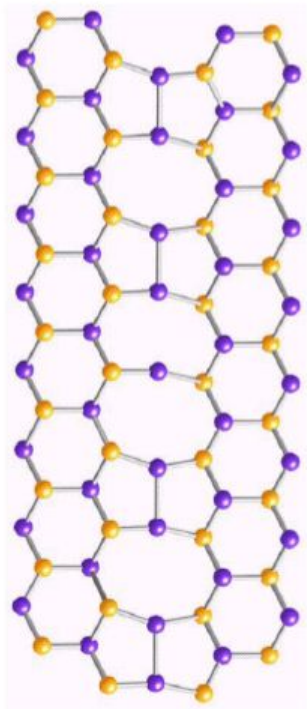


Физика реального кристалла



*7. Теория упругости сплошных сред.
Упругие поля (поля напряжений)
вокруг дислокаций. Энергия
дислокаций.*

Профессор Б.И.Островский

`ostr@cea.ru`

Типы дислокаций:

Краевые дислокации - *Edge Dislocation:*

A portion of an extra plane of atoms

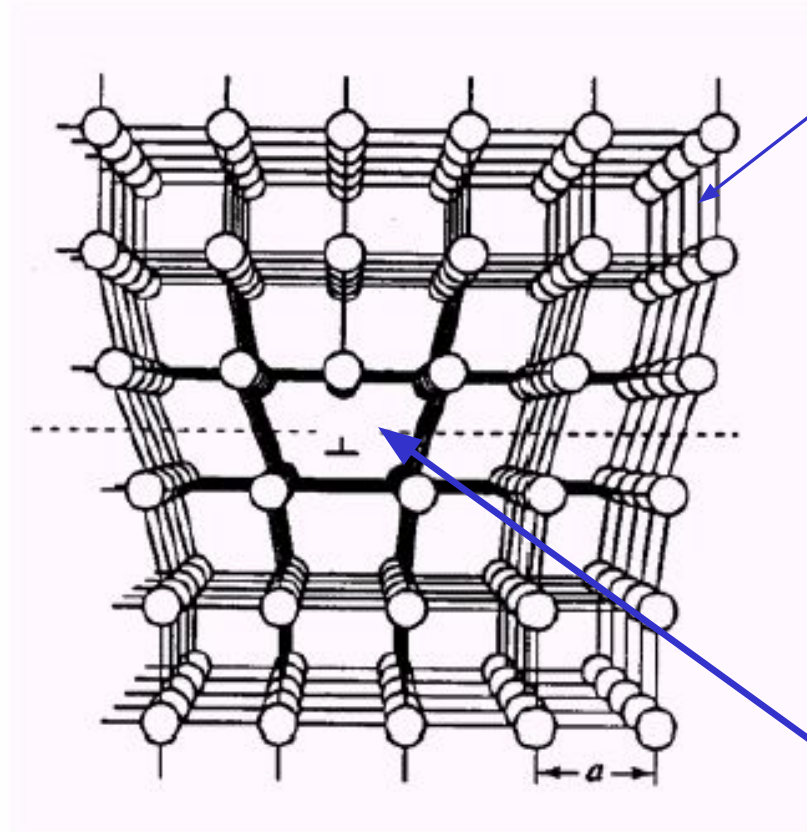
Винтовые дислокации - *Screw Dislocation:*

Helical atomic displacement around a
line extending through the crystal

Смешанные дислокации - *Mixed Dislocation:*

Some edge, some screw nature

Краевая дислокация



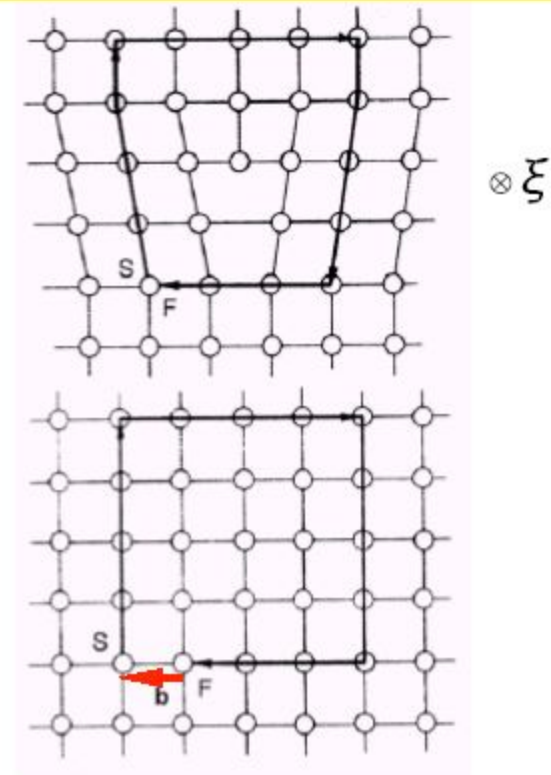
Слабые, упругие
искажения идеальной
решетки - «хороший
материал» -
линейная теория
упругости

Ядро дислокации (??)
- сильные искажения решетки,
нелинейные деформации

Свойства вектора Бюргерса

- Sign of the Burgers vector depends on the sense of a dislocation line; not unambiguous
- **FS/RH rule** by Hirth, Lothe
- $\mathbf{b} \perp \boldsymbol{\xi}$ for edge dislocation, $\mathbf{b} \parallel \boldsymbol{\xi}$ for screw.
- $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ for point defects.
- Dislocations with $\mathbf{b}$ and $-\mathbf{b}$ are different (alternatively with equal $\mathbf{b}$ and opposite $\boldsymbol{\xi}$).

Finish-start/ right hand



FS/RH circuits in a real and a perfect reference crystal. $\boldsymbol{\xi}$ points into the drawing plane.

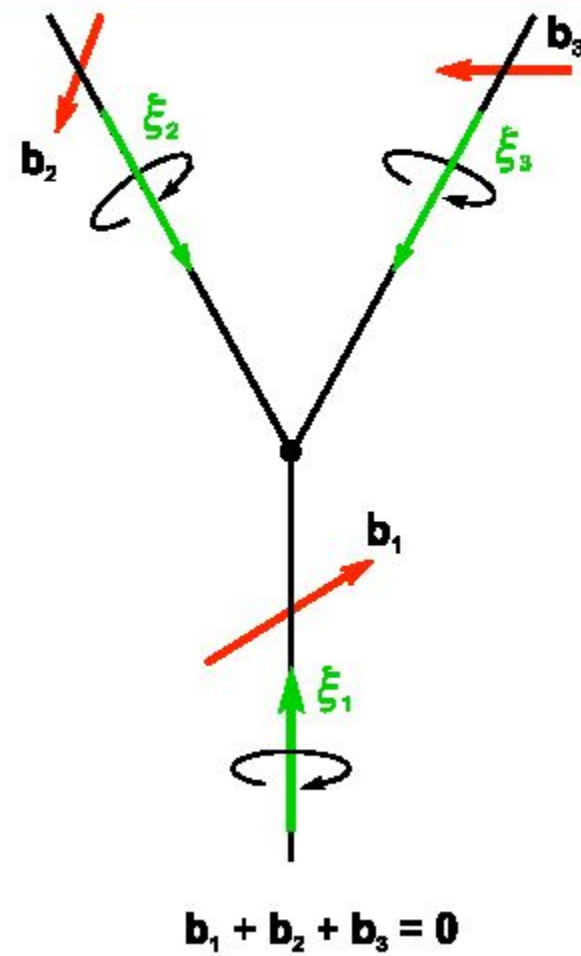
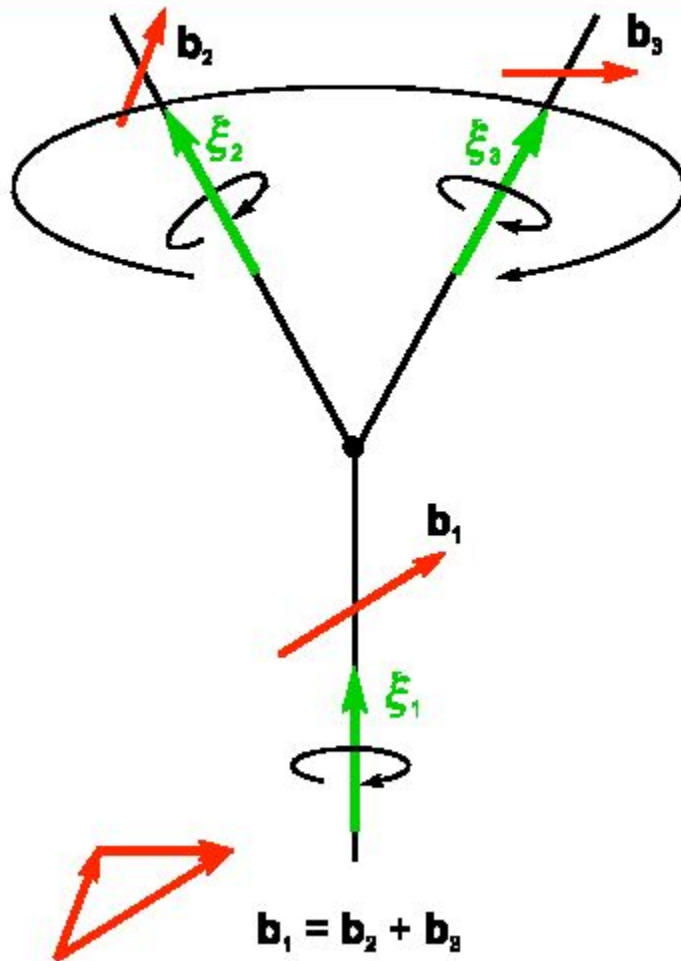
[Hirth, Lothe 1982]

Свойства дислокаций

Дислокационная линия **не может** закончиться внутри кристалла, а только

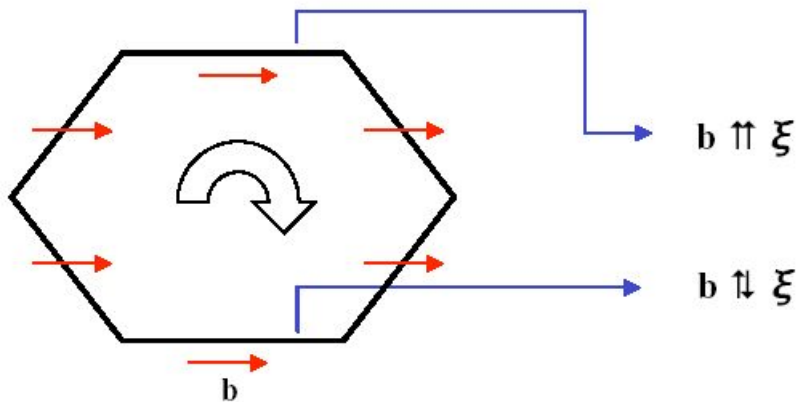
- на его поверхности
- на внутренней границе раздела (на границах зерен)
- в дислокационном узле
- с образованием дислокационной петли

Dislocation node



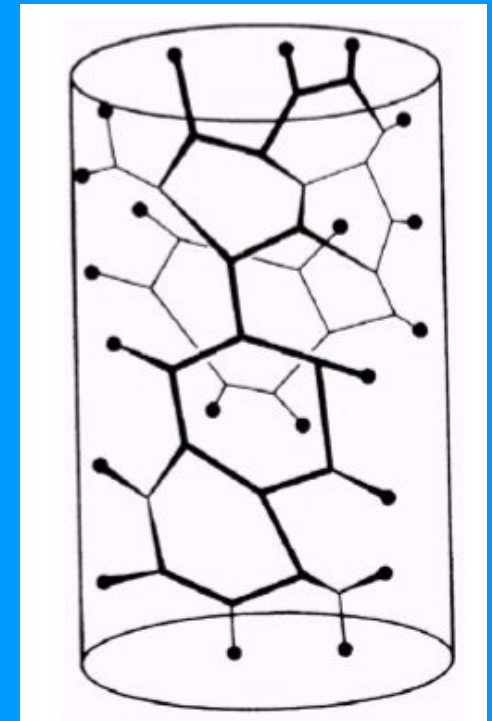
Примеры дислокационных петель и узлов в кристаллах

Дислокационная петля
в fcc кристалле

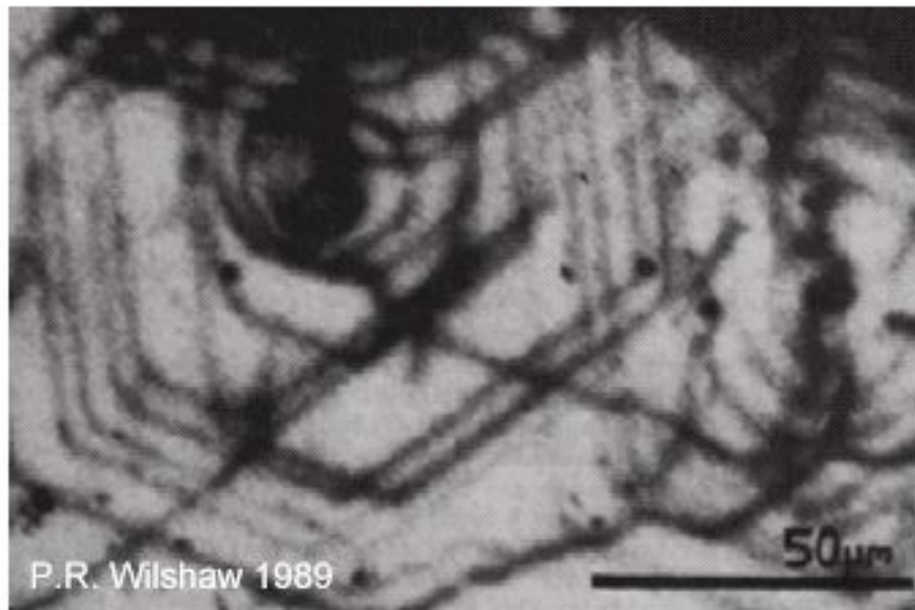


Perfect dislocation loop consisting of screw and 60° segments

Сетка Франка



Дислокационные петли в алмазоподобной структуре

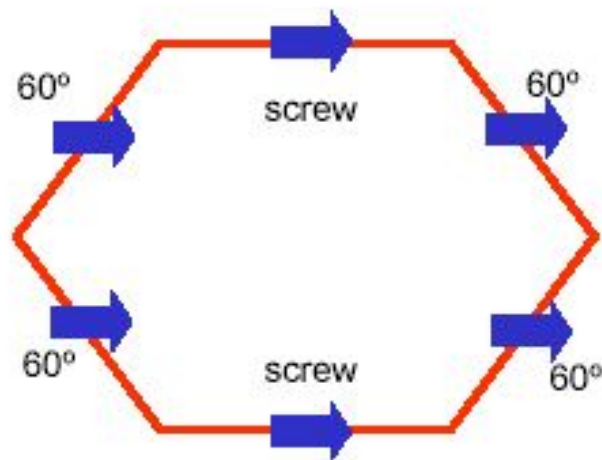


Dislocation cores are highly structured:

Core energy depends strongly on direction.

Dislocations lie along $\langle 110 \rangle$.

[Electron Beam Induced Conductivity (EBIC) image in SEM. Demonstrates dislocations are electrically active. Important in semiconductor devices.]



Dislocations thus are likely to be either pure screw or " 60° " type.

What will their core structure be ?

Плотность дислокаций

- Определение плотности дислокаций $\rho = L / V$
(total dislocation length per unit volume) $\rho = L / V = Nl / V = Nl / lS = N / S$
- Выражается в единицах, см^{-2}

Типичные значения в отожженных металлах 10^6 to 10^8 cm^{-2} ,

В полупроводниках 10 to 10^5 cm^{-2}

После пластической деформации 10^{12} cm^{-2} и выше

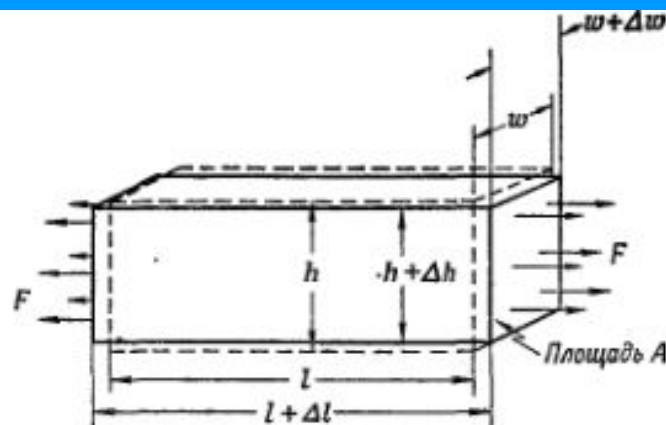
$$\rho^{-1} = S / N$$

Dislocation density ρ in cm^{-2}	10^2	10^4	10^6	10^8	10^{10}	10^{12}	10^{14}
Total length in km/cm^3	10^{-3}	0.1	10	10^3	10^5	10^7	10^9
Average distance $\rho^{-1/2}$ in m	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}
relative distance in $5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$	$2 \cdot 10^6$	$2 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^3$	200	20	2

$\rho^{-1/2} = \langle r \rangle$ - среднее расстояние между дислокациями

*Элементы теории упругости
сплошных сред*

Закон Гука,
модуль Юнга



Ф и г. 38.1. Растяжение бруска под действием однородной нагрузки.

Брусек из однородного
изотропного материала

Силу, действующую на единичной площади, называют напряжением, а удлинение участка, отнесенное к его длине, т. е. относительное удлинение называют деформацией. Уравнение (38.3) можно переписать следующим образом:

$$Y \equiv E \quad \frac{F}{A} = Y \times \frac{\Delta l}{l}. \quad (38.4)$$

Напряжение = (Модуль Юнга) $\times$ (Деформация).

При растяжении, подчиняющемся закону Гука, возникает еще одно осложнение: если брусек материала *растягивается* в одном направлении, то под прямым углом к растяжению он *сжимается*. Уменьшение толщины пропорционально самой толщине w и еще отношению $\Delta l/l$. Относительное боковое сжатие

Коэффициент Пуассона

одинаково как для ширины, так и для его высоты и обычно записывается в виде

$$\frac{\Delta w}{w} = \frac{\Delta h}{h} = -\sigma \frac{\Delta l}{l}, \quad (38.5)$$

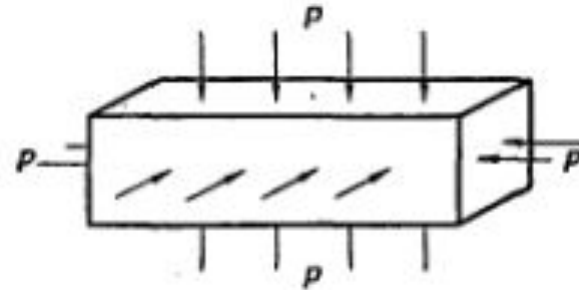
где постоянная σ характеризует новое свойство материала и называется *отношением Пуассона*. Это число положительное по знаку, по величине меньше $1/2$. (То, что постоянная σ в общем случае должна быть положительной, «разумно», но ниоткуда не следует, что она *должна* быть такой.)

Две константы Y и σ полностью определяют упругие свойства *однородного изотропного* (т. е. некристаллического) материала. В кристаллическом материале растяжение и сокращение в разных направлениях может быть различным, поэтому и упругих постоянных может быть гораздо больше. Временно мы ог-

В кристаллах:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$$

Брус под действием гидростатического давления



Задача 1. Если мы приложим к концам бруска давление p , то деформация сжатия будет отрицательна и равна p/Y :

$$\frac{\Delta l_1}{l} = -\frac{p}{Y}.$$

Задача 2. Если мы надавим на горизонтальные грани бруска, то деформация по высоте будет равна $-p/Y$, а соответствующая деформация в боковом направлении будет $+\sigma p/Y$. Мы получаем

$$\frac{\Delta l_2}{l} = +\sigma \frac{p}{Y}.$$

Задача 3. Если мы приложим к сторонам бруска давление p , то деформация давления снова будет равна p/Y , но теперь нам нужно

определить деформацию длины. Для этого боковую деформацию нужно умножить на $-\sigma$. Боковая деформация равна

$$\frac{\Delta w}{w} = -\frac{p}{Y},$$

так что

$$\frac{\Delta l_3}{l} = +\sigma \frac{p}{Y}.$$

Комбинируя результаты этих трех задач, т. е. записывая Δl как $\Delta l_1 + \Delta l_2 + \Delta l_3$, получаем

$$\frac{\Delta l}{l} = -\frac{p}{Y} (1 - 2\sigma). \quad (38.6)$$

Задача, разумеется, симметрична во всех трех направлениях, поэтому

$$\frac{\Delta w}{w} = \frac{\Delta h}{h} = -\frac{p}{Y} (1 - 2\sigma). \quad (38.7)$$

Интересно также найти изменение *объема* при гидростатическом давлении. Поскольку $V = lwh$, то для малых перемещений можно записать

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{\Delta l}{l} + \frac{\Delta w}{w} + \frac{\Delta h}{h}.$$

Воспользовавшись (38.6) и (38.7), мы имеем

$$\frac{\Delta V}{V} = -3 \frac{p}{Y} (1 - 2\sigma). \quad (38.8)$$

Имеются любители называть $\Delta V/V$ *объемной деформацией* и писать

$$p = -K \frac{\Delta V}{V}.$$

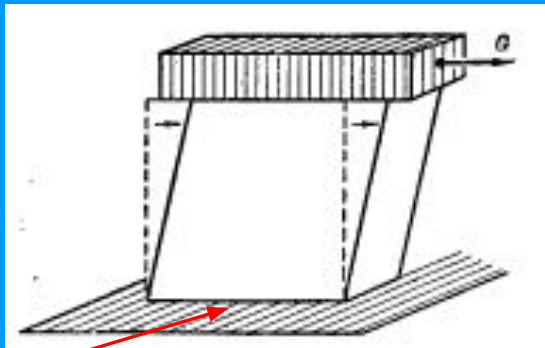
Объемное напряжение p (гидростатическое давление) пропорционально вызванной им *объемной деформации* — снова закон Гука. Коэффициент K называется *объемным модулем* и связан с другими постоянными выражением

$$K = \frac{Y}{3(1-2\sigma)}. \quad (38.9)$$

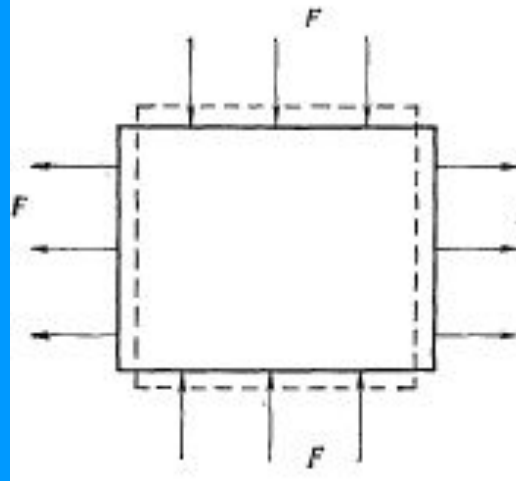
Поскольку коэффициент K представляет некоторый практический интерес, то во многих справочниках вместо Y и σ приводятся Y и K . Но если вам нужно знать σ , то вы всегда можете получить это значение из формулы (38.9). Из этой формулы видно также, что коэффициент Пуассона σ должен быть меньше $1/2$. Если бы это было не так, то *объемный модуль* K был бы отрицательным и материал при увеличении давления расширялся бы. Это позволило бы добывать механическую энергию из любого кубика, т. е. это означало бы, что кубик находится в неустойчивом равновесии. Если бы он начал расширяться, то расширение продолжалось бы само по себе с высвобождением энергии.

Объемный модуль упругости

Однородный сдвиг (1)



клей



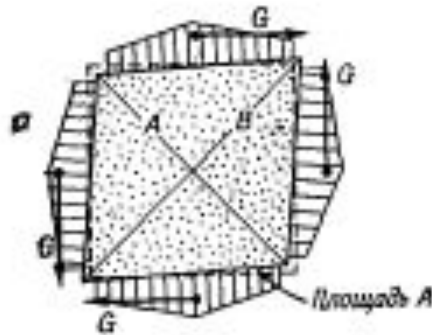
Фиг. 38.5. Действие сжимающих сил, давящих на верхнюю и основную, и равных им растягивающих сил с двух сторон.

Посмотрим, что получится, если мы приложим к чему-то «косое» напряжение. Под косым, или скалывающим, напряжением мы подразумеваем такое воздействие, как показано на фиг. 38.4. В качестве предварительной задачи посмотрим, какова будет деформация кубика под действием сил, показанных на фиг. 38.5. Снова можно разделить эту задачу на две: вертикальное давление и горизонтальное растяжение. Обозначая через A площадь грани кубика, мы получаем для изменения горизонтальной длины

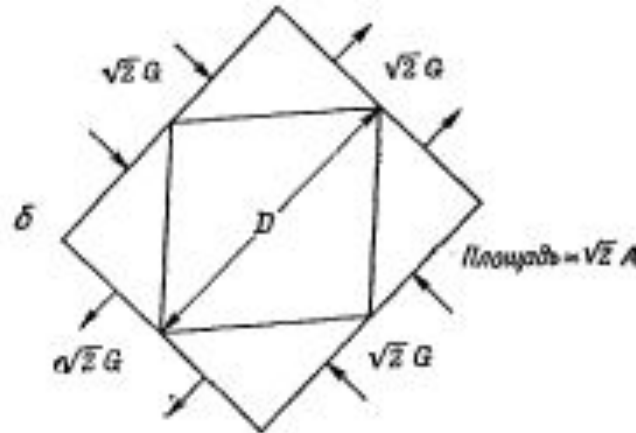
$$\frac{\Delta l}{l} = \frac{1}{Y} \frac{F}{A} + \sigma \frac{1}{Y} \frac{F}{A} = \frac{1 + \sigma}{Y} \frac{F}{A}. \quad (38.10)$$

Изменение же высоты по вертикали равно просто тому же выражению с обратным знаком,

Однородный сдвиг (2)



Фиг. 38.6. Две пары сил сдвига (а) создают то же самое напряжение, что и сжимающие — растягивающие силы (б).



$$\sum F_i = 0$$

$$\sum M_i = 0$$

сдвиговых сил, показанных на фиг. 38.6, а. Заметим теперь, что все силы должны быть равными, ибо на тело не должен действовать никакой момент сил и оно должно находиться в равновесии. (Подобные силы должны действовать также и в случае, изображенном на фиг. 38.4, поскольку кубик находится в равновесии. Они обеспечиваются тем, что кубик «приклеен» к столу.) При таких условиях говорят, что кубик находится в состоянии чистого сдвига. Но обратите внимание, что если мы разрежем кубик плоскостями под углом 45° , скажем, вдоль диагонали A на фиг. 38.6, а, то полная сила, действующая в этой плоскости, нормальна к ней и равна $\sqrt{2}G$. Площадь, на которой действует эта сила, равна

Предположим теперь, что мы имеем тот же самый кубик, и подвергнем его действию

Однородный сдвиг (3)

$\sqrt{2}G$. Площадь, на которой действует эта сила, равна $\sqrt{2}A$; следовательно, напряжение, нормальное к этой плоскости, будет просто G/A . Точно так же если взять плоскость, наклоненную под углом 45° в другую сторону, т. е. по диагонали B , то мы увидим, что на ней действует нормаль-

ное сдвигивающее напряжение, равное $-G/A$. Из этого ясно, что *напряжение при чистом сдвиге* эквивалентно комбинации растягивающего и сжимающего напряжений, направленных под прямым углом друг к другу и под углом 45° к первоначальным граням кубика. Внутренние напряжения и деформации будут такими же, как и в большом кубике материала под действием сил, показанных на фиг. 38.6, б. Но эту задачу мы уже решили. Изменение длины диагонали задается уравнением (38.10):

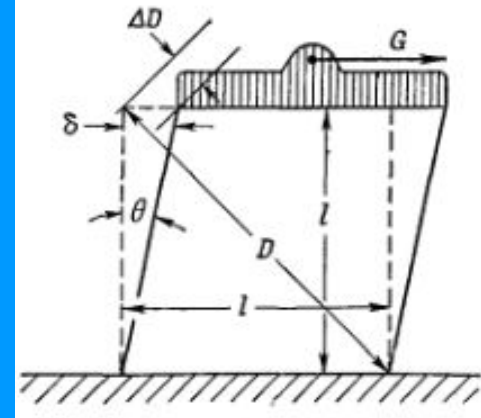
$$\frac{\Delta D}{D} = \frac{1+\sigma}{Y} \frac{G}{A}. \quad (38.11)$$

(Одна диагональ сокращается, а другая удлиняется.)

Однородный сдвиг (4)

Часто деформацию сдвига удобно описывать с помощью угла «искажения» кубика θ , показанного на фиг. 38.7. Из геометрии фигуры вы видите, что горизонтальный сдвиг δ верхнего края равен $\sqrt{2}\Delta D$, так что

$$\theta = \frac{\delta}{l} = \frac{\sqrt{2}\Delta D}{l} = 2 \frac{\Delta D}{D}. \quad (38.12)$$



Напряжение сдвига g определяется как отношение тангенциальной силы, действующей на грань, к площади грани $g = G/A$. Воспользовавшись уравнением (38.11), мы из (38.12) получаем

$$\theta = 2 \frac{1+\sigma}{Y} g.$$

Или, если написать это в форме

Напряжение = Постоянная $\times$ Деформация

$$g = \mu \theta. \quad (38.13)$$

Коэффициент пропорциональности μ называется *модулем сдвига* (или иногда коэффициентом жесткости). Вот как он выражается через Y и σ :

$$\mu = \frac{Y}{2(1+\sigma)}. \quad (38.14)$$

Кстати, модуль сдвига должен быть положительным, иначе мы бы могли получить энергию от самопроизвольного сдвига куби-

$$-1 < \sigma < 1/2$$

*Элементы теории упругости
кристаллов*

Объемные и поверхностные силы. Тензор напряжений

Изменение в состоянии движения жидкости может быть вызвано двумя типами сил, называемыми объемными силами и поверхностными силами (рис. 6.2.). Некоторые силы (например, электростатического происхождения) могут быть представлены в каждой из этих двух форм.

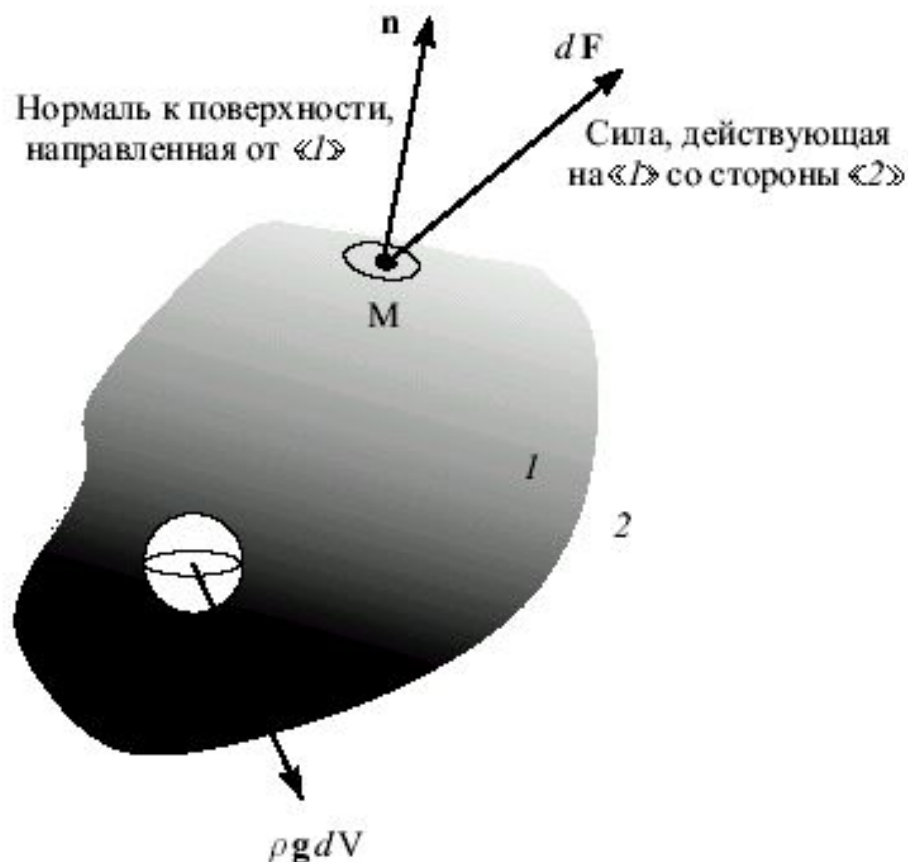


Рис. 6.2. Объемная сила $\rho \mathbf{g} dV$, действующая на малый элемент объема, и поверхностная сила $d\mathbf{F}$, действующая на малый элемент поверхности с единичным вектором нормали $\mathbf{n}$

Объемные силы *Объемные силы* проникают в весь объем системы и действуют на все ее элементы. Очевидным примером является гравитация. Объемная сила, действующая на элементарный объем dV , пропорциональна этому объему и может быть записана в виде $\rho g dV$, где g есть сила, действующая на единицу массы.

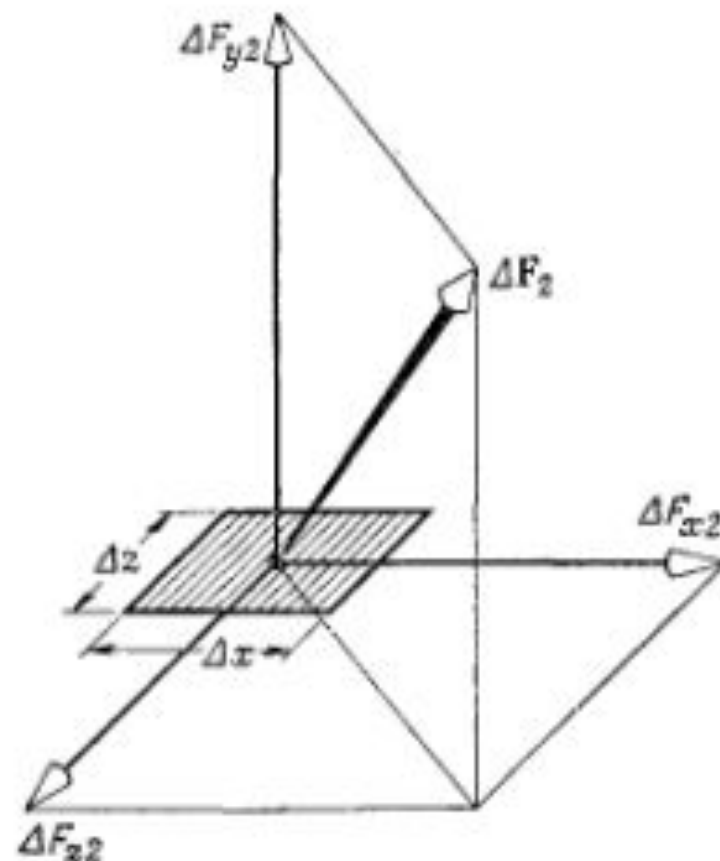
Поверхностные силы *Поверхностные силы* вызваны прямыми молекулярными взаимодействиями, которые включают в себя взаимодействия между соседними областями одной и той же среды. Поверхностная природа этих сил обусловлена очень малым радиусом молекулярных взаимодействий по сравнению с характерными масштабами возмущений в континуальной модели. Поверхностные силы принято представлять с помощью компонент σ_{ij} *тензора напряжений* (рис. 6.2). Величина σ_{ij} — i -я компонента бесконечно малой поверхностной силы, действующей на бесконечно малую область dA_j , перпендикулярную оси координат j :

$$dF_i = \sigma_{ij} dA_j = \sigma_{ij} \nu_j dA; \quad (6.5)$$

$$\sigma_{ij} = dF_i / dA_j$$

А теперь представьте себе разрез, перпендикулярный оси y . Пусть на маленькую площадку $\Delta x \Delta z$ действует сила ΔF_z . Разлагая снова эту силу на три компоненты, как показано на фиг. 31.7, мы определяем три компоненты напряжения S_{xz} , S_{yz} , S_{zz} как силы, действующие на единичную площадь в этих

Ф и г. 31.7. Сила, действующая на элемент площади, перпендикулярной оси y , разлагается на три взаимно перпендикулярные компоненты.



Тензор напряжения (1)

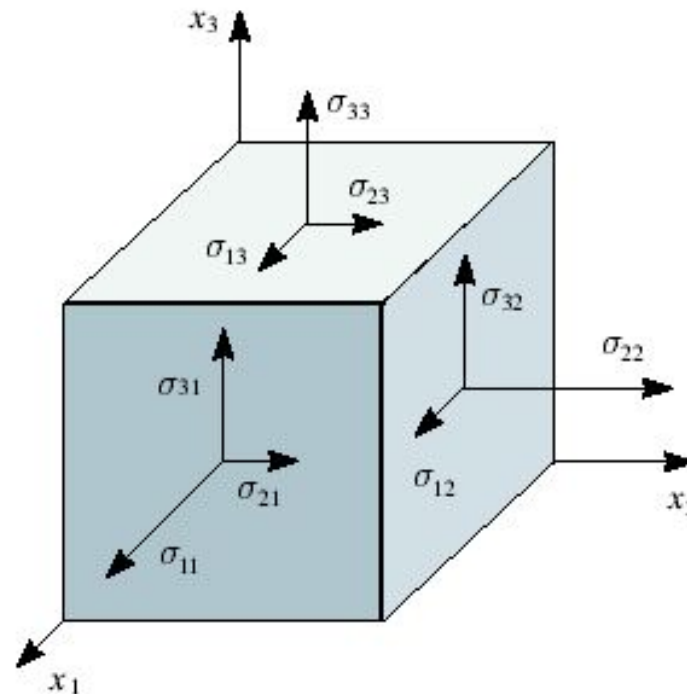


Рис. 6.3. Куб с нормальными и тангенциальными напряжениями на его поверхностях

Три диагональных элемента тензора σ_{ii} — это *нормальные напряжения*, в то время как шесть недиагональных элементов суть *напряжения сдвига*. Эта концепция помогает отличать жидкости от твердых тел при гидродинамическом описании: среда является жидкой, если напряжения сдвига, независимо от их малости, вызывают неограниченно большие деформации при неограниченном времени действия. Жидкости не испытывают напряжений сдвига, находясь в покое.

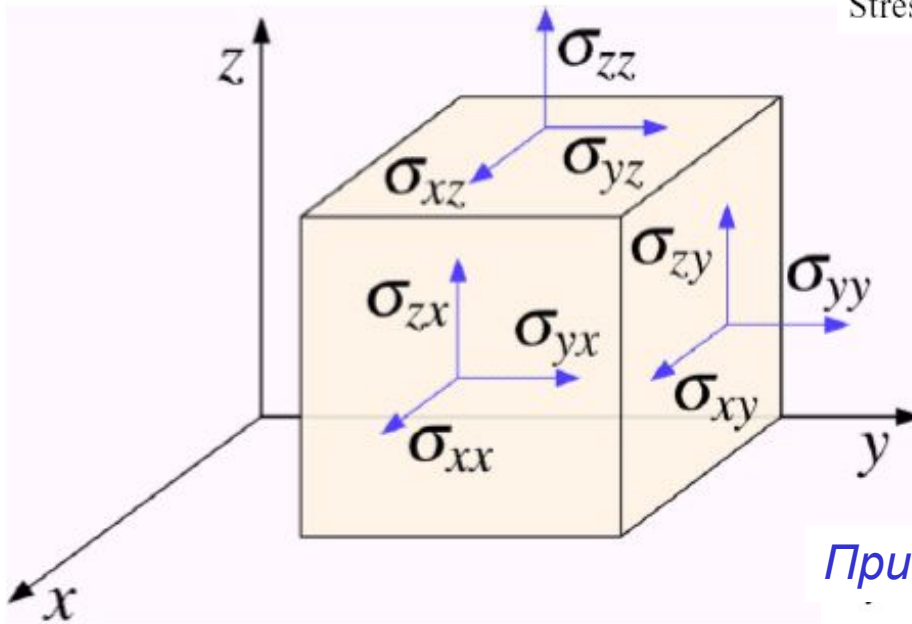
Тензор напряжения (2)

- Considering a small cubic volume element in a solid, the total stress state can be described by the forces perpendicular and parallel to the faces of the cube.
- On each face, three stresses: 1 normal σ_{ii} , 2 shear σ_{ij} ($i \neq j$; $i, j = x, y, z$)
- All together nine components of the stress

!!

Stress tensor is symmetrical, $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ (rotational equilibrium).

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$



Приведение к диагональному виду

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}$$

Симметрия тензора напряжения

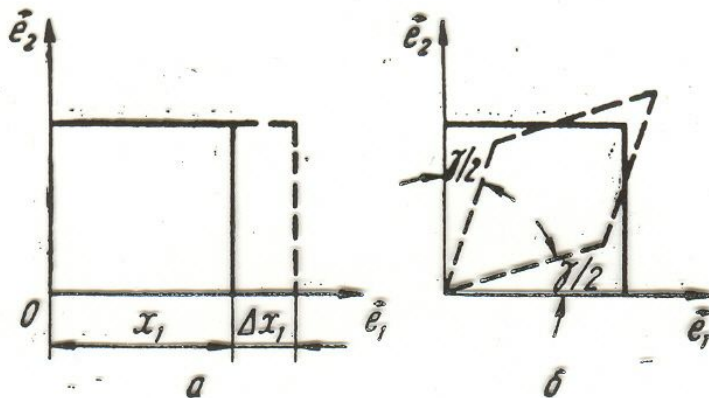
Благодаря этой симметрии тензора σ_{ij} , его можно тоже описывать эллипсоидом с тремя главными осями. Напряжение имеет особенно простой вид на площадках, нормальных к этим осям: оно соответствует чистому сжатию или растяжению в направлении главных осей. Вдоль этих площадок нет никаких сдвиговых сил, причем такие оси, для которых отсутствуют сдвиговые силы, можно выбрать для *любого* напряжения. Если эллипсоид превращается в сферу, то в *любом* направлении действуют только нормальные силы. Это соответствует гидростатическому давлению (положительному или отрицательному). Таким образом, для гидростатического давления тензор диагонален, причем все три компонента его равны друг другу (фактически они просто равны давлению p). В этом случае мы можем написать

$$\sigma_{ij} = p\delta_{ij}. \quad (31.25)$$

Тензор деформации (1)

Бесконечно малое перемещение элемента сплошной среды состоит из:

- *поступательного перемещения элемента как целого;*
- *вращательного перемещения элемента как целого;*
- **деформации** элемента, при которой происходит изменение размеров и формы элемента



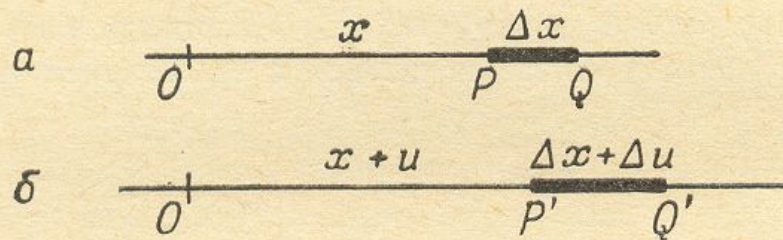
Однородная деформация элемента среды:

a — растяжение; b — сдвиг

Тензор деформации (2)

Одномерная деформация

На фиг. 35, *a* изображена растяжимая струна. Зафиксируем в пространстве начало координат *O* и затем растянем струну. После



Ф и г. 35. Деформация растяжимой струны.

a — до растяжения; *б* — после растяжения.

u - смещение
частицы

$$\Delta x' = \Delta x + u_2 - u_1$$

$$\Delta x' = \Delta x + \Delta u$$

$$e = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} (\Delta x' - \Delta x) / \Delta x =$$

$$= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \Delta u / \Delta x = du/dx - \text{деформация}$$

$$\Delta x \rightarrow 0$$

$$e = d\mathbf{u}/d\mathbf{r}; \quad e_{ij} = du_i/dx_j$$

$$du_i = e_{ij} dx_j; \quad e_{ij} - \text{тензор дисторсии}$$

Тензор дисторсии (1)

$$\Delta \vec{u} = \Delta \vec{r}' - \Delta \vec{r} = (\Delta u_1, \Delta u_2, \Delta u_3). \quad (\text{V.81})$$

Так как в общем случае $\vec{u} = f(\vec{r})$, можно записать, что

$$\left. \begin{aligned} \Delta u_1 &= \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \Delta x_3; \\ \Delta u_2 &= \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \Delta x_3; \\ \Delta u_3 &= \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \Delta x_3, \end{aligned} \right\} \quad (\text{V.82})$$

или более компактно

$$\Delta u_i = e_{ik} \Delta x_k, \quad (\text{V.82}')$$

где

$$e_{ik} = \frac{\partial u_i}{\partial x_k}.$$

вектор смещения

В общем случае: $\Delta \mathbf{r}' = \Delta \mathbf{r} + \Delta \mathbf{u}$

$$\mathbf{e} = d\mathbf{u}/d\mathbf{r}; \quad e_{ij} = du_i/dx_j$$

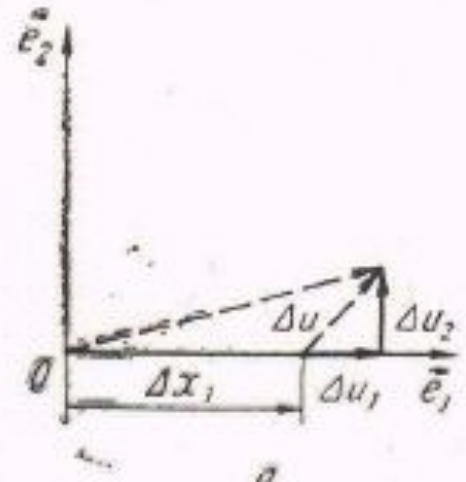
$$du_i = e_{ij} dx_j; \quad e_{ij} - \text{тензор деформации (??)}$$

Легко понять смысл компонент тензора e_{ij} :

$$\left. \begin{aligned} \Delta u_1 &= e_{11} \Delta x_1; \\ \Delta u_2 &= e_{21} \Delta x_1; \\ \Delta u_3 &= e_{31} \Delta x_1. \end{aligned} \right\}$$

$$\Delta \mathbf{x} = (\Delta x_1; 0; 0)$$

$$\Delta u_i = e_{ij} \Delta x_j$$



Тензор дисторсии (2)



К сожалению, тензор $[e_{ik}]$ не обращается в нуль при повороте элемента как целого. Как видно из рис поворот прямого угла вокруг оси $\vec{e}_3$ описывается тензором

$$[e_{ik}] = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\gamma}{2} & 0 \\ -\frac{\gamma}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

Определение тензора деформации

Представим тензор $[e_{ik}]$ в виде суммы тензоров $[\epsilon_{ik}]$ и $[\omega_{ik}]$:

$$[e_{ik}] = [\epsilon_{ik}] + [\omega_{ik}],$$

где

$$\epsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right); \quad - \text{Тензор деформации}$$

$$\omega_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right), \quad - \text{Чистые повороты}$$

Как видно, симметричный тензор $[\epsilon_{ik}]$, называемый тензором деформации, обращается в нуль при повороте элемента как целого

Антисимметричный тензор $[\omega_{ik}]$ не обращается в нуль только при чистых поворотах элемента.

Тензор деформации (6)

- **Displacement vector** $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$
- Nine components of the strain tensor

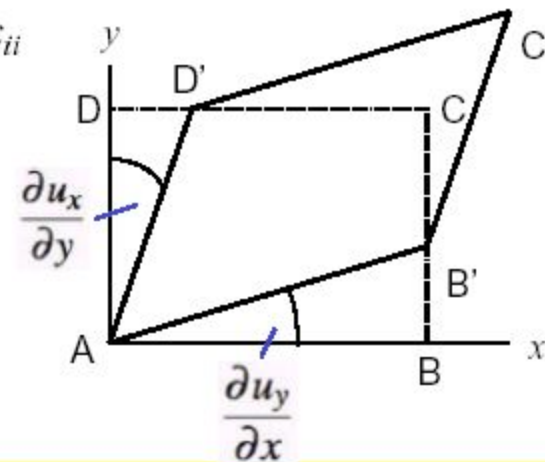
$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad \varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}$$

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

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

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

- $\varepsilon_{ij} \ll 1$,
 ε_{ii} normal strain, ε_{ij} ($i \neq j$) **shear strain**
- Fractional change in volume $\Delta V/V = \Sigma \varepsilon_{ii}$



Акивис,
Гольдберг,
1969

$$\Delta r' = \Delta r + \Delta u$$

$$(\Delta r')^2 = (\Delta r)^2 + 2\Delta r \Delta u + \Delta u^2$$

Так как деформация малая, то третьим слагаемым в правой части равенства можно пренебречь, и мы получим

откуда
$$(\Delta r')^2 - (\Delta r)^2 = 2\Delta r \Delta u$$

Полученная величина характеризует чистую деформацию окрестности точки M . Правая часть этого выражения может быть записана в виде

$$2\Delta r \Delta u \quad (4)$$

Разложим теперь тензор e_{ij} на симметричную часть ε_{ij} и кососимметричную часть ω_{ij} :

$$e_{ij} = \varepsilon_{ij} + \omega_{ij},$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} + e_{ji}), \quad \omega_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} - e_{ji}).$$

Для этого разложения тензора e_{ij} в равенство (4), по-

$$2\Delta r \Delta u$$

$$= 2\varepsilon_{ij} \Delta x_i \Delta x_j$$

Таким образом,
в чистую
деформацию
вносит вклад
только тензор ε

Вклад равен 0

Акивис,
Гольдберг,
1969

$$\Delta \mathbf{u} = \boldsymbol{\omega} \times \Delta \mathbf{r}$$

В самом деле, если Ω — линейное преобразование, имеющее кососимметричную матрицу (ω_{ik}) , то, как было показано в гл. III (стр. 106),

$$\Omega \Delta \mathbf{x} = \boldsymbol{\omega} \times \Delta \mathbf{x}.$$

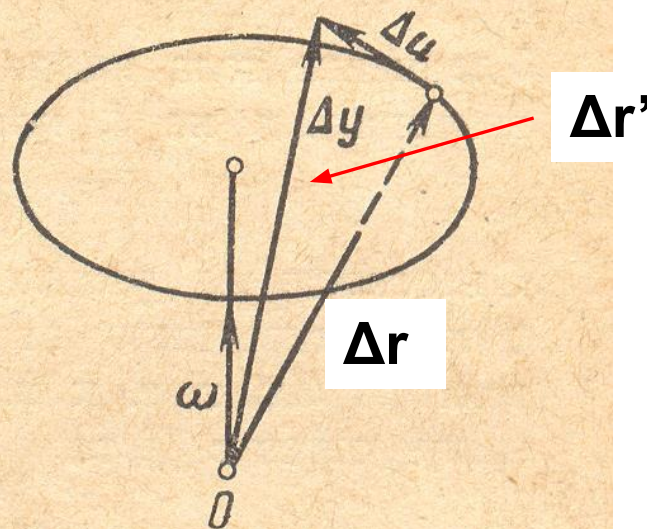
Поэтому

$$\Delta \mathbf{u} = \boldsymbol{\omega} \times \Delta \mathbf{x}$$

и

$$\Delta \mathbf{y} = \Delta \mathbf{x} + \boldsymbol{\omega} \times \Delta \mathbf{x}.$$

Но легко видеть, что последнее преобразование представляет собой поворот на малый угол $|\boldsymbol{\omega}|$ вокруг оси,



координат. Поэтому матрица антисимметричного преобразования может быть записана так:

Акивис,
Гольдберг,
1969

$$(a_{ij}) = \varepsilon \begin{pmatrix} 0 & -a_3 & a_2 \\ a_3 & 0 & -a_1 \\ -a_2 & a_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Докажем теперь, что антисимметричное линейное преобразование A может быть представлено в виде

$$Ax = a \times x.$$

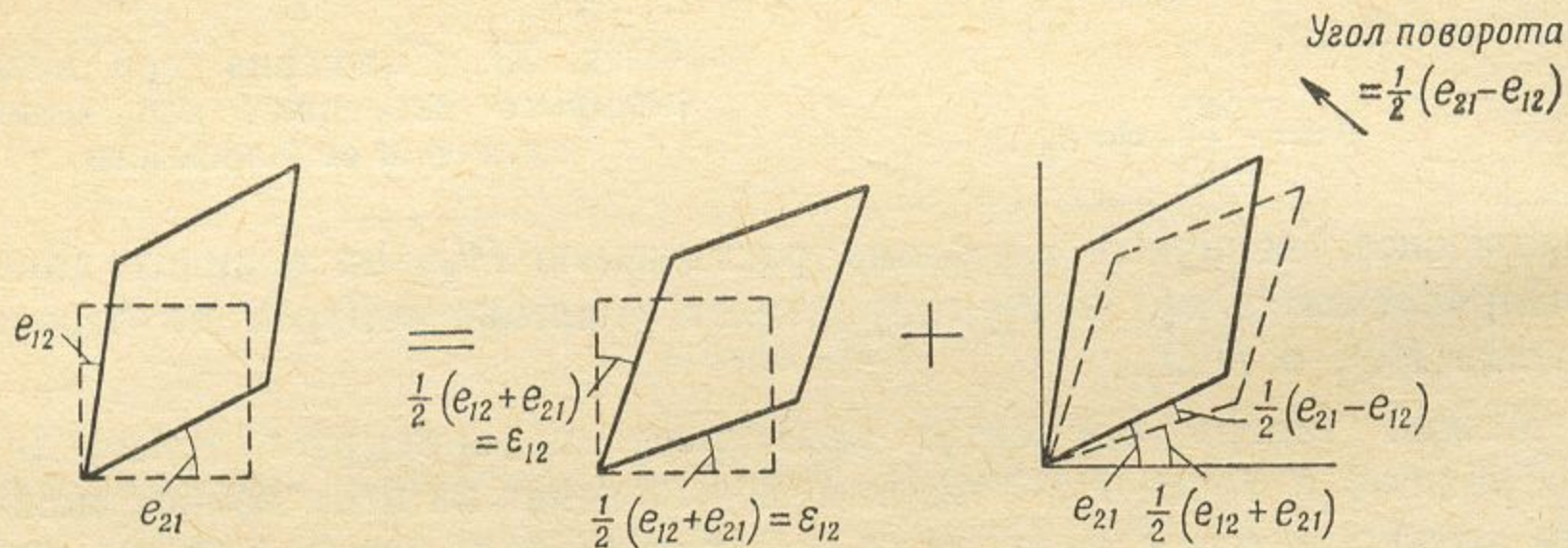
В самом деле, если $y = Ax$, то

$$y_1 = a_{1j}x_j = \varepsilon(-a_3x_2 + a_2x_3),$$

$$y_2 = a_{2j}x_j = \varepsilon(a_3x_1 - a_1x_3),$$

$$y_3 = a_{3j}x_j = \varepsilon(-a_2x_1 + a_1x_2).$$

Но выражения, стоящие в правой части этих формул, в точности совпадают с координатами векторного произведения векторов a и x (гл. I, стр. 27).



Двумерный чертеж, иллюстрирующий то обстоятельство, что произвольная деформация (слева) равна собственно деформации (в середине) плюс поворот (справа).

Тензор деформации (5)

- Generally, the elastic deviation of the shape of the solid can be expressed as a *strain tensor*,

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}$$

- ε_{ii} elongations, ε_{ij} shear ($i \neq j$)
- Strain tensor also symmetrical

$$\frac{V - V_0}{V_0} = (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})$$

Тензор деформации (6)

- **Displacement vector** $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$
- Nine components of the strain tensor

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

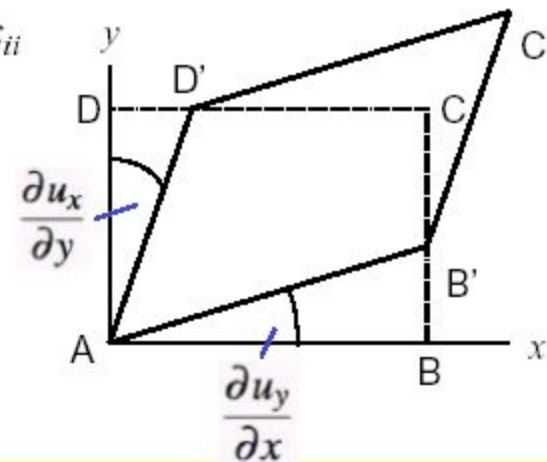
- $\varepsilon_{ij} \ll 1$,
 ε_{ii} normal strain, ε_{ij} ($i \neq j$) **shear strain**

- Fractional change in volume $\Delta V/V = \Sigma \varepsilon_{ii}$

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

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

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



Тензор упругости

Теперь, чтобы описать деформации, мы должны связать их с внутренними силами — с напряжениями в материале. Мы предполагаем, что закон Гука справедлив для любого кусочка материала, т. е. что напряжения всюду пропорциональны деформациям. В гл. 31 мы определили тензор напряжений σ_{ij} как i -ю компоненту силы, действующей на единичной площадке, перпендикулярной оси j . Закон Гука говорит, что каждая компонента σ_{ij} линейно связана с каждой компонентой напряжения. Но поскольку S и l содержат по девяти компонент, то всего для описания упругих свойств материала требуется $9 \times 9 = 81$ возможных коэффициентов. Если материал однороден, то все эти коэффициенты будут постоянными. Мы обозначим их C_{ijkl} , определив посредством уравнения

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} e_{kl}, \quad (39.12)$$

где каждый значок i, j, k и l может принимать значения 1, 2 или 3. Поскольку коэффициенты C_{ijkl} связывают один тензор с другим, они тоже образуют тензор — на этот раз тензор четвертого ранга. Мы можем назвать его *тензором упругости*.

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$$

Роль симметрии

Crystal system	No. of elastic constants
Triclinic	21
Monoclinic	13
Orthorhombic	9 ← Ромбическая
Tetragonal	6 or 7
Rhombohedral	6 or 7 ← Тригональная
Hexagonal	5
Cubic	3

Кубические кристаллы

галлов (6×6) -матрица упругих постоянных имеет, следова-

$$c_{mn} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

и связь между σ и ε согласно уравнениям (2.19) и (2.20) представляется в виде

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{11} &= c_{11}\varepsilon_{11} + c_{12}\varepsilon_{22} + c_{12}\varepsilon_{33}; \\ \sigma_{22} &= c_{12}\varepsilon_{11} + c_{11}\varepsilon_{22} + c_{12}\varepsilon_{33}; \\ \sigma_{33} &= c_{12}\varepsilon_{11} + c_{12}\varepsilon_{22} + c_{11}\varepsilon_{33}; \\ \sigma_{23} &= 2c_{44}\varepsilon_{23}; \\ \sigma_{31} &= 2c_{44}\varepsilon_{31}; \\ \sigma_{12} &= 2c_{44}\varepsilon_{12}. \end{aligned} \right\} \quad (2.21)$$

В кубических кристаллах достаточно трех упругих констант

Изотропное твердое тело

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

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

$\mu \equiv$

G

Связь с константами упругости
кубического кристалла

$$\begin{aligned} \mu &= c_{44} = \frac{1}{2} (c_{11} - c_{12}); \\ \lambda &= c_{12}; \\ \lambda + 2\mu &= c_{11}. \end{aligned}$$

Связь с модулем Юнга и
коэффициентом Пуассона

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

$$\nu = \lambda / 2(\lambda + G)$$

Коэффициенты упругости

The order of magnitude of a typical elastic constant C appearing C_{ijkl} can be estimated using dimensional analysis. Since strain is unitless, K has units of energy/volume. The energy scale is set by the binding energy per atom of the solid. As discussed in Chapter 1, this is typically of the order of a few electron volts 1.6×10^{-12} erg). The length scale is set by the interparticle spacing, which is typically of the order of a couple of angstroms. Thus we estimate C to be of order $(1.6 \times 10^{-12} / 8 \times 10^{-24}) \sim 0.2 \times 10^{12}$ dynes/cm². Elastic constants for some common materials are listed in Tables 6.4.2 and 6.4.3.

Оценка величины коэффициентов упругости

$$C = U/a^3$$

Table 6.4.2. Elastic constants for some common solids in units of 10^{12} dynes/cm².

Material	C_{11}	C_{12}	C_{44}
Li	0.148	0.125	0.108
Cu	1.68	1.21	0.75
Al	1.07	0.61	0.28
Fe	2.34	1.36	1.18
NaCl	0.487	0.124	0.126

Кубические кристаллы

$$\text{Дин/см}^2 = \text{эрг/см}^3 = 10^{-1} \text{ Дж/м}^3$$

Изотропные тела

Дин/см²

Material	Shear modulus	Bulk modulus
Tungsten carbide	2.2×10^{12}	3.2×10^{12}
Steel	0.83×10^{12}	1.5×10^{12}
Gold	0.28×10^{12}	1.7×10^{12}
Pyrex	0.25×10^{12}	0.4×10^{12}
Nylon	0.12×10^{12}	0.59×10^{12}
Rubber	$\sim 10^7$	0.03×10^{12}
Jello	$\sim 10^4$	0.02×10^{12}
Polystyrene foam	1.3×10^8	2×10^8
Shaving foam	$\sim 10^3$	$\sim 10^6$
Ice	0.025×10^{12}	0.073×10^{12}
Water	0	0.02×10^{12}
Air	0	10^6 (1 atm)

$$\text{Дин/см}^2 = \text{эрг/см}^3 = 10^{-1} \text{ Дж/м}^3 = 10^{-1} \text{ Н/м}^2$$

Энергия деформируемого кристалла

Когда единичный элемент объема деформируется на малую величину $d\varepsilon_{ij}$, напряжения совершают над ним работу:

$$dW_{el} = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} d\varepsilon_{ij}$$

Плотность
энергии!
[эрг/см³]

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad - \text{Закон Гука}$$

После интегрирования имеем для плотности энергии:

$$W_{el} = (1/2) C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} = (1/2) \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}$$

Полная упругая энергия деформации получается интегрированием

по всему объему кристалла:
$$W_{el \text{ полн}} = (1/2) \int_V C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} d^3r$$

В случае однородной деформации: $\varepsilon_{kl} = \text{const} (r)$

$$W_{el \text{ полн}} = (1/2) C \varepsilon^2 V \quad - \text{одноконстантное приближение}$$

При неоднородной деформации: $\varepsilon_{kl} = \varepsilon_{kl} (r)$;

$$W_{el \text{ полн}} = (1/2) \int C \varepsilon^2(r) d^3r$$


Энергия деформируемого кристалла

Обратимся теперь к упругой энергии. Когда единичный элемент объема обратимо деформируется на малую величину $d\varepsilon_{ij}$, напряжения совершают над ним работу

$$dw = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl} d\varepsilon_{ij}. \quad (2.9)$$

В общем случае изменение свободной энергии при обратимом изменении объема имеет вид

$$dF = -S dT + \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} + dw', \quad (2.10)$$

где в dw' включена работа, обусловленная другими явлениями, например электрической поляризацией, пьезоэлектричеством и т. д.

Если деформация производится обратимо и при постоянной температуре и если вся работа идет на упругую деформацию, то дифференциал работы равен дифференциальному изменению свободной энергии данного элемента:

$$dF = dw = c_{ijkl} \varepsilon_{kl} d\varepsilon_{ij}. \quad (2.11)$$

Отсюда

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} = c_{ijkl}. \quad (2.12)$$

В общем случае если деформация производится обратимо и при постоянной температуре, и если вся работа идет на упругую деформацию, то свободная энергия системы имеет вид:

$$F = (1/2) \int_V C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} d^3r$$

Плотность энергии деформации в общем случае записывается в виде:

$$W_{el} = W_{el}(\epsilon_{kl}) = (1/2) C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + (1/6) C_{ijklmn} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \epsilon_{mn} + \\ + (1/24) C_{ijklmnpq} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \epsilon_{mn} \epsilon_{pq}$$

$$\partial^2 W_{el} / \partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}$$

Гармоническое приближение

Ангармонические поправки

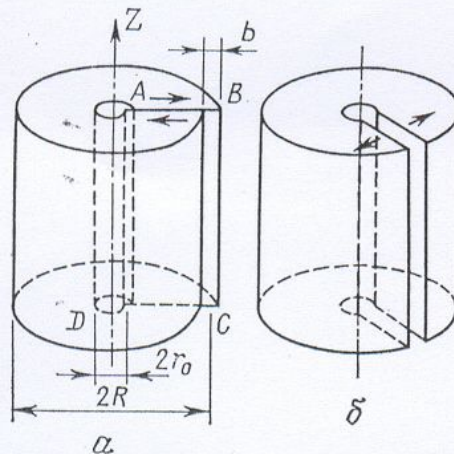
*Упругие поля и напряжения вокруг
дислокаций*

Дислокации в непрерывной упругой среде

Как видно из рис. 18 и 21, вокруг дислокации кристаллическая решетка искажена, причем деформация убывает по мере удаления от ядра и вне ядра настолько мала, что может быть вычислена в приближении линейной теории упругости. Такая задача была решена Вольтерра

еще в 1907 г. Мы ее рассмотрим в следующем простом варианте, пренебрегая краевыми эффектами. Дан цилиндр радиусом R (рис. 22, a). Вырежем из него коаксиальный цилиндр радиусом $r_0 \ll R$. Проведем плоский разрез $ABCD$, проходящий через ось цилиндра, сдвинем ле-

вый берег разреза относительно правого вдоль радиуса R на расстояние b (для чего к ним надо приложить силу), склеим берега раз-

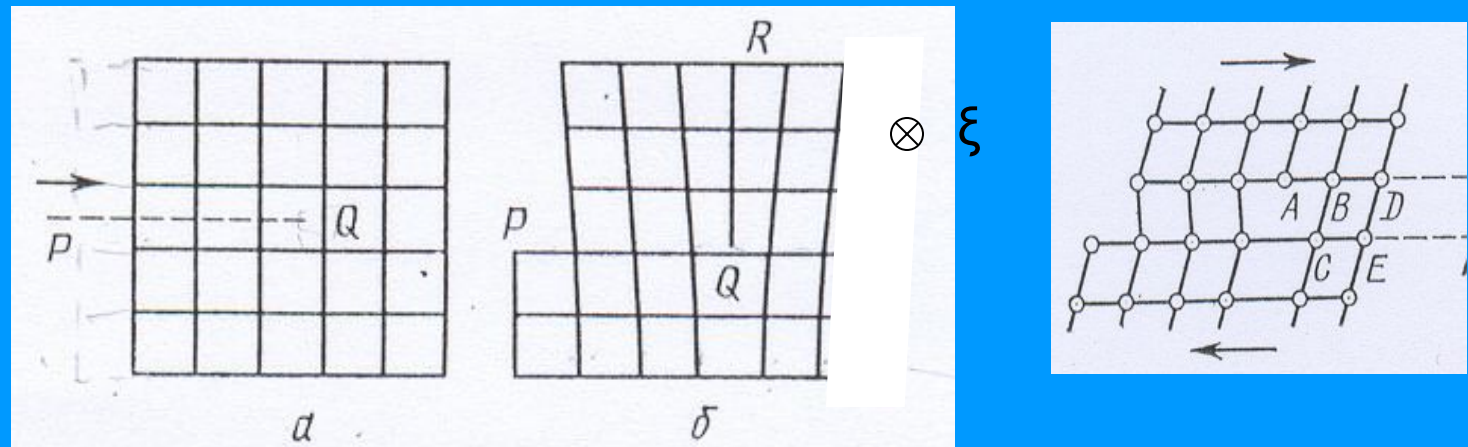


22. Образование краевой дислокации в непрерывной упругой среде

Построение
Вольтерра

реза и снимем приложенную силу. В результате в цилиндре возникнет такое же напряженное состояние, как в кристалле с краевой дислокацией*. Действительно,

Образование краевой дислокации в кристалле



представленный на рис. 18, б кристалл с экстраплоскостью CA можно приготовить только что описанным способом (рис. 23, а). Представим для простоты кристалл состоящим из правильно расположенных атомов-шариков, соединенных локализованными «межатомными связями» — черточками (об условности этой схемы говорилось в § 3). Разрезу по полуплоскости PQ отвечает разрыв всех межатомных связей, пересекающих эту полуплоскость. Если теперь сдвинуть верхнюю половину кристалла относительно нижней на b и воссоединить оказавшиеся друг против друга связи, возникнет конфигурация, показанная на рис. 23, б. Вдоль прямой Q останется ряд «ненасыщенных» связей — край экстраплоскости. Такой же ряд P возникает на поверхности кристалла.

Построение Вольтерра для винтовых и краевых дислокаций

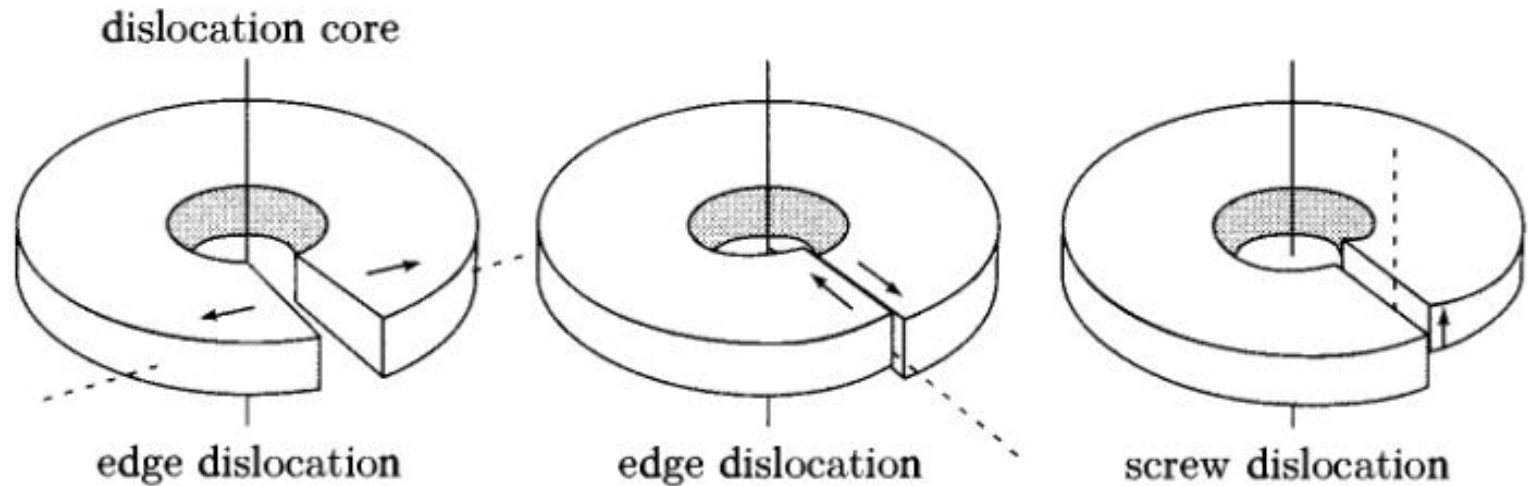
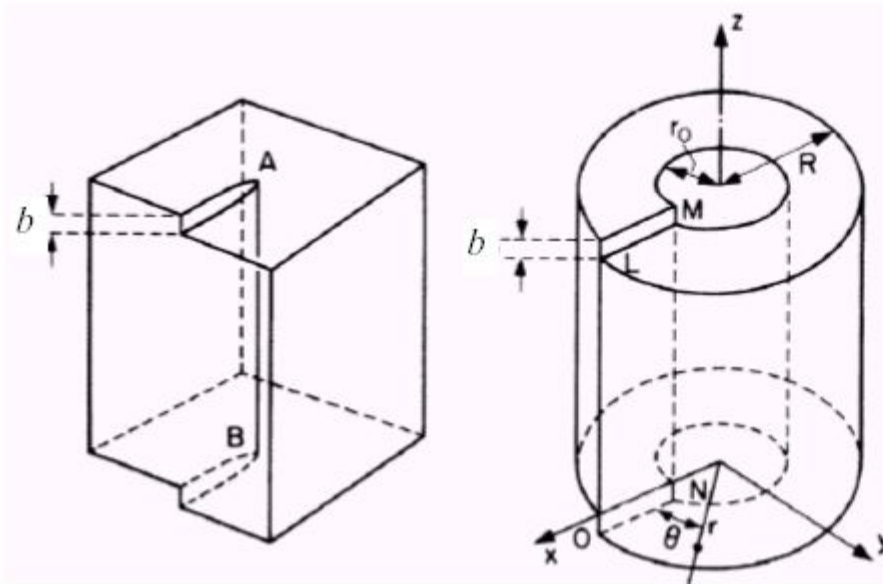


Fig. 9.2.13. The Volterra construction for edge and screw dislocations.

Поле смещений вокруг винтовой дислокации



Volterra screw **dislocation**
[Hull, Bacon 1992]

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

Displacements:

$$u_x = u_y = 0$$

$$u_z = \frac{b\theta}{2\pi} = \frac{b}{2\pi} \operatorname{arctg}(y/x)$$

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

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

Цилиндрические
координаты:

r, θ, z

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

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

Вычисление компонент тензора деформации (1)

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

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

$$u_x = 0$$

$$u_y = 0$$

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

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

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

Вычисление компонент тензора деформации (2)

Смещения:

$$u_x = u_y = 0$$

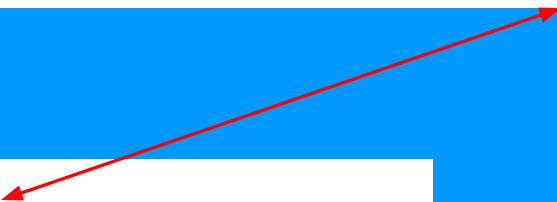
$$u_z = \frac{b\theta}{2\pi} = \frac{b}{2\pi} \operatorname{arctg}(y/x)$$

$$\varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} =$$

$$(1/2) du_z / dy = (b/4\pi) d[\operatorname{arctg}(y/x)] / dy$$

=

$$\frac{b}{4\pi} \frac{x}{(x^2 + y^2)}$$

$$\int dy / (y^2 + a^2) = (1/a) \operatorname{arctg}(y/a)$$


Вычисление компонент тензора деформации (3)

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx} &= \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = \\ \varepsilon_{xz} &= \varepsilon_{zx} = -\frac{b}{4\pi} \frac{y}{(x^2 + y^2)} = -\frac{b}{4\pi} \frac{\sin \theta}{r} \\ \varepsilon_{yz} &= \varepsilon_{zy} = \frac{b}{4\pi} \frac{x}{(x^2 + y^2)} = \frac{b}{4\pi} \frac{\cos \theta}{r}\end{aligned}$$

Цилиндрические
координаты:

$r, \theta, z; \quad x^2 + y^2 = r^2; \quad \operatorname{tg} \theta = y/x$

Вычисление компонент тензора напряжений

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

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

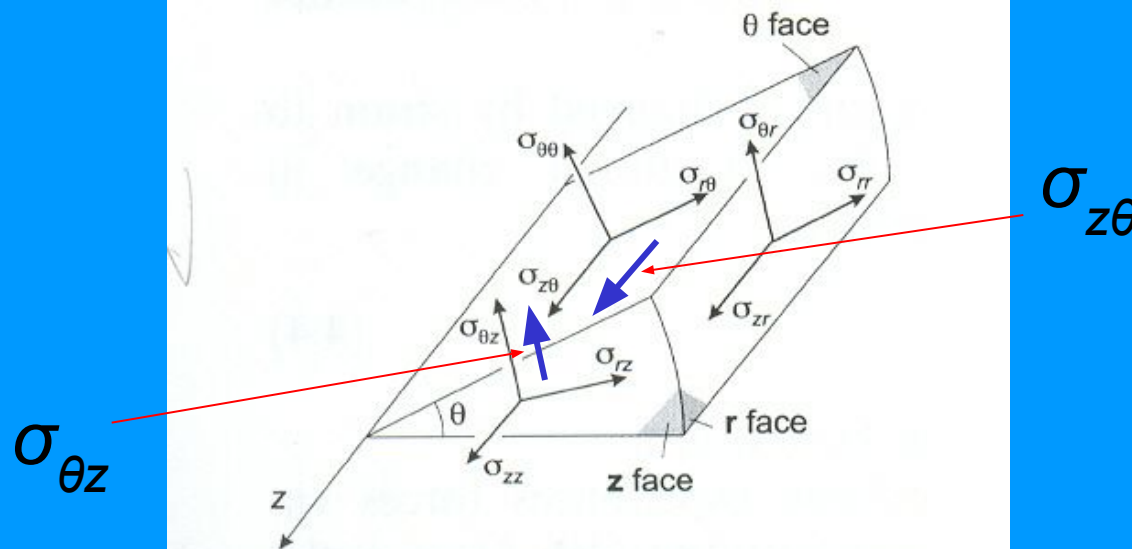
$\mu \equiv$
 G

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

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

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

Компоненты тензора напряжений 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 θ 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*.

Цилиндрические координаты:

$$\begin{aligned} r, \theta, z \\ x^2 + y^2 &= r^2; \\ \text{tg} \theta &= y/x \end{aligned}$$

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:

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

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

Упругие поля искажений вокруг дислокаций являются дальнодействующими!

Отличные от нуля компоненты ε_{ij} и σ_{kl} убывают с расстоянием от дислокации как r^{-1} ,

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

Сравнение законов спада напряжений с расстоянием r , для точечных дефектов, дислокаций и дислокационных стенок

напряжение σ на расстоянии r от точечного Д. мощности S , определяемой разностью объёмов Д.—включения и полости в кристалле, в которую он вставлен, равно:

$$\sigma \sim GS/r^3, \quad (1)$$

т. е. спадает с r сравнительно быстро. В отличие от этого, упругое поле дислокации

$$\sigma \sim Gb/r \quad (2)$$

является дальнодействующим. Для поверхностных Д. σ спадает с r быстрее; так, для малоугловой дислокац. границы при $r > h$ (h — расстояние между дислокациями):

$$\sigma \approx \frac{Gbr}{h^2} e^{-2\pi r/h}. \quad (3)$$

Легко вычислить поле напряжений для винтовой дислокации. В этом случае сдвиг по поверхности разреза $ABCD$ на рис. 22 проводится в направлении оси цилиндра. При этом вектор смещения u направлен всюду вдоль OZ и пропорционален азимуту θ

$$u_z = w = \frac{b\theta}{2\pi} = \frac{b}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y}{x}. \quad (14.3)$$

Отличные от нуля компоненты тензора деформации равны

$$\varepsilon_{xz} = -\frac{b}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}, \quad \varepsilon_{yz} = \frac{b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}, \quad (14.4)$$

откуда с помощью закона Гука находятся компоненты тензора напряжений

$$\sigma_{xz} = -\frac{Gb}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}, \quad \sigma_{yz} = \frac{Gb}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}. \quad (14.5)$$

Из (14.2), (14.4) и (14.5) следует важный вывод, что отличные от нуля компоненты σ_{ij} и ε_{ij} убывают с расстоянием от дислокации как r^{-1} :

$$\varepsilon \sim \sigma \sim r^{-1}. \quad (14.6)$$

Мы видим таким образом, что даже если к телу с дислокациями не приложены никакие внешние напряжения,

в нем имеются внутренние напряжения, источником которых являются дислокации.

Упругая энергия дислокации

Полная энергия дислокации состоит из двух частей:

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

$$W_{\text{el}} = (1/2) C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \\ = (1/2) \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}$$

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 :

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

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

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

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

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

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

$$E_{\text{bond}} \approx Gb^3$$

Что в пересчете на одну связь дает:

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

Как видно, упругая энергия дислокации пропорциональна Gb^2 . При числовой оценке U необходимо учитывать, что в реальных кристаллах дислокации располагаются различным образом, так что их поля напряжений местами усиливаются, местами компенсируются. Можно считать, что в среднем расстояние R , на котором поле данной дислокации компенсировано полями соседних, порядка среднего расстояния между ними $R \approx \rho^{-1/2}$, что при обычных значениях плотности дислокаций в отожженных кристаллах $\rho = 10^7 \text{ см}^{-2}$ дает $R/r_0 = 10^4$, так что $\ln(R/r_0) \approx 10$ и $U \approx Gb^2$. Подставляя сюда типичные значения $G = 10 \text{ ГПа}$, $b^2 = 10^{-15} \text{ см}^2$, получаем $U = 0,1 \text{ Дж/м}$. В пересчете на одно межплоскостное расстояние это дает

$$U \approx 10 \text{ эВ.} \quad (16.5)$$

Чтобы найти полную линейную энергию дислокации, надо к (16.5) добавить энергию U_c ядра дислокации, т. е. энергию атомов в трубке радиусом r_0 . Энергия U_c должна быть вычислена с помощью микроскопической теории. Оценки U_c для некоторых кристаллов получены на ЭВМ с использованием потенциалов межатомного взаимодействия типа (3.2) и дают значения около 1—2 эВ на атомную плоскость. Следовательно, основная часть энергии дислокации сосредоточена в ее дальнедействующем упругом поле. Учитывая неточность оценки значения логарифма в (16.4), можно считать, что полная энергия дислокации определяется формулой

$$U = Gb^2. \quad (16.6)$$

Эта величина называется также *линейной энергией* или *энергией линейного натяжения дислокации*.

Наименьшей энергией обладают дислокации с наи-

меньшим возможным значением b , равным, очевидно, кратчайшему межатомному расстоянию в данной решетке. Только такие дислокации и встречаются обычно в кристаллах (за исключением особых случаев слияния дислокаций; см. § 38).

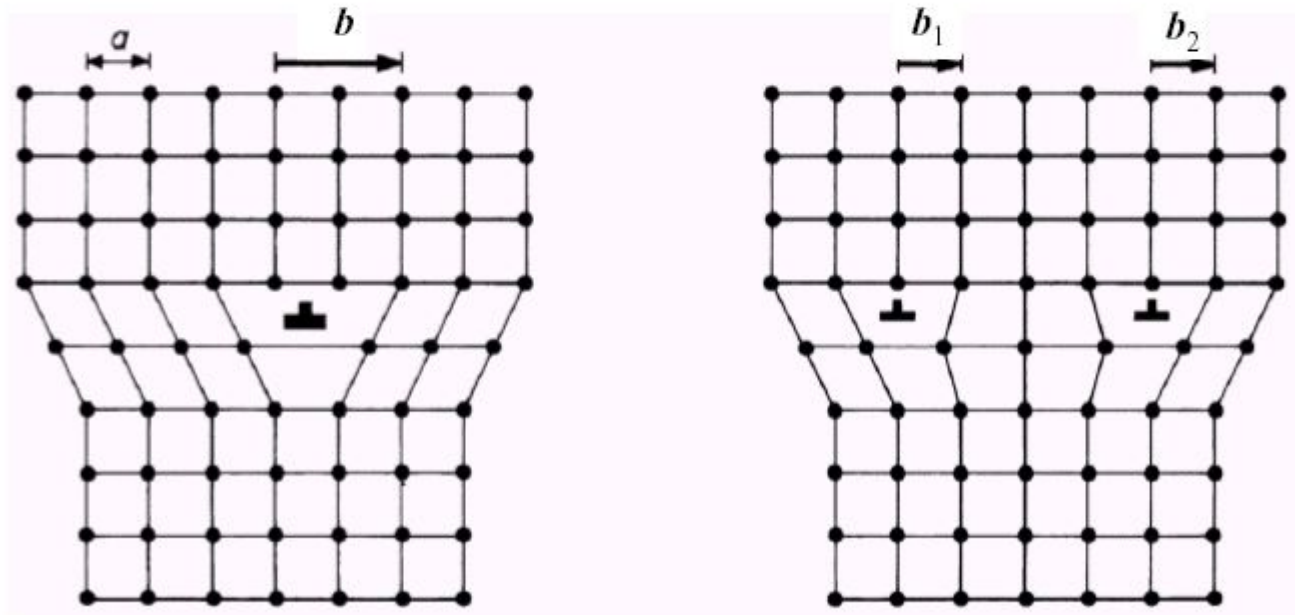
Оценка (16.5) показывает, что даже короткий отрезок дислокации длиной в 10 межатомных расстояний имеет энергию более 100 эВ. Это означает, что дислокации не могут возникать за счет тепловых флуктуаций и в термодинамическом равновесии кристалл дислокаций не содержит. Иными словами, *дислокации (в отличие от вакансий и межузельных атомов) не являются термодинамически равновесными дефектами*. Поскольку полное удаление дислокаций из кристалла практически всегда связано с диффузионными процессами, оно требует даже при высоких температурах очень больших времен, гораздо больших, чем время установления равновесной концентрации точечных дефектов. Поэтому можно говорить о равновесном распределении таких дефектов в поле напряжений дислокации (см. § 27).



Диссоциация дислокаций

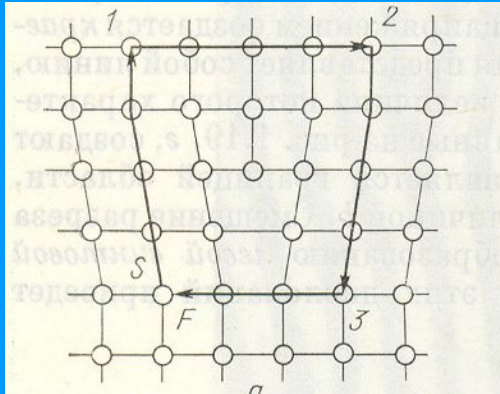
Energy criterion for the dissociation into partial dislocations

$$E_{\text{el}} \approx \alpha G b^2$$



Ядро дислокации

В области радиусом порядка нескольких межатомных расстояний, называемой *ядром дислокации*, искажения решетки велики и не могут быть описаны в терминах теории упругости. Плотность энергии в ядре дислокации достигает величины одного порядка со скрытой теплотой плавления кристалла, поэтому иногда образуются дислокации с полным ядром. Энергия дислокации складывается из энергии неупругих искажений в ядре дислокации и энергии упругих деформаций вокруг дислокации. Как правило, основным оказывается вклад второго слагаемого, которое можно оценить, полагая в формуле (14) величину R порядка радиуса кристалла, а величину r_0 — порядка радиуса ядра дислокации (обычно полагают $r_0 \sim b$). Энергия дислокации составляет величину порядка $0,5Gb^2$ на один сантиметр длины дислокации, что соответствует одному или нескольким электрон-вольтам на одно межатомное расстояние.



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

ядро — неупругие искажения

упругие деформации

Оценки, выполненные на основе различных микроскопических подходов и результатов компьютерного моделирования взаимодействий в ядре дислокаций, показывают, что энергия ядра дислокации не превышает 10-15% полной энергии, т.е. большая часть энергии дислокации связана с упругими деформациями, распространяющимися далеко в объеме кристалла.