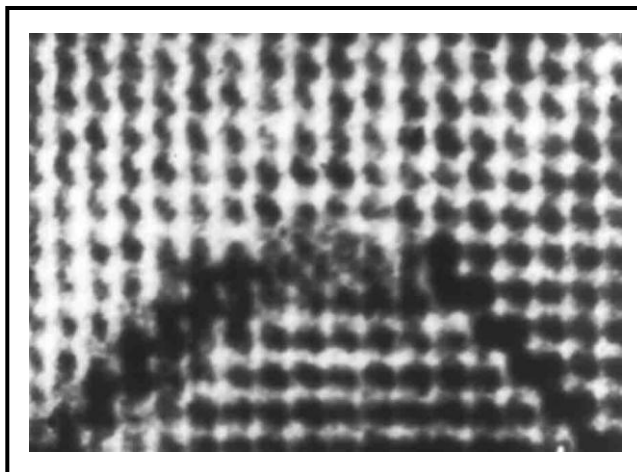


МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«Харьковский политехнический институт»

А. Г. Багмут, В. М. Косевич

НЕСОВЕРШЕНСТВА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК



Сборник задач с подробными решениями

Харьков 2015

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«Харьковский политехнический институт»

А. Г. Багмут, В. М. Косевич

НЕСОВЕРШЕНСТВА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК

Сборник задач с подробными решениями

Утверждено
редакционно-издательским
советом университета,
протокол № 1 от 04.06.14 г.

Харьков
НТУ «ХПИ»
2015

УДК 548.4/620.18

ББК 22.31/32я7

Б 14

Рецензенты:

А.Т. Пугачев, д-р физ.-мат. наук, профессор, зав. каф. физики металлов и полупроводников, НТУ «ХПИ»;

С.И. Шевченко, д-р физ.-мат. наук, лауреат Государственной премии Украины, ведущий научный сотрудник, ФТИНТ НАНУ.

У збірнику наведено 58 задач з докладними розв'язаннями з основних розділів, що стосуються фізики дефектів кристалічної будови речовини: «Елементи кристаллографії», «Точкові дефекти», «Лінійні дефекти», «Плоскі дефекти». В основу збірника покладений курс лекцій, який протягом багатьох років викладається авторами студентам-фізикам НТУ «ХП».

Призначено для студентів, аспірантів і викладачів фізико-технічних і матеріалознавчих спеціальностей.

Багмут А.Г.

Б 14 **Несовершенства кристаллических решеток. Сборник задач с подробными решениями / А.Г. Багмут, В.М. Косевич. – Х. : Изд-во «Підручник НТУ «ХП»», 2015. – 72 с. – На рус. яз.**

ISBN

В сборнике приведено 58 задач с подробными решениями по основным разделам, касающимся физики дефектов кристаллического строения вещества: «Элементы кристаллографии», «Точечные дефекты», «Линейные дефекты», «Плоские дефекты». В основу сборника положен курс лекций, на протяжении многих лет читаемый авторами студентам-фізикам НТУ «ХП».

Предназначено для студентов, аспирантов и преподавателей физико-технических и материаловедческих специальностей.

Ил. 33. Табл. 1. Библиогр. 10 назв.

УДК 548.4/620.18

ББК 22.31/32я7

ISBN

© А.Г. Багмут, В.М. Косевич, 2015

Введение

Дефекты кристаллического строения – это отклонения структуры кристаллов от идеализированной модели. Они обусловлены отсутствием атомов в местах, предписанных кристаллической структурой, или, напротив, присутствием лишних атомов, наличием оборванных кристаллических плоскостей или нарушением порядка их чередования. Кристаллы, содержащие дефекты кристаллического строения, называются реальными.

Дефекты принято классифицировать по геометрическому принципу. Точечными, или нульмерными, дефектами считаются такие, которые вызывают нарушение правильного расположения атомов на расстояниях, сравнимых с межатомными. Это, например, вакансии и межузельные атомы. Линейные дефекты приводят к нарушениям структуры вдоль линий макроскопической длины. Это дислокации. Двумерные дефекты нарушают правильное расположение атомов вдоль поверхностей. Это в простейшем случае дефекты упаковки атомных плоскостей. Трехмерные дефекты приводят к нарушению структуры в макроскопических объемах, например, трещины, инородные выделения в монокристалле и др.

В существующих сборниках задач по физике твердого тела, как правило, отсутствуют задачи, посвященные несовершенствам кристаллических решеток. Настоящее издание предназначено в определенной мере устранить этот пробел. В основу его положен курс лекций, на протяжении многих лет читаемый авторами студентам-физикам Национального технического университета «Харьковский политехнический институт».

Сборник задач как дополнение к лекционному курсу «Несовершенства кристаллических решеток и физика прочности», составленному для студентов физико-технического и механико-технологического факульте-

тов. Он должен помочь студентам усвоить теоретический материал и найти подходы к решению как типовых задач, так и задач повышенной сложности. Все задачи в сборнике даны с подробными решениями. Это будет способствовать развитию навыков решения задач в этой области физики твердого тела. В решениях использована преимущественно Международная система единиц СИ. В отдельных случаях применены и другие системы.

Сборник задач содержит 58 задач по основным вопросам, касающимся дефектов кристаллического строения вещества. Он состоит из пяти разделов, в начале каждого приведено теоретическое вступление. Для более глубокого изучения материала приведен список рекомендованной литературы.

1. Элементы кристаллографии

Для описания правильной внутренней структуры кристаллов используется понятие кристаллической решетки. Положение узла в такой решетке определяется вектором \mathbf{r} :

$$\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}, \quad (1.1)$$

где u, v, w – целые числа. Векторы $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ называются наименьшими векторами трансляции. Их численные величины называются периодами трансляции. Решетка, построенная путем трансляции (параллельного переноса) какого-либо узла по трем направлениям, называется трансляционной решеткой (или решеткой Браве).

Наименьший параллелепипед, построенный на векторах $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$, называют элементарной ячейкой кристалла (рис. 1.1). В общем случае она характеризуется шестью величинами (параметрами элементарной ячейки). Это три ребра ячейки (a, b, c) и три угла между ними (α, β, γ). Длины в решетках можно измерять отрезками a, b и c . Их называют осевыми единицами.

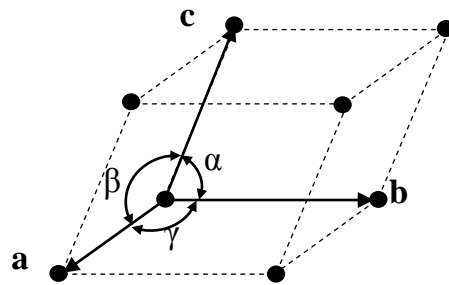


Рис. 1.1. Элементарная ячейка кристалла

Узлы, направления и плоскости в решетке обозначаются специальными индексами. Положение любого узла решетки относительно узла, выбранного за начало координат, задается тремя числами u, v, w . Они называются индексами узла. Индексы узлов записывают в двойных квадратных скобках $[[u \ v \ w]]$.

Индексы направлений записывают в одинарных квадратных скобках $[u \ v \ w]$. Индексы направления совпадают с индексами узла, через который проходит прямая, если она одновременно проходит и через начало координат $[[0 \ 0 \ 0]]$. Индексы направлений задают семейство параллельных прямых.

Индексы плоскости (индексы Миллера) записывают в круглых скобках $(h \ k \ l)$. Они связаны с отрезками A, B, C , отсекаемыми плоскостью на осях координат. Индексы Миллера такой плоскости находят следующим образом. Отрезки A, B и C следует выразить в осевых единицах и записать

величины, обратные этим отрезкам: $\frac{1}{A}, \frac{1}{B}, \frac{1}{C}$. Полученные дроби надо привести к общему знаменателю. Пусть общий знаменатель есть число D . Целые числа $h = \frac{D}{A}, k = \frac{D}{B}, l = \frac{D}{C}$ и есть индексы плоскости.

Для нахождения минимальных отрезков A, B, C (выраженных в осевых единицах), отсекаемых плоскостью с индексами Миллера ($h k l$) на осях координат, следует среди чисел h, k, l найти наименьшее общее кратное N (наименьшее, делящееся на каждое из них, положительное число). Тогда $A = \frac{N}{h}, B = \frac{N}{k}, C = \frac{N}{l}$.

Задача 1.1

Плоскость отсекает на осях координат отрезки $A = 0,5; B = 1,25$ и $C = 1,5$ в единицах длин ребер элементарной ячейки. Определить индексы Миллера этой плоскости.

Решение

Следует подобрать три наименьших числа h, k, l , относящихся друг к другу как $\frac{1}{A}, \frac{1}{B}, \frac{1}{C}$. Составим отношения отрезков, обратных данным, в виде обыкновенных дробей и затем приведем их к общему знаменателю:

$$h : k : l = \frac{1}{A} : \frac{1}{B} : \frac{1}{C} = \frac{2}{1} : \frac{4}{5} : \frac{2}{3} = \frac{30}{15} : \frac{12}{15} : \frac{10}{15} = 30 : 12 : 10 = 15 : 6 : 5.$$

Общий знаменатель $D = 15$. Следовательно, $h = \frac{15}{2,5} = 30, k = \frac{15}{1,25} = 12,$

$l = \frac{15}{1,5} = 10$. После сокращения на общий множитель 2 получаем индексы

Миллера данной плоскости (15 6 5).

Задача 1.2

Найти индексы Миллера плоскостей, проходящих через узловые точки кристаллической решетки. Определить индексы этих узлов. Координаты первой точки $x_1 = 9, y_1 = 0, z_1 = 0$. Координаты второй точки

$x_2 = 0, y_2 = 10, z_2 = 0$. Координаты третьей точки $x_3 = 0, y_3 = 0, z_3 = 30$.
Параметры решетки $a = 3, b = 5, c = 6$.

Решение

Отрезки, отсекаемые плоскостью на координатных осях, в единицах длин ребер: $A = \frac{x_1}{a} = 3, B = \frac{y_2}{b} = 2, C = \frac{z_3}{c} = 5$. Значит, индексы узлов, через которые проходит рассматриваемая плоскость, есть $[[1\ 0\ 0]], [[0\ 1\ 0]]$ и $[[0\ 0\ 1]]$.

Для нахождения индексов Миллера этой плоскости подберем три наименьших числа h, k, l , таких, что

$$h:k:l = \frac{1}{A} : \frac{1}{B} : \frac{1}{C} = \frac{1}{3} : \frac{1}{2} : \frac{1}{5}.$$

Приведем дроби к общему знаменателю: $D = 30$.

$$h:k:l = \frac{10}{30} : \frac{15}{30} : \frac{6}{30} = 10:15:6.$$

Следовательно, $h = \frac{30}{3} = 10, k = \frac{30}{2} = 15, l = \frac{30}{5} = 6$. Поскольку числа 10, 15 и 6 не имеют общего множителя, индексы Миллера плоскостей (10 15 6).

Задача 1.3

Определить отрезки, которые отсекает на осях решетки плоскость (1 2 5).

Решение

Среди чисел 1, 2, и 5 наименьшее общее кратное $N = 10$. Тогда $A = \frac{10}{1} = 10, B = \frac{10}{2} = 5, C = \frac{10}{5} = 2$.

Задача 1.4

Найти индексы направления, по которому пересекаются грани с индексами Миллера (3 2 0) и (1 1 0).

Решение

Индексы направления $[u\ v\ w]$, по которому пересекаются грани с индексами Миллера $(h_1\ k_1\ l_1)$ и $(h_2\ k_2\ l_2)$, определяются соотношениями:

$$u = (k_1 l_2 - l_1 k_2), v = (l_1 h_2 - l_2 h_1), w = (h_1 k_2 - h_2 k_1).$$

Решение получается также из схемы

$$\begin{array}{c|ccc|c} h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2 \end{array}$$

Для нашего случая

$$\begin{array}{c|ccc|c} 3 & 2 & 0 & 3 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{array}$$

Отсюда $u = 0 - 0 = 0$; $v = 0 - 0 = 0$; $w = 3 - 2 = 1$. Индексы направления, по которому пересекаются грани, $[0\ 0\ 1]$.

Задача 1.5

Даны индексы направлений двух ребер $[\bar{1}\ 3\ 0]$ и $[2\ 0\ 1]$. Найти индексы Миллера грани, в которой они лежат одновременно.

Решение

Решение проводим по схеме

$$\begin{array}{c|ccc|c} \bar{1} & 3 & 0 & \bar{1} & 3 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 2 & 0 & 1 \end{array}$$

Отсюда $h = 3 - 0 = 3$; $k = 0 - \bar{1} = 1$; $l = 0 - 0 = \bar{6}$. Индексы Миллера грани $[0\ 1\ \bar{6}]$.

Задача 1.6

Написать индексы направления прямой, проходящей в кубической решетке через начало координат $[[0\ 0\ 0]]$, и узел с кристаллографическими индексами, в двух случаях: а) $[[4\ 8\ 2]]$; б) $[[1\ 1\ 3]]$.

Решение

Индексы направления совпадают с индексом узла, через который проходит прямая, если она одновременно проходит и через начало координат $[[0\ 0\ 0]]$. Следовательно, в первом случае индексы направления можно записать как $[4\ 8\ 2]$. После сокращения на общий множитель 2 получим $[2\ 4\ 1]$. Во втором случае индексами направления есть $[1\ 1\ 3]$.

2. Точечные дефекты

К числу точечных дефектов относятся вакансии и их комплексы (бивакансии, тривакансии и т.д.), межузельные атомы, примесные атомы внедрения и примесные атомы замещения. Основную функцию в кристаллах выполняют вакансии. Возникновение вакансии приводит к повышению внутренней энергии кристалла U на величину Q_v , которую называют энергией образования вакансии. Термодинамическому равновесию кристалла при температуре T отвечает минимум свободной энергии $F = U - TS$, где T – энтропия кристалла. Если в кристалле, состоящем из N атомов, содержится N_v вакансий, то концентрация вакансий $c_v = \frac{N_v}{N}$.

При температуре кристалла T минимуму F отвечает равновесная концентрация вакансий, задаваемая соотношением:

$$c_v = e^{-\frac{Q_v}{kT}}, \quad (2.1)$$

где постоянная Больцмана $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж · моль⁻¹. Аналогичным соотношением задается равновесная концентрация межузельных атомов c_i :

$$c_i = e^{-\frac{Q_i}{kT}}, \quad (2.2)$$

где Q_i есть энергия образования межузельного атома.

Избыточные вакансии, собираясь в одной плоскости кристалла, образуют полость в форме диска толщиной в одно межатомное расстояние. При «захлопывании» диска образуется вакансионная дислокационная петля, охватывающая дефект упаковки. Петля из избыточных атомов формируется при скоплении междоузлий в одной плоскости. Петли обоих типов называются частичными дислокациям Франка. В металлах с гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой они располагаются по плоскостям $\{111\}$.

Задача 2.1

Для образования вакансий в алюминии требуется энергия $Q_v = 0,75$ эВ. Сколько существует вакансий на один атом кристалла в состоянии термодинамического равновесия при комнатной температуре (300 К)? При 600 К?

Решение

Число вакансий N_v в кристалле, содержащем N атомов, задается соотношением (2.1):

$$N_v = Ne^{-\frac{Q_v}{kT}}.$$

Число вакансий на один атом (т.е. концентрация вакансий c_v) равно:

$$c_v = \frac{N_v}{N} = e^{-\frac{Q_v}{kT}};$$

- при температуре $T = 300$ К

$$c_v = e^{-\frac{0,751,6 \cdot 10^{-19}}{1,3810^{-23} \cdot 300}} \approx e^{-28,99} \approx 2,6 \cdot 10^{-13};$$

- при температуре $T = 600$ К

$$c_v = e^{-\frac{0,751,6 \cdot 10^{-19}}{1,3810^{-23} \cdot 600}} \approx e^{-14,5} \approx 5 \cdot 10^{-7}.$$

Задача 2.2

Рассчитать отношение числа вакансий к числу междоузлий в алюминии при комнатной температуре. Энергия образования вакансии $Q_v = 0,75$ эВ. Энергия образования междузельного атома $Q_i = 3$ эВ.

Решение

Число вакансий N_v в кристалле, содержащем N атомов, задается соотношением:

$$N_v = Ne^{-\frac{Q_v}{kT}}.$$

Аналогично число междузельных атомов N_i в кристалле задается соотношением:

$$N_i = Ne^{-\frac{Q_i}{kT}}.$$

Тогда отношение числа вакансий к числу междузельных атомов в алюминии при комнатной температуре рассчитывается так:

$$\frac{N_v}{N_i} = \frac{Ne^{-\frac{Q_v}{kT}}}{Ne^{-\frac{Q_i}{kT}}} = e^{\frac{Q_i - Q_v}{kT}} = e^{\frac{(3-0,75)1,610^{-19}}{1,3810^{-23} \cdot 300}} \approx e^{87} \approx 5,8 \cdot 10^{37}.$$

Задача 2.3

Энергия Q_v , требуемая для образования вакансии в кристалле Na, равна 1 эВ. Вычислить молярную теплоемкость C_μ натрия, обусловленную наличием в нем вакансий.

Решение

Число вакансий N_v в кристалле, содержащем N атомов, задается соотношением:

$$N_v = Ne^{-\frac{Q_v}{kT}}.$$

Тогда общая энергия дефектов $U = Q_v N_v$:

$$U = Q_v Ne^{-\frac{Q_v}{kT}}.$$

Отсюда находим теплоемкость C_μ :

$$C_\mu = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{NQ_v^2}{kT^2} e^{-\frac{Q_v}{kT}}.$$

Один моль вещества содержит число частиц, равное числу Авогадро $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹. Следовательно, $N = 6,02 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹. Находим молярную теплоемкость Na:

$$C_\mu = \frac{6,02 \cdot 10^{23} \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^2 \cdot e^{-\frac{1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300}}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300^2} \text{ Дж} \cdot (\text{моль} \cdot \text{град})^{-1} \approx \\ \approx 2,04 \cdot 10^{-13} \text{ Дж} \cdot (\text{моль} \cdot \text{град})^{-1}.$$

Задача 2.4

Для образования вакансии в алюминии требуется энергия $Q_v = 0,75$ эВ. Алюминиевый образец был быстро охлажден от температуры $T_2 = 550$ °C до комнатной $T_1 = 20$ °C. Предположим, что все вакансии, имевшиеся при высокой температуре T_2 , сохранились при комнатной температуре T_1 . С течением времени вакансии «отжигаются». В итоге достигается концентрация C_{v1} , которая является равновесной при комнатной температуре. Если отжиг происходит адиабатически, то образец будет нагреваться или охлаждаться? Если будет, то насколько?

Решение

Найдем концентрацию вакансий C_{v1} , которая является равновесной при комнатной температуре:

$$c_{v1} = e^{-\frac{Q_v}{kT_1}} = e^{-\frac{0,751,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 293}} \approx e^{-29,79} \approx 1,3 \cdot 10^{-13}.$$

Найдем концентрацию вакансий C_{v2} , которая является равновесной при высокой температуре T_2 :

$$c_{v2} = e^{-\frac{Q_v}{kT_2}} = e^{-\frac{0,751,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 823}} \approx e^{-10,6} \approx 2,6 \cdot 10^{-5}.$$

Превышение концентрации вакансий Δc_v по сравнению с их равновесной концентрацией при комнатной температуре составит:

$$\Delta c_v = c_{2v} - c_{1v} = 2,6 \cdot 10^{-5} - 1,3 \cdot 10^{-13} \approx 2,6 \cdot 10^{-5}.$$

Будем считать, что количество вещества в алюминиевом образце составляет 1 моль. В этом случае число атомов $N = N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹. Тогда

$$c_{2v} = \frac{n_{2v}}{N_A}; c_{1v} = \frac{n_{1v}}{N_A}, \text{ где } n_{2v} \text{ и } n_{1v} \text{ есть числа вакансий при температурах } T_2 \text{ и } T_1$$

соответственно. Превышение числа вакансий Δn_v при температуре T_2 по сравнению с их числом при комнатной температуре составит T_1 :

$$\Delta n_v = N_A \cdot \Delta c_v = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1} \cdot 2,6 \cdot 10^{-5} = 1,57 \cdot 10^{19} \text{ моль}^{-1}.$$

При отжиге избыточных вакансий в количестве Δn_v , выделяется теплота $\Delta U = \Delta n_v Q_v$, что приводит к повышению температуры образца на величину

$$\Delta T = \frac{\Delta U}{C_\mu}. \text{ Согласно закону Дюлонга и Пти, молярная теплоемкость простых}$$

веществ $C_\mu = 3R$, где универсальная газовая постоянная $R = 8,31$ Дж·моль⁻¹·К⁻¹.

Следовательно,

$$\Delta T = \frac{\Delta U}{C_\mu} = \frac{\Delta n_v Q_v}{3R} = \frac{1,57 \cdot 10^{19} \cdot 0,75 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{3 \cdot 8,31} \text{ К} = 0,076 \text{ К}.$$

Задача 2.5

ГЦК решетка моделируется плотнейшей упаковкой шаров (атомов) одинакового размера, при которой каждый шар третьего слоя располагается над лунками первого слоя. Вычислить отношение объема сферы V_v , вписанной в октаэдрическую пустоту, к объему шара V_R в кристалле с ГЦК решеткой.

Решение

Октаэдрические пустоты расположены между шестью соприкасающимися шарами: три шара одного слоя находятся над тремя шарами другого слоя. Центры октаэдрических пустот находятся посередине ребер и в центре объема элементарной ячейки ГЦК решетки. Их расположение на (100) грани куба показано точками на рис. 2.1.

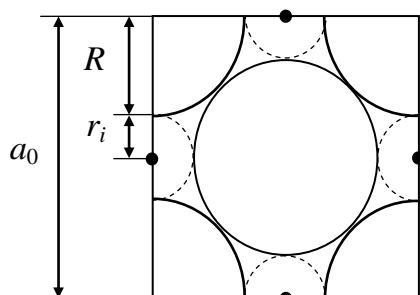


Рис. 2.1. Расположение октаэдрических пустот на (100) грани куба: r_i – радиус сферы, вписанной в октаэдрическую пустоту; R – радиус шара в кристалле с ГЦК решеткой

Если длина ребра куба ГЦК решетки равна a_0 , то радиус шара в кристалле с ГЦК решеткой $R = \frac{a_0\sqrt{2}}{4}$. Радиус сферы, вписанной в октаэдрическую пустоту r_i :

$$r_i = \frac{a_0}{2} - \frac{a_0\sqrt{2}}{4} = R(\sqrt{2} - 1) = 0,41R.$$

В октаэдрическую пустоту можно вписать сферу, равную $0,41R$. Тогда отношение объема сферы V_i , вписанной в октаэдрическую пустоту, к объему шара V_R в кристалле с ГЦК решеткой будет равно:

$$\frac{V_i}{V_R} = \frac{\frac{4}{3}\pi(0,41R)^3}{\frac{4}{3}\pi R^3} = (0,41)^3 \approx 0,07.$$

Следовательно, при помещении атома в междуузлие (октаэдрическую пустоту) он должен раздвинуть ближайших соседей на 93 % своего объема.

Задача 2.6

В образце алюминия после резкого охлаждения в воде появились дислокационные петли, число которых $n_D = 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Средний диаметр петли $D = 30 \text{ нм}$. Оценить концентрацию вакансий c_v при температуре, от которой охлаждался образец. Для Al постоянная решетки $a_0 = 0,404 \text{ нм}$.

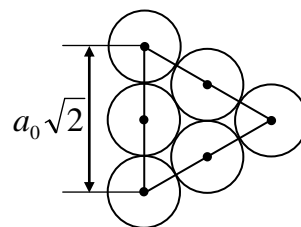
Решение

Дислокационные петли образованы избыточными вакансиями, которые в кристалле образуют полость в форме диска. Толщина диска соответствует одному межатомному расстоянию. В металлах с ГЦК решеткой плоскость диска совпадает с плоскостью (111). Будем считать, что число вакансий, образующих петлю, равно числу атомов, образующих диск толщиной в одно межатомное расстояние. Площадь диска равна площади дислокационной петли.

На рисунке показана модель жестких сфер плоскости (111) кристалла. Треугольник охватывает область, находящуюся внутри элементарной ГЦК ячейки, которая соответствует двум атомам Al. Площадь треугольника

$$S_{\Delta} = \frac{1}{2} (a_0 \sqrt{2})^2 \sin 60^{\circ} = 0,866 \cdot a_0^2 = 0,141 \text{ нм}^2.$$

Число вакансий N_D , образующих дислокационную петлю с диаметром D , равно удвоенному отношению площади дислокационной петли S_D к площади рассматриваемого треугольника:



$$N_D = 2 \frac{S_D}{S_{\Delta}} = 2 \frac{\frac{\pi D^2}{4}}{0,866 a_0^2} = 2 \cdot \frac{706,86}{0,141} = 10026.$$

Искомая концентрация вакансий

$$c_v = n_D \cdot N_D = 10^{15} \cdot 10026 \text{ см}^{-3} \approx 10^{19} \text{ см}^{-3}.$$

Задача 2.7

В медной фольге после ядерного облучения появились дислокационные петли в количестве $n_D = 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Их образование связано с конденсацией точечных дефектов, концентрация которых после облучения $c_f = 2,2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Оценить средний диаметр дислокационных петель D . Для Си постоянная решетки $a_0 = 0,3615 \text{ нм}$.

Решение

Воспользуемся результатами предыдущей задачи. Число вакансий N_D , образующих дислокационную петлю с диаметром D , равно отношению

концентрации точечных дефектов c_f к концентрации дислокационных петель n_D :

$$N_D = \frac{c_f}{n_D} = \frac{2,2 \cdot 10^{19}}{10^{15}} = 22000.$$

Площадь дислокационной петли S_D равна половине произведения числа вакансий N_D , образующих дислокационную петлю с диаметром D , на площадь треугольника S_Δ , показанного на рис. 2.2:

$$S_D = \frac{1}{2} N_D S_\Delta = \frac{1}{2} \cdot 22000 \cdot 0,866 a_0^2 = 1245 \text{ нм}^2.$$

Тогда диаметр дислокационной петли

$$D = \sqrt{\frac{4S_D}{\pi}} = 39,8 \text{ нм}.$$

3. Линейные дефекты – дислокации

3.1. Контур и вектор Бюргера

Дислокацией называется линейное несовершенство в кристалле, для которого контур Бюргера оказывается разомкнутым. Контур Бюргера строится путем обхода по трансляционным векторам \mathbf{t} (в простейшем случае путем перемещения из узла в узел решетки). Направление обхода – правый винт. В бездефектном кристалле контур замкнутый (рис. 3.1, *a*). Замкнутый контур Бюргера переносится на кристалл с дефектом (рис. 3.1, *б*). Направление дислокационной линии задается единичным вектором касательной ξ . На рис. 3.1 вектор ξ направлен перпендикулярно плоскости рисунка внутрь чертежа.

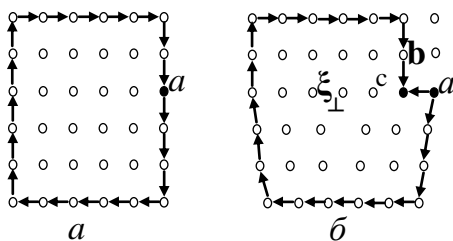


Рис. 3.1. Замкнутый контур Бюргера в бездислокационном кристалле (*a*) и разомкнутый контур, охватывающий дислокацию (*б*)

Построение контура начинается из точки a . Контур, который был замкнутым в бездефектном кристалле, в кристалле с дислокацией закончится в точке c , т.е. окажется разомкнутым. Вектор \mathbf{b} , замыкающий контур Бюр-

герса, называется вектором Бюргерса. Проводится он из начальной точки контура в конечную.

Если вектор Бюргерса \mathbf{b} перпендикулярен линии дислокации ξ , т.е. $(\mathbf{b} \cdot \xi) = 0$, то такая дислокация называется краевой. Для нее существует представление о плоскости скольжения – это плоскость, проходящая через линию дислокации и вектор Бюргерса.

Дислокация, вектор Бюргерса которой параллелен или антипараллелен линии дислокации, называется винтовой. Правовинтовая дислокация отвечает $(\mathbf{b} \cdot \xi) = b$. Для левовинтовой дислокации $(\mathbf{b} \cdot \xi) = -b$.

Дислокация, вектор Бюргерса которой равен трансляционному вектору \mathbf{t} , называется полной или совершенной. В кристаллах с ГЦК решеткой он отвечает кратчайшему расстоянию между атомами вдоль плотноупакованного направления типа $[110]$. Записывается этот вектор так: $\mathbf{b} = \frac{a}{2}[110]$, где a – параметр решетки. Умножение на параметр решетки a дает абсолютное значение вектор Бюргерса. В безразмерных кристаллографических координатах вектор Бюргерса записывают как $b = \frac{1}{2}[110]$.

В кристаллах с объемно центрированной кубической (ОЦК) решеткой вектор Бюргерса полной дислокации отвечает кратчайшему расстоянию между атомами вдоль плотно упакованного направления типа $[111]$.

В кристаллах с гексагональной плотно упакованной (ГПУ) решеткой вектор Бюргерса полной дислокации располагается в базисной плоскости и равен базисному вектору. В четырехиндексной координатной системе вектор Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{a}{3}[11\bar{2}0]$.

Из определения дислокации как линейного дефекта, для которого контур Бюргерса является разомкнутым, вытекают два важных следствия. *Следствие 1.* Дислокация не может обрываться внутри кристалла. *Следствие 2.* Вектор Бюргерса дислокации есть величина постоянная (т.е. одинаков во всех точках дислокационной линии).

Из правила постоянства вектора Бюргерса вытекает правило дислокационных реакций. Пусть дислокация с вектором Бюргерса \mathbf{b}_1 расщепляется на две дислокации с векторами Бюргерса \mathbf{b}_2 и \mathbf{b}_3 . Тогда:

$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3. \quad (3.1)$$

Разнообразные дислокационные реакции подчиняются критерию Франка (правилу квадратов): реакция возможна в том случае, если сумма квадратов векторов Бюргера исходных дислокаций больше суммы квадратов векторов Бюргера дислокаций, являющихся результатом реакции.

Задача 3.1

Вычислить абсолютную величину вектора Бюргера $\mathbf{b} = \frac{1}{6}[112]$ частичной дислокации Шокли в меди. Параметр решетки $a = 0,3615$ нм.

Решение

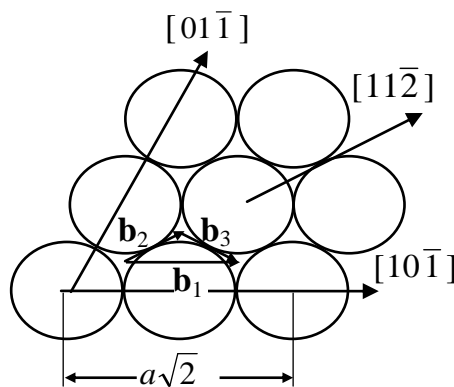
Длина вектора $[112]$ в безразмерных координатах:

$$\sqrt{(u^2 + v^2 + w^2)} = \sqrt{(1^2 + 1^2 + 2^2)} = \sqrt{6}.$$

С учетом коэффициента $b = \frac{a}{6}\sqrt{6} = \frac{a}{\sqrt{6}} = 0,1476$ нм. В безразмерных координатах $b = \frac{1}{\sqrt{6}}$.

Задача 3.2

На рисунке приведена модель плотнейшей шаровой упаковки в плоскости (111) кристалла с ГЦК решеткой. Построить на схеме вектор Бюргера частичной дислокации Шокли и рассчитать его величину для алюминия. Параметр решетки $a = 0,405$ (нм).



Решение

В ГЦК решетки атомы одного плотноупакованного слоя могут попадать в тождественное положение не только путем сдвига на единичный вектор \mathbf{b}_1 , но и путем последовательных смещений вдоль вектора \mathbf{b}_2 и вдоль вектора \mathbf{b}_3 . Согласно рисунку, длина отрезка $b_1 = |\mathbf{b}_1| = \frac{a}{\sqrt{2}}$. Длина

отрезка $b_2 = |\mathbf{b}_2| = \frac{b_1}{2 \cos 30^\circ} = \frac{a}{\sqrt{6}}$. Длина отрезка $b_3 = |\mathbf{b}_3| = \frac{b_1}{2 \cos 30^\circ} = \frac{a}{\sqrt{6}}$. Вектор \mathbf{b}_1 направлен по $[10\bar{1}]$. Это вектор Бюргера единичной дислокации $\frac{a}{2}[10\bar{1}]$. Вектор \mathbf{b}_2 направлен по $[11\bar{2}]$. Это вектор Бюргера частичной дислокации Шокли $\frac{a}{6}[11\bar{2}]$. Вектор \mathbf{b}_3 направлен по $[2\bar{1}1]$. Это вектор Бюргера частичной дислокации Шокли $\frac{a}{6}[2\bar{1}1]$. В соответствии с предыдущей задачей $b_2 = b_3 = \frac{a}{\sqrt{6}} = 0,165$ нм.

Задача 3.3

Есть кристалл с решеткой ГЦК. Параметр кристаллической решетки $a = 4,2$ нм. Проверить по правилу квадратов (критерий Франка) возможность реакции диссоциации единичной дислокации на две частичные:

$$\frac{a}{2}[01\bar{1}] = \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}] + \frac{a}{6}[11\bar{2}].$$

Найти модуль вектора Бюргера каждой из дислокаций.

Решение

$$|\mathbf{b}_1| = \sqrt{0 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2} = \frac{a\sqrt{2}}{2} = 2,97 \text{ нм};$$

$$|\mathbf{b}_2| = \sqrt{\left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{2a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{6}}{6} = 1,71 \text{ нм};$$

$$|\mathbf{b}_3| = \sqrt{\left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{2a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{6}}{6} = 1,71 \text{ нм}.$$

Проверка по критерию Франка показывает, что такая реакция диссоциации возможна:

$$\left(\frac{a\sqrt{2}}{2}\right)^2 > \left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2 + \left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2.$$

Или $\frac{a^2}{2} > \frac{a^2}{3}$.

Задача 3.4

Есть кристалл с решеткой ГЦК. Параметр кристаллической решетки $a = 3,6$ нм. Проверить по правилу квадратов (критерий Франка) возможность реакции объединения двух дислокаций:

$$\frac{a}{3}[111] + \frac{a}{6}[11\bar{2}] = \frac{a}{2}[110].$$

Найти модуль вектора Бюргера каждой из дислокаций.

Решение

$$|\mathbf{b}_1| = \sqrt{\left(\frac{a}{3}\right)^2 + \left(\frac{a}{3}\right)^2 + \left(\frac{a}{3}\right)^2} = \frac{a\sqrt{3}}{3} = 2,08 \text{ нм};$$

$$|\mathbf{b}_2| = \sqrt{\left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{2a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{6}}{6} = 1,47 \text{ нм};$$

$$|\mathbf{b}_3| = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 + 0} = \frac{a\sqrt{2}}{2} = 2,55 \text{ нм}.$$

Проверка по критерию Франка не позволяет дать заключение о возможности реакции объединения двух дислокаций:

$$\left(\frac{a\sqrt{3}}{3}\right)^2 + \left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2 = \left(\frac{a\sqrt{2}}{2}\right)^2.$$

$$\text{Или } \frac{a^2}{2} = \frac{a^2}{2}.$$

Однако такая реакция возможна, поскольку при этом устраняется дефект упаковки. Поэтому следует ее считать энергетически выгодной.

Задача 3.5

Есть кристалл с решеткой ГЦК. Параметр кристаллической решетки $a = 3,9$ нм. Проверить по правилу квадратов возможность реакции диссоциации полной дислокации ($\mathbf{b}_1 = \frac{a}{2}[111]$) с образованием сидячей дислокации Франка ($\mathbf{b}_2 = \frac{a}{3}[112]$) и скользящей дислокации Шокли ($\mathbf{b}_3 = \frac{a}{6}[11\bar{1}]$):

$$\frac{a}{2}[111] = \frac{a}{3}[112] + \frac{a}{6}[11\bar{1}]$$

Найти модуль вектора Бюргера каждой из дислокаций.

Решение

$$|b_1| = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2} = \frac{a\sqrt{3}}{2} = 3,38 \text{ нм};$$

$$|b_2| = \sqrt{\left(\frac{a}{3}\right)^2 + \left(\frac{a}{3}\right)^2 + \left(\frac{2a}{3}\right)^2} = \frac{a\sqrt{6}}{3} = 3,18 \text{ нм};$$

$$|b_3| = \sqrt{\left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{3}}{6} = 1,13 \text{ нм}.$$

Проверка по критерию Франка не позволяет дать заключение о возможности реакции объединения двух дислокаций:

$$\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}\right)^2 = \left(\frac{a\sqrt{6}}{3}\right)^2 + \left(\frac{a\sqrt{3}}{6}\right)^2.$$

Или $\frac{3a^2}{4} = \frac{3a^2}{4}.$

Выигрыша энергии такая реакция не дает, и поэтому она может идти только под действием приложенных напряжений.

Задача 3.6

Есть кристалл с решеткой ГЦК. Параметр кристаллической решетки $a = 4,7$ нм. Проверить по правилу квадратов возможность объединения двух головных частичных дислокаций Шокли ($\mathbf{b}_1 = \frac{a}{6}[1\bar{1}2]$ и $\mathbf{b}_2 = \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$) в одну частичную (вершинную) дислокацию ($\mathbf{b}_3 = \frac{a}{6}[011]$) по реакции:

$$\frac{a}{6}[1\bar{1}2] + \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}] = \frac{a}{6}[011].$$

Найти модуль вектора Бюргера каждой из дислокаций.

Решение

$$|b_1| = \sqrt{\left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{2a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{6}}{6} = 1,92 \text{ нм};$$

$$|b_2| = \sqrt{\left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{2a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{6}}{6} = 1,92 \text{ нм};$$

$$|b_3| = \sqrt{0 + \left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{2}}{6} = 1,11 \text{ нм}.$$

Проверка по критерию Франка позволяет дать заключение, что реакция объединения двух дислокаций возможна:

$$\left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2 + \left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2 > \left(\frac{a\sqrt{2}}{6}\right)^2.$$

Или $\frac{a^2}{3} > \frac{a^2}{18}$.

Такое объединение дает большой выигрыш в энергии.

3.2. Дислокационные границы

Единичные дислокации создают в кристаллах локальные повороты решетки. Упорядоченные группы дислокаций вызывают макроскопические повороты соседних областей кристалла. Симметричная граница наклона состоит из одного ряда параллельных дислокаций. Ось поворота решетки лежит в плоскости границы и параллельна линиям дислокаций. Вектор Бюргерса перпендикулярен плоскости границы. Угол поворота на границе θ может быть найден из модели, представленной на рис. 3.2:

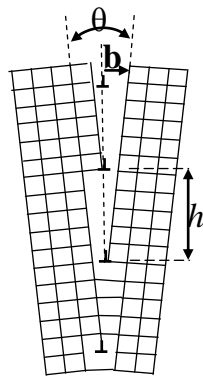


Рис. 3.2. Модель симметричной малоугловой границы наклона

$$\theta = 2 \arcsin \frac{b}{2h}, \quad (3.2)$$

где h – расстояние между дислокациями. Приближенная формула имеет вид:

$$\theta \approx \frac{\mathbf{b}}{h}. \quad (3.3)$$

В большинстве случаев углы поворота на дислокационных границах составляют минуты и единицы градуса. Поэтому такие границы и называют малоугловыми.

Второй тип малоугловых границ – это границы кручения. Такая граница может быть создана винтовыми дислокациями. Формула (3.3) для вычисления угла поворота оказывается одной и той же и для границы наклона, и для границы кручения. Однако граница наклона может быть создана только одним рядом дислокаций, а для границы кручения одного ряда дислокаций недостаточно. Ее особенностью является то, что векторы Бюргера дислокаций лежат в плоскости границы, а ось поворота перпендикулярна границе. Вид дислокационной сетки в границе кручения определяется типом кристаллической решетки и симметрией плоскости залегания границы.

Границы сопряжения двух кристаллических решеток различных веществ могут иметь дислокационную структуру. Представление о таких межфазных границах ввели Франк и ван дер Мерве. Из-за различия межплоскостных расстояний d_1 и d_2 в границе сформируются дислокации, которые называются межфазными или дислокациями несоответствия. Геометрические характеристики дислокаций несоответствия такие же, как и у обычных дислокаций. В решетке со структурой ГЦК они имеют векторы Бюргера $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$. Для сопряжения по плоскости (001) требуются две ортогональные системы дислокаций несоответствия.

Количественной характеристикой дислокационной межфазной границы является несоответствие линейных параметров решеток F :

$$F = 2 \frac{a_1 - a_2}{a_1 + a_2}, \quad (3.4)$$

где a_1 и a_2 – параметры кристаллической решетки 1 и 2 соответственно. Вектору Бюргера дислокаций приписывается среднее значение:

$$\mathbf{b} = \frac{1}{2} \left(\frac{a_1 + a_2}{2} \right) [110]. \quad (3.5)$$

Период дислокаций несоответствия D равен длине границы, приходящейся на одну дислокацию:

$$D = \frac{d_1 d_2}{d_2 - d_1}. \quad (3.6)$$

Упрощенная формула для периода D , выраженного через средний вектор Бюргерса \mathbf{b} и несоответствие F , выглядит так:

$$D = \frac{b}{|F|}. \quad (3.7)$$

Задача 3.7

Симметричная граница наклона в медной фольге, состоящая из одного ряда параллельных краевых дислокаций, для которых вектор Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{a}{2}[110]$ обеспечивает поворот кристаллической решетки на угол $\theta = 0,57^\circ$. Определить среднее расстояние между дислокациями. Параметр решетки меди $a = 0,3615$ нм.

Решение

Длина вектора $[110]$ в безразмерных координатах есть:

$$\sqrt{(u^2 + v^2 + w^2)} = \sqrt{(1^2 + 1^2 + 0)} = \sqrt{2}.$$

С учетом коэффициента $b = \frac{a}{2}\sqrt{2} = \frac{a}{\sqrt{2}} = 0,2556$ нм. Поворот кристаллической решетки, выраженный в радианах, $\theta = 0,57^\circ : 57,296 \text{ рад}/^\circ = 0,00995$ рад. Среднее расстояние между дислокациями h определим согласно (3.3):

$$h \approx \frac{b}{\theta} = \frac{0,2556}{0,00995} \approx 25,69 \text{ нм}.$$

Задача 3.8

Определить несоответствие линейных параметров решеток F , среднее значение векторов Бюргерса \mathbf{b} и $|\mathbf{b}|$, а также среднее расстояние D между дислокациями несоответствия на границе сопряжения кристаллических решеток Au/Cu и Au/Ag. Результаты оформить в виде таблицы. Параметры кристаллических решеток следующие: $a_{\text{Au}} = 0,4079$ нм, $a_{\text{Cu}} = 0,3615$ нм, $a_{\text{Ag}} = 0,4074$ нм.

Решение

Несоответствие линейных параметров решеток F определим, используя соотношение (3.4). Для системы Au/Cu:

$$F = 2 \frac{a_{\text{Au}} - a_{\text{Cu}}}{a_{\text{Au}} + a_{\text{Cu}}} = 0,121.$$

Для системы Au/Ag:

$$F = 2 \frac{a_{\text{Au}} - a_{\text{Ag}}}{a_{\text{Au}} + a_{\text{Ag}}} = 0,0012.$$

Согласно (3.5), среднее значение вектора Бюргера для системы Au/Cu равно:

$$\mathbf{b} = \frac{1}{2} \left(\frac{a_{\text{Au}} + a_{\text{Cu}}}{2} \right) [110] = 0,1923 [110] \text{ нм};$$
$$|\mathbf{b}| = 0,1923\sqrt{2} = 0,2720 \text{ нм}.$$

Среднее значение вектора Бюргера для системы Au/Ag равно:

$$\mathbf{b} = \frac{1}{2} \left(\frac{a_{\text{Au}} + a_{\text{Ag}}}{2} \right) [110] = 0,2038 [110] \text{ нм};$$
$$|\mathbf{b}| = 0,2038\sqrt{2} = 0,2882 \text{ нм}.$$

Среднее расстояние D между дислокациями несоответствия на границе сопряжения кристаллических решеток определим согласно (3.7).

Для системы Au/Cu:

$$D = \frac{b}{|F|} = \frac{0,2720}{0,121} \text{ нм} \approx 2,25 \text{ нм}.$$

Для системы Au/Ag:

$$D = \frac{b}{|F|} = \frac{0,2882}{0,0012} \text{ нм} \approx 240,2 \text{ нм}.$$

Полученные результаты сведены в таблицу.

Сопрягающиеся решетки	F	\mathbf{b}	$ \mathbf{b} $	D
Au/Cu	12,1 %	0,1923 [110] нм	0,2720 нм	2,25 нм
Au/Ag	0,12 %	0,2038 [110] нм	0,2882 нм	240,2 нм

3.3. Напряжения и силы, действующие на дислокацию

Модель винтовой дислокации в однородной упругой среде показана на рис. 3.3, а. Деформированное состояние возле винтовой дислокации отвечает чистому сдвигу. Поэтому поле напряжений для нее имеет только касательные составляющие:

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_{33} = \sigma_{12} = 0; \quad (3.8a)$$

$$\sigma_{31} = \sigma_{zy} = \frac{\mu b}{2\pi} \left(\frac{x}{x^2 + y^2} \right); \quad (3.8б)$$

$$\sigma_{32} = \sigma_{zy} = \frac{\mu b}{2\pi} \left(\frac{x}{x^2 + y^2} \right), \quad (3.8в)$$

где μ – модуль сдвига. По условию отсутствия вращающих моментов $\sigma_{ik} = \sigma_{ki}$. Здесь и далее принят следующий порядок индексации тензора напряжений: первый индекс указывает ось, вдоль которой действует напряжение, второй индекс – площадку, к которой относится напряжение. Индекс площадки совпадает с индексом нормали к ней.

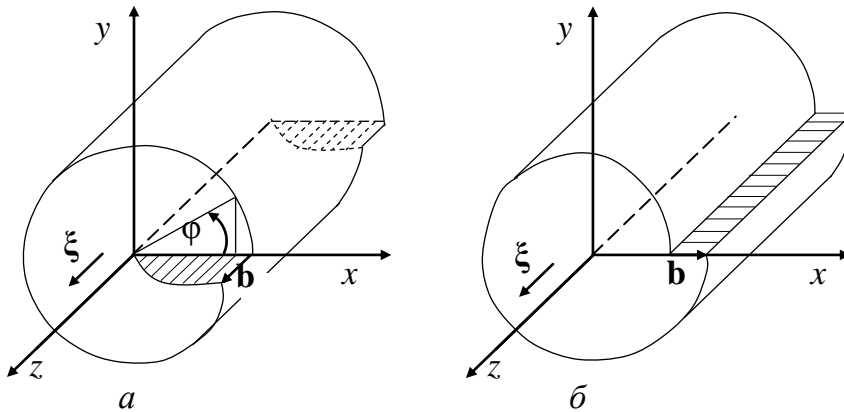


Рис. 3.3. Модель винтовой (а) и краевой (б) дислокации в упругой среде

Модель краевой дислокации в однородной упругой среде показана на рис. 3.3, б. Для нее компоненты тензора σ_{ik} имеют следующий вид:

$$\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0; \quad (3.9a)$$

$$\sigma_{xx} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \quad (3.9б)$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \quad (3.9в)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu \mathbf{b}}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (3.9\Gamma)$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = -\frac{\nu\mu\mathbf{b}}{\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y}{x^2 + y^2}, \quad (3.9\Delta)$$

где ν – коэффициент Пуассона.

Относительное изменение объема в деформированном теле определяется выражением:

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{(1-2\nu)}{E} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}), \quad (3.10)$$

где E – модуль Юнга.

Энергия u_s , приходящаяся на единицу длины винтовой дислокации, пропорциональна квадрату вектора Бюргерса:

$$u_s = \frac{\mu \mathbf{b}^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_o}, \quad (3.11)$$

где r_o – радиус ядра дислокации, внутри которого формулы теории упругости не верны ($r_o = 10^{-7}$ см), R – некоторый конечный размер твердого тела.

Энергия u_e , приходящаяся на единицу длины краевой дислокации, задается соотношением:

$$u_e = \frac{\mu \mathbf{b}^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_o}. \quad (3.12)$$

Поскольку коэффициент Пуассона меньше единицы ($\nu \approx 0,3 - 0,4$), энергия краевой дислокации больше, чем винтовой. Причина этого очевидна: возле краевой дислокации присутствуют нормальные напряжения, создающие изменения относительного объема, а возле винтовой дислокации их нет.

Движение дислокаций приводит к пластической деформации кристаллов. В ходе перестройки, происходящей в основном в пределах ядра дислокации, дислокация занимает позиции с повышенной энергией. Периодическое изменение энергии дислокации при ее движении в кристалле было рассчитано Пайерлсом и Набарро. Называют это изменение пайерлсовским рельефом кристалла. Для того чтобы дислокация двигалась, она должна преодолевать энергетические барьеры пайерлсовского рельефа. Внешнее напряжение, которое необходимо приложить к дислокации, чтобы вызвать ее движение, называют напряжением Пайерлса:

$$\sigma_p = \frac{2\mu}{1-\nu} \exp\left(-\frac{2\pi}{1-\nu} \frac{d}{b}\right), \quad (3.13)$$

где d – межплоскостное расстояние для плоскости скольжения. Формула (3.13) для σ_p получена в предположении, что пайерлсовский рельеф синусоидальный, что справедливо для металлических кристаллов.

Скольжение дислокаций будет происходить так, чтобы напряжение Пайерлса было минимальным. Этому условию отвечает минимальное значение $|\mathbf{b}|$ и максимальное значение d . Поэтому направлением скольжения должно быть плотно упакованное направление в кристалле, а плоскостью скольжения – плоскость с плотнейшей упаковкой.

Чем ближе дислокация к поверхности, тем энергия ее меньше. Поэтому дислокация притягивается к свободной поверхности. Существование силы притяжения приводит к тому, что тонкий приповерхностный слой кристалла оказывается обедненным дислокациями по сравнению с объемом. Сила притяжения f , приходящаяся на единицу длины дислокации, находящейся на расстоянии x от поверхности, задается соотношением:

$$f = \frac{\mu \mathbf{b}^2}{4\pi(1-\nu)} \left(\frac{1}{x}\right). \quad (3.14)$$

Силы, действующие на дислокации в отсутствие внешних напряжений, называют силами самодействия. Их можно также трактовать как проявление сил линейного натяжения дислокации. Сила самодействия f_r , действующая на единицу длины дислокационной петли с радиусом r , направлена по радиусу к центру петли и равна:

$$f_r = \frac{\mu \mathbf{b}^2}{4\pi(1-\nu)r} \left[1 + \ln\left(\frac{8r}{r_0}\right)\right]. \quad (3.15)$$

Сила f , с которой поле внутренних напряжений действует на единицу длины дислокации, определяется формулой Пича – Кёлера:

$$f_m = \varepsilon_{klm} b_i \sigma_{ik} \xi_l, \quad (3.16)$$

где f_m – m -я компонента силы f ; ε_{klm} – единичный антисимметричный тензор третьего ранга; b_i – i -я компонента вектора Бюргерса \mathbf{b} ; σ_{ik} – тензор напряжений; ξ_l – l -я компонента единичного вектора касательной к линии дислокации ξ , направление которого совпадает с направлением обхода линии дислокации.

В выражении (1.16) индексы m, k, l, i могут принимать значения 1, 2, 3. При наличии дважды повторяющихся индексов компоненты единичного антисимметричного тензора третьего ранга $\varepsilon_{klm} = 0$. В остальных случаях:

$$\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1, \quad (3.17a)$$

$$\varepsilon_{213} = \varepsilon_{321} = \varepsilon_{132} = -1. \quad (3.17б)$$

Дислокации оказывают друг на друга силовое воздействие, обусловленное создаваемыми ими полями упругих напряжений. На рис. 3.4 показаны две параллельные краевые дислокации с векторами Бюргера \mathbf{b}^I и \mathbf{b}^{II} , лежащие в плоскостях скольжения, расположенных на расстоянии y_0 одна от другой.

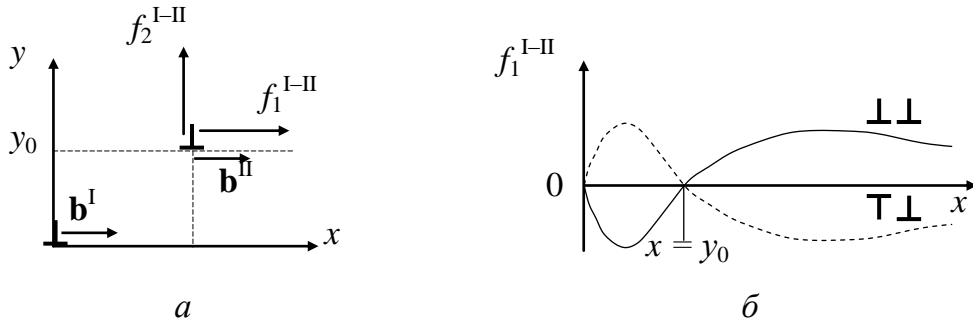


Рис. 3.4. Параллельные краевые дислокации с векторами Бюргера: a – схема взаимного расположения краевых дислокаций; b – график x -й компоненты силы f_1^{I-II} , действующей на дислокацию 2 со стороны дислокации 1.

Сплошная линия соответствует дислокациям одного знака.

Пунктирная линия соответствует дислокациям разных знаков

Первая дислокация закреплена в начале координат, а вторая может перемещаться по плоскости скольжения в направлении оси x . Со стороны первой дислокации на вторую дислокацию действует сила f^{I-II} , компонентами которой по осям x и y являются соответственно f_1^{I-II} и f_2^{I-II} :

$$f_1^{I-II} = \mathbf{b}^{II} \sigma_{12}^I = \frac{\mu \mathbf{b}^I \mathbf{b}^{II}}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - y_0^2)}{(x^2 + y_0^2)^2}; \quad (3.18a)$$

$$f_2^{I-II} = -\mathbf{b}^{II} \sigma_{11}^I = \frac{\mu \mathbf{b}^I \mathbf{b}^{II}}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y_0(3x^2 + y_0^2)}{(x^2 + y_0^2)^2}. \quad (3.18б)$$

На рис. 3.4, b сплошной линией показана зависимость силы f_1^{I-II} от расстояния между дислокациями одинаковых знаков. Эта сила имеет два нулевых значения: при $x = 0$ и $x = y_0$. Точка $x = y_0$ разделяет области притя-

жения и отталкивания дислокаций: при $x > y_0$ дислокации отталкиваются, при $x < y_0$ – притягиваются. Поэтому точке $x = y_0$ отвечает положение неустойчивого равновесия. Точка $x = 0$ отвечает устойчивому равновесию: смещение дислокации из этой точки вызывает появление силы, возвращающей дислокацию назад.

Если дислокации имеют разные знаки, то одному вектору Бюргерса в формуле (3.18а) для силы f_1^{I-II} нужно приписать знак плюс, другому – минус, что приведет к изменению знака силы. График силы f_1^{I-II} для дислокаций разных знаков показан на рис. 3.4, б пунктиром. В этом случае положением устойчивого равновесия оказывается точка $x = y_0$.

Две параллельные винтовые дислокации с векторами Бюргерса \mathbf{b}^I и \mathbf{b}^{II} , находящиеся на расстоянии x друг от друга (рис. 3.5), взаимодействуют с силой f_1^{I-II} , равной:

$$f_1^{I-II} = \mathbf{b}^{II} \sigma_{32}^I = \frac{\mu \mathbf{b}^I \mathbf{b}^{II}}{2\pi} \left(\frac{1}{x} \right). \quad (3.19)$$

Анализ соотношения (3.19) показывает, что две винтовые дислокации одного знака только отталкиваются. Если дислокации разных знаков, то знак силы f_1^{I-II} становится отрицательным, и такие дислокации притягиваются. Для параллельных винтовых дислокаций равновесная конфигурация отсутствует.

Если кристалл пересыщен вакансиями, то появляется сила, которую называют осмотической и которая действует вдоль оси y . Величина осмотической силы f_{osm} , приходящейся на единицу длины краевой дислокации с вектором Бюргерса \mathbf{b} , задается соотношением:

$$f_{osm} = \frac{kT\mathbf{b}}{V_v} \ln \left(\frac{C}{C_0} \right), \quad (3.20)$$

где V_v – объем, приходящийся на одну вакансию. Объем вакансии $V_v \sim a^3$, где a есть параметр кристаллической решетки; C – неравновесная концентрация вакансий, обусловленная внешним воздействием; C_0 – равновесная концентрация вакансий при температуре T . Отношение $\frac{C}{C_0}$ есть пересыще-

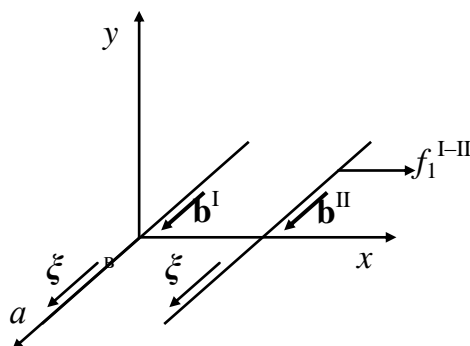


Рис. 3.5. Схема взаимного расположения винтовых дислокаций

ние кристалла вакансиями.

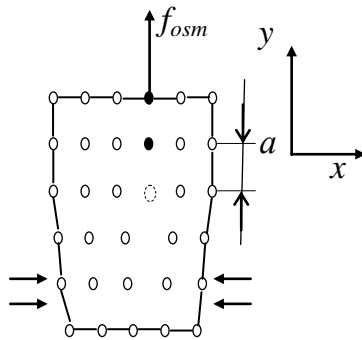


Рис. 3.6. Перемещение краевой дислокации под действием осмотической силы f_{osc}

При пересыщении вакансиями f_{osc} направлена вверх (рис. 3.6) и дислокация перемещается за счет поглощения избыточных вакансий. Если имеет место недосыщение, то f_{osc} направлена вниз. Дислокация двигается вниз, присоединяя новые атомы, т.е. испуская вакансии.

При наличии внешнего напряжения и пересыщении (недосыщении) кристалла вакансиями полная сила, действующая на единицу длины прямолинейной дислокации, будет равна:

$$f_2 = -\sigma_{11} + \frac{kTb}{V_v} \ln\left(\frac{C}{C_0}\right). \quad (3.21)$$

Задача 3.9

Пояснить, почему возле винтовой дислокации изменения объема отсутствуют, а возле краевой дислокации они имеют место.

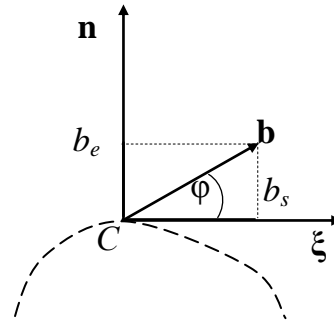
Решение

Относительное изменение объема в деформированном теле определяется выражением (3.10). Деформированное состояние возле винтовой дислокации отвечает чистому сдвигу, и поле напряжений имеет только касательные составляющие. Поэтому $\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz} = 0$ и относительное изменение объема $\frac{\Delta V}{V} = 0$.

Возле краевой дислокации присутствуют как касательные, так и нормальные напряжения (3.9). Поэтому $\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz} \neq 0$ и относительное изменение объема $\frac{\Delta V}{V} \neq 0$.

Задача 3.10

Зная выражение для энергии винтовой и краевой дислокации, найти выражение для энергии смешанной дислокации (рисунок), у которой вектор Бюргерса составляет с линией дислокации угол, равный φ .



Решение

В точке C (см. рис.) вектор Бюргерса смешанной дислокации $\mathbf{b} = b_s \xi + b_e \mathbf{n}$, где b_s и b_e соответственно винтовая и краевая составляющие вектора \mathbf{b} . Винтовая компонента $b_s = \mathbf{b} \cos \varphi$. Краевая компонента $b_e = \mathbf{b} \sin \varphi$. Используя соотношение (3.11), найдем энергию u_s , приходящуюся на единицу длины винтовой компоненты смешанной дислокации:

$$u_s = \frac{\mu (\mathbf{b} \cos \varphi)^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}.$$

Используя соотношение (3.12), найдем энергию u_e , приходящуюся на единицу длины краевой компоненты смешанной дислокации:

$$u_e = \frac{\mu (\mathbf{b} \sin \varphi)^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0}.$$

Складывая u_s и u_e , найдем выражение для энергии единицы длины смешанной дислокации u :

$$u = \frac{\mu (\mathbf{b} \cos \varphi)^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0} + \frac{\mu (\mathbf{b} \sin \varphi)^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0} = \frac{\mu b^2}{4\pi} \left(\frac{1-\nu \cos^2 \varphi}{1-\nu} \right) \ln \frac{R}{r_0}.$$

Задача 3.11

Плотность винтовых дислокаций в кристалле алюминия $n = 10^6 \text{ см}^{-2}$. Модуль сдвига $\mu = 2,5 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$. Параметр кристаллической решетки $a = 0,404 \text{ нм}$. Рассчитать энергию дислокаций с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{1}{2} \langle 110 \rangle$, приходящуюся на одно межплоскостное расстояние. Радиус ядра дислокации $r_0 = 10^{-7} \text{ см}$. Ответ представить как в джоулях, так и в электрон-вольтах.

Решение

Площадь, приходящаяся на одну дислокацию, $S = n^{-1} = 10^{-6} \text{ см}^2$. Тогда среднее расстояние между дислокациями $R = \sqrt{S} = 10^{-3} \text{ см}$. Модуль вектора Бюргерса дислокаций $\mathbf{b} = a(\sqrt{2})^{-1} = 0,286 \text{ нм}$. Используя соотношение (3.11), найдем энергию u , приходящуюся на единицу длины винтовой дислокации:

$$u = \frac{\mu \mathbf{b}^2}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right) = \frac{2,5 \cdot 10^{10} (0,286 \cdot 10^{-9})^2}{4 \cdot 3,14} \ln\left(\frac{10^{-3}}{10^{-7}}\right) \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1} = 3,7 \cdot 10^{-9} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}.$$

Межплоскостное расстояние $d_{110} = a(\sqrt{2})^{-1} = 0,286 \text{ нм}$. Найдем энергию u_1 дислокаций, приходящуюся на одно межплоскостное расстояние:

$$u_1 = u \cdot d_{110} = 3,7 \cdot 10^{-9} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1} \cdot 0,286 \cdot 10^{-9} \text{ м} = 1,06 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}.$$

Поскольку $1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$, то $u_1 = 1,06 \cdot 10^{-18} : 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ эВ} = 6,6 \text{ эВ}$.

Задача 3.12

Используя формулу Пайерлса – Набарро, оцените критическое напряжение сдвига σ_c для алюминия. Считать, что пластическая деформация осуществляется при скольжении дислокаций с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{1}{2}\{110\}$. Модуль сдвига для алюминия $\mu = 0,25 \text{ (ГПа)}$. Параметр решетки $a_0 = 0,405 \text{ (нм)}$. Коэффициент Пуассона $\nu = 0,33$. Полученное значение сопоставить со значением σ_c , вычисленным в предположении, что элементарным актом сдвига является смещение одной части кристалла как целого относительно другой части кристалла (т.е. без участия дислокаций).

Решение

Направлениями скольжения являются плотно упакованные направления $\langle 110 \rangle$, а плоскостями скольжения являются плоскости с плотнейшей упаковкой $\{111\}$. $d_{111} = a_0(\sqrt{3})^{-1} = 0,234 \text{ нм}$. $|\mathbf{b}| = a_0(\sqrt{2})^{-1} = 0,287 \text{ нм}$.

Используя соотношение (3.13), оценим критическое напряжение сдвига τ_c для алюминия:

$$\sigma_{\bar{n}} = \frac{2\mu}{1-\nu} \exp\left(-\frac{2\pi}{1-\nu} \frac{d_{111}}{\mathbf{b}}\right) = \frac{2 \cdot 0,25 \cdot 10^9}{1-0,33} \exp\left(-\frac{2 \cdot 3,14}{1-0,33} \frac{0,234}{0,287}\right) = 0,36 \text{ МПа}.$$

Полученное значение сопоставим со значением σ_c , вычисленным в предположении, что элементарным актом сдвига является смещение одной

части кристалла как целого относительно другой части кристалла (т.е. без участия дислокаций). В этом случае:

$$\sigma_{\bar{n}} = \frac{\mu}{2\pi} = \frac{0,25 \cdot 10^9}{2 \cdot 3,14} = 39,8 \text{ МПа.}$$

Задача 3.13

Сила f , действующая на единицу длины краевой дислокации, находящейся на расстоянии x от поверхности тонкой пленки Ag, равна 0,03 Н. Найдите это расстояние. Модуль сдвига $\mu = 44$ ГПа. Модуль вектора Бюргера дислокации $b = 0,25$ нм. Коэффициент Пуассона $\nu = 0,33$.

Решение

Сила притяжения дислокации к свободной поверхности в расчете на единицу длины задается соотношением (3.14). Отсюда найдем расстояние x между дислокацией и свободной поверхностью кристалла:

$$x = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \left(\frac{1}{f} \right) = \frac{44 \cdot 10^9 \cdot (0,25 \cdot 10^{-9})^2}{4 \cdot 3,14 \cdot (1-0,33)} \left(\frac{1}{0,03} \right) = 10,9 \text{ нм.}$$

Задача 3.14

Что такое сила самодействия? Определите величину силы самодействия, действующей на единицу длины дислокационной петли, радиус которой $r = 30$ нм. Модуль вектора Бюргера дислокации $b = 0,286$ нм. Модуль сдвига $\mu = 0,25$ (ГПа). Коэффициент Пуассона $\nu = 0,33$. Радиус ядра дислокации $r_0 = 10^{-9}$ м. Как направлена эта сила?

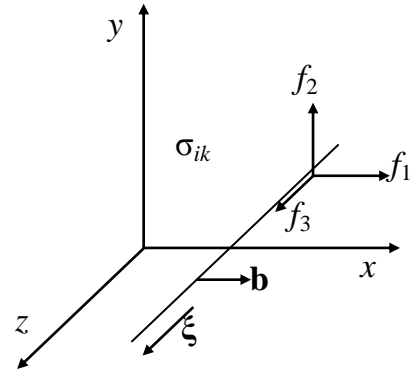
Решение

Сила самодействия – это сила, действующая на дислокацию в отсутствие внешних напряжений. Согласно (3.15) сила самодействия f_r , действующая на единицу длины дислокационной петли с радиусом r , направлена по радиусу к центру петли и равна:

$$f_r = \frac{\mu b^2}{4\pi r(1-\nu)} \left[1 + \ln \left(\frac{8r}{r_0} \right) \right] = \frac{0,25 \cdot 10^9 \cdot (0,286 \cdot 10^{-9})^2}{4 \cdot 3,14 \cdot 30 \cdot 10^{-9} \cdot (1-0,33)} \left[1 + \ln \left(\frac{8 \cdot 30 \cdot 10^{-9}}{10^{-9}} \right) \right] = 0,52 \cdot 10^{-3} \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}.$$

Задача 3.15

Используя формулу Пича – Кёлера (3.16), найти силу f , с которой поле внутренних напряжений действует на единицу длины краевой дислокации. Считать, что вектор Бюргерса параллелен оси x (рисунок).



Решение

В соответствии с рисунком, компоненты вектора Бюргерса краевой дислокации $\mathbf{b}_x = \mathbf{b}_1 = \mathbf{b}$; $\mathbf{b}_y = \mathbf{b}_2 = 0$; $\mathbf{b}_z = \mathbf{b}_3 = 0$. Компоненты единичного вектора касательной к линии дислокации $\xi_x = \xi_1 = 0$; $\xi_y = \xi_2 = 0$; $\xi_z = \xi_3 = 1$. Тогда не равными нулю будут те компоненты силы f , для которых в формуле (3.16) индексы $i = 1$ и $l = 3$:

$$f_m = \varepsilon_{k3m} \mathbf{b}_1 \sigma_{1k} \xi_3 = \varepsilon_{k3m} \mathbf{b} \sigma_{1k}.$$

Компонента силы по оси x ($m = 1$) будет отлична от нуля только в том случае, когда $\varepsilon_{k31} = \varepsilon_{231}$ (не будет дважды повторяющихся индексов). В соответствии с (3.17а), $\varepsilon_{231} = 1$. Тогда:

$$f_1 = \varepsilon_{k31} \mathbf{b} \sigma_{1k} = \varepsilon_{231} \mathbf{b} \sigma_{12} = \mathbf{b} \sigma_{12}.$$

Сила f_1 направлена вдоль вектора Бюргерса и приводит к движению дислокации в плоскости скольжения. Эта сила возникает за счет касательного напряжения σ_{12} , действующего в плоскости скольжения дислокации и в направлении вектора Бюргерса. Другие составляющие тензора σ_{ik} на эту силу не влияют.

Аналогично компонента силы по оси y ($m = 2$) будет отлична от нуля, когда $\varepsilon_{k32} = \varepsilon_{132}$. В соответствии с (3.17б), $\varepsilon_{132} = -1$. Тогда:

$$f_2 = \varepsilon_{k32} \mathbf{b} \sigma_{1k} = \varepsilon_{132} \mathbf{b} \sigma_{11} = -\mathbf{b} \sigma_{11}.$$

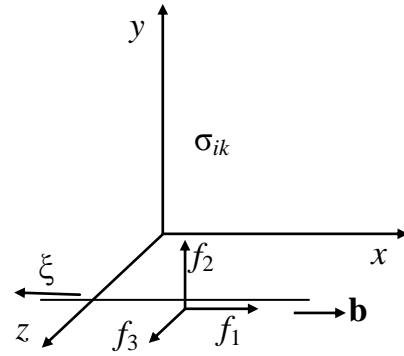
Сила f_2 действует перпендикулярно вектору Бюргерса. Она создается нормальными напряжениями.

Компонента силы по оси z ($m = 3$) будет равна $f_3 = \varepsilon_{k33} \mathbf{b} \sigma_{1k} = 0$ (элемент единичного антисимметричного тензора третьего ранга с повторяющимися индексами $\varepsilon_{k33} = 0$). Внутреннее напряжение не создает силы, направленной вдоль линии дислокации:

$$f_3 = 0.$$

Задача 3.16

Используя формулу Пича – Кёлера (3.16), найти силу f , с которой поле внутренних напряжений действует на единицу длины винтовой дислокации. Считать, что вектор Бюргерса параллелен оси x (рисунок).



Решение

В соответствии с рисунком, компоненты вектора Бюргерса краевой дислокации $\mathbf{b}_x = \mathbf{b}_1 = \mathbf{b}$; $\mathbf{b}_y = \mathbf{b}_2 = 0$; $\mathbf{b}_z = \mathbf{b}_3 = 0$. Компоненты единичного вектора касательной к линии дислокации $\xi_x = \xi_1 = -1$; $\xi_y = \xi_2 = 0$; $\xi_z = \xi_3 = 0$. Тогда не равными нулю будут те компоненты силы f , для которых в формуле (3.16) индексы $i = 1$ и $l = 1$:

$$f_m = \varepsilon_{k1m} \mathbf{b}_1 \sigma_{1k} \xi_1 = \varepsilon_{k1m} \mathbf{b} \sigma_{1k} \cdot (-1).$$

Компонента силы по оси x ($m = 1$) будет равна $f_1 = -\varepsilon_{k11} \mathbf{b} \sigma_{1k} = 0$ (элемент единичного антисимметричного тензора третьего ранга с повторяющимися индексами $\varepsilon_{k11} = 0$). Вдоль линии дислокации сила не действует:

$$f_1 = 0.$$

Компонента силы по оси y ($m = 2$) будет отлична от нуля только в том случае, когда $\varepsilon_{k12} = \varepsilon_{312}$ (не будет дважды повторяющихся индексов). В соответствии с (3.17а), $\varepsilon_{312} = 1$. Тогда:

$$f_2 = \varepsilon_{k12} \mathbf{b} \sigma_{1k} \cdot (-1) = \varepsilon_{312} \mathbf{b} \sigma_{13} \cdot (-1) = -\mathbf{b} \sigma_{13}.$$

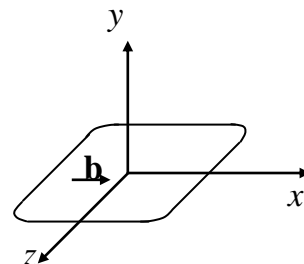
Компонента силы по оси z ($m = 3$) будет отлична от нуля, когда $\varepsilon_{k13} = \varepsilon_{213}$ (не будет повторяющихся индексов). В соответствии с (3.17б), $\varepsilon_{213} = -1$. Тогда:

$$f_3 = \varepsilon_{k13} \mathbf{b} \sigma_{1k} \cdot (-1) = \varepsilon_{213} \mathbf{b} \sigma_{12} \cdot (-1) = \mathbf{b} \sigma_{12}.$$

Сила f_3 создается касательным напряжением σ_{12} и направлена перпендикулярно вектору Бюргерса.

Задача 3.17

Дана дислокационная петля, у которой вектор Бюргерса лежит в плоскости петли (рисунок). Такая петля носит название скользящей. Используя результаты, полученные при решении задач 3.15 и 3.16, определить, какие силы будут дей-

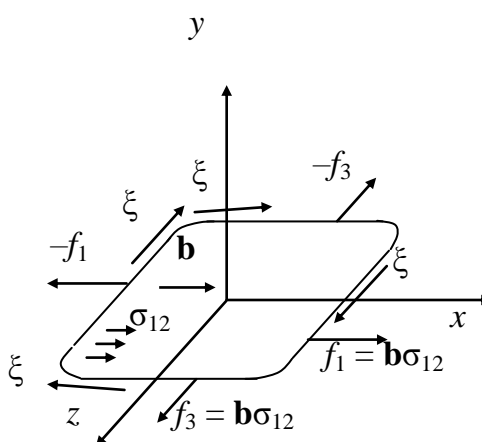


ствовать на каждую составляющую петли в плоскости скольжения. Рассмотреть условия движения скользящей дислокационной петли.

Решение

В плоскости скольжения на дислокационную петлю действуют компоненты сил f_1 и f_3 . Вдоль линии дислокации сила не действует. С учетом сказанного расставим силы, действующие на отдельные дислокационные ветви в плоскости скольжения. На противоположные ветви дислокационной петли действуют противоположные силы, так как для них оказываются разнонаправленными векторы ξ .

Под действием внешнего напряжения дислокационная петля должна либо расширяться (при положительном знаке σ_{12}), либо сжиматься (если знак σ_{12} изменится на противоположный). При одном и том же знаке σ_{12} краевая дислокация двигается вдоль этого напряжения, а винтовая – перпендикулярно к нему.



Для того чтобы дислокационная петля расширялась, необходимо, чтобы создаваемая внутренним напряжением сила превосходила сумму силы, обусловленную напряжением Пайерлса (3.13), и силы самодействия (3.15), стремящейся захлопнуть дислокационную петлю. Для того чтобы петля захлопнулась, сумма этих сил должна быть больше силы Пайерлса.

Задача 3.18

Даны две параллельные краевые дислокации с векторами Бюргера \mathbf{b}^I и \mathbf{b}^{II} , лежащие в плоскостях скольжения, расположенных на расстоянии y_0 одна от другой (см. рис. 3.4, а). Первая дислокация закреплена в начале координат, а вторая перемещается по плоскости скольжения, имея текущую координату x . Вторая дислокация находится в поле напряжений первой. Используя результаты, полученные при решении задачи 3.15, вычислить компоненты силы по оси x и по оси y , действующей на вторую дислокацию со стороны первой.

Решение

Поле напряжений σ_{ik}^I , создаваемое первой дислокацией, будет внешним по отношению ко второй дислокации. Поэтому со стороны первой дислокации на вторую дислокацию будет действовать сила f^{I-II} . Компоненты этой силы по оси x и по оси y есть f_1^{I-II} и f_2^{I-II} соответственно. Из решения задачи 3.15 следует, что:

$$\begin{aligned} f_1^{I-II} &= \mathbf{b}^{II} \sigma_{12}^I; \\ f_2^{I-II} &= -\mathbf{b}^{II} \sigma_{11}^I. \end{aligned}$$

Значения σ_{12}^I и σ_{11}^I при $y = y_0$ определим по формулам (3.9г) и (3.9б) соответственно:

$$\begin{aligned} \sigma_{12}^I &= \frac{\mu \mathbf{b}^I}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - y_0^2)}{(x^2 + y_0^2)^2}; \\ \sigma_{11}^I &= -\frac{\mu \mathbf{b}^I}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y_0(3x^2 + y_0^2)}{(x^2 + y_0^2)^2}. \end{aligned}$$

Компоненты силы по оси x и по оси y , действующей на вторую дислокацию со стороны первой, равны:

$$\begin{aligned} f_1^{I-II} &= \frac{\mu \mathbf{b}^I \mathbf{b}^{II}}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - y_0^2)}{(x^2 + y_0^2)^2}; \\ f_2^{I-II} &= \frac{\mu \mathbf{b}^I \mathbf{b}^{II}}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y_0(3x^2 + y_0^2)}{(x^2 + y_0^2)^2}. \end{aligned}$$

Задача 3.19

Даны две параллельные винтовые дислокации с векторами Бюргерса b^I и b^{II} , лежащие в плоскости xoz (см. рис. 3.5). Найти компоненты силы f^{I-II} , действующей на вторую дислокацию со стороны первой.

Решение

Согласно формуле Пича – Кёлера (3.16), $f_m^{I-II} = \varepsilon_{klm} \mathbf{b}^{II} \sigma_{ik}^I \xi_l$. В соответствии с рисунком, компоненты вектора Бюргерса винтовой дислокации $\mathbf{b}_x = \mathbf{b}_1 = 0$; $\mathbf{b}_y = \mathbf{b}_2 = 0$; $\mathbf{b}_z = \mathbf{b}_3 = 1$. Компоненты единичного вектора касательной к линии дислокации $\xi_x = \xi_1 = 0$; $\xi_y = \xi_2 = 0$; $\xi_z = \xi_3 = 1$. Тогда не равными нулю будут те компоненты силы f^{I-II} , для которых индексы $i = 3$ и $l = 3$:

$$f_m^{I-II} = \varepsilon_{k3m} \mathbf{b}_3 \sigma_{3k}^I \xi_3 = \varepsilon_{k3m} \mathbf{b} \sigma_{3k}^I.$$

Компонента силы по оси x ($m = 1$) будет отлична от нуля только в том случае, когда $\varepsilon_{k31} = \varepsilon_{231}$ (не будет дважды повторяющихся индексов). В соответствии с (3.17а), $\varepsilon_{231} = 1$. Тогда:

$$f_1^{I-II} = \varepsilon_{k31} \mathbf{b}^{\Pi} \sigma_{3k}^I \cdot (1) = \varepsilon_{231} \mathbf{b}^{\Pi} \sigma_{32}^I \cdot (1) = \mathbf{b}^{\Pi} \sigma_{32}^I.$$

Аналогично компонента силы по оси y ($m = 2$) будет отлична от нуля, когда $\varepsilon_{k32} = \varepsilon_{132}$. В соответствии с (3.17б), $\varepsilon_{132} = -1$. Тогда:

$$f_2^{I-II} = \varepsilon_{k32} \mathbf{b}^{\Pi} \sigma_{3k}^I \cdot (-1) = \varepsilon_{132} \mathbf{b}^{\Pi} \sigma_{31}^I \cdot (-1) = \mathbf{b}^{\Pi} \sigma_{31}^I.$$

Компонента силы по оси z ($m = 3$) будет равна $f_3^I = \varepsilon_{k33} \mathbf{b}^{\Pi} \sigma_{3k}^I = 0$ (элемент единичного антисимметричного тензора третьего ранга с повторяющимися индексами $\varepsilon_{k33} = 0$). Вдоль линии дислокации сила не действует:

$$f_3^{I-II} = 0.$$

Значения компонент тензора напряжений σ_{32}^I и σ_{31}^I , создаваемых винтовой дислокацией, определим согласно (3.8в) и (3.8б) при $y = 0$:

$$\sigma_{32}^I = \frac{\mu \mathbf{b}^I}{2\pi} \left(\frac{1}{x} \right);$$

$$\sigma_{31}^I = 0.$$

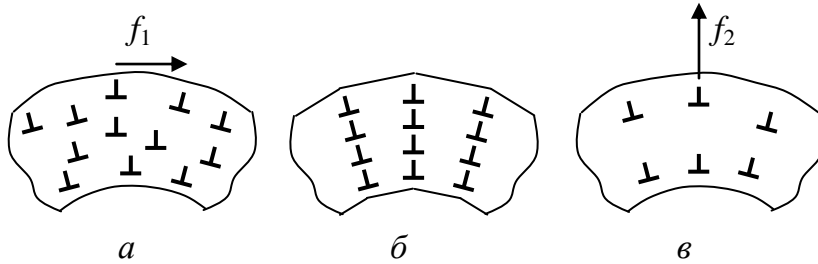
Следовательно,

$$f_1^{I-II} = \mathbf{b}^{\Pi} \sigma_{32}^I = \frac{\mu \mathbf{b}^I \mathbf{b}^{\Pi}}{2\pi} \left(\frac{1}{x} \right);$$

$$f_2^{I-II} = 0.$$

Задача 3.20

В ходе пластического изгиба монокристалла в нем возникло неупорядоченное распределение краевых дислокаций (рисунок а). После отжига в нем произошла перестройка дислокационной структуры (рисунок б). При дальнейшем повышении температуры отжига плотность дислокаций в кристалле заметно снизилась (рисунок в). Пояснить происходящие изменения дислокационной структуры кристалла при отжиге.



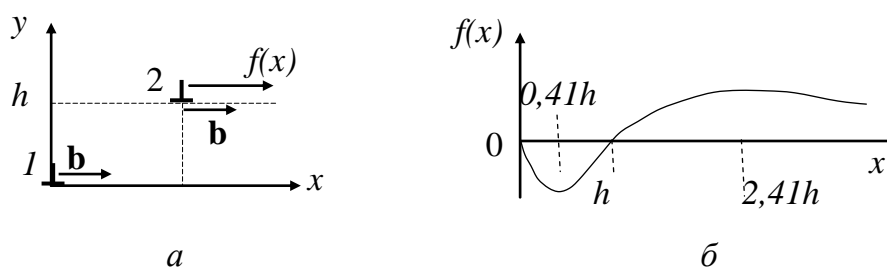
Решение

Знание сил, действующих между дислокациями, позволяет объяснить природу многих явлений, протекающих при пластической деформации и отжиге кристаллов. Данное явление носит название полигонизации. При отжиге кристалла под действием сил f_1 происходит такая перестройка дислокационной структуры, при которой дислокации выстраиваются одна над другой. Это будет отвечать их равновесному распределению (рисунок б). В результате возникнут дислокационные границы наклона, которые разобьют монокристалл на отдельные блоки, называемые блоками-полигонами.

Структура, изображенная на рисунке б, является механически устойчивой. Однако она неустойчива термодинамически. Термодинамически равновесному состоянию отвечает полное отсутствие дислокаций в кристалле. Поэтому при дальнейшем повышении температуры до такого уровня, когда активизируется самодиффузия, начинается выход дислокаций из кристалла путем их диффузионного движения по нормали к плоскости скольжения (рисунок в). Этому процессу будут способствовать силы f_2 .

Задача 3.21

В плоскости $y = 0$ вдоль оси z расположена краевая дислокация 1 с вектором Бюргера b , а в плоскости $y = h$ движется параллельно ей краевая дислокация 2 с таким же вектором Бюргера (рисунок а). Найти, в какой точке x сила взаимодействия между дислокациями f максимальна. Указать внешнее напряжение, необходимое для того, чтобы дислокация 2 прошла через эту точку.



Решение

Дислокации оказывают друг на друга силовое воздействие, обусловленное создаваемыми ими полями упругих напряжений. Для решения за-

дачи воспользуемся формулой (3.18a). Полагая $f_1^{I-II} = f(x)$, $\mathbf{b}^I = \mathbf{b}^{II} = \mathbf{b}$ и $y_0 = h$, получим:

$$f(x) = \frac{\mu \mathbf{b}^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - h^2)}{(x^2 + h^2)^2}.$$

Для нахождения значений x , при которых функция $f(x)$ достигает экстремума, следует приравнять нулю производную:

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{\mu \mathbf{b}^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{d}{dx} \left[\frac{x(x^2 - h^2)}{(x^2 + h^2)^2} \right] = 0;$$

$$\frac{(3x^2 - h^2)(x^2 + h^2)^2 - 4x(x^3 - xh^2)(x^2 + h^2)}{(x^2 + h^2)^4} = 0.$$

После несложных преобразований получим уравнение четвертой степени относительно x :

$$x^4 - 6x^2h^2 + h^4 = 0.$$

После замены $x^2 = v$ получим уравнение второй степени относительно v :

$$v^2 - 6h^2v + h^4 = 0.$$

Корни этого уравнения:

$$v_1 = 3h^2 - \sqrt{9h^4 - h^4} = h^2(3 - \sqrt{8}) = 0,17h^2;$$

$$v_2 = 3h^2 + \sqrt{9h^4 - h^4} = h^2(3 + \sqrt{8}) = 5,83h^2.$$

В данной задаче физический смысл имеют только положительные значения координат x , при которых сила $f(x)$ достигает экстремума:

$$x_1 = \sqrt{0,17h^2} = 0,41h;$$

$$x_2 = \sqrt{5,83h^2} = 2,41h.$$

Значения x_1 и x_2 показаны на графике рисунка б. При $x_1 = 0,41 h$ максимума достигает сила отталкивания между дислокациями:

$$f(x_1) = \frac{\mu \mathbf{b}^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{0,41h \left[(0,41h)^2 - h^2 \right]}{\left[(0,41h)^2 + h^2 \right]^2} = -0,04 \frac{\mu \mathbf{b}^2}{(1-\nu)h}.$$

При $x_2 = 2,41 h$ максимума достигает сила притяжения между дислокациями:

$$f(x_2) = \frac{\mu \mathbf{b}^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{2,41h \left[(2,41h)^2 - h^2 \right]}{\left[(2,41h)^2 + h^2 \right]^2} = 0,04 \frac{\mu \mathbf{b}^2}{(1-\nu)h}.$$

Согласно (3.18а), $f(x_1) = \mathbf{b}\sigma_{12}$. Поэтому внешнее напряжение σ_{12} , необходимое для того, чтобы дислокация 2 прошла через точку $x = x_1$, составит:

$$\sigma_{12} = -0,04 \frac{\mu \mathbf{b}}{(1-\nu)h}.$$

Задача 3.22

Найти наибольшую силу взаимодействия между краевыми дислокациями с векторами Бюргерса $\mathbf{b} = 0,25$ нм, скользящими в плоскости (110) α -железа. Расстояние между их плоскостями скольжения $h = 0,1$ мкм. Коэффициент Пуассона $\nu = 0,3$. Для α -Fe модуль сдвига $\mu = 80$ ГПа. Найти положение неустойчивого равновесия. Использовать результаты, полученные при решении задачи 3.21.

Решение

При решении задачи 3.21 показано, что при $x_1 = 0,41 h$ максимума достигает сила отталкивания между дислокациями:

$$f(x_1) = -0,04 \frac{\mu \mathbf{b}^2}{(1-\nu)h} = -0,04 \frac{80 \cdot 10^9 (0,25 \cdot 10^{-9})^2}{(1-0,3) \cdot 0,1 \cdot 10^{-6}} \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1} = -0,003 \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}.$$

При $x_2 = 2,41 h$ максимума достигает сила притяжения между дислокациями

$$f(x_2) = 0,04 \frac{\mu \mathbf{b}^2}{(1-\nu)h} \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1} = 0,003 \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}.$$

Согласно рисунку б задачи 3.21, положение неустойчивого равновесия имеет место тогда, когда координата $x = h = 0,1$ мкм. При $x > h$ дислокации отталкиваются, при $x < h$ – притягиваются. Поэтому точке $x = h$ отвечает положение неустойчивого равновесия.

3.4. Образование дислокаций в кристаллах

Дислокации появляются в кристаллах в процессе их роста и пластической деформации. Винтовые дислокации обеспечивают рост кристаллов при таких малых пересыщениях, когда бездислокационные кристаллы практически не растут. Краевые и винтовые дислокации могут формироваться как ошибки роста. Они зарождаются при срастании разориентированных кристаллических зародышей.

Плотность дислокаций ρ – это число дислокационных линий, пересекающих единичную площадку. Высокие плотности дислокаций возникают в ходе пластической деформации кристаллов. Деформация сдвига γ и плотность дислокаций связаны простым соотношением:

$$\gamma = \rho b l, \quad (3.22)$$

где l – средний пробег дислокаций в кристалле.

Радиус изгиба R пластически изогнутого кристалла обратно пропорционален плотности дислокаций ρ :

$$R = \frac{1}{\rho b}. \quad (3.23)$$

Для объяснения увеличения плотности дислокаций в ходе пластической деформации был сконструирован механизм размножения дислокаций – дислокационный источник Франка – Рида. Рассмотрим отрезок краевой дислокации, закрепленный в точках a и c (рис. 3.7, *a*). Пусть плоскостью скольжения является плоскость чертежа и пусть в направлении вектора Бюргерса действует касательное напряжение σ_{12} . Под действием этого напряжения возникает сила $f_1 = \mathbf{b}\sigma_{12}$. Сила f_1 приводит к искривлению дислокации (рис. 3.7, *б*).

У возникшей дислокационной петли появляются винтовые компоненты, на которые будут действовать силы $f_2 = \pm \mathbf{b}\sigma_{12}$. Справа и слева эти силы будут иметь разные знаки, что видно по расположению векторов ζ . Указанные силы приведут к тому, что дислокационная петля будет расширяться и приобретет далее вид, показанный на рис. 3.7, *в*. Очевидно, что на отдельные составляющие этой полупетли будут действовать силы f_1 и f_2 , изображенные на рисунке.

Следующая стадия изменения формы дислокации представлена на рис. 3.7, *г*. Отрезки винтовых дислокаций в верхней части рисунка имеют разные знаки и притягиваются. Соприкоснувшись, они аннигилируют, что приводит к отщеплению дислокационной петли и восстановлению исходного дислокационного отрезка между точками a и c (рис. 3.7, *д*).

Если внешнее напряжение σ_{12} продолжает действовать, то возникшая дислокационная петля будет расширяться, а дислокационный отрезок ac начнет искривляться заново. Это приведет к образованию новой дислокационной петли.

Напряжение, при котором источник Франка – Рида может испускать дислокации, называется напряжением старта источника σ_{st} :

$$\sigma_{st} = \frac{0,5\mu b}{L}. \quad (3.24)$$

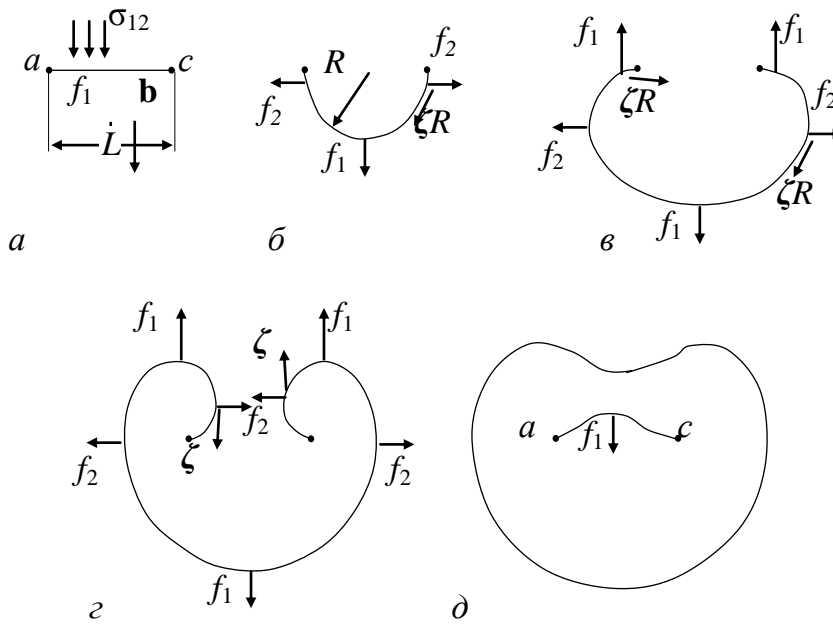


Рис. 3.7. Схема действия дислокационного источника Франка – Рида.

Источник Франка – Рида испускает скользящие дислокационные петли, для которых вектор Бюргера лежит в плоскости петли. Движение дислокаций при действии источника Франка – Рида происходит механическим путем в плоскости скольжения.

Наряду с этим существует другой вид движения краевых дислокаций – перемещение по нормали к плоскости скольжения. Осуществляется такое движение диффузионным путем. Оно возможно, как указывалось выше, при наличии пересыщения вакансиями.

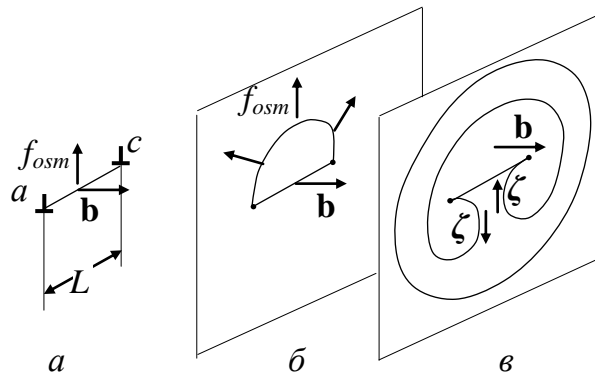


Рис. 3.8. Схема действия дислокационного источника Бардина – Херинга

Учет диффузионного движения дислокаций привел к представлению о еще одном дислокационном источнике, называемом источником Бардина – Херинга. Рассмотрим отрезок краевой дислокации, закрепленный в точках a и c (рис. 3.8, a). При наличии в кристалле пересыщения вакансиями возникает осмотическая сила f_{osm} , которая приводит к искривлению дислокации в плоскости, перпендикулярной плоскости скольжения (рис. 3.8, b). Весь искривленный дислокационный отрезок будет представлять собой краевую дислокацию, на которую во всех точках действует осмотическая сила. Далее процесс развивается подобно тому, как это имеет место для дислокационного источника Франка – Рида (рис. 3.8, $в$).

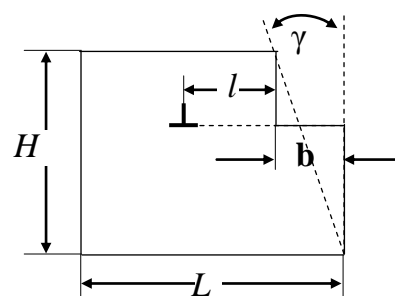
Дислокационные отрезки краевой дислокации, имеющие разные знаки, аннигилируют, в результате чего от источника отщепляется свободная дислокационная петля. Особенность этой петли состоит в том, что ее вектор Бюргерса перпендикулярен плоскости залегания петли, т.е. она является призматической. Таким образом, источник Франка – Рида испускает скользящие петли, а источник Бардина – Херинга – призматические.

Источник Бардина – Херинга будет испускать петли при условии, что осмотическая сила f_{osm} будет больше силы самодействия f_r , которая стремится выпрямить искривленную дислокацию. Критическое значение осмотической силы f_{osm}^* находится из условия:

$$f_{osm}^* = \frac{kTb}{V_v} \ln \frac{C}{C_0} \geq \frac{0,5\mu b^2}{L}. \quad (3.25)$$

Задача 3.23

Кристалл, сечение которого представляет собой прямоугольник размером $H \times L$ (рисунок), после деформации сдвига γ содержит дислокации, плотность которых равна ρ . Найти связь между деформацией сдвига и плотностью дислокаций при условии, что средний пробег дислокаций составляет l .



Решение

Согласно рисунку, при вхождении в кристалл одной краевой дислокации возникает деформация сдвига $\gamma_1 = \frac{b}{H}$. При этом левая грань кри-

сталла остается недеформированной. Усредненная деформация, отнесенная ко всему сечению, составит $\gamma = \frac{\mathbf{b}}{H} \left(\frac{l}{L} \right)$. Если в кристалл войдет n дислокаций и каждая из них совершит пробег l , то средняя деформация сдвига $\gamma = \frac{n\mathbf{b}}{H} \left(\frac{l}{L} \right) = \rho \mathbf{b} l$, поскольку по определению плотность дислокаций $\rho = \frac{n}{Hl}$.

Задача 3.24

Найти плотность дислокаций ρ в кристалле серебра (структура ГЦК), если деформация сдвига кристалла $\gamma = 10^{-2}$, а средний пробег полных дислокаций $l = 10^{-4}$ см. Параметр решетки серебра $a = 0,409$ нм.

Решение

Для полных дислокаций в кристаллах с ГЦК структурой вектор Бюргера $\mathbf{b} = \frac{1}{2}\{110\}$. Длина вектора $[110]$ в безразмерных координатах есть $\sqrt{(1^2 + 1^2 + 0^2)} = \sqrt{2}$. С учетом коэффициента $\mathbf{b} = \frac{a}{2}\sqrt{2} = \frac{a}{\sqrt{2}} = 0,289$ нм. Согласно (3.22), деформация сдвига $\gamma = \rho \mathbf{b} l$. Тогда плотность дислокаций:

$$\rho = \frac{\gamma}{\mathbf{b}l} = \frac{0,02}{0,289 \cdot 10^{-9} \cdot 10^{-4} \cdot 10^{-2}} \frac{1}{\text{м}^2} = 6,92 \cdot 10^{13} \frac{1}{\text{м}^2} = 6,92 \cdot 10^9 \frac{1}{\text{м}^2}.$$

Задача 3.25

Оценить максимально возможную плотность дислокаций ρ_{\max} в кристалле как такую, когда ядра дислокаций начинают соприкасаться. В этом случае кристаллическая решетка полностью разрушается. Принять радиус ядра дислокации $r_0 \sim 0,5 \cdot 10^{-7}$ см.

Решение

В плоскости, которая перпендикулярна линиям дислокаций, на каждую дислокацию приходится площадь $\sim (2r_0)^2$. Тогда предельное значение ρ_{\max} будет составлять:

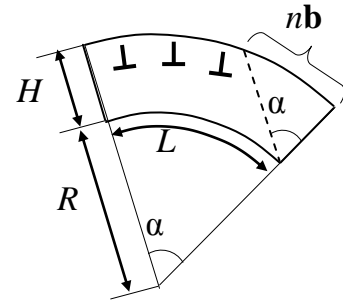
$$\rho_{\max} \approx \frac{1}{(2r_0)^2} \approx 10^{14} \text{ см}^{-2}.$$

Задача 3.26

Найти связь между плотностью краевых дислокаций ρ и радиусом кривизны R изогнутого кристалла (после пластического изгиба).

Решение

На рисунке приведено изображение сечения размером $H \times L$ кристалла, деформированного изгибом. R – радиус изгиба. В результате пластической деформации в кристалл вошло n краевых дислокаций с вектором Бюргерса \mathbf{b} . В соответствии с рисунком, для угла α выполняется соотношение:



$$\alpha = \frac{L}{R} = \frac{n\mathbf{b}}{H}.$$

Отсюда:

$$\frac{1}{R} = \frac{n\mathbf{b}}{HL} = \rho\mathbf{b}.$$

Следовательно,

$$R = \frac{1}{\rho\mathbf{b}}.$$

Задача 3.27

Плотность полных дислокаций в пластически изогнутом кристалле серебра $\rho = 10^8 \text{ см}^{-2}$. Найти радиус кривизны R изогнутого кристалла. Для Ag параметр решетки $a = 0,409 \text{ нм}$.

Решение

Для полных дислокаций в кристалле Ag вектор Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{1}{2}\{110\}$. Длина вектора $[110]$ в безразмерных координатах есть: $\sqrt{(1^2 + 1^2 + 0^2)} = \sqrt{2}$. С учетом коэффициента $\mathbf{b} = \frac{a}{2}\sqrt{2} = \frac{a}{\sqrt{2}} = 0,289 \text{ нм}$. Согласно (3.23), радиус изгиба R пластически изогнутого кристалла обратно пропорционален плотности дислокаций ρ :

$$R = \frac{1}{\rho \mathbf{b}} = \frac{1}{10^8 \cdot 10^4 \cdot 0,289 \cdot 10^{-9}} \text{ м} = 0,0035 \text{ м} = 0,35 \text{ см.}$$

Задача 3.28

Оценить стартовое напряжение σ_{st} для дислокационного источника Франка – Рида в кристалле алюминия, в котором концентрация дислокационных стопоров $n = 3,4 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$. Величина вектора Бюргерса дислокаций $\mathbf{b} = 2,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$. Модуль сдвига $\mu = 2,5 \cdot 10^{10} \text{ Н} \cdot \text{м}^{-2}$.

Решение

Полагаем, что длина источника Франка – Рида равна среднему расстоянию L между дислокациями, которое можно найти, зная концентрацию дислокационных стопоров n :

$$L = \sqrt[3]{\frac{1}{n}} = \sqrt[3]{\frac{1}{3,4 \cdot 10^{18}}} \text{ м} = 6,65 \cdot 10^{-7} \text{ м.}$$

Напряжение старта источника Франка – Рида задается соотношением (3.24):

$$\sigma_{st} = \frac{0,5\mu b}{L} = \frac{0,5 \cdot 2,5 \cdot 10^{10} \cdot 2,5 \cdot 10^{-10}}{6,65 \cdot 10^{-7}} \text{ Н} \cdot \text{м}^{-2} = 4,7 \cdot 10^6 \text{ Н} \cdot \text{м}^{-2}.$$

Задача 3.29

Оценить вакансионное пересыщение P , необходимое для действия источника Бардина – Херинга в кристалле алюминия при температуре $T = 300 \text{ К}$. Длина источника Бардина – Херинга $L = 10^{-8} \text{ м}$. Объем вакансии $V_v = 10^{-29} \text{ м}^3$. Величина вектора Бюргерса дислокаций $\mathbf{b} = 2,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$. Модуль сдвига $\mu = 2,5 \cdot 10^{10} \text{ Н} \cdot \text{м}^{-2}$. Постоянная Больцмана $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1}$.

Решение

Вакансионное пересыщение P , необходимое для действия источника Бардина – Херинга, есть отношение неравновесной концентрации вакансий C к равновесной концентрации C_0 при температуре T :

$$P = \frac{C}{C_0}.$$

Источник Бардина – Хернига будет испускать дислокационные петли при условии, что осмотическая сила f_{osm} больше силы самодействия, которая стремится выпрямить искривленную дислокацию. Соотношение (3.25) определяет критическое значение этой силы. Заменяя знак неравенства знаком равенства в соотношении (3.25), получим:

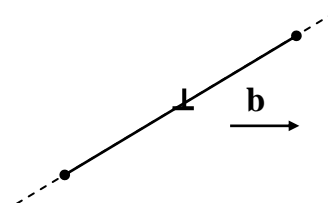
$$\frac{kTb}{V_v} \ln \frac{C}{C_0} = \frac{0,5\mu b^2}{L}.$$

Из этого выражения находим пересыщение P :

$$P = \frac{C}{C_0} = \exp\left(\frac{0,5\mu b V_v}{kTL}\right) = \exp\left(\frac{0,5 \cdot 2,5 \cdot 10^{10} \cdot 2,5 \cdot 10^{-10} \cdot 10^{-29}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300 \cdot 10^{-8}}\right) = \exp(0,8) = 2,2.$$

Задача 3.30

Дан закрепленный в двух точках отрезок краевой дислокации. Какие дислокационные источники могут сформироваться из этого отрезка? Какие для этого необходимы условия?



Решение

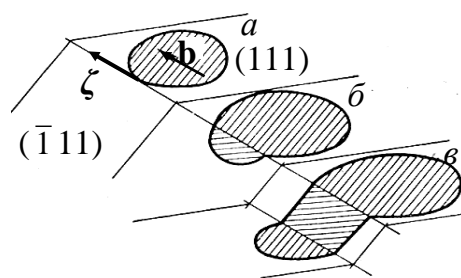
1. Может сформироваться источник Франка – Рида, который испускает скользящие дислокационные петли. Для этого в плоскости скольжения в направлении \mathbf{b} должно действовать касательное напряжение σ_{12} . Под действием этого напряжения возникает сила $f_1 = \mathbf{b}\sigma_{12}$, приводящая к искривлению дислокации (рис. 3.7, б). Напряжение должно превышать напряжение старта источника σ_{st} , задаваемое соотношением (3.24).

2. Может сформироваться источник Бардина – Херинга, испускающий призматические дислокационные петли. Это возможно при пересыщении кристалла вакансиями, когда возникает осмотическая сила f_{osm} , приводящая к искривлению дислокации в плоскости, перпендикулярной плоскости скольжения (см. рис. 3.8, б).

Источник Бардина – Херинга будет испускать петли при условии, что осмотическая сила f_{osm} будет больше силы самодействия f_r , которая стремится выпрямить искривленную дислокацию. Критическое значение осмотической силы f_{osm}^* находится из условия (3.25).

Задача 3.31

Поясните характер движения дислокационной петли, изображенной на рисунке. Считать, что кристалл имеет решетку ГЦК.



Решение

На рисунке (а) дислокационная петля распространяется в плоскости (111). Вблизи линии пересечения плоскостей (111) и $(\bar{1}11)$ участок петли имеет винтовую ориентацию, поскольку вектор касательной ζ и вектор Бюргера \mathbf{b} в этой области параллельны.

На рисунке (б) этот участок дислокационной петли совершает поперечное скольжение. При этом он переходит в плоскость поперечного скольжения $(\bar{1}11)$, которая находится под углом к первоначальной плоскости скольжения (111). Это происходит ввиду того, что винтовая дислокация не имеет фиксированной плоскости скольжения. Она может ее менять в процессе движения при наличии на пути препятствия или в результате изменения направления действия на дислокацию силы.

Рисунок (в) соответствует двойному поперечному скольжению дислокации. При этом участок петли с винтовой ориентацией из плоскости $(\bar{1}11)$ переходит в плоскость, параллельную первоначальной плоскости скольжения (111). В результате поперечного и двойного поперечного скольжения дислокационная петля перестает быть плоской.

3.5. Стандартный тетраэдр Томпсона

Стандартный тетраэдр Томпсона есть специальное геометрическое построение, используемое для представления векторов Бюргера характерных дислокаций в кристаллах со структурой ГЦК. Стандартный тетраэдр Томпсона образован четырьмя плоскостями $\{111\}$. Его вершины совпадают с узлами решетки, в которых находятся четыре соседних атома (рис. 3.9, а). Ребра тетраэдра (рис. 3.9, б) расположены вдоль кристаллографических направлений $\langle 110 \rangle$. По величине и направлению они представляют все возможные векторы Бюргера единичных дислокаций $\frac{a}{2}\langle 110 \rangle$ в ГЦК решетке, а боковые грани – все плоскости скольжения $\{111\}$. Буквами α , β , γ и δ обо-

значены точки центров масс граней, противоположных вершинам A , B , C и D соответственно. Отрезками типа $A\delta$, δC , $B\alpha$ и Da и др., лежащими в плоскостях $\{111\}$, представлены все возможные векторы Бюргерса частичных дислокаций Шокли $\frac{a}{6}\langle 112 \rangle$. Отрезки типа $D\delta$, соединяющие вершину тетраэдра и центр масс противоположной грани, представляют собой все возможные векторы Бюргерса частичных дислокаций Франка $\frac{a}{3}\langle 111 \rangle$.

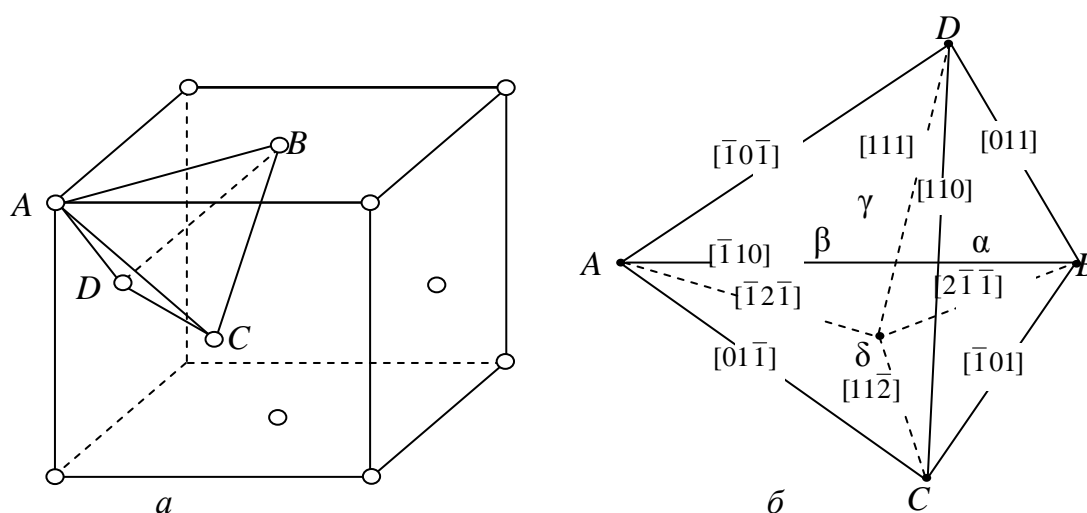


Рис. 3.9. Стандартный тетраэдр Томпсона: a – расположение тетраэдра в элементарной ячейке решетки ГЦК; b – основные элементы стандартного тетраэдра

Задача 3.32

Используя стандартный тетраэдр Томпсона, записать результат реакции расщепления единичной дислокации на две частичные:

$$AC = A\delta + ?$$

По правилу квадратов (по критерию Франка) дать ответ о возможности такого расщепления. Найти численное значение модуля вектора Бюргерса $|\mathbf{b}|$ образующихся дислокаций в алюминии. Параметр решетки $a_0 = 0,405$ (нм). Как называются получившиеся дислокации?

Решение

Основные элементы стандартного тетраэдра показаны на рис. 3.9, б. По правилу сложения векторов находим:

$$AC = A\delta + \delta C.$$

Или соответственно:

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

Ребро тетраэдра AC расположено вдоль кристаллографического направления $[01\bar{1}]$. Поскольку оно представляет вектор Бюргерса единичной дислокации в ГЦК решетке, то $\mathbf{b}_1 = \frac{a}{2}[01\bar{1}]$.

Отрезок $A\delta$, лежащий в плоскости (111) , представляет вектор Бюргерса частичной дислокации Шокли. Следовательно, $\mathbf{b}_2 = \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$. Соответственно отрезок δC , также лежащий в плоскости (111) , представляет собой вектор Бюргерса частичной дислокации Шокли, для которой $\mathbf{b}_3 = \frac{a}{6}[11\bar{2}]$.

Эта реакция происходит в плоскости (111) :

$$\frac{a}{2}[01\bar{1}] = \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}] + \frac{a}{6}[11\bar{2}].$$

Находим модули векторов Бюргерса дислокаций, участвующих в реакции:

$$|\mathbf{b}_1| = \sqrt{0 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2} = \frac{a\sqrt{2}}{2} = 0,286 \text{ нм};$$

$$|\mathbf{b}_2| = \sqrt{\left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{2a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{6}}{6} = 0,165 \text{ нм};$$

$$|\mathbf{b}_3| = \sqrt{\left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{2a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{6}}{6} = 0,165 \text{ нм}.$$

Проверка по критерию Франка показывает, что такая реакция диссоциации возможна, поскольку $\mathbf{b}_1^2 > \mathbf{b}_2^2 + \mathbf{b}_3^2$:

$$\left(\frac{a\sqrt{2}}{2}\right)^2 > \left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2 + \left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2.$$

Или $\frac{a^2}{2} > \frac{a^2}{3}$.

Задача 3.33

Используя стандартный тетраэдр Томпсона, записать результат реакции объединения дислокации Франка и дислокации Шокли:

$$D\delta + \delta C = ?$$

По правилу квадратов (по критерию Франка) дать ответ о возможности такого объединения. Найти численное значение модуля вектора Бюргера $|\mathbf{b}|$ образующейся дислокации в алюминии. Параметр решетки $a_0 = 0,405$ (нм). Как называется получившаяся дислокация?

Решение

Основные элементы стандартного тетраэдра показаны на рис. 3.9, б. По правилу сложения векторов находим:

$$D\delta + \delta C = CD,$$

что соответствует:

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

Отрезок $D\delta$, соединяющий вершину тетраэдра D и центр масс противоположной грани δ , представляет собой вектор Бюргера частичной дислокации Франка $\mathbf{b}_1 = \frac{a}{3}[111]$. Отрезок δC , лежащий в плоскости (111), представляет собой вектор Бюргера частичной дислокации Шокли $\mathbf{b}_2 = \frac{a}{6}[11\bar{2}]$. Ребро тетраэдра CD расположено вдоль кристаллографического направления $[110]$ и представляет собой вектор Бюргера единичной дислокации $\mathbf{b}_3 = \frac{a}{2}[110]$.

Реакция объединения записывается так:

$$\frac{a}{3}[111] + \frac{a}{6}[11\bar{2}] = \frac{a}{2}[110].$$

Находим модули векторов Бюргера дислокаций, участвующих в реакции:

$$|\mathbf{b}_1| = \sqrt{\left(\frac{a}{3}\right)^2 + \left(\frac{a}{3}\right)^2 + \left(\frac{a}{3}\right)^2} = \frac{a\sqrt{3}}{3} = 0,234 \text{ нм};$$

$$|\mathbf{b}_2| = \sqrt{\left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{2a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{6}}{6} = 0,165 \text{ нм};$$

$$|\mathbf{b}_3| = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 + 0} = \frac{a\sqrt{2}}{2} = 0,286 \text{ нм}.$$

По критерию Франка дать ответ о возможности реакции диссоциации нельзя, поскольку $\mathbf{b}_1^2 = \mathbf{b}_2^2 + \mathbf{b}_3^2$:

$$\left(\frac{a\sqrt{3}}{3}\right)^2 = \left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2 + \left(\frac{a\sqrt{2}}{2}\right)^2.$$

Или $\frac{a^2}{2} = \frac{a^2}{2}$.

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

Задача 3.34

Используя стандартный тетраэдр Томпсона, записать результат реакции объединения единичной дислокации и дислокации Шокли:

$$DA + A\delta = ?$$

По правилу квадратов (по критерию Франка) дать ответ о возможности такого объединения. Найти численное значение модуля вектора Бюргерса $|\mathbf{b}|$ образующейся дислокаций в алюминии. Параметр решетки $a_0 = 0,405$ (нм). Как называется получившаяся дислокация?

Решение

Основные элементы стандартного тетраэдра показаны на рис. 3.9, б. По правилу сложения векторов находим:

$$DA + A\delta = \delta D,$$

что соответствует

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

Ребро тетраэдра DA расположено вдоль кристаллографического направления $[101]$ и представляет собой вектор Бюргерса единичной дислокации $\mathbf{b}_1 = \frac{a}{2}[101]$. Отрезок $A\delta$, соединяющий вершину тетраэдра A и центр масс грани δ , представляет собой вектор Бюргерса частичной дислокации Шокли $\mathbf{b}_2 = \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$. Отрезок δD , соединяющий центр масс грани δ и вершину тетраэдра D , представляет собой вектор Бюргерса частичной дислокации Франка $\mathbf{b}_3 = \frac{a}{3}[111]$. Реакция объединения записывается так:

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

Находим модули векторов Бюргера дислокаций, участвующих в реакции:

$$|\mathbf{b}_1| = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + 0 + \left(\frac{a}{2}\right)^2} = \frac{a\sqrt{2}}{2} = 0,286 \text{ нм};$$

$$|\mathbf{b}_2| = \sqrt{\left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{2a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{6}}{6} = 0,165 \text{ нм};$$

$$|\mathbf{b}_3| = \sqrt{\left(\frac{a}{3}\right)^2 + \left(\frac{a}{3}\right)^2 + \left(\frac{a}{3}\right)^2} = \frac{a\sqrt{3}}{3} = 0,234 \text{ нм}.$$

Проверка по критерию Франка показывает, что такая реакция объединения возможна, поскольку $\mathbf{b}_1^2 + \mathbf{b}_2^2 > \mathbf{b}_3^2$:

$$\left(\frac{a\sqrt{2}}{2}\right)^2 + \left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2 > \left(\frac{a\sqrt{3}}{3}\right)^2.$$

Или $\frac{2a^2}{3} > \frac{a^2}{3}$, что соответствует удвоенному снижению энергии дислокаций.

Задача 3.35

Используя обозначения стандартного тетраэдра Томпсона (рис. 3.9, б), записать результат реакции встречи двух частичных дислокаций Шокли:

$$\frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}] - \frac{a}{6}[\bar{2}1\bar{1}] = ?$$

По правилу квадратов (по критерию Франка) дать ответ о возможности такой реакции. Как называется получившаяся дислокация?

Решение

По правилу сложения векторов находим:

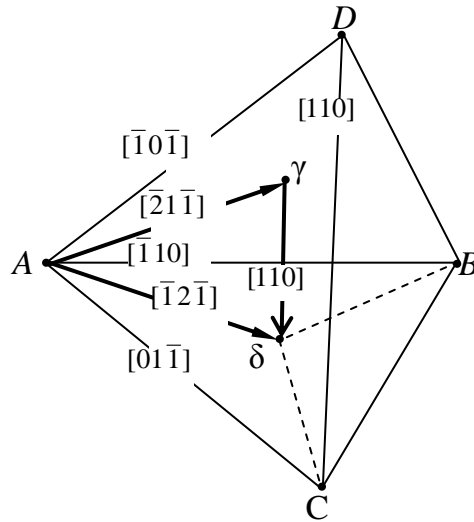
$$\frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}] - \frac{a}{6}[\bar{2}1\bar{1}] = \frac{a}{6}[110],$$

что соответствует

$$\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_3.$$

Элементы стандартного тетраэдра, относящиеся к данной задаче, показаны на рисунке. Вектору $\mathbf{b}_1 = \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}]$ соответствует отрезок $A\delta$, лежа-

ший в плоскости ABC. Вектору $\mathbf{b}_2 = \frac{a}{6}[\bar{2}1\bar{1}]$ соответствует отрезок $A\gamma$, лежащий в плоскости ADB. Вектору $\mathbf{b}_3 = \frac{a}{6}[110]$ (результату реакции) соответствует отрезок $\gamma\delta$, проведенный из центра масс треугольника ADB (точка γ) в центр масс треугольника ABC (точка δ).



Поэтому результат реакции встречи двух частичных дислокаций Шокли записывается так:

$$A\delta - A\gamma = \gamma\delta.$$

Для ответа на вопрос о возможности такой реакции находим модули векторов Бюргерса дислокаций:

$$|\mathbf{b}_1| = \sqrt{\left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{2a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{6}}{6};$$

$$|\mathbf{b}_2| = \sqrt{\left(\frac{2a}{6}\right)^2 + \left(\frac{1a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2} = \frac{a\sqrt{6}}{6};$$

$$|\mathbf{b}_3| = \sqrt{\left(\frac{a}{6}\right)^2 + \left(\frac{a}{6}\right)^2 + 0} = \frac{a\sqrt{2}}{6}.$$

Проверка по критерию Франка показывает, что такая реакция дает большой выигрыш в энергии, поскольку $\mathbf{b}_1^2 + \mathbf{b}_2^2 > \mathbf{b}_3^2$:

$$\left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2 + \left(\frac{a\sqrt{6}}{6}\right)^2 > \left(\frac{a\sqrt{2}}{6}\right)^2.$$

Или $\frac{a^2}{3} \frac{a^2}{18}$. Дислокация с вектором Бюргерса $\mathbf{b}_3 = \frac{a}{6} [110]$, образовавшаяся в результате реакции двух частичных дислокаций Шокли, также частичная. Дислокации типа $\frac{a}{6} \langle 110 \rangle$ называют вершинными.

3.6. Атмосфера Коттрелла

Атом примеси со стороны краевой дислокации испытывает силу притяжения, в основном обусловленную взаимодействием полей напряжений. Примесные атомы внедрения притягиваются к области гидростатического растяжения и размещаются под краем экстраплоскости. Атомы элемента, растворенного по способу замещения, также притягиваются к области гидростатического растяжения в том случае, если их размер больше размера атомов основного металла. В противном случае они притягиваются к области гидростатического сжатия и размещаются над краем экстраплоскости.

Притяжение атомов примесей приводит к их “осаждению” в виде цепочки атомов вдоль края экстраплоскости. Цепочка атомов примеси, осажденная вдоль края экстраплоскости дислокации, называется *атмосферой Коттрелла*.

При температуре T в условиях термодинамического равновесия концентрация примесных атомов C_E около дислокации равна:

$$C_E = C_0 e^{\frac{E}{kT}}, \quad (3.26)$$

где E – энергия связи примесного атома; C_0 – средняя концентрация примеси в металле. С повышением температуры атмосфера Коттрелла рассасывается. При понижении температуры концентрация примеси возле дислокации возрастает, и по достижении предела растворимости вблизи ядра дислокации могут образовываться дисперсные выделения второй фазы.

Температура T_H , ниже которой коттрелловская атмосфера становится насыщенной, определяется выражением:

$$T_H = \frac{E_{\max}}{k \ln \frac{1}{C_0}}, \quad (3.27)$$

где E_{\max} – максимальная энергия связи примесного атома и дислокации (вблизи ее ядра).

Чем больше плотность дислокаций ρ , тем больше требуется атомов примеси, чтобы образовать насыщенные атмосферы. Концентрация примесных атомов C_{imp} , расположенных в виде непрерывных одноатомных цепочек вдоль линии дислокации:

$$C_{imp} = \rho a^2, \quad (3.28)$$

где a есть межатомное расстояние.

Задача 3.36

Оценить температуру T_H , ниже которой коттрелловская атмосфера атомов Zn в α – латуни становится насыщенной. Средняя концентрация примеси в металле $C_0 = 4\%$. Максимальная энергия связи атома Zn с ядром дислокации $E_{max} = 0,1$ эВ.

Решение

Концентрацию примесных атомов $C_{E_{max}}$ при температуре T в атмосфере Коттрелла в положениях, характеризующихся максимальной энергией связи с ядром краевой дислокации E_{max} , находим согласно формуле (3.27):

$$C_{E_{max}} = C_0 e^{\frac{E_{max}}{kT}}.$$

Из этого выражения следует, что при понижении T концентрация $C_{E_{max}}$ возрастает, и при температуре ниже T_H атмосфера становится насыщенной (конденсированной). Этому соответствует условие $C_{E_{max}} \sim 1$.

Подставив в формулу значение $C_{E_{max}} = 1$, получим выражение для температуры T_H , ниже которой коттрелловская атмосфера становится насыщенной:

$$1 = C_0 e^{\frac{E_{max}}{kT_H}};$$

$$\ln \frac{1}{C_0} = \frac{E_{max}}{kT_H};$$

$$T_H = \frac{E_{max}}{k \ln \frac{1}{C_0}}.$$

В полученное выражение подставим значения $C_0 = 4\% = 0,04$; $E_{max} = 0,1$ эВ $= 0,16 \cdot 10^{-19}$ Дж; $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж·К⁻¹:

$$T_H = \frac{E_{\max}}{k \ln \frac{1}{C_0}} = \frac{0,16 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot \ln \frac{1}{0,01}} \text{ К} \approx 360 \text{ К.}$$

Следовательно, при комнатной температуре Коттрелловская атмосфера атомов цинка вокруг дислокации является насыщенной.

Задача 3.37

В отожженном металле плотность дислокаций $\rho_1 \approx 10^8 \text{ см}^{-2}$, а в наклепанном металле плотность дислокаций $\rho_2 \approx 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Во сколько раз в наклепанном металле концентрация примесных атомов C_{2imp} , необходимая для образования насыщенной атмосферы Коттрелла, больше концентрации примесных атомов C_{1imp} в отожженном металле?

Решение

При наличии насыщенной атмосферы Коттрелла концентрация примесных атомов C_{imp} , расположенных в виде непрерывных одноатомных цепочек вдоль линии дислокации, задается формулой (3.28). Пренебрегая изменением межатомного расстояния a при деформации металла, получим:

$$\frac{C_{2imp}}{C_{1imp}} = \frac{\rho_2 a^2}{\rho_1 a^2} = \frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{10^{11}}{10^8} = 1000.$$

4. Плоские дефекты

4.1. Границы двойников

Плоские дефекты, в частности границы двойниковых прослоек, малы только в одном измерении. Они возникают при двойниковании – симметричной переориентации областей кристаллической решетки. В случае механического двойникования под действием силы одна часть кристалла перестраивается в зеркально-симметричное положение относительно другой части.

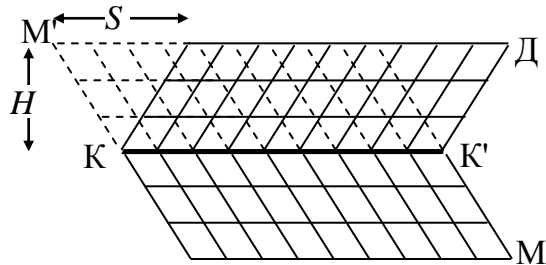


Рис. 4.1. Схема совершенного двойника

На рис. 4.1 исходный кристалл обозначен как М-М', а двойник М-Д. Решетка внутри двойниковой прослойки является зеркальным отображением решетки остальной части кристалла. Плоскость зеркального отражения К-К' называется плоскостью двойникования.

Величина деформации, которая осуществляется при двойниковании, определяется удельным кристаллографическим сдвигом S_y :

$$S_y = \frac{S}{H}, \quad (4.1)$$

где S и H есть величина сдвига и толщина двойниковой области соответственно (рис. 4.1).

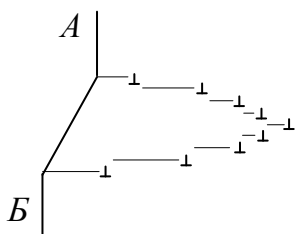


Рис. 4.2. Схема дислокационной модели двойниковой ламели, пересекающей поверхность АБ

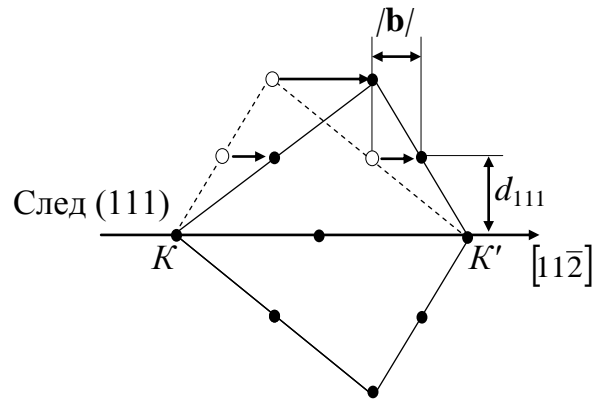
При деформировании кристалла двойникованием сдвойникованные области имеют форму пластин, параллельных плоскости двойникования КК'. Начальной стадией двойникования является образование упругих двойниковых прослоек клиновидной формы – ламелей (рис. 4.2). Соответствующая модель для ГЦК двойника состоит из частичных двойниующих дислокаций с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{a}{6}[11\bar{2}]$, лежащих в каждой плоскости (111). Поверхность раздела между двойником и матрицей не содержит дислокаций, когда она параллельна плоскости двойникования. В этом случае она называется когерентной двойниковой границей.

Задача 4.1

Определить удельный кристаллографический сдвиг при образовании двойника в кристалле с решеткой ГЦК, параметр которой равен a . Считать, что двойник формируется при перемещении двойниующих дислокаций с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{a}{6}[11\bar{2}]$ в кристаллографической плоскости двойникования (111).

Решение

На рисунке показана схема образования двойника в результате сдвига. Плоскость рисунка соответствует плоскости $(1\bar{1}0)$ кристалла. Штриховыми линиями показаны детали структуры над плоскостью двойникования $K-K'$. Перемещение в плоскости (111) двойнивающей дислокации



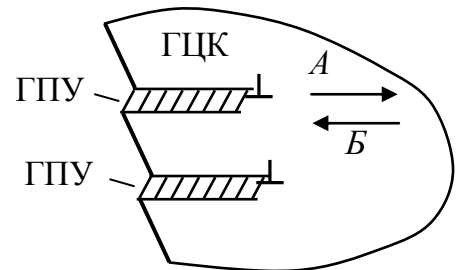
с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{a}{6}[11\bar{2}]$ приводит к сдвигу верхней части исходного кристалла на величину $S = |\mathbf{b}|$. Это приводит к образованию дефекта упаковки, залегающего в плоскости (111) . Двойник формируется при таком же (относительно предыдущего слоя) смещении в каждом последующем слое (111) за счет прохождения двойнивающих дислокаций.

Для нахождения удельного кристаллографического сдвига S_y в соотношении (4.1) следует величину сдвига S положить равной модулю вектора Бюргерса двойнивающей дислокации b , а высоту ступеньки H считать равной межплоскостному расстоянию d_{111} :

$$S_y = \frac{S}{H} = \frac{b}{d_{111}} = \frac{\frac{a}{\sqrt{6}}}{\frac{a}{\sqrt{3}}} = \frac{1}{\sqrt{2}} = 0,707.$$

Задача 4.2

Дан кристалл кобальта, который может существовать в двух модификациях: высокотемпературной – ГЦК, и низкотемпературной – ГПУ. Сперва кристалл находился при температуре, при которой стабильной является гексагональная модификация Co . После охлаждения ниже 400°C в неравновесной кубической модификации возникли дефекты упаковки, окаймленные частичными дислокациями Шокли. Записать аналитическое выражение для термодинамических сил, действующих на дислокации. В



каком направлении (в направлении А или Б) будут перемещаться дислокации Шокли?

Решение

Полиморфное превращение ГЦК → ГПУ при охлаждении Со происходит не диффузионным путем. Оно осуществляется при движении вглубь образца двойникующих частичных дислокаций Шокли с вектором Бюргера $\mathbf{b} = \frac{a}{6}\langle 112 \rangle$. При прохождении каждой дислокации формируется дефект упаковки (заштрихованная область на рисунке), который является двойниковой прослойкой, толщиной d в один монослой атомов. Образуется слой решетки ГПУ в кристалле с решеткой ГЦК. Увеличение объема дефектов приводит к увеличению объема равновесной фазы. Таким образом, полиморфное превращение осуществляется путем зарождения и разрастания дефектов упаковки.

Превращение происходит в некотором температурном интервале и сопровождается выигрышем энергии. На дислокацию Шокли действует термодинамическая сила f_{td} :

$$f_{td} = \Delta U \cdot d \cdot \left(\frac{T - T_0}{T_0} \right),$$

где T_0 – температура полиморфного превращения; T – температура, при которой развивается полиморфное превращение.

Термодинамическая сила f_{td} всегда направлена так, чтобы содействовать увеличению равновесной фазы. Следовательно, дислокации Шокли будут перемещаться в направлении, отмеченном стрелкой А.

4.2. Трещины

Трещина – нарушение сплошности твердого тела, локализованное вдоль некоторой поверхности. Это плоский дефект, молекулярные связи между берегами которого разорваны. При механическом нагружении тела напряжения концентрируются в вершине трещины. Неконтролируемое развитие трещины в теле, находящемся под нагрузкой, приводит к его разрушению.

На основе теории, развитой А. Гриффитсом, выведена формула, устанавливающая связь между разрушающим напряжением σ (хрупкой прочностью) и длиной трещины l :

$$\sigma = \sqrt{\frac{8\gamma E}{\pi l}}, \quad (4.2)$$

где γ – удельная поверхностная энергия, а E – модуль Юнга. Формула (4.2) дает возможность установить при данном уровне σ критический размер трещины l_c , вызывающей разрушение тела. Соотношение (4.2) находится в хорошем согласии с экспериментальными данными для хрупких тел, таких как стекло.

Для металлов оценка l_c по формуле (4.2) дает заниженное значение, поскольку вблизи излома имеет место пластическая деформация. По предложению Дж. Р. Ирвина и Е. Орована удельная поверхностная энергия 2γ была заменена вязкостью разрушения G :

$$G = \frac{\pi l \sigma^2}{E}. \quad (4.3)$$

Вязкость разрушения G , как и удельная поверхностная энергия γ , имеет размерность $\text{Н}\cdot\text{м}^{-1}$. G определяет сопротивление материала распространению трещины и характеризует усилие, необходимое для продвижения трещины на единицу длины.

При данной длине трещины значение критического напряжения σ_c , вызывающего разрушение, определяется соотношением:

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{G_c E}{\pi l_c}}, \quad (4.4)$$

где G_c – критическое значение вязкости разрушения для данного материала и условий нагружения.

Значение нормального напряжения в устье трещины характеризуется (по Дж. Р. Ирвину) коэффициентом интенсивности напряжения K :

$$K = \sigma \sqrt{\pi l}, \quad (4.5)$$

который имеет размерность $\text{Па}\cdot\text{м}^{1/2}$. Он является условной величиной, не совпадающей с напряжением, возникающим у края трещины. Для плоско-напряженного состояния:

$$K^2 = EG. \quad (4.6)$$

Для объемно напряженного состояния:

$$K_1^2 = \frac{EG}{1-\nu}. \quad (4.7)$$

Критические значения коэффициентов интенсивности напряжения обозначают как K_c и K_{1c} .

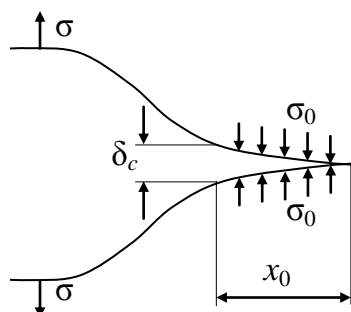


Рис. 4.3. Схема устья трещины:
 σ – приложенное напряжение;
 σ_0 – предел хрупкой прочности;
 δ_c – критическое раскрытие трещины

Схема тупиковой части трещины показана на рис. 4.3. Вблизи устья трещины находится зона предразрушения, в которой материал деформирован пластически. Ширина зоны x_0 . В этой области напряжение σ_0 обеспечивает притяжение друг к другу противоположных берегов трещины. Критерием, характеризующим сопротивление материалов распространению трещины, является «критическое раскрытие трещины» (КРТ). На рис. 4.3 величина КРТ обозначена как δ_c . Если раскрытие трещины $\delta < \delta_c$, то трещина устойчива. В противном случае под влиянием приложенного напряжения σ трещина развивается. Условию равновесия тела с трещиной соответствует соотношение

$$G_c = \sigma_0 \delta_c. \quad (4.8)$$

Через КРТ-критерий критическое напряжение σ_c , вызывающее разрушение тела, записывается как:

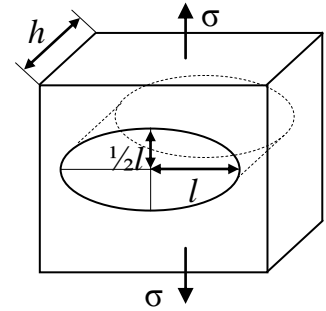
$$\sigma_c = \sqrt{\frac{\sigma_0 E \delta_c}{\pi l_c}}. \quad (4.9)$$

При подсчете σ_c по КРТ-критерию (4.9) принимается, что $\sigma_0 = \sigma_{0,2}$. Предел текучести условный $\sigma_{0,2}$ – напряжение, при котором остаточное удлинение достигает 0,2 % начальной длины образца. Он достаточно точно отражает переход от упругих деформаций к пластическим.

Величины δ_c , K_c и K_{1c} являются параметрами трещиностойкости. Чем они выше, тем меньше опасность хрупкого разрушения конструкционных материалов.

Задача 4.3

Найти размер l сквозной эллиптической трещины в деформируемой растяжением пластине (рисунок), когда приращение поверхностной энергии W'' (за счет трещины) полностью компенсируется уменьшением объемной энергии W' .



Решение

При образовании трещины упругая энергия деформированного тела уменьшается пропорционально объему трещины. Объем V_t трещины в виде цилиндра, в основании которого эллипс, равен произведению площади основания (площади эллипса) $\frac{\pi l^2}{2}$ на толщину пластины h :

$$V_t = \frac{\pi l^2}{2} \cdot h.$$

При осевом напряжении σ в единице объема возникает упругая энергия $\rho_w = \frac{\sigma^2}{2E}$. Следовательно, при образовании трещины, объем которой V_t , упругая энергия тела уменьшается на величину $W' = W \cdot V_t$:

$$W' = \frac{\sigma^2}{2E} \cdot \frac{\pi l^2 h}{2} = \frac{\pi \sigma^2 l^2 h}{4E}.$$

При возникновении трещины в теле образуется новая поверхность, площадь которой S равна произведению длины периметра трещины на толщину пластины h :

$$S = 4lh,$$

где $4l$ – длина периметра эллипса. Величина поверхностной энергии при этом прирастает на величину W'' :

$$W'' = 4lh\gamma,$$

где γ – удельная поверхностная энергия тела.

По условию задачи при возникновении трещины приращение поверхностной энергии W'' полностью компенсируется уменьшением объемной энергии W' :

$$4lh = \frac{\pi \sigma^2 l^2 h}{4E}.$$

Откуда следует, что $l = \frac{16\gamma E}{\pi\sigma^2}$.

Задача 4.4

Найти критическую длину l_c сквозной эллиптической трещины в деформируемой растяжением пластине (рисунок к задаче 4.3) как длину, которая соответствует максимуму изменения внутренней энергии ΔW от длины трещины l . Считать, что изменение внутренней энергии тела ΔW при образовании в нем трещины определяется разностью приращения поверхностной энергии W'' и объемной энергии W' .

Решение

При возникновении трещины в теле образуется новая поверхность, площадь которой S равна произведению длины периметра трещины на толщину пластины h :

$$S = 4lh,$$

где $4l$ – длина периметра эллипса. Величина поверхностной энергии при этом прирастает на величину W'' :

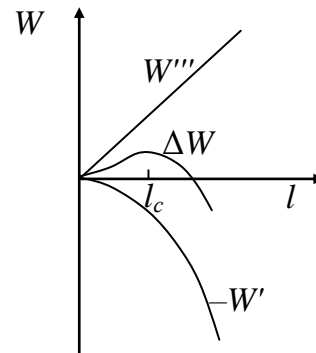
$$W'' = 4lh\gamma,$$

где γ – удельная поверхностная энергия тела. На рисунке отображена линейная зависимость W'' от l (прямая W'').

С другой стороны, при образовании трещины упругая энергия деформированного тела уменьшается пропорционально объему трещины V_t . Объем трещины в виде цилиндра, в основании которого эллипс, равен произведению площади основания (площади эллипса) $\frac{\pi l^2}{2}$ на толщину пластины h :

$$V_t = \frac{\pi l^2}{2} \cdot h.$$

При осевом напряжении σ в единице объема возникает упругая энергия $\rho_w = \frac{\sigma^2}{2E}$. Следовательно, при образовании трещины, объем которой V_t , упругая энергия тела уменьшается на величину $W' = W \cdot V_t$:



$$W' = \frac{\sigma^2}{2E} \cdot \frac{\pi l^2 h}{2} = \frac{\pi \sigma^2 l^2 h}{4E}.$$

На рисунке отображена зависимость W' от l (парабола $-W'$).

Изменение внутренней энергии тела ΔW при образовании в нем трещины определяется разностью W'' и W' :

$$\Delta W = W'' - W' = 4lh - \frac{\pi \sigma^2 l^2 h}{4E}.$$

Результирующая зависимость изменения внутренней энергии тела при образовании в нем трещины от размера трещины показана на рисунке (кривая с максимумом ΔW).

Точке максимума на кривой ΔW соответствует критический размер трещины l_c . Величина l_c находится из условия $\left(\frac{\partial \Delta W}{\partial l}\right)_{l=l_c} = 0$:

$$4 - \frac{\pi \sigma^2 l_c}{2E} = 0.$$

Откуда следует, что $l_c = \frac{8\gamma E}{\pi \sigma^2}$.

Если в теле образовалась трещина, размер которой $l > l_c$, то при дальнейшем увеличении l уменьшение упругой энергии W' начинает превалировать над возрастанием поверхностной энергии W'' . В этом случае увеличение длины трещины сопровождается уменьшением общей энергии тела, что делает процесс развития трещины выгодным с термодинамической точки зрения.

Задача 4.5

Оценить критический размер трещины l_c для стальной конструкции, находящейся под напряжением $\sigma = 1000$ (МПа). Использовать следующие величины: модуль Юнга $E = 2,1$ (ГПа), коэффициент поверхностного натяжения $\gamma = 2 \cdot 10^4$ (н·м⁻¹) и вязкость разрушения $G_c = 10^7$ (н·м⁻¹).

Дать оценку:

- а) по теории Гриффита для хрупкого разрушения;*
 - б) по теории Гриффита – Ирвина с учетом вязкости разрушения.*
- Пояснить причину различия полученных результатов.*

Решение

а) Критический размер трещины l_c по теории Гриффита для хрупкого разрушения задается соотношением (4.2):

$$\sigma = \sqrt{\frac{8\gamma E}{\pi l_c}}.$$

Откуда следует, что $l_c = \frac{8\gamma E}{\pi \sigma^2} = \frac{8 \cdot 2 \cdot 10^4 \cdot 2,1 \cdot 10^9}{3,14 \cdot (1000 \cdot 10^6)^2} \approx 0,11$ мм.

б) Критический размер трещины l_c по теории Гриффита – Ирвина с учетом вязкости разрушения задается соотношением (4.4):

$$\sigma = \sqrt{\frac{G_c E}{\pi l_c}}.$$

Откуда следует, что $l_c = \frac{G_c E}{\pi \sigma^2} = \frac{10^7 \cdot 2,1 \cdot 10^9}{3,14 \cdot (1000 \cdot 10^6)^2} \approx 6,69$ мм.

Заниженное значение l_c , вычисленное по теории Гриффита, обусловлено тем, что теория не учитывает пластическую деформацию металла в окрестности излома образца.

Задача 4.6

Дать численную оценку критического значения вязкости разрушения G_{1c} стали в условиях объемнонапряженного состояния. Критическое значение коэффициента интенсивности напряжения $K_{1c} = 140$ МПа·м^{1/2}. Модуль Юнга $E = 210 \cdot 10^3$ МПа. Коэффициент Пуассона $\nu = 0,3$.

Решение

Критическое значение вязкости разрушения G_{1c} в условиях объемнонапряженного состояния задается соотношением (4.7):

$$K_{1c}^2 = \frac{EG_{1c}}{1-\nu}.$$

Откуда следует, что $G_{1c} = \frac{K_{1c}^2 (1-\nu)}{E} = \frac{(140 \cdot 10^6)^2 \cdot (1-0,3)}{210 \cdot 10^3 \cdot 10^6} \approx 65,3$ КПа·м.

Задача 4.7

Определить критическое раскрытие трещины δ_c в случае объемнонапряженного состояния тела. Предел текучести материала $\sigma_{0,2} = 700$ МПа.

Критическое значение вязкости разрушения $G_{1c} \sim 0,3 \text{ МПа}\cdot\text{м}$.

Решение

Критическое раскрытие трещины δ_c в случае объемно напряженного состояния тела задается соотношением (4.8), где $\sigma_0 = \sigma_{0,2}$:

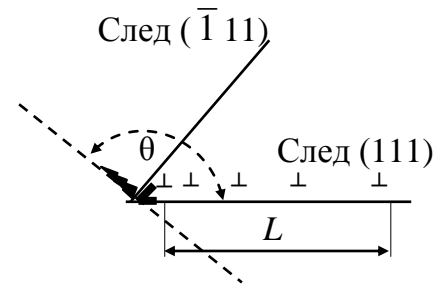
$$G_{1c} = \sigma_{0,2} \delta_c.$$

Откуда следует, что $\delta_c = \frac{G_{1c}}{\sigma_{0,2}} = \frac{0,3 \cdot 10^6}{700 \cdot 10^6} \approx 0,43 \text{ мм}$.

Задача 4.8

Дать оценку числу дислокаций n , скольжение которых приостановлено барьером Ломера – Коттрелла (рисунок).

Вектор Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{a_0}{2} \{110\}$. Длина скопления дислокаций $L = 10 \text{ (нм)}$. Модуль сдвига для алюминия $\mu = 0,25 \text{ (ГПа)}$. Параметр решетки $a_0 = 0,405 \text{ (нм)}$. Конструкция находится под напряжением $\sigma = 700 \text{ (МПа)}$. Под каким углом θ к плоскости скольжения дислокаций расположена плоскость, в которой может сформироваться трещина?



Решение

В головной части заторможенного дислокационного скопления напряжение возрастает пропорционально числу дислокаций n . Максимального значения нормальное напряжение достигает в плоскости, которая образует с плоскостью скольжения (111) угол $\theta \approx 110^\circ$. Следовательно, трещина может сформироваться под углом $\sim 110^\circ$ к плоскости скольжения дислокаций.

Скопление образовано дислокациями, для которых модуль вектора Бюргерса $|\mathbf{b}| = \sqrt{\left(\frac{a_0}{2}\right)^2 + \left(\frac{a_0}{2}\right)^2} = \frac{a_0 \sqrt{2}}{2} = 0,286 \text{ нм}$. Зная вектор Бюргерса дислокаций, определим их число n в скоплении:

$$n = \frac{2L\sigma}{\mu b} = \frac{2 \cdot 10 \cdot 10^{-9} \cdot 700 \cdot 10^6}{0,25 \cdot 10^9 \cdot 0,286 \cdot 10^{-9}} \approx 196.$$

Список литературы

1. Косевич А.М. Дислокации в теории упругости / А.М. Косевич. – К. : Наукова думка, 1978.
2. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов / И.И. Новиков. – М. : Металлургия, 1975.
3. Новиков Н.Н. Структура и структурно-чувствительные свойства реальных кристаллов / Н.Н. Новиков. – К. : Выща школа, 1983.
4. Келли А. Кристаллография и дефекты в кристаллах / А. Келли, Г. Гровс. – М. : Мир, 1974.
5. Дяченко С.С. Фізичні основи міцності та пластичності металів / С.С. Дяченко. – Х. : ХНАДУ, 2004.
6. Дьяченко С.С. Физические основы прочности металлов / С.С. Дьяченко, В.Б. Рабухин. – Х. : Выща школа, 1982.
7. Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах / М. Томпсон. – М. : Мир, 1971.
8. Шаскольская М.П. Кристаллография / М.П. Шаскольская. – М. : Высшая школа, 1976.
9. Чередниченко В.С. Материаловедение. Технология конструкционных материалов / В.С. Чередниченко. – М. : Омега-Л, 2006.
10. Черняков Е.І. Фізика твердого тіла / Е.І. Черняков, О.С. Замковий, Г.Г. Канарик. – Х. : Колегіум, 2006.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	3
1. Элементы кристаллографии.....	5
2. Точечные дефекты.....	9
3. Линейные дефекты – дислокации.....	15
3.1. Контур и вектор Бюргерса.....	15
3.2. Дислокационные границы.....	21
3.3. Напряжения и силы, действующие на дислокацию.....	25
3.4. Образование дислокаций в кристаллах.....	41
3.5. Стандартный тетраэдр Томпсона.....	49
3.6. Атмосфера Коттрелла.....	56
4. Плоские дефекты.....	58
4.1. Границы двойников.....	58
4.2. Трещины.....	61
Список литературы.....	69

Навчальне видання

БАГМУТ Олександр Григорович

КОСЕВИЧ Вадим Маркович

НЕДОСКОНАЛОСТІ КРИСТАЛІЧНИХ РЕШІТОК

Збірник задач з докладним розв'язанням

Російською мовою

Роботу до виконання рекомендувала К.Т. Лемешевська

Редактор Л.А. Пустовойтова

План 2014 р., поз. 181

Підп.до друку 2014 р. Формат 60x84 1/16. Папір офсетний.
Riso-друк. Гарнітура Таймс. Ум. друк. арк.
Наклад 100 прим. Зам. № Ціна договірна

Видавничий центр НТУ «ХПІ». 61002, Харків, вул Фрунзе, 21
Свідоцтво про державну реєстрацію ДК № 3657 від 24.12.2009 р.

Друкарня НТУ «ХПІ». 61002, Харків, вул Фрунзе, 21