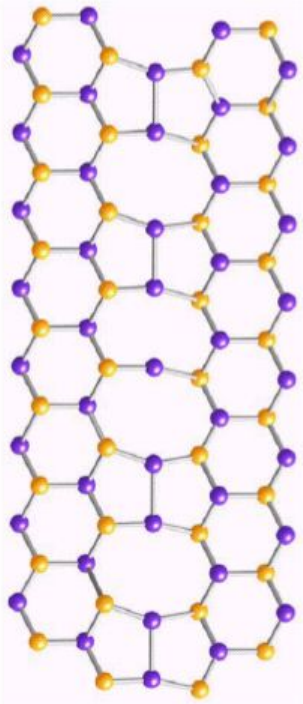


# Физика реального кристалла



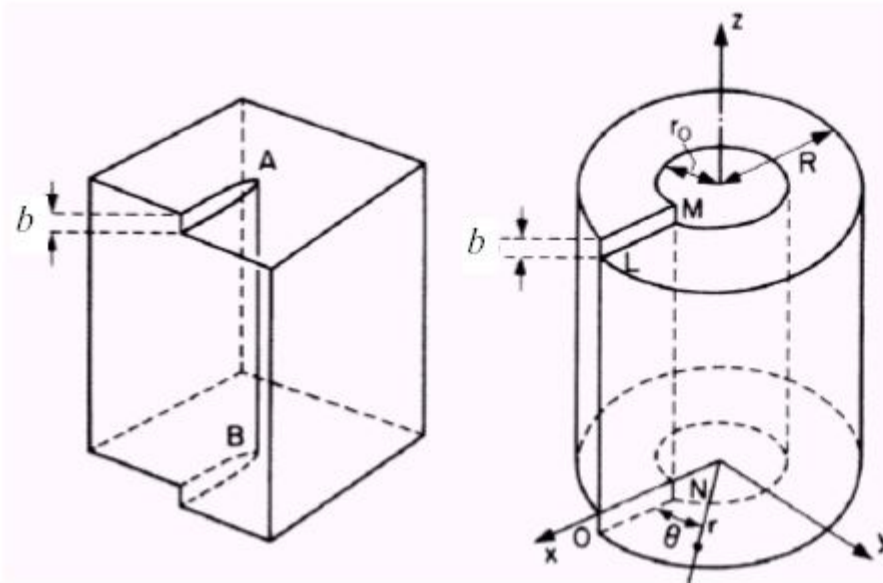
8. Упругие поля (поля напряжений) вокруг дислокаций. Энергия дислокаций. Взаимодействия между дислокациями. Термодинамика дислокаций.

Профессор Б.И.Островский

[ostr@cea.ru](mailto:ostr@cea.ru)

*Упругие поля и напряжения вокруг  
дислокаций*

# Поле смещений вокруг винтовой дислокации



Цилиндрические  
координаты:

$r, \theta, z$

$x^2 + y^2 = r^2;$

$\text{tg}\theta = y/x$

**Volterra** screw **dislocation**

[Hull, Bacon 1992]

- Representation as a cylinder of elastic material
- Slit LMNO  $\parallel$  z axis, surface displaced by  $b$

Displacements:

$$u_x = u_y = 0$$

$$u_z = \frac{b\theta}{2\pi} = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \frac{y}{x}$$

$$u_z = u_z(x, y)$$

- Cylinder with radius  $r_0$  not taken into account: assumptions of *linear* elasticity theory not valid

# Компоненты тензоров напряжений и деформаций в цилиндрических координатах

*используя соотношения:*

$$\sigma_{rz} = \sigma_{xz} \cos \theta + \sigma_{yz} \sin \theta$$

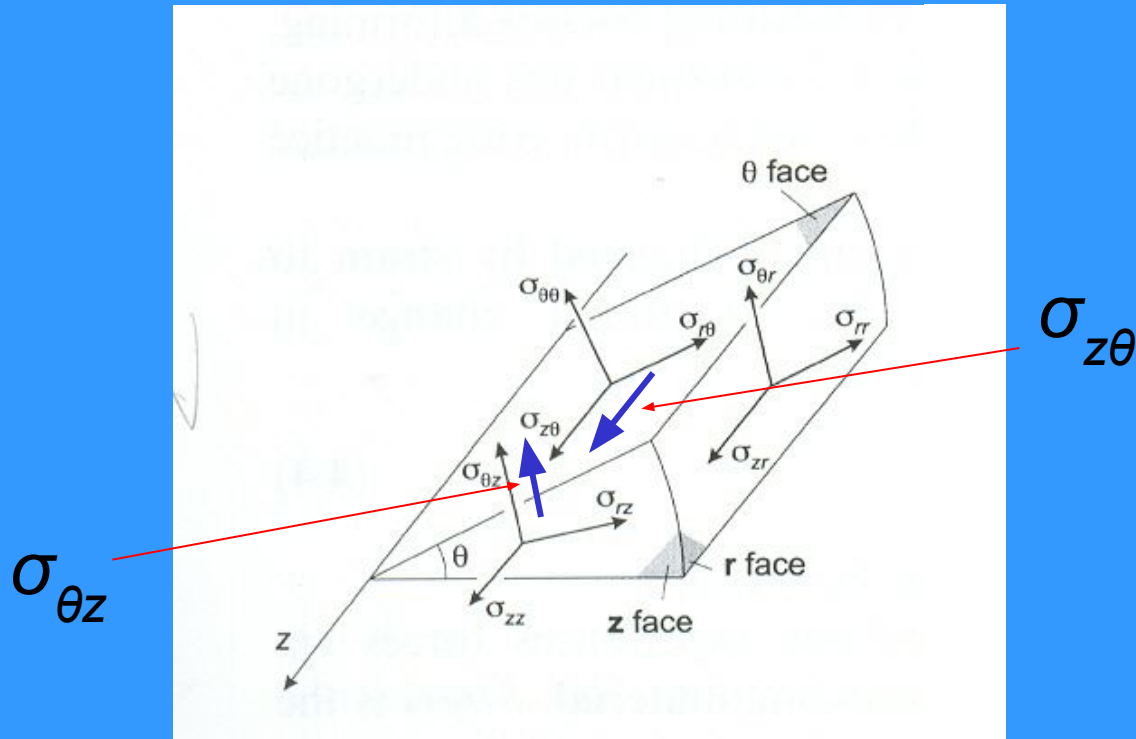
$$\sigma_{\theta z} = -\sigma_{xz} \sin \theta + \sigma_{yz} \cos \theta$$

*и, аналогичным образом, для сдвиговых деформаций, получаем:*

$$e_{\theta z} = e_{z\theta} = \frac{b}{4\pi r}$$

$$\sigma_{\theta z} = \sigma_{z\theta} = \frac{Gb}{2\pi r}$$

# Компоненты тензора напряжения в цилиндрических координатах



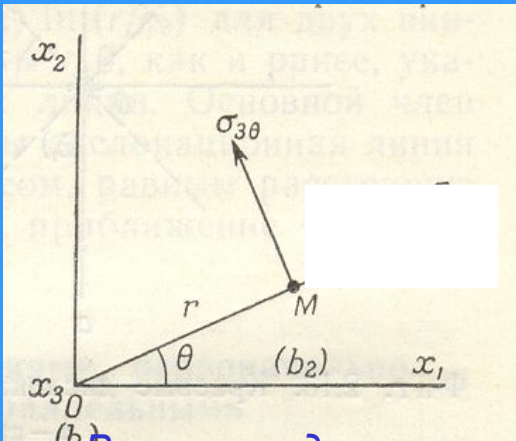
The elastic distortion contains no tensile or compressive components and consists of pure shear:  $\sigma_{z\theta}$  acts parallel to the  $z$ -axis in radial planes of constant  $\theta$  and  $\sigma_{\theta z}$  acts in the fashion of a torque on planes normal to the axis (Fig. 4.4). The field exhibits complete radial symmetry and the cut  $LMNO$  can be made on any radial plane  $\theta = \text{constant}$ . For a dislocation of *opposite* sign, i.e. a left-handed screw, the signs of all the field components are *reversed*.

*Упругие поля искажений вокруг дислокаций являются дальнедействующими!*

*Отличные от нуля компоненты  $\varepsilon_{ij}$  и  $\sigma_{kl}$  убывают с расстоянием от дислокации как  $r^{-1}$ ,*

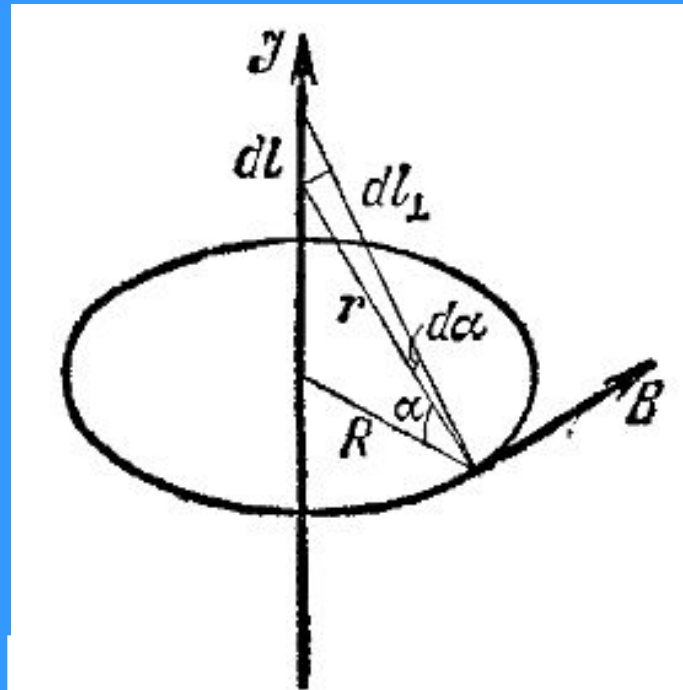
$$\varepsilon \sim \sigma \sim r^{-1}$$

# Замечательная аналогия с магнитным полем прямолинейного проводника



Винтовая дислокация  
направлена вдоль оси  $x_3$   
= $z$

$$\varepsilon \sim \sigma \sim r^{-1}$$

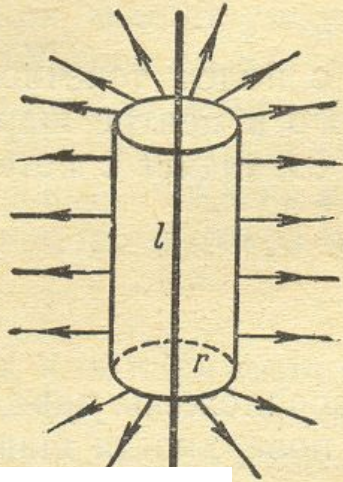


$$B \sim J/R ;$$

**B** - аксиальный  
вектор

# Электрическое поле равномерно заряженной прямолинейной нити

пренебречь влиянием ее концов, т. е. считать ее как бы бесконечно длинной. Из соображений симметрии ясно, что создаваемое такой нитью поле не может иметь составляющих в ту или другую сторону вдоль нити (поскольку обе эти стороны совершенно эквивалентны), т. е. должно быть направлено в каждой точке перпендикулярно нити.



Пользуясь этим, легко определить поле нити. Рассмотрим для этого поток поля через замкнутую поверхность радиуса  $r$  и длины  $l$  с осью вдоль нити (рис. 5). Так как поле перпендикулярно оси, то поток через основания цилиндра будет равен нулю. Поэтому полный поток поля через рассматриваемую замкнутую поверхность сводится к потоку через боковую поверхность цилиндра. Он равен, очевидно,  $E \cdot 2\pi r l$ . С другой стороны, по теореме Гаусса он равен  $4\pi e$ , где  $e$  — заряд, находящийся на длине  $l$  нити; если обозначить через  $q$  заряд, приходящийся на единицу длины нити, то  $e = ql$ . Таким образом, имеем

$$2\pi r l E = 4\pi e = 4\pi q l,$$

откуда

$$E = \frac{2q}{r}.$$

Теорема Гаусса –  
- Остроградского



Мы видим, что поле, создаваемое равномерно заряженной нитью, обратно пропорционально расстоянию  $r$  от нее.

Определим потенциал этого поля. Поскольку поле  $E$  направлено в каждой точке вдоль радиуса, то его радиальная проекция  $E_r$  совпадает с полной величиной  $E$ . В силу общего соотношения между напряженностью и потенциалом имеем поэтому

$$-\frac{d\varphi}{dr} = E = \frac{2q}{r},$$

откуда

$$\varphi = -2q \ln r + \text{const.}$$

# Упругая энергия дислокации

Полная энергия дислокации состоит из двух частей:

$$E = E_{\text{core}} + E_{\text{el}}$$

Плотность упругой энергии, запасенной в дислокации:

$$E_{\text{el}} = \frac{1}{2} (\sigma_{\theta z} \varepsilon_{\theta z} + \sigma_{z\theta} \varepsilon_{z\theta})$$

$$= \frac{Gb^2}{8\pi^2 r^2}$$

$$E_{\text{el}} \text{ полн} = \int E_{\text{el}} dV$$

Полная энергия, запасенная в полом цилиндре радиуса  $R$  и длины  $L$  :

$$E_{\text{el}} \text{ полн} = \int_0^L \int_0^{2\pi} \int_{r_0}^R (Gb^2/8\pi^2) dz d\theta r dr/r^2 = \frac{L Gb^2}{4\pi} \int_{r_0}^R \frac{dr}{r} = \frac{L Gb^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}$$

Или на единицу длины дислокации:

$$E_{\text{el}} \text{ полн} / L = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}$$

## Оценки упругой энергии дислокации

При обычных значениях плотности дислокаций  $\rho = 10^7 \text{ см}^{-2}$ , среднее расстояние между ними составляет  $R \approx \rho^{-1/2} \approx 3 \cdot 10^{-4} \text{ см}$ , что дает

$$\text{для } \ln \frac{R}{r_0} \approx 10$$

$$\text{и } E_{\text{el полн}}/L \approx Gb^2$$

При  $G \approx 10^{12} \text{ дин.см}^{-2}$  и  $b = 2 \cdot 10^{-8} \text{ см}$   
имеем:

$$E_{\text{el полн}}/L \approx 4 \cdot 10^{-4} \text{ эрг/см}$$

Что в пересчете на одну связь дает:

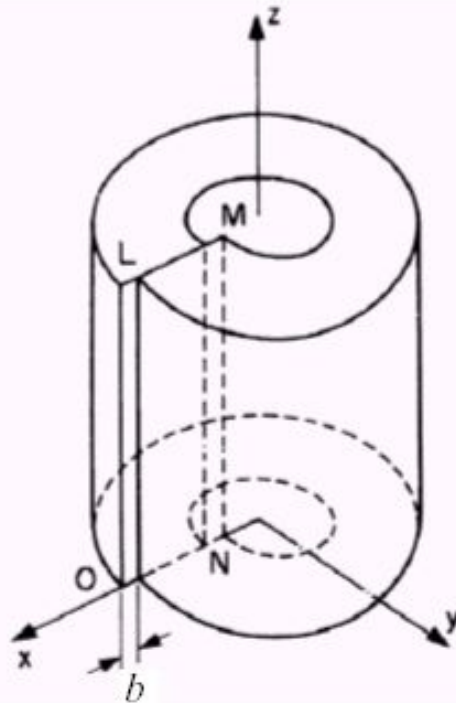
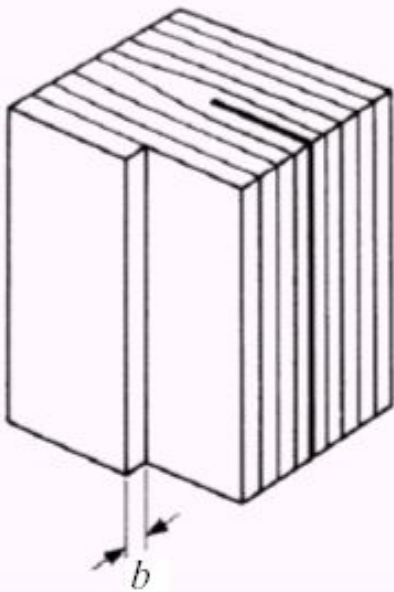
$$E_{\text{bond}} \approx 4 \cdot 10^{-4} \text{ эрг/см} \times 2 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 8 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} \approx 5 \text{ эв}$$

# Поле напряжений прямой краевой дислокации (сплошная изотропная среда)

$$u_x = u_x(x, y)$$

$$u_y = u_y(x, y)$$

Плоское деформированное состояние:  $U_z = 0$



$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = \sigma_{yz} = \sigma_{zy} = 0$$

$$\sigma_{xx} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$\sigma_{yy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

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

Volterra edge dislocation  
[Hull, Bacon 1992]

$$E = 2G(1 + \nu)$$

$$-1 < \nu < 1/2$$

# Вычисление компонент тензоров деформации и напряжений

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad \varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}$$

$$u_x = u_x(x, y)$$

$$u_y = u_y(x, y)$$

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right)$$

$$\varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right)$$

$$\varepsilon_{zx} = \varepsilon_{xz} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \right)$$

В изотропном случае уравнения (2.21) обычно записывают с использованием двух упругих постоянных:  $\lambda$  (коэффициент Ламэ) и  $\mu$  (модуль сдвига)\*, в следующем виде:

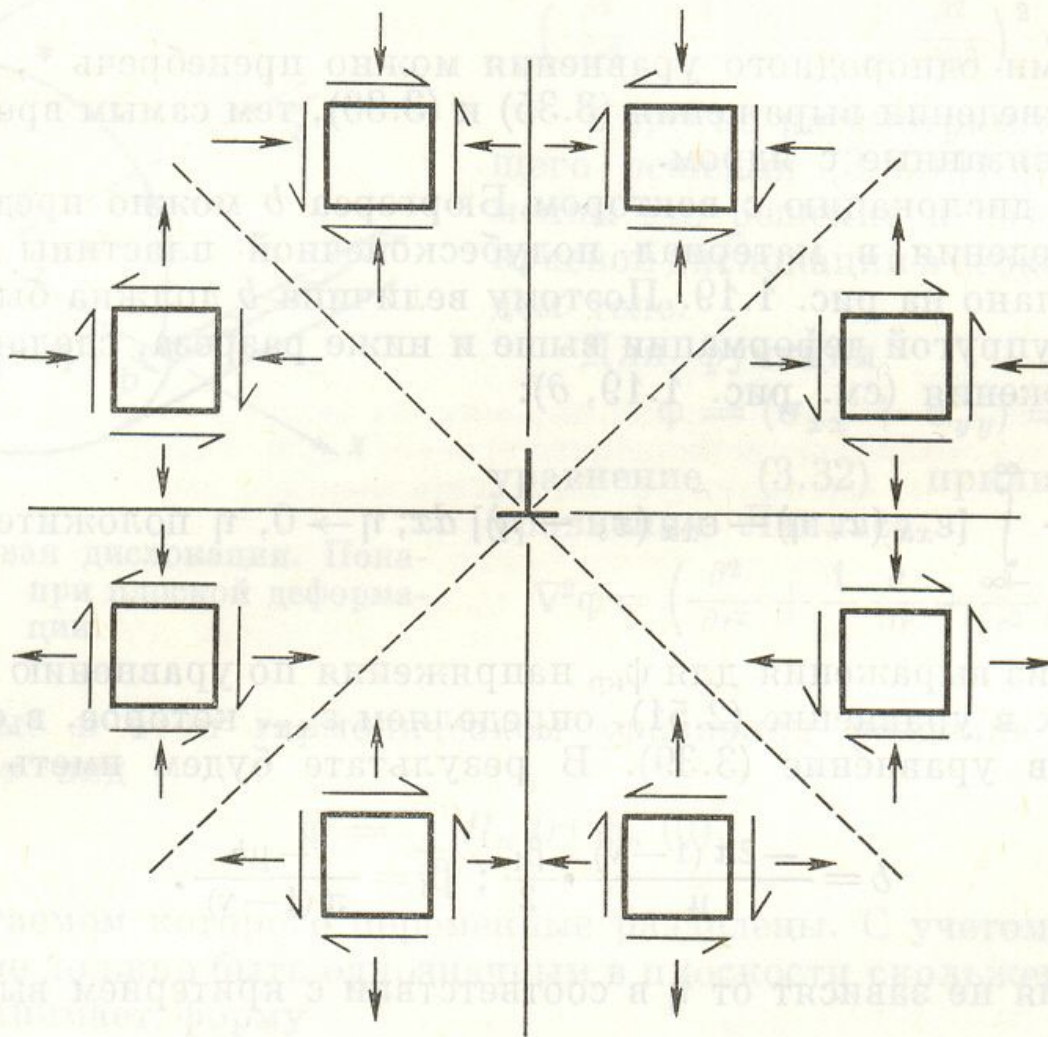
$$\left. \begin{aligned} \sigma_{11} &= (\lambda + 2\mu) \varepsilon_{11} + \lambda \varepsilon_{22} + \lambda \varepsilon_{33}; \\ \sigma_{22} &= \lambda \varepsilon_{11} + (\lambda + 2\mu) \varepsilon_{22} + \lambda \varepsilon_{33}; \\ \sigma_{33} &= \lambda \varepsilon_{11} + \lambda \varepsilon_{22} + (\lambda + 2\mu) \varepsilon_{33}; \\ \sigma_{23} &= 2\mu \varepsilon_{23}; \\ \sigma_{31} &= 2\mu \varepsilon_{31}; \\ \sigma_{12} &= 2\mu \varepsilon_{12}; \end{aligned} \right\} \quad (2.46)$$

## Поля упругих смещений вокруг прямолинейной краевой дислокации

$$u_x = \frac{b}{2\pi} \left[ \operatorname{arctg} \frac{y}{x} + \frac{xy}{2(1-\nu)(x^2+y^2)} \right]$$

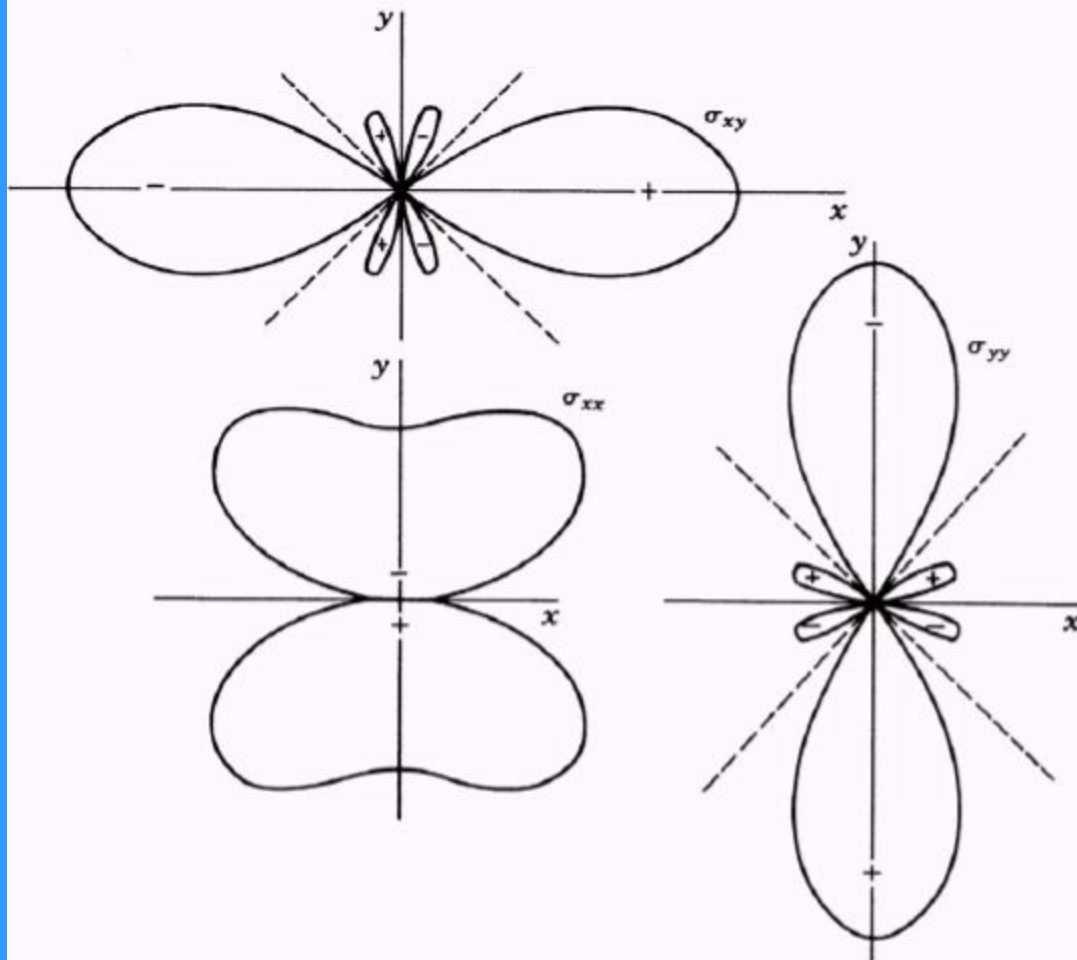
и аналогично

$$u_y = -\frac{b}{2\pi} \left[ \frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} \ln(x^2+y^2) + \frac{x^2-y^2}{4(1-\nu)(x^2+y^2)} \right].$$



Схематическое изображение поля напряжений  
вокруг краевой дислокации.

## Компоненты поля напряжений для краевой дислокации



Contours of equal stress  
about an edge dislocation  
[Hirth, Lothe 1992]



## Компоненты тензора напряжений в случае винтовой дислокации

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{y}{(x^2 + y^2)} = -\frac{Gb \sin \theta}{2\pi r}$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy} = \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{(x^2 + y^2)} = \frac{Gb \cos \theta}{2\pi r}$$

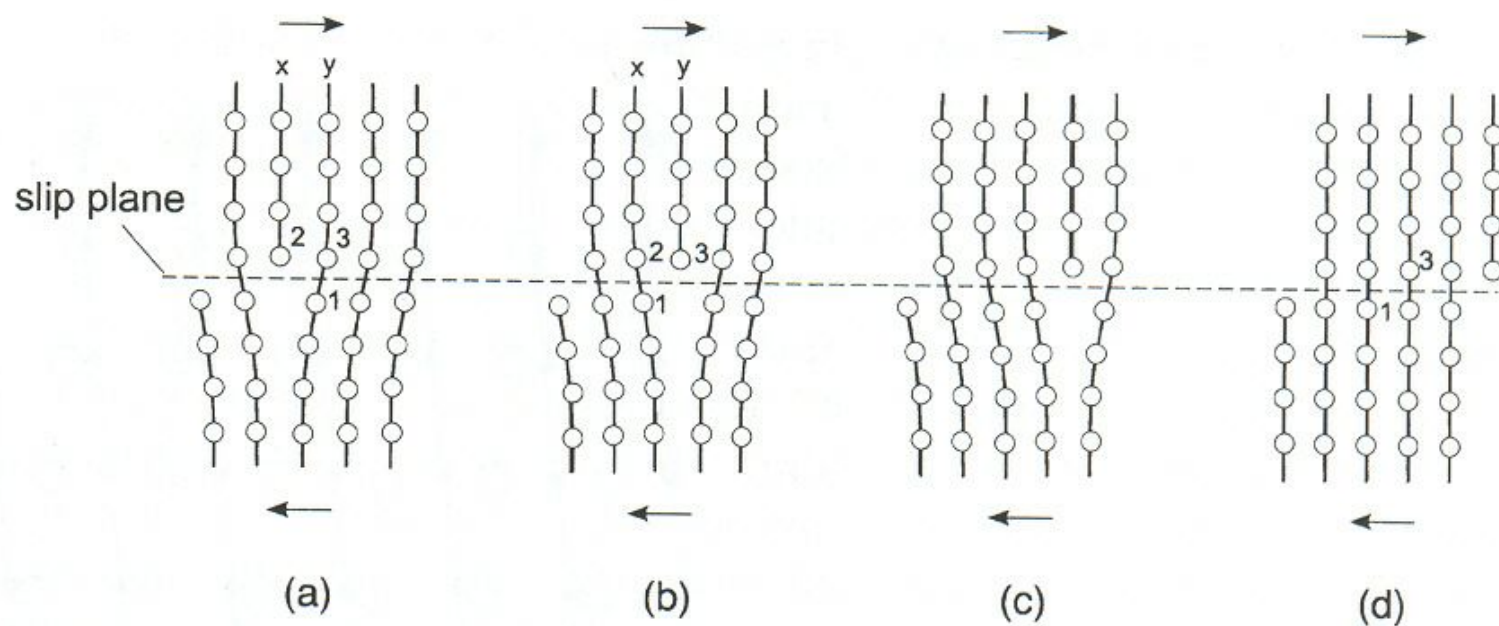
$Gb/2\pi(1-$   
 $v)$

$$-1 < \nu < 1/2$$

*Вывод: все энергетические оценки, выполненные ранее для винтовых дислокаций, остаются справедливыми и для краевых дислокаций*

*Силы, действующие на дислокации*

# Движение дислокации в кристалле под действием однородного сдвигового напряжения



**Figure 3.4** Movement of an edge dislocation: the arrows indicate the applied shear stress.

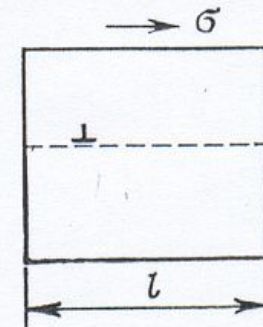
**Образование ступенек скольжения!**

# Сила, действующая на единицу длины дислокации

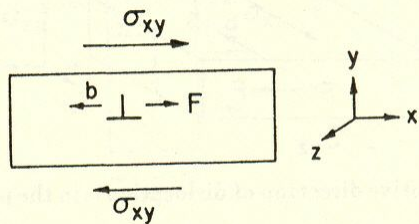
Для нахождения силы, действующей на единицу длины прямолинейной дислокации в кристалле под однородным напряжением, вычислим работу, произведенную внешней силой при перемещении дислокации длины  $L=1$  через кристалл толщиной  $l$  (рис. 28). С одной стороны, эта работа равна силе  $\sigma Ll$ , умноженной на длину  $b$  пластического сдвига при прохождении одной дислокации, с другой стороны, она равна произведению искомой силы  $f$  на длину  $l$  пути дислокации. Приравнявая оба выражения, получаем  $\sigma Ll b = fl$  или

$$f = \sigma b L = \sigma b. \quad (16.1)$$

В общем случае следует учесть, что деформированное состояние кристалла может быть сложным, а направление силы не обязательно совпадает с направлением вектора Бюргерса. Тогда формула (16.1) заменится формулой Пича — Келера для механической силы, действующей на элемент длины дис-



28. К вычислению силы, действующей на дислокацию



$$G_j = b_i \sigma_{ij}$$

вектор

$$\mathbf{F} = (b\sigma) \times \mathbf{t}, \quad (8.22)$$

инициальная касательная к линии. В этом уравнении  $\mathbf{b}$  действует на первый индекс тензора  $\sigma$ , т. е.  $(b\sigma)_i = b_j \sigma_{ji}$ , как в (8.21). Это замечание

Сила всегда направлена перпендикулярно линии дислокации

# Формула Пича - Келлера

(сила, действующая на единицу длины дислокации)

$\mathbf{t} \equiv \boldsymbol{\xi}$ , *единичный вектор вдоль линии дислокации*

exerted on a unit length of dislocation line by externally applied forces:

$$\mathbf{F} = (t_y G_z - t_z G_y)\mathbf{i} + (t_z G_x - t_x G_z)\mathbf{j} + (t_x G_y - t_y G_x)\mathbf{k}, \quad (3.18)$$

where

$$\begin{aligned} G_x &= \sigma_{xx}b_x + \sigma_{xy}b_y + \sigma_{xz}b_z, \\ G_y &= \sigma_{yx}b_x + \sigma_{yy}b_y + \sigma_{yz}b_z, \\ G_z &= \sigma_{zx}b_x + \sigma_{zy}b_y + \sigma_{zz}b_z. \end{aligned} \quad (3.19)$$

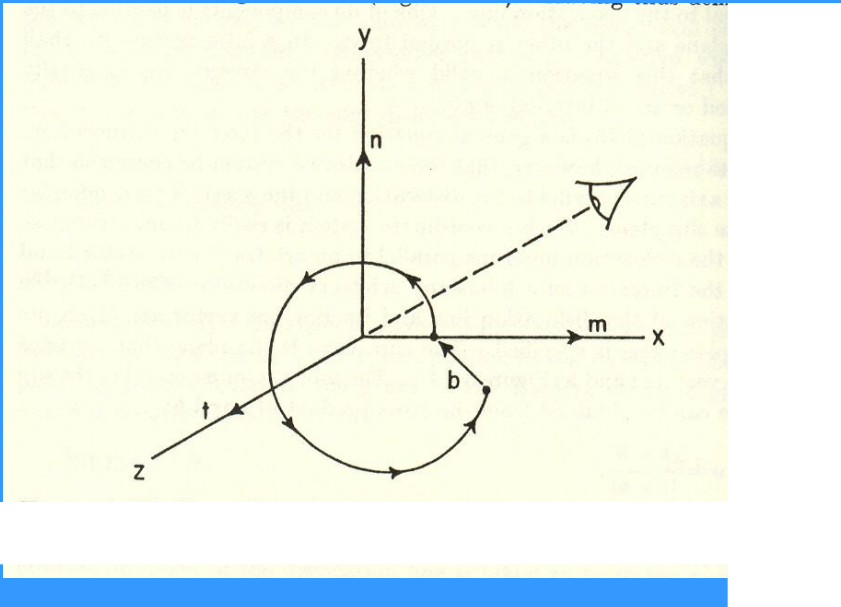
The quantities  $b_x$ ,  $b_y$ , and  $b_z$  are the three components of the Burgers vector, and  $\sigma_{yx} = \sigma_{xy}$ , etc. If we let Equation (3.19) define the three components of a vector  $\mathbf{G}$ , Equation (3.18) can be rewritten as:

$$\mathbf{F} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ t_x & t_y & t_z \\ G_x & G_y & G_z \end{vmatrix} = \mathbf{t} \times \mathbf{G}. \quad (3.20)$$

*Сила всегда направлена перпендикулярно линии дислокации*

This fundamental formula was derived first by Peach and Koehler. It could be noted that, because of the cross product on the right, the force on the dislocation is always directed normal to the dislocation line.

# Сила Пича - Келлера



$\mathbf{t} \equiv \boldsymbol{\xi}$ , единичный  
вектор вдоль  
линии дислокации

$$\mathbf{G}_j = b_i \sigma_{ij}$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{t} \times \mathbf{G}$$

*Сила всегда направлена перпендикулярно линии дислокации*

# Сила Пича - Келлера

- General case of a shear force on a crystal:  $F = \sigma \cdot n$   
( $n$  unit vector of the swept-out surface,  $n = \xi \times u$ , with line vector  $\xi$ , direction of motion  $u$ )
- Displacement by Burgers vector  $b$  if dislocation moves
- Work done by the crystal:

$$W = (\sigma \cdot n) \cdot b = (\sigma \cdot b) \cdot n$$

$$W = (\sigma \cdot b) \cdot (\xi \times u) = \underbrace{(\sigma \cdot b) \times \xi}_{\text{Force to move the dislocation in the direction } u} \cdot u$$

Force to move the dislocation in the direction  $u$

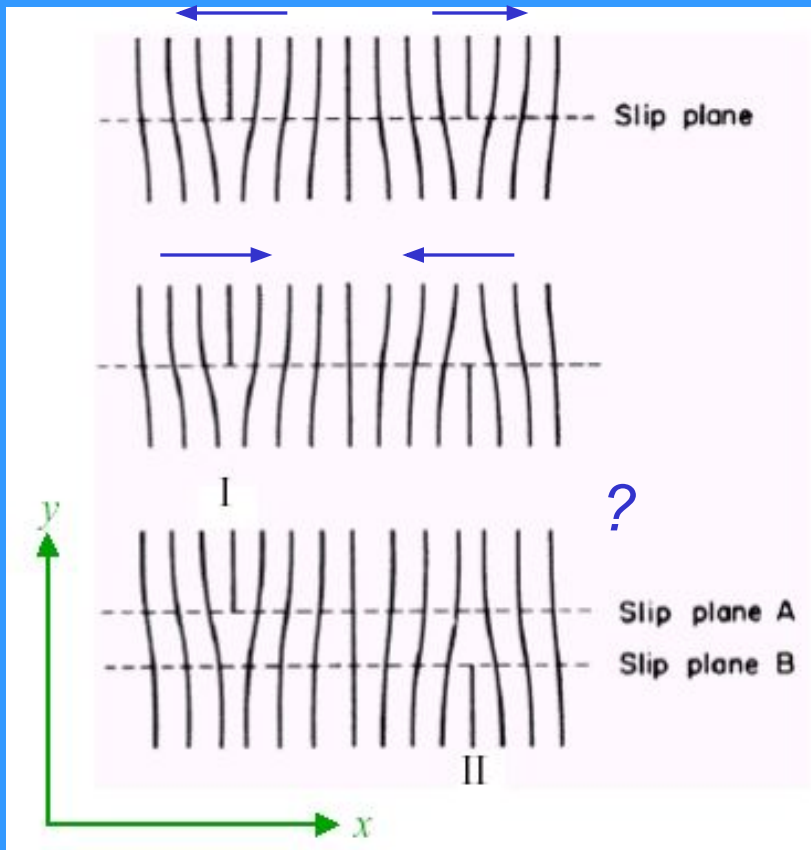
- **Peach-Koehler** force  $F_d = \sigma \cdot b \times \xi$
- Force acting on a plane perpendicular to  $b$
- $\xi \parallel$  dislocation:  $F_d$  always normal to the dislocation

(All eq. are given per unit length of dislocation  $L$ .)

# *Взаимодействие дислокаций*



# Силы между дислокациями



A simple semi-qualitative argument will illustrate the significance of the concept of a force between dislocations. Consider two parallel edge dislocations lying in the same slip plane. They can either have the same sign as in Fig. 4.11(a) or opposite sign as in Fig. 4.11(b). When the dislocations are separated by a large distance the total elastic energy per unit length of the dislocations in both situations will be, from equation (4.24)

$$\alpha Gb^2 + \alpha Gb^2 \quad (4.32)$$

When the dislocations in Fig. 4.11(a) are very close together the arrangement can be considered approximately as a single dislocation with a Burgers vector magnitude  $2b$  and the elastic energy will be given by

$$\alpha G(2b)^2 \quad (4.33)$$

which is twice the energy of the dislocations when they are separated by a large distance. Thus the dislocations will tend to repel each other to reduce their total elastic energy. When dislocations of opposite sign (Fig. 4.11(b)) are close together, the effective magnitude of their Burgers vectors will be zero, and the corresponding long-range elastic energy zero also. Thus dislocations of opposite sign will attract each other to reduce their total elastic energy. The positive and negative edge dislocations in Fig. 4.11(b) will combine and annihilate each other. These

*Аналогия с заряженным конденсатором*

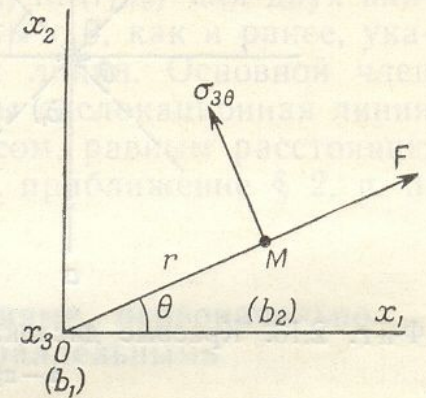
# Взаимодействие двух параллельных винтовых дислокаций

1. *Винтовые дислокации.* Дислокация, лежащая вдоль  $Ox_3$  (фиг. 2.12), создает на плоскости  $x_1Ox_2$  чисто касательные напряжения  $\sigma_{3\theta} = \mu b_1 / 2\pi r$ , если пренебречь действием пары сил на ее концах (см. § 1). Сила, действующая на единицу длины параллельной винтовой дислокации, проходящей через точку

$M(r, \theta)$ , перпендикулярна  $\sigma_{3\theta}$  и  $Ox_3$  и, следовательно, направлена вдоль радиуса  $OM$ , а по величине равна

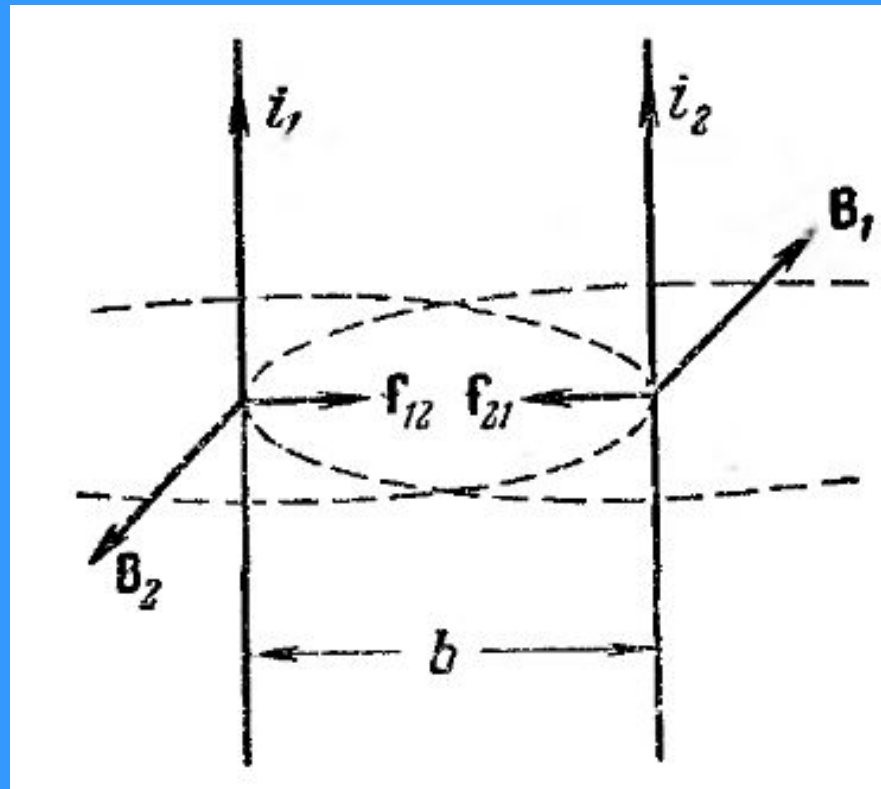
$$F = F_r = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi r}, \quad (2.40)$$

где  $b_1$  и  $b_2$  — два вектора Бюргера. Эта центральная сила является притягивающей, если  $b_1 b_2 < 0$ , и отталкивающей, если  $b_1 b_2 > 0$ ; она убывает с расстоянием как  $1/r$ .



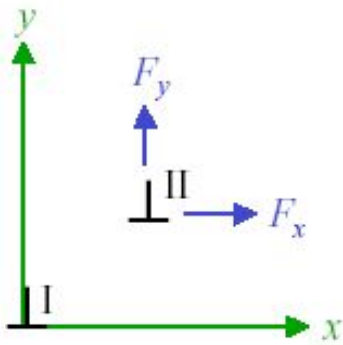
Фиг. 2.12. Взаимодействие между двумя параллельными винтовыми дислокациями.

Снова возникает аналогия с магнитным взаимодействием двух прямолинейных параллельных токов:  $F \approx J_1 J_2 / r$



$$f_{21} = k i_2 B_1 = k \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2i_1 i_2}{b} \cdot$$

# Взаимодействие двух параллельных краевых дислокаций



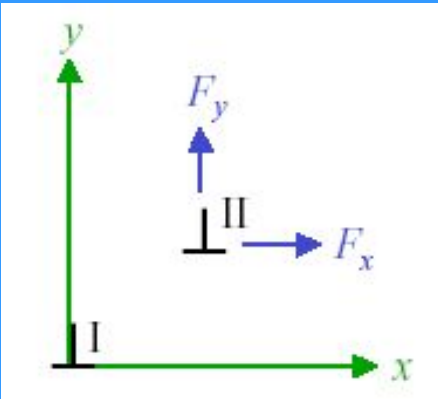
The basis of the method used to obtain the force between two dislocations is the determination of the additional work done in introducing the second dislocation into a crystal which already contains the first. Consider two dislocations lying parallel to the  $z$ -axis (Fig. 4.12). The total energy of the system consists of (a) the self-energy of dislocation I, (b) the self-energy of dislocation II, and (c) the elastic interaction energy between I and II. The *interaction energy*  $E_{\text{int}}$  is the work done in displacing the faces of the cut which creates II in the presence of the stress field of I. The displacements across the cut are  $b_x, b_y, b_z$ , the components of the Burgers vector  $\mathbf{b}$  of II. By visualising the cut parallel to either the  $x$  or  $y$  axes, two alternative expressions for  $E_{\text{int}}$  per unit length of II are

$$E_{\text{int}} = + \int_x^{\infty} (b_x \sigma_{xy} + b_y \sigma_{yy} + b_z \sigma_{zy}) dx \quad (4.34)$$

$$E_{\text{int}} = - \int_y^{\infty} (b_x \sigma_{xx} + b_y \sigma_{yx} + b_z \sigma_{zx}) dy$$

where the stress components are those due to I. (The signs of the right-hand side of these equations arise because if the displacements of  $\mathbf{b}$  are taken to occur on the face of a cut with outward normal in the positive  $y$  and  $x$  directions, respectively, they are in the direction of positive  $x, y, z$  for the first case ( $x$ -axis cut) and negative  $x, y, z$  for the second ( $y$ -axis cut).)

# Вычисление сил взаимодействий



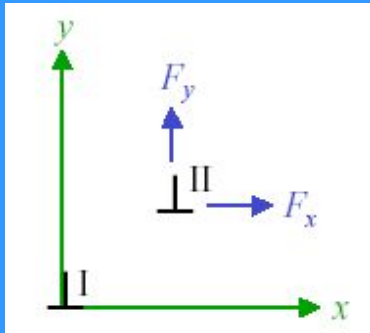
The interaction force on II is obtained simply by differentiation of these expressions, i.e.  $F_x = -\partial E_{\text{int}}/\partial x$  and  $F_y = -\partial E_{\text{int}}/\partial y$ . For the two parallel edge dislocations with parallel Burgers vectors shown in Fig. 4.12,  $b_y = b_z = 0$  and  $b_x = b$ , and the components of the force per unit length acting on II are therefore

$$F_x = \sigma_{xy}b \quad F_y = -\sigma_{xx}b \quad (4.35)$$

where  $\sigma_{xy}$  and  $\sigma_{xx}$  are the stresses of I evaluated at position  $(x, y)$  of II. The forces are reversed if II is a negative edge i.e. the dislocations have opposite sign. Equal and opposite forces act on I.  $F_x$  is the force in the glide direction and  $F_y$  the force perpendicular to the glide plane. Substituting from equation (4.16) gives

$$F_x = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$
$$F_y = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \quad (4.36)$$

Since an edge dislocation can move by slip only in the plane contained by the dislocation line and its Burgers vector, the component of force which is most important in determining the behaviour of the dislocations in Fig. 4.12 is  $F_x$ . For dislocations of the same sign, inspection of the variation of  $F_x$  with  $x$  reveals the following:



$F_x$	<i>nature</i>	<i>x range</i>
negative	repulsive	$-\infty < x < -y$
positive	attractive	$-y < x < 0$
negative	attractive	$0 < x < y$
positive	repulsive	$y < x < \infty$

The sign and nature of  $F_x$  is reversed if I and II are edge dislocations of opposite sign.  $F_x$  is plotted against  $x$ , expressed in units of  $y$ , in Fig. 4.13. It is zero when  $x = 0, \pm y, \pm\infty$ , but of these, the positions of stable equilibrium are seen to be  $x = 0, \pm\infty$  for edges of the same sign and  $\pm y$  if they have the opposite sign.

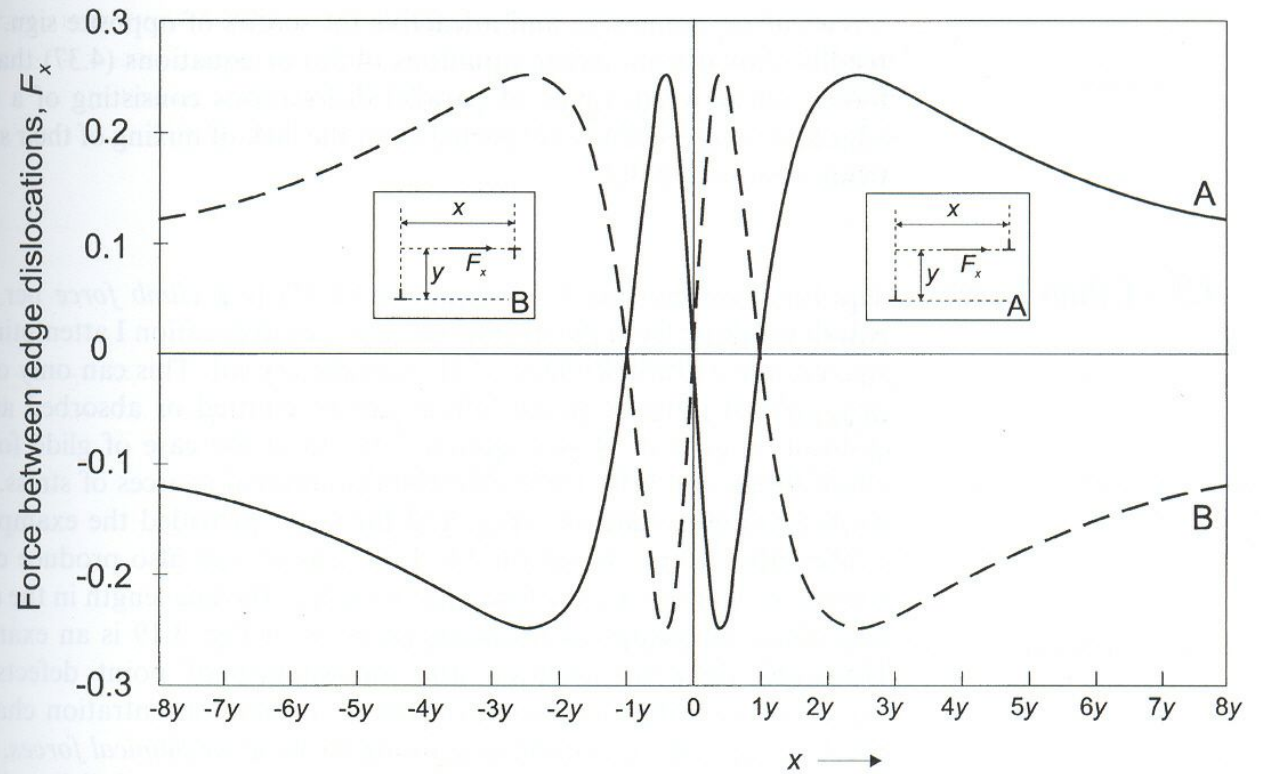
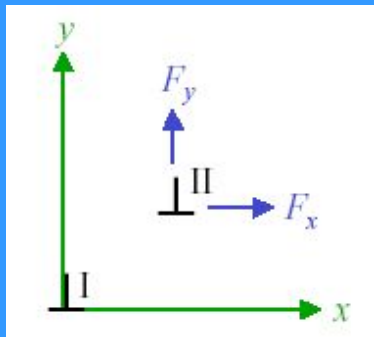
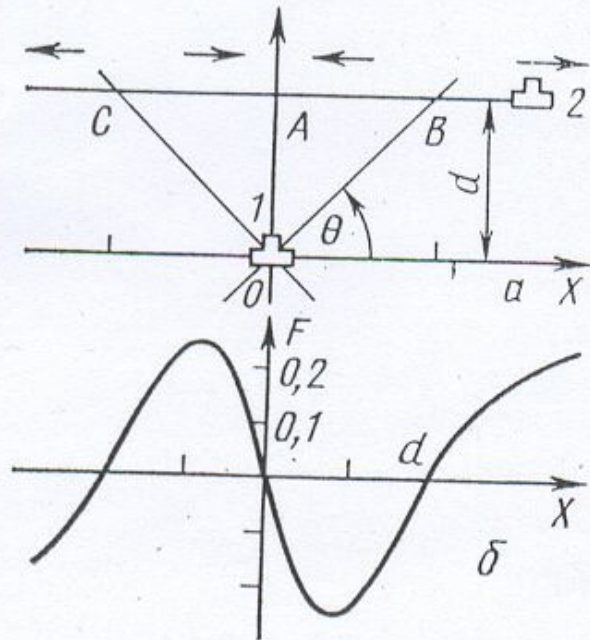


Figure 4.13 Glide force per unit length between parallel edge dislocations with parallel Burgers vectors from equation (4.36). Unit of force  $F_x$  is  $Gb^2/2\pi(1 - \nu)y$ . The full curve A is for like dislocations and the broken curve B for unlike dislocations.

## Взаимодействие дислокаций

Поскольку дислокации создают внутренние напряжения (см. § 14), а в поле напряжений испытывают силу (16.2), между ними возникают упругие силы взаимодействия. Рассмотрим несколько важных случаев взаимодействия дислокаций.



29. Дислокации 1 и 2 в параллельных плоскостях скольжения (а). Сила взаимодействия одноименных дислокаций (б):

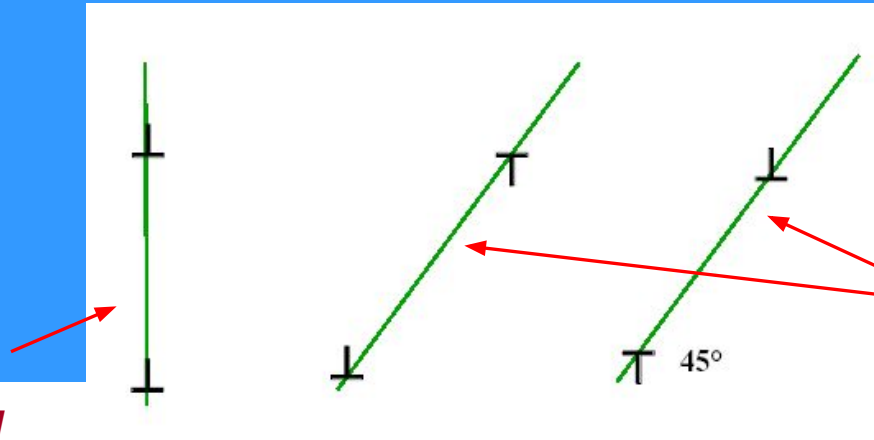
$F > 0$  отвечает отталкиванию при  $x > 0$

Две одноименные невинтовые дислокации в параллельных плоскостях скольжения. Пусть первая дислокация расположена в начале координат (рис. 29, а), а вторая движется в параллельной плоскости скольжения на расстоянии  $d$ . Из рис. 29, б видно, что при  $x > d$  дислокация 2 отталкивается от дислокации 1. Это вытекает также из следующего простого рассуждения. Если  $x \gg d$  то можно считать, что



обе дислокации находятся практически в одной плоскости скольжения. Тогда области сжатия обеих дислокаций перекрываются (см. рис. 24) и области растяжения тоже. Такое перекрытие энергетически невыгодно и дислокации отталкиваются. Согласно рис. 24 знак напряжения  $\sigma_{xy}$  и, следовательно, силы взаимодействия изменяются при  $x=d$ . Эта точка отвечает неустойчивому положению равновесия двух дислокаций, а при  $x < d$  вторая дислокация притягивается к устойчивому положению равновесия  $x=0$ . Направление силы, действующей на дислокацию 2, указано на рис. 29 стрелками.

## Стабильные конфигурации краевых дислокаций



Стабильные дипольные конфигурации для дислокаций противоположного знака

Стабильная конфигурация для дислокаций одного знака

if they have the opposite sign.

It follows that an array of edge dislocations of the same sign is most stable when the dislocations lie vertically above one another as in Fig. 4.14(a). This is the arrangement of dislocations in a small angle pure tilt boundary described in Chapter 9. Furthermore, edge dislocations of opposite sign gliding past each other on parallel slip planes tend to form stable *dipole* pairs as in Fig. 4.14(b) at low applied stresses (section 10.8).

**Дислокационный диполь.** Если изменить знак дислокации 2, то в точке  $A$  ее равновесие неустойчивое, а в  $B$  и  $C$  — устойчивое. Такая устойчивая пара разноименных дислокаций называется дислокационным диполем ( $d$  — плечо диполя). Конфигурации  $B$  и  $C$  устойчивы при отсутствии внешнего напряжения. Если же кристалл находится под однородным касательным напряжением  $\sigma_{xy} = \sigma_a$ , условие устойчивости требует, чтобы суммарная сила, действующая на каждую дислокацию, была равна нулю. Для дислокации 2 это означает, что

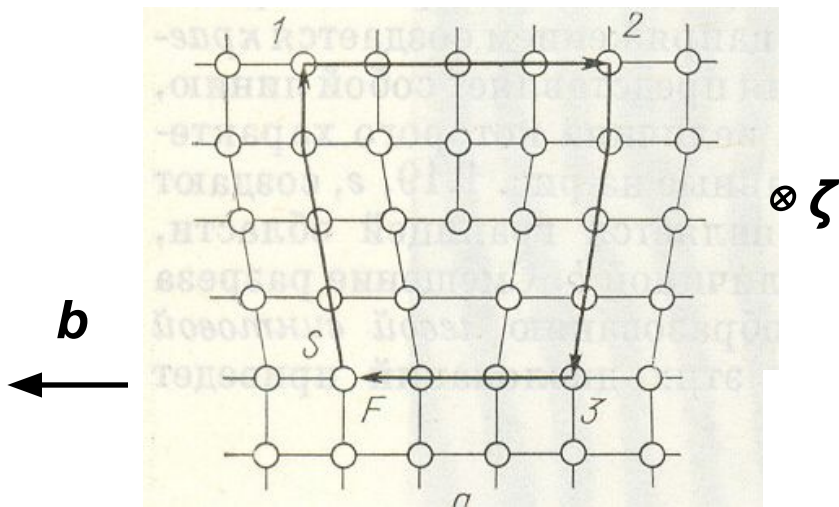
$$\sigma_a b + (Db/r) \cos \theta \cos 2\theta = 0,$$

или в декартовых координатах

$$\sigma_a b = -Db \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}. \quad (17.1)$$

График правой части (17.1) как функции  $x$  при  $y = d$  представлен на рис. 29, б. Сила отложена в единицах  $Db/d$ . Ее максимальное значение равно 0,2500. Следовательно, при  $\sigma_a > \sigma^0 = 0,2500 D/d$  уравнение (17.1) не имеет вещественного решения, т. е. под действием напряжения  $\sigma > \sigma^0$  диполь теряет устойчивость и разрывается, дислокации расходятся в противоположные стороны. Если под действием напряжения  $\sigma > \sigma^0$  к покоящейся или скользящей дислокации 1 приближается в параллельной плоскости дислокация 2, она проходит мимо. Если  $\sigma < \sigma^0$ , она захватывается дислокацией 1 и образуется диполь. Из (17.1) следует, что поле напряжений дислокационного диполя с центром на прямой  $r = 0$  при  $|r| \gg d$  убывает как  $r^{-2}$ .

*Почему дислокации не являются термодинамически равновесными дефектами решетки?*



$$\mathbf{b} \perp \zeta$$

Вектора  $\mathbf{b}$  и  $\zeta$  определяют плоскость скольжения

## Оценки упругой энергии дислокации

При обычных значениях плотности дислокаций  $\rho = 10^7 \text{ см}^{-2}$ , среднее расстояние между ними составляет  $R \approx \rho^{-1/2} \approx 3 \cdot 10^{-4} \text{ см}$ , что дает

$$\text{для } \ln \frac{R}{r_0} \approx 10$$

$$\text{и } E_{e \text{ полн}} / L \approx Gb^2$$

При  $G \approx 10^{12} \text{ дин.см}^{-2}$  и  $b = 2 \cdot 10^{-8} \text{ см}$  имеем:

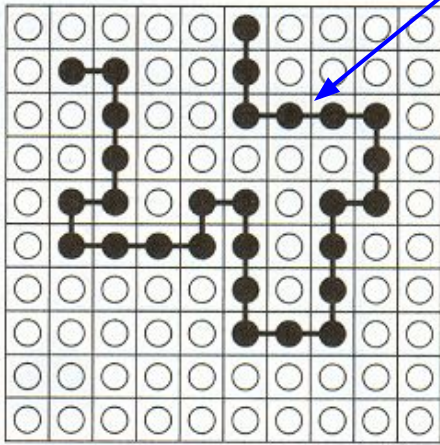
$$E_{e \text{ полн}} / L \approx 4 \cdot 10^{-4} \text{ эрг/см}$$

Что в пересчете на одну связь дает:

$$E_{\text{bond}} \approx 4 \cdot 10^{-4} \text{ эрг/см} \times 2 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 8 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} \approx 5 \text{ эв}$$

## Расчет энтропии дислокационной линии

*«траектория» дислокационной линии в плоскости скольжения*



Легко вычислить общее число путей длины  $N$  : если каждый узел решетки имеет  $z$  соседей, то число различных возможностей на каждом шаге есть  $z-1$ , и общее число путей равно

$$\Omega = \sum \Omega_N = (z - 1)^N$$

*(сумма статистических весов всех конфигураций, возможных в системе).*

*Энтропия  $S$  определяется всеми возможными конформациями цепи, которые начинаются в начале координат и заканчиваются за  $N$  шагов:*

$$S = k_B \ln \Omega = k_B N \ln(z-1)$$

Двумерный случай,  $D=2$ ,  $z = 4$ :

$$S = k_B N \ln 3$$

В случае дислокации, состоящей из  $N$  звеньев, ее свободную энергию можно записать в виде:

$$F = NE - TS = NE - k_B T N \ln 3$$

или в пересчете на одну связь:

$$F/N = E - k_B T \ln 3$$

$$T \approx T_{melt}$$

$$k_B T = 1.4 \cdot 10^{-16} \text{ эрг/К} \times 1200 \text{ К} = 1.6 \cdot 10^{-13} \text{ эрг} \approx 10^{-1} \text{ эВ}$$

$$E = E_{bond} \approx 5 \text{ эВ} .$$

$$E \gg k_B T$$

Таким образом, прирост энтропии благодаря создаваемому дислокациями беспорядку, недостаточен, чтобы компенсировать рост энергии дислокационной линии.

Согласно выражениям (8.14) и (8.15), величина  $\mu b^3$  есть типичная энергия дислокационной линии, приходящаяся на межатомное расстояние вдоль линии. В ГЦК-металле Al,  $\mu b^3 \sim 2,2$  эВ ( $\mu = 2,7 \times 10^{10}$  Н/м<sup>2</sup>,  $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[110]$ ,  $b = 0,29$  нм). В оливине, ромбоэдрическом смешанном силикате Mg и Fe, наиболее распространенном в земной коре минерале, имеем:  $\mu b^3 \sim 52$  эВ ( $\mu = 8 \times 10^{10}$  Н/м<sup>2</sup>,  $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[110]$ ,  $b = 0,48$  нм). Энергии ядер, как мы увидим, имеет тот же порядок величины. Таким образом, полная энергия дислокационной линии, измеренная на атомную или молекулярную длину вдоль линии, значительна и, самое меньшее, имеет тот же порядок величины, что и энергия связи. Следовательно, за исключением специальных случаев, дислокация является неравновесным объектом, так как прирост энтропии благодаря создаваемому дислокациями беспорядку мал,



*Таким образом свободная энергия системы может быть минимизирована только если все дислокации удалены из кристалла. Термодинамически равновесные дислокации не могут существовать в кристалле.*

*Дислокации, в отличие от точечных дефектов, являются линейными дефектами решетки. Это топологическое отличие проявляется при подсчете числа состояний и энтропии дислокаций.*

# Равновесная концентрация точечных дефектов

Возможность существования дефектов со столь высокой энергией в условиях термодинамического равновесия объясняется тем, что образование точечных дефектов намного повышает энтропию кристалла. Из кристалла, содержащего  $N$  одинаковых атомов, можно удалить  $n$  атомов

$$C_N^n = \frac{N!}{n!(N-n)!}$$

различными способами. По формуле Больцмана соответствующее приращение конфигурационной энтропии равно

$$\Delta S = k \ln \frac{N!}{n!(N-n)!} \quad (1)$$

Если энергия образования одного дефекта равна  $E$ , то образование  $n$  дефектов при температуре  $T$  изменяет свободную энергию кристалла на

$$\Delta F = nE - T\Delta S. \quad (2)$$

$$\Omega = C_N^n = N!/n!(N-n)!$$

$$c = n/N \approx e^{-E/kT}$$

# Dislocations and crystal growth

- Thermodynamically stable density of dislocations in a stress-free crystal is zero
- Nevertheless, dislocations occur in all crystals
- Introduction during the growth process
- Dislocations or other defects in the seed give rise to the extension of dislocations in the growing crystal

## *Other processes:*

- Heterogeneous nucleation of dislocations due to internal stress of particles, thermal expansion/contraction
- Formation of dislocation loops due to aggregation of supersaturated point defects
- Impingement of different parts of the growing interface with imperfect matching (**misfit**)