

---

ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

---

548(07)  
М634

Мирзаев Д.А., Окишев К.Ю.

**ОСНОВЫ ТЕОРИИ ДЕФЕКТОВ,  
ПРОЧНОСТИ И ПЛАСТИЧНОСТИ  
КРИСТАЛЛОВ**

Учебное пособие

---

Челябинск  
2013

---

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Южно-Уральский государственный университет  
Кафедра физического металловедения и физики твёрдого тела

548(07)

М634

Мирзаев Д.А., Окишев К.Ю.

# **ОСНОВЫ ТЕОРИИ ДЕФЕКТОВ, ПРОЧНОСТИ И ПЛАСТИЧНОСТИ КРИСТАЛЛОВ**

Учебное пособие

Челябинск  
Издательский центр ЮУрГУ  
2013

УДК 669.017(075.8) + 539.4(075.8) + 548.4(075.8)  
М634

Одобрено  
учебно-методической комиссией  
физико-металлургического факультета.

Рецензенты:  
В.Д. Бучельников, Л.А. Песин.

**Мирзаев, Д.А.**  
М634 Основы теории дефектов, прочности и пластичности кристаллов: учебное пособие / Д.А. Мирзаев, К.Ю. Окишев. — Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2013. — 336 с.

В пособии содержится краткое изложение основных положений кристаллографии, теории точечных и линейных дефектов кристаллического строения, механизмов упрочнения и теории разрушения, а также задачи для самостоятельной работы и справочные приложения.

Пособие предназначено для бакалавров и магистров направлений «Физика», «Прикладная механика», «Металлургия» и «Материаловедение».

УДК 669.017(075.8) + 539.4(075.8) + 548.4(075.8)

© Издательский центр ЮУрГУ, 2013

## ВВЕДЕНИЕ

Теория металлов под влиянием революционных открытий начала XX века (рентгеноструктурный анализ, квантовая физика и др.) долгое время развивалась на основе идеи об идеальном периодическом расположении атомов. Она позволила разработать целый ряд строгих теорий электропроводности, магнетизма, теплоёмкости. Однако в таких проблемах как прочность, диффузия, кинетика превращений заметных успехов достигнуто не было.

Восемьдесят лет назад, в 1930–1934 гг. Тейлор, Орован и Поляни выдвинули концепцию дислокаций в кристаллической решётке. Почти одновременно к аналогичной идее пришёл советский физик Я.И. Френкель. Ещё в 1924 г. он провёл классический расчёт критического напряжения сдвига и обнаружил разительное различие между результатами расчёта и эксперимента. Стало ясным, что в кристалле существуют некоторые нарушения периодичности, которые не позволяют реализоваться жёсткому сдвигу. Размышления о возможной природе таких нарушений привели Френкеля к гипотезе о краевой дислокации, представляющей собой по существу край оборванной атомной плоскости. В пятидесятых годах XX века была создана электронная микроскопия, и наблюдения тонких металлических фольг на просвет блестяще подтвердили существование дислокаций. Дислокации стали видимыми. В настоящее время теория дислокаций превратилась в строгую физическую теорию, позволяющую описать пластическую деформацию, эффекты упрочнения, влияние нагрева на деформированные металлы и разнообразные другие процессы. Оказалось, что дислокации играют важную роль во всех фазовых переходах, а превращения мартенситного типа, вероятно, осуществляются скольжением частичных дислокаций. В этих теориях дислокации играют роль «элементарной частицы» сдвига, подобно тому, как электрон в электродинамике выступает элементарным носителем заряда.

В данном учебном пособии материал дислокационной теории изложен в форме учебного курса, то есть подробно рассматриваются только фундаментальные принципы. Детали проблем и приложения читатели смогут найти в двухтомной энциклопедии М.А. Штремеля «Прочность сплавов» [1, 2], а также в другой учебной и монографической литературе, примерный список которой приведён в конце пособия [3–20].

Изложению основного материала в пособии предшествует раздел о термодинамическом равновесии (глава 1), ибо это состояние мы считаем исходным. Затем система выводится из равновесия, и в ней развиваются кинетические процессы, в том числе деформация и разрушение. Также в начале пособия рассматриваются основные понятия кристаллографии и строение кристаллических решёток металлов (глава 2), что необходимо

для понимания особенностей строения и поведения дефектов в реальных металлах.

Данное учебное пособие предназначено для студентов и аспирантов физико-металлургического и физического факультетов, будущая деятельность которых связана с разработкой, производством, термической обработкой, исследованием и моделированием поведения разнообразных сплавов. Среди многих ценных свойств металлов важнейшим для практики является их высокая прочность, которая и делает стали и сплавы важнейшими конструкционными материалами. Развитие металлургии есть, по существу, непрерывная борьба специфическими методами за повышение прочности и вязкости сплавов, позволяющих длительное время эксплуатировать детали при высоких или низких температурах, в космосе, где на материалы воздействует радиация, метеориты, магнитные поля и резкие перепады температуры, на Земле в условиях коррозии, абразивного износа, циклических динамических воздействий и т.п.

Сотни лет создание сплавов осуществлялось методом эмпирического подбора химических компонентов сплавов. Этот метод, который критикуют столько же лет, сколько он существует, позволил тем не менее создать современную технику. Но время эмпирического метода «убавим — добавим», безусловно, прошло. Он, конечно, не умер, но отодвигается на второй план методами, в основе которых лежит теоретическое понимание сущности деформации и разрушения. Уже первые оценки теоретической прочности металлов и сплавов показали, что мы не используем и сотой доли прочности химических связей, потому что сами технологические (равновесные) процессы получения металлов уже закладывают в металл дефекты, являющиеся будущими центрами разрушения. Непрерывный анализ механизмов упрочнения наряду с учетом дефектов на всех уровнях от атомных до макроскопических и возможности сегрегации атомов на дефектах — вот тот новый путь создания сплавов, который становится определяющим. Наступает время создания автоматизированных систем разработки сплавов, начало которым заложено мировой наукой в 80–90-е годы двадцатого века. Эмпирика в науке, даже в такой сложной и содержащей случайные, неопределенные параметры, как металлургия, должна быть заменена количественными теориями, ибо по справедливому выражению Д.И. Менделеева «Каждая наука может быть названа наукой ровно настолько, насколько в ней содержится математика».

Пособие основано на материале ранее изданного авторами в двух частях курса «Физические основы прочности» [3, 4], но переработано и дополнено.

# 1. РАВНОВЕСНОЕ СОСТОЯНИЕ МЕТАЛЛОВ

## 1.1. РАВНОВЕСИЕ В СИСТЕМАХ ЧАСТИЦ

Поместим в термостат температуры  $T$  произвольную систему частиц. Мысленно разделим её объём  $V$  на большое число одинаковых частей — подсистем, и будем производить измерения физических свойств каждой подсистемы. Мы заметим, что с течением времени температура, давление, энергия, число частиц и другие физические параметры во всех подсистемах выравниваются. Мы говорим, что система приходит в состояние равновесия. В наиболее общем смысле *равновесной* называют систему, для которой любая термодинамическая величина является функцией только внешних параметров ( $T$ ,  $V$  и других) и не зависит от времени и точки измерения. Поэтому процессы переноса тепла и вещества являются неравновесными процессами, точнее процессами установления равновесия. Истинно равновесный процесс протекает при столь медленном изменении внешних параметров, что равновесие успевает установиться в каждый момент времени.

В ходе процесса любая система обменивается теплотой с окружением (термостатом) и совершает работу против внешних сил (например, давления), поэтому вследствие сохранения энергии  $E$

$$dE = \delta Q - \delta W, \quad (1)$$

где  $\delta Q$  — количество теплоты, поглощённой системой, а  $\delta W$  — работа, совершённая ею.

Важно помнить, что работа и количество тепла являются функциями процесса, а не только начального и конечного состояния тела. Это особенно наглядно проявляется в круговых процессах, начинающихся и кончающихся в одном состоянии ( $T$  и  $V$ ). Изменение энергии для такого процесса всегда равно нулю, хотя тело может получить или отдать некоторое количество тепла (или работы). Поэтому можно говорить об энергии  $E$  в данном состоянии, но нельзя говорить о количестве теплоты.

Однако для равновесных круговых процессов было замечено, что сумма приведённых теплот  $\left(\frac{\delta Q}{T}\right)$ , поглощённых или отданных системой на различных этапах процесса, равна нулю, т.е.  $\oint \delta Q = 0$ .

Это показывает, что термодинамическая функция  $S$ , дифференциал которой определён равенством

$$dS = \frac{\delta Q}{T}, \quad (2)$$

является, как и энергия  $E$ , функцией состояния и не зависит от вида равновесного процесса. Эта функция названа *энтропией*.

Феноменологическое описание равновесия можно углубить, если рассмотреть это понятие с атомистических позиций. Внутренняя энергия, выступающая как основная термодинамическая функция, представляет сумму энергий атомов. В металле, например, атомы совершают малые колебания около узлов решётки. Энергия колебательного движения квантована, поэтому атом может иметь любую из дозволенных энергий  $\varepsilon_p$ :

$$\varepsilon_p = h \cdot \nu \cdot \left( p + \frac{1}{2} \right), \quad (3)$$

где  $\nu$  — частота колебаний, а  $p$  — целое положительное число, определяющее уровень энергии.

В каждый момент времени в системе реализуется определённое распределение атомов по энергиям. Чтобы ясно представить себе это положение, рассмотрим замкнутую систему из 1000 атомов и допустим для простоты, что каждый атом может находиться только в трёх квантовых состояниях с энергиями  $\varepsilon_1 = h\nu$ ;  $\varepsilon_2 = 2h\nu$ ;  $\varepsilon_3 = 3h\nu$ . Возможны многочисленные варианты распределения частиц по уровням, оставляющие постоянной энергию. Важно понимать, что каждый вариант распределения можно осуществить различным числом способов. Например, поместить на уровень  $\varepsilon_2$  один атом можно  $10^3$  способами, а два — уже  $999 \cdot 10^3$ . Будем понимать под термодинамической вероятностью  $W$  данного распределения число микроскопических способов его осуществления. Пусть на уровнях  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$  находятся соответственно  $N_1, N_2, N_3$  атомов. Рассчитаем термодинамическую вероятность такого распределения.  $N_1$  атомов из 1000 можно выбрать  $C_{1000}^{N_1}$  способами, из остающихся  $(1000 - N_1)$  атомов  $N_2$  можно выбрать  $C_{1000 - N_1}^{N_2}$  способами, и так далее. Следовательно,

$$W = \frac{1000!}{N_1! N_2! N_3!}. \quad (4)$$

Числа заполнений  $N_1, N_2, N_3$  связаны условиями постоянства энергии и полного числа частиц:

$$\frac{E}{h\nu} = N_1 + 2N_2 + 3N_3; \quad (5)$$

$$1000 = N_1 + N_2 + N_3. \quad (6)$$

Поэтому фактически  $W$  есть функция только одного параметра, например,  $N_2$ . Обозначим  $N_2 = x$ . Пусть  $E = 2000h\nu$ . Тогда уравнения (5) и (6) удовлетворяются, если  $N_1 = N_3 = \frac{1000 - x}{2}$ , поэтому искомое  $W_x$  равно

$$W_x = C_{1000}^x \cdot C_{1000-x}^{(1000-x)/2} = \frac{1000!}{x! \cdot \frac{1000-x}{2}! \cdot \frac{1000-x}{2}!}. \quad (7)$$

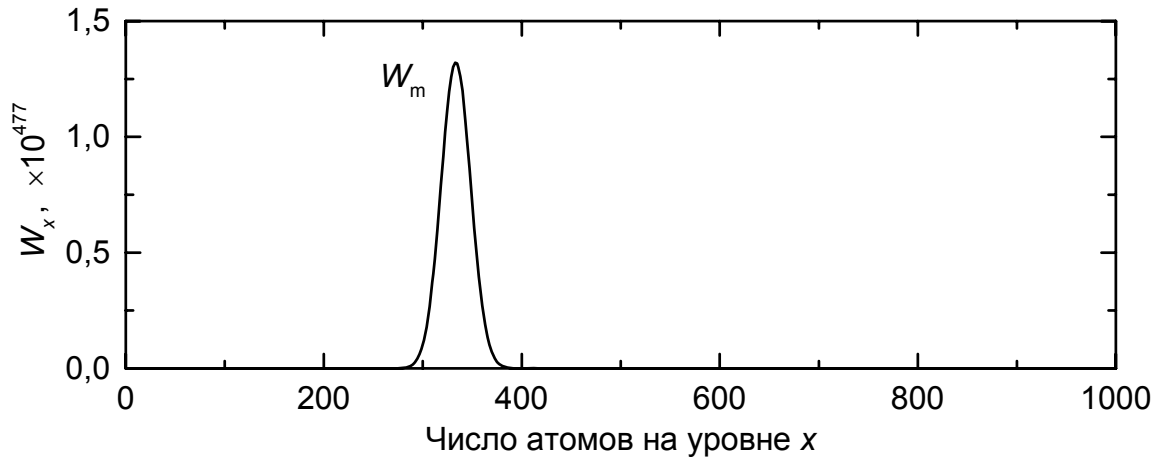


Рис. 1. Термодинамическая вероятность  $W_x$  нахождения некоторого числа атомов  $x$  на квантовом уровне  $\epsilon_2$

Этот простой расчёт, результаты которого даны на рис. 1, наглядно показывает основную особенность систем частиц: для некоторого распределения частиц по энергиям термодинамическая вероятность имеет очень резкий максимум ( $W_m$ ). Поэтому система практически всегда будет иметь распределение, соответствующее  $W_m$ . Это распределение называют равновесным. Если система в данный момент находится в неравновесном состоянии ( $W_x < W_m$ ), то в следующие моменты она переходит в состояние с большей вероятностью и, наконец, достигает равновесного. Следовательно, наиболее вероятным развитием процесса является

$$dW \geq 0. \quad (8)$$

Как ясно из расчёта,  $W_m = f(E)$ , поскольку требование  $E = \text{const}$  существенно ограничивает число способов распределения. Например, при  $E = 1000h\nu$  все атомы занимают низший уровень, для которого  $W = 1$ .

Разделим нашу систему на ряд макрочастей. Пренебрегая слабым взаимодействием между подсистемами, запишем

$$E = E_1 + E_2 + E_3 + \dots, \quad (9)$$

а в силу того, что вероятность одновременного появления независимых событий равна произведению вероятностей появления каждого,

$$W = W_1 \cdot W_2 \cdot W_3 \cdot \dots \quad (10)$$

Поскольку  $E$  — аддитивная величина, она должна зависеть не от  $W$ , а от  $\ln W$ , так как последний есть также аддитивная функция. Л. Больцман доказал, что  $\ln W$  совпадает с вводимой в термодинамике энтропией (см. уравнение (2)):

$$S = k \ln W, \quad (11)$$

где  $k$  — константа Больцмана, уравнивающая размерности. Тем самым энтропия определена как для равновесного состояния ( $W = W_m$ ), так и неравновесного ( $W \neq W_m$ ). Из уравнения (8) следует, что в изолированной системе наиболее вероятным процессом является рост энтропии:



$$dS > 0, \quad (12)$$

а равновесие отвечает условию  $dS = 0$ .

Говоря о «наиболее вероятном» следствии, надо иметь в виду, что в действительности вероятность перехода в состояние с большей энтропией настолько подавляюще велика (см. рис. 1) по сравнению с вероятностью сколько-нибудь заметного её уменьшения, что последнее фактически никогда не может наблюдаться. В этом заключается второй закон термодинамики.

Рассмотрим на простом примере физический смысл другой важной функции — температуры. Пусть в тепловой контакт приведены две простые системы из  $10^3$  атомов, уже обсуждавшиеся выше. Энергия одной из них равна  $1000h\nu$  ( $N_1 = 1000$ ,  $N_2 = N_3 = 0$ ,  $W_m = 1$ ,  $S = 0$ ), а другой  $2000h\nu$  ( $N_1 = N_2 = N_3 = 1000/3$ ,  $W_m = 1,32 \cdot 10^{477}$ ,  $S = 1100k$ ). Для объединённой системы  $W = W_1 \cdot W_2 = 1,32 \cdot 10^{477}$  и  $S = S_1 + S_2 = 1100k$ . Допустим теперь, что энергия  $250h\nu$  перешла от первого тела ко второму. Изменились числа атомов  $N_1$ ,  $N_2$  и  $N_3$  обеих систем. Решив уравнения (5) и (6), получаем  $W_{1m} = 4,47 \cdot 10^{267}$ ,  $S = 616k$  и  $W_{2m} = 3,30 \cdot 10^{456}$ ,  $S = 1051k$ . Следовательно,  $W = 1,48 \cdot 10^{724}$ , а  $S = 1667k$ .

Итак, в результате перераспределения тепловой энергии полная энтропия увеличивается. Такой процесс по второму закону термодинамики реализуется самопроизвольно. Энергия от системы 2 будет перетекать к системе 1 до тех пор, пока полная энтропия не достигнет максимума, то есть когда

$$dS = dS_1 + dS_2 = 0. \quad (13)$$

При равновесии  $dS_1 = f(E_1)$  и  $dS_2 = f(E_2)$ . Поэтому

$$dS = \frac{dS_1}{dE_1} \cdot dE_1 + \frac{dS_2}{dE_2} \cdot dE_2 = 0. \quad (14)$$

В изолированной системе  $dE_1 = -dE_2$ . Следовательно, максимум энтропии достигается при

$$\frac{dS_1}{dE_1} = \frac{dS_2}{dE_2}. \quad (15)$$

В рассмотренном процессе система не совершала работы, поэтому  $dE = \delta Q = TdS$ . Максимуму полной энтропии отвечает поэтому условие постоянства температуры во всех частях системы:

$$T_1 = T_2. \quad (16)$$

Теперь рассмотрим условие равновесия незамкнутой системы более общего типа, совершающей работу против внешних сил. Энтропия системы меняется как в результате обмена тепла, так и естественного увеличения в ходе необратимого процесса. Поэтому в общем случае

$$dS \geq \frac{\delta Q}{T}. \quad (17)$$

Из уравнения сохранения энергии (1) следует

$$dE - TdS + \delta W \leq 0. \quad (18)$$

Допустим, что работа совершается против внешнего давления, то есть  $\delta W = PdV$ , тогда

$$dE - TdS + PdV \leq 0. \quad (19)$$

Пусть в ходе процесса остаются неизменными  $V$  и  $T$ . Постоянство температуры можно, например, обеспечить, если поместить тело в другую систему, имеющую настолько более значительную массу и энергию, что их изменения после контакта пренебрежимо малы. Так как  $PdV = 0$ , а  $TdS = d(TS)$  то уравнение (19) можно записать

$$dE - d(TS) = d(E - TS) \leq 0. \quad (20)$$

Здесь знак равенства относится к равновесному состоянию. Введем для изучаемой системы функцию свободной энергии (Гельмгольца)

$$F = E - TS. \quad (21)$$

Энергия и энтропия определены как для равновесного, так и для неравновесного состояния. Следовательно, это же справедливо и для  $F$ . Из условия (20) видно, что при равновесии свободная энергия имеет минимум

$$dF = 0. \quad (22)$$

Более важным для теории металлов является случай постоянства  $P$  и  $T$ , поскольку измерения свойств обычно проводят при  $P = P_{\text{атм}}$ . Теперь  $PdV = d(PV)$  и  $TdS = d(TS)$ , и мы получим

$$d(E - TS + PV) \leq 0. \quad (23)$$

Равновесие описывается как минимум термодинамического потенциала (свободной энергии Гиббса)  $G = E - TS + PV$

$$dG = 0. \quad (24)$$

Заметим, что для конденсированных тел при невысоких давлениях  $PV$  мало, так что  $G$  и  $F$  практически совпадают.

## 1.2. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМОВ ПО ЭНЕРГИЯМ

Принцип минимума свободной энергии позволяет установить равновесное распределение атомов по энергиям. В металлах атомы колеблются около узлов решетки. Поскольку энергия колебаний квантована, то каждый атом имеет одно из дозволённых значений энергии  $\varepsilon_p = h\nu \left( p + \frac{1}{2} \right)$ ,

где  $\nu$  — частота колебаний. Пусть при данной температуре энергию  $\varepsilon_p$  имеют  $n_p$  атомов. Индекс  $p$  будем рассматривать как переменный целочисленный индекс, нумерующий последовательно уровни энергии. Полная энергия системы  $N$  атомов равна

$$E = \sum_{p=0}^{\infty} n_p \varepsilon_p. \quad (25)$$

При расчете  $W$  учтем, что  $n_0$  атомов можно выбрать  $C_N^{n_0}$  способами, из оставшихся  $N - n_0$  атомов  $n_1$  атомов выбирается  $C_{N-n_0}^{n_1}$  способами. Продолжая эту цепочку рассуждений, получим

$$W = C_N^{n_0} \cdot C_{N-n_0}^{n_1} \cdot C_{N-n_0-n_1}^{n_2} \cdot \dots = \frac{N!}{n_0! \cdot n_1! \cdot n_2! \cdot \dots \cdot n_p! \cdot \dots}; \quad (26)$$

энтропия

$$S = k \ln W = k \left\{ \ln N! - \sum_{p=0}^{\infty} \ln n_p! \right\}. \quad (27)$$

Для расчетов  $\ln n_p!$  удобно воспользоваться известной формулой Стирлинга. При больших  $n_p$

$$\ln n_p! \approx n_p \ln n_p - n_p. \quad (28)$$

Нахождение равновесных  $n_p$  сводится к отысканию минимума свободной энергии

$$F = \sum_{p=0}^{\infty} n_p \varepsilon_p - kT \left( N \ln N - N - \sum_{p=0}^{\infty} (n_p \ln n_p - n_p) \right), \quad (29)$$

который однако является условным, поскольку переменные  $n_p$  ( $p=0, 1, 2, 3, \dots$ ) связаны условием постоянства числа атомов

$$\sum_p n_p = N \quad (30)$$

По методу Лагранжа для подобных задач ищется минимум более сложной функции

$$\Phi = \sum_{p=1}^{\infty} n_p E_p - kT \left( N \ln N - N - \sum_{p=0}^{\infty} (n_p \ln n_p - n_p) \right) + \lambda \left( \sum_{p=0}^{\infty} n_p - N \right), \quad (31)$$

содержащей неопределенный множитель  $\lambda$ . Из условий экстремума

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_1} = \frac{\partial \Phi}{\partial n_2} = \dots = \frac{\partial \Phi}{\partial n_p} = \dots = 0 \text{ следует}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_p} = E_p - kT \ln n_p + \lambda = 0, \quad p=0, 1, 2, 3, \dots, \quad (32)$$

откуда

$$n_p = \exp\left(-\frac{\lambda}{kT}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon_p}{kT}\right). \quad (33)$$

Неизвестный множитель  $\lambda$  можно найти из уравнения

$$N = \exp\left(-\frac{\lambda}{kT}\right) \cdot \sum_{p=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_p}{kT}\right). \quad (34)$$

Окончательно

$$n_p = N \cdot \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon_p}{kT}\right)}{\sum_{p=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_p}{kT}\right)}. \quad (35)$$

Эта формула определяет при равновесии число атомов, имеющих энергию  $\varepsilon_p$ . Отношение  $\frac{n_p}{N}$  представляет долю частиц, имеющих энергию  $\varepsilon_p$  или, как говорят физики, расположенных на  $p$ -ом квантовом уровне. Эту же величину можно трактовать как вероятность события, что произвольный атом имеет энергию  $\varepsilon_p$ :

$$U(\varepsilon_p) = \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon_p}{kT}\right)}{\sum_{p=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_p}{kT}\right)}. \quad (36)$$

Формула (36) была впервые получена немецким физиком Л. Больцманом и называется распределением (атомов по энергиям) Больцмана.

Здесь важно обратить внимание на следующее обстоятельство. При выводе формулы (35) постулировалось, что колебания атомов независимы. На самом деле в системе полностью невзаимодействующих частиц невозможно изменить начальное распределение. Поэтому в неявном виде допускается, что между атомами существует слабое взаимодействие, которое, не меняя баланс энергий, достаточно, чтобы изменить распределение, приближая его к равновесному.

### 1.3. РАВНОВЕСИЕ ФАЗ

Опыт убеждает нас, что в тепловом равновесии тела не обязательно являются однородными, но могут распадаться на две (и более) соприкасающиеся однородные части, находящиеся в различных состояниях, то есть имеющих разные кристаллические решетки, химический состав, тип связи и т.д. Однородные части вещества или раствора, которые могут существовать одновременно, соприкасаясь между собой, называются *фазами* данного вещества или раствора. Равновесие фаз, очевидно, в первую очередь заключается в тепловом равновесии — равенстве температур и механическом равновесии поверхности раздела фаз — равенстве давлений. Далее, проницаемость границы позволяет фазам обмениваться атомами. Поэтому должно иметь место равновесие атомных переходов между фазами.

Допустим, что рассматриваемая система состоит из двух фаз и некоторое количество  $dn_v$  молей компонента  $v$  переходит из фазы I в фазу II. Изменение свободной энергии всей системы

$$dG = \left( \frac{\partial G^{\text{II}}}{\partial n_v} - \frac{\partial G^{\text{I}}}{\partial n_v} \right) \cdot dn_v. \quad (37)$$

Производная  $\frac{\partial G}{\partial n_v} = \mu_v$  называется химическим потенциалом компонента  $v$  при  $P, T = \text{const}$ . Из общего условия равновесия  $dG = 0$  следует, что равновесие фаз по элементу  $v$  достигается, когда

$$\mu_v^{\text{II}} = \mu_v^{\text{I}}. \quad (38)$$

В противоположном случае, при  $\mu_v^{\text{II}} < \mu_v^{\text{I}}$ , элемент самопроизвольно переходит из фазы I в фазу II, так как  $dG = (\mu^{\text{II}} - \mu^{\text{I}}) \cdot dn_v < 0$ . Полное равновесие фаз имеет место при равенстве химических потенциалов всех компонентов ( $v=0, 1, 2, 3, \dots$ ).

В частном случае уравнение (38) описывает равновесие твердой и газообразной фаз растворов. Обозначим через  $P_v^0$  равновесное давление пара над чистым компонентом  $v$ , а через  $P_v$  — парциальное давление его пара над сплавом. Приведем в контакт чистое вещество  $v$  и его раствор. При переходе  $dn_v$  молей в раствор

$$dG = (\mu_v - \mu_v^0) dn_v. \quad (39)$$

Этот процесс можно провести иначе, через газовую фазу: испарим  $dn_v$  молей чистого компонента при давлении  $P_v^0$ , изотермически сожмем до  $P_v$  и осадим в раствор при давлении  $P_v$ . Изменение свободной энергии для такого процесса равно работе изотермического сжатия

$$dG = dn_v \int_{P_v^0}^{P_v} \frac{RT}{P} dP = dn_v \cdot RT \ln \frac{P_v}{P_v^0}. \quad (40)$$

Отношение равновесных давлений пара над сплавом и чистым компонентом обозначают как активность  $a_v = \frac{P_v}{P_v^0}$ . Сравнивая уравнения (39) и (40), заключаем

$$\mu_v = \mu_v^0 + RT \ln a_v. \quad (41)$$

Для сильноразбавленных растворов  $a_v = x_v$ , где  $x_v$  — атомная доля растворенного элемента. В общем случае отношение  $a_v/x_v$  представляет коэффициент активности  $f_v$ . Поэтому

$$\mu_v = \mu_v^0 + RT \ln f_v x_v. \quad (42)$$

Химические потенциалы компонентов можно рассчитать из молярной свободной энергии раствора. Рассмотрим для простоты бинарный сплав ( $A$ ,  $B$ ) состава  $x_A$  и  $x_B = 1 - x_A$ . Свободная энергия  $n$  молей раствора вследствие аддитивности этой функции равна  $nG(x_A, x_B)$ , где  $G(x_A, x_B)$  — свободная энергия моля раствора. Учитывая, что  $n = n_A + n_B$  и  $x_A = \frac{n_A}{n_A + n_B}$ , имеем:

$$\mu_A = \frac{\partial}{\partial n_A}(nG)_{T,P,n_B} = G + (1 - x_A) \frac{dG}{dx_A}; \quad (43a)$$

$$\mu_B = \frac{\partial}{\partial n_B}(nG)_{T,P,n_A} = G + (1 - x_B) \frac{dG}{dx_B}. \quad (43б)$$

Уравнениям (43) можно дать наглядное геометрическое толкование. Допустим, что элементы  $A$  и  $B$  образуют неограниченные твердые растворы. Нанесем на осях ординат (рис. 2) свободные энергии чистых компонентов. Прямая, соединяющая эти точки, определяет свободную энергию их механической смеси. Свободная энергия растворов должна лежать ниже этой линии, так как растворение есть процесс самопроизвольный. Проведём в некоторой точке  $x_A$  касательную к кривой  $G(x_A)$ . Коэффициент её наклона равен  $\frac{dG}{dx_A} = -\frac{dG}{dx_B}$ , поэтому отрезки, отсекаемые на осях  $A$  и  $B$ , соответ-

ственно равны  $G + (1 - x_A) \frac{dG}{dx_A}$  и  $G + (1 - x_B) \frac{dG}{dx_B}$ , то есть равны химическим потенциалам компонентов.

Если раствор состоит из двух фаз ( $\alpha$  и  $\beta$ ), находящихся в равновесии, то условия  $\mu_A^\alpha = \mu_A^\beta$  и  $\mu_B^\alpha = \mu_B^\beta$  означают, что равновесные составы определяются точками касания общей касательной, проведенной к обоим кривым (рис. 3). На отрезке  $x_1 \dots x_2$  наименьшей свободной энергии отвечает прямая  $CD$ . Её уравнение

$$G(x) = G^\alpha(x_1) \cdot \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} + G^\beta(x_2) \cdot \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \quad (44)$$

описывает свободную энергию механической смеси  $\alpha$ -фазы состава  $x_1$  и  $\beta$ -фазы состава  $x_2$ , взятых в молярных долях  $\frac{x_2 - x}{x_2 - x_1}$  и  $\frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$  соответственно. Поэтому сплавы состава  $x_1 < x < x_2$  при рассматриваемой температуре являются двухфазными.

Для однокомпонентных систем, например, чистый металл, химические потенциалы просто равны молярным свободным энергиям фаз. Фазами в этом случае могут являться жидкость, газ, а также различные (аллотропные) кристаллические формы. Равновесие фаз достигается при

$$G^\alpha = G^\beta.$$

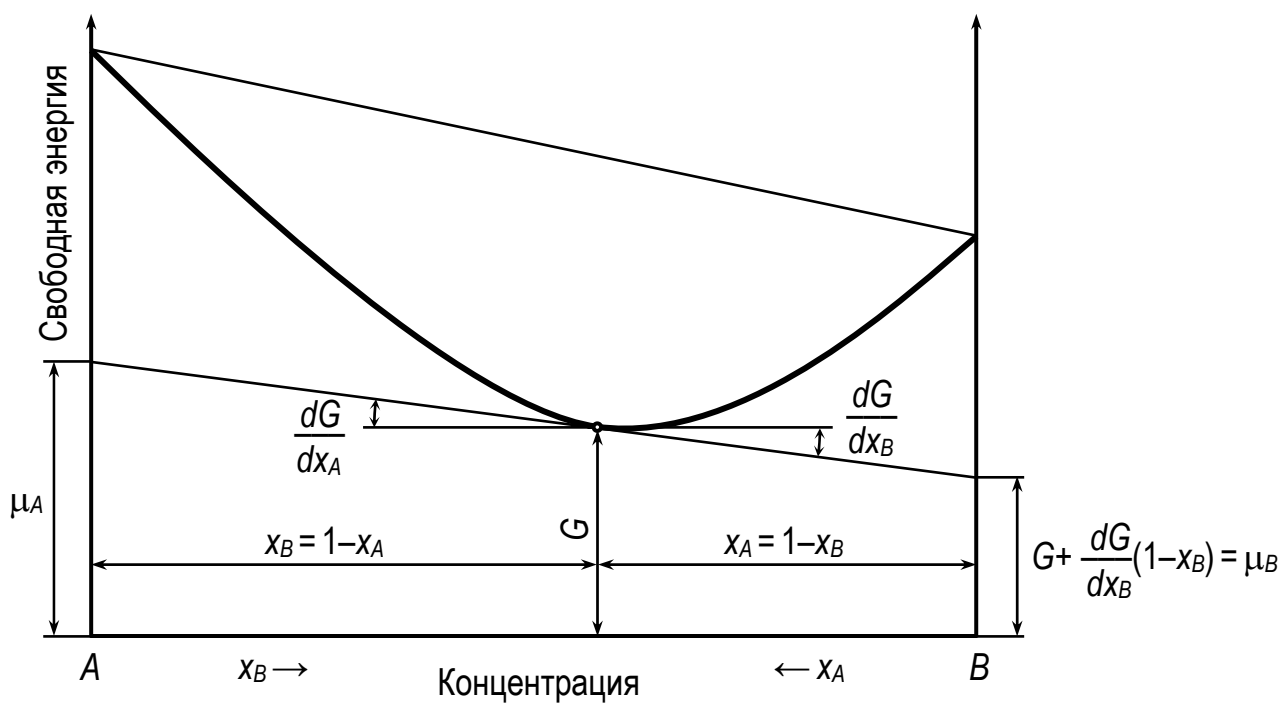


Рис. 2. Геометрический метод определения химических потенциалов

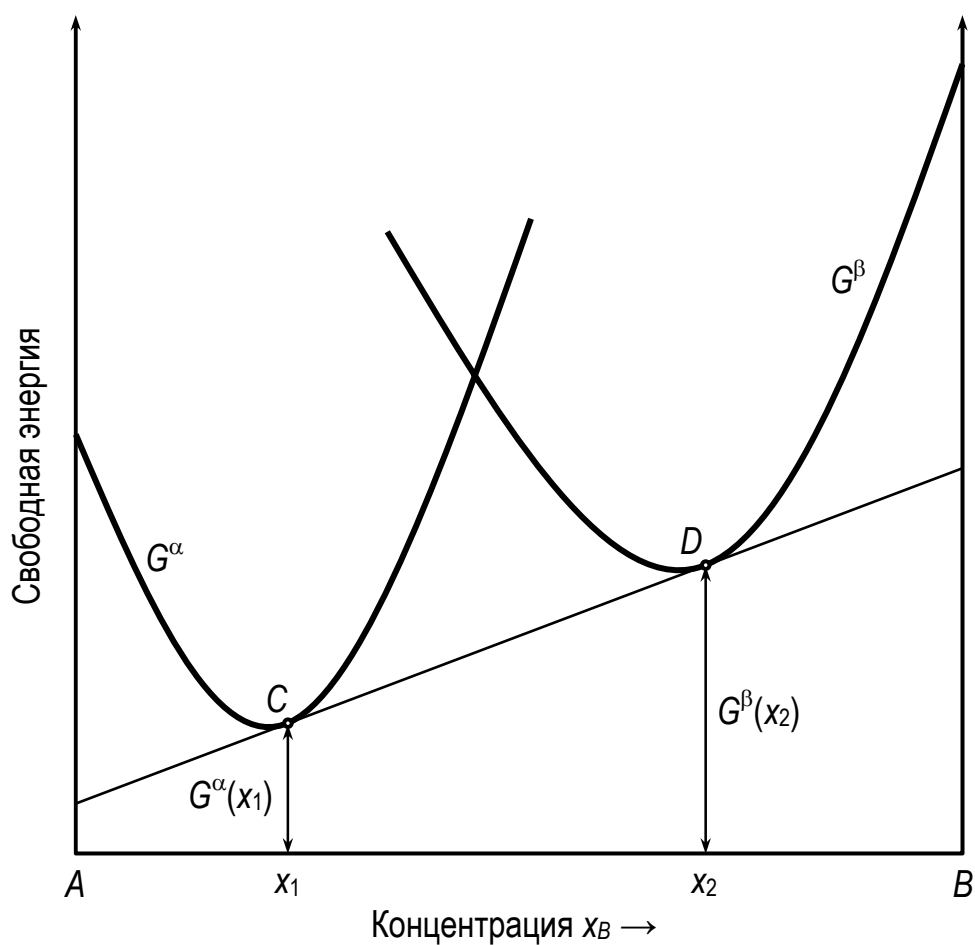


Рис. 3. Графическое изображение условий равновесия  $\alpha$ - и  $\beta$ -твёрдых растворов

В пространстве  $T$  и  $P$  функции  $G^\alpha(T, P)$  и  $G^\beta(T, P)$  образуют поверхности (рис. 4). Равновесию фаз отвечает линия пересечения  $AD$ . Ее проекция на плоскость  $P—T$  определяет равновесные значения  $T$  и  $P$ , причем  $T=f(P)$ . Правее этой линии устойчива  $\alpha$ -фаза, а левее —  $\beta$ -фаза. Если, как обычно,  $P=\text{const}$ , то имеется только одна точка пересечения. Соответствующая температура называется *температурой фазового перехода I рода* (плавление, кипение, полиморфное превращение). Иногда одна или обе фазы вещества являются ферромагнетиками, то есть обладают самопроизвольной намагненностью. Величина свободной энергии ферромагнетика зависит от напряжённости магнитного поля:  $G = G(P, T, H)$ , причём

$$dG = -S \cdot dT + V \cdot dP - I \cdot dH, \quad (45)$$

где  $I$  — намагненность, или магнитный момент единицы объёма. Теперь очевидно, что и температура перехода должна помимо давления зависеть от напряжённости магнитного поля.

В заключение рассмотрим способ определения числа фаз, которые могут одновременно находиться в равновесии в сплаве. Пусть в сплаве из  $K$  компонентов образуется  $\Phi$  фаз. Обозначим через  $\mu_{vj}(x_1, x_2, \dots, x_v, \dots)$  химический потенциал компонента  $v$  в фазе  $j$ . Независимые уравнения равновесия между фазой  $j$  и, например, фазой 1 можно записать так:

$$\mu_{vj}(j = 2, 3, 4, \dots, \Phi) = \mu_{v1}(v = 1, 2, 3, \dots, K). \quad (46)$$

Для каждого  $v$  получается  $\Phi - 1$  уравнение, так что всего уравнений  $K(\Phi - 1)$ . Независимыми переменными являются концентрации фаз, давление и температура. Поскольку  $x_1 + x_2 + \dots + x_v + \dots + x_K = 1$ , то общее число неизвестных  $(K - 1)\Phi + 2$ .

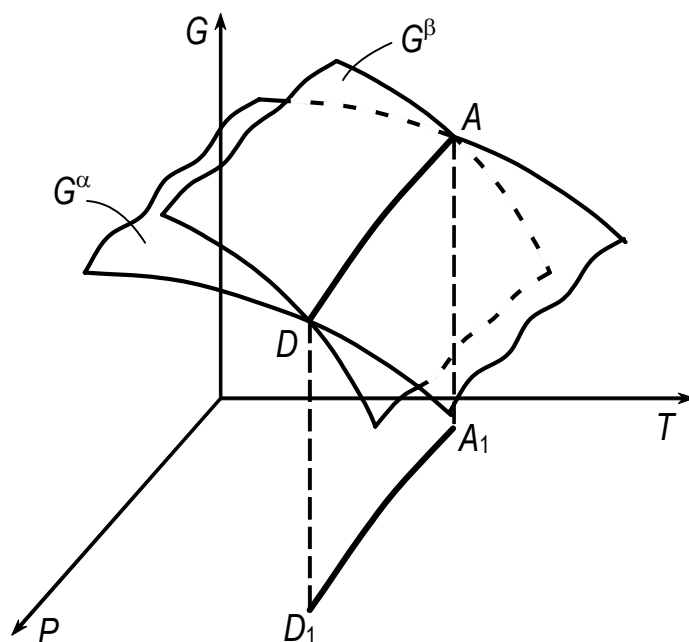


Рис. 4. Равновесие фаз однокомпонентной системы



Легко заметить, что числа независимых уравнений и неизвестных не обязательно одинаковы. Назовем их разность

$$f = (K - 1)\Phi + 2 - K(\Phi - 1) = K - \Phi + 2 \quad (47)$$

числом степеней свободы или степенью неопределенности системы. Если  $f < 0$ , то система (46) несовместна, и равновесие невозможно. Если  $f = 0$ , то равновесие достигается при строго фиксированных  $x_{vj}$ ,  $T$  и  $P$ . Если  $f > 0$ , то есть число неизвестных больше, чем число уравнений, то система (46) имеет решения, выраженные через  $f$  произвольных неизвестных. Это означает, что равновесие фаз будет иметь место при произвольных значениях любых  $f$  переменных. При  $f = 0$  в равновесии находится максимальное число фаз. Из (47) следует, что

$$\Phi_{\max} = K + 2. \quad (48)$$

Формула (47) называется правилом фаз Гиббса.

## 2. ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ МЕТАЛЛОВ

При низких температурах почти все вещества находятся в твёрдом состоянии. Самое замечательное свойство твёрдых тел заключается в том, что (за редким исключением аморфных веществ) их атомы располагаются в пространстве упорядоченно, образуя периодическую трёхмерную решётку. Твёрдое тело с таким правильным расположением атомов называется кристаллическим.

*Кристаллография* занимается систематизацией и классификацией кристаллов, отвлекаясь от природы составляющих их частиц и рассматривая лишь симметрию расположения этих частиц. *Кристаллохимия* рассматривает химическую природу, размер, взаимную координацию атомов или других образующих кристалл частиц, а также особенности химической связи между ними.

### 2.1. СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ

#### 2.1.1. Пространственная решётка

Поскольку атомы (ионы, молекулы) в кристалле расположены периодически, то в нём можно выделить систему эквивалентных точек — *узлов*. Эти узлы образуют *пространственную решётку*, или *решётку Бравэ* кристалла (рис. 5, а). С каждым узлом пространственной решётки связана одинаковая группа атомов — *атомный базис*. Он может включать в себя как один, так и несколько атомов (рис. 5, б, в).

При перемещении (*трансляции*) из одного узла пространственной решётки в другой мы попадаем в абсолютно идентичную точку — говорят, что кристалл обладает *трансляционной симметрией*. Вектор, соединяющий два узла пространственной решётки, называется *трансляционным*.

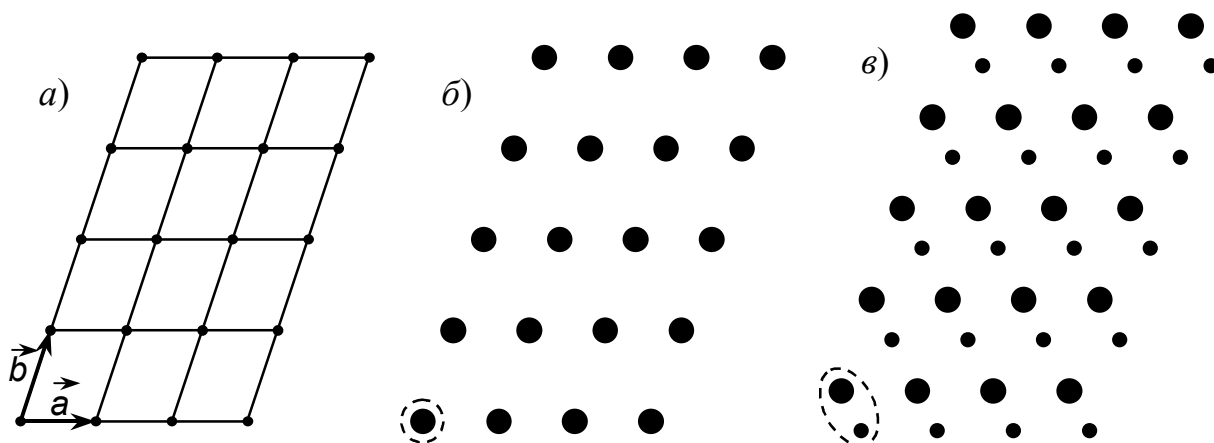


Рис. 5. Пространственная решётка на плоскости (а) и две построенные на ней кристаллические структуры (б, в) с различным атомным базисом (обведён)

При перемещении на любой трансляционный вектор решётки совмещается сама с собой. Для описания пространственной решётки вводят тройку некопланарных векторов  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$ , соединяющих один из узлов решётки с тремя другими. Эти векторы называются *базисными векторами*. Любой трансляционный вектор  $\vec{R}$  может быть выражен через базисные векторы:

$$\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}; \quad (49)$$

тройка чисел  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_3$  определяет координаты узла пространственной решётки.

Параллелепипед, построенный на трёх базисных векторах  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$ , называется *элементарной ячейкой* пространственной решётки (рис. 6). Её повторением в пространстве строится вся периодическая решётка. Форма и размер элементарной ячейки характеризуются модулями векторов  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , называемыми *параметрами (периодами) решётки*, и углами  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  между базисными векторами.

Элементарная ячейка, у которой узлы находятся только в вершинах, называется *примитивной*. Каждый из этих восьми узлов принадлежит одновременно восьми соседним ячейкам, поэтому на примитивную ячейку приходится  $8 \cdot (1/8) = 1$  узел. Однако выбор базисных векторов и, следовательно, элементарной ячейки неоднозначен. Если элементарная ячейка содержит несколько узлов, то она называется *непримитивной* или *сложной*. Так, непримитивной элементарной ячейке 3 двумерной решётки на рис. 7 принадлежат два узла с координатами  $[[00]]$  и  $[[\frac{1}{2} \frac{1}{2}]]$ . Совокупность координат узлов, принадлежащих непримитивной элементарной ячейке решётки Бравэ, называют её *базисом* (не путать с атомным базисом). Примитивная ячейка имеет минимальный объём, а объём сложной ячейки во столько раз превышает объём примитивной, сколько узлов в ней содержится.

Обычно элементарную ячейку стараются выбирать так, чтобы она: а) отражала симметрию кристалла; б) содержала как можно больше пря-

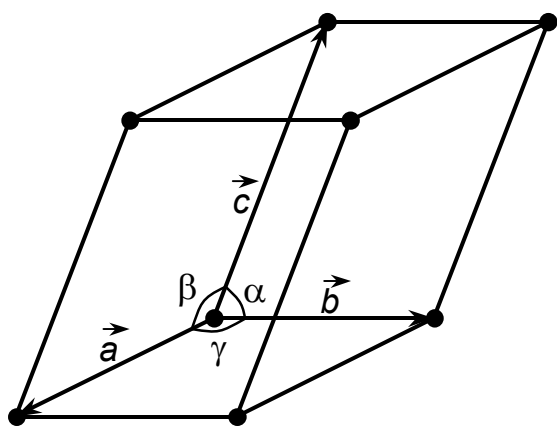


Рис. 6. Элементарная ячейка пространственной решётки

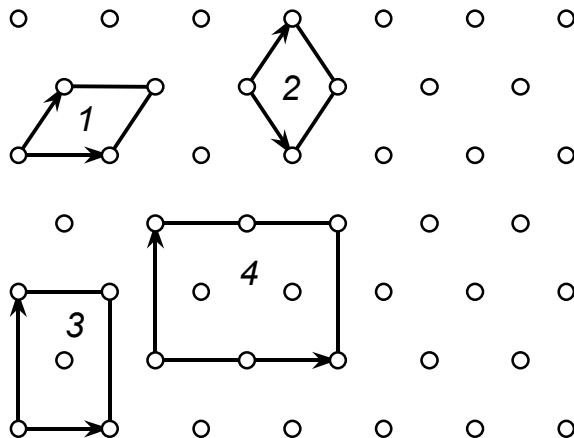


Рис. 7. Различные элементарные ячейки для одной и той же плоской решётки

мых углов, равных углов и равных рёбер; в) обладала минимальным объёмом. Например, ячейка 1 на рис. 7 имеет минимальный объём, но не соответствует симметрии пространственной решётки, а ячейка 2 с таким же объёмом этой симметрии соответствует. Ячейки 3 и 4, помимо этого, имеют прямые углы, но объём ячейки 3 вдвое, а ячейки 4 — вчетверо больше, чем ячеек 1 и 2. Поэтому в данном примере рациональным выбором будет ячейка 2 или 3.

В зависимости от числа и расположения узлов различают элементарные ячейки *примитивные* (базис  $[[000]]$ ), *базоцентрированные* (базис  $[[000]]$ ,  $[[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0]]$ ), *гранецентрированные* (базис  $[[000]]$ ,  $[[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0]]$ ,  $[[\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}]]$ ,  $[[0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}]]$ ) и *объёмноцентрированные* (базис  $[[000]]$ ,  $[[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]]$ ) — рис. 8.

Помимо базиса, элементарные ячейки различаются также и формой. В зависимости от формы элементарного параллелепипеда кристаллические структуры делятся на семь *сингоний*:

- 1) *кубическая* — элементарная ячейка представляет собой куб;
- 2) *тетрагональная* — куб, растянутый вдоль оси  $c$ ;
- 3) *ромбическая* или *орторомбическая* — прямоугольный параллелепипед с разными длинами сторон;
- 4) *моноклинная* — параллелепипед с одним отличающимся от прямого углом;
- 5) *триклинная* — произвольный параллелепипед;
- 6) *тригональная* (при несколько ином выборе элементарной ячейки называется также *ромбоэдрической*) — куб, растянутый вдоль пространственной диагонали;
- 7) *гексагональная* — правильная шестигранная призма.

Схемы элементарных ячеек и соотношение между параметрами для различных сингоний приведены в табл. 1. Не в каждой сингонии возможны

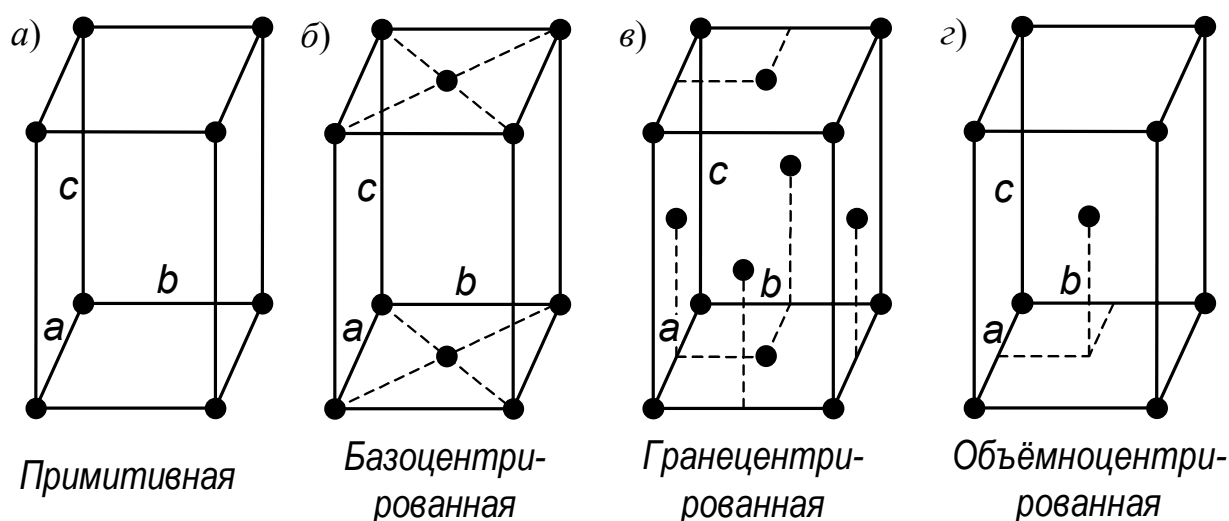
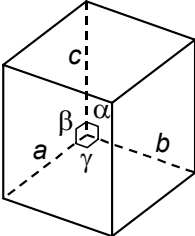
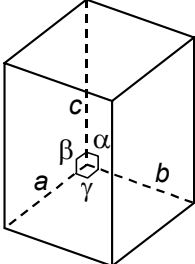
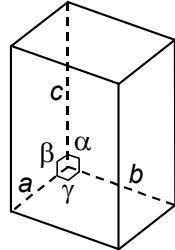
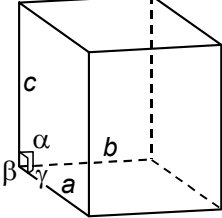
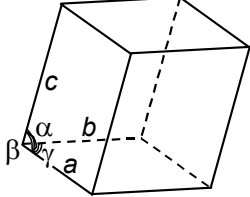
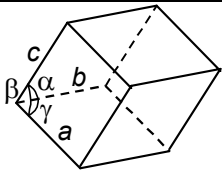
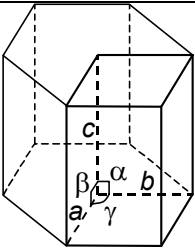


Рис. 8. Четыре типа элементарных ячеек. Показаны узлы решётки Бравэ

Таблица 1

## Семь кристаллических сингоний (систем)

Сингония	Форма элементарной ячейки	Возможные типы решёток Бравэ
1. Кубическая	 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Примитивная, гранецентрированная, объёмноцентрированная
2. Тетрагональная	 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Примитивная, объёмноцентрированная
3. Ромбическая	 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Примитивная, базоцентрированная, гранецентрированная, объёмноцентрированная
4. Моноклинная	 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta \neq \gamma = 90^\circ$	Примитивная, базоцентрированная
5. Триклинная	 $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Примитивная
6. Тригональная	 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Примитивная
7. Гексагональная	 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ ; $\gamma = 120^\circ$	Примитивная

все четыре типа элементарных ячеек. Например, в кубической сингонии не может быть базоцентрированной ячейки, поскольку это нарушает симметрию (все грани куба должны быть одинаковы); в тетрагональной сингонии не может быть базоцентрированной и гранецентрированной ячеек, поскольку их можно свести соответственно к примитивной и объёмноцентрированной (рис. 9), и т.д. Как следует из табл. 1, в кристаллах возможны только 14 типов решёток Бравэ.

Следует отметить важную особенность гексагональной сингонии. Симметрию гексагональной решётки, имеющей поворотную ось шестого порядка, отражает ячейка в форме правильной шестигранной призмы. Однако такая ячейка не обладает свойством трансляционности: при переносе вдоль ребра основания на один параметр призма не совпадает сама с собой (рис. 10, *а*). Поэтому в качестве трансляционной элементарной ячейки выбирают одну третью часть от полной шестигранной призмы (рис. 10, *б*); такая ячейка при параллельном переносе вдоль координатных осей полностью воспроизводит пространственную решётку кристалла.

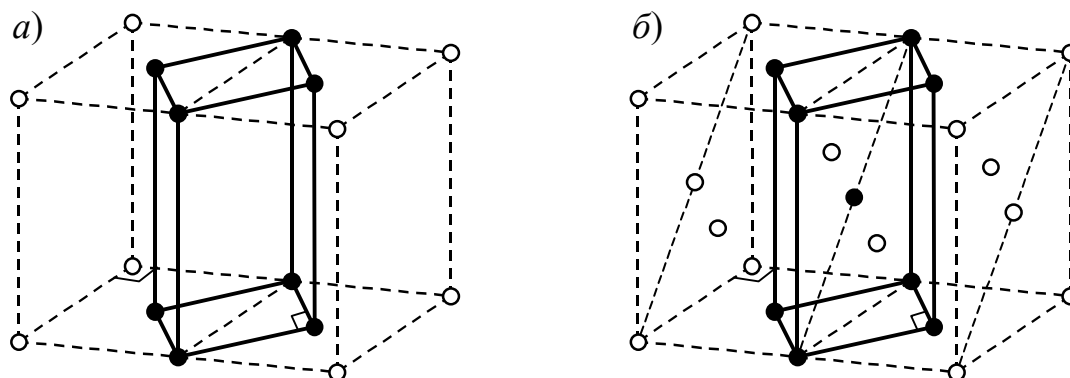


Рис. 9. Преобразование базоцентрированной тетрагональной ячейки в примитивную (*а*) и гранецентрированной в объёмноцентрированную (*б*) путём смены базисных векторов. Границы исходных ячеек показаны пунктирными линиями, новой ячейки — сплошными

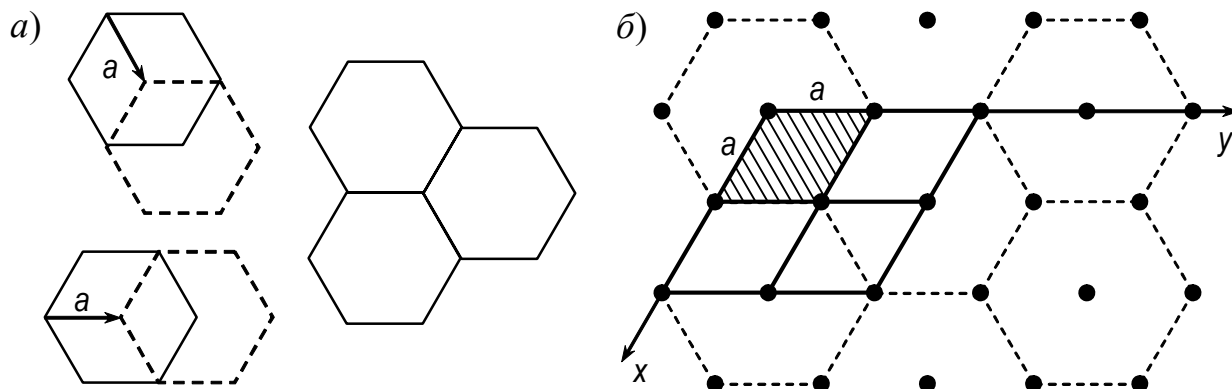


Рис. 10. Нетрансляционная шестигранная (*а*) и трансляционная четырёхгранная (*б*) ячейки гексагональной решётки — вид вдоль оси  $z$

### 2.1.2. Элементы симметрии кристаллов

Элементами симметрии кристалла называются геометрические операции, переводящие его сам в себя. Одним из таких элементов является уже упоминавшаяся *трансляция*, то есть перенос кристалла на вектор, кратный базисным векторам пространственной решётки. Кроме трансляции, в кристаллах встречаются следующие основные элементы симметрии.

1. *Центр симметрии (центр инверсии)* — переводит точку с радиус-вектором  $\vec{r}$  в точку с радиус-вектором  $-\vec{r}$ , то есть соответствует «отражению» кристалла в точке. Центр симметрии есть у всех решёток Бравэ, поэтому при перечислении элементов симметрии кристалла о нём часто не упоминают.

2. *Ось симметрии (поворотная ось)  $n$ -го порядка* — при повороте вокруг этой оси на угол, кратный  $360^\circ/n$ , кристалл совмещается сам с собой. В кристаллах могут встречаться поворотные оси только 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядка. Оси 5-го порядка и порядков выше 6 невозможны, поскольку правильными 5-, 7-, 8- и т.д. угольниками нельзя заполнить плоскость без разрывов (рис. 11). Иногда встречаются также инверсионные оси симметрии, сочетающие поворот с инверсией.

3. *Плоскость симметрии (плоскость зеркального отражения)* — кристалл совмещается сам с собой при отражении в этой плоскости, как в зеркале.

Например, куб (рис. 12) имеет:

- центр инверсии, расположенный в его центре;
- 3 оси 4-го порядка, проходящие через центры противоположных граней;
- 4 оси 3-го порядка, проходящие через противоположные вершины;
- 3 плоскости зеркального отражения, проходящие параллельно граням, и ещё 6 плоскостей, проходящих через диагонали противоположных граней.

Различные сочетания рассмотренных элементов симметрии дают 32 *класса симметрии (точечных группы)*, относящихся к тем же 7 сингониям. (Их больше, чем решёток Бравэ (14), поскольку атомный базис, находя-

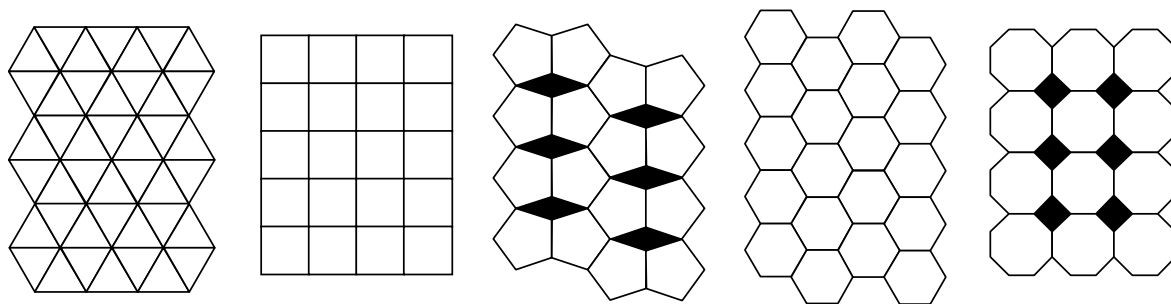


Рис. 11. Заполнение плоскости правильными 3-, 4-, 5-, 6-, 8-угольниками

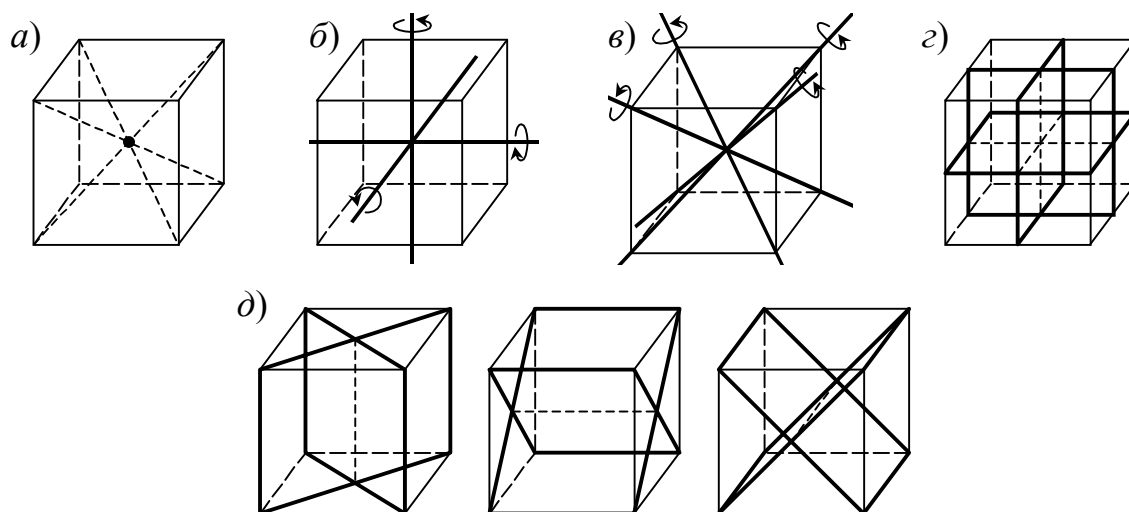


Рис. 12. Элементы симметрии куба: центр симметрии (а); оси симметрии 4-го (б) и 3-го (в) порядка; плоскости симметрии (г, д)

щийся в каждом из узлов решётки Бравэ, может обладать собственным набором элементов симметрии. В кристалле остаются лишь те элементы симметрии, которые являются общими для решётки Бравэ и атомного базиса — *принцип Кюри*.)

В отличие от трансляции, центр, оси и плоскости симметрии оставляют неподвижной как минимум одну точку кристалла — отсюда и термин «точечная группа». С учётом же трансляций число групп симметрии кристаллов вырастает до 230; они называются *пространственными группами*. (230 пространственных групп были выведены независимо Е. С. Фёдоровым и А. Шёнфлисом в 1890–91 гг., поэтому их иногда называют также *фёдоровскими группами*.) При взаимодействии с трансляциями поворотные оси иногда преобразуются в *винтовые оси*, соответствующие одновременному повороту кристалла около оси и параллельному переносу вдоль неё (на вектор, меньший трансляционного), а плоскости зеркального отражения — в *плоскости скользящего отражения*, соответствующие одновременному отражению в плоскости и параллельному переносу вдоль неё.

## 2.2. ИНДЕКСЫ МИЛЛЕРА

Узлы, направления и плоскости в кристаллической решётке принято обозначать тройками чисел — *индексами Миллера*.

Индексы узла представляют собой его координаты, выраженные в единицах параметров решётки (рис. 13). Индексы узлов заключают в двойные квадратные скобки или приводят без скобок:  $[[001]]$  или 001.

За индексы *направления*, проходящего через начало координат, принимают координаты первого узла, лежащего на этом направлении. Часто удобнее бывает взять любую точку, лежащую на направлении, и привести её координаты к трём наименьшим целым числам. Индексы направлений



заключают в одинарные квадратные скобки:  $[111]$ . Если какой-либо из индексов отрицателен, то минус ставят над цифрой:  $[01\bar{1}]$ . Индексы направления всегда представляют собой три взаимно простых целых числа: пишут не  $[01\frac{1}{2}]$ , а  $[021]$ , не  $[\bar{2}2\bar{4}]$ , а  $[\bar{1}1\bar{2}]$ . Если направление не проходит через нулевой узел, то нужно перенести либо этот узел так, чтобы он лежал на направлении, либо само направление так, чтобы оно проходило через нулевой узел. Примеры индексации направлений приведены на рис. 14.

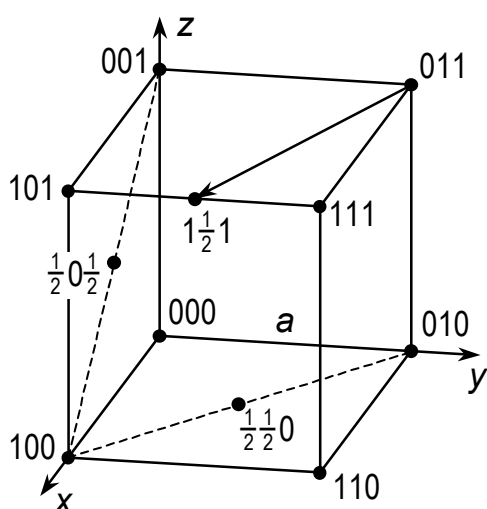


Рис. 13. Индексы узлов

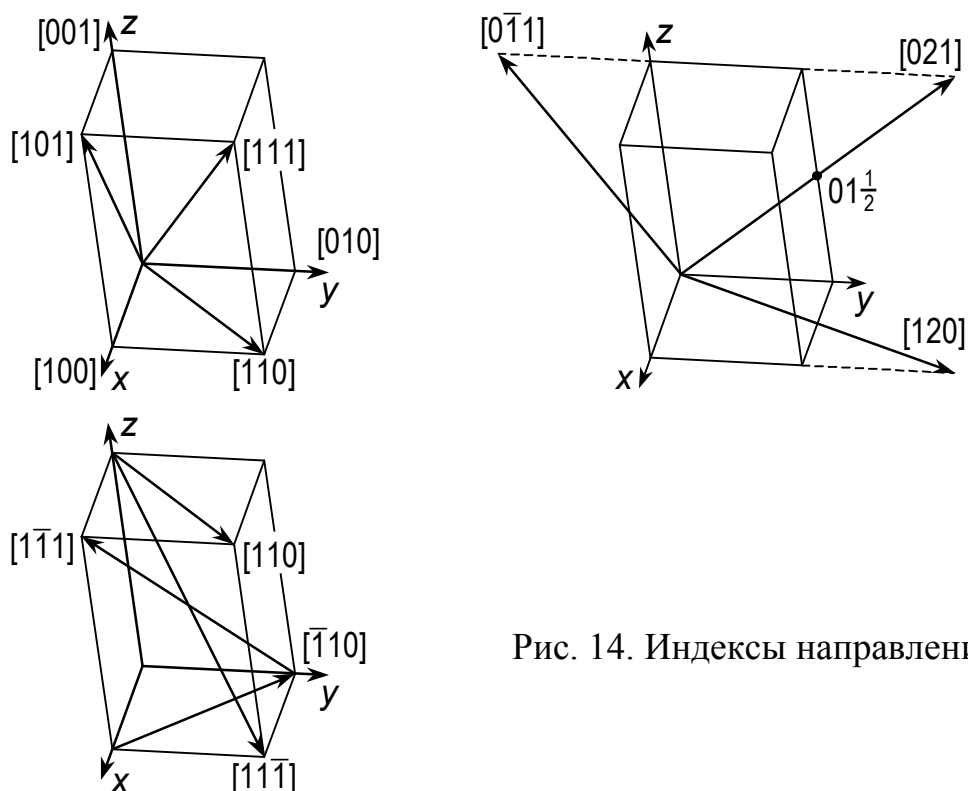


Рис. 14. Индексы направлений

Индексами *плоскости*, не проходящей через начало координат, являются числа, обратные величинам отрезков, которые плоскость отсекает на координатных осях. Например, плоскость на рис. 15 отсекает на осях  $x$ ,  $y$  и  $z$  соответственно отрезки  $1$ ,  $\frac{1}{2}$  и  $\frac{1}{2}$ , поэтому индексы этой плоскости  $(122)$ . Индексы плоскости заключают в круглые скобки. Если плоскость параллельна одной из осей («пересекается в бесконечности»), то соответствующий индекс равен нулю ( $1/\infty = 0$ ). Если начало координат лежит в плоскости, то либо саму плоскость, либо нулевой узел необходимо перенести так, чтобы она не проходила через него. Как и для направлений, индексы плоскостей всегда приводят к трём взаимно простым целым числам. Примеры индексации плоскостей приведены на рис. 16.

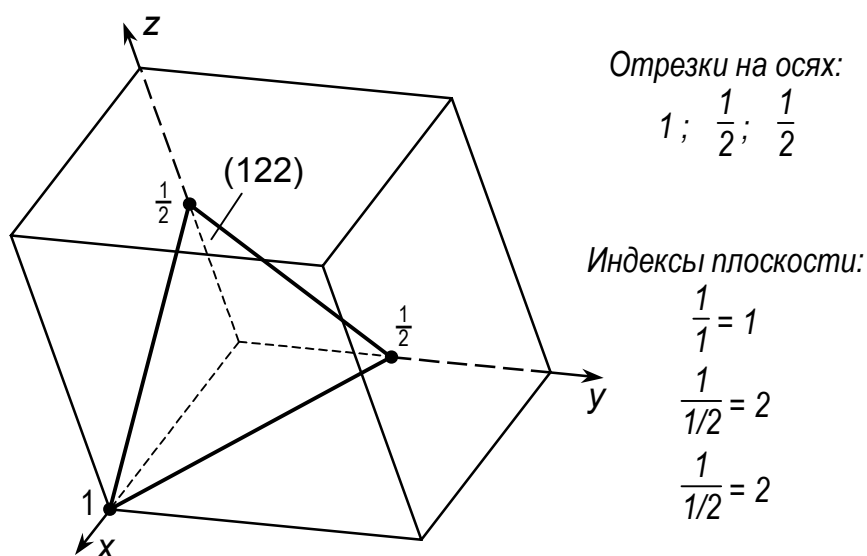


Рис. 15. Определение индексов плоскости

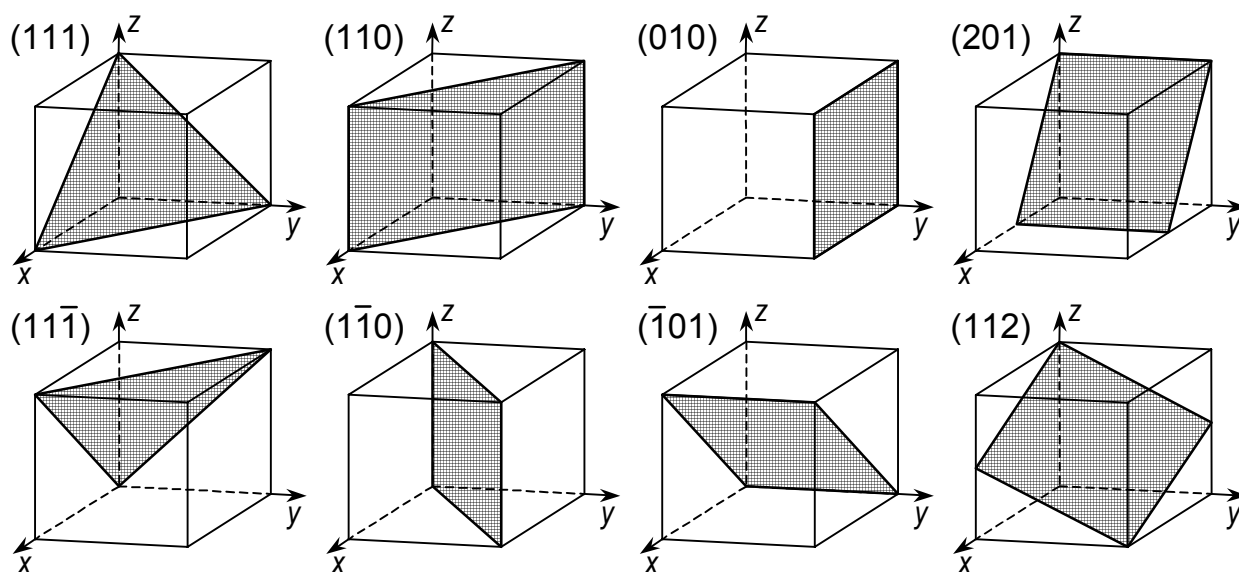


Рис. 16. Индексы плоскостей

При перемещении начала координат в другой узел решётки индексы всех остальных узлов изменяются, а индексы направлений и плоскостей остаются неизменными, поэтому тройка индексов задаёт не одну прямую или плоскость, а всё множество параллельных прямых (плоскостей) кристалла.

Некоторые непараллельные плоскости и направления являются тем не менее кристаллографически эквивалентными. Например, все рёбра элементарной ячейки кубической сингонии физически идентичны, хотя имеют разные индексы:  $[100]$ ,  $[010]$  и  $[001]$ ; то же можно сказать и о её гранях  $(100)$ ,  $(010)$  и  $(001)$ . Совокупность таких кристаллографически эквивалентных направлений или плоскостей называется *семейством*. Индексы семейства направлений заключают в угловые скобки:  $\langle 100 \rangle$ , а семейства плоскостей — в фигурные:  $\{100\}$ . Все направления (плоскости), входящие в семейство, могут быть переведены друг в друга путём симметричных преобразований, характерных для данной решётки. Важно запомнить, что для *кубических* кристаллов в семейство входят все направления (плоскости), которые можно получить из данного набора индексов путём их перестановки или замены знаков: например, семейство  $\{110\}$  образуют плоскости  $(110)$ ,  $(101)$ ,  $(011)$ ,  $(1\bar{1}0)$ ,  $(10\bar{1})$  и  $(01\bar{1})$ .

Векторы. Индексы направления описывают бесконечную прямую. Однако в ряде случаев бывает необходимо задать вектор определённой длины — к примеру, связывающий центры двух соседних атомов решётки. Координатами вектора являются его проекции на три оси координат. При записи вектора принято оставлять в скобках индексы направления (три взаимно простых целых числа), вдоль которого расположен вектор, а общий множитель выносить перед скобками. Например, вектор, изображённый на рис. 13, имеет проекции  $[a, -\frac{1}{2}a, 0]$ , поэтому его записывают в виде  $\frac{1}{2}a[2\bar{1}0]$ . Модуль (длина) вектора в кубической решётке, очевидно, равен корню из суммы квадратов его координат; например, модуль вектора  $\frac{1}{2}a[2\bar{1}0]$  равен

$$\frac{1}{2}a \cdot \sqrt{2^2 + (-1)^2 + 0^2} = a \frac{\sqrt{5}}{2}.$$

Особенности индексации гексагональных кристаллов. В кристаллах гексагональной сингонии наряду с индексами Миллера используется и другая система обозначений плоскостей и направлений, называемая *индексами Миллера – Бравэ*. В этом случае вводят четвёртую, дополнительную координатную ось  $t$ , лежащую в плоскости  $xOy$  и направленную под углом  $120^\circ$  к осям  $x$  и  $y$  (рис. 17). Индексы плоскостей тогда состоят не из трёх цифр  $(hkl)$ , а из четырёх  $(hkil)$ . Дополнительный индекс  $i$ , подобно индексам  $h$  и  $k$ , равен обратной длине отрезка, отсекаемого плоскостью на оси  $t$ , и связан с ними простым соотношением

$$h + k + i = 0, \quad \text{или} \quad i = -(h + k). \quad (50)$$

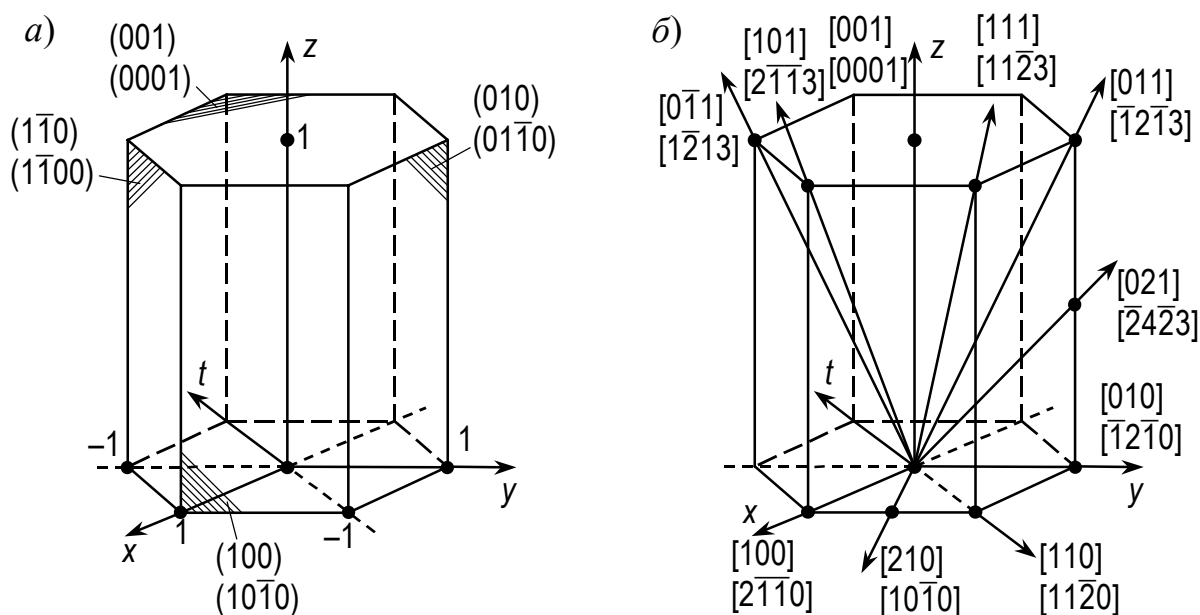


Рис. 17. Трёхзначные индексы Миллера и четырёхзначные Миллера – Бравэ для некоторых плоскостей (а) и направлений (б) в гексагональной решётке

Индексы же направлений при переходе от трёхиндексной записи к четырёхиндексной меняются полностью, и определять их по проекциям лежащего на направлении узла на четыре координатные оси становится нельзя. Если направление имеет индексы Миллера  $[uvw]$ , то его индексы Миллера – Бравэ  $[rstn]$  рассчитываются по формулам

$$r = 2u - v; \quad s = 2v - u; \quad t = -(u + v); \quad n = 3w. \quad (51)$$

Для обратного перехода служат формулы

$$u = \frac{2r + s}{3}; \quad v = \frac{r + 2s}{3}; \quad w = \frac{n}{3}. \quad (52)$$

Как и у плоскостей, индексы направления подчиняются соотношению  $r + s + t = 0$ .

На рис. 17 приведены примеры индексации плоскостей и направлений. Из этих примеров видно выгодное отличие четырёхиндексной системы от трёхиндексной: эквивалентные плоскости и направления (например, боковые грани призмы) имеют в ней одинаковый набор индексов.

### 2.3. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

1. Индексы нормали к плоскости в кубических кристаллах совпадают с индексами самой плоскости:  $[hkl] \perp (hkl)$ .

2. Межплоскостное расстояние, то есть расстояние по нормали между соседними параллельными атомными плоскостями  $(hkl)$ , равно  $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$ ,

где  $a$  — параметр решётки. Формула относится к кубической решётке.

3. Угол между двумя направлениями  $[h_1k_1l_1]$  и  $[h_2k_2l_2]$  в кубических кристаллах находят по правилу скалярного произведения:

$$\cos \varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \cdot \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}. \quad (53)$$

Угол между двумя плоскостями равен углу между их нормальными и может быть найден по этой же формуле. Например, для направлений  $[01\bar{1}]$  и  $[12\bar{1}]$

$$\cos \varphi = \frac{0 \cdot 1 + 1 \cdot 2 + (-1) \cdot (-1)}{\sqrt{0^2 + 1^2 + (-1)^2} \cdot \sqrt{1^2 + 2^2 + (-1)^2}} = \frac{3}{\sqrt{2}\sqrt{6}} = \frac{\sqrt{3}}{2}, \text{ откуда } \varphi = 30^\circ.$$

4. Условие принадлежности прямой к плоскости. Прямая  $[h_1k_1l_1]$  лежит в плоскости  $(h_2k_2l_2)$ , если  $h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2 = 0$ . Например, направление  $[112]$  лежит в плоскости  $(11\bar{1})$ , а  $[110]$  — не лежит. Для кубических кристаллов это же условие определяет перпендикулярность двух направлений или двух плоскостей.

5. Индексы оси зоны. Кристаллографической зоной называется совокупность всех плоскостей, параллельных одной и той же прямой — оси зоны. Если известны индексы двух плоскостей, входящих в зону:  $(h_1k_1l_1)$  и  $(h_2k_2l_2)$ , то индексы оси зоны  $[uvw]$  удовлетворяют системе двух линейных уравнений:  $h_1u + k_1v + l_1w = 0$  и  $h_2u + k_2v + l_2w = 0$ . Решением этой системы будет тройка индексов

$$u = k_1l_2 - k_2l_1; \quad v = l_1h_2 - l_2h_1; \quad w = h_1k_2 - h_2k_1. \quad (54)$$

Существует удобное мнемоническое правило: если записать индексы обеих плоскостей в двух строчках, повторив их по два раза, и отбросить два крайних столбца, то оставшиеся столбцы дадут три определителя второго порядка, значения которых и будут искомыми индексами оси зоны:

$$\begin{array}{ccccccc} h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1 & \\ h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2 & \\ \hline & \underbrace{\quad \times \quad}_{u} & \underbrace{\quad \times \quad}_{v} & \underbrace{\quad \times \quad}_{w} & & & \end{array}$$

Найденная ось зоны — это направление, по которому пересекаются две плоскости. Например, плоскости  $(101)$  и  $(12\bar{1})$  пересекаются по направлению  $[\bar{1}11]$ . Эти же формулы можно использовать для нахождения плоскости, проходящей через две прямые. Кроме того, для кристаллов кубической сингонии они позволяют найти индексы прямой, перпендикулярной другой прямой и лежащей в заданной плоскости, а также направления, перпендикулярного двум другим направлениям.

## 2.4. АТОМНЫЕ РАДИУСЫ И МОДЕЛЬ ТВЁРДЫХ ШАРОВ

Для описания кристаллических решёток веществ с любым типом связи удобно использовать модель *твёрдых шаров*: считать частицы (атомы или

ионы) несжимаемыми шарами определённого радиуса, уложенными в пространстве до соприкосновения. Радиусы ряда элементов в соединениях с металлической, ионной и ковалентной связью приведены в приложениях 3, 4 и 5. В дальнейшем мы будем называть эти воображаемые твёрдые шары просто атомами.

В модели твёрдых шаров для любой структуры вводят две характеристики:

1) *координационное число* (число ближайших соседей) — число атомов, находящихся на ближайшем расстоянии от данного, то есть соприкасающихся с ним;

2) *коэффициент компактности упаковки* — доля пространства, занятая шарами-атомами.

Рассмотрим для примера *примитивную кубическую* (ПК) структуру, элементарная ячейка которой представляет собой куб, в каждой из вершин которого расположен один атом (рис. 18, а, б). Кратчайшее расстояние между атомами (точнее, их центрами) — вдоль рёбер элементарной ячейки  $\langle 001 \rangle$ . Если ребро куба равно  $a$ , то атомный радиус  $R = a/2$ . Каждый атом окружён 6 соседями, расположенными на расстоянии  $a$ , то есть координационное число  $z = 6$ . Чтобы найти коэффициент компактности, нужно разделить объём всех  $n_{\text{э.я.}}$  шаров-атомов, входящих в элементарную ячейку, на объём самой этой ячейки:  $k = n_{\text{э.я.}} \cdot \frac{4}{3} \pi R^3 / a^3$ . На рис. 18, а мы видим 8 атомов, но каждый из них одновременно принадлежит 8 соседним кубическим ячейкам, то есть каждой ячейке — лишь на 1/8 долю. Всего на элементарную ячейку приходится  $n_{\text{э.я.}} = 8 \cdot 1/8 = 1$  атом. [Можно рассуждать и иначе: у каждого из атомов, находящихся в вершинах куба, внутрь его попадает лишь 1/8 часть — всё остальное лежит вне элементарной ячейки; таких атомов 8, поэтому  $n_{\text{э.я.}} = 8 \cdot 1/8 = 1$ . Либо, наиболее строго: в элементарную ячейку входят лишь те атомы, которые образуют её базис, то есть которые

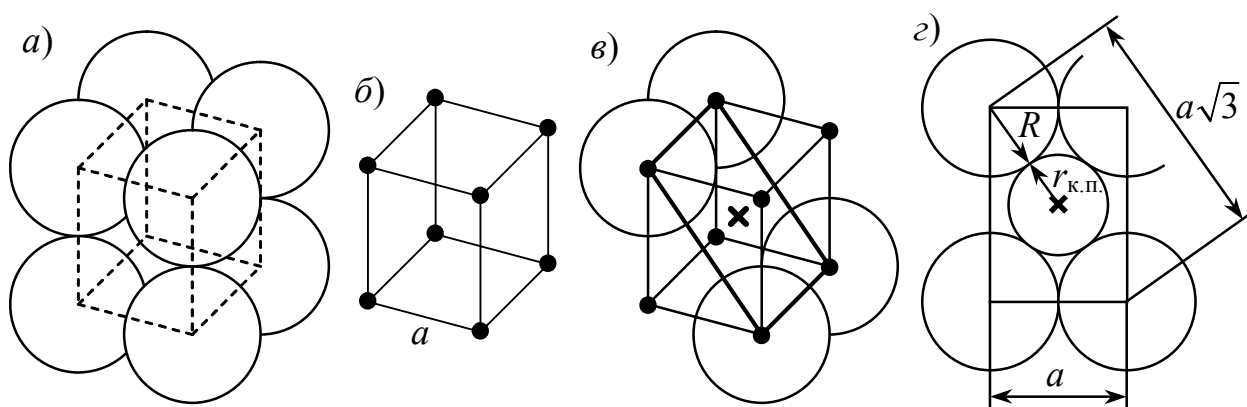


Рис. 18. Примитивная кубическая решётка.

$a$  — укладка атомов; б — элементарная ячейка; в — положение кубической поры (центр поры указан крестиком); г — укладка атомов в плоскости (011)

нельзя перевести друг в друга параллельным переносом на параметр решётки. Для примитивной решётки такой атом всего один — тот, который лежит в начале координат (базис решётки  $[[000]]$ ), поэтому  $n_{\text{з.я.}} = 1$ .] Поскольку  $R = a/2$ , то компактность упаковки  $k = 1 \cdot \frac{4}{3} \pi (a/2)^3 / a^3 = 0,524$  (52,4%).

Остальные 47,6% объёма заняты пустотами — *порами* (междоузлиями). В ПК-решётке есть лишь один тип пор — кубические поры. Центр одной из них расположен в центре элементарной ячейки (рис. 18, в). Пору окружают 8 атомов, образующих куб (поэтому её и называют кубической). Соседние поры находятся в центрах соседних ячеек, так что на каждую элементарную ячейку приходится по одной поре. Поскольку  $n_{\text{з.я.}} = 1$ , то число кубических пор в ПК-решётке равно числу атомов. Радиусом поры называется радиус наибольшего шара, который можно поместить в неё, не вызвав смещения окружающих атомов (рис. 18, з). Если такой шар поместить в центр кубической поры, то он будет касаться атомов вдоль диагоналей куба. Расстояние между центром поры и центром атома равно  $a\sqrt{3}/2 = R\sqrt{3}$ , поэтому радиус поры  $r_{\text{к.п.}} = R\sqrt{3} - R = R(\sqrt{3} - 1) = 0,732R$  — он ненамного меньше размера атома.

## 2.5. РЕШЁТКИ МЕТАЛЛОВ

Почти 80 % всех элементов в таблице Менделеева являются металлами. В силу ненасыщенности и ненаправленности металлической связи атом стремится окружить себя как можно бóльшим числом соседей. Как следствие, кристаллические решётки металлов имеют высокую симметрию, большое координационное число и высокую компактность упаковки. Более 80% всех металлов имеют плотноупакованные решётки (ГЦК, ГПУ и др.) или решётку ОЦК. Многим металлам свойствен *полиморфизм* — они изменяют тип решётки с температурой или давлением.

### 2.5.1. Плотноупакованные структуры. Решётки ГЦК и ГПУ

I. Рассмотрим вначале *гранецентрированную кубическую* (ГЦК) решётку. Она отвечает ГЦК-решётке Бравэ с одноатомным базисом (рис. 19, а, б). Кратчайшее межатомное расстояние — вдоль диагоналей граней куба  $\langle 110 \rangle$ , поэтому радиус атома  $R = a\sqrt{2}/4$ . Из рис. 19, в, з видно, что плоскость  $\{111\}$  в ГЦК-структуре является *плотноупакованной* — атомы в ней уложены в узлах правильной треугольной сетки. Если посмотреть на структуру такого плотноупакованного слоя, то можно увидеть, что между атомами в нём имеются треугольные лунки двух типов: направленные остриём вниз ( $\nabla$ , тип В) и вверх ( $\blacktriangle$ , тип С); буквой А обозначим центры атомов. Чтобы второй плотноупакованный слой плотно прилегал к перво-

му, его атомы должны лежать в тех или других лунках первого слоя. И действительно, атом 7 на рис. 19, б, д лежит в лунке типа *B*, образованной атомами 1, 2 и 3, и точно так же уложены атомы 8 и 9. Третий слой (атом 10 на рис. 19, б, д) лежит в точно таких же лунках второго слоя, находящихся над лунками типа *C* первого слоя атомов. Продолжая рассуждения, легко понять, что четвёртый плотноупакованный слой окажется расположенным точно над первым, то есть будет проецироваться в позиции *A*. Период укладки состоит из трёх плоскостей: *ABCABCABC...*. Это наглядно иллюстрирует рис. 19, е. Каждый следующий плотноупакованный слой (111) в ГЦК-решётке сдвинут относительно предыдущего на один и тот же вектор  $\frac{1}{2}a[110]$  (или  $\frac{1}{6}a[\bar{2}11]$  в проекции на плоскость (111)).

Из рис. 19, з, д ясно видно, что координационное число для ГЦК-решётки  $z=12$ : каждый атом имеет 6 ближайших соседей в своём слое и по 3 — в выше- и нижележащих слоях. На элементарную ячейку приходится  $n_{\text{э.я.}}=4$  атома, поэтому коэффициент компактности  $k = 4 \cdot \frac{4}{3}\pi(a\sqrt{2}/4)^3 / a^3 = 0,740$ . Эти значения  $z$  и  $k$  являются максимально возможными для решёток простых веществ.

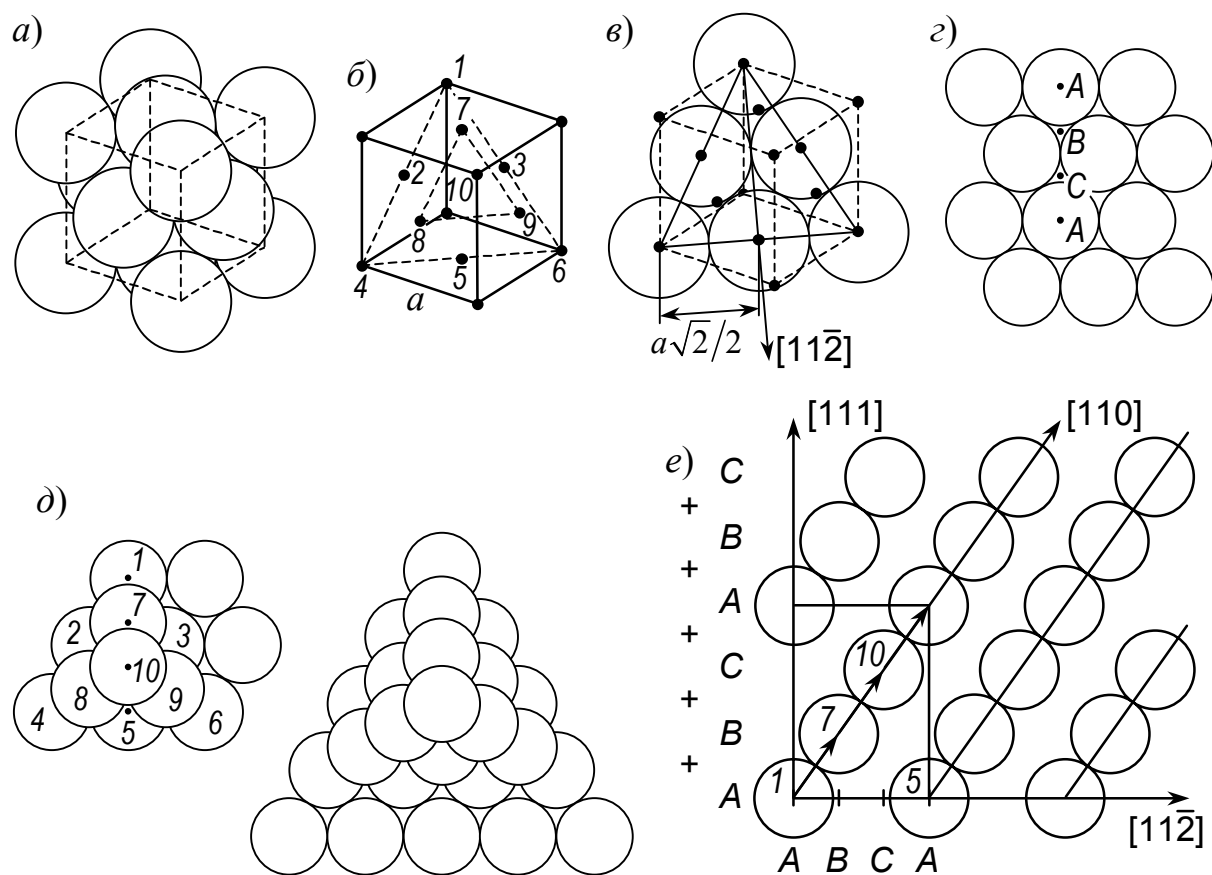


Рис. 19. Гранецентрированная кубическая (ГЦК) структура.  
*a, б* — элементарная ячейка; *в, з* — плотноупакованный слой (111);  
*д, е* — последовательность укладки плотноупакованных слоёв



II. Структуры, составленные из последовательности плотноупакованных атомных слоёв, подобных слоям  $\{111\}$  ГЦК-решётки, уложенных в лунки друг друга, также называются плотноупакованными. Друг от друга такие структуры отличаются лишь последовательностью укладки слоёв. При укладке каждого следующего слоя на предыдущий всегда есть два варианта: например, второй слой можно уложить в лунки типа  $B$  ( $\nabla$ ) или типа  $C$  ( $\Delta$ ). Если второй слой уложить в лунки  $\nabla$  первого слоя, а третий — в лунки  $\Delta$  второго, то третий слой окажется точно над первым, и последовательность укладки будет двухслойной:  $ABABAB\dots$ . Решётка с такой последовательностью укладки слоёв называется *гексагональной плотноупакованной* (ГПУ) — рис. 20, а–в. В отличие от ГЦК-решётки, здесь направления сдвигов слоёв друг относительно друга чередуются: « $+-+-$ » (рис. 20, г). Трансляционная элементарная ячейка ГПУ-структуры (заштрихованная на рис. 20, в) содержит два атома — один в начале координат  $[[000]]$ , второй

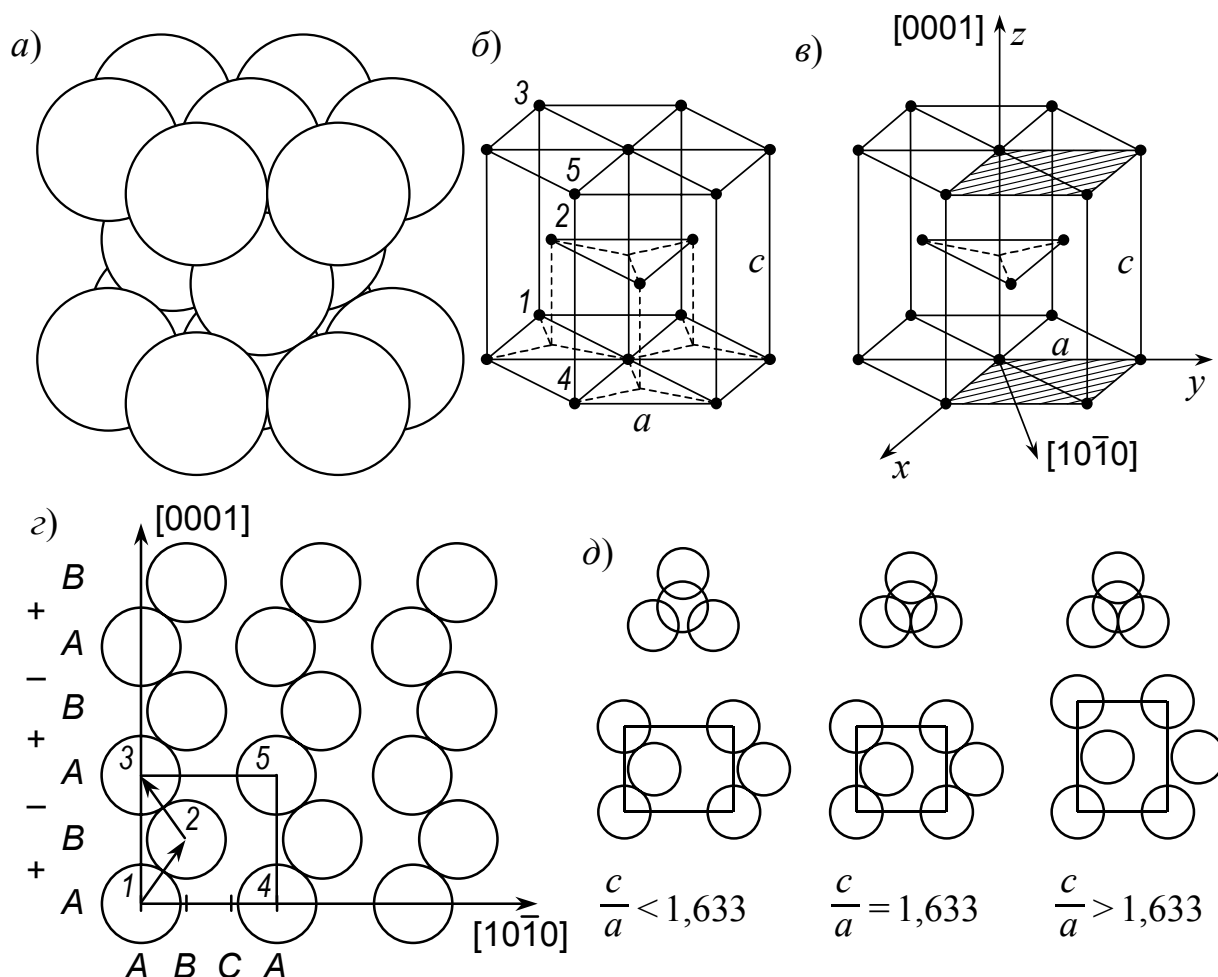


Рис. 20. Гексагональная плотноупакованная (ГПУ) структура.  
а–в — элементарная ячейка (на рис. в заштрихована трансляционная ячейка структуры); г — последовательность укладки плотноупакованных слоёв;  
д — укладка атомов в ГПУ-металлах с различным отношением  $c/a$

на половине высоты  $[\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{2}]$ . При плотном прилегании слоёв друг к другу между её параметрами (длиной ребра основания  $a$  и высотой  $c$ ) должно соблюдаться соотношение  $c/a = \sqrt{8/3} \approx 1,633$ . В этом случае координационное число  $z$  и компактность упаковки  $k$  для ГПУ-структуры будут такими же, как для ГЦК. Но в действительности ни для одного металла отношение  $c/a$  не равно идеальному: у цинка и кадмия решётка «растянута» вдоль оси  $c$  ( $c/a = 1,86$  и  $1,89$  соответственно), а у остальных ГПУ-металлов — «сжата» ( $c/a = 1,57 \dots 1,62$ ). Если придерживаться модели твёрдых шаров, то в первом случае слои (0001) остаются плотноупакованными, но отодвинуты друг от друга, а во втором — атомы соседних слоёв друг друга касаются, но в самом слое (0001) между атомами появляется зазор (рис. 20, д), и поэтому все реальные ГПУ-структуры не являются истинно плотноупакованными. В действительности же отличие  $c/a$  от идеального 1,633 означает, что атомы в ГПУ-металлах имеют форму не сфер, а эллипсоидов.

Возможны и другие, более сложные законы чередования слоёв в плотноупакованных решётках. Например, для многих лантаноидов характерна четырёхслойная структура:  $ABCBABCB \dots$  (сдвиги чередуются по два: «++--»). Встречаются структуры с семи-, девяти- и даже восемнадцатислойной укладкой.

### 2.5.2. Решётка ОЦК

В объёмноцентрированной кубической (ОЦК) структуре атомы расположены в вершинах и в центре элементарной ячейки (рис. 21, а), поэтому кратчайшее расстояние между ними — вдоль диагоналей куба  $\langle 111 \rangle$ . Радиус атома  $R = a\sqrt{3}/4$ . Координационное число равно 8 — например, у атома, находящегося в центре элементарной ячейки, 8 ближайших соседей в её

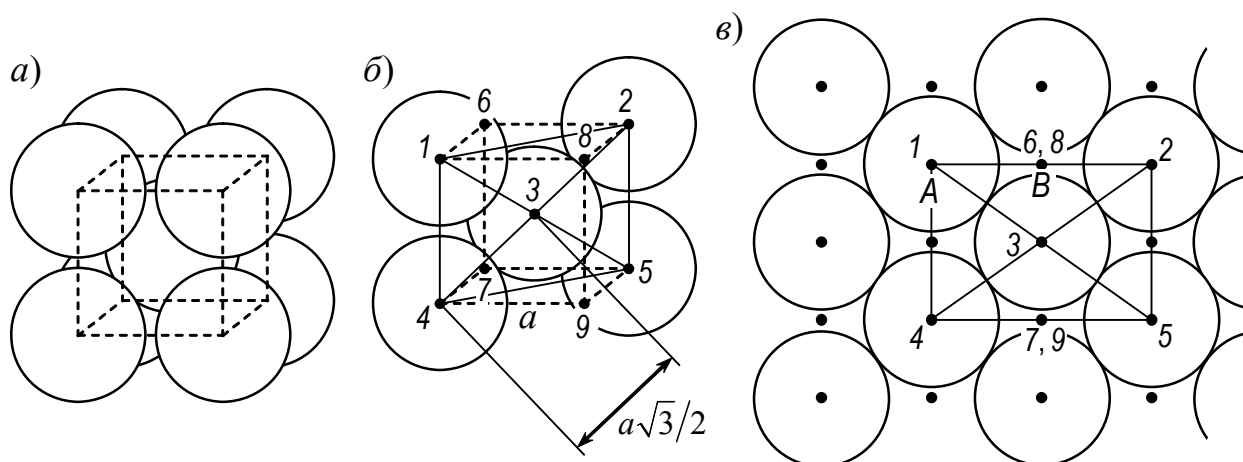


Рис. 21. Объёмноцентрированная кубическая (ОЦК) структура. а — элементарная ячейка; б, в — плоскость (110) с наибольшей плотностью упаковки атомов

вершинах. В элементарной ячейке  $8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$  атома, и коэффициент компактности  $k = 2 \cdot \frac{4}{3} \pi (a\sqrt{3}/4)^3 / a^3 = 0,680$  — меньше, чем у ГЦК-решётки. Поэтому ОЦК-решётка не является плотноупакованной. Действительно, в ней нельзя найти атомных плоскостей, подобных изображённой на рис. 19, *з*; наибольшую плотность упаковки в ОЦК-структуре имеют плоскости  $\{110\}$  с несколько более «рыхлым» расположением атомов (рис. 21, *б*, *в*). В каждой такой плоскости лежит по два (а не по три, как в ГЦК) плотноупакованных атомных ряда  $\langle 111 \rangle$ . Как видно из рис. 21, *б*, *в*, такие плоскости в ОЦК-решётке уложены в лунки друг друга с периодом укладки в 2 слоя:  $ABABAB \dots$

### 2.5.3. Поры в решётках металлов

I. Плотноупакованные решётки (ГЦК, ГПУ и т.д.). В отличие от примитивной кубической, в них имеются поры двух типов: октаэдрические и тетраэдрические.

*Октаэдрическая* пора (октапора) окружена шестью атомами двух соседних плотноупакованных слоёв — рис. 22, *а*; центры этих атомов образуют правильный октаэдр. В ГЦК-решётке центры октапор находятся в центре элементарной ячейки и на серединах её рёбер (рис. 22, *б*). Следовательно, подрешётка октапор имеет базис  $[\frac{1}{2} 00]$ ;  $[0 \frac{1}{2} 0]$ ;  $[00 \frac{1}{2}]$ ;  $[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$ : на элементарную ячейку приходится четыре поры. (Или иначе: октаэдр, находящийся в центре ячейки, полностью лежит внутри неё, тогда как каждый из 12 октаэдров, находящихся в центрах рёбер, принадлежит одновременно 4 ячейкам; следовательно, всего «нашей» ячейке принадлежит

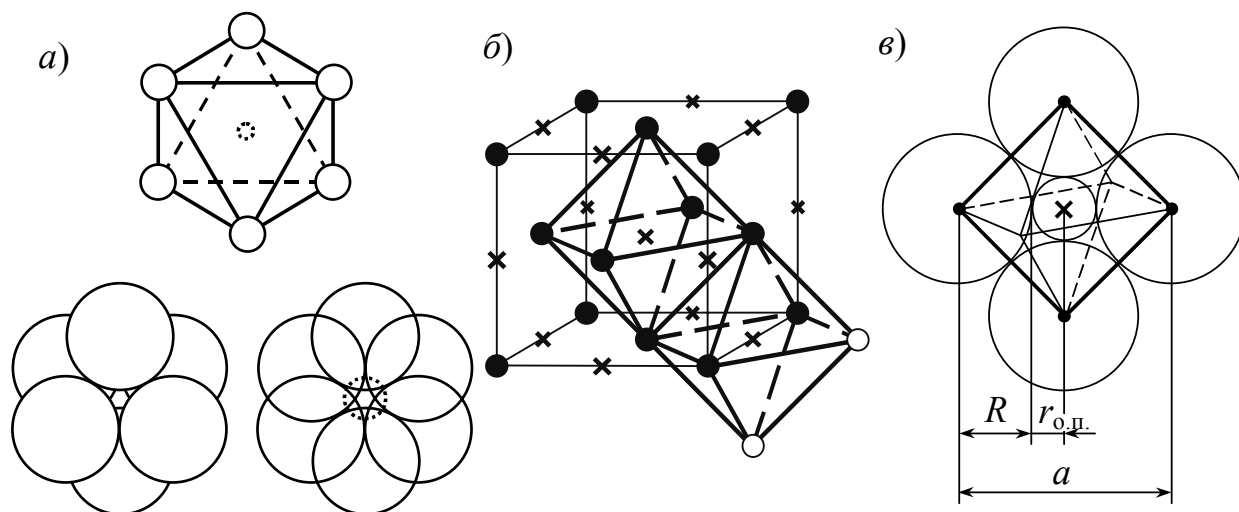


Рис. 22. Октаэдрические поры в плотноупакованных структурах.  
*а* — расположение поры между шестью атомами двух соседних  
 плотноупакованных слоёв; *б* — центры октапор в элементарной  
 ячейке ГЦК-решётки; *в* — нахождение радиуса октапоры

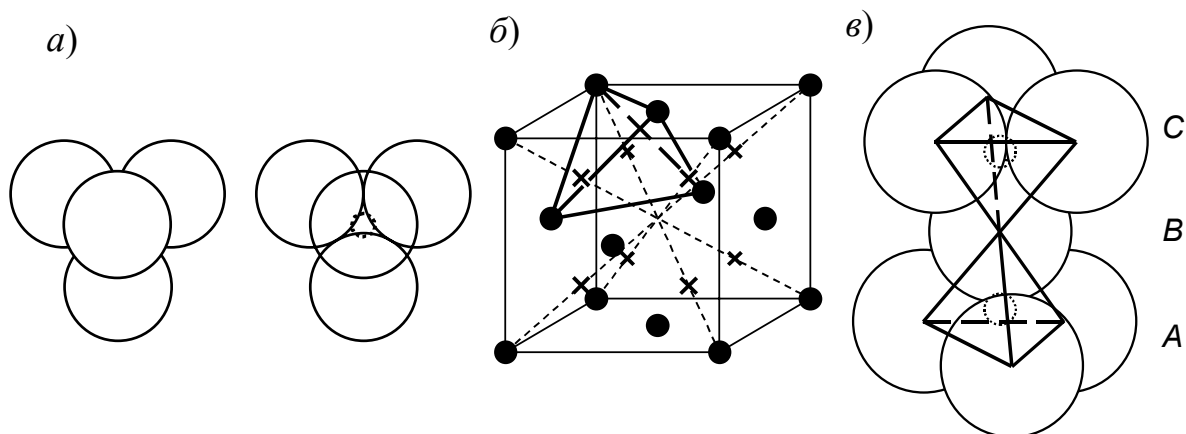


Рис. 23. Тетраэдрические поры в плотноупакованных структурах. *а* — расположение поры между четырьмя атомами двух соседних плотноупакованных слоёв; *б* — центры тетрапор в элементарной ячейке ГЦК-решётки; *в* — две тетраэдрические поры, направленные вершинами «вверх» и «вниз», над и под атомом слоя *В* в ГЦК-решётке

$1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4$  октаэдрических поры; ср. с. 29.) Поскольку атомов в элементарной ячейке ГЦК-решётки тоже четыре, то число октапор равно числу атомов. Радиус октаэдрической поры равен  $r_{\text{о.п.}} = a/2 - R = (\sqrt{2} - 1) \cdot R \approx 0,414 \cdot R$ , где  $R$  — радиус атома (рис. 22, в).

*Тетраэдрическая пора (тетрапора)* окружена четвёркой атомов двух соседних плотноупакованных слоёв, которые образуют правильный тетраэдр (рис. 23, а). Базис подрешётки тетрапор в ГЦК-решётке (рис. 23, б) состоит из 8 пор:  $[\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}]$ ;  $[\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}]$ ;  $[\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}]$ ;  $[\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}]$ ;  $[\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}]$ ;  $[\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}]$ ;  $[\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}]$ ;  $[\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}]$ , и на каждый атом в решётке приходится по две тетрапо-ры. Это ясно и из рис. 23, а: к каждому атому прилегают три атома в ниже-лежащем плотноупакованном слое и три — в вышележащем, поэтому над и под каждым атомом имеется по тетраэдрической поре, направленной со-ответственно вершиной вверх и вниз. Радиус тетраэдрической поры равен  $r_{\text{т.п.}} = (\sqrt{3/2} - 1) \cdot R \approx 0,225 \cdot R$ .

Очевидно, что таким же будет количество и радиус окта- и тетраэдри-ческих пор и в любых других плотноупакованных структурах. В качестве примера найдите самостоятельно положение пор в решётке ГПУ (по ана-логии с рис. 22 и 23).

**II. Решётка ОЦК.** В ней также имеются окта- и тетраэдрические поры, но эти октаэдры и тетраэдры уже не являются правильными.

Центры октаэдрических пор расположены в плоскостях наиболее плот-ной упаковки  $\{110\}$  (рис. 24, а) и лежат в центрах граней и рёбер элемен-тарной ячейки (рис. 24, б). Образованный шестёркой атомов октаэдр «сплюснут» вдоль одной из осей, поэтому в ОЦК-решётке различают окта-

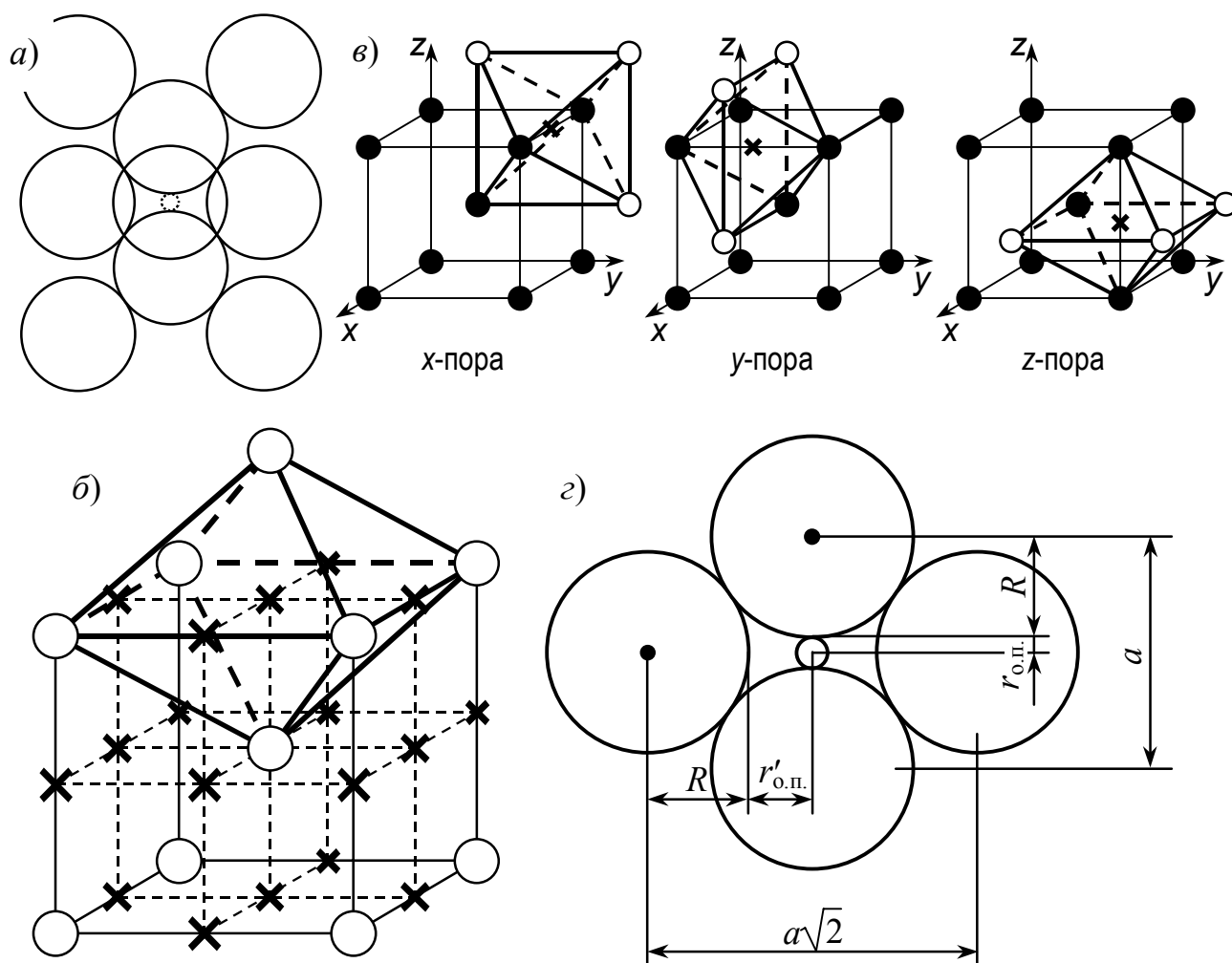


Рис. 24. Октаэдрические поры в ОЦК-структуре.  $a$  — расположение поры в плоскости (110); б — центры октапор в элементарной ячейке ОЦК-решётки; в — октапоры  $x$ -,  $y$ - и  $z$ -типа; г — нахождение радиусов октапоры

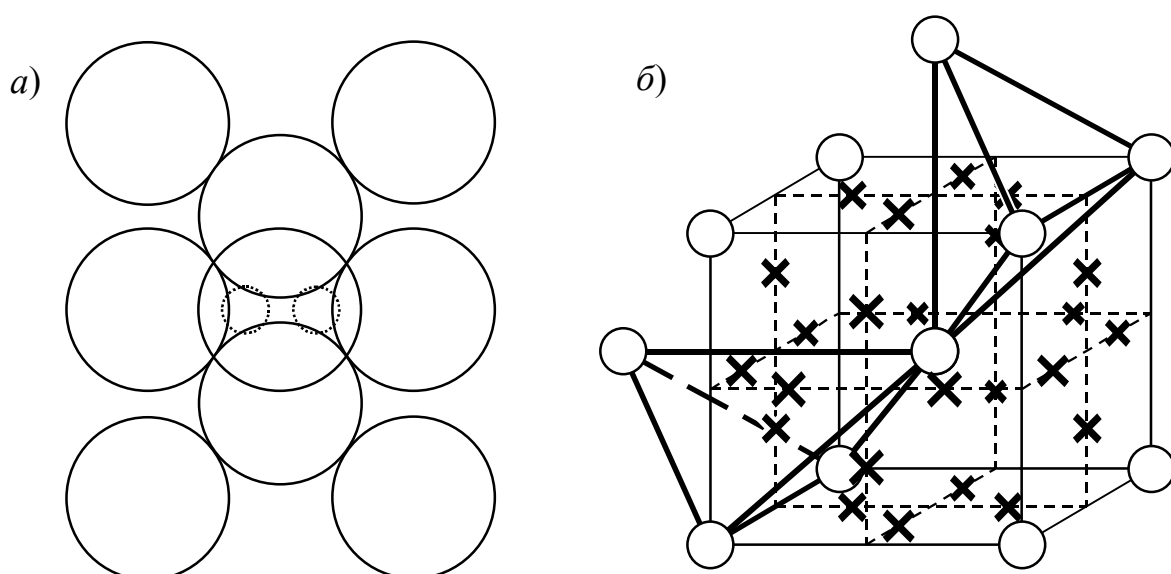


Рис. 25. Тетраэдрические поры в ОЦК-структуре.  $a$  — расположение пор в плоскости (110); б — центры тетрапор в элементарной ячейке ОЦК-решётки

поры  $x$ -,  $y$ - и  $z$ -типа (рис. 24, *в*). Размер октапоры вдоль «короткой» оси равен  $r_{\text{о.п.}} = a/2 - R = (2/\sqrt{3} - 1) \cdot R \approx 0,155 \cdot R$ , а вдоль «длинной»  $r'_{\text{о.п.}} = a\sqrt{2}/2 - R = (2\sqrt{2}/\sqrt{3} - 1) \cdot R \approx 0,633 \cdot R$  (рис. 24, *з*). Подсчитав число октаэдрических пор, можно убедиться, что на каждый атом в ОЦК-решётке приходится по три октапоры, то есть по одной поре каждого из трёх типов ( $x$ ,  $y$  и  $z$ ).

Тетраэдрические поры в ОЦК-решётке лежат не между октаэдрическими, а внутри них (рис. 25, *а*). Центры тетрапор расположены на гранях элементарной ячейки (рис. 25, *б*). Размер тетраэдрических пор больше, чем октаэдрических:  $r_{\text{т.п.}} = (\sqrt{5/3} - 1) \cdot R \approx 0,291 \cdot R$ , однако это расстояние одинаково для всех четырёх атомов, окружающих тетрапору, в то время как для октапор на минимальном расстоянии от центра находятся лишь два атома из шести. На каждый атом в ОЦК-решётке приходится по шесть тетраэдрических пор.

### 3. ТЕОРИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ

Будем называть несовершенным кристалл, содержащий участки, в которых расположение атомов (и в отношении симметрии, и в отношении расстояний) отлично от расположения подавляющего большинства. Подобные участки или области следует рассматривать как дефекты кристаллического строения.

По геометрическим признакам дефекты разделяют на нульмерные, или точечные, линейные, двумерные, или поверхностные, и трёхмерные макродефекты.

К последней группе следует относить макроскопические дефекты типа пор или трещин. Поверхностные дефекты имеют макроскопические размеры в двух измерениях: это границы зёрен, двойников, межфазные границы, дефекты упаковки. Одномерные дефектам, то есть дислокации, которым в основном посвящен наш курс, будут рассмотрены ниже. К нульмерным, или точечным, следует отнести вакансии, междоузельные атомы и примесные атомы. Изложение теории дефектов мы начнём с них.

#### 3.1. ВИДЫ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ

Вакансия — узел кристаллической решётки, в котором отсутствует атом, является главным видом точечных дефектов. Из рис. 26, *а* видно, что удаление атома вызывает изменение механического равновесия соседних атомов, вследствие чего они смещаются к центру вакансии.

В отличие от вакансии, междоузельный атом добавочно внедрён в элементарную ячейку (рис. 26, *б*). Поскольку укладка атомов в металлах весьма плотная, то появление междоузельного атома вызывает сильнейшую деформацию решётки. Рис. 26, *б* является, конечно, плоской схемой. Действительными местами расположения междоузельных атомов являются октаэдрические поры.

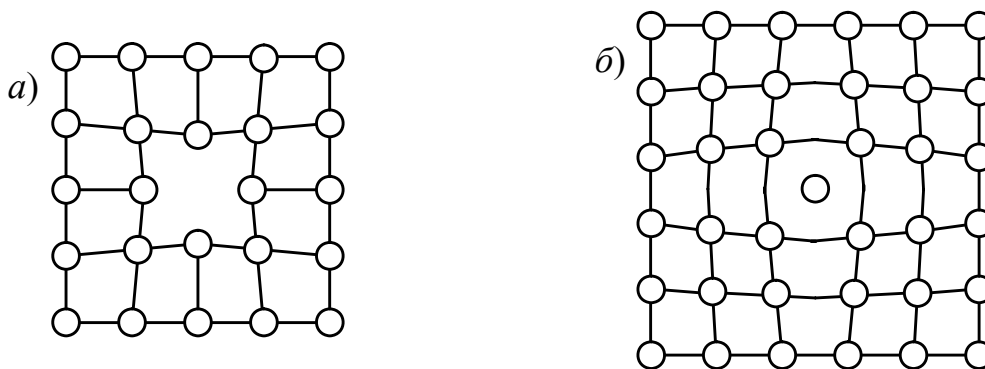


Рис. 26. Схематическое изображение вакансии (*а*) и междоузельного атома (*б*)

Строение и размеры пор в ГЦК- и ОЦК-решётках были рассмотрены в разделе 2.5.3. Помещение атома в октаэдрическую пору создаёт деформацию, но в случае ГЦК-решётки эта деформация, во-первых, меньше, во-вторых, изотропна, поскольку октаэдры атомов, образующие поры, в ГЦК-решётке правильные. В ОЦК-структуре деформация около междоузельного атома сосредоточена в основном вдоль одной оси, поскольку соответствующие октаэдры сплюснуты.

Иногда к точечным дефектам относят и атомы примесей, растворённых в металлах. Атомы четырёх элементов: водорода, азота, углерода, кислорода (иногда и бора) образуют в металлах растворы внедрения; эти атомы располагаются в октаэдрических (иногда тетраэдрических) порах. Так как их атомные радиусы невелики, то создаваемая ими деформация не столь большая, как от междоузельных атомов, но все же велика и оказывается существенной для большой группы эффектов (сегрегации у границ, образование атмосфер примесей около дислокации, упрочнение и т.д.).

Атомы остальных элементов периодической системы образуют растворы замещения, то есть они замещают атомы растворяющего металла в узлах кристаллической решётки. Появление упругой деформации в этом случае зависит от соотношения атомных радиусов примеси и растворителя. Заметим, что растворённые атомы, вакансии и междоузельные атомы могут беспорядочно блуждать по решётке, перескакивая из одной поры (узла) в другую. Такие диффузионные процессы усиливаются при повышении температуры.

### 3.2. МЕХАНИЗМЫ ОБРАЗОВАНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ

Первый механизм возникновения дефектов был предложен Я. И. Френкелем и сводился к следующему. Атомы в твёрдых телах совершают колебания около узлов кристаллической решетки с частотой порядка  $10^{13}$  Гц. Эта частота мало изменяется с повышением температуры, зато существенно возрастает амплитуда колебаний. Это можно показать так: энергия колеблющегося атома (осцилятора) равна  $2\pi^2 m \nu^2 A^2$ , где  $m$  — масса,  $\nu$  — частота, а  $A$  — амплитуда колебаний. Но именно колебания атомов представляют то внутреннее движение частиц в теле, интенсивность которого мы характеризуем температурой. Поэтому средняя энергия колебаний (на одну степень свободы) равна тепловой энергии  $\frac{1}{2}kT$ , где  $k$  — постоянная Больцмана. Следовательно,

$$\frac{1}{2}kT = 2\pi^2 m \nu^2 \langle A^2 \rangle \quad (55)$$

или

$$\langle A^2 \rangle = \frac{kT}{4\pi^2 m \nu^2}, \quad (56)$$



то есть усреднённый по всем атомам квадрат амплитуды возрастает пропорционально температуре. Однако энергии колебаний у атомов неодинаковы, поэтому неодинаковы и амплитуды колебаний. У некоторых атомов амплитуды колебаний при высоких температурах могут оказаться столь большими, что атомы достигнут позиций октаэдрических пор. В подавляющем большинстве случаев в следующий миг атом возвращается в исходный узел, но иногда освободившийся узел может занять любой соседний, также колеблющийся атом, как это показано на рис. 27.

В таком случае возникает пара дефектов, которые разбегаются друг от друга. В вакансию может «запрыгнуть» соседний атом, и она перемещается на место атома, а междоузельный атом, оказавшийся в ловушке, может «столкнуться» соседний атом в междоузелие и встать на его место. Возможно, что когда-нибудь эта вакансия в ходе непрерывного блуждания по решётке встретит свой междоузельный атом, тогда, встав на место вакансии, междоузельный атом превратится в обычный узловой атом, то есть вакансия и междоузельный атом могут аннигилировать. Очевидно, что аннигиляция происходит между любыми соседними междоузельными атомами и вакансией. В момент аннигиляции должна выделяться та избыточная энергия, которой обладают оба дефекта, поэтому в точке аннигиляции происходит локальное повышение температуры. Но благодаря теплопроводности пик температуры быстро «рассасывается». И вновь в каких-то местах возникают новые пары дефектов и так далее.

Этот механизм долгое время считался очевидным и не встречал возражений.

Как ни странно, но они появились у специалистов по низкотемпературной электропроводимости металлов. Согласно квантовой теории электроны проводимости рассеиваются на любых отклонениях от периодического расположения атомов в кристаллической решётке, то есть на атомных колебаниях и дефектах кристаллической решётки. Колебания атомов при 0 К полностью прекращаются, и если дефекты отсутствуют, то электрическое сопротивление металлов при 0 К должно обращаться в ноль, как это показано пунктиром на рис. 28.

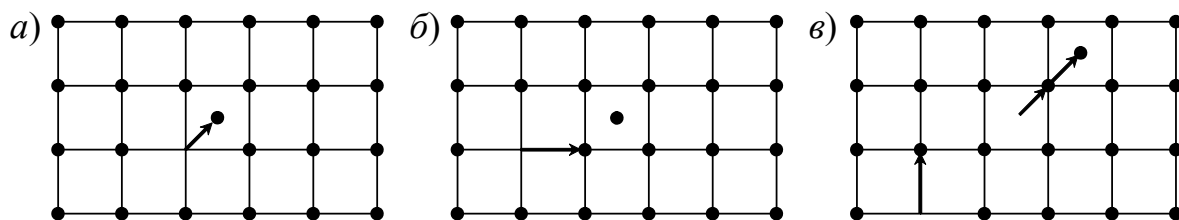


Рис. 27. Образование точечных дефектов по механизму Френкеля: *а* — атом перескакивает из узла в октаэдрическую пору; *б* — почти одновременно его узел занимает любой соседний атом; *в* — вакансия и междоузельный атом расходятся

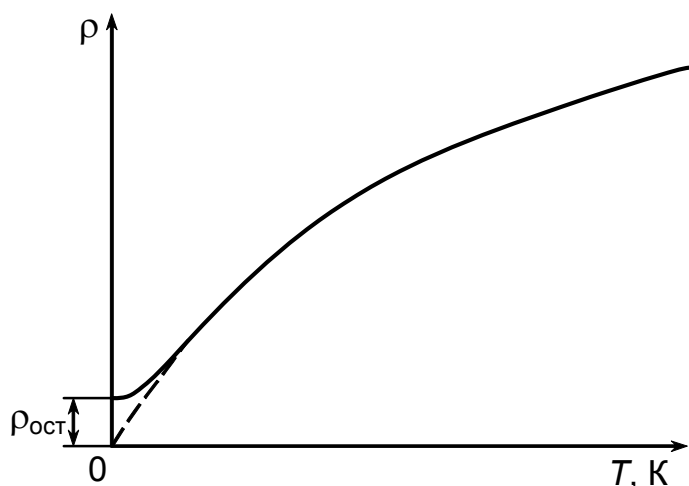


Рис. 28. Зависимость электросопротивления  $\rho$  металлов, содержащих дефекты, от температуры (схема)

В действительности при 0 К всегда существует остаточное сопротивление, обусловленное дефектами. Была построена теория рассеяния электронов на дефектах, и тут неожиданно выяснилось, что наблюдавшиеся значения  $\rho_{\text{ост}}$  можно объяснить только вакансиями, а междоузельные атомы, количество которых по Френкелю равно числу вакансий, должны были создать в десятки и даже сотню раз больший эффект. Подобные оценки привели к выводу, что число междоузельных атомов много меньше (в тысячи и миллионы раз), чем вакансий. Следовательно, механизм Френкеля экспериментально не подтверждается.

Немецкий физик В. Шоттки разработал принципиально иной механизм образования вакансий. Шоттки обратил внимание на то, что любая, даже идеально полированная, поверхность кристалла содержит шероховатости атомного масштаба, то есть горизонтальные террасы, соединённые ступеньками (рис. 29). Допустим, что атомы 1 или 2 нижней террасы перескакивают в позицию застройки верхней террасы, то есть в позиции 1' или 2'. Следовательно, освобождаются узлы 1 или 2. В них перескакивают соседние из глубины атомы. В освободившиеся узлы — другие, соседние и так далее. Вакансии, возникнув на поверхности, уходят вглубь материала. Таким образом, Шоттки удалось объяснить причину преимущественного су-

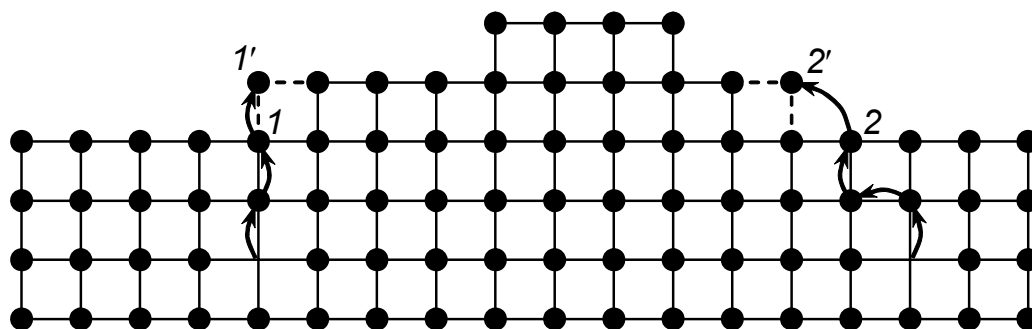


Рис. 29. Схема возникновения вакансий на внешней поверхности кристалла по Шоттки

существования вакансий. Но продолжим рассуждения. Допустим, что имеются два шарообразных образца с радиусами  $r_1 = 1$  мм и  $r_2 = 1$  м. Нагреем их, чтобы интенсифицировать образование вакансий. Время достижения вакансиями, родившимися на поверхности шара радиусом  $r$ , его центра имеет порядок  $\tau \sim r^2/D$ , где  $D$  — коэффициент диффузии. В первом образце вакансии, возникнув на поверхности, довольно быстро достигнут центра, для второго время достижения вакансиями центра окажется в  $(r_2/r_1)^2 = 10^6$  раз больше. Однако эксперименты «упрямо» свидетельствовали о том, что в центре обоих образцов вакансии появляются практически одновременно (после прогрева).

Вскоре Шоттки объяснил и этот эффект. Образцы, которые используются в подобных экспериментах, являются поликристаллическими, то есть состоят из огромного количества маленьких кристалликов (зёрен), соприкасающихся друг с другом. Зёрна имеют одинаковый химический состав, одинаковую кристаллическую решётку и параметр, но отличаются пространственной ориентацией решётки, иначе говоря, решётки соседних зёрен повернуты друг по отношению к другу, так что граница зерна представляет поверхность разрыва ориентировки. Схематически строение границы зерна показано на рис. 30.

Граница зерна содержит точно такие же террасы и ступеньки, как и внешняя поверхность. Поэтому можно утверждать, что внутренние границы могут служить источниками вакансий точно так же, как и внешняя поверхность. Вакансиям не нужно двигаться от внешней поверхности к центру образца. Они возникают на внутренних границах зерна, расположенного в центре образца, поэтому путь вакансий равен радиусу зерна. Следует

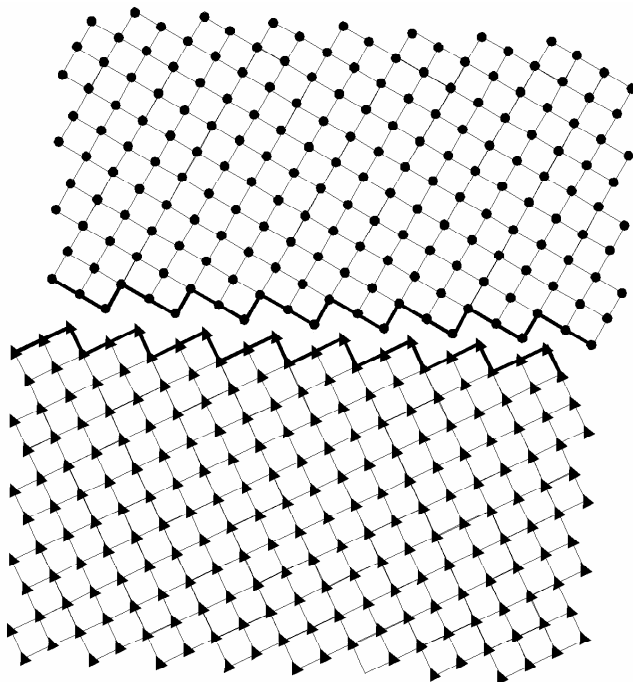


Рис. 30. Схема расположения атомов на границах зерна. (Обратите внимание на атомные террасы и ступеньки)

напомнить, что в металлургии размер зерна характеризуется баллом или номером зерна:

$$n = (\log_2 N - 3), \quad (57)$$

где  $N$  — число зерен, наблюдающихся на участке шлифа площадью  $1 \text{ мм}^2$ . Допустим,  $N=4$  зерна на  $\text{мм}^2$ , тогда  $n = 2 - 3 = -1$  (минус первый номер); для  $N=8, 16, 32, 64$  зёрен на  $\text{мм}^2$  соответственно найдём номер зерна 0, 1, 2, 3. Если упрощённо принять, что каждое зерно имеет форму сферы радиусом  $R$ , а случайное сечение сферы плоскостью имеет среднюю площадь  $\frac{2\pi}{3} R^2$ , то, используя (57), легко получить связь размера зерна  $R$  и балла зерна:

$$R = 0,24 \cdot 10^{-0,15n}, \text{ мм}. \quad (58)$$

Мелкое зерно сталей соответствует 5...7 баллу. Зерно шестого балла имеет радиус 0,03 мм, для восьмого балла  $R \approx 0,015$  мм, для десятого балла 0,0077 мм.

Очевидно, что длина пути вакансий от границы зерна к его центру имеет порядок сотых долей миллиметра. Используем далее типичное для  $1000^\circ\text{C}$  значение коэффициента диффузии вакансий  $D = 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$  (в металлах типа меди, серебра, золота) и найдём время миграции вакансий от поверхности зерна, например, шестого балла к его центру  $(3 \cdot 10^{-3} / 10^{-5})^2 \approx 0,9 \text{ с}$ . Таким образом, благодаря границам зерна равномерное распределение вакансий устанавливается очень быстро независимо от диаметра образца.

После обнаружения в кристаллах дислокаций удалось выяснить, что вакансии могут рождаться также на краевых дислокациях. Линия такой дислокации представляет собой край «обрыва» атомной плоскости. Атомы из узлов соседних плоскостей могут перескакивать на этот край, как бы продолжая достройку плоскости. Соседние узлы, таким образом становятся «свободными», и в них «рождаются» вакансии, которые уходят, равномерно распределяясь по кристаллу. Дислокационный механизм рождения вакансий особенно существенен для монокристалльных образцов.

### 3.3. РАВНОВЕСНАЯ КОНЦЕНТРАЦИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ

Вакансии и междоузельные атомы возникают на внешней или внутренних поверхностях кристалла — границах зерна, дислокациях и других несплошностях структуры типа пор, газовых пузырей, трещин. Эти же места являются стоками вакансий и междоузельных атомов. Заметим, что образование точечного дефекта всегда приводит к увеличению энергии кристалла. Согласно рис. 29, образование вакансии можно представить как реакцию выхода «глубинного» атома на поверхность. Но в глубине атом был

связан с  $z$  соседними атомами, тогда как на поверхности — в среднем только с  $z/2$ . Следовательно, энергия образования вакансии

$$\varepsilon_V = \left( z - \frac{z}{2} \right) \varepsilon_{AA} = \frac{z}{2} \varepsilon_{AA}, \quad (59)$$

где  $\varepsilon_{AA}$  — энергия парной связи атом–атом. Полный разрыв связи происходит при сублимации (испарении). Можно считать, что

$$\varepsilon_V \approx \frac{1}{2} \varepsilon_{\text{субл}}, \quad (60)$$

где  $\varepsilon_{\text{субл}} = z\varepsilon_{AA}$  — энергия сублимации в расчете на атом. Известны и другие оценки. Например,  $\varepsilon_V$  выражают через модуль сдвига  $G$  и кратчайшее межатомное расстояние  $b$ :

$$\varepsilon_V \approx \frac{1}{4} G b^3. \quad (61)$$

Подобные оценки дают для энергии образования вакансии  $\varepsilon_V$  в меди, серебре, золоте значение  $\sim 1$  эВ что находится в разумном согласии с экспериментом (значения энергии образования вакансии в различных металлах можно найти в приложении 8). Энергия образования междоузельных атомов много больше, причём в основном она обусловлена энергией деформации окружающих атомов при введении атома в стеснённую пору. По некоторым оценкам,

$$\varepsilon_{\text{м.а.}} \approx 3\varepsilon_V.$$

Можно задать вопрос: почему вообще существуют вакансии и междоузельные атомы, если их образование приводит к росту энергии? Дело в том, что, как уже говорилось в разделе 1.1, для систем, находящихся при постоянной температуре, стремление к минимуму энергии становится абсолютным только при 0 К. При  $T > 0$  К проявляется и другая противоборствующая тенденция: стремление энтропии системы к неограниченному возрастанию. Энтропия определяется (по Л. Больцману) термодинамической вероятностью системы — числом макроскопических вариантов осуществления данного макросостояния [см. уравнение (11)]. Рост  $W$  означает переход системы в состояния со все увеличивающейся хаотичностью как в распределении частиц по энергиям, так и в их пространственном положении. Очевидно, что стремление энергии к минимуму, а энтропии к максимуму представляют антагонистические тенденции. Равновесие устанавливается как компромиссное, промежуточное состояние, для которого и энергия не минимальна, и энтропия не максимальна. Условием равновесия является минимум функции  $F$ , называемой свободной энергией и определяемой уравнением (21). Если система в исходном состоянии была неравновесной, то в ней протекают релаксационные процессы, уменьшающие свободную энергию ( $dF < 0$ ), пока наконец она не достигнет минимума, то есть система не придёт к равновесию ( $dF = 0$ ).

Применим принцип минимума свободной энергии для расчёта равновесной концентрации точечных дефектов.

Допустим, что в кристалле золота, содержащем  $N=N_0$  атомов, где  $N_0=6,022 \cdot 10^{23}$  есть число Авогадро, возникает единственная вакансия. Запишем изменение свободной энергии при её образовании:

$$\Delta F = \Delta E - T \cdot \Delta S, \quad (62)$$

где  $\Delta E = \varepsilon_V$ , а изменение энтропии

$$\Delta S = k \ln W = k \ln(N_0 + 1), \quad (63)$$

ибо единственная вакансия может быть размещена в кристалле  $N+1$  способами, в любом из  $N_0 + 1$  узлов решётки. Таким образом,

$$\Delta F = \varepsilon_V - kT \ln(N_0 + 1), \quad (64)$$

Учитывая, что  $k=1,381 \cdot 10^{-23}$  Дж/К  $=8,617 \cdot 10^{-5}$  эВ/К, рассчитаем  $\Delta F$  при различных температурах. Для золота  $\varepsilon_V = 0,97$  эВ. Находим

$$\Delta F = 0,97 - 0,00492 \cdot T, \text{ эВ.} \quad (65)$$

Для ряда температур получим (табл. 2).

Таблица 2

Изменение энергии при образовании одной вакансии в золоте

$T, \text{ К}$	0	100	200	300	500	800	1000	$T_{\text{пл}} = 1336$
$\Delta F, \text{ эВ}$	+0,97	+0,48	-0,014	-0,51	-1,49	-2,97	-3,95	-5,60

В соответствии с принципом минимума свободной энергии при 0...100 К самопроизвольное образование вакансии невозможно, так как оно сопровождается увеличением свободной энергии. При дальнейшем повышении температуры растёт энтропийное слагаемое  $T \cdot \Delta S$ , так что величина  $\Delta F$  становится отрицательной. Следовательно, выше 200 К образование вакансий становится термодинамически возможным. Вакансии стабилизируются конфигурационной (перестановочной) энтропией.

Перейдём к более общему случаю. Предположим, что в кристалле, содержащем  $N'$  узлов, возникли  $n$  вакансий. Здесь  $N' = N + n$ , где  $N$  — неизменное число атомов. Изменение свободной энергии кристалла при образовании вакансий можно записать так:

$$\Delta F = \Delta E - T \Delta S = n\varepsilon_V - kT \ln W. \quad (66)$$

Записывая  $\Delta E = n\varepsilon_V$ , мы принимаем, что вакансии не взаимодействуют друг с другом.

Термодинамическая вероятность  $W$  в данном случае равна числу способов размещения  $n$  вакансий по  $N'$  позициям. Подсчитать её можно так. Будем последовательно вводить вакансии по одной. Первая вакансия может быть размещена  $N'$  способами, вторая —  $(N' - 1)$  способами, так как одну позицию занимает первая вакансия, третья —  $(N' - 2)$  и т.д., последняя —

$(N' - n + 1)$  способом. Поэтому  $W = N' \cdot (N' - 1) \cdot \dots \cdot (N' - n + 1)$ . Но в действительности в это выражение приходится вводить поправку, обусловленную абсолютной тождественностью вакансий. Они неразличимы, и их перестановки местами не дают физически нового состояния: поэтому указанную выше термодинамическую вероятность следует разделить на число перестановок, равное  $n!$  Итак,

$$W = \frac{N' \cdot (N' - 1) \cdot \dots \cdot (N' - n + 1)}{n!}. \quad (67)$$

Далее умножим числитель и знаменатель на  $(N' - n)!$  и обратим внимание, что в числителе произведение чисел от 1 до  $(N' - n)$  продолжается далее вплоть до  $N'!$  Окончательно запишем

$$W = \frac{N'!}{n!(N' - n)!}. \quad (68)$$

При расчёте  $\ln W$  используем приближённую формулу Стирлинга (28):  $\ln M! \approx M \ln M - M$ . При  $M=10$  её погрешность составляет 14%, для  $M=20$  — 6%, но уже при  $M=100$  погрешность не превышает 1%. Найдём

$$\Delta F = n\varepsilon_V - kT(N' \ln N' - n \ln n - (N' - n) \ln(N' - n)). \quad (69)$$

График зависимости  $\Delta F$  от числа вакансий  $n$  показан схематически на рис. 31.

Мы видим, что резкий вначале темп снижения  $\Delta F$  при увеличении числа вакансий уменьшается, так что изменение свободной энергии  $\Delta F$  при некотором числе вакансий  $n^*$  достигает минимума. Несложно понять, что уменьшение темпа обусловлено действием  $n!$  в знаменателе формулы (67).

Число вакансий в образце будет увеличиваться, пока не достигнет  $n^*$ . Дальнейший рост  $n$  приведёт к увеличению свободной энергии, что запрещено термодинамикой. Следовательно,  $n^*$  есть равновесное число вакансий.

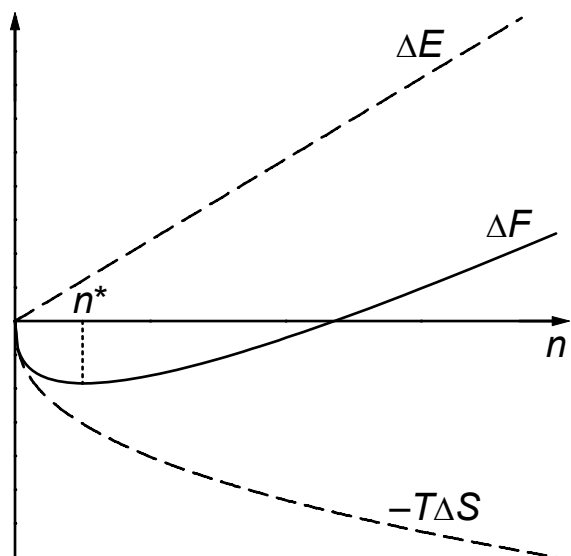


Рис. 31. Изменение слагаемых  $\Delta E$ ,  $-T\Delta S$  и свободной энергии  $\Delta F = \Delta E - T\Delta S$  в зависимости от числа вакансий  $n$  (схема)

Для расчёта  $n^*$  используем условие минимума  $\Delta F$  как функции от  $n$ :

$$\left. \frac{\partial \Delta F}{\partial n} \right|_{n=n^*} = \varepsilon_V + kT (\ln n^* - \ln N') = 0, \quad (70)$$

откуда найдём

$$\frac{n^*}{N + n^*} \approx \frac{n^*}{N} = \exp\left(-\frac{\varepsilon_V}{kT}\right). \quad (71)$$

Формулу (71) для доли вакантных узлов можно уточнить, если учесть, что удаление атома ослабляет «жесткость связей» соседних атомов, снижает частоту их атомных колебаний  $\nu$  и, как следствие, увеличивает энтропию колебаний решётки. По теории Эйнштейна колебательная энтропия в расчёте на атом

$$S \approx k \ln \frac{kT}{h\nu}. \quad (72)$$

Поскольку изменение частоты с  $\nu$  до  $\nu'$  проявляется у всех  $z$  атомов, окружающих вакансию, то изменение колебательной энтропии системы в расчёте на одну вакансию составит

$$\Delta S_K = zk \ln \frac{kT}{h\nu'} - zk \ln \frac{kT}{h\nu} = k \ln \left( \frac{\nu}{\nu'} \right)^z. \quad (73)$$

Учёт изменения колебательной энтропии в выражении (71) приведёт к замене  $\varepsilon_V$  на  $\varepsilon_V - kT \ln \left( \frac{\nu}{\nu'} \right)^z$ . Фактически в (71) появляется добавочный множитель

$$A = \left( \frac{\nu}{\nu'} \right)^z. \quad (74)$$

Значение  $A$  оказывается порядка 1...3. В тех случаях, когда проводят приближённую оценку  $\frac{n^*}{N}$ , множитель  $A$  можно не учитывать.

Полезно рассмотреть, как изменяется равновесная доля вакантных узлов при повышении температуры. Для золота  $\varepsilon_V/k = 4890$  К, так что найдём (табл. 3).

Таблица 3

Равновесная доля вакантных узлов в золоте

$T, \text{ К}$	0	100	300	500	800	1000	1200	$T_{\text{пл}} = 1336$
$n^*/N$	0	$1 \cdot 10^{-49}$	$5 \cdot 10^{-17}$	$2 \cdot 10^{-10}$	$8 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$8 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-4}$



При низких температурах число вакансий пренебрежимо мало, при комнатной температуре одна вакансия приходится на  $10^{16}$  атомов, но вблизи температуры плавления вакансий довольно много: одна вакансия на пять тысяч атомов. Схематически зависимость  $\frac{n^*}{N}$  от температуры показана на рис. 32 (линия 1).

В одной из моделей жидкого состояния принимают, что жидкость отличается от твёрдой фазы только количеством вакансий, их в жидкости около 12%. Высокая подвижность вакансий и их огромное количество создают эффект текучести жидкой фазы, который, по существу, отличает жидкость от твёрдой фазы. Если эта модель правильная, то при температуре плавления доля вакансий скачкообразно должна увеличиваться с  $10^{-4}$  до  $10^{-1}$  и именно этот процесс должен определять сущность плавления.

Доля междоузельных атомов рассчитывается аналогично вакансиям, и получается формула, такая же как и (71), но с заменой  $\epsilon_V$  на  $\epsilon_{м.а.}$ . Но поскольку энергия образования междоузельных атомов в среднем в три раза выше, чем для вакансий, то доля междоузельных атомов оказывается ничтожно малой даже при высоких температурах. Например, для золота при  $\epsilon_{м.а.} = 3 \cdot 0,97 = 2,91$  эВ найдём, что при температуре плавления  $\frac{n_{м.а.}^*}{N} = 1 \cdot 10^{-11}$ . Существование междоузельных атомов в некоторых металлах надёжно не установлено.

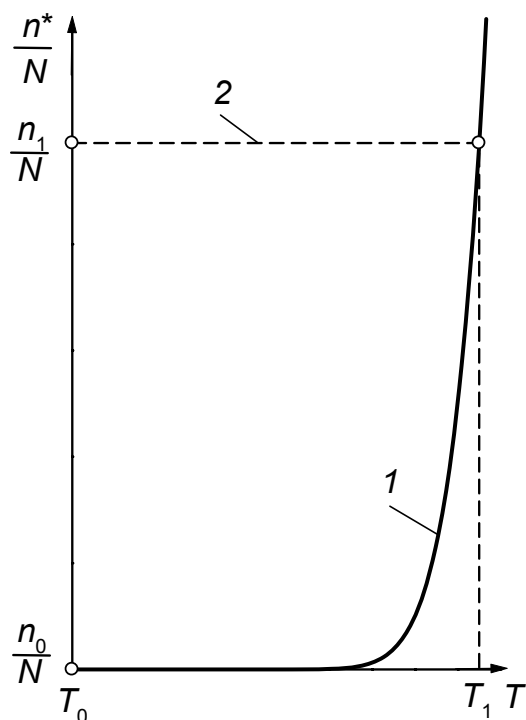


Рис. 32. Изменение концентрации вакансий с температурой при медленном охлаждении (линия 1) и при резкой закалке от температуры  $T_1$  (линия 2)

### 3.4. ОБРАЗОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ТОЧЕЧЕННЫХ ДЕФЕКТОВ

Избыточную, сверхравновесную долю точечных дефектов при комнатной и более низких температурах можно создать несколькими способами.

1. Резкое охлаждение от высоких температур. Допустим, что образец в форме тонкой фольги или проволоки был нагрет до высокой температуры  $T_1$  (см. рис. 32). Равновесная доля вакансий равна  $n_1/N$ . Будем медленно охлаждать образец до комнатной температуры. Вакансии будут в процессе охлаждения возвращаться к местам своего рождения, которые приобретают теперь характер стоков, и вновь встраиваются в структуру границ зёрен. Равновесная доля вакансий будет уменьшаться в соответствии с функцией (71) и её графиком  $I$  на рис. 32. В итоге охлаждения до комнатной температуры  $T_0$  равновесная доля снизится до  $n_0/N$ .

Но охлаждение можно провести быстро, например, в струе газа или жидкости. При этом время охлаждения до комнатной температуры можно довести до  $10^{-1} \dots 10^{-2}$  с. Время закалки оказывается меньше длительности миграции вакансий к стокам, равной в изотермических условиях  $\tau \sim r^2/D$ , где  $r$  — радиус образца, а  $D$  — коэффициент диффузии. Фактически все вакансии будут «донесены» до комнатной температуры, а при этой температуре подвижность вакансий очень мала, так что вакансии оказываются «законсервированными». На рис. 32 разность ординат  $n_1/N - n_0/N$  определяет сверхравновесную концентрацию вакансий.

Безусловно, в процессе очень долгого хранения (месяцы, годы) миграция вакансий всё же происходит, часть вакансий достигает границ зерна и дислокаций. Другие вакансии, сталкиваясь, образуют комплексы: двойные вакансии (дивакансии)  $\rightarrow$  тройные  $\rightarrow$  тетраэдры (четыре вакансии)  $\rightarrow$  тетраэдры с возрастающими размерами. Появление комплексов вакансий, в общем, свидетельствует о существовании слабого притяжения между вакансиями. Когда размеры вакансионных тетраэдров, фактически пор, достигает  $30 \dots 100 \text{ \AA}$ , наблюдается заметное повышение твердости и прочности образцов.

2. Пластическая деформация. В результате пересечения винтовых дислокаций, двигавшихся по пересекающимся плоскостям скольжения, на дислокациях возникают ступеньки, которые принципиально не могут двигаться вместе с дислокациями. Высокие напряжения деформации могут вызвать принудительное (атермическое) движение ступенек вместе с дислокациями (подробнее см. раздел 6.4.2 ниже). При этом каждая ступенька создает цепочку вакансий, которые в дальнейшем «расползаются» по кристаллу. При холодной прокатке никеля со степенью деформации 90 % избыточная доля вакансий составляет  $10^{-4}$ , то есть почти такая же, как в равновесных условиях при температуре плавления.

3. Облучение металлов ядерными частицами. При столкновении ядерных частиц с атомами твёрдых тел, которое можно рассматривать как упругое, частицы передают атому часть своей энергии:

$$\Delta E \approx 4E \frac{m}{M}, \quad (75)$$

где  $E$  — энергия падающей частицы массой  $m$ , а  $M$  — масса атома. Когда величина  $\Delta E$  оказывается порядка или больше энергии связи  $\varepsilon_{\text{св}}$  атома с окружением, наш атом будет выбит из узла решётки в междоузлие. В этом случае реализуется точная схема Френкеля для рождения вакансии и междоузельного атома. Если принять  $\Delta E = \varepsilon_{\text{св}}$ , то из равенства (75) можно оценить пороговую энергию частицы

$$E_{\text{порог}} \approx \frac{M}{m} \cdot \frac{\varepsilon_{\text{св}}}{4}, \quad (76)$$

при которой она способна создать хотя бы одну пару радиационных дефектов. Энергия связи имеет порядок 10 эВ/атом, масса атома, например, меди 64 (массы атома водорода). Поэтому при облучении нейтронами и протонами ( $m=1$ ) пороговая энергия  $\sim 160$  эВ, но при облучении электронами, которые легче нейтрона в 1840 раз, пороговая энергия равна уже 300 кэВ. Для атомной техники это небольшие энергии, реальные энергии нейтронов и протонов могут достигать нескольких миллионов эВ. Подобные частицы, врезаясь в металл, проникают на глубину до нескольких сантиметров, выбивая по дороге атомы из регулярных узлов. Причём выбитые в начале процесса атомы получают кинетическую энергию в несколько кэВ, и поэтому сами способны выбивать атомы. В итоге формируется каскад столкновений и большое число пар дефектов. Но выбитые частицей междоузельные атомы могут довольно быстро вновь объединиться с вакансиями, созданными этой же или другой частицей. Следовательно, непрерывно падающий поток частиц создаёт всё новые и новые дефекты, но внутри металла идет аннигиляция дефектов, и в итоге устанавливается стационарная (постоянная во времени) доля дефектов, зависящая от числа частиц, падающих на единицу площади, и их энергии. Экспериментально наблюдались доли дефектов  $n/N$  порядка 0,3, значительно большие, чем при высокой температуре в жидкости. Очевидно, что материалы, подвергающиеся радиационному облучению, могут рассматриваться как квазжидкости. Они текут при приложении давления.

4. Автоимплантация. В этом методе избыточную концентрацию только междоузельных атомов получают, облучая фольгу металла ионами того же элемента с энергией  $E \geq 100$  эВ.

### 3.5. ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ И ДИФФУЗИЯ

#### 3.5.1. Частота перескоков вакансий и атомов

Существование вакансий позволяет атомам чистых металлов, а также атомам растворителя и примесей в твердых растворах диффундировать по кристаллу. Очевидно, что перескок вакансий вправо эквивалентен перескоку атому влево. Однако следует учитывать, что вакансия всегда может совершить перескок, тогда как перемещение атома требует, чтобы рядом располагалась вакансия.

Допустим, что рядом с атомом 1 лежит вакансия (рис. 33). Путь атома в вакансию «заперт» соседними атомами 2 и 3. Необходимость их раздвинуть приводит к тому, что изменение энергии при перемещении атома 1 имеет максимум в так называемой «перевальной» позиции.

Избыточная энергия  $\varepsilon_m$ , требуемая атому для перескока, называется энергией миграции вакансии. Обычно она имеет порядок 0,5...2 эВ (см. приложение 8), то есть много выше, чем средняя кинетическая энергия атомов  $kT$  (так, при  $T=1200$  К  $kT=0,1$  эВ), поэтому большинство атомов не в состоянии совершить перескок. Однако кинетическая энергия распределена между атомами неравномерно. Согласно квантовой статистике Больцмана вероятность события, что атом имеет энергию  $\varepsilon_p$ , определяется соотношением (36). Напомним, что полная энергия колеблющегося атома-осциллятора квантована: для  $p$ -го уровня энергии  $\varepsilon_p = ph\nu$ . Из (36) следу-

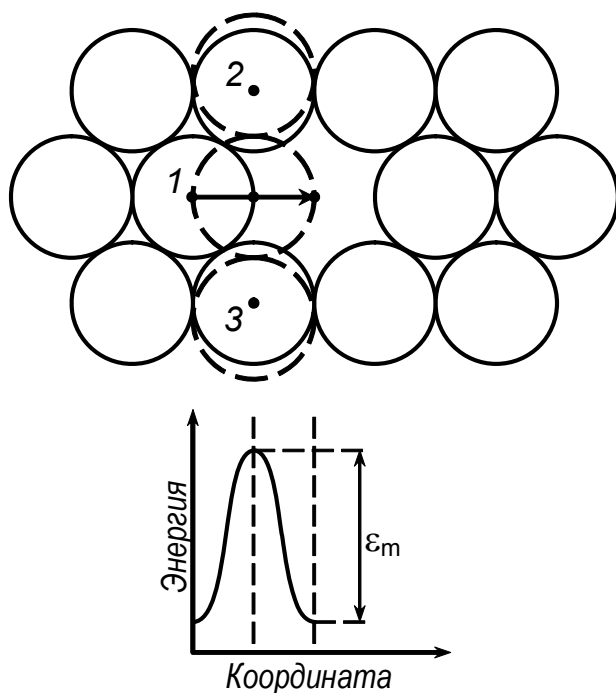


Рис. 33. Изменение энергии атома 1 при перескоке в соседнюю вакантную позицию. Положение атомов в «перевальной» позиции, соответствующей избыточной энергии  $\varepsilon_m$ , показано пунктирными линиями

ет, что существует отличная от нуля вероятность события, что энергия атома равна или превосходит энергию миграции  $\varepsilon_m$ :

$$U(\varepsilon_p \geq \varepsilon_m) = \frac{e^{-\frac{\varepsilon_m}{kT}} + e^{-\frac{\varepsilon_m + hv}{kT}} + e^{-\frac{\varepsilon_m + 2hv}{kT}} + \dots}{\sum_{p=0}^{\infty} e^{-\varepsilon_p/kT}} = e^{-\frac{\varepsilon_m}{kT}} \cdot \frac{\sum_{\lambda=0}^{\infty} e^{-\frac{\lambda \cdot hv}{kT}}}{\sum_{p=0}^{\infty} e^{-\varepsilon_p/kT}} = e^{-\frac{\varepsilon_m}{kT}}. \quad (77)$$

При выводе этого выражения были учтены события, когда энергия атома  $\varepsilon_p$  точно равна  $\varepsilon_m$ , а также превосходит её на  $hv$ ;  $2hv$ ;  $3hv$  и т.д. Атомы, входящие в высокоэнергетическую группу, постоянно обновляются, поэтому вероятность (77) можно относить к произвольному атому. Если атом колеблется с частотой  $\nu$ , то он совершает  $\nu$  попыток в единицу времени преодолеть барьер. Вероятность удачных попыток определена выражением (77). Поэтому частоту атомных перескоков вакансии следует записать как математическое ожидание:

$$\Gamma_V = z \cdot \nu \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon_m}{kT}\right), \quad (78)$$

где  $z$  — как и ранее, число соседних с вакансией атомов (координационное число решётки). Чтобы получить выражение для частоты перескоков атома, следует умножить выражение (78) на вероятность того, что соседний с атомом узел вакантен. Эта вероятность равна доле вакансий  $n_V/N$ . Поэтому

$$\Gamma_a = \Gamma_V \cdot \frac{n_V}{N} = z\nu \exp\left(-\frac{\varepsilon_V + \varepsilon_m}{kT}\right). \quad (79)$$

Частота перескоков междоузельных атомов, а также атомов внедрения в сплавах, для перемещения которых не нужны вакансии, определяется соотношением (78), хотя энергия  $\varepsilon_m$  будет иметь в каждом случае своё значение.

Поскольку междоузельные атомы создают вокруг себя очень большие смещения окружающих атомов, то энергия миграции междоузельных атомов оказывается малой; она по данным для ряда металлов в 10...50 раз меньше, чем энергия миграции вакансий. Так получается потому, что междоузельному атому достаточно немного «подтолкнуть» соседний атом, чтобы тот переместился в следующее междоузлие (октаэдрическую пору), а бывший междоузельный атом занял его место. Хотя количество междоузельных атомов невелико, они обладают большой частотой перескоков, и их роль в диффузии может быть сравнимой с ролью вакансий. Однако проблема диффузии при участии междоузельных атомов до сего времени остаётся неизученной.

### 3.5.2. Коэффициент диффузии вакансий

Предположим, что в кристалле создано неоднородное распределение вакансий в направлении оси  $x$ . Для описания числа вакансий в локальных объёмах введём концентрацию вакансий  $C_V$ , которая равна числу вакансий в единице объёма:

$$C_V = \frac{1}{\Omega_0} \cdot \frac{n}{N}, \quad (80)$$

где  $\Omega_0$  — объём, приходящийся на один атом решётки ( $\Omega_0 \sim b^3$ , где  $b$  — межатомное расстояние). Величина  $1/\Omega_0$  представляет число атомов в единице объёма, а поскольку  $n/N$  есть доля вакантных узлов, то произведение их и определяет число вакансий в единичном объёме.

Рассмотрим две ближайшие в направлении оси  $x$  атомные плоскости (рис. 34). Вакансии перескакивают слева направо и наоборот. Потоки вакансий, то есть числа вакансий, пересекающих площадку в  $1 \text{ см}^2$  за секунду, равны

$$j_{1 \rightarrow 2} = \frac{1}{6} C_V(x) \cdot b \Gamma_V \cdot 1 \text{ см}^2 \quad \text{и} \quad j_{2 \rightarrow 1} = \frac{1}{6} C_V(x+b) \cdot b \Gamma_V \cdot 1 \text{ см}^2. \quad (81)$$

Коэффициент  $\frac{1}{6}$  введён потому, что из 6 возможных направлений движения рассматривается одно. Толщина атомной плоскости условно принята равной  $b$ . Разность потоков даёт результирующий поток

$$j_V = j_{1 \rightarrow 2} - j_{2 \rightarrow 1} = \frac{1}{6} b \Gamma_V \cdot (C_V(x) - C_V(x+b)). \quad (82)$$

Поскольку  $b$  — микроскопический параметр, а  $x$  — макроскопическая координата, то  $x \gg b$ , поэтому  $C_V(x+b) \approx C_V(x) + b \frac{\partial C_V}{\partial x}$ , и тогда

$$j_V = -\frac{1}{6} b^2 \Gamma_V \cdot \frac{\partial C_V}{\partial x}. \quad (83)$$

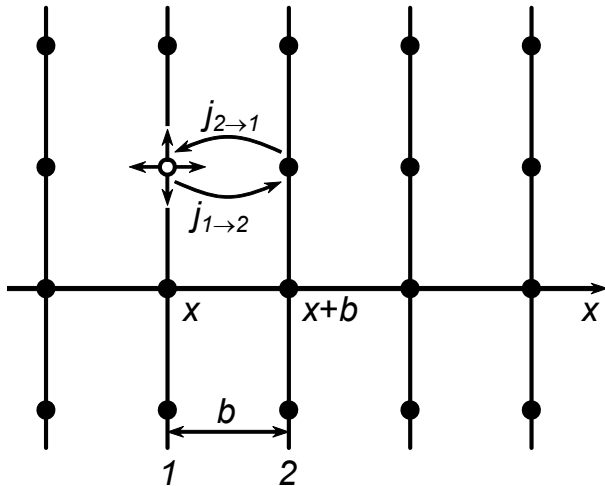


Рис. 34. К расчёту коэффициента диффузии вакансий (пояснения в тексте)

Мы получили типичное выражение первого закона диффузии

$$j = -D \frac{\partial C}{\partial x} : \quad (84)$$

поток пропорционален минус градиенту концентрации, а коэффициент пропорциональности между ними представляет коэффициент диффузии вакансий:

$$D_V = \frac{1}{6} b^2 \Gamma_V = \frac{z}{6} b^2 v \exp\left(-\frac{\varepsilon_m}{kT}\right). \quad (85)$$

### 3.5.3. Коэффициент диффузии атомов

Рассмотрим теперь диффузию атомов в твёрдых растворах замещения. Для сплавов концентрацию  $C_i$  растворённого элемента  $i$  принято выражать количеством массы в единице объёма, например, г/см<sup>3</sup>. Предположим, что в образце создано неоднородное распределение концентрации этого компонента вдоль оси  $x$ . Вновь вернёмся к рис. 34, но будем считать, что белые кружки обозначают атомы растворённого элемента  $i$ . Аналогично вакансиям атомы этого элемента перескакивают из плоскости 1 с координатой  $x$  в ближайшую соседнюю плоскость 2, расположенную при  $x+b$ , и наоборот, из плоскости 2 в плоскость 1. Абсолютно так же можно записать потоки  $j_{1 \rightarrow 2}$  и  $j_{2 \rightarrow 1}$ , но, во-первых, частоту перескоков  $\Gamma_V$  придётся заменить на  $\Gamma_a$ , а во-вторых, эти потоки будут представлять не потоки атомов, а потоки массы, поскольку концентрация  $C_i$  равна не числу атомов, а количеству массы в единице объёма. После вычитания этих потоков аналогично (82) получим

$$j_i = -\frac{1}{6} b^2 \Gamma_a^i \cdot \frac{\partial C_i}{\partial x}, \quad (86)$$

где диффузионный поток  $j_i$  есть количество массы элемента  $i$ , проходящей за единицу времени через единицу площади сечения, перпендикулярного

оси  $x$ . Размерность потока  $[j] = \frac{\text{кг}}{\text{м}^2 \cdot \text{с}}$ . Величина потока пропорциональна

градиенту концентрации элемента, минус означает, что поток направлен против градиента, то есть из области с большой концентрацией в область с малой концентрацией. По прошествии достаточно большого времени концентрация во всех точках образца окажется одинаковой. Коэффициент

пропорциональности между  $j_i$  и  $-\frac{\partial C_i}{\partial x}$  в выражении (86) представляет коэффициент диффузии элемента  $i$  в сплаве:

$$D_i = \frac{1}{6} b^2 \Gamma_a^i = \frac{z}{6} b^2 v_i \exp\left(-\frac{\varepsilon_V + \varepsilon_m^i}{kT}\right). \quad (87)$$

Аналогичное выражение может быть получено для любого компонента сплава, в том числе и для растворителя. В принципе, это выражение применимо и для диффузии атомов чистого металла; такое явление называется самодиффузией. Хотя самодиффузия несомненно происходит, но для её экспериментального выявления на образец чистого металла приходится наносить тонкий слой радиоактивного изотопа этого же элемента, а затем изучать диффузию изотопа вглубь металла. Опыты свидетельствуют о том, что различные элементы в многокомпонентных сплавах диффундируют с различной интенсивностью, то есть обладают различающимися коэффициентами диффузии. В формуле (87) индивидуальность элемента отражается через параметры: частоту колебаний атомов  $\nu$ , зависящую от массы атома, и энергию миграции  $\epsilon_m$ , определяющуюся энергией химических связей данного атома с окружающими его атомами, а также размером атома.

Множитель  $\exp\left(-\frac{\epsilon_v}{kT}\right)$  введён как вероятность вакансии находиться около любого атома. В действительности вакансия несёт небольшой отрицательный заряд и испытывает притяжение к ионам с положительным зарядом, а также к ионам небольших размеров, создающих вокруг себя поле сжатия. Вакансии как бы оббегают подобные атомы, могут обмениваться с ними местами, но не отрываются от них. В этом случае нужно ожидать высокой скорости диффузии атомов этих элементов.

Принципиально возможен и другой способ диффузии в чистых металлах и сплавах — с помощью междоузельных атомов. Выражение для коэффициента диффузии по этому механизму окажется аналогичным (87):

$$D_i = \frac{z}{6} b^2 \nu_i \exp\left(-\frac{\epsilon_{\text{м.а.}} + \epsilon_{\text{м(м.а.)}}^i}{kT}\right), \quad (88)$$

но энергии активации относятся к междоузельным атомам. Обычно коэффициент диффузии записывают в виде

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{U}{kT}\right) \quad (89)$$

и называют  $U$  — энергией активации диффузии в расчёте на атом, а  $D_0$  — предэкспоненциальным множителем. Поскольку

$$\frac{U}{kT} = \frac{N_0 \cdot U}{N_0 \cdot kT} = \frac{Q}{RT}, \quad (90)$$

где  $Q = N_0 U$ , то энергию активации диффузии можно относить на моль:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right). \quad (91)$$

Сравним энергии активации в двух моделях диффузии — по вакансиям и междоузельным атомам:



$$U_{(\text{вак})} = \varepsilon_V + \varepsilon_m; U_{(\text{м.а.})} = \varepsilon_{\text{м.а.}} + \varepsilon_{m(\text{м.а.})}. \quad (92)$$

Энергия миграции междоузельных атомов  $\varepsilon_{m(\text{м.а.})}$  мала, а для вакансий  $\varepsilon_m$  близка по величине к  $\varepsilon_V$  (см. приложение 8). Поэтому, грубо оценивая, запишем

$$U_{(\text{вак})} \approx 2\varepsilon_V; U_{(\text{м.а.})} \approx 3\varepsilon_V. \quad (93)$$

Диффузия по вакансиям имеет в полтора раза меньшую энергию активации, однако частота колебаний атомов  $\nu$  около вакансий уменьшена по сравнению с обычным атомом, а около междоузельных атомов должна быть повышена. Последнее обстоятельство в какой-то мере компенсирует различие энергий активации. Мы должны признать, что междоузельные атомы могут участвовать в диффузии, хотя их роль, возможно, не основная.

Особого внимания заслуживает проблема диффузии атомов, образующих растворы внедрения. Атомы внедрения располагаются в октаэдрических порах решётки. Их диффузия происходит перескоками из одной поры в другую, поскольку количество октаэдрических пор в решётке очень велико. В ГЦК-решётке их количество равно числу атомов растворителя, а в ОЦК-решётке втрое превышает его (см. раздел 2.5.3). Предельная растворимость углерода в  $\gamma$ -железе составляет 2 % по массе или 9 атомных процентов, поэтому даже у стали с предельно высокой концентрацией углерода 91 % всех октаэдрических пор оказываются незаполненными. Следовательно, для диффузии примесей внедрения не нужны вакансии. Поэтому в выражениях для частоты атомных перескоков (79) и коэффициента диффузии (87) следует положить  $\frac{n_V}{N} \approx 1$ . Формально для коэффициента диффузии

получается такое же выражение, как и при вакансионной диффузии. Исключение величины  $\varepsilon_V$  из энергии активации диффузии обуславливает низкие значения последней для элементов внедрения (табл. 4) по сравнению с элементами, образующими растворы замещения. При этом энергия активации диффузии элементов внедрения  $Q$  увеличивается при возрастании их атомного радиуса  $r$ .

Обратим внимание (рис. 22), что при перескоке атома из данной октапоры в соседнюю ему приходится «протискиваться» через тройку прижатых друг к другу атомов, образующих треугольный промежуток с радиусом

вписанной окружности  $r_0 = R \left( \frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \right) \approx 0,155 \cdot R \approx 0,19 \text{ \AA}$ , где  $R$  — радиус атома растворителя (для железа  $R = 1,24 \text{ \AA}$ ; для вывода этой формулы

следует вспомнить, что в равностороннем треугольнике высоты, пересекаясь в центре треугольника, делятся в соотношении 1:2). Поэтому

$$r_0 = \frac{2}{3} \cdot 2R \frac{\sqrt{3}}{2} - R.$$

Таблица 4

Коэффициенты диффузии в железе элементов,  
образующих растворы внедрения и замещения [14]

Диффундирующий элемент	$r, \text{\AA}$	$D_0, \text{см}^2/\text{с}$	$Q, \text{кДж/моль}$	Диффундирующий элемент	$D_0, \text{см}^2/\text{с}$	$Q, \text{кДж/моль}$
Растворы внедрения в $\gamma\text{-Fe}$				Растворы замещения в $\gamma\text{-Fe}$		
H	0,28	$1,1 \cdot 10^{-2}$	41,6	Cu	3,0	252
N	0,71	$1,9 \cdot 10^{-2}$	118,5	Mo	0,068	247
C	0,77	$7,0 \cdot 10^{-2}$	134,0	W	$10^3$	377
B	0,88	$2,0 \cdot 10^{-3}$	87,8	Ni	0,344	282
Растворы внедрения в $\alpha\text{-Fe}$				Co	300	364
H	0,28	$2,2 \cdot 10^{-3}$	12,1	Mn	0,486	278
N	0,71	$3,0 \cdot 10^{-3}$	76,5	Cr	$1,8 \cdot 10^4$	406
C	0,77	$2,0 \cdot 10^{-2}$	84,0	S	2,42	223
B	0,88	$1,2 \cdot 10^{-2}$	85,0	P	28,3	292

Даже у атома водорода радиус 0,28  $\text{\AA}$  превосходит величину  $r_0$ , поэтому перескок атома водорода сопряжён с раздвижением тройки атомов железа, то есть с совершением работы, которая содержится в энергии активации диффузии  $Q$ . Чем больше разность  $r - r_0$ , тем должна быть больше энергия активации  $Q$ , что подтверждается экспериментом (табл. 4).

Наиболее быстро диффундируют атомы водорода: их диффузия проявляется уже при комнатной температуре и является причиной образования зародышей трещин у газовых и нефтяных труб, заполненных водородом с очень высоким давлением.

Диффузия углерода и азота проявляется выше 100  $^{\circ}\text{C}$ . Что касается элементов, образующих растворы замещения, то их диффузия вследствие высокой энергии активации становится заметной лишь выше 450...500  $^{\circ}\text{C}$ .

### 3.5.4. Второй закон диффузии

Очевидный недостаток формулировки первого закона диффузии заключается в том, что она не содержит время, а между тем все диффузионные процессы развиваются во времени. Попытаемся установить зависимость концентрации диффундирующего элемента от времени. Вернёмся вновь к одномерной диффузии (рис. 35). Проведём два очень близких друг к другу сечения, в точках  $x$  и  $x + dx$ , которые проходят по двум ближайшим атомным плоскостям. Рассмотрим изменение количества элемента  $i$ , заключённого между этими сечениями:

$$m_i = C_i \cdot F_0 dx. \quad (94)$$

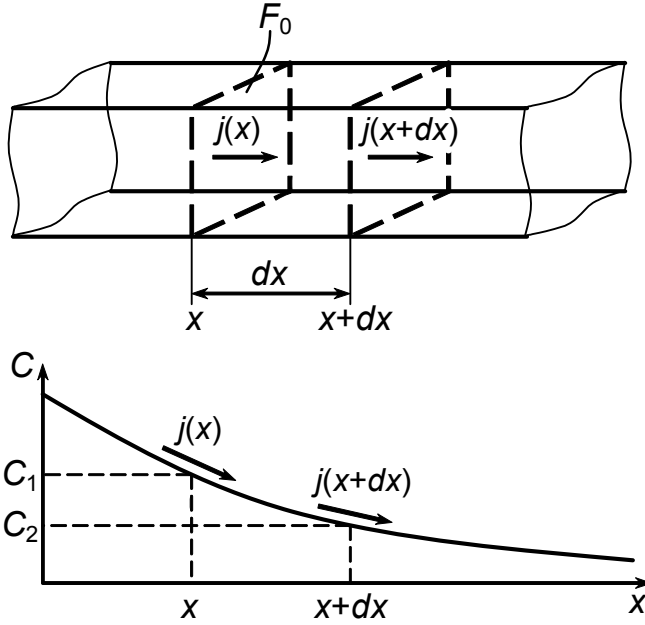


Рис. 35. К выводу второго закона диффузии (пояснения в тексте)

Поток  $j_i(x)$  добавляет массу в этот объём, поток  $j_i(x+dx)$  уносит массу из объёма. Следовательно, изменение массы элемента  $i$  в рассматриваемом объёме подчиняется уравнению

$$\frac{\partial m_i}{\partial \tau} = F_0 \cdot (j_i(x) - j_i(x + dx)), \quad (95)$$

так что  $\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = -\frac{dj_i}{dx}$ . Далее используем первый закон диффузии (84), считая, что коэффициент диффузии от координаты  $x$  не зависит. Найдём:

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2}. \quad (96)$$

Это дифференциальное уравнение в частных производных и выражает второй закон диффузии.

Уравнения (84) и (96), записанные для одномерной диффузии, могут быть просто обобщены на случай трёхмерной или объёмной диффузии. Диффузионный поток необходимо записывать в виде вектора

$$\vec{j} = j_x \vec{e}_x + j_y \vec{e}_y + j_z \vec{e}_z, \quad (97)$$

где  $j_x, j_y, j_z$  — потоки около рассматриваемой точки в направлениях осей  $x, y$  и  $z$ , а  $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$  — единичные векторы в направлениях осей  $x, y$  и  $z$ . Аналогичным образом записывают вектор-градиент концентрации:

$$\overrightarrow{\text{grad } C} = \vec{\nabla} C = \frac{\partial C}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial C}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial C}{\partial z} \vec{e}_z. \quad (98)$$

Выражение первого закона в общем случае имеет вид

$$\vec{j} = -D \cdot \overrightarrow{\text{grad } C}, \quad (99)$$

а второй закон диффузии принимает форму

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D \cdot \nabla^2 C = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right); \quad (100)$$

при этом считается, что концентрация  $C(x, y, z, \tau)$  какого-либо элемента является функцией координат и времени.

Методы решения этих уравнений рассматриваются в курсе «Уравнения математической физики». В соответствующих учебниках и особенно задачниках по этому курсу приводится решение огромного числа задач. Прежде чем решать ту или иную возникшую на практике задачу, следует сначала просмотреть содержание соответствующих пособий.

### 3.5.5. Решение простейших диффузионных задач

Ограничимся случаем одномерной диффузии для бесконечного или полубесконечного тела. Покажем прежде всего, что зависимость концентрации  $C$  от времени и координаты  $x$  при решении уравнения диффузии (96) может быть выражена с помощью единственной переменной

$$\lambda = \frac{x}{2\sqrt{D\tau}}, \quad (101)$$

то есть  $C(x, \tau) = C(\lambda)$ . Рассчитаем производные

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = \frac{dC}{d\lambda} \cdot \frac{\partial \lambda}{\partial \tau} = -\frac{1}{4} \cdot \frac{x}{\tau\sqrt{D\tau}} \cdot \frac{dC}{d\lambda}; \quad (102a)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{dC}{d\lambda} \cdot \frac{\partial \lambda}{\partial x} = \frac{1}{2\sqrt{D\tau}} \cdot \frac{dC}{d\lambda}; \quad (102б)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{2\sqrt{D\tau}} \cdot \frac{dC}{d\lambda} \right) = \frac{1}{2\sqrt{D\tau}} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial \lambda^2} \cdot \frac{\partial \lambda}{\partial x} = \frac{1}{4D\tau} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial \lambda^2}. \quad (102в)$$

Подставим соответствующие выражения в уравнение (96):

$$-\frac{1}{4} \cdot \frac{x}{\tau\sqrt{D\tau}} \cdot \frac{dC}{d\lambda} = D \cdot \frac{1}{4D\tau} \cdot \frac{d^2 C}{d\lambda^2}, \quad (103)$$

и получим дифференциальное уравнение

$$\frac{d^2 C}{d\lambda^2} = -2\lambda \cdot \frac{dC}{d\lambda}. \quad (104)$$

Как видно, переменные  $x$  и  $\tau$ , входящие в обобщённую переменную  $\lambda$ , действительно сокращаются, и это доказывает справедливость исходного предположения о существовании переменной  $\lambda$ .

Обозначим в выражении (104)  $\frac{dC}{d\lambda} = z(\lambda)$ ; тогда получим дифференциальное уравнение для  $z(\lambda)$

$$\frac{dz}{d\lambda} = -2\lambda z \quad (105)$$

с разделяющимися переменными:

$$\frac{dz}{z} = -2\lambda d\lambda. \quad (106)$$

Проинтегрировав его, получим решение для  $z(\lambda)$ :

$$z = \beta_1 e^{-\lambda^2} \quad (107)$$

и далее для функции  $C(\lambda)$ :

$$C(\lambda) = \beta_1 \int e^{-\lambda^2} d\lambda + \beta_2. \quad (108)$$

Рассмотрим два простых примера.

Контакт двух полубесконечных тел. Допустим, что два длинных разнородных стержня плотно соединены торцевыми сечениями при  $x=0$ , а затем выдержаны длительное время при высокой температуре. Пусть один из них изготовлен из меди, второй — из никеля. Через  $C(x, \tau)$  обозначим концентрацию никеля в данной точке (рис. 36).

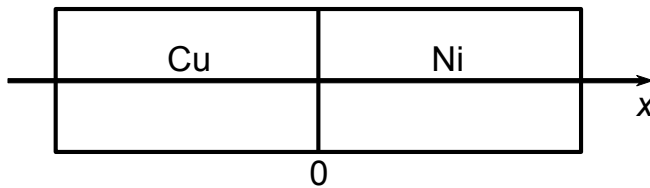


Рис. 36. К задаче о контакте полубесконечных тел

Основываясь на выражении (108), запишем решение нашей задачи:

$$C(x, \tau) = \beta_1 \int_{-\infty}^{\frac{x}{2\sqrt{D\tau}}} e^{-\lambda^2} d\lambda + \beta_2. \quad (109)$$

Неизвестные константы  $\beta_1$  и  $\beta_2$  найдём на основе начального

$$C(x, 0) = \begin{cases} C_0 & \text{для } x \geq 0, \\ 0 & \text{для } x < 0 \end{cases} \quad (110a)$$

и граничного условий нашей задачи:

$$C(-\infty, \tau) = 0. \quad (110б)$$

Последнее условие означает, что за любое конечное время никель не сможет продиффундировать на минус бесконечность. Используем условие (110б)

$$\beta_1 \int_{-\infty}^{-\infty} e^{-\lambda^2} d\lambda + \beta_2 = 0 \quad (111)$$

и найдём  $\beta_2 = 0$ . При использовании условия (110a) при  $\tau = 0$  нужно обратить внимание, что верхний предел  $\frac{x}{2\sqrt{D\tau}}$  равен  $-\infty$ , если  $x < 0$ , и  $+\infty$ , если  $x > 0$ . Имеем

$$\beta_1 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda^2} d\lambda = C_0. \quad (112)$$

Интеграл  $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda^2} d\lambda$  известен в математике как интеграл Пуассона и равен  $\sqrt{\pi}$ , следовательно,  $\beta_1 = \frac{C_0}{\sqrt{\pi}}$ . Итак, окончательное решение задачи имеет вид

$$C(x, \tau) = \frac{C_0}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_{-\infty}^{\frac{x}{2\sqrt{D\tau}}} e^{-\lambda^2} d\lambda. \quad (113)$$

При 1000 К коэффициент диффузии никеля в меди  $D = 2 \cdot 10^{-11} \text{ см}^2/\text{с} = 7,2 \cdot 10^{-6} \text{ мм}^2/\text{ч}$ . Профили распределения концентрации никеля в различные моменты времени приведены на рис. 37. В начальный момент выдержки никель сосредоточен правее плоскости контакта при  $x \geq 0$ . Профиль концентрации имеет вид прямоугольной ступеньки. После выдержки длительностью  $\tau_1 = 100$  ч ступенька размывается, никель проникает в медную часть стержня, и мы обнаруживаем там «хвост» распределения никеля. Такой же хвост распределения меди появляется правее плоскости контакта в никелевой части стержня. Интересно, что на поверхности контакта  $x = 0$  устанавливается концентрация  $C_0/2$ . Чем длительнее выдержка, тем глубже проникают атомы никеля в медь, а меди в никель.

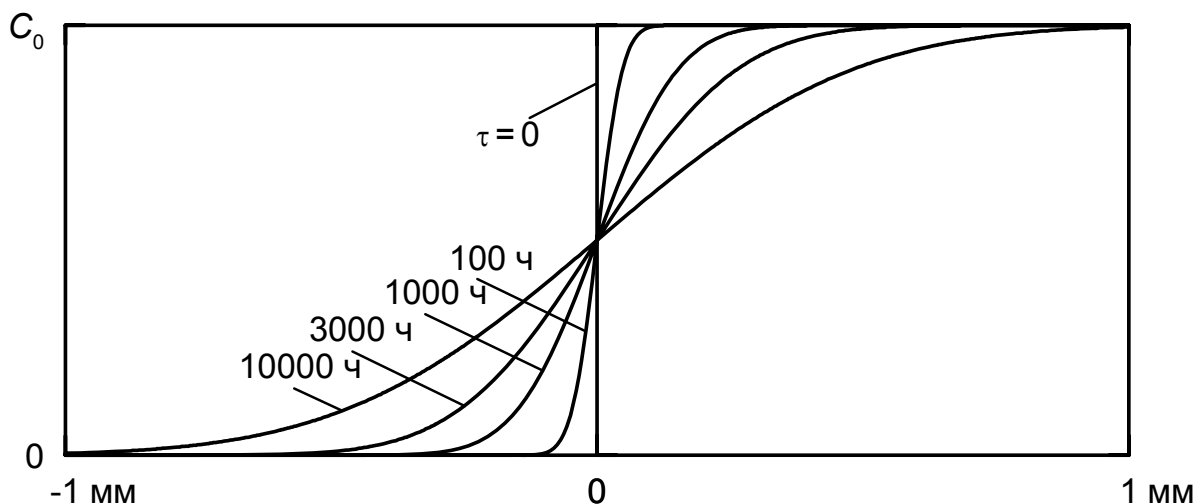


Рис. 37. Распределение концентрации никеля вдоль длины составного стержня

### 3.5.6. Цементация стали

Некоторые детали, которые работают в условиях износа и одновременно ударного нагружения (например, шестерни коробки передач) должны обладать высокой поверхностной твердостью, но вязкой сердцевиной. Чтобы добиться такого состояния детали изготавливают из низкоуглеродистой стали с 0,15...0,25 %C, а затем осуществляют поверхностное науглероживание до концентрации примерно 1 %C при высокой температуре (930...950 °C), закалку и низкий отпуск. Поверхностное науглероживание деталей проводят обычно в печах с герметичным муфелем, куда подается природный газ, предварительно переработанный в специальных генераторах, или капли бензина, керосина, синтина. В результате разложения углеводородного топлива в условиях нехватки кислорода в печах проявляются молекулы CO и CH<sub>4</sub>. Вблизи поверхности деталей проходят реакции



приводящие к образованию атомарного углерода, который растворяется в поверхностных слоях детали. Важнейшей характеристикой атмосферы в печах для цементации является углеродный потенциал. Это концентрация углерода, которая возникает в очень тонком образце железа или стали при помещении его в печь. Система управления подачей газа или жидкости в печь позволяет регулировать углеродный потенциал в довольно широких пределах.

Можно считать, что с момента помещения детали в цементационную печь на поверхности детали устанавливается, а затем поддерживается постоянная концентрация углерода  $C_0$ , равная углеродному потенциалу печи. Поэтому диффузия углерода вглубь детали проходит при неизменной концентрации на поверхности. Для простоты примем, что деталь имеет вид стержня, торец которого насыщается углеродом; ось  $x$  направлена вдоль оси стержня, а координата  $x = 0$  соответствует торцу. Основываясь на общей формуле (108), запишем решение для полубесконечного тела:

$$C(x, \tau) = \beta_1 \int_0^{\frac{x}{2\sqrt{D\tau}}} e^{-\lambda^2} d\lambda + \beta_2, \quad (114)$$

Константы  $\beta_1$  и  $\beta_2$  опять найдём исходя из граничных условий задачи:

$$C(x = 0, \tau) = C_0; \quad (115a)$$

$$C(x \rightarrow \infty, \tau) = C_{\text{исх}}, \quad (115б)$$

где  $C_{\text{исх}}$  — исходная концентрация углерода в стали. Используем условия (115):

$$\beta_1 \int_0^0 e^{-\lambda^2} d\lambda + \beta_2 = C_0; \quad (116a)$$

$$\beta_1 \int_0^{\infty} e^{-\lambda^2} d\lambda + \beta_2 = C_{\text{исх}}. \quad (116б)$$

Поскольку  $\int_0^{\infty} e^{-\lambda^2} d\lambda = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ , получаем  $\beta_1 = -\frac{2}{\sqrt{\pi}}(C_0 - C_{\text{исх}})$  и  $\beta_2 = C_0$ . Итак, искомое решение имеет вид

$$\frac{C(x, \tau) - C_{\text{исх}}}{C_0 - C_{\text{исх}}} = 1 - \int_0^{\frac{x}{2\sqrt{D\tau}}} e^{-\lambda^2} d\lambda \quad (117)$$

или, если использовать принятое в математике обозначение

$$\text{erfc } z = 1 - \text{erf } z = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\lambda^2} d\lambda = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{+\infty} e^{-\lambda^2} d\lambda, \quad (118)$$

то

$$C(x, \tau) = C_{\text{исх}} + (C_0 - C_{\text{исх}}) \cdot \text{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{D\tau}} \right). \quad (119)$$

На основе этого уравнения технолог легко может спрогнозировать длительность цементации для получения науглероженного слоя определённой глубины.

### 3.5.7. Диффузия как процесс случайного блуждания атомов

Представим единственный атомный ряд, простирающийся от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Поместим в точку  $x = 0$  чужеродный атом и проанализируем его движение. Атом перескакивает из узла в узел с частотой  $\Gamma_a$ , но его перескоки влево или вправо равновероятны. За время  $\tau$  атом совершит  $m = \Gamma_a \tau$  перескоков и будет находиться на расстоянии  $x_m$  от исходной точки 0. Вновь поместим атом в эту точку и позволим ему совершить те же  $m$  перескоков. Во втором эксперименте атом окажется на ином расстоянии от точки 0, например, потому что второй прыжок он совершил влево, а не вправо. Проведя множество таких опытов, мы убедимся, что расстояние  $x_m$  каждый раз получается разным и по величине и по знаку, а иногда вообще равным нулю, то есть частица как бы возвращается назад. Следовательно, положения частицы являются случайными, и их нужно характеризовать средним квадратом смещений в результате  $x_m$  скачков  $\langle x_m^2 \rangle$ , потому что  $\langle x_m \rangle$  — среднее расстояние до точки 0 — равно нулю, ибо смещения влево и вправо являются равновероятными.

Допустим, что частица, совершив  $m$  скачков, находится в точке  $x_m$ , и дадим ей совершить ещё один скачок. Очевидно, что координата частицы станет равной



$$x_{m+1} = x_m \pm b, \quad (120)$$

где  $b$  — расстояние между узлами. Возведём обе части этого равенства в квадрат:

$$x_{m+1}^2 = x_m^2 + b^2 \pm 2x_m b \quad (121)$$

и усредним это равенство по возможным  $x_{m+1}$  и  $x_m$ , которые наблюдались в опытах:

$$\langle x_{m+1}^2 \rangle = \langle x_m^2 \rangle + b^2 + 0. \quad (122)$$

Последнее слагаемое равно нулю, так как  $\langle x_m \rangle = 0$ . Равенство (122) справедливо для любого  $m$ . Положим  $m = 0$ , имеем  $\langle x_1^2 \rangle = b^2$ ; затем  $m = 1$ :  $\langle x_2^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + b^2 = 2b^2$ ; далее  $\langle x_3^2 \rangle = \langle x_2^2 \rangle + b^2 = 3b^2$ . Продолжив цепочку вычислений, найдём  $\langle x_m^2 \rangle = mb^2 = b^2 \cdot \Gamma_a \tau$ . Среднеквадратичное смещение атома

$$\sqrt{\langle x_m^2 \rangle} = b \cdot \sqrt{\Gamma_a \tau} \quad (123)$$

В отличие от формулы (87), в случае диффузии вдоль оси  $x$  коэффициент диффузии  $D = \frac{1}{2}b^2\Gamma_a$ , поскольку здесь у атома не шесть, а только два варианта движения. Соответственно, среднеквадратичное смещение атома за  $m$  прыжков

$$\sqrt{\langle x_m^2 \rangle} = \sqrt{2D\tau} \quad (124)$$

Эту формулу иногда рассматривают как «диффузионный путь» атома за время  $\tau$ , и в этом заключается причина того, что решения диффузионных задач всегда содержат комбинацию  $\sqrt{D\tau}$ .

### 3.5.8. Термодинамика процесса диффузии

Два соседних участка в сплаве, различающихся химическим составом, можно всегда, хотя бы условно, рассматривать как две фазы. Равновесие по обмену атомами между фазами наступает в случае равенства химических потенциалов компонентов в обеих фазах. Поэтому мы приходим к заключению, что необходимым термодинамическим условием диффузии компонента  $v$  является различие химического потенциала этого компонента вдоль осей образца.

Обратимся теперь к одномерному образцу (стержню), вдоль оси  $y$  которого изменяется концентрация компонента  $v$  (рис. 38). Пусть  $dn$  молей компонента переместились из точки  $y$  в точку  $y + dy$ . Тогда изменение свободной энергии всей системы в соответствии с выражением (39) составит

$$dG = dn \cdot (\mu(y + dy) - \mu(y)) = dn \cdot \frac{d\mu}{dy} dy, \quad (125)$$

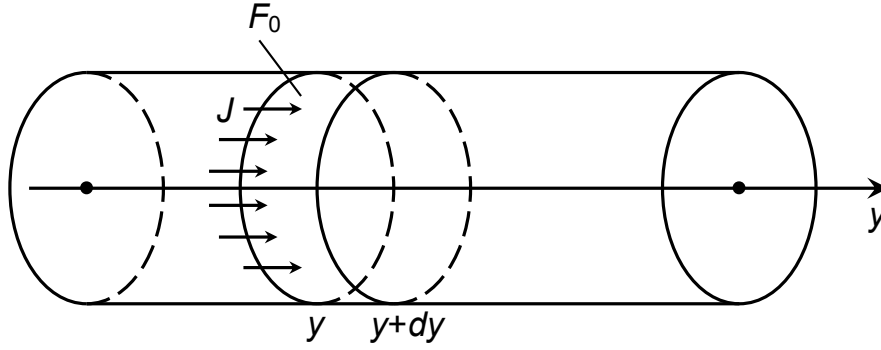


Рис. 38. Диффузионные потоки в одномерном теле

где  $\mu(y)$  и  $\mu(y+dy)$  — химические потенциалы компонента в соответствующих точках. Изменение свободной энергии в ходе любого процесса равно минус работе, совершаемой системой. Поэтому

$$dG = -dA = -f \cdot dy, \quad (126)$$

где  $f$  — некоторая сила химической природы. Будем считать, что диффузию совершает один атом компонента ( $dn = \frac{1}{N_0}$ , где  $N_0$  — число Авогадро).

Приравняв выражения (125) и (126), найдём силу, действующую на атом:

$$f = -\frac{1}{N_0} \cdot \frac{d\mu}{dy}. \quad (127)$$

Это и есть движущая сила процесса диффузии, вынуждающая атомы перемещаться через решётку. Будем считать, следуя А. Эйнштейну, что их средняя скорость  $w$  пропорциональна  $f$ , то есть

$$w = Bf = -\frac{B}{N_0} \cdot \frac{d\mu}{dy}, \quad (128)$$

где  $B$  — коэффициент пропорциональности, который называют подвижностью.

Рассмотрим поток  $j$  массы атомов через полное сечение стержня. За единицу времени сечения достигнут атомы, находившиеся на расстоянии  $1 \cdot w$  от сечения. Поэтому

$$J = F_0 w \cdot C \quad (129)$$

где  $F_0$  — площадь поперечного сечения стержня, а поток через единичную площадку

$$j = wC = -\frac{B}{N_0} \cdot C \cdot \frac{d\mu}{dy}. \quad (130)$$

Химический потенциал в данном случае зависит от координаты  $y$  через концентрацию компонента, которая считается переменной, то есть

$$\frac{d\mu}{dy} = \frac{d\mu}{dC} \cdot \frac{dC}{dy}. \text{ Поэтому}$$

$$j = - \left( \frac{B}{N_0} C \cdot \frac{d\mu}{dC} \right) \cdot \frac{dC}{dy}. \quad (131)$$

Мы получили уравнение первого закона диффузии, причем коэффициент диффузии

$$D = \frac{B}{N_0} C \cdot \frac{d\mu}{dC}. \quad (132)$$

Запишем известное из термодинамики выражение для химического потенциала

$$\mu = \mu_0 + RT \ln a, \quad (133)$$

где  $a$  — активность рассматриваемого компонента в растворе, которая в свою очередь выражается через коэффициент активности  $\gamma$  и атомную долю  $x$  компонента в сплаве:

$$a = \gamma x. \quad (134)$$

Обозначим через  $\delta$  молярную плотность (число молей в единице объёма); тогда

$$x = \frac{C}{N_0 \delta}. \quad (135)$$

С учётом (132) и (133) получаем

$$D = \frac{B}{N_0} x \cdot \frac{d\mu}{dx} = \frac{B}{N_0} \cdot \frac{d\mu}{d \ln x} = BkT \left( 1 + \frac{d \ln \gamma_v}{d \ln x_v} \right). \quad (136)$$

Для разбавленных растворов активность равна атомной доле ( $\gamma = 1$ ), и второе выражение в скобках исчезает. Поэтому при диффузии в разбавленных растворах

$$D_v^* = BkT. \quad (137)$$

Тем самым становится понятным физический смысл величины  $BkT$  и самого коэффициента подвижности. Окончательное выражение для коэффициента диффузии в концентрированных неидеальных растворах, впервые полученное Даркеном, имеет вид

$$D_v = D_v^* \left( 1 + \frac{d \ln \gamma_v}{d \ln x_v} \right), \quad (138)$$

причём выражение в скобках отражает влияние концентрации на величину коэффициента диффузии. Для неразбавленных растворов в зависимости от энергии взаимодействия компонентов сплава величина  $\frac{d \ln \gamma_v}{d \ln x_v}$  может иметь

разные значения и даже менять знак. Область значений  $-1 < \frac{d \ln \gamma_v}{d \ln x_v}$  отвеча-

ет нормальной, положительной диффузии, а область  $\frac{d \ln \gamma_v}{d \ln x_v} < -1$  — отри-

цательной, восходящей диффузии. Последнее означает, что поток атомов движется от области с малой концентрацией в область с более высокой — так называемая «диффузия на гору». Это явление имеет исключительное значение при распаде пересыщенных твёрдых растворов.

В термодинамике растворов получила широкое распространение модель регулярных растворов. Допустим, что мы смешали  $x_A$  молей порошка элемента  $A$  и  $x_B$  молей порошка компонента  $B$  с одинаковыми кристаллическими решётками, причём  $x_A + x_B = 1$ . В итоге получается один моль механической смеси элементов  $A$  и  $B$ , свободная энергия которого равна  $x_A \cdot {}^0G_A + x_B \cdot {}^0G_B$ , где  ${}^0G_A$  и  ${}^0G_B$  — молярные свободные энергии чистых металлов. Однако это не раствор: чтобы получить раствор следует либо сплавить эти порошки нагревом до жидкого состояния, либо длительное время выдержать в твердом состоянии при высокой температуре, чтобы порошки спеклись, а атомы  $A$  и  $B$  равномерно перемешались. При перемешивании атомов, во-первых, возникает энтропия смешения, равная на моль раствора

$$S_{\text{см}} = k \ln W = k \ln \frac{N_0!}{(x_A N_0)!(x_B N_0)!} \approx RT(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B), \quad (139)$$

а во-вторых, изменяется потенциальная энергия взаимодействия атомов, потому что появляется взаимодействие новых соседей  $A$  и  $B$ . В этой модели учитываются парные энергии взаимодействия только ближайших соседей:  $\varepsilon_{AA}$ ,  $\varepsilon_{AB}$  и  $\varepsilon_{BB}$ . Несложно рассчитать, что после растворения атомов молярная энергия системы изменится на величину

$$U = \frac{z}{2} N_0 \varepsilon x_A x_B, \quad (140)$$

где  $\varepsilon = 2\varepsilon_{AB} - \varepsilon_{AA} - \varepsilon_{BB}$ . Поэтому уменьшение свободной энергии в результате растворения составит

$$\Delta G_{\text{см}} = U - TS. \quad (141)$$

Используя (43), найдём активность компонента в растворе:

$$RT \ln a_B = \Delta G_{\text{см}} + (1 - x_B) \cdot \frac{d\Delta G_{\text{см}}}{dx_B} = W(1 - x_B)^2 + RT \ln x_B, \quad (142)$$

где  $W = \frac{z}{2} N_0 \varepsilon$  — энергия смешения компонентов, и коэффициент активности

$$RT \ln \gamma_B = W(1 - x_B)^2. \quad (143)$$

Это выражение используем для расчета по (138) концентрационной зависимости коэффициента диффузии:

$$D = D \left( 1 + \frac{d \ln \gamma_B}{d \ln x_B} \right) = D \left( 1 - 2 \frac{W}{RT} x_B (1 - x_B) \right). \quad (144)$$

При анализе полученного выражения следует иметь в виду, что параметр  $W$  может быть для одних сплавов отрицателен, для других — положителен. Отрицательность  $W$  означает, что в растворах наблюдается взаимное притяжение атомов  $A$  и  $B$ , то есть стремление атомов данного типа окружить себя преимущественно атомами другого типа. Такие растворы при понижении температуры склонны к упорядочению. Если энергия смешения отрицательна, то выражение, заключённое в скобках, положительно. При увеличении концентрации компонента  $B$  его коэффициент диффузии возрастает, достигает максимума при  $x_B = 1/2$  и вновь убывает при  $x_B \rightarrow 1$ , причём график зависимости симметричен относительно  $x_B = 1/2$ .

Однако иногда энергия смешения бывает положительна, то есть атомы  $A$  и  $B$  отталкиваются в растворе, стремясь окружить себя атомами своего сорта. Подобные растворы известны как расслаивающиеся. При повышенной температуре эти растворы стабилизированы энтропией смешения (139), создающей большой отрицательный вклад в величину свободной энергии при малом, но положительном значении энергии смешения. Понижение температуры ведёт к расслоению таких растворов на две изоморфные по кристаллической решётке фазы, обогащённую и обеднённую компонентом  $B$ . Соответственно в низкотемпературной области такие растворы имеют диаграмму равновесия типа купола (расслоения).

Если  $W > 0$ , то выражение в скобках в (144) при некоторых значениях температуры и концентрации может обратиться в ноль. Это произойдёт при  $2 \frac{W}{RT} x_B (1 - x_B) = 1$  или

$$T = \frac{2W}{RT} x_B (1 - x_B). \quad (145)$$

График этой функции тоже напоминает купол, но смысл этой линии в пространстве температура–концентрация иной: на данной линии, называемой спинодалью, коэффициент диффузии  $D$  обращается в ноль. Под спинодалью он отрицателен, над спинодалью — положителен (рис. 39). Отрицательность коэффициента диффузии означает, что диффузионный поток направлен по градиенту концентрации, то есть течёт из области с малой концентрацией в область с большой, усиливая размытие концентрации («диффузия на гору»). Выше спинодали коэффициент диффузии хотя и положителен, но при всех концентрациях меньше, чем для бесконечно разбавленного раствора (137). Отметим ещё одну особенность спинодали, показанную также на рис. 39: спинодаль в точке максимума касается купола диаграммы расслоения. Это происходит при  $x_B = 1/2$  и температуре  $T_m = \frac{W}{2R}$ .

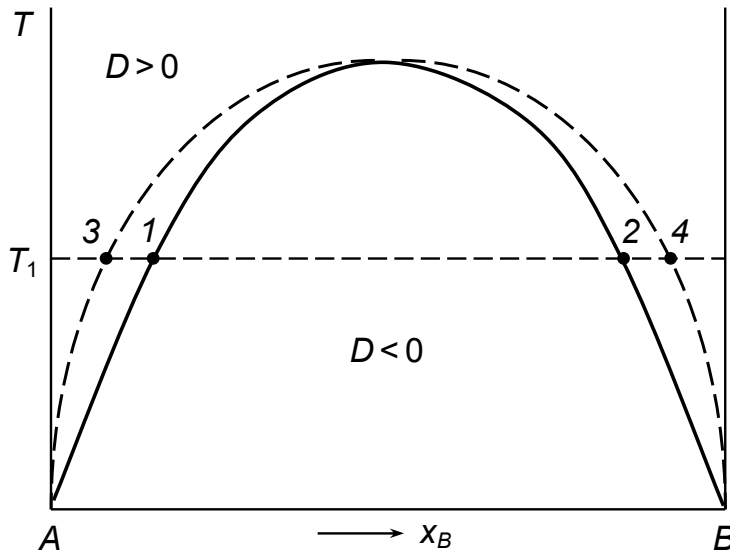


Рис. 39. Положение спинодали (сплошная линия) и купола расслоения для бинарных расслаивающихся растворов

Чтобы точнее понять причину обращения коэффициента диффузии в ноль, преобразуем выражение (144) к иному виду. Воспользуемся формулой (136) и подставим в неё выражение (43) для химического потенциала бинарного сплава:

$$D = \frac{D^*}{RT} \cdot x_B \cdot \frac{\partial \mu_B}{\partial x_B} = \frac{D^*}{RT} \cdot x_B \cdot \frac{\partial}{\partial x_B} \left( G + (1 - x_B) \frac{\partial G}{\partial x_B} \right) = \frac{D^*}{RT} \cdot x_A x_B \cdot \frac{\partial^2 G}{\partial x_B^2}. \quad (146)$$

Таким образом, коэффициент диффузии может быть выражен через вторую производную по концентрации от свободной энергии раствора. Вторая производная обращается в ноль в точках перегиба кривой  $G = G(x_B)$ , как показано на рис. 40. Поэтому при рассматриваемой температуре точки 1 и 2 принадлежат к спинодали. Равновесные составы фаз (точки 3 и 4) определяются условием проведения общей касательной. Концентрационный интервал между точками 3 и 4 шире, чем для точек 1 и 2. Поэтому спинодаль всегда находится внутри купола расслоения.

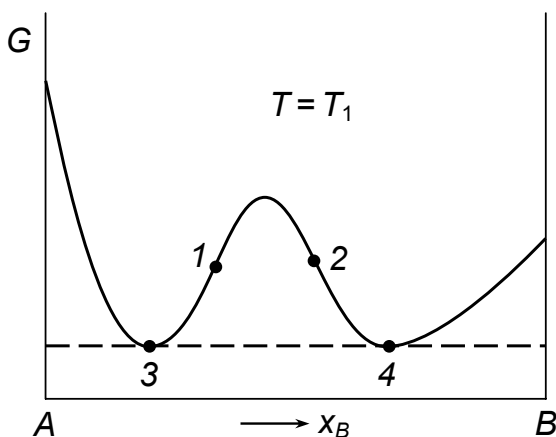


Рис. 40. Зависимость свободной энергии от концентрации для расслаивающихся растворов. Точки 1 и 2 — точки перегиба графика, точки 3 и 4 — точки касания прямой и графика, они отражают равновесные составы фаз при температуре  $T_1$

Изложенное выше относится в основном к растворам замещения, хотя формула (138) применима и к растворам внедрения. Отклонение от идеальности раствора внедрения обусловлено сильным взаимодействием атомов внедрения друг с другом. Известно несколько статистических моделей, в которых учитывается это взаимодействие. Мы используем модель блокировки, развитую для растворов внедрения в ГЦК-металлах, по которой каждый атом внедрения, попавший в октапору, блокирует, то есть делает энергетически невозможными для заполнения  $m - 1$  ближайших октапоров. В таком варианте для активности примеси внедрения (например, углерода) получается выражение

$$\ln a_C = \ln \frac{x_C}{\beta - (\beta + m)x_C} + \ln \beta, \quad (147)$$

где  $\beta$  — число октаэдрических пор, приходящихся на атом растворителя. Для ГЦК-растворов  $\beta = 1$ , так что

$$\left(1 + \frac{d \ln \gamma_C}{d \ln x_C}\right) \approx 1 + (m + 1)x_C. \quad (148)$$

Для твёрдых растворов углерода в  $\gamma$ -железе параметр  $m \approx 5$ , и

$$D_C^{\gamma\text{-Fe}} = D_C^* (1 + 6x_C) = D_C^* (1 + 0,28p_C), \quad (149)$$

где  $p_C$  — содержание углерода в процентах по массе. Коэффициент диффузии углерода возрастает при увеличении концентрации углерода в стали, что подтверждается экспериментальными результатами.

### 3.6. ВЛИЯНИЕ ВНЕШНИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ОБРАЗОВАНИЕ ВАКАНСИЙ

Рассмотрим образование вакансий в образце, который подвергается трёхосному, то есть всестороннему растяжению при напряжении  $P$  вдоль каждой оси. Допустим, что в образце появилась одна вакансия. Атом, располагавшийся в этом узле, вышел на поверхность образца (рис. 41) в соответствии с механизмом Шоттки. Объём образца при образовании вакансии увеличивается на  $\Delta V = \Omega_0$ . Поэтому внешние напряжения совершают над системой работу  $P\Delta V = P\Omega_0$ . Поэтому часть энергетических затрат берёт на себя источник напряжений. Следовательно, энергия образования вакансий в таких условиях

$$\varepsilon_V = \varepsilon_V^0 - P\Omega_0, \quad (150)$$

где  $\varepsilon_V^0$  — энергия образования вакансии в отсутствии нагрузки. Соответственно увеличивается доля вакансий

$$\frac{n^*}{N} = \exp\left(-\frac{\varepsilon_V^0 - P\Omega_0}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{\varepsilon_V^0}{kT}\right) \cdot \exp\left(-\frac{P\Omega_0}{kT}\right). \quad (151)$$

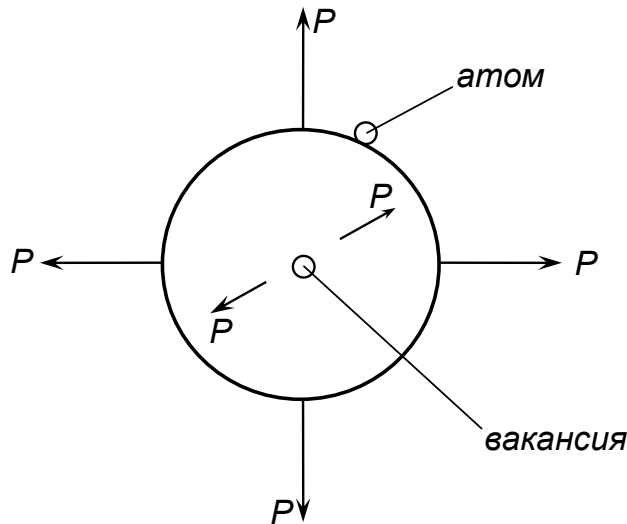


Рис. 41. Образование вакансии в условиях трёхосного растяжения

Объём одного атома  $\Omega_0$  представляет очень малую величину  $\sim 10^{-30} \text{ м}^3$ , поэтому отношение  $\frac{P\Omega_0}{kT} \ll 1$ . Используем далее приближённое выражение  $e^\alpha \approx 1 + \alpha$ , справедливое при малых  $\alpha$ , и преобразуем выражение (151) к виду

$$\frac{n^*}{N} \approx \left(1 + \frac{P\Omega_0}{kT}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon_V^0}{KT}\right). \quad (152)$$

Если  $P$  есть положительная величина, то количество вакансий возрастает; при отрицательном  $P$  (сжатие) число вакансий по отношению к образцу без нагрузки уменьшается. В тех случаях, когда напряжения  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  и  $\sigma_z$  в образце не равны, под гидростатическим давлением понимают среднее напряжение

$$P = \frac{\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z}{3}. \quad (153)$$

Следовательно, для одноосного напряжённого состояния  $P = \sigma/3$ , а

$$\frac{n^*}{N} = \left(1 + \frac{\sigma_x \Omega_0}{3kT}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon_V^0}{kT}\right), \quad (154)$$

то есть приложение растягивающих напряжений вдоль любой оси должно вызвать увеличение числа вакансий. Однако экспериментально было установлено, что в общем случае это утверждение неверно. Количество вакансий возрастает только у тех границ зерна, которые ориентированы перпендикулярно напряжению. Если же граница параллельна действию напряжения, то доля вакантных узлов вблизи неё остаётся такой же, как для ненагруженного образца:  $\frac{n^*}{N} = \exp\left(-\frac{\varepsilon_V^0}{kT}\right)$ , а если к ней диффундируют вакан-



сии, то граница поглощает их, поддерживая неизменным отношение  $n^*/N$ . Каждое зерно окаймлено границами, поэтому границы зерна имеют участки, параллельные и перпендикулярные напряжению. Первые поглощают вакансии, вторые их испускают; следовательно, приложение напряжений приводит к появлению незатухающих потоков вакансий от одних участков границы к другим, что вызывает ползучесть.

Точно так же, если экстраплоскость краевой дислокации перпендикулярна растягивающему напряжению, она будет порождать избыточные вакансии, а экстраплоскость её при этом наращиваться — дислокация переползает «вниз». Приложение сжимающих напряжений приводит к поглощению вакансий краевой дислокацией, она переползает «вверх», то есть «выдавливается» из кристалла.

Напряжения Лапласа. Источником напряжений не обязательно является механическая нагрузка. Напряжения могут возникать под действием поверхностного натяжения. Натяните слегка кожу на запястье. Вы почувствуете, как кожа давит на мышцы. Итак, поверхностное натяжение на выпуклых участках поверхности создает сжатие. Сложите теперь пальцы «лодочкой» и натяните кожу на ладони: Вы почувствуете, что кожа как бы отходит от мышц, то есть возникает растяжение. Такие эффекты были впервые изучены великим французским физиком и математиком Пьером-Симоном Лапласом. Он показал, что под выпуклыми или вогнутыми участками внешней поверхности, по которой действует поверхностное натяжение, возникают (лапласовы) напряжения, равные

$$P_{\text{Л}} = \pm \frac{2\gamma}{\rho}, \quad (155)$$

где  $\rho$  — модуль радиуса кривизны поверхности,  $\gamma$  — величина поверхностного натяжения; знак «+» относится к вогнутым участкам, «−» — к выпуклым (рис. 42).

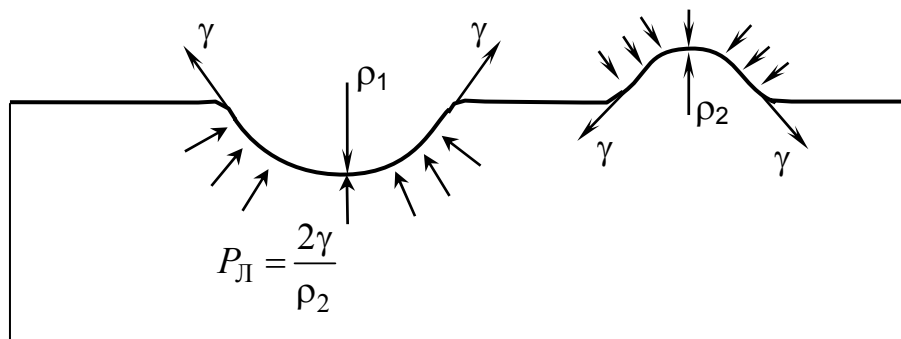


Рис. 42. К определению лапласова давления.  
На горизонтальных участках лапласово давление равно нулю

Как и любое другое, лапласово напряжение, всегда перпендикулярное участкам границы, изменяет долю вакантных узлов в подповерхностных слоях:

$$\frac{n^*}{N} = \left( 1 \pm \frac{2\Omega_0\gamma}{\rho kT} \right) \cdot \exp \left( -\frac{\varepsilon_V^0}{kT} \right). \quad (156)$$

Под выпуклыми участками поверхности вакансий меньше, под вогнутыми больше, чем вблизи плоских участков границ.

Влияние лапласова давления ощутимо в образцах с малым радиусом внешних и внутренних поверхностей, например, для порошковых образцов.

### 3.7. ВАКАНСИОННАЯ ПОЛЗУЧЕСТЬ

Ползучестью называется непрерывное во времени изменение размеров детали при повышенных температурах под действием напряжений, существенно меньших предела текучести. Допустим, что исходная длина образца на рис. 43 составляет  $l_0$ ; под действием усилия  $P$  или создаваемого им напряжения  $\sigma = P/F_0$  происходит необратимое увеличение длины образца во времени. В момент  $\tau$  длина образца составляет  $l(\tau)$ , следовательно, возникает удлинение образца  $\Delta l = l(\tau) - l_0$ .

Обычно наблюдающаяся зависимость  $\Delta l$  от времени показана на рис. 44. На этой кривой выделяются три участка: I — участок неустановившейся ползучести; II — участок стационарной ползучести и III — участок катастрофической ползучести, заканчивающейся разрушением. Длительность выдержки до разрушения  $\tau_p$  называется долговечностью образца.

Второй участок кривой имеет постоянный наклон; это означает, что скорость ползучести

$$\dot{\varepsilon}_{II} = \frac{1}{l_0} \cdot \frac{\Delta l}{\Delta \tau} \quad (157)$$

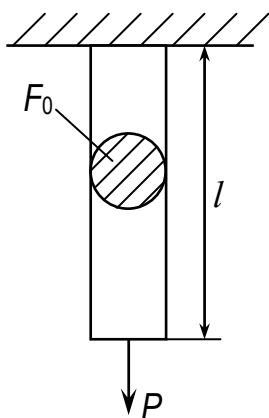


Рис. 43. Схема испытаний на ползучесть

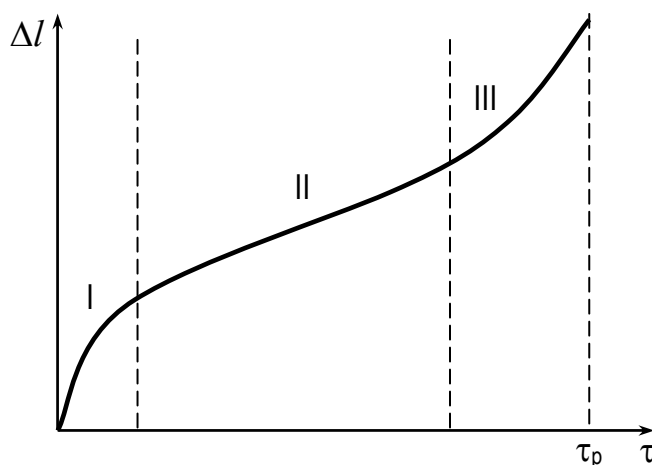


Рис. 44. Кривая ползучести

для этого участка постоянна. Экспериментальное изучение ползучести у чистых металлов и сплавов позволило установить зависимости скорости ползучести от температуры и напряжения:

$$\dot{\epsilon}_{\text{II}} = A\sigma^n \exp\left(-\frac{U}{RT}\right), \quad (158)$$

где  $U$  — энергия активации ползучести;  $A$  — постоянный, но изменяющийся от сплава к сплаву коэффициент, а  $n$  — показатель степени. Величина  $n$  лежит обычно в пределах от 1 до 4 и может существенно изменяться при изменениях температуры и напряжения. Считается, что величина  $n$  характеризует механизм ползучести. В частности, значение  $n = 1$  характерно для рассматриваемого ниже вакансионного механизма ползучести.

Важно отметить существование связи между долговечностью образца  $\tau_p$  и скоростью ползучести на участке II установившейся ползучести:

$$\tau_p \cdot \dot{\epsilon}_{\text{II}} = 1. \quad (159)$$

Это выражение выполняется довольно точно, потому нередко используется для быстрой оценки долговечности на основе измерения скорости ползучести для участка II. Всё же существование выражения (159) кажется до некоторой степени, удивительным, так как  $\tau_p$  относится к моменту разрушения, а скорость ползучести  $\dot{\epsilon}_{\text{II}}$  — ко второй стадии ползучести.

Структурный механизм разрушения при ползучести заключается в образовании пор (в начале стадии III) и их последующем росте. Поры, то есть пустоты, иногда возникают в объёме зерна около неметаллических включений, но чаще они появляются на границах зерна, как правило, ориентированных перпендикулярно напряжению. Число пор и их размеры увеличиваются во времени, поры объединяются, образуя пустые полости, на базе которых формируется магистральная трещина.

Ползучесть может протекать по дислокационному или вакансионному механизмам. В первом случае нужно рассматривать дислокационные скопления, созданные источниками Франка–Рида, расположенными в плоскостях, где действуют максимальные касательные напряжения. Породив группу дислокаций (точнее, дислокационных петель), источник прекращает работать, так как напряжения от созданных дислокаций компенсируют внешние напряжения. Однако под влиянием вакансионных потоков краевые дислокации переползают из плоскостей скольжения и, встретив аналогичную дислокацию с противоположным знаком, аннигилируют. Тем самым у источников Франка–Рида возникает возможность породить следующую дислокацию и т.д. Для такого дислокационного механизма ползучести потоки вакансий играют косвенную роль, а величина показателя степени  $n$  находится в пределах 3...5.

Скорость дислокационной ползучести

$$\dot{\epsilon}_{\text{II}} = \frac{1}{2} \rho b \bar{V}, \quad (160)$$

где  $\bar{V}$  — средняя скорость движения дислокаций. Плотность дислокаций  $\rho$  всегда пропорциональна  $\sigma^2$ , а зависимость  $\bar{V}$  от напряжения  $\sigma$  определяется конкретными особенностями процесса скольжения и переползания краевой дислокации. Если переползание является наиболее медленным процессом, то его скорость, пропорциональная напряжению, определяет скорость движения дислокации, и тогда  $\dot{\epsilon}_{\text{п}} \sim \sigma^3$ , то есть  $n = 3$  (ползучесть Дорна).

При пониженных температурах преобладает диффузия вакансий по ядру дислокаций. Если плотность дислокаций сетки есть  $\rho$ , то скорость переползания пропорциональна  $\rho\sigma \sim \sigma^3$ , а скорость ползучести пропорциональна  $\sigma^5$ . Известны и другие механизмы ползучести, для которых  $n = 4$ . Одновременная реализация этих механизмов приводит к тому, что параметр  $n$  принимает некоторое значение в интервале  $3 < n < 5$ .

Вакансионная ползучесть проявляется у поликристаллических образцов чистых металлов и сплавов при температурах вблизи плавления и низких напряжениях.

Проанализируем изменение длины поликристаллического образца под действием небольших напряжений, приложенных вдоль оси образца  $x$ . В поликристаллическом образце (рис. 45) некоторые из границ зёрен будут расположены перпендикулярно к действующим напряжениям. Такие границы мы будем рассматривать как положительные (+); концентрация вакансий около таких границ согласно формуле (154) повышена и равна

$$C_V^+ = C_V^0 \cdot \left(1 + \frac{\sigma_x \Omega_0}{3kT}\right). \quad (161)$$

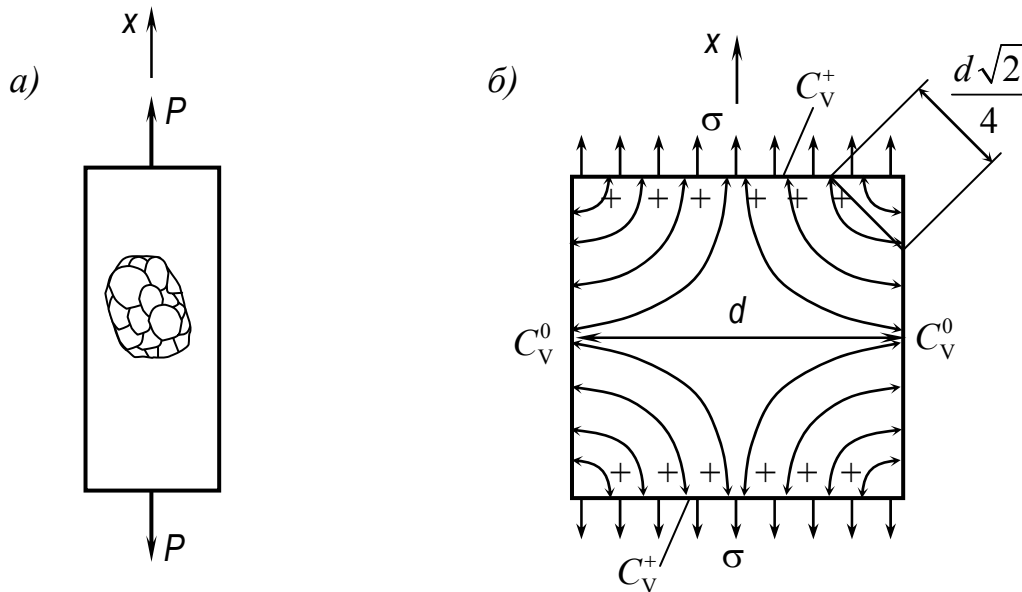


Рис. 45. К анализу вакансионной ползучести: *a* — схема нагружения поликристаллического образца; *б* — вакансионные потоки в пределах одного зерна

Концентрация вакансий у отрицательных границ, то есть параллельных направлению нагружения,

$$C_V^- = C_V^0 = \frac{1}{\Omega_0} \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon_V^0}{kT}\right) \quad (162)$$

остаётся такой же, как и в отсутствие напряжений. Для упрощения анализа будем считать условно, что зёрна в поликристалле имеют форму кубов с ребром, равным  $d$ , где  $d$  есть средний размер зерна. Две грани такого куба положительны, то есть перпендикулярны напряжению, и около них концентрация вакансий повышена. Остальные четыре грани являются отрицательными, концентрация вакансий около них такая же, как в образце без нагрузки. Подобное распределение вакансий устанавливается сразу же после приложения нагрузки. Неоднородность распределения вакансий вызывает появление потоков вакансий

$$\vec{j}_V = -D_V \cdot \overrightarrow{\text{grad } C_V} \quad (163)$$

от плюсовых граней к минусовым (рис. 45, б). Средний диффузионный путь указан на этом рисунке, а средний градиент концентрации равен

$$\langle \overrightarrow{\text{grad } C_V} \rangle \approx \frac{C_V^+ - C_V^-}{d \sqrt{2}/4} = \beta_1 \cdot \frac{C_V^0 \sigma_x \Omega_0}{kT \cdot d}, \quad (164)$$

где  $\beta_1$  — численный коэффициент. Рассчитаем средний поток вакансий к минусовым граням:

$$\langle \vec{j}_V \rangle = -D_V \cdot \langle \overrightarrow{\text{grad } C_V} \rangle = -\beta_1 \cdot \frac{C_V^0 D_V \sigma_x \Omega_0}{kT \cdot d}. \quad (165)$$

Вакансии двигаются, обмениваясь местами с атомами. Поэтому в направлении от минусовых граней к плюсовым навстречу вакансиям движется абсолютно такой же поток атомов  $j_a$ ; его размерность  $[j_a] = \frac{\text{число атомов}}{\text{м}^2 \cdot \text{с}}$ . За единицу времени на единицу площади плюсовой грани осаждается  $j_a$  атомов, то есть добавляется объем  $j_a \Omega_0$ . Следовательно, размер зерна в направлениях  $x$  за единицу времени увеличивается на  $j_a \Omega_0$ . А поскольку скорость ползучести

$$\dot{\varepsilon}_n = \frac{1}{d} \cdot \frac{d(d)}{d\tau}, \quad (166)$$

то должна возникнуть ползучесть образца с постоянной скоростью

$$\dot{\varepsilon}_n = \frac{1}{d} j_a \Omega_0 = \frac{1}{d} \langle j_V \rangle \Omega_0 = \beta_1 \frac{D_a \Omega_0}{d^2 kT} \cdot \sigma_x, \quad (167)$$

где  $D_a = D_V \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon_V}{kT}\right)$  — коэффициент диффузии атомов. При записи формулы учтено, что  $j_a = -j_V$ . Точное значение константы  $\beta_1$  в работе Херринга и Набарро равно 12.

Анализируя полученное выражение, обратим внимание на следующее:

1) скорость ползучести пропорциональна напряжению в первой степени;

2) температурная зависимость  $\dot{\varepsilon}_n$  проявляется через зависимость коэффициента диффузии атомов от температуры (89);

3) измельчение зерна резко ускоряет ползучесть, поэтому в конструкциях, работающих в условиях ползучести, следует применять крупнозернистые и даже монокристалльные материалы.

У крайне мелкозернистых материалов в условиях ползучести иногда наступает явление сверхпластичности, при котором удлинение образцов достигает тысячи процентов.

В случае низких температур возможна диффузия вакансий вдоль границ зерна. Обычно процедура учёта зернограницной диффузии сводится к замене коэффициента объёмной диффузии  $D_a$  на  $D_a^{gp} \cdot \frac{\delta}{d}$ , где  $D_a^{gp}$  — коэффициент зернограницной диффузии,  $\delta$  — толщина границы,  $d$  — размер зерна:

$$\dot{\varepsilon}_n = \beta_2 \frac{D_a^{gp} \delta \Omega_0}{d^3 kT} \cdot \sigma_x. \quad (168)$$

Этот механизм ползучести, известный как ползучесть Кобле, еще более сильно зависит от размера зерна, чем механизм Херринга – Набарро.

### 3.8. РОСТ ПОР ПРИ ПОЛЗУЧЕСТИ

На заключительной стадии ползучести наблюдается образование и рост пор, что также обусловлено переносом вакансий. Рассмотрим следующую простую схему. Пусть внутри зерна сферической формы радиуса  $R_0$  возникает пора радиуса  $\rho$ . Примем условно, что зерно находится в условиях всестороннего растяжения (рис. 46). Тогда для концентрации вакансий у границы зерна имеем

$$C_V(r = R_0) = C_V^0 \cdot \left(1 + \frac{\sigma \Omega_0}{kT}\right). \quad (169)$$

Но на поверхности поры отсутствуют нормальные напряжения, здесь концентрация вакансий

$$C_V(r = \rho) = C_V^0. \quad (170)$$

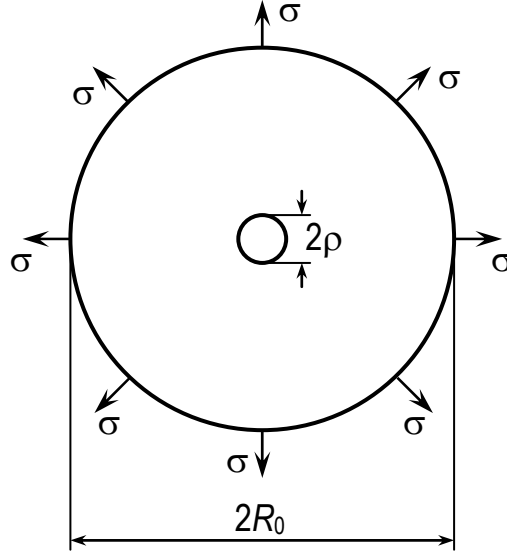


Рис. 46. К расчету скорости роста поры

При точном решении задачи следует учитывать действие натяжения по поверхности поры, которое создаёт растягивающее лапласово давление  $2\gamma/r$ . Однако этот эффект существенен при очень малых  $r$ . Пока мы будем им пренебрегать.

Различие концентраций вакансий у границ зерна и поры вызывает диффузионный поток вакансий от границы зерна в пору. Поскольку вакансии являются носителями пустоты, то их диффузия в пору должна приводить к увеличению её размеров.

Мы используем при расчётах скорости роста поры так называемое приближение стационарного потока, считая, что полный поток вакансий через любую сферическую поверхность произвольного радиуса  $r$ , окружающую пору, постоянен, то есть

$$4\pi r^2 \cdot j_V = \text{const.} \quad (171)$$

Это условие выполняется, если  $j_V = \frac{\text{const}}{r^2}$ . Но поскольку согласно первому закону диффузии

$$j_V = -D_V \frac{dC_V}{dr}, \quad (172)$$

то возникает дифференциальное уравнение для концентрации вакансий  $C_V(r)$ :

$$\frac{dC_V}{dr} = -\frac{\alpha}{r^2}, \quad (173)$$

где  $\alpha$  — константа, а  $r$  — расстояние от центра поры. Очевидное решение уравнения (173) имеет вид

$$C_V = \beta + \frac{\alpha}{r}. \quad (174)$$

Неизвестные коэффициенты  $\alpha$  и  $\beta$  определим из граничных условий (169) и (170). Два линейных уравнения относительно двух неизвестных  $\alpha$  и  $\beta$  легко решаются:

$$\alpha = -C_V^0 \frac{\sigma \Omega_0}{kT} \left( \frac{1}{\rho} - \frac{1}{R_0} \right)^{-1} \approx -C_V^0 \cdot \frac{\rho \sigma \Omega_0}{kT}; \quad (175a)$$

$$\beta \approx C_V^0 \left( 1 - \frac{\sigma \Omega_0}{kT} \right), \quad (175б)$$

что позволяет рассчитать поток вакансий в общем виде:

$$j_V = C_V^0 \cdot \frac{\rho \sigma \Omega_0}{r^2 kT} \cdot D_V. \quad (176)$$

Полный поток вакансий через всю поверхность  $4\pi\rho^2 \cdot j_V(r=\rho)$  вызывает увеличение объёма  $V$  поры за единицу времени

$$\frac{dV}{d\tau} = 4\pi\rho^2 \cdot j_V(r=\rho) \cdot \Omega_0, \quad (177)$$

поскольку каждая вакансия несёт в себе объём пустоты, равный  $\Omega_0$ . Но так как  $\frac{dV}{d\tau} = 4\pi\rho^2 \frac{d\rho}{d\tau}$ , то приравняв это выражение и (177), найдём скорость роста поры

$$\frac{d\rho}{d\tau} = C_V^0 \cdot D_V \cdot \frac{\sigma \Omega_0^2}{\rho kT} = D_a \cdot \frac{\sigma \Omega_0}{\rho kT}, \quad (178)$$

где  $D_a = D_V \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon_V}{kT}\right)$  — коэффициент диффузии атомов.

Если в равенстве (178)  $\rho$  перенести влево, а  $d\tau$  вправо, то переменные разделяются. Проинтегрируем полученное выражение слева и справа и найдем  $\rho$  в зависимости от времени:

$$\rho = \sqrt{2\mu D_a \tau}, \quad (179)$$

где  $\mu = \frac{\sigma \Omega_0}{kT}$ . Таким образом, рост поры подчиняется параболическому закону.

Учёт действия поверхностного натяжения приводит к замене в выражении (178) напряжения  $\sigma$  на  $\left(\sigma - \frac{2\gamma}{\rho}\right)$ . Рост возможен, если  $\sigma > \frac{2\gamma}{\rho}$ , поэтому способными к росту оказываются не всякие поры, а только те, радиус которых превышает критический размер  $\rho_{кр} = \frac{2\gamma}{\sigma}$ . Для железа  $\gamma = 1,5$  Дж/м<sup>2</sup>;



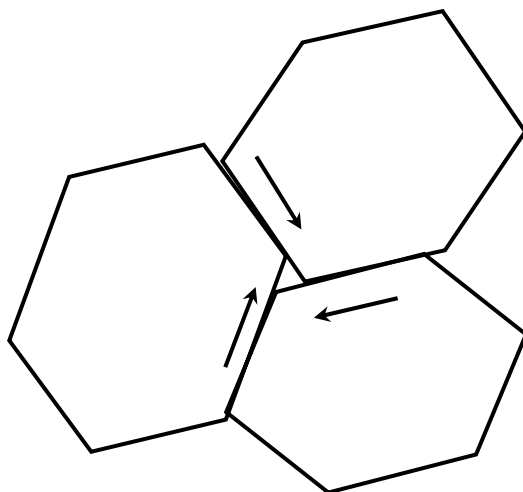


Рис. 47. Схема согласованного проскальзывания по трём границам зерна, приводящего к образованию поры в тройном стыке зёрен

примем, что напряжение  $\sigma = 150$  МПа, тогда найдём  $\rho_{кр} = 2 \cdot 10^{-8} \text{ м} = 200 \text{ \AA}$ . До размера  $200 \text{ \AA}$  пора должна расти каким-то иным, недиффузионным способом. Например, возможно проскальзывание зёрен по границам друг относительно друга, и тогда в тройных стыках зёрен неизбежно возникает пустое пространство (рис. 47). Возможно, что образование пор стимулирует сильнейшая концентрация напряжений около частиц неметаллических фаз: оксидов, нитридов, сульфидов.

### 3.9. СПЕКАНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОРОШКОВ

В шестидесятые годы XX века появились промышленные технологии порошковой металлургии, которые следует рассматривать как реакцию металлургов на то гигантское количество металлов и сплавов, которое машиностроители переводят в стружку при точении, строгании, фрезеровании деталей. Во-первых, металлурги научились получать порошки чистых металлов и сплавов. Наиболее простой способ получения порошков заключается в распылении вытекающего из ковша жидкого металла с помощью сильной струи инертного газа (азота или аргона). В зависимости от объёма и скорости вытекающего металла, а также скорости газовой струи можно получить порошки различной дисперсности. Во-вторых, переняв опыт литейщиков и специалистов по обработке металлов давлением, научились изготавливать пресс-формы будущих деталей, при проектировании которых учитывается будущая усадка при спекании. В пресс-форму, как правило, закладываются порошки нескольких фракций, подобранных так, чтобы почти сферические частицы мелких размеров точно вместились в поры, образованные частицами более крупных размеров. Порошковая смесь пропи-

тывается клеем, затем проводят прессование и просушку деталей. До этого момента технология напоминает изготовление детьми «куличей» в песочницах. Однако механическая прочность спрессованных деталей близка к нулю, потому что между порошками нет сцепления, кроме пленки слабого клея. Следующая и самая важная операция заключается в длительной выдержке порошковой заготовки при высокой температуре (иначе говоря, спекании), которая приводит к объединению порошинок в единый металлический каркас. Пустое пространство между порошинками постепенно заполняется металлом, возникает перешеек, радиус  $r$  которого увеличивается во времени. В результате спекания плотность тела возрастает и соответственно уменьшается объём, что обычно называют усадкой. Чтобы разобраться с природой спекания, рассмотрим сначала простой случай спекания двух шарообразных порошинок (рис. 48). Точка  $I$  — фактически произвольная точка на поверхности порошинок. Радиус выпуклой поверхности в этой точке по модулю равен радиусу  $R$  порошинок. Лапласово давление под точкой  $I$  равно  $-2\gamma/R$  и носит характер сжатия. Концентрация вакансий вблизи точки  $I$

$$C_V(I) = C_V^0 \left( 1 - \frac{2\gamma\Omega_0}{RkT} \right). \quad (180)$$

Около точки 2, где касаются порошинки, возникает углубление (вогнутость) с чрезвычайно малым положительным радиусом кривизны  $\rho$ ; второй радиус кривизны  $r$  представляет радиус окружности, по которой две порошинки уже срослись (рис. 48, б). Второй радиус отрицателен, но так как полный радиус кривизны выражается через два главных радиуса:

$\left( -\frac{1}{|r|} + \frac{1}{\rho} \right)$ , а  $\frac{1}{\rho} \gg \left| \frac{1}{r} \right|$ , то первым слагаемым можно пренебречь. Поэтому

$$C_V(2) = C_V^0 \left( 1 + \frac{\gamma\Omega_0}{\rho kT} \right). \quad (181)$$

Таким образом, концентрация вакансий в точке 2 оказывается выше, чем в точке 1. Поэтому возникают потоки вакансий из точки 2 в точку 1, отмеченные на рис. 48, а стрелками. Но поскольку вакансии при своем движении обмениваются местами с атомами, то в противоположных направлениях двигаются потоки атомов из точек типа 1 в точку 2. Атомы осаждаются на перешейке и увеличивают его площадь; два касающихся друг друга шара превращаются в гантель, затем в эллипсоид вращения (рис. 49). Теперь поверхность становится выпуклой во всех точках, но на экваторе радиус кривизны больше, чем у полюсов, поэтому концентрация вакансий на экваторе выше, сюда по-прежнему диффундируют атомы от полюсов. В итоге эллипсоид превращается в сферу.

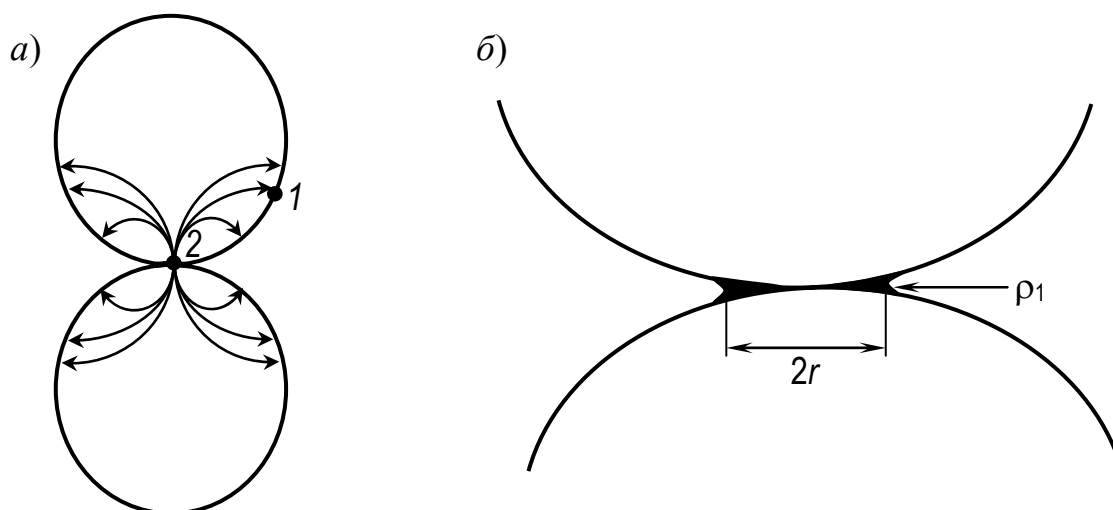


Рис. 48. Спекание порошинок:  
*a* — схема спекания; *б* — радиусы кривизны у перешейка

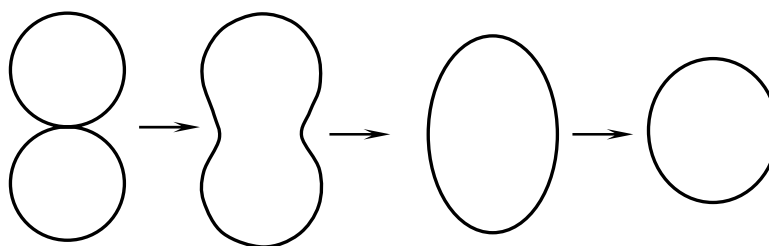


Рис. 49. Последовательность изменения формы  
 спекающихся сферических частиц

Точное решение задачи о спекании порошинок оказалось сложным. Приведём без вывода решение Б. Я. Пинеса для начальной стадии спекания:

$$r^4 = 8\gamma R \frac{D\Omega_0}{kT} \cdot \tau. \quad (182)$$

Когда площадь перешейка  $\pi r^2$  окажется равной  $\frac{1}{2}\pi R^2$ , спечённый материал будет иметь прочность, равную одной второй от прочности монолитного (литого или ковального) образца. Это произойдёт после выдержки

$$\tau = \frac{R^3 kT}{32\gamma D\Omega_0}. \quad (183)$$

## 4. ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

### 4.1. РОЛЬ НОРМАЛЬНЫХ И КАСАТЕЛЬНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В СКОЛЬЖЕНИИ И РАЗРУШЕНИИ

Когда мы говорим о механическом напряжении, то подразумеваем, что к телу приложены уравнивающие друг друга силы или моменты сил. Однако точки приложения этих сил не совпадают. В пространстве между точками приложения эти силы распределяются между сцепленными друг с другом атомами, так что каждая атомная связь как бы испытывается на прочность.

Рассмотрим цилиндрический образец, который растягивается силами, направленными вдоль оси. Представим кристаллическое тело состоящим из атомных плоскостей, как это показано на рис. 50. Проведём два мысленных сечения  $cc$  и  $bb$ , отбросим внешние части (рис. 50,  $a$ ,  $b$ ). По законам статистического равновесия действие отброшенной части мы должны заменить силой  $P$ , которая, таким образом, оказывается распределённой по площади сечения и направленной перпендикулярно ей. Если величину силы разделить на площадь сечения  $F_0$ , то мы найдём напряжение, ориентированное так же, как сила:

$$\sigma = \frac{P}{F_0}. \quad (184)$$

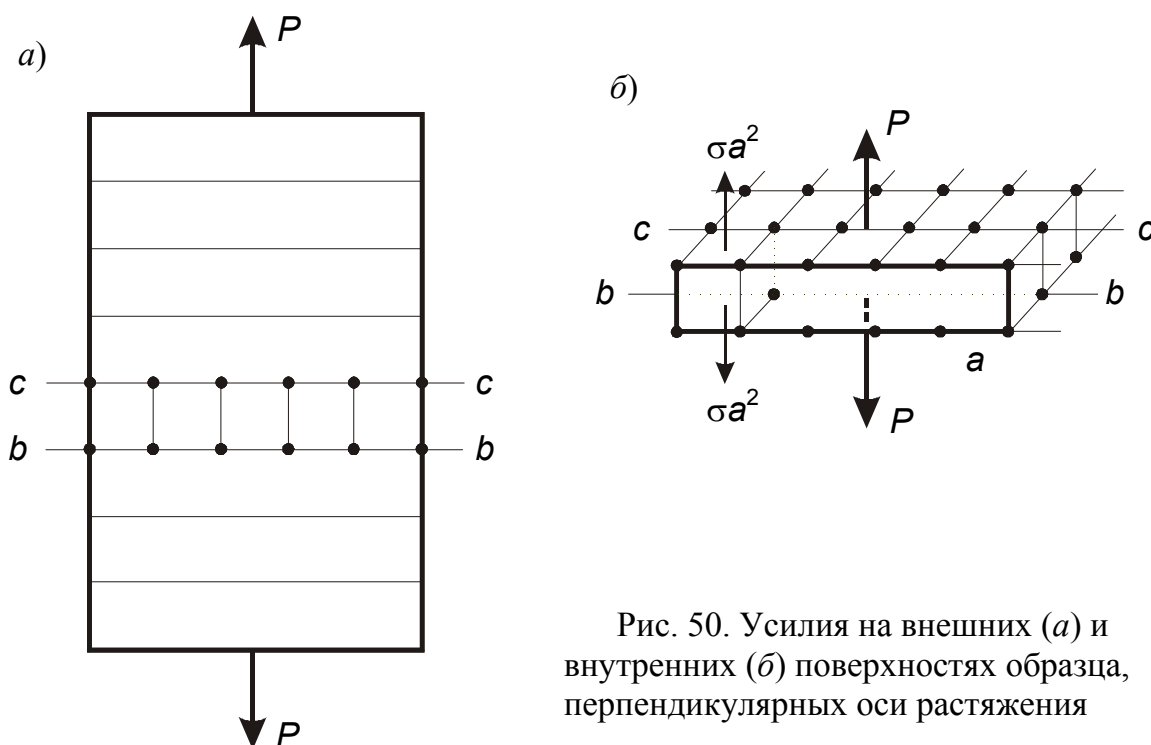


Рис. 50. Усилия на внешних ( $a$ ) и внутренних ( $b$ ) поверхностях образца, перпендикулярных оси растяжения

В данном случае оно перпендикулярно площади и называется нормальным напряжением. Для простоты будем считать, что кристалл имеет простую кубическую решётку с параметром  $a$ , тогда на один атом приходится площадь  $a^2$ . Следовательно, каждую пару атомов разрывают две противоположно направленные силы  $\sigma a^2$ . Этим силам противостоят силы межатомного взаимодействия, которые мы обсудим позднее.

Рассмотрим иной тип напряжений — касательные напряжения. Проведем новые сечения  $cc$  и  $bb$  цилиндра, но наклонно, под некоторым углом  $\varphi$  к оси образца (рис. 51). Сечение имеет вид эллипса с большой и малыми осями. Как известно, площадь наклонного сечения в  $1/\cos \varphi$  раз больше площади кругового сечения. Действие отброшенных частей, как и ранее, заменим силами  $P$ , которые теперь не перпендикулярны плоскости сечения. Поскольку  $P$  — вектор, мы разложим его на нормальную  $P_1 = P \cos \varphi$  и касательную  $P_2 = P \sin \varphi$  составляющие. Разделив эти величины на площадь наклонного сечения, найдём нормальное  $\sigma_n$  и касательное  $\tau_n$  напряжения в рассматриваемом сечении с нормалью  $\vec{n}$ :

$$\sigma_n = \frac{P_1}{F_0/\cos \varphi} = \frac{P}{F_0} \cdot \cos^2 \varphi = \sigma \cdot \cos^2 \varphi \quad (185a)$$

$$\tau_n = \frac{P_2}{F_0/\cos \varphi} = \frac{P}{F_0} \cdot \sin \varphi \cos \varphi = \frac{\sigma}{2} \cdot \sin 2\varphi, \quad (185б)$$

где  $\sigma$  — нормальное напряжение в сечении, перпендикулярном оси. Нормальное напряжение по наклонной площадке меньше, чем по площадке, перпендикулярной к оси, в  $\cos^2 \varphi$  раз, но и оно стремится разорвать выделенные слои атомов (рис. 51 б). Совершенно иным оказывается действие касательного напряжения. У соседних слоёв эти напряжения действуют в противоположных направлениях, как бы пытаюсь сдвинуть слои друг относительно друга. Когда касательное напряжение превысит некоторую критическую величину  $\tau_s$ , такой сдвиг действительно начнётся, что приведёт к пластической деформации всего образца. Прежде всего сдвиг начнётся по плоскостям, наклонённым к оси под углом  $45^\circ$ , ибо в них, согласно (185б), касательные напряжения максимальны и равны  $\sigma/2$ . Когда касательное напряжение по плоскости скольжения достигает критического значения  $\tau_s$ , то нормальное напряжение по площадкам, перпендикулярным оси, окажется равным пределу текучести  $\sigma_t$  (или  $\sigma_{0,2}$ ). Важно понимать, что по плоскостям, нормальным к оси, никаких сдвигов не происходит, так как при  $\varphi = 0$  касательные напряжения отсутствуют. Однако с помощью разрывной машины может быть легко измерено именно нормальное напряжение вдоль оси, тогда как касательные напряжения по наклонным к оси площадкам измерить нельзя. Поэтому определение начала пластической деформации по нормальному напряжению является вынужденным приёмом.

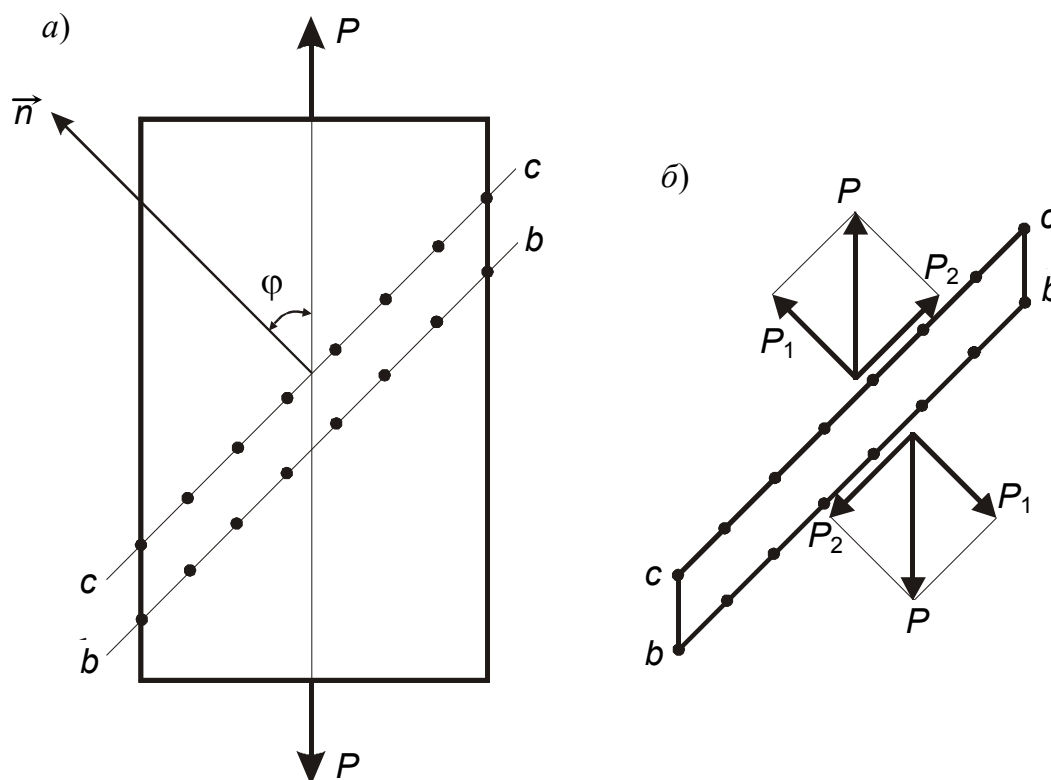


Рис. 51. Наклонные сечения (а) и усилия на них (б) в растягиваемом цилиндре;  
 $n$  — нормаль к плоскостям сечения

В условиях сдвигов по наклонным площадкам прямой цилиндр в среднем деформируется в наклонный (рис. 52, а). Те студенты, которые уже работали с разрывной машиной, могут возразить, что после растяжения образцы удлиняются, но обычно сохраняют форму прямого цилиндра. Так получается вот почему. Касательные напряжения имеют максимальное по модулю значение  $\sigma/2$  не только на площадках, наклонённых к оси на угол  $+45^\circ$ , но и при угле наклона  $-45^\circ$ . Говоря строго, аналогичные касательные напряжения действуют по любым сечениям, наклонённым под углом  $45^\circ$  к оси. Поэтому схемы скольжения на рис. 52, а и б равноправны, так как характеризуются одинаковыми значениями  $\tau$  и создают одинаковое удлинение, но наклон образцов для них противоположный. Если допустить, что скольжение идёт с одинаковой интенсивностью по обеим схемам одновременно, или что обе плоскости скольжения действуют одновременно, то макроскопической формой деформированного образца действительно останется прямой цилиндр, но его боковая поверхность будет испещрена ступеньками скольжения. Именно появление ступенек скольжения делает матовой предварительно отполированную до блеска поверхность образца.

Итак, касательное и нормальное напряжения играют различные роли: касательное напряжение стимулирует сдвиг и пластическую деформацию, тогда как нормальное напряжение вызывает отрыв, скол, то есть разрушение детали.

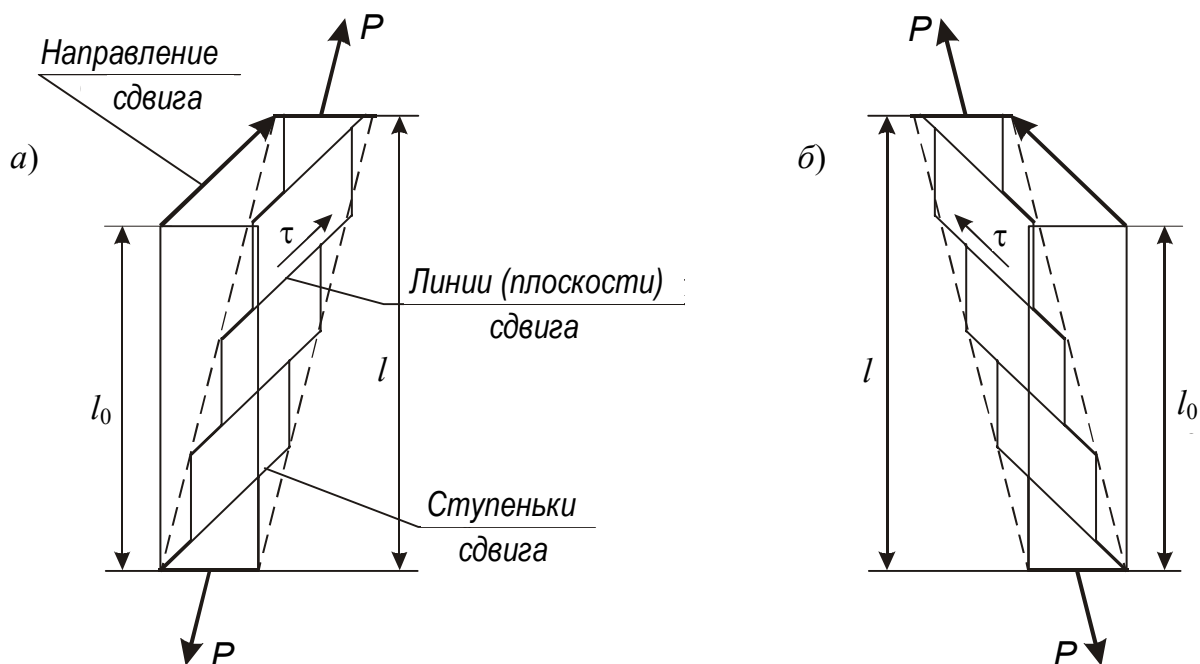


Рис. 52. Схема пластической деформации образца при растяжении образца путём последовательных сдвигов по плоскостям, наклонённым к оси образца под углами  $+45^\circ$  (а) и  $-45^\circ$  (б)

Когда мы говорим о сколе, или отрыве, то понимаем, что в деформированном металле возникает трещина по плоскости, перпендикулярно которой действуют максимальные нормальные напряжения. Быстрое расширение трещины приводит к разрушению, причём ориентация плоскости скола сохраняется.

У металлов, которые имеют кристаллическое строение, сдвиги при пластической деформации и скол (отрыв) при разрушении происходят по строго определенным кристаллографическим плоскостям, причём сдвиг еще и в строго определенных кристаллографических направлениях. Согласно табл. 5, сдвиги у гранецентрированных кристаллов реализуются по плоскостям  $\{111\}$ .

В ГЦК-решётке имеется 4 неэквивалентных плоскости скольжения, причём в каждой плоскости расположены три неэквивалентных направления скольжения (рис. 53, а). Скол у гранецентрированных кристаллов не наблюдается даже при 0 К. Напротив, металлы с ОЦК-решёткой склонны к разрушению сколом. Плоскостями скола у  $\alpha$ -железа являются грани куба  $\{100\}$ , их три. Плоскостей сдвига у ОЦК-металлов много (табл. 5), но наиболее важными являются плоскости  $\{110\}$ , так называемые плоскости додекаэдра, две из которых,  $(110)$  и  $(1\bar{1}0)$ , показаны на рис. 53, б. Они образуют с плоскостью скола  $(010)$  углы  $\pm 45^\circ$ . Именно такие углы образуют между собой площадки с максимальными касательными и нормальными напряжениями. Пожалуй, ОЦК-решётка является единственной из всех

структур, у которой кристаллогеометрия скольжения и разрушения позволяет идеально реализовать представленную на рис. 52 схему деформации с последующим разрушением сколом.

Справедливости ради следует отметить, что скольжение, вызванное напряжениями, может в принципе приводить к разрушению. Предположим, что сдвиг локализован, то есть он проходит по двум плоскостям в одном участке образца, как это показано на рис. 54. Непрерывный сдвиг приводит к тому, что сечение образца в месте локализованного сдвига уменьшается, появляется шейка, соединённая с цилиндрическими частями двумя конусами с углами при вершинах  $45^\circ$ . Диаметр шейки становится все меньше, а конусообразные части все длиннее. В итоге всё сечение сходится на нет, и

Таблица 5

Плоскости и направления сдвига, плоскости скола в различных структурах

Тип решётки	Плоскость сдвига*	Направление сдвига	Плоскость скола
ГЦК	$\{111\}$ : 4	$\langle 1\bar{1}0 \rangle$ : 3	Нет
ОЦК	$\{110\}$ : 6 $\{112\}$ : 12 $\{123\}$ : 24	$\langle 111 \rangle$ : 2 $\langle 111 \rangle$ : 1 $\langle 111 \rangle$ : 1	$\{100\}$ ( $\alpha$ -Fe) или $\{110\}$ (Ta, V)
ГПУ	$(0001)$ : 1 $\{10\bar{1}0\}$ : 3	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$ : 3 $\langle 1\bar{2}10 \rangle$ : 3	$\{0001\}$
Решётка NaCl	$\{110\}$	$\langle 1\bar{1}0 \rangle$ : 1	$\{110\}$

\* Указано число плоскостей и направлений (в каждой плоскости) без учёта противоположных сторон плоскости и направления

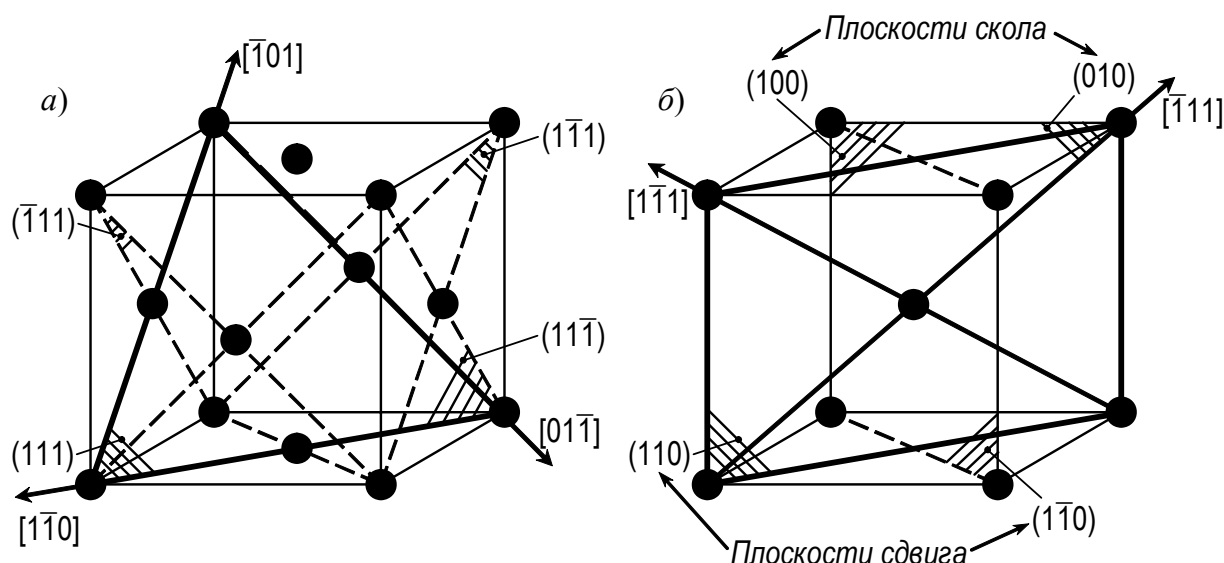


Рис. 53. Плоскости и направления сдвига и скола в структурах ГЦК (а) и ОЦК (б)



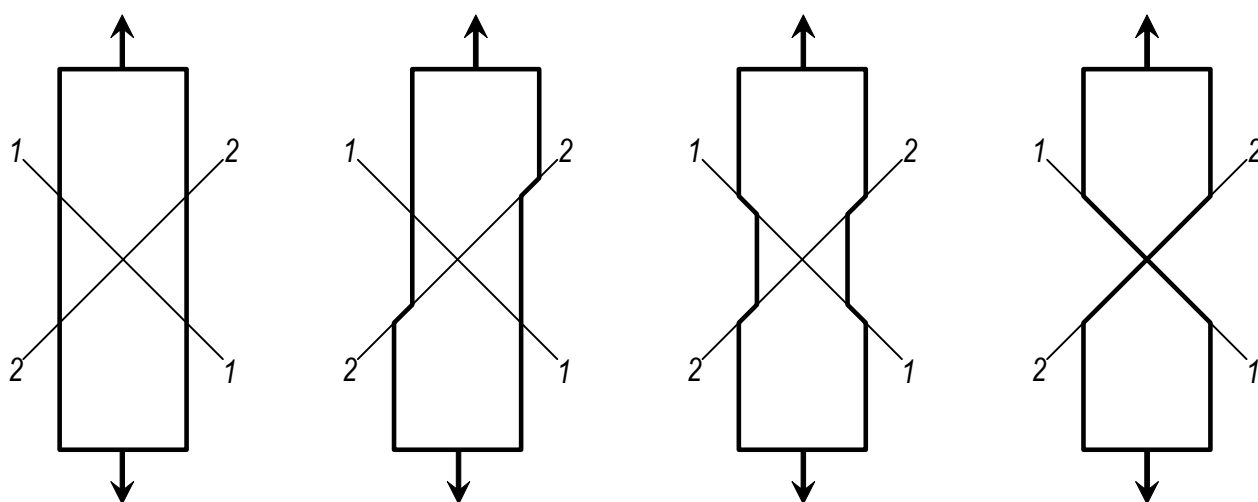


Рис. 54. Образование шейки и последующее разрушение в результате локализованного сдвига по двум пересекающимся плоскостям скольжения. Стрелками показаны направления сдвигов

образец разрывается. В действительности разрушение наступает раньше при конечном диаметре шейки, но при участии отрыва под действием нормального напряжения. Наличие в изломе участков, наклонённых под углом  $45^\circ$  к оси, можно рассматривать как признак пластичного и вязкого разрушения. Однако, известны случаи, когда хрупкое разрушение проходит под углом  $45^\circ$  к оси, например, при сжатии образцов из чугуна или растяжении упрочнённых плоских образцов титана. Однако в этих случаях скольжение по углом  $45^\circ$  приводит к смещению центров верхнего и нижнего сечений, наступает внецентровое сжатие или растяжение, то есть появляется изгибающий момент сил, что стимулирует разрушение.

## 4.2. КРИТИЧЕСКОЕ НАПРЯЖЕНИЕ СДВИГА

При испытаниях образцов на растяжение металловеды привыкли оценивать начало пластической деформации по величине предела текучести  $\sigma_T$  ( $\sigma_{0,2}$ ), отражающего уровень нормальных напряжений. Между тем пластическая деформация осуществляется скольжением, а скольжение (или сдвиг) вызывается касательными напряжениями. К сожалению, измерить касательные напряжения по наклонённой к оси образца плоскости нельзя. В лучшем случае его можно рассчитать.

Пусть к цилиндрическому монокристаллу с площадью поперечного сечения  $F_0$  приложена сила  $P$  (рис. 55). Если плоскость скольжения расположена под углом  $\varphi$  к плоскости поперечного сечения, то её площадь равна  $F_0/\cos\varphi$ . А так как составляющая силы  $P$  в направлении скольжения есть

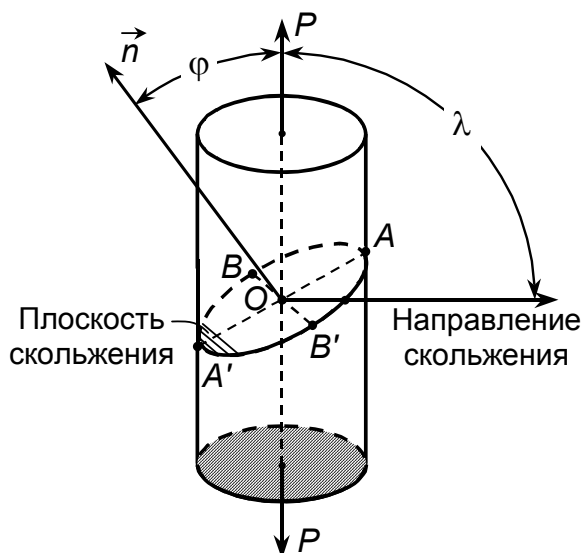


Рис. 55. К расчёту касательного напряжения по плоскости скольжения

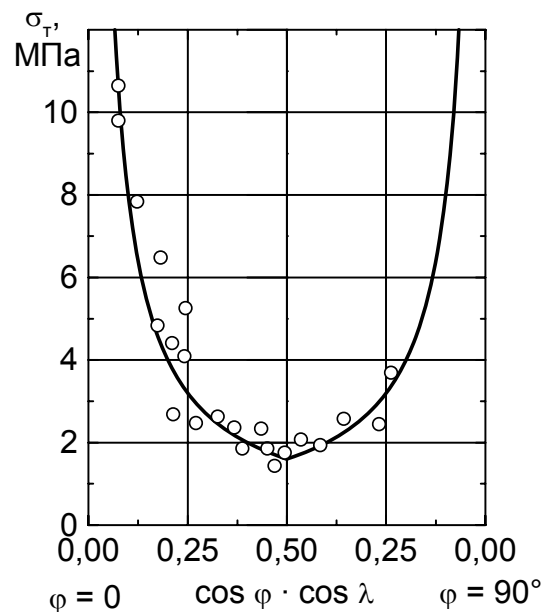


Рис. 56. Зависимость предела текучести кристаллов магния от их ориентировки. Кривая рассчитана по уравнению (189)

$P \cos \lambda$ , то величина касательных напряжений  $\tau$  в этом направлении составит  $(P/F_0) \cos \varphi \cos \lambda$ . Отношение  $P/F_0$  представляет собой нормальное напряжение  $\sigma$ , действующее вдоль оси. Поэтому связь нормальных и касательных напряжений имеет вид

$$\tau = \sigma \cos \varphi \cos \lambda; \quad \sigma = \frac{\tau}{\cos \varphi \cos \lambda}. \quad (186)$$

Величину

$$m = \frac{1}{\cos \varphi \cos \lambda} \quad (187)$$

называют ориентационным фактором для данной системы скольжения.

Самое большое касательное напряжение получается для  $\lambda = 90^\circ - \varphi$  и  $\varphi = 45^\circ$ :

$$\tau_{\max} = \sigma \cos^2 45^\circ = \frac{1}{2} \sigma \quad (188a)$$

или

$$\sigma = 2\tau. \quad (188b)$$

Ориентационный фактор  $m$  для этого случая равен 2. Это минимальное из всех возможных значений. В 1927 г. Шмид доказал, что, независимо от уровня нормальных напряжений скольжение начинается только в том случае, когда величина касательных напряжений по плоскости скольжения в направлении скольжения превысит критическое значение. Этот закон приведённых касательных напряжений определяет, в частности, ориентацион-

ную зависимость предела текучести при растяжении. Особенно просто это показать на примере растяжения гексагональных кристаллов (Zn, Mg, Cd и др.), у которых наблюдается только одна плоскость скольжения (0001).

Когда касательное напряжение достигнет критической величины,  $\sigma$  будет равно пределу текучести при растяжении  $\sigma_T$ , который приобретает, таким образом, ориентационную зависимость:

$$\sigma_T = \frac{\tau_s}{\cos\varphi \cos\lambda}, \quad (189)$$

согласующуюся с экспериментом (рис. 56).

Для фиксированной плоскости скольжения величина угла  $\lambda$  зависит от ориентации направления скольжения относительно большой и малой осей эллипса (рис. 55). В положении, когда направление скольжения совпадает с большой осью  $AA'$ , угол  $\lambda$  имеет минимальное значение:  $\lambda_{\min} = 90^\circ - \varphi$ , а касательные напряжения достигают наивысшего для данного  $\varphi$  значения:  $\tau = \sigma \cos\varphi \sin\varphi$ . Максимум произведения  $\cos\varphi \sin\varphi$  отвечает углу  $\varphi = 45^\circ$ . Таким образом, максимальные касательные напряжения возникают по площадкам, наклонённым к оси растяжения под углом  $45^\circ$ , и мы приходим к выражению (188б).

В другом предельном положении, когда направление скольжения совпадает с малой осью  $BB'$ , угол  $\lambda$  равен  $90^\circ$  при любом  $\varphi$ , и тогда  $\tau = 0$ , а предел текучести неограниченно велик ( $\sigma_T \rightarrow \infty$ ). В действительности такой случай реализовать невозможно даже в ГПУ-металлах, поскольку в плоскости скольжения (0001) расположены под углами  $120^\circ$  друг к другу *три* направления скольжения  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ . Когда одно из них совпадает с малой осью  $BB'$ , два других образуют с большой осью  $AA'$  углы  $\varphi = \pm 30^\circ$ . Так как  $\cos\lambda = \cos(90^\circ - \varphi)\cos\varphi$ , то для предела текучести при этой неблагоприятной ориентировке получим

$$\sigma_T = \frac{2\tau_s}{\sqrt{3} \cos\varphi \sin\varphi}. \quad (190)$$

Таким образом, для ГПУ-кристаллов величина  $\sigma_T$  определяется в основном ориентировкой плоскости скольжения (0001) относительно оси растяжения, причём при  $\varphi \rightarrow 0$  (или  $\varphi \rightarrow 90^\circ$ )  $\sigma_T \rightarrow \infty$ . Однако добиться таких предельных ориентировок обычно не удаётся из-за внутренней разориентировки монокристаллов.

Для ГЦК- и ОЦК-кристаллов зависимость предела текучести от ориентационного фактора  $m$  оказывается не столь отчётливой в связи с высокой степенью симметрии кристаллов, обуславливающей большое число эквивалентных систем скольжения. Но и для этих структур несложно оценить предел текучести. Предположим, что вдоль оси растяжения лежит направление  $[UVW]$ . Углы  $\varphi$  и  $\lambda$  между этой осью и соответственно нормалью к

плоскости скольжения ( $hkl$ ) и направлением скольжения  $[uvw]$  можно рассчитать по формуле (53) и таким образом определить ориентационный фактор  $m$  для любой системы скольжения. Пример расчёта для ГЦК-кристаллов дан в табл. 6.

Плоскости первичного скольжения для разных вариантов нагружения легко выбрать, основываясь на минимальном значении  $m$ . Оказывается, что в каждом рассмотренном случае одновременно могут действовать несколько систем скольжения, так как оси  $[100]$ ,  $[110]$  и  $[111]$  являются поворотными осями симметрии соответственно четвёртого, второго и третьего порядка. Для промежуточных ориентировок оси растяжения, которые задают точкой внутри стереографического треугольника  $[100] - [110] - [111]$ , первичная система скольжения оказывается единственной, но очень скоро вследствие поворота плоскостей скольжения при пластической деформации в действие включаются вторичные системы. Отметим, основываясь на данных табл. 6, что при растяжении вдоль  $[100]$  или  $[110]$

$$\sigma_T = \sqrt{6} \cdot \tau_s \approx 2,4\tau_s, \quad (191)$$

тогда как при растяжении вдоль  $[111]$

$$\sigma_T = \frac{3}{2}\sqrt{6} \cdot \tau_s \approx 3,6\tau_s. \quad (192)$$

Таблица 6

Ориентационный множитель для систем скольжения  $\{111\} \langle 110 \rangle$  ГЦК-кристаллов

Системы скольжения		Ось растяжения $[UVW]$								
		$[100]$			$[110]$			$[111]$		
		$\cos \varphi$	$\cos \lambda$	$m$	$\cos \varphi$	$\cos \lambda$	$m$	$\cos \varphi$	$\cos \lambda$	$m$
(111)	$[1\bar{1}0]$	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{2}$	$\sqrt{6}$	$2/\sqrt{6}$	0	$\infty$	1	0	$\infty$
	$[10\bar{1}]$		$1/\sqrt{2}$	$\sqrt{6}$		$1/2$	$\sqrt{6}$		0	$\infty$
	$[01\bar{1}]$		0	$\infty$		$1/2$	$\sqrt{6}$		0	$\infty$
$(\bar{1}11)$	$[110]$	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{2}$	$-\sqrt{6}$	0	1	$\infty$	$1/3$	$2/\sqrt{6}$	$3\sqrt{6}/2$
	$[01\bar{1}]$		0	$\infty$		$1/2$	$\infty$		0	$\infty$
	$[101]$		$1/\sqrt{2}$	$-\sqrt{6}$		$1/2$	$\infty$		$2/\sqrt{6}$	$3\sqrt{6}/2$
$(1\bar{1}1)$	$[110]$	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{2}$	$\sqrt{6}$	0	1	$\infty$	$1/3$	$2/\sqrt{6}$	$3\sqrt{6}/2$
	$[10\bar{1}]$		$1/\sqrt{2}$	$\sqrt{6}$		$1/2$	$\infty$		0	$\infty$
	$[011]$		0	$\infty$		$1/2$	$\infty$		$2/\sqrt{6}$	$3\sqrt{6}/2$
$(11\bar{1})$	$[1\bar{1}0]$	$1/\sqrt{3}$	$1/\sqrt{2}$	$\sqrt{6}$	$2/\sqrt{6}$	0	$\infty$	$1/3$	0	$\infty$
	$[011]$		0	$\infty$		$1/2$	$\sqrt{6}$		$2/\sqrt{6}$	$3\sqrt{6}/2$
	$[101]$		$1/\sqrt{2}$	$\sqrt{6}$		$1/2$	$\sqrt{6}$		$2/\sqrt{6}$	$3\sqrt{6}/2$

### 4.3. ДЕФОРМАЦИЯ МОНОКРИСТАЛЛА СКОЛЬЖЕНИЕМ

Прохождение дислокационной петли через всю плоскость скольжения вызывает относительное смещение обеих частей кристалла на вектор  $\vec{b}$  длиной порядка  $3 \cdot 10^{-8}$  см. Такие смещения нельзя заметить даже под микроскопом. Однако, когда число испущенных источником дислокаций достигнет нескольких десятков, на предварительно полированной боковой поверхности возникнет ступенька, оттеняющая линию скольжения. По мере роста степени деформации число линий скольжения растёт, и одновременно увеличивается высота ступеньки. Очевидно, что все параллельные линии скольжения относятся к одной системе скольжения.

При работе только одной системы микроскопическая деформация образца (рис. 57) в среднем представляет собой чистый сдвиг величиной  $\gamma$ , который определён как отношение максимального смещения  $|\vec{s}|$  к расстоянию по нормали между основаниями образца:

$$\gamma = \operatorname{tg} \alpha = \frac{s}{MN}. \quad (193)$$

Этот сдвиг (см. рис. 57) вызывает удлинение образца и поворот оси растяжения от  $OO$  к  $OO'$  таким образом, что плоскости скольжения поворачиваются в направлении к действующим усилиям. Следует помнить, однако, что при растяжении монокристалла на разрывной машине равномерную деформацию сдвигом испытывает только центральный участок образца, а вблизи захватов возникают изгибы, приводящие оба конца образца на одну вертикаль (рис. 58). Естественно, что деформацию изучают только в средней зоне.

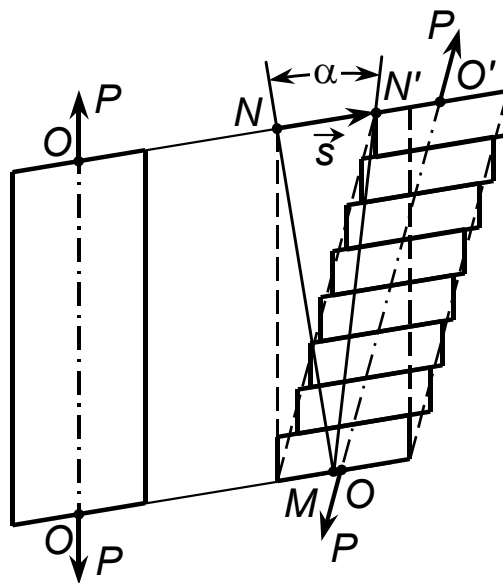


Рис. 57. Деформация монокристалла скольжением

Рассмотрим более подробно изменение геометрии образца при скольжении по одной системе. На рис. 59 показана ориентация монокристалла до и после деформации скольжением в направлении  $AA_1$ . Обозначив через  $l_0$  и  $l_1$  начальную и конечную длины образца ( $AB = l_0$ ,  $A_1B = l_1$ ) и отметив, что в треугольнике  $ABA_1$  углы  $A$  и  $A_1$  равны соответственно  $180^\circ - \lambda_0$  и  $\lambda_1$ , по теореме синусов находим

$$\frac{l_1}{l_0} = \frac{\sin \lambda_0}{\sin \lambda_1}; \quad (194)$$

$$AA_1 = l_0 \frac{\sin(\lambda_0 - \lambda_1)}{\sin \lambda_1}. \quad (195)$$

Как следует из выражения (194), удлинение образца оказывается непосредственно связанным с изменением угла  $\lambda$  между осью растяжения и направлением скольжения. Если  $l_1 \rightarrow \infty$ , то угол  $\lambda$  должен стремиться к нулю. Ещё раз подчеркнём, что в ходе деформации плоскость скольжения должна установиться параллельно направлению действующей силы. Это обстоятельство является причиной возникновения кристаллографической текстуры при деформации поликристаллического образца.

Обычно изменение длины характеризуют относительным удлинением  $\varepsilon = \frac{l_1 - l_0}{l_0}$ . Для  $\varepsilon$  имеем

$$\varepsilon = \frac{\sin \lambda_0}{\sin \lambda_1} - 1. \quad (196)$$

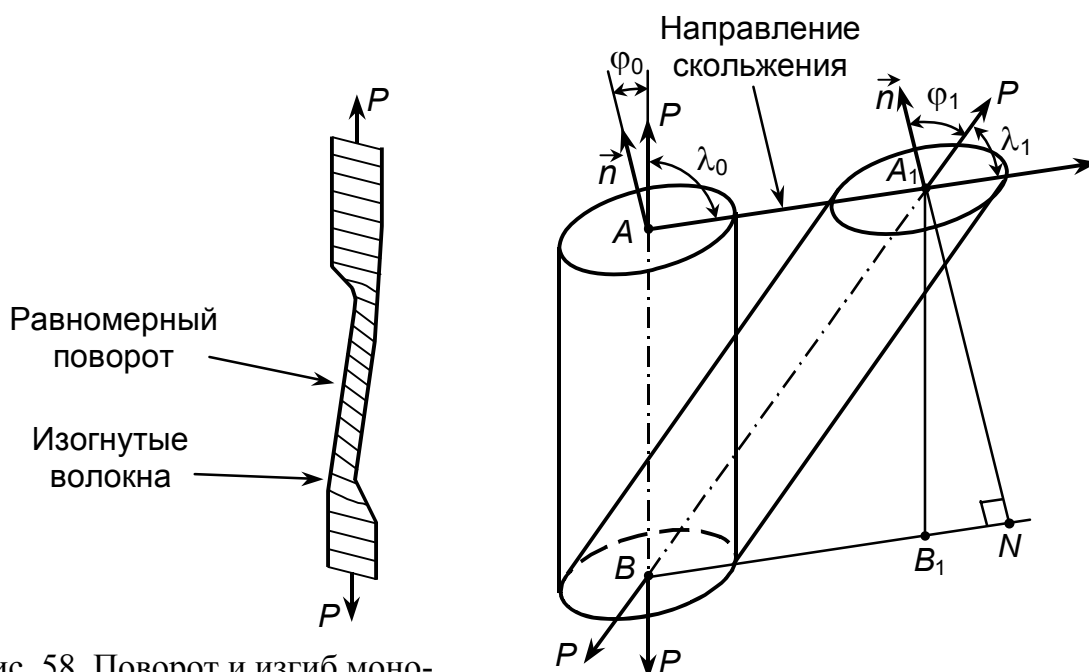


Рис. 58. Поворот и изгиб монокристалла при растяжении на разрывной машине

Рис. 59. Изменение длины и ориентировки монокристалла при растяжении

Деформацию сдвига  $\gamma$  можно определить соотношением  $AA_1/A_1N$ , где  $A_1N$  — высота цилиндрического образца, которая равна  $l_0 \cos \varphi_0$  (или  $l_1 \cos \varphi_1$ ). Используя выражение (195) для  $AA_1$ , получим связь удлинения и сдвига:

$$\gamma = \frac{1}{\cos \varphi_0} \cdot \frac{\sin(\lambda_0 - \lambda_1)}{\sin \lambda_1} = \frac{\left((l_1/l_0)^2 - \sin^2 \lambda_0\right)^{1/2} - \cos \lambda_0}{\cos \varphi_0}. \quad (197)$$

Существование зависимостей (188) и (197) позволяет представлять диаграмму растяжения монокристалла либо в осях  $\sigma - \epsilon$ , либо в осях  $\tau - \gamma$ .

#### 4.4. ДИАГРАММА РАСТЯЖЕНИЯ ОБРАЗЦОВ

Эта диаграмма должна быть известна студентам по нескольким учебным курсам. Поэтому мы рассмотрим ее вкратце. Испытания на растяжение проводят с помощью разрывной машины на цилиндрических образцах с двумя головками, которые вставляются или вкручиваются в верхний и нижний захваты машины. Между головками расположена цилиндрическая часть образца. Длина расчетной части образца  $l_0$  в пять или десять раз превышает диаметр:  $\frac{l_0}{d_0} = 5$ ;  $\frac{l_0}{d_0} = 10$ . Обычно  $d_0 = 5$  мм, но используют об-

разцы и с другими диаметрами, например, 10 мм. Перед установкой образца в машину его размечают вдоль образующей цилиндра отмечают или слегка накерняют две точки, находящиеся на расстоянии  $l_0$ . После проведения испытания и разрыва образца его половинки могут быть составлены рядом, и тогда можно измерить конечное расстояние  $l_k$  между точками, необходимое прежде всего для контроля за измерительным механизмом машины. В процессе испытания верхний или нижний захват машины перемещается с постоянной скоростью  $\dot{\epsilon}_0$ , которая определяет удлинение образца  $\Delta l = l - l_0 = \dot{\epsilon}_0 \tau$ , где  $l$  — текущее значение длины рабочей части образца. С помощью механической системы величина удлинения (в некотором масштабе) передается на записывающее устройство.

Вторым важнейшим параметром является усилие растяжения. В современных машинах используют два способа нагружения: 1) механический, когда вращение от электродвигателя через редуктор и червячную пару передается на гайку, что вызывает поступательное перемещение винта, на конце которого расположен захват для головки образца; 2) гидравлический, при котором деформация вызывается перемещением поршня гидроцилиндра, а усилие на образце определяется давлением масла. В каждой машине имеется механизм измерения усилия, величина  $P$  которого записывается на диаграммной ленте вдоль вертикальной оси  $Oy$ . Если одновременно вдоль оси  $Ox$  записать удлинение  $\Delta l$ , то возникает инст-

рументальная, первичная диаграмма растяжения  $P(\Delta l)$ . Поскольку размеры образца известны, то усилие  $P$  и абсолютное значение удлинения образца  $\Delta l$  можно легко пересчитать на условное нормальное напряжение

$$\sigma = \frac{P}{F_0} \quad (198)$$

и условное относительное удлинение

$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l_0}. \quad (199)$$

Эти величины называют условными, потому что для их расчёта используют неизменную исходную площадь поперечного сечения  $F_0 = \pi d_0^2 / 4$  и неизменную длину рабочей части образца  $l_0$ . Истинное относительное удлинение

$$e = \int_{l_0}^l \frac{dl}{l} = \ln \frac{l}{l_0} = \ln(1 + \varepsilon) \quad (200)$$

и истинное напряжение

$$S = \frac{P}{F} \quad (201)$$

используются в тех случаях, когда в ходе растяжения удаётся непрерывно измерять  $F$  — текущую площадь поперечного сечения образца. В итоге математической обработки инструментальная диаграмма  $P = P(\Delta l)$  может быть перестроена в диаграмму условных напряжений  $\sigma = \sigma(\varepsilon)$  или в диаграмму истинных напряжений  $S = S(e)$  (рис. 60).

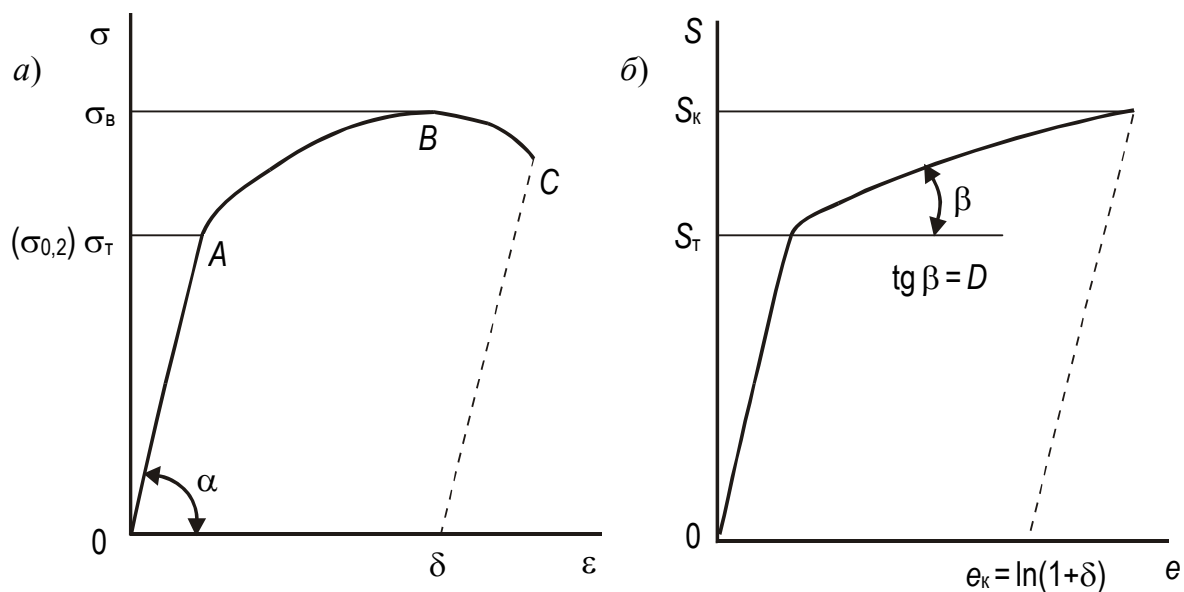


Рис. 60. Типичный вид диаграмм растяжения для условных (а) и истинных (б) напряжений (схема)



Кривую растяжения можно разделить на два участка:  $OA$  — участок упругой деформации и  $ABC$  — участок пластической деформации. Особенность первого участка заключается в том, что если мы нагрузим образец усилием, соответствующим точке  $I$  (рис. 61), то разгрузку пойдёт по той же линии диаграммы. После полного снятия нагрузки остаточной деформации не наблюдается, поэтому нагружение является упругим. Для участка  $OA$  выполняется закон Гука

$$\sigma = E\varepsilon \quad (202)$$

где  $E$  — модуль нормальной упругости, который может быть измерен по диаграмме как  $\operatorname{tg} \alpha$ , где  $\alpha$  — угол наклона участка  $OA$ . Никаких изменений в структуре или на поверхности образца при нагружении в упругой области не наблюдается. Нужно заметить, что один и тот же модуль нормальной упругости при нагружении или разгрузке наблюдается только при малой скорости нагружения. Модуль упругости зависит от температуры, а если скорость деформации конечна, то растяжение должно приводить к небольшому снижению температуры образца, а разгрузка к повышению её. Вследствие этого, а также благодаря тепловому расширению теоретически линия нагружения будет отличаться от линии разгрузки, но это отличие невелико.

Иная ситуация наблюдается в том случае, если нагрузить образец выше предела текучести, например, до точки 2 на рис. 61. Линия разгрузки  $22'$  параллельна упругому участку  $0I$ . После разгрузки оказывается, что длина образца необратимо увеличилась на  $\Delta l_{02'}$ . Интересно, что на предварительно отполированной поверхности образца после нагружения до точки 2 возникают линии и ступеньки скольжения, как это показано на рис. 62. Нагружение образца усилием до точки 3 и последующее разгрузку выявит ещё большее необратимое удлинение образца. На поверхности образца будет увеличиваться количество линий скольжения, а единичные линии превра-

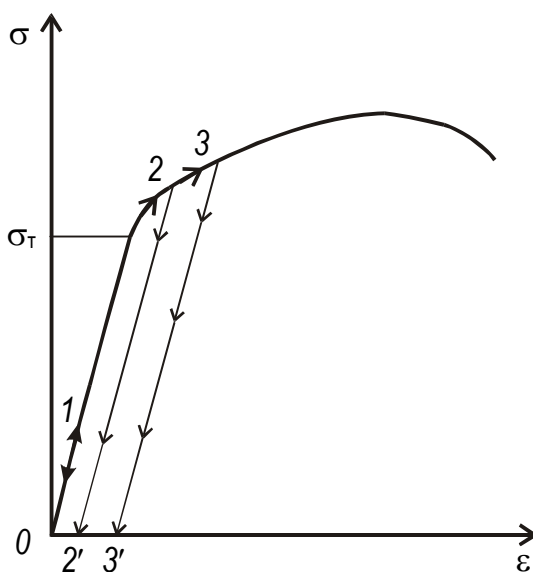


Рис. 61. Остаточная деформация после разгрузки

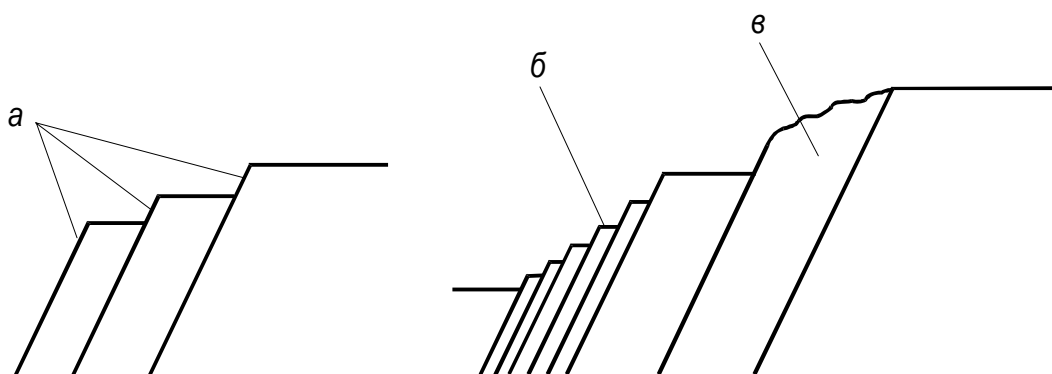


Рис. 62. Рельеф скольжения: *а* — одиночные линии скольжения; *б* — пачка скольжения; *в* — полоса скольжения

щаются в пачки скольжения и полосы скольжения, возникающие в результате сдвига по соседним с уже реализовавшимися плоскостям скольжения.

Итак, предел текучести — это напряжение, разделяющее упругую и пластическую части диаграммы растяжения. Иногда в начале пластической области диаграммы проявляется площадка текучести. В этом случае удаётся определить физический предел текучести  $\sigma_T$  — это условное напряжение, соответствующее наименьшей нагрузке площадки текучести, когда деформация образца проходит без увеличения усилия:  $\sigma_T = P_T / F_0$ , где  $P_T$  — нагрузка на пределе текучести. Чаше встречаются ситуации, когда площадка текучести отсутствует. В этом случае по диаграмме растяжения определяют условный предел текучести  $\sigma_{0,2}$  — условное напряжение, после снятия которого остаточная деформация составляет 0,2 %.

Помимо предела текучести сопротивление малым пластическим деформациям характеризуют предел пропорциональности и предел упругости. Физический смысл этих величин студентам следует изучить самостоятельно.

В области больших степеней деформаций наиболее важной характеристикой является предел прочности  $\sigma_B$  (временное сопротивление разрыву) — это условное напряжение, соответствующее наибольшей нагрузке, выдерживаемой образцом. Интересно, что разрушение происходит не при этом напряжении, а при соответствующем точке *С* на рис. 60, *а*, однако условное разрушающее напряжение оказывается меньшим, чем  $\sigma_B$ . Дело в том, что при напряжении  $\sigma_B$  на образце возникает шейка, то есть скольжение локализуется в средней части образца, как это схематично показано на рис. 54. Площадь поперечного сечения в шейке меньше, чем в среднем по образцу, что и вызывает снижение деформирующего усилия. Диаграмма истинных напряжений не имеет максимума напряжений, наибольшее напряжение достигается в момент разрушения (рис. 60, *б*), оно называется истинным разрушающим напряжением

$$S_K = \frac{P_K}{F_K}, \quad (203)$$

где  $P_k$  — усилие в момент разрушения, а  $F_k$  — площадь сечения в месте разрыва (в шейке).

Пластичность металлов принято характеризовать следующими величинами:

1) относительное удлинение к моменту разрушения

$$\delta = \frac{l_k - l_0}{l_0} \cdot 100 \% ; \quad (204)$$

индексы ( $\delta_5$ ,  $\delta_{10}$ ) указывают на тип образца, то есть на отношение  $l_0/d_0$ ;

2) относительное сужение  $\psi$  — отношение наибольшего уменьшения поперечного сечения образца к первоначальной площади поперечного сечения:

$$\psi = \frac{F_0 - F_k}{F_0} \cdot 100 \% . \quad (205)$$

Площадь под диаграммой определяет полную работу деформации до разрушения. Если эту работу отнести к объёму образца, то можно определить удельную работу разрушения  $A$  (вязкость). Приблизительно

$$A \approx \frac{S_k + S_T}{2} \cdot e_k . \quad (206)$$

Если принять, что в пластической области линия нагружения на диаграмме истинных напряжений линейно возрастает с ростом напряжения, то можно ввести коэффициент упрочнения  $D$  (см. рис. 60, б)

$$D \approx \frac{S_k - S_T}{e_k} ; \quad (207)$$

тогда

$$A \approx \frac{S_k^2 - S_T^2}{2D} . \quad (208)$$

Вязкость возрастает при увеличении истинного разрушающего напряжения или уменьшении коэффициента упрочнения.

Важным и интересным является вопрос о причинах существования максимального усилия в ходе растяжения. Обычно диаграмма истинных напряжений может быть описана в пластической области уравнением

$$S = S_T + \lambda e^m , \quad (209)$$

где  $\lambda$  и  $m$  — постоянные для данного сплава параметры; например, для низкоуглеродистых сталей  $m \approx 0,17$ .

Усилие деформирования при данном истинном напряжении  $S$

$$P = S_T F_0 + F \lambda e^m . \quad (210)$$

В области пластических деформаций выполняется закон постоянства объёма образца:  $Fl = \text{const}$ , поэтому

$$F = \frac{\text{const}}{l} = \frac{\text{const}}{l_0} \cdot \exp(-e) \quad (211)$$

так как согласно (199) и (200)  $l = l_0 \exp(e)$  [здесь  $e$  — не основание натуральных логарифмов, а истинное удлинение]. Функция

$$P = S_{\tau} F_0 + \frac{\lambda \cdot \text{const}}{l_0} e^m \exp(-e) \quad (212)$$

имеет максимум при  $e = m$ , в чём легко убедиться, рассчитав производную от  $dP/de$  и приравняв её к нулю. Этот результат означает, что однородная равномерная деформация теряет свою устойчивость при достижении истинной деформации  $e = m$ ; с этого момента деформация становится неоднородной и локализуется в области шейки. Существование максимума усилия деформации фактически уже заложено в уравнении связи истинных напряжений и деформаций (209).

#### 4.5. ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМАЦИИ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

Обычно ориентировка зёрен в поликристаллах носит случайный характер, так что границы зёрен являются поверхностями, на которых ориентация плоскости скольжения испытывает скачкообразное изменение, в простейшем случае — поворот. Покажем, что это неизбежно приводит к множественному скольжению при деформации. Пусть в зерне  $A$  (рис. 63) сдвиг произошёл по плоскости скольжения  $1-1$  и распространился до границы зерна. В заштрихованной области зерно  $A$  из-за сдвига накладывается на зерно  $B$ . Чтобы исключить это сгущение, скольжение пройдёт по плоскости  $2-2$  зерна  $B$ . Но так как первый сдвиг определён вектором  $\vec{\delta}_1$ , то его компенсация в зерне  $B$  требует одновременного скольжения по плоскостям  $2-2$  и  $3-3$  в соответствии с векторным треугольником. Итак, главная особенность деформации поликристалла заключается в множественности скольжения (как правило, по четырём–шести системам).

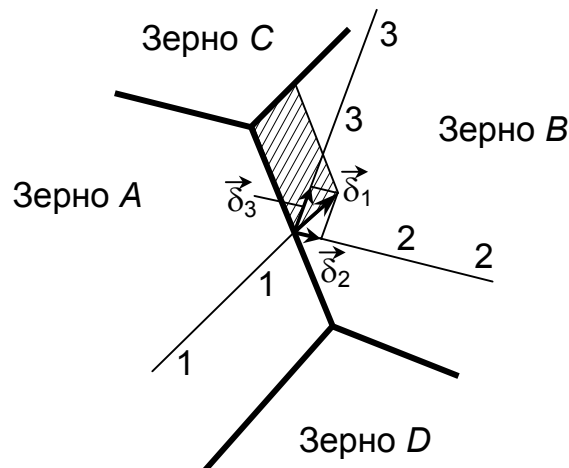


Рис. 63. Множественное скольжение в поликристалле

При растяжении поликристаллов изменения ориентировки оси образцов не происходит. Деформация проявляется как удлинение, обусловленное согласованными процессами скольжения в кристаллах. Поэтому существует связь усреднённой по всем зёрнам сдвиговой деформации  $\gamma$  с относительным удлинением образца  $\varepsilon$ . Рассмотрим её.

Пусть, например, под действием растягивающих напряжений  $\sigma$  образец получил удлинение  $d\varepsilon$ . Работа внешних сил на деформацию одного зерна объёмом  $V_3$  составит  $\sigma d\varepsilon \cdot V_3$ . Эту же величину можно представить как работу усреднённых касательных напряжений при сдвиге. Предполагая, что в среднем на зерно приходится  $n$  систем скольжения, запишем

$$\sigma d\varepsilon \cdot V_3 = \bar{\tau} \cdot \sum_{i=1}^n \gamma_i V_3, \quad (213)$$

где  $\gamma_i$  — сдвиг по  $i$ -й системе скольжения зерна. Затем найдём отношение

$$\frac{\sigma}{\bar{\tau}} = \frac{\sum_{i=1}^n d\gamma_i}{d\varepsilon} = \bar{m}, \quad (214)$$

представляющее собой усреднённый ориентационный фактор  $m = \frac{1}{\cos \lambda \cos \varphi}$ , связывающий нормальные и касательные напряжения, а

также сдвиг и удлинение. Усреднение  $m$  следует проводить по всем возможным системам, удовлетворяющим условию непрерывности деформации на границах зерна.

Первый расчёт  $\bar{m}$  был выполнен Заксом (1928 г.) для образца, содержащего беспорядочно ориентированные ГЦК- или ОЦК-кристаллы. Для каждого зерна учитывалась та система скольжения, для которой произведение  $\cos \lambda \cos \varphi$  минимально, а приведённое касательное напряжение максимально. Значение  $\bar{m}$  в таком варианте равно 2,238. Ясно, что в этом случае совместности деформаций нет. В том же 1928 г. Мизес показал, что любую деформацию, создаваемую внешней нагрузкой, можно осуществить через сдвиг как минимум по пяти независимым системам скольжения. Учёт только одной плоскости скольжения даёт заниженное значение  $\bar{m}$ .

Тейлор (1938 г.) использовал при расчёте  $\bar{m}$  иную гипотезу: об одинаковости деформации всех зёрен в образце. Условия совместности и непрерывности деформации выполняется в этом случае автоматически. Тейлор для ГЦК-поликристаллов получил  $\bar{m} = 3,06$ , что не намного отличается от ориентационного фактора монокристалла при растяжении вдоль  $[111]$  или  $[100]$  ( $m = 3,67$  и  $2,45$  соответственно).

В более общей теории Бишопа и Хилла (1951 г.) использован принцип максимальной работы внешних сил, совершающих деформацию, но снято допущение об однородной, одинаковой деформации всех зёрен. Вместо

этого вводится местная неоднородная деформация и учитывается условие однородности напряжений. В итоге авторы приходят к соотношению  $\sigma d\varepsilon = \bar{\tau} \sum_i d\gamma_i$ , фактически использованному Тейлором. Тем самым был

подтверждён его результат для  $\bar{m}$ . Экспериментальные данные свидетельствуют, что значение  $\bar{m}$  действительно находится между 2,238 и 3,06, но может зависеть от размера зерна и степени деформации. Это означает, что ни гипотеза Закса, ни гипотеза Тейлора в действительности точно не реализуется — деформация соседних зёрен совместна, но неоднородна. «Жёсткие», то есть неблагоприятно ориентированные зёрна деформируются меньше и по меньшему числу систем скольжения, зато соседние «мягкие» зёрна деформируются сильнее. Этим обеспечивается снижение  $\bar{m}$  от 3,06.

Уравнение (214) играет важную роль в теории упрочнения, потому что позволяет переходить от сдвиговой деформации, создаваемой дислокациями, к видимой деформации удлинения. Если, например, при растяжении монокристаллов получены зависимости  $\tau = f_1(\gamma)$  и измерены коэффициенты упрочнения  $d\tau/d\gamma$ , то их легко пересчитать на зависимости  $\sigma = f_2(\varepsilon)$  и  $d\sigma/d\varepsilon$  для поликристаллов:

$$\sigma = \bar{m}\tau; \quad d\gamma = \bar{m}d\varepsilon; \quad \frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \bar{m}^2 \frac{d\tau}{d\gamma}. \quad (215)$$

В частности, если известна величина критического напряжения скольжения  $\tau_s$  для монокристалла, то для крупнозернистого поликристалла, имеющего аналогичную тонкую структуру, можно просто рассчитать предел текучести:

$$\sigma_T = \bar{m} \cdot \tau_s. \quad (216)$$

## 4.6. ДВОЙНИКОВАНИЕ

В тех случаях, когда пластическая деформация металлов и сплавов осуществляется при температурах ниже  $0,2T_{\text{пл}}$  (в кельвинах), можно наблюдать особый механизм деформации — двойникование, также осуществляющийся под действием касательных напряжений. При этом атомные плоскости одной части кристалла последовательно сдвигаются так, что они оказываются в зеркальном отражении по отношению к атомам недеформированной части (рис. 64). Плоскость сопряжения двойникованной и матричной частей называется плоскостью двойникования, а направление или вектор смещения атомных плоскостей — направлением или вектором двойникования. Переброс кристаллической решётки в двойниковое положение не может изменить энергии взаимодействия подавляющего большинства соседних атомов, так как их взаимное расположение фактически не изменяется. Изменение характера соседства, и то лишь для следующих

за ближайшими, проявляется только для граничного слоя. По этой причине можно ввести удельную поверхностную энергию  $\gamma_{\text{дв}}$  двойниковой границы, аналогичную поверхностной энергии границы металл–вакуум  $\gamma_0$ . Для железа величину  $\gamma_{\text{дв}}$  оценивают в  $0,01 \dots 0,05 \text{ Дж/м}^2$ , что в сотни раз ниже поверхностной энергии (около  $2 \text{ Дж/м}^2$ ). Поэтому двойникование не требует значительных затрат энергии. Вопрос, не вполне понятный до сих пор, заключается в том, как обеспечивается строго определённое перемещение огромного коллектива атомов. Обычные плоскости и направления двойникования для различных структур даны в табл. 7. Важно отметить, что плоскости  $\{110\}$  у ОЦК-кристаллов, по которым в основном идёт скольжение, не могут выступать плоскостями двойникования, так как являются зеркальными плоскостями симметрии. Относительно этих плоскостей ОЦК-решётка как бы естественно двойникова.

Схема двойникования ОЦК-кристаллов по плоскости  $(11\bar{2})$  в направлении  $[111]$  приведена на рис. 64. Плоскость рисунка совпадает с кристаллографической плоскостью  $(\bar{1}10)$ , направление двойникования обозначено  $AB$ . Обратите внимание, что в двойниковании участвуют все без исключения плоскости в сдвинутой части, а не некоторые, как при скольжении. Все соседние плоскости сдвигаются по отношению друг к другу на одинаковое расстояние  $s$ , существенно меньшее межатомного. Решётка как бы опрокидывается. Но поскольку сдвиги соседних плоскостей идут в одном направлении, суммарный сдвиг увеличивается пропорционально толщине двойников. Если механически двойникуется монокристалл, то, как правило, он будет состоять из двух частей с исходной и двойниковой ориентацией. В принципе двойники могут образоваться в ходе кристаллизации или рекристаллизации. В этом случае двойниковые прослойки довольно толстые. Механические двойники настолько тонкие, что имеют вид линий, а не полосок. Двойникование проходит с высокой скоростью и сопровождается характерным потрескиванием. Диаграмма растяжения кристаллов, дефор-

Таблица 7

Кристаллографические характеристики двойникования

Кристаллическая структура	Плоскость двойникования	Направление двойникования	Сдвиг $\gamma$ *
ГЦК	$\{111\}$	$\langle 11\bar{2} \rangle$	$\sqrt{2}/2$
ОЦК	$\{112\}$	$\langle 1\bar{1}1 \rangle$	$\sqrt{2}/2$
ГПУ	$\{10\bar{1}2\}$	$\langle 10\bar{1}1 \rangle$	$\frac{3 - (c/a)^2}{\sqrt{3} \cdot c/a}$

\* Сдвиг  $\gamma$  представляет отношение величины смещения плоскостей  $s$  к межатомному расстоянию  $d$ :  $\gamma = s/d$ .

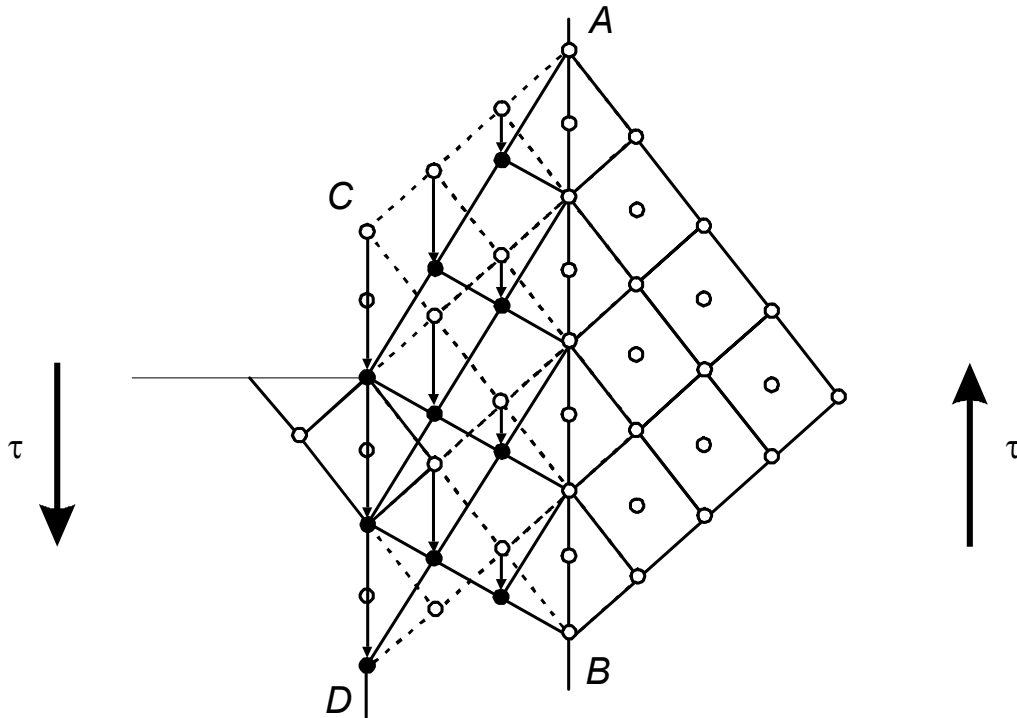


Рис. 64. Двойникование ОЦК-кристалла по плоскости  $(11\bar{2})$ ; направление двойникования  $AB$  соответствует  $[111]$

мирующихся скольжением и двойникованием, часто содержит скачки изменения нагрузки. Считают, что двойникование создаёт ориентировки, которые облегчают скольжение.

Двойникование в ГПУ-металлах рассмотрим на примере магния. Скольжение в магнии проходит по базисной плоскости  $(0001)$ , поэтому ориентационную зависимость предела текучести отражает уравнение (186):

$$\sigma_T = \frac{\tau_s^{\text{ск}}}{\cos \varphi \cos \lambda}. \quad (217)$$

Эксперименты (см. рис. 56) подтверждают справедливость формулы (217). Другие системы скольжения, например, сдвиги по плоскостям  $\{10\bar{1}1\}$ , проявляются у магния только при повышенных температурах. Анализируя данные рис. 56, нужно обратить внимание на то, что для ориентировок при  $\cos \lambda \cos \varphi \rightarrow 0$  предел текучести становится очень большим, в пределе стремящимся к бесконечности. Такая ситуация возникает либо при  $\varphi \rightarrow 0$ ,  $\lambda \rightarrow 90^\circ$ , либо при  $\varphi \rightarrow 90^\circ$ ,  $\lambda \rightarrow 0$ . В первом случае плоскость сдвига перпендикулярна оси образца, а во втором — параллельна ей. Для этих двух ориентировок скольжение по  $(0001)$  становится невозможным. Эксперименты показывают, что при таких условиях деформация в магнии протекает путём двойникования по плоскостям  $\{10\bar{1}2\}$  в направлении  $\langle 10\bar{1}1 \rangle$ .

На рис. 65 показаны положения плоскости и направления двойникования в гексагональной решётке магния. Суть двойникования заключается в том,



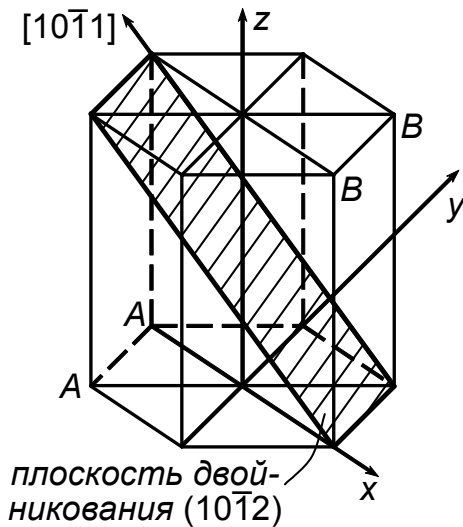


Рис. 65. Одна из возможных систем двойникования в решетке магния: плоскость \$(10\bar{1}2)\$, направление \$[10\bar{1}1]\$

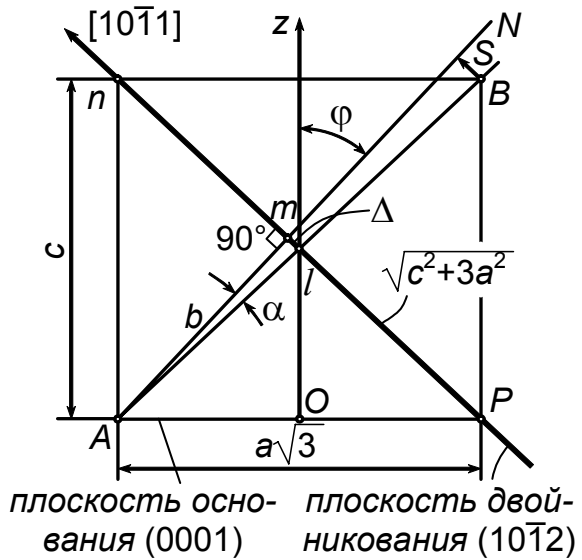


Рис. 66. Геометрические параметры двойникования по плоскости \$(10\bar{1}2)\$ в магнии

что верхняя часть кристалла сдвигается параллельно плоскости двойникования и устанавливается в позиции зеркальной симметрии относительно этой плоскости. В частности, ребро \$B\$ устанавливается в позиции зеркального отражения ребра \$A\$ (рис. 66).

Величина \$Am = b\$ представляет собой расстояние между соседними плоскостями \$(10\bar{1}2)\$. Используя формулы площади прямоугольника, запишем:

$$b\sqrt{c^2 + 3a^2} = ca\sqrt{3}. \quad (218)$$

Найдём отрезок \$b\$:

$$b = \frac{ac\sqrt{3}}{\sqrt{c^2 + 3a^2}}. \quad (219)$$

Далее вычисляем величину абсолютного сдвига \$ml = \Delta\$ соседних плоскостей при двойниковании. Сначала рассчитаем длину отрезка \$nm\$, являющегося катетом в прямоугольном треугольнике \$Anm\$:

$$nm = \sqrt{c^2 - \xi^2} = \frac{c^2}{\sqrt{c^2 + 3a^2}}. \quad (220)$$

Величина \$\Delta\$ представляет разность полудлины диагонали и отрезка \$nm\$:

$$\Delta = \frac{\sqrt{c^2 + 3a^2}}{2} - \frac{c^2}{\sqrt{c^2 + 3a^2}} = \frac{3a^2 - c^2}{2\sqrt{c^2 + 3a^2}}. \quad (221)$$

Сдвиг второй плоскости на рис. 66 равен \$S = 2\Delta\$.

Величина сдвиговой деформации при двойниковании

$$\gamma = \operatorname{tg} \alpha = \frac{\Delta}{\xi} = \left( 3 - \frac{c^2}{a^2} \right) : \left( \frac{c}{a} \sqrt{3} \right). \quad (222)$$

Если  $c/a > \sqrt{3} \approx 1,732$ , то величина  $\gamma < 0$ .

У магния отношение осей элементарной ячейки  $\frac{c}{a} = 1,624$ , поэтому сдвиговая деформация при двойниковании  $\gamma = 0,13 > 0$ . Рассчитаем далее угол  $\varphi$  между осью  $Oz$ , то есть направлением  $[0001]$ , и нормалью  $AN$  к плоскости двойникования. Из рис. 66 видно, что в прямоугольном треугольнике  $Alp$  длина отрезка  $lp$  равна

$$lp = np - nm = \sqrt{c^2 + 3a^2} - \frac{c^2}{\sqrt{c^2 + 3a^2}} = \frac{3a^2}{\sqrt{c^2 + 3a^2}}; \quad (223)$$

тогда

$$\sin \varphi = \frac{\frac{3a^2}{\sqrt{c^2 + 3a^2}}}{a\sqrt{3}} = \frac{3a^2}{a\sqrt{3}\sqrt{c^2 + 3a^2}} = \frac{\sqrt{3}}{\frac{c}{a}\sqrt{1 + \frac{3}{(c/a)^2}}}. \quad (224)$$

Оценим численно при  $\frac{c}{a} = 1,624$ :  $\sin \varphi \approx 0,729$ ;  $\varphi \approx 46,84^\circ$ . Плоскости двойникования почти совпадают с площадками максимальных касательных напряжений, для которых  $\varphi = 45^\circ$ ;  $\lambda = 45^\circ$ . Введём критическое напряжение двойникования  $\tau_s^{\text{ДВ}}$  и используем формулу (217) для предела текучести:

$$\sigma_T = \frac{\tau_s^{\text{ДВ}}}{\cos \lambda \cdot \cos \varphi} = \frac{\tau_s^{\text{ДВ}}}{\cos(90 - 46,84) \cdot \cos(46,84)} \approx \frac{\tau_s^{\text{ДВ}}}{0,499}. \quad (225)$$

Из рис. 66 отчётливо видно, что в случае растяжения образца, вырезанного вдоль  $Oz$ , двойникование возможно, поэтому формула (225) определяет предел текучести при растяжении. Однако двойниковый сдвиг имеет только одно направление, поэтому в условиях сжатия процесс двойникования оказывается невозможным, а пластическая деформация должна осуществляться либо скольжением, либо двойникованием по другим допустимым плоскостям, но с более высоким  $\tau_s^{\text{ДВ}}$ . Тем самым создаётся возможность для заметного различия пределов текучести магниевых сплавов при растяжении и сжатии. Для монокристаллов магния экспериментальные данные об анизотропии  $\sigma_{0,2}$  и  $\sigma_{-0,2}$  нам не известны. Мы рассмотрим данные для прокованных образцов поликристаллического магния.

Литой поликристаллический магний, равно как и сплавы магния, характеризуется практически равными значениями  $\sigma_{0,2}$  и  $\sigma_{-0,2}$ . Анизотропия пре-

дела текучести проявляется только у деформированных сплавов, причём только в том случае, когда предварительная пластическая деформация сопровождается возникновением кристаллографической текстуры благодаря стремлению плоскостей скольжения установиться вдоль направления течения при деформации.

У прокованных и прокатанных на лист заготовок плоскость базиса гексагональной призмы (0001) ориентирована приблизительно перпендикулярно действующим усилиям, то есть лежит в плоскости листа. В случаековки текстура имеет осью симметрии нормаль к поверхности поковки. При прокатке плоскость базиса (0001) также преимущественно расположена в плоскости листа, но испытывает некоторое рассеяние. Бухман и Альтвикер исследовали анизотропию механических свойств прокованной плиты. Чтобы описать их результаты, введём следующую сферическую систему осей (рис. 67):  $Oz$  — нормаль к поверхности пластины,  $Ox$  — направление в плоскости пластины,  $ON$  — направление измерения свойства. В случае прокованной пластины направление  $Ox$  выбирается произвольно. В цитируемой работе свойства были измерены в трёх направлениях:  $\varphi=0$ ,  $\vartheta=90^\circ$  (вдоль  $Ox$ );  $\vartheta=0$  (вдоль  $Oz$ ) и  $\varphi=0$ ,  $\vartheta=45^\circ$ , а численные данные представлены в табл. 8.

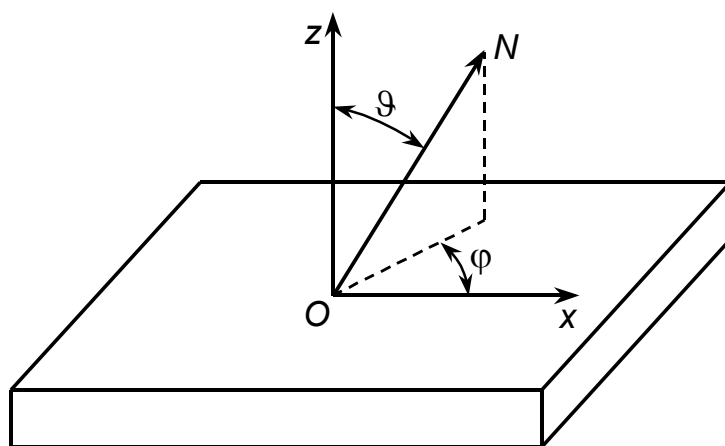


Рис. 67. Система координат для описания свойств прокованной «лепёшки»

Таблица 8

Пределы текучести при растяжении и сжатии в различных направлениях прокованной круглой пластины («лепёшки») из однофазного магниевого сплава

	Направление		
	1 ( $\varphi=0$ , $\vartheta=90^\circ$ )	2 ( $\vartheta=0$ )	3 ( $\varphi=0$ , $\vartheta=45^\circ$ )
При растяжении ( $\sigma_{+0,2}$ )	181	140	117
При сжатии ( $\sigma_{-0,2}$ )	118	203	108
Отношение $\sigma_{-0,2}/\sigma_{+0,2}$	0,65	1,45	0,92

Итак, в направлении любого радиуса «лепёшки» предел текучести на сжатие составляет примерно 0,65 предела текучести на растяжение. В направлении нормали  $Oz$  (ось 2) ситуация иная — предел текучести при сжатии уже в 1,45 раза выше  $\sigma_{0,2}$ . В наклонном направлении под углом  $45^\circ$  к оси  $z$  оба предела текучести оказываются почти равными. Попробуем объяснить эти результаты в рамках идеи о конкуренции скольжения и двойникования.

Рассмотрим сначала направление 2, в среднем совпадающее с нормалью  $[0001]$ . При растяжении деформация происходит в основном двойникованием, так что предел текучести определяется выражением (225). Для согласования расчётов с экспериментальными данными следует принять  $\tau_s^{DB}=70$  МПа, тогда предел текучести при растяжении окажется равным 140 МПа. В условиях сжатия двойникование по  $\{10\bar{1}2\}$  невозможно, так что можно предположить, что деформация будет происходить скольжением. Но если бы все плоскости скольжения были параллельны поверхности плиты, то оказалась бы невозможной деформация скольжением образцов, вырезанных вдоль  $Oz$ . Учтём, что существует рассеяние полюсов плоскостей  $(0001)$  относительно нормали к плоскости листа в интервале углов порядка  $30^\circ$ . Примем, что средний угол  $\bar{\varphi}=15^\circ$ , тогда

$$\sigma_T \approx \sigma_{-0,2} = \frac{\tau_s^{CK}}{\cos 15^\circ \cdot \cos 75^\circ} = 4\tau_s^{CK}. \quad (226)$$

Если принять, что критическое напряжение скольжения в магнии составляет  $\tau_s^{CK}=50$  МПа, то для образца, вырезанного вдоль  $Oz$ , предел текучести при сжатии составит 200 МПа в согласии с данными табл. 8.

Рассмотрим теперь образец типа 3, вырезанный под углом  $45^\circ$  к осям  $Oz$  и  $Ox$ . Ось такого образца будет расположена близко к линии  $AB$  на рис. 67, так как образует угол  $45^\circ$  с плоскостью основания  $Ap$ . Очевидно, что плоскости скольжения  $(0001)$  в таком образце почти совпадают с площадками максимальных касательных напряжений. Пределы текучести при сжатии и растяжении в этом случае должны быть равными и определяться только процессами скольжения:

$$\sigma_T \approx \sigma_{0,2} = \sigma_{-0,2} = \frac{50}{\cos 45^\circ \cdot \cos 45^\circ} = 100 \text{ МПа}. \quad (227)$$

Но если учесть рассеяние ориентировок на  $\bar{\varphi}=15^\circ$ , то возникает поправка на 6 МПа. Тогда  $\sigma_{0,2}=\sigma_{-0,2}=106$  МПа в удовлетворительном согласии с данными для образца 3.

У образца 1, вырезанного вдоль оси  $Ox$ , направлением растяжения является линия  $Ap$ . Поэтому угол  $\varphi'$  между осью и нормалью к плоскости скольжения или двойникования равен  $\varphi' = 90^\circ - \varphi$ , где  $\varphi$  — аналогичный угол для образца 2. Обратим внимание, что растягивающие усилия вдоль  $Ap$  не создают составляющей вдоль направления сдвига  $S$ , поэтому дефор-

магия должна происходить скольжением. Оценка предела текучести будет такой же, как для образца 2 при сжатии:  $\sigma_{0,2} \approx 4 \tau_s^{\text{СК}} = 200$  МПа. Но если образец 1 сжимать, то двойникование станет возможным, и мы получим оценку предела текучести порядка 140 МПа, что приблизительно соответствует реальности.

Эти результаты можно существенно уточнить, если оценки заменить точным расчётом среднего ориентационного фактора

$$\bar{m} = \left\langle \frac{1}{\cos \varphi \cos \lambda} \right\rangle = \int_0^{2\pi} d\lambda \int_0^{\pi} \frac{1}{\cos \varphi \cos \lambda} \rho(\varphi, \lambda) \cos \varphi d\varphi \quad (228)$$

с помощью функций текстурной плотности  $\rho(\varphi, \lambda)$  полюсов плоскостей (0001) и  $\{10\bar{1}2\}$ , что, однако, потребует тщательных текстурных исследований деформированных магниевых сплавов.

Но даже представленный простой анализ позволяет понять и описать природу анизотропии пределов текучести магния и других металлов и сплавов с ГПУ-решёткой.

## 5. ПОНЯТИЕ О ДИСЛОКАЦИЯХ

### 5.1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ПРОЧНОСТЬ НА СДВИГ

Я. И. Френкель выполнил расчёты критического напряжения сдвига в предположении, что сдвиг верхней части кристалла по плоскости происходит одновременно во всех точках плоскости и на одинаковое расстояние, равное межатомному промежутку  $b$ . В этом случае достаточно рассмотреть сдвиг одного атома верхней части, потому что остальные атомы точно повторяют его движение. Если атом  $A$  смещается вправо на небольшое расстояние  $x$ , то на него будет действовать сила  $f_x$ , возвращающая его в исходный узел решётки (и поэтому отрицательная). Далее атом попадает в позицию  $x = b/2$ . Это позиция симметрии относительно атомов нижней, неподвижной части. Очевидно, что в точке  $x = b/2$  сила  $f_x$  обращается в ноль. Поэтому на отрезке  $0 < x < b/2$  график силы имеет минимум. Следующий ноль силы расположен в точке  $x = b$ . Схематичный график силы показан на рис. 68. Он напоминает синусоиду. Френкель приближённо принял

$$f_x = -f_m \sin\left(2\pi \frac{x}{b}\right), \quad (229)$$

где  $f_m$  — максимальная сила. Поскольку точно такая же сила действует на каждый атом сдвигаемой поверхности, то легко рассчитать суммарную силу, действующую на все  $N$  атомов, расположенных на единичной площади.

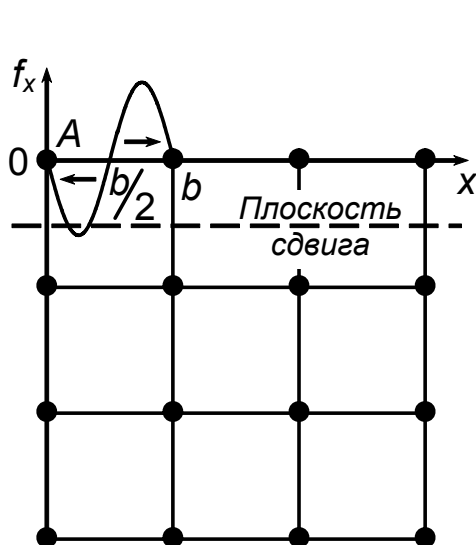


Рис. 68. К расчёту силы, необходимой для сдвига атомов

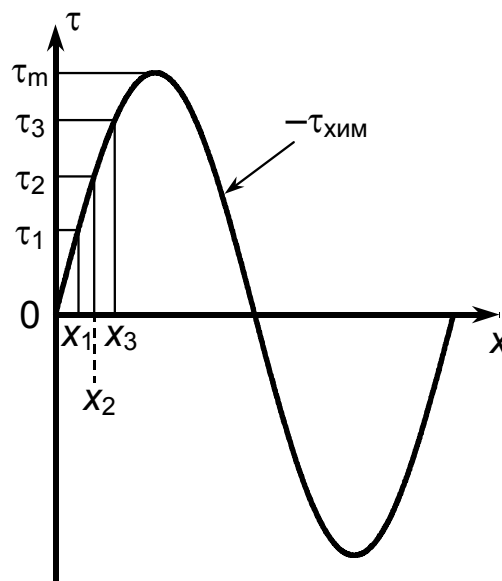


Рис. 69. Графическое представление равновесия внешнего и химического сдвиговых напряжений

Эта сила имеет размерность напряжения; мы будем называть её химическим напряжением:

$$\tau_{\text{хим}} = -\tau_m \sin\left(2\pi \frac{x}{b}\right), \quad (230)$$

где  $\tau_m = Nf_m$  представляет собой амплитуду химического напряжения. Подобное напряжение возникает при любой попытке сдвига атомов; его действие отражает реакцию сил межатомного взаимодействия на подобный сдвиг. Оно заставляет атомы вернуться в исходные позиции либо, если сдвиг больше  $b/2$ , переместиться в следующий узел решётки.

Теперь приложим к образцу усилия, которые будут создавать касательное напряжение  $\tau$ , стимулирующее сдвиг. Внешнее напряжение сдвинет атомы рассматриваемой плоскости на расстояние  $x$  относительно предыдущей. Такой сдвиг вызовет появление химического напряжения противоположного знака. Они уравновесятся, когда, по закону статики, сумма проекций этих сил (напряжений) на ось  $x$  будет равна нулю, то есть

$$\tau + \tau_{\text{хим}} = 0$$

или

$$\tau = \tau_m \sin\left(2\pi \frac{x}{b}\right). \quad (231)$$

Равенство сил (231) рассмотрим подробнее. На рис. 69 приведён график функции  $\tau_m \sin(2\pi x/b)$ . Горизонтальные линии отражают значения внешнего напряжения  $\tau$ . Если  $\tau = \tau_1$ , то атомы сдвинутся на расстояние  $x_1$  и останутся, так как оба напряжения уравновесят друг друга. При  $\tau = \tau_2$  и  $\tau = \tau_3$  сдвиги окажутся большими, но уравнивание всё равно происходит (при  $x = x_2$  и  $x = x_3$ ). Но как только внешнее напряжение превзойдёт  $\tau_m$ , равенство сил станет невозможным. Атомы будут неограниченно двигаться, пока кристалл не разделится на две части подобно колоде карт при сдвиге. Отсюда следует, что напряжение  $\tau_m$  фактически представляет собой критическое напряжение, обозначенное нами ранее как  $\tau_s$ .

Для расчёта  $\tau_s$  Френкель рассмотрел равенство (231) при малых  $x$ , когда уравнивание заведомо происходит:

$$\tau \approx \tau_m \cdot 2\pi \frac{x}{b}. \quad (232)$$

Но при малых сдвигах выполняется закон Гука

$$\tau = G\gamma, \quad (233)$$

где  $G$  — модуль сдвига, а  $\gamma$  — сдвиговая деформация, в нашем случае равная  $x/a$  (рис. 70). Сравнив два эквивалентных выражения (232) и (233), найдём теоретическое сдвиговое напряжение

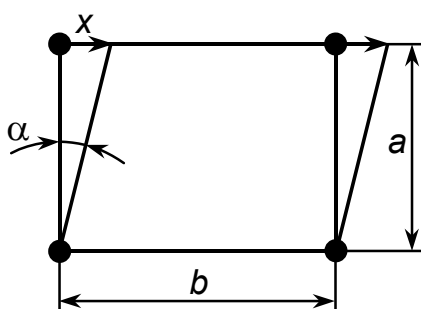


Рис. 70. Сдвиговая деформация  
( $\gamma = \operatorname{tg} \alpha = x/a$ ) в теории Френкеля

$$\tau_s = \frac{G}{2\pi} \cdot \frac{b}{a}, \quad (234)$$

или для кристаллов с простой кубической решёткой

$$\tau_s = \frac{G}{2\pi}. \quad (235)$$

Расчёты по выражению (235) дали значения  $\tau_s$  на несколько порядков больше экспериментальных значений сдвигающего напряжения, полученных на монокристаллах различных металлов (см. табл. 9). Это свидетельствовало о том, что любая плоскость смещается относительно соседней не как единое жёсткое целое — по-видимому, сдвиг зарождается на каких-то участках плоскости скольжения, а затем последовательно распространяется на всю плоскость, и поэтому в каждый данный момент лишь небольшая часть атомов участвует в работе против внешних сил. Механизм такого сдвига объясняет теория дислокаций.

Таблица 9

Теоретические и опытные значения критических сдвиговых напряжений

Металл	Модуль сдвига $G$ , ГПа	Теоретическое сдвиговое напряжение $G/2\pi$ , МПа	Экспериментальное критическое напряжение сдвига, МПа
Al	26,4	4200	0,8
Cu	47,7	7600	0,5
Ag	29,6	4700	0,5
Au	27,8	4400	0,5
Ni	86,2	13700	6
Fe	79,7	12700	22
Nb	37,5	6000	34
Mo	124	19700	73
Mg	17,3	2800	0,5
Ti	43,4	6900	14
Zn	39,6	6300	0,3
Cd	24,2	3900	0,13



## 5.2. КРАЕВАЯ ДИСЛОКАЦИЯ

Пусть на каком-то ограниченном участке плоскости скольжения произошёл сдвиг верхней части кристалла относительно нижней на вектор  $\vec{b}$ , равный межатомному расстоянию. Считается, что вектор сдвига постоянен на всей площади, охваченной сдвигом, но за пределами контура рассматриваемого участка он равен нулю. Поскольку вектор сдвига равен межатомному, то есть трансляционному вектору, то после сдвига на место сдвинутого атома «приходит» другой аналогичный атом, неотличимый от первого. Поэтому сдвиг не может приводить к образованию дефектов на поверхности участка. Нарушение укладки может появиться только на самом контуре, куда сдвиг доставляет новые атомы или откуда уносит их. Следовательно, граница, отделяющая участок сдвига от той части поверхности, на которую он ещё не распространился, представляет собой протяжённое (одномерное) искажение кристаллической решетки, называемое дислокацией. Таким образом, дислокация — это граница незавершённого сдвига.

Произведём в кристалле (вначале для упрощения рассматривается простая кубическая решетка) сдвиг на одно межатомное расстояние на участке  $ABCD$  (рис. 71, а). По определению линия  $AB$  является дислокацией, точнее её осью. Здесь сосредоточены наибольшие искажения. За пределами ядра дислокации, то есть на расстоянии нескольких межатомных расстояний от оси, структуру можно считать идеальной, хотя и упруго искажённой.

Расположение атомов в плоскости, перпендикулярной линии дислокации, показано на рис. 71, б. Как видно, произошло «сгущение»: выше плоскости скольжения получим одну «лишнюю» вертикальную полуплоскость. Край этой атомной полуплоскости (экстраплоскости) и есть краевая дислокация, обозначаемая значком  $\perp$ . Её можно рассматривать как вставленный в решётку «клин» шириной  $b$  (рис. 71, в). В отсутствие внешних напряжений «лишняя» полуплоскость расположена симметрично относительно соседних полных плоскостей. Если на атомы, образующие линию дислокации, и действуют силы со стороны соседних сжатых атомов, то из-за существования плоскости симметрии эти силы уравниваются аналогичными силами, действующими с противоположной стороны. Тем самым обеспечивается механическое равновесие дислокаций. Однако это равновесие может быть нарушено, если к образцу приложить касательные напряжения в направлении вектора сдвига  $\vec{b}$ .

Внутренние напряжения нельзя создать воздействием на свободное тело единственной силой. Нужны две силы, направленные в противоположные стороны, причём их точки приложения не должны совпадать. В частности, для создания касательных напряжений силы должны быть приложены параллельно плоскости, по которой будут действовать касательные напряжения. Они, разумеется, сосредоточены в пространстве между точ-

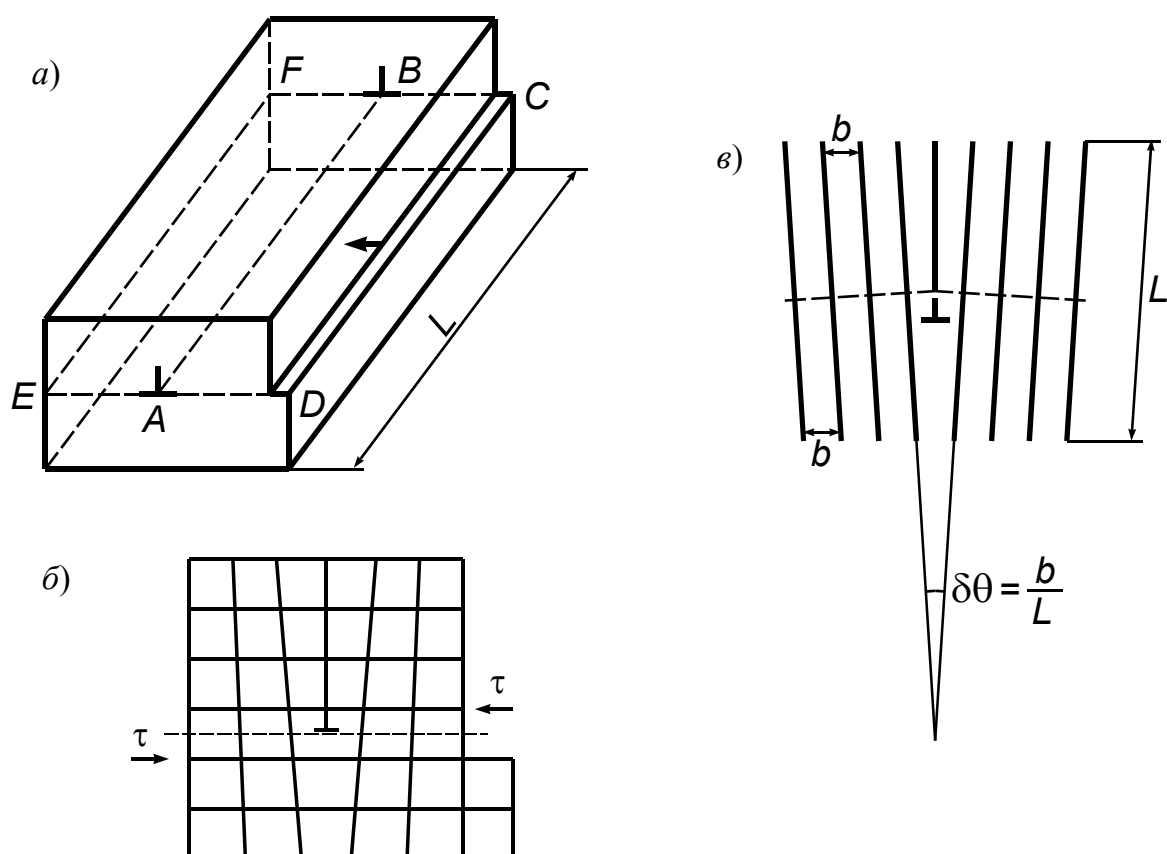


Рис. 71. Краевая дислокация  $AB$ . Плоскость скольжения  $EDCF$ .  
 Сдвиг произошёл на участке  $ABCD$ .  $AB$  — граница незавершённого сдвига.  
 $a$  — край атомной полуплоскости;  $b$  — краевая дислокация;  
 $c$  — поворот кристаллической решетки около дислокации

ками приложения сил. Действие касательных напряжений можно представлять так, что выше плоскости скольжения напряжение действует в одном, а ниже плоскости скольжения — в противоположном направлении (рис. 72).

Соответственно действию напряжений происходит и смещение атомов. В плоскости, где расположена линия дислокации, атомы сдвигаются вправо, в нижерасположенной плоскости — влево. Поэтому край экстраплоскости начинает приближаться к краю нижней половины соседней полной плоскости. Наконец, под действием внешних напряжений экстраплоскость присоединит к себе недостающую часть соседней полной плоскости. Верхняя же часть полной плоскости оказывается оборванной, то есть новая экстраплоскость появляется рядом со старой, и таким образом краевая дислокация сместится на одно межатомное расстояние (рис. 72,  $a$ ). Многократное повторение этого процесса приведёт к тому, что дислокация выйдет из кристалла, и вся верхняя его часть сдвинется относительно нижней на межатомное расстояние (рис. 72,  $b$ ,  $c$ ).

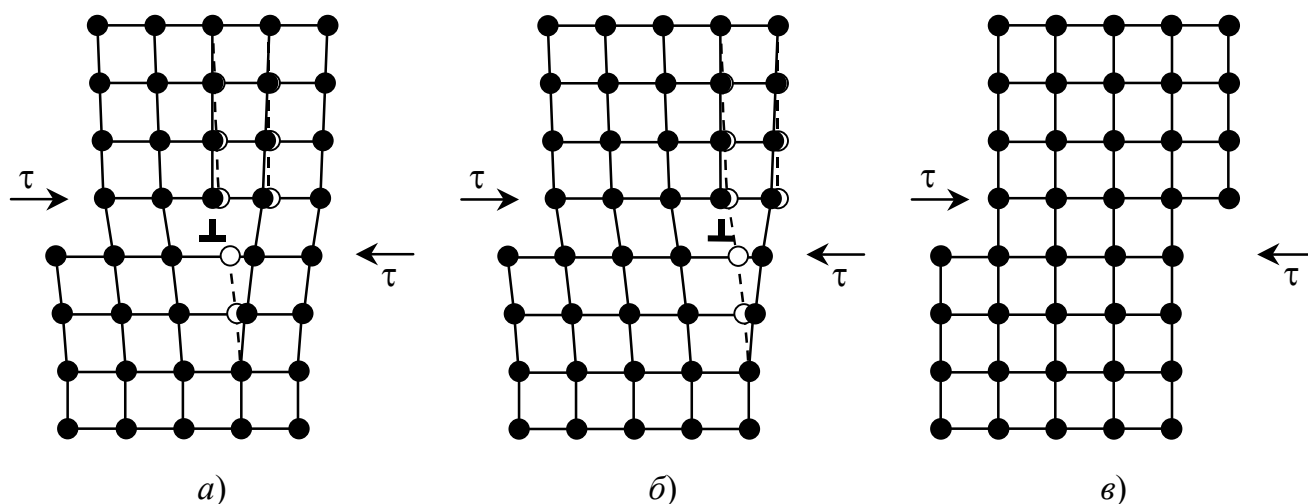


Рис. 72. Движение краевой дислокации. Когда дислокация проходит через весь кристалл, две его части, разделенные плоскостью скольжения, смещаются друг относительно друга на одно межатомное расстояние: *а, б, в*

Теперь рассмотрим ситуацию, когда экстраплоскость расположена снизу (рис. 73). Приложим такие же касательные напряжения, что и на рис. 72. Теперь атомные ряды, расположенные в плоскости 1–1, смещаются под действием касательных напряжений  $\tau$  вправо, а ряды в плоскости 2–2 — влево. Поэтому экстраплоскость присоединяет к себе верхнюю половину соседней левой плоскости, а новая экстраплоскость возникает слева (рис. 73, *а*). Таким образом, краевая дислокация на рис. 73 движется влево, то есть в противоположную сторону по отношению к дислокации на рис. 72.

Допустим, что в одной плоскости скольжения расположены две дислокации: одна (слева) имеет экстраплоскость, расположенную над плоскостью скольжения, а другая (справа) — под плоскостью скольжения. Мы

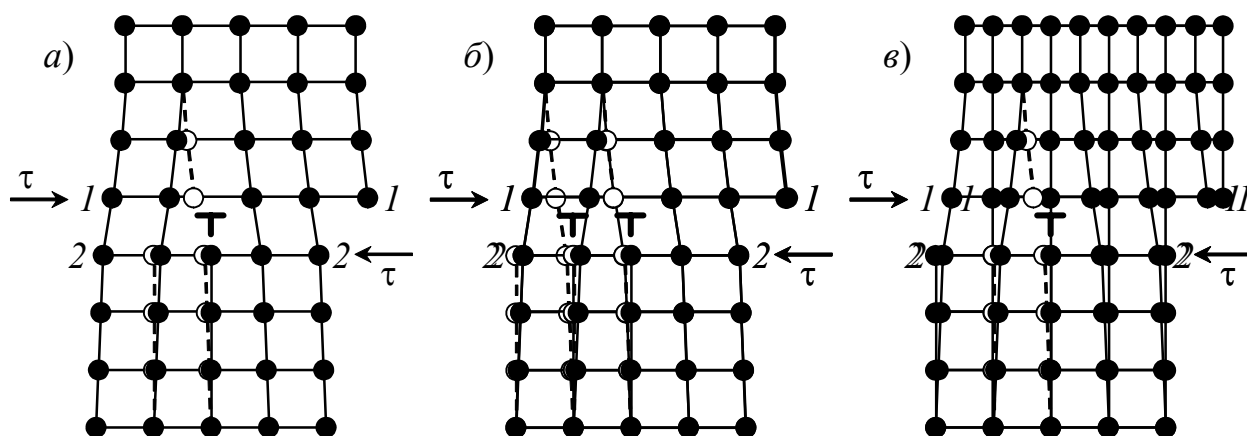


Рис. 73. Движение отрицательной краевой дислокации.  
*а, б, в* — последовательные стадии

уже знаем, что под действием одного и того же касательного напряжения первая дислокация движется вправо, а вторая — влево. В какой-то момент их линии столкнутся, и две половины плоскости соединятся в полную плоскость. Дислокации исчезнут, а энергия искажений вокруг них превратится в тепловую энергию, сосредоточенную вначале вдоль линии столкновения. Затем за счёт теплопроводности эта энергия равномерно распределится по объёму. Ситуация напоминает столкновение электрона и позитрона, происходящее с аннигиляцией частиц:  $e^+ + e^- = 2h\nu$ , где  $2h\nu$  — два кванта световой энергии. Естественно возникает идея обозначить одну дислокацию, — например, левую, — как положительную, а вторую как отрицательную.

Образование краевых дислокаций можно мысленно представить путем «надрезания» кристалла и помещения или удаления из него экстраплоскостей. Вставка дополнительной плоскости приводит и к определенным упругим деформациям. Отметим, что деформации возникают не на стадии вставления дополнительной экстраплоскости, а тогда, когда приходится ниже экстраплоскости сближать до равновесного расстояния  $b$  промежуток между плоскостями, соседствующими с экстраплоскостью (рис. 74). Наибольшие деформации возникают около линии дислокации на расстоянии нескольких межатомных. Эта наиболее искажённая область, окаймляющая линию дислокации, называется ядром дислокации (рис. 74, б). Но возникает деформация и на больших расстояниях. В частности, левая и правая части кристалла и, соответственно, горизонтальные плоскости повернуты навстречу друг другу относительно экстраплоскости вокруг оси, совпадающей с осью дислокации (рис. 71, в), на угол  $\delta\theta$ :

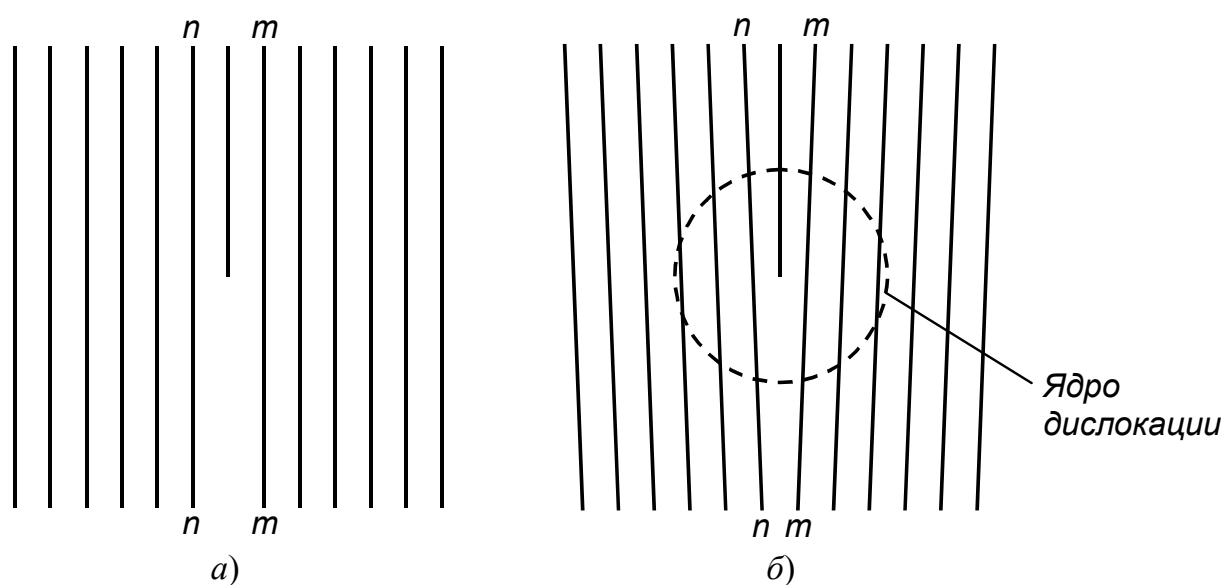


Рис. 74. Образование дислокации путём вставления дополнительной экстраплоскости (а) с последующим сближением плоскостей  $nn$  и  $mm$  (б)

$$\delta\theta = \frac{b}{L}. \quad (236)$$

При анализе движения краевой дислокации следует учитывать возможность изменения вертикального размера (высоты) экстраплоскости. Этот размер остаётся неизменным только в том случае, когда дислокация перемещается в плоскости, проходящей через векторы  $\vec{b}$  и  $\vec{e}_L$ . Отсутствие массопереноса позволяет назвать такое движение консервативным скольжением. Соответственно, плоскость, в которой одновременно лежат линия дислокации и её вектор сдвига представляет собой плоскость скольжения. Скольжение дислокации в этой плоскости происходит довольно легко с помощью механизма перехвата вертикальных плоскостей, уже рассмотренного выше. Тем не менее всегда существует критическое касательное напряжение  $\tau_s$ , ниже которого скольжение невозможно. Величина  $\tau_s$  зависит от характера препятствий, с которыми сталкивается дислокация, или от условий её закрепления. Консервативное движение может происходить с очень большой скоростью, ограниченной сверху скоростью звука.

В том случае, когда кристалл, содержащий краевые дислокации, находится при повышенной температуре, необходимо учитывать возможность взаимодействия дислокаций и вакансий. Допустим, что кристалл был резко охлаждён от высокой температуры и поэтому имеет концентрацию вакансий  $C_V$  более высокую, чем равновесная  $C_V^0$ . Избыток вакансий  $C_V - C_V^0$  постепенно осаждается на границах зерна. Но ещё более предпочтительными стоками оказываются краевые дислокации. Когда вакансии осаждаются на краю экстраплоскости, то возникает как бы выщербина, содержащая две ступеньки (рис. 75). Затем количество осевших вакансий увеличивается; диффундируя вдоль края, они достигают ступенек и вызывают их перемещение. Наконец, весь крайний атомный ряд оказывается растворённым. Дислокация перемещается вверх на одно межатомное расстояние. Последовательное осаждение избыточных вакансий приведёт к непрерывному перемещению дислокации перпендикулярно плоскости скольжения.

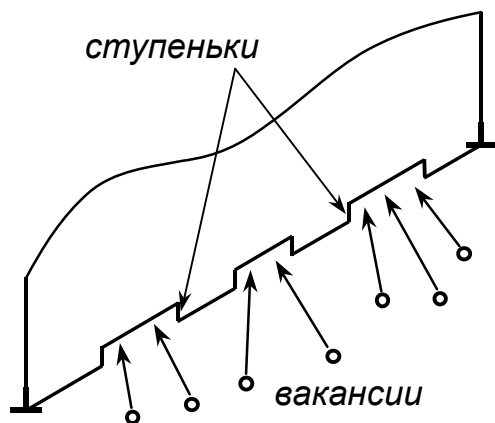


Рис. 75. Осаждение вакансий на краю экстраплоскости

Такое движение называют переползанием или неконсервативным движением. В отсутствие вакансий или при их малой подвижности переползание невозможно. Неконсервативным и перемещение дислокации под некоторым углом к плоскости скольжения, ибо при этом должно происходить уменьшение или увеличение высоты экстраплоскости. Фактически здесь скольжение осуществляется совместно с переползанием, что возможно лишь в кристалле, насыщенном вакансиями, — например, при повышенных температурах.

Отметим, что определение дислокации (по Тейлору) как границы незавершённого сдвига предполагает существование двух геометрических характеристик: линии дислокации и вектора сдвига  $\vec{b}$ . Для краевой дислокации вектор  $\vec{b}$  перпендикулярен её линии. Ориентацию линии проще всего задать единичным вектором  $\vec{e}_L$ , расположенным вдоль линии. Итак, для краевой дислокации  $\vec{b} \perp \vec{e}_L$ . Возможны иные виды дислокаций, для которых угол между  $\vec{b}$  и  $\vec{e}_L$  может иметь произвольное значение, в том числе и нулевое.

### 5.3. ОБРАЗОВАНИЕ КРАЕВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Теоретически понять концепцию дислокаций довольно легко, однако инженер должен точно представлять, почему возникают дислокации в металлах. Причина их образования связана с неравновесностью процесса кристаллизации и, более конкретно, с существованием градиента температур на фронте кристаллизации.

Охлаждение жидкого металла, залитого в форму, обусловлено конвективным теплообменом на внешней поверхности, что приводит к снижению температуры наружных слоёв. В жидкости возникает тепловой поток, текущий из центральной части к поверхности. Поскольку в уравнение теплопроводности

$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \quad (237)$$

входит градиент температуры  $\frac{\partial T}{\partial z}$ , то в отсутствие такого градиента тепловой поток возникнуть не может. Постепенно температура поверхностных слоёв снижается ниже точки плавления, и возникает слой закристаллизованного металла, постепенно расширяющийся к центру. Будем считать, что ось  $z$  направлена по нормали к фронту кристаллизации. Остальные оси  $x$  и  $y$  расположены параллельно фронту (рис. 76).

Температура жидкого и твёрдого металла уменьшается в направлении —  $z$ . Фактически каждый следующий слой имеет более высокую температуру, чем предшествующий. Теперь необходимо учесть тепловое расширение.

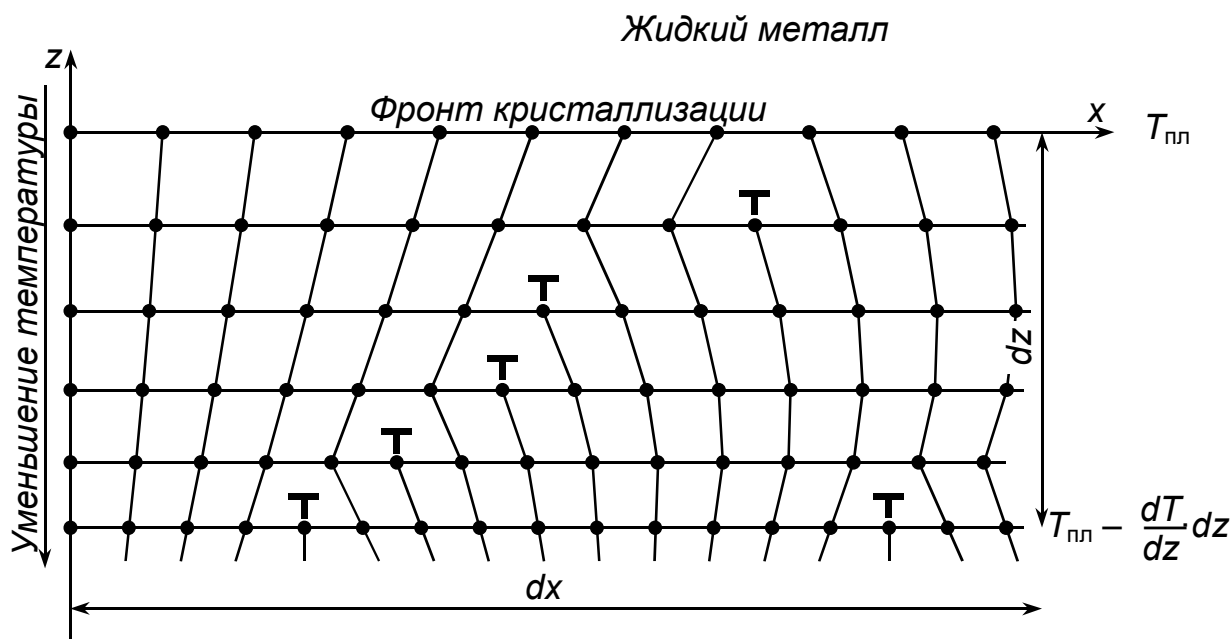


Рис. 76. Схема образования краевых дислокаций в ходе кристаллизации.  
Уменьшение межатомных расстояний обусловлено тепловым сжатием

Благодаря ему каждый следующий слой имеет межатомные промежутки бóльшие, чем у предыдущих (см. рис. 76). Наложить такие сетки без пропусков невозможно. Возникают оборванные вертикальные плоскости. При охлаждении до комнатной температуры искажения плоскостей, видимые на рис. 76, исчезают. Однако обрывы плоскостей устранить невозможно. На рис. 76 линии дислокаций расположены вдоль оси  $y$ , но точно такие же обрывы возникают и у плоскостей  $zx$ . Они дадут вторую систему дислокаций, также параллельных фронту кристаллизации, но расположенных вдоль оси  $y$ .

Рассчитаем количество образовавшихся дислокаций. Выделим участок площадью  $dx \cdot dz$ . Найдём число межатомных промежутков на отрезке  $dx$  вверху:

$$N_1 = \frac{dx}{b_0}, \quad (238)$$

где  $b_0$  — межатомное расстояние при температуре кристаллизации. Аналогичное число промежутков внизу:

$$N_2 = \frac{dx}{b}, \quad (239)$$

где  $b$  — межатомное расстояние для слоя, расположенного на  $dz$  ниже фронта кристаллизации, причем по закону теплового расширения

$$b = b_0 \left( 1 - \alpha \cdot \frac{\partial T}{\partial z} dz \right). \quad (240)$$

Число образовавшихся дислокаций  $dN_d$  равно разности чисел промежутков на верхней и нижней границе площадки:

$$dN_d = \frac{dx}{b_0} \left( 1 - \frac{1}{1 - \alpha(\partial T / \partial z) dz} \right) \approx \frac{dx \cdot dz}{b_0} \alpha \frac{\partial T}{\partial z}. \quad (241)$$

Обозначим через  $\rho$  плотность дислокаций и определим её как число дислокационных линий, пересекающих площадку единичной площади ( $1 \text{ см}^2$  или  $1 \text{ м}^2$ ). В рассматриваемом случае

$$\rho = \frac{dN_d}{dx \cdot dz} = \frac{\alpha}{b_0} \frac{\partial T}{\partial z}; \quad (242)$$

таким образом, плотность образовавшихся дислокаций определяется градиентом температуры на фронте кристаллизации и коэффициентом теплового расширения.

Для железа  $\alpha = 12 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$ ,  $b = 2,5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ . Градиент температуры зависит, безусловно, от массы отливки, материала литейной формы и условий охлаждения. Примем типичное значение  $500 \text{ К/см}$ . Получим тогда оценку плотности дислокаций в отливках  $\rho \approx 2,4 \cdot 10^5 \text{ см}^{-2}$ .

При кристаллизации твёрдых растворов существует ещё один механизм рождения дислокаций, обусловленный неодинаковым химическим составом последовательно наслаивающихся атомных плоскостей. Обычно растворение примесей приводит к изменению параметра решётки, поэтому складывается примерно такая же ситуация, что и при учёте теплового расширения. Градиент температуры в (242) следует заменить на градиент концентрации  $\frac{\partial c}{\partial z}$ , а коэффициент теплового расширения  $\alpha$  на коэффициент

концентрационного расширения  $\beta = \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial c}$ , где  $a$  — параметр решётки.

Уравнение (242), если в нём положить  $\frac{\partial T}{\partial z} = 0$ , на первый взгляд, открывает перед инженерами возможность получения бездислокационных кристаллов, которые должны обладать теоретической прочностью на сдвиг. Их предел текучести должен иметь величину порядка  $2 \frac{G}{2\pi} = \frac{G}{\pi}$ , для железа это  $27000 \text{ МПа}$ , что в тысячи раз больше, чем у технически чистого железа, и в десять раз выше, чем у наиболее высокопрочной, протянутой в холодную проволоки из стали У8.

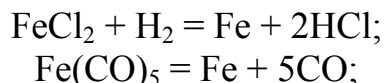
Однако провести кристаллизацию при нулевом градиенте температур физически нельзя — это потребует бесконечно большого времени кристаллизации. Простое уменьшение величины градиента не даёт желаемого результата. Появление в кристалле  $10 \dots 100$  дислокаций уже приводит к снижению предела текучести на три порядка по сравнению с бездислока-



ционным состоянием. Дальнейшее увеличение числа дислокаций, напротив, даёт слабый рост предела текучести, поскольку дислокации мешают движению друг друга. Ясно, что получить бездислокационные кристаллы при обычной металлургической технологии: расплавление, создание расплава с данным химическим составом и кристаллизация не удаётся. Возникает и более общий вопрос: существуют ли бездислокационные кристаллы в принципе?

Металлические усы. Многие природные минералы могут кристаллизоваться не только в виде крупных огранённых кристаллов, но и в виде тонких игл или волокон; для ряда минералов (например, асбеста) такая форма даже является наиболее типичной. Известны и природные нитевидные кристаллы металлов (олова, меди, серебра, золота). Такие кристаллы в форме тончайших нитей диаметром несколько микрон могут возникать и на поверхностях технических изделий, покрытых слоем олова, цинка и др. Нитевидные кристаллы называют также металлическими усами. В 1952 г. была впервые измерена прочность оловянных усов, оказавшаяся близкой к теоретической прочности олова. После этого методам выращивания нитевидных кристаллов, исследованию их структуры и свойств, а также техническому применению стали уделять значительное внимание.

В лабораторных и промышленных условиях усы обычно получают путём разложения галогенидов или карбониллов металлов при температурах 600...800°C по реакциям типа



если в реактор поместить специально подготовленную металлическую подложку, то на ней вырастут усы металла диаметром от 1 до 10 мкм и длиной до 0,1...10 мм и более. Сходным образом получают и неметаллические усы — кремния, сапфира, графита и др. Механизм роста усов выяснен не до конца. Присоединение атомов к кончику растущего кристалла происходит либо прямо из газовой фазы, либо через посредство небольшой капельки жидкости, а иногда и более сложным путём. Рост происходит обычно в две стадии: вначале быстро образуется тонкий кристалл, который затем постепенно утолщается за счёт присоединения атомов к его боковой поверхности.

Причина исключительно высокой прочности усов (см. табл. 10) заключается в том, что они совершенно не содержат дислокаций. Впрочем, это относится лишь к самым тонким нитевидным кристаллам, диаметр которых составляет около 1 мкм. Когда нитевидный кристалл начинает расти в толщину, в нём появляются дислокации — в усах диаметром около 5 мкм их может содержаться от нескольких десятков до нескольких сотен. Из-за этого прочность усов начинает быстро снижаться (обратно пропорционально их диаметру), приближаясь к прочности обычных макроскопических образцов — см. рис. 77. Иногда в центре нитевидного кристалла имеется одна винтовая дислокация (по-видимому, обеспечивающая его рост; см. раздел 5.7).

## Прочность нитевидных кристаллов и волокон

Материал	$\sigma_B (\sigma_{\max}), \text{ МПа}$	$\sigma_B/E (\sigma_{\max}/E)$
Нитевидные кристаллы (усы):		
железа	13400	0,065
меди	3600	0,028
олова	1250	0,025
графита	24500	0,035
$\text{Al}_2\text{O}_3$	27400	0,056
Композиты, армированные усами:		
серебро (матрица)	200	0,002
серебро + 7% усов $\text{Al}_2\text{O}_3$	400	—
серебро + 31% усов $\text{Al}_2\text{O}_3$	1100	—
Неорганические волокна:		
углеродные	1000...4500	0,004...0,018
SiC на вольфрамовой подложке	3150...3700	0,007...0,009
SiC на подложке из углеродного волокна	3500...4500	0,008...0,010
SiC без подложки	2500...3500	0,013...0,018

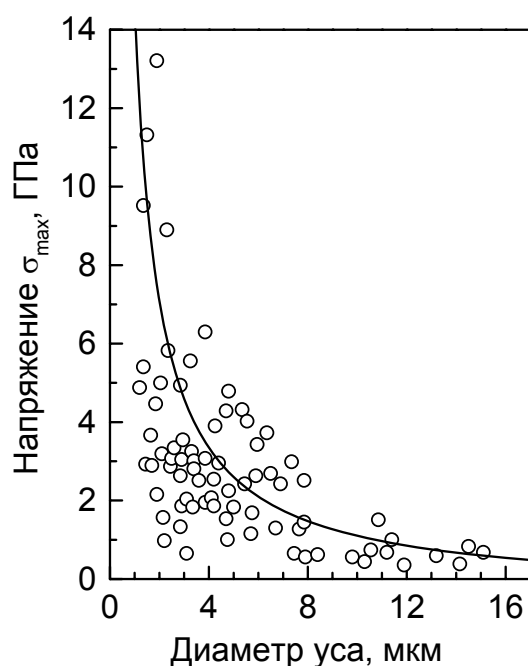
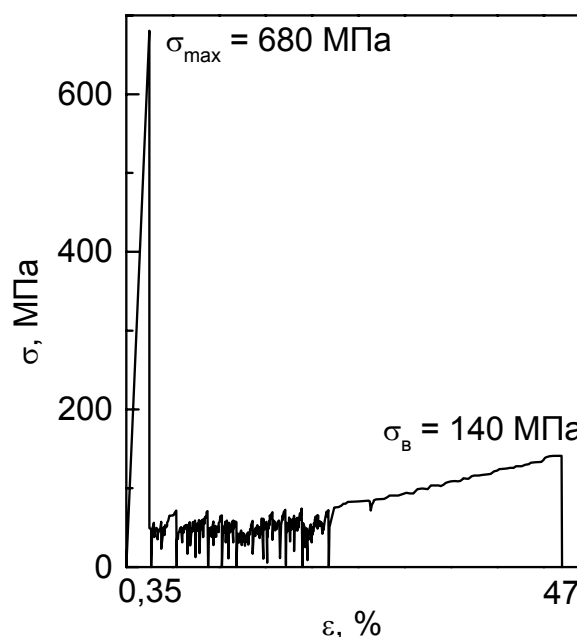


Рис. 77. Зависимость прочности железных усов от их диаметра

Рис. 78. Диаграмма растяжения нитевидного кристалла меди. При напряжении  $\sigma_{\max}$  зарождаются дислокации и начинается пластическая деформация. Скачки на кривой связаны с зарождением отдельных линий скольжения. Разрушение происходит после образования шейки при напряжении  $\sigma_B$

Усы железа обычно разрушаются хрупко после упругой деформации до 5%. Усы же большинства остальных металлов разрушаются вязко: после достижения максимального напряжения  $\sigma_{\max}$  начинается зарождение и движение дислокаций, и в дальнейшем протекает пластическая деформация, заканчивающаяся образованием шейки и разрушением при напряжении  $\sigma_{\text{в}} \ll \sigma_{\max}$  (рис. 78). Поэтому прочность усов определяется не пределом прочности  $\sigma_{\text{в}}$ , а высотой «зуба текучести»  $\sigma_{\max}$  (см. рис. 78). Зарождение дислокаций (или трещин при хрупком разрушении) происходит на различного рода дефектах поверхности кристалла (например, ступеньках роста), служащих концентраторами напряжений.

Несмотря на исключительно высокую прочность усов, непосредственно использовать их довольно трудно из-за малых размеров. Их применяют, например, в тензодатчиках и других точных приборах. Гораздо чаще усы используют в качестве армирующего компонента композиционных материалов. Это позволяет получать композиции с очень высокой прочностью при комнатной и повышенных температурах (см. табл. 10).

Высокой прочностью обладают и другие волокна — углерода, бора, карбида кремния и т.п. (табл. 10). Как правило, эти волокна не являются монокристаллическими. Например, углеродные волокна получают путём термического разложения органических полимерных волокон при температурах 1000...3000 °С. Их структура состоит из отдельных фибрилл диаметром 2...10 нм (при диаметре самого волокна 6...10 мкм), образованных группами плоских лент, в которых атомы углерода уложены, как в базисной плоскости графита. Между фибриллами имеются поры, объёмная доля которых может достигать 30%. Волокна бора, карбида кремния, оксида алюминия, получаемые методом химического осаждения из газовой фазы на подложке (вольфрамовом или углеродном волокне) и имеющие диаметр 100...200 мкм, состоят из отдельных зёрен размером от нескольких нанометров до нескольких микрон. Эти волокна также применяют в основном для армирования композиционных материалов.

#### **5.4. КОНТУР И ВЕКТОР БЮРГЕРСА ДЛЯ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ**

Определение дислокации как границы незавершённого сдвига создаёт впечатление, что дислокации могут возникать только вследствие сдвига. Мы уже видели, что это не так. Бюргерс дал иное, более общее определение дислокации, на основе которого может быть построена теория полей напряжений и деформаций около дислокации.

Проведём вокруг дефекта, но вдали от него по узлам решетки хорошего неискаженного материала замкнутый контур произвольной формы — контур Бюргерса (рис. 79, а). Перенесём этот контур в идеальный кристалл, не

содержащий дефекта структуры. Если дефект структуры является дислокацией, то контур обязательно окажется незамкнутым. Для того, чтобы ликвидировать невязку в контуре, то есть замкнуть его, надо провести отрезок, который и называется вектором Бюргерса  $\vec{b}$  (рис. 79, б). Следовательно, дислокацию можно определить не только как границу незавершенного сдвига, но и как одномерный дефект, для которого контур Бюргерса в идеальной решётке разомкнут.

Вектор Бюргерса показывает величину и направление сдвига, вызванного движением дислокации. Вектор сдвига идентичен вектору Бюргерса, однако надо учитывать, что не всегда образование дислокации обусловлено сдвигом.

Если контур Бюргерса обойти в обратном направлении, то и направление  $\vec{b}$  изменится на обратное. Поэтому принято знак  $\vec{b}$ , который всегда соединяет конечную точку контура с начальной (при произвольно выбранном положительном направлении линии дислокации), определять, обходя контур Бюргерса по правилу правого винта. Если принять положительное направление линии дислокации  $AB$  идущим вдоль оси на нас, то обход контура следует производить против часовой стрелки (рис. 79). Вектор Бюргерса — весьма важная количественная характеристика дислокации. Он определяет энергию дислокации, является мерой создаваемых ею упругих искажений, служит параметром подвижности дислокации.

Из представления о дислокации как границе незавершённого сдвига следует, что вектор Бюргерса постоянен по всей длине дислокации, а линия дислокации не может обрываться внутри кристалла — она либо замыкается на себя, либо сходится с другими дислокациями.

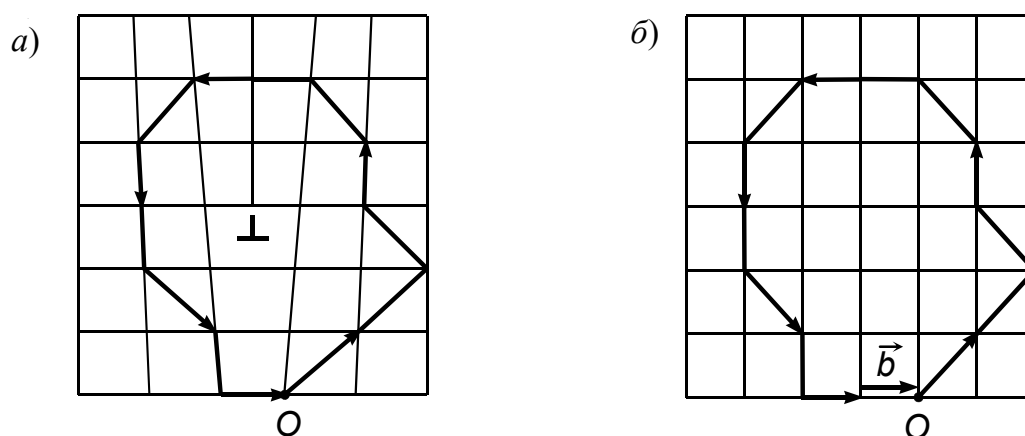


Рис. 79. Определение вектора Бюргерса краевой дислокации.

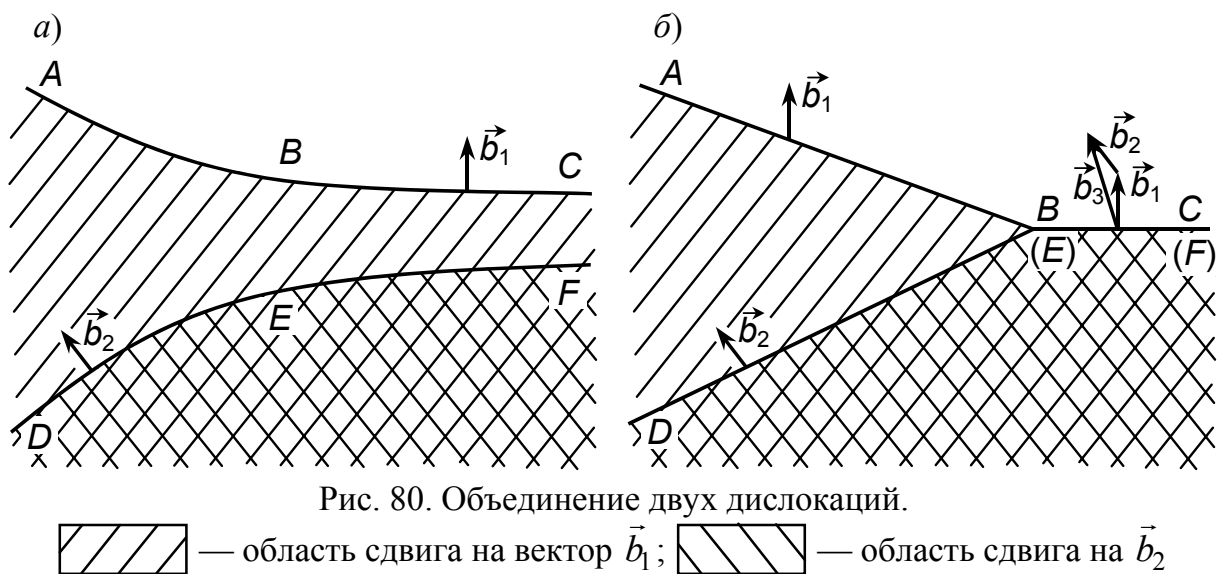
Контур Бюргерса, замкнутый в дефектном кристалле (а), оказывается разомкнутым в идеальном кристалле (б). Вектор Бюргерса замыкает этот контур

Рассмотрим ситуацию неполного объединения двух дислокаций (рис. 80). Проведём в плоскости рисунка незавершённый сдвиг на вектор  $\vec{b}_1$ . Граница сдвига обозначена через  $ABC$ . Напомним, что вектор сдвига постоянен по всей области сдвига и, конечно, вдоль линии дислокации  $ABC$ . Затем проведём ещё один сдвиг на вектор  $\vec{b}_2$ ; его граница  $DEF$  передвигается и, наконец, на участке  $EF$  сливается с границей  $BC$  первого сдвига. Векторы Бюргерса  $\vec{b}_1$  и  $\vec{b}_2$  складываются, поэтому дислокация  $BC$  имеет суммарный вектор Бюргерса  $\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$ , тогда как несоединившиеся участки  $AB$  и  $DB$  имеют вектора Бюргерса  $\vec{b}_1$  и  $\vec{b}_2$  соответственно. Точка  $B$ , в которой фактически соединяются три дислокации, называется дислокационным узлом, а равенство  $\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$  — правилом дислокационного узла. При его выводе мы считали, что положительное направление для дислокаций выбрано от  $C$  к  $B$  и далее к  $A$  или к  $D$ . Но если мы изменим положительное направление для дислокации  $BC$  на противоположное, то, как мы знаем, изменится на противоположный и знак вектора  $\vec{b}_3$ . Получается, что положительные направления линий всех трёх дислокаций исходят от узла  $B$ . При этом условии мы получим

$$\vec{b}_1 + \vec{b}_2 + \vec{b}_3 = 0, \quad (243)$$

то есть сумма векторов Бюргерса для любого узла дислокационных линий равна нулю. Формула (243) применима для дислокаций любого типа.

Ориентация вектора Бюргерса к линии дислокации определяет тип дислокации или её отдельного участка (если она не прямолинейна).



## 5.5. ВИНТОВАЯ ДИСЛОКАЦИЯ И ЕЁ ВЕКТОР БЮРГЕРСА

Мысленно надрежем кристалл с торца и произведём сдвиг верхнего участка влево (рис. 81). Сдвиг произошел по поверхности  $ABCD$ , и граница незавершённого сдвига  $AB$  представляет собой винтовую дислокацию. По мере распространения деформации на всю плоскость скольжения линия винтовой дислокации  $AB$  будет перемещаться к заднему торцу кристалла и выйдет из него. При этом верхняя часть кристалла по отношению к нижней его части сместится вправо на одно межатомное расстояние (рис. 81).

Как видим, результат аналогичен тому, что наблюдалось при движении краевой дислокации (рис. 71, б), однако для этого пришлось расположить линии краевой и винтовой дислокаций взаимно перпендикулярно. Эта аналогия проявляется также и в том, что касательное напряжение, движущее краевую дислокацию, нормально к её линии, а для винтовой дислокации оно параллельно линии дислокации. Следовательно, один и тот же сдвиг при заданном напряжении можно альтернативно осуществить либо винтовой, либо краевой дислокацией, при этом их линии должны быть взаимно перпендикулярными.

Вид сверху на две атомные плоскости, одна из которых расположена выше, а другая ниже геометрической плоскости сдвига  $DEFC$ , даёт представление о расположении атомов вокруг винтовой дислокации (рис. 82). Важно обратить внимание на то, что в области ядра положение атомов в атомных рядах, обозначенных ●, не совпадает с позициями ○ атомов, расположенных ниже. Следовательно, в области ядра находятся атомы, ещё не завершившие сдвиг и поэтому находящиеся в неустойчивом положении. Если вдоль линии  $BA$  приложить касательное напряжение, то оно будет помогать атомам закончить сдвиг. Атом  $1$ , например, встанет над  $2$  и закончит сдвиг, атом  $1'$  приблизится к  $2'$ , но зато атом  $1''$  отодвинется влево и повторит исходное положение  $1'$ . Затем атом  $1'$  встанет над  $2'$  и завершит сдвиг. Атомы  $1''$  и  $2''$  раздвинутся ещё сильнее, то есть атом  $1''$  будет приближаться к следующему узлу. Но в движение будут вовлечены атомы следующего ряда и т.д. При этом линия дислокации, то есть граница сдвига, перемещается параллельно самой себе вверх на рис. 82. Фактически, главную роль в скольжении винтовой, а в общем случае дислокации любого типа, играют не завершившие сдвиг атомы, которые расположены в ядре, а их стремление перейти в устойчивое состояние с минимумом потенциальной энергии приводит к движению дислокации. Атомы, входящие в ядро, постоянно обновляются, но принцип движения дислокации остаётся неизменным.

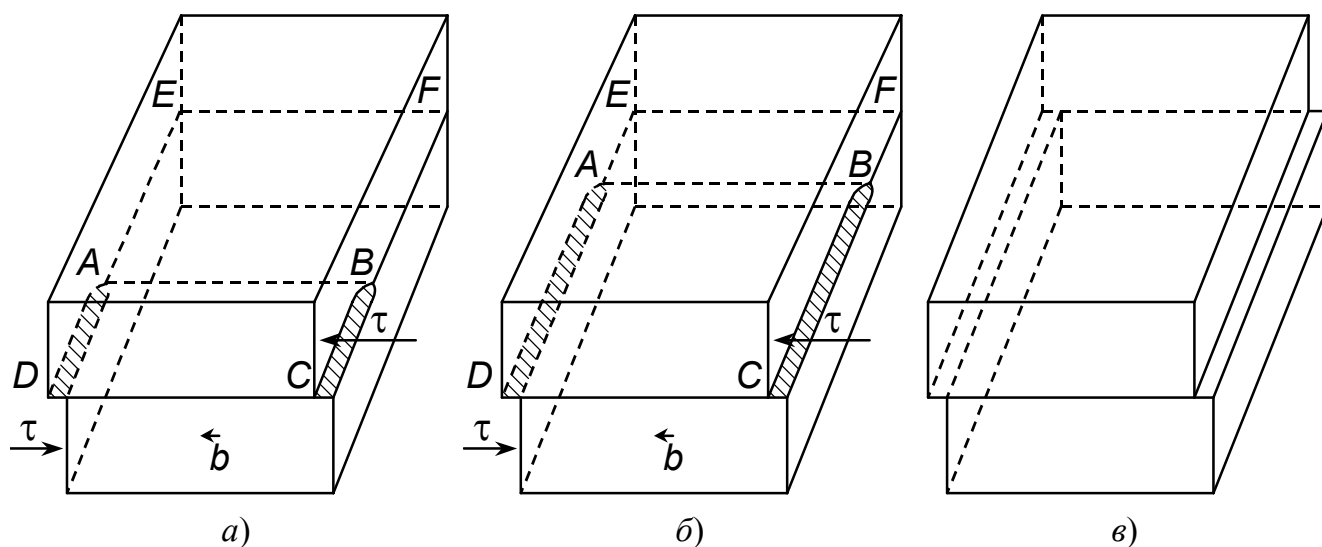


Рис. 81. Движение винтовой дислокации  $AB$ :  $a, б, в$  — стадии движения. Линия дислокации смещается в направлении, перпендикулярном вектору сдвига

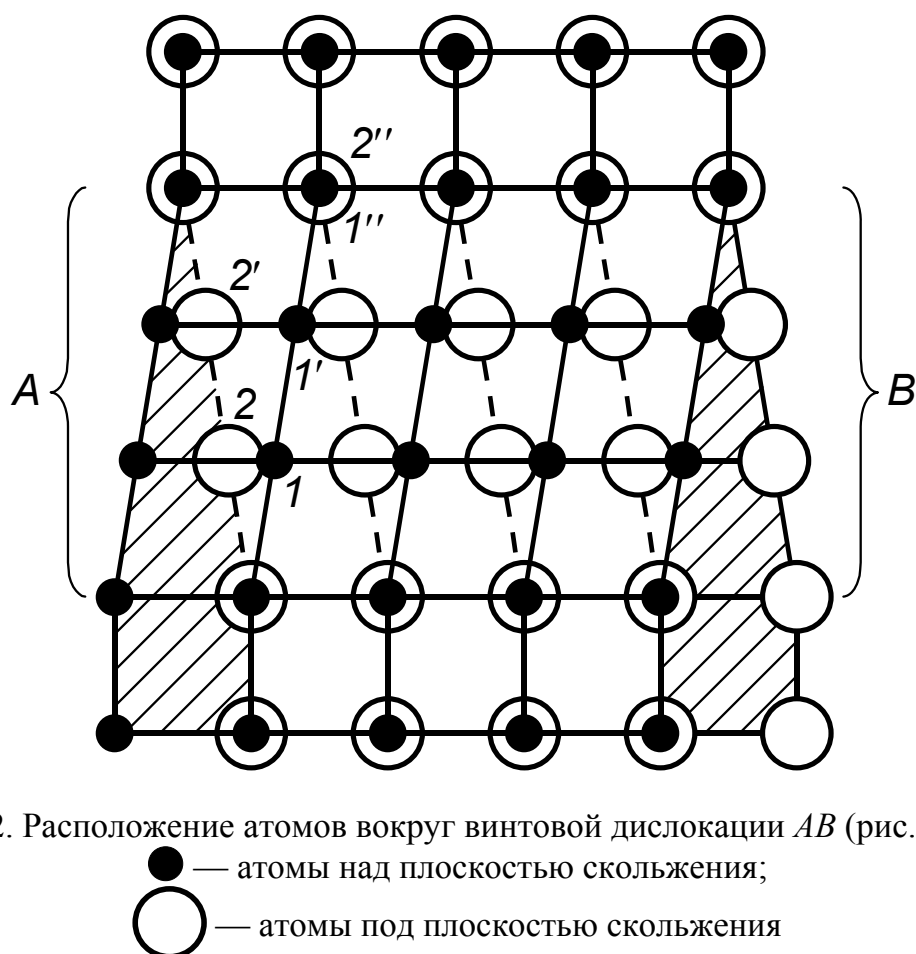


Рис. 82. Расположение атомов вокруг винтовой дислокации  $AB$  (рис. 81,  $a$ ).

● — атомы над плоскостью скольжения;  
○ — атомы под плоскостью скольжения

Из рис. 83 видно, что кристалл, содержащий винтовую дислокацию, можно представить как бы состоящим из одной атомной плоскости, закрученной в виде винтовой лестницы — поэтому такая дислокация и названа винтовой. Зададим положительное направление линии дислокации от  $B$  к  $A$  и будем обходить ее по замкнутому контуру, пользуясь правилом правого винта (рис. 83,  $a$ ). Построенный в идеальном материале контур Бюргера будет начинаться в точке  $C$  и заканчиваться в  $C'$ , то есть окажется разомкнутым (рис. 83,  $b$ ). Его замыкающий вектор — вектор Бюргера — параллелен линии дислокации. По ориентации вектора  $b$  относительно линии (параллелен или антипараллелен) различают положительные и отрицательные винтовые дислокации. Если сдвиг проводить в одном направлении, то положительная и отрицательная дислокации движутся в противоположных направлениях и, встречаясь, аннигилируют (рис. 84). Для того, чтобы понять направление перемещения дислокаций на рис. 84,  $a$ , следует обратить внимание на движение не завершивших сдвиг атомов вблизи ядра и на то, какие атомы будут затем вовлечены в движение.

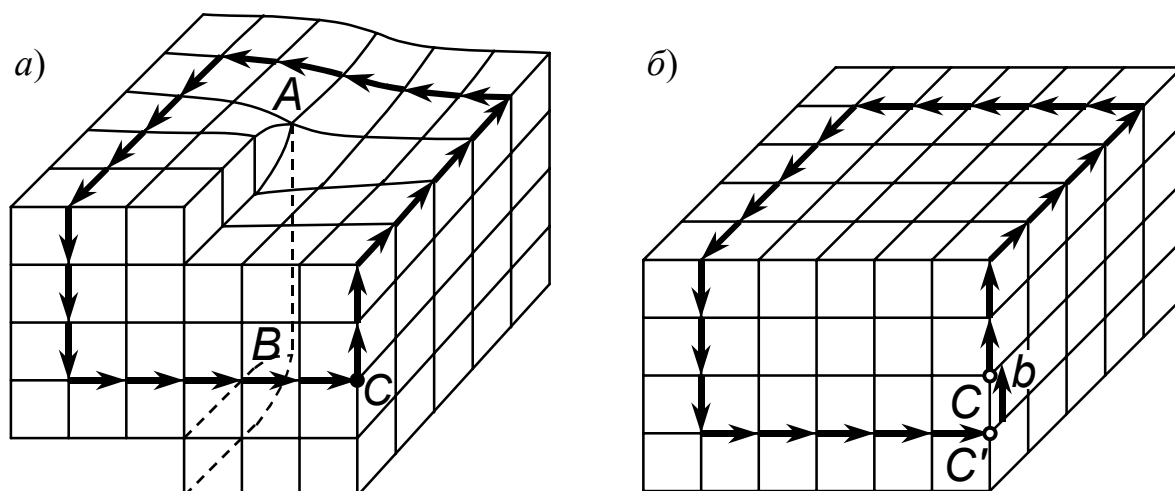


Рис. 83. Контур Бюргера около винтовой дислокации

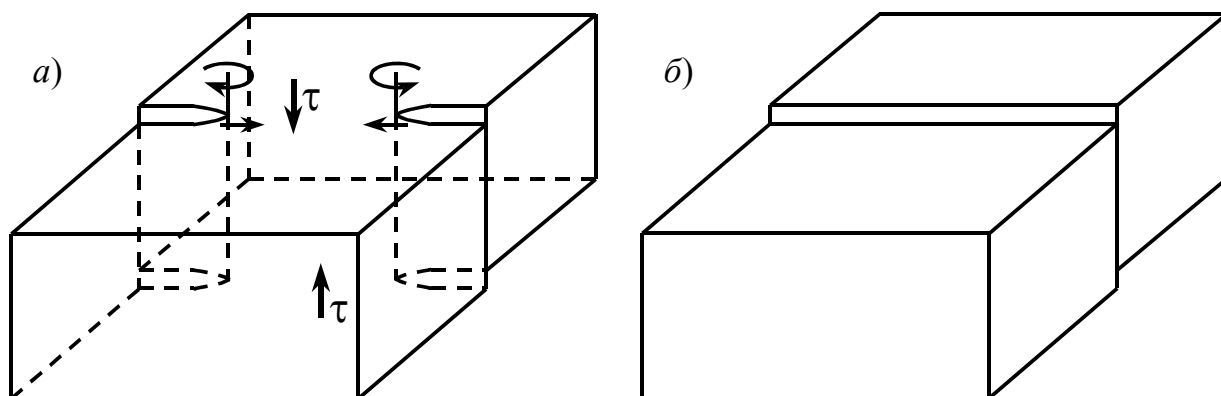


Рис. 84. Аннигиляция винтовых дислокаций противоположных знаков



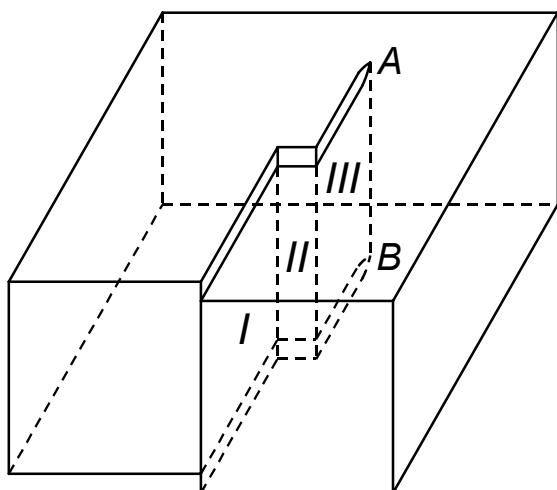


Рис. 85. Поперечное (двойное) скольжение винтовой дислокации  $AB$

Очевидно, можно провести бесконечное множество плоскостей, в которых будет лежать и линия, и вектор Бюргерса винтовой дислокации. Это означает, что, в отличие от краевой, винтовая дислокация не закреплена за определённой плоскостью скольжения. Так, винтовая дислокация, двигаясь по плоскости  $I$  и встретив на своём пути препятствие, может перейти в плоскость  $II$  и затем в плоскость  $III$ , параллельную плоскости  $I$  (рис. 85). Такой процесс получил название поперечного скольжения. В данном случае поперечное скольжение было двойным, но оно может быть и множественным. Неконсервативное же движение винтовой дислокации невозможно, так как она не связана с атомной полуплоскостью.

## 5.6. СМЕШАННАЯ КРИВОЛИНЕЙНАЯ ДИСЛОКАЦИЯ

Смешанными дислокациями называются такие, у которых вектор Бюргерса которых не перпендикулярен и не параллелен линии дислокации, а образует с ней произвольный угол. Пусть граница незавершённого сдвига  $AB$  будет криволинейной (рис. 86). Вектор Бюргерса (он же вектор сдвига) постоянен по всей длине дислокации и около точки  $A$  он параллелен, а около точки  $B$  перпендикулярен линии дислокации. Следовательно, участок дислокации около точки  $A$  имеет винтовую, а около  $B$  — краевую ориентацию. По всей остальной дислокационной линии вектор Бюргерса располагается под некоторым углом, поэтому дислокация является смешанной. Её всегда можно разложить на компоненты с чисто винтовыми и краевыми ориентациями (рис. 86, б). В результате движения смешанной дислокации  $AB$  сдвиг произойдёт по всей плоскости скольжения, и верхняя часть кристалла сместится относительно нижней на одно межатомное расстояние. Допустим, что сдвиговое напряжение приложено вдоль  $\vec{b}$ . Напряжение — это сила, действующая на единицу площади. Как и всякий

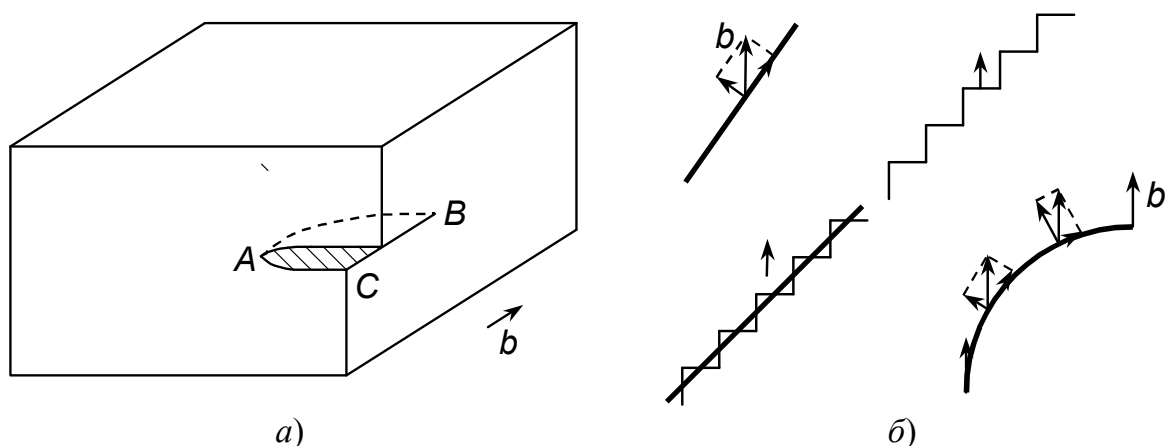


Рис. 86. Образование смешанной дислокации  $AB$  (а) и её разложение на краевые и винтовые компоненты (б)

вектор, полную силу можно разложить на две составляющие: параллельную  $\vec{b}_{\text{кр}}$  и параллельную  $\vec{b}_v$ . Напряжение вдоль  $\vec{b}_{\text{кр}}$  заставляет рассматриваемый участок краевой ориентации перемещаться вдоль  $\vec{b}_{\text{кр}}$ . Напряжение вдоль  $\vec{b}_v$ , как мы знаем, вынуждает винтовую дислокацию перемещаться в направлении, перпендикулярном к её линии. Следовательно, оба движения совместимы, то есть смешанная дислокация движется перпендикулярно своей линии под действием напряжения, ориентированного вдоль  $\vec{b}$ .

Аналогичная картина будет при движении дислокации, замыкающейся на себя — дислокационной петли (см. рис. 87). Образование петли можно представить следующим образом. Выделим на плоскости скольжения прямоугольник  $ABCD$ . В принципе, форма петли не имеет никакого значения, но проще всего рассмотреть движение именно для прямоугольника. На него опирается сверху прямоугольная колонна атомов. Сдвинем эту колонну на вектор  $\vec{b}$  по плоскости скольжения. Незавершённый сдвиг ограничен периметром прямоугольника. Следовательно,  $ABCD$  есть граница сдвига, то есть дислокация, состоящая из четырёх отрезков. Два из них,  $AB$  и  $CD$ , представляют краевые дислокации, так как их линии перпендикулярны к вектору сдвига. Два других являются винтовыми дислокациями. Несложно понять, что дислокации  $AB$  и  $DC$ , а также  $CB$  и  $AD$  имеют разные знаки. Действительно, будем мысленно сближать отрезки  $AB$  и  $DC$  до совпадения. Очевидно, что площадь, охваченная сдвигом, стремится к нулю, поэтому исчезает и граница сдвига. Следовательно, дислокации  $AB$  и  $CD$  аннигилируют, то есть они имели разные знаки. В этом можно убедиться и иначе. При сдвиге колонны на межатомное расстояние над линией  $AB$  возникает оборванная полуплоскость, тогда как над  $DC$  — лишняя полуплоскость (точнее, участок полуплоскости). Ясно, что  $DC$  — это положительная, а  $AB$  — отрицательная дислокация.

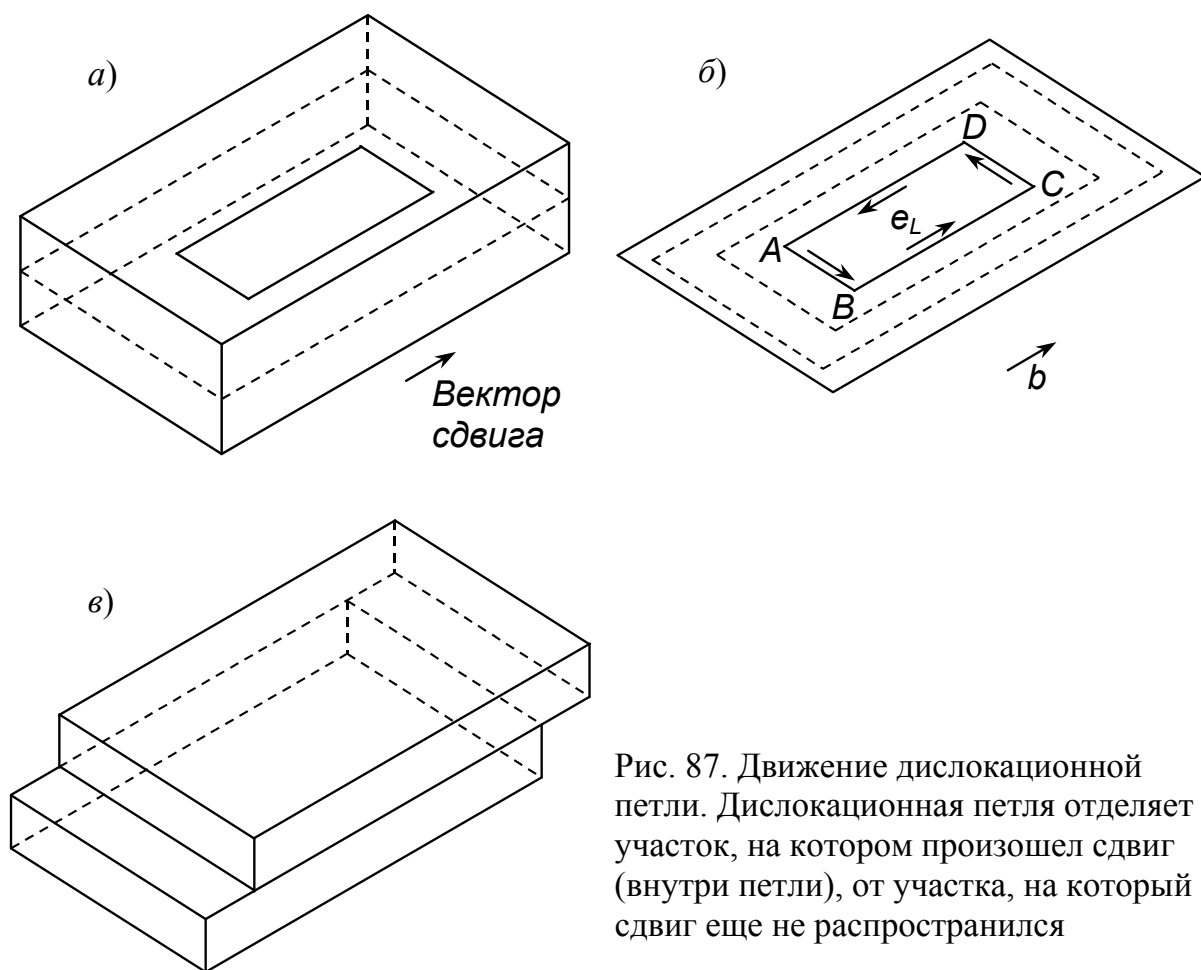


Рис. 87. Движение дислокационной петли. Дислокационная петля отделяет участок, на котором произошел сдвиг (внутри петли), от участка, на который сдвиг еще не распространился

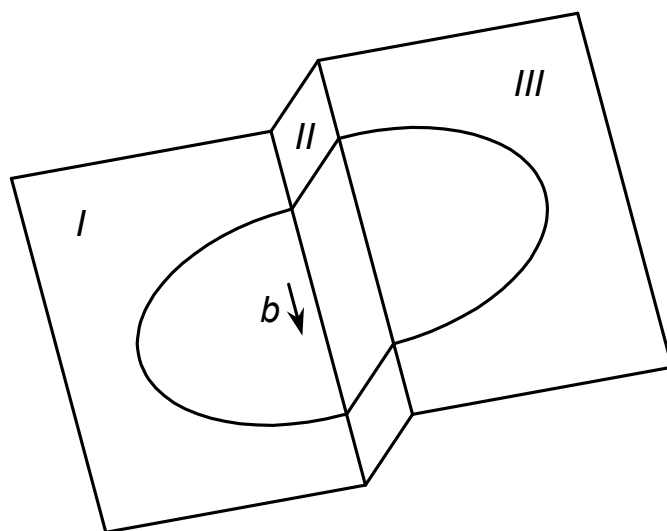
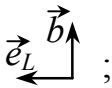
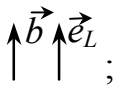


Рис. 88. Поперечное скольжение дислокационной петли

Если кристалл на рис. 81, *a* повернуть на  $90^\circ$  влево, то приведённая там дислокация, которую мы считаем положительной винтовой, окажется эквивалентной *CB*. Дислокация *AD* имеет отрицательный знак, так как породивший её сдвиг проведён справа от линии, а не слева, как у *CB* или *AB* на рис. 81. Будем обходить контур в направлении против часовой стрелки и рассмотрим ориентировку вектора  $\vec{b}$  и вектора обхода  $\vec{e}_L$ . Для отрица-

тельной краевой дислокации *AB*  ;

для положительной краевой *DC*  ;

для положительной винтовой *BC*  ;

для отрицательной винтовой *AD*  .

Эти правила можно успешно применить для определения знаков векторов  $\vec{b}$ , но строгим способом является построение контуров Бюргерса для каждого участка, причём положительное направление линии должно быть таким же, как на рисунке.

Теперь приложим касательное напряжение вдоль вектора  $\vec{b}$  над плоскостью сдвига. Такое напряжение, как мы знаем, заставляет двигаться положительную краевую дислокацию *DC* в направлении  $\vec{b}$ , положительную винтовую *CB* влево, а отрицательные дислокации *AB* и *AD* — в противоположных направлениях. Следовательно, дислокационная петля будет расширяться, как показано на рис. 87, *б*, и, наконец, выйдет на поверхность кристалла, вызвав смещение всей его верхней части относительно нижней на вектор  $\vec{b}$  (рис. 87, *в*).

Участок петли с винтовой дислокацией, встретив на своем пути препятствие, может переходить в другую дозволенную для этого скольжения плоскость, а из нее в следующую плоскость, параллельную первой (рис. 88).

Иная ситуация будет наблюдаться, если изменить направление касательного напряжения. Движение всех дислокаций будет проходить в обратных направлениях, и в итоге петля сомкнётся и исчезнет, так как сталкивающиеся дислокации аннигилируют. Забегая вперёд, заметим, что для процесса стягивания петли внешние напряжения, строго говоря, не нужны, поскольку положительная и отрицательная дислокации каждого типа притягиваются друг к другу благодаря упругим напряжениям, которые они создают сами.

## 5.7. ВИНТОВЫЕ ДИСЛОКАЦИИ И КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ

В разделе 5.3 отмечалось, что при кристаллизации из-за наличия градиента температур на фронте неизбежно возникает система краевых дислокаций. Винтовые дислокации также играют важную роль в процессе кристаллизации.

Известно, что рост кристалла происходит путём присоединения к его внешней поверхности отдельных атомов из жидкости или пара. Однако теоретические оценки показывают, что скорость присоединения атомов в позиции типа 1 (рис. 89, *a*), что необходимо для зарождения каждого следующего атомного слоя, намного меньше реально наблюдаемых скоростей кристаллизации. В 1949 г. Франк предположил, что это несоответствие объясняется тем, что в действительности на поверхности кристаллов имеются незарастающие ступеньки на месте выхода винтовых дислокаций.

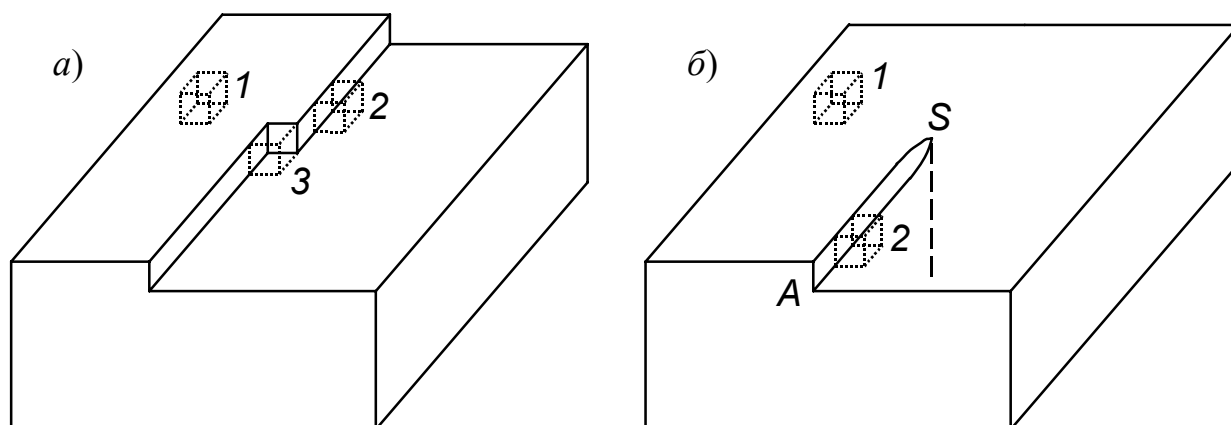


Рис. 89. Присоединение атомов к поверхности растущего кристалла: *a* — бездефектного; *б* — содержащего винтовую дислокацию *S*

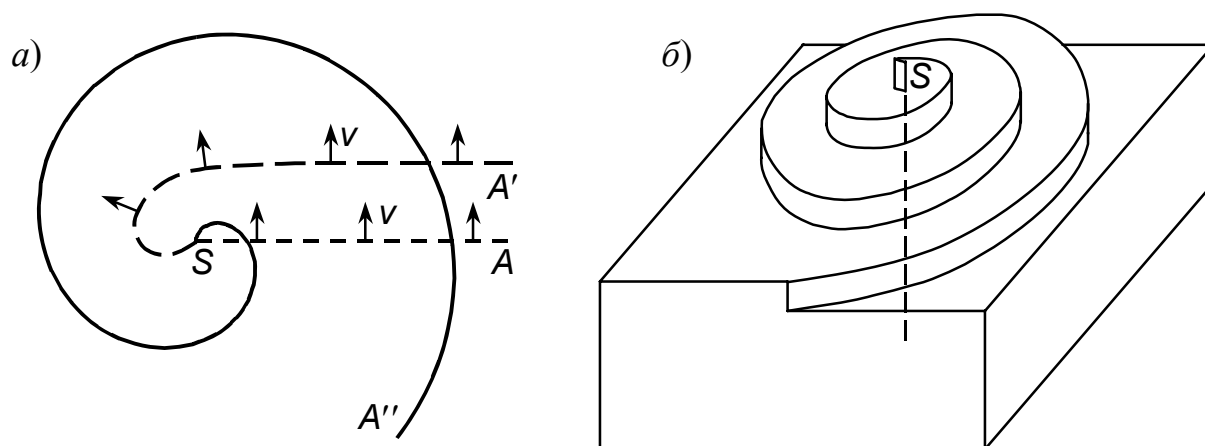


Рис. 90. Образование спирали роста при перемещении атомной ступеньки около винтовой дислокации *S*: *a* — последовательные стадии; *б* — спираль роста

Присоединение атомов в позиции 2 (рис. 89, б) вызывает лишь перемещение ступеньки и постепенное увеличение высоты кристалла, но никогда не устранил ступеньку.

Если в начальный момент времени ступенька винтовой дислокации  $SA$  была прямой, то в результате присоединения к ней атомов она начнёт смещаться вперёд по всей длине с некоторой постоянной скоростью  $v$  (рис. 90, а). Однако сама точка выхода дислокации  $S$  при этом остаётся неподвижной, поэтому ступенька начнёт закручиваться вокруг этой точки, занимая последовательно положения  $SA'$ ,  $SA''$  и т.д. и образуя на поверхности спираль. Такие спирали роста (рис. 90, б) очень часто наблюдаются на поверхности как природных, так и искусственно выращенных кристаллов. Вопрос о происхождении винтовых дислокаций, образующих спирали роста, окончательно не решён.

## 5.8. СИЛЫ, ДЕЙСТВУЮЩИЕ НА ДИСЛОКАЦИЮ

Выше уже была рассмотрена причина, по которой внешние напряжения могут вызывать движение дислокаций: они заставляют атомы в ядре дислокации завершить смещение на вектор  $\vec{b}$ , но тем самым приводят к смещению соседей, а те — своих соседей, и т.д., что вызывает непрерывное перемещение дислокационной линии. Отсюда следует, что движущее напряжение должно быть сдвиговым и направленным вдоль  $\vec{b}$ , или хотя бы иметь ненулевую компоненту вдоль  $\vec{b}$ . Дислокации в таком случае будут перемещаться параллельно своей исходной линии. Механическое движение обычно происходит под действием сил. Поэтому мы вправе считать, что внешние напряжения могут создавать силу на дислокацию.

Рассмотрим краевую дислокацию  $AB$ , на которую действует касательное напряжение  $\tau_{xy}$ , где  $x$  — направление действия напряжения, а  $y$  — направление переместилась на расстояние  $\Delta x$  в положение  $A'B'$ . Тогда на участке  $ABB'A'$  малая площадка, по которой оно действует (рис. 91). Пусть дислокация

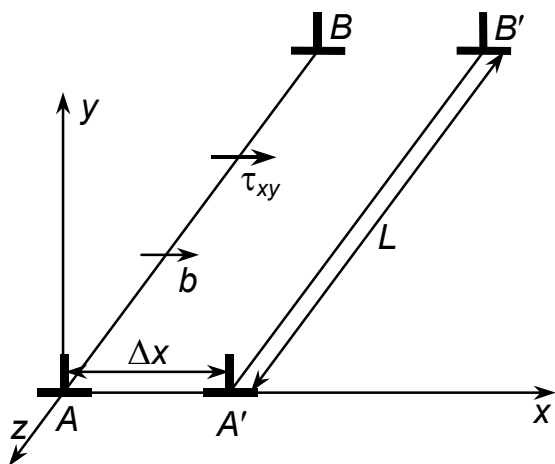


Рис. 91. Перемещение краевой дислокации  $AB$  под воздействием касательного напряжения

площадью  $L \cdot \Delta x$  пройдёт дополнительный сдвиг верхней части кристалла относительно нижней на вектор  $\vec{b}$ . На этот же вектор переместится точка приложения усилия  $L \cdot \Delta x \cdot \tau_{xy}$ , действующего по этой площади. При этом источник напряжения совершит работу

$$\Delta A = L \Delta x \tau_{xy} \cdot b, \quad (244)$$

где  $b$  — перемещение точки приложения усилия. Эту же работу можно рассчитать иначе. Обозначим через  $f_x$  силу, действующую на единицу длины дислокации в плоскости приложения напряжения  $\tau_{xy}$ . Полная сила на всю линию равна  $f_x \cdot L$ , а путь дислокации  $\Delta x$ . Поэтому можно записать иное выражение для работы:

$$\Delta A = f_x L \cdot \Delta x. \quad (245)$$

Приравняв эти выражения, найдём формулу

$$f_x = \tau_{xy} \cdot b \quad (246)$$

для силы, вызывающей скольжение дислокации. Аналогичное соотношение получается и для винтовой дислокации, лежащей вдоль оси  $Oz$ :

$$f_x = \tau_{zy} \cdot b. \quad (247)$$

В принципе, силу вызывает любое касательное напряжение, направленное вдоль оси  $z$ , причём она будет действовать перпендикулярно линии дислокации в плоскости приложения напряжения.

Как известно, краевая дислокация способна к переползанию при участии вакансий. Здесь необходимо различать три возможные ситуации:

а) кристалл пересыщен вакансиями, а внешние механические напряжения отсутствуют;

б) вакансии находятся в равновесии с решёткой, но действуют внешние напряжения;

в) вакансии неравновесны, и действуют внешние напряжения.

Рассмотрим эти варианты переползания дислокаций.

Допустим, что доля вакантных узлов  $\frac{n_v}{N}$  или концентрация вакансий

$C_v = \frac{1}{\Omega_0} \cdot \frac{n_v}{N}$  в месте расположения дислокации превышает равновесные

значения  $\frac{n_v^*}{N}$  и  $C_v = \frac{1}{\Omega_0} \cdot \frac{n_v^*}{N}$  для данной температуры. С позиции термоди-

намики это означает, что изменение свободной энергии образца при образовании  $n_v$  вакансий

$$\Delta F = n_v \varepsilon_v - kT (N \ln N - (N - n_v) \ln (N - n_v) - n_v \ln n_v) \quad (248)$$

перешло через минимум, соответствующий равновесию (см. раздел 3.3). Для перехода к равновесию число вакансий должно уменьшиться. Предпо-

ложим, что оно изменилось на  $\delta n_V$ ; свободная энергия при этом получит приращение  $\delta F$ . Рассчитаем дифференциалы:

$$\delta(n_V \ln n_V) = \delta n_V (\ln n_V + 1); \quad (249a)$$

$$\delta((N - n_V) \ln(N - n_V)) = \delta n_V (-\ln(N - n_V) - 1); \quad (249б)$$

и найдём

$$\delta F = \delta n_V (\varepsilon_V + kT (\ln n_V - \ln(N - n_V))). \quad (250)$$

Это изменение свободной энергии равно нулю при равновесии, поэтому последнее выражение можно записать иначе:

$$\delta F = \delta n_V \cdot kT \left( \ln \frac{n_V}{n_V^*} - \ln \frac{N - n_V}{N - n_V^*} \right). \quad (251)$$

Отметим, что второе слагаемое в скобках много меньше первого.

В бесконечном кристалле само по себе переползание дислокации не может изменить величину свободной энергии всей системы. Уменьшение  $\Delta F$  происходит только потому, что вакансии, осаждаясь на дислокации, уходят из кристалла. Чтобы дислокация переползла вверх на расстояние  $\delta h$ , на единице её длины должно осесть количество вакансий

$$\delta n_V = -\frac{\delta h \cdot b}{\Omega_0}. \quad (252)$$

Поскольку  $-\delta F$  равно работе, совершаемой системой, то отношение  $-\delta F/\delta h$  представляет собой термодинамическую силу

$$f_{п,1} = -\frac{\delta F}{\delta h} = \frac{\delta F}{\delta n_V} \cdot \frac{b}{\Omega_0} = \frac{b}{\Omega_0} \cdot kT \ln \frac{n_V}{n_V^*}, \quad (253)$$

стимулирующую переползание. Она, конечно, исчезает, если вакансии находятся в равновесии с решёткой ( $n_V = n_V^*$ ). Если количество вакансий меньше равновесного, то сила меняет знак на противоположный; положительная дислокация переползает вниз, увеличивая свою экстраплоскость, а высвобождающиеся вакансии переходят в кристалл.

Помимо этой осмотической силы, переползание дислокаций может быть вызвано механическим напряжением. Краевая дислокация создаёт вокруг себя взаимный поворот вертикальных плоскостей в среднем на угол  $\delta\theta = b/L$ , как если бы в решётку был вставлен клин (рис. 71) с углом  $\delta\theta$ . Приложим сжимающие усилия перпендикулярно экстраплоскости  $P_{сж} = \sigma_{xx} L^2$ , где  $\sigma_{xx}$  — нормальные к экстраплоскости напряжения. В такой ситуации, как известно из механики, возникает выталкивающая клин сила, равная  $-P_{сж} \sin \delta\theta \approx -\sigma_{xx} bL$ . По аналогии сила, выталкивающая дислокацию (в расчёте на единицу длины)

$$f_{п,2} = -\sigma_{xx} b. \quad (254)$$



Теперь легко учесть действие обоих факторов — пересыщения вакансиями и напряжений. Сложив выражения (253) и (254), получим выражение для полной силы переползания краевой дислокации:

$$f_{\Pi} = -\sigma_{xx}b + \frac{b}{\Omega_0} kT \ln \frac{n_v}{n_v^*}. \quad (255)$$

Сила обращается в ноль, когда доля вакансий достигнет значения

$$\frac{n_v}{N} = \frac{n_v^*}{N} \cdot \exp\left(\frac{\sigma_{xx}\Omega_0}{kT}\right), \quad (256)$$

фактически являющегося равновесным в условиях сжимающего напряжения.

Любопытный эффект изменения формы наблюдается для смешанной дислокации в кристалле, пересыщенном вакансиями. Смешанную дислокацию всегда можно разложить на краевую и винтовую компоненты, как показано на рис. 92, *а*. Участок *AB* представляет собой элемент краевой дислокации; на него опирается экстраплоскость. Вакансии осаждаются на экстраплоскости (рис. 92, *б*) и растворяют её (рис. 92, *в–д*). Нужно учитывать, что на самом деле точки *A* и *B*, в которых участок краевой ориентации присоединяется к участку винтовой ориентации, не закреплены. Точка *B* смещается вдоль линии дислокации. Поэтому дислокация превращается в спираль — геликоид (рис. 92). Такой же эффект может проявляться и для винтовых дислокаций, содержащих ступеньки (см. ниже).

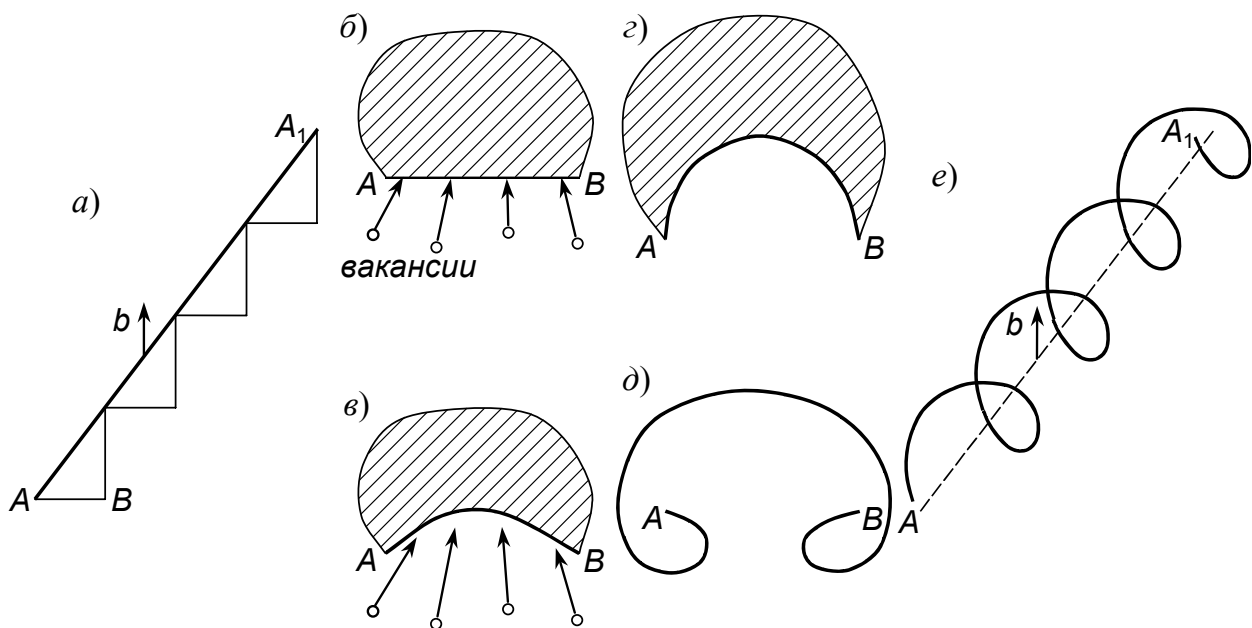


Рис. 92. Образование геликоидальной дислокации при осаждении вакансий на смешанной дислокации (объяснения см. в тексте)

Дополнение. Общее выражение для силы на дислокацию, которая находится в поле напряжения  $\sigma_{kl}$ , дали Пич и Келер:

$$f_i = -e_{ijk} e_{L,j} \sigma_{kl} b_l, \quad (257)$$

где  $e_j$  — проекция на координатную ось  $x_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) единичного вектора направления  $\vec{e}_L$  линии дислокации;  $\sigma_{kl}$  — компонента тензора напряжения;  $b_l$  — проекция вектора Бюргерса на ось  $x_l$ ;  $e_{ijk}$  — антисимметричный тензор Леви-Чивитта:

$$e_{ijk} = \vec{t}_i \cdot [\vec{t}_j \times \vec{t}_k], \quad (258)$$

где  $\vec{t}_i$  — орт направления оси  $x_i$ . Смешанное векторно-скалярное произведение ортов обладает очевидными свойствами:

$$e_{123} = e_{312} = e_{231} = 1; \quad (259a)$$

$$e_{132} = e_{213} = e_{321} = -1, \quad (259б)$$

а если любые два индекса совпадают, то

$$e_{iik} = e_{kii} = e_{iki} = 0. \quad (259в)$$

В выражении (257) предполагается независимое суммирование по трём повторяющимся индексам  $j, k, l$ . Применим формулу (257) к простому случаю краевой дислокации, расположенной вдоль оси  $Oz$ , вектор Бюргерса которой ориентирован вдоль оси  $Ox$  (рис. 91). Из условия задачи следует:  $e_1=0$ ;  $e_2=0$ ;  $e_3=1$ ;  $b_1=b$ ;  $b_2=0$ ;  $b_3=0$ . Тогда

$$f_i = -e_{i3k} e_3 \sigma_{kl} b_l. \quad (260)$$

В приведённом выражении сохранился только один из трёх индексов суммирования  $k$ ; проведём суммирование по нему:

$$f_i = -e_{i31} \sigma_{11} b - e_{i32} \sigma_{21} b - e_{i33} \sigma_{31} b. \quad (261)$$

Третье слагаемое в правой части равно нулю, поскольку  $e_{i33} = 0$ . Запишем все проекции вектора силы  $\vec{f}$  на краевую дислокацию:

$$\begin{aligned} f_1 &= -e_{131} \sigma_{11} b - e_{132} \sigma_{21} b = \sigma_{21} b; \\ f_2 &= -e_{231} \sigma_{11} b - e_{232} \sigma_{21} b = -\sigma_{11} b; \\ f_3 &= -e_{331} \sigma_{11} b - e_{332} \sigma_{21} b = 0. \end{aligned} \quad (262)$$

Мы получили уже знакомые выражения: сила, вызывающая скольжение краевой дислокации,  $f_1 = f_x = \sigma_{21} b = \tau_{xy} b$ , а сила, стимулирующая её перемещение,  $f_2 = f_y = -\sigma_{xx} b$ .

Аналогичный расчёт для винтовой дислокации, расположенной вдоль оси  $Oz$ , даёт результат:

$$\begin{aligned} f_1 &= \sigma_{23} b = \tau_{zy} b; \\ f_2 &= -\sigma_{13} b = -\tau_{zx} b; \\ f_3 &= 0, \end{aligned} \quad (263)$$

причём обе компоненты  $f_1$  и  $f_2$  являются силами, вызывающими скольжение, поскольку скольжение винтовой дислокации теоретически может реа-

лизироваться в любой плоскости, проходящей через её линию, хотя, безусловно, кристаллография ограничивает число возможных плоскостей скольжения. Переползать же винтовая дислокация не может, на что указывает и равенство  $f_3 = 0$ .

## 5.9. ЯДРО ДИСЛОКАЦИИ

Ядром называется область кристалла радиусом  $(3...4)b$ , которая непосредственно окружает геометрическую линию дислокации и в которой сдвиг «сходит на нет». Положения атомов в ядре дислокации существенно отклоняются от узлов кристаллической решётки, поскольку область ядра зажата между двумя макроскопическими участками с правильным расположением атомов: до сдвига и после сдвига на трансляционный вектор. Линейная теория упругости для точек ядра малоприменима. Анализ равновесия атомов в ядре следует проводить в рамках теории решётки, задавая потенциальную энергию взаимодействия между атомами и смещая их до достижения минимума. Подобные расчёты, хотя они и возможны при современных компьютерных мощностях, осложнены необходимостью учёта совместного поведения большого коллектива атомов. Поэтому рассмотрим сначала анализ ядра методом Пайерлса (1940 г.), развитым позднее Набарро (1947 г.), а уже затем результаты современных исследований.

Пусть имеются два одинаковых кристалла  $A$  и  $B$ , ограниченных горизонтальными плоскостями. Вертикальные плоскости также идентичны и расположены на расстоянии  $b$  одна от другой. Сместим кристаллы так, чтобы плоскость  $O$  кристалла  $A$  располагалась симметрично относительно плоскостей  $I$  и  $I$  кристалла  $B$  (рис. 93, а), а затем сблизим плоскости  $A$  и  $B$  до обычного в кристалле расстояния. Атомы начнут взаимодействовать, плоскости  $I$  и  $I$  кристалла  $A$  соединятся с плоскостями  $I$  и  $I$  кристалла  $B$ . То же произойдёт и с другими плоскостями, но плоскость  $O$  останется оборванной (рис. 93, б). Очевидно, что при объединении вертикальных плоскостей с одинаковыми номерами должно происходить горизонтальное перемещение соответствующих атомных рядов в плоскостях  $A$  и  $B$ . Поэтому обозначим через  $\varphi$  расстояние вдоль оси  $x$  между  $n$ -ным атомом (точнее, атомным рядом) плоскости  $B$  и  $n$ -ным атомом плоскости  $A$ . Перед соединением в кристалл

$$\varphi^0(x) = \begin{cases} b/2 & \text{при } x > 0; \\ -b/2 & \text{при } x < 0. \end{cases} \quad (264)$$

После соединения кристаллов с образованием дислокации произойдёт дополнительное смещение атомов  $A$  и  $B$  навстречу друг другу, обусловленное их химическим взаимодействием. Будем считать, что смещения  $u(x)$  таких атомов равны и противоположны. Тогда после образования дислокации

$$\varphi(x) = \begin{cases} 2u(x) + b/2 & \text{при } x > 0; \\ 2u(x) - b/2 & \text{при } x < 0. \end{cases} \quad (265)$$

На концах плоскости скольжения решётка должна быть «правильной», и  $\varphi(x)|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0$ . Это означает, что  $u(+\infty) = -u(-\infty) = -b/4$ . Схематично вид графика  $U(x)$  показан на рис. 94. Точный вид функции  $u(x)$  зависит от характера сопряжения кристаллов. Для её определения Пайерлс предположил, что:

1) материал в зоне сопряжения можно рассматривать как упруго-изотропную среду с модулем сдвига  $G$  и коэффициентом Пуассона  $\nu$ ;

2) напряжение сдвига между плоскостями  $A$  и  $B$  является синусоидальной функцией сдвига  $\varphi(x)$  с периодом  $b$ :

$$\tau_{xy} = \frac{Gb}{2\pi a} \sin \frac{2\pi\varphi}{b} = \frac{Gb}{2\pi a} \sin \frac{4\pi u}{b}. \quad (266)$$

Для малых  $\varphi$  эта зависимость сводится к закону Гука:

$$\tau_{xy} = G \frac{\varphi}{a}. \quad (267)$$

Здесь параметр  $a$  есть расстояние между соседними плоскостями  $A$  и  $B$ .

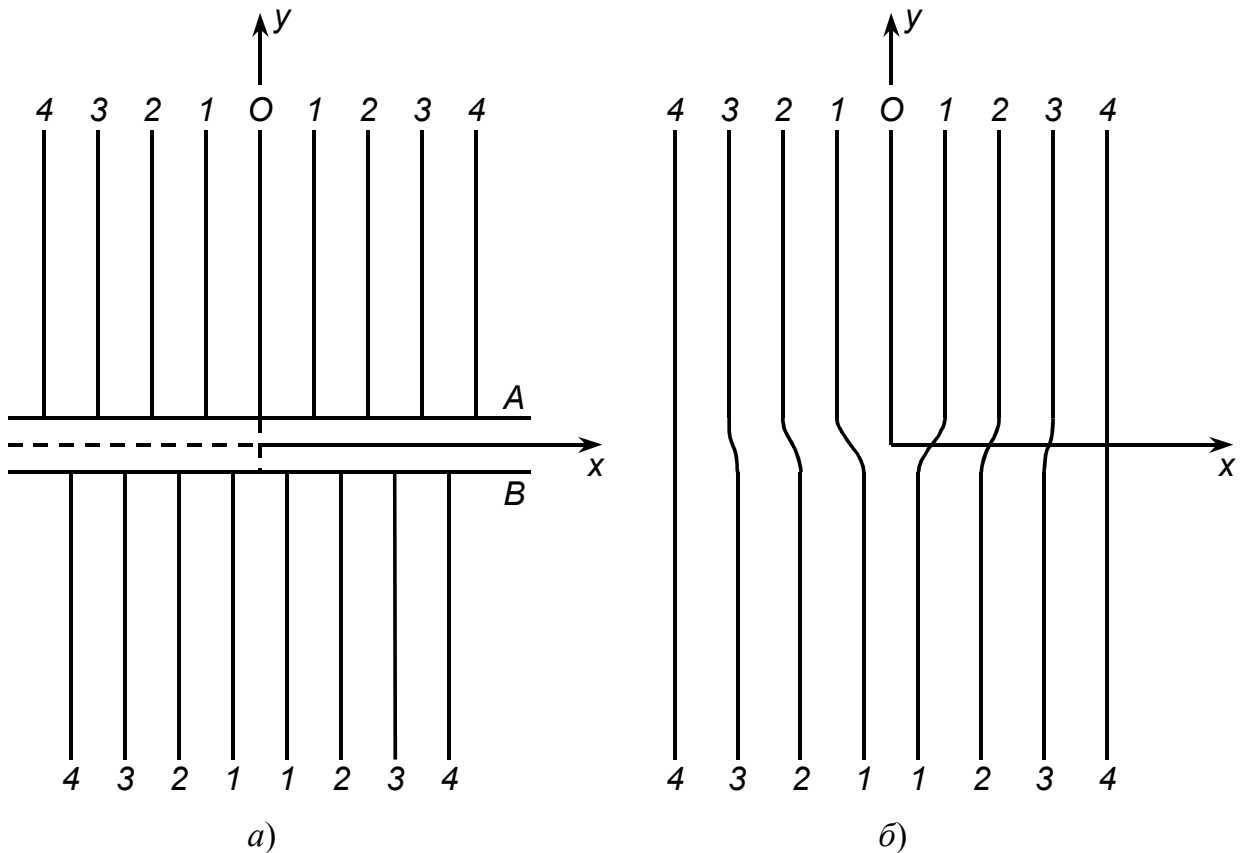


Рис. 93. Образование краевой дислокации в модели Пайерлса – Набарро.

$a$  — два идентичных кристалла до соединения;  $b$  — после соединения

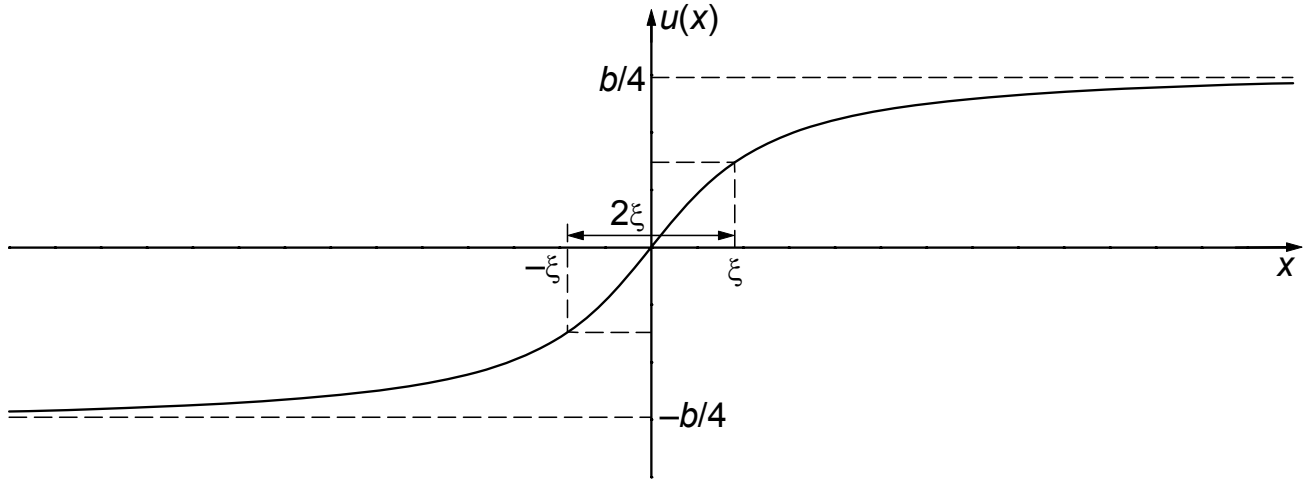


Рис. 94. Схематичный вид графика функции  $u(x)$

Суть рассматриваемого метода заключается в том, что резкая граница сдвига на вектор  $\vec{b}$  «размазывается» вдоль оси  $x$ , для чего вводится функция  $p(x')$  такая, что  $p(x')dx'$  представляет величину сдвига  $db$  на отрезке  $dx'$  около точки  $x'$ . Очевидно, что  $\int p(x')dx' = b$ .

Напряжение, создаваемое такой распределённой дислокацией в точке  $x$ ,

$$\tau_{xy} = \frac{G}{2\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p(x')dx'}{x-x'} = \frac{G}{\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du/dx'}{x-x'} dx'. \quad (268)$$

Последнее равенство возникает потому, что у элемента  $dx'$  точки выше и ниже его имеют смещения  $db = p(x')dx' = -2du = -2 \frac{du}{dx'} dx'$ . Приравняем далее напряжения (266) и (268):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du/dx'}{x-x'} dx' = \frac{b}{2a} (1-\nu) \sin \frac{4\pi u}{b}. \quad (269)$$

Решением этого уравнения является простая функция

$$u = -\frac{b}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{2(1-\nu)x}{a}, \quad (270)$$

удовлетворяющая краевым условиям.

Назовём шириной дислокации  $2\xi$  область, где величина смещения меньше половины предельного, то есть  $-\frac{b}{2} \leq u(x) \leq \frac{b}{2}$ . Это условие реализуется, если  $\operatorname{arctg} \frac{2(1-\nu)x}{a} = \pm \frac{\pi}{4}$ , откуда  $x = \pm \frac{a}{2(1-\nu)}$ , а ширина дислокации  $2\xi = \frac{a}{1-\nu} \approx 1,5a$ .

Критическое напряжение, необходимое для движения дислокации. На единичную дислокацию, расположенную симметрично относительно плоскостей нижнего кристалла, не действует результирующей силы. Но при небольшом смещении линии дислокации такая сила появляется и начинает противодействовать попытке смещения, причём это противодействие возникает не только при перемещении самой экстраплоскости, но и других параллельных ей плоскостей. Пусть дислокация из своего симметричного положения перемещается на малое расстояние  $\alpha b$ . Тогда, согласно (270), смещение атомных рядов с одинаковым номером  $n$  будет равно

$$u_n = -\frac{b}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{(\alpha + n/2)}{\xi}, \quad (271)$$

где  $n = 0; \pm 1; \pm 2; \pm 3; \dots$ . При смещении  $n$ -го ряда производится работа и, следовательно, затрачивается энергия

$$E_n = \frac{1}{2} \int b \tau_{xy} d\varphi = \int_{b/4}^{u_n} \frac{Gb^2}{2\pi a} \sin \frac{4\pi u}{b} du = \frac{Gb^3}{8\pi^2 a} \left( 1 + \cos \frac{4\pi u_n}{b} \right) \quad (272)$$

(сила на единицу длины дислокации равна  $\tau b$ ; коэффициент  $1/2$  появляется потому, что рассматривается энергия верхней части кристалла). Полную энергию можно определить суммированием по  $n$ :

$$E = \frac{Gb^3}{8\pi^2 a} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \left( 1 + \cos \left( 2 \operatorname{arctg} \frac{(\alpha + n/2)b}{\xi} \right) \right). \quad (273)$$

Сумма этого ряда была вычислена Набарро и другим способом Набарро и Коттреллом (см. Коттрелл А.Х. Дислокации и пластическое течение в кристаллах. — М.: Металлургиздат, 1958. — С. 82–83.):  $\frac{4\pi\xi}{b} \left( 1 + 2e^{-4\pi\xi/b} \cos 4\pi\alpha \right)$ ,

поэтому

$$E = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} + \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} e^{-4\pi\xi/b} \cos 4\pi\alpha. \quad (274)$$

Первое слагаемое можно рассматривать как оценку энергии ядра дислокации единичной длины. Второе позволяет определить силу

$$f_n = -\frac{\partial E}{\partial(\alpha b)} = -\frac{2Gb}{1-\nu} e^{-4\pi\xi/b} \sin 4\pi\alpha, \quad (275)$$

которая максимальна по модулю при  $\alpha = \pi/8$ . Знак «минус» означает, что сила направлена в противоположную сторону по отношению к смещению, то есть возвращает дислокацию в исходное положение. Для того, чтобы дислокация двигалась, сила от внешнего напряжения  $\tau b$  должна уравновесить и превзойти в точке максимума силу  $|f_n|$ . Соответствующее напряжение называют напряжением Пайерлса

$$\tau_{\Pi} = \frac{2G}{1-\nu} e^{-4\pi\xi/b}. \quad (276)$$

Оно отражает сопротивление кристаллической решётки движению дислокации.

Для краевой дислокации  $b = \frac{1}{2}a[\bar{1}10]$ , скользящей по плоскости (111) ГЦК-кристалла,  $b = a\sqrt{2}/2$ , расстояние между плоскостями скольжения  $a/\sqrt{3}$ , тогда  $2\xi = \frac{a}{(1-\nu)\sqrt{3}} = 0,825a$ , а  $\tau_{\Pi} = 1,24 \cdot 10^{-6} G = 0,1$  МПа. Таким образом, напряжение Пайерлса у ГЦК-кристаллов оказывается очень малым.

В последующие годы были выявлены «слабые точки» теории Пайерлса и сделаны попытки её уточнения. К недостаткам этой теории относят: 1) учёт только двух слоёв сдвинутой зоны; 2) исключение возможности вертикальных перемещений атомов в зоне ядра и 3) использование цепочек связанных атомов, характерных для краевой, но не для винтовой дислокации, между тем как напряжение Пайерлса для винтовых дислокаций не меньше, чем для краевых.

В течение многих лет сильную температурную зависимость предела текучести металлов и сплавов с ОЦК-решёткой объясняли эффектами термически активированного отрыва дислокаций от примесных атмосфер или выделений частиц второй фазы, поскольку ОЦК-металлы всегда содержат примеси С, N, H, O. Но за последние двадцать лет были получены новые результаты, поставившие такую концепцию под сомнение. Во-первых, эксперименты с ОЦК-металлами высокой чистоты показали, что с уменьшением количества примесей температурная зависимость предела текучести в области низких температур почти не изменяется. Во-вторых, наблюдения движения дислокаций выявили, что при низких температурах скорости движения краевых и винтовых дислокаций относятся примерно как 10:1 (для железа). Результаты компьютерного моделирования движения дислокаций в ОЦК-кристаллах отчётливо продемонстрировали, что напряжения Пайерлса для винтовых дислокаций очень велики, что подтверждается экспериментами. И в-третьих, влиянием примесей невозможно объяснить ориентационную зависимость критических напряжений скольжения.

Постепенно точка зрения изменилась, и доминирующим стало мнение, что ответственной за температурный ход предела текучести является сила Пайерлса, очень высокая для дислокаций ОЦК-металлов:  $\tau_{\Pi} \approx (0,003 \dots 0,01)G$ , тогда как в ГЦК-кристаллах  $\tau_{\Pi} \sim 10^{-5}G$  (но не  $10^{-6}G$ , как в приведённой выше оценке); причём напряжения Пайерлса для винтовых и краевых дислокаций примерно равны. У кристаллов с ковалентной связью сила Пайерлса ещё выше — порядка  $0,1G$ . Имеются данные о высоком уровне  $\tau_{\Pi}$  и для ионных кристаллов. Если напряжение Пайерлса  $\tau_{\Pi} < 10^{-5}G$ , то оно почти не сказывается на температурной зависимости предела текучести.

Данные об особенностях движения винтовых дислокаций в ОЦК-кристаллах позволили предположить, что низкотемпературная хрупкость металлов с ОЦК-решёткой обусловлена в значительной степени высоким сопротивлением кристаллической решётки движению дислокаций, хотя охрупчивающее влияние примесей внедрения, безусловно, существует. Хирш (1960 г.) предложил модель расщеплённой в ядре винтовой дислокации. Дислокация  $\frac{1}{2}a[111]$  расположена как бы на пересечении трёх плоскостей из семейства  $\{112\}$ :  $(11\bar{2})$ ,  $(1\bar{2}1)$ ,  $(\bar{2}11)$ . Поэтому она может разделиться (расщепиться) на три дислокации по реакции:

$$\frac{1}{2}a[111] = \frac{1}{6}a[111] + \frac{1}{6}a[111] + \frac{1}{6}a[111]. \quad (277)$$

Каждая из этих дислокаций имеет нетрансляционный вектор Бюргерса. Такие дислокации называются частичными. В принципе подобные дислокации не должны существовать, но вектор  $\frac{1}{6}a <111>$  особый — это вектор двойникового в ОЦК-решётке. Поэтому сдвиг на  $\frac{1}{6}a <111>$  приводит к образованию двухслойного двойника, который называют дефектом упаковки. Так как двойникование у ОЦК-кристаллов наблюдается весьма часто, то энергия дефекта упаковки невелика. Взаимное отталкивание трёх параллельных частичных дислокаций приводит к расхождению их по трём плоскостям  $\{112\}$ . В результате, по Хиршу, возникает устойчивая структура ядра из трёх частичных дислокаций (рис. 95). Частичные дислокации перемещаются на небольшое расстояние  $(2...5)b$  — такое, чтобы уменьшение упругой энергии дислокации компенсировалось ростом общей энергии дефекта упаковки. Такая дислокация не может двигаться ни в одной из плоскостей скольжения (за исключением процесса двойникового), пока три частичные дислокации под влиянием внешнего напряжения не сольются снова в полную.

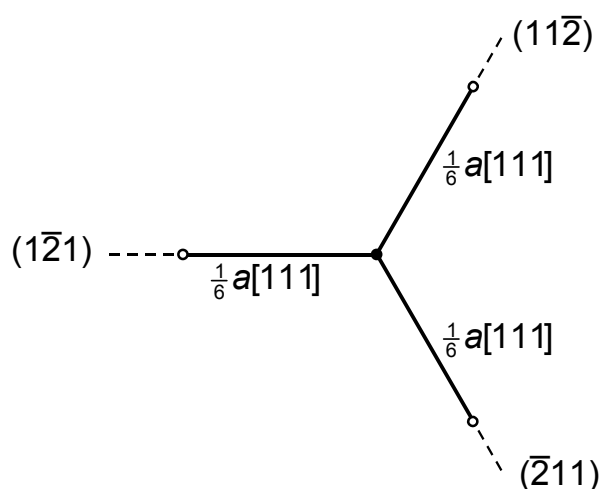


Рис. 95. Расщепление в ядре винтовой дислокации  $\frac{1}{2}a[111]$  в кристаллах с ОЦК-решёткой



Судзуки (1968 г.) обратил внимание, что если через атомы цепочки [111] провести плоскости, перпендикулярные этому направлению, то только 1/3 всех атомов решётки окажутся в этих плоскостях. Остальные 2/3 атомов расположены выше или ниже этих плоскостей. Поэтому при движении винтовой дислокации  $\frac{1}{2}a[111]$ , — а она, как известно, движется в направлении, перпендикулярном своей линии, — возникают ситуации, когда атомам, помимо «горизонтального» перемещения, приходится спускаться или подниматься примерно на  $0,06b$ , и эти места характеризуются высоким значением напряжения Пайерлса.

Компьютерное моделирование в целом подтверждает возможность расщепления в ядре винтовых дислокаций, но расщепление, возможно, более сложного вида, чем рассмотрено Хиршем, а позднее Витеком. Например, по данным Фаркаса, на расстоянии  $\sim 4,5b$  ядро дислокации в железе расщеплено по трём плоскостям  $\{112\}$ , но ближе к центру полной дислокации проявляется аналогичное расщепление по трём плоскостям скольжения  $\{110\}$ . Если приложить касательное напряжение по одной из плоскостей (110), то ядро сплющивается, теряя треугольную форму, и становится вытянутым вдоль (112), а затем начинает вытягиваться вдоль (110). Эта плоскость образует с (112) угол  $30^\circ$ . Наконец, при напряжении  $\tau_{II} = 8 \cdot 10^{-3} G$  ядро теряет устойчивость и начинает двигаться в плоскости приложенного напряжения.

Хотя исследования и моделирование ядра, по существу, только начались, но уже ясно, что строение ядра оказывает значительное влияние на напряжение Пайерлса.

## 5.10. СКОРОСТЬ СКОЛЬЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИИ

Уже отмечено, что дислокация может двигаться только под действием тех напряжений, которые создают силу скольжения  $\tau b$ . В первые моменты после появления напряжения, превосходящего критическое значение  $\tau_s$ , дислокация движется ускоренно. В соответствии со вторым законом Ньютона величина ускорения

$$a \approx \frac{(\tau - \tau_s)b}{m^*}, \quad (278)$$

где  $m^* = \rho_0 b^2$  — эффективная масса единицы длины дислокации [ $\rho_0$  — эффективная масса (плотность) металла]. Вероятно, более точно под  $b$  понимать радиус ядра. Тогда масса дислокации равна массе, заключённой в пределах ядра. Если в кристалле мало дислокаций или имеется единственная дислокация, то скольжение в поле напряжений происходит со всё увеличивающейся скоростью (рис. 96). Пределом скорости является скорость

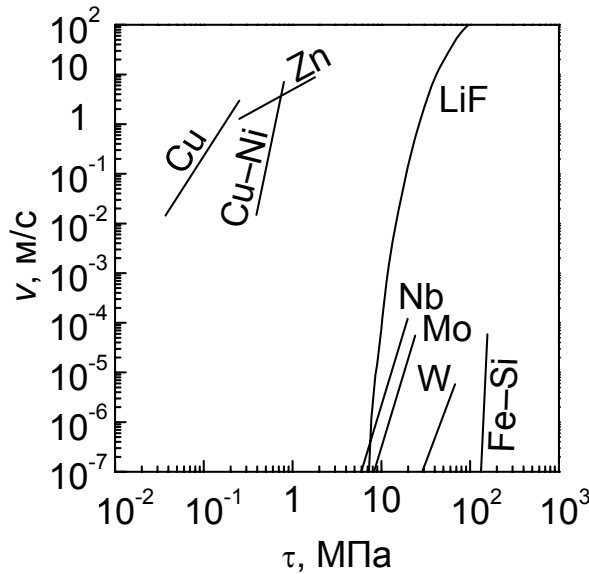


Рис. 96. Зависимость скорости дислокаций от напряжения сдвига для некоторых материалов

звука  $c$  в кристалле. Интересно, что для энергии движущейся дислокации справедлива та же формула, что и в специальной теории относительности:

$$E = \frac{E_0}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \approx E_0 \left( 1 + \frac{v^2}{2c^2} \right), \quad (279)$$

причём  $E_0 = m^* c^2$ .

Движение со скоростями, близкими к звуковой, является редким явлением — при возрастании скорости наблюдается рассеивание энергии движения, так как работа  $\tau b x$  внешней силы на пути  $x$  превращается в тепловую энергию. Рассеивание может происходить несколькими механизмами. Для чистых металлов это электронное и фононное трение. Как известно, свободные электроны в металлах рассеиваются при столкновениях не атомами, а отклонениями структуры от идеально периодической: атомными колебаниями, точечными дефектами и т.д. Очевидно, что ядро дислокации будет выступать мощным центром рассеяния электронов, двигающихся навстречу дислокации. Отсюда и возникает сила трения подобно трению крыла летящего самолёта о воздух. Рассеяние на фононах, то есть тепловых колебаниях решётки, имеет иную природу. Участок дислокации, наталкиваясь на волну колебаний, сам начинает колебаться с такой же частотой, так что вдоль дислокации, как вдоль струны, будет распространяться упругое колебание, которое затем снова будет передано решётке, но уже в другом направлении. Векторная разность импульсов поглощённого и рассеянного фонона создаёт силу сопротивления. В обоих случаях эти силы тем больше, чем выше скорость движения дислокации. Трение превращает механическую работу в тепло. В итоге дислокация движется в основном с постоянной скоростью  $v$ , зависящей от уровня напряжений. Некоторые

экспериментальные измерения такой зависимости показаны на рис. 96. В достаточно широком интервале скоростей движения ( $v = 10^{-7} \dots 10^2$  см/с) справедлива эмпирическая формула

$$v = B \left( \frac{\tau - \tau_s}{G} \right)^n, \quad (280)$$

где  $B$  и  $n$  — параметры, зависящие от типа вещества, типа и концентрации примесей и температуры. Обычно  $2 < n < 20$ . Интересно, что подвижность краевых дислокаций несколько выше, чем винтовых.

В реальных кристаллах имеется и множество других препятствий для движущейся дислокации. Их следует разделить на препятствия, создаваемые самой кристаллической решёткой, и сторонними препятствиями. К первым относится сопротивление движению, создаваемое рельефом потенциальной энергии кристалла (потенциал Пайерлса). Сторонними препятствиями являются точечные дефекты (атомы примесей, вакансии, междоузельные атомы), другие дислокации и создаваемые ими поля упругих напряжений, частицы второй фазы, скопления атомов типа атмосфер Коттрелла, Снука и Судзуки, границы зерна и т.п. Именно эти препятствия, которые дислокация в ряде случаев вынуждена преодолевать с помощью термической активации, ограничивают скорость консервативного движения.

Если  $W_s$  есть барьер потенциальной энергии, который преодолевает дислокация, то при 0 К для прохождения дислокации через препятствия работа внешнего напряжения  $\tau b l s$  на пути  $s$ , равном полуширине барьера, должна превысить  $W_s$ . Эквивалентное условие для напряжения выглядит так:

$$\tau \geq \tau_s = \frac{W_s}{b l s}, \quad (281)$$

где  $l$  — длина участка дислокации, взаимодействующего с препятствием. Для температуры выше 0 К часть необходимой энергии

$$\Delta E = W_s - \tau b l s, \quad (282)$$

могут обеспечить флуктуации энергии, возникающие вследствие неоднородного распределения энергии между одинаковыми частями атомной системы, в том числе между атомами. Вероятность флуктуации в единицу времени равна  $\exp(-\Delta E/kT)$ , причём частота попыток «прорваться» через барьер для участка дислокации длиной  $l$  равна частоте его колебаний

$$v^* = \frac{c}{2l} = \frac{c}{2b} \cdot \frac{b}{l} \approx v_D \cdot \frac{b}{l}, \quad (283)$$

где  $v_D = \frac{c}{2b}$  — дебаевская, то есть максимальная частота звуковых волн в решётке. Произведение  $v^* \exp(-\Delta E/kT)$  определяет среднюю частоту пе-

перехода участка дислокации через барьер. Если после перехода дислокация проходит путь  $h$  до встречи с новым препятствием, то скорость термически активированного скольжения дислокации составит

$$v = v_D h \frac{b}{l} \exp \left( - \frac{W_s - \tau V^*}{kT} \right). \quad (284)$$

Величину  $V^* = b l s$  называют активационным объёмом. Именно в этом объёме должна возникнуть флуктуация тепловой энергии величиной  $\Delta E$ . В рассмотренном варианте, то есть при  $\tau < \tau_s$ , температура очень существенно влияет на скорость движения дислокации, а следовательно, и на предел текучести. Напротив, для  $\tau \geq \tau_s$  движение дислокации является безактивационным, иначе говоря, атермическим.

## 6. МЕХАНИКА ДИСЛОКАЦИЙ

### 6.1. ПОЛЯ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ ВОКРУГ ДИСЛОКАЦИЙ

В классической теории упругости или сопротивления материалов считается, что среда представляет собой упругий континуум, то есть бесструктурна и в микро-, и в макромасштабе, не имеет атомно-кристаллического строения, а упругие свойства всех её участков одинаковы. Для расчёта напряжений необходимо прежде всего построить континуальную модель дислокаций в непрерывной среде.

Следуя Вольтерра и Тейлору, поступим следующим образом. Возьмём образец в форме цилиндра и «просверлим» в нём осевой канал радиусом  $r_y$  для того, чтобы устранить из рассмотрения наиболее искажённую область — ядро дислокации. Введём систему координатных осей так, чтобы ось  $Oz$  совпала с осью цилиндра. В плоскости  $zx$  проведём полуразрез — разрез от поверхности цилиндра до осевого канала.

Теперь сместим края полуразреза на определённое расстояние (вектор), равное вектору  $\vec{b}$ . Конечно, в этом состоянии внутри цилиндра возникнут напряжения, стремящиеся вернуть телу исходную форму. Поэтому для проведения сдвига нам придётся приложить усилия. Затем используем клей и соединим сдвинутые поверхности разреза. После высыхания можно снять усилия, так как от возвращения к старой форме цилиндр будут удерживать склеенные поверхности. Ясно, что внутренние напряжения останутся — они и образуют поле напряжений вокруг дислокации. В реальном кристаллическом теле «склеивание» происходит потому (и очень важно обратить на это внимание), что вектор сдвига является трансляционным. На место сдвинутого атома встаёт абсолютно такой же, но пришедший из другого узла атом, который немедленно образует с атомами условно неподвижной части кристалла химические связи, точно такие же, какие создавал предыдущий. Эти связи и играют роль «клея» в континуальной модели.

#### 6.1.1. Напряжения от винтовой дислокации

Чтобы получить континуальную модель винтовой дислокации, необходимо края полуразреза сдвинуть на вектор  $\vec{b}$  параллельно оси дислокации, как это показано на рис. 97. В таком состоянии края разреза склеиваются. Для расчёта напряжений будем использовать в сечении цилиндра наряду с декартовой системой  $Oxy$  ещё и полярную систему координат  $(r, \theta)$ . Связь этих координат точки очевидна:

$$x = r \cos \theta; \quad y = r \sin \theta; \quad (285a)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}; \quad \operatorname{tg} \theta = \frac{y}{x}. \quad (285б)$$

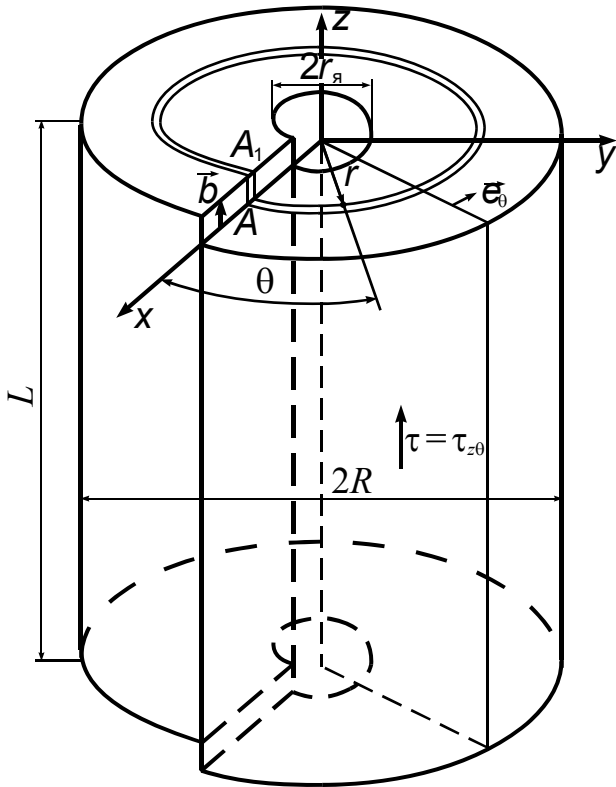


Рис. 97. Континуальная модель винтовой дислокации

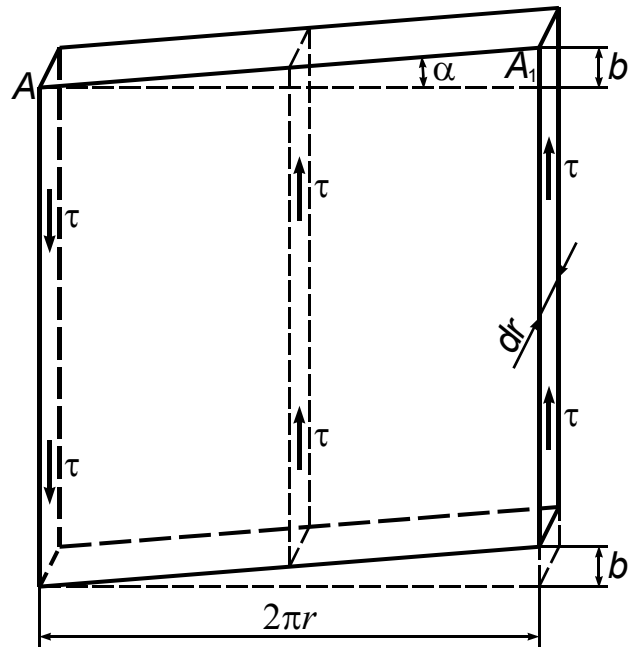


Рис. 98. Развёртка цилиндрического слоя  $AA_1$  на плоскость

Проведём окружности: одну радиусом  $r$ , а вторую  $r + dr$  так, чтобы получился круговой пояс шириной  $dr$ . На основе этого пояса построим тонкий цилиндрический слой, проведя образующие. Далее развернём боковую поверхность полученного цилиндра на вертикальную плоскость (рис. 98). Точка  $A_1$  расположена над  $A$  на расстоянии  $b$ . Поэтому окружность, а точнее, отрезок спирали  $AA_1$  развернётся в отрезок прямой, слегка наклонённый к горизонтали на угол  $\alpha$ , тангенс которого равен  $\frac{b}{2\pi r}$ . Он характеризует отклонение угла  $A$  от прямого. В теории упругости такие углы называют углами сдвига, а тангенс угла — деформацией сдвига  $\gamma$ :

$$\gamma = \tan \alpha = \frac{b}{2\pi r}. \quad (286)$$

Очевидно, что деформация сдвига возникла после создания винтовой дислокации. Её появление можно объяснить только тем, что в любом радиальном сечении цилиндрического слоя возникают касательные напряжения  $\tau$ , показанные на рис. 98.

Величины касательного напряжения и сдвиговой деформации связаны простым законом Гука для сдвигов  $\tau = G\gamma$ , а поэтому

$$\tau = \frac{Gb}{2\pi} \cdot \frac{1}{r}. \quad (287)$$

В цилиндре эти касательные напряжения действуют по любой плоскости, проходящей через линию дислокации. Напряжение в любой точке направлено вдоль оси  $z$ , а нормаль к плоскости совпадает с направлением орта  $\vec{e}_0$  касательной к окружности радиуса  $r$ . Поэтому более строго  $\tau$  следует обозначить  $\tau_{z0}$ . Напряжение убывает по мере удаления от линии дислокации как  $1/r$ . Если  $r \rightarrow 0$ , то напряжение  $\tau_{z0} \rightarrow \infty$ , то есть по мере приближения к оси дислокации напряжение неограниченно возрастает. Вот почему в континуальной модели дислокации был вырезан канал радиусом  $r_\text{я}$ .

На плоскости полуразреза  $xOz$  орт  $\vec{e}_0$  совпадает с направлением оси  $Oy$ , а  $r = x$ , так что

$$\tau_{z0} = \tau_{zy} = \frac{Gb}{2\pi} \cdot \frac{1}{x}. \quad (288)$$

Это обстоятельство позволяет легко рассчитать упругую энергию винтовой дислокации. Сначала найдём равнодействующую  $P$  сил, действующих на поверхности полуразреза:

$$P = \int_0^L dz \int_{r_\text{я}}^R dx \cdot \tau_{zy}, \quad (289)$$

так как элемент площади на поверхности полуразреза равен  $dz \cdot dx$ . Поскольку подынтегральная функция от  $z$  не зависит, то интеграл по  $z$  даёт длину дислокации  $L$ , а второй интеграл  $\int \frac{dx}{x} = \ln x$ . Тогда

$$P = \frac{Gb}{2\pi} L \ln \frac{R}{r_\text{я}}. \quad (290)$$

Именно это усилие приходится преодолевать при проведении сдвига на вектор  $\vec{b}$ . Работа против усилия  $P$  превращается в упругую энергию  $W$  кристалла, содержащего дислокацию:

$$W = \int_0^b P db = \frac{Gb^2}{4\pi} L \ln \frac{R}{r_\text{я}}. \quad (291)$$

Усложнённый расчёт работы обусловлен тем, что усилие  $P$  равномерно нарастает при увеличении величины сдвига от нуля до  $b$ . При простом перемножении  $P \cdot b$  мы потеряли бы коэффициент  $\frac{1}{2}$ , так как  $\int_0^b b db = \frac{1}{2} b^2$ .

Дополнение. По закону парности касательных напряжений  $\tau_{z0} = \tau_{0z} = \frac{Gb}{2\pi r}$ . Напряжение  $\tau_{0z}$  действует вдоль периметра любой окружности радиуса  $r$ . Поэтому оно создаёт на внешних торцах цилиндра момент сил  $M_z = \int \tau_{0z} r dF = \int \tau_{0z} r 2\pi r dr = \frac{Gb}{2\pi} 2\pi \int r dr = \frac{Gb}{2} R^2$ . Таким образом, во-

круг винтовой дислокации должно происходить закручивание кристалла, и оно действительно проявляется у нитевидных кристаллов, содержащих вдоль своей оси винтовую дислокацию. Если торцевые поверхности свободны от усилий, то в формулу (287) нужно внести малосущественную поправку на «эффект обратного вращения»:

$$\tau_{z\theta} = \tau_{\theta z} = \frac{Gb}{2\pi r} \left( 1 - \frac{r^2}{R^2} \right), \quad (292)$$

которая получается, если мысленно приложить к торцевой поверхности крутящий момент противоположного направления.

### 6.1.2. Напряжения вокруг краевой дислокации

Континуальная модель краевой дислокации (рис. 99) строится так же, как для винтовой, но поверхности полуразреза смещают в направлении оси  $Ox$  на вектор  $\vec{b}$  перпендикулярно линии дислокации. Затем поверхности склеивают и устраняют усилия, удерживающие сдвинутые края разреза.

Расчёт напряжений, созданных краевой дислокацией (рис. 100), представляет очень сложную задачу. Она была решена независимо Вольтерра в 1907 г. и Тейлором в 1934 г. Мы здесь приведём лишь окончательные результаты для поля напряжений дислокации, лежащей вдоль оси  $Oz$  с вектором Бюргерса  $\vec{b}$ , ориентированным по оси  $Ox$ :

$$\sigma_{xx} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot y \frac{3x^2 + y^2}{(x^2 + y^2)^2} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{\sin \theta \cdot (2 \cos^2 \theta + 1)}{r}; \quad (293a)$$

$$\sigma_{yy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot y \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{\sin \theta \cdot \cos 2\theta}{r}; \quad (293б)$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot x \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{\cos \theta \cdot \cos 2\theta}{r}; \quad (293в)$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = -\frac{Gb\nu}{\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y}{x^2 + y^2} = -\frac{Gb\nu}{\pi(1-\nu)} \cdot \frac{\sin \theta}{r}. \quad (293г)$$

Остальные возможные компоненты тензора напряжений  $\tau_{xz}$  и  $\tau_{yz}$  равны нулю. Для единственной дислокации в бесконечном кристалле  $\sigma_{zz}$  также равно нулю. Но обычно возникает ситуация, когда линия дислокации ограничена объёмом одного зерна в поликристалле. Растягивающие напряжения  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{yy}$  создают в поперечном направлении  $Oz$  пуассоново сжатие  $\left( -\nu \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{E} \right)$ , которое не может реализоваться, так как линия дислокации не выходит на поверхности образца. Поэтому возникнет растягивающее напряжение  $\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$ , компенсирующее деформацию сжатия.



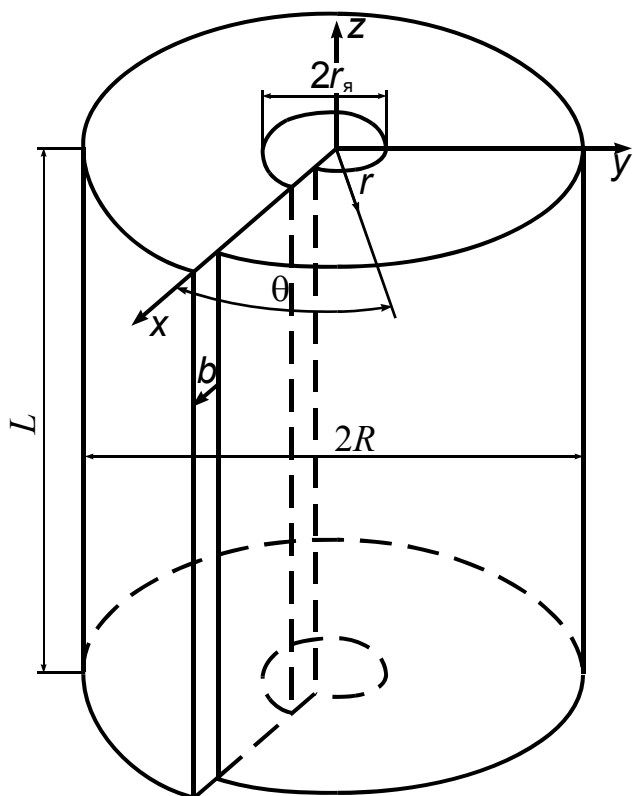


Рис. 99. Континуальная модель краевой дислокации

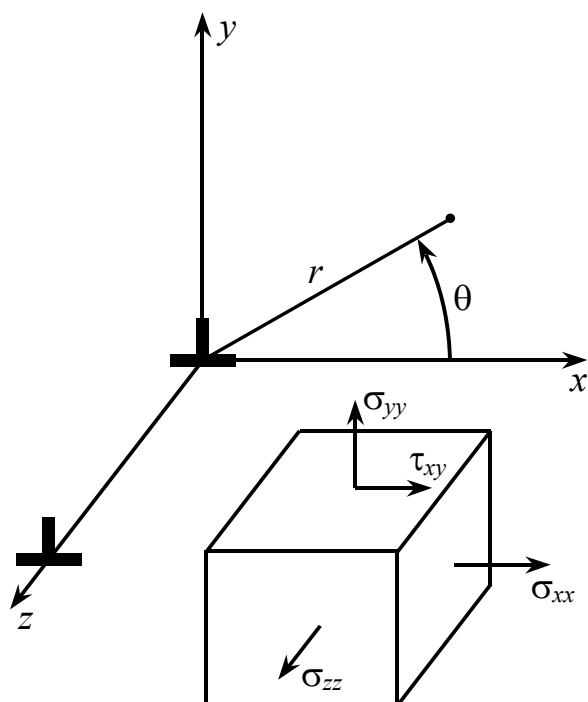


Рис. 100. Напряжения, возникающие вокруг краевой дислокации

В любом заданном направлении ( $\theta = \text{const}$ ) все напряжения убывают с расстоянием как  $1/r$ .

Расчёт энергии упругих напряжений проведём тем же методом, как и для винтовой дислокации. По плоскости полуразреза  $zOx$ , для которой  $y=0$ , действует только касательное напряжение

$$\tau_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{x}. \quad (294)$$

Рассчитаем аналогично (289)–(291) равнодействующее усилие по поверхности разреза

$$P = \int_0^L dz \int_{r_y}^R dx \cdot \tau_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} L \ln \frac{R}{r_y} \quad (295)$$

и упругую энергию

$$W = \int_0^b P db = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} L \ln \frac{R}{r_y}. \quad (296)$$

Благодаря множителю  $\frac{1}{1-\nu}$  энергия краевой дислокации приблизительно в 1,5 раза выше, чем энергия винтовой. Для смешанной дислокации вектор Бюргерса можно разложить на винтовую и краевую составляющие,

поэтому для энергии прямолинейной смешанной дислокации справедливо выражение

$$W = \frac{Gb^2}{4\pi} L \ln \frac{R}{r_{\text{я}}} \cdot \left( \frac{\cos^2 \varphi}{1-\nu} + \sin^2 \varphi \right), \quad (297)$$

где  $\varphi$  — угол между линией дислокации и вектором Бюргерса.

При  $R \rightarrow \infty$  энергия любой дислокации неограниченно возрастает. Однако кристалл обычно содержит значительное число дислокационных линий. Плотность дислокаций в отожжённых материалах имеет порядок  $\rho \simeq 5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$ , то есть каждый квадратный сантиметр площади в среднем пересекает  $5 \cdot 10^8$  дислокационных линий. Обратная величина  $1/\rho$  имеет смысл площади, приходящейся на одну дислокацию, а  $\rho^{-1/2}$  представляет собой среднее междислокационное расстояние. На расстояниях, превышающих половину этого промежутка, напряжения соседних дислокаций в среднем компенсируются. Обратите внимание на формулу (293в): при переходе из области  $x < 0$  в область  $x > 0$  напряжение  $\tau_{xy}$  меняет свой знак; следовательно, на интервале между двумя соседними краевыми дислокациями напряжения от них имеют разный знак и точно компенсируют друг друга в средней точке. Обычно считают, что  $R \approx \frac{1}{2} \rho^{-1/2}$ . Формулу (297) перепишем в виде

$$\frac{W}{L} = \alpha Gb^2, \quad (298)$$

где  $\alpha = \frac{1}{4\pi} \ln \frac{1}{2r_{\text{я}}\sqrt{\rho}} \cdot \left( \frac{\cos^2 \varphi}{1-\nu} + \sin^2 \varphi \right)$ . Примем  $\rho \simeq 5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$ ;  $r_{\text{я}} \simeq 4b = 10 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ . Для чисто винтовой дислокации ( $\varphi = 90^\circ$ ) при этих значениях  $\alpha = 0,44$ , а с учётом энергии ядра, оцениваемой примерно как 10 % от упругой энергии вне ядра,  $\alpha \simeq 0,5$ . Для краевой дислокации значение  $\alpha$  формально должно быть выше, однако больше должен быть и радиус ядра дислокации  $r_{\text{я}}$ . Поэтому при проведении оценочных расчётов обычно принимают, что для дислокаций всех видов  $\alpha \simeq 1/2$ .

### 6.1.3. Точный расчёт полей напряжений около дислокаций (для подготовленных студентов)

Особенности теории упругости для материалов, содержащих дислокации. Появление дислокаций в телах приводит к перемещению материальных точек на вектор  $\vec{u}(\vec{r})$ , зависящий от радиуса-вектора  $\vec{r}$  или координат точки наблюдения. Совокупность векторов  $\vec{u}(\vec{r})$  определяет поле смещений, причём за исходное принимается положение точек в теле, ещё не содержащем дислокаций. Вектор смещения имеет три компоненты  $u_x$ ,  $u_y$  и  $u_z$ , или  $u_i(\vec{r})$ , где  $i = 1; 2; 3$ .

Поле деформации можно найти через производные компонент вектора смещения по координатам. Деформированное состояние в точке определяет тензор

$$e_{ij}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (299)$$

Деформации связаны с напряжениями законом Гука:

$$\sigma_{ij} = 2G \left( e_{ij} + \delta_{ij} \frac{\nu}{1-2\nu} e_{ll} \right), \quad (300)$$

где  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера  $\left( \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{для } i = j; \\ 0 & \text{для } i \neq j \end{cases} \right)$ ;  $G$  — модуль сдвига;  $\nu$  — коэффициент Пуассона;  $e_{ll}$  — дилатация, или относительное изменение объёма:

$$e_{ll} = e_{11} + e_{22} + e_{33}. \quad (301)$$

Обратные соотношения имеют вид

$$\left. \begin{aligned} e_{11} &= \frac{\sigma_{11}}{E} - \frac{\nu}{E} (\sigma_{22} + \sigma_{33}); \\ e_{22} &= \frac{1}{E} (\sigma_{22} - \nu (\sigma_{11} + \sigma_{33})); \\ e_{33} &= \frac{1}{E} (\sigma_{33} - \nu (\sigma_{11} + \sigma_{22})); \end{aligned} \right\} \quad (302)$$

$$e_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{2G} \quad (\text{при } i \neq j), \quad (303)$$

где модуль нормальной упругости

$$E = 2G(1 + \nu). \quad (304)$$

Тензор напряжений удовлетворяет условию равновесия

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + f_i = 0, \quad (305)$$

где  $f_i$  —  $i$ -я компонента объёмной силы ( $i = 1; 2; 3$ ). Мы в дальнейшем будем считать, что объёмные силы отсутствуют.

Если подставить (300) в (305) и учесть (299), то после несложных расчётов получим основное уравнение теории упругости для смещений

$$(1 - 2\nu) \nabla^2 \vec{u} + \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) = 0, \quad (306)$$

где под  $\vec{\nabla}$  понимается оператор

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \vec{e}_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \vec{e}_3 \frac{\partial}{\partial x_3}; \quad (307)$$

его двукратное применение даёт оператор Лапласа:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (308)$$

Уравнение (306) эквивалентно трём соотношениям для компонент вектора  $\vec{u}$ :

$$(1 - 2\nu) \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial}{\partial x_j} u_j \right) = 0, \text{ где } i = 1; 2; 3. \quad (309)$$

Как обычно, считается, что в (309) проведено суммирование по повторяющимся индексам.

В классической теории упругости вводится также условие совместности и непрерывности деформаций. Однако уже рассмотренные континуальные модели дислокаций предполагают разрезы и смещение краёв разрезов. Естественно, что при переходе через подобную поверхность разреза получается скачкообразное (в макроскопическом смысле) изменение вектора смещения  $\vec{u}$ . Согласно определению дислокации, данному Бюргерсом, для любого замкнутого контура  $C$ , проведённого вокруг линии дислокации,

$$\oint_C d\vec{u} = \vec{b}, \quad (310)$$

или для компонент

$$\oint du_i = \oint \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_j = b_i. \quad (311)$$

Уравнения (311) используются вместо уравнений непрерывности.

Напряжения около винтовой дислокации. Континуальная модель винтовой дислокации уже рассмотрена выше. Из рис. 97 видно, что смещение  $u_z$  равномерно нарастает при увеличении угла  $\theta$ . Поэтому с хорошим приближением

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \theta, \quad (312)$$

где  $\operatorname{tg} \theta = y/x$ , то есть  $\theta = \operatorname{arctg}(y/x)$ . Остальные компоненты вектора  $\vec{u}$  равны нулю. Дифференцируя  $u_z$  по  $x$  и  $y$ , найдём

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{xz} &= \frac{1}{2} \frac{\partial u_z}{\partial x} = -\frac{b}{4\pi} \frac{y}{y^2 + x^2}; \\ \varepsilon_{zy} = \varepsilon_{yz} &= \frac{1}{2} \frac{\partial u_z}{\partial y} = +\frac{b}{4\pi} \frac{x}{y^2 + x^2}; \\ \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} &= \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = 0. \end{aligned} \right\} \quad (313)$$

Отсюда для напряжений получим

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{zx} = \sigma_{xz} = \tau_{zx} &= -\frac{Gb}{2\pi} \frac{y}{y^2 + x^2}; \\ \sigma_{zy} = \sigma_{yz} = \tau_{zy} &= +\frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{y^2 + x^2}; \\ \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = \sigma_{xx} &= \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = 0. \end{aligned} \right\} \quad (314)$$

Существенно заметить, что винтовая дислокация не создаёт дилатации. В силу этого она не взаимодействует с примесями, в отличие от краевой

дислокации. Если использовать цилиндрическую систему координат, то легко рассчитать напряжение в любой плоскости, проходящей через линию дислокации:

$$\sigma_{z\theta} = 2G\varepsilon_{z\theta} = 2G \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right) = \frac{Gb}{4\pi} \cdot \frac{1}{r}; \quad (315)$$

$$\sigma_{\rho\rho} = \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{zz} = \sigma_{z\rho} = \sigma_{\rho\theta} = 0. \quad (316)$$

Энергия дислокации складывается из энергии поля упругих деформаций и ядра. Для изотропной среды плотность упругой энергии определяется выражением

$$w = \frac{1}{2} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}, \quad (317)$$

а полная величина энергии  $W$  определяется интегрированием (317) по объёму. Наиболее просто это сделать в цилиндрической системе координат, где отличны от нуля только  $\sigma_{z\theta}$  и  $\sigma_{\theta z}$ :

$$W = \frac{Gb^2}{8\pi^2} \int_0^L \int_{\rho_0}^R \frac{1}{\rho} 2\pi r dr dz = \frac{Gb^2}{4\pi} \cdot \ln \left( \frac{R}{\rho_0} L \right). \quad (318)$$

Краевая дислокация. В случае краевой дислокации нахождение поля напряжений представляет достаточно сложную проблему. Мы её рассмотрим в упрощённом варианте. Континуальная модель краевой дислокации (рис. 99) описана выше. Отметим, что напряжённое состояние для бесконечной прямолинейной дислокации является плоским. Отличны от нуля только компоненты тензора напряжений  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\tau_{xy}$ .

В теории упругости показывается, что для описания плосконапряжённого состояния можно ввести функцию напряжения  $\psi(x, y)$ , удовлетворяющую бигармоническому уравнению Эри

$$\Delta^2 \psi(x, y) = 0. \quad (319)$$

Через эту функцию можно выразить искомые напряжения:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}; \\ \sigma_{yy} &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}; \\ \tau_{xy} &= -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y}. \end{aligned} \right\} \quad (320)$$

Введём вспомогательную функцию

$$\lambda(x, y) = \sigma_{xx} + \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \Delta \psi. \quad (321)$$

Функция  $\lambda(x, y)$  удовлетворяет уравнению Лапласа

$$\Delta \lambda(x, y) = 0, \quad (322)$$

поэтому для неё справедливо  $\lambda(x, y) = 0$ . В полярной системе координат оператор Лапласа

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (323)$$

Известно общее решение уравнения  $\Delta\lambda = 0$  в цилиндрических координатах:

$$\lambda(r, \theta) = (\alpha_0 + \beta_0 \ln r) + \sum_{n=1}^{\infty} (\alpha_n r^n + \beta_n r^{-n}) \sin n\theta + \sum_{n=1}^{\infty} (\gamma_n r^n + \delta_n r^{-n}) \cos n\theta. \quad (324)$$

При этом следует учесть, что сумма напряжений пропорциональна объёмным изменениям. Из схемы краевой дислокации (рис. 100) следует, что максимальное объёмное сжатие наблюдается над экстраплоскостью, то есть при  $\theta = \pi/2$ , а растяжение — под экстраплоскостью при  $\theta = 3\pi/2$ . Этому условию удовлетворяет слагаемое, содержащее  $\sin \theta$ . Учтём также, что, как показывает решение для винтовых дислокаций, напряжение убывает с расстоянием как  $1/r$ . Итак, для краевой дислокации функция  $\lambda(r, \theta)$  должна иметь вид

$$\lambda(r, \theta) = \beta_1 \frac{1}{r} \sin \theta. \quad (325)$$

Следовательно, функция напряжений для краевой дислокации должна определяться как решение уравнения

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} = \beta_1 \frac{1}{r} \sin \theta. \quad (326)$$

Прямым дифференцированием легко убедиться в том, что частным решением этого уравнения является функция

$$\psi = \frac{\beta_1}{2} r \sin \theta \ln r = \frac{\beta_1}{2} y \ln \sqrt{x^2 + y^2}. \quad (327)$$

Используем выражения (320) и рассчитаем напряжения:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{\beta_1}{2} \cdot y \frac{3x^2 + y^2}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{yy} &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\beta_1}{2} \cdot y \frac{y^2 - x^2}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \tau_{xy} &= -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} = -\frac{\beta_1}{2} \cdot x \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2}, \end{aligned} \right\} \quad (328)$$

но константа  $\beta_1$  остаётся неизвестной. Необходимо использовать формулу Бюргера. Проведём контур Бюргера в виде двух горизонталей, соединяющихся на  $+\infty$  и  $-\infty$ , одна из которых расположена чуть выше, а вторая — чуть ниже плоскости разреза (рис. 101). Затем начнём их сближать так, чтобы вертикальные отрезки обращались в ноль ( $y \rightarrow 0$ ). Учитывая, что направление обхода контура выбрано против стрелки часов, запишем

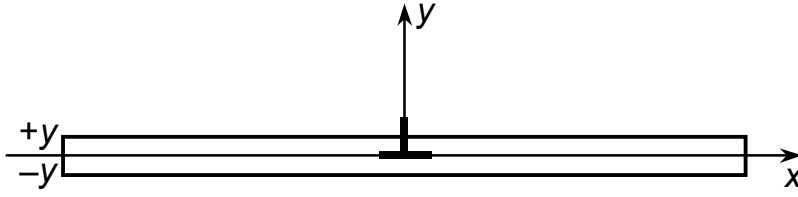


Рис. 101. Контур Бюргера при расчёте интеграла (329)

$$\int_{+\infty}^{-\infty} du_x + \int_{-\infty}^{+\infty} du_x = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial u_x}{\partial x} dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial u_x}{\partial x} dx = b. \quad (329)$$

Здесь принято, что интегрирование по короткому отрезку от  $+y$  до  $-y$  при  $x \rightarrow \pm\infty$  даёт нулевой вклад. Совершим в выражении (329) предельный переход:

$$\lim_{y \rightarrow \infty} \left( \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon_{xx} dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon_{xx} dx \right) = -b \quad (330)$$

и рассчитаем  $\varepsilon_{xx}$ :

$$\varepsilon_{xx} = \frac{1}{E} (\sigma_{xx} - \nu(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})) = \frac{1}{E} \frac{\beta_1}{2} \left( \frac{(3+\nu-2\nu^2)yx^2}{(x^2+y^2)^2} + \frac{(1-\nu-2\nu^2)y^3}{(x^2+y^2)^2} \right). \quad (331)$$

Следовательно, интегралы в (330) выражаются через два табличных интеграла:

$$\int \frac{dx}{(a^2+x^2)^2} = \frac{x}{2a^2(a^2+x^2)} + \frac{1}{a^3} \arctg \frac{x}{a}; \quad (332a)$$

$$\int \frac{x^2 dx}{(a^2+x^2)^2} = -\frac{x}{2(a^2+x^2)} + \frac{1}{2a} \arctg \frac{x}{a}, \quad (332б)$$

где  $a=y$ . Поэтому

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\varepsilon_{xx}(x, y>0) - \varepsilon_{xx}(x, y<0)) dx = \left( 2 \frac{1-\nu^2}{E} \beta_1 \arctg \frac{x}{a} \right) \Big|_{-\infty}^{+\infty} = \frac{1-\nu}{G} \frac{\beta_1}{2} 2\pi. \quad (333)$$

Итак,

$$\beta_1 = -\frac{Gb}{4\pi(1-\nu)}. \quad (334)$$

Отсюда получаются окончательные выражения для компонент тензора напряжений, которые были приведены выше без вывода [см. (293)].

Рассчитаем также гидростатическое давление около дислокации:

$$p = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{\nu} + 1 \right) \sigma_{zz} = -\frac{Gb}{3\pi} \cdot \frac{1+\nu}{1-\nu} \cdot \frac{y}{x^2+y^2} = -\frac{Gb}{3\pi} \cdot \frac{1+\nu}{1-\nu} \cdot \frac{\sin \theta}{r}. \quad (335)$$

При  $y > 0$ , или  $\theta \leq 180^\circ$ , то есть выше линии дислокации, расположена область сжатия, ниже при  $y < 0$  — область растяжения. Максимальное расширяющее давление действует прямо под экстраплоскостью. При  $x=0$  и  $y < 0$  давление  $p \sim |y|^{-1}$ , то есть неограниченно возрастает по мере приближения к линии дислокации. Но в решётке наименьшее значение  $y$  есть межатомное расстояние  $b$ , поэтому

$$p_{\max} \approx \frac{G}{3\pi} \cdot \frac{1+\nu}{1-\nu}. \quad (336)$$

Прямой расчёт плотности упругой энергии деформации даёт результат

$$w(r, \theta) = \frac{1}{2} \sigma_{ij} e_{ij} = \frac{Gb^2}{8\pi^2(1-\nu)^2} \cdot \frac{1-2\nu \sin^2 \theta}{r^2}, \quad (337)$$

где  $\sigma_{ij} e_{ij} = \sigma_{xx} \varepsilon_{xx} + \sigma_{yy} \varepsilon_{yy} + 2\tau_{xy} \varepsilon_{xy}$ , а связь  $\sigma_{ij}$ ,  $\varepsilon_{ij}$  задана уравнениями (302) и (303). Полная упругая энергия краевой дислокации может быть получена интегрированием функции  $w$  по всему объёму:

$$W = \int_0^L dz \int_{r_y}^R r dr \int_0^{2\pi} w(r, \theta) d\theta = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} L \ln \frac{R}{r_y}. \quad (338)$$

Здесь учтено, что  $\int_0^{2\pi} (1-2\nu \sin^2 \theta) d\theta = 2\pi(1-\nu)$ . Более простой способ расчёта  $W$  рассмотрен выше (см. раздел 3.1.2).

Дислокация произвольной формы. За время развития теории дислокаций были предприняты удачные попытки получить общие решения для полей смещения, деформации и напряжения в форме интегралов по контуру площади, охваченной незавершённым сдвигом.

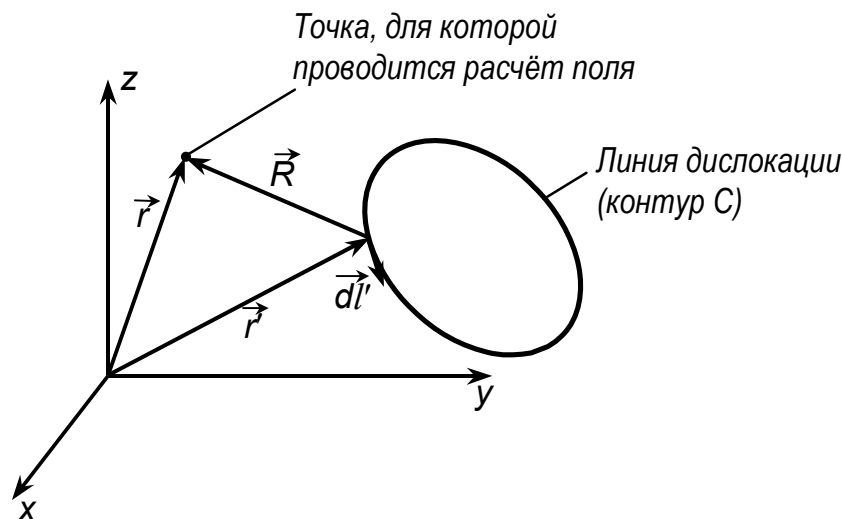


Рис. 102. Обозначения векторов и координат, принятые в формуле (339)



Бюргерс (1939 г.) получил решения для поля векторов смещения в форме

$$\vec{u}(\vec{r}) = -\frac{\vec{b}\Omega}{4\pi} - \frac{1}{4\pi} \oint_C \frac{\vec{b} \times \vec{dl}'}{R} - \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{\lambda + G}{\lambda + 2G} \text{grad} \oint_C \frac{(\vec{b} \times \vec{R}) dl'}{R}, \quad (339)$$

где  $\lambda = \frac{2G\nu}{1-2\nu}$ . В эту формулу, помимо контурных интегралов, входит те-

лесный угол  $\Omega(\vec{r}) = \int_{\Sigma} \frac{\vec{R} \cdot \vec{n}}{R^3} dS'$ , под которым из точки наблюдения поля  $\vec{r}$

видна поверхность сдвига  $\Sigma$ , опирающаяся на контур  $C$ . Когда используют это решение для прямолинейной дислокации любого вида, то контур  $C$  берут в виде полуокружности радиусом  $R_0$ , вдоль диаметра которой расположена линия дислокации, вычисляют вектор смещения  $\vec{u}(\vec{r})$  на основе формулы (339) и далее устремляют  $R_0 \rightarrow \infty$ . Вычисления удобно проводить в сферической системе координат  $(r, \theta, \phi)$  для точки наблюдения и  $(r', \theta', \phi')$  для координат контура (рис. 102).

Пичу и Келеру (1950 г.) удалось преобразовать производные от телесного угла к контурным интегралам и получить общую формулу для компонент тензора напряжений в виде контурного интеграла

$$\sigma_{mn}(\vec{r}) = \frac{Gb_q}{4\pi} \oint_C \left[ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_p} \frac{\partial}{\partial x_p} \frac{\partial}{\partial x_j} R (e_{njq} dl'_m + e_{mj q} dl'_n) + \right. \\ \left. + \frac{m}{m-1} e_{kjq} \left( \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_m} \frac{\partial}{\partial x_n} R - \delta_{mn} \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_p} \frac{\partial}{\partial x_p} R \right) dl'_k \right], \quad (340)$$

где  $m = 2(\lambda + G)/\lambda$ ,  $R = \sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2}$ . По повторяющимся индексам необходимо суммировать. При использовании уравнения Пича – Келера следует иметь в виду, что  $\frac{\partial}{\partial x_i} R = \frac{X_i}{R}$ ;  $\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} R = \frac{\delta_{ij}}{R} - \frac{X_i X_j}{R^3}$ ;

$\frac{\partial^2}{\partial x_p \partial x_p} R = \Delta R = \frac{2}{R}$ ;  $\frac{\partial}{\partial x_p} \frac{\partial}{\partial x_p} \frac{\partial}{\partial x_k} R = -\frac{2X_k}{R^3}$ ;  $X_i = x_i - x'_i$ ;  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера;  $e_{ijk}$  — тензор Леви-Чивитта.

Расчёты полей напряжений криволинейных дислокаций и дислокационных петель требуют нахождения очень сложных интегралов, часто не выражающихся в элементарных функциях. Например, согласно Марцинковскому и Шри Харше (1968 г.), напряжения вокруг круговой петли выражаются через эллиптические интегралы. Приведём для примера формулу для напряжения  $\tau_{zx}$ :

$$\tau_{zx} = -\frac{GbR}{\pi} \left( A + By^2 + \frac{A + Cz^2 + (B + Ez^2)x^2}{1 - \nu} \right), \quad (341)$$

где  $A = \frac{2\tilde{E} - (2-k^2)\tilde{K}}{\rho s k^2}$ ;  $B = -\frac{a^2 C + 3A}{2\rho^2}$ ;  $C = -\frac{3\tilde{F}}{s^6 k^2 (1-k^2)}$ ;  $E = -\frac{a^2 F + 5C}{2\rho^2}$ ;

$$F = \frac{1}{\rho s^5 (1-k^2)} \left[ \frac{(2-k^2)\tilde{K} - 2(1-2k^2)\tilde{E}}{k^2} - \frac{2(2-k^2)\tilde{E}}{1-k^2} \right]; \quad \tilde{F} = \frac{s^3}{3\rho} [2(1-k^2)\tilde{K} - (2-k^2)\tilde{E}];$$

$$\tilde{K} = \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \varphi}} \quad \text{и} \quad \tilde{E} = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1-k^2 \sin^2 \varphi} d\varphi \quad \text{— полные эллиптические ин-}$$

тегралы первого и второго рода соответственно;  $R$  — радиус петли;  $\rho^2 = x^2 + y^2$ ;  $a^2 = z^2 + R^2 - \rho^2$ ;  $s^2 = z^2 + (R + \rho)^2$ ;  $k^2 = 4\rho R/s^2$ ; считается, что петля лежит в плоскости  $xOy$ , вектор Бюргерса  $\vec{b}$  направлен вдоль оси  $x$ , а начало координат находится в центре петли. Несколько профилей  $\tau_{zx}$ , рассчитанных по формуле (341), приведены на рис. 103.

Энергия дислокаций. Рассмотрим дислокацию, создающую собственное поле деформаций и напряжений  $e_{ij}^d$  и  $\sigma_{ij}^d$  и находящуюся в некотором внешнем поле напряжений  $\sigma_{ij}^{BH}$ . В рамках линейной теории упругости полные напряжение и деформация рассчитываются как суммы

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^d + \sigma_{ij}^{BH} \quad (342a)$$

и

$$e_{ij} = e_{ij}^d + e_{ij}^{BH}. \quad (342b)$$

Для полной упругой энергии справедливо равенство

$$W = \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij} e_{ij} dV = \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij}^d e_{ij}^d dV + \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij}^{BH} e_{ij}^{BH} dV + \frac{1}{2} \int_V (\sigma_{ij}^{BH} e_{ij}^d + \sigma_{ij}^d e_{ij}^{BH}) dV. \quad (343)$$

В правой части последнего выражения первый и второй интегралы имеют смысл упругой энергии дислокации и внешнего поля напряжений по отдельности, а третий интеграл представляет энергию упругого взаимодействия  $E_{B3}$  двух систем напряжений. Так как по  $i$  и  $j$  в этом интеграле идёт суммирование, то оба слагаемых под интегралом одинаковы, и

$$E_{B3} = \int_V \sigma_{ij}^{BH} e_{ij}^d dV = \int_V \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i^d}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^d}{\partial x_i} \right) \sigma_{ij}^{BH} dV = \int_V \frac{\partial u_i^d}{\partial x_j} \sigma_{ij}^{BH} dV, \quad (344)$$

так как  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ . Обратим внимание, что

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (u_i \sigma_{ij}) = u_i \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (345)$$

Однако если объёмные силы отсутствуют, то, согласно условию равновесия,  $\partial \sigma_{ij} / \partial x_j = 0$ , и тогда

$$E_{B3} = \int_V \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i^d \sigma_{ij}^{BH}) dV = \int_V \text{div}(\vec{u} \cdot \hat{\sigma}) dV. \quad (346)$$

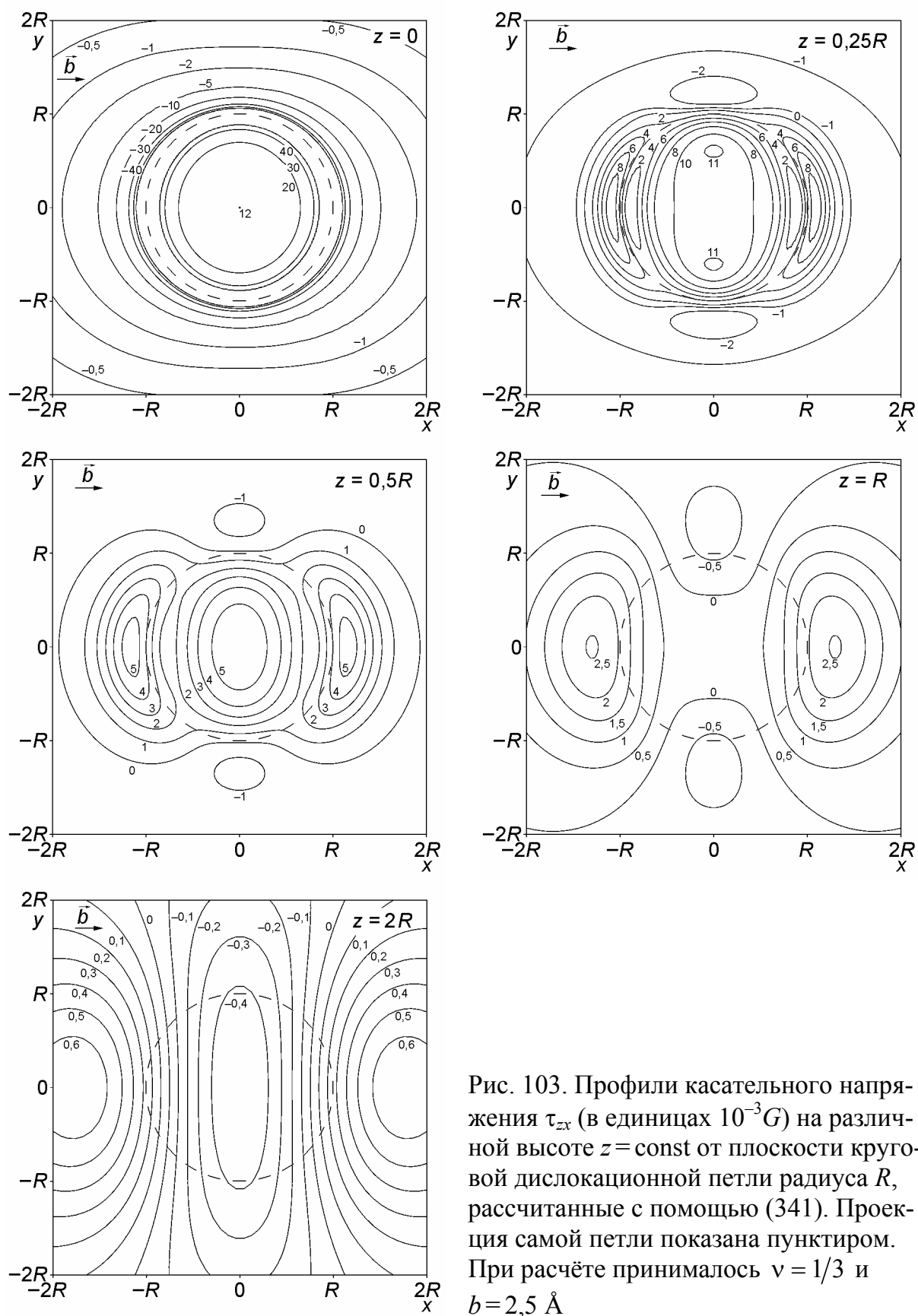


Рис. 103. Профили касательного напряжения  $\tau_{zx}$  (в единицах  $10^{-3}G$ ) на различной высоте  $z = \text{const}$  от плоскости круговой дислокационной петли радиуса  $R$ , рассчитанные с помощью (341). Проекция самой петли показана пунктиром. При расчёте принималось  $\nu = 1/3$  и  $b = 2,5 \text{ \AA}$

Под интегралом появляется дивергенция вектора  $\vec{A}$ , возникающего при умножении вектора  $\vec{u}$  на тензор напряжения  $\hat{\sigma}$ . Вспомним теорему Стокса, по которой объёмный интеграл от дивергенции вектора равен потоку вектора через поверхность, ограничивающую этот объём:  $\int_V \text{div } \vec{A} dV = \oint_S \vec{A} dS$ . Тело

ограничивают две поверхности: одна — внешняя поверхность, но на бесконечности  $\vec{u} = 0$ , вторая — поверхность  $\Sigma$ , по которой был проведён незавершённый сдвиг. У этой поверхности две стороны, так что её можно считать замкнутой. Итак,

$$E_{\text{вз}} = \oint_S u_i^{\text{д}} \sigma_{ij}^{\text{вн}} dS_j. \quad (347)$$

Замкнутая поверхность  $S$  фактически состоит из двух поверхностей  $\Sigma$ , смещённых друг относительно друга на вектор  $\vec{b}$ , однако их нормали направлены в противоположные стороны. Поэтому в (347) можно ограничиться интегрированием по положительной стороне разреза:

$$E_{\text{вз}} = b_i \int_{\Sigma} \sigma_{ij}^{\text{вн}} dS_j, \quad (348)$$

так как  $u_i^+ + u_i^- = b_i$ .

Формула (348) широко применяется в теории дислокаций для расчётов энергии взаимодействия. Если внешние напряжения заменить на напряжения от другой дислокации  $\sigma_{ij}^{(2)}$ , а  $b_i$  на  $b_i^{(1)}$ , то эта формула позволит рассчитать энергию взаимодействия двух дислокаций. А если под  $\sigma_{ij}^{\text{вн}}$  понимать напряжения, создаваемые этой же дислокацией, то уравнение (348) определит собственную энергию дислокации.

Этим способом, проведя интегрирование по площади круга петли Крёнер получил следующее выражение для упругой энергии круговой скользящей дислокационной петли радиусом  $a$ :

$$W = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \cdot \frac{2-\nu}{2} \cdot 2\pi a \left( \ln \frac{4a}{r_y} - 1 \right). \quad (349)$$

Покажем далее, как на основе формулы (348) получить выражение для сил, действующих на дислокацию. Пусть некоторый элемент  $\vec{\delta l} = \delta x_k \vec{e}_k$  дислокационной линии перемещается на вектор  $\vec{dr} = dx_m \cdot \vec{e}_m$ . При этом возникает добавочная поверхность  $[\vec{\delta l} \times \vec{dr}]$ . Векторное произведение записано, чтобы отразить учесть положение нормали к образовавшейся поверхности. Изменение энергии взаимодействия элемента дислокации и внешнего напряжения составит

$$dE_{\text{вз}} = b_i \sigma_{ij} \cdot [\vec{\delta l} \times \vec{dr}]_j. \quad (350)$$

Но

$$[\vec{\delta l} \times \vec{dr}]_j = \vec{e}_j [\delta x_k dx_m \cdot \vec{e}_k \times \vec{e}_m] = e_{jkm} \delta x_k dx_m, \quad (351)$$

следовательно:

$$dE_{\text{вз}} = e_{jkm} b_i \sigma_{ij} \delta x_k dx_m. \quad (352)$$

Компоненты силы  $f_n$ , действующей на единицу длины, вычислим по аналогии с (260)–(262):

$$f_n = -\frac{1}{\delta l} \frac{dE_{\text{вз}}}{dx_n} = -e_{jkm} b_i \sigma_{ij} \frac{\delta x_k}{\delta l} \delta_{n,m}, \quad (353)$$

ибо  $\frac{dx_m}{dx_n} = \delta_{n,m}$ . Отношение  $\frac{\delta x_k}{\delta l}$  представляет проекцию на ось  $x_k$  вектора  $\vec{e}_L$  направления линии в данной точке  $e_{L,k}$ . Учитывая, что  $\delta_{n,m}$  отлично от нуля, если  $n=m$ , и что допустима циклическая перестановка индексов у тензора  $e_{jkn}$ , приходим к формуле (260).

## 6.2. ХАРАКТЕРИСТИКИ И ПРОЦЕССЫ, СВЯЗАННЫЕ С УПРУГОЙ ЭНЕРГИЕЙ ДИСЛОКАЦИИ

В силу второго закона термодинамики самопроизвольные процессы протекают только при понижении свободной энергии  $F$ , а равновесие соответствует минимуму  $F$ . Дислокации обладают небольшой энтропией, вследствие чего роль слагаемого  $(-TS)$  невелика. Можно принять, что минимум энергии при невысоких температурах примерно совпадает с минимумом свободной энергии. Поэтому принцип минимума энергии часто используется в теории дислокаций. Важно иметь в виду, что сама дислокация является хотя и весьма устойчивым, но неравновесным образованием. Абсолютный минимум энергии соответствует бездислокационному кристаллу. Однако время перехода реального кристалла к такому состоянию очень велико. В принципе количество дислокаций разного знака в кристалле должно быть одинаковым. Аннигиляция одиночных дислокаций может проходить достаточно быстро, если скорость диффузии вакансий может обеспечить необходимую скорость переползания краевых дислокаций. Однако при уменьшении числа дислокаций аннигиляция затрудняется вследствие возникновения устойчивых сложных дислокационных комплексов, имеющих более низкую упругую энергию, чем в исходном (после деформации) состоянии или при хаотическом расположении дислокаций. В таких случаях приходится рассматривать процессы, приводящие к уменьшению упругой энергии без изменения количества дислокаций. Итак, упругая энергия уменьшается благодаря а) реакциям объединения и аннигиляции дислокаций; б) уменьшению длины дислокации; в) такому взаимному расположению дислокаций, при котором происходит компенсация полей напряжений в окружающих областях пространства.

### 6.2.1. Натяжение дислокационной линии

Если к концу упругой нити, закреплённой с другого конца, приложить усилие  $P$ , то вдоль нити возникнет натяжение  $T$ , обусловленное, подобно нормальному напряжению, силами межатомного сцепления. Очевидно, что  $P = -T$ , то есть обе силы направлены в разные стороны и уравнивают друг друга. Упругая энергия  $dW$  натянутой нити равна работе, совершаемой против силы натяжения при удлинении на  $dL$ , поэтому

$$T = \frac{dW}{dL}. \quad (354)$$

Во многих процессах, связанных с движением дислокаций, их линии ведут себя подобно резиновым нитям, то есть изгибаются под действием локальных сил или вокруг препятствий и вновь выпрямляются, если силы или препятствия исчезают. Иначе говоря, дислокационная линия также обладает натяжением. Появление натяжения непосредственно связано с существованием поля упругих деформаций около дислокации, энергия которого на единицу её длины составляет примерно  $\alpha Gb^2$ . Если длина дислокации увеличилась на  $\Delta L$ , то и упругая энергия увеличивается на  $\Delta W = \alpha Gb^2 \Delta L$ . Дислокация будет стремиться выпрямиться, чтобы уменьшить упругую энергию. Это стремление можно выразить силой  $T$ , которая определена как  $\Delta W / \Delta L$ , а поэтому по модулю равна  $\alpha Gb^2$ . Сила натяжения всегда действует вдоль дислокационной линии, и благодаря натяжению дислокация всегда стремится принять прямолинейную форму.

Рассмотрим теперь напряжение, необходимое для изгиба дислокационной линии. Изгиб дислокационной линии получается в том случае, когда какой-либо её участок или отдельные точки оказываются закреплёнными включениями фаз, дислокациями другой системы или иными препятствиями. Тогда под влиянием силы от внешнего напряжения  $\tau b$ , действующей на каждый единичный элемент длины, дислокация будет прогибаться между частицами (рис. 104). Рассмотрим равновесие изогнутого бесконечно малого элемента дислокационной линии  $r\Delta\theta$ , имеющего радиус кривизны  $r$  (рис. 105). Вертикально вверх со стороны внешнего напряжения на элемент действует сила  $F_1 = \tau b r \Delta\theta$ , а в тангенциальных направлениях — силы натяжения. Спроектируем силы на вертикальную ось и учтём, что в условиях равновесия сумма проекций равна нулю. Имеем

$$F_1 = 2T \cos\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\Delta\theta}{2}\right) \approx 2T \frac{\Delta\theta}{2}. \quad (355)$$

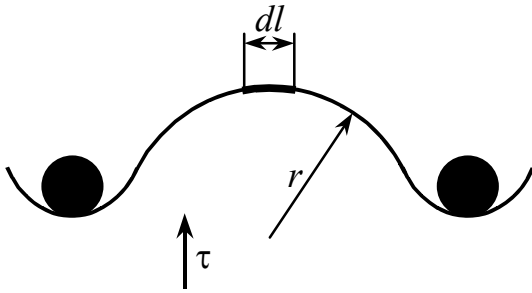


Рис. 104. Изгиб движущейся дислокационной линии, вызванный частицами второй фазы

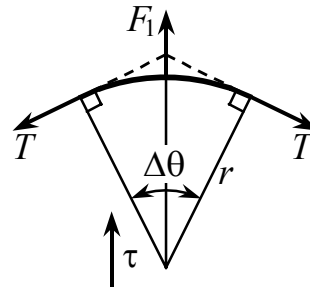


Рис. 105. К расчёту радиуса кривизны дислокационной линии

Отсюда следуют выражения

$$\tau = \frac{T}{br} = \alpha \frac{Gb}{r}; \quad (356a)$$

$$r = \frac{T}{\tau b} = \alpha \frac{Gb}{\tau}, \quad (356b)$$

связывающие  $\tau$  и  $r$ . Первое определяет напряжение, необходимое для изгиба до радиуса кривизны  $r$ , второе — радиус  $r$  при данном уровне  $\tau$ .

Рассмотрим в заключение некоторые проблемы, возникающие в связи с введением понятия натяжения дислокационной линии.

1. Обратим внимание на формулу (349) для упругой энергии круговой дислокационной петли радиусом  $R$ . Так как длина петли  $2\pi R$ , то натяжение линии, определённое по (354),

$$T = \frac{\partial W}{\partial(2\pi R)} = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{2-\nu}{4} \cdot \ln \frac{4R}{r_y}, \quad (357)$$

оказывается зависящим от радиуса петли  $R$ . Если, например, радиус петли  $R = 1000 \text{ \AA}$ , то коэффициент  $\alpha \approx 0,6$  — примерно такой же, как для прямолинейной дислокации. Но если  $R = 50 \text{ \AA}$ , то  $\alpha \approx 0,3$ . При уменьшении радиуса петли сила натяжения уменьшается.

2. Дислокации имеют длину порядка размера зерна, то есть макроскопического размера при радиусе (ядра) около  $10 \text{ \AA}$ . Кажется невероятным, чтобы при движении такой линии выполнялось синхронное перемещение обоих концов дислокации. Принято считать, и этому есть экспериментальное подтверждение, что движение линии проходит не одновременно во всех точках, а случайным перебросом отдельных участков линии из одной «ложбины» потенциальной энергии в соседнюю. Затем перемещаются другие участки, так что даже кажущаяся прямолинейной дислокация всегда имеет форму ломаной (рис. 106), то есть состоит из прямых участков средней длины  $l$ , заканчивающихся перегибами. Такое состояние дислокации можно считать естественным. Для краевой дислокации перегибы являются

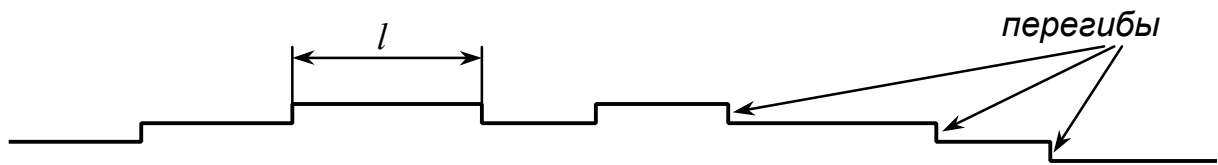


Рис. 106. Реальная форма прямолинейной дислокации

участками винтовой ориентации, а их длина равна  $b$ . В случае винтовой дислокации перегибы имеют краевую ориентацию. Когда дислокация выбрасывает вперёд «язык», то он включает два перегиба, знаки которых противоположны. Наличие перегибов создаёт отличие дислокации от упругой струны. В случае дислокации с перегибами сила натяжения определяется более сложным уравнением (Вит и Кёлер, 1959):

$$T = \frac{\partial W}{\partial L} \left( 1 + \frac{\partial^2 W}{\partial \alpha^2} \right). \quad (358)$$

### 6.2.2. Дислокационные реакции

Предположим, что в кристалле с простой кубической решёткой возникла дислокация с вектором Бюргерса  $\vec{b} = 4a[100]$ ; такой вектор является трансляционным, хотя искажения вокруг дислокации очень велики (рис. 107). Упругая энергия дислокации  $\frac{W}{L} = 16 \frac{Ga^2}{2}$ . Такая дислокация может разделиться на четыре дислокации  $a<100>$  с меньшими по модулю трансляционными векторами Бюргерса. Когда новые дислокации разойдутся на достаточно большие расстояния так, чтобы можно было пренебречь их

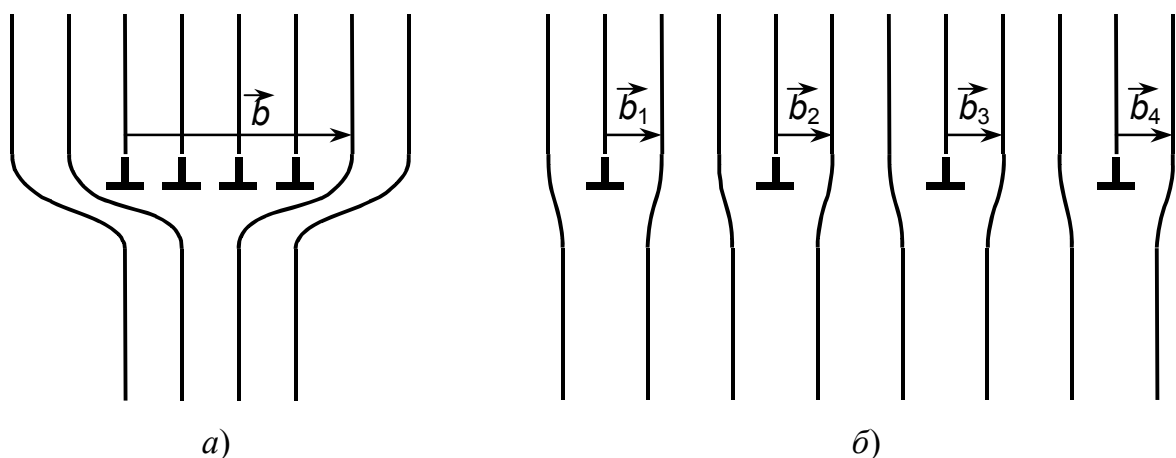


Рис. 107. Разделение дислокации  $\vec{b} = 4a[100]$  (а) на четыре единичных дислокации  $a<100>$  (б)



взаимодействием, то упругая энергия каждой окажется  $\frac{W}{L} = \frac{Ga^2}{2}$ , а в сумме  $4\frac{Ga^2}{2}$ . Таким образом, после деления упругая энергия уменьшится в четыре раза. Следовательно, эта реакция обязательно произойдёт. Дислокации с большими по модулю векторами сдвига будут делиться на дислокации с более короткими векторами. Самыми устойчивыми окажутся единичные дислокации, у которых вектор сдвига равен кратчайшим трансляционным векторам.

Тип единичных дислокаций зависит от кристаллической решётки рассматриваемого металла. Например, в ГЦК-решётке кратчайшие трансляции направлены вдоль малых диагоналей граней:  $\vec{b} = \frac{1}{2}a <110>$ . Имеется 12 неэквивалентных векторов, точнее, шесть попарно антипараллельных векторов. У ОЦК-кристаллов аналогичные векторы расположены вдоль пространственных диагоналей куба:  $\vec{b} = \frac{1}{2}a <111>$ . Напомним, что символ семейства  $< >$  для кубической сингонии позволяет расставить три индекса в произвольном порядке, а также произвольно изменять знак каждого индекса. Следовательно, совокупность всех векторов Бюргерса единичных дислокаций выглядит так:  $\frac{1}{2}a[111]$ ;  $\frac{1}{2}a[\bar{1}11]$ ;  $\frac{1}{2}a[1\bar{1}1]$ ;  $\frac{1}{2}a[11\bar{1}]$ ;  $\frac{1}{2}a[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ ;  $\frac{1}{2}a[\bar{1}\bar{1}1]$ ;  $\frac{1}{2}a[\bar{1}1\bar{1}]$ ;  $\frac{1}{2}a[1\bar{1}\bar{1}]$  (см. ниже рис. 138, глава 8).

### 6.2.3. Образование дислокационных сеток

Вернёмся к механизму образования дислокаций при кристаллизации. На рис. 76 отражено уменьшение межатомных расстояний в направлении градиента температуры, приводящее к образованию краевых дислокаций, линии которых параллельны оси  $y$ . Однако абсолютно такая же картина должна наблюдаться и в сечении  $yOz$  — там также происходит уменьшение межатомных расстояний от слоя к слою и, соответственно, обрывы вертикальных плоскостей. Фактически в плоскостях, параллельных фронту кристаллизации, возникают две системы параллельных между собой, но перпендикулярных друг другу дислокаций; одна из них ориентирована вдоль оси  $y$ , другая — вдоль оси  $x$ , как это показано на рис. 108.

Итак, возникла квадратная сетка дислокаций. Допустим для определённости, что речь идёт об ОЦК-решётке и что для рассматриваемых дислокаций  $\vec{b}_1 = \frac{1}{2}a[111]$ ;  $\vec{b}_2 = \frac{1}{2}a[\bar{1}\bar{1}1]$ . В исходной сетке имеются узлы, в которых дислокации разных систем соединяются. Поэтому, начиная от этих точек, возможно дальнейшее соединение дислокаций, приводящее к появлению участков новых дислокаций. Предположим, что новая дислокация III воз-

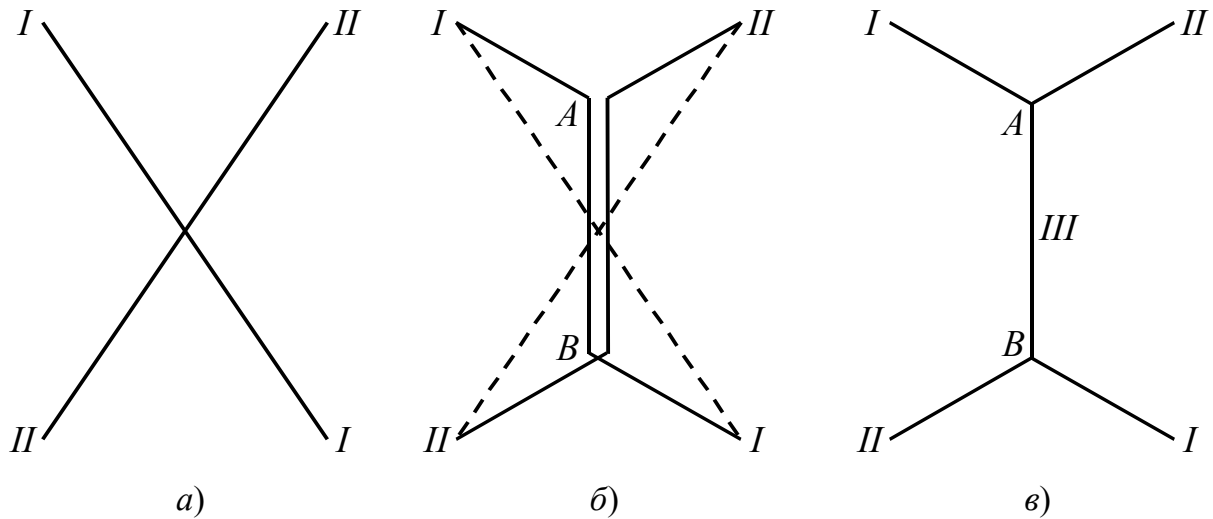


Рис. 108. Образование новых дислокаций в узлах дислокационной сетки. *а* — пересекающиеся дислокации; *б* — на участке *AB* линии дислокаций устанавливаются параллельно; *в* — параллельные участки образуют новую дислокацию

ника. Её вектор Бюргерса  $\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$ . При сложении векторов складываются компоненты по соответствующим осям. Простой расчёт даёт

$$\vec{b}_3 = a[\frac{1}{2} - \frac{1}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2}; \frac{1}{2} + \frac{1}{2}] = a[001]. \quad (359)$$

Рассчитаем теперь упругую энергию единицы длины исходных дислокаций:  $\frac{Gb_1^2}{2} = \frac{G}{2} \left( \frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4} \right)$ ;  $\frac{Gb_2^2}{2} = \frac{G}{2} \left( \frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4} \right)$ , а в сумме  $\frac{3Ga^2}{4}$ .

Упругая энергия возникшей дислокации  $\frac{Gb_3^2}{2} = \frac{Ga^2}{2}$ . Итак, мы видим, что

при образовании дислокации  $\vec{b}_3$  упругая энергия понижается в полтора раза. Следовательно, слияние дислокаций *I* и *II* будет происходить вследствие действия принципа минимума энергии. В то же время образование новых дислокаций сопровождается увеличением суммарной протяжённости дислокационных линий. Реакция в итоге остановится, и участки новой дислокации будут сосуществовать с участками старых. Квадратная сетка превратится в гексагональную, четверные узлы — в тройные (рис. 109).

Далеко не всегда слияние двух дислокаций сопровождается уменьшением упругой энергии. Изменим вектор Бюргерса второй дислокации. Пусть  $\vec{b}_2 = \frac{1}{2}a[1\bar{1}1]$ . Тогда

$$\vec{b}_3 = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 = \frac{1}{2}a[111] + \frac{1}{2}a[1\bar{1}1] = a[101]. \quad (360)$$

Упругая энергия исходных дислокаций равна  $\frac{3}{2} \cdot \frac{Ga^2}{2}$ , а образующейся  $2 \frac{Ga^2}{2}$ .

В этом варианте дислокация *III* возникнуть не может, ибо её образование

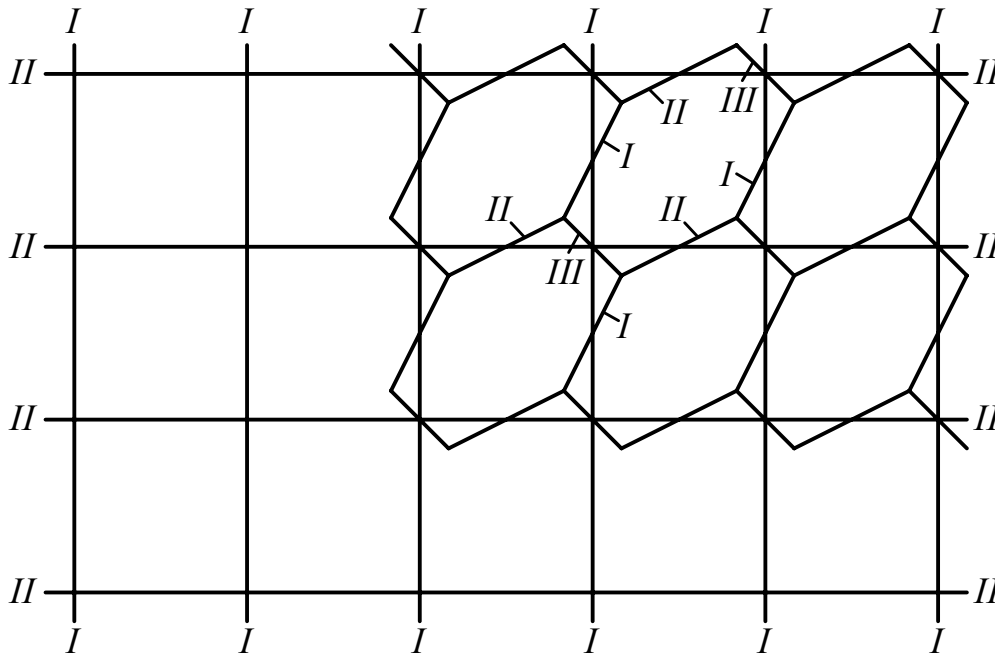


Рис. 109. Образование гексагональной сетки из пересекающихся рядов дислокаций

ведёт к возрастанию упругой энергии. Правило отбора реакций можно установить так. Рассчитаем упругую энергию дислокации *III* в общем виде:

$$\frac{W_3}{L} = \frac{G(\vec{b}_1 + \vec{b}_2)^2}{2} = \frac{G(b_1^2 + b_2^2 + 2\vec{b}_1\vec{b}_2)}{2} = \frac{Gb_1^2}{2} + \frac{Gb_2^2}{2} + G\vec{b}_1\vec{b}_2. \quad (361)$$

Величина  $\frac{Gb_1^2}{2} + \frac{Gb_2^2}{2}$  представляет суммарную упругую энергию исходных дислокаций. Третье слагаемое определяет величину и знак изменения полной упругой энергии при слиянии дислокаций. Слияние возможно, если  $G\vec{b}_1\vec{b}_2 = G|b_1||b_2|\cos\varphi < 0$ . Отрицательной эта величина может быть только в том случае, если угол  $\varphi$  между векторами Бюргерса дислокаций больше  $90^\circ$  (критерий Франка). В первом варианте  $\cos\varphi_1 = \cos([111]\hat{[1\bar{1}1]}) = \frac{-1 \cdot 1 - 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1}{\sqrt{3}\sqrt{3}} = -\frac{1}{3}$ , а  $\varphi_1 = 121,6^\circ$ . Во втором случае  $\cos\varphi_2 = \cos([111]\hat{[1\bar{1}1]}) = \frac{1 \cdot 1 - 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1}{\sqrt{3}\sqrt{3}} = \frac{1}{3}$ , а  $\varphi_2 = 78,4^\circ$ . Для второго случая критерий Франка не выполняется, поэтому дислокационная реакция невозможна.

В заключение отметим, что сетка на рис. 109 отражает лишь идеальную ситуацию. В действительности градиент температуры не вполне одинаков по фронту кристаллизации. Следовательно, дислокации не расположены точно в одной горизонтальной плоскости: одни лежат немного выше, дру-

гие немного ниже. То же относится и к дислокациям типа II. Сетка дислокаций оказывается не плоской, а пространственной, но сплюснутой.

#### 6.2.4. Работа источников Франка – Рида

В ходе пластической деформации дислокации, находящиеся в кристалле, должны «пробежать» через всю плоскость скольжения и выйти на поверхность, создав ступеньку скольжения. Вскоре мы обнаружим, что все дислокации, образовавшиеся при кристаллизации, выйдут из кристалла. Но для развития процесса пластической деформации необходимо, чтобы в кристалле всё время появлялись новые дислокации. Кроме того, опыт показывает, что с увеличением степени пластической деформации плотность дислокаций в кристалле существенно возрастает. Один из возможных способов размножения дислокаций в процессе пластической деформации был предложен Франком и Ридом.

Рассмотрим сегмент дислокационной сетки  $AB$ , имеющий краевую ориентацию и способный перемещаться (рис. 110, *a*). Другие элементы дислокационной сетки, сходящиеся в узлах  $A$  и  $B$ , не лежат в плоскости чертежа и двигаться не могут. Неподвижность соседних элементов может быть обусловлена различными причинами: отсутствием или недостаточностью напряжений в соответствующих плоскостях, а также неспособностью элементов сетки к консервативному движению.

Под воздействием напряжения линия краевой дислокации  $AB$  начнёт изгибаться в плоскости скольжения (рис. 110, *б*). Увеличение длины дислокации компенсируется работой внешних сил. С увеличением напряжения возникает дислокационная петля, образованная отрезком краевой дислокации и двумя отрезками винтовых дислокаций (рис. 110, *в*). Если при обходе петли в одном направлении (или по часовой стрелке, или против) поставить стрелки, то легко убедиться, что отрезки винтовых дислокаций

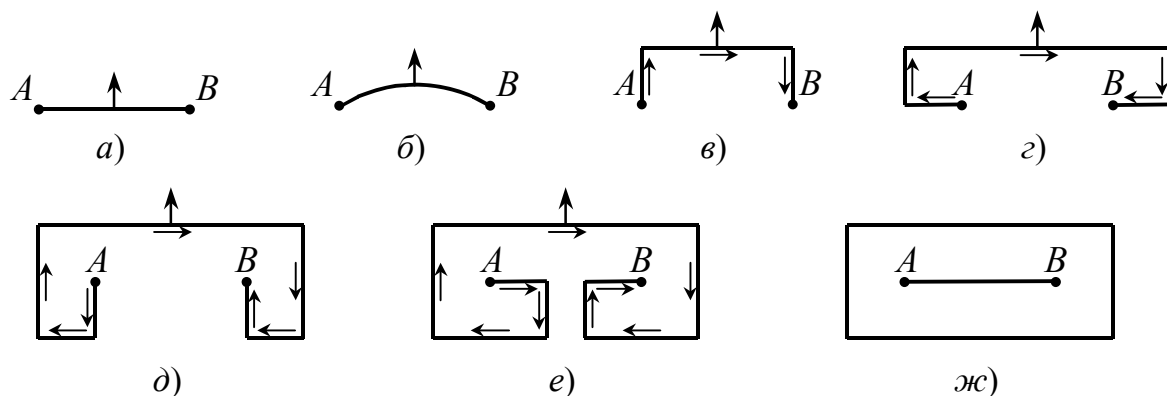


Рис. 110. Схема образования дислокационной петли источником Франка – Рида. *а–ж* — последовательные стадии

имеют разный знак и при дальнейшем расширении петли будут двигаться в противоположные стороны.

Движение краевого отрезка вперёд, а винтовых влево и вправо приведёт к образованию двух новых отрезков краевых дислокаций, знак которых будет обратным знаку исходной дислокации  $AB$  (рис. 110,  $з$ ). Благодаря движению этих двух краевых отрезков возникнет вновь два отрезка винтовых дислокаций (рис. 110,  $д$ ), которые двигаются навстречу друг другу, образуя при этом ещё два отрезка краевых дислокаций (рис. 110,  $е$ ). Вторая пара отрезков винтовых дислокаций, встречаясь, аннигилирует, в результате чего восстанавливается исходная дислокация  $AB$  (рис. 110,  $ж$ ), а расширение освободившейся от точек закрепления дислокационной петли на всю плоскость скольжения приводит к смещению по ней верхней части кристалла относительно нижней (вперёд) на величину вектора Бюргерса. Затем источник повторяет весь цикл изменений и генерирует вторую, третью и т.д. петлю. Повторение описанного процесса будет увеличивать величину сдвига по данной плоскости до макроскопических размеров. Процесс затормаживается и затем приостанавливается в связи с тем, что выпускаемые дислокационные петли наталкиваются на те или иные препятствия (границы зёрен, другие дислокации и др.). Остановившиеся дислокационные петли создают обратное касательное напряжение около источника и могут блокировать его работу. Количество дислокаций, создаваемых одним источником, обычно ограничено.

Схему на рис. 110 мы использовали для объяснения этапов работы источника Франка – Рида. В действительности дислокационная линия обладает натяжением. Поэтому изломы и углы на линии дислокации возникнуть не могут. Под действием касательных напряжений исходный прямой сегмент  $AB$  прогибается (рис. 111,  $б$ ) до радиуса кривизны  $r_1$ ,

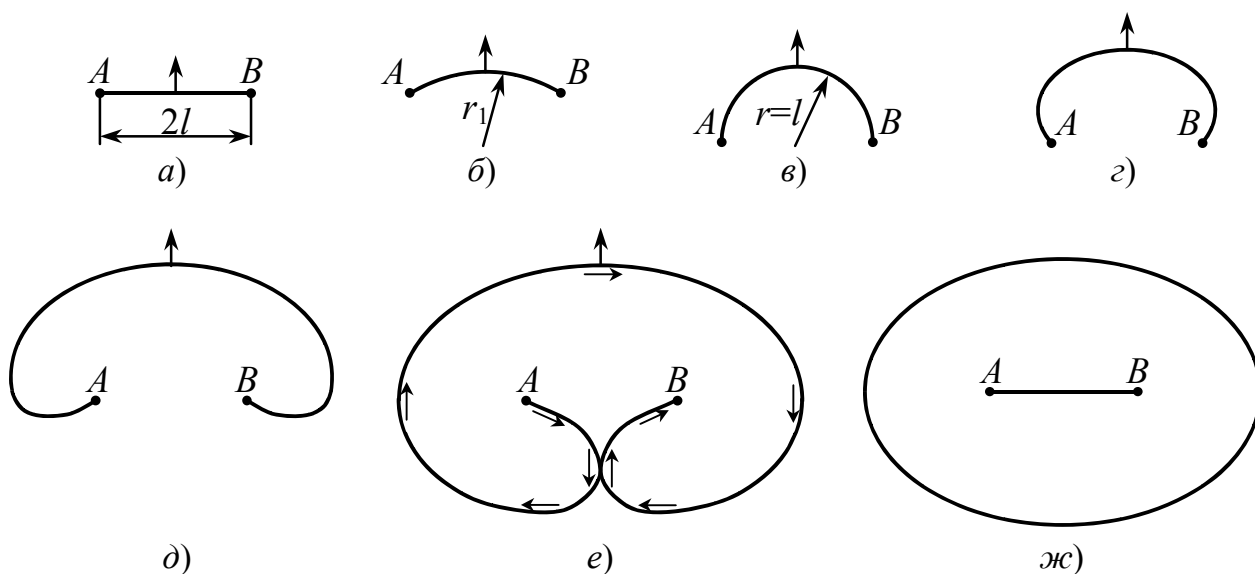


Рис. 111. Работа источника Франка – Рида

связанного с  $\tau$  выражением (356б). Рост напряжения будет вызывать уменьшение радиуса, но только до того момента, как сегмент изогнётся в полуокружность (рис. 111, в). Дальнейшее плавное изменение формы (рис. 111, г–е) связано с появлением участков меньшей кривизны, а поэтому не требует роста  $\tau$ . При встрече элементов петли «сзади» источника (рис. 111, е) они аннигилируют, петля отделяется от сегмента  $AB$ , а тот возвращается в исходное положение, после чего начинается новый цикл. Как следует из (356а), критическое напряжение срабатывания источника Франка – Рида, соответствующее изгибу сегмента до полуокружности,

$$\tau_s = \frac{Gb}{2l}, \quad (362)$$

где  $2l$  — длина сегмента  $AB$ .

### 6.3. ДЕФОРМАЦИЯ, СОЗДАВАЕМАЯ СКОЛЬЖЕНИЕМ ДИСЛОКАЦИЙ

Макроскопическая деформация нагружаемого образца становится заметной тогда, когда начинают генерировать дислокации многочисленные источники Франка – Рида. Каждая петля, порождённая источником, теоретически может пройти весь сложный путь от точки рождения до внешней поверхности образца. Однако дислокации встречают разнообразные препятствия типа скоплений или сеток дислокаций, границ зёрен, частиц второй фазы, так что часть родившихся дислокаций «застревает» в кристалле, повышая плотность дислокаций в нём. Средняя площадь, по которой проходит сдвиг  $F_{cp} = \pi R_e^2$  меньше, чем площадь плоскости скольжения  $F_1$  (рис. 112). Здесь  $R_e$  — радиус или длина свободного пробега дислокационной петли, так как  $F_{cp} < F_1$ , то сдвиг, создаваемый одной петлёй, окажется меньше, чем межатомное расстояние  $b$ :

$$s = b \frac{F_{cp}}{F_1}. \quad (363)$$

Допустим, что все распределённые по образцу дислокационные источники создали  $N$  петель. При этом возникла плотность дислокаций

$$\rho = \frac{\sum_i L_i}{V} = N \frac{2\pi R_e}{V}, \quad (364)$$

где  $\sum_i L_i$  представляет полную протяжённость дислокационных линий в образце объёмом  $V$ . Полный сдвиг по рассматриваемым плоскостям скольжения

$$S = Ns = \frac{\rho V}{2\pi R_e} \cdot b \frac{F_{cp}}{F_1}, \quad (365)$$

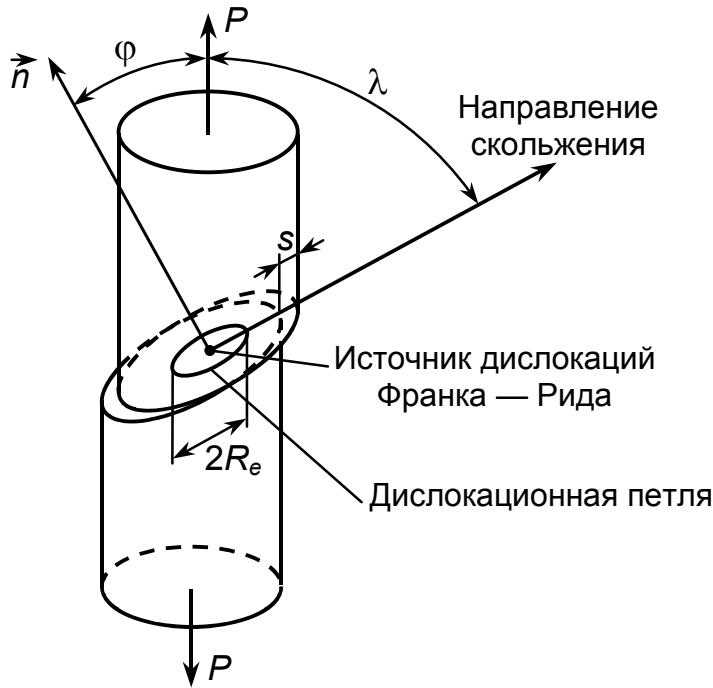


Рис. 112. Сдвиг, создаваемый дислокационной петлёй

а тогда деформация сдвига равна

$$\gamma = \frac{S}{A_1 N}, \quad (366)$$

где  $A_1 N$  — размер образца в направлении, перпендикулярном плоскости скольжения (см. рис. 59). Но так как  $A_1 N \cdot F_1 = V$ , то выражение для  $\gamma$  принимает вид

$$\gamma = \frac{1}{2} \rho b R_e. \quad (367)$$

Вектор сдвига  $\vec{S}$  имеет две компоненты: вертикальную  $S \cos \lambda$  и горизонтальную  $S \sin \lambda$ . Скольжение в поликристаллах проходит всегда по нескольким плоскостям. Для того, чтобы в ходе растяжения образец сохранил форму прямого цилиндра, необходимо, чтобы сумма  $\sum_n S \sin \lambda = 0$ .

Вертикальная составляющая даёт удлинение образца

$$\Delta l = S \cos \lambda, \quad (368)$$

тогда относительное удлинение

$$e = \frac{\Delta l}{l_0} = \frac{S \cos \lambda}{A_1 N} \cdot \frac{A_1 N}{l_0} = \gamma \cos \lambda \cos \varphi \quad (369)$$

(с учётом того, что  $A_1 N = l_0 \cos \varphi$ ) и, соответственно,

$$\gamma = e \cdot \frac{1}{\cos \lambda \cos \varphi}. \quad (370)$$

Если принять, что скольжение по каждой системе создаёт одинаковое удлинение, и провести усреднение по всем системам, то окажется, что

$$\gamma = \bar{m}e, \quad (371)$$

или

$$e = \frac{1}{m}\gamma = \frac{1}{2\bar{m}}\rho b R_e, \quad (372)$$

где  $\bar{m}$  — средний ориентационный фактор.

Таким образом, деформация сдвига или относительное удлинение в пластической области определяются плотностью дислокаций и длиной свободного пробега  $R_e$ . Продифференцировав это выражение по времени, найдём скорость деформации

$$\dot{e} = \frac{1}{2\bar{m}}b(\dot{\rho}R_e + \rho\dot{R}_e). \quad (373)$$

Здесь величина  $\dot{R}_e$  представляет скорость движения дислокации  $v$ . Как показывает опыт, плотность дислокаций изменяется со временем слабо (но каждый раз этот факт следует доказывать!), поэтому с хорошей точностью

$$\dot{e} = \frac{1}{2\bar{m}}b\rho v, \quad (374)$$

то есть скорость деформации определяется скоростью движения дислокаций в ходе деформирования и их плотностью.

## 6.4. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИСЛОКАЦИЙ

При напряжении немного выше предела текучести пластическая деформация происходит сначала за счёт скольжения по параллельным плоскостям, что приводит к повороту таких плоскостей относительно оси нагружения и включению в работу новых, пересекающих исходные плоскостей скольжения. Соответственно, в первом случае должны упруго взаимодействовать параллельные дислокации в параллельных плоскостях, а во втором должно наблюдаться пересечение дислокаций, относящихся к пересекающимся плоскостям скольжения. Важно помнить, что скользящие дислокации порождаются источниками Франка – Рида, количество которых в кристалле огромно. Соответственно рождается огромное количество дислокационных петель. Часть этих петель, проходя через границы зёрен, выходят на внешнюю поверхность образца и, создавая ступеньки сдвига, осуществляет требуемое изменение формы. Другая часть рождённых дислокаций «застревает» внутри образца, увеличивая плотность дислокаций. Именно эти «застрявшие» дислокации обычно и являются предметом металлофизических исследований. «Застрявшие» дислокации наряду с границами зёрен, атомами примесей и частицами второй фазы создают препятствия движению новых, только что порождённых дислокаций, что вызывает необходимость повышения деформирующих напряжений.



### 6.4.1. Упругое взаимодействие параллельных дислокаций

Рассмотрим взаимодействие параллельных краевых дислокаций одного знака  $b_1$  и  $b_2$ , расположенных в параллельных плоскостях скольжения, удалённых друг от друга на расстояние  $h$  (рис. 113). Первая дислокация, условно закреплённая в начале координат, создаёт вокруг себя поле упругих напряжений. В частности, касательное напряжение

$$\tau_{xy}^{(1)} = \frac{Gb_1}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

действует перпендикулярно линии второй дис-

локации в направлении её вектора Бюргерса, а потому создаёт действующую на неё силу

$$f_x = \tau_{xy}^{(1)} b_2 = \frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - h^2)}{(x^2 + h^2)^2}. \quad (375)$$

График этой функции показан на рис. 113. Сила обращается в ноль в точках  $x=0$  и  $\pm h$ . Следовательно, в этих точках дислокация  $b_2$  находится в состоянии равновесия, а сила  $f_x$  при переходе через эти точки изменяет знак. Направления действия силы в разных интервалах изменения  $x$  показаны на рисунке стрелками. Допустим, что вторая дислокация расположена в точке  $x=0$ , то есть над первой. Поскольку линия дислокации состоит из атомов, совершающих непрерывные колебания, то линия дислокации  $b_2$  будет совершать непрерывные колебания относительно позиции равновесия  $x=0$ . Если линия или её часть перемещается вправо, где  $x>0$ , на неё будет действовать сила  $f_x$ , направленная влево, и дислокация будет вынуждена вернуться в исходную точку. При движении дислокации влево на неё будет действовать возвращающая сила, направленная вправо. Фактически дислокация будет совершать колебания около точки  $x=0$ . Эту точку следует считать точкой устойчивого равновесия.

Можно поместить на вертикаль и третью, четвёртую и т.д. дислокации. Тогда мы получим конфигурацию, которая называется дислокационной стенкой. Взаимодействие всех дислокаций всегда можно рассматривать как взаимодействие различных пар дислокаций, равновесие которых мы

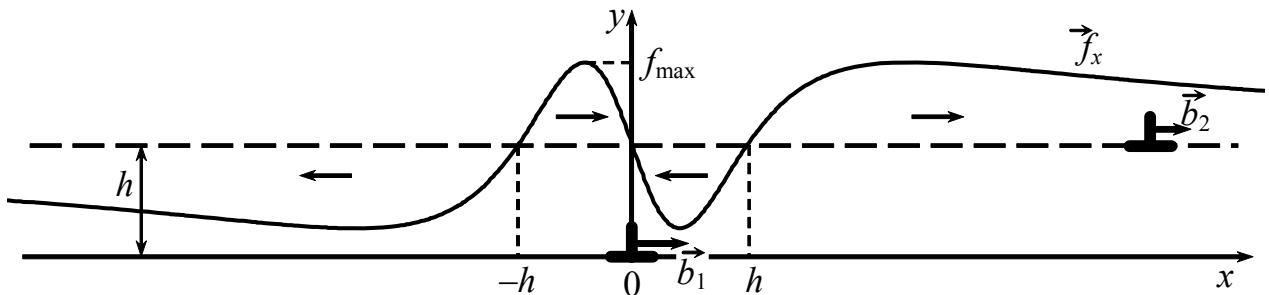


Рис. 113. Упругое взаимодействие двух краевых дислокаций в параллельных плоскостях скольжения

доказали. Следовательно, и все дислокации стенки находятся в равновесии, а потому обладают минимальной потенциальной энергией. Такая стенка представляет малоугловую границу наклона, которая делит зерно на два субзерна (рис. 114). Угол наклона (разориентировки) субзёрен равен

$$\Delta\theta = n \frac{b}{L} = \frac{b}{h}, \quad (376)$$

где  $n$  — количество дислокаций, образующих стенку высотой  $L$ , а  $h$  — среднее расстояние между соседними дислокациями по вертикали. Если  $h = 100b$ , то  $\Delta\theta = 0,01$  рад  $= 0,57^\circ$  — граница действительно малоугловая. Но если  $h < 10b$ , то угол разориентировки превышает  $5,7^\circ$ , и такую границу следует отнести уже к большеугловым. Кроме того, такие расстояния сопоставимы с размером ядра дислокации, поэтому соседние дислокации фактически начнут сливаться.

Характер равновесия дислокации в точках  $x = \pm h$  (рис. 113) иной. Допустим, что вторая дислокация смещается из точки  $x = h$  вправо. Её подхватит сила  $f_x$  и унесит вправо к  $+\infty$ . При смещении влево сила  $f_x$  движет дислокацию к положению  $x = 0$ . Аналогичная картина характерна и для точки  $x = -h$ . Следовательно, эти точки представляют позиции неустойчивого равновесия. Дислокации в них фактически не задерживаются.

Теперь допустим, что вторая краевая дислокация на рис. 113 является отрицательной ( $\vec{b}_2 < 0$ ). Это приведёт к появлению знака «минус» в формуле (376) для  $f_x$ . График силы перевернётся относительно оси  $x$  на  $180^\circ$ . Точки равновесия останутся теми же, но характер равновесия изменится. Теперь устойчивое равновесие наблюдается для точек  $x = \pm h$ , а неустойчивое — при  $x = 0$ . Поэтому краевые дислокации разных знаков стремятся расположиться под углом  $45^\circ$  к плоскости скольжения, образуя конфигурации дислокационных диполей, как это показано на рис. 115.

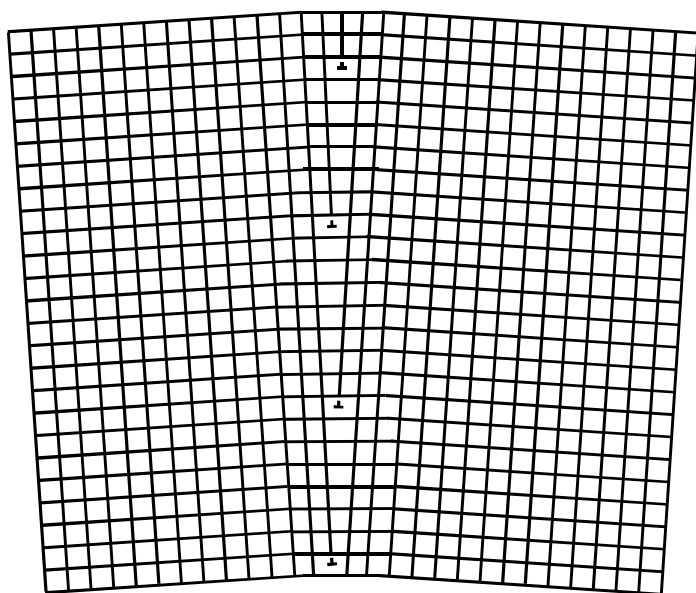


Рис. 114. Малоугловая граница наклона, образованная системой краевых дислокаций

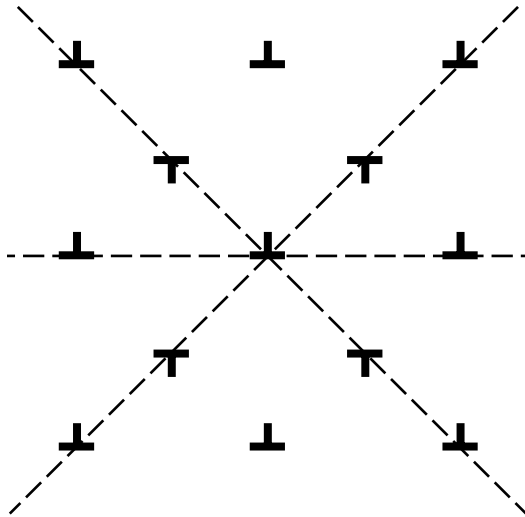


Рис. 115. Устойчивая конфигурация краевых дислокаций разного знака

Далее допустим, что в формуле (375)  $h=0$ . Тогда выражение

$$f_x = \tau_{xy}^{(1)} b_2 = \pm \frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{x} \quad (377)$$

определяет силу взаимодействия параллельных краевых дислокаций, расположенных в одной плоскости. Знак «+» относится к одноимённым дислокациям, которые отталкиваются друг от друга, стремясь разойтись на бесконечность. Знак «-» характеризует взаимное притяжение разноимённых дислокаций. Сила притяжения оказывается тем большей, чем ближе друг к другу находятся дислокации. Притянувшись друг к другу, дислокации соединяются и уничтожают друг друга (аннигилируют), так как оборванные плоскости соединяются и создают полную идеальную плоскость. Это важнейший механизм уменьшения плотности дислокаций. На линии столкновения дислокаций происходит выделение тепловой энергии, в которую превращается упругая энергия обеих дислокаций. За счёт теплопроводности это тепло рассеивается по кристаллу.

До этого момента мы считали, что внешние напряжения отсутствуют. Теперь допустим, что в плоскости скольжения на рис. 113 справа налево действует касательное напряжение  $\tau$ . Оно создаёт силу  $\tau b_2$  на единицу длины дислокации  $b_2$ , и эта сила стремится переместить дислокацию от  $+\infty$  к  $-\infty$ . Однако в процессе движения дислокация будет испытывать отталкивание с силой  $f_x$  от дислокации  $b_1$ . Как видно из графика функции на рис. 113, сила  $f_x$  имеет максимальные значения в двух точках. Для того, чтобы проанализировать экстремумы функции, рассчитаем производную функции  $f_x$  и приравняем её нулю:

$$\frac{df_x}{dx} = -\frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x^4 - 6h^2 x^2 + h^4}{(x^2 + h^2)^3} = 0. \quad (378)$$

Нас, разумеется, интересуют корни полинома в числителе. Корни биквадратного уравнения

$$x_{1,2,3,4} = \pm \sqrt{3 \pm \sqrt{8}} \cdot h. \quad (379a)$$

Обратим внимание, что  $3 \pm \sqrt{8} = 2 \pm 2\sqrt{2} + 1 = (\sqrt{2} \pm 1)^2$ , поэтому координаты точек экстремума можно записать иначе:

$$x_{1,2,3,4} = \pm (\sqrt{2} \pm 1) \cdot h. \quad (379b)$$

Максимумы соответствуют координатам  $x_1 = (\sqrt{2} + 1)h$  и  $x_3 = (\sqrt{2} - 1)h$ , а два оставшихся корня определяют минимумы  $f_x$ . Подставив значения  $x_1$  и  $x_3$  в выражение (375), найдём

$$f_{\max} = \frac{1}{4} \cdot \frac{Gb_1 b_2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{h}. \quad (380)$$

Для того, чтобы движущаяся дислокация преодолела отталкивание в точках  $x_1$  и  $x_3$ , сила от внешней нагрузки  $\tau b_2$  должна превышать  $f_{\max}$ . Следовательно, прохождение второй дислокации над первой станет возможным, если

$$\tau \geq \frac{1}{4} \cdot \frac{Gb_1}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{h}. \quad (381)$$

Формулу (381) можно обобщить на случай движения дислокации в среде с плотностью дислокаций  $\rho$ . Если  $\rho$  есть число дислокационных линий, пересекающих площадку с единичной площадью, то  $1/\rho$  представляет площадь, приходящуюся на одну линию, а  $\bar{h} = 1/\sqrt{\rho}$  есть среднее расстояние между ближайшими дислокациями. Но теперь рассматриваемая дислокация взаимодействует не с одной, а с несколькими ( $z$ ) ближайшими неподвижными дислокациями. Тогда напряжение, необходимое для движения в среде с плотностью дислокаций  $\rho$  составит

$$\tau = \frac{z}{8\pi(1-\nu)} Gb\sqrt{\rho} + \tau_s^0, \quad (382)$$

где  $\tau_s^0$  — критическое напряжение начала скольжения в металле с малой плотностью дислокаций. Важно иметь в виду, что и в случае, когда отрицательная краевая дислокация перемещается над положительной, первой из них также приходится преодолевать барьеры отталкивания, которые расположены в точках  $\pm(\sqrt{2} \pm 1)h$ . Экспериментальные исследования подтверждают правильность формулы (382). Численные значения коэффициента  $\alpha = \frac{z}{8\pi(1-\nu)}$  для разных металлов несколько различаются, но в среднем близки к  $\alpha = 0,5$ .

Наконец, кратко обсудим взаимодействие параллельных винтовых дислокаций. В отличие от краевых, винтовые дислокации имеют множество плоскостей скольжения, в том числе и плоскость, в которой они одновременно находятся. Будем считать, что обе дислокации расположены параллельно оси  $z$ , а перпендикулярная к ним ось  $x$  лежит в общей для обеих дислокаций плоскости. Тогда дислокация  $b_1$ , согласно формуле (287), создаёт вокруг себя поле напряжения  $\tau_{zx} = \frac{Gb}{2\pi} \cdot \frac{1}{r}$ , которое воздействует на дислокацию  $b_2$  с силой  $f_x = \frac{Gb_1b_2}{2\pi} \cdot \frac{1}{r}$ , где  $r=x$  — расстояние между дислокациями. Характер взаимодействия таков же, как и для краевых дислокаций, лежащих в одной плоскости: если  $b_1$  и  $b_2$  имеют одинаковый знак, то они отталкиваются, а разноимённые дислокации притягиваются и аннигилируют. Параллельные краевая и винтовая, а также две перпендикулярные краевые или винтовые дислокации не взаимодействуют, так как не создают касательных напряжений в направлении векторов Бюргерса друг друга.

#### 6.4.2. Пересечение дислокаций

Поскольку перпендикулярные дислокации не взаимодействуют посредством своих упругих полей, то они могут при скольжении сближаться и пересекать друг друга. Рассмотрим несколько примеров таких пересечений.

1. Две краевые дислокации с параллельными векторами Бюргерса. Пусть две краевые дислокации  $AB$  и  $CD$ , имеющие параллельные вектора Бюргерса  $b_1$  и  $b_2$ , скользят навстречу друг другу в пересекающихся плоскостях скольжения  $xu$  и  $zu$  (рис. 116, а). Будущие точки пересечения обозначим  $E$  и  $F$ . Рассмотрим состояние дислокаций после пересечения. Когда дислокация  $AB$  движется в плоскости скольжения, то верхняя ( $z > 0$ ) часть кристалла сдвигается по отношению к нижней ( $z < 0$ ) на вектор  $b_1$ . Вместе с верхней частью сдвинется на  $b_1$  и отрезок  $FD$  второй дислокации, а точка  $F$  переместится в  $F_1$ . Кажется, что дислокация  $CD$  оказалась разрезанной на две части  $CF$  и  $F_1D$ . Но дислокация есть граница незавершённого сдвига и, следовательно, разрывов её линии быть не может. Мы должны признать, что между точками  $F$  и  $F_1$  возник новый, особый отрезок дислокации, называемый обычно порогом. Если порог перпендикулярен к плоскости скольжения дислокации, на которой он возник, то его обозначают как ступеньку, а если, как в данном случае, порог лежит в плоскости скольжения, то его называют перегибом. Аналогичные рассуждения нужно провести в отношении второй дислокации: когда  $CD$  движется по плоскости  $zu$ , то «верхняя» часть кристалла ( $x > 0$ ), а вместе с ней и отрезок  $EB$  дислокации  $AB$  сдвигается на вектор  $b_2$  относительно «нижней» части ( $x < 0$ ). Теперь кажется, что разорванной оказалась дислокация  $AB$ . Но это невозможно, поэтому между точками разрыва возникает новый дислокационный эле-

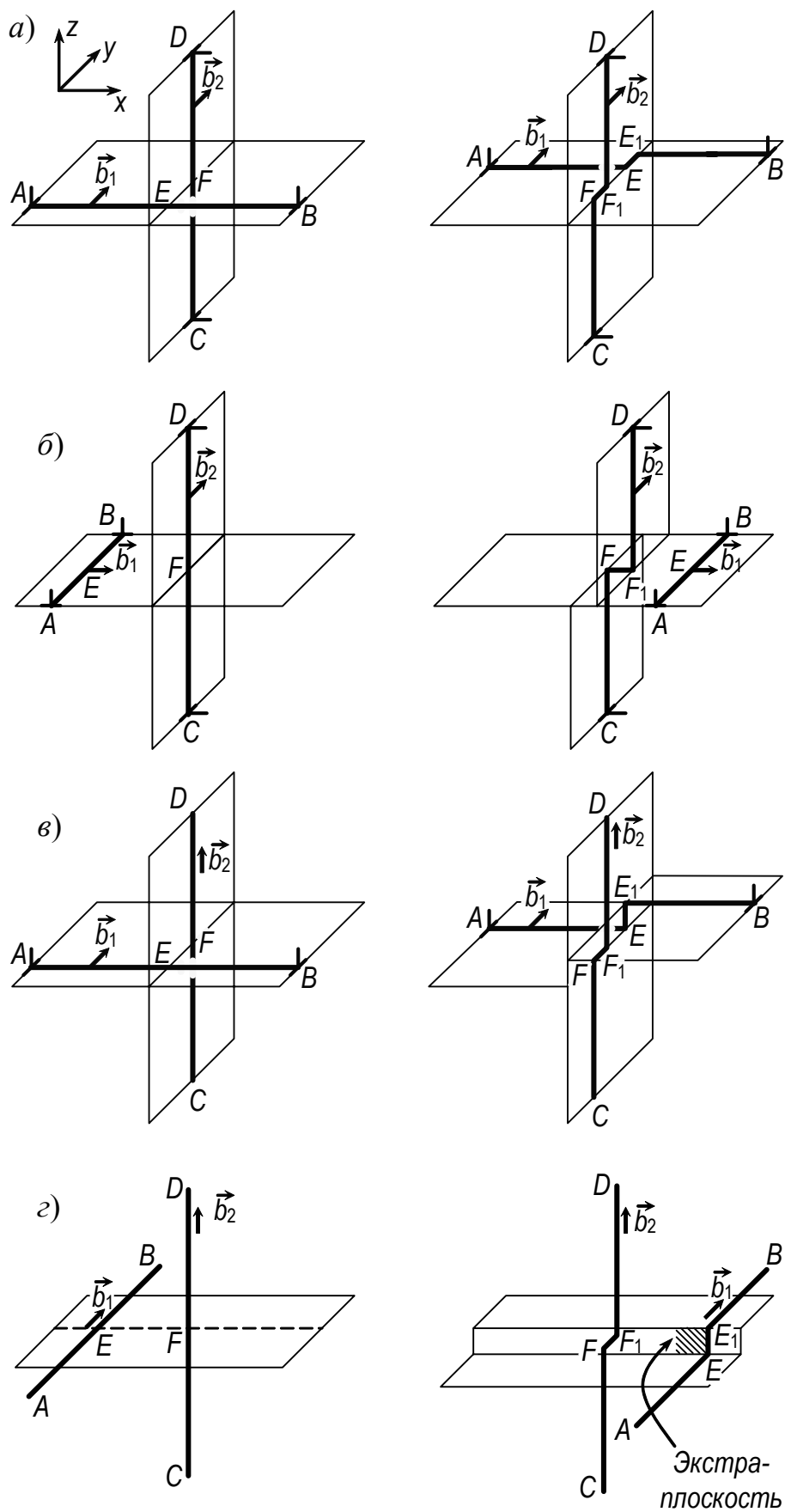


Рис. 116. Пересечение перпендикулярных дислокаций:  
 $a$  и  $б$  — двух краевых,  $в$  — краевой и винтовой,  $г$  — двух винтовых

мент  $EE_1$  — перегиб. Итак, в результате пересечения двух краевых дислокаций по схеме рис. 116, а на каждой из них образуется перегиб.

Возникает важный вопрос: будет ли образование перегиба мешать последующему движению дислокации? Исследование этого вопроса дало результат — нет, не будет. Дело в том, что длина каждой дислокации велика по сравнению с вектором Бюргерса, поэтому сила натяжения не в состоянии синхронизировать движение всех атомов на линии дислокации. Отдельные участки вырываются вперёд — говорят, что дислокация выбрасывает «языки», другие отстают, но в следующие моменты уже они могут обогнать лидеров. Фактически дислокация всегда имеет вдоль своей линии множество перегибов (см. рис. 106 в разделе 6.2.1), так что появление в результате пересечения новых перегибов ситуацию не меняет.

2. Две краевые дислокации с перпендикулярными векторами Бюргерса. При движении дислокации  $AB$  (рис. 116, б) смещается на вектор  $b_1$  верхняя часть кристалла, расположенная выше плоскости скольжения  $xu$ , а вместе с ней и отрезок  $FD$  второй дислокации. Появляется порог  $FF_1$ , который расположен перпендикулярно к плоскости скольжения дислокации  $CD$  и, следовательно, является ступенькой. Вектор сдвига  $b_2$  перпендикулярен новому участку дислокации  $FF_1$ , поэтому этот участок имеет краевую ориентацию и должен двигаться вдоль  $b_2$ , оставаясь в плоскости скольжения первой дислокации  $xu$ , тогда как остальная часть дислокации  $CD$  скользит в этом же направлении (вдоль  $y$ ), но по другой плоскости ( $yz$ ). Оба движения совместимы, поэтому образовавшаяся ступенька не тормозит перемещения дислокации  $CD$ .

3. Краевая и винтовая дислокация. Схема пересечения краевой и винтовой дислокаций показана на рис. 116, в. Краевая дислокация  $AB$  движется в плоскости  $xu$  в направлении оси  $y$ , а навстречу ей в плоскости  $yz$  перемещается винтовая дислокация  $CD$ . Обозначим через  $E$  и  $F$  будущие точки пересечения дислокаций. При анализе пересечения используем тот же логический подход. При движении краевой дислокации  $AB$  верхняя часть кристалла, а с ней и отрезок  $FD$  винтовой дислокации, сдвигается на вектор  $b_1$ , так что на винтовой дислокации возникает порог  $FF_1$ , являющийся перегибом. Аналогично на краевой дислокации возникает порог (ступенька)  $EE_1$ , перпендикулярный плоскости скольжения. Но и в этом случае возникающие в ходе пересечения пороги не мешают последующему движению своих дислокаций. В частности, винтовая дислокация, подобно краевой, всегда имеет большое количество перегибов, поэтому появление ещё одного не может повлиять на её движение.

4. Две винтовые дислокации. Особый случай представляет пересечение винтовых дислокаций. Пусть винтовая дислокация  $AB$  движется в направлении  $x$  и пересекает дислокацию  $CD$ , перемещающуюся в противоположном направлении (рис. 116, г). После пересечения на обеих дислокациях возникают пороги, перпендикулярные к плоскостям скольжения, то есть ступеньки. Рассмотрим их влияние на последующее движение дислокаций. Винтовая

дислокация  $AB$  движется в плоскости  $xu$ , проходящей через её линию. Ступенька  $EE_1$  расположена перпендикулярно к вектору Бюргерса  $b_1$  и, следовательно, имеет краевую ориентацию. Поэтому она может скользить только вдоль  $y$  в плоскости  $yz$ , в которой одновременно лежат линия  $EE_1$  и вектор  $b_2$ , но двигаться совместно с дислокацией  $AB$  вдоль  $x$  ступенька не может и поэтому тормозит перемещение дислокации. Если в плоскости скольжения действует касательное напряжение  $\tau_{zx}$ , то оно будет создавать на участок дислокации длиной  $L$  между двумя точками закрепления (двумя соседними ступеньками) силу  $F_x = \tau_{zx}bL$ , которая вызовет прогиб участка; эта же сила будет действовать и на ступеньку. При больших  $\tau_{zx}$  эта сила может заставить ступеньку принудительно перемещаться вдоль  $x$  совместно с дислокацией. Рассмотрим экстраплоскость, опирающуюся на ступеньку. Ширина этой экстраплоскости равна  $b_2$ , то есть фактически она представляет собой атомный ряд. Перемещение ступеньки вдоль  $x$  означает последовательное увеличение длины этого ряда атомов, то есть образование вакансий. Отсюда следует, что при движении винтовой дислокации со ступеньками происходит генерация вакансий каждой ступенькой. При движении дислокации в противоположном направлении ступеньки будут генерировать междоузельные атомы. Аналогичная ситуация должна наблюдаться и для второй дислокации  $CD$ .

#### 6.4.3. Условие пересечения дислокации с «лесом». Скольжение винтовых дислокаций со ступеньками

Рассмотрим случай, когда дислокация пересекает не одну, а целую группу дислокаций, называемую дислокационным лесом (рис. 117). В результате пересечения на каждой из дислокаций возникает порог, в результате чего её длина увеличивается на  $b$ . Для простоты будем считать, что

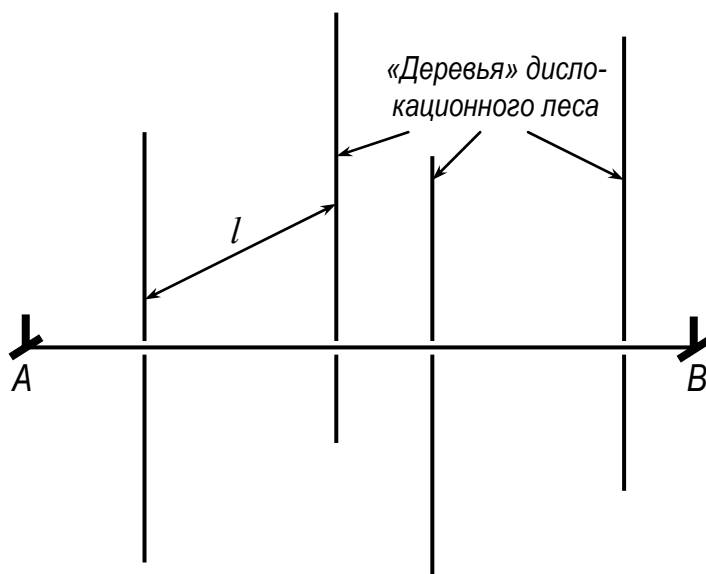


Рис. 117. Пересечение горизонтальной дислокации  $AB$  с лесом расположенных вертикально дислокаций



модули векторов Бюргерса всех дислокаций одинаковы. Увеличение длины приводит к росту упругой энергии дислокации на величину

$$\Delta E_{\text{упр}} = 2 \frac{Gb^2}{2} b \quad (383)$$

в расчёте на одно пересечение. Но одновременно на длине пересечения  $b$  внешнее напряжение совершает на участке между двумя «деревьями» работу  $\tau b L \cdot b$ . Пересечение возможно, если  $\tau b^2 l \geq Gb^3$ , откуда получаем условие пересечения:

$$\tau \geq \frac{Gb}{l}. \quad (384)$$

Если плотность дислокаций леса равна  $\rho_{\text{л}}$ , то в среднем  $l = \rho_{\text{л}}^{-1/2}$ , и для напряжения, при котором становится возможным пересечение, получаем формулу

$$\tau = Gb \sqrt{\rho_{\text{л}}}. \quad (385)$$

Чем выше плотность дислокаций леса, тем более высокое напряжение требуется для движения дислокации.

В некоторых случаях напряжение деформирования определяет не процесс пересечения, а последующее скольжения пересёкшихся и потому содержащих многочисленные ступеньки винтовых дислокаций. Допустим, что  $l$  есть среднее расстояние между соседними ступеньками (рис. 118). При перемещении отрезка дислокации длиной  $l$  на расстояние  $b$  должна возникнуть одна вакансия, для чего должна быть затрачена энергия  $\varepsilon_{\text{в}}$ . Но при перемещении такого отрезка на расстояние  $b$  источник внешних напряжений совершает над образцом работу  $\tau b^2 L$ , что приводит к понижению энергии. Движение винтовой дислокации становится возможным, если

$$\tau b^2 l \geq \varepsilon_{\text{в}}. \quad (386)$$

Следовательно, напряжение, необходимое для движения винтовой дислокации, равно

$$\tau = \frac{\varepsilon_{\text{в}}}{b^2 l} = \frac{\varepsilon_{\text{в}}}{b^2} \sqrt{\rho_{\text{л}}}, \quad (387)$$

где  $\rho_{\text{л}}$  — плотность дислокаций леса, пересечение с которыми привело к образованию ступенек.

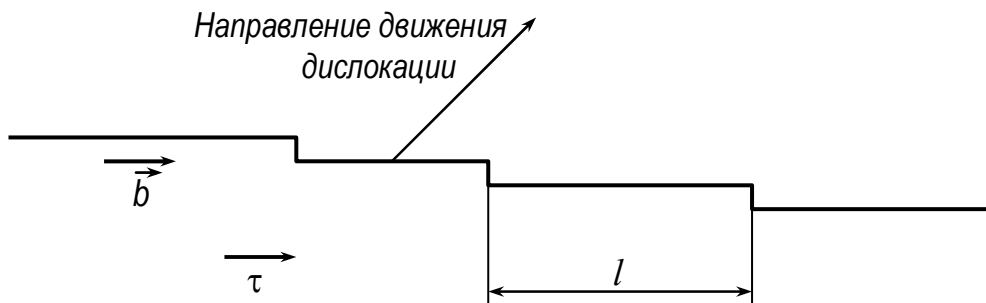


Рис. 118. Движущаяся винтовая дислокация со ступеньками

#### 6.4.4. Понятие о термически активированном движении дислокаций

Допустим, что пластическая деформация происходит при повышенных температурах, а деформирующее напряжение  $\tau$  невелико, так что условия (384) или (386), необходимые для движения дислокаций, не выполняются, то есть разности

$$W_1 = Gb^3 - \tau b^2 l \quad (388a)$$

или

$$W_2 = \varepsilon_V - \tau b^2 l \quad (388b)$$

оказываются положительными. В таком случае пересечение дислокации с лесом или движение дислокации со ступеньками при низких температурах становится энергетически невозможным, так как затраты энергии на пересечение или на образование вакансий превосходят выигрыш, который даёт работа сдвига. Около точек закрепления участки дислокации, подобно лубой натянутой нити, совершают колебания с частотой  $\nu$  ( $\sim 10^{12} \text{ с}^{-1}$ ). Фактически  $\nu$  раз в секунду дислокация как бы пытается совершить прорыв, но затем откатывается назад, не обладая достаточным энергетическим стимулом. Однако при повышенных температурах на эти реакции могут оказать влияние флуктуации энергии в объёме, охватывающем элементарный акт процесса ( $\sim b^2 l$ ).

Разобьём мысленно объём образца на множество подсистем с одинаковым объёмом  $b^2 l$ . Хотя все подсистемы и содержат равное количество атомов, но их энергии  $E_1, E_2, \dots, E_i, \dots$  отличны друг от друга и не равны средней энергии подсистемы  $\bar{E}$ . Отличие энергии какой-либо подсистемы от средней  $W_i = E_i - \bar{E}$ , которое мы назовём флуктуацией, возникает вследствие случайного характера столкновения атомов на поверхностях условного раздела подсистем. В статистической физике показано (см. главу 1), что вероятность флуктуации энергии, превосходящей некоторый заданный уровень  $W$ , определяется больцмановским множителем

$$P(W) = \exp\left(-\frac{W}{kT}\right), \quad (389)$$

где  $P(W)$  можно интерпретировать как долю (от общего числа) тех подсистем, энергия которых превышает  $\bar{E}$  на величину  $W$ .

Можно поступить и иначе: рассмотреть изменение энергии одной подсистемы во времени. По эргодической гипотезе, энергия одной подсистемы будет изменяться точно так же, как при переходе от одной подсистемы к другой в фиксированный момент времени. В единице времени содержится  $\nu$  периодов колебаний дислокации, поэтому величина  $\nu \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)$

представляет среднее число (математическое ожидание) пересечений дислокации либо «шагов» ступеньки в единицу времени.

После одного пересечения участок дислокации длиной  $l$  быстро проходит путь, равный  $l$ , до следующего «дерева». Поэтому скорость термически активированного движения пересекающей лес дислокации оказывается равной

$$v_1 = vl \exp\left(-\frac{W_1}{kT}\right) = vl \exp\left(-\frac{Gb^3 - \tau b^2 l}{kT}\right). \quad (390)$$

Аналогичная формула получается и в случае термически активированного движения винтовой дислокации со ступеньками:

$$v_1 = vb \exp\left(-\frac{W_2}{kT}\right) = vb \exp\left(-\frac{\varepsilon_V - \tau b^2 l}{kT}\right) \quad (391)$$

(здесь путь дислокации между последовательными точками рождения вакансий равен  $b$ ).

Выражения (390) и (391) можно отразить обобщённой формулой

$$v = v_0 \exp\left(-\frac{U_0 - V^* \tau}{kT}\right), \quad (392)$$

где  $U_0$  — энергия активации,  $V^*$  — объём, в котором должна произойти флуктуация энергии, а  $v_0$  — скорость дислокации при  $T \rightarrow \infty$ . Используем далее формулу (374) и найдём скорость деформации образца в условиях термической активации, то есть при низком напряжении и повышенных температурах:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{1}{2\bar{m}} b \sqrt{\rho} \cdot v_0 \exp\left(-\frac{U_0 - \frac{1}{\bar{m}} V^* \sigma}{kT}\right). \quad (393)$$

Простые преобразования позволяют получить зависимость деформирующего напряжения от скорости и температуры деформации:

$$\sigma = \frac{\bar{m} U_0}{V^*} - \frac{\bar{m} k}{v_0} T \ln \frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0}, \quad (394)$$

где  $\dot{\varepsilon}_0 = \frac{1}{2\bar{m}} b \rho v_0$ . Величина деформирующих напряжений уменьшается при возрастании температуры и возрастает при увеличении скорости деформирования.

## 6.5. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИСЛОКАЦИЙ С ПОДВИЖНЫМИ РАСТВОРЁННЫМИ АТОМАМИ

Закон Паскаля гласит, что в жидкости и в газе давление передаётся без изменения по всем направлениям. Для твёрдых тел этот закон несправед-

лив. Но всё же среднее для трёх напряжений  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{zz}$  называют гидростатическим давлением  $p$ . Для краевой дислокации величина  $p$  определена выражением (335). Если в образце или его локальной части произойдёт дилатация, то есть изменение объёма  $\Delta V$ , то гидростатическое давление совершит работу

$$\Delta A = W = p\Delta V. \quad (395)$$

Поскольку работу совершает сама система, то  $\Delta A$  равно энергии  $W$  взаимодействия дислокации и области дилатации. Центрами дилатации являются растворённые атомы, частицы включений и, наконец, участки второй и т.д. фаз в многофазном сплаве.

### 6.5.1. Образование атмосфер Коттрелла

Упругую модель атома строят следующим образом. В упругом материале вырезают мысленно сферическую полость с радиусом  $R_0$ , равным радиусу атома растворителя. Затем в эту полость помещают, сжимая или растягивая, шар с радиусом  $R_1$ , равным радиусу растворённого атома, а поверхность контакта склеивают. Если  $R_1$  отличается от  $R_0$ , то в материале возникнут внутренние напряжения, а объём тела увеличится на

$$\Delta V = 4\pi R_0^2 (R_1 - R_0) = 4\pi R_0^3 \left( \frac{R_1 - R_0}{R_0} \right) = 3\Omega_0 \varepsilon, \quad (396)$$

где  $\Omega_0 = \frac{4}{3}\pi R_0^3$  — объём атома растворителя, а  $\varepsilon = \frac{R_1 - R_0}{R_0}$  — параметр несоответствия размеров. Интуитивно понятно, что величина  $\Delta V$  должна зависеть от соотношения упругих характеристик атомов разного типа. Для случая, когда они неодинаковы, согласно расчётам Эшелби,

$$\Delta V = \Delta V_0 \frac{\gamma}{\gamma'}, \quad (397)$$

где  $\Delta V_0$  определено (396), а  $\gamma$  и  $\gamma'$  представляют комбинацию упругих характеристик решёток матрицы и растворителя:

$$\gamma = \frac{3K_0 + 4G_0}{3K_0}; \quad \gamma' = \frac{3K_1 + 4G_0}{3K_1}, \quad (398)$$

где  $K_0$  и  $K_1$  — модули объёмного сжатия соответственно матрицы и включения, а  $G_0$  — модуль сдвига матрицы.

Учитывая формулу (335) для гидростатического давления около краевой дислокации, запишем выражение для энергии взаимодействия

$$W = \pm \beta_0 \frac{\sin \theta}{r}, \quad (399)$$

в котором коэффициент

$$\beta_0 = \frac{Gb}{\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \Omega_0 |\varepsilon| \quad (400)$$

имеет размерность Дж·м. Знак «+» соответствует случаю, когда параметр размерного несоответствия  $\varepsilon$  положителен ( $R_1 > R_0$ ), то есть растворённые атомы растягивают решётку (см. табл. 11). Для атомов внедрения параметр  $\varepsilon$  также положителен, но вводится несколько иначе:

$$\varepsilon = \frac{R_{\Pi} - R_1}{R_{\Pi}}, \quad (401)$$

где  $R_{\Pi}$  — радиус октаэдрической поры в решётке растворителя. Для атомов, образующих растворы внедрения, величины параметра  $\varepsilon$  на один-два порядка больше, чем для атомов замещения. Соответственно выше и энергии взаимодействия  $W_0$ .

Таблица 11

Параметры размерного несоответствия для некоторых твёрдых растворов  $\varepsilon = (R_1 - R_0)/R_0$  и  $\delta = (1/a)(da/dx)$

Растворитель*	Растворённый элемент*	$\varepsilon$	$\delta$
Al (1,432)	Mg (1,602)	+0,119	+0,106
	Mn (1,304)	−0,089	−0,136
	Cu (1,278)	−0,108	−0,079
Cu (1,278)	Al (1,432)	+0,121	+0,066
	Si (1,319)	+0,032	+0,019
	Mn (1,304)	+0,020	+0,100
	Ni (1,246)	−0,025	−0,028
	Zn (1,394)	+0,091	+0,055
	Ag (1,445)	+0,131	+0,152
	Sn (1,623)	+0,270	+0,285
	Au (1,442)	+0,128	+0,152
Au (1,442)	Cu (1,278)	−0,114	−0,074
	Ag (1,445)	+0,002	−0,005
	Pt (1,387)	−0,038	−0,047
$\alpha$ -Fe (1,274)	Si (1,319)	+0,035	−0,024
	Mn (1,304)	+0,024	+0,014
	Ni (1,246)	−0,022	+0,024
	Mo (1,400)	+0,099	+0,077
	W (1,408)	+0,105	+0,119

\* В скобках указаны атомные радиусы для координационного числа 12 в ангстремах.

Если при рассматриваемой температуре отжига растворённые атомы достаточно подвижны, то при  $\varepsilon > 0$  они будут стремиться в позиции, для которых энергия системы минимальна ( $\theta \rightarrow 270^\circ$ ,  $r \rightarrow b$ ), то есть расположиться непосредственно под экстроплоскостью, где решётка максимально растянута. Атомы, для которых  $\varepsilon < 0$ , а также вакансии стремятся в позиции над линией дислокации ( $\theta \rightarrow 90^\circ$ ,  $r \rightarrow b$ ), то есть туда, где проявляется максимум гидростатического сжатия.

Рассмотрим траектории осреднённого перемещения атомов. Уравнение

$$r = \frac{\beta_0}{W} \sin \theta \quad (402)$$

при фиксированном  $W < 0$  определяет окружность радиусом  $\left| \frac{\beta_0}{2W} \right|$ , касающуюся плоскости скольжения в точке, где расположена линия дислокации (рис. 119). Поэтому эквипотенциальные поверхности представляют систему цилиндрических поверхностей, вложенных друг в друга и касающихся вдоль одной линии — линии дислокации. Чем больше энергия  $|W|$ , тем меньше радиус окружности. Важно иметь в виду, что над плоскостью скольжения расположены аналогичные эквипотенциальные поверхности, но с положительными значениями  $W$ , причём и в этом случае меньшему радиусу соответствует более высокая (положительная)  $W$ .

Знак «+» у энергии означает отталкивание примесного атома и дислокации. Поэтому атомы из верхнего полупространства будут стремиться перейти в нижнее полупространство. При этом исходное положение примесного атома следует считать случайным, а его перемещение происходит в результате случайных перескоков. Но если проследить за точкой с макси-

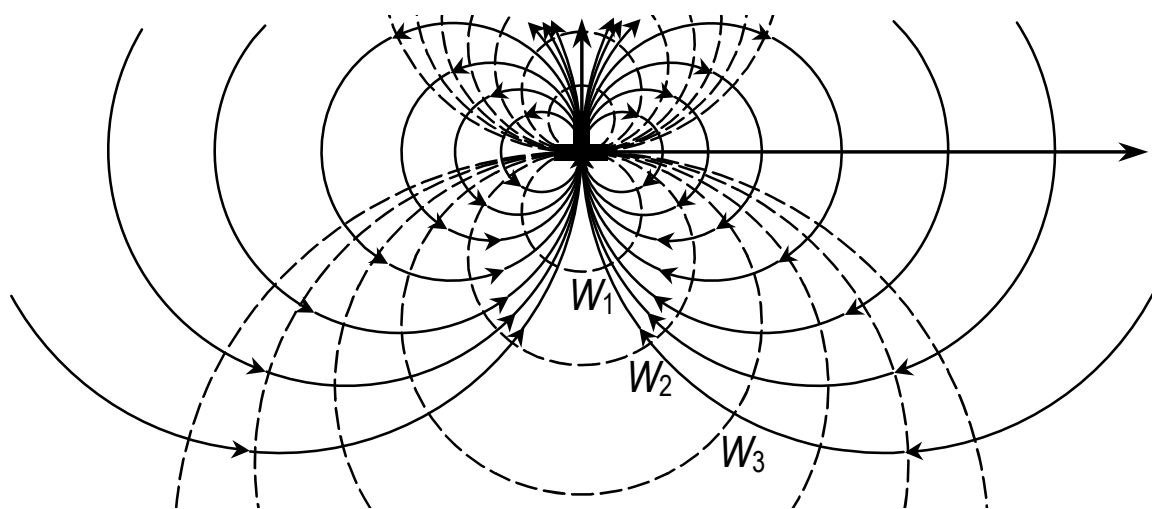


Рис. 119. Эквипотенциальные поверхности взаимодействия краевой дислокации с растворёнными атомами (пунктирные линии;  $W_1 < W_2 < W_3 < \dots < 0$ ) и траектории движения растворённых атомов к ядру дислокации (сплошные линии)

мальной вероятностью нахождения атома, то мы получим усреднённую траекторию его движения (дрейфа) под действием термодинамической силы  $\vec{F} = -\text{grad} W$ . Такая сила по закону Эйнштейна – Смолуховского сообщает атому скорость дрейфа

$$\vec{v} = \frac{D}{kT} \vec{F} = -\frac{D}{kT} \text{grad} W, \quad (403)$$

где  $D$  — коэффициент диффузии атомов. Вектор градиента направлен перпендикулярно эквипотенциальной поверхности. Поэтому линия тока направлена в каждой точке перпендикулярно эквипотенциальной окружности. Легко видеть, что и сами линии тока представляют окружности, пересекающие линию дислокации, и в этой точке касающиеся экстраплоскости (рис. 119). Постепенно под экстраплоскостью будут накапливаться атомы примеси.

В полярной системе координат

$$\text{grad} W = \vec{e}_r \frac{\partial W}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial W}{\partial \theta} = \beta_0 \left( -\frac{\sin \theta}{r^2} \vec{e}_r + \frac{\cos \theta}{r^2} \vec{e}_\theta \right), \quad (404)$$

поэтому величина полной скорости дрейфа

$$v = \frac{D}{kT} \beta_0 \frac{1}{r^2} \quad (405)$$

зависит только от радиуса  $r$ . Хотя вдоль линии тока величина  $r$  меняется, но в среднем чем меньше радиус окружности тока, тем меньше значения  $r$  и, в соответствии с формулой (405), больше скорость дрейфа. Перемещение атомов из верхнего полупространства под экстраплоскость быстрее всего проходит именно по окружностям тока с минимальными радиусами, после чего движение атомов по таким линиям тока прекращается. Поэтому количество  $n(\tau)$  атомов, достигших ядра дислокации, не пропорционально  $\tau$ . Расчёты Набарро, а затем Коттрелла и Билби (1949 г.) дали результат

$$\tilde{n}(\tau) = \alpha n_0 \cdot \left( \frac{\beta_0 D \tau}{kT} \right)^{2/3}, \quad (406)$$

где значение  $\tilde{n}(\tau)$  приведено в расчёте на единицу длины дислокационной линии,  $n_0$  — число растворённых атомов в единице объёма, а коэффициент  $\alpha = 3(\pi/2)^{1/3} \approx 3,49$ .

Из изложенного следует, что быстрее всего к линии краевой дислокации переместятся атомы, расположенные вблизи неё. Затем начнут подходить атомы, расположенные всё дальше и дальше. В итоге под экстраплоскостью появится большое количество примесных атомов. Это скопление растворённых атомов называется атмосферой Коттрелла. Атомам внедрения удобно размещаться непосредственно под экстраплоскостью, в зоне ядра, где они образуют фактически одноатомную цепочку, но процесс их накопления на этом не останавливается — атомы внедрения начинают заполнять более далёкие от ядра октаэдрические поры. Аналогичный процесс проходит у каждой краевой дислокации.

Общая протяжённость дислокаций во всём образце объёмом  $V$  есть  $\rho V$ . Тогда  $\tilde{n}(\tau)\rho V$  представляет общее количество атомов примеси, скопившихся около дислокаций, а  $\frac{\tilde{n}(\tau)\rho}{n_0} = f$  есть доля атомов, находящихся у дислокаций, среди всех растворённых атомов. Эта доля равна

$$f = \alpha \rho \left( \frac{\beta_0 D \tau}{kT} \right)^{2/3}. \quad (407)$$

Конечно, приведённый расчёт не учитывает ослабление упругого поля дислокации по мере накопления атомов, вызывающих расширение решётки. Кроме того, формула (407) справедлива только для начальных стадий образования атмосфер примесных атомов. Харпер (1951 г.) формально обобщил её и на более поздние стадии, приняв

$$f = 1 - \exp \left[ -\alpha \rho \left( \frac{\beta_0 D \tau}{kT} \right)^{2/3} \right]. \quad (408)$$

Согласно этому выражению,  $\ln(1-f)$  должен линейно изменяться с  $\tau^{2/3}$ . На рис. 120 приведены данные работы Харпера, которые подтверждают справедливость выражения (408). Оценки энергии активации диффузии дали значение 20 ккал/моль (84 кДж/моль), близкие к энергии активации диффузии углерода в  $\alpha$ -железе.

Процессы диффузии примесных атомов к дислокациям должны завершиться установлением равновесного распределения атомов в поле дислокации. Его можно легко рассчитать, используя распределение Больцмана:

$$dN = A \exp \left( -\frac{W(\theta, r)}{kT} \right) dV, \quad (409)$$

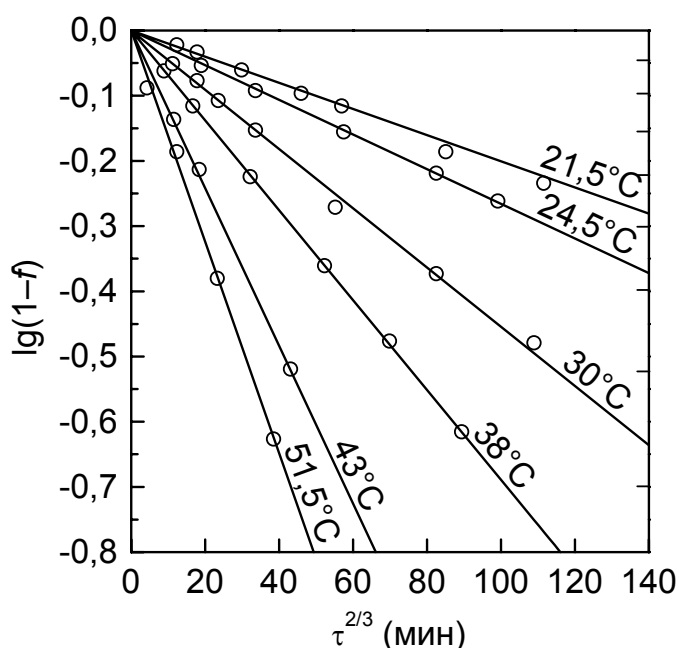


Рис. 120. Влияние температуры на старение после деформации железа, содержащего углерод (Харпер)



где  $dN$  — число атомов в объёме  $dV$  около точки с координатами  $r$  и  $\theta$ . Учтём, что, во-первых,  $dN/dV = n(r, \theta)$  есть число растворённых атомов в единице объёма, а во-вторых, при  $r \rightarrow \infty$  энергия взаимодействия  $W \rightarrow 0$ . Константа  $A$  должна тогда представлять исходную концентрацию атомов  $n_0$ . Следовательно,

$$n(r, \theta) = n_0 \exp\left(-\frac{\beta_0}{kT} \cdot \frac{\sin \theta}{r}\right). \quad (410)$$

Мы можем разделить левую и правую часть равенства на число атомов в единице объёма раствора или, в случае растворов внедрения, на число октаэдрических пор, и выразить концентрацию в атомных долях  $x$ . Тогда

$$x(r, \theta) = x_0 \exp\left(-\frac{\beta_0 \sin \theta}{rkT}\right). \quad (411)$$

При  $\theta > 180^\circ$  показатель экспоненты положителен, и, следовательно, при понижении температуры он неограниченно нарастает. Очевидно, что для любой точки пространства при  $\theta > 180^\circ$  существует такая температура, при которой доля примесных атомов  $x(r, \theta) = 1$ , то есть наступает насыщение, причём самая высокая температура насыщения относится к точке  $\theta = 270^\circ$  и  $r = b$ :

$$T_k = -\frac{\beta_0}{kb \ln x}. \quad (412)$$

Ниже этой температуры под экстраплоскостью дислокации возникает упомянутая цепочка растворённых атомов, например, углерода. Конкретная величина температуры зависит от концентрации примесей. Оценки для

раствора углерода в  $\alpha$ -железе следующие:  $\beta_0 = 1,4 \cdot 10^{-29}$  Дж/м;  $T_k = \frac{4230}{|\ln x|}$ ;

при  $x = 0,0012$  ( $p_c = 0,025\%$ ) температура конденсации  $T_k \approx 620$  К = 347 °С, при уменьшении концентрации углерода она понижается. Если снижать температуру, то теоретически насыщение должно проходить и в более удалённых от дислокации областях. Но часто возможен и другой путь — зарождение и рост участков новой фазы, — например, цементита  $Fe_3C$  в низкоуглеродистом феррите.

### 6.5.2. Атомы внедрения в ОЦК-сплавах как упругие диполи

Напомним, что атомы внедрения, например, углерод или азот, располагаются в октаэдрических порах, окружённых шестёркой атомов растворителя (см. часть I, с. 88–90). В гранецентрированной кубической решётке такие октаэдры являются правильными, так что все три их диагонали имеют равную длину  $l = a$  ( $a$  — параметр решётки). Радиус октапоры  $R_{\text{окт}}$  определяется как наибольший радиус шарика, который может быть помещён

в пору без деформации. Для ГЦК-решётки  $R_{\text{окт}} = \frac{l-2R_0}{2}$ . В модели жёстких

сфер  $R_0 = \frac{a\sqrt{2}}{4}$ , поэтому  $R_{\text{окт}} = R_0(1-\sqrt{2}) \approx 0,41R_0$ . В объёмноцентрированной кубической решётке октаэдр является неправильным. Длина одной его диагонали  $l_1 = a$ , а двух других  $l_2 = a\sqrt{2}$ ; соответственно пора имеет два радиуса. Поскольку в ОЦК-решётке  $R_0 = \frac{a\sqrt{3}}{4}$ , то эти радиусы равны

$$R_{\text{окт1}} = \frac{l_1 - 2R_0}{2} = R_0 \left( \frac{2\sqrt{3}}{3} - 1 \right) \approx 0,15R_0 \text{ и } R_{\text{окт2}} = \frac{l_2 - 2R_0}{2} = R_0 \left( \frac{2\sqrt{6}}{3} - 1 \right) \approx 0,63R_0.$$

Для  $\alpha$ -железа, у которого  $R_0 \approx 1,24 \text{ \AA}$ , радиусы пор  $R_{\text{окт1}} \approx 0,19 \text{ \AA}$  и  $R_{\text{окт2}} \approx 0,79 \text{ \AA}$ . Поэтому растворённые атомы углерода и азота, имеющие атомные радиусы  $R_C \approx 0,77 \text{ \AA}$  и  $R_N \approx 0,71 \text{ \AA}$ , попадая в октаэдрические междоузлия, будут раздвигать не все шесть, а только два атома, соединённых малой диагональю. Допустим, что эта диагональ ориентирована вдоль оси  $Oz$ . Локальное относительное удлинение в модели жёстких шаров при внедрении атома углерода

$$e_3 = \frac{2R_C - 2R_{\text{окт1}}}{a} = \frac{1,54 - 0,38}{2,866} \approx 0,4. \quad (413)$$

Атом углерода, судя по величине  $R_{\text{окт2}}$ , не должен касаться четвёрки более далёких атомов, но в направлениях  $Ox$  и  $Oy$  возникнет пуассоново сжатие от растяжения вдоль  $Oz$ , которое сблизит четвёрку атомов растворителя и атом углерода:

$$e_1 = e_2 = -\nu e_3 \approx -0,12, \quad (414)$$

где  $\nu$  — коэффициент Пуассона, принятый равным 0,3.

Можно независимо рассчитать эти деформации, используя данные Г.В.Курдюмова о параметрах кристаллической решётки мартенсита углеродистых сталей в зависимости от концентрации углерода:

$$c = 2,866 + 0,166p_C = 2,866 + 2,4945x_C, \text{ \AA}; \quad (415 \text{ а})$$

$$a = 2,866 + 0,013p_C = 2,866 - 0,2796x_C, \text{ \AA}, \quad (415 \text{ б})$$

где концентрация выражена в процентах по массе  $p_C$  или в атомных долях  $x_C$ . Как известно, атомы углерода занимают в решётке мартенсита только одну, например,  $z$ -подрешётку октаэдрических междоузлий. Она будет полностью заполнена углеродом при  $x_C = 1/2$ . Для такого гипотетического состояния из (415а, б) следует  $c = 4,133$ ;  $a = 2,726 \text{ \AA}$ . Отсюда найдём

$$e_3 = \frac{4,133 - 2,866}{2,866} = 0,435; \quad e_1 = e_2 = \frac{2,726 - 2,866}{2,866} = -0,049. \text{ Оба метода оценки}$$

дают для  $e_3$  близкие значения. Величины  $e_1$  и  $e_2$  отрицательны, но меньшие

абсолютные значения даёт метод анализа решётки мартенсита. Вероятно, что наличие атомов внедрения препятствует поперечному сужению решётки.

Часто вместо параметров  $e_1$ ,  $e_2$ ,  $e_3$  используют величины концентрационного расширения решётки

$$\delta_i = \frac{1}{a_i} \frac{\partial a_i}{\partial x} \quad (\text{по } i \text{ не суммировать}). \quad (416)$$

Если речь идёт о растворах замещения, то в случае выполнения закона Vegard

$$a = a_0 x_0 + a_1 x_1 = a_0 (1 - x_1) + a_1 x_1 \quad (417)$$

величины концентрационного расширения

$$\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = \frac{1}{a_0} (a_1 - a_0) = \frac{R_1 - R_0}{R_0} \quad (418)$$

точно совпадают с параметрами размерного несоответствия. Однако для растворов внедрения ситуация другая. Например, используя выражения (415а, б), получим для углерода в решётке железа

$$\delta_1 = \delta_2 = \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial x_c} = -0,098; \quad \delta_3 = \frac{1}{c} \frac{\partial c}{\partial x_c} = 0,870. \quad (419)$$

Эти величины ровно в два раза больше, чем  $e_1$ ,  $e_2$  и  $e_3$ .

Итак, существенная особенность растворов внедрения в ОЦК-решётке заключается в том, что растворённые атомы создают в решётке деформацию, сосредоточенную преимущественно вдоль одной оси, совпадающей с направлением короткой диагонали октаэдра. Подобные источники деформации принято называть упругими диполями. Характеристикой диполя является его мощность

$$\lambda = \delta_3 - \delta_1. \quad (420)$$

Для атомов углерода в  $\alpha$ -железе  $\lambda = 0,97$ .

Формула (399) неприменима для оценки энергии взаимодействия атома — упругого диполя с полем внешнего напряжения. Вместо неё следует использовать

$$W = \Omega (3\delta_1 p + (\delta_3 - \delta_1) \sigma_{zz}), \quad (421)$$

где  $\sigma_{zz}$  — внешнее напряжение, действующее вдоль оси диполя, а  $\Omega = a^3/2$  — объём атома растворителя. Напряжение  $\sigma_{zz}$  указано в формуле в качестве частного примера. Фактически в это выражение должно входить нормальное напряжение вдоль оси упругого диполя.

### 6.5.3. Взаимодействие примесей внедрения и винтовой дислокации

Уже отмечено, что винтовая дислокация не создаёт гидростатического давления, и по площадкам, параллельным оси дислокации, действуют только касательные напряжения. Поэтому считается, что винтовые дислокации

не взаимодействуют с растворёнными атомами, создающими вокруг себя изотропную деформацию. Иная ситуация с атомами-диполями. Дело в том, что по площадкам, наклонённым к оси, винтовая дислокация создаёт нормальное напряжение. Его величина

$$\sigma = 2 \cos \alpha \sin \alpha \cdot \frac{Gb}{4\pi} \cdot \frac{x}{x^2 + y^2}, \quad (422)$$

зависит только от угла  $\alpha$  между линией дислокации и направлением действия напряжения и максимальна при  $\alpha = 45^\circ$ . Поворот проведён на угол  $\alpha$  вокруг оси  $x$  на рис. 97. Поэтому согласно формуле (421) винтовая дислокация притягивает к себе атомы внедрения, у которых ось диполя ориентирована вдоль  $\sigma$ . Таким образом, атомы внедрения в ОЦК-решётке создают атмосферы как около краевых, так и около винтовых дислокаций.

#### 6.5.4. Атмосферы Снука

Существует иной механизм взаимодействия атомов внедрения и дислокаций, заключающийся в изменении характера расположения атомов примеси по октаэдрическим порам в пределах одной элементарной ячейки, иначе говоря, в упорядочении под действием поля напряжений, созданного дислокацией. Как было показано в разделе 2.5.3, в пределах элементарной ячейки ОЦК-решётки находится шесть октаэдрических пор, или три поры на атом. Ориентация короткой диагонали у этих пор различна. Будем называть порами  $x$ -,  $y$ - и  $z$ -типа поры, короткая диагональ (то есть ось упругого диполя) которых ориентирована соответственно вдоль оси  $x$ ,  $y$  и  $z$  (рис. 24).

У мартенсита сплавов Fe–C атомы углерода занимают в решётке только поры  $z$ -типа. Дело в том, что поля упругой деформации атомов внедрения, расположенных в  $z$ -порах, взаимодействуют друг с другом, понижая энергию системы по сравнению с состоянием хаотического расположения атомов по  $x$ -,  $y$ - и  $z$ -порам. Конечно, при этом уменьшается конфигурационная энтропия, то есть энтропия смешения. Но поскольку существует стремление свободной энергии  $F = E - TS$  к минимуму, а энтропия входит в эту функцию в виде произведения  $TS$ , то при высоких температурах эффект повышения энтропии более важен для уменьшения  $F$ , чем отрицательный вклад энергии. При низких температурах ситуация противоположная. Поэтому существует критическая температура  $T_C$  типа точки Кюри, ниже которой атомы внедрения располагаются преимущественно в  $z$ -порах, а выше неё — беспорядочно по порам всех трёх типов. К. Зинер оценил критическую температуру для  $\alpha$ -сплавов Fe–C:

$$T_C = E \cdot \frac{\lambda^2}{k} \cdot \frac{a^3}{2} \cdot \frac{x_C}{1 - x_C}, \quad (423)$$

где  $E$  — модуль упругости  $\alpha$ -железа в направлении  $[001]$ ,  $k$  — постоянная Больцмана, а концентрация  $x_C$  выражена в атомных долях. После подстановки всех значений в это уравнение Зинер получил

$$T_C = 1330 \cdot p_C, \text{ К}, \quad (424)$$

где концентрация  $p_C$  задана в процентах по массе. При предельной для отожжённой  $\alpha$ -фазы концентрации 0,025%С получим  $T_C = 34 \text{ К}$ , то есть при комнатной температуре атомы углерода в феррите равномерно заполняют поры всех трёх типов.

Ситуация изменяется, если в направлении одной из осей  $\langle 100 \rangle$ , например,  $Ox$ , приложить растягивающие напряжения, которые вызовут увеличение радиуса  $R_{\text{окт1}}$  октаэдрических пор  $z$ -типа и уменьшение этого радиуса у  $y$ - и  $z$ -пор. Поры  $x$ -типа окажутся предпочтительными для заполнения их атомами углерода, и некоторое, зависящее от напряжения количество атомов углерода перейдёт из  $z$ - и  $y$ -пор в поры  $x$ -типа. Возникает избыток атомов углерода или азота в порах одного типа, вызванный приложением напряжений (эффект Снука). Снятие напряжений приводит к обратному переходу избыточного числа атомов из  $x$ -пор в поры  $y$ - или  $z$ -типа. Так как расстояние между пора́ми порядка  $a/2$ , то время перескока

$$\tau \approx \frac{a^2}{4D} = \frac{1}{\Gamma}, \quad (425)$$

где  $\Gamma$  — частота перескоков атомов углерода.

Если прикладывать переменное во времени напряжение с частотой  $\nu_1$ , то в случае резонанса  $\nu_1 = \Gamma$  возникнет максимум рассеяния упругой энергии, который можно зафиксировать измерением декремента затухания. Чаще поступают иначе. Частоту переменного напряжения сохраняют постоянной порядка  $\nu_1 \approx 1 \text{ Гц}$ , а изменяют температуру, и тем самым увеличивают частоту перескоков  $\Gamma$  [см. (78)], добиваясь получения максимума рассеяния энергии, что соответствует условию резонанса. Для железа, содержащего примеси углерода, пик внутреннего трения расположен примерно при  $35^\circ\text{C}$ . Его существование можно рассматривать как доказательство реальности эффекта Снука.

Когда в ОЦК-решётке сплава, содержащего примеси внедрения, возникают краевые или винтовые дислокации, то вокруг них появляются поля нормальных напряжений. Атомы внедрения перескакивают в те октапоры, вдоль осей которых действуют максимальные растягивающие напряжения. Если обратиться к выражениям для нормальных напряжений вокруг краевой дислокации в полярных координатах, то легко заметить, что напряжение  $\sigma_{xx}$  максимально при  $\theta = 225^\circ$  и  $315^\circ$  и равно  $1,414 \cdot \psi(r)$ , а  $\sigma_{yy}$  — при  $\theta = 270^\circ$  [ $\sigma_{yy} = 1 \cdot \psi(r)$ ], где  $\psi(r) = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{r}$ . В пределах элементарной ячейки атомы внедрения будут переходить в те октаэдрические поры, оси

которых лежат на этих направлениях или близки к ним. Вокруг краевой дислокации возникнет атмосфера Снука, то есть область, в которой атомы внедрения занимают октаэдрические поры одного типа. Её образование происходит очень быстро, так как не требует диффузии на большое расстояние. Атмосфера Снука фактически перемещается вместе с дислокацией.

### 6.5.5. Зуб текучести

Особенностью железа и отожжённых низкоуглеродистых сталей является резко выраженное на диаграмме растяжения начало пластической деформации в вершине пика или «зуба» текучести (рис. 121). Соответствующее напряжение  $\sigma_T^B$  называется верхним пределом текучести. Затем следует спад напряжения до уровня площадки текучести, сама площадка, а далее начинается подъём деформирующих напряжений вследствие упрочнения. Напряжение, соответствующее площадке, обозначают  $\sigma_T^H$  — нижний предел текучести. Для участка спада напряжения показатель степени  $m$  в уравнении диаграммы деформации

$$\sigma = \sigma_0 + D\varepsilon^m \quad (426)$$

[ср. (209)] отрицателен, а в случае площадки  $m=0$ . Поэтому здесь неизбежно проявление неустойчивости, то есть локализации течения. Вероятно, ещё на участке спада и, несомненно, на площадке текучести появляются полосы сдвиговой деформации Людерса–Чернова. Они зарождаются около концентраторов напряжений — очень часто у зажимов образца, и продвигаются (расширяются) с конечной скоростью вдоль образца. Полосы наклонены к оси растяжения на угол около  $\pm 50^\circ$ . Чаше появляется одна расширяющаяся полоса, но наблюдали и несколько полос, которые могут

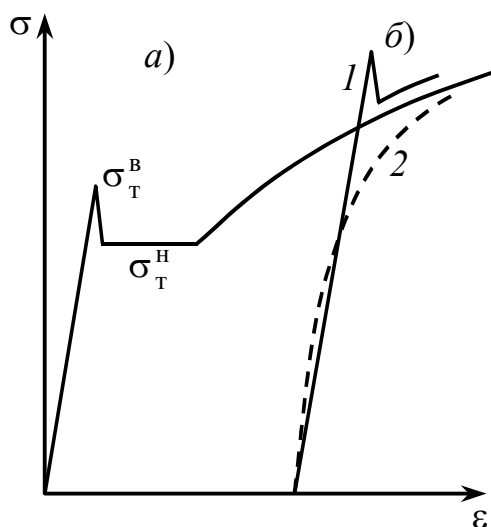


Рис. 121. Кривые деформации железа (а) и низкоуглеродистой стали (б). 1 — после деформационного старения; 2 — без деформационного старения

составлять с осью как положительный, так и отрицательный угол. Внутри полос Людерса сосредоточены линии скольжения, они создают диффузное рассеяние падающего света, тогда как не охваченная полосами поверхность отражает свет как зеркало.

Зуб текучести проявляется тем слабее, чем меньше в сплаве концентрация растворённых атомов азота и углерода. Зуб текучести можно устранить, если продеформировать образец со степенью, превышающей «длину» площадки, до напряжения большего, чем  $\sigma_T^B$ , затем быстро разгрузить и провести повторное нагружение (рис. 121, б). Однако, если после упомянутой малой деформации выдержать образец около часа при 250°C или несколько недель при комнатной температуре, то при повторном нагружении зуб текучести вновь появляется.

В случае, когда деформация низкоуглеродистых сталей проводится в интервале температур 200...300°C, где диффузия атомов углерода и азота проходит довольно быстро, то на диаграмме растяжения можно наблюдать несколько пиков и площадок текучести.

Вся эта совокупность экспериментальных данных была объяснена Коттреллом как эффекты закрепления дислокаций атмосферами Коттрелла и Снука и последующего отрыва дислокаций от атмосфер растворённых атомов.

Будем считать, что взаимодействие дислокации и примесных атомов определяется потенциалом (399), а примесные атомы при  $T < T_K$  создают линейную цепочку ниже экстралоскости дислокации на расстоянии  $\delta$  от её края. Внешнее напряжение  $\tau_{xy}$ , создавая силу  $\tau b$  на единицу длины, пытается сместить краевую дислокацию вдоль оси  $x$  (рис. 122). Допустим, что произошло перемещение на расстояние  $x$ . Если растворённые атомы имеют малую диффузионную подвижность, то их положение остаётся неизменным, то есть  $y = -\delta$ , а  $r = \sqrt{\delta^2 + x^2}$ . Найдём энергию взаимодействия дислокации и примесного атома, учитывая, что  $\sin \theta = y/r$ :

$$W = -\frac{\beta_0}{b(\delta^2 + x^2)} \cdot \delta; \quad (427)$$

здесь  $b$  — расстояние между соседними атомами в цепочке. Тогда энергия  $W$  отнесена к единице длины дислокации.

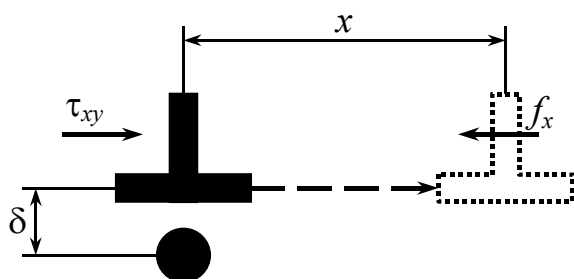


Рис. 122. Сила притяжения к примесному атому, возникающая при движении закреплённой дислокации

Производная  $-\frac{\partial W}{\partial x}$  определяет силу  $f_x$  притяжения дислокации к примеси. Продифференцировав (427) по  $x$ , получим

$$f = -2\beta_0 \frac{\delta x}{b(\delta^2 + x^2)^2}. \quad (428)$$

Знак «минус» означает, что сила направлена в сторону, противоположную движению дислокации. Она равна нулю при  $x=0$ , но и при  $r \rightarrow \infty$  стремится к нулю. Поэтому существует максимум  $|f|$ , который легко отыскать, используя условие экстремума:  $\frac{\partial f}{\partial x} = 0$ . Максимум расположен при  $x = \delta \frac{\sqrt{3}}{3}$ ,

а его высота равна

$$|f|_{\max} = \frac{3\sqrt{3} \cdot \beta_0}{8\delta^2 b}. \quad (429)$$

Для того, чтобы преодолеть максимум силы притяжения, внешнее напряжение должно иметь величину

$$\tau = \frac{3\sqrt{3} \cdot \beta_0}{8\delta^2 b^2}. \quad (430)$$

Если считать, что речь идёт о примесях углерода и азота в железе, то  $b = 2,5 \cdot 10^{-10}$  м;  $\beta_0 = 1,4 \cdot 10^{-29}$  Дж·м;  $\delta = 2 \cdot 10^{-10}$  м. Тогда следует оценка  $\tau = 3600$  МПа. Исключительно высокое значение  $\tau$ , превышающее предел прочности технического железа при 0 К, свидетельствует об эффективности закрепления дислокации атомами примеси. В то же время остался неучтённым очень важный эффект. Примесные атомы не могут создать абсолютно однородную цепочку хотя бы потому, что дислокация имеет ступеньки и перегибы. В некоторых точках линии дислокации атомов углерода нет. Поэтому отрыв линии дислокации от неподвижных атомов начинается в отдельных местах, а затем распространяется на всю линию. В этом случае напряжение, соответствующее отрыву, будет много (на два порядка) ниже, но эффект всё равно значителен. Выше 0 К термическая активация будет способствовать отрыву, поэтому предел текучести снижается с ростом температуры.

При данной скорости деформирования необходимое напряжение тем меньше, чем выше плотность свободных дислокаций [см. уравнение (374); напомним, что по (280) скорость движения дислокаций увеличивается с ростом напряжения]. Поэтому отрыв дислокаций от атмосфер, приводящий к резкому увеличению плотности подвижных дислокаций, вызывает спад напряжения, то есть появление зуба текучести. Высота зуба текучести  $\sigma_T^B - \sigma_T^H$  увеличивается с ростом скорости нагружения и с уменьшением исходной плотности подвижных дислокаций. Как уже упоминалось в разделе 5.3, при деформации металлических усов, изначально полностью лишённых дислокаций, она может достигать сотен и даже тысяч мегапаскалей.



## 7. МЕХАНИЗМЫ УПРОЧНЕНИЯ МЕТАЛЛОВ

### 7.1. ПРЕДЕЛ ТЕКУЧЕСТИ ЧИСТОГО ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО МЕТАЛЛА

Уже отмечено, что процесс пластической деформации скольжением начинается в условиях механического нагружения тогда, когда касательное напряжение  $\tau$  сдвига по разрешённым плоскостям скольжения, созданное внешним источником нагрузки, превысит критическое напряжение  $\tau_s$  начала скольжения. В случае кристаллов с сильным межатомным взаимодействием в качестве величины  $\tau_s$  выступает напряжение Пайерлса (276). Однако в случае многих ГЦК- и чистых ОЦК-металлов начало деформации определяется срабатыванием источников Франка–Рида. Используя формулу (215), определяющую связь нормального и касательного напряжения, а также (362) для критического напряжения, мы получим выражение для предела текучести

$$\sigma_T = \bar{m}\tau_s = \bar{m} \frac{Gb}{2l}, \quad (431)$$

которое относится к чистым металлам с очень крупным зерном и низкой плотностью дислокаций.

Рассчитаем предел текучести отожжённых образцов  $\alpha$ -Fe, у которых размер сегментов дислокационной сетки  $2l$  составляет примерно 1 мкм ( $10^4$  Å). Поскольку  $G = 80 \cdot 10^3$  МПа,  $b = a\sqrt{3}/2$  и  $a = 2,87$  Å, получим

$$\sigma_T = 2,2 \frac{80 \cdot 10^3 \cdot 2,5}{10^4} \approx 44 \text{ МПа}, \quad (432)$$

что близко к экспериментальным данным. Это значение полезно сопоставить с пределами текучести:

- а) мелкозернистого железа (250 МПа);
- б) холоднотянутой железной проволоки (600 МПа);
- в) закалённой стали с 0,25 %С (900 МПа).

Очевидно, что стартовое напряжение работы источников Франка–Рида есть нижний уровень предела текучести, к которому добавляется более значительное упрочнение, создаваемое иными механизмами.

### 7.2. УПРОЧНЕНИЕ ГРАНИЦАМИ ЗЕРНА

Передача скольжения от одного зерна к другому реализуется путем активации определённых систем скольжения, сдвиги по которым должны, согласно рис. 123, компенсировать сдвиг соседнего зерна. Помимо этих приграничных систем в зёрнах могут действовать и другие, более благоприятно ориентированные системы. Поэтому упрочнение границами пред-

ставляет особой эффект, который не учтён в факторе поликристалличности  $\bar{m}$ . Для его количественной оценки рассмотрим следующую схему. Пусть в зерне *A* (рис. 123) напряжение  $\tau$ , действующее по плоскости скольжения, превышает стартовое значение  $\tau_s$  для источника Франка–Рида, и тот генерирует  $n$  дислокационных петель, которые изображены в сечении рядами положительных и отрицательных дислокаций, остановившихся у границ. Чтобы оценить число возникших петель, рассмотрим обратное напряжение, создаваемое скоплениями на источник. Для его расчёта можно приближённо заменить  $n$  дислокаций одной сверхдислокацией с вектором  $nb$ , и тогда согласно выражению (328) получим

$$\tau_{\text{обр}} = 2 \cdot \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{2}{D}, \quad (433)$$

поскольку среднее расстояние между источником и дислокациями равно  $D/2$ , где  $D$  — размер зерна. Коэффициент «2» учитывает и действие отрицательных дислокаций, скопившихся с левой стороны. Очевидно, что когда  $\tau_{\text{обр}}$  окажется равным внешнему напряжению  $\tau$  (точнее, не  $\tau$ , а  $\tau - \tau_s$ , но этим различием мы будем пренебрегать), работа источника прекратится. Отсюда имеем

$$n = \frac{\pi(1-\nu)D}{2Gb} \tau. \quad (434)$$

Подставив выражение для  $n$  в формулу (568) [см. раздел 9.6 ниже], найдём длину скопления  $L = D/2$  и напряжение, которое оно создаёт в соседнем зерне *B*:

$$\tau_{\text{ск}} = \tau \cdot \sqrt{\frac{D}{2r}} f(\theta). \quad (435)$$

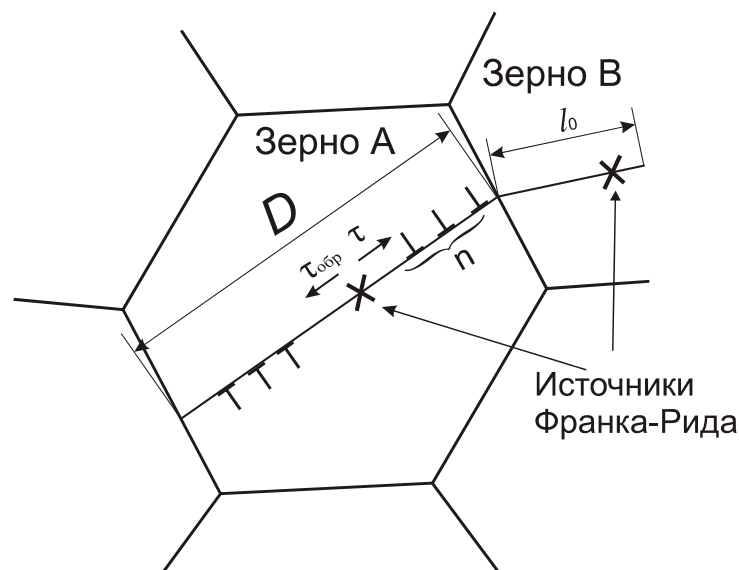


Рис. 123. Механизм перехода сдвига через границу зерна

Вид углового множителя  $f(\theta)$  показан в выражении (569). Под влиянием этого напряжения активируются источники Франка–Рида, и начинается пограничное скольжение с другой стороны границы. Если расстояние от границы до источников есть в среднем  $l_0$ , то условия активации в зерне  $B$ , с точностью до углового множителя порядка единицы, запишутся так:

$$\tau_{\text{ск}}(r=l_0) \approx \tau \cdot \sqrt{\frac{D}{2l_0}} = \tau_s. \quad (436)$$

Поэтому необходимое для активации внешнее напряжение

$$\tau = \tau_s \cdot \sqrt{\frac{2l_0}{D}} \quad (437)$$

оказывается обратно пропорциональным корню из среднего размера зерна. В правую часть этого выражения следует добавить опущенное слагаемое  $\tau_s$ , при достижении которого начинается скольжение в зерне  $A$ . Перейдя, как и в выражении (215), к растягивающим напряжениям, и усреднив их по всем ориентировкам, получим для предела текучести уравнение

$$\sigma_T = \bar{m}\tau_s + \bar{m}\tau_s \sqrt{\frac{2l_0}{D}} = \sigma_T^0 + \frac{k_y}{\sqrt{D}}, \quad (438)$$

которое известно в металловедении как закон Холла–Петча. Коэффициент Холла–Петча  $k_y = \bar{m}\tau_s \sqrt{2l_0}$  имеет размерность  $[\text{МПа} \cdot \text{м}^{1/2}]$ . Его значения для некоторых металлов даны в табл. 12.

Определим предел текучести железа, для чего примем  $\sigma_T = 45$  МПа и  $k_y = 0,74 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$ :

Размер зерна $D$ , мм (мкм)	10 ( $10^4$ )	1 ( $10^3$ )	0,1 ( $10^2$ )	0,01 (10)	0,001 (1)
Предел текучести, МПа	52	68	119	279	785

Заметное упрочнение наблюдается при измельчении зерна сверх 100...10 мкм. Зёрна таких размеров для чистых металлов достигают обычно применением рекристаллизации. Однако у полиморфных металлов аналогичный эффект проще получить в результате одного или нескольких циклов фазового превращения, если оно сопровождается структурной перекристаллизацией.

Таблица 12

Значения коэффициента Холла–Петча для некоторых металлов и сплавов

Металл	$k_y$ , МПа·м <sup>1/2</sup>	Металл	$k_y$ , МПа·м <sup>1/2</sup>
Железо	0,74	Латунь	0,06
Молибден	1,76	Серебро	1,18
Ниобий	0,04	Цинк	0,43
Медь	0,12	Магний	0,28
Алюминий	0,06	Титан	0,4

### 7.3. ДЕФОРМАЦИОННОЕ УПРОЧНЕНИЕ

Выражение «деформационное упрочнение» означает, что напряжение, необходимое для продолжения пластического течения металлов, возрастает с увеличением степени пластической деформации. Все без исключения теории деформационного упрочнения принимают, что это явление связано с ростом плотности дислокаций в процессе деформирования, но расходятся в оценке основного воздействия, ответственного за упрочнение (рис. 124).

Еще в 1934 г. Тейлор высказал предположение, что причиной деформационного упрочнения металлов оказывается накопление дислокаций в виде упорядоченных систем (рис. 124, а). Для прохождения скользящей дислокации через такую систему внешнее напряжение должно превысить максимум внутренних напряжений, пропорциональный  $\sqrt{\rho}$  [см. уравнение (382)].

Дж. Тейлор		Дислокационная сверхструктура: $\frac{\tau - \tau_s}{G} = \frac{1}{2\pi K_T} b \sqrt{\rho}$
А. Зеегер		Структура заторможенных скоплений: $\frac{\tau - \tau_s}{G} = \frac{\sqrt{n}}{2\pi K_3} b \sqrt{\rho}$ (И — источник Франка – Риды; ♣ — дислокация Ломера – Коттрелла)
З. Базинский		Упругое взаимодействие между пересекающимися дислокациями $\frac{\tau - \tau_s}{G} = \frac{1}{2\pi K_B} b \sqrt{\rho_{\text{л}}}$
Н. Мотт, П. Хирш		Движение порогов (ступенек) $\frac{\tau - \tau_s}{G} = \frac{1}{2\pi K_M} b \sqrt{\rho_{\text{л}}}$
Д. Кульман-Вильсдорф		Выгибание дислокаций между узлами сетки в дислокационных сплетениях $\frac{\tau - \tau_s}{G} = \frac{1}{\pi K_K} b \sqrt{\rho_{\text{л}}}$

Рис. 124. Сопоставление пяти моделей деформационного упрочнения по Г. Видериху ( $\rho$  — плотность дислокаций, лежащих в плоскости скольжения;  $\rho_{\text{л}}$  — плотность дислокаций леса)

Зеегер для объяснения стадии линейного упрочнения в ГЦК-кристалле предложил модель плоских скоплений, ограниченных сидячими дислокациями Ломера–Коттрелла (рис. 124, б). Для активации скольжения требуется, чтобы внешнее напряжение на источнике  $S$ , расположенном в центре скопления, превысило величину обратного напряжения от соседних скоплений. После многочисленных микроскопических исследований стало ясно, что плоские скопления дислокаций характерны для весьма небольшой группы материалов (латунь, нержавеющая сталь и т.д.) с очень низкой энергией дефекта упаковки. В большинстве случаев (железо, алюминий, никель, медь и др.) даже после небольшой пластической деформации появляются нерегулярные дислокационные образования (в виде клубков, сплетений). Дислокационные сплетения имеют тенденцию расширяться с увеличением степени пластической деформации, и в итоге они образуют ячеистую структуру с участками, почти свободными от дислокаций. Повышение температуры деформирования приводит обычно к образованию более чёткой ячеистой структуры. В связи с этим во многих работах упрочнение обсуждалось с позиций взаимодействия движущейся дислокации и пересекаемых ею дислокаций другой системы («леса» дислокаций).

Базинский связывает величину напряжения течения с упругим взаимодействием дислокаций с лесом (рис. 124, в). Мотт и Хирш считают, что эта величина определяется движением порогов (рис. 124, г) на винтовых дислокациях, число которых связано с плотностью дислокаций леса.

По Кульман – Вильсдорф, напряжение течения соответствует напряжению, необходимому для выгибания дислокаций между узлами дислокационной сетки (рис. 124, д).

Пока эти теории находятся в стадии экспериментальной проверки, нельзя отдать предпочтение какой-либо из них. Однако все они приводят в принципе к одному и тому же соотношению между напряжением начала скольжения и плотностью дислокаций

$$\tau = \tau_s + AGb\sqrt{\rho}, \quad (439)$$

которое многократно подтверждено экспериментами. Экспериментальные значения постоянной  $A$  лежат в интервале от 0,3 до 0,6 (табл. 13); в среднем  $A \approx 0,5$ . Таким образом, для оценки деформационного упрочнения можно использовать полуэмпирическое выражение  $(1/2)Gb\sqrt{\rho}$ , и тогда предел текучести

$$\sigma_T = \sigma_T^0 + \frac{k_y}{\sqrt{D}} + \frac{\bar{m}}{2} Gb\sqrt{\rho}. \quad (440)$$

Таблица 13

Экспериментальные значения константы  $A$ , входящей в уравнение (439)

Материал	Cu	Cu+4,5%Al	Ni+40%Co	NaCl	Cu	Ag	Fe
Тип образца	монокристалл				поликристалл		
$A$	0,6	0,5	0,3	0,4	0,55	0,55	0,4

## 7.4. ТВЕРДОРАСТВОРНОЕ УПРОЧНЕНИЕ

Еще наши далёкие предки использовали сплавы меди с оловом и другими элементами для изготовления орудий труда и оружия. Причины, побуждавшие применять оловянистые бронзы, легко понять из рис. 125, а, где представлены данные об упрочнении меди при растворении в ней легирующих элементов. Зависимости  $\sigma_T$  от концентрации  $c$  для медных сплавов оказались линейными, но для других систем (Fe–Al, Ni–Mn), и в особенности для растворов внедрения изменение  $\sigma_T$  пропорционально  $\sqrt{x}$  (рис. 125, б).

Интересно, что оба варианта зависимости нашли объяснение в теоретических работах Мотта–Набарро и Флейшера. Обе теории базируются на идее об упругом взаимодействии примесей и дислокаций, но расходятся в оценке его дальнего действия. Очевидно, что замена матричного атома радиуса  $R_0$  атомом примеси с радиусом  $R_1$  вызовет смещение соседних атомов, что можно представить как появление упругой деформации и связанных с ней напряжений в матрице. Анализ напряжённого состояния проведён на простой модели, в которой сфера радиусом  $R_1$  вставлена в сферическую полость радиусом  $R_0$ . В любом радиальном направлении в матрице действуют только сжимающие (или растягивающие, если  $R_1 < R_0$ ) напряжения, вызванные изменением радиуса. Касательные напряжения действуют по плоскости, перпендикулярной любому радиусу. В частности, по плоскостям, параллельным  $xu$  (рис. 126) действуют напряжения

$$\tau_{yz} = 2 \frac{1+\nu}{1-\nu} G \varepsilon_a R_0^3 \frac{zy}{r^5}; \quad (441a)$$

$$\tau_{xz} = 2 \frac{1+\nu}{1-\nu} G \varepsilon_a R_0^3 \frac{xz}{r^5}, \quad (441б)$$

где через  $\varepsilon_a$  обозначен параметр атомного несоответствия  $\frac{R_1 - R_0}{R_0}$ . Его ве-

личину можно довольно точно определить по концентрационной зависимости параметра решетки сплава:

$$\varepsilon_a = \frac{R_1 - R_0}{R_0} \approx \frac{1}{a} \cdot \frac{da}{dc}, \quad (442)$$

где  $c$  — концентрация легирующего элемента, выраженная в атомных долях.

Предположим, что краевая дислокация расположена параллельно оси  $y$ , как это показано на рис. 126. Тогда напряжение  $\tau_{xz}$  создаёт на единицу длины дислокации силу  $\tau_{xz} b$ . Такой силы нет в случае чистого металла. Для того, чтобы дислокация двигалась в направлении  $-x$ , эту силу при  $x > 0$ , помимо других, необходимо преодолеть силе от внешнего напряжения  $\tau$ .

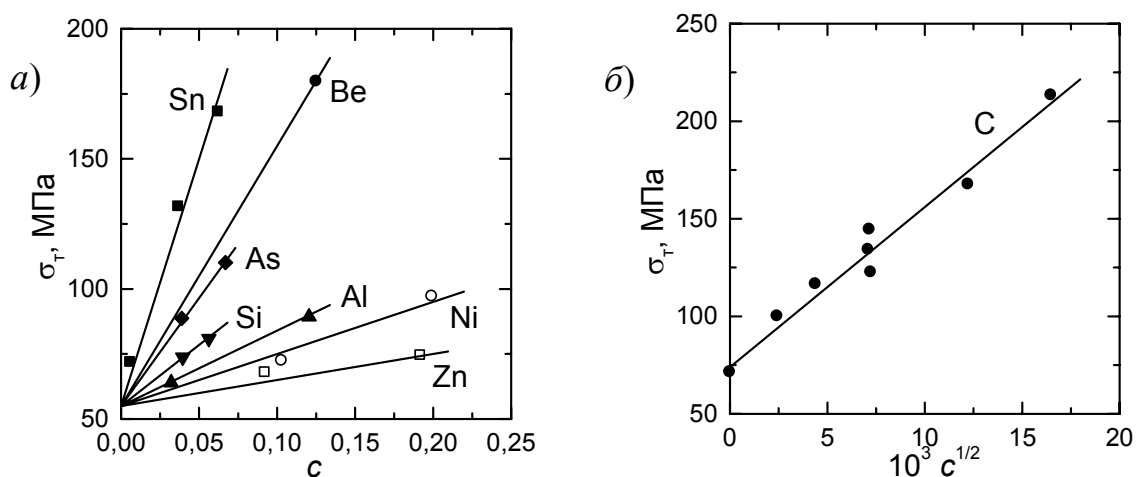


Рис. 125. Влияние примесных элементов на предел текучести меди (а) и железа (б)

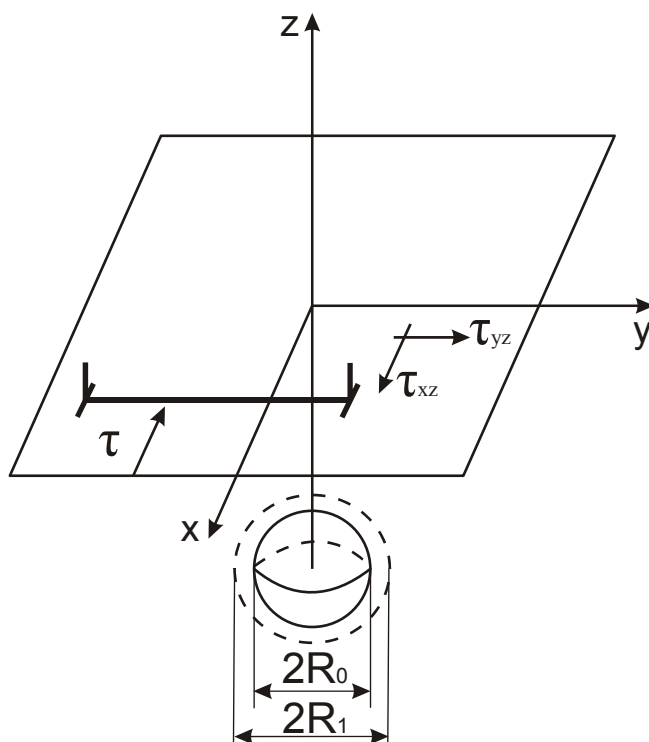


Рис. 126. Напряжения около примесного атома

Конечно, дислокация взаимодействует не с одним атомом растворённого элемента, а со многими. Причём чем ближе к дислокации расположен атом, тем больше сила отталкивания им дислокации. В итоге возникает усреднённое отталкивающее напряжение  $\bar{\tau}_{xz}$ , которое внешнее напряжение должно превзойти. Характер усреднения локальных напряжений от всевозможных атомов отличен для разных теорий.

#### 7.4.1. Упрочнение атомами, образующими раствор замещения

Вернёмся к растворам замещения. В уравнениях (441)  $x$ ,  $y$ ,  $z$  и  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$  представляют координаты дислокации по отношению к примесному атому. Отметив, что расположение атома примеси и дислокации случайно, Мотт и Набарро приняли для напряжения  $\tau_{\Pi}$ , действующего на дислокацию со стороны примеси, среднее по объёму значение  $\tau_{xz}$ :

$$\tau_{\Pi} = \frac{1}{\Lambda^3} \int_b^{\Lambda} \int_b^{\Lambda} \int_b^{\Lambda} \tau_{xz} dx dy dz. \quad (443)$$

Объём  $\Lambda^3$ , по которому проводится усреднение, представляет собой средний объём образца, отнесённый к одному атому примеси. Если концентрация  $c$  растворённых атомов задана в атомных долях, то искомый объём составит  $\frac{V_0}{N_0 c}$ , где  $V_0$  — объём образца, а  $N_0$  — общее число атомов в нём. Поскольку атомный объём  $V_0/N_0$  примерно равен кубу межатомного расстояния  $b$ , то

$$\Lambda = \frac{b}{c^{1/3}}. \quad (444)$$

При расчёте интеграла (443) нужно учесть, что  $\frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \left( \frac{1}{r} \right) = 3 \frac{xz}{r^5}$ . Тогда интегрирование по  $x$  и  $z$  снимается, а оставшийся интеграл  $\int \frac{dy}{(y^2 + a^2)^{1/2}}$ , где  $a^2 = x^2 + z^2$  является табличным и равен  $\ln(y + \sqrt{y^2 + a^2})$ . После подстановки пределов в окончательное выражение получим

$$\tau_{\Pi} = \frac{2}{9} \cdot \frac{1+\nu}{1-\nu} G \epsilon_a c |\ln c| \approx 0,41 G \epsilon_a c |\ln c|. \quad (445)$$

В первых работах Мотт полагал, что  $\tau_{\Pi}$  представляет собой искомую добавку к пределу текучести. Однако эта идея вызвала серьезные возражения у Коттрелла. Он заметил, что  $\tau_{\Pi}$  может определять начало скольжения только в том случае, когда участок дислокации длиной  $\Lambda$  может двигаться независимо от остальной части. Это возможно, если прогиб его под действием  $\tau_{\Pi}$  достигает величины  $\Lambda$ , то есть расстояния от одного атома до другого. Однако радиус изгиба такого участка в поле  $\tau_{\Pi}$  равен  $r = \frac{Gb}{2\tau_{\Pi}}$ , угол изгиба (рис. 127)

$$\theta \approx \frac{\Lambda}{r} = \frac{\tau_{\Pi} \Lambda}{Gb}, \quad (446)$$



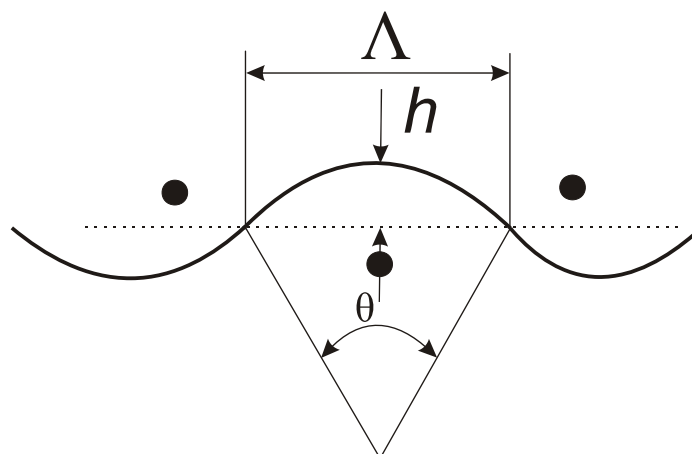


Рис. 127. Изгиб дислокационной линии около примесного атома

и, наконец, величина прогиба  $h \approx \frac{\Lambda\theta}{8}$ : оказывается, что при типичном для растворов замещения значении  $\varepsilon_a = 0,1$  угол  $\theta$  не превосходит  $0,1^\circ$ , а прогиб — порядка  $10^{-4}\Lambda$ . Это означает, что линия дислокации почти прямая. Поэтому отрезок должен двигаться совместно с другими участками дислокаций. Но так как вероятности встречи дислокацией областей с положительными и отрицательными  $\tau_{\Pi}$  одинаковы, то сумма всех напряжений  $\tau_{\Pi}^{(i)}$  по линии дислокации равна нулю, то есть растворённые атомы примеси не должны вызывать упрочнения.

Чтобы преодолеть возникшее затруднение, Мотт и Набарро обратили внимание на то, что на достаточно длинном участке дислокации, равном  $M\Lambda$ , всегда возможны случайные отклонения числа участков с положительным (или отрицательным)  $\tau_{\Pi}$  от среднего  $M/2$ . Согласно теории вероятности, в среднем это отклонение составляет  $\sqrt{M}$ . Тогда суммарный угол изгиба (рис. 128) такого отрезка будет равным  $\theta\sqrt{M}$ , а величина прогиба

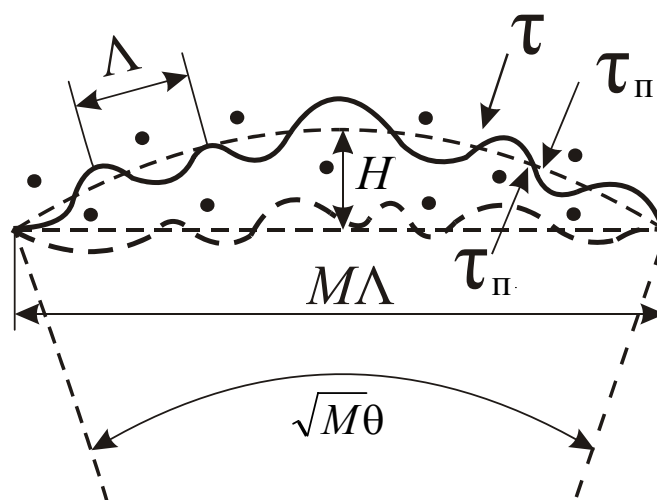


Рис. 128. Элементарное перемещение дислокационного отрезка

$H = \frac{\Lambda\theta}{8}M^{3/2}$ . Чтобы удовлетворить условию независимости движения, авторы потребовали, чтобы  $H = \Lambda$ , и нашли  $M = \left(\frac{8}{\theta}\right)^{2/3} = 8\left(\frac{Gb}{\tau_{\Pi}\Lambda}\right)^{2/3}$ . Для начала движения этого отрезка необходимо, чтобы сила  $\tau b M \Lambda$  от внешнего напряжения превзошла силу  $\tau_{\Pi} b \sqrt{M} \Lambda$ , созданную на дислокации примесями. Находим стартовое значение  $\tau = \tau_s^{(1)}$ :

$$\tau_s^{(1)} = \tau_{\Pi} \left( 8 \frac{Gb}{\tau_{\Pi}\Lambda} \right)^{-1/3} = A\beta G\varepsilon_a^{4/3}c, \quad (447)$$

где  $A = \left( 2\pi \left( \frac{2}{9} \cdot \frac{1+\nu}{1-\nu} \right)^4 \right)^{1/3} \approx 0,56$ , а  $\beta = \left( \frac{c^{2/3}}{2\pi} |\ln c|^4 \right)^{1/3}$ . Величина  $\beta$  имеет до-

вольно слабую концентрационную зависимость: при  $c = 0,01$  имеем  $\beta = 1,49$ , а при  $c = 0,1$  —  $\beta = 0,988$ . Напряжение  $\tau_s^{(1)}$  представляет дополнительное по отношению к чистому металлу касательное напряжение, необходимое для начала скольжения дислокации. Если перейти к нормальному напряжению, то

$$\Delta\sigma_T^{\Pi} = \bar{m}\tau_s^{(1)} = \bar{m}A\beta G\varepsilon_a^{4/3}c \quad (448)$$

есть увеличение предела текучести металла в результате растворения в нём до концентрации  $c$  элемента, атомы которого характеризуются параметром размерного несоответствия  $\varepsilon_a$ . Для ОЦК-металлов величина  $\bar{m}A$  близка к 1. Заметим, что в оригинальной работе  $A = 2,5$ .

В табл. 14 и 15 приведены значения  $\varepsilon_a$  для легирующих элементов в сплавах железа и меди. В теории Мотта–Набарро эффект твердорастворного упрочнения определённым элементом, помимо концентрации, зависит только от величины  $\varepsilon_a$ . Судя по данным табл. 14 и 15, наиболее сильное упрочнение железа создают добавки олова, вольфрама и ниобия. Значительное упрочнение меди дают примеси олова, сурьмы и бериллия.

Таблица 14

Параметры размерного несоответствия атомов (442) в сплавах с железом [2]

Растворённый элемент	$\varepsilon_a$	Растворённый элемент	$\varepsilon_a$
Be	-0,087	Zn	+0,066
Ni	+0,024	Mo	+0,076
Cu	+0,059	W	+0,12
Mn	+0,014	Au	+0,13
Si	-0,024	Nb	+0,11
		Sn	+0,24

Таблица 15

Параметры размерного несоответствия атомов в сплавах на основе меди [2]

Растворённый элемент	$\varepsilon_a$	Растворённый элемент	$\varepsilon_a$
Be	-0,088	Ti	+0,086
Ni	-0,028	Sb	+0,306
Fe	+0,015	Sn	+0,28
Si	+0,017	Al	+0,067
Cr	+0,066	P	+0,055
Zn	+0,057	Ga	+0,08

### 7.4.2. Упрочнение примесями внедрения

Флейшер, в отличие от Мотта, считал, что дислокации взаимодействуют только с атомами, лежащими в плоскости скольжения ( $z \approx b/2$ ), причём это взаимодействие весьма короткодействующее, поскольку  $\tau_{xz}$  обратно пропорционально кубу расстояния до примеси [формулы (441)]. По существу, сила отталкивания становится заметной на расстояниях  $x$  порядка  $(1...3)b$ . Величина силы резко убывает и при удалении атома вдоль линии дислокации (ось  $y$ ). Флейшер вводит эффективную длину участка приложения силы  $l_0 \approx (4...6)b$ , которая несопоставимо мала по сравнению с расстоянием  $\Lambda$  между атомами примеси в плоскости скольжения. Последнюю величину можно оценить так. Общее количество атомов на площади  $F_0$  в плоскости основной решётки составляет  $F_0/b^2$ . Из них атомов примеси  $F_0x/b^2$ . Следовательно, средняя площадь, приходящаяся на один атом, составит  $\frac{F_0}{F_0x/b^2} = \frac{b^2}{x}$ , а среднее расстояние  $\Lambda$  между ближайшими растворёнными атомами окажется равным

$$\Lambda = \frac{b}{\sqrt{x}}. \quad (449)$$

Когда дислокация подходит к примесному атому, она должна изогнуться под действием отталкивающего напряжения  $\tau_{xz}$  (или  $\tau_{yz}$ ), создаваемого этим атомом, как это показано на рис. 129, *a*, где через  $\rho$  обозначен радиус локальной кривизны линии дислокации, а через  $\theta$  — угол изгиба

$$\theta = \frac{l_0}{\rho} = \frac{2\tau_{xz}l_0}{Gb}. \quad (450)$$

Здесь учтено, что согласно (356б) радиус кривизны  $\rho$  связан с изгибающим напряжением. Поскольку в модели Флейшера рассматриваются существенно меньшие расстояния взаимодействия ( $x = y \approx 2b$ ;  $z \approx b/2$ ), чем у Мот-

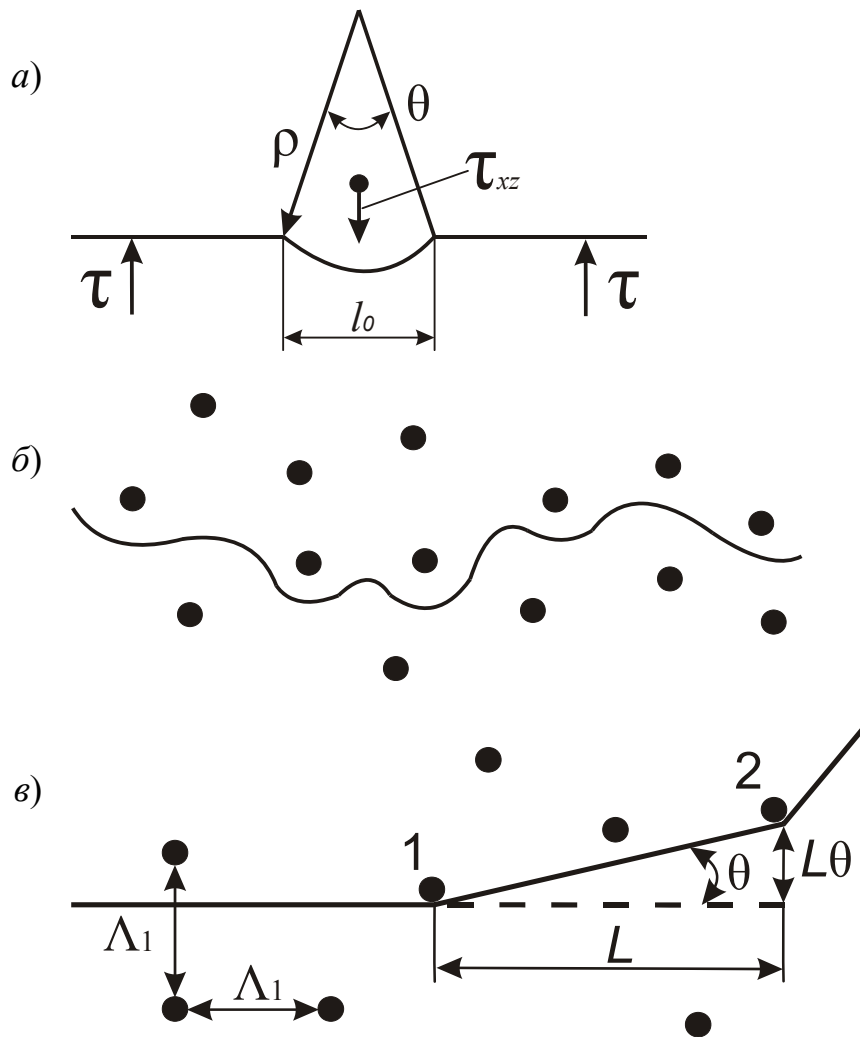


Рис. 129. Взаимодействие дислокаций с примесными атомами (по Флейшеру):  
*а* — изгиб дислокационной линии вблизи атома; *б* — движение гибкой дислокации; *в* — движение жёсткой дислокации

та и Набарро, то углы изгиба дислокации оказываются заметно большими. Всё же для примесей замещения, у которых параметр размерного несоответствия мал, угол  $\theta$  не превышает  $2^\circ$ , то есть линия дислокации изогнута слабо (жёсткая дислокация; рис. 129, в). Но примеси внедрения, создающие чрезвычайно сильные напряжения, по-видимому, могут изгибать контактирующие с ними участки дислокации на угол, больший  $90^\circ$ . В таких растворах дислокации следует рассматривать как гибкие (рис. 129, б).

Условие начала движения дислокации заключается в равенстве силы  $\tau b L$  от внешнего напряжения и силы  $F = \tau_{xz} l_0 b$ , с которой примесный атом воздействует на дислокацию. Отсюда для критического напряжения начала скольжения получается выражение

$$\tau_s = \frac{F}{bL}, \quad (451)$$

где  $L$  — расстояние между соседними атомами, задерживающими дислокацию. Флейшер вычислил силу взаимодействия примеси с винтовой ( $F_1$ ) и краевой дислокациями:

$$F_1 = \frac{Gb^2x}{3\pi r^4} |\varepsilon_G - 3\varepsilon_a|; \quad (452a)$$

$$F_2 = \frac{Gb^2x}{3\pi(1-\nu)r^4} |\varepsilon_G - 16\varepsilon_a|, \quad (452б)$$

$x$  и  $y$  — координаты, а  $r$  — радиус-вектор примесного атома,  $\varepsilon_a$  — параметр размерного, а  $\varepsilon_G = \frac{1}{G} \frac{dG}{dc}$  — параметр упругого несоответствия атомов растворителя и растворённого элемента.

В случае гибкой дислокации  $L = \Lambda$ , поэтому

$$\tau_s = \frac{F}{b^2} \sqrt{c}. \quad (453)$$

В зависимости от того, рассматривается ли взаимодействие с краевой или винтовой дислокацией с  $\vec{b} = \frac{1}{2}a <111>$ , Флейшер, используя уравнения (452) для сил  $F_1$  и  $F_2$  и подставив в них координаты  $x$  и  $y$ , а также значения параметров  $\varepsilon_a$  и  $\varepsilon_G$ , получил для твёрдых растворов Fe—C:

$$\Delta\sigma_T^{\text{т.р.}} = \bar{m}\tau_s = \begin{cases} \bar{m} \frac{G}{8} \sqrt{c} & \text{(винтовая дислокация);} \\ \bar{m} \frac{G}{6} \sqrt{c} & \text{(краевая дислокация),} \end{cases} \quad (454)$$

где  $\Delta\sigma_T^{\text{т.р.}}$  — приращение предела текучести, создаваемое растворёнными атомами. Лучшее согласие с экспериментом даёт первое выражение, отражающее взаимодействие атомов углерода и винтовых дислокаций. Но следует иметь в виду, что из-за отсутствия точной информации о взаимодействии атома углерода и дислокации при малых расстояниях, то есть, по существу, в области ядра дислокации, численное значение коэффициента в знаменателе (8 или 6) может оказаться неточным. Концентрационная зависимость типа  $\Delta\sigma_T \sim \sqrt{c}$  возникает вследствие взаимодействия дислокации с атомами углерода, расположенными в одной плоскости.

В случае жёсткой дислокации  $L$  не равно  $\Lambda$ , так как ближайший соседний примесный атом не обязательно лежит на линии дислокации (рис. 129, в). Если дислокация достигла атома 1, то она изгибается на угол  $\theta$ , так что участок её линии длиной  $L$  опишет площадь  $L^2\theta/2$ . Когда эта площадь будет равна  $b^2/c$ , изогнувшаяся часть дислокации встретит следующий атом 2. Расстояние между атомами 1 и 2

$$L = b \sqrt{\frac{2}{c\theta}}, \quad (455)$$

поэтому, используя условие начала движения (451), найдём для напряжения начала скольжения в растворах замещения

$$\tau_s^{(3)} = \frac{2\tau_{пl_0}}{b} \sqrt{c \frac{\tau_{пl_0}}{Gb}} \approx \frac{G\varepsilon^{3/2}}{760} \sqrt{c}. \quad (456)$$

Позднее Флейшер учёл, что напряжения около примесей могут возникать из-за неравенства модулей сдвига матрицы и растворённого элемента, которое он охарактеризовал параметром упругого несоответствия  $\varepsilon_G = \frac{1}{G} \frac{dG}{dc}$ . Оказалось, что можно учесть  $\varepsilon_G$ , не изменяя структуры выражения (456), простой заменой  $\varepsilon$  на  $\delta$ :

$$\tau_3 \approx \frac{\varepsilon \delta^{3/2}}{760} \sqrt{c}, \quad (457)$$

где  $\delta = |\varepsilon_G - 3\varepsilon_a|$ . При растворении углерода в  $\alpha$ -железе  $\varepsilon_a = 0,87$ ,  $\varepsilon_G = -1,3$ ;

тогда  $\frac{\delta^{3/2}}{760} \approx \frac{1}{100}$ , что много меньше, чем  $\frac{1}{8}$  и  $\frac{1}{6}$  в формуле (454). Посколь-

ку в основе вывода выражения (457) лежит идея о жёсткой дислокации, оно должно относиться к пределу текучести растворов замещения. Однако эксперименты выявили линейную зависимость  $\Delta\sigma_T$  от концентрации. Использовать это выражение для растворов внедрения можно для сплавов с высокой концентрацией, когда из-за малого расстояния между атомами линия зависящей на атомах дислокации состоит из большого количества малых дуг, а по существу, оказывается прямолинейной. Однако в экспериментах единая зависимость  $\Delta\sigma_T \sim \sqrt{c}$  наблюдалась в области как больших, так и малых концентраций атомов внедрения. Эти обстоятельства дают основания сомневаться в применимости формулы (457) для описания твердорастворного упрочнения. О теориях примесного упрочнения Фриделя ( $\Delta\sigma_T \sim c^{1/2}$ ) и Мотта–Лабуша ( $\Delta\sigma_T \sim c^{2/3}$ ) смотрите в монографии М.А.Штремеля [2].

### 7.4.3. Природа прочности углеродистого мартенсита

Известны несколько подробных исследований пределов текучести закалённой стали. Робертс и Оуэн (1968 г.) установили зависимость предела текучести закалённой высоконикелевой стали (21 и 31 %Ni) от концентрации углерода для различных температур испытаний. Оказалось, что

$$\sigma_T = \sigma_T^0 + 1670 \sqrt{P_C} = \sigma_T^0 + 7950 \sqrt{x_C}, \text{ МПа}, \quad (458)$$

где температурнозависящей величиной является первое слагаемое, отражающее предел текучести закалённого железа:  $\sigma_T^0$  равно 780, 552 и 480 МПа соответственно при температурах 77, 195 и 293 К. Упрочнение от атомов углерода является атермическим, не зависящим от температуры. Чтобы сравнить экспериментальную зависимость с теорией, запишем выражение (458) иначе:

$$\sigma_T = \sigma_T^0 + \bar{m} \frac{G}{18} \sqrt{x_C}, \quad (459)$$

где  $G = 65,9 \cdot 10^3$  МПа — модуль сдвига для стали с 21 %Ni, а  $x_C = c$  — атомная доля углерода в стали. Зависимость  $\Delta\sigma_T \sim c^{1/2}$  проявляется отчётливо, но численный коэффициент в знаменателе отличается от полученного Флейшером значения 8, что безусловно можно отнести за счёт неточности описания взаимодействия дислокации и атома углерода, когда последний расположен в ядре дислокации. Отметим, что по теории Фриделя величина коэффициента близка к 30. Очевидно, что требуется доработка теории. Отметим, что в рассмотренной работе измерялся условный предел текучести при различных допускаемых деформациях. Данные (458) относятся к степени деформации 0,6 %. Но влияние допускаемой деформации на концентрационную зависимость предела текучести очень сильно: при возрастании условной деформации происходит очень сильное повышение предела текучести в области малых значений. Причина такого явления заключается в динамическом деформационном старении, то есть образовании атмосфер атомов внедрения около дислокаций, остановившихся у препятствий, что ограничивает длину их свободного пробега и стимулирует рождение новых дислокаций, приводя к интенсивному упрочнению.

Ю.Н.Андреев, И.Н.Кидин и М.А.Штремель (1971 г.) изучили предел упругости при кручении мартенсита углеродистых сталей, содержащих 1...2 % углерода, и получили результат

$$\tau_{0,02} = (310 - 124\lambda + 0,6\lambda^2) + (1460 - 36,3\lambda)\sqrt{P_C}, \text{ МПа}, \quad (460)$$

где  $\lambda$  — объемная доля остаточного аустенита в процентах. И в этом исследовании проявилась зависимость  $\Delta\tau_s \sim c^{1/2}$ , но было обнаружено снижение прочности при появлении даже малых количеств остаточного аустенита. Важно рассмотреть первое слагаемое  $\sigma_T^0$  в выражении (458), равное при комнатной температуре 480 МПа, что намного превышает  $\sigma_T$  отожжённого железа (~45 МПа). Различие в 435 МПа следует связывать с деформационным и структурным упрочнением. Как известно, главная особенность мартенситного превращения состоит в том, что новая атомная структура (ОЦК) рождается из старой (ГЦК) путём небольших последовательных сдвигов атомных плоскостей друг относительно друга. Такой способ перестройки структур приводит к ориентационному сопряжению ре-

шѐток обеих фаз, но сопровождается появлением значительных упругих напряжений в матрице вокруг превращѐнного участка. Накоплению очень большой энергии внутренних напряжений в ходе превращения препятствуют некоторые специфические эффекты. Во-первых, пластины мартенситной фазы имеют небольшую толщину, но около них возникают пластины с другим (иногда противоположным) направлением сдвига, что понижает внутренние напряжения. В результате такого процесса из одного зерна (монокристаллика) аустенита возникает группа пластинчатых образований, кристаллографически связанных с матрицей, а значит, и между собой.

Во-вторых, уровень упругих напряжений понижается в результате вторичного скольжения и двойникования в мартенсите, возвращающих форму превращѐнного участка к первоначальному. Поэтому пластины мартенсита имеют плотность дислокаций порядка  $\sim 10^{11} \text{ см}^{-2}$ . Согласно схеме мартенситного превращения Курдюмова–Закса, в превращѐнной пластине аустенита должны пройти сдвиги по двум пересекающимся плоскостям  $\gamma$ -фазы, что вызывает пересечение дислокаций. В мартенсите должны существовать краевые и винтовые дислокации, содержащие пороги и перегибы. Движение таких дислокаций должно быть термически активируемым, что при постоянной скорости нагружения вызывает снижение деформирующего напряжения при повышении температуры. Этим можно объяснить уменьшение  $\sigma_T^0$  в экспериментах Робертса и Оуэна. Деформационное упрочнение  $\Delta\sigma_T = \frac{\bar{m}}{2} Gb\sqrt{\rho}$  при плотности дислокаций  $10^{11} \text{ см}^{-2}$  равно 490 МПа при полной величине 780 МПа. Вклад в 290 МПа должно дать упрочнение, связанное с малой толщиной мартенситных пластин. Величина  $\sigma_T^0$  особенно существенна для сталей с очень низким содержанием примесей внедрения, например, для мартенситно-стареющих сталей.

## 7.5. ДИСПЕРСИОННОЕ УПРОЧНЕНИЕ

Следующий очень эффективный способ упрочнения связан с распадом пересыщенных твёрдых растворов, которые можно получить в сплавах, где компоненты ограниченно растворимы в твёрдом состоянии, и с понижением температуры растворимость уменьшается. Простейшая диаграмма состояния такого типа представлена на рис. 130. Согласно диаграмме, сплав состава  $c_1$  находится при температуре  $T_1$  в однофазном состоянии. Выделение  $\beta$ -фазы в процессе равновесного (то есть бесконечно медленного) охлаждения начнѐтся ниже температуры  $T_2$ , причѐм количество  $\beta$ -фазы, определяемое правилом рычага, будет нарастать по мере охлаждения. Однако диффузионный по своей природе процесс образования  $\beta$ -фазы можно подавить при ускоренном охлаждении. Сохранившаяся без распада до



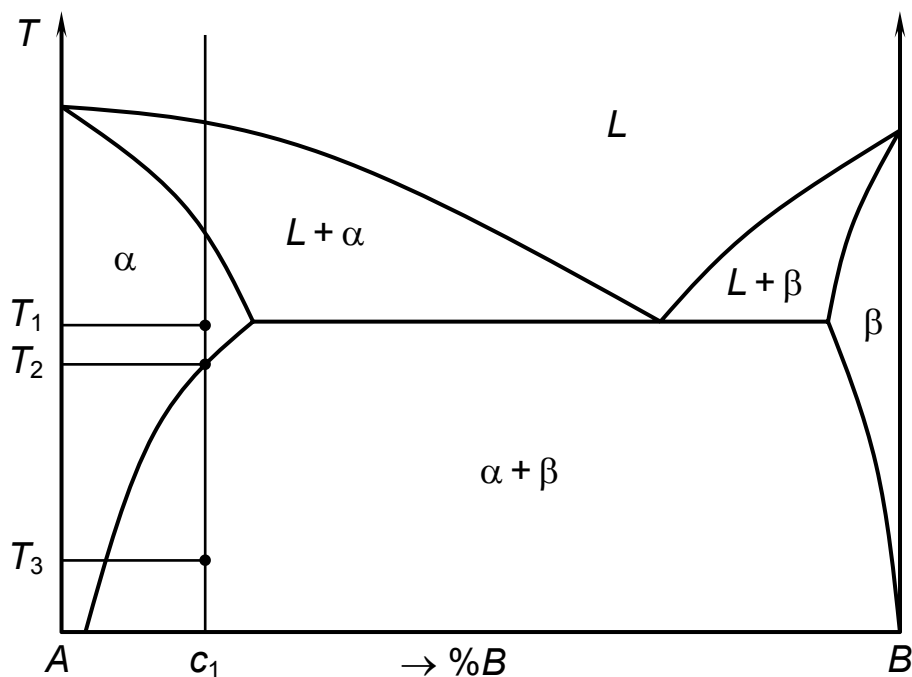


Рис. 130. Диаграмма состояния системы  $A-B$  с ограниченной растворимостью компонентов в твёрдом состоянии

комнатной температуры  $\alpha$ -фаза оказывается пересыщенной компонентом  $B$ , но выделение  $\beta$ -фазы здесь затруднено из-за малой скорости диффузии. Её можно ускорить повторным невысоким нагревом в двухфазную область ( $T_3$ ), причём здесь появляется возможность регулировать дисперсность выделений за счёт изменения температуры и длительности выдержки (старения).

Местами преимущественного зарождения частиц новой фазы являются дислокации, дефекты упаковки или границы зёрен. Значительно реже зародыши возникают в неискажённых участках. Рост выделений происходит, как правило, по меньшей мере в две стадии. На первой стадии частицы выделений когерентно связаны с матрицей, то есть их кристаллические решётки сопрягаются по определённым кристаллографическим плоскостям, наиболее близким друг к другу по структуре и межатомным расстояниям. Такое сопряжение обеспечивает минимум энергии межфазной поверхности, но приводит к появлению внутренних напряжений, поскольку сетки атомных узоров матрицы и выделений, как правило, не совпадают точно, и должны приспособляться друг к другу (рис. 131). По мере роста частиц упругая энергия сопряжения нарастает, и на второй стадии старения когерентность утрачивается вследствие пластической деформации. Не исключено, что при повышенных температурах выделение частиц происходит некогерентным путём. Эта стадия характеризуется быстрым обеднением твёрдого раствора растворённым элементом и укрупнением некогерентных частиц за счёт как продолжающегося распада матричного раствора, так и растворения мелких частиц. Последний процесс, названный коагуляцией,

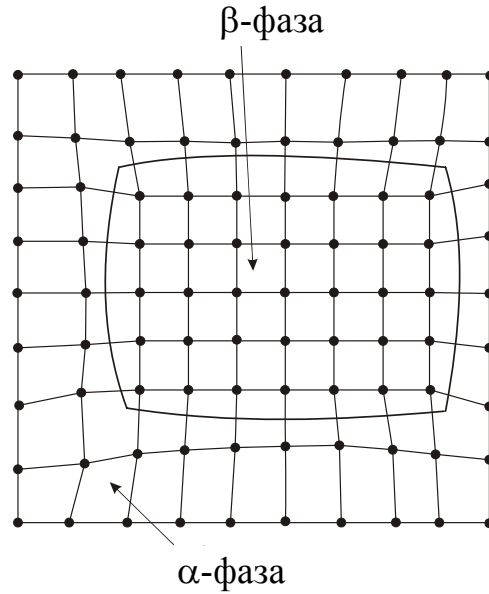


Рис. 131. Когерентное выделение  $\beta$ -фазы

получает особенно заметной развитие на заключительном этапе старения, когда распад  $\alpha$ -фазы уже прекращается.

Для количественного описания структуры состаренного состояния вводят следующие параметры:

1. Число частиц  $\beta$ -фазы в единице объема  $N = [1/\text{см}^3]$ .
2. Средний радиус выделений  $R$  и их средний объем  $(4/3)\pi R^3$  (упрощенно полагаем, что выделения имеют сферическую форму).
3. Доля распада  $f$ , равная отношению объема  $V^*$  выделившейся фазы к объему исходной  $V_0$ , то есть  $f = V^*/V_0$ .
4. Среднее расстояние  $\Lambda$  между выделениями в плоскости скольжения.

Заметим, что среди введенных параметров самостоятельными являются только два, которые выбираются в зависимости от принятой методики исследования. Рассмотрим связь между ними. Во-первых, поскольку  $N$  рассчитывается на  $1 \text{ см}^3$  исходной матрицы, то

$$f = \frac{4}{3} \pi R^3 N. \quad (461)$$

Во-вторых, для того чтобы включение «задело» фиксированную атомную плоскость, его центр должен располагаться от неё на расстоянии не далее, чем  $R$ . Поэтому число частиц, «задевающих»  $1 \text{ см}^2$  плоскости, есть  $2R \cdot 1 \text{ см}^2$ , и следовательно, свободная площадь на одну частицу в плоскости составит  $\frac{1}{2RN}$ . Ее можно выразить также как  $\Lambda^2$ . Поэтому

$$\Lambda \approx \sqrt{\frac{1}{2RN}} = \sqrt{\frac{2\pi}{3f}} R. \quad (462)$$

Отметим ещё, что средний диаметр частиц на случайной плоскости отличается от истинного диаметра, равного  $2R_0$ . Можно показать методами теории вероятности, что  $d = \sqrt{2/3} \cdot 2R \approx 0,82 \cdot 2R$ .

При деформации состаренных сплавов дислокации неизбежно вступают во взаимодействие с частицами выделений, и это создаёт добавочное упрочнение, известное как дисперсионное твердение. Согласно рис. 132, максимальный прирост  $\sigma_T$  достигается за конечный вполне определенный интервал времени старения  $t_0$ , относящийся, как правило, к концу первой стадии, когда частицы ещё когерентны. Рост температуры вызывает сокращение интервала  $t_0$ , но так как прирост  $\sigma_T$  изменяется в зависимости от температуры также по кривой с максимумом, то существует обычно единственный оптимальный режим старения. Его нарушение неизбежно приводит к недостаренному ( $t < t_0$ ) или перестаренному ( $t > t_0$ ) состояниям, для которых упрочнение ослабляется или может вообще почти не проявляться.

Для выяснения причины дисперсионного упрочнения нужно прежде всего рассмотреть, каким образом дислокация, встретившая на своем пути выделения, может преодолеть их. Наиболее простой путь состоит в перерезании дислокациями когерентных частиц. Сопротивление движению связано здесь с тем, что вектор Бюргерса дислокации в матрице не равен межатомному расстоянию в выделении. Переход дислокации в частицу приводит поэтому к образованию плоскостного нарушения укладки (рис. 133, а), характеризующегося повышенной энергией. Если дислокация прошла че-

рез всё включение, то повышение энергии составит  $\frac{\pi d^2}{4} \gamma$ , где  $\gamma$  — удельная энергия дефекта укладки. Перерезание частицы позволяет отрезку дислокации длиной  $\Lambda$  продвинуться на расстояние  $d$  (рис. 133, б). При этом

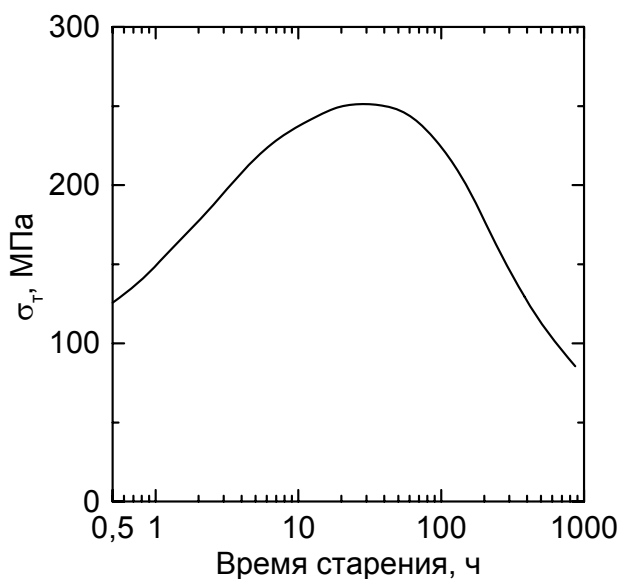


Рис. 132. Зависимость предела текучести сплава Al–1,7 %Cu от времени старения при 180 °C

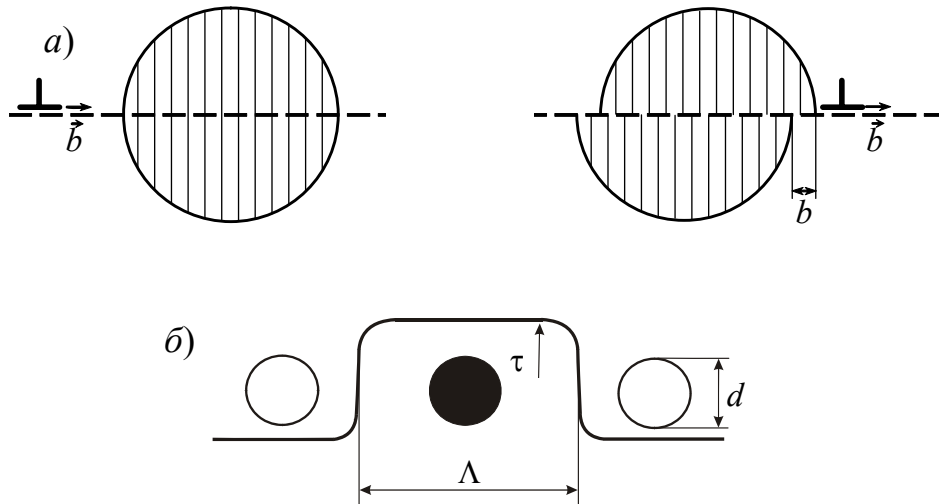


Рис. 133. Механизм перерезания: *a* — нарушение атомной укладки по плоскостям скольжения; *б* — к расчёту напряжения перерезания

внешние напряжения совершат работу  $\Lambda \tau b d$ , которая должна по крайней мере компенсировать рост энергии. Приравняв эти величины, находим напряжение перерезания:

$$\tau_{\text{пер}} = \frac{\pi}{4} \cdot \frac{\gamma d}{\Lambda b}. \quad (463)$$

В ходе распада  $\tau_{\text{пер}}$  должно возрасть, поскольку, согласно выражению (462), отношение  $d/\Lambda$  пропорционально  $\sqrt{f}$ .

Другой вариант прорыва дислокации, показанный на рис. 134, *a–г*, в основном, аналогичен работе источника Франка–Рида. Прогиб дислокации между частицами выделений возрастает по мере увеличения напряжения до тех пор, пока не возникает критическая конфигурация (рис. 134, *б*), соответствующая изгибу по полуокружности. В этот момент внешнее напряжение максимально, и в соответствии с формулой (362),

$$\tau_{\text{ог}} = \frac{Gb}{\Lambda - d}, \quad (464)$$

где  $2l = \Lambda - d$  есть длина среднего промежутка между частицами.

Дальнейшее расширение петель не требует роста  $\tau$ . Можно показать аналогично тому, как это было выше сделано для источника Франка–Рида, что сталкивающиеся за частицами участки дислокационных петель имеют разные знаки и аннигилируют (рис. 134, *г*). Таким образом, дислокации огибают частицы, но около последних возникают дислокационные кольца, затрудняющие прохождение следующих дислокаций.

Стартовое напряжение механизма огибания определяется выражением (464), из которого следует, что рост  $\Lambda$  на второй стадии старения будет снижать  $\tau_{\text{ог}}$ . Очевидно, что зависимости напряжений перерезания и огиба-

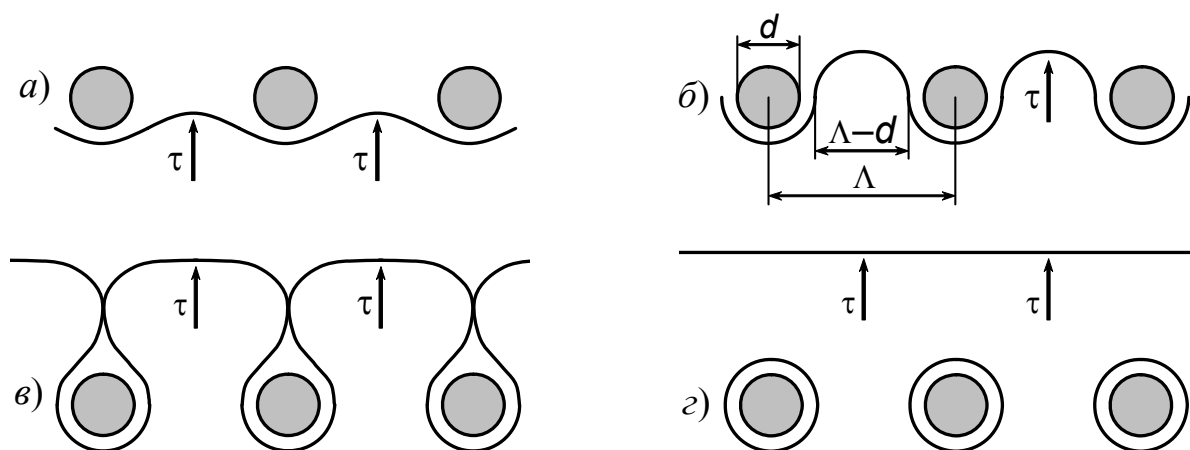


Рис. 134. Механизм огибания. а–г — последовательные стадии

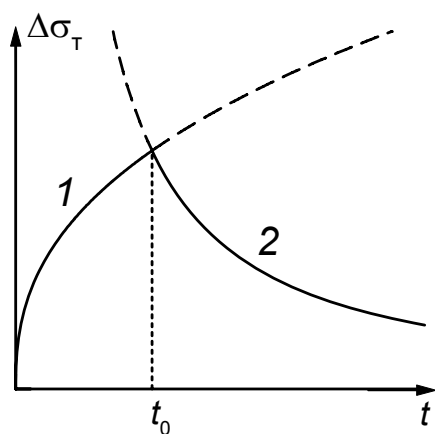


Рис. 135. Объяснение максимума предела текучести при старении.  
1 — механизм перерезания;  
2 — механизм огибания

ния от времени старения имеют противоположный характер, а поэтому пересекаются (рис. 135), и мы можем заключить, что максимум  $\sigma_T$  при старении объясняется переходом от механизма перерезания к механизму огибания.

Здесь рассмотрен один из наиболее важных механизмов дисперсионного упрочнения, но к нему может добавляться упрочнение от зон Гинье — Престона и др. Подробнее об этом говорится в курсах термической обработки и цветных металлов и сплавов.

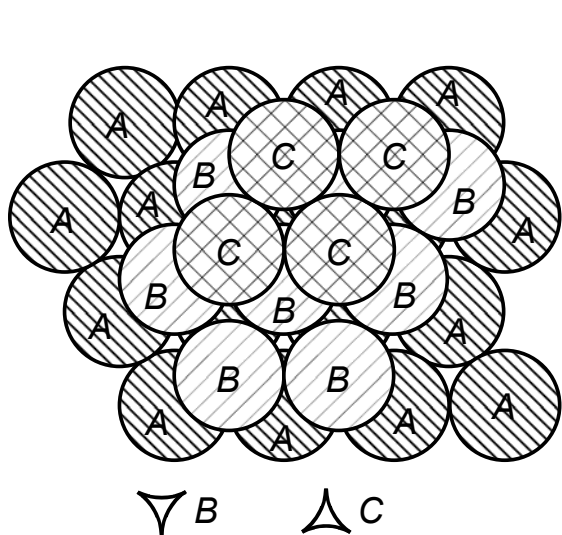
## 8. ДИСЛОКАЦИИ В РЕШЁТКАХ МЕТАЛЛОВ

Металлам несвойственна простая кубическая решётка, на примере которой рассматривалась геометрия дислокаций, — для них типичны структуры ГЦК, ГПУ и ОЦК. Вспомним порядок укладки атомов в плотноупакованных структурах ГПУ и ГЦК.

Обозначим позиции атомов первого плотноупакованного слоя  $A$  (рис. 136). Атомы второго слоя можно положить во впадины, обращённые остриём либо вниз ( $\nabla$ ; позиции  $B$ ), либо вверх ( $\blacktriangle$ ; позиции  $C$ ) — это равноценно. Допустим, второй слой занимает позиции  $B$ , тогда третий слой можно уложить двояко: либо над первым слоем, то есть в позиции  $A$ , либо в позиции  $C$ . В первом случае получим чередование  $ABABAB\dots$ , что соответствует решётке ГПУ, а во втором случае —  $ABCABCABC\dots$ , что соответствует решётке ГЦК.

Плотноупакованной плоскостью в решётке ГЦК является плоскость октаэдра  $\{111\}$ . Чтобы увидеть последовательность укладки этих плоскостей, надо смотреть в направлении нормали к плоскости октаэдра (рис. 137). В решётке ГПУ плотноупакованная плоскость — это плоскость базиса  $\{0001\}$ .

Наименьшие трансляционные вектора Бюргерса (рис. 138), их мощность и число для простой кубической решётки и решёток ОЦК и ГЦК приведены в табл. 16.



Последовательность укладки плоскостей:  
в решётке ГПУ —  $ABABAB\dots$ ;  
в решётке ГЦК —  $ABCABCABC\dots$

Рис. 136. Порядок укладки плотноупакованных плоскостей в решётках ГПУ и ГЦК

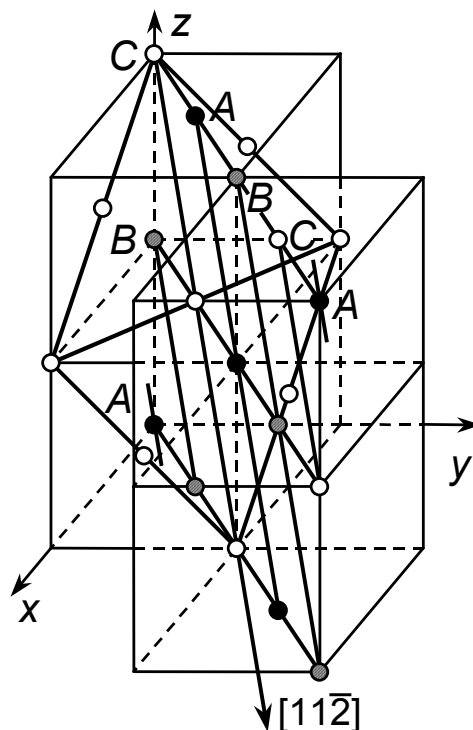


Рис. 137. Укладка атомов в решётке ГЦК. Направление  $[11\bar{2}]$  лежит в плоскости  $(111)$ . В направлении  $[111]$  атомы находятся друг над другом через три слоя

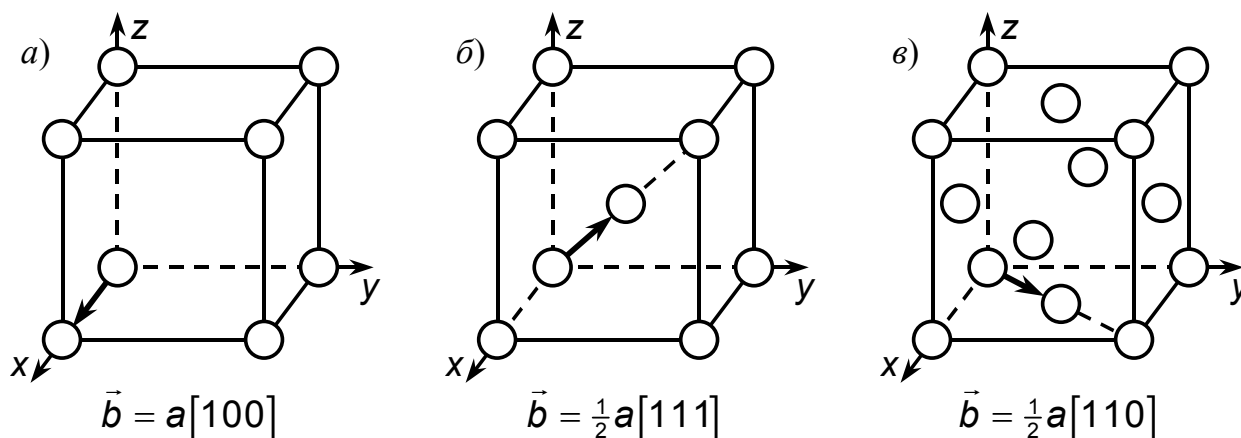


Рис. 138. Векторы Бюргерса в простой кубической решётке (а) и решётках ОЦК (б) и ГЦК (в)

Таблица 16

Наименьшие трансляционные вектора Бюргерса в кубических решётках

Тип решётки	Плоскость скольжения	Направление вектора Бюргерса	Число направлений	Мощность вектора Бюргерса
Простая кубическая	$\{100\}$	$\langle 010 \rangle$	3	$a$
ОЦК	$\{110\}$ $\{211\}$	$\langle 111 \rangle$	4	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$
ГЦК	$\{111\}$	$\langle 110 \rangle$	6	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$

## 8.1. ДИСЛОКАЦИИ В МЕТАЛЛАХ С ГЦК-РЕШЁТКОЙ

Рассмотрим металлы, имеющие структуру ГЦК. Для них плоскостями скольжения являются плотноупакованные плоскости  $\{111\}$ , а направлениями скольжения  $\langle 110 \rangle$ .

### 8.1.1. Полные и частичные дислокации

Пусть сдвиг происходит по плоскости  $(111)$ , в которой атомы уложены в позиции  $B$  (рис. 139). Смещение атомов в этой плоскости из одной позиции  $B$  в другую позицию  $B$  происходит на величину вектора Бюргерса  $\vec{b} = \frac{1}{2}a[\bar{1}10]$ . Неполной атомной плоскостью здесь является плоскость  $(\bar{1}10)$ , перпендикулярная плоскости  $(111)$ , так как  $\cos[\bar{1}10]^\wedge[111] = 0$  в со-

ответствии с выражением (53). Край этой атомной полуплоскости, совпадающий с направлением  $[11\bar{2}]$ , должен был бы являться линией краевой дислокации. Однако, чтобы атомы можно было перемещать из одной в другую ближайшую позицию  $B$ , необходимо удалить (или вставить) не одну, а две соседние полуплоскости  $(\bar{1}10)$ , как это обозначено линиями  $I$  и  $II$  на рис. 139, б (в рассматриваемом слое удаляются атомы  $B$ , выше  $C$ , затем  $A$  и т.д.). Таким образом, краевая дислокация в решётке ГЦК образована не одной, а двумя вертикальными экстраплоскостями (рис. 140, а). Расположение атомов в вертикальных плоскостях  $(\bar{1}10)$  одинаково, однако соседние плоскости смещены друг относительно друга, поэтому одни из них обозначены  $n$ , а другие  $m$ . На рис. 141 сплошными и пунктирными кружками показано расположение атомов в двух соседних плоскостях  $(\bar{1}10)$ .

Движение такой единичной краевой дислокации с вектором  $\frac{1}{2}a[\bar{1}10]$  должно было бы заключаться в том, что две экстраплоскости «перехватывали» недостающие им половинки у двух вертикальных плоскостей, расположенных справа, и, следовательно, обе полуплоскости смещались вправо, оставаясь соседями. При этом укладка атомов не нарушается, так как соединяются  $n$  с  $n$  и  $m$  с  $m$ .

Вернёмся к рис. 139 и обратим внимание на то, что переместить атом в ближайшую позицию  $B$  можно не сразу, а в две стадии: сначала из  $B$  в  $C$ , а затем снова в  $B$ . Таким образом, полную дислокацию с вектором Бюргерса  $\vec{b}_1$  можно заменить двумя частичными дислокациями с векторами  $\vec{b}_2$  и  $\vec{b}_3$ .

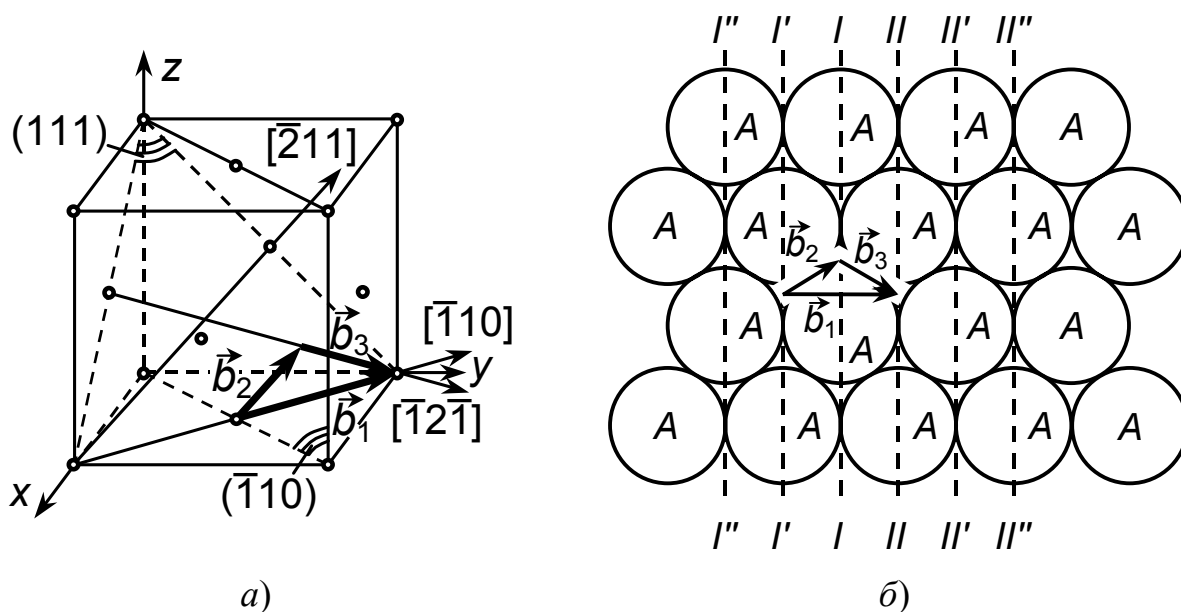


Рис. 139. Разложение вектора сдвига  $\frac{1}{2}a[\bar{1}10]$  на составляющие  $\frac{1}{6}a[\bar{1}2\bar{1}]$  и  $\frac{1}{6}a[\bar{2}11]$  в плоскости  $(111)$ : а — пространственная схема; б — на плоскости  $(111)$



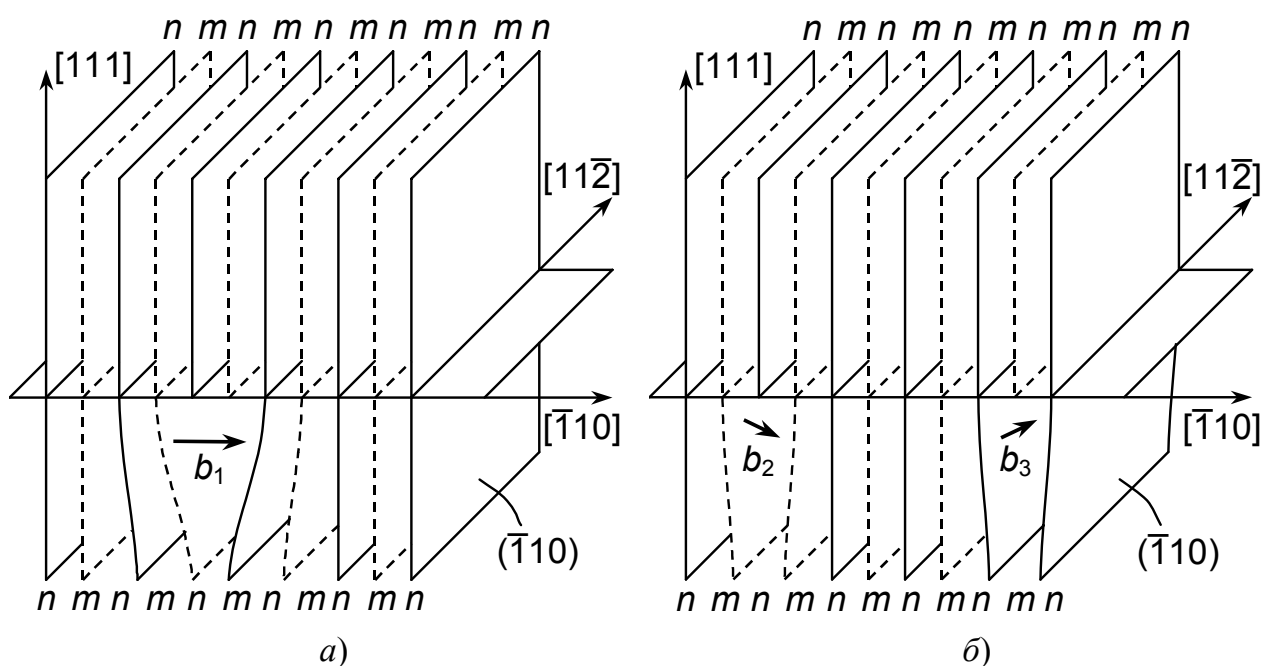


Рис. 140. Нерасщеплённая (а) и расщеплённая (б) краевые дислокации в ГЦК-решётке. Вектор Бюргерса полной дислокации  $\vec{b}_1 = \frac{1}{2}a[\bar{1}10]$ , а частичных дислокаций  $\vec{b}_2 = \frac{1}{6}a[\bar{2}11]$  и  $\vec{b}_3 = \frac{1}{6}a[\bar{1}2\bar{1}]$

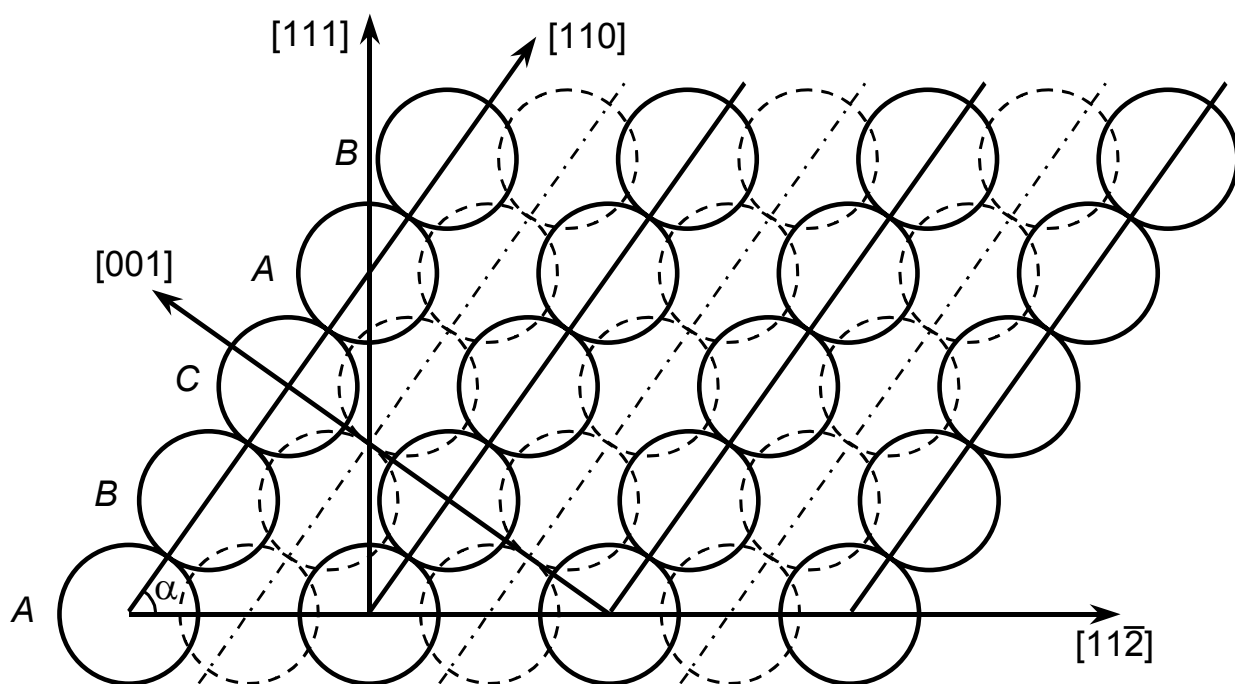


Рис. 141. Расположение атомов в соседних плоскостях  $(1\bar{1}0)$

Возможно ли такое расщепление? Это определяется соотношением энергий полной и двух частичных дислокаций. Согласно формуле (298), энергия дислокации пропорциональна квадрату модуля её вектора Бюргерса, поэтому расщепление выгодно, если  $b_1^2 > b_2^2 + b_3^2$ , и невыгодно при  $b_1^2 < b_2^2 + b_3^2$  (критерий Франка).

Запишем реакцию расщепления полной дислокации (рис. 139):

$$\frac{1}{2}a[\bar{1}10] = \frac{1}{6}a[\bar{2}11] + \frac{1}{6}a[\bar{1}2\bar{1}]. \quad (465)$$

Произведём проверку записи, исходя из того, что сумма индексов частичных дислокаций равна индексам полной дислокации:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}a(-1) &= \frac{1}{6}a(-2) + \frac{1}{6}a(-1); \\ \frac{1}{2}a(1) &= \frac{1}{6}a(1) + \frac{1}{6}a(2); \\ \frac{1}{2}a(0) &= \frac{1}{6}a(1) + \frac{1}{6}a(-1). \end{aligned} \quad (466)$$

Определим модули векторов и возведём их в квадрат:

$$\begin{aligned} b_1^2 &= \frac{1}{4}a^2 \cdot 2 = \frac{1}{2}a^2; \\ b_2^2 + b_3^2 &= \frac{1}{36}a^2 \cdot 6 + \frac{1}{36}a^2 \cdot 6 = \frac{1}{3}a^2. \end{aligned} \quad (467)$$

Получаем, что  $b_1^2 > b_2^2 + b_3^2$  и, следовательно, расщепление полной дислокации на две частичные, называемые дислокациями Шокли, энергетически выгодно.

Линия полной дислокации проходит вдоль края двух соседних экстраплоскостей, а частичных — вдоль края каждой отдельной полуплоскости. Вектор Бюргерса частичной дислокации направлен под некоторым углом к линии дислокации (смешанная дислокация) и не является трансляционным вектором.

Легко показать, что частичные дислокации взаимно отталкиваются. Найдём краевую и винтовую компоненты частичных дислокаций, для чего рассчитаем проекции их векторов Бюргерса на оси  $x$  и  $y$  (рис. 142):

$$b_{кр} = a \frac{\sqrt{6}}{6} \cos 30^\circ = a \frac{\sqrt{2}}{4}; \quad b_v = a \frac{\sqrt{6}}{6} \sin 30^\circ = a \frac{\sqrt{6}}{12}. \quad (468)$$

Винтовые компоненты частичных дислокаций имеют различный знак и взаимно притягиваются, а краевые компоненты — одинаковый знак и взаимно отталкиваются. Результирующая сила их упругого взаимодействия

$$f_{упр} = \frac{Gb_{кр}^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{x} - \frac{Gb_v^2}{2\pi} \cdot \frac{1}{x} = \frac{Gb_1^2}{24\pi} \cdot \frac{2+\nu}{1-\nu} \cdot \frac{1}{x} \quad (469)$$

имеет характер отталкивания, так как вектор Бюргерса краевых компонент значительно больше, чем винтовых. Поэтому вертикальные полуплоскости удаляются друг от друга; происходит расщепление полной дислокации на две частичные дислокации Шокли (рис. 140, б).

Движение частичной дислокации  $I-I$  влево будет переводить атомы из позиций  $B$  в позицию  $C$  (рис. 139, б). То же самое будет происходить и при

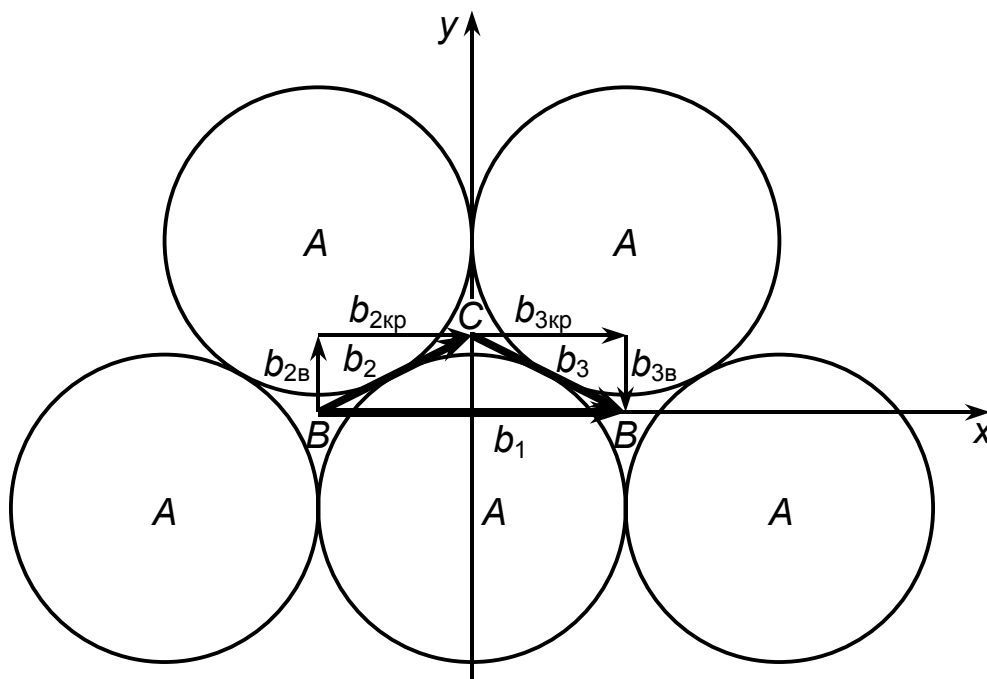


Рис. 142. Краевые и винтовые компоненты  
частичных дислокаций в ГЦК-решётке

движении дислокации  $II-II$  вправо. Таким образом, между расходящимися частичными дислокациями создается нарушение порядка укладки атомов, так как вместо позиции  $B$  все они занимают позицию  $C$ , и плоскости (110) между двумя частичными дислокациями изменили свой тип из  $n$  в  $m$  и обратно (рис. 140, б). Это нарушение называется дефектом упаковки (ДУ). При движении расщеплённой дислокации головная частичная дислокация создает ДУ, а идущая за ней частичная дислокация его устраняет. Когда обе частичные дислокации пройдут через весь кристалл, одна его часть сместится относительно другой в направлении и на величину вектора Бюргера полной дислокации.

Дефект упаковки обладает поверхностной энергией  $\gamma_{\text{ДУ}}$  (в расчёте на единицу его площади). При попытке двух частичных дислокаций единичной длины разойтись на расстояние  $x$  энергия дефекта упаковки увеличится на  $\gamma_{\text{ДУ}} \cdot x$ . Кристалл будет сопротивляться увеличению энергии, так что

возникнет сила (химической природы)  $f_{\text{хим}} = -\frac{d(\gamma_{\text{ДУ}} x)}{dx} = -\gamma_{\text{ДУ}}$ , которая бу-

дет стремиться уничтожить дефект упаковки, то есть стягивать частичные дислокации друг к другу. Эта сила, в отличие от  $f_{\text{упр}}$ , не зависит от расстояния  $x$ . Равновесие двух сил, направленных противоположно, будет достигнуто при  $x = x_{\text{ДУ}}$ , где

$$x_{\text{ДУ}} = \frac{Gb_1^2}{24\pi\gamma_{\text{ДУ}}} \cdot \frac{2+\nu}{1-\nu}. \quad (470)$$

Объяснить конечную ширину расщепления можно и иначе. На образование дефекта упаковки затрачивается энергия, поэтому частичные дислокации могут удаляться друг от друга до тех пор, пока энергия, выделяемая благодаря реакции расщепления  $\vec{b}_1 \rightarrow \vec{b}_2 + \vec{b}_3$ , не будет полностью израсходована на образование ДУ. Примем значения, характерные для сплавов меди:  $G = 48$  ГПа;  $b_1 = 2,5 \cdot 10^{-10}$  м;  $\nu = 0,35$ , и рассчитаем на основе выражения (470) соответствующие им значения ширины расщепления:

$\gamma_{\text{ДУ}}, \text{ мДж/м}^2$	100	50	10	1	0,1	0,01
$x_{\text{ДУ}}, \text{ нм}$	1,41	2,82	14,1	141	1 410	14 100
$x_{\text{ДУ}}/b_1$	5,63	11,3	56,3	563	5 630	56 300

Мы видим, что, когда энергия дефекта упаковки превосходит  $100 \text{ мДж/м}^2$ , ширина расщеплённой дислокации оказывается меньше  $5b_1$ , то есть соизмерима с размером ядра дислокации. Поэтому фактического расщепления нет. Только при  $\gamma_{\text{ДУ}} < 50 \text{ мДж/м}^2$  можно говорить о расщеплении. Для значений же  $\gamma_{\text{ДУ}}$  порядка  $1 \text{ мДж/м}^2$  и менее ширина расщепления велика и должна надёжно фиксироваться при наблюдении в электронном микроскопе.

Дефект упаковки в решётке ГЦК представляет собой тонкий слой (как бы пластинку), имеющий структуру ГПУ. Это можно наглядно показать, если сделать рисунок в плоскости  $(\bar{1}\bar{1}0)$  и произвести сдвиг частичной дислокации с вектором Бюргерса  $\vec{b} = \frac{1}{6}a[11\bar{2}]$ , лежащим в плоскостях (111) и (110) (рис. 143). Как видим, в результате сдвига правильная укладка слоев  $ABCABC$  нарушилась и получилась укладка  $ABCACABC$ . Стрелками показано нарушение укладки, при котором слой  $C$  повторяется через один слой  $A$ , что соответствует упаковке ГПУ. Толщина ДУ составляет всего лишь несколько межатомных слоёв, тогда как его размеры в плоскости скольжения (111) определяются длиной частичных дислокаций и могут быть значительными. Поэтому ДУ представляет собой двумерный (плоский) дефект. Так как связанная с дефектом упаковки энергия пропорциональна его размерам, то энергию ДУ обычно рассчитывают на единицу площади (в  $\text{мДж/м}^2$ ). Значения энергии ДУ для некоторых металлов и сплавов приведены в табл. 17.

Аналогично расщепляется и винтовая дислокация, которая, как известно, не связана с представлением об экстраплоскости. В случае движения винтовой дислокации также реализуется последовательность смещения атомов  $B \rightarrow C \rightarrow B$ . Допустим, что линия винтовой дислокации расположена вдоль оси  $x$ . Тогда ориентация векторов Бюргерса полной и частичных дислокаций будет такой же, как для исходно краевой, но  $b_{\text{кр}} = a \frac{\sqrt{6}}{6} \sin 30^\circ = a \frac{\sqrt{6}}{12}$ , а  $b_{\text{в}} = a \frac{\sqrt{6}}{6} \cos 30^\circ = a \frac{\sqrt{2}}{4}$ . Отталкивание более мощных винтовых компонент частичных дислокаций превысит притяжение

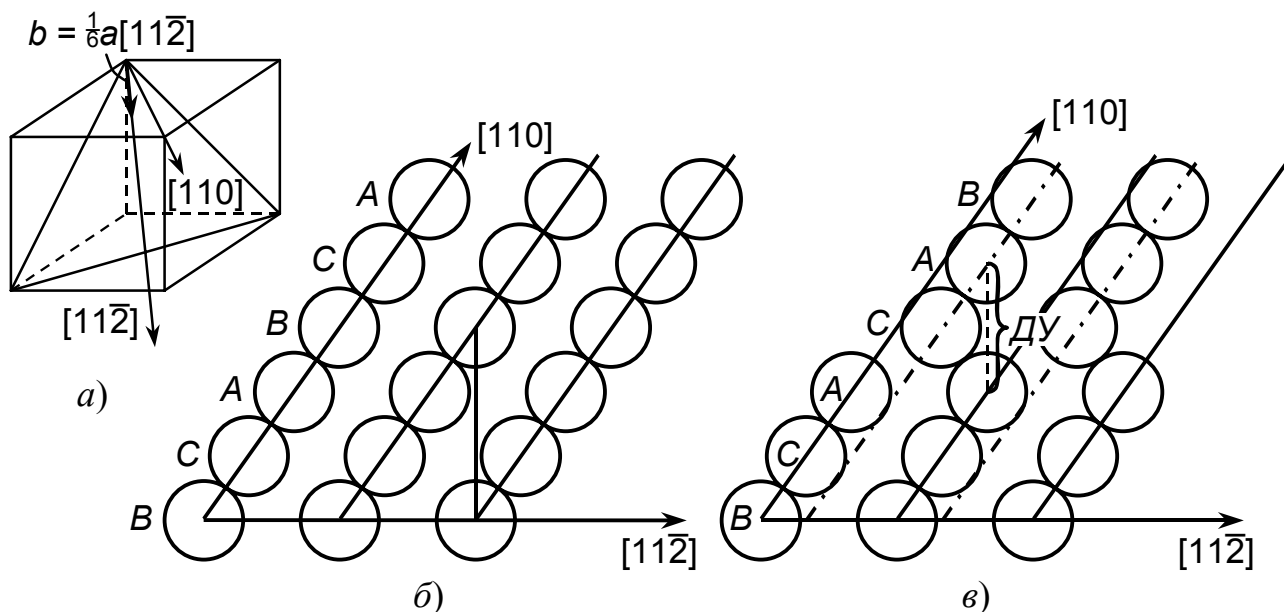


Рис. 143. Нарушение укладки атомов в плоскости  $(\bar{1}10)$  в результате сдвига атомов  $B$  на вектор частичной дислокации  $\vec{b} = \frac{1}{6}a[11\bar{2}]$ .  $a$  — вектор Бюргерса частичной дислокации  $\vec{b} = \frac{1}{6}a[11\bar{2}]$ ;  $b$  — расположение атомов до сдвига;  $c$  — расположение атомов после сдвига (образовался дефект упаковки, имеющий структуру ГПУ)

Таблица 17

Значения энергии дефекта упаковки  $\gamma_{\text{ДУ}}$  некоторых металлов и сплавов  
(при комнатной температуре)

Металл (сплав)	Тип решётки	$\gamma_{\text{ДУ}},$ мДж/м <sup>2</sup>	Металл (сплав)	Тип решётки	$\gamma_{\text{ДУ}},$ мДж/м <sup>2</sup>
Медь	ГЦК	41	Нержавеющая сталь 08X18H10	ГЦК	12
Серебро	ГЦК	16	Сталь Гадфильда 110Г13	ГЦК	6
Золото	ГЦК	32	Сплав Fe+12%Mn	ГЦК	34
Алюминий	ГЦК	135	Сплав Fe+22%Mn	ГЦК	15
Никель	ГЦК	125	Сплав Fe+30%Mn	ГЦК	42
Свинец	ГЦК	50	Сплав Fe+20%Ni	ГЦК	50
$\gamma$ -железо	ГЦК	70	Сплав Fe+36%Ni	ГЦК	30
Иридий	ГЦК	30	Сплав Co+33%Ni	ГЦК	15
Цинк	ГПУ	181	Латунь Cu+10%Zn	ГЦК	30
Кадмий	ГПУ	181	Латунь Cu+30%Zn	ГЦК	15
Магний	ГПУ	129	Бронза Cu+2%Al	ГЦК	30
$\alpha$ -титан	ГПУ	150	Бронза Cu+6%Al	ГЦК	10
$\alpha$ -кобальт	ГПУ	27	Бронза Cu+3%Si	ГЦК	10
$\alpha$ -железо	ОЦК	140	Сплав Cu+5%Ge	ГЦК	20
Хром, молибден, вольфрам	ОЦК	>300			

разноимённых краевых компонент. Результирующая сила взаимного отталкивания

$$f_{\text{упр}} = \frac{Gb_v^2}{2\pi} \cdot \frac{1}{x} - \frac{Gb_{\text{кр}}^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{x} = \frac{Gb_1^2}{24\pi} \cdot \frac{2-3\nu}{1-\nu} \cdot \frac{1}{x} \quad (471)$$

обусловит расщепление винтовой дислокации. Равновесная ширина расщеплённой винтовой дислокации

$$x_{\text{ДУ}} = \frac{Gb_1^2}{24\pi\gamma_{\text{ДУ}}} \cdot \frac{2-3\nu}{1-\nu} \quad (472)$$

для  $\nu = 0,3$  оказывается вдвое меньше, чем для краевой.

### 8.1.2. Поперечное скольжение расщеплённой винтовой дислокации

Расщепляться на частичные дислокации могут и краевые, и винтовые дислокации (и компоненты смешанных дислокаций). Частичные дислокации связаны ДУ и двигаются как единое целое. Однако, если головная частичная дислокация на каком-то участке встретит препятствие, то под действием внешней силы с помощью термической активации частичные дислокации, сближаясь, могут образовать полную дислокацию малой (перетяжка) или большой протяжённости (рис. 144).

Слияние частичных дислокаций на некотором участке имеет первостепенное значение в случае расщепления винтовой дислокации. Как уже отмечалось, в отличие от краевой винтовая дислокация может обходить препятствие путём поперечного скольжения, однако расщеплённые винтовые дислокации «привязаны» к своей плоскости скольжения. На участке слияния частичных дислокаций вектор Бюргерса становится параллелен линии дислокации, и этот отрезок, представляющий собой полную винтовую дислокацию, способен переходить в другие плоскости скольжения, то есть совершать поперечное скольжение. Пусть винтовая дислокация с вектором Бюргерса  $\frac{1}{2}a[110]$  переходит из плоскости  $(\bar{1}11)$  в плоскость  $(1\bar{1}1)$ . В этих плоскостях винтовая дислокация расщепляется соответственно по следующим реакциям (рис. 145):

$$\frac{1}{2}a[110] = \frac{1}{6}a[211] + \frac{1}{6}a[12\bar{1}]; \quad (473 \text{ а})$$

и

$$\frac{1}{2}a[110] = \frac{1}{6}a[121] + \frac{1}{6}a[21\bar{1}]. \quad (473 \text{ б})$$

Косинус угла пересечения нормалей к плоскостям

$$\cos \varphi = \cos[\bar{1}11] \wedge [1\bar{1}1] = -\frac{1}{3}, \quad (474)$$

а угол между плоскостями  $\alpha = 180^\circ - \varphi = 70^\circ 42'$ ; направление линии пересечения плоскостей  $[110]$ .

Все стадии поперечного скольжения показаны на рис. 146.

Как следует из формул (470) и (472), протяжённость дефекта упаковки зависит от его энергии  $\gamma_{\text{ДУ}}$ . Чем меньше  $\gamma_{\text{ДУ}}$ , тем на большее расстояние расходятся частичные дислокации. Так, для алюминия  $\gamma_{\text{ДУ}}$  сравнительно велика (135 мДж/м<sup>2</sup>), а для меди мала (41 мДж/м<sup>2</sup>). Благодаря этому протяжённость ДУ в меди значительно больше, чем в алюминии (три и тринадцать векторов Бюргерса соответственно). Поэтому для слияния частичных дислокаций в меди требуется значительно большие затраты энергии, и поперечное скольжение, легко протекающее в алюминии, затруднено в меди. Поперечное скольжение — процесс термически активируемый, и поэтому облегчается с повышением температуры.

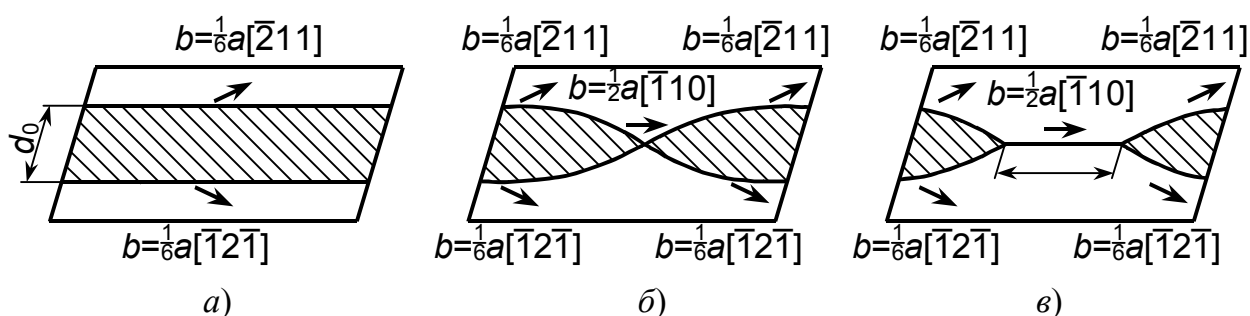


Рис. 144. Образование перетяжки на расщеплённой винтовой дислокации:  
 а — до образования; б — слияние на малом участке;  
 в — слияние на большом участке

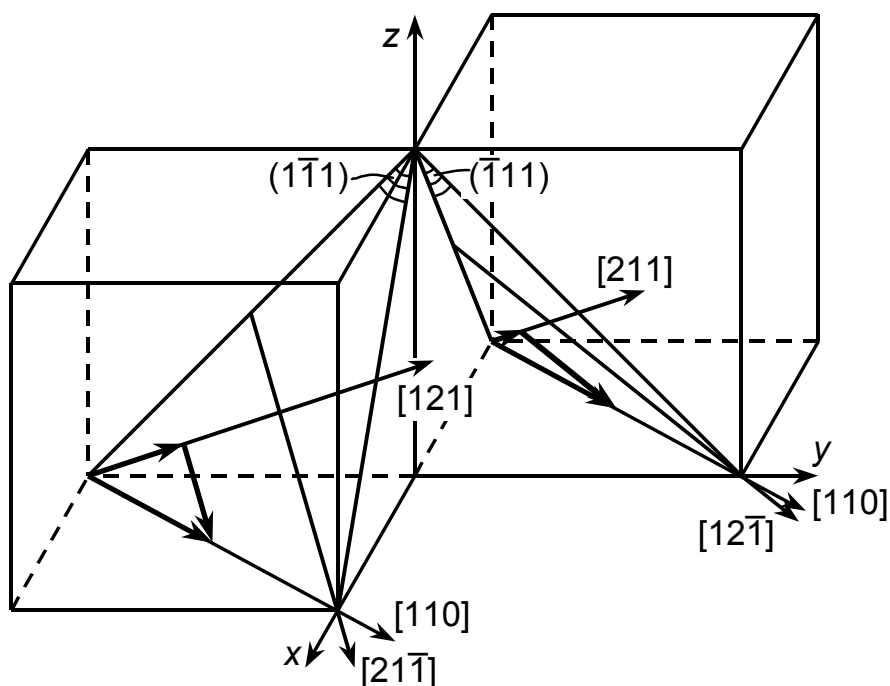


Рис. 145. Расщепление винтовой дислокации  $\frac{1}{2}a[110]$  в плоскостях  $(\bar{1}11)$  и  $(1\bar{1}1)$

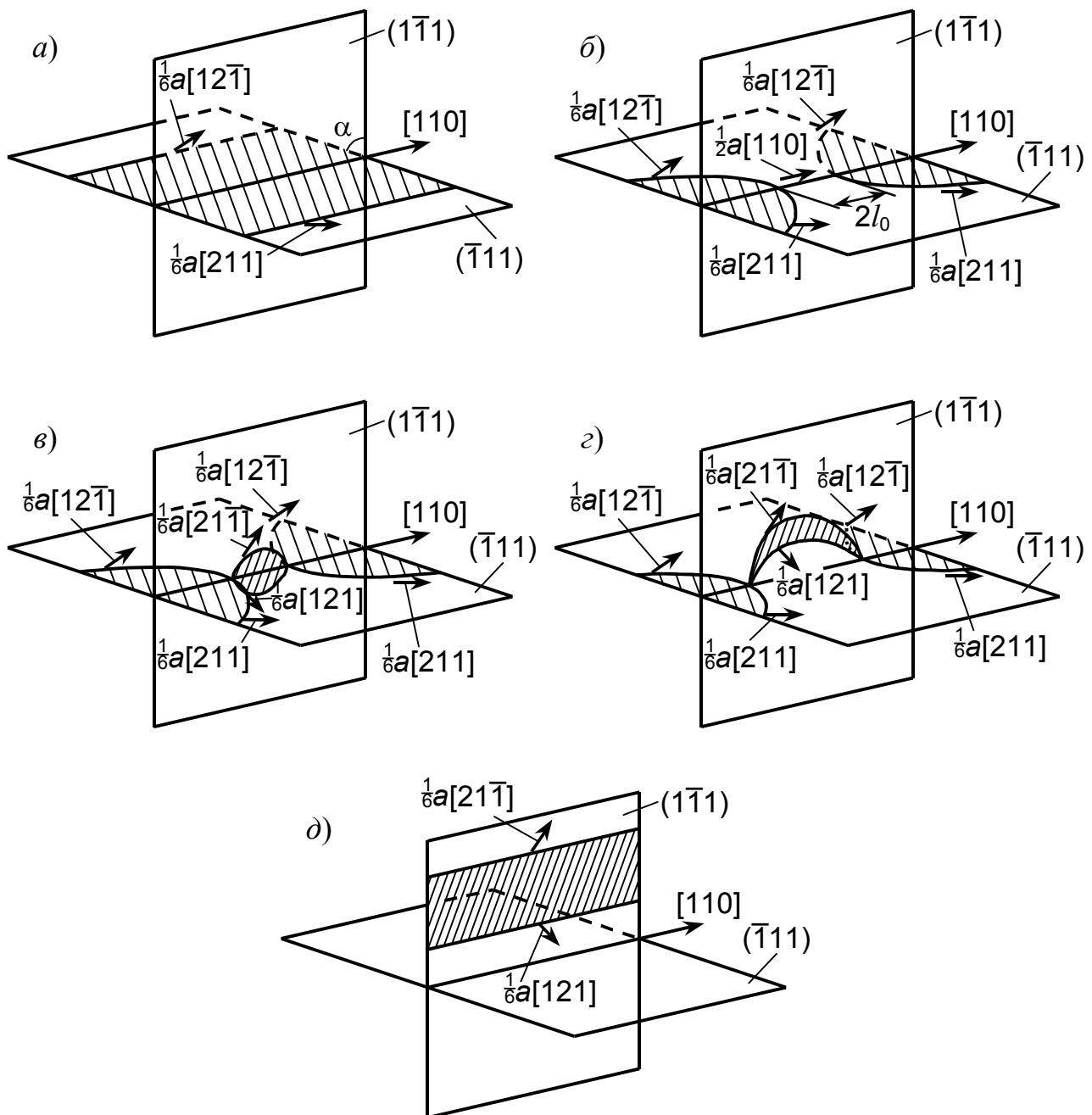


Рис. 146. Стадии поперечного скольжения расщеплённой винтовой дислокации  $\frac{1}{2}a[110]$ . *a* — исходная дислокация в плоскости  $(\bar{1}\bar{1}1)$ ; *б* — частичные дислокации слились в полную на участке  $2l_0$ , совпадающем с линией пересечения плоскостей  $(\bar{1}\bar{1}1)$  и  $(1\bar{1}1)$ ; *в* — полная дислокация расщепилась в другой плоскости скольжения  $(1\bar{1}1)$ , при этом образовались две перетяжки; *г* — под действием касательного напряжения вновь расщеплённый участок изгибается между двумя перетяжками в плоскости поперечного скольжения  $(1\bar{1}1)$ , длина участка увеличивается; *д* — процесс поперечного скольжения завершён



Пересечение расщеплённых винтовых дислокаций. При пересечении расщеплённых винтовых дислокаций на них образуются перетяжки, которые будут взаимодействовать как две полных винтовых дислокации. В результате пересечения возникнут пороги, имеющие краевую ориентацию, и затем они расщепятся на две частичные дислокации (рис. 147). На образование перетяжек требуется затрата энергии (и тем бóльшая, чем больше протяжённость ДУ), а движение винтовых дислокаций с порогами в сильной мере затруднено, так как порог может перемещаться только неконсервативным путём. Эта одна из важных причин наклёпа.

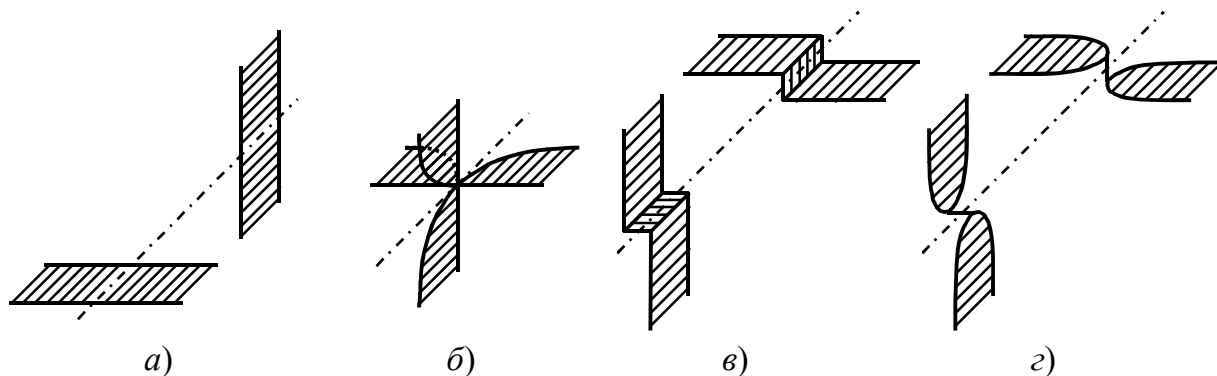


Рис. 147. Пересечение двух расщеплённых винтовых дислокаций. *а* — до пересечения; *б* — встреча головных частичных дислокаций и образование перетяжек; *в* — после пересечения на винтовых дислокациях образовались пороги, имеющие краевую ориентацию; *з* — пороги расщепились на частичные дислокации

### 8.1.3. Образование барьера Ломера – Коттрелла

Интенсивное упрочнение металлов при деформации обусловлено не только образованием порогов на винтовых дислокациях. Имеются и другие важные причины деформационного упрочнения, в частности образование в результате взаимодействия дислокаций различных барьеров, препятствующих движению. Рассмотрим один вид барьера, образование которого, по-видимому, возможно в металлах с ГЦК-структурой при взаимодействии двух расщеплённых дислокаций:

$$\frac{1}{2}a[10\bar{1}] = \frac{1}{6}a[11\bar{2}] + \frac{1}{6}a[2\bar{1}\bar{1}] \quad (475 \text{ а})$$

и

$$\frac{1}{2}a[011] = \frac{1}{6}a[11\bar{2}] + \frac{1}{6}a[\bar{1}21], \quad (475 \text{ б})$$

двигающихся в плоскостях (111) и ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ), которые пересекаются по направлению  $[\bar{1}10]$  (рис. 148). При встрече двух головных частичных дислокаций они объединяются:

$$\frac{1}{6}a[2\bar{1}\bar{1}] + \frac{1}{6}a[\bar{1}21] = \frac{1}{6}a[110]. \quad (476)$$

Энергетически эта реакция выгодна, так как

$$\frac{1}{36}a^2 \cdot 6 + \frac{1}{36}a^2 \cdot 6 > \frac{1}{36}a^2 \cdot 2. \quad (477)$$

Линия  $[\bar{1}10]$  и вектор Бюргерса  $\frac{1}{6}a[110]$  вновь образовавшейся частичной дислокации (её вектор не равен вектору решётки) взаимно перпендикулярны и лежат в плоскости (001), не являющейся плоскостью скольжения; следовательно, эта краевая дислокация двигаться не может. Так как она связана с двумя другими хвостовыми частичными дислокациями ДУ, то и они теряют способность перемещаться. Такое устойчивое образование из трёх частичных дислокаций препятствует движению других дислокаций и называется барьером, или дислокацией Ломера – Коттрелла. Дислокация Ломера – Коттрелла представляет собой ленту ДУ, согнутую в виде клина с углом  $48^\circ 11'$ , вершину которого образует неподвижная частичная краевая дислокация называемая вершинной, а края — две частичные дислокации Шокли. Всего имеется шесть различных ориентаций дислокаций Ломера – Коттрелла.

Барьер Ломера – Коттрелла может образоваться не только в результате взаимодействия расщеплённых дислокаций, но и путём диссоциации единичной винтовой дислокации по реакции:

$$\frac{1}{2}a[110] = \frac{1}{6}a[11\bar{2}] + \frac{1}{6}a[110] + \frac{1}{6}a[112]. \quad (478)$$

Энергетически такое расщепление выгодно, так как

$$b_1^2 > b_2^2 + b_3^2 + b_4^2; \quad \frac{1}{2}a^2 > \frac{7}{18}a^2. \quad (479)$$

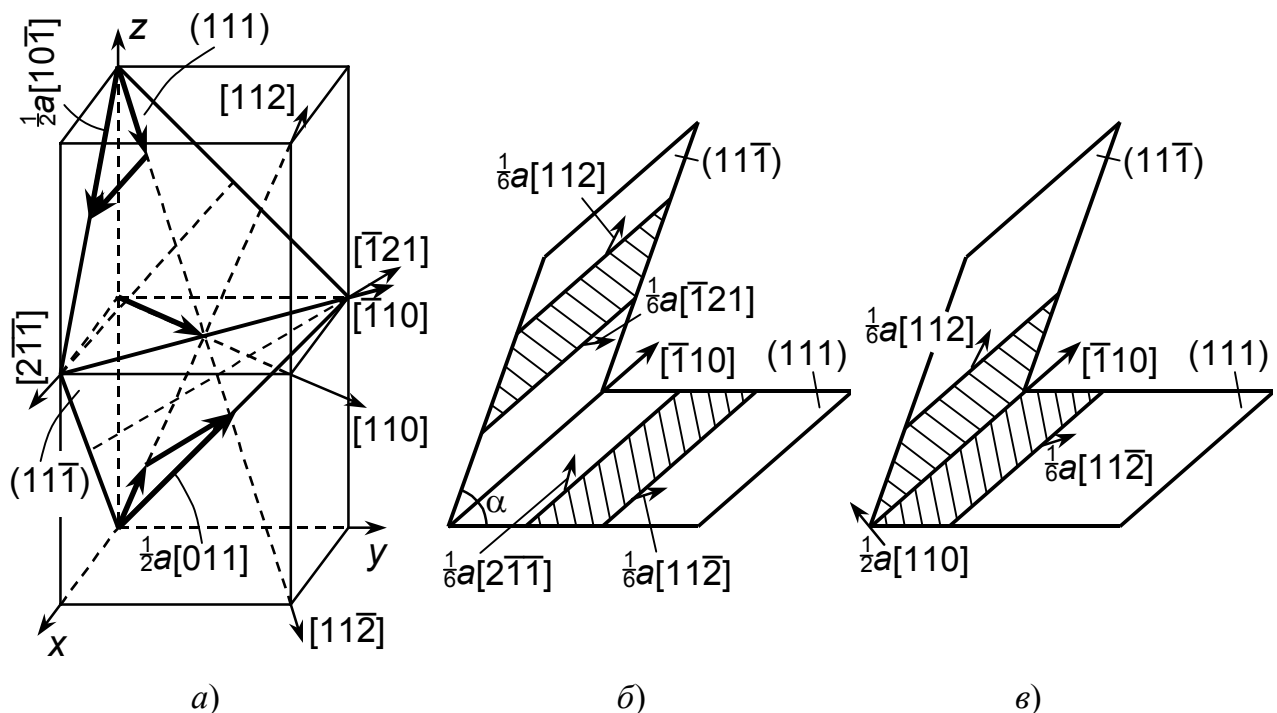


Рис. 148. Образование барьера Ломера – Коттрелла при взаимодействии двух расщеплённых дислокаций в пересекающихся плоскостях скольжения.  
 а — схема расщепления дислокации; б — движение расщеплённых дислокаций навстречу друг другу; в — головные частичные дислокации образовали новую частичную дислокацию с вектором Бюргерса  $\frac{1}{6}a[110]$

#### 8.1.4. Образование сидячей дислокации Франка

Как отмечалось, при расщеплении единичной дислокации образуется ДУ, границей которого служат частичные дислокации Шокли. Частичная дислокация Франка также является границей между ДУ и совершенным кристаллом, но в этом случае нарушение укладки создаётся удалением из кристалла с решёткой ГЦК части плотноупакованного слоя (рис. 149, а), так что создаётся чередование плоскостей  $\underbrace{ABCACABC...}_{\text{ДУ}}$ . Такой дефект

упаковки называется ДУ вычитания. Если, наоборот, между двумя плоскостями  $\{111\}$  вставить дополнительную плотноупакованную плоскость, то образуется ДУ внедрения с чередованием  $\underbrace{ABCACBACABC...}_{\text{ДУ}}$  (рис. 149, б).

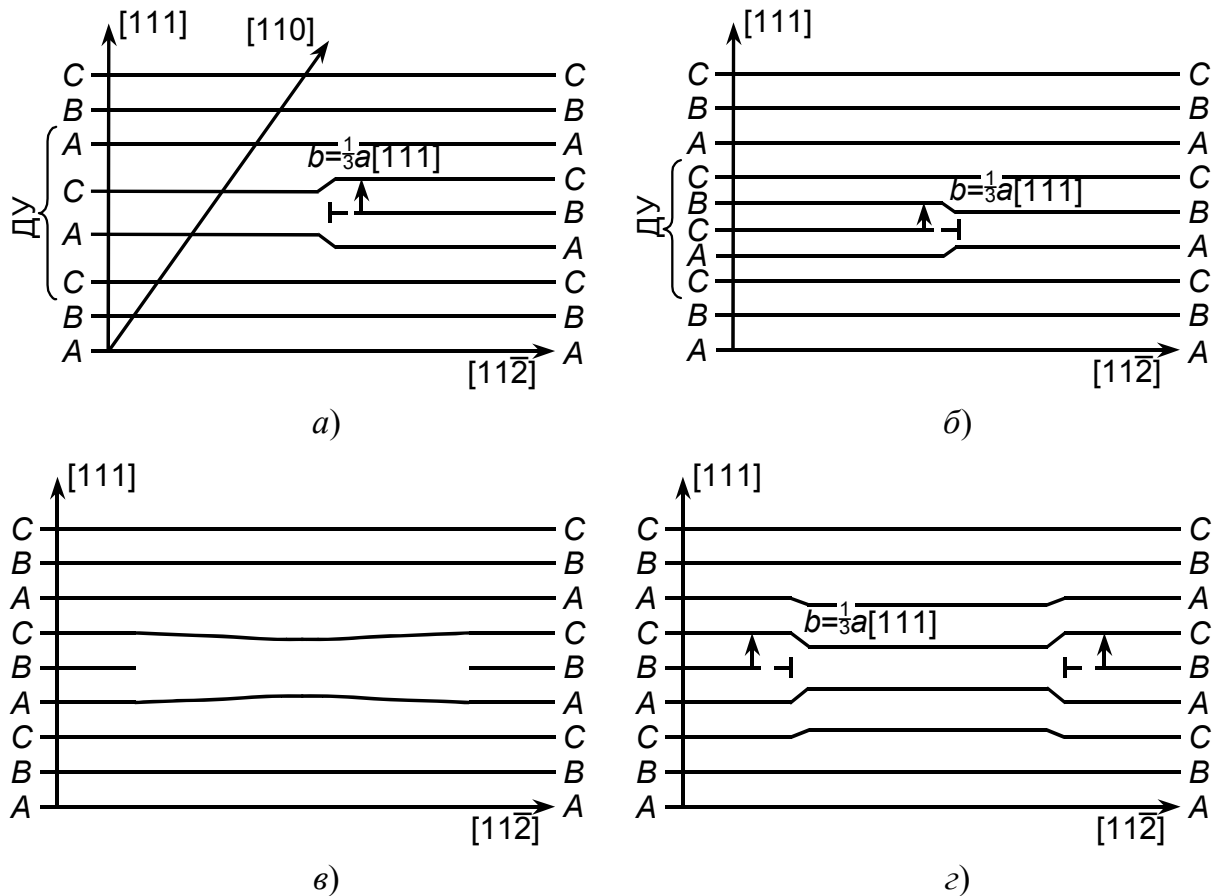


Рис. 149. Образование частичной дислокации Франка. Чертёж в плоскости  $(\bar{1}10)$ .

а — дефект упаковки вычитания образован удалением части плотноупакованной плоскости, край полуплоскости — частичная дислокация Франка;

б — дефект упаковки внедрения образован внедрением части дополнительной плотноупакованной плоскости; в — вакансионный диск в плоскости  $(111)$ ;

г — захлопывание вакансионного диска и образование частичной дислокации Франка в виде замкнутой дислокационной петли

Как видно, при вычитании частей плоскости образуется простой, а при внедрении — двойной дефект упаковки. Край полуплоскости (111) и является частичной дислокацией Франка (рис. 149). Её вектор Бюргерса  $\vec{b} = \frac{1}{3}a[111]$  лежит в плоскости  $(\bar{1}10)$ , не являющейся плоскостью скольжения, и по величине равен расстоянию между соседними плоскостями (111). Он не является трансляционным вектором решетки, и, следовательно, дислокация Франка — частичная дислокация. Поскольку вектор Бюргерса дислокации Франка не лежит в плоскости скольжения, то она, в отличие от частичных дислокаций Шокли, не способна к консервативному движению (может перемещаться только переползанием, то есть диффузионным путём), и потому получила название сидячей.

Допустим, внутри кристалла по плоскости (111) образовалось скопление вакансий — вакансионный диск, который захлопнулся благодаря сближению соседних плотноупакованных плоскостей (рис. 149, в, г). Тогда граница этого диска (в данном случае замкнутая дислокационная петля) является частичной дислокацией Франка, которая не способна к скольжению и играет роль барьера для других подвижных дислокаций. Следует иметь в виду, что частичная дислокация Франка может вступать в разнообразные реакции с другими дислокациями. Так, например, при взаимодействии частичной дислокации Франка с частичной дислокацией Шокли образуется полная подвижная дислокация по реакции:

$$\frac{1}{3}a[111] + \frac{1}{6}a[11\bar{2}] = \frac{1}{2}a[110]. \quad (480)$$

### 8.1.5. Стандартный тетраэдр Томпсона<sup>1</sup>

Описание всех основных типов дислокаций и дислокационных реакций в ГЦК-решётке существенно облегчается при использовании построения, называемого стандартным тетраэдром Томпсона. Он образован четырьмя равносторонними треугольниками, представляющими собой плотноупакованные плоскости  $\{111\}$ , а его вершины совпадают с четырьмя соседними атомами, находящимися в узлах ГЦК-решётки (рис. 150). Рёбра тетраэдра, совпадающие с направлением плоскостных диагоналей, представляют собой все четыре возможных вектора Бюргерса полных (единичных) дислокаций  $\frac{1}{2}a[110]$ . Вершины тетраэдра принято обозначать буквами  $A, B, C$  и  $D$ , а центры противоположных им граней — буквами  $\alpha, \beta, \gamma$  и  $\delta$  (см. рис. 150).

1. Расщепление полной (единичной) дислокации на частичные дислокации Шокли. Полные дислокации расщепляются на частичные дислокации Шокли. Так, в плоскости  $ABC$  (111) полная дислокация с трансляци-

<sup>1</sup> Этот раздел написан проф. М.М. Штейнбергом.

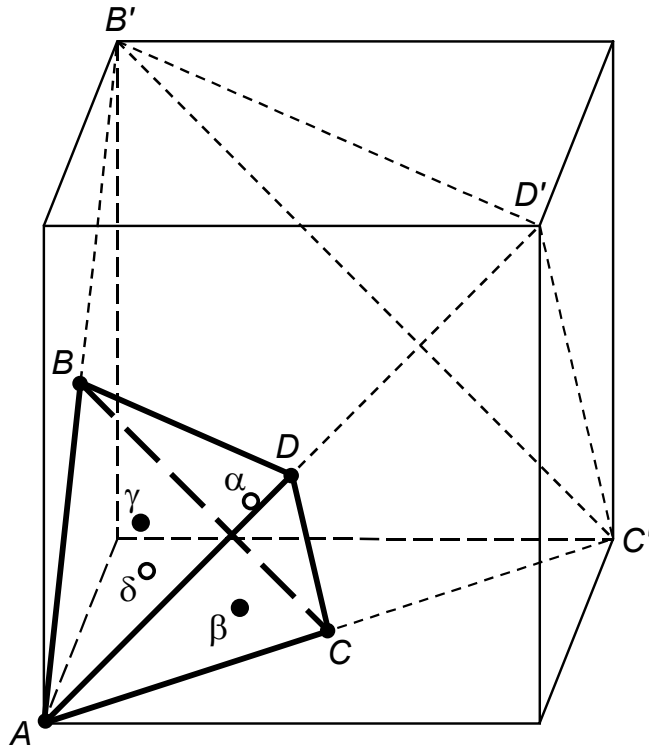


Рис. 150. Стандартный тетраэдр Томпсона

онным вектором Бюргерса  $\frac{1}{2}a[\bar{1}10]$  расщепляется на дислокации Шокли по реакции (рис. 151, 152)

$$\frac{1}{2}a[\bar{1}10] = \frac{1}{6}a[\bar{2}\bar{1}1] + \frac{1}{6}a[\bar{1}2\bar{1}]. \quad (481)$$

Прямые линии, соединяющие вершины тетраэдра с центрами его граней, являются векторами Бюргерса частичных дислокаций. Поэтому указанную реакцию расщепления в символах Томпсона можно записать в весьма лаконичном виде:

$$AC = A\delta + \delta C. \quad (482)$$

Следует строго соблюдать знаки индексов, помня, что их надо поменять на обратные, если вместо  $C\delta$  записано  $\delta C$ . Дислокацию  $AC$  можно расщепить и в другой плоскости, а именно  $ACD$  ( $\bar{1}\bar{1}1$ ), и тогда реакцию запишем так:

$$AC = A\beta + \beta C. \quad (483)$$

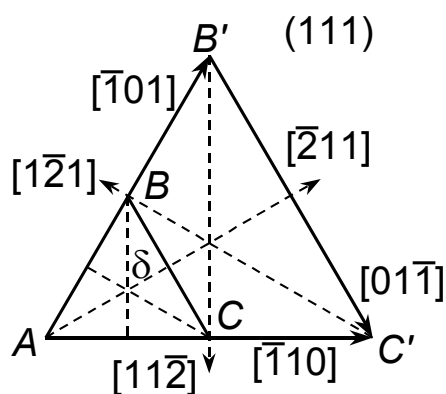
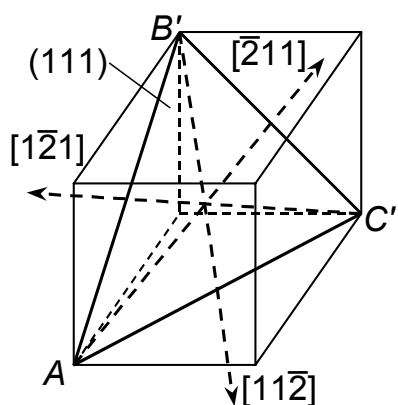
От этой записи легко перейти к обычной кристаллографической (рис. 151, 152):

$$\frac{1}{2}a[\bar{1}10] = \frac{1}{6}a[\bar{1}21] + \frac{1}{6}a[\bar{2}1\bar{1}]. \quad (484)$$

При этом надо строго следить за правильной расстановкой индексов и их знаков, помня, что сумма индексов частичных дислокаций должна быть равна индексам полной дислокации.

Рассмотрев стандартный тетраэдр, мы видим, что каждая полная дислокация может быть расщеплена лишь в двух определённых плоскостях скольжения.

Следует иметь в виду, что  $AC$ ,  $AD$ ,  $\delta C$ ,  $D\beta$  и т.д. указывают лишь векторы Бюргерса дислокаций, но не их линии.



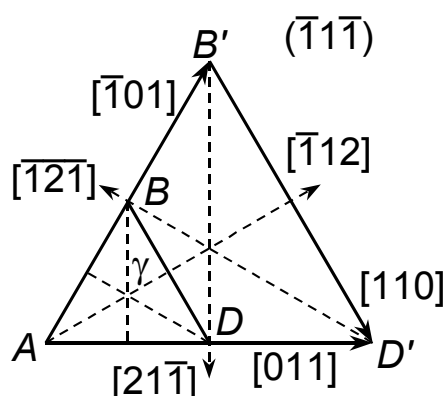
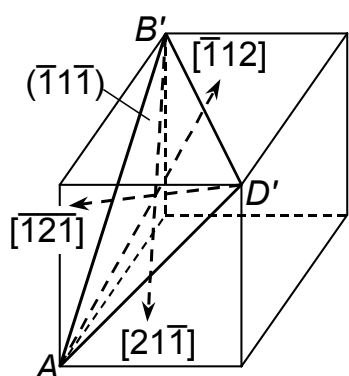
$$AB = \frac{1}{6} a [\bar{1}01]$$

$$BC = \frac{1}{6} a [01\bar{1}]$$

$$A\delta = \frac{1}{6} a [\bar{2}11]$$

$$B\delta = \frac{1}{6} a [11\bar{2}]$$

$$C\delta = \frac{1}{6} a [1\bar{2}1]$$

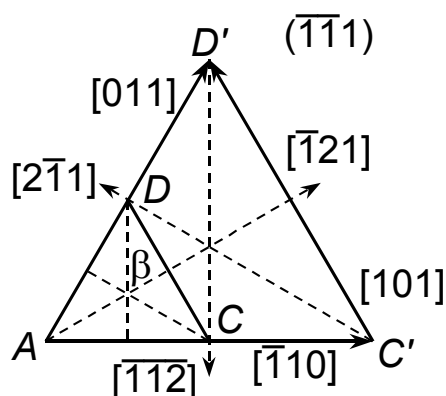
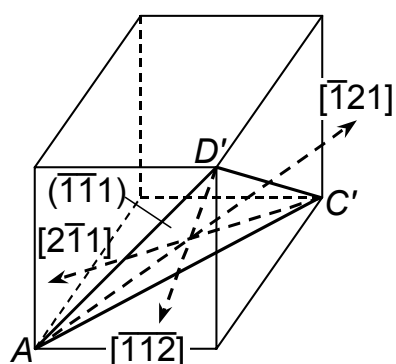


$$AD = \frac{1}{6} a [011]$$

$$A\gamma = \frac{1}{6} a [\bar{1}12]$$

$$B\gamma = \frac{1}{6} a [21\bar{1}]$$

$$D\gamma = \frac{1}{6} a [\bar{1}2\bar{1}]$$



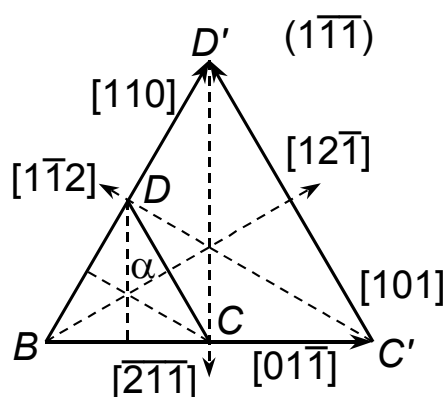
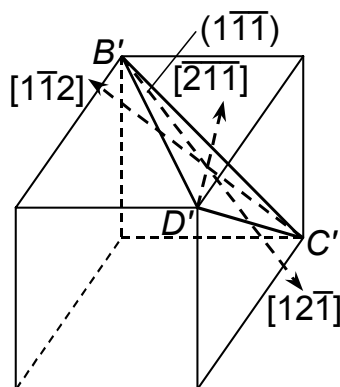
$$AC = \frac{1}{6} a [\bar{1}10]$$

$$CD = \frac{1}{6} a [101]$$

$$A\beta = \frac{1}{6} a [\bar{1}21]$$

$$C\beta = \frac{1}{6} a [2\bar{1}1]$$

$$D\beta = \frac{1}{6} a [\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$$



$$BD = \frac{1}{6} a [110]$$

$$B\alpha = \frac{1}{6} a [12\bar{1}]$$

$$C\alpha = \frac{1}{6} a [1\bar{1}2]$$

$$D\alpha = \frac{1}{6} a [\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$$

Рис. 151. Соответствие символики Томпсона и обычной кристаллографической для полных дислокаций и частичных дислокаций Шокли

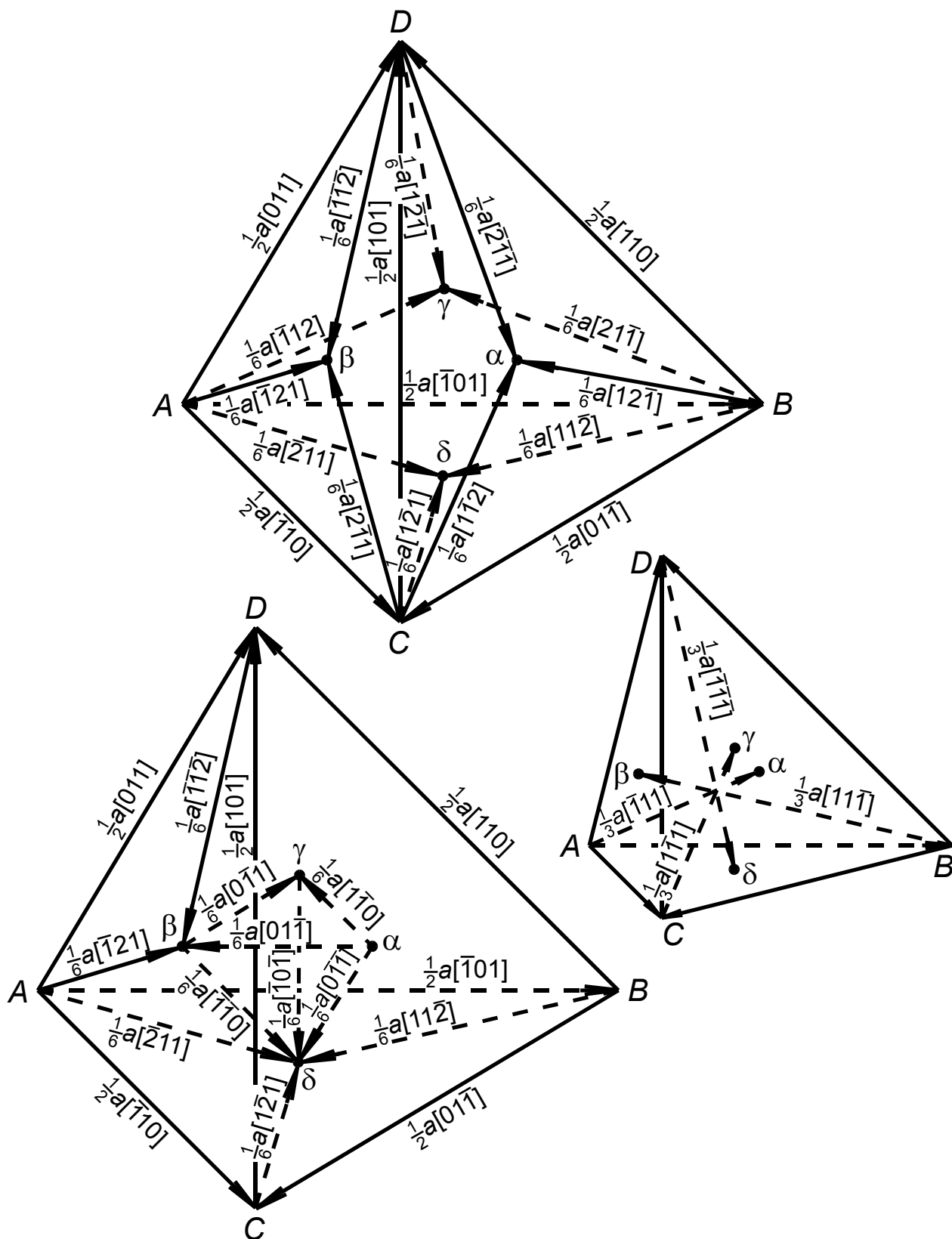


Рис. 152. Тетраэдр Томпсона с кристаллографическими индексами  
полных и частичных дислокаций

2. Дислокация Франка. При расщеплении полной дислокации на частичные дислокации Шокли между ними нарушается правильная укладка плотноупакованных плоскостей  $\{111\}$  и образуется дефект упаковки. Аналогичный дефект упаковки можно получить, если удалить часть плотноупакованной плоскости либо, наоборот, ввести часть лишней плоскости  $\{111\}$  между двумя плотноупакованными плоскостями.

При удалении или введении части плоскости образуется частичная дислокация, линия которой находится в плоскости скольжения и проходит вдоль края полуплоскости (или полуплоскостей), и которая существенно отличается от дислокаций Шокли. Дислокации Шокли подвижны, так как их линии и вектора Бюргерса лежат в одной плоскости  $\{111\}$ , дозволенной для скольжения. Дислокации же, возникающие в результате образования ДУ вычитания (внедрения), хотя и находятся в плоскости  $\{111\}$ , имеют вектор Бюргерса, лежащий в другой плоскости, а именно  $\{110\}$ ; он равен  $\frac{1}{3}a\langle 111 \rangle$  (рис. 153). Поэтому такие дислокации не могут двигаться консервативным путём, а только диффузионным, то есть переползанием. Они называются сидячими дислокациями Франка и представляют собой частичные (так как вектора Бюргерса  $A\alpha$ ,  $B\beta$ ,  $C\gamma$ ,  $D\delta$  не трансляционные) дислокации.

Часто дислокацию Франка называют ещё полужакреплённой, поскольку при взаимодействии с дислокацией Шокли она может образовать полную подвижную дислокацию. Это можно наглядно показать при помощи стандартного тетраэдра. Обратимся к рис. 152. Прямые линии, соединяющие вершины тетраэдра с центрами противоположных граней, являются векторами Бюргерса дислокаций Франка  $\frac{1}{3}a\langle 111 \rangle$ . Пусть дислокация Франка  $D\delta$  встретится с дислокацией Шокли  $\delta C$ ; тогда может произойти реакция

$$D\delta + \delta C = DC. \quad (485)$$

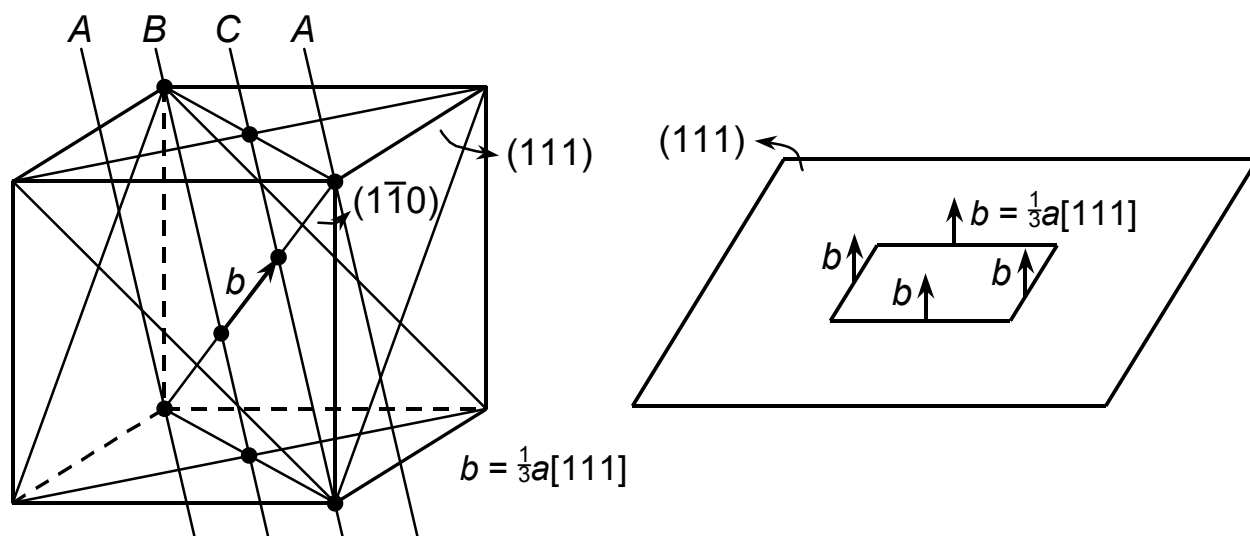


Рис. 153. Вектор Бюргерса частичной дислокации Франка



В обычной кристаллографической записи

$$\underbrace{\frac{1}{3}a[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}_{b_1} + \underbrace{\frac{1}{6}a[\bar{1}2\bar{1}]}_{b_2} = \underbrace{\frac{1}{2}a[\bar{1}0\bar{1}]}_{b_3}. \quad (486)$$

Проверим энергетическую выгодность реакции объединения дислокаций Франка и Шокли в подвижную полную дислокацию. Для этого определим модули векторов Бюргерса и возведём их в квадрат:  $|b_1|^2 = \frac{1}{3}a^2$ ;  $|b_2|^2 = \frac{1}{6}a^2$ ;  $|b_3|^2 = \frac{1}{2}a^2$ . Следовательно,  $|b_1|^2 + |b_2|^2 = |b_3|^2$ , и критерий Франка не даёт определённого ответа на вопрос о возможности протекания такой реакции. Однако указанная реакция всё же является энергетически выгодной, так как устраняет дефект упаковки (если его энергия достаточно высока).

Следует отметить, что линии дислокаций Франка и Шокли и связанные с ними ДУ лежат в одной плоскости  $ABC$ , а их вектора Бюргерса в разных плоскостях —  $(111)$  и  $(1\bar{1}0)$  соответственно. Образующаяся полная дислокация с вектором Бюргерса  $DC$  ( $\frac{1}{2}a[\bar{1}0\bar{1}]$ ) уже не находится в плоскости  $ABC$  и может двигаться только в плоскостях  $ADC$  или  $CBD$ .

При движении в разных пересекающихся плоскостях полной дислокации, например  $DB$ , и дислокации Шокли  $B\delta$  будет протекать реакция

$$DB + B\delta = D\delta, \quad (487)$$

или в кристаллографических символах

$$\frac{1}{2}a[\bar{1}\bar{1}0] + \frac{1}{6}a[11\bar{2}] = \frac{1}{3}a[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]. \quad (488)$$

Из правила квадратов следует

$$\left(\frac{1}{2}a\sqrt{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{6}a\sqrt{6}\right)^2 > \left(\frac{1}{3}a\sqrt{3}\right)^2. \quad (489)$$

Таким образом, полная дислокация  $DB$ , которая может двигаться в плоскостях  $ADB$  или  $BCD$ , и дислокация Шокли с вектором Бюргерса  $B\delta$  вместе с ДУ, находящаяся в плоскости  $ABC$ , образуют дислокацию Франка, линия которой находится в плоскости  $ABC$ . При этой реакции энергия уменьшается в два раза.

Если прореагировавшая дислокация Шокли является частью расщеплённой дислокации Шокли–Шокли, то оставшаяся дислокация Шокли с образовавшейся дислокацией Франка способна вновь образовать полную дислокацию по реакции

$$D\delta + \delta C = DC. \quad (490)$$

При этом энергия системы уменьшается за счёт устранения ДУ, простирающегося между дислокациями Шокли и Франка.

Итак, дислокация Франка представляет собой краевую частичную дислокацию, не способную скользить, так как её линия и нетрансляционный вектор Бюргерса находятся в разных плоскостях. Дислокация Франка может образоваться как вследствие захлопывания вакансионного диска в плотноупакованных плоскостях, так и путём энергетически выгодного

взаимодействия полной дислокации с дислокацией Шокли. Если последняя является частью расщеплённой дислокации Шокли–Шокли, то дефект упаковки, заключённый между оставшейся дислокацией Шокли и дислокацией Франка, может «стянуть» их в полную (нерасщеплённую) подвижную дислокацию, которая называется результирующей или R-дислокацией.

### 3. Образование вершинных дислокаций и барьера Ломера – Коттрелла.

Рассмотрим взаимодействие двух расщеплённых дислокаций, движущихся в пересекающихся плоскостях. Это весьма целесообразно сделать именно используя стандартный тетраэдр.

Пусть полные дислокации  $CA$  и  $AD$  расщеплены на дислокации Шокли в плоскостях  $ABC$  и  $ACD$  соответственно. В символах Томпсона (рис. 152) это запишется так:

$$\begin{aligned} CA &= C\delta + \delta A; \\ AD &= A\beta + \beta D. \end{aligned} \quad (491)$$

При встрече дислокаций Шокли  $A\beta$  и  $\delta A$  произойдёт реакция

$$A\beta + \delta A = \delta\beta. \quad (492)$$

В итоге останутся три дислокации:  $C\delta$ ,  $\delta\beta$  и  $\beta D$ . Теперь запишем указанные реакции в обычных кристаллографических символах (рис. 151, 152):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}a[1\bar{1}0] &= \frac{1}{6}a[1\bar{2}1] + \frac{1}{6}a[2\bar{1}\bar{1}]; \\ \frac{1}{2}a[011] &= \frac{1}{6}a[\bar{1}21] + \frac{1}{6}a[112]; \\ \frac{1}{6}a[2\bar{1}\bar{1}] + \frac{1}{6}a[\bar{1}21] &= \frac{1}{6}a[110]. \end{aligned} \quad (493)$$

По правилу квадратов проверим выгодность последней реакции слияния двух дислокаций Шокли в новую дислокацию с вектором Бюргерса  $\delta\beta$  ( $\frac{1}{6}a[110]$ ):

$$\frac{1}{6}a^2 + \frac{1}{6}a^2 > \frac{1}{18}a^2. \quad (494)$$

Как видим, эта реакция выгодна, так как энергия уменьшается в шесть раз.

Что же представляет собой новая дислокация? Её линия находится на пересечении двух плоскостей  $ABC$  и  $ACD$ , в которых расщеплены полные дислокации, имеет направление  $[110]$  и находится на грани куба  $(001)$ . Вектор Бюргерса  $\frac{1}{6}a[110]$  нетрансляционный и перпендикулярен линии дислокации. Следовательно, дислокация  $\delta\beta$  краевая и частичная (рис. 148 и 152, *а*). Частичная краевая дислокация не может скользить консервативным путём несмотря на то, что и её линия, и вектор Бюргерса лежат в одной плоскости, так как грани куба  $\{100\}$  не являются плоскостями скольжения. Будучи неподвижной, дислокация  $\delta\beta$  лишает подвижности две оставшиеся дислокации Шокли  $C\delta$  и  $\beta D$ , поскольку она связана с ними дефектом упаковки (рис. 148, *б*).

Дислокация Ломера – Коттрелла неподвижна и является барьером для подвижных дислокаций. Барьер Ломера – Коттрелла может образоваться не только в результате взаимодействия двух расщеплённых полных (еди-

ничных) дислокаций, движущихся в пересекающихся плоскостях, но и в случае диссоциации полной дислокации по реакции типа

$$AD = A\delta + \delta\beta + \delta D, \quad (495)$$

или в кристаллографических символах (рис. 152)

$$\frac{1}{2}a[011] = \frac{1}{6}a[\bar{2}11] + \frac{1}{6}a[110] + \frac{1}{6}a[112]. \quad (496)$$

Как видно из стандартного тетраэдра (рис. 152), всего можно образовать шесть вершинных дислокаций, имеющих вектора Бюргерса  $\alpha\beta$ ,  $\alpha\gamma$ ,  $\alpha\delta$ ,  $\beta\gamma$ ,  $\beta\delta$  и  $\gamma\delta$ . Вектора Бюргерса вершинных дислокаций образуют тетраэдр, рёбра которого параллельны определённым рёбрам стандартного тетраэдра, а именно:  $\alpha\beta \parallel BA$ ;  $\alpha\gamma \parallel CA$ ;  $\alpha\delta \parallel DA$ ;  $\beta\gamma \parallel CB$ ;  $\beta\delta \parallel DB$ ;  $\gamma\delta \parallel DC$  (см. рис. 152).

Итак, стандартный тетраэдр, образованный четырьмя плоскостями скольжения  $\{111\}$ , удобен для описания всех основных дислокаций и дислокационных реакций в решётке ГЦК. Его рёбра  $AB$ ,  $AC$ ,  $AD$ ,  $BC$ ,  $BD$ ,  $CD$  представляют собой вектора Бюргерса полных (единичных) дислокаций  $\frac{1}{2}a <110>$ ; прямые, соединяющие вершины тетраэдра с центрами соседних граней  $A\beta$ ,  $A\gamma$ ,  $A\delta$ ,  $B\alpha$ ,  $B\gamma$ ,  $B\delta$ ,  $C\alpha$ ,  $C\beta$ ,  $C\delta$ ,  $D\alpha$ ,  $D\beta$ ,  $D\gamma$ , — вектора Бюргерса частичных дислокаций Шокли  $\frac{1}{6}a <112>$ ; прямые, соединяющие вершины тетраэдра с центрами противоположных граней  $A\alpha$ ,  $B\beta$ ,  $C\gamma$ ,  $D\delta$ , — вектора Бюргерса частичных дислокаций Франка  $\frac{1}{3}a <111>$ ; а прямые, соединяющие центры граней тетраэдра  $\alpha\beta$ ,  $\alpha\gamma$ ,  $\alpha\delta$ ,  $\beta\gamma$ ,  $\beta\delta$ ,  $\gamma\delta$ , — вектора Бюргерса вершинных дислокаций  $\frac{1}{6}a <110>$ .

Запись в символике Томпсона позволяет легко определить линии дислокаций, решить вопрос об их подвижности и указать, в каких плоскостях возможно их скольжение. Ещё раз напомним, что при переходе от символики Томпсона к обычной кристаллографической записи дислокационных реакций необходимо строго следить за знаками над индексами Миллера, помня, что при изменении направления на обратное необходимо все знаки также изменить на обратные.

По существу, все дислокационные реакции представляют собой либо сложение векторов, либо разложение одних векторов на сумму других (см. рис. 152). Реальность реакции проверяется по критерию Франка (правилу квадратов). Для проверки энергетической выгодности той или иной реакции необязательно переходить от символики Томпсона к обычной кристаллографической — достаточно помнить, чему равны квадраты векторов Бюргерса различных дислокаций: у полной дислокации (типа  $AB$ )  $|b|^2 = \frac{1}{2}a^2$ ; у дислокации Шокли (типа  $A\beta$ )  $|b|^2 = \frac{1}{6}a^2$ ; у дислокации Франка (типа  $A\alpha$ )  $|b|^2 = \frac{1}{3}a^2$ ; у вершинной дислокации (типа  $\alpha\beta$ )  $|b|^2 = \frac{1}{18}a^2$ .

## 8.2. ДИСЛОКАЦИИ В МЕТАЛЛАХ С ОЦК-РЕШЁТКОЙ

Наименьший трансляционный вектор в ОЦК-решётке соединяет атомы, расположенные в вершине и центре куба, поэтому основным вектором Бюргерса единичной дислокации является  $\frac{1}{2}a \langle 111 \rangle$ . Направление  $\langle 111 \rangle$  лежит в двух наиболее плотно упакованных в ОЦК-решётке плоскостях (рис. 154)  $\{110\}$ ,  $\{112\}$ , которые часто одновременно являются плоскостями скольжения или могут сменять друг друга с повышением температуры. Существует по три плоскости  $\{110\}$  и  $\{112\}$ , пересекающихся по направлению  $\langle 111 \rangle$ : например, по направлению  $[11\bar{1}]$  пересекаются плоскости  $(1\bar{1}0)$ ,  $(101)$ ,  $(011)$  и  $(112)$ ,  $(2\bar{1}1)$ ,  $(\bar{1}21)$ . Винтовые дислокации могут двигаться в любой из них, часто переходя из плоскости в плоскость. Поэтому линии скольжения в металлах с ОЦК-решёткой бывают волнистыми.

Между дислокациями, лежащими в пересекающихся плоскостях, например в плоскостях  $(\bar{1}01)$  и  $(101)$ , возможна реакция

$$\frac{1}{2}a[111]_{(\bar{1}01)} + \frac{1}{2}a[1\bar{1}\bar{1}]_{(101)} = a[100]_{(001)}. \quad (497)$$

Эта реакция со значительным понижением энергии:

$$\frac{3}{4}a^2 + \frac{3}{4}a^2 > a^2. \quad (498)$$

Дислокация  $a[100]$ , образуясь как элемент дислокационной сетки, весьма часто наблюдается в ОЦК-металлах. Диссоциация единичной дислокации на частичные с образованием ДУ может происходить по плоскостям  $\{112\}$ ,  $\{011\}$  и  $\{310\}$ . Рассмотрим характер расщепления по плоскости  $\{112\}$ , имеющего особое значение для механического двойникового металла. Последовательность укладки плоскостей  $\{112\}$ , как следует из рис. 155, может быть описана  $ABCDEFABCD\dots$ . Различие в буквенных обозначениях означает, что эквивалентные по структуре слои накладывается с горизонтальным сдвигом. Проекция атомов всех слоёв на слой  $A$  показаны на рис. 156,  $a$ ,  $b$ . Вектор  $\frac{1}{6}a[\bar{1}\bar{1}1]$  соединяет позиции  $A$  с позициями  $E$ . Проведём по плоскости  $A$  сдвиг на  $\frac{1}{6}a[\bar{1}\bar{1}1]$ , что эквивалентно прохождению частичной дислокации  $\frac{1}{6}a[\bar{1}\bar{1}1]$ . Такой сдвиг изменит последовательность укладки на  $ABCDEFEF'ABC\dots$ . Аналогичный сдвиг по плоскости  $F$  изменит позицию на  $D$ , то есть получаем  $ABCDEFEF'D'EF\dots$ . Сдвиг по плоскости  $E$  даёт укладку  $ABCDEFEF'D'C'DEF\dots$ . Замечаем, что при последовательном проведении сдвигов на  $\frac{1}{6}a[\bar{1}\bar{1}1]$  возникает двойникованная укладка слоёв. Таким образом, механическое двойникование можно трактовать как результат движения частичной дислокации  $\frac{1}{6}a[\bar{1}\bar{1}1]$  в плоскости  $(211)$ . Эта частичная дислокация может возникнуть в результате реакции

$$\frac{1}{2}a[\bar{1}\bar{1}1] = \frac{1}{3}a[\bar{1}\bar{1}1] + \frac{1}{6}a[\bar{1}\bar{1}1]. \quad (499)$$

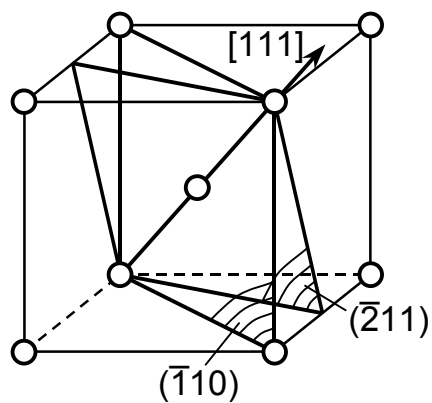


Рис. 154. Основные плоскости скольжения в ОЦК-решётке

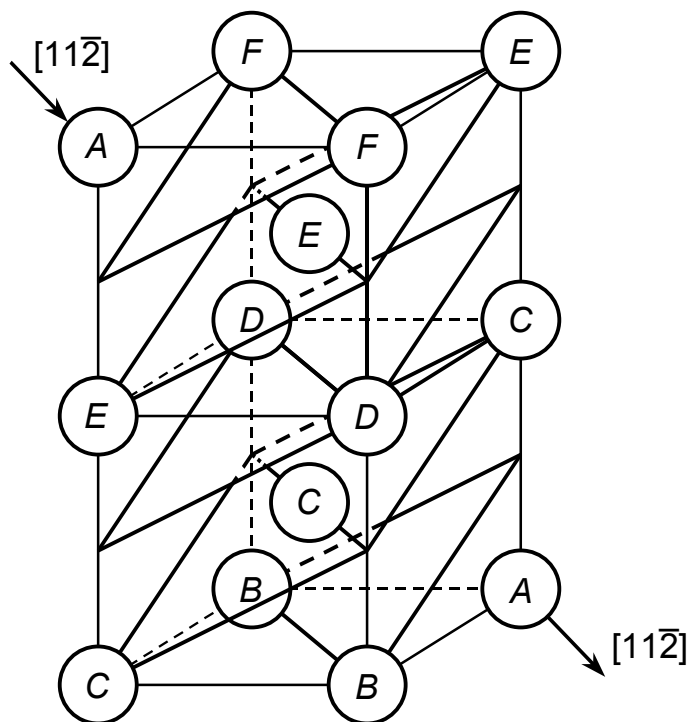
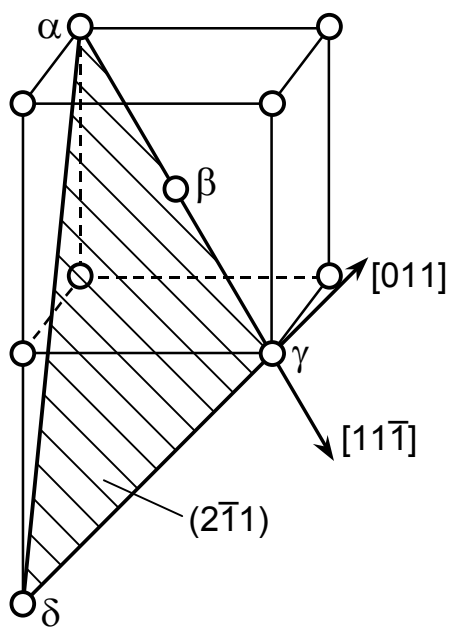
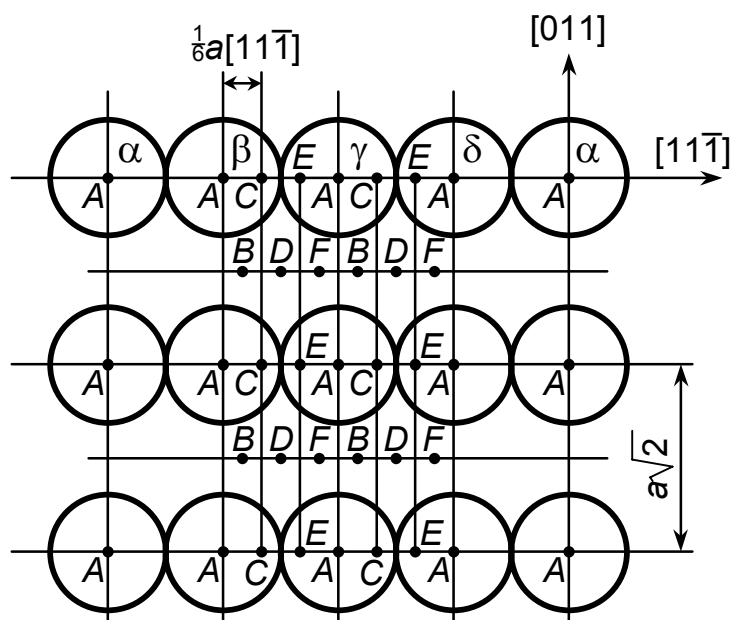


Рис. 155. Последовательность укладки плоскостей  $\{112\}$  в ОЦК-решётке:  $ABCDEF\dots$



а)



б)

Рис. 156. Структура плоскости  $(2\bar{1}1)$  в ОЦК-решётке (а) и проекции атомов всех плоскостей на плоскость типа  $A$  (б)

Частичные дислокации  $\frac{1}{3}a[\bar{1}\bar{1}1]$  и  $\frac{1}{6}a[\bar{1}\bar{1}1]$  и исходная  $\frac{1}{2}a[\bar{1}\bar{1}1]$  имеют параллельные векторы Бюргерса. Поэтому расщепленные винтовые дислокации в ОЦК-кристаллах, в отличие от ГЦК, могут переходить в другую плоскость без образования перетяжки. Возможна и другая реакция расщепления в этой плоскости:

$$\frac{1}{2}a[1\bar{1}1] = \frac{1}{3}a[2\bar{1}1] + \frac{1}{6}a[\bar{1}\bar{1}1] \quad (500)$$

Эта реакция не сопровождается уменьшением энергии, но может идти под действием напряжений. Частичная дислокация  $\frac{1}{3}a[2\bar{1}1]$  есть дислокация Франка и, следовательно, неподвижна. Движение дислокации  $\frac{1}{6}a[\bar{1}\bar{1}1]$  приводит, как отмечалось, к механическому двойникованию. Соответствующий механизм перехода в вышерасположенные плоскости указан Коттреллом и Билби, но в настоящем пособии не рассматривается.

### 8.3. ДИСЛОКАЦИИ В МЕТАЛЛАХ С ГПУ-РЕШЁТКОЙ<sup>1</sup>

#### 8.3.1. Полные дислокации

В гексагональной плотноупакованной решётке плоскостями скольжения являются плоскости: базиса  $\{0001\}$ , призмы первого рода  $\{10\bar{1}0\}$ , пирамиды первого  $\{10\bar{1}1\}$  и второго  $\{11\bar{2}2\}$  родов (рис. 157).

Векторы Бюргерса полных дислокаций  $b_1$ ,  $b_2$ ,  $b_3$  показаны на рис. 158. Дислокации с векторами типа  $b_1$  находятся в плоскостях базиса  $\{0001\}$  и, следовательно, могут скользить в этих плоскостях. Дислокации с векторами Бюргерса типа  $b_3$  могут двигаться в плоскостях пирамиды первого и второго рода. Дислокация с вектором Бюргерса  $b_2$  может скользить в плоскости призмы первого рода ( $1\bar{1}00$ ).

Минимальный единичный вектор  $b_1$  равен  $a$  и соответствует смещению атома из позиции  $A$  в ближайшую позицию  $A$  (из точки  $O$  в точку  $K$  на рис. 159), то есть является трансляционным. Напомним, что в решётке ГПУ плотноупакованные плоскости базиса имеют чередование  $ABABAB\dots$ . Направление  $b_1$  совпадает с направлением  $x_1 = [\bar{2}110]$ . Если из точки  $O$  отложить  $\bar{2}$  по оси  $x_1$ , 1 по оси  $x_2$  и 1 по оси  $x_3$ , то будет пройден путь через точки  $O$ , 1, 2, 3. Расстояние между точками  $O$  и 3 равно трём векторам Бюргерса  $b_1$ , поэтому  $b_1 = \frac{1}{3}a[\bar{2}110]$ . Для  $b_2$  составляющая по осям  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $x_3$  равна нулю, и  $b_2 = c[0001]$ .

Обычно для решётки ГПУ множитель  $a$  перед индексами направления для векторов Бюргерса не записывается, так как для вектора, имеющего составляющие по всем осям, не может быть общего множителя, поскольку по осям  $x$  период решётки равен  $a$ , а по оси  $z$  —  $c$ . Так, вектор

<sup>1</sup> Этот раздел написан проф. М.М. Штейнбергом.

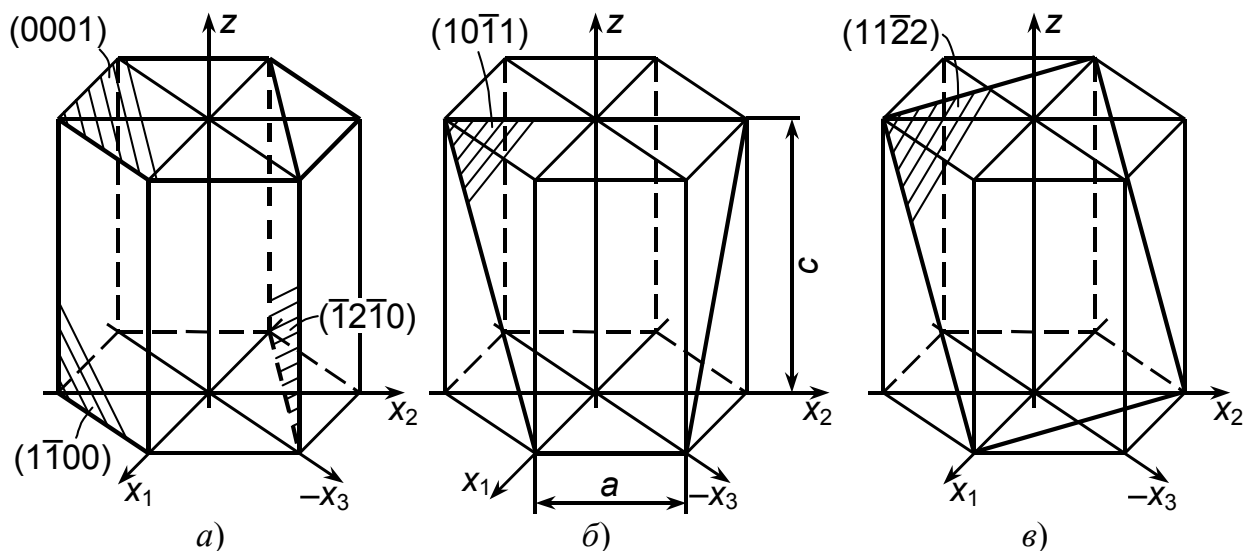


Рис. 157. Плоскости скольжения в гексагональной плотноупакованной решётке. *a* — плоскость базиса (0001), плоскость призмы первого ( $1\bar{1}00$ ) и второго ( $\bar{1}2\bar{1}0$ ) рода; *b* — плоскость пирамиды первого рода ( $10\bar{1}1$ ); *v* — плоскость пирамиды второго рода ( $11\bar{2}2$ )

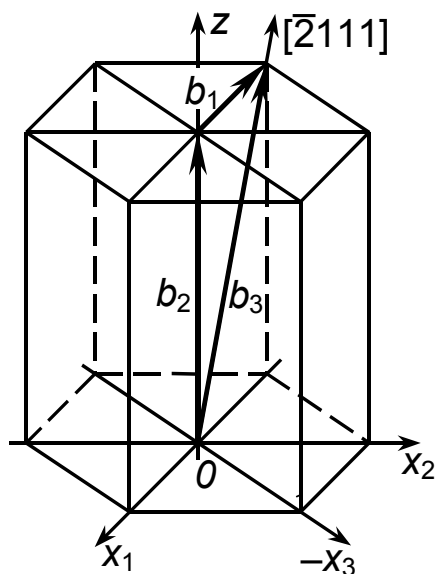


Рис. 158. Вектора Бюргерса полных (единичных) дислокаций в гексагональном кристалле:  $b_1 = \frac{1}{3}[\bar{2}110]$ ,  $b_2 = [0001]$ ,  $b_3 = \frac{1}{3}[\bar{2}113]$

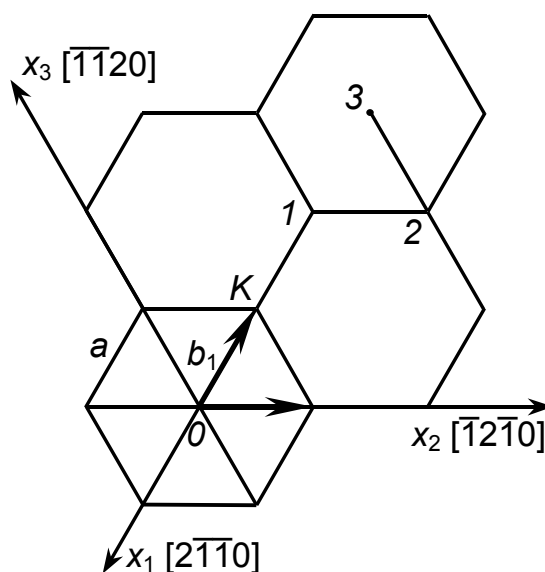


Рис. 159. Вектора Бюргерса, лежащие в плоскости базиса  $b_1 = \frac{1}{3} < \bar{2}110 >$

Бюргерса  $b_3$  (см. рис. 158) совпадает с направлением  $[\bar{2}111]$ . Чтобы попасть в точку *K* в плоскости базиса, надо пройти путь от *O* до *K*, то есть  $\frac{1}{3}a[\bar{2}110]$  (см. рис. 159), а затем по оси *z* — путь *c*. Но так как перед индексами вынесен общий сомножитель  $\frac{1}{3}a$ , то вместо индекса «1» по оси *z* надо поста-

вить «3» и убрать «a» перед скобками:  $b_3 = \frac{1}{3}[\bar{2}113]$ . Эта запись означает вектор с координатами  $[-\frac{2}{3}a, \frac{1}{3}a, \frac{1}{3}a, c]$ .

Итак, полные (единичные) дислокации в ГПУ-решётке могут иметь следующие вектора Бюргерса:  $\frac{1}{3}\langle\bar{2}110\rangle$ ;  $\langle 0001\rangle$ ;  $\frac{1}{3}\langle\bar{2}113\rangle$ . Величины (модули) этих векторов различны:  $|b_1|=a$ ;  $|b_2|=c$ ;  $|b_3|=\sqrt{a^2+c^2}$ . Выразим их в одинаковых единицах через период решётки  $a$ . В случае плотнейшей упаковки  $c/a = \sqrt{8/3} \approx 1,633$ , и:

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{1}{3}\langle\bar{2}110\rangle; \quad |b_1|=a; \quad |b_1|^2 = a^2; \\ b_2 &= \langle 0001\rangle; \quad |b_2| = \sqrt{\frac{8}{3}}a; \quad |b_2|^2 = \frac{8}{3}a^2; \\ b_3 &= \frac{1}{3}\langle\bar{2}113\rangle; \quad |b_3| = \sqrt{\frac{11}{3}}a; \quad |b_3|^2 = \frac{11}{3}a^2. \end{aligned}$$

Как видим, наименьшей энергией обладает дислокация с вектором Бюргерса  $b_1$ , и поэтому предпочтительной плоскостью скольжения является плоскость базиса. Из других наиболее часто встречается пирамидальное скольжение в системе  $\{10\bar{1}1\}\langle\bar{1}2\bar{1}0\rangle$ , реже призматическое скольжение в системе  $\{1\bar{1}00\}\langle 11\bar{2}0\rangle$ . Скольжение по плоскостям пирамиды и призмы происходит лишь в тех случаях, когда базисное скольжение по тем или иным причинам затруднено.

### 8.3.2. Расщепление полных дислокаций. Частичные дислокации Шокли

Пусть сдвиг происходит по плоскости базиса (0001), в которой атомы уложены в позиции  $A$ . Смещение атомов в этой плоскости из позиции  $A$  в ближайшую позицию  $A$  происходит на величину вектора Бюргерса  $b_1 = \frac{1}{3}[\bar{2}110]$  (рис. 160). Для такого смещения необходимо удалить две полуплоскости, перпендикулярные плоскости базиса, по линиям  $I-I$  и  $II-II$ . Этими плоскостями являются плоскости  $(\bar{2}110)$ , то есть плоскости призмы второго рода. Таким образом, краевая дислокация располагается вдоль двух экстраплоскостей  $(\bar{2}110)$ , которые в нашем случае находятся под плоскостью рис. 160. Аналогичный результат можно получить, если удалить две полуплоскости снизу или вставить две полуплоскости сверху с той лишь разницей, что знак краевой полной дислокации сменится на обратный.

Движение такой единичной дислокации с вектором Бюргерса  $b_1 = \frac{1}{3}[\bar{2}110]$  должно было бы заключаться в том, что две экстраплоскости «перехватывали» недостающие им половинки у двух вертикальных плоскостей, расположенных справа и, следовательно, обе полуплоскости смещались вправо, оставаясь соседями.



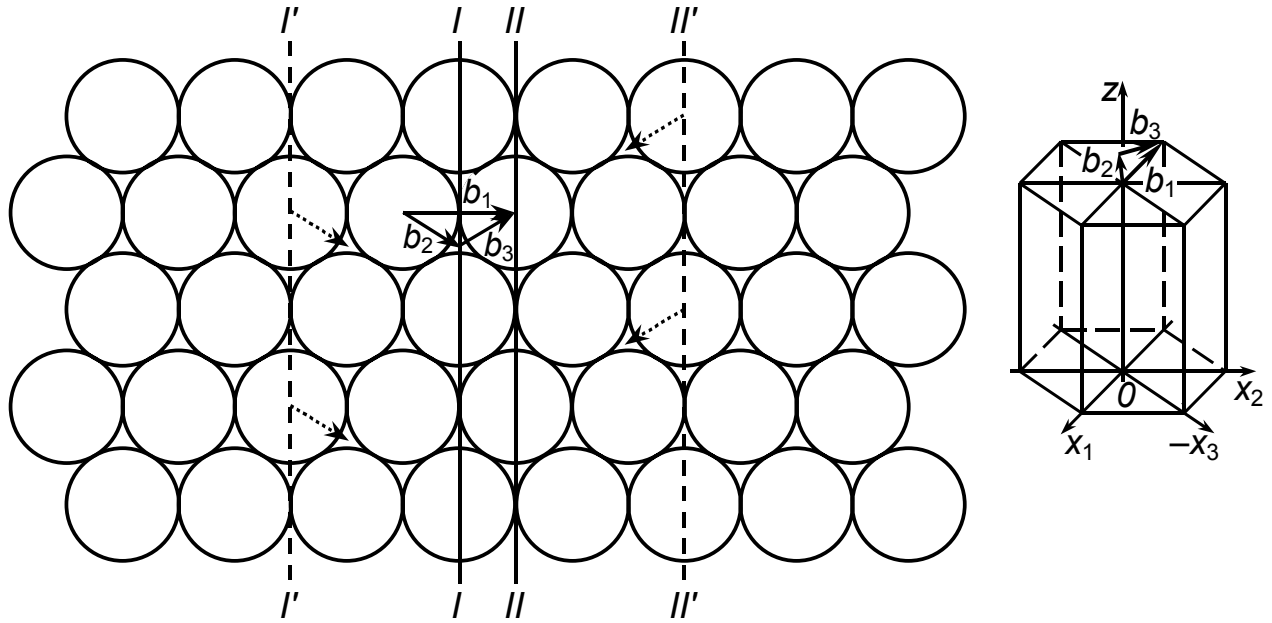


Рис. 160. Расщепление полной дислокации  $b_1 = \frac{1}{3}[\bar{2}110]$  на дислокации Шокли  $b_2 = \frac{1}{3}[\bar{1}010]$  и  $b_3 = \frac{1}{3}[\bar{1}100]$

Обратим внимание на то, что атом  $A$  можно переместить в ближайшую позицию  $A$  не сразу, а в две стадии: сначала из  $A$  в  $C$ , а затем из  $C$  в  $A$ . Таким образом, полную дислокацию  $b_1 = \frac{1}{3}[\bar{2}110]$  можно заменить двумя частичными дислокациями  $b_2 = \frac{1}{3}[\bar{1}010]$  и  $b_3 = \frac{1}{3}[\bar{1}100]$  (см. рис. 160). Реакция расщепления записывается так:

$$\frac{1}{3}[\bar{2}110] = \frac{1}{3}[\bar{1}010] + \frac{1}{3}[\bar{1}100]. \quad (501)$$

Проверим энергетическую выгодность этой реакции по правилу квадратов:

$$|b_1| = a; \quad |b_2| = |b_3| = \frac{a}{\sqrt{3}}; \quad a^2 > \frac{1}{3}a^2 + \frac{1}{3}a^2. \quad (502)$$

Как видим, такая реакция возможна. Так как вектора  $b_2$  и  $b_3$  не трансляционные и образуют угол  $60^\circ$  с линией полной дислокации, то соответствующие им дислокации являются частичными, криволинейными и называются дислокациями Шокли, как в ГЦК-решётке. Если векторы Бюргерса дислокаций Шокли разложить на краевую и винтовую компоненты (см. рис. 142), то краевые компоненты будут иметь одинаковые знаки, а винтовые — противоположные. Поскольку краевые компоненты больше винтовых, то между дислокациями Шокли преобладает отталкивание, и они будут расходиться на некоторое расстояние (см. рис. 160). Движение дислокации Шокли  $I-I$  влево, а  $II-II$  вправо будет переводить атомы из позиции  $A$  в не свойственное им положение  $C$ . В связи с этим между дислокациями Шокли нарушится правильное расположение атомов и образуется дефект упаковки.

Энергия расщеплённой дислокации будет складываться из энергии двух дислокаций Шокли, энергии их отталкивания и энергии ДУ. На образование ДУ затрачивается энергия. Отнесённая к единице площади, энергия ДУ является поверхностным натяжением, которое стремится стянуть дислокации Шокли в полную дислокацию. Поэтому чем меньше энергия дефекта упаковки  $\gamma_{\text{ДУ}}$ , тем сильнее расщеплены дислокации, тем больше ширина ДУ. По аналогии с дислокациями в ГЦК-решётке [см. (470) и (472)],

$$x_{\text{ДУ}} = k \frac{Gb_1^2}{\gamma_{\text{ДУ}}}, \quad (503)$$

где константа  $k$  зависит от типа дислокации.

Попутно заметим, что критерий Франка (правило квадратов) лишь приближённо оценивает энергетическую выгодность той или иной дислокационной реакции. Если в результате реакции образуется ДУ, следует учитывать и его энергию. В случае высокой энергии ДУ дислокации могут диссоциировать слабо либо совсем не расщепляться. Однако в решётках ГЦК и ГПУ расщепление всегда имеет место, так как энергия ДУ не столь уж велика (см. табл. 17).

Что же представляет собой ДУ в гексагональной решётке? Если атом из позиции  $A$  смещается в свободную позицию  $C$  (на вектор  $b_2$ ), то атом из позиции  $B$  смещается в  $A$ , из  $A$  в  $C$  и т.д. (рис. 161,  $a$ ). Вместо чередования  $ABABAB...$  получаем  $ABAB \underbrace{ABCACAC}_\text{ДУ}...$ . Таким образом, между дислока-

циями Шокли образуется нарушение укладки атомов, уже не свойственное гексагональной решётке — дефект упаковки. Позиции атомов повторяются уже не через один, а через два слоя, как в решётке ГЦК. То есть дефект упаковки в ГПУ-решётке в четырёх атомных слоях имеет укладку атомов, соответствующую ГЦК-решётке. Если бы укладка плотноупакованных

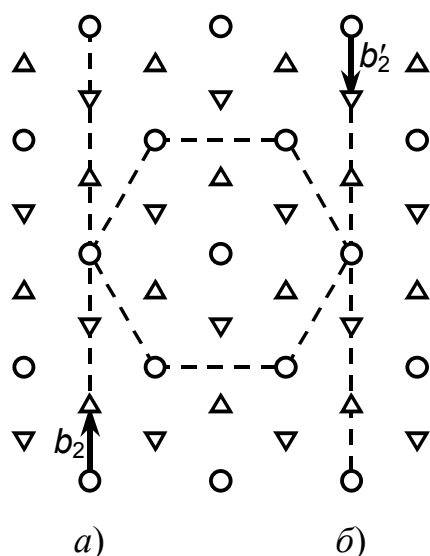


Рис. 161. Схема расположения позиций  $A$  ( $\bigcirc$ ),  $B$  ( $\nabla$ ) и  $C$  ( $\triangle$ ) в плотноупакованных структурах.  $a$  — позиция  $C$  вакантна, чередование  $ABAB...$ ;  $b$  — все позиции заняты атомами, чередование  $ABCABC...$

плоскостей соответствовала схеме  $ABCABCABC\dots$ , то есть решётке ГЦК, то смещение атома из позиции  $A$  в позицию  $B$  (на расстояние вектора  $b'_2$ ) привело бы к следующему нарушению укладки атомов между дислокациями Шокли:  $ABCABCBCABC\dots$  (рис. 161, б) — дефект упаковки в решётке ГЦК

имеет укладку атомов, присущую гексагональной решётке.

В реальных плотноупакованных структурах вследствие расщепления полных дислокаций всегда образуются ДУ, и кристаллы представляют собой как бы «слоёный пирог», состоящий из прослоек ГЦК- и ГПУ-решёток.

ДУ может находиться только между дислокациями Шокли. Если обе дислокации Шокли движутся в одном направлении, то головная дислокация образует ДУ, а хвостовая устраняет его.

### 8.3.3. Дефекты упаковки внедрения и вычитания.

#### Частичная дислокация Франка

В решётке ГПУ, как и в ГЦК, можно получить дефект упаковки путём внедрения части (или всей) лишней плотноупакованной плоскости. Между плоскостями  $A$  и  $B$  можно внедрить часть плоскости  $C$ , и тогда получим ДУ внедрения:  $ABABCABAB\dots$  (рис. 149). ДУ вычитания в ГПУ-структуре

нельзя образовать путём удаления плоскости  $\{0001\}$ , так как при этом сблизилась бы плоскости с одинаковыми позициями атомов, а это нарушило бы плотную упаковку. Поэтому, если изъять часть плоскости, например,  $B$ , то верхнюю часть кристалла необходимо тангенциально сме-

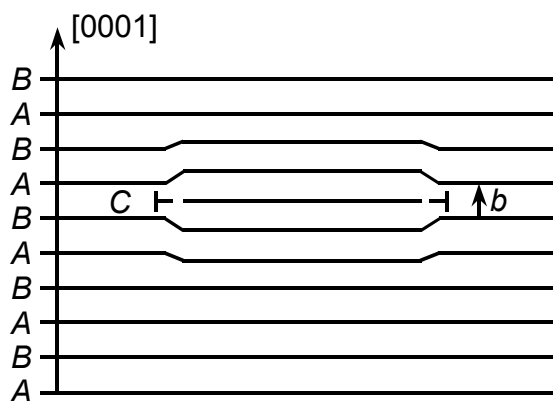


Рис. 162. ДУ внедрения в гексагональной решётке:  $ABABABCABAB$   
ДУ

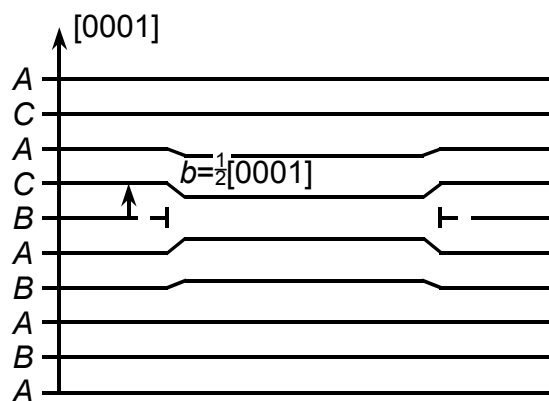


Рис. 163. ДУ вычитания в гексагональной решётке. Изъята часть плоскости  $B$ , а вышележащие плоскости  $(0001)$  смещены так, что атомы  $B$  перешли в  $C$ , атомы  $A$  в  $B$  и т.д., так что получилось чередование  $ABABACAC$   
ДУ

считать на величину вектора дислокации Шокли  $b_2$  (рис. 163) так, чтобы атомы  $A$  перешли в  $C$ , а атомы  $B$  — в  $A$ . Тогда получим ДУ вычитания  $\underbrace{ABABACACAC}_{\text{ДУ}} \dots$  (см. рис. 163).

При образовании ДУ внедрения или вычитания в плоскости базиса появляются дислокации Франка, как это показано на рис. 149, 163. Вектор Бюргерса нетрансляционный, перпендикулярен линиям дислокаций и равен межплоскостному расстоянию:  $b = \frac{1}{2}c = \frac{1}{2} \langle 0001 \rangle = a\sqrt{2/3}$  (при условии, что  $c/a = \sqrt{8/3} \approx 1,633$ ). Таким образом, дислокации Франка являются краевыми и частичными. Эти дислокации не могут скользить (являются сидячими), так как их линии лежат в одной плоскости  $\{0001\}$ , а вектор Бюргерса — в другой,  $\{10\bar{1}0\}$ .

#### 8.3.4. Описание дислокаций и их реакций с использованием стандартного битетраэдра

При рассмотрении дислокаций в решётке ГЦК мы использовали стандартный тетраэдр Томпсона. Аналогичным построением в плотноупакованной гексагональной структуре является двойной тетраэдр (битетраэдр).

Основанием битетраэдра является равносторонний треугольник  $ABC$ , соединяющий три ближайших атома в базисной плоскости; его стороны равны  $a$ , а центр треугольника  $\sigma$  соответствует позиции  $\Delta$  ( $C$ ) — рис. 164,  $a$ . Вершины битетраэдра  $S$  и  $T$  находятся в выше- и нижележащих узлах гексагональной сетки и проецируются в центр  $\sigma$  треугольника  $ABC$ , от которого они удалены на  $c/2$ . Весь битетраэдр состоит из векторов Бюргерса различных дислокаций.

Для ГПУ-структуры имеется три вида полных и три вида частичных дислокаций. Полные дислокации — это:

1) дислокации, лежащие в базисной плоскости и имеющие векторы Бюргерса  $AB$ ,  $BC$  и  $CA$  (в кристаллографических символах  $\frac{1}{3} \langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$ ; их принято называть  $\alpha$ -дислокациями;

2) дислокации с векторами Бюргерса  $ST$ , перпендикулярными плоскости базиса (в кристаллографических символах  $c = \langle 0001 \rangle$ ;

3) дислокации типа  $AD = \frac{1}{3} \langle \bar{1}\bar{1}23 \rangle$ , находящиеся в призматических плоскостях первого рода (см. рис. 164,  $a$ ). Отрезок  $AD$  находится вне битетраэдра, но является трансляционным, так как позиции точек  $A$  и  $D$  эквивалентны (принадлежат атомам в одинаковых позициях  $A$ ). Как видно из рис. 164,  $a$ , вектор Бюргерса  $AD$  может быть получен суммированием векторов  $AK=c$  и  $KD=a$ . Поэтому дислокации с вектором Бюргерса  $AD = \frac{1}{3} \langle \bar{1}\bar{1}23 \rangle$  называют дислокациями  $c + a$ .

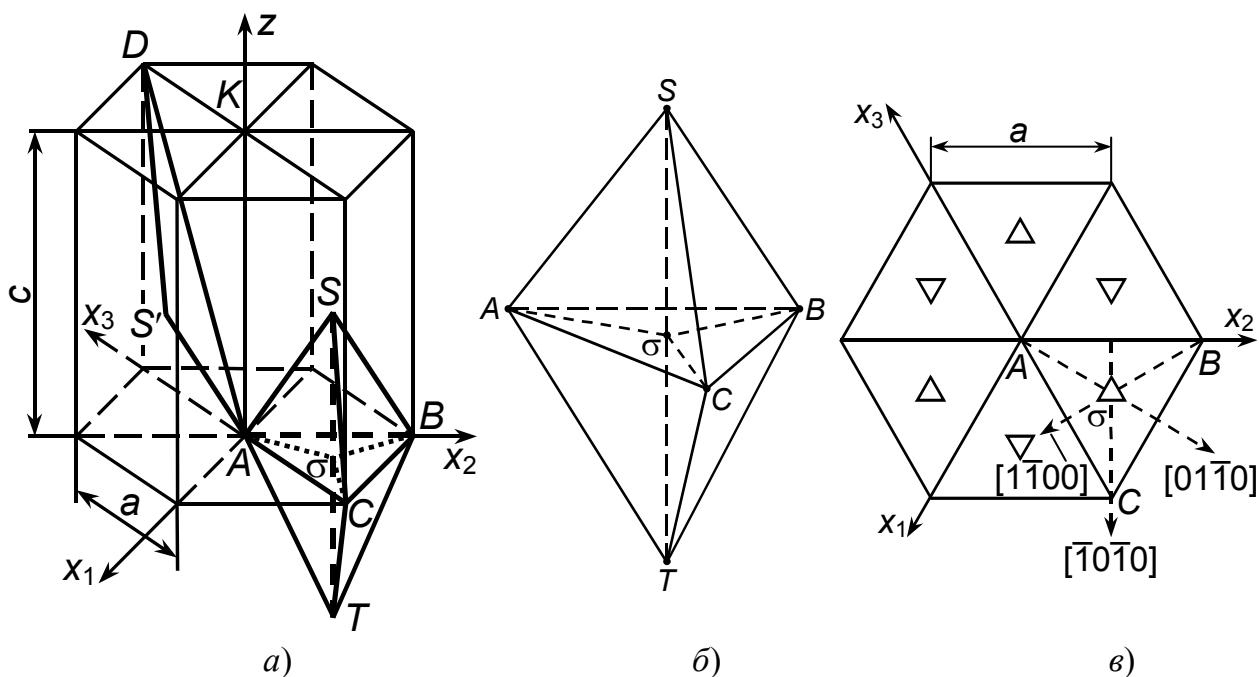


Рис. 164. Стандартный битетраэдр в гексагональной плотноупакованной решётке

К частичным дислокациям относятся:

1) подвижные частичные дислокации Шокли с векторами Бюргерса  $A\sigma$ ,  $B\sigma$  и  $C\sigma$  ( $\frac{1}{3} < 1\bar{1}00 >$ ), находящиеся в плоскости базиса; дислокации Шокли принято обозначать  $P$ ;

2) сидячие частичные дислокации Франка, находящиеся в плоскости базиса; их векторы Бюргерса  $\sigma S$  и  $\sigma T$  ( $c/2 = \frac{1}{2} < 0001 >$ ) перпендикулярны к плоскости базиса и лежат в плоскости призмы первого рода  $\{1\bar{1}00\}$ ;

3) частичные дислокации с нетрансляционными векторами типа  $AS$ ,  $AS'$ ,  $S'D$ ,  $BS$ ,  $BT$  и т.п. ( $\frac{1}{6} < 0\bar{2}23 >$ ), которые являются комбинациями частичных дислокаций Франка ( $\sigma S$ ,  $\sigma T$ ) и Шокли ( $A\sigma$ ,  $B\sigma$ ,  $C\sigma$ ). Их обозначают как дислокации  $\frac{c}{2} + P$ . Это также сидячие дислокации Франка, линии которых

находятся в плоскости базиса, но они не краевые, а смешанные, так как вектор Бюргерса, находящийся в плоскости призмы второго рода ( $2\bar{1}10$ ), не перпендикулярен линиям дислокаций, а образует с ними угол  $\sim 55^\circ 44'$ .

В табл. 18 приведены основные характеристики дислокаций в гексагональной плотноупакованной решётке.

Пользуясь стандартным битетраэдром, можно записать самые различные дислокационные реакции, соблюдая правила сложения и разложения векторов, а также следя за правильностью знаков и расстановки кристаллографических индексов (или символов битетраэдра). Реальная возможность

Основные дислокации в гексагональной  
плотнупакованной решётке и их вектора Бюргерса

Полные дислокации			Частичные дислокации		
Тип дислокации	$\vec{b}$	$b^2$	Тип дислокации	$\vec{b}$	$b^2$
$AB = a$	$\frac{1}{3} \langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$	$a^2$	Шокли $A\sigma$ ( $P$ -дислокации)	$\frac{1}{3} \langle 01\bar{1}0 \rangle$	$\frac{1}{3} a^2$
$ST = c$	$\langle 0001 \rangle$	$\frac{8}{3} a^2$	Франка $\sigma S = c/2$	$\frac{1}{2} \langle 0001 \rangle$	$\frac{2}{3} a^2$
$AD = c + a$	$\frac{1}{3} \langle \bar{1}\bar{1}23 \rangle$	$\frac{11}{3} a^2$	Франка $AS = c/2 + P$	$\frac{1}{6} \langle 0\bar{2}23 \rangle$	$a^2$

протекания тех или иных дислокационных реакций должна проверяться критерием Франка. При этом следует помнить о том, что этот критерий приближённый — если в результате реакции образуется дефект упаковки, то энергию этого ДУ критерий Франка не учитывает.

Воспользуемся битетраэдром для рассмотрения некоторых дислокационных реакций (рис. 164). Ещё раз напомним, что вектор Бюргерса  $AD$  лежит вне битетраэдра.

Наиболее важной является реакция расщепления базисной полной дислокации на две частичные дислокации Шокли, поскольку плоскость  $\{0001\}$  является плоскостью лёгкого скольжения. В символах битетраэдра реакция запишется так:

$$AC = A\sigma + \sigma C, \quad (504)$$

или

$$\frac{1}{3} [11\bar{2}0] = \frac{1}{3} [01\bar{1}0] + \frac{1}{3} [10\bar{1}0]. \quad (505)$$

Энергетическая выгодность подобных реакций доказана выше.

Выясним, могут ли частичные дислокации Шокли  $A\sigma$  и Франка  $\sigma S$  образовать частичную дислокацию  $AS$  по реакции

$$A\sigma + \sigma S = AS, \quad (506)$$

или

$$\frac{1}{3} [01\bar{1}0] + \frac{1}{2} [0001] = \frac{1}{6} [022\bar{3}]. \quad (507)$$

Критерий Франка не даёт определённого ответа на этот вопрос, так как сумма квадратов векторов  $A\sigma$  и  $\sigma S$  равна квадрату вектора  $AS$  ( $\frac{1}{3} a^2 + \frac{2}{3} a^2 = a^2$ ). Для решения вопроса о направлении протекания реакции необходим учёт энергий ДУ.

Объединение полных дислокаций  $AD$  и  $AK$  ( $AK=ST$ , см. рис. 164) в полную базисную дислокацию происходит по реакции

$$KA + AD = KD, \quad (508)$$

или

$$[000\bar{1}] + \frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}23] = \frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}20]. \quad (509)$$

Эта реакция существенно энергетически выгодна, поскольку  $\frac{8}{3}a^2 + \frac{11}{3}a^2 > a^2$ .

Полная дислокация  $AD$  может диссоциировать на частичные дислокации по реакции

$$AD = AS' + S'D, \quad (510)$$

или

$$\frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}23] = \frac{1}{6}[0\bar{2}23] + \frac{1}{6}[\bar{2}023]. \quad (511)$$

Так как  $\frac{11}{3}a^2 > 2a^2$ , то эта реакция энергетически выгодна. Заметим, что дислокация  $AD = \frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}23]$  может скользить и в пирамидальной плоскости второго рода  $(11\bar{2}2)$  (см. рис. 157), а её диссоциация с образованием сидячих дислокаций Франка прекращает скольжение.

Полная дислокация  $TS$  может расщепиться на две частичных по реакции

$$TS = TB + BS, \quad (512)$$

или

$$[0001] = \frac{1}{6}[\bar{2}203] + \frac{1}{6}[2\bar{2}03]. \quad (513)$$

Данная реакция энергетически выгодна, так как  $\frac{8}{3}a^2 > 2a^2$ . Скользящим полным дислокациям  $AD$  и базисной  $DK$  при встрече энергетически выгодно образовать полную дислокацию  $AK$  ( $AK=TS$ ):

$$AD + DK = AK, \quad (514)$$

то есть

$$\frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}23] + \frac{1}{3}[11\bar{2}0] = [0001]; \quad (515)$$

при этом  $\frac{11}{3}a^2 + a^2 > \frac{8}{3}a^2$ .

## 9. ФИЗИЧЕСКАЯ ПРИРОДА РАЗРУШЕНИЯ МЕТАЛЛОВ

### 9.1. ИЗЛОМЫ ПРИ ВЯЗКОМ И ХРУПКОМ РАЗРУШЕНИИ

Металлурги всегда уделяли исключительное внимание характеру излома. С микроструктурной точки зрения существуют три различных механизма разрушения: 1) хрупкий транскристаллитный или ручьистый излом; 2) вязкий, волокнистый или чашечный излом; 3) хрупкий интеркристаллитный, то есть межзёрненный излом (транскристаллитный и интеркристаллитный означает проходящий внутри кристаллитов (зёрен) и по границам кристаллитов соответственно).

Для хрупкого разрушения, который в классической форме проявляется у стекла, кости, мрамора, кварца и т.п. материалов, характерно практически полное отсутствие пластической деформации к моменту разрушения. Иначе говоря, разрушение при растяжении наступает тогда, когда предел текучести еще не перейдён. Возможность истинно хрупкого разрушения у металлов и сплавов, имеющих кристаллическую решётку, до сих пор остается дискуссионной. Следы пластической деформации обычно проявляются. Но если пластическая деформация не превышает 0,5...2,0 %, то разрушение можно считать квазихрупким. Поскольку остаточная деформация мала, то мала и механическая энергия, поглощаемая образцом до и в процессе разрушения. Именно по этой причине хрупкие материалы не надёжны в эксплуатации, если даже они обладают высоким значением предела прочности. Любая случайная царапина немедленно приведёт к разрушению детали. Разрыв межатомных связей произойдет с большой скоростью в форме роста трещины, порождённой царапкой, под действием нормального напряжения.

Распространение хрупкой трещины идёт достаточно строго по определённым кристаллографическим плоскостям. У железа и сталей это плоскости семейства  $\{100\}$ , являющимися гранями куба. Таких плоскостей три или, если учитывать противоположные стороны, шесть. В каждом зерне разрушение проходит по той из шести допустимых плоскостей, по которой максимально нормальное напряжение. Плоский участок разрушения в пределах зерна обозначают как фасетку излома. При переходе через границу зерна изменяется ориентация плоскости разрушения и соответственно меняется ориентация фасетки излома, поэтому поверхность хрупкого излома имеет вид совокупности плоских участков, которые отражают падающий свет, блестят, «играют» гранями при наклоне.

Однако при рассмотрении фасеток при увеличениях свыше 1000 раз, например, с помощью растрового электронного микроскопа, выявляется тонкая структура фасеток, известная как ручьистый излом. Распростра-



ние хрупкого разрушения сколом в следующем зерне начинается из нескольких точек (фокусов), расположенных на различных уровнях, поэтому трещины как бы проходят друг над другом. В какой-то момент вертикальные перемычки разрушаются, и возникают ступеньки, окаймляющие «ручьи». Максимальные измеренные скорости движения трещин составляют  $(2...4) \cdot 10^3$  м/с и близки к скорости звука.

Академик А.Ф.Иоффе ввёл важную механическую характеристику — сопротивление хрупкому разрушению, или хрупкую прочность  $S_T$ . Используют также обозначение  $\sigma_{отр}$  — напряжение отрыва. Иоффе считал, что хрупкая прочность металлов и сплавов от температуры растяжения не зависит, тогда как предел текучести существенно возрастает с понижением температуры. Серия диаграмм растяжения на рис. 165 иллюстрирует такой эффект. При относительно высокой температуре  $T_1$  предел текучести  $\sigma_{T1}$  мал, поэтому образец должен получить значительное пластическое удлинение  $e_{к1}$ , пока деформирующее напряжение не достигнет хрупкой прочности и образец не разрушится. При более низкой температуре  $T_2$  предел текучести имеет более высокое значение, поэтому пластическое удлинение  $e_{к2}$  до разрушения оказывается существенно меньшим.

При ещё более низкой температуре  $T_3$  предел текучести оказался выше хрупкой прочности  $S_T$ , разрушение образца должно происходить при напряжении, меньшем предела текучести. Пластическое удлинение отсутствует, то есть разрушение должно быть полностью хрупким. Приведенная схема наглядно объясняет возможность перехода от вязкого разрушения при  $T_1$  к хрупкому разрушению при  $T_3$  по мере снижения температуры. Это явление хорошо известно и металлургам, оно проявляется у всех металлов с объёмноцентрированной кубической решёткой, в том числе у железа и

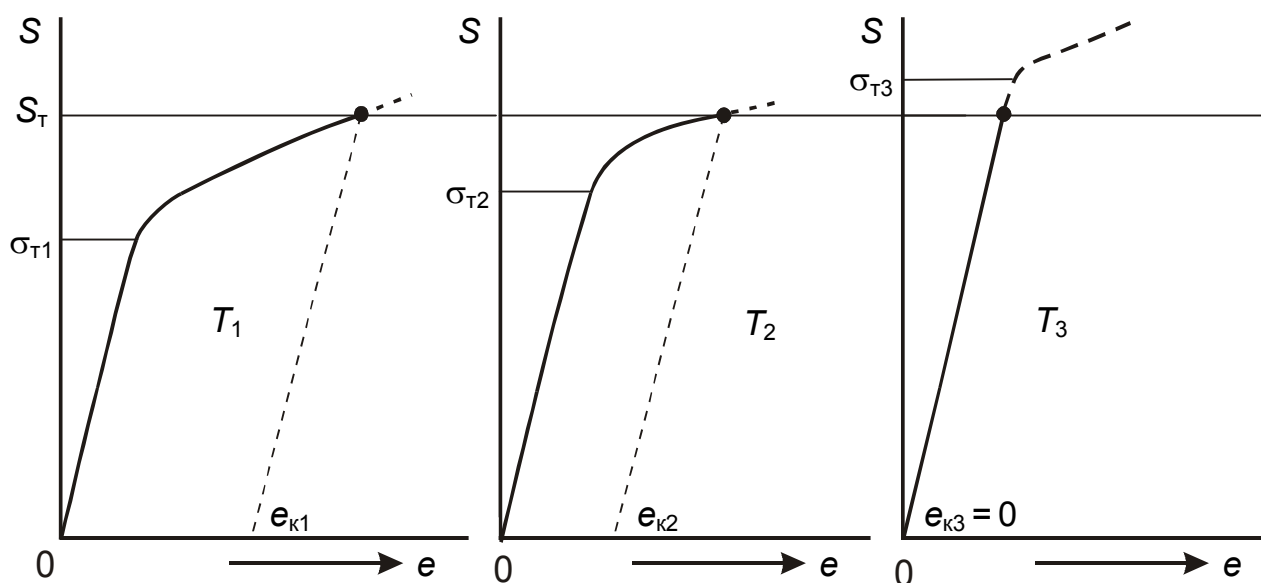


Рис. 165. Диаграммы растяжения образцов при различных температурах ( $T_1 > T_2 > T_3$ ).

Горизонталь хрупкой прочности  $S_T$  ограничивает относительное удлинение

сталей, и обозначается как хладноломкость. При 100...200 °С металлы с ОЦК-решёткой могут разрушаться вязко, тем не менее при последовательном охлаждении и испытаниях для ОЦК-металла всегда можно указать температуру вязко-хрупкого перехода, ниже которой относительное удлинение до разрушения или сужение (рис. 166) приближаются к нулю, а излом оказывается полностью хрупким.

Согласно Йоффе, металл переходит в хрупкое состояние при температуре, для которой предел текучести становится равным хрупкой прочности  $S_T$ . У многих сталей эта температура лежит в районе  $-20...40$  °С. Очевидно, что подобные стали нельзя использовать в машинах, работающих на Севере, где температура окружающего воздуха может понижаться до  $-50$  °С. Напротив, для южных районов подобные стали вполне допустимы.

Хладноломкостью не обладают металлы и сплавы с гранецентрированной (медь, никель, свинец, алюминий,  $\gamma$ -железо, титан и т.д., а также их сплавы) и некоторые металлы с плотноупакованной гексагональной решёткой (титан, цирконий и кобальт; хладноломкими ГПУ-металлами являются цинк, кадмий, магний, рутений, осмий). Гамма-железо стабильно между 910 °С и 1390 °С; при комнатной температуре оно не существует. Однако добавки 30 %Ni или 13 %Mn + 1 %C, или 18 %Cr + 9 %Ni делают ГЦК-решётку сплавов устойчивой при комнатной температуре. Так возникают аустенитные стали типа Н30, 110Г13 или Х18Н10Т. Первая и третья стали могут содержать дополнительно углерод или азот, примеси которых усиливают стабильность ГЦК-решётки. Ни аустенитные стали, ни сплавы титана, ни бронзы, ни латуни, ни сплавы алюминия не обладают хладноломкостью, но хрупкость, связанная с межзёрненным разрушением, для них может проявиться. У ГЦК-сплавов Fe–Mn, а также у стали Гадфильда

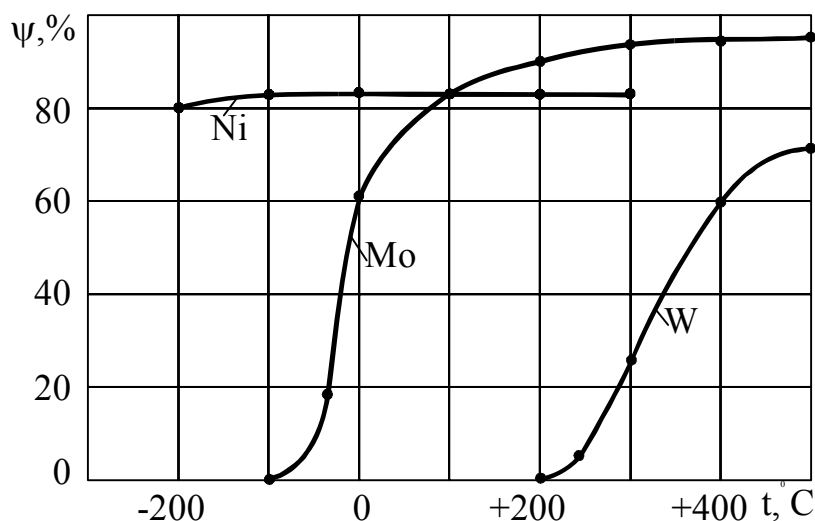


Рис. 166. Зависимость пластичности (относительного сужения в месте разрыва) тугоплавких ОЦК-металлов и ГЦК-никеля от температуры (Е.М. Савицкий)

110Г13 может проявляться хладноломкость в районе  $-80 \dots -120^\circ\text{C}$ , однако она обусловлена переходом магнитной структуры сплавов из парамагнитного состояния в антиферромагнитное с коллинеарным расположением спиновых атомных магнитных моментов. Магнитное упорядочение сопровождается искажением кристаллической решётки: она становится слабо тетрагональной. Видимо, этот фазовый переход и является причиной появления хладноломкости аустенитных сталей на железо-марганцевой основе.

Антиподом хрупкому разрушению выступает вязкое разрушение, которое происходит после большой предшествующей пластической деформации, после образования шейки и значительного сужения в этом месте. Основываясь на схеме образования шейки, приведённой на рис. 54, можно сделать вывод о существенной роли в этом процессе вызывающих сдвиг касательных напряжений. Однако чисто сдвиговое разрушение, когда шейка утоняется до точки — вершины двух конусов, проявляется в редчайших случаях у некоторых чистых ГЦК-металлов (Al, Pb, Ag, Au). В подавляющем большинстве случаев вязкое разрушение технически чистых металлов наблюдается после уменьшения площади шейки на  $20 \dots 80\%$  по отношению к исходному сечению. Следовательно, для таких металлов, а тем более их сплавов нормальные напряжения также участвуют в разрушении.

Вязкому разрушению соответствуют высокие значения поглощённой энергии, то есть большая работа и соответственно малая скорость распространения трещины. По этим причинам эксплуатационная надёжность деталей или узлов машины, изготовленных из вязких сталей, максимальна. Типичным видом разрушения пластичных металлов является излом конусо-чашечка. Картину разрушения можно представить следующим образом. До образования шейки пластическое удлинение происходит равномерно по длине образца, что обеспечивается непрерывно увеличивающейся плотностью (то есть количеством на единицу площади боковой поверхности) плоскостей скольжения. Однако при достижении критического истинного удлинения  $e = m$  скольжение локализуется, и возникает шейка — местное сужение поперечного сечения. П. Бриджмен доказал, что в плоскости шейки возникают помимо осевых напряжений  $\sigma_z$  ещё и радиальные растягивающие напряжения  $\sigma_r$  (рис. 167):

$$\sigma_r = \sigma_T \ln \left( 1 + \frac{a - 2r}{2R} \right), \quad (516)$$

где  $a$  — диаметр шейки,  $r$  — радиус точки наблюдения,  $R$  — радиус кривизны шейки,  $\sigma_T$  — предел текучести.

В центре шейки при  $r = 0$  радиальные напряжения максимальны:

$$\sigma_{r \max} = \sigma_T \ln \left( 1 + \frac{a}{2R} \right), \quad (517)$$

и по величине приближаются к пределу текучести. Таким образом, в центре шейки возникает, по существу, трёхосное, всестороннее растяжение,

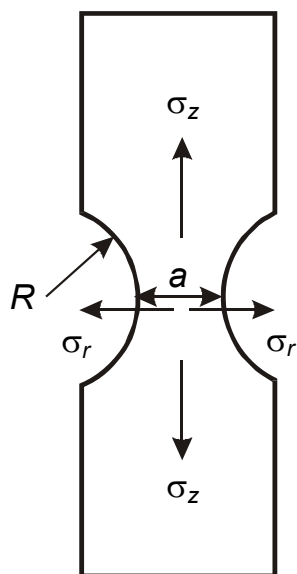


Рис. 167. Напряженное состояние в шейке образца, растягиваемого в направлении оси  $z$

что неминуемо приводит к образованию микропустот — пор. Первые поры появляются в центральной части шейки ( $r \approx 0$ ), где радиальные напряжения максимальны. Поры всегда располагаются около включений, то есть частиц оксидов, сульфидов, нитридов, карбидов, которые попадают в сталь ещё при плавке или раскислении, десульфурации расплава и т.п. Например, оксиды и нитриды алюминия ( $\text{Al}_2\text{O}_3$  и  $\text{AlN}$ ) возникают при раскислении расплава стали алюминием. В сталях, легированных марганцем, появляются сульфиды марганца  $\text{MnS}$ . При раскислении или легировании расплава кремнием возникают силикаты.

Обычно неметаллические включения находятся в плотном контакте с основным металлом, так что в закристаллизованном состоянии между ними нет свободного промежутка. Возможно, что на поверхности раздела возникает химическая или механическая связь, обуславливающая сцепление частиц и основной фазы. В ходе пластической деформации твёрдые, малопластичные включения не позволяют скольжению пройти через них. Сдвиги доходят до включений и останавливаются, при этом в частицах возникают значительные напряжения. Непрерывно увеличиваясь в ходе деформации, эти напряжения приводят или к разрушению, или к отслаиванию частиц от основной фазы. Внутренняя поверхность, по которой матрица сопрягалась с частицей, отрывается от частицы и начинает удлиняться подобно всему образцу. Сферическая полость должна превратиться в эллипсоидальную, причём, как и у образца, её площадь сечения, на первый взгляд, должна уменьшаться, так что частица будет зажата в узком коридоре. В действительности возникшие в шейке радиальные напряжения будут препятствовать сжатию. В итоге на месте каждой частицы возникает пора (рис. 168,  $a$ ). Возможно, что вакансии также принимают участие в

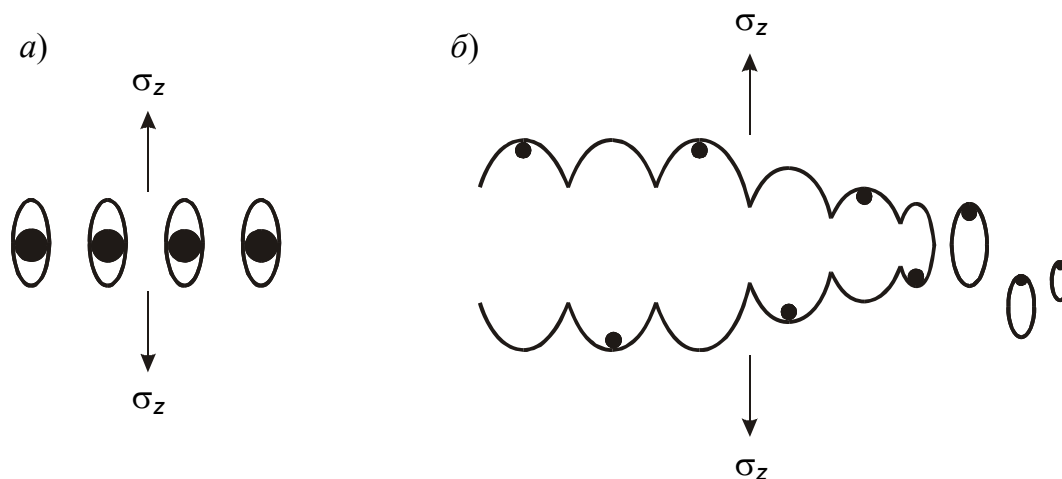


Рис. 168. Образование пор на включениях (а) и трещины (б) при вязком разрушении

этом процессе, подобно тому, как это происходит при ползучести, но роль скольжения, по-видимому, основная. Пора, имеющая форму эллипсоида, непрерывно увеличивает свои размеры во всех направлениях под влиянием пластических сдвигов.

Появление и рост пор составляют первую и наиболее длительную стадию вязкого разрушения, так как первые поры образуются при относительном удлинении, близком к  $\delta$ . На второй стадии расширение пор в направлениях действия напряжений  $\sigma_z$  и  $\sigma_r$  приводит к утончению перемычки между соседними порами, разрушению этих перемычек и формированию трещины. (рис. 168, б). Трещина, как известно, является мощным концентратором напряжений. Поэтому поры, ближайшие к концу трещины, испытывают более сильную пластическую деформацию, они быстро растут с последующим разрушением перемычки.

Так, шаг за шагом, вязкая трещина распространяется по сечению шейки и образует будущее дно чашечки. Особенность дна, а точнее обеих поверхностей разрушения, во-первых, заключается в том, что поверхности не связаны с определённой кристаллографической плоскостью. Во-вторых, они имеют ямочную структуру, причём в каждой ямке с вероятностью 1/2 (из одной поры получаются две ямки) лежит частица неметаллической фазы. Разумеется, чтобы наблюдать это, необходимы увеличения от 1000 до 50 000 раз, которые обеспечивает растровый электронный микроскоп. При наблюдениях с малыми увеличениями ( $\times 5 \dots 100$ ) система ямок, объединённых в трещину, представляется канавкой с возвышенными берегами. Поэтому говорят о волокнистом изломе. Наличие ямок обуславливает диффузное отражение света; поверхности вязкого разрушения кажутся матовыми. Ямочная структура изломов наблюдалась у углеродистых и легированных сталей, чугунов, аустенитных сталей, алюминиевых и медных

сплавов, цинковых и магниевых сплавов, то есть является общей особенностью разрушения выше температуры хладноломкости.

Третья стадия вязкого разрушения происходит в условиях резкого уменьшения радиальных напряжений вследствие образования поверхности разрушения в центре шейки и, напротив, увеличения истинных растягивающих напряжений в том относительно тонком кольце шейки, которое осталось неразрушенным. Расширение пор здесь затруднено. Главными становятся процессы скольжения по плоскостям, наклонённым на  $45^\circ$  к поверхности шейки. Подобное скольжение может инициировать разрушение перемычек между вытянутыми вдоль оси  $z$  ямками. Поэтому трещина меняет своё направление и, распространяясь по поверхности усечённого конуса с углом  $45^\circ$ , выходит на боковую поверхность образца. Таким образом оформляется «чашка» излома в одной половине и «конус» излома в другой половине сломавшегося образца.

## 9.2. МЕЖЗЁРЕННЫЙ ИЗЛОМ

Иногда разрушение металлов и сплавов происходит по межзёрным или межфазным границам. Этот вид разрушения обусловлен состоянием границ зёрен. Приведем простой пример. Висмут практически нерастворим в твёрдой меди и образует с ней эвтектику, плавящуюся при  $270^\circ\text{C}$ . Эвтектика состоит в основном из висмута, потому что эвтектическая концентрация  $0,2\% \text{Cu}$ . Эта эвтектика при охлаждении практически любого сплава кристаллизуется последней и поэтому расположена на границах зёрен меди. При нагреве меди, содержащей висмут, выше  $270^\circ\text{C}$  эвтектика расплавляется, так что на границах зёрен появляется жидкая прослойка. Приложение напряжения при температурах выше  $270^\circ\text{C}$  приводит к немедленному разрушению меди по границам зёрен. Однако в меди всё-таки растворяется очень небольшое количество висмута ( $0,01\%$  при  $800^\circ\text{C}$ ), и если медь висмута менее предела растворимости, то эвтектическая реакция проявиться не может. Именно поэтому содержание висмута в технической меди не должно превышать  $0,002\dots 0,005\%$ . Аналогичные эффекты охрупчивания границ меди при повышенных температурах получили название краснеломкости.

Причинами, вызывающими межзёрненное разрушение при комнатной температуре, могут быть выделение хрупкой фазы или сегрегация примесей и легирующих элементов на границах зерна при повышенных температурах в ходе термической обработки. Отсылая за подробностями к курсам по термической обработке легированных сталей, приведём несколько важных примеров.

Чтобы уменьшить объём снимаемого при механической обработке металла, слитки конструкционных сталей куют на молотах, максимально приближая форму поковки к форме будущей детали. Нагрев под ковку до-

водят до 1120...1200 °С, причём в условиях грубого контроля температуры возможен перегрев до 1250...1350 °С. Разумеется, во время перегрева  $\gamma$ -зерно стали чрезмерно вырастает. В процессе горячейковки проходит деформация, вызывающая рекристаллизацию. Последующий отжиг или нормализация дополнительно измельчает зерно стали. Тем не менее, при разрушении исходно перегретых, но, на первый взгляд, мелкозернистых сталей при комнатной температуре наблюдается излом по поверхности тех очень крупных зерен, которые существовали в момент перегрева. Излом такого типа был назван камневидным. Современная теория объясняет образование этого излома оплавлением выше 1250 °С и растеканием по границам зерна сульфидной фазы ( $\text{MnS} + \text{FeS}$ ), созданной примесями серы, остаточное содержание которой в стали обычно не превышает 0,04 %.

Чтобы связать серу в сульфид марганца, необходимо  $\frac{54,9}{12,0} \cdot 0,04 = 0,18 \text{ \%Mn}$ .

Такое содержание марганца имеет почти каждая сталь, даже если марганец не введён как легирующий элемент. Охлаждение ниже 1250 °С ведёт к кристаллизации хрупкой плёнки сульфидов по границам зерна перегретой стали. Именно по этим ослабленным поверхностям идёт разрушение при комнатной температуре, хотя фактическое зерно может быть мелким. Для устранения камневидного излома используются различные приёмы. Один из них заключается в микролегировании стали элементами, которые обладают большей энергией связи с серой, чем марганец (цирконий, кальций, РЗМ), и образуют более тугоплавкие сульфиды, подавляя образование сульфидов железа и марганца.

Выделение хрупких фаз по границам зерна довольно часто встречается в металловедческой практике. Например, выдержка высокохромистых ферритных (X25), аустенито-ферритных (08X22H6) или аустенитных (03X21H21M4ГБ) коррозионностойких сталей в районе температур 560...880 °С приводит к образованию по границам зерна хрупкой интерметаллидной  $\sigma$ -фазы на основе химического соединения  $\text{FeCr}$  с тетрагональной кристаллической решёткой, элементарная ячейка которой содержит 30 атомов. Выделение кристаллов  $\sigma$ -фазы стимулирует зернограницный излом.

В качестве следующего примера рассмотрим проблему хрупкости тугоплавких металлов: W, Mo, Cr, Re, V, Ta, Nb и др. Все они являются переходными металлами, обладают ОЦК-решёткой, характеризуются очень высокими температурами плавления от 3380 °С для вольфрама и 3180 °С для рения до 1875 °С для хрома, имеют высокие значения модуля упругости, твёрдости, прочности и плотности.

У переходных элементов IV, V и VI групп происходит заполнение электронами  $3d$ ,  $4d$  или  $5d$  внутренних орбиталей при уже заполненных  $4s^2$ ,  $5s^2$  или  $6s^2$  внешних. Так как атомные функции пространственно направлены, то согласно теории химических связей валентные  $d$ -электроны

соседних атомов образуют ковалентные связи, которые ответственны за высокую энергию связи, а значит и тугоплавкость этих металлов, тогда как внешние  $s$ -электроны коллективизируются и обуславливают металлические свойства (электропроводность, характерный цвет, блеск и другие). Максимальная валентность  $d$ -электронов, равная пяти, должна проявляться у элементов седьмой группы; из ОЦК-металлов в ней расположен только рений. Однако у элементов шестой группы (Cr, Mo, W) электронная конфигурация атомов типа  $4s^2 3d^4$  для хрома преобразуется, по-видимому, в  $4s^1 3d^5$ , при которой достигается максимальная валентность как у  $s$ -, так и у  $d$ -электронов. Вот почему хром, молибден и вольфрам обладают наивысшими точками плавления, модулями упругости и плотностями, каждый в своем периоде. В пятидесятых годах считали, что пространственная направленность ковалентных связей обуславливает чрезвычайную хрупкость вольфрама, хрома и молибдена, ибо в процессе пластического сдвига меняется расположение ближайших соседей, что должно приводить к нарушению направленности связи, самой связи, а значит и разрушению образца. Эта идея подтверждалась очень низкой пластичностью технически чистых металлов ( $\delta < 2\%$ ).

Заметим, что металлургов всегда беспокоило наличие в этих металлах примесей внедрения — для молибдена примерно  $0,005\%C$ ;  $0,02\%O$ ;  $0,02\%N$ ,  $0,006\%H$ . Однако метод получения металла путём восстановления в потоке водорода порошка их окислов, выделенных из соответствующих минералов (вольфрамат + шеелит, молибденит, хромистый железняк) не позволял существенно повысить степень чистоты. Но в шестидесятые годы был разработан метод зонной очистки, основанный на непрерывном постепенном перемещении фронтов расплавления и кристаллизации вдоль цилиндрического образца. В этом случае примеси переносятся в конец образца. Локальное оплавление осуществляется либо кольцевым индуктором, либо пучком электронов. Вскоре выяснилось, что двух-трёхкратный зонный переплав этих металлов приводит к резкому повышению пластичности ( $\delta > 50\%$ ), а температура перехода в хрупкое состояние опускается ниже  $-196^\circ C$ . Цилиндрический образец хрома после зонной очистки можно завязать в узел подобно галстуку. Так «лопнула» красивая теория влияния ковалентной связи на хрупкость. Стало ясно, что причиной хрупкости технически чистых металлов является относительно высокое содержание примесей внедрения: углерода, кислорода, азота и водорода, значительно превышающее предельные растворимости этих элементов в металлах. Например, для молибдена и вольфрама при  $1000^\circ C$  растворимости оцениваются так:  $5 \cdot 10^{-5}$  мас.  $\%C$  и менее  $0,0001\%O$ ,  $0,0002\%N$ ,  $0,0001\%H$ . Очевидно, что концентрация примесей в технических металлах в десятки и сотни раз превосходит их растворимость. Поэтому в ходе охлаждения избыточные примеси связываются с основным металлом в кристаллы окси-



дов ( $\text{MoO}_2$ ,  $\text{WO}_3$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ), карбидов ( $\text{W}_2\text{C}$ ,  $\text{Mo}_2\text{C}$ ,  $\text{Cr}_{23}\text{C}_6$  или  $\text{Cr}_7\text{C}$ ) и нитридов, которые выделяются по границам зерна и охрупчивают их. Вследствие этого разрушение образцов металлов обычной чистоты происходит в основном по границам зерна. Важно иметь в виду, что растворимость примесей внедрения увеличивается при повышении температуры: например, при  $2000^\circ\text{C}$  молибден растворяет уже около  $0,1\% \text{C}$ . Поэтому очень быстрое охлаждение образцов этих металлов от высоких температур может в какой-то степени подавить выделение избыточных фаз по границам зерна и повысить пластичность.

Следующий важный пример интеркристаллитного разрушения является отпущенная конструкционная сталь. Вспомним, что если нагреть сталь до аустенитного состояния, а затем охладить  $\gamma$ -фазу настолько резко, чтобы не успел выделиться цементит  $\text{Fe}_3\text{C}$ , то при довольно низких температурах  $400\dots 200^\circ\text{C}$  аустенит (ГЦК-фаза) превращается в мартенсит — фазу на основе  $\alpha$ -железа, в результате чего значительно возрастает твёрдость и прочность стали. Эффект упрочнения обусловлен: 1) принудительным переходом углерода из  $\gamma$ -фазы в решётку мартенсита; 2) образованием тонких, закономерно ориентированных пластинок мартенсита, границы которых препятствуют сдвигу; 3) чрезвычайно высокой плотностью дислокаций в пластинах.

Однако мартенсит хотя и твёрдая, но очень хрупкая фаза, поэтому закалённую сталь с целью повышения вязкости необходимо отпустить, то есть выдержать порядка часа при температуре от  $150$  до  $700^\circ\text{C}$ . При отпуске часть углерода выделяется в форме частиц карбида  $\text{Fe}_3\text{C}$  или специальных карбидов ( $\text{Cr}_{23}\text{C}_6$ ,  $\text{VC}$  и т.п.). Снижается также и плотность дислокаций. В случае углеродистых сталей их твёрдость непрерывно уменьшается, а ударная вязкость возрастает по мере повышения температуры отпуска. Но если конструкционная сталь легирована кремнием, марганцем, никелем, хромом, медью, ванадием так, что суммарное количество легирующих элементов превосходит  $0,8\dots 1,0\%$ , то на кривой зависимости ударной вязкости от температуры отпуска отчетливо проявляются два минимума: один в районе  $300\dots 350^\circ\text{C}$ , второй при  $500\dots 550^\circ\text{C}$ . Пример такой зависимости приведён на рис. 169. Обратите внимание на монотонное снижение твёрдости на фоне волнообразного поведения ударной вязкости. Конструкционные стали, в том числе и 37ХН3А, после низкого отпуска при  $200^\circ\text{C}$  и разрушения дают как правило волокнистый (вязкий) излом. Но как только мы переходим к температурам отпуска  $300\dots 400^\circ\text{C}$  — первого минимума на кривой ударной вязкости  $KCU(T_{\text{отп}})$ , то вид излома резко меняется: он становится хрупким межкристаллитным изломом. Появление хрупкости первого рода объясняют выделением из мартенсита тонких пластинок цементита, преимущественно вдоль всей поверхности границ  $\gamma$ -зерна, ибо диффузия углерода в железе, как и в вольфраме, молибдене, хроме, при

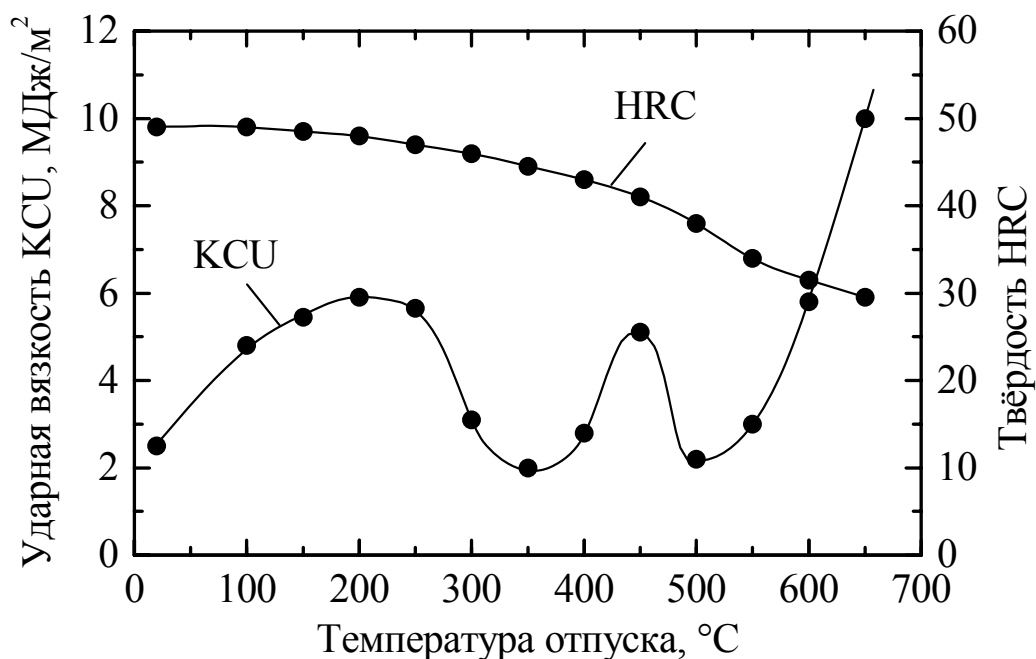


Рис. 169. Зависимость твердости и ударной вязкости закалённой стали 37ХН3А от температуры отпуска (В.Д. Садовский)

относительно низких температурах происходит не по объёму, а по поверхности большеугловых границ, какими и являются старые границы  $\gamma$ -зёрен. Выделение цементита идёт с уменьшением объёма, что стимулирует зарождение трещин. У сталей, легированных молибденом, второго минимума ударной вязкости (отпускная хрупкость второго рода) нет, поэтому отпуск выше 400 °C вновь приводит к волокнистому излому. Но для большинства легированных сталей в районе 500 °C проявляется второй минимум ударной вязкости. Излом здесь также межкусталлитный, но природа охрупчивания совершенно иная: оно обусловлено сегрегацией атомов фосфора и его аналогов (Sb, Sn, As) на большеугловых границах. Попадая на границы зерна, эти примеси уменьшают поверхностное натяжение. Поэтому и возникает термодинамический стимул диффузии их к границе зерна. Атомы фосфора покрывают границу двумя атомными слоями, так что прочность границы обуславливают слабые связи P–P, по которым идёт разрушение. По теории Гуттмана, атомы углерода являются конкурентами атомов фосфора в борьбе за места расположения на границе зерна. У углеродистых сталей «победителями» оказываются атомы углерода. Такие стали не подвержены отпускной хрупкости второго рода. Но достаточно ввести в сталь легирующий элемент, например, хром или марганец, понижающий активность углерода, как сегрегации фосфора станут предпочтительными. Добавки молибдена снижают активность фосфора в альфа-фазе и тем самым подавляют отпускную хрупкость второго рода.

Отпуск выше 600 °С вновь даёт вязкий, волокнистый излом. Однако если при охлаждении образца от 600 °С замедлить охлаждение в районе 500 °С, можно вновь охрупчить образец сегрегациями фосфора. Поэтому охлаждение подобных сталей после высокого отпуска следует проводить ускоренно.

В рассмотренных примерах хрупкий скол проходил по старым границам аустенита. Иная ситуация наблюдается для сталей, обработанных на перлит. Классическим примером является эвтектоидная сталь У8, медленно охлаждённая из аустенитного состояния. В таких условиях в каждом зерне аустенита возникает большое число перлитных зерен, точнее перлитных колоний. Перлитная колония представляет систему в среднем параллельных чередующихся пластин феррита и цементита. Разрушение перлитных структур в основном происходит сколом по поверхности раздела пластин феррита и цементита. Зёрна перлита различаются пространственной ориентацией пластин. Поэтому поверхность разрушения будет также менять свою ориентировку при переходе от одного зерна перлита к другому. Строго говоря, разрушение перлитного зерна является транскристаллитным, но поверхности разрушения очерчивают форму и размер зёрен перлита. С детальным изложением других важных особенностей разрушения мартенситных, перлитных и бейнитных структур можно познакомиться по статьям и книгам академика В.Д.Садовского и его учеников.

### **9.3. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ НА ОТРЫВ**

#### **9.3.1. Межатомное взаимодействие и упругость кристаллов**

Еще в начале XVIII века хорватский физик Бошкович высказал предположение, что молекулы, равно как и твёрдые тела, образуются из атомов потому, что на малых расстояниях между атомами действуют силы отталкивания, а на больших — силы притяжения. В те годы, конечно, полагали, что притяжение создают гравитационные силы, а природа сил отталкивания была неизвестной. В современной физике установлено, что при сближении атомов между ними действительно проявляется взаимодействие. Термин «между ними», в общем-то, неточен. Он предполагает, что объединяющиеся атомы имеют неизменное строение на любой стадии процесса. В действительности по мере сближения электроны перераспределяются, благодаря чему и возникает химическая связь: ковалентная, ионная, металлическая или ван-дер-ваальсова. Мы не будем подробно обсуждать природу связи, она изложена в курсах физики и химии. Полезно вспомнить, что ковалентная связь возникает в результате пространственного обособления двух электронов, по одному от каждого атома, с противоположными спинами, которые, таким образом, образуют электронную семью, или электронную пару со скомпенсированными спинами. В кова-

лентной связи участвуют, как правило,  $p$ -,  $d$ - или  $f$ -электроны, для которых атомные  $\psi$ -функции не сферически симметричны, а имеют вытянутые лепестки. Ионная связь возникает тогда, когда один из атомов имеет малую энергию ионизации, то есть легко теряет электрон, взаимодействуя с другим атомом, обладающим высоким сродством к электрону. Фактически атомы первого типа, например, натрий, отдают электроны второму типу атомов, например, хлору, и при этом образуются соответственно положительные и отрицательные ионы  $\text{Na}^+$  и  $\text{Cl}^-$ . Кулоновское притяжение между ними и создаёт ионную связь. Металлическая связь в кристаллах, в отличие от ковалентной, являет противоположный пример крайней делокализации связи. Электроны наружных оболочек ядра атомов под влиянием притяжения к ядрам соседних атомов получают возможность двигаться по всему кристаллу. Иначе говоря, электроны всех атомов обобществляются и, подобно газу, заполняют всё пространство между ионами. Благодаря притяжению коллективизированных электронов к ионам возникает иллюзия притяжения ионов друг к другу, подобно тому, как соперники в борьбе за сердце дамы вынуждены находиться в одной компании из-за притяжения к общему объекту внимания. Силы Ван-дер-Ваальса возникают из-за колебаний электронной оболочки как целого относительно ядра. Когда центр массы электронов смещён относительно ядра, то атом оказывается поляризованным, у него появляется электрический дипольный момент. В процессе колебания, разумеется, величина и знак момента непрерывно меняются, и всё же средняя по времени энергия взаимодействия дипольных моментов соседних атомов оказывается отрицательной, то есть возникает слабое притяжение.

Однако если сблизить атомы чрезмерно, притяжение между ними сменится отталкиванием. Причины отталкивания очень просты. Ядра атомов несут положительные заряды, поэтому они отталкиваются. Электроны, а значит и электронные оболочки, заряжены отрицательным электричеством, следовательно, тоже отталкиваются. Но существует ещё одна очень важная причина отталкивания. Электроны имеют спиновое число  $n_s = 1/2$ , а следовательно, подчиняются статистике Ферми. Это значит, что при заполнении уровней энергии в атомах на каждом уровне может находиться не более двух электронов, причём они должны различаться ориентацией спинового момента. Взаимопроникновение электронных оболочек соседних атомов создаёт недопустимую ситуацию, когда рядом находятся не два, а четыре электрона с одинаковыми энергиями. Поэтому два электрона переходят на более высокий уровень энергии, то есть приобретают более высокую кинетическую энергию. Отталкивание в данном случае как бы проявляется посредством роста кинетической энергии. (В деталях разберитесь самостоятельно.)

Притяжение или отталкивание удобно характеризовать с помощью потенциальной энергии атома, которую можно определить как работу, затра-

чиваемую на удаление атома из данной точки вблизи второго атома на бесконечность. При этом второй атом или группа атомов считаются неподвижными. В случае отталкивания направление силы и вектора перемещения совпадают. Работа положительна, потенциальная энергия тоже положительна. Схематично зависимость потенциала (потенциальной энергии) от расстояния между атомами приведена на рис. 170. Отталкивание действует на коротких расстояниях, поэтому график быстро падает до нуля. Потенциальная энергия притяжения, напротив, отрицательна, так как направления для силы притяжения и вектора перемещения на бесконечность антипараллельны. Притяжение проявляется на больших расстояниях, поэтому, во-первых, график для потенциальной энергии расположен в области отрицательных значений, а, во-вторых, затухание с расстоянием проявляется слабее. Говорят, что силы притяжения дальнего действия, тогда как силы отталкивания короткодействующие. Суммарная потенциальная энергия на малых расстояниях совпадает с потенциалом отталкивания, на больших — с потенциалом притяжения, а в промежуточной области её график имеет вид ямы. Эта «яма» играет особую роль в теории химической связи. Глубина ямы характеризует работу, которую нужно совершить, чтобы оторвать один атом от молекулы. Фактически она представляет энергию связи. При  $x' = a$  потенциальная энергия имеет минимум, а в точке минимума производная  $dV/dx'$  равна нулю. Но производная от потенциальной энергии представляет силу, которая действует на атом 2 со стороны атома 1:

$$f_{x'} = -\frac{\partial V}{\partial x'}. \quad (518)$$

Следовательно, точка  $x' = a$  является точкой равновесия, в которой суммарная сила равна нулю, то есть силы межатомного притяжения и отталкивания уравновешены. Величина  $a$  представляет равновесное межатомное расстояние. Полный график зависимости силы от расстояния показан на рис. 171. В окрестности точки  $x' = a$  или  $x = 0$  сила меняет свой знак. Если атом 2 расположен правее этой точки, то сила отрицательна, она «толкает» атом 2 влево, назад к  $x' = a$ . Но когда атом 2 находится левее рассматриваемой точки, то сила  $f_{x'}$  положительна, то есть направлена вдоль  $+x'$ . Она толкает атом 2 вправо к  $x' = a$ . Ситуация очень похожа на ту, в какой находится шарик, колеблющийся на пружине. Поэтому можно ожидать, что атом 2 будет совершать колебания около точки  $x' = a$ . Подчеркнём, что согласно третьему закону Ньютона о равенстве по модулю и противоположности по направлению сил действия и противодействия, на атом 1 действует такая же сила  $f_{x'}$ , но направленная в противоположном направлении. Поэтому атом 1 будет также совершать колебания около точки  $x' = 0$ .

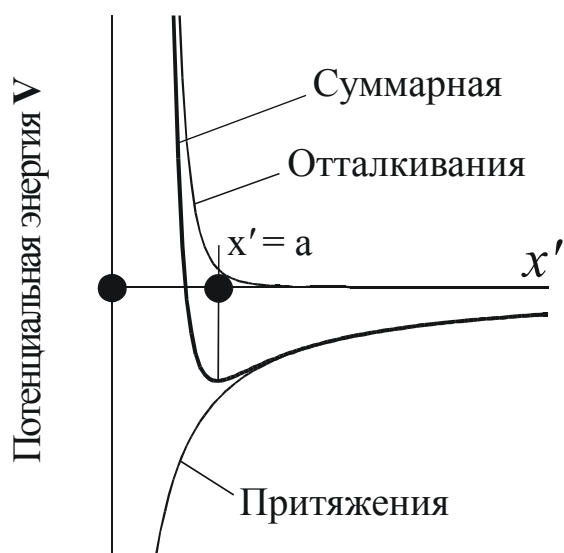


Рис. 170. Зависимость потенциальной энергии притяжения, отталкивания и суммарного взаимодействия соседних атомов от расстояния  $x'$  между ними

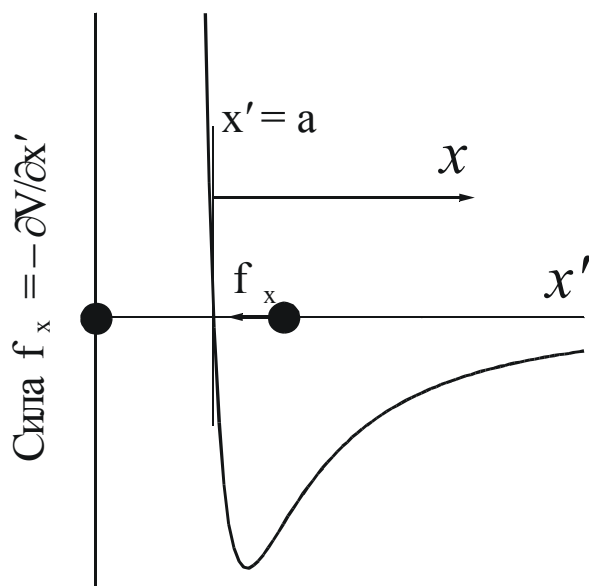


Рис. 171. Зависимость силы взаимодействия соседних атомов от расстояния  $x'$  между ними

Вернёмся к атому 2 и рассмотрим его поведение при малых отклонениях  $x = x' - a$  от точки равновесия. Так как  $x \ll a$ , то можно разложить функцию  $V(x')$  в ряд Тейлора по малому отклонению  $x$ :

$$V(x') = V(a) + \left. \frac{\partial V}{\partial x'} \right|_{x'=a} \cdot x + \frac{1}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2 V}{\partial (x')^2} \right|_{x'=a} \cdot x^2 + \dots, \quad (519)$$

но поскольку  $\left. \frac{\partial V}{\partial x'} \right|_{x=a'} = -f_{x'}(a) = 0$ , то второй член исчезает. Поэтому

$$V(x) = V(a) + \frac{k_{\text{упр}}}{2} \cdot x^2, \quad (520)$$

где  $k_{\text{упр}} = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial (x')^2} \right|_{x'=a}$  — есть константа, которую называют коэффициентом упругой силы. Соответственно для силы при малых  $x$  получим линейную зависимость

$$f_x = -\frac{\partial V}{\partial x} = -k_{\text{упр}} x. \quad (521)$$

Существование такой линейности около  $x' = a$  заметно и по рис. 171. График  $f_x(x')$  в окрестностях  $x' = a$  прямолинеен, он пересекает ось  $x'$  в точке  $x' = a$ . Нарушения линейности проявляются при больших отклонениях влево или вправо относительно  $x' = a$ . Заметим, что оси  $x'$  и  $x$  совпадают, а координаты отличаются на постоянное число. Поэтому подстрочный индекс  $x'$  далее будем заменять на  $x$ .

Используем второй закон Ньютона  $m\ddot{x} = f_x$  и найдём дифференциальное уравнение движения:

$$\ddot{x} + \frac{k_{\text{упр}}}{m} \cdot x = 0, \quad (522)$$

где  $\ddot{x}$  — ускорение атома, то есть вторая производная от координаты по времени. Решение этого уравнения многократно встречалось в курсах математики и физики. Оно представляет функцию гармонических колебаний:

$$x = A \sin \omega t, \quad (523)$$

где  $\omega = \sqrt{k_{\text{упр}}/m}$  — есть циклическая частота колебаний, связанная простым соотношением с частотой  $\nu$  периодических колебаний:

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{k_{\text{упр}}/m} \quad (524)$$

Покажем, что коэффициент  $k_{\text{упр}}$  может быть выражен через модуль упругости. Рассмотрим два атомных слоя, которые растягиваются напряжением  $\sigma$  (см. рис. 50, глава 4). Будем считать, что осью образца является ось  $x'$ . Выделим из этих слоёв одну элементарную ячейку. По обеим граням ячейки действует вдоль оси  $x'$  растягивающие усилия  $\sigma a^2$ , они стремятся разорвать, как кажется, четыре межатомных связи, действующие вдоль четырёх рёбер, параллельных  $x'$  (рис. 172). На самом деле усилию  $\sigma a^2$  противостоит одна связь, и вот почему. По ребру куба соединяются четыре ячейки, следовательно, каждое ребро принадлежит кубу на  $1/4$  часть. Из четырёх рёбер ячейке принадлежит только одно. Мы выберем то, которое лежит на оси  $x'$ . Итак, пара атомов, исходно находящихся в равновесии, растягивается усилием  $\sigma a^2$ . Допустим, что расстояние между атомами увеличивается на величину  $x$ , тогда согласно рис. 172 или выражению (521) возникает сила  $f_x$ , направленная в противоположном направлении. Новое равновесие

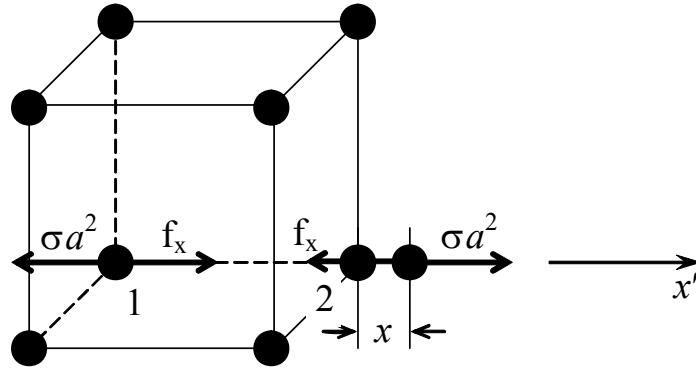


Рис. 172. Схема равновесия сил при растяжении элементарной ячейки

будет достигнуто, если  $f_x + \sigma a^2 = 0$ , то есть сумма проекций сил на любую ось (здесь  $x'$ ) окажется равной нулю. Следовательно, при равновесии

$$\sigma = -\frac{f_x}{a^2} = +\sigma_{\text{хим}}. \quad (525)$$

Величину  $-f_x/a^2$  следует по смыслу назвать химическим напряжением, так как это напряжение создаётся силами химической связи. Будем считать, что  $x$  мало, тогда, используя выражение (521), получим

$$\sigma = \frac{k_{\text{упр}}}{a} \cdot \frac{x}{a}. \quad (526)$$

Но величина  $x/a$  есть относительное удлинение  $\varepsilon$ ; следовательно, по закону Гука,  $k_{\text{упр}}/a$  представляет собой модуль нормальной упругости  $E$ , а

$$k_{\text{упр}} = Ea. \quad (527)$$

Это выражение позволяет найти связь частоты колебаний атомов и модуля упругости:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{Ea}{m}}. \quad (528)$$

Оценим численно частоту колебаний атомов для типичного металла — меди. Модуль упругости  $E = 1,2 \cdot 10^{11}$  Па, параметр решётки  $a = 3,6 \cdot 10^{-10}$  м, масса атома может быть рассчитана через атомную массу  $A = 63,5$  г =  $63,5 \cdot 10^{-3}$  кг и число Авогадро  $6,022 \cdot 10^{23}$  атомов/моль:

$m = \frac{63,5 \cdot 10^{-3}}{6,022 \cdot 10^{23}} = 10,5 \cdot 10^{-26}$  г. Находим частоту:

$$\nu = \frac{1}{6,28} \sqrt{\frac{1,2 \cdot 10^{11} \cdot 3,6 \cdot 10^{-10}}{10,5 \cdot 10^{-26}}} = 3,2 \cdot 10^{12} \text{ Гц}. \quad (529)$$



Таким образом, каждый атом меди совершает за одну секунду три триллиона колебаний, причём частота колебаний слабо изменяется при повышении температуры — лишь под влиянием температурного уменьшения модуля  $E$ . Уже отмечено, что колебания данного атома неизбежно вызывают колебания соседнего атома, тот следующего и так далее. Все атомы в решётке в отсутствие внешней нагрузки должны колебаться в узлах кристаллической решётки примерно с постоянной частотой. Эти колебания представляют невидимое внутреннее движение атомов, суммарную энергию которого мы уподобляем теплоте. Если мы прикоснулись рукой к горячему металлу и получили ожог, то физически это означает, что атомы в металле колеблются более энергично, а при контакте с атомами руки «толкают» их, заставляя колебаться более энергично, и передают часть своей энергии, как это делает солнце с помощью квантов света. Мы говорим в таком случае о переходе теплоты от металла к руке.

Полную энергию  $\varepsilon$  колеблющегося в одном направлении атома можно рассчитать как сумму кинетической  $(m\dot{x}^2/2)$  и потенциальной  $(k_y x^2/2)$  энергий. Поскольку  $x = A \sin \omega t$ , то  $\dot{x} = A\omega \cos \omega t$ . Следовательно,

$$\varepsilon = \frac{A^2 \omega^2}{2} \cdot m(\cos^2 \omega t + \sin^2 \omega t) = \frac{A^2}{2} \cdot \omega^2 m, \quad (530)$$

ибо величина в скобках равна единице. В классической термодинамике доказано, что на одну степень свободы движения приходится тепловая энергия  $kT$ , где  $k = 8,616 \cdot 10^{-5}$  эВ/К — константа Больцмана. Приравняв  $\varepsilon$  и  $kT$ , получим выражение для амплитуды колебаний:

$$A = \left( \frac{2kT}{\omega^2 m} \right)^{1/2}, \quad (531)$$

то есть амплитуда колебаний (а не частота!) существенно возрастает при увеличении температуры. В квантовой физике установлена важная особенность колебаний атомов: их полная энергия не может принимать произвольные значения, а изменяется дискретно с шагом, равным  $h\nu$  (где  $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$  Дж·с =  $4,140 \cdot 10^{-15}$  эВ·с представляет постоянную Планка). Для меди, например, у которой  $\nu = 3,2 \cdot 10^{12}$  с<sup>-1</sup>, шаг изменения энергии  $h\nu = 0,0132$  эВ. Тепловая энергия  $kT$  равна 0,0132 эВ для  $T = 154$  К, то есть при нагревании до этой температуры энергия колеблющегося атома изменяться почти не должна.

Точный расчёт средней энергии каждого из независимо колеблющихся с одинаковой частотой  $\nu$  атомов (приближение Эйнштейна) можно сделать, используя распределение Больцмана (36). Средняя энергия атома рассчитывается как математическое ожидание случайной величины — энергии атома  $\varepsilon_p$ , которая с определённой вероятностью  $W(\varepsilon_p)$  может принимать значения  $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots$ :

$$\bar{\varepsilon} = \sum W \varepsilon_p = \frac{\sum_{p=0}^{\infty} \varepsilon_p \exp\left(-\frac{\varepsilon_p}{kT}\right)}{\sum_{p=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_p}{kT}\right)}. \quad (532)$$

Обратите внимание, что числитель этой формулы может быть получен дифференцированием знаменателя по  $(-1/kT)$ , поэтому

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\partial}{\partial(-1/kT)} \ln\left(\sum_{p=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_p}{kT}\right)\right). \quad (533)$$

Расчёт суммы

$$\sum_{p=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_p}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{h\nu}{2kT}\right) \cdot \left(1 + e^{-\frac{h\nu}{kT}} + e^{-\frac{2h\nu}{kT}} + \dots\right) \quad (534)$$

провести легко, так как ряд в скобках представляет бесконечно убывающую прогрессию со знаменателем  $q = \exp(-h\nu/kT)$ , сумма членов которой  $1/(1-q)$ . Итак,

$$\sum_{p=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_p}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{h\nu}{2kT}\right) \cdot \frac{1}{1 - \exp(-h\nu/kT)}. \quad (535)$$

После дифференцирования логарифма этой суммы найдём среднюю энергию атома:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{h\nu}{2} + \frac{h\nu}{\exp(h\nu/kT) - 1}. \quad (536)$$

Первое постоянное слагаемое отражает энергию так называемых нулевых колебаний. Оно сохраняется и при 0 К. Второе слагаемое зависит от температуры. При низких температурах, когда  $h\nu \gg kT$ , можно пренебречь единицей по сравнению с  $\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)$ , и тогда

$$\bar{\varepsilon} \approx \frac{h\nu}{2} + h\nu \exp\left(-\frac{h\nu}{kT}\right). \quad (537)$$

Действительно, вблизи 0 К повышение температуры почти не изменяет среднюю энергию атома. Но при повышенных температурах, порядка комнатной и выше, уже  $kT \gg h\nu$ , то есть  $\alpha = \frac{h\nu}{kT} \ll 1$ . Тогда в разложении экспоненты в ряд Тейлора  $e^{-\alpha} = 1 + \alpha + \dots$  можно ограничиться двумя членами, и

$$\bar{\varepsilon} = \frac{h\nu}{2} + \frac{h\nu}{1 - 1 + h\nu/kT} \approx kT. \quad (538)$$

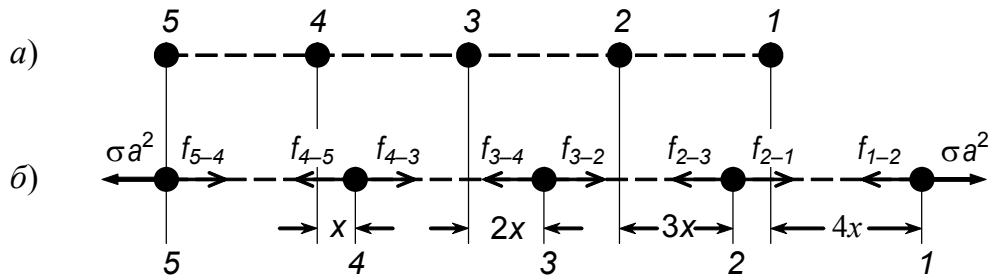


Рис. 173. Равновесие сил и удлинение при растяжении атомной цепочки:  
 а — цепочка без нагрузки; б — после приложения нагрузки

Мы получаем уже использованный выше результат классической термодинамики: на одну степень свободы колебаний атомов приходится тепловая энергия  $kT$ .

Рассмотрим далее на примере одного атомного ряда причину передачи механического напряжения вглубь (рис. 173). Приложим справа к атому 1 усилие  $\sigma a^2$ . Атом переместится вправо на расстояние  $x$  такое, чтобы возникла сила  $f_{1-2}$  притяжения к атому 2, уравнивающая внешнюю силу  $\sigma a^2$ :  $f_{1-2} = -\sigma a^2$ . Однако по третьему закону Ньютона на атом 2 будет действовать сила противодействия  $f_{2-1}$ , равная  $(-f_{1-2})$ . Поэтому атом 2 будет перемещаться вправо, а вместе с ним и атом 1, на такое расстояние  $x$ , чтобы возникающая сила  $f_{2-3}$  уравнивала  $f_{2-1}$ . Продолжая последовательность рассуждений, мы придём к выводу, что каждый атом отодвинется от соседа на одинаковое расстояние  $x$ , и между ними возникнет сила притяжения  $k_y x$ , одинаковая для каждой пары и равная  $\sigma a^2$ . С помощью сил межатомного притяжения механическое напряжение передаётся от крайних атомов вглубь цепочки.

### 9.3.2. Расчёт теоретической прочности кристаллов на отрыв

Вернёмся к рис. 172. Будем постепенно увеличивать напряжение  $\sigma$ , создаваемое внешней нагрузкой, до тех пор, пока не разорвётся химическая связь между атомами 1 и 2. Пока ещё разрушение не наступило, внешнее напряжение  $\sigma$  уравнивается химическим напряжением:

$$\sigma = \sigma_{\text{хим}}, \quad (539)$$

где  $\sigma_{\text{хим}} = -f_x/a^2$ . Зависимость  $\sigma_{\text{хим}}$  от расстояния  $x'$  или  $x$  между атомами 1 и 2 такая же (рис. 174), как и для силы  $-f_x$ , поскольку  $1/a^2$  есть постоянный коэффициент. Она очень похожа на полволны синусоиды. Э. Орован аппроксимировал эту зависимость выражением

$$\sigma_{\text{хим}} = \sigma_m \sin \frac{\pi x}{\lambda}, \quad (540)$$

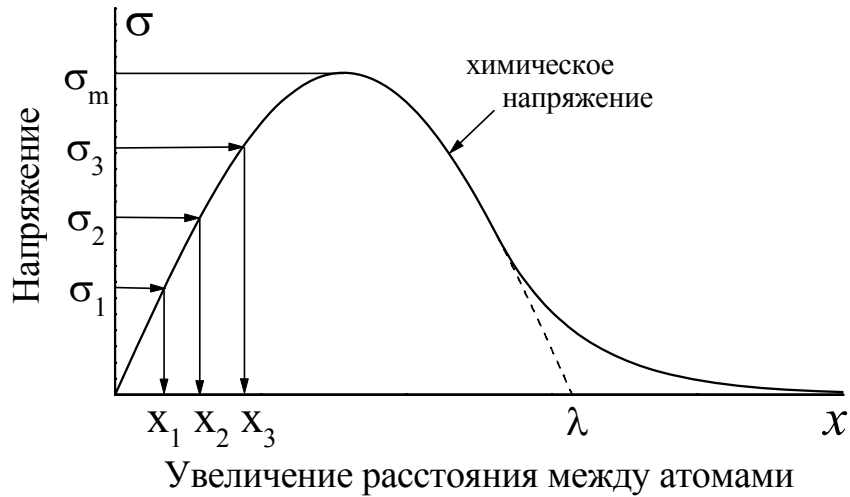


Рис. 174. Равновесие внешнего и химического напряжения и условия разрушения

где  $\sigma_m$  — наибольшее значение (амплитуда), а  $\lambda$  — величина смещения атома 2, при котором сила взаимодействия обращается в ноль. Но фактически вблизи  $x = \lambda$  эта аппроксимация неточна (см. рис. 174), поэтому  $\lambda$  приходится рассматривать как неизвестный параметр.

Допустим, что внешнее напряжение оказалось равным  $\sigma_1$ ; проведём горизонталь через это значение на оси ординат. Она пересекает график зависимости  $\sigma_{\text{хим}}$  от  $x$  в точке  $x_1$ . Следовательно, атом 2 должен сместиться вправо на  $x_1$ , и тогда химическое и внешнее напряжения уравновесят друг друга. Повысим напряжение до  $\sigma_2$ ; теперь уравнивание напряжений произойдёт при  $x = x_2$ . Для  $\sigma_3$  — при  $x = x_3$ . Но если внешнее напряжение больше  $\sigma_m$ , равновесие станет невозможным для любых  $x$ , то есть твёрдое тело неизбежно должно разрушиться. Следовательно, величина  $\sigma_m$  и представляет теоретическую прочность на отрыв  $\sigma_{\text{отр}}^T = \sigma_m$ . Итак, необходимо вычислить  $\sigma_m$ .

Перепишем уравнение (539) в виде

$$\sigma = \sigma_m \sin \frac{\pi x}{\lambda} \quad (541)$$

и будем рассматривать малые значения  $x$ . Синус малого аргумента примерно равен самому аргументу. Поэтому

$$\sigma \approx \sigma_m \frac{\pi x}{\lambda} = \sigma_m \frac{\pi a}{\lambda} \cdot \frac{x}{a}. \quad (542)$$

Отношение  $x/a$  представляет относительное удлинение  $\varepsilon$ , которое связано с напряжением через модуль нормальной упругости ( $\sigma = E\varepsilon$ ). Следовательно,

$$\sigma_m \frac{\pi a}{\lambda} = E. \quad (543)$$

В полученное уравнение входят две неизвестные:  $\sigma_m$  и  $\lambda$ . Нужно ещё одно уравнение. Орован обратил внимание, что интеграл

$$\int_0^\lambda \sigma dx = \int_0^\lambda \sigma_m \sin \frac{\pi x}{\lambda} dx = -\sigma_m \frac{\lambda}{\pi} \cdot \cos \frac{\pi x}{\lambda} \Big|_0^\lambda = 2\sigma_m \frac{\lambda}{\pi} \quad (544)$$

представляет работу разрушения, совершённую источником напряжений (разрывной машиной) в расчёте на единицу площади. Возник вопрос: в какие виды энергии переходит эта работа? В кинетическую энергию обломков? В тепловую энергию, в электрическую энергию, в энергию звука? Сделанные за сто лет инженерные измерения неопровержимо показали, что в эти виды энергии переходит не более 5 % освобождающейся упругой энергии. Стало ясным, что основные затраты энергии связаны с формированием двух свежих поверхностей, которые обладают поверхностной энергией. Обозначим через  $\gamma$  избыточную энергию единицы площади поверхности, иначе её называют поверхностным натяжением, и приравняем:

$$2\sigma_m \frac{\lambda}{\pi} = 2\gamma. \quad (545)$$

Двойка справа учитывает образование двух поверхностей разрушения. Выразив из этого соотношения  $\lambda$ :

$$\lambda = \frac{\pi\gamma}{\sigma_m} \quad (546)$$

и подставив в (543), найдём  $\sigma_m$ :

$$\sigma_m = \sigma_{отр}^T = \sqrt{\frac{E\gamma}{a}}. \quad (547)$$

Таким образом, мы получили вслед за Орованом основную формулу теоретической прочности на отрыв. Среди величин, через которые выражается  $\sigma_{отр}^T$ , с наименьшей точностью измеряется поверхностная энергия твёрдых тел. Поверхностная энергия обусловлена тем простым обстоятельством, что атомный слой, граничащий с вакуумом, «утерял» аналогичные соседние слои, с которыми бы он взаимодействовал, если бы находился в объёме. По этой причине равновесные межатомные расстояния на поверхности оказываются слегка больше, чем в объёме, как если бы некие усилия по линии контура растягивали ограниченную им поверхность. Такие усилия именуются поверхностным натяжением и имеют размерность Н/м. Но если умножить числитель и знаменатель на 1 м, то получается размерность Дж/м<sup>2</sup>, характеризующая избыточную энергию единицы поверхности. В этих единицах та же величина интерпретируется как поверхностная энергия  $\gamma$  — избыточная энергия единицы площади крайнего слоя. Фактически поверхностная энергия и упругость обусловлены одинаковыми силами межатомного взаимодействия. Логично предполагать пропорциональность между  $\gamma$  и модулем упругости.

В табл. 19 приведены более или менее надёжные литературные данные о величине  $\gamma$ . Для большой группы металлов действительно выполняется соотношение

$$\gamma \approx \frac{Ea}{40}, \quad (548)$$

хотя для алмаза и каменной соли наблюдаются сильные отклонения от этого выражения, возможно, обусловленные большим числом атомов, входящих в элементарную ячейку. Если использовать эту зависимость для металлов, то формула для теоретической прочности на отрыв предельно упрощается:

$$\sigma_m = \sigma_{отр}^T = 0,156E. \quad (549)$$

Несложно вычислить упругую деформацию, при которой происходит разрушение. Наивысшее химическое напряжение, согласно (540), соответствует  $x = \lambda/2$ . Следовательно,

$$\varepsilon_{\max} = \frac{\lambda}{2a} = \frac{\pi\gamma}{2a\sigma_m} = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{\gamma}{Ea}} = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{1}{40}} = 0,24 \text{ (24 \%)}. \quad (550)$$

Теоретические значения напряжений отрыва в табл. 20 сравниваются с действительными. Близкого согласия нет ни в одном случае. Для металлов технической чистоты теоретическая прочность в сто раз выше, чем действительная. Влияние степени очистки от примесей иллюстрируют данные для железа. По мере роста степени очистки, то есть по мере того как железо приближается к очищенному истинно железу, предел прочности  $\sigma_v$  уменьшается, так что различие между  $\sigma_{отр}^T$  и  $\sigma_v$  достигает трёх порядков.

Таблица 19

Модули упругости, параметры решётки и поверхностные энергии кристаллов

Вещество	Модуль упругости		Поверхностная энергия $\gamma$ , Дж/м <sup>2</sup>	Параметр решётки $a$ , 10 <sup>-10</sup> м*	$Ea/\gamma$
	в кристаллографическом направлении	$E$ , 10 <sup>10</sup> Па			
Ag	<111>	12,1	1,13	4,086	43,7
Au	<111>	11,0	1,35	4,079	33,0
Cu	<111>	19,2	1,65	3,615	42,0
W	<100>	39,0	3,0	3,165	41,1
$\alpha$ -Fe	<100>	26,0	2,0	2,866	37,2
Mo	<100>	33,6	2,6	3,147	40,7
C (графит)	<0001>	0,49	0,07	6,708	46,9
C (алмаз)	<111>	121,0	5,4	3,566	80,0
Zn	<0001>	3,5	0,4	4,947	43,2
NaCl	<100>	4,4	0,15	5,640	165,4
В среднем					40,9

Сравнение теоретической и реальной прочности металлов

Металл	$\sigma_{\text{отр}}^T$ , МПа	$\sigma_{\text{в}}^{\text{экспер}}$ , МПа	$\sigma_{\text{в}}^{\text{экспер}} / \sigma_{\text{отр}}^T$
Cu	30000	220	0,007
Au	17200	150	0,009
Ag	18900	180	0,01
Zn	5460	130	0,02
W	60840	1050	0,02
Pt	26500	190	0,007
Fe (0,04 %C)	40600	240	0,006
Fe (0,001 %C)	40600	120	0,003
Fe ( $10^{-7}$ % примесей)	40600	60	0,001
Fe (нитевидные кристаллы)	40600	13300	0,33

Единственным материалом, прочность которого всего в три раза меньше теоретической, являются нитевидные кристаллы железа и других материалов («усы»), о которых говорилось в разделе 5.3. Подобные усы диаметром  $\sim 1$  мкм не имеют дефектов решётки и именно поэтому обладают исключительной прочностью.

Дополнение. Когда было проведено сравнение теоретической и реальной прочности металлов, появились статьи, в которых теория Орована резко критиковалась за использование аппроксимации (540) для химического напряжения, а окончательный результат (547) поставлен под сомнение. Поэтому учёные вновь вернулись к проблеме прочности, но начали придавать потенциальной энергии притяжения и отталкивания более определённый функциональный вид. В частности, для полного потенциала ковалентных кристаллов (алмаз, кремний) использовалась функция Морзе:

$$U = U_0 \left( \exp[-2\beta(x' - a)] - 2 \exp[-\beta(x' - a)] \right), \quad (551)$$

где  $U_0$  — энергия связи, а  $\beta$  — константа, которую можно найти по данным о межатомном расстоянии. Для ионных кристаллов типа NaCl, KCl и т.п. использовали потенциал Борна:

$$U = \pm \frac{e^2}{r} + \frac{A}{r^9}, \quad (552)$$

где  $A$  — константа, определяемая подобно  $\beta$ , а  $r = x'$  — координата. Для металлов использовался потенциал Леннарда – Джонса:

$$U(r) = U_0 \frac{mn}{n-m} \left[ -\frac{1}{m} \left( \frac{r_0}{r} \right)^m + \frac{1}{n} \left( \frac{r_0}{r} \right)^n \right], \quad (553)$$

где  $m = 6$ ,  $n = 12$ , а  $r_0$  — равновесное расстояние.

Зависимость сил от расстояния  $r$  получается строгим дифференцированием функции потенциальной энергии по координате, а максимум силы (химического напряжения) соответствует точке, в которой  $\frac{d^2U}{dr^2} = 0$ . Проведённые расчёты подтвердили правильность результата Орована. Интересно, что для потенциала Леннарда–Джонса коэффициент пропорциональности между  $\sigma_{\text{отр}}^T$  и модулем  $E$  оказался равным  $0,16E$ , а максимальная деформация 25 %, точно как у Орована.

К настоящему моменту стало общепризнанным, что расхождение теоретической и реальной прочности обусловлено не погрешностями расчётов Орована.

## **9.4. ТЕОРИЯ ПРОЧНОСТИ РЕАЛЬНЫХ ТВЁРДЫХ ТЕЛ ПО ГРИФФИТСУ**

### **9.4.1. Роль микротрещин в разрушении**

Чем же объясняется столь резкое различие между теоретической и технической, то есть реальной прочностью? Акад. А.Ф. Иоффе выполнил в 1920–24 гг. удивительно простые опыты, ответившие на этот вопрос. Берётся кристалл природной поваренной соли  $\text{NaCl}$ , из которого вытачивают образцы для испытаний на разрыв. Измеряют прочность на разрыв, как правило, равную 3...4 МПа. Затем образцы погружают в горячую воду, в которой растворяется поверхностный слой на некоторую глубину, и вновь измеряют прочность кристалла. На этот раз она оказывается намного более высокой, порядка 1600 МПа, что лишь в 2,5 раза ниже теоретической. Лишившись поверхностного слоя, кристалл освободился от многочисленных ран — щербин и царапин, трещин и других более мелких поверхностных дефектов. Именно они и являлись началом преждевременного разрушения. Примерно в это же время английский учёный-механик из авиационного исследовательского центра в Фарнборо А.А. Гриффитс изучал прочность свежевытянутых стеклянных волокон при последовательном уменьшении их диаметра и установил, что с уменьшением диаметра прочность резко возрастает (рис. 175) и приближается к теоретическому уровню.

Резкое отличие прочности подавляющего большинства реальных твёрдых тел от теоретической Гриффитс объяснил присутствием в них трещин, может быть и невидимых, но значительно превышающих по размеру межатомные расстояния. Независимо от того, изготовлены ли вещества искусственно по определённой технологии, или технологией управляла Природа, микротрещины могут быть названы технологическими, обусловленными неравновесным изменением управляющих параметров (температуры,



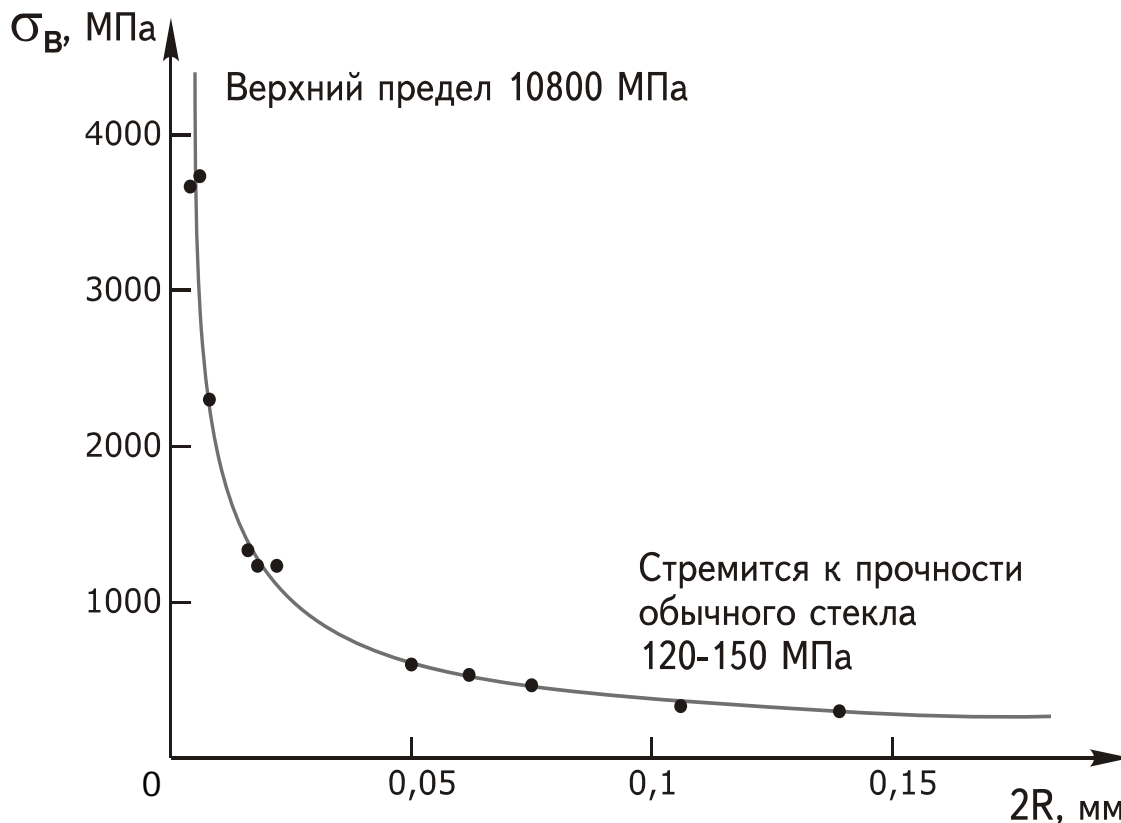


Рис. 175. Зависимость прочности стеклянных нитей от их диаметра по А. Гриффитсу

давления, концентрации) или механическими повреждениями при царапании, шлифовке, точении и т.п. Чем ближе технологические процессы к равновесию, тем меньше вероятность появления трещин. В частности, уменьшение диаметра стеклянных волокон приводит к снижению температурных напряжений после кристаллизации.

Однако приближение условий получения веществ к равновесным требует резкого увеличения длительности всех операций и, следовательно, приведёт к снижению производительности. Ясно, что существуют экономические ограничения. Тем не менее, на любой операции следует стремиться получить совершенную структуру кристалла без микротрещин и остаточных напряжений.

#### 9.4.2. Теория разрушения

Чтобы проиллюстрировать роль трещин в разрушении, Гриффитс провёл следующий расчёт. Предположим, что в середине плиты бесконечной ширины, растягиваемой вдоль оси  $x$  постоянным (на бесконечности) напряжением  $\sigma$ , возникла сквозная трещина длиной  $2l$  (рис. 176).

Важно понимать, что на самой поверхности трещины нормальных напряжений быть не может, так как атомы поверхностного слоя не имеют соседей в направлении  $x$  и не создают химической связи в этом направлении, а потому не могут находиться в напряжённом состоянии.

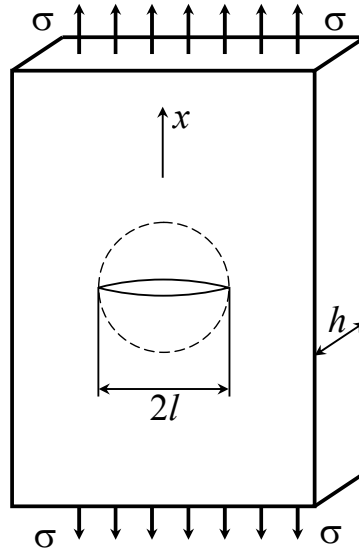


Рис. 176. К теории роста трещины

По мере удаления вдоль  $x$  от поверхности разрушения напряжение  $\sigma_x$  увеличивается и вдали достигает общего постоянного уровня  $\sigma$ . Это изменение проходит, конечно, плавно. Основываясь на приближённых оценках, Гриффитс принял, что внутри круга с радиусом  $l$  напряжения тоже равны нулю, а вне круга они постоянны. Тем самым область релаксации напряжений у поверхности трещины он сделал резко выраженной, но, по-видимому, это не сказалось на результатах оценки.

При одноосном напряжённом состоянии упругая энергия единицы объёма есть  $\frac{\sigma^2}{2E}$  — убедиться в этом очень просто. Если растягивающее усилие  $P = \sigma F_0$ , где  $F_0$  — площадь поперечного сечения, а  $dx$  — перемещение верхнего

захвата машины, то работа деформации  $A = \int_0^x P dx = F_0 \int_0^x \sigma dx = F_0 l_0 \int_0^x \sigma \frac{dx}{l_0} =$

$= F_0 l_0 \int_0^\varepsilon \sigma \frac{d\varepsilon}{E} = F_0 l_0 \frac{\sigma^2}{2E}$ , где  $l_0$  — длина, а  $F_0 l_0$  — объём образца (учтите, что от-

носительная деформация  $\varepsilon = x/l_0$  связана с напряжением законом Гука  $\varepsilon = \sigma/E$ ); эта работа и переходит в упругую энергию образца. Объём диска с радиусом  $l$  и толщиной  $h$  равен  $\pi l^2 h$ . Следовательно, появление трещины при-

водит к уменьшению упругой энергии на  $\frac{\sigma^2}{2E} \cdot \pi l^2 h$ . Однако края трещины обладают поверхностной энергией  $\gamma$  в расчёте на единицу площади. Поэтому полное изменение энергии плиты  $\Delta U$  при образовании трещины составит

$$\Delta U = -\frac{\sigma^2}{2E} \cdot \pi l^2 h + 2 \cdot 2lh \cdot \gamma. \quad (554)$$

Как известно, при малых  $l \ll 1$  величина  $l^2$  меньше  $l$ . Сравните: если  $l = 0,1$ , то  $l^2 = 0,01$ , но если  $l = 10$ , то  $l^2 = 100$ . Следовательно, при малых  $l$  основной вклад в  $\Delta U$  даёт второе слагаемое; при больших  $l \gg 1$  определяющим оказывается первое отрицательное слагаемое. Поэтому график функции  $\Delta U(l)$  проходит через максимум и уходит в область отрицательных значений (рис. 177).

Размер  $l^*$ , соответствующий максимуму, будем называть критическим размером трещины. Для определения  $l^*$  продифференцируем выражение (554) по  $l$ :

$$\frac{d(\Delta E)}{dl} = -\frac{\sigma^2}{E} \pi h l + 4h\gamma \quad (555)$$

и, приравняв нулю производную, найдём

$$l^* = \frac{4}{\pi} \cdot \frac{\gamma E}{\sigma^2}; \quad (556a)$$

$$\sigma = \left(\frac{4}{\pi}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{\gamma E}{l^*}} \quad (556b)$$

Формула (556a) определяет критический размер трещины при данном напряжении, а (556b) — напряжение, при котором размер трещины  $l^*$  оказывается критическим.

Соответственно, если вместо  $l^*$  использовать технологический размер трещин, уже существующих в хрупком теле, то формула

$$\sigma_p = \sigma_{отр} = \left(\frac{4}{\pi}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{\gamma E}{l_{техн}}} \quad (557)$$

определяет разрушающее для образца напряжение.



Рис. 177. Изменение энергии стеклянной пластины толщиной  $h = 1$  мм, растягиваемой напряжением  $\sigma = 100$  МПа, при образовании в ней сквозной поперечной трещины длиной  $2l$

В идеальной бездефектной решётке соседние атомы находятся на расстоянии порядка параметра решётки. Если считать, что это расстояние играет роль длины трещины и принять  $l_{\text{техн}} \approx a$ , то формула (557) приобретает смысл теоретической прочности на отрыв и фактически совпадает с (547). Можно заключить, что отношение теоретической и реальной прочности равно отношению  $\sqrt{\frac{l_{\text{техн}}}{a}}$ . Чем менее совершенен кристалл, и чем длиннее микротрещины в нём, тем ниже реальная прочность кристалла.

Проверить точность теории Гриффитса можно двумя способами. Если известна реальная прочность кристалла, то можно вычислить ожидаемый размер технологических трещин, а затем сравнить его с размерами наблюдаемых трещин. Можно поступить иначе: нанести алмазом или лазерным лучом сквозные надрезы определённой длины на стекле и измерить, при каком напряжении растяжения произойдёт разрушение стеклянной пластины. Вторым способом проверки убедительно подтвердил приемлемость теории Гриффитса для хрупких материалов, таких как стекло, мрамор, кость, кварц, пластмассы и т.д.

У стекла модуль  $E = 7 \cdot 10^{10}$  Па, поверхностная энергия  $\gamma = 0,5$  Дж/м<sup>2</sup>. Для того, чтобы  $\sigma_{\text{отр}}$  было равным 150 МПа, размер критической трещины по выражению (556а)

$$l^* = \frac{4}{\pi} \cdot \frac{0,5 \cdot 7 \cdot 10^{10}}{(1,5 \cdot 10^8)^2} = 2 \cdot 10^{-6} \text{ м} = 2 \text{ мкм.} \quad (558)$$

При увеличении в 1000 раз с помощью оптического микроскопа такие трещины имели бы длину 2 мм, но заметить их в прозрачном материале крайне трудно. Однако в 1950–60-х годах научились декорировать трещины путём осаждения на поверхность стекла натрия из пара. Атомы натрия оседали как правило на микротрещинах, благодаря чему последние становились видимыми. Микротрещины, существование которых постулировано Гриффитсом, действительно были обнаружены. Часть трещин имели механическую природу. Достаточно самого лёгкого прикосновения к стеклу, чтобы создать на поверхности «образцовые» трещины поперёк царапин. Лишь в очень редких случаях стекло оберегается от подобных прикосновений с самого момента его изготовления из расплавленной стекло-массы. Вторая и более важная причина микрорастрескивания обусловлена началом кристаллизации в основном аморфного стекла. Кристаллизация медленно проходит и при комнатной температуре, вследствие чего, например, античные вазы дошли до нас мутными в расстеклованном состоянии. Но и в процессе охлаждения из жидкого состояния расстеклование (кристаллизация) проходит тем в большей мере, чем толще изделие. Микротрещины возникают благодаря усадке при кристаллизации и расположены в основном на поверхности. Когда Гриффитс вытягивал стеклянные нити

диаметром  $2,5 \cdot 10^{-3}$  мм, ему удалось полностью подавить расстекловывание, но при увеличении диаметра оно происходило, и прочность стекла снижалась (рис. 175). Измерение длины трещин с помощью декорирования атомами натрия в этом случае подтвердило правоту теории Гриффитса.

Фактически Гриффитс доказал, что независимо от того, создаёт ли вещество Природа или человек по определённой технологии, в материале возникают технологические трещинки, обусловленные градиентом температуры, давления и концентрации. Трещинки могут быть невидимыми и проявляться только в условиях, когда к детали прикладывают механические усилия. Трещины длиной  $l_{\text{техн}}$  неподвижны, пока растягивающее напряжение не достигнет величины  $\sigma_p$ , определённой выражением (557), после чего начинают расти, вызывая хрупкое разрушение.

### 9.4.3. Роль поверхностной энергии в разрушении

Во всех формулах этого раздела фигурирует поверхностная энергия, которую мы неявно принимаем постоянной. Теперь приведём примеры ситуаций, когда уменьшение поверхностной энергии может стимулировать разрушение.

Профессор И.В. Обреимов ещё в 1930 году продемонстрировал, что напряжение скола слюды в воздухе и в вакууме существенно различается: он объяснил этот эффект уменьшением поверхностной энергии слюды в воздухе в результате адсорбции атомов газа на поверхностях трещины. Аналогичные эффекты при разрушении стекла в вакууме, воде, спирте обнаружил В.П. Берденников. Поверхностная энергия стекла, равная в вакууме  $1,2 \text{ Дж/м}^2$ , снижается в воде до значений порядка  $0,3 \text{ Дж/м}^2$ , что сопровождается уменьшением напряжения скола почти в 2 раза.

Влияние на поверхностную энергию скола могут оказывать примеси, содержащиеся в кристалле. Они могут увеличивать или уменьшать поверхностную энергию в зависимости от того, насколько прочно связаны в основной матрице молекулы этих примесей или от того, могут ли эти примеси адсорбироваться на внутренних поверхностях раздела.

Особый интерес для металлургов представляет влияние жидких металлов, смачивающих поверхность твёрдых металлов, на напряжение разрушения последних (В.И. Лихтман, Е.Д. Щукин, П.А. Ребиндер). Рассмотрим один из опытов, проведённых этими учёными. На плоский разрывной образец из цинка наносили каплю ртути массой около миллиграмма. Затем образец растягивали на горизонтальной разрывной машине. При достижении 70 МПа в месте контакта плоской поверхности с ртутью возникала трещина, которая в течение долей секунды впитывала в себя всю лежащую на поверхности ртуть и быстро росла в направлении, перпендикулярном оси нагружения, вызывая разрушение. Трещина проходила по границам

зерна — именно туда попадала и быстро растекалась, благодаря поверхностной диффузии, жидкая ртуть. Адсорбция ртути резко уменьшает поверхностное натяжение и тем самым активизирует разрушение. Предел прочности цинка в отсутствие ртути составлял 150 МПа. Аналогичное воздействие на прочность алюминия и цинка оказывают жидкие покрытия ртутью, оловом, галлием.

Профессор М.В. Якутович рассказывал в 1950-х годах студентам УрГУ об аварии самолёта, происшедшей в 30-х годах. Самолёт вёз в Грузию оборудование для метеорологической станции. Во время полёта тяжёлый ящик упал сверху и разбил содержащие ртуть приборы. Ртуть вытекла наружу, и началось её испарение; при комнатной температуре равновесное давление паров ртути составляет  $10^{-2}$  мм рт. ст. — после брома и йода ртуть является наиболее легко испаряющимся элементом. Пары ртути разлетелись по фюзеляжу, осаждаясь в холодных местах. Через 30 минут полёта хрупко разрушилась алюминиевая балка крыла, и одно крыло упало. Всё же самолёт благополучно приземлился. Авария была тщательно исследована. Выяснилось, что изломы на упавшем крыле и на самолёте покрыты тончайшим слоем ртути. Причина разрушения заключалась в следующем. Как и любая деталь, алюминиевая балка содержала технологические трещинки. Допустим, их длина есть  $l_{\text{техн}}$ . Безусловно, при  $\sigma_{\text{max}}$  — максимальном растягивающем напряжении изгиба балки, возникающем при полёте, критический размер гриффитсовской трещины  $l^* = \frac{4}{\pi} \cdot \frac{\gamma E}{\sigma_{\text{max}}^2}$  много

больше длины технологических трещин, как это показано на рис. 178.

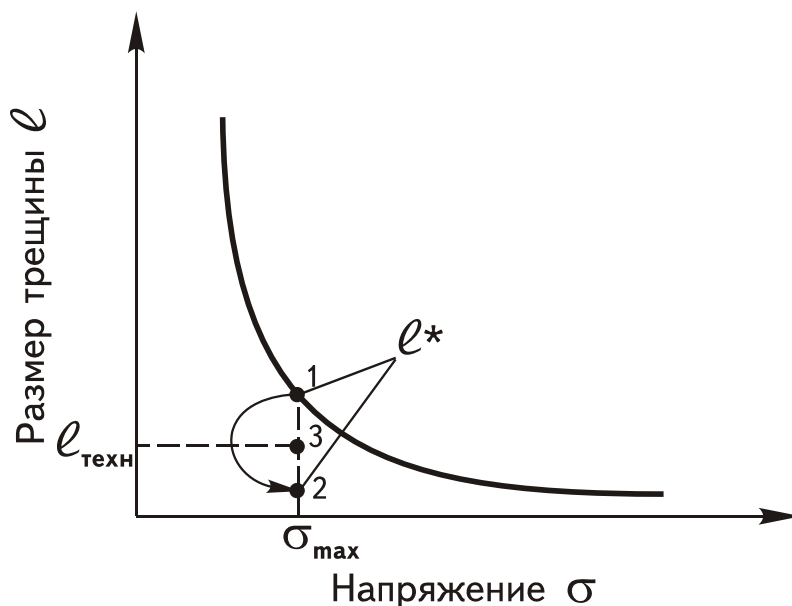


Рис. 178. Критический размер трещины в алюминиевой балке в отсутствие ртути (1) и при покрытии ртутью (2). Точка 3 определяет технологический размер трещины

Кривая на рис. 178 отражает зависимость  $l^*$  от напряжения согласно формуле (556a). Точка 1 определяет величину  $l^*$  для максимального напряжения  $\sigma_{\max}$ . Точка 3 соответствует технологическому размеру трещины. В отсутствие ртути ситуация была безопасной, так как при  $l^* \gg l_{\text{техн}}$  рост трещины невозможен. Когда же пары ртути сконденсировались на поверхности трещины, её поверхностное натяжение уменьшилось в десятки раз. Но согласно (556a) во столько же раз уменьшается и критический размер трещины. Его новое значение, отражённое на графике точкой 2, оказывается меньше, чем  $l_{\text{техн}}$ . Безопасная раньше трещина становится закритической, она растёт, вызывая разрушение. Со времени той аварии в авиации действует запрет на перевозки ртутьсодержащих приборов.

Отметим также эффект коррозионного растрескивания, который имеет сходную природу. Если детали, например, ротор и бандаж электрогенератора или фермы моста длительное время находятся под действием постоянных растягивающих усилий, то они могут разрушиться вследствие образования на поверхности и роста вглубь трещин, которые покрыты хрупкой плёнкой химических соединений. Практически все конструкционные сплавы и металлы технической чистоты подвержены коррозионному растрескиванию в определённых окружающих средах. Аустенитные стали на Fe–Cr–Ni основе весьма чувствительны к появлению в окружающей атмосфере ионов  $\text{Cl}^-$ , углеродистые стали — к ионам  $\text{NO}_3^-$  и  $\text{OH}^-$ . Титановый сплав, содержащий 8 %Al, 1 %Mo и 1 %V подвергается коррозионному растрескиванию под напряжением в растворах, содержащих ионы  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{I}^-$ , но растворы с  $\text{OH}^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{S}^{2-}$ ,  $\text{NO}_3^-$  не дают никакого эффекта. Латунь может разрушаться коррозионным растрескиванием под нагрузкой в атмосфере, содержащей хотя бы следы аммиака. Высокопрочные стали обнаруживают коррозионное растрескивание в спиртах, в воде, в атмосфере водорода и паров воды. Интересно, что кислород в атмосфере действует в противоположном направлении, задерживая рост образовавшейся микротрещины.

Законченной теории этого явления пока не создано, но несомненно, что коррозионное растрескивание включает, во-первых, процессы диффузии ионов к вершине трещины, а, во-вторых, адсорбцию, вероятно связанную с образованием плёнки химического соединения и приводящую к уменьшению поверхностной энергии. Технологические трещины становятся закритическими и медленно растут, так как процесс лимитируется диффузией ионов вдоль сформировавшейся поверхности трещины.

## 9.5. РАЗРУШЕНИЕ ТВЁРДЫХ ТЕЛ ПО ОРОВАНУ

### 9.5.1. Эффективная поверхностная энергия

Теория Гриффитса является, по существу, первой физической теорией прочности, которая может предсказать с достаточной точностью разрушающее напряжение для хрупких материалов, если известны размеры исходных или специально нанесённых трещин, а также поверхностная энергия и модуль упругости. Но для вязких материалов, в том числе металлов, теоретические результаты оказывались в несколько и даже в десятки раз ниже экспериментальных. Следовательно, теория Гриффитса для вязких материалов неприменима. Тем самым в теории разрушения появились новые проблемы, и потребовались новые идеи для их выяснения. Учёные обратили пристальное внимание на энергетику разрушения и изучение изломов. Наряду с изломами при растяжении были изучены также изломы образцов квадратного сечения при испытаниях на ударную вязкость. В последнем методе маятник-гильотина перерубает опёртый с двух краёв образец в сечении, на котором с противоположной стороны сделан U- или V-образный надрез. Если подвешенный на оси маятник длиной  $l_0$  отклонить на угол  $\alpha$  от вертикального направления, то есть поднять на высоту  $h_0 = l_0(1 - \cos \alpha)$ , то его потенциальная энергия будет равна  $mgh_0$ . Затем гильотина падает вниз по окружности, перерубает образец и отклоняется в другую сторону на угол  $\beta$  меньший, чем  $\alpha$ , из-за потерь энергии на разрушение. Если углы  $\alpha$  и  $\beta$  измерены, то работа разрушения  $A_p$  может быть точно рассчитана по разности потенциальных энергий:

$$A_p = mgl_0(\cos \alpha - \cos \beta). \quad (559)$$

Ударная вязкость представляет отношение работы разрушения к площади поперечного сечения образца  $A_p/F$ . В зависимости от формы надреза её обозначают  $KCV$  или  $KCU$ . Испытания на  $KCV$  считаются более жёсткими.

Хотя мы говорим, что маятник «перерубает» образец, но в действительности речь идёт об ударном изгибе. При изгибе образца наибольшие растягивающие напряжения возникают на поверхности грани, противоположной той, по которой производится удар. Угол отклонения гильотины подбирается таким, что величина напряжения, усиленная надрезом, заведомо превышает  $\sigma_v$ . Разрушение происходит в условиях растяжения, но при нагружении с большой скоростью и при воздействии концентратора напряжений. Наличие плоских граней у ударных образцов позволило изучить поведение микротвёрдости по мере приближения к поверхности излома (рис. 179, а). При  $-196^\circ\text{C}$  разрушение образцов стали 25 происходит хрупко. Ударная вязкость  $KCV$  составляет  $5 \text{ Дж/см}^2$ . Микротвёрдость на боковых гранях не изменяется вплоть до самой кромки разрушения. Иная



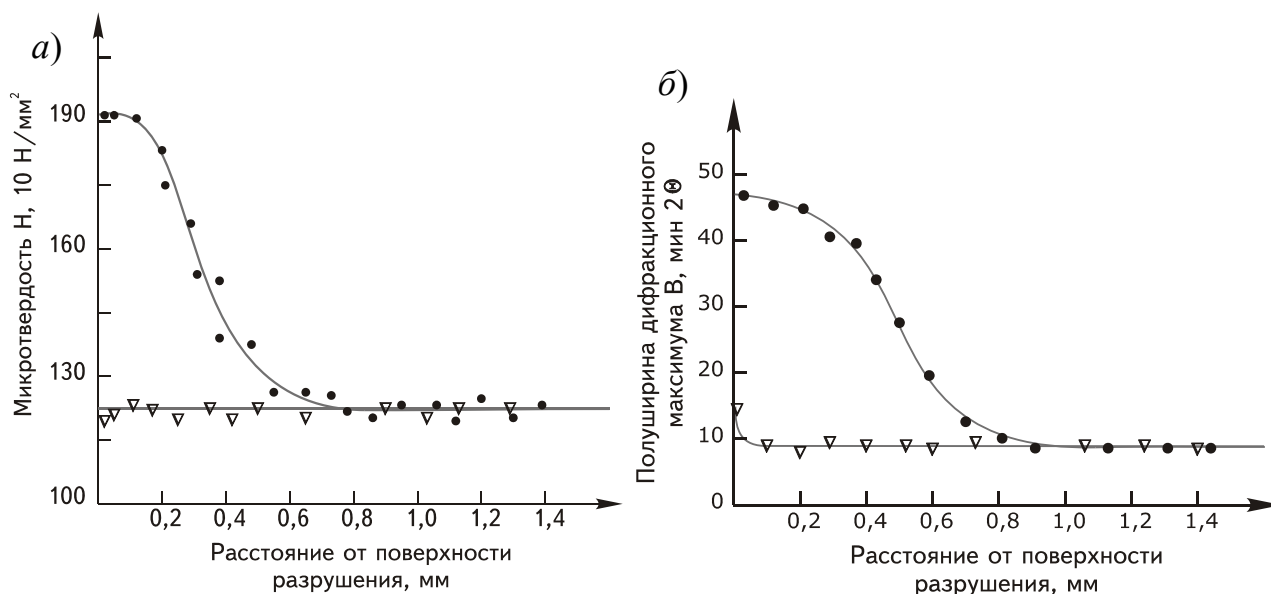


Рис. 179. Микротвёрдость (а) и ширина дифракционного максимума (211)  $\text{Cr } K_\alpha$  (б) образца стали 25 после закалки и высокого отпуска в зависимости от расстояния до поверхности разрушения. Температуры разрушения:  $+24$  (●) и  $-196$  °C (▼)

ситуация наблюдается в случае разрушения при  $+24$  °C. Ударная вязкость равна  $220 \text{ Дж/см}^2$ , а излом характеризуется как вязкий. Микротвёрдость на расстояниях от поверхности разрушения, больших 1 мм, имеет то же значение, что и в первом случае, так как измерения проводили при комнатной температуре. Но на расстоянии 0,5...0,6 мм начинается существенный подъём микротвёрдости, продолжающийся вплоть до самой поверхности излома. Повышение микротвёрдости имеет очевидную причину — пластическую деформацию, поскольку предварительная пластическая деформация, независимо от способа её осуществления, увеличивает твёрдость и прочность изделия. Поверхность разрушения как бы окаймлена пластически деформированным слоем толщиной 0,5 мм.

Обнаружить этот слой можно и иначе, с помощью рентгеновского дифрактометра. Допустим, что образец установлен в держатель образцов дифрактометра так, что излучение падает на поверхность излома. Зафиксируем на ленте потенциометра профиль дифракционного максимума (211) и измерим полуширину его. Затем проведём электрополировку образца со стороны излома в реактиве, состоящем из ортофосфорной кислоты, перекиси водорода и щавелевой кислоты, на глубину 0,03 мм, и вновь запишем дифрактограмму. Повторяя многократно растворение и запись дифрактограммы, можно построить зависимость ширины максимума от расстояния, подобную тем, что приведены на рис. 179, б. Отчётливо видно, что для образца, разрушенного при  $+24$  °C, слой толщиной 0,6 мм обладает уширенным дифракционным максимумом. Причиной уширения является микродеформация решётки, создаваемая пластической деформацией.

В случае хрупкого разрушения при  $-196\text{ }^{\circ}\text{C}$  деформированный слой почти не проявляется, хотя всё же заметно слабое уширение дифракционного максимума от самой поверхности разрушения. Толщина наклёпанного слоя, если он существует, менее  $0,02\text{ мм}$ . Подобные исследования позволили установить ещё одно существенное различие между вязким и хрупким изломами — существование пластически деформированного слоя около поверхности разрушения в первом случае и его слабую выраженность или отсутствие во втором. Венгерский физик Э. Орован обратил внимание, что при разрушении детали источник нагрузки, например, мотор разрывной машины, совершает работу не только на создание свежих поверхностей разрушения, но и на пластическую деформацию приповерхностных слоёв. Заключённая в этих слоях энергия деформации  $E_d$  пропорциональна площади поверхности разрушения  $F$ . Отношение

$$\gamma_{\text{пл}} = \frac{E_d}{F} \quad (560)$$

имеет смысл поверхностной энергии, обусловленной деформацией, а сумма

$$\gamma + \gamma_{\text{пл}} = \gamma_{\text{эфф}} \quad (561)$$

может быть названа эффективной поверхностной энергией.

### 9.5.2. Теория Орована

Идея Орована, известная сейчас как теория квазихрупкого разрушения, состояла в том, чтобы, сохранив основную формулу теории Гриффитса (557) для разрушающего напряжения  $\sigma_p$ , заменить в ней истинную поверхностную энергию  $\gamma$  на эффективную  $\gamma_{\text{эфф}}$ :

$$\sigma_p = \sqrt{\frac{4}{\pi} \cdot \frac{E\gamma_{\text{эфф}}}{l_{\text{техн}}}} = \sqrt{\frac{4}{\pi} \cdot \frac{E(\gamma + \gamma_{\text{пл}})}{l_{\text{техн}}}}. \quad (562)$$

Важно представлять соотношение  $\gamma$  и  $\gamma_{\text{пл}}$ . По оценкам Т. Ёкобори, для стали с  $0,2\text{ \% C}$  при вязком разрушении  $\gamma_{\text{пл}} \approx 2000\text{ Дж/м}^2$ , тогда как истинная поверхностная энергия  $\gamma$  имеет величину  $2\text{ Дж/м}^2$ , пренебрежимо малую по сравнению с  $\gamma_{\text{пл}}$ . Теперь становится ясной причина, по которой уравнение Гриффитса неприменимо к вязким материалам: поверхностная энергия  $\gamma$  отражает лишь малую долю расхода энергии на создание поверхности разрушения в таких материалах. При постепенном переходе от вязкого излома к хрупкому  $\gamma_{\text{эфф}}$  уменьшается, оказываясь равной  $\gamma$  для случая чисто хрупкого разрушения.

Уравнение Гриффитса – Орована (562) применимо для всех материалов независимо от характера их излома.

### 9.5.3. Дополнение к теории Орована

Орован получил формулу (562) несколько иным, чем изложено, способом, в котором была учтена концентрация напряжений в вершине трещины. Инженерам-металлургам необходимо понимать смысл термина «концентратор напряжения». Поэтому поучительно рассмотреть рассуждения Орована.

В XIX и XX веках кораблестроители столкнулись с многочисленными катастрофами судов с металлическими корпусами во время шторма. Между тем расчёты напряжений изгиба при самых неблагоприятных ситуациях, когда корабль, например, располагался симметрично на одном гребне волны или нос и киль корабля находились на соседних гребнях, давали результаты в четыре-пять раз ниже, чем предел прочности корабельной стали (380...460 МПа). Ситуация стала проясняться, когда в 1898 году немецкий механик Г. Кирш решил задачу об одноосном растяжении прямоугольной пластины с малым круговым отверстием (рис. 180, *а*) и обнаружил резкий пик напряжения  $\sigma_x$  ( $x$  — ось растяжения) в точках *A* вблизи выреза. Напряжение в три раза превышало среднее растягивающее напряжение. Стало понятно, почему трещины возникают около отверстий под заклёпки, с помощью которых соединяли листы металлической обшивки. Позднее русский математик Г.В. Колосов (1909 г.) и английский механик К. Инглис (1913 г.) независимо решили задачу о растяжении аналогичной пластинки с вырезом в форме эллипса, оси которого равны  $a$  и  $b$  (рис. 180, *б*). Оказалось, что наиболее опасные (пиковые) напряжения возникают в вершинах эллипса *A*:

$$\sigma_x = \left(1 + 2 \cdot \frac{a}{b}\right) \sigma_0, \quad (563)$$

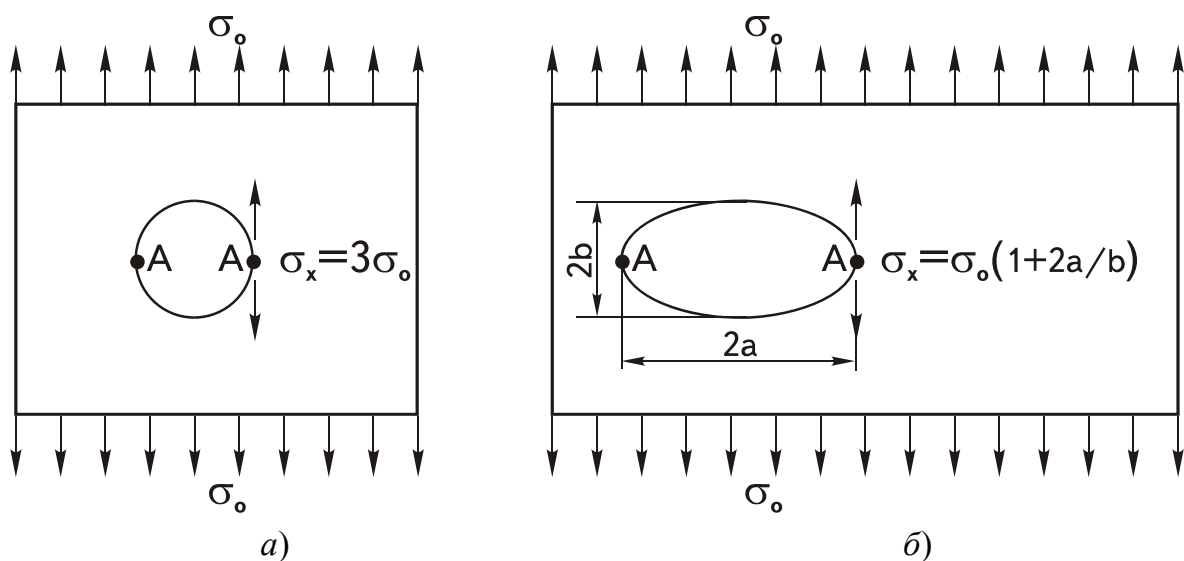


Рис. 180. Концентрация напряжений вблизи кругового (*а*) и эллиптического (*б*) выреза в пластине, растягиваемой вдаль от выреза однородным напряжением  $\sigma_0$

причём величина напряжения зависит от отношения осей  $a/b$ , то есть от кривизны отверстия. Если, например, отношение осей  $a/b = 4,5$ , то максимальные напряжения  $\sigma_x = (1 + 2 \cdot 4,5)\sigma_0 = 10\sigma_0$  в десять раз превосходят среднее напряжение  $\sigma_0$ . Радиус кривизны эллипса около точки  $A$  есит  $\rho = b^2/a$ , поэтому формуле (563) можно придать более общий вид:

$$\sigma_x^{\max} = (1 + 2\sqrt{l/\rho})\sigma_0 \approx 2\sigma_0\sqrt{l/\rho}, \quad (564)$$

что делает её применимой для любой формы выреза при радиусе кривизны  $\rho$  и полудлине  $l = a$ .

Именно это выражение использовал в своей теории Э. Орован для анализа роста тонких трещин. Минимальный радиус кривизны равен параметру решётки:  $\rho = a_0$ . Перед вершиной подобных трещин должна возникать согласно (564) гигантская концентрация напряжений, однако  $\sigma_x^{\max}$  ограничено теоретической прочностью на отрыв (547). Приравняв выражения (564) и (547), а также сделав замену  $\gamma$  на  $\gamma_{\text{эфф}}$ , Орован пришёл к формуле (562). Различие в  $1/2$  здесь не существенно, так как оценка  $\rho = a_0$  является приближённой.

## 9.6. ХЛАДНОЛОМКОСТЬ

Наиболее просто изучать хладноломкость сплавов с помощью ударных испытаний образцов при последовательном понижении температуры с последующим построением кривых «ударная вязкость – температура». На этих кривых обнаруживается, если, конечно, он существует, критический интервал температур перехода из вязкого состояния в хрупкое. Например, ударная вязкость образцов стали 20, нормализованных от  $900^\circ\text{C}$ , снижается в интервале температур  $+20\dots-100^\circ\text{C}$  от 230 до 10 Дж/см<sup>2</sup>. Подобное постепенное снижение ударной вязкости характерно для надрезанных образцов. Если используются образцы без надреза, то снижение ударной вязкости происходит дискретно (скачкообразно) в узком, порядка 20 градусов температурном интервале. Для надрезанных образцов за критическую температуру вязко-хрупкого перехода  $T_k$  принимают температуру 50 %-ного снижения ударной вязкости. Аналогичную температуру можно определить, наблюдая за количеством вязкой, волокнистой составляющей в изломе, которая с понижением температуры заменяется блестящим, кристаллическим (хрупким) изломом. Равные доли двух структурных разновидностей излома наблюдаются обычно при той же температуре  $T_k$ , при которой ударная вязкость снижается на 50 %.

В разделе 9.1 уже отмечено, что основы теории вязко-хрупкого перехода были развиты академиком А.Ф. Иоффе. Согласно его схеме, приведённой на рис. 181, температура перехода в хрупкое состояние определяется как точка пересечения графиков температурной зависимости напряжения

отрыва и предела текучести, причём считается, что напряжение отрыва слабо изменяется при понижении температуры, тогда как предел текучести существенно возрастает. Физический смысл схемы Иоффе заключается в том, что в условиях нагружения при  $T > T_k$  сначала достигается предел текучести, проходит пластическая деформация, и лишь потом будет достигнуто разрушающее напряжение. Следовательно, реализуется механизм вязкого разрушения. Если же нагружение проходит при температурах ниже  $T_k$ , то первым будет достигнуто напряжение отрыва, так что пластическая деформация произойти не успевает, и разрушение происходит хрупко.

Проанализируем схему Иоффе с позиций теории Орована. При  $T < T_k$  пластическая деформация отсутствует, в том числе и на поверхности разрушения. Следовательно,  $\gamma_{пл} = 0$ . Таким образом,  $\sigma_{отр}$  должно определяться формулой Гриффитса (557). Когда температура деформации превысит  $T_k$ , должно проявляться постепенное нарастание степени пластической деформации, предшествующей разрушению. Следовательно, величина  $\gamma_{пл}$ , которая равна нулю при  $T \leq T_k$ , должна стремительно возрасти, достигая, по крайней мере, в районе комнатных температур значения порядка  $2 \cdot 10^3 \text{ Дж/м}^2$ , в тысячу раз большего, чем для истинного поверхностного натяжения  $\gamma$ . Если последовательно считать, что разрушение всегда вызывается технологическими трещинками, уже существовавшими в металлах до нагружения, то можно прийти к заключению, что разрушающее напряжение должно резко, почти в тридцать раз ( $\sqrt{1000}$ ), увеличиться при повышении температуры относительно  $T_k$ , как это показано схематично на рис. 182.

Ни в одном из многочисленных исследований не было обнаружено подобного резкого возрастания предела прочности при переходе температуры деформации через  $T_k$ , хотя небольшой скачок значений  $\sigma_b$  на 20...40 % обычно проявляется. Приходится признать, что гипотеза, связывающая разрушение с началом роста технологических трещин постоянной длины, оправданная для некристаллических материалов типа стекла или пластмассы, оказалась непригодной для кристаллов вообще и металлов в частности.

Ученик акад. Иоффе профессор А.В. Степанов первым показал на кристаллах NaCl и KCl, что даже в условиях хрупкого излома при низких температурах разрушению всегда предшествует скольжение. В дальнейшем этот факт был надёжно установлен для многих сплавов, в том числе для технически чистого железа и сталей. При температурах ниже  $T_k$  перед разрушением хотя бы в малой степени, но проходит скольжение или двойникование. Именно эти два конкурирующие между собой процесса вызывают рост мелких технологических трещин, чаще всего расположенных на поверхности образцов. При деформирующем напряжении, немного меньшем, чем предел прочности, трещинки появляются в зёрнах, расположенных у поверхности поликристаллического образца. Их размер достигает диаметра зерна, но пройти через границу зёрен большинство микротрещин не

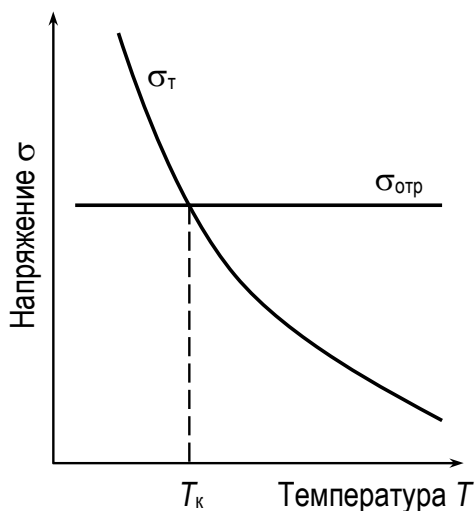


Рис. 181. Схема вязко-хрупкого перехода при изменении температуры (по А. Ф. Иоффе)

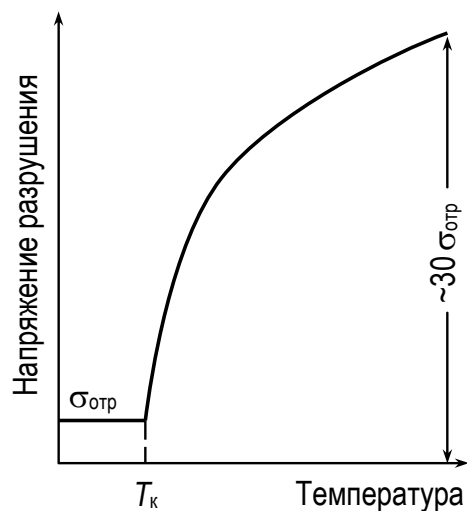


Рис. 182. Температурная зависимость напряжения разрушения, которая следует из гипотез Иоффе и Орована (схема)

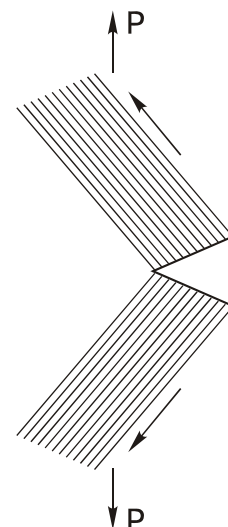


Рис. 183. Схема подрастания микротрещины за счёт сдвига в двух полосах скольжения (Е. Паркер)

может. Несомненно, что исходные технологические трещины росли в ходе нагружения. Один из возможных механизмов их роста показан на рис. 183. К моменту достижения разрушающей нагрузки длина трещины существенно увеличивается и достигает гриффитсовских размеров, после чего для её роста скольжение становится ненужным. В случае вязкого разрушения, когда трещина формируется в центральной части образца, тем более нельзя ожидать существенного участия в разрушении технологических трещин. Фактически в ходе нагружения действуют механизмы докритического подрастания как хрупких, так и вязких трещин. Одновременно, согласно (556a), с ростом напряжений уменьшается критический размер трещины. Эти два размера (истинный и критический) при повышении напряжения изменяются навстречу друг другу; когда они становятся равными, наступает стадия быстрого роста трещин и разрушение.

В экспериментах по растяжению при температурах ниже комнатных (прутки диаметром 5,5 мм, скорость деформации  $0,02 \text{ мин}^{-1}$ ) были тщательно изучены [18] температурные зависимости предела прочности и предела текучести железа и стали.

Особое внимание было уделено малоуглеродистой стали. Её разрушение имеет характерные особенности для определённых интервалов температуры. Им соответствуют области А–Е на рис. 184. Область А соответствует образованию шейки с последующим чашечным изломом; разрушение по плоскости скола не наблюдается. В температурном интервале В образо-

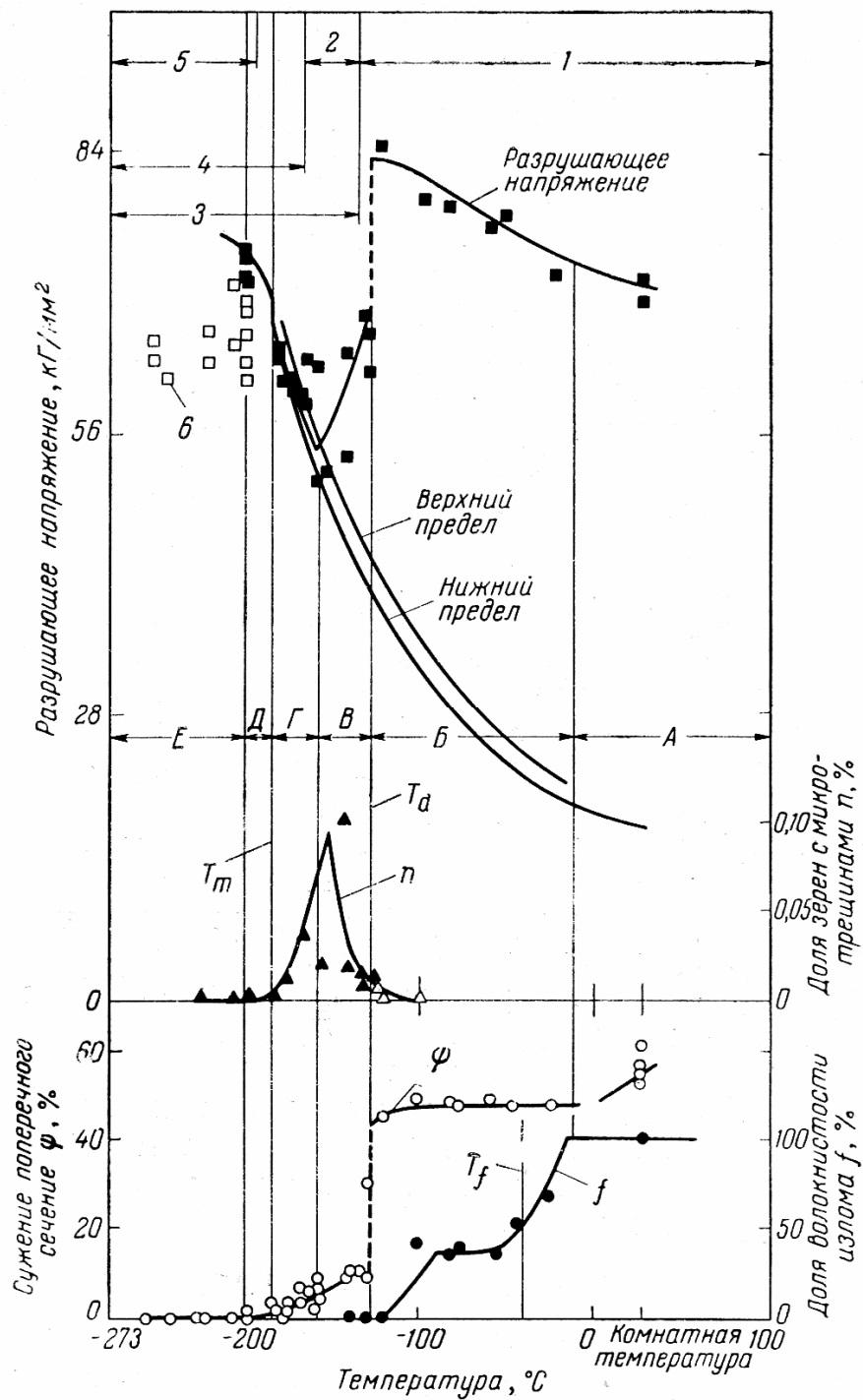


Рис. 184. Зависимость от температуры предела прочности при растяжении, предела текучести, пластичности, доли волокнистости в изломе и доли зёрен с микротрещинами в стали с 0,22 %С и баллом зерна 4 [18, с. 125]. 1 — двойников нет; 2 — наблюдаются отдельные двойники; 3 — двойники на поверхности скола; 4 — двойники образуются вплоть до разрушения; 5 — двойники образуются в момент начала текучести; 6 — сопротивление разрушению при температуре жидкого гелия

вание шейки всё ещё наблюдается, однако разрушение начинается в сердцевине шейки в результате образования волокнистых трещин на кольцевых поверхностях скола. В итоге область разрушения охватывает всё поперечное сечение. Вид поверхности излома характеризуется отношением площади участков с волокнистым изломом к общей площади поверхности разрушения. По мере понижения температуры уменьшается доля волокнистого излома (см. нижнюю кривую на рис. 184). Температуру  $T_f$ , при которой указанное отношение площадей равно  $1/2$  (как при испытаниях на удар образцов Шарпи), можно считать критической температурой хрупкости; эта температура выше была обозначена  $T_k$ . Она является критической в том смысле, что соответствует изменению вида излома. При дальнейшем непрерывном понижении температуры прочность и сужение поперечного сечения резко падают; можно считать, что на соответствующих кривых имеет место разрыв непрерывности. Граница интервалов  $B$  и  $B$  ( $T_\alpha$ ) является температурой перехода от вязкого разрушения к хрупкому, ниже  $T_\alpha$  разрушение носит характер скола и начинается с образования трещин скола.

Поверхностные микротрещины в действительности возникают при температурах несколько выше  $T_\alpha$  — в интервале  $B$ , однако частота их образования увеличивается с понижением температуры и становится максимальной при наиболее низких температурах интервала  $B$ . Размер микротрещин, образовавшихся внутри образца, близок к размеру ферритных зёрен. В крупнозернистых материалах максимальная доля зёрен с микротрещинами может достигать 2 % от общего числа зёрен. Однако при температурах несколько ниже  $T_\alpha$  величина удлинения при разрушении все еще находится в интервале от 10 до 20 %, и разрушение не является идеально хрупким. Разность значений предела прочности и предела текучести в интервале  $B$  остаётся большой (верхние кривые на рис. 184).

Наличие значительных остаточных удлинений и тот факт, что в температурных интервалах  $B$  и  $B$  появлению трещин в отдельных местах образца предшествует удлинение (около 10 %) ставят под сомнение утверждение Иоффе и Давиденкова о том, что ниже критической температуры хрупкости разрушение опережает текучесть.

В области  $\Gamma$  предел прочности становится приблизительно равным пределу текучести, и обе эти характеристики возрастают с понижением температуры. Текучесть имеет место непосредственно перед разрушением, которое фактически происходит при напряжениях, немного превосходящих нижний предел текучести, хотя Хан и другие исследователи считают, что оно наступает при нижнем пределе текучести. В интервале  $\Gamma$  действительно существуют микротрещины, как это следует из кривой распределения на рис. 184, однако они образуются лишь в тех областях, где нарушается непрерывность деформации, и их количество уменьшается по мере понижения температуры. Исключение составляют стали с высоким содержанием марганца, в которых трещины не образуются ни в интервале  $B$ , ни в интервале  $\Gamma$ .



При еще более низких температурах, в интервале  $D$ , разрушение сколом происходит внезапно и не при нижнем, а при верхнем пределе текучести; наблюдается значительный разброс экспериментальных значений предела прочности относительно экстраполированного участка кривой для верхнего предела текучести. Поведение материала в этом температурном интервале похоже на поведение в соседнем интервале  $\Gamma$  в том смысле, что разрушение сколом происходит в локализованной области, в которой имела место прерывистая текучесть. Микротрещины не наблюдаются (см. рис. 184), поэтому возможно, что процесс протекает путём образования одной трещины и её распространения по всему поперечному сечению. Другими словами, при наступлении текучести происходит мгновенное распространение трещины. Граничная температура  $T_m$  интервалов  $\Gamma$  и  $D$ , ниже которой имеет место указанное явление, называется критической температурой хрупкости, оцененной по образованию микротрещин. Наконец, при совсем низких температурах, в интервале  $E$ , происходит внезапное разрушение образца при напряжениях, которые ниже экстраполированных значений верхнего и нижнего пределов текучести. Это разрушение можно считать идеально хрупким, то есть таким, при котором скол наступает без какой бы то ни было предварительной пластической деформации. Однако имеются данные о том, что разрушение сколом связано с двойникованием и что последнее является контролирующим фактором процесса разрушения, в отличие от температурных интервалов  $B$ ,  $\Gamma$  и  $D$ , в которых зарождение скола контролируется скольжением.

Следует несомненно признать правоту идей проф. А.В. Степанова о двоякой роли пластической деформации, которая упрочняет кристаллы, но и подготавливает их разрушение. В связи с этим наглядная схема хладноломкости А.Ф. Иоффе нуждается в некотором уточнении.

Роль пластического скольжения в разрушении твердого тела. Рассматривая теорию разрушения, мы предполагали, что микротрещины в кристаллах возникают еще на стадии создания материала природой или человеком. Однако при изучении структур пластически деформированных кристаллов наблюдали неоднородное распределение дислокаций типа скоплений, которые создают огромные концентрации напряжений. В качестве простого примера рассмотрим группу из  $n$  краевых дислокаций, которые прижимает к барьеру (границе зерна) внешнее напряжение  $\tau$  (рис. 185).

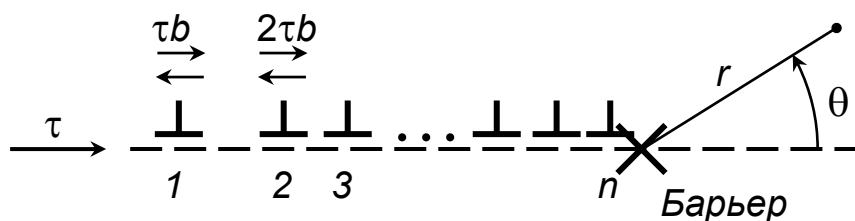


Рис. 185. Дислокационное скопление, прижатое к барьеру внешним напряжением

На первую дислокацию действует сила  $\tau b$  от внешнего напряжения, которая должна уравниваться силой отталкивания от ближайшей соседней дислокации. Для силы отталкивания краевых дислокаций одного знака, расположенных в одной плоскости на расстоянии  $x$  друг от друга, справедливо выражение (377):

$$f_{\text{от}} = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{x}, \quad (565)$$

поэтому условие равновесия первой дислокации в скоплении имеет вид

$$\tau b = f_{2 \rightarrow 1} = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{x_{1-2}}, \quad (566)$$

а расстояние между первой и второй дислокациями  $x_{1-2} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)\tau}$ .

На вторую дислокацию слева действуют сила  $\tau b$ , созданная внешним напряжением, и сила отталкивания от первой дислокации  $f_{1 \rightarrow 2}$ , которая по третьему закону Ньютона равна  $f_{2 \rightarrow 1}$ . Следовательно, слева действует сила  $2\tau b$ , которая должна уравниваться отталкиванием третьей дислокации, то есть

$$f_{3 \rightarrow 2} = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{1}{x_{2-3}} = 2\tau b, \quad (567)$$

что позволяет найти расстояние между второй и третьей дислокациями:

$x_{1-2} = \frac{Gb}{4\pi(1-\nu)\tau}$ . Продолжая эту цепочку рассуждений, можно последо-

тельно определять расстояния  $x_{i-(i+1)}$  и силу на  $i$ -ю дислокацию. В частности, оказывается, что на головную  $n$ -ю дислокацию действует сила  $n\tau b$  или напряжение  $n\tau$ , увеличенное в  $n$  раз по сравнению с исходным. Знание  $x_{i-(i+1)}$  позволяет найти координаты  $x$  дислокаций, а суммирование  $x_{i-(i+1)}$  и напряжений — длину скопления  $L$  и результирующее напряжение, действующее под углом  $\theta$  к плоскости скопления на расстоянии  $r$  от барьера. Однако эти громоздкие расчёты мы опустим и приведём только приближённые окончательные выражения, полученные Эшелби:

$$L = \frac{Gb}{\pi(1-\nu)\tau} n; \quad (568)$$

$$\tau_{\text{ск}} \approx \tau \cdot \sqrt{\frac{L}{r} \left( \cos \frac{\theta}{2} - \frac{1}{2} \sin \theta \cdot \sin \frac{3\theta}{2} \right)}, \quad (569)$$

где  $\tau_{\text{ск}}$  — напряжение, вызванное скоплением, а  $r$  — радиус-вектор точки поля напряжений с азимутом  $\theta$ .

Максимальное значение  $\tau$  достигается при  $\theta=0$ , то есть на плоскости скольжения. Как известно, площадка с максимальным нормальным напря-

жением, по которой может возникнуть трещина, расположена перпендикулярно к площадке с максимальным  $\tau$ . Следовательно, в рассмотренном случае микротрещина может возникнуть перпендикулярно к плоскости скольжения. Предложено много моделей зарождения трещин под влиянием деформации. Некоторые из них показаны на рис. 186 по [18].

Согласно модели Зинера, зарождение трещины обусловлено сильной концентрацией растягивающих напряжений в полосах скольжения перед препятствиями — границами зерна. Дислокационные представления в теории Зинера были введены Моттом (рис. 186, а); они представлены выше. Анализ, сделанный Стро, позволил установить, что максимальные нормальные напряжения составляют угол  $\theta = 110^\circ$  (а не  $90^\circ$ ) с плоскостью скольжения, и именно так должна быть ориентирована трещина (рис. 186, б). Модель Коттрелла для ОЦК-металлов предполагает пересечение двух плоскостей скольжения типа  $\{110\}$ . Скользящие по ним краевые дислокации  $\frac{1}{2}a <111>$  сталкиваются на линии пересечения плоскостей и могут вступить в реакцию вида  $\frac{1}{2}a[111] + \frac{1}{2}a[1\bar{1}\bar{1}] = a[100]$ , так что возникают новые дислокации  $a[100]$ , которые не могут двигаться ни по одной, ни по другой плоскости скольжения. Накопление большого количества краевых дислокаций  $a[100]$  приводит к слиянию экстраплоскостей (001) и зарождению трещины (рис. 186, в).

Модель Баллафа–Гилмана (рис. 186, г) также предполагает скопление дислокаций в плоскости скольжения у границы зерна, но трещина возникает в плоскости скольжения. Модель Орована–Стро основана на предположении, что полигонизация обусловлена образованием стенок дислокаций, создающих, как известно, значительный разворот горизонтальных плоскостей. Скольжение по этим плоскостям может привести к образованию трещины вдоль плоскости скольжения (рис. 186, д). Остальные три модели уточняют идеи Зинера–Стро. Модель Ёкобори (рис. 186, е) учитывает, что карбидные частицы и включения в стали представляют барьеры для дислокаций и подобно границам зерна вызывают образование скоплений и зарождение клиновидных трещин. Ранее возникшие трещины также могут вызывать образование новых трещин из-за сложения высокого напряжения в вершине трещины и напряжений от скопления дислокаций по схемам Ёкобори (рис. 186, ж) и Орована (рис. 186, з). Выражения для критического напряжения начала образования трещин во всех моделях имеют одинаковый вид

$$\sigma = \beta \left( \frac{G\gamma}{L} \right)^{1/2}, \quad (570)$$

но с различным численными значениями коэффициента  $\beta$ . Здесь  $\gamma$  — эффективная поверхностная энергия трещины, а  $L$  — длина скопления. Можно заключить, что пластическая деформация стимулирует зарождение трещин и подготавливает последующее разрушение.

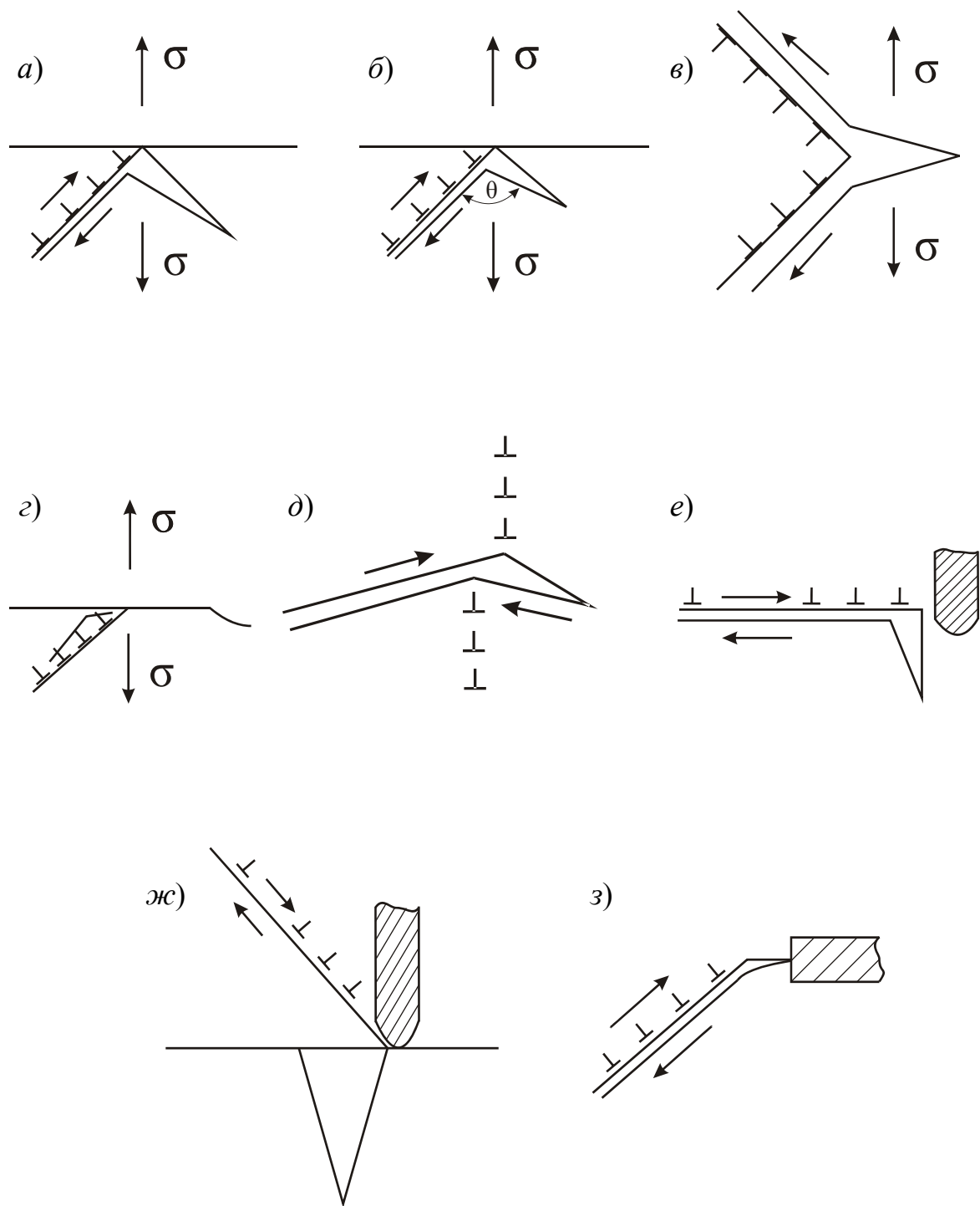


Рис. 186. Дислокационные модели зарождения микротрещин [18]

## 9.7. СОВРЕМЕННАЯ ТЕОРИЯ РАЗРУШЕНИЯ

Несмотря на очевидный успех теории Орована, она не нашла широкого применения в расчетах на прочность, поскольку содержит параметр  $\gamma_{\text{пл}}$ , величина которого зависит от температуры, структуры, количества примесей и не может быть измерена с достаточной точностью.

Следующая в историческом аспекте и широко применяющаяся в настоящее время теория разрушения была разработана в 1950–60-е годы английским механиком-физиком Дж. Ирвином. Он, продолжив развитие идей Орована, строго рассчитал поле напряжений около вершины трещины и на основе результатов расчёта построил механическую теорию движения трещин.

### 9.7.1. Напряжения и смещения точек у вершины трещины

Рассмотрим один из трёх проанализированных Дж. Ирвином видов трещин, для которого внешние усилия перпендикулярны к плоскости трещины (рис. 187). С вершиной трещины жёстко связана система координатных осей  $x, y$ . При росте трещины вместе с вершиной перемещается и начало координат. Положение любой точки  $A$  на поверхности пластины можно задать с помощью прямоугольных координат  $x$  и  $y$ . Но можно использовать и полярную систему координат  $r, \theta$ , где  $r$  — длина радиус-вектора, проведённого из начала координат в точку  $A$ , а  $\theta$  — угол между осью  $x$  в плоскости роста трещины и радиус-вектором. Очевидно, что

$$x = r \cos \theta; \quad y = r \sin \theta; \quad (571a)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}; \quad \operatorname{tg} \theta = y/x. \quad (571б)$$

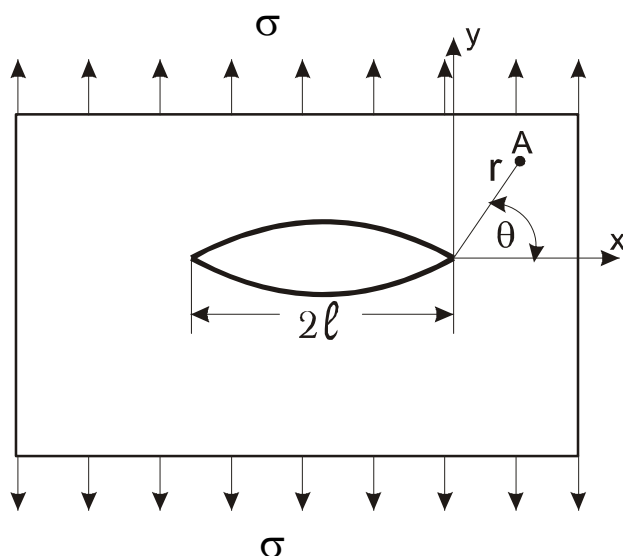


Рис. 187. Трещина длиной  $2l$  в бесконечной пластине, растягиваемой постоянным и однородным вдали от трещины напряжением

Ирвин использовал в расчётах именно полярную систему координат. Мы опустим детали расчёта напряжений. Этот расчёт был неоднократно проверен различными методами теории упругости, а его результаты считаются классическими.

Около вершины трещины возникает напряжённое состояние, которое можно отразить следующими напряжениями<sup>1</sup>:

$$\sigma_{xx} = \sigma_x \approx \frac{K}{\sqrt{2\pi r}} \cdot \cos \frac{\theta}{2} \left( 1 - \sin \frac{\theta}{2} \cdot \sin \frac{3\theta}{2} \right); \quad (572a)$$

$$\sigma_{yy} = \sigma_y \approx \frac{K}{\sqrt{2\pi r}} \cdot \cos \frac{\theta}{2} \left( 1 + \sin \frac{\theta}{2} \cdot \sin \frac{3\theta}{2} \right); \quad (572б)$$

$$\tau_{xy} \approx \frac{K}{\sqrt{2\pi r}} \cdot \sin \frac{\theta}{2} \cdot \cos \frac{\theta}{2} \cdot \cos \frac{3\theta}{2}; \quad (572в)$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zy} = 0. \quad (572г)$$

Очевидно, что на внешних поверхностях пластины не могут существовать отличные от нуля нормальные напряжения. Поэтому в случае сквозной трещины на поверхности  $\sigma_z = 0$ , то есть напряжённое состояние оказывается плоским (все действующие напряжения расположены в одной плоскости). Однако для центральной по толщине части пластины приходится учитывать, что растягивающие напряжения  $\sigma_x$  и  $\sigma_y$  создают поперечную деформацию сжатия вдоль оси  $z$ . Поэтому вдоль края трещины в центре пластины должно возникнуть растягивающее напряжение

$$\sigma_z = \nu(\sigma_x + \sigma_y), \quad (573)$$

действие которого точно компенсирует деформацию сжатия. В таком случае говорят о плоском деформированном состоянии. Но далее будем считать, что выполняется условие  $\sigma_z = 0$ .

Перейдём к анализу формул (572). Через  $K$  в этих формулах обозначена величина  $\sigma\sqrt{\pi l}$ . Зависимость всех напряжений от расстояния  $r$  однотипна: при  $r \rightarrow 0$  величина напряжений неограниченно возрастает ( $\rightarrow \infty$ ), а на больших расстояниях убывает как  $r^{-1/2}$ . Различны лишь угловые зависимости напряжений.

Для линии или, точнее, плоскости, вдоль которой трещина распространяется, угол  $\theta = 0$  или  $180^\circ$ . Если  $\theta = 0$ , то ось  $r$  совпадает с осью  $x$ , и  $r = x$ . Выражения для напряжений вдоль  $+x$  имеют вид

$$\sigma_x = \frac{K}{\sqrt{2\pi x}}; \quad \sigma_y = \frac{K}{\sqrt{2\pi x}}; \quad \tau_{xy} = 0. \quad (574)$$

<sup>1</sup> Напомним смысл индексов у напряжений  $\sigma_{ii}$  ( $\tau_{ij}$ ). Первый индекс определяет направление действия напряжения, а второй — нормаль к площадке, по которой оно действует. Например,  $\tau_{xy}$  — касательное напряжение, действующее вдоль оси  $x$  по площадке с нормалью  $y$ . Для касательных напряжений существует закон парности:  $\tau_{ij} = \tau_{ji}$ . В частности,  $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ .

В противоположном направлении  $-x$  при  $\theta = 180^\circ$  функция  $\cos(\theta/2)$  обращается в ноль, поэтому  $\sigma_x = \sigma_y = \tau_{xy} = 0$ .

Для напряжений  $\sigma_y$  иного результата и быть не могло, так как ось  $-x$  направлена внутрь трещины, а на внешней поверхности трещины нормальное напряжение  $\sigma_y$  отсутствует. Напряжения  $\sigma_x$  и  $\sigma_y$  равны и положительны, то есть являются растягивающими. При  $x \rightarrow 0$  они неограниченно возрастают. В этом смысле говорят, что трещина является мощным концентратором напряжений. Но так как в кристаллических телах атомы расположены на дискретном расстоянии  $a$  друг от друга, то максимальное напряжение вдоль  $y$

$$\sigma_y(x = a) = \frac{K}{\sqrt{2\pi a}} = \sigma \sqrt{\frac{l}{2a}} \quad (575)$$

ограничено. При относительно малых  $\sigma$  трещина находится в статическом равновесии. Следует обратить внимание, что оба напряжения  $\sigma_x$  и  $\sigma_y$  зависят через параметр  $K$  от напряжения  $\sigma$ , и если внешняя нагрузка отсутствует, то напряжения у вершины трещины не могут возникнуть.

Помимо напряжений Ирвин рассчитал смещения всех точек пластины после образования трещины по отношению к ситуации, когда трещины не было. Вектор  $\vec{\delta}$  смещения точки с исходными координатами  $x$  и  $y$

$$\vec{\delta} = u\vec{i} + v\vec{j} \quad (576)$$

имеет две проекции:  $u(x, y)$  — на ось  $x$  и  $v(x, y)$  — на ось  $y$ . Нас в первую очередь должно интересовать смещение вдоль оси  $y$ . Для него Ирвин получил выражение

$$v(x, y) \approx \frac{2K(1+\nu)}{E} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \sin \frac{\theta}{2} \left( 1 - 2\nu + \sin^2 \frac{\theta}{2} \right). \quad (577)$$

Замена множителя  $\sin \frac{\theta}{2}$  на  $\cos \frac{\theta}{2}$  позволяет найти  $x$ -ю компоненту смещения  $u(x, y)$ .

Рассчитаем смещение точек  $v(x)$  вдоль оси  $+x$ , приняв  $\theta = 0$ :  $v(x) = 0$ . Такой результат получается потому, что ось  $+x$  расположена симметрично относительно обоих краёв трещины. В случае  $\theta = 180^\circ$  значения  $x$  отрицательные,  $r = -x$  и  $\sin \frac{\theta}{2} = 1$ ; имеем

$$v(x) = \frac{4K(1-\nu^2)}{E} \sqrt{\frac{-x}{2\pi}}. \quad (578)$$

Напомним, что в этом случае речь идёт о смещении точек внутри трещины, то есть о расстоянии вдоль оси  $y$ , на которое смещаются точки верхнего и нижнего краёв трещины по отношению к средней линии. Фактически выражение (578) представляет уравнение параболы для формы трещины

вблизи её вершины. При  $x = 0$  раскрытие трещины  $v = 0$ , как и должно быть, ибо мы принимали, что точка  $x = 0$  является вершиной трещины.

### 9.7.2. Теория разрушения

Дж. Ирвина, как и его предшественника Э. Орована, почти не занимал вопрос о зарождении трещины. Основываясь на экспериментах, он полагал, что именно развитие, рост трещины определяет основной период, предшествующий разрушению. Соответственно, целью теоретических исследований Ирвина являлось выяснение энергетических и силовых критериев роста трещин. Допустим, рассуждал Ирвин, что трещина длиной  $2l$  увеличивает свой размер в одном направлении на величину  $\delta l$ . Радиус гриффитсовского круга, в котором внешние (по отношению к создаваемым самой трещиной) напряжения релаксировали, увеличился на  $\delta l$ . Поэтому можно утверждать, что прошла дополнительная релаксация (устранение) упругой энергии. Куда девается энергия? Формально устранение упругой энергии происходит каждый раз, когда вершина трещины перемещается вперёд. Релаксация связана с движением вершины, то есть конца трещины. Чтобы выразить эту связь, Ирвин предположил, что упругая энергия как бы втекает в движущуюся вершину в форме потока энергии  $W$ :

$$\delta U = -W \cdot h \cdot \delta l, \quad (579)$$

где  $\delta U$  — изменение упругой энергии в растянутой пластине,  $W$  — количество энергии «втекающей» в трещину, в расчёте на единицу площади поверхности разрушения, а  $h$  — толщина пластины. Релаксировавшая часть упругой энергии превращается в иные формы энергии, например, в тепловую, электрическую, звуковую. Но все же основное превращение происходит в энергию образования поверхности разрушения и работу пластической деформации. Запишем с учётом результатов Орована:

$$Wh\delta l \geq 2(\gamma + \gamma_{\text{пл}})h\delta l, \quad (580)$$

откуда находим энергетический критерий разрушения

$$W \geq 2(\gamma + \gamma_{\text{пл}}). \quad (581)$$

Для дальнейшего анализа необходимо знать зависимость потока упругой энергии от напряжения и размера трещины. Эту зависимость Ирвин вычислил простым элегантным способом. Обратимся к рис. 188, на котором показаны два последовательных положения вершины трещины  $O$  и  $O'$  на расстоянии  $\delta l$  друг от друга. Когда вершина трещины была в точке  $O$ , поле напряжений впереди неё определялось выражением (574), а величина полураскрытия трещины — выражением (578) при отрицательном  $x$ . Эти же формулы применимы и для случая, когда вершина перемещается в точку  $O'$  но с заменой  $x$  на  $x'$ , где  $x'$  отсчитывается от  $O'$ .



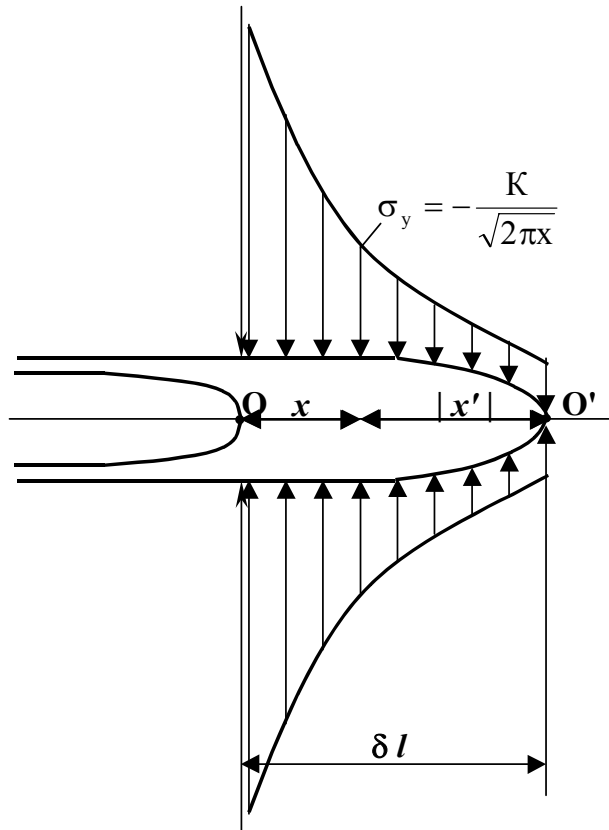


Рис. 188. К расчету потока упругой энергии

Теперь главное. Приложим мысленно к небольшому участку  $\delta l$  трещины, вершина которой находится в точке  $O'$ , сжимающие напряжения  $\sigma_y$ , определённые формулой (574), но с противоположным знаком. Действие сжимающих напряжений приведёт к соприкосновению верхней и нижней поверхностей трещины на участке  $\delta l$ . Когда эти грани сомкнутся, вершина трещины вернется в точку  $O$ , и тогда напряжения  $\sigma_y$ , созданные трещиной, точно скомпенсируют приложенные. Рассчитаем работу, которую необходимо совершить для соединения поверхностей:  $\sigma_y(x)hdx$  есть сжимающее усилие на площади  $h \cdot dx$ ; это усилие совершает работу на пути  $v(x')$ . Не забывайте, что величина  $v(x')$  определена по отношению к точке  $O'$ . Поскольку  $x' = x - \delta l$ , то  $v(x') = v(x - \delta l)$ . Итак, полная работа выражается интегралом

$$h \int_0^{\delta l} \sigma_y(x) \cdot V(\delta l - x) dx = h \cdot \frac{4K^2(1 - v^2)}{2\pi E} \int_0^{\delta l} \sqrt{\frac{\delta l - x}{x}} dx. \quad (582)$$

Для расчёта интеграла полезно сделать подстановку  $x = \delta l \cdot \sin^2 \varphi$ . Дифференциал  $dx = 2\delta l \cdot \cos \varphi \sin \varphi \cdot d\varphi$ . Поскольку  $\sqrt{\frac{\delta l(1 - \sin^2 \varphi)}{\delta l \cdot \sin^2 \varphi}} = \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi}$ , то интеграл

приводится к виду  $h \cdot \frac{4K^2(1-v^2)}{\pi E} \delta l \int_0^{\pi/2} \cos^2 \varphi d\varphi$ . Последний интеграл равен  $\frac{\pi}{4}$ .

Таким образом, работа соединения поверхностей трещины на площади  $h \delta l$  равна  $\frac{K^2(1-v^2)}{E} h \delta l$ . Ирвин считал, что абсолютно такая же энергия выделяется в ходе прямого процесса роста трещины на расстояние  $\delta l$ , то есть

$$Wh \delta l = \frac{K^2(1-v^2)}{E} h \delta l, \quad (583)$$

что позволяет найти поток упругой энергии

$$W = \frac{K^2(1-v^2)}{E}. \quad (584)$$

Используем далее энергетический критерий (581). Разрушение детали будет происходить, если  $W \geq 2(\gamma + \gamma_{пл})$ . С учётом формулы (584) можно получить критерий разрушения для  $K$ . Разрушение начнётся, если

$$K = \sigma \sqrt{\pi l} \geq \sqrt{\frac{2E(\gamma + \gamma_{пл})}{1-v^2}}. \quad (585)$$

Параметр  $K$  был введён в расчёты с целью упрощения записи формул. Однако теперь он начинает выступать в качестве основного параметра, отражающего внешнее воздействие на образец. Ирвин многократно наблюдал, что пластины, содержащие длинные трещины, разрушаются при небольшом напряжении  $\sigma$ , тогда как для роста коротких трещин требуется значительное увеличение  $\sigma$ . Важнейшая заслуга Ирвина заключается в том, что он не стал расщеплять произведение  $\sigma \sqrt{\pi l} = K$  на сомножители, а определил всё произведение как новую объединённую физическую величину  $K$ , назвав её интенсивностью напряжения. Разрушение наступает тогда, когда согласно выражению (585) интенсивность напряжения достигает критического значения  $K_c = \sqrt{\frac{2E(\gamma + \gamma_{пл})}{1-v^2}}$ :

$$K \geq K_c \quad (586)$$

Критическую величину интенсивности напряжения  $K_c$ , или, как её позднее называли, вязкость разрушения, разумеется, не рассчитывают, а экспериментально определяют для каждой стали при различных температурах и структурных состояниях. Интервал реальных значений  $K_c$  — от 10 до 300 МПа·м<sup>1/2</sup>. Например, для стали 20Х после закалки и среднего отпуска при 400 °С величина  $K_c$  при комнатной температуре равна 63 МПа·м<sup>1/2</sup>. Если понижать температуру испытаний, то вязкость разрушения снижается, и при –100 °С составляет 44 МПа·м<sup>1/2</sup>.

Проиллюстрируем суть новой концепции разрушения на примере следующей простой задачи [20]. В центре стальной панели шириной  $b = 3$  м и

толщиной  $h=0,025$  м обнаружена плоская сквозная трещина длиной  $2l=0,04$  м, расположенная перпендикулярно приложенным усилиям. Панель растягивается усилиями  $P=11,5 \cdot 10^6$  Н. Безопасна ли эксплуатация панели, если вязкость разрушения  $K_c$  при комнатной температуре составляет  $70 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$ ?

Решение. Длина трещины мала по сравнению с шириной панели, так что теория Ирвина применима. Найдём напряжение  $\sigma$  вдали от трещины:

$$\sigma = \frac{P}{hb} = \frac{11,5 \cdot 10^6 \text{ Н}}{3 \cdot 0,025 \text{ м}^2} = 153 \text{ МПа}.$$

Рассчитаем интенсивность напряжений:

$$K = \sigma \sqrt{\pi l} = 153 \cdot \sqrt{3,14 \cdot 0,025} = 43 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}.$$

Это меньше критического значения  $K_c = 70 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$ , то есть  $K < K_c$ ; ситуация неопасная, хотя, безусловно, нужно выяснить, почему возникла трещина.

Изменим условия задачи. Та же панель с трещиной эксплуатируется на улице, где максимальная дневная температура  $+22^\circ \text{C}$ , а минимальная ночная  $-35^\circ \text{C}$ . Решение аналогично. Но при  $-35^\circ \text{C}$  величина  $K_c = 35 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$ , и, сравнив  $K$  и  $K_c$ , мы убеждаемся, что панель эксплуатировать нельзя, поскольку в ночное время  $K > K_c$ , то есть произойдёт рост трещины и разрушение панели.

Насколько сложен вывод результатов теории, настолько же просто ее применять на практике.

### 9.7.3. Поправки к теории Ирвина

Формула интенсивности напряжений справедлива только для бесконечно длинной и бесконечно широкой пластины с трещиной, расположенной в центре. В тех случаях, когда либо трещина расположена с краю пластины, либо ширина конечна, хотя и превышает длину трещины  $2l$ , в эту формулу необходимо ввести поправочный множитель  $Y_i(\lambda)$  (табл. 21):

$$K = \sigma \sqrt{\pi l} \cdot Y_i(\lambda) \quad (587)$$

где  $\lambda = l/b$  есть отношение полудлины трещины к ширине пластины. Для вариантов  $i=2, 3, 5$  и  $6$  полная длина трещины равна  $l$ ; в остальных  $2l$ .

Образцы типа 6 часто используются для измерения критического коэффициента интенсивности напряжений  $K_c$ . Проводится это в следующей последовательности. Сначала из листа стали на строгальном и фрезерном станках изготавливают образцы вида 6. Однако треугольный вырез в них представляет тупую трещину. Чтобы сделать ее острой, образец подвергают усталостному, то есть знакопеременному нагружению, добиваясь образования усталостной трещины в вершине. Как только трещинка появляется, образец снимают и переносят на разрывную машину, снабженную держателями в виде пальцев, которые входят в круглые отверстия образцов.

Растягивают образец до разрушения и фиксируют усилие разрушения  $P_p$ , что позволяет рассчитать  $K_c$ :

$$K_c = \frac{P_p \sqrt{l}}{hb} Y_6(\lambda), \quad (588)$$

где  $h$  — толщина образца.

Вторая поправка имеет более сложную физическую природу, она учитывает существование пластической зоны. В вершине трещины при  $x=0$ ,  $y=0$  (или  $r=0$ ,  $\theta=0$ ) напряжения  $\sigma_x$  и  $\sigma_y$  неограниченно возрастают. Если мы будем двигаться от вершины вдоль  $x$ , то напряжения согласно (572) будут уменьшаться и на некотором расстоянии достигнут уровня предела текучести. Мы должны ожидать, что на этом отрезке должна проходить пластическая деформация. Вообще говоря, аналогичная ситуация будет наблюдаться при движении в любом направлении. Поэтому введем  $r_{пл}^\theta$  — радиус пластической зоны в направлении под углом  $\theta$  к оси  $x$ . Оценка  $r_{пл}^\theta$  осложнена тем, что напряженное состояние отлично от простого осевого растяжения. В теории пластичности металлов известно, что пластическая деформация начинается тогда, когда максимальные касательные напряжения достигают критического значения, или пропорциональные касательным нормальные напряжения  $\sigma$ :

$$\sigma = \frac{1}{2} \sqrt{(\sigma_x - \sigma_y)^2 + (\sigma_y - \sigma_z)^2 + (\sigma_z - \sigma_x)^2 + 6(\tau_{xy}^2 + \tau_{yz}^2 + \tau_{zx}^2)} \quad (589)$$

достигают величины предела текучести при одноосном растяжении  $\sigma_T$ . После подстановки выражений (572) в (589), получим уравнение

$$\sigma_T = K \cdot \sqrt{\frac{1}{2\pi r} \cdot \cos^2 \frac{\theta}{2} \cdot \left(1 + 3 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right)}. \quad (590)$$

Его очевидное решение для радиуса пластической зоны

$$r_{пл}^\theta = \frac{K^2}{2\pi\sigma_T^2} \cdot \cos^2 \frac{\theta}{2} \cdot \left(1 + 3 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right); \quad (591)$$

в частности, при  $\theta=0$

$$r_{пл}^0 = \frac{K^2}{2\pi\sigma_T^2}. \quad (592)$$

При расчетах радиуса  $r_{пл}$  мы полагали, что  $\sigma_z=0$ . Но если рассматривается плоское деформированное состояние, когда  $\sigma_z = \nu(\sigma_x + \sigma_y)$ , то

$$r_{пл}^\theta = \frac{K^2}{2\pi\sigma_T^2} \cdot \cos^2 \frac{\theta}{2} \cdot \left(1 + 3 \sin^2 \frac{\theta}{2} - 4\nu(1-\nu)\right). \quad (593)$$

При  $\theta=0$  и  $\nu=0,3$

$$r_{пл}^0 = 0,16 \frac{K^2}{2\pi\sigma_T^2}. \quad (594)$$

Сравните (592) и (594): в случае плоского деформированного состояния радиус пластической зоны в шесть раз меньше. Тем самым возникает предрасположенность к хрупкому разрушению.

Суть «пластической» поправки Ирвина сводится к тому, что длину трещины  $l$  в формуле для интенсивности напряжений следует увеличить на размер радиуса пластической зоны  $r_{пл}^0$ . Условие разрушения приобретает более сложный вид:

$$K = \sigma \sqrt{\pi(l + r_{пл}^0)} \cdot Y_i(\lambda) \geq K_c. \quad (595)$$

Проиллюстрируем, как проводится учет поправок, на примере следующей задачи (В.З.Партон [20]). Поперечная трещина длиной  $l = 30$  мм обнаружена в нижней полке стальной крановой балки, ширина которой  $b = 254$  мм. Балка эксплуатируется при максимальном растягивающем напряжении  $\sigma = 172$  МПа. Вязкость разрушения при  $+20^\circ\text{C}$  равна  $K_c^{+20} = 165$ , а при  $-20^\circ\text{C}$   $K_c^{-20} = 60$  МПа $\cdot\text{м}^{-1/2}$ ; предел текучести  $\sigma_T = 480$  МПа. Допустима ли эксплуатация крана в помещении при  $20^\circ\text{C}$ ?

1. Трещина расположена с краю полки, поэтому схема расположения трещины соответствует п. 3 в табл. 21. Найдем:  $\lambda = l/b = 0,12$  и далее  $Y_3(0,12) = 1,2135$ .

Таблица 21

Значения коэффициентов  $Y_i(\lambda)$  для образцов различного вида [20]

№ п/п	Форма образца и положение трещины	$Y_i(\lambda)$ [где $\lambda = l/b$ ]
1	Бесконечно широкая пластина, трещина в центре	$Y_1 = 1$
2	Полубесконечная в ширину пластина, трещина с края	$Y_2 = 1,12$
3	Полоса шириной $b$ с краевой трещиной; осевое растяжение	$Y_3 = 1,12 - 0,23\lambda + 10,55\lambda^2 - 21,71\lambda^3 + 30,38\lambda^4$
4	Полоса с центральной поперечной трещиной, осевое растяжение	$Y_4 = 1 + 0,128\lambda - 0,288\lambda^2 + 1,525\lambda^3$
5	Цилиндр радиуса $R$ с внешней кольцевой трещиной глубиной $l$ , осевое растяжение	$\lambda = 0,03 \quad 0,05 \quad 0,1 \quad 0,2 \quad 0,4$ $Y_5 = 1,88 \quad 1,82 \quad 1,66 \quad 1,41 \quad 1,01$
6	«Компактный» образец (см. рис. 189)	$Y_6(\lambda) = 29,6 - 185\lambda + 655\lambda^2 - 1017\lambda^3 + 639\lambda^4;$ $K = \frac{P\sqrt{l}}{hb} Y_6(\lambda)$

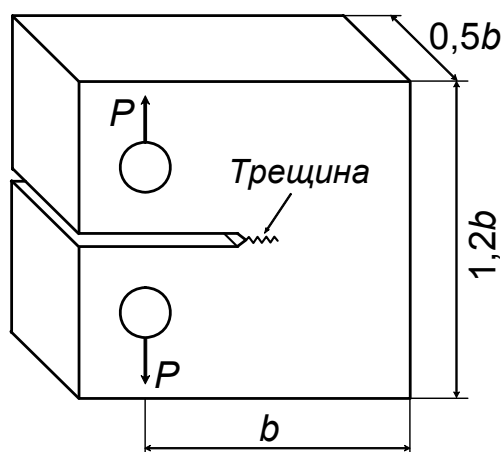


Рис. 189. «Компактный» образец для определения вязкости разрушения

2. Рассчитаем «пластическую» поправку:  $r_{\text{пл}}^0 = \frac{165^2}{2\pi \cdot 480^2} = 0,019 \text{ мм}$ .

3. Найдем интенсивность напряжений, воспользовавшись формулой (595):  $K = 172\sqrt{3,14(0,03 + 0,019)} \cdot Y_3(0,12) = 81,7 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{-1/2}$ .

4. Сравним значения  $K$  и  $K_c^{+20}$ :  $81,7 < 165 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{1/2}$ .

Таким образом, эксплуатация крана возможна, но, конечно, нужно выяснить причину образования трещины.

Несколько изменим условия задачи. Допустим, что кран работает на открытом воздухе. Температура ночью в рассматриваемый период года может понижаться до  $-20^\circ\text{C}$ . Безопасна ли эксплуатация крана в новых условиях? Изменяются:

1) пластическая поправка  $r_{\text{пл}}^0 = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{60}{480} \right)^2 = 0,0025 \text{ мм}$ ;

2) величина  $K = 172\sqrt{3,14(0,03 + 0,0025)} \cdot 1,213 = 66,7 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{-1/2}$ ;

3) величина  $K_c^{-20} = 60 \text{ МПа} \cdot \text{м}^{-1/2}$ .

При  $-20^\circ\text{C}$  оказывается, что  $K > K_c^{-20}$ , и, следовательно, ночная эксплуатация крана может привести к разрушению балки.

## 10. ЗАДАЧИ

**1.** Нарисуйте направление:

- 1)  $[1\bar{1}1]$ ; 7)  $[1\bar{1}0]$ ; 13)  $[\bar{1}20]$ ; 19)  $[121]$ ; 25)  $[10\bar{1}]$ ; 31)  $[\bar{2}0\bar{1}]$ ; 37)  $[11\bar{1}]$ ;  
 2)  $[2\bar{1}0]$ ; 8)  $[210]$ ; 14)  $[21\bar{1}]$ ; 20)  $[\bar{1}11]$ ; 26)  $[112]$ ; 32)  $[111]$ ; 38)  $[1\bar{1}2]$ ;  
 3)  $[101]$ ; 9)  $[22\bar{1}]$ ; 15)  $[011]$ ; 21)  $[10\bar{2}]$ ; 27)  $[0\bar{1}2]$ ; 33)  $[1\bar{2}1]$ ; 39)  $[012]$ ;  
 4)  $[2\bar{1}1]$ ; 10)  $[\bar{2}\bar{1}0]$ ; 16)  $[1\bar{2}2]$ ; 22)  $[221]$ ; 28)  $[212]$ ; 34)  $[\bar{1}22]$ ; 40)  $[211]$ ;  
 5)  $[\bar{2}2\bar{1}]$ ; 11)  $[122]$ ; 17)  $[102]$ ; 23)  $[20\bar{1}]$ ; 29)  $[01\bar{1}]$ ; 35)  $[02\bar{1}]$ ; 41)  $[110]$ ;  
 6)  $[01\bar{2}]$ ; 12)  $[\bar{2}01]$ ; 18)  $[\bar{2}\bar{1}2]$ ; 24)  $[\bar{2}12]$ ; 30)  $[12\bar{1}]$ ; 36)  $[\bar{1}12]$ ; 42)  $[1\bar{2}0]$ .

**2.** Нарисуйте направление ..., проходящее через узел ...:

- 1)  $[\bar{1}\bar{1}1]$ ,  $[[110]]$ ; 7)  $[120]$ ,  $[[00\frac{1}{2}]]$ ; 13)  $[\bar{1}2\bar{1}]$ ,  $[[\frac{1}{2}1\frac{1}{2}]]$ ; 19)  $[011]$ ,  $[[\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]]$ ;  
 2)  $[\bar{1}01]$ ,  $[[1\frac{1}{2}0]]$ ; 8)  $[\bar{2}2\bar{1}]$ ,  $[[101]]$ ; 14)  $[\bar{1}21]$ ,  $[[\frac{1}{2}00]]$ ; 20)  $[\bar{1}0\bar{2}]$ ,  $[[1\frac{1}{2}1]]$ ;  
 3)  $[010]$ ,  $[[\frac{1}{2}0\frac{1}{2}]]$ ; 9)  $[21\bar{2}]$ ,  $[[001]]$ ; 15)  $[\bar{1}\bar{1}2]$ ,  $[[111]]$ ; 21)  $[\bar{1}10]$ ,  $[[10\frac{1}{2}]]$ ;  
 4)  $[2\bar{1}0]$ ,  $[[011]]$ ; 10)  $[01\bar{2}]$ ,  $[[\frac{1}{2}\frac{1}{2}1]]$ ; 16)  $[\bar{1}01]$ ,  $[[100]]$ ; 22)  $[1\bar{1}1]$ ,  $[[0\frac{1}{2}0]]$ ;  
 5)  $[0\bar{1}0]$ ,  $[[\frac{1}{2}11]]$ ; 11)  $[1\bar{2}0]$ ,  $[[010]]$ ; 17)  $[10\bar{2}]$ ,  $[[0\frac{1}{2}1]]$ ; 23)  $[1\bar{1}1]$ ,  $[[01\frac{1}{2}]]$ ;  
 6)  $[\bar{2}21]$ ,  $[[11\frac{1}{2}]]$ ; 12)  $[\bar{1}21]$ ,  $[[\frac{1}{2}10]]$ ; 18)  $[0\bar{1}\bar{1}]$ ,  $[[\frac{1}{2}1\frac{1}{2}]]$ ; 24)  $[01\bar{1}]$ ,  $[[\frac{1}{2}01]]$ .

**3.** В кубическом кристалле нарисуйте вектор и найдите его длину (модуль):

- 1)  $\frac{1}{2}a[211]$ ; 4)  $\frac{1}{2}a[\bar{1}01]$ ; 7)  $\frac{1}{2}a[111]$ ; 10)  $\frac{1}{2}a[10\bar{2}]$ ; 13)  $\frac{1}{2}a[011]$ ;  
 2)  $\frac{1}{2}a[101]$ ; 5)  $\frac{1}{3}a[121]$ ; 8)  $\frac{1}{2}a[0\bar{1}1]$ ; 11)  $\frac{1}{3}a[10\bar{1}]$ ; 14)  $\frac{1}{2}a[\bar{1}11]$ ;  
 3)  $\frac{1}{3}a[11\bar{2}]$ ; 6)  $\frac{1}{3}a[110]$ ; 9)  $\frac{1}{3}a[\bar{1}10]$ ; 12)  $\frac{1}{2}a[\bar{1}12]$ ; 15)  $\frac{1}{2}a[\bar{1}2\bar{1}]$ .

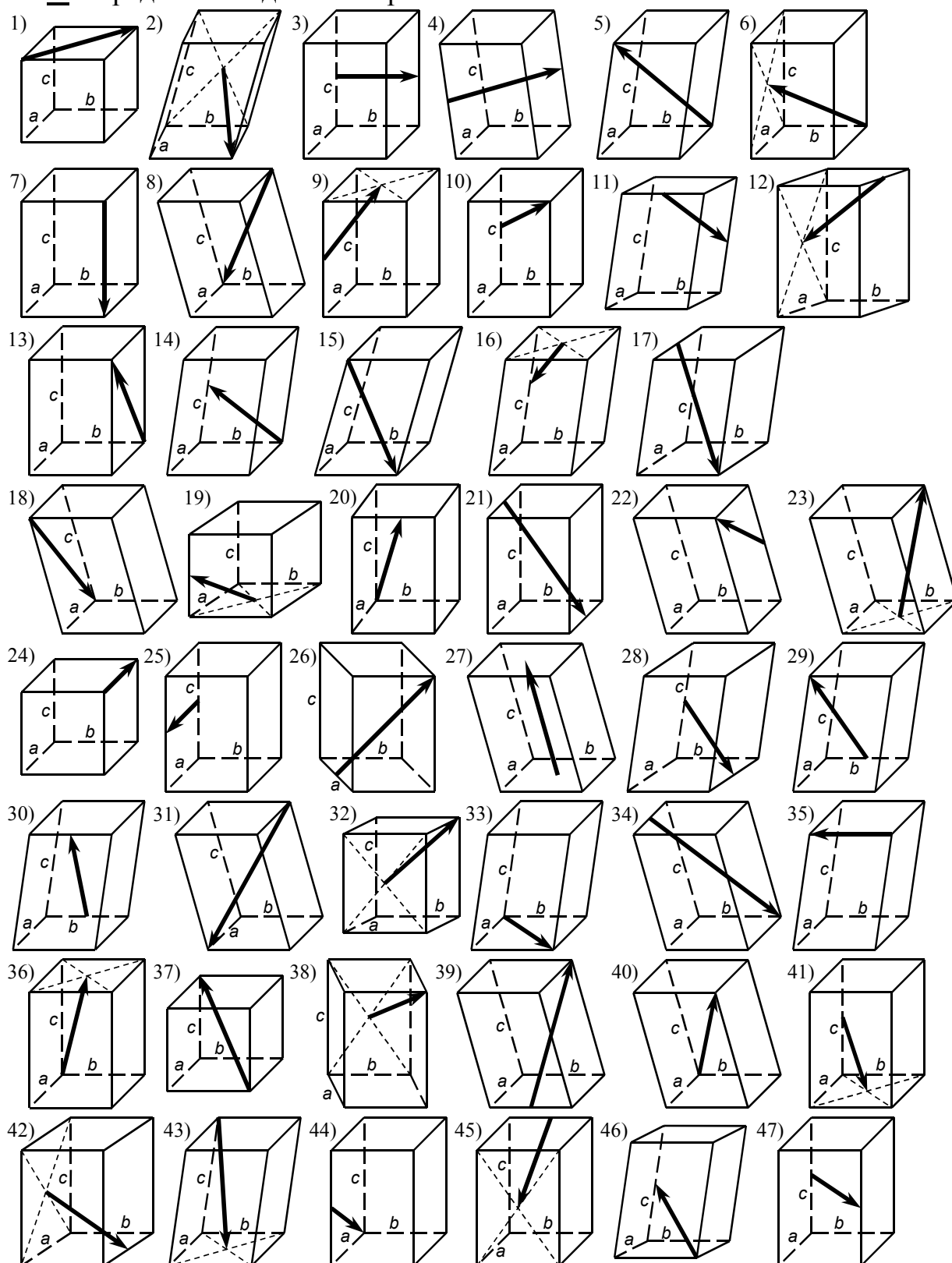
**4.** Нарисуйте плоскости:

- 1)  $(001)$ ; 11)  $(1\bar{1}2)$ ; 21)  $(1\bar{1}1)$ ; 31)  $(2\bar{2}1)$ ; 41)  $(01\bar{1})$ ; 51)  $(10\bar{2})$ ;  
 2)  $(101)$ ; 12)  $(1\bar{1}0)$ ; 22)  $(100)$ ; 32)  $(0\bar{2}1)$ ; 42)  $(111)$ ; 52)  $(02\bar{1})$ ;  
 3)  $(2\bar{1}0)$ ; 13)  $(102)$ ; 23)  $(\bar{1}01)$ ; 33)  $(121)$ ; 43)  $(22\bar{1})$ ; 53)  $(12\bar{2})$ ;  
 4)  $(\bar{1}12)$ ; 14)  $(110)$ ; 24)  $(11\bar{2})$ ; 34)  $(1\bar{1}0)$ ; 44)  $(210)$ ; 54)  $(221)$ ;  
 5)  $(0\bar{1}1)$ ; 15)  $(\bar{2}10)$ ; 25)  $(21\bar{1})$ ; 35)  $(\bar{1}11)$ ; 45)  $(\bar{1}01)$ ; 55)  $(\bar{1}02)$ ;  
 6)  $(0\bar{1}2)$ ; 16)  $(01\bar{2})$ ; 26)  $(20\bar{1})$ ; 36)  $(11\bar{1})$ ; 46)  $(012)$ ; 56)  $(112)$ ;  
 7)  $(2\bar{1}2)$ ; 17)  $(011)$ ; 27)  $(10\bar{1})$ ; 37)  $(21\bar{2})$ ; 47)  $(\bar{2}01)$ ; 57)  $(212)$ ;  
 8)  $(010)$ ; 18)  $(\bar{1}10)$ ; 28)  $(201)$ ; 38)  $(12\bar{1})$ ; 48)  $(120)$ ; 58)  $(01\bar{1})$ ;  
 9)  $(\bar{2}11)$ ; 19)  $(021)$ ; 29)  $(\bar{1}20)$ ; 39)  $(211)$ ; 49)  $(10\bar{1})$ ; 59)  $(\bar{1}21)$ ;  
 10)  $(1\bar{1}1)$ ; 20)  $(2\bar{1}1)$ ; 30)  $(1\bar{2}1)$ ; 40)  $(\bar{1}10)$ ; 50)  $(1\bar{2}0)$ ; 60)  $(11\bar{1})$ .

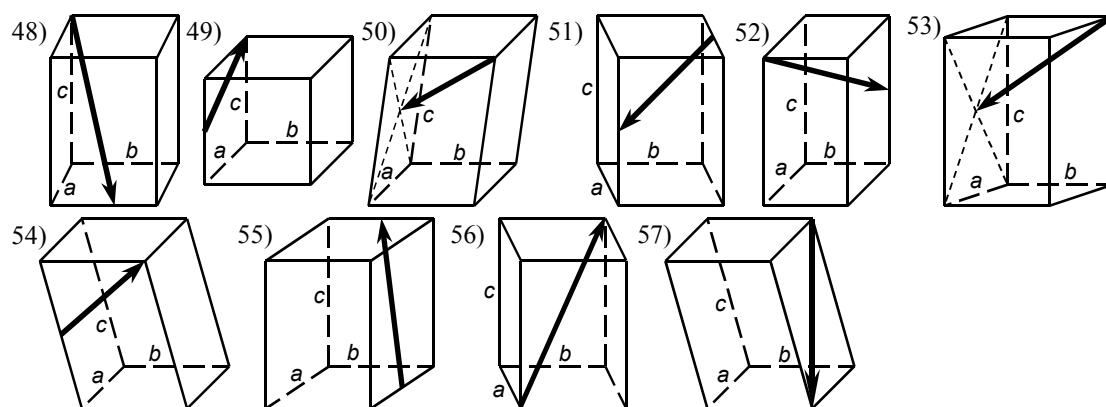
**5.** Нарисуйте плоскость ..., проходящую через узел ...:

- 1)  $(102)$ ,  $[[001]]$ ; 4)  $(20\bar{1})$ ,  $[[111]]$ ; 7)  $(110)$ ,  $[[0\frac{1}{2}0]]$ ; 10)  $(10\bar{1})$ ,  $[[\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]]$ ;  
 2)  $(1\bar{1}0)$ ,  $[[110]]$ ; 5)  $(12\bar{1})$ ,  $[[100]]$ ; 8)  $(201)$ ,  $[[\frac{1}{2}01]]$ ; 11)  $(111)$ ,  $[[011]]$ ;  
 3)  $(11\bar{2})$ ,  $[[101]]$ ; 6)  $(11\bar{1})$ ,  $[[11\frac{1}{2}]]$ ; 9)  $(112)$ ,  $[[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}]]$ ; 12)  $(1\bar{1}1)$ ,  $[[\frac{1}{2}00]]$ .

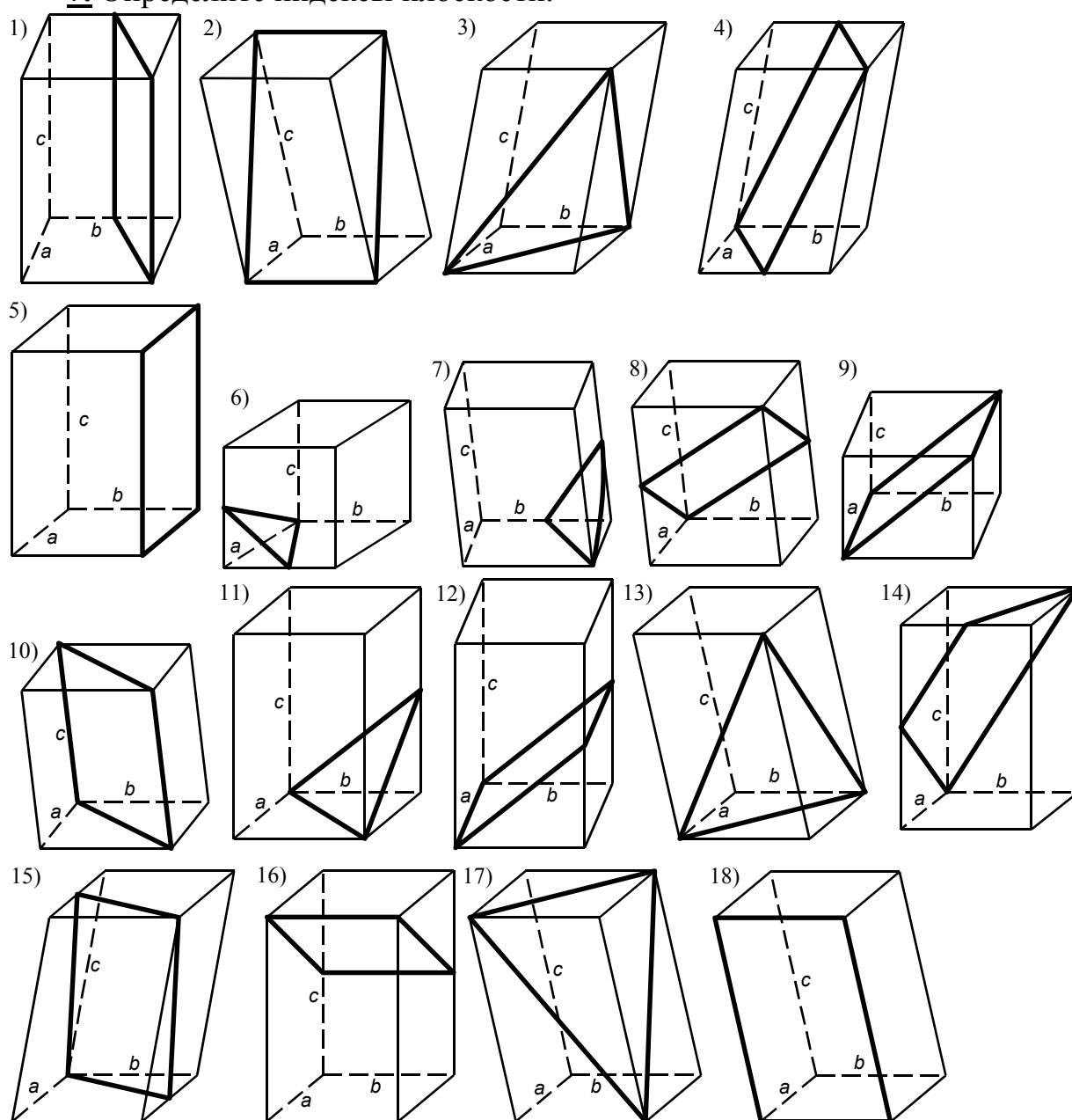
## 6. Определите индексы направления.

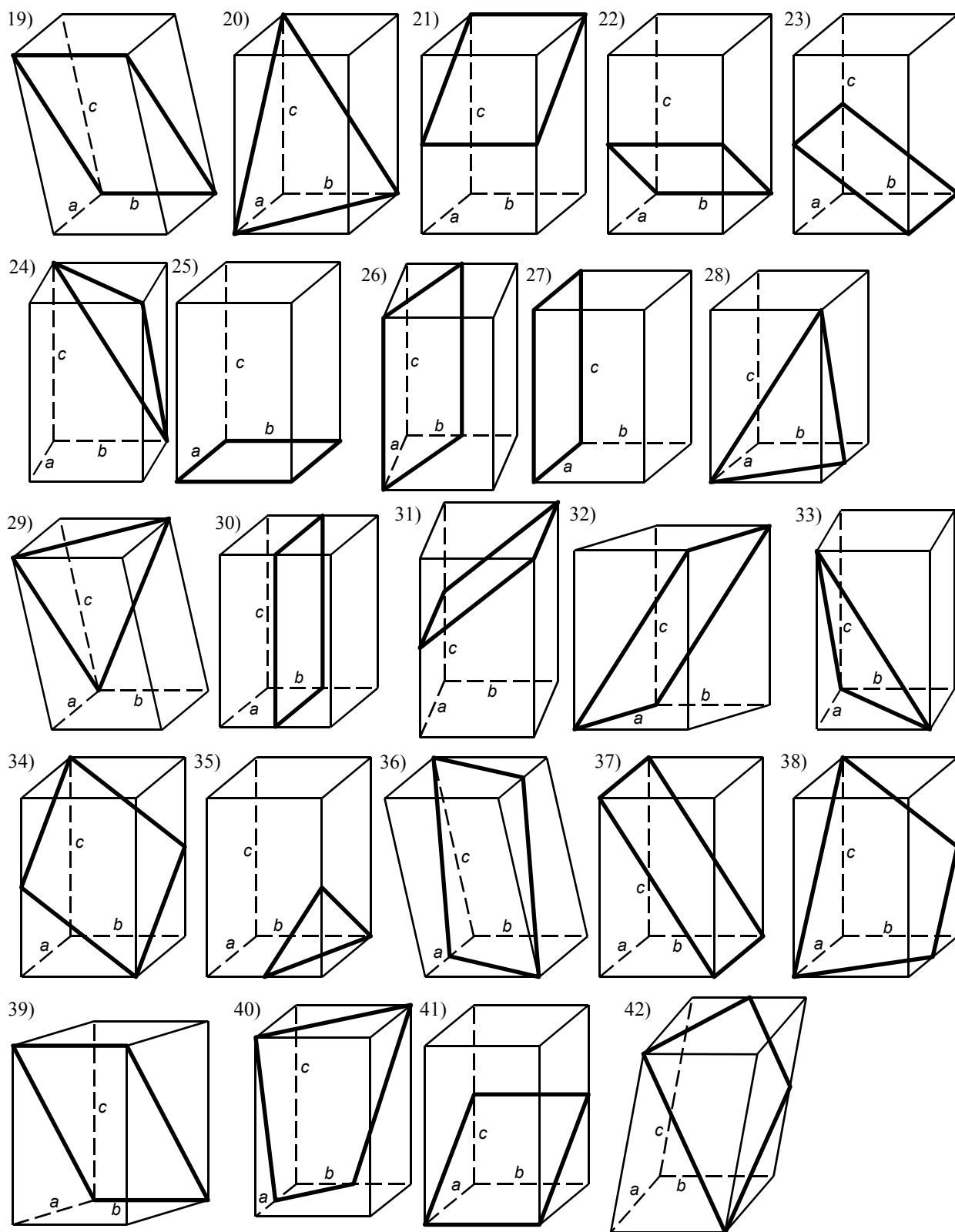


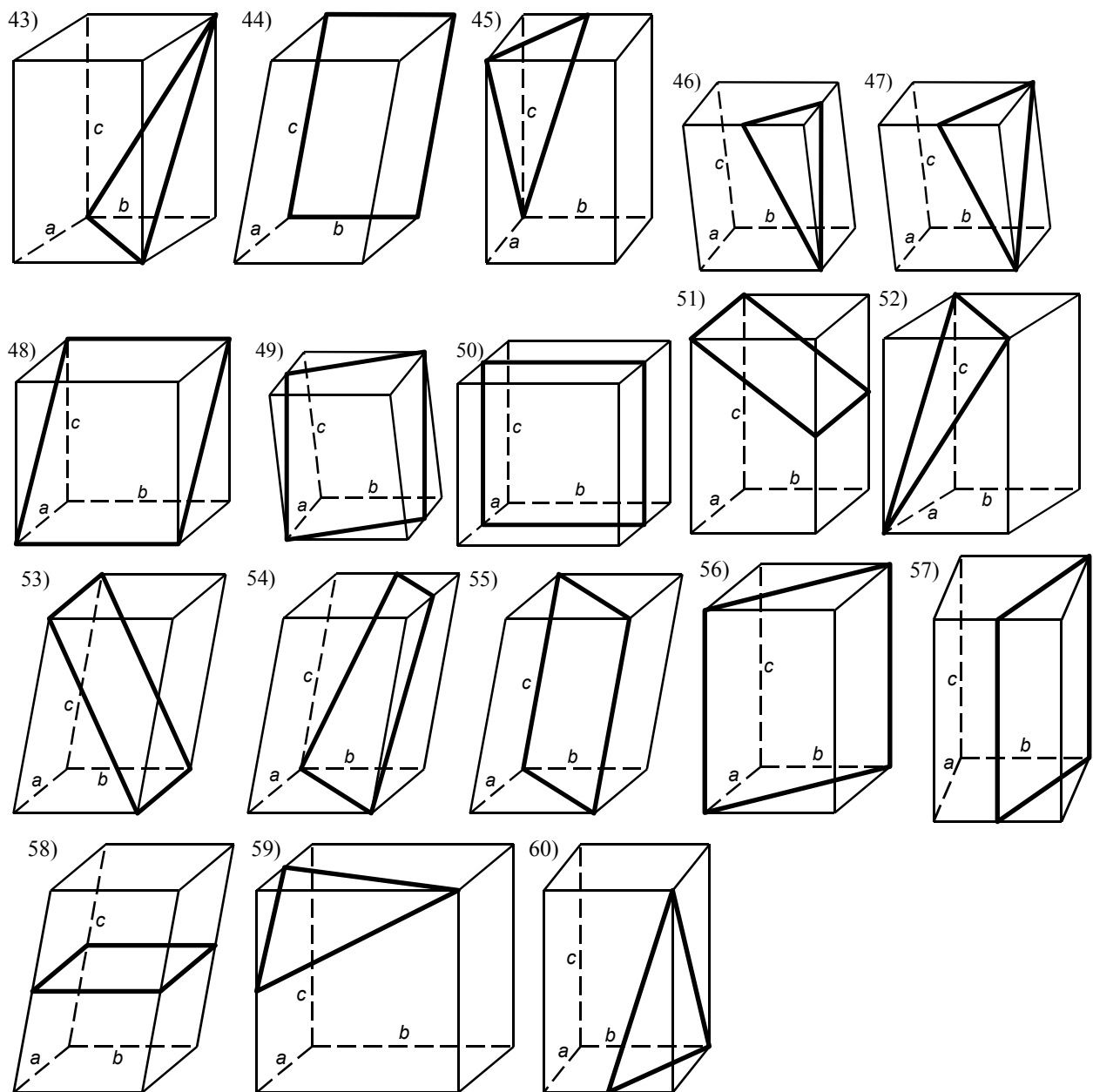




## 7. Определите индексы плоскости.







**8.** Определите, лежит ли направление в плоскости, и подтвердите рисунком:

- 1)  $[1\bar{1}1]$  в  $(101)$ ; 4)  $[012]$  в  $(22\bar{1})$ ; 7)  $[221]$  в  $(110)$ ; 10)  $[\bar{2}01]$  в  $(122)$ ;  
 2)  $[110]$  в  $(11\bar{1})$ ; 5)  $[10\bar{1}]$  в  $(\bar{1}11)$ ; 8)  $[111]$  в  $(\bar{2}01)$ ; 11)  $[\bar{1}01]$  в  $(121)$ ;  
 3)  $[121]$  в  $(1\bar{1}1)$ ; 6)  $[123]$  в  $(11\bar{1})$ ; 9)  $[2\bar{2}1]$  в  $(\bar{1}01)$ ; 12)  $[312]$  в  $(\bar{1}11)$ .

**9.** Найдите индексы двух любых направлений, лежащих в плоскости:

- |                    |                     |                     |                     |                     |
|--------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| 1) $(1\bar{1}0)$ ; | 7) $(112)$ ;        | 13) $(1\bar{1}1)$ ; | 19) $(1\bar{2}1)$ ; | 25) $(\bar{1}10)$ ; |
| 2) $(\bar{2}01)$ ; | 8) $(012)$ ;        | 14) $(11\bar{2})$ ; | 20) $(21\bar{1})$ ; | 26) $(102)$ ;       |
| 3) $(111)$ ;       | 9) $(011)$ ;        | 15) $(0\bar{1}1)$ ; | 21) $(\bar{1}01)$ ; | 27) $(2\bar{1}1)$ ; |
| 4) $(1\bar{2}0)$ ; | 10) $(0\bar{1}2)$ ; | 16) $(1\bar{1}2)$ ; | 22) $(100)$ ;       | 28) $(\bar{1}21)$ ; |
| 5) $(110)$ ;       | 11) $(010)$ ;       | 17) $(10\bar{1})$ ; | 23) $(11\bar{1})$ ; | 29) $(01\bar{1})$ ; |
| 6) $(001)$ ;       | 12) $(101)$ ;       | 18) $(\bar{1}02)$ ; | 24) $(12\bar{1})$ ; | 30) $(\bar{1}11)$ . |

**10.** Найдите угол между направлениями:

- 1)  $[001]$  и  $[\bar{1}01]$ ; 6)  $[12\bar{1}]$  и  $[01\bar{1}]$ ; 11)  $[2\bar{1}1]$  и  $[112]$ ; 16)  $[111]$  и  $[1\bar{1}1]$ ;  
2)  $[101]$  и  $[2\bar{2}1]$ ; 7)  $[1\bar{1}1]$  и  $[101]$ ; 12)  $[111]$  и  $[1\bar{2}0]$ ; 17)  $[123]$  и  $[0\bar{1}1]$ ;  
3)  $[\bar{1}22]$  и  $[01\bar{1}]$ ; 8)  $[101]$  и  $[011]$ ; 13)  $[1\bar{1}0]$  и  $[010]$ ; 18)  $[101]$  и  $[112]$ ;  
4)  $[011]$  и  $[0\bar{1}1]$ ; 9)  $[021]$  и  $[112]$ ; 14)  $[010]$  и  $[2\bar{1}2]$ ; 19)  $[1\bar{1}0]$  и  $[\bar{2}11]$ ;  
5)  $[1\bar{2}1]$  и  $[\bar{2}11]$ ; 10)  $[1\bar{1}0]$  и  $[101]$ ; 15)  $[311]$  и  $[010]$ ; 20)  $[011]$  и  $[1\bar{1}2]$ .

**11.** Перечислите все плоскости, входящие в семейство:

- 1)  $\{100\}$ ; 4)  $\{112\}$ ; 7)  $\{203\}$ ; 10)  $\{223\}$ ; 13)  $\{225\}$ ;  
2)  $\{110\}$ ; 5)  $\{113\}$ ; 8)  $\{102\}$ ; 11)  $\{123\}$ ; 14)  $\{557\}$ ;  
3)  $\{111\}$ ; 6)  $\{122\}$ ; 9)  $\{103\}$ ; 12)  $\{331\}$ ; 15)  $\{259\}$ .

**12.** Найдите направление, по которому пересекаются плоскости:

- 1)  $(111)$  и  $(121)$ ; 4)  $(112)$  и  $(11\bar{2})$ ; 7)  $(021)$  и  $(01\bar{1})$ ; 10)  $(011)$  и  $(102)$ ;  
2)  $(100)$  и  $(\bar{1}10)$ ; 5)  $(\bar{1}02)$  и  $(101)$ ; 8)  $(211)$  и  $(011)$ ; 11)  $(102)$  и  $(120)$ ;  
3)  $(122)$  и  $(101)$ ; 6)  $(103)$  и  $(1\bar{1}1)$ ; 9)  $(2\bar{1}1)$  и  $(\bar{1}21)$ ; 12)  $(012)$  и  $(021)$ .

**13.** Найдите индексы плоскости, проходящей через направления:

- 1)  $[110]$  и  $[101]$ ; 7)  $[1\bar{1}1]$  и  $[121]$ ; 13)  $[110]$  и  $[100]$ ; 19)  $[011]$  и  $[10\bar{1}]$ ;  
2)  $[112]$  и  $[10\bar{1}]$ ; 8)  $[111]$  и  $[\bar{1}11]$ ; 14)  $[110]$  и  $[1\bar{1}1]$ ; 20)  $[\bar{1}12]$  и  $[\bar{1}11]$ ;  
3)  $[111]$  и  $[211]$ ; 9)  $[110]$  и  $[\bar{1}10]$ ; 15)  $[112]$  и  $[11\bar{2}]$ ; 21)  $[011]$  и  $[1\bar{1}0]$ ;  
4)  $[111]$  и  $[\bar{1}01]$ ; 10)  $[10\bar{1}]$  и  $[1\bar{1}0]$ ; 16)  $[12\bar{2}]$  и  $[10\bar{1}]$ ; 22)  $[\bar{1}21]$  и  $[101]$ ;  
5)  $[21\bar{1}]$  и  $[011]$ ; 11)  $[121]$  и  $[110]$ ; 17)  $[\bar{1}21]$  и  $[111]$ ; 23)  $[111]$  и  $[101]$ ;  
6)  $[101]$  и  $[10\bar{1}]$ ; 12)  $[131]$  и  $[101]$ ; 18)  $[01\bar{1}]$  и  $[10\bar{1}]$ ; 24)  $[100]$  и  $[110]$ .

**14.** Перечислите все плоскости семейства  $\{\dots\}$ , входящие в зону  $[\dots]$ .

- 1)  $\{111\}$ ,  $[011]$ ; 4)  $\{123\}$ ,  $[111]$ ; 7)  $\{011\}$ ,  $[001]$ ; 10)  $\{211\}$ ,  $[1\bar{1}1]$ ;  
2)  $\{111\}$ ,  $[1\bar{1}0]$ ; 5)  $\{112\}$ ,  $[\bar{1}11]$ ; 8)  $\{221\}$ ,  $[01\bar{1}]$ ; 11)  $\{123\}$ ,  $[\bar{1}11]$ ;  
3)  $\{110\}$ ,  $[111]$ ; 6)  $\{112\}$ ,  $[111]$ ; 9)  $\{011\}$ ,  $[11\bar{1}]$ ; 12)  $\{012\}$ ,  $[010]$ .

**15.** Какие направления семейства  $\langle\dots\rangle$  лежат в плоскости  $(\dots)$ ?

- 1)  $\langle 102 \rangle$ ,  $(001)$ ; 4)  $\langle 122 \rangle$ ,  $(0\bar{1}1)$ ; 7)  $\langle 111 \rangle$ ,  $(\bar{1}10)$ ; 10)  $\langle 210 \rangle$ ,  $(100)$ ;  
2)  $\langle 211 \rangle$ ,  $(11\bar{1})$ ; 5)  $\langle 110 \rangle$ ,  $(\bar{1}11)$ ; 8)  $\langle 101 \rangle$ ,  $(1\bar{1}1)$ ; 11)  $\langle 123 \rangle$ ,  $(1\bar{1}1)$ ;  
3)  $\langle 111 \rangle$ ,  $(101)$ ; 6)  $\langle 321 \rangle$ ,  $(11\bar{1})$ ; 9)  $\langle 101 \rangle$ ,  $(100)$ ; 12)  $\langle 112 \rangle$ ,  $(11\bar{1})$ .

**16.** Подсчитайте, какой процент металлов периодической системы имеют каждую из решёток ОЦК, ГЦК, ГПУ: а) при комнатной температуре; б) при температуре плавления. Сколько процентов металлов полиморфны? (См. приложение 7.)

**17.** Найдите плотность двух любых металлов (с решётками ОЦК и ГЦК) по значениям параметра решётки. Сравните с табличными значениями плотности.

**18.** Найдите плотность двух любых металлов с решёткой ГПУ по значениям параметров решётки  $c$  и  $a$ . Сравните с табличными значениями плотности.

**19.** Рассчитайте плотность металла (при комнатной температуре) по параметрам его кристаллической решётки и сравните с табличным значением:

- |              |               |               |              |               |
|--------------|---------------|---------------|--------------|---------------|
| 1) стронций; | 8) литий;     | 15) ниобий;   | 22) кальций; | 29) железо;   |
| 2) алюминий; | 9) цинк;      | 16) молибден; | 23) хром;    | 30) ванадий;  |
| 3) никель;   | 10) свинец;   | 17) палладий; | 24) титан;   | 31) вольфрам; |
| 4) медь;     | 11) европий;  | 18) серебро;  | 25) рубидий; | 32) кобальт;  |
| 5) иридий;   | 12) натрий;   | 19) тантал;   | 26) платина; | 33) барий;    |
| 6) калий;    | 13) цирконий; | 20) цезий;    | 27) рений;   | 34) осмий;    |
| 7) магний;   | 14) кадмий;   | 21) золото;   | 28) торий.   | 35) таллий.   |

**20.** Рассчитайте атомный радиус металла (при комнатной температуре) по параметрам его кристаллической решётки:

- |              |               |               |              |               |
|--------------|---------------|---------------|--------------|---------------|
| 1) стронций; | 8) литий;     | 15) ниобий;   | 22) кальций; | 29) железо;   |
| 2) алюминий; | 9) цинк;      | 16) молибден; | 23) хром;    | 30) ванадий;  |
| 3) никель;   | 10) свинец;   | 17) палладий; | 24) титан;   | 31) вольфрам; |
| 4) медь;     | 11) европий;  | 18) серебро;  | 25) рубидий; | 32) кобальт;  |
| 5) иридий;   | 12) натрий;   | 19) тантал;   | 26) платина; | 33) барий;    |
| 6) калий;    | 13) цирконий; | 20) цезий;    | 27) рений;   | 34) осмий;    |
| 7) магний;   | 14) кадмий;   | 21) золото;   | 28) торий.   | 35) таллий.   |

**21.** Покажите, что при идеально плотной упаковке атомов соотношение осей  $c$  и  $a$  ГПУ-решётки должно составлять  $c/a = 1,633$ .

**22.** В структуре ГЦК последовательность чередования плотноупакованных слоёв  $ABC$ , а последовательность их сдвигов друг относительно друга «+++» (см. рис. 19,  $e$ ). В структуре ГПУ последовательность слоёв  $AB$ , а сдвигов слоёв «+−+−» (см. рис. 20,  $z$ ). Сделайте аналогичный рисунок и определите последовательность сдвигов слоёв для:

- четырёхслойной «двойной ГПУ» структуры с чередованием слоёв  $ABCB$ ;
- семислойной структуры  $7R$  с чередованием слоёв  $ABCBCB$ ;
- девятислойной структуры  $9R$  с чередованием слоёв  $ABCBCACAB$ .

**23.** Рассчитайте равновесную долю вакансий при температурах  $-196^{\circ}\text{C}$ ;  $+20^{\circ}\text{C}$ ;  $\frac{1}{2}T_{\text{пл}}$ ;  $\frac{2}{3}T_{\text{пл}}$ ;  $0,9T_{\text{пл}}$ ;  $T_{\text{пл}}$  (по абсолютной шкале). Постройте график зависимости доли вакансий от температуры для:

- |              |             |               |               |
|--------------|-------------|---------------|---------------|
| 1) алюминия; | 4) золота;  | 7) кадмия;    | 10) серебра;  |
| 2) ниобия;   | 5) ванадия; | 8) платины;   | 11) палладия; |
| 3) никеля;   | 6) цинка;   | 9) молибдена; | 12) свинца.   |

**24.** Постройте график зависимости энергии образования вакансии в 10...20 различных металлах от их температуры плавления. Объясните (качественно), почему эти две величины связаны таким образом.

**25.** Сравните равновесную долю вакансий при температуре плавления в 5...10 любых металлах. Объясните полученный результат.

**26.** Резкая закалка меди от температуры плавления уменьшает её плотность на 0,02%. Оцените энергию образования вакансии и сравните её с табличной.

**27.** Образец металла закалён от температуры плавления до комнатной. Оцените долю избыточных вакансий и их концентрацию (в  $1 \text{ см}^3$ ). Металлы:

- |             |            |              |             |
|-------------|------------|--------------|-------------|
| 1) висмут;  | 4) магний; | 7) палладий; | 10) индий;  |
| 2) платина; | 5) медь;   | 8) свинец;   | 11) олово;  |
| 3) цинк;    | 6) золото; | 9) серебро;  | 12) никель. |

**28.** Образец золота нагревают от  $20^\circ\text{C}$  до температуры плавления. При этом его объём растёт вследствие как термического расширения, так и увеличения числа вакансий. Сравните вклады этих двух эффектов. Средний коэффициент термического расширения золота в указанном интервале температур равен  $17 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ .

**29.** Образец металла (возьмите любой) с размером зерна  $10 \text{ мкм}$  закалён от температуры  $0,95 T_{\text{пл}}$  до комнатной. Оцените среднее смещение границ зёрен в результате стока избыточных вакансий, считая, что вакансии стекают только к границам. Сравните величину смещения с межатомным расстоянием.

**30.** Для двух любых металлов оцените внешнее давление, которое уменьшит равновесную концентрацию вакансий при температуре плавления на порядок.

**31.** Рассчитайте значения параметра размерного несоответствия  $\epsilon$  по приведённым ниже параметрам решётки  $a$  твёрдых растворов замещения и по атомным радиусам (см. приложение 3). Сравните полученные значения. Параметр решётки чистого растворителя  $a_0$  возьмите из приложения 7.

Раствор	$a, \text{Å}$	Раствор	$a, \text{Å}$	Раствор	$a, \text{Å}$
Cu–1 ат. %Sn	3,6249	Al–1 ат. %Mg	4,0539	$\alpha$ -Fe–1 ат. %W	2,8699
Cu–1 ат. %Au	3,6201	Al–1 ат. %Cu	4,0464	$\alpha$ -Fe–1 ат. %Ni	2,8672
Cu–1 ат. %Zn	3,6166	Al–0,5 ат. %Mn	4,0469	$\alpha$ -Fe–1 ат. %Si	2,8658

**32.** Оцените частоту перескоков вакансии и атома и коэффициент самодиффузии при комнатной температуре и вблизи температуры плавления:

- |                 |              |                |                |
|-----------------|--------------|----------------|----------------|
| 1) в никеле;    | 4) в кадмии; | 7) в алюминии; | 10) в железе;  |
| 2) в молибдене; | 5) в литии;  | 8) в серебре;  | 11) в ниобии;  |
| 3) в свинце;    | 6) в олове;  | 9) в цинке;    | 12) в ванадии. |

**33.** Оцените среднеквадратическое смещение вакансии и атома за 1 час (в микронах и в единицах межатомного расстояния) при комнатной температуре и вблизи температуры плавления:

- |              |                 |               |                 |
|--------------|-----------------|---------------|-----------------|
| 1) в золоте; | 4) в железе;    | 7) в магнии;  | 10) в тантале;  |
| 2) в хrome;  | 5) в вольфраме; | 8) в платине; | 11) в палладии; |
| 3) в меди;   | 6) в свинце;    | 9) в индии;   | 12) в литии.    |

**34.** Сталь с исходной концентрацией углерода  $C_\infty$  находится в цементационной печи с температурой  $T$  и углеродным потенциалом  $C_0$ . Рассчитайте: а) концентрацию углерода на глубине  $h$  через время  $\tau_1$ ; б) спустя какое время эта концентрация достигнет  $C_1$ ; в) глубину слоя, где концентрация превышает  $C_1$ , через

время  $\tau_2$ ; г) во сколько раз больше времени потребуется для получения слоя такой же глубины, если температуру понизить на  $100^\circ\text{C}$ ? Коэффициент диффузии углерода в аустените принимайте равным  $D = 0,10 \exp(-134 \cdot 10^3 / RT)$  см<sup>2</sup>/с (где энергия активации выражена в Дж/моль).

- 1)  $T = 920^\circ\text{C}$ ;  $C_\infty = 0,12\%$ ;  $C_0 = 1,2\%$ ;  $C_1 = 0,65\%$ ;  $h = 0,8$  мм;  $\tau_1 = 8$  ч;  $\tau_2 = 16$  ч;
- 2)  $T = 920^\circ\text{C}$ ;  $C_\infty = 0,12\%$ ;  $C_0 = 1,2\%$ ;  $C_1 = 0,6\%$ ;  $h = 0,8$  мм;  $\tau_1 = 6$  ч;  $\tau_2 = 16$  ч;
- 3)  $T = 920^\circ\text{C}$ ;  $C_\infty = 0,2\%$ ;  $C_0 = 1,2\%$ ;  $C_1 = 0,8\%$ ;  $h = 0,6$  мм;  $\tau_1 = 6$  ч;  $\tau_2 = 20$  ч;
- 4)  $T = 930^\circ\text{C}$ ;  $C_\infty = 0,2\%$ ;  $C_0 = 1,2\%$ ;  $C_1 = 0,8\%$ ;  $h = 0,6$  мм;  $\tau_1 = 6$  ч;  $\tau_2 = 20$  ч;
- 5)  $T = 930^\circ\text{C}$ ;  $C_\infty = 0,15\%$ ;  $C_0 = 1,0\%$ ;  $C_1 = 0,5\%$ ;  $h = 1$  мм;  $\tau_1 = 10$  ч;  $\tau_2 = 18$  ч;
- 6)  $T = 930^\circ\text{C}$ ;  $C_\infty = 0,15\%$ ;  $C_0 = 1,0\%$ ;  $C_1 = 0,7\%$ ;  $h = 0,5$  мм;  $\tau_1 = 6$  ч;  $\tau_2 = 16$  ч;
- 7)  $T = 940^\circ\text{C}$ ;  $C_\infty = 0,18\%$ ;  $C_0 = 0,8\%$ ;  $C_1 = 0,5\%$ ;  $h = 0,9$  мм;  $\tau_1 = 8$  ч;  $\tau_2 = 20$  ч;
- 8)  $T = 940^\circ\text{C}$ ;  $C_\infty = 0,18\%$ ;  $C_0 = 0,8\%$ ;  $C_1 = 0,5\%$ ;  $h = 0,7$  мм;  $\tau_1 = 6$  ч;  $\tau_2 = 15$  ч;
- 9)  $T = 940^\circ\text{C}$ ;  $C_\infty = 0,2\%$ ;  $C_0 = 1,0\%$ ;  $C_1 = 0,6\%$ ;  $h = 0,8$  мм;  $\tau_1 = 7$  ч;  $\tau_2 = 16$  ч;
- 10)  $T = 950^\circ\text{C}$ ;  $C_\infty = 0,2\%$ ;  $C_0 = 1,0\%$ ;  $C_1 = 0,6\%$ ;  $h = 0,8$  мм;  $\tau_1 = 6$  ч;  $\tau_2 = 14$  ч;
- 11)  $T = 950^\circ\text{C}$ ;  $C_\infty = 0,15\%$ ;  $C_0 = 0,9\%$ ;  $C_1 = 0,6\%$ ;  $h = 0,7$  мм;  $\tau_1 = 6$  ч;  $\tau_2 = 18$  ч;
- 12)  $T = 950^\circ\text{C}$ ;  $C_\infty = 0,15\%$ ;  $C_0 = 0,9\%$ ;  $C_1 = 0,5\%$ ;  $h = 0,8$  мм;  $\tau_1 = 6$  ч;  $\tau_2 = 12$  ч.

**35.** Перечислите все возможные системы скольжения:

- 1)  $\{111\} \langle \bar{1}10 \rangle$  в ГЦК-решётке;
- 2)  $\{110\} \langle \bar{1}11 \rangle$  в ОЦК-решётке.

**36.** Найдите фактор Шмида для системы скольжения ... в монокристалле ГЦК- (ОЦК-) металла, растягиваемом вдоль оси ... . При каком нормальном напряжении в поперечном сечении  $\sigma$  начнётся сдвиг по этой системе, если критическое напряжение сдвига  $\tau_s = 20$  МПа?

- |   |  |
|---|--|
| 1) $(111) [\bar{1}10]$ , ГЦК, вдоль $[112]$ ;       | 7) $(\bar{1}11) [110]$ , ГЦК, вдоль $[10\bar{1}]$ ;  |
| 2) $(111) [\bar{1}01]$ , ГЦК, вдоль $[\bar{1}11]$ ; | 8) $(011) [11\bar{1}]$ , ОЦК, вдоль $[\bar{1}02]$ ;  |
| 3) $(11\bar{1}) [011]$ , ГЦК, вдоль $[121]$ ;       | 9) $(1\bar{1}0) [111]$ , ОЦК, вдоль $[0\bar{1}1]$ ;  |
| 4) $(1\bar{1}1) [110]$ , ГЦК, вдоль $[211]$ ;       | 10) $(1\bar{2}1) [111]$ , ОЦК, вдоль $[1\bar{1}1]$ ; |
| 5) $(1\bar{1}1) [110]$ , ГЦК, вдоль $[212]$ ;       | 11) $(211) [\bar{1}11]$ , ОЦК, вдоль $[011]$ ;       |
| 6) $(\bar{1}11) [110]$ , ГЦК, вдоль $[010]$ ;       | 12) $(101) [\bar{1}11]$ , ОЦК, вдоль $[112]$ .       |

**37.** Монокристалл металла с решёткой ... растягивают вдоль оси .... Найдите факторы Шмида для всех систем скольжения (для ОЦК-металлов ограничьтесь рассмотрением систем  $\{110\} \langle \bar{1}11 \rangle$ ). По скольким системам одновременно начнётся скольжение при достижении критического касательного напряжения  $\tau_s$ ? Чему будет равен предел текучести  $\sigma_{0,2}$ , если  $\tau_s = \dots$  МПа?

- 1) ОЦК,  $[111]$ , 20 МПа; 5) ГЦК,  $[121]$ , 25 МПа; 9) ОЦК,  $[100]$ , 30 МПа;
- 2) ГЦК,  $[101]$ , 25 МПа; 6) ОЦК,  $[110]$ , 50 МПа; 10) ГЦК,  $[001]$ , 20 МПа;
- 3) ОЦК,  $[211]$ , 30 МПа; 7) ГЦК,  $[112]$ , 25 МПа; 11) ОЦК,  $[101]$ , 40 МПа;
- 4) ОЦК,  $[011]$ , 20 МПа; 8) ОЦК,  $[112]$ , 40 МПа; 12) ГЦК,  $[110]$ , 40 МПа.

**38.** Перечислите все возможные векторы Бюргерса и соответствующие им направления оси полных краевых дислокаций в решётке ..., имеющих плоскость скольжения .... Для каждого случая сделайте чертёж. В какой

плоскости и в каком направлении должно действовать касательное напряжение, чтобы эта дислокация начала скользить? В каком направлении будет происходить скольжение?

- |                          |                          |                                |                                     |
|--------------------------|--------------------------|--------------------------------|-------------------------------------|
| 1) ГЦК, (111);           | 4) ОЦК, (101);           | 7) ГЦК, (11 $\bar{1}$ );       | 10) ОЦК, (10 $\bar{1}$ );           |
| 2) ОЦК, (110);           | 5) ГЦК, (1 $\bar{1}$ 1); | 8) ОЦК, (0 $\bar{1}$ 1);       | 11) ГЦК, ( $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ); |
| 3) ГЦК, ( $\bar{1}$ 11); | 6) ОЦК, (011);           | 9) ГЦК, ( $\bar{1}\bar{1}$ 1); | 12) ГЦК, (1 $\bar{1}\bar{1}$ ).     |

**39.** Определите тип дислокации в ГЦК-решётке, если линия этой дислокации лежит вдоль направления ..., а вектор Бюргерса равен .... Способна ли эта дислокация к скольжению, и если да, то в какой плоскости (плоскостях)?

- |   |   |  |  |
|---|---|--|--|
| 1) [110], $\frac{1}{6}a$ [12 $\bar{1}$ ];           | 6) [110], $\frac{1}{2}a$ [0 $\bar{1}$ 1];           | 11) [21 $\bar{1}$ ], $\frac{1}{2}a$ [011];           | 16) [101], $\frac{1}{2}a$ [01 $\bar{1}$ ];           |
| 2) [ $\bar{1}$ 10], $\frac{1}{3}a$ [111];           | 7) [0 $\bar{1}$ 1], $\frac{1}{6}a$ [1 $\bar{1}$ 2]; | 12) [ $\bar{1}$ 12], $\frac{1}{6}a$ [ $\bar{1}$ 12]; | 17) [ $\bar{1}$ 10], $\frac{1}{2}a$ [1 $\bar{1}$ 0]; |
| 3) [1 $\bar{2}$ 1], $\frac{1}{2}a$ [10 $\bar{1}$ ]; | 8) [121], $\frac{1}{3}a$ [1 $\bar{1}$ 1];           | 13) [1 $\bar{1}$ 2], $\frac{1}{2}a$ [110];           | 18) [ $\bar{1}$ 01], $\frac{1}{6}a$ [ $\bar{1}$ 12]; |
| 4) [011], $\frac{1}{6}a$ [121];                     | 9) [112], $\frac{1}{2}a$ [ $\bar{1}$ 10];           | 14) [011], $\frac{1}{6}a$ [0 $\bar{1}$ 1];           | 19) [01 $\bar{1}$ ], $\frac{1}{2}a$ [101];           |
| 5) [110], $\frac{1}{6}a$ [1 $\bar{1}$ 0];           | 10) [101], $\frac{1}{6}a$ [10 $\bar{1}$ ];          | 15) [2 $\bar{1}$ 1], $\frac{1}{3}a$ [11 $\bar{1}$ ]; | 20) [110], $\frac{1}{3}a$ [ $\bar{1}$ 11].           |

**40.** Определите тип дислокации в ОЦК-решётке, если линия этой дислокации лежит вдоль направления ..., а вектор Бюргерса равен .... Способна ли эта дислокация к скольжению, и если да, то в какой плоскости (плоскостях)?

- |   |   |  |
|---|---|--|
| 1) [121], $\frac{1}{2}a$ [1 $\bar{1}$ 1]; | 5) [2 $\bar{1}$ 1], $\frac{1}{2}a$ [ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ]; | 9) [010], $a$ [100];                                       |
| 2) [ $\bar{1}$ 10], $\frac{1}{2}a$ [111]; | 6) [001], $a$ [010];  | 10) [1 $\bar{1}$ 0], $\frac{1}{2}a$ [ $\bar{1}\bar{1}$ 1]; |
| 3) [111], $\frac{1}{2}a$ [11 $\bar{1}$ ]; | 7) [110], $\frac{1}{2}a$ [ $\bar{1}$ 11];                     | 11) [111], $\frac{1}{2}a$ [1 $\bar{1}\bar{1}$ ];           |
| 4) [100], $a$ [001];                      | 8) [ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ], $\frac{1}{2}a$ [1 $\bar{1}$ 1]; | 12) [1 $\bar{2}$ 1], $\frac{1}{2}a$ [111].                 |

**41.** Найдите все возможные плоскости скольжения полных краевых дислокаций в решётке ..., имеющих вектор Бюргерса .... Для каждого варианта укажите направление линии дислокации.

- |  |  |   |   |
|--|--|---|---|
| 1) $\frac{1}{2}a$ [110] в ГЦК;                 | 5) $\frac{1}{2}a$ [ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ] в ОЦК; | 9) $\frac{1}{2}a$ [01 $\bar{1}$ ] в ГЦК;        | 13) $\frac{1}{2}a$ [ $\bar{1}$ 11] в ОЦК; |
| 2) $\frac{1}{2}a$ [101] в ГЦК;                 | 6) $\frac{1}{2}a$ [10 $\bar{1}$ ] в ГЦК;           | 10) $\frac{1}{2}a$ [1 $\bar{1}$ 1] в ОЦК;       | 14) $\frac{1}{2}a$ [0 $\bar{1}$ 1] в ГЦК; |
| 3) $\frac{1}{2}a$ [011] в ГЦК;                 | 7) $\frac{1}{2}a$ [111] в ОЦК;                     | 11) $\frac{1}{2}a$ [ $\bar{1}$ 01] в ГЦК;       | 15) $\frac{1}{2}a$ [11 $\bar{1}$ ] в ОЦК; |
| 4) $\frac{1}{2}a$ [ $\bar{1}\bar{1}$ 1] в ОЦК; | 8) $\frac{1}{2}a$ [ $\bar{1}$ 10] в ГЦК;           | 12) $\frac{1}{2}a$ [1 $\bar{1}\bar{1}$ ] в ОЦК; | 16) $\frac{1}{2}a$ [1 $\bar{1}$ 0] в ГЦК. |

**42.** Полная винтовая дислокация расположена вдоль направления ... кристалла с решёткой .... Чему равен её вектор Бюргерса? В какой плоскости и вдоль какого направления должно действовать касательное напряжение, которое заставит её скользить в плоскости ...? В каком направлении будет происходить скольжение?

- |  |   |   |
|--|---|---|
| 1) [1 $\bar{1}$ 1] в ОЦК, ( $\bar{1}$ 01);       | 6) [11 $\bar{1}$ ] в ОЦК, (1 $\bar{1}$ 0);  | 11) [ $\bar{1}$ 1 $\bar{1}$ ] в ОЦК, (10 $\bar{1}$ ); |
| 2) [111] в ОЦК, (11 $\bar{2}$ );                 | 7) [1 $\bar{1}$ 0] в ГЦК, (111);            | 12) [ $\bar{1}$ 01] в ГЦК, (111);                     |
| 3) [ $\bar{1}\bar{1}$ 1] в ОЦК, (21 $\bar{1}$ ); | 8) [ $\bar{1}$ 11] в ОЦК, (1 $\bar{1}$ 2);  | 13) [110] в ГЦК, (1 $\bar{1}$ 1);                     |
| 4) [011] в ГЦК, (1 $\bar{1}$ 1);                 | 9) [1 $\bar{1}$ 1] в ОЦК, (121);            | 14) [1 $\bar{1}\bar{1}$ ] в ОЦК, (110);               |
| 5) [101] в ГЦК, (11 $\bar{1}$ );                 | 10) [10 $\bar{1}$ ] в ГЦК, (1 $\bar{1}$ 1); | 15) [01 $\bar{1}$ ] в ГЦК, ( $\bar{1}$ 11).           |



**43.** Кристалл пересыщен вакансиями до концентрации  $n_v/N \sim 10^{-4}$  и имеет плотность дислокаций  $\rho \sim 10^8 \text{ см}^{-2}$ . Считая все дислокации краевыми, найдите их среднее смещение (в микронах и в единицах межатомного расстояния) вследствие переползания, если все вакансии стекут к дислокациям. Сравните полученную величину со средним расстоянием между дислокациями.

**44.** Воспользовавшись формулами для какой-либо из компонент напряжения, найдите радиус ядра краевой и винтовой дислокации в плоскости скольжения, условно считая, что отклонения от закона Гука становятся существенными при деформации  $\sim 5\%$ .

**45.** Найдите среднее расстояние между дислокациями: а) в отожжённом металле с плотностью дислокаций  $\rho = 10^6 \text{ см}^{-2}$ ; б) в холоднодеформированном металле с  $\rho = 10^{10} \text{ см}^{-2}$ . Сравните его с радиусом ядра дислокаций ( $r_{\text{ядра}} \sim 3b$ ).

**46.** Сколько километров дислокаций содержится в  $1 \text{ см}^3$ : а) отожжённого металла с плотностью дислокаций  $\rho = 10^6 \text{ см}^{-2}$ ; б) холоднодеформированного металла с  $\rho = 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ? Найдите объёмную долю ядер дислокаций в обоих случаях (принимая радиус ядра  $r_{\text{ядра}} \sim 3b$ ).

**47.** В расчёте на  $1 \text{ см}^3$  металла сравните: а) энергию дислокаций при их максимально возможной плотности  $\sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ; б) энергию вакансий при их максимально возможной равновесной концентрации (вблизи температуры плавления); в) энергию межатомной связи (энергию сублимации)  $\epsilon_{\text{субл}}$ . Расчёт сделайте для:

- |  |   |
|--|---|
| 1) серебра ( $\epsilon_{\text{субл}} = 2,60 \text{ эВ/атом}$ );          | 8) алюминия ( $\epsilon_{\text{субл}} = 2,60 \text{ эВ/атом}$ );  |
| 2) никеля ( $\epsilon_{\text{субл}} = 3,83 \text{ эВ/атом}$ );           | 9) свинца ( $\epsilon_{\text{субл}} = 1,85 \text{ эВ/атом}$ );    |
| 3) платины ( $\epsilon_{\text{субл}} = 5,30 \text{ эВ/атом}$ );          | 10) палладия ( $\epsilon_{\text{субл}} = 3,66 \text{ эВ/атом}$ ); |
| 4) ванадия ( $\epsilon_{\text{субл}} = 4,61 \text{ эВ/атом}$ );          | 11) меди ( $\epsilon_{\text{субл}} = 3,13 \text{ эВ/атом}$ );     |
| 5) магния ( $\epsilon_{\text{субл}} = 1,32 \text{ эВ/атом}$ );           | 12) золота ( $\epsilon_{\text{субл}} = 3,43 \text{ эВ/атом}$ );   |
| 6) $\alpha$ -железа ( $\epsilon_{\text{субл}} = 3,63 \text{ эВ/атом}$ ); | 13) ниобия ( $\epsilon_{\text{субл}} = 6,86 \text{ эВ/атом}$ );   |
| 7) цинка ( $\epsilon_{\text{субл}} = 1,20 \text{ эВ/атом}$ );            | 14) кадмия ( $\epsilon_{\text{субл}} = 1,03 \text{ эВ/атом}$ ).   |

**48.** Найдите напряжение, необходимое для прохождения полной краевой дислокации над параллельной ей закреплённой дислокацией, если расстояние между их плоскостями скольжения составляет  $10b$ ;  $25b$ ;  $100b$ . Расчёт сделайте для:

- |                      |                      |               |               |             |
|----------------------|----------------------|---------------|---------------|-------------|
| 1) $\alpha$ -железа; | 4) меди;             | 7) молибдена; | 10) палладия; | 13) магния; |
| 2) никеля;           | 5) $\alpha$ -титана; | 8) серебра;   | 11) цинка;    | 14) свинца; |
| 3) вольфрама;        | 6) алюминия;         | 9) хрома;     | 12) ванадия;  | 15) золота. |

**49.** Какое напряжение надо приложить к паре полных краевых дислокаций одного знака, скользящих в одной плоскости, чтобы сблизить их до расстояния  $10b$ ;  $25b$ ;  $100b$ ? Расчёт сделайте для:

- 1)  $\alpha$ -железа; 4) меди; 7) молибдена; 10) палладия; 13) магния;  
 2) никеля; 5)  $\alpha$ -титана; 8) серебра; 11) цинка; 14) свинца;  
 3) вольфрама; 6) алюминия; 9) хрома; 12) ванадия; 15) золота.

**50.** Монокристалл серебра выращивают из расплава. Оцените плотность возникающих в ходе кристаллизации дислокаций, если перепад температуры вблизи границы раздела жидкости и твёрдой фазы составляет  $10 \text{ К/мм}$ . Коэффициент линейного расширения серебра при температуре плавления равен  $28 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$ .

**51.** Найдите напряжение, под действием которого закреплённый с обоих концов сегмент дислокации в ... длиной ... испустит первую дислокационную петлю.

- 1) в меди,  $1,5 \text{ мкм}$ ; 6) в  $\alpha$ -железе,  $1 \text{ мкм}$ ; 11) в  $\alpha$ -титане,  $2 \text{ мкм}$ ;  
 2) в алюминии,  $2 \text{ мкм}$ ; 7) в ванадии,  $0,7 \text{ мкм}$ ; 12) в цинке,  $1 \text{ мкм}$ ;  
 3) в никеле,  $2,5 \text{ мкм}$ ; 8) в вольфраме,  $5 \text{ мкм}$ ; 13) в  $\alpha$ -кобальте,  $1,5 \text{ мкм}$ ;  
 4) в свинце,  $1 \text{ мкм}$ ; 9) в литии,  $3 \text{ мкм}$ ; 14) в  $\alpha$ -цирконии,  $4 \text{ мкм}$ ;  
 5) в золоте,  $0,5 \text{ мкм}$ ; 10) в молибдене,  $4 \text{ мкм}$ ; 15) в бериллии,  $3 \text{ мкм}$ .

**52.** Запишите реакцию расщепления полной краевой дислокации ..., скользящей в плоскости ... в ГЦК-решётке, на частичные дислокации Шокли и покажите, что эта реакция энергетически выгодна.

- 1)  $\frac{1}{2}a [1\bar{1}0], (111)$ ; 5)  $\frac{1}{2}a [\bar{1}01], (1\bar{1}1)$ ; 9)  $\frac{1}{2}a [101], (11\bar{1})$ ; 13)  $\frac{1}{2}a [\bar{1}10], (11\bar{1})$ ;  
 2)  $\frac{1}{2}a [0\bar{1}1], (\bar{1}11)$ ; 6)  $\frac{1}{2}a [01\bar{1}], (\bar{1}11)$ ; 10)  $\frac{1}{2}a [10\bar{1}], (111)$ ; 14)  $\frac{1}{2}a [011], (11\bar{1})$ ;  
 3)  $\frac{1}{2}a [\bar{1}01], (111)$ ; 7)  $\frac{1}{2}a [011], (1\bar{1}1)$ ; 11)  $\frac{1}{2}a [1\bar{1}0], (11\bar{1})$ ; 15)  $\frac{1}{2}a [10\bar{1}], (1\bar{1}1)$ ;  
 4)  $\frac{1}{2}a [\bar{1}10], (111)$ ; 8)  $\frac{1}{2}a [110], (1\bar{1}1)$ ; 12)  $\frac{1}{2}a [110], (\bar{1}11)$ ; 16)  $\frac{1}{2}a [0\bar{1}1], (111)$ .

**53.** В каких плоскостях может винтовая полная дислокация ... в ГЦК-кристалле расщепляться на частичные дислокации Шокли? Запишите реакции расщепления в каждой из этих плоскостей. Какого типа будут образующиеся частичные дислокации (краевые, винтовые, смешанные)? Все ли эти реакции будут возможны, если полная дислокация краевая?

- 1)  $\frac{1}{2}a [\bar{1}\bar{1}0]$ ; 3)  $\frac{1}{2}a [0\bar{1}1]$ ; 5)  $\frac{1}{2}a [\bar{1}0\bar{1}]$ ; 7)  $\frac{1}{2}a [\bar{1}10]$ ; 9)  $\frac{1}{2}a [011]$ ; 11)  $\frac{1}{2}a [\bar{1}01]$ ;  
 2)  $\frac{1}{2}a [1\bar{1}0]$ ; 4)  $\frac{1}{2}a [0\bar{1}\bar{1}]$ ; 6)  $\frac{1}{2}a [10\bar{1}]$ ; 8)  $\frac{1}{2}a [110]$ ; 10)  $\frac{1}{2}a [01\bar{1}]$ ; 12)  $\frac{1}{2}a [101]$ .

**54.** Найдите энергию дефекта упаковки в сплаве на основе ..., если средняя ширина равновесного расщепления краевых дислокаций в нём составляет  $x = \dots$

- |  |   |
|--|---|
| 1) сплав меди, $x = 50b$ ;                     | 7) аустенитная <sup>1</sup> сталь, $x = 120b$ ; |
| 2) сплав серебра, $x = 60b$ ;                  | 8) сплав золота, $x = 80b$ ;                    |
| 3) сплав никеля, $x = 25b$ ;                   | 9) сплав алюминия, $x = 25b$ ;                  |
| 4) аустенитная <sup>1</sup> сталь, $x = 50b$ ; | 10) сплав меди, $x = 100b$ ;                    |
| 5) сплав золота, $x = 30b$ ;                   | 11) сплав серебра, $x = 80b$ ;                  |
| 6) сплав алюминия, $x = 15b$ ;                 | 12) сплав никеля, $x = 40b$ .                   |

**55.** Какую долю составляет энергия дефекта упаковки (имеющего равновесную ширину) от упругой энергии двух ограничивающих его частичных дислокаций Шокли в ГЦК-металлах?

---

<sup>1</sup> Аустенитом называется твёрдый раствор на основе  $\gamma$ -железа (с ГЦК-решёткой)

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Штремель, М.А. Прочность сплавов: учебник для вузов. Часть I: Дефекты решётки / М.А. Штремель. — М.: МИСиС, 1999. — 384 с.
2. Штремель, М.А. Прочность сплавов: учебник для вузов. Часть II: Деформация / М.А. Штремель. — М.: МИСиС, 1997. — 527 с.
3. Мирзаев, Д.А. Физические основы прочности: учебное пособие — Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2000. — Часть I. — 144 с.
4. Мирзаев, Д.А. Физические основы прочности: учебное пособие / Д.А. Мирзаев, К.Ю. Окишев. — Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2004. — Часть II. — 132 с.
5. Гойхенберг, Ю.Н. Кристаллография и кристаллохимия: конспект лекций / Ю.Н. Гойхенберг, С.В. Рушиц. — Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2002. — 49 с.
6. Окишев, К.Ю. Кристаллохимия и дефекты кристаллического строения: учебное пособие / К.Ю. Окишев. — Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2007. — 97 с.
7. Новиков, И.И. Кристаллография и дефекты кристаллической решётки: учебник для вузов / И.И. Новиков, К.М. Розин. — М.: Металлургия, 1990. — 336 с.
8. Новиков, И.И. Дефекты кристаллического строения металлов: учебное пособие для вузов / И.И. Новиков. — М.: Металлургия, 1983. — 232 с.
9. Шаскольская, М.П. Кристаллография: учебное пособие для вузов / М.П. Шаскольская. — М.: Высшая школа, 1984. — 376 с.
10. Пирсон, У. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов / У. Пирсон. — М.: Мир, 1977. — Ч. 1. — 424 с.; Ч. 2. — 472 с.
11. Гольдшмидт, Х.Дж. Сплавы внедрения / Х.Дж. Гольдшмидт. — М.: Мир, 1971. — Вып. I. — 424 с.; Вып. II. — 464 с.
12. Ермаков, С.С. Физика металлов и дефекты кристаллического строения: учебное пособие / С.С. Ермаков. — Л.: Изд-во ЛГУ, 1989. — 272 с.
13. Орлов, А.Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах: учебное пособие для вузов / А.Н. Орлов. — М.: Металлургия, 1983. — 144 с.
14. Криштал, М.А. Механизм диффузии в железных сплавах / М.А. Криштал. — М.: Металлургия, 1972. — 400 с.
15. Халл, Д. Введение в дислокации / Д. Халл. — М.: Атомиздат, 1968. — 280 с.
16. Гольдштейн, М.И. Металлофизика высокопрочных сплавов: учебное пособие / М.И. Гольдштейн, В.С. Литвинов, Б.М. Бронфин. — М.: Металлургия, 1986. — 312 с.
17. Гринберг, Б.А. Физика прочности и пластичности металлов и сплавов: учебное пособие / Б.А. Гринберг, В.Г. Пушин. — Свердловск: Изд-во УрГУ, 1986. — 196 с.
18. Ёкобори, Т. Физика и механика разрушения и прочности твёрдых тел / Т. Ёкобори. — М.: Металлургия, 1971. — 264 с.
19. Ёкобори, Т. Научные основы прочности и разрушения материалов / Т. Ёкобори. — Киев: Наукова думка, 1978. — 352 с.
20. Партон, В.З. Механика разрушения: от теории к практике / В.З. Партон. — М.: Наука, 1990. — 240 с.

# ПРИЛОЖЕНИЯ

## Приложение 1

### Физические постоянные

Постоянная Больцмана  $k = 1,381 \cdot 10^{-23}$  Дж/К =  $8,617 \cdot 10^{-5}$  эВ/К.

Число Авогадро  $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$  моль<sup>-1</sup>.

Газовая постоянная  $R = k \cdot N_A = 8,314$  Дж/(моль·К) = 1,987 кал/(моль·К).

Заряд электрона  $e = 1,602 \cdot 10^{-19}$  Кл.

Постоянная Планка  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж·с.

Ускорение свободного падения  $g = 9,807$  м/с<sup>2</sup>.

## Приложение 2

### Единицы измерения

1 Å =  $10^{-10}$  м =  $10^{-8}$  см =  $10^{-4}$  мкм = 0,1 нм.

1 эВ =  $1,602 \cdot 10^{-19}$  Дж.

1 эрг =  $10^{-7}$  Дж.

1 кал (термохимическая) = 4,184 Дж.

1 ГПа =  $10^9$  Па =  $10^3$  МПа.

1 МПа =  $10^6$  Па = 1 Н/мм<sup>2</sup>.

1 кг/мм<sup>2</sup> = 9,807 МПа  $\approx$  10 МПа.

1 атм =  $1,013 \cdot 10^5$  Па  $\approx$  0,1 МПа.

## Приложение 3

### Металлические атомные радиусы элементов, Å

H	0,78	Ca	1,974	Se	1,40	Sn	1,623	Dy	1,773	Hg	1,573
Li	1,562	Sc	1,641	Rb	2,546	Sb	1,59	Ho	1,766	Tl	1,716
Be	1,128	Ti	1,462	Sr	2,151	Te	1,60	Er	1,757	Pb	1,750
B	0,98	V	1,346	Y	1,801	Cs	2,731	Tm	1,746	Bi	1,70
C	0,916	Cr	1,360	Zr	1,602	Ba	2,243	Yb	1,940	Po	1,76
N	0,88	Mn	1,304	Nb	1,468	La	1,877	Lu	1,734	Fr	2,80
O	0,89	Fe	1,274	Mo	1,400	Ce	1,715	Hf	1,580	Ra	2,26
Na	1,911	Co	1,252	Tc	1,360	Pr	1,828	Ta	1,467	Ac	1,878
Mg	1,602	Ni	1,246	Ru	1,339	Nd	1,821	W	1,408	Th	1,798
Al	1,432	Cu	1,278	Rh	1,345	Pm	1,810	Re	1,375	Pa	1,63
Si	1,319	Zn	1,394	Pd	1,376	Sm	1,802	Os	1,353	U	1,56
P	1,28	Ga	1,411	Ag	1,445	Eu	2,042	Ir	1,357	Np	1,555
S	1,27	Ge	1,369	Cd	1,568	Gd	1,802	Pt	1,387	Pu	1,58
K	2,376	As	1,39	In	1,663	Tb	1,782	Au	1,442	Am	1,81

Атомные радиусы приведены для координационного числа 12 ( $R_{12}$ ). Переход к другим координационным числам:  $R_8 = 0,973 \cdot R_{12}$ ;  $R_6 = 0,96 \cdot R_{12}$ ;  $R_4 = 0,88 \cdot R_{12}$ .

## Приложение 4

### Ионные радиусы

Ион	$R, \text{Å}$	Ион	$R, \text{Å}$	Ион	$R, \text{Å}$	Ион	$R, \text{Å}$	Ион	$R, \text{Å}$	Ион	$R, \text{Å}$
$\text{Li}^+$	0,60	$\text{Be}^{2+}$	0,31	$\text{B}^{3+}$	0,20	$\text{C}^{4+}$	0,15	$\text{H}^-$	2,08	$\text{N}^{3-}$	1,71
$\text{Na}^+$	0,95	$\text{Mg}^{2+}$	0,65	$\text{Al}^{3+}$	0,50	$\text{Si}^{4+}$	0,41	$\text{F}^-$	1,36	$\text{P}^{3-}$	2,12
$\text{K}^+$	1,33	$\text{Ca}^{2+}$	0,99	$\text{Sc}^{3+}$	0,81	$\text{Ti}^{4+}$	0,68	$\text{Cl}^-$	1,81	$\text{As}^{3-}$	2,22
$\text{Rb}^+$	1,48	$\text{Sr}^{2+}$	1,13	$\text{Y}^{3+}$	0,93	$\text{Zr}^{4+}$	0,80	$\text{Br}^-$	1,95	$\text{Sb}^{3-}$	2,45
$\text{Cs}^+$	1,69	$\text{Ba}^{2+}$	1,35	$\text{La}^{3+}$	1,15	$\text{Ce}^{4+}$	1,01	$\text{I}^-$	2,16	$\text{C}^{4-}$	2,60
$\text{Cu}^+$	0,96	$\text{Zn}^{2+}$	0,74	$\text{Ga}^{3+}$	0,62	$\text{Ge}^{4+}$	0,53	$\text{O}^{2-}$	1,40	$\text{Si}^{4-}$	2,71
$\text{Ag}^+$	1,26	$\text{Cd}^{2+}$	0,97	$\text{In}^{3+}$	0,81	$\text{Sn}^{4+}$	0,71	$\text{S}^{2-}$	1,84	$\text{Ge}^{4-}$	2,72
$\text{Au}^+$	1,37	$\text{Hg}^{2+}$	1,10	$\text{Tl}^{3+}$	0,95	$\text{Pb}^{4+}$	0,84	$\text{Se}^{2-}$	1,98	$\text{Sn}^{4-}$	2,94
								$\text{Te}^{2-}$	2,21		

Ионные радиусы приведены для координационного числа 6 ( $R_6$ ). Переход к другим КЧ:  $R_{12} = 1,12 \cdot R_6$ ;  $R_8 = 1,03 \cdot R_6$ ;  $R_4 = 0,94 \cdot R_6$ .

## Приложение 5

### Ковалентные радиусы

Элемент	$V$	$R, \text{Å}$	Элемент	$V$	$R, \text{Å}$	Элемент	$V$	$R, \text{Å}$	Элемент	$V$	$R, \text{Å}$
H	1	0,30	Si	4	1,173	Se	2	1,17	Cs	1	2,35
Li	1	1,225	P	3	1,10	Br	1	1,142	Ba	2	1,981
Be	2	0,889	S	2	1,04	Rb	1	2,16	La	3	1,690
B	3	0,80	Cl	1	0,994	Sr	2	1,914	Ce	3,2	1,646
C	4	0,771	K	1	2,025	Y	3	1,616	Au	1	1,520
N	3	0,74	Ca	2	1,736	Ag	1	1,528	Hg	2	1,490
O	2	0,74	Sc	3	1,439	Cd	2	1,485	Tl	3	1,460
F	1	0,72	Cu	1	1,352	In	3	1,442		1	1,540
Na	1	1,572	Zn	2	1,309	Sn	4	1,399	Pb	4	1,430
Mg	2	1,364	Ga	3	1,266	Sb	3	1,41		2	1,540
Al	3	1,248	Ge	4	1,223	Te	2	1,37	Bi	3	1,52
			As	3	1,21	I	1	1,334	Po	2	1,53

Приведённые в таблице ковалентные радиусы  $R$  соответствуют случаю, когда координационное число атома  $Z$  равно его валентности  $V$ .

# Периодическая система химических элементов

[illegible]

Дантаноилы:

<b>La</b>	57	<b>Ce</b>	58	<b>Pr</b>	59	<b>Nd</b>	60	<b>Pm</b>	61	<b>Sm</b>	62	<b>Eu</b>	63	<b>Gd</b>	64	<b>Tb</b>	65	<b>Dy</b>	66	<b>Ho</b>	67	<b>Er</b>	68	<b>Tm</b>	69	<b>Yb</b>	70	<b>Lu</b>	71
$4f^0 5d^1 6s^2$		$4f^1 5d^1 6s^2$		$4f^3 5d^0 6s^2$		$4f^4 5d^0 6s^2$		$4f^5 5d^0 6s^2$		$4f^6 5d^0 6s^2$		$4f^7 5d^0 6s^2$		$4f^7 5d^1 6s^2$		$4f^8 5d^0 6s^2$		$4f^{10} 5d^0 6s^2$		$4f^{11} 5d^0 6s^2$		$4f^{12} 5d^0 6s^2$		$4f^{13} 5d^0 6s^2$		$4f^{14} 5d^0 6s^2$		$4f^{14} 5d^1 6s^2$	
Лантан		Церий		Празеодим		Неодим		Прометий		Самарий		Европий		Гадолиний		Тербий		Диспрозий		Гольмий		Эрбий		Тулий		Иттербий		Лютеций	

**АКТИНОИДЫ:**

89	90	91	92	93	94	95	96	97	97	99	100	101	102	103
<b>Ac</b>	<b>Th</b>	<b>Pa</b>	<b>U</b>	<b>Np</b>	<b>Pu</b>	<b>Am</b>	<b>Cm</b>	<b>Bk</b>	<b>Cf</b>	<b>Es</b>	<b>Fm</b>	<b>Md</b>	<b>No</b>	<b>Lr</b>
$5f^6d^17s^2$	$5f^6d^27s^2$	$5f^6d^17s^2$	$5f^6d^17s^2$	$5f^6d^17s^2$	$5f^6d^7s^2$	$5f^6d^7s^2$	$5f^6d^7s^2$	$5f^6d^17s^2$	$5f^{10}d^07s^2$	$5f^{16}d^07s^2$	$5f^{12}d^07s^2$	$5f^{13}d^07s^2$	$5f^{14}d^07s^2$	$5f^{14}d^17s^2$
Актиний	Торий	Протактиний	Уран	Нептуний	Плутоний	Америций	Кюрий	Берклий	Калифорний	Эйнштейний	Фермий	Менделевий	Нобелий	Лоуренсий

# Приложение 7

## Атомные массы и кристаллические структуры элементов

		$A$ , г/моль	Решётки и температуры фазовых превращений, °С	Параметры решётки, Å
1	H	1,0080	ГЦК (–272) ГПУ (–259) (–253)	(3,776; 6,162)
2	He	4,0026	ГПУ (–271) (–269)	(3,470; 5,540)
3	Li	6,968	9R (–199) <b>ОЦК</b> (181) (1342)	3,5093
4	Be	9,0122	<b>ГПУ</b> (1270) <b>ОЦК</b> (1289) (2472)	2,2859; 3,5845
5	B	10,814	<b>ромбоэдрич.</b> (2092) (4002)	10,17; $\alpha=65,12^\circ$
6	C	12,011	<b>графита</b> (4492)	2,4612; 6,709
7	N	14,007	кубич. (–238) гексаг. (–210) (–196)	(4,050; 6,604)
8	O	15,999	монокл. (–249) ромбоэдрич. (–229) кубич. (–219) (–183)	(6,83)
9	F	18,998	монокл. (–228) кубич. (–220) (–188)	(6,67)
10	Ne	20,180	ГЦК (–249) (–246)	(4,462)
11	Na	22,990	ГПУ (–241) <b>ОЦК</b> (98) (883)	4,2906
12	Mg	24,305	<b>ГПУ</b> (650) (1090)	3,2094; 5,2107
13	Al	26,982	<b>ГЦК</b> (660) (2520)	4,0496
14	Si	28,085	<b>алмаза</b> (1414) (3267)	5,4306
15	P	30,974	<b>кубич.</b> (44) (277)	7,18
16	S	32,068	<b>ромбич.</b> (96) монокл. (115) (445)	10,464; 12,866; 24,486
17	Cl	35,452	ромбич. (–101) (–34)	(6,24; 4,48; 8,26)
18	Ar	39,948	ГЦК (–189) (–186)	(5,3109)
19	K	39,098	<b>ОЦК</b> (64) (759)	5,321
20	Ca	40,078	<b>ГЦК</b> (443) <b>ОЦК</b> (842) (1484)	5,5884
21	Sc	44,956	<b>ГПУ</b> (1337) <b>ОЦК</b> (1541) (2831)	3,3088; 5,2680
22	Ti	47,867	<b>ГПУ</b> (882) <b>ОЦК</b> (1670) (3289)	2,9506; 4,6835
23	V	50,942	<b>ОЦК</b> (1910) (3409)	3,0240
24	Cr	51,996	<b>ОЦК</b> (1863) (2672)	2,8848
25	Mn	54,938	<b>кубич.</b> (727) кубич. (1100) ГЦК (1138) <b>ОЦК</b> (1246) (2062)	8,9126
26	Fe	55,845	<b>ОЦК</b> (912) ГЦК (1394) <b>ОЦК</b> (1538) (2862)	2,8665
27	Co	58,933	<b>ГПУ</b> (422) ГЦК (1495) (2928)	2,5071; 4,0686
28	Ni	58,693	<b>ГЦК</b> (1455) (2914)	3,5240
29	Cu	63,546	<b>ГЦК</b> (1085) (2563)	3,6146
30	Zn	65,38	<b>ГПУ</b> (420) (907)	2,6650; 4,9470
31	Ga	69,723	<b>ромбич.</b> (30) (2205)	4,5186; 7,6570; 4,5258
32	Ge	72,63	<b>алмаза</b> (938) (2834)	5,6574
33	As	74,922	<b>ромбоэдрич.</b> (614)	4,1319; $\alpha=54,12^\circ$
34	Se	78,96	<b>гексаг.</b> (221) (685)	4,3659; 4,9537
35	Br	79,904	ромбич. (–7) (+59)	(6,68; 4,49; 8,74)
36	Kr	83,798	ГЦК (–157) (–153)	(5,810)



		$A$ , г/моль	Решётки и температуры фазовых превращений, °С	Параметры решётки, Å
37	Rb	85,468	<b>ОЦК</b> (39) (688)	5,705
38	Sr	87,62	<b>ГЦК</b> (547) <b>ОЦК</b> (769) (1382)	6,084
39	Y	88,906	<b>ГПУ</b> (1478) <b>ОЦК</b> (1522) (3338)	3,6482; 5,7318
40	Zr	91,224	<b>ГПУ</b> (863) <b>ОЦК</b> (1855) (4409)	3,2316; 5,1475
41	Nb	92,906	<b>ОЦК</b> (2469) (4744)	3,3004
42	Mo	95,96	<b>ОЦК</b> (2623) (4639)	3,1470
43	Tc	[97,9]	<b>ГПУ</b> (2204) (4265)	2,738; 4,393
44	Ru	101,07	<b>ГПУ</b> (2334) (4150)	2,7058; 4,2816
45	Rh	102,91	<b>ГЦК</b> (1963) (3697)	3,8032
46	Pd	106,42	<b>ГЦК</b> (1555) (2964)	3,8903
47	Ag	107,87	<b>ГЦК</b> (962) (2163)	4,0857
48	Cd	112,41	<b>ГПУ</b> (321) (767)	2,9793; 5,6196
49	In	114,82	<b>тетр.</b> (157) (2073)	3,253; 4,9470
50	Sn	118,71	алмаза (13) <b>тетр.</b> (232) (2603)	5,8318; 3,1818
51	Sb	121,76	<b>ромбоэдрич.</b> (631) (1587)	4,5067; $\alpha=57,11^\circ$
52	Te	127,60	<b>гексаг.</b> (450) (988)	4,4566; 5,9264
53	I	126,90	<b>ромбич.</b> (114) (185)	7,2697; 4,7903; 9,7942
54	Xe	131,29	<b>ГЦК</b> (–112) (–108)	(6,350)
55	Cs	132,91	<b>ОЦК</b> (28) (671)	6,141
56	Ba	137,33	<b>ОЦК</b> (727) (1898)	5,0227
57	La	138,91	<b>дв. ГПУ</b> (310) <b>ГЦК</b> (865) <b>ОЦК</b> (918) (3457)	3,7740; 12,171
58	Ce	140,12	<b>ГЦК</b> (–177) <b>дв. ГПУ</b> (61) <b>ГЦК</b> (726) <b>ОЦК</b> (798) (3426)	3,6810; 11,857
59	Pr	140,91	<b>дв. ГПУ</b> (795) <b>ОЦК</b> (931) (3512)	3,6721; 11,8326
60	Nd	144,24	<b>дв. ГПУ</b> (863) <b>ОЦК</b> (1021) (3068)	3,6582; 11,7966
61	Pm	[145]	<b>дв. ГПУ</b> (890) <b>ОЦК</b> (1042) (2600)	3,65; 11,65
62	Sm	150,36	<b>9R</b> (734) <b>ГПУ</b> (922) <b>ОЦК</b> (1074) (1791)	3,6290; 26,207
63	Eu	151,96	<b>ОЦК</b> (822) (1597)	4,5827
64	Gd	157,25	<b>ГПУ</b> (1235) <b>ОЦК</b> (1313) (3266)	3,6336; 5,7810
65	Tb	158,93	ромбич. (–53) <b>ГПУ</b> (1289) <b>ОЦК</b> (1356) (3223)	3,6055; 5,6966
66	Dy	162,50	ромбич. (–187) <b>ГПУ</b> (1381) <b>ОЦК</b> (1412) (2562)	3,5915; 5,6501
67	Ho	164,93	<b>ГПУ</b> (1474) (2695)	3,5778; 5,6178
68	Er	167,26	<b>ГПУ</b> (1529) (2863)	3,5592; 5,5850
69	Tm	168,93	<b>ГПУ</b> (1545) (1947)	3,5375; 5,5540
70	Yb	173,05	<b>ГПУ</b> (–3) <b>ГЦК</b> (795) <b>ОЦК</b> (819) (1194)	5,4848
71	Lu	174,97	<b>ГПУ</b> (1663) (3395)	3,5052; 5,5494

		<i>A</i> , г/моль	Решётки и температуры фазовых превращений, °С	Параметры решётки, Å
72	Hf	178,49	<b>ГПУ</b> (1743) <b>ОЦК</b> (2231) (4603)	3,1946; 5,0510
73	Ta	180,95	<b>ОЦК</b> (3020) (5458)	3,3030
74	W	183,84	<b>ОЦК</b> (3422) (5555)	3,1652
75	Re	186,21	<b>ГПУ</b> (3186) (5596)	2,7609; 4,458
76	Os	190,23	<b>ГПУ</b> (3033) (5012)	2,7341; 4,3198
77	Ir	192,22	<b>ГЦК</b> (2447) (4428)	3,8392
78	Pt	195,08	<b>ГЦК</b> (1769) (3827)	3,9236
79	Au	196,97	<b>ГЦК</b> (1064) (2857)	4,0782
80	Hg	200,59	ромбоэдрич. (–39) (+357)	(3,005; $\alpha=70,53^\circ$ )
81	Tl	204,38	<b>ГПУ</b> (230) <b>ОЦК</b> (304) (1473)	3,4566; 5,5248
82	Pb	207,2	<b>ГЦК</b> (328) (1750)	4,9502
83	Bi	208,98	<b>ромбоэдрич.</b> (271) (1564)	4,7460; $\alpha=57,23^\circ$
84	Po	[209]	<b>кубич.</b> (54) ромбоэдрич. (254) (962)	3,366
85	At	[210]	? (302) (334)	
86	Rn	[222]	<b>ГЦК</b> (–71) (–62)	
87	Fr	[223]	<b>ОЦК</b> (27) (677)	
88	Ra	[226]	<b>ОЦК</b> (700) (1320)	5,148
89	Ac	[227]	<b>ГЦК</b> (1051) (3200)	5,311
90	Th	232,04	<b>ГЦК</b> (1360) <b>ОЦК</b> (1755) (4788)	5,0842
91	Pa	231,04	<b>тетр.</b> (1170) <b>ОЦК</b> (1572) (3780)	3,921; 3,235
92	U	238,03	<b>ромбич.</b> (668) <b>тетр.</b> (776) <b>ОЦК</b> (1135) (4134)	2,8537; 5,8695; 4,9548
93	Np	[237]	<b>ромбич.</b> (280) <b>тетр.</b> (576) <b>ОЦК</b> (639) (4000)	6,663; 4,723; 4,887
94	Pu	[244]	<b>монокл.</b> (125) <b>монокл.</b> (215) <b>ромбич.</b> (320) <b>ГЦК</b> (463) <b>тетр.</b> (483) <b>ОЦК</b> (640) (3230)	6,183; 4,822; 10,963; $\beta=101,97^\circ$
95	Am	[243]	<b>дв. ГПУ</b> (769) <b>ГЦК</b> (1077) <b>ОЦК</b> (1176) (2400)	3,4681; 11,241
96	Cm	[247]	<b>дв. ГПУ</b> (1277) <b>ГЦК</b> (1345)	3,496; 11,331
97	Bk	[247]	<b>дв. ГПУ</b> (977) <b>ГЦК</b> (1050)	3,416; 11,069
98	Cf	[251]	<b>дв. ГПУ</b> (590) <b>ГЦК</b> (900)	3,39; 11,015
99	Es	[252]	<b>дв. ГПУ</b> (?) <b>ГЦК</b> (860)	

*A* — атомная масса (в квадратных скобках — для наиболее стабильного изотопа). Решётки обозначены сокращёнными наименованиями: **ОЦК**, **ГЦК**, **ГПУ**, **дв. ГПУ** («двойная ГПУ» с чередованием слоёв *ABCB*), **9R** (девятислойная плотноупакованная с чередованием *ABCBCACAB*), графита, алмаза; для остальных решёток указана только сингония. Жирным шрифтом выделена решётка при комнатной температуре. Между обозначениями решёток приведены температуры полиморфных переходов, после них — температуры плавления и кипения. Параметры решётки даны для комнатной температуры; для элементов с температурой плавления ниже комнатной указаны параметры решётки наиболее высокотемпературной модификации (в скобках).

Свойства элементов

		$\rho$ , г/см <sup>3</sup>	$G$ , ГПа	$\nu$	$\varepsilon_v$ , эВ	$\varepsilon_m$ , эВ	$T_D$ , К	$\gamma$ , мДж/м <sup>2</sup>	Наиболее долго- живущий изотоп
1	H						110		
2	He								
3	Li	0,534	3,90	0,35	0,34	0,21	448		
4	Be	1,848	148	0,034			1031	$\alpha$ : 1000	
5	B	2,34					1250		
6	C	2,26					1860		
7	N						79		
8	O						46		
9	F								
10	Ne						63		
11	Na	0,971	2,11	0,36	0,38		155		
12	Mg	1,738	17,3	0,29	0,58	0,82	330		
13	Al	2,689	26,4	0,35	0,66	0,65	390	1140	
14	Si	2,33	66,5	0,22			645		
15	P	1,82							
16	S	2,07							
17	Cl								
18	Ar						85		
19	K	0,862	1,04	0,36			100		
20	Ca	1,55	7,5	0,31			230		
21	Sc	2,989	29,5	0,28			476		
22	Ti	4,505	43,4	0,32			380	$\beta$ : 1938	
23	V	5,96	47,5	0,36	2,1	1,2	390		
24	Cr	7,19	115	0,21	2,27	2,23	424	2090	
25	Mn	7,44	83	0,32			363		
26	Fe	7,874	79,7	$\alpha$ : 0,29 $\gamma$ : 0,36	$\alpha$ : 1,6 $\gamma$ : 1,6	$\alpha$ : 1,28 $\gamma$ : 1,34	373	$\gamma$ : 2170 $\delta$ : 1910	
27	Co	8,90	74,8	0,34	$\beta$ : 1,62	$\beta$ : 1,07	386	$\alpha$ : 1500 $\beta$ : 2454	
28	Ni	8,91	86,2	0,30	1,72	1,30	345	1940	
29	Cu	8,96	47,7	0,35	1,22	0,78	310	1520	
30	Zn	7,133	39,6	0,26	0,51	0,44	237	868	
31	Ga	5,904					240	767	
32	Ge	5,323	54,8	0,21			373	820	
33	As	5,73					285		
34	Se	4,79	19	0,45			150		
35	Br	(3,119)							
36	Kr						73		

Продолжение приложения 8

		$\rho$ , г/см <sup>3</sup>	$G$ , ГПа	$\nu$	$\varepsilon_v$ , эВ	$\varepsilon_m$ , эВ	$T_D$ , К	$\gamma$ , мДж/м <sup>2</sup>	Наиболее долго- живущий изотоп
37	Rb	1,532	0,80	0,36			59		
38	Sr	2,63	5	0,28			148		
39	Y	4,469	25,4	0,25			214		
40	Zr	6,45	36,0	0,33			250	$\beta$ : 1850	
41	Nb	8,57	37,5	0,40	2,5	0,95	260	2210	
42	Mo	10,22	124	0,30	3,15	1,32	377	2630	
43	Tc	11,49	123	0,31			422		<sup>98</sup> Tc: 6,6 млн лет
44	Ru	12,41	191	0,25			415		
45	Rh	12,41	149	0,26			350		
46	Pd	12,02	50,0	0,38	1,85	0,91	275		
47	Ag	10,50	29,6	0,37	1,10	0,65	221	1205	
48	Cd	8,65	24,2	0,30	0,42	0,38	321	675	
49	In	7,31	5,07	0,44	0,52	0,27	129	633	
50	Sn	7,29	18,2	0,35	0,53	0,59	254	$\beta$ : 673	
51	Sb	6,691	20	0,33			200		
52	Te	6,24					135		
53	I	4,93							
54	Xe								
55	Cs	1,873	0,70	0,36			43		
56	Ba	3,594	6,2	0,28			116		
57	La	6,145	13,6	0,29			135		
58	Ce	6,77	12,8	0,25			138		
59	Pr	6,773	14,8	0,28			138		
60	Nd	7,007	18,5	0,28			148		
61	Pm	7,22							<sup>145</sup> Pm: 17,7 года
62	Sm	7,536	13	0,35			184		
63	Eu	5,243	6,2	0,25			127		
64	Gd	7,895	21,8	0,26			184		
65	Tb	8,272	22,7	0,26			158		
66	Dy	8,550	24,6	0,25			158		
67	Ho	8,795	26,3	0,23			161		
68	Er	9,066	28,3	0,24			163		
69	Tm	9,321	23,8	0,28			167		
70	Yb	6,965	9,9	0,35			118		
71	Lu	9,840	27,1	0,26			116		
72	Hf	13,31	55,8	0,28			213		
73	Ta	16,654	69,1	0,34	2,5	1,1	225	2480	
74	W	19,35	160	0,28	3,2	1,78	312	2690	

		$\rho$ , г/см <sup>3</sup>	$G$ , ГПа	$\nu$	$\varepsilon_v$ , эВ	$\varepsilon_m$ , эВ	$T_D$ , К	$\gamma$ , мДж/м <sup>2</sup>	Наиболее долго- живущий изотоп
75	Re	21,02	179	0,29			275	2200	
76	Os	22,57	225,5	0,26			400		
77	Ir	22,42	216,7	0,25			228		
78	Pt	21,45	65,8	0,39	1,33	1,43	225	1950	
79	Au	19,32	27,8	0,42	0,97	0,81	178	1410	
80	Hg	(13,546)					100		
81	Tl	11,85	5,35	0,43			91	$\beta$ : 562	
82	Pb	11,336	8,51	0,41	0,53	0,55	87	560	
83	Bi	9,78	12	0,33	0,35		120	501	
84	Po	9,32	$E=26$						<sup>209</sup> Po: 130 лет
85	At								<sup>210</sup> At: 8,1 часа
86	Rn								<sup>222</sup> Rn: 3,823 суток
87	Fr	2,44					77		<sup>223</sup> Fr: 22,0 мин
88	Ra	5,0					85		<sup>226</sup> Ra: 1599 лет
89	Ac	10,07					118		<sup>227</sup> Ac: 21,77 года
90	Th	11,72	27,7	0,30			100		<sup>232</sup> Th: 14,0 млрд лет
91	Pa	15,37					262		<sup>231</sup> Pa: 32,5 тыс. лет
92	U	19,040	80,5	0,16	$\gamma$ : 1,2		300		<sup>238</sup> U: 4,468 млрд лет
93	Np	20,25	76	0,22			163		<sup>237</sup> Np: 2,14 млн лет
94	Pu	19,84	~40	0,21			176		<sup>244</sup> Pu: 81 млн лет
95	Am	13,67							<sup>243</sup> Am: 7,37 тыс. лет
96	Cm								<sup>247</sup> Cm: 15,6 млн лет
97	Bk	14,78							<sup>247</sup> Bk: 1,4 тыс. лет
98	Cf								<sup>251</sup> Cf: 0,90 тыс. лет
99	Es	8,8							<sup>252</sup> Es: 472 суток

$\rho$  — плотность при комнатной температуре (для твёрдых тел; в скобках — для жидкостей).

$G$  — модуль сдвига при комнатной температуре;  $\nu$  — коэффициент Пуассона. Модуль Юнга  $E$  можно найти по формуле  $E = 2G(1 + \nu)$ .

$\varepsilon_v$  и  $\varepsilon_m$  — энергии образования и миграции вакансии.

$T_D$  — температура Дебая.

$\gamma$  — поверхностная энергия (поверхностное натяжение) в твёрдом состоянии.

В последней колонке для радиоактивных элементов приведена атомная масса наиболее долгоживущего изотопа элемента и период его полураспада.

Таблица интеграла вероятности  $\operatorname{erf} z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt$

z	erf z	z	erf z	z	erf z	z	erf z	z	erf z	z	erf z
0,000	0,0000	0,185	0,206	0,410	0,438	0,635	0,631	0,860	0,776	1,17	0,902
0,001	0,0011	0,190	0,212	0,415	0,443	0,640	0,635	0,865	0,779	1,18	0,905
0,002	0,0023	0,195	0,217	0,420	0,447	0,645	0,638	0,870	0,781	1,19	0,908
0,003	0,0034	0,200	0,223	0,425	0,452	0,650	0,642	0,875	0,784	1,20	0,910
0,004	0,0045	0,205	0,228	0,430	0,457	0,655	0,646	0,880	0,787	1,21	0,913
0,005	0,0056	0,210	0,234	0,435	0,462	0,660	0,649	0,885	0,789	1,22	0,916
0,006	0,0068	0,215	0,239	0,440	0,466	0,665	0,653	0,890	0,792	1,23	0,918
0,007	0,0079	0,220	0,244	0,445	0,471	0,670	0,657	0,895	0,794	1,24	0,921
0,008	0,0090	0,225	0,250	0,450	0,475	0,675	0,660	0,900	0,797	1,25	0,923
0,009	0,0102	0,230	0,255	0,455	0,480	0,680	0,664	0,905	0,799	1,26	0,925
0,010	0,0113	0,235	0,260	0,460	0,485	0,685	0,667	0,910	0,802	1,27	0,928
0,015	0,0169	0,240	0,266	0,465	0,489	0,690	0,671	0,915	0,804	1,28	0,930
0,020	0,0226	0,245	0,271	0,470	0,494	0,695	0,674	0,920	0,807	1,29	0,932
0,025	0,0282	0,250	0,276	0,475	0,498	0,700	0,678	0,925	0,809	1,30	0,934
0,030	0,0338	0,255	0,282	0,480	0,503	0,705	0,681	0,930	0,812	1,31	0,936
0,035	0,0395	0,260	0,287	0,485	0,507	0,710	0,685	0,935	0,814	1,32	0,938
0,040	0,0451	0,265	0,292	0,490	0,512	0,715	0,688	0,940	0,816	1,33	0,940
0,045	0,0507	0,270	0,297	0,495	0,516	0,720	0,691	0,945	0,819	1,34	0,942
0,050	0,0564	0,275	0,303	0,500	0,520	0,725	0,695	0,950	0,821	1,35	0,944
0,055	0,0620	0,280	0,308	0,505	0,525	0,730	0,698	0,955	0,823	1,36	0,946
0,060	0,0676	0,285	0,313	0,510	0,529	0,735	0,701	0,960	0,825	1,37	0,947
0,065	0,0732	0,290	0,318	0,515	0,534	0,740	0,705	0,965	0,828	1,38	0,949
0,070	0,0789	0,295	0,323	0,520	0,538	0,745	0,708	0,970	0,830	1,39	0,951
0,075	0,0845	0,300	0,329	0,525	0,542	0,750	0,711	0,975	0,832	1,40	0,952
0,080	0,0901	0,305	0,334	0,530	0,546	0,755	0,714	0,980	0,834	1,41	0,954
0,085	0,0957	0,310	0,339	0,535	0,551	0,760	0,718	0,985	0,836	1,42	0,955
0,090	0,1013	0,315	0,344	0,540	0,555	0,765	0,721	0,990	0,839	1,43	0,957
0,095	0,1069	0,320	0,349	0,545	0,559	0,770	0,724	0,995	0,841	1,44	0,958
0,100	0,1125	0,325	0,354	0,550	0,563	0,775	0,727	1,00	0,843	1,45	0,960
0,105	0,1180	0,330	0,359	0,555	0,567	0,780	0,730	1,01	0,847	1,46	0,961
0,110	0,1236	0,335	0,364	0,560	0,572	0,785	0,733	1,02	0,851	1,47	0,962
0,115	0,1292	0,340	0,369	0,565	0,576	0,790	0,736	1,03	0,855	1,48	0,964
0,120	0,1348	0,345	0,374	0,570	0,580	0,795	0,739	1,04	0,859	1,49	0,965
0,125	0,1403	0,350	0,379	0,575	0,584	0,800	0,742	1,05	0,862	1,50	0,966
0,130	0,1459	0,355	0,384	0,580	0,588	0,805	0,745	1,06	0,866	1,55	0,972
0,135	0,1514	0,360	0,389	0,585	0,592	0,810	0,748	1,07	0,870	1,60	0,976
0,140	0,1569	0,365	0,394	0,590	0,596	0,815	0,751	1,08	0,873	1,65	0,980
0,145	0,1625	0,370	0,399	0,595	0,600	0,820	0,754	1,09	0,877	1,70	0,984
0,150	0,1680	0,375	0,404	0,600	0,604	0,825	0,757	1,10	0,880	1,75	0,987
0,155	0,1735	0,380	0,409	0,605	0,608	0,830	0,760	1,11	0,884	1,80	0,989
0,160	0,1790	0,385	0,414	0,610	0,612	0,835	0,762	1,12	0,887	1,90	0,993
0,165	0,1845	0,390	0,419	0,615	0,616	0,840	0,765	1,13	0,890	2,0	0,995
0,170	0,1900	0,395	0,424	0,620	0,619	0,845	0,768	1,14	0,893	2,1	0,997
0,175	0,1955	0,400	0,428	0,625	0,623	0,850	0,771	1,15	0,896	2,3	0,999
0,180	0,2009	0,405	0,433	0,630	0,627	0,855	0,773	1,16	0,899	2,5	1,000

# ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение .....	3
1. Равновесное состояние металлов	
1.1. Равновесие в системах частиц .....	5
1.2. Распределение атомов по энергиям.....	9
1.3. Равновесие фаз.....	11
2. Основы кристаллографии металлов .....	17
2.1. Симметрия кристаллов	
2.1.1. Пространственная решётка .....	17
2.1.2. Элементы симметрии кристаллов .....	22
2.2. Индексы Миллера .....	23
2.3. Основные формулы кристаллографии .....	27
2.4. Атомные радиусы и модель твёрдых шаров .....	28
2.5. Решётки металлов.....	30
2.5.1. Плотноупакованные структуры. Решётки ГЦК и ГПУ .....	30
2.5.2. Решётка ОЦК .....	33
2.5.3. Поры в решётках металлов .....	34
3. Теория точечных дефектов кристаллической решётки.....	38
3.1. Виды точечных дефектов .....	38
3.2. Механизмы образования точечных дефектов .....	39
3.3. Равновесная концентрация точечных дефектов.....	43
3.4. Образование неравновесных точечных дефектов.....	49
3.5. Точечные дефекты и диффузия	
3.5.1. Частота перескоков вакансий и атомов .....	51
3.5.2. Коэффициент диффузии вакансий .....	53
3.5.3. Коэффициент диффузии атомов .....	54
3.5.4. Второй закон диффузии.....	57
3.5.5. Решение простейших диффузионных задач.....	59
3.5.6. Цементация стали.....	62
3.5.7. Диффузия как процесс случайного блуждания атомов .....	63
3.5.8. Термодинамика процесса диффузии .....	64
3.6. Влияние внешних напряжений на образование вакансий .....	70
3.7. Вакансионная ползучесть .....	73
3.8. Рост пор при ползучести.....	77
3.9. Спекание металлических порошков.....	80
4. Геометрические аспекты пластической деформации	
4.1. Роль нормальных и касательных напряжений в скольжении и разрушении.....	83
4.2. Критическое напряжение сдвига .....	88
4.3. Деформация монокристалла скольжением.....	92
4.4. Диаграмма растяжения образцов.....	94

4.5. Особенности деформации поликристаллов.....	99
4.6. Двойникование .....	101
5. Понятие о дислокациях	
5.1. Теоретическая и экспериментальная прочность на сдвиг .....	109
5.2. Краевая дислокация .....	112
5.3. Образование краевых дислокаций при кристаллизации.....	117
5.4. Контур и вектор Бюргерса для краевой дислокации.....	122
5.5. Винтовая дислокация и её вектор Бюргерса .....	125
5.6. Смешанная криволинейная дислокация .....	128
5.7. Винтовые дислокации и кристаллизация .....	132
5.8. Силы, действующие на дислокацию .....	133
5.9. Ядро дислокации .....	138
5.10. Скорость скольжения дислокации .....	144
6. Механика дислокаций	
6.1. Поля упругих напряжений вокруг дислокаций.....	148
6.1.1. Напряжения от винтовой дислокации.....	148
6.1.2. Напряжения вокруг краевой дислокации .....	151
6.1.3. Точный расчёт полей напряжений около дислокаций (для подготовленных студентов).....	153
6.2. Характеристики и процессы, связанные с упругой энергией дислокации .....	164
6.2.1. Натяжение дислокационной линии.....	165
6.2.2. Дислокационные реакции .....	167
6.2.3. Образование дислокационных сеток .....	168
6.2.4. Работа источников Франка – Рида .....	171
6.3. Деформация, создаваемая скольжением дислокаций.....	173
6.4. Взаимодействие дислокаций.....	175
6.4.1. Упругое взаимодействие параллельных дислокаций.....	176
6.4.2. Пересечение дислокаций.....	180
6.4.3. Условие пересечения дислокации с «лесом». Скольжение винтовых дислокаций со ступеньками .....	183
6.4.4. Понятие о термически активированном движении дислокаций	185
6.5. Взаимодействие дислокаций с подвижными растворёнными атомами .....	186
6.5.1. Образование атмосфер Коттрелла.....	187
6.5.2. Атомы внедрения в ОЦК-сплавах как упругие диполи .....	192
6.5.3. Взаимодействие примесей внедрения и винтовой дислокации	194
6.5.4. Атмосферы Снука .....	195
6.5.5. Зуб текучести .....	197
7. Механизмы упрочнения металлов	
7.1. Предел текучести чистого поликристаллического металла .....	200
7.2. Упрочнение границами зерна .....	200
7.3. Деформационное упрочнение.....	203



7.4. Твердорастворное упрочнение .....	205
7.4.1. Упрочнение атомами, образующими раствор замещения .....	207
7.4.2. Упрочнение примесями внедрения .....	210
7.4.3. Природа прочности углеродистого мартенсита.....	213
7.5. Дисперсионное упрочнение .....	215
8. Дислокации в решётках металлов .....	221
8.1. Дислокации в металлах с ГЦК-решёткой .....	222
8.1.1. Полные и частичные дислокации .....	222
8.1.2. Поперечное скольжение расщеплённой винтовой дислокации. ....	229
8.1.3. Образование барьера Ломера – Коттрелла .....	232
8.1.4. Образование сидячей дислокации Франка .....	234
8.1.5. Стандартный тетраэдр Томпсона .....	235
8.2. Дислокации в металлах с ОЦК-решёткой .....	243
8.3. Дислокации в металлах с ГПУ-решёткой .....	
8.3.1. Полные дислокации .....	245
8.3.2. Расщепление полных дислокаций. Частичные дислокации Шокли .....	247
8.3.3. Дефекты упаковки внедрения и вычитания. Частичная дислокация Франка .....	250
8.3.4. Описание дислокаций и их реакций с использованием стандартного битетраэдра .....	251
9. Физическая природа разрушения металлов .....	
9.1. Изломы при вязком и хрупком разрушении.....	255
9.2. Межзёренный излом .....	261
9.3. Теоретическая прочность на отрыв .....	
9.3.1. Межатомное взаимодействие и упругость кристаллов.....	266
9.3.2. Расчёт теоретической прочности кристаллов на отрыв .....	274
9.4. Теория прочности реальных твёрдых тел по Гриффитсу .....	
9.4.1. Роль микротрещин в разрушении.....	279
9.4.2. Теория разрушения .....	280
9.4.3. Роль поверхностной энергии в разрушении.....	284
9.5. Разрушение твёрдых тел по Оровану .....	
9.5.1. Эффективная поверхностная энергия .....	287
9.5.2. Теория Орована .....	289
9.5.3. Дополнение к теории Орована.....	290
9.6. Хладноломкость .....	291
9.7. Современная теория разрушения .....	300
9.7.1. Напряжения и смещения точек у вершины трещины .....	300
9.7.2. Теория разрушения .....	303
9.7.3. Поправки к теории Ирвина .....	306
10. Задачи .....	310
Библиографический список.....	323
Приложения .....	324

*Учебное издание*

**Мирзаев** Джалал Аминулович,  
**Окишев** Константин Юрьевич

ОСНОВЫ ТЕОРИИ ДЕФЕКТОВ,  
ПРОЧНОСТИ И ПЛАСТИЧНОСТИ  
КРИСТАЛЛОВ

Учебное пособие

Техн. редактор *А.В. Миних*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 24.12.2013. Формат 60×84 1/16. Печать цифровая.  
Усл. печ. л. 19,76. Тираж 30 экз. Заказ 706/9.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ.  
454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.