

Сопротивление сдвигу в монокристаллах	692
Скольжение (673).	
Дислокации	695
Вектор Бюргера (698). Поля напряжений, связанные с дислокациями (699). Границы зерен с малым углом разориентировки (701). Плотность дислокаций (704). Размножение дислокаций и скольжение (709).	
Прочность сплавов	709
Дислокации и рост кристаллов	712
Усы (715).	
Задачи	716
Литература	790

Настоящая глава посвящена главным образом интерпретации пластических свойств кристаллических твердых тел на основе представлений теории дислокаций. Пластические свойства — текучесть и скольжение — связаны с необратимой (пластической) деформацией, а упругие свойства — с обратимой (упругой) деформацией. Ниже мы увидим, что дислокации играют определенную роль в процессах роста кристаллов.

Легкость, с которой чистые монокристаллы многих твердых тел пластически деформируются, просто поразительна. Эта характерная «податливость» кристаллов проявляется весьма различным образом.

Чистое хлористое серебро плавится при 455 °С, но и при комнатной температуре оно чрезвычайно пластично, и из него можно прокатать пластинку. Чистые кристаллы алюминия сохраняют упругость (т. е. подчиняются закону Гука) лишь до деформации порядка 10^{-5} , а затем при увеличении нагрузки пластически деформируются. Теоретические оценки предела упругости идеальных кристаллов часто приводят к значениям, в 10^3 — 10^4 раз превышающим наблюдаемые на опыте; впрочем, чаще это расхождение оказывается порядка 10^2 . Можно считать правилом, что чистые кристаллы обладают высокой пластичностью и низкой прочностью, хотя это правило имеет исключения¹⁾.

¹⁾ Эти исключения действительно существуют. Например, кристаллы особо чистых германия и кремния при комнатной температуре не обладают пластичностью и дают типичную картину хрупкого разрушения. Стекло при комнатной температуре тоже хрупко, но оно не является кристаллическим телом. Принято считать, что хрупкость стекла обусловлена концентрацией напряжений на микротрещинах, как было предположено Гриффитом [1].

СОПРОТИВЛЕНИЕ СДВИГУ В МОНОКРИСТАЛЛАХ

Френкель [2] дал простой метод оценки теоретического значения сопротивления сдвигу в совершенном кристалле. Рассмотрим схематическую модель кристалла, изображенную на рис. 20.1, с помощью которой определим силу, необходимую для того, чтобы сдвинуть одну атомную плоскость кристалла относительно другой — соседней. В области малых упругих деформаций возникающее напряжение σ можно считать (как и в гл. 4) пропорциональным смещению:

$$\sigma = Gx/d. \quad (20.1)$$

Здесь d — расстояние между атомными плоскостями, G — соответствующий модуль сдвига; например, $G = C_{44}$ для сдвига в направлении $\langle 100 \rangle$ в плоскости $\{100\}$ кубического кристалла.

В ходе смещения до тех пор, пока атом A не окажется непосредственно над атомом B (см. рис. 20.1) и напряжение не обратится в нуль, две атомные плоскости будут находиться в состоянии неустойчивого равновесия. В первом приближении связь между смещением и напряжением можно описать следующей синусоидальной функцией:

$$\sigma = \frac{Ga}{2\pi d} \sin \frac{2\pi x}{a}, \quad (20.2)$$

где a — межатомное расстояние в направлении сдвига. При малых x соотношение (20.2) переходит в (20.1). Критическое скалывающее напряжение σ_c , при котором решетка становится неустойчивой, соответствует максимальному значению σ ,

$$\sigma_c = Ga/2\pi d. \quad (20.3)$$

Если $a \approx d$, то $\sigma_c \approx G/2\pi$ и критическое скалывающее напряжение будет составлять примерно 1/6 от модуля сдвига.

Экспериментальные данные, приведенные в табл. 20.1, показывают, что наблюдаемые значения предела упругости оказы-

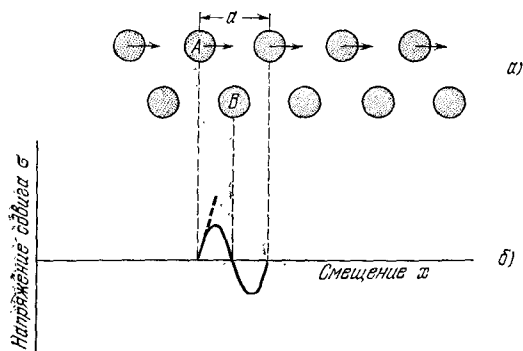


Рис. 20.1. а) Сдвиг одной плоскости относительно другой (показано в сечении) в однородно деформированном кристалле. б) Напряжение сдвига как функция относительного смещения плоскостей из их равновесных положений. Жирным пунктиром показан начальный наклон, соответствующий модулю сдвига G .

Модуль сдвига и предел упругости
(по Мотту)

Материал	Модуль сдвига G , 10^{11} дин/см ²	Наблюдаемый предел упругости σ_c , 10^6 дин/см ²	$\frac{G}{\sigma_c}$
Олово (монокристалл)	1,9	13	15 000
Серебро (монокристалл)	2,8	6	45 000
Алюминий (монокристалл)	2,5	4	60 000
Алюминий чистый поликристаллический	2,5	260	900
Алюминий технический тянутый	~ 2,5	990	250
Дюралюминий	~ 2,5	3 600	70
Железо (мелкое, поликристаллическое)	7,7	1 500	500
Углеродистая сталь (после термообработки)	~ 8	6 500	120
Никель-хромовая сталь	~ 8	12 000	65

ваются значительно меньшими, чем предсказываемые соотношением (20.3). Теоретическая оценка может быть улучшена, если принять какой-то более точный закон, описывающий силы межмолекулярного взаимодействия, и учесть возможность возникновения при сдвиге других механически устойчивых конфигураций атомных плоскостей в решетке. Маккензи [3] показал, что учет этих двух факторов может снизить значение теоретической прочности на сдвиг примерно до $G/30$, что соответствует критической деформации сдвига, равной примерно двум градусам¹⁾.

Наблюдаемые низкие значения сопротивления сдвигу можно объяснить присутствием в кристалле дефектов, которые могут действовать как источники механической податливости реальных кристаллов. Хорошо известно, что особые дефекты кристалла, называемые дислокациями, присутствуют почти во всех кристаллах и их движение обуславливает скольжение при очень низких значениях прикладываемых нагрузок.

Скольжение. Пластическая деформация во многих кристаллах протекает путем скольжения. Фотографии деформированных монокристаллов цинка, приведенные на рис. 20.2, иллюстрируют этот тип пластической деформации. При скольжении одна часть кристалла скользит как целое относительно другой, смежной части. Поверхность, вдоль которой происходит скольжение, часто является плоской и поэтому называется плоскостью

¹⁾ См. также работу Брэгга и Ломера [4], где было показано, что наблюдаемые значения прочности на сдвиг для идеальной двухмерной системы мелких мыльных пузырьков имеют тот же порядок величины.



Рис. 20.2. Трансляционное скольжение в монокристаллах цинка. (Фото Э. Р. Паркера.)

скольжения. Направление перемещения называют направлением скольжения.

Для процессов пластической деформации весьма существенны свойства кристаллической решетки (по сравнению со свойствами кристалла, рассматриваемого как сплошная среда). На это указывает чрезвычайно анизотропный характер скольжения. Даже в металлах кубической структуры смещение происходит лишь вдоль вполне определенных кристаллографических плоскостей с небольшими значениями индексов Миллера; например, в металлах с гранецентрированной кубической структурой — вдоль плоскостей $\{111\}$, в объемноцентрированных — вдоль плоскостей $\{110\}$, $\{112\}$ и $\{123\}$. В большинстве случаев направление скольжения совпадает с направлением наиболее плотной упаковки атомов. В металлах гранецентрированной кубической структуры это направление типа $\langle 110 \rangle$, в объемноцентрированных — типа $\langle 111 \rangle$.

Для сохранения структуры кристалла после скольжения необходимо, чтобы вектор смещения или скольжения был равен вектору трансляции решетки. Наименьший вектор решеточной трансляции, выраженный через постоянную решетки a , в случае гранецентрированной кубической структуры можно записать как $(a/2)(\hat{x} + \hat{y})$, а в случае объемноцентрированной кубической структуры — $(a/2)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$. Но в кристаллах с гранецентрированной кубической структурой наблюдаются также частичные смещения, нарушающие правильное чередование плоскостей плотнейшей упаковки $ABCABC\dots$ (гл. I) и создающие *дефект упаковки* типа $ABCABABC\dots$. В результате образуется структура со «смешанным» типом плотнейшей упаковки — кубической и гексагональной.

Деформация кристалла, обусловленная скольжением, не является однородной. Значительные смещения при сдвиге происходят вдоль нескольких далеко отстоящих друг от друга плоскостей скольжения, в то время как те части кристалла, которые

лежат между этими плоскостями, почти не подвергаются деформации. Скольжению присуще свойство, которое можно охарактеризовать законом Шмида — законом о критическом скальвующем напряжении: скольжение в данной плоскости и в данном направлении начинается тогда, когда соответствующая компонента напряжения сдвига достигает некоторой определенной критической величины.

Скольжение является одним из видов пластической деформации. Другим видом пластической деформации является так называемое *двойникование*, наблюдаемое в ряде кристаллов, особенно имеющих плотноупакованную гексагональную или объемноцентрированную кубическую структуру. В процессе скольжения вдоль некоторых плоскостей скольжения, далеко отстоящих друг от друга, локализуются значительные смещения. При двойниковании, наоборот, незначительные смещения испытывает каждая из многих соседних кристаллографических плоскостей. После такой деформации деформированная часть кристалла оказывается зеркальным отражением недеформированной части.

Хотя и скольжение, и двойникование обусловлены движением дислокаций, мы будем рассматривать здесь главным образом скольжение.

ДИСЛОКАЦИИ

Низкие наблюдаемые значения критического скальвующего напряжения можно объяснить, полагая, что в решетке движется особого типа линейное несовершенство структуры, известное под названием дислокации. Идея о том, что скольжение осуществляется посредством движения дислокаций, была опубликована в 1934 г. независимо Тейлором, Орованом и Поляни; в физику понятие дислокации было введено несколько ранее Прандтлем и Делингером.

Имеются несколько основных типов дислокаций. Сначала мы остановимся на описании *краевой дислокации*. На рис. 20.3 изображен простой кубический кристалл, в котором в левой части плоскости скольжения произошел сдвиг на одно межатомное расстояние; в правой части этого не произошло. Граница между той частью, где сдвиг произошел, и той частью, где он не произошел, называется дислокацией. Ее положение указывается краем «лишней» вертикальной полуплоскости атомов, которые сгущаются в верхней половине кристалла, как показано на рис. 20.4. Вблизи дислокации кристалл сильно деформирован. Простая краевая дислокация неограниченно простирается в плоскости скольжения в направлении, нормальном к направлению скольжения. На рис. 20.5 приведена фотография дислокации в двухмерной системе мелких мыльных пузырьков (модель, предложенная Брэггом и Наем [5, 4]).

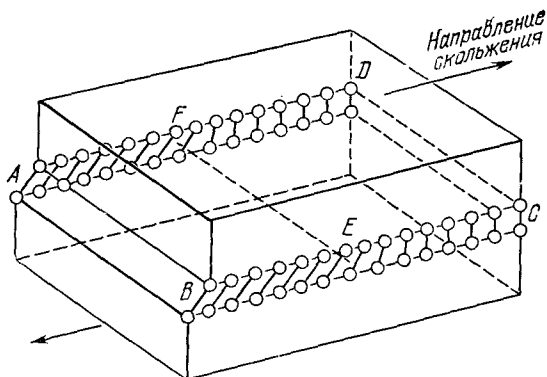


Рис. 20.3. Краевая дислокация в плоскости скольжения $ABCD$. В области $ABEF$ атомы смещены более чем на половину постоянной решетки, в области $FECD$ атомы смещены менее чем на половину постоянной решетки.

Механизм перемещения дислокации схематически иллюстрируется на рис. 20.6. Движение краевой дислокации через кристалл можно уподобить перемещению складки по ковра: складка перемещается легче, чем весь ковер, и ее прохождение через ковер дает то же смещение, что и скольжение всего ковра по полу. Когда атомы, расположенные по одну сторону от плоскости скольжения, перемещаются относительно атомов, расположенных по другую сторону, то часть атомов, находящихся в плоскости скольжения, будет отталкиваться своими соседями по ту сторону плоскости скольжения, а часть притягиваться. В первом приближении эти силы взаимно компенсируются.

Расчитанное значение внешнего напряжения, необходимого для движения дислокации, оказалось довольно малым, меньшим, вероятно, чем 10^5 дин/см², при условии, что силы связи в кристалле не сильно направлены. Таким образом, наличие дислокаций делает кристалл очень пластичным. Прохождение дислокации через кристалл эквивалентно сдвигу одной части кристалла относительно другой.

Другой простой тип дислокации — это *винтовая дислокация*, схематически изображенная на рис. 20.7 и 20.8. Винтовая дислокация указывает границу между смещенной и несмещенной частями кристалла. Граница на этот раз располагается *параллельно* направлению скольжения, а не перпендикулярно к нему, как в случае краевых дислокаций. Винтовую дислокацию можно представить себе, если мысленно сделать в кристалле разрез, а затем сдвинуть части кристалла по обе стороны разреза навстречу друг другу на одно межатомное расстояние параллельно краю разреза. Наличие винтовой дислокации превращает атомные плоскости в кристалле в геликондальные поверхности; отсюда и возник термин «винтовая дислокация».

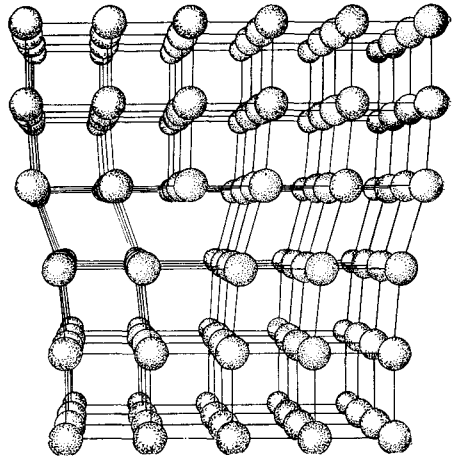


Рис. 20.4. Структура краевой дислокации. Можно считать, что деформация вызвана появлением лишней атомной плоскости, совпадающей на рисунке с верхней половиной оси y . В верхней половине кристалла имеет место сжатие, в нижней половине — растяжение.

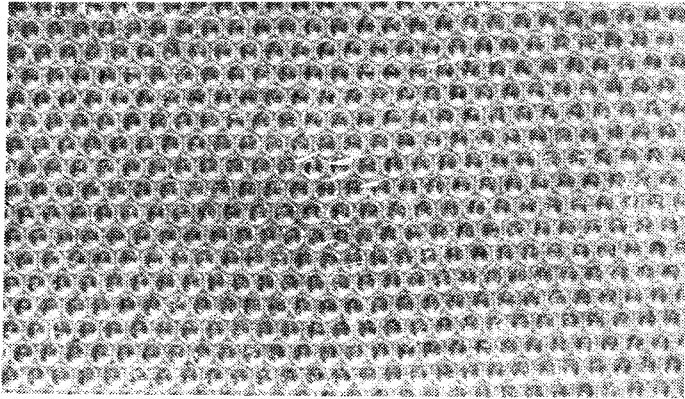


Рис. 20.5. Дислокация в двухмерной системе мелких мыльных пузырьков. Дислокацию легче всего заметить, если повернуть фотографию на 30° в ее плоскости и рассматривать под малым углом. (Фотография выполнена Лормером.)

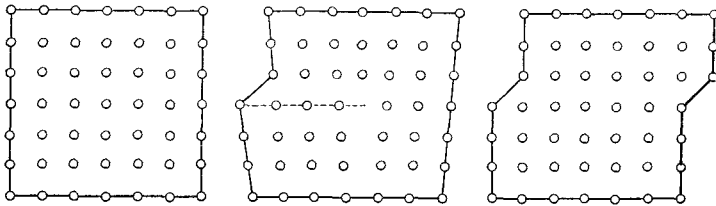


Рис. 20.6. Движение дислокации в процессе сдвига; верхняя поверхность образца смещается вправо. (По Тейлору.)

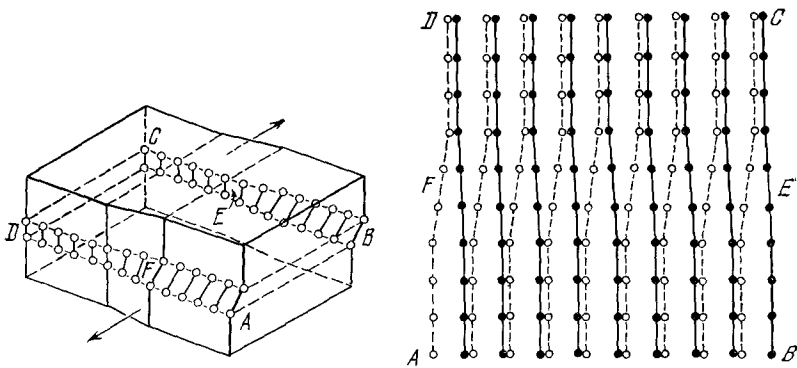


Рис. 20.7. Винтовая дислокация. Участок $ABEF$ плоскости скольжения смещается в направлении, параллельном линии дислокации EF . Винтовую дислокацию можно представить себе как спиральное расположение атомных плоскостей решетки, так что при каждом полном обходе вокруг линии дислокации мы перемещаемся на одно межплоскостное расстояние вдоль линии дислокации. (По Коттрелю.)

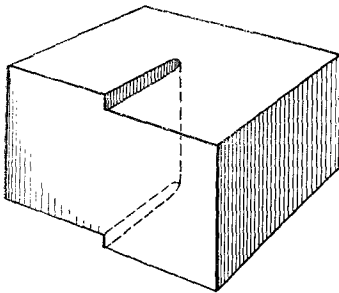


Рис. 20.8. Другое схематическое изображение винтовой дислокации. Вертикальная пунктирная линия — линия дислокации, вблизи этой линии сосредоточены максимальные искажения решетки.

Вектор Бюргерса. Произвольную дислокацию можно считать состоящей из отрезков, имеющих краевую и винтовую компоненты. Бюргерс показал, что в наиболее общей форме линейную систему дислокаций в кристалле можно описать, исходя из схемы типа приведенной на рис. 20.9. Рассмотрим расположенную внутри кристалла произвольную замкнутую кривую (не обязательно плоскую) или незамкнутую кривую, оба конца которой выходят на поверхность кристалла. а) Произведем сечение кристалла некоторой простой поверхностью, опирающейся на эту кривую. б) Сместим вещество, находящееся по одну сторону поверхности, на расстояние b относительно вещества, находящегося по другую сторону. Вектор b называется *вектором Бюргерса*. в) В областях, где вектор b не параллелен секущей поверхности, это относительное смещение должно приводить либо к образованию зазора, либо к перекрытию областей, образовавшихся после смещения. В первом случае вещество следует добавить, чтобы заполнить зазор, во втором — убрать часть ма-

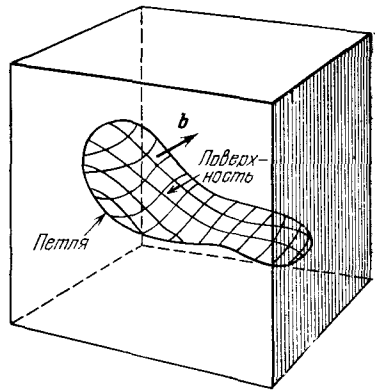


Рис. 20.9. Общий метод образования дислокационной петли в сплошной среде по Зейтцу. Среда ограничена прямоугольным блоком. Петля представляет собой замкнутую пространственную кривую, расположенную внутри блока. Среда рассечена поверхностью, опирающейся на эту кривую. Вещество по одну сторону поверхности смещается относительно вещества по другую сторону поверхности на длину вектора \mathbf{b} , который произвольным образом ориентирован относительно поверхности. Для осуществления смещения требуются силы. После того как смещение произведено, для сохранения непрерывности может оказаться необходимым добавить материал в тех местах, где появятся полости, и убрать лишний материал там, где возникло перекрытие. Затем производится «склеивание». После снятия приложенного напряжения, удерживающего края надреза в смещенном положении, устанавливается некоторое равновесное поле напряжений. Вектор \mathbf{b} называется вектором Бюргерса данной дислокации.

териала, чтобы предотвратить перекрытие. г) После этого «склеим» стороны разреза; при этом в кристалле сохраняются деформации, отвечающие новому состоянию равновесия. Результирующее распределение деформаций как раз и будет давать картину линий дислокаций, характеризуемую граничной кривой и вектором Бюргерса. Вектор Бюргерса должен быть равен вектору решетки, для того чтобы в процессе «склеивания» сохранялась кристаллическая структура вещества.

Вектор Бюргерса винтовой дислокации (рис. 20.7 и 20.8) параллелен линии дислокации, тогда как вектор Бюргерса краевой дислокации (рис. 20.3 и 20.4) перпендикулярен к линии дислокации и лежит в плоскости скольжения.

Поля напряжений, связанные с дислокациями. Поле напряжений винтовой дислокации имеет особенно простой вид. На рис. 20.10 изображен отрезок цилиндрической трубки, мысленно вырезанный из материала так, чтобы осью трубки была винтовая дислокация. Трубка деформирована путем сдвига ее части на вектор \mathbf{b} по вертикали на окружности длиной $2\pi r$, вследствие чего возникла деформация сдвига $e = b/2\pi r$. Если вещество трактовать как упругий континуум, то соответствующее напряжение сдвига

$$\sigma = Ge = Gb/2\pi r. \quad (20.4)$$

Это соотношение не имеет места в области, непосредственно прилегающей к линии дислокации, так как деформации здесь

слишком велики для сплошной среды или для того, чтобы была справедлива линейная теория упругости.

Упругая энергия, приходящаяся на единицу длины трубки, равна

$$dE_s = \frac{1}{2} G e^2 dV = \frac{G b^2}{4\pi} \cdot \frac{dr}{r}.$$

Полная упругая энергия на единицу длины винтовой дислокации находится путем интегрирования:

$$E_s = \frac{G b^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}, \quad (20.5)$$

где R и r_0 — соответственно верхний и нижний пределы значений переменной r . Приемлемая величина r_0 сравнима с длиной вектора Бюргерса b или постоянной решетки; величина R не должна превышать размеров кристалла. Для многих применений R должно быть значительно меньше размеров кристалла. Величина отношения R/r_0 не является определяющей, так как это отношение входит в логарифмический член соотношения (20.5).

Рассчитаем энергию краевой дислокации, расположенной в начале системы координат (рис. 20.4). Обозначим через σ_{rr} и $\sigma_{\theta\theta}$ нормальные напряжения в радиальном и перпендикулярном к нему направлениях, а через $\sigma_{r\theta}$ — напряжение сдвига. В упругой изотропной среде σ_{rr} и $\sigma_{\theta\theta}$ пропорциональны $(\sin \theta)/r$: мы ищем функцию, которая спадает обратно пропорционально r и меняет знак при замене y на $-y$. Напряжение сдвига $\sigma_{r\theta}$ пропорционально $(\cos \theta)/r$: рассматривая плоскость $y = 0$, мы видим из рис. 20.1, что напряжение сдвига есть нечетная функция x . В коэффициенты пропорциональности войдут модуль

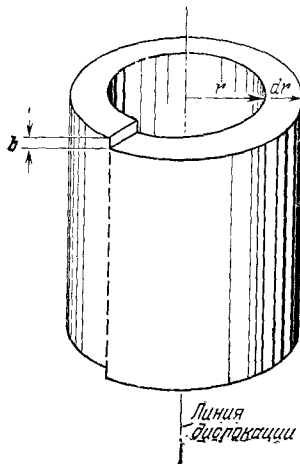


Рис. 20.10. Часть упруго деформированного кристалла в виде цилиндрической трубки, окружающей винтовую дислокацию с вектором Бюргерса b .

сдвига и длина вектора Бюргера. Окончательное выражение, которое выводится в работах, приведенных в литературных ссылках, имеет следующий вид:

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin \theta}{r}, \quad \sigma_{r\theta} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\cos \theta}{r}, \quad (20.6)$$

где ν — коэффициент Пуассона, определяемый в задаче 4.1 (для большинства кристаллов $\nu \approx 0,3$). Энергия деформации на единицу длины краевой дислокации равна

$$E_e = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0}. \quad (20.7)$$

Выражение для энергии в случае краевой дислокации очень похоже на выражение для энергии в случае винтовой дислокации.

Мы хотим теперь получить выражение для компоненты напряжения сдвига σ_{xy} в плоскостях, параллельных плоскости скольжения (рис. 20.4). Используя выражения для компонент напряжения σ_{rr} , $\sigma_{\theta\theta}$ и $\sigma_{r\theta}$ в плоскости, расположенной на расстоянии y от плоскости скольжения, получим:

$$\sigma_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin 4\theta}{4y}. \quad (20.8)$$

Решение задачи 20.3 (в конце главы) показывает, что на единицу длины дислокации в поле однородного напряжения сдвига σ действует сила $F = b\sigma$. Этот результат справедлив также для силы, с которой одна дислокация действует на другую. В результате сила, с которой краевая дислокация, расположенная в начале координат, действует на аналогичную дислокацию, расположенную в точке (y, θ) , равна

$$F = b\sigma_{xy} = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin 4\theta}{4y} \quad (20.9)$$

на единицу длины ¹⁾.

Границы зерен с малым углом разориентировки. Бюргерс [6, 7] предположил, что границы между соседними кристаллами или зернами кристалла, расположенными под малым углом друг к другу (т. е. границы зерен с малым углом разориентировки), состоят из совокупности дислокаций. Простым примером модели границы зерен Бюргерса может служить схема на рис. 20.11. Здесь принято, что граница расположена вдоль плоскости (010) простой кубической решетки и делит кристалл на две части, для которых ось [001] является общей. Это — простая

¹⁾ Строго говоря, F является составляющей вектора силы в направлении скольжения. Имеется еще и другая составляющая этого вектора, перпендикулярная к направлению скольжения, но ею можно пренебречь при низких температурах, когда единственным возможным движением дислокации является ее движение в плоскости скольжения.

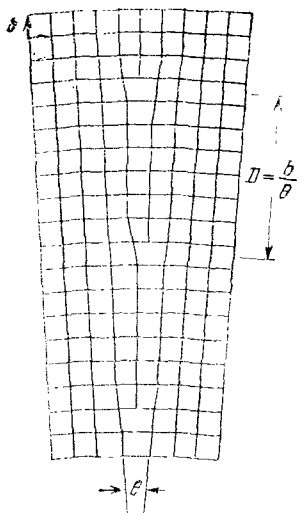


Рис. 20.11. Граница зерен с малым углом разориентировки. (По Бюргерсу.)

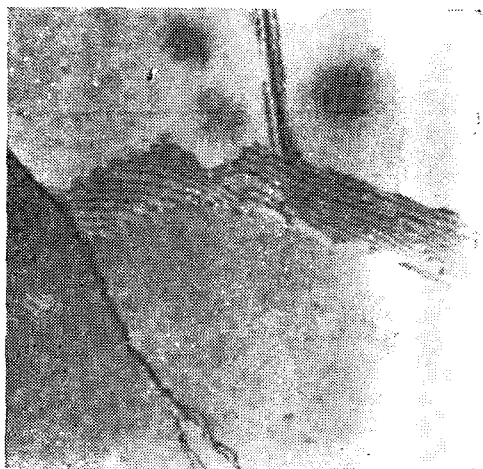


Рис. 20.12. Электронно-микроскопический снимок распределения дислокаций на границе зерен с малым углом разориентировки в твердом растворе Al—7% Mg. Увеличение $\times 17\,000$. (R. Goodrich, G. Thomas.)

наклонная граница; в данном случае разориентировку можно описать как малый поворот (на угол θ) одной части кристалла относительно другой около общей оси $[001]$. Наклонная граница, изображенная на рис. 20.11, состоит из совокупности краевых дислокаций, расположенных на расстоянии $D = b/\theta$ одна от другой (b — длина вектора Бюргерса).

Экспериментальные исследования подтверждают модель Бюргерса. На рис. 20.12 приведен электронно-микроскопический снимок, на котором показано распределение дислокаций на границе зерен с малым углом разориентировки. Рид и Шокли [8] вычислили величину энергии границы зерен как функцию угла разориентировки. Полученные ими результаты находятся в прекрасном согласии с экспериментальными данными. Заметим, что область упругого искажения вблизи границы зерен не распространяется очень далеко в глубь «кристаллитов» и ограничена в основном слоем, толщина которого равна расстоянию между дислокациями D . Каждая дислокация окружена собственным полем деформации и полями деформаций дислокаций, расположенных выше и ниже данной дислокации. Поля деформаций соседних дислокаций почти компенсируют друг друга, так как они равны по величине и противоположны по знаку. Поэтому энергия деформации вблизи каждой дислокации обусловлена главным образом ее собственным полем деформаций. В этом приближении, если мы воспользуемся выражением (20.7) для упру-

гой энергии единицы длины дислокации, для энергии границы получим:

$$\frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{\alpha D}{b},$$

где мы положили $r_0 = b$ и α есть число порядка единицы. Поскольку на единицу длины границы приходится $\frac{1}{D} = \frac{\theta}{b}$ дислокаций, то энергия границы между зернами равна

$$\gamma = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \theta (-\ln \theta + \ln \alpha). \quad (20.10)$$

Отсюда видно, что энергия границы γ равна нулю при $\theta = 0$ и увеличивается при возрастании угла θ . При дальнейшем возрастании θ энергия γ достигает максимума γ_m , а затем уменьшается. Если обозначить через θ_m значение θ , соответствующее $\gamma = \gamma_m$, то выражение (20.10) примет вид

$$\frac{\gamma}{\gamma_m} = \frac{\theta}{\theta_m} \left(1 - \ln \frac{\theta}{\theta_m} \right). \quad (20.11)$$

Выражение (20.11) можно сравнить с экспериментальными результатами измерений относительной энергии границы зерен как функции θ . Это сделано на рис. 20.13. Совпадение теории с экспериментом очень хорошее даже для углов $\theta \geq 30^\circ$, превышающих угол θ_m , который входит в формулу (20.11), полученную для дислокационной модели границ зерен.

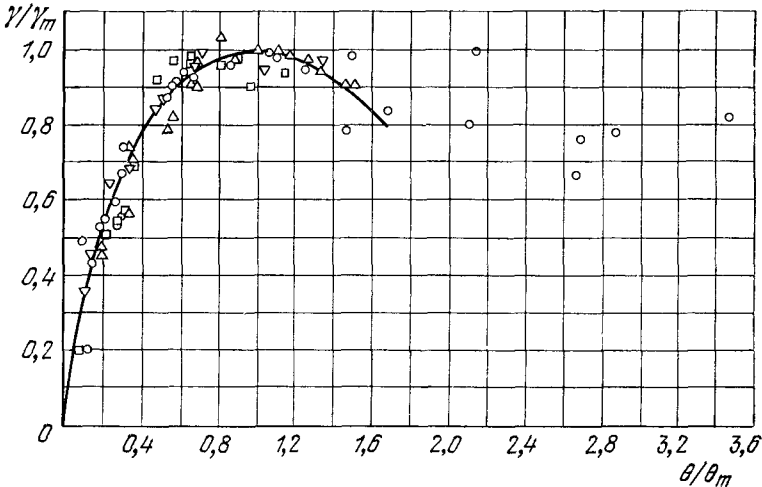


Рис. 20.13. Сравнение теоретической кривой (20.11) с экспериментальными данными. \circ — кремнистое железо серии (110), $\theta_m = 26,6^\circ$ (Данн); \triangle — кремнистое железо серии (100), $\theta_m = 29,8^\circ$ (Данн); \square — олово, $\theta_m = 12,2^\circ$ (Ауст и Чалмерс); ∇ — свинец, $\theta_m = 25,0^\circ$ (Ауст и Чалмерс). (Из книги Рида [9].)

Прямое подтверждение модели Бюргерса дают количественные рентгеновские и оптические исследования малоугловых границ в кристаллах германия, проведенные Фогелем с сотрудниками [10, 11]. Они определили расстояние между дислокациями D путем подсчета ямок травления на линии пересечения малоугловой границы зерен с травленной поверхностью германия (рис. 20.14). При этом предполагалось, что каждая ямка травления совпадает с выходом дислокации на поверхность кристалла. Рассчитанный ими по формуле $\theta = b/D$ угол разориентировки хорошо совпадает со значением угла, измеренным непосредственно с помощью рентгеновских лучей.

Представление малоугловых границ как совокупности дислокаций подтверждается, кроме того, и тем фактом, что простые наклонные границы движутся перпендикулярно к самим себе при наложении соответствующего напряжения. Это движение было продемонстрировано тонким экспериментом Уошберна и Паркера [12] (рис. 20.15). Образец представлял собой бикристалл цинка, содержащий двухградусную наклонную границу. Дислокации были расположены на расстоянии примерно 30 межплоскостных расстояний одна от другой. С одной стороны образец был закреплен, а по другую сторону границы в некоторой точке к нему была приложена сила. Перемещение границы происходило в результате коллективного перемещения дислокаций внутри границы, причем каждая дислокация в своей плоскости скольжения смещалась на одно и то же расстояние. Движение границы происходило под действием напряжений, которые по порядку величины были близки к пределу текучести для кристаллов цинка. Этот факт послужил сильным аргументом в пользу того, что обычные деформации являются следствием движения дислокаций.

Границы зерен и дислокации хотя и затрудняют процесс диффузии атомов по сравнению с процессом диффузии в идеальных кристаллах, однако незначительно. Дислокация является своего рода открытым каналом для диффузии. Как известно, процессы диффузии быстрее протекают в пластически деформированном, а не в отожженном кристалле. Диффузия по границам зерен определяет в некоторых случаях скорость процессов осаждения в твердой фазе. Например, осаждение олова из твердых растворов $PbSn$ при комнатной температуре происходит в 10^5 раз быстрее, чем можно ожидать, исходя из механизма диффузии в идеальной решетке.

Плотность дислокаций. Плотность дислокаций определяется как число дислокационных линий, пересекающих единичную площадку внутри кристалла. Возможные значения плотности дислокаций простираются от $10^2 - 10^3 \text{ см}^{-2}$ в наиболее совершенных кристаллах германия и кремния до $10^{11} - 10^{12} \text{ см}^{-2}$ в сильно деформированных металлических кристаллах. Сравни-

Рис. 20.14. Ямки травления на поверхности (100) образца германия вдоль границы с малым углом разориентировки. Угол между кристаллами равен 27,5 угловой секунды. Граница лежит в плоскости (011). Направление линии дислокации совпадает с направлением [100]. Вектор Бюргерса в данном случае является кратчайшим из векторов трансляции решетки, а именно $|b| = a/\sqrt{2} = 4,0 \text{ \AA}$. (По Фогелю [11].)

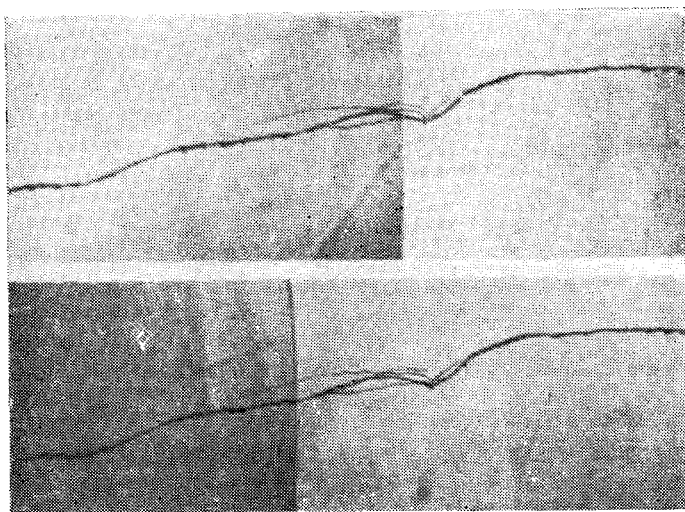
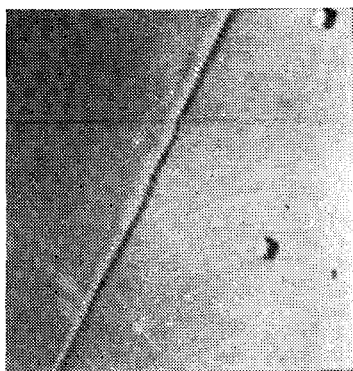


Рис. 20.15. Движение границы с малым углом разориентировки под действием напряжений в бикристалле цинка. Граница видна в виде вертикальной линии. Фотосъемка производилась при вертикальном освещении, так что по различной освещенности на плоскости спайности легко выявляется наличие угла разориентировки (2°). Неправильная горизонтальная линия указывает на наличие ступеньки на плоскости спайности и облегчает наблюдение перемещения границы. Кристалл закреплен слева; справа на кристалл действует сила, приложенная перпендикулярно к плоскости фотографии. Вверху — исходное положение границы; внизу — граница переместилась в обратном направлении (влево) на 0,4 мм. (Из работы Уошберна и Паркера [12].)

Методы определения плотности дислокаций

Метод	Толщина образца	Ширина изображения	Максимальная определяемая плотность дислокаций на 1 см^2
Электронная микроскопия	$> 1000 \text{ \AA}$	$\sim 100 \text{ \AA}$	$10^{11} - 10^{12}$
Рентгеновское излучение (на пропускание)	0,1—1,0 мм	5 мкм	$10^4 - 10^5$
Рентгеновское излучение (на отражение)	$< 2 \text{ мкм (min.)} - 50 \text{ мкм (max.)}$	2 мкм	$10^6 - 10^7$
Декоорирование	$\sim 10 \text{ мкм (глубина фокуса)}$	0,5 мкм	$2 \cdot 10^7$
Ямки травления	Без ограничения	0,5 мкм *)	$4 \cdot 10^8$

*) Предел разрешения одной ямки.

тельная характеристика методов, используемых для определения плотности дислокаций, приведена в табл. 20.2 (на основе работы [13]). В книге Амелинка [14] превосходно изложены все современные методы наблюдения дислокаций.

В литом металле или в отожженных (медленно охлажденных) кристаллах дислокации либо сосредоточены в границах с малым углом разориентировки, либо образуют трехмерные сетки, которые, в свою очередь, образуют ячейки, как показано на рис. 20.16.

В сильно деформированных кристаллах плотность дислокаций можно оценить по увеличению внутренней энергии, которое происходит в результате пластической деформации. Из формул (20.5) и (20.7) для энергии, приходящейся на единицу длины дислокации, можно приблизительно получить $(Gb^2/4\pi) \ln(R/r_0)$.



Рис. 20.16. Ячеистая структура, образованная трехмерными сетками дислокаций в деформированном кристалле алюминия. (P. R. Swann.)

Если значение R сравнимо с расстоянием между дислокациями и $r_0 \approx b$, то $R/r_0 \approx 10^3$ и дислокационная энергия равна приблизительно $5 \cdot 10^{-4}$ эрг/см, или около 8 эВ на атомную плоскость, через которую проходит дислокация. Максимальная энергия, которую может запасти решетка за счет искажений, вызываемых сильной пластической деформацией, например скручиванием, растягиванием или сжатием, измерялась калориметрическими методами для ряда металлов. Если деформация не слишком велика, то в решетке накапливается примерно 10% энергии, затраченной на пластическое течение. Однако если пластическое течение продолжается, то величина накапливаемой кристаллом энергии приближается к насыщению. Наблюдаемые значения накопленной энергии соответствуют примерно 10^8 эрг/см³. Если энергия дислокации на единицу ее длины равна $5 \cdot 10^{-4}$ эрг/см, то на 1 см³ кристалла придется примерно 10^{11} дислокационных линий, т. е. плотность дислокаций будет составлять в среднем 10^{11} см⁻². Иначе говоря, через квадратную площадку со стороной 100 межатомных расстояний будет проходить в среднем одна дислокация. Такая плотность дислокаций характерна для сильно деформированных металлов.

Возникла проблема о наличии дислокаций в литом металле и в отожженных кристаллах. Дислокации не являются термически равновесными дефектами, поскольку возрастание свободной энергии при их образовании далеко не компенсируется имеющим при этом место ростом энтропии. Дислокации должны поэтому образовываться неравновесным путем при затвердевании расплава и сохраняться даже после самого тщательного отжига. Механизм образования дислокаций при затвердевании расплава неизвестен, хотя можно предполагать, что он связан с осаждением вакансий при охлаждении кристалла.

Вакансии, осаждающиеся вдоль существующей краевой дислокации, будут поглощать часть лишней атомной полуплоскости, в результате чего будет иметь место переползание дислокаций, заключающееся в движении дислокаций под прямыми углами к направлению скольжения. Если в кристалле нет дислокаций, то он будет пересыщен вакансиями; за образованием дискообразных полостей может следовать их захлопывание и образование дислокационных петель, которые растут по мере дальнейшего осаждения вакансий, как показано на рис. 20.17.

Другая проблема, рассматриваемая ниже, возникла в связи с необходимостью объяснить очень резкое увеличение плотности дислокаций, вызванное пластической деформацией. Измерения плотности дислокаций обычно показывают, что в процессе деформации плотность дислокаций возрастает примерно с 10^8 см⁻² до 10^{11} см⁻², т. е. в 1000 раз. Не менее интересен и тот факт, что если бы дислокация двигалась полностью в своей плоскости скольжения, то смещение происходило бы только на одно

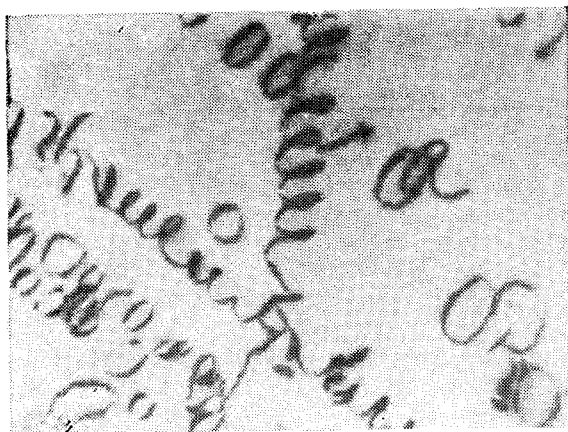


Рис. 20.17. Электронно-микроскопический снимок дислокационных петель, образовавшихся в результате скопления и слияния вакансий в твердом растворе Al—5% Mg, закаленного от 550 °С. Спиралевидные дислокации образуются путем «переползания» винтовых дислокаций в результате осаждения вакансий. Увеличение $\times 43\,000$. (А. Eikum, G. Thomas.)

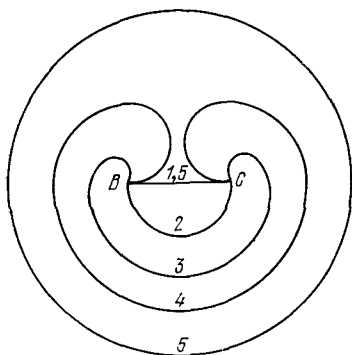


Рис. 20.18. Схема, иллюстрирующая предложенную Франком и Ридом модель размножения дислокаций. Показаны последовательные этапы образования дислокационной петли из исходного отрезка BC линии дислокации. Процесс может повторяться многократно.

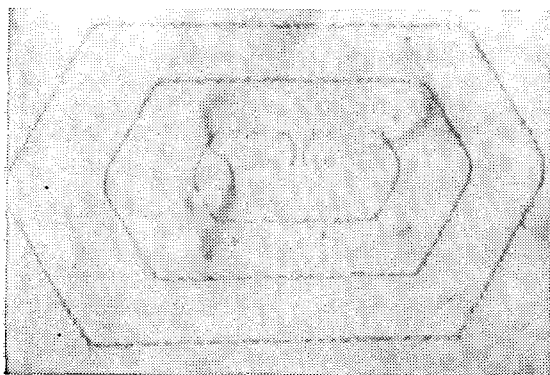


Рис. 20.19. Источник Франка — Рида в кремнии, декорированном медью. Снимок сделан в инфракрасном свете. Видны две уже образовавшиеся дислокационные петли и третья, внутренняя, почти образовавшаяся [16].

межатомное расстояние, тогда как в действительности обычно наблюдаемое смещение составляет от 100 до 1000 межатомных расстояний.

Размножение дислокаций и скольжение. Рассмотрим замкнутую дислокационную петлю радиуса r , которая охватывает область того же радиуса, претерпевшую сдвиг. Такая дислокация будет частично винтовой, частично краевой, а на большей части длины — смешанного типа. Поскольку энергия деформаций, связанных с дислокационной петлей, возрастает пропорционально длине петли, последняя будет стремиться сократиться. Однако если при этом действует скальывающее напряжение, способствующее развитию скольжения, то петля будет стремиться расшириться. Отрезок дислокационной линии, закрепленной на конусе (рис. 20.18), называется *источником Франка — Рида*¹⁾, и, как видно из рисунка, из него в одной и той же плоскости скольжения может развиваться большое число «концентрических» дислокационных петель. Этот и аналогичные типы механизмов размножения дислокаций приводят к возникновению скольжения и к возрастанию плотности дислокаций при пластической деформации. Прекрасный пример дислокационного источника показан на рис. 20.19.

ПРОЧНОСТЬ СПЛАВОВ

Чистые кристаллы обладают высокой пластичностью и текут при очень малых напряжениях. Существуют четыре основных способа упрочнения сплавов, позволяющих добиться того, чтобы материал выдерживал напряжения сдвига, достигающие $10^{-2} G$. Эти способы следующие: 1) механическое торможение движения дислокаций, 2) закрепление дислокаций растворенными атомами, 3) противодействие движению дислокаций путем создания ближнего порядка и 4) увеличение плотности дислокаций, приводящее в результате к переплетению дислокаций. Таким образом, успех применения любого механизма упрочнения зависит от того, насколько эффективно удастся затормозить движение дислокаций. Существует еще один, пятый механизм, сущность которого сводится к удалению из кристалла всех дислокаций. Этот способ пригоден для некоторых тонких нитевидных кристаллов (усов) и будет рассмотрен ниже в разделе, посвященном росту кристаллов.

Наиболее непосредственным способом создания механического торможения дислокаций является введение в кристалл

¹⁾ Источник Франка — Рида в описанном здесь классическом варианте наблюдается редко. Чаще встречаются некоторые его модификации; см., например, работу Томаса [15].

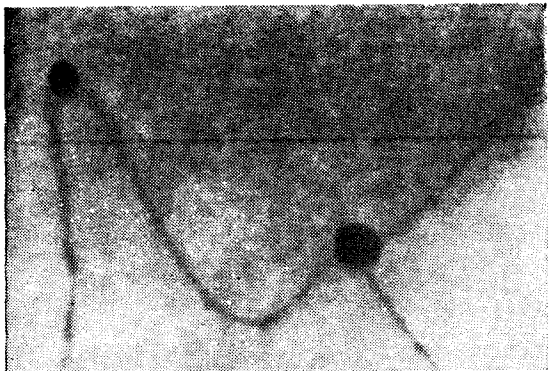


Рис. 20.20. Дислокации, закрепленные атомами примеси в MgO. (Электронно-микроскопическая фотография Томаса и Уошберна.)

мелких частиц другой фазы. Этот процесс имеет место при твердении стали, когда частицы карбида железа выпадают в железе, или при твердении алюминия, где выпадают частицы Al_2Si . Случай закрепления дислокаций атомами примеси показан на рис. 20.20.

При упрочнении путем введения в кристалл мелких частиц другой фазы возможны два случая: либо частица может деформироваться вместе с матрицей, для чего требуется, чтобы частица пересеклась дислокацией, либо частица не пересекается дислокацией. Если частица не может быть разрушена дислокацией¹⁾, то напряжение, которое необходимо приложить, чтобы дислокация могла «прорваться» между частицами, расположенными на расстоянии L друг от друга в плоскости скольжения, определяется приблизительно соотношением

$$\frac{\sigma}{G} = \frac{b}{L}. \quad (20.12)$$

Чем меньше расстояние между частицами L , тем больше должно быть напряжение σ . В самом начале процесса выпадения мелкодисперсной фазы L велико, а прочность мала. Как только процесс выпадения в основном закончился и образовалось достаточно много мелких частиц, величина L достигает минимума, а прочность — максимума. Если выдерживать сплав при высокой температуре, то некоторые частицы начнут расти, другие — растворяться; в результате L снова увеличится, а прочность уменьшится.

В случае разбавленных твердых растворов прочность обуславливается закреплением дислокаций растворенными атомами. Коттрел установил, что растворимость инородных атомов вблизи дислокаций выше, чем в неискаженной части кристалла. Например, атом, стремящийся «раздвинуть» решетку кристалла,

¹⁾ Частицы твердых интерметаллических фаз, например таких, как огнеупорные окислы, не могут быть разрушены дислокациями.

будет попадать в основном в область растяжения вблизи краевой дислокации. Наоборот, атом, имеющий малый размер, будет попадать преимущественно в область сжатия вблизи дислокации, — дислокация создает в месте своего нахождения как область растяжения, так и область сжатия. В результате сосредоточения растворенных атомов вблизи дислокаций вокруг каждой дислокации при охлаждении кристалла до температур, при которых подвижность растворенных атомов все еще велика, будет создаваться облако растворенных атомов.

При достаточно низких температурах диффузия растворенных атомов резко замедляется и облако растворенных атомов закрепляется в кристалле. Когда дислокация перемещается и покидает облако растворенных атомов, энергия кристалла возрастает. Увеличение энергии может обеспечиваться только возрастающим напряжением, действующим на дислокацию, так как оно выталкивает дислокацию из облака растворенных атомов. Таким образом, наличие в кристалле облаков растворенных атомов ведет к его упрочнению.

В чистых кристаллах прохождение дислокации в плоскости скольжения не изменяет энергии связи в этой плоскости после того, как дислокация прошла через нее. Внутренняя энергия кристалла остается прежней. То же справедливо и в отношении неупорядоченных твердых растворов, поскольку и после скольжения растворенные атомы расположены в плоскости скольжения по-прежнему неупорядоченно. Однако, как показано в гл. 19, большинство твердых растворов обладает ближним порядком. Атомы различных сортов располагаются в узлах решетки не беспорядочно; они стремятся разместиться так, чтобы иметь вокруг себя избыток или, наоборот, недостаток пар атомов другого сорта.

Таким образом, в упорядоченных сплавах дислокации имеют тенденцию двигаться парами: вторая дислокация «упорядочивает» местный беспорядок, создаваемый первой дислокацией.

Прочность кристаллического материала в результате пластической деформации возрастает. Это явление называется *деформационным упрочнением* или *наклепом*. Считают, что прочность возрастает из-за увеличения плотности дислокаций, что существенно затрудняет перемещение данной дислокации в плоскости скольжения, пронизанной многими другими дислокациями. Перемещение особенно затруднено, когда одна винтовая дислокация пытается пересечь другую; при этом могут образовываться вакансии и внедренные атомы. В упорядоченных материалах часто применяется деформационное упрочнение, но область его использования ограничивается достаточно низкими температурами, при которых не происходит отжиг.

Важным фактором, способствующим деформационному упрочнению, является не общая плотность дислокаций, а их расположение. В большинстве металлов дислокации стремятся

образовать ячейки областей (рис. 20.16), свободных от дислокаций, размерами порядка 1 микрона. Но если мы не можем получить однородную высокую плотность дислокаций, мы не сможем деформационно упрочнить металл до его теоретической прочности из-за скольжения в областях, свободных от дислокаций. Равномерная плотность достигается взрывной деформацией или специальными термомеханическими обработками [17].

Любой из механизмов упрочнения кристаллов может повысить предел прочности до величины порядка 10^{-3} — $10^{-2} G$. Все механизмы становятся неэффективными при температурах, когда процессы диффузии могут проходить со значительной скоростью. Когда диффузия происходит быстро, частицы микродисперсной фазы растворяются, облака растворенных атомов перемещаются вместе с дислокациями, ближний порядок после прохождения дислокаций восстанавливается, переползание дислокаций и отжиг ведут к уменьшению плотности дислокаций. Остаточная зависящая от времени деформация называется *ползучестью*. Необратимому движению предшествует предел упругости. При разработке сплавов, пригодных для использования при высоких температурах, основной задачей является значительное понижение скорости диффузионных процессов, с тем, чтобы указанные четыре механизма упрочнения сохраняли бы свою эффективность вплоть до высоких температур. Однако основной проблемой при создании твердых сплавов является не прочность, а пластичность, отсутствие которой приводит к разрушению сплава.

ДИСЛОКАЦИИ И РОСТ КРИСТАЛЛОВ

Франком и его сотрудниками было установлено, что в некоторых случаях дислокации могут играть определяющую роль в процессах роста кристаллов¹⁾. При выращивании кристаллов в условиях небольшого пересыщения (порядка 1%) было замечено, что наблюдаемая скорость роста значительно превышает теоретически рассчитанную для идеального кристалла. Объяснение наблюдаемой скорости роста дал Франк, исходя из дислокационных представлений.

Теория роста идеальных кристаллов предсказывает, что при росте кристалла из паров пересыщение (отношение данного давления паров к равновесному) должно быть порядка 10 для возникновения кристаллических зародышей, порядка 5 — для образования жидких капелек и около 1,5 — для создания на поверхности идеального кристалла двухмерных мономолекуляр-

¹⁾ Для того чтобы получить исчерпывающее представление о рассматриваемом вопросе, см. работы [18] и [19]. Длинноцепочечные полимерные молекулы кристаллизуются в плоские пластинки и имеют необычную картину кристаллизации; см. обзор Келлера [20].

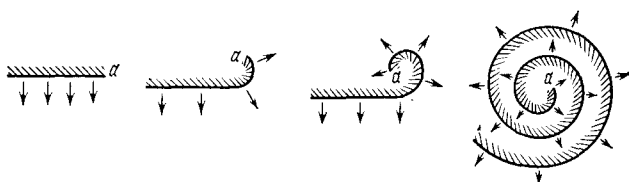
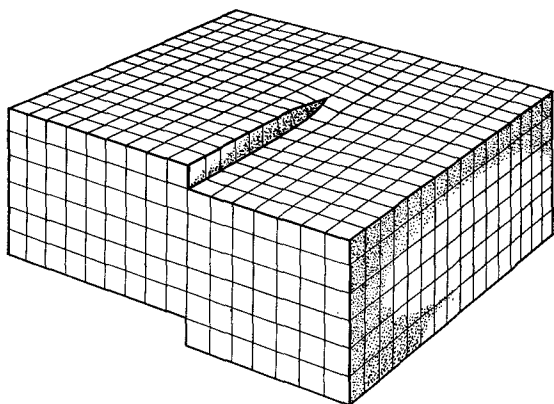


Рис. 20.21. Развитие спиральной «лесенки», образующейся в результате пересечения винтовой дислокации с поверхностью кристалла. Каждый куб изображает собой молекулу. (По Франку.)

ных зародышей. Однако Фольмер и Шульце наблюдали рост кристаллов иода при пересыщении паров иода менее 1%, причем минимальная наблюдавшаяся ими скорость роста была в e^{3000} раз больше предсказываемой по теории роста идеальных кристаллов. Это было значительным расхождением между теорией и экспериментом.

Такое расхождение можно объяснить трудностью создания на поверхности кристалла зародышей новых мономолекулярных слоев в том случае, когда поверхность кристалла совершенна. Если же имеется винтовая дислокация типа изображенной схематически на рис. 20.21, то в зарождении нового слоя нет никакой необходимости, поскольку кристалл будет спирально расти от края ступеньки. (Атом может быть связан со ступенькой сильнее, чем с плоской поверхностью.) Вычисление скорости роста, основанное на этом механизме, дает результаты, хорошо согласующиеся с наблюдениями. Поэтому следует, видимо, считать, что все кристаллы в природе, выросшие при малых пересыщениях, содержат дислокации, ибо в противном случае они не могли бы вырасти.

Спиральный механизм роста наблюдается для многих кристаллов. Прекрасный пример такого роста на отдельной винтовой дислокации показан на рис. 20.22. Рост на нескольких дислокациях показан на рис. 20.23.

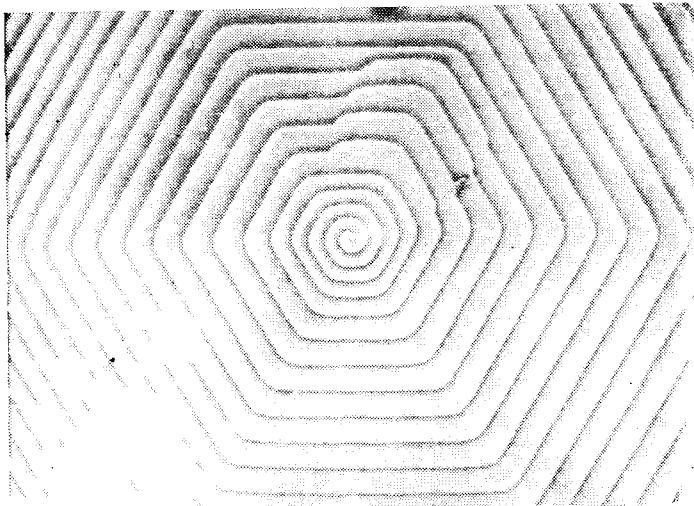


Рис. 20.22. Микрофотография гексагональной спирали роста в кристалле SiC. Высота ступеньки 165 Å. (A. R. Verma.)

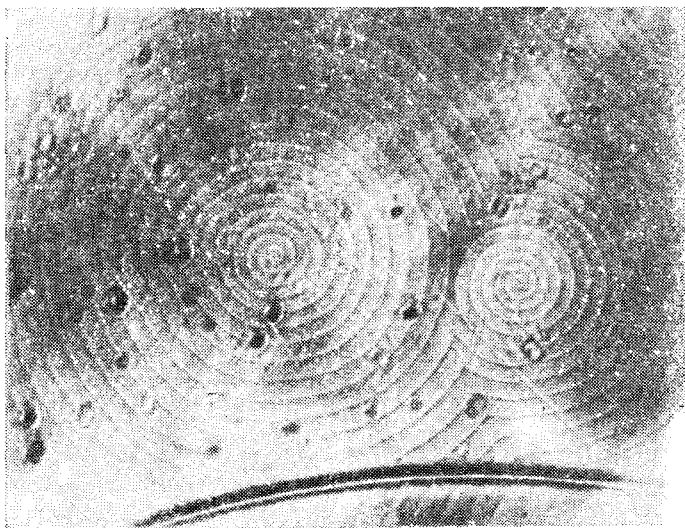


Рис. 20.23. Микрофотография элементарных спиралей роста с почти круговой симметрией в SiC. В левой части рисунка виден выход на поверхность кристалла правовинтовой и левовинтовой дислокаций. Спираль левовинтовой дислокации делает около трех витков до встречи с выступами, образованными правовинтовой дислокацией. С этого момента, согласно теории, образуются замкнутые петли, имеющие в основном (с незначительным искажением на малом участке) круговую форму. Высота ступенек этих круговых спиралей 15 Å. В правой части рисунка видна единичная левовинтовая спираль и кривая пересечения ее со ступеньками, образованными спиралью слева. (A. R. Verma.)

Рис. 20.24. Нитевидный кристалл меди, деформированный до 1,5%. (S. S. Brenner.)

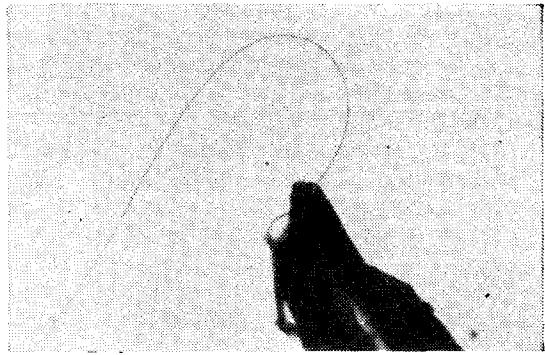
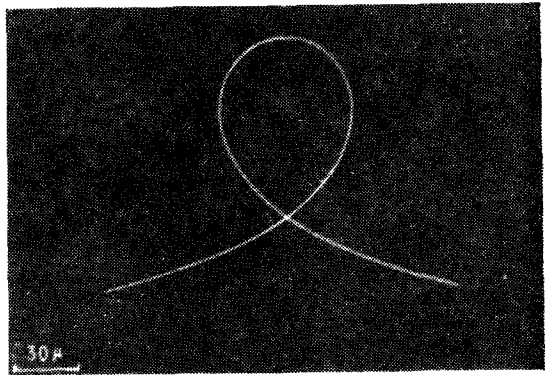


Рис. 20.25. Нитевидный кристалл никеля диаметром 1000 Å, согнутый в петлю. (По Деблуа.)



Если скорость роста не зависит от направления на плоскости грани, картина роста может быть описана спиралью Архимеда:

$$r = a\theta, \quad (20.13)$$

где a — постоянная. Такая спираль имеет некоторый предельный минимальный радиус кривизны вблизи дислокации, величина которого определяется степенью пересыщения. Если радиус кривизны слишком мал, атомы на этом участке кривой испаряются до тех пор, пока не установится равновесная кривизна. По мере удаления от центра каждая часть ступеньки приобретает новые атомы с постоянной скоростью, так что $dr/dt = \text{const}$.

Усы. Наблюдавшийся при больших пересыщениях рост тонких нитевидных кристаллов (усов) не связан, по-видимому, с необходимостью наличия более чем одной дислокации. Возможно, что эти кристаллы содержат единственную осевую винтовую дислокацию, которая обуславливает его преимущественный

рост в одном направлении. Если предположить, что нитевидные кристаллы вообще не содержат дислокаций, то можно ожидать, что они будут обладать очень высокой прочностью, близкой к вычисленному теоретически значению порядка $G/30$, о котором выше шла речь.

Присутствие единственной винтовой дислокации не может уменьшить прочность нитевидного кристалла, так как при растяжении кристалла на эту дислокацию не действует напряжение сдвига, а напряжение оказывается при этом параллельным вектору Бюргерса, т. е. напряжение не действует в направлении, которое может вызвать скольжение. Херринг и Голт [21] (см. также работу [22]) исследовали усы олова, имеющие радиус около 10^{-4} см, и установили, что их упругие свойства близки к тем, которые теория предсказывает для идеальных кристаллов. Измеренные ими деформации у предела текучести соответствуют напряжениям сдвига порядка $10^{-2} G$, т. е. оказываются в 1000 раз больше, чем для массивных образцов олова. Это подтверждает ранее сделанные оценки прочности для идеальных кристаллов.

Упругие свойства, близкие к теоретическим, наблюдались для ряда материалов. Упругая деформация усов меди до высокой степени деформации показана на рис. 20.24. Ферромагнитные доменные структуры усов железа были проиллюстрированы в гл. 16; монодоменный нитевидный кристалл никеля показан на рис. 20.25.

ЗАДАЧИ

20.1. Линии плотнейшей упаковки. Показать, что направления плотнейшей атомной упаковки для кубических гранецентрированных структур суть направления $\langle 110 \rangle$, а для кубических объемноцентрированных структур — $\langle 111 \rangle$.

20.2. Пары дислокаций. а) Найти пару дислокаций, эквивалентную ряду вакантных узлов, б) эквивалентную ряду атомов в междоузлиях.

20.3. Сила, действующая на дислокацию. Имеется кристалл в форме куба со стороной L , содержащей краевую дислокацию с вектором Бюргерса b . К верхней и нижней граням кристалла приложено напряжение сдвига σ в направлении скольжения. Показать, используя энергетический баланс, что на единицу длины дислокации действует сила $F = b\sigma$.