

2. Дефекты кристаллических решёток

- 1. Дефекты: определение; классификация.**
- 2. Точечные дефекты.**
- 3. Дислокации.**
- 4. Поверхностные дефекты.**
- 5. Объёмные дефекты**

1. Дефекты: определение

- **Дефектами** кристаллической структуры называют отклонения от идеальной кристаллической решётки.
- Идеальное кристаллическое строение без каких-либо дефектов расположения атомов в пространстве у реальных материалов практически не встречается.

1. Дефекты: классификация

Наиболее удачной и универсальной системой классификации дефектов кристаллического состояния в настоящее время признана

классификация по геометрическому принципу

т.е. по числу измерений, в которых дефект имеет макроскопические размеры (т.е. превышающий параметр решётки a).

1. Дефекты: классификация

Искажения кристаллической структуры начинаются с изменения положения отдельных атомов, занимающих нерегулярные позиции.



Параметр решётки a (*кратчайшее межатомное расстояние или атомный размер*) - единица измерения, сравнивая с которой размеры дефекта вдоль одного из трёх измерений можно отнести к некоторому определённом типу.

1. Дефекты: классификация

Типы дефектов

1) Нуль-мерные, или точечные, дефекты – дефекты, размеры которых во всех трёх измерениях сравнимы с межатомным параметром a .

К точечным дефектам относятся:

- вакансии,
- междоузельные атомы и всевозможные их сочетания,
- комплексы точечных дефектов,
- атомы примеси.

1. Дефекты: классификация

Типы дефектов

2). Одномерные, или линейные, дефекты – дефекты, у которых один из размеров существенно больше a , а два других сравнимы с параметром решётки;

К линейным дефектам относятся:

- дислокации,
- дисклинации,
- цепочки вакансий и междоузельных атомов.

1. Дефекты: классификация

Типы дефектов

3). Двумерные, или плоские, дефекты, т.е. несовершенства кристаллического строения, у которых два размера существенно превышают параметр решётки.

К двумерным дефектам относятся:

- поверхность,
- границы зёрен, фаз, двойников,
- дефекты упаковки,
- границы доменов в сверхструктуре и т.п.

1. Дефекты: классификация

Типы дефектов

4). Трёхмерные, или объёмные, дефекты, т.е. несовершенства, у которых все три размера существенно больше межатомного параметра a ;

К НИМ ОТНОСЯТСЯ:

- поры,
- трещины,
- выделения отдельных фаз и т.д.

2. Точечные дефекты

Характерной особенностью точечных дефектов является то, что они нарушают лишь ближний порядок в кристаллах, не затрагивая дальнего порядка.

2.1. Вакансии

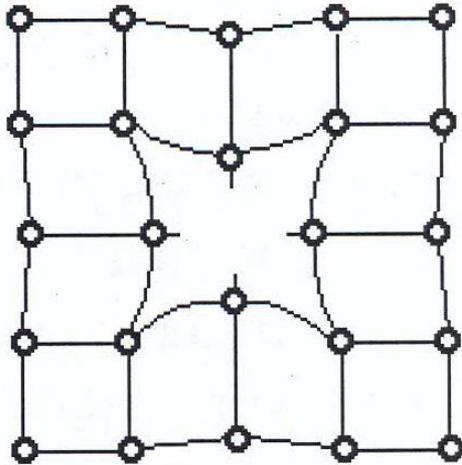


Рис. 1. Схематичное изображение кристаллической решётки, содержащей вакансию

Вакансии. Это отсутствие атомов в отдельных узлах кристаллической решётки (дефекты Шоттки).

Атомы, ближайšie к вакантному месту в решётке, смещаются в сторону свободного узла за счёт нарушения равновесия межатомных сил притяжения и отталкивания.

В результате около вакансии наблюдается локальное искажение кристаллической решётки.

2.1. Вакансии

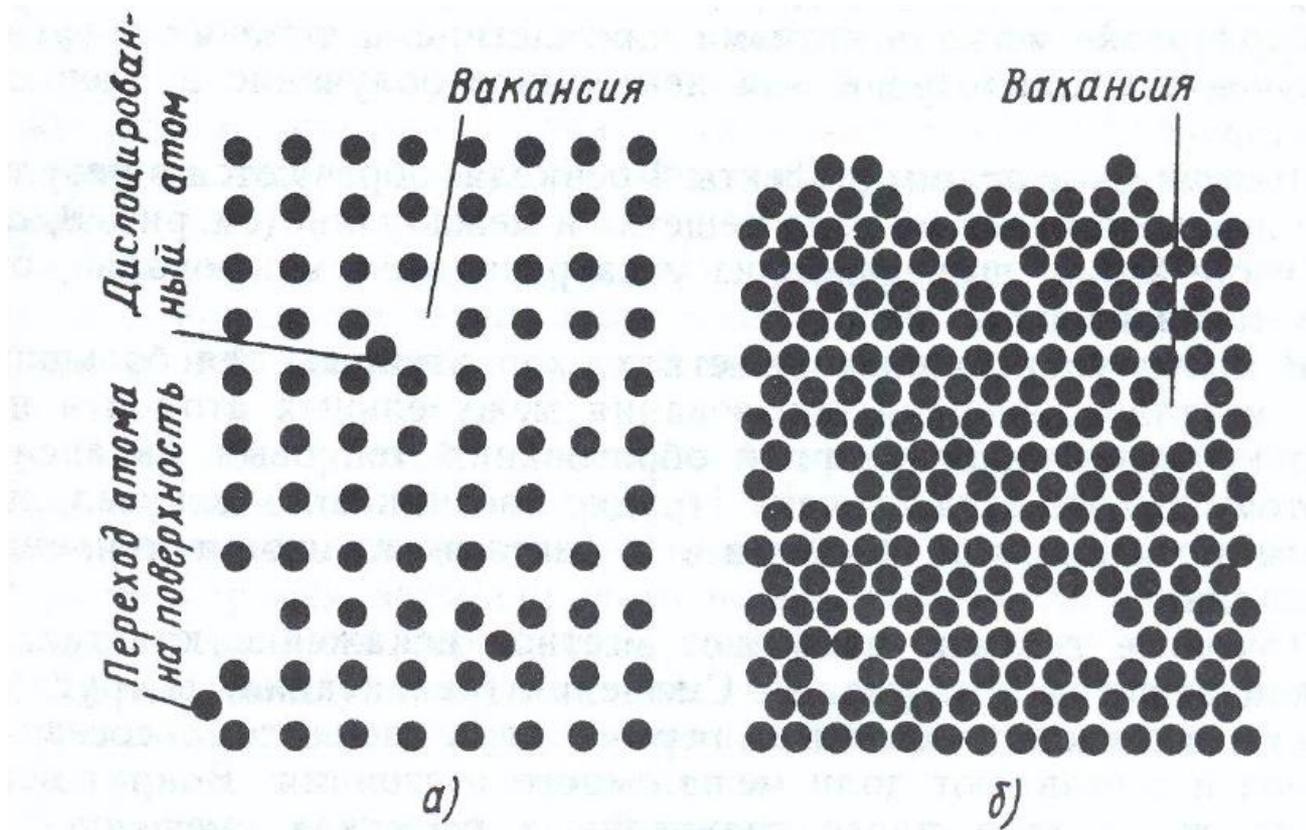


Рис. 2. Представление вакансий: а) – точечные вакансии; б) – двойные и тройные вакансии.

2.1. Как образуются вакансии?

В кристалле всегда имеются атомы, кинетическая энергия которых значительно выше средней, свойственной заданной температуре (чем выше температура, тем больше подвижность атомов).

Такие атомы, особенно расположенные вблизи поверхности, могут выйти на поверхность кристалла. Они могут даже испариться.

Их место займут атомы, находящиеся дальше от поверхности. Принадлежащие им узлы окажутся свободными, т.е. возникнут **тепловые вакансии**.

Чем выше температура, тем выше термодинамически равновесная концентрация вакансий.

2.1. Образование вакансий

Источниками **тепловых** **вакансий** (возникающих при нагреве) являются:

- свободные поверхности,
- границы зёрен,
- пустоты и трещины.

Причины образования вакансий:

- нагрев;
- пластические деформации,
- рекристаллизация,
- облучение высокоэнергетическими частицами.

2.1. Влияние вакансий на интенсивность диффузии

Один из механизмов диффузии в металлах – перемещение атомов по вакансиям.

Следовательно, чем больше в материале вакансий, тем легче осуществляются диффузионные процессы.

В свою очередь, диффузия лежит в основе многих процессов структурообразования, формирующих свойства материалов. Поэтому наличие в материале вакансий играет существенную роль.

2.2. Междоузельные атомы

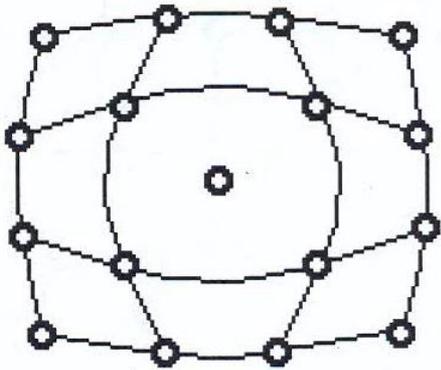


Рис. 3. Схематичное изображение кристаллической решётки с междоузельным атомом.

Междоузельные атомы (дефекты Френкеля). Около заполненного узла в междоузлии располагается лишний атом.

- Этот лишний атом может образовывать с атомом в узле различные конфигурации.
- Междоузельные атомы образуются в результате перехода атома из узла решётки в междоузлие. На месте атома, вышедшего из узла решётки в междоузлие, образуется вакансия.

2.2. Возможные механизмы перемещения атомов в кристаллической решётке

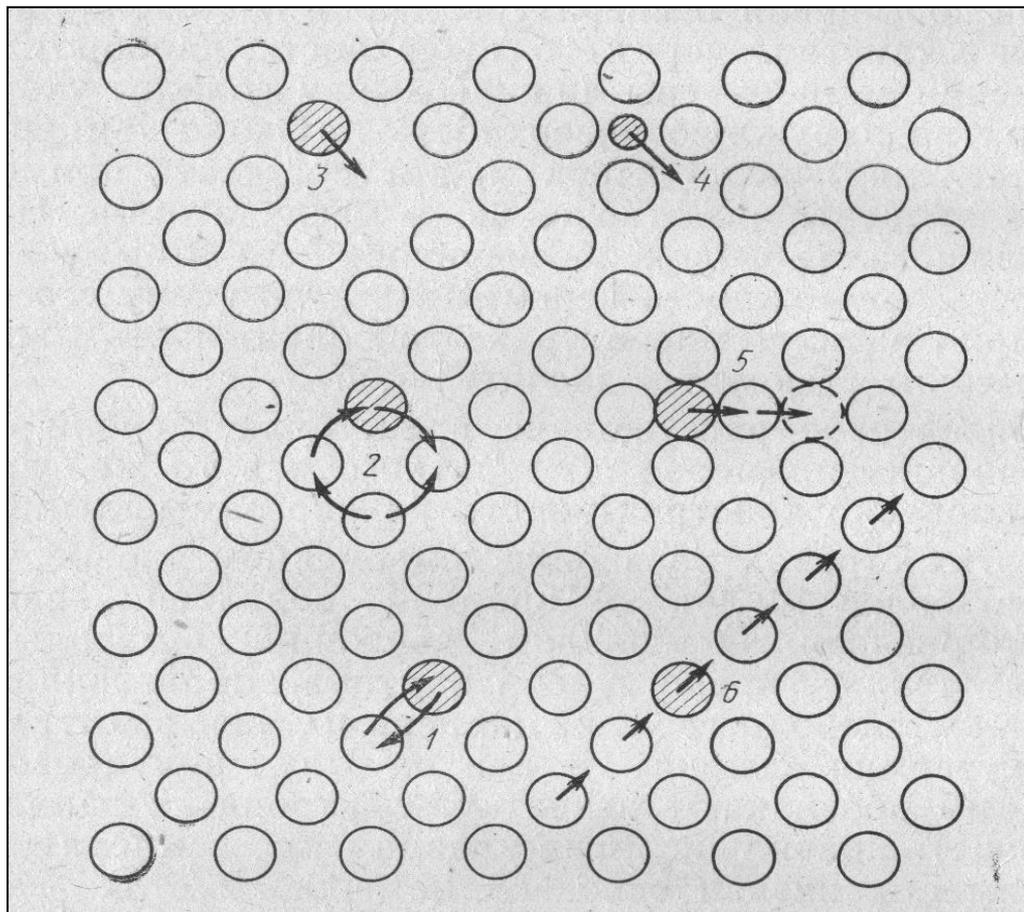


Рис. 4. Механизмы перемещения атомов в кристалле.

1 – простой обменный;
2 – циклический обменный;
3 – вакансионный;
4 – простой междуузельный;
5 – междуузельный механизм вытеснения;
6 – краудионный;

7 – бивакансионный механизм;
8 – механизм диффузии по структурным дефектам (дислокационным трубкам, границам зёрен, внешней поверхности).

2.2. Конфигурации междоузельных атомов

В то время как вакансии всегда расположены в узлах решётки, для междоузельных атомов рассматривают более чем одну возможную конфигурацию.

2.2. Конфигурации междоузельных атомов

1). Гантельная конфигурация, или гантель – такое взаимное расположение двух атомов около одного узла в решётке, когда они оба сдвинуты по разные стороны от узла вдоль одного из плотноупакованных направлений в решётке, а окружающие их атомы смещены лишь в силу действия упругих напряжений, созданных таким искажением решётки.

2.2. Конфигурации междоузельных атомов

2). Статический краудион – конфигурация атомов, образованная путём встраивания лишнего атома в расположение регулярных атомов вдоль плотноупакованных направлений, когда смещение атомов от своих равновесных положений распределяется только по плотноупакованному ряду на несколько межатомных расстояний (порядка 7 – 10 ангстремов).

2.2. Конфигурации междоузельных атомов

3). Тетра- и октаэдрические междоузельные атомы – такие конфигурации, когда лишний атом находится в центре тетраэдра или октаэдра, в вершинах которого расположены атомы решётки.

Величина искажений вокруг междоузельных атомов значительно больше, чем в случае образования вакансии.

Наличие в металлах междоузельных атомов вызывает некоторое упрочнение, повышение электросопротивления и влияет на другие свойства.

2.3. Другие виды точечных дефектов

Мелкие кластеры точечных дефектов – это дефекты, состоящие из нескольких точечных, пока размер кластера сравним с межатомным параметром a ,

например,:

- бивакансия, состоящая из двух расположенных рядом вакансий;
- плоская тривакансия;
- би- и тримеждоузлия и т.д.

2.3. Другие виды точечных дефектов

Примесные дефекты – примеси внедрения и примеси замещения, а также мелкие примесные кластеры:

а) **примесь замещения** – примесные атомы, расположенные в узлах кристаллической решётки, т.е. занимающие в регулярных положениях атомы матрицы; как правило, это примеси, размер которых больше матричных атомов;

б) **примесь внедрения** – примесные атомы, занимающие любую из перечисленных выше конфигураций междоузельных атомов; как правило, положение внедрения занимают примеси, размер которых меньше размера матричного атома;

в) **мелкие кластеры** примесных атомов – образования, состоящие из нескольких примесных атомов; их размеры сравнимы с межатомными.

3. Линейные дефекты

Основным видом дефектов этого типа являются **дислокации: краевые, винтовые и смешанные.**

В отличие от точечных линейные дефекты нарушают дальний порядок.

3. Дислокации

Дислокации являются особым типом несовершенств в решётке, резко отличным по своей природе от других.

Это - линии, вдоль и вблизи которых нарушено характерное для кристалла правильное расположение атомных плоскостей.

В настоящее время с помощью теории дислокаций рассматриваются многие процессы, протекающие в кристаллах:

- пластическая деформация,
- кристаллизация из расплава,
- фазовые и структурные превращения в твёрдом состоянии и многое другое.

3.1. Краевые дислокации

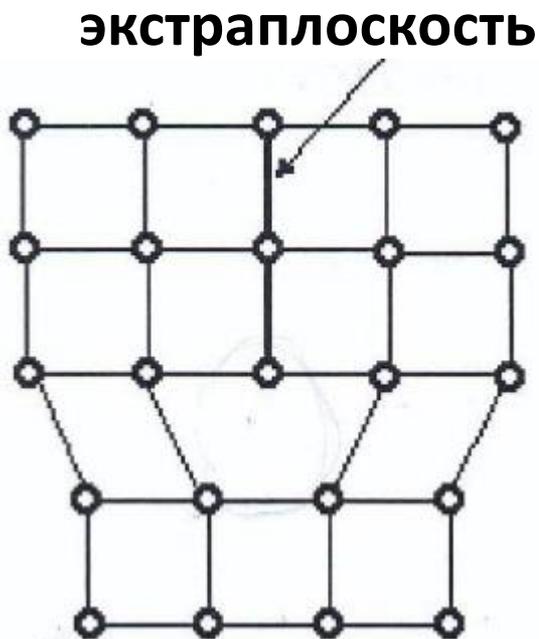


Рис. 5. Краевая дислокация.

Краевые дислокации - локализованное искажение кристаллической решётки, вызванное наличием в ней «лишней» атомной плоскости, или **экстраплоскости**.

Вдоль неё (под её краем) как раз и происходит нарушение в регулярном расположении атомов кристалла.

Т.е. одна из атомных плоскостей кристалла оказалась **недостроенной**.

3.1. Образование краевых дислокаций

Наиболее простой способ образования дислокации в кристалле – сдвиг.

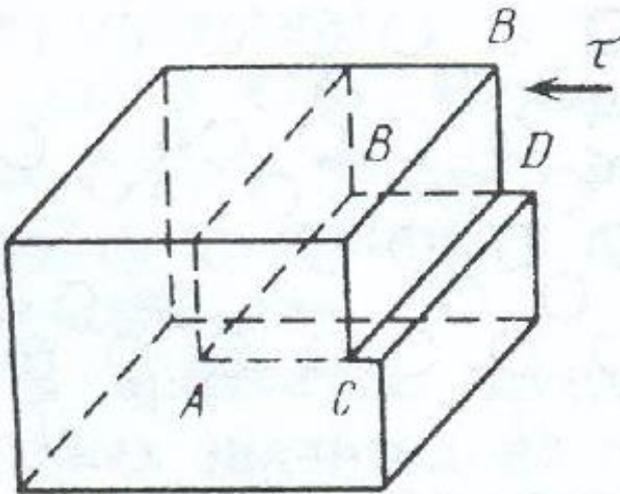


Рис. 6. Сдвиг, создавший краевую дислокацию.

Если верхнюю часть кристалла сдвинуть относительно нижней на одно межатомное расстояние, причём зафиксировать положение, когда сдвиг охватит не всю плоскость скольжения, а только часть её ABC, то граница АВ между участком, где скольжение уже произошло, и участком в плоскости скольжения, в котором скольжение ещё не произошло, и будет **дислокацией**.

3.1. Краевые дислокации

На рис. 6 край экстраплоскости АВ представляет собой линию краевой дислокации, которая простирается вдоль плоскости скольжения (перпендикулярно к вектору сдвига τ) через всю толщину кристалла.

В поперечном сечении, где имеет место существенное нарушение периодичности расположения атомов, размеры дефекта не превышают $(3-5)a$ (a – период решётки).

Дислокационные линии не обрываются внутри кристалла. Они выходят на его поверхность, заканчиваются на других дислокациях или образуют замкнутые дислокационные петли.

3.1. Краевые дислокации

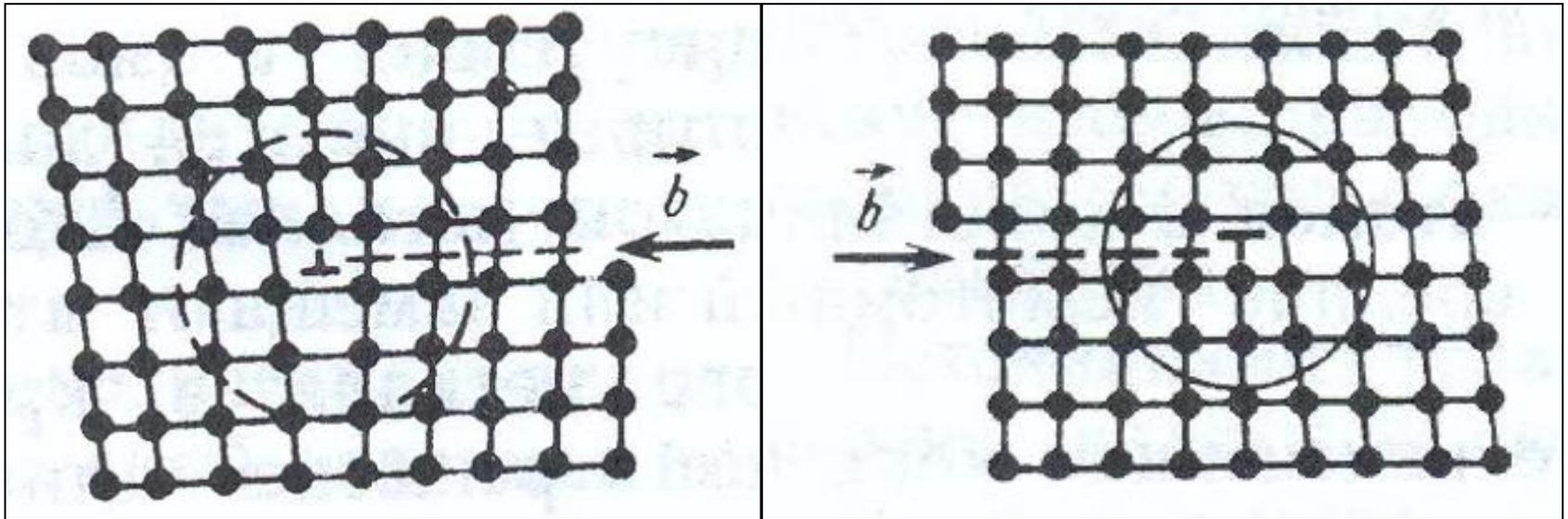


Рис. 7. Схемы расположения атомов у дислокаций

Если экстраплоскость находится в верхней части кристалла, то это – положительная дислокация (обозначение - \perp), а если в нижней – отрицательная дислокация (обозначение – T).

3.1. Краевые дислокации

Дислокации при приложении небольшого касательного напряжения легко перемещаются. В этом случае экстраплоскость посредством незначительного смещения перейдёт в полную плоскость кристалла, а функции экстраплоскости будут переданы соседней плоскости.

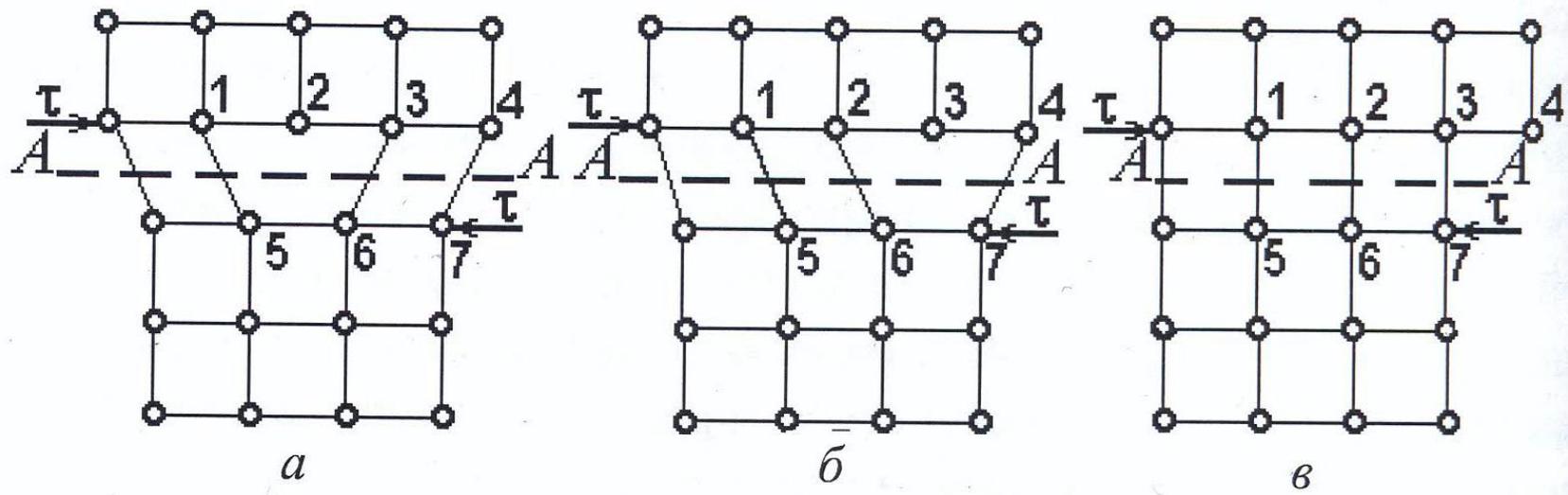


Рис. 8. Скольжение краевой дислокации.

3.1. Краевые дислокации

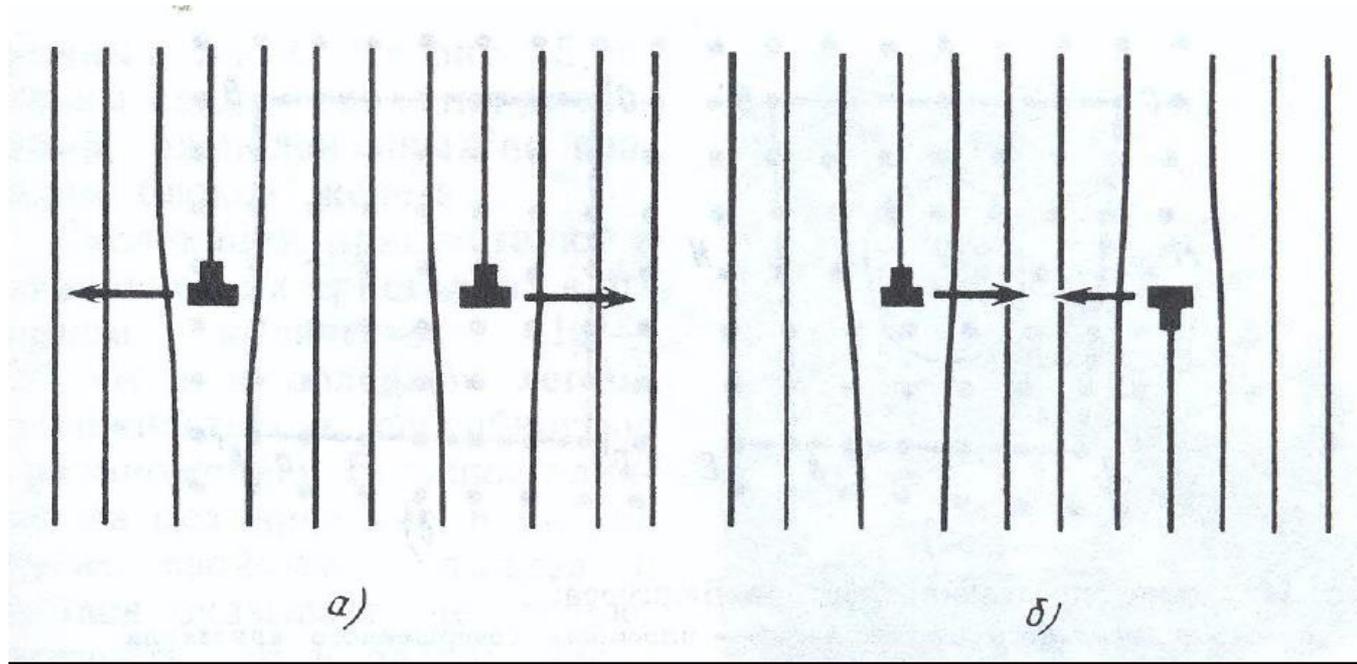


Рис. 9. Схема взаимодействия дислокаций, лежащих в одной плоскости скольжения.

Дислокации одинакового знака отталкиваются (а), а разного знака взаимно притягиваются (б). Сближение дислокаций разного знака приводит к их уничтожению (аннигиляции).

3.2. Винтовые дислокации

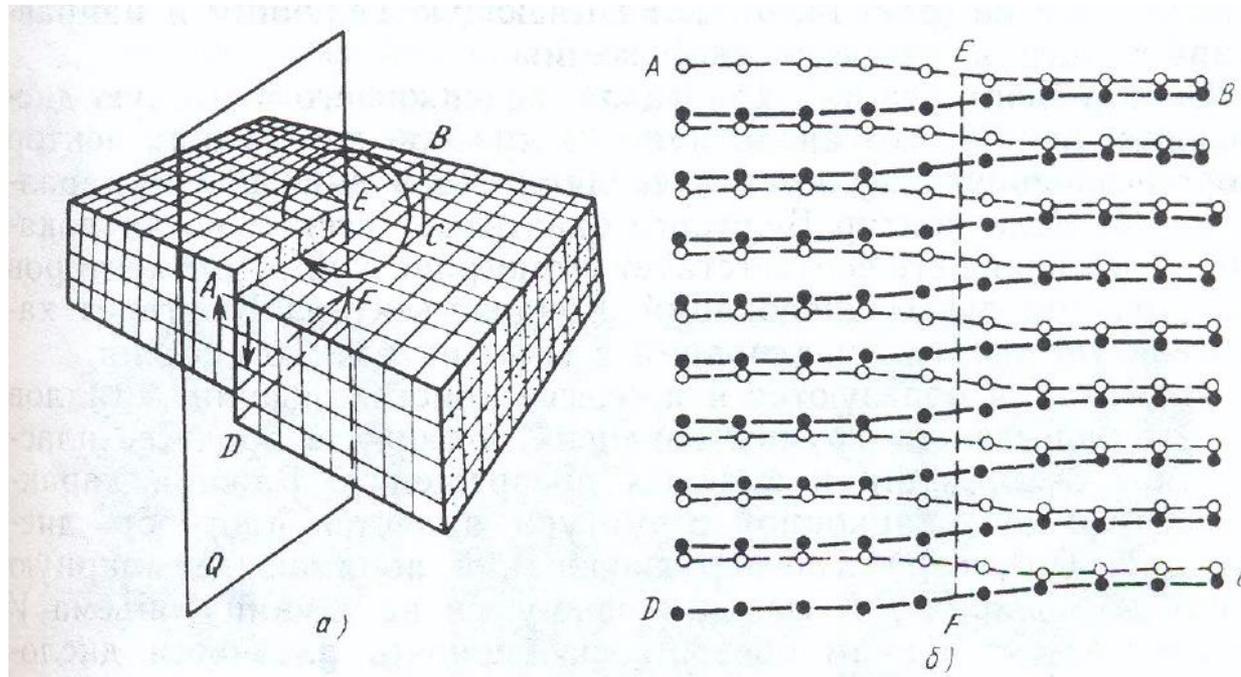


Рис. 10. Винтовая дислокация EF в результате неполного сдвига по плоскости Q (а) и расположение атомов в области винтовой дислокации (б).

Вокруг линии EF атомные плоскости изогнуты по винтовой поверхности. Обойдя верхнюю атомную плоскость по часовой стрелке, приходим к краю второй атомной плоскости и т.д.

3.2. Винтовые дислокации

Винтовую дислокацию можно представить как расположение атомов по винтовой поверхности с шагом в одно межатомное расстояние (**Рис. 10**).

Ось этой винтовой поверхности является **линией дислокации**.

Кристалл, содержащий винтовую дислокацию, представляет собой фактически одну-единственную атомную плоскость, свёрнутую в виде винтовой лестницы.

3.2. Винтовые дислокации

Винтовая дислокация, также как и краевая, образована неполным сдвигом кристалла по плоскости Q.

По каким-то причинам в процессе образования кристалла произошло слипание верхнего и нижнего атомных слоёв.

В отличие от краевой дислокации, винтовая дислокация параллельна вектору сдвига.

3.3. Другие линейные дефекты

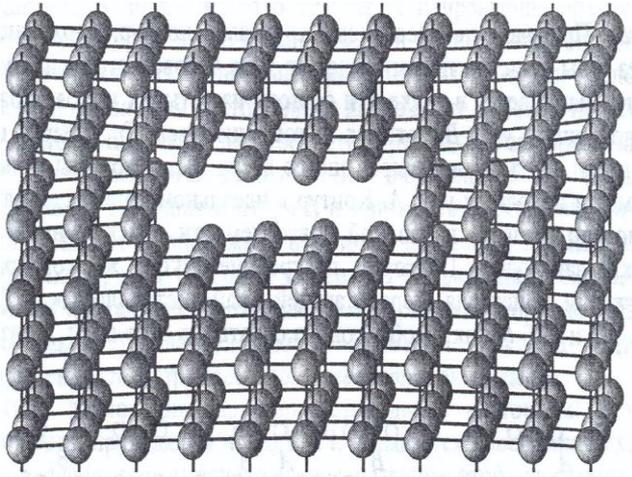


Рис. 11. Структура вакансионной дислокационной петли.

Дислокационные петли.

1). Если в каком-то месте плотноупакованной кристаллической плоскости образуется скопление вакансий, то это эквивалентно как бы вырезанию диска из атомной плоскости.

Край такого «вынутого» атомного диска представляет «круговую» дислокацию, или **вакансионную дислокационную петлю.**

3.3. Другие линейные дефекты

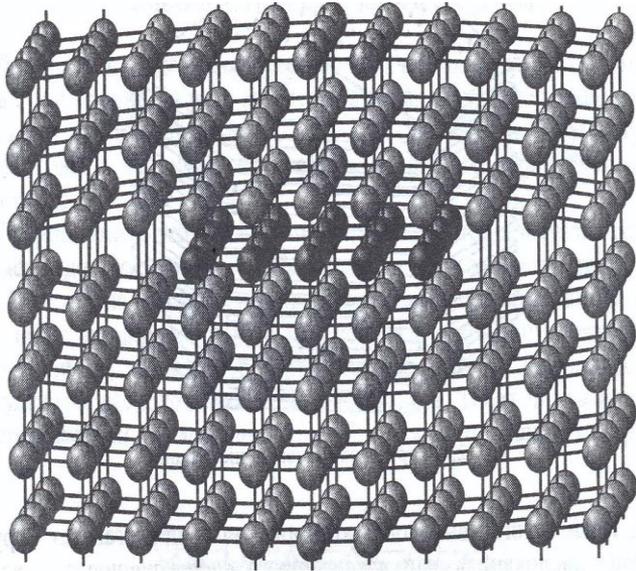


Рис. 12. Структура междуузельной дислокационной петли

Дислокационные петли.

2). Если образуется скопление междуузельных атомов в пространстве между двумя соседними атомными плоскостями (Рис. 12), то они могут образовать кусок дополнительной плоскости, «вставленной» между имеющимися кристаллическими плоскостями.

Край такого атомного диска, «вставленного» в кристалл, представляет собой **междуузельную дислокационную петлю.**

3.4. Характеристики дислокаций

В районе края экстраплоскости на протяжении нескольких межатомных расстояний возникают искажения кристаллической решётки.

Энергия искажения решётки является одной из важнейших характеристик дислокации любого типа. Критерием этого искажения служит *вектор Бюргерса*.

Вектор Бюргерса – параметр, характеризующий искажённость кристаллической решётки **при наличии дислокаций**.

3.4. Характеристики дислокаций.

Представить себе **вектор Бюргерса** можно следующим образом.

Если в кристалле с дислокацией сделать обход по некоторому контуру вокруг этого дефекта (контур ABCDA на рис. 13, который называют контуром Бюргерса), а затем нанести такой же контур в идеальном кристалле, т.е. без дислокации), то отрезок, необходимый для того, чтобы замкнуть контур в идеальном кристалле, и будет являться **вектором Бюргерса**.

3.4. Характеристики дислокаций

К определению вектора Бюргера

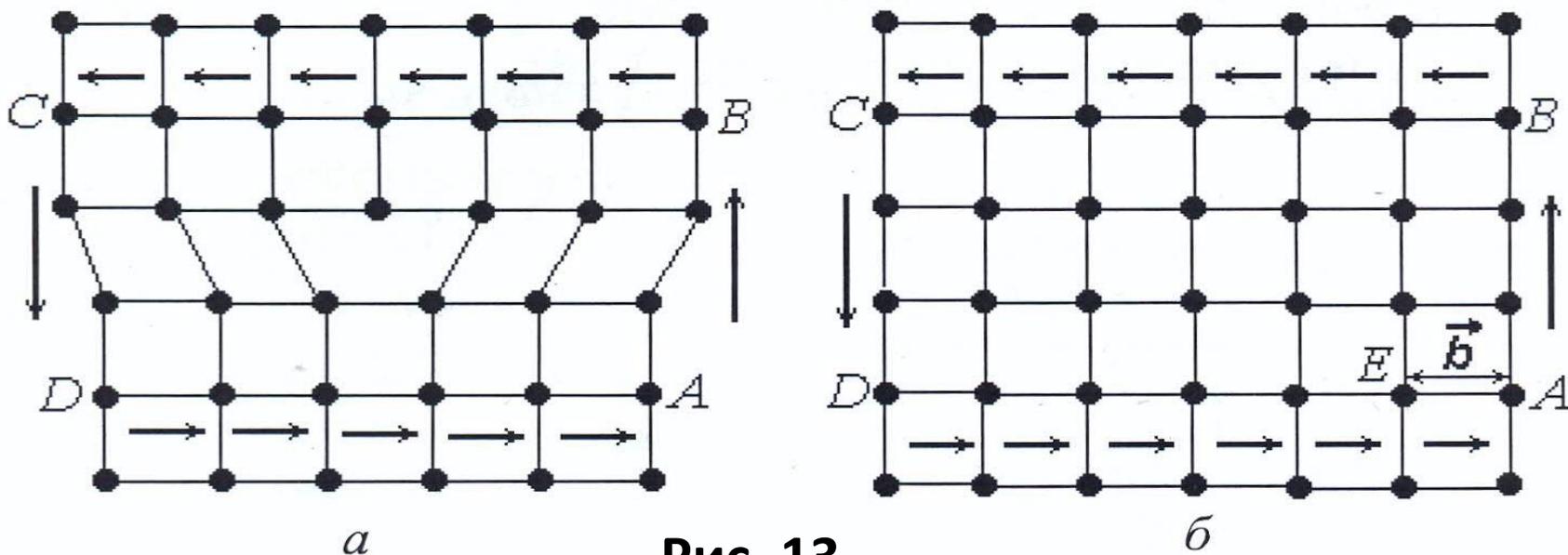


Рис. 13.

Для краевой дислокации вектор Бюргера перпендикулярен к её линии, для винтовой – параллелен ей.

3.4. Характеристики дислокаций

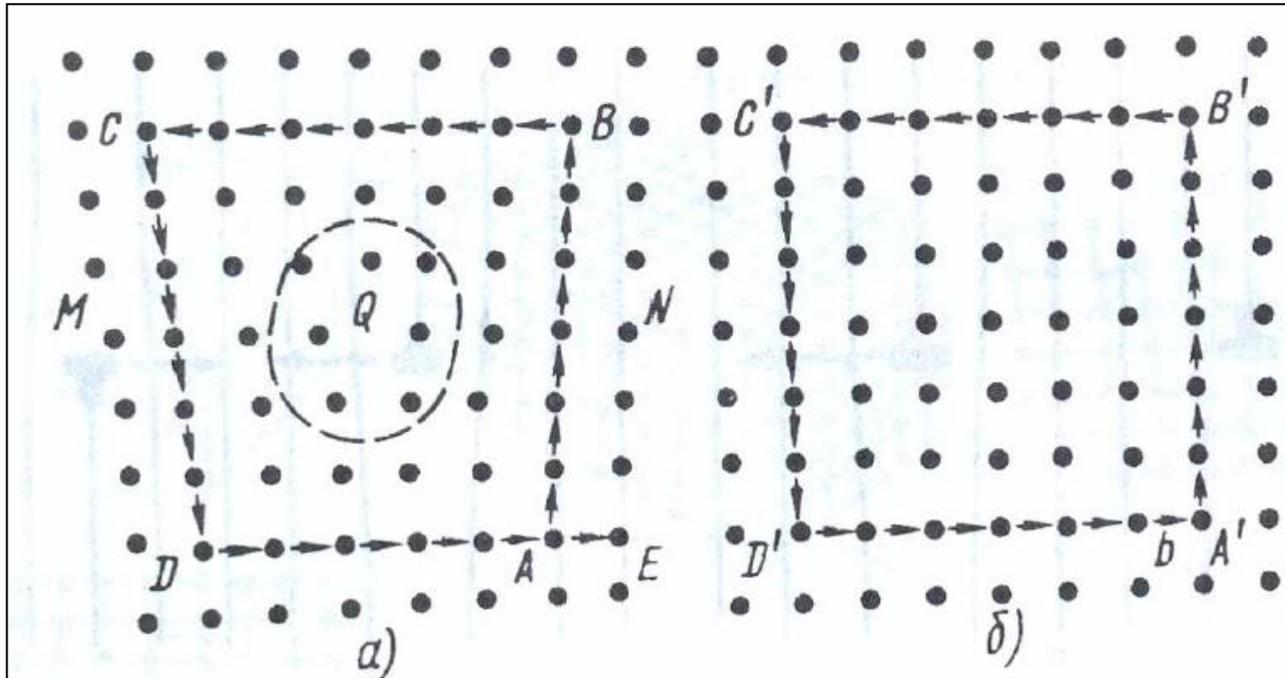


Рис. 14. Схема определения вектора Бюргерса: а) – плоскость реального кристалла; б) – плоскость совершенного кристалла.

3.4. Характеристики дислокаций

Из способа построения контура следует, что **вектор Бюргерса** представляет собой разность периметров контуров вокруг данного атома в плоскости идеальной решётки и вокруг центра дислокации в реальной решётке, показывающую величину и направление сдвига в процессе скольжения.

Квадрат вектора Бюргерса характеризует энергию дислокаций и силы их взаимодействия.

3.4. Характеристики дислокаций

Величина **вектора Бюргерса** зависит от типа кристаллической решётки и от того, в какой плоскости находится дислокация.

В простой кубической решётке с параметром « a », если краевая дислокация лежит в плоскости одной из граней куба, величина **вектора Бюргерса** будет определена как a .

Если же дислокация лежит в диагональной плоскости, то величина **вектора Бюргерса** будет равна $a\sqrt{3}$.

3.4. Характеристики дислокаций

Область диаметром 2 – 3 межатомных расстояния, непосредственно окружающая край экстраплоскости, где число ближайших соседей данного атома (координационное число) однозначно не определяется из-за смещений из равновесных положений, называется **ядром дислокации**.

3.5. Связь дислокаций со свойствами материала.

Количественной характеристикой дислокационной структуры является **плотность дислокаций ρ** .

Это – суммарная длина дислокаций в 1 см^3 .

Плотность дислокаций имеет размерность $\text{см}/\text{см}^3$ или см^{-2} .

Для реальных технических металлов $\rho = 10^6 \dots 10^8 \text{ см}^{-2}$.

Количество дислокаций в металле возрастает при пластической деформации, и в сильно деформированном металле плотность дислокаций может достигать 10^{12} см^{-2} .

3.5. Связь дислокаций со свойствами материала

Наличие дислокаций в металле, их количество, подвижность в значительной степени определяют сопротивление материала деформации и разрушению.

В идеальном металле, где нет дислокаций, для пластической деформации и разрушения **нужно преодолеть силы всех межатомных связей в плоскости сдвига.**

Следовательно, в бездефектном, идеальном кристалле прочность должна быть максимальной (точка 1 на рис. 15).

3.5. Связь дислокаций со свойствами материала.

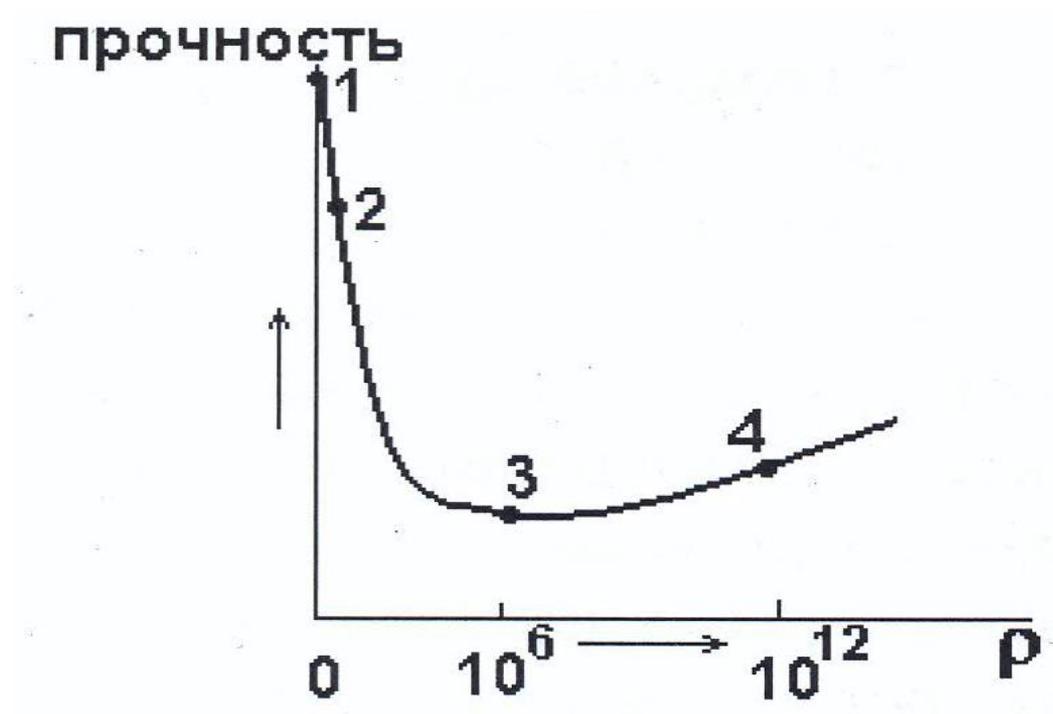


Рис. 15. Зависимость прочности от плотности дислокаций.

3.5. Связь дислокаций со свойствами материала

С появлением в металле дислокаций и увеличением их количества прочность сильно снижается (до точки 3 на рис. 15).

Это прочность реального технического металла.

Затем, при дальнейшем возрастании плотности дислокаций (свыше $10^6..10^7$ см⁻²) прочность снова увеличивается.

3.5. Связь дислокаций со свойствами материала.

Из зависимости, приведённой на рис. 15, следует две возможности повышения прочности металла.

Первое возможное направление – создать материал с идеальной кристаллической решёткой или близкой к этому.

Реализация этого направления представляет большие трудности.

Искусственным путём по специальной технологии получают кристаллы различных металлов, которые имеют прочность, близкую к теоретической. Величина таких кристаллов небольшая: толщина порядка 2 мкм и длина около 10 мм.

3.4. Связь дислокаций со свойствами материала

Второе направление – создание в структуре материала очень большого числа дислокаций. При этом происходит упрочнение (точка 4 на рис. 15).

Такое упрочнение может быть получено:

- пластическим деформированием,
- термической обработкой,
- и другими методами.

Оно широко используется в практике работы с реальным металлом.

4. Поверхностные дефекты

Реальный промышленный металл – поликристаллическое твёрдое тело.

Он состоит из множества кристалликов, или зёрен.

Размер этих зёрен может быть различным и составляет от нескольких микронов до нескольких миллиметров.

4. Поверхностные дефекты

Соседние зёрна разориентированы друг относительно друга на угол в **несколько десятков градусов** (говорят, что зёрна разделяет **большеуголовая граница**).

В области границ зёрен решётка одного кристалла, имеющего определённую ориентацию, переходит в решётку другого кристалла, имеющего иную ориентацию.

Граничная область между зёрнами обычно бывает шириной от 2 до 10 межатомных расстояний.

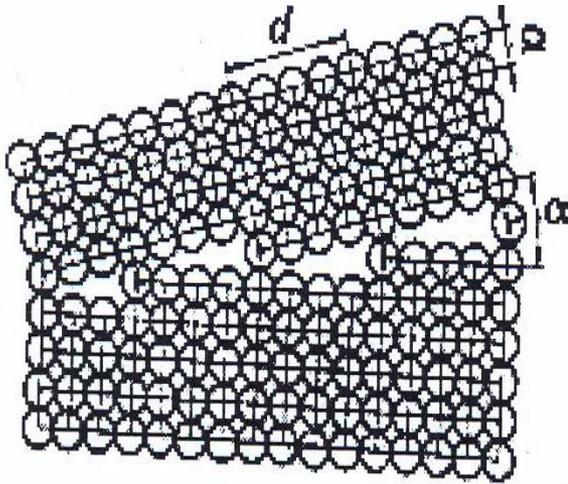


Рис. 16. Кристаллическое строение двух соседних зёрен, расположенных под углом α , и границы между ними .

4. Поверхностные дефекты

На границе между зёрнами имеется большое число дислокаций, микроучастков с искажениями кристаллической решётки.

Также на границах зёрен может находиться значительное количество атомов примесей, имеющих в металле.

Следовательно, зернограничная поверхность небольшой толщины насыщена дефектами кристаллического строения, искажениями решётки, атомами примесей, т.е. **границы зёрен являются поверхностными дефектами кристаллического строения.**

4. Поверхностные дефекты

Зерно в свою очередь состоит из более мелких образований, называемых фрагментами и блоками (это - субзёрна).

Фрагменты расположены под углом в несколько градусов друг к другу, а блоки, самые маленькие структурные образования размером от 0,1 до 10 мкм, расположены под углом в несколько минут.

Границы между фрагментами или блоками обычно называют малоугловыми.

4. Поверхностные дефекты

Плоские трещины - нарушения сплошности материала, у которых раскрытие трещины ещё сравнимо с межатомным параметром a .

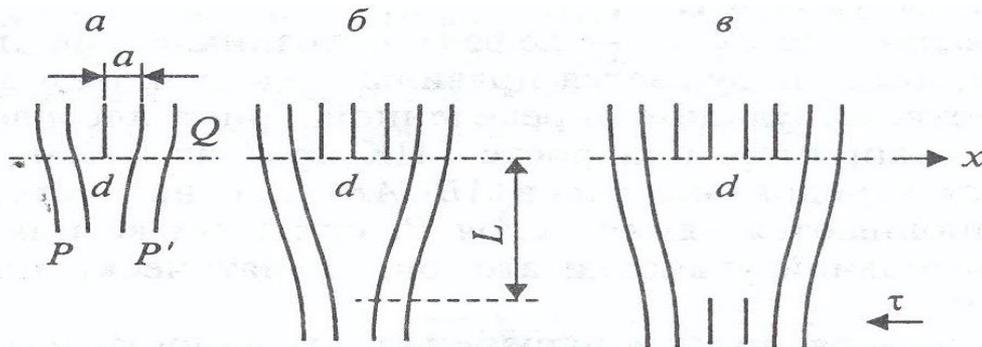


Рис. 17. Ядро краевой дислокации (а); формирование краевых дислокаций (б) и микротрещины (в).

Если объединить несколько краевых дислокаций, то вдоль направления x размер такого дефекта d (раскрытие трещины) будет сравним с параметром a , а два других размера – макроскопические.

4. Поверхностные дефекты

Внешняя поверхность – отсутствие соседних атомов в двух направлениях.

Плоские выделения – образования второй фазы, сформированные в виде плоских включений.

4. Поверхностные дефекты

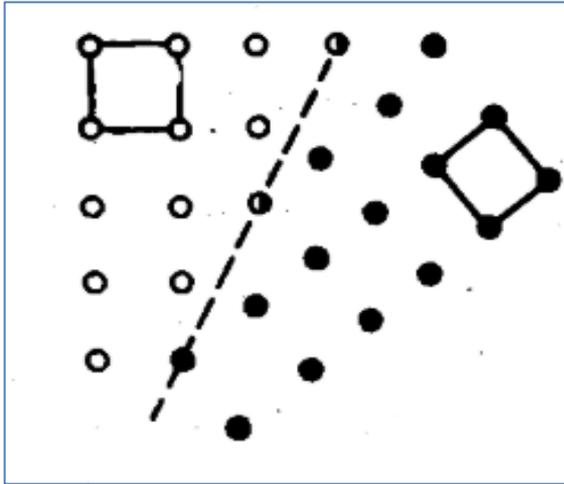


Рис. 18. Двойниковая граница.

Двойниковая граница относится к двумерным (поверхностным) дефектам, в то время как сам двойник является трехмерным. **Двойникованием** называется симметричная переориентация областей кристаллической решетки.

Двойники могут образовываться при фазовых превращениях, при механическом воздействии, либо в процессе зарождения и роста кристалла.

5. Объёмные дефекты

Объёмные дефекты имеют значительно большие размеры, несоизмеримые с межатомным расстоянием.

К объёмным дефектам относятся:

- поры,
- трещины,
- инородные включения,
- царапины,
- разупорядоченные области и т.п.

5. Объёмные дефекты кристаллического строения

Большинство объёмных дефектов уменьшают прочностные характеристики кристаллического материала с одновременным уменьшением и пластических.

Более сложное влияние оказывают инородные включения, создавая, например, в некоторых случаях дисперсное упрочнение.

5. Объёмные дефекты кристаллического строения

В ненагруженном кристалле различают два типа нарушений сплошности (т.е. образования полости, наименьший размер которой превышает радиус действия межатомных сил, т.е. превосходит 2-3 межатомных расстояния):

- трещины,
- поры.

5. Объёмные дефекты кристаллического строения

Трещины образуются, как правило, в результате скопления дислокаций перед каким-либо препятствием. Такими препятствиями могут быть, например, границы зёрен.

В отличие от трещины, **пора возникает** в результате объединения дефектов, не имеющих дальнедействующих полей напряжений, например, вакансий.

Сваливание дислокаций обратного знака в дислокационную микротрещину приводит к её затуплению и к превращению её также в пору.

4. Объёмные дефекты кристаллического строения

Трещины обладают собственным полем напряжений.

Кристалл же вокруг поры, как правило, свободен от напряжений.

Если к телу приложено напряжение, то любое нарушение сплошности, в том числе и пора, становится концентратором напряжений.

4. Объёмные дефекты кристаллического строения

Образование трещин и пор происходит при механическом, температурном воздействиях, при фазовых превращениях в кристалле.

Проверочная работа № 2

Для заданного дефекта:

- 1) изобразить дефект;
- 2) охарактеризовать дефект (точечный, линейный, поверхностный, объёмный) и дать ему определение;
- 3) описать механизм формирования дефекта.