

ный слой, что можно сделать также двумя способами и т. д. Ясно, что всякая плотно упакованная структура может быть получена таким образом и записана в виде $ABCBCA...$, причем в этой строке не могут стоять рядом слои, обозначенные одинаковыми буквами. Впрочем, из бесконечного множества мыслимых комбинаций реальное значение в учении о кристаллах имеют только два типа укладки, соответствующие схемам: 1) $ABCABC...$ (*гранецентрированная кубическая структура*, рис. 175, а) и 2) $ABABAB...$ (*гексагональная плотно упакованная структура*, рис. 175, б).

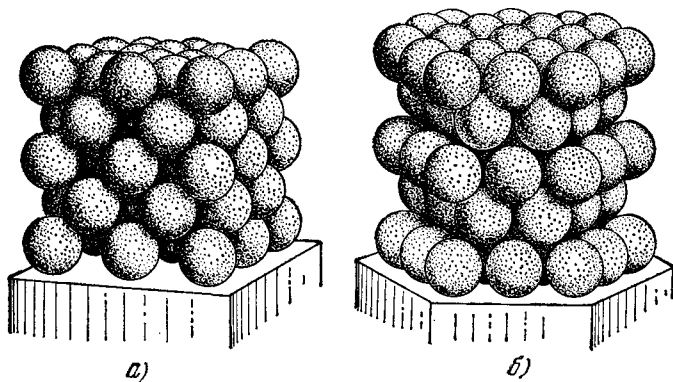


Рис. 175.

Подсчитаем, какая часть пространства приходится на шары в первой из этих структур. Для этого, предполагая шары одинаковыми, будем строить все слои в виде ромбов, укладывая их друг на друга так, чтобы получился ромбоэдр с острыми углами 60° . Если n — число шаров на ребре ромбоэдра, то полное число шаров в ромбоэдре будет $N = n^3$. Они занимают объем $v = \pi d^3 n^3 / 6 = \pi l^3 / 6$, где l — длина ребра ромбоэдра. Объем самого ромбоэдра $V = l^3 / \sqrt{2}$. Таким образом, $v = \pi V / (3\sqrt{2}) = 0,74V$, т. е. на долю шаров приходится 74% всего объема. Так и должно быть, ибо при рассмотренном способе укладки шаров они образуют гранецентрированную кубическую решетку.

§ 135. Дефекты в кристаллах

1. В реальных кристаллических решетках существуют отклонения от того идеального расположения атомов в решетке, которое мы до сих пор рассматривали. Все такие отклонения называются *дефектами кристаллической решетки*. Их можно подразделить на *макроскопические* и *микроскопические*. К макроскопическим дефектам относятся *поры, трещины, инородные макроскопические*

включения и пр. Наиболее простыми микроскопическими дефектами являются *точечные дефекты*. К ним относятся: 1) отсутствие атома в каком-либо узле решетки (*вакансия*, рис. 176, а), 2) замена «своего атома» решетки каким-либо другим «чужим» атомом (рис. 176, б), 3) внедрение своего или чужого атома в межузельное пространство (*межузельный атом*, рис. 176, в). Точечные дефекты — вакансии и межузельные атомы — могут возникнуть в результате тепловых флуктуаций. Такие дефекты называются *термодинамически равновесными*. Очевидно, они столь же неизбежны, как и броуновское движение или любые флуктуации. При нагревании кристалла концентрация вакансий и межузельных атомов возрастает экспоненциально.

Энергия точечных дефектов много больше энергии тепловых колебаний решетки. Например, для меди энергия вакансии $E_v \approx$

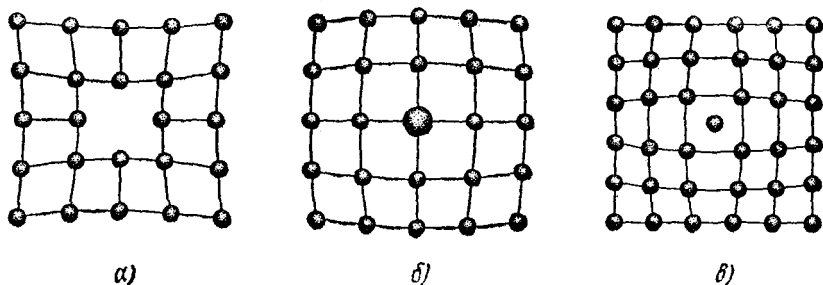


Рис. 176.

≈ 1 эв, энергия межузельного атома $E_y \approx 3$ эв, в то время как энергия тепловых колебаний kT даже вблизи температуры плавления ($1084,5^\circ\text{C}$) составляет всего $0,12$ эв. Поэтому равновесная концентрация точечных дефектов, как правило, невелика. Так, для меди вблизи температуры плавления равновесные концентрации вакансий и межузельных атомов, если их оценить по формуле Больцмана, будут соответственно

$$c_v \approx \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right) \sim 10^{-4}, \quad c_y \approx \exp\left(-\frac{E_y}{kT}\right) \sim 10^{-11}.$$

Однако в кристаллах в результате закалки, облучения нейтронами и пр. концентрация точечных дефектов часто бывает много выше равновесной. Такой «пересыщенный раствор» вакансий и межузельных атомов может распасться с образованием дислокаций.

2. *Дислокации* — это специфические *линейные дефекты* кристаллической решетки, нарушающие правильное чередование атомных плоскостей. В отличие от точечных дефектов, нарушающих *ближний порядок*, дислокации нарушают *дальний порядок* в кристалле, искажая всю его структуру. Поэтому именно дислокации

играют наиболее важную роль в механических свойствах твердых тел.

Различают два главных типа дислокаций: *краевую* и *винтовую*. Схема краевой дислокации показана на рис. 177. Дислокация характеризуется лишней кристаллической плоскостью, вдвинутой между двумя соседними слоями атомов. Линией дислокации в данном случае является прямая, перпендикулярная к плоскости рисунка и отмеченная на нем знаком \perp . «Лишний» слой атомов расположен над этим знаком. Краевая дислокация, образовавшаяся в результате неправильного наращивания кристаллической решетки, может существовать на протяжении десятков и сотен межатомных расстояний.

Винтовую дислокацию можно наглядно представить себе, произведя «разрез» решетки по полуплоскости и сдвинув части решетки по обе стороны разреза навстречу друг другу на один период параллельно краю разреза. Этот край называется *линией винтовой дислокации* и изображен на рис. 178 пунктиром. Наличие винтовой дислокации превращает кристаллические плоскости решетки в *геликоидальную поверхность* (подобную винтовой линии без ступенек).

Для определения вида дислокации пользуются *методом Бюргера*. Назовем *контуром Бюргера* контур, составленный из основных векторов трансляции решетки так, чтобы он замыкался в идеальном кристалле. В дефектном кристалле при обходе вокруг линии дислокации контур Бюргера окажется разомкнутым. Вектор, соединяющий его конечную точку с начальной, называется *вектором Бюргера*. На рис. 178 в качестве примера показано, как строится вектор Бюргера \vec{EF} для винтовой дислокации. В случае краевой дислокации вектор Бюргера перпендикулярен, а в случае винтовой — параллелен линии дислокации.

Дислокации и их движение можно наблюдать с помощью электронного микроскопа. Другой метод основан на травлении кристалла специальными реагентами. В местах выхода дислокаций на поверхность кристалла разрушение его происходит более интенсивно. Благодаря этому возникают ямки травления, делающие дислокации видимыми.

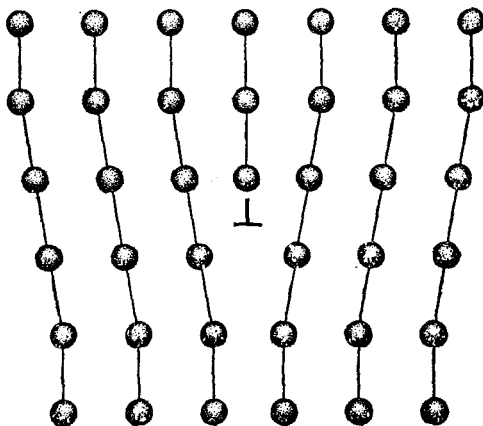


Рис. 177.

Для характеристики числа дислокаций в теле вводят их плотность. *Плотностью дислокаций* называется число дислокационных линий, пересекающих единичную площадку, мысленно проведенную в теле. Это число меняется примерно от $10^2 - 10^3$ в наиболее совершенных чистых монокристаллах до $10^{11} - 10^{12} \text{ см}^{-2}$ в сильно деформированных (холоднообработанных) металлах.

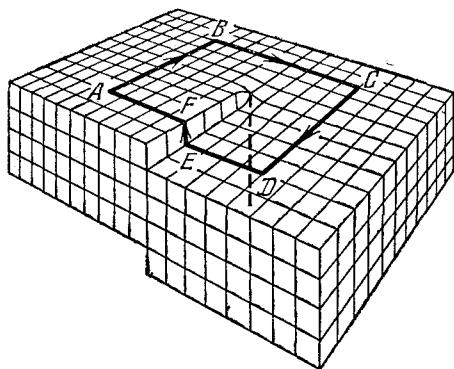


Рис. 178.

3. Дефекты в кристаллах оказывают сильное влияние на их физические свойства (механические, магнитные, электрические и пр.). Рассмотрим, например, деформацию кристалла под действием касательных напряжений. Будем предполагать сначала, что кристалл — *идеальный*, т. е. не содержит никаких дефектов. Пусть приложенное касательное напряжение τ параллельно одной

из кристаллических плоскостей решетки (рис. 179). Под действием такого напряжения слой CD решетки сместится относительно слоя AB на расстояние x . Потенциальная энергия решетки

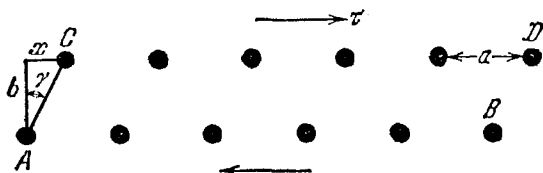


Рис. 179.

$U(x)$ будет периодической функцией смещения x с периодом a , равным постоянной решетки в направлении смещения. Она минимальна при $x = 0, a, 2a, \dots$ и максимальна при $x = a/2, 3a/2, 5a/2, \dots$. Минимумам $U(x)$ соответствуют *устойчивые*, максимумам — *неустойчивые положения равновесия*. Допустим, что на кривой $U = U(x)$ нет никаких других минимумов и максимумов. Если $x < a/2$, то после снятия напряжения решетка вернется в исходное положение равновесия, т. е. деформация будет *упругой*. Не то будет, когда x перейдет через точку максимума $x = a/2$. В этом случае произойдет самопроизвольный переход в ближайшее положение устойчивого равновесия $x = a$. Если при этом напряжение τ не снимать, то за ним последуют переходы в дальнейшие положения

устойчивого равновесия $x = 2a$, $x = 3a$ и т. д. Иными словами, деформация станет *пластической*. Таким образом, максимальное смещение, при котором еще не получится пластической деформации, будет $x = a/2$. Соответствующее ему напряжение называется *пределом упругости* или *пределом текучести* кристалла. Для оценки предела упругости τ_y Френкель предположил, что периодическая функция $U(x)$ — синусоидальна:

$$U(x) = U_0 \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{a} \right).$$

Если площадь грани AB взять равной единице, то приложенное напряжение будет

$$\tau = \frac{dU}{dx} = \frac{2\pi U_0}{a} \sin \frac{2\pi x}{a}.$$

Максимальное значение его, т. е. $2\pi U_0/a$, и будет пределом упругости τ_y . Таким образом,

$$\tau = \tau_y \sin \frac{2\pi x}{a}.$$

При малых x $\tau = \frac{2\pi\tau_y}{a} x$. С другой стороны, в этом случае $\tau = G\gamma$, где G — модуль, а γ — угол сдвига. Последний равен $\gamma = x/b$, где b — межплоскостное расстояние, т. е. расстояние между плоскостями AB и CD . Сравнивая оба выражения, получаем

$$\tau_y = \frac{G}{2\pi} \frac{a}{b}. \quad (135.1)$$

В частности, для кубических кристаллов ($a = b$)

$$\tau_y = \frac{G}{2\pi}. \quad (135.2)$$

Если подставить сюда экспериментальные значения модулей сдвига, то для предела упругости наиболее употребительных материалов (металлов и пр.) получатся величины, лежащие в интервале приблизительно от 1000 до 10 000 Н/мм². Они примерно на два порядка превосходят наблюдаемые значения. Такое расхождение теории с опытом объясняется тем, что теория не учитывает различные дефекты, всегда содержащиеся в реальном кристалле. Механизм действия дефектов, благодаря их разнообразию и нерегулярному расположению в кристаллах, может быть самым разнообразным. Ограничимся поэтому одним сильно упрощенным примером. Рассмотрим идеализированный дефект, напоминающий краевую дислокацию. Пусть в кристалле имеется кристаллическая плоскость, содержащая по сравнению с соседними параллельными плоскостями лишние атомы (рис. 180). Допустим, что n атомов одной плоскости укладываются на том же расстоянии, что и $n + 1$ атомов другой плоскости. (Такой дефект напоминает нониус.) Тогда можно воспользоваться оценкой Френкеля. Только вместо прежнего периода a

надо взять больший период, а именно $na = (n + 1) a'$. Это понижает предел упругости в n раз.

4. Совершенно аналогичная картина имеет место в вопросе о *прочности кристаллов на разрыв*. Теоретические оценки прочности приводят к результату, что эта величина для кристаллов может достигать нескольких тысяч — вплоть до 10 тысяч — ньютонов на 1 мм^2 . На самом деле в большинстве случаев наблюдаемые значения примерно в 100 и даже в 1000 раз меньше. Расхождение опять объясняется тем, что теория не учитывает наличия дефектов в реальных кристаллах. На прочность кристаллов прежде всего влияют *микроскопические поверхностные и объемные трещинки*, имеющиеся в кристаллах. Один из механизмов влияния трещин состоит в том, что напряжения в окрестности трещин распределяются *неравномерно*. Они максимальны вблизи краев трещин и могут во много раз превосходить средние напряжения в кристалле. Как

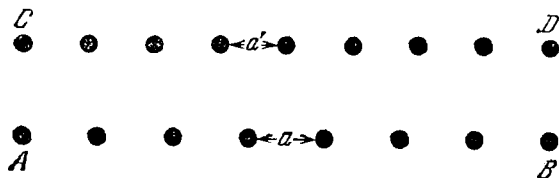


Рис. 180.

только эти максимальные напряжения достигают теоретического предела прочности, происходит увеличение размеров трещинок, а затем и *разрыв кристалла*. А. Ф. Иоффе (1880—1960) экспериментально показал, что при погружении кристаллов поваренной соли в воду ее прочность возрастает с 5 Н/мм^2 до 1600 Н/мм^2 , т. е. до величины, близкой к теоретической. Он объяснил этот результат растворением в воде поверхностного слоя кристалла и ликвидацией в нем микротрещин и других дефектов.

Существуют и другие причины понижения прочности кристаллов на разрыв. Например, как показал П. А. Ребиндер (1898—1972), на прочность материалов большое влияние оказывают *поверхностно-активные вещества*, адсорбированные на поверхности тел и понижающие при этом их поверхностную энергию. По-видимому, частицы адсорбированных веществ распирают зародышевые трещинки, проникая при этом в глубь тела и сильно уменьшая его прочность. В воздухе всегда имеется влага и другие вещества, адсорбирующиеся на поверхности тел. При удалении воздуха вместе с примесями происходит дезадсорбция, сопровождающаяся повышением прочности тела на разрыв.

Влияние дефектов на прочность материалов отчетливо проявляется при рассмотрении так называемого «*масштабного фактора*»,

т. е. зависимости средней прочности образца данного материала от его размера. Для образцов обычных размеров, порядка нескольких сантиметров и больше, эта зависимость практически не наблюдается. Но для тонких нитей она выступает весьма отчетливо. Например, прочность стеклянных нитей с диаметрами 22, 16, 12,5, 8 и 2,5 мкм равна соответственно 220, 1000, 1400, 2000 и 5500 Н/мм². Таким образом, при уменьшении диаметра стеклянной нити от 22 до 2,5 мкм прочность повышается примерно в 25 раз. Дело в том, что вероятность встречи «опасного дефекта» (например, трещины), приводящего к разрыву образца, для тонких нитей меньше, чем для толстых.

Прочность материала увеличивается в результате подавления процессов зарождения трещин, а также в результате создания препятствий для их распространения в теле. Поэтому наиболее прочные материалы могут быть получены двумя противоположными способами. Один из них состоит в изготовлении бездефектных (например, нитевидных) кристаллов, где устранены источники внутренних напряжений, на которых могут зарождаться трещины. Другой путь, наоборот, состоит в максимальном искажении правильной структуры кристалла, что затрудняет распространение в теле трещин и пластических деформаций. Техника получения сверхпрочных материалов и сплавов в настоящее время использует только второй способ (*легирование*, т. е. введение в решетку примесей из посторонних атомов, *наклеп*, т. е. сильное пластическое деформирование кристаллической решетки при холодной обработке металлов, *закалка* и пр.).