



ЛЕКЦИЯ 1. СВЯЗЬ МЕЖДУ СТРОЕНИЕМ И СВОЙСТВАМИ МАТЕРИАЛОВ

Дефекты кристаллического строения

Дефекты кристаллической решётки

Три причины отсутствия идеальных кристаллов:

- Атомы вещества находятся в непрерывном тепловом колебательном движении;
- Нет идеально чистых веществ;
- У монокристаллов имеется поверхность, у поликристаллов – границы зёрен.

Дефекты решётки классифицируют по размерному признаку:

- Точечные (нульмерные);
- Линейные (одномерные);
- Поверхностные (двумерные);
- Объемные (трехмерные).

Классификация дефектов кристаллического строения



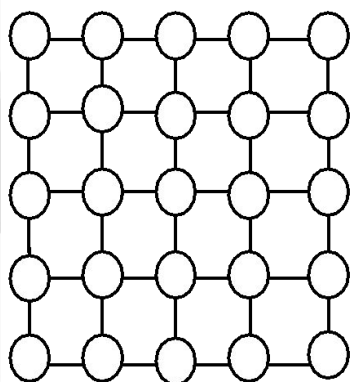
Равновесными называются дефекты, находящиеся в термодинамическом равновесии со структурой. К ним относятся точечные дефекты.

Неравновесными называются дефекты, не находящиеся в равновесии со структурой и имеющие вследствие этого высокие значения энергии образования. К ним относятся дислокации, поверхностные и объемные дефекты.

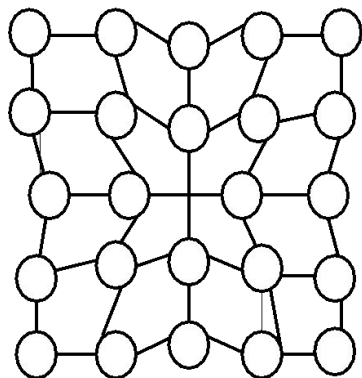
Точечный дефект — это нарушение кристаллической структуры, размеры которого во всех трех измерениях сравнимы с одним или несколькими (немногими!) междоузлиями

Точечные дефекты

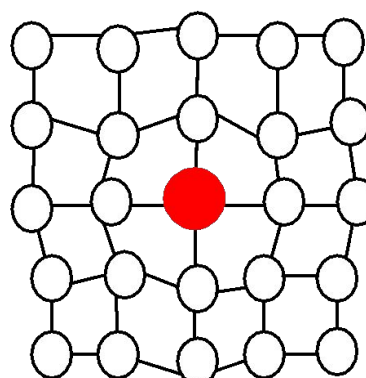
Одним из распространенных несовершенств кристаллического строения является наличие точечных дефектов: *вакансий, дислоцированных атомов и примесных атомов.*



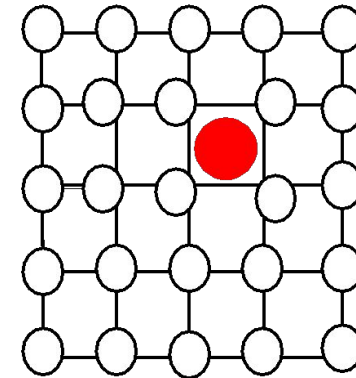
а



б



в



г

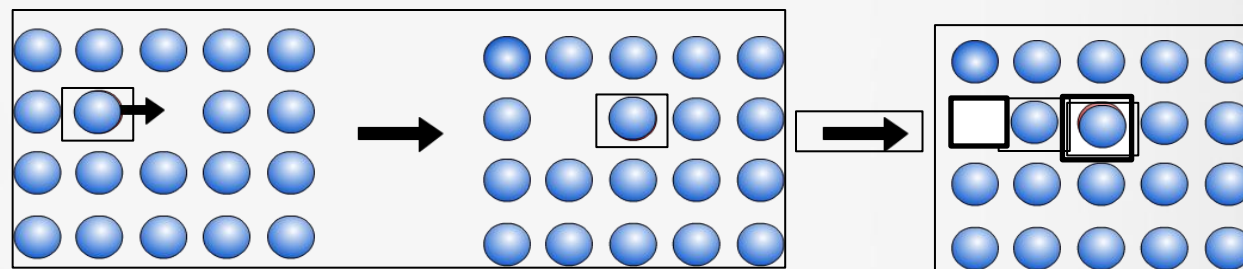
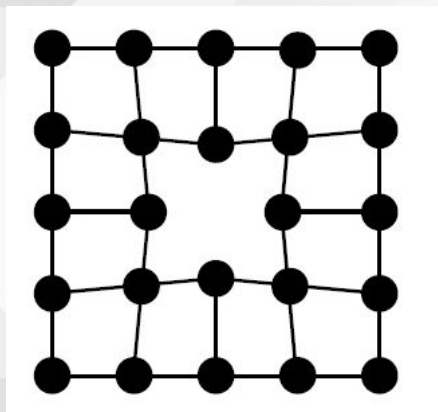
а – идеальный кристалл, б – вакансия, в – примесный атом,
г - дислоцированный атом

Вакансии (точечные

дефекты)

Вакансии - узлы кристаллической решётки, в которых отсутствуют атомы.

Вакансии, меняясь местами с одним из соседних атомов, могут легко мигрировать по кристаллу.



При выходе на свободные поверхности кристаллов или на границы зерен поликристаллов вакансии исчезают.

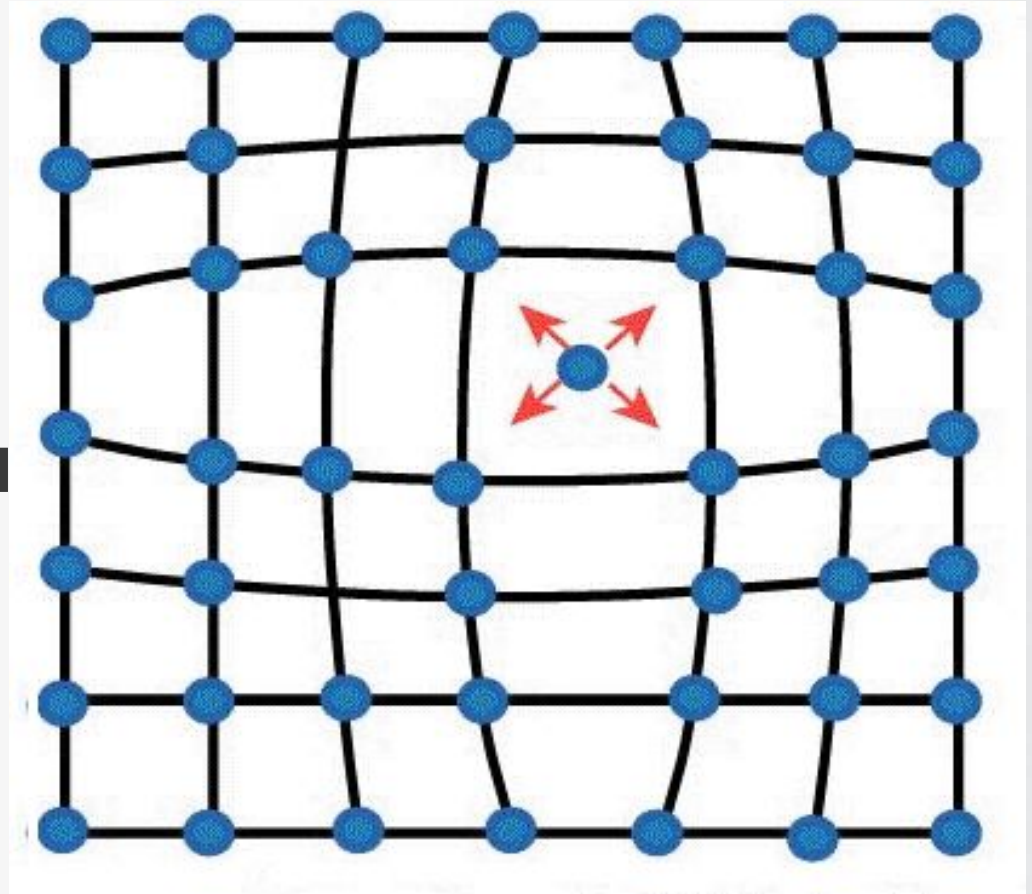
Эти же свободные поверхности и границы зерен являются местами зарождения вакансий.

Вакансия образуется при переходе атомов с поверхности в окружающую среду или из узлов решетки на поверхность (границы зерен, пустоты, трещины и т. д.), в результате пластической деформации, при бомбардировке тела атомами или частицами высоких энергий.

Концентрация вакансий в значительной степени определяется температурой тела. Одиночные вакансии могут встречаться и объединяться в дивакансии. Скопление многих вакансий может привести к образованию *пор* и *пустот*.

Точечные дефекты

Межузельный
атом
(Дислоцированны
й
атом)



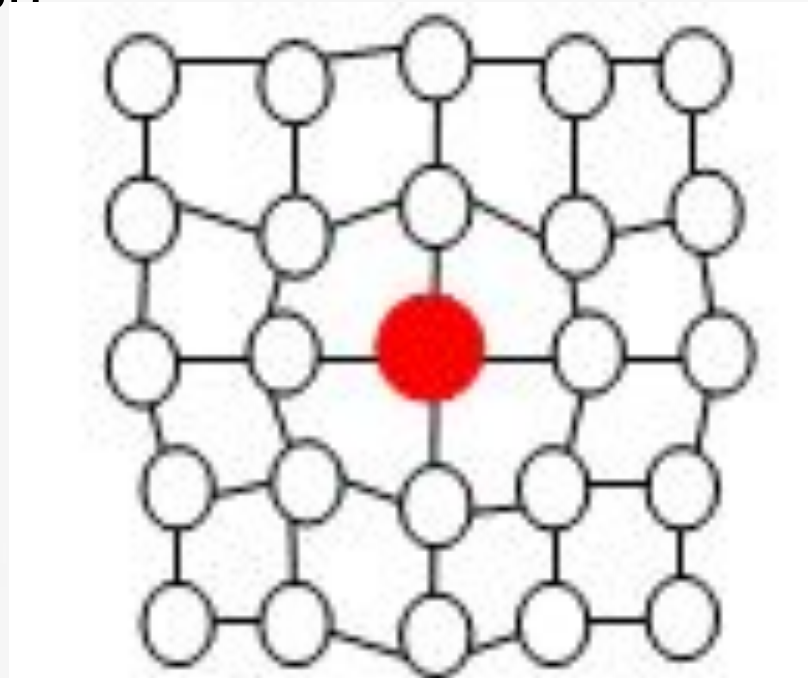
Дислоцированный атом – это атом, вышедший из узла решетки и занявший место в междоузлии.

Точечные дефекты вызывают незначительные искажения решетки, что может привести к изменению свойств тела (электропроводность, магнитные свойства), их наличие способствует процессам диффузии и протеканию фазовых превращений в твердом состоянии. При перемещении по материалу дефекты могут взаимодействовать.

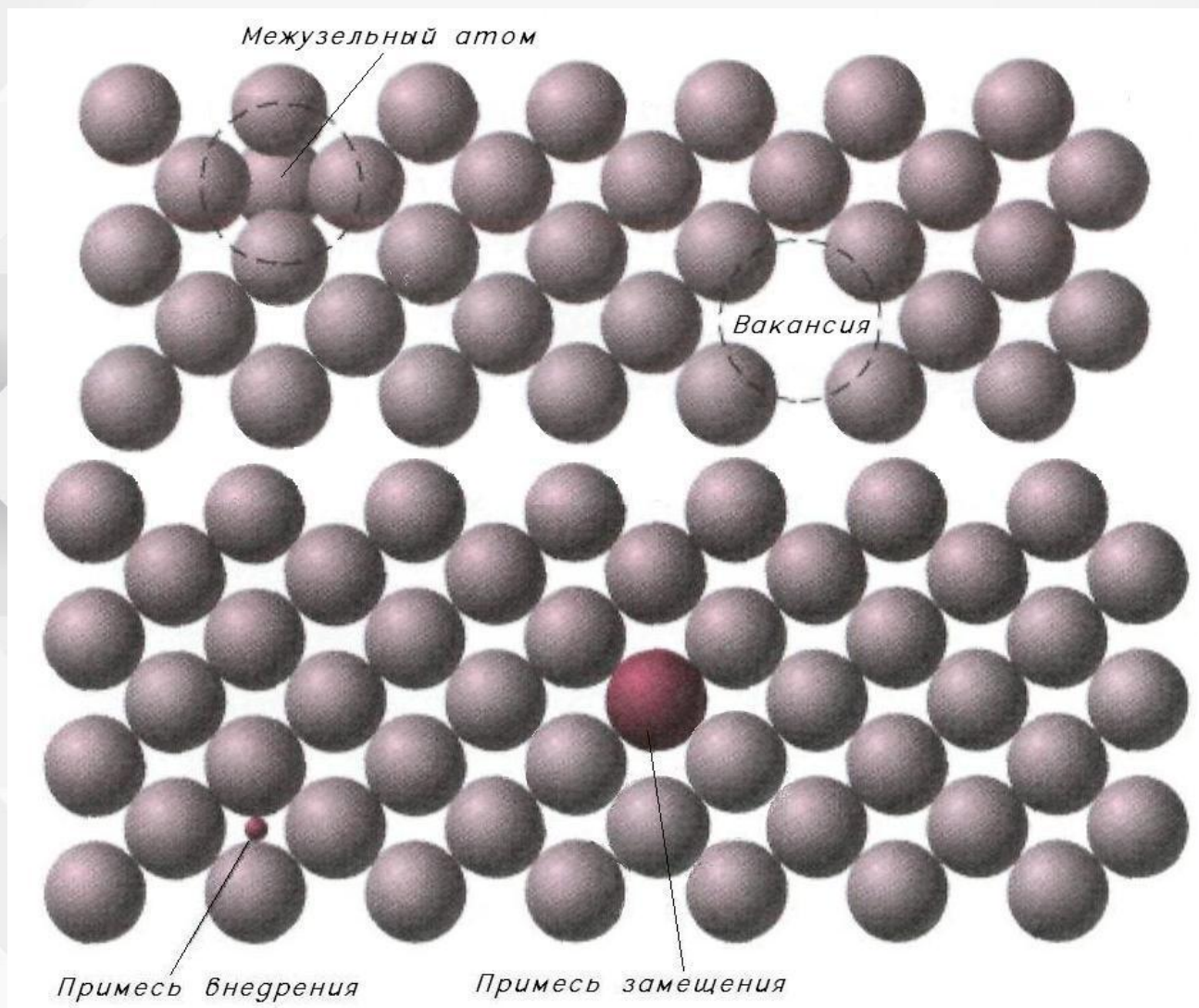
Примесные атомы

Примесные атомы всегда присутствуют в металле, так как практически невозможно выплавить химически чистый металл.

Они могут иметь размеры больше или меньше размеров основных атомов



Точечные дефекты



Линейные дефекты

Линейные дефекты – одномерные, т. е. протяженные в одном измерении: нарушения периодичности в одном измерении простираются на расстояния, сравнимые с размером кристалла, а в двух других измерениях не превышают нескольких параметров решетки.

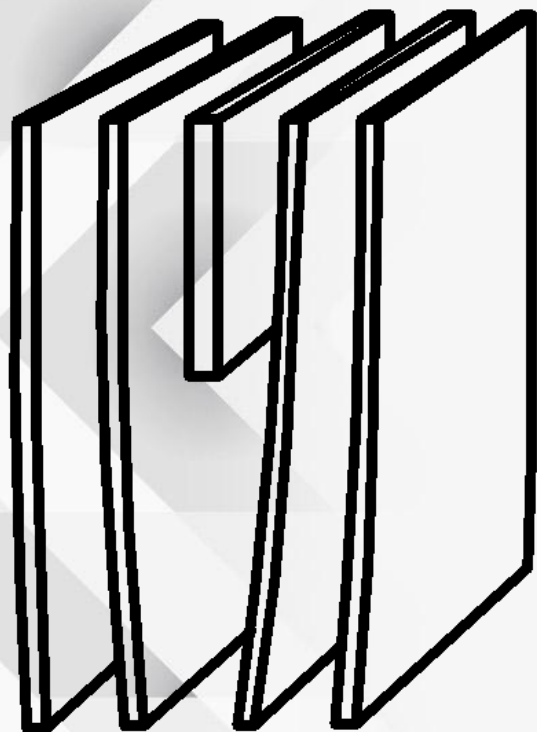
У **линейных** дефектов – длина на несколько порядков больше ширины (это так называемые **краевые** и **винтовые дислокации**), возникают при пластических деформациях.

Линейные дефекты

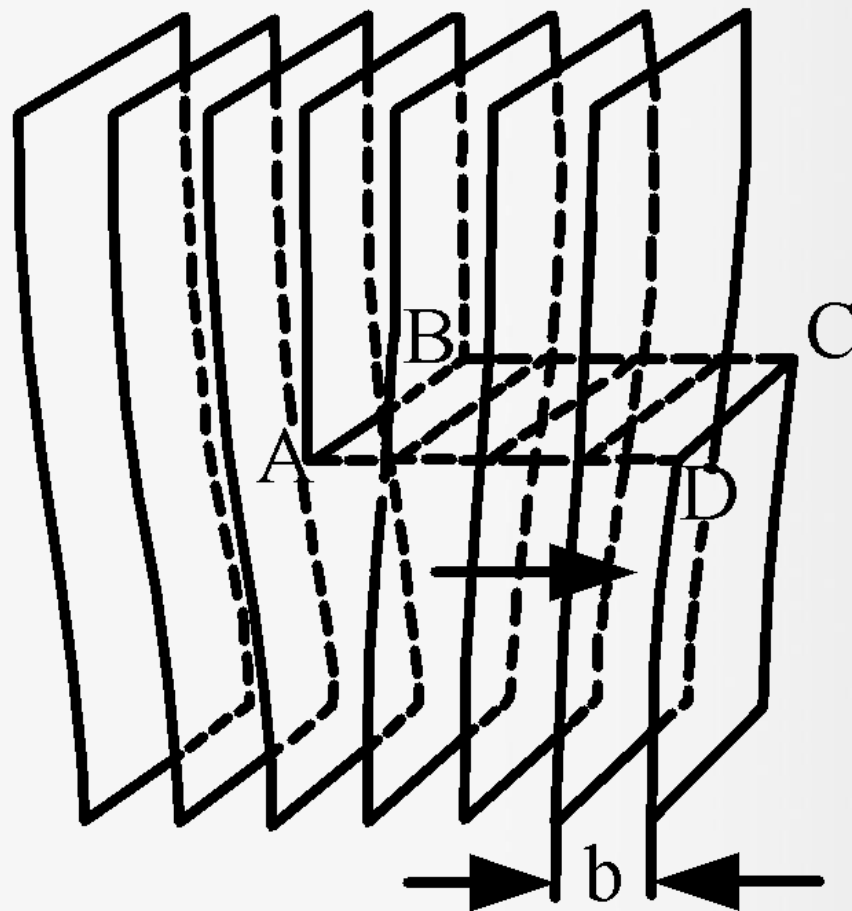
Основными линейными дефектами являются **дислокации**.

- *Дислокация* – это дефекты кристаллического строения, представляющие собой линии, вдоль и вблизи которых нарушено характерное для кристалла правильное расположение атомных плоскостей.

Краевая дислокация



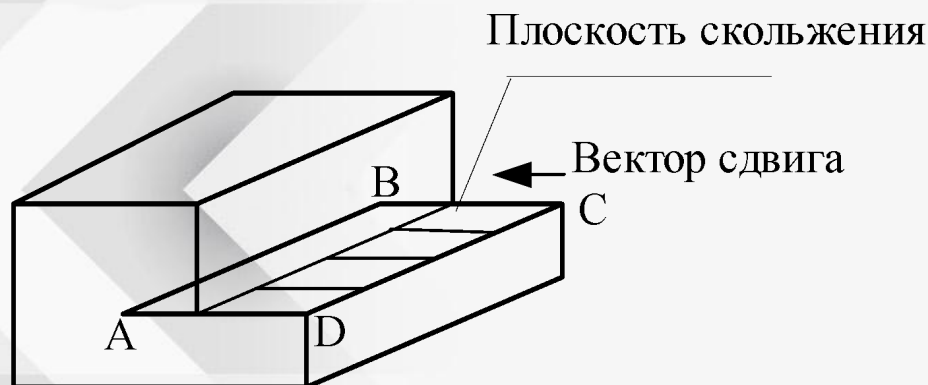
а



б

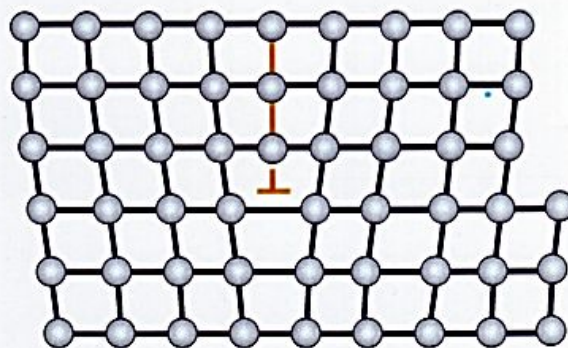
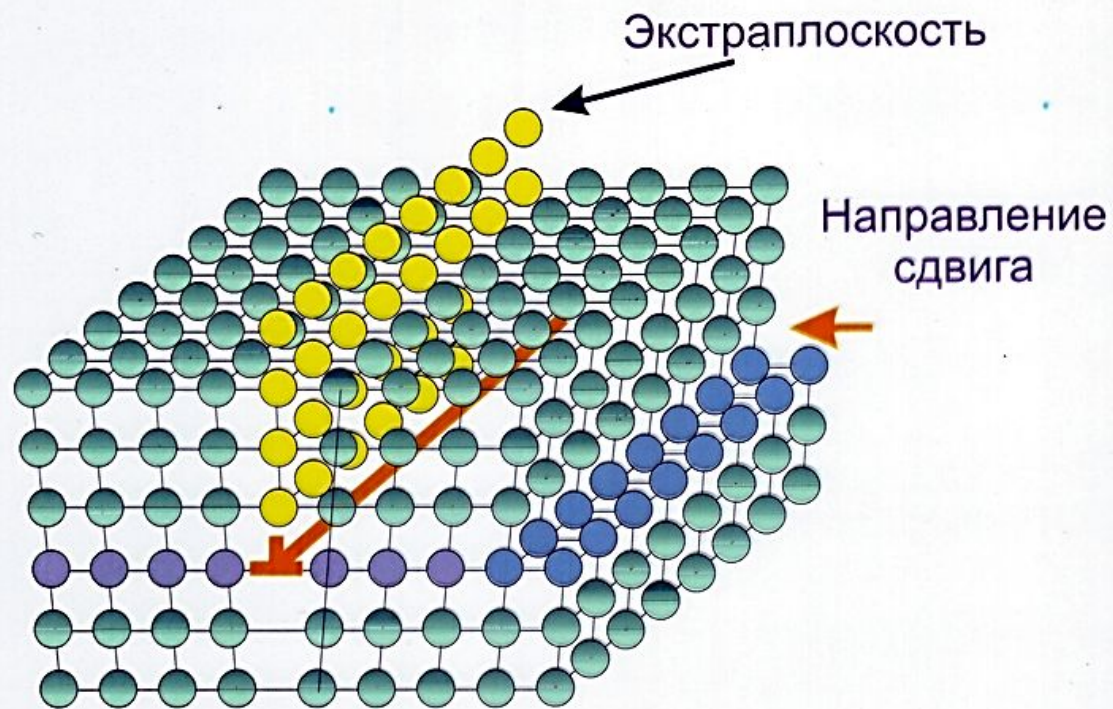
Краевая дислокация (а) и механизм ее образования (б)

Механизм образования краевой дислокации

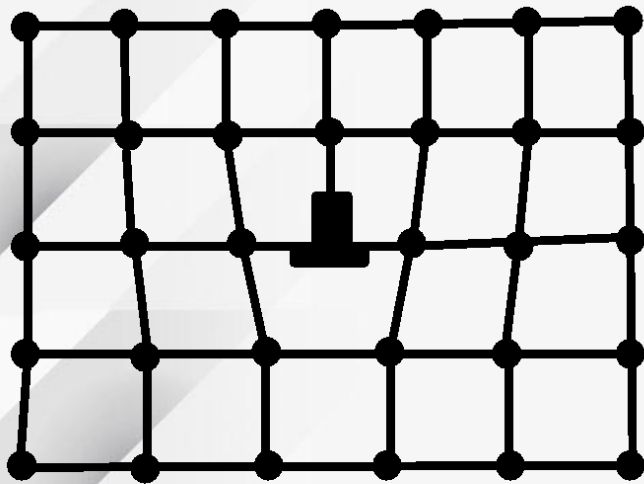


Большинство дислокаций образуются путем сдвигового механизма. Ее образование можно описать при помощи следующей операции. Надрезать кристалл по плоскости **ABCD**, сдвинуть нижнюю часть относительно верхней на один период решетки в направлении, перпендикулярном **AB**, а затем вновь сблизить атомы на краях разреза

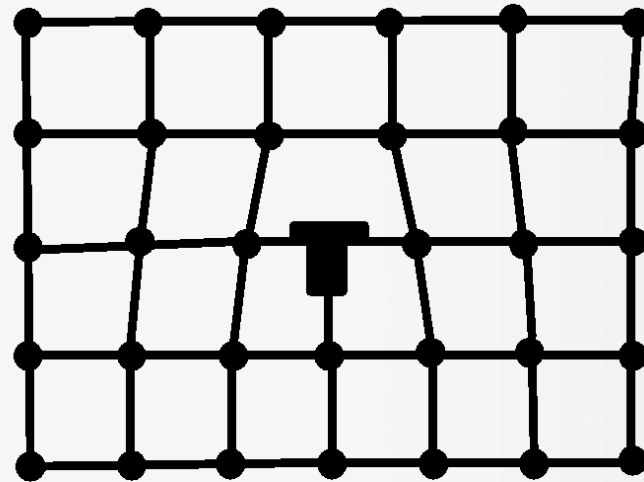
Краевая дислокация



Положительная (а) и отрицательная (б) краевые дислокации



а)



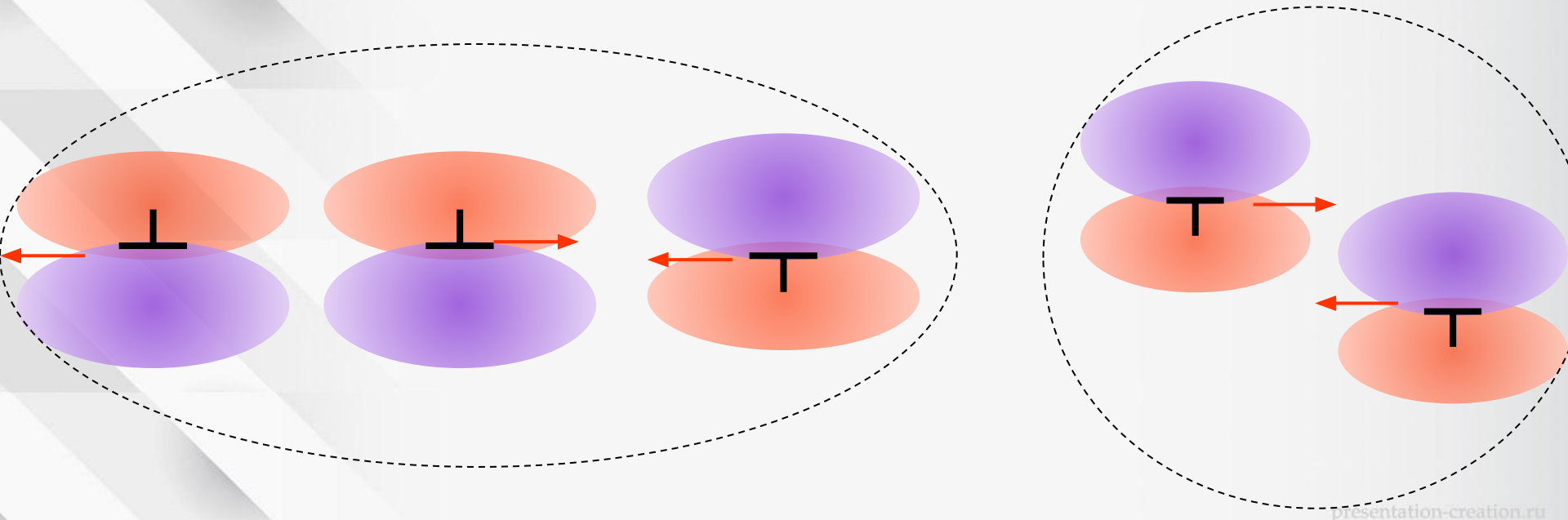
б)

Если экстраплоскость находится в верхней части кристалла, то краевая дислокация – положительная (\perp), если в нижней, то – отрицательная (\top).

Дислокации одного знака отталкиваются, а противоположные притягиваются.

Взаимодействие дислокаций

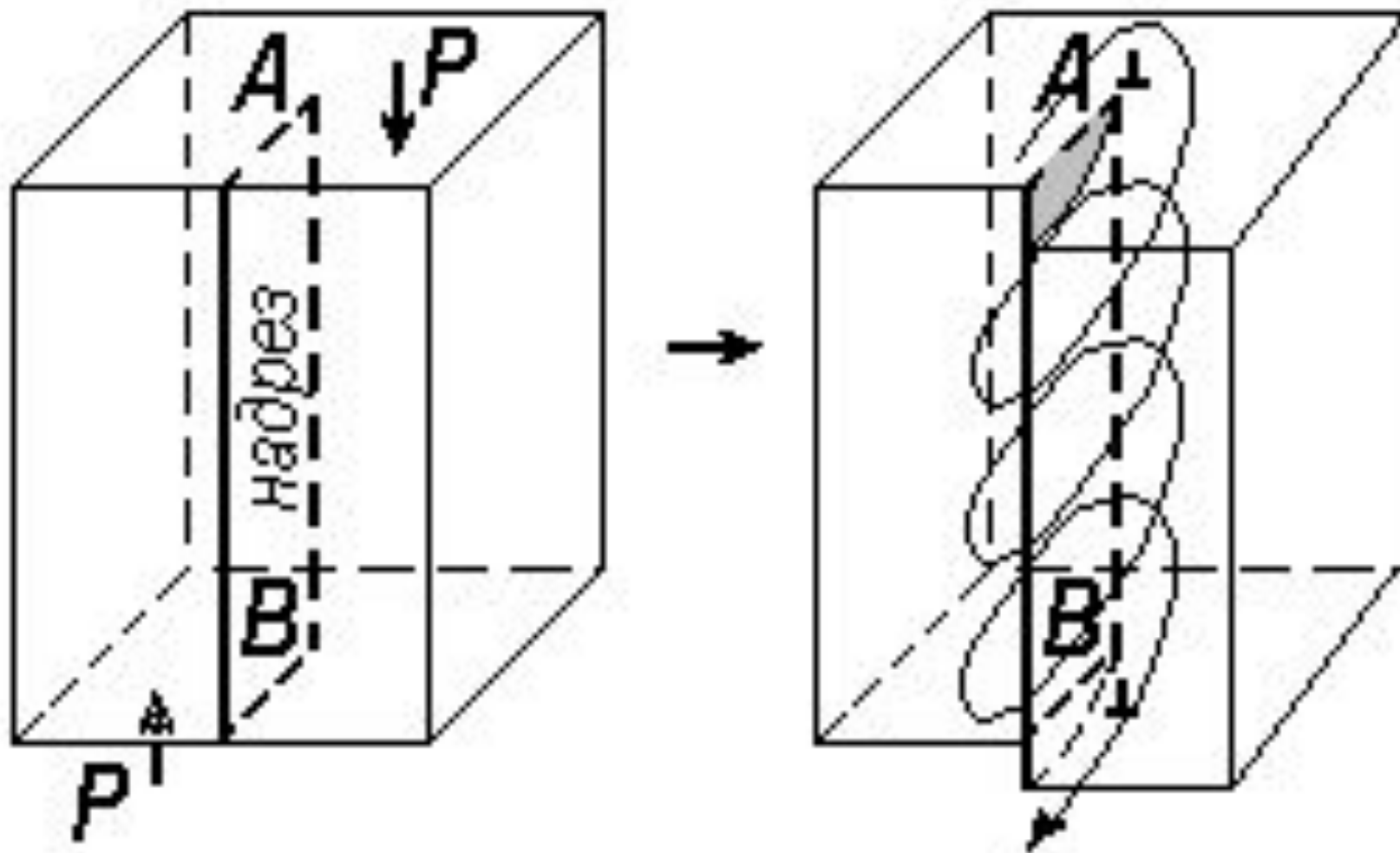
- **Притягиваются** \perp с противоположным вектором сдвига, лежащие в одной плоскости скольжения, при сближении уничтожают друг друга (аннигиляция).
- Если \perp лежат в разных плоскостях скольжения, для аннигиляции требуется переползание.
- **Отталкиваются** с одинаковым \mathbf{b} .



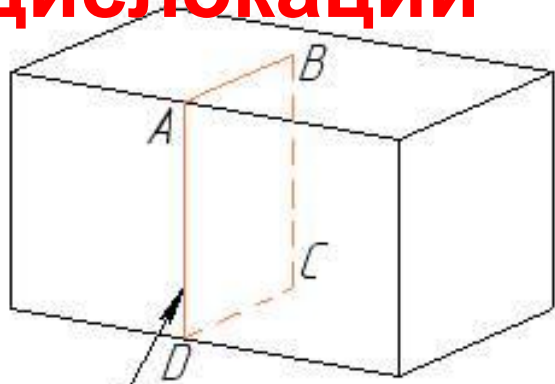
Другой тип дислокаций был описан Бюргерсом в 1939г., и получил название ***винтовая дислокация.***

Винтовая дислокация получена при помощи частичного сдвига по плоскости вокруг линии AD. На поверхности кристалла образуется ступенька.

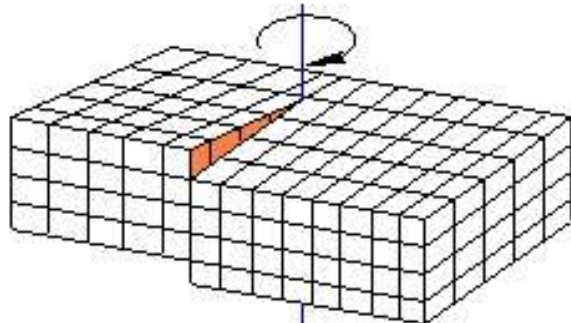
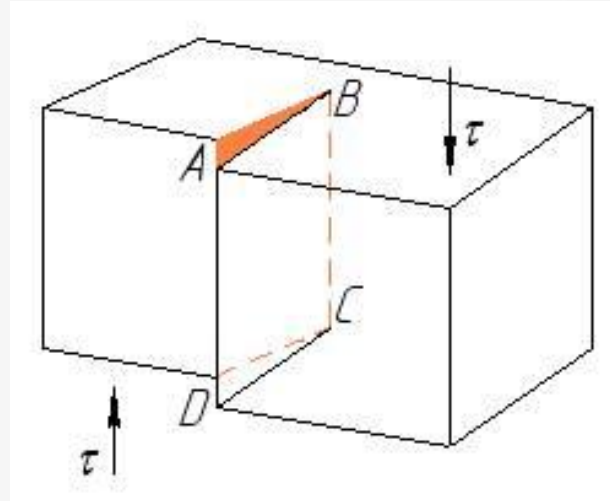
Винтовая дислокация



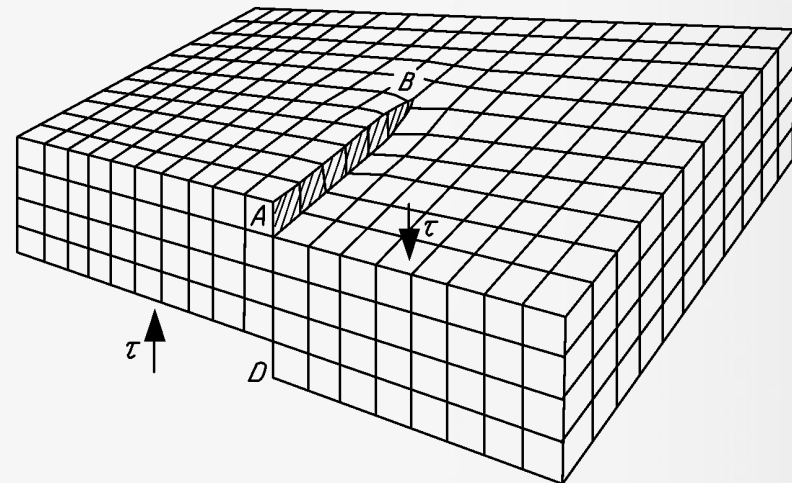
Механизм образования винтовой дислокации



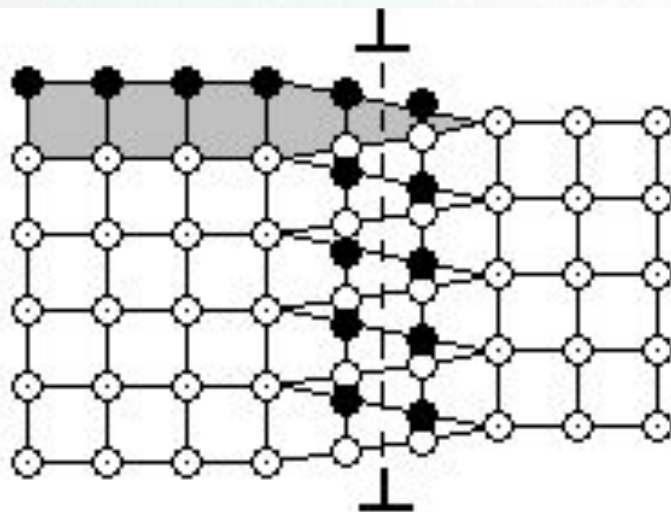
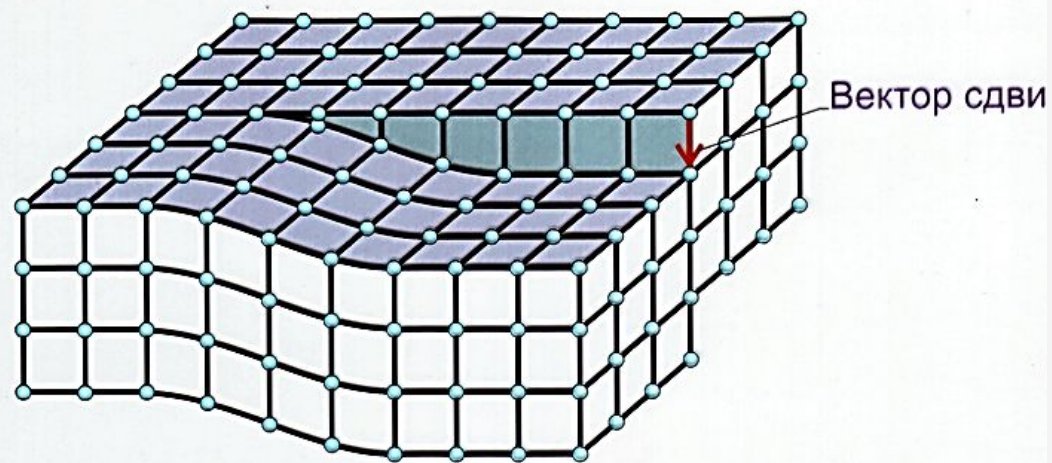
Плоскость скольжения



Ось дислокации



Винтовая дислокация



Линия дислокации

Линейные

дефекты

Винтовая дислокация не связана с какой-либо плоскостью скольжения, она может перемещаться по любой плоскости, проходящей через линию дислокации.

Вакансии и дислоцированные атомы к винтовой дислокации не стекают.

Линейные дефекты

Линии дислокаций не могут обрываться внутри кристалла, они должны либо быть замкнутыми, образуя петлю, либо разветвляться на несколько дислокаций, либо выходить на поверхность кристалла.

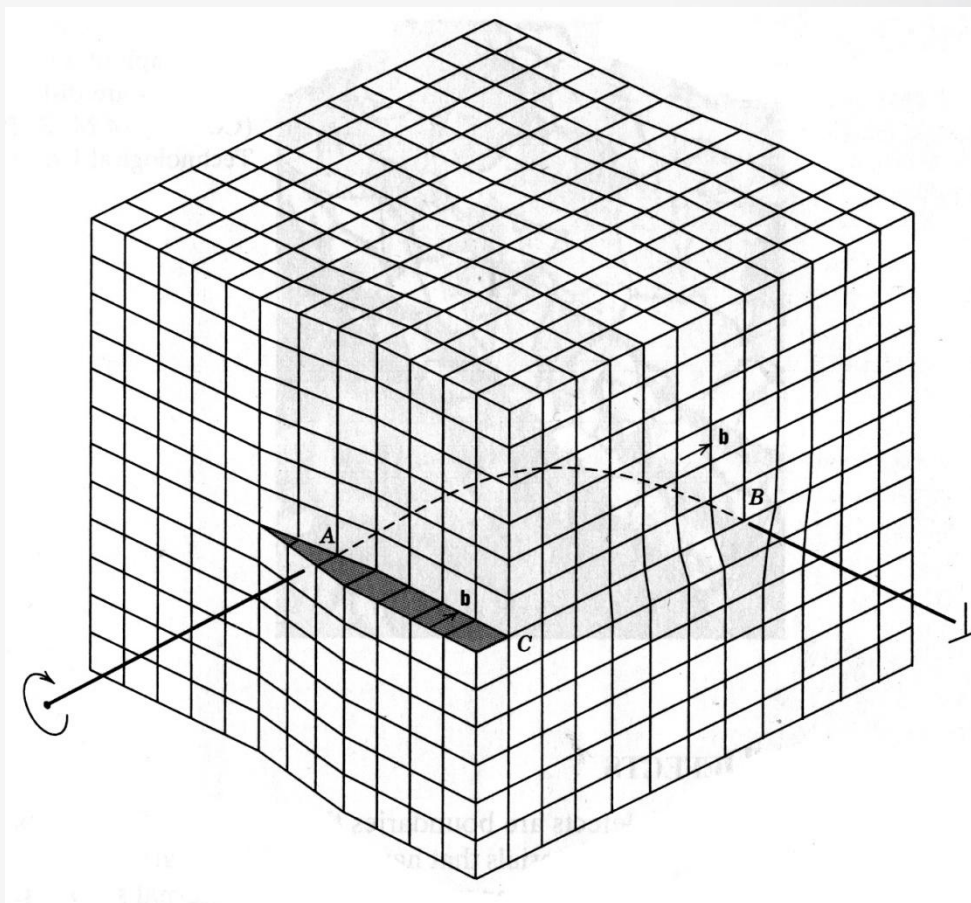
- Дислокационная структура материала характеризуется *плотностью дислокаций*.

Образование краевой дислокации всегда сопровождается изменением объема кристалла решетки. Винтовая дислокация не вызывает объемных изменений, но дислокациям того и другого вида сопутствуют касательные (сдвигающие) напряжения.

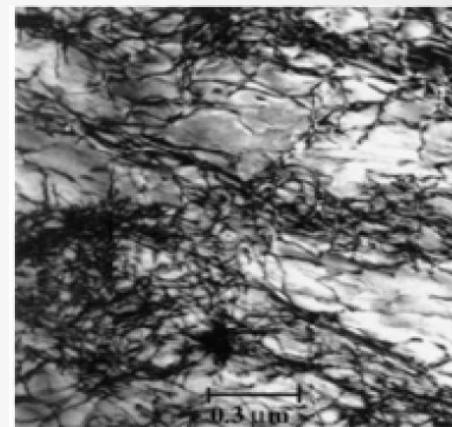
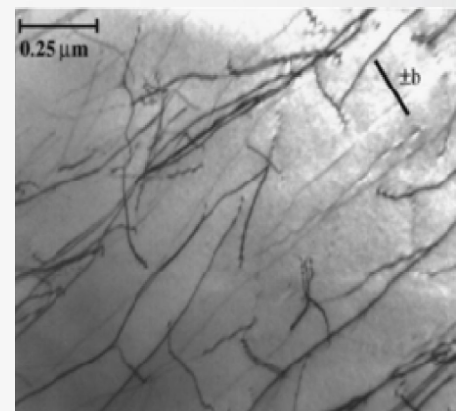
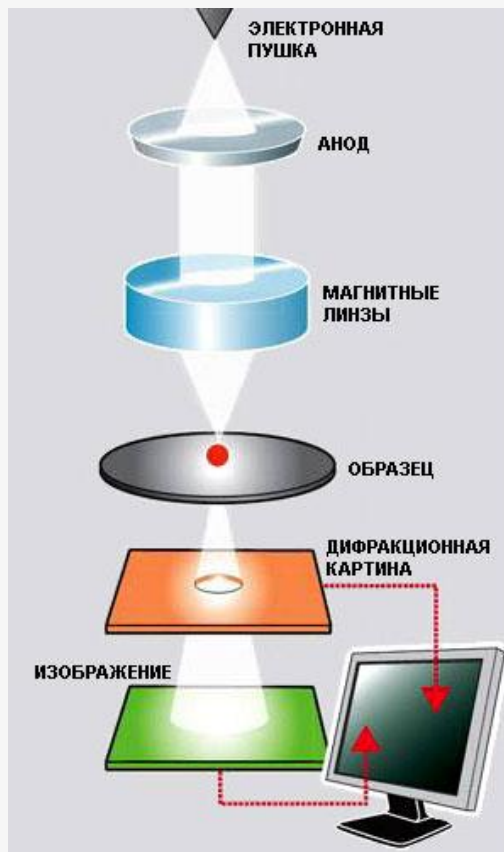
Дислокации оказывают влияние на физические свойства кристаллов:
механическая прочность,
пластичность.

Линейные дефекты

Смешанная дислокация



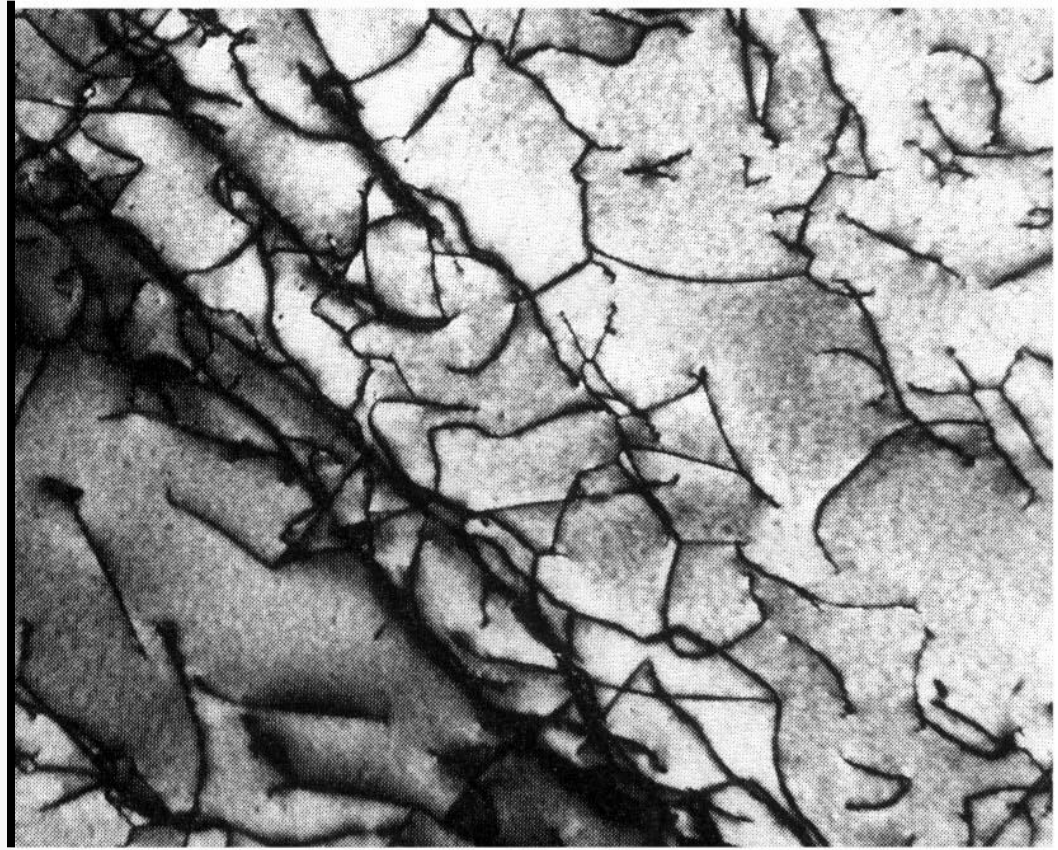
Электронная микроскопия – основной метод изучения дефектов кристаллического строения



Электронно-микроскопические изображения кристаллов с низкой и высокой плотностью дислокаций.

Линейные дефекты

- **Дислокационная структура металла**
(просвечивающая электронная микроскопия, $\times 32\ 000$)



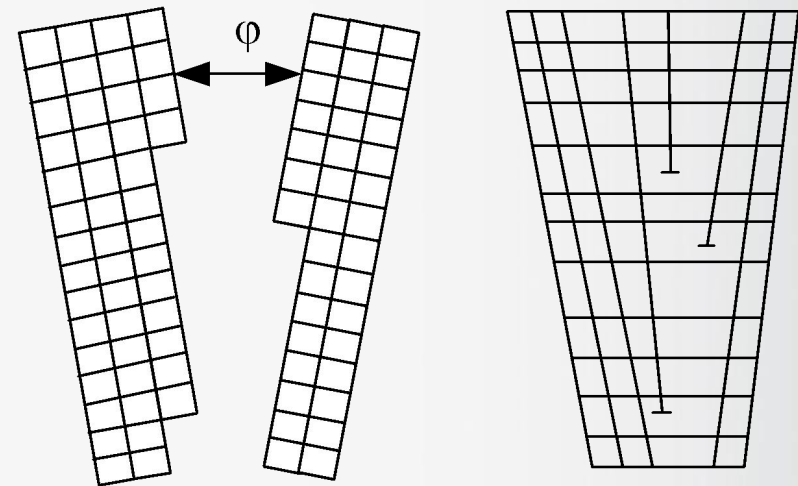
МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ

Дислокации образуются следующими способами:

- 1) при срастании в процессе кристаллизации отдельных кристаллитов;
- 2) за счет перерождения колоний вакансий в дислокации;
- 3) в процессе пластического деформирования благодаря источникам Франка-Рида.

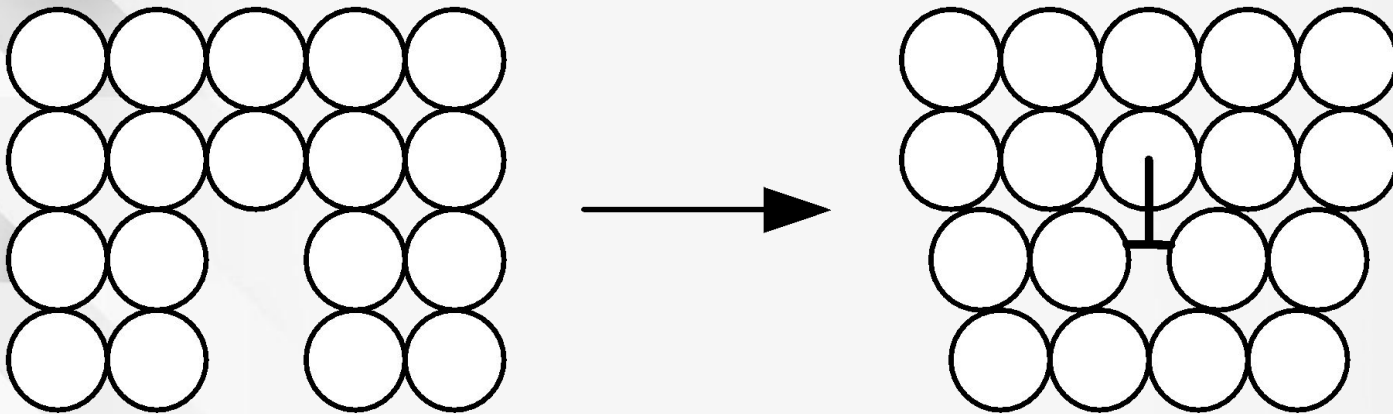
1. Образование дислокаций при срастании в процессе кристаллизации отдельных кристаллитов

На рисунке показаны границы двух блоков, растущих навстречу друг другу. Блоки повернуты на небольшой угол. При срастании блоков ряд атомных плоскостей не проходит через весь кристалл и заканчивается на границах блоков. В этих местах и возникают дислокации.



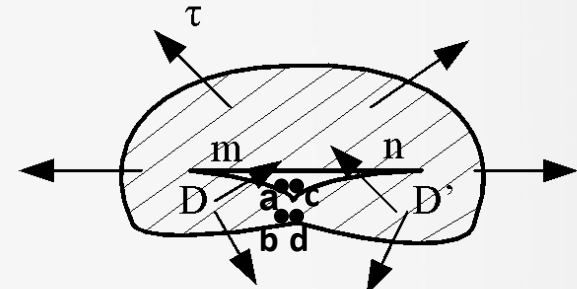
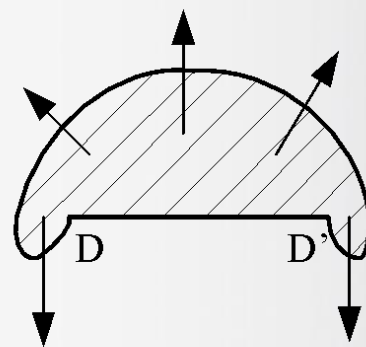
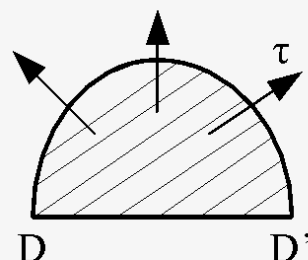
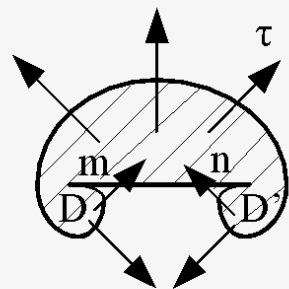
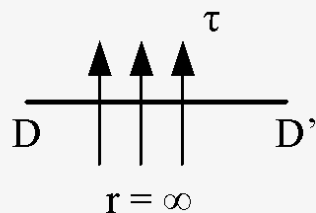
2. Образование дислокаций за счет перерождения колоний вакансий в дислокации

Источником дислокаций в недеформированном кристалле могут служить также скопления вакансий.



3. Схема последовательных I – V стадий действия источника Франка – Рида

Отрезок дислокации D-D' огибает препятствия в точках D и D', замыкается и образует дислокационную петлю



Источник Франка-Рида

(электронная фотография)

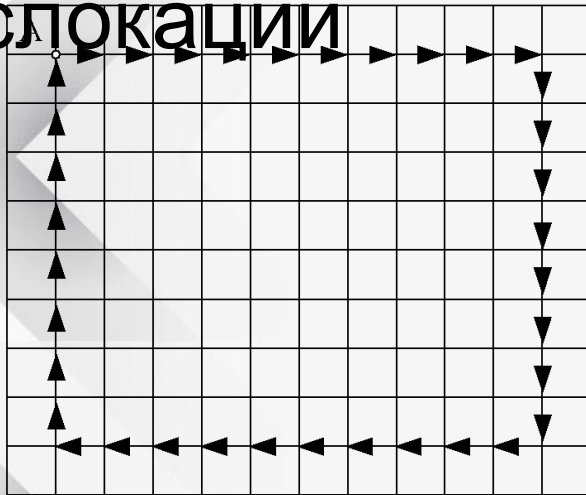


Дислокационные петли – результат действия источника Франка-Рида

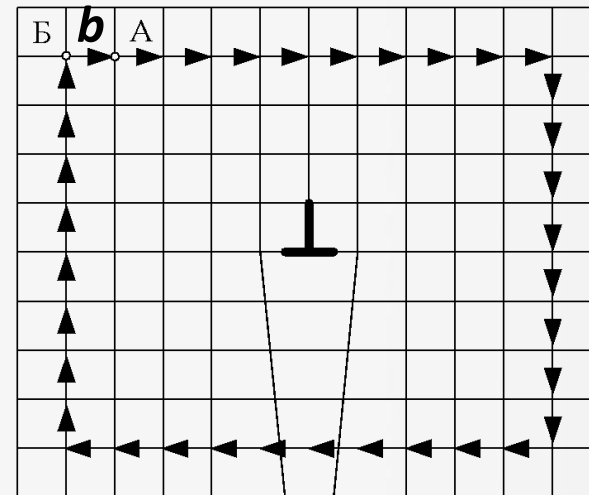
ВЕКТОР БЮРГЕРСА

Вектор Бюргерса (b) — количественная характеристика, описывающая искажения кристаллической решётки вокруг

дислокации



а)



б)

Контуры вектора Бюргерса для краевой (а) и винтовой (б) дислокаций

У краевой дислокации вектор Бюргерса равен межатомному расстоянию и перпендикулярен дислокационной линии, у винтовой дислокации — параллелен ей.

Скачок вектора Бюргерса в некоторой точке означает, что дислокация ветвится. Если точек ветвления нет, то вектор Бюргерса остаётся неизменным вдоль всей длины дислокации, поэтому дислокация не может начинаться или обрываться внутри кристалла.

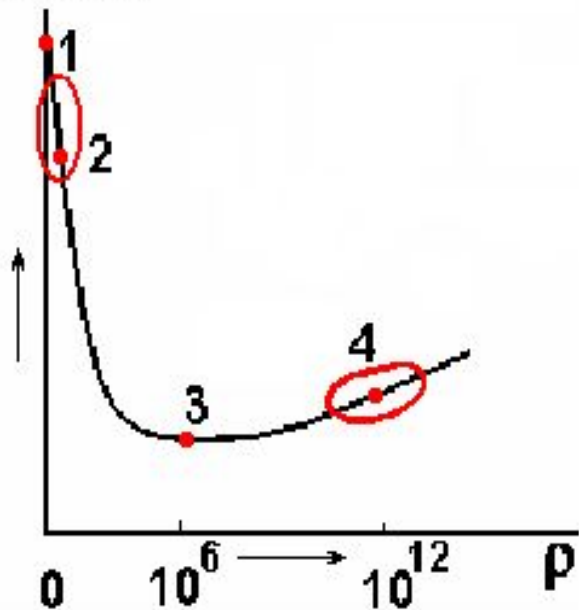
Линейные дефекты

Характеристикой дислокационной структуры является плотность дислокаций ρ , под которой понимают суммарную длину дислокаций Σl , приходящуюся на единицу объёма V :

$$\rho = \frac{\Sigma l}{V} \left[\text{см}^{-2} \right]$$

Кривая Бочвара-Одинга

прочность



ρ — плотность дислокаций, см^{-2}

Влияние плотности дислокаций на прочность:

- 1 – идеальный кристалл,
- 2 – «усы» (монокристаллы),
- 3 – отожжённые металлы (поликристаллы),
- 4 – деформированные металлы

Линейные дефекты

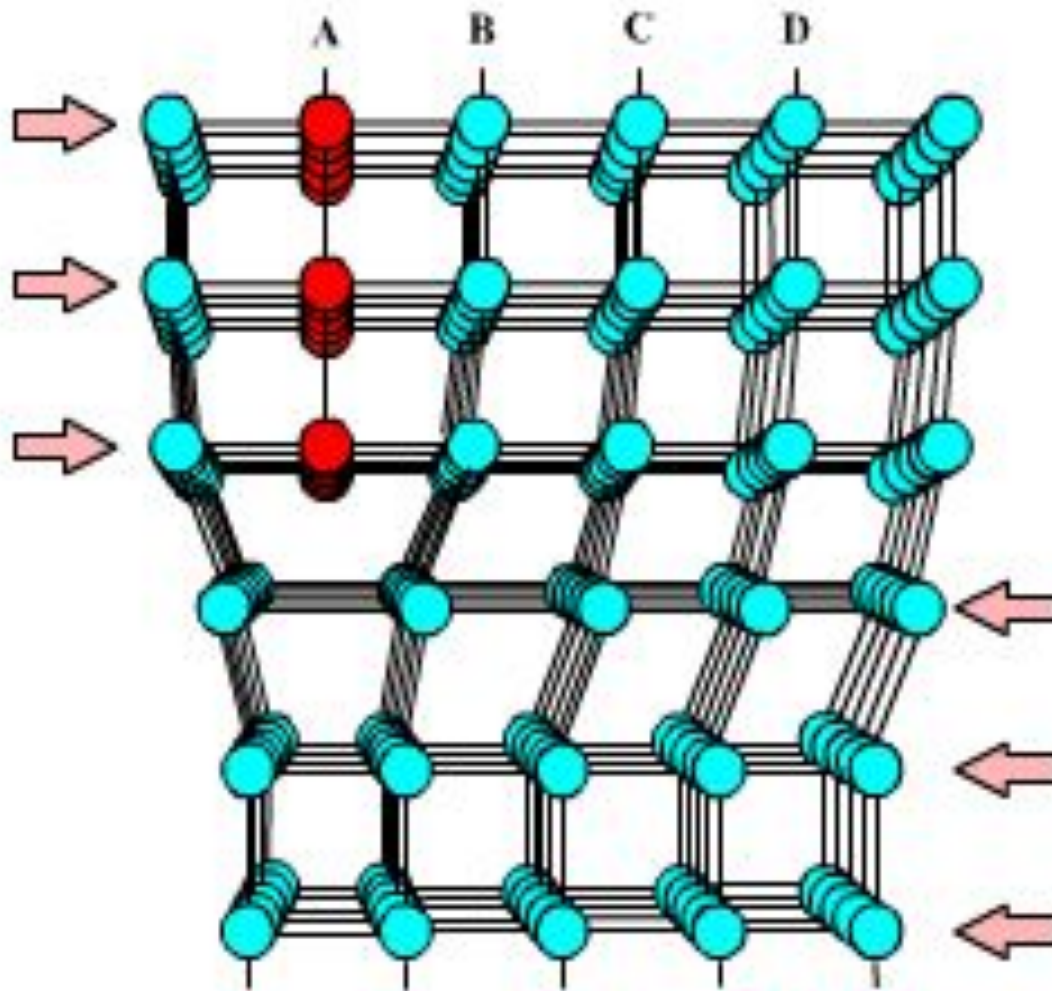
- При упрочнении металлов увеличением плотности дислокаций, она не должна превышать значений $10^{15} \dots 10^{16} \text{ м}^{-2}$. В противном случае образуются трещины.
- Дислокации влияют не только на *прочность и пластичность*, но и на другие свойства кристаллов.

ПЕРЕМЕЩЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ

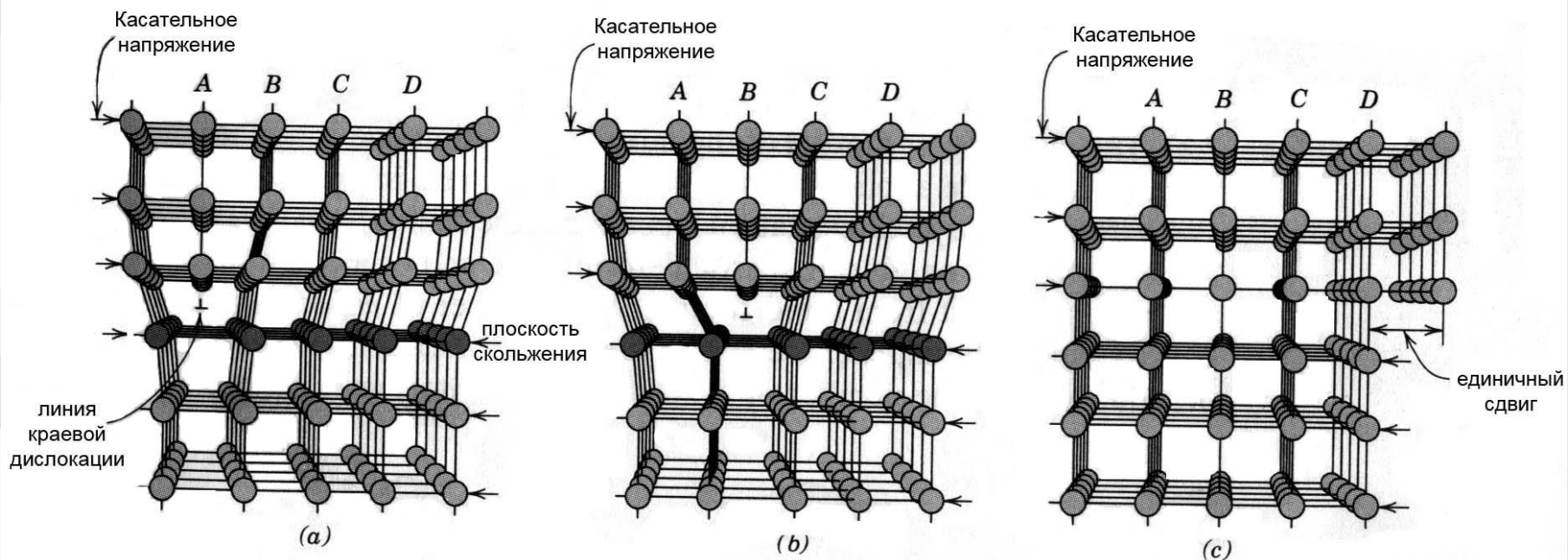
В отличие от точечных дефектов, дислокации не двигаются самопроизвольно, но очень подвижны.

Существует два основных механизма движения дислокаций: «*скольжением*» и «*переползанием*».

Движение краевой дислокации



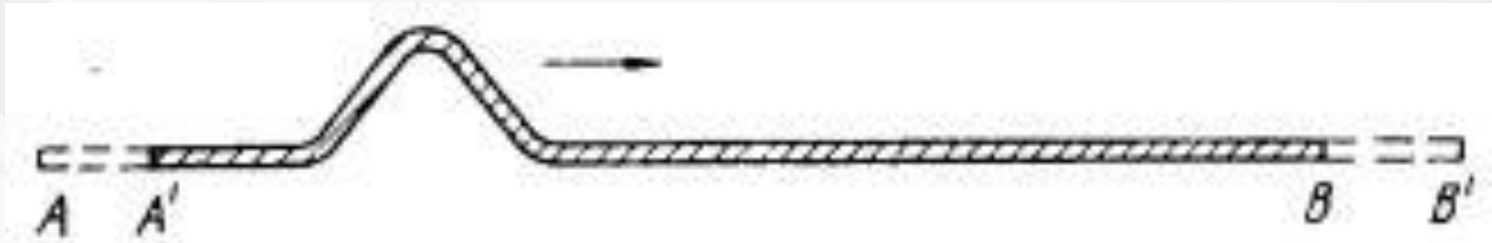
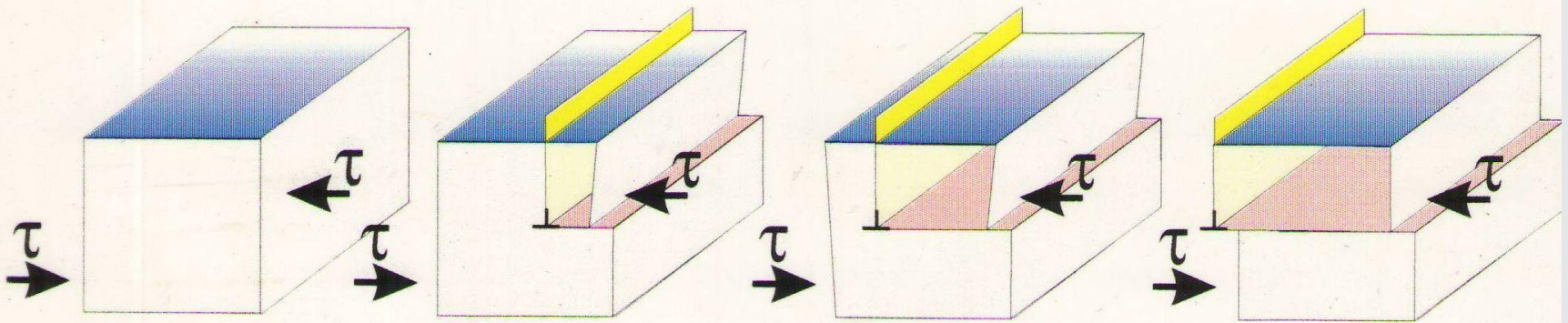
Движение краевой дислокации приводит к образованию ступеньки на поверхности кристалла



Механизм пластической деформации

Основным механизмом пластической деформации является скольжение

Схема скольжения краевой дислокации



Схемы скольжения дислокаций

Схема движения краевой дислокации

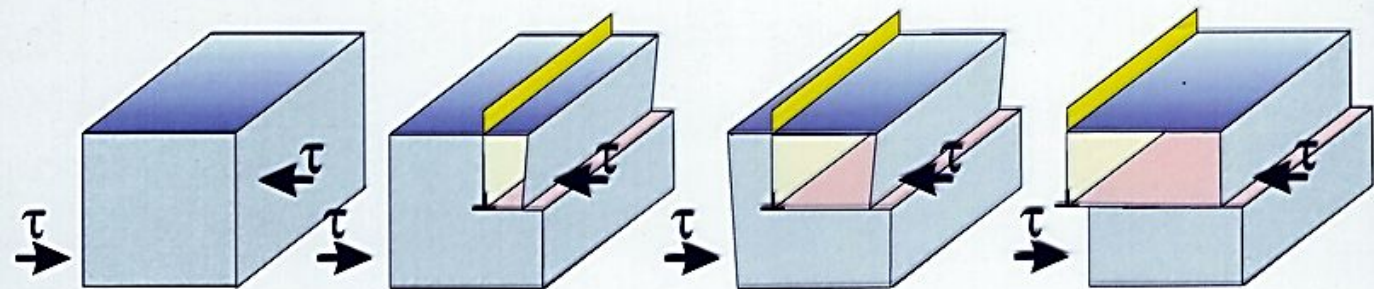
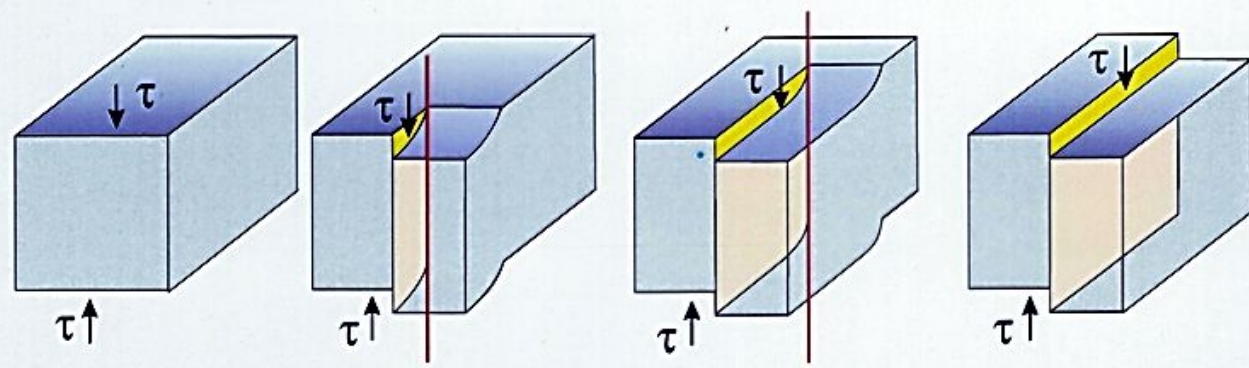
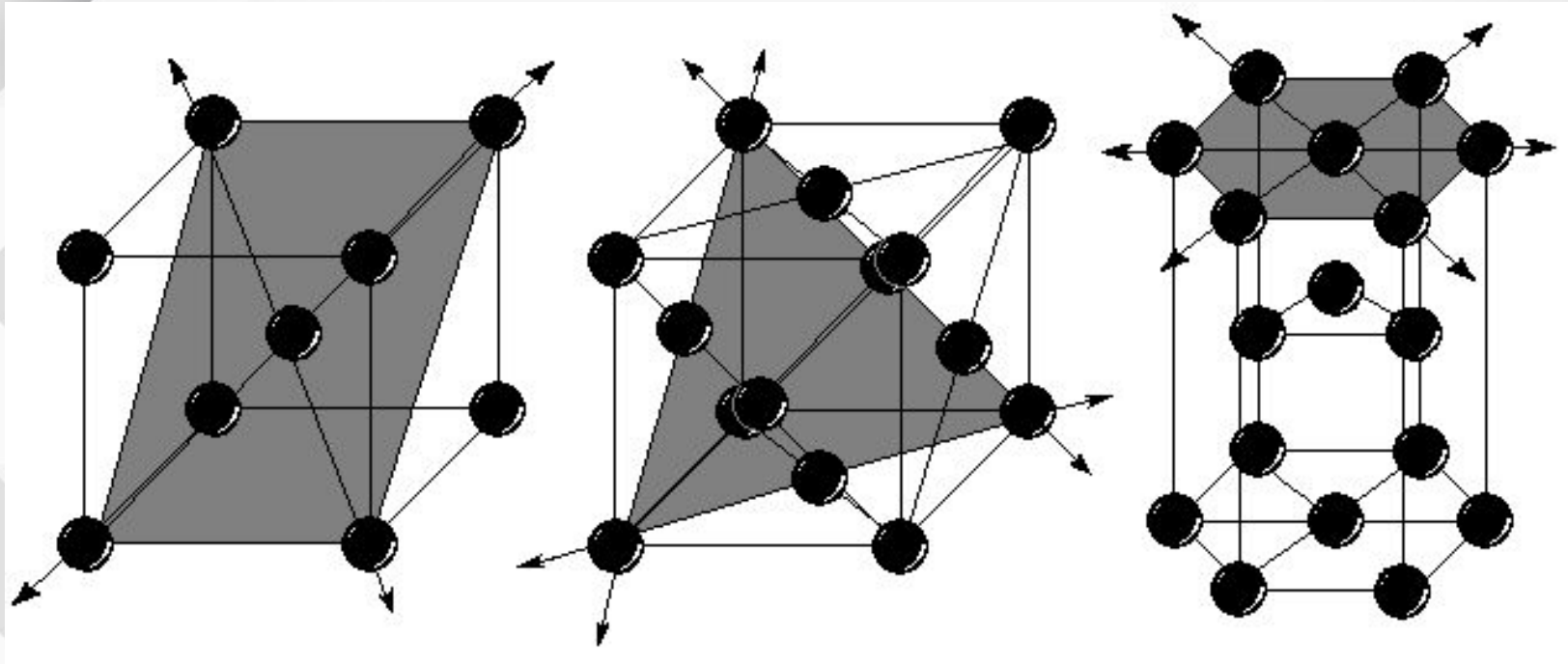


Схема движения винтовой дислокации

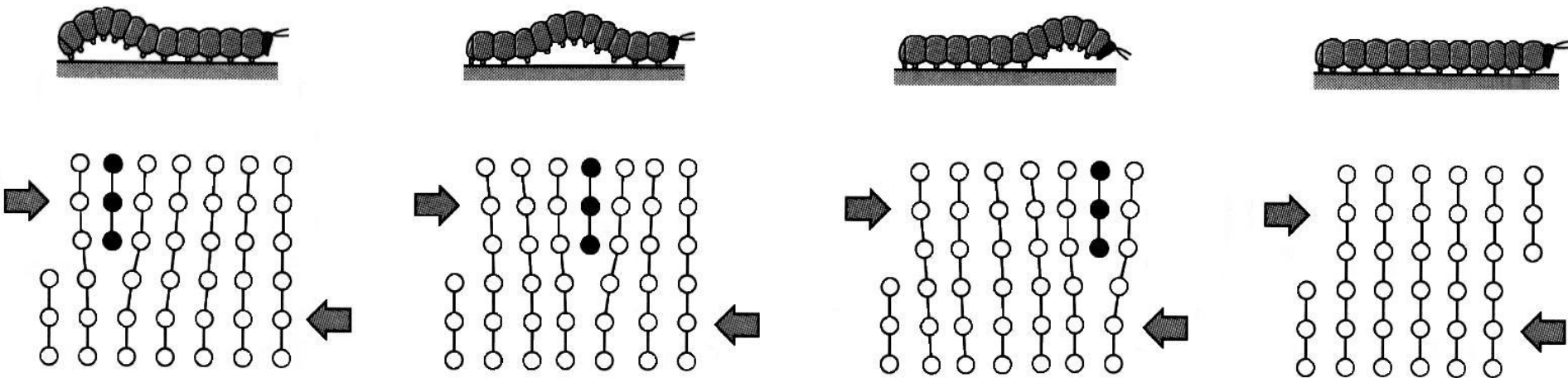


По плоскостям и направлениям с максимальной плотностью атомов дислокации скользят легче всего



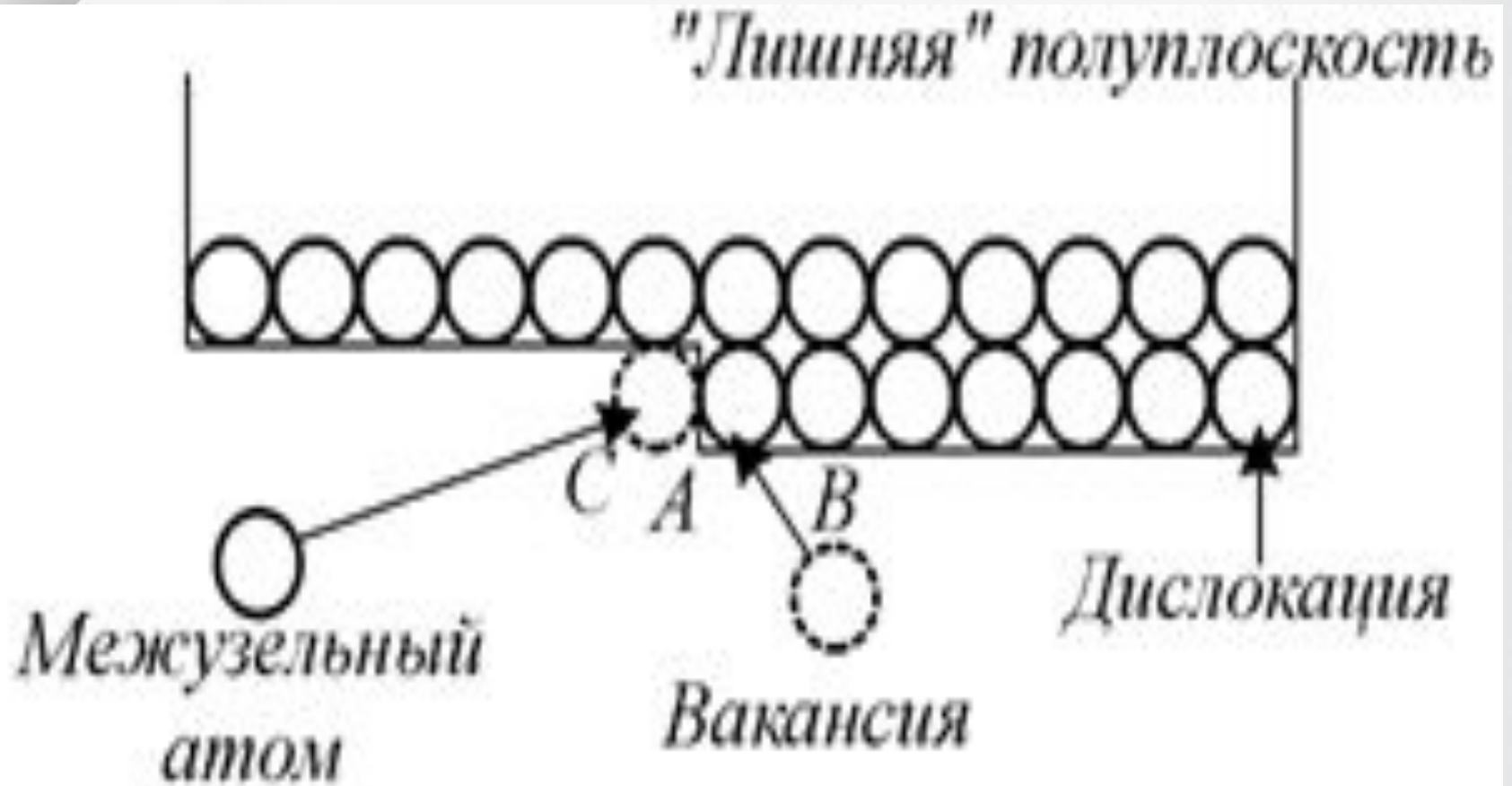
В ОЦК-решётке 8 (**Cr, W**), в ГЦК-решётке 12 (**Cu, Al**), в ГПУ-решётке 12 систем наилегчайшего скольжения

Скольжение дислокации подобно перемещению гусеницы



Лапки гусеницы, оторванные от земли, – это дефект.
Дислокация (недостроенная атомная плоскость) – это дефект.
Двигается **дефект**, а в итоге смещается **вся** гусеница или **вся** верхняя часть кристалла.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИСЛОКАЦИЙ С ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ



Облака Коттрелла

В участки кристалла вблизи краевых дислокаций, где решетка растянута, легко перемещаются вакансии и межузельные атомы, образуя скопления примесных атомов, называемых *облаками Коттрелла*.

Облака Коттрелла мешают движению дислокаций и упрочняют металл.

С повышением температуры облака Коттрелла рассеиваются.

Поверхностные дефекты

Поверхностные, или *двумерные*, дефекты простираются в двух измерениях на расстояния, сравнимые с размером кристалла, а в третьем — составляют несколько параметров решетки.

К ним относятся: *плоскости двойникования, границы зерен и блоков, стенки доменов, дефекты упаковки* и, наконец, сама *поверхность кристалла*.

У *поверхностных* дефектов – мала толщина, а длина и ширина больше её на несколько порядков.

Двумерные дефекты

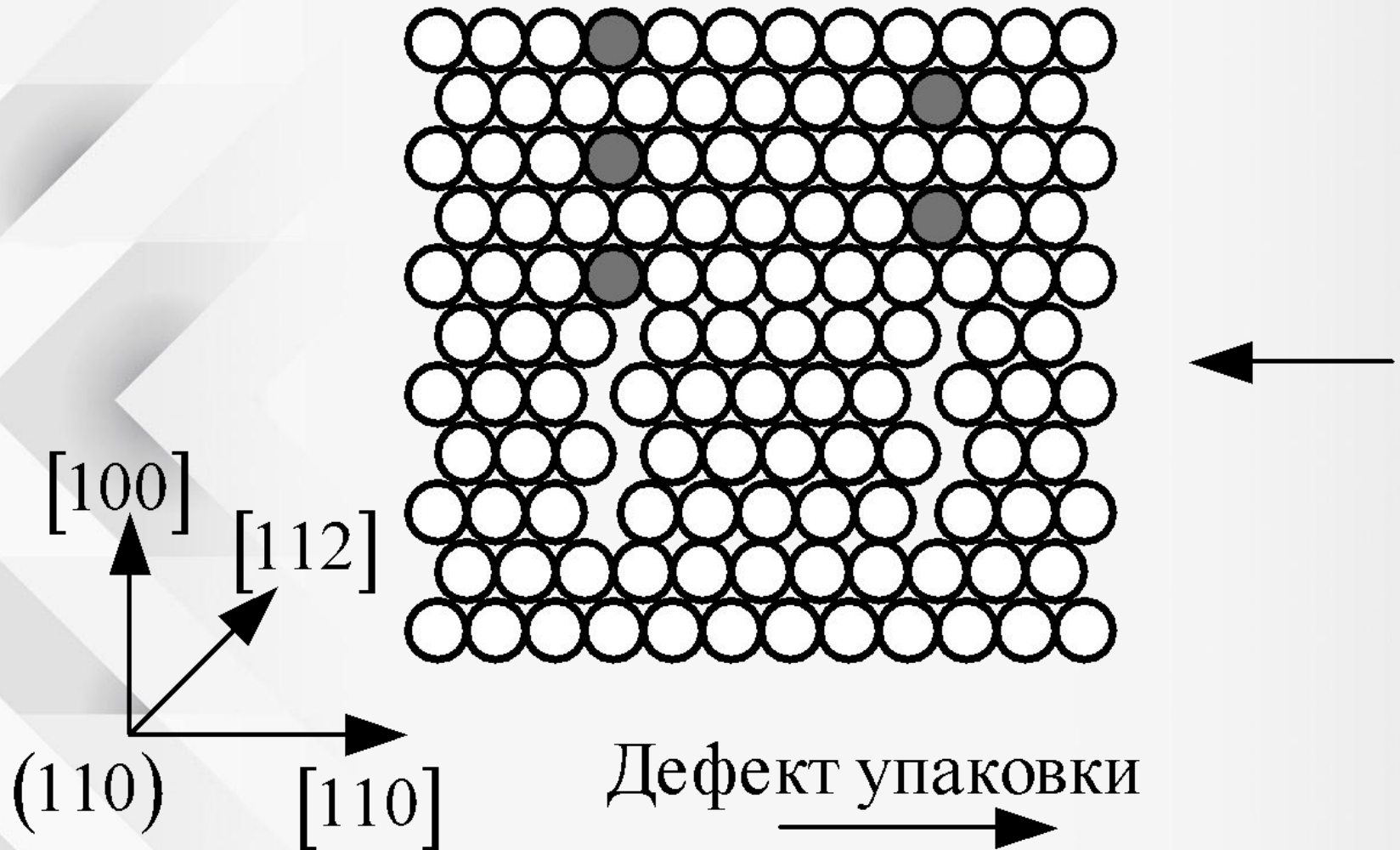
К двумерным дефектам относятся:

1. Дефекты упаковки.

2. Границы в кристаллах:

межфазные, высокоугловые границы зерен, средне- и малоугловые границы субзерен, границы двойников, границы областей упорядочения.

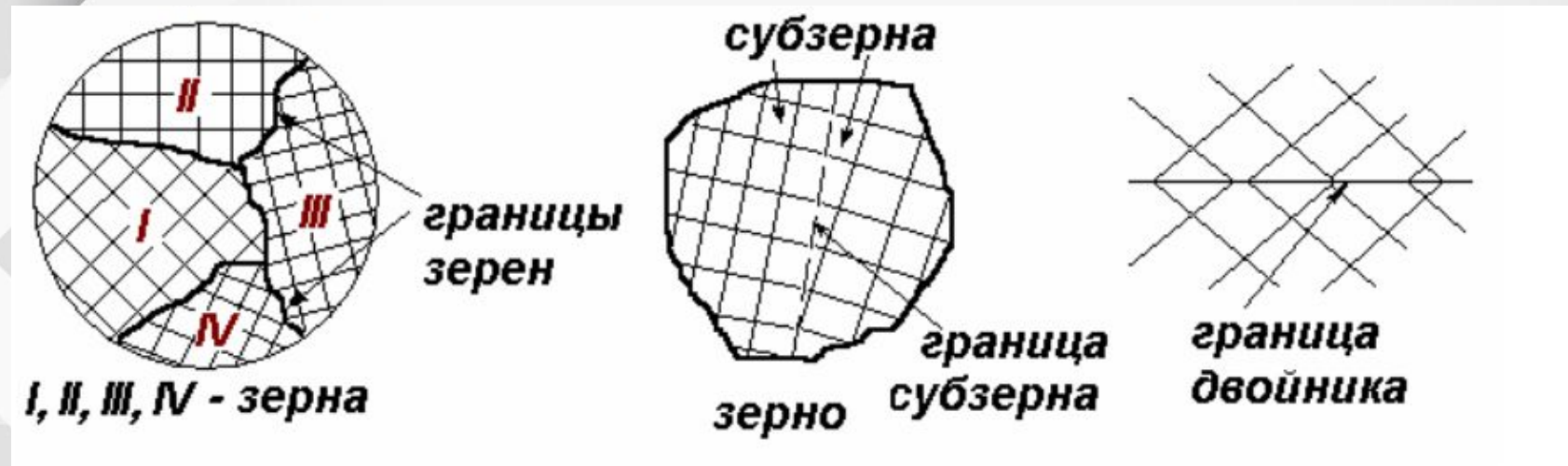
ДЕФЕКТЫ УПАКОВКИ



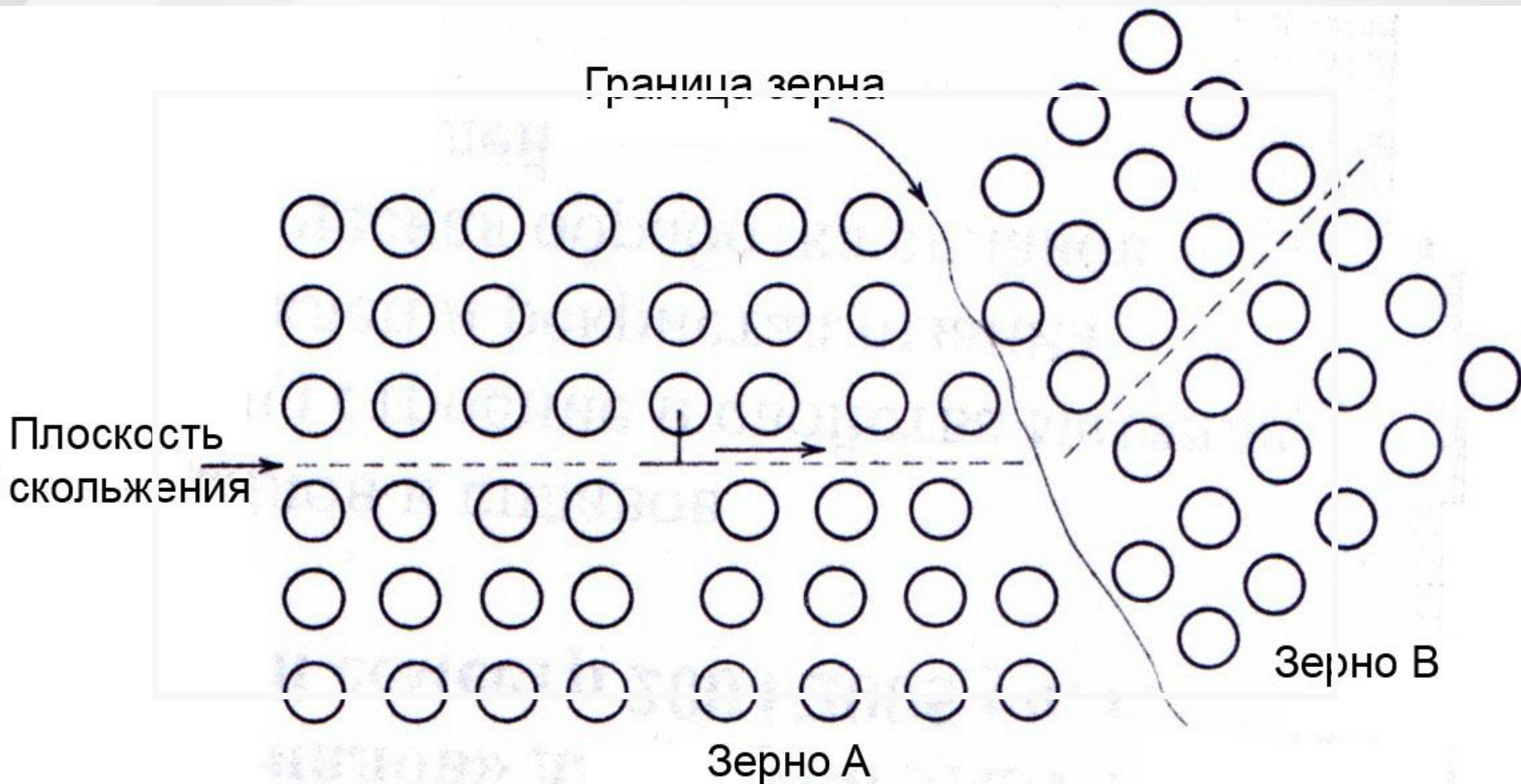
Поверхностные дефекты

- Размеры зерен составляют до 1000 мкм. Углы разориентации составляют до нескольких десятков градусов.
- Граница между зернами представляет собой тонкую в 5 – 10 атомных диаметров поверхностную зону с максимальным нарушением порядка в расположении атомов.

Поверхностные дефекты



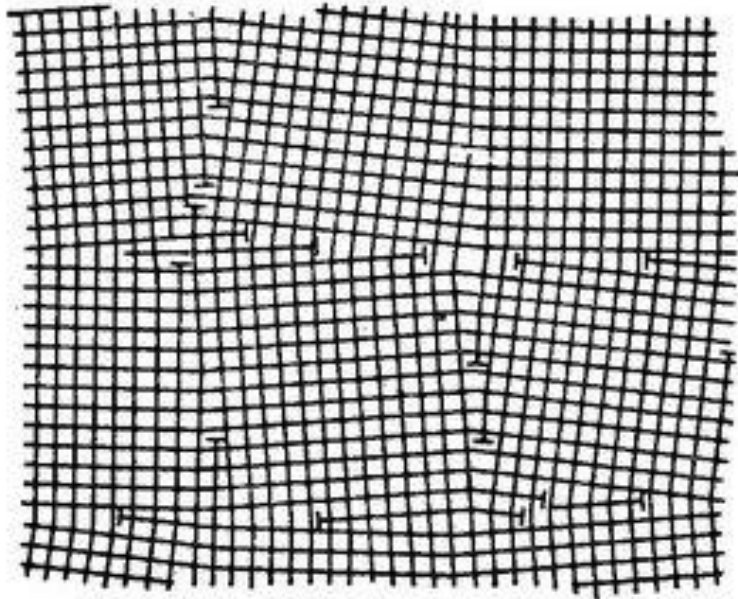
Поверхностные дефекты



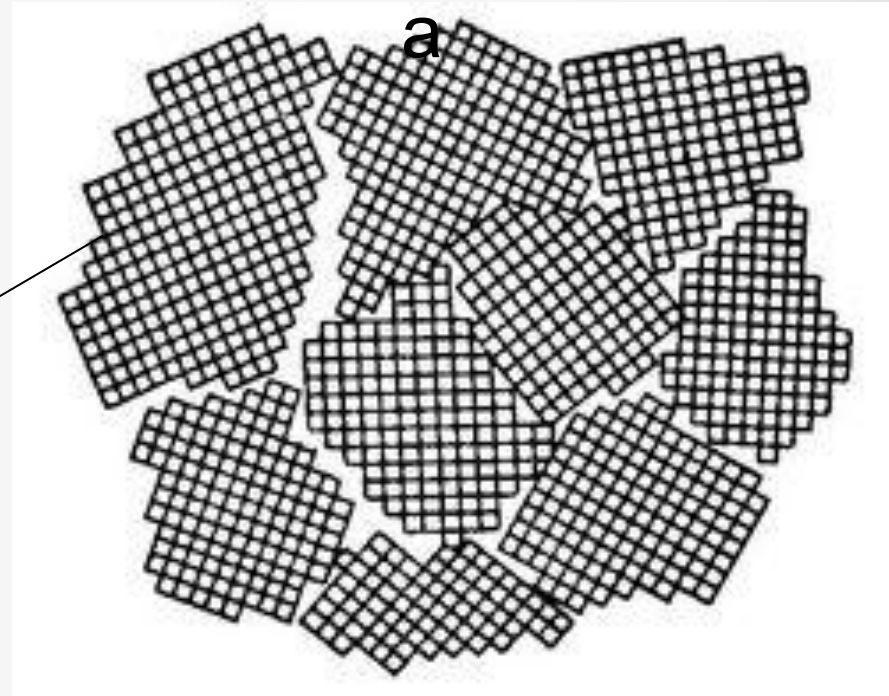
Границы зёрен – препятствия для развития деформации

Границы с разориентацией соседних зерен менее $\sim 6^\circ$ относят к **малоугловым**, а с большей разориентацией – к **большеугловым**.

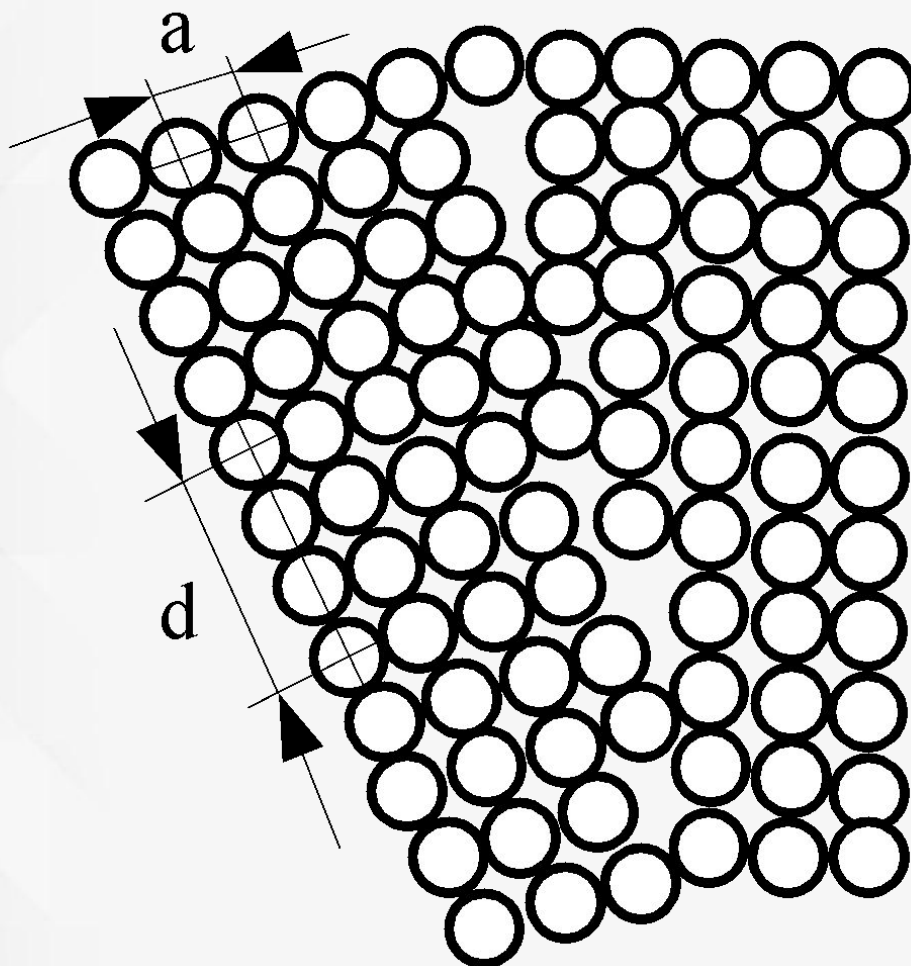
Блоки или



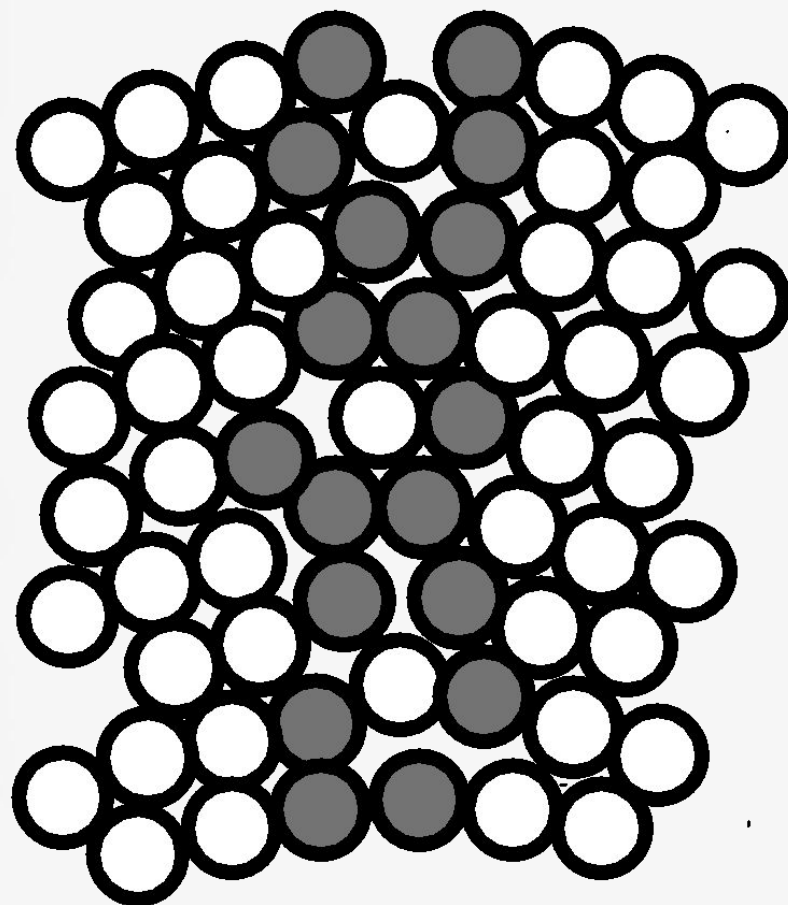
Зёрна
а



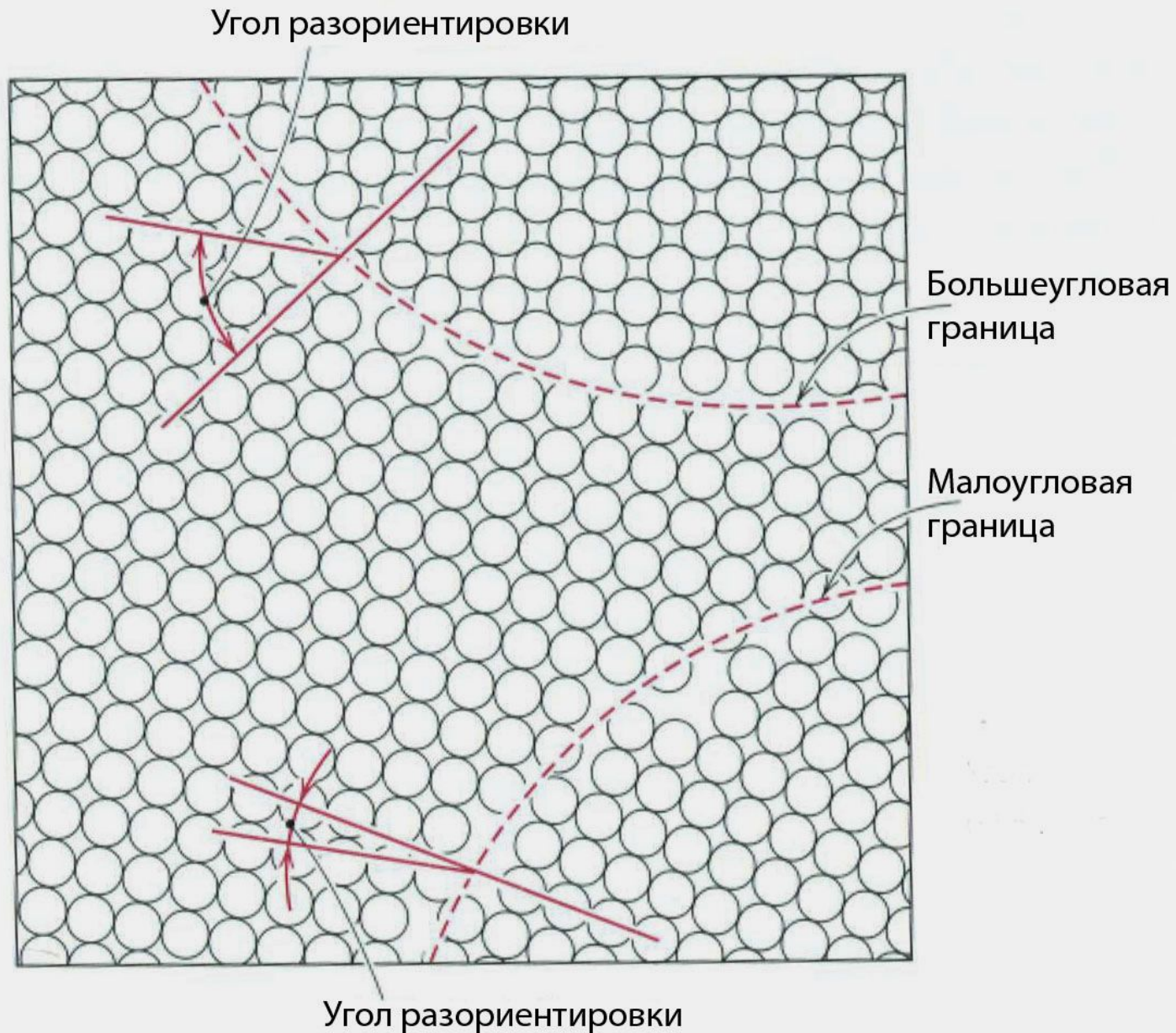
МАЛОУГЛОВАТЫЕ ГРАНИЦЫ СУБЗЕРЕН



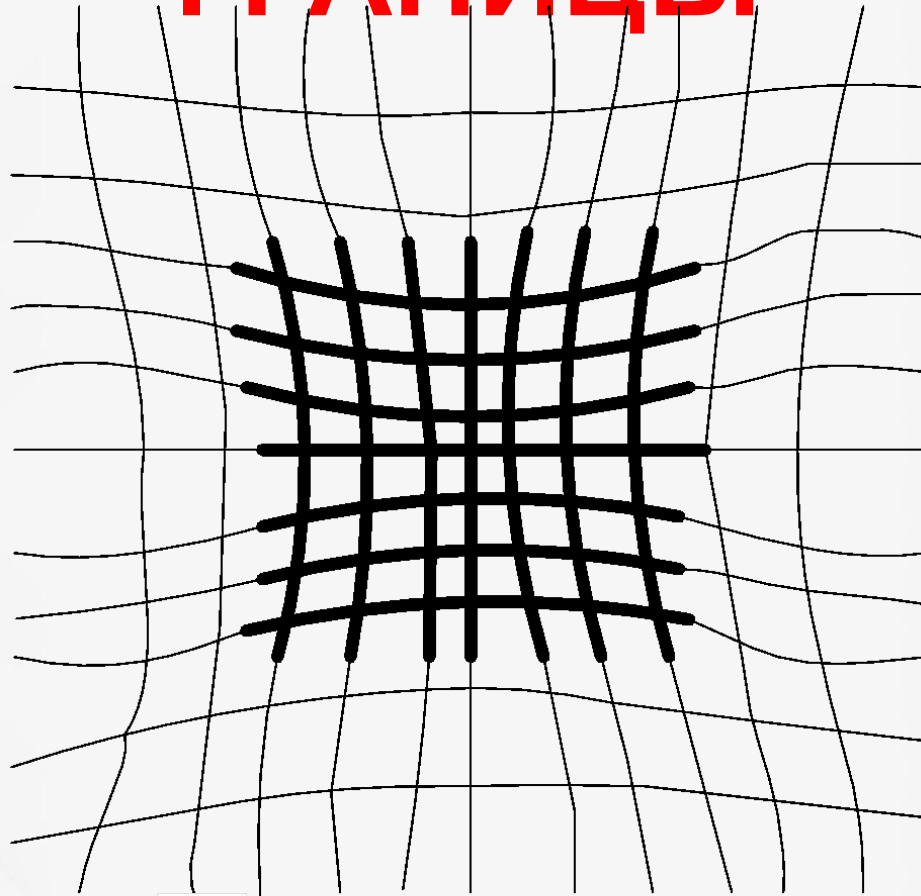
БОЛЬШЕУГЛОВАТЫЕ ГРАНИЦЫ ЗЕРЕН



Поверхностные дефекты

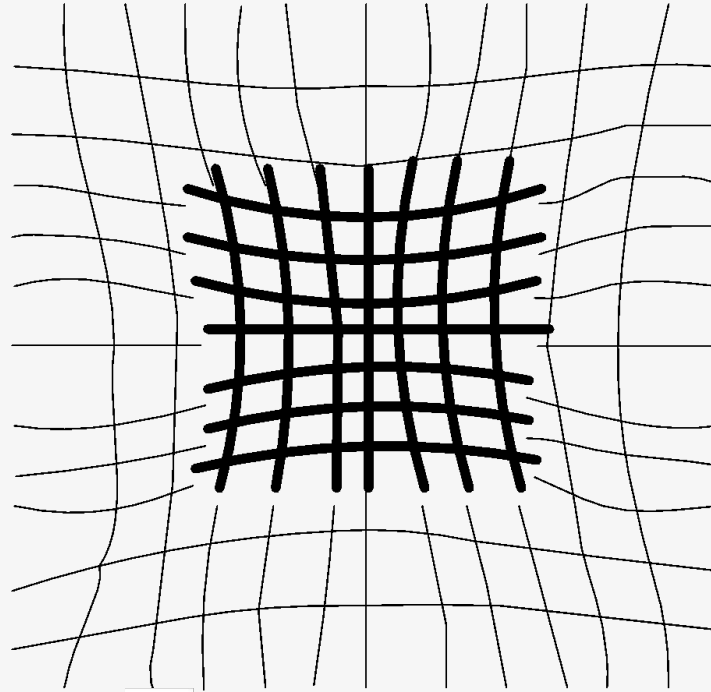


МЕЖФАЗНЫЕ ГРАНИЦЫ



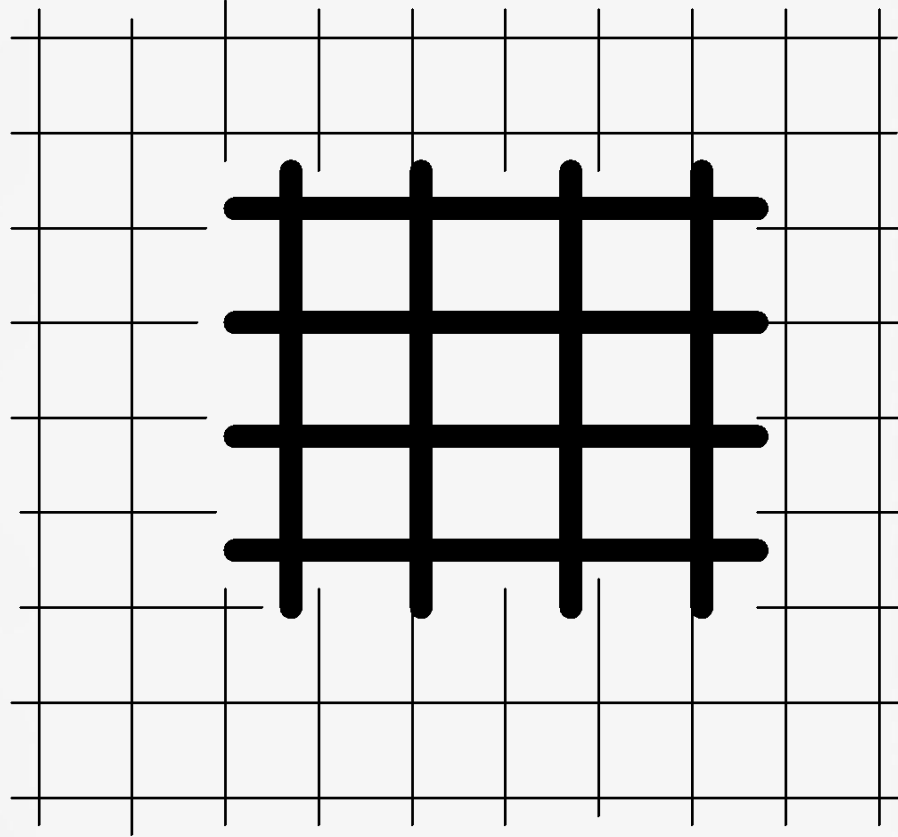
Когерентные межфазные
границы

МЕЖФАЗНЫЕ ГРАНИЦЫ



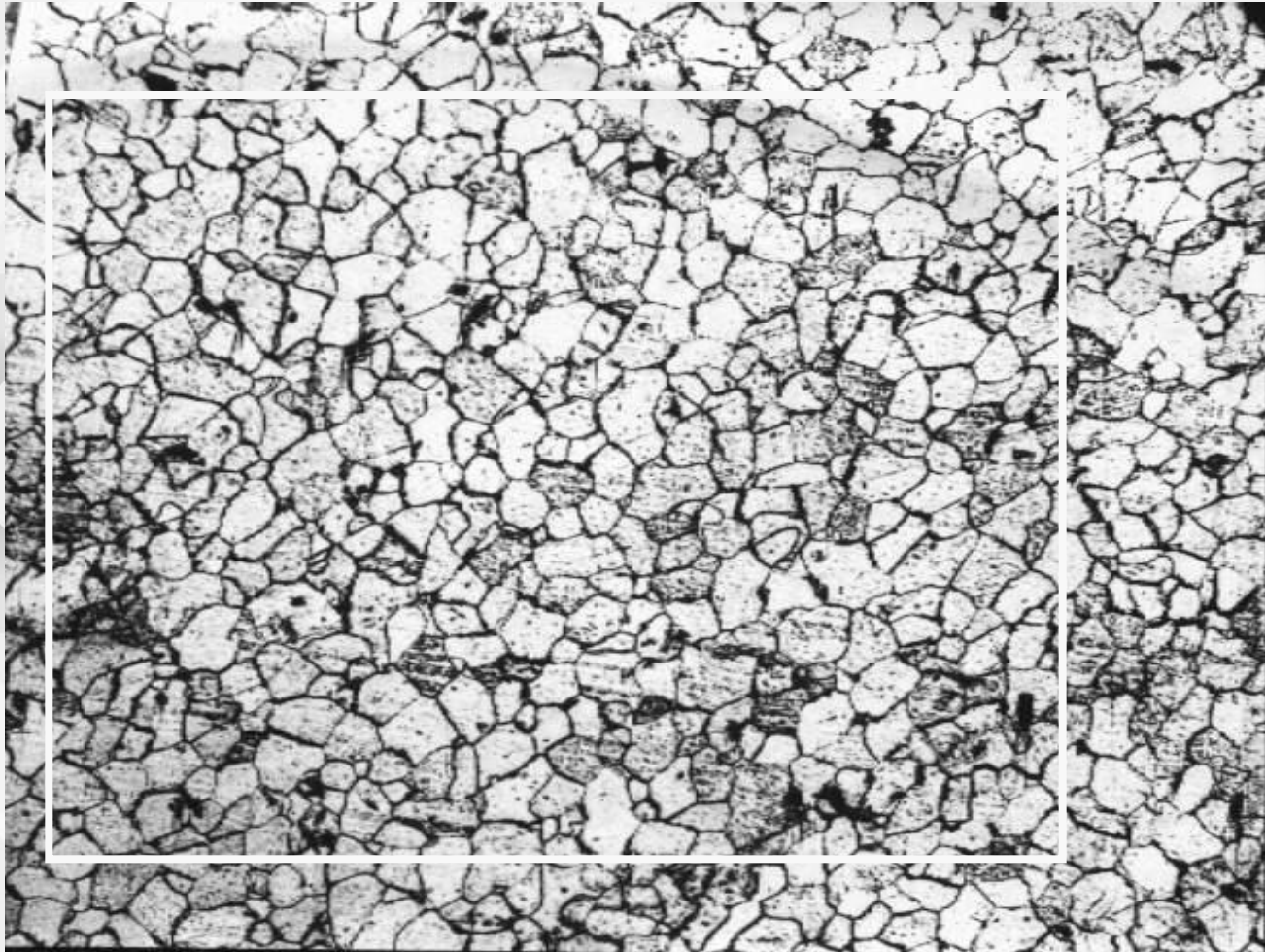
Полукогерентные межфазные
границы

МЕЖФАЗНЫЕ ГРАНИЦЫ



Некогерентные межфазные
границы

Поверхностные дефекты



Границы зёрен в железе выявлены травлением

Поверхностные дефекты

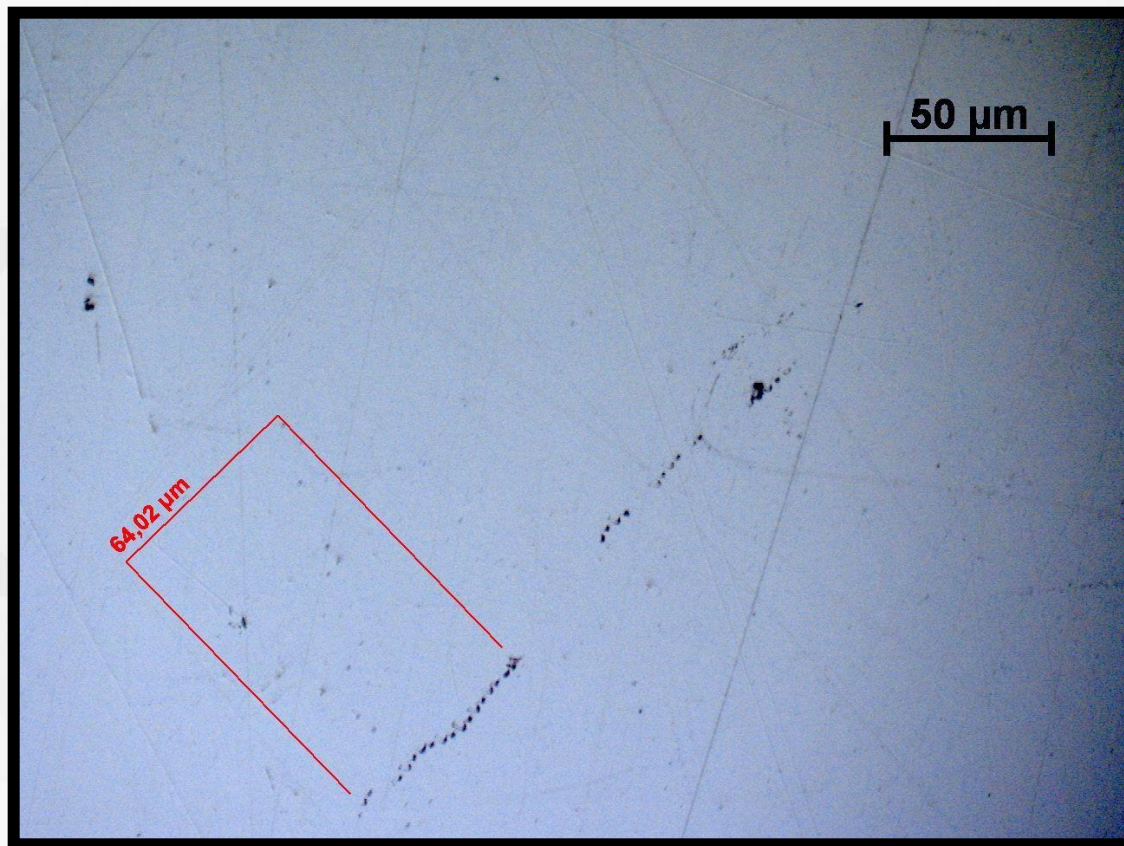
Имеются участки, разориентированные один относительно другого на несколько градусов . Эти участки называются *фрагментами*. Процесс деления зерен на фрагменты называется *фрагментацией* или *полигонизацией*.

В свою очередь каждый фрагмент состоит из блоков, размерами менее 10 мкм, разориентированных на угол менее одного градуса . Такую структуру называют *блочной* или *мозаичной*.

Объёмные дефекты

К **объемным (трехмерным) дефектам** относят такие, которые имеют размеры в трех измерениях: *неметаллические включения, царапины, макроскопические трещины, поры* и т. д.

Объёмные дефекты



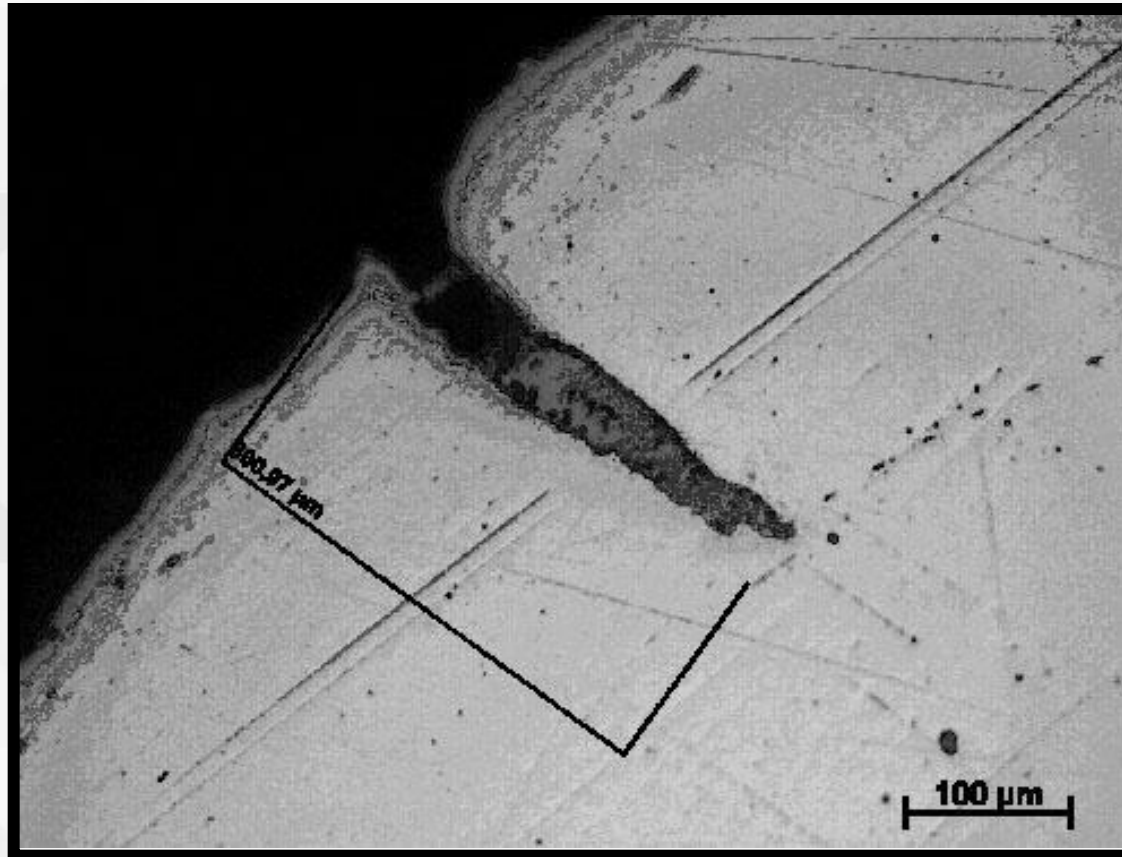
Неметаллические включения

Объёмные дефекты



Неметаллические включения

Объёмные дефекты



Неметаллические включения – места зарождения трещин

Объёмные дефекты



Кованая заклёпка

Хрупкое разрушение корпуса судна

Одна из возможных причин – наличие в металле корпуса (или в сварных швах, в заклёпках) неметаллических включений.

Объёмные дефекты



Под углом в 22° корма «Титаника» отломилась от корпуса между третьей и четвёртой дымовыми трубами.