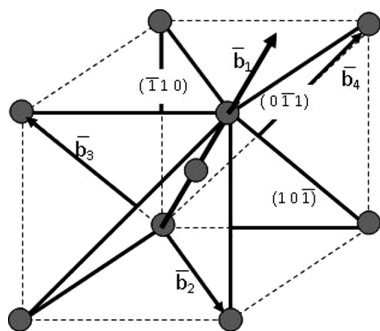


Рис. 6.24. Сидячая дислокационная конфигурация, образовавшаяся при расщеплении винтовой дислокации. На схеме показаны направления векторов без учета их мощности: дислокация с вектором $\bar{b}_1 = a/4[111]$ расщепляется на $\bar{b}_2 = a/8[\bar{1}10]$ в плоскости (110) , на $\bar{b}_3 = a/8[10\bar{1}]$ в плоскости $(10\bar{1})$ и $\bar{b}_4 = a/8[011] - (011)$

$$\begin{aligned} a/2[111] = & a/4[111] + a/8[011]_{(0\bar{1}1)} + \\ & + a/8[10\bar{1}]_{(10\bar{1})} + a/8[110]_{(\bar{1}10)} \end{aligned} \quad (6.13)$$

Реакция идет с большим выигрышем в энергии: $3a^2/4 > 9a^2/32$.

Частичные дислокации с векторами Бюргера $a/8[110]$ образуются в трех разных плоскостях $\{110\}$. Они соединены дефектами упаковки с частичной дислокацией, имеющей вектор Бюргера $a/4[111]$ и образующейся в пересечении этих плоскостей на прямой $[111]$.

Рассмотренная дислокационная конфигурация, состоящая из четырех частичных дислокаций, соединенных дефектами упаковки в трех пересекающихся плоскостях $\{110\}$, неподвижна.

Таким образом, расщепление винтовой дислокации по реакции (6.13) превращает эту дислокацию из скользящей в сидячую.

3. Дислокации $a/2\langle 111 \rangle$ могут расщепляться также в плоскостях скольжения $\{112\}$. Диссоциация винтовой дислокации $a/2\langle 111 \rangle$ в плоскости $\{112\}$ с образованием двух частичных дислокаций $a/6\langle 111 \rangle$ и $a/3\langle 111 \rangle$ уже была рассмотрена ранее (6.9).

Образующаяся по этой реакции конфигурация из двух частичных дислокаций, соеди-

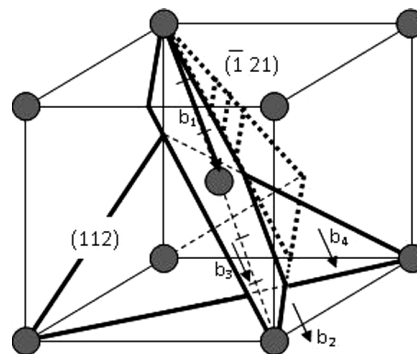


Рис. 6.25. Сидячая дислокационная конфигурация, образовавшаяся при расщеплении в двух плоскостях (121) и (112) по реакции $b_1 = b_2 + b_3 + b_4$ или в кристаллографических символах: $a/2[111] = a/6[111] + a/6[111] + a/6[111]$

ненным дефектом упаковки, находится в одной плоскости и является скользящей.

Частичные дислокации Шокли, образовавшиеся при расщеплении винтовой дислокации по реакции (6.9), обладают следующей особенностью. Их векторы Бюргера параллельны вектору Бюргера исходной единичной дислокации (в отличие от расщепленной винтовой дислокации в ГЦК решетке).

Следовательно, винтовая единичная дислокация в ОЦК решетке расщепляется по реакции (6.9) на две чисто винтовые, и в результате расщепления винтовая дислокация может легко переходить из одной плоскости скольжения $\{112\}$ в другую, что невозможно для расщепленной винтовой дислокации в ГЦК решетке.

Полная винтовая дислокация (рис. 6.25) $a/2\langle 111 \rangle$ может расщепляться одновременно в двух плоскостях $\{112\}$, образуя сидячую конфигурацию из трех частичных дислокаций, соединенных дефектами упаковки:

$$\begin{aligned} a/2\langle 111 \rangle = & a/6\langle 111 \rangle + a/6\langle 111 \rangle + \\ & + a/6\langle 111 \rangle. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Одна частичная дислокация с вектором Бюргера $a/6\langle 111 \rangle$ лежит на линии $\langle 111 \rangle$ пересечения плоскостей $\{112\}$, а две других

таких же частичных дислокаций находятся в плоскостях {112} на равном расстоянии от первой.

Это расщепление энергетически выгодней, чем реакция (6.9), так как при реакции (6.14) $3a^2/4 > a^2/4$, а при реакции (6.9) $3a^2/4 > 5a^2/12$.

4. Дислокации $a/2\langle 111 \rangle$ могут также диссоциировать с образованием частичных дислокаций и соответственно дефектов упаковки одновременно в плоскостях {110} и {112}.

Число возможных дислокационных реакций в ОЦК решетке значительно больше, чем в ГЦК, так как в ней больше число разных плоскостей скольжения. Здесь обсуждены лишь некоторые из возможных дислокационных реакций.

В заключение в таблице 6.3 приведены сведения о всех рассмотренных выше характерных дислокациях в ОЦК решетке.

Таблица 6.3

Характерные дислокации в ОЦК решетке

Полные дислокации						
Вектор Бюргерса	$a/2\langle 111 \rangle$		$a\langle 100 \rangle$		$a\langle 110 \rangle$	
Квадрат вектора	$3a^2/4$		a^2		$2a^2$	
Частичные дислокации						
Вектор Бюргерса	$a/8\langle 100 \rangle$	$a/6\langle 111 \rangle$	$a/4\langle 111 \rangle$	$a/3\langle 111 \rangle$	$a/4\langle 112 \rangle$	$a/3\langle 112 \rangle$
Квадрат вектора	$a^2/32$	$a^2/12$	$3a^2/16$	$a^2/3$	$3a^2/8$	$2a^2/3$

Глава 7. ПОВЕРХНОСТНЫЕ ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ

7.1 Кристаллографические параметры границ зерен

Укладка атомов в плоскости границ зерен и субзерен не соответствует правильному упорядоченному расположению узлов решетки и представляют собой особый двухмерный дефект решетки. Такие границы относятся к так называемым поверхностным дефектам микроструктуры, в двух направлениях пространства они имеют макроскопические размеры, а в третьем — размеры, соизмеримые с межатомными параметрами решетки. Для описания поверхности используют макро- и микроскопические параметры.

7.1.1 Макроскопические параметры границы. Макроскопические параметрами описывают взаимную ориентацию сопрягаю-

щихся кристаллов и ориентацию граничной поверхности в кристаллической решетке каждого зерна. Разориентировку зерен, то есть взаимную ориентацию двух соседних кристаллов (рис. 7.1), принято описывать как поворот одного кристалла относительно другого, приводящий к совмещению решеток кристаллов, на угол ϕ вокруг общей для обоих зерен оси $[uvw]$.

Угол ϕ называют углом разориентировки, а ось $[uvw]$ — осью разориентировки. Например, условная запись параметров границ: $37^\circ\langle 001 \rangle$ означает, что угол разориентировки между направлениями $[011]$ в двух соседних зернах равен 37° .

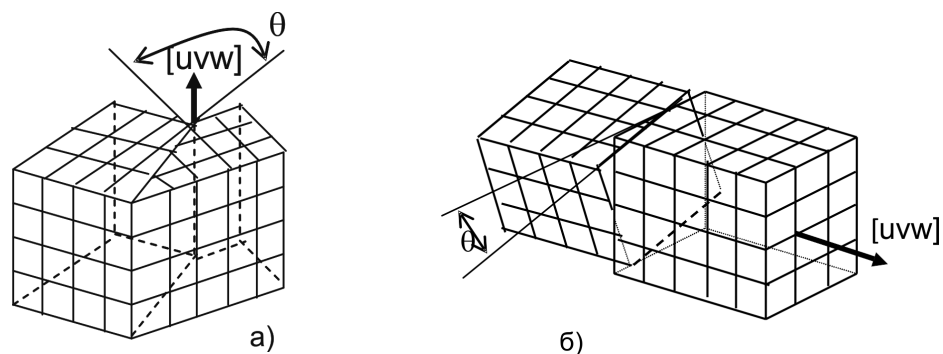


Рис. 7.1. Границы наклона (а) и кручения (б)

Разориентировка кристаллов может приводить к образованию границ наклона или кручения (рис. 7.1). Если ось вращения лежит в плоскости границы зерен (субзерен), то такую границу называют *границей наклона* (рис. 7.1, а), а если ось вращения перпендикулярна плоскости границы, то мы имеем дело с *границей кручения* (рис. 7.1, б).

В более общем случае граница смешанного типа состоит из элементов и наклона, и кручения.

Ориентацию поверхности границ вычисляют, определяя индексы плоскости решетки, параллельной границе, предварительно определив тем или иным способом ориентировку кристаллографических решеток соседствующих зерен.

Таким образом, *макроскопическими параметрами границы являются угол разориентировки кристаллов и общее для обоих зерен направление оси [uvw]*.

Однако макроскопические параметры не дают полной картины описания границы зерен.

Границы с разориентацией соседних зерен менее $\sim(8-15)^\circ$ относят к *малоугловым*, а с большей разориентацией — к *высокугловым* (*большеугловым*).

Такое разделение оправдано, во-первых, тем обстоятельством, что *малоугловые границы образуют поверхностные дефекты внутри кристалла, являясь границей между субзернами, а поликристаллы, растущие из*

разных центров кристаллизации, разделены чаще всего большеугловыми границами.

Во-вторых, структура мало- и большеугловых границ имеет некоторые принципиальные различия.

7.1.2 Микроскопические параметры границы. Знание разориентировки кристаллов и ориентации плоскости границы достаточно для описания положения границы зерен с макроскопической точки зрения.

При образовании границы зерен, кроме взаимного разворота двух частей кристалла, возможно их взаимное смещение.

С точки зрения микроскопической, сдвиг одного кристалла по отношению к другому может приводить к новой структуре границы при тех же самых макроскопических параметрах — разориентировке зерен и ориентации поверхности границы.

Микроскопические параметры границы определяют ее внутреннюю структуру. Для описания микроскопических параметров границ зерен в металлах надо знать относительную трансляцию и всего оказывается три микроскопических параметра (в трех направлениях пространства).

От относительной трансляции существенно зависит зернограницная структура.

7.2 Структура совершенных границ

Развитие представления о структуре границ зерен с начала их изучения и до настоящего времени связано построением моделей, описывающих наблюдаемые экспериментально свойства границы.

Первая структурная модель аморфной границы *модель аморфной прослойки*, как «цемента», обеспечивающего сцепление соседних кристаллов принадлежит Розенхайну. Она позволила объяснить зернограничное проскальзывание при высоких температурах.

Взаимное смещение зерен как единого целого во время высокотемпературной деформации объясняли тем, что с повышением температуры аморфные прослойки размягчаются быстрее, чем кристаллические зерна.

Однако новые экспериментальные факты, связанные с анизотропией свойств границ зерен, скорости диффузии по границам, скорости миграции границ и зернограничного скольжения, а также другие характеристики границ зависят от угла разориентировки зерен не укладывались в рамки представлений об аморфной границе.

Следовательно, границы не аморфны, не бесструктурны и должны иметь определенное строение, зависящее от кристаллографической разориентировки зерен.

Во-вторых, аморфная прослойка должна иметь достаточно большую ширину (например, порядка ста атомных диаметров), чтобы по ней могли взаимно скользить зерна неправильной формы.

В то же время на основании косвенных, а затем и прямых экспериментальных данных, полученных с помощью ионного проектора, был сделан вывод, что ширина границы составляет всего 1–2 атомных диаметра.

Появились модели границ зерен, структура которых сочетала аморфные и кристаллические участки. По *островковой модели* Мотта, граница представлялась в виде островков

«хорошего» и «плохого» сопряжения решеток двух зерен.

Число островков хорошего сопряжения тем меньше, чем больше угол разориентировки соседних зерен. Хотя эту модель в ее первоначальном виде уже не используют, но общую идею о чередовании в структуре границы областей хорошего и плохого сопряжения широко применяют в большинстве современных моделей высокоугловых границ.

По Смолуховскому граница представляет чередование участков объединенных дислокаций (плохого сопряжения) и участков хорошего упругого сопряжения решеток между дислокациями.

Установление нового фундаментального факта — немонотонной зависимости свойств границ от угла разориентировки зерен привело к появлению теории кристаллической границы зерен.

Еще Харгривс и Хилл (1929 г.) в теории *переходной решетки* описали такую модель. Согласно этой модели граница является слоем толщиной 1–2 атомных диаметра, в котором атомы занимают положения, компромиссные между положениями узлов решеток соседних зерен, чтобы потенциальная энергия атомов в этом слое была минимальной. Естественно, что строение границы — переходной зоны зависит от разориентировки решеток соседних зерен, чем и обусловлено влияние этой разориентировки на свойства и поведение границ.

Из гипотезы переходной решетки по существу исходят все современные модели строения высокоугловых границ.

Таким образом, все существующие в настоящее время структурные модели учитывают кристаллическое строение границ зерен и описываются:

- дислокационной (либо дисклинационной) моделью;
- моделью решеток совпадающих узлов.

Кроме того, существуют модели, дополненные структурными элементами строения границ этих моделей.

Все эти модели рассматривают структуру совершенных границ.

Совершенными называются границы, разделяющие недеформированные кристал-

лы, не имеющих дальнедействующих упругих полей.

В реальных материалах им отвечают границы хорошо отожженных поликристаллов.

7.3 Дислокационные и дисклинационные модели строения границ зерен

7.3.1 Малоугловые границы. Дислокационной моделью хорошо описывается разориентировка субзерен (блоков) кристалла, а также структура малоугловых границ двух зерен. Линейные дефекты позволяют описать несовпадение ориентировок двух кристаллов с минимальной энергией искажения.

Модель строения границ иллюстрирует рис. 7.2.

Решетки двух зерен или субзерен упруго сопрягаются, за исключением мест, где оканчиваются неполные атомные плоскости, образуя краевые дислокации.

Такая граница является стенкой дислокаций одного знака.

Линии дислокаций перпендикулярны плоскости чертежа.

Два соседних зерна или субзерна симметрично наклонены по отношению к плоскости границы.

Поэтому такую малоугловую границу называют *симметричной границей наклона*.

Из геометрии симметричной границы наклона (рис. 7.2, а) следует, что расстояние между дислокациями в стенке D , вектор Бюргерса их и угол разориентировки зерен связаны следующим соотношением:

$$\bar{b}/2 = D \sin \theta / 2 \quad (7.1)$$

Так как при малых углах $\sin \theta \sim \theta$, расстояние между дислокациями в стенке:

$$D \approx \bar{b} / \theta \quad (7.2)$$

Взаимное уничтожение дальнедействующих полей напряжения от отдельных дислокаций является причиной образования малоугловых границ.

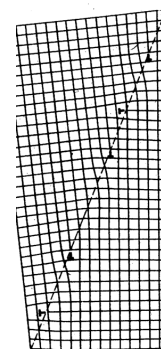
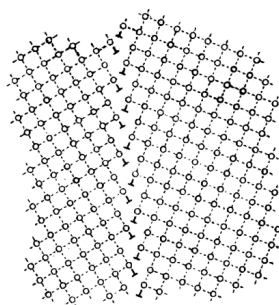
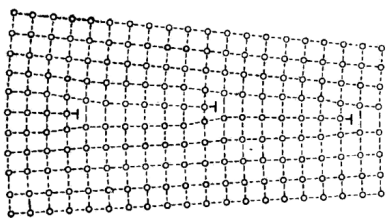


Рис. 7.2. Дислокационная модель симметричной границы наклона в простой кубической решетке: а) малоугловая граница; б) высокоугловая граница

Рис. 7.3. Несимметричная граница наклона

Они образуются при холодной деформации, рекристаллизации, полигонизации, ползучести.

Образование малоугловой границы из неупорядоченного массива дислокаций в результате взаимодействия полей напряжения от дислокаций показано на рис. 7.4.

Поле напряжений на краю дислокационной стенки притягивает отдельные краевые дислокации, которые, уменьшая напряжения, располагаются, удлиняя дислокационную стенку.

Отжиг равномерно деформированного кристалла, в котором дислокации хаотично распределены по плоскости скольжения, также уменьшает упругие искажения решетки.

Он сопровождается пластической деформацией кристалла, связанной с образованием малоугловой границы раздела внутри зерна — полигонизацией.

Поля упругих напряжений отдельных дислокаций в стенке, накладываясь, в значительной мере взаимно уничтожаются (на рис. 7.6, б под областью растяжения от одной дислокации находится область сжатия от другой дислокации). Этим и обеспечивается стабильность стенки.

В результате поле упругих напряжений бесконечной стенки, внутри которой дислокации отстоят одна от другой на расстоянии D , становится ничтожно малым при удалении по обе стороны от стенки на расстояние больше D .

Следовательно, стенка дислокаций имеет поле напряжений, которое распространяется на гораздо меньшее расстояние от нее, чем поле напряжений изолированной дислокации.

По краям стенки конечной протяженности поле напряжений не скомпенсировано и распространяется на большие расстояния.

Малоугловая граница упруго взаимодействует с дислокациями, вакансиями, примесными атомами. Источником силы является поле напряжений вокруг дислокационной стенки, которое простирается всего на несколько межатомных расстояний от стенки и

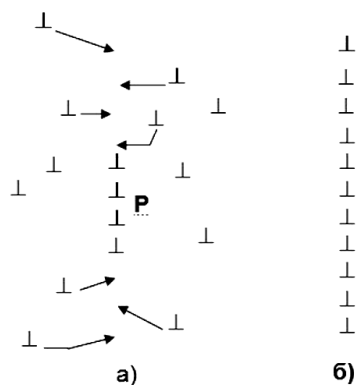


Рис. 7.4. Формирование малоугловой границы из разупорядоченного массива дислокации. Дислокационная стенка P притягивает окружающие дислокации (а) и, объединяясь с ними, образует малоугловую границу (б)

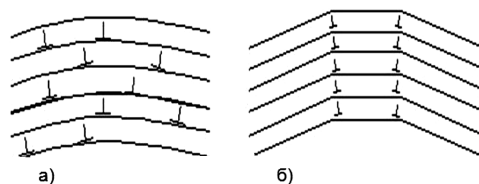


Рис. 7.5. Схема полигонизации кристалла: а) хаотичное расположение краевых дислокаций при изгибе; б) полигонизация — перемещение и образование стенок дислокаций, приводящее к образованию субзерен (разделения кристалла на полигоны)

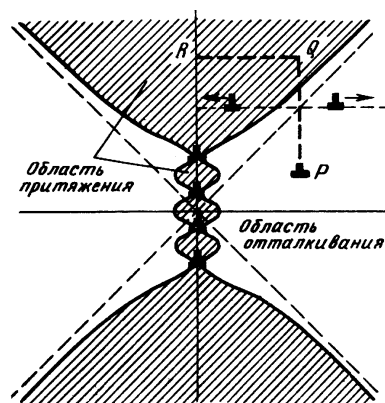


Рис. 7.6. Распределение упругих полей напряжений в дислокационной стенке, состоящей из 4 дислокаций (область притяжения заштрихована, область отталкивания не заштрихована)

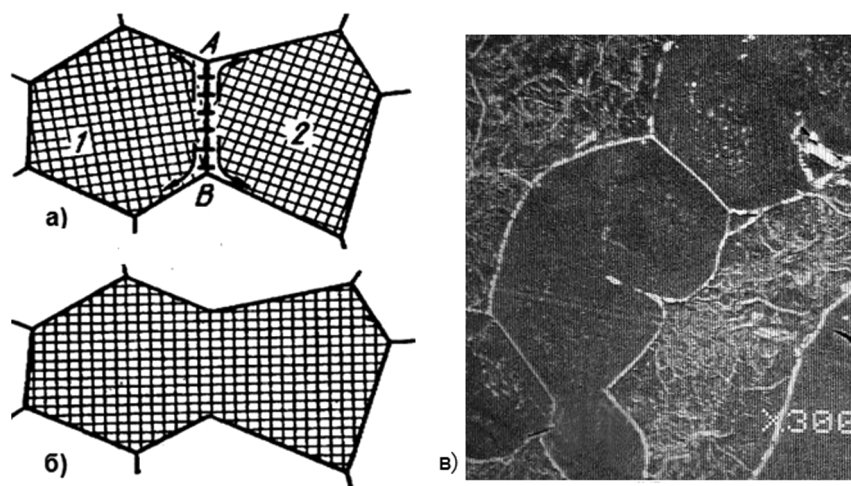


Рис. 7.7. Перемещение и структурные изменения малоугловой границы. а) подвижные дислокации, образующие границу АВ, поглощаются границами, окружающие зерна 1 и 2, при перемещении вдоль границ (показано стрелками); б) перемещение дислокации приводит к взаимному вращению субзерен 1 и 2 до положения одной ориентации; в) электронная микрофотография структуры малоугловых границ в алюминиевом образце

действует на дефекты кристаллической решетки, расположенных в этой зоне.

В результате взаимодействия дислокаций малоугловая граница может расти (рис. 7.4), перемещаться путем скольжения и переползания вдоль своей границы (рис. 7.7).

Она может притягивать к себе точечные дефекты, в том числе и примесные атомы, который, скапливаясь, образуют атмосферы. Примесные атомы тормозят перемещение малоугловых границ, стабилизируя субструктуру.

Хорошо разработанные дислокационные модели справедливы и для границ зерен, но с близкой ориентацией ($\sim 10-15^\circ$). Чем больше угол разориентировки, тем меньше расстояние между дислокациями в стенке.

В случае малых значений расстояния между дислокациями $D \approx b/\theta$.

Это соотношение подтверждается экспериментально при определении угла разориентировки рентгеновским методом, а расстояния между дислокациями — металлографически.

Общая плотность дислокаций в малоугловых границах составляет $10^8-10^{10} \text{ см}^{-2}$.

Поэтому к малоугловым или *дислокационным* относят межзеренные границы с углом разориентировки не более 10° .

Соседние субзерна внутри одного зерна обычно разориентированы на угол не более 1° .

Значит, все субзеренные (блочные) границы малоугловые.

Для описания строения границы вместо дислокационной можно использовать дисклинационную модель (рис. 7.8).

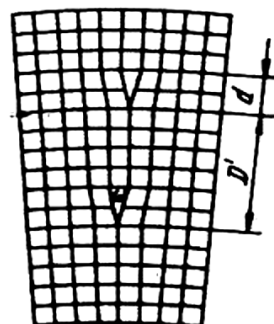


Рис. 7.8. Дисклинационная модель строения симметричной границы наклона

Каждая дислокация (рис. 7.2, а) как бы трансформируется в дислокационный диполь.

Краевая дислокация имеет такое же поле упругих напряжений, как и дислокационный диполь, если вектор Бюргера: $\bar{b} = d$, где — вектор поворота дисклинаций; d — расстояние между ними в диполе:

$$\bar{b} = 2d \operatorname{tg}(\alpha/2) \quad (7.3)$$

Из сопоставления формул (7.2) и (7.3) следует, что расстояние D между дисклинационными диполями в границе на рис. 7.8 связано с углом разворота зерен соотношением:

$$D = d / \alpha \quad (7.4)$$

Дислокационная и дисклинационная модели различаются строением ядер линейных дефектов, составляющих границу.

7.3.2 Большеугловые границы. Моделирование большеугловых границ ($\alpha > 15^\circ$) рядом плотноупакованных дислокаций является расширением модели на большеугловые (рис. 7.2, б).

Однако такая дислокационная модель для большеугловых границ имеет существенные недостатки.

Описание произвольной границы зерна в виде высокоугловой с помощью дислокаци-

онной модели с минимальной энергией возможно.

Энергия границы минимальна, если дислокации однородно распределены в ее плоскости (рис. 7.2).

Но при этом плотность дислокаций в границах зерен резко возрастает, а расстояния между дислокациями становятся столь малы, что соизмеримы с размерами ядер дислокаций.

Таким образом, в дислокационной модели большеугловой границы не учитываются особенности упругих полей вблизи центра дислокации, исключаются взаимодействия ядер дислокаций, а граница представляется в виде линейной суперпозиции дислокаций.

Указанные выше недостатки дислокационной модели большеугловых границ относительно преодолены в дисклинационной модели границ, при рассмотрении большеугловой дислокационной границы как массива пор с введением в границу диполей поперечных дислокаций.

Современное машинное моделирование на ЭВМ с учетом релаксационных процессов границы зерна и геометрический анализ могли бы значительно улучшить дислокационную модель границ.

7.4 Модели решеток совпадающих узлов

Развитием кристаллографического подхода в теории строения большеугловых границ явилась разработка модели решеток совпадающих узлов (PCY).

Согласно этой модели при анализе зернограницной структуры рассматривают не непосредственно кристаллические решетки соседствующих зерен, а вводят различные вспомогательные решетки, общие для обоих зерен: решетку совпадающих узлов (PCY), полную решетку наложения (ПРН) и др.

При определенных взаимных ориентировках соседних зерен может возникнуть общая решетка, состоящая из узлов обоих зерен. Узлами такой решетки в плоскости гра-

ницы будут атомы, общие для кристаллических решеток граничащих зерен.

Наиболее энергетически выгодными, то есть с наиболее низкой энергией, будут границы, лежащие в плотноупакованных плоскостях такой решетки.

Если незначительно изменить угол α , то совпадение узлов нарушится.

На смежной границе зерен всегда есть хотя бы один общий атом, лежащий в узлах обеих решеток.

Если выбрать его за начало отсчета и мысленно продолжить каждую из решеток, они становятся взаимнопроникающими.

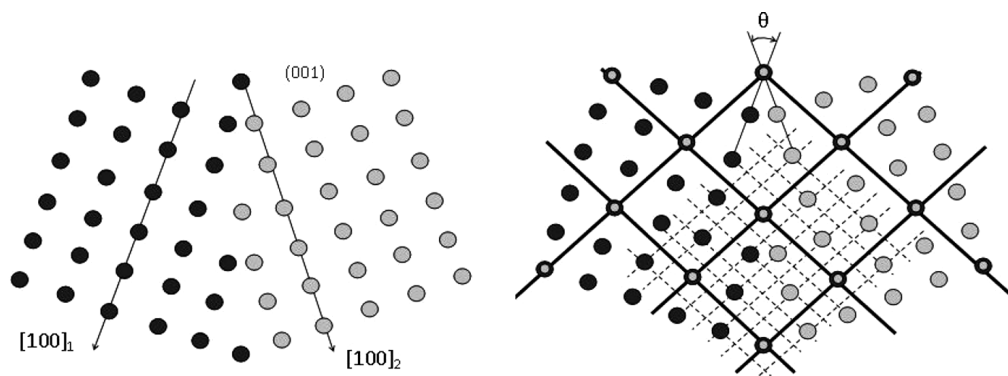


Рис. 7.9. Границы двух зерен с кубической решеткой на плоскости (001), разориентированных на $36,86^\circ$ вокруг оси [001]. а) светлые и темные шары — узлы решеток 1 и 2 соответственно. б) сплошные линии — решетка совпадения узлов (PCY), штриховые — полная решетка наложения (ПРН). Двойные шары — совпадающие узлы обеих решеток

На рис. 7.9 в качестве примера показаны проекции на плоскость (001) границ двух смежных примитивных кубических решеток, разориентированных на $36,86^\circ$ вокруг оси [001].

Видно, что часть узлов одной решетки совпадает с узлами второй, каждый пятый узел решеток 1 и 2 образуют пространственную решетку совпадающих узлов.

В направлениях [001] каждой решетки периоды PCY кратны трансляциям атомно-кристаллических решеток. Необходимые и достаточные условия PCY или решетки совпадений — рациональная трансляция.

Границы, для которых существует решетка совпадений, называются *регулярными* или

специальными, поскольку они обладают особыми свойствами.

Этим границам соответствуют минимумы энергии, коэффициента зернограницной диффузии, склонности к сегрегации примеси и других свойств в зависимости от разориентировки (рис. 7.10).

Если граница зерна совпадает с одной из плоскостей PCY, то узлы последней образуют в плоскости границы зерна двумерную сетку.

Параметры PCY позволяют описать строение границы: величину соответствия границ, равного периоду решетки совпадений в плоскости границы и толщину переходного слоя «толщину границы» — период решетки по нормали к границе.

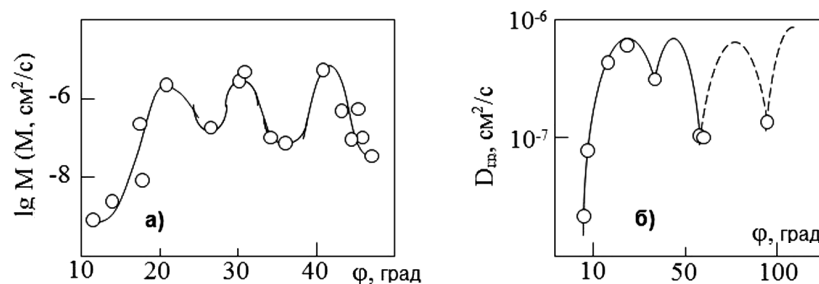


Рис. 7.10. Зависимость свойств границ наклона в алюминии (поворот вокруг оси $\langle 110 \rangle$) от угла их разориентировки: а) подвижность; б) коэффициент граничной диффузии цинка при 250°C

Границы, отвечающие условиям возникновения совпадающих узлов (границы частичного сопряжения, специальные или особые) могут быть для ряда дискретных значений углов разворота зерен в плоскости границы.

Главный параметр регулярной границы — число узлов решетки металла, приходящихся на один совпадающих узел в общей решетки совпадений (σ).

Чем больше атомов в ячейке совпадений, тем сложнее устроена граница.

Размеры ячейки РСУ характеризуют :

$$\sigma = (V_{\text{PCY}})/(V_{\text{исх.яч.}}),$$

где V_{PCY} — объем ячейки РСУ; $V_{\text{исх.яч.}}$ — объем ячейки исходной решетки.

Число σ всегда нечетное.

Так, $\sigma=1$ означает полное совпадение решеток: границы нет, и энергия $\sigma=0$.

В таблице 7.1 в качестве примера приведены значения σ для разных условий совпадения.

Здесь же указаны плоскости с наибольшей плотностью совпадающих узлов.

Согласно теории границ раздела считается, что совпадения узлов имеют место только для определенных плоскостей в границе.

Граница между кристаллами с ориентациями, отличающимися от специальных, состоит из областей с атомами в узлах совпадения и областей, в которых отклонения упаковки атомов компенсируется дислокациями несоответствия.

Совокупность возможных векторов Бюргера дислокаций определяет вектора трансляций полной решетки наложения.

ПРН одновременно содержит узлы обеих решеток, то есть включает кристаллические решетки обоих соседних зерен, а также РСУ, как свои подрешетки (рис. 7.9, б).

7.4.1 Модель полиэдров. Кроме того, есть еще одна зернограничная характеристика: атомные конфигурации, из которых построена граница.

Таблица 7.1

Характеристики решеток совпадающих узлов в ГЦК и ОЦК металлах

α , град.	Ось вращения [uvw]	σ	Плоскости с наибольшей плотностью совпадающих узлов (в символах hkl исходной решетки)	
			ГЦК	ОЦК
70,5 60 131,8 180 146,4	110 111 210 211 311	3	111	112
36,9 180 101,6 143,1 180 154,2 95,7	100 210 211 221 310 311 331	5	210	310
38,2 73,4 135,6 115,4 149 180 110,9	111 210 211 310 320 321 331	7	123	123

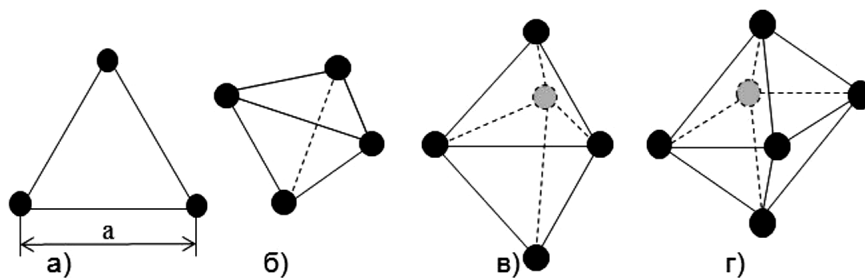


Рис. 7.11. Простейшие полиэдры из равносторонних треугольников (а), б — тетраэдр, в — битетраэдр, г — октаэдр

Простейший элемент укладки состоит из трех атомов в вершинах равностороннего треугольника (рис. 7.11, а) со стороной a .

Из таких треугольников (граней) можно составить только 8 выпуклых многоугольников, во внутрь которых невозможно вписать атомы того же радиуса (рис. 7.11, б, в, г): тетраэдры, битетраэдры, октаэдры, тетрагональные додекаэдры и т.д.

В таких полиэдрах число атомов составляет от 4 до 12, а граней — от 4 до 20.

Если для всех атомов межзеренной границы провести анализ координационных чисел и межатомных расстояний, то можно разложить укладку атомов как внутри зерна, так и на границе на эти устойчивые атомные конфигурации.

Например, периодические укладки, заполняющие весь объем из октаэдров и тетраэдров, дают решетки ГЦК, ГПУ. Решетка ОЦК сложена из одних октаэдров.

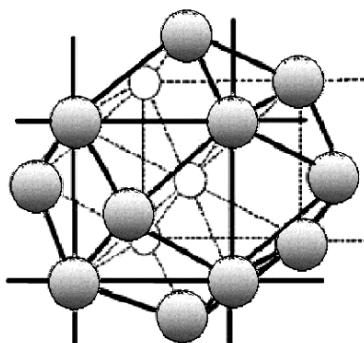


Рис. 7.12. Решетка ОЦК, сложенная из полиэдров

Существует строго ограниченный набор координационных многогранников, по вершинам которых располагаются атомы границ зерен, являющихся простейшим структурным элементом.

Межзеренная граница может состоять из нескольких таких типов координационных многогранников.

С помощью набора структурных единиц может быть представлен непрерывный переход зернограницных структур через весь интервал разориентировок как для границ наклона, так и границ кручения.

Все границы по этой модели имеют упорядоченное строение. Очень важно, что теория структурных единиц соответствует дислокационным моделям большеугловых границ.

Считается, что отклонения разориентировки границы от специальной создается сеткой зернограницных дислокаций, аналогично том, как сетка решеточных дислокаций создает малоугловую разориентировку кристаллической решетки.

Эти зернограницные дислокации называемые собственными, структурными или вторичными ЗГД, имеют ПНР векторы Бюргерса.

Таким образом, описание с помощью структурных единиц свидетельствует об упорядоченном, кристаллическом строении всех границ, которое позволяет выявить дислокационную структуру любой границы.

Поскольку межзеренные границы имеют кристаллическое строение, они также могут иметь нарушения в своих упаковках.

Они могут быть аналогичны решеточным, но существуют и специфические зернограничные дефекты.

Нужно отметить, что некоторые особенности строения границ, например структурные ЗГД, являются неотъемлемой ее частью,

то есть присущи границе в равновесном состоянии при заданных зернограничных параметрах им не могут быть отнесены к ее дефектам.

В границах зерен могут присутствовать вакансии и межузельные атомы.

7.5 Дефекты структуры границ зерна

Дефекты структуры границ зерен могут быть аналогичным решеточным: вакансии, межузельные и примесные атомы, дислокации, при этом они могут иметь свои специфические зернограничные различия. На рис. 7.13 (а, б) показан пример моделирования на ЭВМ структуры вакансии в симметричной границе наклона $\theta = 7^\circ$. Как показано путем машинного моделирования в работах [13, 14], несмотря на большую «рыхлость» структуры границ по сравнению совершенной решеткой, зернограничные вакансии являются вполне определенным дефектом — отсутствующим атомом, хотя этот дефект и может быть больше «размазан» в границе, чем в совершенной кристаллической решетке.

Видно, что в этой границе, являющейся специальной границей хорошего сопряжения, вакансия может быть описана как сво-

бодное место в границе (локализованная вакансия), приводящее к смещению соседних атомов, что изменяет форму вакансии по сравнению с решеточной.

Эти смещения охватывают довольно большую группу атомов, причем вблизи вакансии величина смещения составляет около 10 % от межатомного расстояния, т.е. примерно в 4 раза больше чем вблизи вакансии в решетке.

В произвольной границе вакансии (рис. 7.13, в) вызывают большую релаксацию окружающих атомов, чем в специальной границе, однако остается дискретным дефектом зернограничной структуры.

Физическая причина большой дислокации вакансии в произвольных границах, по-видимому, заключается в следующем. Как отмечалось ранее (см. п. 7.4.1 данной главы), произвольная граница может быть представ-

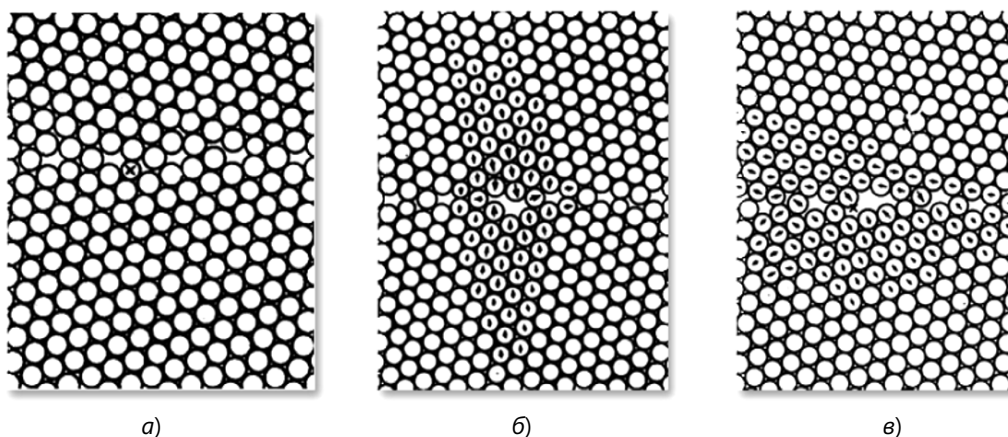


Рис. 7.13. Смоделированные на ЭВМ зернограничные вакансии [13]: а) граница наклона 7° ; б) вакансия в этой границе, образованная удалением атома X на рис. а; в) вакансия в произвольной границе

лена состоящей из сегментов разных структур, причем эти сегменты упруго связаны.

Поэтому образование вакансии на участке одного из сегментов может приводить к релаксации атомов в соседних сегментах.

При данных условиях (температура и давление) концентрация вакансии в границе может быть равновесной или неравновесной.

Однако вопрос о температурной зависимости концентрации зернограничных вакансий экспериментально недостаточно изучен.

Межузельный атом также является вполне определенным дефектом в границе, хотя и его релаксация в границе больше, чем в совершенной решетке [14]. Прямые наблюдения межузельных атомов в границах, возникающих при облучении металлов, могут быть выполнены методом ионной микроскопии [15].

В структуре границы могут содержаться инородные атомы (как замещения, так и внедрения). Концентрация примеси в границе также может быть равновесной и неравновесной при данной объемной концентрации примеси.

К линейным дефектам границ зерен относятся зернограничные дислокации, которые являются наиболее изученными зернограничными дефектами.

По своему происхождению ЗГД делятся на две группы — собственные (структурные, вторичные) и внесенные.

Собственные ЗГД являются необходимыми в границе при данных ее параметрах с точки зрения граничной кристаллогеометрии, например, для обеспечения отклонения разориентировки от специальной (рис. 7.14), поэтому они не являются дефектами структуры границы в прямом смысле этого слова.

Отклонение поверхности большеугловой специальной границы от плоскости хорошего сопряжения также может осуществляться с помощью системы ЗГД.

Структурные ЗГД имеют ПРН-векторы Бюргерса, возможны также частичные ЗГД. Упругие поля собственных ЗГД взаимно скомпенсированы, поэтому они создают у границ дальнедействующих напряжений.

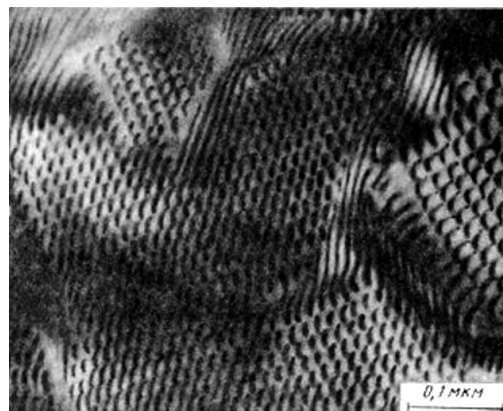


Рис. 7.14. Сетка ЗГД, создающая отклонение $0,5^\circ$ от разориентировки $36,9^\circ$ [001] в границе кручения 5 в тонкопленочном бикристалле золота

Внесенные ЗГД не являются кристаллогеометрически необходимыми структурными особенностями границ. Механизмы внесенных ЗГД изучены недостаточно.

Они могут зарождаться непосредственно в границе путем действия какого-либо зернограничного источника.

Наиболее достоверно экспериментально установленный путь образования внесенных ЗГД — это взаимодействие решеточных дислокаций с границами. Захваченная границей решеточная дислокация имеет решеточный вектор Бюргерса одного из зерен и представляет собой частный случай внесенных ЗГД.

Чисто геометрически решеточный вектор Бюргерса может быть представлен суммой базисных трансляций ПРН, поэтому решеточная дислокация может распадаться в границе на ЗГД с ПРН-векторами Бюргерса, которые являются внесенными ЗГД.

Внесенные ЗГД имеют нескомпенсированные упругие поля, следовательно границы, их содержащие, могут быть определены как неравновесные. Поэтому *внесенные ЗГД принято называть неравновесными дефектами* в отличие от собственных ЗГД.

Кроме полных ЗГД с ПРН-векторами Бюргерса в границах могут быть частичные ЗГД, векторы Бюргерса которых не являются трансляциями ПРН.

Частичные ЗГД могут собственными и внешними. Частичные ЗГД разделяют участки границы с различной трансляцией зерен.

Считая структуру границы в одном из трансляционных состояний границы является зернограничным дефектом упаковки, и тогда частичная ЗГД окаймляет этот дефект. Однако, если структура границы в равновесном состоянии представляет набор доменов с различным трансляционным состоянием. То описание с дефектами упаковки вряд ли имеет физический смысл.

Можно также предположить (пока только гипотетически), что в границах могут существовать не только трансляционные дислокации, но и дефекты ротационного типа — дисклинации.

Существование собственных зернограничных дислокаций, точнее — дисклинационных диполей, предполагается в модели, предложенной А.Л.Ройтбурдом.

Эти дисклинации разделяют участки границы с различной разориентировкой, являются собственными — равновесными дефектами границ.

Можно предположить существование и внесенных зернограничных дисклинаций, приводящих к неравновесному состоянию структуры границы.

Межзеренные границы могут иметь различные топографические особенности — ступеньки, уступы, фасетки.

Ступенька на границе может быть связана с зернограничной дислокацией, в этом случае она является составной частью ядра ЗГД (рис. 7.15).

Существуют и бездислокационные зернограничные уступы, высота которых должна быть кратна периоду РСУ. Такие уступы могут иметь масштаб от нескольких межатомных расстояний до макроскопических фасеток.

Считается, что при отклонении поверхности специальной границы от симметричного положения ее поверхность фасетируется по плотноупакованным плоскостям РСУ (рис. 7.16).

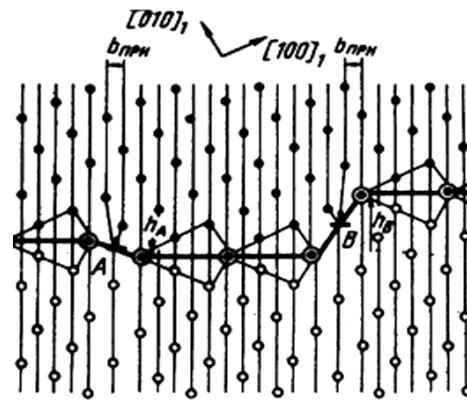


Рис. 7.15. ЗГД с одинаковыми векторами Бюргерса, но имеющие различные ступеньки в границе 5

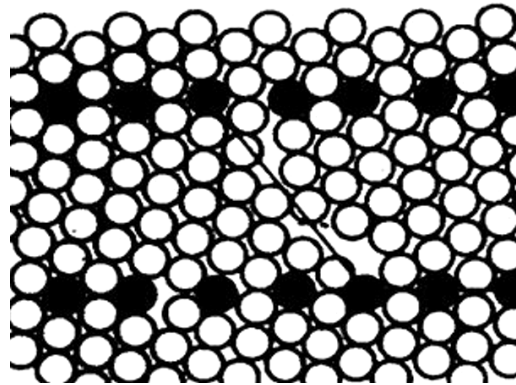


Рис. 7.16. Фасетированная граница 25

Такое фасетирование может иметь атомный масштаб, т.е. несимметричная граница наклона разбивается на структурные единицы соответствующих симметричных границ.

Экспериментально обнаруживаемый масштаб фасетирования границ зависит от метода исследования.

При различных внешних условиях границы могут фасетироваться не только в силу уменьшения энергии границы при ее прохождении по плотноупакованным плоскостям РСУ или по плотноупакованным атомным плоскостям одного из зерен.

Они могут быть обнаружены на границах у тройных стыков зерен: граница фасетируется, чтобы соблюдать условие механического

равновесия в тройном стыке. Установлено, что регулярный ряд микроступенок может возникать, когда на границу под малым ($<10^\circ$) углом выходят плотноупакованные атомные плоскости одного из зерен.

Надо отметить, что различные бездислокационные поверхностные особенности всегда возникают в результате заданных внешних условий и параметров границы, в частности — условий расположения поверхности границы.

Следовательно, эти особенности являются собственными для границы и не являются неравновесными дефектами зернограницной структуры.

В заключение хотелось бы отметить, что дефекты кристаллической решетки — как точечные и линейные, так и поверхностные, не случайно относятся к числу важнейших структурных параметров, определяющих свойства металлических материалов.

Что касается границ зерен — это один из основных видов дефектов кристаллического строения металлов.

Появление новых данных о кристаллогеометрии границ зерен и их атомном строении

связано с совершенствованием экспериментальных методов высокого разрешения, а также развитию машинного моделирования.

К настоящему времени наши знания о границах зерен достигли такого уровня, что становится возможным использовать теоретические и экспериментальные результаты о структуре границ зерен для объяснения свойств реальных материалов.

Важным моментом оказалась необходимость учета того обстоятельства, что *свойства поликристаллов обусловлены не только исходной статичной структурой границ, но и изменениями этой структуры вследствие внешних воздействий.*

В настоящее время *связь структуры границ и свойств материалов* — активно развивающийся раздел науки о границах зерен.

Большинство конструкционных материалов, прежде всего металлов, используются в виде поликристаллов и неотъемлемой частью их структуры являются границы зерен.

Вот почему большое внимание уделяют дефектам кристаллического строения и в частности границ зерен исследователи различных специальностей.

7.6 Методы изучения линейных и поверхностных дефектов

Для детального исследования тонкой структуры кристаллических материалов различной природы существует много разнообразных методов, среди которых основным является микроскопия.

Микроскопия, как средство получения увеличенного изображения, зародилась еще XV веке, когда впервые были изготовлены простые увеличительные стекла для изучения насекомых.

Уже в 20 веке были разработаны методы микроскопии с помощью электронных и ионных пучков. Во всех упомянутых методах применяется принцип облучения исследуемого объекта потоком частиц и детектирования результатов взаимодействия пучка частиц с объектом исследования.

В сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ) использован другой принцип: вместо зондирующих частиц в ней используется твердотельный механический зонд в виде иглы и детектируется результат взаимодействия иглы с поверхностью исследуемого объекта.

При этом может использоваться взаимодействие различной природы (механическое, электростатическое, магнитное, электромагнитное).

Другим важным принципом, отраженным в названии метода СЗМ, является принцип сканирования, т.е. получение не усредненной информации об объекте исследования, а дискретное (от точки к точке, от линии к линии) перемещение зонда и считывание информации в каждой точке.

СЗМ — один из мощных современных методов изучения исследования морфологии и локальных свойств поверхности твердого тела с высоким разрешением.

Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) — первый из семейства зондовых микроскопов — был изобретен в 1981 году швейцарскими учеными Гердом Биннигом и Генрихом Рорером.

В своих работах они показали, что это достаточно простой и весьма эффективный способ исследования поверхности с пространственным разрешением вплоть до атомного.

Настоящее признание данная методика получила после визуализации атомной структуры поверхности ряда материалов и, в частности, реконструированной поверхности кремния.

Вслед за туннельным микроскопом в течение короткого времени были созданы атомно-силовой микроскоп (АСМ), магнитно-силовой микроскоп (МСМ), электросиловой микроскоп (ЭСМ), ближнепольный оптический микроскоп (БОМ) и многие другие приборы, имеющие сходные принципы работы и называемые сканирующими зондовыми микроскопами.

7.6.1 Сканирующая электронная микроскопия. В сканирующих зондовых микроскопах исследование микрорельефа поверхности и ее локальных свойств проводится с помощью специальным образом подготовленных зондов в виде игл.

Рабочая часть таких зондов (острие) имеет размеры порядка десяти нанометров. Характерное расстояние между зондом и поверхностью образцов в зондовых микроскопах по порядку величин составляет 0,1–10 нм.

В основе работы зондовых микроскопов лежат различные типы взаимодействия зонда с поверхностью.

Так, работа туннельного микроскопа основана на явлении протекания туннельного тока между металлической иглой и проводящим образцом; различные типы силового взаимодействия лежат в основе работы атом-

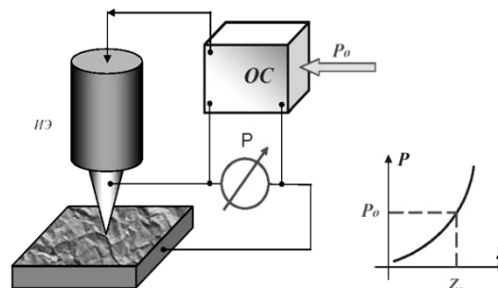


Рис. 7.17. Схема организации системы обратной связи зондового микроскопа

но-силового, магнитно-силового и электросилового микроскопов.

Рассмотрим общие черты, присущие различным зондовым микроскопам. Взаимодействие зонда с поверхностью характеризуется некоторым параметром P , данный параметр используется для организации системы обратной связи (ОС), контролирующей расстояние между зондом и образцом.

На рис. 7.17 схематично показан общий принцип организации обратной связи сканирующего зондового микроскопа.

Система обратной связи поддерживает значение параметра P постоянным, равным величине P_0 , задаваемой оператором.

Если расстояние зонд – поверхность изменяется (например, увеличивается), то происходит изменение (увеличение) параметра P , на основании чего осуществляется приближение или удаление зонд от поверхности.

Таким образом, можно поддерживать расстояние зонд-образец с высокой точностью.

В существующих зондовых микроскопах точность удержания расстояния зонд-поверхность достигает величины $\sim 0,01$ А.

При перемещении зонда вдоль поверхности образца происходит изменение параметра взаимодействия P , обусловленное рельефом поверхности.

Наряду с исследованием рельефа поверхности, зондовые микроскопы позволяют изучать различные свойства поверхности: меха-

нические, электрические, магнитные, оптические и многие другие.

7.6.2. Сканирующая туннельная микроскопия. Исторически первым в семействе зондовых микроскопов появился сканирующий туннельный микроскоп. Как известно, полная энергия частицы E представляет собой сумму потенциальной и кинетической энергии. Если потенциальная энергия в некоторой области принимает вид

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0, & 0 < x < a, \\ 0, & x > a, \end{cases}$$

а полная энергия $E < U_0$, то в этом случае говорят, что частица находится в области потенциального барьера.

В классической механике частица с такой энергией не может преодолеть барьер и отражается от него.

В квантовой механике существует определенная вероятность прохождения частицы через барьер, то есть частица может «туннелировать» сквозь него. Если эта вероятность достаточно большая, тогда говорят, что барьер туннельно-прозрачный.

Принцип работы СТМ основан на явлении туннелирования электронов через узкий зазор, между металлическим зондом и проводящим образцом, во внешнем электрическом поле (рис. 7.18).

7.6.3. Растровая электронная микроскопия. Растровый электронный микроскоп (РЭМ) предназначен для получения изображения поверхности объекта с высоким (до 0,4 нанометра) пространственным разрешением,

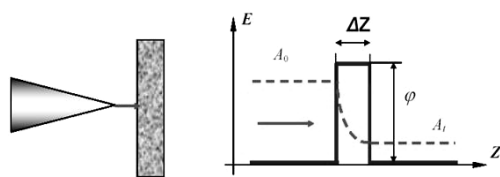


Рис. 7.18. Схема туннелирования электронов через потенциальный барьер в туннельном микроскопе

также информации о составе, строении и некоторых других свойствах приповерхностных слоёв.

РЭМ основан на принципе взаимодействия электронного пучка с исследуемым объектом.

Электроны зонда (пучка) взаимодействуют с материалом образца и генерируют различные типы сигналов: вторичные электроны, обратноотраженные электроны, Оже-электроны, рентгеновское излучение, катодoluminesценция и т.д.

Эти сигналы являются носителями информации о топографии и материале образца.

В результате взаимодействия с атомами образца электроны первичного пучка передают часть своей энергии электронам образца.

Если в результате такого взаимодействия происходит отрыв электронов, то такие электроны называются вторичными. Эти электроны обычно обладают небольшой энергией (порядка 50 эВ).

Часто электрон первичного пучка обладает энергией, достаточной для появления нескольких вторичных электронов. Так как энергия вторичных электронов невелика, их выход возможен только с приповерхностных слоев материала (менее 10 нм). Благодаря небольшой кинетической энергии эти электроны легко отклоняются небольшой разностью потенциалов.

Это делает возможным существенно повысить эффективность детекторов (собрать максимально возможное количество электронов) и получить высококачественные изображения с хорошим отношением сигнал/шум и разрешением до 1 нм.

Принимая во внимание, что вторичные электроны генерируются приповерхностными слоями, они очень чувствительны к состоянию поверхности. Минимальные изменения отражаются на количестве собираемых электронов.

Таким образом, этот тип электронов несет в себе информацию о рельефе (топографии) образца. Однако, они мало чувствительны к составу образца.

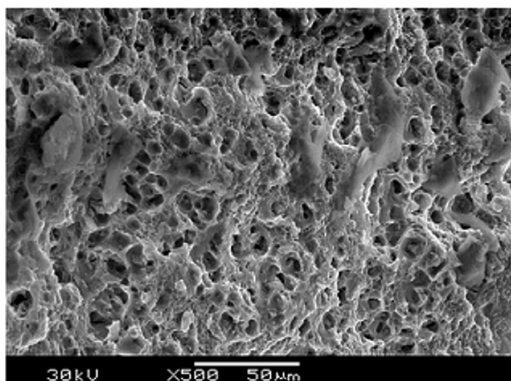


Рис. 7.19. СЭМ. Изображение поверхности излома алюминиевого образца после испытание на растяжение, полученное во вторичных электронах [9]

Отражённые электроны — это электроны пучка, отражённые от образца упругим рассеиванием.

В зависимости от конфигурации детектора они могут отображать либо композицию (состав) образца, либо его топографию (рельеф поверхности).

В композиционном режиме отраженные электроны часто используются в аналитичес-

ком РЭМ совместно с анализом характеристических спектров рентгеновского излучения.

Поскольку интенсивность сигнала ОЭ напрямую связана со средним атомным номером (Z) облучаемой в данный момент электронным пучком области образца, изображения ОЭ несут в себе информацию о распределении различных элементов в образце (рис. 7.20).

Характеристическое рентгеновское излучение генерируется когда электрон пучка выбивает электрон с внутренней оболочки одного из атомов образца, заставляя электрон с более высокого энергетического уровня перейти на нижний уровень энергии с одновременным испусканием кванта рентгеновского излучения.

Детектирование спектра характеристического рентгеновского излучения позволяет идентифицировать состав и измерить количество элементов в образце.

Анализ характеристического излучения (EDS) образца, представленного на рисунке 7.20 приведен в таблице 7.3.

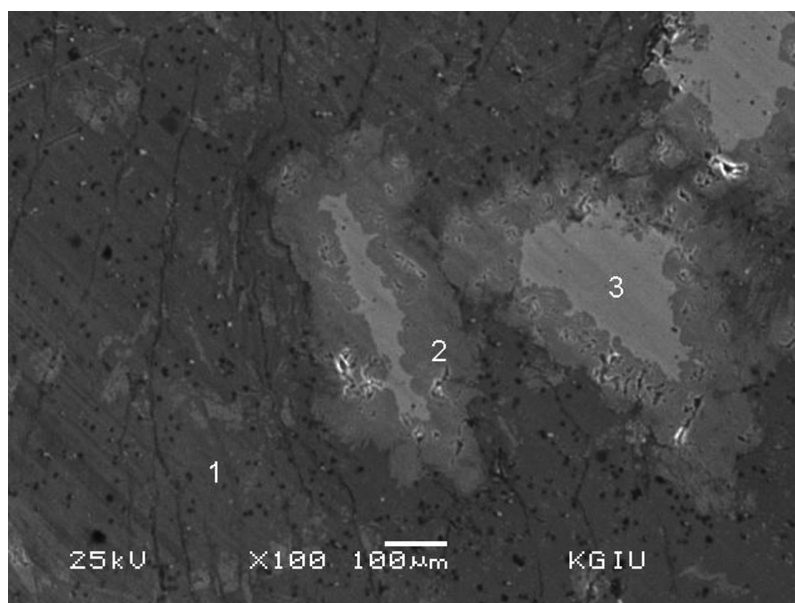


Рис. 7.20. СЭМ. Изображение сплава системы Al-Si-Fe после деформирования, полученное в отраженных электронах [10]

Таблица 7.3

Химический состав структурных составляющих сплава

Тип структурных составляющих сплава (рис. 7.20)		
1	2	3
Element — Mass%	Element — Mass%	Element — Mass%
Al — 97,71	C — 9,32	C — 0,08
Si — 2,29	Al — 59,47	Fe — 99,92
	Si — 11,44	
	Fe — 19,77	
Total — 100,00	Total — 100,00	Total — 100,00

7.6.5 Просвечивающая электронная микроскопия. Просвечивающие электронные микроскопы (ПЭМ) представляют собой класс электронных приборов, изображение строения объекта которых формируется проходящим электронным пучком за счет его взаимодействия с атомами твердого тела.

При этом электроны проявляют волновые свойства, что в значительной степени используется для интерпретации изображений структуры материалов в ПЭМ.

Основная задача метода ПЭМ в материаловедении — это анализ элементарных дефектов кристаллографического строения (дислокации, дефекты упаковки), дефектов объемного характера (сложные дефекты, границы зерен) и образования микрочастиц (поры, выделения в гетерогенных сплавах).



Рис. 7.21. ПЭМ. Изображение дефектов отожженного алюминиевого образца (дислокации, границы зерна и раздела фаз, включения) [11]

Важным элементом метода является возможность сопоставления фотографий микроструктуры материалов с дифракцией электронов на них (микрообъектах с периодическим их расположением — атомы, дислокации, поры, плоскости отражения и т.п.).

Формирование изображения строения объекта в просвечивающих электронных микроскопах основано на взаимодействии электронного излучения (электронного пучка) с периодически расположенными структурами (атомами).

При этом важным параметром является когерентность волнового излучения. В данном случае когерентность излучения определяется как мера совершенства волнового излучения в пространстве и времени.

Рассеяние электронного пучка на периодическом объекте можно условно разделить на отдельные самостоятельные пучки, между которыми возникают определенные фазовые соотношения, если они когерентны.

Эти соотношения фаз определяются геометрией осветительной системы и оптическим расстоянием между источниками излучения и освещаемой точкой объекта.

Если размеры характеристических свойств объекта изменяются и существенно больше длины волны, то электронные лучи на них поглощаются, рассеиваются и дифрагируют.

Лучи, исходящие из объекта (или из его различных точек), как правило, отклонены от исходного направления за счет рассеяния и

дифракции и благодаря своей когерентности могут интерферировать.

Таким образом, в результате взаимодействия электронного пучка с периодической структурой объекта за ним возникает модифицированное волновое поле, которое, в принципе, содержит всю информацию об объекте (падающий и рассеянный пучки).

Распределение энергии излучения, обусловленное дифракцией и интерференцией, регистрируется соответствующим приемни-

ком, например, фотопластинкой (или люминесцентным экраном), расположенной перпендикулярно к пучку.

При прохождении через образец электроны испытывают упругое и неупругое рассеяние и поглощение.

Для формирования контраста на изображениях кристаллических объектов наиболее существен эффект дифракции электронов — их упругое рассеяние под брэгговскими углами.

Заключение

В заключение хотелось бы отметить, тот известный факт, что прогресс человечества неразрывно связан с производством жизненно важных материалов и умением обрабатывать их с целью придания им определенных требуемых свойств.

На сегодняшний день, основной конструкционный материал — это металлы и сплавы на их основе, и управление их свойствами осуществляется путем создания определенной микроструктуры.

В этой связи, изучение основных понятий и законов теории тонкой структуры кристаллических материалов являются обязательным. Это необходимо для понимания и управления такими процессами, как старение, наклеп, упрочнение, именно они оказывают непосредственное влияние на окончательное качество изделий.

К тонкой структуре материалов относят все дефекты кристаллического строения: как точечные и линейные, так и поверхностные, и они не случайно, относятся к числу важнейших структурных параметров, определяющих свойства металлических материалов.

Знание механизмов возникновения и размножения дефектов строения позволяет управлять и прогнозировать многие механические и физические свойства кристаллических материалов.

Изложенный материал содержит подробную классификацию точечных дефектов, описание геометрии и упругих свойств дислокаций.

Рассмотрены механизмы образования и размножения дислокаций, их поведение в типичных металлических структурах. А также представлены данные о современном состоянии вопроса о структуре малоугловых и большеугловых границ зерен и субзерен, их макро- и микроскопические параметры, модели строения границ, подробно рассмотрена их дефектная структура.

Кратко описаны строения границ разных типов. Особое внимание уделено еще дискуссионной в настоящее время проблеме фазовых переходов в границах зерен, развитию нового подхода к описанию неравновесного состояния границ.

Таким образом, в книге обосновано положение, что при деформации, рекристаллизации в границах происходят различные перестройки, которые являются реакцией структуры зерен на внешние воздействия, следствием взаимодействия дефектов решетки.

Между собой учет этих эффектов весьма важен для создания физической теории пластической деформации поликристаллов, которая синтезирует наши знания о деформационных процессах как внутри, так и на границах зерен.

К настоящему моменту достигнуты значительные успехи в изучении тонкой структуры материалов и эти успехи связаны с появлением новых данных об атомном строении структуры границ зерен благодаря совершенствованию экспериментальных методов высокого разрешения, а также развитию машинного моделирования.

К настоящему времени наши знания о тонкой структуре материалов достигли такого уровня, что становится возможным использовать теоретические и экспериментальные результаты о структуре для объяснения свойств реальных материалов.

Важный момент — это понимание и необходимость учета того обстоятельства, что свойства поликристаллов обусловлены не только исходной статичной структурой, но и изменениями этой структуры вследствие внешних воздействий.

В настоящее время связь тонкой структуры и свойств материалов — активно развивающийся раздел материаловедения.

Знания о дефектах кристаллической решетки имеют непосредственное значение для многих областей материаловедения.

Например, в современной нанотехнологии, с целью управления и прогнозирования свойствами кристаллических наноматериалов.

Поэтому неудивительно, что большое внимание уделяют тонкой структуре кристаллических материалов исследователи различных специальностей.

Список использованной литературы

1. Новиков И.И., Розин К.М. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. — М.: Металлургия, 1990. — 336 с.
 2. Физическое металловедение / Под ред. Р.У.Кана, П.Хаасена. — 3-е изд., перераб. и доп. В 3-х т. Т. 1. Атомное строение металлов и сплавов: пер. с англ. — М.: Металлургия, 1987. — 640 с.
 3. Штремель М.А. Прочность сплавов. Часть 1. Дефекты решетки. Учеб. пособие для вузов. — М.: Металлургия, 1982. — 280 с.
 4. Кайбышев О.А., Валиев Р.З. Границы зерен и свойства металлов. — М.: Металлургия, 1987. — 214 с.
 5. Hahn H., Gleiter H. // Acta Met. — 1981. — Vol. 29, № 4. — P. 601–606.
 6. Bristowe P.D., Брокман А., Spaepen F., Balluffi R.W. // Scripta Met. — 1980. — Vol. 14, № 8. — P. 943–950.
 7. Дранова Т.Н., Михайловский И.М. // ФММ. — 1984. — Т. 57, № 3. — С. 551–557.
 8. Косевич В.М., Палатник Л.С. и др. Электронномикроскопические изображения дислокаций и дефектов упаковки. — М.: Наука, 1976. — 224 с.
 9. Naizabekov A.B., Andreyachshenko V.A., Radim Kocich. Study of deformation behavior, structure and mechanical properties of the AlSiMnFe alloy during ECAP-PBP // Micron. — 2013. Vol. 44. — P. 210–217.
 10. Найзабеков А.Б., Андрященко В.А. Анализ и исследование возможности получения сплава системы Al-Si-Fe методом равноканального углового прессования // Горное дело и металлургия в Казахстане. Состояние и перспективы: Труды науч.-практ. конф. — Алматы, 2012.
 11. Naizabekov A.B., Andreyachshenko V.A., Jiri Kliber. Forming of microstructure of the Al-Si-Fe-Mn system alloy by equal channel angular pressing with backpressure // Conference Metal. — 2012. — P. 391–395.
-

Учебное издание

**Султамурат Гульмира Изатуллаевна,
Лежнев Сергей Николаевич,
Боранбаева Багдат Мекетаевна,
Андреященко Виоллета Александровна**

ТОНКАЯ СТРУКТУРА РЕАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Учебное пособие

Компьютерная верстка *В.В.Бутяйкин*

Подписано в печать 25.04.2013 г. Формат 70×100 1/16. Бумага офсетная.
Объем 9,3 уч.-изд. л., 7,5 п.л. Тираж 100 экз. Заказ № 951.

Отпечатано в типографии Издательства КарГУ им. Е.А.Букетова
100012, г. Караганда, ул. Гоголя, 38. Тел. 8(7212)513820. e-mail: izd_kargu@mail.ru