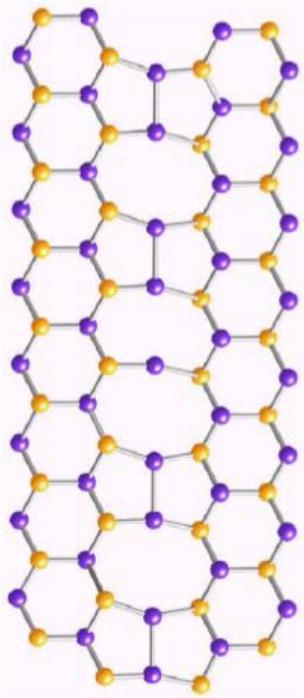


# *Физика реального кристалла*

10. *Сдвиговая прочность кристаллов. Модели ядра дислокаций. Барьер Пайерлса. Механизмы пластической деформации.*



*Профессор Б.И.Островский*

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

*Прочность кристаллов на сдвиг*

## Атомная структура ядра дислокации

Опыт показывает, что свойства дислокаций, особенно их подвижность, в разных кристаллах сильно различаются. Одни кристаллы пластичны, другие практически не способны пластически деформироваться (по крайней мере при не очень высоких температурах) и под действием напряжения хрупко разрушаются. Указанные и некоторые другие особенности определяются атомной структурой ядра дислокации.

Пластичные  
материалы  
можно ковать!

*Fe, Cu – пластичны; Si, Ge – хрупки*

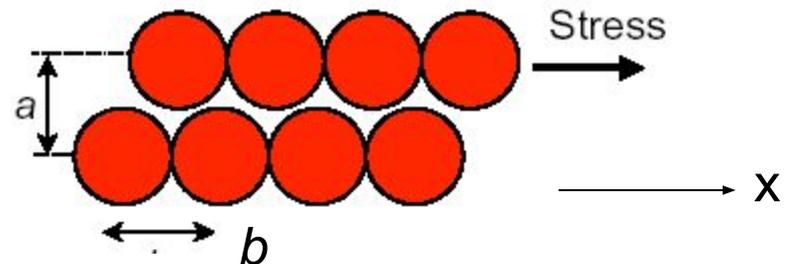
??

# Пластическая деформация кристаллов

- Existence of **dislocations** as line defects deduced as early as in the 1930ies (Orowan, Polanyi, Taylor independently in 1934)
- Important contributions 1930–50 by Dehlinger, Seitz, Burgers, Cottrell, Frank, ...
- Strong evidence for dislocations: comparison of theoretical and experimental shear stress (Frenkel)

Periodic shearing force to move the top atomic row:

$$\tau(x) = A \sin \frac{2\pi}{b} x$$



Для малых сдвиговых деформаций,  $\epsilon = x/a$ , справедлив закон Гука:  $T = G\epsilon = Gx/a$ . При этом  $T(x) \approx A2\pi x/b$

Max.  $\tau$  is **theoretical critical shear stress**:

$$A = \frac{G b}{2\pi a} \quad \text{i. e. } A \approx G/2\pi$$

Experimentally:  
 $10^{-4}$  to  $10^{-8} G$

## Модель Френкеля

дующем разделе.

### ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ НА СДВИГ ИДЕАЛЬНОГО КРИСТАЛЛА

Классическую работу в этой области выполнил Френкель [13], который использовал показанную на рис. 1.2 зависимость между касательным напряжением и смещением сдвига. Френкель предположил, что в процессе пластического сдвига по рациональной плоскости кристалл проходит через серию эквивалентных состояний с одинаковыми энергиями и с периодом между состояниями, равным  $b$  — величине простого вектора трансляции решетки. Малыми граничными эффектами, связанными с образующимися на поверхности в результате сдвига ступеньками, Френкель пренебрегал. Касательное напряжение, которое необходимо приложить к кристаллу, чтобы произвести сдвиг на величину  $x$ , пропорционально  $\frac{dW}{dx}$ , где  $W$  — энергия перемещения на единицу длины в данной плоскости. Френкель предположил, что в первом приближении периодическая зависимость указанной энергии является синусоидальной, т. е.

$$\sigma = \sigma_{\text{теор}} \sin \frac{2\pi x}{b}. \quad (1.1)$$

Для малых деформаций сдвига  $x/d$ , где  $d$  — межплоскостное расстояние, выполняется закон Гука:

$$\sigma = \mu \frac{x}{d}. \quad (1.2)$$

Здесь  $\mu$  — модуль сдвига. Приравнявая уравнения (1.1) и (1.2) в случае малых деформаций, когда  $\sin(2\pi x/b) \simeq 2\pi x/b$ , для теоретического напряжения сдвига  $\sigma_{\text{теор}}$  получаем

$$\sigma_{\text{теор}} = \frac{\mu b}{2\pi d} \simeq \frac{\mu}{5}. \quad (1.3)$$

Во времена работы Френкеля экспериментальные значения касательного напряжения, которое требовалось для начала пластического течения в металлах, не превышали  $(10^{-3} \div 10^{-4}) \mu$ , что заметно расходится с величиной, предсказываемой уравнением (1.3).

Учитывая эту ситуацию, авторы более поздних работ отмечали, что уравнение (1.3), возможно, завышает величину  $\sigma_{\text{теор}}$  по той причине, что согласно различным полуэмпирическим законам межатомного взаимодействия силы притяжения убывают с расстоянием гораздо быстрее, чем синусоидальный потенциал.

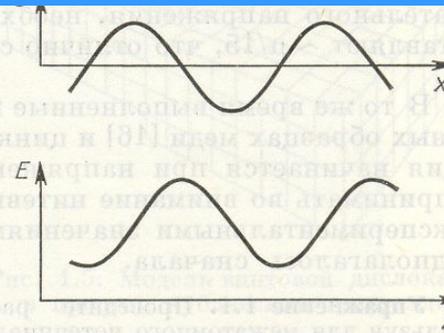
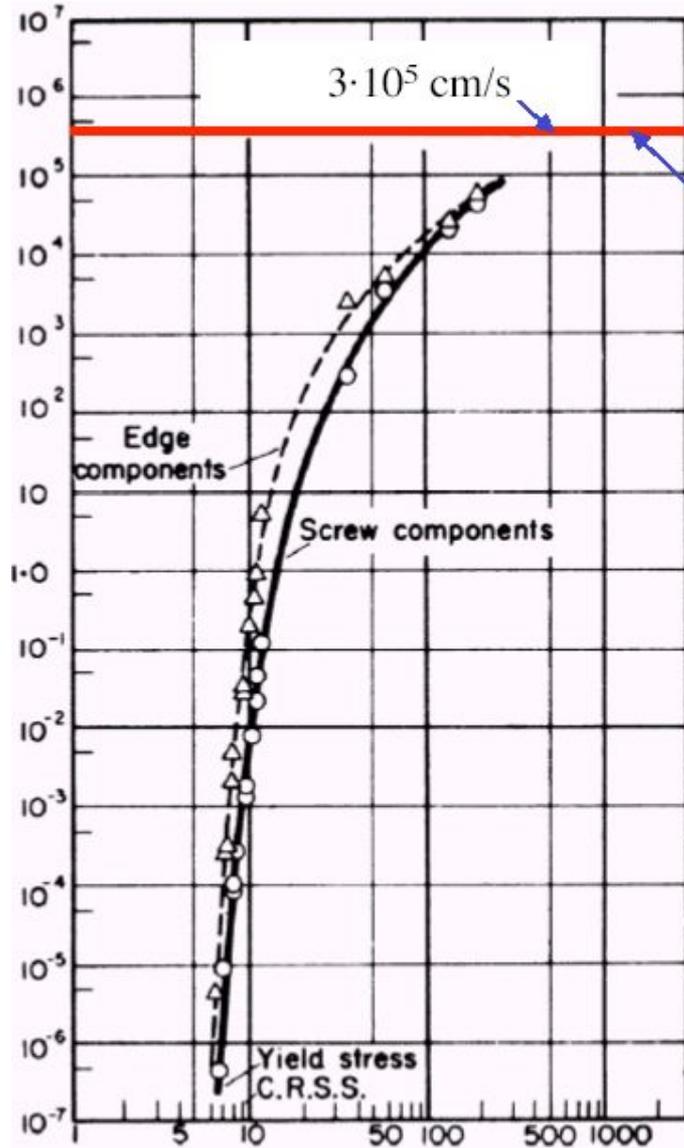


Рис. 1.2. Периодический потенциал решетки и соответствующая величина касательного напряжения, необходимого для сдвига в идеальной решетке.

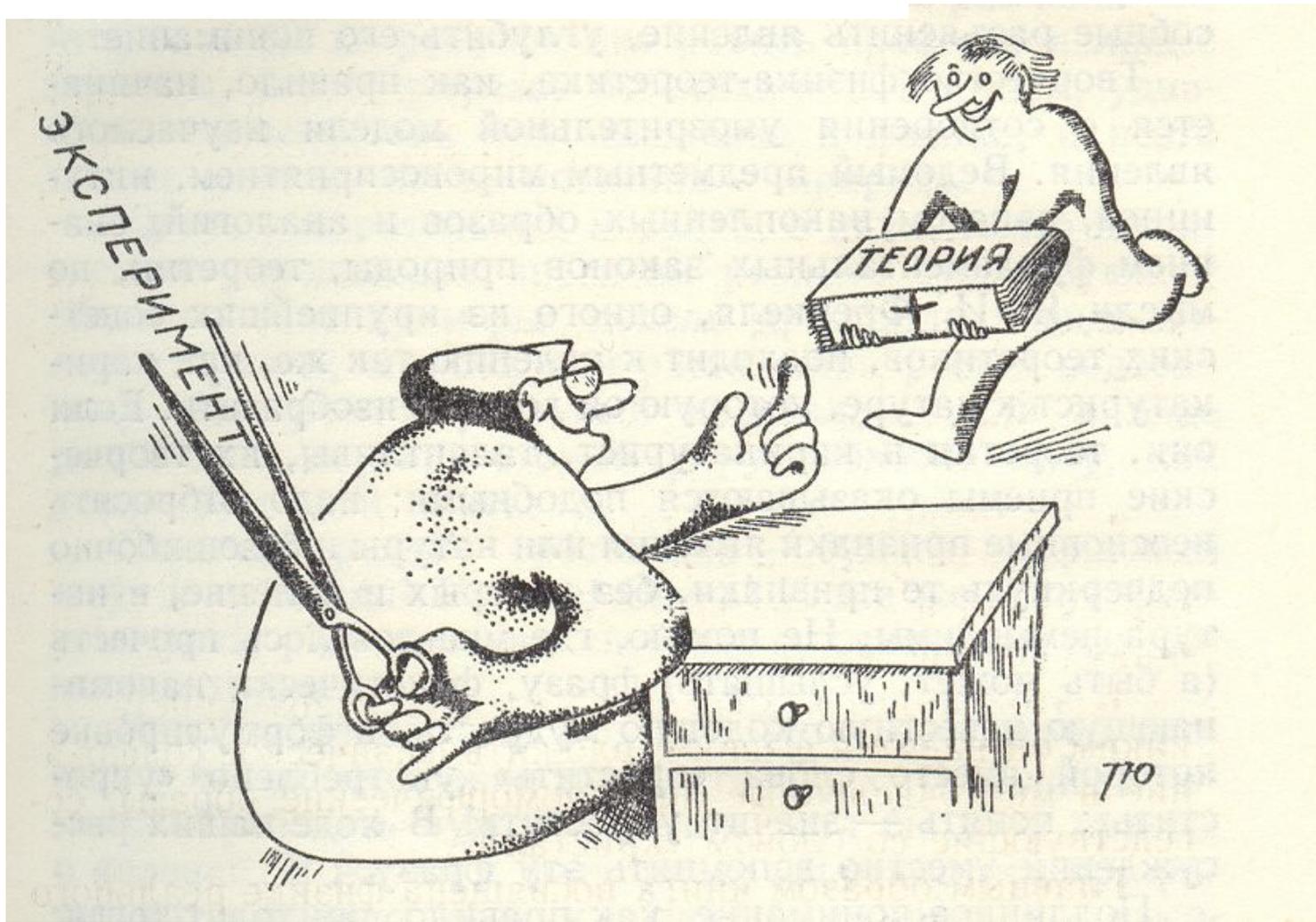
$$\sigma \equiv \tau = -dU/dx$$



## Velocity of dislocations

Velocity of (110)[110] shear waves

Stress dependence of dislocation velocity  
in LiF  
[Gilman, Johnston 1959/Hull, Bacon 1992]



## Экспериментальные факты

Испытание монокристалла на растяжение при низкой температуре (рис. 8.13) выявляет линии скольжения, расположенные в тех плотных плоскостях решетки, которые ближе всего к плоскостям с максимальным сдвиговым напряжением, вызываемым приложенной растягивающей силой, т. е.

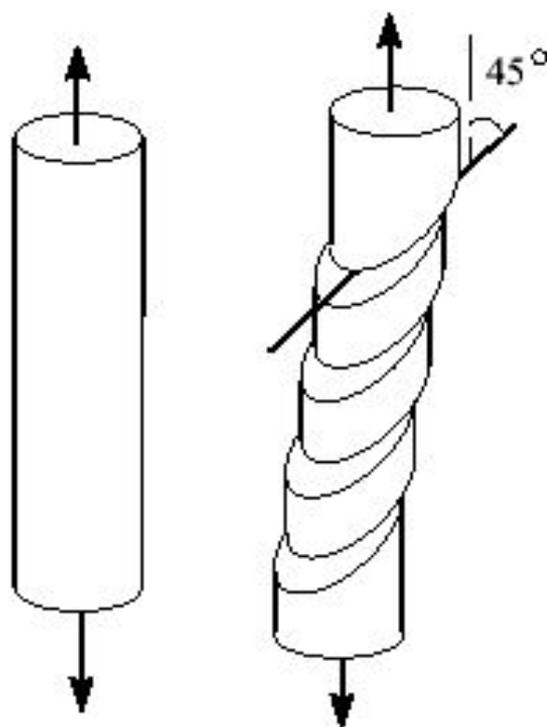
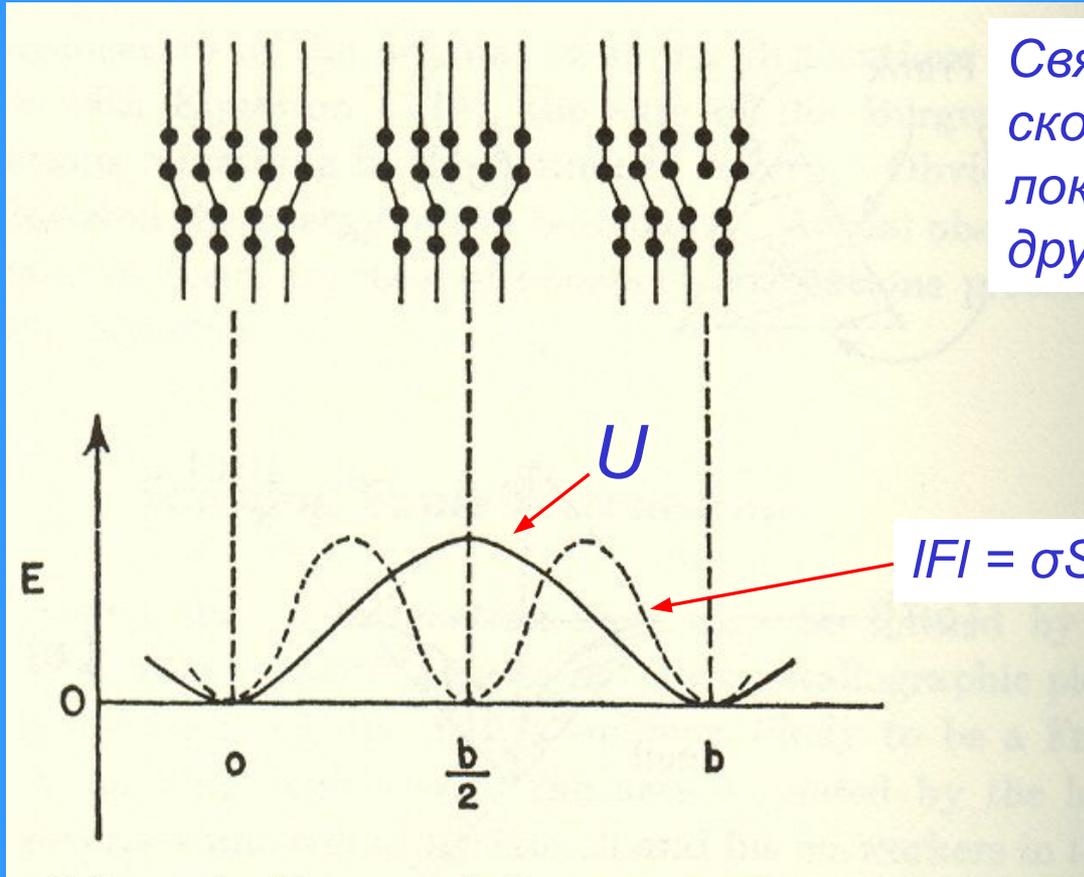


Рис. 8.13. Растягивающее напряжение

есть близко к плоскостям, составляющим угол  $45^\circ$  с осью растяжения. Эти плотные плоскости являются, как легко понять, плоскостями скольжения и размножения дислокаций. Но не сразу очевидно, почему направления смещения являются плотными *направлениями* в этих плотных плоскостях. Скольжение начинается при значении сдвигового напряжения  $\sigma_E$ , называемом *напряжением течения*. Модель Пайерлса объясняет три факта: 1) движение дислокаций облегчено по плоскости, в которой ее ядро «размазано», такие плоскости являются плотными; 2) направление смещения является плотным направлением; 3) напряжение течения есть напряжение, необходимое для преодоления энергетических барьеров, создаваемых изменениями энергии ядра при движении дислокации через неэквивалентные положения в решетке, что есть сила трения.

# Барьер Пайерлса



Связи в плоскости скольжения рвутся локально, одна за другой!

$$|F| = \sigma S = -dU/dx$$

Schematic diagram of the energy of an edge dislocation as a function of its position in the lattice.

# Барьер Пайерлса

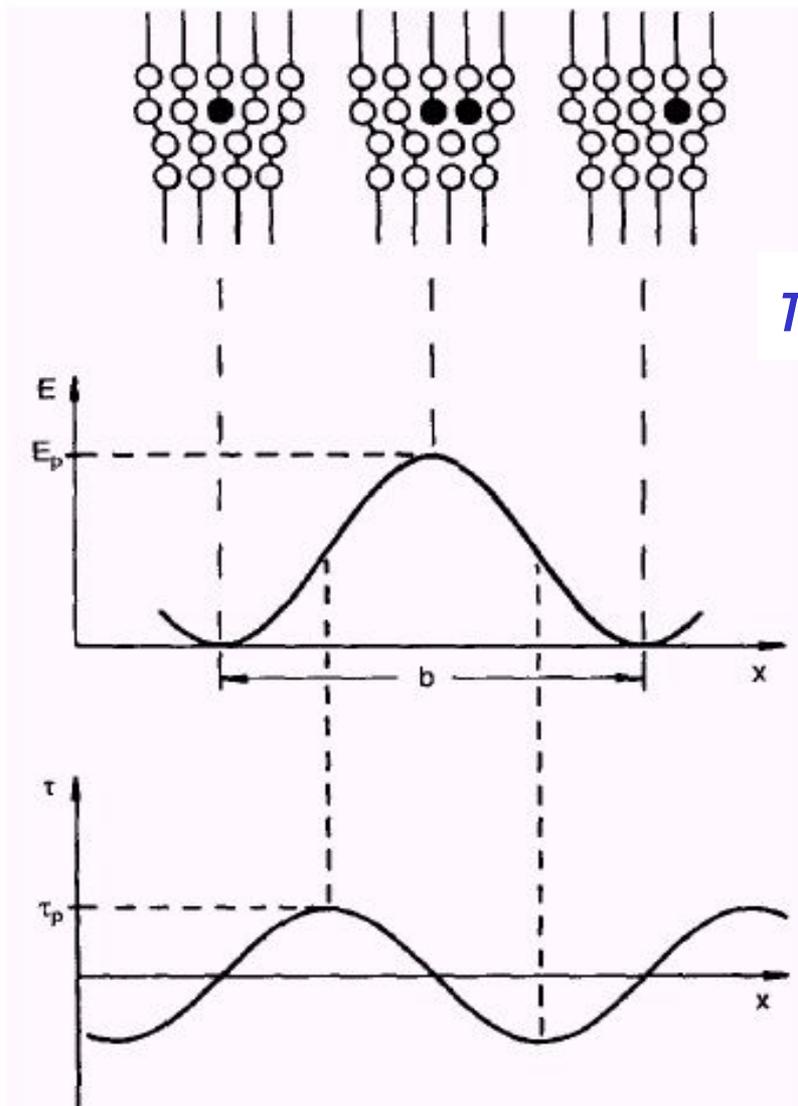
$$E_p \ll k_B T$$

Критическое сдвиговое напряжение

$$\tau_p \approx 10^{-3} \div 10^{-4} G$$

for fcc and hcp metals  
(very small!)

Fig. 3-23. Sketch illustrating the definition of the Peierls energy  $E_p$  and the Peierls stress  $\tau_p$ .  $\tau_p$  is given by the negative gradient of the Peierls potential and is the stress which a dislocation has to overcome to glide on a slip plane. In materials with relatively large  $\tau_p$ , e.g., in Ge  $\tau_p \cong 10^{-2} G$ , dislocation can move at  $\tau \ll \tau_p$  by thermally activated formation of kink pairs which can then propagate sideways.



# Модель Пайерлса - Набарро

- Disregistry  $\Leftrightarrow$  core energy, resistance to dislocation movement
- Simple approach (Peierls–Nabarro model): sinusoidal force relation between planes A, B
- Calculation of the dislocation energy per unit length as a function of the dislocation position
- Maximum: **Peierls energy**

$$E_p = \frac{Gb^2}{\pi(1-\nu)} \exp\left(-\frac{2\pi w}{b}\right)$$

$$\tau_p = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left(-\frac{2\pi w}{b}\right)$$

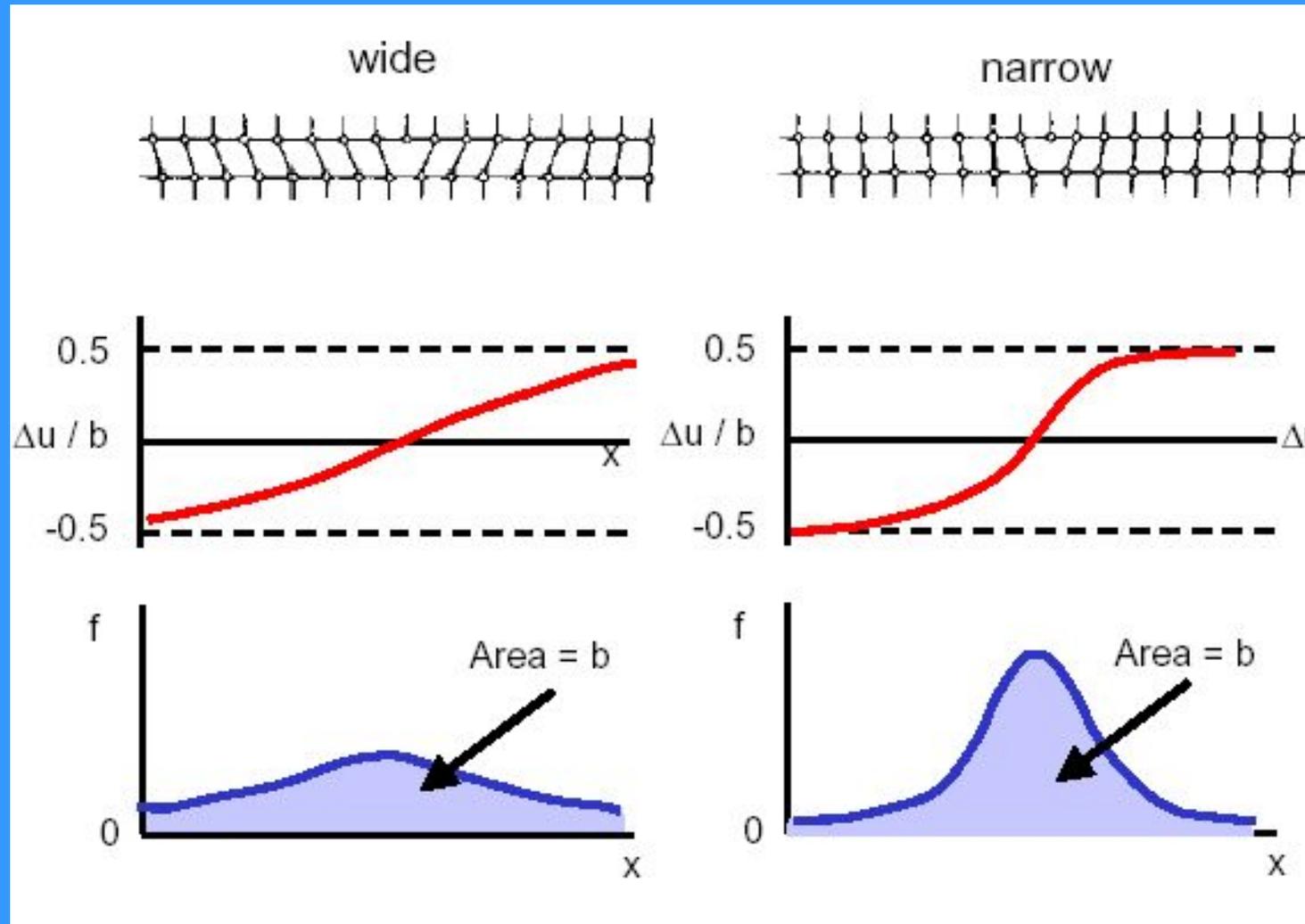
«ширина»  
ядра  
дислокации

- **Peierls stress**: resolved shear stress required to move a dislocation in the perfect crystal
- Direct consequence of the lattice periodicity
- $\tau_p$  depends on the core structure

$$\tau_p \approx 10^{-5}G$$

for fcc and hcp metals  
(very small!)

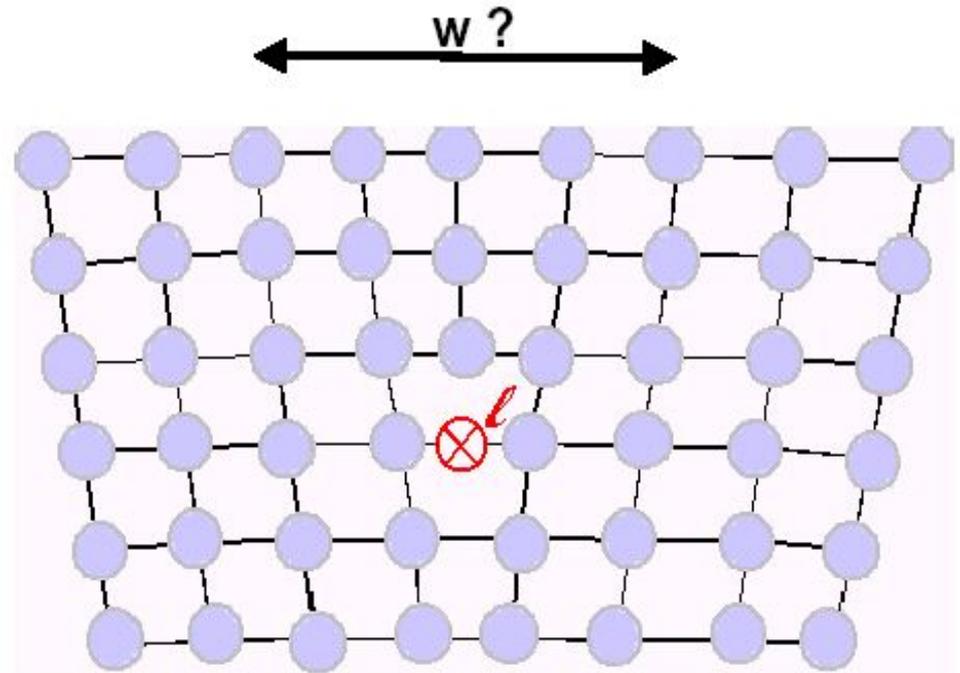
# Распределение вектора Бюргерса в ядре дислокации



# Dislocation motion – The Peierls-Nabarro Stress

Elasticity theory tells us a lot about dislocations' stresses, energetics & interactions, but to understand dislocation mobility we need to look at the core structure and how it changes as the dislocation moves.

1. Can we define the width of a dislocation core and what does it depend on?
2. What happens as the dislocation moves on the glide plane?
3. Why do dislocations choose particular crystallographic planes within a crystal on which to glide?  
In principle slip could take place on any plane.



In the original Peierls Nabarro model the core structure of a dislocation is derived by balancing the forces produced by deforming two half crystals with a one-dimensional periodic potential acting across the glide plane [21,22]. The model is attractive in its simplicity, incorporating atomistic effects into a continuum framework. However, it involves solving an integral equation:

$$C \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p(x')}{x - x'} dx' = F(u), \quad p(x) = \frac{du}{dx} \quad (2)$$

where  $p(x)$  is subject to a normalization condition corresponding to the closure failure produced by the burgers vector. Here  $x$  is in the plane of the dislocation core perpendicular to the line direction, and  $u(x)$  is the misfit in the direction of the burgers vector. Eq. (2) equates the restoring stress of the atoms interacting across the glide plane,  $F(u)$ , with the stress produced by a continuous distribution of infinitesimal dislocations ( $p(x)$ ). The analytic solution for the PN model for a sinusoidal potential takes a  $\tan^{-1}$  form, though in practice the potential realized in an actual lattice may be more

[21] R. Peierls, Proc. Phys. Soc., London B 52 (1940) 34.

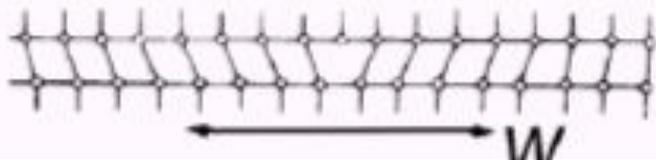
[22] F.R.N. Nabarro, Proc. Phys. Soc., London B 59 (1947) 256.

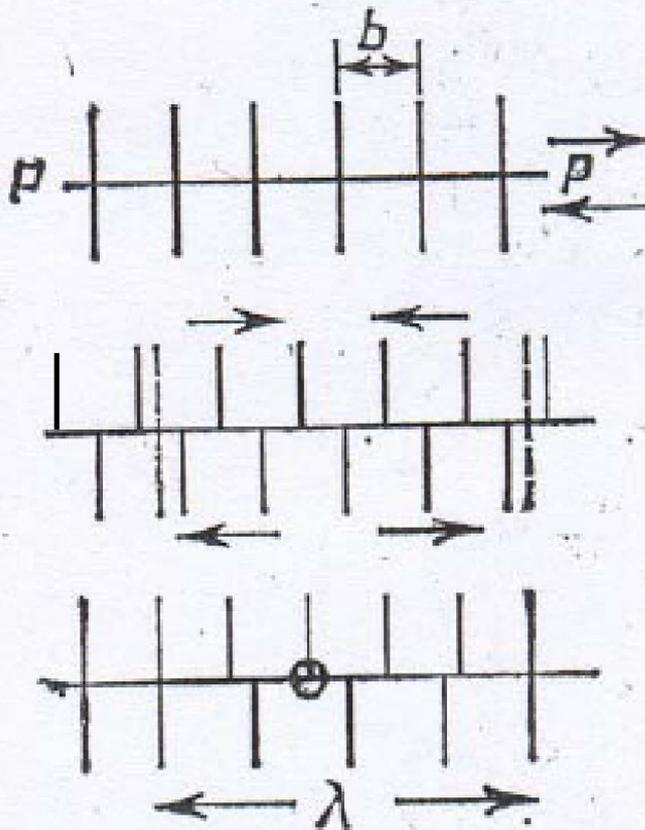
## Модель Пайерлса

Для количественного исследования роли дискретности кристаллической решетки в дислокационной деформации *Р. Пайерлс* (1940) предложил полумикроскопическую модель, позволяющую, с одной стороны, учесть трансляционную симметрию кристалла, а с другой, — получить непосредственный предельный переход к результатам теории упругости.

Чтобы получить кон-

фигурацию дислокации в упругой среде с периодической структурой в направлении  $PP$  (рис. 42) с периодом, равным  $b$ , проведем в плоскости скольжения  $PP$  сдвиг одной половины кристалла относительно другой на  $b/2$ , затем сожмем верхнюю половину и растянем нижнюю, чтобы на бесконечности (а практически на некотором расстоянии  $\lambda/2$  от центра рисунка) восстановилось правильное взаимное расположение вертикальных плоскостей в верхней и нижней половине. Тогда в плоскости  $PP$  возникает краевая дислокация.





Сдвиг одной половины кристалла относительно другой на  $b/2$

Сожмем верхнюю половину кристалла и растянем нижнюю

42. Образование дислокации в модели Пайерлса:

○ — край обрывающейся атомной плоскости

## Теория Пайерлса — Набарро

Рассмотрим краевую дислокацию с вектором Бюргера  $b, 0, 0$ , лежащую в направлении  $[001]$  в плоскости  $(010)$  простой кубической решетки. Выберем начало координат на дислокации и обозначим через  $u(x)$  компоненту смещения верхней стороны плоскости скольжения в направлении скольжения, а соответствующее смещение нижней стороны — через  $\bar{u}(x)$ . Предположим, что  $\bar{u}(x) = -u(x)$ , и пренебрежем вертикальными смещениями. Тогда взаимное смещение двух атомов, расположенных один против другого по разные стороны от плоскости скольжения, дается выражением

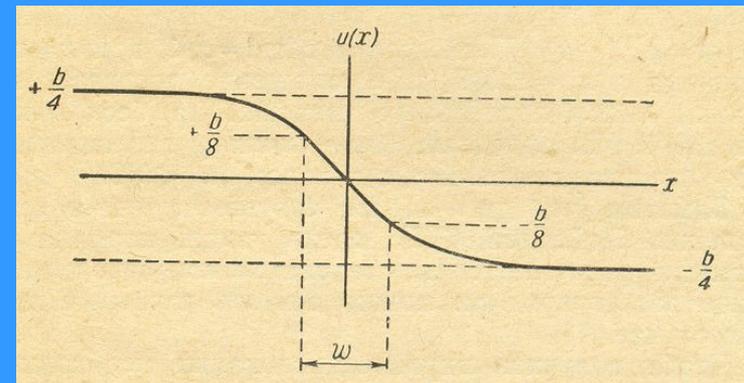
$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}b + 2u(x) & \text{при } x > 0, \\ -\frac{1}{2}b + 2u(x) & \text{при } x < 0. \end{cases} \quad (7.2)$$

Поскольку на бесконечно большом расстоянии от дислокации атомы расположены правильно, можно написать

$$\varphi(\pm\infty) = 0, \quad u(\pm\infty) = \mp \frac{b}{4}, \quad (7.3)$$

т. е. функция  $u(x)$ , по-видимому, должна быть такой, как на фиг. 29.

**Функция взаимного смещения двух атомов, расположенных один против другого по разные стороны от плоскости скольжения**

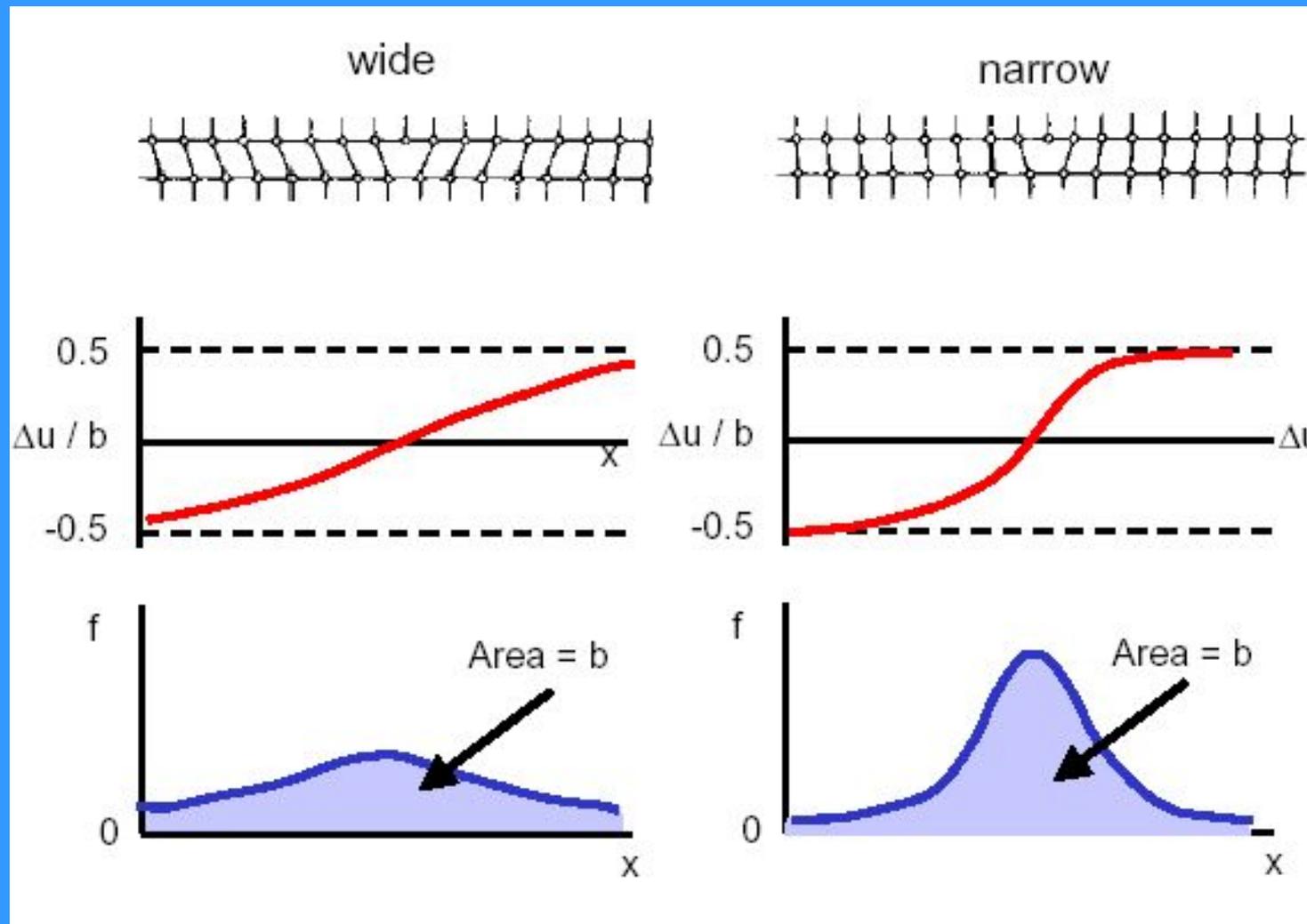


## Расположение $n$ одноименных дислокаций в плоскости скольжения

Задача о равновесной конфигурации  $n$  дислокаций в скоплении была рассмотрена Эшелби, Франком и Набарро. Она сводится к решению системы уравнений равновесия для каждой из  $n$  дислокаций, имеющих вид (в соответствии с принципом суперпозиции напряжений в линейной теории упругости)

$$\sigma = \sum_{j=1}^n \frac{D}{x_i - x_j} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad D = Gb/2\pi(1-\nu)$$

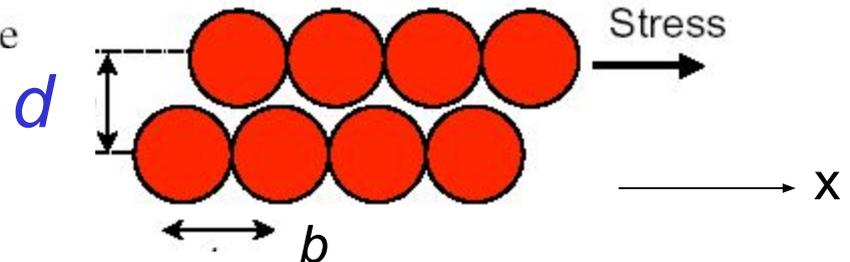
# Распределение вектора Бюргерса в ядре дислокации



$$\tau(x) = \sigma(x) = \left(\frac{Gb}{2\pi d}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{b}\right)x$$

Periodic shearing force to move the top atomic row:

$$\tau(x) = \sigma(x) = A \sin\left(\frac{2\pi}{b}\right)x$$



Для малых сдвиговых деформаций,  $\epsilon = x/d$ , справедлив

закон Гука:  $T = G\epsilon = Gx/d$ . При этом  $T(x) \approx A2\pi x/b$

Max.  $\tau$  is **theoretical critical shear stress**:

$$A = \frac{Gb}{2\pi d}$$

Предположим, что лишняя атомная плоскость на рисунке не дискретная, а равномерно размазана в пространстве, образуя элементарные дислокации с плотностью вектора Бюргерса  $b'(x)$ , так что полный вектор Бюргерса

$$b = \int_{-\infty}^{\infty} b'(x') dx'. \quad (20.23)$$

С другой стороны, очевидно, что

$$b = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{du}{dx} \right)_{x=x'} dx'. \quad (20.24)$$

Каждая элементарная дислокация в точке  $x'$  создает в точке  $x$  касательное напряжение  $\sigma_{xy} =$

$= -Db'dx'/(b(x-x'))$ . Полное напряжение в точке  $x$  равно

$$\sigma_{xy} = -\frac{D}{b} \int \frac{b' dx'}{x-x'}. \quad (20.25)$$

В равновесии напряжение (20.25) должно быть скомпенсировано напряжением, вызванным взаимодействием (20.22) с другой половиной кристалла и равным

$$\sigma_{xy} = 2G\varepsilon_{xy} = -2G \frac{u}{d} = -2G \frac{\varphi}{2d} = \frac{Gb}{2\pi d} \sin \frac{4\pi u}{b}. \quad (20.26)$$

Коэффициент пропорциональности перед  $\sin(4\pi u/b)$  подобран так, чтобы при малых  $\varepsilon$  выполнялся закон Гука. Приравнявая (20.25) и (20.26) с обратным знаком с учетом (20.24), получаем интегральное уравнение

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{(du/dx)_{x=x'} dx'}{x-x'} = -\frac{b(1-\nu)}{2d} \sin \frac{4\pi u}{b}. \quad (20.27)$$

Его решение имеет вид

$$u = -\frac{b}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{x}{\zeta}, \quad (20.28)$$

где

$$\zeta = d/[2(1-\nu)]. \quad (20.29)$$

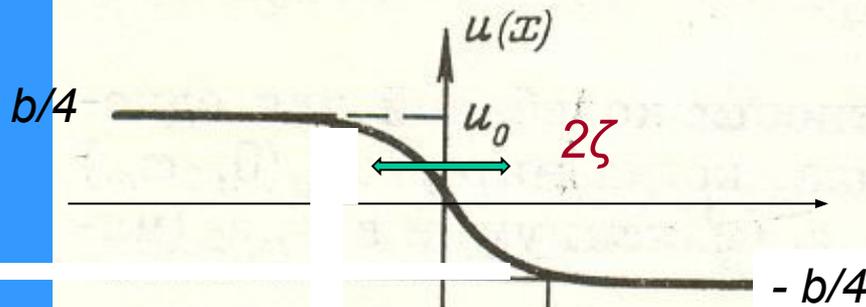
Подстановка (20.28) в (20.26) дает

$$\sigma_{xy}(x, 0) = Dx/(x^2 + \zeta^2). \quad (20.30)$$

Так исчезает расходимость при  $r \rightarrow 0$  в формулах

для сдвиговых напряжений, полученных на основе континуального подхода Вольтерра

$$D = Gb/2\pi(1-\nu);$$



$\zeta$  - определяет «ширину»  
ядра дислокации

Сравнение формул (8.13) и (3.42) показывает, что поле напряжений Пайерлса для дислокации сводится к полю напряжений дислокации Вольтерра для  $r = (x^2 + y^2)^{1/2} \gg \zeta$ . Интересно отметить, что параметр  $\zeta$  в модели Пайерлса снимает сингулярность в начале координат  $r = 0$ , имеющую место для дислокации Вольтерра. Таким образом, модель Пайерлса, в которой учитывается дискретность кристаллической решетки, устраняет искусственную расходимость на ядре, существующую в идеализированной непрерывной модели дислокации Вольтерра. Тем не менее для дислокации Пайерлса деформации в области ядра столь велики, что применимость закона

## Пайерловский рельеф кристалла

Выражение для смещения (20.28) позволяет вычислить и остальные упругие характеристики дислокации, в частности энергию одного атомного ряда  $W(x)$  и ее изменение  $W(x, \alpha)$  при смещении верхней половины кристалла относительно нижней на расстояние  $\alpha b$ . Энергия дислокации  $W(\alpha)$  получается суммированием  $W(x, \alpha)$  по всем атомным рядам  $x = mb$  и  $x = (m + 1/2)b$  соответственно в нижней и верхней половинах кристалла и есть, очевидно, периодическая функция. Вычисления дают [4]

$$W(\alpha) = \frac{1}{2}Db + Db \cos 4\pi\alpha \exp(-4\pi\zeta/b). \quad (20.31)$$

Периодически изменяющуюся энергию кристалла с дислокацией при ее перемещении в плоскости скольжения называют *пайерловским рельефом* кристалла. Он

состоит из канавок и разделяющих их горбов. Напряжение  $\sigma_P$ , необходимое для преодоления потенциального барьера в (20.31), называется *напряжением Пайерлса*:

$$\sigma_P = \frac{1}{b^2} \left( \frac{\partial W(\alpha)}{\partial \alpha} \right)_{\max} = \frac{2G}{1-\nu} \exp(-4\pi\zeta/b). \quad (20.32)$$

$$\zeta = d/2(1 - \nu) \approx (3/4)d;$$

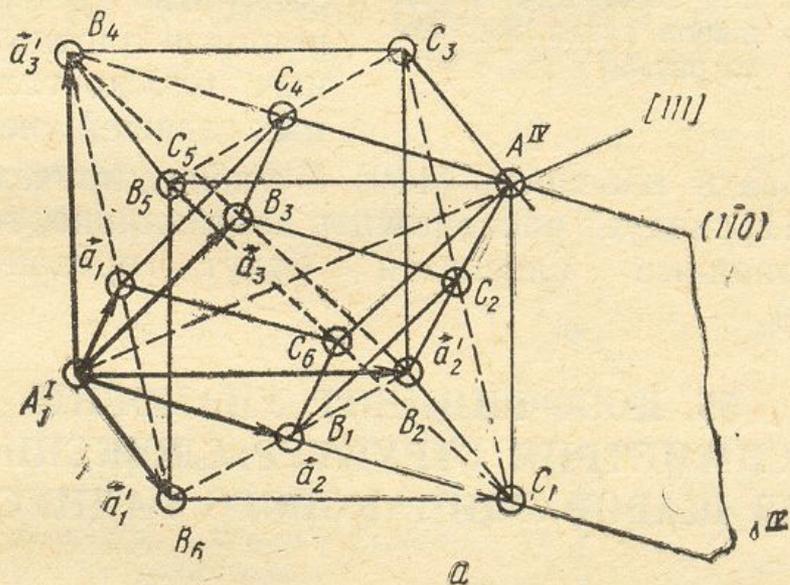
$$\exp(-3\pi d/b) \approx 2 \times 10^{-4} \text{ (ГЦК решетки)}$$

$\nu \approx 1/3$  –  
Коэффициент  
Пуассона

где  $d$  — расстояние между соседними плоскостями скольжения, определяющее амплитуду потенциального рельефа  $A$ . Например, для ГЦК решетки  $d/b = \sqrt{2/3}$  и

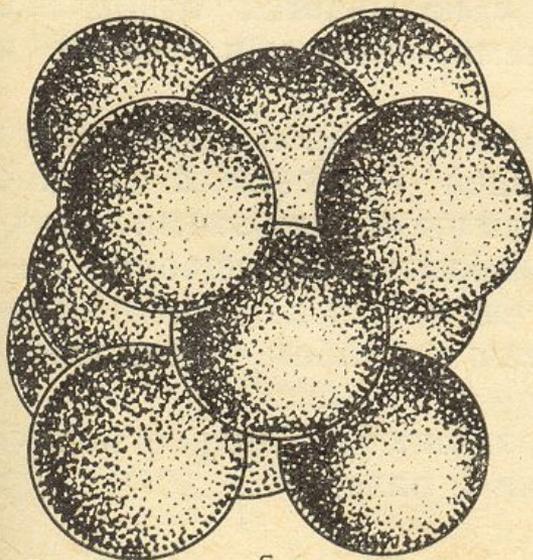
Выражение 20.32 подтверждает известное эмпирическое *правило отбора плоскостей скольжения*: ими являются такие плоскости, в которых атомы расположены плотно (малое  $b$ ) и расстояния  $d$  между которыми велики. В ГЦК-решетке это плоскости  $\{111\}$ .

# ГЦК структура

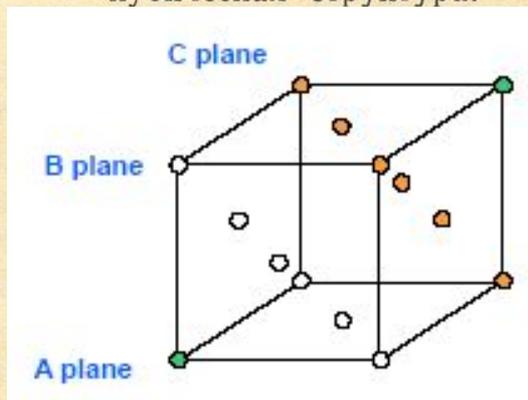


a

Рис. 97. Гранецентрированная кубическая структура:



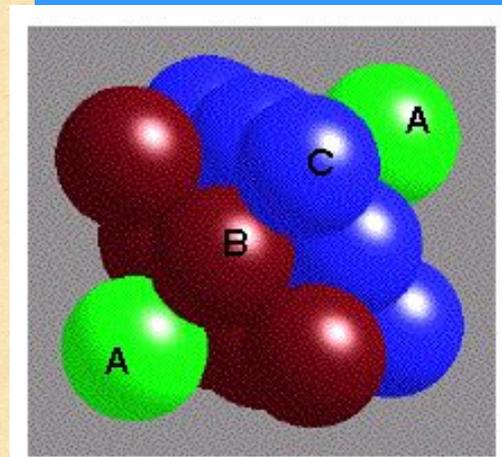
б



шаров); б — укладка шаров в ячейке; направление [001] вертикально

Коэффициент упаковки  $k = 0.74$ .

Характеризует все структуры, построенные по принципу плотнейшей упаковки (в том числе ГПУ)



## Peierls energy

$$E_p = \frac{Gb^2}{\pi(1-\nu)} \exp\left(-\frac{2\pi w}{b}\right)$$

$$\tau_p = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left(-\frac{2\pi w}{b}\right)$$

Peierls stress:

$$\tau_p \approx 10^{-4} G \text{ (ГЦК решетка)}$$

$$E_p = \tau_p b^2 / 2\pi \approx 10^{-4} Gb^2$$

Что в пересчете на одну связь дает:

$$E_{pbond} \approx 5 \times 10^{-4} \text{ эВ}$$

Для сравнения:  $k_B T = 1.4 \cdot 10^{-16} \text{ эрг/К} \times 300 \text{ К} \approx 4 \times 10^{-14} \text{ эрг}$   
 $\approx 3 \times 10^{-2} \text{ эВ}$

## 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

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

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

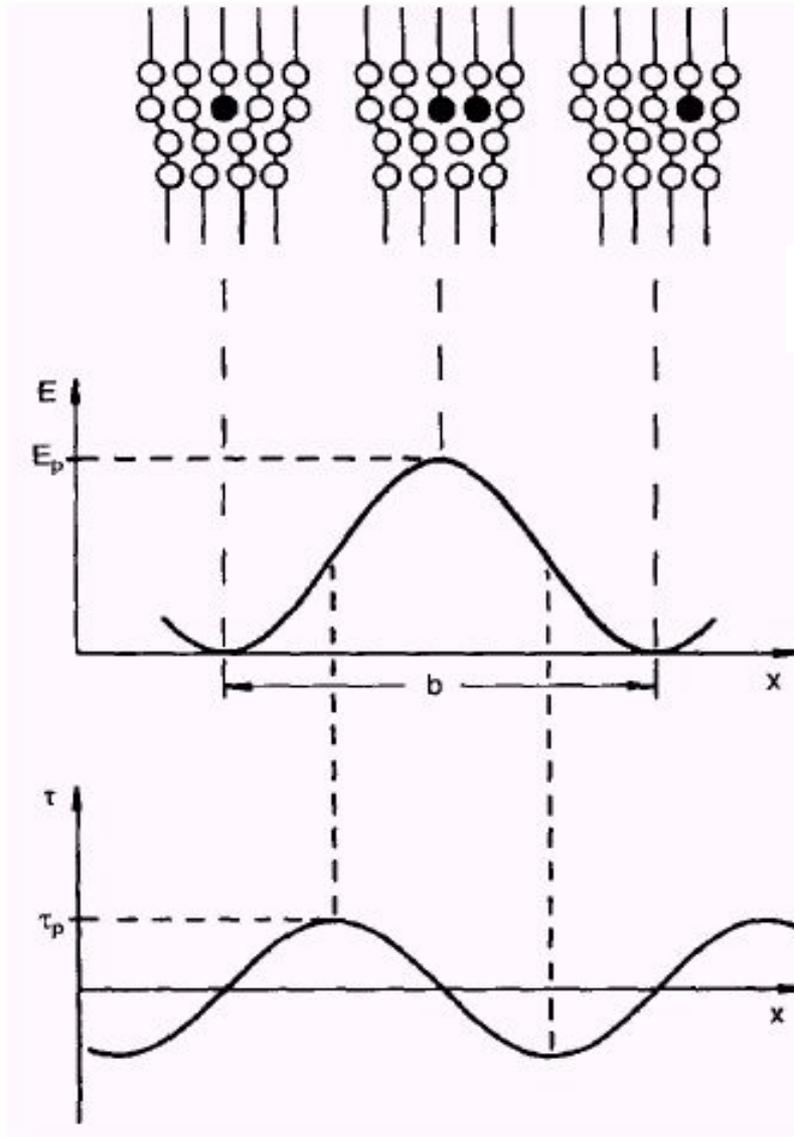
При  $G \approx 10^{12} \text{ дин.см}^{-2}$  и  $b = 2 \cdot 10^{-8} \text{ см}$   
имеем:

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

Что в пересчете на одну связь дает:

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

# Энергия (барьер) Пайерлса



$$E_p \ll k_B T$$

$$\tau_p \approx 10^{-3} \div 10^{-4} G$$

for fcc and hcp metals  
(very small!)

propagate sideways.

# Summary

$\tau_p \approx \exp(-kd/a) \Rightarrow$  Slip planes are planes with largest distance  $d$

$a - \min \Rightarrow$  Slip on close packed planes

Close packed planes are also atomically most flatest planes

$\Rightarrow$  Minimum friction

$E_l \propto b^2 \Rightarrow$   $b$ : shortest lattice vector

Пластическая деформация - движение и размножение дислокаций в плоскости скольжения

# Дислокации в гранецентрированной кубической решетке

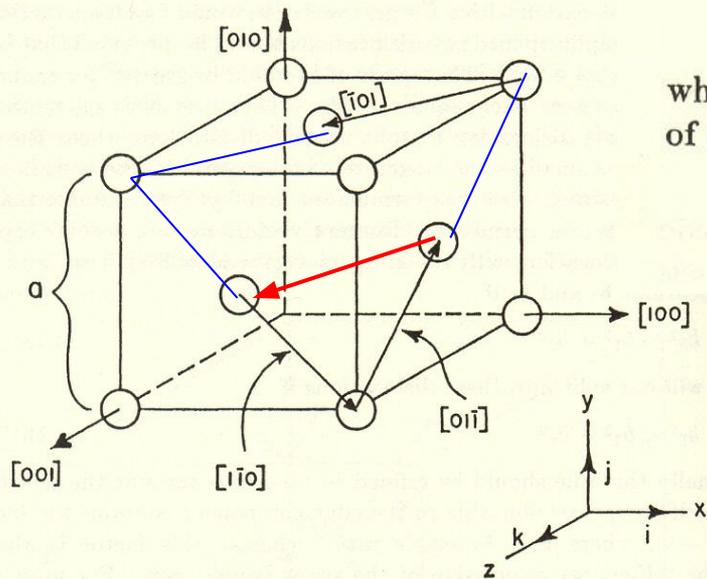


FIGURE 4-3. Face-centered cube.

If  $a$  is the lattice parameter of an f.c.c. crystal (Figure 4-3), the length of the smallest Burgers vector possible to a perfect dislocation in this crystal structure is  $a/\sqrt{2}$ . This Burgers vector can be written:

$$\mathbf{b} = \frac{a}{2} [110], \quad (4.2)$$

where  $[110]$  represents the vector  $\mathbf{i} + \mathbf{j}$  (or its equivalent). The square of this Burgers vector is:

$$b^2 = \mathbf{b} \cdot \mathbf{b} = \frac{a^2}{4} (\mathbf{i} + \mathbf{j}) \cdot (\mathbf{i} + \mathbf{j}) = \frac{a^2}{2}. \quad (4.3)$$

Дислокационные сетки  
с тройными узлами

# Slip system (slip plane + Burgers vector)

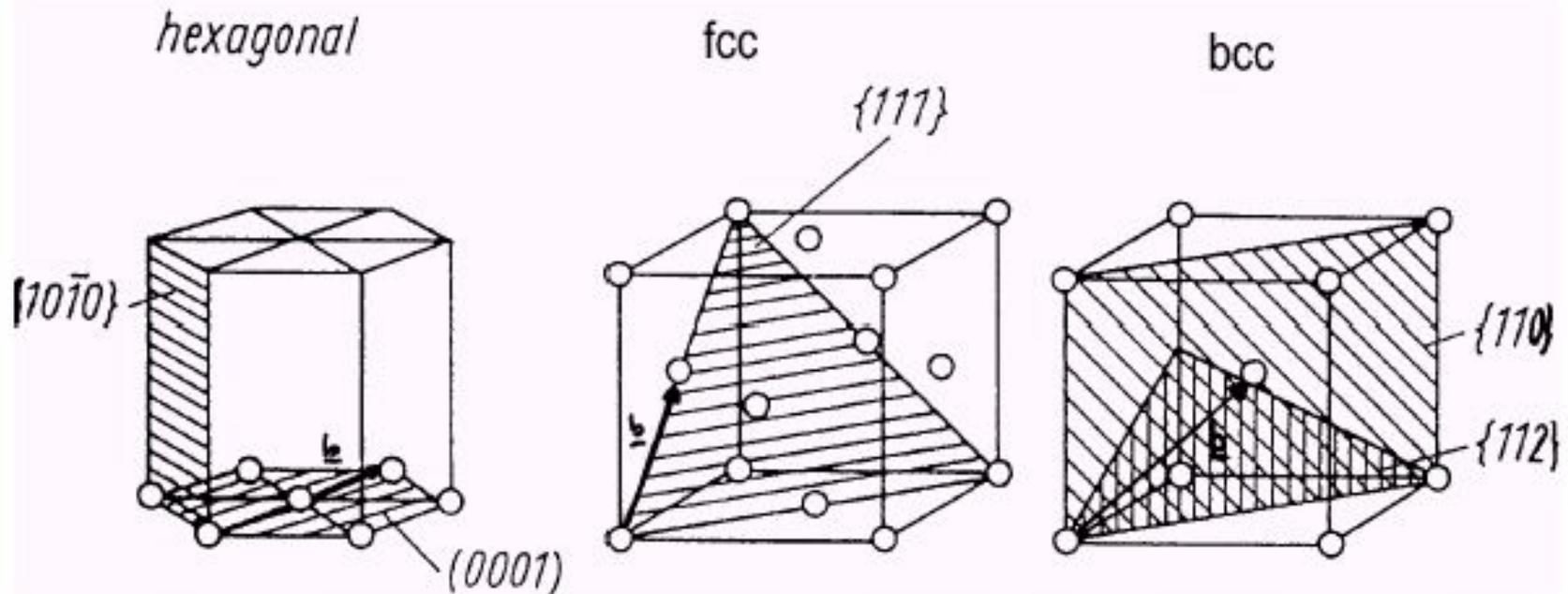
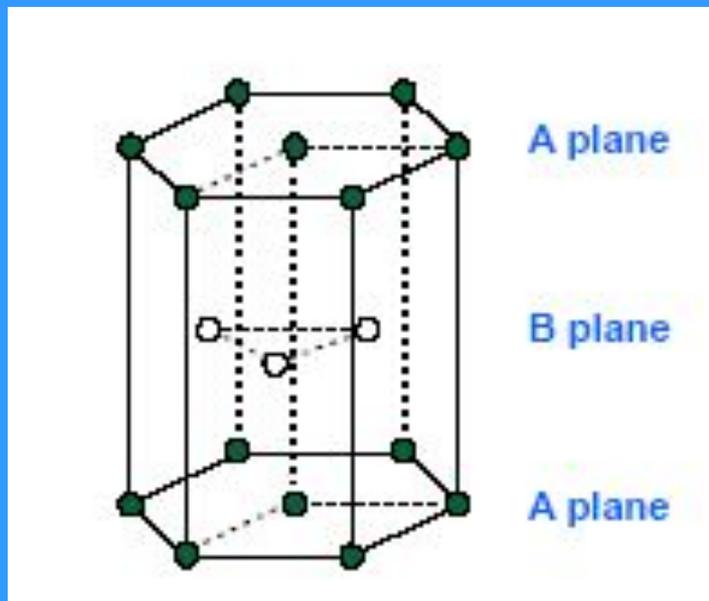
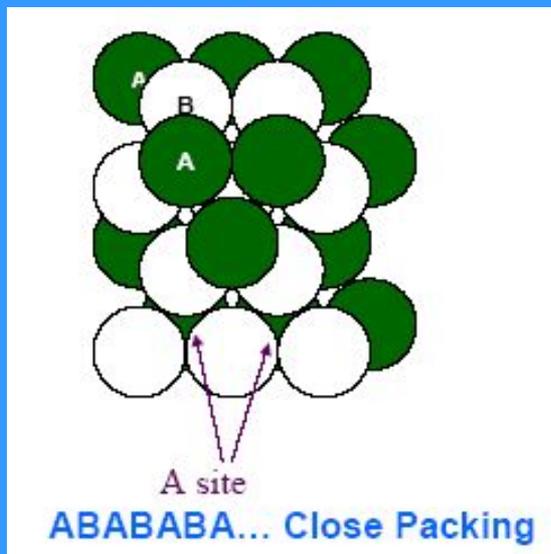


Fig. 3-24. Slip planes and Burgers vectors in the hcp, fcc and bcc crystal structures.

**fcc:**  $\underline{b} = \frac{a}{2} \langle 110 \rangle$ , slip plane:  $\{111\}$

3 slip directions per plane x 4 parallel planes = **12 slip systems**

Гексагональная  
Плотная упаковка



**hcp:**  $c/a > 1.63$ : Zn, Cd, Mg, ...

$\underline{b} = a \langle 110 \rangle$ , slip planes:  $\{001\} = \{0001\}$  basal plane

3 slip directions per plane x 1 parallel plane = **3 slip systems**

$c/a < 1.63$ : Ti, Be, ...

$\underline{b} = a \langle 110 \rangle$ , slip planes:  $\{1010\}$  prism plane

(other slip planes also observed)

1 slip direction per plane x 3 parallel planes = **3 slip systems**

**bcc:**  $\underline{b} = \frac{a}{2} \langle 111 \rangle$ , slip plane:  $\{110\}$ ,

$\{112\}$  and  $\{113\}$  also observed.

2 slip directions per plane x 6 parallel planes = **12 slip systems**

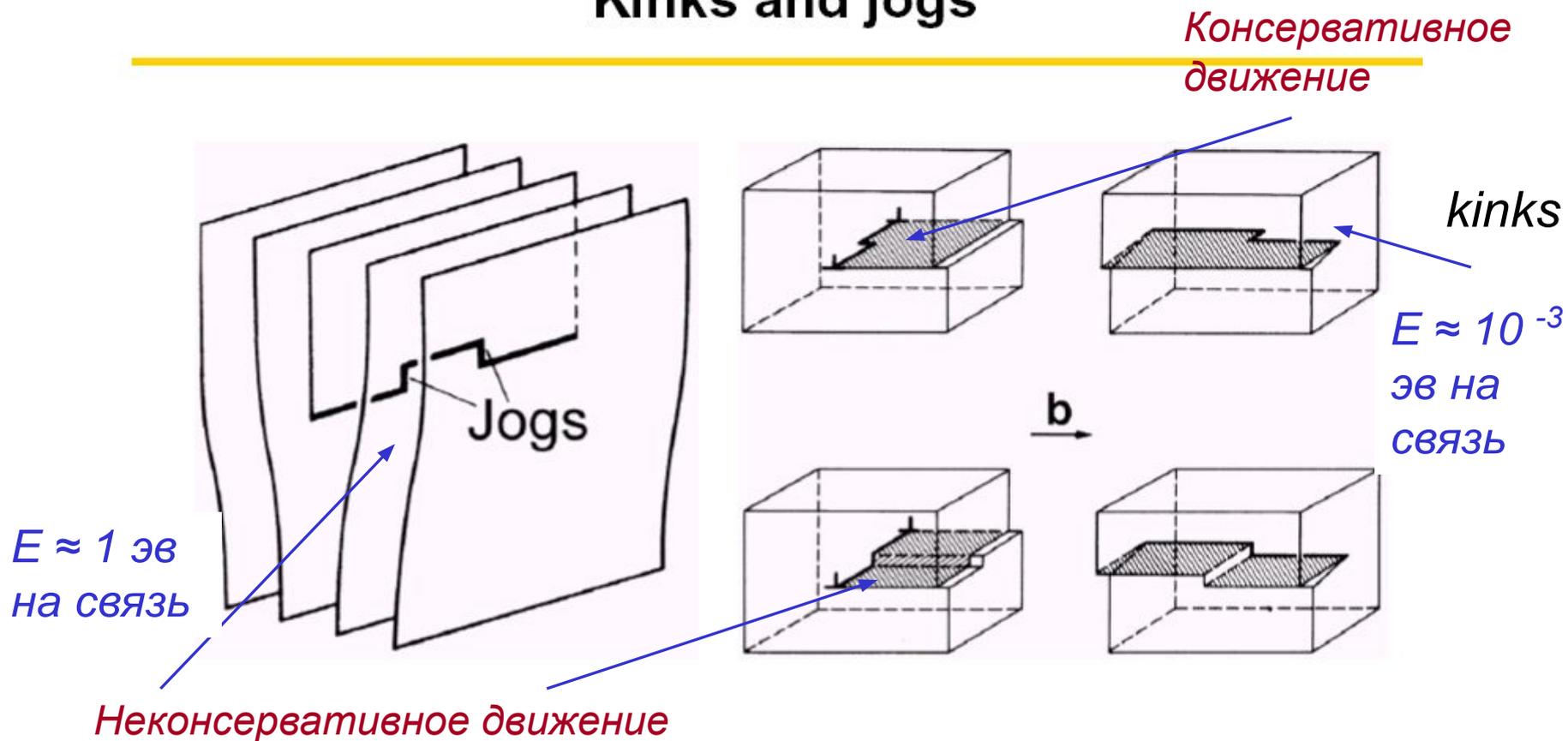
**Deformation of polycrystals requires 5 slip systems** (see below).

⇒ **hcp polycrystals generally brittle!**

*Common crystal structures in metals:*

- Face centered cubic (fcc): ABCABC...  
packing: Ni, Cu, Ag, Al, Au*
- Hexagonal close packed (hcp): ABABAB  
... packing: Mg, Zn, Co, Ti*

# Kinks and jogs

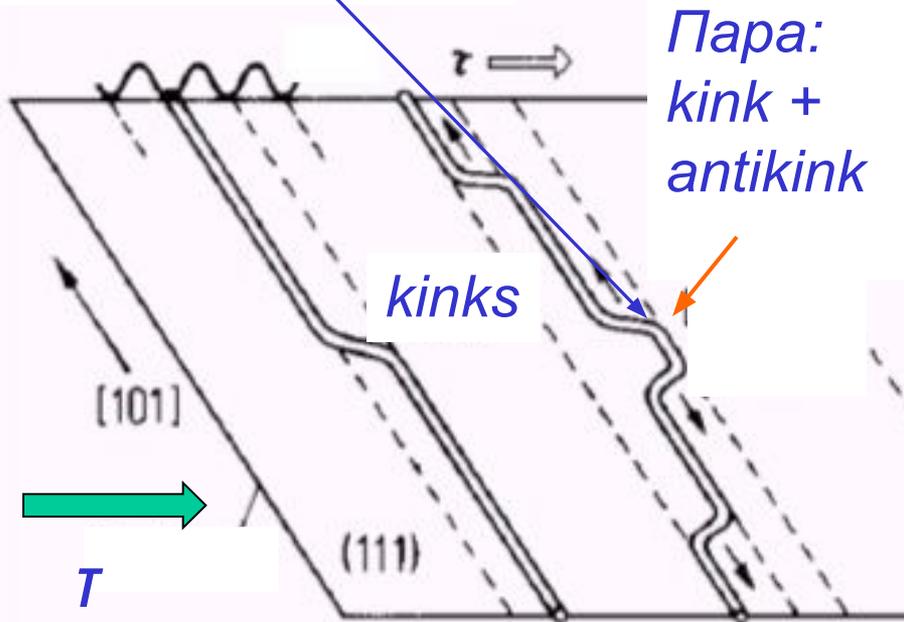


The jogs described have a height of one lattice spacing and a characteristic energy  $E_j \sim 1 \text{ eV}$  (0.16 aJ) resulting from the increase in dislocation line length (section 7.2). They are produced extensively during plastic deformation by the intersection of dislocations (see Chapter 7), and exist even in well-annealed crystals, for there is a thermodynamic equilibrium number of jogs (*thermal jogs*) per unit length of dislocation given by

$$n_j = n_0 \exp(-E_j/kT) \quad (3.5)$$

# Дефекты дислокационной линии в плоскости скольжения - пары: kink и antikink

Участки винтовых дислокаций противоположного знака



Кинк и антикинк - элементарные возбуждения, изменяющие положение дислокационной линии в плоскости скольжения.

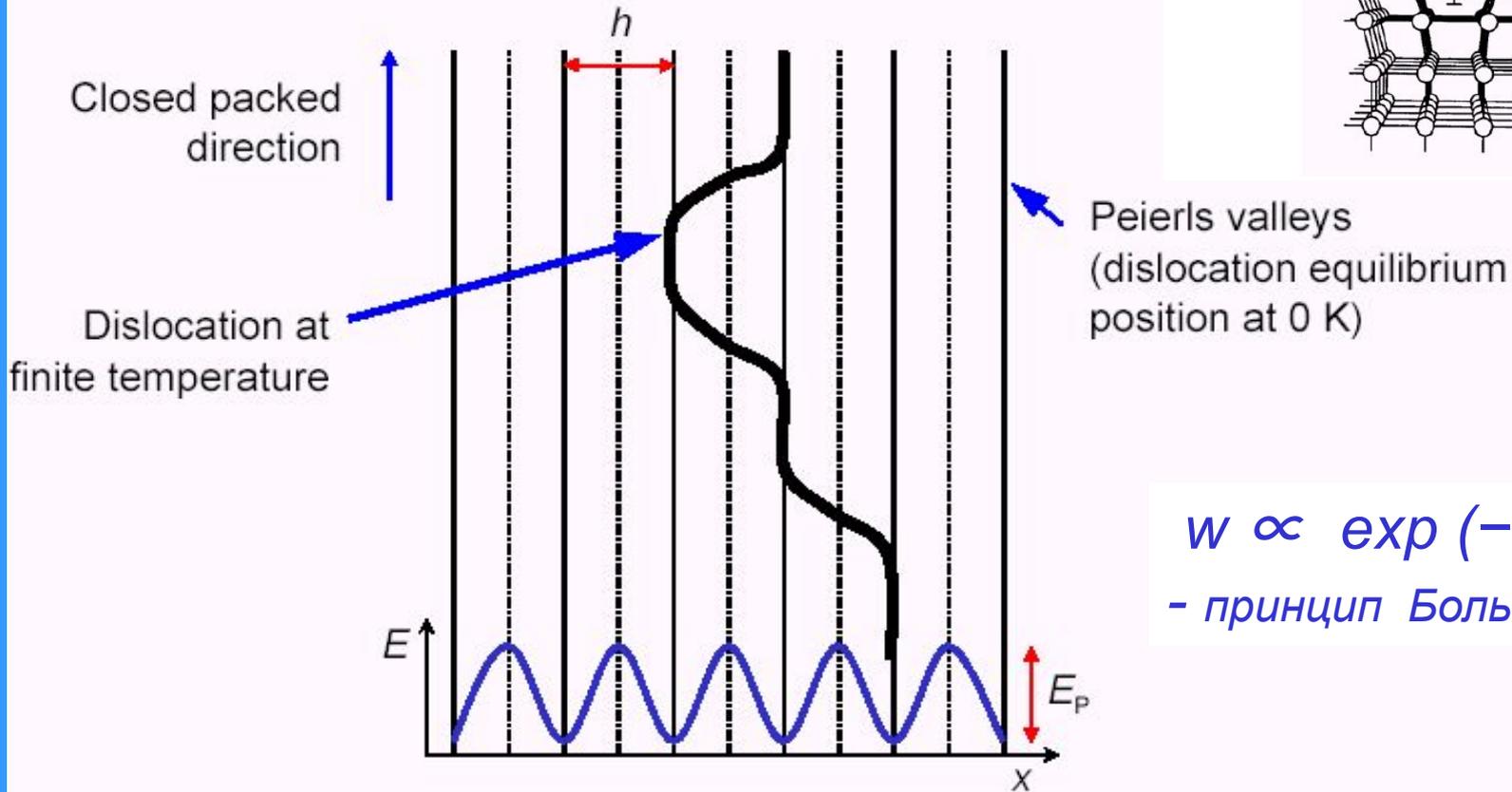
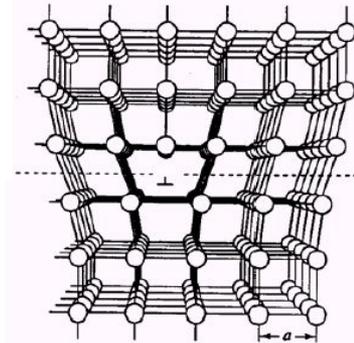
Пусть длина кинка равна 10 связям. Тогда на один кинк приходится энергия Пайерлса,  $E_p$  много меньшая тепловой энергии  $k_B T$

$$E_p \approx 5 \times 10^{-3} \text{ эв} \ll k_B T$$

Кинки и антикинки возбуждаются за счет тепловых флуктуаций и затем распространяются в плоскости скольжения под действием слабых напряжений  $T \ll T_p$

$$k_B T \approx 3 \times 10^{-2} \text{ эв}$$

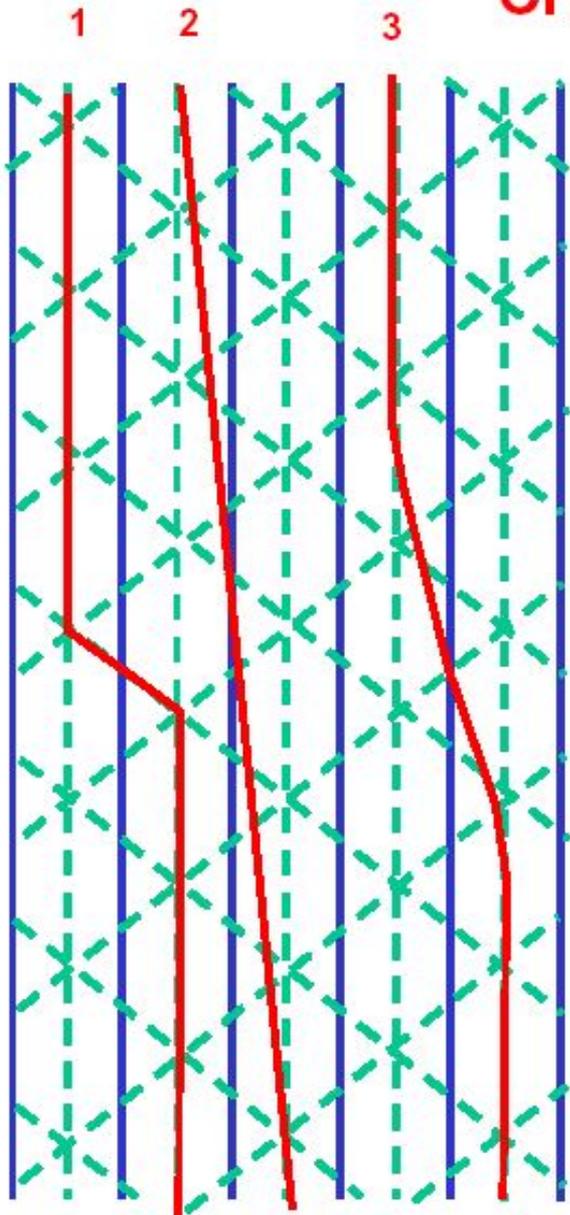
# Потенциал Пайерлса (1)



$$w \propto \exp(-F/k_B T)$$

- принцип Больцмана

# Crystallography of kinks



Kinks also have structure – they will have lowest energy if aligned along “secondary Peierls valleys”. (1)

However, this gives maximum line length – maximum line energy.

Minimum line energy configuration is to have dislocation line and kinks “ignoring” the primary and secondary Peierls valleys. (2)

Real dislocation structure will be a compromise, giving minimum total energy (3).

Balance will depend on bonding strength and temperature.

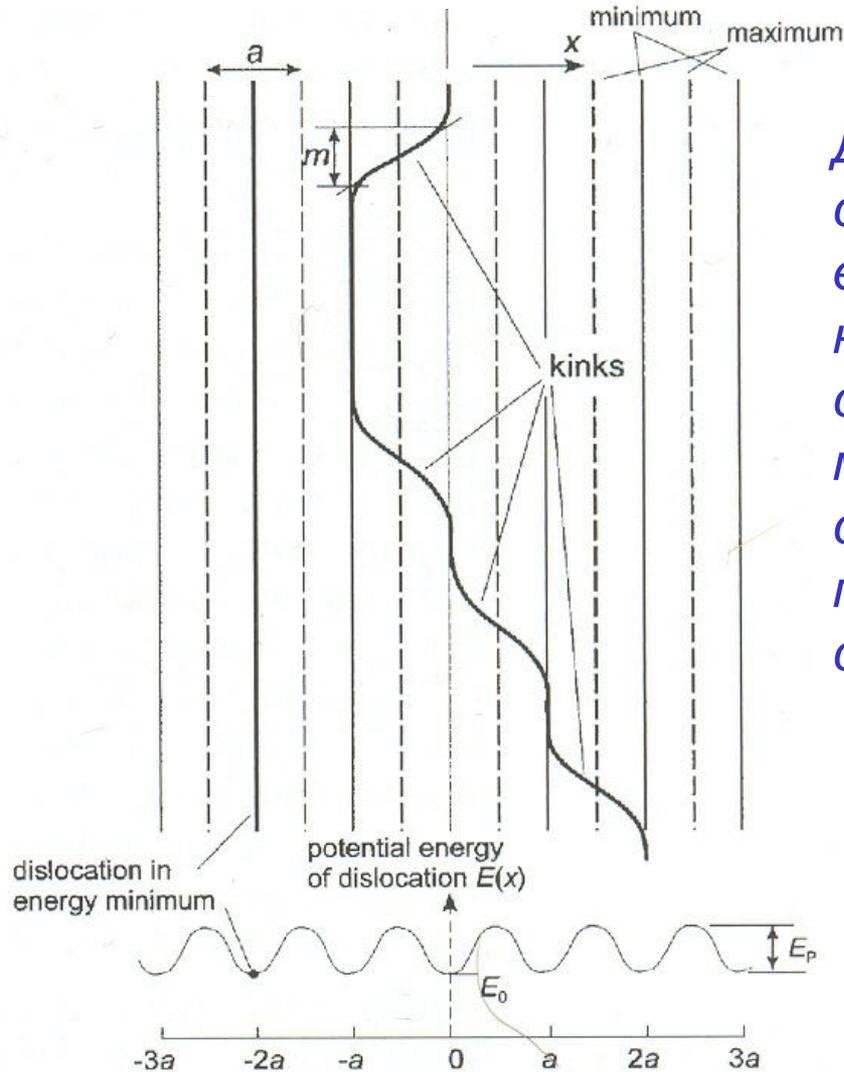
Stress to produce glide at given rate will then depend on:

1. Stress to produce double kinks;
2. Stress to move kinks

These will depend on the details of the kink structure (material & temperature dependent) and the amount of thermal activation available (temperature dependent).

*Theories have been worked out in detail (see Hirth and Lothe), but are beyond the scope of this course. We will look at simplified theories which ignore the “kink mechanics”.*

## Потенциал Пайерлса (2)



Дислокации не могут спонтанно появляться в кристалле - неравновесный дефект, однако уже существующие дислокации могут свободно менять свою конфигурацию и перемещаться в плоскости скольжения

$$E_p \ll E_0$$

$$E_p < k_B T$$

**Figure 10.6** Schematic illustration of the potential energy surface of a dislocation line due to the Peierls stress  $\tau_p$ . (After Seeger, Donth and Pfaff, *Disc. Faraday Soc.* **23**, 19, 1957.)

## Заключительные замечания

Необходимо отметить, что величины энергии Пайерлса  $E_p$  и критического напряжения сдвига  $T_p$  чрезвычайно чувствительны к природе межатомных сил и характеру упаковки атомов в элементарной ячейке.

$$T_p \approx 10^{-4} \div 10^{-5} \text{ Г} \text{ для ГЦК и ГПУ металлов;}$$

$$T_p \approx 10^{-2} \text{ для ковалентных кристаллов типа кремния и алмаза}$$