Дефекты кристаллической структуры

Залужный А. Г.

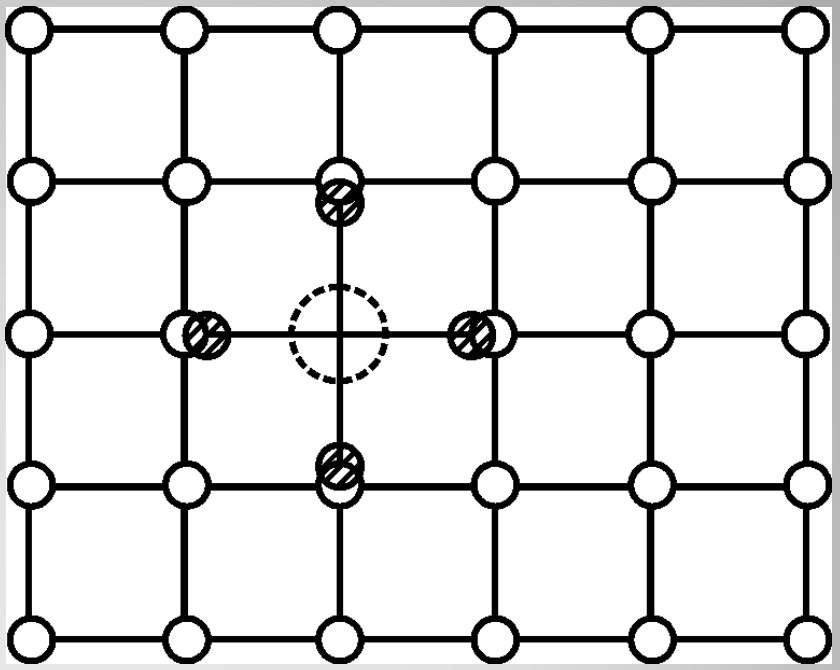
- **Точечные**. Имеют атомные размеры во всех трех измерениях. Их размеры во всех направлениях не больше нескольких атомных диаметров. К точечным дефектам относятся: вакансии, междоузельные атомы и всевозможные их сочетания, их комплексы, атомы примеси.
- **Линейные.** Имеют атомные размеры в двух измерениях и сколь угодно протяженные в третьем. К линейным дефектам относятся дислокации, дисклинации, цепочки вакансий и междоузельных атомов.
- **Поверхностные.** Имеют атомные размеры только в одном измерении. К ним относятся поверхность, границы зерен, фаз, двойников; дефекты упаковки; границы доменов в сверхструктуре и т.п.
- **Объемные.** В отличие от перечисленных выше дефектов, имеют во всех измерениях относительно большие размеры, несоизмеримые с атомными. К ним относятся поры, трещины, выделения и т.д.

Классификация дефектов

Точечные дефекты.
Вакансия

- Вакансия представляет собой пустой узел кристаллической решетки , междоузельный атом – атом, расположенный в междоузлии. В то время как вакансии всегда расположены в узлах решетки, для междоузельных атомов рассматривают более чем одну возможную конфигурацию, что связано с изменением энергии кристалла при образовании дефекта в зависимости от его расположения.

- Вакансия представляет собой пустой узел кристаллической решетки

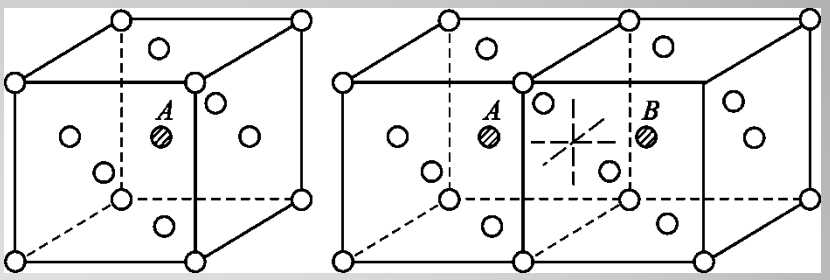


Вакансия

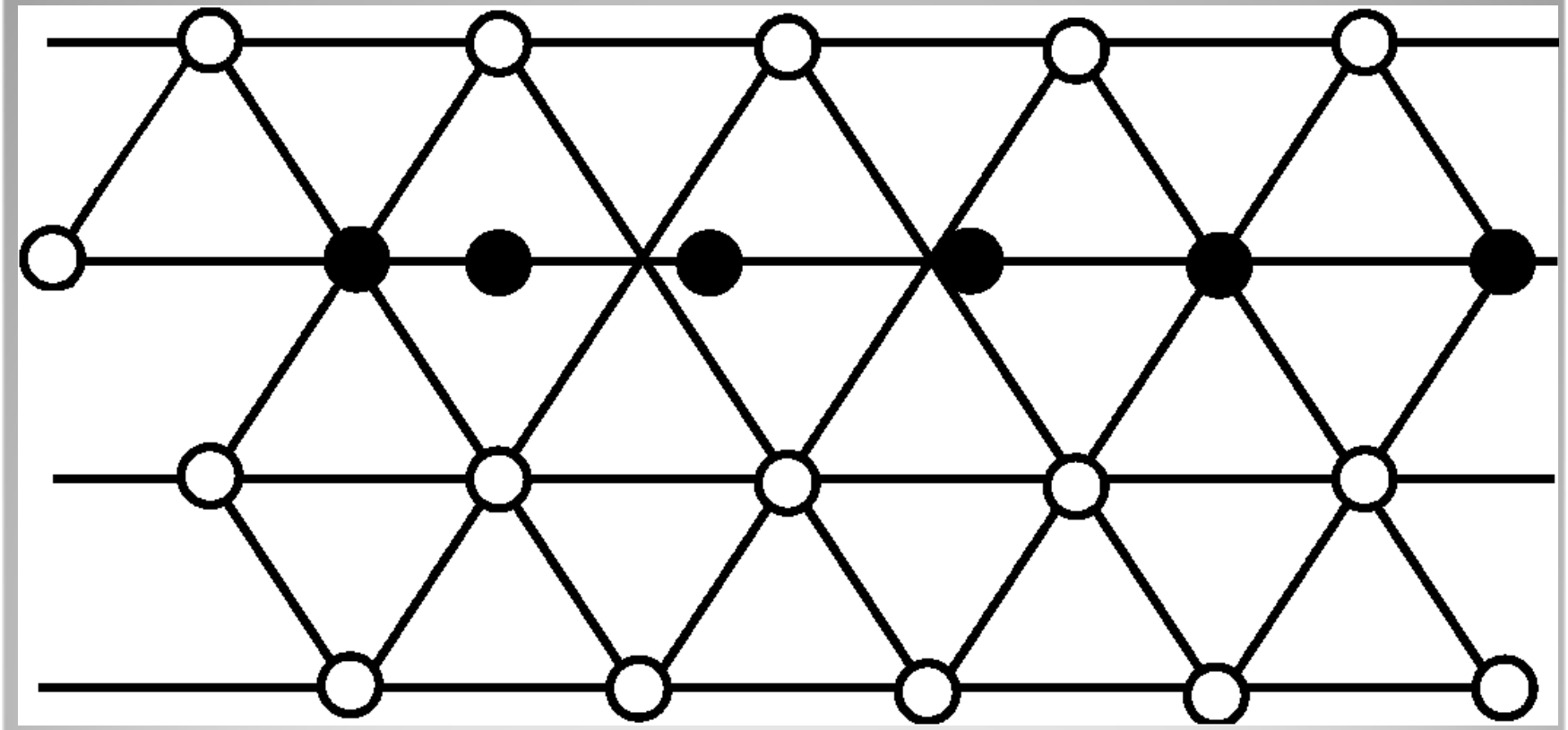
- Одним из основных параметров, характеризующих точечный дефект, является энергия его образования E^F . $E^F = E_c - B$
- Величина энергии образования точечного дефекта определяет их равновесную концентрацию в кристалле $C = \exp(-E^F/kT)$

Энергия образования точечных дефектов

Междоузельный атом – атом, расположенный в междоузлии. Для междоузельных атомов рассматривают более чем одну возможную конфигурацию.

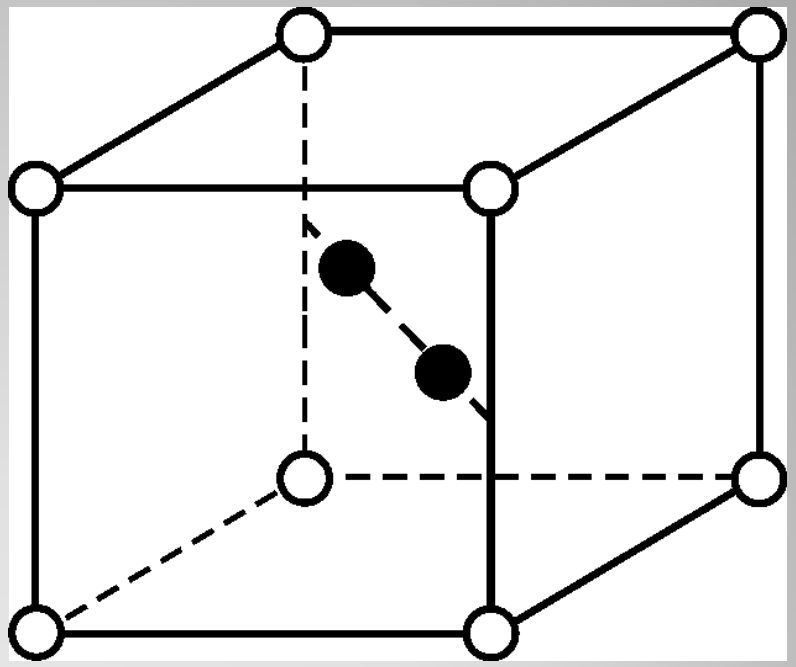


Междоузельный атом

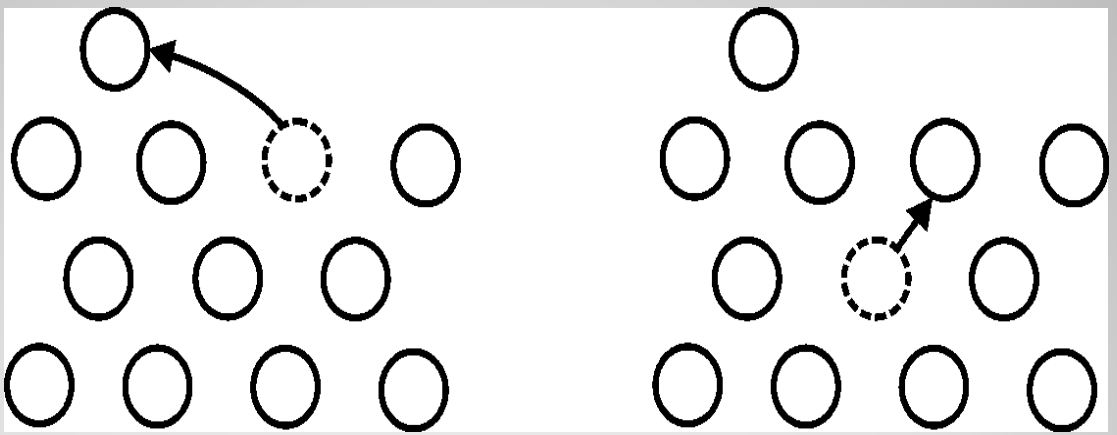


Краудион

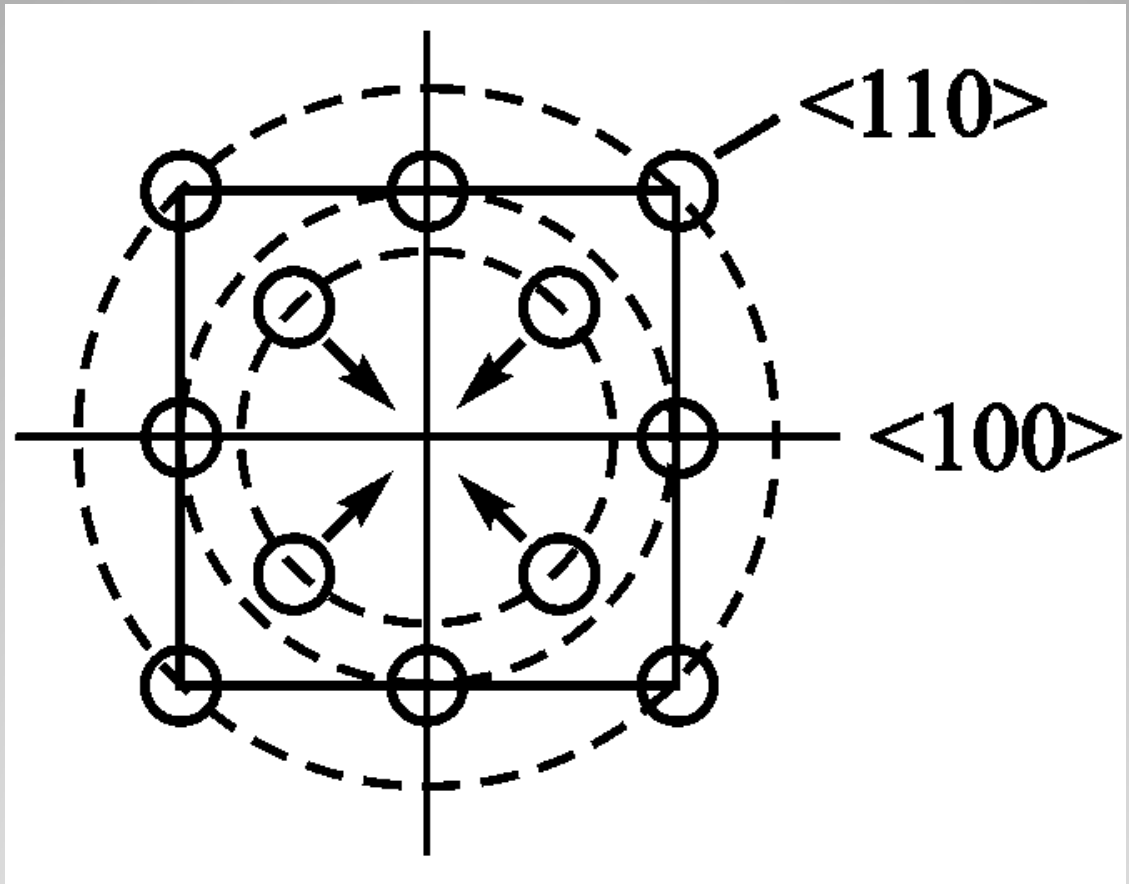
Эксперименты и расчеты показывают, что энергия образования междоузельного атома в несколько раз больше, чем энергия образования вакансии (несколько эВ). Это превышение связано со значительными искажениями решетки, возникающими при образовании междоузельного атома.



Междоузельный атом (ОЦК)



Механизм Шоттки

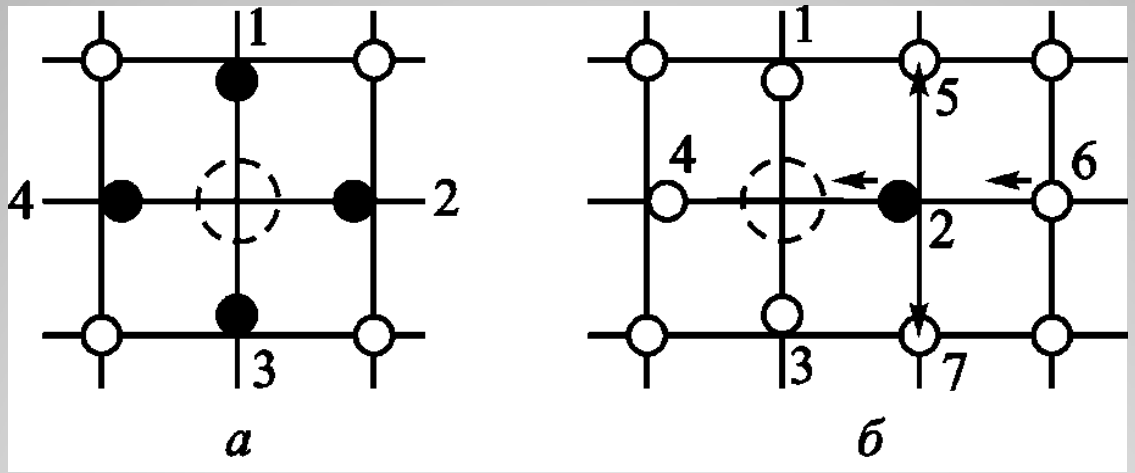


Искажение кристаллической решетки, вызываемое точечными дефектами

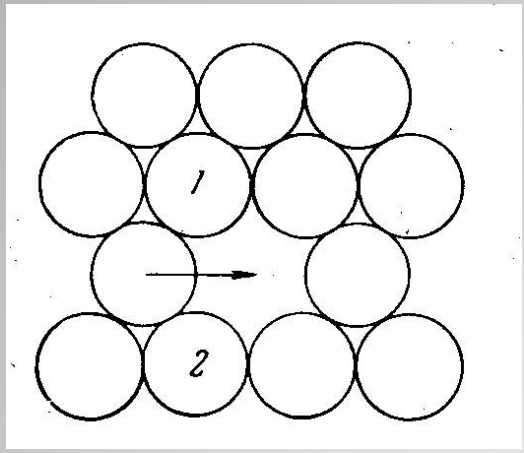
Искажение атомной структуры вокруг дефектов (смещения атомов в прилегающих к дефекту первых координационных сферах, выраженные в долях расстояния между ближайшими атомами)

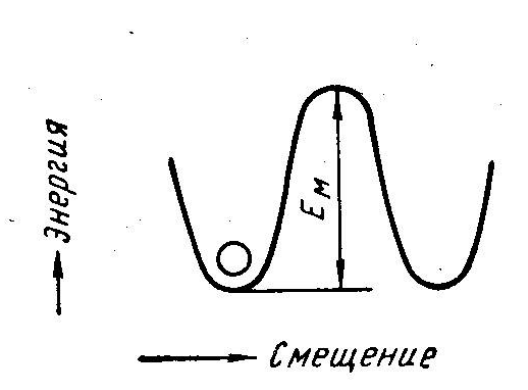
Металл	Тип решетки	Тип дефекта	Порядковый номер сферы		
			1	2	3
Cu	ГЦК	Вакансия	– 0,021	0,002	–0,002
Cu		Межузельный атом (ОЦК конфигурация)	0,149		0,032
Fe	ОЦК	Вакансия	– 0,061	0,021	–0,003
Na		Межузельный атом	0,3		

Знак «–» означает смещение атомов в сторону дефекта.

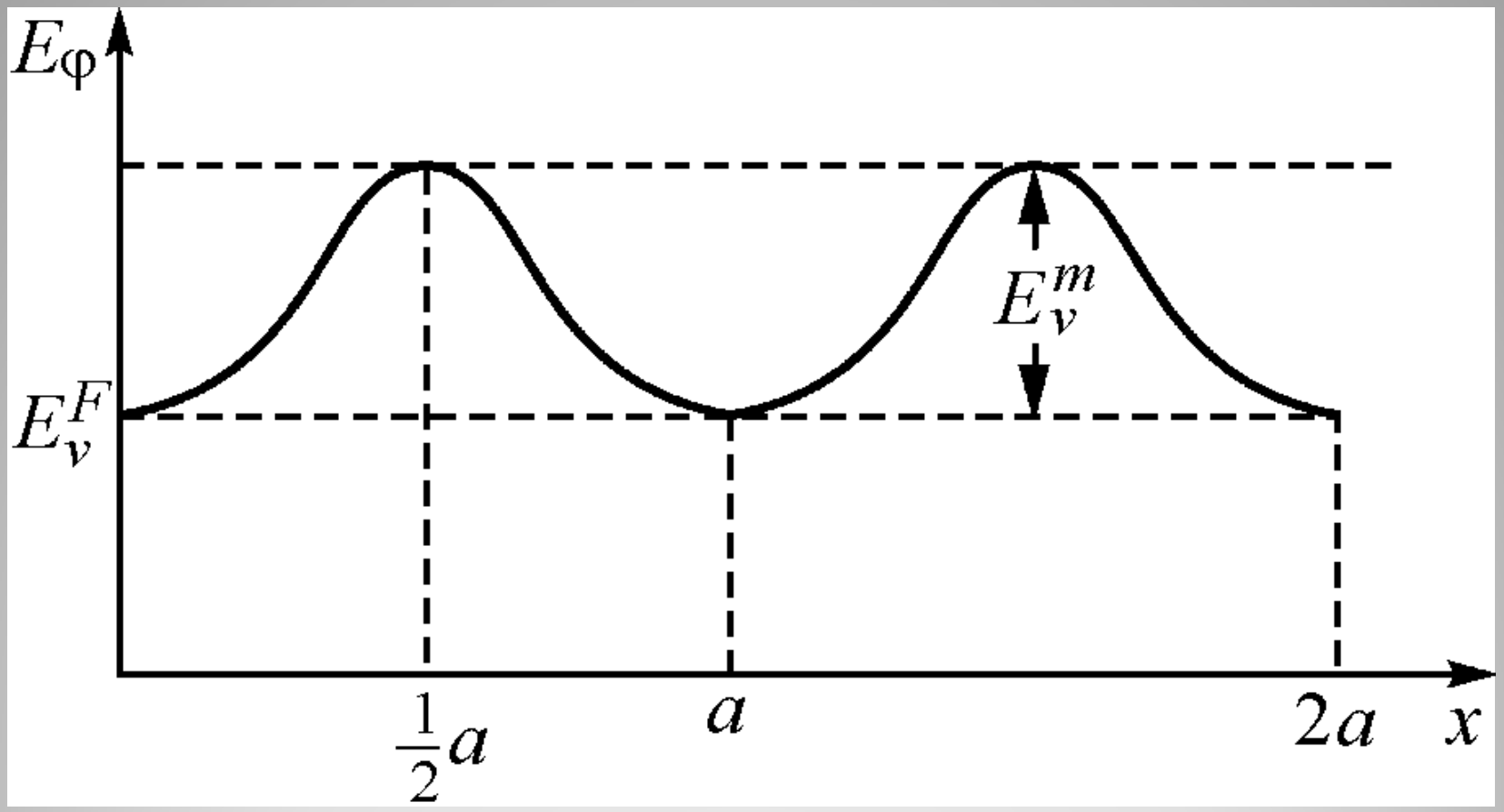


Миграция вакансий





При перемещении в соседний узел атом преодолевает энергетический барьер



Энергия миграции вакансии

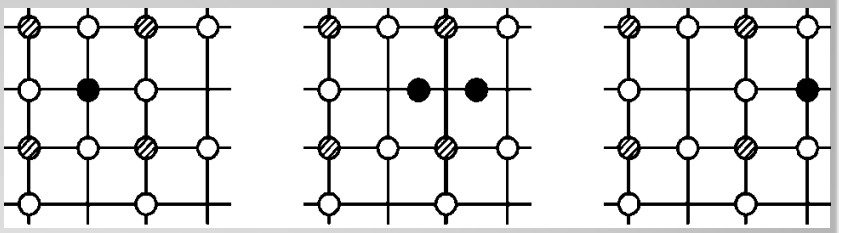
Самодиффузия

- Миграция собственных атомов по узлам кристаллической структуры (вакансионный механизм)
- $D=D_0\exp(-E_{сд}/kT)$,
- $E_{сд}= E_v^f + E_v^m$

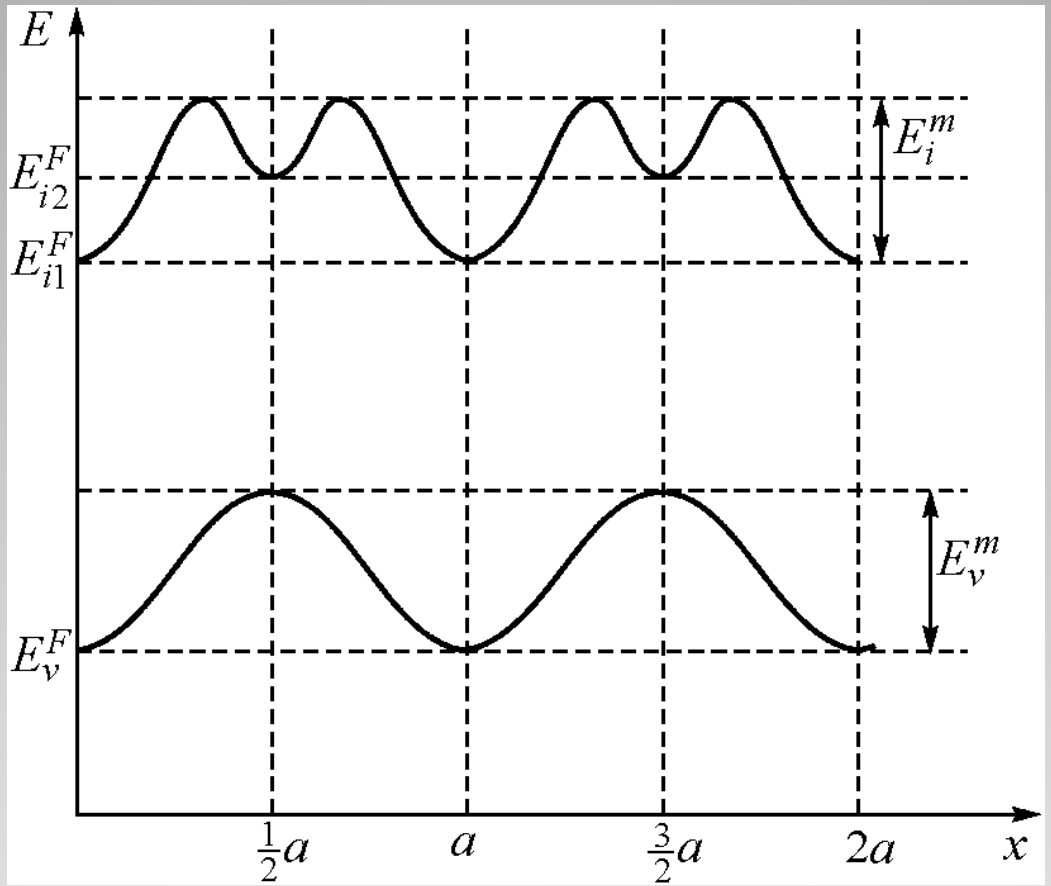
  $E_{сд} \approx 2$ эВ

- При облучении $E_{сд}= E_v^m$, радиационно – стимулированная диффузия

- Подвижность междоузельных атомов должна быть значительно выше подвижности вакансий. Это следует из того, что объемно-центрированная и гантельная конфигурации близки друг другу по расположению атомов и энергии, и поэтому наиболее легкий путь перемещения междоузельного атома есть последовательное изменение конфигурации: объемно-центрированная – гантельная – объемно-центрированная и т.д., т.е. движение междоузельного атома носит «эстафетный» характер

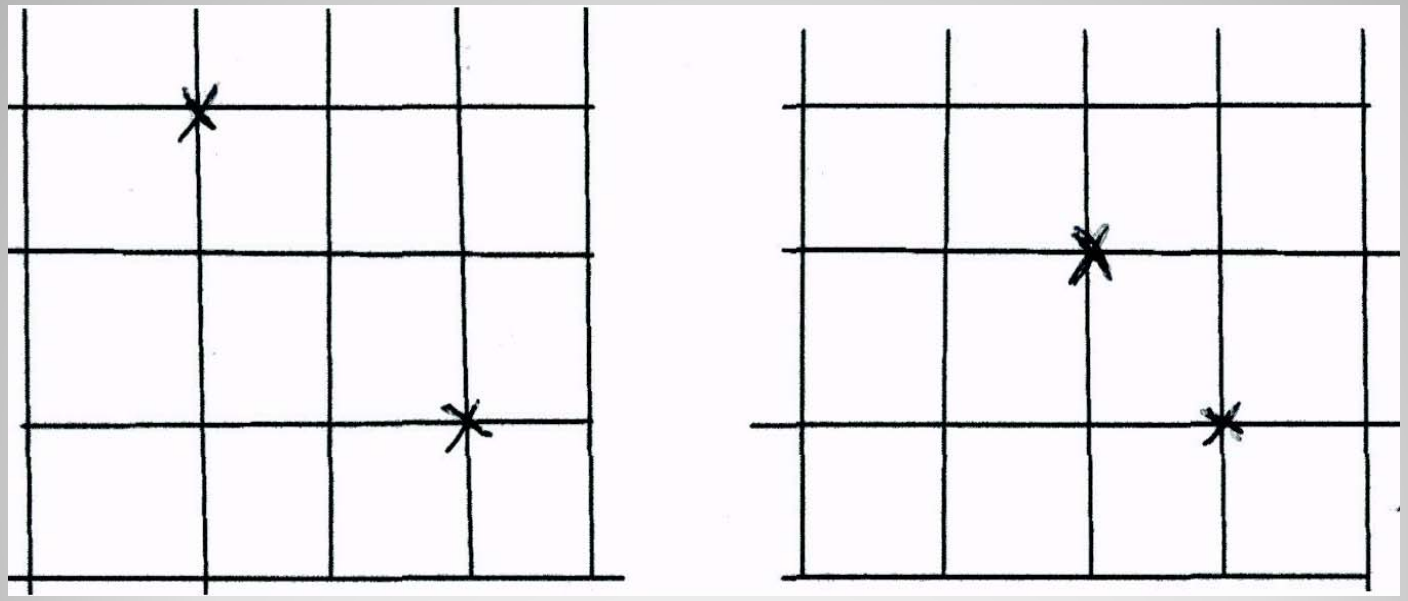


Миграция междоузельных атомов

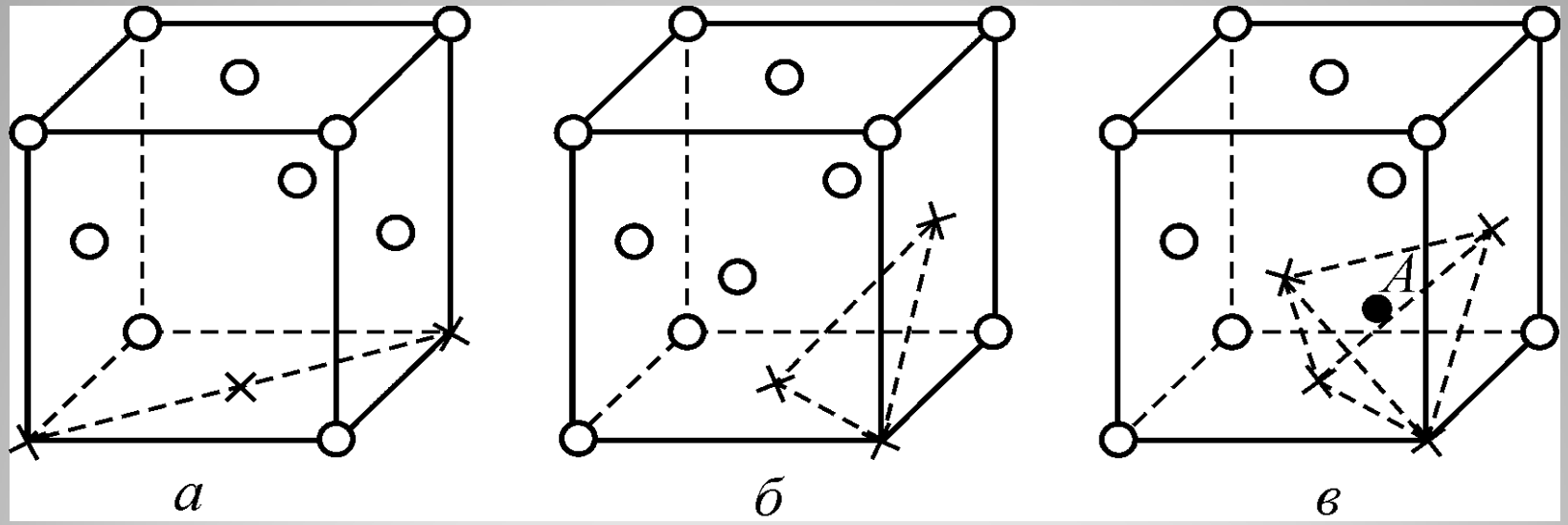


Энергия миграции точечных дефектов

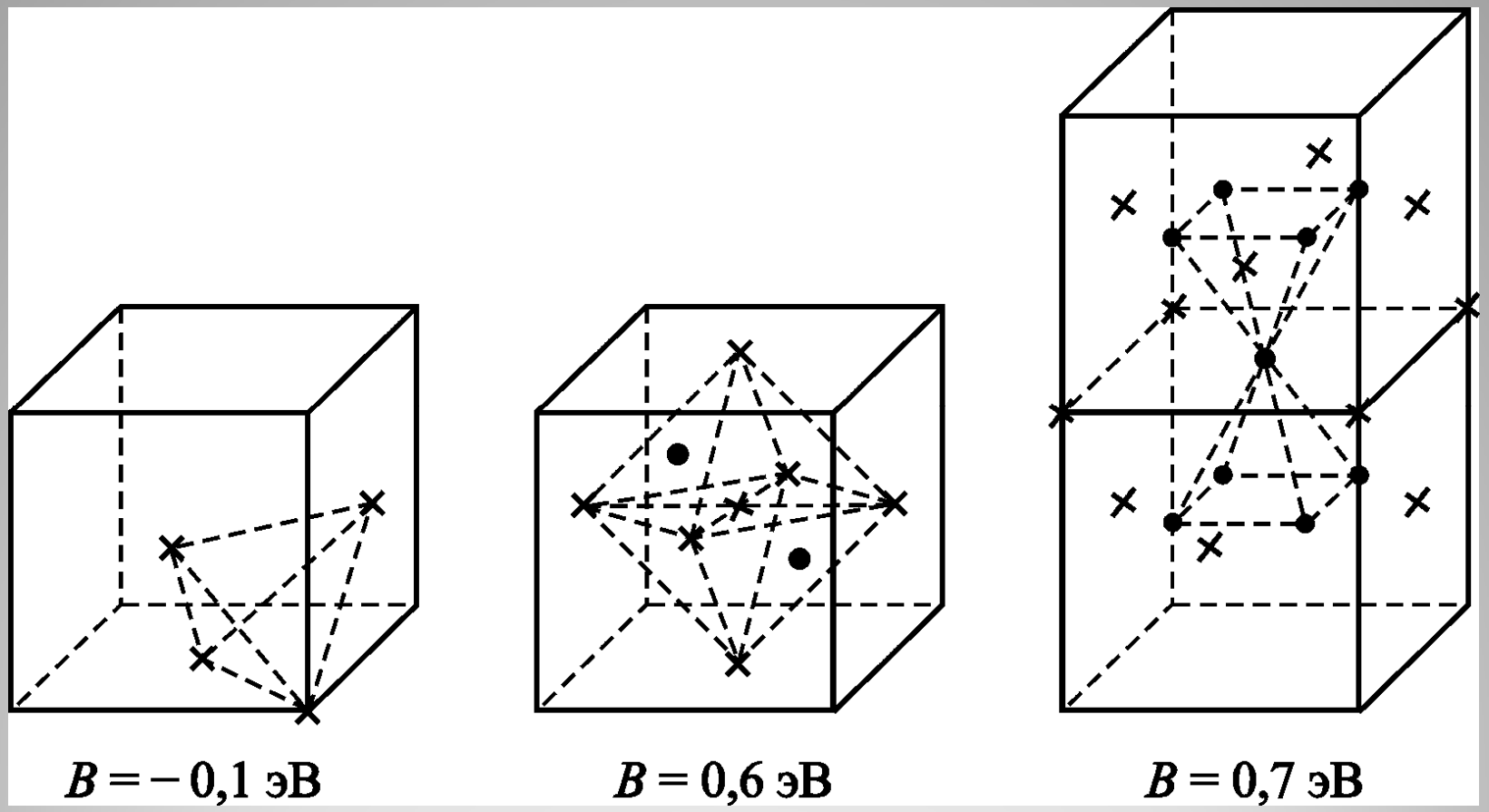
$$E_{2v}^{f} = 2E_{v}^{f} - B$$



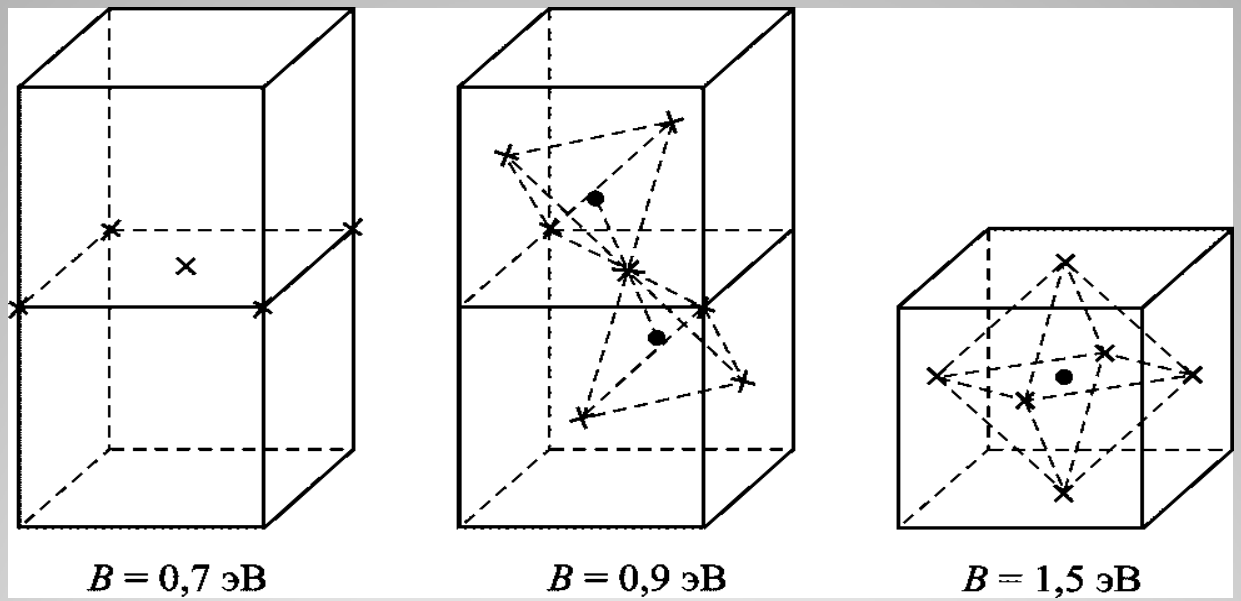
Комплексы точечных дефектов



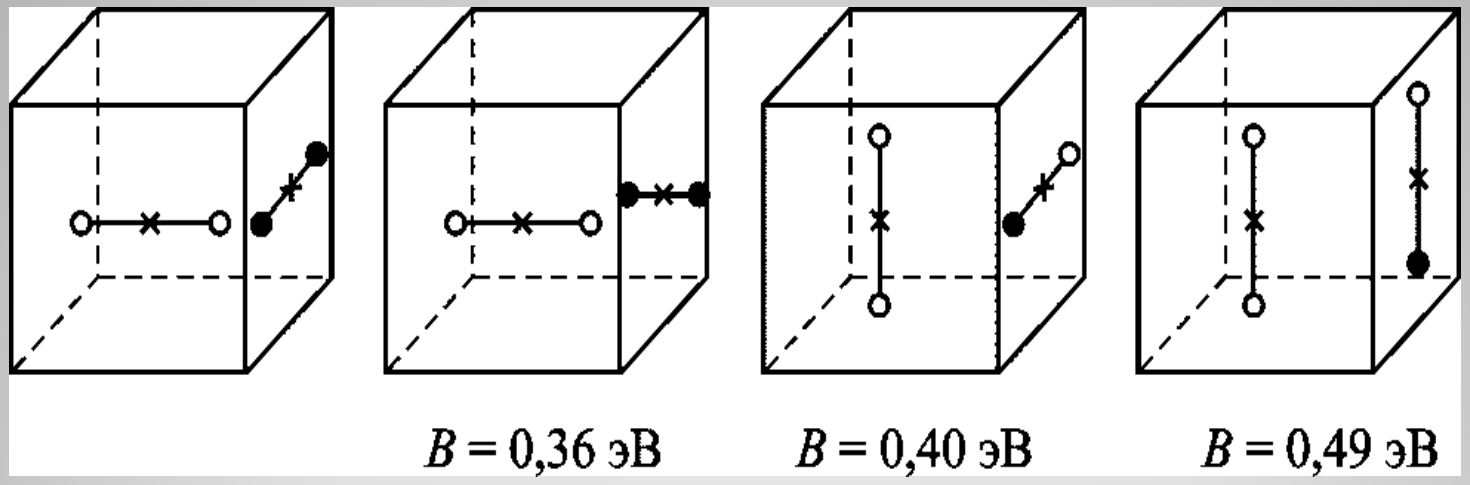
Конфигурация и энергия связи комплексов. Тривакансии



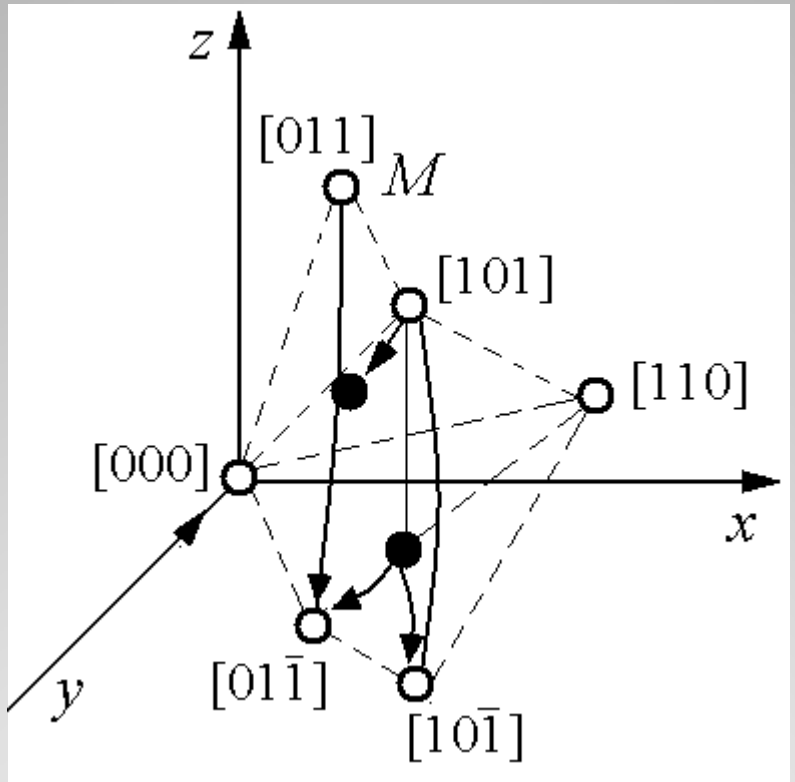
Тетравакансии



Пентавакансии

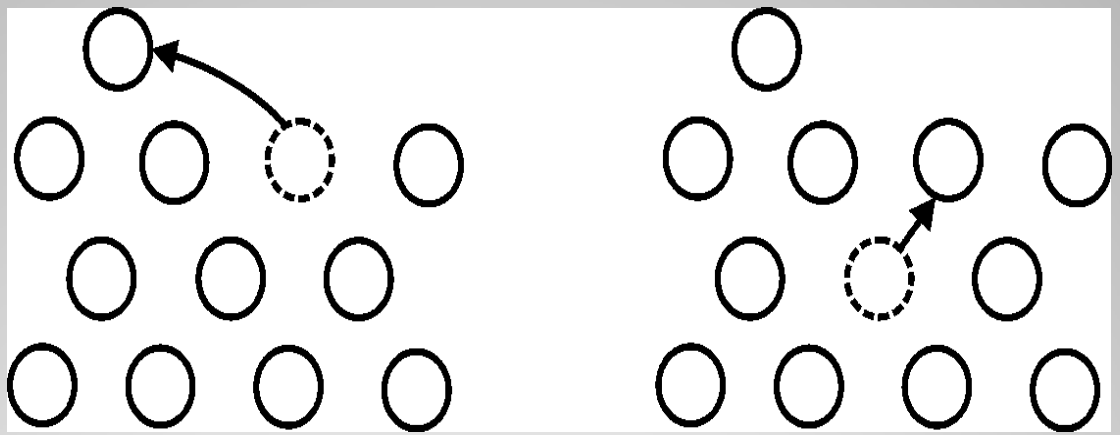


Двойные комплексы междоузельных атомов



Миграция тривакансии

Более легко происходит образование тепловых вакансий по механизму Шотки



Образование и отжиг точечных дефектов

Отжигом дефектов называется процесс исчезновения дефектов из перенасыщенного ими кристалла. Избыточные дефекты могут удаляться из кристалла двумя различными путями: перемещением к стокам и рекомбинацией. Если в кристалле имеются дефекты одного типа например вакансии и их простые комплексы, то они исчезают только в стоках, простейшим из которых является внешняя поверхность. Однако в реальном кристалле всегда присутствуют внутренние поверхности, такие, как границы зерен. В свою очередь, точечные дефекты могут порождать дислокации, на которых сами же затем исчезают.

Если имеются дефекты двух типов, которые способны взаимно уничтожать друг друга , то возможно их исчезновение за счет прямой рекомбинации.

Отжиг дефектов

- **Закалка.** Равновесная концентрация дефектов достигается и поддерживается за счет того, что дефекты диффундируют к внутренним и внешним поверхностям и от них. С понижением температуры равновесная концентрация вакансий уменьшается по экспоненциальному закону. При закалке этот процесс не успевает пройти, и фиксируется избыточная концентрация вакансий – металл пересыщается вакансиями.

Получение высокой концентрации точечных дефектов

Ван-Бюрен вывел формулы для максимальной с
образца, при которых не возникает пластическая де

$$V < V_{\max} = \frac{5(1-\nu)\delta\sigma_{кр}}{\alpha G r^2} \quad \text{или} \quad r < r_{\max} =$$

где V – скорость закалки, r – радиус проволоки; ν –
температуропроводность; α – коэффициент те
критическое напряжение сдвига; G – модуль сдвига

Пластическая деформация. Под действием приложенных напряжений может происходить как перемещение существующих, так и образование новых дислокаций. Движение дислокаций, в свою очередь, может привести к возникновению точечных дефектов.

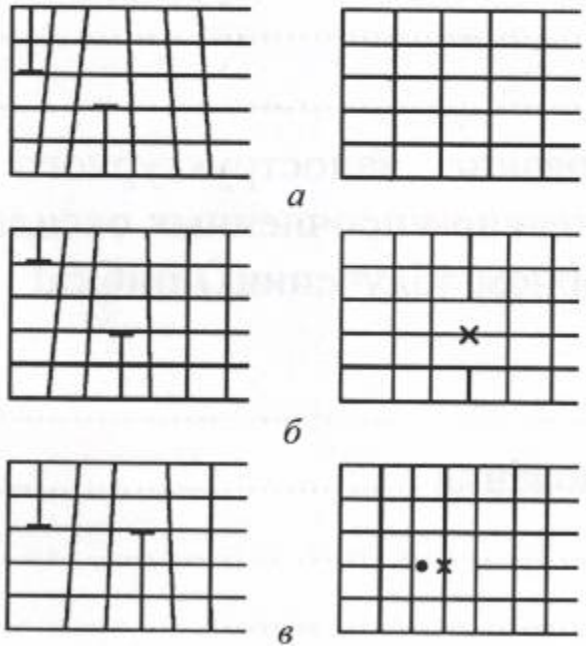
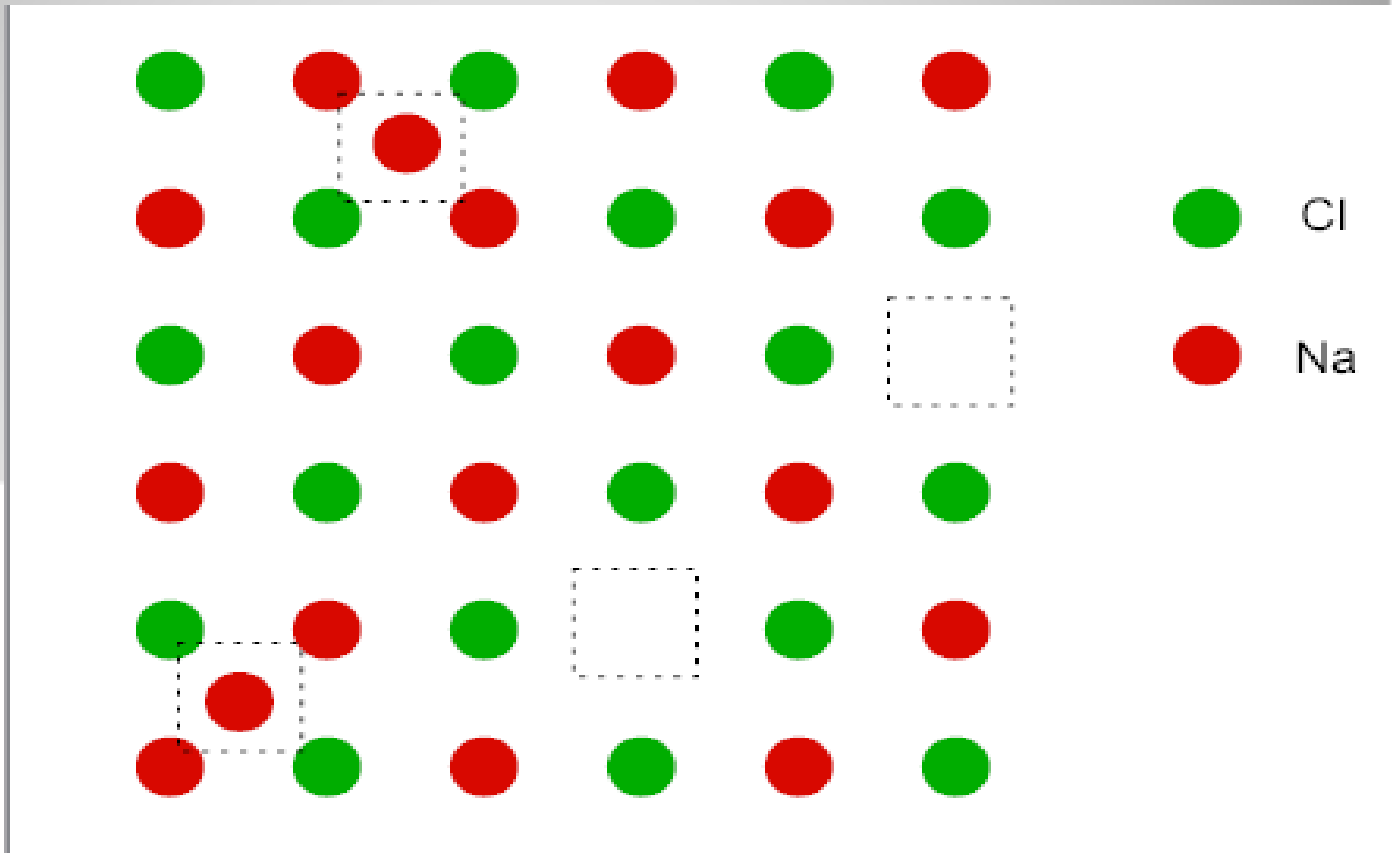


Рис. 2.21. Взаимное уничтожение положительной и отрицательной краевых дислокаций с образованием:
а – совершенной решетки;
б – цепочки вакансий;
в – цепочки межузельных атомов

Облучение



Пара «вакансия-межузельный атом» называется дефектом Френкеля (1926)

Яков Ильич Френкель
1894-1952

Таблица 5

Пороговая энергия облучения, при которой возникают смещения атомов (E_d = 25 эВ)

Бомбардирующие частицы	Атомный вес вещества мишени			
	10	50	100	200
Нейтроны, протоны, эВ	70	325	638	1263
Электроны, γ-лучи, МэВ	0,10	0,41	0,68	1,10
α-частицы, эВ	31	91	169	325
Осколки деления с массой 100, эВ	76	28	25	28

Облучение

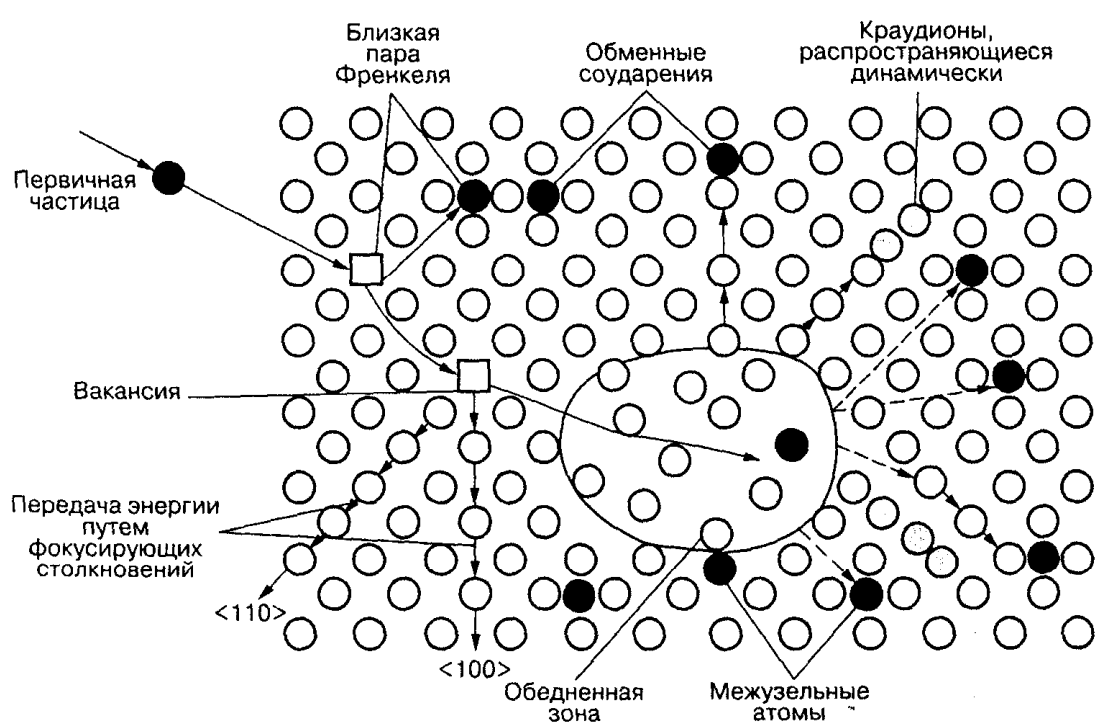


РИС. 1.5. Модель радиационных повреждений, производимых при соударении одного нейтрона с атомами решетки [9]

Каскады смещения

Теоретическое значение среднего числа смещенных атомов, приходящихся на одно первичное соударение, для различных веществ при облучении нейтронами с энергией 1 МэВ

Вещество	Атомный вес	$\bar{\nu}$
Железо	56	390
Медь	64	380
Германий	93	290
Золото	197	140

Каскадная функция

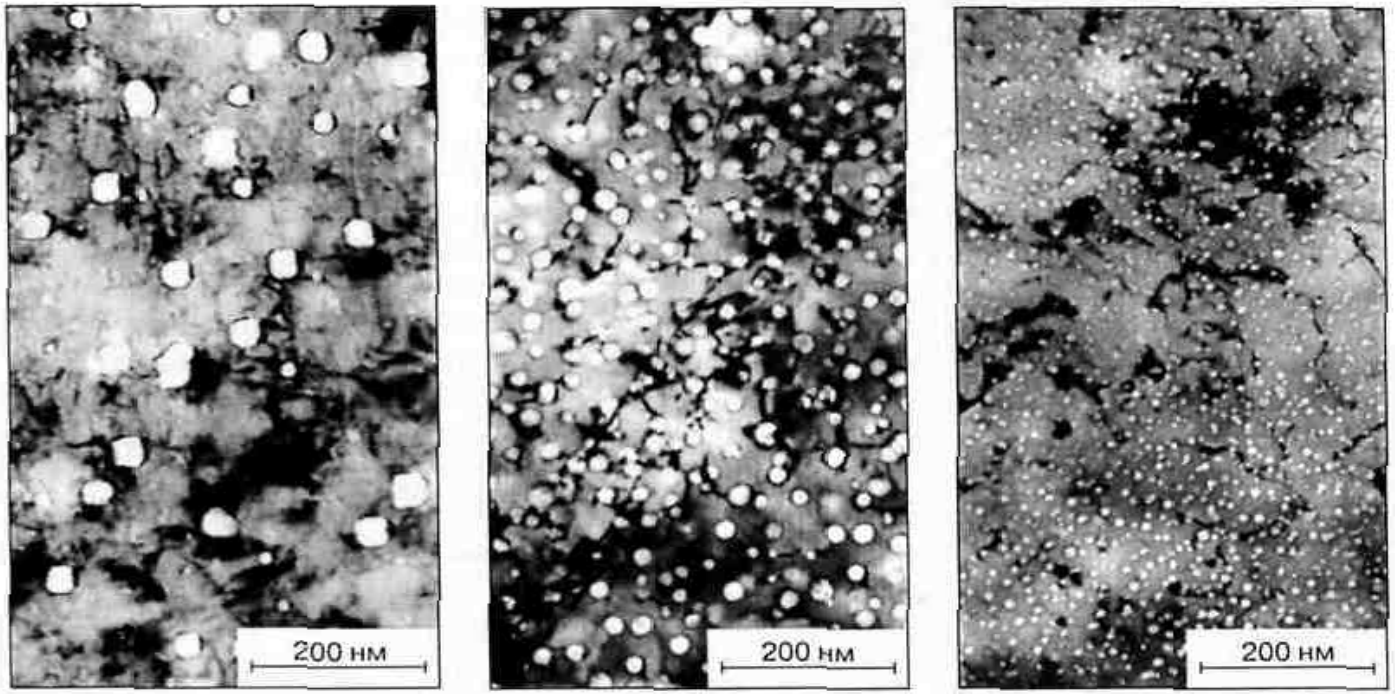


РИС. 5.1. Микроструктура Ni, *облученного ионами* Ni (Ni^{3+}, E = 3МэВ, $K = 10^{-3}$сна/с, D = 30 сна, $T_{обл}$ = 600 °С): *а* — исходная обработка 800 °С, 1 ч; *б* — исходная обработка 800 °С, 1 ч + 10 %ХД; *в* — исходная обработка 800 °С, 1 ч + 50 %ХД

Радиационное распухание материалов

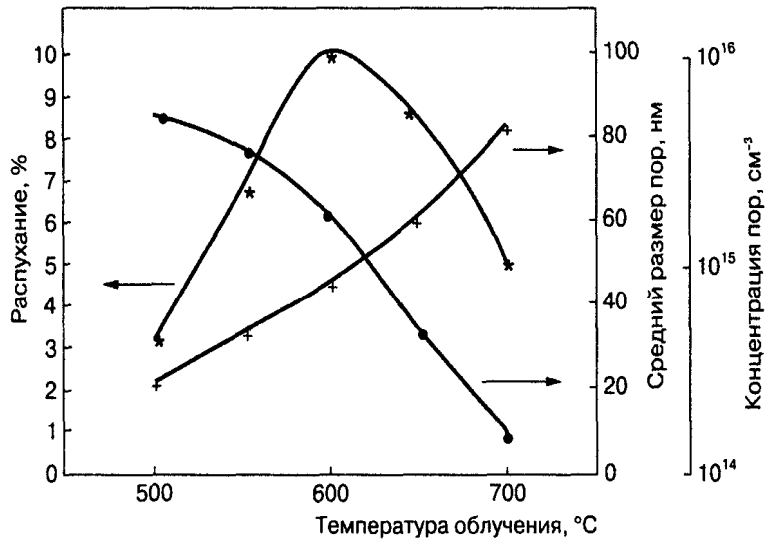


РИС. 5.2. Температурная зависимость параметров распухания Ni (Ni^{3+}, E = 3МэВ, D = 40 сна)

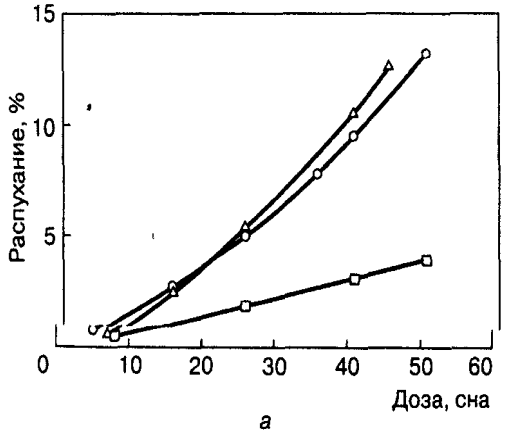


РИС. 5.3. Зависимость от дозы облучения (Ni^{3+}, E = 3 МэВ, $T_{обл}$ = 600 °С): *а* — распухания Ni; *б* — диаметра пор в Ni; *в* — концентрации пор в Ni; ○ — Ni отожженный; Δ — Ni+10 %ХД; □ — Ni+50 % ХД

- Легирование на уровне твердого раствора
- Легирование с целью создания дисперсионно – упрочненных сплавов
- Создание дисперсно-упрочненных сплавов
- Предварительная деформация
- Уменьшение размера зерна
- Создание условий для процесса аннигиляции точечных дефектов

Способы борьбы с радиационным распуханием

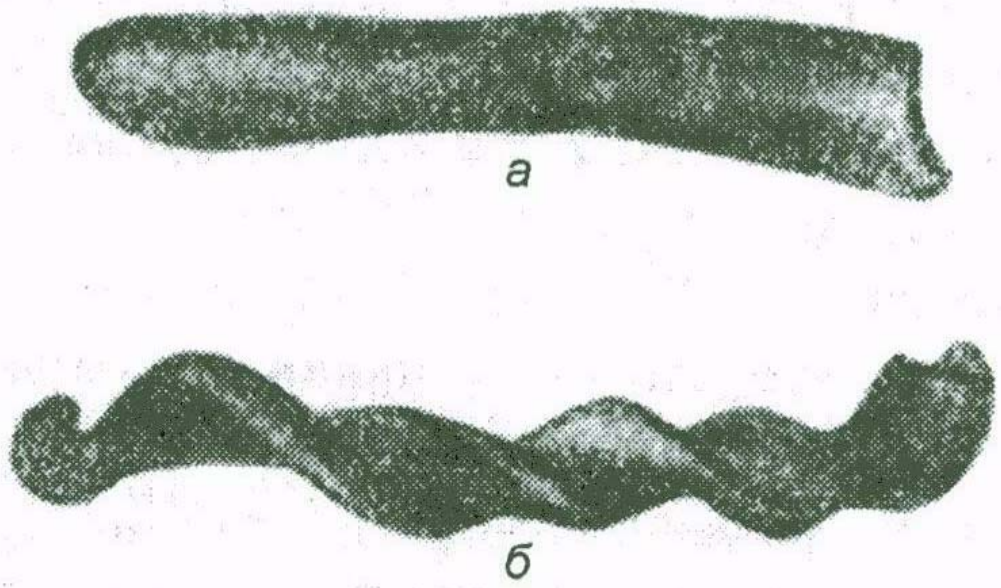
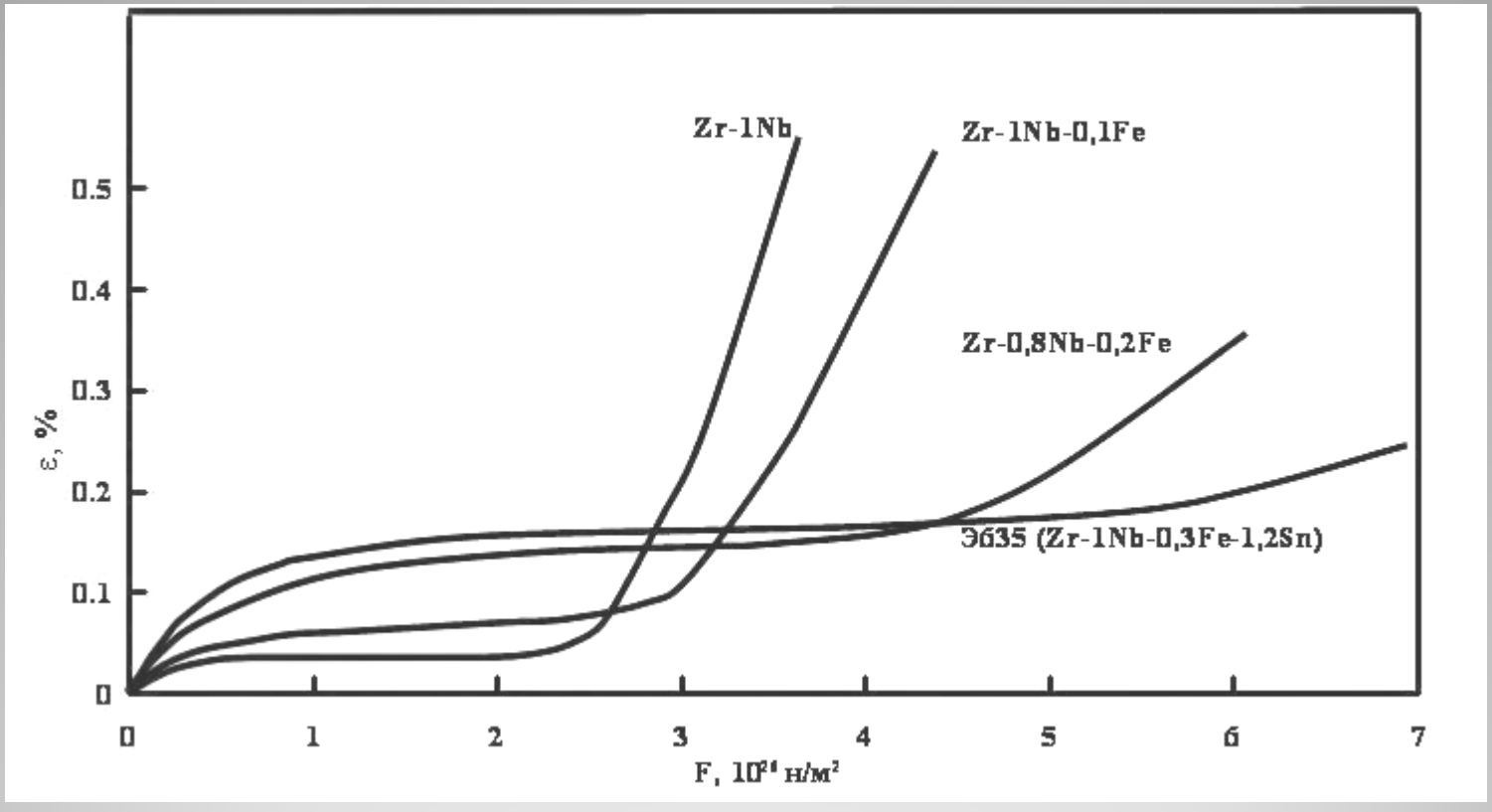


Рис. 24.18. Рост уранового прутка при термических циклах в интервале температур 100 – 500 °С (×2): *а* – 2132 цикла; *б* – 4882 цикла

Радиационный рост



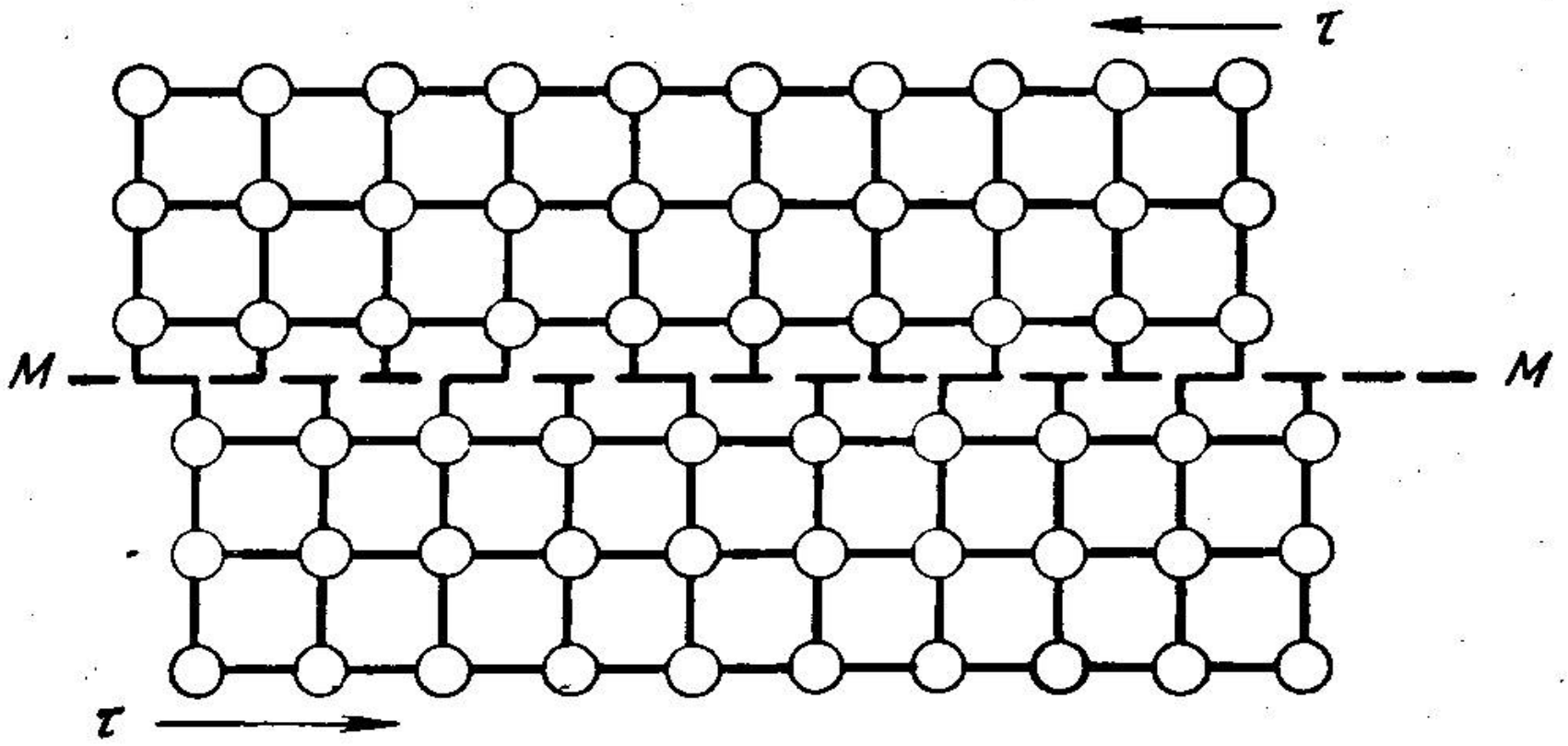
Радиационный рост в зависимости от флюенса

- Устранение анизотропии
- Устранение текстуры
- Уменьшение размера зерен
- Создание условий для процесса аннигиляции точечных дефектов

Способы борьбы с радиационным ростом

Дислокации

Дислокация: линия незавершенного сдвига



Сдвинуть полкристалла целиком – энергетически очень невыгодно!

$$\sigma = \sigma_{теор} \sin \frac{2\pi x}{b} \quad . \qquad (1)$$

Для малых деформаций сдвига $\frac{x}{a}$, где a – межплоскостн расстояние, выполняется закон Гука:

$$\sigma = G \frac{x}{a} \quad ; \qquad (2)$$

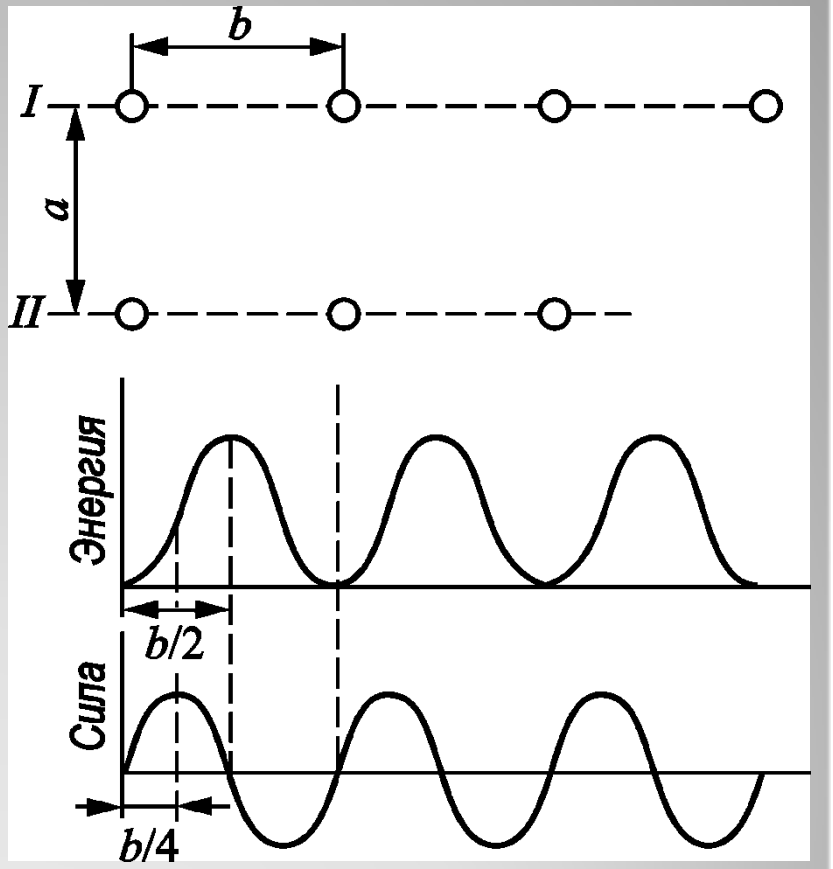
G – модуль сдвига.

Приравнивая уравнения (1) и (2) в случае малых деформаци когда

$$\sin\left(\frac{2\pi x}{b}\right) \simeq \frac{2\pi x}{b} \quad ,$$

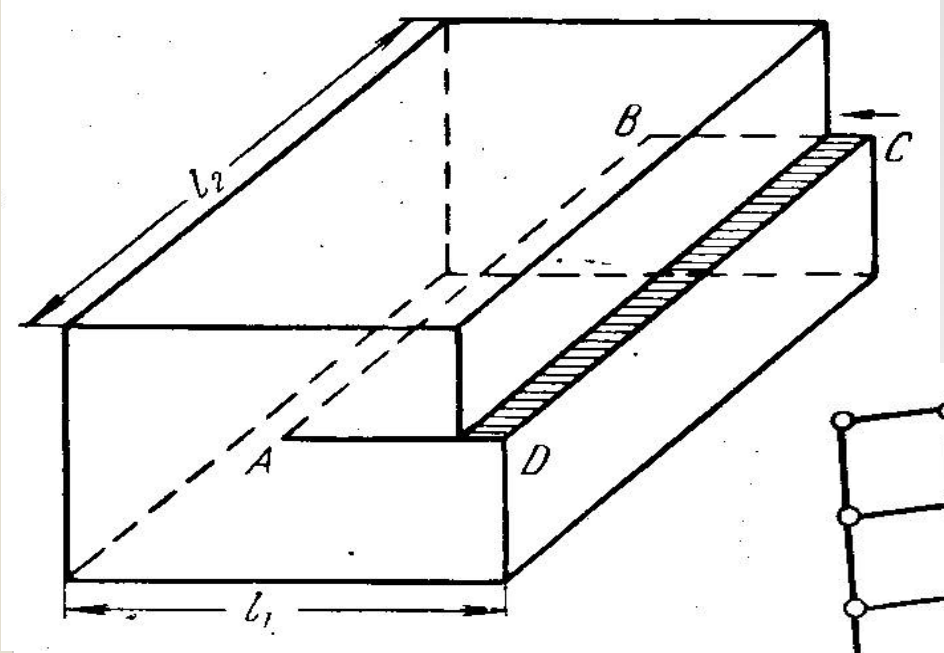
для теоретического напряжения сдвига получаем

$$\sigma_{теор} = \frac{Gb}{2\pi a} \approx \frac{G}{5} \quad . \qquad (3)$$

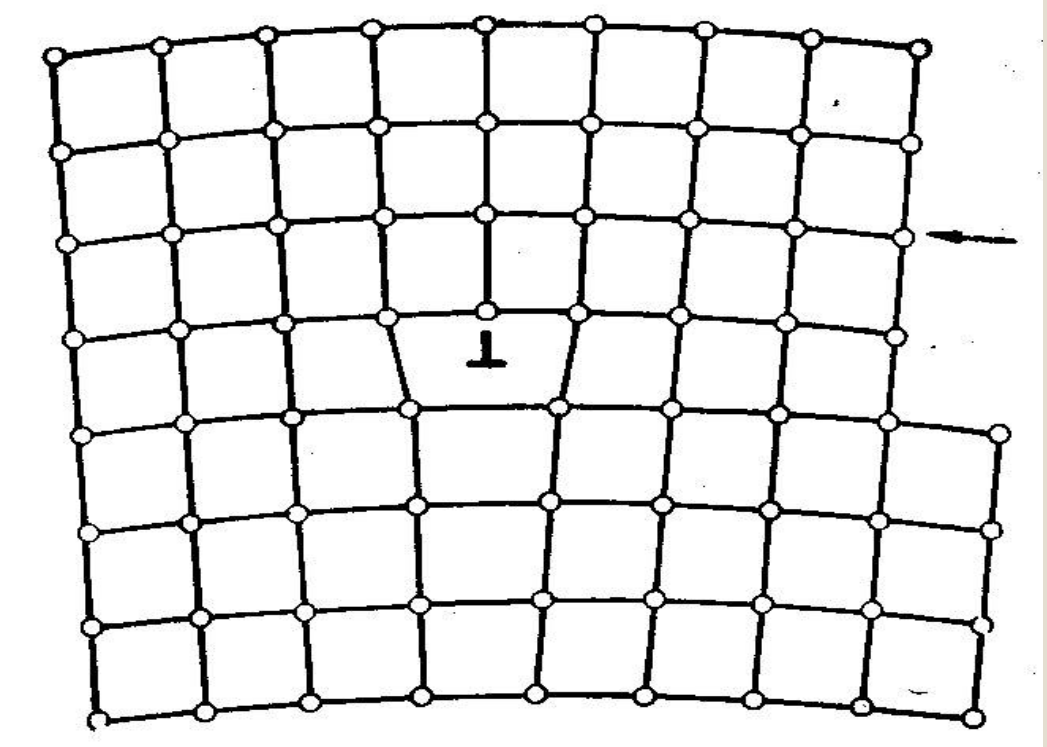


Оценка Френкеля

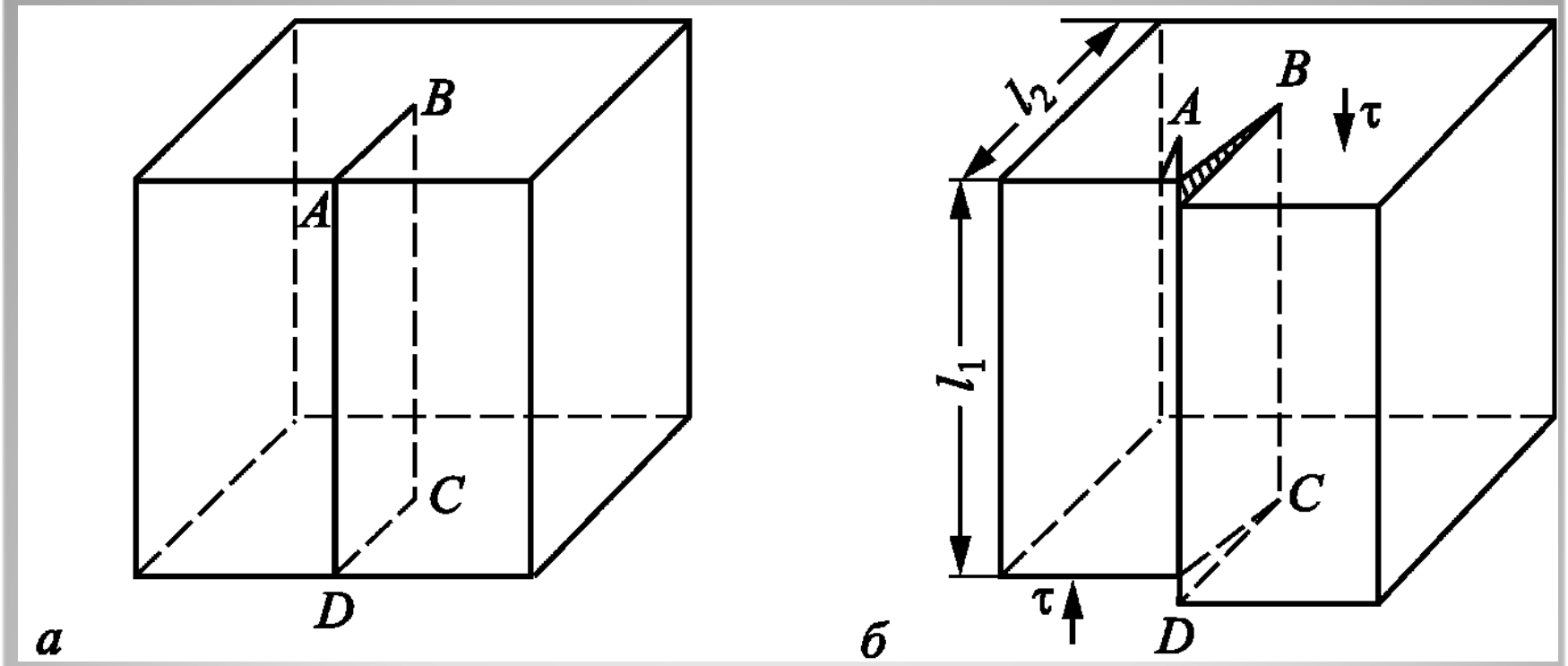
Краевая дислокация (edge dislocation)



Вставленная экстраплоскость

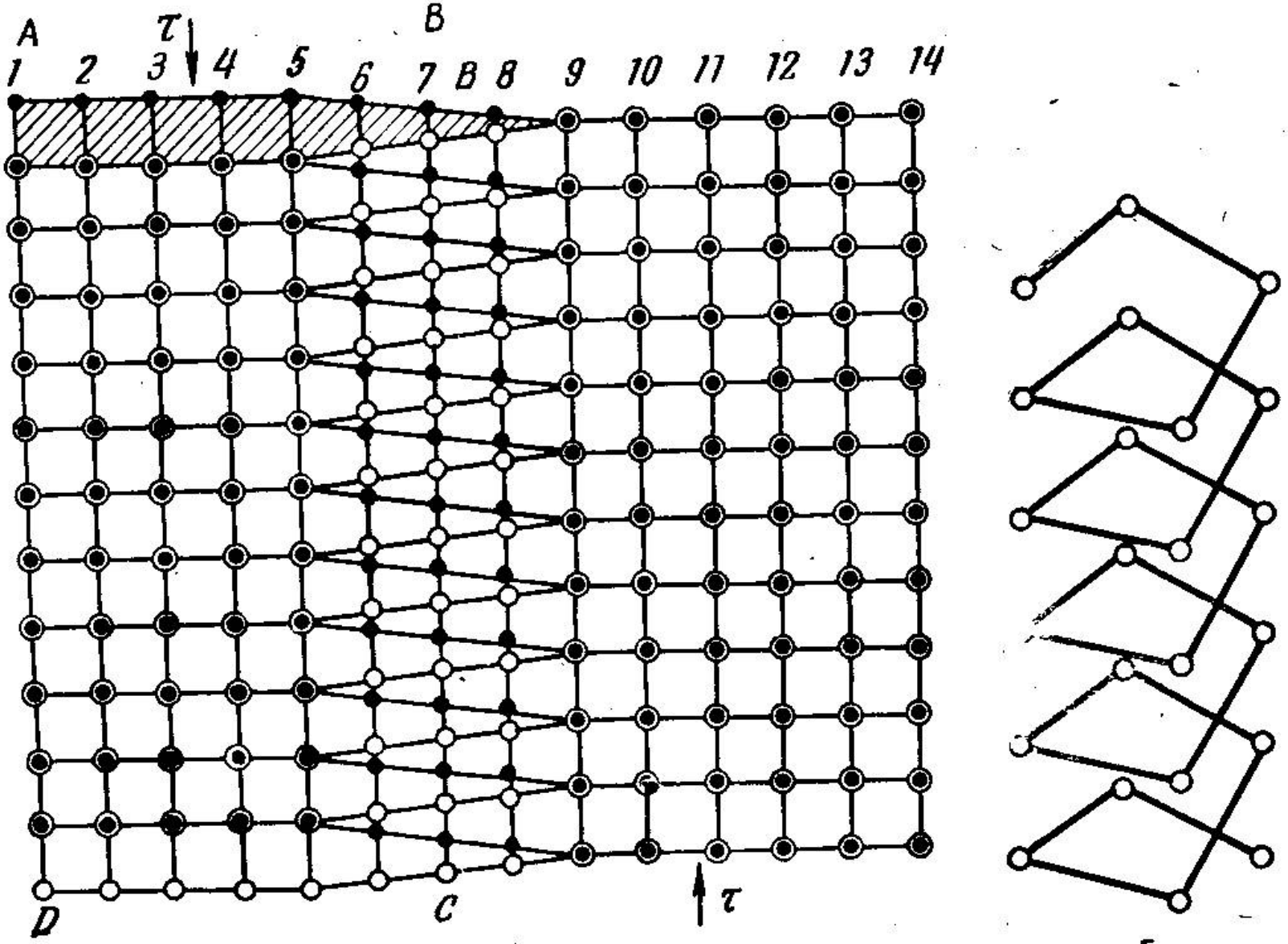


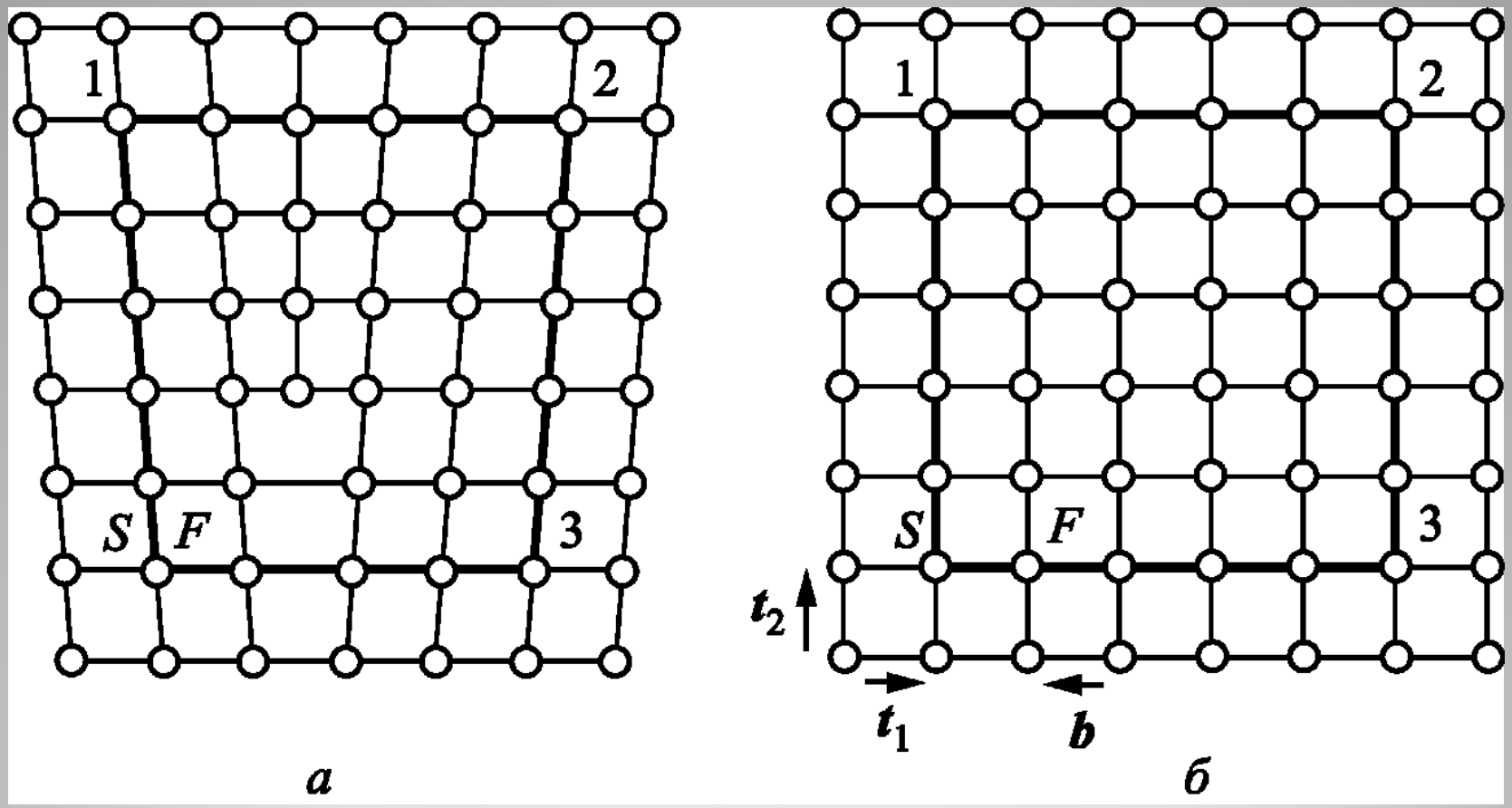
Сдвиг, создавший дислокацию



Винтовая дислокация

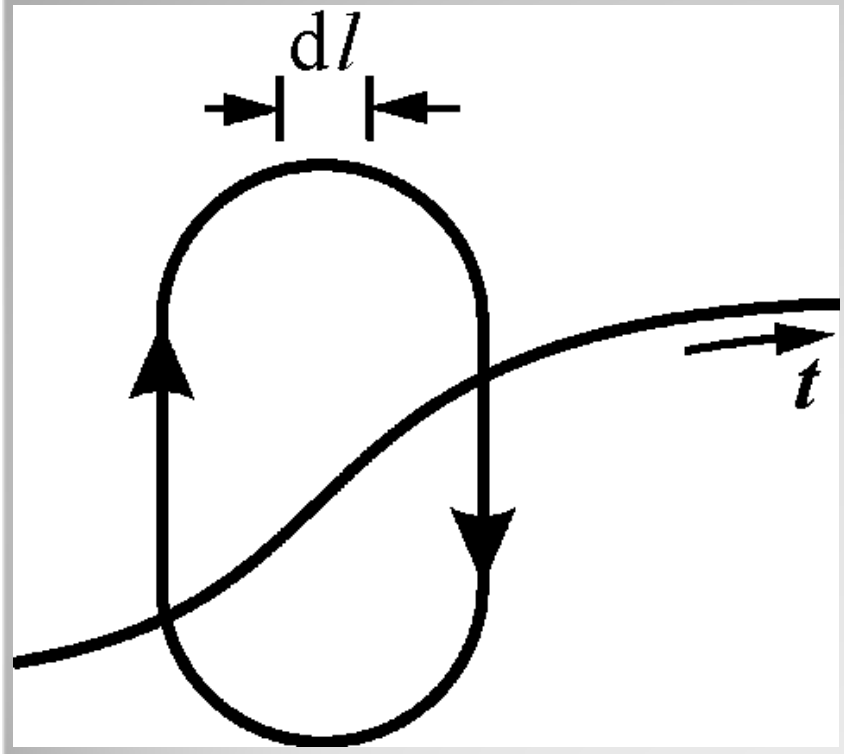
Винтовая дислокация: расположение атомов





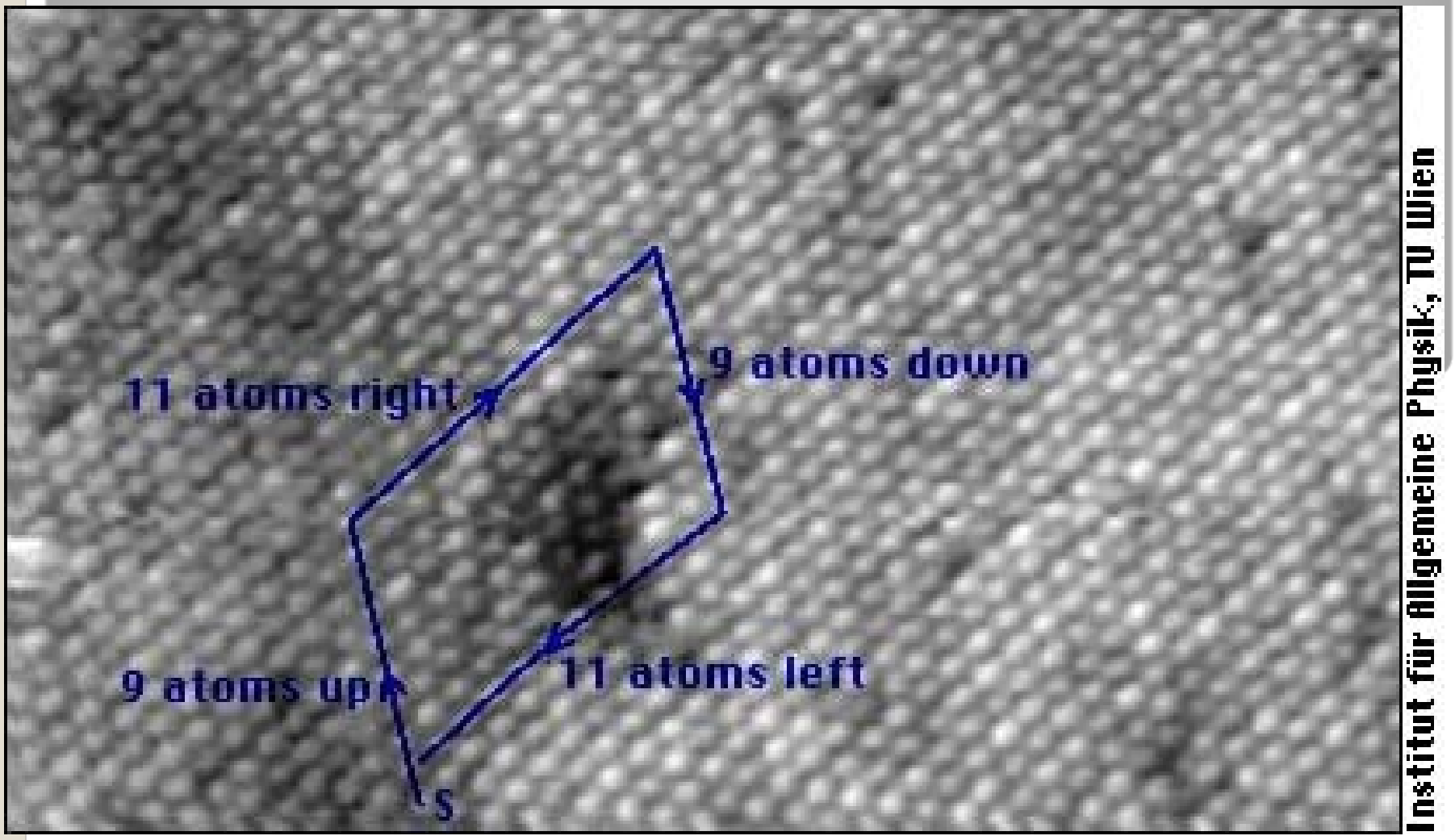
Контур и вектор Бюргерса

Контур и вектор Бюргерса



$$\vec{b} = \oint_c \frac{d\vec{U}}{dl}\, dl$$

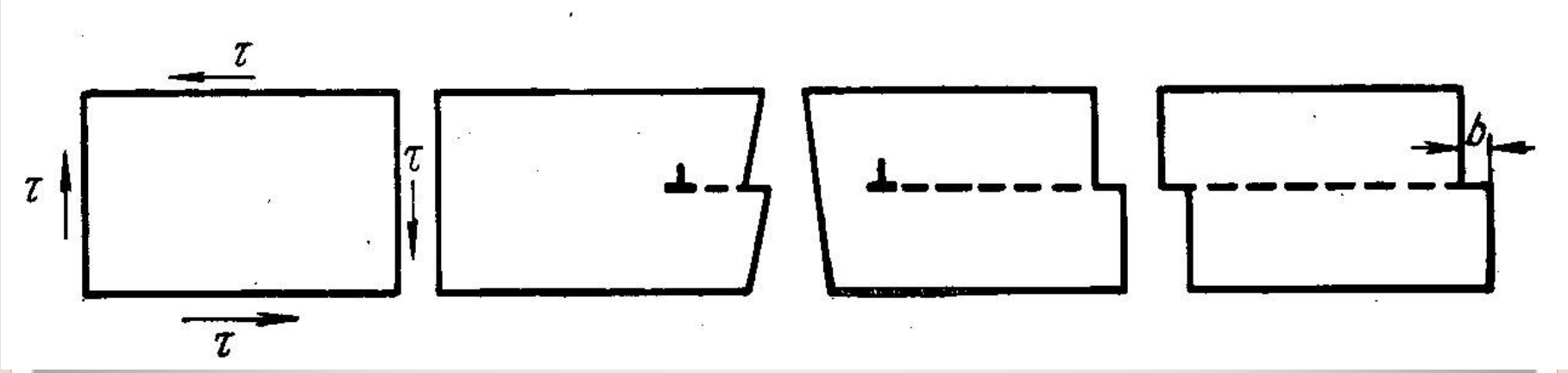
Вектор Бюргерса краевой дислокации



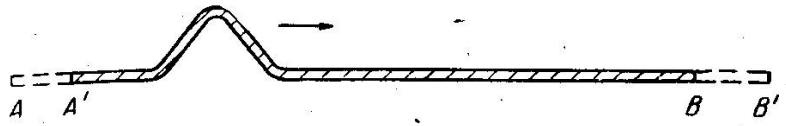
Движение дислокации может осуществляться консервативным и неконсервативным путями. Консервативное движение дислокации – скольжение – не сопровождается переносом массы вещества, неконсервативное движение – переползание – обусловлено переносом вещества.

Движение дислокаций

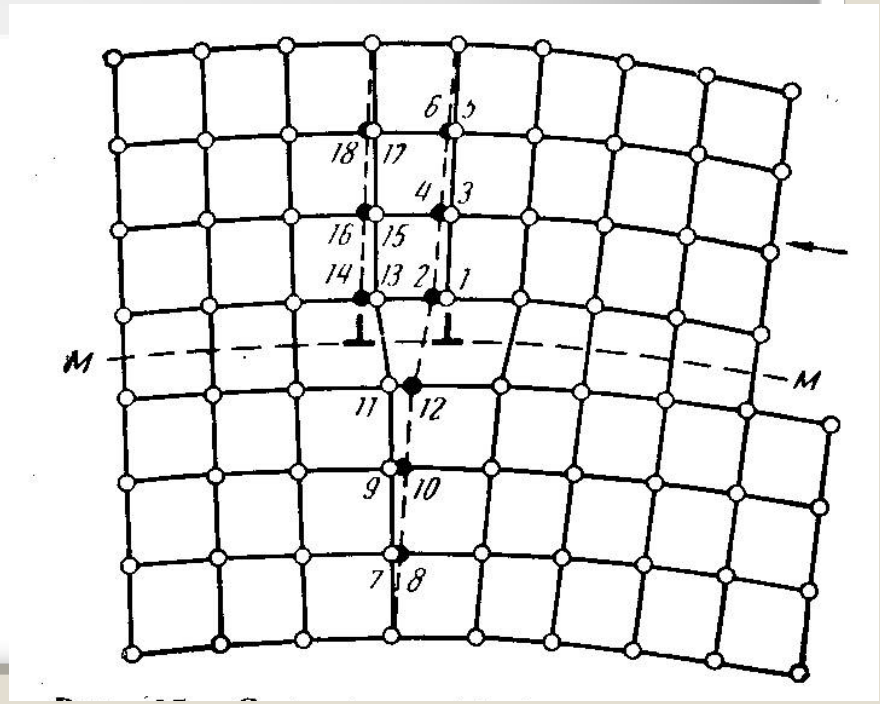
Скольжение краевой дислокации

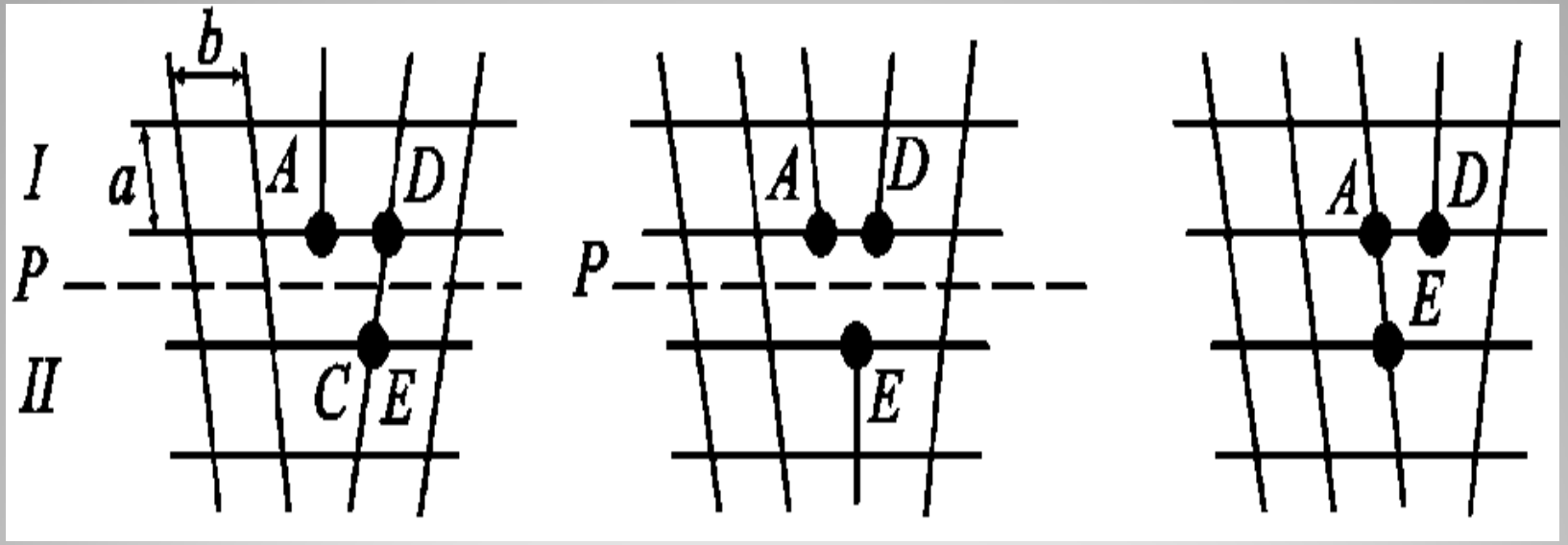


Поэтому сдвиг происходит постепенно ...



... как складка на ковре





Скольжение дислокаций

При таких допущениях были оценены энергия активации ΔE на единицу длины линии дислокации и критическое напряжение сдвига $\tau_П$, которые изменяются экспоненциально с $\frac{a}{b}$:

$$\Delta E \approx \frac{Gb^2}{2\pi k}\exp\left(-\frac{2\pi a}{kb}\right), \qquad \tau_П = \frac{2G}{k}\exp\left(-\frac{2\pi a}{kb}\right),$$

где k равно 1 для винтовой и $(1 - \nu)$ для краевой дислокации, где ν – коэффициент Пуассона.

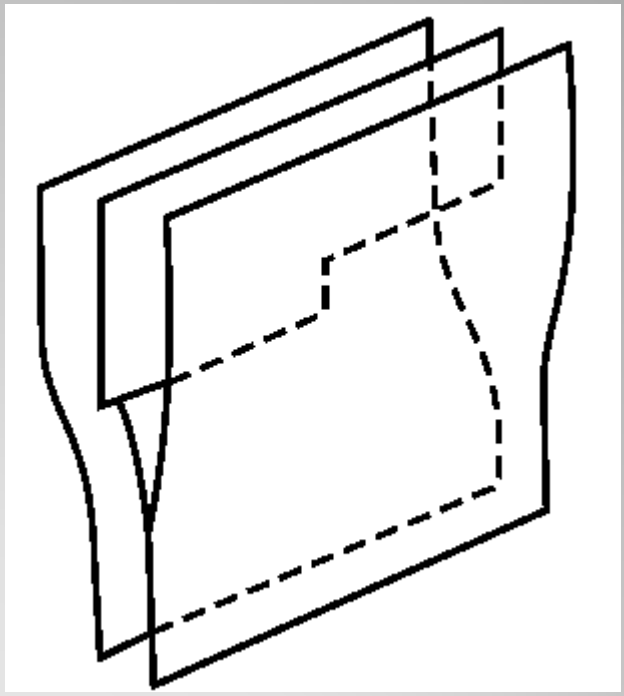
Скольжение дислокаций

Преобладающие плоскости скольжения и направления скольжения различных металлов [2,53]

Структура	Металл	Плоскость скольжения	Направление скольжения
Гранецентрированная кубическая	Al	{111}	$\langle\bar{1}01\rangle$
	Cu	{111}	$\langle\bar{1}01\rangle$
	Ag	{111}	$\langle\bar{1}01\rangle$
	Au	{111}	$\langle\bar{1}01\rangle$
	Ni	{111}	$\langle\bar{1}01\rangle$
Объемноцентрированная кубическая	α-Fe	{110}, {211}, {321}	$\langle\bar{1}11\rangle$
	Mo	{211}	$\langle\bar{1}11\rangle$
	W	{211}	$\langle\bar{1}11\rangle$
	K	{321}	$\langle\bar{1}11\rangle$
	Na	{211}	$\langle\bar{1}11\rangle$
Гексагональная плотноупакованная	Mg	{0001}, $\{10\bar{1}1\}$	$\langle 2\bar{1}\bar{1}0\rangle$
	Cd	{0001}	$\langle 2\bar{1}\bar{1}0\rangle$
	Zn	{0001}	$\langle 2\bar{1}\bar{1}0\rangle$
	Be	{0001}	$\langle 2\bar{1}\bar{1}0\rangle$
	Ti	$\{10\bar{1}0\}$, {0001}, $\{10\bar{1}1\}$	$\langle 2\bar{1}\bar{1}0\rangle$

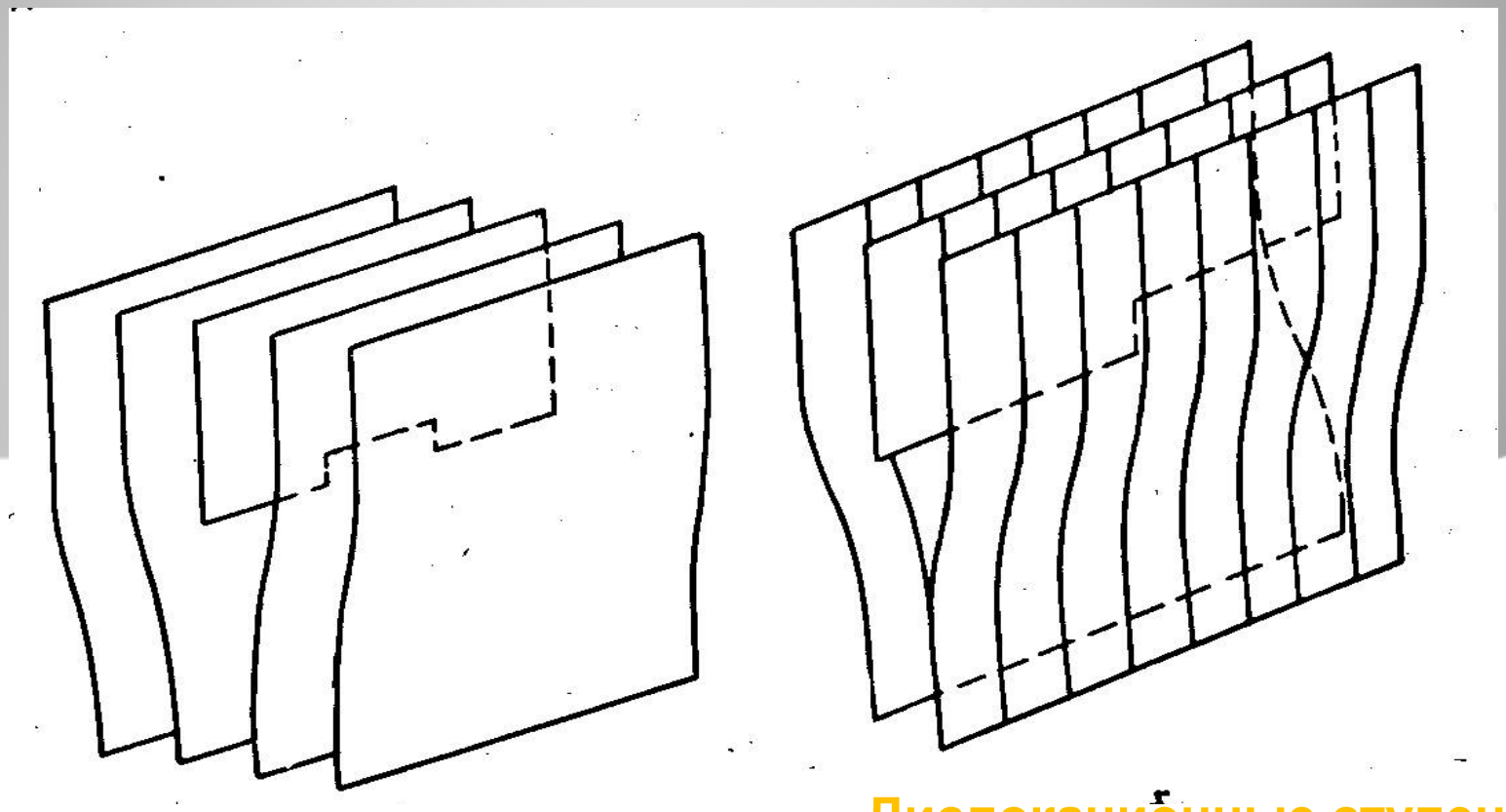
Системы скольжения

Пороги на
краевой дислокации



Переползание дислокации

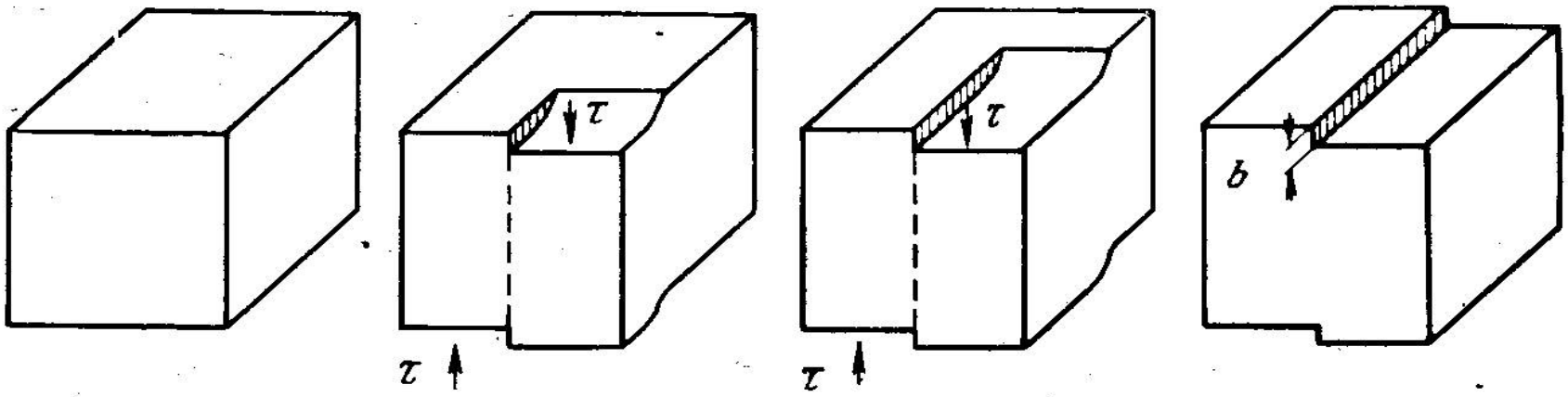
Переползание краевой дислокации

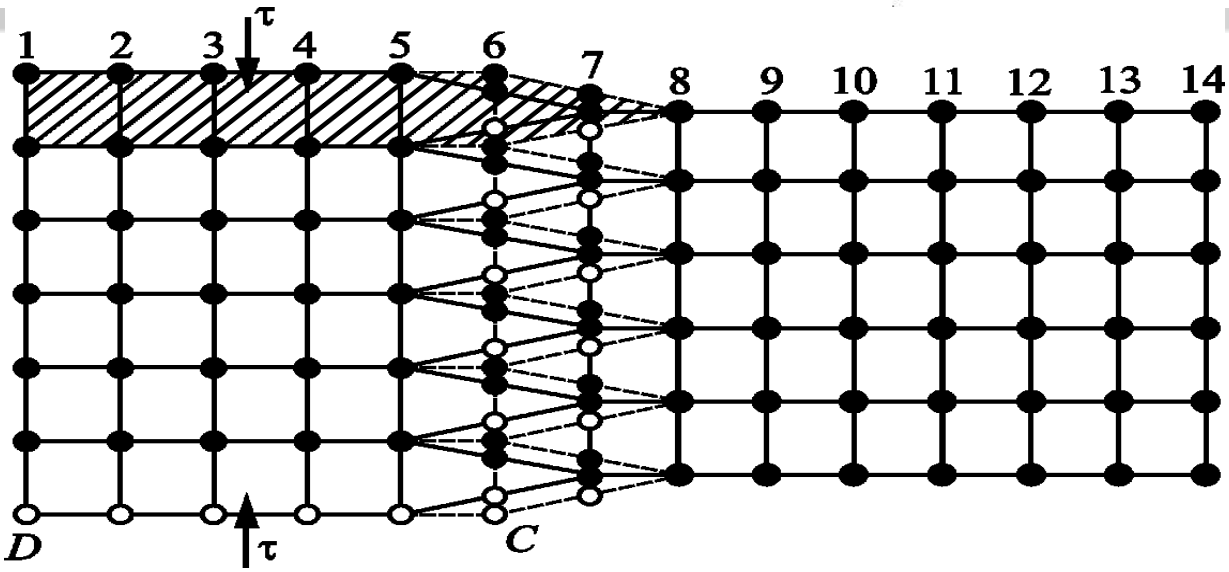


Дислокационные ступени (изломы) – источники (стоки) вакансий

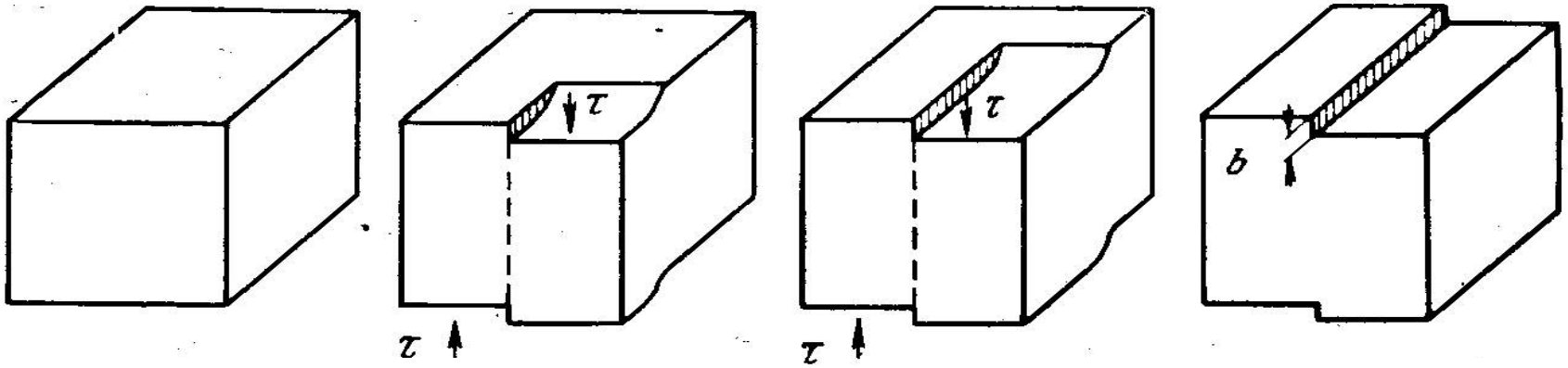
Для смещения ступени (излома) нужна диффузия атомов и вакансий.

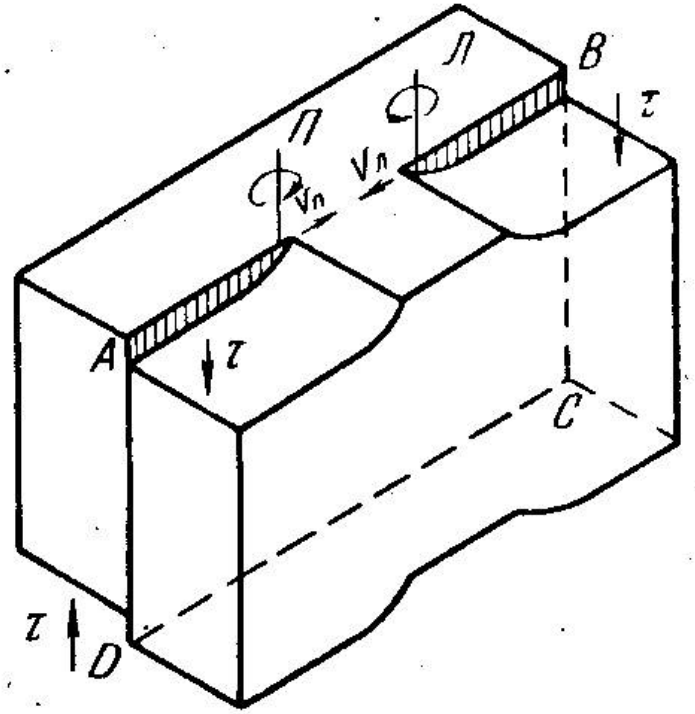
Скольжение винтовой дислокации

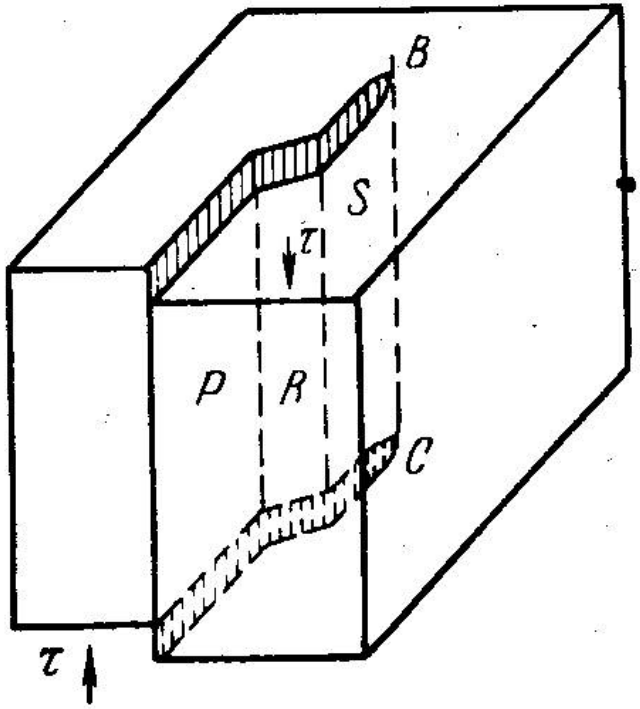




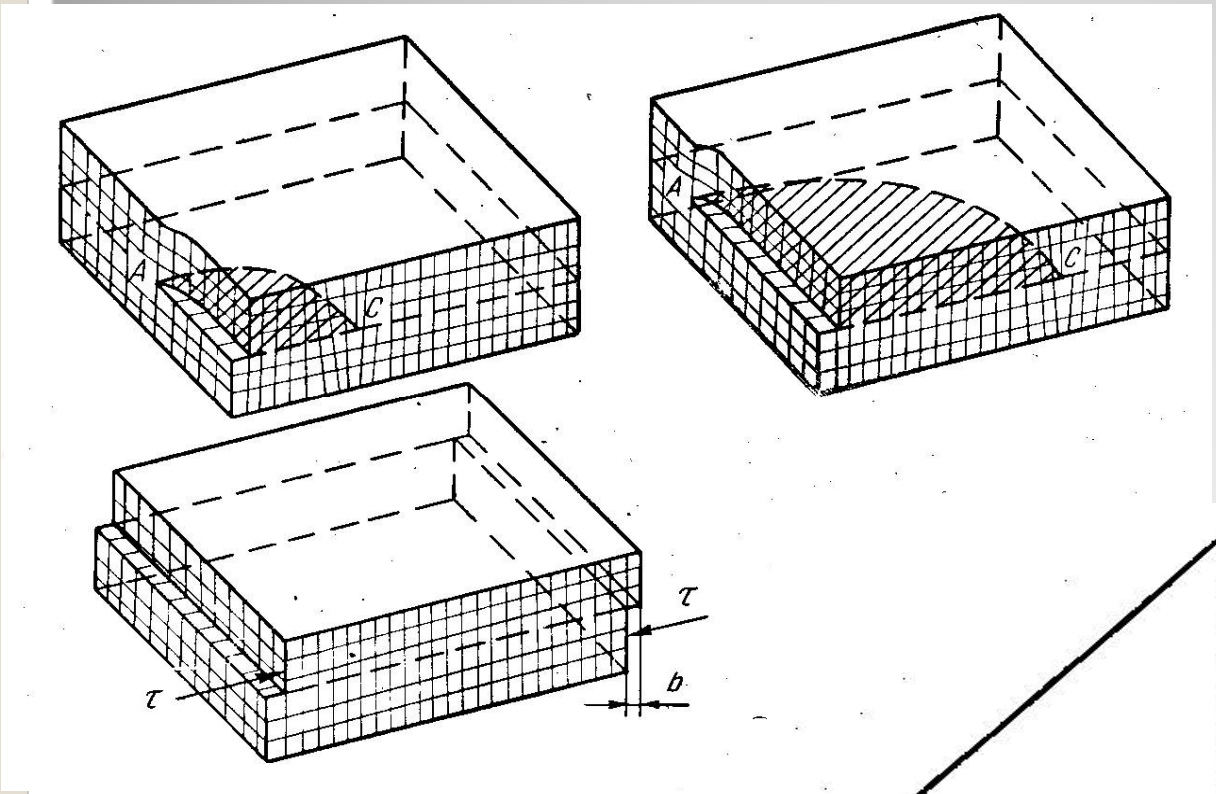
Скольжение винтовой дислокации



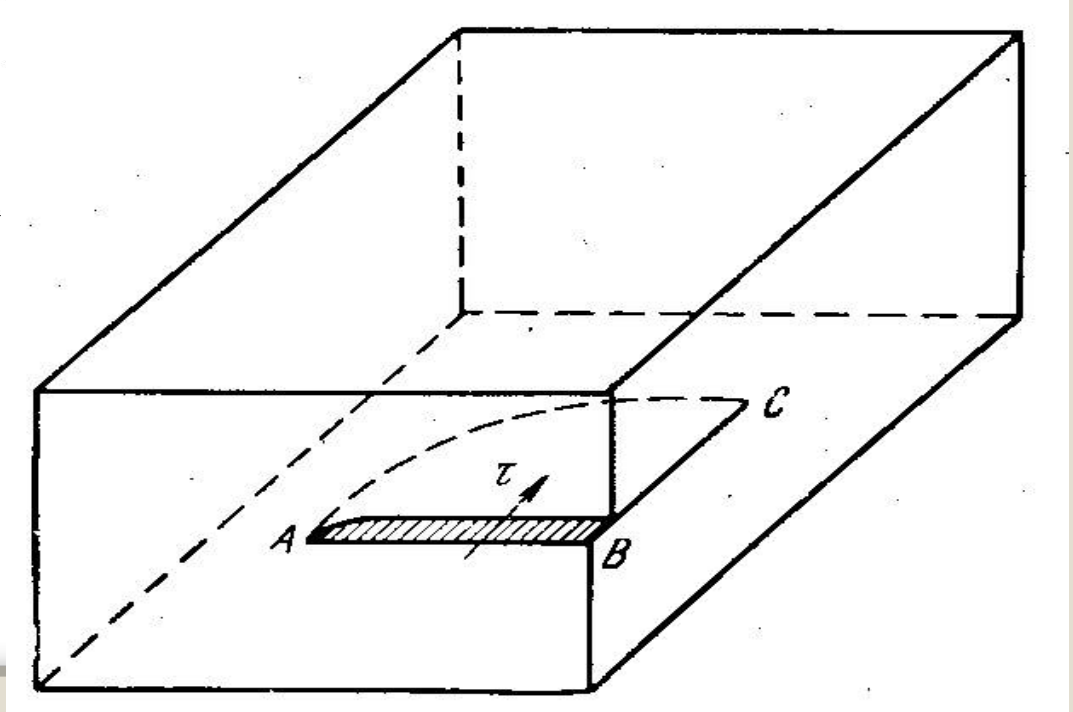




Смешанные дислокации



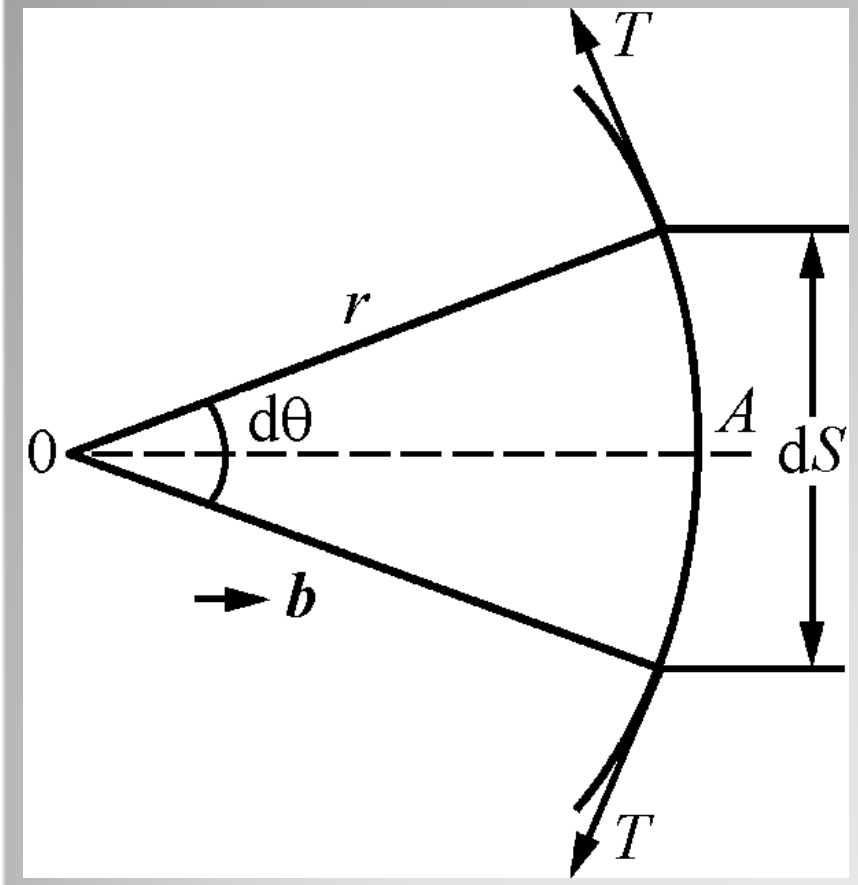
Скольжение смешанной дислокации через весь кристалл



Сдвиг, создающий смешанную дислокацию

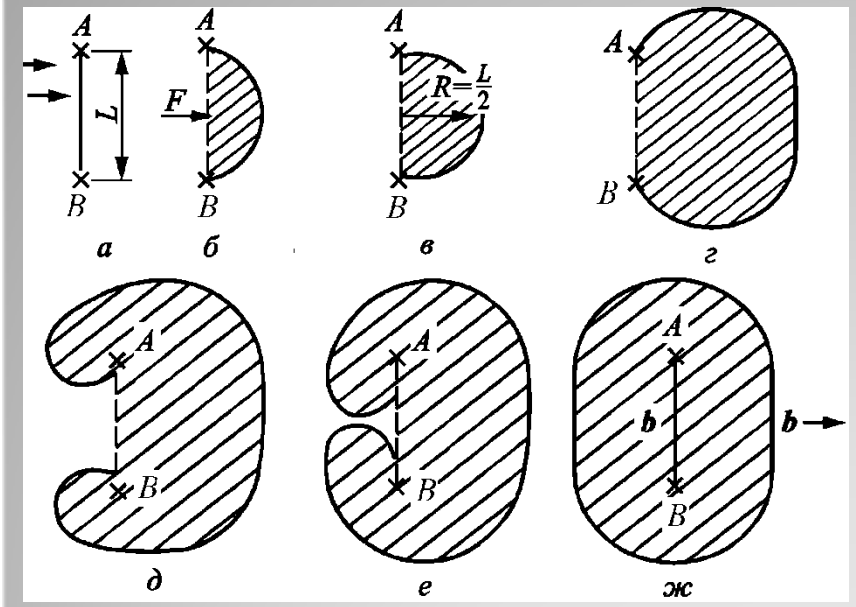
Пластическая деформация как движение дислокаций

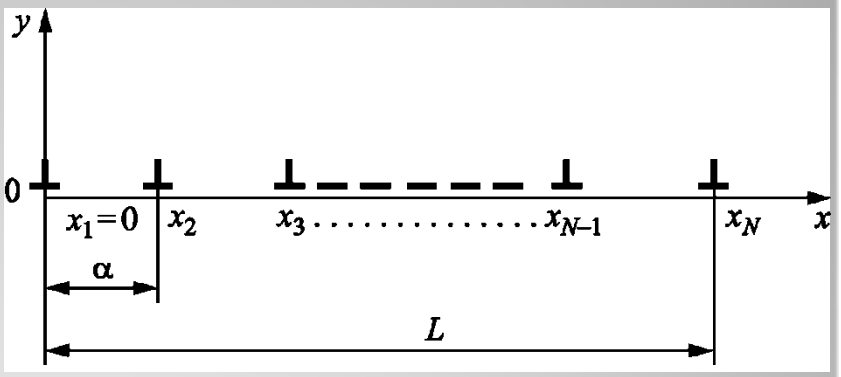
Факторы, тормозящие движение дислокаций (упрочнение материалов)



$$F = Gb/r$$

Равновесие прогнутой дислокации





Деформационное упрочнение. Источник Франка-Рида

Размножение дислокаций при пластической деформации: источник Франка-Рида

1950

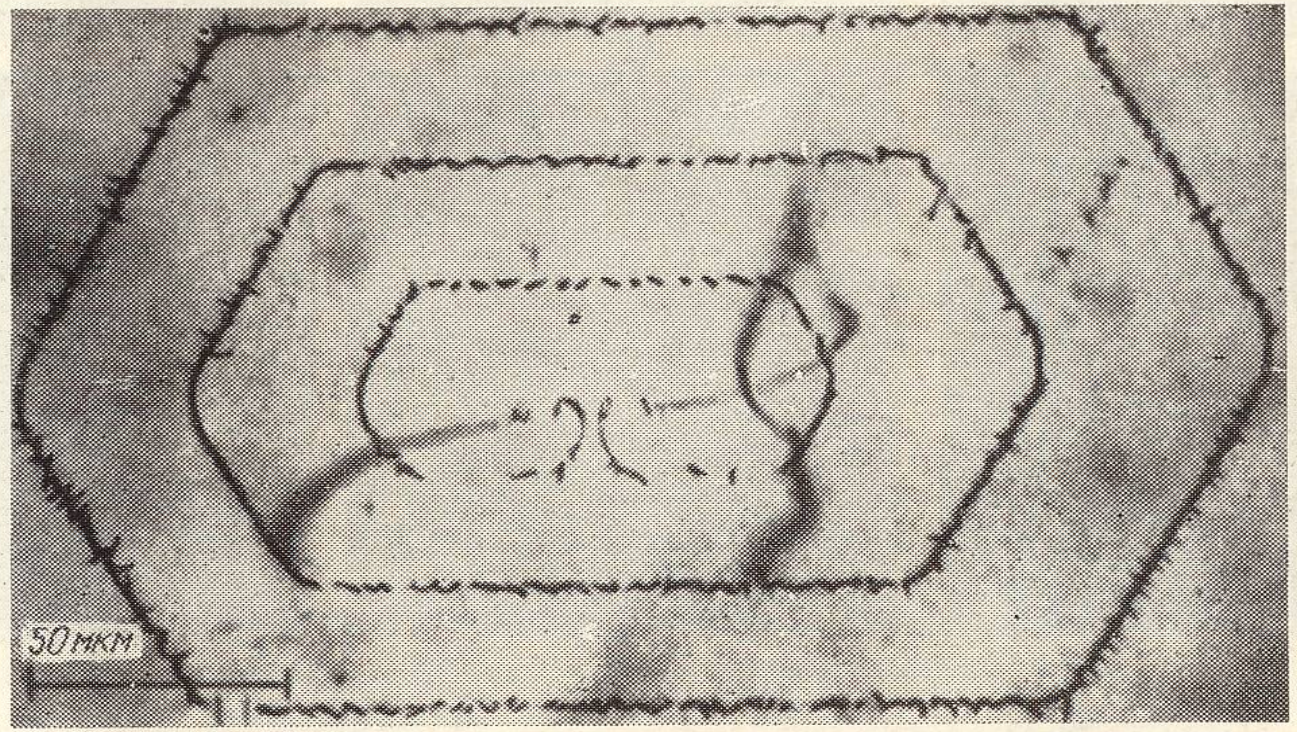
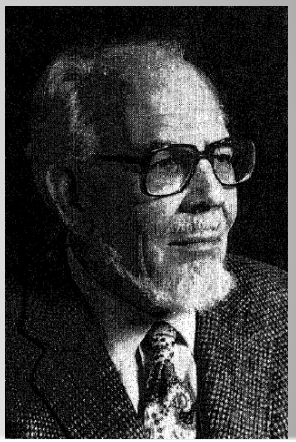


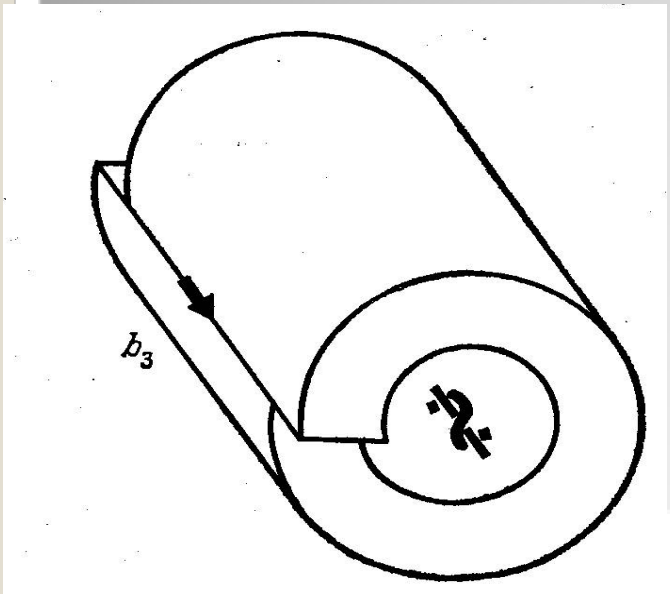
Рис. 136. Дислокационные петли от источника Франка—Рида в пластинке кремния (Дэш). Для декорирования дислокаций выделениями меди кристалл кремния был нагрет в контакте с медью до 900°С и затем охлажден до 20°С. Снимок сделан в инфракрасном свете (ср. с рис. 108)

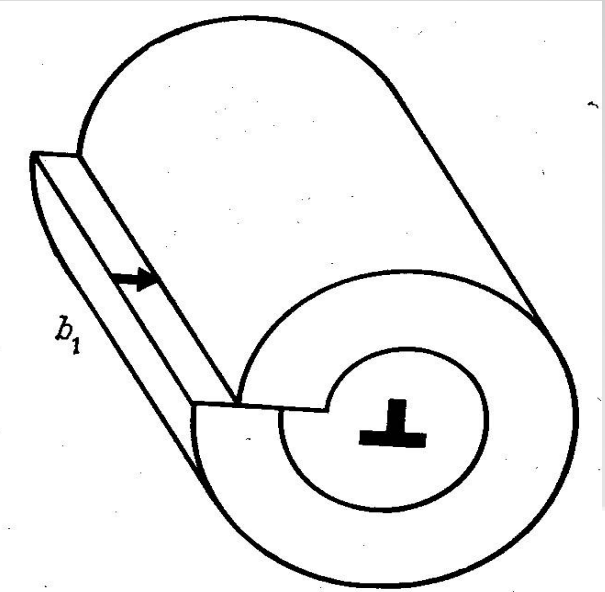


Sir Frederick Charles Frank
1911-1998

Thornton Read

Упругие поля дислокаций





Vito Volterra
1860-1940

$$E_д = \frac{Gb^2 l}{4\pi} \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right).$$

Энергия винтовой дислокации

G — модуль сдвига;
b — вектор Бюргерса дислокации;
l — ее длина;
r_0 — радиус ядра дислокации (несколько межатомных расстояний);
r_1 — расстояние, на которое распространяется упругая деформация от дислокации.

Поле напряжений винтовой и краевой дислокаций

$$\sigma_{xx} = -Dy\frac{(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2},$$

$$\sigma_{yy} = Dy\frac{(x_2-y^2)}{(x^2+y^2)^2},$$

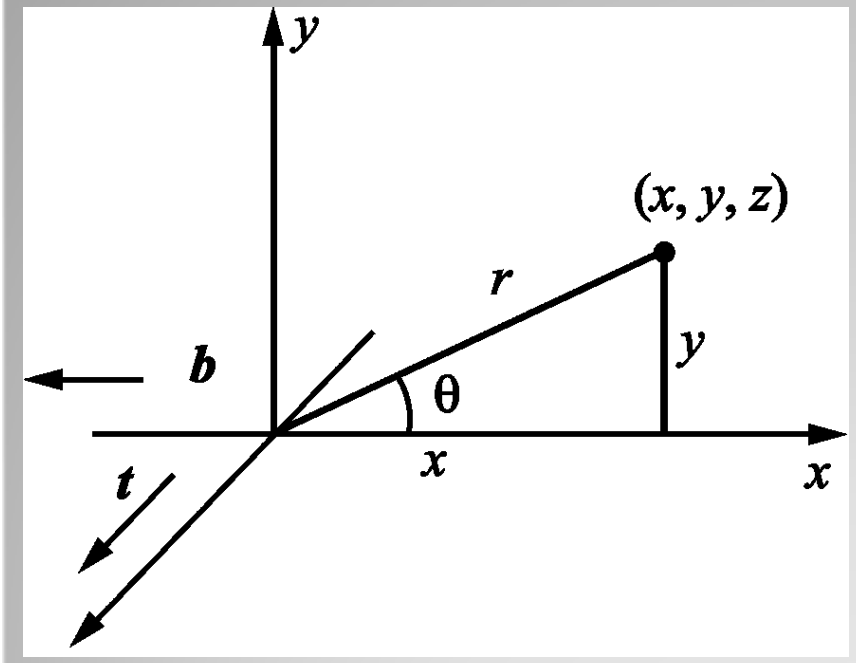
$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = Dx\frac{(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2},$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx}+\sigma_{yy}),$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = \tau_{yz} = \tau_{zy}.$$

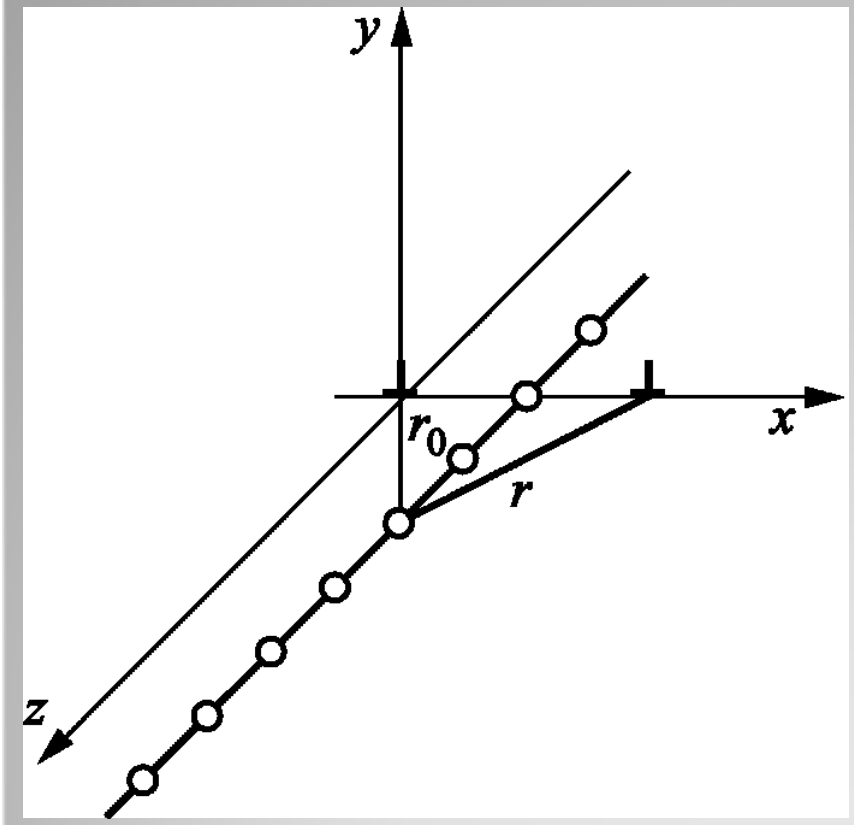
$$\sigma^{\text{в}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \tau_{xz} \\ 0 & 0 & \tau_{ez} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & 0 \end{bmatrix}$$

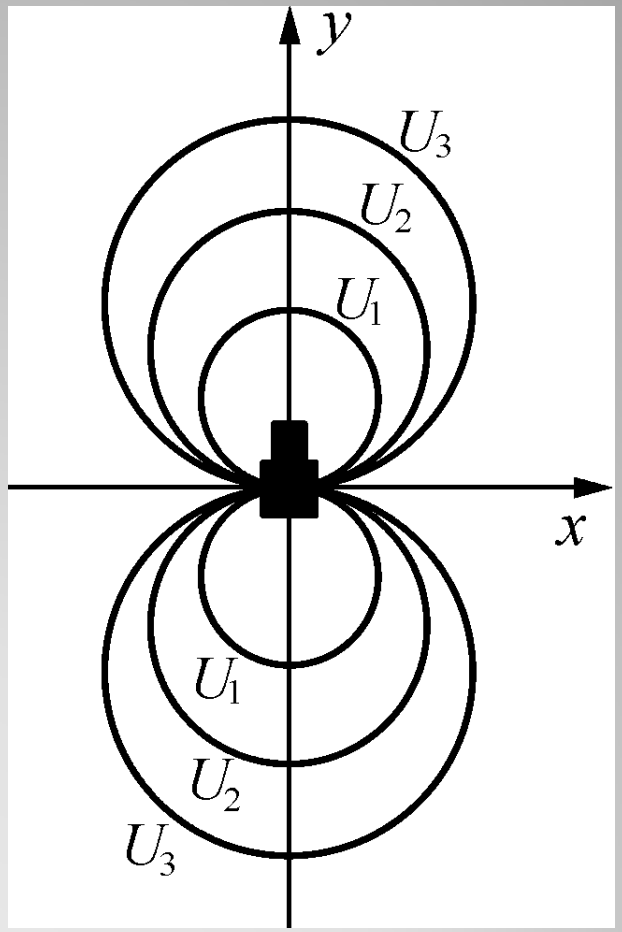
$$\sigma^{\text{кр}} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & 0 \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{bmatrix}.$$



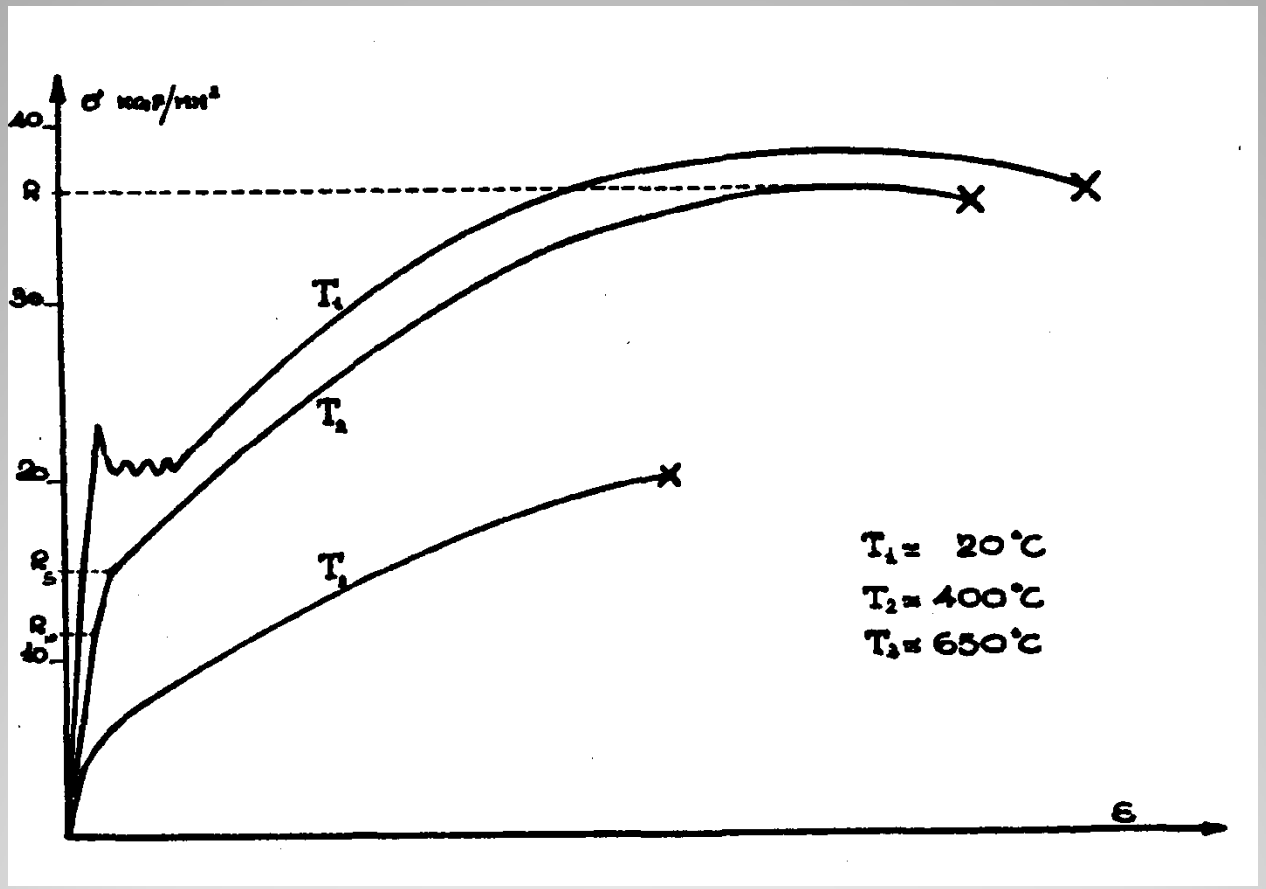
$$E_{вз} = A \sin\theta / r$$

Легирование на уровне твердых растворов





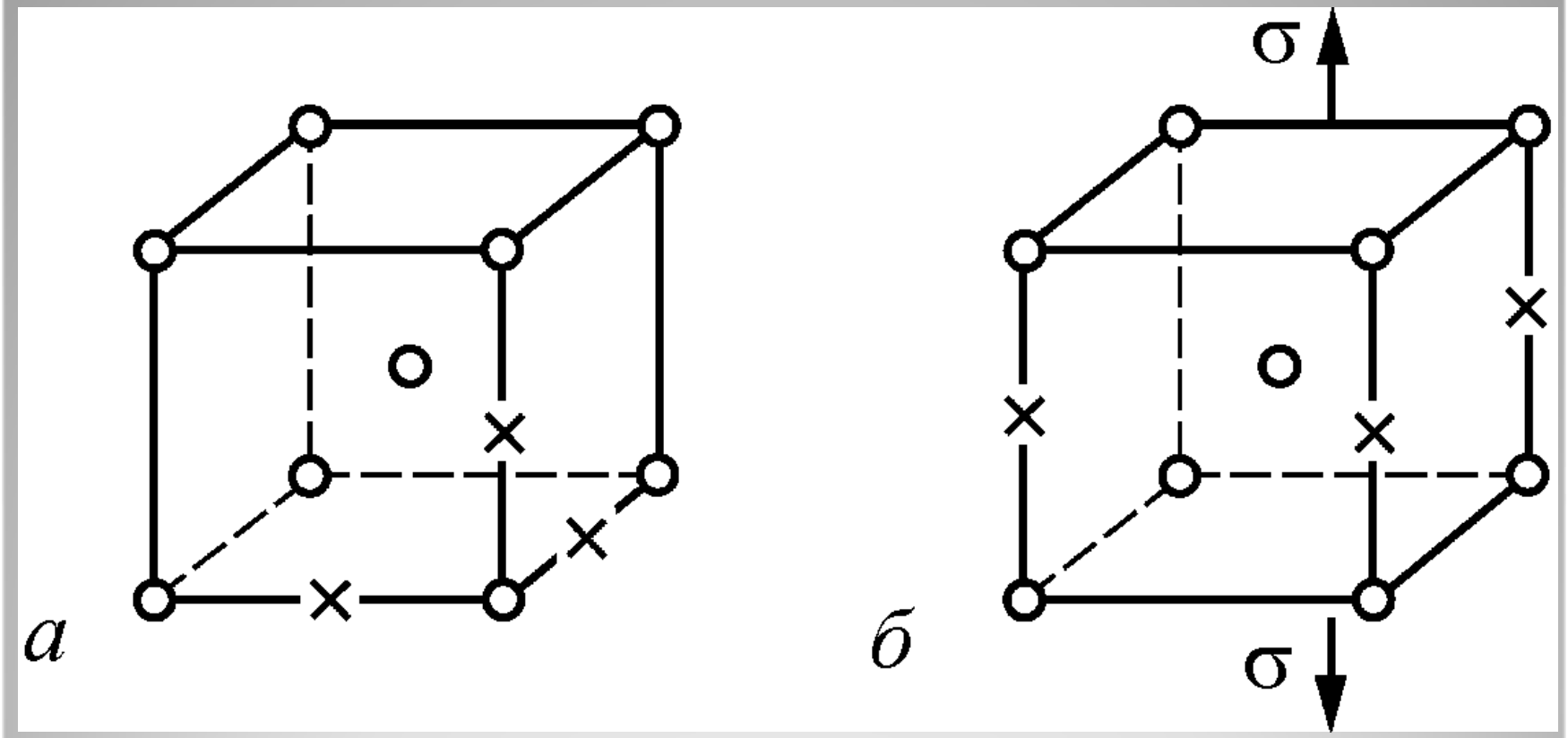
Атмосферы Коттрела



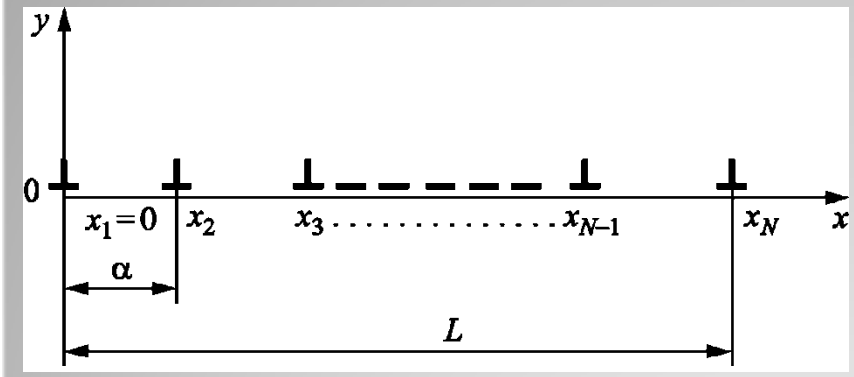
Зуб текучести

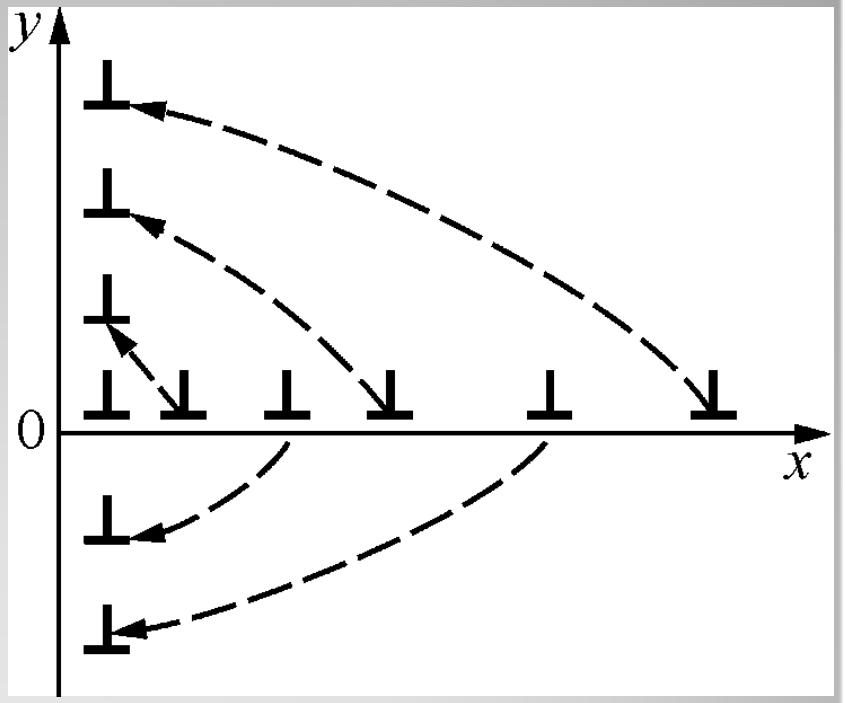
Энергия связи точечных дефектов с краевой дислокацией

Точечный дефект	$E_{упр.}$ эВ	$E_{эл.}$ эВ
Межузельный атом	0,2-0,5	0,02
Атом замещения	0,05 – 0,1	0,02
Вакансия	0,02	0,02

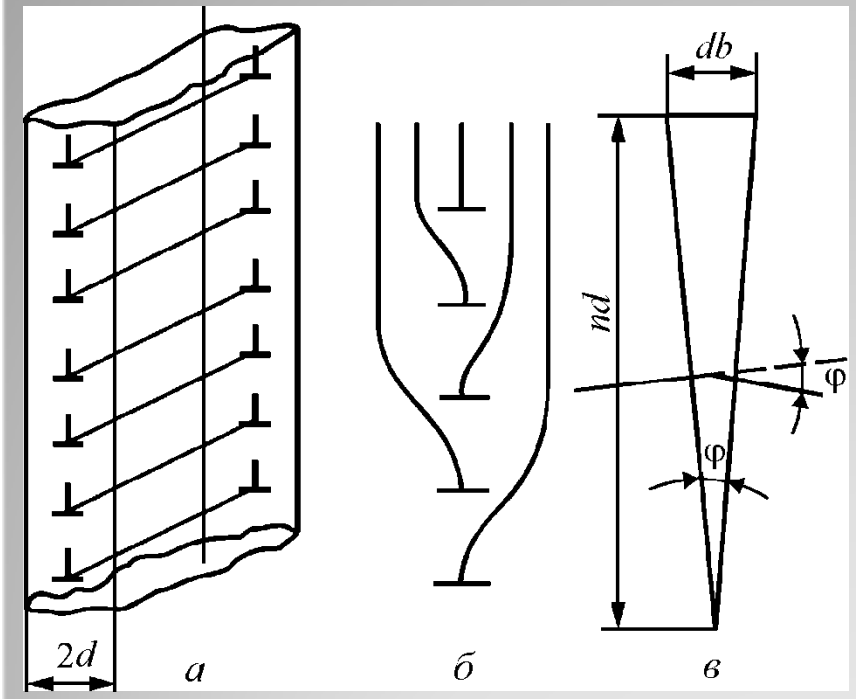


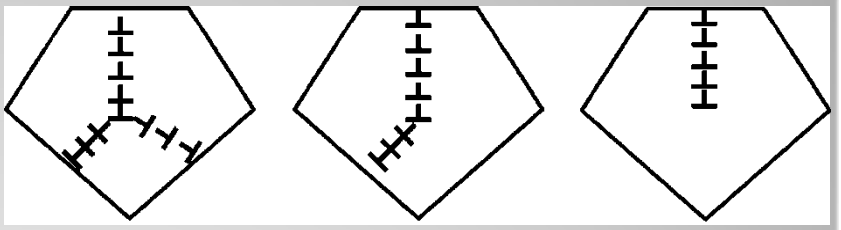
Атмосферы Снука



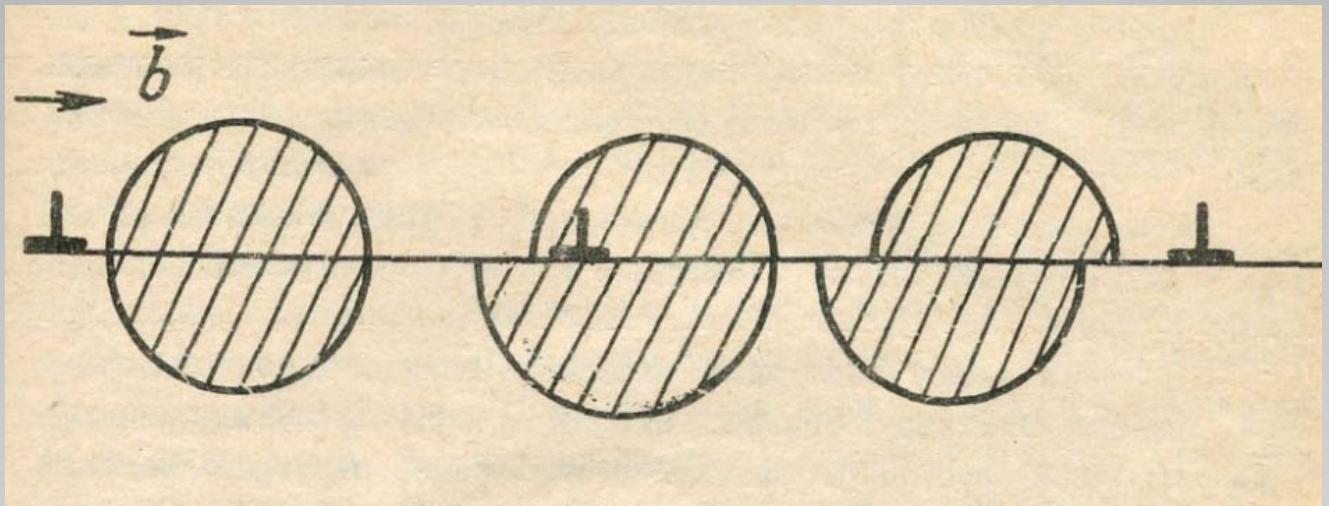


Упрочнение границами зерен и субструктурой

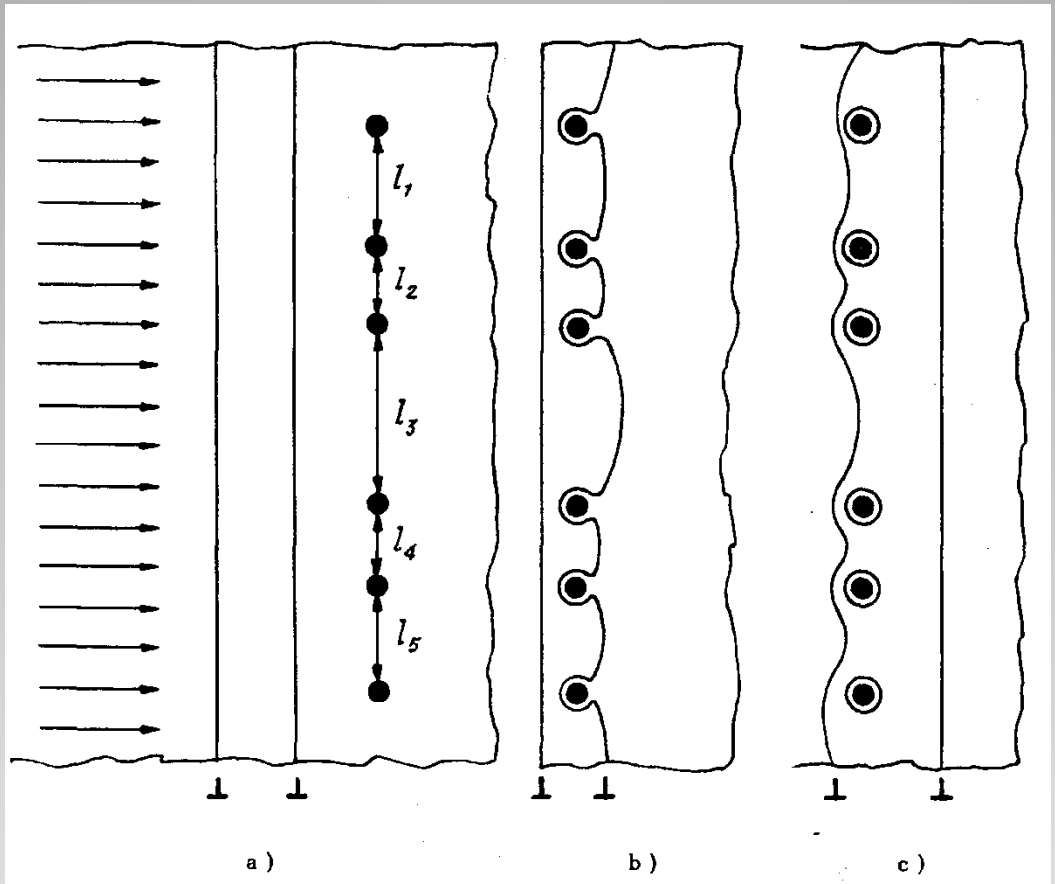




Стенка дислокаций



Дисперсионное упрочнение



Упрочнение дисперсными частицами

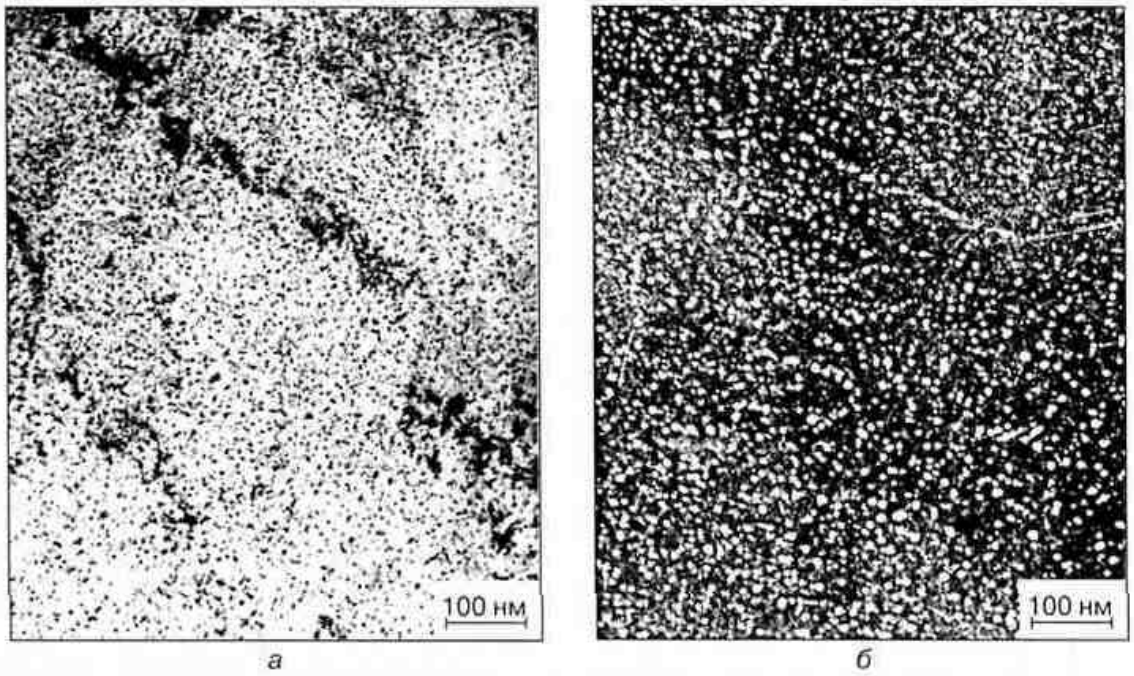


РИС. 4.27. Мелкодисперсные выделения M_6C в стали ЭП-823, облученной при температурах в интервале 365—385 °С до дозы 50,5 сна: *а* — светлопольное изображение; *б* — темнопольное изображение [63]

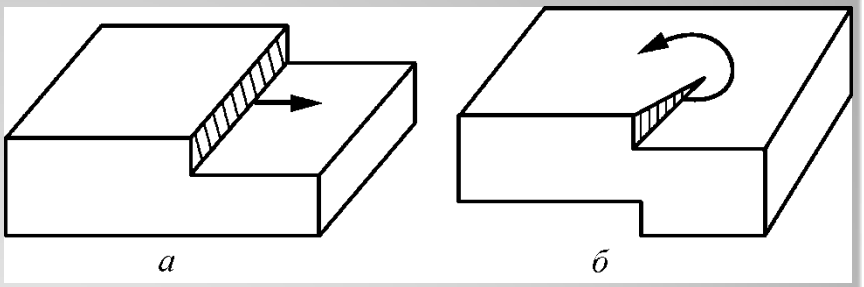
Радиационное упрочнение

- Упругое взаимодействие дислокаций
- Пересечение дислокаций
- Движение дислокаций с порогами
- Взаимодействие дислокаций с дислокациями леса
- Образование барьеров Ломер – Коттрелла и
- Легирование
- Границы зерен
- Субструктура
- Дисперсное и дисперсионное упрочнение и др.

Упрочнение материалов

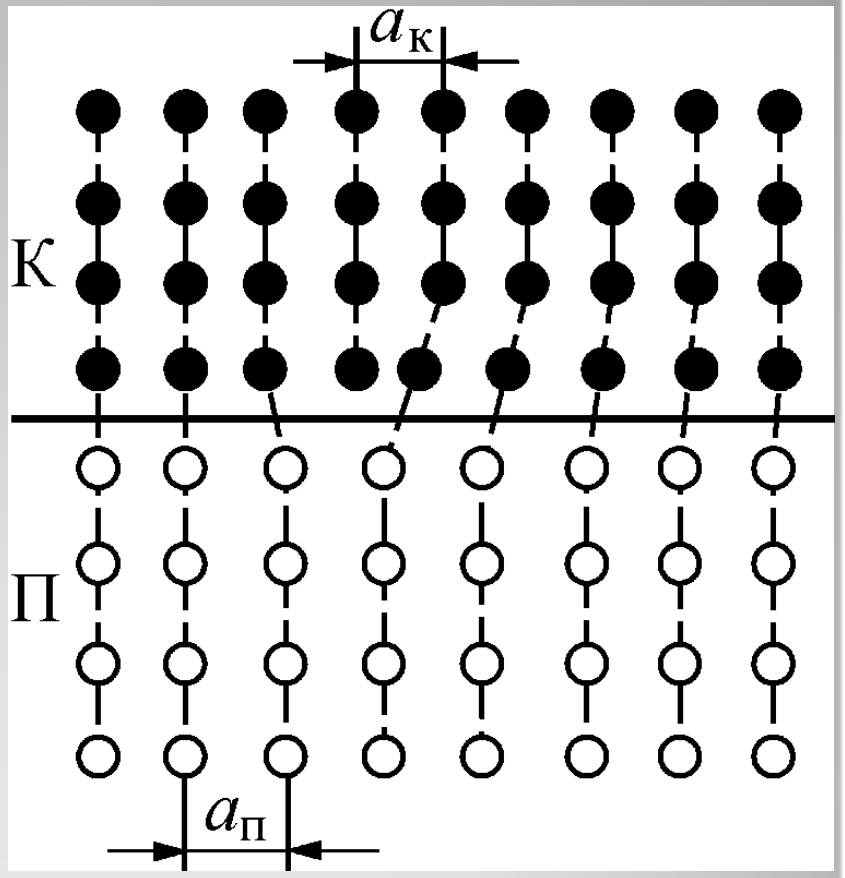
Образование дислокаций

- Ступенька на
- поверхности совершенного кристалла (*а*) и кристалла с винтовой дислокацией (*б*)



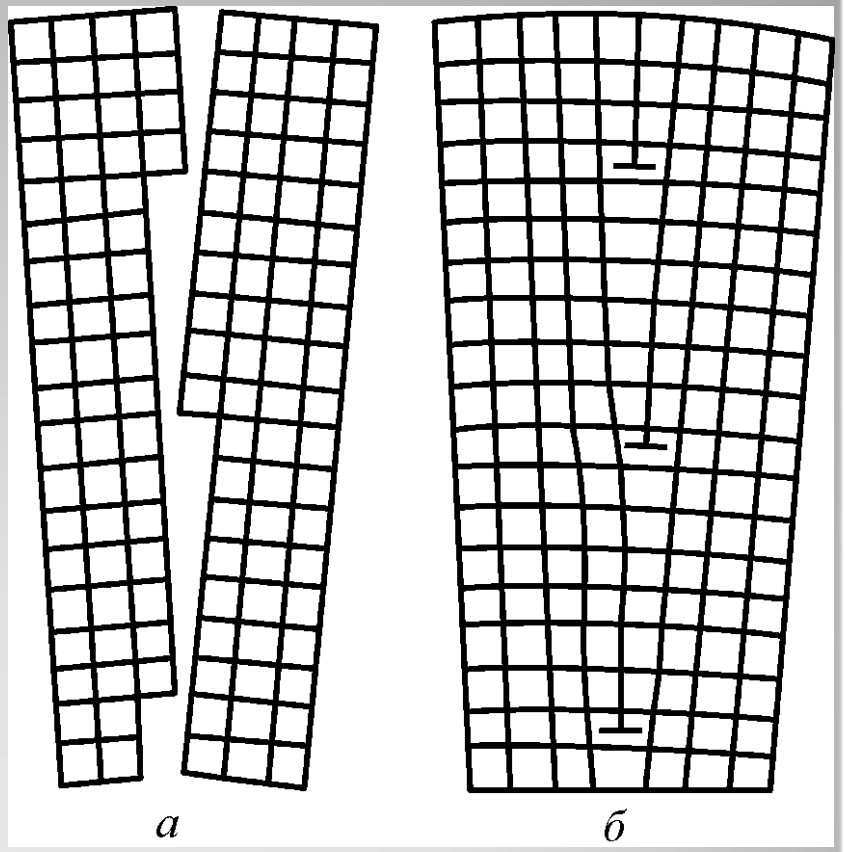
Образование дислокаций

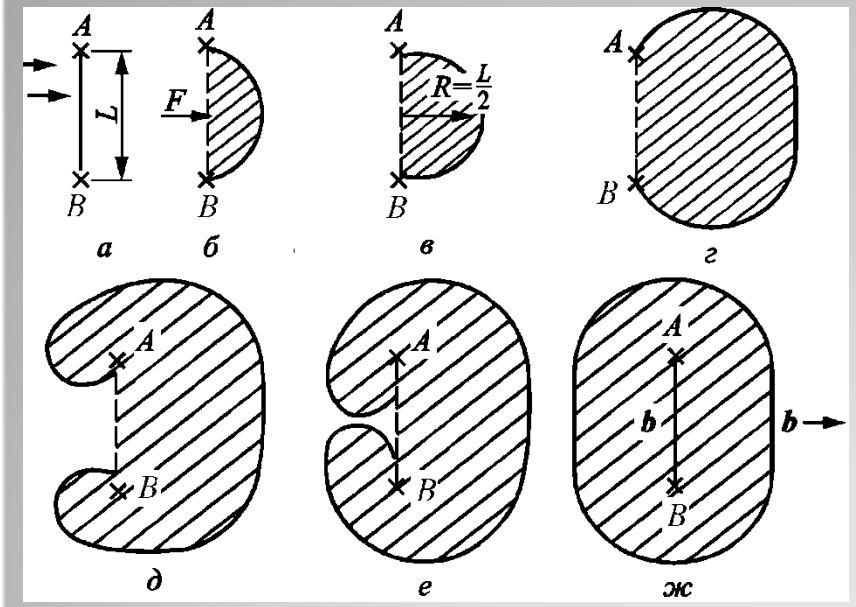
Дислокация несоответствия на границе растущего кристалла К с подложкой П

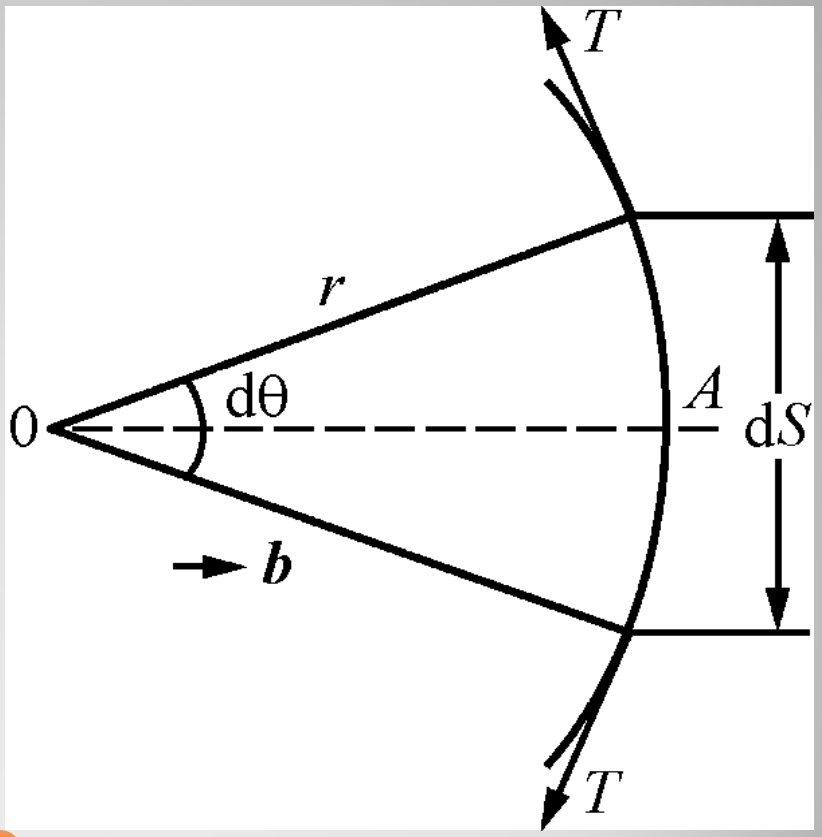


Дислокация несоответствия

Образование стенки
дислокаций при срастании
зерен во время кристаллизации







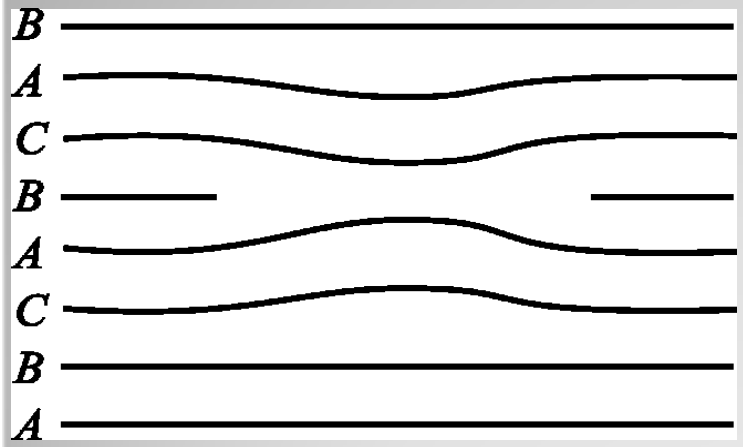
Источник Франка–Рида

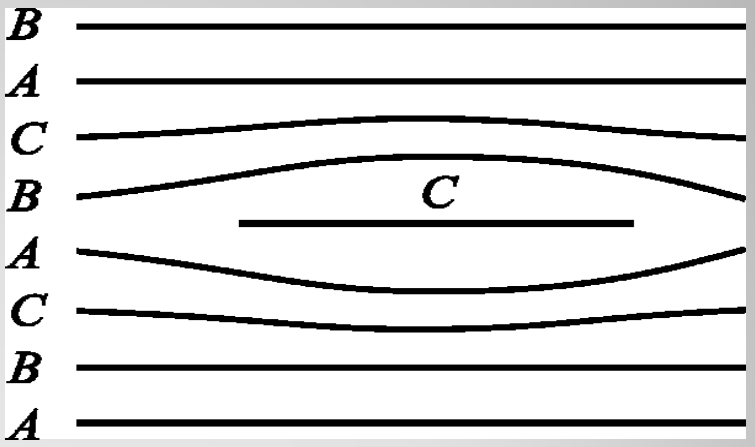
Дислокации в типичных кристаллических структурах

Подразделение дислокаций на полные и частичные

Краевые дислокации единичной (*а*) и двукратной мощности (*б*)

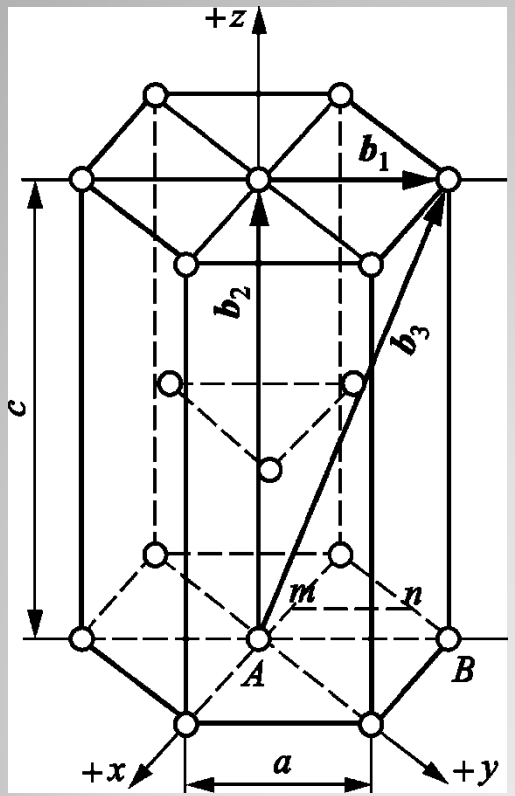
Подразделение дислокаций на полные и частичные.

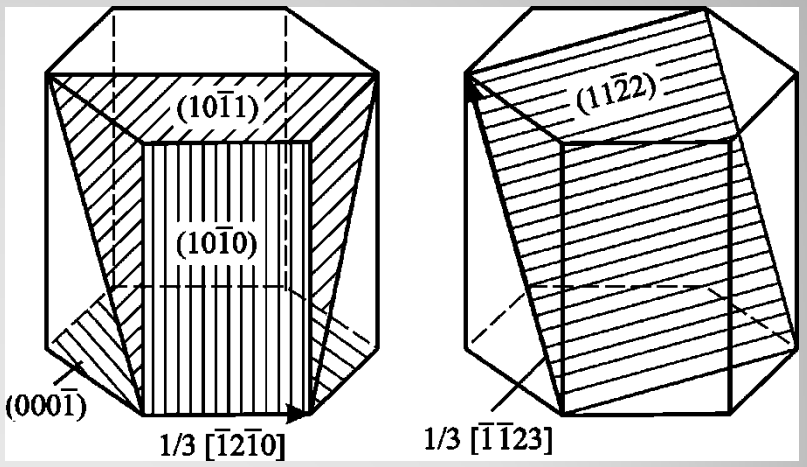


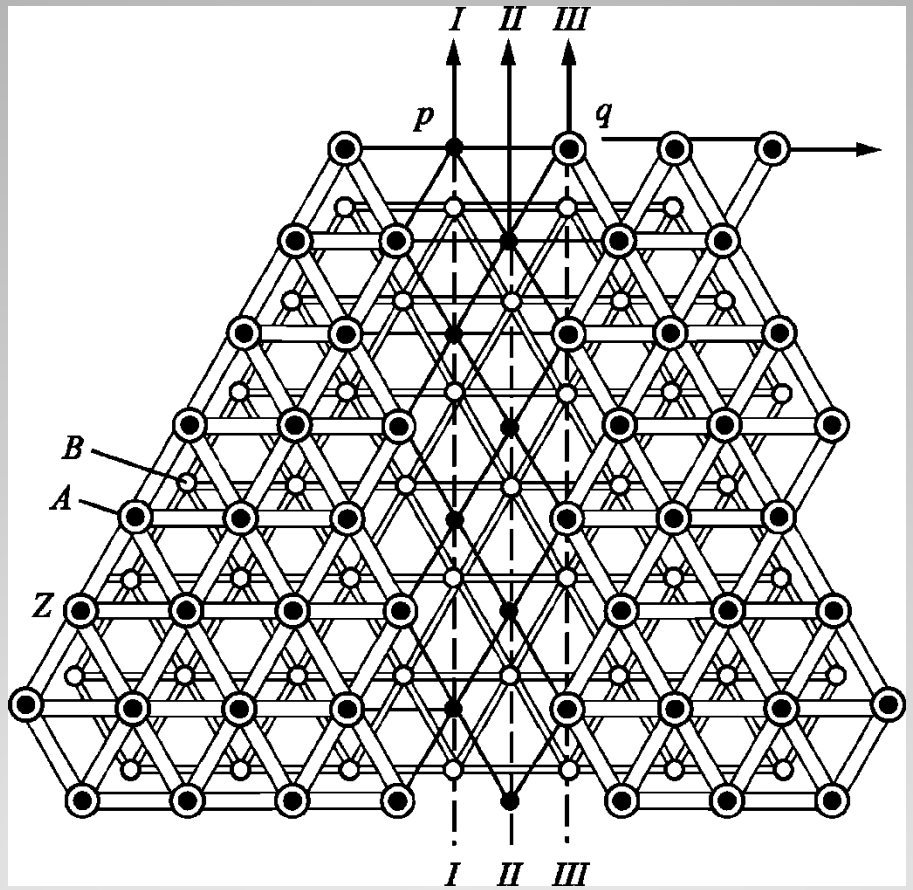


Плотнейшие упаковки и дефекты упаковки.

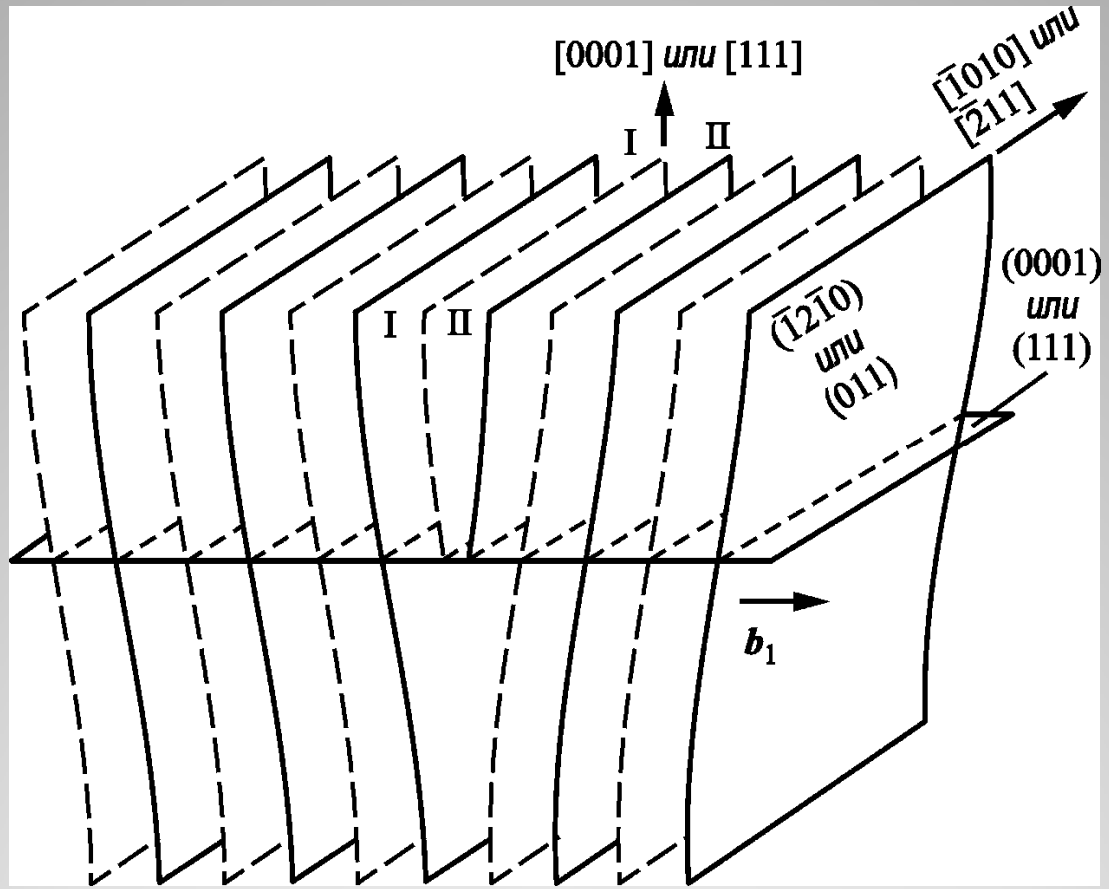
Характерные полные (единичные) дислокации.


+z
b1
b2
b3
c
m
n
A
B
+x
a
+y


(10$\bar{1}$1)
(10$\bar{1}$0)
(000$\bar{1}$)
1/3 [$\bar{1}$2$\bar{1}$0]
(11$\bar{2}$2)
1/3 [$\bar{1}\bar{1}$23]



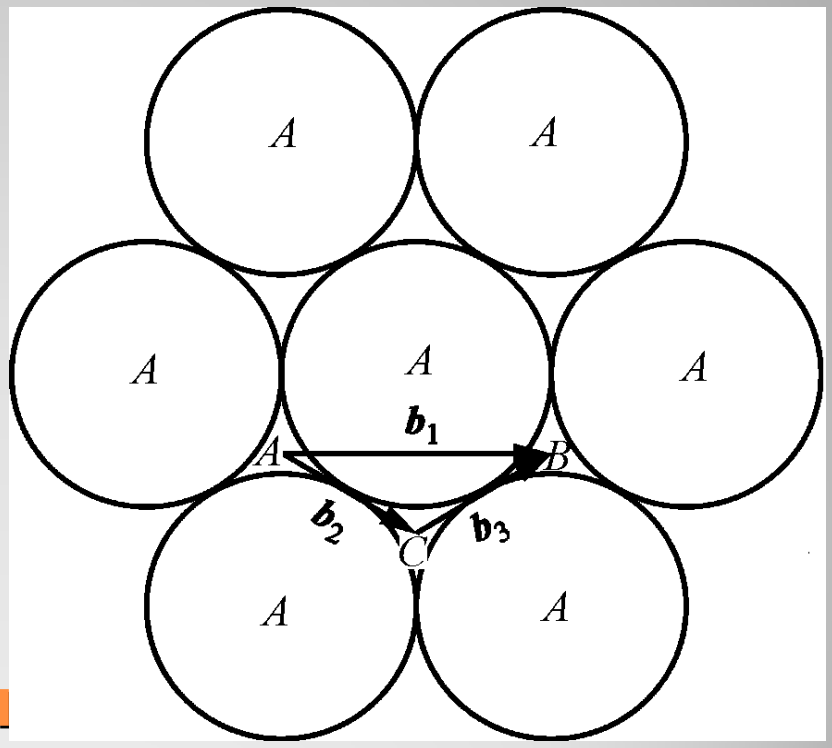
Единичная краевая дислокация в плоскости (0001) в ГПУ структуре



- **Единичная краевая дислокация в ГПУ и ГЦК структурах: I–I и II–II – экстраплоскости; b_1 = 1/3[ ] или a/2[011]**

Частичные дислокации Шокли.

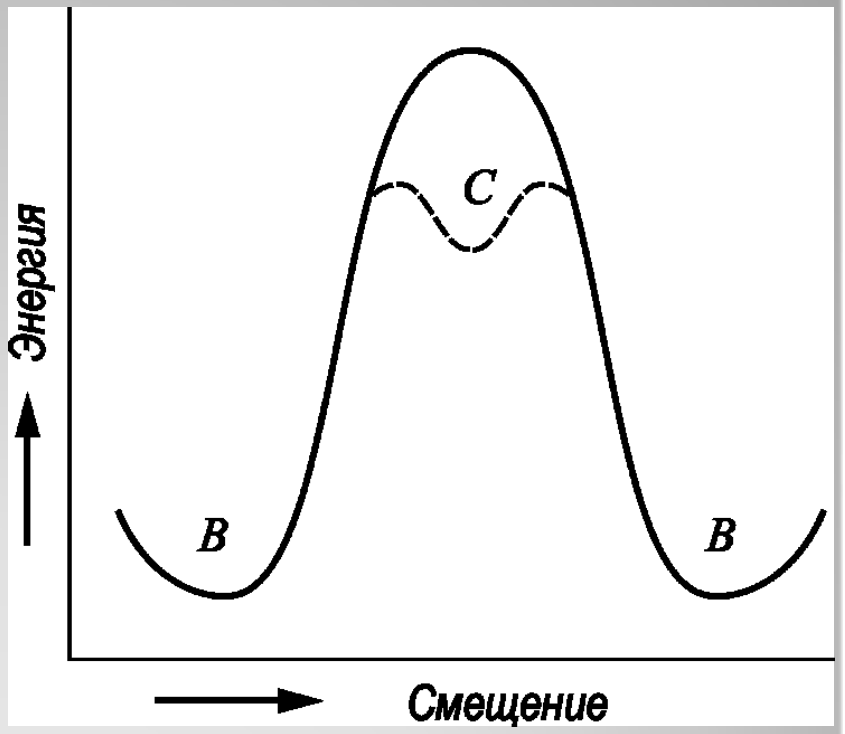
Слой плотнейшей упаковки атомов А и векторы Бюргерса единичной $\boldsymbol{b}_1$ и частичных дислокаций ($\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_3$)

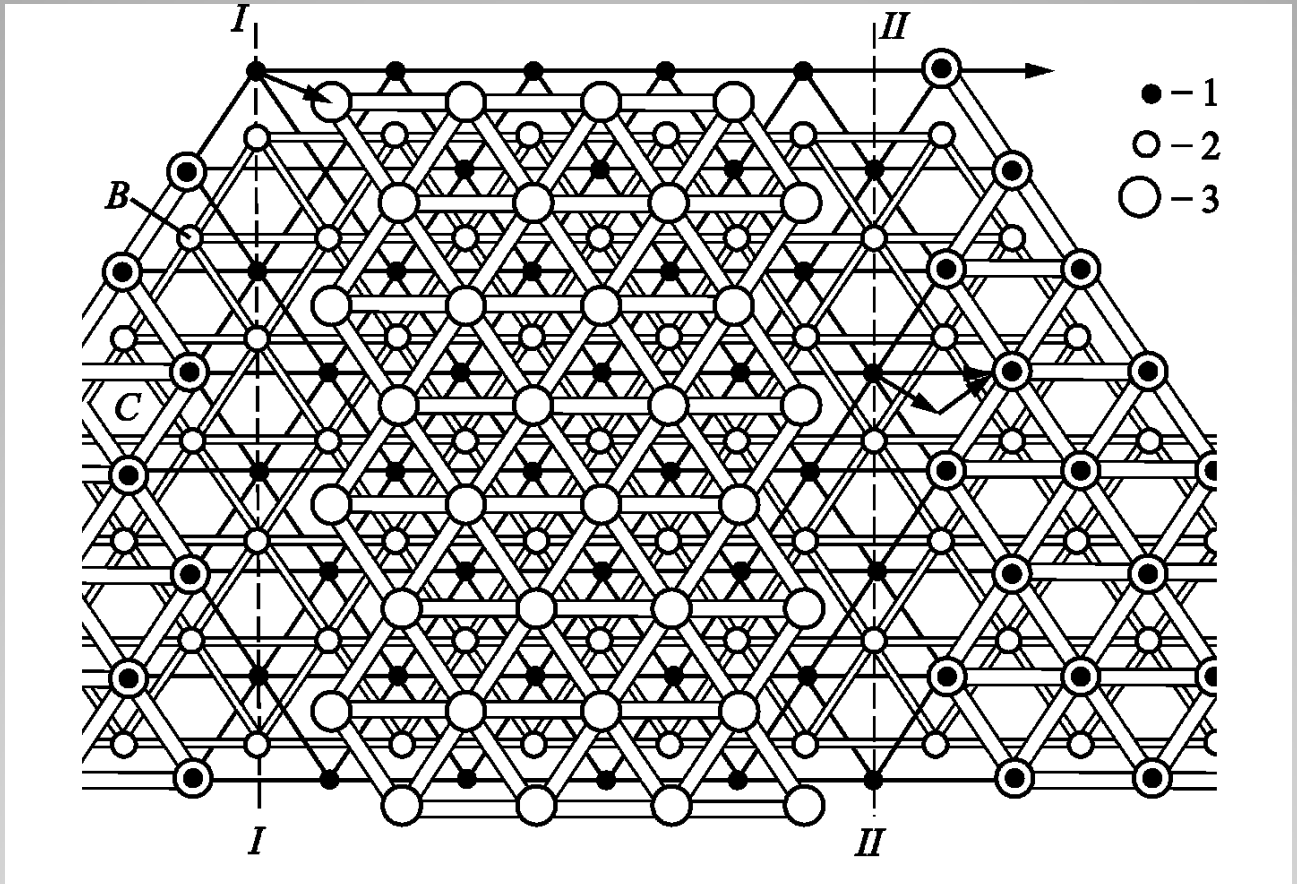


Частичные дислокаци

Расщепленные дислокации.

Изменение энергии при смещении атомов в слое плотнейшей упаковки

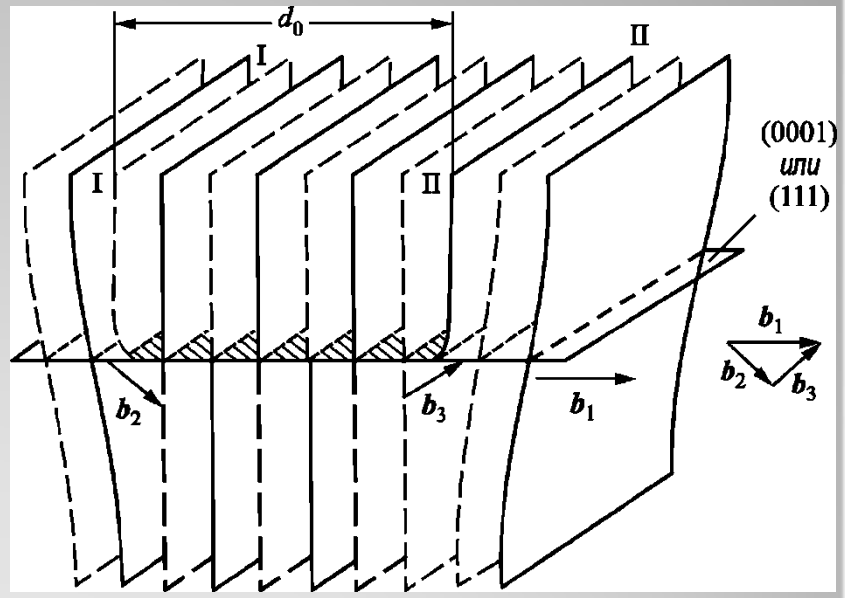




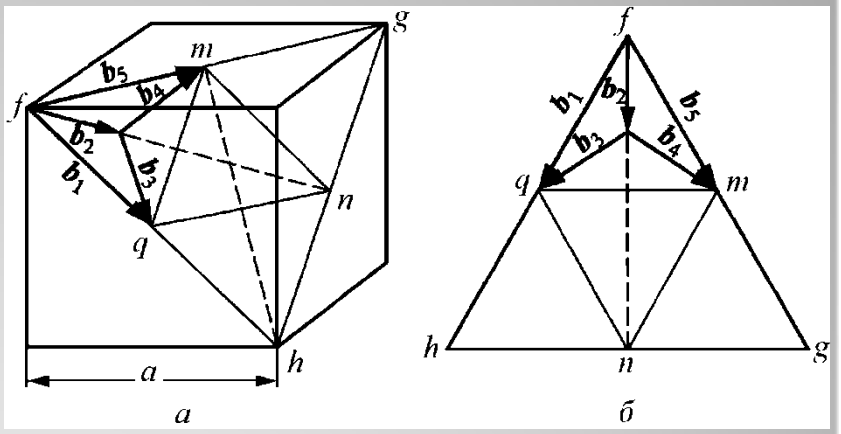
Расщепленная дислокация в плоскости (0001) ГПУ структуры

Расщепленная краевая дислокация в ГПУ и ГЦК структурах:

d_0 – ширина дефекта упаковки; $\boldsymbol{b}_1$ = 1/3 или $a/2$



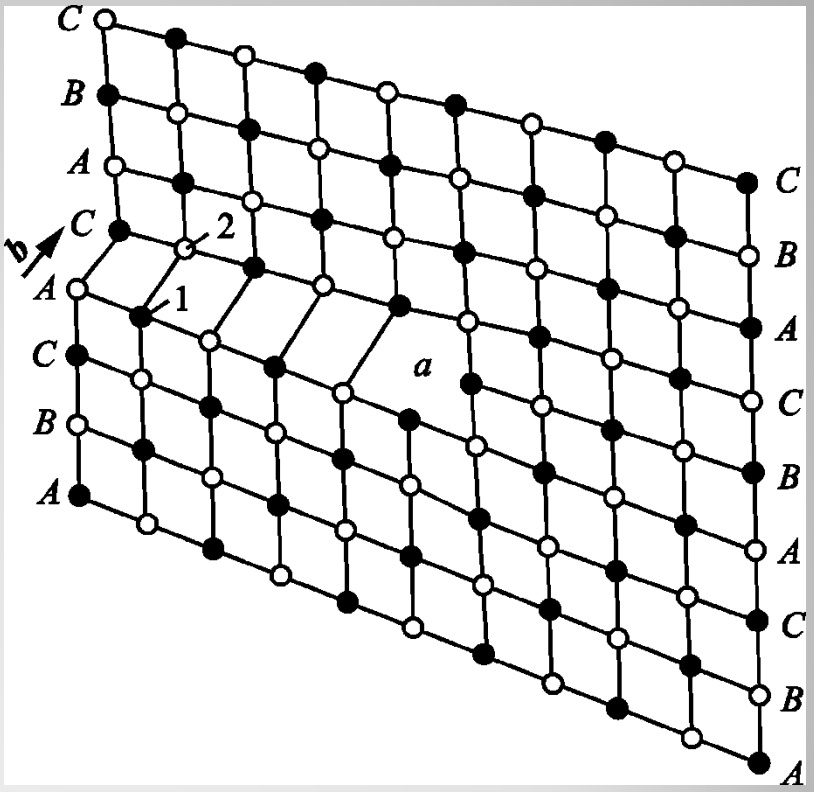
Векторы Бюргерса единичных дислокаций ($\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_5$) и частичных дислокаций Шокли ($\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_3$, $\boldsymbol{b}_4$) в ГЦК структуре:
а – элементарная ячейка; *б* – плоскость $(\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{1})$; $\boldsymbol{b}_1 = a/2\,[01\bar{1}]$, $\boldsymbol{b}_2 = a/6\,[\bar{1}2\bar{1}]$, $\boldsymbol{b}_3 = a/6\,[11\bar{2}]$, $\boldsymbol{b}_4 = a/6\,[\bar{2}11]$, $\boldsymbol{b}_5 = a/2\,[\bar{1}10]$



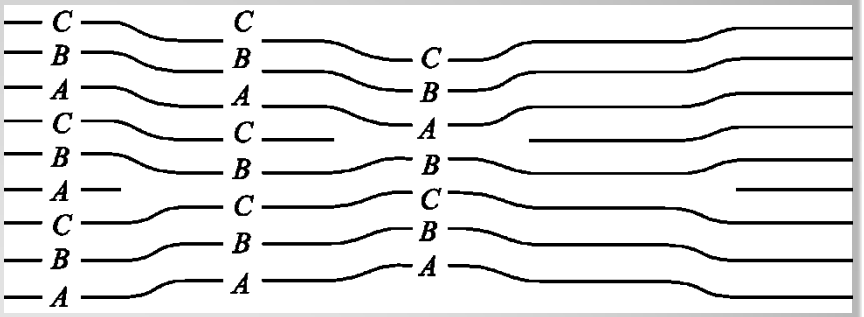
Дислокация Франка в ГЦК структуре. Линия дислокации лежит в плоскости {111}, перпендикулярной плоскости чертежа {110},

и выходит на плоскость чертежа в точке *a*:

1 – атомы в плоскости рисунка; 2 – атомы непосредственно над ней



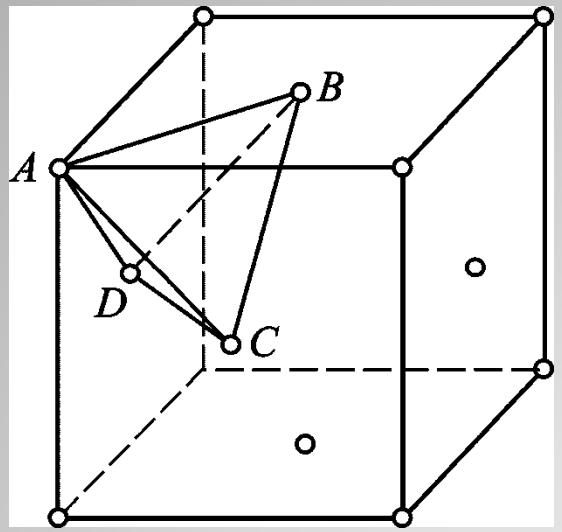
Двойная дислокационная петля Франка в ГЦК структуре

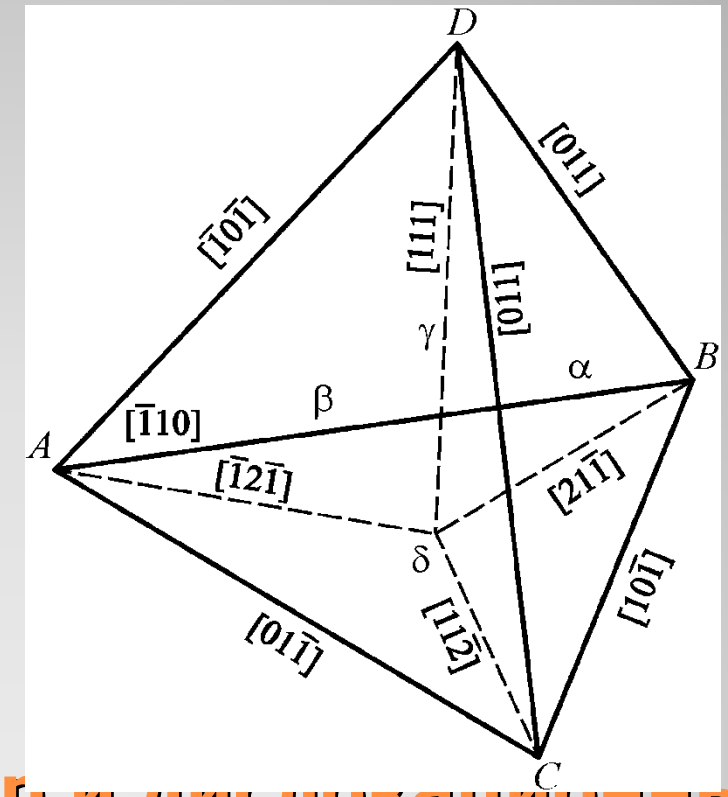


Дислокационные реакции

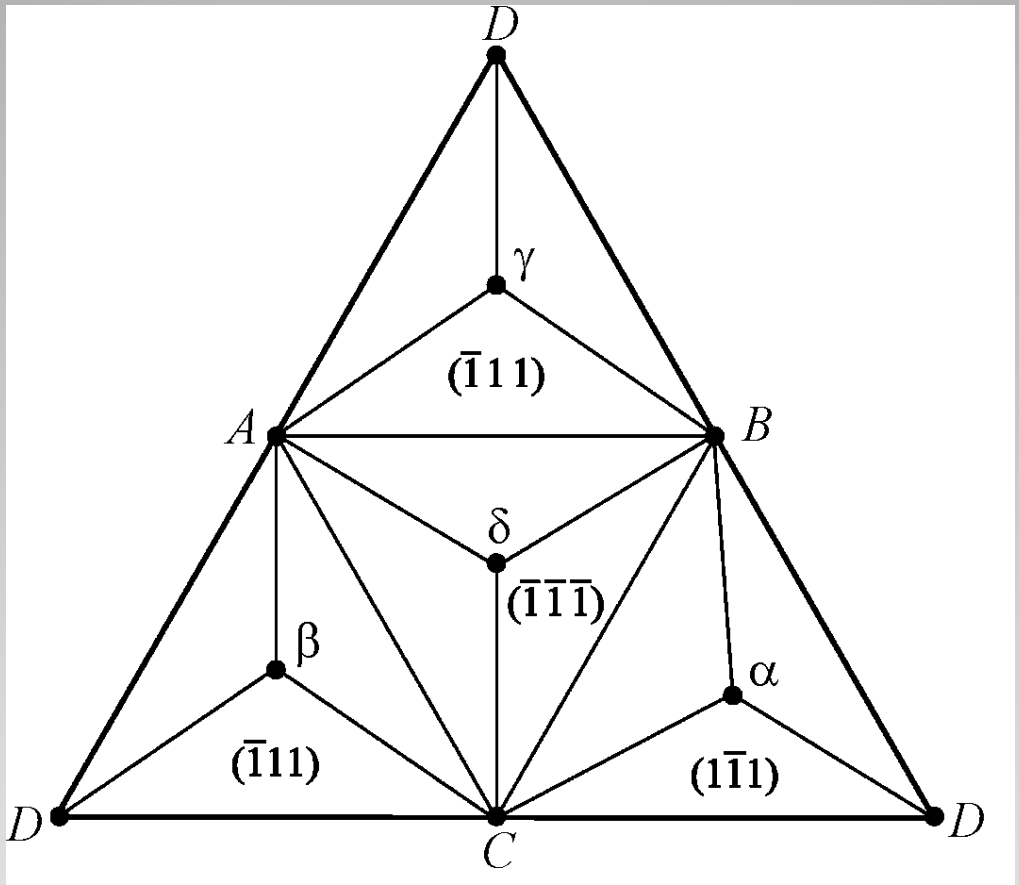
Лекция №15

Частичные дислокации Шокли.





Стандартный тетраэдр и дислокационные реакции в ГЦК структуре.

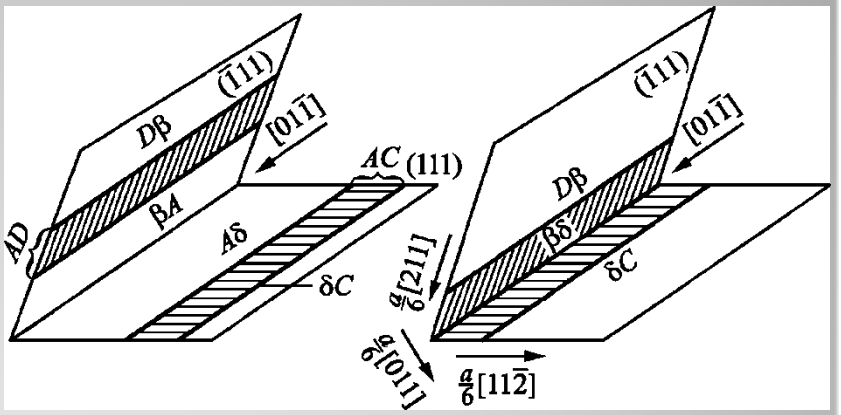


Развертка тетраэдра Томпсона

Образование барьера Ломер – Коттрелла при встрече

растянутых дислокаций в пересекающихся плоскостях скольжения:

а – до встречи, *б* – после встречи



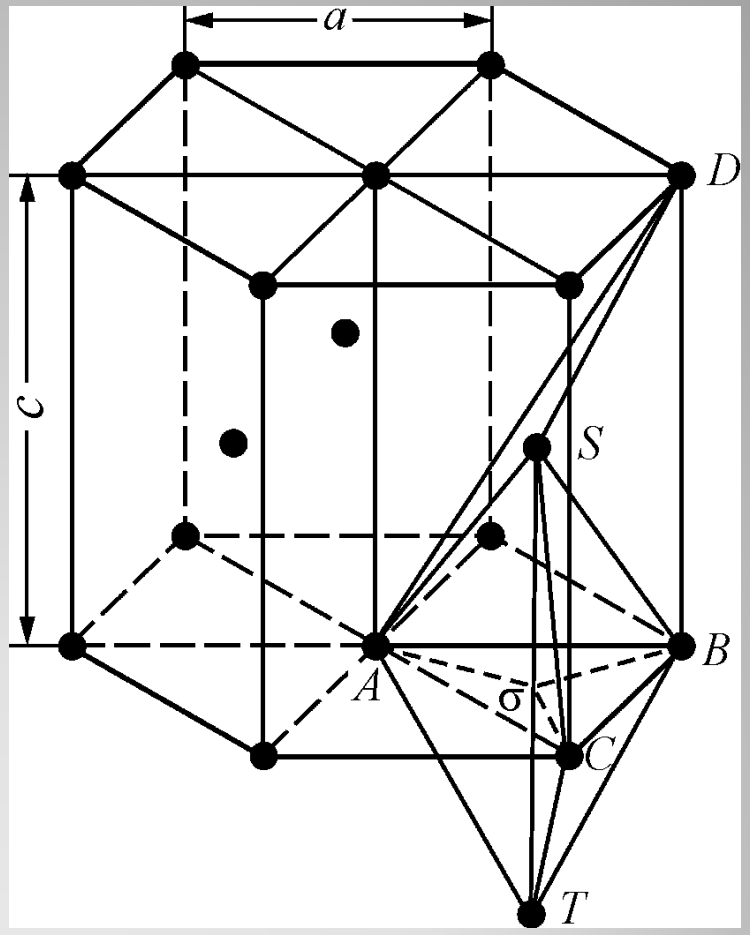
Тип	Полные		Частичные		
			Шокли	Франка	Вершинные
Вектор Бюргерса	$a/2<110>$	$a<110>$	$a/6<112>$	$a/3<111>$	$a/6<110>$
Квадрат вектора Бюргерса	$a^2/2$	a^2	$a^2/6$	$a^2/3$	$a^2/18$

Характерные дислокации в ГЦК структуре

Лекция №16

Стандартная пирамида и дислокационные реакции в ГПУ структуре.

Элементарная ячейка ГПУ структуры со стандартной бипирамидой



Стандартная пирамида и дислокационные реакции в ГПУ структуре.

Характерные полные дислокации в ГПУ структуре

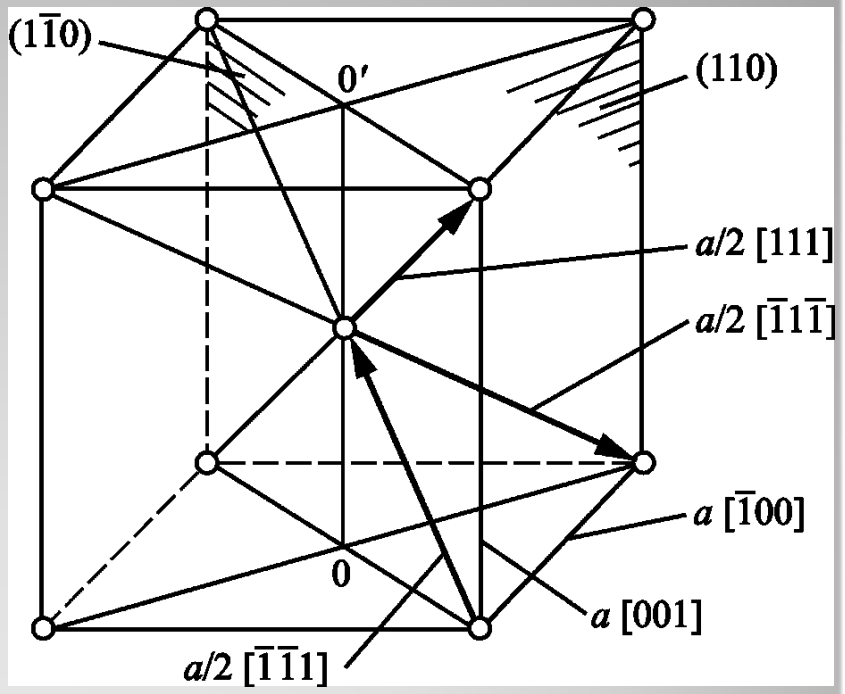
Тип	Полные		
Вектор Бюргерса	$1/3 < \bar{1}2\bar{1}0 >$	<0001>	$< \bar{1}2\bar{1}3 >$
Квадрат вектора Бюргерса	a^2	$8a^2/3$	$11a^2/3$

Характерные частичные дислокации в ГПУ структуре

Тип	Частичные		
	Шокли	Франка	
Вектор Бюргерса	$1/3 < 01\bar{1}0 >$	$1/2 < 0001 >$	$1/6 < 02\bar{2}3 >$
Квадрат вектора Бюргерса*	$a^2/3$	$2a^2/3$	a^2

* При $c/a = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1{,}633$.

Векторы Бюргерса единичных дислокаций $a/2\langle 111\rangle$ и $a\langle 100\rangle$ в ОЦК структуре



Дислокационные реакции в ОЦК структуре.

Характерные полные дислокации в ОЦК структуре

Тип	Полные		
Вектор Бюргерса	$a/2<111>$	$a<100>$	$a<110>$
Квадрат вектора Бюргерса	$3a^2/4$	a^2	$2a^2$

Характерные частичные дислокации в ОЦК структуре

Тип	Частичные					
Вектор Бюргерса	$a/8<110>$	$a/6<111>$	$a/4<111>$	$a/3<111>$	$a/4<112>$	$a/3<112>$
Квадрат вектора Бюргерса	$a^2/32$	$a^2/12$	$3a^2/16$	$a^2/3$	$3a^2/8$	$2a^2/3$