

ЛЕКЦИЯ №2

2. ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Кристаллы, атомы в которых расположены строго периодически, называют идеальными. Все реальные кристаллы обязательно содержат отклонения от идеальной структуры, такие отклонения принято называть *дефектами структуры*. Дефекты структуры разделяют на динамические и статические. К *динамическим дефектам* относят искажения кристаллической решетки, вызванные тепловыми колебаниями или же колебаниями атомов в поле проходящей через кристалл электромагнитной волны. Эти дефекты подробно рассмотрены в главах 3 и 5, они связаны со смещениями атомов относительно их равновесных положений, они существуют даже в идеальных кристаллах. *Статические дефекты*, рассматриваемые в этой главе, связаны с нарушениями в расположении атомов в кристаллической решетке, например один атом в узле решетки отсутствует или замещен другим, или же атомы перегруппировались и сформировали внутри кристалла более крупный дефект.

Статические дефекты принято разделять на 4 группы, различающиеся "формой" дефекта: 1) точечные дефекты, например отсутствие атома в узле решетки (они рассмотрены в [разд.2.1](#)); 2) линейные дефекты - дислокации, в которых сильные отклонения от периодичности наблюдаются вдоль линии (они рассмотрены в [разд.2.2](#)); 3) поверхностные дефекты, например, границы кристалла и зерен поликристалла (они рассмотрены в [разд.2.3](#)); 4) объемные дефекты, например, поры, микротрещины или малые включения другой фазы (они рассмотрены в [разд.2.3](#)).

Многие физические свойства кристаллов сильно зависят от дефектов разных групп. Например, прочность и пластичность материала сильнее всего зависят от линейных, поверхностных и объемных дефектов. Электросопротивление в основном зависит от точечных дефектов. Коэффициент диффузии, теплопроводность, окраска кристаллов также сильно зависят от наличия дефектов.

2.1. Точечные дефекты.

Точечные дефекты - самые мелкие дефекты, обычно связаны с "ненормальной" ситуацией вокруг одного атома (отсутствием одного атома, замещением одного атома другим или же появлением "лишнего" атома). Рассмотрим различные точечные дефекты, схематически изображенные на рис. 2.1.

Вакансия. Атом может отсутствовать в некотором узле кристаллической решетки (см. рис. 2.1 (1)). Такое пустое место называют *вакансией*. Часто вакансия появляется при кристаллизации - случайно один узел оказывается пустым, и, если следующий слой атомов закрывает подход атомов из раствора или расплава к пустому узлу-вакансии, то узел может оказаться пустым. Вакансию часто называют - *дефект по Шотки*.

Междоузельный атом. Атом может разместиться не в узле кристаллической решетки, а в промежутке между атомами - *междоузлии* (см. рис. 2.1 (2)), такой дефект называют *междоузельным атомом*. Появляется междоузельный атом, как и вакансия, часто при кристаллизации - случайно один из атомов в результате теплового движения попадет в промежуток между соседними атомами, и, если его место займет какой либо другой атом, то междоузельный атом так и останется в новом ненормальном положении.

Дефект по Френкелю. Часто вакансия и междоузельный атом возникают парами (см. рис. 2.1 (3)), в этом случае один из атомов перескакивает из узлового положения в соседнее междоузлие. Причиной такого перескока может быть тепловое движение при сравнительно высоких температурах, порядка температуры плавления, или выбивание атома быстро движущейся частицей (радиационный дефект). Такая пара дефектов называется *дефектом по Френкелю*.

Атом примеси. Один из атомов может быть замещен атомом примеси (см. рис. 2.1 (4)), при этом также получается дефект, называемый *примесным атомом замещения*. Примесный атом может разместиться и в междоузлии (см. рис. 2.1 (5)), как бы внедрившись в него. Такой дефект, называемый *примесным атомом внедрения*, часто появляется в случае, когда атом примеси значительно меньше атомов кристалла и в решетке кристалла имеются междоузлия достаточного размера; часто примесями внедрения оказываются атомы водорода, бора, углерода. Если атом примеси превосходит по размерам атомы кристалла, то, как правило, он замещает атомы кристалла.

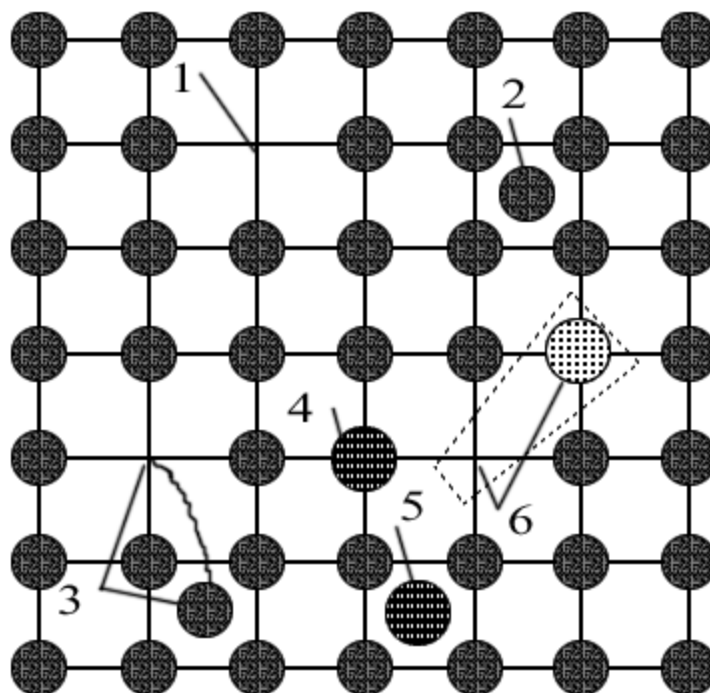


Рис. 2.1.

дефектов: 1 - вакансия; 2 - межузельный атом; 3 - дефект по Френкелю; 4 - примесный атом замещения; 5 - межузельный атом примеси; 6 - атом замещения большей валентности

Часто атомы примеси, отличающиеся валентностью от атомов кристалла, обуславливают появление вакансий, как это происходит в кристаллах KCl при добавлении к нему Ca , так, что кристалл в целом остается нейтральным. В таком случае атом двухвалентного кальция занимает место одного атома калия, а место, где должен был бы находиться атом калия, оказывается пустым (см. рис. 2.1 (6)).

Энергия точечного дефекта и вероятность его образования. С точечным дефектом связана энергия E_v образования дефекта: в случае вакансии (это энергия, необходимая для удаления атома на поверхность кристалла; в случае внедренного атома - энергия необходимая для перемещения атома с поверхности кристалла в междоузлие. Как правило, она составляет примерно 1 эВ. Вероятность образования точечного дефекта вычисляется по формуле Больцмана:

$$P = N_d / N_{\alpha} = \exp(-E_v / kT) \quad (2.1)$$

Вероятность P , вычисленная по этой формуле (см. задачу 2.1) при $E_v = 1 \text{ эВ}$ и $T = 1000^\circ K$, окажется равной $P = N_d / N_{\alpha} \approx \exp(-12) \approx 10^{-5}$. При более низких температурах плотность дефектов убывает экспоненциально и оказывается очень малой величиной при температурах ниже комнатной. Однако и при низких температурах плотность дефектов может оказаться высокой, если кристалл,

нагретый до высокой температуры, быстро охладить (закалить). Тогда плотность дефектов будет соответствовать высокой температуре.

В случае дефекта по Френкелю, для образования пары дефектов (вакансии и межузельного атома) потребуется энергия E_{Fr} , численно равная энергии необходимой для удаления атома на поверхность кристалла, а затем для перемещения атома с поверхности кристалла в междоузлие. Можно показать, что число таких дефектов вычисляется по формуле:

$$N_{Fr} = (N_A N_M)^{1/2} \exp(-E_{Fr} / 2kT) \quad (2.2)$$

где N_A и N_M соответственно число узлов и междоузлий в кристалле.

С повышением температуры равновесное количество дефектов возрастает, и на их образование требуется дополнительная энергия. Поэтому в некоторых кристаллах вблизи температуры плавления, когда при нагреве намного увеличивается число дефектов, наблюдается эффект увеличения теплоемкости, сопоставимый с типичными значениями молярной теплоемкости, связанной с колебаниями кристаллической решетки (см. рис. 2.2).

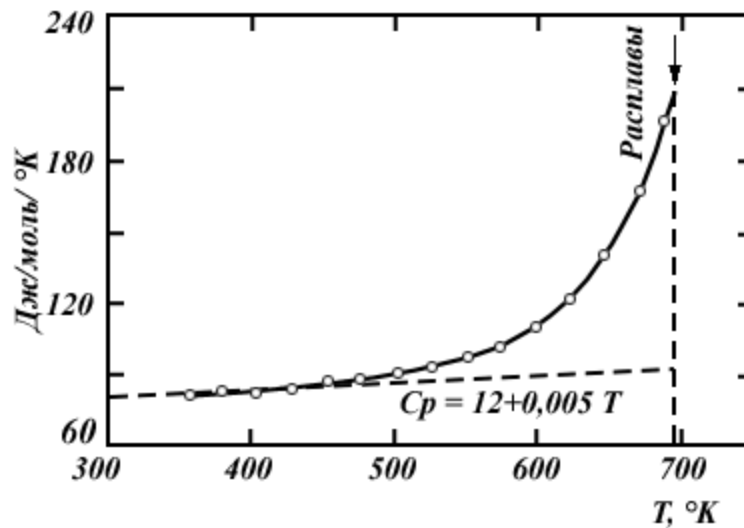


Рис. 2.2.

Вклад в теплоемкость, связанный с образованием точечных дефектов вблизи температуры плавления

Влияние точечных дефектов на диффузию. Точечные дефекты оказывают наиболее значительное влияние на скорость диффузии в кристаллах и на электропроводность в диэлектрических кристаллах. Остановимся, прежде всего, на возможных механизмах диффузии в кристаллах.

Атомы в кристаллах могут перескакивать из одного положения в другое. Возможные варианты таких перескоков изображены на рис. 2.3. Два или четыре атома могут поменяться местами (см. рис. 2.3 (1, 2)). Однако атому гораздо легче

(это показывают как наглядные соображения о том, как "легче протиснуться атому между другими, раздвигая их", так и строгие расчеты) перескакивать в вакансию (см. рис. 2.3 (3)). Также сравнительно легко перескакивать межузельному атому, особенно если он небольшого размера (см. рис. 2.3 (4)). Поэтому основными механизмами диффузии в твердых телах считают вакансионный, связанный с перегруппировками атомов вблизи вакансий (см. рис. 2.3 (3)) и межузельный, связанный с перемещениями, как правило, сравнительно мелких атомов по междоузлиям (см. рис. 2.3 (4)).

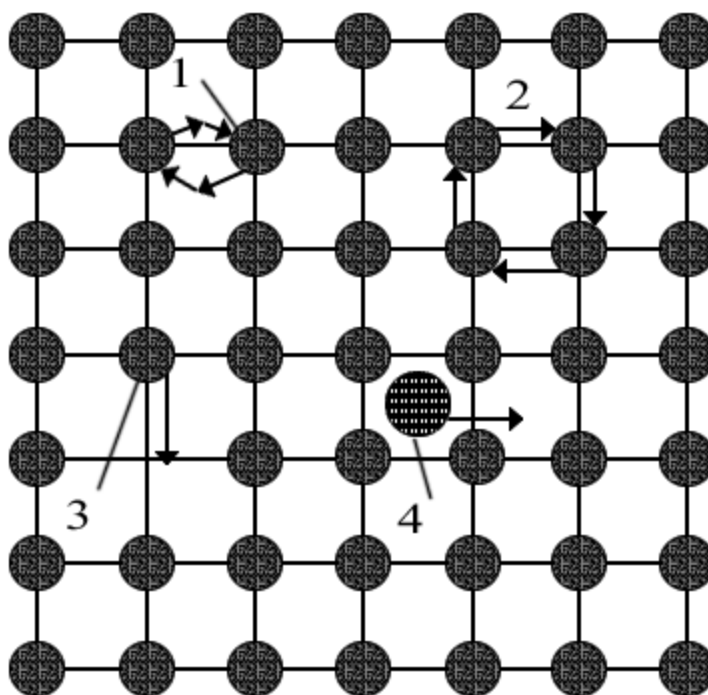


Рис. 2.3.

Основные механизмы диффузии атомов в кристаллах: 1 - обмен местами двух соседних атомов; 2 - обмен атома с соседним атомом; 3 - перескок атома в вакансию; 4 - перескоки межузельных атомов в соседние междоузлия.

Во всех случаях диффузии атомы должны преодолевать потенциальный барьер; происхождение которого связано главным образом с квантовыми силами отталкивания, сильно увеличивающимися при сближении атомов. Рассмотрим наиболее простой для анализа случай перескакивания межузельного атома в соседнее междоузлие. На рис. 2.4 схематически изображена зависимость энергии межузельного атома от координаты x . Энергия, необходимая для такого перескока, называется энергией активации E_a . Она обычно значительно больше средней энергии теплового движения ($\approx kT$). Вероятность такого события очень мала и задается формулой Больцмана:

$$P = P_0 \exp(-E_a / kT) \quad (2.3)$$

Поэтому атомы в кристаллах в течение длительного времени испытывают колебания около положения равновесия с некоторой частотой ν , и только очень редко, когда случайно энергия тепловых колебаний превысит энергию активации, могут перепрыгнуть на новое место. Можно приблизительно оценить частоту f таких перескоков как:

$$f = \nu P \quad (2.4)$$

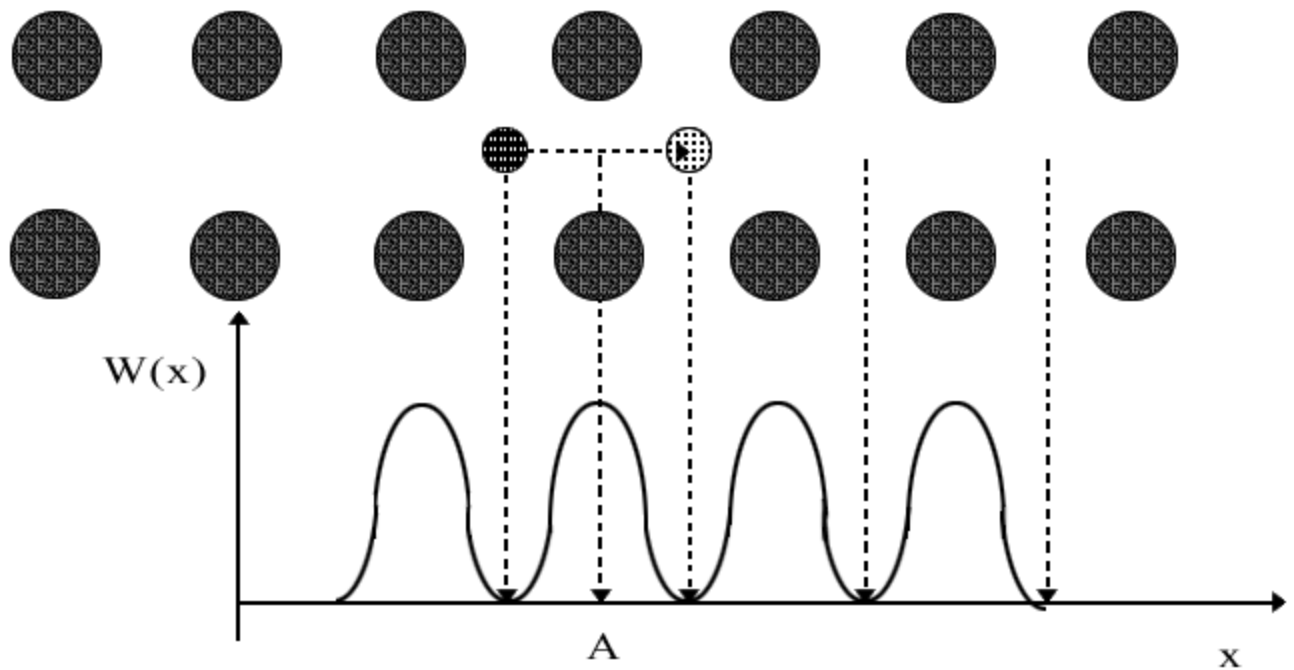


Рис. 2.4.

Энергии межузельного атома от координаты x . Энергия атома минимальна в междоузлиях и максимална в узлах.

Таким образом, атом в твердых телах перемещается редкими прыжками, на расстояние a и частотой f как это схематически показано на рис 2.5.

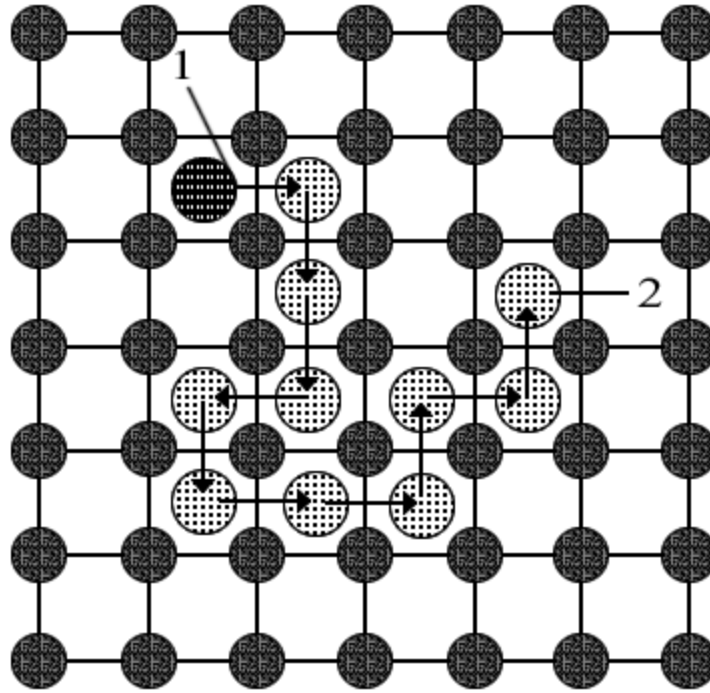


Рис. 2.5.

Схематическое изображение процесса диффузии межузельных атомов в примитивной кубической решетке

С помощью такой модели движения атомов рассчитаем коэффициент диффузии межузельных атомов в случае простой кубической решетки с параметром a . Пусть частота перескоков из данного междоузлия в соседнее равна f .

Вспомним закон диффузии Фика, связывающий поток числа атомов dN/dt через площадку S и градиент концентрации dC/dx :

$$dN/dt = -DS(dC/dx) \quad (2.5)$$

Параметр D называется коэффициентом диффузии. Он зависит от типа диффундирующего атома и вещества, в котором происходит диффузия заданных атомов. Рассмотрим в кристалле направление $[100]$ и перпендикулярную ему плоскость S , и проходящую через узлы решетки (отмечены кружочками на рис. 2.6 а). Также рассмотрим две параллельные соседние плоскости 1 и 2, проходящие соответственно слева и справа через ближайšie к выбранной плоскости междоузлия (обозначены квадратиками). Расстояние между плоскостями 1 и 2, равное расстоянию между междоузлиями, равно также параметру решетки и "длине перескока" a . Пусть на участке площади S плоскости 1 находится N_1 межузельных атомов, а на таком же по площади участке плоскости 2 - N_2 межузельных атомов (см. рис. 2.6 а).

Можно рассчитать входящие в закон диффузии концентрации C_1 и C_2 межузельных атомов в точке с координатой x и $x + \Delta x$. Очевидно:

$$C_1 = N_1 / \Delta V = N_1 / (Sa); \quad C_2 = N_2 / \Delta V = N_2 / (Sa). \quad (2.6)$$

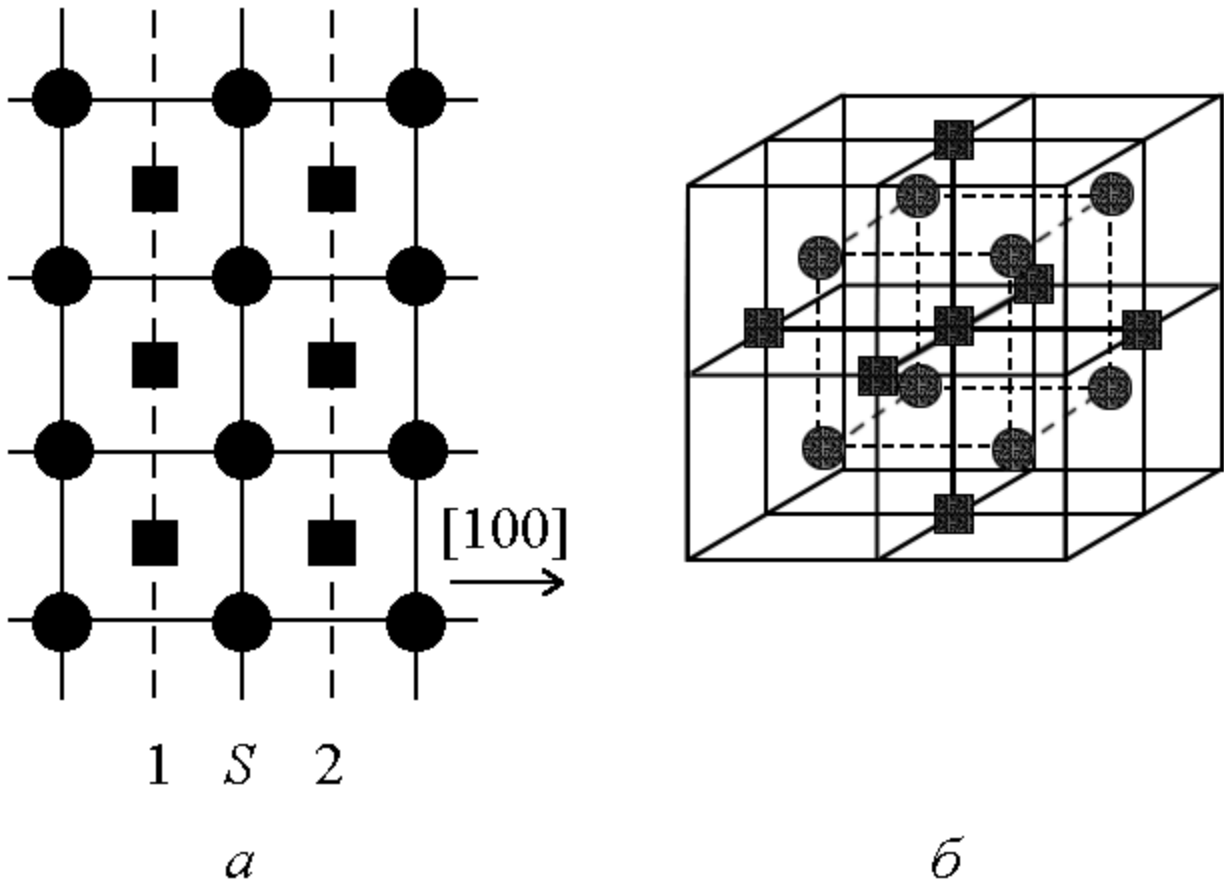


Рис. 2.6.

ов и междоузлий кубической примитивной решетке (а) Расположение междоузлий ближайших к заданно

Вычислим число атомов ΔN_1 , пересекших за Δt плоскость S слева направо. Каждый атом первой плоскости может перепрыгнуть в одно из шести ближайших мест (см. рис. 2.6 б), только одно из них соответствует пересечению атомом выбранной центральной плоскости. Тогда

$$\Delta N_1 = (1/6) f N_1 \Delta t \quad (2.7)$$

Аналогично вычисляется число атомов ΔN_2 , пересекших за Δt выбранную плоскость S справа налево:

$$\Delta N_2 = (1/6) f N_2 \Delta t \quad (2.8)$$

Общее число атомов, пересекших плоскость, окажется равным:

$$\Delta N = \Delta N_1 - \Delta N_2 = (1/6)f(N_1 - N_2)\Delta t = (1/6)f\Delta t(C_1 - C_2)Sa \quad (2.9)$$

С учетом, что $C_1 - C_2 = -(dC/dx)a$, получаем:

$$\Delta N / \Delta t = -(1/6)f((dC/dx)a)Sa \quad (2.10)$$

Сравнивая (2.10) и (2.5), получим, что коэффициент диффузии оказывается равным:

$$D = fa^2 / 6 \quad (2.11)$$

Примерно по такой же схеме можно рассчитать коэффициенты диффузии и в других изображенных на рис. 2.3 случаях, характерная энергия активации будет другой, причем в случаях 1 и 2 она будет больше, чем в случаях 3 и 4. Заметим, что энергия активации при перегруппировке атомов вблизи вакансии будет значительно меньше, чем в случаях 1 и 2. Несмотря на то, что число вакансий в соответствии с (2.1) обычно небольшое, вклад в диффузию по механизму 3 значительно превосходит вклад в диффузию по механизму 1 и 2 из-за меньшей энергии активации и, следовательно, большей вероятности перескока атомов.

Общим для всех случаев диффузии, изображенных на рис. 2.3, окажется экспоненциальная зависимость коэффициента диффузии от температуры вида:

$$D = D_0 \exp(-E_a / kT) \quad (2.12)$$

Параметры D_0 и E_a этой формулы измерены экспериментально для каждой пары диффундирующий элемент - вещество, в котором происходит диффузия (см. табл. 2.1).

Таблица 2.1.

Параметры D_0 и E_a формулы (2.12) для некоторых пар диффундирующий элемент - вещество.

Элементы	D_0 , м ² /с	E_a , эВ
Ge в Ge	$7,8 \cdot 10^{-4}$	3,0
As в Ge	$6,0 \cdot 10^{-4}$	2,5
P в Ge	$2,0 \cdot 10^{-4}$	2,5
In в Ge	$6,0 \cdot 10^{-6}$	2,5
B в Ge	$4,0 \cdot 10^{-4}$	4,5
Cu в Al	$2,3 \cdot 10^{-4}$	1,45

Cu в Cu	$2,0 \cdot 10^{-5}$	2,05
Zn в Cu	$3,4 \cdot 10^{-5}$	1,98
C в Fe (ОЦК-железо)	$2,0 \cdot 10^{-5}$	0,9
U в U	$1,8 \cdot 10^{-7}$	1,20

На рис. 2.7 изображена зависимость коэффициента диффузии углерода в ОЦК железе от температуры. Видно, что соотношение (2.12) выполняется весьма точно.

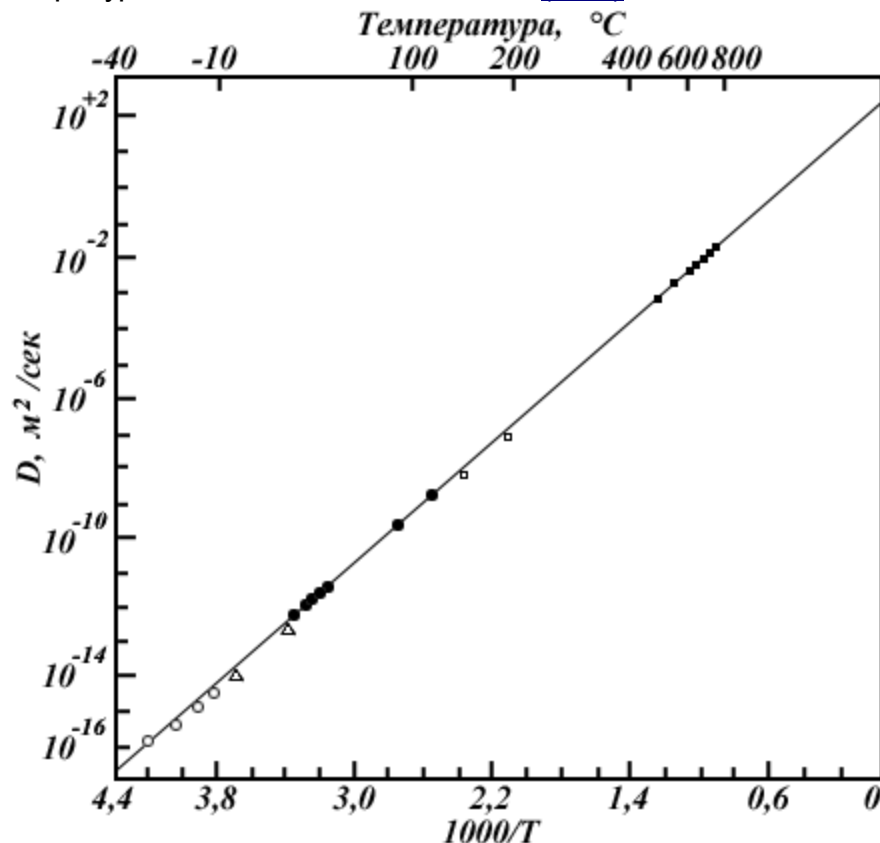


Рис. 2.7.

Зависимость коэффициента диффузии углерода в ОЦК железе от температуры

С помощью рассмотренной выше модели диффузии можно оценить среднее смещение $\langle x^2 \rangle$ атома в кристалле за время $t = Nt_1 = N/f$ (здесь $t_1 = 1/f$ (среднее время между последовательными перескоками атома)). Для этого вычисляют величину $\langle x^2 \rangle$ в предположении о полной независимости последующих прыжков друг от друга [2]. В этом случае можно получить формулу:

$$\langle x^2 \rangle = a^2 N / 3 = a^2 f t / 3 = a D 2 t \quad (2.13)$$

Эта формула используется для экспериментального определения величины D .

Диффузию в твердых телах в настоящее время наиболее эффективно изучают с использованием "меченых атомов". Для таких исследований на поверхность

вещества наносят определенное количество радиоактивных меченых атомов. Затем образец выдерживается при заданной температуре в течение времени достаточного для диффузии "меченых атомов" на глубину порядка 0,3-1 мм. Затем измеряется активность образца. После удаления шлифованием слоя вещества заданной толщины снова измеряется активность образца, и так несколько раз. Таким образом можно определить среднюю глубину проникновения "меченых атомов" в вещество и вычислить коэффициент диффузии D при заданной температуре. Проведя серию опытов при различных температурах можно определить параметры D_0 и E_a формулы (2.12).

Можно по формулам (2.3) и (2.4) и данным табл. 1.1 получить оценки частот перескоков атомов при различных температурах. Так атом углерода в альфа-железе при температуре 1800 К перескакивает 10^{11} раз в секунду, при комнатной температуре - 1 раз за десятки секунд. Таким образом, заметную роль диффузия играет только при высоких температурах, сопоставимых с температурой плавления вещества. Известно, что защитное никелевое или хромовое покрытие железа при комнатной температуре практически не "впитывается" в железо, а при температуре 1000-1300 К этот процесс сильно ускоряется. Кратковременные нагревы для легирования полупроводника примесями используются в полупроводниковой технике изготовления интегральных схем: нанесенные напылением на нужные участки поверхности полупроводникового кристалла легирующие примеси при нагреве на несколько сотен градусов диффундируют в полупроводник и легируют его, образуя в кристалле сложную систему областей полупроводников P - и n - типа.

Диффузия, происходящая главным образом за счет перемещения дефектов, является механизмом постепенного изменения числа дефектов в веществе. Известно (см. формулу (2.1)), что вероятность образования дефекта при температуре, значительно меньшей температуры плавления вещества, очень мала. Однако обычно число дефектов во много раз больше, так как дефекты зарождались при высоких температурах: либо во время роста кристаллов, либо после закалки от высокой температуры. Постепенно плотность дефектов уменьшается. Происходит это благодаря либо попаданию межузельных атомов в вакансию (рекомбинация дефектов, подобная рекомбинации электронов и дырок в полупроводниках), либо благодаря перемещению дефекта на поверхность кристалла или границы кристаллического зерна. В некоторых случаях (см. разд. 2.3) точечные дефекты - примесные атомы группируются, образуя выделения новой фазы. Перечисленные процессы называют залечиванием дефектов.

Часто проводят специальные термообработки, состоящие в длительных выдержках детали при постепенно понижающейся температуре, имеющие целью ускорить залечивание дефектов. После такой термообработки количество дефектов меньше меняется впоследствии, а значит, меньше изменяются и свойства материала в процессе его эксплуатации. По таким схемам обрабатывают, например, калиброванные электросопротивления точных приборов, постоянные магниты и т. п.

Влияние точечных дефектов на электропроводность. Электропроводность реальных кристаллов оказывается значительно выше электропроводности идеального кристалла-диэлектрика, вычисленной в рамках зонной теории. Это связано с двумя главными причинами.

Во-первых, с наличием донорных или акцепторных примесей, которые увеличивают проводимость диэлектрика по тем же механизмам что и полупроводников (см. главу 4).

Во-вторых, с облегченным переносом заряда ионами вблизи вакансий в ионных кристаллах (и в меньшей степени междузельными ионами) по механизму схематически изображенному на рис. 2.3. Если вакансия 3, в которой должен был бы находиться положительный ион, оказывается во внешнем электрическом поле \vec{E} , то вероятность перескока в нее положительного иона в направлении \vec{E} будет несколько выше, чем для иона в направлении, противоположном \vec{E} . В среднем положительно заряженные ионы будут перемещаться вдоль направления внешнего электрического поля и давать вклад в электропроводность. Аналогично, во внешнем электрическом поле \vec{E} отрицательно заряженному иону выгоднее переместиться в вакансию в направлении противоположном \vec{E} , чем в направлении поля \vec{E} . Тогда отрицательно заряженные ионы будут перемещаться в направлении против поля \vec{E} и также давать вклад в электропроводность. Во всех этих случаях вакансия как бы перемещается по кристаллу и обеспечивает перенос заряда, хотя фактически заряд переносят ионы, которые по-разному группируются вблизи вакансии. В таком случае говорят о вакансионном механизме переноса заряда подобно тому, как в главе 4 мы рассматривали дырочный механизм переноса заряда в полупроводниках. Перенос заряда по такому механизму требует преодоления значительно меньших потенциальных барьеров, чем, скажем, передача электрона от иона к иону.

Междузельный ион 4 (см. рис. 2.3) также преимущественно перемещается (перескакивает) в направлении внешнего электрического поля \vec{E} .

Влияние точечных дефектов на окраску кристаллов. Примесные атомы изменяют окраску кристаллов, например, примеси замещения - ионы хрома в

кристаллах Al_2O_3 обеспечивают их красную окраску (получаются кристаллы рубина), ионы титана в кристаллах Al_2O_3 обеспечивают их голубую окраску (получаются кристаллы сапфира).

Методы изучения точечных дефектов. Число вакансий в единице объема можно оценить по сопоставлению результатов точного определения параметра решетки рентгеновским методом и точного определения плотности вещества как отношения его массы к объему. Метод основан на том, что вакансии крайне мало изменяют параметр решетки, но увеличивают объем кристалла, а значит уменьшают его плотность. Таким же способом, но с меньшей точностью, можно определить число межузельных атомов в единице объема, поскольку межузельные атомы несколько увеличивают плотность кристалла и слабее изменяют его параметр решетки. Если в кристалле присутствуют и вакансии и межузельные атомы, то описанным методом можно лишь оценить разность чисел вакансий и межузельных атомов в единице объема. Аналогично, плотность дефектов по Френкелю этим методом точно определить не удастся.

Рассмотренные выше измерения электросопротивления и диффузии, а также измерения коэффициента поглощения различных электромагнитных излучений позволяют изучать точечные дефекты в кристаллах.

Задачи к [разделу 2.1](#).

Задача 2.1. Вычислить равновесную концентрацию вакансий при температуре 300 и 900 К, если энергия образования вакансии равна 1 эВ.

Указание. Следует воспользоваться формулой [\(2.1\)](#).

Задача 2.2. Оценить глубину проникновения атомов углерода в поверхностный слой железа после выдержки при температуре 300 и 1500 К в течение 3 часов. Считать, что среда, содержащая углерод, вплотную прилегает к поверхности железа. Коэффициент диффузии вычислить по данным табл. 2.1. Такой способ насыщения поверхности углеродом, дополняемый последующей закалкой, используют для получения детали с твердой поверхностью и мягкой сердцевиной. Параметр решетки ОЦК-железа равен 0,288 нм.

Указание. Следует воспользоваться формулами [\(2.12\)](#) и [\(2.13\)](#).

2.2. Линейные дефекты - дислокации

Подробное изучение **линейных дефектов** кристаллической решетки, называемых **дислокациями**, связано с их сильным влиянием на прочность и пластичность практически всех конструкционных кристаллических материалов.

Теории прочности кристаллов, не учитывающие этот тип дефектов, не могли даже приближенно объяснять наблюдающиеся механические свойства как моно- так и поликристаллических веществ.

Типы дислокаций. Дислокации принято разделять на краевые и винтовые, хотя, строго говоря, наблюдаемые дислокации только иногда могут быть отнесены к одному из этих модельных типов дислокаций, поскольку обычно содержат элементы и того и другого типа. Начнем рассмотрение с этих двух наглядных модельных дислокаций. Для простоты будем рассматривать простую кубическую решетку, хотя полученные результаты справедливы с незначительными изменениями и для решеток других типов.

Краевая дислокация представляет собой особое расположение атомов, изображенное для случая простой кубической решетки на рис 2.8. На этом рисунке изображена "лишняя половинка" плоскости, помещенная между двумя другими целыми соседними плоскостями типа 100. Атомы этих целых плоскостей восстановили связи друг с другом, при этом вблизи края вставленной полуплоскости возникли очень сильные деформации. Линию, проходящую через край лишней полуплоскости, называют линией краевой дислокации, а иногда просто краевой дислокацией. По этой причине дислокацию относят к линейным дефектам. Она проходит через места, находящиеся около границы лишней полуплоскости, с наиболее сильными искажениями кристаллической решетки, вызванными этой полуплоскостью. Область сильных искажений вблизи дислокации простирается на 2-3 периода кристаллической решетки. На больших расстояниях искажения малы и их можно описывать в рамках теории упругости.

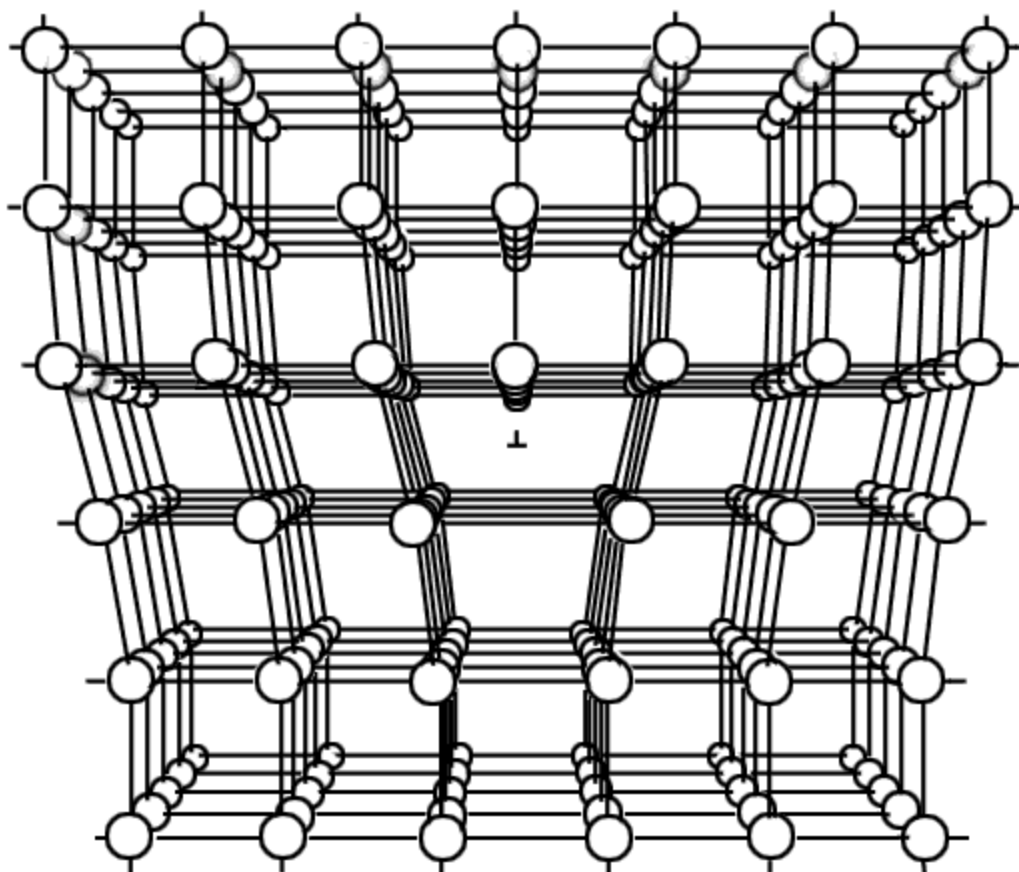


Рис. 2.8.

Схема расположения атомов вблизи краевой дислокации

Появляется краевая дислокация чаще всего при деформации кристалла по схеме, изображенной на рис. 2.9. Прежде всего, заметим, что появляются дислокации при сдвиговых деформациях в плоскостях, наиболее густо занятых атомами, называемых *плоскостями скольжения*. Мы будем рассматривать случай простой кубической решетки и ее плоскость типа $\{100\}$. Отметим, что для ОЦК решетки плоскостями скольжения являются $\{110\}$, $\{112\}$, и $\{123\}$, а для ГЦК решетки - $\{111\}$. Если на кристалл воздействовать силой \vec{F} (см. рис. 2.9 (1)), то плоскости (100) в месте, отмеченном пунктиром, могут "разорваться" (см. рис. 2.9 (2)), после чего верхняя половина плоскости 1 присоединится к нижней половине плоскости 2 (см. рис. 2.9 (3)), а верхняя половина плоскости 2 станет "лишней". Если продолжать воздействие на кристалл, то следующая плоскость разорвется, после чего верхняя половина плоскости 2 присоединится к нижней половине плоскости 3 (см. рис. 2.9 (4)), и так далее. Таким образом в кристалле появится лишняя полуплоскость (100), которая под воздействием силы \vec{F} сможет перемещаться вдоль плоскости скольжения за счет разрыва-соединения соседних половинок плоскостей. Заметим, что разрыв новой плоскости происходит как раз на линии дислокации, поскольку именно на ней искажения кристаллической решетки наибольшие (см. рис. 2.8).

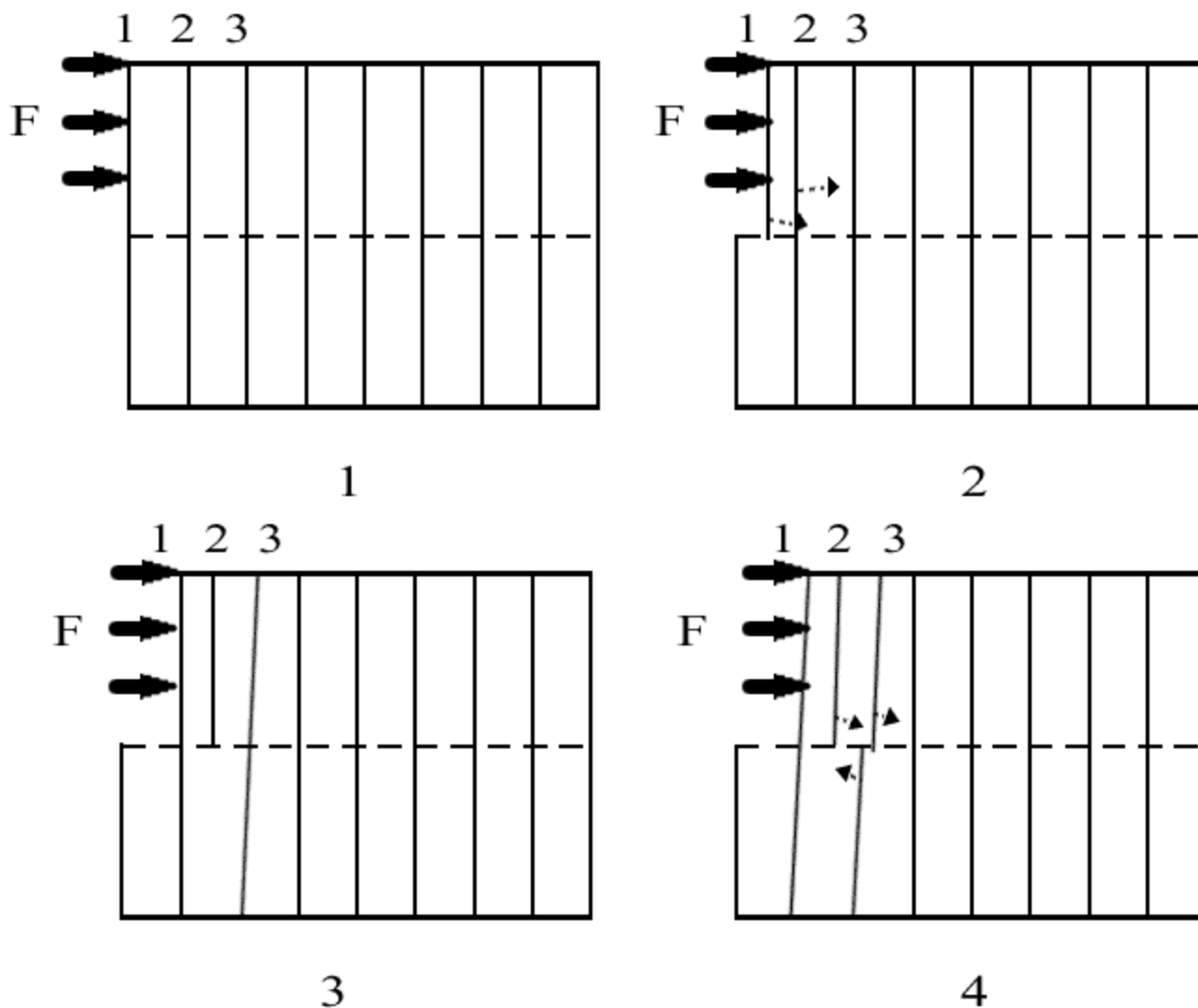


Рис. 2.9.

Схема зарождения и перемещения краевой дислокации при сдвиговой деформации кристалла

Винтовая дислокация. *Винтовая дислокация* представляет собой особое расположение атомов, изображенное на рис 2.10 для случая простой кубической решетки. На этом рисунке атомы, расположенные слева от половинки плоскости А, остались на месте, а атомы справа от нее смещены вниз на одно межплоскостное расстояние. При этом вблизи линии В возникли очень сильные деформации. Линию В, проходящую через границу полуплоскости А и оставшейся полуплоскости также называют винтовой дислокацией. На рис. 2.10 видно, что по горизонтальной, теперь уже деформированной плоскости типа (001) можно при повороте вокруг линии В подняться на 1 период кристаллической решетки, а совершив несколько оборотов вокруг линии В можно подняться на несколько периодов решетки. Подъем похож на движение по винтовой автодороге, отсюда и название винтовая дислокация. Заметим, что в случае винтовой дислокации все плоскости (010) перестали быть обособленными, они как бы слились в одну сложную винтовую поверхность с осью

В. Изображенная на рис. 2.10 поверхность обеспечивает подъем при движении против часовой стрелке вокруг линии В (если смотреть сверху). Может быть построена такая же поверхность, которая обеспечивает подъем при движении по часовой стрелке вокруг линии В (для этого надо было правую часть кристалла на рис. 2. 10 смещать не вниз, а вверх). Поэтому винтовые дислокации бывают правовинтовые и левовинтовые.

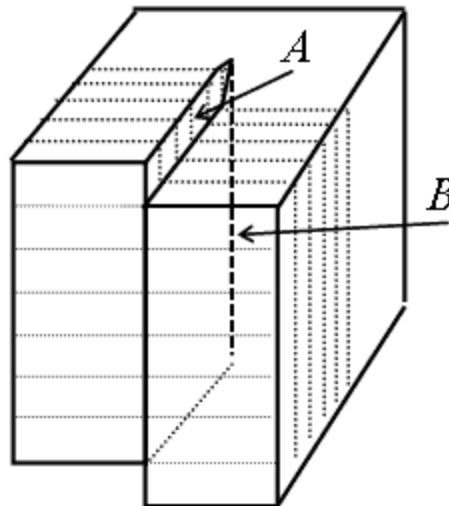


Рис. 2.10.

Схема расположения атомных плоскостей вблизи винтовой дислокации

Появляется винтовая дислокация при деформации кристалла по схеме, изображенной на рис. 2.11. Рассмотрим в случае простой кубической решетки плоскость типа $\{100\}$. Если на кристалл воздействовать силой \vec{F} (см. рис. 2.11 а), то плоскость А1 в месте, отмеченном стрелочкой, может "разорваться" по линии В, после чего нижняя и верхняя половинки плоскости А1 соединятся со сдвигом на 1 период решетки (см. рис. 2.11 б). Если продолжать воздействие на кристалл, то следующая плоскость разорвется, после чего нижняя и верхняя половинки плоскости А2 соединятся со сдвигом (см. рис. 2.11 в), и так далее. Таким образом в кристалле появится винтовая дислокация, которая при воздействии на кристалл будет перемещаться вдоль плоскости скольжения за счет разрыва-соединения соседних половинок плоскостей. Заметим, что разрыв новой плоскости происходит как раз на линии дислокации, поскольку именно на ней искажения кристаллической решетки наибольшие (см. рис. 2.11).

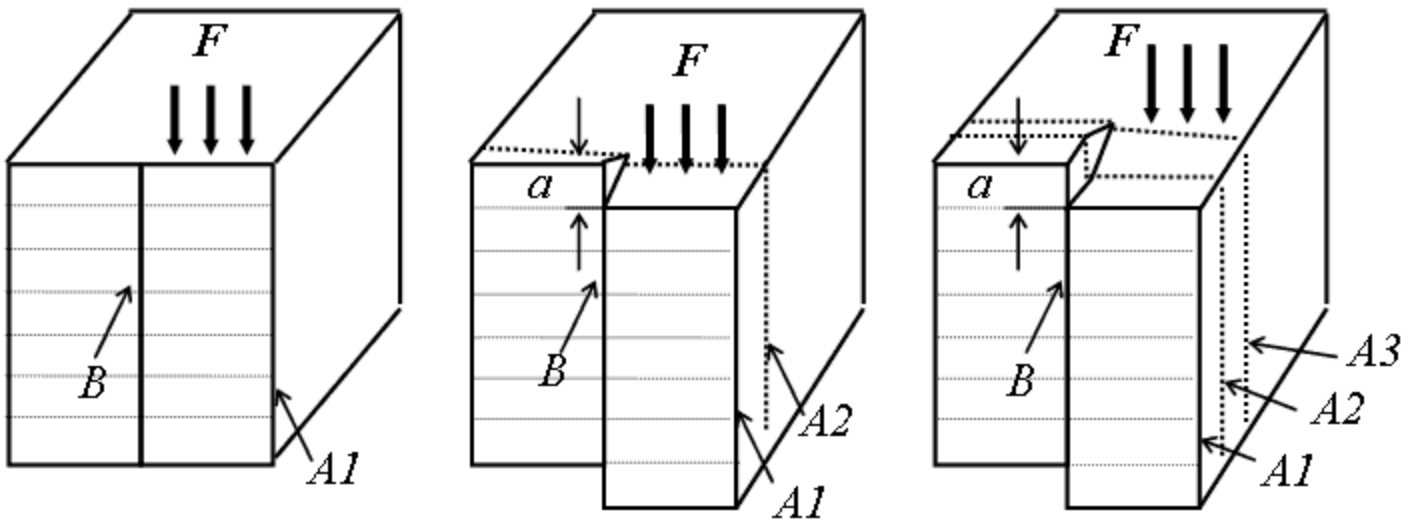


Рис. 2.11.

Схема зарождения и перемещения винтовой дислокации при сдвиговой деформации кристалла

Вектор Бюргерса. Винтовую дислокацию можно получить с помощью следующей модельной операции над кристаллом (см. рис. 2.12 а). На кристалле по плоскости (100) сделаем мысленный разрез по полуплоскости A , проходящей между узлами кристаллической решетки. Затем атомы, находящиеся справа от нее сместим вниз на одно межплоскостное расстояние и снова соединим атомы связями, проходящими через A . Вектор смещения "левой" части кристалла относительно "правой" является **вектором Бюргерса** \vec{b} винтовой дислокации B . Видно, что вектор Бюргерса винтовой дислокации параллелен этой дислокации.

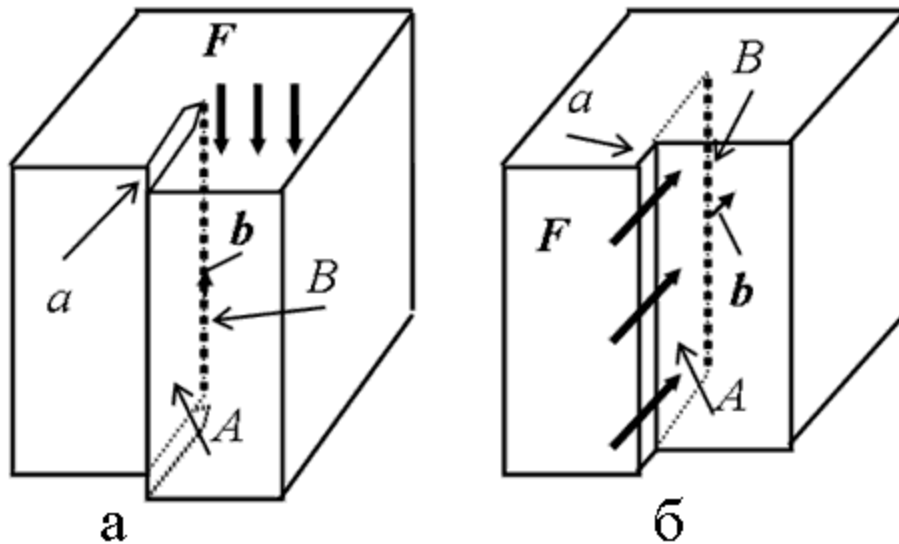


Рис. 2.12.

Схема смещения атомов кристалла в случае винтовой и краевой дислокации. \vec{b} - вектор Бюргерса

Аналогичным способом можно получить и краевую дислокацию (правда, отвечающую другой плоскости скольжения). Для этого "правую" часть кристалла надо сместить вдоль поверхности A "от нас" и срастить связи между всеми

атомами, кроме расположенных вдоль линии дислокации B (см. рис. 2.12 а). Вектор смещения этой части кристалла является вектором Бюргера краевой дислокации. Видно, что вектор Бюргера краевой дислокации перпендикулярен этой дислокации.

Можно получить и краевую дислокацию, отвечающую плоскости скольжения (010). Для этого правую половину кристалла надо сместить перпендикулярно поверхности A "направо" на один период и заполнить промежуток атомами, тогда получается краевая дислокация B (см. рис. 2.12). Вектор смещения этой части кристалла является вектором Бюргера краевой дислокации.

Дислокации смешанного типа. На рис. 2.13 приведен пример *криволинейной дислокации смешанного типа*, соединяющей точки A и B . Видно, что в точке A расположение атомов отвечает краевой, а в точке B - винтовой дислокации. Такая дислокация может быть получена сдвиговой неоднородной деформацией под действием силы \vec{F} в направлении \vec{b} (см. рис. 2.13), в результате которой только часть атомных связей в местах, отмеченных на рис. 2.13 штриховкой, разорвутся и соединятся со смещением на вектор \vec{b} . При продолжении воздействия дислокация A - B будет перемещаться, а заштрихованная площадь расширяться. Именно такие сложные дислокации смешанного типа обычно встречаются в кристаллах.

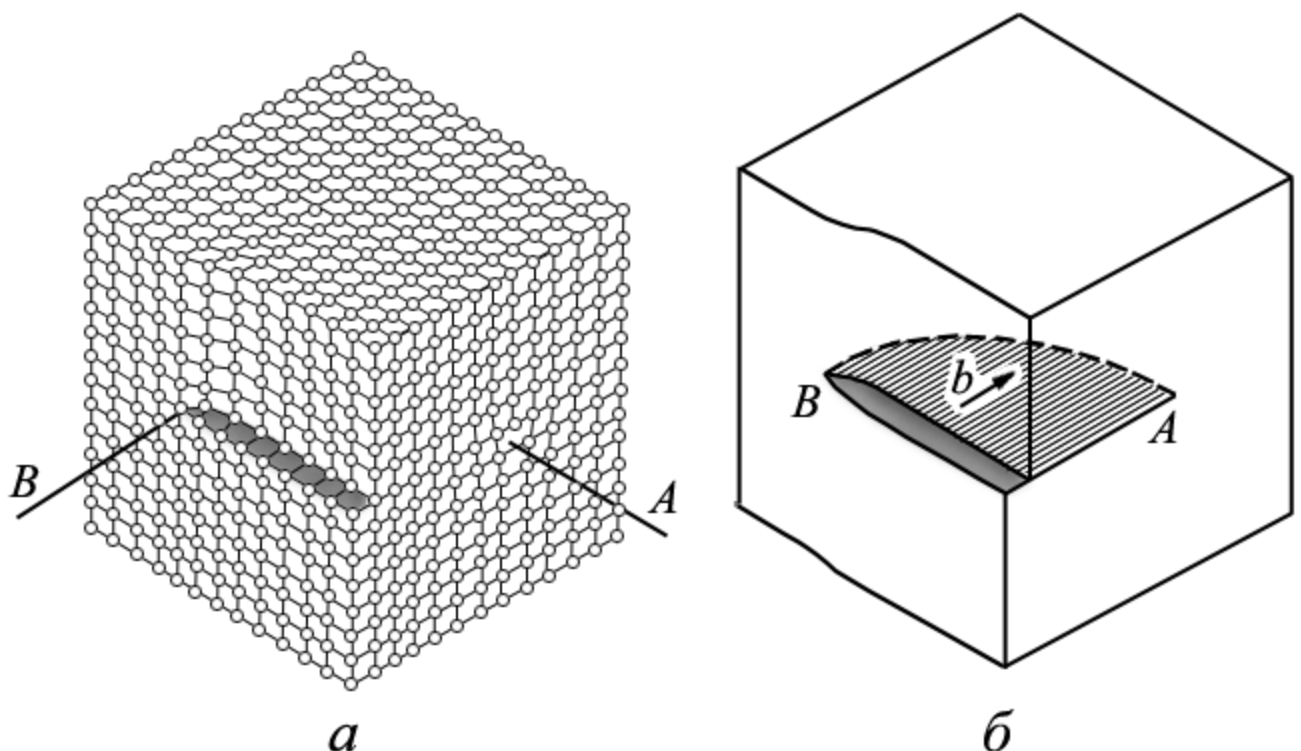


Рис. 2.13.

Криволинейная дислокация смешанного типа

Плотность дислокаций. Методы наблюдения дислокаций. Плотность дислокаций в кристаллах характеризуют числом дислокаций, пронизывающих единицу

поверхности, выбранной внутри кристалла, или же, что почти то же самое, суммарной длиной дислокаций в единице объема кристалла. Типичные значения плотности дислокаций и применяемые для данной плотности дислокаций методы их наблюдения приведены в табл. 2.2.

Таблица 2.2.

Типичные значения плотности дислокаций и методы их наблюдения.

Метод изучения дислокаций	Толщина образца, мкм	Ширина изображения дислокации, мкм	Максимальная плотность дислокаций на 1 см ²
Электронная микроскопия	10 ⁻⁰ -10 ⁻¹	10 ⁻²	10 ¹¹ -10 ¹²
Рентгеновская топография (на пропускание)	10 ² -10 ³	5	10 ⁴ -10 ⁵
Рентгеновская топография (на отражение)	2-50	2	10 ⁶ -10 ⁷
Оптическая микроскопия (по ямкам травления)	любая	0,3-0,5	10 ⁻⁶ -10 ⁻⁷

Наблюдать дислокации можно с помощью электронных микроскопов практически при любой их плотности, а в достаточно совершенных монокристаллах - и с помощью рентгеновской топографии [4-6] - метода основанного на измерении (фотографировании) интенсивности аномального прохождения рентгеновского излучения через совершенный кристалл (см. рис. 2.14) или же дифракционного отражения от совершенного монокристалла. Заметим, что методы наблюдения дислокаций "видят" не саму дислокацию, а искажения кристаллической решетки вблизи нее.

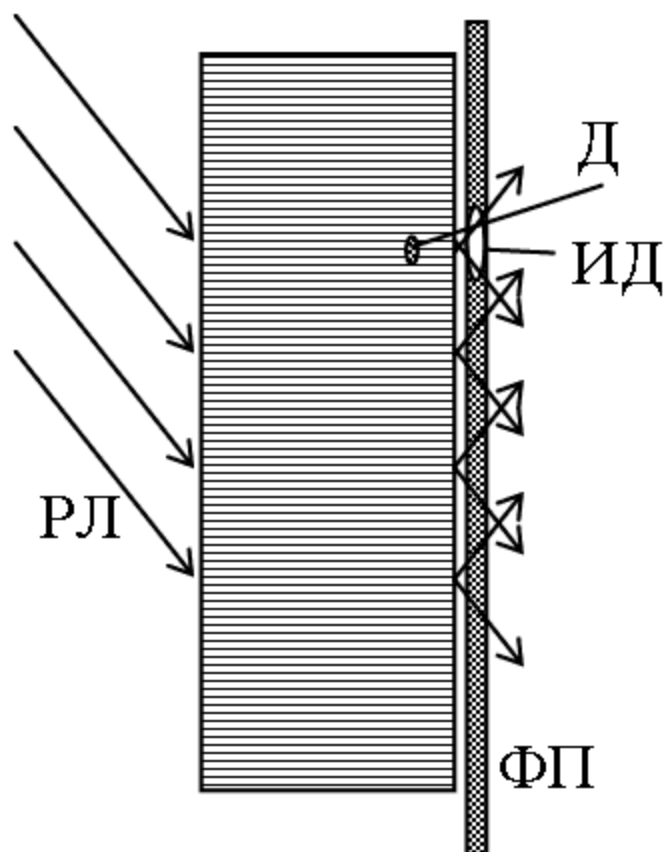


Рис. 2.14.

на получения изображения дислокации в монокристалле методом рентгеновской топографии (на прох

Иногда следы дислокаций удается наблюдать на поверхности хорошо отшлифованного и протравленного в специально подобранном химическом травителе кристалла по "ямкам травления". Метод основан на том, что травитель сильнее растворяет искаженные участки кристаллической решетки вблизи дислокации, поэтому в месте выхода дислокации на поверхность кристалла будет видна ямка. При использовании светового микроскопа следует учитывать, что предел его разрешения - до 0,5-1 мкм, значит "ямки травления", расположенные примерно на таком же расстоянии будут видны как отдельные, а при большей плотности дислокаций - будут неразличимы.

Энергия дислокаций. С дислокацией связана энергия деформации кристаллической решетки, которую можно вычислить, используя приближение сплошной среды для удаленных от дислокации участков кристалла и модель взаимодействующих атомов для малых расстояний от дислокации.

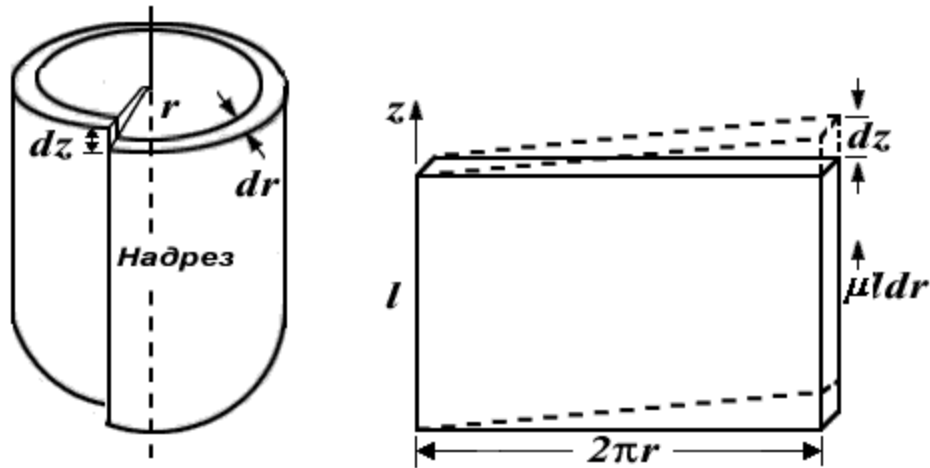


Рис. 2.15.

Картина деформации кристалла вблизи винтовой дислокации

Проще всего выполнить такой расчет для винтовой дислокации. На рис. 2.15 изображена картина упругих деформаций вблизи винтовой дислокации в предположении, что кристалл представляет собой сплошную изотропную среду. В таком случае пространство вокруг дислокации можно разбить на тонкие цилиндрические слои с внутренним радиусом r и внешним $r + dr$. Видно, что на полуплоскости каждый слой разрезан и соединен со сдвигом на вектор Бюргерса b . В таком случае в первом приближении каждый слой можно считать подвергнутым сдвиговой деформации с относительной деформацией $\varepsilon = b / 2\pi r$ (для большей наглядности каждый цилиндр можно "раскрутить", как показано на рис. 2.15 и оценить величину сдвиговой деформации по этому рисунку). Плотность энергии сдвиговой деформации может быть вычислена через относительную деформацию ε и модуль сдвига μ по формуле:

$$w = \mu \varepsilon^2 / 2 = (\mu / 2)(b / 2\pi r)^2 \quad (2.14)$$

Если эту формулу домножить на объем каждого цилиндра $dV = 2\pi r l dr$ и проинтегрировать по всем допустимым значениям r , то можно получить оценку энергии винтовой дислокации длиной l .

$$U = (b^2 l \mu / 4\pi) \ln(R_0 / r_0) \quad (2.15)$$

В этой формуле следует положить r_0 равным примерно периоду решетки, а R_0 - среднему расстоянию между дислокациями, равному 100-200 периодам решетки. Впрочем, большой точности здесь не требуется, так как отношение R_0 / r_0 находится под знаком логарифма и результат наш - оценочный. В этой формуле не учтена

энергия "ядра" дислокации - сильно искаженной области вблизи линии дислокации, что делается обычно численными методами. Подставив типичные значения: $b = 2,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$; $\mu = 10^{11} \text{ Н/м}^2$; $r_0 = 5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$; $R_0 = 200 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ в (2.14),

получим, что плотность энергии винтовой дислокации в расчете на единицу длины $U/l = 4 \cdot 10^{-9} \text{ Дж/м}$, а на одно межатомное расстояние (то есть на один атом) будет $U/b = 10^{-18} \text{ Дж/атом} = 6 \text{ эВ/атом}$. Это - очень большая величина, намного превосходящая энергию теплового движения атомов. Поэтому дислокация не может зародиться в результате теплового движения, для этого нужны неравновесные процессы, например деформация кристалла.

Взаимодействие дислокаций. Дислокация создает поля деформаций, которые могут воздействовать на другие дислокации. Так очевидно, что две дислокации, изображенные на рис. 2.16 (а), должны отталкиваться, а изображенные на рис. 2.16 (б) - притягиваться. Можно вычислить силу взаимодействия дислокации на единицу ее длины с полями механических напряжений, с другими дислокациями; однако эти вопросы, изложенные в [3], выходят за рамки учебника.

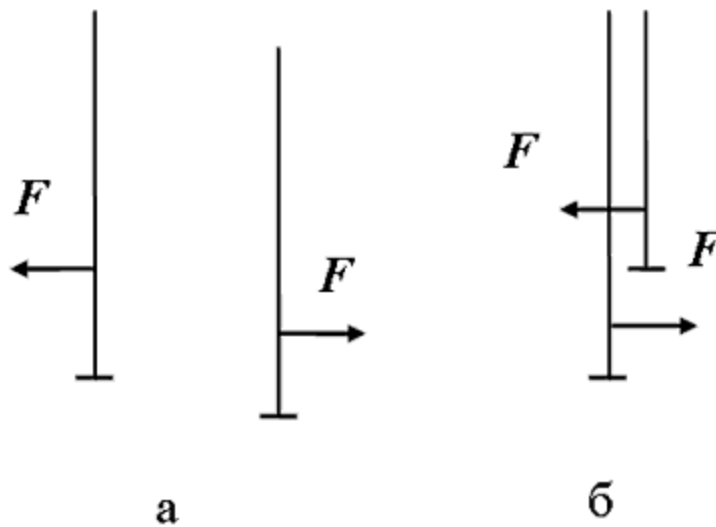


Рис. 2.16.

Расположение двух краевых дислокаций в случае их отталкивания (а) и притяжения (б)

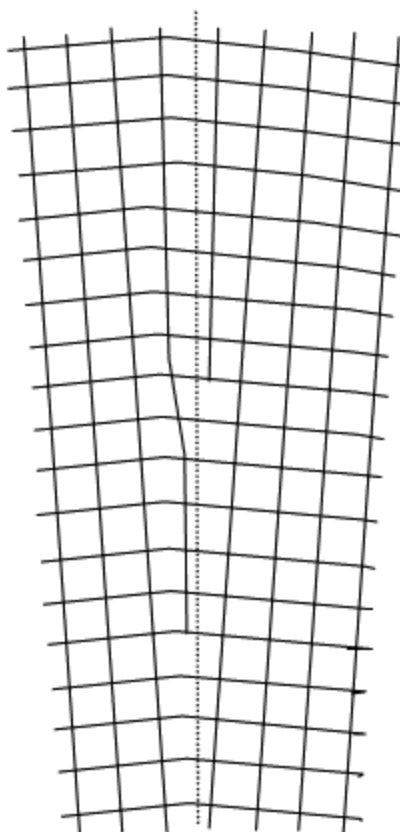


Рис. 2.17.

поверхности раздела (пунктирная линия) двух сросшихся монокристаллов со слегка разориентированными решетками

Дислокации, изображенные на рис. 2.16 (б) и 2.17, часто встречаются на границах двух сросшихся монокристалликов, кристаллические решетки которых слегка разориентированы. Расчеты показывают, что при таком расположении дислокаций минимизируется энергия единицы поверхности раздела двух кристалликов.

Взаимодействие дислокаций и точечных дефектов. Дислокация, особенно краевая, создает сильно сжатые и сильно растянутые участки кристаллической решетки (см. рис. 2.18). В растянутые места энергетически выгоднее переместиться крупным атомам примеси замещения, а в сжатые - мелким атомам примеси замещения. Атомам внедрения, особенно крупным, также выгоднее перемещаться в область растянутой кристаллической решетки вблизи дислокации. В таком случае вблизи дислокации образуется скопление примесей, называемое "шубой дислокации", которое уменьшает локальную деформацию вблизи дислокации и энергию дислокации. При пластической деформации сдвинуть такую дислокацию с места труднее, чем дислокацию без "шубы", поскольку в первом случае дислокация сместится на новое место, где ее энергия будет больше. Считают, что отдельные точечные дефекты и их скопления закрепляют дислокацию. В электронный микроскоп удается заметить появление крупных примесей вблизи дислокации.

Рассмотренный ниже при рассмотрении теории прочности "зуб текучести" связывают с отрывом дислокации от шубы, для чего требуется дополнительное усилие.

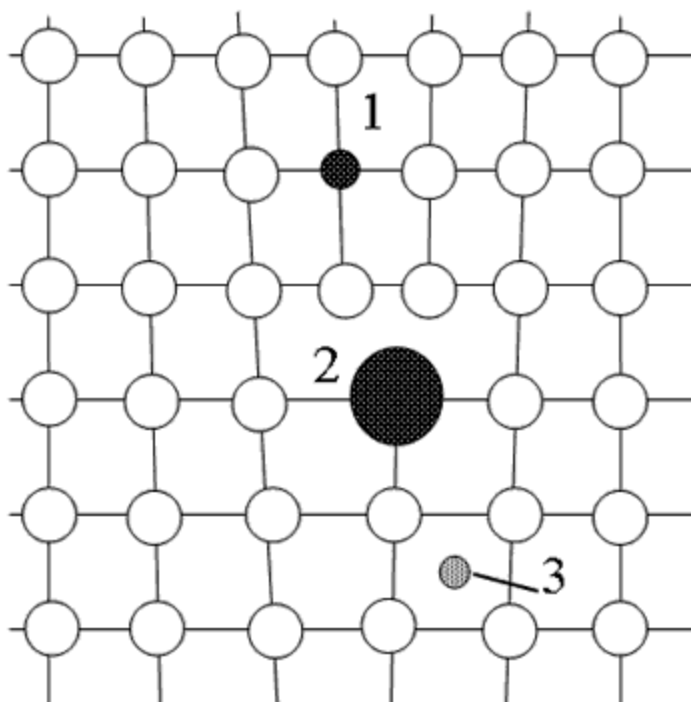


Рис. 2.18.

Разное расположение точечных дефектов вблизи дислокации: более мелкий атом - примесь замещения (1), примесь замещения (2), атом внедрения (3)

Участки кристалла с растянутой кристаллической решеткой вблизи дислокации являются своеобразными каналами облегченной диффузии. Известно, что диффузия в сильно деформированных материалах, в которых плотность дислокаций больше, происходит быстрее, чем в недеформированных.

Точечные дефекты часто исчезают, попав на край "лишней" полуплоскости, создающей дислокацию (см. рис. 2.18); при этом изменяется форма края этой "полуплоскости". Также считают, что дислокации при движении способны порождать точечные дефекты, особенно вакансии, появляющиеся вблизи края лишней плоскости (см. рис. 2.18); при этом изменяется форма края этой "полуплоскости". Линия дислокации в таких процессах (называемых переползанием дислокации) смещается (переползает) на новое место.

Пластическая деформация кристалла и дислокации. Чтобы придать детали заданные размер и форму, многие материалы в процессе технологической обработки необратимо деформируют. Такие необратимые деформации наблюдаются при сильных деформациях детали, когда не выполняется закон Гука, а напряжение в детали сложным нелинейным образом зависит от относительной деформации.

Рассмотрим процесс растяжения поликристаллического образца. Обычно образец имеет форму длинного цилиндра с утолщениями на концах - для закрепления образца. Этот процесс характеризуют: а) механическим напряжением σ , равным отношению приложенной силы к площади сечения образца, и б) относительным удлинением ε образца:

$$\varepsilon = \Delta l / l = (l - l_0) / l_0, \quad (2.16)$$

где l - длина образца при воздействии напряжения σ , а l_0 - первоначальная длина образца. На рис. 2.19 изображена типичная зависимость механического напряжения σ от относительного удлинения ε при растяжении образца. Кривая имеет 3 характерных участка. Участок 0-1 соответствует упругим обратимым деформациям, когда выполняется *закон Гука*. Участок 1-2 соответствует необратимым *пластическим деформациям*; если в точке А прекратить деформацию (сделать $\sigma=0$), то состояние образца станет соответствовать точке В. Участок 2-3 соответствует разрушению образца. Часто вблизи точки 1 кривая имеет "*зуб текучести*" - пунктирная кривая на рис. 2.14. Его происхождение связано с точечными дефектами, которые скапливаются вблизи дислокаций, в таких местах, что уменьшаются деформации и плотность энергии вблизи дислокации, из-за чего дислокацию труднее сдвинуть при пластической деформации на новое место, где ее энергия будет больше.

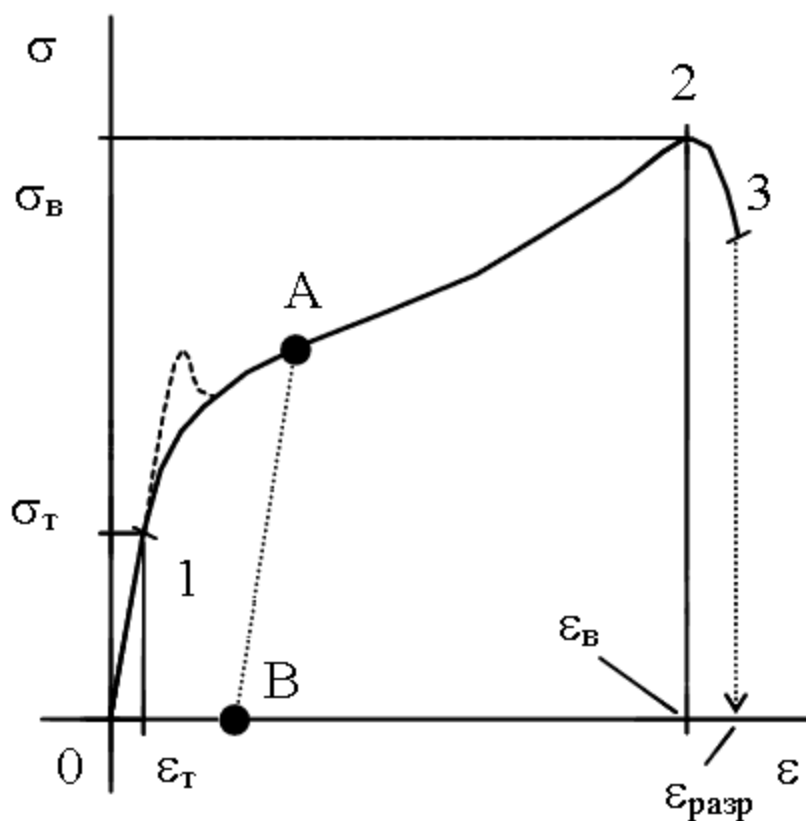


Рис. 2.19.

Зависимость напряжения σ от относительного удлинения ε при растяжении образца

Величину σ , отвечающую точке 1, называют *пределом текучести* σ_T , а отвечающую точке 2, называют *пределом прочности* σ_B .

Попытки рассчитать предел текучести без учета дислокаций приводили к завышенным на 2-4 порядка значениям. Попробуем и мы рассчитать предел текучести для модельной кристаллической решетки при сдвиговой деформации. Для этого остановимся на механизме пластической деформации.

Эксперименты показывают, что пластическая деформация происходит в первую очередь вдоль так называемых *плоскостей скольжения* (атомных плоскостей, наиболее густо заселенных атомами. Пример такой плоскости приведен на рис. 2.20. Если к верхней плоскости приложить тангенциальное усилие, то атомы сместятся, и появится сила упругости, равная приложенной. С этой силой будет связана энергия деформации, которая будет возрастать до тех пор, пока атомы верхней плоскости не окажутся "над" атомами нижней плоскости - в точке *B* на рис. 2.20. При дальнейшем смещении атомам будет уже выгоднее "спуститься" в положения *C*. Таким образом верхняя плоскость может проскользнуть на новое положение. Следы таких проскальзываний хорошо видны на поверхности тщательно отшлифованных монокристаллов в виде "ступенек" после пластической деформации.

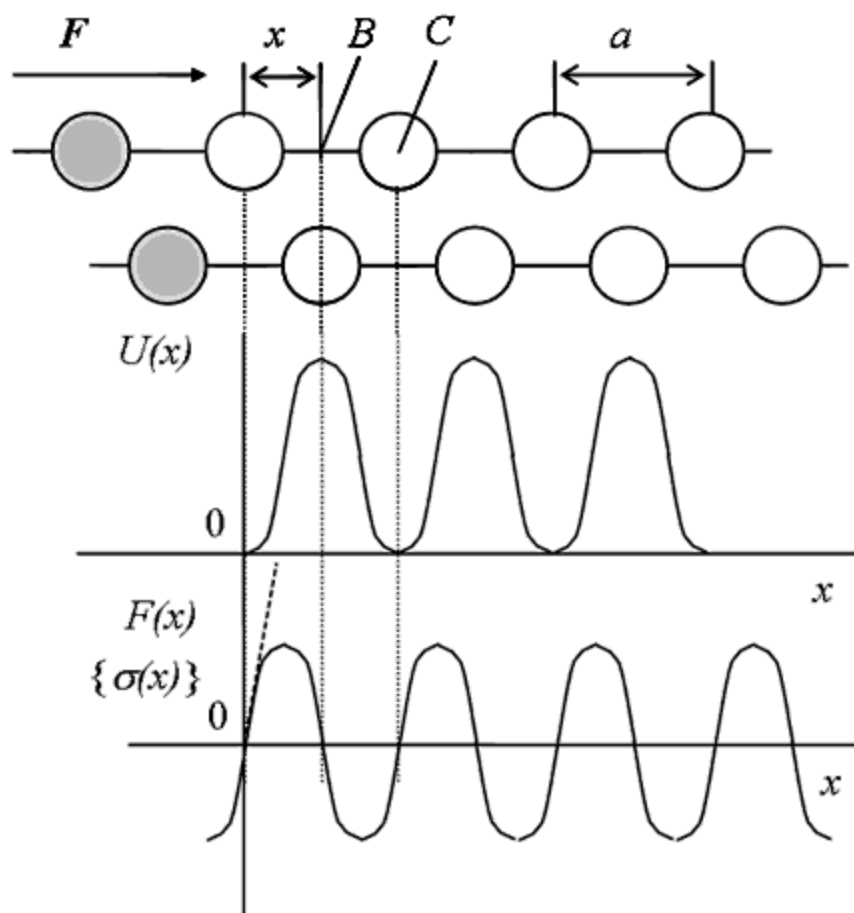


Рис. 2.20.

Схема деформации кристалла за счет скольжения верхней плоскости атомов относительно нижней

Можно оценить усилие, необходимое для того, чтобы сдвинуть верхнюю плоскость относительно нижней (см. рис. 2.20). Для этого воспользуемся связью механического напряжения и связанной с ней потенциальной энергии. На рис. 2.20. построена схематическая зависимость этой силы и связанной с ней потенциальной энергии от координаты x . Зависимость $\sigma_c(x)$ можно приближенно описать синусоидой с периодом a и амплитудой $\mu a / (2\pi d)$, где d - межплоскостное расстояние. Величину амплитуды этой синусоиды мы вычислили, воспользовавшись тем, что в области малых x тангенс наклона синусоиды (см. рис. 2.20) должен быть равен $\mu E = \mu(x/d)$. Тогда для $\sigma_c(x)$ получается формула:

$$\sigma_c(x) = \{\mu a / (2\pi d)\} \sin(2\pi x / a) \quad (2.17)$$

Величина $\sigma_c(x)$ примет максимальное значение при $x = a/4$. Расчет по формуле (2.17) дает максимальное значение $\sigma_c(x)$, которое на 2-4 порядка больше типичных наблюдаемых на опыте. Причиной такого сильного расхождения является предположение об одновременном смещении всех атомов верхней плоскости

относительно нижней (см. рис. 2.20). Однако смещение верхней полуплоскости на 1 межатомное расстояние может произойти за счет движения дислокации, как это было показано на рис. 2.9. Для такого смещения потребуется много меньшее усилие, поскольку теперь при смещении происходит не одновременный разрыв всех атомных связей, а только связей вблизи дислокации.

Очень уместны следующие механические аналогии. Очень трудно порвать лист бумаги сразу (например, когда он скручен в трубу и ее разрывают вдоль оси трубы); разорвать же этот лист "как обычно" очень легко, поскольку в первом случае приходится разорвать все связи между частицами листа сразу, а во втором - постепенно. Также очень трудно слегка сместить ковровую дорожку, лежащую на полу, сразу, "потянув ее за конец", поскольку этому противодействует сила трения всей дорожки о пол; сместить же эту дорожку при наличии складки путем перемещения этой складки очень легко, так как при этом перемещается с трением лишь малый ее участок.

Дислокационный механизм пластической деформации объясняет наблюдаемые на опыте значения предела текучести σ_T и σ_B , а также и возрастание зависимости $\sigma(\epsilon)$ на участке 1-2 на рис. 2.19. При деформации сначала перемещаются менее сильно закрепленные дислокации, затем - более закрепленные, также при деформации увеличивается число дислокаций и прочих дефектов (см. ниже).

Предел текучести материала сильно зависит от плотности дислокаций в нем. На рис. 2.21 приведена такая зависимость. Видно, что предел текучести σ_T оказывается больше при очень малых значениях плотности дислокаций ρ_D и, наоборот, при больших плотностях дислокаций ρ_D . Увеличение σ_T при больших ρ_D связывают с взаимодействием дислокаций друг с другом и с другими дефектами кристаллической решетки.

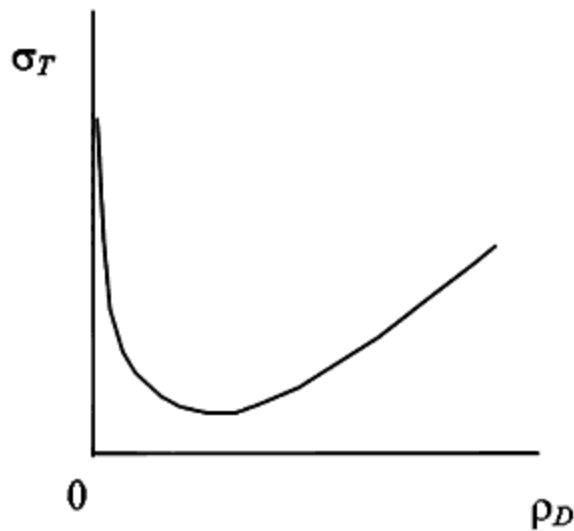


Рис. 2.21.

Схематическая зависимость предела текучести от плотности дислокаций

Пути увеличения прочности материалов. В настоящее время используют ряд способов увеличения прочности материалов, позволяющие достигать предела прочности порядка 0.01μ ; большинство из них связаны с введением дополнительных препятствий движению дислокаций. Такими препятствиями являются различные дефекты: 1) выделения другой фазы (см. [разд. 2.3](#)); 2) точечные дефекты и их скопления (в частности, рассмотренная выше "шуба дислокации"); 3) большие количества дислокаций, тормозящие движение дислокаций за счет взаимодействия друг с другом; 4) ближний порядок в расположении атомов, этот вопрос рассмотрен в [1], его следует и здесь обсудить особо.

Во многих сплавах наблюдается явление, называемое *ближним порядком*, когда атом одного сорта стремится окружить себя преимущественно атомами другого сорта, при этом достигается меньшая энергия сплава. При движении дислокации разрываются более энергетически выгодные, а формируются менее выгодные связи между атомами. На это требуется большая энергия, что приводит к увеличению усилий, необходимых для смещения дислокации и, в конечном счете, к увеличению прочности материала.

Перечисленные способы хотя и значительно увеличивают прочность, но и, как правило, сильно уменьшают пластичность материала.

Прочность кристаллов может быть больше и при особо малой плотности дислокаций, когда затруднена деформация кристалла по дислокационному механизму.

Происхождение дислокаций. Как уже отмечалось, дислокации появляются главным образом в результате пластической деформации кристаллов. Одним из

источников дислокаций при пластической деформации считают источник Франка-Рида, схематически изображенный на рис. 2.22. Пусть дислокация 1 закреплена в точках A и B . Такими точками могут быть скопления атомов иного размера, область другой фазы и т.п. При приложении внешнего механического напряжения дислокация перемещается, последовательно занимая положения 2, 3, 4. Наконец в положении 5 левая и правая полупетли дислокации схлопываются, образуя дислокационную петлю 6 округлой формы, которая под влиянием механического напряжения примет форму 1, а далее процесс повторится и зародится следующая дислокация и так далее.

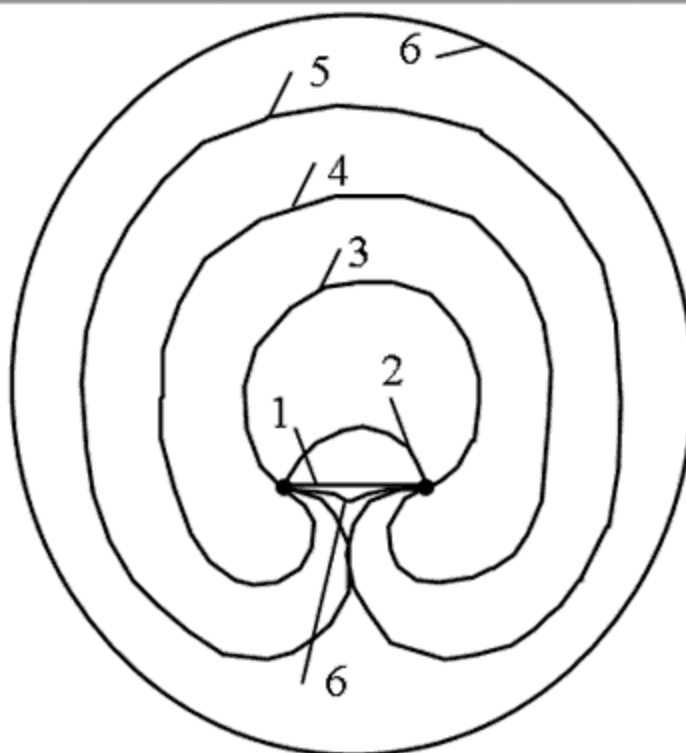


Рис. 2.22.
Источник дислокаций Франка-Рида

Также замкнутые дислокации появляются при образовании дископодобных скоплений вакансий (см. рис. 2.23) при охлаждении кристалла.

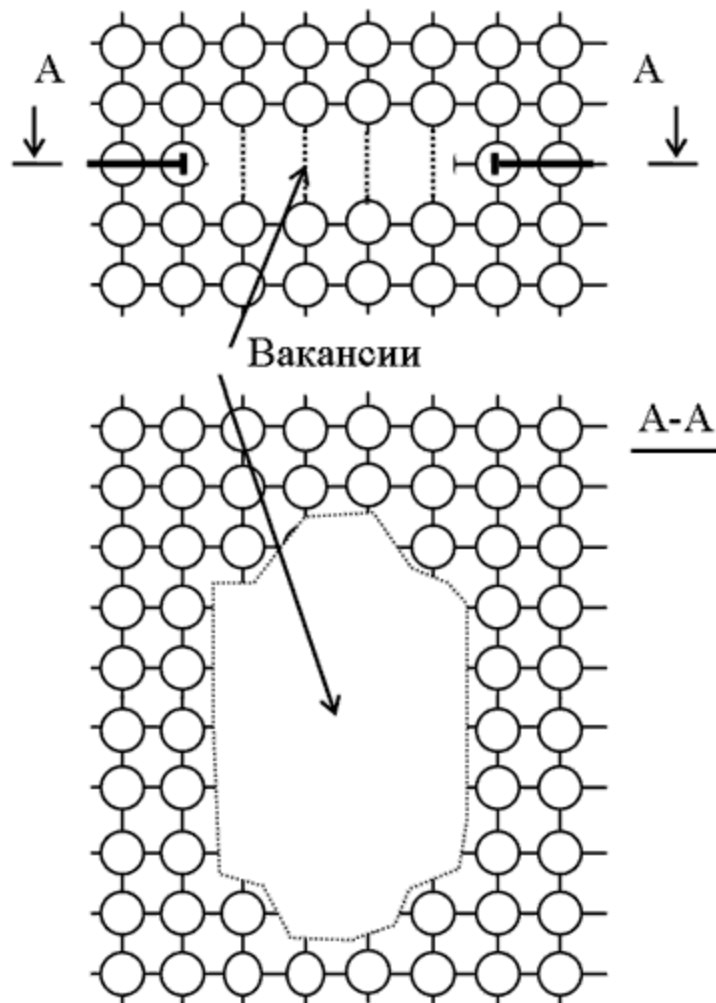


Рис. 2.23.

Дископодобные скопления вакансий эквивалентные дислокации смешанного типа в виде замкнутой линии

Дислокации и рост кристаллов. Винтовые дислокации облегчают рост кристаллов (как из расплавов, так растворов и паров), поскольку ступенька на поверхности кристалла (см. рис. 2.24), связанная с винтовой дислокацией, облегчает осаждение атомов на поверхность кристаллов в местах обозначенных на рис. 2.24 буквой *A*. Атомы прикрепляются под ступенькой большим числом связей, чем на гладкой поверхности кристаллов.

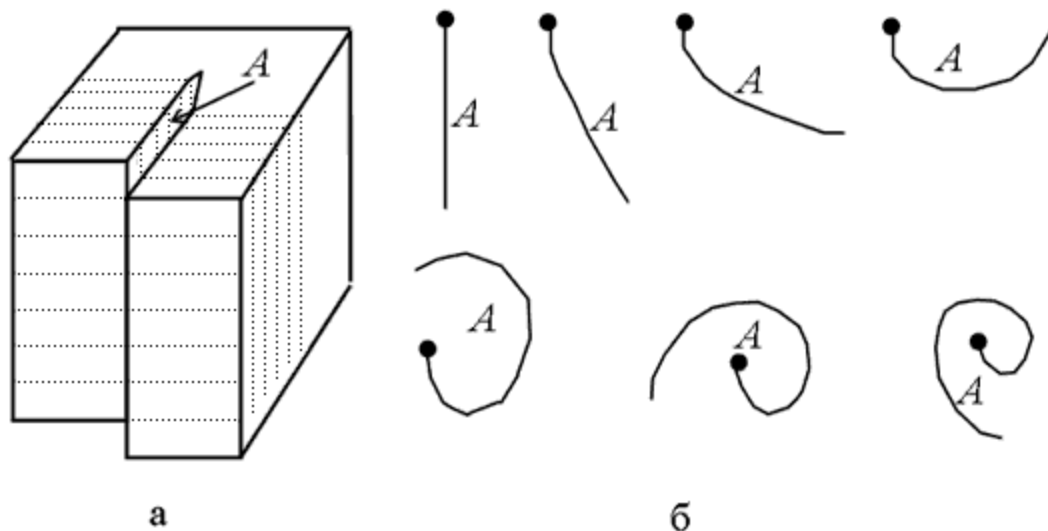


Рис. 2.24.

ция на поверхности кристалла, облегчающая его рост (а) и последовательное изменение формы дислокации на поверхность кристалла преимущественно в области под ступенькой - А

На поверхности достаточно совершенных кристаллов часто наблюдают следы подобных ступенек.

Задачи к [разделу 2.2](#).

Задача 2.3. Изобразить пару дислокаций которая эквивалентна: а) прямой линии вакансий; б) дискообразному однослойному скоплению вакансий.

2.3. Поверхностные и объемные дефекты.

Поверхностные и объемные дефекты - сравнительно крупные дефекты, состоящие из большого числа атомов. В случае **поверхностных дефектов** область кристалла с сильно нарушенным периодическим расположением атомов имеет форму некоторой поверхности, толщина этой области в направлении нормали к поверхности составляет 1-2 межплоскостных расстояния. В случае **объемных дефектов** область кристалла с нарушенным периодическим расположением атомов имеет форму некоторого тела, например эллипсоида, все размеры которого соответствуют нескольким межатомным расстояниям.

Поверхностные дефекты. Поверхность кристалла является самым очевидным примером поверхностного дефекта. Известно, что вблизи поверхности кристалла нарушается в некоторой степени периодическое расположение атомов. Из-за этого поверхностный слой находится в напряженном состоянии и обладает некоторой поверхностной энергией, подобно тому как и поверхность жидкости обладает энергией поверхностного натяжения. Стремление кристалла как любой системы

иметь минимум энергии приводит к минимальной поверхности кристалла. Отчасти поэтому кристаллы имеют форму выпуклых многогранников.

Однако поверхностные дефекты встречаются и внутри кристалла. Это связано с тем, что большинство реальных кристаллов формируются одновременно из нескольких центров кристаллизации и поэтому состоят из зерен с близкой ориентацией кристаллических решеток. На границе раздела этих зерен неизбежно нарушается периодическое расположение атомов (см. рис. 2.17). Такие границы называют малоугловыми.

Существуют и другой тип границ - границы между кристаллическими зернами в поликристаллическом материале. В этом случае разориентировка кристаллических решеток соседних зерен бывает произвольной.

Границы зерен кристалла с нарушенной кристаллической решеткой находятся обычно в напряженном состоянии. Поэтому именно вблизи границ зерен кристалла под действием внешних, дополнительных механических напряжений и происходит чаще всего разлом кристалла.

Вдоль границ зерен быстрее проходит диффузия атомов (так называемая *межзеренная диффузия*), и, в частности, атомов газов, способных вызывать нежелательные химические реакции с атомами кристалла. Из-за этого ухудшается коррозионная стойкость изделий из кристаллических веществ. Продукты этих реакций (например оксиды, нитриды и др.) будут дополнительно искажать кристаллическую решетку вблизи границ зерен, из-за чего неизбежно повысится вероятность разлома кристалла вдоль границ его зерен и в целом его хрупкость.

Существуют несколько способов уменьшения отрицательного влияния рассмотренных выше поверхностных дефектов на механические и коррозионные свойства кристаллов.

Первый, самый распространенный способ - это выдержка кристалла при температуре примерно в 2 раза меньшей температуры плавления. В процессе такой выдержки происходит миграция атомов, и напряжения вблизи границы частично уменьшаются, из-за чего и несколько затрудняется диффузия вдоль границ и улучшается коррозионная стойкость кристалла.

Второй, менее распространенный и дорогостоящий способ - использование монокристаллических материалов с малыми углами разориентировки соседних зерен. Его применяют, в частности, при производстве лопаток газовых турбин. Монокристаллические лопатки, в которых сведена к минимуму межзеренная

диффузия, служат дольше и при более высоких температурах, чем такие же лопатки из поликристаллических материалов.

Границы зерен, как и другие дефекты, оказывают влияние на теплопроводность и электросопротивление, поскольку на них происходит дополнительное рассеяние переносящих энергию фононов и переносящих энергию и заряд электронов. Особенно сильное влияние поверхностных дефектов на теплопроводность и электросопротивление наблюдается при низких температурах, когда длины свободного пробега фононов и электронов оказываются сопоставимыми с размерами кристаллических зерен (см. главы 3 и 4).

Объемные дефекты. К объемным дефектам относят микровключения других фаз, поры и трещины. Последние два типа дефектов - крайне нежелательны для материала, поскольку искажают практически все его физические свойства, причем наиболее значительно ухудшают прочность и пластичность изделий.

Микровключения других фаз широко используют для улучшения прочности материала. В таком случае специально создают структуру подобную железобетону, состоящую из вещества основной фазы и упрочняющей фазы. Наилучшие результаты получаются, если кристаллические решетки обеих фаз "удачно стыкуются" вдоль некоторых плоскостей. Примерами могут служить сплавы алюминия с медью и алюминия с литием.

В сплавах алюминий-медь (широко известных как дюралюминий), содержащих порядка одного процента меди, в процессе выдержки при температуре 200 С атомы меди группируются в виде дисковых тонких, толщиной 1-2 атома, скоплений. Формируется структура, состоящая из кристаллической решетки алюминия, в которой в местах дисковых скоплений атомы алюминия заменены на атомы меди. Прочность такого материала оказывается значительно выше, чем у чистого алюминия, поскольку в такой структуре движение дислокаций сильно затруднено дискообразными скоплениями атомов меди. Такие сплавы (в частности, дюралюминий) широко используются в авиа и ракетостроении как легкий и достаточно прочный материал.

В сплавах алюминий-литий, содержащих порядка трех процентов лития, в процессе выдержки при температуре 200 С атомы лития и алюминия группируются в виде округлых скоплений, размером в 50-500 межатомных расстояний, имеющих такую же кристаллическую решетку, как и алюминий (более того, решетки обеих областей являются как бы продолжением друг друга), но несколько меньший параметр кристаллической решетки. Сплав состоит из кристаллической решетки

алюминия, в которую вкраплены округлые области фазы, обогащенной литием, кристаллическая решетка которых слегка деформирована кристаллической решеткой алюминия. Прочность такого материала оказывается значительно выше, чем у чистого алюминия, поскольку в такой структуре движение дислокаций сильно затруднено округлыми областями другой фазы. Сплавы алюминий-литий широко используются в авиа и ракетостроении как легкий и достаточно прочный материал.

В настоящее время найдены пути управления формой и размерами областей выделяющихся объемных дефектов путем проведения специальных термообработок за счет использования энергии упругого взаимодействия кристаллических решеток областей фаз, внешнего магнитного поля во время проведения термообработок и некоторых других факторов.

Подробно рассмотренные в [разд. 5.5](#) материалы для постоянных магнитов на основе сплавов $Fe - Cr - Co$ и $Fe - Ni - Al$ являются примерами сплавов, в которых специально создается структура из областей ферромагнитной фазы определенного размера и вытянутой формы, окруженной прослойками парамагнитной фазы.

Выделения другой фазы, которые можно рассматривать как объемные дефекты в материале и которые радикально изменяют его физические свойства, очень широко используются при создании новых материалов с заданными наборами физических свойств