

**И.И.Новиков
К.М.Розин**

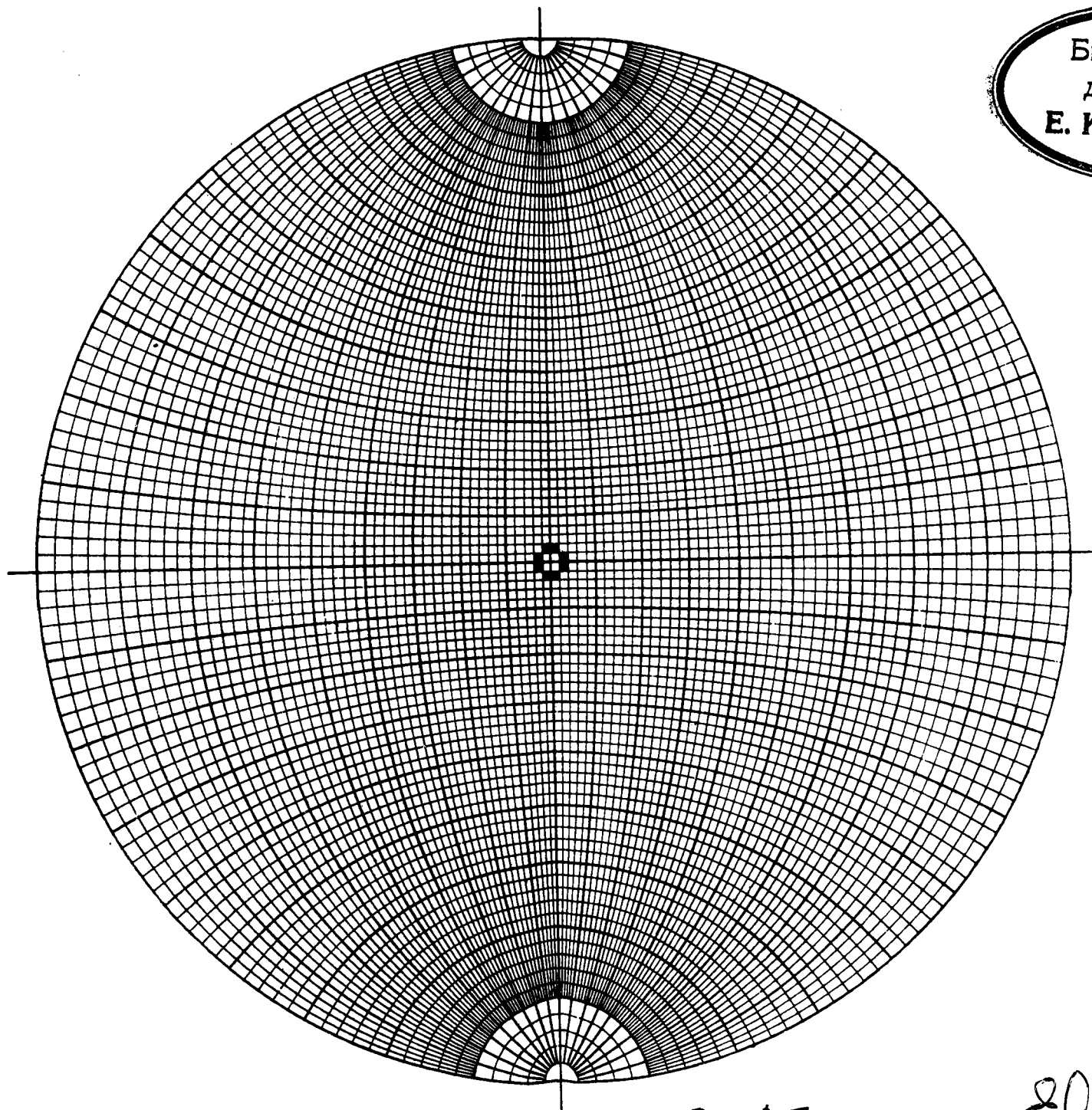
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ



И.И.НОВИКОВ, К.М.РОЗЯН



Библиотека
доцента
Е. И. Яковлева



17-25

Elmoh

И. И. НОВИКОВ, К. М. РОЗИН

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Допущено Государственным комитетом СССР
по народному образованию в качестве учебника
для студентов вузов, обучающихся по специальности
«Металловедение, оборудование и технология
термической обработки металлов»



МОСКВА, «МЕТАЛЛУРГИЯ», 1990

Рецензенты: кафедра термообработки и физики металлов УПИ; докт. хим. наук, проф. А. А. Елисеев

Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. Учебник для вузов/Новиков И. И., Розин К. М. М.: Металлургия, 1990, 336 с.

Рассмотрены методы индирования направлений и плоскостей в кристаллах и построения стереографических проекций. Изложены стандартные способы описания кристаллических структур и на основе кристаллохимических представлений даны характеристики важнейших структурных типов фаз в металлических сплавах; элементарная теория дефектов решетки, определяющих важнейшие свойства металлов и изменения их структуры при обработке и эксплуатации. Рассмотрены вакансии, межузельные атомы, дислокации, дискликации, дефекты упаковки, мало- и высокоугловые границы, зернограничные дислокации и взаимодействие дефектов разного вида. Приведены задачи и упражнения, помогающие усвоить теоретические положения. Ил. 238. Табл. 19. Библиогр. список: 19 назв.

Н 2608000000—044
040(01)—90 57—90

ISBN 5-229-00519-X

© И. И. Новиков, К. М. Розин,
издательство «Металлургия», 1990

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	7
Введение	8
Часть 1. КРИСТАЛЛОГРАФИЯ	10
Глава 1. Законы геометрической кристаллографии. Символы направлений и плоскостей	10
§ 1. Пространственная решетка	10
§ 2. Определение символов направлений и атомных рядов	12
1. Определение направления с помощью полярных координат	12
2. Метод стереографической проекции	13
3. Кристаллографическая сетка Вульфа	13
4. Определение символа направления в кристалле	14
§ 3. Определение символов плоскостей	17
1. Определение символа плоскости по отрезкам (параметрам)	17
2. Определение символа атомной плоскости по символам атомных рядов	20
3. Определение символа атомной плоскости по координатам трех узлов пространственной решетки	22
§ 4. Индирование гексагональных и тригональных кристаллов	24
1. Индирование плоскостей	25
2. Индирование направлений	29
§ 5. Классы симметрии и координатные системы для описания кристаллов	30
1. Элементы симметрии кристаллических многогранников	30
2. Классы симметрии, сингонии, категории кристаллов. Координатные системы для описания кристаллов	39
§ 6. Зоны в кристаллах	51
Глава II. Структурная кристаллография и кристаллохимия	58
§ 7. Элементы симметрии кристаллических структур	58
§ 8. Пространственные группы симметрии кристаллических структур	69
1. Определение типа пространственной решетки Браве и правила выбора элементарной ячейки в кристаллической структуре	71
2. Определение символа пространственной группы симметрии	76
§ 9. Правильные системы точек и базис кристаллической структуры	78
1. Правильные системы точек	79
2. Базис кристаллической структуры	81
§ 10. Влияние различных факторов на кристаллическую структуру	84
1. Определение атомных радиусов	84
2. Определение ионных и ковалентных радиусов	86
3. Влияние кристаллохимических факторов на кристаллическую структуру	91
4. Влияние внешних факторов на кристаллическую структуру	94
§ 11. Плотнейшие шаровые упаковки в кристаллических структурах	98
1. Характеристики плотнейших шаровых упаковок	100
2. Правила определения плотнейших шаровых упаковок в кристаллических структурах	105
3. Координационные многогранники Полинга—Белова	109
§ 12. Структурные типы фаз в металлических сплавах	110
1. Структурный тип меди (A1)	111
2. Структурный тип вольфрама или α -железа (A2)	111
3. Структурный тип магния (A3)	111
4. Структурный тип алмаза (A4)	112
5. Структурный тип белого олова (A5)	112
6. Структурный тип NiAs (B8)	113

7. Структурный тип CsCl (B2)	113
8. Структурный тип CaF ₂ (C1)	113
9. Структурный тип AuCu ₃ (L1 ₂)	113
10. Структурный тип θ—CuAl ₂ (C16)	114
11. Структурный тип MgCu ₂ (C15)	115
12. Структурный тип MgZn ₂ (C14)	116
13. Структурный тип MgNi ₂ (C36)	117
§ 13. Эпитаксиальные и двойниковые кристаллические структуры	117
1. Эпитаксиальные кристаллические структуры	117
2. Двойниковые кристаллические структуры	122
Часть 2. ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ	127
Глава III. Точечные дефекты	127
§ 14. Виды точечных дефектов	127
§ 15. Термодинамика точечных дефектов	130
§ 16. Миграция точечных дефектов	133
1. Миграция вакансий	133
2. Миграция межузельных атомов	135
3. Миграция примесных атомов	136
§ 17. Источники и стоки точечных дефектов	137
§ 18. Комплексы точечных дефектов	137
1. Вакансионные комплексы	138
2. Комплексы собственный дефект—примесный атом	140
§ 19. Поведение вакансий при закалке и отжиге	142
1. Закалка	142
2. Отжиг	143
§ 20. Методы определения концентрации вакансий, энергии их образования и миграции	144
1. Концентрация вакансий и энергия их образования	144
2. Энергия активации миграции вакансий	147
Глава IV. Основные типы дислокаций и их движение	148
§ 21. Краевая дислокация	148
§ 22. Скольжение краевой дислокации	151
§ 23. Переползание краевой дислокации	156
§ 24. Винтовая дислокация	158
§ 25. Скольжение винтовой дислокации	162
§ 26. Смешанные дислокации и их движение	165
§ 27. Призматические дислокации	170
§ 28. Вектор Бюргерса	172
§ 29. Плотность дислокаций	178
§ 30. Методы выявления дислокаций в металлах	178
1. Метод ямок травления	179
2. Дифракционная (просвечивающая) электронная микроскопия	180
Глава V. Упругие свойства дислокаций	183
§ 31. Энергия дислокации	183
§ 32. Силы, действующие на дислокацию	187
§ 33. Упругое взаимодействие параллельных краевых дислокаций	189
§ 34. Упругое взаимодействие параллельных винтовых дислокаций	192
Глава VI. Дислокации в типичных металлических структурах	193
§ 35. Подразделение дислокаций на полные и частичные	193
§ 36. Энергетический критерий дислокационных реакций	195
§ 37. Дефекты упаковки	196
§ 38. Характерные полные (единичные) дислокации	202
1. Полные дислокации в г.п. решетке	202

2. Полные дислокации в г.ц.к. решетке	206
3. Полные дислокации в о.ц.к. решетке	208
§ 39. Частичные дислокации Шокли. Растянутые дислокации	210
1. Частичные дислокации Шокли в г.п. решетке	210
2. Частичные дислокации Шокли в г.ц.к. решетке	216
3. Частичные дислокации Шокли в о.ц.к. решетке	219
4. Ширина растянутых дислокаций	221
§ 40. Частичные дислокации Франка	223
§ 41. Стандартный тетраэдр и дислокационные реакции в г.ц.к. решетке	226
1. Стандартный тетраэдр Томпсона	226
2. Вершинные дислокации и дислокации Ломер — Коттрелла	230
3. Тетраэдр дефектов упаковки	233
§ 42. Стандартная бипирамида и дислокационные реакции в г.п. решетке	234
§ 43. Дислокационные реакции в о.ц.к. решетке	236
§ 44. Поперечное скольжение и переполизация растянутых дислокаций	240
§ 45. Двойникующая дислокация	243
§ 46. Дислокации в упорядоченных сплавах	245
Глава VII. Пересечение дислокаций	247
§ 47. Пересечение единичных дислокаций	247
1. Пересечение краевых дислокаций	247
2. Пересечение краевой и винтовой дислокаций	250
3. Пересечение винтовых дислокаций	251
§ 48. Движение дислокаций с порогами	253
§ 49. Пересечение растянутых дислокаций	255
Глава VIII. Взаимодействие дислокаций с точечными дефектами	257
§ 50. Взаимодействие дислокаций с примесными атомами	257
1. Атмосферы Коттрелла	257
2. Атмосферы Снука	261
3. Атмосферы Сузуки	262
§ 51. Взаимодействие дислокаций с вакансиями и межузельными атомами	262
Глава IX. Образование дислокаций	264
§ 52. Происхождение дислокаций	264
§ 53. Размножение дислокаций при пластической деформации	267
1. Источник Франка—Рида	267
2. Источник Бардина—Херринга	272
Глава X. Дисклинации	273
§ 54. Дисклинации в непрерывной упругой среде	273
§ 55. Дисклинации в кристаллической решетке	276
Глава XI. Границы зерен и субзерен	279
§ 56. Малоугловые границы	279
§ 57. Высокоугловые границы	283
1. Специальные и произвольные границы	284
2. Зернограницные дислокации	288
Глава XII. Торможение дислокаций	293
§ 58. Сила Пайерлса	293
§ 59. Торможение дислокаций при их взаимодействии с другими дислокациями и границами зерен	295
§ 60. Торможение дислокаций дисперсными частицами	298
1. Выгибание дислокаций между дисперсными частицами	298
2. Локальное поперечное скольжение	299

3. Перерезание дислокациями дисперсных частиц	300
§ 61. Торможение дислокаций атомами примесей и легирующих элементов	301
1. Торможение дислокаций атмосферами Коттрелла, Сузуки и Снука	301
2. Торможение дислокаций в твердых растворах	302
Задачи и упражнения к части 1	303
Задачи и упражнения к части 2	305
Приложение А. Определение нормали к плоскости (hkl)	311
Приложение Б. Обратная пространственная решетка и расчетные формулы для определения межплоскостных расстояний и углов между направлениями	312
Приложение В. Преобразование символов направлений и плоскостей при изменении выбора элементарной ячейки	317
Приложение Г. Построение стандартных стереографических проекций	319
Приложение Д. Формулы для кристаллографических расчетов	320
Приложение Е. Кристаллическая структура металлов, неметаллов и двойных соединений	322
Рекомендуемый библиографический список	332
Предметный указатель	333

ПРЕДИСЛОВИЕ

Двухсеместровый курс лекций «Кристаллография и дефекты кристаллической решетки» изучают студенты, специализирующиеся в области металловедения и термической обработки металлов, на втором году обучения. Этот курс является одним из базовых для преподавания таких дисциплин металловедческого цикла, как рентгенография и электронная микроскопия, металлография, физика металлов, теория термической обработки и механические свойства металлов.

Учебник, состоящий из двух частей, написан на основе многолетнего опыта чтения соответствующего курса авторами в Московском институте стали и сплавов.

В первой части в сравнительно сжатой форме дано систематическое изложение основных понятий и методов структурной кристаллографии и кристаллохимии, используемых при решении металловедческих вопросов. Сложный математический аппарат намеренно не применяли. Вместе с тем, использование общедоступных приемов векторной алгебры позволило сделать изложение достаточно строгим: большинство выводов применимо к кристаллам с ортогональными осями координат и к кристаллам с косоугольными координатными системами.

Во второй части изложены основы теории дефектов кристаллического строения металлов в объеме, который позволяет в основном в качественной форме проанализировать многие металловедческие задачи. Приложения теории дефектов к анализу фазовых превращений, пластической деформации и разрушения, механических и физических свойств не рассматриваются, так как эти вопросы являются неотъемлемой частью соответствующих самостоятельных разделов металловедения, физики металлов, теории термической обработки и механических свойств. Главная трудность для начинающих — овладение чисто геометрическими представлениями теории дефектов кристаллической решетки. Поэтому во второй части книги большое внимание уделено модельным представлениям о расположении и движении атомов в области несовершенств в типичных металлических решетках.

Первая часть учебника написана канд. техн. наук, доц. К. М. Розиным, вторая — докт. техн. наук, проф. И. И. Новиковым.

В конце книги помещены задачи и упражнения по кристаллографии и теории дефектов, которые должны помочь читателю в усвоении теоретического материала.

Хотя книга написана как учебник для студентов-металловедов, она может служить учебным пособием по отдельным разделам кристаллографии и учения о дефектах кристаллической решетки для студентов других инженерных специальностей,

а также может быть использована инженерами для самообразования.

Авторы благодарны коллективу кафедры термобработки и физики металлов Уральского политехнического института (зав. кафедрой — докт. техн. наук, проф. М. И. Гольдштейн; рецензенты — докт. техн. наук, доц. А. А. Попов и канд. техн. наук, доц. В. Г. Черемных) за подробный анализ рукописи, сделанный ими при рецензировании. При подготовке учебника были учтены замечания докт. хим. наук, проф. А. А. Елисеева, которые помогли улучшить содержание книги.

Авторы выражают искреннюю признательность докт. техн. наук, доц. В. К. Портному и преподавателям кафедры рентгенографии и физики металлов МИСиС докт. техн. наук, проф. Г. Н. Эпштейну, канд. физ.-мат. наук, доц. Н. П. Дьяковой и канд. техн. наук, доц. А. И. Новикову за просмотр рукописи и критические замечания.

ВВЕДЕНИЕ

Представление о кристалличности металлических зерен, из которых состоит подавляющее большинство промышленных металлических материалов, является фундаментальным для всего металловедения. Это представление, возникшее в XIX в., позволило рассматривать строение металлов и сплавов с позиций строгой физической теории.

Первоначально кристаллография развивалась в тесной связи с минералогией. Наблюдения естественной плоской огранки природных кристаллов послужили основой для предположения об упорядоченном расположении атомов в кристалле, получившего впоследствии прямое экспериментальное доказательство при изучении дифракции рентгеновских лучей. Было показано, что возникновение огранки не является обязательным признаком кристаллического состояния. Например, металлические зерна — кристаллы, как правило, не имеют огранки, которую можно получить лишь в определенных условиях кристаллизации. Атомы в любом кристалле, при любой его форме, располагаются строго периодически, как узлы трехмерной пространственной решетки.

В современной кристаллографии можно выделить четыре направления, которые в известной мере связаны одно с другим:

геометрическую кристаллографию, изучающую различные формы кристаллов и законы их симметрии;

структурную кристаллографию и кристаллохимию, которые изучают пространственное расположение атомов в кристаллах и зависимость его от химического состава и условий образования кристаллов;

кристаллофизику, изучающую влияние внутреннего строения кристаллов на их физические свойства;

физико-химическую кристаллографию, которая изучает вопросы образования искусственных кристаллов.

В настоящем учебнике рассматриваются два первых направления. К этим направлениям классической кристаллографии примыкает учение о дефектах структуры реальных кристаллов. Интерес к отступлениям от правильного внутреннего строения кристаллов, к разного рода дефектам кристаллической структуры, которые оказывают решающее влияние на прочность, пластичность, многие физические свойства и разнообразные процессы структурных изменений в металлических материалах, стал быстро возрастать, начиная с середины тридцатых годов. Для металловедения весьма важно то, что в настоящее время экспериментально можно определять количество и расположение разного типа дефектов кристаллической структуры непосредственно в промышленных сплавах, изучать появление, перераспределение и исчезновение этих дефектов при литье, обработке давлением, термической обработке и эксплуатации изделий. Это не только позволяет глубже понять поведение металлических материалов в разных условиях обработки и эксплуатации, но и открывает новые возможности для целенаправленного формирования оптимальной кристаллической структуры с заданным количеством и распределением дефектов структуры, которые обеспечивают требуемые свойства материалов.

часть 1 КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Глава I ЗАКОНЫ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ. СИМВОЛЫ НАПРАВЛЕНИЙ И ПЛОСКОСТЕЙ

§ 1. Пространственная решетка

Кристалл представляет собой сложное периодическое пространственное расположение материальных частиц: атомов, ионов или молекул. Периодический характер расположения этих частиц является главной отличительной особенностью внутреннего строения кристаллических веществ и проявляется в строгом чередовании через равные расстояния: атомов — в атомных рядах, самих атомных рядов — в атомных плоскостях и, наконец, атомных плоскостей — в кристалле. В качестве примера, отражающего закономерное внутреннее строение кристалла, можно привести его схематическое изображение в виде пакета параллельных атомных плоскостей (рис. 1).

Каждому кристаллическому веществу свойственны свои собственные межатомные и межплоскостные расстояния, а также свои значения углов между пересекающимися атомными рядами и атомными плоскостями, которые сводятся в специальные справочные таблицы и служат специфическими признаками конкретного кристаллического вещества.

Для описания закономерного внутреннего строения кристаллов применяют трехмерную *пространственную решетку*. Периодическому расположению атомов в кристалле соответствует периодическое расположение узлов — математических точек в пространственной решетке. Между кристаллической структурой и ее пространственной решеткой существует геометрическое и размерное соответствие: если один из узлов пространственной решетки совместить с центром любого атома кристаллической структуры, то все остальные узлы соответствующим образом ориентированной пространственной решетки при этом совместятся с центрами идентичных атомов.

В качестве примера на рис. 2 приведена пространственная решетка, которая соответствует простейшей кристаллической структуре, показанной на рис. 1. Различие сопоставляемых рисунков сводится к тому, что на одном показана схема пространственного расположения атомов в кристалле, на другом — пространственное расположение математических точек — узлов пространственной решетки. Межатомным расстояниям в кристалле соответствуют точно такие же расстояния в пространственной решетке. Атомные ряды и атомные плоскости кристалла параллельны соответствующим узловым рядам и узловым плоским сеткам пространственной решетки.

Совокупность узлов пространственной решетки можно описать с помощью радиусов-векторов типа $\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$, где

\vec{a} , \vec{b} , \vec{c} — координатные базисные векторы, ориентированные параллельно плотнейшим атомным рядам кристаллической структуры и равные по модулю соответствующим межатомным расстояниям, а m , n , p принимают любые целочисленные значения (от $-\infty$ до $+\infty$, включая нуль). Величины межатомных расстояний вдоль координатных направлений ($|\vec{a}|$, $|\vec{b}|$, $|\vec{c}|$) называются *параметрами* или *периодами* кристаллической структуры и являются важнейшими характеристиками кристаллов.

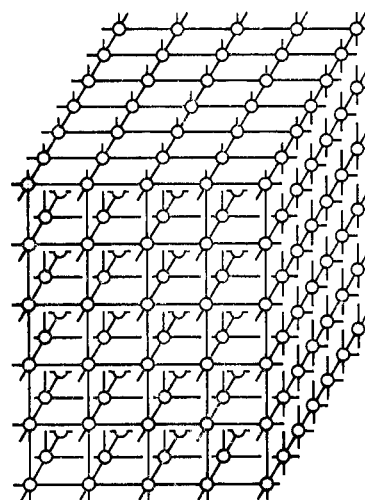


Рис. 1. Схема периодического строения кристалла в виде пакета параллельных атомных плоскостей

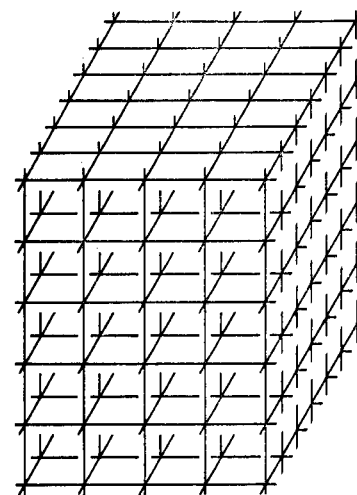


Рис. 2. Пространственная решетка кристаллической структуры, приведенной на рис. 1

Благодаря указанному описанию всю бесконечную пространственную решетку можно разбить на одинаковые повторяющиеся *элементарные параллелепипеды* с ребрами \vec{a} , \vec{b} и \vec{c} . Таким же образом всю кристаллическую структуру можно представить как совокупность повторяющихся *элементарных ячеек* в форме параллелепипеда, вплотную примыкающих одна к другой. Такие параллелепипеды часто называют *параллелепипедами повторяемости* (или порождающими параллелепипедами).

В рассмотренных примерах центры атомов кристаллической структуры можно совместить с узлами пространственной решетки. При этом используют лишь целочисленные координаты радиусов-векторов $\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$. Однако ту же пространственную решетку можно применять для описания любых атомов кристаллической структуры, даже если их координаты не являются целочисленными, что характерно для большинства кристаллических структур $\vec{R}' = (m+x)\vec{a} + (n+y)\vec{b} + (p+z)\vec{c}$, где $0 < (x, y, z) < 1$. Следует отметить, что узлы пространственной решетки могут не совпадать с центрами атомов, но при этом все узлы пространственной решетки будут располагаться в совершенно идентичных положениях по отношению к атомному окружению. Соот-

ветствующие правила выбора начала координат при описании кристаллических структур регламентируются Международными кристаллографическими таблицами.

Следует отметить, что выбор координатных направлений в кристалле во многих случаях удается провести с помощью естественной огранки кристалла. В соответствии с законом Браве естественная (самопроизвольная) огранка кристалла образуется в большинстве случаев такими гранями, которые соответствуют наиболее плотноупакованным атомным плоскостям, т. е. атомным плоскостям с максимальным или относительно высоким количеством атомов, приходящихся на единицу площади (Браве называл такие атомные плоскости плоскостями с максимальной ретикулярной плотностью). Если грани кристалла — плотнейшие атомные плоскости, то ребра как линии пересечения таких плоскостей представляют собой наиболее плотные атомные ряды. Таким образом, ребра элементарного параллелепипеда и ребра кристалла могут быть ориентированы одинаковым образом.

§ 2. Определение символов направлений и атомных рядов

Наличие сильной зависимости свойств кристаллов от направления (анизотропия) делает очень важной задачу правильного выбора заданного направления в кристалле и его описания.

1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ НАПРАВЛЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ ПОЛЯРНЫХ КООРДИНАТ

Каждое из направлений в кристалле может быть однозначно определено с помощью полярных координат: *полярного расстояния* ρ — угла между заданным направлением и верти-

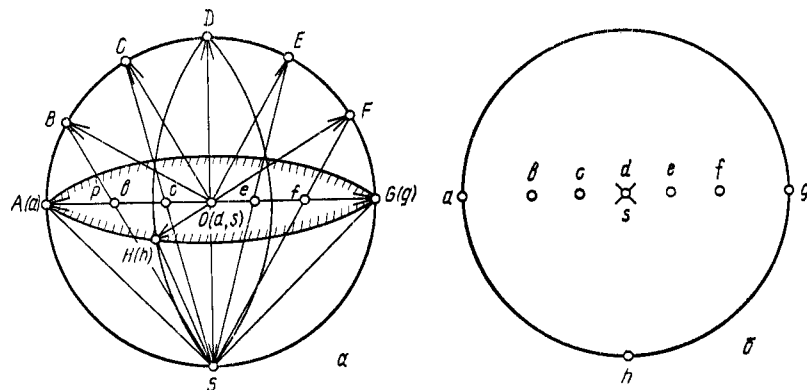


Рис. 3. Схема построения стереографических проекций направлений в кристалле (а) и примеры проекций (б)

калью и *долготы* φ — угла между начальным меридианом и меридианом, который проходит через заданное направление. Долготу отсчитывают вдоль экватора по часовой стрелке от начального меридиана DGS (рис. 3, а).

Приведем в качестве примера полярные координаты некоторых направлений: OH ($\rho=90^\circ$, $\varphi=90^\circ$), OA ($\rho=90^\circ$, $\varphi=180^\circ$), OC ($\rho=30^\circ$, $\varphi=180^\circ$), OD ($\rho=0^\circ$, φ — не указывается), OE ($\rho=30^\circ$, $\varphi=0^\circ$), OF ($\rho=60^\circ$, $\varphi=0^\circ$), OG ($\rho=90^\circ$, $\varphi=0^\circ$), OS ($\rho=180^\circ$, φ — не указывается). При этом особое положение занимают оба полярных направления OD и OS , для обозначения которых достаточно задать лишь величину соответствующего полярного расстояния.

2. МЕТОД СТЕРЕОГРАФИЧЕСКОЙ ПРОЕКЦИИ

Для представления разнообразных пространственных направлений на плоскости и измерения углов между ними применяют метод стереографической проекции. Каждому направлению в кристалле соответствует его стереографическая проекция, которая лежит в экваториальном сечении сферы и обычно изображается в качестве самостоятельного рисунка.

Стереографическую проекцию e кристаллографического направления OE (рис. 3, а) определяют как след пересечения луча зрения SE , проведенного к точке E на сфере из противоположного полюса сферы, с плоскостью экваториального сечения сферы P , которая называется *плоскостью стереографической проекции*. Построенную указанным образом стереографическую проекцию заданного направления выносят на отдельный рисунок (рис. 3, б). Стереографические проекции горизонтальных направлений (OA , OH , OG) располагают на контуре круга проекций (a , h , g), проекции вертикальных направлений (OD и OS) — в центре круга проекций (d и s), проекции наклонных направлений (OB , OC , OE , OF) — между центром и контуром круга проекций (b , c , e , f). Стереографические проекции всех направлений, выходящих на верхнюю полусферу и экватор, принято обозначать полыми кружками, проекции остальных направлений обозначают крестиками.

3. КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ СЕТКА ВУЛЬФА

Для построения стереографических проекций направлений по их полярным координатам (и решения обратной задачи), а также для измерения углов между направлениями по их проекциям применяют кристаллографическую сетку Вульфа, названную по имени ее автора Г. В. Вульфа — профессора Московского Университета. Эта сетка (см. на 2-й стр. обложки) состоит из совокупности стереографических проекций меридиональных дуг сферы с горизонтальной полярной осью, разбитых

на угловы деления через каждые два градуса и предназначенных для измерения угловых расстояний на круге проекций.

Для построения стереографической проекции направления по заданным полярным координатам (ρ , φ) на сетку Вульфа накладывают кальку и наносят на ней контур круга проекций, диаметр которого должен совпадать с диаметром сетки. Затем на кальке проводят два взаимно перпендикулярных диаметра: вертикальный — через полюса сетки и горизонтальный — по экватору сетки. После этого вдоль контура круга проекций от правого края горизонтального диаметра по часовой стрелке откладывают заданную долготу φ . Сделанную при этом отметку на контуре круга совмещают путем поворота кальки с диаметром сетки и откладывают от центра круга по диаметру заданное значение полярного расстояния ρ . Если последнее превышает 90° , то, отсчитав 90° от центра круга до линии контура, оставшуюся часть угла отсчитывают по тому же диаметру, но в обратном направлении: от контура к центру. Затем такие же построения выполняют для каждого заданного направления.

Для определения угла между направлениями по их стереографическим проекциям кальку с нанесенными на ней контуром круга и заданными проекциями накладывают на сетку Вульфа того же диаметра, путем вращения совмещают обе проекции с подходящей меридиональной дугой сетки и отсчитывают искомый угол по участку дуги, заключенному между проекциями. Если заданные проекции лежат на разных полушарах (верхней и нижней), то каждая из проекций должна совместиться с одной из двух меридиональных дуг сетки, расположенных симметрично относительно ее вертикального диаметра. При этом угол между двумя направлениями определяют по сумме двух углов, которым соответствуют участки меридиональных дуг от каждой проекции до полюса.

4. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СИМВОЛА НАПРАВЛЕНИЯ В КРИСТАЛЛЕ

Пространственное положение любого атома кристаллической структуры можно легко описать с помощью координат (компонент) радиуса-вектора, который соединяет два узла пространственной решетки: $0[0; 0; 0]$ и $M[m; n; p]$. Заданное кристаллографическое направление совпадает с радиусом-вектором $\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$ (как отмечено выше, базисные векторы \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} располагаются параллельно наиболее плотным рядам кристаллической структуры, а их модули соответствуют периодам атомных рядов: $|\vec{a}| = a_0$, $|\vec{b}| = b_0$, $|\vec{c}| = c_0$).

Символ заданного кристаллографического направления определяют с помощью трех взаимно простых чисел u , v , w , которые пропорциональны координатам радиуса-вектора \vec{R} :

$$u : v : w = m : n : p.$$

(1)

Полученные три индекса u , v , w , определяющие заданное направление, записывают в квадратных скобках и обычно не разделяют запятыми, поскольку они представляют собой небольшие (однозначные) числа: $[uvw]$.

Такой же результат можно получить, если разложить любой вектор, параллельный заданному направлению, на компоненты \vec{OA} , \vec{OB} , \vec{OC} , каждая из которых параллельна соответствующему базисному вектору:

$$u : v : w = OA/a_0 : OB/b_0 : OC/c_0. \quad (2)$$

Совместим узлы пространственной решетки с центрами атомов кристаллической структуры, фрагмент которой приведен на рис. 4, а, выберем за на-

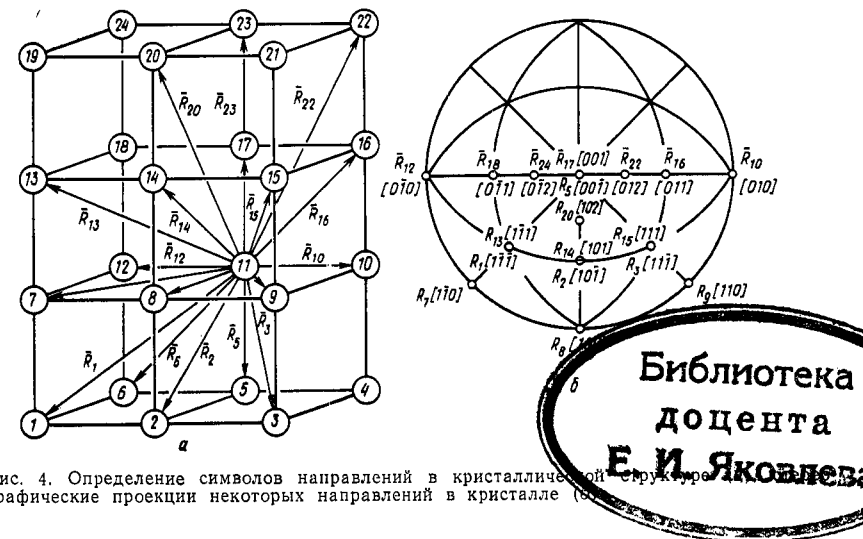


Рис. 4. Определение символов направлений в кристаллической структуре. (а) — кристаллическая структура; (б) — стереографические проекции некоторых направлений в кристалле

чало координат узлов, совпадающий с центром атома 11. Тогда, выбрав базисные векторы вдоль плотнейших атомных рядов $\vec{a} = \vec{R}_8$ (вдоль атомного ряда 11—8), $\vec{b} = \vec{R}_{10}$ (вдоль атомного ряда 11—10) и $\vec{c} = \vec{R}_{17}$ (вдоль атомного ряда 11—17), мы можем по известным координатам определить любое кристаллографическое направление. Например, вектору \vec{R}_1 , соединяющему центры атомов 11 и 1, соответствует направление $[1\bar{1}1]$, вектору \vec{R}_2 — направление $[10\bar{1}]$, \vec{R}_8 — $[100]$, \vec{R}_5 — $[00\bar{1}]$, \vec{R}_{10} — $[010]$, \vec{R}_9 — $[110]$, \vec{R}_{12} — $[0\bar{1}0]$, \vec{R}_{16} — $[011]$, \vec{R}_{17} — $[001]$, \vec{R}_{13} — $[1\bar{1}1]$, \vec{R}_{20} — $[102]$, \vec{R}_{22} — $[012]$, \vec{R}_{23} — $[001]$. При чтении символа каждого направления следует произносить отдельно каждый из индексов, например, символ последнего из приведенных выше направлений читается: ноль — ноль — один, символ направления \vec{R}_1 читается: один — один с минусом — один с минусом.

Символы параллельных направлений совпадают. Так, векторы, соединяющие центры атомов 12—13, 11—14, 10—15, 16—21, соответствуют направлению $[101]$ (читается: один — ноль — один). Действительно, любое направление в кристалле может быть перенесено параллельно самому себе из центра одного атома в центр другого идентичного атома. Стереографические проекции всех упомянутых направлений приведены на рис. 4, б.

Библиотека
доцента
Е. И. Яковлева

Следует отметить, что индексы направления u, v, w численно совпадают с координатами вектора, проведенного из начала координат, в тех случаях, когда соответствующий узел пространственной решетки оказывается ближайшим к началу координат по сравнению с другими узлами, лежащими на том же луче. Указанное совпадение позволяет использовать этот несложный метод для описания направлений в кристалле.

Определим с помощью данного метода символ направления, которое задано центрами двух атомов: 1 и 8 (рис. 4, а). Совместим начало координат пространственной решетки с центром атома 1. Тогда центр другого атома (8) совместится с узлом пространственной решетки, который имеет координаты $[[0; 1; 1]]$. Таким образом получим символ заданного направления $[011]$, совпадающий с символом того же направления, которое определялось вектором \vec{R}_{18} (атомный ряд 11—16). На примере той же кристаллической структуры определим символ другого направления, которое проходит через центры атомов 17 и 7. Примем центр атома 17 за начало координат. Центр атома 7 при данном построении совпадает с узлом пространственной решетки, который имеет координаты $[[1; -1; -1]]$. Следовательно, символ заданного направления $[-1\bar{1}\bar{1}]$ (читается: один — один с минусом — один с минусом). Этим же символом описывается параллельный вектор \vec{R}_1 .

Следует обратить внимание на то, что в обоих последних примерах при определении символов направлений мы учитывали порядок, в котором были заданы атомы: мы принимали направление от первого названного атома ко второму (хотя это не было специально оговорено). Между тем существует множество задач, в которых требуется определить символ атомного ряда и безразлично направление движения вдоль самого ряда. В этом случае вполне приемлем любой порядок задания точек, определяющих направление в кристалле; с любой из этих двух точек можно совместить начало координат подвижной пространственной решетки. Чтобы учесть оба возможных и вполне равноправных результата, которые будут различаться лишь знаками всех индексов, формулу (1) можно несколько видоизменить для определения символов атомных рядов:

$$u:v:w = \pm (m:n:p). \quad (3)$$

Таким образом, если для задачи безразлично конкретное направление движения вдоль прямой линии, например вдоль атомного ряда, то следует использовать формулу (3).

Вернемся теперь к двум последним примерам. С учетом формулы (3) символ атомного ряда, заданного парой атомов 11 и 16, следует записать в следующем виде: $\pm[011]$, т. е. помимо уже известного нам символа $[011]$ добавляется другой равноправный символ того же атомного ряда: $[0\bar{1}\bar{1}]$.

В общем случае, когда ни одна из заданных точек не совпадает с началом координат — $M_1[[m_1; n_1; p_1]]$ и $M_2[[m_2; n_2; p_2]]$, индексы направления определяют из отношения разностей

координат узлов пространственной решетки, соответствующих двум заданным точкам кристалла:

$$u:v:w = \pm (m_2 - m_1) : (n_2 - n_1) : (p_2 - p_1). \quad (4)$$

Возвращаясь к кристаллической структуре, приведенной на рис. 4, а, для направления, заданного атомами 17 и 7, с помощью формулы (4) запишем: $u:v:w = \pm (1 - 0) : (\bar{1} - 0) : (0 - 1) = \pm (1 : \bar{1} : \bar{1})$, что полностью совпадает с ранее полученным результатом. Добавим, что если одному из узлов пространственной решетки соответствуют координаты $[[0; 0; 0]]$, то определение символа направления $[uvw]$ сводится к формуле (1).

Особый случай описания направления в кристалле представляет определение символа нормали к атомной плоскости. Зная символы двух любых непараллельных атомных рядов $[u_1v_1w_1]$ и $[u_2v_2w_2]$, принадлежащих данной атомной плоскости, можно однозначно определить положение нормали этой плоскости n . Действительно, записав выражения для радиусов-векторов, которые параллельны заданным направлениям: $\vec{R}_1 = u_1\vec{a} + v_1\vec{b} + w_1\vec{c}$ и $\vec{R}_2 = u_2\vec{a} + v_2\vec{b} + w_2\vec{c}$, можно определить вектор-нормаль данной плоскости как векторное произведение указанных радиусов-векторов*:

$$\vec{n} = [\vec{R}_1\vec{R}_2] = (v_1w_2 - v_2w_1)[\vec{bc}] + (w_1u_2 - w_2u_1)[\vec{ca}] + (u_1v_2 - u_2v_1)[\vec{ab}]. \quad (5)$$

§ 3. Определение символов плоскостей

6*†

Методы определения символов плоскостей в кристаллах вместе с методами определения направлений составляют единую систему описания, или индентирования кристаллов.

1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СИМВОЛА ПЛОСКОСТИ ПО ОТРЕЗКАМ (ПАРАМЕТРАМ)

Символ плоскости ABC в кристалле можно определить по величине отрезков OA , OB и OC , отсекаемых ею на координатных осях OX , OY и OZ (рис. 5). Зная координаты точек пересечения плоскости ABC с осями координат $A [[a; 0; 0]]$, $B [[0; b; 0]]$ и $C [[0; 0; c]]$, можно записать известное из аналитической геометрии уравнение плоскости в отрезках:

$$x/a + y/b + z/c = 1,$$

которое применимо не только для ортогональных, но и для

* Конкретные случаи определения символов нормалей к плоскостям для различных кристаллов рассмотрены в Приложении А.

косоугольных координатных систем (числа a, b, c в кристаллографии принято называть параметрами плоскости). Заменяя дроби $1/a, 1/b, 1/c$ пропорциональными им взаимно-простыми целыми числами h, k, l :

$$h:k:l = 1/a : 1/b : 1/c, \quad (6)$$

получим уравнение плоскости в следующем виде:

$$hx + ky + lz = n.$$

Коэффициенты этого уравнения h, k, l называются индексами плоскости, а их совокупность, заключенная в круглые скобки, определяет соответствующий символ плоскости в кристалле: (hkl) .

В качестве примера определим символ плоскости по заданным параметрам $a=3, b=2, c=6$. Подставляя значения параметров в формулу (6), получим

$$h:k:l = \frac{1}{a} : \frac{1}{b} : \frac{1}{c} = \frac{1}{3} : \frac{1}{2} : \frac{1}{6} = 2:3:1.$$

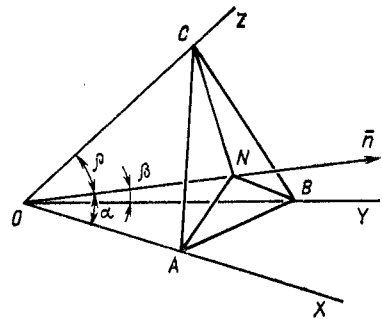


Рис. 5. Определение символа атомной плоскости в кристалле

Следовательно, искомый символ плоскости — (231) .

Основываясь на рассмотренном методе индирования плоскости по заданным параметрам, перейдем к задаче определения символа плоскости по заданным отрезкам OA, OB, OC , которые она отсекает соответственно на координатных осях OX, OY, OZ . Величины отрезков, отсекаемых атомной плоскостью на осях координат, измеряются целым числом осевых единиц — межатомных расстояний вдоль каждой оси a_0, b_0, c_0 :

$$OA = aa_0; \quad OB = bb_0; \quad OC = cc_0.$$

Данные соотношения позволяют определить значения параметров плоскости ABC с тем, чтобы подставить их в формулу (6) и получить новое выражение для определения индексов плоскости по отношениям отрезков, отсекаемых ею на координатных осях:

$$h:k:l = \frac{1}{OA/a_0} : \frac{1}{OB/b_0} : \frac{1}{OC/c_0}. \quad (7)$$

Так, для кристалла с заданным отношением отрезков, отсекаемых на координатных направлениях $OA:OB:OC = 8,79:9,44:\infty$ (последняя запись для отрезка OC означает, что заданная плоскость расположена параллельно координатной

оси OZ) и с известным отношением осевых единиц $a_0:b_0:c_0 = 0,621:1:1,013$, получим отношение индексов:

$$h:k:l = \frac{1}{8,79/0,621} : \frac{1}{9,44/1} : \frac{1}{\infty/1,013} = 2:3:0.$$

Таким образом, мы получили символ плоскости (230) по заданным отрезкам и осевым единицам (эту задачу часто называют *методом индирования* плоскости кристалла по отрезкам).

В некоторых случаях определение символа плоскости в кристалле приходится проводить, когда отношение осевых единиц неизвестно, но заданы помимо отрезков, отсекаемых определяемой гранью или плоскостью кристалла на координатных осях, также соответствующие отрезки для другой грани или плоскости кристалла с известными индексами.

Запишем с помощью формулы (7) выражения для индексов известной плоскости

$$h_1:k_1:l_1 = \frac{1}{OA_1/a_0} : \frac{1}{OB_1/b_0} : \frac{1}{OC_1/c_0},$$

а также для плоскости с неизвестными индексами

$$h:k:l = \frac{1}{OA_2/a_0} : \frac{1}{OB_2/b_0} : \frac{1}{OC_2/c_0}.$$

Разделив одно отношение на другое, получим окончательное выражение для определения индексов плоскости, не содержащее осевых единиц

$$h:k:l = h_1 \frac{OA_1}{OA_2} : k_1 \frac{OB_1}{OB_2} : l_1 \frac{OC_1}{OC_2}. \quad (8)$$

Возвращаясь к рассмотренной задаче, отметим, что если грань с известным символом является единичной $(h_1k_1l_1) = (111)$ (грань с символом (111) условно принято называть «единичной» гранью), то выражение (8) для определения индексов плоскости упростится:

$$h:k:l = \frac{OA_1}{OA_2} : \frac{OB_1}{OB_2} : \frac{OC_1}{OC_2}. \quad (9)$$

Таким образом, для определения символа грани кристалла (или его атомной плоскости) нужно взять отношения отрезков, которые отсекают на осях координат единичная и исследуемая грани кристалла (или соответствующие атомные плоскости). Так, определим символ грани кристалла по заданным отрезкам, которые отсекает эта грань, — $OA_2=2,5$ см, $OB_2=8,65$ см, $OC_2=20,00$ см, с учетом известных значений отрезков, отсекаемых на осях координат единичной гранью того же кристалла,

— $OA_1=10,00$ см, $OB_1=34,60$ см, $OC_1=40,00$ см. Подставляя данные в выражение (9):

$$h:k:l = \frac{10,00}{2,50} : \frac{34,60}{8,65} : \frac{40,00}{20,00} = 2:2:1,$$

получим символ грани (221).

Важный частный случай представляет собой индцирование плоскостей кристаллов по отрезкам *при равенстве осевых единиц* в кристалле ($a_0=b_0=c_0$). Для таких кристаллов (и только для них) выражение для определения индексов по отрезкам (7) записывают в упрощенном виде—без осевых единиц, что позволяет определять индексы плоскостей кристалла как величины, обратно пропорциональные величинам отрезков, отсекаемых плоскостями на координатных осях:

$$h:k:l = \frac{1}{OA} : \frac{1}{OB} : \frac{1}{OC}. \quad (10)$$

Для плоскости в таком кристалле найдем символ по заданному отношению отрезков $OA:OB:OC = (-16,38):12,28:24,56$

$$h:k:l = \frac{-1}{16,38} : \frac{1}{12,28} : \frac{1}{24,56} = \bar{3}:4:2.$$

В итоге получим символ плоскости $(\bar{3}42)$.

2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СИМВОЛА АТОМНОЙ ПЛОСКОСТИ ПО СИМВОЛАМ АТОМНЫХ РЯДОВ

Пусть атомная плоскость задана с помощью двух принадлежащих ей непараллельных друг другу атомных рядов, которые описываются соответствующими символами $[u_1v_1w_1]$ и $[u_2v_2w_2]$. Подобное определение плоскости эквивалентно заданию плоскости с помощью трех точек с координатами: $[[u_1; v_1; w_1]]$, $[[u_2; v_2; w_2]]$ и $[[0; 0; 0]]$, поскольку две первые точки соответствуют координатам радиусов-векторов $\bar{R}_1 = u_1\bar{a} + v_1\bar{b} + w_1\bar{c}$ и $\bar{R}_2 = u_2\bar{a} + v_2\bar{b} + w_2\bar{c}$, исходящими из третьей точки—начала координат $[[0; 0; 0]]$.

Запишем уравнение плоскости (hkl) проходящей через начало координат:

$$hx + ky + lz = 0$$

и определим искомые индексы плоскости из условий принадлежности точек $[[u_1; v_1; w_1]]$ и $[[u_2; v_2; w_2]]$ этой плоскости:

$$hu_1 + kv_1 + lw_1 = 0; \quad hu_2 + kv_2 + lw_2 = 0.$$

После умножения первого уравнения на w_2 и второго уравнения на $(-w_1)$ и их сложения получим отношение индексов h и

k , которое выражено через индексы двух заданных направлений:

$$h:k = (v_1w_2 - v_2w_1) : (w_1u_2 - w_2u_1).$$

Аналогичным образом можем получить отношение для индексов k и l :

$$k:l = (w_1u_2 - w_2u_1) : (u_1v_2 - u_2v_1).$$

Объединяя оба отношения, получим решение поставленной задачи в общем виде:

$$h:k:l = \pm (v_1w_2 - v_2w_1) : (w_1u_2 - w_2u_1) : (u_1v_2 - u_2v_1). \quad (11)$$

В качестве примера определим с помощью выражения (6) символ горизонтальной плоскости кристалла. Для этого возьмем два любых непараллельных один другому вектора, лежащих в горизонтальной плоскости и определяющих положение соответствующих горизонтальных атомных рядов, например, $\bar{R}_2 = \bar{a} + \bar{b}$ и $\bar{R}_3 = \bar{a} + 2\bar{b}$. По определению (1) вектору \bar{R}_2 соответствует направление $[110]$, а вектору \bar{R}_3 —направление с символом $[120]$ (равенство нулю третьих индексов означает, что оба вектора лишены вертикальных компонент, т. е. оба взятых нами вектора лежат в горизонтальной плоскости, символ которой мы и определяем). В соответствии с формулой (6) получаем два символа горизонтальной плоскости:

$$h:k:l = \pm (1 \cdot 0 - 2 \cdot 0) : (0 \cdot 1 - 0 \cdot 1) : (1 \cdot 2 - 1 \cdot 1) = \pm (0:0:1)$$

или $(hkl) = \pm (001)$.

Таким образом мы определили символ заданной атомной плоскости $\pm (001)$.

Для удобства вычисления индексов плоскости по заданным индексам принадлежащих этой плоскости направлений используют мнемоническое *правило «перекрестного умножения»*. Для этого каждый из символов направлений записывают по два раза подряд—в строчку так, чтобы в одной строке были индексы одного направления и чтобы одноименные индексы при такой записи оказались в одинаковых столбцах:

$$\begin{array}{c|ccc|c} u_1 & v_1 & w_1 & u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 & u_2 & v_2 & w_2 \end{array}$$

Затем, отбрасывая крайние столбцы и выполняя перемножение в соответствии со стрелками, т. е. крест-накрест, получают результат, отвечающий формуле (11):

$$h:k:l = (v_1w_2 - v_2w_1) : (w_1u_2 - w_2u_1) : (u_1v_2 - u_2v_1).$$

Пользуясь правилом перекрестного умножения, найдем символ атомной плоскости ABC , проходящей через три вершины

куба (рис. 6), по заданным символам диагоналей его граней $BC [10\bar{1}]$ и $AB [\bar{1}10]$:

$$\begin{array}{c|ccc|c} 1 & 0 & 1 & 0 & \bar{1} \\ 1 & \bar{1} & 0 & 1 & \bar{1} & 0 \end{array}$$

$$h:k:l = \pm (0 \cdot 0 - \bar{1} \cdot \bar{1}) : (\bar{1} \cdot 1 - 1 \cdot 0) : (1 \cdot \bar{1} - 0 \cdot 1) = \pm (\bar{1} : \bar{1} : \bar{1}).$$

Таким образом, искомый символ плоскости ABC мы определили с точностью до знака: $\pm (111)$, поскольку выбранный порядок перемножения символов может быть произвольным.

Отметим важный результат, который можно получить, подставляя отношение (11) в выражение для нормали к плоскости (5):

$$\bar{n} = h[\bar{b}\bar{c}] + k[\bar{c}\bar{a}] + l[\bar{a}\bar{b}].$$

При равенстве осевых единиц и взаимной перпендикулярности базисных векторов (т. е. для кубических кристаллов, для описания которых применяется привычная декартова система координат) выражение для нормали принимает следующий вид:

$$\bar{n} = h\bar{a} + k\bar{b} + l\bar{c}.$$

Тогда в соответствии с отношением (1), символ, определяющий направление нормали \bar{n} , принимает вид $[hkl]$, поскольку числа h, k, l являются координатами вектора нормали. Таким образом, в данном случае (и только в данном случае!) численные значения индексов плоскости (hkl) и направления ее нормали $[uvw]$ совпадают:

$$h = u; \quad k = v; \quad l = w.$$

Например, нормаль к плоскости $(11\bar{2})$ кубического кристалла описывается с помощью таких же индексов — $[\bar{1}12]$.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СИМВОЛА АТОМНОЙ ПЛОСКОСТИ ПО КООРДИНАТАМ ТРЕХ УЗЛОВ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ РЕШЕТКИ

Положение атомной плоскости в кристалле наряду с описанными методами может быть также определено с помощью совмещенных с этой плоскостью трех узлов пространственной решетки.

Пусть заданы координаты трех узлов пространственной решетки

$$M_1[[m_1; n_1; p_1]], M_2[[m_2; n_2; p_2]] \text{ и } M_3[[m_3; n_3; p_3]].$$

Тогда отношение индексов атомной плоскости можно определить с помощью трех детерминантов:

$$h:k:l = \begin{vmatrix} 1 & n_1 & p_1 \\ 1 & n_2 & p_2 \\ 1 & n_3 & p_3 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} m_1 & 1 & p_1 \\ m_2 & 1 & p_2 \\ m_3 & 1 & p_3 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} m_1 & n_1 & 1 \\ m_2 & n_2 & 1 \\ m_3 & n_3 & 1 \end{vmatrix} \quad (12)$$

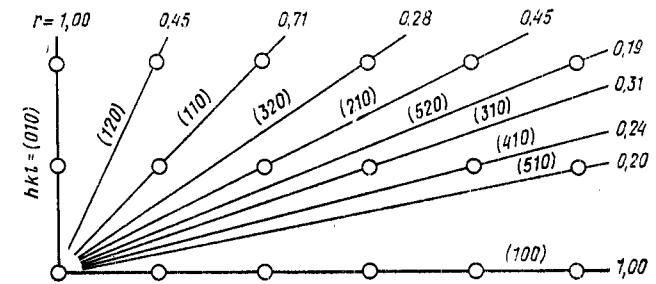


Рис. 7. Значения относительных ретикулярных плотностей для различных атомных плоскостей

С помощью формулы (12) определим символ плоскости, заданной тремя точками $M_1[[1; 1/2; 1]], M_2[[1/2; 1; 1]], M_3[[1; 1; 1/2]]$:

$$h:k:l = \begin{vmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \frac{1}{2} \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \frac{1}{2} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \frac{1}{2} \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 1 \\ \frac{1}{2} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = 1:1:1.$$

В результате получим символ плоскости (111) .

В заключение отметим, что индексы плоскости h, k, l в большинстве случаев выражаются небольшими (однозначными) числами, что непосредственно связано с законом Браве (§ 1). Действительно, наиболее плотноупакованным граням кристалла соответствуют сравнительно высокая ретикулярная плотность, высокая вероятность образования грани на растущем кристалле и небольшие численные значения индексов. Так, с уменьшением ретикулярной плотности r атомных плоскостей увеличиваются значения индексов (рис. 7).

§ 4. Индцирование гексагональных и тригональных кристаллов

Как было показано ранее, кристаллографические символы направлений и плоскостей несмотря на свою простоту характеризуются высокой информативностью: с помощью трех индексов можно однозначно определить положение, которое занимает в кристалле атомный ряд или атомная плоскость, например, по известным индексам можно рассчитать отношение отрезков, которые атомная плоскость отсекает на осях координат. Действительно, поскольку грань растущего кристалла перемещается параллельно самой себе, присоединяя к себе последовательно все новые и новые параллельные идентичные атомные плоскости, то величины углов между гранью, или атомной плоскостью, и осями координат остаются при этом неизменными в течение всего процесса роста кристалла и служат надежными характеристиками ее пространственного расположения. Специфической особенностью описания положения атомных рядов и атомных плоскостей в кристалле является то, что *каждую из семейства параллельных атомных плоскостей в кристаллографии описывают одним и тем же символом* — независимо от величины расстояния между плоскостью и началом координат. Таким же образом *одним и тем же символом описывают любой из параллельных атомных рядов* — независимо от того, проходит ли он через начало координат или не проходит. Следовательно, трех углов с осями координат вполне достаточно, чтобы описать пространственную ориентацию любого атомного ряда или любой атомной плоскости в кристалле.

Прежде чем приступить к рассмотрению особенностей определения символов направлений и плоскостей в указанной группе кристаллов, отметим важную особенность кристаллографических индексов: *все симметрично-равные направления*, или симметрично-равные атомные плоскости, т. е. совершенно одинаковые по своему атомному узору и межатомным расстояниям, но различным образом ориентированные в кристалле, *описываются однократными символами*. Например, однократными являются символы граней куба (рис. 8, а): передняя — (100), правая — (010), задняя — ($\bar{1}00$), левая — (0 $\bar{1}0$), верхняя — (001), нижняя — (00 $\bar{1}$). Однократны также символы его ребер [100], [010], [001], его объемных диагоналей [111], [$\bar{1}\bar{1}1$], [$\bar{1}1\bar{1}$], [$1\bar{1}\bar{1}$] и др., граней октаэдра (рис. 8, б) (111), ($\bar{1}\bar{1}1$), ($\bar{1}1\bar{1}$), ($1\bar{1}\bar{1}$), (11 $\bar{1}$), ($\bar{1}\bar{1}1$), ($\bar{1}1\bar{1}$), его ребер [110], [$\bar{1}\bar{1}0$], [$\bar{1}10$], [$1\bar{1}0$], [101], [$\bar{1}01$], [10 $\bar{1}$], [011], [0 $\bar{1}1$] и т. д. Однократные символы можно представить как комбинации одинаковых индексов, взятых как с положительными, так и с отрицательными знаками. Однотипность символов обязательно наблюдается у равных граней кристалла, у равных его ребер.

Совокупность симметрично-равных направлений обозначают символом $\langle uvw \rangle$. Так, совокупность ребер куба обозначают символом $\langle 100 \rangle$, совокупность его объемных диагоналей — $\langle 111 \rangle$, совокупность ребер октаэдра — $\langle 110 \rangle$. Аналогичным образом совокупность симметрично-равных граней куба обозначают символом {100}, совокупность граней октаэдра — {111}, совокупность любых симметрично-равных граней кристалла или его атомных плоскостей — символом {hkl}.

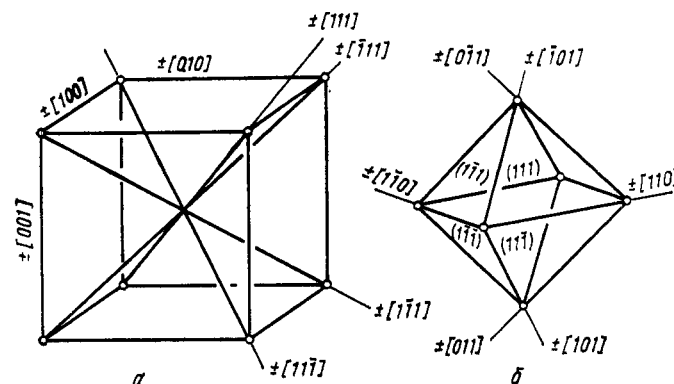


Рис. 8. Символы граней и ребер в кубе (а) и октаэдре (б)

1. ИНДИЦИРОВАНИЕ ПЛОСКОСТЕЙ

К сожалению, условие однотипности символов равных граней кристалла не выполняется при индцировании граней гексагональной призмы (рис. 9, а), которая имеет своим основанием правильный шестиугольник, с помощью обычной, трехосной координатной системы (рис. 9, б). Действительно, если мы попробуем проиндцировать с помощью метода параметров вертикальные грани гексагональной призмы, то получим для них символы различных типов: для граней p_2 , p_3 , p_5 , p_6 , каждая из которых параллельна двум координатным осям, получим символы соответственно (100), (010), ($\bar{1}00$), (0 $\bar{1}0$), в то время как для граней p_1 и p_4 , которые пересекают обе горизонтальные оси координат и параллельны только одной вертикальной координатной оси, получим символы другого типа — ($1\bar{1}0$) и (110). Указанное несоответствие устраняется, если к трем обычным координатным осям OX , OY и OZ условно добавить еще одну координатную ось OU , которая лежит в горизонтальной плоскости и располагается на биссектрисе между отрицательными полуосями ($-OX$) и ($-OY$), как показано на рис. 9, в. Вводя при этом дополнительный индекс i , будем записывать в соответствии с методом параметров отношение индексов в виде

$$h : k : i : l = \frac{1}{OA/a_0} : \frac{1}{OB/b_0} : \frac{1}{OE/e_0} : \frac{1}{OC/c_0},$$

который отличается от соответствующего выражения (8) для метода параметров кроме дополнительного индекса i наличием отношения отрезка OE , отсекаемого плоскостью на новой координатной оси (OU), к соответствующей осевой единице e_0 . Учитывая, что в новой координатной системе осевые единицы для трех горизонтальных координатных осей равны одна другой $a_0 = b_0 = e_0$, последнее выражение для определения индексов плоскости в указанной группе кристаллов перепишем в окончательном виде:

$$h:k:i:l = \frac{1}{OA} : \frac{1}{OB} : \frac{1}{OE} : \frac{1}{(a_0/c_0) OC}. \quad (13)$$

Возвращаясь к индизированию вертикальных граней гексагональной призмы и используя новую четырехосную систему координат

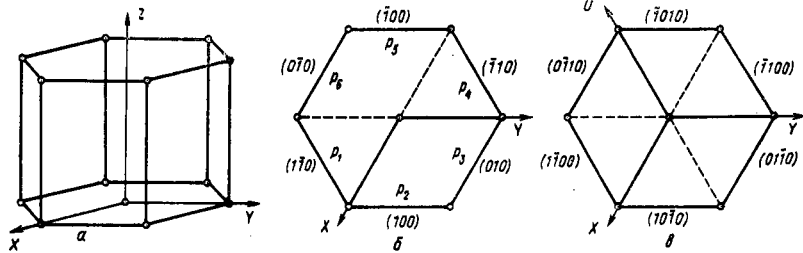


Рис. 9. Индизирование граней гексагональной призмы (а) в трехосной (б) и четырехосной (в) координатных системах

ординат (рис. 9, в), с помощью формулы (13) получим однотипные (так называемые «четырёхосные») символы. Так, для грани p_1 , которая параллельна осям OU и OZ , отрезок, отсекаемый на оси OX [в формуле (13) он обозначен OA], равен по величине и противоположен по знаку отрезку, который эта грань отсекает на отрицательной полуоси OY [в формуле (13) он обозначен OB], получаем отрезки $OA = -OB$, $OE = \infty$, $OC = \infty$, откуда определяем символ грани $p_1 - (1\bar{1}00)$. Таким же образом для грани p_2 получим $OA = -OE$, $OB = \infty$, $OC = \infty$ и символ $(10\bar{1}0)$; символы других граней: $p_3 (01\bar{1}0)$, $p_4 (\bar{1}100)$, $p_5 (1010)$, $p_6 (0\bar{1}10)$. Все полученные символы равных граней гексагональной призмы оказались однотипными — $\{1\bar{1}00\}$; каждый из них имеет по два нулевых и по два единичных индекса. Отметим, что символы параллельных граней, расположенных по разные стороны от начала координат, различаются только своими знаками. Для горизонтальной (верхней) грани получим $OA = \infty$, $OB = \infty$, $OE = \infty$ и символ (0001) .

Между четырехосными индексами существует простое соотношение

$$h + k + i = 0, \quad (14)$$

которое облегчает переход от известного трехосного символа к четырехосному, и обратно. Например, зная трехосный символ грани $p_2 (100)$, можно с помощью выражения (14) найти неизвестный четвертый индекс:

$$i = -(h + k) = -(1 + 0) = -1.$$

В результате получим четырехосный символ $(10\bar{1}0)$, что соответствует нашим прежним расчетам.

Следует отметить, что рассмотренный нами дополнительный индекс i обычно применяют для того, чтобы выявить в кристалле симметрично-равные, эквивалентные плоскости. Поскольку этот индекс не используют для расчета таких фундаментальных характеристик кристалла, как межплоскостные расстояния, углы между плоскостями, углы между плоскостями и координатными направлениями, его при записи иногда заменяют точкой и называют «немым» или «непроизносимым» индексом. Так, вместо полной записи символа плоскости $(2\bar{1}\bar{1}0)$ можно встретить $(2\bar{1}.0)$.

Примеры индизирования граней гексагональных кристаллов приведены на рис. 10, а и б.

Для описания плоскостей в тригональных кристаллах, например граней тригональной пирамиды с основанием в виде правильного равностороннего треугольника, наряду с четырехосной иногда применяют специальную, ромбоэдрическую систему координат. В отличие от рассмотренной нами четырехосной системы координат, где каждая из трех горизонтальных осей координат OX , OY , OU составляющих одна с другой равные углы по 120° , образует прямой угол с вертикальной осью координат, ромбоэдрическая система имеет три оси координат X' , Y' , Z' , причем все они направлены вдоль ребер ромбоэдра, отклонены на одинаковые углы от вертикали и составляют одна с другой равные углы (рис. 11). Все три осевые единицы в ромбоэдрической системе равны ($a_0 = b_0 = c_0$), в то время как в четырехосной системе были равны только три из четырех осевых единиц ($a_0 = b_0 = e_0 \neq c_0$). Описание кристалла с помощью четырехосной системы часто называют в литературе *установкой Браве* в отличие от его описания в ромбоэдрической системе, которое называют *R-установкой*.

Определение символов плоскости в *R-установке* производят теми же методами, что и для других трехосных систем, но с учетом особой ориентации осей координат и соотношения между осевыми единицами. Например, соотношение между индексами R_1 , R_2 , R_3 в ромбоэдрической системе в методе отрез-

ков формально совпадает с выражением (10) для индирования кристаллов, у которых мы отмечали равенство осевых единиц

$$R_1 : R_2 : R_3 = \frac{1}{OA} : \frac{1}{OB} : \frac{1}{OC}. \quad (15)$$

Однако это совпадение носит чисто формальный характер, поскольку результаты индирования одинаковым образом ори-

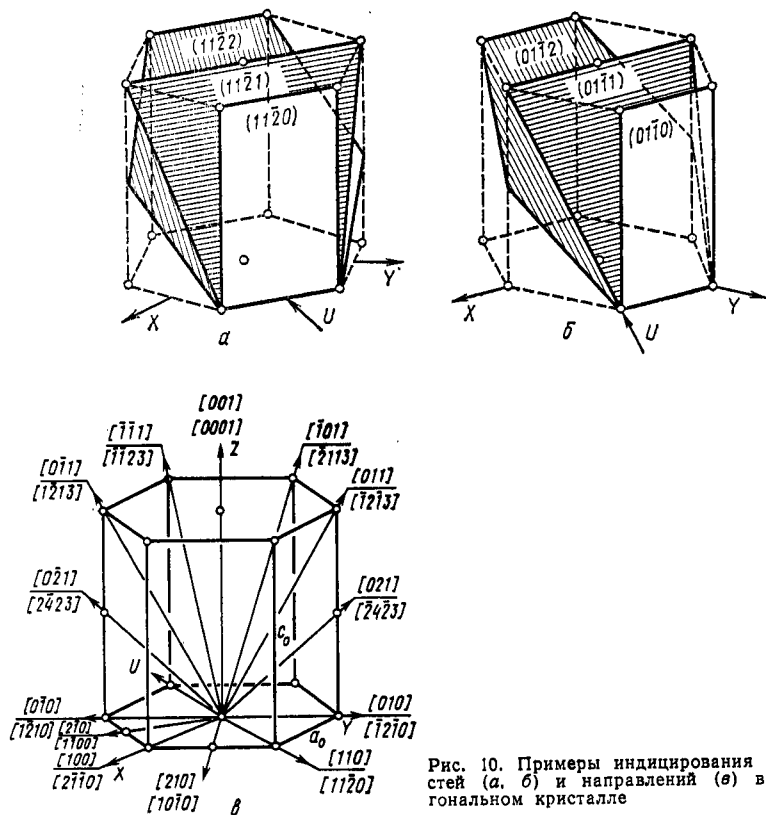


Рис. 10. Примеры индирования плоскостей (а, б) и направлений (в) в гексагональном кристалле

ентированных плоскостей в обоих случаях совершенно не совпадают. Например, для горизонтальной плоскости в R -установке мы получим символ (111) , в то время как в прежнем случае мы имели (001) .

Для перехода от индексов плоскости в установке Браве h, k, i к индексам в ромбоэдрической установке R_1, R_2, R_3 используют соотношение

$$R_1 : R_2 : R_3 = (h - i + l) : (k - h + l) : (i - k + l). \quad (16)$$

Переход от трехосных индексов в ромбоэдрической установке

R_1, R_2, R_3 к четырехосным символам в установке Браве h, k, i, l осуществляют с помощью соотношения

$$h : k : i : l = (R_1 - R_2) : (R_2 - R_3) : (R_3 - R_1) : (R_1 + R_2 + R_3). \quad (17)$$

Например, переведем четырехосный символ плоскости $(10\bar{1}0)$ в трехосный символ в ромбоэдрической установке, пользуясь формулой (16):

$$R_1 : R_2 : R_3 = (1 + 1 + 0) : (0 - 1 + 0) : (-1 - 0 + 0) = 2 : (-1) : (-1).$$

В результате получим новый символ плоскости в R -установке — $(2\bar{1}\bar{1})$.

2. ИНДИЦИРОВАНИЕ НАПРАВЛЕНИЙ

Для описания направлений в гексагональной установке применяют и трехосные $[uvw]$, и четырехосные $[r_1r_2r_3r_4]$ символы, однако в отличие от соответствующих трехосных и четырехосных символов плоскостей, они один с другим в принципе не совпадают.

Для определения трехосных символов направлений применяют формулу общего вида (2), которую с учетом соотношения между осевыми единицами в указанной группе кристаллов записывают в соответствии с (2) в виде

$$u : v : w = OA : OB : (a_0/c_0) OC, \quad (18)$$

где OA, OB и OC — координаты заданного вектора.

Между четырехосными индексами направлений существует простое соотношение

$$r_1 + r_2 + r_3 = 0, \quad (19)$$

которое напоминает аналогичное соотношение между индексами плоскостей (14).

Для перехода от трехосных символов направлений $[uvw]$ к четырехосным используют следующие соотношения:

$$r_1 = 2u - v; \quad r_2 = 2v - u; \quad r_3 = -u - v; \quad r_4 = 3w. \quad (20)$$

На рис. 10, в представлены некоторые направления в гексагональном кристалле, выраженные и в трехосных $[uvw]$, и в четырехосных $[r_1r_2r_3r_4]$ символах с помощью формул (20). При этом размеры стороны правильного шестиугольника — основания призмы и ее высота соответствуют осевым единицам (a_0 и c_0).

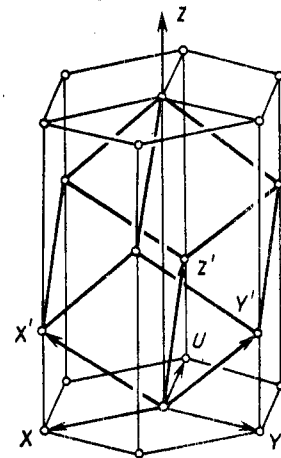


Рис. 11. Взаимное расположение координатных осей в гексагональной (X, Y, U, Z) и ромбоэдрической (X', Y', U', Z') установках

Для обратного перехода применяют аналогичные отношения:

$$u = 1/3(2r_1 + r_2); \quad v = 1/3(r_1 + 2r_2); \quad w = 1/3r_4. \quad (21)$$

Как отмечено выше, для индирования направлений в тригональных кристаллах применяют как описанную четырехосную систему координат ($a_0 = b_0 \neq c_0$; $\alpha = \beta = 90^\circ$; $\gamma = 120^\circ$), которую связывают с установкой Браве, так и свою собственную, ромбоэдрическую ($a_0 = b_0 = c_0$; $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$) систему координат, где все три координатные оси составляют одинаковые углы с вертикалью, которую связывают с R -установкой. Чтобы получить символ направления в R -установке по известному символу в установке Браве $[r_1 r_2 r_3 r_4]$, можно использовать соотношение:

$$s_1 : s_2 : s_3 = (r_1 - r_3 + r_4) : (r_2 - r_1 + r_4) : (r_3 - r_2 + r_4). \quad (22)$$

Для обратного перехода соответственно можно записать

$$r_1 : r_2 : r_3 : r_4 = (s_1 - s_2) : (s_2 - s_3) : (s_3 - s_1) : (s_1 + s_2 + s_3). \quad (23)$$

§ 5. Классы симметрии и координатные системы для описания кристаллов

Профессор Михайловской артиллерийской академии А. В. Гадолин в 1867 г. создал законченную систему классификации кристаллов, положив в ее основу *принцип симметрии*. Полученные 32 класса симметрии позволили ввести простое и однозначное описание любых кристаллов. В зависимости от имеющих в кристалле элементов симметрии для его описания выбирают одну из семи координатных систем, где роль координатных направлений играют наиболее плотные атомные ряды — естественные координатные направления, которые в кристалле совпадают с его ребрами и осями симметрии. Таким образом анализ симметрии кристалла является необходимым этапом его описания для отнесения к определенному классу симметрии и однозначного определения пространственного расположения важнейших атомных рядов и атомных плоскостей.

1. ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МНОГОГРАННИКОВ

Как отмечено выше, в кристаллах встречаются симметрично-равные атомные ряды — ряды атомов с одинаковыми периодами, различающиеся лишь своими направлениями в пространстве. Наличие одинаковых межатомных расстояний в таких атомных рядах позволяет мысленно совместить их один с другим либо путем поворота на соответствующий угол, либо путем отражения в зеркальной плоскости. Геометрические образы

указанных преобразований, приводящих к совмещению равных элементов огранки кристаллов или одинаковых атомных рядов или атомных плоскостей, называются *элементами симметрии*.

Рассмотрим группу элементов симметрии, которые встречаются при описании симметрии кристаллических многогранников.

Простые оси симметрии. Если поворот фигуры вокруг прямой линии, проходящей через фигуру, на угол 60° , 90° , 120° или 180° переводит эту фигуру в новое положение, совершенно эквивалентное исходному (когда каждая грань кристалла заменяет равную ей грань, когда каждое ребро кристалла заменяет равное ребро, когда каждая вершина кристалла заменяет равную ей вершину, при этом конечное положение фигуры неотличимо от ее исходного положения), то это является доказательством наличия в кристалле простой оси симметрии соответственно шестого, четвертого, третьего или второго порядков. *Порядок* оси симметрии определяется по количеству совмещений фигуры со своим исходным положением за один полный поворот вокруг оси симметрии. Минимальный угол поворота фигуры вокруг оси симметрии, при котором фигура совмещается со своим исходным положением, носит название *элементарного угла* α . Он связан с порядком оси симметрии N соотношением

$$N = 360^\circ : \alpha. \quad (24)$$

Разумеется, что в понятие фигуры могут входить не только кристаллические многогранники, ограненные вышеупомянутыми гранями, ребрами, вершинами, но и любая кристаллическая структура с ее атомными рядами и атомными плоскостями. Так, на рис. 12 приведен пример плоской атомной сетки, которая содержит простые оси симметрии второго порядка, располагающиеся перпендикулярно этой сетке. Поворот элементарного параллелограмма на 180° вокруг любой из показанных на рисунке осей второго порядка приводит этот параллелограмм к совмещению с исходным положением, либо меняет его местами с другим таким же равным ему параллелограммом. Очевидно, что каждый такой поворот будет приводить к совмещению с исходным положением не только один отдельно взятый элементарный параллелограмм, но вся атомная плоскость при таком повороте займет новое положение, совершенно эквивалентное ее исходному положению, каждый атомный ряд либо совместится со своим исходным положением (поменяв при повороте местами свои концы), либо поменяется местами с равным ему эквивалентным атомным рядом. Наконец, при таком повороте каждый атом займет на плоскости место идентичного атома (либо просто повернется на месте, если он лежит на самой оси симметрии).

Примеры плоских атомных сеток с другими простыми поворотными осями симметрии приведены на рис. 13, где оси симметрии третьего порядка проходят перпендикулярно плоскости чертежа через вершины треугольников и их центры, на рис. 14, где оси симметрии четвертого порядка проходят перпендикулярно атомной плоскости через вершины и центры квадратов,

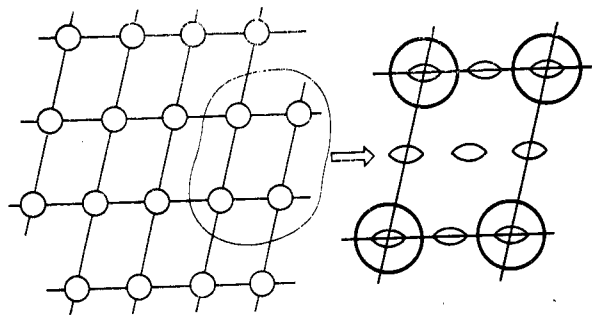


Рис. 12. Атомная плоскость с простыми осями симметрии второго порядка

и на рис. 15, где оси симметрии шестого порядка проходят через центр каждого правильного шестиугольника — гексагона.

Важной отличительной особенностью всех рассмотренных плоских атомных сеток является то, что они оказываются це-

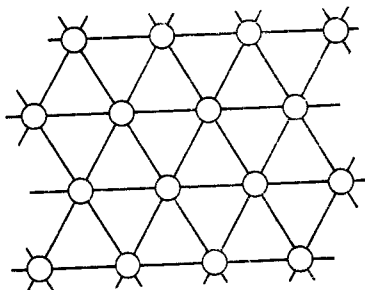


Рис. 13. Атомная плоскость с простыми осями симметрии третьего порядка

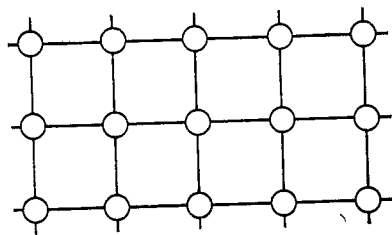


Рис. 14. Атомная плоскость с простыми осями симметрии четвертого порядка

ликом заполненными одинаковыми правильными фигурами — либо параллелограммами, либо правильными равносторонними треугольниками, либо квадратами, либо гексагонами, которые без просветов покрывают всю атомную плоскость. Очень важно отметить, что никакие другие одинаковые правильные многоугольники не могут заполнить плоскость без просветов: ни пятиугольники (рис. 16), ни семиугольники, ни восьмиугольники и т. д. Такое сопоставление доказывает, что в кристаллах мо-

гут присутствовать оси симметрии только указанных порядков: второго, третьего, четвертого и шестого.

В проведенном анализе мы не упоминали оси симметрии первого порядка, поскольку этот элемент симметрии имеет тривиальный смысл: любая фигура содержит бесчисленное множество таких осей.

Перечень простых осей симметрии в кристаллах и их обозначения приведены в табл. 1.

Следует отметить, что приведенные в табл. 1 графические обозначения вертикальных осей симметрии второго и третьего

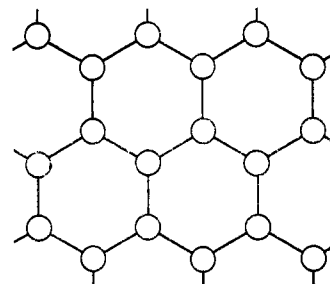


Рис. 15. Атомная плоскость с простыми осями симметрии шестого порядка

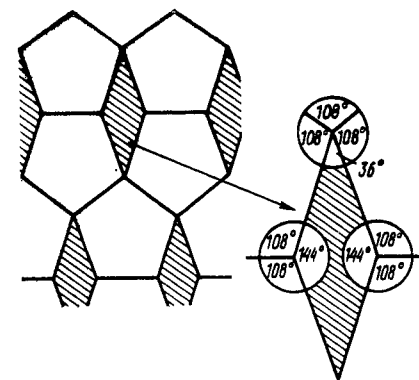


Рис. 16. Доказательство отсутствия в кристаллах осей симметрии пятого порядка

Таблица 1. Простые оси симметрии в кристаллах

Порядок оси симметрии	Элементарный угол, град	Обозначения простых осей симметрии			
		символические		графические	
		международный символ	учебный символ	вертикальная ось	горизонтальная ось
1	360	1	L_1	—	—
2	180	2	L_2		
3	120	3	L_3		
4	90	4	L_4		
6	60	6	L_6		—

порядков применяют также для наклонных осей симметрии указанных порядков.

Наличие осей симметрии в кристалле является важным доказательством равенства его свойств по некоторым направлениям.

Зеркальные плоскости симметрии. Если фигуру можно разделить плоскостью на две зеркально-равные части, связанные между собой как предмет и его зеркальное изображение, то эта плоскость является *зеркальной плоскостью симметрии* (или просто плоскостью симметрии). На рис. 17 показана горизонтальная плоскость симметрии в гексагональной кристаллической структуре. В этой же кристаллической структуре можно

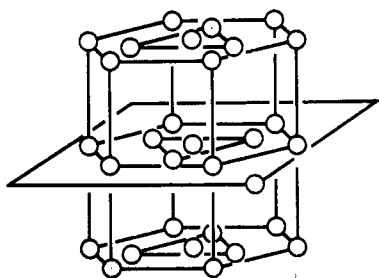


Рис. 17. Пример зеркальной плоскости симметрии в гексагональной кристаллической структуре

отметить три проходящие через центры структурных треугольников и их вершины вертикальные плоскости симметрии. Другой пример различной пространственной ориентации плоскостей симметрии — различные плоскости симметрии куба (рис. 18). Плоскость симметрии обозначают либо международным символом m , либо учебным символом P . Например, наличие девяти различным образом ориентированных плоскостей симметрии в кубе записывают с помощью

последнего символа весьма лаконично: $9P$.

Центр симметрии. Если в фигуре можно выбрать особую точку, которая будет делить пополам любую заключенную внутри этой фигуры прямую, то такую точку называют *центром симметрии*. Так, точка C пересечения объемных диагоналей параллелепипеда (рис. 19) является центром симметрии. Этот центр симметрии связывает равные элементы параллелепипеда: вершину 1 с вершиной 2, вершину 5 с вершиной 6, ребро 1—6 с равным ему ребром 2—5, переднюю грань — с равной ей задней гранью параллелепипеда и т. д.

Центр симметрии обозначают либо международным символом $\bar{1}$ (читается: «один с чертой»; о происхождении этого обозначения см. в следующем разделе), либо учебным символом C , причем последнее обозначение совпадает с графическим обозначением центра симметрии на стереографических проекциях элементов симметрии (в центре круга проекции).

Инверсионные оси симметрии. Несмотря на существенные различия все описанные элементы симметрии характеризуются одним общим свойством: каждый из них позволяет доказать равенство тех или иных элементов фигуры с помощью *однократного* симметрического преобразования. Так, при наличии

плоскости симметрии достаточно только *отражения в плоскости симметрии*, чтобы доказать равенство определенных эле-

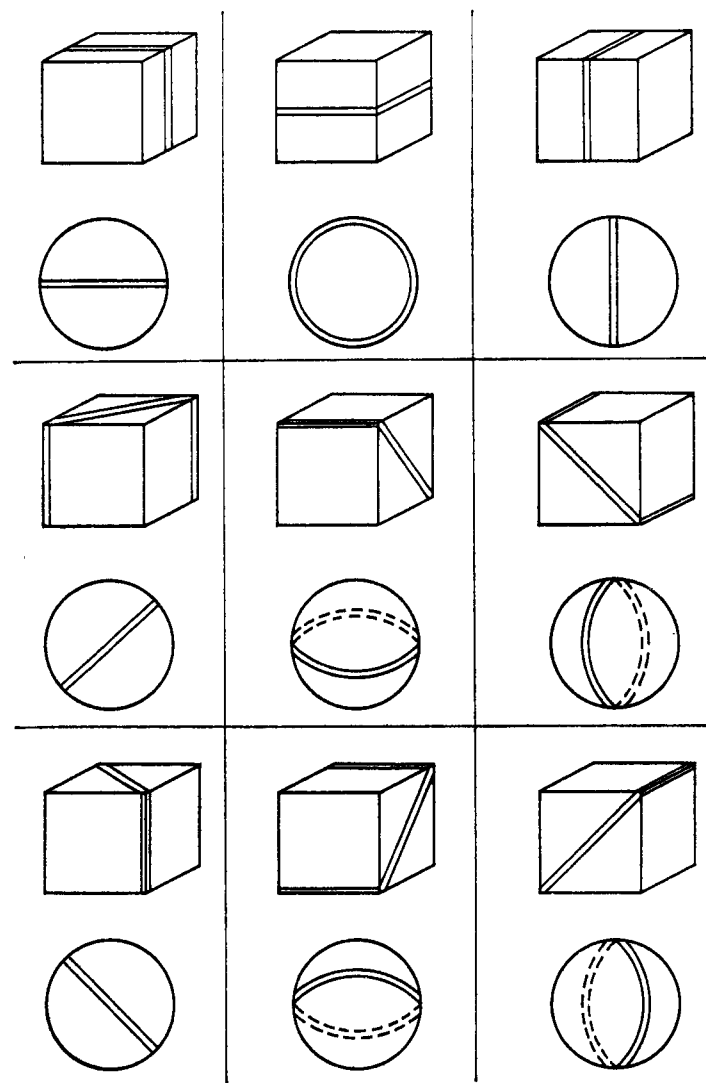


Рис. 18. Зеркальные плоскости симметрии куба и их стереографические проекции

ментов фигуры. Таким же образом при наличии простой оси симметрии для такого доказательства достаточно только *поворота* фигуры на *элементарный угол*. При наличии центра сим-

метрии доказательство равенства определенных элементов фигуры производится с помощью только *отражения* фигуры в точке, т. е. в центре симметрии.

Однако в кристаллах встречаются также более сложные симметрические преобразования. Например, инверсионные оси

симметрии, которые сочетают поворот фигуры вокруг оси симметрии на элементарный угол с отражением фигуры в центральной точке — центре инверсии.

В качестве примера такого сложного симметрического преобразования рассмотрим, как доказывается равенство сторон основания тригональной призмы, имеющего форму равностороннего треугольника (рис. 20). На первый взгляд равенство сторон основания можно доказать, совместив стороны основания поворотом призмы на 120° вокруг вертикальной оси, проходящей через центры обоих оснований, что свидетельствовало бы о наличии у тригональной призмы вертикальной простой оси симметрии третьего порядка (L_3). Однако это доказательство можно осуществить с помощью сочетания

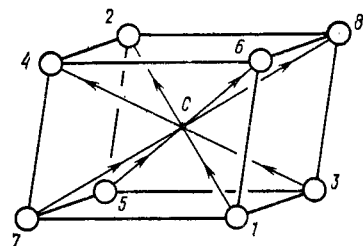


Рис. 19. Центр симметрии C в элементарном параллелепипеде

основания поворотом призмы на 120° вокруг вертикальной оси, проходящей через центры обоих оснований, что свидетельствовало бы о наличии у тригональной призмы вертикальной простой оси симметрии третьего порядка (L_3). Однако это доказательство можно осуществить с помощью сочетания

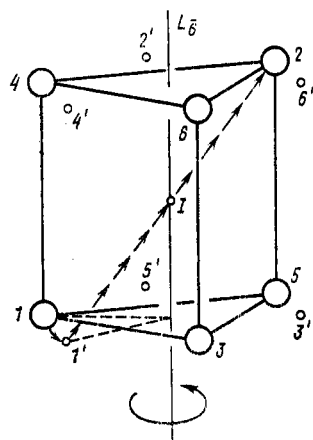


Рис. 20. Схема действия инверсионной оси симметрии шестого порядка \bar{L}_6 на примере тригональной призмы

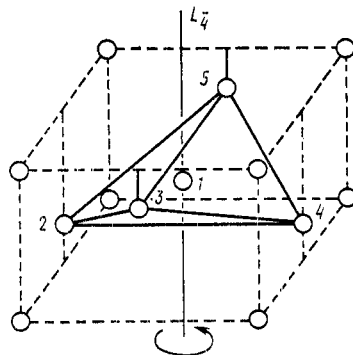


Рис. 21. Инверсионная ось симметрии четвертого порядка \bar{L}_4 в кристаллической структуре β -олова

поворота фигуры на вдвое меньший угол — на 60° вокруг той же оси и отражения в центральной точке фигуры I . Действительно, после поворота против часовой стрелки на 60° вокруг вертикальной оси нижнее ребро призмы $1-5$ займет положение $1'-5'$, а после отражения в центре инверсии I совместится с равным ребром верхнего основания $2-6$. Продолжая подобные преобразования, докажем последовательно равенство ребер $2-6$, $1-3$, $2-4$, $3-5$, $4-6$. Наконец, когда повернем ребро $4-6$ на 60° в положение $4'-6'$

и отразим его в центре инверсии I , то сможем совместить его с исходным ребром $1-5$. Таким образом, завершив полный поворот фигуры вокруг оси (сделали шесть поворотов по 60° и шесть раз проводили отражение в центральной точке фигуры), мы доказали равенство всех шести ребер верхнего и нижнего оснований. Следовательно, вертикальная ось, вокруг которой производился поворот, является инверсионной осью симметрии шестого порядка. Таким образом, предполагаемая простая ось третьего порядка на деле оказалась осью симметрии более высокого порядка — инверсионной осью шестого порядка. Для обозначения последней применяют либо международный символ $\bar{6}$ (читается: «шесть с чертой»), либо учебный символ L_6 .

В кристаллической структуре металлического олова (рис. 21) можно найти инверсионную ось другого типа — инверсионную ось симметрии четвертого порядка. Проходящая через центральный атом 1 вертикальная прямая является инверсионной осью четвертого порядка, поскольку поворот вокруг нее на 90° с последующим отражением в центральной точке I позволяет совместить любую пару вершин тетрагонального тетраэдра $2-3-4-5$. Например, атом 2 , расположенный на высоте $z=c/4$, после поворота на 90° попадает на одну вертикаль с атомом 3 и после отражения в центральной точке I ($z=c/2$) совместится с атомом 5 , который расположен на высоте $z=3c/4$. Для обозначения инверсионной оси симметрии четвертого порядка употребляют международный символ $\bar{4}$ (читается: «четыре с чертой») и учебный символ L_4 .

Следует отметить, что для упрощения симметрических преобразований инверсионную ось симметрии шестого порядка можно заменить двумя простыми элементами симметрии — простой осью симметрии третьего порядка и перпендикулярной ей зеркальной плоскостью симметрии, что символически обозначают соотношением $L_6 = L_3 P_\perp$. Действительно, ребро $1-5$ после поворота на 120° переходит в положение $3-1$ и затем после отражения в горизонтальной плоскости симметрии совмещается с равным ему ребром основания $6-4$ (см. рис. 20).

Следует отметить существенное различие между центром инверсии и центром симметрии, на которое довольно часто не обращают внимания. Если отражение в центре симметрии совмещает две эквивалентные точки фигуры и является законченным симметрическим преобразованием, то само по себе отражение в центре инверсии не приводит к такому совмещению, поскольку для завершения симметрического преобразования необходимо еще произвести поворот фигуры на элементарный угол. Действительно, в рассмотренных примерах инверсионных осей симметрии для совмещения эквивалентных точек фигур было недостаточно одного лишь отражения в центральной точке, поэтому в каждом случае к этому отражению мы добавляли поворот на элементарный угол. Таким образом, отражение фигуры в центре симметрии, с одной стороны, и отражение ее в центре инверсии, с другой, приводят к совершенно различным результатам, представляют собой существенно различающиеся преобразования. Хотя и говорят, что отражение в центре инверсии происходит, как в центре симметрии, но из такого сравнения нельзя делать вывод об их полной тождественности; это сравнение подчеркивает лишь сходство в тех-

нике осуществления операции отражения — в обоих случаях производится *отражение* фигуры *в точке*. Этим и ограничивается сходство между двумя преобразованиями.

Единственная инверсионная ось симметрии, в которой центр инверсии одновременно служит центром симметрии, представляет собой инверсионную ось симметрии третьего порядка (международный символ $\bar{3}$, учебный символ L_3). Ребро нижнего основания фигуры 3—1 (рис. 22) после поворота на 120° переходит в положение 1—5, а затем после отражения

в центре инверсии I занимает положение равного ему ребра верхнего основания 4—2. В данном случае центр инверсии совпадает с центром симметрии фигуры: в промежуточном положении 1—5 указанное ребро нижнего основания 3—1 совмещается с равным ему ребром 1—5.

Поскольку в случае инверсионной оси симметрии третьего порядка центр инверсии совпадает с центром симметрии, инверсионную ось симметрии третьего порядка можно заменить двумя простыми элементами симметрии — простой осью симметрии третьего порядка и центром симметрии, что символически запишем в следующем виде: $L_3 = L_3 C$.

Что касается инверсионных осей симметрии первого и второго порядков, присутствие которых формально

возможно в кристаллах, то они не представляют самостоятельного интереса, поскольку дублируют простые элементы симметрии. Инверсионная ось симметрии первого порядка, содержащая формально поворот на 360° и отражение в центральной точке, является центром симметрии. На основании их тождества возникло международное обозначение центра симметрии $\bar{1}$. Инверсионная ось симметрии второго порядка, как в этом нетрудно убедиться, эквивалентна зеркальной плоскости симметрии, поэтому ее не используют для описания кристаллов.



Таким образом для описания кристаллов применяют три инверсионные оси симметрии: третьего, четвертого и шестого порядков.

Внешними признаками, по которым определяют инверсионную ось третьего порядка, является наличие простой оси симметрии третьего порядка и центра симметрии. Для инверсионной оси шестого порядка таким признаком служит наличие простой оси симметрии третьего порядка и перпендикулярной ей зер-

кальной плоскости симметрии. Инверсионная ось четвертого порядка не может быть заменена другими элементами симметрии и поэтому единственным, но недостаточным признаком для ее определения служит некоторое ее внешнее сходство с простой осью симметрии второго порядка. Действительно, инверсионная ось четвертого порядка содержит простую ось второго порядка (естественно, обратное заключение силы не имеет), так как двукратное действие инверсионной оси четвертого порядка дает такой же результат, как поворот на 180° вокруг оси второго порядка. Следовательно, инверсионную ось симметрии четвертого порядка нужно искать лишь там, где проходят оси симметрии второго порядка. При этом, определив, что данная ось симметрии второго порядка на самом деле является инверсионной осью четвертого порядка, мы перестанем считать ее осью симметрии второго порядка.

Перечень инверсионных осей симметрии в кристаллах и их обозначения приведены в табл. 2, при этом малоупотребительные обозначения взяты в скобки.

Т а б л и ц а 2. Инверсионные оси симметрии в кристаллах

Порядок оси симметрии	Элементар- ный угол, град	Эквивалент- ные простые элементы симметрии	Обозначения инверсионных осей симметрии			
			символические		графические	
			междуна- родный символ	учебный символ	верти- каль- ная ось	горизонтальная ось
1	360	C	$\bar{1}$	(L_1)	—	—
2	180	P	$(\bar{2})$	(L_2)	—	—
3	120	$L_3 + C$	$\bar{3}$	L_3		—
4	90	Не имеет	$\bar{4}$	L_4		
6	60	$L_3 + P_\perp$	$\bar{6}$	L_6		—

2. КЛАССЫ СИММЕТРИИ, СИНГОНИИ, КАТЕГОРИИ КРИСТАЛЛОВ. КООРДИНАТНЫЕ СИСТЕМЫ ДЛЯ ОПИСАНИЯ КРИСТАЛЛОВ

Понятие класса симметрии включает в себя определенное сочетание элементов симметрии, которое в общем случае содержит плоскости симметрии, простые и инверсионные оси симметрии, а также центр симметрии. Вывод всевозможных сочетаний элементов симметрии обусловлен для кристаллов рядом ограничений и по составу элементов симметрии (запрет осей симметрии пятого, седьмого и более высоких порядков), и по

их взаимному пространственному расположению. Следствием указанных ограничений является сравнительно небольшое количество классов симметрии: богатейшее многообразие кристаллов укладывается всего в 32 класса симметрии.

Для вывода классов симметрии используют следующие теоремы сложения элементов симметрии и некоторые следствия из этих теорем*.

О взаимодействии зеркальных плоскостей симметрии. Линия пересечения зеркальных плоскостей симметрии является осью симметрии, порядок которой определяется углом между пересекающимися плоскостями, причем элементарный угол α этой оси симметрии вдвое больше двугранного угла между плоскостями. Данная теорема позволяет сделать важное заключение о величине углов, которые образуют плоскости симметрии в кристаллах. Действительно, поскольку в кристаллах существуют лишь оси симметрии второго, третьего, четвертого и шестого порядков с соответствующими элементарными углами (180° , 120° , 90° , 60°), то возможные значения двугранных углов между пересекающимися плоскостями симметрии в кристаллах ограничиваются лишь *четырьмя* значениями: 90° , 60° , 45° и 30° .

О взаимодействии простых осей симметрии. Через точку пересечения двух осей симметрии проходит по крайней мере еще одна, непараллельная им ось симметрии (теорема Эйлера). Следовательно, определив в кристалле две непараллельные оси симметрии, необходимо искать другие оси симметрии, поскольку в соответствии с данной теоремой число непараллельных осей симметрии не может быть равно двум.

О взаимодействии плоскости симметрии с параллельной осью симметрии. Вдоль оси симметрии N -го порядка проходит N плоскостей симметрии, либо не проходит ни одной плоскости симметрии. Следовательно, если при исследовании кристалла обнаружена хотя бы одна плоскость симметрии, параллельная оси симметрии N -го порядка, это служит бесспорным признаком присутствия других $N - 1$ плоскостей симметрии, которые располагаются также параллельно данной оси симметрии и образуют одна с другой двугранные углы, кратные половине элементарного угла α .

О взаимодействии оси симметрии N -го порядка с перпендикулярной осью симметрии второго порядка. Перпендикулярно оси симметрии N -го порядка проходят N осей симметрии второго порядка либо не проходит ни одной оси симметрии второго порядка. Данная теорема, являясь как бы частным случаем теоремы Эйлера, значительно облегчает поиск различных

элементов симметрии в кристалле, обосновывая обязательный признак определения осей симметрии второго порядка, которые располагаются перпендикулярно другим осям симметрии.

О взаимодействии плоскости симметрии с перпендикулярной осью симметрии четного порядка. Точка пересечения плоскости симметрии с перпендикулярной ей осью симметрии четного порядка является центром симметрии. Следовательно, при наличии в кристалле центра симметрии количество осей симметрии четного порядка (второго, четвертого, шестого) в сумме обязательно должно быть равно количеству плоскостей симметрии. Данная теорема также облегчает анализ симметрии кристалла: наличие двух из указанных трех элементов симметрии (плоскость симметрии, перпендикулярная ей ось симметрии, центр симметрии) является свидетельством присутствия в кристалле третьего элемента симметрии.

Следует отметить, что все перечисленные теоремы взаимодействия элементов симметрии распространяются только на простые оси симметрии (и не относятся к инверсионным осям симметрии). При выводе инверсионных классов симметрии, т. е. тех классов симметрии, в которые входят инверсионные оси симметрии, последние по возможности заменяют эквивалентной парой простых элементов симметрии с тем, чтобы использовать для вывода указанные теоремы (это относится к инверсионным осям третьего и шестого порядка).

Методы вывода классов симметрии довольно просты. Для этого берут в большинстве случаев два, а в отдельных случаях три исходных, или порождающих элемента симметрии и получают указанным путем остальные элементы симметрии соответствующего класса симметрии. Следует добавить, что каждый из указанных нами элементов симметрии, взятый в отдельности, может представлять собою самостоятельный класс симметрии. Рассматривая всевозможные сочетания элементов симметрии, мы получим 32 класса симметрии. В табл. 3 приведены символика и состав 32 классов симметрии, а также их распределение по сингониям (системам) и категориям.

В табл. 3 приведены обе разновидности формул симметрии для инверсионных классов тригональной и гексагональной сингоний, а также даны полные символические обозначения для некоторых классов ромбической сингонии (помимо общеупотребительных).

Подразделение 32 классов симметрии на семь сингоний позволяет для всех классов симметрии, принадлежащих данной сингонии, использовать одну и ту же координатную систему, которая наилучшим образом учитывает особенности соответствующих кристаллов. Действительно, выбирая в качестве осей координат оси симметрии кристалла, расположенные параллельно наиболее плотным атомным рядам, мы получим простое описание плоскостей и направлений в кристалле.

* Доказательства указанных теорем, а также сведения о выводе 32 классов симметрии см. в учебнике: Шаскольская М. П. Кристаллография. — М.: Высшая школа, 1984. 375 с.

Таблица 3. Состав (формула симметрии) и символы 32 классов симметрии, их распределение по сингониям (системам) и категориям

Формула симметрии	Международный символ	Формула симметрии	Международный символ
<i>Триклинная сингония, низшая категория</i>		<i>Тетрагональная сингония, средняя категория</i>	
$— (L_1)$	1	$L_4 4 L_2$	422
$C (L_1^-)$	$\bar{1}$	$L_4 4P$	4mm
<i>Моноклинные сингония, низшая категория</i>		$L_4 PC$	4/m
L_2	2	$L_4 L_2 5PC$	4/mmm
P	m	$L_4 2 L_2 2P$	$\bar{4} 2m$
$L_2 PC$	2/m	L_4	$\bar{4}$
<i>Ромбическая сингония, низшая категория</i>		L_4	4
$3L_2$	222	<i>Гексагональная сингония, средняя категория</i>	
$L_2 2P$	mm (mm2)	$L_6 6 L_2$	622
$3L_2 3PC$	mmm(2/mmm)	$L_6 6P$	6mm
<i>Тригональная сингония, средняя категория</i>		$L_6 PC$	6/m
$L_3 3L_2 3P = L_3 3L_2 3PC$	$\bar{3}m$	$L_6 6 L_2 7PC$	6/mmm
$L_3 3P$	3m	$L_6 3L_2 3P = L_3 3L_2 4P$	$\bar{6} m2$
$L_3 3L_2$	32	$L_6 = L_3 P$	$\bar{6}$
$L_3 = L_3 C$	$\bar{3}$	L_6	6
L_3	3	<i>Кубическая сингония, высшая категория</i>	
		$3L_2 4L_3$	23
		$3L_4 4L_3 6L_2$	432
		$3L_2 4L_3 3PC$	m3
		$3L_4 4L_3 6P$	$\bar{4} 3m$
		$3L_4 4L_3 6L_2 9PC$	m3m

Таким образом распределение кристаллов на отдельные сингонии позволяет однозначно описывать направления и плоскости в кристалле, устанавливать взаимное расположение базисных векторов и соотношения между осевыми единицами. Принадлежность кристалла к той или иной сингонии определяется его симметрией.

Распределение на сингонии производят по следующим признакам:

в кубическую сингонию входят такие классы симметрии, которые включают в себя несколько осей высшего порядка (т. е. выше второго порядка), в том числе *четыре оси симметрии третьего порядка*, которые ориентированы в пространстве как объемные диагонали куба; наличие упомянутых осей симметрии ($4L_3$), которые служат главным определяющим признаком кубических кристаллов, отражено в формулах симметрии и во второй позиции международного символа в виде символа $\bar{3}$ (три);

в тригональную сингонию входят классы симметрии, имеющие по одной оси симметрии *третьего порядка*: либо простую, либо инверсионную, что отражено в формулах симметрии в первой позиции международного символа в виде символа $\bar{3}$ или $\bar{3}$ (три или три с чертой);

в тетрагональную сингонию входят классы симметрии с *единственной осью симметрии четвертого порядка* — простой или инверсионной, что отражено в формулах симметрии и первой позиции международного символа класса симметрии символом $\bar{4}$ или $\bar{4}$;

в гексагональную сингонию входят классы симметрии с *одной осью симметрии шестого порядка* — простой или инверсионной, чему соответствует символ $\bar{6}$ или $\bar{6}$ в первой позиции международного символа класса симметрии;

в ромбическую сингонию входят классы симметрии, имеющие несколько плоскостей симметрии и (или) несколько осей симметрии второго порядка, что отражено повторением символов m или 2 в международном символе класса симметрии;

в моноклинные сингонии входят классы симметрии, которые содержат одну плоскость симметрии и (или) одну ось симметрии второго порядка, чему соответствует международный символ m или (и) 2 (наклонной чертой в международном символе класса симметрии $2/m$ обозначается взаимно перпендикулярное пространственное расположение оси симметрии второго порядка и плоскости симметрии);

в триклинные сингонии входят наиболее бедные элементами симметрии классы, полностью лишенные не только осей симметрии, но и плоскостей симметрии; это класс симметрии $\bar{1}$ с единственным элементом симметрии — центром симметрии и класс симметрии 1 без элементов симметрии (что символически обозначено как присутствие тривиальной оси симметрии *первого* порядка).

Все кристаллы, относящиеся к одной сингонии, описывают с помощью *однотипных* систем координат, где соблюдаются определенные соотношения между величинами координатных углов (α, β, γ) и между осевыми единицами (a_0, b_0, c_0), которые однозначно определяются симметрией кристаллов. Характеристики различных координатных систем, применяемых для опи-

сания кристаллов, приведены в табл. 4, где указаны соотношения между координатными углами $\alpha(OY, OZ)$, $\beta(OX, OZ)$ и $\gamma(OX, OY)$, а также соотношения между осевыми (масштабными) единицами: a_0 (по оси OX), b_0 (по оси OY) и c_0 (по оси OZ).

Таблица 4. Характеристики координатных систем для кристаллов разных сингоний

Соотношение между осевыми единицами	Наименование сингонии при угловых соотношениях				
	$\alpha = \beta = \gamma$		$\alpha = \beta = 90^\circ$; $\gamma = 120^\circ$	$\alpha = \gamma = 90^\circ$; $\beta \neq 90^\circ$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
	$\alpha = 90^\circ$	$\alpha \neq 90^\circ$			
$a_0 = b_0 = c_0$	Кубическая	Тригональная	—	—	—
$c_0 = b_0 \neq a_0$	Тетрагональная	—	Гексагональная	—	—
$a_0 \neq b_0 \neq c_0$	Ромбическая	—	—	Моноклинная	Триклинная

Следует отметить, что кристаллы тригональной сингонии помимо ромбоэдрической системы координат (с тремя одинаково наклоненными к вертикали осями координат: R — установка) часто описывают с помощью гексагональной системы координат — см. табл. 4 (установка Браве). В переводной литературе вместо термина «ромбическая сингония» часто употребляют «орторомбическая сингония».

Кристаллы по своей симметрии делятся не только по классу симметрии и сингониям, но и по категориям — на высшую, среднюю и низшую. *Высшая категория* включает только кубические классы симметрии, каждый из которых содержит несколько осей симметрии высшего порядка. Классы симметрии, содержащие по одной оси симметрии высшего порядка, объединяются в *среднюю категорию*, к которой следовательно, относятся тригональные, тетрагональные и гексагональные кристаллы. Наконец, *низшая категория* объединяет классы симметрии, в которых нет ни одной оси симметрии высшего порядка; сюда относятся ромбические, моноклинные и триклинные кристаллы.

Выбор элементов симметрии, которые принимают за координатные направления, обеспечивает наиболее простое описание кристаллов (поэтому говорят, что координатные системы «заложены в самих кристаллах»). Так, в кубических кристаллах в качестве координатных направлений выбирают три взаимно перпендикулярные оси симметрии: либо три простые оси симметрии четвертого порядка, либо три инверсионные оси сим-

метрии четвертого порядка, либо три оси симметрии второго порядка — в зависимости от класса симметрии кристалла.

Соотношения между осевыми, или масштабными единицами a_0 , b_0 , c_0 также зависят от симметрии кристаллов. Если с помощью имеющихся элементов симметрии можно связать какие-либо координатные направления (подобно тому, как мы совмещали непараллельные и тождественные атомные ряды, одинаковые атомные плоскости в кристалле), то соответствующие масштабные единицы будут для этих координатных осей одинаковыми. Так, равенство всех трех осевых единиц в кубических кристаллах обусловлено тем, что имеющимися элементами симметрии (например, любой из четырех осей симметрии третьего порядка, которые параллельны объемным диагоналям куба) можно совместить любые два координатных направления. Если же подобное совмещение не достигается, то осевые единицы будут различными у ромбических, моноклинных и триклинных кристаллов.

Ниже приведены описания важнейших классов симметрии, которые включают сведения о выборе координатных направлений, расшифровку международных символов классов симметрии, а также стереографические проекции элементов симметрии. Для удобства пользования эти описания даны по сингониям.

В каждом из пяти классов симметрии *кубической сингонии* (рис. 23) обязательно присутствуют четыре наклонные простые оси симметрии третьего порядка ($4L_3$), которые ориентированы в пространстве как объемные диагонали куба. В международном символе класса симметрии этому соответствует символ 3 во второй позиции.

За координатные направления в кубических кристаллах принимают три взаимно перпендикулярные направления, совпадающие с тремя взаимно перпендикулярными осями симметрии: либо $3L_2$ (в классах симметрии 23 и $m\bar{3}$), либо $3L_4$ (в классах симметрии 432 и $m\bar{3}m$), либо $3L_2$ (в классе симметрии $\bar{4}3m$).

Если в кристалле присутствуют и координатная ось симметрии, и координатная плоскость симметрии, то при записи международного символа класса симметрии предпочтение отдают плоскостям симметрии и в первой позиции международного символа у кубических кристаллов указывают координатный элемент симметрии, во второй позиции — символ 3. В последней, третьей позиции международного символа класса симметрии кубического кристалла отражается наличие диагональных элементов симметрии.

Таким образом международный символ свидетельствует о наличии в кристалле лишь важнейших элементов симметрии. О присутствии других элементов симметрии можно сделать

заключение на основании соответствующих теорем о взаимодействии элементов симметрии. Так, исходя из международного символа $m\bar{3}m$ можно заключить, что в кубическом кристалле (символ 3 по второй позиции записывают только у кубических кристаллов) присутствуют и координатные, и диагональные плоскости симметрии. Поскольку через каждую из трех коор-

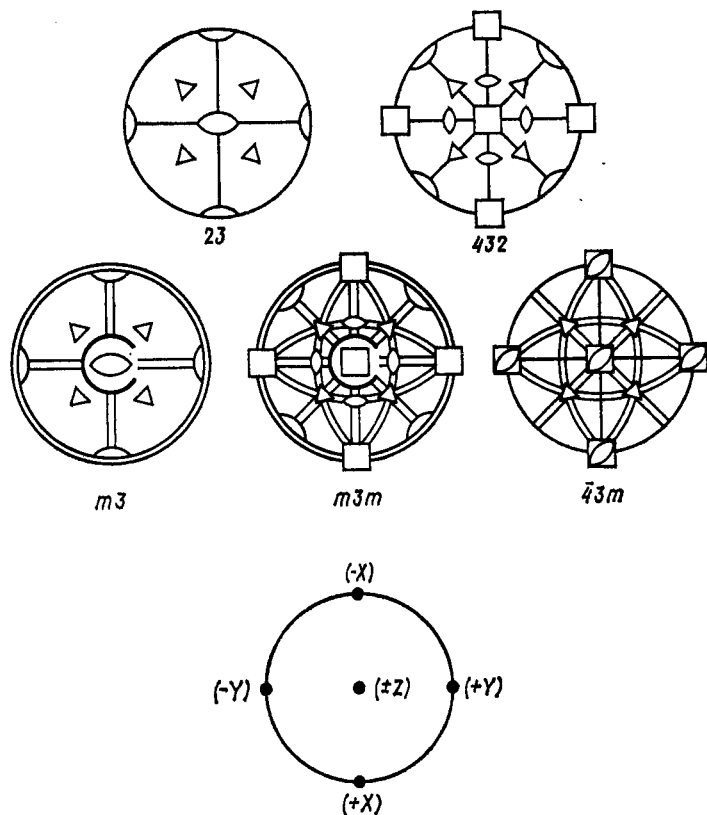


Рис. 23. Стереографические проекции элементов симметрии кубических классов симметрии и их координатных направлений

динатных осей проходят параллельно оси две координатных и две диагональные плоскости симметрии, то в соответствии с теоремой о взаимодействии пересекающихся плоскостей симметрии линия пересечения плоскостей будет осью симметрии четвертого порядка и для трех координатных осей получим $3L_4$. На основании той же теоремы можно заключить, что линии пересечения диагональных плоскостей симметрии с перпендикулярными координатными плоскостями симметрии являются осями симметрии второго порядка ($6L_2$) и т. д.

В первой позиции международного символа каждого класса симметрии *тетрагональной сингонии* (рис. 24) указывают символ присутствующей вертикальной оси симметрии четвертого порядка (4 или $\bar{4}$), затем наличие горизонтальной плоскости симметрии (если такая плоскость входит в состав данного класса симметрии) с помощью символа $/m$. В следующих позициях международного символа для простых (неинверсионных)

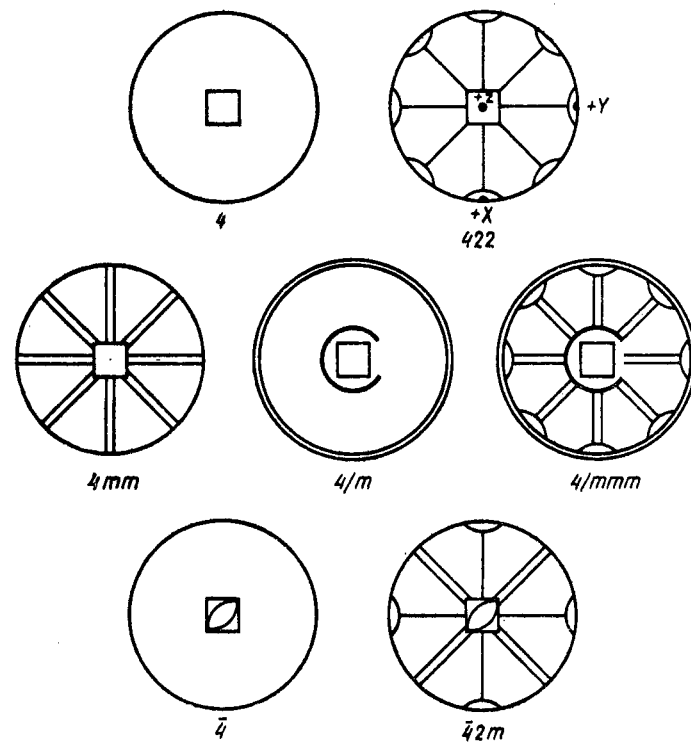


Рис. 24. Стереографические проекции элементов симметрии тетрагональных классов симметрии

классов симметрии указывают наличие четырех вертикальных плоскостей симметрии (в классах $4mm$ и $4/mmm$), а при отсутствии — наличие четырех горизонтальных осей симметрии второго порядка (в классе 422). В международном символе инверсионного класса симметрии $42m$ вторая позиция соответствует наличию двух горизонтальных взаимно перпендикулярных осей симметрии второго порядка (принимаемых за оси координат OX и OY), а третья позиция указывает на две вертикальные диагональные плоскости симметрии.

Для описания кристаллов тетрагональной сингонии применяют ортогональную систему координат ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) с двумя

одинаковыми осевыми единицами ($a_0 = b_0 \neq c_0$) вдоль горизонтальных координатных направлений. Последнее соотношение между осевыми единицами легко проиллюстрировать на примере класса симметрии 422. Действительно, два горизонтальных взаимно перпендикулярных атомных ряда, которые принимают за горизонтальные оси координат, в тетрагональных кристаллах эквивалентны и могут быть совмещены при повороте на элементарный угол 90° . Такое совмещение подтверждает равенство двух осевых единиц: $a_0 = b_0$. Вместе с тем, никакими имеющимися в тетрагональных кристаллах элементами симметрии невозможно совместить горизонтальные и вертикальные атомные ряды (горизонтальная ось симметрии второго порядка с элементарным углом 180° совмещает любое координатное направление с ним самим), что указывает на несоответствие структур горизонтальных и вертикальных атомных рядов и несовпадение в них межатомных расстояний ($a_0 \neq c_0$; $b_0 \neq c_0$).

Запись международных символов классов симметрии *гексагональной сингонии* (рис. 25) во многом напоминает символику тетрагональных кристаллов.

В первой позиции международного символа указывают вертикальную ось симметрии шестого порядка (6 или $\bar{6}$) и, если имеется, горизонтальную плоскость симметрии (в классах $6/m$ и $6/mmm$).

В следующих позициях международного символа класса симметрии гексагонального кристалла указывают либо наличие шести вертикальных плоскостей симметрии (в классе $6mm$ и $6/mmm$), либо наличие шести горизонтальных осей симметрии (в классе 622). Во второй и третьей позициях международного символа инверсионного класса симметрии $\bar{6}m2$ указывают соответственно наличие трех вертикальных плоскостей симметрии и трех горизонтальных осей симметрии второго порядка. Следует отметить, что указанные горизонтальные оси симметрии второго порядка являются линиями пересечения вертикальных плоскостей симметрии с горизонтальной плоскостью симметрии (которая содержится в инверсионной оси симметрии шестого порядка: $L_{\bar{6}} = L_3P$).

В качестве осей координат для описания гексагональных кристаллов выбирают: присутствующую вертикальную ось симметрии шестого порядка (6 или $\bar{6}$) — за ось OZ и две горизонтальные оси симметрии второго порядка, составляющие угол 120° , — за оси OX и OY ($\alpha = \beta = 90^\circ$; $\gamma = 120^\circ$). Как и в случае тетрагональных кристаллов, при отсутствии осей симметрии второго порядка горизонтальные координатные направления выбирают параллельными нормалью к плоскостям симметрии.

Как было уже указано, в целях достижения однотипности символов эквивалентных атомных рядов и эквивалентных атомных плоскостей к двум горизонтальным осям координат OX и

OY добавляют третью горизонтальную ось OU , которая образует с осями OX и OY равные углы (120°). Описание кристаллов в первом случае называют установкой Миллера, а во втором случае — установкой Браве.

В классах симметрии *тригональной сингонии* обязательно присутствует одна из осей симметрии третьего порядка — про-

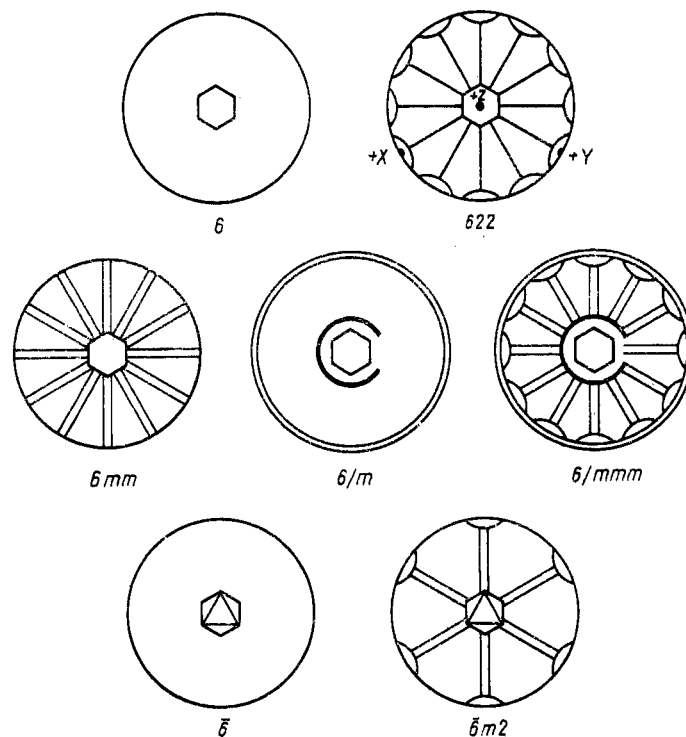


Рис. 25. Стереграфические проекции элементов симметрии гексагональных классов симметрии

стая ($L_{\bar{3}}$) или инверсионная ($L_{\bar{3}}$), символ которой указывают в первой позиции международного символа класса симметрии (соответственно 3 или $\bar{3}$). Во избежание недоразумений напомним, что подобным символом 3, но записанным во второй позиции, мы обозначали в кубических кристаллах наличие четырех осей симметрии третьего порядка.

Во второй позиции международного символа класса симметрии тригональной сингонии указывают наличие вертикальных плоскостей симметрии (в классах $3m$ и $\bar{3}m$), а в случае их отсутствия — наличие горизонтальных осей симметрии второго порядка (в классе 32).

Особенностью описания тригональных кристаллов является возможность использования двух координатных систем — ромбоэдрической и гексагональной. В ромбоэдрической системе все три оси координат занимают наклонное положение, образуя равные углы как между собой, так и с вертикальной осью симметрии третьего порядка; эти оси координат параллельны ребрам элементарного *ромбоэдра*, как показано на рис. 11. Описание тригональных кристаллов в данной системе называют *R-установкой*.

В каждом из классов симметрии *ромбической сингонии* четко отражены три взаимно перпендикулярных направления: это либо три взаимно перпендикулярные оси симметрии второго порядка — в классах 222 и mmm , либо три взаимно перпендикулярные плоскости симметрии — в классе mmm (точнее, нормали к плоскостям симметрии), либо две нормали к плоскостям симметрии в совокупности с осью симметрии второго порядка, которая является линией пересечения двух перпендикулярных плоскостей симметрии, в классе mm .

В каждой позиции международного символа класса симметрии *ромбической сингонии* указывают плоскость симметрии, расположенную перпендикулярно координатному направлению, а при ее отсутствии — ось симметрии второго порядка, параллельную координатному направлению, причем указанные элементы симметрии записывают в порядке следования координатных осей ($OX-OY-OZ$).

В кристаллах *ромбической сингонии* все осевые единицы различны ($a_0 \neq b_0 \neq c_0$), поскольку углы между осями координат равны 90° ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$), в то время как элементарный угол здесь составляет 180° .

В отличие от кристаллов *ромбической сингонии* в трех классах симметрии *моноклинной сингонии* m , 2 , $2/m$ не только отсутствуют повторяющиеся элементы симметрии, но с помощью имеющихся элементов симметрии удается выделить в кристалле лишь одно направление, которое либо совпадает с осью симметрии второго порядка (в классах 2 и $2/m$), либо располагается перпендикулярно плоскости симметрии (в классе m) и которое принимают за ось Y .

В соответствии с законом Браве выбор двух других координатных направлений производят по представленным на кристалле наиболее плотным атомным рядам (например, по ребрам кристалла), которые перпендикулярны оси симметрии второго порядка или же расположены параллельно плоскости симметрии.

Указанное взаимное расположение осей координат определяет величину углов между ними ($\alpha = \gamma = 90^\circ$; $\beta \neq 90^\circ$). Данная координатная система, как и другие координатные системы кристаллов низшей категории, характеризуется несовпадением осевых единиц ($a_0 \neq b_0 \neq c_0$).

В двух классах симметрии *триклинной сингонии* 1 и $\bar{1}$ полностью отсутствуют и оси симметрии, и плоскости симметрии (в классе $\bar{1}$ единственный элемент симметрии — центр симметрии). Поэтому здесь координатные направления выбирают параллельными наиболее плотным атомным рядам или наиболее развитым ребрам кристалла, опять-таки следуя закону Браве. Координатная система характеризуется несовпадающими осевыми единицами ($a_0 \neq b_0 \neq c_0$) и неравными косыми координатными углами: $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ (наименование сингонии можно перевести как «трижды косоугольная»).

§ 6. Зоны в кристаллах

Как правило, большая часть граней кристалла связана с помощью элементов симметрии. В кристаллографии широко применяют такие методы, которые позволяют работать не с отдельными гранями, а с совокупностями граней кристалла или его атомных плоскостей, объединяемых по тому или иному признаку. Использование подобных совокупностей позволяет упростить решение многих задач, существенно сократить объем описательного материала. Кроме того, во многих случаях обращение к совокупностям указанного характера позволяет совместно с другими методами кристаллографии решать довольно сложные задачи.

В качестве признаков, по которым строят упомянутые выше множества, используют либо симметрию кристаллов, либо параллельность группы атомных плоскостей или граней кристалла некоторому кристаллографическому направлению.

Грани *ромбической дипирамиды* равны одна другой (рис. 26), связаны одна с другой тремя зеркальными плоскостями симметрии и имеют символы, которые выражены одинаковыми (без учета знака) индексами: $ABF - (111)$, $BCF - (\bar{1}11)$, $CDF - (1\bar{1}1)$, $DAF - (\bar{1}\bar{1}1)$, $ABE - (11\bar{1})$ и т. д. Геометрическое и размерное равенство граней кристалла выражается в подобии их кристаллографических символов.

Вместо перечисления символов всех граней *ромбической дипирамиды* (рис. 26) достаточно привести символ любой из этих граней, заключив его при этом в фигурные скобки, например символ $\{111\}$, и указать класс симметрии кристалла. Совокупность граней (или атомных плоскостей) кристалла, связанных одна с другой элементами симметрии, называют *простой формой*. Грани упомянутой *ромбической дипирамиды* представляют одну простую форму $\{111\}$.

Среди простых форм, представляющих интерес для описания металлических фаз, можно упомянуть куб $\{100\}$ (рис. 27), ромбододекаэдр $\{110\}$ (рис. 28), тетраэдр $\{111\}$ (рис. 29) и октаэдр $\{111\}$ (рис. 30). В последнем примере различие внешнего облика тетраэдра и октаэдра (при формальном сходстве

Наряду с понятием простых форм, которые объединяют эквивалентные атомные плоскости или грани кристалла, равные одна другой и связанные элементами симметрии, в кристаллографии часто используют понятие зон, которое объединяет

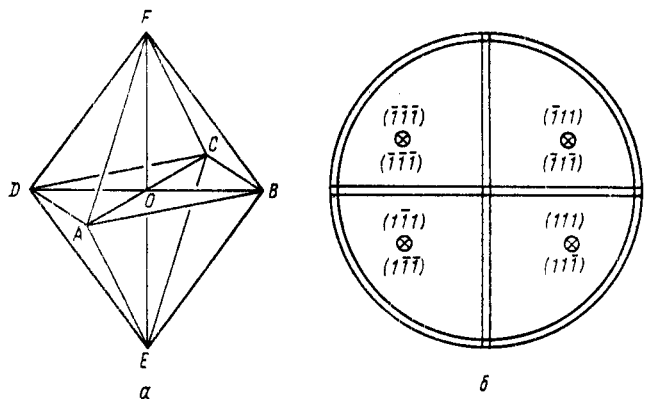


Рис. 26. Ромбическая дипирамида (а) и стереографические проекции нормалей ее граней (б)

Рис. 27. Куб $\{100\}$ (класс симметрии $m\bar{3}m$)

Рис. 28. Ромбододекаэдр $\{110\}$ (класс симметрии $m\bar{3}m$)

В кристаллическом многограннике (рис. 31), где представлены две простые формы — куб $\{100\}$ и октаэдр $\{111\}$, можно выделить несколько систем ребер (параллельных одно другому) каждой из которых соответствует своя зона. Так, вертикальные грани куба пересекаются по вертикальным ребрам

и составляют одну зону, которая называется зоной [001] по символу ребра пересечения вертикальных граней — «оси зоны» [001]. Грани куба образуют еще две зоны: зону [100], ось которой параллельна координатной оси OX и в которую входят верхняя (001), нижняя (00 $\bar{1}$), левая (010) и правая (010 $\bar{0}$) грани, и зону [010], ось которой параллельна координатной оси OY

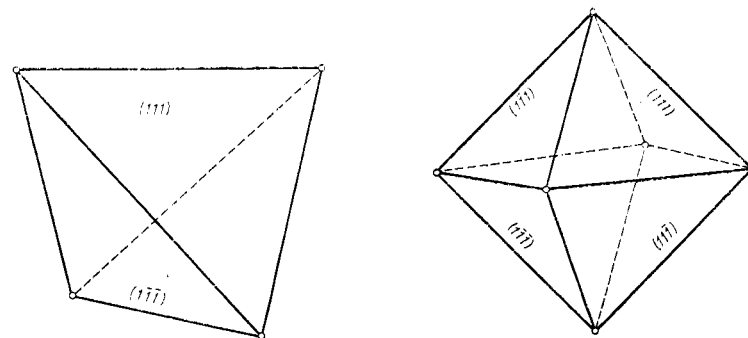


Рис. 29. Тетраэдр (кубический) $\{111\}$
(класс симметрии $43m$)

Рис. 30. Октаэдр $\{111\}$ (класс симметрии $m\bar{3}m$)

Рис. 31. Определение зон в кристаллах:
А — многогранник; б — проекции его граней

Аналитическое условие вхождения грани (hkl) в зону $[uvw]$ можно получить, если учесть, что нормаль любой грани (hkl) , входящей в зону, должна быть перпендикулярна оси зоны $[uvw]$, которая лежит в плоскости (hkl) . Это условие перпендикуляр-

ности можно записать в виде равенства нулю скалярного произведения двух векторов: вектора-нормали плоскости (hkl)

$$\bar{n} = h[\bar{bc}] + k[\bar{ca}] + l[\bar{ab}],$$

[которое мы получили в § 3, объединив выражения (5) и (11)] и радиуса-вектора оси зоны $\bar{R} = u\bar{a} + v\bar{b} + w\bar{c}$:

$$(\bar{n}\bar{R}) = (h[\bar{bc}] + k[\bar{ca}] + l[\bar{ab}]) \cdot (u\bar{a} + v\bar{b} + w\bar{c}) = \\ = \{hu([\bar{bc}]\bar{a}) + kv([\bar{ca}]\bar{b}) + lw([\bar{ab}]\bar{c})\} = 0.$$

Учитывая, что каждое из полученных тройных смешанных произведений базисных векторов представляет собою скалярную величину — объем элементарной ячейки V , где базисные векторы \bar{a} , \bar{b} , \bar{c} играют роль ребер элементарного параллелепипеда*, получим:

$$(\bar{n}\bar{R}) = V(hu + kv + lw) = 0.$$

В результате запишем искомое аналитическое выражение вхождения грани (или плоскости) (hkl) в зону $[uvw]$:

$$hu + kv + lw = 0. \quad (24)$$

Используя полученное выражение, проверим аналитически принадлежность грани октаэдра (111) зоне $[\bar{1}\bar{1}0]$:

$$1 \cdot 1 + 1 \cdot \bar{1} + 1 \cdot 0 = 0.$$

Таким образом подтверждается вхождение плоскости (111) в указанную зону. Нетрудно показать на том же примере, что с помощью условия (24) можно определить символы любых плоскостей, которые могут принадлежать зоне $[\bar{1}\bar{1}0]$. Действительно, подставляя конкретные значения индексов оси зоны $u=1$; $v=-1$; $w=0$ в указанное выражение, получим конкретное условие принадлежности любой грани (или плоскости) зоне $[\bar{1}\bar{1}0]$:

$$h \cdot 1 + k(-1) + l \cdot 0 = 0 \quad \text{или} \quad h = k.$$

Таким образом, в зону $[\bar{1}\bar{1}0]$ могут войти лишь такие атомные плоскости или грани кристалла, в символе которых одинаковы первые два индекса — h и k . Задавая различные целочисленные значения для индексов h и k , соответствующие указанному условию, а также различные значения индекса l , на который вообще не наложено никаких ограничений, получим символы плоскостей, которые могут входить в данную зону:

при $h = k = 0$ (001) и (00 $\bar{1}$);

» $h = k = 1$ (110); (111), (112), (113), (11 $\bar{1}$), (11 $\bar{2}$), (11 $\bar{3}$) и т. д.;

» $h = k = -1$ ($\bar{1}\bar{1}0$), ($\bar{1}\bar{1}1$), ($\bar{1}\bar{1}2$), ($\bar{1}\bar{1}3$), ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$), ($\bar{1}\bar{1}\bar{2}$) и т. д.;

» $h = k = 2$ (221), (223), (22 $\bar{1}$), (22 $\bar{3}$) и т. д.;

» $h = k = -2$ ($\bar{2}\bar{2}1$), ($\bar{2}\bar{2}3$), ($\bar{2}\bar{2}\bar{1}$), ($\bar{2}\bar{2}\bar{3}$) и т. д.

* См. Приложение Б.

Каждая грань кристалла входит не менее чем в две различные зоны, поскольку она ограничена по крайней мере двумя непараллельными ребрами. Естественно, для любой атомной плоскости в кристалле количество зон, в которые она может входить, не ограничено. В качестве наглядного примера приведем грань октаэдра (111) (рис. 30), которая имеет форму равностороннего треугольника и входит одновременно в три зоны: $\pm[\bar{1}\bar{1}0]$, $\pm[0\bar{1}1]$ и $\pm[\bar{1}01]$. Символ зоны можно определить как символ линии пересечения двух плоскостей (с известными символами) методом перекрестного умножения. Так, последний символ зоны получим как результат перекрестного умножения символов правой грани куба и заданной грани октаэдра:

$$\begin{array}{c|ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline \end{array}$$

$$u : v : w = \pm (1 \cdot 0 - 1 \cdot 1) : (1 \cdot 0 - 1 \cdot 0) : (1 \cdot 1 - 1 \cdot 0) = \pm (-1) : 0 : 1.$$

Проекции нормалей к граням кристалла, входящим в одну зону, лежат на дуге одного большого круга, т. е. укладываются на один меридиан сетки Вульфа или на два ее меридиана, которые располагаются симметрично относительно центрального меридиана. Действительно, нормали всех граней, входящих в одну зону, располагаются перпендикулярно оси зоны — линии пересечения входящих в нее плоскостей и поэтому параллельны одной и той же плоскости (перпендикулярной оси зоны). Следовательно, мы имеем основание считать их лежащими в одной плоскости, а стереографическая проекция плоскости, как известно, изображается дугой большого круга. Так, проекции граней кубического многогранника, представляющего комбинацию двух простых форм — куба и октаэдра (рис. 31, а), располагаются на дугах больших кругов, каждый из которых соответствует одной зоне. На большом круге, проекция которого совпадает с вертикальным диаметром проекции (рис. 31, б)) лежат проекции нормалей граней куба (100), (001), ($\bar{1}00$) и (00 $\bar{1}$), которые входят в зону $\pm[010]$. На проекции другого большого круга, совпадающей с горизонтальным диаметром проекции, лежат проекции нормалей граней куба, которые входят в зону $\pm[100]$ (значит, линии пересечения этих граней параллельны оси X): (010), (001), (00 $\bar{1}$), (0 $\bar{1}0$). На проекции третьего большого круга, которая совпадает с контуром круга проекций, лежат проекции вертикальных граней куба (100), (010), ($\bar{1}00$) и (0 $\bar{1}0$), принадлежащие зоне $\pm[001]$. На диагональных диаметрах круга проекций располагаются проекции зон, которые образованы совместно гранями куба и гранями октаэдра. Так, на одном диагональном диаметре лежат гномостереографические проекции граней (001), (00 $\bar{1}$), (111), (11 $\bar{1}$), ($\bar{1}\bar{1}1$) и ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) — зона

$\pm[\bar{1}10]$, а на другом диагональном диаметре — проекции граней зоны $\pm[110]$: $(1\bar{1}1)$, $(1\bar{1}\bar{1})$, (001) , $(00\bar{1})$, $(\bar{1}11)$ и $(\bar{1}1\bar{1})$. Остальные зоны имеют наклонные по отношению к вертикали оси, диагональ сетки Вульфа. Так, в зону $\pm[10\bar{1}]$ входят грани (111) , (010) , $(\bar{1}\bar{1}1)$, $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, $(0\bar{1}0)$ и $(1\bar{1}1)$.

С понятием зон связано известное правило проверки символов граней. Если в одну и ту же зону входят две грани $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$, то той же зоне будет принадлежать любая грань, символ которой состоит из линейной комбинации соответствующих индексов данных граней. Действительно, записав для каждой из заданных граней условие их вхождения в зону $[uvw]$ и умножив члены каждого из этих уравнений на некоторые произвольные целые числа, сложим почленно оба уравнения:

$$Dh_1u + Dk_1v + Dl_1w = 0$$

$$Fh_2u + Fk_2v + Fl_2w = 0$$

$$(Dh_1 + Fh_2)u + (Dk_1 + Fk_2)v + (Dl_1 + Fl_2)w = 0.$$

Так, сложив почленно индексы символов граней (111) и $(\bar{1}\bar{1}1)$, входящих в зону $\pm[1\bar{1}0]$ и сократив на два, получим символ (001) , который соответствует верхней грани куба, входящей в ту же самую зону.

С понятием зон связан так называемый закон зон, который позволяет предсказать, какие грани могут образоваться на кристалле при благоприятных условиях (например, какие грани могут появиться на кубическом кристалле помимо граней куба $\{100\}$ и октаэдра $\{111\}$). Реальный набор граней кристалла зависит кроме симметрии кристалла от условий его образования (температуры материнской фазы, ее состава, пересыщения и др.). Закон зон определяет теоретический подход к этому вопросу: плоскость, параллельная двум ребрам кристалла, является действительной или возможной гранью этого кристалла.

Хотя на основании закона зон количество возможных граней на кристалле не ограничивается, однако на практике редко можно встретить грани с индексами более трех или пяти.

Что касается применения закона зон к кристаллическим структурам, то в них возможны атомные плоскости с любыми, в том числе и с большими индексами. Однако роль таких плоскостей (которые имеют сравнительно низкую ретикулярную плотность) в физических явлениях типа скольжения дислокаций (см. ч. 2) обычно проявляется слабо.

На рис. 32 и 33 показаны комплексы возможных граней кубических и гексагональных кристаллов, построенные на основании закона зон. Знакомство с топографией этих комплексов существенно помогает закрепить навыки работы с проекциями

граней и их символами (в частности, позволяет наглядно представить описанный в настоящем разделе метод суммирования индексов), а также использовать их в качестве полезного справочного материала.

Так, символ грани (110) , проекция нормали которой лежит на контуре круга проекций (рис. 32), можно получить, суммируя по указанному правилу индексы соседних граней куба (100) и (010) . Затем можно получить

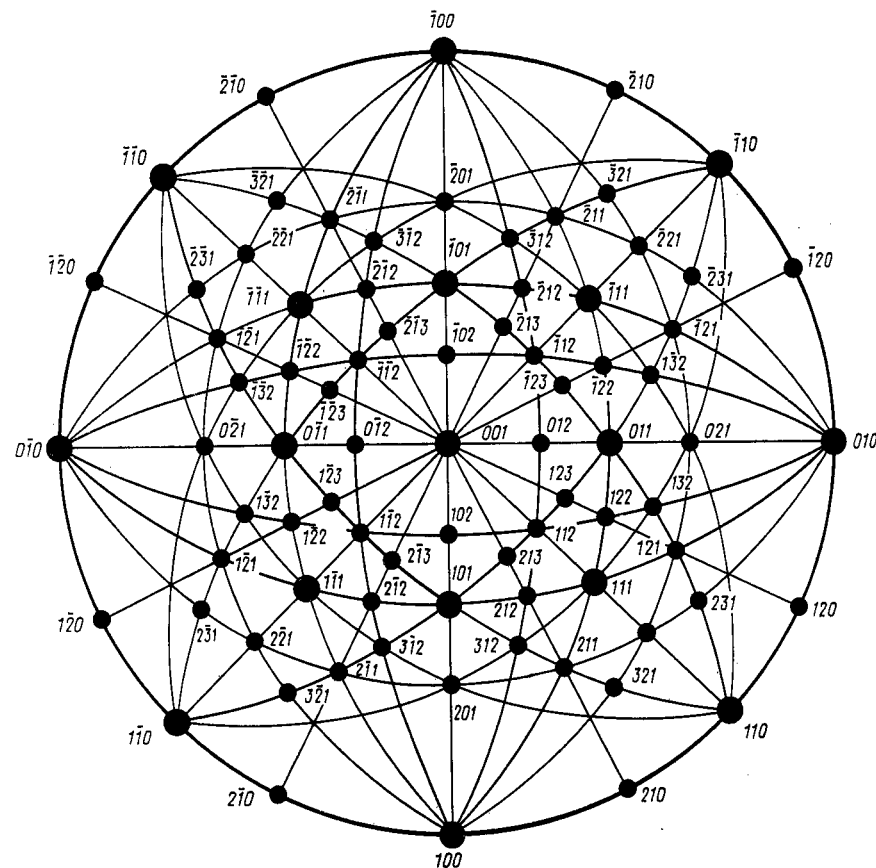


Рис. 32. Комплекс возможных граней кубических кристаллов (при записи символов граней, круглые скобки опущены)

таким же образом символ грани (210) , суммируя индексы граней (100) и (110) . Символ грани октаэдра (111) можно получить по символам граней (001) и (110) . Символы граней тригонтриоктаэдра (221) , (212) и (122) можно получить, суммируя индексы грани октаэдра (111) с индексами граней ромбододекаэдра (110) , (101) и (011) .

Аналогичным образом можно установить связь между символами граней гексагональной призмы $(2\bar{1}10)$ и $(11\bar{2}0)$ и символом грани другой гексагональной призмы $(10\bar{1}0)$ (см. рис. 10, а, б):

$$(h_1 + h_2) : (k_1 + k_2) : (i_1 + i_2) : (l_1 + l_2) = 3 : 0 : \bar{3} : 0 = 1 : 0 : \bar{1} : 0.$$

Символы граней гексагональной пирамиды $\{hkil\}$ можно получить суммированием индексов граней призмы $\{hkio\}$ с индексом базисной грани (0001). Так, взяв символ грани призмы $(2\bar{1}\bar{1}0)$ и учитывая символ базисной грани (0001), получим символ грани пирамиды $(2\bar{1}\bar{1}1)$. Далее можно перейти к символам более тупых пирамид, суммируя полученный символ $(2\bar{1}\bar{1}1)$ с символом базисной грани (0001): $(2\bar{1}\bar{1}2)$, затем $(2\bar{1}\bar{1}3)$ и т. д.

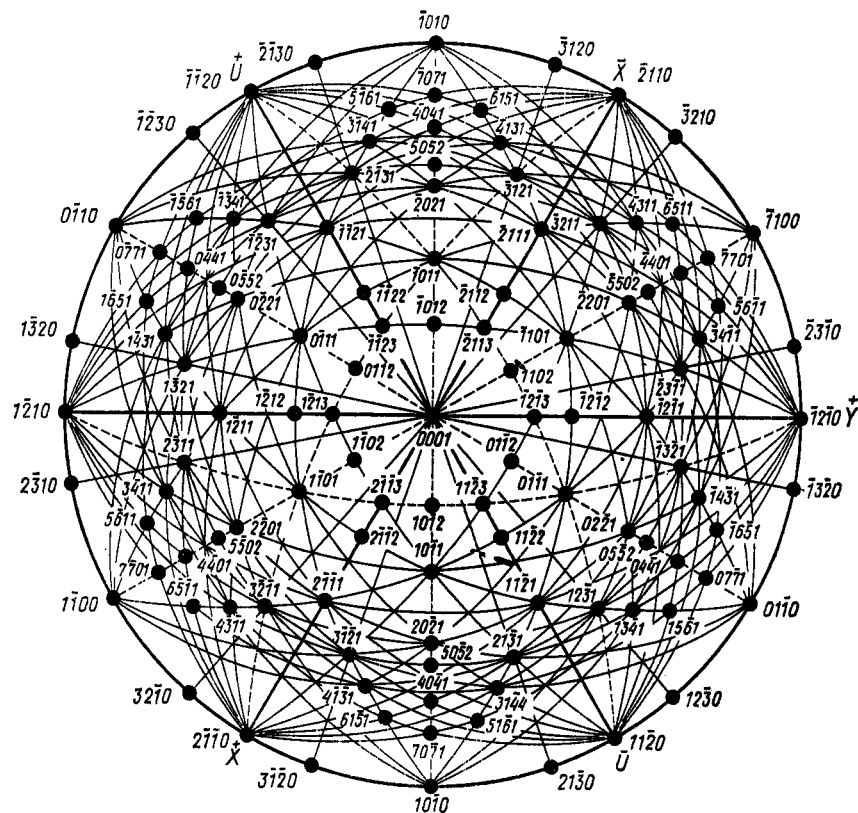


Рис. 33. Комплекс возможных граней гексагональных кристаллов (см. примечание к рис. 32)

Глава II СТРУКТУРНАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И КРИСТАЛЛОХИМИЯ

§ 7. Элементы симметрии кристаллических структур

Прежде чем приступить к описанию элементов симметрии кристаллических структур, необходимо отметить, что кристаллическую структуру во всех описаниях принято считать *бесконеч-*

ной, поскольку величина межатомных расстояний (порядка 10^{-8} см) практически несоизмеримо мала по сравнению с линейными размерами любого кристалла. Такое приближение, как мы увидим, значительно упрощает описание кристаллических структур.

Уникальные свойства, присущие кристаллическому состоянию вещества, имеют место благодаря закономерному, периодическому внутреннему строению кристаллов. Такие кристаллы характеризуются высокой однородностью, анизотропией, разнообразием симметрии свойств. Одной из центральных задач кристаллографии как науки о кристаллических структурах является сведение неограниченно большого ансамбля закономерно размещенных в трехмерном пространстве структурных единиц, составляющих в целом кристаллическую структуру, к небольшому по объему элементарному параллелепипеду — к одной элементарной ячейке. Эту задачу невозможно решить без метода симметрии, который позволяет перейти от *целого* к его малой *части*, чтобы через анализ этой части дать детальный, исчерпывающий обзор целого.

Характерной особенностью метода симметрии является возможность найти в целом, в частности в кристалле, *повторяющиеся* материальные фрагменты, чтобы, изучив закон повторения этих фрагментов в пространстве, создать рациональное и однозначное описание целого. Мы уже применяли метод симметрии для описания кристаллических многогранников и кристаллических структур. С помощью плоскостей симметрии, простых и инверсионных осей симметрии, центра симметрии мы связывали равные грани кристаллов, их вершины, двугранные углы, эквивалентные атомные плоскости и атомные ряды. Все названные элементы симметрии применяют также для описания кристаллических структур, и приведенные в гл. I примеры убедительно это доказывают. Однако ни один из этих элементов симметрии в отдельности, ни все они вместе взятые не позволяют перейти от одного атома к бесконечному повторению его вдоль всего атомного ряда, от одного атомного ряда — к повторению параллельных эквивалентных атомных рядов вдоль неограниченной атомной плоскости, от одной атомной плоскости — к бесконечному пакету эквивалентных параллельных равноудаленных атомных плоскостей, составляющих в целом кристаллическую структуру, от элементарных ячеек (отдельных элементарных параллелепипедов) — к кристаллу. Эти функции выполняют особые элементы симметрии: трансляции, плоскости скользящего отражения и винтовые оси симметрии.

Трансляцию определяют как такой элемент симметрии, который соответствует параллельному переносу всей кристаллической структуры как единого целого из исходного положения в новое положение, которое неотличимо от исходного. При этом переносе каждый из атомов должен занять такое же в точности

положение, которое до него в исходном положении занимал атом такого же сорта. Трансляция характеризуется особым вектором \bar{T} , который указывает направление параллельного переноса и расстояние вдоль этого направления между исходным и новым положением кристаллической структуры в целом и каждого ее атома в отдельности. Вектор трансляции \bar{T} , или трансляционный вектор, определяют с помощью тех же самых координатных базисных векторов \bar{a} , \bar{b} , \bar{c} , которые мы применяли для описания пространственной решетки:

$$\bar{T} = t_1\bar{a} + t_2\bar{b} + t_3\bar{c},$$

где t_1 , t_2 , t_3 — соответствующие численные коэффициенты.

Рассмотрим фрагмент атомной плоскости, где представлены атомы двух сортов, условно обозначенные кружочками и квадратиками (рис. 34, I). В соответствии с определением трансляции построим вектор \bar{T}_1 таким образом, чтобы он соединял между собой центры двух идентичных атомов, расположенных в верхнем левом углу (рис. 34, II). Данный вектор окажется трансляционным только в том случае, если с помощью него можно будет соединить центры любых двух идентичных атомов. Поскольку трансляционный вектор можно переносить параллельно ему самому (как и любое другое направление в кристаллической структуре), достаточно совместить начальную точку вектора \bar{T}_1 с центром любого атома, чтобы убедиться, что конец этого вектора точно совпадает с центром другого аналогичного атома (некоторые возможные положения трансляционного вектора показаны на рис. 34, II). Следовательно, вектор \bar{T}_1 действительно обладает необходимыми свойствами трансляционного вектора. Чтобы определить этот вектор через базисные векторы \bar{a} , \bar{b} , \bar{c} , рассмотрим узловую плоскую сетку, соответствующую данной атомной плоскости (рис. 34, III), где обозначены базисные векторы (условимся считать данную атомную плоскость и соответствующую ей узловую плоскую сетку горизонтальными). Совмещая трансляционный вектор с плоской узловой сеткой, запишем его выражение с помощью базисных векторов: $\bar{T}_1 = -\bar{a} + \bar{b}$.

Анализируя функции трансляционного вектора \bar{T}_1 как элемента симметрии, необходимо отметить, что трансляционный вектор позволяет осуществить переход от одного атома к другому, причем выполнить такой переход можно неограниченное число раз — вдоль всего атомного ряда. Действительно, передвигая вектор трансляции шаг за шагом из центра одного атома, где находилась начальная точка вектора, в центр другого атома, где находилась конечная точка вектора, мы сможем описать закономерное, периодическое строение атомного ряда в кристаллической структуре.

Учитывая, что выбор вектора \bar{T}_1 был сделан нами произвольно (мы совершенно случайно выбрали два атома, принадлежащие данной атомной плоскости), постараемся ответить на два вопроса.

1. Сколько можно выбрать трансляционных векторов на одной атомной плоскости?

2. Всегда ли вектор, соединяющий центры идентичных атомов, оказывается трансляционным?

Чтобы ответить на первый вопрос, обратимся к рис. 34, II, где приведен фрагмент атомной плоскости довольно простой

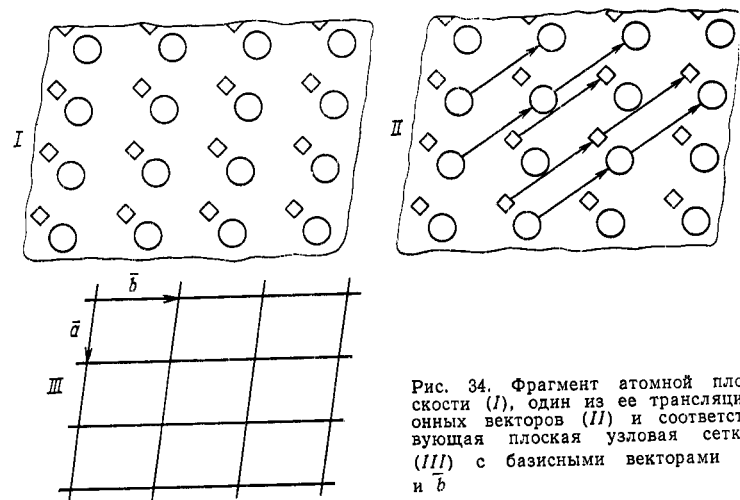


Рис. 34. Фрагмент атомной плоскости (I), один из ее трансляционных векторов (II) и соответствующая плоская узловая сетка (III) с базисными векторами \bar{a} и \bar{b}

кристаллической структуры. Нетрудно убедиться, что в данной структуре любой вектор, соединяющий центры двух идентичных атомов, оказывается трансляционным, в том числе трансляционными являются векторы, которые по величине и направлению соответствуют базисным векторам \bar{a} и \bar{b} (рис. 34, III). Следовательно, даже в пределах одной атомной плоскости можно выбрать любое количество трансляционных векторов, точно так же, как можно выбрать на этой плоскости сколько угодно большее количество непараллельных атомных рядов. Каждому такому атомному ряду соответствует свой трансляционный вектор.

В качестве основных трансляционных векторов кристаллической структуры выбирают такие, которые по величине и направлению соответствуют базисным координатным векторам \bar{a} , \bar{b} , \bar{c} . При таком выборе основные трансляционные векторы будут совпадать с ребрами элементарного параллелепипеда. Поскольку координатные направления в кристалле выбирают

вдоль наиболее плотных атомных рядов (как правило, параллельных осям симметрии), то и основные трансляции, и ребра элементарного параллелепипеда будут привязаны к одним и тем же атомным рядам (а, следовательно, будут располагаться вдоль координатных осей симметрии).

Чтобы решить второй вопрос, достаточно проанализировать плоскую атомную сетку (0001) кристаллической структуры графита (рис. 35). Очевидно, что в этой структуре не всякий вектор, соединяющий центры двух атомов, является трансляционным. Так, вектор \vec{T}_3 , соединяющий два ближайших атома углерода, не может быть трансляционным, поскольку при параллельном переносе его вдоль направления, соединяющего центры двух любых ближайших атомов, либо вперед, либо назад один из концов вектора не совмещается ни с одним из атомов. Однако, если в той же структуре мы попытаемся связать вектором не ближайшие атомы, а атомы, которые имеют общего «соседа», то такой вектор (\vec{T}_1 или \vec{T}_2) будет обладать всеми свойствами трансляционного.

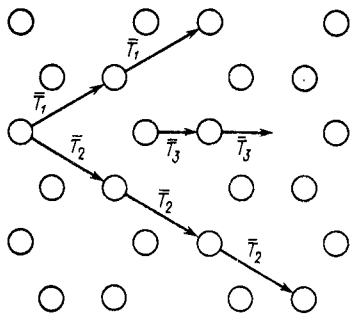


Рис. 35. Трансляционные векторы \vec{T}_1 и \vec{T}_2 в кристаллической структуре графита (вектор \vec{T}_3 не является трансляционным)

Таким образом, трансляции представляют собой элемент симметрии, принципиально отличающийся от всех ранее рассмотренных тем, что позволяет описывать бесконечные кристаллические структуры, связывая между собой идентичные атомы и в атомных рядах, и в атомных плоскостях, и в кристаллической структуре в целом. Именно с помощью трансляций можно связать каждый элементарный параллелепипед с любым другим элементарным параллелепипедом кристаллической структуры, именно благодаря трансляциям удастся свести описание любой, даже самой сложной кристаллической структуры к описанию одной элементарной ячейки, содержащей конечное и в большинстве случаев небольшое количество атомов.

Как было показано, трансляции являются особым элементом симметрии, с помощью которого можно описать совокупность неограниченного множества материальных частиц. Применяя неограниченное число раз однородную операцию — параллельный перенос, мы из одной элементарной ячейки могли получить бесконечную кристаллическую структуру. Аналогичной особенностью, правда, с более ограниченными возможностями обладают еще два типа элементов симметрии, применяемых для описания кристаллических структур — плоскости скользящего отражения и винтовые оси симметрии. В отличие от транс-

ляций указанные два типа элементов симметрии описывают не простые, а сложные симметрические преобразования, которые складываются из двух операций, причем одной из этих операций является уже знакомый нам параллельный перенос.

Плоскость скользящего отражения — это особый элемент симметрии, который описывает *отражение* кристаллической структуры в плоскости в сочетании с *параллельным переносом* (или, как часто говорят, со «скользящим») вдоль плоскости на определенную долю трансляции (в зависимости от типа плоскости скользящего отражения). При этом порядок выполнения указанных операций отражения и переноса не оказывает влияния на конечный результат.

В кубической кристаллической структуре типа хлористого натрия (рис. 36, I) соседние атомные плоскости имеют совершенно одинаковые рисунки и межатомные расстояния. Показанную на рисунке крайнюю левую атомную плоскость можно связать с аналогичной крайней правой атомной плоскостью с помощью зеркальной плоскости симметрии, которая проходит через среднюю

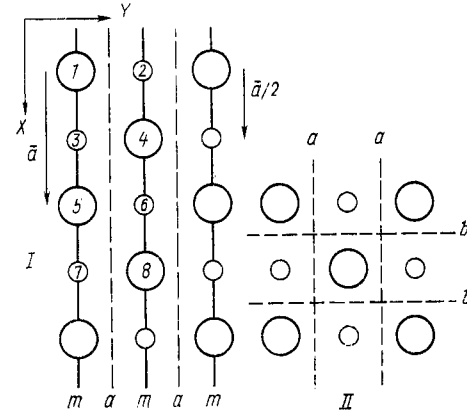


Рис. 36. Зеркальные плоскости симметрии m и плоскости скользящего отражения a в кристаллической структуре хлористого натрия: I — фрагмент из двух элементарных ячеек; II — плоскости скользящего отражения a и b в той же структуре

атомную плоскость, содержащую атомы 2—4—6—8 (все три атомные плоскости ориентированы перпендикулярно плоскости чертежа и занимают в пространстве вертикальное положение: они располагаются в координатной плоскости XOZ и перпендикулярны оси OY). Однако совместить подобным образом все соседние атомные плоскости не удастся несмотря на их очевидное сходство. Для того, чтобы связать соседние атомные плоскости, необходимо использовать новый элемент симметрии — плоскость скользящего отражения. Эти атомные плоскости можно совместить как симметрично-равные объекты с помощью двух операций: отражения в плоскости, расположенной на одинаковом расстоянии от обеих атомных плоскостей, и параллельного переноса (или «скользящего») вдоль оси OX на величину половины трансляции \vec{T}_x , равной базисному вектору \vec{a} . Такую плоскость называют плоскостью скользящего отражения a и обозначают на чертеже штриховой линией, если эта плоскость расположена перпендикулярно плоскости чертежа (как на рис. 36).

Рассмотрим описанное преобразование детально. Центр атома 1 после отражения в ближайшей к нему плоскости скользящего отражения займет положение центра (неидентичного) атома 2, а после скольжения вдоль оси OX на половину трансляции \bar{T}_x совместится с центром идентичного атома 4. В свою очередь, атом 4 после подобных преобразований займет положение идентичного атома 5. Атом 2 под действием плоскости скользящего отражения займет положение идентичного атома 3, атом 3 займет положение атома 6 и т. д. Таким образом, с помощью плоскости скользящего отражения мы связали полностью идентичные соседние атомные плоскости в рассматриваемой кристаллической структуре. Поскольку эта структура относится к кубической сингонии, все атомные плоскости, расположенные перпендикулярно каждой из координатных осей, являются идентичными. Поэтому плоскости скользящего отражения, подобные только что рассмотренной, будут связывать и соседние атомные плоскости, перпендикулярные оси OX и соседние атомные плоскости, перпендикулярные оси OZ . Так, на рис. 36, II кроме рассмотренных плоскостей скользящего отражения a показаны аналогичные плоскости скользящего отражения типа b , которые расположены перпендикулярно оси OX и имеют компоненту скольжения вдоль оси OY , равную половине трансляции \bar{T}_y (поскольку $\bar{T}_y = \bar{b}$, то компонента скольжения равна $\bar{b}/2$).

Плоскости скользящего отражения, которые имеют вертикальную компоненту скольжения, равную половине трансляции \bar{T}_z , называют плоскостями типа c (величина компоненты скольжения составляет $\bar{c}/2$, поскольку трансляционный вектор \bar{T}_z равен базисному вектору c).

В качестве плоскости скользящего отражения другого типа рассмотрим плоскость типа n , которая в отличие от ранее рассмотренных плоскостей скользящего отражения a , b и c имеет две или три компоненты скольжения, направленные вдоль разных координатных направлений. В кристаллической структуре куприта Cu_2O (рис. 37) вертикальная плоскость скользящего отражения n' с компонентами скольжения $-\bar{T}_x/2 = -\bar{a}/2$ и $-\bar{T}_z/2 = \bar{c}/2$ связывает между собой вершинный атом 6 с идентичным центральным атомом 5, а также атом 13 с атомом 11. Действительно, отразившись в вертикальной плоскости n' , вершинный атом 6 займет положение посередине ребра 6—7 элементарной ячейки. Затем после скольжения на половину трансляции вдоль оси OX и на половину трансляции вдоль оси OZ центр атома 6 займет положение центра атома 5. В свою очередь, центр атома 13, расположенный в самой плоскости скользящего отражения n' , после операции отражения не изменит

своего положения, а после скольжения на $-1/2(\bar{a} + \bar{c})$ займет положение центра атома 11.

Аналогичным образом действует соседняя вертикальная плоскость скользящего отражения n'' с компонентами скольжения $+\bar{T}_x/2 = +\bar{a}/2$ и $-\bar{T}_z/2 = -\bar{c}/2$. Например, атом 8 после отражения окажется посередине ребра элементарной ячейки 8—9, а после скольжения займет положение атома 5. Атом 12, лежащий в самой плоскости n'' , после скольжения займет положение атома 10. Поскольку рассматриваемая кристаллическая

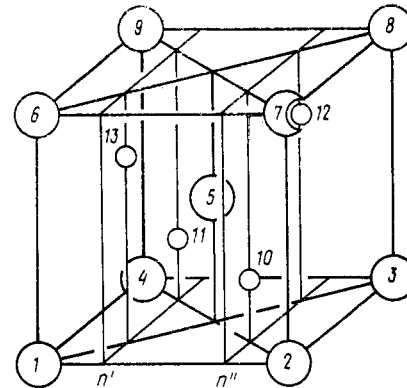


Рис. 37. Плоскости скользящего отражения типа n в кристаллической структуре куприта

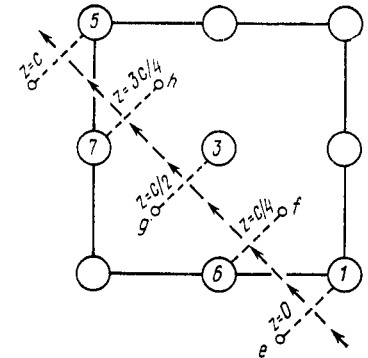


Рис. 38. Плоскость скользящего отражения типа d в кристаллической структуре β -олова

структура относится к кубической сингонии, подобные плоскости скользящего отражения типа n будут располагаться также перпендикулярно оси OX (с компонентами скольжения $\bar{T}_y/2$ и $\bar{T}_z/2$) и перпендикулярно оси OZ (с компонентами скольжения $\bar{T}_x/2$ и $\bar{T}_y/2$).

Как было отмечено, в общем случае плоскость скользящего отражения типа n может иметь не только две, но и все три компоненты скольжения ($\pm\bar{a}/2$; $\pm\bar{b}/2$; $\pm\bar{c}/2$).

В заключение рассмотрим плоскость скользящего отражения типа d , содержащую три компоненты скольжения, каждая из которых равна четверти соответствующей трансляции и направлена вдоль координатного направления. В тетрагональной кристаллической структуре металлического β -олова (рис. 38) атомы занимают положения в вершинах тетрагональной элементарной ячейки ($a_0 = b_0 \neq c_0$), в ее центре, а также на ее вертикальных гранях: на вертикалях, проведенных через центры граней, на высоте $c/4$ — для передней и задней граней и на высоте $3c/4$ — для левой и правой граней. Для наглядности изображения кристаллическая структура β -олова приведена и

в объемном виде (см. рис. 21), и в проекции на горизонтальную плоскость (см. рис. 38). На этой проекции — для каждого атома приведено соответствующее значение аппликаты — высоты расположения атома (считая от основания элементарной ячейки), выраженной в долях вертикальной трансляции \bar{c} . Положение плоскости скользящего отражения d с компонентами скольжения $-\bar{T}_x/4 = -\bar{a}/4$, $-\bar{T}_y/4 = -\bar{b}/4$ и $\bar{T}_z/4 = \bar{c}/4$ показано на проекции особой линией, где штрихи чередуются со стрелками (это общепринятое обозначение вертикальных плоскостей скользящего отражения типа d).

Таким образом, результирующее направление скольжения оказывается параллельным объемной диагонали элементарной ячейки, которая идет вдоль атомного ряда 1—3—5, а величина самого скольжения (или параллельного переноса) составляет одну четвертую часть объемной диагонали. Атом 1, занимающий положение в вершине основания элементарной ячейки ($z=0$), после отражения в вертикальной плоскости d попадает в точку e , которая также лежит в плоскости основания (см. рис. 38), а затем, после скольжения из точки e на четверть объемной диагонали займет положение атома 6 на передней грани элементарной ячейки на высоте $z=1/4$. В свою очередь, атом 6, отразившись в плоскости d , попадет в точку f , расположенную на той же высоте, а оттуда переместится в положение атома 3 в центре объема элементарной ячейки (высота $z=1/2$). Таким же образом атом 3, минув точку g , займет положение атома 7 (высота $z=3/4$), атом 7 после отражения в плоскости d попадет в точку h на той же высоте, а затем после скольжения вдоль объемной диагонали на ее четвертую часть займет положение в вершине элементарной ячейки на высоте $z=1$, которое до того принадлежало атому 5, и т. д. Если соединить отрезками прямых центры атомов, расположенных возле плоскости d , то образуется характерная зигзагообразная, ломаная линия 1—6—3—7—5. Мы рассматривали действие плоскости скользящего отражения d только на ближайшие к ней атомы, хотя эта плоскость как элемент симметрии связывает *каждый* атом данной кристаллической структуры с аналогичным атомом (чтобы наглядно убедиться в этом, нужно «достроить» еще несколько соседних элементарных ячеек).

Таким образом, новый рассмотренный нами тип элементов симметрии — плоскости скользящего отражения — позволяет связать такие эквивалентные атомные плоскости, которые мы раньше не могли связать зеркальными плоскостями симметрии, а также иными элементами симметрии. Именно наличие в реальных кристаллических структурах таких эквивалентных атомных плоскостей, которые нельзя связать другими элементами симметрии, доказывает объективную необходимость применения понятия о плоскостях скользящего отражения. По-видимому, соображение такого же характера можно привести и по поводу другой группы элементов симметрии, применяемых для описания кристаллических структур — винтовых осей симметрии, которые мы рассмотрим несколько ниже.

Возможные плоскости скользящего отражения и их стандартные обозначения приведены в табл. 5. В целях общности описания в этой таблице представлена обычная зеркальная плоскость симметрии как плоскость скользящего отражения с нулевыми компонентами скольжения.

Таблица 5. Плоскости скользящего отражения в кристаллических структурах

Наименование плоскости	Компоненты скольжения	Возможные направления скольжения вдоль оси или диагонали	Графическое обозначение плоскости		
			вертикальной	горизонтальной	наклонной
a	$\pm \bar{T}_x/2$	Оси $OX \pm [100]$	----		
b	$\pm \bar{T}_y/2$	Оси $OY \pm [010]$	----		
c	$\pm \bar{T}_z/2$	Оси $OZ \pm [001]$	—	
n	$(\pm \bar{T}_x \pm \bar{T}_y)/2$	Диагонали $\pm [110]$ основания элементарной ячейки			
n	$(\pm \bar{T}_y \pm \bar{T}_z)/2$	Диагонали $\pm [011]$ передней грани			
n	$(\pm \bar{T}_z \pm \bar{T}_x)/2$	Диагонали $\pm [101]$ боковой грани			
n	$(\pm \bar{T}_x \pm \bar{T}_y \pm \bar{T}_z)/2$	Объемной диагонали $\langle 111 \rangle$			
d	$(\pm \bar{T}_x \pm \bar{T}_y)/4$	Диагонали $\pm [110]$ основания			
d	$(\pm \bar{T}_y \pm \bar{T}_z)/4$	Диагонали $\pm [011]$ передней грани			
d	$(\pm \bar{T}_z \pm \bar{T}_x)/4$	Диагонали $\pm [101]$ боковой грани			
d	$(\pm \bar{T}_x \pm \bar{T}_y \pm \bar{T}_z)/4$	Объемной диагонали $\langle 111 \rangle$			
m^*	0	Нет	----		

* Зеркальная плоскость симметрии m приведена для сопоставления: формально ее можно определить как плоскость скользящего отражения с нулевой компонентой скольжения.

Винтовые оси симметрии описывают поворот всей кристаллической структуры на соответствующий элементарный угол в сочетании с параллельным переносом (скольжением) вдоль оси симметрии на определенную долю трансляции. Элементарный угол поворота определяется порядком винтовой оси симметрии (вторым, третьим, четвертым или шестым), а величина компонент скольжения — типом этой оси. Например, для совмещения двух

соседних атомных рядов, расположенных вдоль вертикальной оси координат (в кристаллической структуре типа хлористого натрия — рис. 39), достаточно повернуть каждый из атомов вокруг винтовой оси симметрии 2_1 (читается: два — один), которая проходит также параллельно оси OZ посередине между двумя атомными рядами, на угол 180° и сместить его параллельно винтовой оси симметрии на половину вертикальной трансляции. При этом символ 2_1 предельно лаконично отражает всю указанную информацию о действии оси. Цифра 2 указывает порядок оси симметрии, а индекс 1 позволяет определить величину компоненты скольжения, которая выражается дробью, где в числителе записывается индекс 1, а в знаменателе — порядок винтовой оси симметрии 2. В результате мы получаем величину компоненты скольжения, равную половине трансляции, что полностью соответствует определению данной винтовой оси симметрии.

В кристаллической структуре β -олова (рис. 38) можно привести пример винтовой

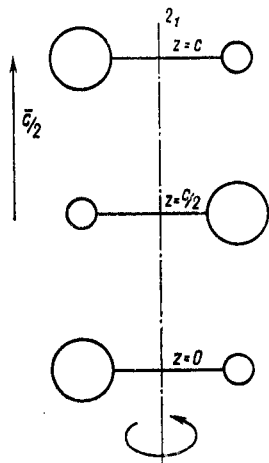


Рис. 39. Винтовая ось симметрии второго порядка 2_1 в кристаллической структуре хлористого натрия

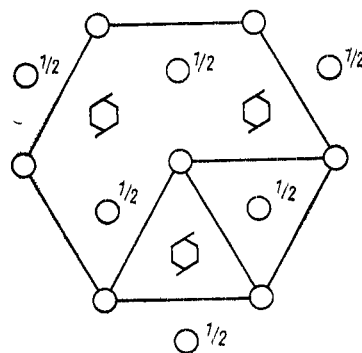


Рис. 40. Винтовая ось симметрии шестого порядка 6_3 в кристаллической структуре магния

оси симметрии четвертого порядка 4_1 , которая описывает поворот на 90° в сочетании со скольжением вдоль оси на четверть трансляции. Если рассмотреть левую нижнюю четверть указанного рисунка, то в вершинах получившегося таким образом квадрата с центром в точке g оказываются атомы, которые как бы располагаются по винтовой линии: при обходе вершин квадрата против часовой стрелки высота z , на которой расположены атомы, возрастает — за каждые 90° поворота высота увеличивается на четверть трансляции — от нуля (у атома в левом нижнем углу) до $1/4$ (атом 6) и далее до $1/2$ (атом 3), до $3/4$ (атом 7) и т. д. Так что, действительно, через центр выделенного нами малого квадрата — точку g перпендикулярно плоскости чертежа, т. е. вдоль оси OZ , проходит вертикальная винтовая ось симметрии 4_1 .

Пример винтовой оси симметрии шестого порядка 6_3 можно увидеть в кристаллической структуре магния (рис. 40). На представленном фрагменте кристаллической структуры вертикальная ось симметрии 6_3 объединяет атомы, которые размещаются на расстоянии половины вертикальной трансляции от основания элементарной ячейки, с теми атомами, которые располагаются на самом ее основании.

Все винтовые оси симметрии, встречающиеся в кристаллах, схематически представлены в табл. 6, которая наглядно показывает, что величина компоненты скольжения определенным

Таблица 6. Графические обозначения и компоненты скольжения винтовых осей симметрии

Наименование оси симметрии	Компонента скольжения	Графическое обозначение винтовой оси		
		вертикальной	горизонтальной	наклонной
2_1	$2\bar{a}$ или $\bar{b}/2$ или $\bar{c}/2$			
3_1	$\bar{c}/3$		—	—
3_2	$2\bar{c}/3$		—	—
4_1	$\bar{a}/4$ или $\bar{b}/4$ или $\bar{c}/4$			—
4_2	$\bar{a}/2$ или $\bar{b}/2$ или $\bar{c}/2$			—
4_3	$3\bar{a}/4$ или $3\bar{b}/4$ или $3\bar{c}/4$			—
6_1	$\bar{c}/6$		—	—
6_2	$\bar{c}/3$		—	—
6_3	$\bar{c}/2$		—	—
6_4	$2\bar{c}/3$		—	—
6_5	$5\bar{c}/6$		—	—

образом связана с порядком винтовой оси симметрии. Например, для винтовых осей симметрии шестого порядка возможны только компоненты скольжения, которые кратны одной шестой трансляции c : $1/6$ (ось 6_1), $2/6$ (ось 6_2), $3/6$ (ось 6_3), $4/6$ (ось 6_4) и, наконец, $5/6$ (ось 6_5).

§ 8. Пространственные группы симметрии кристаллических структур

Основные теоретические предпосылки и полное описание законов симметрии кристаллических структур были получены Е. С. Федоровым в 1890 г. Основываясь на учении о симметрии

кристаллических многогранников, которое к концу XIX в. уже располагало законченным выводом 32 классов симметрии (см. п. 5), он доказал, что все возможное многообразие кристаллических структур может быть описано с помощью 230 сочетаний различных элементов симметрии — пространственных групп симметрии.

Пространственная группа симметрии представляет собой определенную совокупность элементов симметрии данной кристаллической структуры (включая трансляции). Между пространственными группами симметрии и классами симметрии существует непосредственная связь: каждому классу симметрии соответствует несколько пространственных групп симметрии и, наоборот, каждой пространственной группе симметрии соответствует определенный класс симметрии. Пространственные группы симметрии включают в себя большинство тех элементов симметрии, которые входят в исходный класс симметрии. Указанное сходство между пространственными группами симметрии и классами симметрии (или, как их еще называют, точечными группами симметрии) получило свое отражение и в соответствующей международной символике: последовательность записи определяющих элементов симметрии в обоих международных символах практически одна и та же.

В отличие от класса симметрии пространственная группа симметрии обязательно включает трансляции, благодаря которым стало возможным описание бесконечных фигур, какими являются кристаллические структуры. Помимо трансляций, которые описывают параллельный перенос кристаллической структуры вдоль координатных направлений, многие пространственные группы симметрии включают также такие элементы симметрии, которые предусматривают параллельный перенос кристаллической структуры на определенную долю трансляции — плоскости скользящего отражения и винтовые оси симметрии — и которые предназначены исключительно для описания кристаллических структур (бесконечных). Если формально определить вывод пространственных групп симметрии как дополнение класса симметрии некоторыми «трансляционными» элементами симметрии, то для обратного перехода достаточно в символе пространственной группы симметрии заменить все «трансляционные» элементы симметрии на «нетрансляционные», чтобы перейти от символа пространственной группы симметрии к соответствующему символу класса симметрии (например, заменить символ винтовой оси симметрии символом простой оси симметрии того же порядка или заменить символ плоскости скользящего отражения символом зеркальной плоскости симметрии).

При определении пространственной группы кристаллической структуры исключительно важную роль играет правильное определение сингонии, которая полностью определяет не только порядок записи элементов симметрии в символе пространствен-

ной группы симметрии, но и выбор самих элементов симметрии, указываемых в символе. К наиболее ярким признакам сингонии в кристаллических структурах относятся:

тетрагональная призма (с одинаковыми атомами в вершинах элементарной ячейки и основанием в форме квадрата) — для тетрагональной сингонии;

прямоугольный параллелепипед (с неравновеликими ребрами) — для ромбической сингонии;

наличие плоских атомных сеток, составленных из правильных треугольников или правильных шестиугольников (перпендикулярных главному кристаллографическому направлению — оси симметрии высшего порядка) — для тригональной и гексагональной сингоний;

элементарная ячейка в форме куба — для кубической сингонии.

Отсутствие указанных признаков свидетельствует о принадлежности кристаллической структуры двум оставшимся сингониям — моноклинной или триклинной, т. е. отсутствие указанных признаков само по себе служит достаточно надежным признаком установления сингонии кристалла.

1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТИПА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ РЕШЕТКИ БРАВЕ И ПРАВИЛА ВЫБОРА ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ

В первой позиции международного символа пространственной группы симметрии для кристаллов всех сингоний приводится тип пространственной решетки Браве, указывающий набор трансляций в описываемой кристаллической структуре. Браве развил представление о пространственных решетках, основы которого были рассмотрены нами в § 1 и которое позволяет однозначно выбрать в кристаллической структуре элементарную ячейку.

Анализ показывает, что описанная выше пространственная решетка, которую мы представляли с помощью радиуса-вектора $\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$, где m, n, p — любые целые числа, можно охарактеризовать центральной симметрией. Действительно, соединив попарно прямыми восемь соседних узлов пространственной решетки, мы получим параллелепипед, каждая вершина которого является центром симметрии (рис. 41). Такую пространственную решетку Браве предложил называть *примитивной* и обозначать символом P . При этом он обратил внимание на то, что описанный параллелепипед имеет центры симметрии не только в своих вершинах, но также в центре объема (в точке пересечения объемных диагоналей) и в центре каждой своей грани. На основе подобного симметричного анализа были предложены три типа сложных пространственных решеток

с *дополнительными* (по сравнению с примитивной пространственной решеткой) узловыми точками, которые располагаются в указанных центрах симметрии. Так, в *объемноцентрированной* пространственной решетке дополнительный узел располагается

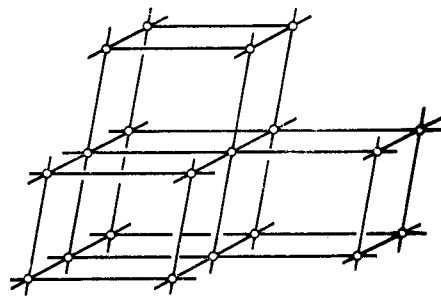


Рис. 41. Фрагмент примитивной пространственной решетки

в центре объема параллелепипеда (рис. 42, а); такую пространственную решетку обозначают символом I . В *базоцентрированной* пространственной решетке дополнительные узлы располагаются в центрах нижнего и верхнего оснований параллелепипеда (рис. 42, б); такую пространственную решетку обозначают символом C . Наконец в *гранецентрированной* пространственной решетке

дополнительные узлы располагаются в центрах *всех* граней параллелепипеда (рис. 42, в); такую пространственную решетку обозначают символом F .

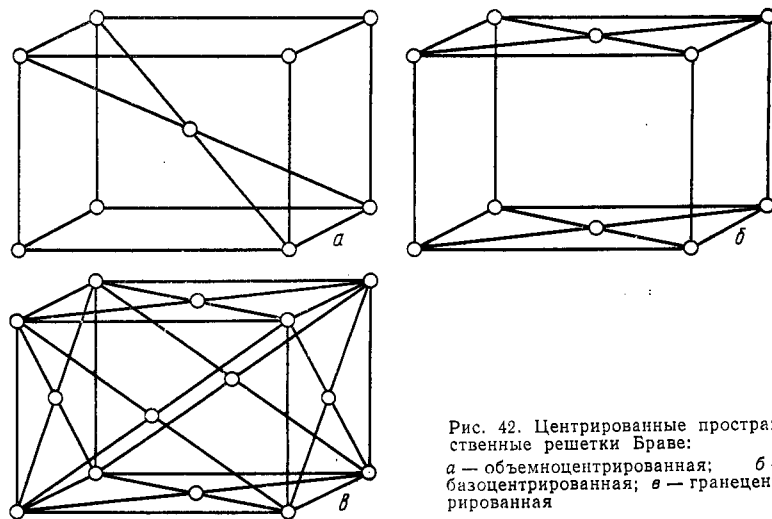


Рис. 42. Центрированные пространственные решетки Браве:
а — объемноцентрированная; б — базоцентрированная; в — гранецентрированная

в этой структуре трансляциями. Так, если в кристаллической структуре представлены лишь основные трансляции $\bar{T}_x = \bar{a}$, $\bar{T}_y = \bar{b}$, $\bar{T}_z = \bar{c}$, которыми можно связать, как элементами симме-

трии, идентичные атомы всех сортов, имеющих в данной структуре, и отсутствуют дополнительные трансляции, то такой кристаллической структуре соответствует примитивная пространственная решетка Браве (тип P , рис. 43, а). Если же в кристаллической структуре обнаруживаются помимо основных (которые обязательно всегда присутствуют в любой кристаллической структуре) дополнительные трансляции либо типа I [соединяющие вершины элементарной ячейки с ее центром и равные

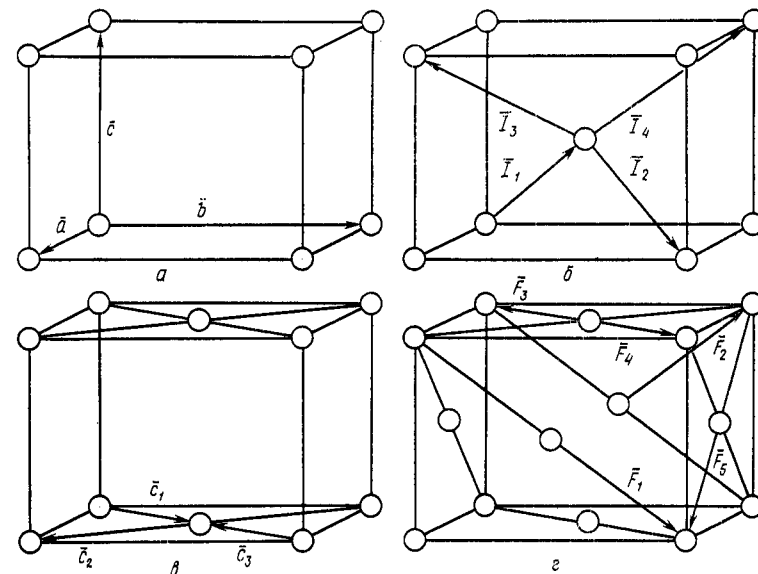


Рис. 43. Кристаллические структуры, которым соответствуют различные типы пространственных решеток Браве:
а — примитивная (тип P); б — объемноцентрированная (тип I); в — базоцентрированная (тип C); г — гранецентрированная (тип F)

$\bar{T} = (\pm \bar{a} \pm \bar{b} \pm \bar{c})/2$ — см, рис. 43, б], либо дополнительные трансляции типа \bar{C} [соединяющие вершины с центрами оснований параллелепипеда, $\bar{C} = (\pm \bar{a} \pm \bar{b})/2$ — см. рис. 43, в], либо дополнительные трансляции типа \bar{F} [которые соединяют вершины с центрами примыкающих к ним граней, $\bar{F} = (\pm \bar{a} \pm \bar{b})/2$, $\bar{F} = (\pm \bar{b} \pm \bar{c})/2$, $\bar{F} = (\pm \bar{c} \pm \bar{a})/2$ — см. рис. 43, г], то анализируемую кристаллическую структуру описывают соответственно с помощью одной из перечисленных центрированных пространственных решеток Браве.

Следует отметить, что в отличие от примитивных пространственных решеток, которые мы характеризовали целочисленными значениями координат радиуса-вектора m , n и p ,

центрированные пространственные решетки характеризуются и целыми, и дробными значениями коэффициентов m , n и p .

При определении типа пространственной решетки Браве необходимо учитывать, что в кристаллических структурах разных сингоний встречается всего семь центрированных пространственных решеток: две базоцентрированные (в моноклинной и ромбической сингониях), три объемноцентрированные (в ромбиче-

Сингония, геометрия решетки	Тип пространственной решетки Браве			
	Примитивная P	Базоцентриро- ванная C	Объемноцентриро- ванная I	Гранецентриро- ванная F
Триклинная, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$; $a_0 \neq b_0 \neq c_0$				
Моноклинная, $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$; $a_0 \neq b_0 \neq c_0$				
Ромбическая, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; $a_0 \neq b_0 \neq c_0$				
Тригональная, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; $a_0 = b_0 = c_0$				
Тетрагональная, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; $a_0 = b_0 \neq c_0$				
Гексагональная, $\alpha = \beta = 90^\circ$; $\gamma = 120^\circ$; $a_0 = b_0 \neq c_0$				
Кубическая, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; $a_0 = b_0 = c_0$				

Рис. 41. 14 пространственных решеток Браве

ской, тетрагональной и кубической сингониях) и две гранцентрированные (в ромбической и кубической сингониях), т. е. существует только 14 пространственных решеток Браве (рис. 44). Отсутствие в этой таблице многих возможных пространственных решеток связано с тем, что они либо в принципе невозможны для кристаллов данной сингонии (как базоцентрированная пространственная решетка для кристаллов кубической сингонии), либо могут быть сведены к пространственным решеткам другого типа. Так, гранцентрированную тетрагональную пространственную решетку F можно заменить объемноцентрированной пространственной решеткой I с уменьшенным вдвое основанием параллелепипеда (рис. 45, а), а базоцентрированную тетрагональную — заменить примитивной, также с умень-

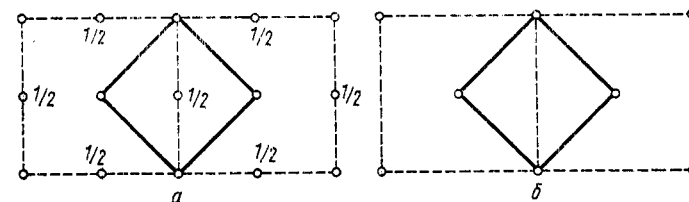


Рис. 45. Исключение некоторых тетрагональных пространственных решеток Браве:
а — гранцентрированная сводится к объемноцентрированной; б — базоцентрированная — к примитивной

шенным вдвое объемом параллелепипеда (рис. 45, б) (данный конкретный случай рассмотрен в Приложении В, где приведены также формулы общего вида для преобразования символов направлений и плоскостей в различных кристаллах при замене базиса). В приведенных примерах переход от одной пространственной решетки к другой сопряжен с заменой трансляций \bar{a} и \bar{b} : новые трансляции повернуты по отношению к старым на 45° , а также меньше них в $\sqrt{2}$ раз.

При определении характерных элементов симметрии не следует ограничиваться пределами одной (часто специально выделенной) элементарной ячейки кристаллической структуры, поскольку связанные данным элементом симметрии атомы могут разместиться за пределами одной ячейки, что часто наблюдается для винтовых осей симметрии, а также плоскостей скользящего отражения.

Определение пространственных решеток Браве дает основание для целесообразного и вместе с тем однозначного выбора в любой кристаллической структуре элементарной ячейки — элементарного параллелепипеда, ребра которого соответствуют трем базисным координатным векторам пространственной решетки.

Правила выбора элементарной ячейки можно свести к трем последовательно выполняемым требованиям. Во-первых, форма элементарной ячейки должна по своей симметрии соответствовать симметрии кристалла. Во-вторых, выбираемая элементарная ячейка должна иметь максимально возможное число прямых углов: в кубических, тетрагональных и ромбических структурах все три угла между ребрами прямые, в гексагональных и моноклинных структурах два угла из трех прямые. Прямые углы отсутствуют лишь в триклинной и ромбоэдрической (тригональной) элементарной ячейке, однако в последнем случае допускается описывать кристаллическую структуру с помощью гексагональной координатной системы с двумя прямыми углами. Третье условие — минимальный объем элементарной ячейки. Примеры выбора элементарных ячеек рассмотрены ниже при анализе конкретных кристаллических структур.

2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СИМВОЛА ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППЫ СИММЕТРИИ

Вслед за символом, указывающим тип пространственной решетки анализируемой кристаллической структуры, в определенной последовательности следуют символы элементов симметрии кристаллической структуры, которые ориентированы в определенных направлениях. Для каждой сингонии установлено несколько таких направлений в кристаллической структуре, по которым определяют соответствующие элементы симметрии, указываемые во второй и последующих позициях международного символа пространственной группы симметрии (табл. 7).

Таблица 7. Главные направления в кристаллах разных сингоний

Сингония	Направления в кристаллах по позициям II—IV в символе пространственной группы симметрии:		
	II	III	IV
Кубическая	[001]	[111]	[110]
Тригональная	[0001]*	[11 $\bar{2}$ 0]	[11 $\bar{0}$ 0]
Тетрагональная	[001]*	[100]	[110]
Гексагональная	[0001]*	[11 $\bar{2}$ 0]	[11 $\bar{0}$ 0]
Ромбическая	[100]	[010]	[001]
Моноклинная	[010]	—	—
Триклинная**			

*В кристаллах средней категории после символа оси симметрии высшего порядка (позиция II) в символе пространственной группы симметрии указывают плоскость симметрии, перпендикулярную оси симметрии высшего порядка (если такая плоскость присутствует в кристаллической структуре).

** В символе пространственной группы симметрии триклинных кристаллов кроме типа решетки Браве указывают лишь центр симметрии.

При записи международных символов пространственной группы симметрии (как и в случае символов классов симметрии) при наличии нескольких элементов симметрии, которые располагаются в указанном направлении, прежде всего используют плоскости симметрии, причем сначала указывают символ зеркальной плоскости симметрии. Если она отсутствует, то указывают символ плоскости скользящего отражения. Когда же плоскости симметрии, перпендикулярные данному направлению, отсутствуют, то указывают в соответствующей позиции символ соответствующей оси симметрии, причем, в первую очередь, — символ «старшей» простой оси симметрии. Исключение делают лишь для кристаллов средней категории при записи второй позиции международного символа, когда указывают и ось симметрии высшего порядка, и перпендикулярную плоскость симметрии, символы которых разделяют при этом наклонной чертой. Если конкурирующими осями оказываются винтовая и инверсионная оси симметрии одного и того же порядка, то, как правило, преимуществом пользуется винтовая ось симметрии, за исключением кристаллов тригональной сингонии. Для тригональных кристаллов приоритетом пользуется инверсионная ось симметрии третьего порядка.

Если в кристаллической структуре отсутствуют и плоскости симметрии, и оси симметрии, то в соответствующей позиции символа пространственной группы пишут единицу (международное обозначение оси симметрии первого порядка).

В кристаллах кубической сингонии в соответствии с табл. 7 в третьей позиции символа пространственной группы симметрии нужно записать элемент симметрии, расположенный в направлении $\langle 111 \rangle$. Поскольку в любом кубическом кристалле с данным направлением совпадает ось симметрии третьего порядка, то в этой позиции приводится ее символ — 3 (три).

Определим пространственную группу симметрии кристаллической структуры серого α -олова (рис. 46). Кристаллическая структура α -олова характеризуется одинаковыми по величине, взаимно-перпендикулярными ребрами элементарной ячейки и относится к кубической сингонии. По правилам записи в первой позиции символа пространственной группы симметрии укажем тип решетки Браве. Структура α -олова относится к числу типичных гранецентрированных структур. Действительно, в этой структуре заняты центры всех граней и вершины элементарной ячейки (атомы 5, 8, 9, 10, 11, 18). Кроме того, типичными для гранецентрированных пространственных решеток трансляциями связаны между собой и «внутренние» атомы: 6 и 7 — трансляцией $(a+b)/2$, атомы 6 и 12 — трансляцией $(a+c)/2$, атомы 6 и 13 — трансляцией $(b+c)/2$. Таким образом, в первой позиции символа пространственной группы симметрии записываем символ гранецентрированной решетки Браве F.

Во второй позиции символа пространственной группы симметрии для кубических кристаллов указывают координатную плоскость симметрии. Такой плоскостью симметрии, перпендикулярной ребру куба, в структуре α -олова является плоскость скользящего отражения типа d. Одна из таких плоскостей проходит параллельно левой вертикальной грани куба на равном расстоянии от двух атомных плоскостей: в одной атомной плоскости располо-

жены атомы 1—2—8—14—15 — слева от плоскости d , в другой, справа, расположены атомы 6—12. Действительно, атом 1 после отражения в плоскости d сместится вдоль оси Y вправо на четверть трансляции, а затем реализует перенос на четверть трансляции вдоль оси OX и на четверть трансляции вдоль оси OZ , в результате чего займет положение атома 6. В свою очередь, атом 6 после отражения в плоскости d выйдет на левую грань элементарной ячейки и после аналогичного скольжения займет положение атома 8. Подобным образом атом 8 займет положение атома 12, а последний займет место атома 15. Направление скольжения, характерное для данной плоскости скользящего отражения, параллельно атомному ряду 1—8—15 [101] и по своей величине составляет четверть диагонали грани $(a+c)/4$. Аналогичные плоскости скользящего отражения типа d проходят также между всеми атомами плоскостями, перпендикулярными ребрам куба — координатным направлениям $\langle 100 \rangle$.

В третьей позиции символа пространственной группы симметрии для любого кубического кристалла записывают символ 3, поскольку указанное в табл. 7 направление [111] соответствует оси симметрии третьего порядка (напомним, что любая из четырех объемных диагоналей куба является осью симметрии третьего порядка).

И, наконец, в последней, четвертой позиции символа пространственной группы симметрии указывают «диагональный» элемент симметрии — вдоль направления типа $\langle 110 \rangle$, в качестве которого по правилам записи мы должны указать символ зеркальной плоскости

симметрии, расположенной перпендикулярно данному направлению (m). Примером такой диагональной зеркальной плоскости симметрии является вертикальная плоскость, проходящая через атомы 15—18—17—2—5—4. Таким образом, мы определили международный символ пространственной группы симметрии кристаллической структуры α -олова: $Fd\bar{3}m$.

Примеры 230 пространственных групп симметрии рассмотрены в разделе, посвященном описанию важнейших структурных типов фаз в металлических сплавах (см. § 12). Полный перечень пространственных групп симметрии приведен в книге: Бокий Г. Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971. 400 с.

§ 9. Правильные системы точек и базис кристаллической структуры

Решая задачу описания бесконечных кристаллических структур, мы сумели с помощью группы «трансляционных» элементов симметрии (трансляций, плоскостей скользящего отражения, винтовых осей симметрии) связать элементарную ячейку с бесконечной кристаллической структурой, свести описание кристаллической структуры к описанию одной элементарной

ячейки, описать периодическое внутреннее строение кристаллов. Вместе с тем, в элементарную ячейку кристаллической структуры могут входить многие десятки атомов (известны кристаллические структуры распространенных в технике веществ, элементарная ячейка которых содержит более ста атомов) и «поштучное» их перечисление было бы не только утомительным занятием, но и, что гораздо важнее, возможным и вероятным источником ошибок в описании исследуемых кристаллических структур. Благодаря знанию пространственных групп симметрии мы имеем возможность построения рациональной системы описания взаимного пространственного расположения атомов, населяющих элементарную ячейку. Подобно тому, как по положению одной единственной грани мы с помощью комплекса элементов симметрии данного класса симметрии можем однозначно установить пространственное расположение всех остальных граней соответствующей простой кристаллической формы, так и с помощью комплекса элементов симметрии, входящих в пространственную группу симметрии, можно по положению немногих атомов воспроизвести точное расположение всех остальных атомов, находящихся в данной элементарной ячейке.

1. ПРАВИЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ ТОЧЕК

Совокупность атомов конкретной кристаллической структуры, связанных элементами симметрии, составляет одну *правильную систему точек*.

Набор элементов симметрии, необходимых для того, чтобы по положению одного атома однозначно определить пространственное расположение других идентичных атомов, связанных с ним элементами симметрии и принадлежащих поэтому к одной и той же *правильной системе точек*, а также взаимное расположение этих элементов симметрии однозначно определяется международным символом пространственной группы симметрии. Размножая одну заданную начальную точку, совпадающую с центром данного атома, поочередно всеми элементами симметрии, представленными в символе пространственной группы симметрии, можно определить положение центров других идентичных атомов, принадлежащих той же *правильной системе точек*.

Все разнообразие кристаллов, относящихся к одной и той же пространственной группе симметрии, можно свести к различию их химического состава и к различию в расположении атомов относительно одинаковых элементов симметрии.

Атомы одного сорта могут принадлежать не только одной, но и нескольким правильным системам точек и тогда, характеризуя расположение атомов данного сорта, мы должны перечислить все эти правильные системы точек. Естественно, количе-

ство правильных систем точек, представленных в кристаллической структуре, не может быть меньше, чем число сортов атомов в данной структуре.

При определении правильных систем точек рассматривают одну элементарную ячейку кристаллической структуры, поскольку все элементарные ячейки являются копиями одна другой. Каждая элементарная ячейка в целом (и каждый ее атом в отдельности) связана трансляциями с другой такой же элементарной ячейкой (и, соответственно, с другими идентичными атомами).

Важнейшей характеристикой правильной системы точек является ее *кратность* — количество атомов, которые принадлежат данной правильной системе точек в пределах одной элементарной ячейки, т. е. связаны один с другим с помощью элементов симметрии. Для практической работы со структурами полезно учесть, что сумма кратностей всех правильных систем точек данной кристаллической структуры совпадает с общим количеством атомов в одной элементарной ячейке.

Определим, какие правильные системы точек могут описывать расположение атомов в кристаллической структуре α -олова (рис. 46). Очевидно, все атомы, которые расположены в вершинах элементарной ячейки и в центрах ее граней, связаны трансляциями типа \bar{F} , характерными для гранецентрированной пространственной решеткой. Такими же трансляциями можно связать и четыре «внутренних» атома 6—7—12—13. Если мы учтем, что атомы 6—12 связаны плоскостью скользящего отражения типа d с «наружными» атомами 1—8—15, то окажется, что все без исключения атомы в элементарной ячейке α -олова можно связать с помощью элементов симметрии. Следовательно, все эти атомы принадлежат одной правильной системе точек.

Теперь определим кратность данной правильной системы точек. Для этого недостаточно подсчитать количество атомов, расположенных на гранях и внутри элементарной ячейки. Нужно обязательно учесть положение атома в элементарной ячейке. Действительно, каждый вершинный атом входит одновременно в *восемь* элементарных ячеек рассматриваемой кристаллической структуры, поэтому каждой из восьми смежных элементарных ячеек принадлежит лишь по одной восьмой части вершинного атома. Следовательно, все *восемь вершинных атомов* дают в расчете на одну элементарную ячейку только *один атом*. Каждый из шести атомов, расположенных на гранях элементарной ячейки, принадлежит двум смежным элементарным ячейкам, поэтому все *шесть «гранных» атомов* дают в расчете на одну элементарную ячейку только *три атома*. И только атомы, расположенные внутри объема элементарной ячейки, целиком принадлежат ей, и их количество можно взять без вся-

ких поправок: четыре внутренних атома полностью учитывают при подсчете количества атомов в элементарной ячейке. Таким образом в элементарную ячейку α -олова входит *восемь* атомов, связанных элементами симметрии и принадлежащих одной, восьмикратной (8:) правильной системе точек.

Важным практическим выводом из рассмотренного примера является то, что использование определения правильной системы точек позволяет заменить перечисление пространственного расположения многих атомов в кристаллической структуре α -олова ссылкой на положение одного атома (вообще говоря, даже безразлично какого именно, потому что положения всех остальных атомов однозначно определяются с помощью тех же самых элементов симметрии, которые мы использовали при анализе правильной системы точек). Следовательно, для описания кристаллической структуры достаточно указать координаты одного из атомов. Например, если атом 1 располагается в начале координат, то после записи кратности правильной системы точек указывают координаты этого атома: 8: (a)0, 0, 0.

Таким образом, на основе детального анализа симметрии внутреннего строения кристалла оказалось возможным, во-первых, свести описание всей кристаллической структуры к описанию одной элементарной ячейки и, во-вторых, свести описание взаимного пространственного расположения всех атомов, населяющих элементарную ячейку, к описанию координат немногих атомов. Задав координаты нескольких атомов и определив тем самым их положение по отношению к каждому из элементов симметрии данной пространственной группы симметрии, мы обеспечим однозначность описания пространственного положения каждого из атомов в отдельности и всей кристаллической структуры в целом.

2. БАЗИС КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Базисом кристаллической структуры называется совокупность координат атомов, принадлежащих всем правильным системам точек.

Координаты центра любого атома измеряются долями основных трансляций $\bar{T}_x = \bar{a}$, $\bar{T}_y = \bar{b}$ и $\bar{T}_z = \bar{c}$ и указываются с помощью трех чисел. При записи базиса в полном объеме указывают координаты атомов в соответствии с кратностью каждой из правильных систем точек, а при сокращенной записи указывают лишь координаты одного атома на каждую правильную систему точек.

Выбор начала координат в кристалле определяется взаимным расположением его элементов симметрии. Так, при определении ориентировки координатных направлений в кристалле мы использовали оси симметрии кристалла в качестве направ-

лений естественных осей координат (параллельных наиболее плотноупакованным атомным рядам). Следовательно, при выборе начала координат мы должны исходить из аналогичных соображений: ориентирами при выборе начала координат служат элементы симметрии кристаллических структур.

Положение начала координат по отношению к соответствующим элементам симметрии для каждой пространственной группы симметрии указано в Международных кристаллографических таблицах в целях обеспечения однозначности описания кристаллических структур. Так, начало координат в кубических гранецентрированных (типа меди) и кубических объемноцентрированных (типа α -железа) металлических структурах может быть совмещено с центром любого атома. В гексагональных металлах (типа магния) начало координат не совпадает с центром атома: его выбирают на винтовой оси симметрии 6_3 — на расстоянии четверти вертикальной трансляции от горизонтальной плоскости симметрии.

Рассмотрим примеры определения базиса в некоторых кристаллических структурах.

Кристаллическая структура α -железа (рис. 47) относится к числу типичных структур с объемноцентрированной пространственной решеткой Браве (I): символ пространственной группы симметрии $Im\bar{3}m$.

Очевидно все атомы элементарной ячейки α -железа относятся к одной и той же правильной системе точек, поскольку они связаны трансляциями типа $\vec{T} = (\pm a \pm b \pm c)/2$. Кратность этой правильной системы точек равна двум в соответствии с числом атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку: каждый из вершинных атомов вносит по одной восьмой, а атом в центре объема ячейки учитывается полностью.

В соответствии с правилами выбора начала координат будем считать, что начало координат находится в левой нижней (задней) вершине элементарной ячейки. Тогда для базиса кристаллической структуры α -железа можем записать $2: 0, 0, 0, 1/2, 1/2, 1/2$ [в Международных кристаллографических таблицах ей соответствует правильная система точек $2: (a) 0, 0, 0$].

В символе пространственной группы типичной гранецентрированной кубической кристаллической структуры типа меди (рис. 48) вслед за символом пространственной решетки Браве указывают: координатную зеркальную плоскость симметрии (вторая позиция), признак структуры кубической сингонии — символ 3 (третья позиция) и, наконец, диагональную плоскость симметрии (четвертая позиция) $Fm\bar{3}m$. Как и в предыдущей структуре, все атомы принадлежат одной правильной системе точек, поскольку связаны трансляциями типа $\vec{F}: \vec{F}' = (\pm a \pm b)/2$, $\vec{F}'' = (\pm b \pm c)/2$ и $\vec{F}''' = (\pm c \pm a)/2$. Поскольку на одну элементарную ячейку меди приходится четыре атома (восемь вершинных атомов дают вместе один атом и каждый из шести атомов в центрах граней куба дает по половине атома в данную элементарную ячейку), указанная правильная система точек будет четырехкратной. Выбрав одну из вершин за начало координат (как и в предыдущем примере возьмем для этого левую нижнюю вершину), сможем определить координаты центров атомов: в центре задней грани $0, 1/2, 1/2$, в центре левой грани $1/2, 0, 1/2$, в центре нижней грани $1/2, 1/2, 0$.

В итоге запишем: $4: (a) 0, 0, 0; 0, 1/2, 1/2; 1/2, 0, 1/2; 1/2, 1/2, 0$.

В гексагональной кристаллической структуре магния (рис. 49, а), которая представляет собой призму с основанием в виде ромба (с углом между ребрами 120°), атомы расположены по вершинам призмы и посередине между

основаниями — в центре правого равностороннего треугольника. Международный символ пространственной группы симметрии $P6_3/mmc$. Атомы в структуре магния связываются элементами симметрии в одну двукратную правильную систему точек (с помощью плоскостей симметрии, винтовой оси 6_3).

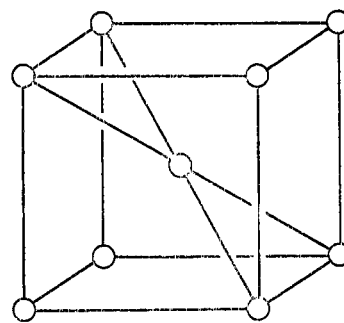


Рис. 47. Кристаллическая структура α -железа

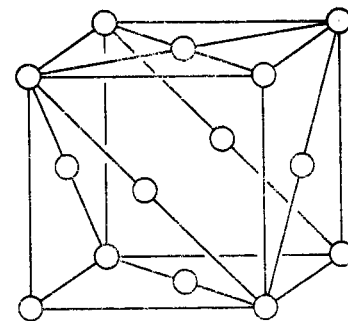


Рис. 48. Кристаллическая структура меди

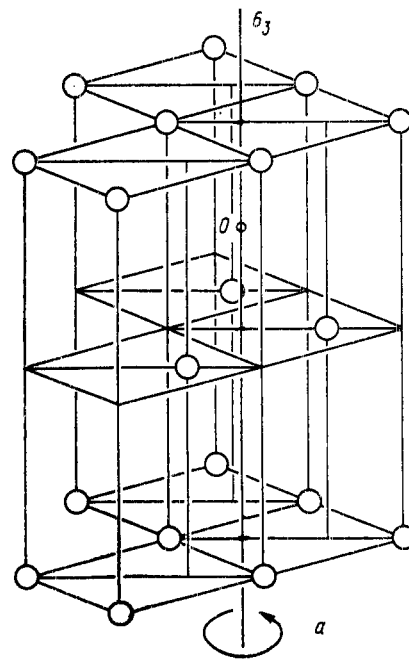


Рис. 49. Кристаллическая структура магния (а), выбор элементарной ячейки (б), определение координат атомов (в)

Оси координат направлены параллельно ребрам элементарной ячейки. Начало координат выбирают на винтовой оси симметрии 6_3 — на расстоянии четверти вертикальной трансляции от горизонтальной зеркальной плоскости симметрии m (точка 0 на рис. 49, а). «Пристроим» элементарную ячейку к точке

можно проследить характер изменения атомных (или, как их называют, металлических) радиусов от группы к группе и от периода к периоду. С увеличением номера периода атомный радиус растет, в то время как с увеличением номера группы он проявляет тенденцию к понижению, что подтверждает зависимость атомных радиусов элемента от его положения в Периодической системе. К трактовке аналогичных зависимостей мы возвратимся позднее, при рассмотрении ионных радиусов в кристаллических структурах сложных веществ.

2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИОННЫХ И КОВАЛЕНТНЫХ РАДИУСОВ

Изучение внутреннего строения кристаллов с преимущественно ионным характером химической связи сыграло важную роль в развитии кристаллохимии. Идеи, которые были успешно применены при разработке теории ионных кристаллов, оказались плодотворными также при исследовании других кристаллических веществ.

Накопление результатов экспериментального исследования щелочно-галогидных кристаллов типа A^+B^{VII-} — эквивалентных соединений, образованных ионами первой (катионы) и седьмой (анионы) групп Периодической системы элементов и в своем большинстве имеющих кристаллические структуры типа хлористого натрия (рис. 36), позволило провести сопоставление меж-атомных расстояний — кратчайших расстояний между центрами соседних ионов в паре катион—анион (табл. 9) и сделать интересные выводы.

В колонках табл. 9 расположены галогениды с общими катионами. В каждой из этих колонок значения приведенных меж-атомных расстояний монотонно возрастают от фторидов к иодидам. Особенный интерес вызывает то, что при этом прирост межатомных расстояний оказывается примерно одинаковым. Так, при переходе от фторидов к хлоридам межатомные расстояния увеличиваются: для соединений лития — на 0,055 нм, для соединений натрия — на 0,050 нм, для соединений калия — на 0,047 нм, для соединений рубидия — на 0,045 нм и для соединений цезия — на 0,056 нм. Причиной такого изменения меж-атомных расстояний является разница в размерах анионов: по видимому, абсолютные размеры ионов фтора и хлора различаются примерно на 0,050 нм.

Аналогичный прирост, причем также на постоянную для всех катионов первой группы величину, можно наблюдать при всех других переходах: от хлоридов — к бромидам и от бромидов — к иодидам. Во всех случаях приращение межатомного расстояния определялось только заменой одного аниона на другой и практически не зависело от природы катиона. Анализ приведенной группы щелочно-галогидных кристаллов показывает, что

каждый из ионов характеризуется постоянным *ионным радиусом*.

Размеры важнейших ионов всех элементов приведены в таблице ионных радиусов (табл. 10). Величины ионных радиусов четко зависят от положения элемента в Периодической системе. Это заключение легко подтвердить, рассматривая значения ионных радиусов для каждого из *изоэлектронных рядов*. Изоэлектронный ряд состоит из катионов одного периода с одинаковыми электронными оболочками, например, изоэлектронный ряд составляют катионы со следующими положительными зарядами: натрий +1, магний +2, алюминий +3, кремний +4 и т. д. Здесь величина ионного радиуса убывает с увеличением номера группы, что легко объяснить увеличением заряда атомного ядра при переходе от одной группы Периодической системы к другой. Так, при наличии одинакового количества

электронов у упомянутых катионов натрия и алюминия заряд ядра последнего больше (на две единицы), что вызывает уменьшение ионного радиуса от 0,098 до 0,057 нм.

Другое важное заключение, которое позволяет сделать сравнение ионных радиусов, — это их увеличение при переходе от одного периода Периодической системы элементов к следующему, что легко связать с увеличением количества электронных оболочек.

Независимость величины ионных радиусов от состава ионного кристалла при сходстве кристаллических структур позволяет рассчитывать любые межатомные расстояния простым сложением соответствующих ионных радиусов. Имея в виду это ценное качество ионных радиусов, говорят об их «аддитивности» (от англ. «addition» — сложение). Определим этим методом значение периода пространственной решетки кристаллической структуры KF . Для этой структуры, которая подобна структуре хлористого натрия (см. рис. 36), сторона куба a равна удвоенной сумме ионных радиусов (катиона и аниона) калия и фтора:

$$a = 2(r_K + r_F) = 2(0,133 + 0,133) = 0,532 \text{ нм.}$$

Таблица 9. Межатомные расстояния в ионных кристаллах, нм

Наименование аниона	Наименование катиона				
	Li	Na	K	Rb	Cs
F	LiF 0,201	NaF 0,231	KF 0,267	RbF 0,282	CsF 0,300
Cl	LiCl 0,256	NaCl 0,281	KCl 0,314	RbCl 0,327	CsCl 0,356
Br	LiBr 0,274	NaBr 0,298	KBr 0,330	RbBr 0,342	CsBr 0,372
I	LiI 0,300	NaI 0,323	KI 0,352	RbI 0,366	CsI 0,395

Т а б л и ц а 10. Ионные радиусы элементов $r \cdot 10^{-10}$ м

Период	Под								
	Ia	IIa	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	VIIIa	
1									
2	Li 1+ 0,68	Be 2+ 0,34							
3	Na 1+ 0,98	Mg 2+ 0,74							
4	K 1+ 1,33	Ca 2+ 1,04	Sc 3+ 0,83	Ti 2+ 0,78 3+ 0,69 4+ 0,64 5+ 0,4	V 2+ 0,72 3+ 0,67 4+ 0,61 5+ 0,4	Cr 2+ 0,83 3+ 0,61 6+ 0,35	Mn 2+ 0,91 3+ 0,70 4+ 0,52 7+ 0,46	Fe 2+ 0,80 3+ 0,67	Co 2+ 0,78 3+ 0,64
5	Rb 1+ 1,49	Sr 2+ 1,20	Y 3+ 0,97	Zr 4+ 0,82	Nb 4+ 0,67 5+ 0,66	Mo 4+ 0,68 6+ 0,65	Tc	Ru 4+ 0,62	Rh 3+ 0,75 4+ 0,65
6	Cs 1+ 1,65	Ba 2+ 1,38	La 3+ 1,04 4+ 0,90	Hf 4+ 0,78	Ta 5+ 0,66	W 4+ 0,68 6+ 0,65	Re 6+ 0,52	Os 4+ 0,65	Ir 4+ 0,65
	Fr	Ra 2+ 1,44	Ac 3+ 1,11						

Лантаноиды

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm
3+ 1,02 4+ 0,88	3+ 1,00	3+ 0,99	3+ 0,98	3+ 0,97

Актиноиды

Th	Pa	U	Np	Pu
3+ 1,08 4+ 0,95	3+ 1,06 3+ 0,91	3+ 1,04 3+ 0,89	3+ 1,01 3+ 0,88	3+ 1,00 3+ 0,86

группа

	I _B	II _B	III _B	IV _B	V _B	VI _B	VII _B	VIII _B
							H 1— 1,36 1+ 0,00	He 0 1,22
			B 3+ 0,20	C 4— 2,60 4+ 0,2	N 3— 1,48 5+ 0,15	O 2— 1,46	F 1— 1,33	Ne 0 1,60
			Al 3+ 0,57	Si 4+ 0,39	P 3— 1,86 5+ 0,35	S 2— 1,82 6+ 0,29	Cl 1— 1,81 7+ 0,26	Ar 0 1,92
Ni 2+ 0,74	Cu 1+ 0,94 2+ 0,80	Zn 2+ 0,83	Ga 3+ 0,62	Ge 2+ 0,64 4+ 0,44	As 3— 1,91 3+ 0,69 5+ 0,47	Se 2— 1,93 4+ 0,69 6+ 0,36	Br 1— 1,96 7+ 0,39	Kr 0 1,98
Pd 4+ 0,64	Ag 1+ 1,13	Cd 2+ 0,99	In 3+ 0,92	Sn 4+ 0,67 2+ 1,02	Sb 3— 2,08 3+ 0,90 5+ 0,62	Te 2— 2,11 4+ 0,89 6+ 0,56	I 1— 2,20 7+ 0,50	Xe 0 2,18
Pt 4+ 0,64	Au 1+ 1,37	Hg 2+ 1,12	Tl 1+ 1,49 3+ 1,05	Pb 2+ 1,26 4+ 0,76	Bi 3— 2,13 3+ 1,20 5+ 0,74			

Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tu	Yb	Lu
3+ 0,97	3+ 0,94	3+ 0,89	3+ 0,88	3+ 0,86	3+ 0,85	3+ 0,85	3+ 0,81	3+ 0,80

Am
3+ 1,00 4+ 0,85

Сопоставление расчетной величины с экспериментальным значением указанного периода (0,535 нм) свидетельствует об их хорошем соответствии: выполненный элементарный расчет обеспечил отклонение расчетной величины от экспериментальной менее чем на один процент. При этом обязательно следует отметить, что необходимым условием хорошего соответствия между расчетом и экспериментом является ионный характер химической связи в данном кристалле. При наличии других составляющих химической связи (ковалентных, металлических, ван-дер-ваальсовых связей или их сочетаний) может возникнуть заметное расхождение между расчетом и экспериментом.

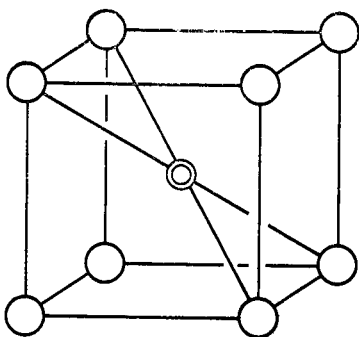


Рис. 50. Кристаллическая структура хлористого цезия

хлористого цезия (рис. 50), объемная диагональ которого составлена двумя радиусами хлора и двумя радиусами цезия, получим период пространственной решетки, с учетом поправочного коэффициента ($KЧ=8$):

$$a = 2(r_a + r_k) \cdot 1,03 / \sqrt{3} = 2(0,181 + 0,165) \cdot 1,03 \cdot 0,57 = 0,4115 \text{ нм.}$$

В результате проведенного кристаллохимического расчета получаем хорошее совпадение с экспериментом (0,4110 нм).

Если в кристаллической структуре преобладает ковалентный тип химической связи, то для расчета межатомных расстояний используют соответствующие «ковалентные» радиусы (табл. 11). Следует отметить, что в отличие от металлических и ионных связей ковалентные связи носят ориентированный характер: они направлены во многих случаях от центра координационного тетраэдра к его вершинам и соответствуют $KЧ=4$. Именно к этому координационному числу относятся приведенные в табл. 11 значения радиусов, которые иногда называют тетраэдрическими. Напомним, что приводившиеся нами до этого значения атомных радиусов соответствовали $KЧ=12$ (см. табл. 8), а ионные радиусы — $KЧ=6$ (см. табл. 10).

Возможности кристаллохимических методов не ограничива-

Таблица 11. Ковалентные радиусы элементов, нм

Период	Подгруппа						
	Iв	IIв	IIIв	IVв	Vв	VIв	VIIв
2			B 0,088	C 0,077	N 0,070	O 0,066	F 0,064
3			Al 0,126	Si 0,114	P 0,110	S 0,104	Cl 0,099
4	Cu 0,135	Zn 0,131	Ga 0,126	Ge 0,122	As 0,118	Se 0,114	Br 0,111
5	Ag 0,154	Cd 0,148	In 0,144	Sn 0,140	Sb 0,136	Te 0,132	I 0,128
6	Au 0,150	Hg 0,148	Tl 0,147	Pb 0,146	Bi 0,146		

ются расчетом межатомных расстояний и периодов пространственной решетки кристаллических структур. В следующем разделе мы рассмотрим некоторые примеры расчета самих кристаллических структур и покажем, какие кристаллохимические характеристики определяют образование того или иного типа атомной структуры кристаллов.

3. ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ

Рассмотрим серию фрагментов кристаллических структур с разными отношениями размеров двух структурных единиц (рис. 51). Для большей определенности будем называть их анионами и катионами. Отношение ионных радиусов от фрагмента к фрагменту изменяется: если на первом фрагменте (см. рис. 51, а) ионные радиусы анионов и катиона равны, то на других фрагментах ионный радиус катиона меньше, чем радиус аниона. Во всех трех представленных случаях наблюдается касание анионов и катионов, но лишь в одном случае можно отметить касание между анионами (см. рис. 51, б). Именно этот случай можно рассматривать как промежуточный между двумя крайними структурами. Действительно, если сначала уменьшение отношения ионных радиусов катиона и аниона r_k/r_a сопровождалось лишь уменьшением межатомных расстояний между анионами и

не вызывало других структурных изменений, то затем, после соприкосновения анионов дальнейшее уменьшение этого отношения приводит к уменьшению координационного числа; при этом старая структура (см. рис. 51, а и б) переходит в новую (см. рис. 51, в).

О тех реальных физических условиях, при которых происходит изменение отношения ионных радиусов в кристаллических структурах, будет упомянуто немного ниже. Здесь же мы сконцентрируем внимание на принципиальной стороне вывода: между координационным числом кристаллической структуры и отношением соответствующих ионных радиусов имеется определенная связь, а именно — уменьшение отношения ионных ради-

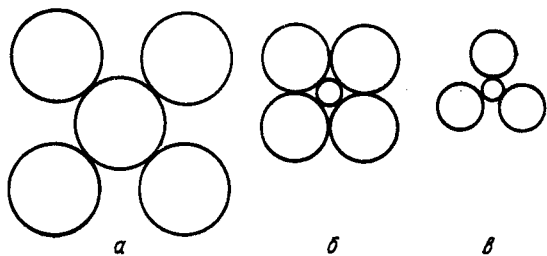


Рис. 51. Влияние отношения ионных радиусов на координацию кристаллической структуры

усов $r_{\text{к}}/r_{\text{а}}$ приводит к уменьшению координационного числа, и соответственно при увеличении этого отношения в определенных пределах возникает новая кристаллическая структура с более высоким координационным числом. Как известно, сила отталкивания между одноименными ионами резко возрастает с уменьшением межатомного расстояния. В кристаллохимических расчетах принимают за признак перехода от одной кристаллической структуры к другой именно момент касания сближающихся анионов. В дальнейшем мы будем принимать, что анионы крупнее, чем катионы.

Проанализируем конкретные отношения ионных радиусов, которые соответствуют моментам касания одинаково заряженных анионов, для кристаллических структур с характерными (и притом близкими) различными координационными числами: четыре, шесть и восемь. В качестве представителей кристаллических структур с указанными координационными числами в целях упрощения расчетов выберем следующие кубические кристаллические структуры: сфалерит (рис. 52), хлористый натрий (рис. 53) и хлористый цезий (см. рис. 50).

Условия касания анионных сфер определим по плоским сечениям названных кристаллических структур с помощью плоскостей, в которых лежат точки касания: (110) — для сфалерита (рис. 54) и хлористого цезия (рис. 55) и плоскость (100) —

для хлористого натрия (рис. 56). Предельные отношения ионных радиусов найдем из следующих отношений: для сфалерита: $a\sqrt{2}/2 : a\sqrt{3}/2 = 2r_{\text{а}}/2(r_{\text{к}} + r_{\text{а}})$, откуда $r_{\text{к}}/r_{\text{а}} = 0,22$; для хлористого натрия: $a/a\sqrt{2} = 2(r_{\text{к}} + r_{\text{а}})/4r_{\text{а}}$, откуда $r_{\text{к}}/r_{\text{а}} = 0,41$; для хлористого цезия: $a/a\sqrt{3} = 2r_{\text{а}}/2(r_{\text{к}} + r_{\text{а}})$, откуда $r_{\text{к}}/r_{\text{а}} = 0,73$.

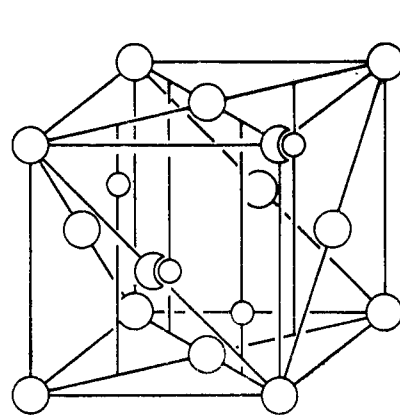


Рис. 52. Кристаллическая структура сфалерита

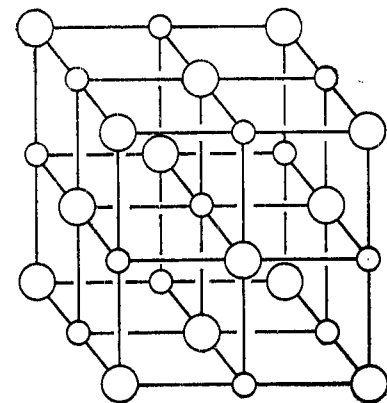


Рис. 53. Кристаллическая структура хлористого натрия

Определив предельные величины отношений ионных радиусов, заметим, что они соответствуют переходу от структуры с одним координационным числом к структуре с другим КЧ.

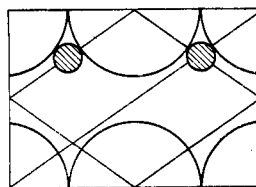


Рис. 54. Сечение элементарной ячейки сфалерита плоскостью (110)

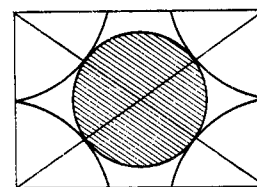


Рис. 55. Сечение элементарной ячейки хлористого цезия плоскостью (110)

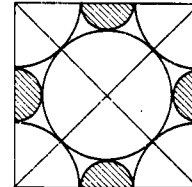


Рис. 56. Сечение элементарной ячейки хлористого натрия плоскостью (100)

Естественно предположить, что переход от одной структуры к другой будет происходить каждый раз, когда отношение ионных радиусов перейдет указанную границу. Например, при отношении $r_{\text{к}}/r_{\text{а}} < 0,41$ структура с КЧ=6 перейдет в структуру с КЧ=4 и, наоборот, при $r_{\text{к}}/r_{\text{а}} > 0,41$ структура с КЧ=4 перейдет в структуру с КЧ=6. Следовательно, область существования структур с КЧ=4 заключена между значениями $r_{\text{к}}/r_{\text{а}}$ от

0,22 до 0,41. Таким же образом для структур с $KЧ=6$ получим граничные значения отношений ионных радиусов: от 0,41 до 0,73. Область существования структур с $KЧ=8$ очевидно простирается от 0,73 до $r_k/r_a < 1$, причем при $r_k=r_a$ теоретически достигается $KЧ=12$.

Для тех сравнительно немногих случаев, когда $r_k/r_a > 1$, предельные отношения ионных радиусов можно найти как обратные величины вычисленных нами пределов:

- при $KЧ=8$ $1 < r_k/r_a \leq 1,37$;
 » $KЧ=6$ $1,37 \leq r_k/r_a \leq 2,44$;
 » $KЧ=4$ $2,44 \leq r_k/r_a \leq 4,45$.

В заключение можно отметить, что описанная простейшая модель внутреннего строения оправдывается более чем для 90 % щелочно-галогидных кристаллов, несмотря на свою, казалось бы чисто геометрическую, основу. Следовательно, рассмотренный кристаллохимический подход позволяет с достаточной надежностью прогнозировать координацию кристаллических структур с преимущественно ионным характером химической связи, что имеет первостепенное значение для анализа устойчивости различных кристаллических структур под влиянием изменения внешних условий.

4. ВЛИЯНИЕ ВНЕШНИХ ФАКТОРОВ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ

Из множества внешних факторов, которые могут оказывать непосредственное влияние на кристаллическую структуру, рассмотрим температуру и давление.

С ростом температуры в соответствии с известным явлением температурного расширения происходит увеличение ионных радиусов. При этом влияние температуры значительно сильнее отражается на более крупных структурных единицах. Следовательно, при $r_a > r_k$ повышение температуры приведет к уменьшению отношения ионных радиусов r_k/r_a . В соответствии с разобранной в предыдущем разделе схемой, уменьшение указанного отношения ионных радиусов может привести к изменению кристаллического строения: образуется структура с более низким $KЧ$. Действительно, аналогичный фазовый переход наблюдается в кристаллической структуре хлористого цезия ($KЧ=8$), который при нагревании (445 °С) переходит в кристаллическую структуру, характерную для хлористого натрия ($KЧ=6$).

Повышение давления также по-разному сказывается на ионных радиусах катионов и анионов — в зависимости от их размеров. При $r_a > r_k$ повышение давления вызовет рост отношения ионных радиусов r_k/r_a и, как следствие, может привести к фазовому переходу от структуры с меньшим $KЧ$ к структуре

с большим $KЧ$. В качестве примера подобного фазового перехода можно сослаться на сульфид кадмия, который при обычных условиях имеет кристаллическую структуру вюрцита ($KЧ=4$), а при давлении 30 кбар приобретает структуру типа хлористого натрия ($KЧ=6$). В последнем случае мы проверяли правильность наших выводов о влиянии давления на кристаллическую структуру, используя для этой цели не кубическую, а гексагональную кристаллическую структуру, поскольку в выводах мы делали упор не столько на тип кристаллической структуры, сколько на величину координационного числа.

На основании изложенного можно построить гипотетические диаграммы фазовых переходов, которые иллюстрируют направ-

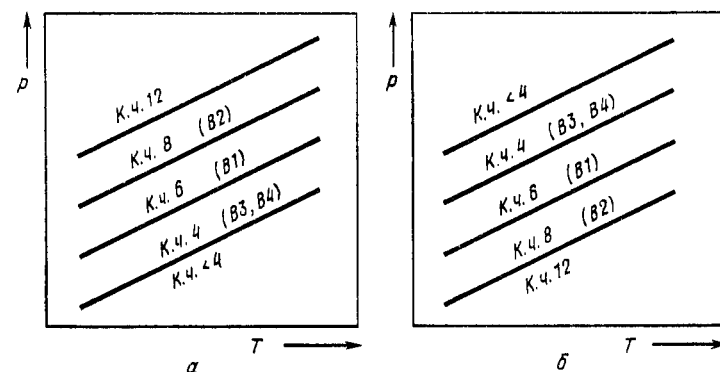


Рис. 57. Схематические фазовые диаграммы для ионных кристаллов: а — при $r_k < r_a$; б — при $r_k > r_a$

ления переходов в зависимости от внешнего воздействия (рис. 57). Диаграммы приведены для ионных кристаллов, у которых $r_k < r_a$ (см. рис. 57, а) и $r_k > r_a$ (см. рис. 57, б). Как видно из приведенных диаграмм, направления фазовых переходов для двух сравниваемых случаев существенно различаются.

На приведенных диаграммах использованы структурные формулы типичных кристаллических структур, которые встречаются в литературе. В соответствии с этой номенклатурой литерой В обозначают кристаллические структуры эквиатомного состава АВ: В1 — структуру хлористого натрия, В2 — структуру хлористого цезия, В3 — структуру сфалерита, В4 — структуру вюрцита.

Фазовые переходы могут быть результатом взаимосвязанных групповых перемещений атомов из исходных положений в новые. Так, фазовое превращение γ -железа (со структурой г. ц. к.) в α -железо (со структурой о. ц. к.) можно описать как результат трех деформаций: сжатия вдоль оси ОZ (от 0,3656 до 0,2866 нм) при одновременном растяжении вдоль осей ОХ и ОУ (от 0,3656 до 0,4053 нм) (рис. 58). Действительно, при

этом тетрагональная призма, выделенная в качестве фрагмента исходной г. ц. к. структуры, перейдет в объемноцентрированный куб α -железа. При этом горизонтальные ребра нового куба развернуты на 45° по отношению к аналогичным ребрам исходного куба. Упомянутые ориентационные соотношения между исходной г. ц. к. (γ) и новой о. ц. к. (α) фазами можно записать следующим образом:

$$(100)_\gamma \parallel (110)_\alpha; [100]_\gamma \parallel [110]_\alpha.$$

Подобные полиморфные превращения наблюдаются также у кальция, церия, лантана, плутония, тория, стронция и др.

Фазовый переход гексагонального α -кобальта в кубический гранецентрированный β -кобальт почти не сопровождается изменением межатомных

расстояний: исходная атомная плоскость (0001) α -фазы (рис. 59, а) практически совпадает с атомной плоскостью (111) β -фазы (соответствующие межатомные расстояния — 0,2507 и 0,2506 нм). Расстояния между соседними атомными плоскостями также близки: для $(0001)_\alpha$ — 0,2035 нм, для $(111)_\beta$ — 0,2046 нм. Суще-

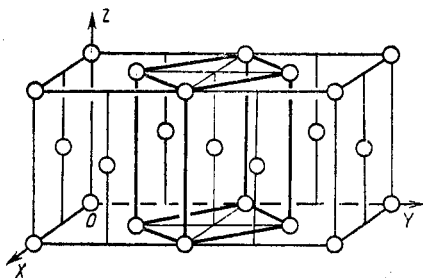


Рис. 58. Схема фазового перехода γ -Fe (г. ц. к.) — α -Fe (о. ц. к.)

ственно отличается в этих фазах лишь порядок чередования смежных атомных плоскостей: в гексагональной фазе одинаковые слои (0001) следуют через слой (рис. 59, б), а в кубической фазе идентичные слои (111) повторяются в каждом третьем слое (рис. 59, в). Указанное изменение порядка чередования плоскостей при этом фазовом переходе описывается как результат согласованного взаимного смещения атомных плоскостей (0001) по направлению типа $\langle 1\bar{1}00 \rangle$. Ориентационные соотношения между гексагональной и кубической фазами можно записать следующим образом: $(0001)_\alpha \parallel (111)_\beta$; $[2110]_\alpha \parallel [111]_\beta$. Подобные полиморфные превращения встречаются также у лантана и лития.

Полиморфное превращение гексагонального титана (α) в кубический объемноцентрированный (β) можно представить как результат перехода плоской гексагональной атомной сетки (0001) (рис. 60) в атомную сетку (110) о. ц. к. структуры. При этом равносторонний структурный треугольник α -фазы (со стороной 0,2950 нм) переходит в равнобедренный структурный треугольник β -фазы (со сторонами 0,2863 и 0,3306 нм). Величина межплоскостного расстояния почти не изменяется (0,2342 и 0,2338 нм). Чередование упомянутых атомных плоскостей

в обеих фазах одинаково: идентичные атомные плоскости повторяются через одну. Ориентационные соотношения между гексагональной и кубической фазами можно записать следующим образом: $(0001)_\alpha \parallel (110)_\beta$; $[2110]_\alpha \parallel [111]_\beta$. Подобные фазовые переходы наблюдаются также у гадолиния, гафния, лития, лантана, натрия, неодима, самария, стронция, циркония и др.

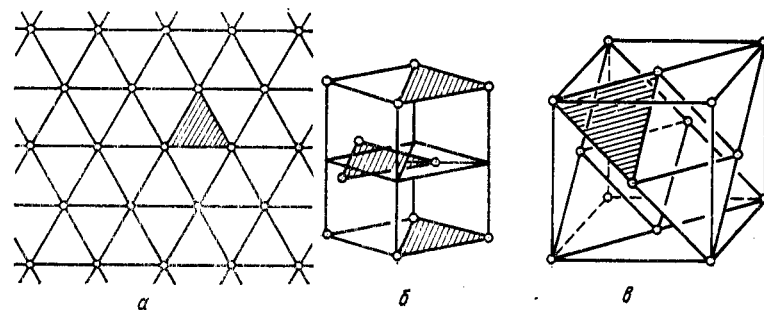


Рис. 59. Схема фазового перехода α -Co (г. п.) — β -Co (г. ц. к.)

Рассмотренные примеры подтверждают несомненную преемственность между кристаллографическими ориентациями старой и новой фаз при полиморфном превращении. К этим фазовым переходам можно применить принцип Данкова—Конобеевского: *кристаллографическая ориентация новой фазы должна соответствовать минимуму поверхностной энергии, что обеспечивается при максимальном структурном и размерном соответствии (в расположении атомов) сопрягающихся на межфазной границе атомных плоскостей.*

Влияние внешних факторов на структуру металлов не удастся так наглядно проследить, как для ионных кристаллов, поскольку для этой цели потребовалось бы детально рассмотреть изменения электронной структуры. Поэтому ограничимся рассмотрением структурных соотношений при типичных полиморфных превращениях в металлах.

У металлов наиболее часто наблюдаются фазовые переходы из низкотемпературных гексагональных плотноупакованных структур (г. п.) в высокотемпературные кубические структуры (о. ц. к. или, реже, г. ц. к.); таких переходов около 60 %.

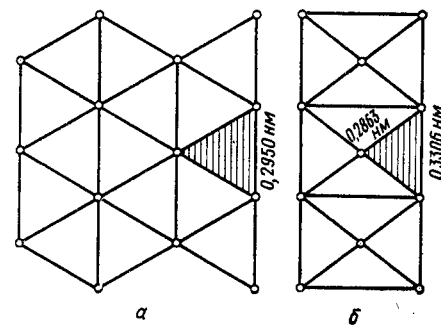


Рис. 60. Схема фазового перехода α -Ti (г. п.) — β -Ti (о. ц. к.)

В табл. 12 приведены полиморфные модификации некоторых металлов и температурные границы их существования. Полиморфные модификации обозначают греческими буквами в алфавитном порядке, начиная от низкотемпературной модификации α . У железа в ранних публикациях при температурах выше $\sim 770^\circ\text{C}$ указана β -модификация. Впоследствии оказалось, что при этой температуре при нагревании железо переходит из ферромагнитного в парамагнитное состояние, а кристаллическая структура при этом не изменяется. Поэтому при обозначении модификаций железа отсутствует буква β .

Таблица 12. Полиморфные модификации некоторых металлов
(t — верхняя температурная граница существования модификации, $^\circ\text{C}$)

Металл	Модификация							
	α		β		γ		δ	
	Структура	t	Структура	t	Структура	t	Структура	t
Железо	О. ц. к.	911	—	—	Г. ц. к.	1392	О. ц. к.	1539*
Титан	Г. п.	882,5	О. ц. к.	1668*	—	—	—	—
Цирконий	Г. п.	865	О. ц. к.	1852*	—	—	—	—
Кобальт	Г. п.	388	Г. ц. к.	1494*	—	—	—	—
Олово	Алмазная	13	Тетрагон.	232*	—	—	—	—
Уран	Ромбич.	662	»	77½	О. ц. к.	1133*	—	—

* Точка плавления.

§ 11. Плотнейшие шаровые упаковки в кристаллических структурах

Уже в первые годы интенсивного изучения внутреннего строения кристаллов с помощью рентгеноструктурного анализа стали обнаруживать отдельные случаи, когда реальные межатомные расстояния в кристаллической структуре не только не удавалось сопоставить с результатами расчета по известным значениям ионных радиусов, но и вообще некоторое время даже не удавалось понять физический смысл этого явления. Речь идет о неожиданном совпадении межатомных расстояний в кристаллических структурах с общим анионом. Так, если ранее вполне понятным казалось различие межатомных расстояний в кристаллических структурах оксидов магния MgO (0,210 нм) и марганца MnO (0,224 нм), которое вполне соответствовало разнице ионных радиусов Mg^{2+} и Mn^{2+} (соответственно 0,074 и 0,091 нм), то в прежнюю модель кристаллического строения совершенно не вписывались одинаковые межатомные расстояния и для сульфидов этих же катионов — MgS (0,260 нм) и MnS (0,259 нм), и для их селенидов — MgSe (0,273 нм) и

MnSe (0,273 нм). Следует отметить, что все указанные структуры относятся к одному и тому же структурному типу $B1$ (структуры типа хлористого натрия).

Детальный анализ указанного явления кажущейся независимости межатомных (катион—анион) расстояний от катионных радиусов, привел к заключению, что здесь имеет место особый, ранее неизвестный случай кристаллического строения, когда кристаллические структуры образованы сравнительно большими анионами и малыми катионами, причем размеры пространственной решетки и вместе с ним межатомные расстояния (катион—анион) обусловлены исключительно размерами анионов. В соответствии с новой трактовкой, катионы ввиду относительно небольших размеров располагаются в оставшихся промежутках между анионами, образующими жесткий каркас кристаллической структуры, вплотную касаясь один другого.

Действительно, это простое и логичное предположение позволило не только дать вполне убедительное объяснение указанному противоречию в рамках прежней структурной модели, но и в значительной мере способствовало развитию новых представлений о внутреннем строении кристаллов. Эти представления оказались плодотворными и сыграли большую роль в совершенствовании знаний о кристаллическом строении вещества. Рассмотрим структурный треугольник ABC , вершины которого совпадают с центрами анионов в кристаллической структуре MgSe (рис. 61). Здесь стороны прямоугольного равнобедренного треугольника AC и BC равны удвоенному ионному радиусу аниона, а сторона AB равна периоду пространственной решетки и разбивается центром катиона D на два одинаковых межатомных расстояния (катион—анион). Приведенный фрагмент кристаллической структуры полностью соответствует данному выше объяснению: анионы касаются один другого, образуя каркас кристаллической структуры, а катионы вписываются в оставшиеся между анионами промежутки. Оценим величину межатомного расстояния (катион—анион) BD из треугольника BCD :

$$BD = BC : \sqrt{2} = 2r_a : \sqrt{2} = r_a \sqrt{2} = 1,93 \sqrt{2} = 0,273 \text{ нм.}$$

Подставив в выражение для определяемого межатомного расстояния значение ионного радиуса двухвалентного селена (0,193 нм), мы получили расчетное значение 0,273 нм, которое полностью совпало с приведенным выше экспериментальным значением межатомного расстояния для кристаллических структур селенидов магния и марганца.

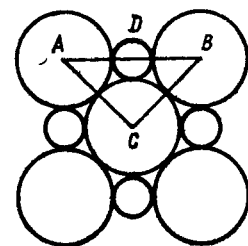


Рис. 61. Структурный треугольник в кристаллической структуре типа $B1$

Таким образом, было доказано наличие кристаллических структур, каркас которых образован атомами одного сорта и в которых поэтому межатомные расстояния не зависят от размеров других — «некаркасных» атомов, входящих в ту же структуру. В дальнейшем подобные кристаллические структуры стали относить к плотнейшим шаровым упаковкам. Хорошее соответствие между экспериментом и новой теорией послужило стимулом для развития учения о плотнейших шаровых упаковках в кристаллических структурах.

1. ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛОТНЕЙШИХ ШАРОВЫХ УПАКОВОК

Атомы, образующие кристаллическую структуру, будем считать жесткими несжимаемыми сферами различных радиусов. Радиусы больших шаров обозначим R , радиусы малых шаров r .

Координационные числа и коэффициент заполнения объема. Кристаллические структуры, имеющие жесткий каркас из равновеликих сфер, касающихся одна другой, характеризуются максимально плотной укладкой шаров. Такая укладка, получившая в кристаллографии наименование плотнейшей шаровой упаковки (ПШУ), обеспечивает определяющую роль более крупных — «каркасных» атомов в формировании кристаллической структуры.

Координационные числа в кристаллических структурах, имеющих ПШУ, ввиду особенностей этих структур определяют для любых атомов только по числу ближайших каркасных атомов — атомов, образующих каркас кристаллической структуры. По простым геометрическим соображениям число ближайших соседних шаров одинакового радиуса, которые лежат в одной плоскости, равно шести (рис. 62). Количество соседних шаров в ближайшей плоскости из таких же шаров равно трем. Действительно, шары верхнего слоя B будут располагаться над луночками, которые образованы шарами нижнего слоя A (рис. 63). Из шести луночек, расположенных в нижнем слое A вокруг шара O , могут быть заполнены шарами верхнего слоя B только три, поскольку положение шара верхнего слоя в луночке между атомами $O-1-2$ исключает возможность расположения шаров в соседних с нею луночках $O-1-6$ и $O-2-3$. Таким образом, если один из шаров верхнего слоя B займет положение над луночкой $O-1-2$, то другие шары ближайшего окружения шара O займут положение над луночками $O-3-4$ и $O-5-6$. В результате ближайшие луночки окажутся занятыми через одну. Таким образом, количество луночек между равновеликими шарами, лежащими в одной плоскости, вдвое превышает количество этих шаров.

В итоге шар O имеет шесть ближайших соседей в своем слое A , трех соседей — в верхнем слое B и, по-видимому, еще трех соседей — в нижнем слое C (на рис. 63 не показан), который располагается под слоем A . В результате получаем для шара O

двенадцать соседей. Следовательно, координационное число для каждого из каркасных атомов составляет двенадцать. Характерно, что рассмотренный вывод координационного числа 12 для каркасных атомов в кристаллических структурах с ПШУ был настолько высоко оценен его современниками, что они называли его «законом двенадцати».

Что касается координационных чисел других, «некаркасных» атомов, то они определяются двумя возможными положениями в промежутках между каркасными атомами. Действительно, некаркасный атом может иметь окружение либо из четырех, либо

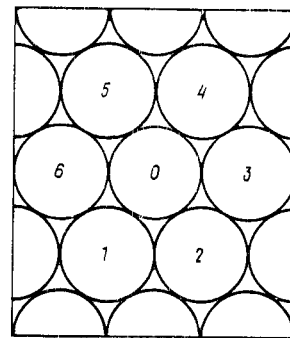


Рис. 62. Фрагмент плоской укладки равновеликих шаров

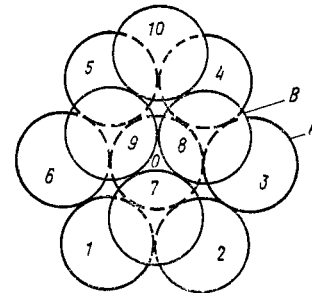


Рис. 63. Фрагмент двухслойной плотнейшей шаровой упаковки

из шести каркасных атомов — в зависимости от вида луночки, у которой он расположен. Если он занимает положение над луночкой типа $O-1-2$, т. е. под шаром 7 верхнего слоя (рис. 63), то его координационное число равно 4 — по числу ближайших каркасных атомов. Если же некаркасный атом расположен над луночкой типа $O-4-5$, то, помимо упомянутых трех ближайших соседей в нижнем слое каркасных атомов, он окружен сверху еще тремя такими же соседями — каркасными атомами $8-9-10$, что в совокупности составит координационное число 6.

Таким образом для кристаллических структур с ПШУ возможны лишь два координационных числа для некаркасных атомов — 4 и 6 — при обязательном координационном числе двенадцать для атомов, слагающих каркас кристаллической структуры.

Важной характеристикой плотнейших шаровых упаковок является коэффициент заполнения объема (коэффициент компактности) η , указывающий долю объема кристаллической структуры, занимаемую каркасными атомами. Из простых геометрических расчетов можно получить значение $\eta = 0,7405$. Следовательно сами каркасные атомы занимают почти три четверти объема каждой элементарной ячейки, оставляя таким образом

на долю всех остальных (некаркасных) атомов лишь четвертую часть объема.

Слойность плотнейшей шаровой упаковки определяется количеством смежных параллельных слоев каркасных атомов, составляющих определенный структурный пакет (минимальной толщины), повторением которого можно построить всю кристаллическую структуру, подобно тому как повторением через трансляцию одной атомной плоскости можно воспроизвести кристаллическую структуру с примитивной пространственной решеткой. Определив число атомных слоев, входящих в этот пакет, можно затем описать всю кристаллическую структуру как последовательное чередование таких пакетов.

Рассмотрим возможное число различных положений, которые могут занимать каркасные атомы в слоях. Если положения атомов в исходном слое обозначить литером *A* (рис. 63), то каркасные атомы соседнего слоя, занимающие положения над лунками первого слоя, будут соответствовать литеру *B*. Атомы третьего слоя, располагаясь над лунками второго слоя, могут занять одно из двух положений. Если они займут положение над лункой 7—8—9, то атомы третьего слоя повторят положение атомов первого слоя *A*. Если же атомы третьего слоя займут положения над лунками первого слоя, например над лункой 0—4—5 (и одновременно — над лункой 8—9—10 второго слоя), то они реализуют новое, третье возможное расположение каркасных атомов, которое мы обозначим литером *C*. Описанными тремя вариантами полностью исчерпываются возможности взаимного расположения слоев каркасных атомов в кристаллических структурах, для которых характерно наличие ПШУ.

Следовательно, для записи порядка чередования слоев в таких кристаллических структурах вполне достаточно указанных трех литеров *A*, *B* и *C*. Если третий слой каркасных атомов повторяет положение первого слоя *A*, четвертый слой повторяет положение второго слоя *B* и т. д., то такую ПШУ называют двухслойной и обозначают *ABABAB...*; толщина структурного пакета составляет два слоя. Если же каркасные атомы третьего слоя занимают положение *C*, атомы четвертого слоя занимают положение *A*, повторяя положения атомов первого слоя, пятый слой повторит положение второго слоя, шестой слой повторит положение третьего слоя и т. д., то одинаковые слои будут повторяться через каждые три слоя; толщина такого структурного пакета будет равна трем слоям, и ПШУ будет трехслойной: *ABCABCABC...*

Для четырехслойной упаковки можем записать порядок чередования слоев как *ABACABAC...*, для пятислойной — *ABACABACABAC...*, для шестислойной — *ABCACBACBACB...* и т. д. Напомним, что рассматриваемые плоские слои каркасных атомов в ПШУ располагаются параллельно один другому и отстоят один от другого на одинаковом расстоянии.

Симметрия плотнейших шаровых упаковок определяется той осью симметрии, которая располагается перпендикулярно слоям каркасных атомов. Как видно на рис. 63, перпендикулярно плоскости каркасных атомов располагаются оси симметрии третьего порядка — они проходят через центры шаров — и оси симметрии шестого порядка (6_3) — они проходят через расположенные одна над другой луночки первого и второго слоев. Итак, в качестве обязательного признака ПШУ отметим наличие осей симметрии третьего (3) или шестого (6_3) порядка, которые расположены перпендикулярно слоям каркасных атомов.

Через каждую из указанных осей симметрии, т. е. перпендикулярно слоям каркасных атомов проходят также три зеркальные плоскости симметрии. Например, через центр шара 9 и центры соседних шаров проходят три плоскости симметрии, перпендикулярные плоскости чертежа: положение этих плоскостей симметрии определяется центрами шаров 9—0; 5—9—1 и 6—9—4. По три таких же плоскости симметрии проходит через центры луночек типа 0—2—3.

Таким образом, для ПШУ обязательно присутствие и осей симметрии (3 или 6_3), и трех зеркальных плоскостей симметрии, которые располагаются в кристаллической структуре перпендикулярно слоям ПШУ.

Анализ симметрии кристаллических структур, сделанный с помощью Международных кристаллографических таблиц, позволяет выделить не менее десяти пространственных групп симметрии, в которых возможны кристаллические структуры с плотнейшими шаровыми упаковками. Из них семь относятся к гексагональной и тригональной сингониям и четыре — к кубической сингонии. К тригональной сингонии относятся пространственные группы симметрии $P3m1$, $P\bar{3}m1$, $R3m$ и $R\bar{3}m$. К гексагональной сингонии относятся три пространственных группы симметрии $P6_3mc$, $P\bar{6}m2$ и $P6_3/mmc$.

Наконец, среди кубических кристаллов плотнейшая шаровая упаковка встречается в тех пространственных группах симметрии, где через наклонные оси симметрии третьего порядка проходят диагональные зеркальные плоскости симметрии $Fm\bar{3}m$, $Fd\bar{3}m$, $Fd3m$ и $Pn\bar{3}m$. Приведенный перечень пространственных групп симметрии не следует считать исчерпывающим, поскольку в кристаллических структурах могут встречаться некоторые частные случаи расположения атомов, которые не противоречат определению ПШУ.

Иногда при определении структурного мотива конкретной кристаллической структуры говорят о наличии «приближенной» ПШУ, например при близости размеров различных атомов в кристаллической структуре.

Важнейшее значение для металлических фаз имеют двухслойные и трехслойные ПШУ. В двухслойной ПШУ перпендику-

лярно плотнейшим слоям проходит ось симметрии 6_3 , поэтому ее часто называют гексагональной. Трехслойная ПШУ (с осью симметрии третьего порядка) характерна для гранецентрированных кубических структур типа меди (ее иногда называют кубической ПШУ — рис. 48).

Пустоты в плотнейших шаровых упаковках — незаполненные промежутки, остающиеся между каркасными атомами (их называют также порами). Промежуток между четырьмя каркасными атомами типа 0—1—2—7 (рис. 63) называют *тетраэдрической пустотой* (сокращенно — тетрапóрой), поскольку центры этих четырех шаров образуют конфигурацию, характерную для вершин кубического тетраэдра. В тетраэдрическую пустоту

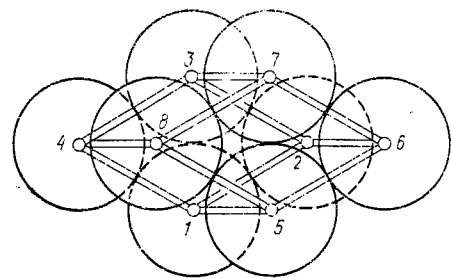


Рис. 64. Фрагмент плотнейшей шаровой упаковки из восьми шаров, содержащий одну октаэдрическую (1—2—3—5—7—8) и две тетраэдрические (1—3—4—8 и 2—5—6—7) пустоты

можно поместить атом с радиусом не более $0,222 R$ (R — радиус каркасного атома). Промежуток между шестью каркасными атомами типа 0—4—5—8—9—10 называют *октаэдрической пустотой* (сокращенно — октапóрой), поскольку их центры расположены подобно шести вершинам октаэдра. В октаэдрическую пустоту можно поместить атом с радиусом не более $0,412 R$.

Чтобы рассчитать количество пустот, приходящихся на каждый каркасный атом, рассмотрим фрагмент ПШУ, образованный восемью равновеликими шарами (рис. 64). Центры этих шаров расположены подобно восьми вершинам параллелепипеда. Если рассматривать такой параллелепипед как одну элементарную ячейку, то на каждую такую элементарную ячейку будет приходиться по одному шару. Вместе с тем, такой параллелепипед содержит одну октаэдрическую пустоту, образованную шестью шарами 1—2—3—5—7—8, и две тетраэдрические пустоты, которые образованы шарами 1—3—4—8 и 2—5—6—7. Таким образом на каждый шар ПШУ, или на каждый каркасный атом приходится одна октаэдрическая и две тетраэдрические пустоты. Следовательно, в общем случае на N каркасных атомов будет приходиться N октаэдрических и $2N$ тетраэдрических пустот.

Между *заполнением пустот* и стехиометрической формулой кристаллической структуры существует простое соотношение. Пусть химический состав кристалла описывается формулой $A_xB_yC_z$. В данной кристаллической структуре атомы A занимают некоторую долю α октаэдрических пустот, атомы B — некоторую долю β тетраэдрических пустот, атомы C образуют

ПШУ и играют роль каркасных атомов. Доля заполнения каждого типа пустот лежит в пределах от нуля (когда соответствующие пустоты совершенно свободны) до единицы (когда заняты все пустоты данного типа).

Если принять число атомов сорта C в «молекуле» равным $Z=N$, то остальные стехиометрические коэффициенты можно выразить через соответствующие доли заполнения пустот: $x=N\alpha$; $y=2N\beta$. Теперь запишем стехиометрическую формулу в виде $A_{N\alpha}B_{2N\beta}C_N$. Например, если в кристаллической структуре заполнена четвертая часть октаэдрических и половина тетраэдрических пустот, то ее стехиометрическая формула будет иметь следующий вид:

$$A_{N \cdot 1/4} B_{2N \cdot 1/2} C_N = AB_4C_4.$$

Аналогичным образом по известной стехиометрической формуле можно определить доли заполнения соответствующих пустот. Так, для структуры шпинели AB_2C_4 доли заполнения пустот вычислим из отношения стехиометрических коэффициентов:

$$(y : x : z) = 1 : 2 : 4 = 2N\beta : N\alpha : N = 2\beta : \alpha : 1.$$

Мы приняли, что атомы A занимают октаэдрические пустоты, а атомы B — тетраэдрические пустоты, плотнейшая шаровая упаковка образована атомами C . В результате доля заполнения октаэдрических пустот составляет одну четвертую часть ($\alpha=1/4$), а тетраэдрические пустоты заняты также на четверть ($\beta=1/4$).

2. ПРАВИЛА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНЕЙШИХ ШАРОВЫХ УПАКОВОК В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

Рассмотренные нами ПШУ позволяют сформулировать необходимые и достаточные условия наличия плотнейшей шаровой упаковки в кристаллической структуре.

1. Наличие в кристаллической структуре параллельных, равноотстоящих одна от другой атомных плоскостей, составленных из атомов одного сорта.

2. Наличие для атомов этого сорта $KЧ=12$, причем координационное число в данном случае считается только по атомам того же сорта (по «своим» атомам).

3. Наличие осей симметрии (оси симметрии третьего порядка либо винтовые оси симметрии шестого порядка 6_3), а также зеркальных плоскостей симметрии, которые ориентированы *перпендикулярно* слоям предполагаемой ПШУ.

4. При выполнении всех предыдущих условий окончательное заключение о наличии или отсутствии ПШУ зависит от соотношения конкретных размеров атомов: размеры некаркасных атомов не должны превышать $0,222R$ (если они располагаются в тетраэдрических пустотах) или $0,412R$ (если они занимают

октаэдрические пустоты). Если первые три условия выполняются, а последнее — нарушено, можно сделать вывод о том, что хотя взаимное расположение атомов и их взаимная координация такие же, как при наличии ПШУ, но каркасные атомы *не касаются* один другого и заполняют менее 74,05 % объема кристалла. Впрочем, такую структуру часто также называют плотноупакованной.

В заключение рассмотрим некоторые структурные типы, для которых всегда выполняются первые три условия наличия ПШУ.

В структурном типе меди (рис. 65) параллельные равноотстоящие один от другого слои, составленные из атомов одного сорта (слой 18—1—15, слой 2—3—4—5—6—7, слой 9—11—13

и т. д.), располагаются перпендикулярно оси симметрии третьего порядка, которая проходит через объемную диагональ элементарной ячейки 1—14. Наличие КЧ=12 удобно проверить для атома 7. Его ближайшими соседями являются четыре вершинных атома 1—2—8—6, четыре атома слева 5—3—9—13 и четыре атома справа 15—16—17—18. Для кристаллической структуры элементарного вещества, все пустоты которого свободны, естественно,

Рис. 65. Плотнейшая шаровая упаковка в кристаллической структуре меди

не требуется проверять выполнение четвертого условия наличия ПШУ.

В структурном типе хлористого натрия (см. рис. 53) анионы занимают такие же положения, как атомы меди в только что рассмотренной структуре, поэтому будем считать первые три условия выполненными. Что касается последнего условия, то оно требует знания конкретного химического состава кристалла. Пусть в соответствии с наименованием данного структурного типа роль каркасных атомов играют ионы хлора (ионный радиус 0,181 нм), а некаркасными являются ионы натрия (ионный радиус 0,098 нм). Поскольку ионы натрия занимают октаэдрические пустоты (их КЧ по хлору равно шести), то проверка четвертого условия дает в данном случае отрицательный результат: ион натрия больше, чем позволяют размеры октаэдрической пустоты. Следовательно, хлорид натрия имеет кристаллическую структуру более рыхлую, чем кристаллическая структура с плотнейшей шаровой упаковкой.

Наглядность и образность теории ПШУ позволяют использовать ее для описания и анализа таких кристаллических структур, в которых, строго говоря, ПШУ отсутствует. Ярким примером широкой популярности ПШУ может служить описание структуры α -железа с помощью понятий о тетраэдрических и

октаэдрических пустотах, которые используются в металловедении для определения положений примесных атомов внедрения.

Действительно, в объемноцентрированной кубической структуре α -железа (см. рис. 47) ПШУ отсутствует, поскольку КЧ=8 (вместо КЧ=12 для ПШУ). Менее плотной укладке атомов в этой структуре соответствует меньший коэффициент заполнения объема η . Если подсчитать отношение объема двух атомов железа, приходящихся на элементарную ячейку ($V_{\text{ат}} = \frac{4}{3}\pi R^3 \times 2$), к объему элементарной ячейки ($V_{\text{яч}} = a^3$) и выразить радиус атома R через ребро куба $R = a\sqrt{3}/4$ (на объемной диагонали элементарной ячейки укладывается четыре радиуса R),

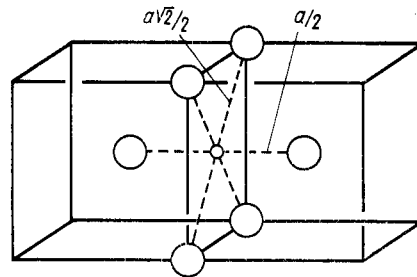


Рис. 66. «Октаэдрическая» пустота в структуре α -железа

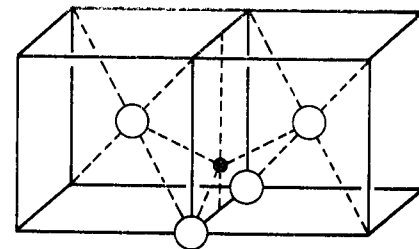


Рис. 67. «Тетраэдрическая» пустота в структуре α -железа

то получим коэффициент заполнения объема $\eta = V_{\text{ат}} : V_{\text{яч}} = \pi\sqrt{3}/8 = 0,68$ — вместо 0,74 для случая ПШУ.

По аналогии с плотноупакованными кубическими гранецентрированными структурами различные положения атомов внедрения в α -железе связывают с пустотами соответствующего наименования. Так, положение атома внедрения в окружении шести атомов железа (рис. 66) сравнивают с заполнением октаэдрической пустоты. Аналогичным образом положение атома внедрения между четырьмя атомами железа, расположенными по вершинам тетрагонального тетраэдра (рис. 67), сравнивают с заполнением тетраэдрической пустоты. Общее количество октаэдрических и тетраэдрических пустот в структуре α -железа в расчете на один атом втрое превышает количество пустот в типичной г. ц. к. структуре (рис. 65). Их взаимное расположение приведено на рис. 68. При этом между пустотами в о. ц. к. и г. ц. к. структурах имеются существенные различия. Так, октаэдрическая пустота в о. ц. к. структуре (рис. 69, а) в самом узком своем месте позволяет вместить атом радиусом 0,154 R (хотя общая протяженность этой пустоты составляет 1,27 R). Размер тетраэдрической пустоты в о. ц. к. структуре (0,291 R) превышает размеры одноименной пустоты в г. ц. к. структуре (0,222 R).

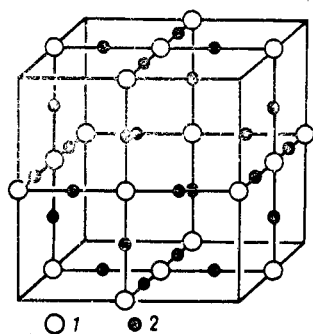


Рис. 68. Взаимное расположение пустот в структуре α -железа:
1 — октаэдрические; 2 — тетраэдрические

Для достижения большей наглядности при описании рассматриваемой структуры α -железа используют такую же систему обозначений чередования атомных слоев, как при описании слоистости ПШУ, хотя, как мы отмечали, в данной структуре ПШУ отсутствует. Так, для обозначения чередования слоев — атомных плоскостей (001) используют такую же символику, как для двухслойной ПШУ: $ABAB...$ (рис. 69, б). Таким же образом обозначают чередование в этой структуре плоскостей (011), показанных на рис. 69, в.

Для плоскостей (111), которые повторяются через каждые два слоя (рис. 69, г), используют такое же обозначение, как для трехслойной ПШУ: $ABCABC...$ При описании чередования атомных плоскостей (112) и любых плоскостей того же типа, которые повторяются через каждые пять слоев (рис. 69, д), трех литеров, как в ПШУ, не хватает, и здесь приходится использовать обозначение, состоящее из шести литеров: $ABCDEFABCDEF...$

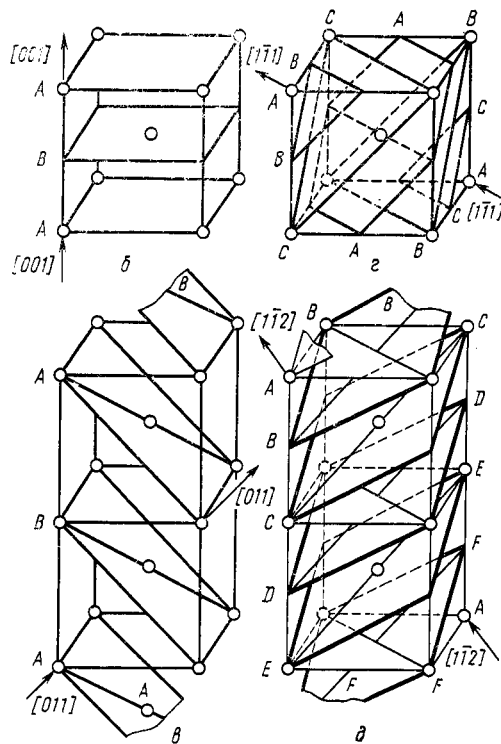
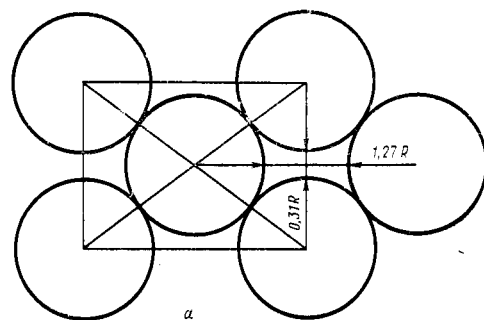


Рис. 69. Сечение октаэдрической пустоты в структуре α -железа плоскостью (100) (а) и чередование различных атомных плоскостей (б—д)

3. КООРДИНАЦИОННЫЕ МНОГОГРАННИКИ ПОЛИНГА—БЕЛОВА

Рассмотренную ранее (см. рис. 53) кристаллическую структуру хлористого натрия можно наглядно представить с помощью так называемых координационных многогранников (рис. 70, а). Как мы видели, каждый катион в этой кристаллической структуре окружен шестью анионами, располагающимися вокруг него по вершинам октаэдра, значит всю кристаллическую структуру можно разбить на такие октаэдры, которые создают четкий и образный рисунок кристаллической структуры. Эти

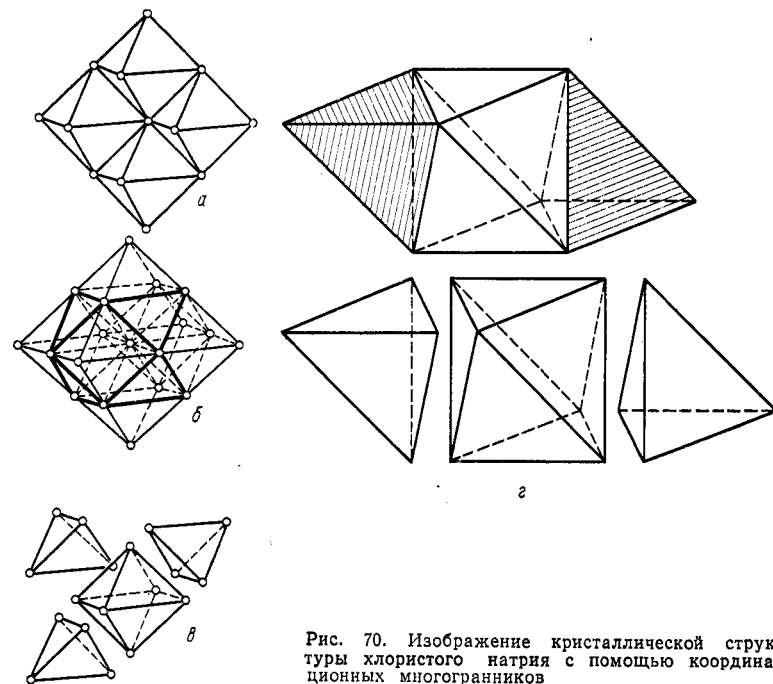


Рис. 70. Изображение кристаллической структуры хлористого натрия с помощью координационных многогранников

октаэдры, выполняющие функции своеобразных структурных единиц, в кристаллической структуре хлористого натрия сочленяются по ребрам и разделены свободными промежутками в виде тетраэдров — незаполненными тетраэдрическими пустотами (рис. 70, б). Действительно, структурные октаэдры как бы переложены пустыми тетраэдрами: каждая грань октаэдра примыкает к такому тетраэдру (рис. 70, в). Напомним, что октаэдры по своей геометрии не могут целиком заполнить пространство, поскольку не являются параллелепипедами, но если дополнить октаэдр двумя тетраэдрами, то получим конфигурацию параллелепипеда (рис. 70, г).

Другой пример изображения кристаллической структуры с помощью координационных многогранников представлен на

рис. 71, где показано взаимное расположение структурных тетраэдров в структуре сфалерита (ZnS). Здесь на одну элементарную ячейку приходится четыре тетраэдра, которые ориентированы одинаковым образом и сочленяются один с другим по вершинам. Структурные тетраэдры разделены промежутком в виде октаэдра. Кроме того следует отметить, что в данной кристаллической структуре заполнены лишь четыре из восьми тетраэдрических пустот, поэтому заполненные и пустые тетраэдры чередуются в шахматном порядке.

Как будет показано ниже, применение координационных многогранников Полинга — Белова позволяет дать наглядное и вместе с тем достаточно строгое описание сложных кристаллических структур (например, фаз Лавеса).

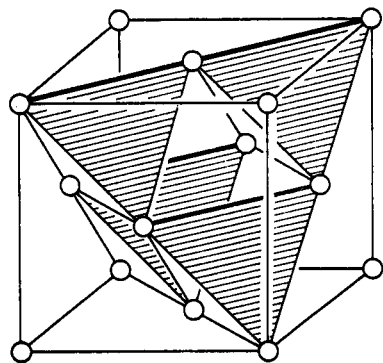


Рис. 71. Представление кристаллической структуры сфалерита с помощью координационных многогранников

§ 12. Структурные типы фаз в металлических сплавах

При огромном разнообразии кристаллических структур многие вещества, различающиеся по составу, оказываются сходными по кристаллическому строению. Так, кристаллические структуры таких металлов, как медь, алюминий, серебро, золото геометрически подобны. Вещества с одинаковым взаимным расположением

атомов называют *изоструктурными*. Такие вещества объединяют в один структурный тип. Кристаллические структуры веществ, относящихся к данному структурному типу, различаются помимо сорта атомов лишь величинами соответствующих межатомных расстояний.

Название каждому структурному типу принято давать по наименованию первого изученного и описанного в литературе вещества. Среди металлов со структурой г. ц. к. раньше всех была изучена и описана кристаллическая структура меди, поэтому все вещества с подобной структурой относятся к структурному типу меди.

Понятие структурного типа значительно упрощает описание кристаллических структур большинства веществ, сводя такое описание к ссылке на ранее описанную аналогичную структуру и дополняя это описание лишь новыми значениями периодов решетки нового вещества.

Следует отметить, что для обозначения структурных типов помимо названия, указывающего наименование одного из изоструктурных веществ данного типа, применяют также специ-

альную международную номенклатуру, по которой изоструктурные типы обозначают условными буквами и цифрами. Так, структурные типы простых веществ обозначают литером *A*, за которым указывают условный порядковый номер структурного типа. Например, структурный тип меди (г. ц. к.) обозначают *A1*, структурный тип вольфрама* (о. ц. к.) обозначают *A2*, структурный тип магния (структура г. п.) обозначают *A3*. Литером *B* обозначают структурные типы эквиатомных химических соединений (состав MN)**, литер *C* используют для соединений состава MN_2 , литер *D* — для двойных соединений более сложного состава и т. д.*¹.

Ниже приведены описания некоторых часто встречающихся в металловедении структурных типов. Отметим, что наиболее распространенными среди чистых металлов являются три вышеупомянутых структурных типа: меди (*A1*), вольфрама (*A2*), магния (*A3*), к которым относится в общей сложности 90 % металлов.

1. СТРУКТУРНЫЙ ТИП МЕДИ (*A1*) *²

Структура — гранецентрированная кубическая: атомы расположены по вершинам и в центре всех граней кубической элементарной ячейки (см. рис. 48). $N=4$; ПГС — $Fm\bar{3}m$; наличие трехслойной ПШУ; базис: $(0, 0, 0; 1/2, 1/2, 0; 1/2, 0, 1/2; 0, 1/2, 1/2)$; КЧ=12. «Представители» данного типа: серебро, алюминий, золото, кальций, β -кобальт, γ -железо, иридий, никель, платина.

2. СТРУКТУРНЫЙ ТИП ВОЛЬФРАМА (или α -ЖЕЛЕЗА) (*A2*)

Структура — объемноцентрированная кубическая: атомы расположены по вершинам и в центре куба (см. рис. 47). $N=2$; ПГС — $Im\bar{3}m$; базис $(0, 0, 0; 1/2, 1/2, 1/2)$; КЧ=8. Представители данного структурного типа: α -железо, δ -железо, хром, литий, молибден, натрий, ниобий, тантал, β -титан, ванадий, вольфрам, β -цирконий.

3. СТРУКТУРНЫЙ ТИП МАГНИЯ (*A3*)

Структура — гексагональная плотноупакованная: атомы расположены по вершинам призмы с основанием в форме ромба ($\gamma=120^\circ$), а также на половине высоты призмы — в центре

* Часто данный структурный тип называют по наименованию другого, наиболее популярного представителя — α -железа.

** См. также раздел 4 в § 10.

¹ Подробное описание структурных типов и их обозначений см. в книге: К. Дж. Смитлз. Металлы. Справочник. — М.: Металлургия, 1980. — 446 с.

² В описаниях структурных типов использованы следующие условные обозначения: N — число атомов в элементарной ячейке; ПГС — пространственная группа симметрии, ПШУ — плотнейшая шаровая упаковка.

тяжести одного из двух равносторонних треугольников горизонтального сечения призмы (см. рис. 49). $N=2$; ПГС — $P6_3/mmc$; двухслойная ПШУ; базис $(1/3, 2/3, 1/4; 2/3, 1/3, 3/4)$; $KЧ=12$. Представители данного структурного типа: бериллий, кадмий, α -кобальт, рений, рутений, α -титан, цинк, α -цирконий.

Большинство металлов, относящихся к структурному типу магния, имеют двухслойные гексагональные плотнейшие упаковки типа $ABAB...$ Их кристаллические структуры в основном соответствуют мотиву ПШУ, для которой отношение $c/a=1,633$. Наибольшие отклонения от ПШУ наблюдаются у кадмия ($c/a=1,886$) и у бериллия ($c/a=1,568$). В первом случае расстояние между горизонтальными базисными атомными плоскостями больше, чем в ПШУ, во втором случае — меньше. Чем больше отклонение c/a от указанной величины в ту или иную сторону, тем рыхлее кристаллическая структура по сравнению с ПШУ. К этому же структурному типу относят некоторые лантаноиды с многослойной гексагональной плотнейшей упаковкой: неодим — с четырехслойной упаковкой $ABCB$, самарий — с девятислойной упаковкой $ABABCBAC$. Величины c/a для них в пересчете на двухслойную упаковку) составляют соответственно 1,613 и 1,601, что вполне сопоставимо с идеальным значением для ПШУ, равным 1,633.

4. СТРУКТУРНЫЙ ТИП АЛМАЗА (A4)

Структура — кубическая гранецентрированная: атомы расположены в вершинах куба, по центрам его граней, а также в центрах четырех из восьми его октантов — через один (см. рис. 46). Подобное расположение атомов иногда условно называют алмазным законом*. $N=8$; ПГС $Fd3m$; базис: $(0, 0, 0; 1/2, 1/2, 0; 1/2, 0, 1/2; 0, 1/2, 1/2; 1/4, 1/4, 1/4; 3/4, 3/4, 1/4; 3/4, 1/4, 3/4; 1/4, 3/4, 3/4)$; $KЧ=4$. Представители данного структурного типа: алмаз, германий, кремний, α -олово.

5. СТРУКТУРНЫЙ ТИП БЕЛОГО ОЛОВА (A5)

Структура β -Sn — тетрагональная объемноцентрированная, может быть представлена как две одинаковые тетрагональные призмы (с атомами в вершинах и в центре каждой призмы), взаимно сдвинутые на половину горизонтального и четверть вертикального ребер: $\bar{a}/2 + \bar{c}/4$ (см. рис. 21). $N=4$; ПГС — $I4_1/amd$; базис: $(0, 0, 0; 1/2, 0, 1/4; 1/2, 1/2, 1/2; 0, 1/2, 3/4)$; $KЧ=4+2$ [при определении координационного числа учитывают

четыре ближайших к центральному (в центре объема ячейки) атому соседних атома на боковых гранях призмы и два атома — по вертикали — из соседних элементарных ячеек].

6. СТРУКТУРНЫЙ ТИП NiAs (B8)

Кристаллическая структура — гексагональная компактная, может быть представлена как двухслойная плотнейшая упаковка с заполненными октаэдрическими пустотами. Атомы A занимают вершины и середины вертикальных ребер призмы с ромбическим основанием ($\gamma=120^\circ$), атомы B поочередно занимают центры левого (на высоте $3c/4$) и правого (на высоте $c/4$) треугольников горизонтального сечения призмы (рис. 72). $N=4$; ПГС $P6_3/mmc$; базис $A (0, 0, 0; 0, 0, 1/2)$; $KЧ_A=6$; базис $B (1/3, 2/3, 1/4; 2/3, 1/3, 3/4)$; $KЧ_B=6$. Пр.: NiAs, NiSb, FeSb.

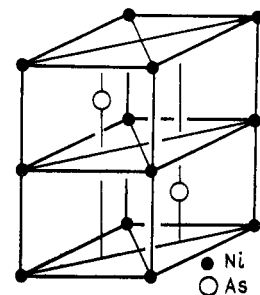


Рис. 72. Кристаллическая структура NiAs

7. СТРУКТУРНЫЙ ТИП CsCl (B2)

Структура — кубическая примитивная: атомы A занимают вершины куба, атомы B — в центрах кубических ячеек (см. рис. 50). $N=2$; ПГС $Pm3m$; базис $A (0, 0, 0)$; $KЧ_A=8$; базис $B (1/2, 1/2, 1/2)$, $KЧ=8$. Представители данного структурного типа: AgZn, CuZn, FeAl, NiAl, CoBe, NiBe.

8. СТРУКТУРНЫЙ ТИП CaF₂ (C1)

Структура — кубическая гранецентрированная: атомы A располагаются как в г. ц. к. структуре (A1), атомы B занимают центры всех октантов (рис. 73). $N=12$; ПГС $Fm3m$. Возможно наличие ПШУ по атомам A при выполнении размерных соотношений. Базис $A (0, 0, 0; 1/2, 1/2, 0; 1/2, 0, 1/2; 0, 1/2, 1/2)$; $KЧ_A=8$; базис $B (1/4, 1/4, 1/4; 3/4, 1/4, 1/4; 3/4, 3/4, 1/4; 1/4, 3/4, 1/4; 1/4, 1/4, 3/4; 3/4, 1/4, 3/4; 3/4, 3/4, 3/4; 1/4, 3/4, 3/4)$; $KЧ_B=4$. Представители данного структурного типа: PbMg₂, SnMg₂.

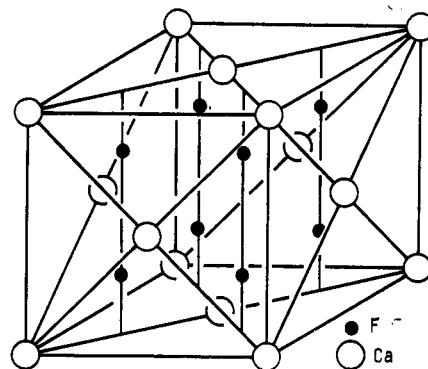


Рис. 73. Кристаллическая структура CaF₂

9. СТРУКТУРНЫЙ ТИП AuCu₃ (L1₂)

Структура — кубическая примитивная: атомы A занимают вершины куба, атомы B —

* Структуру алмаза можно также представить как две одинаковых г. ц. к. структуры, сдвинутых одна по отношению к другой на четверть телесной диагонали куба.

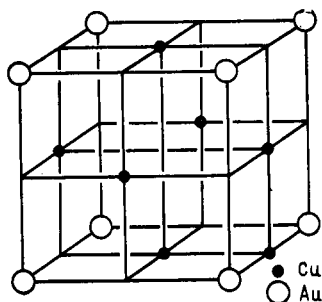


Рис. 74. Кристаллическая структура AuCu_3

середине вертикальных ребер, в центре оснований и в центре объема; атомы B образуют одинаковые квадратные сетки (на высоте $c/4$ и $3c/4$), развернутые в разные стороны на одинаковый угол α (для CuAl_2 $\alpha = \pm 20,20^\circ$, сторона малого квадрата —

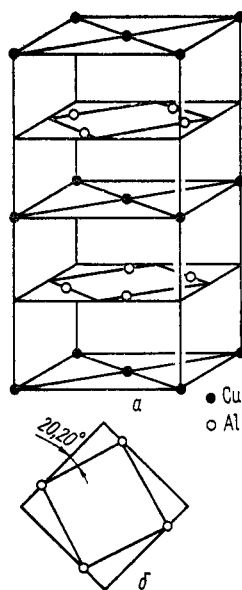


Рис. 75. Кристаллическая структура $\Theta\text{-CuAl}_2$ (а) и расположение атомов алюминия в базисной плоскости (б)

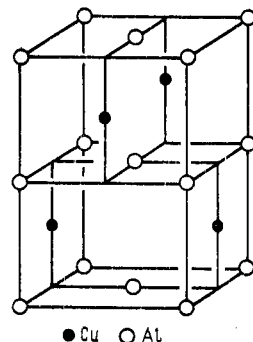


Рис. 76. Кристаллическая структура $\Theta'\text{-CuAl}_2$

* Следует указать также на промежуточную тетрагональную упорядоченную метастабильную фазу аналогичного состава $\Theta'=\text{CuAl}_2$, образующуюся при распаде твердого раствора в сплавах алюминий—медь. В этой фазе (рис. 76) атомы алюминия образуют одинаковые горизонтальные квадратные центрированные сетки, отстоящие одна от другой на половину высоты элементарной ячейки. Между этими сетками расположены слои атомов меди, занимающих попеременно положения на высоте $c/4$ или $3c/4$ на центральных вертикалях боковых граней тетрагональной призмы, $N=6$; ПГС $14/mmm$.

центры его граней (рис. 74). $N=4$; ПГС $Pm\bar{3}m$; базис A $(0, 0, 0)$; $KЧ=12$; базис B $(1/2, 1/2, 0; 1/2, 0, 1/2; 0, 1/2, 1/2)$; $KЧ_B=4$. Представители данного структурного типа: AlNi_3 , AuCu_3 , CaPb_3 .

10. СТРУКТУРНЫЙ ТИП $\Theta=\text{CuAl}_2$ (C16)*

Структура — тетрагональная слоистая (рис. 75, а), в которой горизонтальные слои атомов A чередуются со слоями B : атомы A расположены по вершинам тетрагональной призмы, по

0,533 от стороны квадрата основания — рис. 75, б). $N=12$. ПГС $I4/m\bar{3}m$. Базис A $(0, 0, 1/4; 0, 0, 3/4; 1/2, 1/2, 1/4; 1/2, 1/2, 3/4)$; $KЧ_A=4A+8B$; базис B $(x, 1/2-x, 0; 1-x, 1/2-x, 0; 1/2+x, 1-x, 0; 1/2-x, x, 0; 1/2+x, x, 1/2; 1/2-x, 1-x, 1/2; x, 1/2-x, 1/2; 1-x, 1/2+x, 1/2)$; $KЧ_B=4A+4B$;

11. СТРУКТУРНЫЙ ТИП MgCu_2 (C15)

Структура — сравнительно сложная кубическая гранецентрированная, в которой более крупные атомы (Mg) расположены по алмазному закону, занимая вершины и центры граней куба, а также половину октантов (через один). Атомы меди распо-

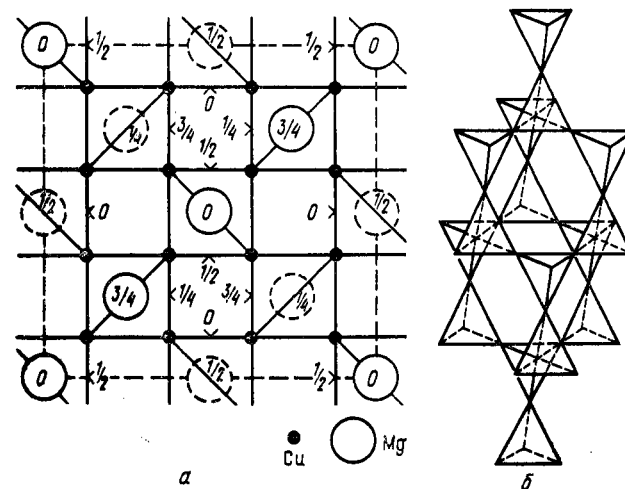


Рис. 77. Изображение кристаллической структуры MgCu_2 с помощью координационных многогранников: а — вид по $[001]$; б — вид по $\langle 111 \rangle$

лагаются по четыре в четырех свободных (от магния) октантах, образуя своеобразные структурные координационные многогранники — тетраэдры (рис. 77, а). На элементарную ячейку таким образом приходится 8 атомов Mg и 16 атомов Cu ($N=24$); ПГС — $Fd\bar{3}m$; базис Mg (см. базис в структурном типе алмаза (см. п. 4); базис Cu — координаты атомов меди легко получить по координатам центров структурных тетраэдров $(1/4, 1/4, 3/4; 3/4, 1/4, 1/4; 1/4, 3/4, 1/4; 3/4, 3/4, 3/4)$, добавляя к ним поправки — для перехода от центра каждого тетраэдра к его вершинам: $(-1/8, +1/8, +1/8)$, $(+1/8, -1/8, +1/8)$, $(+1/8, +1/8, -1/8)$, $(-1/8, -1/8, -1/8)$. Каждый атом магния окружен четырьмя атомами магния и двенадцатью атомами меди — по три от каждого из четырех ближайших струк-

турных тетраэдров ($KЧ=4A+12B$). В свою очередь, каждый из атомов меди имеет окружение из шести атомов меди и шести атомов магния ($KЧ=6A+6B$).

Структуру $MgCu_2$ часто описывают как совокупность координационных многогранников — «медных» тетраэдров, которые соприкасаются один с другим по вершинам. Действительно, четыре ближайших к центру куба атома меди образуют структурный тетраэдр, как бы скрепляющий четыре описанных выше медных тетраэдра. В результате вся кристаллическая структура представляется как «вязь» из тетраэдров. На рис. 77, б показан фрагмент кристаллической структуры $MgCu_2$ из таких координационных многогранников, расположенных вдоль оси третьего порядка $\langle 111 \rangle$. Тетраэдры образуют сложную трехслойную структуру $ABCABC...$

Описывая структуру данного интерметаллического соединения, являющегося одним из типичных представителей фаз Лавеса, следует отметить, что межатомное расстояние $Mg-Mg$ (0,305 нм) оказывается здесь меньше суммы двух атомных радиусов Mg (2,016 нм). Та же особенность относится и к атомам меди, где межатомное расстояние $Cu-Cu$ (0,249 нм) также меньше удвоенного атомного радиуса меди (0,256 нм). При этом межатомное расстояние $Mg-Cu$ (0,292 нм) несколько больше суммы соответствующих атомных радиусов (0,288 нм). Представители данного структурного типа: CeF_2 , KBi_2 , $MgCu_2$.

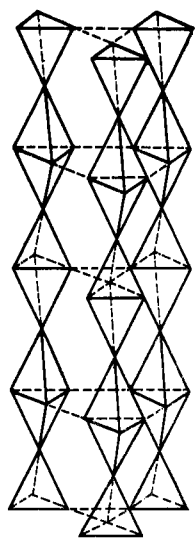


Рис. 78. Изображение кристаллической структуры $MgZn_2$ с помощью координационных многогранников

12. СТРУКТУРНЫЙ ТИП $MgZn_2$ ($C14$)

Структура — сложная гексагональная, которую можно представить с помощью координационных многогранников — тетраэдров (рис. 78). Здесь тетраэдры из атомов цинка сочленяются и по вершинам, и по граням, причем в отличие от предыдущего структурного типа тетраэдры располагаются непрерывными вертикальными (вдоль оси OZ) цепочками. На элементарную ячейку приходится 4 атома Mg и 8 атомов Zn ; $N=12$; ПГС $P6_3/mmc$; координация атомов аналогична $MgCu_2$ (см. п. 11); базис: $Mg \pm (1/3, 2/3, z; 1/3, 2/3, 1/2-z)$, где $z=0,062$; (2) $Zn (0, 0, 0; 0, 0, 1/2)$; (6) $Zn \pm (x, 2x, 1/4; 2x, x, 1/4; x, x, 1/4)$, где $x=-0,170$.

Если структуру $MgCu_2$ мы описывали как сложную трехслойную укладку координационных тетраэдров, то $MgZn_2$ — двухслойная структура: горизонтальные слои тетраэдров чередуются в порядке $ABAB...$ (на рис. 78 — четыре слоя этой укладки). Представители данного структурного типа: $FeBe_2$, KNa_2 .

13. СТРУКТУРНЫЙ ТИП $MgNi_2$ ($C36$)

Структура — сложная гексагональная, которую обычно описывают как промежуточную между структурами ранее описанных фаз Лавеса $MgCu_2$ и $MgZn_2$. Действительно, мотив чередования координационных многогранников никеля (в форме тех же тетраэдров) объединяет характерные особенности обоих структурных типов (рис. 79). Наряду с соприкасающимися тетраэдрами, расположенными на одной вертикали (как в $MgNi_2$), в данном структурном типе имеются смежные тетраэдры, которые не имеют общей вертикали (как в $MgCu_2$). Количество горизонтальных слоев структурных тетраэдров равно четырем: $ABCD$. В элементарной ячейке 8 атомов Mg и 16 атомов Zn ; $N=24$; ПГС — $P6_3/mmc$; координация атомов аналогична $MgCu_2$ и $MgZn_2$; базис: (4) $Mg \pm (1/3, 1/2, z); \pm (2/3, 1/3, 1/2+z); z=0,844$; (4) $Mg \pm (0, 0, z); \pm (0, 0, 1/2+z); z=0,938$; (6) $Ni (1/2, 0, 0; 0, 1/2, 0; 1/2, 1/2, 0; 1/2, 0, 1/2; 0, 1/2, 1/2; 1/2, 1/2, 1/2)$; (6) $Ni \pm (x, 2x, 1/4; 2x, x, 1/4; x, x, 1/4)$; $x=0,167$; (4) $Ni \pm (1/3, 2/3, z; 2/3, 1/3, 1/2+z); z=0,125$. Представитель данного структурного типа — $HfMO_2$.

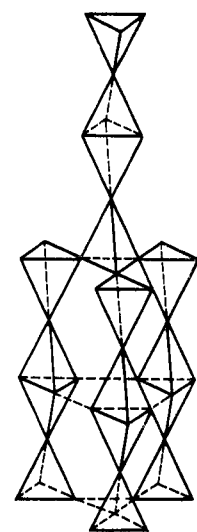


Рис. 79. Изображение кристаллической структуры $MgNi_2$ с помощью координационных многогранников

§ 13. Эпитаксиальные и двойниковые кристаллические структуры

И эпитаксиальные, и двойниковые структуры относятся к числу сложных, особых кристаллических структур, которые представляют собой соответственно либо совокупность двух различных кристаллических структур, сопряжение которых обусловлено наличием определенного структурного и размерного соответствия, либо совокупность сопряженных одна с другой одинаковых кристаллических структур различной кристаллографической ориентации.

1. ЭПИТАКСИАЛЬНЫЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ

Под эпитаксией, или эпитаксиальной кристаллизацией, понимают ориентированное нарастание слоя одной кристаллической фазы на поверхности другой, которую называют подложкой. Такое ориентированное нарастание связано с взаимно-однозначным соответствием между сопрягающимися атомными плоскостями подложки ($h_p k_p l_p$) и эпитаксиального слоя ($h_c k_c l_c$), а также с близостью межатомных расстояний вдоль направлений сопряжения $[u_p v_p w_p]$ и $[u_c v_c w_c]$, которые принадлежат соответствующим атомным плоскостям подложки и эпитаксиального слоя (см. § 10: принцип Данкова — Конобеевского).

Возникновение взаимосвязи между кристаллографическими ориентациями подложки и эпитаксиального слоя, когда между сопрягающимися атомными плоскостями подложки и слоя проявляется структурное и размерное соответствие, связывают с более низкой удельной энергией границы раздела двух фаз по сравнению с удельной энергией любых других возможных межфазных границ (т. е. при стыковке между другими атомными плоскостями подложки и слоя или между другими атомными рядами). Чем полнее структурное и размерное соответствие между двумя сопрягающимися атомными плоскостями сетками подложки и эпитаксиального слоя, тем меньше «оборванных» межатомных связей на поверхности раздела двух фаз, тем меньше удельная энергия границы раздела подложка — эпитаксиальный слой.

Кристаллические вещества, которые реально проявили способность к эпитаксиальной кристаллизации, часто называют эпитаксиальными парами. Для каждой эпитаксиальной пары может быть характерно единственное условие эпитаксиального соответствия, а в отдельных случаях — несколько таких условий. Описание эпитаксиального соответствия между кристаллическими структурами подложки и эпитаксиального слоя формулируется следующим образом: атомные плоскости подложки и эпитаксиального слоя, а также принадлежащие им сопрягающиеся атомные ряды параллельны друг другу:

$$\left. \begin{aligned} (h_p k_p l_p) \parallel (h_c k_c l_c); \\ [u_p v_p w_p] \parallel [u_c v_c w_c]; \\ h_p u_p + k_p v_p + l_p w_p = 0; \\ h_c u_c + k_c v_c + l_c w_c = 0. \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Последние два выражения описывают принадлежность сопрягающихся атомных рядов соответствующим атомным плоскостям и аналогичны уравнению (24).

При наличии структурного и размерного соответствия эпитаксиальный слой как бы продолжает кристаллическую структуру подложки. Если же кристаллографическая ориентация подложки отличается от необходимой для эпитаксиальной кристаллизации, на поверхности подложки при тех же параметрах процесса вместо эпитаксиальной кристаллизации будет идти кристаллизация со случайной кристаллографической ориентацией отдельных зерен поликристаллического слоя.

Теоретическое предсказание возможности эпитаксии для какой-либо конкретной пары кристаллических веществ пока недостаточно надежно; единственным критерием эпитаксиальной кристаллизации является результат ее непосредственного экспериментального наблюдения. Такой эмпирический путь выявления эпитаксиальных пар имеет множество недостатков, по-

скольку результат эксперимента зависит не только от «генетической» способности данной пары к эпитаксиальной кристаллизации, но и от условий самого эксперимента. Так, бывает достаточно небольших отклонений от оптимального режима процесса, чтобы эпитаксиальная кристаллизация не проявилась.

Известен эмпирический критерий оценки возможности эпитаксии, в соответствии с которым предельно допустимое отклонение межатомных расстояний по сопрягаемым атомным рядам подложки и слоя не должно превышать 10—15 %. При расчете это относительное несоответствие в межатомных расстояниях принято вычислять в виде абсолютного значения разности соот-

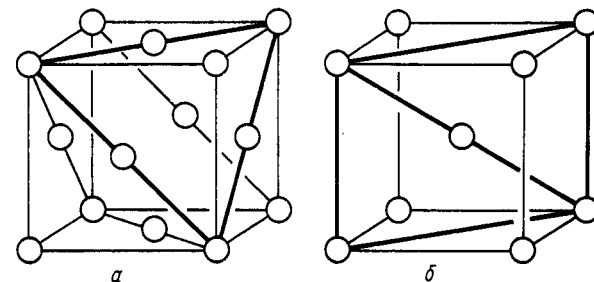


Рис. 80. Атомные плоскости:
а — (111) в кристаллической структуре меди; б — (110) в кристаллической структуре α -железа

ветствующих периодов решеток, отнесенной к их среднеарифметическому значению:

$$\delta = \frac{a_p - a_c}{(a_p + a_c)/2} \cdot 100 \, \%. \quad (26)$$

Однако известно множество отклонений от указанного критерия, что лишает его достаточной надежности.

Для описания эпитаксии с помощью известных данных о кристаллических структурах подложки и эпитаксиального слоя выполняют в одинаковом масштабе чертежи сопрягающихся атомных плоскостей $(h_p k_p l_p)$ и $(h_c k_c l_c)$, после чего накладывают их один на другой, совмещая при этом соответствующие кристаллографические направления подложки и эпитаксиального слоя $[u_p v_p w_p]$ и $[u_c v_c w_c]$.

Выполним указанное построение для известной эпитаксиальной пары медь — α -железо по заданным эпитаксиальным соотношениям: $(111) \parallel (110)$ и $[1\bar{1}0] \parallel [1\bar{1}1]$. Определим рисунок, характерный для сопрягающихся атомных плоскостей (111) меди (рис. 80, а) и (110) α -железа (рис. 80, б). В соответствии с заданными эпитаксиальными соотношениями, сторона равноугольного структурного треугольника меди $[1\bar{1}0]$ совмещается с диагональю структурного прямоугольника железа $[1\bar{1}1]$. Про-

ведем совмещение указанных плоских атомных сеток подложки и эпитаксиального слоя, выбрав для этого по несколько элементарных ячеек (рис. 81) и учитывая величины периодов соответствующих пространственных решеток: 0,36153 нм — для гранецентрированной кубической элементарной меди и

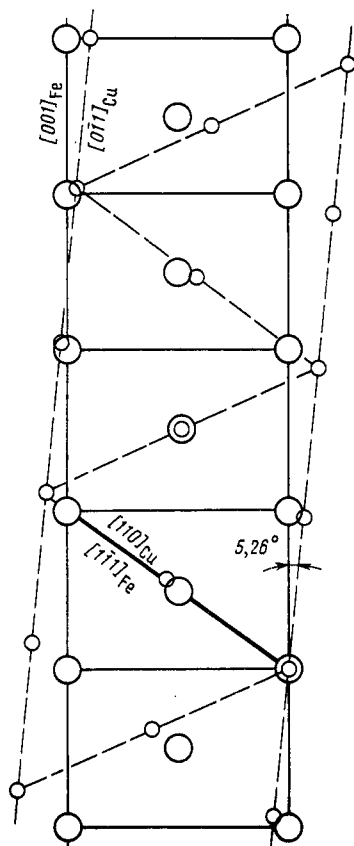


Рис. 81. Схема сопоставления атомных плоскостей меди (111) и железа (110)

стве осей проекций нормали к сопрягающимся атомным плоскостям: (111) и (110). По пространственным группам симметрии меди ($Fm\bar{3}m$) и α -железа ($Im\bar{3}m$) устанавливают соответствующие классы симметрии. Обе пространственные группы симметрии соответствуют классу симметрии $m\bar{3}m$. Опираясь на стандартную стереографическую проекцию осей симметрии указанного класса симметрии с полюсом (осью проекции) [001] (рис. 82, а), строят соответствующие проекции с полюсами [111]

0,28664 нм — для объемноцентрированной кубической элементарной ячейки железа. Ближайшие межатомные расстояния вдоль направления сопряжения составляют: для меди $a\sqrt{2}/2 = 0,36153/\sqrt{2} = 0,25564$ нм, для железа $a\sqrt{3}/2 = 0,28664/\sqrt{3} = 0,24824$ нм. Таким образом, величина относительного несоответствия межатомных расстояний по сопрягаемому направлению.

$$\delta = 2(0,25564 - 0,24824) / (0,25564 + 0,24824) \cdot 100\% = 2,94\%,$$

что соответствует довольно плотному перекрытию сопрягаемых атомных плоскостей. По выполненному построению можно оценить также величину небольшого угла между направлением [001] в железе (малая сторона прямоугольника) и направлением [011] в структуре меди (сторона треугольника); этот угол составляет 5,26°. Для завершения описания данной эпитаксиальной пары с помощью стереографических проекций проводят оценку углов между важнейшими кристаллографическими направлениями подложки и эпитаксиального слоя. Для этого строят соответствующие стереографические проекции осей симметрии, выбирая в качестве осей проекций нормали к сопрягающимся атомным

для меди (рис. 82, б) и [110] для железа (рис. 82, в). После этого совмещают обе проекции, вращая их вокруг общего центра до совпадения проекций стереографических направлений ([110] — для меди и [111] — для железа), которые лежат на контуре круга проекций (рис. 82, г) *. По полученной совмещенной стереографической проекции с помощью сетки Вульфа определяют значения углов между важнейшими кристаллографическими направлениями в обеих структурах. По-видимому, небольшие величины углов между кристаллографическими направлениями свидетельствуют о возможности их сопряжения у границы раздела фаз, когда один атомный ряд будет как бы продолжением другого атомного ряда, «сшивая» подложку с эпитаксиальным слоем.

Завершая рассмотрение эпитаксиальных кристаллических структур, целесообразно рассмотреть один пример, показывающий богатую перспективу применения эпитаксиальных структур в технике. При осаждении металлического кобальта на медную или никелевую подложку при невысоких температурах, т. е. в области устойчивости гексагональной плотноупакованной α -модификации кобальта ($a = 0,2507$; $c = 0,4070$ нм) образующийся на подложке слой кобальта приобретает несвойственную ему при этих температурах структуру г. ц. к., которая характерна для β -кобальта выше 770 °С ($a = 0,3552$ нм). Описанное явление, которое иногда называют пленочным полиморфизмом, легко объяснить, если сопоставить кристаллохимические дан-

Т а б л и ц а 13. Характеристики эпитаксии в металлических фазах

Эпитаксиальная пара	Эпитаксиальные соотношения			
	$(h_c k_c l_c)$	$(h_p k_p l_p)$	$[u_c v_c w_c]$	$[u_p v_p w_p]$
α -железо — медь	(110)	(111)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$
То же	(211)	(110)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$
»	(110)	(100)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[011]$
Хром — медь	(110)	(111)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$
То же	(211)	(110)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$
»	(110)	(100)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[011]$
Золото — α -железо	(001)	(110)	$[010]$	$[001]$
Серебро — α -железо	(001)	(110)	$[010]$	$[001]$
Молибден — вольфрам	(001)	(001)	$[100]$	$[100]$
α -железо — вольфрам	(001)	(001)	$[100]$	$[100]$
Бериллий — молибден	$(10\bar{1}2)$	(001)	$[2\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[011]$
Цинк — медь	(0001)	(111)	$[11\bar{2}0]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$
Бериллий — никель	$(10\bar{1}0)$	(110)	$[0001]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$
Свинец — серебро	(111)	(111)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$
Медь — титан	(111)	(0001)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{0}]$	$[11\bar{2}0]$

* Построение этих проекций рассмотрено в Приложение Б.

ные подложки и эпитаксиального слоя. Действительно, периоды гранецентрированных пространственных решеток меди (0,36153 нм), никеля (0,35238 нм) и высокотемпературного кобальта (0,3552 нм) близки: величины относительного несоответствия межатомных расстояний по сопрягаемым направлениям находятся в пределах 1—2 %. При этих условиях энерге-

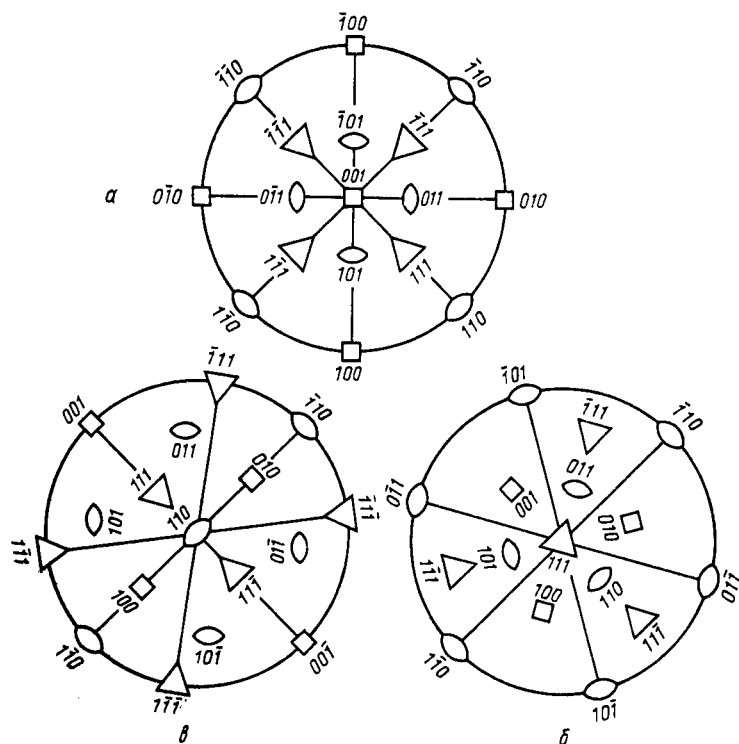


Рис. 82. Стереорафические проекции осей симметрии класса $m\bar{3}m$ (при за a — с полюсом $[001]$; b — с полюсом $[110]$; $в$ — с полюсом $[111]$; $г$ — совмещен

тически более выгодным для кобальта оказывается «пристроиться» к подложке, приняв ее кристаллическую структуру.

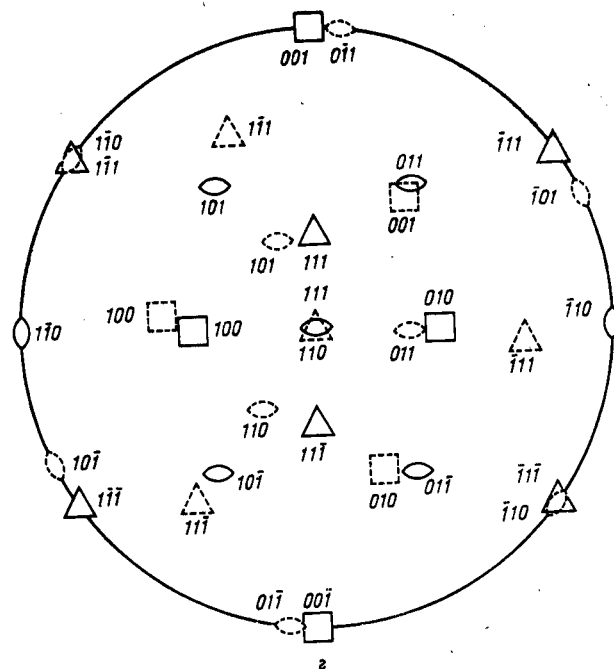
Примеры эпитаксиальных соотношений, которые встречаются в металлических фазах, приведены в табл. 13.

2. ДВОЙНИКОВЫЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ

При некоторых условиях (под воздействием механических нагрузок, в результате отжига, при электрокристаллизации) в металлах возникают двойниковые прослойки (рис. 83). Сдвойникованная часть кристалла, или двойник, имеет такую же кристаллическую структуру, как и остальная его часть (матрица), и отличается от последней лишь кристаллографической ориен-

тацией. Ориентации матрицы и двойника связаны зеркальным отражением относительно плоскости двойникового превращения. Иными словами, кристаллическая структура двойника является зеркальным отражением кристаллической структуры матрицы, из которой он образовался.

Рассмотрим механизм двойникового превращения. Плоскость двойниковая K_1 связывает матрицу с двойником (рис. 84). При двойниковании происходит согласованное (кооперативное) пе-



писи символов осей квадратные скобки опущены);
ная проекция осей симметрии подложки и слоя

ремещение атомов в смежных атомных плоскостях в направлении двойникового превращения η_1 на долю межатомного расстояния. При этом полный результирующий сдвиг оказывается макроскопическим и его можно наблюдать невооруженным глазом. В результате двойникового превращения атомная плоскость K_2 с принадлежащим ей вектором η_2 переходит без искажения в новое положение K_2' с характерным вектором η_2' . Плоскость, в которой лежат векторы η_2 и η_2' , называют плоскостью сдвига. Следует отметить равенство углов, образуемых плоскостью двойникового превращения K_1 с плоскостью K_2 и с плоскостью K_2' (рис. 85). Таким образом, при двойниковом превращении сохраняются симметрия, размеры и форма элементарной ячейки.

В табл. 14 приведены характеристики двойникования для типичных металлических структур.

На рис. 86 приведена схема атомной перестройки в структуре г. ц. к., приводящей к образованию двойниковой структуры. В плоскости сдвига $(1\bar{1}0)$ показаны вектор $\bar{\eta}_2$, указывающий ориентацию атомных рядов в плоскости K_2 — до двойникования, и вектор $\bar{\eta}'_2$, указывающий новую ориентацию этих рядов после двойникования — в плоскости K'_2 , а также положения атомов в матрице (под плоскостью двойникования K_1) и в двойнике.

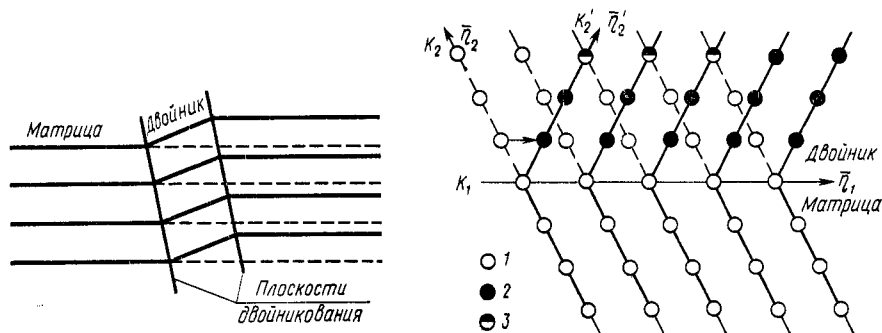


Рис. 83. Схема образования двойниковой прослойки в кристалле

Рис. 84. Атомный механизм двойникового превращения:
1 — положения атомов перед двойникованием;
2 — положения атомов после двойникования;
3 — совпадающие положения атомов до и после двойникования

На рис. 87 приведена схема двойникования в структуре о. ц. к. [плоскость сдвига $(11\bar{0})$].

Таблица 14. Некоторые кристаллографические характеристики двойникования

Металлы	Структура	K_1	$\bar{\eta}_1$	K_2	$\bar{\eta}_2$
Медь, серебро, золото, никель	Г. ц. к.	(111)	$[11\bar{2}]$	$(1\bar{1}\bar{1})$	$[112]$
α -железо, молибден, вольфрам, хром, ниобий, тантал	О. ц. к.	(112)	$[11\bar{1}]$	$(1\bar{1}\bar{2})$	$[111]$
Титан, магний, цинк, бериллий, кадмий	Г. п.	$(10\bar{1}2)$	$[10\bar{1}1]$	$(10\bar{1}\bar{1})$	$[\bar{1}0\bar{1}1]$
β -олово	Тетрагональная объемноцентрированная	(301)	$[\bar{1}03]$	$(\bar{1}0\bar{1})$	$[101]$
Висмут, сурьма	Ромбоэдрическая	(110)	$[00\bar{1}]$	(001)	$[110]$

Рис. 85. Векторная схема двойникового превращения

Рис. 86. Образование двойника в кубической гранецентрированной структуре (1—3 — см. на рис. 84)

Рис. 87. Образование двойника в кубической объемноцентрированной структуре (1—3 — см. на рис. 84)

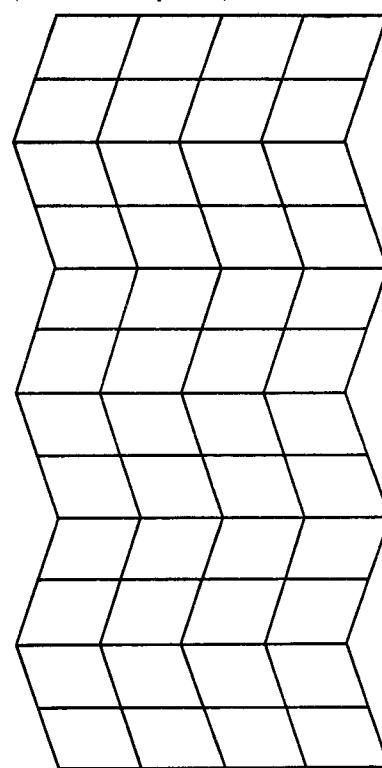


Рис. 88. Схема полисинтетического двойника

Рис. 89. Построение стереографической проекции двойниковых аналогов ($dd_1d_2d_3$ — проекция плоскости двойникования)

Помимо описанных нами одиночных двойников существуют также *полисинтетические двойники*, образованные несколькими пластинками двух чередующихся ориентаций (рис. 88).

Двойники в металлических сплавах обычно хорошо выявляются при травлении шлифов в виде чередующихся контрастных параллельных одна другой полосок, которые пересекают все зерно.

Если $d_1d_2d_3$ — стереографическая проекция плоскости двойникования, а a' , b' и c' — гномостереографические проекции некоторых атомных плоскостей кристалла или его граней, то построение гномостереографических проекций двойниковых аналогов указанных атомных плоскостей производят поворотом вокруг оси dd_0 на угол, который вдвое превосходит угол между нормалью каждой грани и плоскостью двойникования (рис. 89). Так, для двойникового аналога грани a' отложим вдоль параллели сетки Вульфа дугу $a''d_1$, равную дуге $a'd_1$. Для построения аналога грани b' , гномостереографическая проекция которой лежит на экваторе сетки Вульфа, отсчитываем по экватору угол $b''d_2$, равный углу между нормалью b' и плоскостью двойникования: $b'd_2$. Двойниковый аналог грани c' имеет проекцию на нижней полусфере (c''), поэтому дуга $c''d_3$ между нормалью последней грани и плоскостью двойникования должна быть равна соответствующей дуге $c'd_3$. Дугу $c''d_3$ следует отсчитывать вдоль параллели как сумму двух дуг: дуги d_3e — по верхней полусфере и дуги ec'' — по нижней полусфере.

ДЕФЕКТЫ Часть 2 КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Классификация дефектов кристаллической решетки

Дефекты (несовершенства) кристаллического строения подразделяют по геометрическим признакам на *точечные* (нульмерные), *линейные* (одномерные), *поверхностные* (двумерные) и *объемные* (трехмерные).

Точечные дефекты малы во всех трех измерениях; их размеры по всем направлениям не больше нескольких атомных диаметров. К точечным дефектам относятся вакансии, межузельные атомы, примесные атомы и их комплексы.

Линейные дефекты малы (имеют атомные размеры) в двух измерениях, а в третьем они значительно большего размера, который может быть соизмерим с длиной кристалла. К линейным дефектам относятся дислокации, дисклинации, цепочки вакансий и межузельных атомов.

Поверхностные, в частном случае плоские, *дефекты* малы только в одном измерении. К ним относятся границы зерен, субзерен и двойников, дефекты упаковки, границы доменов в сверхструктуре.

Точечные, линейные и поверхностные дефекты являются микроскопическими — минимум в одном измерении их протяженность измеряется атомными диаметрами. В отличие от них *объемные дефекты* в атомном масштабе макроскопические — они имеют во всех трех измерениях относительно большие размеры, несоизмеримые с атомным диаметром. К объемным дефектам относятся поры, трещины и царапины. Когда говорят о несовершенствах металлических кристаллов, то чаще всего имеют в виду микроскопические дефекты.

Искажения решетки, связанные с тепловыми колебаниями, как и упругие деформации, по которым реальный кристалл отличается от идеального, не относятся к несовершенствам. Таким образом, следует различать *идеальный кристалл*, являющийся застывшей схемой, в которой неподвижные атомы образуют правильную систему точек, и *реальный несовершенный кристалл*, содержащий точечные, линейные, поверхностные и объемные дефекты или один из этих видов дефектов. Из-за дефектов в несовершенном кристалле расположение точек, вблизи которых колеблются атомы, не соответствует правильной системе точек в идеальном кристалле. Широко используемое понятие *реальный совершенный кристалл* — условно, так как в реальном кристалле всегда должны содержаться точечные дефекты (вакансии и межузельные атомы), равновесная концентрация которых определяется температурой (см. § 15). Совершенным обычно принято называть реальный кристалл без дислокаций и субграниц.

Глава III ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ

§ 14. Виды точечных дефектов

Точечные дефекты могут быть собственными (структурными) и примесными. К элементарным собственным дефектам относят *вакансии* и *межузельные атомы*, к примесным — атомы примеси, растворенной по способу замещения или внедрения (рис. 90).

Вакансия образуется при удалении атома из его нормального положения в узле кристаллической решетки. Межузель-

ный атом — это собственный атом, втиснувшийся между атомами, которые расположены в узлах кристаллической решетки.

Вокруг пустого узла решетка искажена. В г. ц. к. решетке величина смещения атомов первой координационной сферы, направленного в сторону вакансии, составляет около 2 % межатомного расстояния. В плотнейшей упаковке, какой является г. ц. к. кристалл, смещение атомов первой координационной сферы в сторону вакансии быстро тормозится их взаимным отталкиванием. Аналогичные смещения в о. ц. к. решетке в несколько раз больше, но все равно не превышают 10 % межатомного расстояния. При удалении от вакансии, как и любого другого точечного дефекта, атомные смещения быстро затухают, так как межатомные силы являются силами близкодействия. Заметные смещения создаются на расстоянии одного-двух атомных диаметров от центра точечного дефекта. Эта область называется **ядром дефекта**. Расположение атомов в ядре нельзя описать, исходя из теории

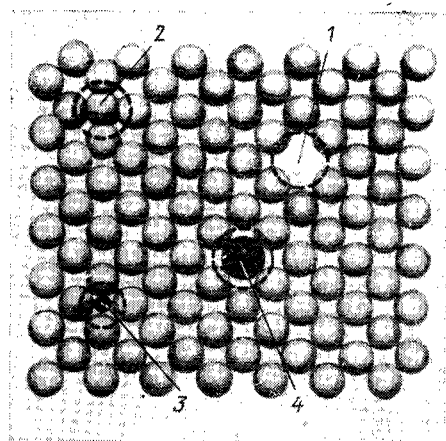


Рис. 90. Двумерная модель кристалла с простейшими собственными и примесными дефектами: 1 — вакансия; 2 — межузельный атом; 3 — примесь внедрения; 4 — примесь замещения

упругости, которая оперирует понятием сплошной среды и не учитывает дискретного атомного строения металла.

Поскольку вакансия стремится стянуть решетку вокруг себя, то ее следует рассматривать как центр всестороннего растяжения в непрерывной упругой среде. Напряжения и деформации вокруг такого центра убывают обратно пропорционально кубу расстояния от него.

Вакансии и атомы замещения могут находиться в любых узлах решетки, причем атомы замещения занимают места атомов основного металла.

Межузельный атом — это собственный атом, втиснувшийся между атомами, которые расположены в узлах кристаллической решетки.

Межузельные атомы и примесные атомы внедрения, расположенные между атомами основного металла, размещаются не в любом междоузлии, а преимущественно в таких пустотах, в которых для них имеется больше свободного пространства. В г. ц. к. и г. п. решетках это — тетраэдрические пустоты (см. § 11, п. 1).

В о. ц. к. решетке, как отмечалось в § 11, октапоры меньше тетрапор. Однако, углерод в α -Fe (о. ц. к. решетка) размещается именно в октапорах, что объясняется следующим.

Если внедряется атом с размером, превышающим размер пустоты, то он должен раздвинуть соседние атомы. При этом вокруг тетраэдрической пустоты сразу смещаются четыре атома в направлениях довольно плотной упаковки, что вызывает значительное перекрытие взаимноотталкивающихся электронных облаков. Вокруг октаэдрической пустоты при этом смещаются два атома вдоль ребра куба, т. е. вдоль направления с малой плотностью упаковки атомов. Поэтому примесные атомы внедрения

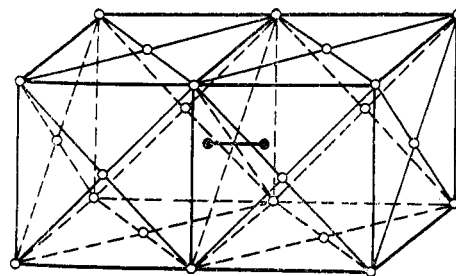


Рис. 91. Гантель [010] в г. ц. к. решетке, состоящая из двух атомов (отмечены черными кружками)

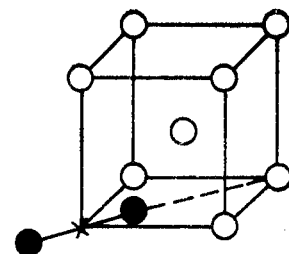


Рис. 92. Гантель $\langle 110 \rangle$ в о. ц. к. решетке

в о. ц. к. решетке могут легко размещаться в меньших по размеру октаэдрических пустотах.

Одиночный межузельный атом основного металла, размещаясь в центре самой большой пустоты, должен вызвать очень сильные смещения соседей. Например, в г. ц. к. решетке в наибольшие по размеру пустоты (октаэдрические) вписываются, как уже указывалось в § 11, сферы радиусом всего лишь 0,41 r.

Расчеты показывают, что вместо одиночного межузельного атома, находящегося в октаэдрической пустоте г. ц. к. решетки, энергетически более выгодна, стабильна конфигурация из двух межузельных атомов, называемая *расщеплением по $\langle 100 \rangle$ или гантелью $\langle 100 \rangle$* . На рис. 91 вместо атома, который должен помещаться в центре граней двух смежных ячеек, т. е. в нормальном узле, находятся два межузельных атома на направлении $\langle 100 \rangle$: атом в центре грани как бы расщепился на два межузельных атома, образовал гантель.

Следует подчеркнуть, что избыточным «лишним» здесь является один атом, а не два по концам гантели. Внедрение одного атома в междоузлие вызвало смещение соседа из узла решетки. В этом узле оказался центр гантельной конфигурации — середина расстояния между двумя смещенными атомами.

В о. ц. к. решетке наиболее устойчива по сравнению с одиночным межузельным атомом гантель $\langle 110 \rangle$: атом в вершине элементарной ячейки как бы «расщепляется» на два атома вдоль направления $\langle 110 \rangle$ (рис. 92).

Существование гантелей как основных конфигураций межузельных атомов и кристаллографическая ориентация их осей экспериментально установлены при изучении диффузного рассеяния рентгеновских лучей.

Лишний атом может создать также уплотненную цепочку атомов — *краудион* (рис. 93). В краудионе цепочка из $(n+1)$ атомов уместается на отрезке $a-b$, где в нормальном положении должны были бы находиться n атомов (шесть против пяти на рис. 93). Лишний атом как бы размазывается на этом отрезке.

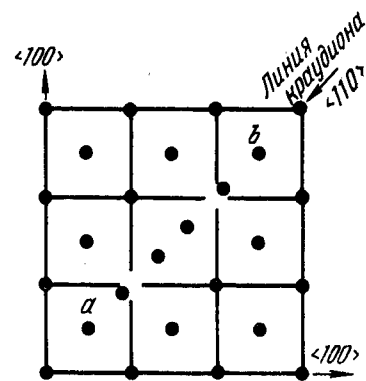


Рис. 93. Краудион $\langle 110 \rangle$ в г. ц. к. решетке

§ 15. Термодинамика точечных дефектов

Точечные дефекты повышают энергию кристалла, так как на образование каждого дефекта была затрачена определенная энергия. Точный расчет этой энергии затруднителен и должен учитывать несколько явлений, возникающих при образовании дефекта. Упругая деформация обуславливает очень малую до-

лю энергии образования вакансии (десятые доли электрон-вольта).

Основная доля энергии образования точечного дефекта связана с нарушением периодичности атомной структуры и сил связи между атомами. Точечный дефект в металле взаимодействует со всем электронным газом. Удаление положительного иона из узла равносильно внесению точечного отрицательного заряда; от этого заряда отталкиваются электроны проводимости, что вызывает повышение их энергии.

Теоретические расчеты показывают, что типичные значения энергии образования вакансий составляют около 1 эВ, а межузельных атомов 3—4 эВ.

Несмотря на увеличение внутренней энергии при образовании вакансий и межузельных атомов, кристалл в равновесном состоянии должен содержать определенное количество собственных точечных дефектов. На первый взгляд это кажется странным. Однако следует вспомнить, что равновесное состояние характеризуется не минимумом внутренней энергии, а минимумом

энергии Гельмгольца (при постоянном объеме) или энергии Гиббса (при постоянном давлении).

Энергия Гельмгольца $A = U - TS$. При образовании точечных дефектов возрастает внутренняя энергия кристалла U , но одновременно из-за роста энтропии S увеличивается и слагаемое TS . При определенной, характерной для данной температуры, концентрации собственных точечных дефектов рост энтропийного члена TS перекрывает увеличение внутренней энергии системы U , и энергия Гельмгольца оказывается пониженной из-за дефектов.

Выведем формулу для расчета равновесной концентрации вакансий. Для этого необходимо минимизировать энергию Гельмгольца относительно числа вакансий.

При введении n вакансий в кристалл энергия Гельмгольца изменится на величину $\Delta A = \Delta U - T\Delta S$. Обозначим энергию образования одной вакансии через E_0 . При условии, что число вакансий так мало, что они не взаимодействуют и E_0 не зависит от n , общее увеличение внутренней энергии кристалла при появлении в нем вакансий $\Delta U = nE_0$.

При введении вакансий в кристалл увеличение энтропии ΔS складывается из двух составляющих — *конфигурационной и колебательной энтропий*.

Как известно из курса физической химии, энтропия системы есть функция вероятности ее состояния: $S = k \ln W$, где k — константа Больцмана; W — число вероятных микросостояний или термодинамическая вероятность данного макросостояния. Если макросостояние задается температурой, давлением и объемом, то микросостояние зависит от положения, скорости и направления движения каждой частицы.

Точечные дефекты сильно увеличивают конфигурационную энтропию кристалла. Если идеальный кристалл состоит из N одинаковых атомов, то для него характерна только одна структурная конфигурация; если атомы поменять местами, то ничего не изменится, так как атомы одного сорта неразличимы.

Заменяв всего лишь один атом на вакансию, мы увеличиваем число возможных структурных конфигураций с 1 до N (вакансия может находиться в любом из N узлов решетки).

При увеличении числа вакансий резко возрастает число возможных способов их расположения по узлам решетки. При наличии N узлов решетки и n вакансий число способов их расположения (число структурных конфигураций) равно $N!/(N-n)!n!$. Из-за вакансий конфигурационная энтропия, называемая также энтропией смешения¹, возрастает на

$$\Delta S_{см} = k \ln [N!/(N-n)!n!]. \quad (26)$$

¹ Вакансии рассматривают как примесь в кристалле.

Вблизи точечных дефектов частота колебания атомов оказывается измененной. Например, вокруг вакансии соседи связаны менее жестко, упругие модули локально снижены, и частота колебаний атомов, окружающих вакансию, ниже. В результате увеличивается число вероятных микросостояний, и энтропия дополнительно возрастает. Обозначим колебательную энтропию при образовании одной вакансии через S_0 . При введении n вакансий в кристалл колебательная энтропия возрастает на nS_0 .

Таким образом, при образовании n вакансий общее увеличение энтропии $\Delta S = \Delta S_{\text{см}} + nS_0$, т. е.

$$\Delta S = k \ln [N!/(N-n)!n!] + nS_0. \quad (27)$$

Отсюда изменение энергии Гельмгольца

$$\Delta A = \Delta U - T\Delta S = nE_0 - T \{k \ln [N!/(N-n)!n!] + nS_0\}. \quad (28)$$

Чтобы избавиться от факториалов, используем приближенную формулу Стирлинга: $\ln x! = x \ln x - x$ (она очень точна при больших значениях x). Тогда

$$\Delta A = nE_0 - kT [N \ln N - (N-n) \ln (N-n) - n \ln n] - nTS_0. \quad (29)$$

Теперь для определения условия минимизации энергии Гельмгольца приравняем к нулю первую производную от ΔF по n :

$$\partial \Delta A / \partial n = E_0 - kT \ln [(N-n)/n] - TS_0 = 0.$$

Отсюда получаем

$$n/(N-n) = \exp(S_0/k) \exp(-E_0/kT).$$

Так как $N \gg n$, то можно написать

$$n/N = C_v = \exp(S_0/k) \exp(-E_0/kT), \quad (30)$$

где C_v — равновесная концентрация (атомная доля) вакансий. В формуле (30) сомножитель $\exp(S_0/k)$ близок к единице. Поэтому многие оценочные расчеты равновесной концентрации вакансий можно вести по упрощенной формуле, пренебрегая колебательной энтропией:

$$C_v = \exp(-E_0/kT). \quad (31)$$

Эта формула показывает, что концентрация вакансий должна сильно зависеть от температуры. Например, если энергия образования вакансии равна 1,1 эВ, то получим следующие расчетные величины концентрации вакансий:

T, K	300	700	1100	1350
C_v	10^{-19}	10^{-8}	10^{-5}	10^{-4}

Тот же вывод и конечные формулы справедливы для межузельных атомов.

Формула (31) для расчета равновесной концентрации собственных точечных дефектов проста, но количественные значения при ее использовании можно получить, только зная величину энергии образования дефекта. Рассчитать же теоретически эту величину, исходя из теории сил межатомной связи, трудно¹.

Поэтому при теоретическом расчете концентрации точечных дефектов приходится довольствоваться лишь приближенными оценками. Они дают очень важную информацию о точечных дефектах. Например, в плотных упаковках энергия образования вакансий в несколько раз меньше энергии образования межузельных атомов. Так как энергия образования дефекта входит в показатель степени, то это различие обуславливает громадную разницу в концентрации вакансий и межузельных атомов.

В плотных упаковках, характерных для большинства металлов, вакансии являются основными собственными точечными дефектами в условиях термодинамического равновесия.

Энергию образования вакансий E_0 можно приближенно оценить, исходя из эмпирического соотношения между E_0 и E_d — энергии активации самодиффузии, которая определяет температурную зависимость коэффициента диффузии

$$D = D_0 \exp(-E_d/kT). \quad (32)$$

У г. ц. к. металлов $E_0 \approx (0,5 \div 0,6) E_d$, а у о. ц. к. металлов $E_0 \approx (0,55 \div 0,65) E_d$.

Энергия активации самодиффузии приближенно пропорциональна температуре плавления металла $T_{\text{пл}}$. Известно эмпирическое соотношение $E_d/T_{\text{пл}} = 150$ Дж/(моль · К). С учетом изложенного можно сделать вывод, что при большой разнице в точках плавления более высокую энергию образования вакансий следует ожидать у более тугоплавкого металла. Это и понятно — значительная разница в температурах плавления означает различие в величине сил межатомной связи, а удаление атома из узла решетки требует полного или частичного разрыва межатомных связей.

§ 16. Миграция точечных дефектов

1. МИГРАЦИЯ ВАКАНСИЙ

Атомы, совершающие колебательное движение, непрерывно обмениваются энергией. Из-за хаотичности теплового движения энергия неравномерно распределена между разными атомами. В какой-то момент атом может получить от соседей такой

¹ Определив из прямых опытов концентрацию точечных дефектов, легко рассчитать по указанной формуле энергию их образования (см. § 20).

избыток энергии, что он займет соседнее положение в решетке, если оно свободно. Так осуществляется миграция (перемещение) вакансий в объеме кристаллов.

Если один из атомов, окружающих вакансию, переместится в вакантный узел, то вакансия соответственно переместится на его место. Последовательные элементарные акты перемещения определенной вакансии осуществляются разными атомами. На рис. 94 показано, что в слое плотноупакованных шаров (атомов) для перемещения одного из шаров на вакантное место он должен несколько раздвинуть шары 1 и 2 (или сжаться сам). Следовательно, для перехода из положения в узле, где энергия атома минимальна, в соседний вакантный узел, где энергия

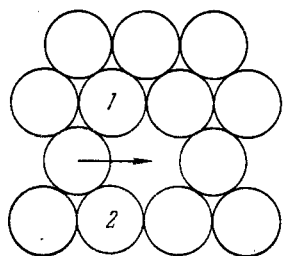


Рис. 94. Перемещение атома на вакантное место в слое плотнейшей упаковки

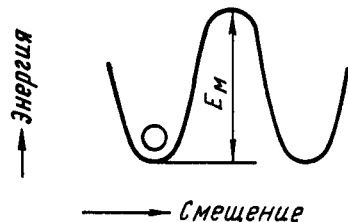


Рис. 95. Изменение энергии атома при перемещении его в вакантный узел

также минимальна, атом должен пройти через состояние с повышенной потенциальной энергией, преодолеть энергетический барьер (рис. 95). Для этого и необходимо атому получить от соседей избыток энергии, который он теряет, «протискиваясь» в новое положение. Высота энергетического барьера (см. рис. 95) называется *энергией миграции вакансии* E_M , а точнее — энергией активации миграции вакансии. При передвижении атома в вакантный узел смещение соседних атомов невелико и энергия миграции вакансии относительно небольшая.

В г. ц. к. металлах перевальное положение, соответствующее максимуму энергии, является серединой пути при смещении атома, движущегося к вакансии.

Частота перескоков в новое положение, совершаемых дефектом в 1 с

$$\Gamma = \nu_0 \exp(S_M/k) \exp(-E_M/kT), \quad (33)$$

где ν_0 — частота колебаний в направлении перевальной точки, т. е. «частота попыток» перехода в соседний узел ($\sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$); S_M — энтропия миграции вакансий.

В случаях, когда вакансионный механизм диффузии — главный, коэффициент самодиффузии пропорционален concentra-

ции и подвижности вакансий, а энергия активации самодиффузии E_D равна сумме энергий образования и миграции вакансий:

$$E_D = E_0 + E_M. \quad (34)$$

Справедливость формулы (34) подтверждается сопоставлением экспериментальных значений $(E_0 + E_M)$ и E_D в табл. 15 (все результаты определения E_0 , E_M и E_D получены в независимых экспериментах).

Т а б л и ц а 15. Экспериментальные значения энергии E_0 и энтропии S_0 образования моновakanсий, энергии активации миграции моновakanсий E_M и энергии активации самодиффузии E_D в разных металлах

Металл	E_0 , эВ	S_0/k	E_M , эВ	$E_0 + E_M$, эВ	E_D , эВ
Г. ц. к. решетка					
Au	0,95	0,7	0,83	1,78	1,76
Ag	1,13	1,5	0,66	1,79	1,76
Cu	1,28	2,4	0,71	1,99	2,07
Al	0,67	0,7	0,62	1,29	1,28
Pt	1,51	—	1,43	2,94	2,9
О. ц. к. решетка					
α -Fe	1,4	—	1,24	2,64	2,6
W	$\sim 3,6$	2	1,7	$\sim 5,3$	$\leq 5,7$
Mo	$\sim 3,2$	—	1,3	$\sim 4,5$	$\sim 4,5$

2. МИГРАЦИЯ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ АТОМОВ

Механизм миграции гантельной конфигурации межузельного атома из исходного положения 1—2 в новое положение 5—6 показан на рис. 96. В миграции гантели в соседнее положение участвуют три атома: атомы 1 и 2 исходной гантельной конфигурации и атом из исходного нормального положения в узле 3. Гантельный атом 1 смещается в ближайший узел решетки 4, а атомы 2 и 3 — в положения 5 и 6, свойственные новой гантели. При этом ось гантели $\langle 100 \rangle$ в г. ц. к. решетке поворачивается на 90° .

Краудионная конфигурация межузельного атома (см. рис. 93) должна легко передвигаться вдоль оси краудиона путем эстафетных перемещений атомов.

Расчеты показали, что энергия активации миграции гантели в г. ц. к. металлах по механизму, изображенному на рис. 96, составляет около 0,1 эВ. Экспериментальные значения находятся в интервале 0,01 (Pb)—0,15 эВ (Ni). Эти величины намного меньше энергии активации миграции вакансий (ср. с величинами E_M в табл. 15). В о. ц. к. металлах в общем положение аналогичное.

Следует отметить, что гантели очень подвижны даже при температурах ниже 100 К, когда подвижность вакансий резко уменьшена. Но это совсем не означает, что в процессах самодиффузии, т. е. перемещения атомов металла в своей решетке, основным является механизм миграции межузельных атомов. Из-за высокой энергии образования межузельных атомов их равновесная концентрация несоизмеримо мала по сравнению с равновесной концентрацией вакансий, которые и играют главную роль в процессах самодиффузии, особенно при температурах выше комнатной.

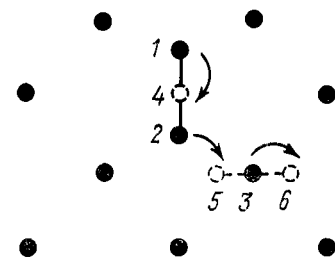


Рис. 96. Миграция гантели $\langle 100 \rangle$ из положения 1—2 в положение 5—6 в г. ц. к. решетке

нахождения вакансии рядом с атомом примеси безусловно меньше, чем вероятность пребывания вакансии рядом с атомом основного металла.

Маленькие атомы примесей внедрения в отличие от больших межузельных атомов могут интенсивно мигрировать в решетке, так как при их перемещении из одной пустоты в соседнюю требуется, чтобы соседние атомы немного раздвинулись. Особенно легко мигрируют маленькие атомы примесей внедрения в о. ц. к. решетке. В § 14 отмечалось, что в о. ц. к. решетке октаэдрические и тетраэдрические пустоты не сильно различаются между собой по энергии внедренных атомов. Поэтому и диффузия примесей внедрения здесь идет быстро, так как атомы могут непрерывно переходить из пустоты одного типа в соседнюю пустоту другого типа, в то время как в г. ц. к. решетке одна октаэдрическая пустота отделена от другой октаэдрической пустоты плотной упаковкой атомов.

Внедренные атомы примесей могут диффундировать по междоузлиям быстрее, чем атомы основного металла, перемещающиеся с помощью вакансионного механизма. Около каждого внедренного атома всегда имеется несколько пустот, куда он может переместиться, а атому железа для диффузии необходимо каждый раз ждать, когда рядом с ним окажется вакансия. Именно поэтому железо диффундирует в стали намного медленнее углерода, мигрирующего по междоузлиям.

3. МИГРАЦИЯ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ

Атомы примесей замещения мигрируют с помощью *вакансионного механизма* так же, как и атомы основного металла. Однако соответствующие элементарные акты миграции совершаются в этом случае значительно реже, ибо вероятность

§ 17. Источники и стоки точечных дефектов

Вакансии образуются: а) в результате флуктуаций энергии при хаотичном тепловом движении атомов; б) при пластической деформации; в) при ядерном облучении металлов, а также при других процессах.

Тепловые вакансии образуются по механизму *Шоттки*: атом поверхностного слоя, приобретая избыток энергии от соседей, испаряется из кристалла или, что еще легче, переходит в адсорбционный слой (рис. 97). В последнем случае не происходит полного разрыва всех межатомных связей. Через некоторое время на место ушедшего атома поверхностного слоя переходит соседний атом из более глубокого слоя и т. п. Таким путем образуется вакансия, переходящая в глубь кристалла. Кристалл как бы растворяет пустоту. Источниками тепловых вакансий являются, таким образом, свободные поверхности кристалла, а также пустоты и трещины внутри него. Другие мощные источники тепловых вакансий — границы зерен и дислокации.

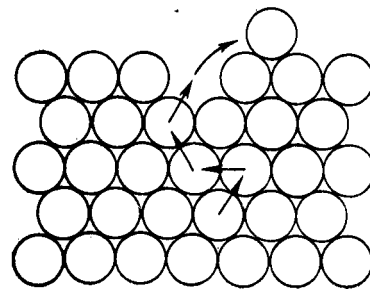


Рис. 97. Образование вакансии по механизму Шоттки

При пластической деформации движение дислокаций с порогами приводит к образованию неравновесного избытка вакансий (см. § 48). Вакансии могут образовываться при аннигиляции краевых дислокаций противоположного знака (см. ниже рис. 139).

При облучении металлов частицами с большой энергией (электронами или нейтронами) атомы выбиваются из узлов решетки, в результате чего образуется *френкелевская пара* (*дефект Френкеля*) — межузельный атом и вакансия.

Свободные поверхности, границы зерен и дислокации служат источниками вакансий, пока кристалл еще не насыщен ими. Если же кристалл пересыщен вакансиями, например при закалке (см. § 19), то эти источники могут действовать как стоки — места, куда мигрируют (стекают) вакансии и где они исчезают. Вакансия и межузельный атом могут аннигилировать при встрече. Но такая комбинация дефектов происходит крайне редко, так как очень мала концентрация межузельных атомов (исключение — облученные металлы, содержащие большое количество межузельных атомов).

§ 18. Комплексы точечных дефектов

При взаимодействии между собой точечные дефекты одного или разных видов могут объединяться в пары и более крупные комплексы, называемые также *кластерами*.

1. ВАКАНСИОННЫЕ КОМПЛЕКСЫ

При случайных столкновениях одиночных вакансий они могут объединяться в пары (*дивакансии*). При этом уменьшается их суммарная поверхность и соответствующий выигрыш в поверхностной энергии обеспечивает устойчивость спаренной вакансии.

Энергию образования дивакансии можно оценить следующим путем. Если удалить атом, являющийся в плотной упаковке соседом изолированной вакансии, то образуется дивакансия. Число разрываемых связей на одну меньше, чем при образовании одиночной вакансии. Следовательно, энергия образования дивакансии меньше, чем двух одиночных вакансий. Разность между суммарной энергией образования двух изолированных вакансий и энергией образования дивакансии — это энергия связи в дивакансии $E_{св}$. Отсюда энергия образования дивакансии равна $(2E_0 - E_{св})$. Зная эту энергию, можно рассчитать равновесную концентрацию дивакансий C_2^* , используя тот же термодинамический расчет, что и в § 15:

$$C_2 = (z/2) \exp [-(2E_0 - E_{св})/kT], \quad (35)$$

где z — координационное число.

Отсюда

$$C_2 = (z/2) \exp (-2E_0/kT) \exp (E_{св}/kT). \quad (36)$$

Выражение $\exp (-2E_0/kT)$, согласно формуле (31), представляет квадрат равновесной концентрации моновакансий. Таким образом, из равенства (36) с учетом формулы (31) получаем, что равновесная концентрация дивакансий связана с равновесной концентрацией моновакансий следующим соотношением:

$$C_2 = 1/2zC_1^2 \exp (E_{св}/kT). \quad (37)$$

Энергия связи у дивакансий в разных металлах колеблется от 0,06 до 0,5 эВ.

Так как $(2E_0 - E_{св}) > 0$, то в соответствии с формулой (35) равновесная концентрация дивакансий растет с повышением температуры. Из формул (31) и (35) легко получить, что

$$C_2/C_1 = A \exp [-(E_0 - E_{св})/kT]. \quad (38)$$

Так как $E_0 > E_{св}$, то с повышением температуры отношение равновесной концентрации дивакансий к концентрации моновакансий растет. Однако и при температурах вблизи точки плавления в г. ц. к. металлах в условиях термодинамического равновесия не более 20 % общего числа вакансий связаны в дивакансии. Следующие расчетные данные показывают, как сильно, по экспоненте, возрастает отношение C_2/C_1 с повыше-

нием температуры (расчет сделан для $E_0 = 1$ эВ и $E_{св} = 0,3$ эВ): при 300 К $1,6 \cdot 10^{-10}$, при 1000 К $4 \cdot 10^{-6}$, при 1200 К $2,9 \cdot 10^{-2}$. При температурах вблизи комнатной в условиях термодинамического равновесия существованием дивакансий можно пренебречь. Роль дивакансий возрастает, если кристалл пересыщен закалочными вакансиями (см. § 19).

Соотношение между C_2 и C_1 легко также получить, если рассматривать образование дивакансии V_2 из моновакансий V_1 как химическую реакцию $V_1 + V_1 = V_2$. В соответствии с законом действующих масс $C_2 = KC_1^2$, где K — константа равновесия. Из сопоставления этой формулы и выражения (37) следует, что константа равновесия

$$K = 1/2z \exp (E_{св}/kT). \quad (39)$$

Расчет показывает, что энергия миграции дивакансий примерно вдвое меньше, чем моновакансий, и дивакансии оказываются более подвижными. Из сравнения плоской схемы на рис. 98 со схемой на рис. 94 видно, что при переходе одного из атомов в дивакансию нет тех затруднений (такого потенциального барьера), как при переходе атомов в моновакансию. Дивакансия легко мигрирует путем поочередного перехода в нее одного из соседних атомов. Например, атом 3 перейдет в положение 1 и дивакансия окажется в положении 2, 3. Затем атом 4 перейдет в положение 2 и дивакансия сместится в положение 3, 4 и т. д. Считают, что дивакансии вносят заметный вклад в диффузионные процессы благодаря своей большой подвижности.

Еще более подвижны тривакансии. Так, например, энергия активации миграции моно-, ди- и тривакансий в золоте составляет 0,83; 0,70 и 0,53 эВ соответственно.

Установлено, что в г. ц. к. решетке энергетически выгодно образоваться комплексу из четырех вакансий по вершинам тетраэдра, в центре которого имеется атом, попавший сюда при небольшом перемещении из узла решетки, находящегося в одной из вершин тетраэдра. Такой комплекс из четырех вакансий конечно включает тривакансию как одну из граней тетраэдра (рис. 99). Для миграции указанного комплекса необходим возврат атома из центра тетраэдра в свободный узел на его вершине и перемещение в центр тетраэдра другого соседнего атома. Вследствие такого сложного процесса *тетраэдрический комплекс* из четырех вакансий рассматривается как практически неподвижный. Таким образом, когда вакансии встречаются с дивакансиями, образуя в конечном итоге тетраэдрические комплексы, они закрепляются на месте, перестают быть подвижными.

Рассмотренные комплексы в принципе могут служить центрами «конденсации» других вакансий, образуя таким путем вакансионные поры — крупные скопления вакансий.

* Здесь и ниже индекс 2 будет обозначать дивакансии, а индекс 1 — моновакансии.

Если учитывать только стремление к уменьшению поверхностной энергии, то следовало бы сделать вывод, что все вакансии должны слиться вместе в одну пустоту. Но это невероятно, так как такой переход от беспорядка к порядку в решетке должен был бы сопровождаться резким уменьшением энтропии. Вопрос об объединении большого числа вакансий очень сложен и пока не решен.

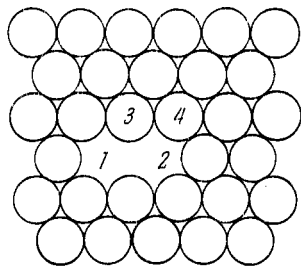


Рис. 98. Дивакансия в слое плотнейшей упаковки

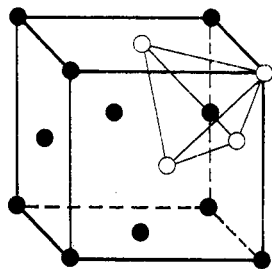


Рис. 99. Тетраэдрический комплекс вакансий (белые кружки) в г.ц.к. решетке. В центре комплекса находится атом

2. КОМПЛЕКСЫ СОБСТВЕННЫХ ДЕФЕКТ — ПРИМЕСНЫЙ АТОМ

Вакансии и межузельные атомы могут образовывать устойчивые комплексы с атомами растворенного элемента (примеси или добавки). Такое взаимодействие обусловлено, во-первых, упругим притяжением и, во-вторых, уменьшением энергии из-за перераспределения электронов.

Упругое притяжение атома растворенного элемента к вакансии или гантели обусловлено частичной взаимной компенсацией упругих деформаций разного знака вокруг точечных дефектов разного вида. Так, например, взаимное упругое притяжение вакансии и примесного атома — это результат того, что пустота, оказавшись вблизи примесного атома, частично компенсирует поле упругой деформации вокруг него.

Электронную составляющую энергии связи комплекса вакансия — примесный атом и соответственно абсолютные значения этой энергии очень сложно оценить чисто расчетными способами. Косвенными методами определены для энергии связи вакансий с разными атомами значения в интервале 0,01—0,3 эВ. Можно ожидать, что элементы, малорастворимые в данном металле в твердом состоянии, будут характеризоваться более высокими значениями энергии связи с вакансиями по сравнению с элементами, образующими широкие области твердых растворов. Это вытекает из того, что атомы малорастворимых элементов вносят сильные искажения в решетку растворителя, и когда

рядом с таким атомом оказывается вакансия, то искажение релаксирует, обуславливая повышенную энергию связи вакансии с примесным атомом.

Равновесная концентрация комплексов вакансия — примесный атом в случае разбавленных растворов замещения

$$C_k = AzC_n \exp [-(E_0 - E_{св})/kT], \quad (40)$$

где A — энтропийный фактор; C_n — концентрация примеси (в атомных долях); E_0 — энергия образования моновакансии; $E_{св}$ — энергия связи вакансии с примесным атомом. Чем выше температура и больше энергия связи $E_{св}$, тем выше равновесная концентрация комплексов вакансия — примесный атом.

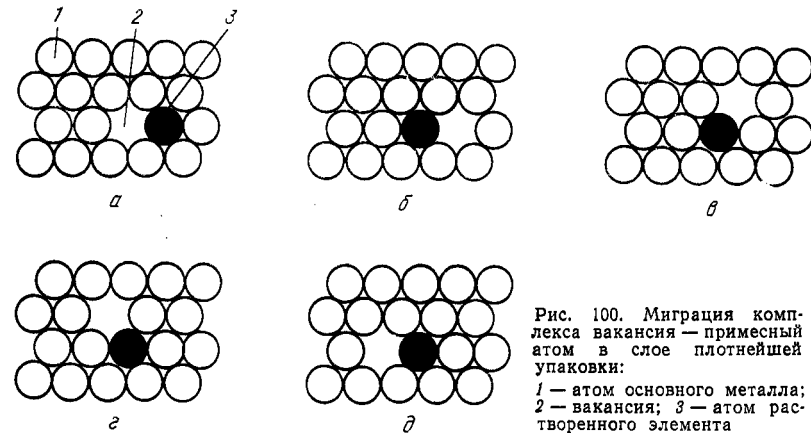


Рис. 100. Миграция комплекса вакансия — примесный атом в слое плотнейшей упаковки: 1 — атом основного металла; 2 — вакансия; 3 — атом растворенного элемента

Комплекс вакансия — примесный атом значительно более подвижен, чем атом того же элемента, не имеющий «приписанной» к нему вакансии. Такой атом-одиночка мигрирует в кристалле, перескакивая в вакантный узел, когда тот случайно оказывается рядом. В комплексе же всегда рядом с растворенным атомом находится «своя» вакансия.

При обмене местами растворенного атома и вакансии внутри комплекса сам комплекс остается неподвижным — растворенный атом смещается только на одно межатомное расстояние (рис. 100, а, б). Комплекс может мигрировать на сколько угодно большие расстояния только при участии в его движении соседних атомов основного металла, обменивающихся местами с вакансией, которая все время остается связанной со «своим» растворенным атомом (рис. 100, в, г, д). Чередование обмена местами вакансии и растворенного атома внутри комплекса и обменов местами вакансии комплекса и соседних атомов основного металла при непрерывном участии одной вакансии в этих обменах обуславливает быструю миграцию атомов растворенного элемента.

Образование комплексов атом растворенного элемента — вакансия играет важную двойную роль: во-первых, обеспечивается быстрая диффузия атомов этого растворенного элемента и, во-вторых, уменьшается доля свободных вакансий и соответственно их участие в других диффузионных процессах.

Вакансии, образующие с атомами растворенных элементов устойчивые комплексы, называют *примесными* в отличие от свободных *тепловых вакансий*.

Комплекс межузельный атом — примесный атом проще всего представить в виде смешанной гантельной конфигурации: на одном конце гантели находится атом основного металла, а на другом — атом примеси замещения. Энергетическая устойчивость такой смешанной пары обуславливает захват примесью межузельного атома.

§ 19. Поведение вакансий при закалке и отжиге

1. ЗАКАЛКА

С понижением температуры равновесная концентрация вакансий уменьшается по экспоненциальному закону (31). При закалке этот процесс не успевает пройти, и фиксируется избыточная концентрация вакансий — металл пересыщается ими. Большой избыток вакансий может возникнуть при обычной закалке в воде.

В период закалки в условиях пересыщения вакансиями они склонны к образованию дивакансий. Расчет показывает, что если энергия связи дивакансии составляет более 0,3 эВ, то в период закалки более 50 % вакансий превращаются в дивакансии.

При закалке с высоких температур, когда вакансии в первый период охлаждения еще достаточно подвижны, они могут объединяться и в более крупные стабильные скопления. В частности, могут образовываться диски вакансий диаметром около 10 нм, при захлопывании которых рождаются дислокации (см. в § 27). В г. ц. к. металлах плоские поверхности дисков являются плоскостями {111}, так как эти плоскости плотнейшей упаковки обладают низкой поверхностной энергией.

При закалке могут образовываться также трехмерные агрегаты вакансий — микропустоты радиусом в несколько десятков нанометров. Такие пустоты — не сферические, и имеют кристаллографическую огранку: в г. ц. к. металлах они представляют собой октаэдры с ребрами вдоль направлений $\langle 110 \rangle$, а в г. п. металлах они окружены плоскостями призм и пирамиды. Образованию рассматриваемых микропустот способствуют более медленное закалочное охлаждение и присутствие атомов газов в твердом растворе, например водорода в меди. Образующиеся при закалке микропустоты — это не обычные газовые поры.

Очень немного атомов газовой примеси требуется только для зарождения пустот, а рост их обусловлен присоединением закалочных вакансий, которыми пересыщена решетка.

Моновакансии и еще более подвижные дивакансии в условиях пересыщения в период закалки устремляются к стокам — границам зерен, дислокациям и др., около которых концентрация вакансий в закаленном металле оказывается пониженной. Вдали от стоков решетка закаленного металла пересыщена вакансиями (рис. 101). Часть вакансий при охлаждении захватывается атомами примесей.

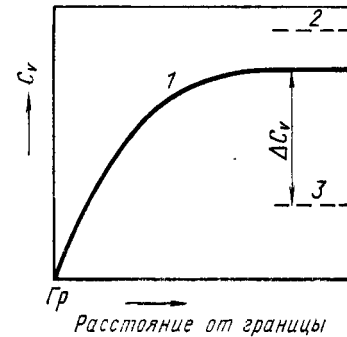


Рис. 101. Распределение вакансий по сечению зерна вблизи его границы G_p сразу после закалки (1), равновесная концентрация вакансий при температуре закалки (2) при комнатной температуре (3); ΔC_v — пересыщение закалочными вакансиями

2. ОТЖИГ

Если металл, пересыщенный вакансиями, нагреть, то благодаря сильному повышению подвижности вакансий весь их неравновесный избыток может исчезнуть в разного рода стоках. Такими стоками могут быть внешняя поверхность образца, границы зерен, дислокации, вакансионные кластеры. Возможна также аннигиляция вакансий при встрече их с межузельными атомами. Процесс исчезновения дефектов из пересыщенного ими металла называют отжигом.

Если принять, что число стоков постоянно, а сами стоки имеют неограниченную емкость, то зависимость концентрации вакансий от времени отжига подчиняется известному уравнению химической реакции первого порядка:

$$-dC_v/dt = KC_v, \quad (41)$$

где C_v — концентрация вакансий в момент времени t .

Константа скорости «реакции»

$$K = \alpha D, \quad (42)$$

где D — коэффициент самодиффузии, а α зависит от геометрии стока. Если стоком для вакансий является только внешняя поверхность образца и в одном из измерений линейный размер образца L намного меньше, чем в других (тонкая проволока), то α будет порядка $1/L^2$.

В условиях пересыщения вакансиями энергия активации диффузии в формуле (32) определяется только энергией миграции вакансий, т. е. $E_d = E_m$ [в отличие от формулы (34)]. Таким образом:

$$-dC_v/dt = C_v \alpha D_0 \exp(-E_m/kT). \quad (43)$$

Чтобы получить зависимость концентрации вакансий от времени отжига, проинтегрируем уравнение (41), взяв в качестве пределов $C_v = C_{v_0}$ при $t=0$ и C_v при $t=t$. Получаем $-\int_{C_{v_0}}^{C_v} \frac{dC_v}{C_v} =$

$$= \int_0^t K dt.$$

Отсюда

$$\ln(C_{v_0}/C_v) = Kt$$

и

$$C_v = C_{v_0} \exp(-Kt). \quad (44)$$

Следовательно, концентрация вакансий экспоненциально уменьшается при увеличении времени отжига. Из уравнения (44) следует, что $\ln C_v = \ln C_{v_0} - Kt$, и в координатах $\ln C_v - t$ получаем прямую. В действительности же закономерности изменения концентрации вакансий при отжиге после закалки металла более сложные из-за непостоянства числа стоков во время отжига, рекомбинации вакансий и межузельных атомов, образования комплексов вакансия—примесный атом, дивакансий и вакансионных кластеров.

Закалку металла, при которой решетка пересыщается вакансиями, часто называют закалкой вакансий, а отжиг металла после такой закалки — отжигом вакансий. Эти термины неточные, так как фактически закаливают и отжигают металл, а не вакансии. Закалку металла для получения избытка вакансий не следует смешивать с обычной закалкой, для проведения которой необходимо, чтобы были возможны фазовые превращения в сплаве.

§ 20. Методы определения концентрации вакансий, энергии их образования и миграции

1. КОНЦЕНТРАЦИЯ ВАКАНСИЙ И ЭНЕРГИЯ ИХ ОБРАЗОВАНИЯ

Удельный объем и соответственно длина образца возрастают с увеличением концентрации вакансий. Вакансии рассеивают электроны проводимости, обуславливая добавочное электросопротивление. Измерение этих свойств чаще всего и используют для определения концентрации вакансий.

Все методы определения концентрации вакансий можно подразделить на две группы: исследование металла в условиях термодинамического равновесия при разных температурах и исследование закаленного металла, пересыщенного вакансиями.

1. Первые прямые и точные определения равновесной концентрации вакансий были выполнены методом параллельного измерения изменений длины образца и периода кристаллической решетки при нагревании.

При рентгеноструктурном анализе измеряют среднее увеличение межатомных расстояний с ростом температуры; длина же образца при нагревании возрастает вследствие этого, а также из-за увеличения числа узлов решетки. Разность между относительным приростом длины $\Delta L/L$ и относительным увеличением периода решетки $\Delta a/a$ (рис. 102), умноженная на 3 для перехода к объему, равна равновесной концентрации $\frac{\Delta L}{L}, \frac{\Delta a}{a} (\cdot 10^3)$ вакансий:

$$C_v = 3(\Delta L/L - \Delta a/a). \quad (45)$$

Зная равновесную концентрацию вакансий при разных температурах, по формулам (30) и (31) легко вычислить энергию их образования.

Если бы главными точечными дефектами были межузельные атомы, то при нагревании из-за уменьшения числа узлов решетки разность $(\Delta L/L - \Delta a/a)$ должна была бы быть отрицательной, чего в экспериментах с металлами никогда не наблюдалось. Это указывает на то, что в условиях термодинамического равновесия концентрация межузельных атомов несравненно меньше концентрации вакансий.

Так как абсолютные величины концентрации вакансий очень малы, то точность экспериментов по установлению разницы $(\Delta L/L - \Delta a/a)$ должна быть чрезвычайно высокой. В настоящее время величину $\Delta L/L$ можно измерить с точностью до 10^{-7} , однако точность рентгеновского измерения $\Delta a/a$ не превышает $5 \cdot 10^{-5}$. Следовательно, рассматриваемым методом можно определять концентрации вакансий $C_v > 5 \cdot 10^{-5}$. Такие концентрации тепловых вакансий в условиях термодинамического равновесия наблюдаются в интервале температур недалеко от точки плавления (см. рис. 102). Этим обусловлен недостаток метода, так как при высоких температурах становится существенной доля дивакансий, влияющих на результаты измерений.

В последние годы для определения равновесной концентрации вакансий и энергии их образования все большее распространение получает спектроскопия аннигиляции позитронов. Являясь античастицами, позитрон при встрече

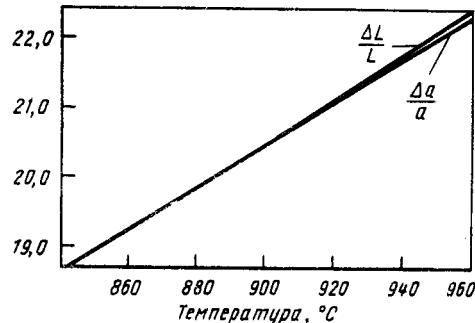


Рис. 102. Изменение длины образца $\Delta L/L$ и периода решетки $\Delta a/a$ при термическом расширении серебра

с электроном аннигилирует с образованием фотонов. Позитроны с высокой энергией, испускаемые радиоактивным источником, например ^{22}Na , направляются в исследуемый образец, где через определенное время аннигилируют. Процесс аннигиляции изучают с помощью детекторов фотонов.

С ростом температуры исследуемого металла время жизни позитронов в нем возрастает. Это объясняется тем, что с ростом температуры увеличивается концентрация вакансий, а позитроны захватываются вакансиями. Так как вблизи вакансий электронная плотность понижена, то время жизни позитронов, захваченных вакансиями и аннигилирующих в них, на 20—80 % больше, чем позитронов, аннигилирующих в решетке (вдали от вакансий). Концентрацию вакансий при разных температурах вычисляют из данных о времени жизни позитронов.

Благодаря высокой чувствительности к присутствию вакансий метод спектроскопии аннигиляции позитронов пригоден для определения изменений равновесной концентрации моновакансий в области таких малых значений C_v , когда образование дивакансий можно пренебречь. Этот метод является хорошим дополнением к методу расчета концентрации вакансий по формуле (45).

2. Закалочные эксперименты — это другой способ определения характеристик вакансий. Избыточная концентрация «замороженных» при закалке вакансий дает прирост электросопротивления $\Delta\rho_v$, прямо пропорциональный этой концентрации. При комнатной температуре прирост электросопротивления, обусловленный закалочными вакансиями, составляет лишь сотые доли от общей величины измеряемого электросопротивления закаленного образца. Поэтому измерения проводят при температуре жидкого гелия (4,2 К), когда величина $\Delta\rho_v$ составляет основную долю от общего электросопротивления¹.

Если знать точную величину прироста электросопротивления в расчете на 1 % (ат.) вакансий, то по значению $\Delta\rho_v$ легко оценить C_v . Для золота указанная величина составляет 1,7 мкОм × см на 10 % (ат.) вакансий.

Поскольку теоретические оценки $\Delta\rho_v$ не обладают приемлемой точностью, то концентрацию вакансий приходится рассчитывать, определив сначала энергию их образования E_0 следующим путем.

Если прирост электросопротивления $\Delta\rho_v$ прямо пропорционален концентрации закалочных вакансий, то с ростом температуры закалки он должен изменяться по экспоненте:

$$\Delta\rho_v = A \exp(-E_0/kT_{\text{зак}}). \quad (46)$$

Отсюда получаем

$$\ln \Delta\rho_v = \ln A - (E_0/k) 1/T_{\text{зак}}. \quad (47)$$

По тангенсу угла наклона прямой в координатах $\ln \Delta\rho_v - 1/T_{\text{зак}}$ определяют E_0 , а по значению E_0 , используя формулу (31), рассчитывают C_v при разных температурах.

Преимущество закалочных экспериментов — высокая точность измерения электросопротивления при низкой темпера-

туре. Возможные недостатки — искажение результатов из-за образования комплексов и стока вакансий на поверхность образца, в границы зерен и дислокации в период закалочного охлаждения.

Можно с большой уверенностью считать, что вклад в прирост электросопротивления от дивакансии равен удвоенному, а вклад от тривакансии — утроенному вкладу от моновакансии. Поэтому образование дивакансий и тривакансий при закалке не должно сказаться на результатах определения концентрации вакансий резистометрическим методом.

Сток вакансий во время закалочного охлаждения (см. рис. 101) приводит к занижению $\Delta\rho_v$. Потери вакансий возрастают с повышением температуры нагрева под закалку и уменьшением скорости охлаждения. Скорость охлаждения следует выбирать такой, чтобы ее изменение не влияло на величину $\Delta\rho_v$. Температуру закалки можно снизить, повысив точность измерения $\Delta\rho_v$. Современная резистометрия позволяет определить концентрацию вакансий, начиная от 10^{-7} .

В тщательно поставленных экспериментах результаты определения характеристик вакансий разными методами хорошо согласуются.

В заключение приведем результаты определения по формуле (45) равновесной концентрации вакансий вблизи точки плавления металлов:

Металл	Au	Ag	Cu	Al	Pb	Li	Na	Mg	Cd
$C_v \cdot 10^4$	7,2	1,7	2,0	9,4	1,7	4,4	7,5	7,2	4,5

Эти данные показывают, что равновесная концентрация вакансий вблизи точки плавления разных металлов составляет величину порядка 10^{-4} — 10^{-3} , т. е. 0,01—0,1 % (ат.).

2. ЭНЕРГИЯ АКТИВАЦИИ МИГРАЦИИ ВАКАНСИЙ

Энергию активации миграции вакансий E_m определяют, анализируя кинетику изменения электросопротивления при отжиге после закалки. При этом предполагают, что падение электросопротивления ρ пропорционально снижению концентрации вакансий C_v , т. е. $d\rho/dt \sim dC_v/dt$ (t — время отжига).

Если за снижение электросопротивления ответствен единственный термоактивированный процесс с постоянной энергией активации, которую можно принять за энергию активации миграции вакансий E_m , то скорость падения электросопротивления

$$d\rho/dt = -f(\rho) K_0 \exp(-E_m/kT), \quad (48)$$

где $\exp(-E_m/kT)$ — фактор Больцмана, K_0 — некоторый кинетический коэффициент, а функция $f(\rho)$ дает поправку на изменение типа и числа вакансионных стоков во время отжига. В случае $f(\rho) = \rho$ выражение (48) идентично уравнению (41), т. е. описывает реакцию первого порядка при постоянстве стоков.

Метод скачкообразного повышения температуры отжига состоит в следующем. Вначале следят за изменением электросопротивления закаленного образца при температуре отжига T_1 , а затем — после резкого повышения температуры до T_2 (рис. 103). Можно принять, что при резком изменении

¹ Возможны измерения и при температуре жидкого азота (78 К).

температуры отжига тип и число стоков, т. е. функция $f(\rho)$ в формуле (48), останутся неизменными. Тогда

$$(d\rho/dt)_{T_1} = -A \exp(-E_m/kT_1), \quad (d\rho/dt)_{T_2} = -A \exp(-E_m/kT_2),$$

где $A = \text{const.}$

Отсюда

$$(d\rho/dt)_{T_1} / (d\rho/dt)_{T_2} = \exp[-(E_m/k) \times (1/T_1 - 1/T_2)]. \quad (49)$$

По наклону двух касательных в точке перелома на рис. 103 определяют соотношение истинных скоростей изменения электросопротивления при двух температурах и по формуле (49) рассчитывают значение энергии активации миграции вакансий E_m .

Простой способ определения энергии миграции вакансий основан на использовании формулы (34): если из экспериментов известны энергия активации диффузии E_d и энергия образования вакансии E_0 , то их разность равна E_m .

Экспериментально определенные характеристики моновakanсий представлены в табл. 15.

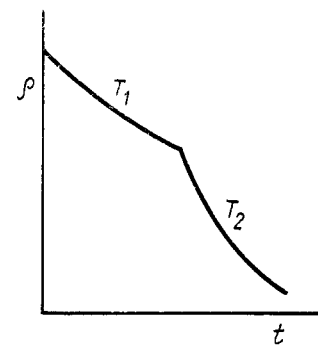


Рис. 103. Зависимость электросопротивления ρ закаленного металла от времени отжига t при температурах T_1 и после резкого подъема температуры отжига до T_2

Глава IV ОСНОВНЫЕ ТИПЫ ДИСЛОКАЦИЙ И ИХ ДВИЖЕНИЕ

Дислокации принадлежат к линейным несовершенствам кристалла. Как будет показано ниже, дислокации являются особым типом несовершенств в решетке, резко отличным по своей природе от других, в том числе и линейных, несовершенств. Первоначально представления о дислокациях были введены в физику кристаллов (Орован, Поляни, Тэйлор, 1934 г.) для того, чтобы объяснить несоответствие между наблюдаемой и теоретической прочностью и описать атомный механизм скольжения при пластической деформации кристаллов. Впоследствии теория дислокаций получила широкое развитие и стала применяться для анализа самых разнообразных явлений в металлах и сплавах. При этом если на первых этапах развития этой теории представления о дислокациях были чисто гипотетическими, то затем были получены прямые доказательства их существования, а в настоящее время используются разнообразные экспериментальные методы изучения дислокаций в металлах и сплавах.

§ 21. Краевая дислокация

Наиболее простой и наглядный способ введения дислокаций в кристалл — сдвиг. Поэтому ниже он взят за основу при рассмотрении многих аспектов теории дислокаций. Другие пути возникновения дислокаций рассматриваются в гл. IX.

На рис. 104 показан параллелепипед, верхняя часть которого сдвинута относительно нижней на одно межатомное расстояние, причем зафиксировано положение, когда сдвиг охватил не всю плоскость скольжения от правой грани параллелепипеда до левой, а лишь часть плоскости скольжения. $ABCD$ — участок плоскости скольжения, в котором произошел сдвиг; AB — граница этого участка.

На рис. 105 для случая примитивной кубической решетки показан разрез параллелепипеда по атомной плоскости, перпендикулярной линии AB на рис. 104. В этом сечении кристалл имеет n вертикальных атомных плоскостей. В результате по-

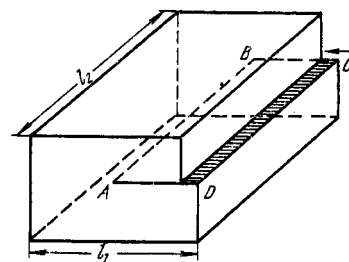


Рис. 104. Сдвиг, создавший краевую дислокацию AB . Стрелка — вектор сдвига (l_1 и l_2 — длина и ширина кристалла соответственно)

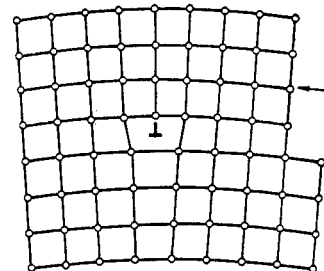


Рис. 105. Краевая дислокация в примитивной кубической решетке. Стрелка — вектор сдвига

казанного на рис. 104 сдвига на одно межатомное расстояние n вертикальных атомных плоскостей, расположенных выше плоскости скольжения, оказываются напротив $(n-1)$ вертикальных атомных плоскостей, расположенных ниже плоскости скольжения (на рис. 105 — девять против восьми). Одна вертикальная атомная плоскость в верхней половине кристалла уже не имеет продолжения в нижней половине кристалла. Такую «лишнюю», неполную атомную плоскость называют *экстраплоскостью*.

Можно представить и другой путь появления экстраплоскости: мысленно расщепить кристалл по вертикали сверху вниз до половины высоты и вставить в него сверху лишний атомный слой.

Лишний атомный слой (экстраплоскость) действует как клин, изгибая решетку вокруг своего нижнего края внутри кристалла (см. рис. 105). Наиболее существенно то, что в некоторой области непосредственно вблизи края экстраплоскости внутри кристалла решетка сильно искажена. Выше края экстраплоскости межатомные расстояния меньше нормальных, а ниже края — больше их. Атом на самой кромке экстраплоскости имеет меньше соседей, чем атом внутри совершенной решетки.

Таким образом, вдоль края экстраплоскости тянется область с несовершенной решеткой.

Область несовершенства кристалла вокруг края экстраплоскости называется *краевой дислокацией*. В одном измерении протяженность этого несовершенства такая же, как и длина края экстраплоскости, т. е. размер ее макроскопический. В плоскости, перпендикулярной краю экстраплоскости, область рассматриваемого несовершенства имеет малые размеры — от двух до десяти атомных диаметров. Следовательно, краевая дислокация относится к классу линейных несовершенств. Можно себе мысленно представить, что рассматриваемая область несовершенства находится внутри трубы, осью которой является край экстраплоскости. Вне этой трубы строение кристалла близко к идеальной решетке, а внутри (в так называемом *ядре дислокации*) сильно искажено.

Истинное положение атомов в ядре дислокации расчетным путем пока не удалось установить, и в металлических кристаллах оно остается неизвестным. В схеме на рис. 105 приведено неточное описание структуры ядра дислокации, но правильно отражено то, что в ядре дислокации выше края экстраплоскости имеется область сгущения атомов, а ниже этого края — область разрежения. Положение центра ядра дислокации в кристаллографической плоскости, являющейся плоскостью чертежа, обозначают знаком \perp . Совокупность таких центров в параллельных атомных плоскостях образует линию дислокации.

Если кристалл расщепить по вертикали не сверху вниз, а снизу вверх до половины высоты и вставить в него снизу «лишнюю» атомную плоскость, то также образуется краевая дислокация — область несовершенства вокруг края экстраплоскости. В отличие от дислокации на рис. 105, в верхней части ядра новой дислокации будет область разрежения, а в нижней — область сгущения атомов.

Если экстраплоскость находится в верхней части кристалла, то дислокацию называют *положительной*, а если в нижней — *отрицательной*. Положение центра ядра отрицательной дислокации обозначают знаком \top . Различие между положительной и отрицательной краевыми дислокациями чисто условное. Переворачивая кристалл (или рисунок), мы превращаем положительную дислокацию в отрицательную, и наоборот. Знак дислокации, как будет показано в гл. V, имеет большое значение для взаимодействия дислокаций.

Рассматривая образование дислокации при сдвиге, необходимо отметить, что линия краевой дислокации перпендикулярна вектору сдвига.

Сопоставляя рис. 104 и 105 и учитывая изложенное в этом параграфе, можно дать следующее общее определение дислокации: *дислокацией называется линейное несовершенство, явля-*

ющееся границей зоны сдвига внутри кристалла. Эта граница отделяет ту часть плоскости скольжения, где сдвиг уже прошел, от той части, где он еще не начинался. При макроскопическом рассмотрении такая граница зоны сдвига внутри кристалла является геометрической линией (AB на рис. 104), а при микроскопическом рассмотрении — областью несовершенства решетки (см. рис. 105).

§ 22. Скольжение краевой дислокации

Давно установлено, что изменение формы кристалла при пластической деформации легко объяснить сдвиговым процессом. По аналогии со сдвигом карт в колоде или монет в стопке, когда направленное смещение каждой карты или монеты по отношению к соседней вызывает изменение формы и размеров всей колоды или стопки, происходит направленное скольжение одних тонких слоев кристалла по отношению к другим. Это скольжение отчетливо проявляется на полированной поверхности кристалла в виде линий сдвига.

Сдвиги происходят по определенным кристаллографическим плоскостям, например преимущественно по плоскостям $\{111\}$ в кристаллах с гранецентрированной кубической решеткой и по плоскостям $\{0001\}$ в кристаллах с гексагональной решеткой. Скольжение в определенной плоскости начинается тогда, когда касательное напряжение в ней достигает некоторой критической величины, называемой критическим скалывающим напряжением. У монокристаллов большинства цветных металлов высокой частоты при комнатной температуре критическое скалывающее напряжение $\tau_{кр} \approx 0,2 \div 1$ МПа.

В додислокационной теории скольжение представляли в виде одновременного смещения всех атомов одного слоя по отношению к атомам соседнего слоя (рис. 106), т. е. так, как скользят соседние карты в колоде. При этом приложенная сила должна быть достаточной, чтобы преодолеть взаимное притяжение между всеми граничными атомами из соседних слоев.

Оценим порядок величины критического скалывающего напряжения, соответствующего этой модели скольжения.

Рассмотрим две соседние атомные плоскости I и II (рис. 107) с междислокационным расстоянием a . При смещении плоскости I относительно плоскости II в направлении, указанном стрелкой b , каждый атом смещающейся плоскости периодически, после продвижения на величину b , попадает в равновесные положения, неотличимые от исходных. В положениях равновесия (узлах решетки) энергия атомов минимальна, а при смещении плоскости I из положения равновесия на расстояние $b/2$ эта энергия достигает максимума.

Сила межатомного взаимодействия двух плоскостей вначале (при смещениях $x < b/2$) мешает удалению плоскости I от положения равновесия, а затем (при $x > b/2$) способствует при-

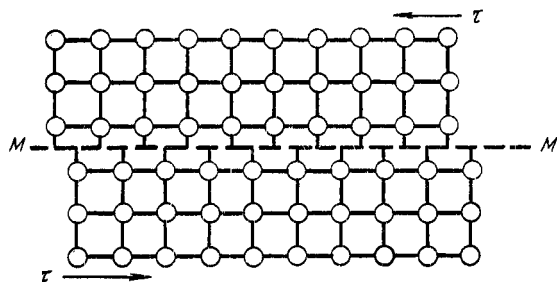


Рис. 106. Сдвиг верхней части кристалла относительно нижней одновременно по всей плоскости MM' (τ — напряжение)

ближению этой плоскости к новому положению равновесия. При $x = b/2$ эта сила, меняя знак, обращается в нуль: на пути до нового положения равновесия атомы плоскости I с одинаковой силой притягиваются к соседним атомам слева и справа на плоскости II.

В первом приближении примем, что сила сдвига плоскости I и соответствующее касательное напряжение изменяются в зависимости от смещения по синусоиде:

$$\tau = k \sin(2\pi x/b). \quad (50)$$

При смещении $x = b/4$ сила сдвига проходит через максимум (см. рис. 107), соответствующий искомому критическому скалывающему напряжению. Постоянную k можно определить, рассматривая малые смещения, в области которых $\sin(2\pi x/b) \approx (2\pi x/b)$, и зависимость касательного напряжения от смещения подчиняется закону Гука: $\tau = G\gamma$, где относительный сдвиг $\gamma = x/a$. Следовательно, в области малых смещений $\tau = k2\pi x/b = Gx/a$. Отсюда $k = Gb/2\pi a$. Подставляя это значение константы в выражение (50), получаем

$$\tau = (Gb/2\pi a) \sin(2\pi x/b). \quad (51)$$

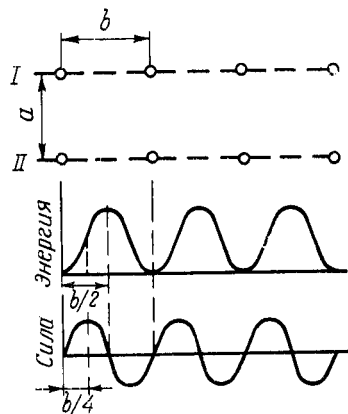


Рис. 107. Изменение энергии атомов и силы межатомного взаимодействия плоскостей I и II при смещении одной плоскости относительно другой

Для определения критического скалывающего напряжения подставляем в формулу (51) значение $x = b/4$ и получаем

$$\tau_{кр} = Gb/2\pi a. \quad (52)$$

Межплоскостное расстояние a по порядку величины равно межатомному расстоянию в направлении сдвига b . Отсюда

$$\tau_{кр} \approx G/2\pi. \quad (53)$$

Таким образом, при одновременном смещении всех атомов одного слоя по отношению к другому атомному слою необходимо касательное напряжение, равное примерно $G/6$. Если принять более точный закон изменения межатомных сил в зависимости от смещения плоскостей, то величина $\tau_{кр}$ получится несколько меньшей, а именно $\sim G/30$. Так как модуль сдвига металлических монокристаллов имеет величину порядка 10^4 — 10^5 МПа, теоретическое значение критического скалывающего напряжения для пластической деформации с одновременным смещением всех атомов одного слоя относительно другого слоя должно быть равно 10^3 — 10^4 МПа, т. е. на 3—4 порядка выше экспериментально установленных значений.

Следовательно, представление об одновременном смещении всех атомов одного слоя по отношению к атомам соседнего слоя кристалла противоречит очень низким опытным значениям критического скалывающего напряжения. Аналогия со сдвигом карт в колоде удовлетворительно объясняет лишь результат пластической деформации, а атомный механизм «сдвига» более сложен.

Чтобы объяснить низкое значение критического скалывающего напряжения, пришлось предположить, что при «сдвиге» соседних слоев межатомные силы преодолеваются не одновременно. В каждый момент времени в смещении участвуют не все атомы, находящиеся по обе стороны от плоскости скольжения, а лишь сравнительно небольшая группа атомов. Для описания такого механизма и было использовано представление об особом типе несовершенств в решетке — дислокациях.

Рассмотрим схему атомного механизма перемещения краевой дислокации при сдвиге на одно межатомное расстояние (рис. 108). В исходном состоянии положение атомов обозначено светлыми кружками, а в конечном — черными. Чтобы дислокация из исходного положения I переместилась в соседнее положение II, не нужно сдвигать всю верхнюю половину кристалла на одно межатомное расстояние. Достаточно, чтобы произошли следующие перемещения атомов: атом 1 в положение 2, атом 3 в —4; атом 5 в —6; атом 7 в —8; атом 9 в —10; атом 11 в —12; атом 13 в —14; атом 15 в —16 и атом 17 в —18. Аналогичным образом смещаются атомы не только в плоскости чертежа, но и во всех атомных слоях, параллельных этой плоскости. Незначительные перемещения атомов в обла-

сти несовершенства (дислокации) приводят к перемещению самой дислокации на одно межатомное расстояние. При этом целая плоскость 7—17 разрывается на две части. Ее нижняя часть объединяется с исходной экстраплоскостью в целую плоскость 8—6, а верхняя превращается в новую экстраплоскость 14—18.

Под действием касательных напряжений дислокация перемещается в плоскости скольжения MM путем указанных выше перемещений атомов. Такое движение ее называется *скольжением* или *консервативным движением*.

На рис. 108 показаны краевая дислокация внутри кристалла и ступенька на его правой боковой грани, образовавшаяся

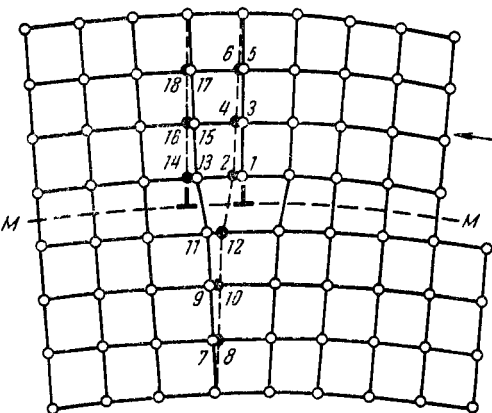


Рис. 108. Смещения атомов при скольжении краевой дислокации справа налево на одно межатомное расстояние. Атомы в новых положениях находятся на пунктирных линиях

в результате сдвига справа налево верхней части кристалла относительно нижней, причем зафиксирован момент, когда сдвиг еще не произошел в потенциальной плоскости скольжения левее дислокации. Если под действием сдвигающей силы дислокация будет скользить справа налево, то сдвиг будет охватывать всё большую часть плоскости скольжения. Когда дислокация выйдет на левую боковую грань кристалла, здесь образуется ступенька.

На рис. 109 показаны разные положения дислокации при ее скольжении. Пунктиром отмечена часть кристаллографической плоскости, в которой уже произошел сдвиг на одно межатомное расстояние b . Ступеньки величиной в одно межатомное расстояние на правой и левой гранях кристалла, образовавшиеся в результате пробега одной дислокации справа налево через кристалл, могли бы явиться следствием сдвига всей верхней части как единого целого по отношению к нижней части кристалла.

Однако в действительности сдвиг распространялся постепенно. В каждый момент времени в нем участвовали не все атомы по обе стороны от плоскости скольжения, а только те, которые находились в области дислокации, вокруг края экстраплоскости. Происходило поочередное, эстафетное перемещение атомов на расстояния меньше межатомного, в результате чего дислокация скользила на большие расстояния через весь кристалл. Если при одновременном сдвиге верхней части кри-

сталла по отношению к нижней необходимо преодолеть межатомные связи между всеми граничными атомами по обе стороны от плоскости скольжения (см. рис. 106), то при перемещении дислокации в соседнее положение разрываются межатомные связи только между двумя цепочками атомов (между 11 и 13 на рис. 108). Именно этим объясняется низкое опытное значение критического скалывающего напряжения.

Развитие сдвига в кристалле при скольжении в нем краевой

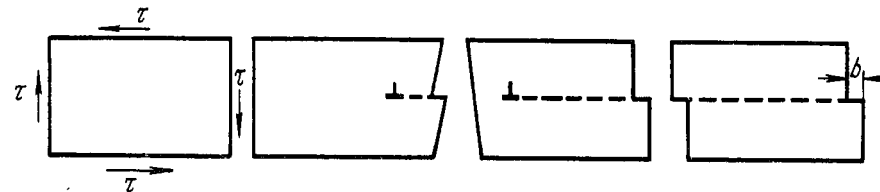


Рис. 109. Схема сдвига верхней части кристалла относительно нижней на одно межатомное расстояние при пробегае краевой дислокации справа налево через весь кристалл

дислокации помогает также понять следующая аналогия (рис. 110). Ковер из положения AB можно переместить в положение $A'B'$, протаскивания его по полу как единого целого. Точно такой же конечный результат дает продвижение складки от одного края ковра до другого, но в этом случае в каждый момент времени требуется затрачивать меньшее усилие, чем при протаскивании по полу целиком всего ковра. Интересно,

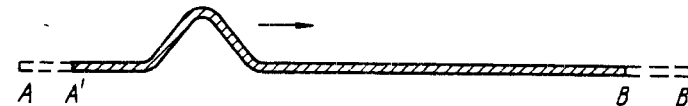


Рис. 110. Перемещение ковра из положения AB в положение $A'B'$ в результате продвижения складки

что змеи обычно ползают за счет образования складки («положительной дислокации») около хвоста и продвижения этой складки в сторону головы.

На рис. 109 показан сдвиг на одно межатомное расстояние при пробегае положительной краевой дислокации справа налево. Аналогичный результат получается при пробегае отрицательной краевой дислокации слева направо. Чтобы убедиться в этом, достаточно перевернуть рис. 109, превратив положительную дислокацию в отрицательную. Под действием одних и тех же сдвигающих напряжений дислокации разного знака движутся в прямо противоположных направлениях. Это также видно при переворачивании рис. 109. Скольжение дислокации не обусловлено диффузионными перемещениями атомов и может происходить при каких угодно низких температурах.

Заметим, что *скольжение всегда происходит по плоскости, в которой находится и линия дислокации, и вектор сдвига.*

Под легкостью скольжения дислокаций не следует понимать обязательную быстроту их движения. При низких напряжениях дислокации скользят очень медленно, со скоростями порядка 10^{-7} см/с и менее.

Скорость скольжения дислокаций изменяется в очень широком диапазоне в зависимости от приложенной силы, температуры и других факторов. Например, у сплава железа с 3,25 % Si (о.ц.к. решетка) при сравнительно небольшом увеличении касательного напряжения (менее чем в два раза) обнаружено резкое возрастание скорости движения краевых дислокаций от очень малых значений (порядка 10^{-7} — 10^{-8} см/с) до больших (порядка 10^{-2} см/с).

Скорость скольжения дислокации не может превышать скорость распространения в данном кристалле упругой деформации, т. е. скорость звука.

§ 23. Переползание краевой дислокации

В предыдущем параграфе было рассмотрено перемещение краевой дислокации в своей плоскости скольжения. Обсудим перемещение дислокации перпендикулярно плоскости скольжения. При перемещении по нормали к плоскости скольжения краевая дислокация попадает в новые атомные плоскости, параллельные той, в которой она ранее находилась. Механизм такого перемещения, называемого *переползанием*, принципиально отличается от механизма скольжения.

Рассмотрим перемещение положительной краевой дислокации, показанной на рис. 105, из своей плоскости скольжения в лежащую выше соседнюю плоскость. Для этого необходимо, чтобы цепочка атомов на самой кромке экстраплоскости отделилась от экстраплоскости и ушла в глубь кристалла. Такое «растворение» кромки экстраплоскости (*положительное переползание*) является диффузионным процессом. Здесь возможны два варианта: 1) при подходе вакансий к краевой дислокации атомы с кромки экстраплоскости перемещаются в соседние вакантные места и 2) атомы с кромки переходят в соседние междоузлия и диффундируют от дислокации. Первый вариант более вероятен, если учесть, что в металле часто появляется избыточная концентрация вакансий (в результате закалки, пластической деформации), а энергия образования межузельных атомов относительно велика.

Перемещение положительной дислокации вниз в соседнюю плоскость скольжения означает, что к краю экстраплоскости присоединился один атомный ряд. Такая достройка экстраплоскости (*отрицательное переползание*) может проходить двумя путями: 1) присоединением межузельных атомов, диффундирующих к дислокации, и 2) присоединением соседних атомов, на-

ходящихся в регулярных положениях, с одновременным образованием вакансий, которые затем мигрируют в глубь кристалла.

Таким образом, перемещение краевой дислокации по нормали к своей плоскости скольжения осуществляется путем диффузионного перемещения атомов (к дислокации или от нее), и именно этим оно принципиально отличается от скользящего движения дислокации. В отличие от скольжения — консервативного движения, не связанного с переносом массы, переползание — *неконсервативное движение* — происходит путем переноса массы.

Диффузия — термически активируемый процесс и, следовательно, переползание также термически активируемый процесс, скорость которого сильно зависит от температуры. В то время как скольжение дислокации легко протекает при любых температурах (вплоть до абсолютного нуля), переползание происходит с заметной скоростью лишь при сравнительно высоких температурах.

Скорость переползания зависит не только от температуры, но и от концентрации точечных дефектов, направленное перемещение которых, по существу, и обеспечивает акт переползания.

Переползание дислокации вызывает деформацию кристаллов. Когда атомы уходят с кромки экстраплоскости, происходит местное сжатие, а когда «осаждаются» на этой кромке — местное растяжение кристалла. «Прорастание» экстраплоскости вниз или отрицательной (вверх) приводит к изгибу кристалла. Сжимающие напряжения стремятся уменьшить экстраплоскость, а растягивающие способствуют ее росту.

Выше рассматривались идеализированные случаи отделения цепочки атомов вдоль всей кромки экстраплоскости или присоединения ряда атомов к экстраплоскости одновременно по всей ее длине, в результате чего дислокация целиком и одновременно переползает в соседнюю параллельную плоскость скольжения. В действительности же перенос массы к кромке экстраплоскости или от нее происходит путем миграции отдельных вакансий (межузельных атомов) или небольших их комплексов, и дислокация переползает в новую плоскость скольжения не одновременно по всей своей длине, а по частям. Например, когда комплекс вакансий «оседает» на кромке экстраплоскости, здесь образуются две *ступеньки (пороги)* на дислокации (рис. 111).

Такой процесс образования порогов — термически активируемый¹. Так как дислокация со ступеньками обладает боль-

¹ В гл. VII рассматривается другой способ образования порогов, не связанный с термической активацией.

шей энтропией, то определенное число ступенек соответствует минимуму энергии Гельмгольца системы (при большей внутренней энергии).

В условиях термодинамического равновесия при данной температуре T число порогов на единице длины дислокации

$$n = n_0 \exp(-E_n/kT), \quad (54)$$

где E_n — энергия образования порога (1 эВ для порога высотой в одно межатомное расстояние); n_0 — число атомов на единице длины дислокации.

Переползание дислокации состоит в зарождении порогов и движении их вдоль линии дислокации. Когда, например, к образовавшемуся порогу присоединяется вакансия, порог смещается вдоль кромки экстраплоскости (см. также § 51).

Энергия активации переползания

$$E = E_n + E_d, \quad (55)$$

где E_d — энергия активации самодиффузии.

Если на дислокации уже имеется большое число порогов, например в результате пересечения с другими дислокациями (см. гл. VII), то $E = E_d$.

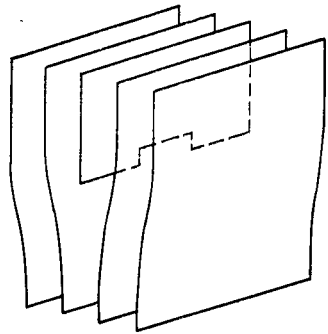


Рис. 111. Два порога на краевой дислокации

§ 24. Винтовая дислокация

Понятие о *винтовой* дислокации в физику твердого тела ввел в 1939 г. Бюргерс.

Сделаем в кристалле надрез по плоскости $ABCD$ (рис. 112, *a*) и сдвинем правую (переднюю) часть кристалла вниз на один период решетки (рис. 112, *б*). Образовавшаяся при таком сдвиге ступенька на верхней грани не проходит через всю ширину кристалла, оканчиваясь в точке B . Простая кубическая решетка в рассматриваемом случае выглядит так, как показано на рис. 113. У переднего края кристалла (вблизи точки A) сдвиг произошел ровно на один период решетки так, что верхняя атомная плоскость справа от точки A сливается в единое целое со второй сверху плоскостью слева от точки A . Так как надрез $ABCD$ дошел только до середины кристалла, то правая часть кристалла не может целиком сдвинуться по отношению к левой на один период решетки. Величина смещения правой части по отношению к левой уменьшается по направлению от точки A к точке B . Верхняя атомная плоскость оказывается изогнутой (см. рис. 113). Точно так же деформируется

вторая сверху атомная плоскость; правая часть ее у передней грани кристалла смещается на один период решетки и сливается в единое целое с третьей сверху атомной плоскостью. Эта плоскость в своей правой части смещается вниз и сливается

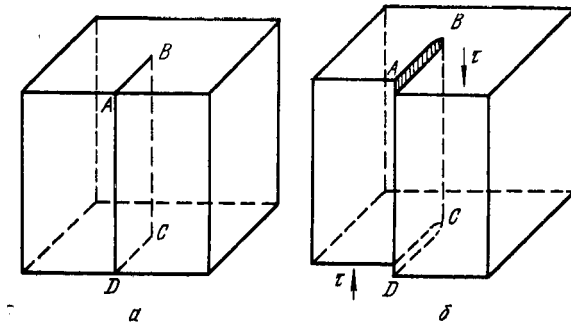


Рис. 112. Сдвиг, создавший винтовую дислокацию: *a* — кристалл до сдвига надрезан по $ABCD$; *б* — кристалл после сдвига

с четвертой сверху плоскостью и т. д. Если до сдвига кристалл состоял из параллельных горизонтальных атомных слоев, то после несквозного сдвига по плоскости $ABCD$ он превратился

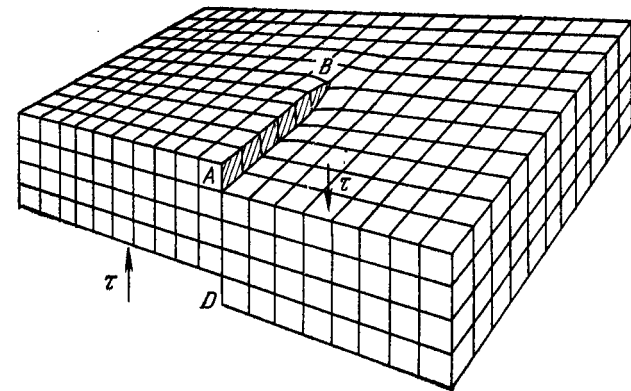


Рис. 113. Кристалл с винтовой дислокацией, представляющий собой атомную плоскость, закрученную в виде геликоида

в одну атомную плоскость, закрученную в виде геликоида (винтовой лестницы).

На рис. 114, *a* показано расположение атомов в двух вертикальных плоскостях, проходящих непосредственно по обе стороны от плоскости сдвига $ABCD$ на рис. 113. Если смотреть на них со стороны правой грани кристалла, то черные кружки

обозначают атомы на вертикальной плоскости слева от плоскости сдвига, а светлые кружки — атомы на вертикальной плоскости справа от плоскости сдвига. Заштрихована образовавшаяся при сдвиге ступенька на верхней грани кристалла. На рис. 114, *а* плоскость скольжения $ABCD$ совпадает с плоскостью чертежа; атомы, обозначенные черными кружками, находятся под плоскостью чертежа, а обозначенные светлыми кружками — над ней. Стрелка, направленная сверху вниз, обозначает сдвигающие напряжения от сил, приложенных к той

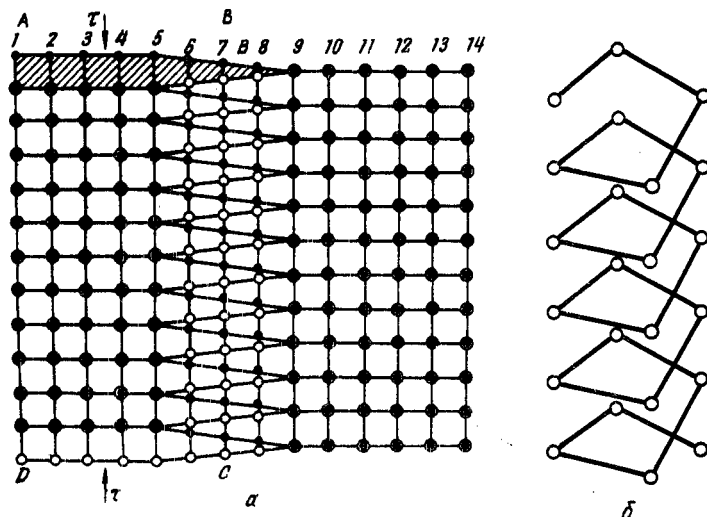


Рис. 114. Расположение атомов в области винтовой дислокации

части кристалла, которая находится над плоскостью чертежа на рис. 114, *а*, т. е. правее плоскости $ABCD$ на рис. 112, *б* и 113. Стрелка, направленная снизу вверх, обозначает сдвигающие напряжения от сил, приложенных к той части кристалла, которая находится под плоскостью чертежа на рис. 114, *а*, т. е. левее плоскости $ABCD$ на рис. 112, *б* и 113.

Правее линии BC (см. рис. 112, *б*), между атомными рядами 9 и 14 (см. рис. 114, *а*), положения белых и черных кружков совпадают, т. е. соответствующие атомы находятся на одном горизонте. Та же картина наблюдается на некотором расстоянии слева от линии BC , между атомными рядами 1 и 5. Вокруг же линии BC , между атомными рядами 5 и 9, атомы, обозначенные черными и белыми кружками, т. е. находящиеся под плоскостью чертежа и над ней, образуют винтовую лестницу.

Таким образом, после рассмотренного сдвига по плоскости $ABCD$ вдали от линии BC решетка остается совершенной,

а вблизи от линии BC вдоль нее тянется область несовершенства. В одном измерении — вдоль линии BC область несовершенства имеет макроскопический размер, а в двух других она очень мала (ее размеры по нормали к линии BC составляют несколько периодов решетки — четыре на рис. 114, *а*). Следовательно, при сдвиге по плоскости $ABCD$ вокруг линии BC возникло линейное несовершенство. Сама линия BC представляет собой границу зоны сдвига внутри кристалла, отделяющую ту часть плоскости скольжения, где сдвиг уже прошел, от той части, где сдвиг еще не начинался. Следовательно, по данному в § 21 определению, несовершенная область вокруг линии BC является дислокацией. Так как после появления такой дислокации в кристалле он состоит из атомной плоскости, закрученной в винтовую лестницу, то эта дислокация называется *винтовой*.

Точное расположение атомов в ядре винтовой дислокации неизвестно. Схематически можно себе представить, что оно близко к расположению их по винтовой линии (см. рис. 114, *а* и *б*).

Дислокация, как и резьба винта, может быть *правой* и *левой*. На рис. 112 и 113 изображены кристаллы с правой винтовой дислокацией: линию дислокации от верхнего горизонта к нижнему следует обходить по спирали по часовой стрелке. Если же на рис. 112, *а* сдвинуть вниз по плоскости $ABCD$ левую часть кристалла, то образуется левая винтовая дислокация BC , которую обойти по спирали с верхнего горизонта на нижний можно только против часовой стрелки. Правую дислокацию нельзя превратить в левую простым переворачиванием кристалла (рисунка), как это можно было сделать для превращения положительной краевой дислокации в отрицательную. Правая дислокация превращается в левую (и наоборот) зеркальным отражением.

В отличие от краевой дислокации, которая всегда перпендикулярна вектору сдвига, винтовая дислокация параллельна вектору сдвига (сравните рис. 112 и 113 с рис. 104 и 105).

Другое принципиальное отличие винтовой дислокации от краевой состоит в следующем. Краевая дислокация в определенной кристаллографической плоскости может быть образована сдвигом только по этой плоскости (см. рис. 105). Винтовая же дислокация может образоваться при сдвиге по любой кристаллографической плоскости, содержащей линию дислокации, по любой поверхности, оканчивающейся на этой линии. Если на рис. 112, *а* сделать надрез по плоскости, находящейся под любым углом к $ABCD$, но так, чтобы этот надрез оканчивался в кристалле на линии BC , то после сдвига мы получим ту же винтовую дислокацию BC . Таким образом, винтовая дислокация в отличие от краевой не определяет однозначно плоскость сдвига.

§ 25. Скольжение винтовой дислокации

Схема атомного механизма перемещения винтовой дислокации показана на рис. 115. Расположение атомов, соединенных сплошными линиями на рис. 115, *а*, такое же, как и на рис. 114, *а*. Плоскость скольжения *ABCD* совпадает с плоскостью чертежа; черные кружки обозначают атомы под плоско-

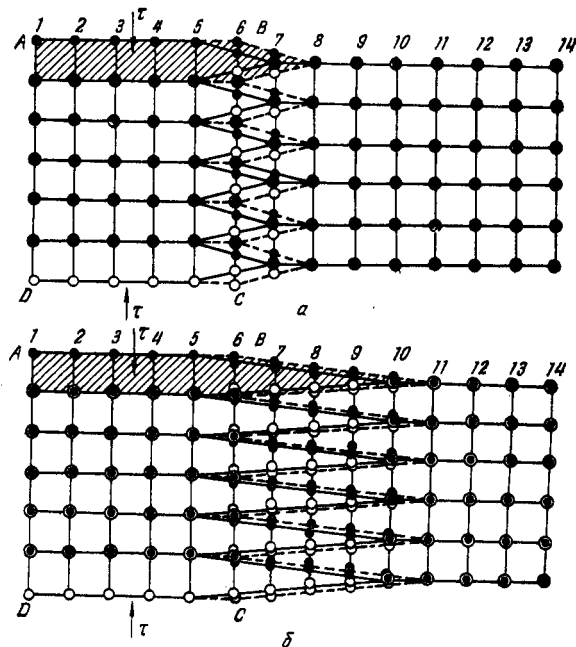


Рис. 115. Смещение атомов при скольжении узкой (*а*) и широкой (*б*) винтовой дислокации слева направо на одно межатомное расстояние

стью чертежа, а белые — над ней. Верхняя стрелка обозначает сдвигающие напряжения, действующие в той части кристалла, которая находится над плоскостью чертежа, а нижняя стрелка — напряжения, действующие в части кристалла под этой плоскостью. Заштрихована ступенька, возникающая при сдвиге на верхней грани кристалла (см. рис. 113). Область несовершенства, внутри которой атомы образуют винтовую лестницу, находится между атомными рядами 5 и 7.

Пунктирные линии соединяют атомы после перемещения (скольжения) винтовой дислокации на один период решетки вправо. Если в исходном положении область несовершенства находилась между атомными рядами 5 и 7, то после смещения на один период решетки вправо она находится между атом-

ными рядами 6 и 8. Атомы над плоскостью чертежа (белые кружки) под действием сдвигающих напряжений, обозначенных верхней стрелкой, смещаются вниз. Атомы под плоскостью чертежа (черные кружки) под действием сдвигающих напряжений, обозначенных нижней стрелкой, смещаются вверх. Необходимо обратить внимание на три важных обстоятельства. Во-первых, дислокация перемещается на один период решетки вправо в результате передвижений атомов только внутри области несовершенства; атомы вне области несовершенства остаются на своих местах. Во-вторых, дислокация перемещается на один период решетки вследствие передвижения атомов внутри ядра дислокации всего лишь на доли периода решетки. В этом отношении скольжение винтовой дислокации аналогично скольжению краевой дислокации. В-третьих, в области ядра винтовой дислокации атомы смещаются в направлении действующих на них сил (вниз и вверх на рис. 115), а сама дислокация перемещается перпендикулярно этому направлению (вправо на рис. 115). Последнее отличает винтовую дислокацию от краевой; при скольжении краевой дислокации экстраплоскость изменяет свое положение в направлении действующих касательных напряжений.

Перемещение винтовой дислокации увеличило площадь ступеньки и площадь зоны сдвига. В исходном состоянии на рис. 115 зона сдвига, т. е. часть плоскости скольжения, где сдвиг уже совершился, находится между атомными рядами 1 и 5, а после перемещения дислокации вправо на один период решетки зона сдвига находится между атомными рядами 1 и 6. При продвижении винтовой дислокации слева направо на рис. 115 область сдвига постепенно распространяется на всю ширину кристалла.

На рис. 116 показан сдвиг на одно межатомное расстояние при пробеге правой винтовой дислокации через весь кристалл от передней грани до задней (сравните с пробегом краевой дислокации на рис. 109).

Как видно на рис. 117, под действием одинаковых сдвигающих напряжений винтовые дислокации разного знака скользят в прямопротивоположных направлениях.

В конце § 24 отмечено, что винтовая дислокация не определяет однозначно плоскость сдвига. Действительно, вокруг линии *BC* на рис. 112—114 наблюдается цилиндрическая симметрия искажения решетки. Схемы атомного строения в области дислокации, аналогичные изображенным на рис. 114, *а* и 115, справедливы не только для плоскостей, параллельных *ABCD* (см. рис. 112, *б* и 113), но и для любых вертикальных плоскостей, проходящих через линию *BC* на рис. 112, *б*. Соответственно схема перемещений атомов на рис. 115, обеспечивающих скольжение винтовой дислокации, также справедлива для любых плоскостей, проходящих через линию *BC* на рис. 112, *б*.

Винтовая дислокация в принципе может скользить в любой кристаллографической плоскости, которая содержит линию дислокации и вектор сдвига.

В отличие от краевой винтовая дислокация может переходить из одной атомной плоскости в другую без переноса

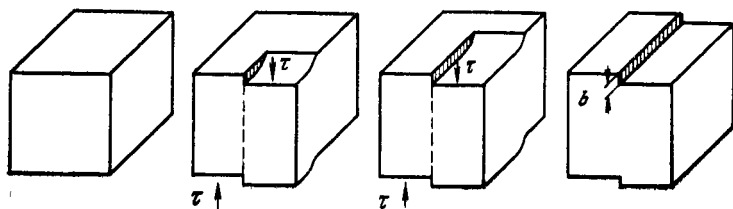


Рис. 116. Схема сдвига правой части кристалла относительно левой на одно межатомное расстояние при пробеге винтовой дислокации от передней грани до задней

массы — скольжением. Если на пути движения винтовой дислокации в плоскости P встречается какой-то барьер (см. гл. XII), то дислокация начинает скользить в другой атомной плоскости R , находящейся под углом к первоначальной плоско-

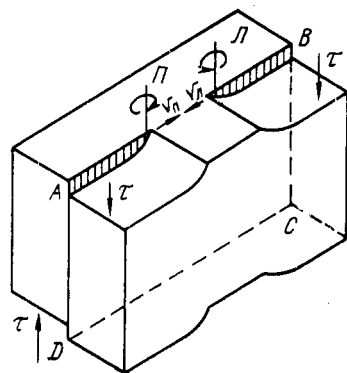


Рис. 117. Кристалл с правой П и левой Л винтовыми дислокациями, скользящими в плоскости ABCD; v_P и v_L — направления скольжения правой и левой дислокаций под действием напряжений

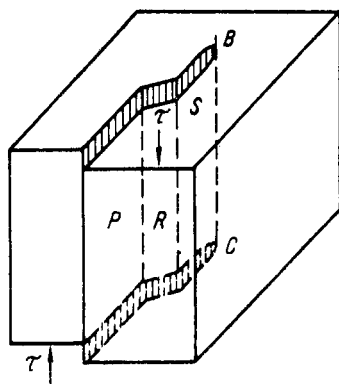


Рис. 118. Двойное поперечное скольжение винтовой дислокации BC

сти скольжения P (рис. 118). Этот процесс называют *поперечным скольжением*.

Пройдя некоторый путь в плоскости поперечного скольжения и удалившись от барьера, винтовая дислокация может перейти в атомную плоскость S , параллельную первоначальной плоскости скольжения P . Этот процесс называют *двойным по-*

перечным скольжением. Многократное его повторение называют *множественным поперечным скольжением*. Например, в г.ц.к. решетке винтовая дислокация, скользящая в плоскости (111) , легко переходит в плоскость поперечного скольжения $(\bar{1}\bar{1}1)$, затем вновь скользит в одной из параллельных плоскостей (111) , снова совершает поперечное скольжение по плоскости $(\bar{1}\bar{1}1)$ и т. д.

Кроме барьеров, одна из причин поперечного скольжения — изменение вектора напряжений.

В отличие от краевой винтовая дислокация не может перемещаться с помощью диффузионного механизма, аналогичного приведенному в § 23. Особый случай переползания винтовой дислокации рассмотрен в § 51.

§ 26. Смешанные дислокации и их движение

Дислокация не может закончиться внутри кристалла, не соединяясь с другой дислокацией. Это следует из того, что граница зоны сдвига всегда является замкнутой линией. Часть этой границы может проходить по внешней поверхности кристалла. Следовательно, линия дислокации должна замыкаться внутри кристалла или оканчиваться на его поверхности. Здесь возможны самые разнообразные варианты.

На рис. 119, а линия дислокации состоит из прямых участков краевой и винтовой ориентации, перпендикулярных и параллельных вектору сдвига соответственно. Это частный случай.

В более общем случае в плоскости скольжения линия дислокации — кривая (рис. 119, б). Отдельные малые участки этой кривой имеют краевую или винтовую ориентацию, но большая ее часть не перпендикулярна и не параллельна вектору сдвига; в последнем случае мы имеем дело с дислокацией смешанной ориентации, которая в макромасштабе является плоской кривой.

Рассмотрим схему атомного строения кристалла со *смешанной дислокацией*. На рис. 120 линия AC ограничивает внутри кристалла зону сдвига ABC. Заштрихована ступенька, образовавшаяся на передней грани кристалла при сдвиге верхней его части относительно нижней по площади ABC. Расположение атомов вдоль линии AC показано на рис. 121, где плоскость чертежа является плоскостью скольжения; черные кружки обозначают атомы под этой плоскостью, а белые — над ней. Вблизи точки A на участке AA' дислокация параллельна вектору сдвига и, следовательно, имеет винтовую ориентацию (сравните с рис. 114). Вблизи точки C дислокация перпендикулярна вектору сдвига и, следовательно, имеет краевую ориентацию. Вблизи точки C в верхней части кристалла (над плоскостью чертежа) имеется сгущение вертикальных атомных

плоскостей и экстраплоскость. В отличие от рис. 105, где мы смотрим на экстраплоскость с ее торца, на рис. 121 экстраплоскость рассматривается сверху. Здесь она видна в виде цепочки светлых кружков CC' , внутри которых нет черных кружков. Эта цепочка атомов является краем экстраплоскости. Вблизи точки C' экстраплоскость искривляется и соединяется с вертикальной плоскостью, находящейся под плоскостью скольжения, т. е. экстраплоскость здесь перестает быть неполной атомной плоскостью (экстраплоскостью), и дислокация теряет краевую ориентацию. В промежутке между чисто кра-

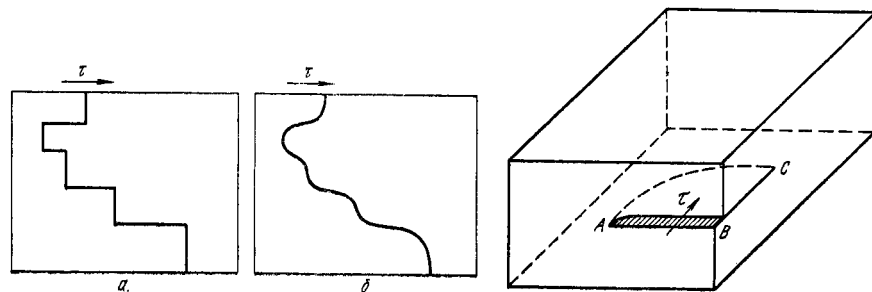


Рис. 119. Образование одной непрерывной ломаной (а) или плавной (б) линии внутри кристалла краевыми и винтовыми дислокациями

Рис. 120. Сдвиг, создавший смешанную дислокацию AC

евым участком вблизи точки C и чисто винтовым вблизи точки A дислокация имеет смешанную ориентацию, промежуточную между краевой и винтовой.

Под действием касательных напряжений τ зона сдвига, заштрихованная на рис. 122, расширяется. Участок дислокации с чисто краевой ориентацией вблизи точки C скользит в направлении приложенной силы, а участок с чисто винтовой ориентацией вблизи точки A — перпендикулярно этому направлению. Когда вся линия смешанной дислокации выйдет на внешние грани, верхняя часть кристалла окажется сдвинутой относительно нижней в направлении действующих касательных напряжений на один период решетки (сравните с рис. 109 и 116). Ясно, что в общем случае отдельные участки смешанной дислокации выходят на поверхность кристалла неодновременно.

На рис. 119, б и 120 линия смешанной дислокации оканчивается на гранях кристалла. Но она может образовывать и замкнутые плоские петли внутри кристалла. Отдельные участки *дислокационной петли* имеют чисто краевую или чисто винтовую ориентацию, а большая часть — смешанную ориентацию.

Плоская петля смешанной дислокации, как и любая дислокация, является границей зоны сдвига. Если вектор сдвига

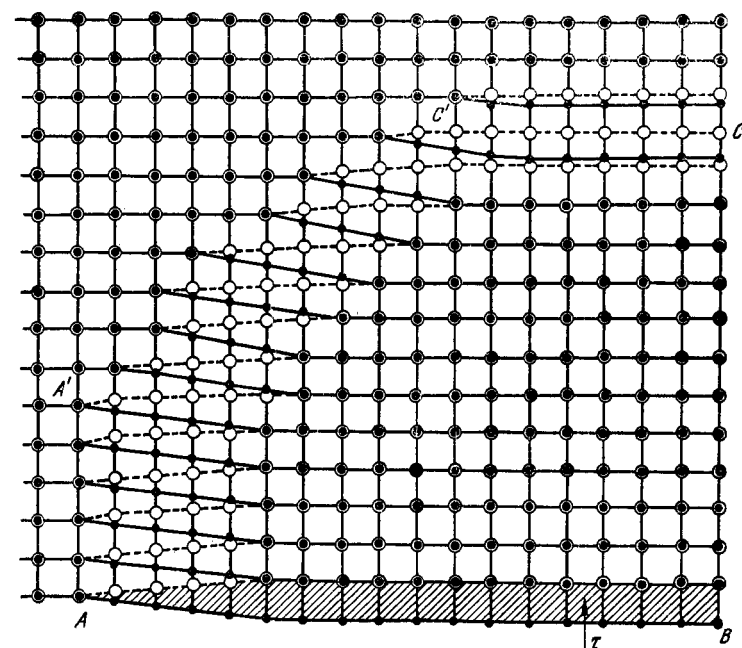


Рис. 121. Расположение атомов в области смешанной дислокации. Схема получена при рассмотрении на рис. 120 плоскости ABC со стороны верхней грани кристалла

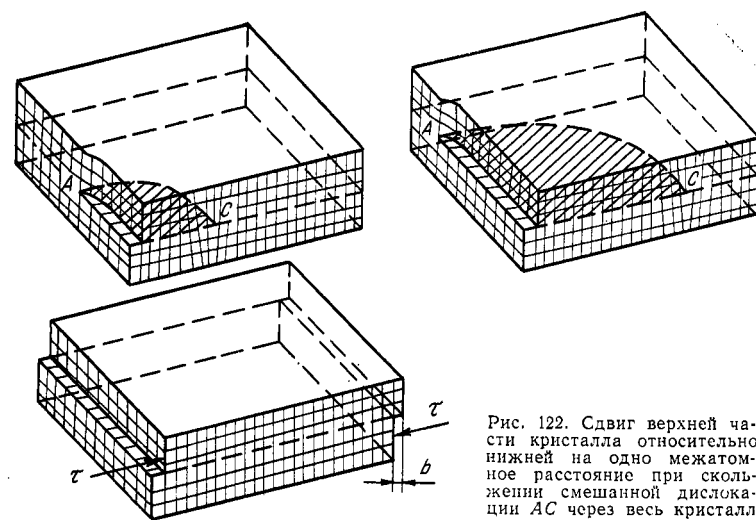


Рис. 122. Сдвиг верхней части кристалла относительно нижней на одно межатомное расстояние при скольжении смешанной дислокации AC через весь кристалл

находится в плоскости петли, то петля отделяет область плоскости скольжения внутри нее, где сдвиг уже прошел, от области, лежащей вне петли и еще не охваченной сдвигом. Скольжение развивается при расширении петли. Возможен и противоположный случай, когда область, где сдвиг уже прошел, находится вне петли дислокации. Скольжение в этом случае развивается при сужении петли. Дислокационные петли играют важную роль в процессах пластической деформации (см. § 53). Поэтому необходимо подробнее рассмотреть атомное строение кристалла с дислокационной петлей и ее движение.

На рис. 123 показана схема атомного строения кристалла с простой кубической решеткой в области петли смешанной дислокации (вектор сдвига \vec{b} лежит в плоскости петли). На этой схеме черные кружки — атомы ниже плоскости чертежа, являющейся плоскостью скольжения, а светлые кружки — атомы над плоскостью чертежа. Хорошо видно, что вблизи точки a имеется экстраплоскость из светлых кружков, т. е. положительная дислокация, а вблизи точки f — экстраплоскость из черных кружков, т. е. отрицательная дислокация. Вблизи точек b и b' атомы расположены по винтовой линии, причем легко обнаружить разный знак дислокаций вблизи этих точек. Между участками с краевой и винтовой ориентацией большая часть петли имеет смешанную ориентацию (сравните с рис. 121).

Под действием одних и тех же касательных напряжений участки петли вблизи точек a и f с краевой ориентацией должны скользить вдоль вектора сдвига в прямо противоположные стороны, так как эти участки имеют разный знак. Под действием тех же напряжений τ участки петли вблизи точек b и b' с чисто винтовой ориентацией должны скользить перпендикулярно вектору сдвига в прямо противоположные стороны, так как эти участки также имеют разный знак. Следовательно, участки дислокационной петли вблизи точек a и f , b и b' удаляются один от другого. Соответственно движутся в разные стороны и участки петли со смешанной ориентацией, и вся петля расширяется, увеличивая зону сдвига, заключенную внутри нее.

Когда распространяющаяся дислокационная петля достигает внешней поверхности кристалла, верхняя часть его оказывается сдвинутой по отношению к нижней (см. аналогичный случай на рис. 122). То, что сдвиг верхней части кристалла относительно нижней в каком-то одном направлении явился результатом скольжения участков петли в разные стороны, не должно вызывать удивления. Как показано в § 22 с помощью рис. 109, пробег краевых дислокаций разного знака через весь кристалл в прямо противоположные стороны приводит к одному и тому же сдвигу верхней части кристалла относительно нижней. Так же ведут себя винтовые дислокации разного знака (см. § 25 и рис. 117).

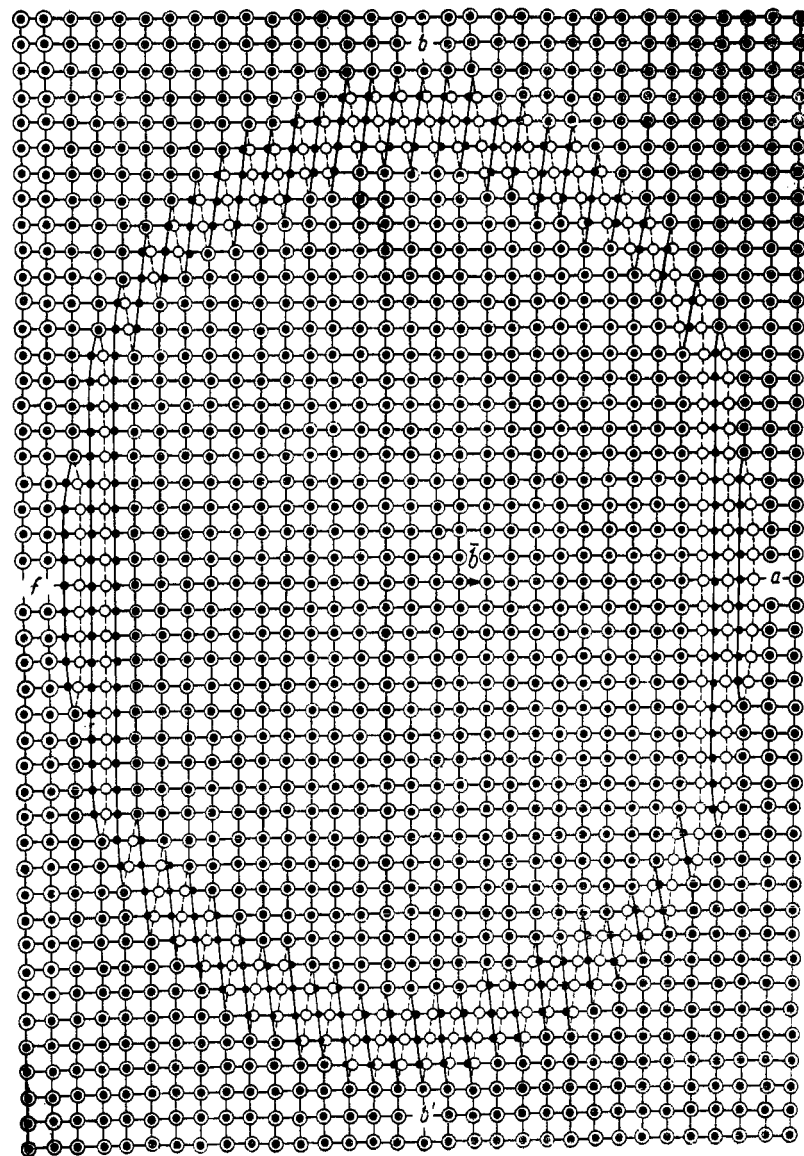


Рис. 123. Расположение атомов кристалла в области петли смешанной дислокации

Выше рассматривались смешанные дислокации на плоской поверхности скольжения. На рис. 120—123 линии смешанных дислокаций лежат в одной плоскости, являются плоскими кривыми. Более общий случай — криволинейная дислокация, линия которой не лежит в одной плоскости. Такая дислокация может образовывать и замкнутую петлю, не лежащую в одной плоскости.

Из-за наличия участков с винтовой ориентацией дислокационная петля может совершать поперечное скольжение. На рис. 124, а показана дислокационная петля, распространявшаяся в плоскости (111) г.ц.к. решетки. Участок петли вблизи точки m , имеющий винтовую ориентацию, из-за встречи с препятствием в плоскости (111) , или по другой причине может «соскользнуть» по плоскости поперечного скольжения $(\bar{1}\bar{1}1)$, находящейся под углом к первоначальной плоскости скольжения (рис. 124, б). Затем участок петли с винтовой ориентацией способен из плоскости $(\bar{1}\bar{1}1)$ перейти в атомную плоскость, параллельную первоначальной плоскости скольжения (рис. 124, в). Многократное повторение этого процесса является множественным поперечным скольжением. В результате петля смешанной дислокации перестает быть плоской. Так как винтовая дислокация легко переходит из одной плоскости в другую, то в общем случае и линия смешанной дислокации и поверхность скольжения не лежат в одной плоскости.

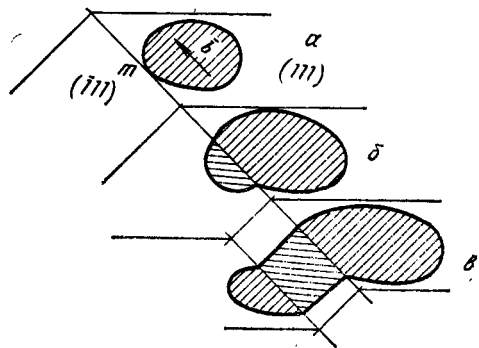


Рис. 124. Поперечное и двойное поперечное скольжение петли смешанной дислокации в г.ц.к. решетке

§ 27. Призматические дислокации

В предыдущем параграфе рассмотрены дислокационные петли, в плоскости которых находится вектор сдвига. В этой плоскости может происходить скольжение дислокационной петли. К другому типу принадлежат дислокационные петли с вектором сдвига, не лежащим в плоскости петли.

На рис. 125 показан результат вдавливания пуансона прямоугольного сечения в боковую грань кристалла. Сдвиг проходил по четырем плоскостям: $A'ABB'$, $B'BCC'$ и т. п. Четырехугольник $ABCD$ — граница зоны сдвига внутри кристалла, т. е. он является дислокацией. Вектор сдвига перпендикулярен линии дислокации и, следовательно, отрезки AB , BC , CD и DA — это

краевые дислокации. При другой форме вдавливаемого пуансона дислокационная петля может иметь форму шестиугольника, круга, овала и др. Так как вектор сдвига, создавшего дислокацию, не лежит в плоскости дислокационной петли, то дислокация не может скользить в этой плоскости. Любая дислокация может скользить только по поверхности, содержащей и дислокационную линию, и вектор сдвига. Если дислокационная петля имеет форму многоугольника, то поверхность скольжения представляет собой боковую поверхность призмы. Такое скольжение называют *призматическим*, а соответствующую дислокацию с краевой ориентацией по всей ее длине — *призматической дислокацией*. Впоследствии призматическими стали называть дислокационные петли с любым отличающимся от нуля углом наклона вектора сдвига к плоскости петли. Если дислокационная петля имеет форму круга и, следовательно, поверхность ее скольжения цилиндрическая, то и дислокацию, и ее скольжение все равно называют призматическими.

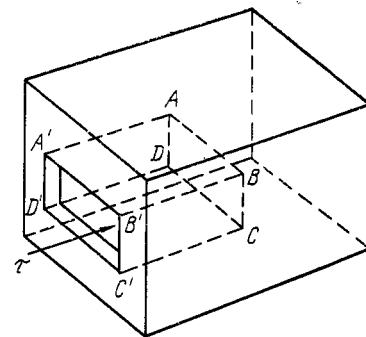


Рис. 125. Призматическая дислокация $ABCD$, образованная вдавливанием пуансона в боковую поверхность кристалла

Призматическая дислокация — не обязательно результат сдвига. Она может появиться при формировании внутри кристалла атомной экстраплоскости в виде многоугольника ($ABCD$ на рис. 125) или круглого диска. Это наблюдается при ядерном облучении металлов, когда образовавшиеся в избытке межузельные атомы образуют плоские скопления. Схема сечения кристалла через такую экстраплоскость из межузельных атомов показана на рис. 126.

Другой часто встречающийся механизм образования призматических дислокационных петель — скопление («конденсация») закалочных вакансий в виде вакансионных дисков на определенных кристаллографических плоскостях (рис. 127, а). При превышении некоторого критического диаметра такой «диск пустоты» самоустранивается сближением его берегов под действием сил межатомного притяжения (рис. 127, б). Это явление называют *захлопыванием диска вакансий*. Кромка захлопнувшегося вакансионного диска представляет собой петлю призматической дислокации.

В своей плоскости призматическая дислокационная петля способна передвигаться только переползанием. Например, на рис. 126 петля будет сужаться при «растворении» кромок диска AB , т. е. при уходе межузельных атомов, из которых со-

стоит диск, в окружающий объем кристалла. На рис. 127, б призматическая петля сужается, наоборот, при подходе атомов, достраивающих изнутри кольцевую плоскость $AB—CD$. Переползание может свести призматическую петлю в точку, т. е. устранить ее. При неравновесном же избытке вакансий в решетке на рис. 127, б призматическая петля будет увеличиваться в диаметре из-за подхода к ней вакансий.

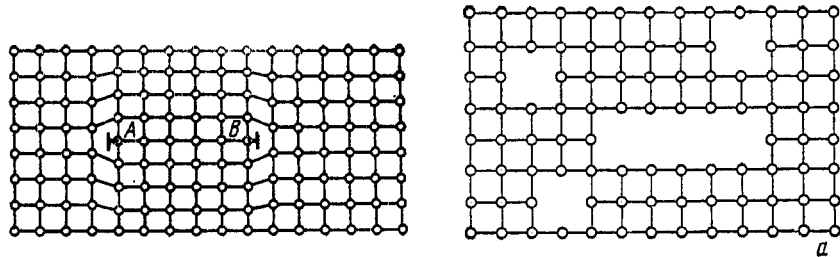
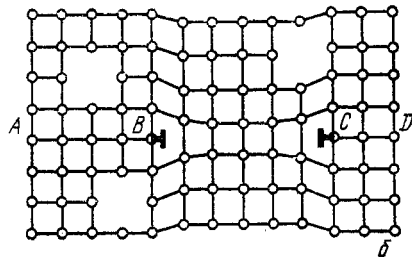


Рис. 126. Строение кристалла в области призматической дислокационной петли, являющейся границей плоского горизонтального скопления межузельных атомов AB

Рис. 127. Кристалл с расположенным в горизонтальной плоскости вакансионным диском (а) и после захлопывания этого диска, приведшего к образованию призматической дислокационной петли BC (б)



§ 28. Вектор Бюргерса¹

Вектор Бюргерса является мерой искаженности кристаллической решетки, обусловленной присутствием в ней дислокации. Он определяет энергию дислокации, действующие на дислокацию силы, величину связанного с дислокацией сдвига, влияет на подвижность дислокации. Следовательно, вектор Бюргерса — главная количественная характеристика дислокации.

Если дислокация вводится в кристалл чистым сдвигом — так, как это было показано выше на примере краевой, винтовой и смешанной дислокаций (см. рис. 105, 112, и 120), то вектор сдвига и является вектором Бюргерса. Вектор сдвига оп-

ределяет величину и направление смещений атомов в той области, где сдвиг уже произошел, т. е. определяет степень искаженности решетки, связанной с присутствием дислокации, введенной в кристалл путем сдвига. Однако дислокация далеко не всегда вызывается сдвигом. Кроме того, не все типы дислокаций можно определить через вектор сдвига. Поэтому более общим является определение вектора Бюргерса не как вектора сдвига, а как меры искаженности кристаллической решетки.

Чтобы оценить степень искаженности решетки, вызванной дислокацией, следует сравнить несовершенный кристалл, содержащий дислокацию, с совершенным кристаллом. Для этого строят так называемый **контур Бюргерса**. Контуром Бюргерса называется замкнутый контур произвольной формы, построенный в реальном кристалле путем последовательного обхода дефекта от атома к атому в совершенной области кристалла.

На рис. 128, а показано построение контура Бюргерса вокруг краевой дислокации. За исходную точку принят атом А. Строя контур, пойдем вверх в совершенной области от атома к атому. Пройдя вверх шесть межатомных расстояний, в точке В остановимся и пойдем налево: через шесть межатомных расстояний достигнем точки С и пойдем вниз (мы могли бы по горизонтали справа налево пройти не шесть, а пять, семь или восемь межатомных расстояний). Вниз от точки С, отсчитав шесть межатомных расстояний, попадем в точку D, находящуюся на одном уровне с точкой А. Чтобы замкнуть контур на отрезке DA, необходимо пройти не произвольное, а строго определенное число межатомных расстояний — ровно пять. Замкнутая линия ABCD, соединяющая атомы совершенной области решетки и охватывающая краевую дислокацию, является контуром Бюргерса.

Проведем соответствующий контур в совершенном кристалле, т. е. кристалле без дислокации (рис. 128, б). Выберем произвольно в качестве исходной точки атом А' и пройдем вверх от него шесть межатомных расстояний (до точки В'), затем влево — шесть (до точки С'), вниз — шесть (до точки D') и вправо — пять межатомных расстояний, т. е. повторим число и направление шагов, сделанных при построении контура ABCD. Пройдя пять межатомных расстояний вправо от точки D', мы попадем в точку E, а не в исходную точку А': контур получается незамкнутым. Вектор \vec{b} , проведенный из точки E в точку А' и замыкающий контур, является вектором Бюргерса. Невязка (разомкнутость) контура A'B'C'D'E в совершенном кристалле обусловлена тем, что в кристалле с дислокацией из-за экстроплоскости на стороне BC, находящейся в верхней половине кристалла, на один атом больше, чем на стороне DA, находящейся в нижней половине кристалла.

Вокруг дислокации атомы в совершенной области, где проходит контур Бюргерса ABCD, несколько смещены по сравне-

¹ Для начинающих изучать теорию дефектов кристаллического строения понятие о векторе Бюргерса является одним из трудных разделов курса. При написании данного параграфа автор использовал методику изложения Л. И. Васильева, который наиболее доступно рассмотрел представления о векторе Бюргерса.

нию с расположением их в совершенном кристалле без дислокации. Сумма всех упругих смещений, накопившаяся при обходе по контуру Бюргерса $ABCD$, и проявляется в виде невязки, когда соответствующий контур строят в совершенном кристалле. Поэтому вектор Бюргерса, замыкающий в совершенном кристалле контур Бюргерса, является мерой той искаженности решетки в несовершенном кристалле, которая вызвана дислокацией. Величина вектора Бюргерса не зависит от того, насколько контур Бюргерса удален от дислокации. Чем

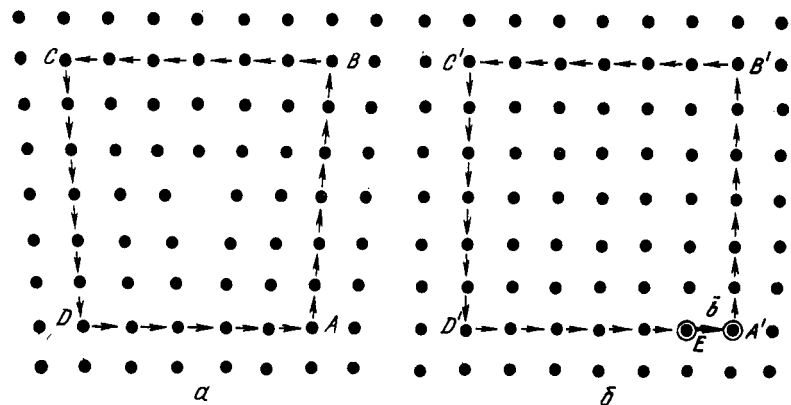


Рис. 128. Контур Бюргерса вокруг краевой дислокации (а) и эквивалентный контур в совершенном кристалле (б); \vec{b} — вектор Бюргерса

дальше от дислокации мы располагаем этот контур, тем меньше упругие смещения атомов в совершенной области, но тем длиннее контур, и сумма всех упругих смещений, накопившаяся при его обходе, неизменна.

Рис. 129 демонстрирует построение контура и вектора Бюргерса винтовой дислокации. Контур Бюргерса можно, например, построить от исходной точки A (рис. 129, а). Пройдем от нее влево девять межатомных расстояний до точки B , шесть — до точки C и вправо девять — до точки D . Чтобы попасть на уровень исходной точки A , спустимся от точки D по вертикали вниз до точки E на одно межатомное расстояние и пройдем шесть межатомных расстояний от E до A .

Для проведения соответствующего контура в совершенном кристалле (рис. 129, б) сделаем девять «шагов» от исходной точки A' до B' , затем шесть — до C' , девять — до D' , один шаг вниз по вертикали от D' до E' и шесть шагов — на горизонтальном уровне в сторону исходной точки. При этом мы попадаем не в исходную точку A' , а в точку F . Невязку контура ликвидируем, замыкая его вектором Бюргерса \vec{b} (соединяя точки F и A'). Этот вектор на рис. 129, б характеризует степень иска-

женности решетки, вызванной винтовой дислокацией в кристалле на рис. 129, а. Весьма удобно, что искаженность решетки несовершенного кристалла выражается через период решетки идеального кристалла, т. е. через константу.

Легко увидеть, что векторы Бюргерса, полученные на рис. 128 и 129, являются векторами сдвига¹.

Направление вектора Бюргерса зависит от направления обхода по контуру Бюргерса. Следовательно, в понятии вектора

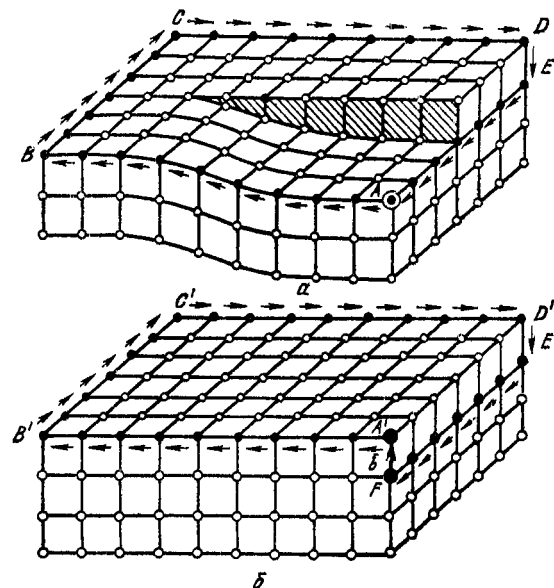


Рис. 129. Контур Бюргерса вокруг винтовой дислокации (а) и эквивалентный контур в совершенном кристалле (б)

Бюргерса содержится неопределенность, соответствующая углу в 180 град. Но это не является серьезным недостатком, так как сущность указанной неопределенности сводится к тому, например, что пробег краевой дислокации через весь кристалл (см. рис. 109) вызвал сдвиг верхней половины кристалла влево относительно нижней или, что то же самое, сдвиг нижней половины кристалла вправо относительно верхней половины.

Вектор Бюргерса характеризуется рядом особенностей:

1. Нормален к линии краевой дислокации и параллелен ли-

¹ Примеры построения контуров Бюргерса в примитивной кубической решетке на рис. 128 и 129 могут создать ложное представление о том, что вектор Бюргерса всегда равен периоду решетки. В действительности же, как показано в гл. VI, вектор Бюргерса в типичных решетках металлов очень часто не равен периоду решетки.

нии винтовой дислокации. Вдоль линии смешанной дислокации угол между ней и вектором Бюргерса в разных точках имеет разную величину (см. рис. 120).

2. У дефектов недислокационного типа равен нулю. Если построить контур Бюргерса вокруг любого точечного дефекта или линейного дефекта недислокационного типа (вокруг цепочки атомов или вакансий), то соответствующий контур в идеальном кристалле окажется замкнутым.

3. Одинаков вдоль всей линии дислокации, т. е. является инвариантом дислокации. Это следует, например, из того, что при смещении контура Бюргерса вдоль линии дислокации он все время будет оставаться эквивалентным исходному контуру (при условии, что он всеми своими точками не выходит из совершенной области решетки, т. е. не пересекает другие несовершенства). Кроме того, вектор сдвига, создавшего, например, криволинейную смешанную дислокацию (см. рис. 120), имеет одну величину и одно направление для всего кристалла.

Рис. 130. Краевая $\bar{b}_{кр}$ и винтовая $\bar{b}_в$ составляющие вектора Бюргерса смешанной дислокации $\bar{b}_{см}$

Вектор Бюргерса смешанной дислокации можно разложить на краевую и винтовую компоненты, которые зависят от угла ϕ между вектором Бюргерса и линией смешанной дислокации mn (рис. 130).

Из инвариантности вектора Бюргерса вытекает важное следствие: дислокация не может обрываться внутри кристалла. Допустив противное, продвинем контур Бюргерса за предполагаемую точку обрыва дислокации. Контур останется неизменным, так как все время находится в области с совершенной решеткой. Но если ему соответствует прежний вектор Бюргерса, отличный от нуля, это значит, что внутри контура Бюргерса все время присутствует дислокация, т. е. обрыв ее внутри кристалла невозможен. Дислокация может обрываться только на границе кристалла. Внутри кристалла дислокации могут образовывать замкнутые петли с одинаковым вектором Бюргерса вдоль всей петли или встречаться с другими дислокациями, образуя узлы (точки встречи) пространственных и плоских сеток.

То, что дислокация не обрывается внутри кристалла, можно доказать, как уже упоминалось в § 26, следующим весьма наглядным путем. Дислокация является границей зоны сдвига (см. § 21), которая должна быть замкнутой линией (часть этой линии может проходить по поверхности кристалла, как, например, на рис. 104).

Из § 22, 25 и 26 следует, что вектор Бюргерса и линия дислокации однозначно определяют возможную плоскость (поверхность) скольжения.

Поскольку вектор Бюргерса — столь важная количественная характеристика дислокации, необходимо уметь обозначить его так, чтобы запись отражала направление и величину вектора.

Если вектор \bar{b} по трем координатным осям x , y и z имеет составляющие b_x , b_y и b_z , то это записывают так: $\bar{b} = [b_x b_y b_z]$.

Величину вектора Бюргерса или, как часто говорят, его мощность легко определить:

$$b = |\bar{b}| = \sqrt{b_x^2 + b_y^2 + b_z^2}.$$

За направления осей x , y и z обычно принимают кристаллографические направления ребер элементарной ячейки данной решетки. В случае кубической решетки составляющие по осям b_x , b_y и b_z можно выразить через период элементарной ячейки a .

Этот период войдет в общий наибольший делитель na , где n — некоторое число. Тогда

$$\bar{b} = na [uvw]. \quad (56)$$

Здесь u , v и w — целые числа, а $[uvw]$ — символ кристаллографического направления вектора Бюргерса. Мощность же его

$$b = na \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}. \quad (57)$$

Рассмотрим форму записи трех векторов Бюргерса \bar{b}_1 , \bar{b}_2 и \bar{b}_3 в примитивной кубической решетке (рис. 131).

Для вектора \bar{b}_1 составляющие по осям $b_{1x}=0$, $b_{1y}=a$ и $b_{1z}=0$. Следовательно, $\bar{b}_1 = [0a0] = a[010]$. Это значит, что направлением вектора \bar{b}_1 является кристаллографическое направление $[010]$, а мощность его равна $a\sqrt{0^2+1^2+0^2} = a$.

Для вектора \bar{b}_2 : $b_{2x}=a$, $b_{2y}=a$ и $b_{2z}=0$. $\bar{b}_2 = [aa0] = a[110]$; его величина равна $a\sqrt{1^2+1^2+0^2} = a\sqrt{2}$.

Для вектора \bar{b}_3 имеем: $\bar{b}_3 = [aaa] = a[111]$. Его мощность равна $a\sqrt{1^2+1^2+1^2} = a\sqrt{3}$.

Векторы Бюргерса в гексагональной решетке рассмотрены в § 38.

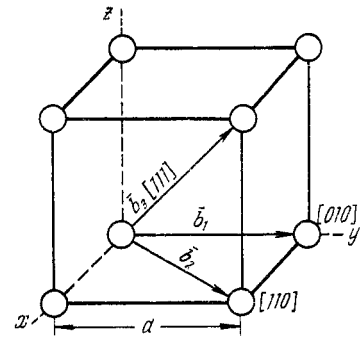


Рис. 131. Векторы Бюргерса в примитивной кубической решетке

§ 29. Плотность дислокаций

Важная характеристика дислокационной структуры, от которой зависят многие свойства металлов — *плотность дислокаций* — суммарная длина всех линий дислокаций в единице объема. Плотность дислокаций, см^{-2}

$$\rho = (\Sigma l / V), \quad (58)$$

где Σl — суммарная длина всех линий дислокаций в кристалле, см; V — объем кристалла, см^3 .

Плотность дислокаций определяют и как число дислокаций, пересекающих единицу площади, например единицу площади металлографического шлифа.

Плотность дислокаций зависит от способа и режима обработки металла. Ниже для металлов в разных состояниях приведены типичные значения плотности дислокаций, см^{-2} :

Тщательно выращенный массивный монокристалл	
очень высокой чистоты	$< 10^3$
Отожженный обычный монокристалл	$10^4 - 10^6$
Отожженный поликристалл	$10^7 - 10^8$
Металл после сильной холодной деформации	$10^{11} - 10^{12}$

Промышленностью освоено производство бездислокационных полупроводниковых кристаллов кремния.

§ 30. Методы выявления дислокаций в металлах

Прямое доказательство существования дислокаций в кристаллах впервые получено в 1956 г. При исследовании в просвечивающем электронном микроскопе фталоцианина платины с большим межплоскостным расстоянием (около 1,2 нм) удалось непосредственно получить изображение отдельных атомных плоскостей, причем были обнаружены участки с неполными атомными плоскостями.

Современная электронная микроскопия высокого разрешения позволяет получить изображение атомных плоскостей в металлах, где межплоскостные расстояния составляют доли нанометра.

Для наблюдения линий дислокаций и пространственного расположения их в объеме прозрачных кристаллов была разработана техника декорирования дислокаций. В кристалл вводят примесь, атомы которой притягиваются к дислокациям. При соответствующей термообработке область вокруг линии дислокации оказывается пересыщенной примесью, которая выделяется в виде мельчайших частиц вдоль линии дислокации. Эти непрозрачные частицы, рассеивающие свет, делают видимой линию дислокации, хотя диаметр ее ядра находится за пределами разрешающей способности обычного микроскопа.

В кремнии, прозрачном в инфракрасной области спектра, декорированные дислокации наблюдаются в инфракрасном микроскопе (рис. 132, сравните с рис. 200). Этот метод неприменим к металлическим кристаллам из-за их непрозрачности в лучах видимой и инфракрасной областей спектра.

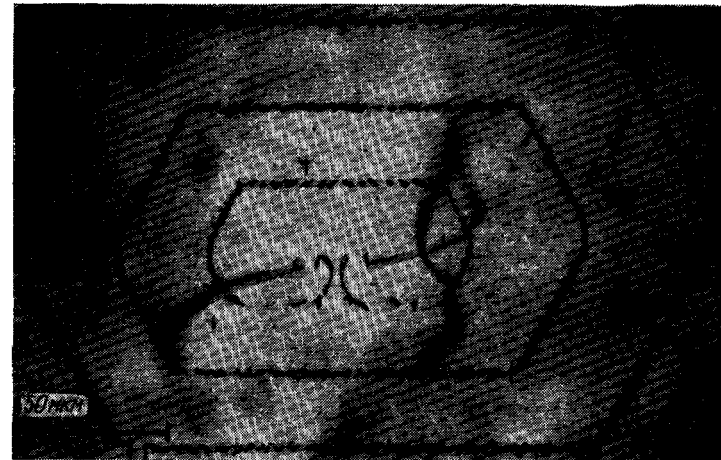


Рис. 132. Дислокационные петли в пластинке кремния, наблюдаемые в инфракрасном микроскопе (Дэш). Для декорирования дислокации выделениями меди кристалл кремния был нагрет в контакте с медью до 900 °С и затем охлажден до 20 °С

1. МЕТОД ЯМОК ТРАВЛЕНИЯ

При воздействии специально подобранного травителя на полированную поверхность шлифа в местах выхода линий дислокаций на эту поверхность появляются *ямки травления* (рис. 133). Последнее обусловлено тем, что ядро дислокации действует как центр растворения. Под микроскопом ямка травления становится видна тогда, когда она достигает размеров, на много порядков больших, чем ширина ядра дислокации. Так как в кристалле скорость растворения зависит от направления, то часто, но не всегда, ямки травления имеют четко различимую кристаллографическую огранку. Например, в кристаллах с г. ц. к. решеткой в плоскости $\{111\}$ ямки травления имеют треугольную форму, а в плоскости $\{100\}$ — квадратную. При отклонении плоскости шлифа от этих кристаллографических плоскостей треугольники и квадраты искажаются. Если дислокация имеет примесную атмосферу, разница в химическом составе участков у выхода линии дислокации на поверхность шлифа и вне этих участков служит дополнительным фактором, способствующим появлению дислокационных ямок травления.

Метод ямок травления используют для оценки плотности дислокаций (по числу ямок травления, приходящихся на единицу площади шлифа) и особенностей распределения дислокаций. Этот метод применительно к металлам следует использовать с большой осторожностью. Травитель может не выявить все дислокации. Необходимо добиться независимости числа ямок от продолжительности травления.

С другой стороны, случайные включения, дефекты оксидной пленки и другие дефекты могут образовать свои ямки травления и исказить представление об истинной дислокационной структуре.

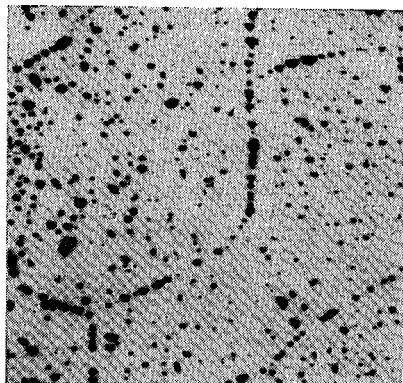


Рис. 133. Ямки травления в монокристалле алюминия, полученном вытягиванием из расплава; $\times 70$. Травитель: 50 % $\text{HCl} + 47\% \text{HNO}_3 + 3\% \text{HF}$

Для ее установления необходимо применять многократную полировку и повторное травление, чтобы убедиться в повторяемости картины расположения ямок травления. Так как линии дислокаций идут от поверхности шлифа в глубь металла, то при переполировке и повторном травлении расположение ямок травления должно воспроизводиться почти в точности.

Метод ямок травления внешне кажется простым и заманчивым для металлографа. Но если для каждого конкрет-

ного металла и сплава не произвести необходимую подготовительную методическую работу, то можно получить ложное представление о его дислокационной структуре.

При наблюдении в световом микроскопе метод ямок травления применим к металлу, у которого локальная плотность дислокаций должна быть не более 10^8 см^{-2} (в противном случае соседние ямки перекрываются).

Метод ямок травления применяют при изучении литых, отожженных и слабодеформированных металлов. Особенно широко этот метод используют при исследовании полупроводниковых кристаллов и некоторых галоидных соединений.

2. ДИФРАКЦИОННАЯ (ПРОСВЕЧИВАЮЩАЯ) ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ

Электронные лучи, проходя через тонкую металлическую пластинку — фольгу, частично дифрагируют на кристаллической решетке, отражаясь от тех ее атомных плоскостей, для которых выполняется условие Вульфа — Брэггов:

$$n\lambda = 2d \sin \vartheta, \quad (59)$$

где λ — длина электронных волн; d — межплоскостное расстояние; n — целое число (порядок отражения); ϑ — угол между падающим пучком и отражающей плоскостью.

Интенсивность пучка лучей $I_{\text{пр}}$, прошедших через фольгу и узкую апертурную диафрагму D , отсекающую отклоненные лучи, равна разности интенсивностей падающих на фольгу первичного пучка I_0 и дифрагированных лучей I_d (рис. 134). Чем больше интенсивность лучей, дифрагированных от определенного участка фольги, тем меньше интенсивность пучка $I_{\text{пр}}$, прошедшего через диафрагму и создающего изображение этого участка, тем более темным выглядит этот участок на экране.

На рис. 105 вблизи дислокации вертикальные атомные плоскости изогнуты в противоположные стороны. Поэтому если кристалл в целом отклонен от отражающего положения ($\vartheta' < \vartheta$ на рис. 134), то участок справа от дислокации может оказаться ближе к отражающему положению, а слева — дальше от него (или наоборот). Следовательно, через участок кристалла справа от дислокации пройдут в направлении первичного пучка лучи меньшей интенсивности, и в результате на экране получится темное изображение этого участка в виде линий шириной 5—20 нм. Таким образом, при просвечивании металлической фольги электронными лучами благодаря дифракционной природе контраста возникает изображение искаженного участка решетки, расположенного по одну сторону от краевой дислокации (аналогичным образом выявляются дислокации любой ориентации). Изображение дислокации смещено от ее центра на расстояние, примерно равное ширине изображения.

Картина с изображением линий дислокаций (рис. 135) представляет собой проекцию пространственного расположения дислокаций в фольге (рис. 135, б) на плоскость экрана. Концевые точки линий, изображающих дислокации (рис. 135, а), не являются местами обрыва дислокаций внутри фольги (чего вообще быть не может), а представляют собой точки выхода дислокаций на верхнюю и нижнюю поверхности фольги (рис. 135, б) или на одну и ту же поверхность.

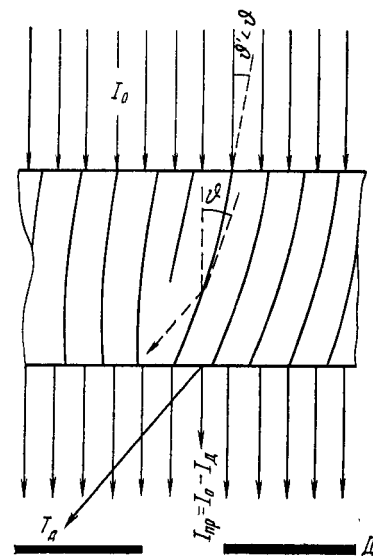


Рис. 134. Схема возникновения дифракционного контраста в электронном микроскопе при просвечивании фольги в участке, содержащем краевую дислокацию

Благодаря сравнительно малой ширине изображения нерасщепленных дислокаций дифракционная электронная микроскопия тонких фольг позволяет изучать металлы и сплавы с локальной плотностью дислокаций до 10^{12} и средней плотностью до 10^{11} см $^{-2}$. Это единственный метод, который дает возможность наблюдать отдельные дислокации и распределение их в сильно наклепанном металле.

Фольга для исследования дислокационной структуры должна быть прозрачной для электронов и поэтому иметь толщину не более 0,5 мкм. Чем больше атомный номер элемента,

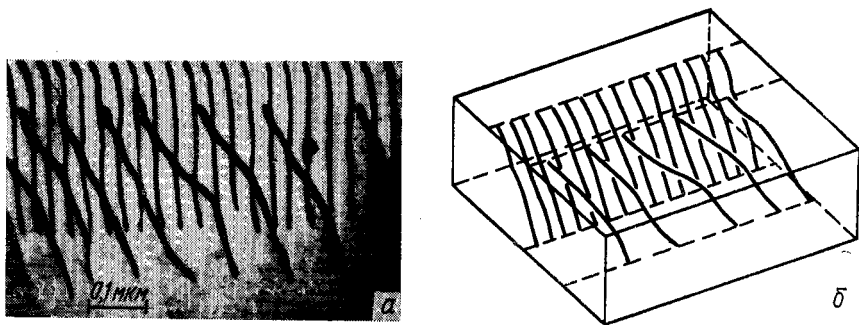


Рис. 135. Два ряда дислокаций в фольге толщиной 200 нм (Хал): а — изображение дислокаций (темные линии), полученное в просвечивающем электронном микроскопе; б — схема пространственного расположения дислокаций, проходящих от одной поверхности фольги к другой

тем сильнее он поглощает электроны и тем тоньше должна быть фольга. Обычная ее толщина 0,1—0,2 мкм. Такую фольгу получают электролитической или химической полировкой тонкой пластинки, вырезанной из исследуемого массивного материала.

Метод электронно-микроскопического просвечивания фольг, впервые примененный в 1956 г., оказался универсальным, и в настоящее время с его помощью физики и металловеды получают основную информацию о дислокационной структуре металлов и сплавов.

Плотность дислокаций ρ можно определить по числу точек выхода дислокаций на единицу площади поверхности фольги. Это число нужно уменьшить вдвое, так как на электронно-микроскопическом изображении видны места выхода дислокаций на нижнюю и верхнюю поверхности фольги (см. рис. 135). Такой метод определения ρ не требует измерения толщины фольги. Однако с его помощью трудно измерить $\rho \geq 3 \cdot 10^9$ см $^{-2}$. Поэтому чаще используют способ измерения плотности дислокаций, как отношения суммарной длины дислокационных линий L к объему фольги; для измерения L используют метод секущих.

При очень высокой плотности дислокаций (порядка 10^{11} — 10^{12} см $^{-2}$), когда изображения отдельных дислокаций сливаются, можно использовать рентгеновский метод определения ρ — по уширению рентгеновских линий (при условии, что дислокации распределены сравнительно равномерно по объему зерен).

Экспериментальное выявление дислокаций разными методами показало, что большая часть предсказанных теорией моделей действительно реализуется в кристаллах.

Глава V УПРУГИЕ СВОЙСТВА ДИСЛОКАЦИЙ

§ 31. Энергия дислокации

Дислокация повышает энергию кристалла. Она — центр поля внутренних напряжений, убывающих с увеличением расстояния от дислокации. В ядре дислокации смещения атомов настолько велики, что рассчитать энергию здесь с помощью метода теории упругости не удастся. За пределами ядра дислокации деформации описываются линейными уравнениями теории упругости, и поле напряжений и соответствующую энергию легко вычислить.

Для оценки энергии винтовой дислокации введем допущение, что в процессе ее образования кристалл ведет себя как упругое изотропное тело. Возьмем такой совершенный кристалл, сделаем в нем несквозной надрез и сдвинем две части этого кристалла одну относительно другой по плоскости надреза на величину b так, как это уже рассматривалось на рис. 112. Такой сдвиг происходит под действием касательных сил и соответствующих напряжений в плоскости надреза. Работа, совершенная этими силами для создания смещения b , равна энергии винтовой дислокации

$$E_b = \int \frac{\tau}{2} ds \cdot b,$$

где τ — касательное напряжение, вызывающее сдвиг на величину b .

В период сдвига напряжение линейно возрастает от 0 до τ . Поэтому при расчете энергии сдвига необходимо брать среднюю за весь период сдвига величину касательного напряжения, равного $\tau/2$. Произведение этого напряжения на площадь ds , по которой происходит сдвиг, дает силу сдвига, а произведение силы сдвига на величину смещения дает искомую работу сдвига. Но касательные напряжения на разном расстоянии от оси дислокации различны (они убывают с увеличением этого

расстояния). Поэтому приходится брать интеграл касательных напряжений по всей площади сдвига.

Для расчета касательных напряжений используем следующий прием. Мысленно подразделим кристалл на ряд цилиндрических слоев с общей осью. Возьмем один такой цилиндрический слой (рис. 136, а) с радиусом r и толщиной dr , разрежем его вдоль образующей цилиндра l с одной стороны и сместим на величину b одну часть этого слоя по отношению к другой. При условии, что толщина слоя мала, величина силы, препятствующей указанному смещению, не изменится, если цилиндрический слой развернуть в плоскую пластину (рис. 136, б).

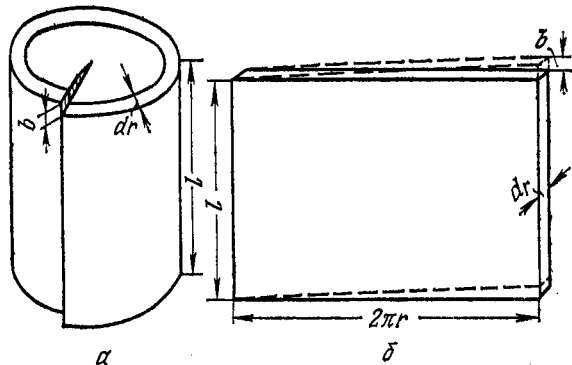


Рис. 136. Цилиндрическая оболочка вокруг винтовой дислокации, развернутая в пластину

Для малых сдвиговых деформаций справедлив закон Гука: $\tau = Gb/2\pi r$ (G — модуль сдвига). Это касательное напряжение действует на площадке $ds = ldr$. Тогда

$$E_b = \int \frac{\tau}{2} ds \cdot b = \int \frac{Gb^2 l}{4\pi r} dr = \frac{Gb^2 l}{4\pi} \int_{r_0}^R \frac{dr}{r};$$

$$E_b = (Gb^2 l / 4\pi) \ln(R/r_0). \quad (60)$$

В этом выражении: G — модуль сдвига; b — вектор Бюргера дислокации; l — длина дислокации; r_0 — радиус ядра дислокации (несколько межатомных расстояний); R — расстояние, на которое распространяется упругая деформация от дислокации.

Далее везде (если не будет специальных оговорок) под энергией дислокации будем понимать связанную с ней упругую энергию кристалла, приходящуюся на единицу длины дислокации. Следовательно:

$$E_b = (Gb^2 / 4\pi) \ln(R/r_0). \quad (61)$$

Расчет энергии краевой дислокации более сложен, так как поле напряжений вокруг нее не обладает цилиндрической симметрией, как поле вокруг винтовой дислокации (с одной стороны от плоскости скольжения — растяжение, а с другой — сжатие).

Энергия краевой дислокации

$$E_{кр} = [Gb^2 / 4\pi (1 - \mu)] \ln(R/r_0), \quad (62)$$

где μ — коэффициент Пуассона, а остальные величины те же, что и в формуле (60). Приняв типичное для металлов значение $\mu = 1/3$, получим, что энергия краевой дислокации в 1,5 раза больше энергии винтовой дислокации. Этим различием в большинстве оценочных расчетов можно пренебречь.

Большинство дислокаций в реальных металлах — смешанные. Вектор Бюргера смешанной дислокации можно разложить на краевую и винтовую компоненты: $b_{кр} = b_{см} \sin \varphi$, $b_v = b_{см} \cos \varphi$ (см. рис. 130). Используя формулы (61) и (62), представим энергию смешанной дислокации как сумму энергий краевой и винтовой дислокаций с указанными векторами Бюргера:

$$E_{см} = E_{кр} + E_v = [Gb_{см}^2 / 4\pi (1 - \mu)] (1 - \mu \cos^2 \varphi) \ln(R/r_0). \quad (63)$$

При $\varphi = 0^\circ$ это выражение преобразуется в формулу (61), а при $\varphi = 90^\circ$ — в формулу (62). Следовательно, в зависимости от угла наклона вектора Бюргера к линии смешанной дислокации ее энергия является промежуточной между значениями энергии краевой и винтовой дислокаций.

Энергия дислокации зависит от расстояния R , на которое от нее распространяется упругая деформация. Максимальное значение R ограничено размерами кристалла. Обычно R принимают равным половине среднего расстояния между соседними дислокациями. Для оценочных расчетов весьма благоприятно то, что энергия дислокаций очень слабо зависит от величины R в реальных кристаллах. Для наиболее типичных интервалов значений R , r_0 и μ формулы (61), (62) и (63) приобретают вид, очень удобный при оценках энергии дислокации любого типа:

$$E = \alpha Gb^2, \quad (64)$$

где $\alpha = 0,5 \div 1,0$.

Вполне естественно, что энергия дислокации зависит от вектора Бюргера, характеризующего степень искаженности решетки, и от модуля сдвига, являющегося характеристикой сил межатомной связи. Чем больше G , тем сильнее межатомные силы сопротивляются смещениям атомов, т. е. больше накапливается упругая энергия искажений решетки.

Разные оценки показывают, что потенциальная энергия ядра дислокации по порядку величины не превышает одну десятую энергии, связанной с упругой деформацией за пределами ядра дислокации. Вследствие неопределенности расчетов общую энергию дислокации считают равной αGb^2 . Для разных твердых тел энергия винтовых дислокаций обычно находится в пределах 3—10 эВ в расчете на одно межатомное расстояние вдоль линии дислокации.

Увеличение длины дислокации приводит к росту ее упругой энергии, и линия дислокации ведет себя как упругая нить, всегда стремящаяся выпрямиться, чтобы сократить свою длину. Поэтому линейное натяжение дислокации T равно энергии E , приходящейся на единицу ее длины [размерность E — джоуль на метр (Дж/м), размерность силы линейного натяжения — ньютон (Н); Дж/м = Н · м/м = Н].

Следовательно, с учетом формулы (64)

$$T = \alpha Gb^2. \quad (65)$$

Сила линейного натяжения T направлена вдоль линии дислокации.

Смещения атомов в ядре дислокации и упругие смещения в поле вокруг дислокации за пределами этого ядра сильно повышают энергию кристалла U . Вместе с тем дислокации увеличивают неупорядоченность и соответственно энтропийный член TS в формуле для энергии Гельмгольца ($A = U - TS$).

Введение дислокации увеличивает число возможных способов размещения атомов в решетке, так как дислокация может располагаться в кристалле разными способами. Это обуславливает повышение конфигурационной энтропии. Возрастает также колебательная энтропия, так как вблизи дислокации оказывается измененной частота колебаний атомов.

Уменьшение энергии Гельмгольца при росте энтропии намного меньше, чем повышение энергии Гельмгольца вследствие образования поля упругих напряжений при введении дислокации в кристалл. Поэтому в отличие от точечных дефектов, которые в определенном числе (концентрации) являются равновесными для данной температуры, дислокации при любых температурах и в любом числе повышают энергию Гельмгольца кристалла и всегда являются термодинамически неравновесными дефектами. В отличие от точечных дефектов, равновесная концентрация которых растет с температурой пропорционально фактору Больцмана $e^{-E_0/kT}$, количество дислокаций не зависит от температуры. Это объясняется большой величиной упругой энергии их образования. Флуктуации энергии не способны создать новую дислокацию; фактор Больцмана здесь не играет существенной роли.

§ 32. Силы, действующие на дислокацию

Движение дислокации вызывает пластическую деформацию кристалла, т. е. дислокация совершает работу. Учитывая это, можно оперировать представлением о действии некоторой силы на линию дислокации как на самостоятельный физический объект. Фактически же дислокация — не частица, не тело, а особая конфигурация в расположении атомов. Следовательно, ниже речь идет о силе, действующей на эту конфигурацию, и такую силу не следует смешивать с силами, действующими на атомы. Это наглядно видно из рассмотрения атомного механизма перемещения винтовой дислокации на рис. 115. В § 25 уже отмечалось, что в области ядра дислокации атомы смещаются вниз и вверх в направлении действующих на них сил, а сама конфигурация, называемая винтовой дислокацией, перемещается вправо перпендикулярно этому направлению. В рассматриваемом случае можно говорить о силе, действующей на дислокацию и направленной перпендикулярно касательным напряжениям от приложенной силы.

В общем случае на дислокацию действуют силы разного происхождения: внешние силы, приложенные к поверхности кристалла, внутренние силы от действия поля напряжений вокруг соседних дислокаций, инородных атомов и других несовершенств.

Ниже рассматривается случай действия только внешних сил (внутренние напряжения от других дефектов отсутствуют). Основная идея расчета состоит в следующем. Кристалл от внешнего источника получает дополнительную энергию в виде механической работы A . Вся эта энергия переходит в работу A_d , совершаемую силой F_d , действующей на дислокацию ($A_d = A$).

Рассмотрим краевую дислокацию на рис. 104 и 109. Однородные касательные напряжения τ от внешней силы F , совершив сквозной сдвиг верхней части кристалла относительно нижней на величину b , произведут работу $A = Fb$. Так как касательные напряжения действуют на площади $l_1 l_2$, где l_1 — длина и l_2 — ширина кристалла, то сила, действующая в этой плоскости, $F = \tau l_1 l_2$ и $A = b \tau l_1 l_2$.

Нашей целью является вычисление силы f , действующей на единицу длины дислокации. Сила, действующая на всю дислокацию, $F_d = f l_2$.

При перемещении дислокации через всю длину кристалла l_1 работа этой силы $A_d = F_d l_1 = f l_1 l_2$. Она, как уже указывалось, равна затраченной работе A . Следовательно, $f l_1 l_2 = b \tau l_1 l_2$, откуда

$$f = b \tau. \quad (66)$$

Сила, действующая на единицу длины дислокации, равна произведению вектора Бюргерса на касательное напряжение

в плоскости скольжения. Эта сила перпендикулярна линии дислокации и направлена к той части плоскости скольжения, где оно еще не происходило.

Аналогичный результат легко получить и для случая движения винтовой дислокации под действием однородных касательных напряжений.

Доказывается, что и в случае смешанной дислокации сила, действующая на единицу ее длины, равна произведению вектора Бюргерса на касательное напряжение и направлена перпендикулярно касательной к линии дислокации в любой ее точке в сторону участка плоскости скольжения, еще не охваченного сдвигом. Так как вектор Бюргерса является инвариантом дислокации, а при однородных касательных напряжениях величина τ на всей плоскости скольжения одна и та же, то сила, действующая на единицу длины дислокации, по своей величине (но не по направлению) одна и та же в любом участке криволинейной дислокации, находящейся в плоскости скольжения.

Рис. 137. Схема к расчету напряжения, выгибающего линию дислокации в дугу

Если направление касательных напряжений от приложенной силы не совпадает с направлением вектора Бюргерса, то в формуле (66) величина τ представляет собой проекцию касательного напряжения на направление вектора Бюргерса.

Когда разные участки дислокации лежат в не параллельных плоскостях, то проекция касательного напряжения на направление вектора Бюргерса в разных плоскостях может быть неодинаковой и соответственно разной будет сила f .

Например, на рис. 124, b сила, действующая на единицу длины дислокации в плоскости (111), в общем случае должна отличаться от силы, действующей в плоскости ($\bar{1}\bar{1}$).

Линия дислокации под действием касательных напряжений должна выгибаться. Выгибанию дислокации препятствует ее линейное натяжение. Найдем напряжение τ , необходимое для выгибания линии дислокации в дугу с радиусом r (рис. 137).

На элемент дуги δl действует приложенная сила $b\tau\delta l$, направленная вдоль OA . Противодействующая ей восстанавливающая сила F (результат линейного натяжения) направлена к центру кривизны вдоль AO . Силу F можно определить, считая, что линейное натяжение создается силами T , приложенными по концам дуги. Тогда $F = 2T \sin \frac{1}{2}\delta\theta$.

При малых углах $\sin \frac{1}{2}\delta\theta \approx \frac{1}{2}\delta\theta$ и $F = T\delta\theta$. Так как

$\delta\theta = \delta l/r$, то $F = T\delta l/r$. Подставляя сюда значение T из выражения (65), получаем для восстанавливающей силы

$$F = \alpha G b^2 \delta l / r. \quad (67)$$

Для стабильной дуги $b\tau\delta l = F$, т. е. $b\tau\delta l = \alpha G b^2 \delta l / r$. Отсюда напряжение, необходимое для изгиба линии дислокации в дугу с радиусом r ,

$$\tau = \alpha G b / r. \quad (68)$$

§ 33. Упругое взаимодействие параллельных краевых дислокаций

Вокруг дислокации решетка деформирована и имеется поле напряжений, которое является источником силы, действующей на соседнюю дислокацию. Так же, как и в случае действия внешних сил, приложенных к поверхности кристалла, внутренние напряжения от одной дислокации обуславливают наличие силы, действующей на единицу длины другой дислокации и равной произведению вектора Бюргерса на составляющую касательного напряжения в направлении этого вектора (66).

Пользуясь формулами теории упругости изотропных сред, можно определить напряжения в любой точке вокруг дислокации и рассчитать силу действия этой дислокации на другую. К упругому взаимодействию дислокаций применим третий закон Ньютона: сила действия дислокации A на дислокацию B равна и противоположна по знаку силе действия дислокации B на дислокацию A .

Поле напряжений вокруг краевой дислокации не обладает такой простой симметрией, как поле напряжений вокруг винтовой дислокации. С одной стороны от плоскости скольжения имеется область гидростатического (всестороннего) сжатия, а с другой стороны — область гидростатического растяжения.

Для анализа сил взаимодействия дислокаций наиболее важны касательные напряжения, действующие в плоскости скольжения.

В поле напряжений вокруг краевой дислокации в точке с координатами x и y касательное напряжение в плоскости, параллельной плоскости скольжения:

$$\tau = [Gb/2\pi (1 - \mu)] [x(x^2 - y^2)/(x^2 + y^2)^2], \quad (69)$$

где x — координата в направлении вектора Бюргерса; y — координата в направлении, перпендикулярном плоскости скольжения; G — модуль сдвига; μ — коэффициент Пуассона; b — вектор Бюргерса.

Рассмотрим вначале две дислокации одного знака, расположенные в параллельных плоскостях скольжения (рис. 138, a). Начало координат поместим в точку O и будем рассматривать

силу воздействия первой дислокации в точке O на вторую дислокацию, имеющую координаты x, y в параллельной плоскости скольжения. Учитывая, что сила, действующая на единицу длины второй дислокации $f = b\tau$, а также выражение (69) для τ , можно записать для силы взаимодействия параллельных краевых дислокаций одного знака:

$$f = [Gb^2/2\pi(1-\mu)] [x(x^2 - y^2)/(x^2 + y^2)^2]. \quad (70)$$

Сложный характер зависимости этой силы от x обусловлен асимметрией поля напряжений вокруг краевой дислокации. Эта зависимость изображается кривой на рис. 138, a , построенной в координатах $f-x$. Началом координат для этой кривой

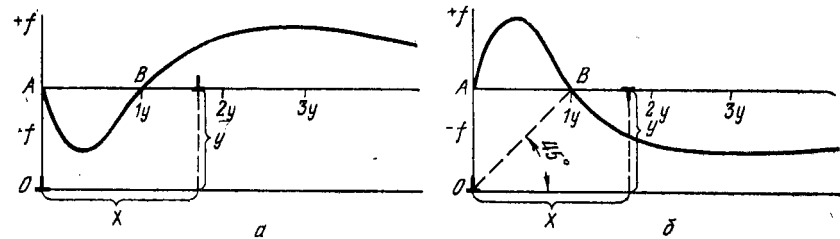


Рис. 138. Силы отталкивания $+f$ и притяжения $-f$ краевых дислокаций в параллельных плоскостях скольжения: a — одноименные дислокации; b — разноименные дислокации; x — расстояние между дислокациями в направлении плоскости скольжения; y — расстояние между плоскостями скольжения

является точка A , от которой вверх отложены значения $+f$, соответствующие отталкиванию. Вправо от точки A отложено расстояние между дислокациями в направлении скольжения. Таким образом, на рис. 138, a совмещены две схемы: одна показывает расположение одноименных краевых дислокаций в параллельных плоскостях скольжения, находящихся на расстоянии y одна от другой, а другая — зависимость силы взаимодействия этих дислокаций (f) от расстояния между ними в направлении скольжения (x). За единицу длины в направлении x принята величина y .

В точке B $x=y$ и $f=0$ [рис. 138, a и формула (70)]. Правее точки B $x>y$ и $f>0$, т. е. одноименные дислокации взаимно отталкиваются. Левее точки B $x<y$ и $f<0$, т. е. одноименные краевые дислокации на относительно близких расстояниях взаимно притягиваются. Это притяжение — результат низкой симметрии поля напряжений вокруг краевой дислокации, результат внецентренного взаимодействия. Сила взаимодействия одноименных дислокаций равна нулю при $x=0$ (в точке A) и при $x=y$ (в точке B). Но в точке B равновесие неустойчиво, так как небольшие отклонения от нее вправо или влево приводят к возникновению силы, стремящейся удалить дислокацию от точки B . В точке A равновесие устойчиво: небольшие

отклонения от точки A приводят к возникновению силы, стремящейся вернуть дислокацию в эту точку (левее точки A на рис. 138, a должна быть картина, симметричная той, что изображена правее этой точки). Таким образом, краевые дислокации одного знака, расположенные одна над другой, — механически устойчивая конфигурация. Обусловлено это тем, что под областью растяжения от одной дислокации находится область сжатия от другой дислокации.

Когда много одноименных дислокаций располагается одна над другой, такую устойчивую конфигурацию называют *дислокационной стенкой*.

Если одноименные дислокации находятся в одной плоскости скольжения, т. е. $y=0$, то формула для силы их взаимодействия приобретает следующий вид:

$$f = [Gb^2/2\pi(1-\mu)] x^{-1}. \quad (71)$$

Следовательно, между одноименными дислокациями, находящимися в одной плоскости скольжения, действует только сила взаимного отталкивания, обратно пропорциональная расстоянию между ними. Отсутствие взаимного притяжения в этом случае легко понять, так как при сближении двух экстраплоскостей чрезвычайно сильно искажается решетка, возрастает энергия.

Перейдем к рассмотрению взаимодействия разноименных краевых дислокаций в параллельных плоскостях скольжения (рис. 138, b). Сила воздействия дислокации, помещенной в точке O , на дислокацию противоположного знака с координатами x, y определяется следующей формулой:

$$f = -[Gb^2/2\pi(1-\mu)] [x(x^2 - y^2)/(x^2 + y^2)^2]. \quad (72)$$

Это выражение отличается от рассмотренного ранее для силы взаимодействия одноименных дислокаций только знаком минус.

При $x>y$ $f<0$, т. е. разноименные дислокации взаимно притягиваются. При $x<y$ $f>0$, т. е. они взаимно отталкиваются. При $x=0$ и $x=y$ $f=0$. В точке A равновесие неустойчиво, так как небольшое отклонение от этой точки вызывает появление силы, стремящейся удалить одну дислокацию от другой. В точке B ($x=y$) равновесие устойчиво: отклонение вправо и влево от точки B вызывает появление силы, стремящейся возвратить дислокацию в эту точку. Таким образом, линия, соединяющая разноименные дислокации, образующие устойчивую конфигурацию, находится под углом 45° к плоскости скольжения. Если разноименные краевые дислокации находятся в одной плоскости скольжения ($y=0$), то между ними действует только сила взаимного притяжения, обратно пропорциональная расстоянию между дислокациями:

$$f = -[Gb^2/2\pi(1-\mu)] x^{-1}. \quad (73)$$

Когда сближающиеся в одной плоскости скольжения (рис. 139, а) дислокации разного знака подходят вплотную одна к другой, они взаимно уничтожаются. Такую аннигиляцию легко себе представить: две экстраплоскости сливаются в единую полную атомную плоскость. Если же разноименные дислокации находятся не в одной плоскости скольжения, а в соседних плоскостях, разделенных одним межатомным расстоянием (рис. 139, б и в), то после их сближения образуется цепочка вакансий (б) между кромками экстраплоскостей или цепочка межузельных атомов (в), оказавшаяся «лишней» при слиянии экстраплоскостей в одну полную плоскость.

При увеличении расстояния между плоскостями скольжения притяжение разноименных дислокаций переходит в рассмотренное выше взаимное отталкивание на коротких расстояниях вдоль плоскости скольжения.

§ 34. Упругое взаимодействие параллельных винтовых дислокаций

Решетка вокруг винтовой дислокации испытывает чисто сдвиговую деформацию. Поле упругих напряжений винтовой дислокации в отличие от поля напряжений краевой дислокации содержит только касательные составляющие напряжения. Нормальные составляющие равны нулю, и областей гидростатического сжатия и растяжения вокруг винтовой дислокации нет.

Поле винтовой дислокации обладает осевой симметрией. В любой точке на расстоянии r от оси дислокации в плоскости, проходящей через эту ось и заданную точку, действует касательное напряжение $\tau = Gb/2\pi r$ (см. рис. 136, б).

Если две параллельные винтовые дислокации находятся на расстоянии r одна от другой, то одна дислокация действует на другую с силой

$$f = b\tau = \pm Gb^2/2\pi r. \quad (74)$$

Знак плюс относится к параллельным векторам Бюргерса (одноименным дислокациям), а знак минус — к антипараллельным векторам (разноименным дислокациям). Сила взаимодействия параллельных винтовых дислокаций приложена центрально, а величина ее обратно пропорциональна расстоянию между дислокациями. Плоскость, проходящая через линии двух винтовых дислокаций, является плоскостью скольжения (как любая другая плоскость, проходящая через линию винтовой дислокации)¹. Параллельные винтовые дислокации одного

¹ Реальные плоскости легкого скольжения для винтовых дислокаций, как и любых других, не произвольны, а определяются конкретной структурой кристаллов (см. § 38, 39, 41—43).

знака взаимно отталкиваются (независимо от расстояния) и стремятся удалиться одна от другой в бесконечность, передвигаясь скольжением. Параллельные винтовые дислокации разного знака, передвигаясь скольжением, взаимно притягиваются (независимо от расстояния). При встрече разноименные винтовые дислокации аннигилируют.

Выше рассматривались простейшие случаи взаимодействия параллельных дислокаций, когда расчетные формулы для силы взаимодействия получить легко. Значительно труднее вычислить силу взаимодействия произвольно направленных дислокаций. Эта задача здесь не рассматривается.

В заключение следует отметить, что поле напряжений дислокации убывает обратно пропорционально расстоянию от нее, а поле напряжений точечного дефекта — обратно пропорционально кубу расстояния. Поэтому в отличие от точечных дефектов, взаимодействующих при сближении на расстояние порядка межатомного, дислокации упруго взаимодействуют на значительных расстояниях благодаря своим дальнедействующим полям напряжений.

Глава VI ДИСЛОКАЦИИ В ТИПИЧНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

§ 35. Подразделение дислокаций на полные и частичные

В предыдущих главах геометрия основных типов дислокаций (краевой, винтовой и смешанной) рассматривалась на примере простой кубической решетки, в которой атомы находятся только в вершинах элементарной кубической ячейки. При этом каждый раз подразумевалось, что после пробега дислокации в зоне сдвига полностью восстанавливается исходная конфигурация атомов в пространстве. Вектор Бюргерса такой дислокации является одним из трансляционных векторов решетки, характеризующих перенос решетки таким образом, что конечное ее положение нельзя отличать от начального.

В случае примитивной кубической решетки трансляцию характеризует не только ребро элементарного куба $a <100>$. Если всю решетку сместить вдоль диагонали грани куба $<110>$ на ее величину (на $a\sqrt{2}$), то также полностью восстановится расположение атомов по узлам исходной кубической решетки. Трансляция обеспечивается и при смещении решетки вдоль пространственной диагонали куба $<111>$ на величину этой диагонали ($a\sqrt{3}$). Схема строения кристалла с красной дислокацией на рис. 105 соответствует вектору Бюргерса $a <100>$.

Аналогичная схема отображает красную дислокацию с вектором Бюргерса $a <110>$. Но в этом случае сетка должна состоять не из квадратов, а из прямоугольников, у которых одна сторона (расстояние между горизонтальными плоскостями кристалла) равна по-прежнему a , другая же сторона (расстояние между вертикальными плоскостями вдоль вектора сдвига) равна $a\sqrt{2}$.

Дислокации в простой кубической решетке, имеющие векторы Бюргерса $a <100>$, $a <110>$ либо $a <111>$, называются *единичными* или дислокациями единичной мощности.

Трансляцию в простой кубической решетке характеризуют не только единичные векторы $a <100>$, $a <110>$ и $a <111>$, но и любые другие векторы, которые в целое число раз $[n]$ больше единичных и имеют с ними одинаковое направление (например, $na <100>$, где $n=1, 2, 3, 4, \dots$). В принципе возможны дислокации, у которых вектор Бюргерса в целое число раз больше единичного. Такие дислокации называются дислокациями n -кратной мощности. Например, на рис. 140 схематично изображены краевые дислокации единичной и двухкратной мощности. Ясно, что при мощности вектора Бюргерса больше единичной энергия искажений решетки очень велика, и такая дислокация n -кратной мощности неустойчива; она стремится разделиться на n единичных дислокаций. В случае, показанном на рис. 140, б, вместо одной дислокации вблизи краев двух соседних экстраплоскостей образуются две отдельные дислокации, каждой из которых будет соответствовать одна экстраплоскость.

Единичные дислокации с векторами Бюргерса $a <100>$, $a <110>$ и $a <111>$ имеют разную энергию. В кристалле должны преобладать единичные дислокации с минимальной энергией, т. е. с наименьшим вектором Бюргерса. В простой кубической решетке это будут дислокации с вектором Бюргерса $a <100>$.

Единичные дислокации и дислокации n -кратной мощности обеспечивают при пробеге через кристалл трансляцию решетки. Такие дислокации называют *полными*.

Типичные кристаллические решетки металлов существенно отличаются от простой кубической. В г. ц. к., о. ц. к. и г. п. решетках существуют дислокации с такими векторами Бюргерса, что перемещение их не приводит к трансляции в зоне сдвига, хотя и обеспечивает новое механически стабильное положение атомов (геометрия таких перемещений рассмотрена в § 39 и 40). Обычно вектор Бюргерса этих дислокаций и соответственно энергия меньше, чем у единичной дислокации минимальной мощности в данной решетке. Дислокации с вектором Бюргерса, не являющимся вектором трансляции, называют *неполными* или *частичными*. Они играют очень важную роль

в разнообразных процессах в металлах. Каждый тип кристаллической структуры характеризуется своими единичными и частичными дислокациями. Такие *характерные дислокации* рассмотрены ниже в этой главе.

В заключение необходимо обратить внимание на то, что подразделение дислокаций на краевые, винтовые и смешанные, с одной стороны, и полные и частичные, с другой, основано на разных признаках. В основу подразделения дислокаций на краевые, винтовые и смешанные положена ориентация линии дислокации по отношению к вектору Бюргерса. В основу же

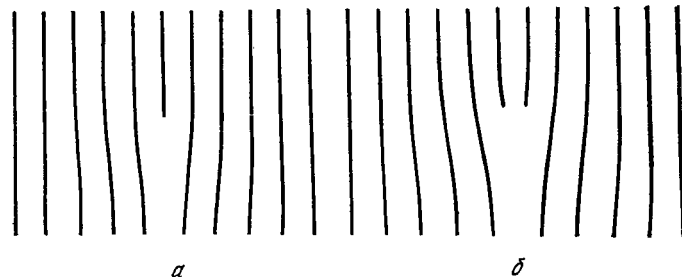


Рис. 140. Краевые дислокации единичной (а) и двухкратной (б) мощности

подразделения дислокаций на полные и частичные положена величина вектора Бюргерса (в сопоставлении с единичным вектором трансляции решетки). Поэтому, например, полная дислокация может быть как краевой, так и винтовой или смешанной. Смешанная дислокация может быть и полной и частичной.

§ 36. Энергетический критерий дислокационных реакций

Полная дислокация может расщепляться (диссоциировать) на частичные ($\vec{b}_1 = \vec{b}_2 + \vec{b}_3$); частичные дислокации могут объединяться в полную ($\vec{b}_1 + \vec{b}_2 = \vec{b}_3$). Одни частичные дислокации могут рекомбинировать, образуя другие частичные дислокации ($\vec{b}_1 + \vec{b}_2 = \vec{b}_3 + \vec{b}_4$). Полная и частичная дислокации могут образовывать частичную дислокацию ($\vec{b}_1 + \vec{b}_2 = \vec{b}_3$). Возможны и другие варианты дислокационных реакций. В приведенной форме записи дислокационных реакций слева от знака равенства стоят векторы Бюргерса исходных дислокаций, вступающих в реакцию, а справа — векторы Бюргерса дислокаций, получающихся в результате реакции. Сумма векторов Бюргерса исходных дислокаций должна быть равна сумме векторов Бюргерса дислокаций, получающихся в результате реакции. Поэтому, если

например, протекает дислокационная реакция $k_1 \langle u_1 v_1 w_1 \rangle = k_2 \langle u_2 v_2 w_2 \rangle + k_3 \langle u_3 v_3 w_3 \rangle$, где $k_1 \langle u_1 v_1 w_1 \rangle$ и т. д. — векторы Бюргерса в кристаллографических символах, то

$$k_1 u_1 = k_2 u_2 + k_3 u_3; \quad k_1 v_1 = k_2 v_2 + k_3 v_3; \quad k_1 w_1 = k_2 w_2 + k_3 w_3. \quad (74a)$$

Разнообразные дислокационные реакции подчиняются простому критерию Франка: реакция возможна в том случае, если сумма квадратов векторов Бюргерса исходных дислокаций больше суммы квадратов векторов Бюргерса дислокаций, являющихся результатом реакции. Легко понять, что критерий Франка (правило квадратов) основывается на двух положениях: 1) энергия дислокации пропорциональна квадрату вектора Бюргерса; 2) реакция должна приводить к уменьшению энергии системы. Например, дислокация может диссоциировать на две ($\bar{b}_1 = \bar{b}_2 + \bar{b}_3$), если $b_1^2 > b_2^2 + b_3^2$. Если $b_1^2 < b_2^2 + b_3^2$, то реакция диссоциации невозможна. Если же $b_1^2 = b_2^2 + b_3^2$, то возникает неопределенность — критерий Франка не позволяет предсказать, возможна ли диссоциация. Однако учитывая рост энтропии при диссоциации, следует признать возможность этой реакции.

Неустойчивость полной дислокации n -кратной мощности (nb) и распад ее на n единичных дислокаций с вектором Бюргерса b согласуется с тем, что $n^2 b^2 > nb^2$.

Объединение двух дислокаций в одну ($\bar{b}_1 + \bar{b}_2 = \bar{b}_3$) возможно в том случае, если $b_1^2 + b_2^2 > b_3^2$.

§ 37. Дефекты упаковки

Для понимания частичных дислокаций необходимо совершенно отчетливо представлять себе пространственное расположение атомов в плотнейших упаковках и возможные отступления от закономерного расположения плотноупакованных слоев — дефекты упаковки.

В дополнение к изложенному в § 11 рассмотрим укладку шаров в плоскостях, перпендикулярных плоскости плотнейшей упаковки в г. п. и г. ц. к. решетках. Шестиугольник $abcdef$ на рис. 141, а с точкой g в его центре характеризует расположение атомов A в плоскости базиса $\{0001\}$, являющейся плоскостью плотнейшей упаковки в г. п. решетке. Гексагональная сетка второго слоя $\{0001\}$ смещена по отношению к гексагональной сетке первого слоя. Проекция центра атома B на плоскости первого слоя смещена по отношению к положению A вдоль отрезка fb на $1/3$ расстояния fb . Положения C — это лунки, не занятые атомами.

Рассмотрим теперь строение одной из плоскостей, перпендикулярных плоскости плотнейшей упаковки. Возьмем такую плоскость, в которой лежат и атомы A , и атомы B , например

плоскость, проходящую через отрезок fb на рис. 141, а. Если смотреть на такую плоскость вдоль прямой da на рис. 141, а, то мы увидим картину, изображенную на рис. 141, б (пунктиром изображены шары соседней параллельной плоскости). Атомы A и B расположены не на прямой, а по зигзагообразной линии.

В г. ц. к. решетке каждый плотноупакованный слой также представляет собой гексагональную сетку: вокруг одного атома g располагаются шесть соседей $abcdef$ (рис. 142, а). Плотноупакованный слой

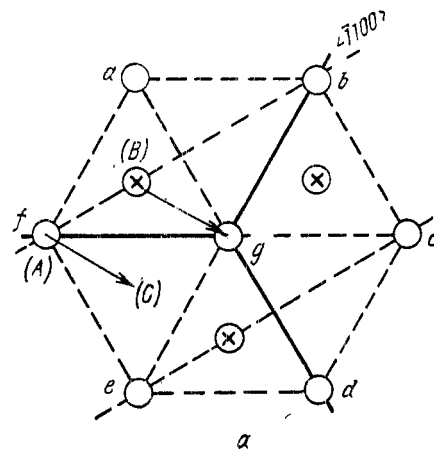
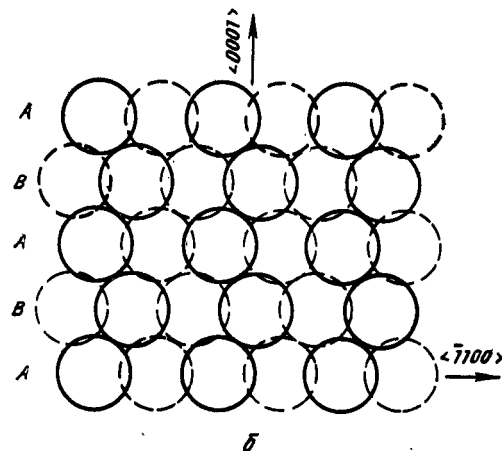


Рис. 141. Гексагональная плотнейшая упаковка:
а — плоскость $\{0001\}$, показаны положения атомов по вершинам равносторонних треугольников в двух соседних слоях A и B ; б — плоскость $\{11\bar{2}0\}$, перпендикулярная плоскости $\{0001\}$



находится в плоскости октаэдра $\{111\}$. Чтобы это понять, следует сопоставить треугольник ebh на рис. 142, а с треугольником плоскости $\{111\}$ на рис. 161. В положениях $abcdef$ расположены атомы A в нижнем слое (рис. 142, а). Гексагональная сетка прилегающего к нему слоя смещена по отношению к гексагональной сетке первого слоя. Проекция центра атома B на плоскость первого слоя смещена по отношению к центру атома A вдоль отрезка fb на одну треть этого отрезка. Точно так же гексагональная сетка третьего слоя смещена по отношению

к гексагональной сетке второго слоя (см. расположение проекций центров атомов B и C на плоскость первого слоя вдоль прямой fb на рис. 142, a).

На рис. 142, b показано расположение атомов в плоскости, перпендикулярной плоскости $abcdef$ на рис. 142, a . Эта плоскость содержит атомы A , B и C . Следом ее на рис. 142, a является прямая fb . На рис. 142, b показан вид этой плоскости, если смотреть на нее вдоль прямой da на рис. 142, a (пунктиром изображены шары в соседней параллельной плоскости). В отличие от аналогичной плоскости в г. п. решетке, где атомы расположены

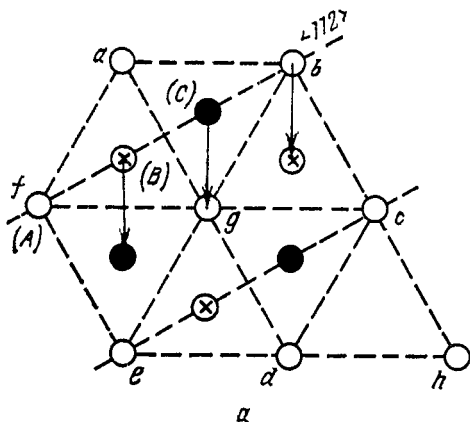
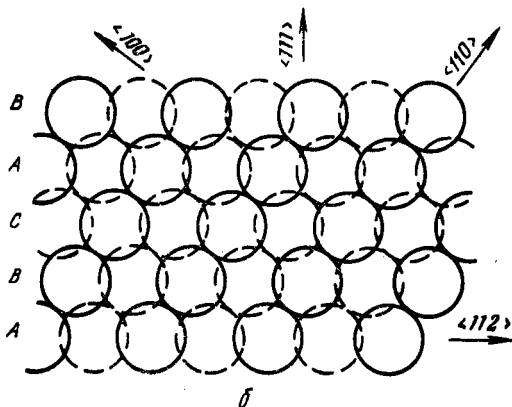


Рис. 142. Кубическая плотнейшая упаковка:

a — плоскость $\{111\}$, показаны положения атомов по вершинам равносторонних треугольников в трех соседних слоях A , B и C ; b — плоскость $\{110\}$, перпендикулярная плоскости $\{111\}$



зигзагообразно (рис. 141, b), в рассматриваемой плоскости в г. ц. к. решетке атомы расположены непрерывными прямыми рядами (рис. 142, b).

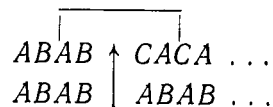
В чередовании плотноупакованных слоев возможны отступления от того порядка, который свойствен г. п. и г. ц. к. решеткам. Прослойку с нарушенным чередованием плотноупакованных слоев называют *дефектом упаковки*.

Дефект упаковки можно создать разными путями: сдвигом в плоскости плотнейшей упаковки, удалением или, наоборот,

внедрением одной плотноупакованной плоскости (или части ее) и другими способами.

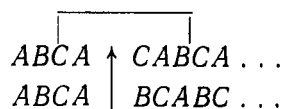
Рассмотрим несколько примеров дефектов упаковки в г. п. и г. ц. к. решетках.

В г. п. решетке чередование слоев



можно получить, если один из слоев A со всеми вышележащими слоями сдвинуть так, чтобы атомы этого слоя попали в соседние лунки (верхняя строка — чередование слоев после сдвига, нижняя — до сдвига; плоскость сдвига обозначена стрелкой). При этом атомы A переходят в положение C , а атомы B — в положение A . В результате около плоскости сдвига получается чередование слоев ABC и BCA (отмечено скобкой $\overline{}$), свойственное г. ц. к. решетке. Ниже плоскости сдвига остается нетронутым чередование $ABABAB\dots$, а выше появляется новое чередование $CACACA\dots$, которое, так же как и $ABABAB\dots$, характеризует г. п. решетку. Таким образом, рассматриваемый дефект упаковки в г. п. решетке является прослойкой г. ц. к. решетки. Это особенно наглядно демонстрирует расположение атомов в плоскости, перпендикулярной плоскости плотнейшей упаковки (рис. 143, a). Здесь между зигзагообразными рядами атомов видна прослойка с прямыми рядами, свойственными г. ц. к. решетке (ср. рис. 143, a с рис. 141, b и 142, b).

В г. ц. к. решетке чередование слоев



можно получить, если из слоев B со всеми вышележащими слоями сдвинуть так, чтобы атомы этого слоя попали в соседние лунки (обозначения см. выше). При этом атомы B переходят в положение C , атомы C — в положение A , атомы A — в положение B . В результате около плоскости сдвига получается чередование слоев $CACA$, свойственное г. п. решетке. Прослойка г. п. решетки в г. ц. к. решетке хорошо видна на рис. 143, b в виде зигзагообразного расположения атомов между их прямолинейными рядами (ср. рис. 143, b с рис. 141, b и 142, b).

Если в г. ц. к. решетке изъять одну из плоскостей B (или часть ее) и сблизить по нормали две половинки кристалла, чтобы исключить образовавшуюся пустоту, то получим чередо-

вание слоев $ABCACABC...$ (рис. 144). Здесь также получается прослойка $CACA$ г. п. решетки в г. ц. к. решетке. Такой дефект называют *дефектом упаковки вычитания*.

Внедряя между нормально чередующимися слоями г. ц. к. решетки полную или неполную атомную плоскость (плоскость C между A и B на рис. 145), получаем чередование слоев $ABCACBCAB...$ с дефектом упаковки внедрения.

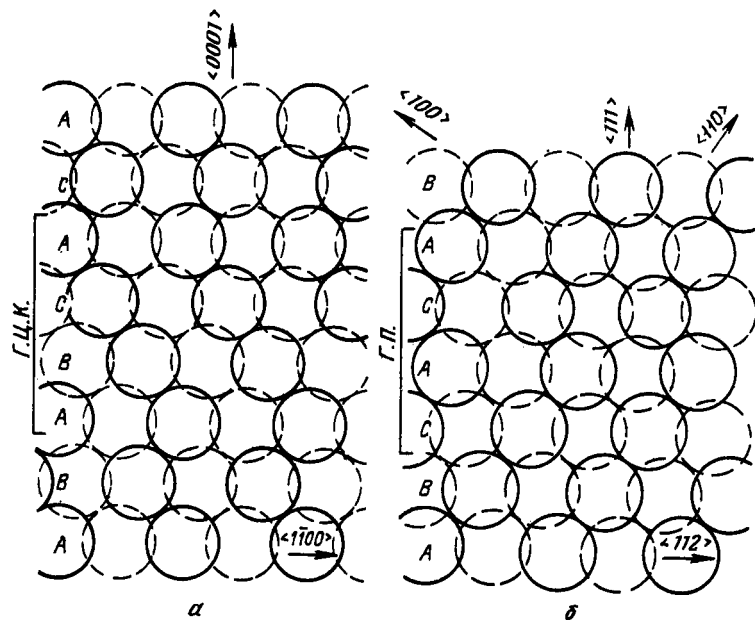


Рис. 143. Дефекты упаковки в г. п. (а) и г. ц. к. (б) решетках:
а — плоскость $\{11\bar{2}0\}$, б — плоскость $\{110\}$

Дефект упаковки имеет атомные размеры в одном измерении и значительно большие размеры в двух других измерениях, т. е. является представителем поверхностных (двумерных) дефектов.

Дефект упаковки при просвечивании фольги электронным пучком дает характерную систему светлых и темных полос (рис. 146).

Появление дефекта упаковки не изменяет ни числа ближайших соседей, ни расстояния до них. Но как показывает зонная теория, из-за изменения в расположении следующих слоев (не ближайших) возрастает энергия электронного газа. Следовательно, с появлением дефекта упаковки связан избыток энергии, который называют *энергией дефекта упаковки*.

Теория показывает, что у одновалентных непреходных металлов (Cu, Ag, Au) энергия дефектов упаковки мала, а у многовалентных (Al, Mg, Zn) — велика.

Экспериментально энергию дефекта упаковки можно оценить косвенным путем по энергии двойниковой границы.

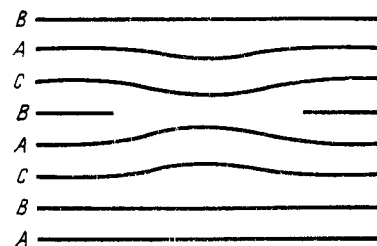


Рис. 144. Дефект упаковки вычитания в г. ц. к. решетке

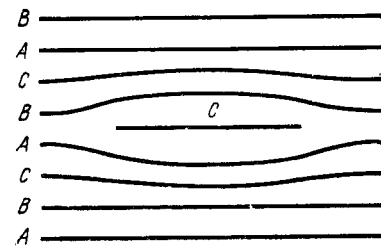


Рис. 145. Дефект упаковки внедрения в г. ц. к. решетке

В г. ц. к. решетке одно нарушение в правильном порядке чередования плоскостей может дать двойниковую границу. В чередовании $ABCABC\bar{A}CBA...$ выделена граница двойника. С одной стороны от этой границы идет чередование $ABCABC...$, а с другой — $CBACBA...$, что и характеризует двойник. Чем меньше энергия двойниковой границы, тем чаще можно встретить двойники отжига в данном металле. В α -латуни, богатой цинком, двойники отжига встречаются значительно чаще, чем в меди, и соответственно энергия дефектов упаковки в меди должна быть выше, чем в латуни.

Полученные разными методами (один из них см. в § 39, п. 4), данные об энергии дефектов упаковки (γ) сильно различаются, но они могут служить для сравнительной характеристики разных металлов:

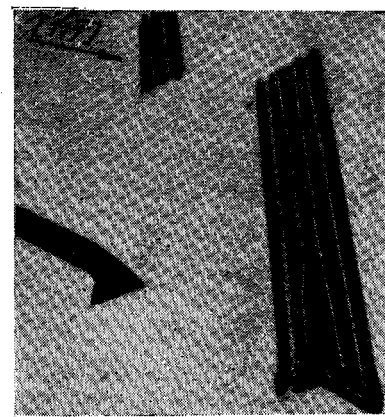


Рис. 146. Дефекты упаковки в сплаве Co — 30 % (ат.) Ni (Лоретто). $\times 60\,000$

Металл	γ -Fe	Ag	Co	Au	Cu	Ni	Al
γ , мДж/м ²	17	20	27	30	40	125	135

Металл	α -Fe	α -Ti	Mg	Zn	Mo	W
γ , мДж/м ²	140	150	310	340	>300	>300

Продолжение

Легирование может сильно изменить энергию дефекта упаковки. В растворах на основе меди γ снижается при росте электронной концентрации. Например, у меди $\gamma=40$ мДж/м², а у бронз, содержащих 4,5 и 7% Al, $\gamma=5$ и 2 мДж/м², соответственно.

§ 38. Характерные полные (единичные) дислокации

1. ПОЛНЫЕ ДИСЛОКАЦИИ В Г. П. РЕШЕТКЕ

Элементарная ячейка г. п. решетки представлена на рис. 147. Единичные векторы трансляции — \bar{b}_1 , \bar{b}_2 и \bar{b}_3 .

Плоскостью плотнейшей упаковки является базисная плоскость (0001), а направлением плотнейшей упаковки $\langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$.

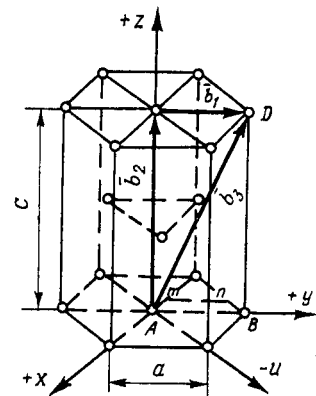


Рис. 147. Элементарная ячейка г. п. решетки с векторами Бюргера единичных дислокаций:
 $\bar{b}_1 = 1/3[\bar{1}2\bar{1}0]$; $\bar{b}_2 = 1/3[0001]$; $\bar{b}_3 = 1/3[\bar{1}2\bar{1}3]$

В этом направлении и находится минимальный единичный вектор трансляции г. п. решетки $\bar{b}_1 = a/3 \langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$. Докажем, что его мощность равна a .

Если в гексагональной сетке черных шаров с периодом a на рис. 148 от исходной точки 1 отложить один период решетки вдоль направления $-x$ (шаг 1—2), два периода вдоль $+y$ (шаг 2—3) и один период вдоль $-z$ (шаг 3—4), то мы попадем в точку 4, отстоящую от исходной точки 1 на отрезок величиной $3a$. Если же вдоль каждого из указанных направлений делать в три раза меньший шаг, то из точки 1 мы попадем в точку 5, отстоящую от исходной ровно на один период решетки a . Поэтому

перед индексами направления минимального единичного вектора $\bar{b}_1 = a/3 \langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$ стоит множитель $a/3$.

Составляющая вектора \bar{b}_1 вдоль оси z равна нулю (см. рис. 147). Если же составляющая какого-либо вектора Бюргера, например \bar{b}_2 или \bar{b}_3 , вдоль оси z не равна нулю, то перед индексами направления нельзя ставить множитель a , так как по оси z период решетки равен c . Поэтому в общем случае в множителе не указывают период решетки, подразумевая, что единицей измерения вдоль осей x , y , u и z являются соответственно периоды решетки a , a , a и c . Например, вектор $\bar{b}_3 = 1/3[\bar{1}2\bar{1}3]$. Действительно, чтобы из точки А на рис. 147 попасть в точку D, необходимо вдоль осей $-x$, $+y$, $-u$ и $+z$ сделать шаги соответственно $\bar{a}/3$, $2\bar{a}/3$, $\bar{a}/3$ и c (путь $A \rightarrow mn \rightarrow BD$).

Если же не ставить множитель $1/3$ и вдоль соответствующих осей сделать шаги \bar{a} , $2\bar{a}$, \bar{a} и $3c$, то мы попадем в точку, которая от исходной точки А отстоит в направлении AD на расстоянии не одного, а трех векторов \bar{b}_3 .

Таким образом, единичные дислокации в г. п. решетке могут быть векторы Бюргера $1/3 \langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$, $\langle 0001 \rangle$ и $1/3 \langle \bar{1}2\bar{1}3 \rangle$ (см. рис. 147).

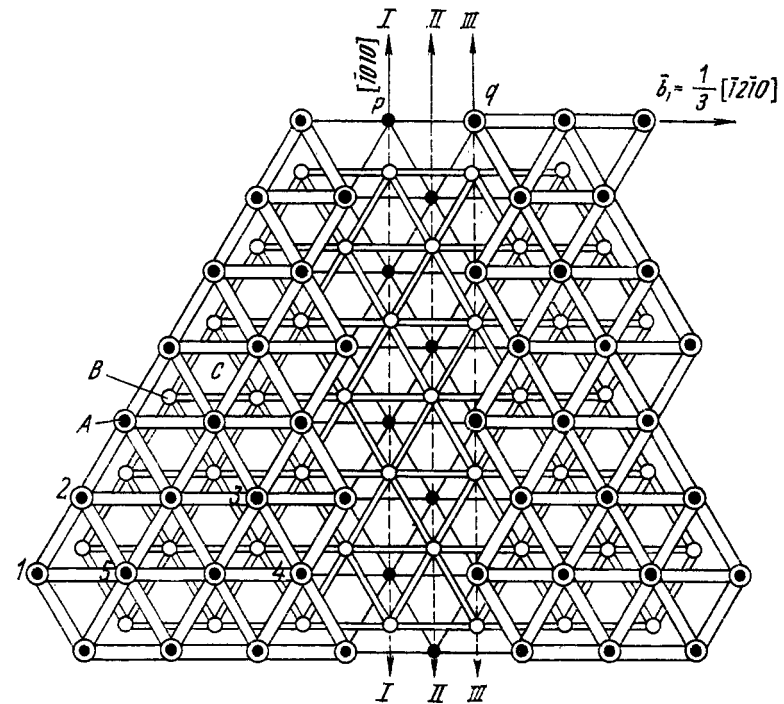


Рис. 148. Единичная краевая дислокация в плоскости (0001) г. п. решетки

Мощность (величина) вектора Бюргера $1/3 \langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$ равна a , вектора $\langle 0001 \rangle$ — c и вектора $1/3 \langle \bar{1}2\bar{1}3 \rangle$ — $\sqrt{a^2 + c^2}$. Поскольку $c > a$, то наименьшей энергией обладает единичная дислокация $1/3 \langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$. Для нее энергетический фактор (квадрат вектора Бюргера) равен a^2 .

Сопоставляя энергию разных дислокаций и используя критерий Франка для анализа дислокационных реакций, необходимо выражать энергетический фактор в одинаковых единицах, например через период решетки a . Для этого необходимо знать отношение c/a . В случае плотнейшей упаковки, т. е. при $c/a = \sqrt{8/3} = 1,633$ для дислокации $\langle 0001 \rangle$ с вектором Бюргера c энергетический фактор равен $8a^2/3$; для дислокации

$1/3 \langle \bar{1}213 \rangle$ с вектором Бюргерса $\sqrt{a^2 + c^2}$ этот фактор равен $11a^2/3$. Величину квадрата вектора Бюргерса, выраженную через период решетки a , легко подсчитать и для любых других значений соотношения c/a , отличного от идеального значения 1,633.

В металлах с г. п. решеткой скольжение дислокаций экспериментально наблюдали в базисных плоскостях (0001), призматических плоскостях $\{10\bar{1}0\}$ и пирамидальных плоскостях $\{10\bar{1}1\}$ и $\{11\bar{2}2\}$ (см. рис. 10). В базисных и призматических плоскостях скользят полные дислокации $1/3 \langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$, в пирамидальных плоскостях $\{11\bar{2}2\}$ — дислокации $1/3 \langle \bar{1}2\bar{1}3 \rangle$, а в пирамидальных плоскостях $\{10\bar{1}1\}$ — и те, и другие.

Рассмотрим геометрию образования в базисной плоскости г. п. решетки краевой единичной дислокации $1/3 \langle \bar{1}2\bar{1}0 \rangle$, отличающейся минимальной энергией среди всех возможных полных дислокаций.

На рис. 148 в левой части показаны три параллельных слоя (плоскости) плотнейшей упаковки. Черные кружки обозначают атомы нижней плоскости в положении A ; малые светлые кружки обозначают атомы второй плоскости в положении B , находящиеся в лунках нижней плоскости, т. е. в центре треугольников из атомов A . Большие светлые кружки относятся к атомам в положениях A в третьем слое, которые находятся над атомами A в первом слое (над черными кружками). Кружки одного сорта соединены своей системой линий, чтобы подчеркнуть расположение их по узлам гексагональных сеток. Положения C остаются незанятыми, так как г. п. решетка характеризуется последовательностью отдельных слоев $ABABAB...$ (ср. рис. 148 с рис. 141, a и 142, a).

Единичным вектором трансляции является любой отрезок, соединяющий соседние положения атомов A или B в одном слое плотнейшей упаковки, т. е. равный периоду решетки a . В частности, единичным вектором трансляции является отрезок pq на рис. 148.

Если разрезать верхний слой по линии $I—I$ и сдвинуть часть его вправо на величину единичного вектора трансляции так, чтобы атом третьего слоя p оказался в положении q , то в правой части после сдвига восстанавливается исходное чередование слоев. При этом обнажаются ряды атомов в положениях A и B из первого и второго слоя, находящихся в вертикальных плоскостях $I—I$ и $II—II$.

Теперь представим себе не три слоя плотнейшей упаковки, а кристалл, состоящий из множества таких слоев с чередованием $ABABAB...$. Он включает в себя три слоя, показанных на рис. 148, и слои, находящиеся ниже и выше плоскости чертежа. Пусть плоскость скольжения проходит между слоем из атомов

B (малые светлые кружки) и слоем из атомов A (большие светлые кружки). Если часть кристалла выше плоскости скольжения сдвинется на единичный вектор трансляции pq в этой плоскости, то возникают две неполные вертикальные экстраплоскости $I—I$ и $II—II$. Вокруг краев таких экстраплоскостей решетка будет сильно искажена. Это искажение на рис. 148 не показано. Так, например, расстояние между большими светлыми кружками по обе стороны от кромок экстраплоскостей должно

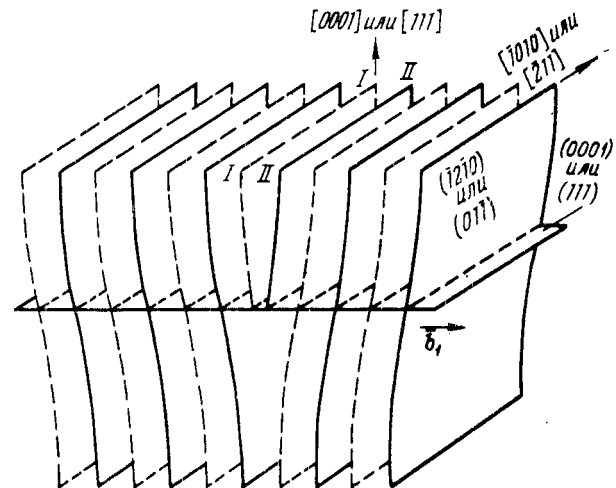


Рис. 149. Единичная краевая дислокация в г. п. и г. ц. к. решетках: $I—I$ и $II—II$ — экстраплоскости; $\delta_1 = 1/3[\bar{1}2\bar{1}0]$ или $a/2[011]$

быть меньше, чем на рис. 148. Каждая из экстраплоскостей содержит атомы в положениях A и B (черные и светлые кружки). Согласно изложенному, вдоль линий $I—I$ и $II—II$ проходит единичная краевая отрицательная дислокация (экстраплоскости находятся в нижней половине кристалла).

Аналогичный результат можно получить, если сделать в кристалле несквозной надрез перпендикулярно плоскости плотнейшей упаковки и вставить в него две неполные плоскости, состоящие из атомов в положениях A и B . Например, на рис. 149 показана положительная краевая единичная дислокация, образовавшаяся из-за наличия двух лишних вертикальных полу-плоскостей $I—I$ и $II—II$ в верхней половине кристалла. Единичная дислокация в кристалле не нарушает последовательности чередования слоев, характерной для г. п. решетки ($ABABAB...$). Расположение атомов в любых двух соседних вертикальных плоскостях, показанных на рис. 149, изображено схемой на рис. 141, b .

При скольжении единичной краевой дислокации атомы сдвигаются на небольшие расстояния (меньше межатомного) только

в области ее ядра (вокруг края двух экстраплоскостей) в направлении, перпендикулярном линии дислокации. Например, при скольжении отрицательной краевой дислокации на рис. 148 слева направо атомы слоя *A*, находящегося над плоскостью скольжения, в области ядра дислокации будут смещаться справа налево, а в слое *B* под плоскостью скольжения — в направлении скольжения дислокации. Здесь полная аналогия с рис. 108, если его перевернуть, превратив положительную дислокацию в отрицательную. На рис. 148 такие малые смещения атомов выше и ниже края экстраплоскостей во взаимопротивоположных направлениях (как это сделано на рис. 108) нельзя показать, так как на схеме здесь не отражено искажение решетки в области ядра дислокации.

Конечный результат направленных атомных смещений в области ядра дислокации будет такой же, как если бы атомы *A* (большие светлые кружки) из положений *q* на линии *III—III* сместились на величину вектора $1/3 [\bar{1}2\bar{1}0]$ в положения *r* на линии *I—I*. После этого края экстраплоскостей будут проходить вдоль линий *II—II* и *III—III*, а не *I—I* и *II—II*, и дислокация окажется смещенной на величину вектора $1/3 [\bar{1}2\bar{1}0]$, т. е. на период решетки *a*.

2. ПОЛНЫЕ ДИСЛОКАЦИИ В Г. Ц. К. РЕШЕТКЕ

Элементарная ячейка г. ц. к. решетки представлена на рис. 150. Плоскостью плотнейшей упаковки является плоскость октаэдра $\{111\}$, а направлением плотнейшей упаковки — диагональ грани куба $\langle 110 \rangle$. Минимальный единичный вектор трансляции \bar{b}_1 соединяет атом в вершине кубической ячейки с атомом в центре грани. Вектор $\bar{b}_1 = a/2 [01\bar{1}]$, его мощность равна $a\sqrt{2}/2$.

В г. ц. к. решетке единичным вектором трансляции является также вектор $\bar{b}_2 = a[010]$. Он может делиться на два вектора: на $\bar{b}_1 = a/2[01\bar{1}]$ и $\bar{b}_3 = a/2[011]$ (см. рис. 150). Однако для реакции диссоциации $\bar{b}_2 = \bar{b}_1 + \bar{b}_3$ критерий Франка не дает определенного ответа, так как $a^2 = (a\sqrt{2}/2)^2 + (a\sqrt{2}/2)^2$. Но эту реакцию можно считать вполне вероятной, учитывая рост энтропии при диссоциации.

Геометрию образования краевой единичной дислокации минимальной мощности в г. ц. к. решетке ($\bar{b}_1 = a/2[01\bar{1}]$) можно понять, используя схему на рис. 151.

В левой части этого рисунка показаны три параллельных слоя (плоскости) плотнейшей упаковки: *A* — атомы нижнего слоя, *B* — атомы второго слоя, *C* — атомы верхнего слоя. На левой стороне рис. 151 сдвига не было, а правая сторона демонстрирует то же чередование плоскостей *ABC*, но только после сдвига части верхнего слоя атомов *C* слева направо на величину

единичного вектора $\bar{b}_1 = a/2[01\bar{1}]$. При таком сдвиге атом из точки *r* попал в точку *s*. Обе эти точки относятся к положениям *C*. В результате указанного сдвига обнажились ряды атомов в положениях *A* и *B* из нижнего и среднего слоев. Эти атомы находятся в вертикальных плоскостях *I—I* и *II—II*.

Если представить себе кристалл, состоящий из множества чередующихся слоев *ABCABC...*, и сдвинуть одну часть его по отношению к другой по плоскости (111) на вектор $a/2[01\bar{1}]$, то мы получим две экстраплоскости *I—I* и *II—II*. Экстраплоскости состоят из атомов в положениях *A*, *B*, *C*. Вокруг краев экстра-

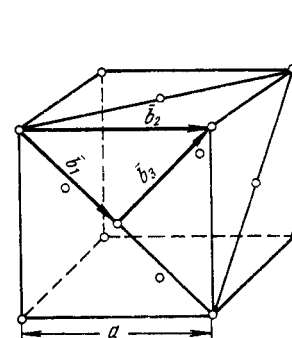


Рис. 150. Элементарная ячейка г. ц. к. решетки с векторами Бюргерса единичных дислокаций

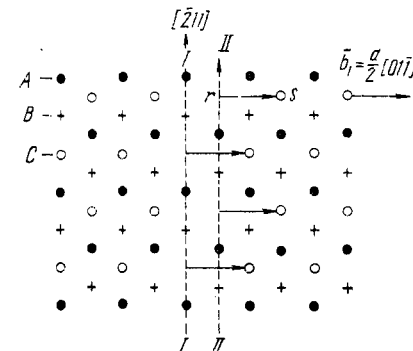


Рис. 151. Единичная краевая дислокация в плоскости (111) г. ц. к. решетки: *I—I* и *II—II* — экстраплоскости, перпендикулярные плоскости (111)

плоскостей решетка сильно искажена (на рис. 151 это искажение не показано). Вдоль линий *I—I* и *II—II* на рис. 151 проходит единичная отрицательная краевая дислокация. На рис. 149 показаны две экстраплоскости *I—I* и *II—II* и соответствующая положительная краевая дислокация в г. ц. к. решетке.

Все, что было сказано о скольжении единичной краевой дислокации в г. п. решетке на рис. 148, справедливо и для отрицательной краевой дислокации в г. ц. к. решетке на рис. 151. При скольжении дислокации на рис. 151 слева направо атомы верхнего слоя *C* (светлые кружки), расположенного выше плоскости скольжения, должны смещаться справа налево в направлении, перпендикулярном дислокации.

Теперь рассмотрим единичную винтовую дислокацию в г. ц. к. решетке. В левой части рис. 152 показано чередование слоев *ABC*, свойственное г. ц. к. решетке в плоскости плотнейшей упаковки $\{111\}$: *A* — атомы в нижнем слое, *B* — атомы в среднем слое и *C* — атомы в верхнем слое. Стрелки показывают величину и направление смещений атомов верхнего слоя. Начало каждой стрелки — исходное положение атомов *C*, конец

стрелки — новое положение этих атомов. Атомы C смещаются в направлении плотнейшей упаковки $[\bar{1}10]$.

В правой части рис. 152 атомы смещены на величину единичного вектора $a/2[\bar{1}10]$, и поэтому здесь кристалл после смещения верхнего слоя атомов сохраняет совершенное строение.

Для кристалла с винтовой дислокацией характерно постепенное увеличение смещений атомов при удалении по оси винтовой дислокации (по направлению от точки B к точке A на рис. 113).

Эта разница в величине смещений атомов в направлении сдвига изображена в средней части рис. 152 разной длиной

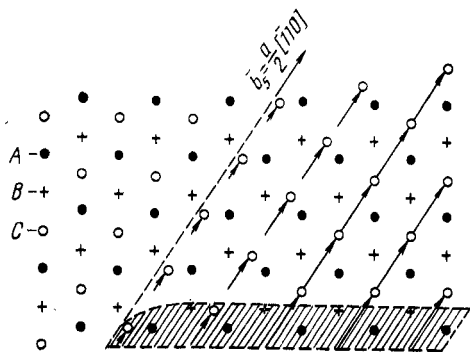


Рис. 152. Единичная винтовая дислокация в плоскости (111) г. ц. к. решетки (вектор \vec{b}_s см. на рис. 161, а)

$[\bar{1}10]$ и длина стрелок здесь будет возрастать, приближаясь к $a/2[\bar{1}10]$, то линия винтовой дислокации передвинется справа налево — зона сдвига расширяется.

Здесь, как и на схеме рис. 115, дислокация скользит в направлении, перпендикулярном направлению смещения атомов в ее ядре, т. е. ведет себя как типичная винтовая дислокация (в отличие от краевой, скользящей в направлении, параллельном смещению атомов — ср. рис. 151 и 152).

3. ПОЛНЫЕ ДИСЛОКАЦИИ В О. Ц. К. РЕШЕТКЕ

В о. ц. к. решетке возможны единичные дислокации с векторами Бюргерса $\vec{b}_1 = a/2\langle 111 \rangle$, $\vec{b}_2 = a\langle 100 \rangle$ и $\vec{b}_3 = a\langle 110 \rangle$ (рис. 153). Наименьшим вектором трансляции является вектор $a/2\langle 111 \rangle$. Дислокации $a/2\langle 111 \rangle$, имеющие среди всех полных дислокаций самую низкую энергию, встречаются чаще всего.

В металлах с о. ц. к. решеткой скольжение обычно идет по плоскостям $\{110\}$ и $\{112\}$ в направлениях наиболее плотной упаковки атомов $\langle 111 \rangle$. Геометрию образования характерных дислокаций в о. ц. к. решетке представить себе труднее, так как

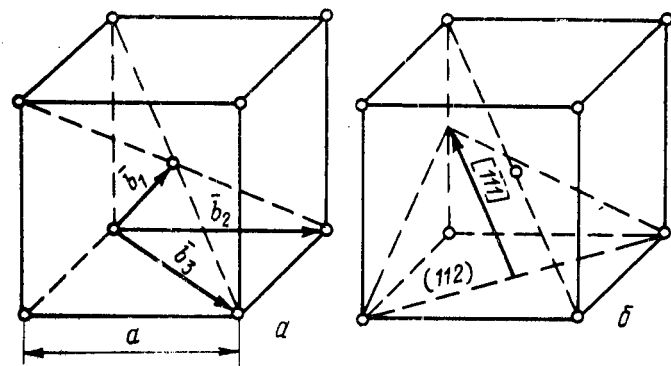


Рис. 153. Элементарные ячейки о. ц. к. решетки: a — векторы Бюргерса единичных дислокаций; b — плоскость скольжения (112) — пунктирный треугольник

в ней нет такого простого чередования атомных слоев, как в плотнейших упаковках. Например, последовательность упаковки атомных слоев $\{112\}$ в о. ц. к. решетке —

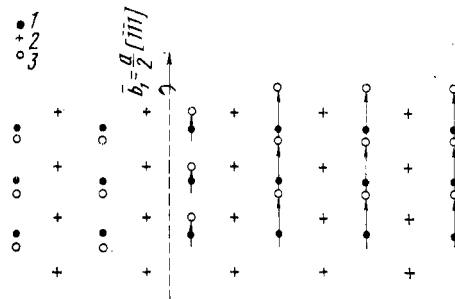


Рис. 154. Единичная винтовая дислокация в плоскости (112) о. ц. к. решетки: 1 — атомы нижнего слоя; 2 — атомы среднего слоя; 3 — атомы верхнего слоя

$ABCDEFAB CDEFA \dots$, т. е. позиции атомов повторяются через пять слоев (см. рис. 69).

Рассмотрим единичную винтовую дислокацию с вектором $a/2[\bar{1}11]$ в плоскости (112) (индексы плоскости и направления см. на рис. 153, б).

На рис. 154 показано расположение атомов в трех соседних слоях, параллельных плоскости (112). Эта плоскость совпадает с плоскостью рис. 154.

В левой части рисунка три слоя чередуются в области, не охваченной сдвигом. В правой части рисунка атомы верхнего слоя смещены на величину единичного вектора трансляции $a/2[\bar{1}\bar{1}1]$. Поэтому здесь после сдвига решетка становится совершенной. В средней же части рис. 154 смещение атомов верхнего слоя в направлении $[\bar{1}\bar{1}1]$ меньше, чем $a/2[\bar{1}\bar{1}1]$, и в этой части находится дислокация. Ее линия параллельна вектору сдвига и, следовательно, показанная единичная дислокация имеет чисто винтовую ориентацию. Если атомы верхнего слоя в ядре дислокации сместятся в направлении $[\bar{1}\bar{1}1]$, то линия дислокации передвинется влево — зона сдвига расширится.

§ 39. Частичные дислокации Шокли. Растянутые дислокации

1. ЧАСТИЧНЫЕ ДИСЛОКАЦИИ ШОКЛИ В Г. П. РЕШЕТКЕ

На рис. 155 образованию единичной дислокации соответствует единичный вектор трансляции \bar{b}_1 . При сдвиге вдоль \bar{b}_1 шар второго слоя из положения в лунке B смещается в соседнюю лунку V , перекатываясь через шар A , т. е. проходя через высокий энергетический барьер (рис. 156). Значительно легче шару V попасть в соседнюю лунку V не прямым путем вдоль вектора \bar{b}_1 , а сначала скользнуть по «желобу» в соседнюю лунку C вдоль вектора \bar{b}_2 , а затем по другому «желобу» в лунку V вдоль вектора \bar{b}_3 . Положение шара в промежуточной лунке C механически стабильно — шар второго слоя плотно прилегает к трем шарам A нижнего слоя, что соответствует относительному минимуму энергии (см. пунктир на рис. 156). Энергия здесь не может соответствовать абсолютному минимуму, так как положения C не свойственны г. п. решетке. Если атомы одного слоя находятся в положениях C , то это значит, что в г. п. решетке имеется дефект упаковки, с которым связан избыток энергии.

Перемещение атомов не вдоль единичного вектора трансляции, а вдоль вектора меньшей мощности приводит к образованию не полной, а частичной дислокации. Схема ее образования приведена на рис. 157.

В левой части рис. 157 показаны три слоя плотнейшей упаковки с чередованием, свойственным г. п. решетке (аналогично рис. 148): 1 — атомы A нижней плоскости; 2 — атомы B второй плоскости и 3 — атомы A в третьей плоскости, расположенные над атомами 1. Положения C в левой части рис. 157 остаются незанятыми.

Структура в средней части рис. 157 получилась в результате смещения атомов верхнего слоя (большие светлые кружки) вдоль вектора \bar{b}_2 из положений A в положения C (по направлению $[01\bar{1}0]$). Например, атом третьего слоя, находившийся ранее в лунке A второго слоя в точке r (над черным кружком — атомом A из нижнего слоя), сместился в соседнюю лунку C второго слоя вдоль вектора \bar{b}_2 (в точку s).

В результате таких смещений в средней части рис. 157 образовалась последовательность слоев, характерная не для г. п., а для г. ц. к. решетки ($ABC\dots$). Хорошо видно, что ни в одном из трех слоев в средней части рис. 157 ни один из атомов не находится над атомом из другого слоя: в нижнем слое атомы занимают положения A , в среднем — B и в верхнем — C .

Если теперь представить себе кристалл с г. п. решеткой, состоящей из множества плотноупакованных слоев, то не трудно понять, что сдвиг части кристалла по одной из плотноупакованных плоскостей вдоль вектора \bar{b}_2 приводит к образованию неполной атомной плоскости $I-I$, перпендикулярной плоскости плотнейшей упаковки. Вокруг края ее решетка искажена (это искажение на рис. 157 не показано). Следовательно, граница между областью кристалла с нормальным для г. п. решетки чередованием плотноупакованных слоев и возникшим дефектом упаковки является дислокацией. Ее вектор Бюргерса $\bar{b}_2 = \frac{1}{3}[01\bar{1}0]$ меньше минимального единичного вектора трансляции $\bar{b}_1 = \frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}0]$. Такая дислокация называется *частичной дислокацией Шокли*.

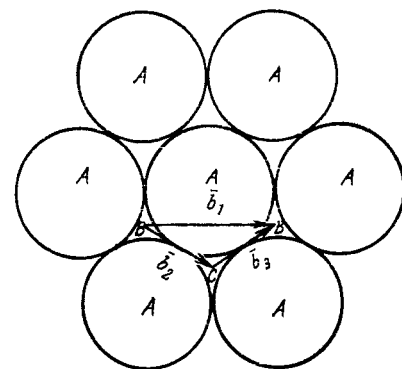


Рис. 155. Слой плотнейшей упаковки атомов A и векторы Бюргерса единичной (\bar{b}_1) и частичных (\bar{b}_2 , \bar{b}_3) дислокаций

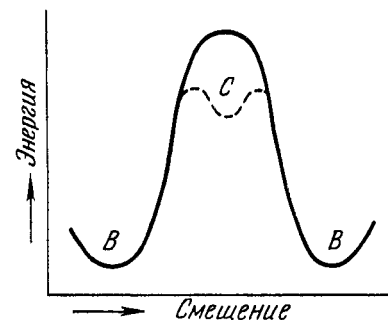


Рис. 156. Изменение энергии при смещении атомов в слое плотнейшей упаковки двумя путями: сплошная линия — смещение из лунки B в соседнюю лунку V вдоль вектора Бюргерса единичной дислокации \bar{b}_1 ; пунктир — то же, но через промежуточную лунку C вдоль векторов Бюргерса частичных дислокаций \bar{b}_2 и \bar{b}_3 (положение лунок B и C и векторы Бюргерса см. на рис. 155)

В плотноупакованном слое, представляющем гексагональную сетку шаров, вектор Бюргерса дислокации Шокли соединяет вершину равностороннего треугольника, стороны которого равны периоду a , с его центром тяжести. Отсюда величина вектора Бюргерса дислокации $1/3 \langle 01\bar{1}0 \rangle$ составляет $a/\sqrt{3}$.

Образовавшийся дефект упаковки, левой границей которого является частичная дислокация, справа может выходить на поверхность кристалла (этот случай не показан на рис. 157).

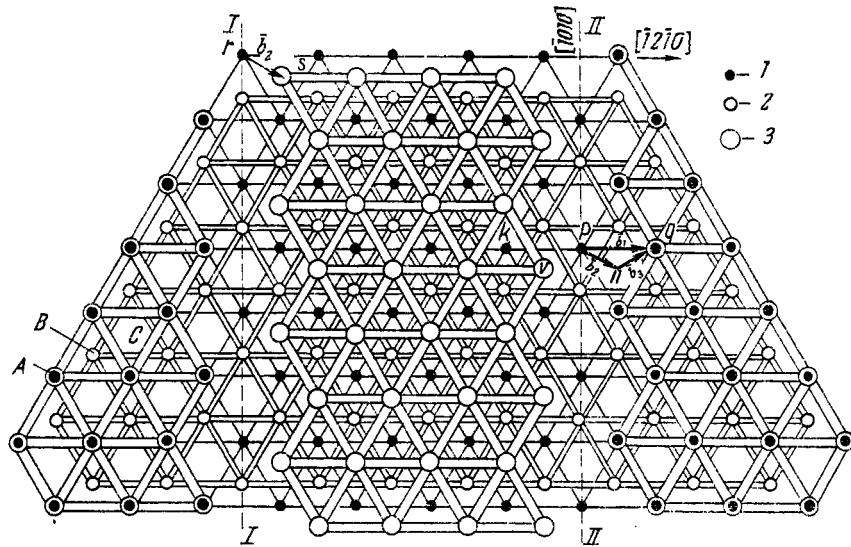


Рис. 157. Растянутая дислокация в плоскости (0001) г. п. решетки. Вдоль линий I—I и II—II проходят частичные дислокации Шокли, между которыми находится дефект упаковки

Если же дефект упаковки справа оканчивается внутри кристалла, то правой границей его также должна быть частичная дислокация. В противном случае, т. е. при отсутствии дислокации, атомы на правой границе дефекта упаковки оказались бы на нереализуемо близком расстоянии от атомов в исходных положениях A в этом же слое. Например, атом A , находившийся ранее в точке k и перешедший теперь в положение v , оказывается по отношению к атому A того же слоя в положении p (на схеме здесь должен быть большой светлый кружок) на расстоянии меньше атомного диаметра. Такое сближение атомов на расстояние, значительно меньшее, чем самое близкое межатомное расстояние в слое плотнейшей упаковки, практически невозможно. В модели жестких шаров вообще невозможно сближение шаров на расстояние меньше их диаметра.

В связи с изложенным при образовании дефекта упаковки атом A из положения p может легко перейти в положение n

(смещение на вектор \bar{b}_2), а затем в положение q (смещение на вектор \bar{b}_3). Результат получается такой же, как если бы атом из положения p прямо сместился в положение q вдоль единичного вектора тождественной трансляции \bar{b}_1 . На рис. 157 показано, что в кристалле справа от дефекта упаковки образуется одна неполная атомная плоскость II—II, перпендикулярная плоскости плотнейшей упаковки. Вокруг края ее проходит частичная дислокация Шокли с вектором Бюргерса $\bar{b}_3 = 1/3 [\bar{1}100]$.

Две частичные дислокации Шокли, связанные между собой полосой дефекта упаковки, называют *растянутой дислокацией*.

На рис. 157 показаны положения центров атомов — жестких шаров в трехслойной шаровой упаковке. На рис. 158 представлены сами атомы — шары в двух соседних слоях в области растянутой дислокации: нижний слой находится в положении A , а часть верхнего слоя B (черные шары) в средней части схемы сдвинута в положение C .

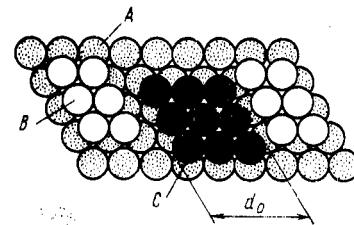


Рис. 158. Два атомных слоя с дефектом упаковки шириной d_0 в верхнем слое

На рис. 149 была показана схема строения кристалла с двумя экстраплоскостями, вокруг края которых проходит единичная дислокация. Энергия такой полной дислокации может сильно понизиться, если две лишние плоскости будут удалены одна от другой, как это схематично показано на рис. 159. Вокруг края каждой из этих экстраплоскостей проходит частичная дислокация Шокли, а в плоскости сдвига между краями экстраплоскостей находится полоса дефекта упаковки. В действительности частичные дислокации здесь не чисто краевые, так как векторы Бюргерса \bar{b}_2 и \bar{b}_3 не перпендикулярны их линиям (см. рис. 157). Для простоты изображения на рис. 159 это не учтено. Строение кристалла в сечении, перпендикулярном плоскости скольжения и проходящем между частичными дислокациями, показано на рис. 143, а. Здесь особенно хорошо видно, что в г. п. решетке имеется прослойка с расположением атомов, свойственным г. ц. к. решетке.

Поскольку единичная дислокация, стремясь уменьшить энергию, самопроизвольно расщепляется на две частичные дислокации, соединенные дефектом упаковки, то растянутую дислокацию называют также *расщепленной*. Реакция диссоциации единичной дислокации в г. п. решетке выглядит так:

$$1/3 [\bar{1}2\bar{1}0] = 1/3 [01\bar{1}0] + 1/3 [\bar{1}100]. \quad (75)$$

Проверка по критерию Франка показывает, что такая реакция диссоциации возможна, так как

$$a^2 > (a/\sqrt{3})^2 + (a/\sqrt{3})^2 \text{ или } a^2 > 2a^2/3.$$

При оценке возможности диссоциации единичной дислокации с образованием растянутой следует обратить внимание на приближенность критерия Франка. Этот критерий учитывает только сумму упругих энергий от двух образовавшихся при расщеплении частичных дислокаций и совсем не учитывает энер-

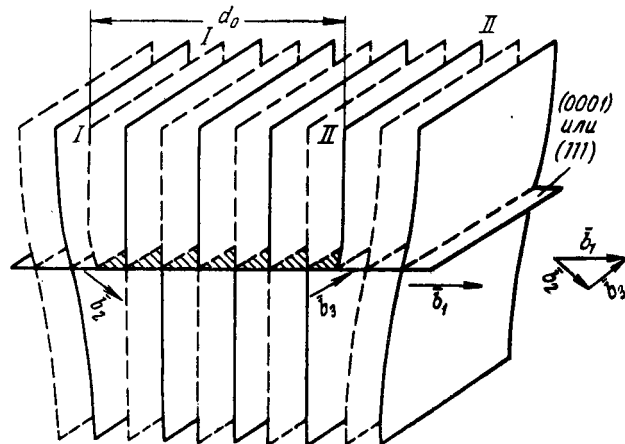


Рис. 159. Растянутая краевая дислокация в г. п. и г. ц. к. решетках; $\vec{b}_1 = 1/3[12\bar{1}0]$ или $a/2[01\bar{1}]$

гии дефекта упаковки, возникающего при расщеплении. В случае г. п. (а также г. ц. к.) решетки эта поправка на энергию дефекта упаковки не столь велика, чтобы изменить оценку энергетической выгоды дислокационной реакции по критерию Франка.

Энергия растянутой дислокации равна сумме энергий двух частичных дислокаций, энергии их упругого отталкивания и энергии дефекта упаковки.

Так как с дефектами упаковки связан избыток энергии, то дефект упаковки стремится уменьшить свою площадь. Энергия, приходящаяся на единицу площади дефекта упаковки, является поверхностным натяжением. Размерность энергии дефекта упаковки — джоуль на квадратный метр (Дж/м²), а поверхностное натяжение измеряют в ньютонах на метр (Н/м): 1 Дж/м² = 1 Н/м.

Поверхностное натяжение дефекта упаковки γ стремится стянуть частичные дислокации, преодолевая силу их упругого

отталкивания. Поверхностное натяжение дефекта упаковки не зависит от расстояния между частичными дислокациями, а сила их упругого отталкивания уменьшается с увеличением расстояния d_0 между ними. Поэтому при определенном расстоянии d_0 между частичными дислокациями устанавливается равновесие силы их стягивания, вызванной поверхностным натяжением дефекта упаковки, и силы упругого отталкивания частичных дислокаций.

Растянутая дислокация способна скользить в плоскости дефекта упаковки. На рис. 157 показано, что векторы Бюргерса частичных дислокаций находятся в плоскости дефекта упаковки, которая является плоскостью скольжения. Растянутая дислокация скользит следующим путем. Головная частичная дислокация, передвигаясь, смещает атомы в неправильные положения (например, из положения В в положение С на рис. 155) и оставляет за собой дефект упаковки. Скользящая вслед за ней замыкающая частичная дислокация смещает атомы в области дефекта упаковки из неправильных положений в нормальные, свойственные данной решетке (из положения С в положение В), т. е. замыкающая частичная дислокация ликвидирует дефект упаковки. Головная частичная дислокация, дефект упаковки и замыкающая дислокация перемещаются как единое целое. Результат перемещения растянутой дислокации в точности такой же, какой получился бы при скольжении единичной дислокации с вектором \vec{b}_1 : в зоне сдвига одна часть кристалла смещается относительно другой на величину \vec{b}_1 . Обусловлено это тем, что соблюдается векторная сумма: $\vec{b}_1 = \vec{b}_2 + \vec{b}_3$.

При скольжении растянутой дислокации слева направо на рис. 157 атомы верхнего слоя в области ядер головной и хвостовой дислокаций смещаются справа налево вдоль векторов соответственно \vec{b}_3 и \vec{b}_2 . Здесь аналогия со смещениями атомов верхнего слоя на рис. 148, за исключением того, что на рис. 157 эти смещения не перпендикулярны линиям частичных дислокаций.

На рис. 160 показан кристалл с растянутой дислокацией, скользящей справа налево, что должно привести к сдвигу верхней части кристалла относительно нижней по аналогии со схемой на рис. 109.

Подводя итог, необходимо отметить следующее. Частичная дислокация Шокли является границей дефекта упаковки и находится в плоскости дефекта упаковки. Единичная дислокация

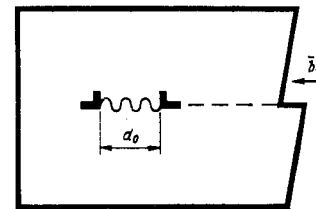


Рис. 160. Дефект упаковки (волнистая линия) с частичными дислокациями по его краям

может быть любой пространственной кривой, а частичная дислокация Шокли должна быть плоской кривой или прямой. Вектор Бюргерса частичной дислокации Шокли находится в плоскости дефекта упаковки. Частичная дислокация Шокли, как и растянутая дислокация, является скользящей, причем кристаллографическая плоскость скольжения совпадает с плоскостью дефекта упаковки. В г. п. решетке единичная и растянутая дислокации лежат в плоскости базиса (0001) и скользят в этой плоскости в направлении плотнейшей упаковки $\langle 12\bar{1}0 \rangle$.

2. ЧАСТИЧНЫЕ ДИСЛОКАЦИИ ШОКЛИ В Г. Ц. К. РЕШЕТКЕ

В г. ц. к. решетке, так же, как и в г. п. решетке, атомы одного плотноупакованного слоя могут попадать в тождественное положение не только путем сдвига на единичный вектор \bar{b}_1 , но и в результате двух последовательных смещений: вдоль вектора \bar{b}_2 из исходного положения в ближайшую лунку и из этой лунки вдоль вектора \bar{b}_3 в стабильное положение (см. рис. 155). Соответствующие векторы смещений показаны в элементарной ячейке г. ц. к. решетки (рис. 161, а) и на ее плоскости октаэдра (рис. 161, б). Единичный вектор $\bar{b}_1 = a/2[01\bar{1}]$. Из рис. 161, б следует, что отрезок \bar{b}_2 равен одной трети отрезка fn , а так как вектор $fn = a/2[\bar{1}2\bar{1}]$, то $\bar{b}_2 = a/6[\bar{1}2\bar{1}]$. Векторы \bar{b}_2 и \bar{b}_3 равны по своей мощности. Следовательно, можно записать, что $\bar{b}_3 = a/6[11\bar{2}]$.

Если в кристалле с г. ц. к. решеткой образовалась единичная краевая дислокация с $\bar{b}_1 = a/2[01\bar{1}]$, то должны существовать рядом две экстраплоскости (см. рис. 149 и 151). Энергия упругой деформации вокруг края сдвоенной экстраплоскости может понизиться, если единичная дислокация расщепится на две частичные:

$$\bar{b}_1 = \bar{b}_2 + \bar{b}_3$$

$$\text{или} \quad a/2[01\bar{1}] = a/6[\bar{1}2\bar{1}] + a/6[11\bar{2}]. \quad (76)$$

Проверка по критерию Франка показывает, что такая реакция диссоциации возможна:

$$(a\sqrt{2}/2)^2 > (a\sqrt{6}/6)^2 + (a\sqrt{6}/6)^2 \quad \text{или} \quad a^2/2 > a^2/3.$$

Расщеплению единичной дислокации соответствует удаление одной экстраплоскости от другой на некоторое расстояние (см. рис. 159). Вокруг края одной из этих экстраплоскостей проходит частичная дислокация с вектором Бюргерса \bar{b}_2 , а вокруг

края другой — частичная дислокация с вектором Бюргерса \bar{b}_3 . Единичная дислокация \bar{b}_1 была чисто краевой, а частичные дислокации \bar{b}_2 и \bar{b}_3 — не чисто краевые, так как векторы Бюргерса этих дислокаций не перпендикулярны их линиям. На рис. 159 для простоты изображения это не учтено.

Смещение атомов по вектору \bar{b}_2 , а не по \bar{b}_1 , создает дефект упаковки. Если, например, в г. ц. к. решетке с чередованием плотноупакованных слоев $ABCABC\dots$ атомы одного слоя сместились из положений B в соседние положения C вдоль вектора

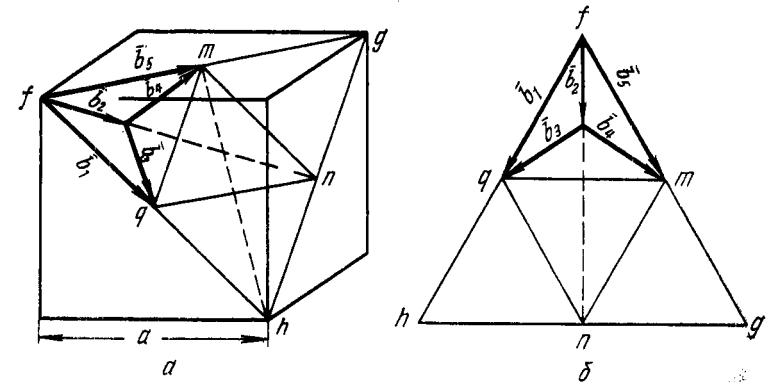


Рис. 161. Векторы Бюргерса единичных дислокаций (\bar{b}_1 , \bar{b}_2) и частичных дислокаций Шокли (\bar{b}_3 , \bar{b}_4 , \bar{b}_5) в г. ц. к. решетке:
а — элементарная ячейка; б — плоскость (111); $\bar{b}_1 = a/2[01\bar{1}]$; $\bar{b}_2 = a/6[\bar{1}2\bar{1}]$; $\bar{b}_3 = a/6[11\bar{2}]$; $\bar{b}_4 = a/6[2\bar{1}1]$; $\bar{b}_5 = a/2[\bar{1}10]$

\bar{b}_2 (причем одновременно сместились все вышележащие слои), то мы получим чередование слоев $ABCACABCA\dots$. Этот дефект является тонкой прослойкой $CACA$ г. п. решетки в г. ц. к. решетке. Прослойка дефекта находится между двумя частичными дислокациями Шокли (строение кристалла в сечении, перпендикулярном этой прослойке, показано на рис. 143, б). Смещение атомов в рассматриваемом слое {111} вдоль вектора \bar{b}_3 из ненормальных положений C в нормальные положения B ликвидирует дефект упаковки. Две частичные дислокации Шокли, связанные полоской дефекта упаковки, называют, как указано выше, растянутой дислокацией. Поверхностное натяжение дефекта упаковки уравнивает силу взаимного отталкивания частичных дислокаций.

В г. ц. к. решетке единичная и растянутая дислокации лежат в плоскости {111} и могут скользить в этой плоскости в направлении плотнейшей упаковки $\langle 011 \rangle$. При скольжении растянутой дислокации головная частичная дислокация, передви-

гаясь, смещает атомы перед собой в неправильные положения, а замыкающая частичная дислокация смещает атомы в области дефекта упаковки в нормальные положения.

Рассмотрим схему атомных перемещений в г.ц.к. решетке, связанных с расщеплением единичной винтовой дислокации на две частичные (рис. 162). Так же, как и на рис. 152, где показана единичная винтовая дислокация, на рис. 162 черные кружки обозначают атомы в положениях A в нижнем слое $\{111\}$, крестики — атомы в положениях B в среднем слое и светлые

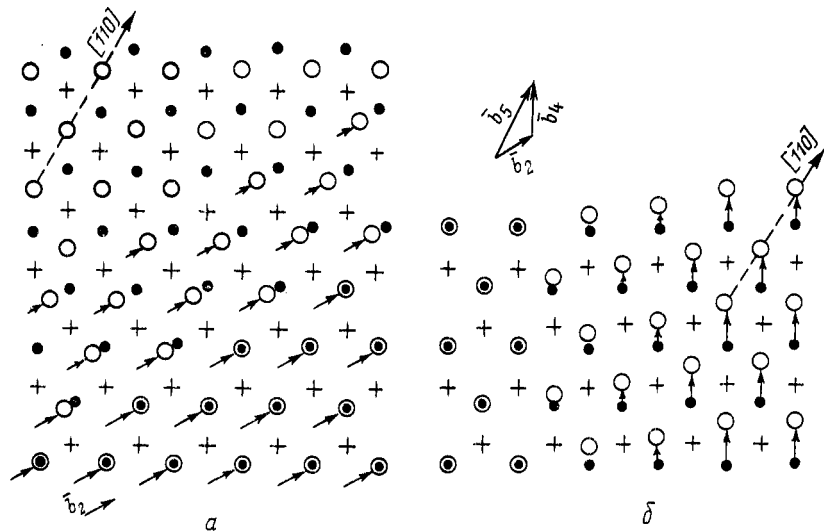


Рис. 162. Дислокация Шокли после расщепления единичной винтовой дислокации в плоскости (111) г.ц.к. решетки (векторы \bar{b}_2 , \bar{b}_4 и \bar{b}_5 см. на рис. 161)

кружки — атомы в положениях C в верхнем слое. В левом верхнем углу рис. 162, a показано чередование слоев в идеальной г.ц.к. решетке. В нижней части рис. 162, a атомы из положения C в третьем слое сместились в положения, находящиеся точно над атомами A из первого слоя (светлые кружки совпали с черными). Это смещение произошло по направлению $[\bar{1}21]$ на величину $a\sqrt{6}/6$. В результате таких смещений образовался дефект упаковки в г.ц.к. решетке (чередование трех слоев ABA). В средней части рис. 162, a смещения атомов (длина стрелок) постепенно уменьшаются при переходе от дефекта упаковки к совершенной решетке. Это область несовершенства, частичная дислокация с вектором Бюргерса $\bar{b}_2 = a/6[\bar{1}21]$, являющаяся границей дефекта упаковки.

На рис. 162, b в левой части изображен тот же дефект упаковки, что и на рис. 162, a . В правой части рис. 162, b показаны

смещения атомов третьего слоя из положений над атомами первого слоя в нормальные положения C , свойственные третьему слою г.ц.к. решетки. Эти смещения произошли на величину $a\sqrt{6}/6$ по направлению $[\bar{2}11]$ (вектор $\bar{b}_4 = a/6[\bar{2}11]$, см. рис. 161). На рис. 162, a смещения могли произойти по направлению $[\bar{1}21]$, а на рис. 162, b — по $[\bar{1}12]$. В средней части рис. 162, b величина смещений атомов третьего слоя из положений A (длина стрелок) постепенно возрастает при удалении от края дефекта упаковки. Здесь находится область линейного несовершенства — частичная дислокация с вектором Бюргерса $\bar{b}_4 = a/6[\bar{2}11]$.

Смещения атомов из-за двух частичных дислокаций с векторами Бюргерса $\bar{b}_2 = \bar{b}_4 = a/6\langle 112 \rangle$ на рис. 162 приводят к такому же результату, как и смещение атомов из-за единичной дислокации с вектором Бюргерса $\bar{b}_5 = a/2[\bar{1}10]$ (см. рис. 152). Соблюдается векторная сумма $\bar{b}_5 = \bar{b}_2 + \bar{b}_4$ (см. рис. 161).

Касательные напряжения, действующие в направлении $\langle 011 \rangle$, вызывают скольжение расщепленной винтовой дислокации перпендикулярно этому направлению. При этом головная частичная дислокация смещает атомы перед собой в неправильные положения, продвигая вперед область дефекта упаковки, а замыкающая частичная дислокация смещает атомы на другой стороне дефекта упаковки в нормальные положения. Здесь полная аналогия со скольжением расщепленной краевой дислокации.

Расщепление винтовой дислокации на две частичные дислокации Шокли резко изменяет ее поведение. Как отмечено в § 25, отличительная особенность чисто винтовой дислокации — ее способность скользить в любой кристаллографической плоскости, содержащей линию дислокации и вектор сдвига. Расщепленная же винтовая дислокация может скользить только в плоскости дефекта упаковки, к которому «привязаны» обе частичные дислокации Шокли.

Это можно объяснить еще и так. Плоскость скольжения должна содержать вектор Бюргерса скользящей дислокации. Два вектора Бюргерса частичных дислокаций, входящих в состав растянутой, не лежат на одной прямой (см. рис. 159, 161, 162) и определяют единственную плоскость скольжения, содержащую их.

Особый механизм перехода растянутой дислокации в другую плоскость скольжения рассматривается в § 44.

3. ЧАСТИЧНЫЕ ДИСЛОКАЦИИ ШОКЛИ

В О. Ц. К. РЕШЕТКЕ

Расщепление единичной винтовой дислокации на две частичные в о.ц.к. решетке показано на рис. 163. Как и на рис. 154, видны три атомных слоя, параллельных кристаллографической

плоскости (112), являющейся плоскостью чертежа рис. 163 (см. также рис. 153, б): 1 — атомы нижнего слоя; 2 — верхнего и 3 — среднего слоя. На левой стороне рис. 163 изображен участок, не претерпевающий сдвига. В средней области рис. 163 атомы верхнего слоя 2 смещены по направлению $[\bar{1}\bar{1}1]$, но не на величину единичного вектора трансляции $a/2[\bar{1}\bar{1}1]$, как на рис. 154, а на одну треть его, т. е. на $a/6[\bar{1}\bar{1}1]$. При этом атомы верхнего слоя 2 попадают в механически устойчивое положение над атомами нижнего слоя 1, образуя дефект упаковки. Левая граница

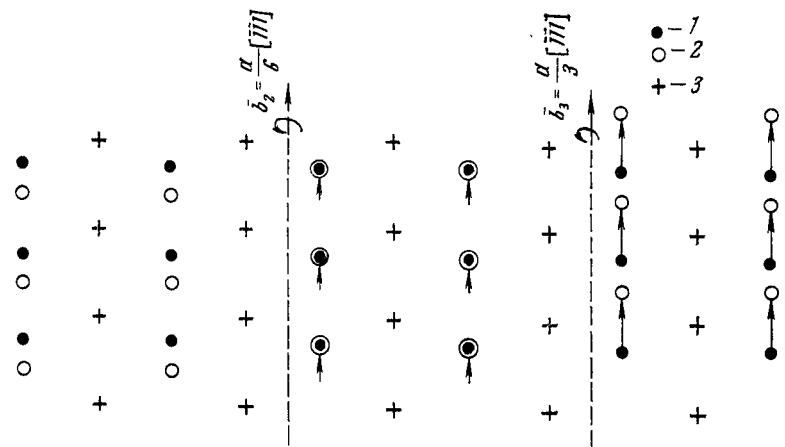


Рис. 163. Растянутая винтовая дислокация в плоскости (112) о.ц.к. решетки. Между частичными дислокациями Шокли с векторами Бюргерса \bar{b}_2 и \bar{b}_3 находится дефект упаковки

дефекта упаковки на рис. 163 — частичная дислокация с вектором Бюргерса $a/6[\bar{1}\bar{1}1]$.

На правой стороне рис. 163 атомы верхнего слоя смещены из положений над атомами нижнего слоя в полностью стабильные положения. Эти смещения произошли на величину, равную двум третям единичного вектора трансляции, т. е. на $(2/3) \times (a/2)[\bar{1}\bar{1}1] = a/3[\bar{1}\bar{1}1]$. В результате сдвига сначала на $a/6[\bar{1}\bar{1}1]$, а затем на $a/3[\bar{1}\bar{1}1]$ образовалось чередование слоев (112), свойственное идеальной о.ц.к. решетке. Правой границей дефекта упаковки на рис. 163 является частичная дислокация с вектором Бюргерса $a/3[\bar{1}\bar{1}1]$.

Образование двух частичных дислокаций Шокли в о.ц.к. решетке при расщеплении единичной дислокации можно описать следующей реакцией:

$$a/2[\bar{1}\bar{1}1] = a/6[\bar{1}\bar{1}1] + a/3[\bar{1}\bar{1}1]. \quad (77)$$

Согласно критерию Франка, эта реакция энергетически выгодна, так как $(a\sqrt{3}/2)^2 > (a\sqrt{3}/6)^2 + (a\sqrt{3}/3)^2$ или $3a^2/4 > 5a^2/12$. Практически такое расщепление будет реализовываться только в том случае, если энергия образующегося дефекта упаковки мала.

4. ШИРИНА РАСТЯНУТЫХ ДИСЛОКАЦИЙ

Как уже указывалось, равновесное расстояние между частичными дислокациями, образующими вместе с дефектом упаковки растянутую дислокацию, определяется равенством силы поверхностного натяжения дефекта упаковки γ и силы взаимного отталкивания частичных дислокаций. Это равновесное расстояние (d_0 на рис. 159) называют шириной растянутой дислокации.

Рассмотрим случай изотропного кристалла, свободного от других дефектов, которые могли бы повлиять на взаимное отталкивание частичных дислокаций. Из § 34 следует, что сила взаимного отталкивания двух параллельных частичных винтовых дислокаций с векторами Бюргерса \bar{b}_2 и \bar{b}_3

$$F = Gb_2 \cdot b_3 / 2\pi d, \quad (78)$$

где d — расстояние между частичными дислокациями. Параллельные частичные дислокации с винтовой ориентацией могут быть в о.ц.к. решетке (см. рис. 163). Из условия равенства $F = \gamma$ получаем выражение для равновесного расстояния между такими частичными дислокациями:

$$d_0 = Gb_2 b_3 / 2\pi \gamma. \quad (79)$$

Если частичные дислокации имеют и краевую и винтовую компоненты, то выражение для ширины растянутой дислокации получается более сложным.

Чем меньше энергия дефекта упаковки γ , тем на большее расстояние упруго отталкивается одна частичная дислокация от другой, т. е. тем больше ширина растянутой дислокации (на рис. 164 $d_0''' > d_0'' > d_0'$). В области малых значений энергии дефекта упаковки небольшие изменения ее величины приводят к значительным изменениям ширины растянутых дислокаций. Это хорошо видно на рис. 164, где $(\gamma' - \gamma'') = (\gamma'' - \gamma''')$, но $(d_0''' - d_0'') > (d_0'' - d_0')$.

Из всех металлов у серебра самая низкая энергия дефекта упаковки — около 20 мДж/м². Ширина растянутых дислокаций в серебре составляет около 10 межатомных расстояний. В других металлах ширина растянутых дислокаций еще меньше. Наибольшей энергией дефекта упаковки обладают тугоплавкие переходные металлы VI группы с о.ц.к. решеткой — молибден и вольфрам ($\gamma = 300$ мДж/м² или более). Ширина растянутых дислокаций в них столь мала, что обычные методы электронной

микроскопии не выявляют расщепления полных дислокаций на частичные. Величина d_0 у этих металлов скорее всего не превышает двух межатомных расстояний, и поэтому можно говорить не о растянутой дислокации, а об асимметрии ядра полной дислокации.

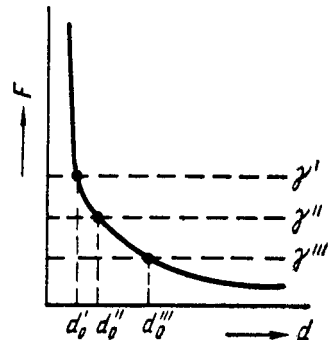


Рис. 164. Зависимость силы взаимного отталкивания F между частичными дислокациями по краям дефекта упаковки от расстояния d между ними:

γ' , γ'' , γ''' — энергия дефекта упаковки в трех материалах; d_0' , d_0'' , d_0''' — соответствующая ширина растянутых дислокаций

дефекта упаковки сильно растянутой дислокации ограничено с двух сторон прямыми линиями пересечения плоскости дефекта с поверхностями фольги; с двух других сторон граница дефекта упаковки — это частичные дислокации в фольге.

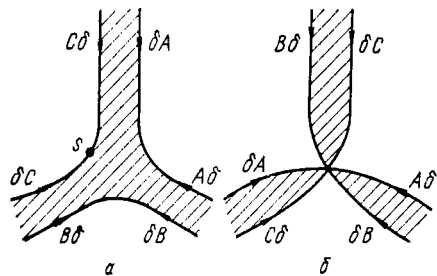


Рис. 165. Схема растянутого (а) и стянутого (б) тройных узлов дислокаций в плоскости $\{111\}$ г. ц. к. решетки (заштрихован дефект упаковки) и растянутые и стянутые узлы дислокационной сетки в сплаве $\text{Cu}-8\% \text{Al}$ (в)

Когда три растянутые дислокации лежат в одной плоскости, то они могут образовать один из узлов, показанных на рис. 165. Параллельные линии на рис. 165, а изображают частичные дислокации Шокли, идущие к узлу, заштрихованная площадь

У алюминия энергия дефекта упаковки ниже, чем у тугоплавких о. ц. к. металлов ($\gamma = 135 \text{ мДж/м}^2$), но из-за низкого модуля сдвига, характеризующего силы межатомной связи, сила взаимного отталкивания частичных дислокаций в алюминии сравнительно мала, и дислокации в нем можно рассматривать как нерасщепленные.

Легирующие элементы способны существенно снижать энергию дефекта упаковки и тем самым увеличивать ширину растянутых дислокаций. Классическими материалами с сильно растянутыми дислокациями являются нержавеющая аустенитная сталь, латунь, алюминиевая бронза и сплавы $\text{Co}-\text{Ni}$.



между ними обозначает дефект упаковки (обозначения частичных дислокаций см. ниже в тетраэдре на рис. 168). Растянутый узел на рис. 165, а включает дефект упаковки.

По величине радиуса r частичной дислокации в растянутом узле можно вычислить энергию дефекта упаковки. В точке s на частичную дислокацию действует восстанавливающая сила F , стремящаяся выпрямить дислокацию вследствие ее линейного натяжения (рис. 165, а). В этой же точке в противоположном направлении на частичную дислокацию действует сила поверхностного натяжения дефекта упаковки γ — дефект упаковки стремится уменьшить свою площадь и стянуть узел.

Из выражения (67) получаем значение силы, отнесенной к единице длины дислокации: $f = \alpha G b^2 / r$. В точке s для равновесной конфигурации растянутого узла $f = \gamma$, следовательно:

$$\gamma = \alpha G b^2 / r. \quad (80)$$

Практически этот метод определения γ из-за трудности измерения r применим только к материалам с низкой энергией дефекта упаковки (α -латунь, алюминиевая бронза, нержавеющая сталь, сплавы $\text{Co}-\text{Ni}$ и др.).

§ 40. Частичные дислокации Франка

Частичные дислокации Шокли создавались несквозным сдвигом в плоскости плотнейшей упаковки, когда возникающий дефект упаковки оканчивался внутри кристалла. Его границей внутри кристалла и была частичная дислокация Шокли с вектором Бюргерса, лежащим в плоскости дефекта упаковки.

Дефект упаковки, как указано § 37, можно получить и другими путями.

Если в г. ц. к. решетке удалить часть плотноупакованного слоя и ликвидировать образовавшуюся «щель», сблизив по нормали соседние плотноупакованные слои, то возникнет дефект упаковки вычитания. Граница его внутри кристалла — линейное несовершенство, называемое *частичной дислокацией Франка* (см. рис. 144).

Схема атомного строения кристалла вблизи частичной дислокации Франка показана на рис. 166. На рис. 144 и 166 дислокация Франка расположена перпендикулярно плоскости чертежа, и мы видим только ее выход на эту плоскость (как и в случае краевой дислокации на рис. 105). Область несовершенства на рис. 144 и 166 тянется вдоль края неполной атомной плоскости. Сближение атомов, которое было необходимо для ликвидации «щели», происходило на величину вектора $a/3 \langle 111 \rangle$, т. е. на $a\sqrt{3}/3$ по нормали к плоскости плотнейшей упаковки. Следовательно, вектор Бюргерса дислокации Франка перпендикулярен линии дислокации, т. е. дислокация Франка — краевая.

При внедрении между слоями $\{111\}$ неполного плотноупакованного атомного слоя возникает дефект упаковки внедрения (см. рис. 145), границей которого также является частичная дислокация Франка с вектором Бюргерса $a/3 \langle 111 \rangle$, перпендикулярным линии дислокации (атомы соседних слоев удаляются по нормали от плоскости $\{111\}$).

Край неполного плотноупакованного слоя в общем случае является не прямой, а плоской кривой, ограничивающей дефект упаковки. Соответственно и дислокация Франка в общем случае — плоская кривая. Это не влияет на ее краевую ориентацию, так как вектор Бюргерса во всех точках перпендикулярен плоскости дефекта упаковки.

Так как вектор Бюргерса дислокации Франка не лежит в плоскости дефекта упаковки, то эта дислокация не может двигаться скольжением подобно тому, как легко скользит единичная краевая дислокация (см. рис. 108). Дислокация Франка может перемещаться только диффузионным путем (переползанием) в плоскости дефекта упаковки при достройке неполного атомного слоя или при удалении атомов с его кромки. Поэтому частичные дислокации Франка называются

Рис. 166. Дислокация Франка в г. ц. к. решетке. Линия дислокации лежит в плоскости $\{111\}$, перпендикулярной плоскости чертежа $\{110\}$, и выходит на плоскость чертежа в точке a : 1 — атомы в плоскости чертежа; 2 — атомы непосредственно над ней

также *сидячими* или *полузакрепленными*. В отличие от них частичные дислокации Шокли и все полные дислокации называют *скользящими*.

Плоскую петлю, внутри которой заключен дефект упаковки, называют *сидячей дислокационной петлей Франка*. Ее вектор Бюргерса перпендикулярен плоскости петли. Этим петля Франка схожа с призматической дислокационной петлей, которая, однако, не содержит дефекта упаковки и поэтому может совершать призматическое скольжение. Дислокационная петля Франка привязана к своему дефекту упаковки и скользить вообще не может.

Петли Франка образуются при закалке и ядерном облучении металлов. При закалке г.ц.к. металлов закалочные вакансии образуют на плоскостях $\{111\}$ вакансионные диски, захлопывание которых приводит к созданию дискообразных дефектов упаковки, чьи контуры являются дислокационными петлями Франка с вектором Бюргерса $a/3 \langle 111 \rangle$. На рис. 144 показано чередо-

вание плотноупакованных слоев $\{111\}$ после захлопывания вакансионного диска. До захлопывания вакансионный диск находился в слое атомов B (середина этого слоя отсутствовала). При захлопывании диска вакансий сближение соседних слоев по нормам привело к образованию дефекта упаковки $CACA$ в г.ц.к. решетке $ABCABC...$

Минимуму энергии соответствует не круглая (или овальная), а кристаллографически правильная форма дислокационной петли Франка, которая состоит из отрезков, параллельных направлению плотнейшей упаковки $\langle 110 \rangle$. Петли Франка являются многоугольниками, стороны которых расположены в направлениях $\langle 110 \rangle$. Реже они представляют собой правильные шестиугольники, чаще имеют как тупые, так и острые углы (см. ниже рис. 202, а).

При ядерном облучении г.ц.к. металлов сильное пересыщение кристалла межузельными атомами приводит к их конденсации в виде внедренных дисков на плоскостях $\{111\}$. Контур возникающего таким путем дефекта упаковки внедрения является сидячей дислокацией Франка с вектором Бюргерса $a/3 \langle 111 \rangle$ (см. рис. 145).

При вакансионных стоках вокруг дислокационной петли Франка, включающей дефект упаковки вычитания, во время отжига петля сужается, испуская вакансии. Сужению петли радиусом R способствуют линейное натяжение дислокации, пропорциональное $Gb^2 2\pi R$, и энергия окруженного петлей дефекта упаковки, равная $\pi R^2 \gamma$.

Внутри больших петель Франка, например в закаленном алюминии, часто видны петли Франка меньшего размера. На рис. 167 показана схема чередования атомных плоскостей $\{111\}$ в области двойной петли в г.ц.к. решетке. Удаление части плоскости A приводит к образованию большой петли Франка, являющейся границей дефекта упаковки вычитания с чередованием плоскостей $BCBC$, свойственным г.п. решетке. Последующее удаление части плоскости C создает новый дефект упаковки вычитания с чередованием плоскостей $BAVB$, свойственным г.п. решетке. Край этого дефекта — малая дислокационная петля Франка, расположенная внутри большой петли. Видно, что два дефекта упаковки вычитания на соседних плоскостях $\{111\}$ эквивалентны одному дефекту упаковки внедрения (в центре рис. 167 плоскость B оказывается как бы внедренной в нормальную для г.ц.к. решетки чередование плоскостей $ABCABC...$).

В г.п. решетке при внедрении в чередование плотноупакованных слоев $ABABAB...$ между слоями A и B диска из атомов в положениях C возникает дефект упаковки, границей которого является частичная краевая дислокация Франка с вектором Бюргерса $1/2 \langle 0001 \rangle$, перпендикулярным плоскости базиса (0001) . Величина вектора Бюргерса этой дислокации равна $c/2$

или для случая идеального отношения $c/a = \sqrt{8/3} = 1,633$ составляет $a\sqrt{2/3}$.

В о.ц.к. решетке сидячая частичная дислокация с чисто краевой ориентацией является границей дефекта упаковки, полученного внедрением двух неполных слоев в семейство параллельных слоев $\{112\}$. Вектор Бюргерса ее $a/3 \langle 112 \rangle$ перпендикулярен плоскости $\{112\}$. Более подробно эта дислокация здесь рассматриваться не будет.

Дислокации Франка наряду с дислокациями Шокли и единич-

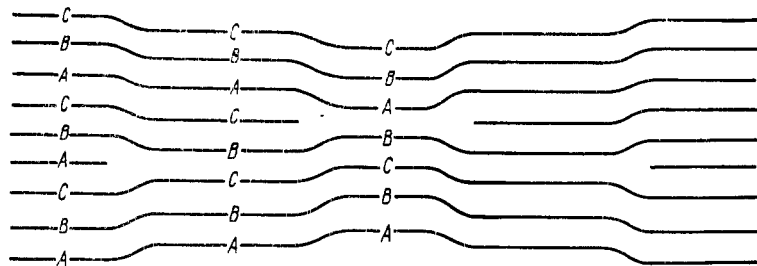


Рис. 167. Двойная дислокационная петля Франка в г.ц.к. решетке

ными дислокациями участвуют в разнообразных дислокационных реакциях, некоторые из них рассмотрены в следующем параграфе.

§ 41. Стандартный тетраэдр и дислокационные реакции в г.ц.к. решетке

1. СТАНДАРТНЫЙ ТЕТРАЭДР ТОМПСОНА

Векторы Бюргерса характерных дислокаций в г.ц.к. решетке принято представлять, используя специальное геометрическое построение — так называемый *стандартный тетраэдр Томпсона*.

Стандартный тетраэдр (рис. 168) состоит из четырех равно-сторонних треугольников — плоскостей $\{111\}$. Его вершины совпадают с узлами г.ц.к. решетки, в которых находятся четыре соседних атома (рис. 169). Ребра тетраэдра расположены вдоль кристаллографических направлений $\langle 110 \rangle$. Ребра AB , BC , AC , AD , BD и CD представляют собой все возможные векторы Бюргерса единичных дислокаций $a/2 \langle 110 \rangle$ в г.ц.к. решетке, а боковые грани — все плоскости скольжения $\{111\}$.

Буквами α , β , γ и δ на рис. 168 обозначены точки центра тяжести треугольных граней, противоположных вершинам A , B , C , D соответственно. Например, β находится в плоскости ACD , а γ — в плоскости ABD . Лежащие в плоскостях $\{111\}$ от-

резки типа $A\delta$, δC , $B\alpha$ и $D\alpha$ представляют собой все возможные векторы Бюргерса $a/6 \langle 112 \rangle$ частичных дислокаций Шокли. Отрезки типа $D\delta$, соединяющие вершину и центр тяжести противоположной грани, т. е. нормальные плоскостям $\{111\}$,

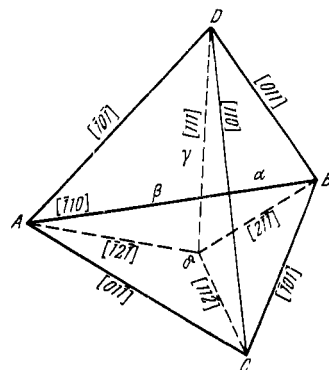


Рис. 168. Стандартный тетраэдр Томпсона

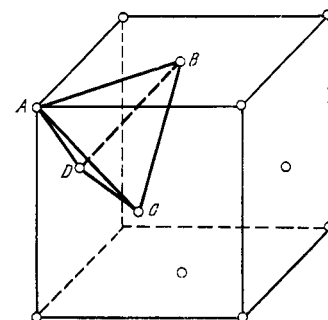


Рис. 169. Расположение стандартного тетраэдра Томпсона в элементарной ячейке г.ц.к. решетки

представляют собой все возможные векторы Бюргерса $a/3 \langle 111 \rangle$ частичных дислокаций Франка.

В дислокационных реакциях необходимо различать дислокации с прямо противоположными направлениями векторов Бюргерса: AB и BA , $A\delta$ и δA , $D\delta$ и δD и т. п. Если, например, вектор Бюргерса $A\delta = a/6 [\bar{1}21]$, то $\delta A = a/6 [\bar{1}21]$ (знак каждого индекса изменен на противоположный).

Для перехода от обозначений Томпсона к кристаллографическим индексам и обратно удобно пользоваться разверткой тетраэдра Томпсона (рис. 170). На этой развертке плоскости (грани), противоположные вершинам A , B , C и D , обозначены соответственно a , b , c и d . Обозначение направления $[011]$ введено вместо обычного обозначения $[011]$, чтобы показать направление вектора.

С помощью стандартного тетраэдра можно легко записывать разнообразные дислокационные реакции в г.ц.к. решетке.

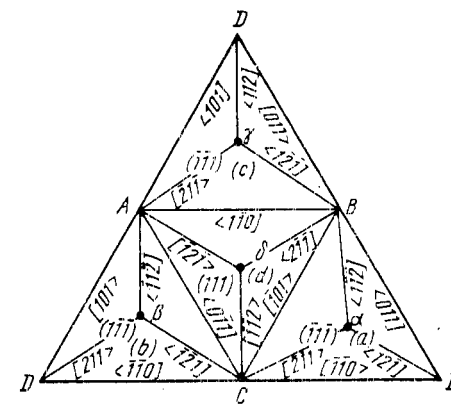


Рис. 170. Развертка тетраэдра Томпсона: $|\rangle = \langle -|$

Например, обсуждавшуюся ранее реакцию (76) расщепления единичной дислокации на две частичные дислокации Шокли при использовании символики Томпсона записывают в следующей форме:

$$AC = A\delta + \delta C. \quad (81)$$

Эта реакция происходит в плоскости ABC с индексами (111). В этой же плоскости возможна реакция расщепления единичной дислокации AB на две дислокации Шокли $A\delta$ и δB , т. е. $AB = A\delta + \delta B$ или при другой форме записи

$$a/2[\bar{1}10] = a/6[\bar{1}2\bar{1}] + a/6[\bar{2}11].$$

В плоскости (111) возможна также реакция расщепления $BC = B\delta + \delta C$. Аналогичные реакции расщепления можно записать и для других граней тетраэдра. Для записи реакций можно использовать только символы Томпсона, причем, если требуется, эти символы легко перевести в обычные кристаллографические. При таком переводе необходимо следить за правильностью расстановки индексов и их знаков для каждого вектора Бюргерса дислокаций, участвующих в реакции, используя для этого соотношения (74, а). Продемонстрируем проверку на примере только что приведенной реакции

$$a/2[\bar{1}10] = a/6[\bar{1}2\bar{1}] + a/6[\bar{2}11]:$$

$$a/2(-1) = a/6(-1) + (a/6)(-2);$$

$$(a/2) \cdot 1 = (a/6) \cdot 2 + (a/6) \cdot 1; \quad (a/2) \cdot 0 = (a/6)(-1) + (a/6) \cdot 1.$$

Если знаки всех индексов поменять на противоположные, то соотношения (74, а) будут выполняться. Такая перемена знаков означает замену реакции $AB = A\delta + \delta B$ на реакцию $BA = B\delta + \delta A$. Если же изменить знак только у одного из индексов любого вектора Бюргерса, то одно из соотношений (74, а) не будет выполняться, т. е. соответствующая дислокационная реакция невозможна (не соблюдается векторная сумма).

При анализе дислокационных реакций с записью в кристаллографических индексах полезно помнить следующее: если вектор Бюргерса $\vec{b} = n[uvw]$ находится в плоскости (hkl) , то, как и для любого направления $[uvw]$ в плоскости (hkl) , должно выполняться соотношение $hu + kv + lw = 0$.

Рассмотрим еще две реакции в г.ц.к. решетке.

Реакция

$$D\delta + \delta C \rightarrow DC \quad (82)$$

описывает объединение дислокации Франка и дислокации Шокли с образованием единичной дислокации.

Здесь уместно отметить, что отрезки $D\delta$, δC и DC являются векторами Бюргерса дислокаций, а не их линиями. Линия дис-

локации Франка с вектором Бюргерса $D\delta$ и связанный с ней дефект упаковки находятся в плоскости ABC . В этой же плоскости находится линия дислокации Шокли с вектором Бюргерса δC и связанный с ней дефект упаковки. Вектор Бюргерса DC образовавшейся по реакции (82) единичной дислокации не лежит в плоскости ABC и, следовательно, дислокация DC не может скользить в этой плоскости. Она может скользить только в плоскости ADC или CDB .

В обычной форме записи реакция (82) выглядит так:

$$a/3[111] + a/6[\bar{1}1\bar{2}] = a/2[110]. \quad (83)$$

Используя критерий Франка (правило квадратов), нельзя сделать определенное заключение о возможности такого объединения, так как $(a\sqrt{3}/3)^2 + (a\sqrt{6}/6)^2 = (a\sqrt{2}/2)^2$ и $a^2/2 = a^2/2$. Однако учитывая, что рассматриваемая реакция устраняет дефект упаковки, следует считать ее энергетически выгодной.

Реакция (83) позволяет понять многократно наблюдавшиеся факты превращения сидячих петель Франка в призматические дислокационные петли. Допустим, что внутри петли Франка (рис. 171, а) под действием напряжений зарождается петля частичной дислокации Шокли (рис. 171, б). Распространяясь внутри петли Франка, дислокация Шокли полностью ликвидирует дефект упаковки (что энергетически выгодно) и, объединяясь с дислокацией Франка, образует полную призматическую дислокационную петлю с вектором Бюргерса, наклоненным к плоскости петли (рис. 171, в). Такую петлю называют также *R-дислокацией* (результатирующей дислокацией).

Реакция

$$DA + A\delta = D\delta \quad (84)$$

описывает объединение единичной дислокации и дислокации Шокли из разных плоскостей скольжения в дислокацию Франка. Дислокация с вектором Бюргерса DA может скользить в плоскости ADB или ADC . Линия дислокации Шокли с вектором Бюргерса $A\delta$ и связанный с ней дефект упаковки находятся в плоскости ABC . Образующаяся по реакции (84) дислокация Франка также находится в плоскости ABC .

В обычных кристаллографических символах реакция (84) имеет вид:

$$a/2[101] + a/6[\bar{1}2\bar{1}] = a/3[111]. \quad (85)$$

Из критерия Франка вытекает, что такая реакция вдвое снижает энергию $(a\sqrt{2}/2)^2 + (a\sqrt{6}/6)^2 > (a\sqrt{3}/3)^2$ или $2a^2/3 > a^2/3$. Если дислокация Шокли является частью растянутой дислокации Шокли — Шокли, то при объединении ее с единичной

дислокацией по указанной реакции образуется растянутая дислокация Шокли — Франка. Но, как было показано выше, поверхностное натяжение дефекта упаковки внутри такой пары стягивает дислокации Шокли и Франка в нерасщепленную единичную дислокацию. Следовательно, если в исходном состоянии в пересекающихся плоскостях скольжения находились единичная дислокация DA и растянутая дислокация $A\delta-\delta C$, то при их встрече вначале протекает реакция (84), а затем (82).

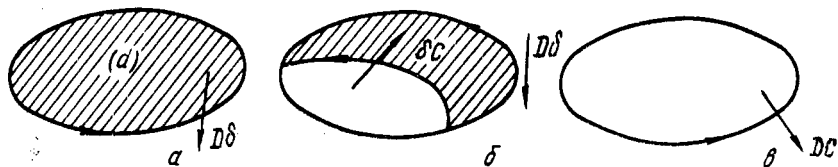


Рис. 171. Скольжение внутри петли Франка частичной дислокации Шокли, приводящее к ликвидации дефекта упаковки (заштрихован), и превращение петли Франка в призматическую дислокационную петлю (обозначения см. на рис. 168)

2. ВЕРШИННЫЕ ДИСЛОКАЦИИ И ДИСЛОКАЦИИ ЛОМЕР — КОТТРЕЛЛА

Используя стандартный тетраэдр (см. рис. 168), рассмотрим встречу двух растянутых дислокаций, движущихся в пересекающихся плоскостях скольжения.

Допустим, что в плоскости ADC , т. е. $(\bar{1}11)$, находится расщепленная дислокация AD , состоящая из частичных дислокаций Шокли $D\beta$ и βA , соединенных дефектом упаковки. В плоскости ABC , т. е. $(11\bar{1})$, находится расщепленная дислокация AC , состоящая из частичных дислокаций $A\delta$ и δC и дефекта упаковки. Исходное расположение двух таких растянутых дислокаций в пересекающихся плоскостях скольжения изображено на рис. 172, a (штриховкой показаны дефекты упаковки). В то время как в стандартном тетраэдре (см. рис. 168) отрезки $D\beta$, βA , $A\delta$ и δC изображают векторы Бюргерса дислокаций Шокли, на рис. 172 обозначенные этими же символами отрезки изображают сами линии дислокаций.

Плоскости ADC и ABC пересекаются по прямой с индексами $[01\bar{1}]$ (см. рис. 168). При движении растянутых дислокаций их головные частичные дислокации βA и $A\delta$ могут встретиться на линии пересечения плоскостей скольжения $[01\bar{1}]$ (рис. 172, b) и образовать в месте встречи новую частичную дислокацию. Вектор Бюргерса дислокации встречи легко определить в тетраэдре (см. рис. 168): объединение дислокаций с векторами Бюргерса βA и $A\delta$ дает дислокацию с вектором Бюргерса $\beta\delta$:

$$\beta A + A\delta = \beta\delta. \quad (86)$$

Отрезок $\beta\delta$, соединяющий центры двух граней, параллелен ребру DB с индексами $[011]$. Можно показать, что отрезок $\beta\delta$

равен одной трети отрезка DB и, следовательно, вектор Бюргерса дислокации встречи будет равен $a/6[011]$.

Объединение двух головных частичных дислокаций в одну частичную по реакции

$$a/6[\bar{1}\bar{1}2] + a/6[\bar{1}2\bar{1}] = a/6[011] \quad (87)$$

дает большой выигрыш в энергии, так как $(a\sqrt{6}/6)^2 + (a\sqrt{6}/6)^2 > (a\sqrt{2}/6)^2$ или $a^2/3 > a^2/18$.

Дислокация с вектором Бюргерса $a/6[011]$, образовавшаяся в результате встречи двух частичных дислокаций Шокли, также

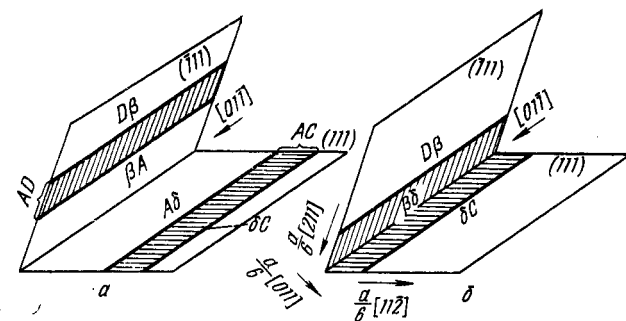


Рис. 172. Образование дислокации Ломер — Коттрелла при встрече растянутых дислокаций в пересекающихся плоскостях скольжения: a — до встречи; b — после встречи

частичная. Ее линия идет вдоль направления $[0\bar{1}1]$ и находится в вершине двугранного угла, образованного встретившимися дефектами упаковки из пересекающихся плоскостей скольжения. Поэтому дислокации типа $a/6\langle 011 \rangle$ называют *вершинными*.

Линия $[0\bar{1}1]$ и вектор Бюргерса $a/6[011]$ вершинной дислокации лежат в плоскости (100) . Это легко показать из рис. 169. Здесь отрезок AC идет в направлении $[01\bar{1}]$, а из точки C вправо и вверх (к атому в вершине) идет отрезок в направлении $[011]$. Оба они лежат в плоскости передней грани куба (100) . Так как линия вершинной дислокации идет вдоль направления $[0\bar{1}1]$, перпендикулярного направлению вектора Бюргерса $[011]$, то вершинная дислокация является чисто краевой.

В результате встречи в пересекающихся плоскостях двух растянутых дислокаций образуется новая растянутая дислокация, в которой дефект упаковки имеет форму клина — ленты, согнутой по линии пересечения плоскостей скольжения (см. рис. 172, b). Кроме частичной вершинной дислокации $\beta\delta$ с вектором Бюргерса $a/6\langle 011 \rangle$, клинообразный дефект упаковки в каждой из плоскостей скольжения ограничен линиями хвостовых

частичных дислокаций Шокли $D\beta$ и δC с вектором Бюргерса $a/6 \langle 112 \rangle$ (см. рис. 172, б). Такую совокупность трех частичных дислокаций и клинообразного дефекта упаковки называют *дислокацией Ломер — Коттрелла*.

Плоскость $\{100\}$, в которой лежат линия и вектор Бюргерса вершинной дислокации, не является плоскостью скольжения в г. ц. к. решетке и в ней не находятся хвостовые дислокации Шокли $a/6 \langle 112 \rangle$. Поэтому все три дислокации $\beta\delta$, $D\beta$ и δC , связанные клинообразным дефектом упаковки, неподвижные, прочно закрепленные по всей длине. Дислокация Ломер — Коттрелла прочно привязана к линии пересечения двух плоскостей скольжения и называется *сидячей*.

Реакцию образования дислокации Ломер — Коттрелла можно записать по этапам в следующей форме, используя символика Томпсона:

$$(D\beta + \beta A) + (A\delta + \delta C) = D\beta + (\beta A + A\delta) + \delta C = D\beta + \beta\delta + \delta C. \quad (88)$$

В результате реакции получилась дислокация, включающая три частичных: $D\beta + \beta\delta + \delta C$ или в кристаллографических символах $a/6[211] + a/6[011] + a/6[112]$. Дислокация Ломер — Коттрелла может образоваться при встрече других растянутых дислокаций в тех же плоскостях скольжения: $(D\beta + \beta C) + (C\delta + \delta B) = D\beta + (\beta C + C\delta) + \delta B = D\beta + \beta\delta + \delta B$.

Конфигурация из одной вершинной дислокации и двух дислокаций Шокли, соединенных клинообразным дефектом упаковки, в принципе может возникнуть не только при встрече растянутых дислокаций, но и при диссоциации единичной дислокации, например по реакции

$$DC = D\beta + \beta\delta + \delta C. \quad (89)$$

Согласно критерию Франка, если не учитывать энергию возникающего дефекта упаковки, эта реакция диссоциации идет с выигрышем энергии:

$$(a\sqrt{2}/2)^2 > (a\sqrt{6}/6)^2 + (a\sqrt{2}/6)^2 + (a\sqrt{6}/6)^2 \text{ и } a^2/2 > 7a^2/18.$$

Т а б л и ц а 16. Характерные дислокации в г. ц. к. решетке

Тип дислокации	Полные дислокации		Частичные дислокации		
			Шокли	Франка	вершинные
Вектор Бюргерса	$a/2 \langle 110 \rangle$	$a \langle 110 \rangle$	$a/6 \langle 112 \rangle$	$a/3 \langle 111 \rangle$	$a/6 \langle 110 \rangle$
Квадрат вектора Бюргерса	AB $a^2/2$	\overline{a} a^2	$A\delta$ $a^2/6$	$D\delta$ $a^2/3$	$\beta\delta$ $a^2/18$

Вершинная дислокация может образоваться и при расщеплении дислокации Франка, линия которой лежит вдоль направления $\langle 110 \rangle$. Примером является реакция расщепления на рис. 173:

$$\delta D = \delta\beta + \beta D. \quad (90)$$

Используя критерий Франка, получаем $a^2/3 > a^2/18 + a^2/6$.

Связанный с дислокацией δD дефект упаковки (заштрихован) находится в плоскости (d), а образующаяся в результате реакции диссоциации частичная дислокация Шокли βD вместе со своим дефектом упаковки находится в плоскости (b). Появившаяся вершинная дислокация $\delta\beta$ проходит вдоль линии пересечения плоскостей (b) и (d), т. е. вдоль направления $[011]$.

Основные сведения о всех рассмотренных характерных дислокациях в г. ц. к. решетке приведены в табл. 16.

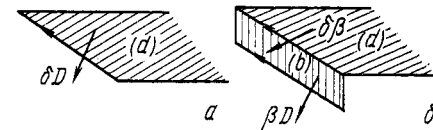


Рис. 173. Образование вершинной дислокации $\delta\beta$ при диссоциации частичной дислокации Франка:

a — дислокация Франка до диссоциации; б — конфигурация дефектов после диссоциации

3. ТЕТРАЭДР ДЕФЕКТОВ УПАКОВКИ

В г. ц. к. металлах можно встретить объемные построения из дефектов упаковки в виде правильных тетраэдров: четыре грани тетраэдра являются дефектами упаковки вычитания в плоскостях $\{111\}$, а шесть ребер — это вершинные дислокации с вектором Бюргерса $a/6 \langle 110 \rangle$. Внутри тетраэдра дефектов упаковки кристалл имеет совершенное строение.

Один из наиболее вероятных механизмов образования тетраэдров дефектов упаковки включает расщепление дислокационной петли Франка, возникающей при захлопывании диска вакансий. Как указано в § 40, минимуму энергии соответствует расположение прямоугольных отрезков петли Франка вдоль направлений плотнейшей укладки атомов $\langle 110 \rangle$.

На рис. 174, а показана лежащая в плоскости (111) дислокационная петля в виде треугольника, стороны которого — это линии дислокаций Франка с вектором Бюргерса $a/3 \langle 111 \rangle$, перпендикулярным плоскости петли. Внутри треугольника находится дефект упаковки вычитания.

Далее будем рассматривать этапы образования тетраэдра дефектов упаковки, используя обозначения Томпсона. Вектор Бюргерса дислокации Франка — δD . Энергетически выгодна диссоциация каждого отрезка петли Франка по реакции типа (90) с образованием частичной дислокации Шокли и вершинной дислокации (рис. 174, б). Расщепление происходит не в плоскости исходной петли Франка ABC , а в плоскостях ADC ($\delta D = \delta\beta + \beta D$), ADB ($\delta D = \delta\gamma + \gamma D$) и CDB ($\delta D = \delta\alpha + \alpha D$). Линии образовавшихся вершинных дислокаций с векторами Бюргерса $\delta\beta$, $\delta\gamma$ и $\delta\alpha$ проходят на месте отрезков расщепившейся петли Франка вдоль направлений BC , CD и DB соответственно. Образовавшиеся скользкие дислокации Шокли отталкиваются от сидячих вершинных дислокаций, выгибаясь при этом в дугу. Например, дислокация Шокли с вектором Бюргерса βD отталкивается от вершинной дислокации с вектором Бюргерса $\delta\beta$, а между ними возникает дефект упаковки.

Выгибающиеся дислокации Шокли из соседних плоскостей $\{111\}$ приближаются одна к другой и, имея противоположный знак, по реакции (86) попарно образуют вдоль направлений AD , BD и CD новые вершинные дислокации с векторами Бюргерса соответственно $\gamma\beta$, $\alpha\gamma$ и $\beta\alpha$.

В результате всех этих дислокационных реакций образуется тетраэдр дефектов упаковки, показанный на рис. 174, в. Не следует путать тетраэдр дефектов упаковки со стандартным тетраэдром Томпсона. Тетраэдр Томпсона — это мысленное геометрическое построение. Его ребра AB , BC и CA и т. п. изображают векторы Бюргерса единичных дислокаций $a/2 \langle 110 \rangle$. Тетраэдр

дефектов упаковки — реальный дефект, его ребра являются линиями вершинных дислокаций (с вектором Бюргерса $a/6 \langle 110 \rangle$), проходящих вдоль обозначенных на рис. 174 латинскими буквами кристаллографических направлений: $AB — [110]$, $DC — [1\bar{1}0]$ и т. п.

Энергия образовавшихся вершинных дислокаций на шести ребрах тетраэдра дефектов упаковки пропорциональна $6(a^2/18) = a^2/3$, а упругая энергия исходного дислокационного треугольника Франка пропорциональна $3(a^2/3) = a^2$. Вследствие этого преобразование петли Франка в тетраэдр дефектов упаковки энергетически очень выгодно, но не следует забывать о повышении суммарной энергии дефектов упаковки, площадь которых у тетраэдра в 4 раза больше, чем у исходной петли Франка. Естественно, чем меньше энергия дефектов упаковки, тем, при прочих равных условиях, больше должен быть размер тетраэдра. Тетраэдры дефектов упаковки обнаружены в золоте,

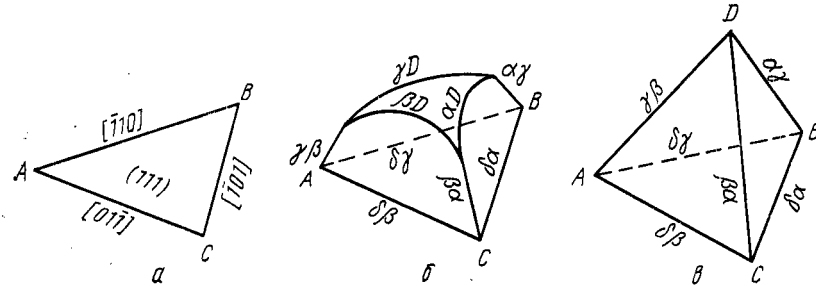


Рис. 174. Этапы образования тетраэдра дефектов упаковки

серебре, меди, нержавеющей аустенитной стали и сплавах Ni—Co, т. е. в металлах и твердых растворах с низкой энергией дефектов упаковки.

Возможен и другой механизм формирования тетраэдров дефектов упаковки, включающий образование объемного вакансионного кластера, состоящего, например, из шести вакансий, при захлопывании которого возникает зародыш тетраэдра.

§ 42. Стандартная бипирамида и дислокационные реакции в г. п. решетке

Для упрощения анализа поведения дислокаций в г. п. решетке (по аналогии со стандартным тетраэдром в г. ц. к. решетке) используют построение, называемое стандартной бипирамидой (рис. 175).

Основанием бипирамиды служит равносторонний треугольник ABC , соединяющий ближайшие узлы в гексагональной сетке базисной плоскости (0001). Вершина бипирамиды S (а также T) находится в узле соседней гексагональной сетки, отстоящей на $c/2$ от базисной и смещенной относительно нее так, чтобы обеспечивалась плотнейшая стыковка соседних атомных слоев. Вершины S и T проецируются в центр тяжести σ треугольника ABC .

Для г. п. решетки характерны три вида полных и три вида частичных дислокаций:

1. Полные дислокации с векторами Бюргерса AB , BC и CA . Сокращенно их называют a -дислокациями. Вектор Бюргерса в кристаллографических символах $1/3 \langle 12\bar{1}0 \rangle$.

2. Полные дислокации с вектором Бюргерса ST , перпендикулярным базисной плоскости. Их обозначают как c или $\langle 0001 \rangle$ — дислокации.

3. Полные дислокации с векторами Бюргерса типа AD , находящимися в призматических плоскостях. Отрезок AD (вне бипирамиды) является век-

тором трансляции решетки, так как узлы A и D структурно эквивалентны. Вектор Бюргерса рассматриваемых дислокаций равен сумме векторов c и a , поэтому их называют $(c+a)$ -дислокациями. В кристаллографических символах вектор Бюргерса $1/3 \langle 12\bar{1}3 \rangle$.

4. Частичные скользящие дислокации Шокли с векторами Бюргерса $A\sigma$, $B\sigma$ и $C\sigma$, находящимися в базисной плоскости. Их обозначают p или $1/3 \langle 01\bar{1}0 \rangle$.

5. Частичные сидячие дислокации Франка с векторами Бюргерса σS и σT , перпендикулярными базисной плоскости. Их обозначают $c/2$ или $1/2 \langle 0001 \rangle$.

6. Частичные сидячие дислокации Франка с векторами Бюргерса AS , BS , CS , AT , BT и CT . Их обозначают $(c/2+p)$ или $1/6 \langle 02\bar{2}3 \rangle$. Точки A и S отвечают положениям атомов (узлов) в соседних гексагональных сетках, но эти узлы структурно неэквивалентны и, следовательно, векторы типа AS не обеспечивают тождественной трансляции, а соответствующие дислокации не могут быть полными.

В дислокационных реакциях необходимо различать дислокации с прямопротивоположными направлениями вектора Бюргерса: AB и BA , ST и TS , $A\sigma$ и σA , AS и SA и т. п.

В табл. 17 приведены основные сведения о рассмотренных дислокациях.

Используя стандартную бипирамиду, рассмотрим некоторые из дислокационных реакций. Следует заметить, что в г. п. решетке больше видов дислокаций и значительно больше вариантов возможных дислокационных реакций, чем в г. ц. к. решетке, а экспериментально изучены они слабее. При записи реакций, как и в случае г. ц. к. решетки, необходимо использовать энергетический критерий Франка, а также следить за правильностью расстановки кристаллографических индексов и их знаков, чтобы соблюдалась векторная сумма.

Реакция расщепления в базисной плоскости полной дислокации на две частичные

$$AB = A\sigma + \sigma B \quad (91)$$

была рассмотрена ранее [см. (75)]. Эта реакция — одна из наиболее важных, так как плоскость базиса является плоскостью легкого скольжения во многих г. п. металлах.

Таблица 17. Характерные дислокации в г. п. решетке

Тип дислокации	Полные дислокации		
Вектор Бюргерса	$1/3 \langle 12\bar{1}0 \rangle$ AB	$\langle 0001 \rangle$ ST	$1/3 \langle 12\bar{1}3 \rangle$ AD
Квадрат вектора Бюргерса *	a a^2	c $8a^2/3$	$c + a$ $11a^2/3$

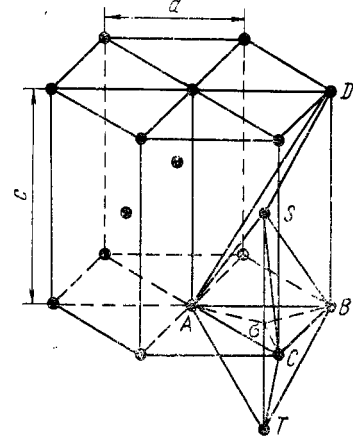


Рис. 175. Элементарная ячейка г. п. решетки со стандартной бипирамидой

Тип дислокации	Частичные дислокации		
	Шокли	Франка	
Вектор Бюргерса	$1/3 \langle 01\bar{1}0 \rangle$ $A\sigma$	$1/2 \langle 0001 \rangle$ σS	$1/6 \langle 02\bar{2}3 \rangle$ AS
Квадрат вектора Бюргерса *	$\frac{\rho}{a^2/3}$	$\frac{c/2}{2a^2/3}$	$\frac{c/2 + \rho}{a^2}$

* При $c/a = \sqrt{3}/3 = 1.633$.

Полная дислокация AD также может диссоциировать на частичные:

$$AD = AS + SD \quad (92)$$

или

$$1/3 [\bar{1}2\bar{1}3] = 1/6 [02\bar{2}3] + 1/6 [\bar{2}203].$$

Эта реакция энергетически выгодна, так как $11a^2/3 > a^2 + a^2$. Дислокация $1/3 [\bar{1}2\bar{1}3]$ может совершать пирамидальное скольжение. Диссоциация по указанной реакции приводит к образованию сидячих дислокаций Франка, т. е. к закреплению скользящей дислокации.

Полная дислокация TS может расщепиться на две частичные по схеме

$$TS = TA + AS \quad (93)$$

или

$$[0001] = 1/6 [0\bar{2}23] + 1/6 [02\bar{2}3].$$

Реакция энергетически выгодна, так как $8a^2/3 > a^2 + a^2$.

§ 43. Дислокационные реакции в о. ц. к. решетке

Для о. ц. к. решетки не предложено простого векторного построения, которое, аналогично тетраэдру Томпсона, могло бы помочь проанализировать в наглядной форме все дислокационные реакции.

Дислокации в о. ц. к. решетке, как отмечено в § 38, могут скользить в плоскостях $\{110\}$ и $\{112\}$. Рассмотрим вначале дислокационные реакции в плоскостях $\{110\}$.

Две полные дислокации $a/2 \langle 111 \rangle$, скользящие в плоскостях $\{110\}$, при встрече объединяются, образуя полную дислокацию $a \langle 100 \rangle$. Такое объединение энергетически выгодно, так как $(a\sqrt{3}/2)^2 + (a\sqrt{3}/2)^2 > a^2$ или $3a^2/2 > a^2$.

Если встречающиеся дислокации $a/2 \langle 111 \rangle$ скользят в одной плоскости, то образующаяся дислокация $a \langle 100 \rangle$ может скользить в этой же плоскости. Например, на рис. 176

$$a/2 [\bar{1}\bar{1}1]_{(1\bar{1}0)} + a/2 [111]_{(1\bar{1}0)} = a [001]_{(1\bar{1}0)}. \quad (94)$$

В том случае, когда дислокации $a/2 \langle 111 \rangle$ скользят во взаимно перпендикулярных плоскостях $\{110\}$, образующаяся при их встрече дислокация $a \langle 100 \rangle$ может скользить только в плоскости $\{100\}$ и поэтому служит барьером для других дислокаций $a/2 \langle 111 \rangle$ во взаимно перпендикулярных плоскостях скольжения $\{110\}$. Допустим, что дислокация $a/2 \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ скользит в плоскости $(1\bar{1}0)$, а дислокация $a/2 [\bar{1}11]$ — в плоскости (110) (см. рис. 176). Эти дислокации могут встретиться только на линии пересечения $00'$ плоскостей $(1\bar{1}0)$ и (110) , т. е. на прямой

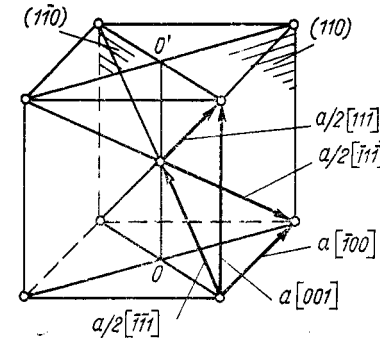


Рис. 176. Векторы Бюргерса единичных дислокаций $a/2 \langle 111 \rangle$ и $a \langle 100 \rangle$ в о. ц. к. решетке

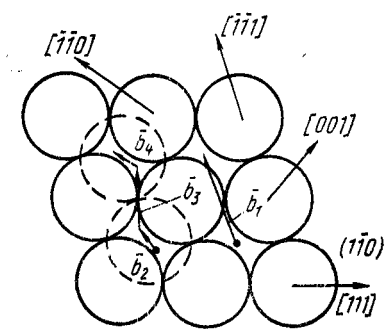


Рис. 177. Упаковка атомов в двух слоях (110) о. ц. к. решетки: $\bar{b}_1 = a/2 [\bar{1}\bar{1}1]$; $\bar{b}_2 = \bar{b}_4 = a/8 [\bar{1}\bar{1}0]$; $\bar{b}_3 = a/4 [\bar{1}\bar{1}2]$

$[001]$, где и возникает дислокация с вектором Бюргерса $a[\bar{1}00]$:

$$a/2 [\bar{1}\bar{1}1] + a/2 [\bar{1}11] = a [\bar{1}00]. \quad (95)$$

Поскольку вектор Бюргерса $a[\bar{1}00]$ образовавшейся дислокации перпендикулярен ее линии $[001]$, то дислокация $a[\bar{1}00]$ является краевой. Она может скользить только в плоскости, в которой находятся ее линия и вектор Бюргерса, т. е. в плоскости (010) . Поэтому дислокация $a[\bar{1}00]$ может быть эффективным барьером для дислокаций $a/2 [\bar{1}\bar{1}1]$ и $a/2 [\bar{1}11]$, скользящих соответственно в плоскостях $(1\bar{1}0)$ и (110) .

Рассмотрим реакции расщепления полных дислокаций $a/2 \langle 111 \rangle$ с образованием частичных в плоскостях $\{110\}$. Последовательность упаковок атомных слоев $\{110\}$ $ABABAB \dots$. Эти слои можно рассматривать как несколько нарушенную плотнейшую упаковку (рис. 177).

Вектор трансляции $\bar{b}_1 = a/2 \langle 111 \rangle$ переводит шары верхнего слоя B (показаны пунктиром) в идентичные положения, в результате чего после смещения верхнего слоя B относительно нижнего слоя A полностью восстанавливается исходная упаковка.

Точно такое же смещение слоя B легче осуществить по ломаному пути вдоль векторов \bar{b}_2 , \bar{b}_3 и \bar{b}_4 (здесь аналогия со схемой на рис. 155 для случая плотнейшей упаковки). Векторы $\bar{b}_2 = \bar{b}_4 = a/8 \langle 110 \rangle$ и $\bar{b}_3 = a/4 \langle 112 \rangle$ не являются векторами трансляции и характеризуют частичные дислокации. Следовательно, в плоскости $\{1\bar{1}0\}$ возможна реакция диссоциации:

$$a/2 \langle 111 \rangle = a/8 \langle 110 \rangle + a/4 \langle 112 \rangle + a/8 \langle 110 \rangle. \quad (96)$$

Эта реакция энергетически выгодна, так как $(a\sqrt{3}/2)^2 > (a\sqrt{2}/8)^2 + (a\sqrt{6}/4)^2 + (a\sqrt{2}/8)^2$ или $3a^2/4 > 7a^2/16$. Образующаяся дислокационная конфигурация из трех частичных дислокаций, соединенных дефектами упаковки, находится в одной плоскости и является скользящей.

Смещение атомов вдоль вектора $a/8 \langle 110 \rangle$ создает дефект упаковки в плоскости $\{110\}$. При этом нарушается взаимное расположение соседей в одном слое и поэтому энергия дефекта упаковки очень высокая; при образовании дефектов упаковки в слоях $\{111\}$ г.ц.к. и $\{0001\}$ г.п. решеток взаимное расположение ближайших соседей не изменяется. Из-за высокой энергии дефектов упаковки в о.ц.к. решетке ширина расщепленных дислокаций столь мала, что расщепление экспериментально прямыми структурными методами не обнаруживается. При очень малом расщеплении с помощью анализа расщепленных дислокаций в о.ц.к. решетке мы фактически лишь формально и приближенно описываем структуру ядра дислокации.

Линия винтовой дислокации с вектором Бюргерса $a/2 \langle 111 \rangle$ проходит вдоль прямой $\langle 111 \rangle$. Эта прямая является линией пересечения трех плоскостей $\{110\}$. Например, на рис. 178 по прямой $[111]$ пересекаются плоскости $(\bar{1}10)$, $(10\bar{1})$ и $(0\bar{1}1)$. Поэтому винтовая дислокация $a/2 [111]$ может расщепляться сразу в трех этих плоскостях:

$$a/2 [111] = a/4 [111] + a/8 [011](0\bar{1}1) + a/8 [101](10\bar{1}) + a/8 [110](\bar{1}10). \quad (97)$$

Реакция идет с большим выигрышем в энергии: $3a^2/4 > 9a^2/32$.

Частичные дислокации с векторами Бюргерса $a/8 \langle 110 \rangle$ образуются в трех разных плоскостях $\{110\}$. Они соединены дефектами упаковки с частичной дислокацией, имеющей вектор Бюргерса $a/4 [111]$ и образующейся в пересечении этих плоскостей на прямой $[111]$ (рис. 179).

Рассмотренная дислокационная конфигурация, состоящая из четырех частичных дислокаций, соединенных дефектами упаковки в трех пересекающихся плоскостях $\{110\}$, неподвижна. Таким образом, расщепление винтовой дислокации по реакции (97) превращает эту дислокацию из скользящей в сидячую.

Дислокации $a/2 \langle 111 \rangle$ могут расщепляться также в плоскостях скольжения $\{112\}$. Диссоциация винтовой дислокации

$a/2 \langle 111 \rangle$ в плоскости $\{112\}$ с образованием двух частичных дислокаций $a/6 \langle 111 \rangle$ и $a/3 \langle 111 \rangle$ уже была рассмотрена [см. реакцию (77) в § 39]. Образующаяся по этой реакции конфигурация из двух частичных дислокаций, соединенных дефектом упаковки, находится в одной плоскости и является скользящей.

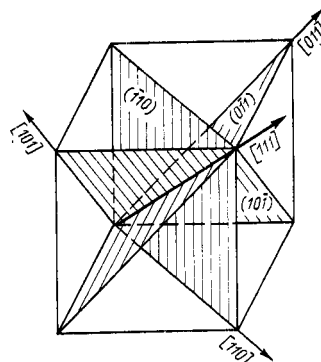


Рис. 178. Три плоскости $\{110\}$, пересекающиеся на прямой $[111]$

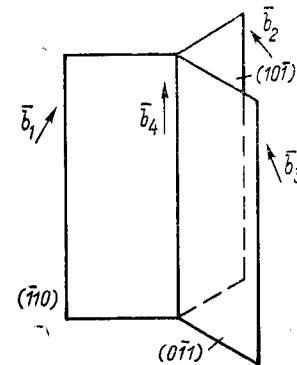


Рис. 179. Сидячая дислокационная конфигурация, образованная при расщеплении винтовой дислокации $a/2 \langle 111 \rangle$ в трех плоскостях $\{110\}$

$$\bar{b}_1 = a/8 [110]; \bar{b}_2 = a/8 [011]; \bar{b}_3 = a/8 [011]; \bar{b}_4 = a/4 [111]$$

Частичные дислокации Шокли, образовавшиеся при расщеплении винтовой дислокации по реакции (77), обладают следующей особенностью. Их векторы Бюргерса параллельны вектору Бюргерса исходной единичной дислокации (в отличие от расщепленной винтовой дислокации в г.ц.к. решетке). Следовательно, винтовая единичная дислокация в о.ц.к. решетке расщепляется по реакции (77) на две чисто винтовые, и в результате расщепленной винтовой дислокации может легко переходить из одной плоскости скольжения $\{112\}$ в другую, что невозможно для расщепленной винтовой дислокации в г.ц.к. решетке.

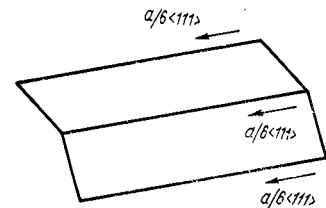


Рис. 180. Сидячая дислокационная конфигурация, образованная при расщеплении винтовой дислокации $a/2 \langle 111 \rangle$ в двух плоскостях $\{112\}$

Полная винтовая дислокация $a/2 \langle 111 \rangle$ может расщепляться одновременно в двух плоскостях $\{112\}$, образуя сидячую конфигурацию из трех частичных дислокаций, соединенных дефектами упаковки (рис. 180):

$$a/2 \langle 111 \rangle = a/6 \langle 111 \rangle + a/6 \langle 111 \rangle + a/6 \langle 111 \rangle. \quad (98)$$

Одна частичная дислокация с вектором Бюргерса $a/6 \langle 111 \rangle$ лежит на линии $\langle 111 \rangle$ пересечения плоскостей $\{112\}$, а две другие такие же частичные дислокации находятся в плоскостях

{112} на равном расстоянии от первой. Это расщепление энергетически выгодней, чем реакция (77), так как при реакции (98) $3a^2/4 > a^2/4$, а при реакции (77) $3a^2/4 > 5a^2/12$.

Дислокации $a/2\langle 111 \rangle$ могут также диссоциировать с образованием частичных дислокаций и соответственно дефектов упаковки одновременно в плоскостях {110} и {112}.

Число возможных дислокационных реакций в о.ц.к. решетке значительно больше, чем в г.ц.к., так как в ней больше число разных плоскостей скольжения. Здесь обсуждены лишь некоторые из возможных дислокационных реакций.

В заключение в табл. 18 приведены сведения о всех рассмотренных выше характерных дислокациях в о.ц.к. решетке.

Таблица 18. Характерные дислокации в о.ц.к. решетке

Тип дислокации	Полные дислокации		
Вектор Бюргерса Квадрат вектора Бюргерса	$a/2\langle 111 \rangle$ $3a^2/4$	$a\langle 100 \rangle$ a^2	$a\langle 110 \rangle$ $2a^2$

Продолжение табл. 18

Тип дислокации	Частичные дислокации		
Вектор Бюргерса Квадрат вектора Бюргерса	$a/8\langle 110 \rangle$ $a^2/32$	$a/6\langle 111 \rangle$ $a^2/12$	$a/4\langle 111 \rangle$ $3a^2/16$

Продолжение табл. 18

Тип дислокации	Частичные дислокации		
Вектор Бюргерса Квадрат вектора Бюргерса	$a/3\langle 111 \rangle$ $a^2/3$	$a/4\langle 112 \rangle$ $3a^2/8$	$a/3\langle 112 \rangle$ $2a^2/3$

§ 44. Поперечное скольжение и переползание растянутых дислокаций

Единичная винтовая дислокация может легко переходить скольжением из одной кристаллографической плоскости в другую (§ 25), совершая, в частности, поперечное и двойное поперечное скольжение (см. рис. 118). Расщепление единичной винтовой дислокации на две частичные лишает ее такой возможности — растянутая дислокация может скользить только

в той плоскости, в которой находится ее дефект упаковки. Чтобы произошел переход из одной плоскости скольжения в другую, пересекающую первую, необходимо предварительное стягивание частичных дислокаций в единичную, после чего вновь может произойти расщепление, снижающее энергию. При использовании стандартного тетраэдра (см. рис. 168) этот процесс в г.ц.к. решетке можно записать в следующем виде:

$$D\beta + \beta C = DC = D\alpha + \alpha C. \quad (99)$$

Таким путем растянутая дислокация из плоскости ADC ($\bar{1}11$) переместилась в плоскость DCB (111), пройдя через промежуточное состояние нерасщепленной дислокации $DC = a/2[110]$.

Объединение двух частичных дислокаций в единичную приводит к повышению энергии [см. применение критерия Франка к обратной реакции (76) расщепления единичной дислокации]. Следовательно, для объединения двух частичных дислокаций необходимо затратить дополнительную энергию. Это осложняет поперечное скольжение растянутых дислокаций, особенно если энергия дефекта упаковки мала, например у золота и меди. При низкой энергии дефекта упаковки растянутая дислокация имеет большую ширину (от трех до двадцати межатомных расстояний для золота и меди) и ее труднее сжать до единичной дислокации. Опыты показывают, что в алюминии, который обладает высокой энергией дефекта упаковки и малой его шириной (около 1—2 межатомных расстояний), поперечное скольжение встречается часто. Металлы с г.ц.к. решеткой можно подразделить на металлы с низкой энергией дефектов упаковки (Cu, Ag, Au, γ -Fe) и с высокой энергией дефектов упаковки (Al, Ni, Pb) и соответственно с разной легкостью поперечного скольжения.

Растянутая винтовая дислокация может совершить поперечное скольжение, если в своей плоскости скольжения она останавливается барьером (такие барьеры рассмотрены в гл. XII). Под действием касательного напряжения ширина дислокации, остановленной барьером, уменьшается (см. рис. 229, б) и появляется возможность для поперечного скольжения в другой плоскости, в которой также действует касательное напряжение.

Чтобы произошло поперечное скольжение, совсем обязательно стягивание частичных дислокаций по всей их длине — это вообще маловероятно. Для осуществления поперечного скольжения вполне достаточно стягивания частичных дислокаций с устранением дефекта упаковки на небольшом участке, называемом *перетяжкой дефекта упаковки*. На рис. 181, а показана растянутая винтовая дислокация в исходной плоскости скольжения ($\bar{1}11$). Заштрихована область дефекта упаковки. Линии, являющиеся границами заштрихованной зоны, изобра-

жают частичные дислокации. Рис. 181, б соответствует промежуточной стадии, когда уже образовалась перетяжка длиной l_1 . На этом отрезке находится единичная дислокация $a/2 [110]$. На рис. 181, в единичная дислокация расщепилась в новой плоскости ($\bar{1}\bar{1}1$), расположенной под углом к исходной плоскости ($\bar{1}\bar{1}1$). Под действием касательных напряжений в плоскости ($\bar{1}\bar{1}1$) растянутая дислокация скользит, увеличивая площадь, охваченную сдвигом. При этом она выгибается, так как ее концевые точки остаются связанными с частью дислокации, остав-

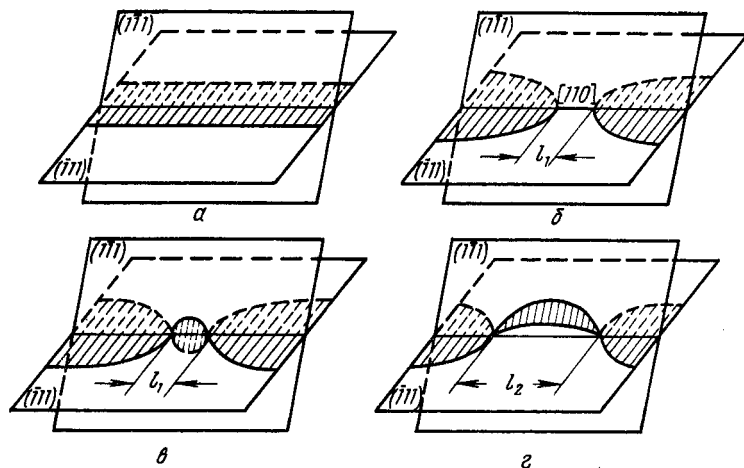


Рис. 181. Стадии поперечного скольжения растянутой винтовой дислокации в г.ц.к. решетке

шейся в исходной плоскости (об этом подробнее см. в § 53). В процессе поперечного скольжения перетяжка распространяется на все новые участки дефекта упаковки в исходной плоскости скольжения, и состояние между концевыми точками растянутой дислокации, совершающей поперечное скольжение, увеличивается ($l_2 > l_1$, рис. 181, г).

Термическая активация способствует образованию перетяжек, и поэтому поперечное скольжение облегчается с ростом температуры.

Растянутая краевая дислокация не может переползти из своей плоскости скольжения, где находится дефект упаковки, в соседнюю плоскость простым присоединением или удалением точечных дефектов по аналогии с переползанием единичной краевой дислокации. Такое переползание становится возможным после слияния частичных дислокаций в единичную. Этот способ переползания вполне вероятен для растянутых дислокаций с высокой энергией дефекта упаковки.

§ 45. Двойникующая дислокация

В процессах пластической деформации и рекристаллизации многих металлов важную роль играет двойникование — образование двойниковых прослоек.

Кристаллическая структура внутри двойниковой прослойки является зеркальным отображением структуры в остальной части кристалла (см. рис. 86).

В общем случае граница двойникового образования не совпадает по всей своей длине с одной и той же кристаллографической плоскостью, ступенчато переходя из одной плоскости двойникования в соседнюю параллельную плоскость двойникования. На рис. 182 изображен такой переход границы двойниковой области из плоскости $a-a$ в соседнюю плоскость $b-b$. На рис. 182 плоскости $a-a$ и $b-b$ и переходная область с несовершенной решеткой расположены перпендикулярно плоскости чертежа. Атомное строение переходной области в месте выхода ее на плоскость чертежа схематично изображено на рис. 182 внутри очерченного контура. Так как переходная область имеет один макроразмер (в плоскости двойникования) и атомные размеры в двух других измерениях (в плоскости чертежа), эта область является линейным несовершенством.

Первый атомный слой выше плоскости $a-a$ (или $b-b$) на рис. 182 является обычным нарушением (ошибкой) упаковки в г.ц.к. решетке (чередование слоев SAC вместо SAB около плоскости $a-a$). Его границей внутри кристалла является частичная дислокация Шокли. Следовательно, область ступенчатого перехода двойниковой границы с одной плоскости на соседнюю является скользящей частичной дислокацией. Такую дислокацию называют *двойникующей*.

Если двойниковая область состоит из N слоев, параллельных плоскости двойникования, то это значит, что она содержит N нарушений упаковки. Каждый слой ошибки упаковки может обрываться внутри кристалла, оканчиваясь частичной дислокацией. Эти частичные дислокации располагаются вдоль границы двойника, которая не лежит в одной плоскости двойникования, ступенчато переходя из плоскости в плоскость.

Двойникующая дислокация перемещается скольжением в кристаллографической плоскости двойникования, т. е. в плоскости дефекта упаковки. Атомный механизм такого сколь-

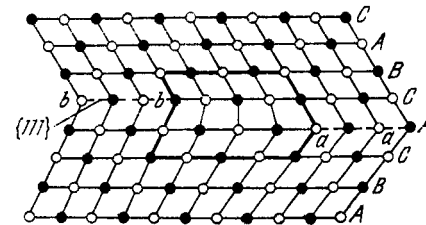


Рис. 182. Двойникующая дислокация $a/6\langle 112 \rangle$ в г.ц.к. решетке. Дислокация находится в плоскости $\{111\}$, перпендикулярной плоскости чертежа $\{110\}$

жения полностью аналогичен механизму скольжения частичной дислокации Шокли, описанному в § 39.

Рассмотрим, каким образом скольжение двойнивающей дислокации обеспечивает образование N -слойной двойниковой области.

Образование двойниковой прослойки со ступенчатой границей можно рассматривать как рост кристалла в твердом состоянии. Известны два пути роста, обеспечиваемого присоединением атомов к ступеньке на его поверхности. Один путь состоит в следующем (рис. 183, а). На поверхности растущего кристалла новый атомный слой тангенциально распространяется (разрастается) так, что когда этот слой полностью достраивается, ступенька сама себя изживает. Для продолжения роста необходимо зарождение участка

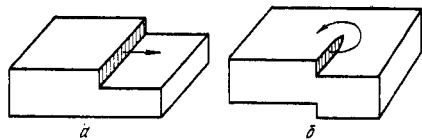


Рис. 183. Ступенька на поверхности совершенного кристалла (а) и кристалла с винтовой дислокацией (б)

нового моноатомного слоя на гладкой поверхности, а это самое узкое звено процесса. Аналогично пробег двойнивающей дислокации в одной плоскости приводит к распространению (разрастанию) всего лишь одного слоя атомов, перешедших в положение

с двойниковой ориентацией. Чтобы образовался многослойный двойник (двойник видимых размеров), необходимо зарождение в каждом из параллельных слоев своего участка с ошибкой укладки, зарождение своей двойнивающей дислокации и последующее разрастание этого участка скольжением двойнивающей дислокации.

Значительно легче другой путь роста кристалла (рис. 183, б). Если кристалл содержит винтовую дислокацию, выходящую на его поверхность, то присоединение атомов к ступеньке не может изжить ее. Пристраивающиеся к ступеньке атомы все время укладываются на винтовую поверхность — ступенька вращается вокруг оси винтовой дислокации, не исчезая. Здесь не требуется на каждом новом горизонте зарождение новой ступеньки.

По аналогии с этим процессом можно представить себе и рост двойниковой области. Допустим, что в кристалле имеется винтовая дислокация, перпендикулярная плоскости двойникования, и вектор Бюргерса ее равен расстоянию между соседними слоями, параллельными плоскости двойникования. Далее допустим, что двойнивающая дислокация все время обегает вокруг линии винтовой дислокации. При этом дефект упаковки распространяется по винтовой поверхности и для перевода атомов в двойниковое положение в каждом новом горизонте не требуется зарождения новой частичной дислокации. Одна частичная дислокация, перемещаясь с горизонта на горизонт по винтовой поверхности скольжением, участвует в образовании

двойниковой области измеримых размеров, т. е. N -слойного двойника. Возможность такого *полюсного механизма* образования двойника вытекает из того, что в узле, где встречаются три дислокации, одна (ОА) может быть двойнивающей, а две другие (полюсные дислокации ОВ и ОС) имеют чисто винтовую или частично винтовую ориентацию с составляющей вектора Бюргерса, перпендикулярной плоскости дефекта упаковки (рис. 184). Трехмерная дислокационная сетка с узлами встречи трех дислокаций типична для реальных кристаллов. Двойнивающая дислокация ОА, будучи «прикреплена» к узлу сетки, может двигаться только вращением вокруг полюса (узла О) в плоскости дефекта упаковки. Совершая полный оборот, линия двойнивающей дислокации ОА каждый раз оказывается на новом горизонте, так как она скользит по винтовой поверхности. Таким образом, N -слойный двойник растет путем последовательного перехода атомов в двойниковое положение при скольжении всего одной двойнивающей дислокации.

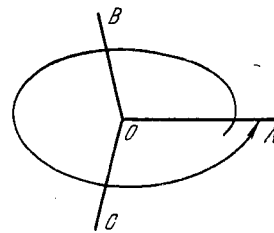


Рис. 184. Схема полюсного механизма роста двойника

В металлах с г.ц.к. решеткой двойнивающей является дислокация с вектором Бюргерса $a/6\langle 112 \rangle$ (см. табл. 16), находящаяся в плоскости двойникования $\{111\}$. В металлах с о.ц.к. решеткой, для которых очень важен механизм деформации двойникованием, частичная двойнивающая дислокация в плоскости двойникования $\{112\}$ имеет вектор Бюргерса $a/6\langle 111 \rangle$ (см. табл. 18). Эта дислокация может образоваться (предположительно) при диссоциации полной дислокации $a/2[111]$ по схеме

$$a/2[111] = a/3[112] + a/6[11\bar{1}]. \quad (100)$$

Выигрыша в энергии такая реакция не дает ($3a^2/4 = 6a^2/9 + 3a^2/36$), и поэтому она может идти только под действием напряжений. Дислокация $a/3[112]$ является сидячей дислокацией Франка, ее линия находится в плоскости (112) . Дислокация $a/6[11\bar{1}]$ является скользящей дислокацией Шокли. Ее линия (ОА), вращаясь в плоскости (112) , смещает слои атомов в этой плоскости в двойниковое положение. Прямых экспериментальных доказательств рассмотренного механизма двойникования в о.ц.к. решетке нет.

§ 46. Дислокации в упорядоченных сплавах

В сплаве с дальним порядком (сверхструктурой) наблюдается строгое чередование атомов разного сорта вдоль определенных кристаллографических направлений. При введении в сверхструктуру дислокаций, кроме обычных атомных смещений, воз-

никают также нарушения закономерного чередования атомов разного сорта.

На рис. 185 показана сверхструктура с двумя краевыми дислокациями. Между ними по обе стороны от плоскости, проходящей через линии дислокаций, в соседстве оказались атомы одного сорта (заштрихованный с заштрихованным и белый с белым). Такая *антифазная граница* (пунктир на рис. 185) обладает повышенной энергией и, стремясь сократить свою площадь, стягивает дислокации, преодолевая их упругое отталкивание.

Пара дислокаций по краям антифазной границы аналогична паре частичных дислокаций Шокли, соединенных дефектом

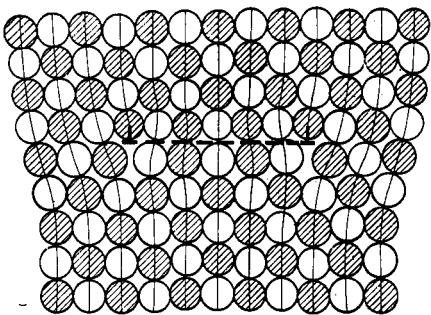


Рис. 185. Парная дислокация в упорядоченном твердом растворе

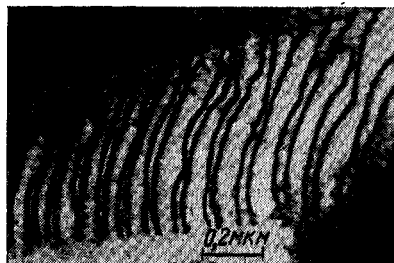


Рис. 186. Парные дислокации в плоском скоплении дислокаций в никроме 80/20 с добавкой 7,5 % (ат.) Al (Глейтер и Хорнбоген)

упаковки в виде растянутой дислокации. В сверхструктуре с о.ц.к. решеткой дислокации по краям антифазной границы имеют векторы Бюргерса $a/2\langle 111 \rangle$, а в сверхструктуре с г.ц.к. решеткой $a/2\langle 011 \rangle$. Скольжение каждой такой дислокации нарушает дальний порядок около плоскости скольжения, создавая здесь антифазную границу. Следовательно, в сверхструктурах с о.ц.к. и г.ц.к. решетками дислокации с векторами Бюргерса $a/2\langle 111 \rangle$ и $a/2\langle 011 \rangle$ соответственно ведут себя как частичные (в чистых металлах и неупорядоченных растворах они единичные).

Действительно, трансляция, после которой сверхструктура полностью восстанавливается, создается при скольжении пары дислокаций, соединенных антифазной границей. Головная дислокация при скольжении создает антифазную границу на своем пути, а хвостовая ликвидирует антифазную границу, восстанавливая дальний порядок в расположении атомов около плоскости скольжения (здесь аналогия со скольжением растянутой дислокации Шокли—Шокли). Такую пару дислокаций, соединенных полоской антифазной границы, называют *парной* или

сверхструктурной дислокацией (рис. 186). Именно она ведет себя как полная (единичная) дислокация в сверхструктуре. В о.ц.к. решетке парная дислокация имеет вектор Бюргерса $a\langle 111 \rangle$, в г.ц.к. — $a\langle 110 \rangle$.

Равновесная ширина (расщепление) сверхструктурной дислокации соответствует расстоянию, на котором взаимное упругое отталкивание пары дислокаций уравнивается силой поверхностного натяжения антифазной границы. С уменьшением степени дальнего порядка в сверхструктуре снижается энергия антифазной границы и соответственно увеличивается ширина сверхструктурной дислокации. Энергия антифазной границы имеет величину порядка $10\text{--}100\text{ мДж/м}^2$, а равновесная ширина парной дислокации часто находится на уровне $10\text{--}20\text{ нм}$.

Каждая из дислокаций в рассматриваемой паре в свою очередь может обычным путем диссоциировать на дислокации Шокли. Следовательно, по краям антифазной границы могут находиться растянутые дислокации со своими дефектами упаковки.

Глава VII

ПЕРЕСЕЧЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ

В кристалле дислокации в общем случае располагаются и движутся в разных плоскостях скольжения, в том числе и пересекающихся. При движении дислокация встречает множество других дислокаций (*лес дислокаций*) и должна пересекать их.

При пересечении дислокаций на них возникают пороги, являющиеся одним из важнейших элементов дислокационной структуры. Ниже рассмотрены основные случаи пересечения прямолинейных дислокаций, образование и движение порогов.

§ 47. Пересечение единичных дислокаций

1. ПЕРЕСЕЧЕНИЕ КРАЕВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ

На рис. 187, а в вертикальной плоскости $klmn$ сверху вниз движется краевая дислокация AB с вектором Бюргерса \bar{b}_1 . Линия AB этой дислокации является краем экстраплоскости $ABCD$. В горизонтальной плоскости $rstv$ находится неподвижная дислокация EF с вектором Бюргерса \bar{b}_2 . Линия EF этой дислокации является краем экстраплоскости $EFGH$.

В результате скольжения дислокации AB сверху вниз часть кристалла, которая находится справа от плоскости $klmn$, оказывается сдвинутой вниз на величину \bar{b}_1 по отношению к той части кристалла, которая находится слева от плоскости $klmn$ (рис. 187, б). При этом на горизонтальной плоскости $rstv$ образуется ступенька, а дислокация EF оказывается разрезанной на две части EP' и PE . Дислокация не может окончиться внутри кристалла, поэтому указанные части должны быть соеди-

нены участком дислокации PP' , являющимся дислокационным порогом (см. § 23). Так как вектор Бюргерса \bar{b}_2 одинаков вдоль всей линии дислокации EF , а порог PP' является частью дислокации EF , делаем вывод, что этот порог перпендикулярен вектору Бюргерса, т. е. имеет краевую ориентацию. Легко видеть, что порог на дислокации EF по величине и направлению равен вектору Бюргерса \bar{b}_1 дислокации AB , которая при движении вниз пересекла дислокацию EF .

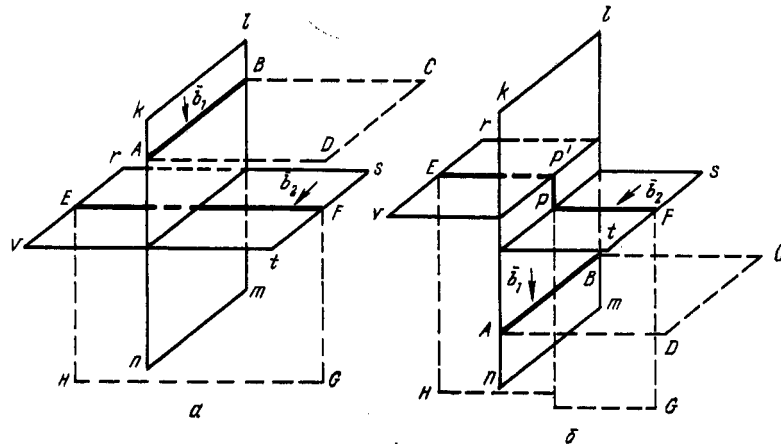


Рис. 187. Пересечение краевых дислокаций AB и EF со взаимно перпендикулярными векторами Бюргерса:
а — до пересечения; б — после пересечения

На самой дислокации AB порога не образуется. Это объясняется тем, что вектор Бюргерса \bar{b}_2 дислокации EF параллелен линии дислокации AB . В результате пересечения дислокаций, показанного на рис. 187, б, дислокация AB только изменяет свою длину на величину вектора Бюргерса \bar{b}_2 другой дислокации. До пересечения, т. е. тогда, когда дислокация AB находилась выше плоскости $rstv$, линия дислокации AB проходила через n вертикальных атомных плоскостей. После пересечения, т. е. тогда, когда дислокация AB находится уже ниже плоскости $rstv$, линия AB проходит через $(n+1)$ вертикальных атомных плоскостей. Лишняя вертикальная плоскость, проходящая через линию AB — экстраплоскость $EFGH$. Следовательно, в результате пересечения краевых дислокаций, показанного на рис. 187, на одной из них (EF) образуется порог величиной \bar{b}_1 , а длина другой увеличивается на \bar{b}_2 . Ясно, что суммарная энергия дислокаций при этом возрастает.

При рассмотрении рис. 187 в самом начале для простоты объяснения было указано, что дислокация EF неподвижна.

Результат пересечения дислокации AB с дислокацией EF не изменится, если дислокация EF будет скользить в плоскости $rstv$.

На рис. 188, а изображены две краевые дислокации, расположенные в пересекающихся плоскостях скольжения. Дислокация AB расположена в плоскости скольжения $klmn$, и линия ее является краем экстраплоскости $ABCD$. В отличие от рис. 187, на котором вектор Бюргерса одной из дислокаций параллелен

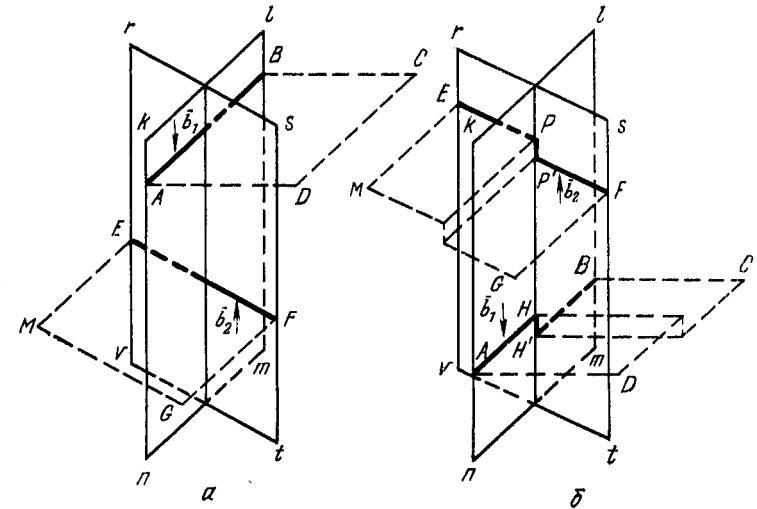


Рис. 188. Пересечение краевых дислокаций AB и EF с параллельными векторами Бюргерса:
а — до пересечения; б — после пересечения

линии другой дислокации, на рис. 188 вектор Бюргерса каждой из дислокаций перпендикулярен линии другой дислокации (\bar{b}_1 перпендикулярен линии EF , а \bar{b}_2 — линии AB). Поэтому в результате пересечения на обеих краевых дислокациях образуется по порогу (рис. 188, б). Происходит это следующим путем.

В результате пробега дислокации AB сверху вниз та часть кристалла, которая находится правее плоскости скольжения $klmn$, сдвигается вниз на величину \bar{b}_1 по отношению к части кристалла, расположенной левее плоскости $klmn$. Соответственно образуется имеющий винтовую ориентацию порог PP' на дислокации EF , равный по величине вектору Бюргерса \bar{b}_1 и одинаковый с ним по направлению. В результате пробега дислокации EF снизу вверх та часть кристалла, которая находится перед плоскостью скольжения $rstv$, сдвигается вверх на величину \bar{b}_2 по отношению к части кристалла, расположенной за плоскостью $rstv$. Следовательно, на перерезаемой дислокации

AB образуется также имеющий винтовую ориентацию порог HH' , равный по величине вектору \bar{b}_2 и одинаковый с ним по направлению.

Таким образом, хотя на рис. 187 и 188 изображено пересечение краевых дислокаций, результат этого пересечения получается разным. Он зависит от взаимной ориентации линий дислокаций и их векторов Бюргерса. На основе изложенного выше можно сформулировать правило, которое справедливо для пересечения любых дислокаций: *при пересечении двух дислокаций на каждой из них образуется порог, причем порог одной дислокации равен по величине вектору Бюргерса другой дислокации и одинаков с ним по направлению*. В частном случае на рис. 187, б порог, равный вектору \bar{b}_2 , как бы сливается с линией дислокации AB , изменяя ее длину (из-за параллельности вектора \bar{b}_2 и линии AB).

Между порогами краевых дислокаций на рис. 188, б и порогом краевой дислокации на рис. 187, б имеется следующее важное различие. Порог PP' дислокации EF на рис. 188, б лежит в плоскости скольжения этой дислокации $rstv$. Стремясь уменьшить свою энергию, дислокация EF при скользящем движении может выпрямиться, полностью исключив порог. То же самое относится к дислокации AB на рис. 188, б. В противоположность этому порог PP' дислокации EF на рис. 187, б не лежит в плоскости скольжения этой дислокации ($rstv$), а перпендикулярен ей. Поэтому дислокация EF на рис. 187, б не может скольжением устранить свой порог. Можно сделать общий вывод: порог устойчив в том случае, если он не лежит в плоскости скольжения дислокации; порог неустойчив, если находится в плоскости скольжения, так как дислокация стремится исключить его при скользящем движении (такой порог называют *перегибом* дислокации).

2. ПЕРЕСЕЧЕНИЕ КРАЕВОЙ И ВИНТОВОЙ ДИСЛОКАЦИИ

На рис. 189, а изображен кристалл с винтовой дислокацией AB и краевой CD . Показана плоскость, закрученная в виде винтовой лестницы. Стрелка около оси AB показывает направление обхода этой оси, при котором можно непрерывно «спускаться» с одного горизонта лестницы на другой. На одном из горизонтов винтовой лестницы оканчивается вертикальная экстраплоскость $CDEF$. Чтобы показать этот горизонт с расположенной на нем линией краевой дислокации CD , все более высокие горизонты (атомные слои) на рис. 189 удалены; волнистая линия является линией обрыва закрученной по геликоиду атомной плоскости.

Предположим, что винтовая дислокация неподвижна, а кра-

евая скользит справа налево и пересекается с винтовой (рис. 189, б).

Поверхность скольжения краевой дислокации CD — не плоская, а представляет собой винтовую поверхность. При приближении дислокации CD к оси винтовой дислокации постепенно искривляется кромка экстраплоскости $CDEF$; участок краевой дислокации, более близкий к точке C , постепенно поднимается, а более близкий к точке D опускается. Максимальное искривление линии CD достигается к моменту пересечения дислокации. После пересечения (левее линии AB на рис. 189, б) один

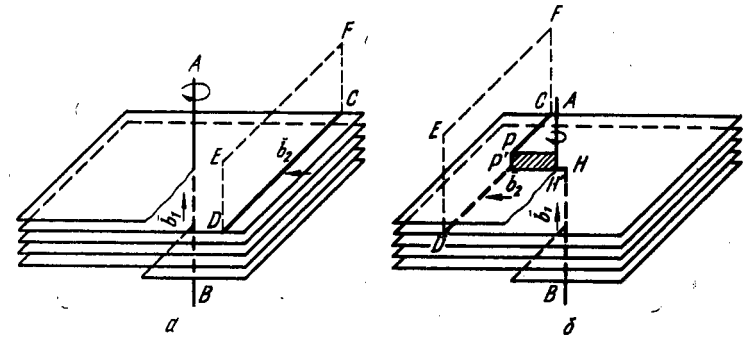


Рис. 189. Пересечение винтовой дислокации AB с краевой CD : а — до пересечения; б — после пересечения; HH' и PP' — пороги с краевой ориентацией на дислокациях AB и CD

участок края экстраплоскости оказывается на один период решетки выше другого участка края экстраплоскости: на краевой дислокации появляется порог, равный вектору Бюргерса винтовой дислокации \bar{b}_1 . Этот порог также имеет краевую ориентацию и может скользить в направлении движения краевой дислокации. На рис. 189, б заштрихована площадь, описываемая движущимся порогом краевой дислокации.

Пробег краевой дислокации справа налево вызывает смещение части кристалла, расположенной выше линии CD , на величину \bar{b}_2 влево по отношению к той части кристалла, которая расположена ниже линии CD . Соответственно на линии винтовой дислокации AB возникает порог, равный по величине вектору \bar{b}_2 и одинаковый с ним по направлению. Этот порог перпендикулярен вектору b_1 , т. е. он имеет краевую ориентацию.

3. ПЕРЕСЕЧЕНИЕ ВИНТОВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ

Рис. 190, а подобен рис. 189, а, но линия CD на нем обозначает не краевую, а винтовую дислокацию. Кристалл на рис. 190, а изображен в виде одной атомной плоскости, закру-

ченной в геликоид из-за существования винтовой дислокации AB . Верхняя часть кристалла срезана по волнистой линии, чтобы обнажить один из горизонтов геликоидальной поверхности, по которому проходит линия винтовой дислокации CD . Вокруг этой линии атомы также расположены по винтовой лестнице, но соответствующее геликоидальное строение кристалла на чертеже не изображено.

Допустим, что дислокация AB неподвижна, а CD скользит справа налево. Поверхность скольжения дислокации CD вдали от линии AB плоская, а с приближением к AB постепенно искривляется. Соответственно линия винтовой дислокации CD на участке вблизи C постепенно поднимается, а на участке вблизи

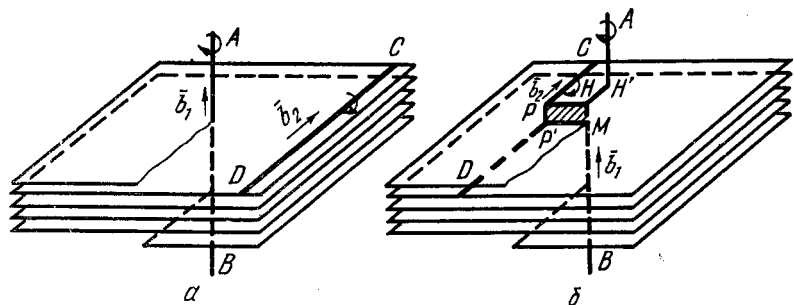


Рис. 190. Пересечение винтовых дислокаций AB и CD :
а — до пересечения; б — после пересечения

D опускается. После пересечения с линией AB дислокация CD разрезается на две части (рис. 190, б): одна часть (CP) лежит на более высоком горизонте геликоидальной поверхности, а другая ($P'D$) — на более низком. Так как дислокация не может закончиться внутри кристалла, то обе части оказываются соединенными порогом PP' . Этот порог имеет такой же вектор Бюргерса \vec{b}_2 , как и вся дислокация CD . Следовательно, порог PP' имеет краевую ориентацию (вектор Бюргерса ему перпендикулярен).

Из тех же рассуждений ясно, что на дислокации AB также должен образоваться порог HH' краевой ориентации. Этот порог по величине и направлению одинаков с вектором Бюргерса \vec{b}_2 дислокации CD .

При сближении дислокаций перед моментом пересечения происходит их упругое взаимодействие, однако соответствующие силы действуют на относительно небольшом участке дислокации (вблизи точки их пересечения) и поэтому существенно повлиять на процесс пересечения они не могут. Эти силы проявляются лишь в некотором искажении формы дислокаций.

§ 48. Движение дислокаций с порогами

Пороги на дислокациях в зависимости от их высоты подразделяют на *короткие (элементарные)* и *длинные (составные)*. Высота элементарного порога равна вектору Бюргерса пересекающей дислокации. Пороги на рис. 187—190 элементарны.

Если же дислокацию последовательно пересекают ряд дислокаций, скользящих в одной плоскости, то возникает длинный (составной) порог размером в несколько векторов Бюргерса.

Порог PP' краевой дислокации на рис. 187, б имеет краевую ориентацию и лежит в плоскости $klmn$, являющейся одной из плоскостей скольжения в кристалле. Поэтому порог PP' может скользить вместе со своей краевой дислокацией EF , которая скользят в плоскости $rstv$.

Значительно многообразнее и важнее поведение порогов на винтовых дислокациях. Эти пороги (см. рис. 189, б и 190, б) имеют краевую ориентацию и способны скользить только вдоль линии винтовой дислокации в направлении вектора Бюргерса. Например, на рис. 190, б элементарный порог PP' может скользить только вдоль линии CD . Винтовая же дислокация CD на рис. 190 скользит справа налево. Ее порог PP' в этом направлении может перемещаться нормальным способом только переползанием — медленной диффузионной достройкой экстраплоскости, находящейся справа от порога PP' .

Быстро скользя справа налево, дислокация как бы протаскивает за собой порог PP' , оставляя на его пути (заштрихован на рис. 190, б) дорожку вакансий. Протаскивание элементарного порога на одно межатомное расстояние влево означает образование позади него вакансий. Рис. 191 более наглядно иллюстрирует образование дорожки из вакансий (пустоты перед заштрихованной экстраплоскостью) при протаскивании порога. Если порог будет протаскиваться в обратном направлении, то возникает цепочка из межузельных атомов. Следовательно, один и тот же порог на винтовой дислокации в зависимости от направления его протаскивания генерирует или вакансии, или межузельные атомы и соответственно называется *вакансионным* или *межузельным* порогом.

Цепочка точечных дефектов, образующихся в хвосте за протаскиваемым порогом, быстро рассасывается диффузионным путем в разные стороны, и с этой точки зрения передвижение винтовой дислокации с порогом — необратимый процесс.

Процесс образования точечных дефектов при скольжении винтовых дислокаций с элементарными порогами изучен недостаточно. Многие авторы придают ему большое значение, считая, что это основной механизм генерирования вакансий при пластической деформации. Сам факт увеличения числа вакансий при пластической деформации сомнений не вызывает. В частности, именно им объясняется увеличение электропроводности

хлористого натрия примерно в 100 раз после пластической деформации на 10 % (увеличение числа вакансий облегчает диффузию, а перенос электричества в ионных кристаллах происходит путем диффузионного перемещения ионов). Однако до сих

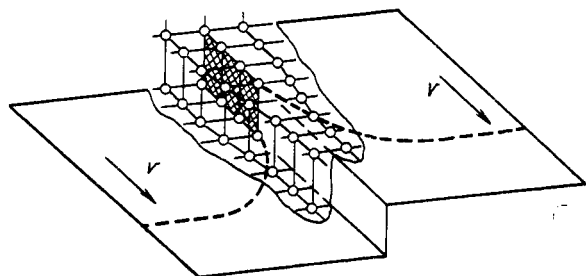


Рис. 191. Скользящая винтовая дислокация с элементарным порогом, имеющим краевую ориентацию; v — направление скольжения

пор неизвестно число вакансий, образующихся по схеме, изображенной на рис. 190, б и 191. Положение осложняется еще и тем, что пороги могут скользить вдоль винтовой дислокации и, встречаясь, могут аннигилировать.

Образование точечных дефектов при протаскивании порогов требует затраты энергии. Пороги на дислокации затрудняют ее

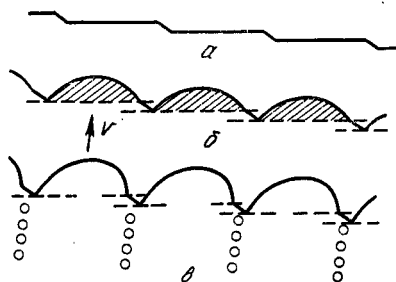


Рис. 192. Образование цепочек вакансий при скольжении винтовой дислокации с элементарными порогами: а — дислокация с порогами до приложения нагрузки; б — выгибание дислокации между порогами под действием напряжений от приложенной нагрузки; в — скользящая дислокация оставляет позади порогов цепочки вакансий (v — направление скольжения)

три кристалла, то около (рис. 193, а, б). Параллельные отрезки петли ab и cd имеют краевую ориентацию и противоположные знаки. В предельном случае, когда между этими отрезками одно межатомное рас-

стояние, при их взаимном упругом притяжении они аннигилируют в соответствии с рис. 139, б, и возникает цепочка вакансий. Это и есть только что рассмотренный случай протаскивания элементарного порога. Если же на дислокации образовался длинный порог, то краевые дислокации ab и cd не аннигилируют, а стремятся вследствие упругого взаимодействия образовать в параллельных плоскостях скольжения устойчивую конфигурацию (ОВ на рис. 138, б). В результате скольжение винтовой дислокации с длинным порогом приводит к образованию довольно устойчивой петли — *дислокационного диполя*, состоящего из связанных длинным порогом краевых дислокаций (см. рис. 193, б). Если порог больше некоторой критической длины, то диполь не образуется, так как отрезки дислокации ab и cd могут под действием напряжений легко проходить один мимо другого. Дипольная петля способна понизить свою упругую энергию, разбиваясь на вытянутые или круглые замкнутые призматические дислокационные петли (рис. 193, в).

Другой механизм образования дислокационных диполей — двойное поперечное скольжение. В плоскости поперечного скольжения ($\bar{1}11$) на рис. 124, в параллельные участки дислокаций имеют краевую ориентацию и разный знак, т. е. могут образовать устойчивый диполь.

§ 49. Пересечение растянутых дислокаций

Перед моментом пересечения растянутых дислокаций их головные частичные дислокации из-за упругого взаимодействия прогибаются назад в сторону хвостовых частичных дислокаций (сравните рис. 194, а, б). К моменту пересечения на обеих дислокациях возникают перетяжки дефектов упаковки и пороги сразу же после образования являются единичными дислокациями (рис. 194, в). В металлах с низкой энергией дефекта упаковки, т. е. большой шириной растянутых дислокаций, для их пересечения требуются повышенные напряжения.

После образования порога энергия может понизиться в результате его диссоциации. Допустим, что в плоскости ABC находится растянутая дислокация с вектором Бюргерса AC , состоящая из двух частичных дислокаций с векторами Бюргерса Ad и dC (см. рис. 168). Эту дислокацию могут пересекать дислокации, скользящие в плоскостях ADC , CDB и ADB с векторами Бюргерса AD , CD и BD . Как отмечено в § 47, направле-

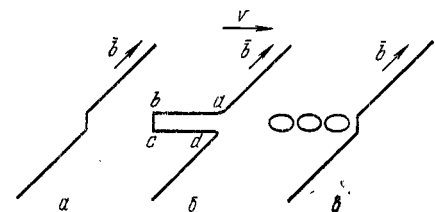


Рис. 193. Образование диполя и призматических петель при скольжении в направлении v винтовой дислокации с длинным порогом

ние порога на дислокации совпадает с направлением вектора Бюргерса пересекающей дислокации. Следовательно, на расщепленной дислокации AC могут образоваться нерасщепленные пороги, линии которых находятся вдоль направлений AD , CD и BD .

Рассмотрим порог, лежащий вдоль BD (рис. 195, a). Поскольку он образовался на дислокации с вектором Бюргерса

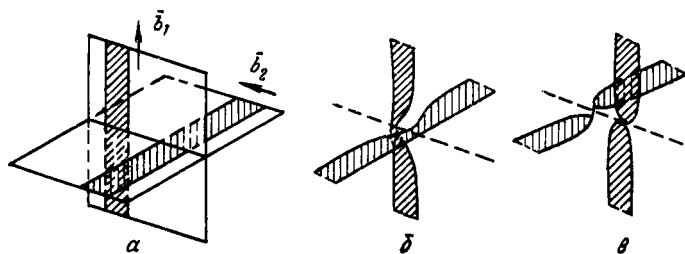


Рис. 194. Пересечение растянутых дислокаций:

a — растянутые дислокации до пересечения (векторы Бюргерса \vec{b}_1 и \vec{b}_2 относятся к соответствующим нерасщепленным дислокациям); $б$ — образование перетяжек дефектов упаковки перед пересечением; $в$ — дислокации с нерасщепленными порогами после пересечения

AC , то и сам порог вдоль линии BD будет иметь вектор Бюргерса AC . Здесь уместно напомнить, что отрезки AC , BD , δC и др. в тетраэдре Томпсона являются векторами Бюргерса единичных и частичных дислокаций; линии же самих дислокаций могут и совпадать с направлениями соответствующих от-

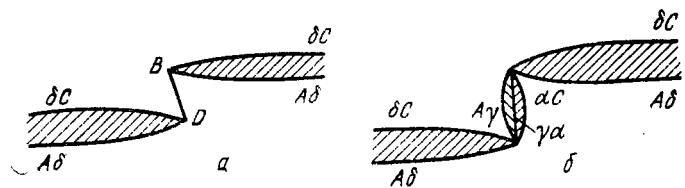


Рис. 195. Стадии расщепления порога BD на дислокации в г. ц. к. решетке

резков в тетраэдре, и располагаться под произвольными углами к ним.

Порог с вектором Бюргерса AC может понизить свою энергию по реакции, аналогичной реакции (89): $AC = A\gamma + \gamma\alpha + \alpha C$.

Это значит, что порог — отрезок дислокации вдоль линии BD — как бы «выбрасывает» в плоскостях ADB и DBC частичные дислокации Шокли с векторами Бюргерса $A\gamma$ и αC , образуя дефект упаковки в виде двугранного угла. В вершине этого угла, т. е. на линии бывшего нерасщепленного порога, возникает краевая вершинная дислокация с вектором Бюргерса $\gamma\alpha$.

Вид дислокации с диссоциировавшим порогом показан на рис. 195, $б*$. Здесь и далее предполагается, что узлы встречи порога и дислокации стянуты (см. рис. 165, $б$).

Скольжение порога возможно только в том случае, если он под действием напряжений от приложенной нагрузки стянется в отрезок единичной дислокации. Чем больше снижается энергия при диссоциации порога, тем больше придется затратить энергии на его стягивание. Если напряжения недостаточно велики, то порог остается расщепленным. Такой порог не может скользить и сильно тормозит движение дислокации.

Глава VIII ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИСЛОКАЦИЙ С ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

§ 50. Взаимодействие дислокаций с примесными атомами

1. АТМОСФЕРЫ КОТТРЕЛЛА

Упругие поля напряжений дислокации и примесного атома взаимодействуют, и примесный атом испытывает со стороны дислокации силу притяжения. Причину этого притяжения легко понять, рассматривая строение кристалла в области краевой дислокации (см. рис. 105).

С одной стороны от плоскости скольжения расположена область гидростатического (всестороннего) сжатия, а с другой — гидростатического растяжения. Атомы элемента, растворенного по способу внедрения, притягиваются к области гидростатического растяжения и размещаются в ней (под краем экстраплоскости на рис. 105). Здесь им легче размещаться, чем в совершенной области решетки, где такие атомы создают поле значительных напряжений. Если атомы элемента, растворенного по способу замещения, по размеру больше атомов основного металла, то они притягиваются к области гидростатического растяжения. Атомы элемента, растворенного по способу замещения и имеющие меньший размер, чем атомы основного металла, притягиваются к области гидростатического сжатия и размещаются в ней (над краем экстраплоскости на рис. 105). Размещение их здесь дает выигрыш в энергии.

Энергия связи положительной краевой дислокации с примесным атомом (разница между значениями энергии примесного атома в положениях вблизи дислокации и на бесконечно большом расстоянии от нее)

$$E = GbR_0^3 \epsilon \sin \theta / r, \quad (101)$$

где r и θ — цилиндрические координаты примесного атома

* На рис. 195, $б$ заштрихованные «лепестки» дефектов упаковки, ограниченные линиями $A\gamma$ и αC , образуют двугранный угол.

относительно прямой линии дислокации ($\theta=0$ в направлении вектора Бюргерса \vec{b}); G — модуль сдвига; $\epsilon = (R_n - R_0)/R_0$, R_n — радиус примесного атома; R_0 — радиус атома основы в случае раствора замещения, а в случае раствора внедрения — радиус такого жесткого шара, который, будучи внесен в то место решетки, где расположен примесный атом, не вызовет объемных искажений.

Чем больше фактор размерного несоответствия ϵ , тем больше энергия упругого взаимодействия дислокации с примесным атомом.

Для атомов замещения с $R_n > R_0$ и всех атомов внедрения $\epsilon > 0$. Соответственно для таких атомов при $0 < \theta < \pi$ имеем $\sin \theta > 0$, и энергия связи положительна, а при $\pi < \theta < 2\pi$ имеем $\sin \theta < 0$ и энергия связи отрицательна. Следовательно, атомы замещения с $R_n > R_0$ и все атомы внедрения притягиваются к области, находящейся под краем экстраплоскости ($\pi < \theta < 2\pi$). Для атомов замещения с $R_n < R_0$ и при $0 < \theta < \pi$ энергия связи отрицательна, а при $\pi < \theta < 2\pi$ она положительна. Следовательно, атомы замещения с $R_n < R_0$ притягиваются к области над краем экстраплоскости ($0 < \theta < \pi$). Максимального значения энергия связи достигает при $\theta = \pi/2$ и $\theta = 3\pi/2$. Атом внедрения, например, будет стремиться занять положение под краем экстраплоскости ($\theta = 3\pi/2$).

Формула (101) получена в предположении чисто упругого взаимодействия дислокации с примесным атомом. Поэтому ее нельзя использовать для оценки энергии связи примесного атома с дислокацией внутри ядра дислокации, где теория упругости сплошной среды неприменима.

Энергия связи краевой дислокации с примесными атомами обусловлена не только упругим (коттрелловским) взаимодействием. В нее вносит вклад электрическое взаимодействие и взаимодействие с неупругими искажениями в ядре дислокации.

Область разрежения вблизи края экстраплоскости из-за избытка электронов имеет слабый отрицательный заряд, а область сжатия — положительный заряд. Краевая и смешанная дислокации являются слабым электрическим линейным диполем. Поэтому существует электрическое взаимодействие между дислокацией и примесными атомами, несущими заряд. Это взаимодействие было оценено количественно. В металлах электрическое взаимодействие дислокации с примесным атомом значительно слабее, чем упругое. Неупругое взаимодействие в ядре дислокации количественно не оценено.

Общее и приближенное представление о величине энергии связи краевой дислокации с точечными дефектами разного вида дает табл. 19 (точечный дефект удален от дислокации на одно межатомное расстояние).

Примесные атомы внедрения значительно сильнее притягиваются к дислокации, чем атомы замещения.

Таким образом, притяжение атомов примесей, вызванное разными причинами, приводит к «осаждению» этих атомов в виде цепочки вдоль края экстраплоскости. Такая цепочка инородных атомов называется *атмосферой Коттрелла*.

Винтовая дислокация не создает областей гидростатического сжатия и растяжения и поэтому не способна притягивать дефекты, вокруг которых поле искажений имеет чисто сферическую симметрию.

Т а б л и ц а 19. Энергия связи точечных дефектов с краевой дислокацией. эВ

Точечный дефект	$E_{\text{упр}}$	$E_{\text{электр}}$	$E_{\text{общ}}$
Межузельный атом (примесный или собственный)	0,2—0,5	0,02	0,2—0,5
Атом замещения	0,05—0,1	0,02	0,05—0,1
Вакансия	0,02	0,02	0,04

Если растворенный атом искажает решетку в разных направлениях неодинаково, то он может взаимодействовать не только с гидростатической, но и с тангенциальной составляющей поля напряжений. Такой атом должен притягиваться к винтовой дислокации. Именно так ведут себя атомы примесей внедрения в о.д.к. решетке. Например, атомы углерода в α -железе находятся в октаэдрических пустотах, занимая положения посередине ребер или в центре граней (см. рис. 71). На рис. 69 атом внедрения в центре грани (010), окруженный шестью соседями, находится на расстоянии $a/2$ от двух соседей в направлении [010] и на расстоянии $a\sqrt{2}/2$ от четырех соседей в других направлениях. Поэтому атом, внедренный в центре грани (010), раздвигая ближайших соседей, несколько удлиняет элементарную ячейку в направлении [010]. В общем случае, когда внедряемый атом в октаэдрической пустоте о.д.к. решетки находится в центре грани {100} или посередине ребра $\langle 100 \rangle$, он тетрагонально искажает элементарную ячейку, удлиняя ее в направлении $\langle 100 \rangle$.

Тетрагональные искажения обуславливают взаимодействие примеси внедрения в о.д.к. решетке с полем касательных напряжений вокруг винтовой дислокации. Результатом такого взаимодействия может стать уменьшение касательных напряжений и соответственно притяжение атомов внедрения к винтовой дислокации. Считают, что это притяжение не слабее, чем к краевой дислокации.

Смешанная дислокация притягивает к себе любые атомы, в том числе и атомы со сферической симметрией поля искажений, так как смешанная дислокация имеет краевую компоненту. Чем ближе к 90° угол между линией смешанной дисло-

кации и ее вектором Бюргерса, тем сильнее притяжение к ней атомов со сферической симметрией поля напряжений.

В растянутой винтовой дислокации в г.д.к. решетке по крайней мере одна из частичных дислокаций должна иметь краевую компоненту. Поэтому в г.д.к. решетке атомы примеси, несмотря на сферичность поля напряжений вокруг них, притягиваются к растянутой винтовой дислокации.

В условиях термодинамического равновесия при температуре T в точке, для которой характерна энергия связи E , концентрация примесных атомов около дислокации

$$C_E = C_0 e^{E/kT}, \quad (102)$$

где C_0 — средняя концентрация примеси в металле; k — константа Больцмана.

Чем дальше от дислокации, тем меньше энергия упругого притяжения примеси к дислокации [см. формулу (101)] и меньше, соответственно, концентрация притянутой к дислокации примеси. На расстояниях более 3—5 межатомных тепловые флуктуации размывают атмосферу Коттрелла.

С повышением температуры атмосфера Коттрелла рассасывается. При понижении температуры концентрация примеси около дислокации возрастает, и по достижении предела растворимости вблизи ядра дислокации могут образоваться дисперсные выделения второй фазы.

Рассмотрим влияние температуры на концентрацию примесных атомов в атмосфере Коттрелла в положениях, характеризующихся максимальной энергией связи дислокации и примесного атома (E_{\max}), например под краем экстраплоскости для примеси внедрения или примеси замещения, у которой размер атомов больше, чем у основного металла. Согласно формуле (102),

$$C_{E_{\max}} = C_0 \exp(E_{\max}/kT). \quad (103)$$

Для сплава данного состава (C_0 и E_{\max} неизменны) $C_{E_{\max}}$ зависит только от температуры. При понижении температуры $C_{E_{\max}}$ возрастает, наступает такой момент, когда все возможные положения с E_{\max} для примесных атомов вдоль линии дислокации заняты (при условии, что для этого хватает общего количества примесных атомов в сплаве). Такую атмосферу Коттрелла называют *насыщенной* или *конденсированной*. У нее $C_{E_{\max}} \approx 1$ в отличие от *разбавленной атмосферы*, у которой $C_{E_{\max}} \ll 1$.

Подставив в формулу (103) значение $C_{E_{\max}} = 1$, получим выражение для температуры конденсации T_k , ниже которой коттрелловская атмосфера становится насыщенной:

$$T_k = E_{\max}/k \ln C_0^{-1}. \quad (104)$$

Энергия связи с дислокацией атомов внедрения значительно выше, чем атомов замещения (см. табл. 19), и поэтому при одинаковой общей концентрации C_0 в растворах внедрения T_k выше, чем в растворах замещения. Иными словами, в растворах замещения при нагревании коттрелловская атмосфера перестает быть насыщенной при более низких температурах.

Чем больше плотность дислокаций, тем больше требуется атомов примеси, чтобы образовались насыщенные атмосферы. Концентрация примесных атомов, расположенных в виде непрерывных одноатомных цепочек вдоль линий дислокаций

$$c = \rho a^2, \quad (105)$$

где ρ — плотность дислокаций; a — межатомное расстояние.

Если в отожженном металле плотность дислокаций порядка 10^8 см^{-2} , а в наклепанном 10^{11} см^{-2} , то соответственно $c \approx 10^{-5}$ и $10^{-2} \%$ (ат.). Следовательно и в сильно наклепанном металле технической чистоты количество атомов примесей достаточно, чтобы они могли создать насыщенные атмосферы на всех дислокациях при температурах ниже T_k . Например, в железе примеси углерода и азота, растворенные по способу внедрения ($E_{\max} \approx 0,5 \text{ эВ}$), при комнатной температуре образуют насыщенные атмосферы.

Низкие значения E_{\max} в растворах замещения с г.д.к. решеткой могут компенсироваться высокой общей концентрацией раствора C_0 , и в этом случае температура T_k также может оказаться довольно высокой. Например, в α -латуни, содержащей 1 % (ат.) Zn, при $E_{\max} = 0,1 \text{ эВ}$ $T_k \approx 300 \text{ К}$, т. е. при комнатной температуре атмосферы вокруг дислокаций насыщены атомами цинка.

2. АТМОСФЕРЫ СНУКА

В о.д.к. решетке железа при отсутствии напряжений атомы углерода и азота с одинаковой вероятностью заполняют октаэдрические пустоты вдоль трех различных кристаллографических осей (рис. 196, а). Напряжения от приложенной нагрузки слегка увеличивают расстояние между двумя атомами железа вдоль одного из направлений, и тогда атомы внедрения располагаются преимущественно в этом направлении (рис. 196, б).

Такой эффект упорядочения в расположении атомов — *эффект Снука* — должен наблюдаться и в поле напряжений вокруг винтовой и краевой дислокаций. Область упорядоченного расположения примесных атомов внедрения вокруг линии дислокации называют *атмосферой Снука*. Ее образование уменьшает энергию Гиббса кристалла. В отличие от несравненно более медленного образования атмосферы Коттрелла, связанного с диффузией атомов на значительные расстояния, снуковское

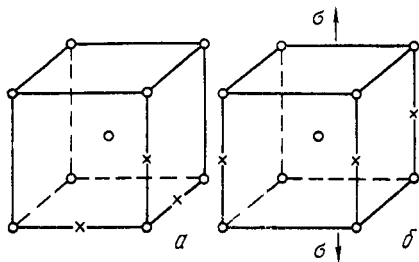


Рис. 196. Расположение атомов внедрения (x) в октаэдрических пустотах о. ц. к. решетки без напряжений (а) и при растягивающих напряжениях σ (б)

достаточно высокой температуре атомы перераспределяются диффузионным путем между дефектом упаковки и г. ц. к. решеткой аналогично перераспределению элементов между двумя фазами. Поэтому такое перераспределение атомов было названо Сузуки химическим взаимодействием растянутой дислокации с растворенными атомами. Примесные атомы или диффундируют в дефект упаковки, или уходят из него. При этом средняя концентрация в основном объеме с г. ц. к. решеткой остается практически постоянной. Измененную концентрацию примесных атомов или атомов легирующего элемента в дефекте упаковки растянутой дислокации называют *атмосферой Сузуки*.

Самопроизвольный процесс образования атмосфер Сузуки уменьшает энергию дефекта упаковки и тем самым приводит к увеличению ширины растянутой дислокации. Энергия химической связи примесного атома с растянутой дислокацией около 0,1–0,2 эВ и более. В отличие от упругого коттрелловского взаимодействия химическое взаимодействие Сузуки проявляется одинаково сильно в случае краевых и винтовых дислокаций в г. ц. к. решетке.

§ 51. Взаимодействие дислокаций с вакансиями и межузельными атомами

Межузельный атом притягивается к области гидростатического растяжения, а вакансия — к области гидростатического сжатия около краевой дислокации. Вакансии и межузельные атомы, притянувшись к дислокации, могут аннигилировать на порогах. На рис. 111 показаны два порога на краевой дислокации — изломы края экстраплоскости. Часть экстраплоскости оканчивается на одной плоскости скольжения, а часть — на соседней. Высота ступенек — одно межатомное расстояние. Когда вакансия подходит к ступеньке и оседает здесь, ступенька смещается на одно межатомное расстояние вдоль края экстраплоскости. При этом вакансия как таковая исчезает. Если же к сту-

порядочение быстро возникает при перескоках атомов из одних октаэдрических пустот в соседние (см. рис. 196, б).

3. АТМОСФЕРЫ СУЗУКИ

В г. ц. к. решетке дефект упаковки растянутой дислокации является тонкой прослойкой с чередованием слоев, характерным для г. п. решетки. Растворимость элемента в общем случае должна быть разной в г. ц. к. и г. п. решетках. При

пеньке подходит и присоединяется межузельный атом, то она смещается на одно межатомное расстояние в противоположном направлении, а этот атом перестает существовать как межузельный — он становится частью экстраплоскости. Следовательно, краевая дислокация может служить стоком для вакансий и межузельных атомов и тем лучшим, чем больше концентрация ступенек на дислокации.

Результат взаимодействия краевой дислокации с примесными атомами принципиально отличен от результата ее взаимодействия с вакансиями и межузельными атомами основного металла. Если последние могут аннигилировать, то примесные

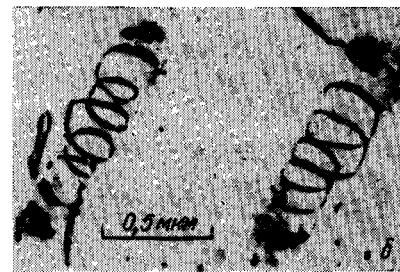
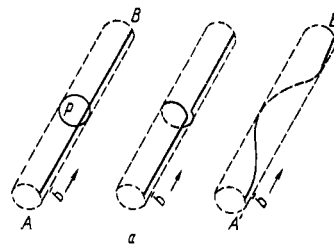


Рис. 197. Схема этапов объединения вакансий P с винтовой дислокацией AB в геликоидальную дислокацию $A'B'$ (а) и геликоидальные дислокации в сплаве $Al-6,5\% Mg$, закаленном с $550^\circ C$ и состаренном при $100^\circ C$ (б)

атомы сохраняют свою индивидуальность, образуя атмосферы.

Смешанные дислокации упруго взаимодействуют с межузельными атомами в соответствии с их краевой компонентой.

Вакансии могут притягиваться к дислокации любого типа, в том числе и к чисто винтовой. Объясняется это тем, что вакансии — пустое место и в ее присутствии упругая энергия дислокации локально уменьшается.

Притяжением вакансий к винтовой дислокации объясняют образование *геликоидальных* дислокаций, у которых линия дислокации закручена в правильную спираль. Природа образования геликоидальной дислокации окончательно не выяснена. Геометрия превращения прямолинейной винтовой дислокации AB в геликоидальную $A'B'$ вследствие присоединения группы вакансий P показана по этапам на рис. 197, а. Геликоидальные дислокации свойственны закаленным с высоких температур алюминиевым сплавам (рис. 197, б), что подтверждает ведущую роль вакансий в их образовании (после закалки с высоких температур решетка сильно пересыщена вакансиями).

Перестраивание прямолинейной винтовой дислокации в геликоидальную вследствие присоединения вакансий является своеобразным переползанием винтовой дислокации. При этом,

как легко понять из рис. 197, дислокация приобретает краевую компоненту и становится смешанной.

Не следует путать понятия «винтовая дислокация» и «геликоидальная дислокация». У винтовой дислокации вектор Бюргера параллелен линии дислокации и атомы закручены по винту в области ядра дислокации вокруг ее оси. У геликоидальной же дислокации по спирали закручена сама линия дислокаций, а вектор Бюргера параллелен оси этой спирали и составляет разные углы с линией дислокации в разных ее участках (будучи инвариантом дислокации, вектор Бюргера не меняет своего направления при превращении прямолинейной дислокации в геликоидальную).

Глава IX ОБРАЗОВАНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ

§ 52. Происхождение дислокаций

Энергия дислокаций составляет несколько электрон-вольт на атом. Поэтому термическая активация не может способствовать образованию дислокаций (в противоположность образованию точечных дефектов).

Сразу же после кристаллизации металлические моно- и поликристаллы содержат, как правило, очень большое число дислокаций. Следовательно, дислокации могут возникать непосредственно у фронта кристаллизации или же при охлаждении кристаллов после исчезновения жидкой фазы. Ниже кратко рассмотрены шесть возможных механизмов образования дислокаций.

1. На фронте кристаллизации легко себе представить образование винтовой дислокации. Когда кристалл, не содержащий дислокаций, растет путем присоединения атомов к ступеньке на новом слое, то этот слой, полностью достраиваясь, сам себя изживает (см. рис. 183, а). Для образования нового атомного слоя требуется возникновение на гладкой поверхности кристалла «двумерного» зародыша, что является самым узким звеном процесса роста совершенного кристалла и требует больших пересыщений (переохлаждений). Это звено отсутствует, если растет кристалл, содержащий винтовую дислокацию (см. рис. 183, б). Присоединение атомов к ступеньке на его поверхности приводит к вращению ступеньки. Поскольку атомы откладываются на винтовую поверхность, то ступенька все время продолжает существовать, облегчая тем самым присоединение атомов к кристаллу и его рост.

Кристалл, содержащий винтовую дислокацию, представляет собой атомную плоскость, закрученную по спирали. Как же возникает такое закручивание в первый момент роста, при об-

разовании зародыша? Известно, что, как правило, зарождение кристаллов самопроизвольно. Кристаллы зарождаются на готовой подложке, которой служат стенки изложницы и мельчайшие твердые частицы, взвешенные в расплаве. На поверхность таких подложек выходят винтовые дислокации, т. е. здесь имеются готовые ступеньки, к которым и присоединяются атомы из кристаллизующегося расплава. Таким образом, винтовая дислокация из подложки как бы «прорастает» в образующийся кристалл.

2. Другая причина зарождения дислокаций в период кристаллизации — возникновение напряжений. Когда происходит ориентированное нарастание (эпитаксия) кристалла на подложку, то сопряжение двух решеток из-за имеющегося всегда небольшого их несоответствия вызывает упругие напряжения в подложке и эпитаксиальном слое. Когда толщина эпитаксиального слоя достигает некоторой критической величины, компенсация несоответствия решеток подложки и растущего кристалла становится энергетически более выгодной не только в результате упругой деформации по всей поверхности сопряжения двух решеток, но и частично за счет дислокаций, возникающих на этой поверхности (рис. 198). Такие дислокации называют *структурными*, *эпитаксиальными*, или *дислокациями несоответствия*. Чем больше степень несоответствия двух решеток, тем выше плотность эпитаксиальных дислокаций. Повышение энергии из-за образования дислокаций компенсируется снижением энергии упругой деформации сопряженных решеток.

3. Из-за сегрегации примесей при кристаллизации образуются смежные слои разного состава с несколько различающимися межатомными расстояниями. Эта разница вызывает появление упругих напряжений. При определенной разнице в межатомных расстояниях соседних слоев энергетически выгодным может стать их сопряжение с участием структурных дислокаций на границе между соседними слоями.

4. Дислокации могут возникать во время кристаллизации из-за разных случайностей при росте кристаллов. Эти случайности приводят к образованию мозаичной структуры — кристалл состоит из *субзерен*, слегка взаимно разориентированных. Одна из возможных причин образования субзерен — изгиб очень «нежных» ветвей дендрита из-за конвекционных токов, градиента температур и действия других факторов. Когда слегка разориентированные ветви одного дендрита срастаются, на границе между ними возникают дислокации. На рис. 199 показан простейший случай срастания двух симметрично разориентированных частей одного кристалла (или разных кристаллов). Вертикальные атомные плоскости в месте срастания не доходят до низа кристалла. Вокруг края каждой такой плоскости находится краевая дислокация. На рис. 199, б поверхность срастания представляет собой стенку из положительных дислокаций.

5. Дислокации могут возникать в полностью затвердевшем металле в непосредственной близости от фронта кристаллизации и вдали от него. Считают, что основным здесь является вакансионный механизм образования дислокаций. Равновесная концентрация вакансий резко уменьшается с понижением температуры от точки кристаллизации. При ускоренном охлаждении кристалл сильно пересыщается вакансиями (см. § 15 и 19). Избыточные вакансии конденсируются в дискообразные образования, параллельные плоскости плотнейшей упаковки. Диск может быть толщиной в один, два или три слоя вакансий. Когда диаметр вакансионного диска превышает некоторую критическую величину, то под действием сил межатомного притяжения его стороны сближаются и в результате захлопывания диска образуется сидячая дислокация Франка, которая может трансформироваться в скользящую призматическую дислокацию (см. § 53).

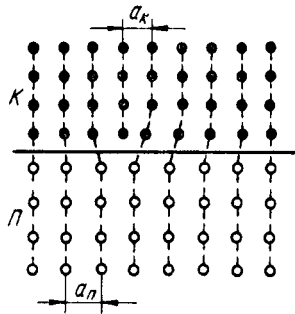


Рис. 198. Дислокация несоответствия на границе растущего кристалла К с подложкой П; $a_k \neq a_n$

Рис. 199. Образование стенки дислокаций при срастании зерен во время кристаллизации: а — до срастания; б — после срастания

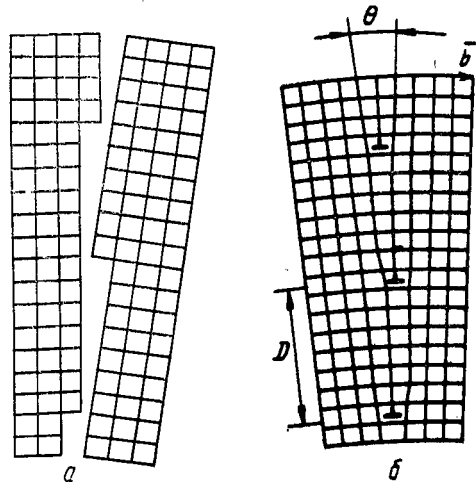


Рис. 199. Образование стенки дислокаций при срастании зерен во время кристаллизации: а — до срастания; б — после срастания

Захлопывание дисков вакансий с образованием дислокационных петель происходит не только при ускоренном охлаждении по окончании кристаллизации, но, естественно, и при охлаждении после специального нагрева под закалку.

При ядерном облучении металлов дислокационные петли возникают на границах плоских скоплений межузельных атомов.

6. Дислокации зарождаются при концентрации напряжений в отдельных участках кристаллов (около включений, трещин) до величин порядка $G/30$ (см. § 22). Например, при охлаждении металла из-за разного термического сжатия включения и кристалла около их поверхности раздела могут возникнуть упругие напряжения, достаточные для самопроизвольного зарождения дислокационных петель. При зарождении дислокационных петель и удалении их от включения происходит релаксация (разрядка) напряжений.

7. Одним из основных источников дислокаций при пластической деформации являются границы зерен. Механизм испускания ими дислокаций рассмотрен в § 57, п. 2.

§ 53. Размножение дислокаций при пластической деформации

1. ИСТОЧНИК ФРАНКА — РИДА

Увеличение плотности дислокаций на несколько порядков в результате холодной пластической деформации требует введения в теорию представлений о механизме образования дислокаций в процессе самой деформации. Кроме того, пробег одной дислокации через весь кристалл приводит к сдвигу по плоскости скольжения на величину вектора Бюргерса; при этом дислокация выходит на поверхность кристалла. Наблюдаемый же экспериментально сдвиг на поверхности кристалла на несколько порядков больше величины межатомного расстояния. Имеющихся перед началом деформации дислокаций совершенно недостаточно, чтобы объяснить такие большие сдвиги последовательным пробегом дислокаций по одной плоскости скольжения. Из этого следует, что в процессе деформирования образуется большое число новых или, как иногда говорят, «свежих» дислокаций.

В 1950 г. Франк и Рид предложили остроумный и простой механизм размножения дислокаций в процессе пластической деформации (рис. 200).

Источником дислокаций является дислокация, концы которой DD' закреплены. На рис. 200, а плоскость чертежа является плоскостью скольжения, содержащей линию дислокации DD' .

Однородные напряжения τ выгибают линию дислокации в дугу (рис. 200, б), а линейное натяжение дислокации стремится ее выпрямить. В условиях, когда приложенная сила уравнивается восстанавливающей, радиус дуги r определяется из соотношения (68): $\tau = aGb/r$. По мере роста касательного напряжения дуга все больше выгибается, и радиус ее уменьшается. Когда дуга становится полуокружностью, ее радиус $r = l/2$, где

l — длина дислокации. Это минимальный радиус, и ему соответствует максимальное значение касательного напряжения $\tau_{кр} = 2\alpha Gb/l$. Принимая $\alpha = 0,5$, получаем

$$\tau_{кр} = Gb/l. \quad (106)$$

Если в формулу (106) подставить значения G , b и $l = 10^{-4}$ см, типичные для отожженных монокристаллов цветных металлов, то $\tau_{кр} \approx 1$ МПа. Эта величина хорошо согласуется с экспериментально определенными значениями критического скалывающего напряжения (см. § 22).

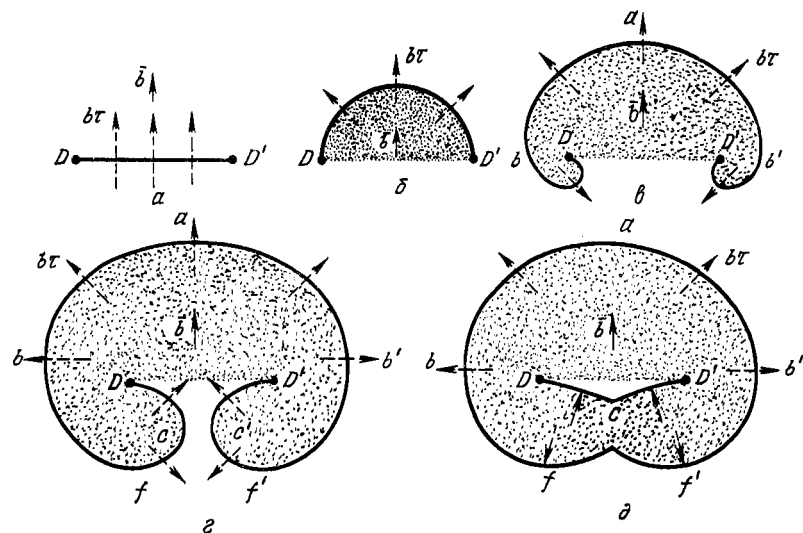


Рис. 200. Этапы образования дислокационной петли плоским источником Франка — Рида

При любых значениях $\tau < \tau_{кр}$ дуга стабильна — определенному значению τ соответствует определенное значение r . Если дуга еще не выгнулась в полуокружность, то при уменьшении касательного напряжения сила натяжения будет упруго выпрямлять дугу.

Площадь, через которую продвигается линия дислокации, затупевана на рис. 200, она является зоной, где сдвиг уже прошел. Направление касательного напряжения от приложенной силы остается все время неизменным, а сила $f = b\tau$, действующая на дислокацию, в каждой точке перпендикулярна линии дислокации, т. е. направлена по радиусу кривой (см. стрелки на рис. 200).

Выгибание дуги от $r = \infty$ (прямая DD' , рис. 200, а) до $r = r_{кр}$ (полуокружность на рис. 200, б) требует непрерывного повышения касательного напряжения от нуля до $\tau_{кр} = Gb/l$. При любом небольшом превышении $\tau_{кр}$ дальнейшее расширение петли дислокации приводит к увеличению радиуса дуги, и линия дис-

локации оказывается в нестабильном положении — при постоянном напряжении от приложенной силы, которое теперь может стать и меньше $\tau_{кр}$, дислокационная петля самопроизвольно расширяется, описывая все большую площадь (рис. 200, в, г). Поэтому напряжение, требующееся для выгибания линии дислокации в полуокружность, называют критическим.

Расширяющаяся петля остается закрепленной в точках D и D' и поэтому закручивается вокруг этих точек в виде двух симметричных спиралей под действием силы $b\tau$, все время перпендикулярной линии дислокации на всех ее участках (рис. 200, в, г). При таком закручивании обязательно наступает момент, когда две симметричные спиралевидные части дислокации соприкасаются. В месте соприкосновения встречаются участки дислокаций противоположного знака. Они взаимно уничтожаются, в результате чего одна дислокация разделяется на две — замкнутую петлю и дислокацию DCD' , состоящую из двух дуг (рис. 200, д).

Замкнутая дислокационная петля не связана с точками закрепления D и D' . Под действием касательного напряжения она может неограниченно распространяться во все стороны, и, если нет других препятствий, выйти на поверхность кристалла.

Дислокация DCD' , выпрямляясь под действием приложенной силы и линейного натяжения, сокращает свою длину до DD' , т. е. приходит в стартовое положение исходной дислокации. После этого, если продолжают действовать напряжения не меньше $\tau_{кр}$, новая дислокация уже рассмотренным путем образует новую дислокационную петлю и дислокацию DD' и т. д. Таким способом источник Франка—Рида может генерировать неограниченное число петель дислокаций в одной плоскости скольжения и создавать в этой плоскости значительный сдвиг.

На первый взгляд может показаться непонятным, почему при напряжении, действующем в одном и том же направлении, сначала спиральные участки дислокации, а затем замкнутая петля распространяются во все стороны, в том числе и в направлении, прямо противоположном действующему напряжению. Это легко уяснить, если обратить внимание на ориентацию разных участков линии дислокации и вспомнить, что говорилось в гл. IV о направлении движения дислокаций разной ориентации и разного знака и о распространении дислокационной петли.

Если исходная дислокация DD' была чисто краевой, то при выгибании ее в дугу она превращается в смешанную дислокацию. На рис. 200, в вблизи точки a дислокация имеет краевую, вблизи точек b и b' — винтовую, а в промежуточных точках — смешанную ориентацию. Участок краевой ориентации скользит по направлению вектора Бюргерса, а участки винтовой ориентации — перпендикулярно ему. Поскольку последние в точках b и b' имеют противоположные знаки, то они перемещаются под

действием одной и той же силы в прямо противоположных направлениях. На участках вблизи точек f и f' дислокация имеет краевую ориентацию (рис. 200, g). Знак краевой дислокации вблизи точек f и f' противоположен знаку краевой дислокации вблизи точки a . Если, например, исходная дислокация DD' была положительной, то участок краевой ориентации вблизи точки a также является положительной дислокацией, а участки вблизи f и f' — отрицательной краевой дислокацией. Под действием одних и тех же напряжений краевые дислокации разного знака перемещаются в прямо противоположных направлениях.

Вблизи точек c и c' участки дислокации имеют винтовую ориентацию и противоположный знак (рис. 200, g). Двигаясь в направлении действия на них силы b и навстречу один другому, они аннигилируют.

Замкнутая петля на рис. 200, d , как уже указывалось, распространяется во все стороны. С этим согласуется то положение, что участки с краевой ориентацией a и f (а также f'), имеющие разный знак, должны скользить в противоположных направлениях под действием одного и того же напряжения. То же самое происходит с участками винтовой ориентации b и b' , имеющими разный знак (см. также рис. 123).

На рис. 132 видны дислокационные петли, генерируемые источником Франка—Рида в кристалле кремния с примесью меди; стартовое положение дислокации здесь не видно, так как оно не попало в фокус при фотографировании.

Рассмотренный источник Франка—Рида генерирует дислокационные петли в одной атомной плоскости. Наряду с таким *плоским источником* был предложен аналогичный по механизму *пространственный источник* дислокаций, часто называемый *коническим* или *спиральным*. Этот источник неограниченно генерирует дислокационные петли в разных атомных плоскостях. На рис. 201 в г.ц.к. решетке в плоскости скольжения $\{111\}$ исходная дислокация DD' закреплена в узлах D и D' , в которых сходятся по три дислокации. Дислокации AD , DB , CD' и $D'E$, не лежащие в плоскости легкого скольжения, — неподвижные или малоподвижные. Точки D и D' принадлежат одновременно им и легко скользящей дислокации DaD' . Поэтому под действием приложенной силы дислокация DaD' перемещается не параллельно самой себе, а выгибается в полуокружность и далее закручивается вокруг точек D и D' . Если векторы Бюргерса неподвижных дислокаций, сходящихся в точках D и D' , имеют винтовую компоненту по отношению к плоскости $\{111\}$, то закручивающиеся участки дислокации DaD' скользят по винтовой поверхности. Совершив один оборот, участок скользящей дислокации поднимается или опускается с одного горизонта на другой. На рис. 201 закручивающиеся участки в результате полного оборота перемещаются вверх на одно межатомное расстояние. Соприкоснувшись позади источника, две симметричные части спирали, имеющие противоположный знак, аннигилируют. В результате этого образуется замкнутая петля, которая может неограниченно распространяться, и участок дислокации, выпрямляющийся на отрезок DbD' (аналогично работе плоского источника, см. рис. 200, d). Особенность конического источника — то, что стартовое положение дислокации в каждый новый цикл оказывается на ином горизонте, чем в предыдущий цикл (DbD' вместо DaD'). Соответственно каждая новая петля распространяется в плоскости, которая отстоит от плоскости предыдущей петли на одно межатомное расстояние (это расстояние показано штриховкой на рис. 201).

О том, какие дислокации могут размножаться по механизму Франка—Рида, имеются разные предположения. Первоначально считалось, что основную роль в размножении дислокаций играют отрезки пространственных дислокационных сеток, концы которых закреплены, так как они связаны с неподвижными или малоподвижными дислокациями в сетках. Такой элемент сетки DD' показан на рис. 201. Позднее были получены экспериментальные данные, поставившие под сомнение ведущую роль элементов дислокационных сеток в размножении дислокаций при пластической деформации.

Другой вероятный источник размножения дислокаций — R -дислокация, возникающая в результате захлопывания вакансионных дисков (см. § 41). Например, если в плоскости ABC стандартного тетраэдра (см. рис. 168) при захлопывании диска вакансий возникает дефект упаковки, то образуется сидячая дислокация Франка с вектором Бюргерса δD . Взаимодействуя с частичной дислокацией Шокли AD , она образует R -дислокацию с вектором Бюргерса AD , так как $A\delta + \delta D = AD$. Дефект упаковки, существующий до образования R -дислокации в плоскости ABC , чаще всего имеет вид шестиугольника, стороны которого параллельны AB , BC и AC (рис. 202, a).

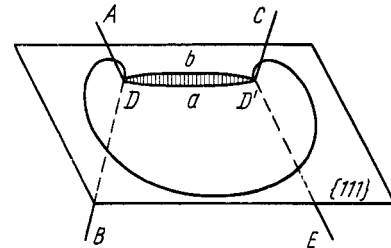


Рис. 201. Пространственный (конический) источник Франка—Рида

Соответственно и R -дислокация будет состоять из шести сегментов, параллельных этим трем направлениям (рис. 202). Плоскостью скольжения R -дислокации может быть только такая плоскость $\{111\}$, которая содержит и линию дислокации, и ее вектор Бюргерса. Если образовалась призматическая R -дислокация с вектором Бюргерса AD , то только сегменты шестиугольника, параллельные AB и AC , могут участвовать в скольжении (каждый из них совместно с вектором Бюргерса AD лежит в одной из плоскостей $\{111\}$ — ADB или ADC). Кроме того, в возможных плоскостях скольжения сегментов R -дислокации действуют разные касательные напряжения.

Таким образом, одни сегменты R -дислокации вообще не могут скользить, а другие малоподвижны. Поэтому сегмент, находящийся в плоскости легкого скольжения, оказывается закрепленным по концам и может действовать как источник Франка—Рида (см. рис. 202).

Источником Франка—Рида может образоваться также при двойном поперечном скольжении. Допустим, что дислокационная петля распространялась в плоскости (111) и была остановлена каким-то препятствием. Тогда она переходит в плоскость поперечного скольжения $(\bar{1}11)$, где хотя и действуют меньшие

касательные напряжения, но нет препятствий. Выйдя из района препятствия, дислокация будет стремиться возвратиться в плоскость (111), где действуют большие касательные напряжения.

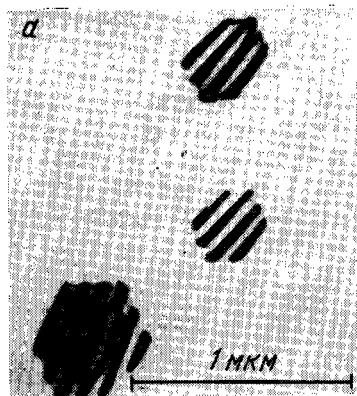
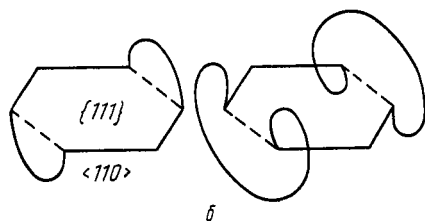


Рис. 202. Шестиугольные петли дислокаций с дефектами упаковки внутри них, образовавшиеся в закаленном алюминии при захлопывании дисков вакансий (а), и отрезки призматической петли, действующие как источники Франка—Рида (б)



Такое двойное поперечное скольжение показано на рис. 124, в. Если в плоскости поперечного скольжения (111) из-за низкого касательного напряжения оставшиеся здесь участки дислокации окажутся малоподвижными, то петля, легко распространяющаяся в плоскости (111), будет закреплена по концам и станет источником Франка—Рида.

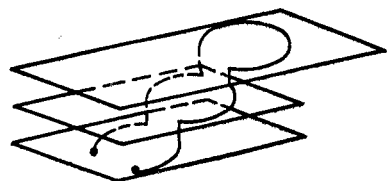


Рис. 203. Размножение дислокаций при множественном поперечном скольжении

Множественное поперечное скольжение, которое приводит к образованию дислокационной линии большой протяженности, переходящей из одной параллельной плоскости в другую, и к работе источников Франка—Рида в этих плоскостях, является эффективным механизмом размножения дислокаций (рис. 203).

2. ИСТОЧНИК БАРДИНА — ХЕРРИНГА

По аналогии с источником Франка—Рида действует источник Бардина—Херринга, только здесь выгибание стартовой дислокации и закручивание ее вокруг точек закрепления происходит не скольжением, а переползанием. Если отрезок DD' на рис. 200 — это закрепленная по концам краевая дислокация, а связанная с ней экстраплоскость находится в плоскости чертежа, то конденсация вакансий на этой плоскости, обеспечивая переползание дислокации DD' , может обусловить работу дислокационного источника Бардина—Херринга. Размножение дислокаций источниками Бардина—Хер-

ринга обнаруживали в закаленных сплавах, пересыщенных вакансиями. При постепенном уменьшении концентрации избыточных вакансий эти источники прекращают свое действие. Малое пересыщение вакансиями может обусловить только сравнительно небольшое выгибание закрепленной по концам дислокации и не приводит к генерации дислокационных петель.

Глава X ДИСКЛИНАЦИИ

§ 54. Дисклинация в непрерывной упругой среде

Задолго до того, как в тридцатые годы представления о дислокациях были введены в физику кристаллов для объяснения несоответствия между теоретической и реальной прочностью, в классической теории упругости были проанализированы особенности поля упругих деформаций и напряжений вокруг дислокаций в упругой среде, образованных разными способами.

В 1907 г. Вольтерра рассмотрел возможные способы создания внутренних напряжений в полой цилиндрической среде, для чего мысленно разрезал его по произвольно выбранной радиальной плоскости и упруго сместил жесткие берега (поверхности) разреза. На рис. 204, а берега разреза разведены на вектор \vec{b} таким образом, что это смещение одинаково в любой точке разреза, и поверхности разреза остаются параллельными. Цилиндр выбран полой, так как в сплошном цилиндре вдоль его оси возникал бы разрыв при указанном смещении берегов разреза. Если теперь в образовавшуюся щель вставить плоскопараллельную пластину толщиной b из того же материала и снять внешнюю нагрузку, то в теле останутся внутренние напряжения. Аналогичный результат получится, если берега разреза упруго сместить один навстречу другому на вектор \vec{b} , извлекая «лишний» материал в форме плоскопараллельной пластины из области перекрытия с последующей склейкой поверхностей разреза.

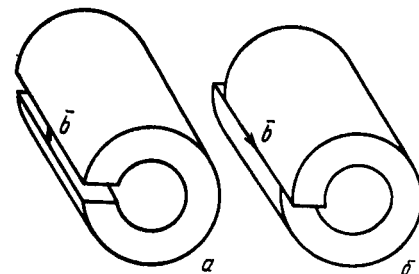


Рис. 204. Трансляционные дислокации Вольтерры

Подобные операции образования нового тела с внутренними напряжениями в 1927 г. в математической теории упругости получили название *дислокаций Вольтерры*.

Другой тип дислокаций Вольтерры показан на рис. 204, б: берега разреза смещены в плоскости разреза на вектор \vec{b} , параллельной оси цилиндра.

В обоих примерах на рис. 204 дислокации характеризуются вектором трансляции \vec{b} , и потому в теории упругости их называют *трансляционными дислокациями Вольтерры*. В физике кристаллов соответствующие дефекты кристаллического строения называют просто дислокациями. Нетрудно заметить, что схема на рис. 204, а соответствует вставке экстраплоскости в кристалл на рис. 105 для создания краевой дислокации, а схема на рис. 204, б аналогична несквозному сдвигу кристалла для создания в нем винтовой дислокации (см. рис. 113).

Следующая разновидность дислокаций Вольтерры показана на рис. 205, а; берега разреза не смещаются параллельно самим себе, как на рис. 204, а — они развернуты вокруг оси цилиндра

на угол ω . После этого в образовавшуюся клиновидную щель вставляется клин из того же материала с углом при вершине, равным ω . После снятия нагрузки в цилиндре остаются внутренние напряжения. Берега разреза можно повернуть вокруг оси цилиндра один навстречу другому, извлекая «лишний» материал из зоны перекрытия и склеивая поверхности разреза в конце этой операции. В обоих случаях дислокация характеризуется вектором поворота ω и в теории упругости называется *поворотной (ротационной) дислокацией Вольтерры*. Значительно позднее в теории дефектов кристаллов поворотные дислокации стали называть *дисклинациями*.

На рис. 205, а показан способ создания *клиновой дисклинации*. Если при описанном создании дисклинации изымается материал в виде клина, то клиновую дислокацию называют положительной, а если в разрез вставляют клин, то дисклинацию называют отрицательной.

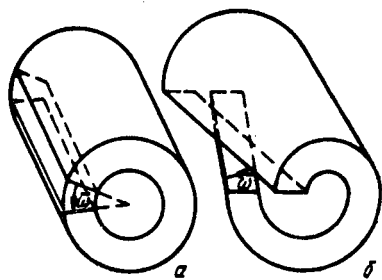


Рис. 205. Поворотные дислокации Вольтерры (дисклинации)

На рис. 205, б жесткие берега разреза упруго поворачивают один относительно другого на угол ω вокруг оси, перпендикулярной плоскости разреза. Получающуюся дисклинацию называют *винтовой, или дисклинацией кручения*.

Вектор поворота ω в теории дисклинаций играет роль, аналогичную роли вектора Бюргерса в теории дислокаций. Энергия дисклинации пропорциональна квадрату вектора поворота. В частности, энергия прямолинейной клиновой дисклинации, приходящаяся на единицу ее длины,

$$E_{\omega} \simeq G\omega^2 R^2 / 16\pi (1 - \mu), \quad (107)$$

где G — модуль сдвига; R — внешний радиус цилиндра; μ — коэффициент Пуассона.

Сопоставим это выражение с формулами (61) и (62) для энергии винтовой и краевой дислокаций. Можно считать, что энергия дислокации растет пропорционально логарифму R ($r_0 \ll R$). В то же время энергия клиновой дисклинации возрастает пропорционально R^2 . Если, например, в центре цилиндрического кристалла радиусом 10 мкм содержится одна дислокация или одна дисклинация, то при увеличении радиуса кристалла до 100 мкм энергия дислокации возрастает всего лишь вдвое, а энергия дисклинации — в 100 раз. При характерном размере

¹ Его называют также вектором Франка.

кристаллов порядка 10^{-2} мм даже при малом значении $\omega = 1^\circ$ энергия прямолинейной дисклинации на четыре порядка (!) больше энергии дислокации. Поэтому в больших кристаллах такие дисклинации должны встречаться крайне редко.

Если на небольшом расстоянии одна от другой находятся две клиновые дисклинации разных знаков, то их дальние поля деформаций взаимно компенсируются. Создадим такой *дисклинационный диполь*, проведя следующие операции (рис. 206, а). Берега разреза AB развернем вокруг оси A на угол ω до положений $AB'n_1$ и $AB''n_2$. Затем сделаем обратный поворот берегов вокруг осей B' и B'' на угол $\omega/2$. После этих операций образовалась щель $n'_1 B' A B'' n'_2$, которую заполним упругим материалом. В результате возникают две параллельные клиновые дисклинации противоположного знака: A и B — точки выхода их линий на рис. 206, а, а сами линии дисклинаций AA_1 и BB_1 на рис. 206, б.

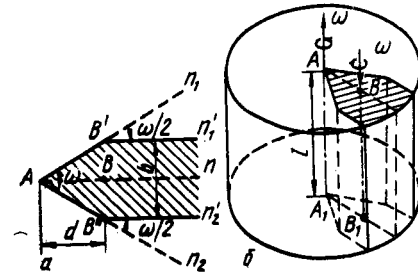


Рис. 206. Диполь из двух клиновых дисклинаций, расположенных в точках A и B

Дальнее поле деформаций у дисклинационного диполя должно быть таким же, как и у краевой дислокации с вектором Бюргерса \bar{b} , равным расстоянию между параллельными берегами щели, в которую вставлен заштрихованный материал на рис. 206, а:

$$b = 2d \operatorname{tg} \omega/2 \simeq d \cdot \omega, \quad (108)$$

где d — расстояние между дисклинациями в диполе. Можно считать, что ядро краевой дислокации, эквивалентной дисклинационному диполю, включает расстояние между дисклинациями d . Энергия дисклинационного диполя должна быть такой же, как у краевой дислокации с вектором Бюргерса $d \cdot \omega$. Тогда из выражения (62) следует, что

$$E_{\text{дип}} \simeq [G\omega^2 d^2 / 4\pi (1 - \mu)] \ln (R/r_0), \quad (109)$$

где $r_0 \simeq d$. Следовательно энергия дисклинационного диполя, как и краевой дислокации, слабо зависит от размера кристалла, и такие диполи энергетически несравненно более выгодны, чем одиночные дисклинации.

Еще большей взаимной экранировкой полей напряжений и, соответственно, меньшей энергией характеризуются *дисклинационные квадруполь*, состоящие из клиновых дисклинаций (рис. 207). Энергия дисклинационного квадруполь может быть даже меньше, чем у единичных дислокаций. Таким образом, взаимная экранировка полей напряжений в системах определенным

образом расположенных дисклиний резко увеличивает вероятность их существования в виде дефектов кристаллов.

Замкнутую на себя линию дисклиний — *дисклинационную петлю* можно получить, мысленно проведя следующие операции (рис. 208). Разрежем тело по плоскости, ограниченной петлей, например в форме окружности радиусом R_0 . Упруго развернем берега разреза на угол ω вокруг оси z , перпендикулярной плоскости петли, склеим поверхности разреза и снимем внешнюю нагрузку. В результате получим дисклинационную петлю кручения. Ее энергия

$$E_{\omega}^{кр} \approx 3\pi G \omega^2 R_0^3 / 16. \quad (110)$$

В отличие от энергии прямолинейных дисклиний, энергия дисклинационной петли не зависит от размеров тела; на нее влияют только размер петли R_0 и вектор поворота ω . Энергия маленькой дисклинационной петли сравнима



Рис. 207. Дисклинационный квадруполь

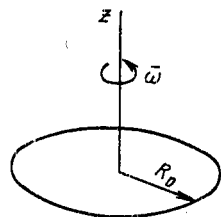


Рис. 208. Дисклинационная петля кручения

с энергией дислокационной петли и может быть даже ниже, чем у последней. Это обуславливает возможность существования небольших дисклинационных петель в реальных кристаллах.

§ 55. Дисклинии в кристаллической решетке

При введении дисклиний в упругий континуум, являющийся непрерывной, однородной и изотропной средой, поверхности разреза после их разворота и «склейки» физически ничем не выделяются в окружающей среде. Ротационный вектор ω у дисклиний в континууме в принципе может быть любым. Кристаллическая же среда, имеющая дискретное атомное строение, накладывает на вектор ω ограничения, обусловленные поворотной симметрией решетки.

Рассмотрим *полные* (совершенные) *дисклинии* единичной мощности, поворотный вектор которых соответствует минимально возможному повороту вокруг оси симметрии. Например, у клиновой дисклинии единичной мощности, параллельной оси симметрии четвертого порядка, $\omega = 90^\circ$, а у параллельной оси симметрии шестого порядка $\omega = 60^\circ$.

На рис. 209 показана схема образования положительной клиновой дисклинии единичной мощности, параллельной оси симметрии шестого порядка. Вырежем из кристалла клин $B'AB''$ с углом между его гранями AB' и AB'' , равным 60° (рис. 209, а). Затем берега разреза AB' и AB'' упруго повернем один навстречу другому вокруг оси A до соприкосновения по линии AB , где «склеим» поверхности разреза (рис. 209, б). В результате образовалась положительная 60-градусная клиновая дисклиния, выходящая в точке A на плоскости базиса г.п. решетки. В этой плоскости дисклиния локализована около точки A . Вокруг атома A на рис. 209, б имеется только пять ближайших соседей, а вокруг всех остальных атомов сохранилось окруже-

ние из шести соседей. Положительная клиновая 60-градусная дисклиния преобразовала ось симметрии шестого порядка в ось симметрии пятого порядка, т. е. привела к псевдосимметрии пятого порядка (в идеальной кристаллической решетке невозможна ось симметрии пятого порядка). На рис. 210 показана схема образования отрицательной 60-градусной клиновой дисклинии, параллельной поворотной оси симметрии шестого порядка. Кристалл разрезали по плоскости AB (рис. 210, а), после чего берега разреза

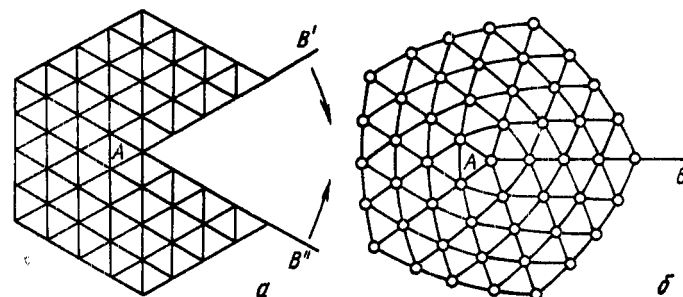


Рис. 209. Схема образования положительной 60-градусной клиновой дисклинии

развернули вокруг оси A на угол 60° и между ними вставили клин дополнительного материала (рис. 210, б). Атом A на линии дисклинии оказался в окружении семи соседей, в то время как все остальные атомы по-прежнему окружены шестью соседями. Отрицательная клиновая 60-градусная дискли-

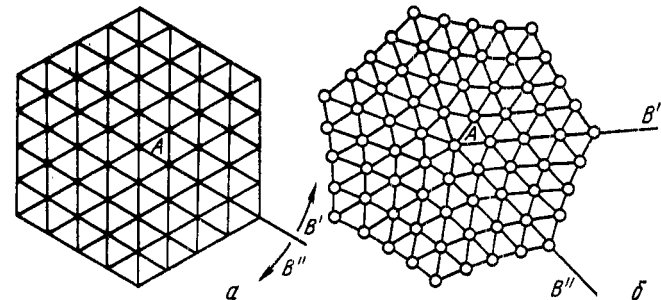


Рис. 210. Схема образования отрицательной 60-градусной клиновой дисклинии

нация преобразовала ось симметрии шестого порядка в поворотную ось псевдосимметрии седьмого порядка.

Из сравнения рис. 209, б и 210, б видно, что положительная и отрицательная клиновые дисклинии с одинаковой величиной угла поворота ω физически различимы: смещения атомов вокруг линии этих дисклиний противоположны.

Вакансии упруго притягиваются к отрицательной клиновой дисклинии и отталкиваются от положительной клиновой дисклинии.

Взаимодействие дисклиний с дислокациями приводит к передвижению дисклиний. Рассмотрим движение положительной 60-градусной дисклинии, линия которой совмещена с осью поворота, находящейся в точке A на рис. 211. В результате скольжения краевой дислокации с вектором

Бюргерса \vec{b} по плоскости EA от точки E к точке A атом C из-за упругой релаксации сместится в положение D и станет новой точкой выхода линии дисклинации, т. е. дисклинация передвинется на одно межатомное расстояние. Направление движения дисклинации всегда перпендикулярно направлению вектора Бюргерса дислокации.

Дисклинационный диполь может перемещаться в результате испускания дислокаций одной дисклинацией диполя и поглощения другой дисклинацией (дислокации скользят внутри диполя).

Движение дисклинаций вызывает пластическую деформацию кристалла. Если скольжение дислокации приводит к сдвигу в кристалле, то движение дисклинаций — к повороту решеток.

По аналогии с плотностью дислокаций используют понятие о плотности дисклинаций как о суммарной длине их линий в единице объема кристалла.

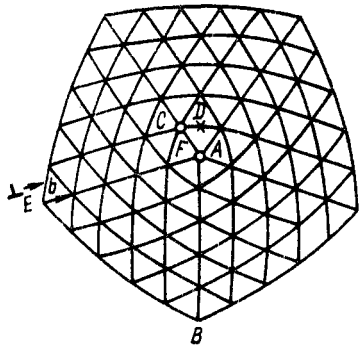


Рис. 211. Схема к объяснению механизма движения положительной 60-градусной клиновой дисклинации

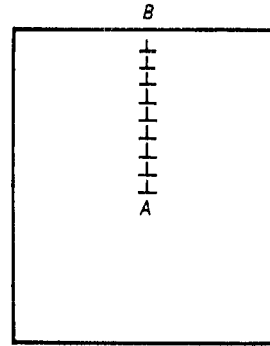


Рис. 212. Оборванная внутри кристалла стенка из краевых дислокаций

Среди полных (совершенных) дисклинаций рассмотренные выше 60-градусные клиновые дисклинации обладают наименьшим вектором поворота ω и, следовательно, наименьшей энергией, пропорциональной ω^2 . Но и они, если не образуют диполей или квадруполов, характеризуются столь большой по абсолютной величине энергией, что их существование в кристаллах обычных размеров маловероятно.

По сравнению с полными энергетически более выгодны *частичные дисклинации* со значительно меньшим вектором поворота ω . Такие дисклинации обязательно связаны с физически выделенными поверхностями. На плоскости, по которой ранее был мысленно сделан разрез, теперь (в монокристаллическом теле) находится двумерный дефект решетки. Пример — частичная клиновая дисклинация, являющаяся линией обрыва внутри кристалла стенки из краевых дислокаций (рис. 212). Каждая дислокация в стенке связана с экстраплоскостью, которая как вставленный сверху клин изгибает кристалл (это хорошо видно на рис. 199, б). По аналогии с процедурой создания клиновой дисклинации на рис. 210, разрежем кристалл на рис. 212 по плоскости AB , развернем берега разреза на такой угол ω вокруг оси A , чтобы в образовавшуюся клинообразную щель можно было вставить экстраплоскости, необходимые для появления всех дислокаций в стенке AB . В результате получим и оборванную дислокационную стенку AB , и связанную с ней клиновую дисклинацию, ось которой выходит на плоскость чертежа на рис. 212 в точке A . Вектор поворота частичной дисклинации ω не дискретен. Он плавно возрастает с уменьшением расстояния между дислокациями в стенке: $\omega \approx b/D$

(см. вывод в § 56 формулы (111), в которой для нашего рассмотрения следует заменить θ на ω). Перемещение частичной дисклинации означает изменение протяженности дислокационной стенки (и наоборот).

Глава XI ГРАНИЦЫ ЗЕРЕН И СУБЗЕРЕН

Границей зерен, а также субзерен¹ называют поверхность, по обе стороны от которой кристаллические решетки различаются пространственной ориентацией. Эта поверхность является двумерным дефектом, имеющим макроскопические размеры в двух измерениях и атомные — в третьем измерении. Двумерный дефект может быть плоским.

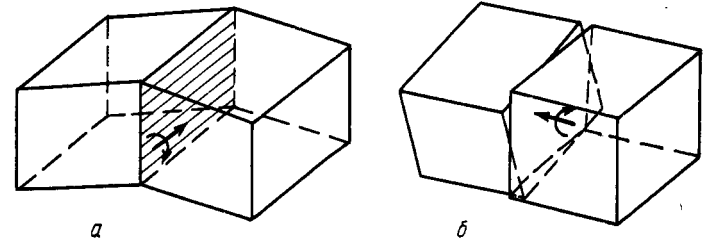


Рис. 213. Границы наклона (а) и кручения (б)

Взаимную ориентацию решеток соседних зерен часто характеризуют, указывая общее для обоих зерен кристаллографическое направление (uvw) и угол поворота θ вокруг него, который приводит к параллельности решеток соседних зерен. Соответствующая условная форма записи: $\theta(uvw)$ (см. например, $37^\circ \langle 001 \rangle$ на рис. 222).

Если ось вращения лежит в плоскости границы зерен (субзерен), то такую границу называют *границей наклона* (рис. 213, а), а если ось вращения перпендикулярна плоскости границы, то мы имеем дело с *границей кручения* (рис. 213, б). В более общем случае граница смешанного типа состоит из элементов и наклона, и кручения.

Границы с разориентацией соседних зерен менее $\sim 10^\circ$ относят к *малоугловым*, а с большей разориентацией — к *высокоугловым* (*большееугловым*).

§ 56. Малоугловые границы

Малоугловые границы образованы системами дислокаций. На рис. 199, б представлена простейшая схема строения малоугловой границы для примитивной кубической решетки. Решетки

¹ Зерна растут из разных центров, а субзерна принадлежат одному зерну.

двух зерен или субзерен упруго сопрягаются, за исключением мест, где оканчиваются неполные атомные плоскости, т. е. где находятся краевые дислокации. Такая граница является стенкой дислокаций одного знака. Линии дислокаций перпендикулярны плоскости чертежа. Два соседних зерна или субзерна симметрично наклонены по отношению к плоскости границы. Поэтому такую малоугловую границу называют *симметричной границей наклона*.

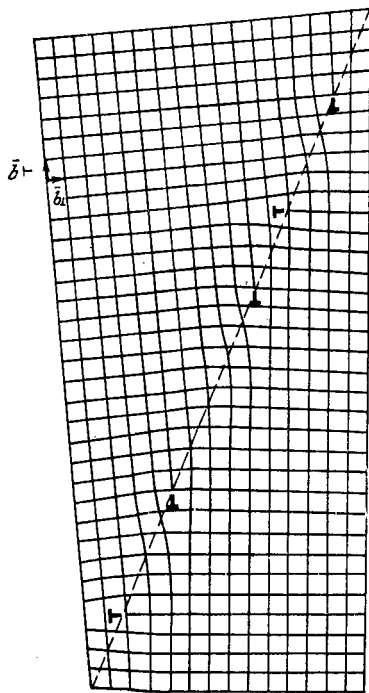


Рис. 214. Несимметричная граница наклона

При малых углах $\sin \theta \approx \theta$, тогда $D = b/\theta$. (111)

Чем больше угол разориентировки, тем меньше расстояние между дислокациями в стенке. При углах разориентировки более $\sim 10^\circ$ указанная дислокационная модель неприменима для описания строения границы зерен, так как дислокации располагаются очень близко одна к другой и теряют свою индивидуальность (их ядра сливаются). Поэтому к малоугловым или *дислокационным* относят межзеренные границы с углом разориентировки не более 10° . Соседние субзерна внутри одного зерна обычно разориентированы на угол не более 1° . Поэтому все *субзеренные (блочные)* границы малоугловые.

Если малоугловая граница лежит несимметрично, то строение ее усложняется, так как на ней оканчиваются две группы плоскостей, образующие две серии краевых дислокаций (рис. 214).

Малоугловая граница кручения образована рядами винтовых дислокаций (на рис. 215 черные кружки обозначают атомы ниже плоскости границы, а светлые — выше ее). Граница не может состоять из одного ряда параллельных винтовых дислокаций, так как такой ряд был бы нестабильным. Граница кручения образована сеткой двух взаимно перпендикулярных рядов

винтовых дислокаций. Как и в малоугловой границе наклона, здесь также между участками с несовершенной решеткой (областями ядер дислокаций) имеются участки упругого сопряжения решеток соседних зерен. На рис. 215 такие участки расположены внутри ячеек дислокационной сетки. Рассмотренная дислокационная модель границы кручения, как и границы наклона,

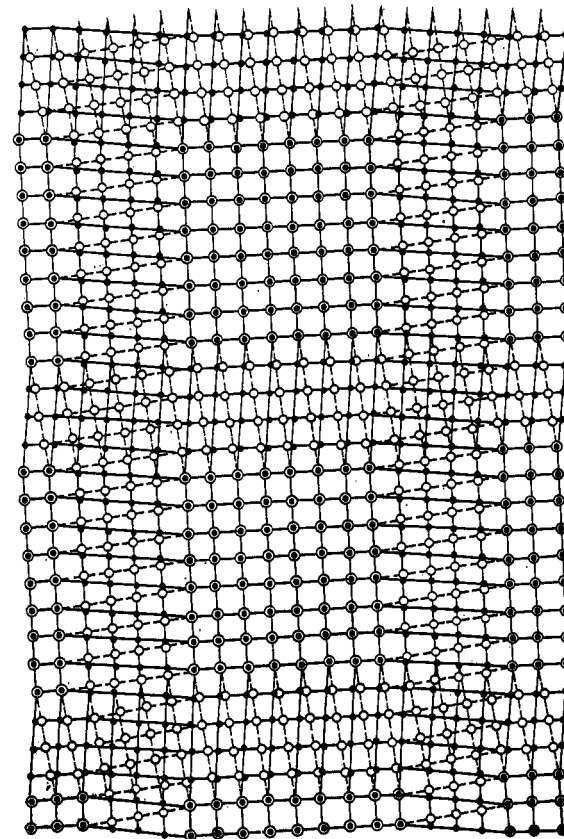


Рис. 215. Граница кручения

применима только при малых углах разориентировки соседних зерен, так как и в этом случае $D = b/\theta$ (D — расстояние между дислокациями одной серии).

На рис. 199, б, 214 и 215 показаны простейшие дислокационные модели строения границ. В более общем случае малоугловая граница содержит ряды дислокаций разной ориентации и с разными векторами Бюргерса.

Симметричная граница наклона, являющаяся стенкой краевых дислокаций одного знака с параллельными векторами

Бюргерса и параллельными плоскостями скольжения, может легко перемещаться при коллективном скольжении всех дислокаций, входящих в стенку. Такую границу называют *скользящей*.

В более общем случае малоугловой границы она не может скользить из-за непараллельности плоскостей скольжения составляющих ее дислокаций.

Миграция границы может происходить только диффузионным путем, когда в зависимости от ориентации одни экстраплоскости достраиваются, а другие сокращаются, растворяясь с кромки. Например, на рис. 214 миграция в горизонтальном направлении несимметричной границы наклона как единого целого должна быть связана с переползанием дислокаций, векторы Бюргерса которых перпендикулярны направлению миграции.

Угол разориентировки зерен или субзерен θ определяет энергию малоугловой границы:

$$E_{\text{гг}} = E_0 \theta (A - \ln \theta), \quad (112)$$

где E_0 и A — константы (E_0 пропорциональна модулю сдвига и вектору Бюргерса). Согласно этой формуле и многим экспериментальным данным с увеличением θ энергия малоугловой границы непрерывно возрастает.

Малоугловые границы — стенки дислокаций возникают при росте кристаллов из расплава (см. рис. 199), при пластической деформации и при дорекристаллизационном отжиге после холодной деформации. Образование стенок дислокаций, приводящее к подразделению кристалла на субзерна — полигоны (многоугольники), было названо *полигонизацией* (впоследствии полигонизацией стали называть более общий процесс перераспределения дислокаций, приводящий к образованию областей кристалла произвольной формы, свободных от дислокаций и разделенных малоугловыми границами). Если, например, до отжига в изогнутом кристалле дислокации были хаотично распределены по плоскостям скольжения (рис. 216, а), то в результате отжига при полигонизации они выстраиваются одна над другой в вертикальные стенки (рис. 216, б). Как видно из сопоставления рис. 216, а и б, для выстраивания в стенку необходимо и скольжение, и переползание дислокаций.

Поля упругих напряжений отдельных дислокаций в стенке, накладываясь, в значительной мере взаимно уничтожаются (на рис. 216, б под областью растяжения от одной дислокации находится область сжатия от другой дислокации). Этим и обеспечивается стабильность стенок. В результате поле упругих напряжений бесконечной стенки, внутри которой дислокации стоят одна от другой на расстоянии D , становится ничтожно малым при удалении по обе стороны от стенки на расстояние больше D .

Малоугловая граница притягивает к себе точечные дефекты, в том числе и примесные атомы, вследствие упругого взаимодействия с ними дислокаций, составляющих границу. Это притяжение, как вытекает из изложенного выше, реализуется в зоне, простирающейся всего на несколько межатомных расстояний от бесконечной границы. Примесные атмосферы тормозят миграцию малоугловых границ, стабилизируя субструктуру.

Малоугловые границы выявляются на шлифах в виде цепочек ямок травления (рис. 133), каждая из которых должна соответствовать дислокации в стенке дислокаций (см. рис. 199, б). Под электронным микроскопом на фольгах границы субзерен выявляются в виде сеток дислокаций (рис. 217).

§ 57. Высокоугловые границы

Границы зерен, выросших из разных центров при кристаллизации и фазовых превращениях в твердом состоянии, чаще всего бывают высокоугловыми.

Высокоугловые границы — это «старейший» вид дефектов кристаллического строения металлов, обнаруженный в самых ранних металлографических работах при изучении под микроскопом протравленной поверхности шлифов.

Хотя описанию границ зерен посвящена обширная литература, до сих пор строгая общая теория высокоугловых границ не создана.

В начале XX столетия была выдвинута гипотеза *аморфной прослойки* по границам, аморфного «цемента», обеспечивающего сцепление соседних кристаллов. Но позже полученные экспериментальные данные о зависимости энергии границ, скорости их

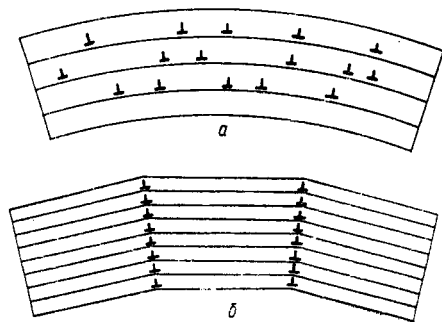


Рис. 216. Схема полигонизации: а — хаотическое расположение краевых дислокаций в изогнутом кристалле; б — вертикальные стенки из дислокаций после полигонизации

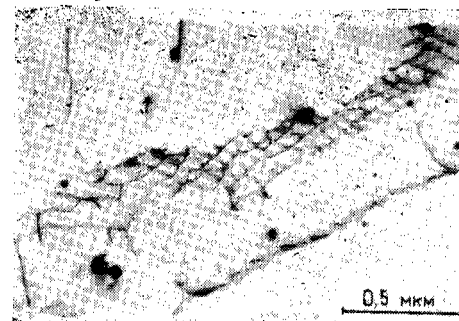


Рис. 217. Субграница в виде сетки дислокаций в горячепрессованном сплаве Al—6,5% Mg (В. В. Истомин)

миграции, скорости диффузии по границам и других их характеристик от разницы кристаллографической ориентации зерен по обе стороны от границы пришли в противоречие с гипотезой аморфной прослойки, согласно которой такого влияния не должно быть.

В 1929 г. была предложена модель *переходной решетки*. В этой модели граница является слоем толщиной 1—2 атомных диаметра, в котором атомы занимают такие положения (компромиссные между положениями узлов решеток соседних зерен), при которых их потенциальная энергия в пограничном слое минимальна. Естественно, что и строение, и поведение границы — переходной зоны должны зависеть от разориентировки соседних зерен.

К настоящему времени достигнут значительный прогресс в понимании атомного строения высокоугловых границ благодаря экспериментальным исследованиям с помощью ионного проектора и электронной микроскопии, а также благодаря машинному моделированию — численным расчетам на ЭВМ энергетически выгодных координат атомов на границе.

Экспериментально прямо доказано, что ширина границ зерен в чистых металлах не превышает двух—трех атомных диаметров.

1. СПЕЦИАЛЬНЫЕ И ПРОИЗВОЛЬНЫЕ ГРАНИЦЫ

В 1949 г. Кронберг и Вильсон ввели представление о *специальных границах*, отвечающих некоторым особым разориентировкам соседних зерен и отличающихся пониженной энергией благодаря более совершенному строению, чем *произвольные границы* (*границы общего типа*).

При развороте двух одинаковых решеток вокруг общей кристаллографической оси на определенный угол часть одной решетки совпадает с узлами другой решетки. Такие *совпадающие узлы*, например вдоль прямой mn на рис. 218, образуют свою трехмерную «сверхрешетку» — общую для обоих зерен *решетку совпадающих узлов* (PCY). Характерным дискретным углом поворота соответствует определенная *плотность совпадающих узлов*, т. е. их доля по отношению ко всем узлам решетки металла. Например, на рис. 218 при угле поворота $36,9^\circ$ вокруг оси $\langle 001 \rangle$ PCY образована каждым пятым атомом соседних зерен, т. е. плотность совпадающих узлов равна $1/5$.

Для характеристики PCY чаще используют *обратную плотность совпадающих узлов*, обозначаемую Σ , — число узлов решетки металла, приходящихся на один совпадающий узел в общей сверхрешетке. Например, в случае, изображенном на рис. 218, $\Sigma = 5$.

При любой разориентировке решеток соседних зерен можно

найти некоторое число совпадающих узлов. Но при низкой их плотности понятие об общей сверхрешетке практически теряет смысл для анализа строения границ зерен. Обычно рассматривают решетки совпадающих узлов при значениях Σ , находящихся в интервале 3—25 (при $\Sigma = 1$ угол разориентировки равен нулю).

Если граница зерен располагается вдоль плоскости с максимальной плотностью совпадающих узлов в PCY (см. рис. 218), то из-за большого числа атомов, принадлежащих одно-

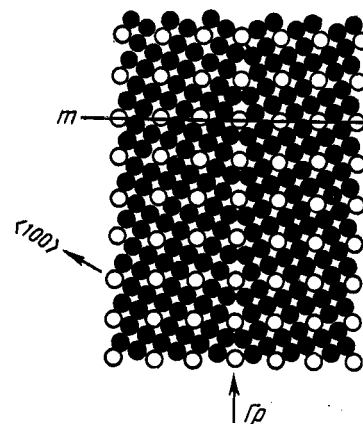


Рис. 218. Специальная граница Gr совпадающих узлов (светлые кружки) между зернами с примитивной кубической решеткой, развернутыми на $36,9^\circ$ вокруг оси $\langle 001 \rangle$

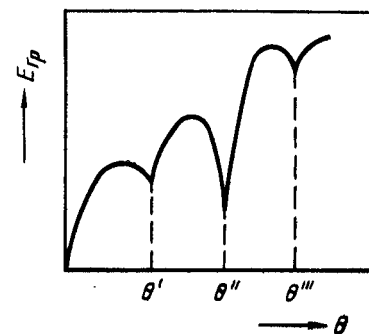


Рис. 219. Зависимость энергии границ зерен E_{Gr} от угла их разориентировки θ

временно решеткам соседних зерен, структура границы совпадающих узлов весьма совершенна и соответственно ее энергия минимальна. Такая граница является *специальной*. В модели PCY плоскость специальной границы параллельна плоскостям PCY с низкими индексами.

С увеличением угла разориентировки соседних зерен энергия границы между ними проходит через минимумы (рис. 219), соответствующие специальным границам (при углах θ' , θ'' и θ''').

Если граница зерен находится под небольшим углом к плотноупакованной плоскости в PCY, то она может иметь ступенчатое строение (рис. 220), что обеспечивает минимум энергии. При этом граница стремится расположиться большей частью своей поверхности в плоскостях с максимальной плотностью совпадающих узлов, где наиболее совершенно сопряжение решеток двух зерен, минимальны энергия и ширина границы (см. участки AB и CD на рис. 220). Эти плоские участки границы (*фасетки*) соединены ступенькой (BC). Число ступенек на единице длины границы зерен тем больше, чем сильнее ее макро-

скопическая ориентация отклоняется от плоскости с наибольшей плотностью совпадающих узлов.

На рис. 220 видно, что вдоль ступеньки BC решетки соседних зерен плохо сопряжены и граница здесь шире. Таким образом, рассматриваемая фасетированная граница представляет собой чередование областей хорошего и плохого сопряжения ре-

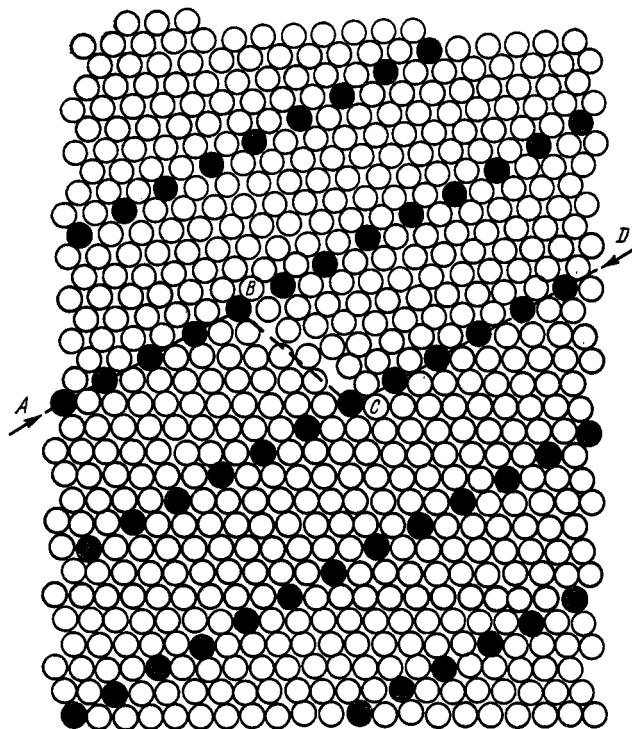


Рис. 220. Фасетированная ступенчатая граница $ABCD$ между двумя зернами с о. ц. к. решеткой, развернутой на $50,5^\circ$ вокруг оси $\langle 110 \rangle$

шеток соседних зерен, причем плохое сопряжение сосредоточено на небольших участках (ступеньках).

В модели жестких сфер нерелаксированная идеальная граница совпадающих узлов не может соответствовать минимуму энергии. На рис. 221 показаны физически невозможные перекрытия жестких сфер (атомов) двух зерен справа от узлов совпадения A и B и участки отсутствия контакта зерен между этими узлами (большой избыточный объем на границе по сравнению с совершенной решеткой внутри зерен).

Границу совпадающих узлов можно рассматривать как состоящую из одинаковых сегментов (AB на рис. 221 или P на

рис. 222, a), являющихся «единицей повторяемости» двумерной периодической структуры.

Чтобы в пределах сегмента P (рис. 222, a) уменьшить сумму энергий парных взаимодействий атомов соседних кристаллов,

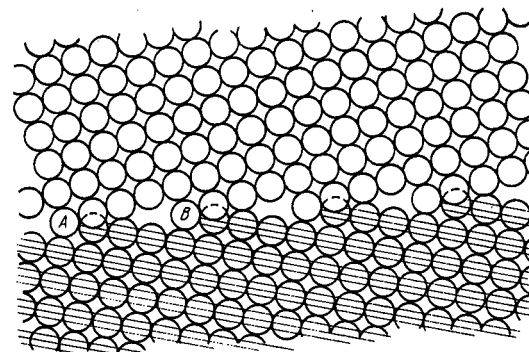


Рис. 221. Граница совпадающих узлов между двумя зернами ($\Sigma=17$)

необходимо, как показывают расчеты, сместить кристаллы один относительно другого (без вращения), выведя границу из положения совпадающих узлов (рис. 222, b). При такой «жесткой релаксации» каждый атом остается в узле решетки своего кри-

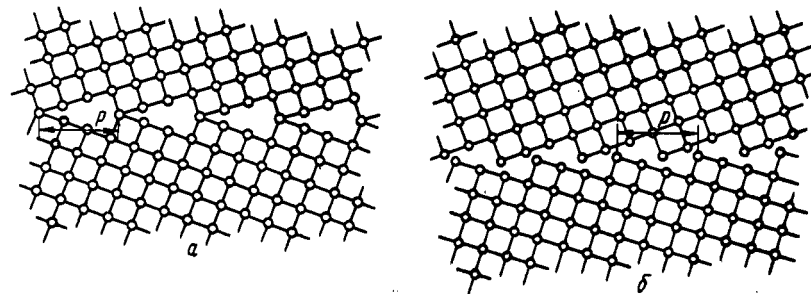


Рис. 222. Наклонная граница $37^\circ \langle 001 \rangle$ между зернами с кубической решеткой в положении совпадения (a) и после жесткой релаксации (b)

сталла. Следует отметить, что хотя границы совпадающих узлов после указанного смещения зерен уже не существует, периодичность строения границы сохраняется и сохраняется сегмент повторяемости P (рис. 222, b), равный соответствующему сегменту в идеальной границе совпадающих узлов (рис. 222, a).

Сумма энергий парных взаимодействий атомов в пределах каждого сегмента P дополнительно уменьшается при индивиду-

альных смещениях атомов из исходных узлов так, чтобы улучшился контакт соседних зерен вдоль сегмента повторяемости (такая релаксация отдельных атомов на рис. 222, б не показана). При этом по обе стороны от границы решетка должна деформироваться на расстояние, соизмеримое с длиной сегмента P . Избыточная энергия (в расчете на единицу площади границы) тем меньше, чем меньше сегмент повторяемости.

Таким образом, хотя реальная структура границ и не описывается моделью совпадающих узлов, особые ориентационные соотношения решеток соседних зерен определяют малую величину сегмента повторяемости в периодической структуре границ и обуславливают тем самым их особые свойства.

Развитие методов машинного моделирования позволило сделать вывод, что все без исключения высокоугловые границы состоят из характерных *структурных единиц* — сравнительно плотноупакованных атомных группировок с определенным расположением атомов. Например, атомы внутри одной структурной единицы границы могут располагаться по вершинам полиэдров двух и более видов, состыкованных один с другим в определенной последовательности (рис. 223).

Специальные границы, состоящие из структурных единиц одного типа, называют *предпочтительными*. У них очень короткий

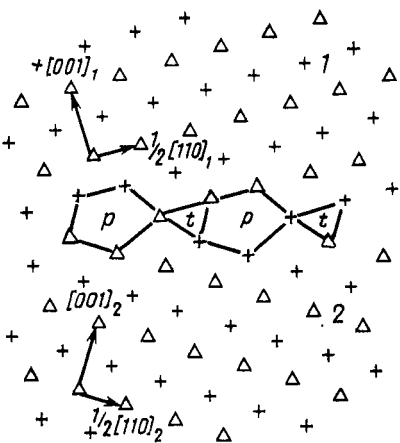


Рис. 223. Рассчитанная на ЭВМ структура симметричной границы наклона в алюминии ($\Sigma 27$; $31,59^\circ$ $[1\bar{1}0]$). Ось наклона $[1\bar{1}0]$ перпендикулярна плоскости чертежа (110) :

1 и 2 — зерна; треугольники и крестики — центры атомов, соответственно, верхнего и нижнего слоя (110) ; p и t — многоугольники, вершины которых расположены в двух соседних слоях (110) (Саттон и Витек)

сегмент повторяемости (несколько атомных диаметров), т. е. они являются «короткопериодными». Произвольные высокоугловые границы можно представить в виде повторяющегося набора в разной пропорции структурных единиц двух типов, т. е. они являются «длиннопериодными». С изменением угла разориентировки зерен непрерывно изменяется набор структурных единиц, из которых состоит высокоугловая граница.

2. ЗЕРНОГРАНИЧНЫЕ ДИСЛОКАЦИИ

Первоначально представления о *зернограницных дислокациях* (ЗГД) были введены для того, чтобы описать атомный механизм *зернограницного скольжения* (*проскальзывания*) — смещения одного зерна относительно другого под действием на-

пряжений. Граница зерна имеет, как отмечалось, периодическое строение. ЗГД отделяет ту часть межзеренной границы, где сдвиг уже прошел и восстановилось исходное периодическое строение границы, от той части, где он еще не начался. На рис. 224 показана краевая ЗГД, являющаяся областью линейного несовершенства на границе зерен вокруг края двух «лишних» плоскостей в верхнем зерне. Вектор Бюргерса такой ЗГД лежит в плоскости границы, и ЗГД может скользить в этой плоскости. При скольжении ЗГД в каждый момент времени в сдвиге участвуют только те атомы, которые находятся в области ядра дислокации. Продвижение одной дислокации по поверхности раздела соседних зерен вызывает их взаимное смещение на величину вектора Бюргерса ЗГД. Здесь полная аналогия со скольжением дислокаций внутри зерен (см. § 22), которые, для отличия от зернограницных, называют *решеточными дислокациями*.

Кроме полных ЗГД, после продвижения которых восстанавливается исходная структура высокоугловой границы, существуют частичные ЗГД, скольжение которых приводит к изменению строения границы.

Так как периодическая структура границы зависит от взаимной кристаллографической ориентации зерен и ориентации самой границы, то ЗГД могут иметь разнообразные векторы Бюргерса. Вектор Бюргерса ЗГД в специальных границах тем меньше, чем больше Σ .

Консервативное движение (скольжение) ЗГД, не связанное с переносом массы, возможно только на плоских участках границы зерен, на которых вектор Бюргерса и линия ЗГД находятся в плоскости границы. Плоские участки (фасетки) наблюдают под микроскопом. Так как вся граница зерен не идеально плоская, то ЗГД могут перемещаться на значительные расстояния вдоль границы только при сочетании скольжения и переползания. В произвольных границах ЗГД движутся легче, чем в специальных, так как диффузия, необходимая для переползания, в более рыхлых произвольных границах идет быстрее.

Переползание ЗГД связано с испусканием или абсорбцией вакансий. Соответственно высокоугловая граница, содержащая такие ЗГД, служит эффективным источником или стоком точечных дефектов, причем произвольная граница является более

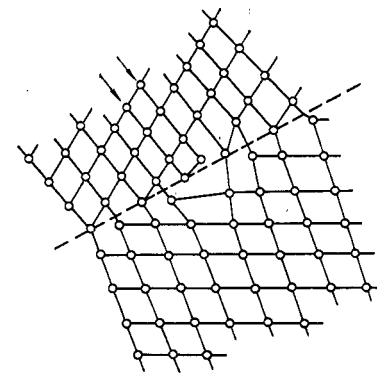


Рис. 224. Модель строения границы зерен со скользящей зернограницной дислокацией (стрелками отмечены две экстраплоскости)

эффективным источником или стоком вакансий нежели специальная.

Зернограничные дислокации подразделяют на два типа: *собственные (вторичные)* и *несобственные (внесенные, избыточные, сторонние)* ЗГД*.

Собственные ЗГД, присущие данной границе, являются неотъемлемым элементом ее структуры и не имеют дальнего действия поля напряжений.

Сетка собственных ЗГД выполняет аккомодационную роль, приспособляя структуру границы к конкретной разориентировке зерен, несколько отличающейся от той, которая точно соответствует существованию границы совпадающих узлов. Такая сетка собственных ЗГД обеспечивает минимум энергии высокоугловой границы при отклонении ориентации решеток соседних зерен от специальной. В этом смысле собственные ЗГД являются «равновесными» линейными дефектами структуры высокоугловой границы. Собственные ЗГД на границе между зернами одной фазы фактически выполняют ту же роль, что и дислокации несоответствия на межфазной границе (см. § 52).

Максимальный угол отклонения (в градусах) от специальной ориентации, когда еще возможна аккомодация с помощью собственных ЗГД, можно найти из формулы

$$\Delta\theta_m \approx \Sigma^{-2/3}. \quad (113)$$

Если $\Delta\theta \leq \Delta\theta_m$, то границу зерен можно считать близкой к специальной, а если $\Delta\theta > \Delta\theta_m$, то граница — произвольная.

Расстояние между собственными ЗГД в их равновесной сетке обратно пропорционально углу отклонения от специальной ориентации. Здесь полная аналогия с влиянием разориентировки на расстояние между дислокациями в малоугловой границе [см. рис. 199, б и формулу (111)], в которой дислокации, обеспечивающие минимум энергии сопряжения слегка разориентированных решеток, являются не специфическими зернограничными, а обычными решеточными (для малоугловой границы $\Sigma=1$). Экспериментально сетку собственных ЗГД (рис. 225) пока наблюдали только при сравнительно небольших значениях Σ и малых отклонениях от особых разориентировок, так как уменьшение вектора Бюргерса с увеличением Σ и уменьшение расстояния между зернограничными дислокациями с увеличением угловых отклонений от специальных разориентировок затрудняют или делают совсем невозможным наблюдение собственных ЗГД.

Несобственные (внесенные) ЗГД образуются в результате взаимодействия границы с решеточными дислокациями (рис.

* Терминология, связанная с ЗГД, еще не устоялась, и в литературе можно встретить разные названия ЗГД указанных двух типов (в английских источниках соответствующие названия — *intrinsic* или *secondary* и *extrinsic*)

226). На рис. 226 видна проекция на экран просвечивающего электронного микроскопа поверхности границы между зернами 1 и 2, наклонно расположенной в объеме фольги. Ширина этой проекции составляет сотни нанометров; она ничего общего не имеет с физической шириной границы зерен, измеряемой долями нанометра (два-три атомных диаметра). Система чередующихся почти параллельных темных и светлых полос вдоль границы зерен — это специфический контраст из-за особых дифракционных условий, не связанный с атомной структурой меж-

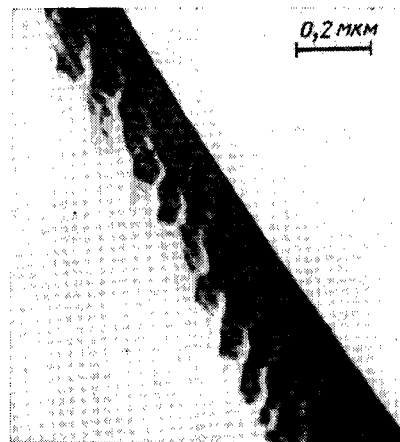


Рис. 225. Сетка собственных зернограничных дислокаций в нержавеющей стали (Мур)

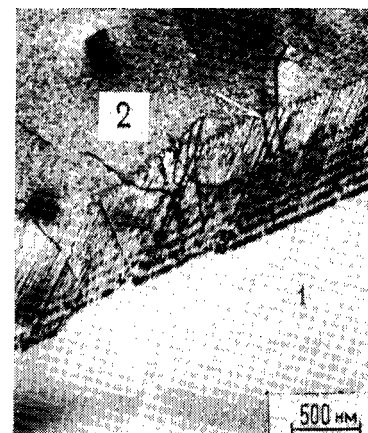


Рис. 226. Внесенные зернограничные дислокации в горячедеформированном сплаве Al—Cu—Mn (В. С. Левченко)

зеренной границы. Некоторые внесенные дислокации (см. стрелку) частично расположены в границе зерен, а частично — в теле зерна 2. При встрече неподвижной границы с движущейся к ней решеточной дислокацией или при встрече мигрирующей границы с неподвижной дислокацией последняя входит в границу. Такая *захваченная границей решеточная дислокация* является одной из разновидностей внесенных ЗГД.

Дифракционный контраст от захваченных границей решеточных дислокаций при повышенных температурах постепенно исчезает, граница поглощает захваченные решеточные дислокации. При этом каждая из них может диссоциировать на несколько внесенных ЗГД.

Векторы Бюргерса ЗГД — продуктов диссоциации меньше вектора Бюргерса захваченной границей решеточной дислокации, поэтому такая диссоциация энергетически выгодна, приводит к уменьшению дальнего действия поля упругих напряжений.

Внесенные ЗГД в отличие от собственных не являются составляющей равновесной структуры границы. С ними связано дальнедействующее поле упругих напряжений.

Диссоциацию решеточной дислокации, захваченной границей, на несколько ЗГД наблюдали в специальных границах и границах, близких к специальным, но не наблюдали в произвольных границах. Для них была предложена другая модель уменьшения энергии — непрерывная делокализация ядра решеточной дислокации.

На рис. 227, а показана краевая решеточная дислокация, скользящая к границе зерен. На рис. 227, б край экстраплоскости достиг границы зерен. При локализованном ядре захва-

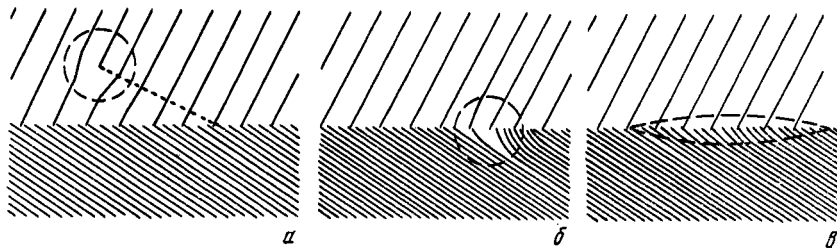


Рис. 227. Размытие ядра решеточной дислокации, захваченной границей

ченной дислокации энергия границы высокая (см. сильные искажения на рис. 227, б). Упругая энергия уменьшится, если область несоответствия решеток, обусловленного наличием экстраплоскости, будет расширяться (рис. 227, в). Этот процесс согласуется с постепенным размытием изображений решеточных дислокаций, захваченных произвольными границами зерен, вплоть до полного исчезновения дифракционного контраста от них.

Непрерывную делокализацию ядра захваченной границей решеточной дислокации можно трактовать и как ее диссоциацию на большое число невидимых в электронном микроскопе ЗГД с очень малыми векторами Бюргерса.

Рассмотренные процессы абсорбции, поглощения границей захваченных решеточных дислокаций интенсифицируются с повышением температуры.

Границы зерен могут не только поглощать, но и испускать решеточные дислокации. Последнее возможно, если произойдет объединение нескольких ЗГД с малыми векторами Бюргерса в одну решеточную дислокацию или же произойдет сжатие делокализованного ядра (см. переход от схемы на рис. 227, в к схеме на рис. 227, б).

Уступы, изломы границ и тройные стыки зерен являются наиболее вероятными местами испускания решеточных дисло-

каций, так как около них, как барьеров, образуются скопления ЗГД, затем объединяющихся под действием приложенной нагрузки в решеточную дислокацию.

Глава XII

ТОРМОЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ

Скользят дислокации всегда тормозятся, часто вплоть до полной остановки, под действием разнообразных факторов. Изучение этих факторов представляет исключительно большой интерес, так как с торможением дислокаций прямо связаны важнейшие механические свойства и прежде всего прочность металлов.

§ 58. Сила Пайерлса

Рассмотрим, какое минимальное (критическое) касательное напряжение требуется для движения краевой дислокации в кристалле, свободном от других дефектов.

В исходном состоянии в результате симметрии горизонтальные составляющие сил, действующих на атом 1 со стороны соседей слева и справа от него, взаимно уравниваются (см. рис. 108). То же самое справедливо по отношению к атому 14, соответствующему новому (соседнему) положению дислокации. Казалось бы, что сила, необходимая для перемещения дислокации на одно межатомное расстояние, бесконечно мала. Однако в период перемещения дислокации в соседнее положение из-за смещений атомов симметрия межатомных сил нарушается. Чтобы дислокация преодолела потенциальный барьер, разделяющий два соседних ее положения в энергетических ямах (точки 1 и 14 на рис. 108), необходима сила. Она называется силой Пайерлса (или силой Пайерлса—Набарро). Поскольку эта сила определяется свойствами решетки, то говорят о силах «трения» в решетках. Учитывая, что сила, действующая на единицу длины дислокации $f = b\tau$, можно для силы Пайерлса написать: $f_p = b\tau_p$, где b — вектор Бюргерса, а τ_p — минимальное касательное напряжение, необходимое для скольжения дислокации в совершенном кристалле (напряжение Пайерлса).

Расчет силы Пайерлса — очень сложная и до конца не решенная задача. Одна из основных трудностей состоит в том, что неизвестны точное расположение атомов в ядре дислокации и точный закон изменения сил взаимодействия между соседними атомными плоскостями при сдвиге на одно межатомное расстояние.

Метод анализа, созданный Пайерлсом и развитый Набарро, при синусоидальном законе для силы взаимодействия соседних

сдвигаемых по отношению одна к другой атомных плоскостей дает следующее выражение для напряжения Пайерлса:

$$\tau_n = \frac{2G}{1-\mu} \exp\left(-\frac{2\pi}{1-\mu} \frac{d}{b}\right), \quad (114)$$

где G — модуль упругости при сдвиге; μ — коэффициент Пуассона; d — расстояние между соседними атомными плоскостями, в которых происходит скольжение; b — межатомное расстояние в направлении скольжения.

Чем больше силы межатомной связи, характеристикой которых является модуль сдвига, тем больше τ_n . Формула (114) качественно правильно указывает, что критическое напряжение

снижается с ростом d и уменьшением b . Для плоскостей и направлений с плотнейшей упаковкой соотношение d/b обычно наибольшее, с чем согласуется тот факт, что скольжение легче всего идет по плоскостям и направлениям плотнейшей упаковки.

В кристалле, свободном от других дефектов, дислокация может

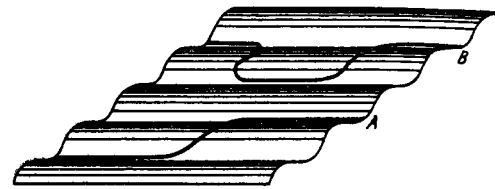


Рис. 228. Рельеф поверхности потенциальной энергии дислокации, обусловленной действием силы Пайерлса:

А — дислокация с одним перегибом; В — дислокация с двумя перегибами

скользить и при напряжениях меньше напряжения Пайерлса. Благодаря действию сил Пайерлса потенциальная энергия дислокации является периодической функцией ее положения в решетке (рис. 228). Минимальные значения потенциальной энергии (канавки потенциального рельефа) соответствуют положениям дислокации вдоль направлений плотнейшей упаковки. Для перемещения дислокации из одной канавки в соседнюю требуется преодолеть потенциальный барьер, приложив напряжение Пайерлса.

Иная картина предполагается в случае, когда одна дислокация расположена в соседних канавках потенциального рельефа, т. е. имеет *перегибы* (см. рис. 228). Движение перегиба вдоль линии дислокации может привести к последовательному (участок за участком) переходу всей дислокации в соседнее положение с минимумом энергии. Напряжение, требуемое для движения перегиба параллельно направлению плотнейшей упаковки, очень мало (меньше напряжения Пайерлса). «Выбрасывание» полупетли в соседнюю канавку (образование двойного перегиба, см. рис. 228) происходит под действием термической активации, а дальнейшее расхождение перегибов в разные стороны — под действием очень малых напряжений.

Скорость скольжения дислокации v , движущейся вследствие образования двойных перегибов, зависит от частоты и, соответственно, энергии образования этих перегибов U_n :

$$v = A \exp(-U_n/kT). \quad (115)$$

Таким образом, основная идея теории дислокаций — представление о неодновременности протекания акта скольжения — распространяется и на перемещение самой линии дислокации.

Критическое касательное напряжение, обусловленное «трением» в решетке, трудно не только рассчитать, но и экспериментально определить, так как действительный предел текучести зависит не только от силы Пайерлса, но и от других факторов, сильно препятствующих скольжению и не связанных с действием сил Пайерлса (см. § 59—61).

§ 59. Торможение дислокаций при их взаимодействии с другими дислокациями и границами зерен

Проходя через лес дислокаций, скользящая дислокация испытывает торможение, обусловленное разными причинами. Если скользящая дислокация была растянута, то перед моментом пересечения возникают перетяжки дефекта упаковки (см. рис. 194, б), для чего требуется повышенное напряжение.

Тормозящее действие оказывают пороги на винтовых дислокациях, образующиеся в большом количестве при пересечении дислокаций леса. Как отмечено в § 48, протаскивание таких порогов за дислокацией, связанное с затратой энергии на генерирование точечных дефектов (см. рис. 192), требует повышенного напряжения.

Нерасщепленные пороги на краевой дислокации, имеющие краевую ориентацию, могут скользить вместе с дислокацией, но если они диссоциированы (см. рис. 195), то необходимо дополнительное напряжение для их стягивания, чтобы стало возможным скольжение. Растянутые пороги должны очень эффективно тормозить дислокации.

В г. ц. к. решетке при встречном движении растянутых дислокаций в пересекающихся плоскостях скольжения образуются дислокации Ломер—Коттрелла, прочно привязанные к линии пересечения плоскостей (см. рис. 172). Сидячая дислокация Ломер—Коттрелла является барьером для других дислокаций, скользящих в плоскостях, в которых находится клинообразный дефект упаковки. Скользящая дислокация, встретившись в своей плоскости скольжения с хвостовой дислокацией *барьера Ломер—Коттрелла*, испытывает отталкивание со стороны поля ее упругих напряжений и после определенного сближения останавливается. Следующая дислокация, скользящая в той же плоскости, будет остановлена ранее задержанной дислокацией и т. д.

Около барьера Ломер—Коттрелла возникает скопление, нагромождение дислокаций (рис. 229, б).

На каждую приближающуюся к барьеру дислокацию действуют результирующие напряжения от ранее остановившихся дислокаций. Поэтому каждая новая дислокация останавливается на более далеком расстоянии от предыдущей (см. рис. 229, а).

Если плоское скопление образовано краевыми дислокациями, то решетка вблизи него должна быть искривлена, так как скапливается большое число параллельных экстраплоскостей, действующих как клинья (см. рис. 105). Сто краевых дислокаций

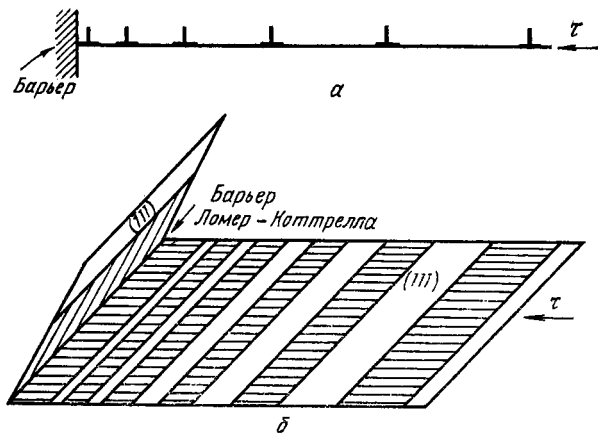


Рис. 229. Нагромождение единичных (а) и растянутых (б) дислокаций у барьера Ломер—Коттрелла

одного знака на длине 5000 межатомных расстояний создают угол изгиба в несколько градусов (на рис. 229, а изгиб плоскости скольжения не показан).

Барьеры Ломер—Коттрелла не только останавливают скользящие дислокации, но и могут подавить генерирование источниками новых дислокаций. Каждая дислокационная петля, порожденная источником Франка—Рида, создает встречное напряжение, действующее на следующие петли и сам источник. При удалении петли от источника противоположно ослабевает. Если же недалеко от источника имеется барьер, у которого возникает нагромождение дислокаций, то суммарное поле напряжений этого нагромождения может создать в плоскости скольжения такое встречное напряжение τ_n , что разность между касательным напряжением от приложенной силы τ и τ_n станет меньше критического напряжения $\tau_{кр}$, обеспечивающего работу источника. Следовательно, при $\tau - \tau_n < \tau_{кр}$ источник оказывается запертым [величина $\tau_{кр}$ определяется формулой (106)].

В плоскости скольжения на длине L от барьера до источ-

ника оказывается заторможенными n дислокаций, образующих нагромождение. Расчет показывает, что число дислокаций в таком нагромождении

$$n = k\pi L\tau / Gb, \quad (116)$$

где G — модуль сдвига; b — вектор Бюргерса.

Для винтовых дислокаций $k=1$, а для краевых $k=(1-\mu)$, где μ — коэффициент Пуассона. Естественно, что чем дальше от барьера находится источник и выше напряжение τ , тем большее число дислокаций от этого источника будет образовывать скопление у барьера. На головную дислокацию, остановленную барьером, действует напряжение

$$\tau_1 = n\tau. \quad (117)$$

Это означает, что коэффициент концентрации напряжений у головной дислокации равен числу сдерживаемых ею дислокаций. Когда у барьера останавливаются растянутые дислокации, то под действием напряжений от приложенной нагрузки ширина их уменьшается (хвостовая дислокация Шокли приближается к головной). Чем ближе к барьеру, тем больше сжаты растянутые дислокации (рис. 229, б). Если передние дислокации полностью стягиваются, то они могут обойти барьер Ломер—Коттрелла: стянутая винтовая дислокация обходит барьер поперечным скольжением, а стянутая краевая — переползанием (при достаточной диффузионной подвижности атомов).

Сидячая дислокация Ломер—Коттрелла — один из эффективных барьеров для скользящих дислокаций, а число таких барьеров в г. ц. к. решетке во время деформирования велико, так как скольжение происходит в пересекающихся плоскостях. С развитием деформации число барьеров Ломер—Коттрелла возрастает и они могут окружить и запереть все источники Франка—Рида. Это является одной из причин деформационного упрочнения (наклепа). Важную роль в деформационном упрочнении отводят дислокационным сплетениям, которые образуются при пластической деформации. Скользящие дислокации, встретив сплетения, должны обходить их.

Таким образом, по мере развития пластической деформации по разным причинам усиливается торможение дислокаций внутри зерен, что обуславливает наклеп. Экспериментальные данные и теоретический анализ с использованием разных моделей торможения дислокаций показывают, что напряжение течения τ растет пропорционально корню квадратному из общей плотности дислокаций ρ :

$$\tau = \tau_0 + A G b \sqrt{\rho}, \quad (118)$$

где A — константа; τ_0 — напряжение, необходимое для движения дислокации при отсутствии других дислокаций.

Межзеренная граница — эффективный барьер для движущихся дислокаций. Захваченная границей решеточная дислокация, обладая дальнедействующим полем напряжений, упруго отталкивает приближающуюся к ней другую решеточную дислокацию. Каждая следующая дислокация останавливается результирующим полем напряжений от ранее остановленных у границы дислокаций и поэтому сама останавливается на более далеком расстоянии (см. рис. 229, а). Так как захваченная границей решеточная дислокация постепенно поглощается границей (см. § 57), то накопление около границы решеточных дислокаций зависит от соотношения скоростей этой абсорбции и подхода к границе новых решеточных дислокаций.

Поскольку граница зерен является барьером для скользящих дислокаций, то развитие пластической деформации поликристалла, начинающейся в наиболее благоприятно ориентированных зернах, происходит эстафетным способом. Возможны разные механизмы эстафетной передачи пластической деформации от зерна к зерну. Напряжения от скопления решеточных дислокаций в одном зерне упруго распространяются через границу в соседнее зерно, где, превысив $\tau_{кр}$, приводят в действие внутризеренные источники дислокаций, например источник Франка—Рида. Другой механизм — испускание границей решеточных дислокаций в соседнее зерно.

§ 60. Торможение дислокаций дисперсными частицами

В промышленных сплавах вторая фаза чаще распределена в виде дисперсных включений внутри основной фазы, например после старения. В таких сплавах действуют разные по своей природе факторы, вызывающие торможение дислокаций.

1. ВЫГИБАНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ МЕЖДУ ДИСПЕРСНЫМИ ЧАСТИЦАМИ

Если расстояние между частицами второй фазы достаточно велико, дислокация под действием касательного напряжения от приложенной нагрузки выгибается между ними (рис. 230). При этом благодаря линейному натяжению возникает восстанавливающая сила. В соответствии с формулой (106) напряжение, необходимое для проталкивания дислокации между частицами, разделенными расстоянием l :

$$\tau_{пр} = Gb/l. \quad (119)$$

При напряжении $\tau \geq \tau_{пр}$ линия дислокации выгибается между частицами, ее участки смыкаются за каждой частицей и, оставив вокруг частиц петли, дислокация продолжает скользить в прежнем направлении. Механизм смыкания двух изогнутых ветвей дислокации вокруг частицы с образованием петли ана-

логичен рассмотренному в § 53 механизму смыкания двух спиральных участков с образованием петли, генерируемой источником Франка—Рида (см. рис. 200). В отличие от рис. 200, б, где зона сдвига находится внутри расширяющейся петли, на рис. 230 она расположена вне петли, которая сужается, образуя кольцо вокруг частицы. Каждая новая дислокация, проходя между частицами, оставляет вокруг каждой из них кольцо, и суммарная длина дислокаций, а соответственно и энергия возрастают. Ожерелья из взаимоотталкивающихся дислокационных колец вокруг дисперсных частиц создают поля упругих напряжений, затрудняющие проталкивание новых дислокаций между частицами.

Рассмотренный механизм обхода частиц второй фазы называется, по имени его автора, *механизмом Орована*.

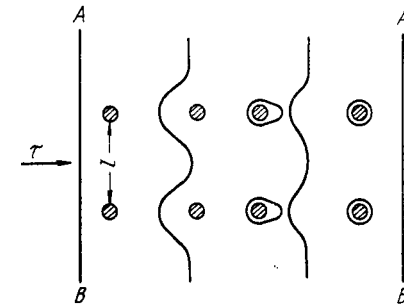


Рис. 230. Стадии выгибания скользящей дислокации между частицами второй фазы с образованием петель

2. ЛОКАЛЬНОЕ ПОПЕРЕЧНОЕ СКОЛЬЖЕНИЕ

Другие механизмы обхода дислокациями частиц второй фазы — локальное поперечное скольжение (рис. 231) и при повышенных температурах переползание.

Локальное поперечное скольжение начинается после того, как, например, скользящая краевая дислокация, выгибаясь

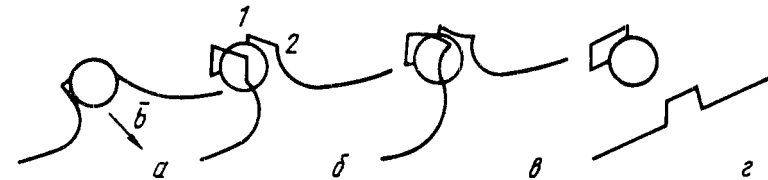


Рис. 231. Стадии локального поперечного скольжения при обходе дислокацией частицы второй фазы

между частицами второй фазы, образует винтовые сегменты (рис. 231, а). Эти сегменты могут совершать двойное поперечное скольжение, переходя в новую плоскость скольжения для обхода частицы и затем возвращаясь в плоскость, параллельную исходной (участки типа 1—2 на рис. 231, б). Винтовые сегменты, имея разный знак, выгибаются навстречу один другому (рис. 231, в) и аннигилируют, оставляя позади частиц призматическую петлю и образуя двойную ступеньку на продолжающей скользить дислокации (рис. 231, г).

3. ПЕРЕРЕЗАНИЕ ДИСЛОКАЦИЯМИ ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ

С уменьшением расстояния между частицами в соответствии с формулой (119) возрастает напряжение, необходимое для проталкивания между ними дислокаций, и может наступить момент, когда более легким путем оказывается прохождение дислокации через тело частиц, как бы перерезание частиц (рис. 232). Из-за того, что решетка

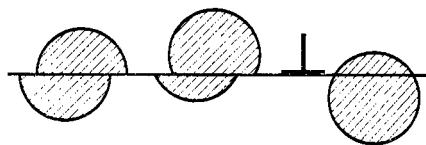


Рис. 232. Перерезание дисперсной частицы скользящей дислокацией

частицы отличается от решетки матрицы, скользящая в матрице дислокация при вхождении в решетку частицы создает в ней сильное нарушение упаковки атомов вдоль плоскости сдвига. Частица сдвигается на величину вектора Бюргерса дислокации матрицы, который отличается от вектора трансляции решетки частицы. Внутри частицы возникает высокоэнергетическая поверхность раздела, что является одной из причин торможения дислокаций. Ясно, что частицы больших размеров и высокопрочные частицы дислокациями не перерезаются.

Другая причина торможения дислокаций — увеличение поверхности раздела между матрицей и перерезанной частицей, на поверхности которой появляются ступеньки (см. рис. 232). Можно предполагать, что это увеличение поверхности вносит существенный вклад в торможение дислокаций, если частицы очень малы.

Еще одна важная причина торможения дислокаций — существование в матрице дальнедействующего поля упругих напряжений вокруг частиц. Эти напряжения возникают из-за разности в удельных объемах частицы и матрицы, из которой выделяется частица. Если выделение когерентно матрице, упругие деформации обеспечивают плавное сопряжение решеток с разными параметрами.

Какой путь выбирает дислокация в сплаве с дисперсными частицами — выгибание и обход частиц или их перерезание, зависит от соотношения многих факторов.

Небольшие когерентные частицы могут перерезаться дислокациями (рис. 233). Чем прочнее частицы и больше их модуль упругости, тем труднее они перерезаются дислокациями.



Рис. 233. Перерезанные дислокациями когерентные частицы, образовавшиеся в растворе при старении нихрома 80/20 с добавкой 7,5 % (ат.) Al (Глейтер и Хорнбоген). Через каждую частицу в плоскости сдвига прошла серия дислокаций (сравните с рис. 232)

Большие некогерентные частицы, находящиеся на значительном расстоянии одна от другой, обычно обходятся дислокациями с образованием петель.

Явления торможения дислокаций дисперсными частицами второй фазы широко используют при разработке высокопрочных материалов.

§ 61. Торможение дислокаций атомами примесей и легирующих элементов

1. ТОРМОЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ АТМОСФЕРАМИ КОТТРЕЛЛА, СУЗУКИ И СНУКА

Скользящая дислокация стремится увлечь за собой атмосферу Коттрелла, которая в отличие от скользящей дислокации может перемещаться только диффузионным путем. Поэтому атмосфера из растворенных атомов способна перемещаться вместе с дислокацией, находящейся в центре этой атмосферы, лишь при высоких температурах и очень малых скоростях скольжения дислокации. При увеличении скорости скольжения атмосфера несколько отстает от ядра дислокации, и сила притяжения к атмосфере тормозит дислокацию. В этом случае скорость движения дислокации все еще лимитируется скоростью миграции атомов атмосферы. Дислокации вместе с атмосферами Коттрелла могут скользить, например, в условиях ползучести.

При повышенных скоростях деформирования или невысоких температурах атмосферы не могут поспеть за дислокациями и удерживают их. Энергия связи атома атмосферы с дислокацией [см. формулу (101) и табл. 19] определяет работу, которую необходимо затратить для отрыва дислокации от своей атмосферы. Если напряжение от приложенной нагрузки недостаточно для отрыва дислокации от атмосферы, то дислокация остается закрепленной, неподвижной. Такое закрепление дислокаций атмосферами Коттрелла способствует большому упрочнению металла примесями и малыми добавками.

Отрыву дислокации от коттрелловской атмосферы помогают тепловые флуктуации, которые способны образовать петлю длиной в несколько межатомных расстояний, свободную от примесных атомов (рис. 234). Под действием напряжений перегибы на дислокации удаляются один от другого, и дислокация постепенно освобождается от удерживающей ее атмосферы. С понижением температуры роль термического возбуждения в отрыве дислокаций от коттрелловской атмосферы падает, и для освобождения дислокаций необходимо повышать напряжения.

«Химическая» связь атомов растворенного элемента с растянутой дислокацией обуславливает торможение дислокаций атмосферами Сузуки. В отличие от коттрелловских атмосфер,

которые образуются вдоль линий дислокаций и потому насыщаются при очень небольших содержаниях примеси (сотые и даже тысячные доли процента), атмосферы Сузуки из-за относительно большой площади дефекта упаковки насыщаются при довольно больших концентрациях легирующего элемента (целые проценты). Поэтому сильное тормозящее действие атмосфер Коттрелла проявляется уже при малом содержании примесей, а значительное тормозящее действие атмосфер Сузуки должно проявляться при гораздо больших концентрациях легирующих элементов. При большой ширине дефекта упаковки термические флуктуации практически не могут разблокировать растянутую дислокацию с атмосферой Сузуки. Поэтому в упрочнении сплавов роль блокировки дислокаций атмосферами Сузуки должна сильнее проявляться при высокотемпературном деформировании, когда термические флуктуации способствуют отрыву дислокаций от коттрелловских атмосфер.



Рис. 234. Отрыв дислокации от атмосферы Коттрелла

Если вокруг дислокации существует атмосфера Снука с упорядоченным расположением атомов внедрения в октаэдрических пустотах (см. § 50), то она должна тормозить движение дислокаций, вызывающее нарушение указанной упорядоченности.

2. ТОРМОЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ

В неупорядоченном твердом растворе деформированные области решетки вокруг атомов растворенного элемента, находящихся в плоскости скольжения, затрудняют продвижение дислокации — поле напряжений скользящей дислокации взаимодействует с полем напряжений вокруг атомов растворенного элемента. Чем больше фактор размерного несоответствия атомов растворенного элемента и основы, тем сильнее эти атомы тормозят дислокации.

Другой фактор, обуславливающий торможение дислокаций — несоответствие модулей упругости растворителя и растворенного элемента. Чем больше несоответствие модулей, тем сильнее торможение дислокаций. Дополнительное торможение оказывает ближний порядок в твердом растворе. Прохождение дислокации нарушает ближний порядок в плоскости скольжения, повышая здесь энергию. Поэтому для начала скольжения необходимо приложить большее усилие.

Сопротивление движению дислокаций в разных системах металл — растворенный элемент нарастает пропорционально его концентрации C или \sqrt{C} .

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ К ЧАСТИ 1*

К гл. 1

1. Определите символы осей симметрии куба и постройте их стереографические проекции.

2. Определите символы атомных рядов, заданных следующими парами точек: а) $(0, 1/2, 0)$ и $(1, 1/2, 1)$; б) $(1/2, 0, 0)$ и $(1, 1/2, 1)$; в) $(1/2, 0, 1)$ и $(1, 1, 1/2)$; г) $(-1/2, 0, 1)$ и $(0, 1/2, 1/2)$; д) $(1, 1/2, 1)$ и $(1/2, 1, 1/2)$; е) $(1, 1, 1/2)$ и $(1/2, 1/2, 0)$; ж) $(1, 1/2, 0)$ и $(0, 1/2, 1)$.

3. Постройте наглядное пространственное изображение указанных направлений в кубе: а) $[1\bar{1}0]$; б) $[\bar{1}10]$; в) $[\bar{1}01]$; г) $[10\bar{1}]$; д) $[0\bar{1}1]$; е) $[011]$; ж) $[01\bar{1}]$; з) $[0\bar{1}\bar{1}]$; и) $[111]$; к) $[\bar{1}11]$; л) $[1\bar{1}1]$; м) $[11\bar{1}]$; н) $[\bar{1}\bar{1}1]$; о) $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$; п) $[1\bar{1}\bar{1}]$; р) $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$; с) $[211]$; т) $[\bar{2}11]$; у) $[21\bar{2}]$; ф) $[\bar{2}1\bar{2}]$; х) $[112]$; ч) $[1\bar{1}2]$.

4. Переведите «трехосные» символы направлений в гексагональной призме, указанных в п. 3, в «четырёхосные», и постройте наглядное пространственное изображение этих направлений.

5. Постройте стереографические проекции, а также наглядное пространственное изображение следующих направлений в кубе: а) $[210]$; б) $[2\bar{1}0]$; в) $[021]$; г) $[0\bar{2}1]$; д) $[201]$; е) $[20\bar{1}]$; ж) $[20\bar{1}]$; з) $[120]$; и) $[\bar{1}20]$; к) $[1\bar{2}0]$; л) $[\bar{1}20]$; м) $[100]$; н) $[010]$.

6. Определите символ атомной плоскости по символам двух принадлежащих ей атомных рядов и покажите ее пространственное расположение на примере куба: а) $[210]$ и $[\bar{2}10]$; б) $[120]$ и $[1\bar{1}0]$; в) $[\bar{1}\bar{1}1]$ и $[1\bar{1}\bar{1}]$; г) $[1\bar{1}0]$ и $[110]$; д) $[112]$ и $[211]$.

7. Определите символ атомной плоскости, заданной указанными тремя точками: а) $(0, 0, 1/2)$, $(0, 1/4, 0)$ и $(0, 0, 0)$; б) $(-1/3, 0, 0)$, $(0, 1/2, 0)$ и $(0, 0, 1/2)$; в) $(1/2, 0, 0)$, $(0, 1/2, 0)$ и $(0, 0, 1/4)$; г) $(1/3, 0, 0)$, $(0, 1/2, 0)$ и $(0, 0, 1/2)$; д) $(1, 0, 0)$, $(0, 1/2, 0)$ и $(0, 0, 0)$; е) $(1, 1/2, 1)$, $(1/2, 1, 1)$ и $(1, 1, 1/2)$.

8. С помощью сетки Вульфа постройте стереографические проекции нормалей к атомным плоскостям по стереографическим проекциям направлений, лежащих в данной плоскости и указанных в п. 6.

9. Определите символ атомного ряда, который лежит на линии пересечения двух атомных плоскостей (в качестве символов пересекающихся плоскостей принять значения, приведенные в п. 6).

10. Определите символ нормали к заданной атомной плоскости кубического кристалла: а) (101) ; б) (210) ; в) $(12\bar{3})$; г) (111) ; д) (001) ; е) (112) ; ж) $(11\bar{2})$; з) (221) ; и) $(32\bar{1})$.

11. Решите аналогичную п. 10 задачу для тетрагонального кристалла, приняв $a/c = 1,10$.

12. Решите аналогичную п. 10 задачу для гексагонального кристалла, приняв $a/c = 1,36$.

13. Решите аналогичную п. 10 задачу для гексагональной кристаллической структуры с плотнейшей шаровой упаковкой.

14. Какие общие элементы симметрии содержатся в указанных классах симметрии: а) $3m$ и $m\bar{3}$; б) $m\bar{3}m$ и 432 ; в) $m\bar{3}m$ и 432 ; г) $m\bar{3}m$ и 23 ; д) 432 и $m\bar{3}$?

15. Укажите кубические классы симметрии, которые содержат центр симметрии (C).

* Более полный перечень задач см. в книгах:

1. Розин К. М., Гусев Э. Б. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. М.: Металлургия. 1982. — 166 с.

2. То же, 1985. — 168 с.

16. Приведите наглядное изображение заданных плоскостей (на примере куба): а) (110); б) (111); в) (112); г) (321); д) (1 $\bar{1}$ 0); е) (1 $\bar{1}$ 1); ж) (1 $\bar{1}$ 2).

17. То же (на примере гексагональной призмы) для плоскостей: а) (10 $\bar{1}$ 0); б) (1 $\bar{1}$ 00); в) (2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0); г) (10 $\bar{1}$ 1); д) (10 $\bar{1}$ 2); е) (2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 1); ж) (2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 2).

18. Определите символы атомных плоскостей, которые входят в заданную зону, и постройте стереографические проекции их нормалей: а) [100]; б) [101]; в) [011]; г) [110]; д) [111]; е) [1 $\bar{1}$ 1]; ж) [211].

19. Определите символ оси зоны, в которую входят две указанные атомные плоскости, и укажите символы других плоскостей, входящих в ту же зону: а) (111) и (1 $\bar{1}$ 1); б) (111) и (1 $\bar{1}$ 1); в) (110) и (011); г) (110) и (101); д) (210) и (021); е) (210) и (2 $\bar{1}$ 0); ж) (112) и (1 $\bar{1}$ 2).

20. Какими элементами симметрии можно связать атомные плоскости кубического кристалла, входящие в зону [001] (класс симметрии $m\bar{3}m$)?

21. Решите аналогичную п. 20 задачу для класса симметрии $m\bar{3}$.

22. Определите величины двугранных углов между плоскостями, входящими в совокупность: а) {110}; б) {111}; в) {112}; г) {210} (класс симметрии $m\bar{3}m$).

23. Решите задачу по условию п. 22 для класса симметрии $m\bar{3}$.

24. Решите задачу по условию п. 22 для класса симметрии $43m$.

25. Используя стереографическую проекцию, определите символы смежных граней кристаллического многогранника, образующих указанную ниже совокупность, а также типичные символы ребер: а) {001}; б) {011}; в) {111}; г) {120}; д) {121}; е) {123} (класс симметрии $m\bar{3}m$).

26. Решите задачу по условию п. 25 для класса симметрии $43m$.

27. Используя условия п. 25, определите величины углов между смежными ребрами любой грани кристаллического многогранника и выполните чертеж этой грани.

28. Постройте проекцию элементов симметрии класса симметрии $m\bar{3}m$ с указанной осью проекции: а) [1 $\bar{1}$ 0]; б) [1 $\bar{1}$ 0]; в) [110]; г) [101]; д) [011]; е) [01 $\bar{1}$]; ж) [100]; з) [010]; и) [1 $\bar{1}$ 00]; к) [0 $\bar{1}$ 0]; л) [001]; м) [011]; н) [101]; о) [111]; п) [1 $\bar{1}$ 1]; р) [111]; с) [112]; т) [112]; у) [210]; ф) [210]; х) [321].

29. Решите задачу по условию п. 28 для класса симметрии $m\bar{3}$.

30. Решите задачу по условию п. 28 для класса симметрии $43m$.

31. Решите задачу по условию п. 28 для класса симметрии 432 .

32. На какие углы нужно повернуть указанные ниже направления в кубическом кристалле, чтобы последние могли стать осями проекции: а) [100]; б) [110]; в) [111]; г) [011]; д) [10 $\bar{1}$]; е) [1 $\bar{1}$ 0].

33. Используя условия п. 32, определите символы осей поворота при переходе от исходной проекции с полюсом [001] к заданным проекциям.

34. Пользуясь стереографической проекцией комплекса граней кубического кристалла (рис. 32), запишите соотношения между индексами h , k и l для каждого из диаметров проекции.

К гл. II

35. Укажите компоненты скольжения указанной плоскости скользящего отражения в кубическом кристалле, которая располагается перпендикулярно направлению [100]: а) b ; б) c ; в) a ; г) d .

36. Укажите взаимное расположение атомов в кристаллической структуре α -железа в указанных атомных плоскостях, а также величины межатомных расстояний: а) (001); б) (110); в) (111); г) (211); (период пространственной решетки α -железа $a=0,2866$ нм).

37. Решите аналогичную п. 36 задачу для кристаллической структуры γ -железа (период решетки γ -железа $a=0,3647$ нм).

38. Укажите взаимное расположение атомов в кристаллической структуре магния в указанных атомных плоскостях, а также величины межатомных

расстояний: а) (0001); б) (10 $\bar{1}$ 0); в) (10 $\bar{1}$ 1); г) (10 $\bar{1}$ 2) (периоды пространственной решетки магния: $a=0,3209$ нм; $c=0,5210$ нм).

39. Определите величины межплоскостных расстояний для указанных кристаллических структур: а) α -железа (см. п. 36); б) γ -железа (см. п. 37); в) магния (см. п. 38).

40. Постройте сопряжение указанных атомных плоскостей для эпитаксиальной пары хром/медь: а) (110)||[(111), [1 $\bar{1}$ 1]]|[1 $\bar{1}$ 0]; б) (211)||[(110), [1 $\bar{1}$ 1]]|[110]; в) (110)||[(100), [111]]|[011] (хром о.ц.к., параметр решетки $a=0,2885$ нм; медь г.ц.к., параметр решетки $a=0,3615$ нм).

41. Определите величины относительного несоответствия при сопряжении плоских атомных сеток хрома и меди по указанным в п. 40 направлениям.

42. С помощью теории обратной пространственной решетки определите величину угла между указанными атомными рядами в кристаллической структуре α -железа: а) [1 $\bar{1}$ 1] и [1 $\bar{1}$ 1]; б) [1 $\bar{1}$ 1] и [1 $\bar{1}$ 1]; в) [1 $\bar{1}$ 1] и [1 $\bar{1}$ 1]; г) [1 $\bar{1}$ 1] и [1 $\bar{1}$ 1]; д) [110] и [110]; е) [110] и [101].

43. Определите стехиометрическую формулу тройного соединения, в котором атомы А располагаются в тетраэдрических пустотах, атомы В — в октаэдрических пустотах, атомы С образуют плотнейшую шаровую упаковку (каркас кристаллической структуры), если степени заполнения указанных пустот равны соответственно 1/4 и 1/2.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ К ЧАСТИ 2*

К гл. III

1. Расположите элементы Al, Nb, Ni и Sn в ряд в порядке предположительного возрастания энергии образования вакансий. Дайте необходимые пояснения.

2. При температуре вблизи точки плавления равновесная концентрация вакансий в магнии равна $7,2 \cdot 10^{-4}$. Приблизительно оцените равновесную концентрацию вакансий в магнии при комнатной температуре.

Ответ: $3,7 \cdot 10^{-10}$.

3. Приблизительно оцените энергию образования вакансий в г.ц.к. металле, если экспериментально определенная равновесная концентрация вакансий при 927°C равна $1 \cdot 10^{-8}$.

Ответ: 1,2 эВ.

4. Оцените, на сколько порядков изменится равновесная концентрация вакансий в золоте при повышении температуры с 600 до 1000°C , если при 600°C эта концентрация равна $9,1 \cdot 10^{-6}$.

5. Пренебрегая колебательной энтропией образования вакансий, определите их равновесную концентрацию C_v в серебре в интервале температур 200—1200 К с шагом 200 К. Постройте график C_v — T .

6. Оцените (с учетом колебательной энтропии) внутреннюю энергию, обусловленную наличием вакансий в 1 моле меди при 27 и 1027°C .

Ответ: $4,3 \cdot 10^{-19}$ и $\sim 3,5$ кДж.

7. Равновесная концентрация вакансий в г.ц.к. металле при комнатной температуре равна 10^{-20} . Приблизительно оцените, на сколько порядков концентрация закалочных вакансий при резком охлаждении с 927°C будет больше равновесной их концентрации при комнатной температуре.

* Составлены совместно с В. К. Портным. Необходимые для расчетов сведения приведены в табл. 15—20 и на с. 311. Константа Больцмана $k=8,62 \cdot 10^{-5}$ эВ/К. Число Авогадро — $6,02 \cdot 10^{23}$ моль $^{-1}$.

8. В меди, закаленной с 600 °С, содержится $1,1 \cdot 10^{-5}$ % (ат.) вакансий. Какую температуру закалки следует выбрать, чтобы концентрация вакансий возросла на два порядка?

Ответ: $\sim 1000^\circ \text{C}$.

9. Оцените средние расстояния между равновесными вакансиями в алюминии при 27 °С и между закалочными вакансиями при той же температуре после закалки с 627 °С (при условии, что все высокотемпературные моновакансии «замораживаются» и распределены статистически равномерно).

Ответ: $\sim 1 \text{ мкм}$ и $3,5 \text{ нм}$.

10. Металл содержит 0,1 % (ат.) равномерно распределенной примеси замещения. Определите среднее расстояние между примесными атомами в единицах периода г. ц. к. и о. ц. к. решетки.

Ответ: 6,3 и 7,9а.

11. Приняв энергию образования межузельного атома в меди равной 3 эВ, приблизительно оцените отношение числа вакансий и межузельных атомов в условиях термодинамического равновесия при комнатной температуре и 1000 °С.

12. Во сколько раз различаются частоты перескоков вакансий в алюминии и платине при 500 °С? Примите, что $S_m/k \sim 1$.

13. Энергия активации миграции вакансий в никеле равна 1,50 эВ, а энергия активации самодиффузии 3,03 эВ. Определите отношение равновесной концентрации вакансий при 1027 °С к равновесной концентрации вакансий при 27 °С.

Ответ: $5,8 \cdot 10^{10}$.

14. Чему равна энергия связи вакансий в меди с примесными атомами германия, если температурная зависимость концентрации комплексов вакансий — германий характеризуется энергией активации 1,03 эВ.

Ответ: 0,25 эВ.

15. Энергия связи атомов кремния и серебра с вакансиями в алюминии равна 0,07 и 0,01 эВ соответственно. Пренебрегая различием в энтропийном факторе, определите отношение концентраций комплексов вакансия — кремний и вакансия — серебро в алюминии при 27 °С и одинаковом содержании этих примесей в разбавленном растворе.

Ответ: ~ 10 .

16. Оцените отношение концентрации комплексов вакансия — кремний к концентрации свободных вакансий в алюминии, содержащем 0,01 % (ат.) Si при 27 °С. Энергия связи в комплексе 0,07 эВ. Энтропийный фактор приближенно равен единице. Примите, что концентрации свободных и связанных вакансий независимы (это справедливо для сильно разбавленных растворов).

Ответ: $\sim 2 \cdot 10^{-2}$.

17. В опытах по параллельному измерению длины и периода решетки стержня из алюминия концентрация вакансий при 655 °С оказалась равной $4,9 \cdot 10^{-4}$, а при 620 °С — $3,7 \cdot 10^{-4}$. Определите энергию и энтропию образования вакансий в алюминии.

18. При нагревании серебряного стержня до температуры плавления 961 °С относительное увеличение длины стержня превышает относительное увеличение периода решетки серебра на $5,6 \cdot 10^{-3}$ %. Считая, что вакансионные комплексы отсутствуют и принимая $S_0/k = 1,5$, определите энергию образования вакансий E_0 .

Ответ: 1,08 эВ.

19. При закалке с 700 и 950 °С электросопротивление золота при 78 К становится больше, чем в хорошо отожженном состоянии, на 0,7 и 9,0 % соответственно. Определите по этим данным равновесную концентрацию вакансий в золоте при 827 °С, пренебрегая энтропийным фактором.

Ответ: $1,6 \cdot 10^{-5}$.

20. При температуре, близкой к точке плавления, в стержне из золота равновесная концентрация вакансий составляет $7,2 \cdot 10^{-4}$. При закалке все эти вакансии оказываются «замороженными». При отжиге, восстанавливающим равновесную очень низкую концентрацию вакансий, относительное укорочение стержня составляет $1,1 \cdot 10^{-4}$. Каково изменение периода решетки в процессе этого отжига?

Ответ: $1,3 \cdot 10^{-4}$.

21. Принимая скорость изменения объема при отжиге закаленного образца пропорциональной скорости уменьшения концентрации вакансий, обсудите возможность определения энергии активации миграции вакансий E_m по результатам измерений длины образца при отжиге.

К гл. IV

22. Покажите с помощью построения, аналогичного рис. 128, что вектор Бюргера прямолинейной цепочки межузельных атомов, расположенной в направлении $\langle 100 \rangle$ кубической решетки, равен нулю.

23. В образце алюминия после резкого охлаждения в воде появились дислокационные петли, число которых равно $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, а средний диаметр 30 нм. Оцените концентрацию вакансий при температуре, с которой охлаждался образец.

Ответ: $\sim 10^{-3}$ %.

24. После резкого охлаждения алюминия в воде с 630 °С внутри зерен появляется множество призматических петель, лежащих в плоскостях $\{111\}$, причем в зонах шириной около 1 мкм по обе стороны от границ зерен указанные петли не возникают. Чем обусловлено существование таких зон и как должна влиять скорость охлаждения с 630 °С на их ширину?

25. В медной фольге после ядерного облучения появились дислокационные петли, число которых составило 10^{15} см^{-3} , а средний диаметр равен 40 нм. Оцените концентрацию возникающих при облучении меди точечных дефектов, конденсация которых привела к образованию дислокационных петель.

Ответ: $\sim 10^{-4}$.

26. Покажите с помощью схемы, что круглая призматическая дислокационная петля во время скольжения может стать овальной.

27. Покажите с помощью схемы, что при скольжении призматической дислокационной петли, имевшей в исходном положении краевую ориентацию, могут появиться участки с винтовой ориентацией (допустите, что отдельные участки исходной петли неподвижны).

28. Оцените (в километрах) суммарную длину всех дислокаций в 1 см³ отожженного металла с плотностью дислокаций 10^8 см^{-2} .

К гл. V

29. Калориметрическим методом установлено, что запасенная в результате пластической деформации энергия в алюминиевом образце составляет 0,63 Дж/г. Оцените плотность дислокаций в этом образце.

Ответ: $\sim 10^{11} \text{ см}^{-2}$.

30. Докажите, что для силы, действующей на единицу длины винтовой дислокации, справедливо соотношение (66).

31. Устойчив или неустойчив ряд параллельных винтовых дислокаций в плоскости скольжения?

32. Чему равна сила упругого взаимодействия дислокационной петли, скользящей в плоскости (111) г. ц. к. решетки, и сидячей дислокации Франка в этой же плоскости (о дислокации Франка см. в гл. VI).

33. Докажите, что сила взаимодействия параллельных краевой и винтовой дислокаций равна нулю.

К гл. VI

34. По аналогии с рис. 145 изобразите дефект упаковки внедрения в г. п. решетке.

35. Почему дефект упаковки вычитания в г. п. решетке нельзя получить, ограничившись только изъятием одного плотноупакованного слоя и сближением по нормали двух половинок кристалла?

36. Найдите ошибки в следующих записях?

а) в плоскости $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ г. ц. к. решетки дислокация Франка расщепляется по реакции $a/3 [\bar{1}\bar{1}\bar{1}] = a/6 [011] + a/6 [\bar{2}11]$;

б) находящаяся в плоскости (112) о. ц. к. решетки единичная дислокация расщепляется по реакции $a/2 [\bar{1}\bar{1}\bar{1}] = a/6 [\bar{1}\bar{1}\bar{1}] + a/3 [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$;

в) находящаяся в плоскости (111) г. ц. к. решетки дислокация Шокли расщепляется по реакции $a/6 [2\bar{1}\bar{1}] = a/2 [011] + a/3 [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$;

г) двойнивающая дислокация $a/6 [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ в плоскости $(1\bar{2}\bar{1})$ о. ц. к. решетки образуется под действием напряжений при расщеплении единичной дислокации $a/2 [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, лежащей в плоскости (112): $a/2 [\bar{1}\bar{1}\bar{1}] = a/3 [\bar{1}\bar{1}\bar{2}] + a/6 [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$.

37. Определите кристаллографические индексы направления линии краевой дислокации $b = a/2 [011]$, которая находится в плоскости (111) г. ц. к. решетки.

38. Оцените минимальное число дислокаций, пробег которых через кристалл никеля приводит к образованию ступеньки на поверхности кристалла, различной в световом микроскопе.

Ответ: $\sim 10^3$.

39. Укажите индексы направлений линий краевой и винтовой дислокаций с вектором Бюргерса $1/3 [2\bar{1}\bar{1}0]$ в г. п. решетке.

40. Укажите кристаллографические индексы всех возможных направлений линий единичных краевых дислокаций, скользящих в плоскости (111) г. ц. к. решетки.

41. В плоскости (111) монокристалла алюминия в направлении $[011]$ действует касательное напряжение, равное 20 МПа. Чему равна сила, действующая на единицу длины винтовой дислокации $a/2 [\bar{1}\bar{1}0]$ при скольжении ее в плоскости (111)?

Ответ: $2,8 \cdot 10^{-3}$ Н/м.

42. В плоскости $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ монокристалла меди в направлении $[10\bar{1}]$ действует касательное напряжение, равное 30 МПа. Чему равна сила, действующая на единицу длины винтовой дислокации $a/2 [101]$ при скольжении ее в плоскости $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$?

Ответ: $7,58 \cdot 10^{-2}$ Н/м.

43. Напишите в кристаллографических индексах реакцию расщепления дислокации $1/3 [2\bar{1}\bar{1}0]$ на частичные дислокации в плоскости (0001) г. п. решетки и докажите, что такое расщепление энергетически выгодно.

44. Какие три реакции расщепления единичных дислокаций на дислокации Шокли возможны в плоскости ADC (111) г. ц. к. решетки?

45. Объясните, почему при отжиге закаленного алюминия призматические дислокационные петли сужаются медленнее, чем дислокационные петли Франка.

46. Напишите в символах Томпсона возможные реакции расщепления дислокации с вектором Бюргерса DB на частичные дислокации Шокли и докажите, что эти реакции энергетически выгодны.

47. Напишите в символах Томпсона возможные реакции объединения дислокации Франка, находящейся в плоскости $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, с дислокациями Шокли и докажите, что эти реакции энергетически выгодны.

48. Укажите индексы плоскостей г. ц. к. решетки, в которых может скользить дислокация, образовавшаяся при объединении частичных дислокаций Aa и aB .

49. Дислокация с вектором Бюргерса BD встречает растянутую дислокацию, скользящую в плоскости ADC стандартного тетраэдра. В результате образуется единичная дислокация, которая может скользить в плоскости ABC . Напишите соответствующие дислокационные реакции и докажите, что они энергетически выгодны.

50. Напишите в символах Томпсона возможные реакции образования дислокаций Ломер—Коттрелла при расщеплении дислокации с вектором Бюргерса AB и докажите, что такие реакции энергетически выгодны. Укажите индексы кристаллографического направления линий образующихся вершинных дислокаций.

51. Напишите в символах Томпсона возможные реакции образования дислокаций Ломер—Коттрелла при расщеплении дислокации с вектором Бюргерса BC и укажите индексы кристаллографического направления, вдоль которого находилась расщепившаяся дислокация. Укажите, какой была исходная дислокация: краевой, винтовой или смешанной.

52. Напишите в символах Томпсона реакции образования вершинных дислокаций βa и δu при расщеплении дислокаций Франка и укажите кристаллографические символы направлений линий расщепившихся дислокаций.

53. Почему вершинная дислокация αu не может образоваться при расщеплении дислокации Франка, линия которой лежит вдоль направления $[0\bar{1}\bar{1}]$?

54. Оцените максимально возможную длину ребра тетраэдров дефектов упаковки в закаленном золоте, образующихся в результате диссоциации дислокаций Франка.

Ответ: 53 нм.

55. Тетраэдры дефектов упаковки в закаленных золоте и серебре образуются в результате диссоциации дислокаций Франка. По величине энергии дефектов упаковки приблизительно оцените отношение ребер $(l_{Ag} : l_{Au})$ тетраэдров максимально возможного размера в этих металлах.

Ответ: 2,25.

56. После закалки золота с 930 °С появились тетраэдры дефектов упаковки с длиной ребер 35 нм. Оцените максимально возможную плотность распределения этих тетраэдров.

Ответ: $\sim 5 \cdot 10^{14}$ см⁻³.

57. Напишите в кристаллографических индексах реакцию взаимодействия в г. п. решетке дислокаций $1/3 [\bar{1}\bar{2}\bar{1}0]$ и $1/2 [\bar{1}\bar{1}\bar{2}0]$. Докажите, что эта реакция энергетически выгодна.

58. Какая дислокация может образоваться при встрече скользящих дислокаций $1/3 [\bar{1}\bar{2}\bar{1}0]$ и $1/3 [\bar{1}\bar{2}\bar{1}3]$?

59. Напишите по одной возможной реакции образования дислокации с вектором Бюргерса $a[010]$ из единичных дислокаций минимальной мощности, скользящих в одной и в разных плоскостях о. ц. к. решетки. Чему равен угол между вектором Бюргерса и линией образующейся дислокации во втором случае?

60. Возможно ли поперечное скольжение растянутой дислокации $AB + \delta C$ из плоскости ABC в плоскость ADB тетраэдра Томпсона?

61. Может ли дислокация $a/3 [111]$ совершать поперечное скольжение из плоскости (111) в плоскость $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ г. ц. к. решетки?

62. В кристалле с г. ц. к. решеткой находятся дислокации $a/2 [110]$, $a/2 [011]$, $a/6 [011]$ и $a/6 [0\bar{1}\bar{1}]$. Какие из них могут совершать поперечное скольжение и какое условие для этого необходимо?

63. В кристалле с г. ц. к. решеткой прямолинейная дислокация с вектором Бюргерса $a/2 [011]$ расположена вдоль направления $[211]$. Может ли она совершать поперечное скольжение?

64. Докажите, что в г. п. решетке при встрече скользящих дислокаций BA и AD (см. рис. 175) выгодно образование дислокаций BD .

К гл. VII

65. Перечислите возможные кристаллографические направления порогов на единичной дислокации $a/2 [\bar{1}10]$, скользящей в плоскости $(\bar{1}\bar{1}1)$, при пересечении ее с единичными дислокациями, скользящими в других плоскостях $\{111\}$.

66. Неподвижную дислокацию с вектором Бюргерса AB последовательно пересекают 20 дислокаций DC , скользящих в плоскости ADC . Чему равна (в единицах периода решетки a) длина порога, образующегося на дислокации AB ?

Ответ: $\sim 14a$.

67. В г. п. решетке ($c/a=1,633$) дислокацию $1/3 <\bar{1}2\bar{1}0>$ пересекает дислокация $1/3 <\bar{1}2\bar{1}3>$. Чему равна длина порога, образующегося на дислокации $1/3 <\bar{1}2\bar{1}0>$?

Ответ: $1,915a$.

68. Определите индексы кристаллографического направления порога на $(c+a)$ -дислокации при пересечении ее a -дислокацией в г. п. решетке.

69. В отличие от случая, изображенного на рис. 195, порог на растянутой дислокации с вектором Бюргерса AC может также расщепляться с образованием дислокаций Шокли, лежащих в одной плоскости. Укажите в индексах Томпсона направление такого порога и реакцию его диссоциации.

К гл. IX

70. Сможет ли работать источник Франка — Рида, если в стартовом положении на рис. 200, a будет находиться не краевая, а винтовая дислокация DD' (направление действующих касательных напряжений τ остается тем же)?

71. Рядом с закрепленной по концам винтовой дислокацией изобразите направление, в котором действует критическое касательное напряжение, необходимое для работы источника Франка — Рида.

72. Изобразите схему работы источника Франка — Рида, если в стартовом положении находится винтовая дислокация. Изобразите векторы Бюргерса и действующего напряжения.

73. Оцените, какую долю модуля сдвига составляет критическое касательное напряжение, необходимое для начала пластической деформации, если дислокационная сетка в отожженном кристалле состоит из отрезков длиной порядка 10^4 векторов Бюргерса.

К гл. XI

74. Определите кристаллографические индексы плоскости, в которой находится симметричная малоугловая граница наклона в никеле.

Ответ: $\{110\}$.

75. Определите расстояние между дислокациями в симметричной малоугловой границе наклона в никеле, если угол разориентировки субзерен равен 12° .

Ответ: 70 нм .

76. Ямки травления вдоль малоугловых границ в алюминии на рис. 133 имеют размер порядка 10 мкм . Можно ли при тех же условиях травления выявить на шлифе дислокационное строение симметричных границ наклона, если угол разориентировки соседних субзерен равен 2° ?

77. Две параллельные малоугловые границы наклона с одинаковым углом разворота вокруг общей оси объединяются в одну границу. Докажите, что это объединение приводит к уменьшению энергии.

78. Выведите формулу, связывающую плотность ρ прямолинейных краевых дислокаций на рис. 216, a с радиусом кривизны изогнутого кристалла R .

Ответ: $\rho = 1/bR$.

К гл. XII

79. В меди между двумя частицами оксида циркония проталкивается скользящая дислокация. Оцените максимальную силу, действующую на каждую из частиц.

Ответ: $Gb^2/2$.

80. Оцените критическое напряжение течения для меди с равномерно распределенными в ней сферическими частицами SiO_2 радиусом 10 нм при объемной доле этих частиц, равной $0,1 \%$.

Ответ: 68 МПа .

Ниже приведены периоды решетки a и модули сдвига G некоторых металлов:

Металл	Ag	Au	Cu	Al	Ni
$a, \text{ нм}$	0,408	0,407	0,361	0,404	0,352
$G, \text{ ГПа}$	28	28	42,4	27,6	73

Приложение А. ОПРЕДЕЛЕНИЕ НОРМАЛИ К ПЛОСКОСТИ (hkl)

При решении разнообразных задач возникает необходимость определения символа нормали к атомной плоскости с известным символом (hkl) . Для этого искомым нормаль запишем в виде вектора $\vec{n} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$. Определим значения u, v, w из скалярных произведений вектора \vec{n} на векторы \vec{AB} и \vec{AC} , лежащие в заданной плоскости (hkl) (см. рис. 5):

$$\vec{AB} = \vec{OB} - \vec{OA} = b\vec{b} - a\vec{a} = m(\vec{b}/k - \vec{a}/h);$$

$$\vec{AC} = \vec{OC} - \vec{OA} = c\vec{c} - a\vec{a} = m(\vec{c}/l - \vec{a}/h).$$

Из указанных скалярных произведений получим:

$$u\left(\frac{ab}{k} \cos \gamma - \frac{a^2}{h}\right) + v\left(\frac{b^2}{k} - \frac{ab}{h} \cos \gamma\right) - w\left(\frac{bc}{k} \cos \alpha - \frac{ac}{h} \cos \beta\right) = 0$$

или $uA_1 + vB_1 + wC_1 = 0$, а также

$$u\left(\frac{ac}{l} \cos \beta - \frac{a^2}{h}\right) + v\left(\frac{bc}{l} \cos \alpha - \frac{ab}{h} \cos \gamma\right) + w\left(\frac{c^2}{l} - \frac{ac}{h} \cos \beta\right) = 0$$

или в сокращенной записи $uA_2 + vB_2 + wC_2 = 0$. Здесь α, β, γ — углы между

базисными векторами \bar{a} , \bar{b} , \bar{c} . Объединяя приведенные выражения, найдем искомое отношение индексов нормали:

$$u:v:w = (C_1B_2 - C_2B_1):(A_1C_2 - A_2C_1):(B_1A_2 - B_2A_1).$$

С учетом конкретных значений координатных углов и соотношений между осями единицами:

$$\text{для кубической сингонии} \left(A_1 = A_2 = -\frac{a^2}{h}; C_1 = B_2 = 0; B_1 = \frac{a^2}{k}; C_2 = \frac{a^2}{l} \right): u:v:w = h:k:l$$

$$\text{для тетрагональной сингонии} \left(C_2 = \frac{c^2}{l}, \text{ остальные значения — те же} \right):$$

$$u:v:w = h:k:la^2/c^2$$

$$\text{для гексагональной сингонии} A_1 = -a^2(1/2k - 1/h); C_1 = 0;$$

$$B_1 = a^2(1/k + 1/2h); A_2 = -a^2/h; B_2 = a^2/2h; C_2 = c^2/l);$$

$$u:v:w = (2h+k):(h+2k):\frac{3}{2}\frac{a^2}{c^2}l.$$

Проведенный анализ позволяет отметить замечательную особенность кубических кристаллов, у которых индексы нормали совпадают с индексами соответствующей плоскости.

Для гексагональных структур с плотнейшей шаровой упаковкой отношение осевых единиц принимает вполне конкретное значение ($a^2/c^2 = 3/8$), поэтому для определения индексов нормали применяют выражение:

$$u:v:w = (2h+k):(h+2k):9l/16.$$

Например, для нормали к плоскости $(\bar{1}01)$ гексагонального кристалла [в полной записи в соответствии с выражением (14) символ этой плоскости: $(\bar{1}011)$] получим:

$$u:v:w = \bar{3}2:\bar{1}6:9$$

или в полной записи в соответствии с соотношениями (20):

$$r_1 = 2u - v = \bar{3}2 \cdot 2 - \bar{1}6 = 48;$$

$$r_2 = 2v - u = \bar{1}6 \cdot 2 - \bar{3}2 = 0;$$

$$r_3 = -u - v = -\bar{3}2 - \bar{1}6 = 48;$$

$$r_4 = 3w = 3 \cdot 9 = 27,$$

откуда получим «четырёхосный» символ нормали: $[\bar{1}6; 0; 16; 9]$.

Приложение Б. ОБРАТНАЯ ПРОСТРАНСТВЕННАЯ РЕШЕТКА И РАСЧЕТНЫЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕЖПЛОСКОСТНЫХ РАССТОЯНИЙ И УГЛОВ МЕЖДУ НАПРАВЛЕНИЯМИ

Метод обратной пространственной решетки широко применяют для решения разнообразных задач рентгенографии и физики металлов. В основе метода лежит векторное описание направлений и плоскостей в кристалле, которое обеспечивает решение в самом общем виде сложных пространственных задач.

Из векторного анализа известно, что обратными (или взаимными) называются любые два вектора \bar{r} и \bar{r}^* , скалярное произведение которых равно единице:

$$(\bar{r} \cdot \bar{r}^*) = 1. \quad (B1)$$

Введем векторы \bar{a}^* , \bar{b}^* и \bar{c}^* , каждый из которых является обратным по отношению к одноименному базисному координатному вектору пространственной решетки (\bar{a} , \bar{b} или \bar{c}) (см. § 1):

$$(\bar{a} \cdot \bar{a}^*) = 1; (\bar{b} \cdot \bar{b}^*) = 1; (\bar{c} \cdot \bar{c}^*) = 1. \quad (B2)$$

По аналогии с упомянутой пространственной решеткой, которую в дальнейшем для определенности будем именовать прямой пространственной решеткой, введем понятие об обратной пространственной решетке с базисными координатными векторами \bar{a}^* , \bar{b}^* и \bar{c}^* . Определенная таким образом обратная пространственная решетка обладает всеми свойствами обычной пространственной решетки. Если прямая пространственная решетка служила для описания закономерного, периодического расположения атомов в кристалле, то обратная пространственная решетка описывает периодическое пространственное расположение дифракционных максимумов, возникающих в результате прохождения через кристалл рентгеновского излучения.

В соответствии с указанным определением (B2) базисные векторы обратной пространственной решетки можно записать в следующем виде:

$$\bar{a}^* = \frac{[\bar{b} \cdot \bar{c}]}{([\bar{b} \cdot \bar{c}] \bar{a})}; \quad \bar{b}^* = \frac{[\bar{c} \cdot \bar{a}]}{([\bar{c} \cdot \bar{a}] \bar{b})}; \quad \bar{c}^* = \frac{[\bar{a} \cdot \bar{b}]}{([\bar{a} \cdot \bar{b}] \bar{c})}. \quad (B3)$$

Записанные в знаменателях скалярно-векторные произведения равны друг другу, поскольку являются определениями инвариантной величины — объема элементарного параллелепипеда прямой пространственной решетки V :

$$([\bar{b} \cdot \bar{c}] \bar{a}) = ([\bar{c} \cdot \bar{a}] \bar{b}) = ([\bar{a} \cdot \bar{b}] \bar{c}) = V. \quad (B4)$$

Для расчета ближайших расстояний между соседними параллельными идентичными атомными плоскостями — межплоскостных расстояний используют вектор обратной решетки $\bar{r}^*(hkl) = h\bar{a}^* + k\bar{b}^* + l\bar{c}^*$, обладающий следующими замечательными свойствами. Во-первых, этот вектор ориентируется в пространстве перпендикулярно плоскости кристалла, имеющей символ (hkl) , т. е. может служить нормалью плоскости (hkl) . Во-вторых, длина этого вектора обратной решетки равна обратной величине соответствующего межплоскостного расстояния.

Для доказательства первого свойства рассмотрим рис. 5, где показана плоскость ABC в кристалле, которая отсекает на координатных осях OX , OY и OZ отрезки соответственно OA , OB и OC . Учитывая, что длина указанных отрезков измеряется целым числом соответствующих базисных векторов прямой пространственной решетки:

$$\overline{OA} = a \cdot \bar{a}; \quad \overline{OB} = b \cdot \bar{b}; \quad \overline{OC} = c \cdot \bar{c}, \quad (B5)$$

запишем условие перпендикулярности нормали к плоскости ABC как равенство нулю двух скалярных произведений:

$$(\bar{n} \cdot \overline{AB}) = 0; \quad (\bar{n} \cdot \overline{AC}) = 0, \quad (B6)$$

поскольку векторы \overline{AB} и \overline{AC} лежат в заданной плоскости ABC . Выразив векторы \overline{AB} и \overline{AC} с помощью (B5)

$$\overline{AB} = \overline{OB} - \overline{OA} = b \cdot \bar{b} - a \cdot \bar{a}; \quad \overline{AC} = \overline{OC} - \overline{OA} = c \cdot \bar{c} - a \cdot \bar{a}$$

и используя в качестве вектора-нормали вектор обратной пространственной решетки $\vec{r}^*(hkl)$, подставим их выражения в (Б6):

$$\left. \begin{aligned} (\vec{AB} \cdot \vec{r}^*(hkl)) &= (b \cdot \vec{b} - a \cdot \vec{a}) \cdot (\vec{h}\vec{a}^* + \vec{k}\vec{b}^* + \vec{l}\vec{c}^*) = 0; \\ (\vec{AC} \cdot \vec{r}^*(hkl)) &= (c \cdot \vec{c} - a \cdot \vec{a}) \cdot (\vec{h}\vec{a}^* + \vec{k}\vec{b}^* + \vec{l}\vec{c}^*) = 0. \end{aligned} \right\} \quad (B7)$$

Учитывая, что скалярные произведения одноименных векторов прямой и обратной пространственных решеток в силу определения (Б2) равны единице, а скалярные произведения соответствующих разноименных векторов обращаются в нуль вследствие их перпендикулярности, получим, что условие (Б7) выполняется, если:

$$ha = kb; \quad ha = lc. \quad (B8)$$

Объединив оба равенства (Б8), получим известное фундаментальное соотношение для определения индексов плоскости по параметрам

$$h:k:l = \frac{1}{a} : \frac{1}{b} : \frac{1}{c}, \quad (B9)$$

которое полностью совпадает с выражением (6). Таким образом мы доказали, что вектор обратной решетки $\vec{r}^*(hkl)$ совпадает с нормалью к плоскости (hkl) .

Для доказательства второго замечательного свойства вектора $\vec{r}^*(hkl)$ рассмотрим элементарный параллелепипед прямой примитивной пространственной решетки, вершина которого совпадает с началом координат, а основание параллельно плоскости с символом (hkl) (рис. 235). Искомое межплоскостное расстояние для плоскостей (hkl) совпа-

Рис. 235. Схема для определения межплоскостного расстояния

дает с высотой этого параллелепипеда. Определим ребра основания параллелепипеда с помощью радиусов-векторов \vec{r}_1 и \vec{r}_2 :

$$\vec{r}_1 = u_1\vec{a} + v_1\vec{b} + w_1\vec{c}; \quad \vec{r}_2 = u_2\vec{a} + v_2\vec{b} + w_2\vec{c}. \quad (B10)$$

Нормаль к основанию параллелепипеда найдем из векторного произведения:

$$\begin{aligned} [\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2] &= (u_1\vec{a} + v_1\vec{b} + w_1\vec{c}) \cdot (u_2\vec{a} + v_2\vec{b} + w_2\vec{c}) = \\ &= [\vec{b} \cdot \vec{c}] (v_1w_2 - v_2w_1) + [\vec{c} \cdot \vec{a}] (w_1u_2 - w_2u_1) + [\vec{a} \cdot \vec{b}] (u_1v_2 - u_2v_1). \end{aligned} \quad (B11)$$

Заменяя в (Б11) векторные произведения векторами обратной пространственной решетки по соотношениям (Б3) и (Б4) и выражения в скобках — индексами h , k и l в соответствии с известным соотношением между символами граней и ребер кристалла (6)

$$(v_1w_2 - v_2w_1) = h; \quad (w_1u_2 - w_2u_1) = k; \quad (u_1v_2 - u_2v_1) = l,$$

получим

$$[\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2] = V \{ \vec{h}\vec{a}^* + \vec{k}\vec{b}^* + \vec{l}\vec{c}^* \}. \quad (B12)$$

Исходя из геометрического смысла векторного произведения в выражении (Б12), который сводится к площади основания элементарного параллелепипеда, можно заключить, что модуль указанного вектора обратной решетки равен обратной величине межплоскостного расстояния $d(hkl)$, что и требовалось доказать:

$$d(hkl) = \frac{1}{|\vec{h}\vec{a}^* + \vec{k}\vec{b}^* + \vec{l}\vec{c}^*|} = \frac{1}{|\vec{r}^*(hkl)|}. \quad (B13)$$

В соответствии с последним выражением можно представить величину межплоскостного расстояния для кристаллической структуры с примитивной пространственной решеткой в квадратичной форме

$$1/d^2(hkl) = (\vec{h}\vec{a}^* + \vec{k}\vec{b}^* + \vec{l}\vec{c}^*) \cdot (\vec{h}\vec{a}^* + \vec{k}\vec{b}^* + \vec{l}\vec{c}^*), \quad (B14)$$

определив квадрат модуля вектора обратной решетки как результат скалярного произведения этого вектора на себя же. Из общего выражения (Б14) можно получить конкретные соотношения для определения межплоскостных расстояний в примитивных кристаллических структурах различных сингоний, из которых упомянем лишь некоторые.

Величина межплоскостных расстояний равна: для примитивных кубических структур

$$1/d^2(hkl) = (h^2 + k^2 + l^2)/a_0^2; \quad (B15)$$

для примитивных тетрагональных структур

$$1/d^2(hkl) = (h^2 + k^2)/a_0^2 + l^2/c_0^2; \quad (B16)$$

для гексагональных структур

$$1/d(hkl) = 4(h^2 + hk + k^2)/3a_0^2 + l^2/c_0^2. \quad (B17)$$

Для определения межплоскостных расстояний в непримитивных кристаллических структурах можно воспользоваться выражениями (Б15), (Б16) и (Б17), вводя в них поправочные множители в следующих случаях:

- в объемноцентрированных кристаллических структурах значения индексов h , k , l следует удвоить, если сумма трех индексов — четная;
- в гранецентрированных кристаллических структурах значения индексов удваивают, если один из индексов — нечетный;
- в базоцентрированных кристаллических структурах значения индексов при подстановке в расчетную формулу следует удвоить, если сумма $(h+k)$ нечетная.

Благодаря упомянутым замечательным свойствам вектора $\vec{r}^*(hkl)$ можно сформулировать следующий способ построения обратной пространственной решетки, сопряженной с соответствующей прямой пространственной решеткой. Чтобы найти узел обратной пространственной решетки, который соответствует данному семейству параллельных атомных плоскостей (hkl) , выбирают произвольную точку O^* , принимаемую за начало координат обратной пространственной решетки, и проводят из нее вектор $\vec{r}^*(hkl)$. При этом направление этого вектора должно быть параллельным нормали семейства плоскостей (hkl) , а его длину выбирают равной обратной величине межплоскостного расстояния $d(hkl)$. Тогда конец этого вектора будет совпадать с искомым узлом обратной пространственной решетки, соответствующим положению первого дифракционного максимума для семейства атомных плоскостей (hkl) . Положение каждого следующего дифракционного максимума можно определить, перенося указанный вектор вперед параллельно самому себе таким образом, чтобы его начальная точка совпала с конечной точкой исходного вектора — с предшествующим узлом обратной пространственной решетки.

Таким образом, каждому семейству атомных плоскостей (hkl) кристаллической структуры соответствует узловой ряд обратной пространственной решетки, а каждому узлу обратной пространственной решетки — определенное семейство плоскостей (hkl) . Для построения обратной пространственной решетки указанным методом обычно вполне достаточно выбрать атомные плоскости типа $\{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$, поскольку при этом однозначно определяются как положения узлов пространственной решетки, так и ее тип. Построив векторы обратной решетки для указанных атомных плоскостей, можно показать, что прямая гранецентрированная пространственная решетка

сопряжена с обратной объемноцентрированной пространственной решеткой, а прямая объемноцентрированная пространственная решетка оказывается сопряженной с обратной гранцентрированной пространственной решеткой.

В простейшем случае примитивной прямой пространственной решетки сопряженная с ней обратная пространственная решетка также оказывается примитивной. На рис. 236, б приведен фрагмент горизонтальной узловой сетки примитивной обратной пространственной решетки. Каждый из узлов этой сетки соответствует семейству вертикальных атомных плоскостей кристаллической структуры (рис. 236, а). На лучах, проведенных из начала координат обратной пространственной решетки 0^* , последовательно располагаются узлы, соответствующие одному и тому же семейству параллельных атомных плоскостей кристаллической структуры. При этом символ узла обратной пространственной решетки получают из символа соответствующей

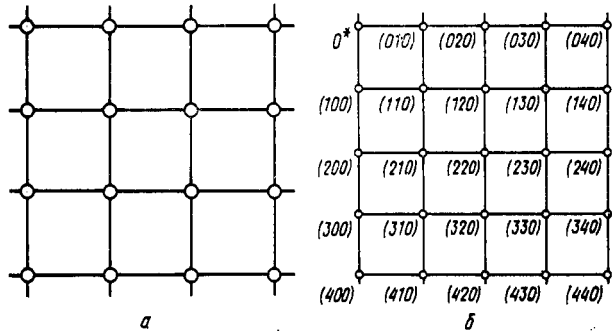


Рис. 236. Кристаллическая структура (а) и сопряженная с ней обратная пространственная решетка (б)

атомной плоскости, умножая индексы последнего на номер порядка дифракционного максимума. Так, для дифракционных максимумов семейства параллельных атомных плоскостей (110) последовательно записываются символы (110), (220), (330) и т. д., для узлов обратной пространственной решетки, соответствующих семейству атомных плоскостей (010), последовательно указывают символы (010), (020), (030), (040) и т. д.

С помощью обратной пространственной решетки можно определить значения углов между двумя атомными плоскостями в кристалле: $(h_1 k_1 l_1)$ и $(h_2 k_2 l_2)$. Если для каждой из заданных плоскостей построить вектор обратной пространственной решетки $\vec{r}_1^*(h_1 k_1 l_1)$ и $\vec{r}_2^*(h_2 k_2 l_2)$, то угол между нормальными к заданным плоскостям можно найти из скалярного произведения указанных векторов:

$$\cos \varphi = (\vec{r}_1^* \cdot \vec{r}_2^*) / |\vec{r}_1^*| |\vec{r}_2^*|. \quad (\text{Б18})$$

Из общего выражения (Б18) можно получить конкретные соотношения для определения углов между любыми атомными плоскостями в кристаллических структурах различных сингоний, из которых приведем лишь некоторые.

Угол между нормальными к плоскостям $(h_1 k_1 l_1)$ и $(h_2 k_2 l_2)$ равен: для кубической сингонии

$$\cos \varphi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}; \quad (\text{Б19})$$

для тетрагональной сингонии

$$\cos \varphi = \frac{\frac{1}{a_0^2} (h_1 h_2 + k_1 k_2) + \frac{1}{c_0^2} l_1 l_2}{\sqrt{\frac{1}{a_0^2} (h_1^2 + k_1^2) + \frac{l_1^2}{c_0^2}} \sqrt{\frac{1}{a_0^2} (h_2^2 + k_2^2) + \frac{l_2^2}{c_0^2}}}; \quad (\text{Б20})$$

для гексагональной сингонии

$$\cos \varphi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + \frac{1}{2} (h_1 k_2 + h_2 k_1) + \frac{3a_0^2}{4c_0^2} l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + h_1 k_1 + \frac{3a_0^2}{4c_0^2} l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + h_2 k_2 + \frac{3a_0^2}{4c_0^2} l_2^2}}. \quad (\text{Б21})$$

Приложение В. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ СИМВОЛОВ НАПРАВЛЕНИЙ И ПЛОСКОСТЕЙ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ВЫБОРА ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ

Иногда при исследовании кристалла оказывается целесообразным перейти от базиса $\vec{a}_1, \vec{b}_1, \vec{c}_1$ к базису $\vec{a}_2, \vec{b}_2, \vec{c}_2$, т. е. выбрать в той же кристаллической структуре другую элементарную ячейку. В этом случае вместо прежнего символа атомной плоскости $(h_1 k_1 l_1)$ мы должны определить новый ее символ $(h_2 k_2 l_2)$, а вместо прежнего символа направления $[u_1 v_1 w_1]$ найти новый символ $[u_2 v_2 w_2]$.

Запишем выражения для новых базисных векторов:

$$\vec{a}_2 = a_{21} \vec{a}_1 + a_{22} \vec{b}_1 + a_{23} \vec{c}_1;$$

$$\vec{b}_2 = b_{21} \vec{a}_1 + b_{22} \vec{b}_1 + b_{23} \vec{c}_1;$$

$$\vec{c}_2 = c_{21} \vec{a}_1 + c_{22} \vec{b}_1 + c_{23} \vec{c}_1.$$

Поскольку при указанном преобразовании значения межплоскостных расстояний оказываются инвариантными, запишем это условие в виде равенства соответствующих векторов обратных пространственных решеток:

$$h_1 \vec{a}_1^* + k_1 \vec{b}_1^* + l_1 \vec{c}_1^* = h_2 \vec{a}_2^* + k_2 \vec{b}_2^* + l_2 \vec{c}_2^*.$$

Умножим скалярно каждый из членов этого равенства на вектор \vec{a}_2 :

$$h_1 \vec{a}_1^* \vec{a}_2 + k_1 \vec{b}_1^* \vec{a}_2 + l_1 \vec{c}_1^* \vec{a}_2 = h_2 \vec{a}_2^* \vec{a}_2 + k_2 \vec{b}_2^* \vec{a}_2 + l_2 \vec{c}_2^* \vec{a}_2.$$

Подставив значение вектора \vec{a}_2 , получим выражение для h_2 :

$$h_2 = h_1 a_{21} + k_1 a_{22} + l_1 a_{23}.$$

Аналогичным образом в результате скалярного умножения на векторы \vec{b}_2 и \vec{c}_2 получим выражения для k_2 и l_2 :

$$k_2 = h_1 b_{21} + k_1 b_{22} + l_1 b_{23};$$

$$l_2 = h_1 c_{21} + k_1 c_{22} + l_1 c_{23}.$$

Полученное решение задачи можно представить в виде матрицы преобразования индексов плоскости, которая полностью идентична матрице преобразования базисных векторов:

$$\begin{vmatrix} h_2 \\ k_2 \\ l_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{vmatrix}.$$

Пример 1. Определим символ атомной плоскости тетрагонального кристалла (100) при переходе от базоцентрированной элементарной ячейки с базисом a_1, \bar{b}_1, c_1 к примитивной элементарной ячейке с базисом a_2, \bar{b}_2, c_2 (рис. 237). Запишем выражения для новых базисных векторов

$$\bar{a}_2 = \frac{1}{2} \bar{a}_1 - \frac{1}{2} \bar{b}_1; \quad \bar{b}_2 = \frac{1}{2} \bar{a}_1 + \frac{1}{2} \bar{b}_1; \quad \bar{c}_2 = \bar{c}_1,$$

чему соответствует матрица перехода

$$\begin{vmatrix} \bar{a}_2 \\ \bar{b}_2 \\ \bar{c}_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \bar{a}_1 \\ \bar{b}_1 \\ \bar{c}_1 \end{vmatrix}.$$

С помощью данной матрицы найдем символ заданной атомной плоскости в новых координатах:

$$\begin{aligned} h : k : l &= (h_1 \cdot 1/2 + k_1 \cdot (-1/2) + \\ &+ l_1 \cdot 0) : (h_1 \cdot 1/2 + k_1 \cdot 1/2 + \\ &+ l_1 \cdot 0) : (h_1 \cdot 0 + k_1 \cdot 0 + l_1 \cdot 1) = \\ &= (1 \cdot 1/2) : (1 \cdot 1/2) : (0) = 1 : 1 : 0. \end{aligned}$$

Рис. 237. Изменение положения осей координат при переходе от базоцентрированной к примитивной элементарной ячейке в тетрагональном кристалле

Таким образом получаем новый символ атомной плоскости (110). **Пример 2.** Определим символ атомной плоскости (100) в гексагональном кристалле при повороте осей координат вокруг вертикальной оси на 30° (рис. 238).

Определим новые базисные векторы

$$\bar{a}_2 = \bar{a}_1 + \bar{b}_1 \cdot 1/2; \quad \bar{b}_2 = -\bar{a}_1/2 + \bar{b}_1 \cdot 1/2; \quad \bar{c}_2 = \bar{c}_1$$

и запишем матрицу преобразования

$$\begin{vmatrix} h_2 \\ k_2 \\ l_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 1/2 & 0 \\ -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{vmatrix}.$$

Найдем новый символ заданной атомной плоскости:

$$\begin{aligned} h_2 : k_2 : l_2 &= (h_1 \cdot 1 + k_1 \cdot 1/2 + l_1 \cdot 0) : (h_1 \cdot (-1/2) + k_1 \cdot 1/2 + \\ &+ l_1 \cdot 0) : (h_1 \cdot 0 + k_1 \cdot 0 + l_1 \cdot 1) = (1 \cdot 1) : (1 \cdot (-1/2)) : (0 \cdot 1) = 2 : \bar{1} : 0. \end{aligned}$$

В результате получили искомый символ плоскости ($2\bar{1}0$) или в полной записи ($2\bar{1}10$).

Теперь определим связь между старым $[u_1 v_1 w_1]$ и новым $[u_2 v_2 w_2]$ символами направления в кристалле при замене базиса. Для этого разложим векторы старого базиса a_1, \bar{b}_1, c_1 по новым базисным векторам a_2, \bar{b}_2, c_2 :

$$\begin{aligned} \bar{a}_1 &= a_{11} \bar{a}_2 + a_{12} \bar{b}_2 + a_{13} \bar{c}_2; \\ \bar{b}_1 &= b_{11} \bar{a}_2 + b_{12} \bar{b}_2 + b_{13} \bar{c}_2; \\ \bar{c}_1 &= c_{11} \bar{a}_2 + c_{12} \bar{b}_2 + c_{13} \bar{c}_2. \end{aligned}$$

Далее преобразуем соответствующую матрицу перехода, меняя для этого местами ее строчки и столбцы (эту операцию называют транспонированием), и получаем окончательную запись в матричном виде для определения нового символа направления — после замены базиса:

$$\begin{vmatrix} u_2 \\ v_2 \\ w_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} \cdot b_{11} \cdot c_{11} \\ a_{12} \cdot b_{12} \cdot c_{12} \\ a_{13} \cdot b_{13} \cdot c_{13} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} u_1 \\ v_1 \\ w_1 \end{vmatrix}$$

В соответствии с этой записью новые индексы направления можно найти из следующих отношений:

$$u_2 : v_2 : w_2 = (u_1 a_{11} + v_1 b_{11} + w_1 c_{11}) : (u_1 a_{12} + v_1 b_{12} + w_1 c_{12}) : (u_1 a_{13} + v_1 b_{13} + w_1 c_{13}).$$

Пример 3. Определим, как изменится символ направления $[101]$ в тетрагональном кристалле после указанного выше перехода от базоцентрированной пространственной решетки (с базисными векторами a_1, \bar{b}_1, c_1) к примитивной пространственной решетке (с базисными векторами a_2, \bar{b}_2, c_2 — см. рис. 237).

Разложим старые векторы по новым:

$$\bar{a}_1 = \bar{a}_2 + \bar{b}_2; \quad \bar{b}_1 = -\bar{a}_2 + \bar{b}_2; \quad \bar{c}_1 = \bar{c}_2$$

и запишем матрицу преобразования в транспонированном виде:

$$\begin{vmatrix} u_2 \\ v_2 \\ w_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} u_1 \\ v_1 \\ w_1 \end{vmatrix}.$$

Выполнив указанное преобразование, получаем новый символ направления в кристалле: $[111]$.

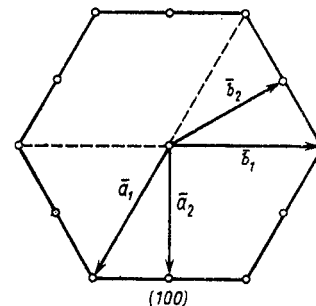


Рис. 238. Изменение положения осей координат в гексагональном кристалле при повороте вокруг вертикальной оси на 30° град

Приложение Г. ПОСТРОЕНИЕ СТАНДАРТНЫХ СТЕРЕОГРАФИЧЕСКИХ ПРОЕКЦИЙ

При решении большинства задач мы использовали наиболее употребительную стереографическую проекцию с полюсом $[001]$ (например, на рис. 18, 32, 33). Рассмотрим построение стереографической проекции с другим полюсом, или ося проекции.

Для построения проекции с осью, отличающейся от $[001]$, необходимо выполнить следующие операции.

1. Построить с помощью сетки Вульфа исходную стереографическую проекцию заданных направлений (или элементов симметрии) с осью $[001]$.
2. Обозначить там же положение новой оси проекции $[uvw]$.
3. Определить символ оси вращения $\pm[uvw]$ и необходимый угол поворота δ для перехода от исходной стереографической проекции с осью $[001]$ к заданной (указанный символ определяют перекрестным перемножением символов исходной и новой осей проекции).
4. Нанести на контур круга проекции выходы оси вращения $\pm[uvw]$.
5. Совместить выходы оси вращения $\pm[uvw]$ с полюсами сетки Вульфа.

6. Через выходы оси вращения и исходную проекцию каждого заданного направления $[u_i v_i w_i]$ провести меридиональные дуги.

7. Измерить по меридиональной дуге угол ξ_i между проекцией заданного направления $[u_i v_i w_i]$ и ближайшим выходом оси вращения.

8. По горизонтальному диаметру сетки Вульфа отложить от каждой исходной меридиональной дуги необходимый угол поворота δ (см. п. 3) и провести новые меридиональные дуги.

9. По каждой новой меридиональной дуге отложить соответствующий угол ξ_i (см. п. 7) от выхода оси вращения до искомой проекции каждого заданного направления.

Примеры различных стереографических проекций осей симметрии класса симметрии $m\bar{3}m$ приведены на рис. 82, а—в.

Приложение Д. ФОРМУЛЫ ДЛЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

1. Определение символа направления:

а) по компонентам радиуса-вектора $\bar{r} = m\bar{a} + n\bar{b} + p\bar{c}$:

$u : v : w = m : n : p$ (где u, v, w — взаимно-простые целые числа);

б) по проекциям отрезка MN на оси координат:

$u : v : w = MN_X/a_0 : MN_Y/b_0 : MN_Z/c_0$ (где a_0, b_0, c_0 — масштабные единицы по осям OX, OY, OZ);

в) по координатам двух точек: $M_1 [[m_1; n_1; p_1]]$ и $M_2 [[m_2; n_2; p_2]]$ выраженных в масштабных (осевых) единицах:

$$u : v : w = \pm (m_2 - m_1) : (n_2 - n_1) : (p_2 - p_1);$$

г) по направляющим косинусам углов λ, μ, ν с осями координат OX, OY, OZ :

$$u : v : w = \cos \lambda / a_0 : \cos \mu / b_0 : \cos \nu / c_0;$$

д) по символам двух пересекающихся плоскостей: $(h_1 k_1 l_1)$ и $(h_2 k_2 l_2)$:

$$u : v : w = \pm (k_1 l_2 - k_2 l_1) : (l_1 h_2 - l_2 h_1) : (h_1 k_2 - h_2 k_1);$$

е) переход от символов $[uvw]$ к символам $[r_1 r_2 r_3 r_4]$ (для гексагональных и тригональных кристаллов) и обратно:

$$r_1 = 2u - v; r_2 = 2v - u; r_3 = -u - v; r_4 = 3w;$$

$$u = (2r_1 + r_2)/3; v = (r_1 + 2r_2)/3; w = r_4/3;$$

ж) переход от символов $[S_1 S_2 S_3]$ (в R -установке) к символам $[r_1 r_2 r_3 r_4]$ (для гексагональных и тригональных кристаллов) и обратно:

$$r_1 : r_2 : r_3 : r_4 = (S_1 - S_2) : (S_2 - S_3) : (S_3 - S_1) : (S_1 + S_2 + S_3)$$

$$S_1 : S_2 : S_3 = (r_1 - r_3 + r_4) : (r_2 - r_1 + r_4) : (r_3 - r_2 - r_4);$$

з) изменение символа направления при замене базиса $(\bar{a}_1, \bar{b}_1, \bar{c}_1)$ на $(\bar{a}_2, \bar{b}_2, \bar{c}_2)$:

$$u_2 : v_2 : w_2 = (u_1 a_{11} + v_1 b_{11} + w_1 c_{11}) : (u_1 a_{12} + v_1 b_{12} + w_1 c_{12}) :$$

$$: (u_1 a_{13} + v_1 b_{13} + w_1 c_{13}),$$

где a_{1i}, b_{1i}, c_{1i} — коэффициенты разложения старых базисных векторов: $\bar{a}_1, \bar{b}_1, \bar{c}_1$ — по новым базисным векторам $\bar{a}_2, \bar{b}_2, \bar{c}_2$:

$$\bar{a}_1 = a_{11}\bar{a}_2 + a_{12}\bar{b}_2 + a_{13}\bar{c}_2;$$

$$\bar{b}_1 = b_{11}\bar{a}_2 + b_{12}\bar{b}_2 + b_{13}\bar{c}_2;$$

$$\bar{c}_1 = c_{11}\bar{a}_2 + c_{12}\bar{b}_2 + c_{13}\bar{c}_2.$$

2. Определение символа плоскости (hkl)

а) по отрезкам, отсекаемым плоскостью на осях координат:

$$h : k : l = \frac{1}{OA/a_0} : \frac{1}{OB/b_0} : \frac{1}{OC/c_0};$$

б) по отношению отрезков, отсекаемых на осях координат определяемой плоскостью (OA, OB, OC) и «единичной» плоскостью (111) (OA_1, OB_1, OC_1) :

$$h : k : l = \frac{1}{OA/OA_1} : \frac{1}{OB/OB_1} : \frac{1}{OC/OC_1};$$

в) по координатам трех точек, выраженных в осевых единицах:

$$h : k : l = \pm \begin{vmatrix} 1n_1p_1 \\ 1n_2p_2 \\ 1n_3p_3 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} m_1p_1 \\ m_2p_2 \\ m_3p_3 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} m_1n_1 \\ m_2n_2 \\ m_3n_3 \end{vmatrix};$$

г) по направляющим косинусам углов λ, μ, ν между нормалью и осями координат OX, OY, OZ соответственно:

$$h : k : l = a_0 \cos \lambda : b_0 \cos \mu : c_0 \cos \nu;$$

д) по символам двух направлений, параллельных определяемой плоскости

$$h : k : l = \pm (v_1 w_2 - v_2 w_1) : (w_1 u_2 - w_2 u_1) : (u_1 v_2 - u_2 v_1);$$

е) переход от символов $(R_1 R_2 R_3)$ (в R -установке) к символам (hkl) (в H -установке) и обратно (для гексагональных и тригональных кристаллов):

$$h : k : l = (R_1 - R_2) : (R_2 - R_3) : (R_3 - R_1) : (R_1 + R_2 + R_3)$$

$$R_1 : R_2 : R_3 = (h - i + l) : (k - h + l) : (i - k + l);$$

ж) изменение символа плоскости при замене базиса $(\bar{a}_1, \bar{b}_1, \bar{c}_1)$ на $(\bar{a}_2, \bar{b}_2, \bar{c}_2)$:

$$h_2 : k_2 : l_2 = (h_1 a_{21} + k_1 a_{22} + l_1 a_{23}) : (h_1 b_{21} + k_1 b_{22} + l_1 b_{23}) :$$

$$: (h_1 c_{21} + k_1 c_{22} + l_1 c_{23}),$$

где a_{2i}, b_{2i}, c_{2i} — коэффициенты разложения новых базисных векторов $\bar{a}_2, \bar{b}_2, \bar{c}_2$ по старым базисным векторам $\bar{a}_1, \bar{b}_1, \bar{c}_1$:

$$\bar{a}_2 = a_{21}\bar{a}_1 + a_{22}\bar{b}_1 + a_{23}\bar{c}_1;$$

$$\bar{b}_2 = b_{21}\bar{a}_1 + b_{22}\bar{b}_1 + b_{23}\bar{c}_1;$$

$$\bar{c}_2 = c_{21}\bar{a}_1 + c_{22}\bar{b}_1 + c_{23}\bar{c}_1.$$

3. Условие параллельности направления $[uvw]$ и плоскости (hkl) (или условие вхождения плоскости (hkl) в зону $[uvw]$):

$$hu + kv + lw = 0.$$

4. Объем элементарной ячейки кристаллической структуры:

$$V = ([\bar{b}\bar{c}]\bar{a}) = ([\bar{c}\bar{a}]\bar{b}) = ([\bar{a}\bar{b}]\bar{c}).$$

5. Определение вектора — нормали к плоскости (hkl) :

$$\vec{r}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*.$$

где $a^* = [\bar{b}\bar{c}] : V$, $b^* = [\bar{c}\bar{a}] : V$, $c^* = [\bar{a}\bar{b}] : V$ — базисные векторы обратной пространственной решетки — см. Приложение Г).

6. Период идентичности вдоль направления $[uvw]$:

в кубическом кристалле $I = a_0(u^2 + v^2 + w^2)^{1/2}$;

в ромбическом кристалле $I = (a_0^2u^2 + b_0^2v^2 + c_0^2w^2)^{1/2}$;

в гексагональном кристалле $I = (a_0^2u^2 + a_0^2v^2 - a_0^2uv + c_0^2w^2)^{1/2}$;

в тетрагональном кристалле $I = (a_0^2u^2 + a_0^2v^2 + c_0^2w^2)^{1/2}$.

Формулы для расчета межплоскостных расстояний и углов между направлениями в кристалле см. в Приложении Г.

Приложение Е. КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА МЕТАЛЛОВ, НЕМЕТАЛЛОВ И ДВОЙНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

В табл. 1 и 2 приведены сведения о кристаллических структурах металлов и неметаллов, используемых в производстве металлических материалов, а также о структурах двойных соединений, которые встречаются в промышленных и близких к ним по составу сплавах.

Наиболее полные сведения о кристаллической структуре двойных и многокомпонентных соединений можно найти в справочнике P. Villars, L. D. Calvert «Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases», USA, 1985,—3258 p.

Таблица 1. Кристаллические структуры металлов и неметаллов

Элемент	Модификация	Пространственная группа	Тип решетки	Периоды решетки при 20 °С, нм	
				a	c
1	2	3	4	5	6
Ag	—	<i>Fm3m</i>	ГЦК	0,40853	—
Al	—	<i>Fm3m</i>	ГЦК	0,40488	—
As	—	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,37598	1,05475
Au	—	<i>Fm3m</i>	ГЦК	0,40789	—
Ba	—	<i>Im3m</i>	ОЦК	0,501	—
Be	α (<1254 °С) β (>1254 °С)	<i>P6₃/mmc</i> <i>Im3m</i>	ГП ОЦК	0,22858	0,35843
Bi	—	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,45460	1,1862
C	Графит	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,2464	0,6711
	Алмаз	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,35669	—
Cd	—	<i>P6₃/mmc</i>	ГП	0,29787	0,56166
Co	α (<400 °С) β (>400 °С)	<i>P6₃/mmc</i> <i>Fm3m</i>	ГП ГЦК	0,25071	0,40695
Cr	—	<i>Im3m</i>	ОЦК	0,2884	—
Cu	—	<i>Fm3m</i>	ГЦК	0,36148	—
Fe	α (<911 °С) γ (911—1392 °С) δ (>1392 °С)	<i>Im3m</i> <i>Fm3m</i> <i>Im3m</i>	ОЦК ГЦК ОЦК	0,28665	—

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6
Ge	—	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,56580	—
Hf	α (<1740 °С) β (>1740 °С)	<i>P6₃/mmc</i> <i>Im3m</i>	ГП ОЦК	0,3198	0,5061
In	—	<i>I4/mmm</i>	ГЦТ	0,32512	0,49467
Ir	—	<i>Fm3m</i>	ГЦК	0,38390	—
K	—	<i>Im3m</i>	ОЦК	0,53298	—
Li	>—195 °С <—195 °С	<i>Im3m</i> <i>P6₃/mmc</i>	ОЦК ГП	0,35100	—
Mg	—	<i>P6₃/mmc</i>	ГП	0,32089	0,52101
Mn	α (<727 °С) β (727—1095 °С) γ (1095—1133 °С) δ (>1133 °С)	<i>I43m</i> <i>P4₁32</i> <i>Fm3m</i> <i>Im3m</i>	Кубич. Кубич. ГЦК ОЦК	0,89139	—
Mo	—	<i>Im3m</i>	ОЦК	0,31470	—
Na	—	<i>Im3m</i>	ОЦК	0,4291	—
Nb	—	<i>Im3m</i>	ОЦК	0,33002	—
Ni	—	<i>Fm3m</i>	ГЦК	0,35232	—
Os	—	<i>P6₃/mmc</i>	ГП	0,27353	0,43191
Pb	—	<i>Fm3m</i>	ГЦК	0,49507	—
Pd	—	<i>Fm3m</i>	ГЦК	0,38874	—
Pt	—	<i>Fm3m</i>	ГЦК	0,39242	—
Re	—	<i>P6₃/mmc</i>	ГП	0,27609	0,44576
Rh	—	<i>Fm3m</i>	ГЦК	0,38034	—
Ru	—	<i>P6₃/mmc</i>	ГП	0,2700	0,4275
Sb	—	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,43084	1,1274
Sc	—	<i>P6₃/mmc</i>	ГП	0,3308	0,5267
Si	—	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,54286	—
Sn	α (<13 °С) β (>13 °С)	<i>Fd3m</i> <i>I4₁/amd</i>	Кубич. Тетрагон.	0,58315	0,31814
Ta	—	<i>Im3m</i>	ОЦК	0,33025	—
Ti	α (<882,5 °С) β (>882,5 °С)	<i>P6₃/mmc</i> <i>Im3m</i>	ГП ОЦК	0,29508	0,46855
U	α (<662 °С) β (662—775 °С) γ (>775 °С)	<i>Cmcm</i> <i>P4n2</i> <i>Im3m</i>	Ромбич. Тетрагон. ОЦК	0,28537	$b = 0,58695$ $c = 0,49548$
V	—	<i>Im3m</i>	ОЦК	0,30271	—
W	—	<i>Im3m</i>	ОЦК	0,31652	—
Y	α (<1490 °С) β (>1490 °С)	<i>P6₃/mmc</i> <i>Im3m</i>	ГП ОЦК	0,36509	0,57388
Zn	—	<i>P6₃/mmc</i>	ГП	0,26646	0,49461
Zr	α (<862 °С) β (>862 °С)	<i>P6₃/mmc</i> <i>Im3m</i>	ГП ОЦК	0,3232	0,5147

Таблица 2. Кристаллические структуры соединений

Продолжение табл. 2

Соединение	Структурный тип	Пространственная группа	Тип решетки	Периоды решетки при 20 °С, нм		
				a	b	c
1	2	3	4	5	6	7

Оксиды

Ag ₂ O	Ag ₂ O	<i>Pn3m</i>	Кубич.	0,4728	—	—
BeO	ZnS	<i>P6₃mc</i>	Гексагон.	0,26984	—	0,42770
CaO	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,48112	—	—
CoO	ZnS	<i>P6₃mc</i>	Гексагон.	0,321	—	0,524
Co ₃ O ₄	Al ₂ MgO ₄	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,8065	—	—
Cr ₂ O ₃	Al ₂ O ₃	<i>R3c</i>	Ромбоэдр.	0,49607	—	1,3599
CuO	CuO	<i>C2/c</i>	Моноклин.	0,4662	0,3416	0,5118
Cu ₂ O	Ag ₂ O	<i>Pb3m</i>	Кубич.	0,4217	—	—
FeO	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,4326	—	—
Fe ₂ O ₃	Al ₂ O ₃	<i>R3c</i>	Ромбоэдр.	0,5034	—	1,3747
Fe ₃ O ₄	Fe ₃ O ₄	<i>Pnmc</i>	Ромбич.	1,1868	1,1851	1,6751
HfO ₂	ZrO ₂	<i>P2₁/c</i>	Моноклин.	0,51093	0,51686	0,52839
			(псевдокуб.)			
Li ₂ O	CaF ₂	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,4628	—	—
MgO	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,42147	—	—
MnO	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,44444	—	—
MoO ₂	TiO ₂	<i>P4₂/mnm</i>	Тетрагон.	0,487	—	2,796
MoO ₃	MoO ₃	<i>Pnma</i>	Ромбич.	1,3855	0,36964	0,39628
NbO	NbO	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,42101	—	—
NbO ₂	NbO ₂	<i>I4₁/a</i>	Тетрагон.	1,370	—	0,5987
Nb ₂ O ₅	Nb ₂ O ₅	<i>C2/m</i>	Моноклин.	0,3983	0,3826	1,279
NiO	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,4177	—	—
OsO ₄	OsO ₄	<i>C2/c</i>	Моноклин.	0,9379	0,4515	0,8632
PbO	PbO	<i>Pbcm</i>	Ромбич.	0,5891	0,5489	0,4775
PbO ₂	PbO ₂	<i>Pbcn</i>	Ромбич.	0,4977	0,5948	0,5444
Re ₂ O ₇	Re ₂ O ₇	<i>P2₁2₁2₁</i>	Ромбич.	1,2508	1,5196	0,5448
SiO ₂	SiO ₂	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,7166	—	—
SnO	SnO	<i>Cmc2₁</i>	Ромбич.	0,500	0,572	1,112
SnO ₂	TiO ₂	<i>P4₂/mnm</i>	Тетрагон.	0,4737	—	0,3185
Ta ₂ O ₅	Ta ₂ O ₅	<i>P6₃/mmm</i>	Гексагон.	0,716	—	1,152
TiO	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,4180	—	—
TiO ₂	TiO ₂	<i>P4₂/mnm</i>	Тетрагон.	0,45922	—	0,29590
	(рутил)					
Ti ₂ O ₃	Al ₂ O ₃	<i>R3c</i>	Ромбоэдр.	0,5433	(a = 56,57 °)	—
V ₂ O ₅	V ₂ O ₅	<i>Pmmn</i>	Ромбич.	1,1510	0,3563	0,4369
WO ₂	VO ₂	<i>P2₁/c</i>	Моноклин.	0,5563	0,4896	0,5663
WO ₃	WO ₃	<i>P2/c</i>	Моноклин.	1,190	0,3826	5,964
Y ₂ O ₃	Mn ₂ O ₃	<i>Ia3</i>	Кубич.	1,06073	—	—
ZnO	ZnS	<i>P6₃mc</i>	Гексагон.	0,32499	—	0,52066
ZrO ₂	ZrO ₂	<i>P2₁/c</i>	Моноклин.	0,522	0,527	0,538

Сульфиды

Ag ₂ S	Ag ₂ S	<i>P2₁/c</i>	Моноклин.	0,4231	0,6930	0,9526
CdS	ZnS	<i>P6₃mc</i>	Гексагон.	0,4160	—	0,6756
CoS	NiAs	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,3384	—	0,5194
CuS	CuS	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,3765	—	1,6290

1	2	3	4	5	6	7
Cu ₂ S	Cu ₂ S	<i>P2₁/c</i>	Моноклин.	1,5246	1,1884	1,3494
FeS	FeS	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,3444	—	0,5876
Fe ₂ S	FeS ₂	<i>P1</i>	Триктин. (псевдокубич.)	0,5417	0,5417	0,5417
HgS	ZnS	<i>F43m</i>	Кубич.	0,5874	—	—
MgS	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,51913	—	—
MnS	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,52226	—	—
MoS ₂	MoS ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,31602	—	1,2294
NbS	NbS	<i>P6₃mc</i>	Гексагон.	0,6702	—	0,6693
NiS	NiS	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,9607	—	0,3143
PbS	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,59362	—	—
SnS	GeS	<i>Pnma</i>	Ромбич.	1,1200	0,3987	0,4334
ZnS	ZnS	<i>P6₃mc</i>	Гексагон.	0,38225	—	0,6261

Фосфиды

CaP ₃	CaP ₃	<i>P1</i>	Триктин.	0,5590	0,5618	0,5665
Co ₂ P	Co ₂ Si	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,5646	0,3513	0,6608
Cu ₃ P	Cu ₃ P	<i>P6₃cm</i>	Гексагон.	0,69593	—	0,7143
Fe ₃ P	Ni ₃ P	<i>I4</i>	Тетрагон.	0,9108	0,9109	0,4455
Mn ₃ P	Ni ₃ P	<i>I4</i>	Тетрагон.	0,9181	—	0,4568
Ni ₃ P	Ni ₃ P	<i>I4</i>	Тетрагон.	0,8954	—	0,4386
Sn ₄ P ₃	Bi ₃ Se ₄	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,3968	—	3,534
Zn ₃ P ₂	Zn ₃ P ₂	<i>P4₂/nmc</i>	Тетрагон.	0,8095	—	1,1470

Карбиды

Al ₄ C ₃	Al ₄ C ₃	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,8547	(α = 22,46°)	—
B ₄ C	B ₄ C	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,52065	(α = 66,01°)	—
Be ₂ C	CaF ₂	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,4342	—	—
CaC ₂	CaC ₂	<i>I4/mmm</i>	Тетрагон.	0,388	—	0,637
Co ₂ C	Fe ₂ C	<i>Pnmm</i>	Ромбич.	0,44465	0,43707	0,28969
Co ₃ C	Fe ₃ C	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,5033	0,6731	0,4483
Cr ₃ C ₂	Cr ₃ C ₂	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,55329	0,28290	1,14719
Cr ₇ C ₈	Cr ₇ C ₈	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,4526	0,7010	1,2142
Cr ₂₃ C ₆	Cr ₂₃ C ₆	<i>Fm3m</i>	Кубич.	1,0650	—	—
Fe ₃ C	Fe ₃ C	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,50890	0,67433	0,45235
HfC	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,4638	—	—
Mn ₃ C	Fe ₃ C	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,5103	0,6787	0,4545
Mn ₇ C ₃	Cr ₇ C ₃	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,4546	0,6959	1,1976
Mn ₂₃ C ₆	Mn ₂₃ C ₆	<i>Fm3m</i>	Кубич.	1,059	—	—
MoC	WC	<i>P6m2</i>	Гексагон.	0,2898	—	0,2809
Mo ₂ C	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,4254	—	—
NbC	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,447	—	—
Nb ₂ C	Nb ₂ C	<i>Pmc2₁</i>	Ромбич.	1,0920	0,4974	0,3090
Ni ₃ C	Ni ₃ C	<i>R3c</i>	Ромбоэдр.	0,4553	—	1,2920
ScC	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,472	—	—
SiC	SiC	<i>P6₃mc</i>	Гексагон.	0,30806	—	1,51173
TaC	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,44413	—	—

1	2	3	4	5	6	7
Ta ₂ C	CdI ₂	<i>P3m1</i>	Тригон.	0,31030	—	0,49378
TiC	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,43176	—	—
VC	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,41599	—	—
V ₂ C	PbO ₂	<i>Pbcn</i>	Ромбич.	0,4577	0,5742	0,5037
WC	WC	<i>P6m2</i>	Гексагон.	0,29063	—	0,28367
W ₂ C	CdI ₂	<i>P3m1</i>	Тригон.	0,300	—	0,4730
ZrC	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,46957	—	—

Нитриды

AlN	ZnS	<i>P6₃mc</i>	Гексагон.	0,3110	—	0,4980
Be ₃ N ₂	Be ₃ N ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,28413	—	0,9693
Ca ₃ N ₂	Mn ₂ O ₃	<i>Ia3</i>	Кубич.	1,1473	—	—
Co ₂ N	Fe ₂ C	<i>Pnmm</i>	Ромбич.	0,46056	0,43443	0,28535
CrN	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,4148	—	—
Cr ₂ N	Cr ₂ N	<i>P31m</i>	Тригон.	0,4796	—	0,4470
Fe ₂ N	Fe ₂ N	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,2705	—	0,4376
HfN	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,45118	—	—
Mg ₃ N ₂	Mn ₂ O ₃	<i>Ia3</i>	Кубич.	0,9964	—	—
MoN	MoN	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,5725	—	0,5608
Mo ₂ N	Mo ₂ N	<i>I4₁/amd</i>	Тетрагон.	0,420	—	0,801
NbN	NiAs	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,2967	—	0,5538
Nb ₂ N	V ₂ N	<i>P31m</i>	Тригон.	0,5267	—	0,4988
TaN	TaN	<i>P62m</i>	Гексагон.	0,5196	—	0,2911
Si ₃ N ₄	Si ₃ N ₄	<i>P31c</i>	Тригон.	0,7818	—	0,5591
Ta ₂ N	V ₂ N	<i>P31m</i>	Тригон.	0,5285	—	0,4919
TiN	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,4239	—	—
Ti ₂ N	Ti ₂ N	<i>I4₁/amd</i>	Тетрагон.	0,4140	—	0,8805
VN	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,4136	—	—
V ₂ N	V ₂ N	<i>P31m</i>	Тригон.	0,4917	—	0,4568
WN	WC	<i>P6m2</i>	Гексагон.	0,2893	—	0,2826
W ₂ N	W ₂ N	<i>P3</i>	Тригон.	0,2890	—	2,285

Бориды

AlB ₂	AlB ₂	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,3006	—	0,3252
Be ₂ B	CaF ₂	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,4663	—	—
CoB	FeB ₂	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,5254	0,3043	0,3956
Co ₂ B	Al ₂ Cu	<i>I4/mcm</i>	Тетрагон.	0,5015	—	0,4220
CrB	CrB	<i>Cmcm</i>	Ромбич.	0,2969	0,7858	0,2932
Cr ₂ B	Al ₂ Cu	<i>I4/mcm</i>	Тетрагон.	0,5185	—	0,4316
FeB	FeB	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,5506	0,2952	0,4061
Fe ₂ B	Al ₂ Cu	<i>I4/mcm</i>	Тетрагон.	0,5110	—	0,4249
Fe ₃ B	Fe ₃ C	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,5428	0,6699	0,4439
Fe ₂₃ B ₄	Cr ₂₃ C ₆	<i>Fm3m</i>	Кубич.	1,069	—	—
HfB	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,462	—	—
HfB ₂	AlB ₂	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,31438	—	0,34793
Mn ₂ B	Al ₂ Cu	<i>I4/mcm</i>	Тетрагон.	0,5149	—	0,4209
MnB ₂	AlB ₂	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,3009	—	0,3039
Mn ₃ B ₄	Ta ₃ B ₄	<i>Immm</i>	Ромбич.	0,3036	1,2842	0,2964
Mo ₂ B	Al ₂ Cu	<i>I4/mcm</i>	Тетрагон.	0,5547	—	0,4739
MoB ₂	Al ₂ B	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,3040	—	0,3060

1	2	3	4	5	6	7
NbB	CrB	<i>Cmcm</i>	Ромбич.	0,3292	0,8713	0,3165
NbB ₂	AlB ₂	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,31150	—	0,32645
Nb ₃ B ₄	Ta ₃ B ₄	<i>Immm</i>	Ромбич.	0,3305	1,408	0,3137
NiB	CrB	<i>Cmcm</i>	Ромбич.	0,2925	0,7396	0,2996
Ni ₂ B	Al ₂ Cu	<i>I4/mcm</i>	Тетрагон.	0,4991	—	0,4247
Ni ₃ B	Fe ₃ C	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,52105	0,66174	0,43904
TaB	CrB	<i>Cmcm</i>	Ромбич.	0,3276	0,8669	0,3157
TaB ₂	Al ₂ B	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,3088	—	0,3241
Ta ₂ B	Al ₂ Cu	<i>I4/mcm</i>	Тетрагон.	0,5783	—	0,4866
Ta ₃ B ₂	U ₃ Si ₂	<i>P4/mbm</i>	Тетрагон.	0,61760	—	0,32844
Ta ₃ F ₄	Ta ₃ B ₄	<i>Immm</i>	Ромбич.	0,3284	1,3980	0,3129
TiB	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,4210	—	—
TiB ₂	AlB ₂	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,3030	—	0,3232
Ti ₂ B ₅	WB ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,298	—	1,398
VB	CrB	<i>Cmcm</i>	Ромбич.	0,3058	0,8043	0,2966
VB ₂	AlB ₂	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,2995	—	0,3052
V ₃ B ₄	Ta ₃ B ₄	<i>Immm</i>	Ромбич.	0,3062	1,321	0,2981
W ₂ B	Al ₂ Cu	<i>I4/mcm</i>	Тетрагон.	0,5568	—	0,4744
WB ₂	AlB ₂	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,3020	—	0,3050
WB ₄	WB ₄	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,520	—	0,634
ZrB	NaCl	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,465	—	—
ZrB ₂	AlB ₂	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,3165	—	0,3520

Интерметаллиды

Ag ₂ Al	Mg	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,28777	—	0,46223
Al ₂ Au	CaF ₂	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,59973	—	—
AlB ₂	AlB ₂	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,3006	—	0,3252
Al ₄ Ca	Al ₄ Ba	<i>I4/mmm</i>	Тетрагон.	0,4362	—	1,1090
Al ₄ Ce	Al ₄ Ba	<i>I4/mmm</i>	Тетрагон.	0,4374	—	1,012
AlCo ₃	AuCu ₃	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,36581	—	—
Al ₁₃ Co ₄	Al ₁₃ Co ₄	<i>Cm</i>	Моноклин.	1,5183	0,8122	1,2340
AlCr ₂	MoSi ₂	<i>I4/mmm</i>	Тетрагон.	0,30045	—	0,86477
Al ₃ Cr	AuCu	<i>P4/mmm</i>	Тетрагон.	0,3723	—	0,3661
Al ₁₃ Cr ₂	Al ₄₅ V ₇	<i>C2/m</i>	Моноклин.	2,5196	0,7574	1,0949
AlFe	CsCl	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,2909	—	—
Al ₂ Fe	Al ₂ Fe	<i>P1</i>	Триклон.	0,4878	0,6461	0,8800
Al ₃ Fe	Al ₃ Fe	<i>C2/m</i>	Моноклин.	1,5489	0,80831	1,2476
Al ₃ Hf	Al ₃ Zr	<i>I4/mmm</i>	Тетрагон.	0,3919	—	1,7653
Al ₂ La	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,8148	—	—
Al ₃ Mg ₂	Al ₃ Mg ₂	<i>Fd3m</i>	Кубич.	2,8239	—	—
Al ₁₂ Mg ₁₇	Mn	<i>I43m</i>	Кубич.	1,05438	—	—
Al ₄ Mn	Al ₄ Mn	<i>Pnnn</i>	Ромбич.	0,6795	0,9343	1,3897
Al ₆ Mn	Al ₆ Mn	<i>Cmcm</i>	Ромбич.	0,75518	0,64978	0,88703
AlMo ₃	Cr ₃ Si	<i>Pm3n</i>	Кубич.	0,4950	—	—
Al ₁₂ Mo	Al ₁₂ W	<i>I43m</i>	Кубич.	0,78815	—	—
AlNb ₂	CrFe	<i>P4₂/mnm</i>	Тетрагон.	0,9943	—	0,5186
Al ₃ Nb	Al ₃ Ti	<i>I4/mmm</i>	Тетрагон.	0,3844	—	0,8605
Al ₂ Nd	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,8002	—	—
AlNi	CsCl	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,28864	—	—
AlNi ₃	AuCu ₃	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,35655	—	—
Al ₃ Ni	Al ₃ Ni	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,66114	0,73662	0,48112
Al ₆ Re	Al ₆ Mn	<i>Cmcm</i>	Ромбич.	0,76091	0,66117	0,9023
Al ₁₂ Re	Al ₁₂ W	<i>I43m</i>	Кубич.	0,75270	—	—

1	2	3	4	5	6	7
AlSb	ZnS	$F\bar{4}3m$	Кубич.	0,61355	—	—
Al ₃ Ta	Al ₃ Ti	$I4/mmm$	Тетрагон.	0,3839	—	0,8535
Al ₃ Ti	Ga ₂ Hf	$I4_1/amd$	Тетрагон.	0,3676	—	2,4360
Al ₃ Ti	Al ₃ Ti	$I4/mmm$	Тетрагон.	0,3848	—	0,8596
Al ₃ V	Al ₃ Ti	$I4/mmm$	Тетрагон.	0,3780	—	0,8321
Al ₁₂ W	Al ₁₂ W	$I\bar{m}3$	Кубич.	0,75803	—	—
Al ₃ Y	Cu ₂ Mg	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	0,7860	—	—
Al ₃ Y	Ni ₃ Sn	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,6276	—	0,4582
Al ₃ Zr	MgZn ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,52824	—	0,87482
Al ₃ Zr	Al ₃ Zr	$I4/mmm$	Тетрагон.	0,4014	—	1,7320
BeCo	CsCl	$Pm\bar{3}m$	Кубич.	0,2611	—	—
Be ₂ Co	W	$I\bar{m}3m$	Кубич.	0,2582	—	—
BeCu	CsCl	$Pm\bar{3}m$	Кубич.	0,2702	—	—
BeCu ₂	W	$I\bar{m}3m$	Кубич.	0,280	—	—
Be ₂ Fe	MgZn ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,4212	—	0,6853
BeHf	CrB	$Cmcm$	Ромбич.	0,334	1,000	0,372
Be ₂ Hf	AlB ₂	$P6/mmm$	Гексагон.	0,3787	—	0,3159
Be ₁₂ Mg	NaZn ₁₃	$Fm\bar{3}c$	Кубич.	1,0166	—	—
Be ₂ Mn	MgZn ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,4231	—	0,6909
BeMo ₃	Cr ₂ Si	$Pm\bar{3}n$	Кубич.	0,489	—	—
Be ₂ Mo	MgZn ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,4433	—	0,7341
Be ₂ Nb	Cu ₂ Mg	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	0,6542	—	—
Be ₂ Re	MgZn ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,4354	—	0,7101
BeTa ₂	Al ₂ Cu	$I4/mcm$	Тетрагон.	0,6010	—	0,4890
Be ₂ Ta	Cu ₂ Mg	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	0,6507	—	—
BeTi	CsCl	$Pm\bar{3}m$	Кубич.	0,2940	—	—
Be ₂ Ti	Cu ₂ Mg	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	0,6450	—	—
Be ₂ V	MgZn ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,4394	—	0,7144
Be ₂ W	MgZn ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,4446	—	0,7289
Be ₂ Zr	AlB ₂	$P6/mmm$	Гексагон.	0,382	—	0,324
BiCe	NaCl	$Fm\bar{3}m$	Кубич.	0,65055	—	—
BiLa	NaCl	$Fm\bar{3}m$	Кубич.	0,65797	—	—
BiZr ₃	Ni ₃ P	$I\bar{4}$	Тетрагон.	1,152	—	0,572
CaLi ₂	MgZn ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,6261	—	1,025
CaMg ₂	MgZn ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,6232	—	1,0120
CaPb ₃	AuCu ₃	$Pm\bar{3}m$	Кубич.	0,4897	—	—
Ca ₂ Pb	Co ₂ Si	$Pnma$	Ромбич.	0,8072	0,5100	0,9647
Ca ₂ Pb	AuCu ₃	$Pm\bar{3}m$	Кубич.	0,4853	—	—
Ca ₂ Sb	As ₂ Eu ₄ O	$I4/mmm$	Тетрагон.	0,4690	—	1,6390
CaZn	CrB	$Cmcm$	Ромбич.	0,4202	1,161	4,442
CaZn ₂	CeCu ₂	$I\bar{m}ma$	Ромбич.	0,4591	0,7337	0,7667
CaZn ₃	CaZn ₃	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,9168	—	0,7327
CaZn ₅	CaCu ₅	$P6/mmm$	Гексагон.	0,5416	—	0,4191
CaZn ₁₁	BaCd ₁₁	$I4_1/amd$	Тетрагон.	1,0699	—	0,6830
CaZn ₁₃	NaZn ₁₃	$Fm\bar{3}c$	Кубич.	1,2185	—	—
Ca ₂ Zn	Al ₃ B	$Cmcm$	Ромбич.	0,4150	1,3258	1,0186
Ca ₂ Zn ₃	Cr ₂ B ₃	$I4/mcm$	Тетрагон.	0,7954	—	1,5443
CdLi ₃	Cu	$Fm\bar{3}m$	Кубич.	0,4259	—	—
Cd ₂ Li	Mg	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,3089	—	0,4899
CdSb	CdSb	$Pbca$	Ромбич.	0,6471	0,8253	0,8526
CdSc	CsCl	$Pm\bar{3}m$	Кубич.	0,3513	—	—
Cd ₂ Sc	Ni ₃ Sn	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,6330	—	0,4853
CeMg	CsCl	$Pm\bar{3}m$	Кубич.	0,3912	—	—

1	2	3	4	5	6	7
CeMg ₂	Cu ₂ Mg	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	0,8733	—	—
CeMg ₃	BiF ₃	$Fm\bar{3}m$	Кубич.	0,7428	—	—
CeMg ₁₂	Mn ₁₂ Th	$I4/mmm$	Тетрагон.	1,033	—	0,596
Ce ₂ Mg ₁₇	Ni ₁₇ Th ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	1,031	—	1,032
Ce ₅ Mg ₄₁	Ce ₅ Mg ₄₁	$I4/m$	Тетрагон.	1,478	—	1,043
CePb ₃	AuCu ₃	$Pm\bar{3}m$	Кубич.	0,4875	—	—
Ce ₅ Pb ₃	Mn ₅ Si ₃	$P6_3/mcm$	Гексагон.	0,9473	—	0,6825
Ce ₅ Pb ₄	Ce ₄ Sm ₅	$Pnma$	Ромбич.	0,8435	1,615	0,8571
Co ₂ Cr	Ni ₃ Sn	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,5028	—	0,4034
Co ₂ Cr ₈	CrFe	$P4_2/mnm$	Тетрагон.	0,8758	—	0,4536
CoFe	CsCl	$Pm\bar{3}m$	Кубич.	0,28571	—	—
CoHf ₂	NiTi ₂	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	1,2031	—	—
Co ₂ Mg	Cu ₂ Mg	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	0,6910	—	—
Co ₂ Hf	Co ₂ Hf	$P4/mmm$	Тетрагон.	0,7070	—	0,7999
Co ₂ Hf ₃	Ni ₂ Zr ₂	$C2/m$	Моноклин.	0,444	0,8191	1,214
Co ₂₈ Hf ₆	Mn ₂₈ Th ₆	$Fm\bar{3}m$	Кубич.	1,148	—	—
CoLa ₃	Fe ₃ C	$Pnma$	Ромбич.	0,7277	1,0020	0,6575
Co ₂ La	Cu ₂ Mg	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	0,7449	—	—
Co ₃ La ₂	La ₂ Ni ₃	$Cmca$	Ромбич.	1,034	0,4886	0,7811
Co ₇ La ₂	Ce ₂ Ni ₇	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,5101	—	2,4511
Co ₁₃ La	NaZn ₁₃	$Fm\bar{3}c$	Кубич.	1,135	—	—
Co ₂ Mg	MgZn ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,486	—	0,792
Co ₂ Mo ₃	CrFe	$P4_2/mnm$	Тетрагон.	0,92287	—	0,48269
Co ₃ Mo	Ni ₃ Sn	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,51245	—	0,41125
Co ₇ Mo ₆	Fe ₇ W ₇	$R\bar{3}m$	Ромбоэдр.	0,4762	—	2,5015
Co ₂ Nb	MgZn ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,4835	—	0,7860
Co ₃ Nb	MgNi ₂	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,47407	—	1,5425
Co ₇ Nb ₆	Fe ₇ W ₆	$R\bar{3}m$	Ромбоэдр.	0,492	—	2,628
CoSc	CsCl	$Pm\bar{3}m$	Кубич.	0,3145	—	—
CoSc ₂	Al ₂ Cu	$I4/mcm$	Тетрагон.	0,6377	—	0,5618
CoSc ₃	CoSc ₃	$Pnma$	Ромбич.	1,3102	0,8624	0,5829
Co ₂ Sc	Cu ₂ Mg	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	0,6921	—	—
CoSi	FeSi	$P2_13$	Кубич.	0,44426	—	—
CoSi ₂	CaF ₂	$Fm\bar{3}m$	Кубич.	0,5365	—	—
Co ₂ Si	Co ₂ Si	$Pnma$	Ромбич.	0,4918	0,3738	0,7109
Co ₂ Si ₃	Ru ₂ Sn ₃	$P4_2c$	Тетрагон.	0,5234	—	0,8543
Co ₃ Si	Ni ₃ Sn	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,4976	—	0,4069
CoSn	CoSn	$P6/mmm$	Гексагон.	0,5279	—	0,4258
CoSn ₂	Al ₂ Cu	$I4/mcm$	Тетрагон.	0,6363	—	0,5456
Co ₃ Sn ₂	Ni ₃ Sn ₂	$Pnma$	Ромбич.	0,7089	0,5221	0,8198
CoTa ₂	Al ₂ Cu	$I4/mcm$	Тетрагон.	0,6116	—	0,4969
Co ₂ Ta	Cu ₂ Mg	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	0,6783	—	—
CoTi ₂	NiTi ₂	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	1,130	—	—
Co ₂ Ti	Cu ₂ Mg	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	0,6692	—	—
CoV	CrFe	$P4_2/mnm$	Тетрагон.	0,8843	—	0,4586
CoV ₃	Cr ₂ Si	$Pm\bar{3}n$	Кубич.	0,4676	—	—
Co ₃ V	Co ₃ V	$P\bar{6}m2$	Гексагон.	0,5032	—	1,227
Co ₃ W	Ni ₃ Sn	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,5130	—	0,4128
Co ₂ W ₆	Fe ₇ W ₆	$R\bar{3}m$	Ромбоэдр.	0,901	($\alpha=30,7^\circ$)	—
CoY ₃	Fe ₃ C	$Pnma$	Ромбич.	0,7026	0,9454	0,6290
Co ₂ Y	Cu ₂ Mg	$Fd\bar{3}m$	Кубич.	0,7217	—	—
Co ₃ Y	CeNi ₃	$P6_3/mmc$	Гексагон.	0,5015	—	1,628

Продолжение табл. 2

1	2	3	4	5	6	7
CoZr	CsCl	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,3197	—	—
CoZr ₂	NiTi ₂	<i>Fd3m</i>	Кубич.	1,2182	—	—
CoZr ₃	Re ₄ B	<i>Cmcm</i>	Ромбич.	0,327	1,084	0,894
Co ₂ Zr	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,69512	—	—
Co ₂₃ Zr ₆	Mn ₂₃ Th ₆	<i>Fm3m</i>	Кубич.	1,1516	—	—
CrFe	CrFe	<i>P4₂/mnm</i>	Тетрагон.	0,87995	—	0,45442
Cr ₂ Hf	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,7157	—	—
CrMn ₃	CrFe	<i>P4₂/mnm</i>	Тетрагон.	0,8860	—	0,4590
Cr ₂ Nb	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,6978	—	—
CrNi	CrFe	<i>P4₂/mnm</i>	Тетрагон.	0,8818	—	0,4578
Cr ₂ Ti	MgZn ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,4932	—	0,8005
Cr ₂ Zr	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,7208	—	—
CuHf ₂	MoSi ₂	<i>I4/mmm</i>	Тетрагон.	0,31643	—	1,1153
Cu ₃ La	AlB ₂	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,4346	—	0,3806
Cu ₁₃ La	NaZn ₁₃	<i>Fm3c</i>	Кубич.	1,160	—	—
CuMg ₂	CuMg ₂	<i>Fddd</i>	Ромбич.	0,9070	0,5284	1,8250
Cu ₂ Mg	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,7048	—	—
Cu ₂ Sc	MoSi	<i>I4/mmm</i>	Тетрагон.	0,3290	—	0,8388
Cu ₃ Ti	Cu ₃ Ti	<i>Pmmm</i>	Ромбич.	0,5162	0,4347	0,4531
Cu ₄ Ti	Au ₄ Zr	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,4525	0,4341	1,2953
Cu ₅ Y	CaCu ₅	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,5005	—	0,4097
Cu ₇ Y	Cu ₇ Tb	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,4940	—	0,4157
Cu ₈ Zr	AuBe ₅	<i>F43m</i>	Кубич.	0,687	—	—
Fe ₂ Hf	MgZn ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,4978	—	0,8137
Fe ₄ Mn	Mg	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,2530	—	0,4079
FeMo	CrFe	<i>P4₂/mnm</i>	Тетрагон.	0,9218	—	0,4813
Fe ₂ Mo	MgZn ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,4745	—	0,7734
Fe ₇ Mo ₆	Fe ₇ W ₆	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,4751	—	2,568
Fe ₂ Nb	MgZn ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,4838	—	0,7889
Fe ₃ Nb ₂	NiTi ₂	<i>Fd3m</i>	Кубич.	1,1262	—	—
FeRe ₂	Mn	<i>I43m</i>	Кубич.	0,8978	—	—
Fe ₃ Re ₂	CrFe	<i>P4₂/mnm</i>	Тетрагон.	0,9020	—	0,4690
FeSb ₂	FeS ₂	<i>Pnnm</i>	Ромбич.	0,58328	0,65376	0,31973
Fe ₃ Sb ₂	NiAs	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,4132	—	0,5175
Fe ₂ Ti	MgZn ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,47870	—	0,78150
Fe ₂ W	MgZn ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,4740	—	0,6726
Fe ₇ W ₆	Fe ₇ W ₆	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,904	($\alpha = 30,5^\circ$)	—
Fe ₃ Y	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,7363	—	—
Fe ₃ Y	Be ₃ Nb	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,5133	—	2,460
Fe ₅ Y	CaCu ₅	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,987	—	0,406
Fe ₂₃ Y ₆	Mn ₂₃ Th ₆	<i>Fm3m</i>	Кубич.	1,212	—	—
Fe ₂ Zr	MgNi ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,4962	—	1,620
Fe ₃ Zr	Fe ₃ W ₃ C	<i>Fd3m</i>	Кубич.	1,1690	—	—
Fe ₂₃ Zr ₆	Mn ₂₃ Th ₆	<i>Fm3m</i>	Кубич.	1,169	—	—
HfIr ₃	AuCu ₃	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,3935	—	—
HfMn ₂	MgZn ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,5007	—	0,8237
Hf ₂ Mn	NiTi ₂	<i>Fd3m</i>	Кубич.	1,1886	—	—
HfMo	MgNi ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,5345	—	1,736
HfNi ₂	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,6906	—	—
Hf ₂ Ni	Al ₂ Cu	<i>I4/mcm</i>	Тетрагон.	0,6405	—	0,5252
HfV ₂	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,7387	—	—
LaMg	CsCl	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,3970	—	—

Продолжение табл. 2

1	2	3	4	5	6	7
LaMg ₂	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,8787	—	—
LaMg ₃	BiF ₃	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,7480	—	—
La ₂ Mg ₁₇	Ni ₁₇ Th ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	1,036	—	1,024
La ₃ Ni	Fe ₃ C	<i>Pnma</i>	Ромбич.	0,722	1,024	0,660
La ₂ Ni ₃	Fe ₃ Th ₇	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	1,0130	—	0,6462
LaZn	CsCl	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,3760	—	—
Mg ₂ Pb	CaF ₂	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,6836	—	—
MgSc	CsCl	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,3597	—	—
Mg ₂₄ Sc ₅	Mn	<i>I43m</i>	Кубич.	0,965	—	—
Mg ₂ Si	CaF ₂	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,6338	—	—
Mg ₂ Sn	CaF ₂	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,6765	—	—
MgZn ₂	MgZn ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,5221	—	0,8567
MoNi ₃	Cu ₃ Ti	<i>Pmmm</i>	Ромбич.	0,5064	0,4224	0,4448
MoNi ₄	MoNi ₄	<i>I4/m</i>	Тетрагон.	0,5720	—	0,3564
MoRe ₂	CrFe	<i>P4₂/mnm</i>	Тетрагон.	0,9579	—	0,4974
Mo ₇ Re ₃	Cr ₂ Si	<i>Pm3n</i>	Кубич.	0,4982	—	—
Mo ₂ Zr	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,7587	—	—
NbNi	Fe ₇ W ₆	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,4893	—	2,664
Nb ₅ Ni	NiTi ₂	<i>Fd3m</i>	Кубич.	1,1642	—	—
NbSn ₂	CuMg ₂	<i>Fddd</i>	Ромбич.	0,9860	0,56477	1,9127
Nb ₃ Sn	Cr ₃ Si	<i>Pm3n</i>	Кубич.	0,52906	—	—
Nb ₅ Sn ₅	Sn ₅ Ti ₆	<i>Immm</i>	Ромбич.	0,5656	0,9199	1,6843
NbTi ₄	U	<i>Cmcm</i>	Ромбич.	0,3166	0,4854	0,4652
Ni ₃ Sn	BiF ₃	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,598	—	—
Ni ₃ Sn ₂	NiAs	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,4125	—	0,5198
Ni ₃ Sn ₄	Ni ₃ Sn ₄	<i>C2/m</i>	Моноклин.	1,2223	0,4061	0,5187
NiTa	Fe ₇ W ₆	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,4921	—	2,6905
Ni ₃ Ta	MoSi ₂	<i>I4/mmm</i>	Тетрагон.	0,3154	—	0,7905
Ni ₃ Ta	NbPt ₃	<i>P2₁/m</i>	Моноклин.	0,5126	0,4523	2,537
Ni ₃ Ta	Cu	<i>Fm3m</i>	Кубич.	0,3623	—	—
NiTi	NiTi	<i>P2₁/m</i>	Моноклин.	0,2885	0,4622	0,4120
Ni ₂ Ti	Ni ₂ Ti	<i>R3m</i>	Ромбоэдр.	0,2549	—	4,3648
Ni ₃ Ti	Ni ₃ Ti	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,5101	—	0,8307
NiV ₃	Cr ₃ Si	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,4710	—	—
Ni ₃ V	Al ₃ Ti	<i>I4/mmm</i>	Тетрагон.	0,35424	—	0,71731
Ni ₃ Y	CaCu ₅	<i>P6/mmm</i>	Гексагон.	0,4883	—	0,3967
NiZr ₂	Al ₂ Cu	<i>I4/mcm</i>	Тетрагон.	0,6483	—	0,5267
Ni ₂ Zr	Cu ₂ Mg	<i>Fd3m</i>	Кубич.	0,6925	—	—
Ni ₃ Zr	AuBe ₅	<i>F43m</i>	Кубич.	0,6702	—	—
Ni ₇ Zr ₂	Ni ₇ Zr ₂	<i>C2/m</i>	Моноклин.	0,4698	0,8235	1,2193
PbSb	W	<i>I43m</i>	Кубич.	0,3894	—	—
Pb ₄ Sb	Mg	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,3461	—	0,5714
Pb ₃ Y	AuCu ₃	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,4814	—	—
Pb ₃ Y ₅	Mn ₅ Si ₃	<i>P6₃/mcm</i>	Гексагон.	0,8971	—	0,6614
ReTi	CsCl	<i>Pm3m</i>	Кубич.	0,3104	—	—
Re ₂₄ Ti ₅	Mn	<i>I43m</i>	Кубич.	0,9606	—	—
Re ₃ V	CrFe	<i>P4₂/mnm</i>	Тетрагон.	0,944	—	0,489
Re ₇ V ₃	Cr ₂ Si	<i>Pm3n</i>	Кубич.	0,48783	—	—
ReW	CrFe	<i>P4₂/mnm</i>	Тетрагон.	0,96274	—	0,50150
ReW ₃	Cr ₃ Fe	<i>Pm3n</i>	Кубич.	0,50182	—	—
Re ₃ W	Mn	<i>I43m</i>	Кубич.	0,9588	—	—
Re ₂ Y	MgZn ₂	<i>P6₃/mmc</i>	Гексагон.	0,5396	—	0,8819

1	2	3	4	5	6	7
Re ₂ Zr	MgZn ₂	P6 ₃ /mmc	Гексагон.	0,5267	—	0,8632
TaV	CrFe	P4 ₂ /mnm	Тетрагон.	0,8648	—	0,4426
TaV ₂	Cu ₂ Mg	Fd3m	Кубич.	0,7155	—	—
VZr	NiTi ₂	Fd3m	Кубич.	1,2153	—	—
V ₂ Zr	MgZn ₂	P6 ₃ /mmc	Гексагон.	0,5288	—	0,8666
W ₂ Zr	Cu ₂ Mg	Fd3m	Кубич.	0,76187	—	—
W ₅ Zr ₃	Si ₃ W ₅	14/mcm	Тетрагон.	0,950	—	0,485

РЕКОМЕНДУЕМЫЙ БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

К ч. 1

1. Попов Г. М., Шафрановский И. И. Кристаллография. — М.: Высшая школа, 1972. — 352 с.
2. Бокий Г. Б. Кристаллохимия. — М.: Наука, 1971. — 400 с.
3. Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах: Пер. с англ. — М.: Мир, 1974. — 496 с.
4. Шаскольская М. П. Кристаллография. — М.: Высшая школа, 1982. — 375 с.
5. Васильев Д. М. Физическая кристаллография. — М.: Металлургия, 1981. — 248 с.
6. Розин К. М., Гусев Э. Б. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. Методы описания кристаллических многогранников. — М.: Металлургия, 1982. — 166 с.
7. Розин К. М., Гусев Э. Б. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. Методы описания кристаллических структур. — М.: Металлургия, 1985. — 168 с.
8. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия/Уманский Я. С., Скаков Ю. А., Иванов А. Н., Расторгуев Л. Н. — М.: Металлургия, 1982. — 631 с.
9. Современная кристаллография/Под ред. акад. Б. К. Вайнштейна. — М.: Наука. Т. 1. — 1979. — 383 с.; т. 2. — 1979. — 359 с.; т. 3. — 1980. — 407 с.; т. 4. — 1981. — 488 с.

К ч. 2

1. Физическое металловедение/Под ред. Р. У. Кана и П. Хаазена: Пер. с англ. — М.: Металлургия, 1987. Т. 1, гл. 26 — с. 111—137; т. 3, гл. 20 и 21. — с. 5—112.
2. Дамаск А., Динс Дж. Точечные дефекты в металлах: Пер. с англ. — М.: Мир, 1966. — 291 с.
3. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций: Пер. с англ. — М.: Атомиздат, 1972. — 599 с.
4. Орлов А. Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах. — М.: Высшая школа, 1983. — 144 с.
5. Штремель М. А. Прочность сплавов. Дефекты решетки. — М.: Металлургия, 1982. — 278 с.
6. Лихачев В. А., Хайров Р. Ю. Введение в теорию дисклиний. — Л.: Изд-во ЛГУ, 1975. — 183 с.
7. Владимиров В. И., Романов А. Е. Дисклинии в кристаллах. — Л.: Наука, 1986. — 233 с.
8. Орлов А. Н., Перевезенцев В. Н., Рыбин В. В. Границы зерен в металлах. — М.: Металлургия, 1980. — 154 с.
9. Структура межкристаллитных и межфазных границ/Косевич В. М., Иевлев В. М., Палатник Л. С., Федоренко А. И. — М.: Металлургия, 1980. — 256 с.
10. Кайбышев О. А., Валиев Р. З. Границы зерен и свойства металлов. — М.: Металлургия, 1987. — 213 с.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Анизотропия 12
 Аннигиляция дислокаций 112
 Атмосфера на дислокации:
 конденсированная 260
 Коттрелла 259
 насыщенная 260
 разбавленная 260
 Снука 261
 Сузуки 262
 Атом межузельный 127
 Атомные ряды 10, 12, 15—17, 41, 62, 82
 — плоскости 10, 12
 Бардина — Херринга источник 272
 Белова Н. В. метод 109, 110, 116
 Бипирамида стандартная 234
 Бокия Г. В. таблица ионных радиусов 88—89
 Браве:
 закон 12
 пространственные решетки 71, 74
 установка 27
 Бюргерса:
 вектор 172
 контур 173
 Вакансия 128
 захлопывание диска 171
 моновакансия 138
 сток 237
 тепловая 137
 тривакансия 139
 Векторы:
 базисные 11, 15, 60, 75
 трансляционные 60—62
 Вульфа сетка 13, 14
 Гантель 129
 Граница:
 антифазная 246
 высокоугловая 279
 дислокационная 280
 кручения 279
 малоугловая 279
 наклона 279
 — несимметричная 280
 — симметричная 280
 общего типа 284
 предпочтительная 288
 произвольная 284
 скользящая 282
 специальная 284
 субзеренная 280
 Грань единичная 19
 Данкова — Конобеевского принцип 97, 117
 Движение дислокаций:
 консервативное 154

неконсервативное 157
 Двойники полисинтетические 126
 Двойниковые структуры 122
 — — направление 123
 — — плоскость 123
 Декорирование дислокаций 178
 Дефекты решетки:
 линейные 127
 объемные 127
 поверхностные 127
 рекомбинация 127
 Дефект упаковки 198
 — — внедрения 200
 — — вычитания 200
 — — перетяжка 241
 — — энергия 200
 Дивакансия 138
 Диполь:
 дислокационный 255
 дисклиниационный 275
 Дисклиния:
 винтовая 274
 клиновая 274
 кручения 274
 частичная 278
 Дислокация:
 вершинная 231
 винтовая 158
 — левая 161
 — правая 161
 Вольтерры 273
 встречи 230
 геликоидальная 263
 двойникующая 243
 единичная 194
 зернограничная (ЗГД) 282, 288
 — снесенная 290
 — собственная 290
 краевая 148
 — отрицательная 150
 — положительная 150
 Ломер — Коттрелла 232
 неполная 194
 несоответствия 265
 парная 246
 полная 194
 полужакрепленная 224
 призматическая 171
 растянутая 213
 расщепленная 213
 решеточная 289
 R-дислокация 229, 271
 сверхструктурная 247
 сидячая 224
 смешанная 165
 структурная 265
 характерная 202
 частичная 194

— Франка 223
 — Шокли 211
 эпитаксиальная 265
 Долгота 13, 14

Единицы:
 осевые (масштабные) 18, 20, 22,
 27, 43, 45, 48, 50, 74
 структурные 80, 81

Закон постоянства углов 10
Зоны 51—53
 — закон 56

Индицирование гексагональных кристаллов 24

Ионные кристаллы 87

Категории 42, 44
Кластер 137

Комплекс граней кристалла:
 кубического 57
 гексагонального 58

Компоненты скольжения 63—66, 68, 69

Координатная система 30, 41, 43—45
 — — декартова 22
 — — ромбоэдрическая 27
 — — трехосная 25
 — — четырехосная 26

Координаты:
 атомов 11, 17, 22
 выбор начала 82
 полярные 12—14
 радиуса-вектора 11, 14

Координационные числа 90, 92, 94, 100, 101, 106, 111—117

Краудин 130

Кристалл:
 идеальный 127
 реальный несовершенный 127
 — совершенный 127

Кристаллография:
 геометрическая 8
 структурная 8
 физико-химическая 9

Кристаллофизика 9

Лес дислокаций 247

Ломер—Коттрелла барьер 295

Межплоскостные расстояния 10, 313, 315

Модели кристаллических структур:
 Полинга—Белова 109, 110, 116, 117
 шариковые 111—117

Многогранники:
 координационные 109, 110, 116
 кристаллические 30, 31
 — простая форма 51

Направления в кристалле:
 главные 76

координатные 12, 44, 45, 61, 81
 полярные 13
 символы 15, 21, 22
 симметрично-равные 24

Несоответствие межатомных расстояний 119

Орована механизм 299

Оси симметрии:
 винтовые 67
 инверсионные 34, 37, 38, 39, 41
 обозначения 33, 39
 порядок 31
 простые 31, 45

Пайерлса—Набарро сила 293

Пара эпитаксиальная 118, 119

Параметры кристаллических структур 11

Параллелепипед элементарный 11, 12
 — — кристаллической структуры 11, 14, 59

Перегиб на дислокации 292

Перекрестного умножения правило 21

Переползание дислокаций 156

Пересечение дислокаций 247, 250, 251

Период идентичности 322

Периодичность атомного строения кристалла 10, 11

Петля дислокационная 266

Плоскости:
 скользящего отражения 63—67, 70, 80
 симметрии (зеркальные) 34, 35
 — обозначения 67
 уравнение 17, 18, 20

Плотнейшие шаровые упаковки 98, 105, 107, 111—113
 — — — двухслойные (гексагональные) 102
 — — — заполнение пустот 105
 — — — координация 100, 101
 — — — коэффициент заполнения объема 101, 107
 — — — пустоты (поры) 99, 104, 105, 109
 — — — октаэдрические 104—107
 — — — тетраэдрические 104, 105, 107
 — — — симметрия 103
 — — — трехслойные (кубические) 102

Плотность дислокаций 178
 — совпадающих узлов 284

Подложка 118

Полигонизация 282

Полиморфные превращения 94—98

Полюсный механизм роста двойника 245

Порог на дислокации 253

Правило квадратов 196

Правильные системы точек 78, 79
 — — — кратность 80

Принцип структурного и размерного соответствия 97, 117

Проекция стереографическая 12, 13
 — — направлений 15
 — — нормали к плоскости 52, 53, 57, 58, 125, 126
 — — плоскости 35, 125
 — — совмещенные 123
 — — элементов симметрии 46, 47, 49

Пространственная решетка:
 прямая 10, 11, 16, 71, 74, 76
 — базоцентрированная 72, 315
 — гранецентрированная 72, 77, 80, 111—113, 115, 315
 — объемноцентрированная 72, 111, 112, 114, 315
 — примитивная 71, 111, 113, 116, 117, 315
 — сложная 71
 — узловые ряды 23
 — плоскости 10
 — узлы 10, 14, 15, 22
 обратная 313
 — вектор 313, 314
 — — единичный 313
 — гранецентрированная 314
 — объемноцентрированная 314
 — примитивная 314
 — узловой ряд 315
 — узлы 315

Пространственная группа симметрии 69, 70, 78, 103, 111—117
 — — — символы 76, 77, 78, 82

Радиус-вектор направления 10, 11, 14, 16, 17, 20

Радиусы:
 ионные 86, 88
 — аддитивность 87, 90
 — предельные отношения 93, 94
 атомные (металлические) 84, 85
 тетраэдрические (ковалентные) 86, 90, 91

Расстояния:
 межатомные 10, 11, 24, 91, 99, 116
 межплоскостные 10, 313, 315
 полярные 12

Растянутый узел 223

Ретикулярная плотность 12, 23

Решетка совпадающих узлов (PCU) 284

Сегмент повторяемости 287

Сила трения 293

Символы:
 граней и ребер куба 25
 — — — октаэдра 25
 направлений, ребер 12, 15, 16, 21, 24
 нормали к плоскости 17, 22, 54, 314
 рядов атомных 12, 16, 17, 20
 условие однотипности 24, 25
 четырехосные 24—30

Сингония 41—45, 50, 70, 71, 103

Скольжение дислокаций 154
 — — поперечное 164
 — — призматическое 171

Симметрично-равные атомные ряды 30
 — грани 25, 63
 — направления 24

Скопление дислокаций 296

Снука эффект 140

Соотношения:
 ориентационные 95—97, 118, 119, 121, 124
 между индексами 27—30

Соответствие:
 структурное и размерное 10, 118
 эпитаксиальное 118

Сопряжение атомных плоскостей 97, 117—120

Стенка дислокаций 191

Стехиометрическое отношение 104, 105

Структура кристаллическая:
 алмаза 77, 78, 80, 81, 98, 112
 вольфрама 82, 83, 111
 вюрцита 95
 графита 62
 железа 82—84, 95, 96, 107, 108, 111, 119, 120, 121, 125
 — положения атомов внедрения 107, 108
 магния 68, 82, 83, 111, 112
 меди 83, 84, 106, 111, 119, 120
 олова 65, 66, 68, 98, 112
 сфалерита 92, 93, 95, 110
 AuCu₃ 113, 114
 CaF₂ 113
 CsCl 90, 92—95, 113
 CuAl₂ 114, 115
 Cu₂O 64, 65
 MgCu₂ 115, 116
 MgNi₂ 117
 MgZn₂ 116
 NaCl 63, 68, 92, 93, 95, 106, 109
 NiAs 113

Ступенька на дислокации 157

Субзерно 265

Тип структурный 110—117

Томпсона стандартный тетраэдр 226

Точечная группа симметрии 30, 39, 40, 45—47, 50, 70

— — — методы вывода 41
— — — международные символы 45—50

Трансляция 59, 62, 63, 66, 70, 72, 77, 80

Углы:

координатные 24, 44, 47
между направлениями 10, 11, 13, 14

— осями координат 74
— плоскостями 10, 316
элементарные 31, 33, 35, 36

Узел дислокаций 222

— совпадения 285

Условие вхождения грани в зону 54, 55, 118

Установка Браве (*H*) 27, 29, 30, 44
— ромбоэдрическая (*R*) 27, 50

Формула симметрии 41, 42

Франка критерий 196

Франка — Рида источник 270

Френкелевская пара 137

Центр инверсии 36—38

— симметрии 34, 36, 38

Ширина дислокации 221

Шоттки механизм 137

Экстраплоскость 149

Элементы симметрии:

взаимодействие 40, 41, 46
кристаллических многогранников 30, 31, 39, 45, 79

— структур 58, 62, 66, 79, 81

трансляционные 70, 78

Энергия дислокации 183

Эпитаксия 117, 118, 144

Ядро дефекта 128

— дислокации 150

Ямка травления 179

Ячейка элементарная 11, 70, 74, 79, 113, 115, 123, 317

Илья Изриэлович Новиков
Константин Маркович Розин

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Редактор издательства М. И. Заславская
Художественный редактор А. А. Якубенко
Технический редактор Г. Б. Жарова
Корректор И. М. Мартынова

ИБ № 3729

Сдано в набор 09.08.89. Подписано в печать 03.01.90. Т-04902. Формат бумаги 60×90^{1/16}.
Бумага книжно-журнальная. Гарнитура литературная. Печать высокая. Усл. печ. л.
21,0. Усл. кр.-отт. 21,25. Уч.-изд. л. 23,75. Тираж 6400 экз. Заказ № 1499. Цена 1 р. 20 к.
Изд. № 1984.

Ордена Трудового Красного Знамени издательство «Металлургия»,
119857 ГСП, Москва, Г-34, 2-й Обыденский пер., д. 14

Ленинградская типография № 4 ордена Трудового Красного Знамени Ленинградского
объединения «Техническая книга» им. Евгении Соколовой Союзполиграфпрома при
Государственном комитете СССР по печати. 191126, Ленинград, Социалистическая ул., 14.