



# **ЛЕКЦИЯ 8.**

## **ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТЕЛ. Простые дислокации и конфигурации их скоплений**

**Дисциплина: Радиационные эффекты и современная спектроскопия твердого тела.**

**Преподаватель: Phd, и.о. доцента Мархабаева А.А.**



**Цель лекции:** Рассмотреть физическую природу дислокаций в кристаллах, их типы и характеристики, а также механизмы взаимодействия и формы скоплений дислокаций, определяющих пластические свойства и устойчивость кристаллических материалов.

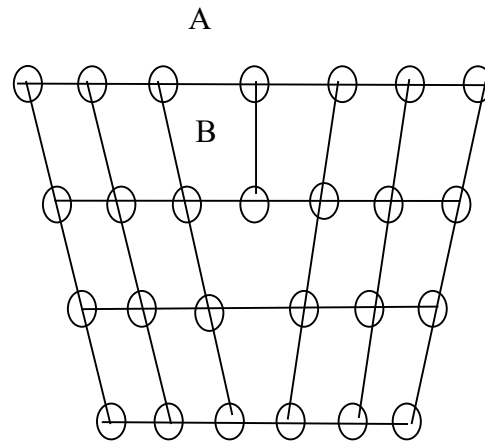
### **Основные вопросы лекции**

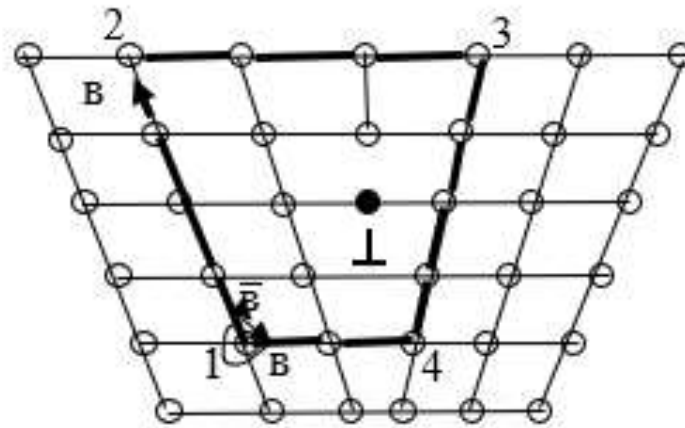
- Понятие дислокации как линейного дефекта.
- Элементарные типы дислокаций: краевая, винтовая, смешанная.
- Вектор Бюргерса и его физический смысл.
- Поля напряжений, создаваемые дислокациями.
- Движение дислокаций и механизмы скольжения.
- Взаимодействие дислокаций: аннигиляция, образование петель, ступеней.
- Конфигурации скоплений дислокаций.
- Роль дислокаций в пластической деформации и упрочнении материалов.



Дислокации, наряду с точечными дефектами, представляют наиболее распространенные типы дефектов кристаллических твердых тел. Однако они, в отличие от точечных, более многообразны. Следовательно, сложными и многообразными являются свойства дислокаций, характер их взаимодействия между собой и с дефектами других типов. Поэтому теоретическое рассмотрение дефектов дислокационного типа потребовало привлечение сложнейшего математического аппарата. В связи с этим уместны слова американского физика Р. Фейнмана: *«Математика – это язык плюс рассуждения, это язык и логика вместе. Математика – орудие для размышления. С ее помощью можно связать одно утверждение с другим. Математика – это путь, по которому мы переходим от одной совокупности утверждений к другой. И она полезна физике потому, что говорить о вещах мы можем говорить по – разному, а математика позволяет нам выяснить следствия, анализировать ситуации и видоизменять законы, чтобы связать различные утверждения».*

В ранее совершенный кубический кристалл вклинили половину лишней плоскости – ABCD. Наиболее сложные искажения решетки будут иметь место вблизи края ВС этой полуплоскости. Именно этот участок и является дислокацией – в данном случае ее называют *краевой*. Можно говорить и о линии дислокации ВС. В данном случае линия дислокации прямая, т.е. *дислокация прямолинейная*.





Единичный вектор  $\vec{a}$  определяет кристаллографическое направление линии дислокации (единичный потому, что его длина равна одному межплоскостному). Его называют вектором Бюргерса. Он замыкает проводимый вокруг линии дислокации контур Бюргерса. Введение дислокации обуславливает сильное искажение кристаллической решетки вблизи ее линии. Характерный признак *краевой* дислокации состоит в том, что связанный с ней вектор Бюргерса перпендикулярен ее линии. Если вектор Бюргерса и линия дислокации параллельны, то такую дислокацию называют *винтовой*. В подавляющем большинстве линия дислокации с вектором  $\vec{a}$  образует произвольный угол, отличный от  $0^\circ$  и  $90^\circ$ . Такие дислокации называют *смешанными*.



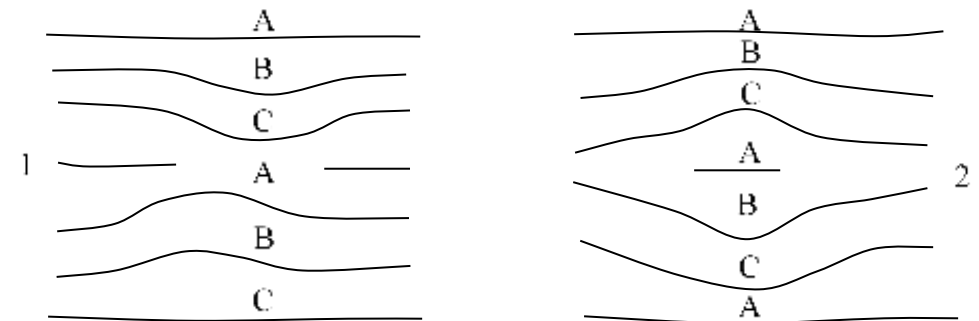
## 2.4 Дефекты упаковки и дислокационные петли

Наряду с перечисленными комплексами дефектов, в кристаллах могут образовываться и устойчиво существовать плоские скопления точечных дефектов весьма высокой кратности – насчитывающие единицы одного из четырех видов – вакансий, МУА, обеденных зон и пор. Фактически они представляют собой отсутствие (или присутствие) в кристаллической решетке части одной плоскости. В том, и другом случае мы имеем дело с краями лишних плоскостей, т.е. дислокациями. Поэтому подобные дефекты так же относятся к дислокационным, но по сравнению с ранее рассмотренными простыми, такие дефекты более сложны как по структуре, так и по свойствам.



В схеме рис.3а отсутствует части плоскости А, что соответствует присутствию плоского комплекса вакансий. Подобное нарушение называют дефектом упаковки (ДУ) вакансионного типа, или ДУ вычитания. В противоположность ему на рис. 7 в присутствие лишней полуплоскости является ДУ внедрения – скопления межузельных атомов. Такие дефекты весьма распространенные нарушения кристаллического строения металлов. Они всегда связаны с дислокациями. С другой стороны, это – частичные дислокации. Параметры этих дефектов определяется конкретной кристаллографией металла. В ГЦК – структурах наиболее распространены два вида частичных дислокаций, названных именами, определивших их ученых: частичные дислокации Шокли и частичные дислокации Франка.

С понятием дефектов упаковки и частичных дислокаций связано представление еще об одном классе дефектов дислокационного типа – *дислокационных петлях*. Подобно ДУ, – дислокационные петли относятся к двумерному или поверхностному классу. *Характерная особенность дислокационных петель* состоит в том, что они представляют собой замкнутую линию дислокации. Важный параметр дислокационных петель – это их диаметр. В этом плане выделяются два класса дислокационных петель.



ДУ вакансионного типа    ДУ межузельного типа

Рисунок 2.3. Образование дефектов упаковок





## 2.5 Границы раздела

При непрерывном периодическом повторении элементарной ячейки со всеми узлами во всех направлениях без разрыва возникает так называемый монокристалл. Но такая ситуация является исключением из правил. В большинстве случаев металлы состоят из огромного количества монокристаллических зерен с линейными размерами на уровне от долей микрона до десятков микрон, но по разному ориентированных в пространстве. Такие кристаллы получили название поликристаллов. В результате важнейшие свойства материала сильно зависят и от размеров, и от степени раз ориентации, и от атомной структуры межзеренных границ. Границы зерен – это сложный дефект кристаллического строения, относящийся к двумерным или поверхностным дефектам. Для пояснения рассмотрим два примера (рис.2.4).

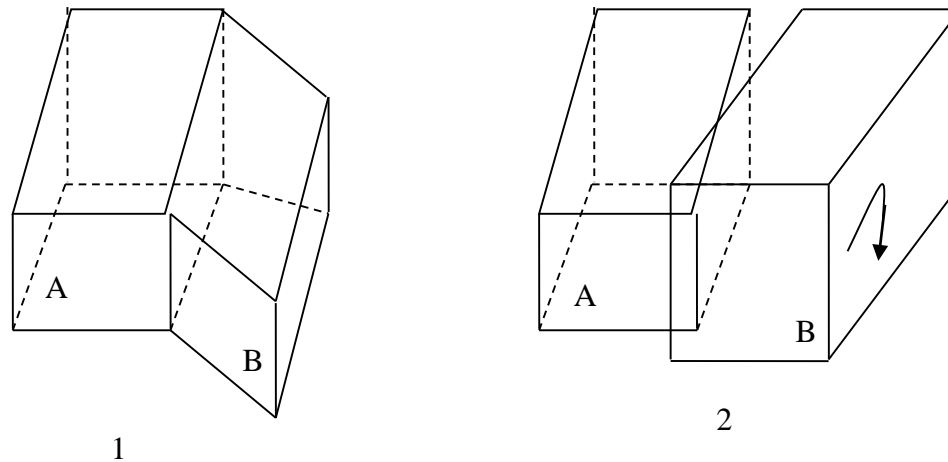


Рис. 2.4. Структура межзеренных границ

Схема 1 соответствует повороту одного зерна относительно другого вокруг оси, лежащей в плоскости границы. Область сопряжения двух кристаллов представляет собой набор краевых дислокаций. Во втором случае кристаллы повернуты друг относительно друга вокруг оси, перпендикулярной плоскости границы. Такие границы кручения образуют наборы винтовых дислокаций. Наклонные дислокации подразделяются на *малоугловые* и *большеугловые*.



Атомная структура межзеренных границ второго класса является более сложной. Информация об атомной структуре межзеренных границ важна по разным причинам. Одна из них обусловлена тем, что они являются эффективным стоком для точечных дефектов, а также тормозом для движущихся дислокаций. Соответствующей термо -, либо механической обработкой металлов можно изменить средние размеры зерен, а также создать преимущественную их ориентацию. В этом случае ее называют текстурой. Границы зерен представляет достаточно большой вид дефектов. Но наибольшим размером обладают внешняя поверхность металлов. Кроме того металл может содержать границы между различными твердыми фазами. Распространенным двумерным дефектом является двойниковая граница – симметричного зеркального смещения кристаллической решетки по одну сторону от границы раздела (рис.2.5).

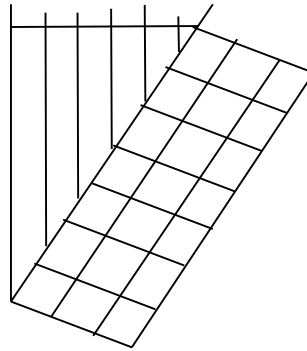


Рис.2.5. Образование двойникования кристалла

Таким образом, поверхностные дефекты металлов – большой и очень важный класс нарушений. Знание их атомной структуры и свойств позволяет лучше понять многие важные свойства в практическом отношении и активно влиять на эти свойства, успешно использовать их при решении ряда задач техники и промышленности.



## 2.6 Образование и поведения дефектов при термическом воздействии

Независимо от вида, все металлические изделия содержат дефекты кристаллической структуры. Для поликристаллов это. прежде всего, границы зерен, а также вакансии и дислокации в объеме каждого зерна. Для монокристаллов это то, что содержат отдельные зерна поликристаллов. Причем чем больше по размерам монокристалл, тем больше вероятность образования в нем дефектов. Откуда же берутся дефекты? Ответ лежит на поверхности: в самый начальный момент образования кристалла. То есть дефекты кристаллической структуры металлов возникают одновременно с возникновением самой кристаллической структуры в процессе кристаллизации из жидкого состояния. Сам процесс кристаллизации зависит от многих причин – и от температуры кристаллизации, от скорости охлаждения, от состава, от среды, где металл затвердевает и т.д. Процесс кристаллизации-это фазовый переход вещества из одного состояния в другое, и этот процесс должен идти медленно.



## 2.7 Образование и поведение дефектов при деформации

Как известно, металлы работают в самых разнообразных областях и далеко в нестабильных условиях. Металлы подвергаются и химическому воздействию и тепловому, и радиационному. Все это ведет к изменению степени совершенства структуры, т.е. образованию и перераспределению в них различного рода дефектов. Среди всех причин образования, и особенно критического поведения дефектов металлах, деформация стоит на первом месте. В конечном счете, именно деформация ведет к разрушению металла. В тоже время нельзя утверждать, что деформация первична, а дефекты структуры – вторичны. Они взаимосвязаны: пластическая деформация не может происходить в отсутствие дислокаций, и в тоже время она является причиной их образования.



Если кристаллу с такой дислокацией приложить внешнее механическое напряжение -  $\tau$  с составляющей в плоскости скольжения, отрезок АВ начинает постепенно выгибаться, последовательно занимая позиции (б-г). В случае ситуации (д) соседние участки дислокации ав и cd соединятся и рекомбинируют. Участки aA и cB сомкнутся в точках в и d, образовав новый, закрепленный в точках А и В отрезок дислокации в плоскости скольжения. Если внешнее напряжение продолжает действовать, с ним снова повторятся те же превращения и т.д. Образованные же дислокационные петли будут под действием тех же механических напряжений расширяться.

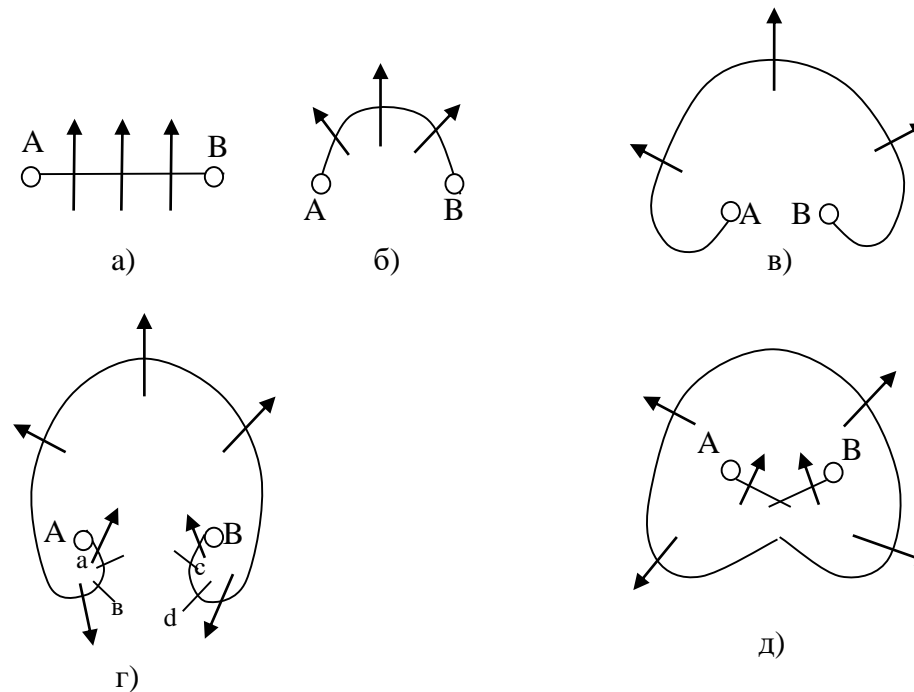


Рисунок 2.6. Механизм Франко-Рида

В находящемся под действием внешней нагрузки металла, на дислокации действуют определенные силы, способные обеспечить их движение. «Встреча» двух и более движущихся дислокаций может привести и к их торможению, и к образованию единичных точечных дефектов, и к их взаимному уничтожению. Эти процессы можно проиллюстрировать на рисунке 2.6.





## 2.8 Удаление дефектов

Термическое воздействие на металлы служит источником возникновения дефектов. Но оно же может способствовать и удалению дефектов, повышению степени совершенства кристаллической структуры металла. Такие операции называются *отжигом*. Как было отмечено ранее, в металлах существует объем рекомбинации парных дефектов Френкеля. В пределах этого объема поля упругих напряжений вакансии и МУА обуславливают их взаимное притяжение и слияние, т.е. *рекомбинацию*. Этот процесс идет при любых температурах и от температуры совершенно не зависит. Однако возможно и термическое слияние точечных дефектов. Роль температуры сводится здесь к обеспечению подвижности дефектов, хотя возможность двигаться по кристаллу является общим из необходимых условий рекомбинации вакансии и МУА, но не достаточным.

Они легко объединяются с порами и дислокационными петлями вакансионного типа. Это ведет к росту вакансионных пор и петель, что очень нехотят. Исследование этого эффекта – т.е. разной способности захватывать МУА и вакансии порами и дислокационными петлями занимает важное место в радиационной физика твердого тела и радиационном материаловедении. Поняв его причины, можно будет научиться на него воздействовать, изменять и подавлять повреждаемость металлов, направлять МУА в поры и петли вакансионного типа, а вакансии в петли межузельные, постепенно уничтожая все вновь образуемые дефекты, обеспечить тем самым радиационную стойкость металлических конструкций.

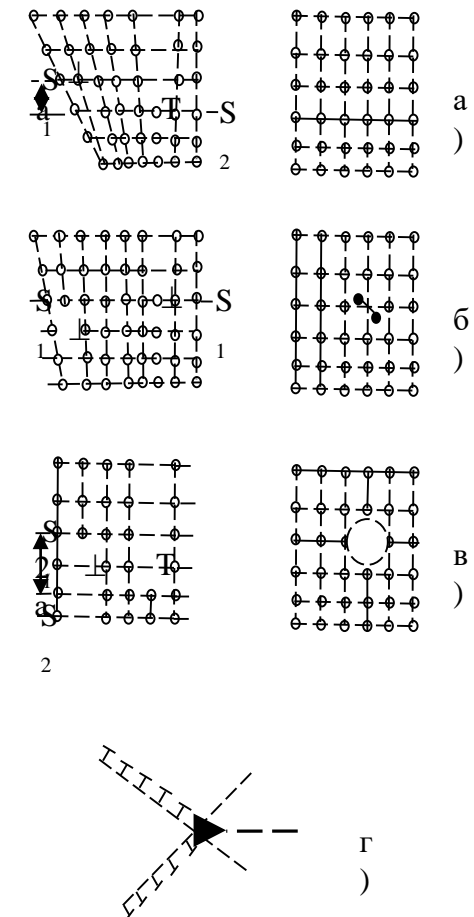


Рис. 2.7. Взаимодействия дислокаций



## Контрольные вопросы: «Простые дислокации и конфигурации их скоплений» (2.3–2.8)

### 2.3 Простые дислокации

1. Что такое дислокация? Чем дислокационные дефекты отличаются от точечных по многообразию и взаимодействиям?
2. Определите краевую, винтовую и смешанную дислокации. По какому признаку их различают?
3. Что такое линия дислокации и как она соотносится с плоскостью скольжения?
4. Дайте определение вектора Бюргерса. Как его находят (контур Бюргерса)?
5. Каково относительное направление вектора Бюргерса и линии дислокации для краевой и винтовой дислокаций?
6. Какие упругие искажения решётки создаёт край лишней полуплоскости (компрессия/растяжение над/под линией)?
7. Какие параметры (знак, модуль  $b$ , направление, линейная плотность, энергия/длина) характеризуют дислокацию?



## **Контрольные вопросы: «Простые дислокации и конфигурации их скоплений»**

### **2.4 Дефекты упаковки и дислокационные петли**

8. Что называют дефектом упаковки (ДУ) вычитания и внедрения? С какими скоплениями точечных дефектов они связаны?
9. Почему ДУ относятся к дислокационным дефектам и чем они отличаются от «простых» дислокаций?
10. Что такое частичные дислокации (Шокли, Франка) и в каких кристаллографических структурах они типичны?
11. Что такое дислокационная петля? Чем петли отличаются от одиночных дислокаций по размерности и геометрии?
12. Объясните разницу между «плоскими» и призматическими петлями (расположение вектора Бюргерса).
13. Как приток/уход вакансий влияет на размеры петель вакансионного и межузельного типов?
14. Какие физические процессы (облучение, отжиг, деформация) способствуют зарождению и эволюции петель?



## 2.5 Границы раздела (поверхностные дефекты)

15. Чем монокристалл отличается от поликристалла с точки зрения дефектной структуры?
16. Что такое межзеренная граница и почему её относят к двумерным дефектам?
17. Объясните различие малоугловых наклонных и кручёных границ (модели массивов краевых и винтовых дислокаций).
18. Как размер зерна, степень разориентации и атомная структура границы влияют на свойства материала?
19. Что такое текстура и как её формируют технологически?
20. Почему межзеренные границы являются стоками для точечных дефектов и барьерами для дислокаций?
21. Что такое двойниковая граница и чем она отличается от обычной межзеренной?



## 2.6 Образование и поведение дефектов при термическом воздействии

- 22. На каком этапе и почему зарождаются дефекты при кристаллизации из расплава?
- 23. Чем отличается гомогенное зародышеобразование от направленного роста монокристалла на затравке?
- 24. Почему сверхбыстрое охлаждение может привести к аморфному состоянию?
- 25. Что такое равновесная концентрация вакансий при данной температуре и как она меняется с  $T$ ?
- 26. Объясните суть «закалки» в терминах равновесных/неравновесных вакансий и МУА.
- 27. Почему поверхность является эффективным стоком для МУА при нагреве?
- 28. Как скорость охлаждения влияет на «заморозку» неравновесных дефектов?

## 2.7 Образование и поведение дефектов при деформации

- 29. Почему пластическая деформация невозможна без дислокаций и одновременно приводит к их размножению?



## Рекомендуемая литература:

1. Кикучи М. Дефекты и дислокации в кристаллах. М.: Мир, 1984.
2. Хирт Дж., Лоте Дж. Теория дислокаций. М.: Мир, 1972.
3. Кудрявцев Ю. И. Дефекты кристаллической решётки и их роль в процессах переноса. М.: Физматлит, 2010.
4. Халл Д., Бейкон Д. Введение в физику дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1989.
5. Callister W. D., Rethwisch D. G. Materials Science and Engineering: An Introduction. Wiley, 2020.