

А.Келли, Г.Гровс

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ
И ДЕФЕКТЫ
В КРИСТАЛЛАХ

A. KELLY AND G. W. GROVES

CRYSTALLOGRAPHY AND CRYSTAL DEFECTS

Longman
London
1970

А. КЕЛЛИ, Г. ГРОВС

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И ДЕФЕКТЫ В КРИСТАЛЛАХ

Перевод с английского
канд. физ.-мат. наук С. Н. Горина
и канд. физ.-мат. наук О. М. Кугаенко
и В. С. Савченко

Под редакцией
д-ра физ.-мат. наук М. П. Шаскольской

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»
МОСКВА 1974

В предлагаемой вниманию читателя монографии известных английских ученых оригинально, умело и просто изложены сложные вопросы физики идеального и реального кристалла.

В первой части книги «Совершенные кристаллы» рассмотрены геометрия и симметрия кристаллов, кристаллические структуры, дано представление о тензорных физических свойствах кристаллов. Во второй части «Несовершенные кристаллы» приведены основные понятия, необходимые для теории дислокаций (напряжение, деформация, упругость), рассмотрены скольжение и двойникование, изложена физика дислокаций, их геометрия, свойства и особенности, обсуждаются механическое двойникование и мартенситные превращения. Книга написана очень просто, для ее понимания требуется знание лишь основ математики. Свойства векторов, тензоров и матричные методы приведены в приложении. Большое достоинство книги — множество оригинальных задач.

Монография чрезвычайно полезна для студентов, аспирантов, преподавателей, работников исследовательских лабораторий и научных институтов, а также для инженеров-практиков.

Редакция литературы по новой технике

© Перевод на русский язык, «Мир», 1974

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

Учение о дефектах структуры кристаллов стало за последние годы неотъемлемой и весьма существенной частью физики твердого тела и физического материаловедения. Точечные дефекты, дислокации, дефекты упаковки и другие несовершенства структуры, неизбежно существующие в кристалле, определяют механические свойства кристалла, управляют процессами диффузии, в значительной мере влияют на электрические, магнитные и тепловые свойства твердых тел, на процессы роста и фазовых переходов и на явления, сопутствующие пластической деформации. Без достаточно глубокого понимания дефектов структуры невозможно использование свойств кристаллов. Поэтому как теория дефектов кристаллической структуры, так и их экспериментальное исследование развиваются за последние два-три десятка лет чрезвычайно бурно. Изучение дефектов структуры кристаллов становится настоятельно необходимым для всех, кто изучает, изготавливает и использует кристаллы в самых разнообразных отраслях техники — в металловедении и металлообработке, в физике и технике полупроводников, в ядерной технике, в космическом материаловедении, в оптике, акустике, радиоэлектронике и т. д.

Сейчас уже нет такой острой нехватки книг о дефектах, какая ощущалась еще совсем недавно. Кроме классических переводных монографий [1—6], имеются и отечественные монографии и учебники [7—13], а также многочисленные сборники трудов конференций и обзорные статьи.

Чем же оправдывается выпуск еще одной книги о дефектах структуры кристаллов? Дело в том, что предлагаемая вниманию читателей монография А. Келли и Г. Гровса имеет одно существенное отличие от предыдущих книг, придающее ей особую ценность. Это книга не о дефектах вообще, а о кристаллографии дефектов.

Учение о дефектах структуры кристаллов базируется на кристаллографии, и для его понимания необходимо хорошо владеть основными понятиями кристаллографии, главным образом геометрическими представлениями и методами. В большинстве книг о дефектах кристаллов в первых главах содержится краткое изложение основных понятий и определений кристаллографии. Но почти всегда подобное изложение дает лишь самое общее представление, не интересное для тех, кто знает предмет, и бесполезное для тех, кто встречается с этими представлениями впервые. Даже лица, которые до изучения теории дефектов изучали классическую кристаллографию, не всегда обращали достаточно внимания на аспекты, необходимые для понимания дефектов структуры. Но, кроме того, те, кому пришлось в последние годы обратиться к учению о дефектах кристаллической структуры, как правило, не изучали кристаллографию совсем или знакомились с ней отрывочно. Содержанием книги Келли и Гровса является именно кристаллография — те ее разделы и методы, которые необходимы для понимания дефектов, — и само учение о дефектах, полностью базирующееся на кристаллографических представлениях. В этом и заключается отличие предлагаемой книги от всех других учебников и монографий по дефектам структуры кристаллов.

Авторы являются не только известными специалистами в данной области, но и опытными педагогами высших учебных заведений; прочитанные ими курсы лекций легли в основу настоящей монографии. При этом ими последовательно были отобраны именно те вопросы кристаллографии, которые используются в учении о дефектах структуры и которыми нужно владеть активно, т. е. не просто понимать в общих чертах, о чем идет речь, а уметь применять основные построения, преобразования, упрощения, графические и вычислительные методы. Авторы опустили многие из тех вопросов, которые стали для кристаллографии традиционными, без которых не обходится ни один учебник, но которые не используются непосредственно в учении о дефектах. Так, например, подробно излагая принципы и приемы стереографической проекции и кристаллографического индицирования, авторы вообще ничего не говорят о кристаллических многогранниках; начав с идеи о решетке, они последовательно проводят ее на протяжении всего изложения. Даже основные экспериментальные

законы кристаллографии, такие, как закон постоянства углов, тоже выводятся из представления о решетке. Изложение действительно получается строго логическим, однако представляется, что традиционный страх перед кристаллическими многогранниками не столь уж обоснован и что хотя бы рисунки их могли бы помочь читателю представить себе системы эквивалентных плоскостей в пространстве, что необходимо, например, когда излагается вопрос о плоскостях скольжения.

Преимущества принятой авторами системы изложения особенно наглядно проявляются в главах, посвященных геометрии пластической деформации путем скольжения и двойникования. Геометрия пластической деформации описана так подробно и наглядно, как это, пожалуй, не сделано ни в одной книге. Здесь, можно сказать, «работает» весь математический и кристаллографический аппарат, изложенный в первой части, и читатель воочию убеждается в том, насколько важны четкие кристалло-геометрические представления для правильного понимания материала книги. Геометрия скольжения, независимые системы скольжения, закон критического скалывающего напряжения иллюстрированы проекциями, формулами, наглядными схемами, т. е. всем тем, чего так не хватает во многих книгах по пластической деформации кристаллов.

Трактовка дислокаций в следующих главах ведется на основе развитого представления о геометрии пластической деформации, что придает изложению законченность и наглядность.

Экспериментальные данные, приводимые в книге, относятся к самому последнему времени. Нельзя не отметить, однако, некоторую однобокость в цитировании литературы: авторы ссылаются в основном лишь на работы, близкие их собственным интересам. Поэтому мы сочли полезным добавить к каждой главе основные отечественные и переводные издания по соответствующим вопросам (в списках литературы они отмечены звездочкой). Подробный перечень работ читатель найдет в выпусках библиографического справочника «Дислокации в кристаллах»! (изд-во «Наука») [17].

В заключение хочется отметить, что данная монография может быть чрезвычайно полезна для студентов, аспирантов и преподавателей вузов и втузов, для работников исследовательских лабораторий и научных институтов, а также для инженеров-практиков.

Главы 1, 2, 3, 10 и 11 переведены С. Н. Гориним, остальные главы — О. М. Кугаенко и В. С. Савченко. С. Н. Горин оказал также большую помощь при редактировании своими ценными замечаниями, в частности по гл. 12. Решения к задачам проверки О. М. Кугаенко, В. С. Савченко и редактором.

М. Шаскольская

ЛИТЕРАТУРА

1. Рид В. Т., Дислокации в кристаллах, Metallurgizdat, М., 1957.
2. Коттрелл А. Х., Дислокации и пластическое течение в кристаллах, Metallurgizdat, М., 1958.
3. Ван Бюрен Х. Г., Дефекты в кристаллах, ИЛ, М., 1960.
4. Фридель Ж., Дислокации, изд-во «Мир», 1967.
5. Халл Д., Введение в дислокации, Атомиздат, М., 1968.
6. Хирт Дж., Лоте И., Теория дислокаций, Атомиздат, М., 1972.
7. Васильев Л. И., Дислокации в металлах и сплавах, Ленингр. дом научно-техн. пропаганды, Л., 1963.
8. Повиков И. И., Дефекты кристаллической решетки металлов, изд-во «Металлургия», 1968.
9. Гегузин Я. Е., Макроскопические дефекты в металлах, Metallurgizdat, М., 1962.
10. Классен-Неклюдова М. В., Механическое двойникование кристаллов, Изд-во АН СССР, М., 1960.
11. Ивапова В. С. и др., сб. «Роль дислокаций в упрочении и разрушении металлов», изд-во «Металлургия», 1965.
12. Финкель В. М., Физика разрушения, изд-во «Металлургия», 1970.
13. Горелик С. С., Дашевский М. Я., Материаловедение полупроводников и металловедение, изд-во «Металлургия», 1973.
14. Сб. «Динамика дислокаций», Харьков, 1968.
15. Физика кристаллов с дефектами (материалы Школы по теории дефектов в кристаллах и радиационных нарушений, Тбилиси, 1965), вып. 1—3, Изд-во АН Груз. ССР, Тбилиси, 1966.
16. Инденбом В. Л., Дислокации в кристаллах, статья в Физич. энцикл. словаре, т. 1, изд-во «Советская энциклопедия», М., 1961.
17. Сб. «Физика деформационного упрочнения монокристаллов», изд-во «Наукова думка», Киев, 1972.
18. Дислокации в кристаллах, библиографический указатель: вып. 1 (до 1959 г.), Изд-во АН СССР, 1959; вып. 2 (1959—1964 гг.), изд-во «Наука» 1966; вып. 3 (1964—1971 гг.), изд-во «Наука», 1974.

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРОВ

В данной книге изложены основы кристаллографии и учения о структурных несовершенствах в кристаллах. Причина, почему эти две темы трактуются вместе, заключается в том, что первая необходима для надлежащего восприятия второй. Поскольку классическая кристаллография сформировалась еще в прошлом столетии, а несовершенства в кристаллах интенсивно изучаются в течение всего лишь двух последних десятилетий, в книгах по дефектам структуры в кристаллах и вообще по физике твердого тела в первых главах обычно дается краткая сводка теорем кристаллографии, а в последующих главах по возможности детально рассматриваются основные свойства дефектов. В практике преподавания мы убедились, что такой подход не является удовлетворительным, во-первых, потому, что студенту многие свойства дефектов оказываются непонятными, если у него нет полной ясности в понимании концепции решетки и отчетливого представления о кристаллографических классах симметрии, а, во-вторых, потому, что подробное изучение дефектов в различных кристаллах, особенно необходимое студентам старших курсов, требует знания кристаллической структуры и умения вычислять такие величины, как межплоскостные расстояния, или преобразовывать индексы или уметь обращаться со стереографической проекцией.

В этой книге мы пытались дать фундаментальное изложение основных теорем кристаллографии, с тем чтобы показать возможность их применения к изучению дислокаций, точечных дефектов, двойников и фазовых превращений. При этом, однако, мы старались избежать трудностей, связанных с изучением внешних форм кристаллов и прежде всего с обилием их наименований.

По этой причине мы начинаем рассмотрение с понятия о кристаллической решетке. Первые три главы посвящены основным

теоремам кристаллографии и описанию важнейших кристаллических структур. Затем мы переходим к элементарным тензорным представлениям физических свойств кристаллов. Во второй части книги описаны дефекты и главным образом те их свойства, которые непосредственно следуют из геометрических представлений. После вводной главы об упругости кристаллов последовательно рассматриваются дислокации, точечные дефекты, двойники, мартенситные превращения и поверхности раздела в кристаллах.

Данное издание рассчитано на читателей, владеющих только элементарной математикой. Некоторые свойства векторов, тензоров и матриц излагаются в основном тексте и в приложениях.

Книга доступна студентам младших курсов; главы по элементарной кристаллографии основаны на сведениях, которые студенты получают в первые три года обучения. Однако, поскольку изложение основ дано в достаточно сжатой форме, а индивидуальные несовершенства рассмотрены детально, книга может быть полезна студентам старших курсов и аспирантам. Материал последних глав излагался в лекциях для студентов старших курсов Кембриджского университета, в специальных курсах Северо-западного университета (Чикаго, шт. Иллинойс) и Технологического института Карнеги. Мы надеемся, что эта книга будет полезна студентам как в начале, так и в конце их обучения.

А. Келли

Г. Гровс

СОВЕРШЕННЫЕ КРИСТАЛЛЫ

Глава 1

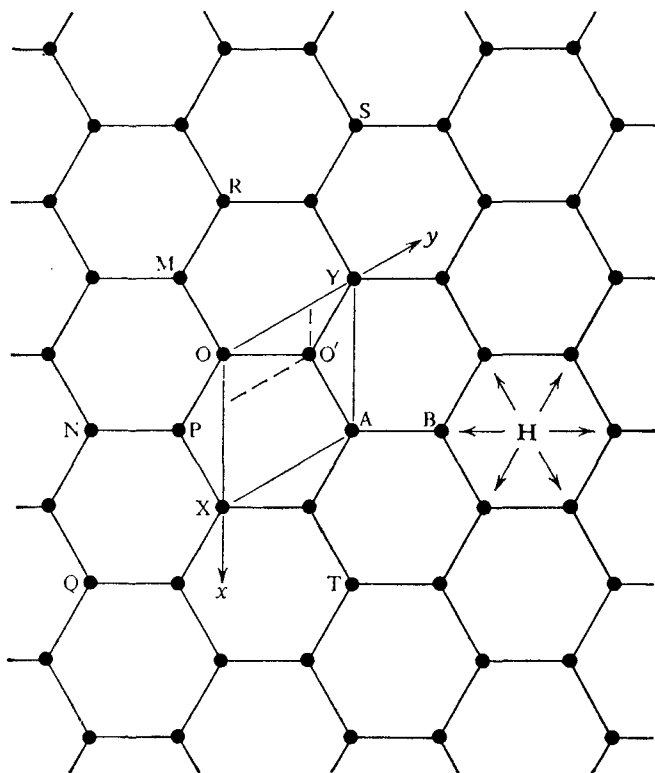
Геометрия решетки

1.1. Элементарная ячейка

Кристаллы — это твердые вещества, в которых атомы располагаются правильным образом относительно друг друга. Эту правильность их относительного взаимного расположения можно описать на основе понятий симметрии; элементы симметрии кристалла определяют симметрию его физических свойств. Например, элементы симметрии показывают, в каких направлениях электрическое сопротивление кристалла будет одинаковым. У многих природных кристаллов, например у каменной соли (галит, хлористый натрий) или кальцита (карбонат кальция), грани очень хорошо развиты. Во взаимном расположении этих граней на кристалле проявляется определенная закономерность, что указывает на правильное расположение атомов в кристалле. Такие кристаллы сыграли очень важную роль в истории науки, так как законы симметрии кристаллов были выведены в свое время именно на основании измерений углов между их гранями; первые измерения подобного рода были произведены еще в XVII в. Изучение таких кристаллов и до сих пор представляет значительную эвристическую ценность при овладении основными понятиями симметрии.

В настоящее время расположение атомов в кристаллах, или тот *атомный узор*, который они образуют, можно определять прямыми методами. Атомный узор кристалла описывается элементами симметрии; он имеет фундаментальное значение, поэтому мы начнем именно с него.

В кристалле графита атомы углерода соединены друг с другом так, что образуются плоские слои. Между собой эти слои связаны очень слабо. Отдельно взятый слой является примером двумерно-



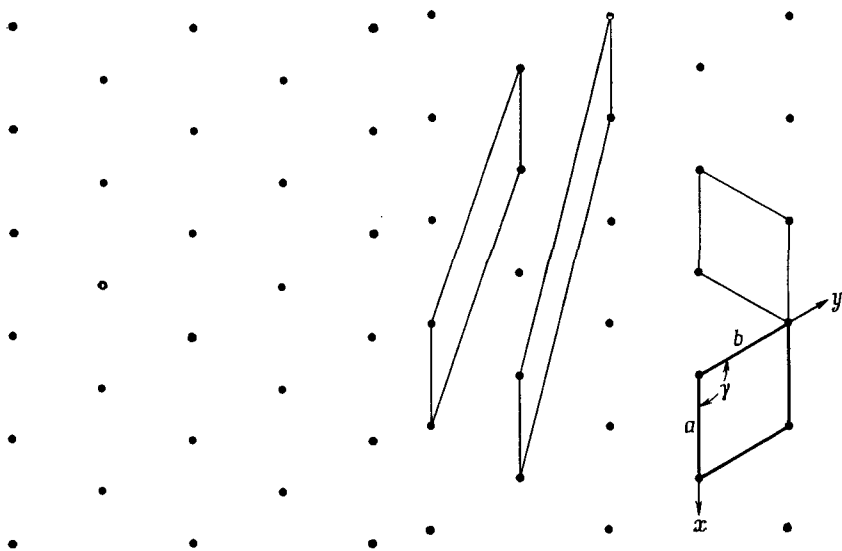
Фиг. 1.1а. Расположение атомов углерода в плоских слоях кристалла графита.

го кристалла. Взаимное расположение атомов внутри слоя показано на фиг. 1.1а. Все атомы одинаковы. Каждый атом имеет трех ближайших соседей. Чтобы выразить эту особенность их взаимного расположения, мы говорим, что у этих атомов координационное число равно трем. В данном случае координационное число одинаково для всех атомов. Заметим, однако, что, хотя координационное число атомов, обозначенных *A* и *B*, одинаково, ориентация узоров, образуемых ближайшими соседними атомами вокруг атомов *A* и *B*, различна. Такую же ориентацию, как вокруг атома *A*, имеют атомы, расположенные вокруг *N* и *Q*; ситуация, аналогичная *B*, наблюдается в *M* и *P*.

Очевидно, что расположение атомов и межатомные связи, показанные на фиг. 1.1а, мы можем полностью описать, выбрав небольшую ячейку, например *OXAY*. После того как указаны расположение атомов и ориентация связей внутри такой ячейки,

мы передвигаем ячейку таким образом, чтобы она заняла позицию $NQXO$, и повторяем описание; затем передвигаем ее в позицию $ROY S$ и т. д., пока не заполним все пространство идентичными ячейками, что и будет равноценно описанию всей структуры. Если считать, что передвижение ячейки и повторение описания происходят автоматически, тогда для описания кристалла достаточно описать расположение атомов и межатомных связей внутри лишь одной ячейки. Выбранную ячейку будем называть *единичным* или *элементарным параллелограммом* в случае двух измерений; в трехмерном пространстве она будет называться *элементарным параллелепипедом* или просто *элементарной ячейкой*. При выборе ячейки мы всегда выбираем параллелограмм в двух измерениях и параллелепипед в трех. Причина этого станет ясна позднее.

Для того чтобы описать положения атомов в элементарной ячейке, выбираем начало координат O и принимаем за оси координат прямые Ox и Oy , параллельные ее сторонам. Мы устанавливаем длины ее сторон a и b , принимая за a расстояние, равное OX , за b расстояние OY (фиг. 1.1а), а также определяем угол γ между



Фиг. 1.16. Одна плоскость решетки структуры графитового кристалла, показанной на фиг. 1.1а.

Фиг. 1.1в. Чертеж, иллюстрирующий возможность различного выбора примитивного элементарного параллелограмма решетки.

Жирными линиями выделен элементарный параллелограмм, используемый обычно для описания структуры графита.

Ox и Oy . В случае графита $a = b = 2,45 \text{ \AA}$ (при 25°C), а $\gamma = 120^\circ$. Далее замечаем, что в ячейке имеется по одному атому в каждой вершине и один атом целиком находится внутри ячейки. Атомы в положениях O , X , A , Y имеют одинаковое окружение¹⁾. Для описания позиций атомов выбираем стороны параллелограмма a и b в качестве единиц длины. Тогда координаты атома, расположенного в точке O , будут $(0, 0)$, атома в точке X — $(1, 0)$, в точке Y — $(0, 1)$, в точке A — $(1, 1)$. Координаты атома, расположенного в точке O' , можно получить, проведя через O' линии, параллельные осям, и измерив отрезки, отсекаемые на осях этими линиями. Прделав это, получаем для точки O' координаты $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3})$. Для полного описания элементарного параллелограмма (т. е. позиций атомов в нем) достаточно дать только координаты атома, расположенного в начале координат, т. е. $(0, 0)$, и координаты атома в точке O' . Причина заключается в том, что атомы в точках X , A и Y имеют такое же окружение, как и в O , и каждый атом в позициях O , X , A или Y принадлежит сразу четырем ячейкам, встречающимся в этих точках. Общее число атомов, принадлежащих параллелограмму $OXA Y$, равно двум: один атом — это O' , который расположен целиком внутри параллелограмма; в точках O , Y , A и X расположены атомы, каждый из которых принадлежит четырем ячейкам, что дает еще $4 \times \frac{1}{4} = 1$ атом. Заметим, что минимальное число атомов, которое может содержать элементарный параллелограмм в этой структуре, равно двум, так как атомы в нем располагаются в позициях двух различных типов с различным окружением.

При описании положений атомов в структуре на фиг. 1.1а мы выбрали в качестве элементарного параллелограмма $OXA Y$. С равным успехом мы могли выбрать $OXTA$. В выборе элементарного параллелограмма или элементарной ячейки допускается определенный произвол. Но взять, например, $NQPM$ для этой цели нельзя, потому что повторением этой ячейки нельзя получить полный узор структуры графита, поскольку окружение точек Q и P не идентично.

Все атомы, расположенные в вершинах элементарного параллелограмма $OYAX$ на фиг. 1.1а, имеют идентичное окружение. Можно выбрать и отметить на чертеже все точки с окружением, таким же, как в O , Y , A и т. п. Этими точками являются N , Q , R , S и т. д. Ансамбль всех таких точек с окружением, идентичным выбранной точке, мы называем *плоской сеткой* (в двух измерениях)

¹⁾ При выборе элементарного параллелограмма или элементарной ячейки кристалл всегда рассматривается как бесконечный. Это значит, что узор на фиг. 1.1а следует представлять себе как простирающийся бесконечно во все стороны. Тем фактом, что в конечном кристалле точки O , X , A и Y занимают слегка различающиеся позиции по отношению к границам узора, можно тогда пренебречь.

или *пространственной решеткой* (в трех измерениях). Каждая из этих точек называется *точкой* или *узлом решетки*.

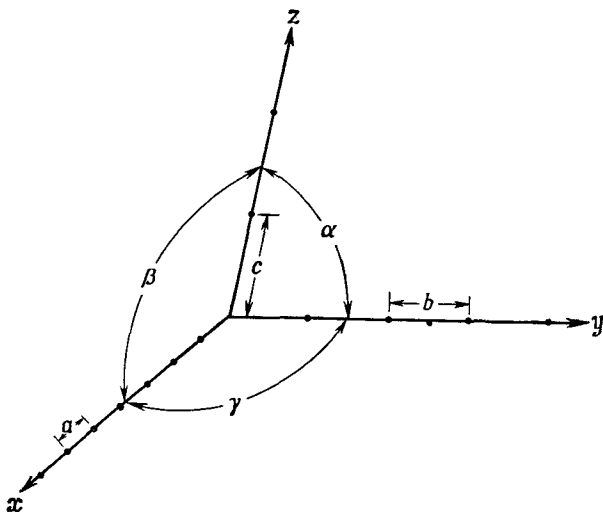
Дадим теперь формальное определение пространственной решетки. *Пространственная решетка — это такая совокупность точек в пространстве, окружение каждой из которых идентично окружению всех остальных точек.* Тип симметрии, находящийся выражение в понятии решетки, называется *трансляционной симметрией*. Одна плоскость решетки кристаллической структуры графита, изображенной на фиг. 1.1а, показана на фиг. 1.1б. Она представляет собой совокупность точек с идентичными окружениями [подчеркнем — совокупность точек (узлов), а не атомов]. На фиг. 1.1в показаны различные примитивные элементарные параллелограммы. Примитивным элементарным параллелограммом называется элементарный параллелограмм, который *содержит всего один узел*. Обычный элементарный параллелограмм для структуры графита, соответствующий *ОХАУ* на фиг. 1.1а, выделен на фигуре 1.1в жирными линиями; на нем отмечены также соответствующие оси координат.

Когда сетка не имеет ярко выраженной симметрии, в качестве примитивного параллелограмма выбирают параллелограмм с кратчайшими и по возможности близкими по размеру сторонами, а за угол γ между осями x и y (если он не равен 90°) выбирают тупой угол. Однако всегда необходимо принимать во внимание симметрию узора. Сетка, показанная на фиг. 1.1б, обладает высокой симметрией; поэтому можно принять стороны равными, т. е. $a = b$, и $\gamma = 120^\circ$.

Сравнение фиг. 1.1а и 1.1б ясно показывает, что начало координат при описании решетки можно выбрать произвольно. Если бы мы выбрали в качестве начала координат O' вместо O и затем отметили все соответствующие точки на фиг. 1.1а, то получили бы идентичную решетку, которая отличалась бы от первой только началом координат. Таким образом, решетка представляет собой существенный элемент трансляционной симметрии кристалла независимо от того, какая точка была выбрана за начало координат.

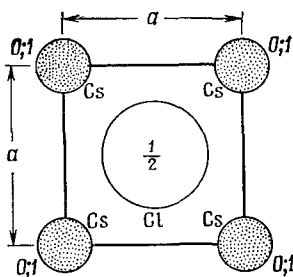
Определение решетки для трехмерного случая будет совершенно таким же, как и для двумерного. *Элементарная ячейка* представляет собой теперь параллелепипед, содержащий всего один узел. Начало координат выбирается в одной из вершин элементарной ячейки. Стороны элементарного параллелепипеда принимают за оси координат кристалла x , y и z , при этом используется правовинтовая установка. Углы α , β и γ между осями называются осевыми или координатными углами (см. фиг. 1.2). Наименьшие расстояния между узлами вдоль осей x , y и z обозначаются a , b и c соответственно и называются *параметрами* или *периодами* решетки.

Рассмотрим чертеж, изображающий расположение атомов в кристалле хлористого цезия (фиг. 3.1, *и*). В этом случае решетка представляет собой ансамбль точек, где $a = b = c$ и $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, так что элементарная ячейка является кубом. С каждым



Фиг. 1.2. Обозначения параметров решетки.
 a, b, c — периоды решетки; α, β, γ — осевые углы.

узлом связан один атом цезия или один атом хлора. Если мы выберем начало координат в центре атома цезия, тогда в элемен-



Фиг. 1.3. Проекция элементарной ячейки структуры хлористого цезия вдоль оси z .
 a — период решетки. Цифры указывают высоту по оси z , на которой расположены центры атомов (за единицу длины выбран период c , равный в данном случае a).

тарной ячейке будет содержаться один атом цезия, имеющий координаты $(0, 0, 0)$, и один атом хлора с координатами $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ¹⁾.

¹⁾ В русской литературе координаты точки принято заключать не в круглые, а в двойные квадратные скобки. В соответствии с этим координаты атома хлора должны быть выражены как $[[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}]]$. В данной монографии мы оставляем обозначения авторов (круглые скобки) как более простые. — *Прим. ред.*

Проекция элементарной ячейки этой структуры на плоскость, перпендикулярную оси z , показана на фиг. 1.3. Необходимо помнить, что атомы цезия, расположенные в вершинах элементарной ячейки, проецируются друг на друга, так что атомы на высотах 0 и 1 оказываются совпадающими, как показано на фиг. 1.3. Если считается, что читатель знаком с такого рода чертежами, цифра, соответствующая атому, расположенному на высоте 1, обычно не приводится. Координационное число для структуры хлористого цезия равно восьми; каждый атом имеет восемь атомов другого сорта в качестве ближайших соседей. Расстояние между этими ближайшими соседями d дается выражением

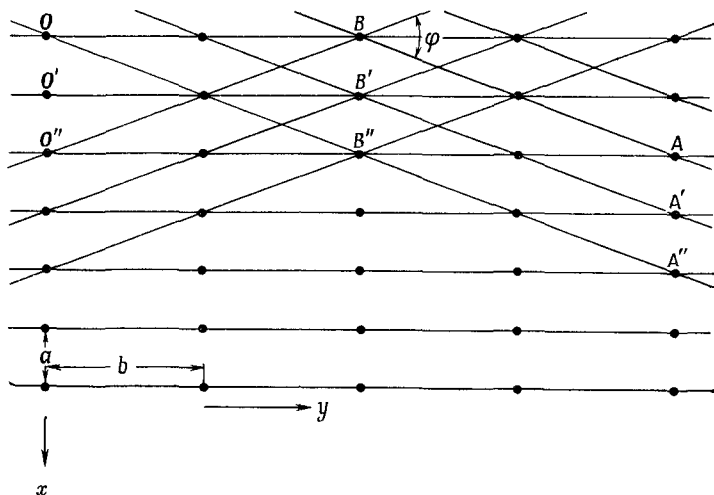
$$d = \left[\left(\frac{a}{2} \right)^2 + \left(\frac{b}{2} \right)^2 + \left(\frac{c}{2} \right)^2 \right]^{1/2} = \frac{a\sqrt{3}}{2}, \quad (1.1)$$

так как $a = b = c$.

Число формульных единиц CsCl , приходящихся на элементарную ячейку, естественно, равно 1.

1.2. Плоскости и направления в решетке

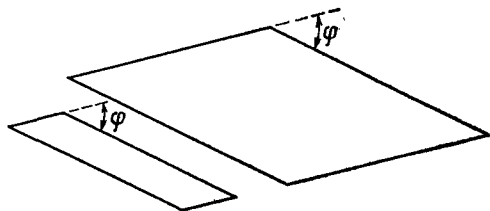
На фиг. 1.4 показана прямоугольная сетка гипотетического двумерного кристалла с неравными параметрами ячейки a и b . Заметим, что линии сетки OB , $O'B'$, $O''B''$ составляют часть некоего



Фиг. 1.4. Прямоугольная сетка гипотетического двумерного кристалла с периодами a и b различной величины.

семейства линий и что расстояния между всеми линиями этого семейства одинаковы; аналогичное положение наблюдается в случае группы линий, параллельных AB , т. е. $A'B'$, $A''B''$ и т. д.

В каждом таком семействе линий расстояние между линиями определяется только величинами a и b (и углом между ними). Точно так же и угол между линиями этих двух семейств зависит только от *отношения* a/b . Если наружные грани кристалла параллельны $O'B$ и AB , угол между этими гранями будет единственным способом связан с отношением a/b . Кроме того, этот угол будет независим от величины граней (фиг. 1.5). Это понимали уже древние кристаллографы, которые пришли к выводу о решетчатой



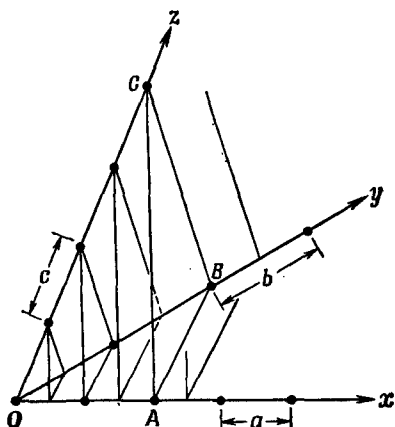
Фиг. 1.5. Чертеж, иллюстрирующий независимость угла между гранями от величины граней.

структуре кристалла на основании наблюдений постоянства углов между соответствующими гранями. Этот закон постоянства углов гласит: *во всех кристаллах одного и того же вещества углы между соответственными гранями постоянны.*

Можно провести очень тесную аналогию между линиями в сетке и плоскостями в решетке кристалла. Грани кристалла параллельны плоскостям решетки, и наиболее важные плоскости решетки характеризуются очень высокой плотностью узлов решетки. Плоскости решетки образуют бесконечное семейство равноотстоящих друг от друга плоскостей, которые в совокупности проходят через все узлы решетки. Расстояние между отдельными плоскостями этого семейства определяется только периодами решетки и осевыми углами, а углы между различными плоскостями определяются только осевыми углами и величинами отношений периодов решетки.

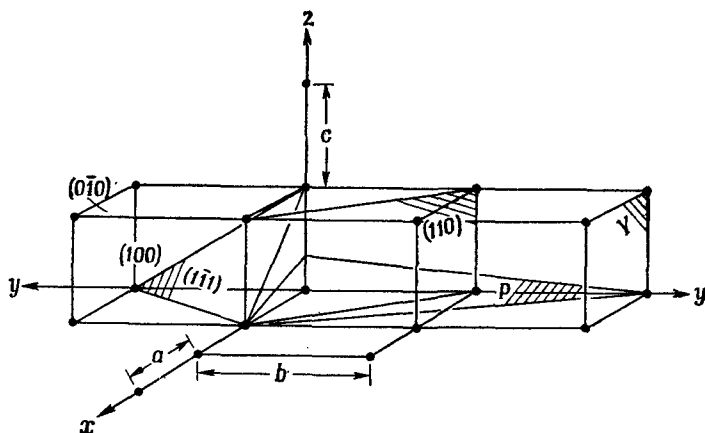
Введем теперь кристаллографические обозначения для различных семейств плоскостей решетки (фиг. 1.6). Пусть какая-либо плоскость решетки пересекает выбранные оси x , y и z соответственно в точках A , B и C . Выразим отрезки, отсекаемые на осях этой плоскостью, через периоды решетки, например $A = ma$, $B = nb$, $C = pc$ (отрезки отсчитываются от начала координат O). Возьмем числа, обратные m , n и p , приведем их к общему знаменателю и отбросим общий множитель. Полученные после этих операций величины называются *индексами Миллера* данного семейства плоскостей решетки. Например, плоскость, обозначенная Y на фиг. 1.7, отсекает на осях x , y и z отрезки, равные соответствен-

по бесконечности, $2b$ и бесконечности, так что $m = \infty$, $n = 2$ и $p = \infty$. Обратные величины их равны 0 , $1/2$ и 0 , что после приведения к общему знаменателю и освобождения от дробей дает 0 , 1 и 0 . Соответственно семейство плоскостей, параллельных



Ф и г. 1.6. К выводу обозначений плоскостей решетки.
 a , b , c — периоды решетки.

плоскости Y , обозначается (010) . Тройка чисел, соответствующих миллеровским индексам плоскости, всегда заключается в круглые скобки. Аналогично плоскость, обозначенная на фиг. 1.7 буквой



Ф и г. 1.7. Индексы некоторых плоскостей в решетке.

P , отсекает на осях отрезки $1a$, $2b$ и $1/3c$, так что $m = 1$, $n = 2$ и $p = 1/3$. Обратные величины их будут 1 , $1/2$ и 3 , и после освобождения от дробей получим миллеровские индексы (216) . На фиг. 1.7 приведены миллеровские индексы некоторых других плоскостей.

Причина, по которой обычно пользуются индексами Миллера, а не прямыми отрезками, состоит в том, что эти индексы очень сильно упрощают некоторые расчеты при вычислениях кристаллов. Уравнение плоскости (фиг. 1.6), которая отсекает на осях отрезки A , B и C , имеет вид

$$\frac{x}{A} + \frac{y}{B} + \frac{z}{C} = 1 \quad (1.2)$$

(см. приложение 1). Введем величины h' , k' и l' , определяемые равенствами $A = a/h'$, $B = b/k'$ и $C = c/l'$, и подставим их в уравнение (1.2):

$$\frac{x}{a/h'} + \frac{y}{b/k'} + \frac{z}{c/l'} = 1$$

или

$$\frac{h'x}{a} + \frac{k'y}{b} + \frac{l'z}{c} = 1. \quad (1.3)$$

Замечаем, что уравнение плоскости, параллельной нашей, но проходящей через начало координат, имеет вид

$$\frac{h'x}{a} + \frac{k'y}{b} + \frac{l'z}{c} = 0; \quad (1.4)$$

это следует непосредственно из вывода уравнения (1.2) в приложении 1. Если мы теперь освободимся от дробей в h' , k' и l' в уравнении (1.4), то получим

$$\frac{hx}{a} + \frac{ky}{b} + \frac{lz}{c} = 0, \quad (1.5)$$

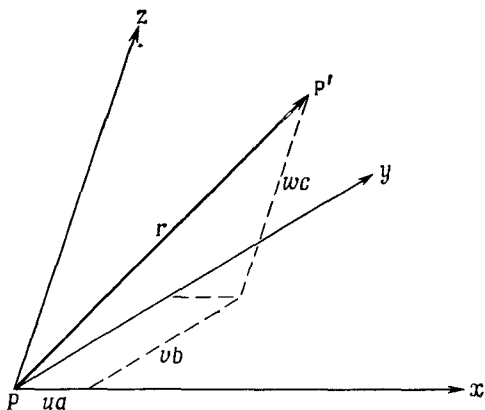
где h , k и l — миллеровские индексы семейства плоскостей решетки, к которому принадлежит рассматриваемая нами плоскость. Совокупность всех плоскостей решетки дается уравнением

$$\frac{hx}{a} + \frac{ky}{b} + \frac{lz}{c} = m, \quad (1.6)$$

где h , k и l — миллеровские индексы, а m пробегает все целые значения, как положительные, так и отрицательные. Когда плоскость отсекает отрезок на отрицательном конце оси, в обозначениях Миллера это выражается в том, что над соответствующим индексом ставится черточка (см., например, фиг. 1.7). При правильном выборе элементарной ячейки малые значения индексов (hkl) соответствуют далеко отстоящим друг от друга плоскостям с высокой плотностью узлов решетки. Такими плоскостями обычно бывают огранены хорошо образованные кристаллы; по этой же причине, как показывает и эксперимент, все хорошо развитые грани кристалла имеют осевые отрезки, которые, будучи выражены

в целых величинах периодов a , b и c , относятся друг к другу как небольшие рациональные числа ¹⁾).

Перейдем к определению направлений. Для того чтобы выделить направление (т. е. прямую линию) в кристалле, поступаем следующим образом. Возьмем любые две точки на этой прямой, например P и P' (фиг. 1.8). Выберем одну из этих точек, скажем P ,



Фиг. 1.8. К выводу обозначений направлений в решетке.

в качестве начала координат. Выразим вектор \mathbf{r} , соединяющий эти две точки, через трансляции вдоль осей x , y и z :

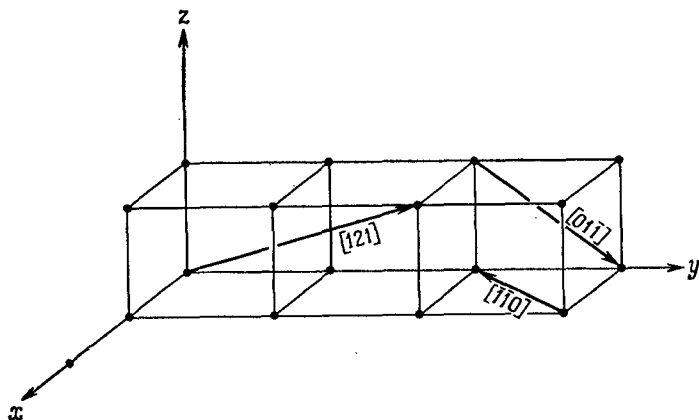
$$\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}, \tag{1.7}$$

где \mathbf{a} , \mathbf{b} и \mathbf{c} — векторы, лежащие вдоль осей x , y и z соответственно и имеющие величины, равные периодам решетки по этим направлениям (фиг. 1.8). Тогда выбранное нами направление будет обозначаться $[uvw]$ (всегда в целых числах, не содержащих общего множителя). Тройка чисел, обозначающих направление, всегда заключается в квадратные скобки. Некоторые направления показаны на фиг. 1.9. Уравнение прямой, проходящей через начало координат параллельно направлению $[uvw]$, имеет вид

$$\frac{x}{ua} = \frac{y}{vb} = \frac{z}{wc}. \tag{1.8}$$

¹⁾ Формально закон рациональных индексов (закон кратных отношений, закон Гаюи) гласит, что все плоскости, параллельные возможным граням кристалла, отсекают на осях кристалла отрезки, которые, будучи выражены в целых величинах некоторых единиц длины, отложенных по осям (и пропорциональных a , b и c), относятся друг к другу как небольшие рациональные числа. Рациональное число всегда может быть записано в виде p/q , где p и q — целые числа.

Если u , v и w — целые числа, а начало координат P совпадает с каким-либо узлом решетки, тогда P' также является узлом,



Фиг. 1.9. Индексы некоторых направлений в решетке.

а линия PP' представляет собой ряд узлов решетки. Такая прямая называется *рациональной прямой*, а плоскость, проходящая через узлы решетки, называется *рациональной плоскостью*.

1.3. Зоны и правило зон

Любые две плоскости решетки пересекаются вдоль прямой линии. Эта линия, которая лежит в обеих плоскостях, называется *осью зоны*, в которой расположены пересекающиеся плоскости. Часто множество важных плоскостей кристалла лежит в одной и той же зоне, т. е. они пересекаются друг с другом по параллельным линиям. Например, на фиг. 1.7 плоскости (100), (010) и (110) все параллельны направлению $[001]$. Про них можно сказать, что они принадлежат зоне $[001]$, так как $[001]$ — это общее направление, лежащее во всех этих плоскостях. Перпендикуляры ко всем этим плоскостям перпендикулярны и к $[001]$.

Если даны индексы каких-либо двух плоскостей, скажем $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$, то индексы зоны, в которой они лежат, даются выражениями

$$\begin{aligned} u &= k_1l_2 - l_1k_2, \\ v &= l_1h_2 - h_1l_2, \\ w &= h_1k_2 - k_1h_2. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Эти выражения легко вывести из уравнений (1.5) и (1.8). Уравнения плоскостей, проходящих через начало координат параллельно плоскостям с миллеровскими индексами $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$,

ИМЕЮТ ВИД

$$\frac{h_1x}{a} + \frac{k_1y}{b} + \frac{l_1z}{c} = 0$$

и

$$\frac{h_2x}{a} + \frac{k_2y}{b} + \frac{l_2z}{c} = 0$$

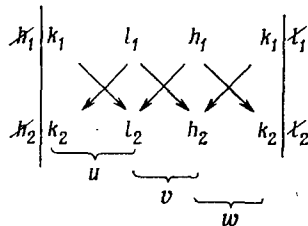
соответственно.

Уравнение линии пересечения этих двух плоскостей получается исключением сначала, скажем, x и затем z из этих двух уравнений, что дает

$$\frac{x}{a(k_1l_2 - l_1k_2)} = \frac{y}{b(l_1h_2 - h_1l_2)} = \frac{z}{c(h_1k_2 - k_1h_2)}. \quad (1.10)$$

Это уравнение прямой, которая проходит через начало координат, так как оно удовлетворяется значениями $x = y = z = 0$. Пусть теперь наша прямая проходит через точку с координатами ua , vb и wc . Если мы подставим эти значения вместо x , y и z , то получим выражения (1.9). Существует мнемоническое правило для запоминания порядка букв и индексов в равенствах (1.9).

Запишем два набора индексов Миллера, как указано ниже



Проведем вертикальные линии, как показано на схеме, и зачеркнем крайние четыре индекса. Перемножим попарно оставшиеся индексы в соответствии со стрелками и возьмем произведения со знаком плюс, если стрелка направлена слева направо, и со знаком минус, если она направлена справа налево. Полученные разности $k_1l_2 - l_1k_2$, $l_1h_2 - h_1l_2$ и $h_1k_2 - k_1h_2$ представляют собой значения u , v и w соответственно ¹⁾.

Условие того, что плоскость с индексами (hkl) лежит в зоне $[uvw]$, записывается следующим образом:

$$hu + kv + lw = 0. \quad (1.11)$$

Оно называется *правилом зон Вейсса*. Это условие того, что нормаль к (hkl) сама будет нормалью к направлению $[uvw]$. Равенство (1.11) легко вывести следующим образом. Уравнение плоско-

¹⁾ Это правило и условие (1.11) легко выводятся с помощью представления об обратной решетке, см. приложение 2, разд. А2.2. — *Прим. ред.*

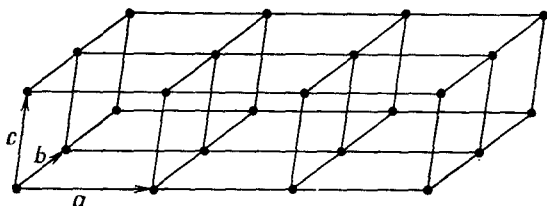
сти, проходящей через начало координат параллельно плоскости (hkl) , дается выражением (1.5). Уравнение прямой, проходящей через начало координат параллельно $[uvw]$, дается выражением (1.8). Если эта прямая должна лежать в плоскости (hkl) , мы можем исключить x , y и z из уравнений (1.5) и (1.8) и получим формулу (1.11).

1.4. Элементы симметрии

Симметричное расположение атомов в кристаллах формально описывается на основе понятий об элементах симметрии. Симметрия возникает потому, что атомы или группы атомов повторяются в кристалле в правильном порядке, образуя определенный пространственный узор. Любая операция повторения может быть описана с помощью следующих трех различных типов элементов чистой симметрии или операторов симметрии.

1.4.1. Трансляционная симметрия

Трансляционная симметрия выражает тот факт, что одинаковые атомы в одинаковом окружении повторяются в различных точках кристалла и любую из этих точек можно перевести в положение,



Фиг. 1.10. Трансляционная симметрия кристалла.

совпадающее с другой точкой, с помощью операции *трансляции*. Например, на фиг. 1.1а атомы углерода, расположенные в позициях O , Y , N и Q , занимают совершенно аналогичные позиции. Мы используем понятие решетки для описания симметрии этого типа. Решетка — это совокупность точек, причем каждая из них имеет идентичное окружение, которое можно найти, исследуя кристаллическую структуру. Мы можем определить взаимное расположение узлов решетки, сказав, что вектор \mathbf{r} , соединяющий любые два узла и соответствующий операции трансляционной симметрии, переводящей один узел в положение, совпадающее с другим узлом, всегда может быть записан в виде

$$\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}, \quad (1.12)$$

где u , v и w — положительные, отрицательные или равные нулю числа. Рассмотрение фиг. 1.10 показывает, что для успешного

описания мы должны выбрать \mathbf{a} , \mathbf{b} и \mathbf{c} таким образом, чтобы были охвачены все узлы. Мы можем добиться этого, выбрав, например, в качестве \mathbf{a} кратчайший вектор, соединяющий два узла (или один из кратчайших, если их несколько). Затем выбираем в качестве \mathbf{b} какой-либо кратчайший вектор, не параллельный \mathbf{a} , и в качестве \mathbf{c} — тоже кратчайший вектор, не копланарный \mathbf{a} и \mathbf{b} . Теперь \mathbf{a} , \mathbf{b} и \mathbf{c} определяют примитивную элементарную ячейку пространственной решетки в том же смысле, что и в разд. 1.1. В объеме $\mathbf{a} \cdot [\mathbf{b} \times \mathbf{c}]$ ¹⁾, который есть объем элементарной ячейки, содержится всего один узел, а \mathbf{a} , \mathbf{b} и \mathbf{c} называются векторами трансляции решетки.

1.4.2. Поворотная симметрия

Вернемся снова к фиг. 1.1а. Если из точки, обозначенной H , смотреть в каком-либо направлении, например в одном из указанных стрелками, тогда при повороте на угол $60^\circ = 360^\circ/6$ картина не изменится. В таких случаях говорят, что через точку H перпендикулярно плоскости чертежа проходит шестерная поворотная ось симметрии, или ось симметрии шестого порядка. Аналогично можно показать, что через точку O' проходит ось тройной симметрии (ось третьего порядка), так как картина не изменится после поворота на $360^\circ/3 = 120^\circ$. Кристалл обладает n -кратной осью поворотной симметрии, если он совпадает сам с собой после поворота вокруг этой оси на угол $360^\circ/n = 2\pi/n$ рад. В кристаллах могут существовать только оси поворотной симметрии с величиной n , равной 1, 2, 3, 4 и 6. Они соответствуют повторению через каждые 360, 180, 120, 90 и 60° и называются соответственно осями первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков²⁾. Причины такого ограничения значений n приведенными величинами объясняются в разд. 1.5.

Центр симметрии есть такая точка, операция инверсии в которой приводит к идентичному взаимному расположению точек. Операция инверсии перемещает точку с координатами (x, y, z) в позицию с координатами $(-x, -y, -z)$. Например, если мы будем смотреть из центра элементарной ячейки с координатами $(1/2, 1/2, 1/2)$ на фиг. 1.3 (см. также фиг. 3.1, u), то в любом направлении $[uvw]$ картина будет точно такой же, как и в направлении

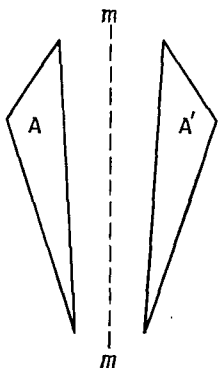
¹⁾ Произведение $\mathbf{a} \cdot [\mathbf{b} \times \mathbf{c}]$ равно $abc \sin \alpha \cos \varphi$, где φ — угол между \mathbf{a} и нормалью к плоскости, в которой лежат векторы \mathbf{b} и \mathbf{c} , α — угол между векторами \mathbf{b} и \mathbf{c} . Основные понятия векторной алгебры см. в приложении 2, разд. А2.1.

²⁾ Употребляются также названия одинарная, двойная, тройная и т. д. оси симметрии, которыми мы будем пользоваться. Авторы употребляют названия моногира (monad), дигира (diad), тригира (triad), тетрагира₄ (tetrad) и гексагира (hexad), которыми в русской литературе теперь не пользуются. — *Прим. ред.*

$[\bar{u}\bar{v}\bar{w}]$. Ясно, что в решетке все узлы являются центрами симметрии решетки. Это следует из уравнения (1.12), так как u , v и w могут быть как положительными, так и отрицательными. Заметим, однако, что, поскольку начало координат решетки любой кристаллической структуры может быть выбрано произвольно, не следует считать, что в кристалле, обладающем центром симметрии, центры симметрии обязательно будут совпадать с узлами.

1.4.3. Отражение

Еще один тип симметрии — это зеркальная симметрия. Операция симметрии сводится в данном случае к отражению в зеркале. Зеркальная симметрия связывает, например, нашу левую и правую руки. Плоскость на фиг. 1.11, проходящая перпендикулярно



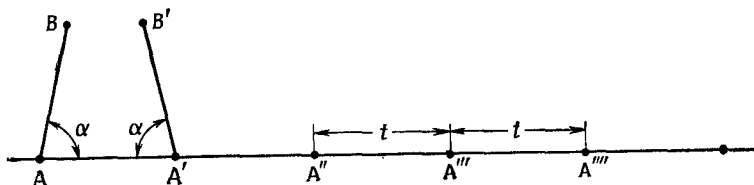
Фиг. 1.11. Отражение в плоскости симметрии.

плоскости чертежа и показанная пунктиром m — m , «отражает» фигуру A в фигуру A' и наоборот. Фигуру A' нельзя совместить с A простым перемещением в плоскости чертежа. Плоскость, проведенная пунктиром, — это зеркальная плоскость симметрии. Необходимо заметить, что операция инверсии в центре симметрии также переводит левосторонний объект в правосторонний.

1.5. Ограничения, накладываемые на элементы симметрии

Трансляционной симметрией обладают все кристаллы. Данный кристалл может обладать или не обладать другими элементами симметрии. Оси поворотной симметрии должны быть совместимы с трансляционной симметрией решетки. Очевидно, что ось симметрии первого порядка всегда совместима с ней. Докажем, что, кроме оси симметрии первого порядка, в кристалле могут существовать только оси симметрии второго, третьего, четвертого и шестого порядков. Для этого рассмотрим двумерную решетку,

или плоскую сетку. Пусть на фиг. 1.12 точки A, A', A'' и т. д. будут узлами этой сетки; выберем направление $AA'A''$ так, чтобы трансляционный вектор t данной сетки в этом направлении был кратчайшим трансляционным вектором решетки. Предположим, что n -кратная ось поворотной симметрии проходит перпендикулярно сетке в точке A . Тогда точка A' должна повториться в точке B



Ф и г. 1.12. К доказательству невозможности существования в кристаллах иных осей симметрии, помимо осей второго, третьего, четвертого и шестого порядков.

при повороте на угол $\alpha = \widehat{A'AB} = 2\pi/n$. Кроме того, поскольку A' есть точка решетки, совершенно аналогичная A , должна существовать также n -кратная ось симметрии, проходящая перпендикулярно плоскости чертежа в точке A' . Эта ось переводит A в B' , как показано на фиг. 1.12. Точки B и B' определяют ряд решетки, параллельный AA' . Следовательно, расстояние между B и B' , согласно уравнению (1.12), должно составлять целое число векторов трансляции t . Обозначим это число через N . Из формулы (1.12) расстояние между B и B' равно $(t - 2t \cos \alpha)$, поэтому возможные значения α ограничены значениями, удовлетворяющими уравнению

$$t - 2t \cos \alpha = Nt$$

или

$$\cos \alpha = \frac{1 - N}{2}, \tag{1.13}$$

где N — целое число. Так как $-1 \leq \cos \alpha \leq 1$, число решений ограничено; возможные решения приведены в табл. 1.1 и соответствуют осям симметрии первого, второго, третьего, четвертого

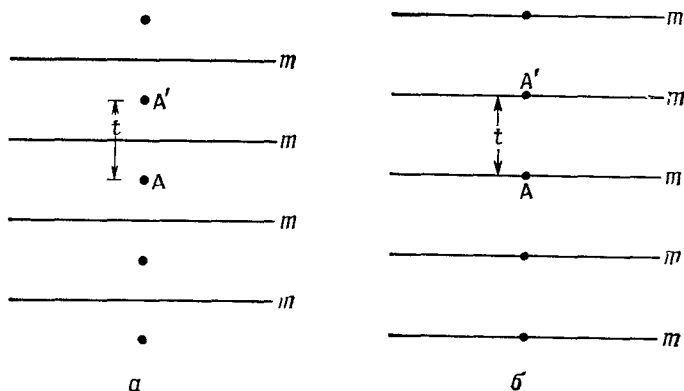
Таблица 1.1

Решения уравнения (1.13)

N	-1	0	1	2	3
$\cos \alpha$	1	$1/2$	0	$-1/2$	-1
α	0°	60°	90°	120°	180°

и шестого порядков. Никакие другие оси симметрии несовместимы с трансляционной симметрией решетки и, следовательно, не существуют в кристаллах.

В соответствии с этими разрешенными значениями α , полученными из уравнения (1.13), определяются возможные виды плоских сеток, или двумерных решеток. Они показаны на фигуре 1.15, *a* — *г* слева. И шестерной, и тройной осям симметрии отвечает одинаковая правильная треугольная сетка, элементарная ячейка которой представляет собой ромб с углом 120° (фиг. 1.15, *в*).

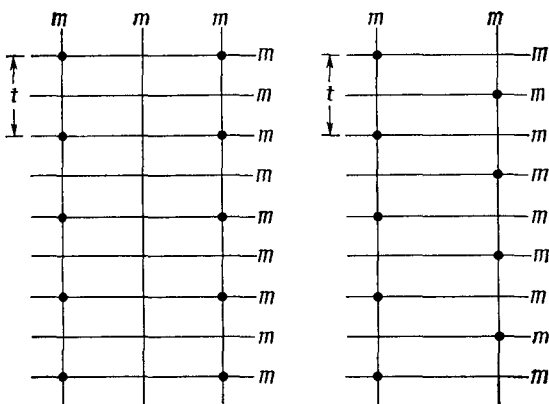


Фиг. 1.13. К построению двумерной решетки, совместимой с наличием зеркальных плоскостей симметрии.

a — плоскости симметрии проходят перпендикулярно ряду узлов AA' посередине между узлами; *б* — плоскости симметрии проходят через узлы решетки.

Аналогичные ограничения налагает на сетку и наличие зеркальных плоскостей симметрии. Имеется всего два вида сеток, совместимых с наличием зеркальной плоскости. Чтобы убедиться в этом, допустим, что A и A' — два узла сетки, а вектор t , соединяющий их, есть трансляционный вектор решетки, определяющий одно ребро элементарной ячейки. Зеркальная плоскость может быть расположена перпендикулярно ряду AA' решетки как на фиг. 1.13, *a* или как на фиг. 1.13, *б*; эта плоскость не может проходить через произвольную точку в промежутке между A и A' . Она должна или лежать посередине между A и A' , как на фигуре 1.13, *a*, или проходить через узел, как на фиг. 1.13, *б*. Так как AA' определяет ряд решетки, можно построить сетку, совместимую с зеркальной симметрией, поместив ряд, идентичный AA' , параллельно AA' , но сместив его относительно AA' . Имеется две возможные конфигурации; обе они приведены на фиг. 1.14; на фигуре показаны также вектор решетки t и все зеркальные плоскости, совместимые с данным расположением узлов.

На фиг. 1.15, *a — д* представлены пять различных видов двумерных решеток, или плоских сеток. На фиг. 1.15, *a* слева показана плоская система точек, совместимых с наличием оси симметрии второго порядка, перпендикулярной плоскости сетки,

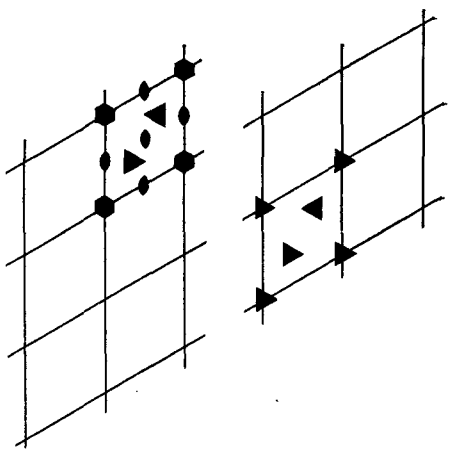
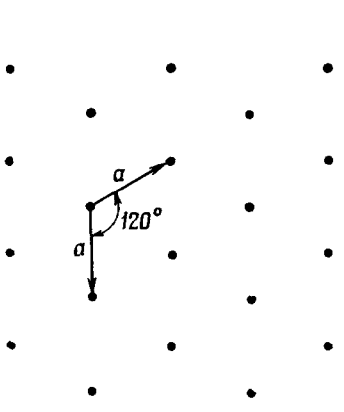
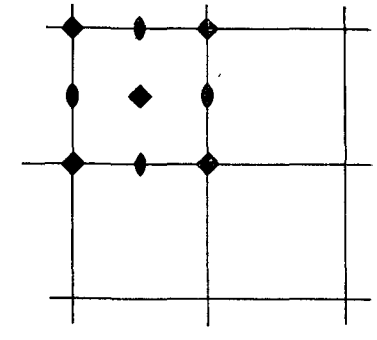
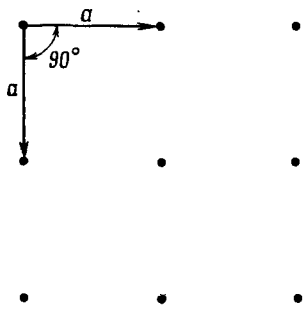
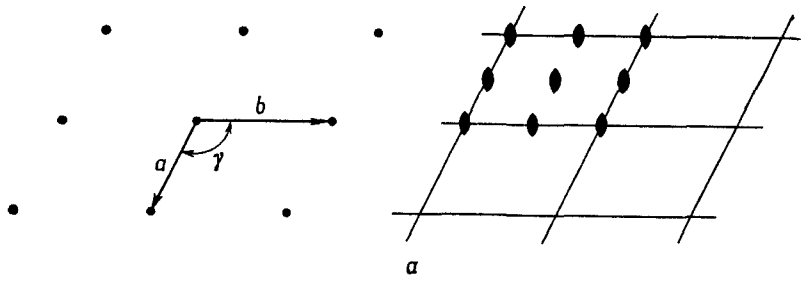


Ф и г. 1.14. Две конфигурации узлов прямоугольной сетки, совместимые с наличием плоскостей симметрии.

при отсутствии осей симметрии более высокого порядка. Эта сетка соответствует решениям, приведенным в табл. 1.1, с $N = -1$ или 3, $\alpha = 0$ или 180° ; основой ее служит *параллелограмм*. Длины двух соприкасающихся сторон параллелограмма (a и b на фигуре 1.15, *a*) и величина заключенного между ними угла γ могут выбираться произвольно; на совместимость с осью симметрии второго порядка это не влияет. Если бы с каждым узлом был связан мотив, характеризующийся осью симметрии второго порядка, перпендикулярной сетке, тогда такие же оси имелись бы во всех точках, показанных на фиг. 1.15, *a* справа.

Все правильные плоские сетки совместимы с осью симметрии второго порядка, перпендикулярной сетке, потому что такая система точек обязательно *центросимметрична*, а в *двух измерениях* нет различия между центром симметрии и двойной осью ¹⁾.

¹⁾ Различие между осью симметрии второго порядка и плоскостью симметрии существует и в плоской сетке, но, чтобы его увидеть, надо изображать узлы не сферически симметричными точками, а несимметричными фигурками. Тогда видно, что ось симметрии второго порядка, перпендикулярная плоскости сетки, поворачивает фигурку на 180° в плоскости сетки, а отражение в плоскости симметрии не только поворачивает ее в плоскости сетки, но еще и переворачивает «с лица наизнанку». — *Прим. ред.*

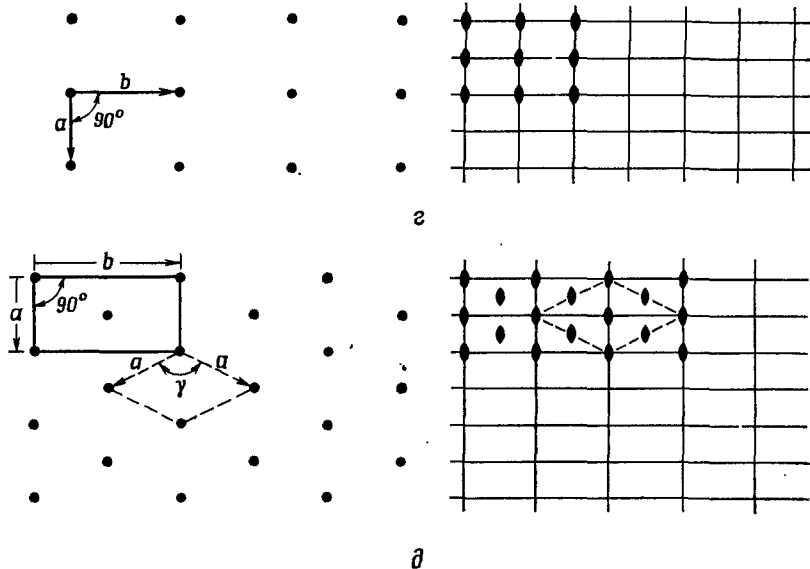


в

Ф и г. 1.15. Пять типов симметрии

Оси симметрии проходят перпендикулярно плоскости чертежа.
a — простая параллелограмматическая сетка; *б* — квадратная сетка; *в* — правильная треугольная сетка; *г* — прямоугольная сетка; *д* — центрированная прямоугольная, или простая ромбическая, сетка.

В основе сетки, соответствующей $N = 1$, $\alpha = 90^\circ$ (табл. 1.1), лежит квадрат, как показано на фиг. 1.15, б слева. Если двумерный кристалл обладает осью симметрии четвертого порядка, то у него обязательно такая сетка. Если, кроме того, атомный мотив, связанный с каждым узлом сетки, также обладает четверной симметрией, то в центре каждого из базисных квадратов сетки должны существовать дополнительные четверные оси, а в точках, соответствующих серединам сторон, — оси второго порядка, как показано на фиг. 1.15, б справа. Двумерный кристалл, обладающий четверной поворотной симметрией, не может обладать меньшим



Символы осей симметрии:

- — ось 2-го порядка
- ▲ — ось 3-го порядка
- ◆ — ось 4-го порядка
- — ось 6-го порядка

ных плоских решеток (или сеток).

числом элементов симметрии, чем показано на правой диаграмме фиг. 1.15, б¹).

Сетка, совместимая с углом α , равным как 60, так и 120°, и соответствующая наличию шестерной или тройной оси симметрии, представляет собой систему точек, расположенных в вершинах равносторонних треугольников, как на фиг. 1.15, в слева. Прimitивная элементарная ячейка этой сетки имеет равные стороны, угол между которыми обязательно равен 120°. Необходимо ясно себе представлять, что такая сетка, рассматриваемая как система точек, всегда совместима с шестерной симметрией. Если атомный мотив, связанный с каждым узлом решетки, также совместим с шестерной симметрией, тогда автоматически должны возникать оси симметрии второго и третьего порядков, как показано в средней части фиг. 1.15, в. Двумерный кристалл будет обладать тройной симметрией, если атомный мотив, соответствующий каждому узлу сетки, показанной на фиг. 1.15, в, обладает тройной симметрией. Единственными элементами симметрии, которые обязательно имеются у такого кристалла, будут тогда оси симметрии третьего порядка, расположенные, как показано на фиг. 1.15, в справа.

С зеркальной симметрией совместимы сетки двух различных типов. Они показаны на фиг. 1.14. Левая — это простая прямоугольная сетка; такая же сетка приведена на фиг. 1.15, г. Стороны a и b простейшей примитивной ячейки такой сетки не обязательно равны, но угол между ними всегда равен 90°. Эта сетка совместима с наличием осей симметрии второго порядка в точках пересечения зеркальных плоскостей симметрии (фиг. 1.15, г, справа), так же как и сетка, показанная на фиг. 1.14 справа (повторенная на фигуре 1.15, д). Простейшая элементарная ячейка сетки, приведенной на фиг. 1.15, д слева, — ромб, выделенный штриховыми линиями. Стороны этой элементарной ячейки равны, а угол γ между ними может принимать любое значение.

Однако в случае такой решетки часто бывает удобнее вместо примитивной ячейки в виде ромба пользоваться прямоугольной

¹ В зависимости от того, как расположен мотив, характеризующийся четверной симметрией, относительно двух осей координат кристалла (которые на фиг. 1.15, б являются стороны квадрата), могут возникать различные дополнительные элементы симметрии. Полное обсуждение этого вопроса для любого взаимного расположения элементов симметрии на фиг. 1.15, т. е. обсуждение совместимых вариантов расположения элементов симметрии в пространстве, привело бы нас непосредственно к проблеме пространственных групп. Мы отложим временно этот вопрос (см. разд. 2.14), но любознательный читатель, возможно, пожелает заглянуть в разд. 2.14, прежде чем продолжать дальнейшее чтение данной главы, как для того, чтобы удостовериться, что он понимает рассматриваемый материал, так и для того, чтобы по достоинству оценить, какой массы деталей можно избежать, не продолжая сейчас рассмотрение этого вопроса. Как могут возникать дополнительные элементы симметрии, легко понять, рассмотрев задачу 1.14 (в конце главы).

элементарной ячейкой, которая содержит дополнительный узел в центре ячейки. В этой ячейке, выделенной на фиг. 1.15, δ сплошными линиями, угол между a и b обязательно равен 90° ; поскольку эта ячейка содержит дополнительный узел, она называется *непримитивной* элементарной ячейкой. Примитивная элементарная ячейка здесь — это ромб, выделенный штриховыми линиями. Площадь непримитивной ячейки в два раза больше примитивной; эта ячейка содержит вдвое больше узлов решетки. Выбор такой ячейки обусловлен тем, что она естественнее отражает тип симметрии решетки; она называется *центрированной прямоугольной* ячейкой. С этой особенностью — т. е. с выбором непримитивной ячейки по той причине, что она более естественно отражает симметрию решетки, — мы часто будем встречаться в случае трехмерных пространственных решеток. Наиболее симметричное расположение осей симметрии второго порядка и зеркальных плоскостей симметрии, совместимое с прямоугольной сеткой и с центрированной прямоугольной сеткой, показано на фиг. 1.15, ϵ и δ справа.

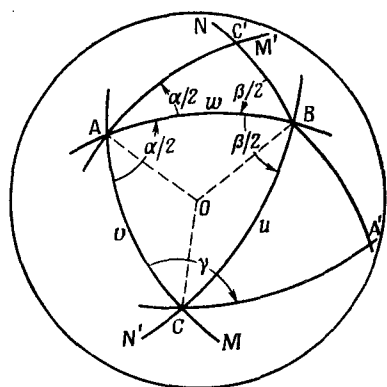
1.6. Возможные сочетания элементов поворотной симметрии

Оси n -кратной поворотной симметрии, которыми может обладать кристалл, ограничены значениями $n = 1, 2, 3, 4$ и 6 . Эти оси перпендикулярны плоскостям сеток. Кристалл может быть, по-видимому, симметричен относительно многих пересекающихся n -кратных осей. Однако оказывается, что возможные угловые соотношения между осями жестко ограничены. Чтобы доказать это, нам необходим метод, позволяющий комбинировать возможные вращения; удобен для этого метод, предложенный Эйлером и усовершенствованный Бюргером.

Сочетания последовательных вращений вокруг различных осей всегда связаны в группы из трех. Это происходит потому, что поворот вокруг какой-либо оси, например A , на угол α с последующим поворотом вокруг другой оси, скажем B , на угол β всегда может быть представлен как единственный поворот вокруг некоторой третьей оси C на угол γ . Наша методика будет заключаться в том, чтобы отыскать угловые соотношения между A , B и C , выраженные через α , β и γ , и затем выбрать значения α , β и γ , которые отвечают вращениям, возможным в кристаллах, соответственно табл. 1.1.

Фиг. 1.16 представляет сферу с центром в точке O . Оси вращения — линии, проходящие через центр сферы, скажем OA и OB . Мы будем обозначать оси одной буквой, отвечающей точке выхода оси на поверхность сферы. Рассмотрим, как будут перемещаться точки, например A и B , на поверхности сферы при последовательных вращениях. Поскольку A и B — оси, мы произведем два

последовательных поворота вокруг каждой из них на углы α и β соответственно. Соединим точки A и B . Возьмем на поверхности сферы линию AM , которая располагается под углом $\alpha/2$ к AB . После поворота на угол α вокруг оси A точка M окажется по другую сторону AB также под углом $\alpha/2$ к AB в положении AM' , симметричном относительно исходного положения. Теперь рассмотрим линию BN , которая перемещается при повороте на угол



Ф и г. 1.16. Сложение вращений на сфере.

A, B, C — выходы поворотных осей симметрии.

β вокруг оси B из положения BN (под углом $\beta/2$ с одной стороны от AB) в положение BN' (под углом $\beta/2$ с другой стороны от AB). Замечаем, что точка C , расположенная на пересечении линий AM и BN' , остается несдвинутой после обоих поворотов, поскольку первый поворот перемещает ее из C в C' , а второй возвращает обратно в C . В процессе каждого вращения неподвижной остается только одна точка, а именно точка пересечения оси вращения со сферой. Поскольку в результате двух последовательных вращений ось C остается несдвинутой, это означает, что такие два последовательных поворота — сначала на угол α вокруг оси A , затем на β вокруг оси B — должны быть эквивалентны вращению на угол γ (который нам необходимо определить) вокруг оси OC . Значение γ находим следующим образом. Замечаем, что точка A остается неподвижной при вращении вокруг оси A ; пусть A' отвечает положению, в которое точка A перемещается при повороте на угол β вокруг оси B . Соединим точки A' и C . Тогда угол γ будет равен углу между AC и $A'C$. Сферические треугольники (треугольники на поверхности сферы) ABC и $A'BC$ конгруэнтны,

потому что $AB = A'B$, углы \widehat{ABC} и $\widehat{A'BC}$ равны (оба имеют величину $\beta/2$), а сторона BC — общая для обоих треугольников.

Следовательно, углы \widehat{ACB} и $\widehat{A'CB}$ оба равны $\gamma/2$.

Решение сферического треугольника возможно, если известны все три его стороны или углы при вершинах ¹⁾. Если мы примем для α , β и γ значения, соответствующие разрешенным значениям углов для поворотных осей симметрии в кристаллах, то можем определить стороны треугольника ABC и таким образом получим углы между этими осями. Чтобы проделать это, обозначим стороны треугольника ABC на фиг. 1.16 через u , v и w соответственно. Тогда имеем (приложение 1)

$$\cos u = \frac{\cos \alpha/2 + \cos \beta/2 \cos \gamma/2}{\sin \beta/2 \sin \gamma/2}, \quad (1.14a)$$

$$\cos v = \frac{\cos \beta/2 + \cos \alpha/2 \cos \gamma/2}{\sin \alpha/2 \sin \gamma/2}, \quad (1.14б)$$

$$\cos w = \frac{\cos \gamma/2 + \cos \alpha/2 \cos \beta/2}{\sin \alpha/2 \sin \beta/2}. \quad (1.14в)$$

Применим полученные нами результаты к кристаллам. Предположим, что A — ось симметрии четвертого порядка, т. е. $\alpha = 90^\circ$, $\alpha/2 = 45^\circ$. Пусть B — ось симметрии второго порядка, так что $\beta = 180^\circ$, $\beta/2 = 90^\circ$. Из уравнения (1.14a) получаем

$$\cos u = \frac{1/\sqrt{2}}{\sin \gamma/2}; \quad (1.15a)$$

из (1.14б) имеем

$$\cos v = \frac{(1/\sqrt{2}) \cos \gamma/2}{(1/\sqrt{2}) \sin \gamma/2} = \operatorname{ctg} \gamma/2 \quad (1.15б)$$

и из (1.14в)

$$\cos w = \frac{\cos \gamma/2}{1/\sqrt{2}} = \sqrt{2} \cos \gamma/2. \quad (1.15в)$$

Определим теперь, какова может быть природа поворотной оси симметрии C , приписывая γ различные значения и проверяя, получим ли мы при этом разумные результаты.

1) Пусть C будет ось второго порядка; тогда $\gamma = 180^\circ$, $\gamma/2 = 90^\circ$. Из уравнения (1.15a) $\cos u = 1/\sqrt{2}$, так что $u = 45^\circ$; из соотношения (1.15б) $\cos v = 0$, так что $v = 90^\circ$; из (1.15в) $\cos w = 0$, т. е. $w = 90^\circ$. Таким образом, одна из возможных комбинаций осей симметрии, проходящих через некоторую точку кристалла, такова: одна четверная ось и две двойных, причем ось четвертого порядка располагается под углом 90° к обеим двойным, так что последние лежат в плоскости, перпендикулярной оси четвертого порядка, а угол между осями второго порядка равен 45° . Эта возможность иллюстрируется на фиг. 1.17, а; буквами A , B и C обозначены на ней исходные (порождающие) оси. Остальные

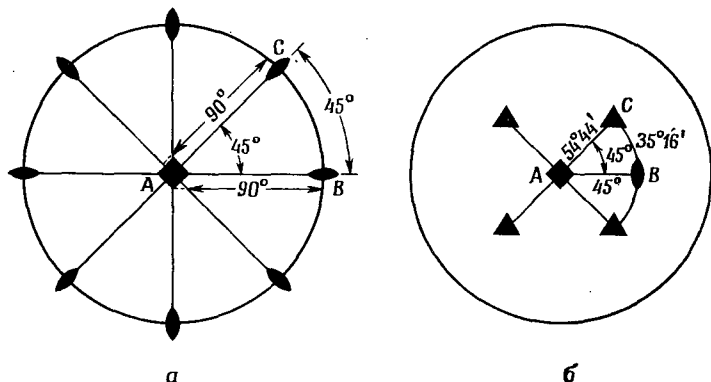
¹⁾ Подробнее о решении сферических треугольников см. приложение 1, разд. А1.2.— Прим. ред.

(порожденные) оси второго порядка, показанные на фиг. 1.17, а, возникают автоматически, потому что ось A является осью четвертого порядка.

2) Пусть ось C будет тройной; тогда $\gamma = 120^\circ$, $\gamma/2 = 60^\circ$. Решая уравнения (1.15), находим

$$\begin{aligned}\cos u &= \sqrt{2/3}, & u &= 35^\circ 16'; \\ \cos v &= 1/\sqrt{3}, & v &= 54^\circ 44'; \\ \cos w &= 1/\sqrt{2}, & w &= 45^\circ.\end{aligned}$$

Данная конфигурация иллюстрируется на фиг. 1.17, б; как и на фиг. 1.17, а, буквами помечены исходные (порождающие)



Фиг. 1.17. Некоторые возможные комбинации осей симметрии.
а — возможная комбинация осей симметрии второго и четвертого порядков;
б — возможная комбинация осей симметрии второго, третьего и четвертого порядков. Буквами обозначены исходные, или порождающие, элементы симметрии.

оси. Снова отмечаем, что наличие оси четвертого порядка A автоматически требует наличия дополнительных тройных осей (а также, конечно, и двойных, которые, однако, на фигуре не показаны), чтобы удовлетворялась четверная симметрия относительно A . Тройные оси расположены под углом $70^\circ 32'$ друг к другу.

3) Предположим, что C — ось шестого порядка; тогда $\gamma = 60^\circ$ и $\gamma/2 = 30^\circ$. В этом случае уравнения (1.15а) и (1.15в) не имеют решений. Если хотя бы одно из них не имеет решения, предполагаемое сочетание вращений невозможно. Таким образом, мы показали, что четверная и шестерная оси не могут одновременно существовать в кристалле.

С помощью уравнений (1.14) можно отыскать все возможные сочетания поворотных осей в кристаллах. Полученные допустимые сочетания и углы между осями, соответствующие этим сочетаниям, приведены в табл. 1.2 (по М. Дж. Бургеру).

При выводе возможных комбинаций осей с помощью уравнений (1.14) мы нашли, что $\arcs \cos (1/\sqrt{3}) = 54^{\circ}44'$; $\arcs \cos \sqrt{2/3} = 35^{\circ}16'$ и $\arcs \cos (1/3) = 70^{\circ}32'$; эти соотношения полезно запомнить. Для обозначения приведенных в табл. 1.2 сочетаний допустимых вращений можно использовать символы из трех цифр, например 222, 233 или 234; каждая цифра указывает соответствующую ось симметрии.

1.7. Кристаллографические системы

Каждому из допустимых сочетаний осей симметрии, приведенных в табл. 1.2, соответствует кристаллографическая система (сингония), указанная в крайней правой колонке таблицы. Кристаллографическая система охватывает все кристаллы, которые

Таблица 1.2

Допустимые сочетания поворотных осей симметрии в кристаллах

Оси			Углы, град						Система
A	B	C	α	β	γ	u	v	w	
2	2	2	180	180	180	90	90	90	Ромбическая
2	2	3	180	180	120	90	90	60	Тригональная
2	2	4	180	180	90	90	90	45	Тетрагональная
2	2	6	180	180	60	90	90	30	Гексагональная
2	3	3	180	120	120	70°32'	54°44'	54°44'	Кубическая
2	3	4	180	120	90	54°44'	45°	35°16'	

обладают одинаковой поворотной симметрией. В любом кристалле имеется четкая связь между наличием той или иной оси симметрии и геометрией решетки кристалла. Этот вопрос будет рассмотрен в следующем разделе; некоторые простые примеры такой связи мы уже наблюдали на двумерных решетках в разд. 1.5. Из-за наличия этой связи между поворотной симметрией кристалла и его решеткой в каждой кристаллографической системе всегда может быть выбрана определенная, наиболее удобная для описания структуры кристалла элементарная ячейка (табл. 1.3). Во многих случаях эта ячейка является непримитивной, т. е. содержит более одного узла. Символ \neq в табл. 1.3 означает, что равенство здесь не обязательно ¹⁾.

¹⁾ В частных случаях указанные значения могут быть почти равными.—
Прим. ред.

Таблица 1.3

Кристаллографические системы

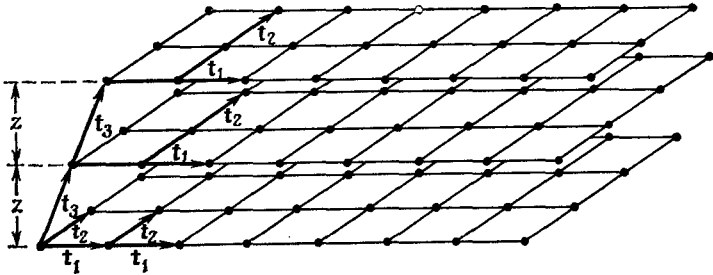
Система	Элементы симметрии	Параметры элементарной ячейки
Триклинная Моноклиная Ромбическая	Осей симметрии нет Одна двойная ось Три взаимно перпендикулярные двойные оси	$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma$ $a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ < \beta$ $a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тригональная ¹⁾ Тетрагональная Гексагональная Кубическая	Одна тройная ось Одна четверная ось Одна шестерная ось Четыре тройные оси	$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ$ ²⁾ $a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ $a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

¹⁾ Иногда называется также ромбоэдрической.
²⁾ В случае тригональных кристаллов часто используется такая же элементарная ячейка, как в гексагональной системе.

1.8. Пространственные решетки (решетки Бравэ)

Все элементы симметрии в кристаллах должны быть взаимно совместимы. Так, пятимерные оси поворотной симметрии не могут существовать в кристаллах, так как они несовместимы с трансляционной симметрией решетки. В разд. 1.6 были выведены возможные сочетания осей симметрии, которые могут проходить через данную точку. Эти сочетания соответствуют различным кристаллографическим системам. Теперь мы рассмотрим типы пространственных решеток (т. е. правильного расположения точек в трехмерном пространстве согласно определению, данному в разд. 1.1), которые совместимы с различными сочетаниями поворотных осей симметрии. Покажем, что, как и в случае двумерной решетки (или сетки), совместимой с зеркальной симметрией (разд. 1.5), с данным сочетанием осей симметрии совместимы в общем случае не один, а несколько способов расположения точек в пространстве. Однако число принципиально различных способов расположения точек ограничено: имеется всего четырнадцать пространственных решеток, или решеток Бравэ. Наш вывод возможных типов пространственных решеток будет не строгим, так как мы не доказываем, что наши решения единственны. Этот вывод решеток Бравэ делается для того, чтобы обеспечить фундамент, необходимый для ясного понимания свойств структурных несовершенств, рассматриваемых в части 2 настоящей книги. Решетка — это наиболее важный элемент симметрии, который приходится принимать во внимание при обсуждении дислокаций и мартенситных превращений.

Начнем с плоских решеток, или сеток, показанных на фиг. 1.15. Для построения пространственной решетки укладываем эти сетки друг на друга таким образом, чтобы получился бесконечный набор параллельных слоев, отстоящих друг от друга на расстояние z . Все эти слои одинаково ориентированы относительно оси вращения, перпендикулярной их плоскости, так что соответствующие векторы решетки t_1 и t_2 во всех плоских сетках остаются

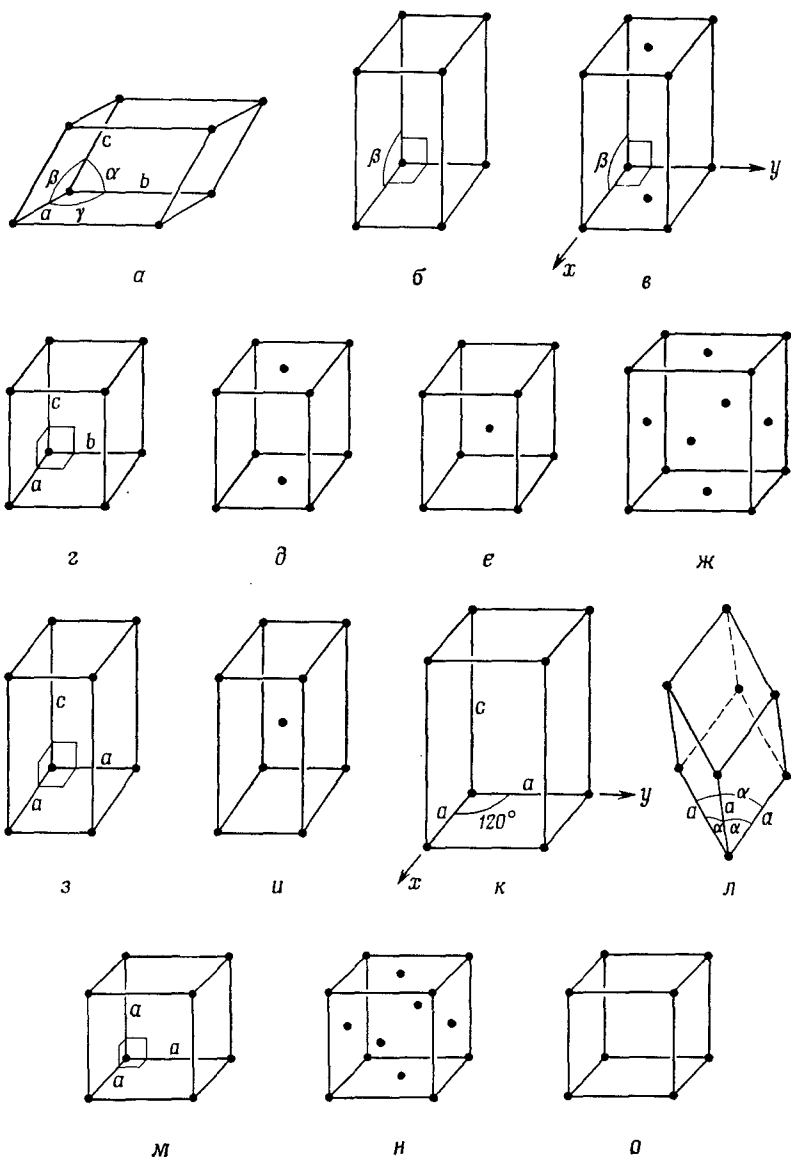


Фиг. 1.18. Построение трехмерной решетки.

параллельными. Получающаяся конфигурация показана на фиг. 1.18. Вектор t_3 , соединяющий точки решетки, лежащие в соседних сетках, не изменяется при переходе от сетки к сетке. Тройка векторов t_1 , t_2 и t_3 определяет элементарную ячейку решетки Браве.

Начнем с сетки, построенной из параллелограммов. Обратимся к фиг. 1.15, а. Если мы будем укладывать друг на друга сетки этого вида так, чтобы точки пересечения двойных осей в последовательных сетках *не* лежали вертикально друг над другом, тогда мы уничтожим двойные оси симметрии, перпендикулярные сеткам. Получится решетка, в которой нет осей симметрии. Элементарная ячейка этой решетки — параллелепипед с ребрами a , b и c , которые могут быть равны, а могут быть и не равны друг другу, а углы α , β и γ между этими ребрами могут принимать любые значения (фиг. 1.19, а). Надлежащим выбором a , b и c мы всегда можем добиться того, чтобы ячейка была примитивной. Хотя в этой решетке нет осей симметрии, такая система точек обязательно является центросимметричной.

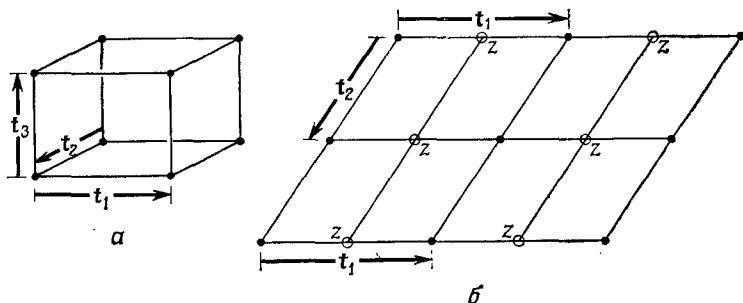
Чтобы сохранить оси симметрии второго порядка, мы можем пойти двумя различными путями. Можно располагать сетки параллелограммов по вертикали друг над другом так, чтобы вектор t_3 был перпендикулярен плоскости слоев, как на фиг. 1.20, а, или чтобы получилось ступенчатое (шахматное) расположение, показанное в плане на фиг. 1.20, б. В первой из этих конфигураций двойные оси расположены в вершинах элементарных параллелограммов сетки и совпадают во всех сетках, так что мы полу-



Ф и г. 1.19. Элементарные ячейки четырнадцати пространственных решеток Браве.

a — примитивная триклинная; *b* — примитивная моноклинная; *v* — базоцентрированная моноклинная. Обычно за ось *y* принимается ось второго порядка, а центрируется грань (001) (*C*-центрированная решетка); *z* — примитивная ромбическая; *d* — базоцентрированная ромбическая. Обычно центрирована грань (001), т. е. это *C*-решетка; *e* — объемноцентрированная ромбическая; *ж* — гранецентрированная ромбическая; *з* — примитивная тетрагональная; *и* — объемноцентрированная тетрагональная; *к* — примитивная гексагональная; *л* — примитивная ромбоэдрическая (тригональная); *м* — примитивная кубическая; *н* — гранецентрированная кубическая; *о* — объемноцентрированная кубическая (здесь в центре куба должен располагаться атом, который по ошибке опущен).

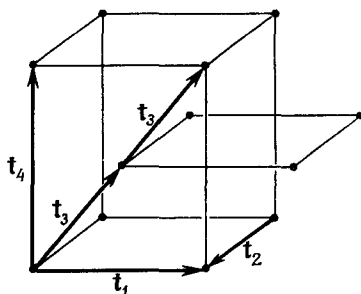
чаем решетку, одна элементарная ячейка которой показана на фиг. 1.19, б. Две стороны этой примитивной ячейки не обязательно равны, но два осевых угла равны 90° . Часто применяется установка, в которой $\alpha = \gamma = 90^\circ$, так что ось y перпендикулярна x и z . В этом случае угол β между осями x и z принимается тупым.



Ф и г. 1.20. Построение пространственных решеток, обладающих осью симметрии второго порядка.

a — вертикальная укладка двумерных сеток друг на друга без сдвига;
b — ступенчатая укладка сеток по вертикали со сдвигом по горизонтали на $t_1/2$ (план); узлы, расположенные на нулевой высоте, обозначены черными точками, узлы на высоте z — кружками.

Во второй конфигурации (фиг. 1.20, б) двойные оси по углам параллелограммов второй сетки совпадают с двойными осями, проходящими через середины сторон элементарных параллелограммов первой сетки (на нулевом уровне). Возможная элементарная ячейка получающейся решетки показана на фиг. 1.21.

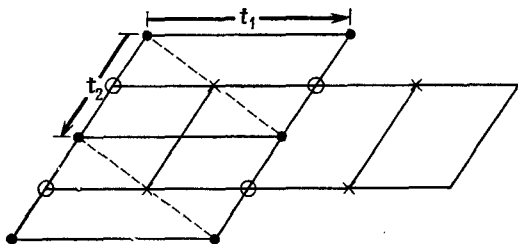


Ф и г. 1.21. Фрагмент пространственной решетки, получаемой при ступенчатой укладке плоских сеток (ср. с фиг. 1.20, б).

Эта элементарная ячейка — непримитивная, она содержит два узла решетки, и вектор t_4 перпендикулярен t_1 и t_2 . Такая ячейка с узлами в центрах противоположных граней, параллельных оси второго порядка, также совместима с наличием этих осей. Ячейка с центрированной парой боковых граней, показанная на фиг. 1.21, выбрана для того, чтобы четче показать особенности решетки, получающейся при ступенчатой укладке плоских сеток, потому

что она более естественно отражает двойную симметрию, чем примитивная ячейка, которую можно было бы выбрать в данном случае.

Ступенчатая конфигурация сеток, показанная на фиг. 1.20, б и 1.21, тоже могла бы обладать двойной симметрией, если бы мы укладывали сетки так, чтобы углы параллелограммов на высоте z располагались не над серединами ребер, соответствующих векторам t_1 нижележащей сетки (фиг. 1.20, б), а над центрами элементарных параллелограммов первой сетки или над серединами



Фиг. 1.22. Ступенчатая укладка сеток по вертикали со сдвигом по горизонтали на $t_2/2$ (соответствующая ячейка выделена кружками) или на $t_1/2 + t_2/2$ (ячейка, выделенная крестиками).

Углы на нулевой высоте обозначены черными точками. Штриховые линии соответствуют элементарной ячейке, которую можно выбрать при ступенчатой укладке со сдвигом на $t_1/2 + t_2/2$. Видно, что при этом снова получаем пространственную ячейку с одной парой центрированных граней.

ребер, отвечающих векторам решетки t_2 (фиг. 1.20, б). Отличие этих двух конфигураций от первой носит непринципиальный характер, поскольку, как видно из фиг. 1.22, для того, чтобы они стали совершенно эквивалентны, нужно лишь по-иному выбрать оси координат в плоскости сетки.

Таким образом, имеются две решетки, совместимые с *моноклинной* симметрией, одна — примитивная с элементарной ячейкой, показанной на фиг. 1.19, б, и вторая — составленная из ступенчатых уложенных сеток, элементарная ячейка которой обычно выбирается в виде параллелепипеда с двумя центрированными противоположными боковыми гранями. Обычно в качестве центрированных граней выбирают грани, параллельные осям x и y , т. е. грани (001), причем оси симметрии второго порядка параллельны y (фиг. 1.19, в). Эта решетка называется моноклинной *C*-решеткой. Вторая решетка, возможная в моноклинной системе, обычно обозначается буквой *P*.

Теперь мы легко можем построить две тетрагональные решетки. Квадратная сетка, показанная на фиг. 1.15, б, имеет оси симметрии четвертого порядка, проходящие через вершины квадратов и через их центры. Эта четверная симметрия сохранится, если поместить вторую сетку так, чтобы вершина квадрата попала

в позицию $(0, 0, z)$ относительно первой сетки (вектор t_3 перпендикулярен t_1 и t_2), или чтобы вершина квадрата попадала в позицию $(1/2, 1/2, z)$ относительно первой сетки. Элементарные ячейки решеток, получающихся в результате укладки сеток этими двумя способами, приведены на фиг. 1.19, *з* и 1.19, *и* соответственно. Их можно обозначить буквами *P* и *I*. Символ *I* означает решетку с дополнительным узлом в центре элементарной ячейки (от немецкого *innenzentrierte* — объемноцентрированная). В тетрагональной системе ось симметрии четвертого порядка обычно выбирается параллельной оси *c*, так что *a* и *b* обязательно равны между собой и все осевые углы равны 90° .

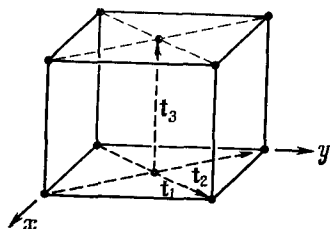
Каждая из сеток на фиг. 1.15, *з* и *д* совместима с симметрией, в которой двойная ось лежит на пересечении двух перпендикулярных зеркальных плоскостей симметрии. В разд. 2.4 показано, что зеркальная плоскость симметрии полностью эквивалентна еще одному элементу симметрии, так называемой инверсионной оси симметрии второго порядка. Симметричное преобразование этой осью включает в себя поворот на 180° и инверсию в центре симметрии, лежащем на этой оси. Эта инверсионная двойная ось, обозначаемая символом $\bar{2}$, располагается перпендикулярно зеркальной плоскости. Симметрия, отвечающая оси симметрии второго порядка, лежащей на пересечении двух взаимно перпендикулярных зеркальных плоскостей, может быть, следовательно, описана символом $\bar{2}22$, указывающим на наличие трех ортогональных осей: одной поворотной оси второго порядка и двух инверсионных осей второго порядка. Решетка, совместимая с этим набором элементов симметрии, будет также совместима с симметрией $\bar{2}22$ в ромбической системе (табл. 1.3)¹⁾. Чтобы получить решетки, совместимые с ромбической симметрией, можно, следовательно, в качестве исходных сеток взять прямоугольную сетку (фиг. 1.15, *з*) и ромбическую сетку (фиг. 1.15, *д*). Позиции двойных осей симметрии показаны на фиг. 1.15, *з* и *д* справа. Ромбическая сетка может быть также описана как центрированная прямоугольная сетка.

Если мы будем укладывать прямоугольные сетки друг на друга так, чтобы вершины параллелограммов второй сетки лежали по вертикали над аналогичными узлами сетки, расположенной на нулевом уровне (вектор t_3 перпендикулярен t_1 и t_2), то получим примитивную ромбическую решетку *P*. Ее элементарная ячейка показана на фиг. 1.19, *з*. Это прямоугольный параллелепипед.

¹⁾ Правильность этого утверждения в данный момент не очевидна. Его истинность станет ясна, если мы примем во внимание, что инверсионная двойная ось плюс центр симметрии равноценны простой двойной оси, перпендикулярной плоскости симметрии (см. разд. 2.4), и что узлы решетки всегда являются центрами симметрии своей решетки.

Если мы таким же образом станем укладывать друг на друга ромбические сетки (центрированные прямоугольники), то получим решетку, приведенную на фиг. 1.23. Это ромбическая решетка с одной парой центрированных (противоположных) градей.

Можно также сохранить симметрию, совместимую с двойной осью, расположенной на пересечении двух зеркальных плоскостей, если уложить прямоугольные сетки друг на друга так, что каждая последующая сетка оказывается сдвинутой по горизонтали относительно сетки, лежащей под ней. Возможны три типа подобных

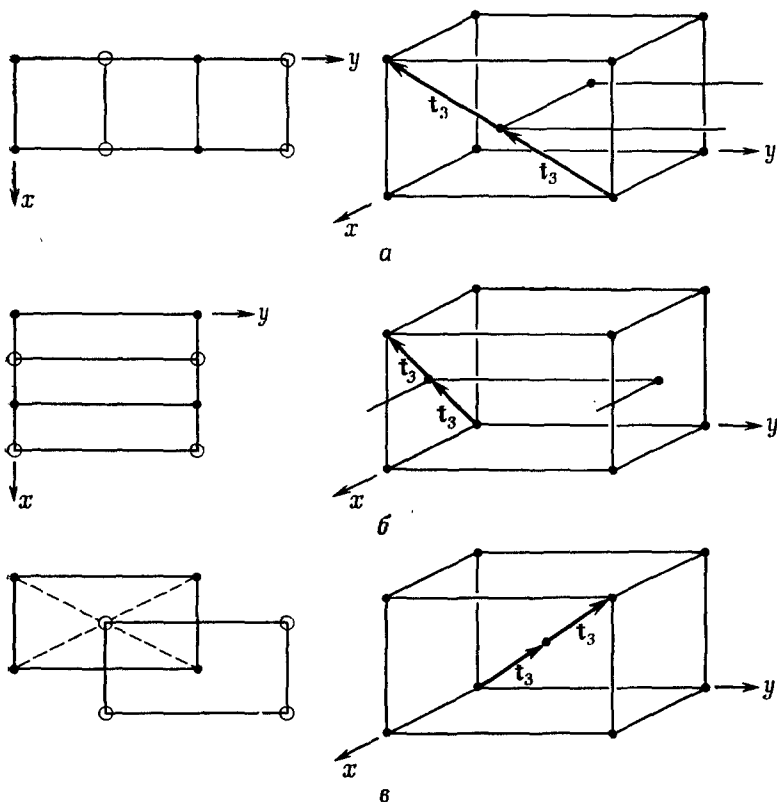


Фиг. 1.23. Элементарная ячейка ромбической базоцентрированной решетки.

как бы ступенчатых последовательностей; они показаны на фиг. 1.24, *a* — *e*. Между решетками, обозначаемыми «*A*-центрированная» и «*B*-центрированная», нет принципиального различия, поскольку они могут быть превращены одна в другую путем простой перестановки осей¹⁾. Ступенчатая последовательность, показанная на фиг. 1.24, *e*, описывается элементарной ячейкой, приведенной на фиг. 1.19, *e*. Это ромбическая объемноцентрированная решетка (символ *I*).

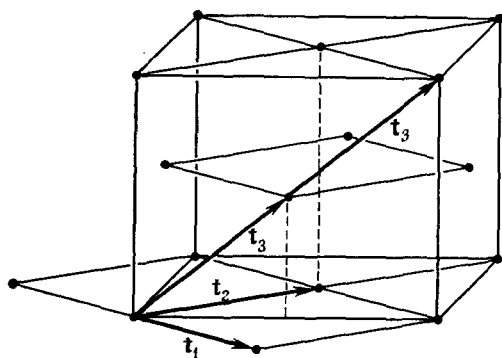
В случае ромбических сеток имеется лишь одна конфигурация, отвечающая ступенчатой укладке. Внимательное изучение правого рисунка на фиг. 1.15, *d* показывает, что единственные места в решетке, где двойные оси лежат на пересечении двух взаимно перпендикулярных зеркальных плоскостей, — это точки с координатами $(0, 0)$ и $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ромбической примитивной ячейки. Мы уже имели дело с вертикальной укладкой ромбических сеток. Если мы возьмем единственно возможную ступенчатую укладку, в которой каждая следующая сетка укладывается на предыдущую так, что вершины ромбических ячеек верхней сетки лежат над центрами ячеек нижней сетки (так что конец вектора t_3 имеет координаты $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$ в ромбической ячейке), то получим конфигурацию, показанную на фиг. 1.25. Удобнее всего описывать эту решетку на основе элементарной ячейки, приведенной на фиг. 1.19, *ж*, которая представляет собой прямоугольный параллелепипед с узлами в вершинах и в центрах всех граней параллелепипеда. Это ромби-

¹⁾ *A* означает наличие центрирующего узла решетки на грани (100) , *B* — на грани (010) и *C* — на грани (001) во всех кристаллографических системах.



Ф и г. 1.24. Другие типы ромбических решеток.

a — *A*-центрированная; *b* — *B*-центрированная; *c* — *I*-решетка, или объемноцентрированная. На левых схемах черные точки соответствуют узлам на нулевом уровне; кружки — узлам на уровне *z*.



Ф и г. 1.25. Ромбическая гранецентрированная решетка, или *F*-решетка.

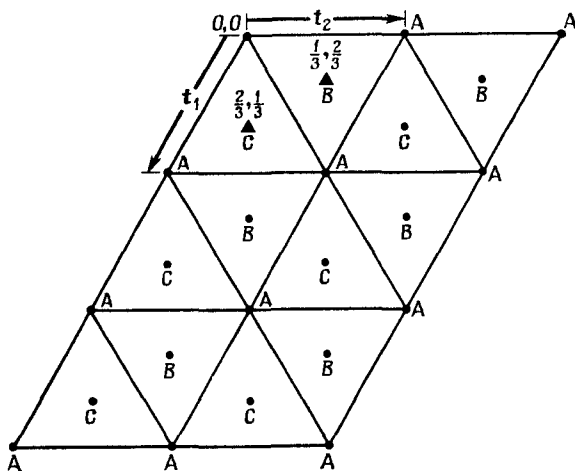
ческая ячейка, обозначаемая буквой F . Символ F означает границентрированный (по-немецки *flächenzentriert*), указывая на наличие дополнительных точек решетки в центрах всех граней элементарной ячейки.

Все решетки, совместимые с набором элементов симметрии 222, т. е. с ромбической симметрией, показаны на фиг. 1.19, $г$ — $ж$. Их элементарные ячейки представляют собой прямоугольные параллелепипеды, так что оси координат во всех случаях можно выбрать так, чтобы они были взаимно перпендикулярны, т. е. $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, но ребра ячейки a , b и c должны быть все разными. Тогда примитивную решетку P можно описать с помощью элементарной ячейки с узлами только в вершинах, объемноцентрированную решетку I — на основе ячейки с дополнительным узлом в центре и границентрированную решетку F — на основе ячейки, центрированной по всем граням. При описании решеток, центрированных по граням типа A , B или C (фиг. 1.24, a и $б$ и фиг. 1.23 соответственно), обычно оси выбирают так, чтобы центрированными оказались грани (001), т. е. C -центрированную ячейку.

Мы разобрали уже девять пространственных решеток Бравэ. Все остальные решетки основываются на укладке правильных треугольных сеток. Такая сетка показана на фиг. 1.15, $в$. В ней имеются оси симметрии шестого порядка, проходящие через узлы сетки. Для того чтобы сохранить шестерную поворотную симметрию в трехмерной решетке, подобные сетки необходимо укладывать друг на друга по вертикали таким образом, чтобы вектор t_3 был перпендикулярен t_1 и t_2 . Получаемая решетка имеет элементарную ячейку, приведенную на фиг. 1.19, $к$. Единственная гексагональная ось (ось шестого порядка) проходит вдоль оси z , так что $a = b \neq c$, $\gamma = 120^\circ$, углы α и β равны 90° каждый. Это единственная решетка (рассматриваемая как упорядоченная система точек), обладающая шестерной поворотной симметрией. Однако она совместима также с тройной поворотной симметрией, причем оси третьего порядка тоже параллельны оси z . Кристалл, в котором каждому узлу такой решетки отвечает атомный мотив, обладающий тройной поворотной симметрией, принадлежал бы тригональной кристаллографической системе.

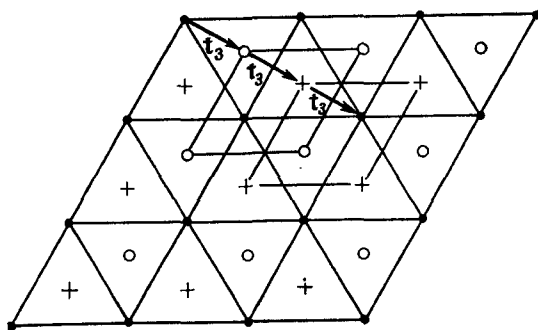
При укладке треугольных сеток в ступенчатой последовательности получается решетка, в которой имеется только тройная поворотная ось. Элементарная ячейка правильной треугольной сетки выделена на фиг. 1.26 векторами t_1 и t_2 , параллельными осям x и y . Оси тройной симметрии проходят перпендикулярно плоской сетке в точках, соответствующих началу координат ячейки (0, 0), т. е. в точках A , а также внутри ячейки в двух позициях с координатами $(1/3, 2/3)$ и $(2/3, 1/3)$ соответственно, которые обозначены на фиг. 1.26 буквами B и C . Мы можем сохранить тройную симметрию (потеряв, конечно, шестерную), укла-

дывая сетки так, чтобы концы векторов имели координаты или $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z)$, или $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z)$. Позиции типа B и C на фиг. 1.26 эквивалентны друг другу в том смысле, что независимо от того, в каком



Ф и г. 1.26. Правильная треугольная сетка.

порядке используются эти два типа позиций, получается одна и та же решетка. На фиг. 1.27 эта решетка показана в плане

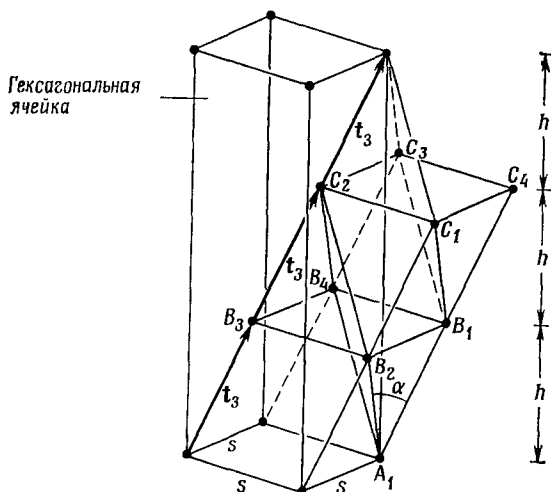


Ф и г. 1.27. Проекция одного из типов пространственных решеток, получаемых при укладке друг на друга правильных треугольных сеток.

Узлы на нулевом уровне (первая сетка) обозначены черными точками; на высоте z (вторая сетка) — кружками и на высоте $2z$ (третья сетка) — крестиками. Показаны также проекции векторов t_3 на плоскость сеток.

в проекции на плоскость, перпендикулярную тройной оси, а на фиг. 1.28 схематически показано соотношение между треугольными сетками и примитивными ячейками этой решетки.

На фиг. 1.27 и 1.28 последовательность укладки сеток имеет вид $ABCABCABC$. Точно такая же решетка, но в иной ориентации (повернутая на 60° по часовой стрелке, если смотреть снизу вверх на фиг. 1.27) получилась бы, если бы последовательность укладки сеток была $ACBACBACB$. Прimitивная ячейка тригональной решетки, показанной на фиг. 1.28, уже приводилась на фиг. 1.19, л. Ее можно обозначить символом R . Это ромбоэдр, т. е. параллелепипед, ребра которого имеют одинаковую длину



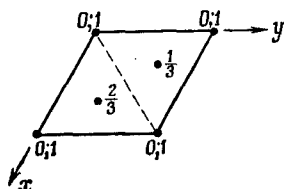
Фиг. 1.28. Соотношение между примитивной элементарной ячейкой тригональной решетки и трижды примитивной гексагональной ячейкой.

и все наклонены под одинаковыми углами к единственной тройной оси. Ячейка характеризуется тем, что $a = b = c$, а углы $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ$.

Иногда для описания тригональной решетки R пользуются иной ячейкой, так как в общем случае неудобно иметь дело с решеткой, в которой осевой угол α может принимать любые значения между 0 и 120° . Эта другая ячейка показана на фиг. 1.28 и 1.29 (в плане, в проекции вдоль тройной оси). Это *трижды примитивная ячейка* высотой в три слоя сеток с внутренними узлами на высотах $1/3$ и $2/3$ периода повторяемости вдоль тройной оси. Форма этой ячейки такая же, как у обычной элементарной ячейки гексагональной решетки Бравэ; для ее характеристики указываются $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$.

Кристаллы, принадлежащие к кубической системе, обладают четырьмя тройными осями симметрии. Сопоставление табл. 1.2 и фиг. 1.17, б показывает, что в кристалле не могут быть только

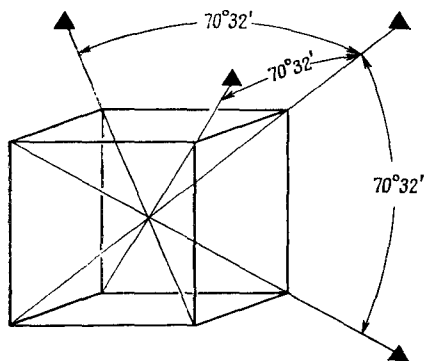
четыре оси третьего порядка. Кроме них, должны быть по крайней мере три двойные оси. Оси третьего порядка проходят вдоль объемных диагоналей куба, так что углы между ними составляют



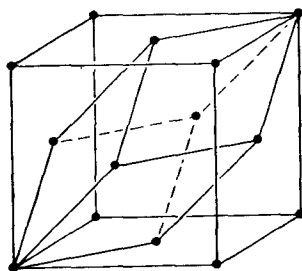
Ф и г. 1.29. Проекция трижды примитивной гексагональной элементарной ячейки (см. фиг. 1.28) на плоскость, перпендикулярную тройной оси.

Цифры указывают высоту узла над плоскостью проекции, выраженную в длинах периода решетки c .

$70^{\circ}32'$ ($= \arccos \cos 1/3$) (фиг. 1.30). Чтобы показать, каким образом возникают решетки, совместимые с подобным расположением тройных осей, начнем с R -решетки, представленной на фиг. 1.28,



Ф и г. 1.30. Взаимное расположение тройных осей в кубических кристаллах.



Ф и г. 1.31. Соотношение между примитивным элементарным ромбоэдром и обычной ячейкой в гранецентрированной кубической решетке.

и обозначим расстояние между ближайшими соседними узлами в треугольной сетке через s , а расстояние между сетками по вертикали вдоль тройной оси через h . Позиции узлов в последовательных слоях в проекции на плоскость, перпендикулярную тройной оси, обозначим $ABCABC\dots$, как на фиг. 1.26 и 1.28.

В тригональной решетке расстояние между сетками h связано с расстоянием между узлами внутри сеток s . Если мы сделаем расстояние между сетками таким, чтобы выполнялось равенство

$h = \sqrt{2/3}s = 2s/\sqrt{6}$, то угол α на фиг. 1.28 станет равен 60° , а треугольники $A_1B_1B_2$, $A_1B_2B_4$ и $A_1B_1B_4$ станут равносторонними. Плоскости типа $A_1B_1C_1B_2$, $A_1B_2C_2B_4$, $A_1B_1C_3B_4$ представляют собой правильные треугольные сетки. Плоскости, параллельные каждой из этих трех плоскостей, тоже содержат правильные треугольные сетки; кроме того, они и укладываются друг на друга тоже так, что сохраняется тройная симметрия вдоль линий, перпендикулярных этим плоскостям. Следовательно, когда $\alpha = 60^\circ$, первоначально тригональная решетка становится совместимой с наличием четырех тройных осей симметрии. Обычная элементарная ячейка этой решетки приведена на фиг. 1.19, *н*; это куб, центрированный по всем граням. Соотношение между этой ячейкой и примитивной ячейкой, имеющей форму ромбоэдра с $\alpha = 60^\circ$, показано на фиг. 1.31.

Большая непримитивная элементарная ячейка на фиг. 1.19, *н* и фиг. 1.31 является гранецентрированной кубической, обозначенной нами выше символом *F*. Она содержит четыре узла, которые располагаются в вершинах и в центрах каждой грани ячейки.

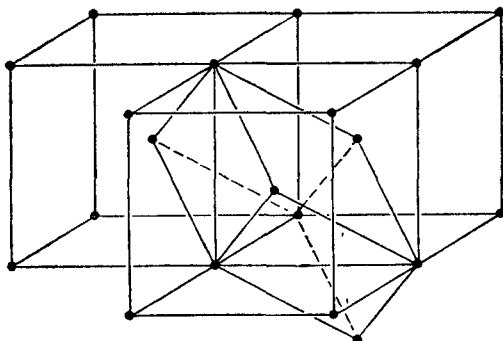
Когда высота h на фиг. 1.28 становится равной $s/\sqrt{6}$, угол α принимает значение 90° и примитивная ячейка *R*-решетки становится кубом. Это кубическая примитивная решетка *P*, приведенная на фиг. 1.19, *м*; узлы такой решетки располагаются только по вершинам кубической элементарной ячейки.

Наконец, если на фиг. 1.28 высота h принимает значение $\frac{1}{6}\sqrt{3/2}s = s/(2\sqrt{6})$, угол α становится равным $109^\circ 28' = 180^\circ - 70^\circ 32' = \arccos(-1/3)$. Получающаяся решетка также обладает четырьмя тройными осями симметрии. Обычная элементарная ячейка этой решетки показана на фиг. 1.19, *о*. Это куб с узлами, расположенными в вершинах и в центре куба. Такая решетка может быть обозначена буквой *I*: это объемноцентрированная кубическая решетка. Соотношение между дважды примитивной элементарной ячейкой на фиг. 1.19, *о* и примитивной элементарной ячейкой, которая представляет собой ромбоэдр с осевыми углами $109^\circ 28'$, показано на фиг. 1.32.

Итак, мы описали три решетки, совместимые с наличием четырех тройных осей поворотной симметрии. Они представлены на фиг. 1.19, *м* — *о*. В качестве элементарной ячейки для каждой из них может быть выбран куб (с параметрами $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$). Примитивная ячейка содержит один узел решетки, гранецентрированная — четыре, а объемноцентрированная — два.

Элементарные ячейки всех четырнадцати пространственных решеток Бравэ показаны на фиг. 1.19. Все кристаллы обладают решеткой одного из этих четырнадцати типов, но с каждым узлом такой решетки может быть связан свой атомный мотив, одипаковый для всех точек решетки данного кристалла, но разный в случае

разных кристаллов. В некоторых кристаллах с каждым узлом решетки ассоциируется единственный сферически симметричный атом. В этом случае решетка сама обладает непосредственной физической значимостью, потому что такая решетка и кристаллическая структура идентичны. В других случаях решетка является лишь каркасом, очень удобным для описания трансляционной



Фиг. 1.32. Соотношение между примитивным элементарным ромбоэдром и обычной ячейкой в объемноцентрированной кубической решетке.

симметрии кристалла. Если известна решетка и расположение атомов (атомный мотив) вокруг единственного узла решетки, то тем самым полностью описана кристаллическая структура. Решетка является наиболее важным элементом симметрии для описания свойств несовершенств в кристаллах.

Задачи

При выполнении некоторых упражнений может оказаться полезным материал приложения 1, разд. А1.1.

1.1. а) Выберите любую удобную точку на плоском узоре, приведенном на фиг. 1.33, и отметьте все эквивалентные ей точки, т. е. укажите решетку.

б) Выберите элементарную ячейку этой решетки несколькими различными способами, в каждом случае обозначьте оси x и y и определите параметры ячейки a , b и γ .

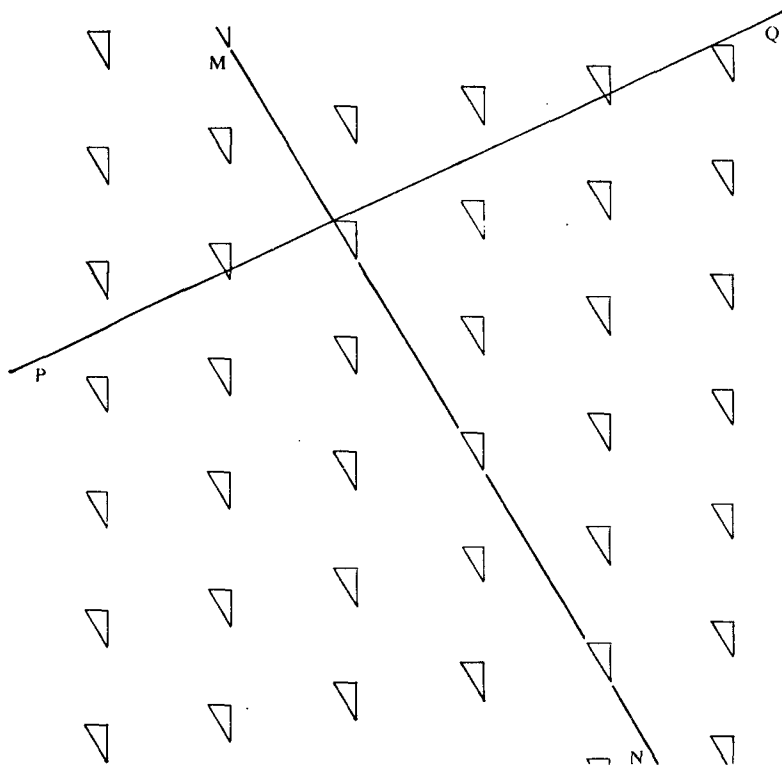
в) Проведите линию, параллельную MN , через любую точку решетки и затем проведите все линии этого семейства. Определите индексы этого семейства линий для каждого из различных случаев выбора элементарной ячейки.

г) Повторите операцию, описанную в п. в), для случая семейства линий, параллельных PQ .

1.2. Рутил (одна из модификаций TiO_2) имеет структуру, параметры которой равны $a = b = 4,58 \text{ \AA}$, $c = 2,95 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Координаты атомов в элементарной ячейке таковы:

$$Ti: 0, 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; O: u, u, 0; u, -u, 0; \frac{1}{2} + u, \frac{1}{2} - u, \frac{1}{2}; \frac{1}{2} - u, \frac{1}{2} + u, \frac{1}{2}.$$

- а) Аккуратно вычертите проекцию элементарной ячейки рутила на плоскость, проходящую через оси x и y .
- б) Определите число формульных единиц TiO_2 , приходящихся на элементарную ячейку структуры рутила.
- в) Найдите число атомов кислорода, окружающих каждый атом титана.
- г) Вычислите межатомные расстояния $\text{Ti} - \text{O}$ для атома титана, расположенного в позиции $1/2, 1/2, 1/2$.



Ф и г. 1.33. К задаче 1.1.

1.3. Ниже описываются элементарные ячейки нескольких ромбических кристаллов. Определите решетки Бравэ этих кристаллов.

а) Ячейка содержит два атома одинакового сорта в позициях $0, 1/2, 0$ и $1/2, 0, 1/2$.

б) Ячейка содержит четыре атома одинакового сорта в позициях $xuz; \bar{x}\bar{y}\bar{z}; 1/2 + x, 1/2 - y, \bar{z}; 1/2 - x, 1/2 + y, \bar{z}$.

в) Ячейка содержит два атома одного сорта в позициях $1/2, 0, 0; 0, 1/2, 1/2$ и два атома другого сорта в позициях $0, 0, 1/2; 1/2, 1/2, 0$.

1.4. Покажите с помощью чертежа, что гранецентрированная тетрагональная решетка эквивалентна объемноцентрированной решетке в иной ориентации.

1.5. Шпинель $MgAl_2O_4$ имеет структуру с параметрами $a = b = c = 8,41 \text{ \AA}$ и $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. На кристаллах наблюдаются грани (111) , $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{1}\bar{1}1)$ и $(1\bar{1}\bar{1})$ и грани, параллельные названным, т. е. $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, $(1\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{1}\bar{1}1)$ и $(1\bar{1}\bar{1})$. Такие кристаллы имеют вид правильных или искаженных октаэдров.

а) Найдите символ (индексы) оси зоны, содержащей грани (111) и $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$. Какие еще из перечисленных выше граней тоже принадлежат этой зоне?

б) Покажите, что зона, содержащая грани (111) и $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, содержит также и грани (001) и (110) .

в) Изобразите проекцию решетки шпинели на плоскость (001) . Проведите след плоскости (110) и нормаль к этой плоскости, проходящую через начало координат. Найдите расстояние по нормали от начала координат до первой плоскости этого семейства, выраженное в величинах стороны элементарной ячейки.

г) Начертите сечение решетки, проходящее через начало координат, которое содержит нормали к плоскостям (110) и (001) . Отметьте на этом сечении следы плоскостей (111) , $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{1}\bar{1}1)$ и $(1\bar{1}\bar{1})$. Измерьте углы между соседними плоскостями.

1.6. Найдите угол между направлением $[111]$ и плоскостью (111) :

а) в кубическом кристалле;

б) в тетрагональном кристалле с периодами $a = 5,67 \text{ \AA}$, $c = 12,70 \text{ \AA}$.

1.7. Покажите, что грани (111) , (231) и $(1\bar{2}4)$ лежат в одной зоне. Найдите символ (индексы) этой зоны и вычислите угол между осью этой зоны и осью зоны $[100]$ в кубической системе.

1.8. В тетрагональном кристалле $CuFeS_2$ угол между плоскостями (111) и $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ равен $108^\circ 40'$. Вычислите а) отношение осей c/a и б) угол между осями зон $[236]$ и $[001]$.

1.9. Следуя методу, рассмотренному в разд. 1.6, определите углы между осями симметрии в сочетаниях: а) две тройные оси и одна двойная; б) четверная, тройная и двойная оси. Начертите схему, показывающую взаимное расположение элементов симметрии в каждом случае.

1.10. Рассмотрите, могут ли существовать в кристаллах: а) две четверные оси и одна тройная; б) двойная, тройная и шестерная оси.

1.11. Элементарная ячейка двумерной решетки имеет параметры $a = b$, $\gamma = 120^\circ$. Расположите вокруг каждого узла этой решетки три атома различными способами так, чтобы получившийся двумерный кристалл имел следующую симметрию: а) шестерная ось симметрии и проходящие параллельно ей зеркальные плоскости симметрии; б) одна тройная ось; в) двойная ось на пересечении двух зеркальных плоскостей симметрии; г) одна двойная ось; д) ось симметрии первого порядка.

1.12. Кристаллы CdI_2 и $CdCl_2$ принадлежат к тригональной системе. Первый из них имеет примитивную гексагональную решетку, второй — ромбоэдрическую. Координаты атомов, связанных с каждым узлом решетки, даны ниже (в обоих случаях использована гексагональная элементарная ячейка).

CdI_2	$CdCl_2$
$Cd: 0, 0, 0$	$Cd: 0, 0, 0$
$I: \pm (2/3, 1/3, 1/4)$	$Cl: \pm (2/3, 1/3, 1/12)$

Начертите проекции обеих структур на плоскость (0001) и проведите на диаграмме, полученной для $CdCl_2$, проекции ребер истинно ромбоэдрической примитивной элементарной ячейки.

1.13. Воспользовавшись методикой, описанной в разд. 1.8, покажите, что имеется всего три вида кубических решеток, отыскав условия того, что на фиг. 1.28 тройные оси лежат перпендикулярно граням (010) , (100) и (001) ромбоэдрической примитивной элементарной ячейки. [Указание. Найдите

условие того, что последовательные плоскости проецируются вдоль нормали к ним таким образом, что узлы одной из них лежат над центрами треугольников, которые образуют узлы плоскости, лежащей ниже.]

1.14. Двумерный кристалл обладает осью симметрии четвертого порядка. Начертите его сетку. Расположите четыре атома какого-либо элемента в узлах сетки таким образом, чтобы полученная конфигурация была совместима: а) с наличием только оси четвертого порядка; б) с наличием оси четвертого порядка и зеркальных плоскостей симметрии, проходящих вдоль этой оси. Можно ли в последнем случае получить две различные конфигурации, отличающиеся расположением плоскостей симметрии?

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ЧТЕНИЯ¹⁾

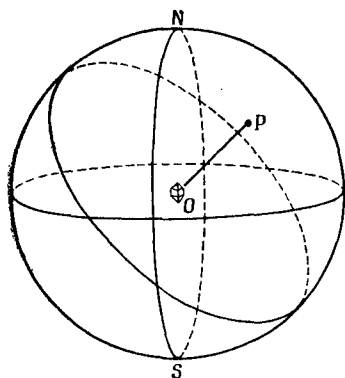
1. Buerger M. J., *Elementary Crystallography*, Wiley, New York, 1963.
2. Hilton H., *Mathematical Crystallography*, Dover Publ., 1963; Clarendon Press, 1903.
3. Jaswon M. A., *An Introduction to Mathematical Crystallography*, American Elsevier, 1965.
- 4*. Шубников А. В., Бокий Г. Б., Флинт Е. Е., *Основы кристаллографии*, Изд-во АН СССР, 1940.
- 5*. Попов Г. М., Шафрановский И. И., *Кристаллография*, изд-во «Высшая школа», 1972.
- 6*. Бокий Г. Б., *Кристаллохимия*, изд-во «Наука», 1972.

¹⁾ Здесь и далее звездочкой отмечены работы, добавленные редактором. — *Прим. ред.*

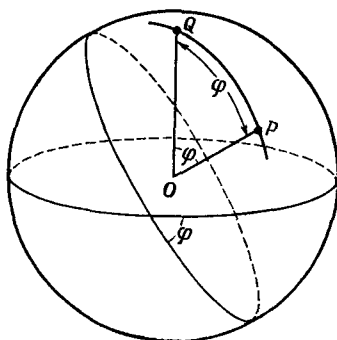
Стереографическая проекция и точечные группы

2.1. Основные понятия

При кристаллографических исследованиях часто полезно уметь представлять кристаллографические плоскости и направления на двумерной схеме так, чтобы можно было на плоском листе бумаги измерять и обсуждать угловые соотношения между гранями кристалла и взаимное расположение элементов симметрии.



Фиг. 2.1а. Сфера проекции.



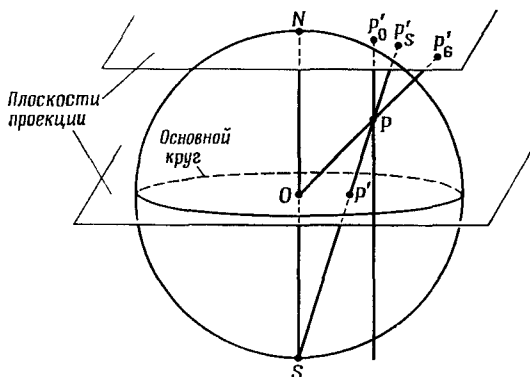
Фиг. 2.1б. Угол между двумя плоскостями равен углу φ между их полюсами на поверхности сферы.

Очевидно, самыми подходящими будут такие схемы, на которых угловые соотношения между элементами кристалла в трех измерениях без искажений воспроизводятся на плоскости.

Представим себе кристалл, расположенный таким образом, что его центр совпадает с центром сферы большего размера, которую мы назовем *сферой проекции* (фиг. 2.1а). Проведем нормали к граням кристалла так, чтобы они проходили через центр сферы и пересекали ее поверхность, например, в точке P . Точка P называется *полюсом* плоскости, для которой OP является нормалью. Аналогично направление представляется точкой на поверхности сферы и определяется как точка, в которой поверхность сферы пересекается линией, параллельной данному направлению и проходящей через центр сферы. Кристаллографическая плоскость

может быть представлена также плоскостью, проходящей через центр сферы и простирающейся до пересечения со сферой (фиг. 2.16). Поскольку такая плоскость проходит через центр сферы, это *диаметральная* плоскость; линия пересечения сферы с такой плоскостью называется *большим кругом*. Большой круг — это окружность на поверхности сферы, радиус которой равен радиусу сферы.

Представив направления в кристалле, т. е. нормали к плоскостям решетки, или кристаллографические направления, точками (полюсами) на поверхности сферы, мы получили *сферическую*



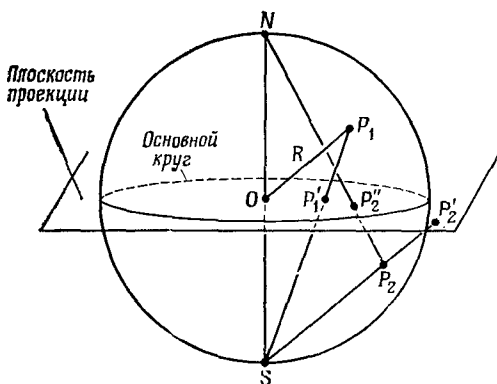
Ф и г. 2.2. Разные способы проектирования полюса, расположенного на поверхности сферы, на плоский лист бумаги.

проекцию кристалла. Угол между двумя плоскостями, нормали к которым OP и OQ (фиг. 2.16), равен углу между этими нормальями, а он в свою очередь есть угол с вершиной в центре сферы, замыкаемый дугой большого круга, проведенной через полюса P и Q . Теперь для того, чтобы получить двумерный чертеж, мы спроектируем эти полюса на плоский лист бумаги.

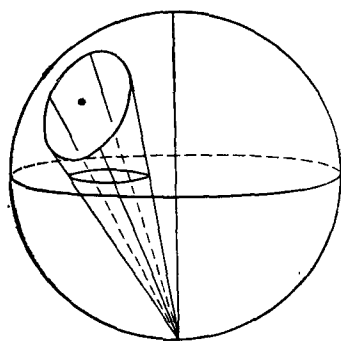
Сферическая проекция подобна глобусу, изображающему земной шар. Определим на ней по аналогии с глобусом северный и южный полюсы. Пусть это будут точки N и S соответственно на фиг. 2.1а. Экваториальная плоскость проходит через центр сферы перпендикулярно линии NS и пересекает сферу по большому кругу, называемому экватором. Есть разные способы проектирования точек со сферы на плоский лист бумаги. Они показаны на фиг. 2.2. В случае *ортогональной* проекции полюс P проектируется из точки, расположенной в бесконечности, на плоскость, параллельную экваториальной плоскости и касательную к сфере в точке N ; при этом получается точка P'_0 . В случае *гномонической* проекции точкой проекции является центр сферы; на проекции при этом получается полюс P'_G .

В случае *стереографической* проекции полюс P проектируется из какой-либо точки на поверхности сферы, например S , называемой полюсом проекции, на плоскость, перпендикулярную OS . Эта плоскость может проходить через любую точку на NS . Если она проходит через N , точка P проектируется в точку P_S . Для наших целей наиболее удобна экваториальная плоскость, перпендикулярная SO . Точку P' , полученную проектированием точки P из точки S на эту плоскость, мы назовем *стереографической проекцией* точки P .

В последующем изложении мы будем рассматривать только стереографические проекции и всегда в качестве плоскости про-



Ф и г. 2.3а. Стереографическая проекция.

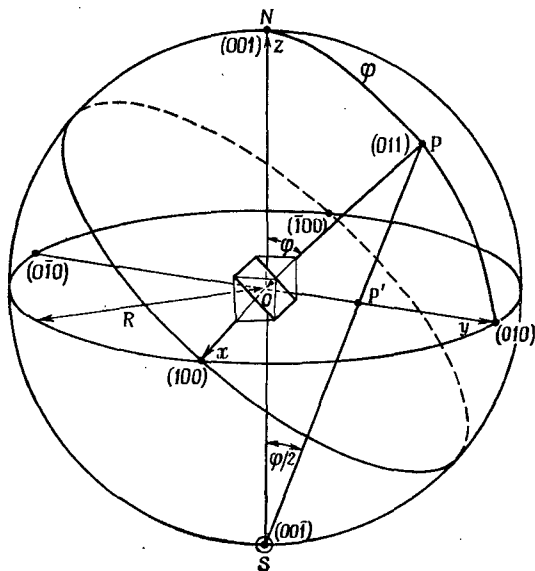


Ф и г. 2.3б. Малый круг проектируется как круг.

екции будем выбирать экваториальную плоскость. Линия пересечения плоскости проекции со сферой проекции является большим кругом, который называется *основным кругом* проекции. Метод проектирования, которым мы будем пользоваться, показан на фиг. 2.3а. Полюс P_1 в северном полушарии проектируется в точку P'_1 внутри основного круга и отмечается точкой на бумаге. Все полюса северной полусферы проектируются в точки, находящиеся внутри основного круга. Полюса южной полусферы, например P_2 , дают проекцию P'_2 , которая оказывается за пределами основного круга. Точка P'_2 есть истинная проекция P_2 . Однако работать с полюсами, проекции которых не попадают внутрь основного круга, неудобно; чтобы избежать этого, полюс P_2 , относящийся к южной полусфере, проектируют из северного полюса N (диаметрально противоположного S); при этом получают проекцию в точке P''_2 . Чтобы отличить такой полюс P''_2 от истинной проекции P_2

(в точке P'_2), P'_2 изображается на стереограмме кружком, а не точкой¹).

Важная роль, которую играют стереографические проекции в кристаллографии, определяется тем, что на ней сохраняются угловые соотношения, т. е. углы на сфере проекции проектируются на стереографическую проекцию без искажения. Кроме того,



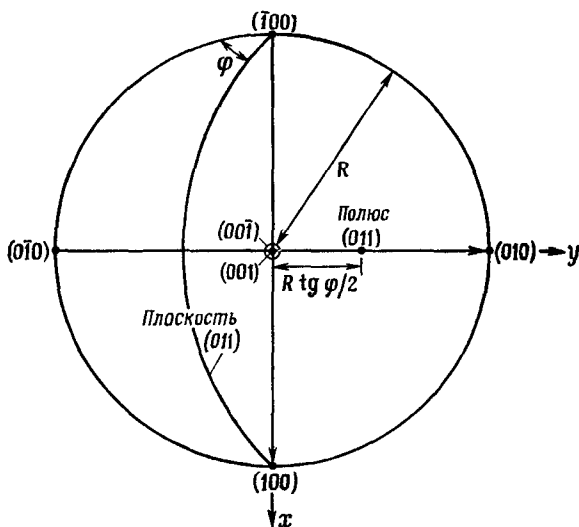
Ф и г. 2.4а. Полюса кубического кристалла на сфере проекции.

все круги (как большие, так и малые) на поверхности сферы проекции проектируются в виде кругов и на стереографической проекции. Для случая малого круга это иллюстрируется чертежом на фиг. 2.3б. Доказательство всех этих свойств стереографической проекции дается в приложении 1.

Перейдем теперь к стереографической проекции полюсов кристаллографических плоскостей кубического кристалла. Оси кристалла располагаются относительно полюса и плоскости проекции, как показано на фиг. 2.4а. Все три оси взаимно ортогональны, а масштабные отрезки по этим осям равны (табл. 1.3). На стандартной проекции, показанной на фиг. 2.4б, ось z кристалла проведена перпендикулярно плоскости проекции, так что вследствие

¹) В русской литературе проекции точек из верхней полусферы изображаются кружочками, а из нижней полусферы — крестиками. В этой книге везде использованы обозначения, принятые английскими авторами. — Прим. ред.

ортогональности осей x и y лежат в плоскости проекции под углом 90° друг к другу. Полюс плоскостей (001) совпадает с точкой N и проектируется в центре основного круга (фиг. 2.4б). Полюса (100) , (010) , (100) и (010) лежат на основном круге на равных расстояниях друг от друга под углами 90° . Полюс (001) лежал бы в бесконечности, если бы проектирование велось из точки S , поэтому мы проектируем этот полюс из N и обозначаем его кружком как проекцию точки из нижней полусферы. Плоскостям (011)



Ф и г. 2.4б. Стереографическая проекция кубического кристалла.

соответствует полюс P . Полюс (011) лежит в зоне, осью которой является ось x . Полюса всех плоскостей зоны с осью Ox лежат на большом круге, который представляет собой геометрическое место точек, отстоящих на 90° от полюса (100) . Этот большой круг проектируется на рассматриваемой стереографической проекции в виде *линии*, соединяющей полюсы (010) , (001) и (010) . Следовательно, точка P проектируется где-то между (001) и (010) . Угол φ на фиг. 2.4а — это угол между (001) и (011) ; для кубических кристаллов $\varphi = 45^\circ$. Из фиг. 2.4а можно видеть, что расстояние OP' равно

$$OP' = R \operatorname{tg} \varphi/2,$$

где R — радиус сферы проекции. Это получается потому, что точки S , O , N , P и P' лежат в одной и той же плоскости, а угол OSP равен $\varphi/2$, так как OSP — угол с вершиной на окружности,

опирающийся на такую же дугу NP , что и угол NOP с вершиной в центре окружности. Мы можем, следовательно, расположить полюс (011) на проекции на расстоянии $R \operatorname{tg} \varphi/2$ (в данном случае на расстоянии $R \operatorname{tg} 22,5^\circ$) от полюса (001) вдоль радиуса основного круга, соединяющего (001) и (010).

Вместо полюса (011) на стереографическую проекцию можно нанести непосредственно саму плоскость (011); для этого надо вычертить проекцию большого круга, который является геометрическим местом точек, отстоящих на 90° от полюса (011). Положение этого большого круга показано на фиг. 2.4б. Проведение большого круга, соответствующего данному полюсу, может быть выполнено или путем геометрического построения, или с использованием вспомогательных графических средств. Мы сначала рассмотрим некоторые построения на стереографических проекциях, а затем перейдем к использованию вспомогательных графических средств, в частности так называемой сетки Вульфа.

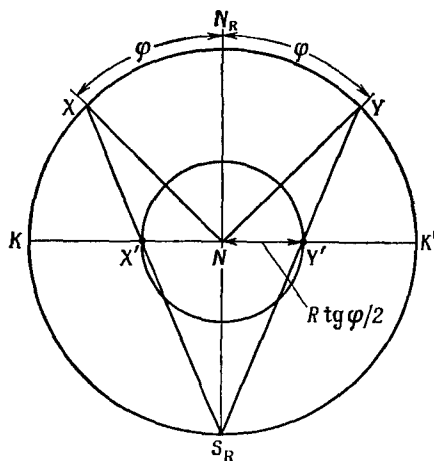
2.2. Построение проекций

Чтобы как следует разобраться в стереограммах, для начинающего имеет смысл провести ряд точных построений, не прибегая к помощи графических средств. Сейчас мы опишем некоторые из них. Однако, поскольку все эти построения могут быть выполнены и с помощью вспомогательных графических средств, этот раздел может быть опущен без ущерба для понимания остальной части книги.

2.2.1. Построение малого круга

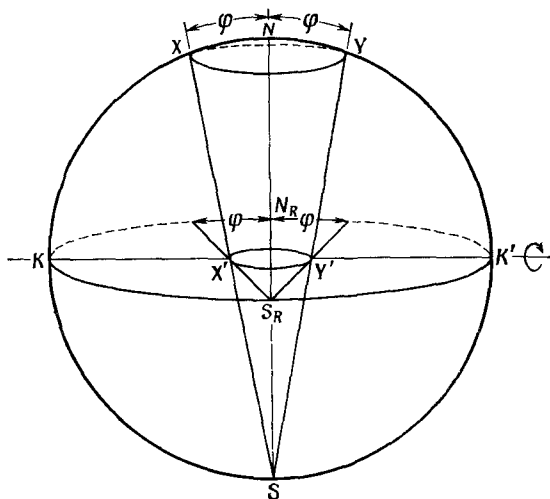
а. Вокруг центра основного круга (фиг. 2.5). По обе стороны от N на стереографическую проекцию наносятся точки X' и Y' на расстоянии, соответствующем угловому радиусу φ искомого малого круга: $NY' = NX' = R \operatorname{tg} \varphi/2$, где R — радиус основного круга. Затем из точки N как из центра описывается круг радиусом NX' ($= NY'$). Это единственный случай, когда центр малого круга на проекции совпадает со стереографической проекцией центра малого круга. Другой путь получения точек X' и Y' на проекции путем построения состоит в следующем. Проводим диаметр основного круга, на который мы желаем поместить X' и Y' , затем диаметр основного круга, перпендикулярный первому, $N_R N S_R$ (фиг. 2.5). Находим точку X на основном круге, такую, чтобы дуга XN_R замыкала угол φ с вершиной в центре основного круга. Если мы соединим X с S_R , тогда X' окажется в точке пересечения $X S_R$ с первым диаметром основного круга. Правильность этого построения подтверждается фиг. 2.6, из которой видно, что

если мы оставим плоскость проекции неподвижной, а сферу проекции повернем на 90° вокруг KK' (прямая линия, лежащая в плоскости проекции), то полюс проекции S ляжет на основной круг



Ф и г. 2.5. Построение малого круга из центра основного круга.

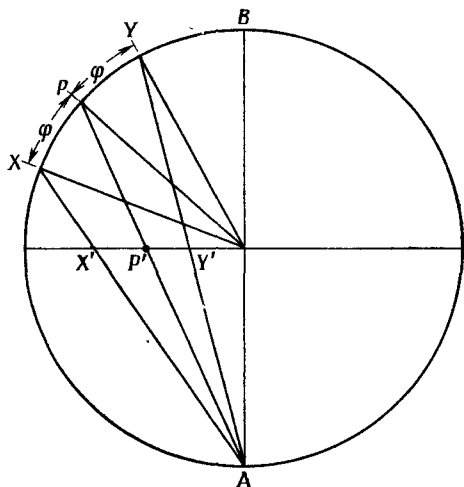
в точке S_R . Аналогично N совпадает с N_R , что подтверждает справедливость построения. Этот полезный прием — когда мы пред-



Ф и г. 2.6. Чертеж, иллюстрирующий правильность построения, использованного на фиг. 2.5.

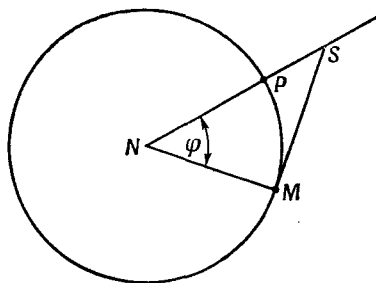
ставляем, что вся сфера проекции поворачивается на 90° , — часто используется для проверки построений на стереографической проекции.

б. Вокруг полюса, расположенного внутри основного круга (скажем, вокруг точки P' , фиг. 2.7). Проводим диаметр, проходящий через P' , и диаметр, перпендикулярный к нему, чтобы получить точки B и A . Проектируем P' из точки A на основной круг и получаем, скажем, точку P . Отмеряем угол φ (соответствующий требуемому радиусу малого круга) на основном круге



Ф и г. 2.7. Построение малого круга с центром в точке, находящейся внутри основного круга.

с обеих сторон от P , чтобы получить точки X и Y на основном круге (фиг. 2.7), учитывая, что φ есть угол с вершиной в центре основного круга, опирающийся на дугу XP . Соединяем X и Y с A , чтобы получить точки X' и Y' , которые соответствуют противоположным концам диаметра искомого малого круга. Необходимо



Ф и г. 2.8. Построение малого круга с центром в точке, находящейся на окружности основного круга.

отметить, что φ есть угол с вершиной в центре основного круга и что P' располагается *не* на полпути между X' и Y' . Чтобы удостовериться в правильности этого построения, полезно начертить проекцию, подобную приведенной на фиг. 2.6.

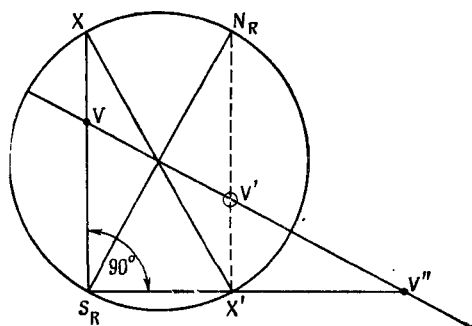
в. Вокруг полюса, расположенного на основном круге (скажем, вокруг точки P , фиг. 2.8). Проводим радиус NP и от точки P

отмеряем угол φ (соответствующий угловому радиусу искомого круга) с вершиной в центре основного круга, чтобы получить местоположение точки M . В точке M строим касательную к основному кругу и проводим ее до пересечения с продолжением линии NP (в точке S). S есть центр требуемого малого круга, а SM — его радиус. Это построение несколько легче, чем описанное в случае „б“ (малый круг вокруг полюса, расположенного внутри основного круга).

2.2.2. Нахождение полюса, противоположного данному

Противоположный данному полюс — это полюс, отстоящий на 180° от данного полюса, т. е. расположенный на другом конце диаметра сферы проекции, проходящего через данный полюс.

Предположим, что мы хотим найти стереографическую проекцию полюса, противоположного полюсу V (фиг. 2.9). Проводим



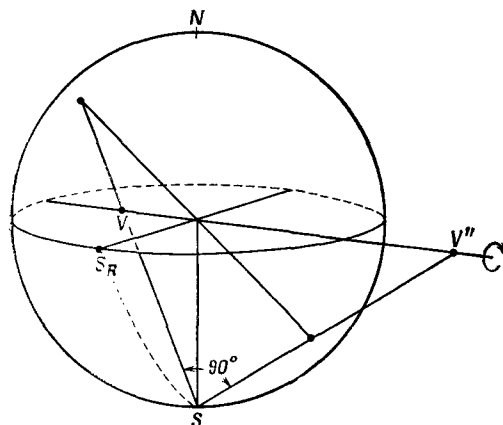
Фиг. 2.9. Нахождение полюса, противоположного заданному.

диаметр основного круга через точку V . Тогда противоположный полюсу V полюс, скажем V'' , очевидно, лежит на этом диаметре и отстоит от V на 180° . Проводим диаметр основного круга перпендикулярно диаметру, проходящему через V , и отмечаем его противоположные концы S_R и N_R . Проектируем V из точки S_R на основной круг, чтобы найти точку X . Проводим через X диаметр основного круга и отмечаем другой конец этого диаметра в точке X' . Точка X' проецируется из точки S_R на продолжение диаметра, проходящего через V , при этом получаем точку V'' , которая и является полюсом, противоположным V (фиг. 2.9).

В правильности этого построения легко убедиться с помощью фиг. 2.10, на которой мы используем тот же самый прием, что и в случае фиг. 2.6: представляем себе, что сфера проекции поворачивается на 90° вокруг диаметра основного круга, проходящего через проекцию точки V ; точка S при этом попадает на основной круг в точке S_R , а V и V'' , лежащие на оси вращения, не сдвигаются с места. Ясно, что угол $XS_R X'$ на фиг. 2.9 равен 90° ,

так что на практике точку V'' легко построить по угольнику, приложив его так, чтобы вершина прямого угла была в точке S_R и одно ребро проходило через V , тогда второе ребро даст положение V'' .

Если данный полюс V лежит на проекции внутри основного круга, тогда истинный полюс V'' , противоположный V , будет вне основного круга. В некоторых случаях поэтому вместо V'' берут



Фиг. 2.10. Чертеж, иллюстрирующий правильность построения, использованного на фиг. 2.9.

полюс V' , проводя линии проекций не из S , а из N (фиг. 2.3а). Совершенно очевидно, что V' всегда располагается на диаметре основного круга, проходящем через V , по другую сторону от центра на таком же расстоянии, что и V (фиг. 2.9).

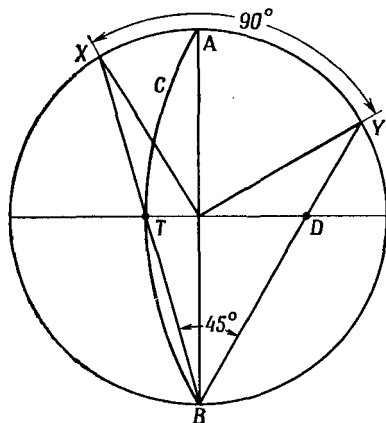
2.2.3. Проведение большого круга через два полюса

Чтобы провести большой круг через два полюса, находим истинную проекцию полюса, противоположного одному из них, используя предыдущие построения, и затем строим круг, проходящий через две данные точки и этот противоположный полюс. Это и будет искомый большой круг.

2.2.4. Нахождение полюса большого круга

Чтобы найти полюс большого круга, проходящего, скажем, через ACB на фиг. 2.11, проводим диаметр AB основного круга, который является хордой дуги этого большого круга, и затем диаметр основного круга, перпендикулярный AB . Пусть этот диаметр пересекает большой круг в точке T . Проектируем T из точки B на основной круг, получаем точку X и отмеряем 90° от X через полюс A — получаем полюс Y . Проектируем Y из точки B на диаметр основного круга, проходящий через T , — находим

точку D , которая и есть искомый полюс. Так как дуга XU опирается на угол 90° с вершиной в центре основного круга, ясно, что угол TBD равен 45° , и если известно положение точки T ,

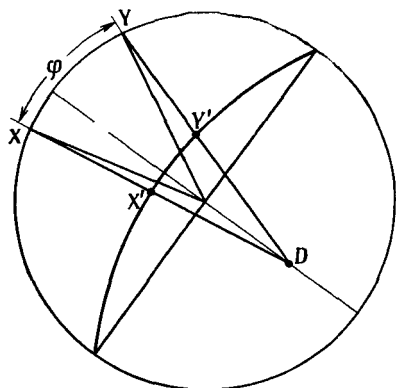


Ф и г. 2.11. Нахождение полюса, соответствующего заданному большому кругу.

точку D можно быстро найти, отложив угол 45° от TB , как показано на фиг. 2.11. Правильность этого построения легко проверить с помощью проекции типа приведенной на фиг. 2.10.

2.2.5. Измерение угла между полюсами на наклонном большом круге

Пусть X' и Y' (фиг. 2.12) являются рассматриваемыми полюсами. С помощью построения, описанного в предыдущем разделе,



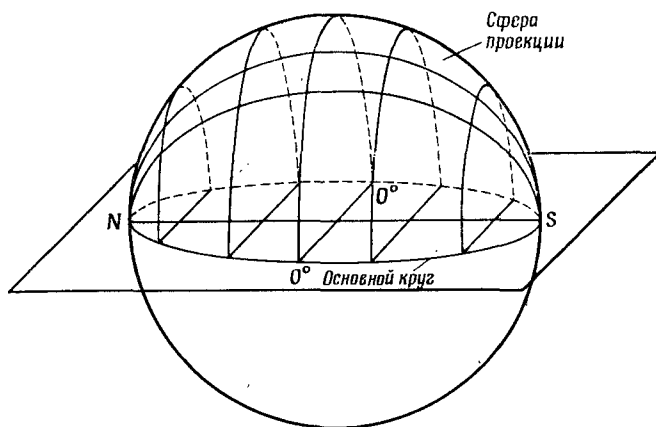
Ф и г. 2.12. Измерение угла между двумя полюсами.

паходим D — местоположение полюса большого круга, на котором находятся точки X' и Y' . Проектируем X' и Y' из D на основной круг, определяя положения точек X и Y . Угол φ , опирающийся-

ся на дугу ХУ, с вершиной в центре основного круга и есть угол между этими двумя полюсами. Для доказательства этого полезно построить проекцию, подобную приведенной на фиг. 2.10.

2.3. Построения с помощью сетки Вульфа

Для построения стереографической проекции и измерения углов на ней очень полезен вспомогательный график, который называется *сеткой Вульфа*. Сетка Вульфа (фиг. 2.13б) представляет собой проекцию одной половины глобуса с линиями широты



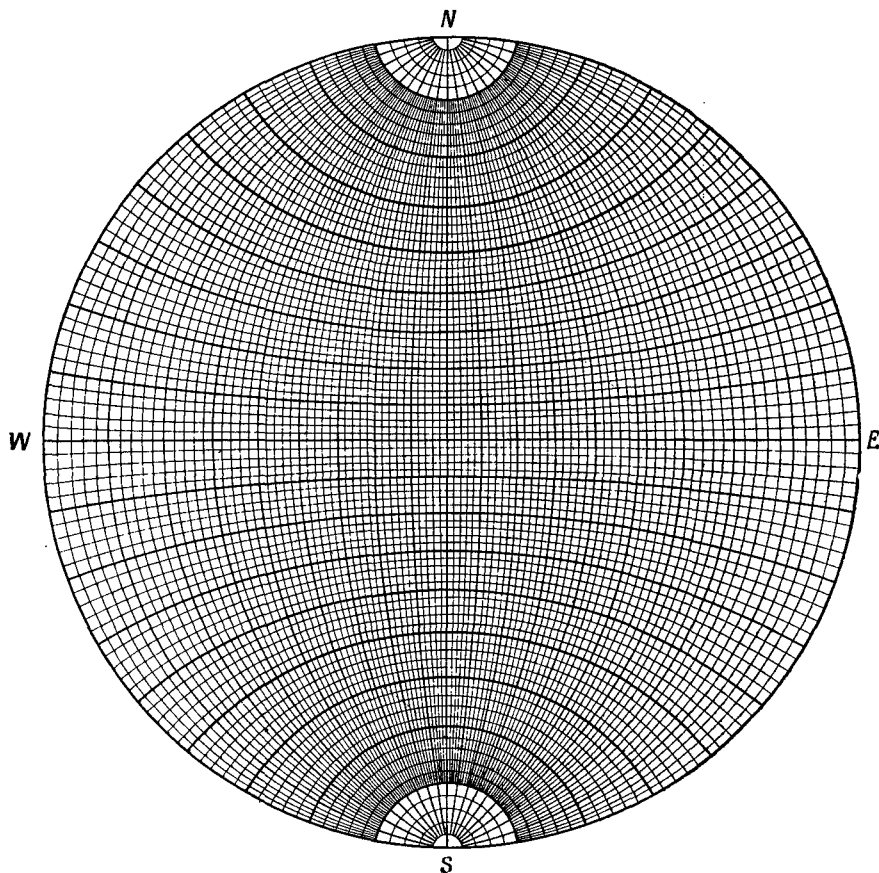
Ф и г. 2.13а. Построение сетки Вульфа путем проектирования линий широты и долготы.

и долготы на его поверхности и с северным и южным полюсами, лежащими в плоскости проекции ¹⁾. Соотношение между линиями широты (которые соответствуют малым кругам, за исключением экватора) и линиями долготы (которые все являются большими кругами) на поверхности сферы проекции и на сетке Вульфа показано на фиг. 2.13а и 2.13б. Радиусы сетки и сферы проекции, конечно, равны между собой и должны равняться радиусу основного круга проекции. При построениях стереографическая проекция вычерчивается на прозрачной бумаге (кальке) и накладывается на сетку, а центры сетки и проекции фиксируются с помощью булавки таким образом, чтобы стереографическую проекцию можно было вращать над сеткой. Угол между полюсами внутри основного круга измеряется поворотом проекции до тех пор, пока оба полюса не лягут на один и тот же большой круг, после чего

¹⁾ Сетка Вульфа чертится стандартно на круге диаметром 20 см. — Прим. ред.

угол определяется по числу малых кругов, расположенных между полюсами (фиг. 2.14, а и б). Углы между полюсами, расположенными на основном круге, измеряются непосредственно по сетке.

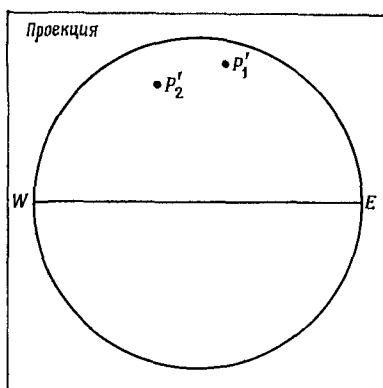
Большой круг, соответствующий геометрическому месту точек, удаленных на 90° от данного полюса, находят, поворачивая сетку до тех пор, пока этот полюс не попадет на экватор сетки (линия,



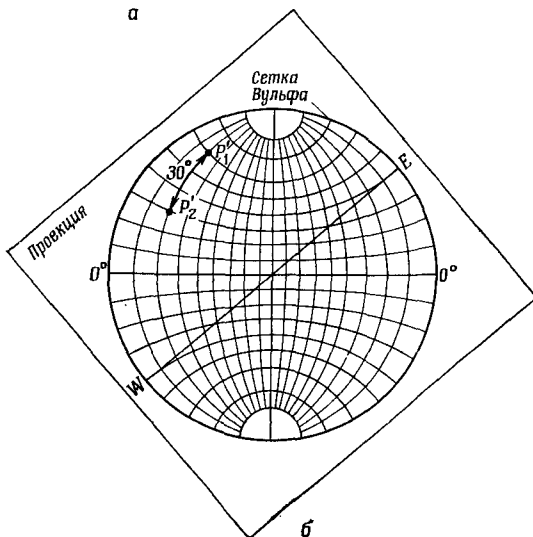
Ф и г. 2.136. Сетка Вульфа с линиями, проведенными через 2° .

обозначенная $0^\circ 0'$ на фиг. 2.13 и 2.15), после чего намечают линию большого круга, отстоящего на 90° от данного полюса (фиг. 2.15). Этот большой круг и есть след плоскости, полюсом которой является P_2 .

Часто бывает необходимо повернуть стереографическую проекцию вокруг данной оси. Чтобы повернуть какой-либо полюс,



а



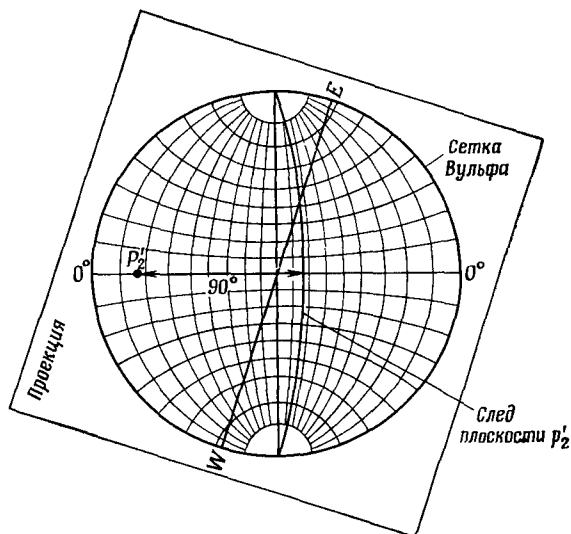
б

Ф и г. 2.14. Определение угла между заданными полюсами [1].

а — стереографическая проекция двух полюсов P'_1 и P'_2 ; б — проекция повернута вокруг своего центра таким образом, что оба полюса теперь лежат на одном и том же большом круге сетки Вульфа.

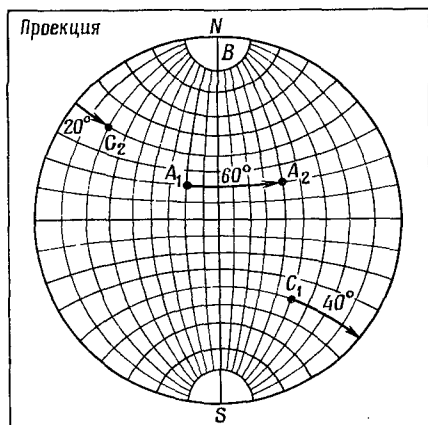
Угол между полюсами равен 30° .

например A_1 (фиг. 2.16), вокруг полюса B , лежащего на основном круге, сетка поворачивается до тех пор, пока ось NS сетки не совпадет с диаметром основного круга, проходящим через полюс B . Тогда A_1 поворачивается на требуемое число градусов вокруг B перемещением A_1 в A_2 по малому кругу (фиг. 2.16). На фиг. 2.16 представлен также случай, когда полюс при вращении оказывает-



Ф и г. 2.15. Нахождение следа плоскости, соответствующей заданному полюсу P'_2 , с помощью сетки Вульфа [1].

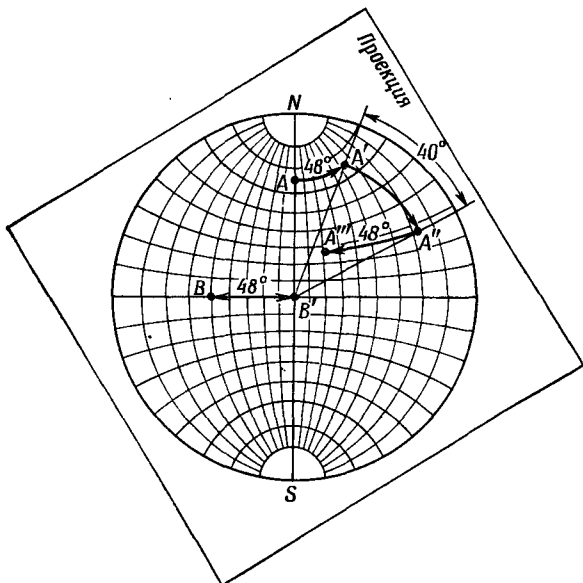
ся вне основного круга. Истинная проекция C_2 , как видно из местоположения полюса, противоположного ему, должна лежать на том же малом круге, что и C_1 .



Ф и г. 2.16. Поворот полюсов вокруг оси, лежащей в плоскости проекции [1].

Если B не лежит на основном круге, можно использовать метод, иллюстрируемый на фиг. 2.17. Сетка поворачивается до тех пор, пока NS не займет положение, перпендикулярное радиусу основного круга, проходящего через B . После этого B и A поворачивают

вокруг оси NS , пока B не ляжет в центр основного круга (B' на фиг. 2.17); A при этом переместится в A' . Если требуется повернуть A , скажем, на 40° по часовой стрелке вокруг B , то мы просто поворачиваем A' на 40° по часовой стрелке вокруг B' и получаем точку A'' . Это легко сделать, как показано на фиг. 2.17.



Ф и г. 2.17. Поворот полюсов вокруг наклонной оси [1].

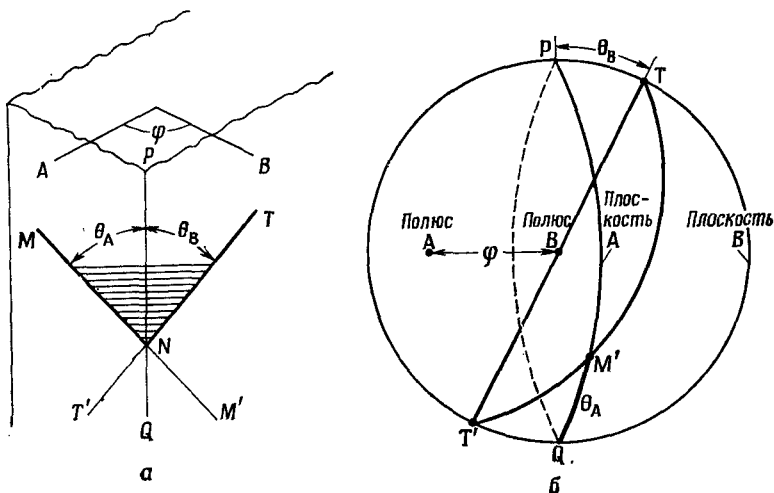
Затем возвращаем B' обратно в B вращением вокруг NS , при этом A'' также вращается вокруг NS на тот же угол в том же направлении, и получаем точку A''' , которая и отвечает положению A после требуемого поворота.

2.3.1. Анализ по двум проекциям

При исследовании плоских несовершенств в кристаллах часто бывает необходимо идентифицировать кристаллографическую плоскость, в которой лежит дефект, на основании линейных следов, которые он дает в двух (или нескольких) других непараллельных плоскостях. Используемое для этого построение рассматривается на фиг. 2.18.

Предположим, что плоскости A и B (которые соответствуют плоским поверхностям кристалла) пересекаются вдоль линии PQ . Начертим стереографическую проекцию, плоскость которой параллельна B , так, чтобы полюс B лежал в центре основного круга.

Угол между A и B (угол между внешними нормальными к плоскостям) равен φ , так что полюс плоскости A лежит на стереографической проекции, как показано на фиг. 2.18, б. Плоскости A и B пересекаются вдоль PQ , и, следовательно, пересечение можно показать на проекции. Плоскость, которая нас интересует, — это MNT . Она образует с PQ угол θ_A на грани A и угол θ_B на грани B . Рассмотрим след TT' на грани B . Направление TT' лежит в плоскости B под углом θ_B к PQ , если отсчитывать угол



Фиг. 2.18. Анализ по двум проекциям.

а — схематическое изображение кристалла и следов искомой плоскости на его гранях; б — стереографическая проекция.

по часовой стрелке от P , как показано на фиг. 2.18, а. Мы можем, следовательно, провести направление TT' на проекции на фиг. 2.18, б под углом θ_B к PQ .

Плоскость MNT должна проектироваться в виде большого круга, который проходит через точки T и T' . Через эти же точки проходит бесконечное число больших кругов, соответствующих всем возможным плоскостям, которые пересекают плоскость B в направлении, параллельном TT' . Чтобы зафиксировать на стереографической проекции другую точку, через которую должна проходить проекция плоскости MNT , рассмотрим след MM' плоскости MNT на грани A . След MM' образует с PQ на грани A плоский угол θ_A . Мы уже провели на проекции направление PQ , так что угол θ_A надо отсчитывать в надлежащем направлении от PQ и в плоскости A . Направление следа MM' на грани A (фиг. 2.18, а) задается точкой M' . Угол θ_A между M' и Q отсчитывается против часовой стрелки по дуге большого круга, соот-

ветствующего плоскости A на фиг. 2.18, б. Угол θ_A можно измерить на стереографической проекции или с помощью метода построения, рассмотренного в разд. 2.2.5 (стр. 65), или, что проще, используя сетку Вульфа, так чтобы ее основной диаметр NS (см. фиг. 2.13б) проходил вдоль линии PQ на фиг. 2.18, б; тогда θ_A измеряется числом широтных линий вдоль большого круга, совпадающего со следом плоскости A . Итак, мы определили положение точек T , M' и T' — полюсов на стереографической проекции, через которые должна проходить проекция плоскости MNT . Мы можем, следовательно, провести MNT как большой круг, проходящий через эти полюса, и использовать сетку Вульфа или метод построения, чтобы найти полюс MNT и тем самым индексы MNT , если известны индексы плоскостей A и B .

2.4. Элементы макроскопической симметрии

Некоторые экспериментально измеряемые (макроскопические) физические свойства кристаллов, например электросопротивление, тепловое расширение, магнитная восприимчивость, упругие константы, имеют симметрию, которую можно определить и понять вне связи с элементами трансляционной симметрии решетки. Если трансляционная симметрия кристалла не принимается во внимание, то остальные элементы симметрии, т. е. оси симметрии, зеркальные плоскости и центр инверсии (которые сами совместимы с трансляционной симметрией решетки), разделяются на 32 группы. Это 32 *кристаллографические точечные группы*. Они называются так потому, что все элементы симметрии группы проходят через единую точку и операции симметрии, определяемые этими элементами, оставляют неподвижной именно эту единственную точку.

Оси симметрии, зеркальные плоскости и центр инверсии называются *макроскопическими элементами симметрии*, потому что их наличие или отсутствие в данном кристалле можно в принципе определить с помощью макроскопических испытаний, например на основании результатов травления, из взаимного расположения граней или симметрии физических свойств, вне всякой связи с атомной структурой кристалла. Макроскопические элементы симметрии бывают двух родов. В случае элементов *первого рода*, например чисто поворотной оси, операция над, скажем, правосторонним объектом даст правосторонний же объект, и все последующие повторения этого объекта также являются правосторонними. Операция симметрии *второго рода* даст *энантиоморфный* объект из первоначального объекта. Левая и правая руки человека связаны энантиоморфным соотношением. Примером операции симметрии второго рода может служить операция отражения в плоскости симметрии (фиг. 1.11), так как эта операция переводит исходный правосторонний объект в объект левосторонний. Повтор-

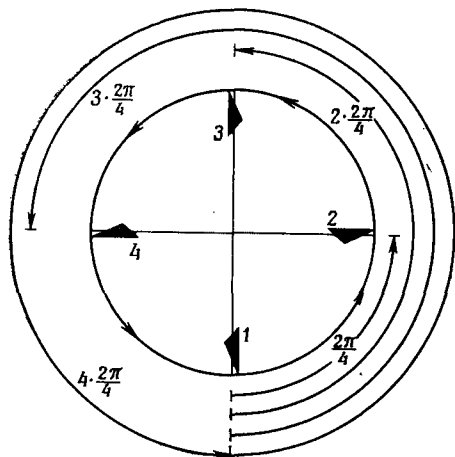
ное преобразование под действием того же самого элемента симметрии дает снова правосторонний объект, следующее — снова левосторонний и т. д. Таким образом, операция симметрии второго рода включает в себя перемену знаков направления и вращения при каждом повторении операции. К элементам симметрии второго рода относятся и центр инверсии.

Для вывода 32 кристаллографических точечных групп удобно все макроскопические элементы симметрии представить в виде соответствующих осей; чтобы сделать это, введем понятие *несобственного* вращения. Несобственное вращение приводит к совмещению фигуры с самой собой в результате одновременного действия вращения и отражения. Будем использовать так называемые инверсионно-поворотные (или просто *инверсионные*) оси, т. е. поворот в сочетании с отражением в точке, или, иначе говоря, с инверсией ¹⁾. Будем говорить, что простая поворотная ось дает *собственное* вращение.

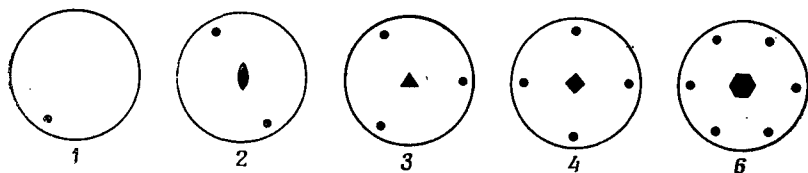
Операция симметричного повторения под действием простой поворотной оси показана на фиг. 2.19. Ось симметрии n -го порядка, или n -кратная ось, дает повторение объекта при последовательных поворотах на угол $2\pi/n$. Фиг. 2.19 иллюстрирует действие оси симметрии четвертого порядка. На фиг. 2.20 показано действие на единственный исходный полюс простых поворотных осей симметрии первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков. Эти схемы представляют собой стереографические проекции, на которых полюс оси помещается в центре основного круга. Числа под проекциями указывают порядок простой поворотной оси симметрии. Фиг. 2.21 иллюстрирует повторение объекта под действием зеркальной плоскости (обозначается m) и центра симметрии (центра инверсии). На фиг. 2.21, *a* зеркальная плоскость перпендикулярна плоскости основного круга. Она обозначена на чертеже вертикальной жирной линией. На фиг. 2.21, *b* зеркальная плоскость совпадает с плоскостью основного круга. На фиг. 2.21, *в* центр инверсии совпадает с центром сферы проекции.

Инверсионная ось первого порядка $\bar{1}$ эквивалентна центру симметрии. На фиг. 2.22 показано действие инверсионной оси

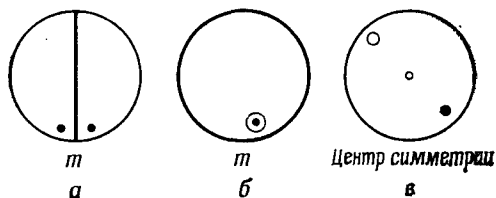
¹⁾ Для вывода точечных групп можно также использовать *зеркально-поворотные* оси. Они дают повторение объекта при сочетании вращения с отражением в плоскости, перпендикулярной оси вращения. Возможны одинарные, двойные, тройные, четверные и шестерные зеркально-поворотные оси; они обозначаются обычно $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$ и $\bar{6}$ соответственно. Ясно, что $\bar{1}$ эквивалентна зеркальной плоскости. [В русской литературе зеркально-поворотные оси обозначаются символами Λ_1 , Λ_2 , Λ_3 , Λ_4 , Λ_6 или L_{i1} , L_{i2} , L_{i3} , L_{i4} , L_{i6} . В международной символике эти оси обычно не используются, потому что каждая зеркально-поворотная ось эквивалентна инверсионной оси, а именно $\Lambda_1 \equiv \bar{1} \equiv m$, $\Lambda_2 \equiv \bar{2}$, $\Lambda_3 \equiv \bar{6}$, $\Lambda_4 \equiv \bar{4}$, $\Lambda_6 \equiv \bar{3}$. — Прим. ред.]



Ф и г. 2.19. Повторение объекта в результате поворота вокруг простой поворотной оси симметрии.

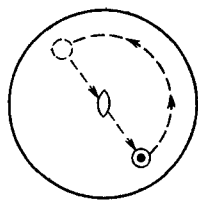


Ф и г. 2.20. Действие простых осей симметрии на единственный полюс. Цифры под стереографическими проекциями указывают порядок оси.

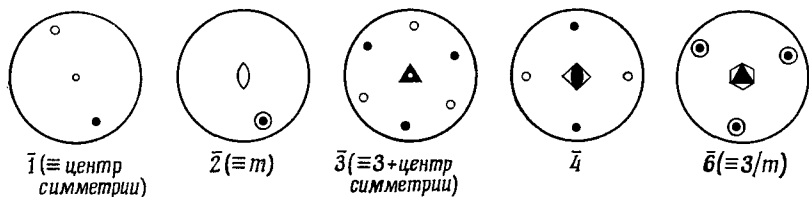


Ф и г. 2.21. Повторение объекта (единственного полюса) под действием плоскости симметрии и центра симметрии.

а — плоскость симметрии перпендикулярна плоскости проекции (вертикальная жирная линия); *б* — плоскость симметрии совпадает с плоскостью основного круга; *в* — центр симметрии совпадает с центром проекции.



Ф и г. 2.22. Действие инверсионной оси второго порядка $\bar{2}$ на единственный полюс.



Ф и г. 2.23. Повторение объекта (единственного полюса) под действием инверсионных осей разного порядка.

второго порядка $\bar{2}$. При повороте на $180^\circ (= 360^\circ/2)$ исходный полюс дает кружок, начерченный штриховой линией, а после инверсии получается кружок, изображенный сплошной линией. Аналогично тройная инверсионная ось $\bar{3}$ приводит к повторению объекта в результате поворота на $360^\circ/3 = 120^\circ$ в сочетании с инверсией. В общем случае инверсионная ось симметрии n -го порядка \bar{n} означает поворот на угол $2\pi/n$ с одновременной инверсией в центре инверсии. Каждая из этих операций — вращение и инверсия — в данном случае является частью общей операции симметрии, и их нельзя рассматривать как отдельные операции. Действие различных инверсионных осей симметрии, которые могут существовать в кристаллах, на отдельный исходный полюс показано на фиг. 2.23; полюса инверсионных осей располагаются на стереографических проекциях в центрах основного круга.

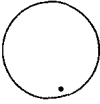
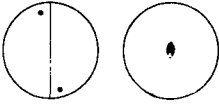
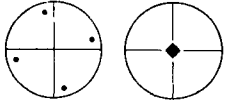
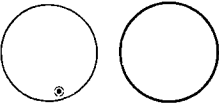
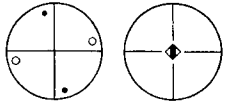
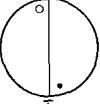
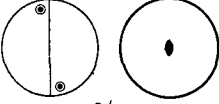
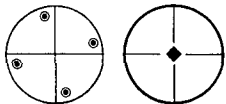
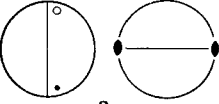
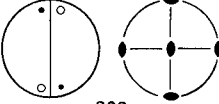
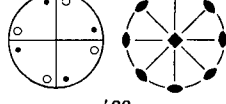
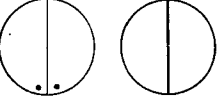
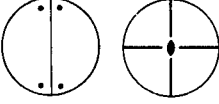
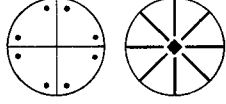
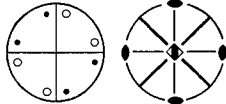
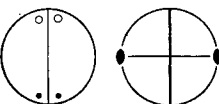
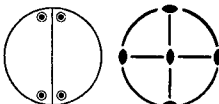
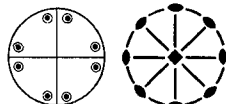
Для инверсионных осей симметрии используются цифры с чертой наверху; символы осей показаны в центрах стереографических проекций на фиг. 2.23.

Изучение фиг. 2.20, 2.21 и 2.23 показывает, что ось $\bar{1}$ эквивалентна центру симметрии; $\bar{2}$ соответствует зеркальной плоскости, расположенной перпендикулярно оси; $\bar{3}$ соответствует комбинации тройной оси с центром симметрии, а $\bar{6}$ — сочетанию тройной оси и перпендикулярной ей зеркальной плоскости (символ $3/m$, где знак $/m$ означает, что плоскость симметрии перпендикулярна оси симметрии)¹⁾. Только ось $\bar{4}$ среди них является особенной. Операция повторения, описываемая осью $\bar{4}$, не может быть воспроизведена никакой комбинацией другой простой оси симметрии и зеркальной плоскости или центра симметрии.

Различные сочетания простых осей симметрии 1, 2, 3, 4 и 6 и инверсионных осей $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$ и $\bar{6}$ составляют 32 точечные группы, которые соответствуют 32 классам кристаллов. Эти 32 класса разбиваются на системы в соответствии с наличием определенных элементов симметрии (табл. 1.3). Стереографические проекции всех 32 точечных групп, или классов симметрии кристаллов, показаны на фиг. 2.24; приведенные на ней обозначения соответствуют принятым в Международных таблицах по рентгеновской кристаллографии [2]. Каждая точечная группа, за исключением триклинных, представлена двумя проекциями. Первая из них

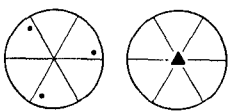
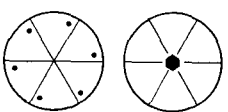
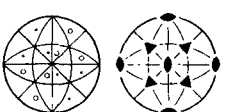
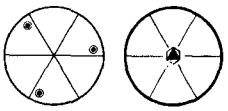
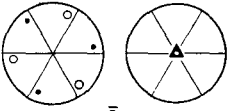
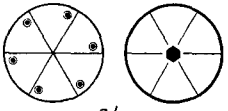
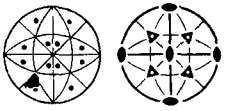
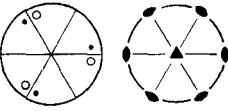
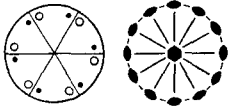
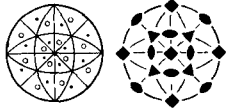
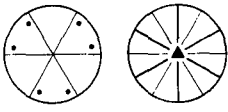
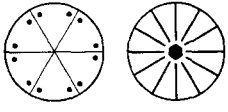
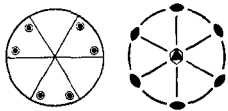
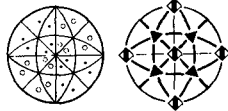
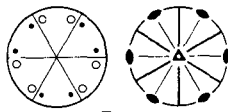
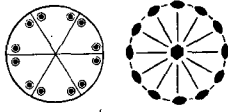
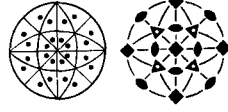
¹⁾ Применяемые нами обозначения идентичны использованным в Международных таблицах по рентгеновской кристаллографии [2], за исключением знака для оси $\bar{2}$ (см. фиг. 2.23, б). [Международные (интернациональные) таблицы по рентгеновской кристаллографии — основной справочник (в трех томах) для определения кристаллических структур, их симметрии и всех связанных с этим вопросов. Справочник выдержал несколько изданий на протяжении 1952—1972 гг. Первое издание его вышло в 1935 г., в одном томе. — Прим. ред.]

Пространственные точечные группы

	Триклинные	Моноклинные (I)	Тетрагональные
X	 1	 2	 4
\bar{X} (четные)	—	 $m (= \bar{2})$	 $\bar{4}$
X (четные) + центр симметрии и \bar{X} (нечетные)	 1	 $2/m$	 $4/m$
	Моноклинные (II)	Ромбические	
X2	 2	 222	 422
Xm	 m	 $2mm$	 $4mm$
$\bar{X}2$ (\bar{X} -четные) или Xm (\bar{X} -нечетные)	—	—	 $\bar{4}2m$
X2 или Xm + центр симметрии и \bar{X} (\bar{X} -нечетные)	 $2/m$	 $m\bar{3}m$	 $4/m\bar{3}m$

Ф и г. 2.24. Стереорафические проекции полюсов эквивалентных направлений z в месте перпендикулярна плоскости чертежа. В случае моноклинные точечные группы расположением элементов сим

Пространственные точечные группы

Тригональные	Гексагональные	Кубические	
 3	 6	 23	X
—	 $\bar{6}$	—	\bar{X} (четные)
 $\bar{3}$	 6/m	 m3	X (четные) + центр симметрии и \bar{X} (нечетные)
 32	 622	 432	X2
 3m	 6mm	—	Xm
—	 $\bar{6}m2$	 $\bar{4}3m$	$\bar{X}2$ (\bar{X} -четные) или Xm (\bar{X} -нечетные)
 $\bar{3}m$	 6/mmm	 m3m	X2 или Xm + центр симметрии и $\bar{X}m$ (\bar{X} -нечетные)

лений общего типа и элементов симметрии 32 точечных групп [2].
стереографические проекции приведены дважды (I и II) в соответствии с различным
метрии относительно наблюдателя.

иллюстрирует, как отдельный исходный полюс повторяется под действием операций симметрии данной точечной группы, на второй проекции показаны все имеющиеся элементы симметрии.

При описании классов кристаллов приняты следующие обозначения: X — поворотная ось; \bar{X} — инверсионная ось; X/m — ось симметрии и перпендикулярная ей плоскость симметрии; Xm — ось симметрии и плоскость симметрии, проходящая вдоль оси ¹⁾; $X2$ — ось симметрии и перпендикулярные ей двойные оси симметрии ²⁾; X/mn или X/mnn — ось симметрии в сочетании с зеркальными плоскостями, перпендикулярными и параллельными ей; $\bar{X}m$ — инверсионная ось с параллельными ей плоскостями симметрии (зеркальными плоскостями).

В следующих разделах мы дадим описание каждого из 32 классов кристаллов. Вывод этих 32 классов производится исходя из доказанных в разд. 1.5 и 1.6 положений о том, что с трансляционной симметрией кристалла совместимы только следующие поворотные оси: 1, 2, 3, 4 и 6. Эти пять осей дают соответственно пять классов кристаллов. Допустимые комбинации этих осей дают еще шесть классов (см. табл. 1.2), а именно 222, 32, 422, 622, 23 и 432, т. е. всего мы имеем уже 11 классов. Во всех этих одиннадцати классах имеются только операции симметрии первого рода. Каждая решетка по существу своему centrosимметрична (раздел 1.4), поэтому каждая из поворотных осей может быть заменена соответствующей инверсионно-поворотной осью, что дает еще пять классов, а именно $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$ и $\bar{6}$. Остальные 16 классов можно получить на основе сочетаний осей собственного и несобственного вращения.

2.5. Ромбическая (орторомбическая) система

Кристаллы этой системы имеют три оси симметрии второго порядка, которые пересекаются под прямыми углами друг с другом ³⁾. На фиг. 2.24 они выбраны в качестве координатных осей кристалла. Как указано в табл. 1.3 и на фиг. 1.19, a — $ж$, периоды решетки у кристаллов этой системы должны быть различны.

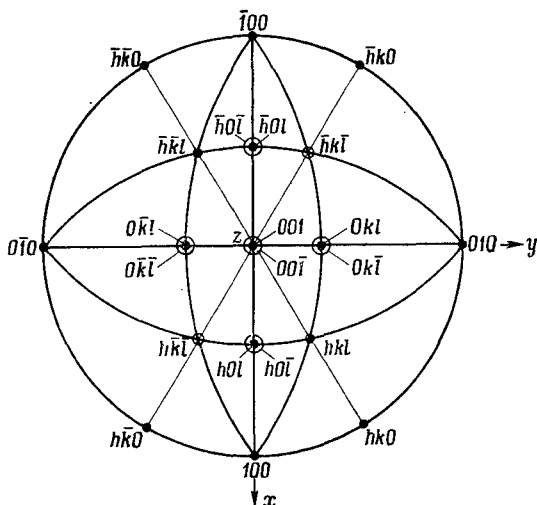
Точечная группа, содержащая три взаимно перпендикулярные двойные оси симметрии (фиг. 2.24), обозначается 222. На стереографической проекции полюс, находящийся в общем положении, повторяется этими осями симметрии четыре раза. Если символ

¹⁾ Число таких плоскостей равно порядку оси, т. е., например, $3m$ означает: ось симметрии третьего порядка и три плоскости симметрии, проходящие вдоль нее. — *Прим. ред.*

²⁾ Их число равно порядку оси, т. е., например, 32 означает: ось симметрии третьего порядка и три оси второго порядка, ей перпендикулярные. — *Прим. ред.*

³⁾ Или одну ось симметрии второго порядка и проходящие вдоль нее две взаимно перпендикулярные плоскости симметрии. — *Прим. ред.*

исходного полюса (hkl) и между индексами h , k и l нет каких-либо особых соотношений, тогда действие всех элементов симметрии данной точечной группы на данный исходный полюс дает дополнительно полюса $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$, $(h\bar{k}\bar{l})$ и $(\bar{h}kl)$ (фиг. 2.25). Совокупность граней кристалла, получаемых при повторении исходной грани кристалла с индексами (hkl) под действием операций симметрии, называется *простой формой* и обозначается индексами в фигурных скобках $\{hkl\}$ ¹⁾. Если эта совокупность граней замыкает



Ф и г. 2.25. Стереографическая проекция ромбического кристалла точечной группы 222.

Оси симметрии 2 располагаются параллельно осям x , y и z .

пространство, простая форма называется *закрытой*, если не замыкает, она называется *открытой*. В нашем случае форма $\{hkl\}$ на фиг. 2.25 является закрытой.

Символ $\{hkl\}$ в фигурных скобках означает все грани простой формы hkl , в случае точечной группы 222 это (hkl) , $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$, $(h\bar{k}\bar{l})$ и $(\bar{h}kl)$. В данном случае о форме $\{hkl\}$ говорят, что она имеет *кратность 4*. Форму $\{hkl\}$ можно назвать *общей формой*, т. е. формой, которая не связана никаким особенным соотношением с элементами симметрии данной точечной группы. Особыми, или

1) Все индивидуальные грани простой формы $\{hkl\}$ кристаллографически эквивалентны. Аналогичным образом, если дано направление, скажем $[uvw]$, то все направления, получаемые действием операций симметрии данной точечной группы на это исходное направление, в совокупности называются *семейством направлений* типа uvw и обозначаются индексами в угловых скобках $\langle uvw \rangle$.

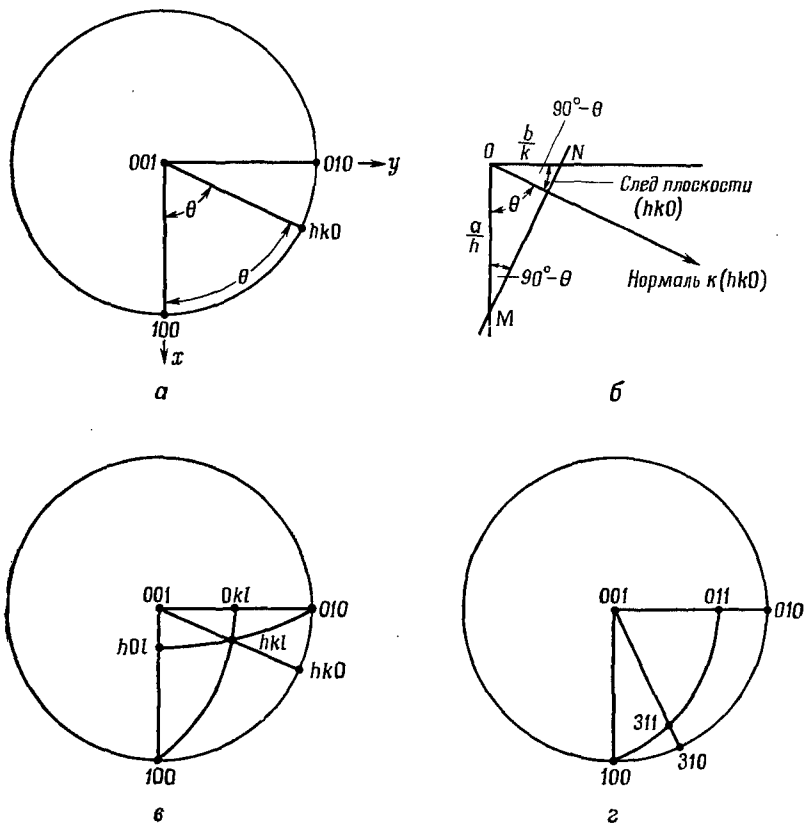
частными, формами в кристаллах этого класса будут $\{100\}$, $\{010\}$ и $\{001\}$; у каждой из них по две грани: например, $\{100\}$ включает грани (100) и $(\bar{1}00)$ (фиг. 2.25). Все эти формы являются открытыми. То, что это формы частные, легко выявляется, так как их кратность меньше, чем кратность общей формы.

Такие формы, как $\{hk0\}$, $\{h0l\}$ и $\{0kl\}$, у которых один индекс равен нулю, а между двумя другими индексами нет особого соотношения, также считаются частными, несмотря на то, что, как показывает фиг. 2.25, кратность каждой из них равна 4. Их относят к частным формам потому, что полюса этих плоскостей лежат на перпендикулярах к осям симметрии второго порядка. Это положение особое по отношению к данной оси; если бы при росте кристалла образовывались только грани, параллельные плоскостям с индексами $\{hk0\}$, $\{h0l\}$ или $\{0kl\}$, у него обнаруживалась бы симметрия, отвечающая не только наличию трех двойных осей, но еще и плоскости симметрии. К частным формам обычно относятся такие формы, грани которых лежат перпендикулярно или параллельно какой-либо оси симметрии или перпендикулярно или параллельно плоскости симметрии, а также иногда равнонаклонно по отношению к двум каким-либо одинаковым элементам симметрии. Однако наилучшим определением частной формы можно считать следующее. Простая форма является частной, если развитие полного комплекса граней этой формы обнаруживает симметрию, более высокую, чем та, которой кристалл обладает в действительности. Частные формы всех классов кристаллов приведены в табл. 2.3 (стр. 108).

В ромбическую систему входят еще два класса: $2mm$ и mmm (фиг. 2.24). В первом из них имеются две зеркальные плоскости, пересекающиеся под прямым углом. Наличие двух взаимно перпендикулярных плоскостей симметрии автоматически приводит к возникновению двойной оси симметрии вдоль линии их пересечения (фиг. 2.24). Поскольку $m \equiv \bar{2}$, эта группа может обозначаться также $2\bar{2}2$; именно поэтому она относится к ромбической системе, определяющей особенностью которой является наличие трех двойных осей. Этот класс кристаллов можно было бы обозначить просто mm , так как на пересечении двух взаимно перпендикулярных осей симметрии второго порядка третья такая же ось появляется автоматически. Однако обычно используется обозначение $mm2$ как удобное для дальнейшего вывода пространственных групп (разд. 2.11).

Кристалл, у которого есть три двойные оси симметрии, может также обладать зеркальными плоскостями, перпендикулярными к имеющимся осям, при отсутствии осей симметрии более высокого порядка. Такая точечная группа обозначается mmm , или $2/m\bar{m}2$. Как показывает фиг. 2.24, кратность общей формы в этом классе

равна 8. Частные формы $\{hk0\}$, $\{h0l\}$ и $\{0kl\}$ в этом классе характеризуются меньшей кратностью, чем общая форма. Точечная группа, обладающая в данной кристаллографической системе наивысшей симметрией, называется *голосимметричным*, или *голоэдрическим*, классом или просто *голоэдрией*.



Фиг. 2.26. Построение стереографической проекции ромбического кристалла с заданными значениями параметров a , b и c . a — положение полюсов (001) , (010) и (100) и нанесение полюса $(hk0)$; b — схема сечения кристалла, параллельного плоскости (001) . Показано положение плоскости $(hk0)$; c — нанесение полюса (hkl) ; d — схема, иллюстрирующая нахождение полюса (311) .

Чтобы построить стереографическую проекцию ромбического кристалла, если даны его периоды решетки a , b и c , поступим, как показано на фиг. 2.26. Положение полюсов граней (001) , (010) и (100) получаем сразу: это центр основного круга и точки, в которых оси y и x пересекают основной круг. Полюс $(hk0)$ можно

получить на основном круге, отложив угол θ от полюса (100), как показано на фиг. 2.26, а. Это следует из фиг. 2.26, б, где представлено пересечение плоскости $\{hk0\}$ с осями координат кристалла на плоскости (001). Действительно, полюс (100) лежит на OM , грань $(hk0)$ отсекает на осях кристалла x и y отрезки длиной a/h и b/k соответственно, а угол θ — это угол между нормалью к $(hk0)$ и (100). Угол θ показан на фиг. 2.26, а и б. Из фигуры 2.26, б имеем

$$\operatorname{tg} \theta = \operatorname{ctg} (90^\circ - \theta) = (a/h)/(b/k) = (a/b) (k/h),$$

т. е.

$$\operatorname{tg} (100) \widehat{(hk0)} = (a/b) (k/h). \quad (2.1a)$$

Зная периоды решетки, мы можем также определить местоположение полюсов $(0kl)$ и $(h0l)$, так как

$$\operatorname{tg} (001) \widehat{(0kl)} = (c/b) (k/l), \quad (2.1б)$$

$$\operatorname{tg} (001) \widehat{(h0l)} = (c/a) (h/l). \quad (2.1в)$$

Здесь $(001) \widehat{(0kl)}$ означает угол между полюсами (001) и $(0kl)$ и т. д. Эти соотношения сразу же становятся очевидными, если сделать построения, аналогичные приведенным на фиг. 2.26, б, но выбрав плоскость чертежа перпендикулярно осям x или y соответственно. Определив местоположения полюсов $(h0l)$, $(0kl)$ $(hk0)$, можно затем найти полюса типа (hkl) , используя правило зон (разд. 1.3). Согласно уравнению (1.11), если какие-либо два полюса $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$ принадлежат одной и той же зоне с индексами $[uvw]$, то

$$h_1u + k_1v + l_1w = 0 \quad (2.2)$$

и

$$h_2u + k_2v + l_2w = 0. \quad (2.3)$$

Если мы умножим уравнение (2.2) на m , а уравнение (2.3) на n и сложим их, то получим

$$(mh_1 + nh_2)u + (mk_1 + nk_2)v + (ml_1 + nl_2)w = 0. \quad (2.4)$$

Следовательно, полюс плоскости $(mh_1 + nh_2, mk_1 + nk_2, ml_1 + nl_2)$ также лежит в зоне $[uvw]$. Другими словами, плоскость, индексы которой являются линейными комбинациями индексов каких-либо двух плоскостей данной зоны, принадлежит той же самой зоне. В общем случае m и n могут быть и положительными, и отрицательными.

Чтобы нанести на стереографическую проекцию, скажем, полюс (hkl) после того, как мы уже нанесли (001), (010), (100) и $(hk0)$, $(h0l)$ и $(0kl)$, воспользуемся тем, что полюс (hkl) должен лежать в зоне, содержащей грани (001) и $(hk0)$, поскольку если умножить (001) на число l и сложить индексы (001) и $(hk0)$, то полу-

чим (hkl) . Аналогичным образом (hkl) лежит в зоне, содержащей (Ok_l) и (100) , поскольку h , умноженное на (100) , дает $(h00)$, что при сложении с (Ok_l) дает (hkl) . Поэтому мы проводим на проекции дуги больших кругов, отвечающих зоне, содержащей (001) и $(hk0)$, и зоне, содержащей (100) и (Ok_l) , и получаем полюс (hkl) на пересечении этих дуг.

Это будет яснее, если разобрать конкретный пример. Предположим, мы хотим определить на стереографической проекции положение полюса (311) после того, как уже нанесли полюса (001) , (010) и (100) (фиг. 2.26, *з*). Один из возможных способов состоит в том, чтобы сначала найти полюс (011) . Для этого используем уравнение (2.1, *б*), подставляя в него $k = 1$, $l = 1$ и известные значения периодов решетки c и b . Затем находим положение (310) на основном круге, определяя угол между (100) и (310) из уравнения (2.1, *а*) путем подстановки $h = 3$, $k = 1$. Наконец, замечаем, что (311) лежит в зоне, содержащей (001) и (310) , так как сложение индексов (001) и (310) дает (311) . Полюс (311) лежит, кроме того, в зоне, содержащей (100) и (011) , поскольку, умножив (100) на 3 и сложив с (011) , снова получаем (311) . Таким образом, положение полюса (311) мы получим, проведя дуги больших кругов через полюса (001) и (310) и через (011) и (100) , а полюс (311) лежит на пересечении этих дуг.

Такой способ отыскания положений полюсов позволяет быстро начертить точную стереографическую проекцию, если положение исходных полюсов определено расчетом. Необходимо подчеркнуть, что, хотя мы выбрали в качестве примера ромбическую систему, по уравнению (2.4) можно определять положения полюсов кристаллов любой системы независимо от того, каковы координатные углы кристалла. Возможность использования уравнения (2.4) — одно из наибольших преимуществ индексов Миллера для обозначения плоскостей кристалла; это естественное следствие из свойств пространственной решетки.

Конечно, уравнениями типа (2.1) можно пользоваться и для решения обратной задачи: нахождения отношения периодов решетки на основании результатов измерения углов между полюсами на проекции (между гранями кристалла).

2.6. Тетрагональная система

В этой системе ось симметрии четвертого порядка всегда принимается за ось z . Периоды решетки a и b равны между собой.

Голосимметричная точечная группа в этой системе — $4/m\bar{3}m$, т. е. три взаимно перпендикулярные плоскости симметрии и ось четвертого порядка, перпендикулярная одной из плоскостей (фиг. 2.24). Если мы будем повторять какой-либо отдельный полюс, действуя на него этими элементами симметрии, то увидим, что

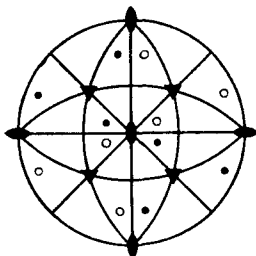
в кристаллах этого класса обязательно должны существовать еще и оси второго порядка, перпендикулярные зеркальным плоскостям, и что, кроме того, автоматически возникает еще вторая пара таких же осей, тоже перпендикулярных зеркальным плоскостям. Одну из этих пар взаимно перпендикулярных двойных осей выбирают как направления осей x и y . Общая форма $\{hkl\}$ имеет кратность 16. Частные формы: $\{001\}$, $\{100\}$, $\{110\}$, $\{hk0\}$, $\{h0l\}$ и $\{hhl\}$ (табл. 2.3). Последняя из них соответствует граням, которые отсекают на осях x и y равные отрезки.

Точечную группу 422 можно обозначать просто как 42, поскольку, если присутствуют взаимно перпендикулярные оси 4 и 2, обязательно возникает вторая пара двойных осей; одна из этих пар выбирается в качестве направлений, определяющих оси x и y . Класс $\bar{4}2m$ можно рассматривать как $\bar{4}m$, поскольку легко показать, что под углом 45° к двум взаимно перпендикулярным плоскостям симметрии автоматически возникают две оси симметрии второго порядка. Эту пару двойных осей принимают за оси x и y . В остальных точечных группах тетрагональной системы двойные оси не возникают.

Углы между полюсами на стереографической проекции и отношение периодов решетки (т. е. отношение a/c в этой системе) легко связываются с помощью уравнений, подобных (2.1), если принять $a = b$.

2.7. Кубическая система

Кубические кристаллы обладают четырьмя осями симметрии третьего порядка, расположенными, как показано на фиг. 1.30: оси всегда проходят вдоль направлений $\langle 111 \rangle$ элементарной ячейки, представляющей собой куб ($a = b = c$). Это единственная



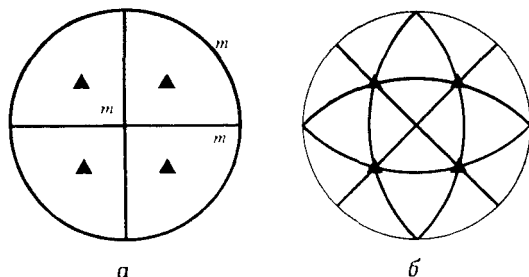
Фиг. 2.27. Схема, иллюстрирующая автоматическое возникновение осей второго порядка в результате действия четырех осей симметрии третьего порядка, расположенных вдоль объемных диагоналей куба.

система, в которой направления $[uvw]$ обязательно совпадают с нормальными к граням (uvw) при всех u , v и w .

Нанесем на стереографическую проекцию тройные оси, совпадающие с направлениями $\langle 111 \rangle$, и рассмотрим результат действия этих осей на некий полюс (фиг. 2.27). Оказывается, что параллельно координатным осям кристалла автоматически возникают оси

симметрии второго порядка. Присутствие этих осей следует также из табл. 1.2 (ряд, начинающийся с 233). Символ точечной группы, используемый для описания этого сочетания двойной и двух тройных осей симметрии, показанной в табл. 1.2, просто 23. Это точечная группа наименшей в кубической системе симметрии. Кратность общей формы 12.

Обозначения точечных групп кубической системы имеют следующую особенность: символ 3 в них, несмотря на то, что он отвечает определяющей оси системы, никогда не ставится первым; тройные оси всегда располагаются под углом $54^{\circ}44'$ ($= \arccos 1/\sqrt{3}$) к кристаллографическим осям. (Во всех остальных системах



Фиг. 2.28. Расположение плоскостей симметрии в кубических кристаллах.

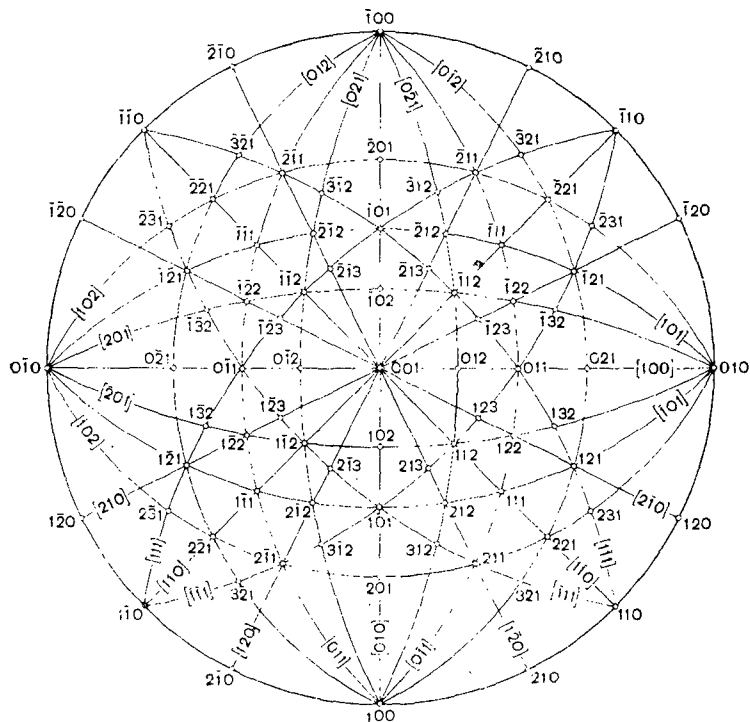
a — параллельно плоскостям $\{100\}$ (координатные плоскости); *b* — параллельно плоскостям $\{110\}$ (диагональные плоскости).

главная ось симметрии ставится первой в символе точечной группы; чтобы установить различие между моноклинными и ромбическими точечными группами, необходимо показать наличие во втором случае двойных или инверсионных двойных осей, параллельных по крайней мере двум осям кристалла.) В символе кубических точечных групп цифра 3 всегда стоит на втором месте, и это помогает отличать точечные группы кубической системы от точечных групп всех остальных систем¹⁾. В кубической системе зеркальные плоскости симметрии могут проходить либо параллельно плоскостям $\{100\}$, как на фиг. 2.28, *a*, либо параллельно плоскостям $\{110\}$, как на фиг. 2.28, *b*. В первом случае *m* стоит в символе перед 3 (т. е. $m\bar{3}$), а во втором *m* ставится после 3, например, $X\bar{3}m$, где *X* означает ось, отличную от 3.

Если мы добавим зеркальные плоскости, параллельные $\{100\}$, к классу 23, то получим $2/m\bar{3}$; обычно этот класс обозначается

¹⁾ В символе кристаллов кубической сингонии на первом месте ставятся элементы симметрии, проходящие вдоль координатных направлений, на третьем — так называемые «диагональные» элементы симметрии, проходящие вдоль диагоналей координатных углов. — *Прим. ред.*

просто $m\bar{3}$. Как показывает фиг. 2.24, этот класс кристаллов, помимо трех двойных осей, располагающихся на пересечении трех взаимно перпендикулярных зеркальных плоскостей и четырех тройных осей, обладает центром симметрии. Тройные оси ввиду наличия центра симметрии становятся инверсионными: $\bar{3}$. Кратность общей формы $\{hkl\}$ 24. Необходимо заметить (табл. 2.3), что если нет двойных осей, параллельных $\langle 110 \rangle$, и зеркальных



Ф и г. 2.29. Стереографическая проекция кубического кристалла [3].

плоскостей, параллельных $\{110\}$, то частные простые формы $\{hk0\}$ и $\{kh0\}$ не одинаковы. Это имеет место в классах 23 и $m\bar{3}$.

Замена осей второго порядка в классе 23 на оси четвертого порядка дает класс 432 . Легко показать, что в этом классе должны автоматически возникать двойные оси, параллельные направлениям $\langle 110 \rangle$. Этот класс обозначается обычно 432 , чтобы показать наличие двойных осей, что важно для вывода пространственных групп (разд. 2.14). Однако в принципе для этого класса достаточно было бы обозначения 43^1).

1) См. примечание редактора на предыдущей странице. — Прим. ред.

Замена 2 на $\bar{4}$ в классе 23 приводит к автоматическому появлению зеркальных плоскостей, параллельных плоскостям $\{110\}$, и, следовательно, проходящих через тройные оси. Соответственно, если к 23 добавляются зеркальные плоскости, параллельные $\{110\}$, тогда двойные оси становятся четверными инверсионными $\bar{4}$. Если через тройные оси проходят плоскости симметрии, тогда параллельно кристаллографическим осям возникают четверные оси — или простые, или инверсионные: 4 или $\bar{4}$. Первый из этих классов $\bar{4}3m$, второй $m\bar{3}m$. В классе $\bar{4}3m$ нет центра симметрии, а поэтому добавочные элементы симметрии не возникают. Кратность общей формы составляет 24. В классе $\bar{4}3m$ (как и в 23) $\{111\}$ и $\{\bar{1}\bar{1}\bar{1}\}$ — это разные частные формы: у каждой из них по четыре плоскости, параллельные поверхностям правильного тетраэдра. В классе $m\bar{3}m$ имеются зеркальные плоскости симметрии, параллельные $\{100\}$ и $\{110\}$; таким образом, всего оказывается девять плоскостей симметрии. В кристаллах этого класса имеется еще шесть двойных осей, три четверных, центр симметрии и, конечно, четыре тройные оси. Все эти элементы можно получить действием плоскостей симметрии, параллельных $\{110\}$ и $\{100\}$, в сочетании с четырьмя тройными осями. Поэтому для обозначения этой точечной группы используется символ $m\bar{3}m$; это голоэдрический класс кубической системы. Общая форма имеет 48 граней.

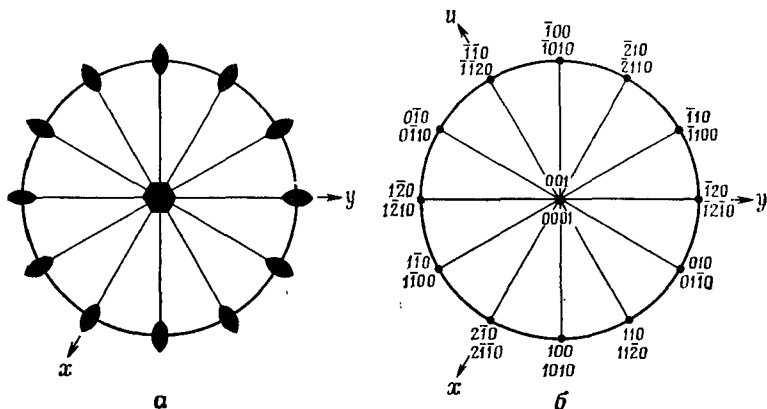
На фиг. 2.29 приведена стереографическая проекция кубического кристалла с символами полюсов нескольких граней и зонами, в которых они лежат. В табл. А3.1 (приложение 3) даны значения углов между некоторыми полюсами с различными индексами для кубической системы. Остальные полюса легко можно нанести на проекцию, используя правило зон, рассмотренное на стр. 82 и в приложении А2.2.

2.8. Гексагональная система

Кристаллы, обладающие осью симметрии шестого порядка, имеют решетку Бравэ, показанную на фиг. 1.19, к. Оси x и y располагаются под углом 120° друг к другу перпендикулярно гексагональной оси (оси шестого порядка), лежащей вдоль оси z . В голоэдрическом классе этой системы $6/mmm$ имеются: гексагональная ось на пересечении вертикальных плоскостей симметрии (два семейства по три плоскости в каждом); два семейства осей второго порядка (по три оси в каждом), перпендикулярных этим вертикальным плоскостям симметрии; плоскость симметрии, перпендикулярная оси шестого порядка, и центр симметрии (фиг. 2.24). Эти элементы симметрии показаны на фиг. 2.30, а. За координатные оси кристалла принимают какие-либо две оси второго порядка, расположенные под углом 120° друг к другу ¹⁾.

¹⁾ Это оси x и y ; ось шестого порядка принимается за ось z . — Прим. ред.

Индексы ряда граней при таком выборе осей показаны на фиг. 2.30, б. Если плоскость с индексами (100) повторить действием шестерной оси, получатся плоскости (010), ($\bar{1}10$), ($\bar{1}00$), (0 $\bar{1}0$), ($\bar{1}\bar{1}0$). Все эти плоскости кристаллографически эквивалентны, и тем не менее их индексы Миллера оказываются совершенно различными: (010) и ($\bar{1}\bar{1}0$). Чтобы избежать возможной путаницы



Фиг. 2.30. Расположение элементов симметрии (а) и индексы некоторых полюсов в обозначениях Миллера и Миллера — Бравэ (б) кристалла голоэдрического класса $6/m\bar{3}m$ гексагональной системы.

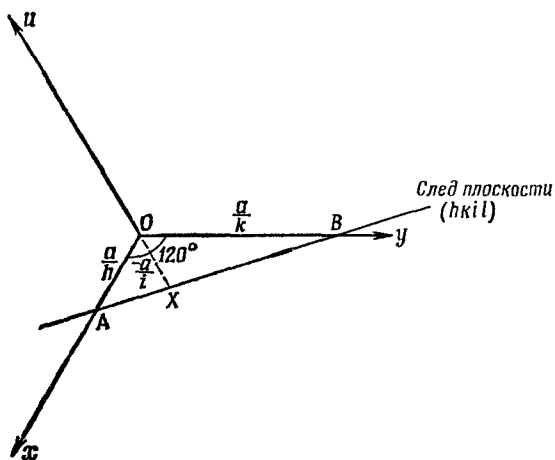
из-за того, что грани одной и той же простой формы имеют совершенно различные индексы, при описании кристаллов гексагональной системы принято использовать вместо индексов Миллера индексы Миллера — Бравэ.

В системе обозначений Миллера — Бравэ, кроме двух горизонтальных осей, выбирается еще одна дополнительная кристаллографическая ось, которая располагается перпендикулярно гексагональной оси под углом 120° к осям a и b . Период решетки u вдоль этой оси, как и вдоль осей x и y , равен a ($= b$), как показано на фиг. 1.19, κ (разд. 1.8). Чтобы найти индексы какой-либо плоскости в обозначениях Миллера — Бравэ, берем отрезки, отсекаемые этой плоскостью на всех трех осях x , y и u , выражаем их через соответствующие периоды решетки и далее продолжаем совершенно так, как в разд. 1.2. В результате плоскость всегда имеет четыре индекса ($hkil$). Ясно, что индекс i не является независимым: между h , k и i должно быть определенное соотношение. Его легко получить из фиг. 2.31:

$$i = -(h + k),$$

т. е. третий индекс всегда есть отрицательная сумма первых двух. На фиг. 2.30, h индексы некоторых полюсов даны как в обозначениях Миллера — Бравэ, так и Миллера. По проекции видно, что если пользоваться индексами Миллера — Бравэ, то явно видна гексагональная симметрия: индексы граней одной и той же простой формы оказываются одинаковыми.

Система Миллера — Бравэ применяется также и для обозначения направлений в гексагональных кристаллах, так что индексы



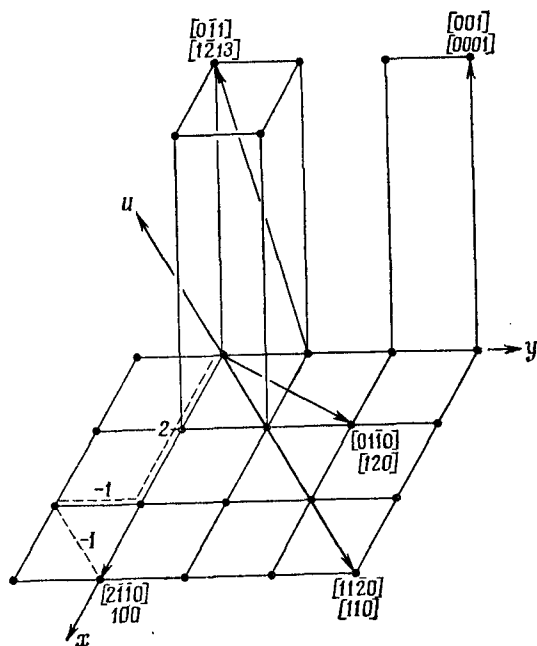
Ф и г. 2.31. К выводу соотношения между индексами h , k и i в четырехиндексной системе обозначений для кристаллов гексагональной системы.

направлений имеют вид $[uvw]$ вместо $[uvw]$. Требуется известная осторожность при преобразовании четырехзначных индексов в трехзначные. Для того чтобы направления данного семейства имели индексы одинакового вида, при индексировании направлений идут от начала координат поочередно вдоль осей x , y и u от узла к узлу и подбирают путь так, чтобы число шагов вдоль оси u было равно алгебраической сумме шагов вдоль осей x и y ; тогда величина индекса t будет равна сумме $(u + v)$ с обратным знаком. Направление, соответствующее оси x на фиг. 2.32, будет в этом случае иметь символ $[2\bar{1}10]$ в четырехиндексной системе обозначений и $[100]$ в трехиндексной системе. Необходимо отметить, что величину третьего индекса Миллера — Бравэ нельзя получить непосредственно исходя из первых двух индексов трехиндексной тройки, как в случае плоскости. На фиг. 2.32 даны индексы некоторых направлений, выраженные обоими способами. При расчетах, например, с помощью уравнений (1.4) и (1.5), обычно лучше работать целиком в трехиндексной системе обозначений

как для плоскостей, так и для направлений и переводить трехиндексные обозначения направлений в четырехиндексные в конце расчета.

Четырехиндексная система обозначений плоскостей и направлений очень широко используется при описании и вычислениях гексагональных и тригональных кристаллов.

Теперь рассмотрим другие точечные группы гексагональной системы, показанные на фиг. 2.24. Заметим, что вследствие исполь-

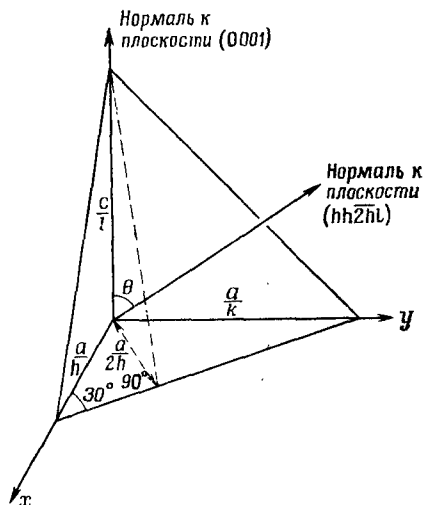


Ф и г. 2.32. Символы некоторых направлений гексагонального кристалла в трех- и четырехиндексной системе обозначений.

зования инверсионно-поворотных осей для описания симметричных операций второго рода класс $\bar{6}$ ($\equiv 3m$) попадает в гексагональную систему. В классах 6 , $\bar{6}$, $6/m$ и $6mm$ отсутствуют двойные оси. В классе $6mm$ оси кристалла обычно выбираются таким образом, чтобы они были перпендикулярны плоскостям симметрии одного из двух имеющихся семейств (тогда они лежат параллельно плоскостям симметрии второго семейства). Класс $\bar{6}m2$ можно иначе представить как $\bar{6}m$ ($\equiv 3/m\bar{m}$). В этом классе автоматически возникают двойные оси; они выбираются в качестве кристаллографических осей. Класс 622 , конечно, имеет двойные оси. Он может быть представлен как 62 , поскольку второе семейство

двойных осей возникает автоматически. За координатные оси кристалла выбираются направления, параллельные двойным осям одного из семейств. Центр симметрии имеется только в классах $6/m$ и $6/mmm$.

Для построения стереографических проекций и отыскания соотношений между полюсами плоскостей и отношением периодов решетки (c/a) в гексагональной системе находят угол между



Ф и г. 2.33. Нахождение угла между гранями (0001) и $(hh\bar{2}hl)$.

гранями типов (0001) и $(hh\bar{2}hl)$, например $(11\bar{2}1)$. Грани типа $(hh\bar{2}hl)$ выбирают потому, что они одинаково наклонены к осям x и y . Например, угол θ между полюсом (0001) и полюсом $(hh\bar{2}hl)$, как видно из фиг. 2.33, определяется выражением

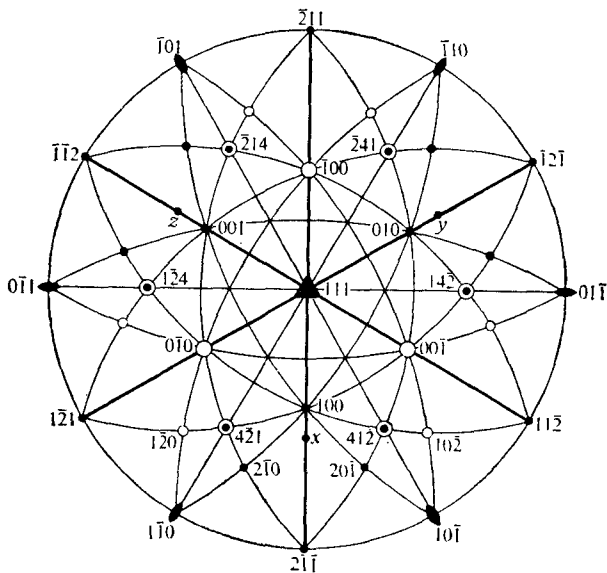
$$\operatorname{tg} \theta = \frac{c}{a} \frac{2h}{l}.$$

Иногда используется грань $(h0\bar{h}l)$, например $(10\bar{1}1)$. Угол между (0001) и $(h0\bar{h}l)$ равен $\operatorname{arctg} [(c/a) (2/\sqrt{3}) (h/l)]$. Простые формы различных классов гексагональной системы приведены в табл. 2.3.

2.9. Тригональная (ромбоэдрическая) система

Для этой кристаллографической системы характерно наличие единственной оси третьего порядка. Тригональная система очень сходна с гексагональной системой. Наличие единственной тройной оси у кристалла не указывает само по себе, является ли данная решетка, рассматриваемая как система узлов, истинно гексагональной или она базируется на ступенчатой упаковке правильных

треугольных сеток. В обоих случаях можно использовать элементарную ячейку типа показанной на фиг. 1.19, *л* (если решетка гексагональная, тогда эта ячейка, конечно, будет непримитивной). Ячейка, приведенная на фиг. 1.19, *л*, представляет собой ромбоэдр, и угол $\alpha (<120^\circ)$ является характеристикой вещества. Элементы симметрии голоэдрического класса $\bar{3}m$ показаны на фиг. 2.24, где приведена также стереографическая проекция, которая получается, когда элементы симметрии действуют на один полюс.



Фиг. 2.34. Стереографическая проекция тригонального кристалла класса $\bar{3}m$.

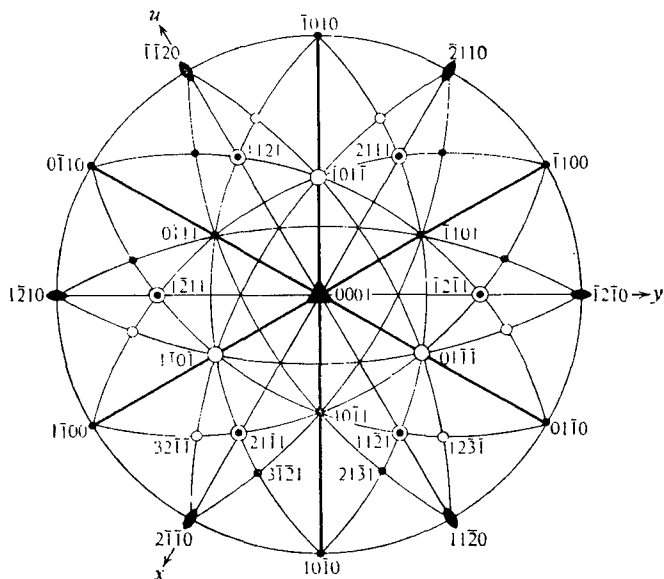
В тех случаях, когда полюса верхней и нижней полусфер на проекции совпадают, индексы относятся к полюсам верхней полусферы.

Наличие оси $\bar{3}$ и трех плоскостей симметрии, проходящих вдоль этой оси, автоматически приводит к появлению трех двойных осей; они проходят перпендикулярно тройной оси и не лежат в плоскостях симметрии. Если для такого кристалла используется ромбоэдрическая ячейка, координатные оси кристалла нельзя выбрать так, чтобы они были параллельны основным осям симметрии. На фиг. 2.34 показана стереографическая проекция тригонального кристалла, индцированного на основе ромбоэдрической элементарной ячейки. Угол α равен 98° ; оси x , y и z выбраны так, что они лежат в зеркальных плоскостях, а инверсионная тройная ось является объемной диагональю ячейки и, следовательно, лежит вдоль направления $[111]$. Ясно, что оси x , y и z , т. е. направления $[100]$, $[010]$ и $[001]$, не проходят перпендикуляр-

но плоскостям (100), (010) и (001) соответственно. Однако местоположение этих направлений легко найти на проекциях, так как ось z [001] является полюсом зоны, содержащей (100) и (010), ось y — полюсом зоны, содержащей (100) и (001), а ось x — полюсом зоны, содержащей (001) и (010). Заметим, что угол γ между любой осью кристалла и единственной осью третьего порядка дается выражением

$$\sin \gamma = \frac{2}{\sqrt{3}} \sin \alpha / 2 \quad (2.5)$$

(см. задачу 2.7); это выражение пригодится при вычерчивании стереографических проекций тригональных кристаллов по заданному значению угла α .

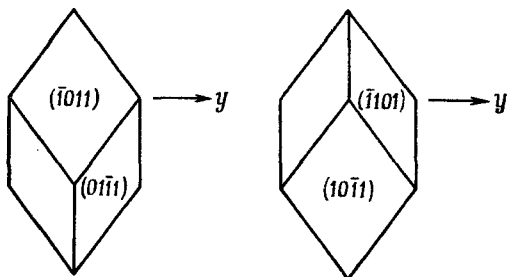


Фиг. 2.35. Тот же кристалл, что и на фиг. 2.34. Обозначения полюсов даны в четырехиндексной системе (использована гексагональная элементарная ячейка).

В тех случаях, когда полюса верхней и нижней полусфер на проекции совпадают, приведенные символы относятся к полюсам верхней полусферы.

Во многих случаях при рассмотрении тригональных кристаллов гораздо удобнее использовать гексагональную ячейку. Форма выбираемой в этом случае элементарной ячейки точно такая же, как и для гексагональных кристаллов (фиг. 1.19, κ), и, поскольку выбирается она безотносительно к решетке, может быть примитивной или непримитивной. Характеристикой вещества при таком выборе ячейки служит отношение c/a . На фиг. 2.35 показана

стереографическая проекция кристалла класса $\bar{3}m$ с гранями, индцированными по Миллеру — Бравэ. Это тот же самый кристалл, что и на фиг. 2.34 ($c/a = 1,02$). Если пользоваться гексагональной ячейкой, то оси x , y и z проводят вдоль осей второго порядка. Соотношение между индексами на этих двух проекциях можно легко вывести по правилу сложения зон и уравнению (1.11). На фиг. 2.34 и 2.35 ориентационное соотношение ячеек таково: $(0001) \parallel (111)$ и $(10\bar{1}1) \parallel (100)$. Тогда плоскости $(10\bar{1}0)$ на фиг. 2.35 соответствует плоскость с индексами $(2\bar{1}1)$ на фиг. 2.34. Индексы



Фиг. 2.36. Соотношение между ромбоэдрами типа $\{h0\bar{h}l\}$ и $\{0k\bar{k}l\}$ в тригональном классе $\bar{3}m$.

$(2\bar{1}1)$ можно получить, замечая, что плоскость $(2\bar{1}1)$ параллельна направлению $[111]$, равнонаклонна к осям y и z и лежит в зоне, содержащей плоскости (111) и (100) . Построение стереографической проекции и определение осевого отношения c/a для тригонального кристалла, рассматриваемого в гексагональных осях, производится так же, как и в гексагональной системе ¹⁾.

В классе $\bar{3}m$ частными являются простые формы, грани которых лежат перпендикулярно тройной оси: $\{0001\}$; параллельно тройной оси: $\{hki0\}$; перпендикулярно зеркальным плоскостям: $\{h0\bar{h}l\}$ и под равными углами к двум двойным осям: $\{hh2\bar{h}l\}$. Шесть граней формы $\{h0\bar{h}l\}$ образуют ромбоэдр, например $\{10\bar{1}2\}$. Эта форма имеет такой же внешний вид, как и $\{0k\bar{k}l\}$, которая также является ромбоэдром, но повернутым на 60° относительно первого. Соотношение между этими ромбоэдрами показано на фиг. 2.36. Это совершенно самостоятельные формы, и обе являются частными. Поэтому к списку частных форм, кроме $\{h0\bar{h}l\}$, добавляем $\{0k\bar{k}l\}$. Фиг. 2.34

¹⁾ Соотношение между двумя ячейками, показанными на фиг. 2.34 и 2.35, поясняется на фиг. А4.2, а (приложение 4), где рассматриваются общие методы преобразования индексов плоскостей и направлений одного и того же кристалла при различном выборе элементарных ячеек.

показывает, что если пользоваться ромбоэдрической ячейкой, то у двух форм $\{10\bar{1}1\}$ и $\{01\bar{1}1\}$ индексы получаются разными, так как грань, лежащая над $(00\bar{1})$ на проекции на фиг. 2.34, будет иметь индексы $(22\bar{1})$.

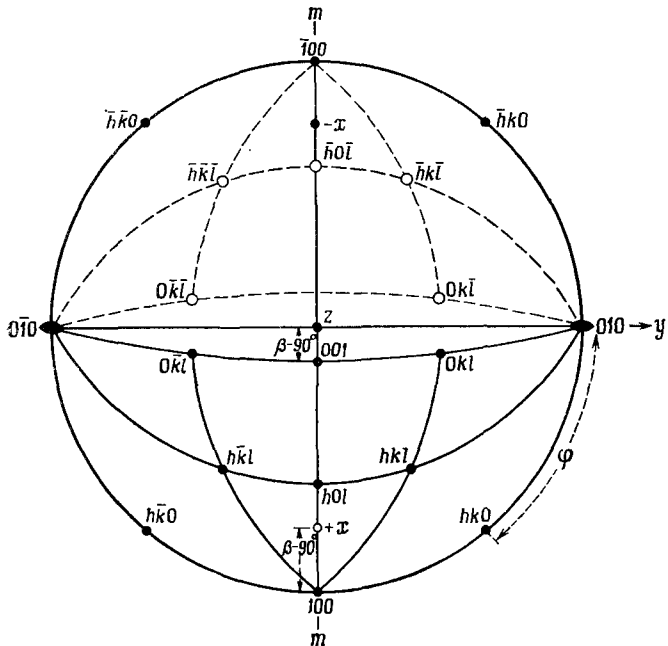
Остальные точечные группы тригональной сингонии показаны на фиг. 2.24. В классах 3 и $\bar{3}$ нет ни зеркальных плоскостей, ни двойных осей. В классе $3m$ есть три плоскости симметрии, пересекающиеся вдоль тройной оси; оси x , y и z гексагональной ячейки выбираются перпендикулярно этим плоскостям симметрии. В классе 32 оси второго порядка перпендикулярны тройной оси; их выбирают в качестве кристаллографических координатных осей. Если три плоскости симметрии пересекаются по инверсионной тройной оси, как в классе $\bar{3}m$, тогда перпендикулярно плоскостям симметрии автоматически возникают двойные оси; эти оси второго порядка выбираются в качестве осей x , y и z . Класс $3/m$ входит в гексагональную систему, так как $3/m$ эквивалентно $\bar{6}$.

2.10. Моноклинные системы

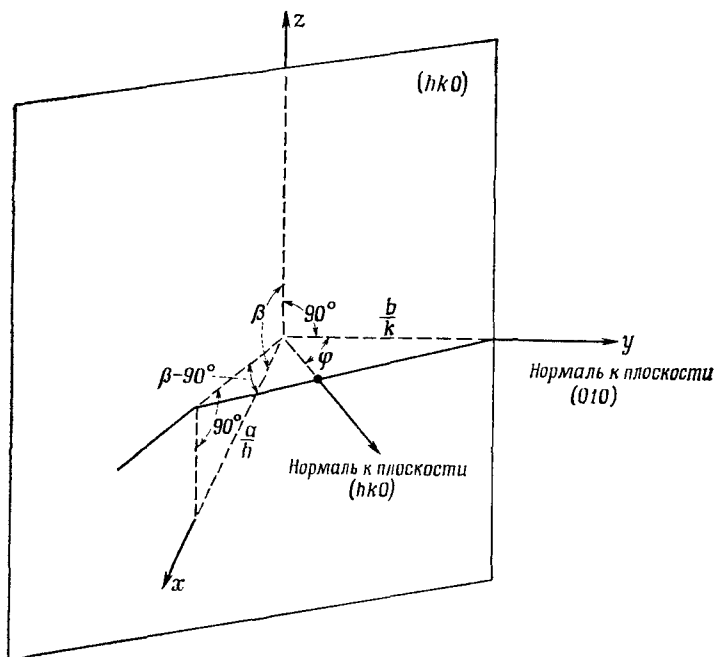
В моноклиновой системе кристаллы обладают единственной осью симметрии второго порядка. Так как плоскость симметрии эквивалентна инверсионной оси второго порядка, класс m ($\equiv \bar{2}$) попадает в эту же систему. Как показывает фиг. 2.24, моноклинные точечные группы можно вывести несколькими путями (например, можно выбрать двойную ось перпендикулярно оси первого порядка или принять двойную ось за ось x). Мы будем описывать точечные группы моноклиновой системы, приняв ось симметрии второго порядка за координатную ось y , чтобы имелось соответствие между фиг. 1.19, b и c и фиг. 2.24 (группы, приведенные в левой нижней части фигуры). Стороны моноклиновой элементарной ячейки в общем случае не равны друг другу; $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta > 90^\circ$. На фиг. 2.37 показаны элементы симметрии голосимметрической точечной группы $2/m$. На стереографической проекции совпадают полюс (010) и ось y . Направление $[001]$, т. е. ось z , проходит через центр основного круга, так что плоскость (100) лежит на основной окружности и отстоит на 90° от (010) . Ось x , т. е. направление $[100]$, находится в нижнем полушарии. β — это угол между $[001]$ и $[100]$, а угол между $[001]$ и (001) равен $(\beta - 90^\circ)$ и, конечно, равен углу между (100) и $[100]$. Полюса типа $\{hk0\}$ лежат на основном круге. Полюс $(hk0)$ лежит под углом φ к (010) ; φ дается выражением

$$\operatorname{ctg} \varphi = \frac{(a/h) \sin \beta}{(b/k)}$$

(см. фиг. 2.38). Множитель $\sin \beta$ появляется потому, что нормали к $(hk0)$ и (010) и ось x не лежат в одной плоскости. В классе $2/m$



Ф и г. 2.37. Элементы симметрии голоэдрического класса $2/m$ моноклинной системы.



Ф и г. 2.38. Чертеж, показывающий, как можно определить угол φ (фиг. 2.37), зная индексы плоскости (hko) .

единственной частной формой, помимо $\{010\}$, является $\{h0l\}$; ее кратность составляет 2. Две грани этой простой формы параллельны между собой, обе перпендикулярны плоскости симметрии и параллельны двойной оси. Общая форма $\{hkl\}$; ее кратность равна 4 (фиг. 2.37). Кроме того, общими формами являются $\{hk0\}$ и $\{0kl\}$.

Еще две точечные группы моноклинной системы — 2 и m . Снова (в обоих классах) частными формами являются $\{010\}$ и $\{h0l\}$. Однако в классе 2 нет центра симметрии, поэтому $\{010\}$ и $\{0\bar{1}0\}$ нужно считать разными частными формами.

2.11. Триклинная система

Ни в одной из точечных групп этой системы нет частных форм. Элементарная ячейка представляет собой обычный параллелепипед. Построение стереографической проекции может быть выполнено с помощью фиг. 2.39, *a* и *б*. Этот чертеж носит самый общий характер и годится для любой кристаллической системы, более симметричной, чем триклинная, если взять соответствующие значения осевых углов и равные периоды решетки. На фиг. 2.39, *б* показана плоскость (hkl) ; углы, отмеченные на фиг. 2.39, *б*, легко связать с углами, отмеченными на фиг. 2.39, *a*: замечаем, что φ_1 есть плоский угол между осью y и следом плоскости (hkl) на плоскости (001) и в то же время — угол между зоной, содержащей (hkl) и (001) , и зоной, содержащей (001) и (100) . Мы можем, следовательно, отметить φ_1 на проекции. Аналогично φ_5 есть плоский угол на плоскости (100) и в то же время — угол между зоной, содержащей (hkl) и (100) , и зоной, содержащей (100) и (010) . Угол φ_5 тоже можно отметить на проекции. Продолжая в том же духе, можно отметить все углы от φ_1 до φ_6 . Из фиг. 2.39, *a* имеем

$$\alpha = 180^\circ - (\varphi_5 + \varphi_6),$$

$$\beta = 180^\circ - (\varphi_3 + \varphi_4),$$

$$\gamma = 180^\circ - (\varphi_1 + \varphi_2).$$

Из плоского треугольника на грани (001) (фиг. 2.39, *б*) имеем

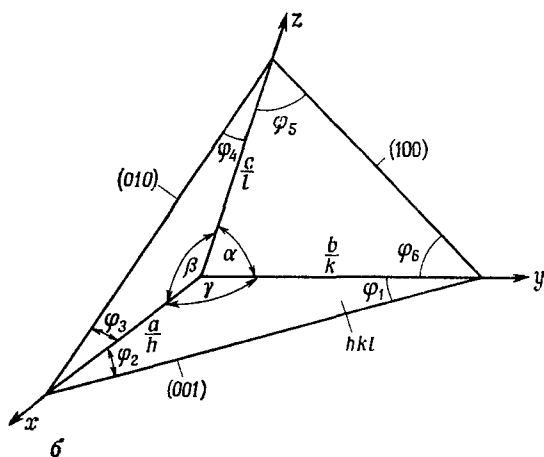
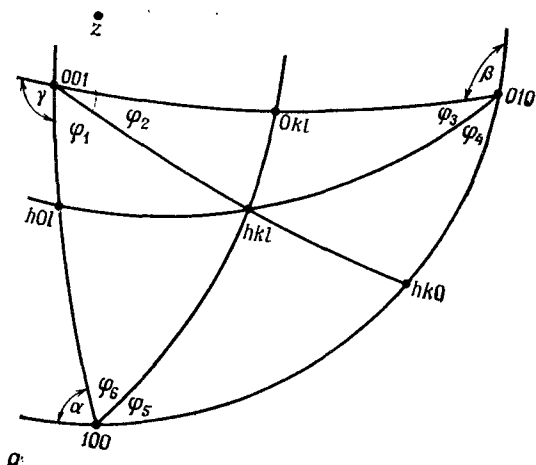
$$\frac{a}{h} \sin \varphi_2 = \frac{b}{k} \sin \varphi_1, \text{ или } \frac{a/h}{b/k} = \frac{\sin \varphi_1}{\sin \varphi_2}, \quad (2.6a)$$

и аналогично из других треугольников

$$\frac{c/l}{b/k} = \frac{\sin \varphi_6}{\sin \varphi_5} \quad (2.6б)$$

и

$$\frac{a/h}{c/l} = \frac{\sin \varphi_4}{\sin \varphi_3}. \quad (2.6в)$$



Ф и г. 2.39. Построение стереографической проекции кристалла триклинной системы.

a — часть проекции; b — углы, образуемые плоскостью (hkl) с осями x , y и z и гранями (100) , (010) и (001) .

Эти соотношения и правило сложения зон, рассмотренное на стр. 82, позволяют вывести дополнительные грани и, следовательно, начертить полную проекцию. Уравнения (2.6) можно также использовать для нахождения осевых отношений и осевых углов по экспериментально измеренным углам между плоскостями.

2.12. Энантиоморфные классы кристаллов

В некоторых классах кристаллов могут существовать кристаллы правой и левой модификаций, которые несовместимы друг с другом в том же смысле, в каком несовместимы правая и левая руки человеческого тела. Это имеет место, если кристалл не обладает элементами симметрии второго рода, т. е. когда у него нет ни плоскостей симметрии, ни инверсионно-поворотных осей какого бы то ни было порядка. Имется одиннадцать таких классов, а именно: 1, 2, 3, 4, 6, 23, 222, 32, 422, 622 и 432.

2.13. Классы Лауэ

При исследовании кристаллов некоторыми физическими методами невозможно определить, есть в кристалле центр симметрии или нет. Классом Лауэ называется класс кристаллов, к которому будет принадлежать данный кристалл, если к уже существующим у него элементам симметрии добавить центр симметрии. Одиннадцать классов Лауэ приведены в табл. 2.1.

Таблица 2.1

Классы Лауэ

Система	Классы	Класс Лауэ
Кубическая	432, $\bar{4}3m$, $m\bar{3}m$	$m\bar{3}m$
	23, $m\bar{3}$	$m\bar{3}$
Гексагональная	622, $6mm$, $\bar{6}m2$, $6/mmm$	$6/mmm$
	6, $\bar{6}$, $6/m$	$6/m$
Тетрагональная	422, $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$	$4/mmm$
	4, $\bar{4}$, $4/m$	$4/m$
Тригональная	32, $3m$, $\bar{3}m$	$\bar{3}m$
	3, $\bar{3}$	$\bar{3}$
Ромбическая	222, $mm2$, mmm	mmm
Моноклиная	2, m , $2/m$	$2/m$
Триклиная	1, $\bar{1}$	$\bar{1}$

2.14. Пространственные группы

В разд. 1.4 мы отмечали, что повторение объекта (например, атома или группы атомов) в кристалле происходит с помощью операций вращения, отражения (или инверсии) и трансляции. Мы описали совместимые сочетания вращений и инверсий, а в разделе 1.8 — возможные трансляции, которые могут встречаться

в кристаллах. До сих пор мы не касались сочетаний операций вращения (и инверсии) с трансляциями, если не считать кратких замечаний в разд. 1.5. Полное описание симметрии кристаллов включает описание того, каким образом все элементы симметрии распределены в пространстве. Это называется *пространственной группой*. Имеется 230 различных кристаллографических пространственных групп, и каждая группа дает полнейшее описание элементов симметрии, присутствующих в кристалле, обладающем этой пространственной группой.

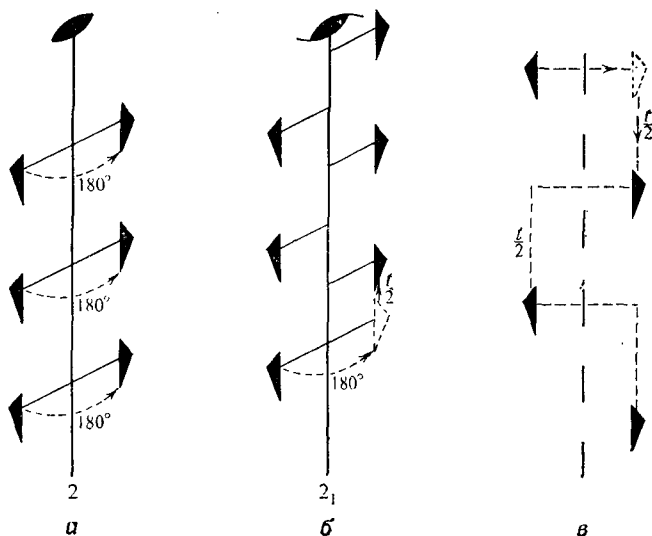
Простые и инверсионные поворотные оси, возможные в кристаллах, обсуждались в разд. 2.4, а возможные трансляции — в разделе 1.8. В описании тех способов, какими эти оси могут совместно сочетаться с трансляцией, и состоит описание возможных пространственных групп. Пространственные группы играют очень важную роль при расшифровке кристаллических структур. При обсуждении несовершенств в кристаллах они практически не используются, поэтому мы лишь очень кратко рассмотрим некоторые вопросы теории пространственных групп в связи с описанием кристаллических структур.

Прежде всего рассмотрим некоторые новые элементы симметрии, которые встречаются в кристаллах.

Если повторение объекта в кристалле происходит путем поворота на определенный угол вокруг оси и одновременного перемещения (трансляции) в направлении, параллельном этой оси, операция симметрии соответствует наличию так называемой *винтовой оси*. Аналогичным образом повторение путем отражения в плоскости симметрии может сочетаться с компонентой трансляции, параллельной этой плоскости, что дает *плоскость скользящего отражения*. Если в кристалле имеется, скажем, двойная ось симметрии, это означает, что некоторая структурная единица, или мотив, располагается вокруг этого направления так, что повторяется при повороте на 180° вокруг этой оси. Конфигурация, показанная на фиг. 2.40, а, соответствует простой поворотной оси симметрии второго порядка. Однако поворот на 180° может сочетаться с трансляцией на половину периода повторяемости решетки в направлении оси, что дает винтовую ось второго порядка, показанную на фиг. 2.40, б; она обозначается символом 2_1 . Трансляция на $t/2$ по величине того же порядка, что и периоды решетки кристалла, т. е. порядка нескольких ангстрем (10^{-8} см), и поэтому ее совершенно невозможно обнаружить невооруженным глазом. Операция повторения под действием плоскости скользящего отражения показана на фиг. 2.40, в. Снова величина трансляции будет порядка периодов решетки. В макроскопических свойствах кристалла, обладающего осью 2_1 , например, в его огранке или в анизотропии его некоторых физических свойств, должна, следовательно, проявляться простая двойная ось, а не 2_1 . Аналогично

плоскость скользящего отражения на фиг. 2.40, в будет проявляться макроскопически как обычная плоскость симметрии.

Хотя наличие винтовой оси, скажем второго порядка, как на фиг. 2.40, б, указывает на существование идентичных атомных мотивов, расположенных вокруг этой оси так, что они связаны поворотом с одновременной трансляцией, не следует думать, что действие винтовой оси смещает вектора трансляции решетки.



Ф и г. 2.40. Повторение объекта под действием поворотных осей и плоскости скользящего отражения.

а — простая ось второго порядка; б — винтовая ось второго порядка; в — плоскость скользящего отражения, перпендикулярная плоскости чертежа (штриховая линия).

Винтовая ось и простая поворотная ось одного и того же порядка n повторяют трансляцию одинаково. Отсюда следует, что поворотные компоненты винтовой оси могут быть только $2\pi/1$, $2\pi/2$, $2\pi/3$, $2\pi/4$ и $2\pi/6$ и что винтовые и простые поворотные оси n -го порядка должны быть расположены одинаково относительно одинаковых групп трансляций. Углы между винтовыми осями и между винтовыми и простыми поворотными осями должны быть, следовательно, такими же, как допускаемые в сочетаниях простых осей симметрии (табл. 1.2).

Для отыскания возможных совместимых сочетаний операций вращения и трансляции можно исходить из какой-либо точечной группы и ассоциировать элементы симметрии этой точечной группы с каждым узлом решеток, совместимых с этой точечной группой.

Таблица 2.2

Винтовые оси симметрии в кристаллах

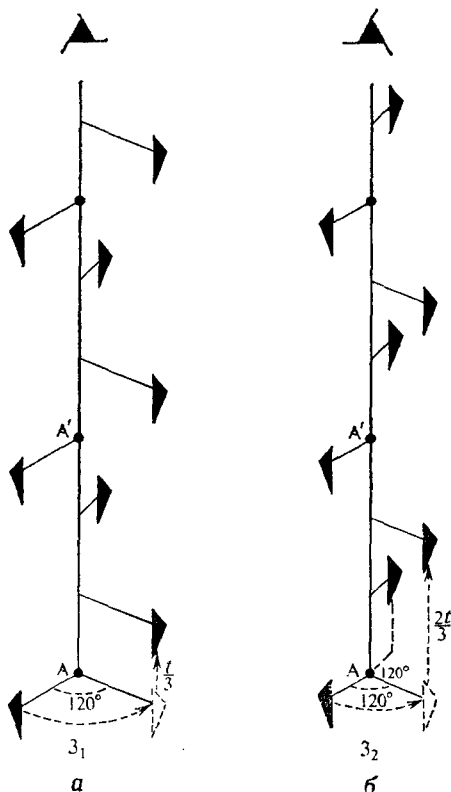
Наименования осей	Символы осей	Графическое обозначение	Трансляция 1)
Двойная винтовая	2_1		$1/2$
Тройные винтовые	3_1		$1/3$
	3_2		$2/3$
Четверные винтовые	4_1		$1/4$
	4_2		$2/4 = 1/2$
	4_3		$3/4$
Шестерные винтовые	6_1		$1/6$
	6_2		$2/6 = 1/3$
	6_3		$3/6 = 1/2$
	6_4		$4/6 = 2/3$
	6_5		$5/6$ 1)

1) В единицах периода идентичности вдоль оси правозаходного винта.

Это даст нам 72 пространственные группы ¹⁾. Затем можно рассмотреть, что произойдет при замене простых поворотных осей винтовыми и зеркальных плоскостей плоскостями скользящего отражения. Можно показать, что в целом это даст нам 230 различных пространственных групп.

¹⁾ Из 14 решеток Браве (фиг. 1.19) и 32 точечных групп (фиг. 2.24) можно таким образом получить 66 пространственных групп. Шесть дополнительных групп возникают из-за вариантов, в которых автоматически возникающие плоскости скользящего отражения или винтовые оси различны для различных ориентаций точечной группы относительно решетки; например, в тетрагональной системе сочетания $I\bar{4}m2$ и $I\bar{4}2m$ порождают различные пространственные группы.

Возможные типы винтовых осей приведены в табл. 2.2. Винтовая ось порядка n_N соответствует повторению объекта при повороте на $360^\circ/n$ с одновременной трансляцией на tN/n , где t — вектор повторяемости решетки в направлении оси. Имеется пять типов шестерных винтовых осей. Например, 6_1 означает поворот на 60°



Ф и г. 2.41. Действие винтовых осей третьего порядка. а — действие оси 3_1 ; б — действие оси 3_2 .

и трансляцию на $t/6$, а 6_5 соответствует повороту на 60° и трансляции на $5t/6$. С помощью схемы легко показать, что оси $6_1, 4_1, 6_2$, эквивалентны осям $6_5, 4_3, 6_4$ (соответственно) с противоположным направлением захода винта, т. е. правовинтовая ось 6_1 равноценна левовинтовой оси 6_5 и т. д. На фиг. 2.41 приведена схема для случая осей 3_1 и 3_2 . Здесь A и A' — узлы рассматриваемой решетки. Операция 3_1 (фиг. 2.41, а) пусть будет правой. Заметим, что, когда объект преобразуется симметричным действием оси 3_2 , он попадает и на высоту $4/3$ и на высоту $1/3$, так как точки A и A' обе — узлы решетки, а узор тянется бесконечно в направлении, параллельном AA' . Необходимо также отметить, что винтовые

оси 4_2 и 6_3 равноценны чисто поворотным осям 2 и 3 соответственно, а оси 6_2 и 6_4 содержат поворотные оси второго порядка.

Плоскости скользящего отражения называются *координатными плоскостями* в том случае, если трансляция, параллельная зеркальной плоскости, параллельна какой-либо из осей элементарной ячейки и равна $1/2$ периода решетки в этом направлении. Координатные плоскости скользящего отражения обозначаются символами a , b или c соответственно направлениям трансляции. *Диагональные плоскости скользящего отражения* (или *клиноплоскости*) включают трансляцию на $1/2$ диагонали грани или объемной диагонали (последнее — в тетрагональных и кубических кристаллах) и обозначаются символом n . Существует еще один тип диагональных плоскостей скольжения — так называемые алмазные плоскости со скольжением на $1/4$ диагонали грани, а в тетрагональной и кубической системах — также на $1/4$ объемной диагонали элементарной ячейки. Эти плоскости обозначаются символом d .

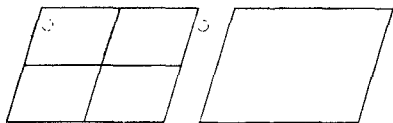
Символ пространственной группы показывает, что пространственные группы получаются, если совместить элементы симметрии точечной группы с каждым узлом соответствующей решетки Бравэ. Так, $Fm\bar{3}m$ означает гранецентрированную кубическую решетку, с каждым узлом которой ассоциируется точечная группа $m\bar{3}m$; $R6_3/mmc$ означает гексагональную примитивную решетку, которая выводится из $R6/mmm$ путем замены шестерной поворотной оси винтовой осью 6_3 , а одной из зеркальных плоскостей плоскостью скользящего отражения c . Точечная симметрия групп $R6_3/mmc$ и $R6/mmm$ одинакова. Симметрия точечной группы любого кристалла выводится непосредственно из символа пространственной группы заменой в нем винтовых осей соответствующими простыми поворотными осями и плоскостей скользящего отражения зеркальными плоскостями.

Распределение всех элементов симметрии в 230 пространственных группах приводится в исключительно ясной форме в Международных таблицах по рентгеновской кристаллографии [2].

На фиг. 2.42 приведены семнадцать двумерных пространственных групп (или групп плоской симметрии) в том виде, в каком они даны в Международных таблицах [2]. Мы кратко рассмотрим их сейчас для того, чтобы проиллюстрировать некоторые моменты, затронутые выше в данном разделе. Если читатель сумеет хорошо понять плоские группы, то разобраться в таблицах трехмерных пространственных групп ему не составит труда.

Пространственные группы получаются приложением симметрии точечных групп к конечным решеткам, причем принимается во внимание возможность трансляционной симметрии. В двух измерениях имеется пять решеток, или плоских сеток; они показаны на фиг. 1.15. Мы обозначим символом p примитивные и символом c центрированные решетки. Обозначения осей и пло-

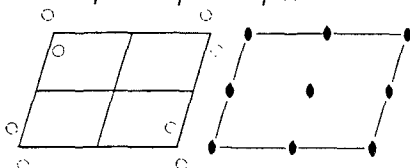
№1 p1 1 Параллелограмматическая



Начало координат на оси 1
Координаты эквивалентных позиций:

$$1 \quad 1 \quad x, y$$

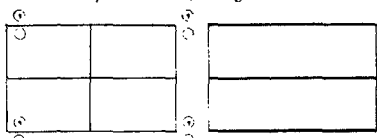
№2 p2 2 Параллелограмматическая



Начало координат в точке выхода оси 2
Координаты эквивалентных позиций:

$$\begin{aligned} 2 \quad 1 \quad x, y; \bar{x}, \bar{y} \\ 1 \quad 2 \quad \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \\ 1 \quad 2 \quad \frac{1}{2}, 0 \\ 1 \quad 2 \quad 0, \frac{1}{2} \\ 1 \quad 2 \quad 0, 0 \end{aligned}$$

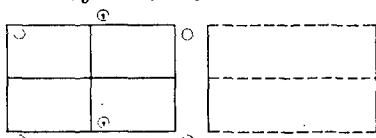
№3 pт т Прямоугольная



Начало координат на т
Координаты эквивалентных позиций:

$$\begin{aligned} 2 \quad 1 \quad x, y; \bar{x}, y \\ 1 \quad т \quad \frac{1}{2}, y \\ 1 \quad т \quad 0, y \end{aligned}$$

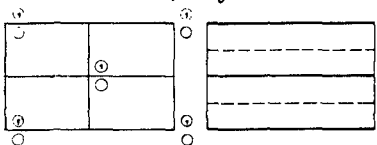
№4 рg т Прямоугольная



Начало координат на g
Координаты эквивалентных позиций:

$$2 \quad 1 \quad x, y; \bar{x}, \frac{1}{2} + y$$

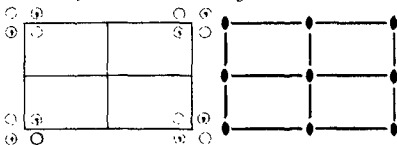
№5 ст т Прямоугольная



Начало координат на т
Координаты эквивалентных позиций:

$$\begin{aligned} (0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) + \\ 4 \quad 1 \quad x, y; \bar{x}, y \\ 2 \quad т \quad 0, y \end{aligned}$$

№6 ртт тт Прямоугольная



Начало координат в точке 2тт
Координаты эквивалентных позиций:

$$\begin{aligned} 4 \quad 1 \quad x, y; \bar{x}, y; \bar{x}, \bar{y}; x, \bar{y} \\ 2 \quad т \quad \frac{1}{2}, y; \frac{1}{2}, \bar{y} \\ 2 \quad т \quad 0, y; 0, \bar{y} \\ 2 \quad т \quad x, \frac{1}{2}; \bar{x}, \frac{1}{2} \\ 2 \quad т \quad x, 0; \bar{x}, 0 \\ 1 \quad тт \quad \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \\ 1 \quad тт \quad \frac{1}{2}, 0 \\ 1 \quad тт \quad 0, \frac{1}{2} \\ 1 \quad тт \quad 0, 0 \end{aligned}$$

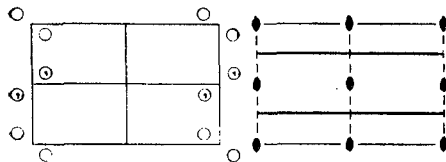
Ф и г. 2.42. Семнадцать двумерных пространственных групп [2].

На каждом чертеже указаны (слева направо): 1) номер по порядку; 2) сокращенный международный символ (см. табл. 2.4); 3) точечная группа; 4) тип решетки.

Под чертежами указано положение начала координат, а в столбцах (слева направо): 1) число эквивалентных позиций; 2) точечная группа симметрии этих позиций и 3) координаты эквивалентных позиций.

Координаты позиций x и y выражаются в единицах, равных длине соответствующих ребер элементарной ячейки (т. е. периодам решетки вдоль осей x и y).

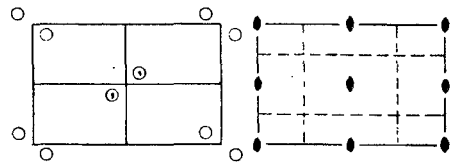
№7 pтг тт Прямоугольная



Начало координат в точке выхода оси 2
Координаты эквивалентных позиций:

- | | | |
|---|-----|------------------------------------------------------------------------|
| 4 | 1 | $x, y; \bar{x}, \bar{y}; \frac{1}{2} + x, \bar{y}; \frac{1}{2} - x, y$ |
| 2 | m | $\frac{1}{2}, y; \frac{1}{2}, \bar{y}$ |
| 2 | 2 | $0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ |
| 2 | 2 | $0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ |

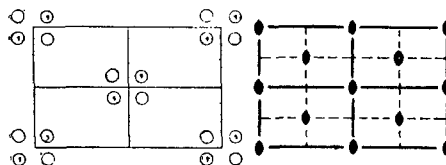
№8 pдг тт Прямоугольная



Начало координат в точке выхода оси 2
Координаты эквивалентных позиций:

- | | | |
|---|---|----------------------------------------------------------------------------------------------|
| 4 | 1 | $x, y; \bar{x}, \bar{y}; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y$ |
| 2 | 2 | $\frac{1}{2}, 0; 0, \frac{1}{2}$ |
| 2 | 2 | $0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ |

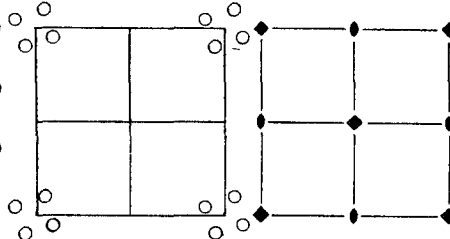
№9 стт тт Прямоугольная



Начало координат в точке пересечения 2тт
Координаты эквивалентных позиций:

- | | | |
|---------------------------------------|-----|--------------------------------------------------------------------------------|
| (0, 0; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$) + | | |
| 8 | 1 | $x, y; \bar{x}, \bar{y}; y, \bar{x}; \bar{y}, x; \bar{x}, \bar{y}; x, \bar{y}$ |
| 4 | m | $0, y; 0, \bar{y}$ |
| 4 | m | $x, 0; \bar{x}, 0$ |
| 4 | 2 | $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$ |
| 2 | тт | $0, \frac{1}{2}$ |
| 2 | тт | $0, 0$ |

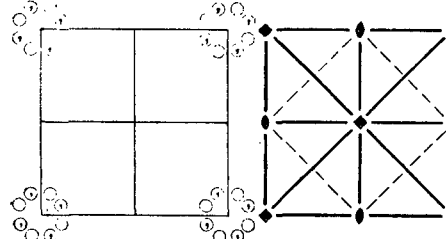
№10 р4 4 Квадратная



Начало координат в точке выхода оси 4
Координаты эквивалентных позиций:

- | | | |
|---|---|--------------------------------------------------|
| 4 | 1 | $x, y; \bar{x}, \bar{y}; y, \bar{x}; \bar{y}, x$ |
| 2 | 2 | $\frac{1}{2}, 0; 0, \frac{1}{2}$ |
| 1 | 4 | $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ |
| 1 | 4 | $0, 0$ |

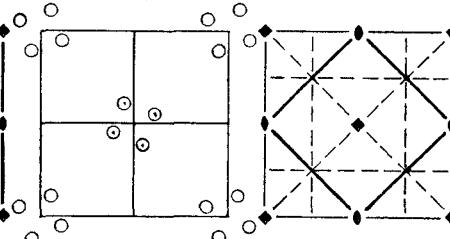
№11 р4т 4тт Квадратная



Начало координат в точке пересечения 4тт
Координаты эквивалентных позиций:

- | | | |
|---|-----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 8 | 1 | $x, y; \bar{x}, \bar{y}; y, \bar{x}; \bar{y}, x; \bar{x}, \bar{y}; x, \bar{y}; \bar{y}, y; x, \bar{x}$ |
| 4 | m | $x, x; \bar{x}, \bar{x}; x, \bar{x}; x, \bar{x}$ |
| 4 | m | $x, \frac{1}{2}; \bar{x}, \frac{1}{2}; x, \frac{1}{2}; \bar{x}, \frac{1}{2}$ |
| 4 | m | $x, 0; \bar{x}, 0; x, 0; \bar{x}, 0$ |
| 2 | тт | $\frac{1}{2}, 0; 0, \frac{1}{2}$ |
| 1 | 4тт | $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ |
| 1 | 4тт | $0, 0$ |

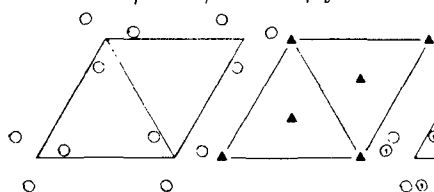
№12 р4д 4тт Квадратная



Начало координат в точке выхода оси 4
Координаты эквивалентных позиций:

- | | | |
|---|-----|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 8 | 1 | $x, y; y, \bar{x}; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y; \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - x; \bar{x}, \bar{y}; \bar{y}, x; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y; \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + x$ |
| 4 | m | $x, \frac{1}{2} + x; \bar{x}, \frac{1}{2} - x; \frac{1}{2} + x, \bar{x}; \frac{1}{2} - x, x$ |
| 2 | тт | $\frac{1}{2}, 0; 0, \frac{1}{2}$ |
| 2 | 4 | $0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ |

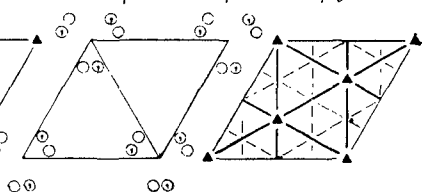
№13 p3 3 Правильная треугольная



Начало координат в точке выхода оси 3
Координаты эквивалентных позиций:

3	1	$x, y; \bar{y}, x - y; y - x, \bar{x}$
1	3	$\frac{2}{3}, \frac{1}{3}$
1	3	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}$
1	3	0, 0

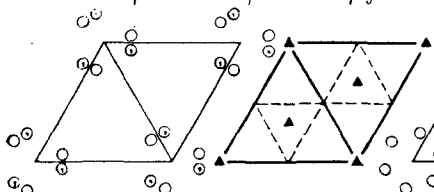
№14 p3m1 3т Правильная треугольная



Начало координат в точке пересечения 3т
Координаты эквивалентных позиций:

6	1	$x, y; \bar{y}, x - y; y - x, \bar{x};$ $x, x - y; y - x, y; \bar{y}, \bar{x}$
3	m	$x, \bar{x}; x, 2x; 2\bar{x}, \bar{x}$
1	3т	$\frac{2}{3}, \frac{1}{3}$
1	3т	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}$
1	3т	0, 0

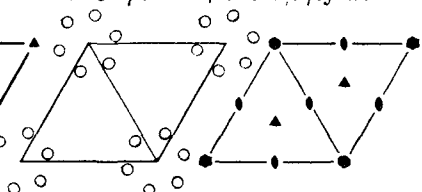
№15 p31т 3т Правильная треугольная



Начало координат в точке пересечения 31т
Координаты эквивалентных позиций:

6	1	$x, y; \bar{y}, x - y; y - x, \bar{x};$ $y, x; \bar{x}, y - x; x - y, \bar{y}$
3	m	$x, 0; 0, x; \bar{x}, \bar{x}$
2	3	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}; \frac{2}{3}, \frac{1}{3}$
1	3т	0, 0

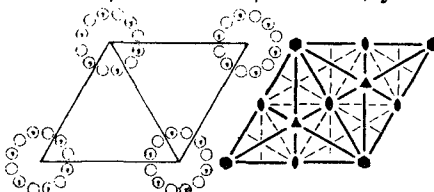
№16 p6 6 Правильная треугольная



Начало координат в точке выхода оси 6
Координаты эквивалентных позиций:

6	1	$x, y; \bar{y}, x - y; y - x, \bar{x};$ $\bar{x}, \bar{y}; y, y - x; x - y, x$
3	2	$\frac{1}{3}, 0; 0, \frac{1}{3}; \frac{1}{3}, \frac{1}{3}$
2	3	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}; \frac{2}{3}, \frac{1}{3}$
1	6	0, 0

№17 p6тt 6тт Правильная треугольная



Начало координат в точке пересечения 6тт
Координаты эквивалентных позиций:

12	1	$x, y; \bar{y}, x - y; y - x, \bar{x}; y, x; \bar{x}, y - x;$ $x - y, \bar{y}; \bar{x}, \bar{y}; y, y - x; x - y, x;$ $\bar{y}, \bar{x}; x, x - y; y - x, y$
6	m	$x, \bar{x}; x, 2x; 2\bar{x}, \bar{x}; \bar{x}, x; \bar{x}, 2\bar{x}; 2x, x$
6	m	$x, 0; 0, x; \bar{x}, \bar{x}; \bar{x}, 0; 0, \bar{x}; x, x$
3	ттt	$\frac{1}{3}, 0; 0, \frac{1}{3}; \frac{1}{3}, \frac{1}{3}$
2	3т	$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}; \frac{2}{3}, \frac{1}{3}$
1	6ттt	0, 0

Сводная таблица частных простых форм всех кристаллических классов ¹⁾

(Ориентация осей — принятая в данной главе; моноклинные кристаллы — в установке, показанной на фиг. 2.24
внизу слева; тригональные кристаллы — в гексагональных осях. В триклинной системе частных простых форм нет)

Класс 2 010, 0 $\bar{1}$ 0, $h0l$	Класс 32 0001, 10 $\bar{1}$ 0, 2 $\bar{1}$ 10, 11 $\bar{2}$ 0, $hk0$, $h0\bar{h}l$, 0 $\bar{k}kl$, $hh2\bar{h}l$, 2 $h\bar{h}\bar{h}l$	Класс 6 $m\bar{m}$ 0001, 000 $\bar{1}$, 10 $\bar{1}$ 0, 11 $\bar{2}$ 0, $hk0$, $h0\bar{h}l$, $hh2\bar{h}l$
Классы m и $2/m$ 010, $h0l$	Класс 4 001, 00 $\bar{1}$, $hk0$	Класс $\bar{6}m2$ 0001, 10 $\bar{1}$ 0, 0 $\bar{1}$ 10, 11 $\bar{2}$ 0, $hk0$, $h0\bar{h}l$, 0 $\bar{k}kl$, $hh2\bar{h}l$
Класс $m\bar{m}2$ 001, 00 $\bar{1}$, 100, 010, $hk0$, $h0l$, 0 $\bar{k}l$	Классы $\bar{4}$ и $4/m$ 001, $hk0$	Классы 622 и 6 $m\bar{m}m$ 0001, 10 $\bar{1}$ 0, 11 $\bar{2}$ 0, $hk0$, $h0\bar{h}l$, $hh2\bar{h}l$
Классы 222 и $m\bar{m}m$ 100, 010, 001, $hk0$, $h0l$, 0 $\bar{k}l$	Класс 4 $m\bar{m}$ 001, 00 $\bar{1}$, 100, 110, $hk0$, $h0l$, hhl	Класс 23 100, 110, $hk0$, $kh0$, 111, 111, hll , $h\bar{l}l$, hhl , $h\bar{h}l$
Класс 3 0001, 000 $\bar{1}$, $hk0$	Класс $\bar{4}2m$ 001, 100, 110, $hk0$, $h0l$, hhl , $h\bar{h}l$	Класс $m\bar{3}$ 100, 110, $hk0$, $kh0$, 111, hll , hhl

<p>Класс $\bar{3}$ 0001, $hki0$</p>	<p>Классы 422 и 4/mmm 001, 100, 110, $hk0$, $h0l$, hhl</p>	<p>Класс $\bar{4}3m$ 100, 110, $hk0$, 111, $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$, hll, $h\bar{l}\bar{l}$, hhl, $h\bar{h}\bar{l}$</p>
<p>Класс $3m$ 0001, 000$\bar{1}$, 10$\bar{1}0$, 0110, 11$\bar{2}0$, $hki0$, $h0\bar{h}l$, $Okkl$, $hh2hl$</p>	<p>Класс 6 0004, 000$\bar{1}$, $hki0$</p>	<p>Класс 432 100, 110, $hk0$, 111, hll, hhl</p>
<p>Класс $\bar{3}m$ 0001, 10$\bar{1}0$, 11$\bar{2}0$, $hki0$, $h0\bar{h}l$, $Okkl$, $hh\bar{2}hl$</p>	<p>Классы $\bar{6}$ и $6/m$ 0004, $hki0$</p>	<p>Класс $m\bar{3}m$ 100, 110, $hk0$, 111, hll, hhl</p>

1) Для упрощения таблицы символы простых форм даны без фигурных скобок.-Прим. ред.

скостей симметрии примем такими же, как в разд. 2.4. Единственный дополнительный элемент симметрии в двух измерениях — это линия скользящего отражения (g), которая на фиг. 2.42 обозначается штриховой линией. Этот элемент симметрии включает отражение и трансляцию на $1/2$ периода повторяемости сетки в направлении, параллельном линии.

Пространственные группы, которые возникают в результате комбинации двумерных решеток и *двумерных точечных групп*,

Таблица 2.4

Двумерные решетки, точечные группы и пространственные группы

Система и символ решетки	Точечная группа	Символ пространственной группы		Номер пространственной группы
		полный	краткий	
Параллелограмматическая; p (примитивная)	1	$p1$	$p1$	1
	2	$p211$	$p2$	2
Прямоугольная; p (примитивная) и c (центрированная)	m	$p1m1$	pm	3
		$p1g1$	pg	4
		$c1m1$	cm	5
	$2mm$	$p2mm$	pmg	6
		$p2mg$	pgg	7
		$p2gg$ $c2mm$	pgg cmg	8 9
Квадратная; p	4	$p4$	$p4$	10
	$4mm$	$p4mm$	$p4m$	11
		$p4gm$	$p4g$	12
Правильная треугольная (гексагональная); p	3	$p3$	$p3$	13
	$3m$	$p3m1$	$p3m1$	14
		$p31m$	$p31m$	15
	6	$p6$	$p6$	16
	$6mm$	$p6mm$	$p6m$	17

Замечание: Две различные группы $p3m1$ и $p31m$ соответствуют двум различным ориентировкам точечной группы по отношению к решетке. В остальных случаях от этого не получаются различные группы.

приведены в табл. 2.4. Пространственные группы показаны, кроме того, в виде схем на фиг. 2.42. На всех чертежах ось x направлена вниз, а ось y горизонтальна; за положительное направление оси y принято направление вправо. На каждом чертеже слева показаны эквивалентные общие позиции пространственной группы, т. е. полный набор позиций, получаемых под действием

элементов симметрии данной пространственной группы на одну исходную позицию, выбранную произвольным образом. Полное число общих позиций равно числу позиций, заключающихся в элементарной ячейке, но для того, чтобы показать симметрию узла, приведены также окружающие позиции. Правый чертеж иллюстрирует группу пространственно расположенных операторов симметрии, т. е. истинную пространственную (плоскую) группу.

Под каждым из чертежей на фиг. 2.42, кроме общих позиций, указаны также частные позиции. Это позиции, расположенные на некоторых операторах симметрии; повторение этих исходных точек дает меньшее число эквивалентных позиций, чем в общем случае. Для каждой частной позиции приводится, кроме того, ее симметрия.

Группа $p1$ получается при сочетании параллелограмматической сетки с поворотной осью симметрии первого порядка. Частные позиции в элементарной ячейке отсутствуют. Группа $p2$ возникает при сочетании параллелограмматической сетки и поворотной симметрии второго порядка. Наличие зеркальной плоскости симметрии *требует* прямоугольной сетки (разд. 1.5), и, если эта сетка сочетается с *единственной* плоскостью симметрии, получается пространственная группа pm (№ 3). Точки \bigcirc и \odot зеркально симметричны друг другу. Если в pm плоскость симметрии заменить линией скользящего отражения, получим пространственную группу pg (№ 4). В группе № 4 линия скользящего отражения перпендикулярна оси x . Центрированная прямоугольная решетка обязательно обладает линией скользящего отражения (например, как в cm , № 5), но только одной, соответственно плоской точечной группе m . Так как в этом случае сетка является многократно примитивной, в узле $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ обязательно возникает мотив, симметричный узлу $(0, 0)$. Следовательно, эти координаты эквивалентных позиций, будучи добавлены к $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, дают дополнительные эквивалентные позиции. Если с прямоугольной решеткой сочетаются две зеркальные плоскости, пересекающиеся под прямым углом, мы получим двойные оси в точках пересечения этих плоскостей (pmc , № 6). Если одну из зеркальных плоскостей заменить плоскостью g , двойные оси будут лежать посередине между точками их пересечения (pmg , № 7).

Группа stm обязательно включает наличие двух семейств линий скользящего отражения. Символ $p4$ означает квадратную решетку и точечную группу 4; сочетание их обязательно приводит к образованию двойных осей (№ 10), однако зеркальные плоскости не обязательны. Если оси 4 лежат в точках пересечения двух семейств зеркальных плоскостей, мы имеем группу $p4m$, в которой обязательно имеются линии диагонального скольжения. Однако оси 4 могут также лежать на пересечении двух семейств линий скользящего отражения; в этом случае снова возникают два семей-

ства зеркальных плоскостей, но эти плоскости пересекаются по двойным осям, давая в точках пересечения симметрию точечной группы $3m$ (№ 12). Правильная треугольная сетка и точечная группа 3 дают пространственную группу $p3$. Когда с тройной осью сочетаются зеркальные плоскости, т. е. если мы имеем комбинацию точечной группы $3m$ и правильной треугольной сетки, тогда зеркальные плоскости могут располагаться относительно точек сетки двумя различными способами, давая плоские группы $p31m$ и $p3m1$. В случае гексагональной точечной группы $6mm$, которая обязательно имеет два семейства зеркальных плоскостей, аналогичная двойственность не возникает; соответствующие пространственные группы $p6$ и $p6mm$.

Задачи

Для решения задач и выполнения упражнений, начиная с 2.7, может понадобиться материал, рассматриваемый в приложении 1 (разд. А1.1—А1.3), а для упражнения 2.17 — в приложении 4.

2.1. а) Постройте стереографическую проекцию земного шара (такого же радиуса, как на фиг. 2.13, б), при этом северный полюс поместите в центр проекции (тогда экватор будет совпадать с основным кругом). Нанесите меридианы (линии долготы) с интервалом 20° и параллели (линии широты), отвечающие широтам $20, 40, 60$ и 80° . [Напомним, что линии долготы отсчитываются от Гринвичского меридиана (0°), а линии широты — от экватора (т. е. от северного полюса они будут отстоять на $70, 50^\circ$ и т. д.).]

б) Отметьте на вашей проекции полюса следующих городов: Нью-Орлеан (30° с. ш., 90° з. д.) и Калькутты (22° с. ш., 90° в. д.); Кйто (0° с. ш., 79° з. д.) и Дели (29° с. ш., 77° в. д.); Перта (32° ю. ш., 116° в. д.) и Пекина (40° с. ш., 116° в. д.). (Заметим, что полюс Перта, находящегося в южном полушарии, окажется на проекции вне основного круга; чтобы он попал внутрь основного круга, необходимо вести проектирование из северного полюса.)

в) Проведите на стереографической проекции большие круги, соответствующие кратчайшим воздушным путям между указанными парами городов.

2.2. а) Постройте стереографическую проекцию земного шара в такой ориентации, при которой с центром проекции совпадает точка пересечения Гринвичского меридиана с экватором. Нанесите на проекцию линии долготы и широты, как указано в упражнении 2.1.

б) Отметьте на данной проекции полюса городов, указанных в упражнении 2.1. (Заметим, что на этот раз вне основного круга, помимо Перта, окажется еще Пекин.)

в) Проведите на вашей стереографической проекции большие круги, отвечающие кратчайшим путям между указанными парами городов, и сравните с соответствующими большими кругами на полярной проекции, построенной в упражнении 2.1.

г) Определите расстояние между Кйто и Дели (приняв, что радиус Земли равен 6400 км) двумя способами: 1) непосредственно на проекции и 2) используя сетку Вульфа.

д) Самолет должен лететь из Дели в Кйто по кратчайшему пути. Определите пеленг (т. е. угол между меридианом, проходящим через Дели, и дугой большого круга, отвечающей кратчайшему расстоянию между Дели и Кйто) различными способами: 1) измеряя угол между касательными к соответствующим большим кругам, проходящим через Дели; 2) измеряя угол между полюсами этих больших кругов непосредственно на проекции и 3) с помощью сетки Вульфа. Сравните значения, полученные различными способами.

2.3. α -серя образует кристаллы, относящиеся к голоэдрическому классу ромбической системы, с периодами решетками $a = 10,48 \text{ \AA}$, $b = 12,92 \text{ \AA}$ и $c = 24,55 \text{ \AA}$.

а) Начертите (от руки) стереографическую проекцию, показывающую элементы симметрии, которыми обладают кристаллы α -серы.

б) Рассчитайте углы между гранями (001) и (011) ; (100) и (110) . Нанесите полосы этих граней на стереографическую проекцию.

в) Начертите точную стереографическую проекцию α -серы с указанием всех граней следующих простых форм: $\{100\}$, $\{010\}$, $\{001\}$, $\{101\}$, $\{110\}$, $\{111\}$, $\{011\}$ и $\{113\}$. Проецируйте все грани на верхней полусфере. Укажите, какие из приведенных простых форм являются общими и какие частными.

2.4. а) Начертите от руки стереографические проекции, иллюстрирующие действие на два различных полюса (оба в общем положении) следующих элементов симметрии: 1) центра симметрии; 2) вертикальной плоскости симметрии; 3) горизонтальной плоскости симметрии; 4) вертикальных осей симметрии 2, 3, 4, 6; 5) вертикальных инверсионных осей $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$; 6) горизонтальных осей симметрии 2, 4; 7) горизонтальной инверсионной оси $\bar{4}$. Нанесите на эти проекции сами элементы симметрии, за исключением центра симметрии.

б) В обычных обозначениях точечных групп символ \bar{X}/m не используется. Начертите от руки стереографические проекции всех полюсов одной общей формы для каждой возможной оси \bar{X} , при этом напишите общепринятые символы, которые в действительности используются для обозначения данных точечных групп.

2.5. а) Начертите стереографические проекции элементов симметрии и полюсов одной общей формы следующих тригональных классов: 3 ; $\bar{3}$; $3m$; 32 ; $\bar{3}m$.

б) В каком из этих классов ромбоэдр является частной формой? В каком классе ромбоэдр является общей формой?

в) У каких из этих классов есть центр симметрии?

2.6. а) Начертите стереографические проекции элементов симметрии и полюсов одной общей формы следующих тетрагональных классов: 4 ; $\bar{4}$; $4/m$; $4mm$; $\bar{4}2m$; 422 ; $4/mmm$.

б) В каких из этих классов есть центр симметрии?

в) В каких из этих классов имеются закрытые общие формы?

2.7. Докажите правильность выражения (2.5).

2.8. В кристалле ромбической системы (топаз) с отношением осей $a : b : c = 0,529:1:0,477$ были измерены углы, которые грань общей формы P образует с гранями (100) и (010) : $(100) \wedge P = 67^\circ 51'$; $(010) \wedge P = 66^\circ 30'$. Определите индексы грани P .

2.9. В кристалле голоэдрического класса кубической системы угол между гранью (110) и гранью P , которая принадлежит зоне $[010]$, равен $53^\circ 58'$. Найдите индексы грани P и вычислите угол между P и гранью P' , которая получается из P при действии плоскости симметрии, параллельной (110) . Определите индексы $[UVW]$ зоны, содержащей P и P' , и рассчитайте угол между $[UVW]$ и $[1\bar{1}0]$.

2.10. а) Начертите от руки стереографические проекции, показывающие расположение элементов симметрии и полюсов общей формы в следующих классах кубической системы: 23 ; $m\bar{3}$; 432 ; $\bar{4}3m$; $m\bar{3}m$.

б) К какому из этих классов мог бы принадлежать кристалл, если бы он имел форму октаэдра, тетраэдра, тетрагонтриоктаэдра (тетрагонтриоктаэдром называется форма типа $\{hkk\}$, например, $\{112\}$)?

2.11. Возьмем деревянную модель куба и будем по очереди отрезать у нее вершины таким образом, чтобы получались грани $\{111\}$ равной величины; при этом первые четыре грани будем получать в таком порядке: (111) ; $(11\bar{1})$;

($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$); ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$). Начертите стереографические проекции, показывающие расположение элементов симметрии, которыми обладает модель после образования каждой новой грани. К какой кристаллической системе относится модель в каждом случае?

2.12. Рассчитайте угол между направлениями $[0001]$ и $[1\bar{1}\bar{2}3]$ в бериллии (гексагональная система; $a = 2,28 \text{ \AA}$, $c = 3,57 \text{ \AA}$). Какая грань лежит на пересечении зон $[1\bar{1}\bar{2}3]$ и $[\bar{2}11\bar{3}]$?

2.13. В кристалле кальцита (тригональная система; $c/a = 0,8543$) между гранями $(10\bar{1}1)$ и $(\bar{1}101)$ имеется грань той же зоны, расположенная (на проекции) на расстоянии $16^\circ 30'$ от грани $(10\bar{1}1)$. Определите индексы этой грани.

2.14. Рассчитайте осевые отношения $a:b:c$ и осевой угол β для кристалла моноклинной системы (гипс), если дано, что $(110) \wedge (\bar{1}\bar{1}0) = 68^\circ 30'$; $(001) \wedge (\bar{1}\bar{1}0) = 82^\circ 20'$; $(001) \wedge (\bar{1}01) = 33^\circ 08'$.

2.15. Кальцит относится к тригональной голоэдрической точечной группе $\bar{3}m$. Покажите распределение элементов симметрии этой точечной группы на стереографической проекции. В качестве двух кристаллографических осей выберите оси симметрии второго порядка и используйте гексагональную элементарную ячейку.

Кристаллы кальцита раскалываются по плоскостям спайности, параллельным $\{h0\bar{h}l\}$. Нанесите полюса граней $\{h0\bar{h}l\}$ на вашу проекцию и отметьте угол между гранями $(h0\bar{h}l)$ и $(0h\bar{h}l)$. Зная, что угол между гранями $(10\bar{1}1)$ и $(01\bar{1}\bar{1})$ в кальците равен $105^\circ 05'$, начертите точную стереографическую проекцию кальцита, включающую формы $\{10\bar{1}1\}$, $\{0001\}$, $\{10\bar{1}0\}$, $\{1\bar{1}\bar{2}0\}$, $\{10\bar{1}2\}$, $\{01\bar{1}2\}$ и $\{21\bar{3}1\}$. Определите отношение осей c/a .

2.16. Нарисуйте стереографические проекции, показывающие распределение элементов симметрии и полюсов граней двух различных общих форм в каждом из псевдосимметричных классов моноклинной и ромбической систем. Напишите символ точечной группы для каждого из этих классов. В каком из классов возможен энантиоморфизм?

2.17. При описании некоторых несовершенных кристаллов с гранецентрированной кубической решеткой удобно использовать гексагональную элементарную ячейку. Гранецентрированную кубическую решетку можно рассматривать на основе гексагональной ячейки, ось которой параллельна направлению $[111]$ кубической решетки и имеет величину параметра $a\sqrt{3}$ (где a — параметр обычной кубической элементарной ячейки), а оси x и y параллельны направлениям (101) кубической решетки и параметры по ним равны $a/\sqrt{2}$.

а) Начертите схему соотношения между этими двумя элементарными ячейками.

б) Выразите векторы гексагональной решетки через векторы кубической решетки. Выведите матрицу преобразования индексов плоскостей этих решеток при переходе от одной элементарной ячейки к другой.

в) Найдите отношение объемов этих двух элементарных ячеек матричным методом и проверьте результат путем прямых вычислений. Сколько узлов содержится в каждой элементарной ячейке?

г) Найдите гексагональные индексы следующих плоскостей кубической решетки: (112) ; (100) ; $(\bar{1}\bar{1}0)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Cullity B. D., Elements of X-Ray Diffraction, Addison-Wesley, Reading (Mass.), 1967.
2. International Tables for X-Ray Crystallography, Vol. 1, Intern. Union of Crystallography, Kynoch Press, Birmingham, England, 1952.
3. De Jong W. F., General Crystallography, A Brief Compendium, Freeman W. H. and Co., 1959.

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ЧТЕНИЯ

См. литературу к главе 1, а также следующие источники:

1. Terpstra P., Codd L. W., Crystallography, Acad. Press, New York, 1961.
2. Phillips F. C., An Introduction to Crystallography, 3rd Ed., Longmans Green, Lond., 1963.
3. Coxeter H. S. M., An Introduction to Geometry, Wiley, New York, 1961; имеется перевод: Кокстер Г. С., Введение в геометрию, изд-во «Наука», 1960.
4. International Tables for X-Ray Crystallography, Vol. 1, Intern. Union of Crystallography, Kynoch Press, Birmingham, England, 1952.
5. Koster G. F., Space Groups and their Representations, Solid State Physics, Vol. 5, p. 173, Seitz F., Turnbull D., edits., Acad. Press, 1957.
- 6*. Шубников А. В., Бокий Г. Б., Флинт Е. Е., Основы кристаллографии, изд-во АН СССР, 1940.
- 7*. Бокий Г. Б., Кристаллохимия, изд-во «Наука», 1972.
- 8*. Белов Н. В., Структурная кристаллография, Изд-во АН СССР, 1951.
- 9*. Попов Г. М., Шафрановский И. И., Кристаллография, изд-во «Высшая школа», 1972.

Кристаллические структуры

3.1. Введение

Для определения относительных положений атомов в кристаллах используются измерения относительных интенсивностей дифракционных спектров рентгеновских лучей, электронов или нейтронов. Наиболее полезными для этой цели оказались рентгеновские лучи, потому что интенсивности дифрагировавших волн в случае рентгеновских лучей не так сильно зависят от степени совершенства кристалла, как в случае электронов и нейтронов. Тщательные измерения спектров дают возможность найти распределение электронной плотности в элементарной ячейке кристалла. Так как в образовании связей между атомами в кристалле принимают участие только внешние электроны атомов, большая часть электронов в кристалле остается на тех же самых орбитах, что и в изолированных атомах. Поэтому кристаллическую структуру можно описывать, указывая относительные позиции *атомов* внутри элементарной ячейки. Во многих кристаллах как элементарных веществ, так и соединений распределение заряда внешних электронов, которые не участвуют в образовании химических связей, обладает более или менее ярко выраженной сферической симметрией, и поэтому иногда считают, что кристаллическая структура состоит из шаров одного и того же размера (если рассматривается кристаллическая структура элемента) или разных размеров (в случае различных атомов, образующих химическое соединение), упакованных вместе.

В настоящее время известны кристаллические структуры всех устойчивых элементов и простейших соединений. Они приводятся в книгах, список которых дается в конце главы. Мы рассмотрим сейчас ряд структур, наибольшее внимание уделяя геометрическим особенностям относительного взаимного расположения атомов. Несовершенства в этих кристаллах будут обсуждаться в части II данной монографии. При описании каждой кристаллической структуры мы будем указывать пространственную группу, пользуясь обозначениями, применяемыми в Международных таблицах по рентгеновской кристаллографии [6], потому что символ пространственной группы непосредственно дает решетку Бравэ и точечную группу кристалла (разд. 2.14). Сначала мы остановимся на структурах некоторых элементов, затем — простых соединений.

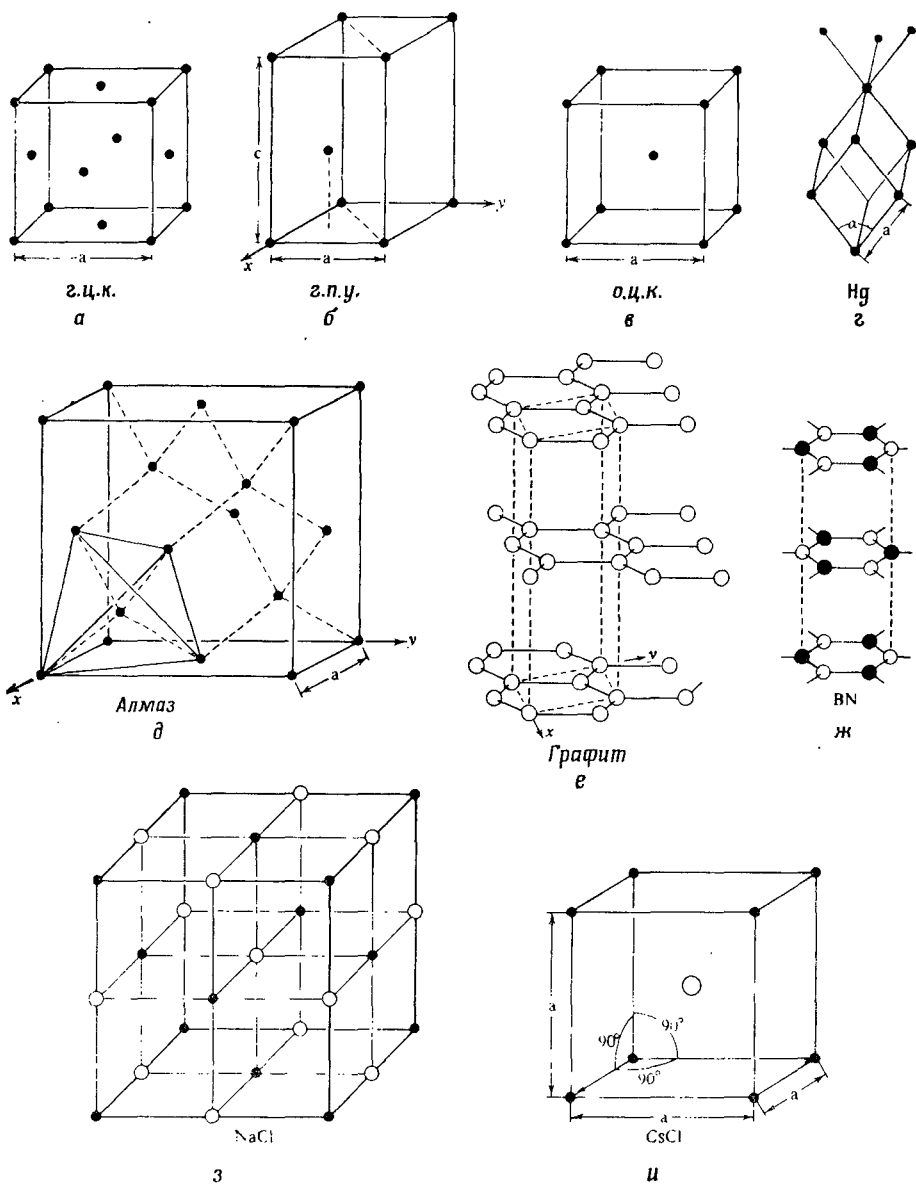
Во многих случаях данный элемент или соединение обладают не одной, а двумя или несколькими кристаллическими структурами, каждая из которых является термодинамически устойчивой формой в определенном интервале температур и давлений. В этих случаях говорят, что элемент проявляет *аллотропию*, а в случае соединений говорят о *полиморфизме*. При описании кристаллических структур некоторых соединений мы иногда будем использовать химические формулы обобщающего типа, например MX , где M будет обозначать ион или атом металла, а X — ион или атом более электроотрицательного элемента, например O , F , Cl и т. д. Кристаллические структуры можно описывать, указывая тип решетки и координаты атомов в элементарной ячейке; при этом в качестве единиц длины обычно используется длина сторон элементарной ячейки, а начало координат выбирается в каком-либо из узлов решетки. В многократно примитивных элементарных ячейках расположение атомов вокруг каждой точки решетки, конечно, должно быть одинаковым.

3.2. Наиболее распространенные структуры металлов

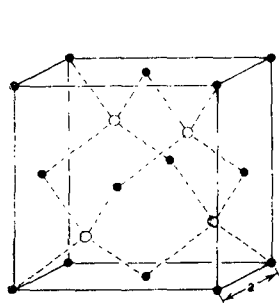
Подавляющее большинство элементов являются металлами. Металлические элементы, за исключением Mn , Ga , In , Sn , Pa , Hg , U и Pu (см. табл. А5.1, приложение 5), обладают одной из трех структур: или гранецентрированной кубической (г. ц. к.), или гексагональной плотноупакованной (г. п. у.), или объемноцентрированной кубической (о. ц. к.).

3.2.1. Гранецентрированная кубическая структура ($Fm\bar{3}m$)

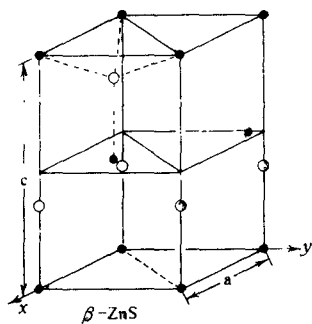
Этой структурой обладают благородные металлы (Cu , Ag , Au), многовалентные металлы (Al и Pb), переходные металлы последних групп (Co , Ni , Rh , Pd , Ir , Pt) и инертные газы (Ne , Ar , Kr , Xe). Решетка в этой структуре — гранецентрированная кубическая, и на каждый узел решетки приходится один атом. На фигуре 3.1, *a* показана обычная элементарная ячейка этой структуры с периодом a , а на фиг. 1.31 — соотношение между этой и примитивной элементарными ячейками. Координаты атомов в гранецентрированной элементарной ячейке таковы: $(0, 0, 0)$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ и $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. На ячейку приходится четыре атома. Каждый атом имеет 12 ближайших соседей на расстояниях $a/\sqrt{2}$. Координационное число, следовательно, равно 12. Эту структуру можно получить, если в узлах г. ц. к.-решетки разместить равновеликие шары таким образом, чтобы они касались друг друга (фиг. 3.2, *a*). Если радиус шара обозначить через R , тогда $R = a/2\sqrt{2}$. Доля пространства, заполненного шарами, равна



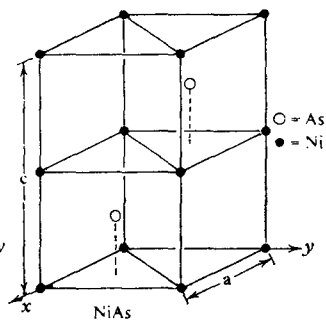
Ф и г. 3.1. Некоторые наиболее рас
 а — г.ц.к.; б — г.п.у.; в — о.ц.к.; г — Hg; д — алмаз; е — графит; ж — нитрид бора;
 з — CaF_2 (флюорит); и — рутил; н — CaTiO_3



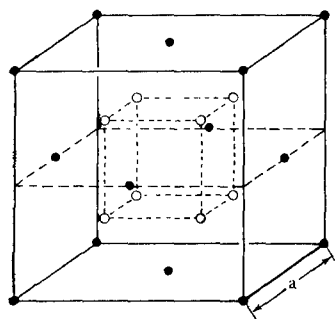
К



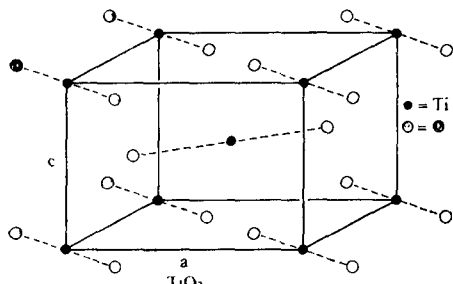
Л



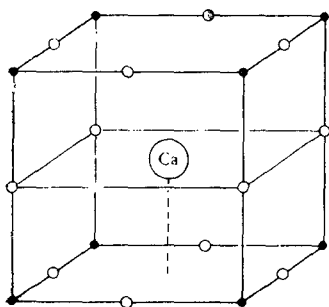
М



Н

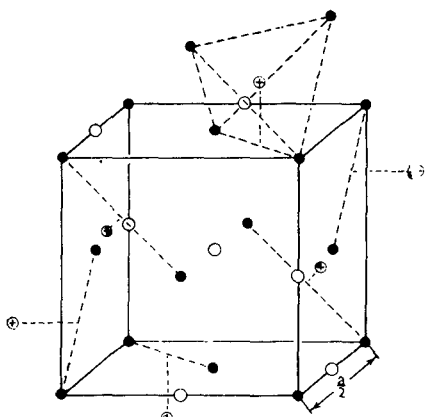


О



O = O; ● = Ti
CaTiO₃

П



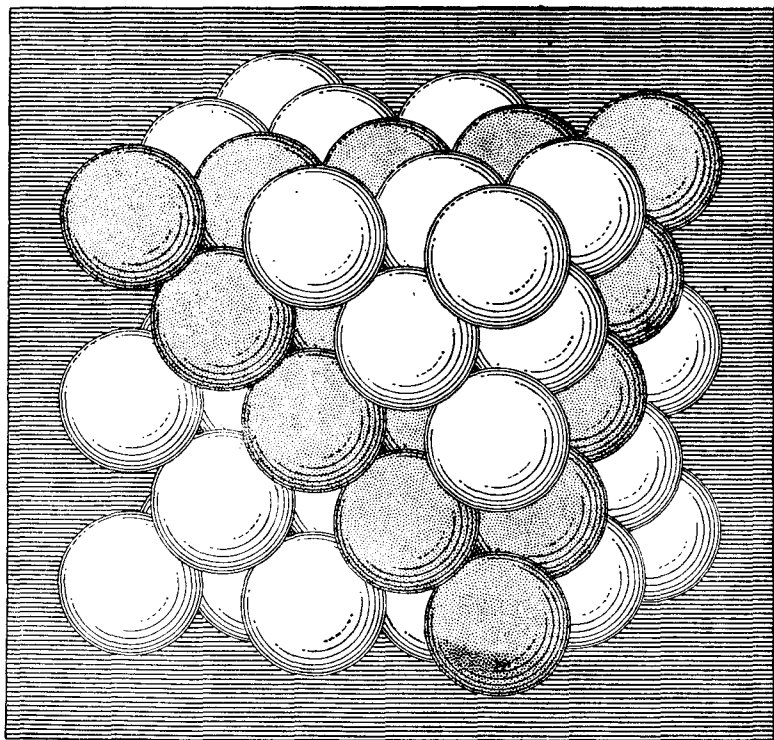
Р

пространственные структуры.

а — NaCl; *и* — CsCl; *к* — α -ZnS (цинковая обманка); *л* — β -ZnS (вюрцит); *м* — NiAs (перовскит); *р* — MgO·Al₂O₃ = MgAl₂O₄ (шпинель).

$\pi\sqrt{2}/6$, или 74%. Принято говорить, что коэффициент компактности равен 0,74. Коэффициент компактности 0,74, вероятно, соответствует наиболее плотной упаковке, которая вообще может быть получена в случае равновеликих шаров, и это действительно плотнейшая упаковка, которая может быть достигнута в случае, когда центры равновеликих шаров располагаются в узлах одной решетки Бравэ (см. разд. 3.6).

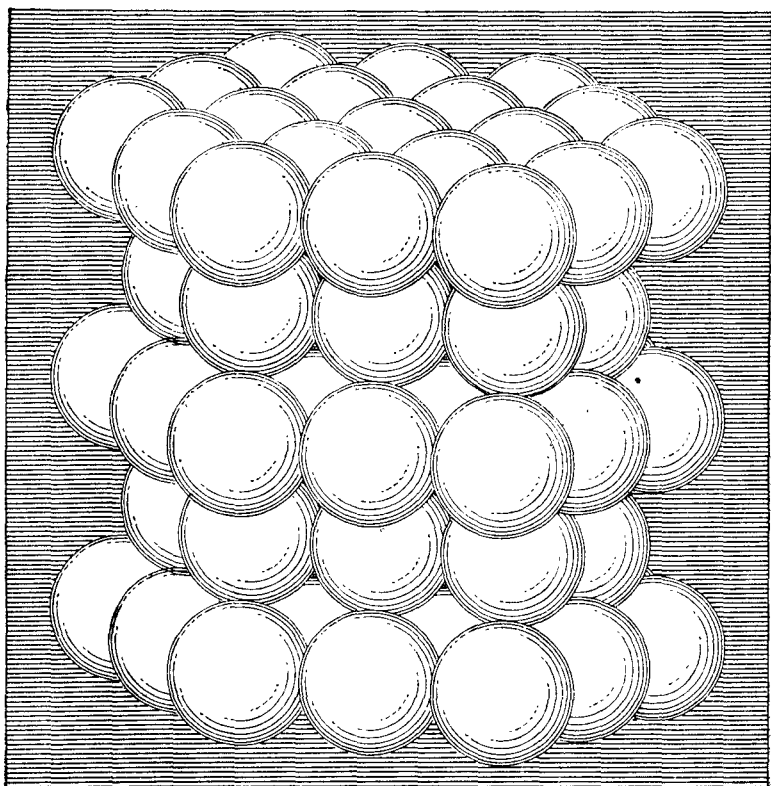
Вдоль кристаллографических направлений $\langle 110 \rangle$ в г. ц. к. структуре располагаются ряды шаров, которые находятся в контакте друг с другом вдоль линии, соединяющей их центры. Такие направления называются *плотноупакованными*. Всего имеется 12 таких направлений, если принимать во внимание перемену знака. Центры атомов располагаются в узлах решетки, и поэтому, как показывает фиг. 1.27, в плоскостях $\{111\}$, которые лежат перпендикулярно осям симметрии третьего порядка, центры атомов



а

Ф и г. 3.2. Плотная упаковка
а — гранецентрированная кубическая структура (плотноупакованные слои)
б — гранецентрированная кубическая структура (плотноупакованные слои)

образуют правильную треугольную сетку узлов. Для случая, когда атомы представляются в виде шаров радиусом $a/2\sqrt{2}$, плоскость $\{111\}$ показана на фиг. 3.3 (сплошными кружками). Каждый шар находится в контакте с шестью другими шарами, расположенными на одинаковых расстояниях от центрального. Центры всех этих шаров расположены в одной плоскости. Поскольку конфигурация, показанная на фиг. 3.3, соответствует плотнейшей упаковке кругов на плоскости, о плоскостях $\{111\}$ говорят как о наиболее плотноупакованных плоскостях. Имеется восемь таких кристаллографических плоскостей (с учетом различия между параллельными нормальными противоположного знака, так что, например, $(\bar{1}\bar{1}1)$ и $(1\bar{1}\bar{1})$ считаются разными), и в каждой такой

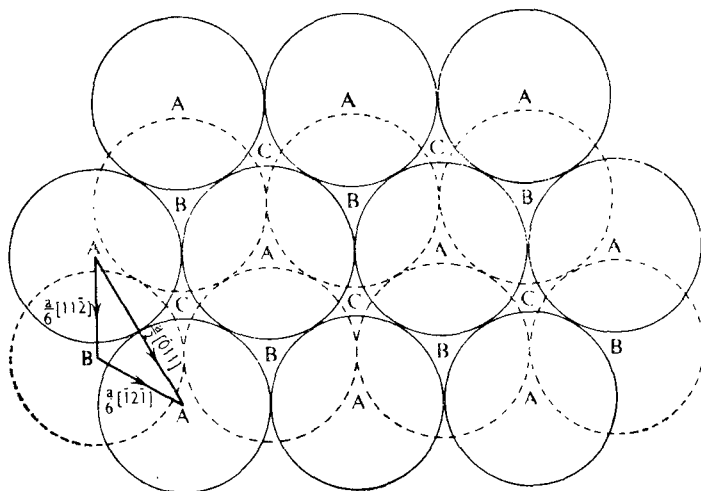


б

равновеликих шаров [4].

параллельны более темным шарам); б — гексагональная плотноупакованная
слои лежат горизонтально).

плоскости имеется шесть плотноупакованных направлений. Расстояние между плоскостями $\{111\}$ равно $a/\sqrt{3} = 2R\sqrt{2/3}$, т. е. равно $\sqrt{2/3}$ межатомного расстояния в плоскости $\{111\}$. Пусть центры атомов в данной плоскости (111) занимают точки A (фиг. 3.3). Если спроектировать на эту же плоскость центры атомов соседних плоскостей (111) , они могут занимать позиции, помеченные или буквой B , или буквой C . Проекция шаров с центрами в точках B показаны на фигуре штриховыми линиями. Г. ц. к.-кристалл можно рассматривать как построенный путем такой укладки



Ф и г. 3.3. Вид плоскости (111) г. ц. к.-структуры в плане.

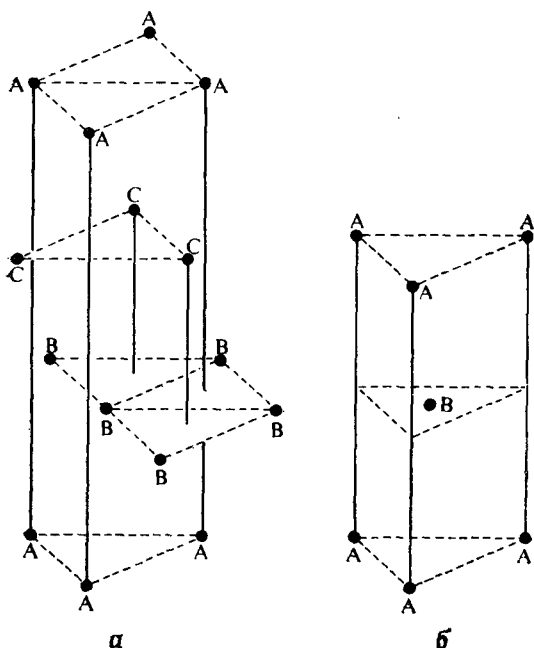
Диаметр шаров равен $a/\sqrt{2}$, где a — период решетки.

друг на друга плоских слоев из плотноупакованных шаров вдоль направления $[111]$, что центры атомов в соседних слоях следуют в порядке $ABC\ ABC\ ABC\ \dots$ (фиг. 3.4, а). Та же самая кристаллическая структура, но в иной ориентации будет описываться последовательностью слоев $ACB\ ACB\ ACB\ \dots$.

Любой атом в гранецентрированном кубическом кристалле имеет 12 ближайших соседей на расстояниях $a/\sqrt{2} (= 2R)$, шесть вторых ближайших соседей на расстояниях $a (= 2R\sqrt{2})$, 24 третьих соседа на расстояниях $a\sqrt{6}/2 (= 2R\sqrt{3})$ и еще 24 на расстояниях $a\sqrt{2} (= 2R\sqrt{4} = 4R)$.

Если рассматривать г. ц. к.-структуру как состоящую из соприкасающихся шаров, важно знать количество и размер промежутков между шарами (называемых иначе *междоузлиями* или *пустотами*), потому что имеется множество кристаллических струк-

тур, которые содержат по крайней мере еще одно семейство атомов, расположенных в узлах гранцентрированной кубической решетки. Междоузлия наибольшего размера в г. ц. к.-структуре располагаются в элементарной ячейке в позициях с координатами $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ и эквивалентных им позициях [т. е. $(0, \frac{1}{2}, 0)$, $(0, 0, \frac{1}{2})$ и $(\frac{1}{2}, 0, 0)$]. На элементарную ячейку приходится

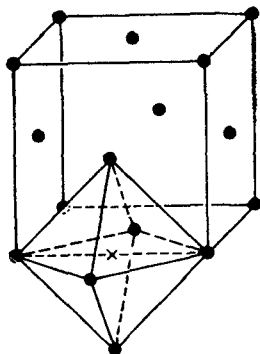


Фиг. 3.4. Последовательность укладки плотноупакованных плоскостей в г.ц.к.-структуре (а) и в г.п.у.-структуре (б).

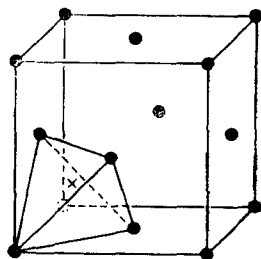
четыре таких междоузлия, т. е. по одному на каждый узел решетки; положение одного из них показано на фиг. 3.5. Наибольшего размера шар, который можно поместить в эту пустоту, не нарушая взаимного расположения окружающих шаров, имеет радиус $r = (\sqrt{2} - 1)R \approx 0,414R$, и этот шар будет иметь октаэдрическую координацию, т. е. у него будет шесть ближайших соседей (фиг. 3.5). Места расположения пустот наибольшего размера сами образуют гранцентрированную кубическую решетку.

Вторые по размеру пустоты располагаются в точках с координатами $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ и в эквивалентных им позициях (фиг. 3.6). Наибольшего размера шар, который может быть помещен в меж-

доузлие этого типа, имеет радиус $r = (\sqrt{3/2} - 1) R \simeq 0,225R$ и обладает тетраэдрической координацией. На элементарную



Ф и г. 3.5. Октаэдрические междуузлия в г. ц. к.-структуре.



Ф и г. 3.6. Тетраэдрические междуузлия в г. ц. к.-структуре.

ячейку приходится восемь таких междуузлий, т. е. по два на каждый узел решетки. Центры вторых по размеру пустот лежат в узлах примитивной кубической решетки.

3.2.2. Гексагональная плотноупакованная структура ($P6_3/mmc$)

Этой структурой обладают переходные металлы первых групп периодической системы Sc, Ti, Yt, Zr, двухвалентные металлы Be, Mg, Zn и Cd и большинство редкоземельных металлов (табл. А5.1, приложение 5). Примитивная элементарная ячейка этой гексагональной структуры содержит два атома с координатами $(0, 0, 0)$ и $(2/3, 1/3, 1/2)$ (фиг. 3.4, б). Таким образом, с каждым узлом решетки связано два атома. Простой оси симметрии шестого порядка нет, имеется ось 6_3 , проходящая через начало координат элементарной ячейки параллельно оси z . Эту структуру можно получить упаковкой равновеликих шаров (фиг. 3.2, б). Если бы каждый шар имел 12 ближайших соседей, тогда осевое отношение должно было бы равняться $\sqrt{8/3} \approx 1,633$. Коэффициент компактности в этом случае равен 0,74, как и в случае гранецентрированной кубической структуры. Значения осевых отношений для ряда металлов с г. п. у.-структурой приведены в табл. 3.1. Осевое отношение, очень близкое к идеальному, имеет кобальт.

Если центры атомов проектируются на плоскость, параллельную (0001) , т. е. плоскость базиса, тогда структуру можно представить как построенную путем укладки слоев из плотноупакованных шаров в последовательности $AB AB AB$ или $AC AC AC$ (фиг. 3.3 и 3.4, б). В плоскости базиса имеется шесть плотноупа-

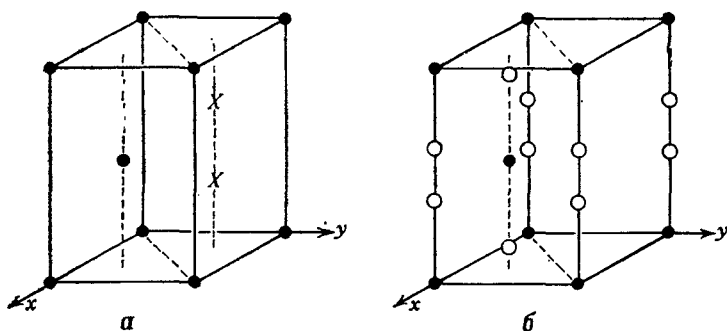
Таблица 3.1

Отношения осей c/a для некоторых материалов с гексагональной решеткой Бравэ (при комнатной температуре)

Материал	Структура	c/a	Материал	Структура	c/a	
Cd	Г. п. у.	1,886	ZnO	Вюрцит	1,60	
Zn		1,856	β -ZnS ¹⁾		1,63	
Co		1,623	β -CdS ¹⁾		1,62	
Mg		1,623	CdSe		1,63	
Re		1,615	AlN		1,60	
Sc		1,594	SiC		1,65	
Zr		1,593	TaN		1,62	
Ti		1,587				
Y		1,571	NiAs		NiAs	1,40
Be		1,567	CrS			1,64
		FeS	1,66			
NH ₄ F	Вюрцит	1,61	CoS		1,52	
AgI		1,63	NiS		1,55	
BeO		1,63				

1) К сожалению, в литературе имеются разночтения в отношении того, которую из модификаций обозначать α , которую — β . Мы оставляем обозначения авторов: α — структура сфалерита, β — структура вюрцита. — Прим. ред.

кованных направлений типа $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, и они являются единственными плотноупакованными направлениями в г. п. у.-структуре.



Фиг. 3.7. Междоузлия в г. п. у.-структуре.

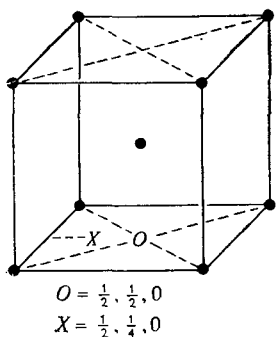
Междоузлия наибольшего размера помечены крестиками, вторые по размеру — кружочками.

Если $c/a = \sqrt{8/3}$, тогда наибольшие межатомные пустоты имеют координаты $(1/3, 2/3, 1/4)$ и $(1/3, 2/3, 3/4)$ (фиг. 3.7, а) и наибольший шар, который можно вставить в такую пустоту без нарушения

взаимного расположения соприкасающихся шаров радиусом R , имеет радиус $r \approx 0,414R$. На элементарную ячейку приходится две такие пустоты, и каждая имеет октаэдрическую координацию. Центры вторых по размеру пустот лежат в позициях $(0, 0, \frac{3}{8})$, $(0, 0, \frac{5}{8})$, $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{8})$ и $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{7}{8})$ (фиг. 3.7, б). Эти пустоты имеют радиус $r \approx 0,225R$; на элементарную ячейку их приходится по четыре, т. е. по две на каждый узел решетки; все они имеют тетраэдрическую координацию.

3.2.3. Объемноцентрированная кубическая структура (ИтЗт)

Этой структурой обладают щелочные металлы Li, Na, K, Rb, Cs (при комнатной температуре), переходные металлы V, Cr, Nb, Mo, Ta и W и Fe, Ti и Zr в некоторых температурных интервалах. Решетка — объемноцентрированная кубическая, на каждый узел



Фиг. 3.8. Положение междоузлий в о. ц. к.-структуре.

O: $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ — октаэдрические междоузлия (меньшего размера); X: $(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0)$ — тетраэдрические междоузлия (большого размера).

решетки приходится по одному атому, так что координаты атомов в ячейке будут $(0, 0, 0)$ и $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ (фиг. 3.1, в). Каждый атом имеет восемь ближайших соседей на расстояниях $a\sqrt{3}/2$, где a — период решетки. Ближайшие соседи одного атома не являются ближайшими соседями друг друга. Если структуру считать построенной из равновеликих шаров, их радиус равен $R = a\sqrt{3}/4$, и восемь направлений $\langle 111 \rangle$ являются плотноупакованными. Коэффициент компактности равен $\pi\sqrt{3}/8 \approx 0,68$. Вторые ближайшие соседи располагаются ближе, чем в гранецентрированной кубической структуре: шесть вторых ближайших соседей лежат на расстояниях $4R/\sqrt{3} (\approx 2,309R)$, в г. ц. к.-структуре они равны $2\sqrt{2}R (\approx 2,828R)$; 12 третьих ближайших соседей находятся на расстояниях $4\sqrt{2/3}R$. В этой структуре нет плотноупакованных атомных плоскостей. Если считать, что структура состоит из равновеликих шаров, тогда наибольшие пустоты располагаются в узлах с координатами $(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0)$ и эквивалентных им позициях (фиг. 3.8). В элементарной ячейке имеется 12 таких позиций,

т. е. по шесть на каждый узел решетки. Наибольший шар, который входит в такую пустоту, имеет радиус $r = R (\sqrt{5/3} - 1) = 0,288R$. Эта пустота меньше, чем наибольшая пустота в г. ц. к.-структуре. Четыре атома, ее окружающие, располагаются на равных расстояниях, однако образуемый ими тетраэдр не является правильным. Вторые по размеру пустоты находятся в позициях $(1/2, 1/2, 0)$ и эквивалентных им позициях (фиг. 3.8). Имеется шесть таких пустот в элементарной ячейке ($6 \times 1/2$ в центрах граней куба и $12 \times 1/4$ в серединах ребер куба), т. е. по три на каждый узел решетки. Каждая такая пустота может вместить шар радиусом $r = R (2/\sqrt{3} - 1) \simeq 0,15R$, который располагается в центре искаженного октаэдра.

3.3. Родственные металлические структуры

Кристаллическая структура *индия* очень близка к г. ц. к.-структуре. Ее пространственная группа $I4/m\bar{3}m$. Это тетрагональная структура с отношением осей $c/a = 1,52$. Если рассматривать структуру как гранецентрированную тетрагональную, а не объемноцентрированную, то c/a будет равно 1,08. Таким образом, эту структуру можно описать как гранецентрированную тетрагональную ($F4/m\bar{3}m$) с одним атомом в каждом узле решетки и осевым отношением $c/a = 1,08$.

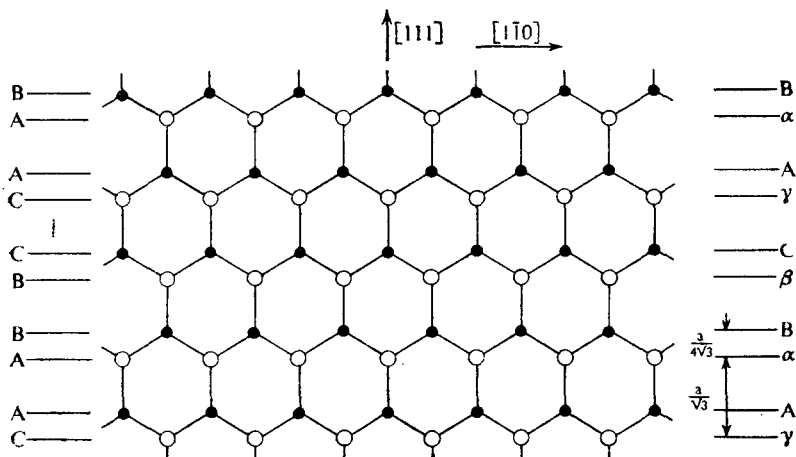
Ртуть также имеет структуру, которая может быть описана как искаженная г. ц. к. Ее пространственная группа $R\bar{3}m$, и примитивная элементарная ячейка является ромбоэдрической с одним атомом в каждом узле решетки (фиг. 3.1, *г*). Осевой угол $\alpha = 70^\circ 44'$, а период $a = 2,993 \text{ \AA}$ при 78 К. Осевой угол α примитивной элементарной ячейки г. ц. к.-кристалла равен 60° (фиг. 1.31). Таким образом, структура ртути может быть выведена из г. ц. к.-структуры сжатием вдоль одной из объемных диагоналей г. ц. к.-ячейки. Атомы в плоскостях (111) ртути располагаются, следовательно, в виде правильной треугольной сетки, но расстояния между этими плоскостями слишком малы, чтобы обеспечить плотнейшую упаковку сферических атомов. Ближайшие соседи любого атома располагаются в соседних плоскостях (111). Направлениями плотнейшей упаковки являются направления $\langle 100 \rangle$ примитивной ромбоэдрической ячейки со стороной a (фиг. 3.1, *г*). У каждого атома имеется шесть ближайших соседей на расстояниях a . Структуру ртути можно, конечно, рассматривать и на основе ромбоэдрической гранецентрированной элементарной ячейки, содержащей четыре атома, чтобы подчеркнуть связь с обычной ячейкой г. ц. к.-кристаллов. Параметры этой большой элементарной ячейки ртути таковы: $a' = 4,581 \text{ \AA}$, $\alpha' = 98^\circ 13'$ при 78 К.

Белое олово — модификация, стабильная при комнатной температуре, — имеет пространственную группу $I4_1/amd$. Решетка — объемноцентрированная тетрагональная; на каждый узел решетки приходится два атома: в позициях $(0, 0, 0)$ и $(0, 1/2, 1/4)$. Значение c/a при 25°C равно 0,545. Каждый атом имеет четырех ближайших соседей в вершинах неправильного тетраэдра и двух чуть более далеких соседей (см. задачу 3.4). Структура белого олова представляет собой искаженную форму алмазной структуры, которую имеет другая модификация олова — серое олово — стабильная при температурах ниже комнатной (разд. 3.4).

3.4. Другие элементы

3.4.1. Алмаз ($Fd\bar{3}m$)

Кремний, германий, серое олово ($\alpha\text{-Sn}$) и кристаллический углерод, образующийся при высоких температурах и давлениях — алмаз, — имеют структуру, показанную на фиг. 3.1, *д*. Решетка



Ф и г. 3.9. Последовательность укладки плоскостей (111) в структурах алмаза и цинковой обманки в проекции на плоскость (112).

В структуре алмаза черные и белые кружочки представляют атомы одного и того же рода. Буквенные обозначения последовательности укладки атомных слоев, приведенные слева, относятся к структуре алмаза, справа — к структуре цинковой обманки (сфалерита).

Бравэ — гранецентрированная кубическая; с каждым узлом решетки связаны два атома — с координатами $(0, 0, 0)$ и $(1/4, 1/4, 1/4)$. Координационное число равно четырем; ближайшие соседи (на расстояниях $a\sqrt{3}/4$) располагаются в вершинах правильного тетраэдра; один из таких тетраэдров выделен на

фиг. 3.1, δ в левом нижнем углу. Центры атомов лежат в узлах правильных треугольных сеток, располагающихся в плоскостях $\{111\}$. При проектировании на плоскость (111) последовательность укладки плоскостей (111) можно записать как $CA AB BC CA AB BC$. Последовательные плоскости идут друг за другом через неодинаковые промежутки (фиг. 3.9). Структура алмаза имеет очень рыхлую упаковку. Для случая равновеликих шаров коэффициент компактности составляет всего $\pi \sqrt{3}/16 \approx 0,34$.

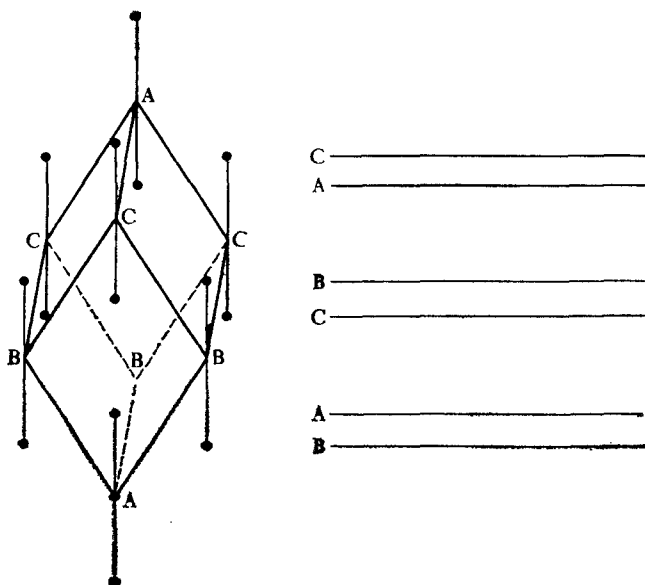
3.4.2. Графит ($P6_3/mmc$)

Стабильной кристаллической структурой углерода при комнатной температуре является графит, показанный на фиг. 3.1, e . Решетка этой структуры — гексагональная, с четырьмя атомами на элементарную ячейку; координаты атомов: $(0, 0, 0)$, $(0, 0, 1/2)$, $(1/3, 2/3, 0)$ и $(2/3, 1/3, 1/2)$. При комнатной температуре $c = 6,70 \text{ \AA}$ и $a = 2,46 \text{ \AA}$, т. е. отношение осей $c/a = 2,72$ относительно велико. Атомы, расположенные в одной плоскости (0001), занимают позиции в вершинах правильных *шестиугольников*. Расположение осей x и y элементарной ячейки показано на фиг. 1.1, a . Структура графита может быть построена путем такой укладки гексагональных слоев из атомов углерода вдоль оси z , при которой все гексагоны имеют одинаковую ориентацию, но половина вершин гексагонов в одной плоскости лежит над центрами гексагонов соседней плоскости (фиг. 3.1, e). Если центры всех атомов структуры графита спроектировать на плоскость (0001), то последовательность укладки атомных слоев можно представить как $AB AB AB \dots$ или $AC AC AC$; при этом следует помнить, что буквы A , B и C относятся в данном случае к слоям атомов, располагающимся в вершинах шестиугольников, а не равносторонних треугольников. Каждый атом имеет трех ближайших соседей в базисной плоскости на расстоянии $a/\sqrt{3}$. Половина атомов любого гексагонального слоя имеет соседей, расположенных непосредственно над ними и под ними на расстояниях $c/2$. Расстояние между ближайшими соседями в плоскостях (0001) равно всего $1,42 \text{ \AA}$ (в сравнении с $1,54 \text{ \AA}$ в алмазе), т. е. намного меньше, чем расстояние между гексагональными слоями, равное $3,35 \text{ \AA}$. Поэтому принято говорить, что графит обладает слоистой структурой, так как атомы сильно связаны внутри слоя, а слои связаны между собой слабо.

Со структурой графита очень сходна структура гексагонального нитрида бора. В ней атомы бора и азота также образуют гексагональные слои, но эти слои накладываются друг на друга вдоль оси [0001] в одинаковом положении, так что последовательность упаковки будет описываться символом $AAAAA \dots$, однако

в соседних слоях атомы разного рода лежат друг над другом (фиг. 3.1, ж). В каждом слое имеется равное число атомов *B* и *N*, расположенных так, что атомы *B* и *N* все время чередуются. При комнатной температуре расстояние между атомами внутри слоев равно $1,45 \text{ \AA}$, а расстояние между слоями составляет $3,33 \text{ \AA}$.

В кристаллах графита, подвергнутых шлифовке или сильному деформированию каким-либо другим способом, можно обнаружить



Ф и г. 3.10. Структура мышьяка, сурьмы и висмута.

другую модификацию графита, в которой атомные гексагоны располагаются в последовательности *ABC ABC ABC* или *CBA CBA CBA*. Эта структура имеет ромбоэдрическую решетку Бравэ (пространственная группа $R\bar{3}m$). Прimitивная ромбоэдрическая элементарная ячейка такой структуры имеет параметры $a = 3,64 \text{ \AA}$ и $\alpha = 34,5^\circ$ при комнатной температуре. В элементарной ячейке содержится два атома с координатами $\pm (u, u, u)$, где $u = 1/6$ ($\approx 0,166$).

В основе структур мышьяка, сурьмы и висмута также лежит примитивная ромбоэдрическая решетка Бравэ (пространственная группа $R\bar{3}m$) с двумя атомами, связанными с каждым узлом решетки. Структура этих элементов показана на фиг. 3.10. Атомы в ней имеют координаты $\pm (u, u, u)$; u чуть меньше $1/4$, а α чуть меньше 60° (табл. 3.2).

Структуру этих элементов можно легко представить себе как составленную из атомных слоев, лежащих перпендикулярно [111]. Внутри каждого слоя атомы располагаются по вершинам правильной треугольной сетки. Последовательность упаковки этих сеток вдоль [111], как легко можно показать, учитывая величину параметра u (фиг. 3.10 и табл. 3.2), имеет вид $BA\ CB\ AC\ BA\ \dots$. Если бы u было равно точно $1/4$, расстояния между соседними сетками были бы одинаковыми. В действительности же каждый атом любого из слоев имеет трех ближайших соседей в ближайшем слое на расстоянии d_1 (табл. 3.2) и трех более далеких соседей (на расстоянии d_2) в чуть дальше отстоящем слое с противоположной стороны от ближайшего слоя. Наличие трех ближайших соседей согласуется с положением As, Sb и Bi в перио-

Таблица 3.2

Параметры элементарных ячеек мышьяка, сурьмы и висмута

Элемент	α	$a, \text{Å}$	u	$d_1, \text{Å}$	$d_2, \text{Å}$
As	$54^\circ 10'$	4,131	0,226	2,51	3,15
Sb	$57^\circ 6'$	4,507	0,233	2,87	3,37
Bi	$57^\circ 14'$	4,746	0,237	3,10	3,47

дической системе элементов: поскольку они являются элементами главной подгруппы пятой группы, они должны быть способны образовывать по три ковалентные связи. Если бы угол α был равен 60° , а u равнялось $1/4$, каждый атом в этой структуре имел бы по шесть ближайших соседей на равных расстояниях: атомы располагались бы в узлах простой кубической решетки.

3.5. Соединения

Треть всех соединений типа MX кристаллизуется в структуру *хлористого натрия* ($Fm\bar{3}m$), показанную на фиг. 3.1, з. Эта структура имеет гранцентрированную кубическую решетку, с каждым узлом которой связаны два атома различного сорта, например M в позициях $(0, 0, 0)$ и X в позициях $(0, 0, 1/2)$. Атомы каждого из этих двух типов лежат в узлах своей г. ц. к.-решетки и в то же время в междоузлиях (наибольшего размера) г. ц. к.-решетки, образованной атомами второго типа. Из фиг. 3.5 ясно, что каждый атом имеет координационное число 6, причем ближайшие соседи располагаются по вершинам правильного октаэдра. На обычную элементарную ячейку этой структуры приходится четыре фор-

мульные единицы, однако фактически в кристаллах веществ с этой структурой невозможно выделить даже малейших признаков образования отдельных молекул MX .

Каждая кристаллографическая плоскость $\{111\}$ в этой структуре представляет собой двойной слой атомов, причем каждый из слоев двойного слоя состоит полностью из атомов одного сорта, располагающихся в узлах правильной треугольной сетки. Если мы будем обозначать слои атомов одного сорта греческими буквами, а слои атомов другого сорта латинскими, тогда последовательность упаковки слоев вдоль направления $[111]$ будет иметь вид $A\gamma B\alpha C\beta A\gamma B\alpha C\beta \dots$. Расстояние между слоями атомов одного и того же сорта (т. е. $A - B$ или $\gamma - \beta$) равно $a/\sqrt{3}$, где a — период решетки.

В структуре хлористого натрия (каменной соли, галита) кристаллизуются все галогениды щелочных металлов, за исключением $CsCl$, $CsBr$ и CsI , многие сульфиды, селениды и теллуриды магния, кальция, стронция, бария, свинца, марганца, окислы типа MO таких металлов, как Mg , Ca , Sr , Ba , Cd , Ti , Zr , Mn , Fe , Co , Ni и U , а также карбиды и нитриды некоторых переходных металлов, например TiC , TiN , TaC , ZrC , ZrN , UN и UC (табл. А5.2, приложение 5).

Если ион металла может иметь переменную валентность, в кристаллах со структурой типа $NaCl$ некоторые из позиций часто оказываются незанятыми. Например, кристаллы FeO имели бы совершенную структуру, если бы в них были ионы только двухвалентного железа Fe^{2+} . Если же в них имеется некоторое количество ионов Fe^{3+} , то в структуре FeO на каждые два иона Fe^{3+} может образовываться один пустой узел в подрешетке железа. Такая структура называется *дефектной* (см. разд. 9.1).

$CsCl$, $CsBr$, CsI (табл. А5.3, приложение 5), а также многие интерметаллические соединения, например $CuBe$, $CuZn$, $AgCd$, $AgMg$, $FeAl$, кристаллизуются в структуру хлористого цезия ($Pm\bar{3}m$), которая имеет примитивную кубическую решетку; с каждым узлом этой решетки связаны два атома разного сорта: один, например типа A , в позиции $(0, 0, 0)$ и другой — типа B — в позиции $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ (фиг. 3.1, u). Координационное число атомов обоих сортов равно 8, причем ближайшие соседи расположены на расстояниях $a/\sqrt{3}/2$, где a — период решетки.

Кубическая модификация ZnS , обозначаемая иногда α - ZnS ¹⁾, имеет структуру *сфалерита*, или *цинковой обманки* ($F\bar{4}3m$); в эту структуру кристаллизуются, кроме того, сульфиды, селениды и теллуриды Be , Zn , Cd , Hg , галогениды меди и AgI (фиг. 3.1, а также табл. А5.4, приложение 5). Эта структура характеризует-

¹⁾ См. примечание к табл. 3.1 на стр. 125.— *Прим. ред.*

ся г. ц. к.-решеткой; с каждым узлом ее связано два атома разного сорта: одного сорта в позициях типа $(0, 0, 0)$ и другого в позициях типа $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$; таким образом, эта структура очень сходна (точнее, геометрически одинакова) со структурой алмаза. Атомы каждого сорта лежат в узлах своей г. ц. к.-решетки и в то же время занимают половину вторых по величине (тетраэдрических) междуузлий г. ц. к.-решетки, образованной атомами другого сорта. Координационное число равно 4; ближайшими соседями являются атомы другого сорта, располагающиеся по вершинам правильного тетраэдра на расстояниях $a\sqrt{3}/4$. Последовательность упаковки плоскостей $\{111\}$ и расстояния между ними такие же, как в структуре алмаза (фиг. 3.1, δ), но плоскости поочередно состоят из атомов различного сорта (т. е. различных химических элементов). Если использовать обозначения, принятые нами для структуры NaCl, эту последовательность можно выразить так: $\gamma A \alpha B \beta C \gamma A \dots$

Структуру сфалерита можно получить из г. ц. к.-структуры, помещая атомы одного сорта в каждое второе тетраэдрическое междуузлие г. ц. к.-решетки, образованной атомами другого сорта. Если таким же образом заполнять тетраэдрические междуузлия не г. ц. к.-, а г. п. у.-структуры, то получим родственную сфалериту структуру, в которую кристаллизуется другая модификация ZnS; это структура *вюрцита* ($P6_3mc$) или β -ZnS. Решетка этой структуры гексагональная; атомы одного сорта занимают позиции $(0, 0, 0)$ и $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$, атомы другого сорта — позиции $(0, 0, u)$ и $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2} + u)$ (фиг. 3.1, λ). Величина u очень близка к $0,375$, т. е. к $\frac{3}{8}$. Соотношение между г. п. у.-структурой и структурой вюрцита можно уяснить из фиг. 3.7, δ . Как и в структуре сфалерита, вокруг каждого атома одного сорта в структуре вюрцита располагаются в тетраэдрической координации четыре атома другого сорта. Последовательность упаковки атомных слоев, параллельных (0001) , в обозначениях, принятых выше для структур NaCl и α -ZnS, можно представить в виде $A \alpha B \beta A \alpha B \beta \dots$ или $A \alpha C \gamma A \alpha C \gamma \dots$. Этой структурой обладает ряд соединений, перечисленных в табл. А5.5 (приложение 5). В табл. 3.1 приведены величины осевых отношений для некоторых соединений при комнатной температуре. Эти величины очень близки к идеальному значению $1,633\dots$, отвечающему гексагональной плотной упаковке ионов одного типа (ионы другого типа располагаются в тетраэдрических междуузлиях).

Мы рассматривали выше структуру NaCl как получаемую из г. ц. к.-структуры путем размещения второго сорта атомов в октаэдрических междуузлиях г. ц. к.-структуры. Не удивительно поэтому узнать, что существует структура, в которой атомы другого сорта размещаются в октаэдрических междуузлиях гексагональной плотноупакованной структуры. Это структура

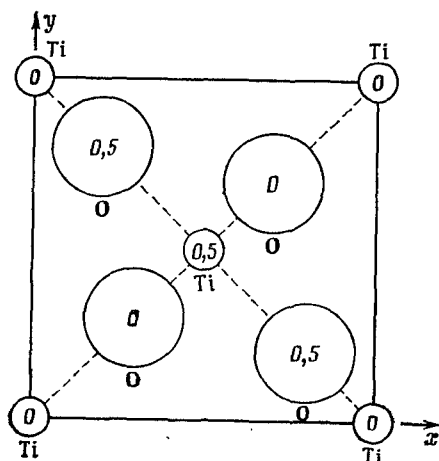
никельарсенида, или никелина (Pb_3/mmc) (фиг. 3.1, м). Она имеет гексагональную решетку; атомы одного сорта занимают позиции $(0, 0, 0)$ и $(0, 0, \frac{1}{2})$; атомы другого сорта — позиции $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4})$ и $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{3}{4})$. Координационное число для атомов обоих сортов равно 6, но в то время как атомы одного сорта, например обозначаемые пустыми кружками на фиг. 3.1, м, располагаются в позициях, отвечающих плотной гексагональной упаковке (As), атомы другого сорта (Ni) находятся в узлах примитивной гексагональной решетки. Это видно из фиг. 3.7, а; последовательность упаковки атомных плоскостей, параллельных (0001) , в принятых нами буквенных обозначениях имеет вид $A\beta A\gamma A\beta A\gamma \dots$. Атомы, обозначаемые греческими буквами, располагаются в центрах тригональных призм, в вершинах которых лежат атомы, обозначенные латинскими буквами, причем атомы, обозначенные латинскими буквами, имеют октаэдрическую координацию.

Осевые отношения для кристаллов некоторых сульфидов с этой структурой приведены в табл. 3.1; в табл. А5.6 приведены селениды, теллуриды и антимониды некоторых металлов, имеющие структуру никельарсенида. Величина отношения c/a при комнатной температуре у соединений со структурой NiAs сильно отклоняется от идеального значения, характерного для плотной гексагональной упаковки ионов одного типа. Обычно атомы металла в структуре NiAs располагаются в тех же позициях, что и Ni, но встречается и противоположный случай, когда в октаэдрической междоузлиях гексагональной плотноупакованной решетки атомов металла располагаются атомы неметалла (например, PtB). Это так называемая структура *антиникельарсенида*.

Если атомами иного сорта, отличными от атомов, образующих г. ц. к.-структуру, заполнить все тетраэдрические пустоты этой структуры, то получим структуру *фторида кальция* (CaF_2), или *флюорита* (плавикового шпата) ($Fm\bar{3}m$) (фиг. 3.1, н). В основе ее лежит г. ц. к.-решетка из атомов Ca, располагающихся в позициях $(0, 0, 0)$; атомы F занимают позиции $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ и $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$. На элементарную ячейку этой структуры приходится четыре формульные единицы. Координационное число атомов Ca равно 8; ближайшие соседи (атомы F) располагаются в вершинах куба. Атомы фтора лежат в узлах простой кубической решетки (период которой вдвое меньше периода структуры CaF_2) и имеют тетраэдрическую координацию (четыре атома Ca в вершинах правильного тетраэдра). Центры атомов одного сорта образуют правильные треугольные сетки, параллельные кристаллографическим плоскостям $\{111\}$, и расстояния между атомами в этих сетках одинаковы для атомов обоих сортов. Последовательность расположения слоев вдоль $\langle 111 \rangle$ имеет вид $\dots \alpha B\gamma \beta Ca \gamma A\beta \alpha B\gamma \beta Ca \dots$. Атомные плоскости, обозначаемые последовательными латинскими буквами, располагаются на равных расстояниях

друг от друга; то же самое справедливо для атомных плоскостей, обозначаемых греческими буквами. Этой структурой обладают фториды Ca, Sr и Ba и окислы Zr, Th, Hf и U, а также окислы и сульфиды щелочных металлов и некоторые другие, хотя последние фактически имеют структуру, которая иногда называется структурой *антифлюорита* (табл. А5.7, приложение 5).

Другой структурой, широко распространенной среди соединений типа $A\bar{X}_2$, является, кроме флюорита, структура *рутила*



Ф и г. 3.11. Структура рутила (TiO_2).

Числа указывают координаты атомов по оси z (в долях соответствующего периода решетки).

(TiO_2) и *касситерита* (SnO_2) ($P4_2/mnm$). Она наблюдается у двуокисей Ti, Sn, Pb, W, Mn, V, Nb, Ta и Ge и у фторидов Mg, Zn, Mn, Co, Ni и Fe (фиг. 3.1, о). Основой структуры является примитивная тетрагональная решетка с отношением осей $c/a \approx 0,65$. Атомы титана располагаются в позициях $(0, 0, 0)$ и $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, атомы кислорода — в позициях $\pm(u, u, 0)$ и $\pm(u + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - u, \frac{1}{2})$; u во всех случаях близко к 0,3. Таким образом, на элементарную ячейку приходится две формульные единицы. На фиг. 3.11 эта структура показана в плане. Каждый атом титана окружен шестью атомами кислорода, однако октаэдр, образованный атомами кислорода, не совсем правильный. Список соединений, имеющих эту структуру, приведен в табл. А5.8 (приложение 5).

3.6. Плотная упаковка

Первые попытки предсказания кристаллических структур основывались на рассмотрении особенностей плотнейшей упаковки шаров, и, как мы видели выше, при описании простых кристаллических структур, эта идея до сих пор имеет огромное практическое значение.

Плотная укладка *кругов* на плоскости определяется математиками как такое расположение, при котором каждый круг имеет по крайней мере три контакта в плоскости и не все они приходится на одну и ту же полуокружность. Плотная упаковка шаров в пространстве — это та, при которой каждый шар имеет по крайней мере четыре контакта с соседними шарами и не все они приходится на одно и то же полушарие. Мы рассмотрим кратко упаковку шаров и кругов одинакового диаметра, как это сделано Паттерсоном и Каспером в Международных таблицах по рентгеновской кристаллографии [1].

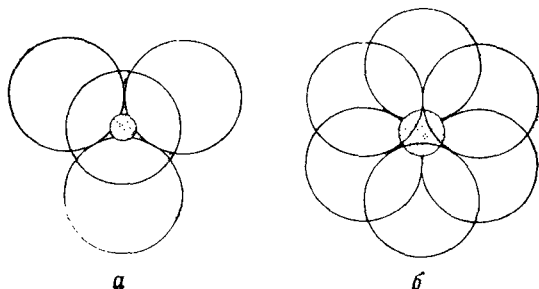
Плотнейшей упаковкой равновеликих кругов на плоскости является упаковка гексагонального типа (фиг. 3.3). Поскольку каждый круг имеет шесть соседей, расположенных вокруг него единственным способом, это наибольшее возможное число ближайших соседей; оно соответствует наиболее плотной упаковке в двумерной решетке; центры кругов лежат при этом в вершинах правильной треугольной сетки. Было доказано, что *кубическая плотнейшая упаковка* (г. ц. к.-структура) является плотнейшей упаковкой равновеликих шаров, центры которых образуют *решетку в трехмерном пространстве*, однако нет строгого доказательства того, что такая упаковка является плотнейшей из всех возможных упаковок шаров, которые заполняют пространство. Осложнение при доказательстве возникает потому, что имеется бесконечное число способов, которыми двенадцать шаров могут быть приведены в контакт с единственным шаром. В частности, было показано, что существуют особые конфигурации шаров в конечном объеме, для которых плотность упаковки превышает плотность, отвечающую г. ц. к.- или идеальной г. п. у.-конфигурации. Концепция плотнейшей упаковки в настоящее время, следовательно, разработана еще не до конца.

Среди бесконечного числа способов, которыми 12 шаров могут быть приведены в контакт с единственным шаром, два отвечают г. ц. к.- и г. п. у.-структурам, которые, повторяясь в пространстве, приводят к возникновению плоских слоев из плотноупакованных шаров. В настоящем разделе мы используем термин *плотнейшая упаковка* для такой конфигурации шаров, которая состоит из плотноупакованных слоев и обладает такой же плотностью упаковки, как г. ц. к.-структура.

Плотноупакованный слой шаров имеет вид, показанный на фиг. 3.3. Проектируя центры шаров выше- и нижележащих плотноупакованных слоев на рассматриваемый плотноупакованный слой, мы можем для описания плотноупакованных конфигураций шаров использовать буквенные обозначения. В зависимости от того, куда проектируются центры шаров данного слоя, слой получает обозначение *A*, *B* или *C* (см. фиг. 3.3). Тогда любая последовательность букв *A*, *B* и *C*, например *ACB ACBCA*,

отвечает плотнейшей упаковке шаров при условии, что никакие два соседних слоя не описываются одинаковыми буквами. Если диаметр шаров обозначить через d , тогда расстояние между плоскостями будет равно $d\sqrt{2/3}$.

Вокруг каждого шара в плотноупакованных конфигурациях имеются пустоты двух типов: *тетраэдрические* (фиг. 3.12, а) и *октаэдрические* (фиг. 3.12, б). В плоском слое шаров, уложенных плотнейшим образом (например, в слое А), любой шар окружен

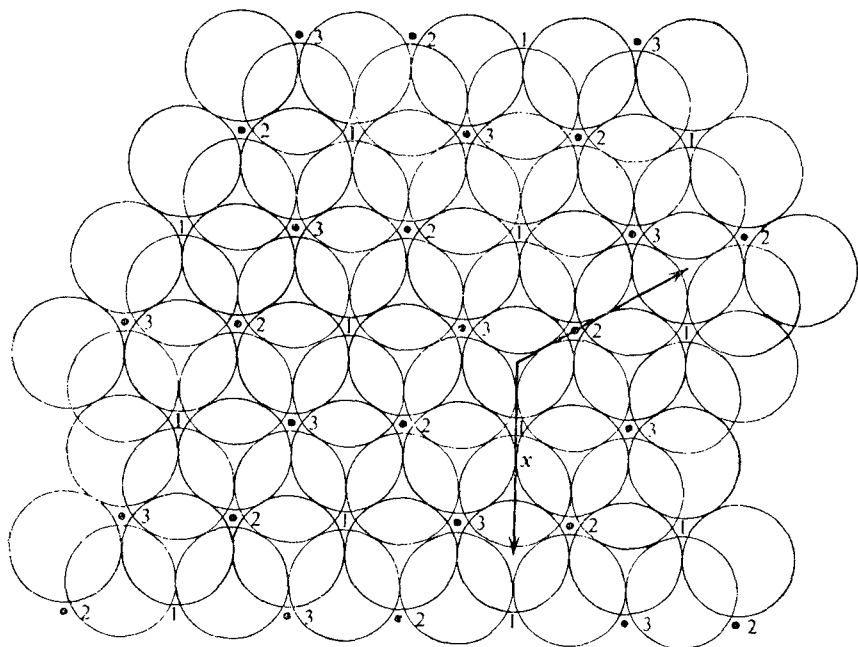


Ф и г. 3.12. Пустоты в плотнейшей шаровой упаковке.
а — тетраэдрическая пустота; б — октаэдрическая пустота.

шестью треугольными пустотами (фиг. 3.3). При добавлении следующего слоя шаров сверху три пустоты становятся тетраэдрическими и три — октаэдрическими; аналогично и при добавлении слоя снизу. Далее каждый шар слоя А сам закрывает треугольные пустоты в выше- и нижележащих слоях, что дает еще две тетраэдрические пустоты. В результате вокруг каждого шара имеется шесть октаэдрических пустот и восемь тетраэдрических; в бесконечной кристаллической постройке на каждый шар приходится одна октаэдрическая и две тетраэдрические пустоты.

Поскольку центры шаров плоского плотноупакованного слоя располагаются в узлах правильной треугольной сетки, точечная группа симметрии такого слоя будет $6mm$ (фиг. 1.15, в). Чисто шестерная симметрия не может быть сохранена, если необходимо получить плотнейшую упаковку шаров в пространстве; пространственные группы *наинизшей* симметрии, которые могут соответствовать плотнейшей упаковке, являются тригональными: $P3m$ и $R3m$. Пространственные группы более высокой симметрии возникают, если в структуре имеются, например, плоскости симметрии, параллельные плотноупакованным слоям, или центр симметрии, превращающий ось 3 в $\bar{3}$. Кроме того, может появляться винтовая ось 6_3 . Следовательно, пространственными группами, которые могут соответствовать плотнейшей упаковке шаров, являются следующие: $P3m$, $R3m$, $P\bar{3}m$, $R\bar{3}m$, $P6m2$, $P6_3mc$, $P6_3/mmc$ и $Fm3m$.

Во многих кристаллах по принципу «плотнейшей упаковки» располагаются атомы или ионы какого-либо одного типа (они не обязательно находятся в контакте друг с другом), в то время как другие атомы (или ионы) меньшего размера заполняют междуузлия (все или лишь некоторую их часть). Часто наблюдаются отклонения от идеальной «плотнейшей упаковки».



α - Al_2O_3

Ф и г. 3.13. Структура корунда $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (или сапфира).

Большими кружками обозначены ионы кислорода (два последовательных слоя). Между слоями в октаэдрических междуузлиях типов γ_2 и γ_3 лежат ионы алюминия (черные точки), пустоты типа γ_1 не заполнены. В следующем слое заполнены пустоты γ_1 и γ_3 , а γ_2 не заняты.

Сапфир¹⁾ ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, пространственная группа $R\bar{3}c$) имеет большую элементарную ячейку, в которой ионы кислорода располагаются по узлам гексагональной плотноупакованной решетки. Ионы алюминия занимают октаэдрические междуузлия. Однако, поскольку формула сапфира — Al_2O_3 , заполненными оказываются лишь $2/3$ всех имеющихся междуузлий этого типа, как показано на фиг. 3.13. Структуру сапфира легко можно описать,

¹⁾ Сапфир, лейкосапфир, рубин — разновидности корунда; структура их одинакова. Различие свойств и цвета обусловлено примесями. — *Прим. ред.*

определяя местоположение «недостающих» атомов алюминия. Если мы спроектируем позиции всех атомов на плоскость (0001) гексагональной ячейки и латинскими буквами обозначим позиции атомов кислорода, а греческими — позиции недостающих ионов алюминия, тогда получим последовательность букв $A\gamma_1 B\gamma_2 A\gamma_3 B\gamma_1 A\gamma_2 B\gamma_3$, где позициям $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ отвечают на фиг. 3.13 места, отмеченные соответствующими индексами 1, 2, 3.

Гексагональная элементарная ячейка структуры сапфира имеет поэтому высоту в шесть слоев атомов кислорода и содержит шесть формульных единиц Al_2O_3 ; ее параметры: $a = 4,75 \text{ \AA}$, $c = 12,97 \text{ \AA}$, $c/a = 2,73$. Если бы ионы кислорода занимали места в узлах идеальной г. п. у.-решетки, отношение c/a было бы равно 2,816.

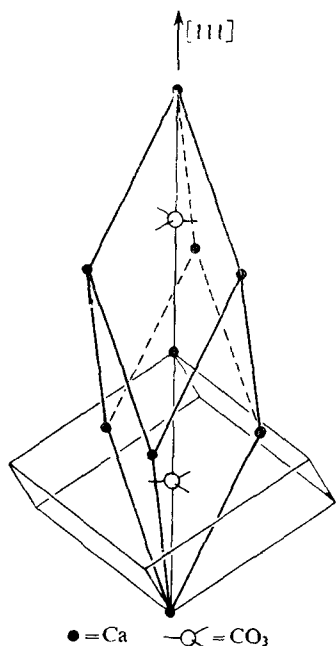
На фиг. 3.13 указаны также векторы трансляции в плоскости (0001), соответствующие трижды примитивной гексагональной ячейке. Ромбоэдрическая примитивная ячейка содержит две формульные единицы Al_2O_3 и имеет параметры $a = 5,12 \text{ \AA}$ и $\alpha = 55^\circ 17'$. Если бы ионы кислорода занимали места в узлах идеальной г. п. у.-решетки, значение α было бы равно $53^\circ 47'$.

В $CaTiO_3$ (*перовскит*, $Pm\bar{3}m$), который обладает структурой, весьма распространенной среди кристаллов соединений типа $MM'X_3$, ионы кальция и кислорода, взятые вместе, образуют г. п. к.-конфигурацию, а ионы титана располагаются в ее октаэдрических пустотах (фиг. 3.1, *n*). Координационное число атомов Ca равно 12, Ti — 6 и O — 2. Координаты атомов в примитивной элементарной ячейке: Ti (0, 0, 0); Ca ($1/2, 1/2, 1/2$); O (0, 0, $1/2$), (0, $1/2, 0$), ($1/2, 0, 0$). Очень точные определения параметров ячейки указывают, что фактически структура является триклинной.

Структура *шпинели* ($Fd\bar{3}m$), которой обладают $MgAl_2O_4$ и многие другие смешанные окислы двух- и трехвалентных металлов, имеет элементарную ячейку, в которой содержится 32 кислородных иона, образующих почти совершенную кубическую плотнейшую упаковку. Восемь из 64 тетраэдрических междоузлий заполнены ионами двухвалентного магния, а 16 из 32 октаэдрических междоузлий — ионами трехвалентного алюминия. Ионы магния образуют структуру алмазного типа (фиг. 3.1, *p*); на фигуре приведена лишь одна восьмая часть полной г. п. к.-элементарной ячейки.

Некоторые окислы состава MM_2O_4 имеют структуру так называемой «обращенной» шпинели, в которой ионы кислорода, как и в «нормальной» шпинели, образуют кубическую плотную упаковку, но катионы располагаются иначе. Типичным представителем обращенных шпинелей является $MgFe_2O_4$. В идеальном случае половина атомов железа занимает восемь тетраэдрических

междуузлий, а атомы магния и остальные атомы железа занимают 16 октаэдрических междуузлий. При этом атомы Mg и Fe распределяются по занятым позициям с октаэдрической координацией беспорядочно. Чтобы подчеркнуть отличие от нормальной шпинели, формула обращенной шпинели иногда записывается в виде $\text{Fe}(\text{MgFe})\text{O}_4$ или, в общем виде, $M'(MM')\text{O}_4$. Фактически структура MgFe_2O_4 слегка отклоняется от идеальной: число атомов железа в тетраэдрических междуузлиях не точно равно числу атомов железа в октаэдрических междуузлиях.



Ф и г. 3.14. Структура кальцита (CaCO_3). Жирными линиями показана примитивная ромбоэдрическая элементарная ячейка, которая содержит две формульные единицы CaCO_3 . Ячейка, показанная тонкими линиями, отвечает наименьшему «спайному ромбоэдру» и содержит четыре формульные единицы.

Многие сложные структуры гораздо легче и удобнее описывать как искаженные формы простых структур. Например, структуру кальцита (одной из модификаций CaCO_3 , пространственная группа $R\bar{3}c$) можно вывести из структуры NaCl , если отождествить ионы Na^+ с ионами Ca^{2+} , а ионы Cl^- с карбонатным радикалом CO_3^{2-} . Если теперь мы представим, что структура NaCl сжимается вдоль объемной диагонали кубической ячейки (т. е. вдоль $[111]$) до тех пор, пока угол между осями, первоначально равный 90° , не станет равен $101^\circ 55'$, мы получим дважды примитивную элементарную ячейку кальцита, содержащую четыре формульные единицы. Плоскости $\{100\}$ этой элементарной ячейки являются

плоскостями спайности ¹⁾. Группа CO_3 имеет треугольную форму; атом С располагается в центре треугольника, а плоскость треугольника располагается перпендикулярно направлению $[111]$ ромбоэдрической ячейки. Прimitивная элементарная ячейка кальцита содержит две формульные единицы CaCO_3 и показана на фиг. 3.14. Ионы Са занимают позиции $(0, 0, 0)$ и $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, а центры групп CO_3 располагаются в точках $\pm (u, u, u)$. Во всех кристаллах, имеющих эту структуру, u близко к $\frac{1}{4}$; в кальците $u = 0,259$. Прimitивная ячейка кальцита имеет параметры $a = 6,361 \text{ \AA}$ и $\alpha = 46^\circ 06'$; ячейка, соответствующая ромбоэдру спайности, имеет параметры $a = 6,412 \text{ \AA}$, $\alpha = 101^\circ 55'$.

3.7. Межатомные расстояния

Из измеренных значений периодов решетки простых структур можно получить величины межатомных расстояний с той же точностью, что и для параметров элементарной ячейки. Например, в меди расстояние между центрами соседних атомов равно $a/\sqrt{2}$, где a — ребро элементарной ячейки. Значения межатомных расстояний для большинства металлов и некоторых других элементов, полученные таким путем, приведены в табл. А5.1, приложение 5. Они часто используются в качестве «атомных диаметров», если кристаллическая структура рассматривается как построенная из соприкасающихся шаров. В тех случаях, когда элемент имеет несколько аллотропных модификаций, величины атомных радиусов, полученные из рассмотрения различных кристаллических структур, отвечающих этим модификациям, оказываются, как правило, различными. В. М. Гольдшмидт показал, что, когда мы переходим от структуры с координационным числом 12 (например, от г. ц. к.-структуры) к структуре с координационными числами 8 и 4, происходит сжатие, уменьшение атомного радиуса элемента на 3 и 12% соответственно.

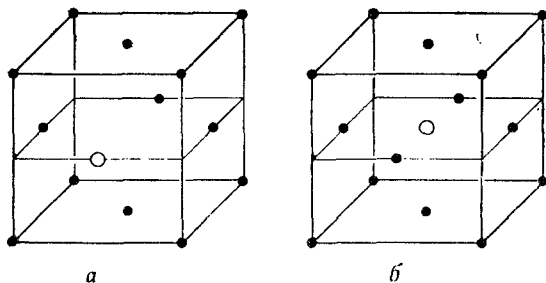
В случае кристаллов соединений также можно рассчитать значения межатомных расстояний, используя экспериментально измеренные значения периодов решетки. Они оказываются полезными при рассмотрении структур на основе представлений об атомах как о жестких соприкасающихся шарах. Однако в этом случае возникает проблема, связанная с необходимостью так разделить расстояние между неодинаковыми атомами или ионами, чтобы каждому из них приписать свой собственный характе-

¹⁾ Спайность — способность некоторых кристаллов раскалываться по плоскостям (иногда идеально гладким), соответствующим основным плоскостям кристаллической структуры. Так, кристаллы динка раскалываются по $\{0001\}$, каменная соль — по $\{100\}$, алмаз и флюорит — по $\{111\}$ и т. д. — *Прим. ред.*

ристический радиус. Эта проблема может быть разрешена только на основе теоретического вычисления размера по крайней мере одного иона. Следовательно, все значения ионных радиусов имеют частично экспериментальное, частично теоретическое происхождение. Значения некоторых ионных радиусов приведены в табл. А5.1. В кристаллах соединений состояние ионизации атомов может сильно отличаться от характерного для кристаллов элементов; соответственно будут различаться и размеры этих атомов. Ионные радиусы металлов обычно меньше атомных радиусов, которые по определению равны половине расстояния, отвечающего наибольшему сближению атомов в структуре элемента. Это объясняется тем, что в металлах структурными единицами являются положительные ионы, в которых электроны втягиваются внутрь за счет избыточного положительного заряда, имеющегося в ядрах. И наоборот, ионные радиусы электроотрицательных элементов обычно намного больше соответствующих атомных радиусов.

3.8. Твердые растворы

Во многих чистых металлах могут растворяться большие количества других элементов с образованием *твердых растворов*. Если растворенный элемент также является металлическим, то растворяющиеся атомы просто замещают атомы элемента-растворителя в его кристаллической структуре, как показано на фиг. 3.15, а.



Ф и г. 3.15. Структура твердых растворов.

а — твердый раствор замещения; б — твердый раствор внедрения.

Такой раствор называется *твердым раствором замещения*. Еще один тип твердых растворов — это *твердые растворы внедрения*, в которых атомы растворенного элемента находятся *между* атомами растворителя (фиг. 3.15, б). Твердые растворы могут образовываться не только металлами, но и другими элементами, однако поскольку громадное большинство элементов является металлами и многие из них имеют близкие химические свойства, наиболее интересны и важны именно твердые растворы металлов.

Образование твердых растворов, а не химических соединений происходит, как правило, в тех случаях, когда компоненты имеют очень сходные химические свойства. Так, золото растворяет серебро во всех отношениях; то же самое наблюдается в случае NaCl и KCl. Это твердые растворы замещения. Когда в кристалле растворяются элементы, атомы или ионы которых имеют небольшие размеры (например, H, C, B, O, N), образуются, как правило, твердые растворы внедрения. Различие между этими двумя типами твердых растворов во всех случаях можно провести на основании измерений плотности и объема элементарной ячейки твердого раствора. Плотность кристалла ρ дается выражением

$$\rho = \nu M/V,$$

где M — молекулярный вес (в граммах); V — объем элементарной ячейки, а ν — число формульных единиц, приходящихся на элементарную ячейку. В чистом материале ν — целое число. В твердых растворах замещения ν остается тем же самым целым числом, а M заменяется средним молекулярным весом \bar{M} , который определяется на основании известного химического состава раствора ¹⁾. В твердых растворах внедрения ν также остается неизменным, но повышается плотность. Для бинарного (двухкомпонентного) твердого раствора внедрения значение ρ дается выражением

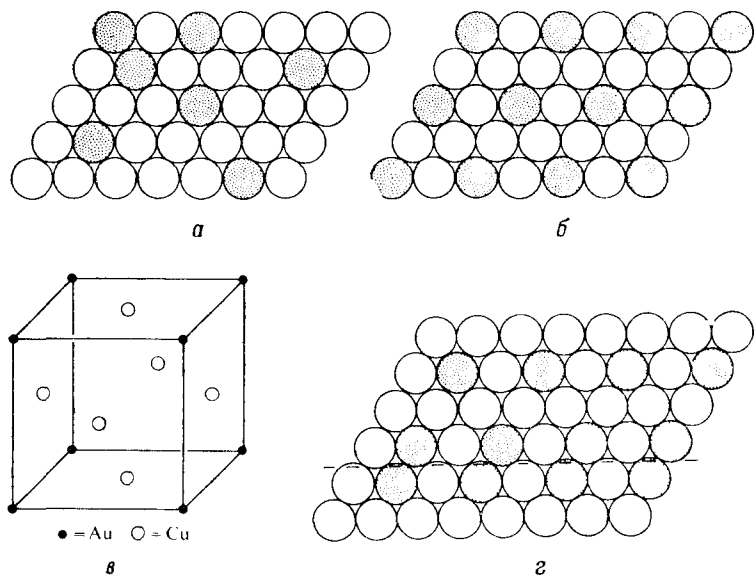
$$\rho = \frac{\nu}{V} \left(M + \frac{n_{p.k}}{n_p} M_{p.k} \right),$$

где $n_{p.k}/n_p$ — отношение молярных долей растворенного компонента и растворителя, а $M_{p.k}$ — молекулярный вес растворенного компонента. Конкретный пример определения типа твердого раствора рассматривается в конце главы, в задаче 3.9.

Атомы компонентов, составляющих твердый раствор, обычно беспорядочно распределены по узлам (или междоузлиям) структуры, однако в ряде случаев при температурах ниже некоторой критической распределение перестает быть неупорядоченным и возникает так называемое упорядочение. Рассмотрим процесс упорядочения на примере металлического твердого раствора. На фиг. 3.16, а показана часть плоскости (111) разупорядоченного сплава меди, содержащего 25 ат. % золота. Выше температуры $\sim 390^\circ \text{C}$ атомы меди и золота встречаются в любых позициях, отвечающих узлам г. ц. к.-решетки: предпочтительные позиции отсутствуют. При температурах ниже 375°C в равновесных условиях плоскость (111) будет выглядеть, как на фиг. 3.16, б: каждый атом золота окружен только атомами меди. Такая структура назы-

¹⁾ $\bar{M} = (n_1 M_1 + n_2 M_2 + \dots)/n$, где n_1 — число молей компонента 1 с молекулярным весом M_1 ; n_2 — число молей компонента 2 и т. д., $n = n_1 + n_2 + \dots$.

вается *упорядоченным твердым раствором*. На фиг. 3.16, *в* показана общепринятая элементарная ячейка такого твердого раствора в полностью упорядоченном состоянии с атомами золота в вершинах куба (0, 0, 0) и атомами меди в центрах всех граней. Эта ячейка является примитивной элементарной ячейкой простой кубической *сверхрешетки*. Превращения порядок — беспорядок происходят во многих твердых растворах. Полностью упорядоченное состояние всегда имеет менее высокую симметрию, чем



Ф и г. 3.16. Структура сплава AuCu_3

a — плоскость (111) неупорядоченного сплава; *б* — плоскость (111) упорядоченного сплава; *в* — элементарная ячейка упорядоченного сплава; *г* — антифазная граница между доменами.

разупорядоченное ¹⁾, оно обычно обладает решеткой с элементарной ячейкой большего размера и поэтому называется *сверхструктурой*.

Фиг. 3.16, *в* показывает, что при перегруппировке атомов в процессе упорядочения каждый атом золота должен оказаться окруженным только атомами меди. Когда начинается упорядочение, в различных частях большого кристалла оно может происходить «не в ногу». В этом случае упорядочение может быть совершенным (как на фиг. 3.16, *б* и *в*) в отдельных областях кристалла, называемых *доменами*; в местах же соприкосновения доменов

¹⁾ При условии, что в разупорядоченном состоянии мы не делаем различия между атомами разных сортов. — *Прим. перев.*

друг с другом требование того, чтобы атомы золота были окружены только атомами меди, может не выполняться (фиг. 3.16, *з*). Штриховая линия на фиг. 3.16, *з* соответствует следу так называемой *антифазной границы* между доменами на плоскости (111). В трехмерном кристалле такие границы являются стенками, разделяющими соседние домены. Поскольку в области доменных границ атомы располагаются не вполне упорядоченно, эти границы являются источником избыточной энергии в упорядоченных кристаллах. Продолжительный нагрев кристалла до температуры, близкой к температуре упорядочения, может привести к полному исчезновению таких границ.

Рассмотренный выше тип упорядочения называется *дальним порядком*, потому что в пределах любого домена атомы какого-либо одного рода располагаются преимущественно в узлах одного и того же типа. Многие твердые растворы характеризуются упорядочением другого типа: хотя дальний порядок в них отсутствует, распределение атомов не является в них и истинно беспорядочным; атомы разного рода оказываются в них соседями друг друга чаще, чем можно было бы ожидать исходя из чисто случайного распределения. Такое состояние называется *ближним порядком*. Ближний порядок встречается в кристаллах очень часто; в частности, он наблюдается в некоторых упорядоченных твердых растворах, нагретых до температуры выше их температуры упорядочения.

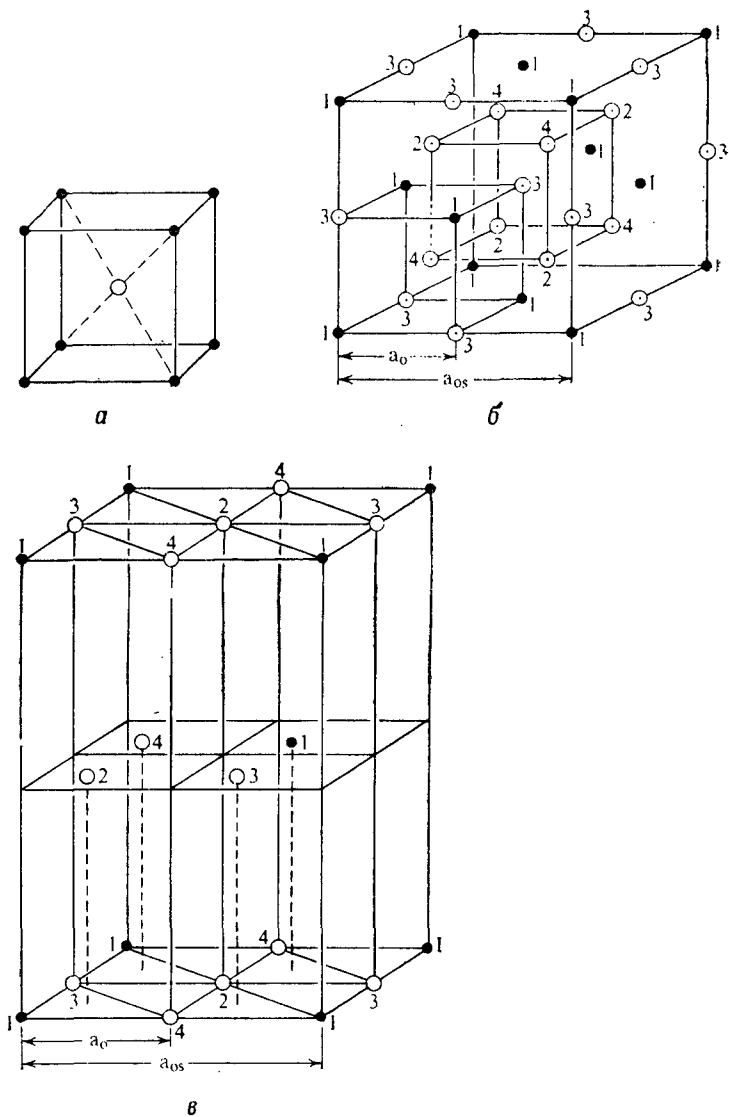
Структуры некоторых упорядоченных твердых растворов приведены на фиг. 3.17, а материалы, дающие эти структуры, перечислены в табл. 3.3. Сверхструктура типа $L2_0$, или $B2$, наблю-

Таблица 3.3

Некоторые типы сверхструктур

Типы сверхструктуры	Примеры
$L2_0$ (CuZn) ¹⁾	CuZn, FeCo, NiAl, CoAl, FeAl, AgMg, AuCd, NiZn
$L1_2$ (Cu ₃ Au)	Cu ₃ Au, Ni ₃ Mn, Ni ₃ Fe, Ni ₃ Al, Pt ₃ Fe, Au ₃ Cd, Co ₃ V, TiZn ₃
DO_{19} (Mg ₃ Cd)	Mg ₃ Cd, Cd ₃ Mg, Ti ₃ Al, Ni ₃ Sn, Ag ₃ In, Co ₃ Mo, Co ₃ W, Fe ₃ Sn, Ni ₃ In, Ti ₃ Sn
DO_3 (Fe ₃ Al)	Cu ₃ Sb, Mg ₃ Li, Fe ₃ Al, Fe ₃ Si, Fe ₃ Be, Cu ₃ Al

¹⁾ Обозначения типа $L2_0$ и т. п. — это обозначения, применявшиеся в первых томах Strukturberichte [1]. Они и до сих пор часто употребляются для обозначения структурных типов.



Ф и г. 3.17. Структуры некоторых упорядоченных твердых растворов.

a — типа $L2_0(\text{CuZn})$ (табл. 3.3); $б$ — типа $DO_8(\text{Fe}_3\text{Al})$; $в$ — типа $DO_{16}(\text{Mg}_3\text{Cd})$.

дается в сплавах, которые обладают объемноцентрированной кубической структурой в разупорядоченном состоянии; при упорядочении она переходит в структуру типа CsCl. Полностью упорядоченная структура имеет состав AB (фиг. 3.17, а). Сверхрешетка в этом случае — простая кубическая. Сверхструктура типа DO_3 в сплавах, полностью упорядоченное состояние которых отвечает составу AB_3 , также имеет объемноцентрированную структуру в разупорядоченном состоянии. Упорядоченное состояние показано на фиг. 3.17, б. Легче всего описать эту структуру, сказав, что она состоит из четырех взаимопроникающих г. ц. к.-решеток, начала координат которых лежат в узлах $(0, 0, 0)$ в случае решетки 1, $(\frac{1}{2}, 0, 0)$ у решетки 3, $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ у решетки 4 и $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ у решетки 2. В упорядоченном состоянии атомы B занимают узлы решеток 2, 3 и 4, а атомы A — узлы решетки 1. Сверхрешетку типа $L1_2$ мы уже рассматривали выше (фиг. 3.16, в). Полностью упорядоченное состояние требует состава AB_3 . Еще одна сверхструктура, родственная $L1_2$, также отвечает составу AB_3 в идеально упорядоченном состоянии и обозначается DO_{19} (типичный пример Mg_3Cd). В разупорядоченном состоянии сплав имеет гексагональную плотноупакованную структуру. Упорядоченную структуру можно представить как состоящую (фиг. 3.17, в) из четырех взаимопроникающих г. п. у.-структур в параллельной ориентации, период c которых имеет такую же длину, как и у упорядоченного сплава, а период a_0 в два раза больше, чем у соответствующего разупорядоченного сплава. Начала координат подрешеток в упорядоченном состоянии лежат в узлах $(0, 0, 0)$ у подрешетки 1, в узлах $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ у подрешетки 2, $(\frac{1}{2}, 0, 0)$ у подрешетки 3 и $(0, \frac{1}{2}, 0)$ у подрешетки 4. Атомы B занимают узлы подрешеток 2, 3 и 4. Атомы A располагаются в узлах подрешетки 1.

Задачи

3.1. Покажите, что если кристалл имеет гексагональную плотноупакованную структуру и атомные места заняты соприкасающимися между собой равновеликими твердыми шарами, то отношение осей будет равно 1,633.

3.2. Какая точечная группа описывает симметрию межатомных сил, действующих на: а) атом углерода в структуре алмаза; б) атом цезия в структуре CsCl; в) атом цинка в структуре цинковой обманки; г) атом цинка в структуре вюрцита; д) атом никеля в структуре никельарсенида; е) атом мышьяка в структуре никельарсенида?

Совет: вычертите стереографические проекции, показывающие расположение соседних атомов, лежащих на различных расстояниях от данного атома.

3.3. В структуре CaF_2 найдите расстояние вдоль $[111]$ между последовательными плоскостями атомов Ca и атомов F; выразите эти расстояния через длину ребра общепринятой элементарной ячейки.

3.4. Начертите структуру белого олова. Положите отношение осей c/a равным 0,545 и покажите, что отношение расстояния до первых ближайших соседей к расстоянию до вторых ближайших соседей равно 0,950.

3.5. Найдите положение оси 4_1 и координатных плоскостей скользящего отражения в элементарной ячейке белого олова.

3.6. Покажите с помощью чертежа, что если бы химический элемент, обладающий структурой висмута, имел значение параметра α (см. табл. 3.2), равное 60° , то узлы решетки, приведенной на фиг. 3.10, образовывали бы г. ц. к.-решетку.

Какой тип решетки получился бы, если бы вдобавок параметр u был равен 0,250?

3.7. Дисульфид молибдена MoS_2 имеет гексагональную примитивную решетку с атомами в следующих позициях: Mo $(0, 0, 0)$, $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$; S $(0, 0, \frac{1}{2} + z)$, $(0, 0, \frac{1}{2} - z)$; $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z)$, $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, -z)$.

а) Начертите проекцию нескольких элементарных ячеек на плоскость (0001); б) выразите последовательность укладки атомных плоскостей вдоль направления [0001] в буквенных обозначениях ($A, B, \dots, \alpha, \beta, \dots$) и сравните ее с имеющейся в CaF_2 ; в) определите местоположение центра симметрии; г) выразите координаты атомов в новой системе координат, начало которой совпадает с центром симметрии (при условии, что в старой системе координат центр симметрии имеет положительные координаты). Запишите полученные координаты в краткой форме $\pm (x, y, z)$.

3.8. Интерметаллическое соединение CaCu_5 имеет гексагональную P -решетку с периодами $a = 5,092 \text{ \AA}$, $c = 4,086 \text{ \AA}$. Координаты атомов: Ca $(0, 0, 0)$; CuI $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0)$, $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0)$; CuII $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

а) Вычертите проекцию структуры на плоскость (0001); б) сколько формульных единиц приходится на элементарную ячейку? в) найдите расстояния между атомами Ca — CuI; Ca — CuII, CuI — CuII; CuI — CuII; г) рассчитайте плотность CaCu_5 . Атомный вес кальция 40,08, меди 63,54; масса атома H равна $1,66 \cdot 10^{-24}$ г.

3.9. Раствор углерода в г. ц. к.-железе имеет плотность $8,142 \text{ г/см}^3$ и период решетки $a = 3,583 \text{ \AA}$. Раствор содержит 0,8 вес. % C. Является ли он твердым раствором внедрения или замещения?

Атомный вес железа 55,85, углерода 12,01; масса атома H равна $1,66 \cdot 10^{-24}$ г.

3.10. Кристалл вюстита (приблизительный состав FeO) имеет структуру типа NaCl и содержит 76,08 вес. % Fe. Было найдено, что его плотность равна $5,613 \text{ г/см}^3$, а период решетки $a = 4,2816 \text{ \AA}$. Содержит ли этот кристалл вакансии по железу или межузельные ионы кислорода? Какова плотность вакансий (или межузельных атомов)?

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ЧТЕНИЯ

Описание кристаллических структур можно найти в следующих источниках:

1. Strukturberichte 1913—1928, Ewald P. P., Herman C., Akad. Verlag, Leipzig, 1931. Впоследствии вышли еще шесть томов этого издания; том VII (1943 г.) охватывает литературу вплоть до 1939 г.

Продолжением серии Strukturberichte в настоящее время являются выпуски Structure Reports (International Union of Crystallography, N. V. A. Oosthoek's Uitgevers M.I.J., Utrecht). Ко времени написания данной книги вышло 23 тома этого издания; последний из них охватывает литературу до 1959 г.

2. Wyckoff R. W. G., Crystal Structures, 2nd Ed., vol. 1 and oth., Interscience. (J. Wiley), New York, 1963. Это издание заменило прежнее издание со свободными листами, печатное Уайковым в 1948 г., которое в свою очередь было

- продолжением издания The Structure of Crystals, ed. by Wyckoff R. W. G., Chemical Catalogue Co., New York, 1924.
3. de Jong W. F., General Crystallography, Freeman W. H., San Francisco, 1959.
 4. Bragg W. L., Claringbull G. F., Crystal Structures of Minerals, Bell and Sons. London, 1965; имеется перевод: Брэгг У., Кларингбулл Г., Кристаллическая структура минералов, изд-во «Мир», 1967.
 5. Pearson W. B., Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals, Pergamon Press, vol. 1, 1958, vol. 2, 1967.
 6. International Tables for X-ray Crystallography, vol. 2, 3 Kynoch Press, Birmingham — London, 1971, 1972.
 - 7*. Бокый Г. Б., Кристаллохимия, изд-во «Наука», 1972.
 - 8*. Белов Н. В., Структура ионных кристаллов и металлических фаз, Изд-во АН СССР, 1947.
 - 9*. Костов И., Кристаллография, изд-во «Мир», М., 1965.
 - 10*. Нарай-Сабо Й., Неорганическая кристаллохимия, АН Венгрии, Будапешт, 1969.

Глава 4

Тензоры

4.1. Природа и свойства тензоров

Понятие тензора можно вводить по-разному. Мы будем определять тензор как величину, которая связывает между собой два вектора, причем каждый вектор характеризует определенную физическую величину. Допустим, что нам надо установить связь между электрическим полем в кристалле и плотностью тока (т. е. силой тока на единицу площади поперечного сечения, перпендикулярного току); электрическое поле описывается вектором \mathbf{E} , а плотность тока — вектором \mathbf{J} .

В кристалле компоненты вектора \mathbf{J} по трем взаимно перпендикулярным осям (Ox_1, Ox_2, Ox_3), которые мы обозначим J_1, J_2, J_3 , связаны с компонентами вектора \mathbf{E} по тем же осям в общем случае так, что каждая из компонент J_1, J_2, J_3 линейно зависит от всех трех компонент E_1, E_2, E_3 . Принято записывать это так:

$$\begin{aligned} J_1 &= \sigma_{11}E_1 + \sigma_{12}E_2 + \sigma_{13}E_3, \\ J_2 &= \sigma_{21}E_1 + \sigma_{22}E_2 + \sigma_{23}E_3, \\ J_3 &= \sigma_{31}E_1 + \sigma_{32}E_2 + \sigma_{33}E_3. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Девять величин $\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{21}, \sigma_{22}, \sigma_{23}, \sigma_{31}, \sigma_{32}, \sigma_{33}$ называются компонентами тензора электропроводности. Этот тензор связывает между собой векторы \mathbf{J} и \mathbf{E} . Все уравнения (4.1) можно записать сокращенно как

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (4.2)$$

где σ — величина, на которую нужно умножить вектор \mathbf{E} , чтобы получить вектор \mathbf{J} . Если тензор связывает между собой два вектора именно таким образом, то он называется тензором второго ранга или второй валентности¹⁾.

Таковыми же тензорами, как тензор электропроводности, выражаются многие физические свойства. Подобные тензоры называются *материальными тензорами*. Некоторые примеры их приведены в табл. 4.1.

¹⁾ В математической литературе иногда употребляют термин «валентность», в кристаллофизической говорят только о «ранге» тензора. — *Прим. ред.*

Таблица 4.1

Физические свойства кристаллов, описываемые тензорами второго ранга

Тензор	Векторы, связываемые тензором	
Электропроводность	Напряженность электрического поля	Плотность тока
Теплопроводность	Градиент температуры (отрицательный)	Плотность теплового потока
Коэффициент диффузии	Градиент концентрации (отрицательный)	Поток атомов
Диэлектрическая проницаемость	Напряженность электрического поля	Электрическая индукция
Диэлектрическая восприимчивость	То же	Электрическая поляризация
Магнитная проницаемость	Напряженность магнитного поля	Магнитная индукция
Магнитная восприимчивость	То же	Интенсивность намагничивания

Кроме того, существуют *полевые тензоры*, причем два из них особенно важны — тензор напряжений и тензор деформаций. Тензор напряжений связывает между собой вектор силы, действующей на единицу площади, и ориентацию этой элементарной площадки в напряженном теле. Тензор деформации связывает смещение точки в деформированном теле с положением этой точки (гл. 5).

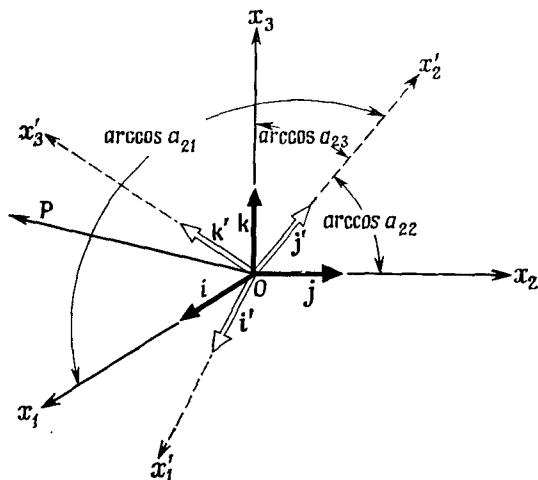
4.2. Преобразование компонент вектора

Если нам известны компоненты вектора, например \mathbf{P} , по некой ортогональной системе осей координат (Ox_1, Ox_2, Ox_3) , часто требуется знать, каковы компоненты того же вектора в другой системе координат (Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3) , тоже ортогональной и имеющей общее начало с первой системой координат (фиг. 4.1). Сначала надо определить, как связаны между собой эти две системы осей. Представим эту связь в виде таблицы косинусов углов между каждой из осей новой системы координат и каждой из трех осей старой системы:

Новые оси	Старые оси		
	x_1	x_2	x_3
x'_1	a_{11}	a_{12}	a_{13}
x'_2	a_{21}	a_{22}	a_{23}
x'_3	a_{31}	a_{32}	a_{33}

(4.3)

Здесь, например, a_{32} — это косинус угла между новой осью 3 и старой осью 2, т. е. угол $x'_3 O x_2$ (фиг. 4.1); аналогично a_{11} — это косинус угла между $O x'_1$ и $O x_1$ и т. д. В выражении типа (4.3) сумма квадратов любого ряда и любой строки равна единице,



Ф и г. 4.1. К преобразованию компонент вектора.

потому что обе системы осей ортогональны. Так, например, $a_{11}^2 + a_{21}^2 + a_{31}^2 = 1$ и $a_{21}^2 + a_{22}^2 + a_{23}^2 = 1$ и т. д.

Положим теперь, что в старой системе координат компоненты вектора \mathbf{P} равны P_1, P_2 и P_3 , так что

$$\mathbf{P} = P_1 \mathbf{i} + P_2 \mathbf{j} + P_3 \mathbf{k}, \quad (4.4)$$

где $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ — единичные векторы по осям Ox_1, Ox_2, Ox_3 соответственно. Тогда компоненту вектора \mathbf{P} по новой оси Ox'_1 можно найти, определив проекции трех компонентов в старой системе осей (т. е. $P_1 \mathbf{i}, P_2 \mathbf{j}, P_3 \mathbf{k}$) на новую ось и сложив все эти проекции. Получим

$$P'_1 = a_{11}P_1 + a_{12}P_2 + a_{13}P_3. \quad (4.4a)$$

Аналогично найдем новые компоненты \mathbf{P} по осям Ox'_2, Ox'_3 , т. е. P'_2, P'_3 , а именно

$$P'_2 = a_{21}P_1 + a_{22}P_2 + a_{23}P_3 \quad (4.4b)$$

и

$$P'_3 = a_{31}P_1 + a_{32}P_2 + a_{33}P_3. \quad (4.4b)$$

Величина и направление вектора \mathbf{P} не зависят от выбора системы координат. Если $\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}'$ — единичные векторы по осям $Ox'_1, Ox'_2,$

Ох', тогда

$$P_1 \mathbf{i} + P_2 \mathbf{j} + P_3 \mathbf{k} = P'_1 \mathbf{i}' + P'_2 \mathbf{j}' + P'_3 \mathbf{k}'. \quad (4.5)$$

На основании системы (4.3) имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{i}' &= a_{11} \mathbf{i} + a_{12} \mathbf{j} + a_{13} \mathbf{k}, \\ \mathbf{j}' &= a_{21} \mathbf{i} + a_{22} \mathbf{j} + a_{23} \mathbf{k}, \\ \mathbf{k}' &= a_{31} \mathbf{i} + a_{32} \mathbf{j} + a_{33} \mathbf{k} \end{aligned} \quad (4.6a)$$

и, обратно,

$$\begin{aligned} \mathbf{i} &= a_{11} \mathbf{i}' + a_{21} \mathbf{j}' + a_{31} \mathbf{k}', \\ \mathbf{j} &= a_{12} \mathbf{i}' + a_{22} \mathbf{j}' + a_{32} \mathbf{k}', \\ \mathbf{k} &= a_{13} \mathbf{i}' + a_{23} \mathbf{j}' + a_{33} \mathbf{k}'. \end{aligned} \quad (4.6b)$$

Соотношения (4.4a)—(4.4в) можно вывести и по-другому, а именно выразить каждый из векторов \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} по (4.6b) через \mathbf{i}' , \mathbf{j}' , \mathbf{k}' и подставить их затем в (4.4), заметив при этом, что P'_i является коэффициентом единичного вектора \mathbf{i}' . Читателю полезно выписать полностью всю эту подстановку в качестве упражнения. Действуя таким же образом, можем получить выражения и для старых компонент вектора \mathbf{P} , т. е. $[P_1 P_2 P_3]$, через новые компоненты, подставляя \mathbf{i}' , \mathbf{j}' , \mathbf{k}' , выраженные через \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} [по уравнению (4.6a)], в правую часть уравнения (4.5) и последовательно приравнивая друг другу члены обеих частей этого уравнения. Поступая так, получим

$$\begin{aligned} P_1 &= a_{11} P'_1 + a_{21} P'_2 + a_{31} P'_3, \\ P_2 &= a_{12} P'_1 + a_{22} P'_2 + a_{32} P'_3, \\ P_3 &= a_{13} P'_1 + a_{23} P'_2 + a_{33} P'_3. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Уравнения (4.7) являются обратными уравнениям (4.4a)—(4.4в). Воспользуемся теперь этими результатами для преобразования компонент векторов в уравнениях типа (4.2).

Тензор — это величина, на которую надо умножить один вектор, чтобы получить другой вектор, в общем случае не параллельный первому; абсолютные величины этих двух векторов тоже не одинаковы. Возвращаясь к нашему примеру с тензором электропроводности, мы можем теперь представить уравнения (4.1) в виде

$$\begin{aligned} J_1 \mathbf{i} &= (\sigma_{11} E_1 + \sigma_{12} E_2 + \sigma_{13} E_3) \mathbf{i}, \\ J_2 \mathbf{j} &= (\sigma_{21} E_1 + \sigma_{22} E_2 + \sigma_{23} E_3) \mathbf{j}, \\ J_3 \mathbf{k} &= (\sigma_{31} E_1 + \sigma_{32} E_2 + \sigma_{33} E_3) \mathbf{k}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Сложим эти три уравнения и запишем правую часть в новом виде:

$$\begin{aligned} J_1 \mathbf{i} + J_2 \mathbf{j} + J_3 \mathbf{k} = \\ = [\sigma_{11} \mathbf{i} \mathbf{i} + \sigma_{12} \mathbf{i} \mathbf{j} + \sigma_{13} \mathbf{i} \mathbf{k} + \sigma_{21} \mathbf{j} \mathbf{i} + \sigma_{22} \mathbf{j} \mathbf{j} + \sigma_{23} \mathbf{j} \mathbf{k} + \sigma_{31} \mathbf{k} \mathbf{i} + \\ + \sigma_{32} \mathbf{k} \mathbf{j} + \sigma_{33} \mathbf{k} \mathbf{k}] (E_1 \mathbf{i} + E_2 \mathbf{j} + E_3 \mathbf{k}). \quad (4.9) \end{aligned}$$

Величину в квадратных скобках можно рассматривать как оператор, которым действуют на вектор \mathbf{E} , чтобы получить из него вектор \mathbf{J} . Форма, в которой здесь записан этот оператор, соответствует ортогональным осям, определяемым единичными векторами $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ ¹⁾. Мы будем «умножать» вектор $\mathbf{E} = E_1 \mathbf{i} + E_2 \mathbf{j} + E_3 \mathbf{k}$ на оператор, заключенный в квадратные скобки, так же, как если бы мы получали скалярное произведение путем перемножения двух векторов (см. приложение 2).

Чтобы понять систему (4.9), лучше всего выписать ее правую часть член за членом. Первый член $\sigma_{11} \mathbf{i} \mathbf{i} \cdot E_1 \mathbf{i} = \sigma_{11} E_1 \mathbf{i}$, потому что $\mathbf{i} \cdot \mathbf{i} = 1$. Следующий член $\sigma_{12} \mathbf{i} \mathbf{j} \cdot E_2 \mathbf{j} = 0$, потому что $\mathbf{i} \cdot \mathbf{j} = 0$, поскольку оси координат ортогональны. Точно так же $\sigma_{13} \mathbf{i} \mathbf{k} \cdot E_3 \mathbf{k} = 0$ и $\sigma_{21} \mathbf{j} \mathbf{i} \cdot E_1 \mathbf{i} = 0$, но пятый член $\sigma_{22} \mathbf{j} \mathbf{j} \cdot E_2 \mathbf{j} = \sigma_{22} E_2 \mathbf{j}$, поскольку $\mathbf{j} \cdot \mathbf{j} = 1$. Если выписать все члены и привести подобные, получим в конце концов уравнения (4.8), которые можно записать и как уравнения (4.1). Уравнение (4.9) представляет собой уравнение (4.2) в развернутом виде. Иначе говоря, самой компактной формой уравнения (4.9) служит уравнение (4.2).

В уравнение (4.9) входят компоненты тензора электропроводности $\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{13}, \dots, \sigma_{33}$ по осям (Ox_1, Ox_2, Ox_3), которые определяются единичными векторами $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$. Зная, как преобразуются компоненты вектора, мы можем преобразовать компоненты тензора. Если выберем новую систему осей координат с единичными векторами $\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}'$, то компоненты тензора электропроводности σ изменятся и мы можем определить их, подставляя вместо $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ в уравнение (4.9) величины $\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}'$, отнесенные к новым осям по уравнению (4.6а). Вместо E_1, E_2, E_3 нам придется подставить компоненты вектора \mathbf{E} по новым осям, т. е. E'_1, E'_2, E'_3 , так что новые компоненты тензора $\sigma'_{11}, \sigma'_{12}, \sigma'_{33}$ и т. д., умноженные на новые компоненты \mathbf{E} , в форме уравнения (4.9) дадут компоненты вектора \mathbf{J} в новой системе осей координат. Полная запись очень громоздка, поэтому сначала введем более удобную, сокращенную форму записи.

¹⁾ Следует обратить внимание на то, что в квадратных скобках приведены не скалярные произведения $\mathbf{i} \cdot \mathbf{i}$ (равные единице), а величины $\mathbf{i} \mathbf{i}$.

4.3. Немой индекс (индекс суммирования)

Тензор T связывает между собой вектор P [$P_1 P_2 P_3$] и вектор q [$q_1 q_2 q_3$] так, что

$$\begin{aligned} P_1 &= T_{11} q_1 + T_{12} q_2 + T_{13} q_3, \\ P_2 &= T_{21} q_1 + T_{22} q_2 + T_{23} q_3, \\ P_3 &= T_{31} q_1 + T_{32} q_2 + T_{33} q_3. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Эти уравнения можно записать как

$$P_i = \sum_{j=1}^{j=3} T_{ij} q_j, \quad P_2 = \sum_{j=1}^{j=3} T_{2j} q_j, \quad P_3 = \sum_{j=1}^{j=3} T_{3j} q_j$$

или, еще короче, как

$$P_i = \sum_{j=1}^{j=3} T_{ij} q_j \quad (i = 1, 2, 3).$$

Опустим теперь знак суммы и введем правило, которое называется *правилом Эйнштейна*: если в одном и том же члене индекс повторяется дважды, то автоматически подразумевается суммирование по этому индексу. В дальнейшем суммирование всегда будет производиться по значениям 1, 2, 3 как для i , так и для j . Уравнения (4.10) в сокращенной форме имеют вид

$$P_i = T_{ij} q_j. \quad (4.11)$$

Здесь j называется *немой индексом*, потому что безразлично, какой буквой мы его обозначаем.

Уравнение (4.11) можно было бы записать и как

$$P_i = T_{ik} q_k.$$

Если мы воспользуемся этим обозначением для уравнений (4.4а) — (4.4б), то все эти три уравнения будут содержаться в выражении

$$P'_i = a_{ij} P_j. \quad (4.12a)$$

Заметим, что немой индекс встречается на соседних местах. Воспользовавшись тем же обозначением для уравнений (4.7), получим

$$P_i = a_{ji} P'_j, \quad (4.12b)$$

т. е. когда «старые» компоненты выражаются через «новые», то немые индексы не должны стоять рядом.

Встретившись с этими обозначениями впервые, лучше начать с того, что выписать подряд все слагаемые. Так, например,

$P'_i = a_{ij}P_j$ раскрывается как

$$P'_1 = a_{1j}P_j,$$

$$P'_2 = a_{2j}P_j,$$

$$P'_3 = a_{3j}P_j.$$

Эти три суммы можно теперь раскрывать дальше, не боясь ошибиться.

4.4. Преобразование компонент тензора второго ранга

Пусть два вектора $\mathbf{P} = [P_1 P_2 P_3]$ и $\mathbf{q} = [q_1 q_2 q_3]$ связаны между собой тензором T_{ij} . Компоненты T_{ij} связывают компоненты \mathbf{q} с компонентами \mathbf{P} согласно уравнению (4.10) или, в сокращенной форме, по уравнению (4.11). Но компоненты обоих этих векторов зависят от выбора осей координат, поскольку этим выбором определяются значения $[P_1 P_2 P_3]$ и $[q_1 q_2 q_3]$. Сами векторы \mathbf{P} и \mathbf{q} не зависят от выбора осей координат. Если меняются оси координат, а значит, меняются и компоненты \mathbf{P} и \mathbf{q} , то меняются и компоненты тензора T_{ij} .

Положим, что $\mathbf{P} [P_1 P_2 P_3]$ и $\mathbf{q} [q_1 q_2 q_3]$ связаны между собой тензором \mathbf{T} , так что

$$\mathbf{P} = \mathbf{T}\mathbf{q}, \quad (4.13)$$

и ли, что то же самое, при заданном выборе осей координат $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$

$$P_i = T_{ij}q_j. \quad (4.14)$$

Выберем теперь новые оси $\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}'$ так, что

$$P'_i = T'_{ij}q'_j, \quad (4.15)$$

и будем искать соотношение между девятью компонентами T'_{ij} и девятью компонентами T_{ij} .

Это соотношение можно найти, непосредственно записав уравнение (4.13) в форме оператора, как в уравнении (4.9), т. е.

$$\begin{aligned} P_1\mathbf{i} + P_2\mathbf{j} + P_3\mathbf{k} = [T_{11}\mathbf{ii} + T_{12}\mathbf{ij} + T_{13}\mathbf{ik} + T_{21}\mathbf{ji} + \\ + T_{22}\mathbf{jj} + T_{23}\mathbf{jk} + T_{31}\mathbf{ki} + T_{32}\mathbf{kj} + T_{33}\mathbf{kk}] \times \\ \times (q_1\mathbf{i} + q_2\mathbf{j} + q_3\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Подставим теперь в это уравнение вместо $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ значения этих величин, выраженные через $\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}'$ по уравнению (4.6б). Левая часть уравнения в соответствии с (4.5) может быть представлена в виде $P'_1\mathbf{i}' + P'_2\mathbf{j}' + P'_3\mathbf{k}'$. Аналогично выражение в круглых скобках в правой части уравнения (4.16) принимает вид $q'_1\mathbf{i}' + q'_2\mathbf{j}' + q'_3\mathbf{k}'$. Так же поступаем с тензорным оператором, заключенным в квадратные скобки, и подставляем вместо $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ величини-

ны i' , j' , k' по уравнению (4.66). Всего получится 81 член. Если собрать, например, все члены, которые содержат векторы j' , k' , то таких членов окажется девять, а коэффициентами при j' , k' будут новые компоненты T'_{23} . Выпишем выражение для T'_{23} :

$$T'_{23} = (a_{21}a_{31}T_{11} + a_{21}a_{32}T_{12} + a_{21}a_{33}T_{13} + a_{22}a_{31}T_{21} + a_{22}a_{32}T_{22} + a_{22}a_{33}T_{23} + a_{23}a_{31}T_{31} + a_{23}a_{32}T_{32} + a_{23}a_{33}T_{33}). \quad (4.16a)$$

Точно так же можно найти остальные восемь компонент T'_{ij} , собирая соответственно члены с $i'i'$, $i'j'$, $i'k'$, $j'j'$, $j'i'$, $k'i'$, $k'j'$ и $k'k'$.

Полную схему преобразования компонент T_{ij} легче всего записать и запомнить, если воспользоваться немым индексом. В старой системе осей i, j, k мы имели дело со старыми компонентами вектора P , т. е. $[P_1 P_2 P_3]$. Они связаны со старыми компонентами q , т. е. $[q_1 q_2 q_3]$, уравнением (4.14). Выберем теперь новые оси i', j', k' , связанные со старыми осями таблицей косинусов (4.3). Чтобы найти новые компоненты тензора T_{ij} , связывающие $[P'_1 P'_2 P'_3]$ с $[q'_1 q'_2 q'_3]$, нужно выполнить следующие операции: а) записать P' через P ; б) записать P через q ; в) записать q через q' . Операция а) осуществляется с помощью формулы (4.12а), а в этом уравнении j является немым индексом, так что мы можем записать (4.12а) как

$$P'_i = a_{ik}P_k.$$

Далее воспользуемся уравнением (4.14), чтобы выполнить операцию б), и получим $P_k = T_{kl}q_l$.

Операция в) выполняется, если воспользоваться для q_i уравнением типа (4.12б). В итоге, если провести все эти три операции, получим

$$P'_i = a_{ik}P_k = a_{ik}T_{kl}q_l = a_{ik}T_{kl}a_{jl}q'_j$$

или

$$P'_i = a_{ik}T_{kl}a_{jl}q'_j.$$

Это уравнение типа (4.15). Сравнивая эти два уравнения, получаем важную формулу

$$T'_{ij} = a_{ik}T_{kl}a_{jl}. \quad (4.17)$$

Это формула преобразования компонент тензора второго ранга при перемене осей координат.

Уравнение (4.17) очень важно, и его надо хорошо понимать. Принятая форма записи с помощью немых индексов такова, что порядок сомножителей в произведении не играет роли, и поэтому правую часть (4.17) можно записать как $a_{ik} a_{jl} T_{kl}$ или как $T_{kl} a_{jl} a_{ik}$. Уравнение (4.17) легче всего запомнить как

$$T'_{ij} = a_{ik}a_{jl}T_{kl}. \quad (4.18)$$

Уравнение (4.18), если выписать его в полном виде, содержит 81 член, по 9 для каждого из значений i и j . Для каждого из значений i и j нужно проводить суммирование по k и по l . Полезно выписать суммирование по каждому из них отдельно в развернутой форме. Например,

$$T'_{23} = a_{2k}a_{3l}T_{kl}.$$

Суммируем по k :

$$T'_{23} = a_{21}a_{3l}T_{1l} + a_{22}a_{3l}T_{2l} + a_{23}a_{3l}T_{3l}.$$

Суммируя далее по l , получаем

$$T'_{23} = a_{21}a_{31}T_{11} + a_{21}a_{32}T_{12} + a_{21}a_{33}T_{13} + a_{22}a_{31}T_{21} + \\ + a_{22}a_{32}T_{22} + a_{22}a_{33}T_{23} + a_{23}a_{31}T_{31} + a_{23}a_{32}T_{32} + a_{23}a_{33}T_{33}, \quad (4.19)$$

т. е. точно то же, что в (4.16).

Преобразование, обратное соотношению (4.18), дающее компоненты тензора T_{ij} через новые компоненты тензора T'_{ij} , можно выполнить совершенно аналогично. Оно приведет к уравнению

$$T_{ij} = a_{ki}a_{lj}T'_{kl}. \quad (4.20)$$

Полезно проделать это в качестве упражнения.

4.5. Определение тензора

Если оператор \mathbf{T} связывает друг с другом два вектора \mathbf{P} и \mathbf{q} , так что \mathbf{T} можно записать в виде оператора, описываемого уравнением (4.16), то \mathbf{T} представляет собой тензор второго ранга (второй валентности), или диаду. Иначе говоря, мы можем определить тензор второго ранга как физическую величину, имеющую девять компонент по осям x_i , которые преобразуются по уравнению (4.18), при перемене системы координат¹⁾. Тензор T_{ij} называют *симметричным*, если $T_{ij} = T_{ji}$, и *антисимметричным* или *асимметричным* (кососимметричным), если $T_{ij} = -T_{ji}$. Например, тен-

¹⁾ При таком определении скаляр — это тензор нулевого ранга, потому что при перемене осей координат он преобразуется по закону $\rho' = \rho$. Вектор оказывается тензором первого ранга, так как его компоненты при перемене осей координат преобразуются по правилу [уравнение (4.12a)] $P'_i = a_{ij}P_j$. Компоненты тензора второго ранга преобразуются как $T'_{ij} = a_{ik}a_{jl}T_{kl}$, компоненты тензора третьего ранга — [как $T'_{ijk} = a_{il}a_{jm}a_{kn}T_{lmn}$ и т. д. Подобно тому как тензор второго ранга связывает между собой два вектора, тензор третьего ранга связывает между собой тензор второго ранга и вектор, а тензор четвертого ранга связывает два тензора второго ранга и т. д. Иногда для определения числа индексов тензора пользуются словом «порядок», а не «ранг».

зор с компонентами

$$\begin{bmatrix} 9 & -4 & 1 \\ -4 & 7 & 2 \\ 1 & 2 & 6 \end{bmatrix}$$

является симметричным. У антисимметричного тензора все диагональные члены T_{ij} должны равняться нулю. Например, тензор

$$\begin{bmatrix} 0 & -\gamma & \beta \\ \gamma & 0 & -\alpha \\ -\beta & \alpha & 0 \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

антисимметричен.

Симметричность или антисимметричность тензора не зависит от выбора системы координат. Два тензора равны друг другу, если каждая компонента одного из них равна соответственной компоненте другого.

Любой тензор второго ранга можно представить как сумму симметричного и антисимметричного тензоров, потому что любую компоненту T_{ij} всегда можно записать как

$$T_{ij} = 1/2 (T_{ij} + T_{ji}) + 1/2 (T_{ij} - T_{ji}).$$

Первый из этих членов содержит компоненты симметричного тензора, а второй — компоненты антисимметричного тензора.

Любой симметричный тензор S_{ij} при надлежащем выборе системы координат можно преобразовать так, что он принимает простой вид

$$\begin{bmatrix} S_{11} & 0 & 0 \\ 0 & S_{22} & 0 \\ 0 & 0 & S_{33} \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

т. е. все $S_{ij} = 0$, за исключением $i = j$. Если тензор выражен в таком виде, то говорят, что он отнесен к своим *главным осям*. Компоненты S_{11} , S_{22} , S_{33} , отнесенные к главным осям, называются *главными компонентами* и их часто записывают просто как S_1 , S_2 , S_3 . Соответственно тензор второго ранга записывается как

$$S_1 \mathbf{i}\mathbf{i} + S_2 \mathbf{j}\mathbf{j} + S_3 \mathbf{k}\mathbf{k}. \quad (4.23)$$

Все эти утверждения мы не будем доказывать.

Доказательства можно найти в книгах, перечисленных в конце этой главы.

4.6. Тензор, отнесенный к главным осям

Если симметричный тензор (S_{ij}), связывающий между собой векторы \mathbf{p} и \mathbf{q} , отнесен к своим главным осям, то у него только диагональные компоненты S_{11} , S_{22} и S_{33} отличны от нуля.

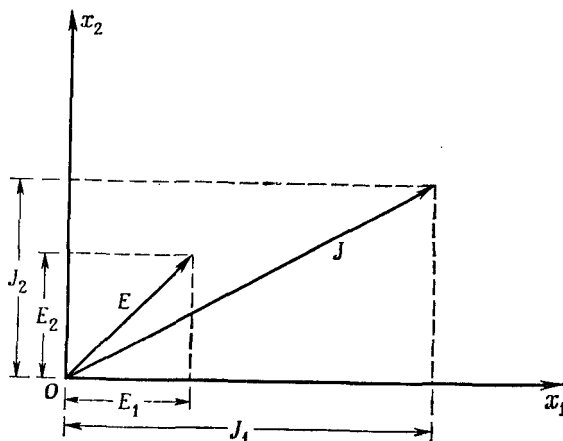
Тогда уравнения

$$P_i = S_{ij}q_j$$

принимают простой вид

$$P_1 = S_{11}q_1, \quad P_2 = S_{22}q_2, \quad P_3 = S_{33}q_3.$$

Вернемся теперь к простому примеру электропроводности. Тензор электропроводности σ_{ij} симметричен, и если отнести его



Фиг. 4.2. К выводу соотношения между векторами напряженности электрического поля \mathbf{E} и плотности тока \mathbf{J} в кристалле.

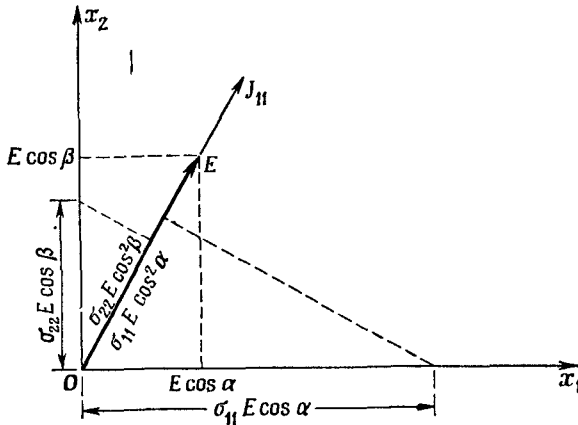
к главным осям, то все $\sigma_{ij} = 0$, кроме σ_{11} , σ_{22} и σ_{33} . Будем считать, что действует электрическое поле \mathbf{E} с компонентами $\{E_1 \ E_2 \ 0\}$ по этим главным осям. Тогда

$$\mathbf{J}_1 = \sigma_{11}E_1 + \sigma_{12}E_2 + \sigma_{13}E_3 = \sigma_{11}E_1,$$

потому что и σ_{12} , и σ_{13} равны нулю.

Точно так же $J_2 = \sigma_{22}E_2$ и $J_3 = \sigma_{33}E_3$, но мы приняли, что $E_3 = 0$, поэтому $J_3 = 0$. Это можно показать на схеме фиг. 4.2. Чтобы построить эту схему, надо отложить \mathbf{E} и найти E_1 и E_2 ; умножая затем E_1 на σ_{11} , получим J_1 , а умножая E_2 на σ_{22} , получим J_2 . Затем можно построить \mathbf{J} , зная его компоненты по осям координат, т. е. J_1 и J_2 . Нужно особо подчеркнуть, что \mathbf{E} и \mathbf{J} не параллельны. Если бы вектор \mathbf{E} был направлен вдоль Ox , мы получили бы $J_1 = \sigma_{11}E_1$, потому что тогда J_2 и J_3 были бы равны нулю. Значит, если вектор \mathbf{E} направлен по одной из главных осей, то вектор \mathbf{J} параллелен \mathbf{E} . В общем случае электропроводность по трем главным осям не одинакова, поскольку не одинаковы значения σ_{11} , σ_{22} , σ_{33} .

Если говорят об электропроводности в каком-то заданном направлении, то при этом подразумевается, что поле \mathbf{E} приложено в этом направлении и плотность тока \mathbf{J} измерена в том же направлении, т. е. измерена ее компонента J_{\parallel} , так что электропроводность в этом направлении равна компоненте J_{\parallel} , деленной на абсолютную величину E , т. е. $J_{\parallel}/|E|$. Найдем выражение для компоненты J , параллельной E . Пусть поле E действует в направлении,



Ф и г. 4.3. К выводу величины электропроводности в заданном направлении.

Чертеж построен для частных значений $\sigma_{11} = 2,5$ и $\sigma_{22} = 0,75$ (Ом·см)⁻¹.

косинусы углов которого с главными осями тензора электропроводности обозначим $\cos \alpha$, $\cos \beta$, $\cos \gamma$. Тогда получаем

$$J_1 = \sigma_{11} E_1 = \sigma_{11} E \cos \alpha,$$

$$J_2 = \sigma_{22} E_2 = \sigma_{22} E \cos \beta,$$

$$J_3 = \sigma_{33} E_3 = \sigma_{33} E \cos \gamma,$$

где E — абсолютная величина \mathbf{E} (т. е. $|\mathbf{E}|$). Отсюда имеем

$$J_{\parallel} = J_1 \cos \alpha + J_2 \cos \beta + J_3 \cos \gamma = \\ = E(\sigma_{11} \cos^2 \alpha + \sigma_{22} \cos^2 \beta + \sigma_{33} \cos^2 \gamma),$$

и, таким образом, проводимость в данном направлении оказывается равной

$$\sigma = J_{\parallel}/E = \sigma_{11} \cos^2 \alpha + \sigma_{22} \cos^2 \beta + \sigma_{33} \cos^2 \gamma. \quad (4.24)$$

Последовательные этапы вывода уравнения (4.24) схематически показаны на фиг. 4.3 для частного случая, когда вектор \mathbf{E} нормален к главной оси Ox_3 тензора электропроводности, так что $\cos \gamma = 0$.

Результат, описываемый уравнением (4.24), полезно вывести еще одним способом. Допустим, что нам надо отыскать значение компоненты σ'_{11} тензора электропроводности независимо от того, отнесен ли он к главным осям или нет. Компонента σ'_{11} связывает напряженность электрического поля вдоль оси Ox'_1 с компонентой плотности тока вдоль той же оси Ox'_1 . Поэтому если надо найти значение электропроводности в заданном направлении, зная компоненты тензора электропроводности, отнесенные к главным осям, то будем поступать следующим образом. Выберем новую систему осей координат так, чтобы ось Ox'_1 была параллельна интересующему нас направлению. Тогда компонента σ'_{11} тензора электропроводности, отнесенного к этой новой системе координат, даст нам искомое значение электропроводности в заданном направлении. нас интересует только компонента σ'_{11} , поэтому, чтобы написать совокупность величин a_{ij} для этого преобразования, достаточно знать только значения косинусов углов между Ox'_1 и главными осями тензора электропроводности Ox_1 , Ox_2 и Ox_3 . Согласно уравнениям (4.3), достаточно знать только a_{11} , a_{12} и a_{13} ; эти величины представляют собой соответственно $\cos \alpha$, $\cos \beta$ и $\cos \gamma$. Воспользовавшись формулой преобразования (4.18), получим

$$\sigma'_{ij} = a_{ik} a_{jl} \sigma_{kl}$$

и отсюда

$$\sigma'_{11} = a_{1k} a_{1l} \sigma_{kl}. \quad (4.25)$$

Поскольку σ_{ij} отнесены к своим главным осям, все члены в (4.25) равны нулю, кроме тех, в которых $k = l$, так что

$$\sigma'_{11} = a_{11} a_{11} \sigma_{11} + a_{12} a_{12} \sigma_{22} + a_{13} a_{13} \sigma_{33}.$$

Подставляя выражения для a_{11} , a_{12} , a_{13} , получаем

$$\sigma'_{11} = \sigma_{11} \cos^2 \alpha + \sigma_{22} \cos^2 \beta + \sigma_{33} \cos^2 \gamma,$$

т. е. приходим к уравнению (4.24).

Совершенно очевидно, что точно тем же путем мы могли бы найти электропроводность в заданном направлении, даже если бы нам были заданы значения компонент тензора электропроводности σ_{ij} , отнесенные не к главным осям. В общем случае в уравнении (4.25) в развернутом виде было бы тогда девять членов. В выводе формул (4.25) не содержится предположения, что компоненты σ_{ij} отнесены к главным осям. Теперь можно сформулировать, как находить свойство кристалла в заданном направлении.

Допустим, что заданы компоненты описывающего это свойство тензора T_{ij} в осях (Ox_1 , Ox_2 , Ox_3). Выберем одну из осей вдоль интересующего нас направления. Пусть направляющие косинусы этого направления по отношению к осям (Ox_1 , Ox_2 , Ox_3) будут

соответственно a_1, a_2, a_3 . Тогда значение свойства, характеризующего тензором T в заданном направлении, будет

$$T = a_i a_j T_{ij}. \quad (4.26)$$

Это выражение пригодно для всех тензоров второго ранга независимо от того, симметричны они или нет.

4.7. Ограничения, налагаемые симметрией кристалла

В этом разделе будут рассматриваться *тензоры, описывающие физические свойства* кристаллов, причем только кристаллов бездефектных.

Допустим, что две векторные величины \mathbf{P} и \mathbf{q} связаны между собой в кристалле тензором T_{ij} , так что этот тензор описывает физическое свойство кристалла. Тогда сам кристалл определяет соотношения между компонентами \mathbf{P} и компонентами \mathbf{q} , и мы представляем эти соотношения с помощью тензора T_{ij} . Запишем компоненты тензора T_{ij} в какой-нибудь системе координат. Если теперь выбрать другую систему осей координат в кристалле, то компоненты \mathbf{P} и \mathbf{q} в этой новой системе в общем случае окажутся другими, а значит, изменится и соотношение между компонентами \mathbf{P} и \mathbf{q} .

Если же новую систему координат в кристалле выбрать так, чтобы она была связана со старой некоторыми операциями симметрии, то значения компонент \mathbf{P} и \mathbf{q} в этой новой системе координат будут отличаться от их значений в старой системе, но *соотношение* между компонентами \mathbf{P} и \mathbf{q} останется неизменным, т. е.

$$T'_{ij} = T_{ij}.$$

Так получится потому, что *свойство кристалла не меняется при перемене осей координат*. Это должно быть верно для любых преобразований симметрии. На компоненты тензора T_{ij} , описывающего физическое свойство кристалла, накладываются поэтому определенные ограничения. Такие же рассуждения приведут к ограничениям, налагаемым на тензоры третьего и более высоких порядков. Пример их встретится в разд. 5.5.

Физические свойства, характеризующие тензором второго ранга, обязательно *центросимметричны*. Это подразумевается в линейных соотношениях

$$P_i = T_{ij} q_j,$$

потому что если мы заменим P_i на $-P_i$, а q_j на $-q_j$ (т. е. если поменяем направления векторов \mathbf{P} и \mathbf{q} на обратные), то эти соотношения будут сохраняться при тех же значениях T_{ij} .

Мы сможем легче понять дальнейшее, если посмотрим на предыдущее рассуждение с другой точки зрения. Допустим, что для

какой-то системы осей координат (Ox_1 , Ox_2 и Ox_3) соотношение между P_i и q_j задано тензором T_{ij} . Если теперь мы поменяем направления осей координат, оставив неизменными векторы \mathbf{P} и \mathbf{q} , это равносильно тому, что мы выберем новую систему осей координат так, чтобы этим осям отвечала совокупность величин a_{ij} , имеющая вид

$$\begin{array}{ccc} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{array}$$

Воспользуемся теперь формулой преобразования (4.18):

$$T'_{ij} = a_{ih} a_{jl} T_{hl}.$$

Все a_{ij} равны нулю, кроме тех, для которых $i = j$. Поэтому

$$T'_{ij} = a_{ii} a_{jj} T_{ij} = T_{ij},$$

поскольку

$$a_{11} = a_{22} = a_{33} = -1.$$

Таким образом, мы оставили измеренные величины \mathbf{P} и \mathbf{q} неизменными и произвели инверсию кристалла в центре симметрии. Такой же результат мы получили бы, если бы поменяли направления векторов \mathbf{P} и \mathbf{q} на обратные.

Допустим теперь, что в кристалле есть ось симметрии второго порядка. Если мы измерим какое-то свойство кристалла вдоль какого-то направления, а затем повернем кристалл на 180° вокруг этой оси и снова измерим это свойство в том же направлении, должно получиться значение такое же, как и раньше. Это налагает определенные условия на значения компонент симметричного тензора второго ранга S_{ij} , описывающего это свойство. Чтобы посмотреть, каковы эти ограничения, выберем оси (Ox_1 , Ox_2 , Ox_3) и допустим, что ось симметрии второго порядка совпадает с осью Ox_2 . Сначала предположим, что тензор S_{ij} симметричен, а значит, что у него шесть независимых компонент. Если теперь выберем новые оси, связанные со старыми поворотом на 180° вокруг оси Ox_2 , то физическое свойство от этого не должно измениться. Эти новые оси связаны со старыми осями следующей совокупностью величин a_{ij} :

	Ox_1	Ox_2	Ox_3
Ox'_1	-1	0	0
Ox'_2	0	1	0
Ox'_3	0	0	-1

Компоненты тензора S_{ij} по отношению к новой системе осей выражаются через компоненты в старой системе осей как

$$S'_{ij} = a_{ih} a_{jl} S_{hl},$$

и для всех i и j должно быть справедливо равенство $S'_{ij} = S_{ij}$. Выписывая компоненты S'_{ij} подряд одну за другой, получим

$$S'_{11} = a_{11}a_{11}S_{11} = S_{11}; \quad S'_{22} = a_{22}a_{22}S_{22} = S_{22};$$

$$S'_{33} = a_{33}a_{33}S_{33} = S_{33}; \quad S'_{13} = a_{11}a_{33}S_{13} = S_{13},$$

но

$$S'_{23} = a_{22}a_{33}S_{23} = -S_{23} \text{ и } S'_{12} = a_{11}a_{22}S_{12} = -S_{12}.$$

Однако мы считаем, что $S'_{23} = S_{23}$, а поэтому, если свойство, описываемое тензором S_{ij} , не должно меняться при таком преоб-

Таблица 4.2

Число независимых компонент тензора второго ранга, описывающего физическое свойство кристалла

Кристаллографическая система	Ориентировка главных осей тензора по отношению к кристаллографическим осям	Вид тензора	Число независимых компонент	Характеристическая поверхность 1)
Кубическая	Ориентировка осей произвольная	$\begin{bmatrix} S & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 \\ 0 & 0 & S \end{bmatrix}$	1	Сфера
Тетрагональная Гексагональная Тригональная (с гексагональной ячейкой)	Ось x_3 параллельна осям 4, 6, 3 или $\bar{3}$	$\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_1 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}$	2	Эллипсоид вращения
Ромбическая	Оси x_1, x_2, x_3 параллельны осям 2 ²), совпадающим с осями x, y, z	$\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_2 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}$	3	Трехосный эллипсоид
Моноклинная	Ось x_2 параллельна оси 2, совпадающей с осью y	$\begin{bmatrix} S_{11} & 0 & S_{13} \\ 0 & S_{22} & 0 \\ S_{13} & 0 & S_{33} \end{bmatrix}$	4	
Триклинная	Положение относительно кристаллографических осей не фиксировано	$\begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{bmatrix}$	6	

1) Дополнение редактора перевода.— Прим. ред.

2) Или соответственно нормалям к плоскостям симметрии.— Прим. ред.

разовании, значит, S_{23} должно равняться нулю. Очевидно, и S_{12} тоже должно равняться нулю. Таким образом, у тензора второго ранга S_{ij} , описывающего физическое свойство кристалла, обладающего осью симметрии второго порядка, компоненты S_{23} и S_{12} должны равняться нулю, если этот тензор отнесен к такой системе осей, в которой ось Ox_2 совпадает с осью симметрии второго порядка.

В табл. 4.2 представлена сводка ограничений, налагаемых на компоненты симметричного тензора второго ранга, описывающего физическое свойство кристалла для каждой из кристаллографических систем. В кубической, тетрагональной, гексагональной и тригональной системах главные оси тензора совпадают с кристаллографическими осями, а в моноклинной системе с кристаллографической осью совпадает только одна из главных осей. Данные этой таблицы очень просто вывести, воспользовавшись методом, изложенным в разд. 4.8. Но часть этих данных можно было бы получить, применяя к каждому из элементов симметрии заданного класса симметрии тот способ, который мы только что использовали¹⁾. Табл. 4.2 применима к любому из физических свойств кристаллов, перечисленных в табл. 4.1 (см. примечание на стр. 167).

4.8. Характеристическая поверхность

В разд. 4.8 было показано, что измеряемое значение свойства, описываемого тензором второго ранга, зависит от направления, в котором оно измеряется, и что эту зависимость можно найти по способу, описанному в том же разделе и приводящему к уравнению (4.26), т. е.

$$T = a_i a_j T_{ij}.$$

Раскрывая это уравнение, получаем

$$T = a_i (a_1 T_{i1} + a_2 T_{i2} + a_3 T_{i3}) = a_1^2 T_{11} + a_1 a_2 T_{12} + a_1 a_3 T_{13} + a_2 a_1 T_{21} + a_2^2 T_{22} + a_2 a_3 T_{23} + a_3 a_1 T_{31} + a_3 a_2 T_{32} + a_3^2 T_{33}. \quad (4.27)$$

Здесь a_1, a_2, a_3 — направляющие косинусы данного направления по отношению к тем же осям координат, в которых описывается тензор T_{ij} . Ограничимся пока рассмотрением симметричных тензоров второго ранга, так что $T_{ij} = T_{ji}$. Если физические свойства описываются тензорами второго ранга, то почти всегда

¹⁾ Этим способом — так называемым методом прямой проверки — нельзя пользоваться для кристаллов тригональной и гексагональной сингоний. — *Прим. ред.*

можно показать, что данный тензор симметричен (доказательство всегда основывается на термодинамических рассуждениях)¹⁾.

Как будет показано в гл. V, тензоры второго ранга, описывающие напряжения и малые деформации, всегда симметричны. Если тензор симметричен, то такие члены, как $a_1 a_2 T_{12}$ и $a_2 a_1 T_{21}$, равны друг другу. Обозначим симметричный тензор через S_{ij} (буква S должна напоминать, что тензор симметричен). На основании (4.27) имеем

$$\mathbf{S} = a_1^2 S_{11} + a_2^2 S_{22} + a_3^2 S_{33} + 2a_1 a_2 S_{12} + 2a_1 a_3 S_{13} + 2a_2 a_3 S_{23}. \quad (4.28)$$

Если же S_{ij} не только симметричен, но и отнесен к главным осям, то равенство (4.27) упростится, и мы получим

$$\mathbf{S} = a_1^2 S_1 + a_2^2 S_2 + a_3^2 S_3, \quad (4.29)$$

потому что $S_{12} = S_{13} = S_{23} = 0$. Уравнение (4.28) имеет такой же вид, как общее уравнение поверхности второго порядка (квадрики)²⁾, записанное в полярных координатах, начало которых совпадает с началом выбранной нами системы координат. Общее уравнение поверхности второго порядка имеет вид

$$\frac{1}{r^2} = A \cos^2 \alpha + B \cos^2 \beta + C \cos^2 \gamma + 2D \cos \alpha \cos \beta + 2E \cos \alpha \cos \gamma + 2F \cos \beta \cos \alpha, \quad (4.30)$$

где r — радиус-вектор, а $\cos \alpha$, $\cos \beta$, $\cos \gamma$ — направляющие косинусы r по отношению к системе ортогональных осей. Если общая поверхность второго порядка отнесена к своим главным осям, то это уравнение принимает вид

$$\frac{1}{r^2} = A \cos^2 \alpha + B \cos^2 \beta + C \cos^2 \gamma, \quad (4.31)$$

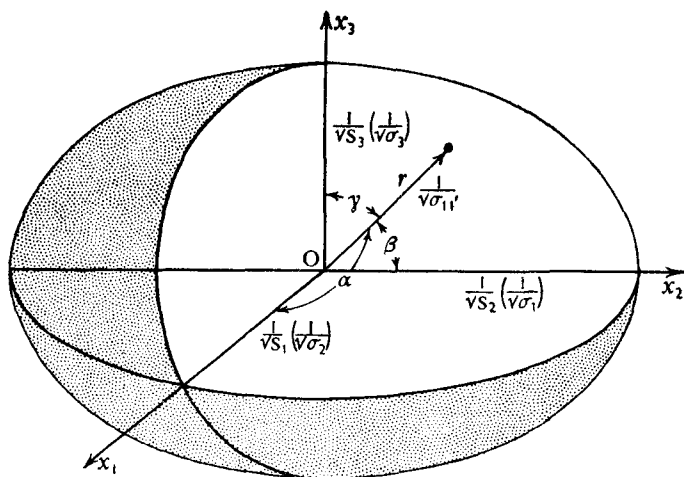
т. е. выглядит так же, как уравнение (4.29). При перемене осей координат, к которым отнесена общая поверхность второго порядка, коэффициенты в уравнении (4.30) преобразуются совершенно так же, как компоненты симметричного тензора второго ранга. Поэтому зависимость данного *физического свойства* кристалла от направления, заданную уравнениями (4.28) и (4.29), можно

1) Можно показать, что все свойства, перечисленные в табл. 4.1, описываются симметричными тензорами второго ранга. Но в случае свойств, относящихся к явлениям переноса (например, электропроводность, теплопроводность, коэффициент диффузии), для полноты доказательства нужно обращаться к экспериментальным данным. Насколько известно авторам, для коэффициента диффузии достаточно надежных данных пока нет.

2) Авторы пользуются термином «квадрика», который в отечественной кристаллографической литературе переводится всегда как «поверхность второго порядка» (см. Дж. Най, Физические свойства кристаллов, ИЛ, М., 1960, стр. 31). — *Прим. ред.*

изобразить в трехмерном пространстве поверхностью, характеризующей изменение свойства \mathbf{S} в зависимости от направления.

Общая поверхность второго порядка может быть эллипсоидом, однополостным гиперболоидом или двухполостным гиперболоидом. Чтобы пояснить, как именно можно изобразить зависимость свойства \mathbf{S} от направления в кристалле, ограничимся случаем, когда значения S_1 , S_2 и S_3 в уравнении (4.29) или A , B и C в уравнении (4.30) положительны ¹⁾. В этом случае поверхность второго



Фиг. 4.4. Характеристический эллипсоид.

порядка, которую мы будем называть характеристической поверхностью, представляет собой эллипсоид ²⁾.

Обратившись к уравнениям (4.29) и (4.31), видим, что если построить эллипсоид, у которого величины главных полуосей равны $1/\sqrt{S_1}$, $1/\sqrt{S_2}$ и $1/\sqrt{S_3}$, как на фиг. 4.4, то обратная величина длины r любого радиуса-вектора этого эллипсоида (характеристической поверхности) будет равна корню квадратному из величины свойства \mathbf{S} в том же направлении. Обратимся к нашему примеру с электропроводностью. Если известны значения σ_1 , σ_2 , σ_3 компонент электропроводности по главным осям, то можно

¹⁾ Если два из коэффициентов S_1 , S_2 , S_3 положительны, а третий отрицателен, то характеристическая поверхность представляет собой однополостный гиперболоид; если два коэффициента отрицательны, а третий положительен — это двухполостный гиперболоид. Если все три коэффициента отрицательны, характеристическая поверхность будет мнимый эллипсоид.

²⁾ Для тензора, описывающего физическое свойство кристалла, имеет смысл рассматривать только положительные и действительные значения A , B , C , т. е. характеристическая поверхность никогда не будет гиперболоидом, а всегда только эллипсоидом. — *Прим. ред.*

построить характеристическую поверхность электропроводности: если все σ_{ij} положительны, то это будет эллипсоид. Таким образом, если поле \mathbf{E} действует в каком-то направлении, то величину электропроводности в этом направлении найдем, проведя радиус-вектор r в направлении \mathbf{E} , измерив величину r и взяв обратную величину корня квадратного из r .

Нетрудно теперь установить ограничения, налагаемые симметрией кристалла на любое физическое свойство кристалла, описываемое симметричным тензором второго ранга. Симметрия физических свойств кристалла подчиняется *принципу Неймана*, который гласит: «Элементы симметрии физического свойства кристалла должны включать в себя элементы симметрии точечной группы кристалла»¹). Характеристическая поверхность показывает, как меняется данное свойство в зависимости от направления, а симметрия характеристической поверхности является симметрией физического свойства. Число независимых коэффициентов в уравнении характеристической поверхности [уравнение (4.30)] равно числу независимых компонент тензора, описывающего данное физическое свойство, — уравнение (4.28). Рассмотрим симметрию характеристической поверхности, описывающей свойство кристалла, принадлежащего какой-либо из групп Лауэ²). Оказывается, что симметрия характеристической поверхности для симметричного тензора второго ранга определяется только симметрией кристаллографической системы. Все эти результаты сведены в табл. 4.2.

Кубический кристалл должен иметь четыре оси симметрии третьего порядка. Характеристическая поверхность будет сферой, а значит, выбор осей координат для симметричных тензоров второго ранга, описывающих любое из свойств, перечисленных в табл. 4.1, не играет никакой роли. В отношении этих свойств кристалл является *изотропным*. У *гексагональных, тригональных и тетрагональных* кристаллов имеются по две независимые компоненты для свойств, приведенных в табл. 4.1, поэтому характеристическая поверхность должна быть поверхностью вращения вокруг оси симметрии соответственно шестого, четвертого или третьего порядков. В общем случае у характеристической поверхности есть три взаимно перпендикулярные оси второго порядка. В ромбической системе оси характеристической поверхности должны совпадать с тремя взаимно перпендикулярными осями симметрии второго порядка кристалла. В этом случае и для опи-

¹) Принцип Неймана не утверждает, что симметрия физического свойства такая же, как симметрия точечной группы кристалла. Симметрия физического свойства часто выше симметрии точечной группы.

²) Здесь надо учитывать не классы симметрии, а именно группы Лауэ, потому что все свойства, описываемые тензором второго ранга, обязательно центросимметричны.

сания физического свойства необходимо знать три независимые компоненты тензора. В моноклинной системе одна из осей второго порядка характеристической поверхности должна быть параллельна одной из кристаллографических осей второго порядка. Имеется четыре независимые компоненты симметричного тензора второго ранга, описывающего физическое свойство. Три из них — это длины полуосей характеристической поверхности, а четвертая — угол между кристаллографической осью и главной осью характеристической поверхности в плоскости, нормальной к кристаллографической оси симметрии второго порядка. В *триклинной* системе, поскольку симметричный тензор второго ранга центросимметричен, а голосимметричный класс этой системы обладает как раз центром симметрии, имеется шесть независимых компонент для любого свойства, которое можно описать симметричным тензором второго ранга.

Задачи

4.1. Определите понятие тензора второго ранга. Запишите два физических свойства кристалла, которые можно описать симметричным тензором второго ранга, и для каждого из них установите те две физические величины, которые связаны этими тензорами. Для одного из наших примеров выпишите полностью уравнения соотношений между компонентами этих двух физических величин и объясните все обозначения. Объясните физический смысл компоненты D_{12} в тензоре коэффициента диффузии D .

4.2. Представляет ли совокупность a_{ij} в уравнении (4.3) компоненты тензора второго ранга?

4.3. Представьте в виде симметричного и антисимметричного тензоров следующий тензор:

$$\begin{pmatrix} 12 & 6 & 0 \\ 4 & 7 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

4.4. Если σ — симметричный тензор второго ранга, а \mathbf{n} и \mathbf{b} — векторы, то покажите, что

$$(\sigma \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{b} = (\sigma \cdot \mathbf{b}) \cdot \mathbf{n}.$$

4.5. Кристалл обладает единственной осью симметрии четвертого порядка, параллельной оси z . Найдите необходимые соотношения между компонентами тензора второго порядка, описывающего физическое свойство этого кристалла, если тензор отнесен к осям, параллельным кристаллическим осям. Как вы согласуете ваш результат с характеристиками тетрагональных кристаллов в табл. 4.2?

4.6. Докажите, что как симметричный, так и антисимметричный тензор не зависят от выбора осей.

Указание. Покажите, что если $T_{ij} = T_{ji}$, то и $T'_{ij} = T'_{ji}$.

4.7. а) Тензор электропроводности кристалла имеет компоненты

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 18,25 & -\sqrt{3} \cdot 2,25 & 0 \\ -\sqrt{3} \cdot 2,25 & 22,75 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{pmatrix} \times 10^6 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}.$$

Выберите новые оси, повернутые на 60° вокруг x_3 по часовой стрелке, если смотреть с отрицательного конца x_3 , и составьте таблицу направляющих косинусов между новыми и старыми осями, как в разд. 4.2. Проверьте, что сумма квадратов a_{ij} равна 1 в каждом ряду и в каждом столбце.

б) Выпишите компоненты тензора электропроводности по новым осям координат. Проверьте, что σ_{ij} не изменился. Теперь тензор отнесен к главным осям.

в) Начертите сечение характеристической поверхности (т. е. в данном случае эллипсоида электропроводности) плоскостью $x'_3 = 0$. Начертите радиусы-векторы получившегося эллипса под углами 30° и 60° к x'_1 и найдите по ним значения электропроводности в этих направлениях.

г) Проверьте прямыми вычислениями результаты, полученные в п. в).

д) Допустим, что электрическое поле E напряженностью 1 В/см действует в направлении OE под углом 60° к x_1 в плоскости $x'_3 = 0$. Выпишите компоненты этого электрического поля по x'_1 по x'_2 и найдите по ним плотности электрического тока в тех же направлениях. Наконец, найдите компоненты результирующей плотности тока в направлении E и по ним электропроводность в том же направлении.

е) Найдите направление результирующего вектора плотности тока J в п. д).

ж) Найдите направление результирующего вектора плотности тока на вашем чертеже [п. в)]. Вы увидите, что направление J совпадает с нормалью к характеристической поверхности, восстановленной в той точке, где OE пересекает эту поверхность.

Этот результат является общим и называется *свойством радиуса-вектора и нормали характеристической поверхности*. Его можно сформулировать так. Если S_{ij} — компоненты симметричного тензора второго ранга, связывающего между собой векторы p и q , так что $p_i = S_{ij}q_j$, тогда направление p для заданного q можно найти, проведя параллельный вектору q радиус-вектор OQ характеристической поверхности и восстановив нормаль к этой поверхности в точке Q .

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ЧТЕНИЯ

1. Nye J. F., *Physical Properties of Crystals*, Clarendon Press, Oxford, 1957; имеется перевод: Най Дж., *Физические свойства кристаллов*, ИЛ, М., 1960; изд. 2, изд-во «Мир», 1967.
2. Page L., *Introduction to Theoretical Physics*, van Nostrand, New York, 1927.
3. Jeffreys H., *Cartesian Tensors*, Cambridge Univ. Press, 1961.
4. Wooster W. A., *A Textbook on Crystal Physics*, Cambridge Univ. Press, 1949.
- 5*. Жданов Г. С., *Физика твердого тела*, Изд-во МГУ, 1961.
- 6*. Желудев И. С., *Физика кристаллических диэлектриков*, изд-во «Наука», 1968.
- 7*. Переломова Н. В., Тагиева М. М., под ред. М. П. Шаскольской, *Задачник по кристаллофизике*, изд-во «Наука», 1972.
- 8*. Аквивис М. А., Гольдберг В. В., *Тензорное исчисление*, изд-во «Наука», 1969.

II

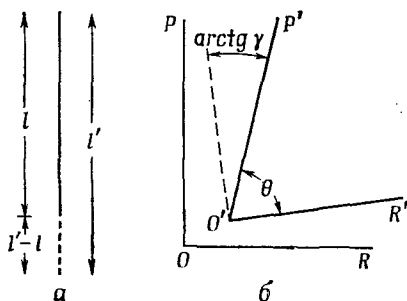
НЕСОВЕРШЕННЫЕ КРИСТАЛЛЫ

Глава 5

Напряжения, деформации и упругость

5.1. Деформации (введение)

Если на кристалл действуют силы или если внутри кристалла образуются несовершенства, то *относительные* положения атомов изменяются. Такое изменение относительных положений называется деформацией. В этом разделе мы познакомимся со способами описания деформации.



Ф и г. 5.1. К определению деформаций растяжения (а) и сдвига (б).

Основные типы деформации — это растяжение и сдвиг. Начнем с растяжения. Рассмотрим очень тонкий стержень длиной l , фиг. 5.1, а. Представим себе, что этот стержень растянут так, что его длина стала равной l' . Тогда растяжение e определим как

$$e = \frac{l' - l}{l}, \quad (5.1)$$

так что

$$l' = l(1 + e).$$

Таким образом, e — это отношение изменения длины к начальной длине. Будем считать e положительным при растяжении и отрицательным при сжатии.

Сдвиг можно характеризовать как меру изменения угла между двумя прямыми линиями в теле, когда это тело деформируется. Сдвиг определяют следующим образом (фиг. 5.1, б). Если OP и OR — две взаимно перпендикулярные прямые линии в недеформированном состоянии, а $O'P'$ и $O'R'$ — положения соответствующих линий в деформированном состоянии, то деформация сдвига γ , связанного с этими двумя направлениями в точке O , выражается как

$$\gamma = \operatorname{tg} \left(\frac{\pi}{2} - \theta \right), \quad (5.2)$$

где θ — угол между $O'P'$ и $O'R'$ в деформированном состоянии.

Описание общих типов деформаций, в которых участвуют и растяжение, и сдвиг, может быть очень сложным. Мы ограничимся рассмотрением двух существенных частных случаев:

1. *Бесконечно малая деформация*, для которой предполагается, что величины e и γ столь малы, что их квадратами и произведениями можно пренебречь. Для упругих деформаций в кристалле это допущение вполне приемлемо, за исключением точек, отстоящих лишь на несколько межатомных расстояний от дефекта.

2. *Однородная деформация*, при которой каждая часть деформированной области претерпевает одинаковое искажение. В гл. 6, 10 и 11 нам придется иметь дело с большими однородными деформациями.

5.2. Бесконечно малая деформация

Искажение, или деформацию, какого-либо тела можно описать, указав смещение каждой точки по отношению к ее положению в неискаженном состоянии. Любые смещения, которые не соответствуют трансляции или вращению тела как целого, создадут деформацию.

Ограничимся пока двумерными случаями и выберем фиксированное в пространстве начало координат, например точку O на фиг. 5.2. Выберем точку P с координатами (x_1, x_2) в недеформированном состоянии; после деформации тела она смещается в точку P' . Смещение точки P описывается вектором PP' . Координаты точки P' пусть будут $(x_1 + u_1, x_2 + u_2)$.

Рассмотрим теперь точку Q с координатами $(x_1 + dx_1, x_2 + dx_2)$, которая в недеформированном состоянии расположена бесконечно близко от P . После деформации Q смещается в положение Q' . В деформированном теле смещение точки Q будет не точно таким же, как у точки P . Вектор смещения от Q к Q' имеет компоненты

$(u_1 + du_1, u_2 + du_2)$, причем

$$du_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} dx_2 \quad (5.3)$$

и

$$du_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} dx_2. \quad (5.4)$$

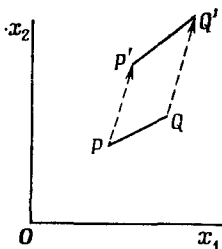
Определим искомые четыре величины в точке P :

$$e_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}, \quad e_{12} = \frac{\partial u_1}{\partial x_2}, \quad e_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial x_2}, \quad e_{21} = \frac{\partial u_2}{\partial x_1}.$$

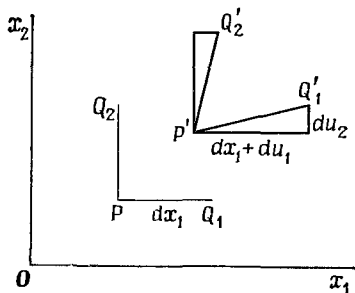
Уравнения (5.3) и (5.4) в компактном виде записываются как

$$du_i = e_{ij} dx_j \quad (j = 1, 2). \quad (5.5)$$

По определению, данному в гл. 4, e_{ij} — тензор, поскольку du_i и dx_j — векторы. Покажем теперь физический смысл различных



Ф и г. 5.2. Отрезок PQ смещается в положение $P'Q'$.



Ф и г. 5.3. К определению компонент смещения.

e_{ij} , когда каждая из них намного меньше единицы. Возьмем два частных положения вектора PQ : первое — параллельно Ox_1 (PQ_1), а второе — параллельно Ox_2 (PQ_2) и выясним, как искажается этот прямой угол с вершиной в точке P (фиг. 5.3). Для PQ_1 положим $dx_2 = 0$ и получим

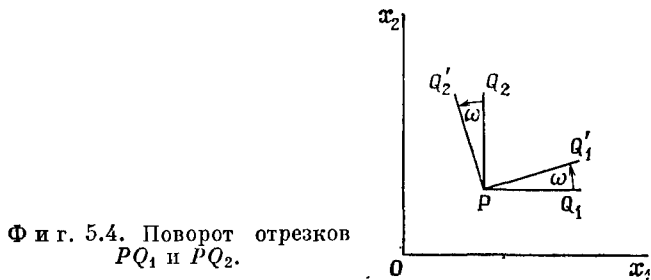
$$du_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} dx_1 = e_{11} dx_1, \quad (5.6)$$

$$du_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} dx_1 = e_{21} dx_1. \quad (5.7)$$

Из фиг. 5.3 ясно, что e_{11} есть мера растяжения на единицу длины вдоль Ox_1 , а e_{21} измеряет вращение PQ_1 против часовой стрелки, причем e_{11} и e_{21} малы.

Точно так же e_{22} измеряет изменение единицы длины PQ_2 вдоль Ox_2 , а e_{12} измеряет малое вращение PQ_2 по часовой стрелке.

В качестве меры деформации тензор e_{ij} не годится, потому что может быть случай, когда компоненты e_{ij} не равны нулю, но деформации тела нет. Рассмотрим, к примеру, поворот жесткого тела на малый угол ω (фиг. 5.4). Очевидно, здесь $e_{11} = e_{22} = 0$, но $e_{12} = -\omega$, а $e_{21} = \omega$. Чтобы отделить компоненты вращения

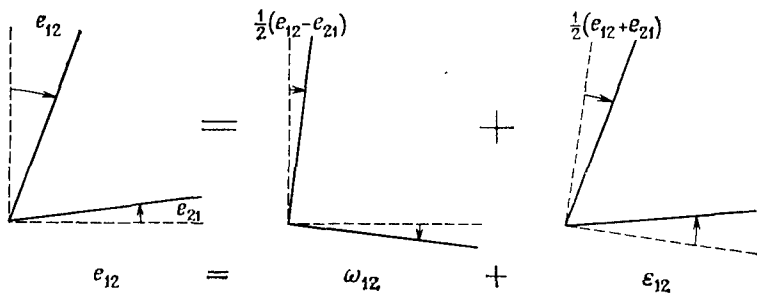


Ф и г. 5.4. Поворот отрезков PQ_1 и PQ_2 .

от компонент e_{ij} , представим компоненты деформации как сумму антисимметричного и симметричного тензоров, так что

$$e_{ij} = 1/2 (e_{ij} - e_{ji}) + 1/2 (e_{ij} + e_{ji}). \quad (5.8)$$

Тогда $\omega_{ij} = 1/2 (e_{ij} - e_{ji})$ измеряет вращение (как на фиг. 5.4), а $\epsilon_{ij} = 1/2 (e_{ij} + e_{ji})$ определяет чистый сдвиг. Геометрическая



Ф и г. 5.5. Геометрическая интерпретация уравнения (5.8).

интерпретация уравнения (5.8) дана на фиг. 5.5. Необходимо заметить, что на фиг. 5.5 изменение угла между прямыми, которые в исходном состоянии пересекались под прямым углом, равно $2\epsilon_{12}$. Поэтому сдвиговая компонента тензора чистого сдвига ϵ_{12} равна половине сдвиговой деформации γ , определяемой уравнением (5.2).

В трехмерном пространстве метод определения деформации таков же, как и в двумерном. Для определения девяти компонент тензора e_{ij} рассматривают изменения смещения $u (= u_1, u_2, u_3)$

при изменении положения $x (= x_1, x_2, x_3)$:

$$e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (i, j = 1, 2, 3). \quad (5.9)$$

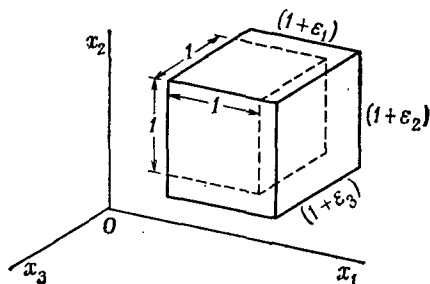
Тензор деформации определяется тогда как симметричная часть e_{ij} :

$$\varepsilon_{ij} = 1/2 (e_{ij} + e_{ji}). \quad (5.10)$$

В полном виде

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_{11} & 1/2 (e_{12} + e_{21}) & 1/2 (e_{13} + e_{31}) \\ 1/2 (e_{21} + e_{12}) & e_{22} & 1/2 (e_{23} + e_{32}) \\ 1/2 (e_{31} + e_{13}) & 1/2 (e_{32} + e_{23}) & e_{33} \end{bmatrix}$$

Диагональные компоненты ε_{ij} представляют собой изменения единичных отрезков прямых, параллельных осям координат,



Фиг. 5.6. Физический смысл главных деформаций $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$.

и называются деформациями растяжения. Недиagonальные компоненты измеряют сдвиговые деформации: например, ε_{13} — это половина изменения угла между двумя прямыми, которые в недеформированном состоянии были параллельны осям Ox_1 и Ox_3 .

Поскольку чистая деформация описывается симметричным тензором второго ранга, этот тензор можно отнести к главным осям (гл. 4). Тогда сдвиговые компоненты обращаются в нуль и остается

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{bmatrix}. \quad (5.11)$$

Геометрический смысл главных деформаций $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ и ε_3 виден из фиг. 5.6, где показано, как единичный куб с ребрами, параллельными главным осям, превращается в параллелепипед с ребрами $(1 + \varepsilon_1), (1 + \varepsilon_2)$ и $(1 + \varepsilon_3)$. Изменение единицы объема называется *дилатацией* и определяется как

$$\Delta = (1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2)(1 + \varepsilon_3) - 1 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3. \quad (5.12)$$

Здесь членами типа $\varepsilon_1 \varepsilon_2$ и $\varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3$ пренебрегаем из-за малости деформаций. Если деформация описывается в какой-нибудь другой системе координат, дилатация всегда определяется инвариантной суммой $(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33})$. Компоненты тензоров e_{ij} или ε_{ij} можно привести к новым осям координат, пользуясь стандартными правилами преобразования тензоров второго ранга (гл. 4).

Во многих книгах по теории упругости деформация описывается величинами

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{zx} \\ \gamma_{xy} & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} & \gamma_{yz} & \varepsilon_z \end{bmatrix}.$$

Отсюда следует, например, что $\gamma_{xy} = 2\varepsilon_{12}$. Все γ -компоненты называются сдвиговыми деформациями, но нужно помнить, что они равны удвоенным сдвиговым компонентам, если последние определены так, как в этой книге. Подобная совокупность величин ε и γ не образует тензор.

5.3. Однородная деформация

Тело считается однородно деформированным, если в любой его точке искажения одинаковы. Иначе говоря, все e_{ij} в уравнениях (5.5) и (5.9) постоянны независимо от их положения внутри тела. В этом случае уравнение

$$du_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_j = e_{ij} dx_j \quad (5.13)$$

можно непосредственно интегрировать и получить

$$u_i = (u_0)_i + e_{ij} x_j \quad (i, j = 1, 2, 3). \quad (5.14)$$

Уравнение (5.14) означает, что при однородной деформации смещения являются линейными функциями пространственных координат.

Константы $(u_0)_i$ описывают трансляцию тела как целого и поэтому не представляют интереса. Вычитая эту трансляцию из смещений, получим остаточное смещение

$$x'_i - x_i = e_{ij} x_j, \quad (5.15)$$

где x'_i — новые координаты точки с начальными координатами x_i , отнесенные к осям, которые претерпели трансляцию на $(u_0)_i$ без поворотов. В развернутом виде уравнения (5.15) имеют вид

$$\begin{aligned} x'_1 &= (1 + e_{11}) x_1 + e_{12} x_2 + e_{13} x_3, \\ x'_2 &= e_{21} x_1 + (1 + e_{22}) x_2 + e_{23} x_3, \\ x'_3 &= e_{31} x_1 + e_{32} x_2 + (1 + e_{33}) x_3. \end{aligned}$$

Форму, в которую деформируется линия или поверхность, описываемая уравнением

$$f(x_1, x_2, x_3) = 0, \quad (5.16)$$

можно определить, решая уравнение (5.15) для x_1, x_2, x_3 , выраженных через x'_1, x'_2 и x'_3 , и подставляя затем полученные значения в уравнение (5.10). Можно показать, что любая однородная деформация, большая или малая, характеризуется следующими особенностями:

1. Прямые линии остаются прямыми линиями и в общем случае поворачиваются (причем все на один и тот же угол), укорачиваются или удлиняются (все в одинаковом отношении). Плоскости тоже деформируются, оставаясь плоскостями.

2. Сфера деформируется в эллипсоид. Эллипсоид, в который деформируется сфера единичного радиуса, называется эллипсоидом деформации.

3. Осями эллипсоида деформации служат три взаимно перпендикулярных диаметра единичной сферы, которые называются главными осями. Эти оси образуют единственную систему трех ортогональных направлений, которая после деформации остается ортогональной.

4. В недеформированном состоянии имеется один частный эллипсоид, который деформируется в единичную сферу. Он называется *эллипсоидом единичных напряжений*. Его осями служат главные оси.

В общем случае при деформации главные оси поворачиваются. Деформация, при которой главные оси не поворачиваются, называется *чистым сдвигом*. Однородная деформация вообще может происходить в два этапа: сначала чистый сдвиг, при котором главные оси сохраняют свои истинные размеры, а потом вращение, в результате которого они занимают окончательные положения.

Всеми этими данными мы воспользуемся в гл. 11, где будет рассматриваться геометрия мартенситного превращения. Приведем теперь некоторые простые типы однородной деформации.

1. *Простое растяжение:*

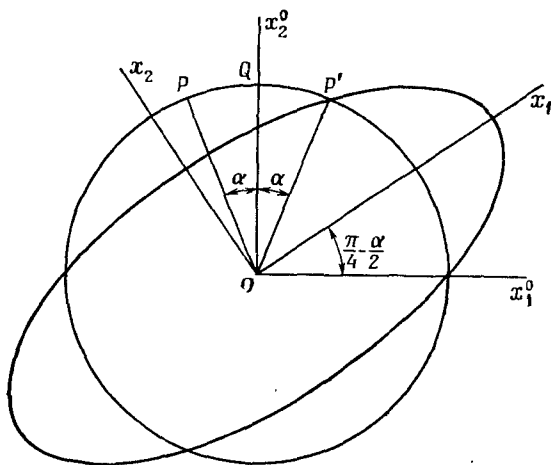
$$\begin{aligned} x'_1 &= kx_1, \\ x'_2 &= x_2, \\ x'_3 &= x_3, \end{aligned} \quad \begin{pmatrix} e_{11} = k - 1 & e_{12} = 0 & e_{13} = 0 \\ e_{21} = 0 & e_{22} = 0 & e_{23} = 0 \\ e_{31} = 0 & e_{32} = 0 & e_{33} = 0 \end{pmatrix}. \quad (5.17)$$

Главные оси Ox_1, Ox_2 и Ox_3 не поворачиваются, поэтому простое растяжение является чистой деформацией.

2. Простой сдвиг:

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1 + gx_2, \\ x'_2 &= x_2, \\ x'_3 &= x_3, \end{aligned} \quad \left(\begin{array}{ccc} e_{11} = 0 & e_{12} = g & e_{13} = 0 \\ e_{21} = 0 & e_{22} = 0 & e_{23} = 0 \\ e_{31} = 0 & e_{32} = 0 & e_{33} = 0 \end{array} \right), \quad (5.18)$$

где g — величина сдвиговой деформации, определяемой уравнением (5.2). Простой сдвиг подробнее объясняется в гл. 6 и 10,



Фиг. 5.7. Соотношение между чистым и простым сдвигом ($\alpha = \arctg g/2$).

где он нужен для описания скольжения и двойникования. Простой сдвиг не является чистой деформацией; его часть, не связанная с вращением, описывается ниже.

3. Чистый сдвиг:

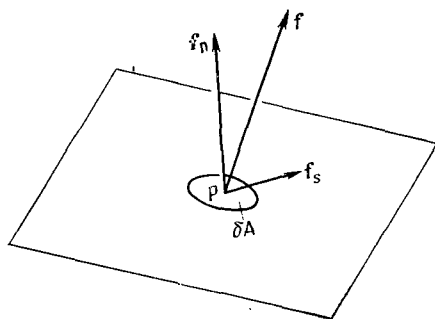
$$\begin{aligned} x'_1 &= kx_1, \\ x'_2 &= k^{-1}x_2, \\ x'_3 &= x_3, \end{aligned} \quad \left(\begin{array}{ccc} e_{11} = k - 1 & e_{12} = 0 & e_{13} = 0 \\ e_{21} = 0 & e_{22} = \frac{1}{k} - 1 & e_{23} = 0 \\ e_{31} = 0 & e_{32} = 0 & e_{33} = 0 \end{array} \right). \quad (5.19)$$

Для этой деформации главными осями служат Ox_1 , Ox_2 и Ox_3 , и они не поворачиваются. Соотношение между чистым сдвигом и простым сдвигом показано на фиг. 5.7. Простой сдвиг величиной g , отнесенный к осям Ox_1^0 , Ox_2^0 , искажает круг в эллипс (фиг. 5.7). Тот же самый эллипс можно получить путем деформации чистого сдвига, отнесенной к осям Ox_1 , Ox_2 , причем ось Ox_1 составляет

с осью Ox_1^0 угол $+\pi/4 - 1/2 \arctg g/2$. Для этого требуется чистый сдвиг величиной

$$k - 1/k = g. \quad (5.20)$$

Для того чтобы смещения, создаваемые этим чистым сдвигом, были бы идентичны тем смещениям, которые создаются простым сдвигом, чистому сдвигу должен предшествовать поворот на $\arctg g/2$. Таким образом, например, точка P поворачивается в положение Q , а затем чистый сдвиг переводит Q в P . Смещения простого сдвига можно получить и иначе, а именно произвести



Фиг. 5.8. К определению нормального и касательного напряжений.

чистый сдвиг относительно осей координат, составляющих углы $\pm\pi/4 + 1/2 \arctg g/2$ с осью Ox_1^0 , а затем поворот на $\arctg g/2$. Эти оси представляют собой главные оси простого сдвига; оси Ox_1 , Ox_2 и Ox_3 (которые остаются неизменными) являются главными осями простого сдвига в их окончательном повернутом положении.

Если величина простого сдвига очень мала ($g = \gamma$, где $\gamma \ll 1$), то этот сдвиг эквивалентен чистому сдвигу, отнесенному к осям, повернутым на угол $\pi/4$,ряду с вращением на $\gamma/2$. Это становится очевидным при тщательном рассмотрении фиг. 5.8.

5.4. Напряжение

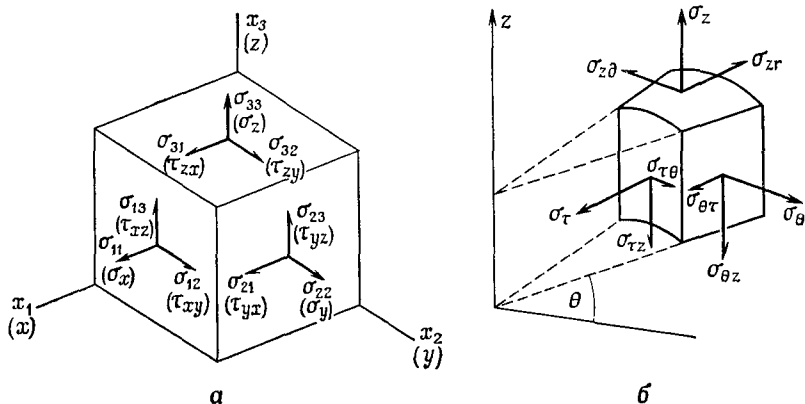
Когда атомы смещаются относительно своих равновесных положений в кристалле, возникают силы, которые стремятся восстановить их нормальное пространственное расположение. Если мысленно рассеять плоскостью напряженную область кристалла, то окажется, что атомы, находящиеся по обе стороны от этой плоскости, действуют друг на друга с некоторыми силами. Такая сила, приходящаяся на единичную площадку плоскости, называется усилием, действующим на плоскость в данной точке. Эту силу обычно разлагают на нормальную и касательную компоненты f_n и f_s , а соответствующие напряжения, нормальное

и касательное (тангенциальное), определяют как

$$\sigma_n = \lim_{\delta A \rightarrow 0} \frac{f_n}{\delta A}, \quad (5.21)$$

$$\tau = \lim_{\delta A \rightarrow 0} \frac{f_s}{\delta A}. \quad (5.22)$$

Площадка δA около точки P изображена на фиг. 5.8; вычисляя сумму ряда средних напряжений $f/\delta A$ при δA , стремящейся к нулю, можно найти напряжение в точке P . Это определение



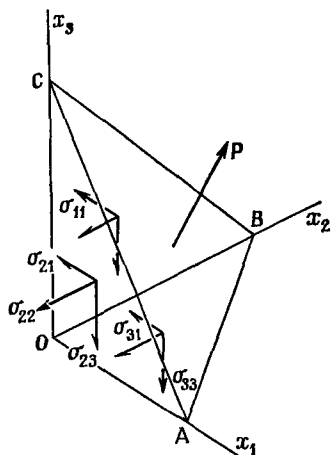
Ф и г. 5.9. Определение [компонент напряжения в декартовых (а) и в цилиндрических (б) координатах.

имеет смысл, лишь если изменения сил около точки P на расстояниях порядка межатомных не слишком велики.

Так же можно поступить для любой плоскости, проведенной через точку P . Чтобы полностью определить напряжение в точке P , достаточно знать напряжения, действующие на три взаимно перпендикулярные плоскости, проходящие через P . На основании равновесия сил можно затем вычислить напряжение, действующее на любую другую плоскость. На фиг. 5.9, а показаны напряжения, действующие на грани бесконечно малого куба, находящегося в точке P , причем даны две эквивалентные системы обозначения. В обозначениях цифровыми индексами компонента δ_{ij} — это компонента в направлении оси x_j напряжения, действующего на грань, нормаль к которой параллельна оси x_i . Знаки выбирают так, что напряжение считается положительным, если компонента силы и внешняя нормаль к грани, на которую действует это напряжение, обращены к одной и той же стороне оси, которой они параллельны. У обозначений с буквенными индексами схема та же, только сдвиговые (касательные) напряжения обозначаются

буквой τ . Иногда удобнее пользоваться не декартовыми координатами, а цилиндрическими; компоненты напряжения в этих координатах показаны на фиг. 5.9, б.

Куб на фиг. 5.9, а считается бесконечно малым. Поэтому силы, действующие на его противоположные грани, должны быть равны и противоположны. Если сторона куба равна δ , то сдвиговые напряжения τ_{xy} и τ_{yx} образуют пару сил $(\tau_{xy} - \tau_{yx}) \delta^3$, стремящуюся повернуть куб вокруг оси z . Поскольку момент инерции куба пропорционален δ^5 , поэтому при $\delta \rightarrow 0$ он стремится



Фиг. 5.10. Вычисление напряжений, действующих на площадку ABC .

к нулю быстрее, чем пара сил $(\tau_{xy} - \tau_{yx}) \delta^3$. Для того чтобы угловое ускорение не возрастало до бесконечности, напряжение τ_{xy} должно равняться τ_{yx} и вообще должно удовлетворяться равенство

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}. \quad (5.23)$$

Вычислим напряжение, действующее на любую данную плоскость в точке P . Для этого возьмем бесконечно малое тело, у которого одна грань ABC параллельна данной плоскости, а все остальные грани параллельны гралям нашего куба (фиг. 5.10). Искомое напряжение определяется затем из условия равновесия сил, действующих на тетраэдр $ABCO$. Пусть $\mathbf{P} = [P_1 P_2 P_3]$ есть напряжение, действующее на грань ABC со стороны материала, находящегося снаружи от тетраэдра. Приравнявая нулю сумму сил, действующих в направлении Ox_1 , имеем

$$P_1 (ABC) = \sigma_{11} (BOC) + \sigma_{21} (AOC) + \sigma_{31} (AOB)$$

или

$$P_1 = \sigma_{11} l_1 + \sigma_{21} l_2 + \sigma_{31} l_3, \quad (5.24)$$

где l_i — направляющие косинусы нормали к плоскости ABC . Такие же уравнения получим для P_2 и P_3 , а все три уравнения можно записать в компактной форме

$$P_i = \sigma_{ij}l_j. \quad (5.25)$$

Разлагая \mathbf{P} на две компоненты, нормальную и параллельную ABC , можем получить нормальное напряжение σ_n и касательное напряжение τ_n . Нормальное напряжение σ_n получается как сумма компонент P_i , каждая из которых нормальна к ABC :

$$\sigma_n = P_i l_i,$$

поэтому из (5.25) имеем

$$\sigma_n = \sigma_{ji}l_j l_i. \quad (5.26)$$

Разлагая силу на компоненты, получаем

$$\tau = (P^2 - \sigma_n^2)^{1/2}. \quad (5.27)$$

Уравнение (5.25) показывает, что компоненты вектора \mathbf{P} , представляющие собой действующие на плоскость напряжения, линейно связаны с компонентами единичного вектора, нормального этой плоскости. Значит, связывающие их коэффициенты σ_{ij} образуют тензор второго ранга. При повороте осей координат компоненты данного напряжения преобразуются по общим законам преобразования:

$$\sigma_{ij} = a_{ih}a_{jl}\sigma_{kl}, \quad (5.28)$$

где a_{ij} — косинусы угла между новой осью Ox_i и старой осью Ox_j . Уравнение (5.28) можно вывести и непосредственно из уравнения (5.25), если одну из новых осей провести параллельно нормали к плоскости ABC .

Поскольку тензор напряжений симметричен ($\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$), всегда можно выбрать такую систему осей координат, для которой на грани куба с ребрами, параллельными осям координат, не действуют напряжения сдвига. Это главные оси. В главных осях тензор напряжений принимает вид

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

при этом $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ называются главными напряжениями.

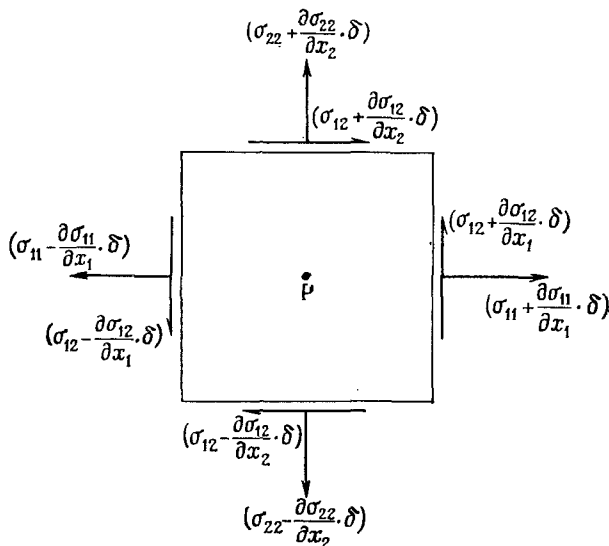
В частных случаях тело может находиться в однородном напряженном состоянии, т. е. в каждой точке тела напряжение одно и то же. Если напряжение однородно, то на параллельные друг другу грани произвольно расположенных кубов действуют одинаковые усилия. Такие условия создаются при растяжении одно-

родного стержня, когда в любой точке стержня напряжение равно

$$\begin{pmatrix} F/A & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Здесь F — растягивающая сила, A — площадь поперечного сечения стержня, а ось растяжения параллельна оси Ox_1 .

В общем случае напряжения в теле меняются от точки к точке. Но все же разные компоненты напряжения не могут изменяться



Ф и г. 5.11. Напряжения, действующие на грань куба в поле переменных напряжений.

совершенно произвольно независимо друг от друга. Изменения разных компонент напряжения должны быть связаны друг с другом так, чтобы соблюдалось условие равновесия внутренних сил, действующих на любое тело (предполагается, что тело как целое находится в статическом равновесии). На фиг. 5.11 показана грань куба с ребром 2δ , находящегося в поле переменных напряжений. Приравнявая нулю сумму сил, действующих в направлении Ox_1 , получаем

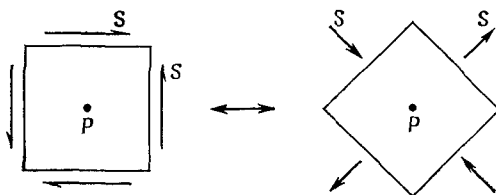
$$\frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{21}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{31}}{\partial x_3} + f_1 = 0, \quad (5.29)$$

где f_1 — компонента действующих в направлении Ox_1 объемных сил (т. е. сил тяжести, приходящихся на единицу объема). Для

направлений Ox_2 и Ox_3 получаются два таких же уравнения, а все три уравнения равновесия можно записать в компактной форме

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + f_j = 0. \quad (5.30)$$

Повторение индекса i и в уравнении (5.30) означает суммирование дифференциальных членов, получающихся, если подставлять поочередно $i = 1, 2, 3$.



Ф и г. 5.12. Касательные напряжения в точке P .

Приведем некоторые типы напряжений, имеющих важные значения для дальнейшего изложения материала. Для напряжения чистого сдвига $\sigma_{12} = S$, а все остальные σ_{ij} равны нулю, т. е.

$$\begin{pmatrix} 0 & S & 0 \\ S & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Если оси координат повернуть против часовой стрелки на 45° вокруг оси Ox_3 , то компоненты напряжения принимают вид

$$\begin{pmatrix} S & 0 & 0 \\ 0 & -S & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, главные напряжения в случае чистого сдвига представляют собой одинаковые (по величине) растягивающее и сжимающее напряжения, действующие на плоскости, повернутые на 45° по отношению к тем плоскостям, на которые действуют только касательные напряжения (фиг. 5.12).

В случае общего напряженного состояния касательные компоненты напряжений действуют на все плоскости, кроме плоскостей, нормальных к главным осям. Можно показать, что наибольшее касательное напряжение действует на плоскость, разделяющую пополам угол между теми плоскостями, на которые действуют наибольшее и наименьшее из главных напряжений (фиг. 5.13). Если $\sigma_1 < \sigma_2 < \sigma_3$, то величина наибольшего касательного напряжения равна $(\sigma_3 - \sigma_1)/2$.

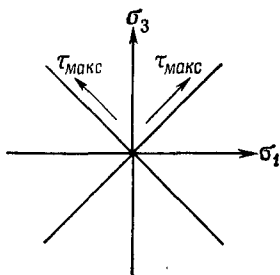
Гидростатическое давление P равно

$$\begin{pmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{pmatrix}$$

независимо от того, как выбраны оси координат.

Иначе говоря, гидростатическое давление не создает касательных напряжений.

Можно создать любое напряженное состояние, налагая гидростатическое давление или растяжение на три чисто сдвиговых напряжения. Чтобы доказать это, заметим, что общее напряжение можно записать как сумму гидростатических компонент



Ф и г. 5.13.

Если σ_3 — наибольшее главное напряжение, а σ_1 — наименьшее, то наибольшее касательное напряжение действует в направлениях, указанных стрелками, на плоскость, нормальную к плоскости чертежа.

и компонент, которые называются девиаторными напряжениями. В главных осях это напряжение можно записать как

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \sigma_{ii} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{ii} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{ii} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_1 - \frac{1}{3}\sigma_{ii} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 - \frac{1}{3}\sigma_{ii} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 - \frac{1}{3}\sigma_{ii} \end{pmatrix}, \quad (5.31)$$

где $\sigma_{ii} = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3$. Гидростатическая компонента $\frac{1}{3}\sigma_{ii}$ инвариантна. Иначе говоря, сумма $(\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})$ остается неизменной независимо от того, как выбраны оси координат. Девиаторную часть напряжения можно выразить как сумму трех чистых сдвиговых напряжений, т. е.

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 - \frac{1}{3}\sigma_{ii} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 - \frac{1}{3}\sigma_{ii} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 - \frac{1}{3}\sigma_{ii} \end{pmatrix} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \sigma_1 - \sigma_2 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 - \sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \sigma_1 - \sigma_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 - \sigma_1 \end{pmatrix} + \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 - \sigma_3 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 - \sigma_2 \end{pmatrix}. \quad (5.32)$$

5.5. Упругость кристаллов

Если деформации очень малы, то в любой точке деформированного кристалла напряжение линейно связано с деформацией в той же точке. Это соотношение называется *законом Гука*. Физический смысл закона Гука состоит в том, что при малых деформациях относительные смещения атомов малы, а межатомные силы действуют на столь малых расстояниях, что смещение можно считать в основном линейным. В большинстве твердых тел деформации действительно остаются малыми вплоть до значительных напряжений.

Мы видели, что и напряжение, и малую деформацию можно представить симметричными тензорами второго ранга, которые содержат по шесть независимых компонент. Линейная связь между напряжением и деформацией в общем виде записывается как

$$\begin{aligned} \sigma_{11} = & c_{1111}\varepsilon_{11} + c_{1112}\varepsilon_{12} + c_{1113}\varepsilon_{13} + c_{1121}\varepsilon_{21} + \\ & + c_{1122}\varepsilon_{22} + c_{1123}\varepsilon_{23} + c_{1131}\varepsilon_{31} + c_{1132}\varepsilon_{32} + \\ & + c_{1133}\varepsilon_{33}. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Такие же уравнения можно написать для всех остальных компонент напряжения. Все эти уравнения могут быть представлены в компактной форме:

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\varepsilon_{kl}. \quad (5.34)$$

Константы c_{ijkl} называются *постоянными (константами) упругой жесткости* или просто *упругими жесткостями*. Если у кристалла некоторые из c_{ijkl} оказываются не равными нулю, следствия получаются довольно неожиданные. Например, если c_{1112} не равно нулю, то деформации сдвига ε_{12} неизбежно сопутствует наличие пропорционального растягивающего напряжения σ_{11} . Из соображений симметрии можно показать, что в изотропной среде константы типа c_{1112} равны нулю, но в монокристалле они, как правило, не равны нулю.

Если же в кристалле есть хотя бы одна компонента деформации, это может означать, что все компоненты напряжения не равны нулю.

Упругая деформация, создаваемая приложенным напряжением, определяется системой уравнений, сходных с уравнением (5.34):

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl}. \quad (5.35)$$

Постоянные s_{ijkl} называются *постоянными (константами) упругой податливости* или просто *упругими податливостями*. Уравнение (5.35) означает, что в общем случае даже при наличии

одной компоненты напряжения все компоненты деформации могут быть отличны от нуля. Раньше экспериментаторы определяли компоненты упругих податливостей, просто прилагая напряжение и измеряя получающуюся деформацию. Современные определения упругих свойств кристаллов основываются на измерениях скоростей упругих волн в кристаллах, по которым можно узнать постоянные упругой жесткости. Зная упругие жесткости, можно вычислять упругие податливости по уравнениям (5.34) и (5.35).

Каждая из систем уравнений (5.34) или (5.35) состоит из девяти уравнений, а в правой части каждого из этих уравнений имеется по девять членов. Поэтому сначала кажется, что число компонент упругих жесткостей или упругих податливостей должно равняться 81. Однако число этих независимых постоянных всегда можно свести от 81 к 21.

Так как $\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21}$, постоянные c_{ij12} и c_{ij21} из уравнения (5.34) входят в равенство $\sigma_{ij} = (c_{ij12} + c_{ij21})\varepsilon_{12}$ всегда вместе. Поэтому можно считать, что $c_{ij12} = c_{ij21}$ или в общем случае $c_{ijkl} = c_{ijlk}$. Далее допустим, что есть только одна компонента деформации ε_{11} . Тогда

$$\sigma_{12} = c_{1211}\varepsilon_{11}$$

и

$$\sigma_{21} = c_{2111}\varepsilon_{11}.$$

Так как $\sigma_{12} = \sigma_{21}$, то $c_{1211} = c_{2111}$ и вообще $c_{ijkl} = c_{jikh}$. Такие же рассуждения справедливы и для величин s_{ijkl} . Число независимых постоянных уменьшается тем самым до 36.

На этом этапе можно ввести сокращенные обозначения, в которых два индекса заменяются одним. Индексы для напряжения σ_{ij} заменяются следующим образом:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{pmatrix}.$$

Те же обозначения применяются и к c_{ijkl} , так что, например, $c_{1233} \rightarrow c_{63}$, $c_{2323} \rightarrow c_{44}$ и т. д.¹⁾ Чтобы записать теперь уравнение (5.34) в сокращенном виде

$$\sigma_i = c_{ij}\varepsilon_j, \quad (5.36)$$

необходимо для сокращенной записи ε_{ij} ввести множитель $1/2$:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 1/2\varepsilon_6 & 1/2\varepsilon_5 \\ 1/2\varepsilon_6 & \varepsilon_2 & 1/2\varepsilon_4 \\ 1/2\varepsilon_5 & 1/2\varepsilon_4 & \varepsilon_3 \end{pmatrix}.$$

¹⁾ Для этих обозначений удобно пользоваться так называемым правилом девятки: сумма полных индексов и сокращенного должна равняться девяти. Например, $\sigma_{23} \rightarrow \sigma_4$, так как $2 + 3 + 4 = 9$. — Прим. ред.

Иными словами, деформации $\varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6$ (в сокращенной записи) совпадают с деформациями сдвига γ , определенными в разд. 5.2, но не являются тензорными величинами. В определении s_{ij} тоже нужно ввести множители 2 и 4, а именно: $s_{mn} = 2s_{ijhl}$, если только m или только n равны 4, 5, 6; $s_{mn} = 4s_{ijhl}$, если ни m , ни n не равны 1, 2, 3.

Например, $s_{11} = s_{1111}$, но $s_{14} = 2s_{1123}$ и $s_{44} = 4s_{2323}$. Пользуясь этими обозначениями, запишем уравнение (5.35) в виде

$$\varepsilon_i = s_{ij}\sigma_j. \quad (5.37)$$

Покажем теперь, что из того, что энергия, содержащаяся в упруго деформированном теле, зависит только от величины деформации, но не зависит от пути, по какому была осуществлена деформация, следует, что $c_{ij} = c_{ji}$. Если деформация тела возрастает на $d\varepsilon_{ij}$, силы, действующие на единичный куб внутри этого тела, совершают работу dw , где

$$dw = \sigma_{11}d\varepsilon_{11} + \sigma_{12}d\varepsilon_{12} + \sigma_{13}d\varepsilon_{13} + \sigma_{21}d\varepsilon_{21} + \sigma_{22}d\varepsilon_{22} + \\ + \sigma_{23}d\varepsilon_{23} + \sigma_{31}d\varepsilon_{31} + \sigma_{32}d\varepsilon_{32} + \sigma_{33}d\varepsilon_{33} \quad (5.38)$$

или, пользуясь сокращенными обозначениями,

$$dw = \sigma_i d\varepsilon_i. \quad (5.39)$$

(Величина dw должна быть положительной, иначе деформированный кристалл не будет находиться в состоянии устойчивого равновесия.) Чтобы вычислить энергию, обусловленную конечной деформацией, надо проинтегрировать уравнение (5.39). Допустим, что сначала задается деформация ε_1 , а все остальные ε_i равны нулю. Тогда совершенная работа, приходящаяся на единицу объема, равна

$$w_1 = \int_0^{\varepsilon_1} \sigma_1 d\varepsilon_1 = \int_0^{\varepsilon_1} c_{11}\varepsilon_1 d\varepsilon_1 = 1/2 c_{11} \varepsilon_1^2. \quad (5.40)$$

Будем увеличивать ε_2 . Работа при этом будет равна

$$w_2 = \int_0^{\varepsilon_2} \sigma_2 d\varepsilon_2 = \int_0^{\varepsilon_2} c_{22}\varepsilon_2 d\varepsilon_2 + \int_0^{\varepsilon_2} c_{21}\varepsilon_1 d\varepsilon_2 = 1/2 c_{22} \varepsilon_2^2 + c_{21}\varepsilon_1 \varepsilon_2. \quad (5.41)$$

Полная энергия упруго деформированного тела получается равной

$$w = w_1 + w_2 = 1/2 c_{11} \varepsilon_1^2 + 1/2 c_{22} \varepsilon_2^2 + c_{21} \varepsilon_1 \varepsilon_2. \quad (5.42)$$

Такую же деформацию можно получить, задавая деформации ε_1 и ε_2 в обратном порядке, что даст

$$w = 1/2 c_{22} \varepsilon_2^2 + 1/2 c_{11} \varepsilon_1^2 + c_{12} \varepsilon_2 \varepsilon_1. \quad (5.43)$$

Из уравнений (5.42) и (5.43) следует, что $c_{12} = c_{21}$ и вообще

$$c_{ij} = c_{ji}. \quad (5.44)$$

Записав уравнение (5.39) в виде

$$dw = \sigma_i s_{ij} d\sigma_j \quad (5.45)$$

и выражая приращение энергии через приложенное напряжение, получим, что

$$s_{ij} = s_{ji}. \quad (5.46)$$

Теперь можно записать постоянные упругой жесткости или упругой податливости в самом общем виде как матрицу из 21 независимого члена; например,

c_{11}	c_{12}	c_{13}	c_{14}	c_{15}	c_{16}
c_{12}	c_{22}	c_{23}	c_{24}	c_{25}	c_{26}
c_{13}	c_{23}	c_{33}	c_{34}	c_{35}	c_{36}
c_{14}	c_{24}	c_{34}	c_{44}	c_{45}	c_{46}
c_{15}	c_{25}	c_{35}	c_{45}	c_{55}	c_{56}
c_{16}	c_{26}	c_{36}	c_{46}	c_{56}	c_{66}

Если оси координат выбраны произвольно, то в общем случае число независимых упругих постоянных кристалла равно 21, хотя из-за симметрии кристалла между ними могут существовать некоторые соотношения. Но если оси координат выбраны в соответствии со структурой кристалла, то из-за требований симметрии некоторые константы могут обратиться в нуль. В кубическом кристалле оси тензора выбирают обычно параллельно кристаллографическим осям. Остановимся на наименее симметричном классе кубической симметрии 23. Полученный результат применим затем ко всем классам кубической сингонии. Оси Ox_1 , Ox_2 , Ox_3 параллельны соответственно направлениям $[100]$, $[010]$ и $[001]$. Оси третьего порядка обеспечивают эквивалентность направлений Ox_1 , Ox_2 и Ox_3 , так что

$$\begin{aligned} c_{11} &= c_{22} = c_{33}, & s_{11} &= s_{22} = s_{33}, \\ c_{12} &= c_{23} = c_{31}, & s_{12} &= s_{23} = s_{31}, \\ c_{44} &= c_{55} = c_{66}, & s_{44} &= s_{55} = s_{66}. \end{aligned} \quad (5.47)$$

Из-за того что оси Ox_1 , Ox_2 и Ox_3 являются осями симметрии второго порядка, остальные константы равны нулю. Например, как показано на фиг. 5.14, напряжение σ_6 не может создать деформацию ϵ_3 , потому что это несовместимо с наличием оси симметрии второго порядка вдоль Ox_1 . На фиг. 5.14, б кристалл повернут на 180° вокруг оси Ox_1 . Касательное напряжение должно было бы

создать одинаковые деформации в случае фиг. 5.14, а и б, и в частности

$$\varepsilon'_3 = \varepsilon_3. \quad (5.48)$$

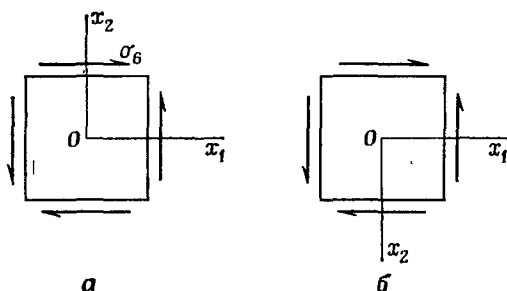
Однако знак касательного напряжения изменился (оси координат повернулись вместе с кристаллом), поэтому

$$\varepsilon_3 = s_{36} \sigma_6, \quad (5.49)$$

$$\varepsilon'_3 = -s_{36} \sigma_6. \quad (5.50)$$

Отсюда следует, что $\varepsilon_3 = 0$ и $s_{36} = 0$.

Те ограничения, которые симметрия кристалла налагает на упругие постоянные, можно вывести и формально, применяя



Ф и г. 5.14.

а — на кристалл действует касательное напряжение σ_6 ; б — тот же кристалл повернут вокруг оси симметрии второго порядка, нормальной к плоскости чертежа в точке 0; знак напряжения изменился, поэтому $\varepsilon_3 = 0$ и $s_{36} = 0$.

последовательно то условие, что упругие постоянные должны остаться неизменными, когда на оси координат действуют поочередно все преобразования симметрии, входящие в точечную группу кристалла [1].

Итак, упругие свойства кубического кристалла полностью определяются тремя константами c_{11} , c_{12} и c_{44} . Постоянные упругой податливости связаны с упругими жесткостями через уравнения (5.36) и (5.37). Для кубических кристаллов ¹⁾

$$s_{11} = \frac{c_{11} + c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}, \quad (5.51)$$

$$s_{44} = 1/c_{44}$$

и

$$s_{12} = \frac{-c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}.$$

¹⁾ См. задачу 5.17.

Постоянные упругой жесткости можно получить из упругих податливостей, просто заменяя s на c в уравнении (5.51). В табл. 5.1 приведены упругие постоянные для некоторых кубических кристаллов.

Таблица 5.1

Упругие постоянные кубических кристаллов

Оси координат параллельны осям куба; $c_{11} = c_{22} = c_{33}$,

$$c_{44} = c_{55} = c_{66}, \quad c_{12} = c_{23} = c_{13}$$

Материал	$c_{ij}, 10^{11}$ дина·см ⁻²			$s_{ij}, 10^{-12}$ см ² ·дина ⁻¹			Источ-ник
	c_{11}	c_{44}	c_{12}	s_{11}	s_{44}	s_{12}	
Ag	12,40	4,61	9,34	2,29	2,17	-0,983	[2]
Al	10,82	2,85	6,13	1,57	3,51	-0,568	[2]
Au	18,6	4,20	15,7	2,33	2,38	-1,065	[2]
Cu	16,84	7,54	12,14	1,498	1,326	-0,629	[2]
Ni	24,65	12,47	14,73	0,734	0,802	-0,274	[2]
Pb	4,95	1,49	4,23	9,51	6,72	-4,38	[3]
Fe	22,8	11,65	13,2	0,762	0,858	-0,279	[4]
Mo	46	11,0	17,6	0,28	0,91	-0,078	[2]
Na	0,732	0,419	0,625	64,0	23,9	-29,5	[5]
Nb	24,55	2,93	13,90	0,690	3,42	-0,249	[6]
Ta	26,7	8,25	16,1	0,685	1,21	-0,258	[7]
V	22,8	4,26	11,9	0,683	2,35	-0,234	[7]
W	50,1	15,14	19,8	0,257	0,660	-0,073	[2]
C (алмаз)	107,6	57,58	12,50	0,0953	0,174	-0,0099	[2]
Ge	12,89	6,71	4,83	0,978	1,490	-0,266	[2]
Si	16,57	7,96	6,39	0,768	1,256	-0,214	[2]
NaCl	4,87	1,26	1,24	2,29	7,94	-0,465	[2]
LiF	11,12	6,28	4,20	1,135	1,59	-0,31	[2]
MgO	28,92	15,46	8,80	0,403	0,647	-0,094	[8]
TiC	50,0	17,5	11,3	0,218	0,572	-0,040	[9]

Во всех кристаллографических сингониях, кроме триклинной, условия симметрии уменьшают число независимых упругих постоянных. В табл. 5.2 приведены формы матриц для случаев расположения осей координат вдоль заданных осей симметрии. Если одна из осей координат параллельна какой-нибудь оси симметрии, а другая координатная ось параллельна другой оси симметрии, то на матрицу налагаются ограничения, соответствующие обеим осям (см. табл. 5.2). С помощью данных этой таблицы легко получить число независимых констант упругости для каждого класса симметрии. Так как напряжение и деформация сами по себе центросимметричны, наличие или отсутствие центра симметрии в кристалле не влияет на число упругих постоянных.

Таблица 5.2

Формы матриц упругих податливостей и упругих жесткостей [10]

Ось симметрии	Ось симметрии параллельна Ox_1					Ось симметрии параллельна Ox_2					Ось симметрии параллельна Ox_3								
2 или $\bar{2}$	11	12	13	14	0	0	11	12	13	0	15	0	11	12	13	0	0	0	16
	12	22	23	24	0	0	12	22	23	0	25	0	12	22	23	0	0	0	26
	13	23	33	34	0	0	13	23	33	0	35	0	13	23	33	0	0	0	36
	14	24	34	44	0	0	0	0	0	44	0	46	0	0	0	44	45	0	0
	0	0	0	0	55	56	15	25	35	0	55	0	0	0	0	45	55	0	0
	0	0	0	0	56	66	0	0	0	46	0	66	16	26	36	0	0	0	66
3 или $\bar{3}$	11	12	12	0	0	0	11	12	13	14	0	16	11	12	13	14	15	0	0
	12	22	23	0	25	26	12	22	12	0	0	0	12	11	13	-14	-15	0	0
	12	23	22	0	-25	-26	13	12	11	-14	0	-16	13	13	33	0	0	0	0
	0	0	0	A	-a	6	14	0	-14	44	-в	0	14	-14	0	44	0	-д	0
	0	25	-25	-26	55	0	0	0	0	-16	Б	Г	15	-15	0	0	44	е	0
	0	26	-26	25	0	55	16	0	-16	0	14	44	0	0	0	-15	14	В	0
4 или $\bar{4}$	11	12	12	0	0	0	11	12	13	0	15	0	11	12	13	0	0	0	16
	12	22	23	24	0	0	12	22	12	0	0	0	12	11	13	0	0	0	-16
	12	23	22	-24	0	0	13	12	11	0	-15	0	13	13	33	0	0	0	0
	0	24	-24	44	0	0	0	0	0	44	0	0	0	0	0	44	0	0	0
	0	0	0	0	55	0	15	0	-15	0	55	0	0	0	0	0	44	0	0
	0	0	0	0	0	55	0	0	0	0	0	44	16	-16	0	0	0	0	66
6 или $\bar{6}$	11	12	12	0	0	0	11	12	13	0	0	0	11	12	13	0	0	0	0
	12	22	23	0	0	0	12	22	12	0	0	0	12	11	13	0	0	0	0
	12	23	22	0	0	0	13	12	11	0	0	0	13	13	33	0	0	0	0
	0	0	0	A	0	0	0	0	0	44	0	0	0	0	0	44	0	0	0
	0	0	0	0	55	0	0	0	0	0	Б	0	0	0	0	0	44	0	0
	0	0	0	0	0	55	0	0	0	0	0	44	0	0	0	0	0	0	В
	а	б	в	г	д	е	А	Б	В										
Жесткости	c_{26}	c_{25}	c_{16}	c_{14}	c_{15}	c_{14}	$\frac{1}{2}(c_{22}-c_{23})$	$\frac{1}{2}(c_{11}-c_{13})$	$\frac{1}{2}(c_{11}-c_{12})$										
Податливости	$2s_{26}$	$2s_{25}$	$2s_{16}$	$2s_{14}$	$2s_{15}$	$2s_{14}$	$2(s_{22}-s_{23})$	$2(s_{11}-s_{13})$	$2(s_{11}-s_{12})$										

Иными словами, упругие свойства одинаковы для всех классов, входящих в одну и ту же группу Лауэ (табл. 2.1).

Отсюда следует, что во всех моноклинных классах число упругих констант одинаково; как видно из первого ряда табл. 5.2, это число равно тринадцати. Поскольку у ромбической решетки имеются три взаимно перпендикулярные оси второго порядка, суперпозиция всех трех столбцов первого ряда табл. 5.2 приведет

Таблица 5.

Формулы для выражения коэффициентов податливости s_{ij} через коэффициенты жесткости c_{ij} для высокосимметричных кристаллографических систем

Коэффициенты жесткости можно выразить через коэффициенты податливости, поменяв местами c_{ij} и s_{ij} в этих уравнениях

Кристаллографическая система	Уравнения
Кубическая	$s_{11} = \frac{c_{11} + c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}$ $s_{12} = \frac{-c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}$ $s_{44} = \frac{1}{c_{44}}$
Гексагональная	$s_{11} + s_{12} = \frac{c_{33}}{c}$ $s_{11} - s_{12} = \frac{1}{c_{11} - c_{12}}$ $s_{13} = \frac{-c_{13}}{c}, \quad s_{33} = \frac{c_{11} + c_{12}}{c}$ $s_{44} = \frac{1}{c_{44}}, \quad c = c_{33}(c_{11} + c_{12}) - 2c_{13}^2$
Тетрагональная	$s_{11} + s_{12} = \frac{c_{33}}{c}$ $s_{11} - s_{12} = \frac{1}{c_{11} - c_{12}}$ $s_{13} = \frac{-c_{13}}{c}, \quad s_{33} = \frac{c_{11} + c_{12}}{c}$ $s_{44} = \frac{1}{c_{44}}, \quad s_{66} = \frac{1}{c_{66}}$ $c = c_{33}(c_{11} + c_{12}) - 2c_{13}^2$
Тригональная	$s_{11} + s_{12} = \frac{c_{33}}{c}, \quad s_{11} - s_{12} = \frac{c_{44}}{c'}$ $s_{13} = \frac{-c_{13}}{c}, \quad s_{14} = \frac{-c_{14}}{c'}$ $s_{33} = \frac{c_{11} + c_{12}}{c}, \quad s_{44} = \frac{c_{11} - c_{12}}{c'}$ $c = c_{33}(c_{11} + c_{12}) - 2c_{13}^2$ $c' = c_{44}(c_{11} - c_{12}) - 2c_{14}^2$

к выводу, что во всех ромбических классах число констант упругости равно девяти. Как видно из третьего ряда табл. 5.2, у лауэ-группы $4/m$ тетрагональной системы (табл. 2.1) остается семь независимых упругих постоянных, а у второй лауэ-группы тетрагональной системы ($4/m\bar{m}m$) — шесть постоянных. Это можно видеть, наложив, например, колонку для четверной оси симметрии, параллельной Ox_3 , на колонку для плоскости симметрии, нормальной к Ox_2 (т. е. ось $\bar{2}$ параллельна Ox_2); в результате такой процедуры получается, что постоянная с индексом $\bar{16}$ должна равняться нулю. В тригональной системе у лауэ-группы $\bar{3}$ имеется семь независимых постоянных, а у лауэ-группы $\bar{3}m$ — шесть независимых постоянных. Оба эти результата легко проверить по данным табл. 5.2.

Очевидно, что у гексагонального кристалла остается пять независимых постоянных. Если, как обычно, ось x_3 параллельна оси симметрии шестого порядка, т. е. c -оси, то нужно определять постоянные c_{11} , c_{33} , c_{44} , c_{12} и c_{13} . Упругие податливости можно вывести из упругих жесткостей, пользуясь соотношениями, приведенными в табл. 5.3. В той же таблице даны и соответствующие формулы для тетрагональных и тригональных кристаллов. Упругие постоянные для некоторых гексагональных кристаллов приведены в табл. 5.4.

В изотропной среде упругие постоянные не должны зависеть от выбора системы координат. Это требование налагает дополни-

Таблица 5.4

Упругие постоянные гексагональных кристаллов при комнатной температуре

Ось x_3 параллельна $[0001]$, оси x_1 и x_2 лежат в плоскости базиса.

$$c_{11} = c_{22}, c_{44} = c_{55}, c_{13} = c_{23}, c_{66} = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12}), s_{66} = 2(s_{41} - s_{12}).$$

Материал	c_{ij} , 10^{11} дина·см ⁻²					s_{ij} , 10^{-12} см ² ·дина ⁻¹					Источник
	c_{11}	c_{33}	c_{44}	c_{12}	c_{13}	s_{11}	s_{33}	s_{44}	s_{12}	s_{13}	
Be	29,23	33,64	16,25	2,67	1,4	0,348	0,298	0,616	-0,030	-0,0131	[11]
C(графит)	116	4,66	0,23	29	10,9	0,111	3,32	43,5	-0,0046	-0,249	[12]
Cd	11,58	5,14	2,04	3,98	4,06	1,24	3,52	4,98	-0,076	-0,920	[13]
Co	30,7	35,81	7,83	16,5	10,3	0,472	0,319	1,324	-0,231	-0,069	[2]
Hf	18,11	19,69	5,57	7,72	6,61	0,715	0,613	1,80	-0,247	-0,157	[14]
Mg	5,97	6,17	1,64	2,62	2,17	2,20	1,97	6,1	-0,785	-0,50	[2]
Re	61,25	68,27	16,25	27,0	20,6	0,212	0,170	0,616	-0,080	-0,040	[15]
Ti	16,24	18,07	4,67	9,20	6,90	0,958	0,698	2,14	-0,462	-0,189	[14]
Zn	16,1	6,10	3,83	3,42	5,01	0,838	2,838	2,61	-0,053	-0,731	[2]
ZnO	20,97	21,09	4,25	12,11	10,51	0,787	0,694	2,35	-0,344	-0,221	[16]
Zr	14,34	16,48	3,20	7,28	6,53	1,013	0,799	3,13	-0,404	-0,241	[14]

тельное ограничение, кроме условия кубической симметрии, а именно

$$c_{44} = 1/2 (c_{11} - c_{12}) \quad (5.52)$$

или

$$s_{44} = 2 (s_{11} - s_{12}). \quad (5.53)$$

Эти условия изотропности среды можно вывести и непосредственно из формы матриц для гексагональных кристаллов (табл. 5.2).

Кубический кристалл подчиняется всем ограничениям изотропности, кроме уравнения (5.52), а степень его анизотропии можно измерять по тому, насколько отличается от единицы отношение A , равное

$$A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}}. \quad (5.54)$$

Отношение A представляет собой меру относительного сопротивления кристалла двум типам сдвиговой деформации, так как c_{44} измеряет сопротивление сдвигу по плоскости (010) в направлении [001], а $(c_{11} - c_{12})/2$ есть жесткость по отношению к сдвигу по (110) в направлении [110]. Из кристаллов, перечисленных в табл. 5.1, только вольфрам и алюминий можно считать почти изотропными.

Однако с изотропными материалами приходится встречаться часто, потому что металлы обычно применяются в виде агрегата беспорядочно ориентированных кристаллов, если при затвердевании или последующей деформации не образовалась текстура. Упругие свойства изотропного материала принято характеризовать двумя константами — модулем Юнга E и коэффициентом Пуассона ν . Их определяют из простых испытаний на растяжение под действием напряжения σ как

$$E = \sigma/\varepsilon, \quad (5.55)$$

$$\nu = \varepsilon'/\varepsilon, \quad (5.56)$$

где ε — деформация растяжения в направлении растягивающего усилия, а ε' — деформация растяжения в направлении, нормальном к первому. Через упругие податливости эти постоянные выражаются в виде

$$E = 1/s_{11}, \quad (5.57)$$

$$\nu = s_{12}/s_{11}. \quad (5.58)$$

Пользуются и другими постоянными, зависящими от E и ν . Например, модуль сдвига μ определяется как

$$\mu = \tau/\gamma, \quad (5.59)$$

где γ — деформация упругого сдвига, вызванного касательным напряжением τ .

Очевидно, что

$$\mu = 1/s_{44} = c_{44}, \quad (5.60)$$

а из уравнений (5.53), (5.57) и (5.58) получим

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}. \quad (5.61)$$

Используя постоянные E , ν и μ , запишем закон Гука для изотропного твердого тела в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} &= \frac{\sigma_{11}}{E} - \frac{\nu}{E} (\sigma_{22} + \sigma_{33}), \\ \varepsilon_{22} &= \frac{\sigma_{22}}{E} - \frac{\nu}{E} (\sigma_{11} + \sigma_{33}), \\ \varepsilon_{33} &= \frac{\sigma_{33}}{E} - \frac{\nu}{E} (\sigma_{11} + \sigma_{22}), \\ \varepsilon_{12} &= \frac{\sigma_{12}}{2\mu}, \\ \varepsilon_{23} &= \frac{\sigma_{23}}{2\mu}, \\ \varepsilon_{31} &= \frac{\sigma_{31}}{2\mu}. \end{aligned} \quad (5.62)$$

Часто пользуются также двумя другими константами — постоянными Ламе λ и μ . Постоянная Ламе μ идентична модулю сдвига, а постоянная λ идентична компоненте упругой жесткости c_{11} изотропного материала

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}.$$

Выражая закон Гука через постоянные Ламе, получаем

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{ij} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}, \quad (5.63)$$

где $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$; $\delta_{ij} = 1$ при $i = j$ и $\delta_{ij} = 0$ при $i \neq j$.

Уменьшение числа независимых постоянных до двух для изотропного материала, до трех для кубического кристалла и т. д. следует только из симметрии. Дальнейшие соотношения между этими константами выводились раньше на основе частных предположений о том, что твердое тело представляет собой атомную решетку, а силы взаимодействия между атомами направлены по линиям, их соединяющим. Эти соотношения называются соотношениями Коши. Они требуют равенства компонент, для которых при четырехиндексном обозначении один индекс из первой пары заменяется индексом из второй пары. В общем случае это

сводит число независимых постоянных от 21 до 15. Для изотропного материала условие Коши будет

$$\nu = 1/4, \quad (5.64)$$

для кубического кристалла

$$c_{12} = c_{44}, \quad (5.65)$$

а для гексагонального и тригонального кристаллов соответственно

$$c_{13} = c_{44}, \quad c_{11} = 3c_{12}. \quad (5.66)$$

Как видно из данных табл. 5.1 и 5.3, условия Коши соблюдаются очень редко, даже и приближенно. Из кубических кристаллов некоторые щелочно-галлоидные кристаллы довольно хорошо подчиняются условиям Коши.

При решении задач по упругости кристаллов иногда оказывается удобным выбрать нестандартные оси координат. Преобразование упругих постоянных к новым осям можно провести по уравнению

$$c'_{ijkl} = a_{im}a_{jn}a_{ko}a_{lp}c_{mnop}, \quad (5.67)$$

где a_{ij} — косинусы углов между новыми осями x'_i и старыми x_j . Хирмон дал эти уравнения в форме таблиц, воспользовавшись сокращенными обозначениями c_{ij} и s_{ij} [17]. Если одна из новых осей является осью симметрии или нормалью к плоскости симметрии, то это вычисление упрощается благодаря симметричным соотношениям, которые выводятся непосредственно из табл. 5.2.

Задачи

5.1. Выведите выражения для параллельных фиксированным осям Ox_1 и Ox_2 смещений u_1 и u_2 точки (x_1, x_2) в теле, которое поворачивается на угол θ вокруг оси, проходящей через начало координат. Покажите затем, что если угол θ очень мал, то его величина равна $1/2 \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} - \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right)$.

5.2. Некое тело подвергается деформации чистого упругого сдвига путем растяжения вдоль оси x_1 и сжатия вдоль оси x_2 . Смещение, параллельное Ox_1 , равно $u_1 = ex_1$, а параллельное Ox_2 равно $u_2 = -ex_2$, причем e очень мало. Запишите тензор деформации, отнесенный к осям Ox_1, Ox_2, Ox_3 , и получите тензор деформации для осей Ox'_1, Ox'_2 и Ox'_3 , которые повернуты по отношению к старым осям Ox_1 и Ox_2 на 45° против часовой стрелки вокруг оси Ox_3 и имеют с ними общее начало координат.

5.3. Некое тело подвергается деформации упругого растяжения вдоль оси x_1 . Возникающие смещения равны $u_1 = ex_1, u_2 = -\nu ex_2, u_3 = -\nu ex_3$, где ν — коэффициент Пуассона (материальная константа). Напишите тензор деформации, отнесенный к осям Ox_1, Ox_2, Ox_3 , и получите тензор, отнесенный к осям Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 , ориентировка которых дана в задаче 5.2.

5.4. Докажите, что однородный простой сдвиг $e_{12} = g$ преобразует плоскость, симметрично наклоненную по отношению к осям Ox_1, Ox_2, Ox_3 , т. е. плоскость, нормаль к которой параллельна вектору $(1, 1, 1)$, в другую плоскость, нормаль к которой параллельна вектору $(1, 1 - g, 1)$.

5.5. Докажите, что однородный простой сдвиг $e_{12} = g$ преобразует круг $x_1^2 + x_2^2 = 1$ в эллипс, большая ось которого составляет с осью Ox_1 угол θ , причем $\operatorname{tg} 2\theta = 2/g$.

5.6. Покажите, что если на некое тело действует одноосное растягивающее напряжение σ , то плоскости, в которых сдвиговые напряжения максимальны, проходят под углом 45° к оси растяжения. Определите величину наибольшего скалывающего напряжения.

5.7. Цилиндрические координаты точки (r, θ, z) связаны с ортогональной системой координат Ox_1, Ox_2, Ox_3 следующим образом: ось z параллельна Ox_3 , а угол θ отсчитывается против часовой стрелки от оси Ox_2 , если смотреть вдоль положительного направления оси Ox_3 . Покажите, что

$$\begin{aligned}\sigma_{rz} &= \sigma_{13} \sin \theta + \sigma_{23} \cos \theta, \\ \sigma_{\theta z} &= \sigma_{13} \cos \theta - \sigma_{23} \sin \theta.\end{aligned}$$

5.8. Покажите, что одноосное сжимающее напряжение эквивалентно сумме гидростатического давления и двух чисто сдвиговых напряжений. С помощью тензора напряжения напишите уравнение, описывающее этот результат, и начертите схему напряжений для этого уравнения.

5.9. В точке P отличны от нуля только компоненты напряжений σ_{11}, σ_{22} и σ_{13} , отнесенные к осям Ox_1, Ox_2 и Ox_3 . Рассмотрим плоскость, проведенную через P параллельно Ox_3 и составляющую с осью x_2 угол θ , отсчитываемый от Ox_2 против часовой стрелки, если смотреть вдоль Ox_3 . Покажите, что нормальное напряжение σ_n , действующее на эту плоскость в точке P , равно

$$\sigma_n = \sigma_{11} \cos^2 \theta + \sigma_{22} \sin^2 \theta - 2\sigma_{13} \sin \theta \cos \theta,$$

а скалывающее напряжение τ равно

$$\tau = \sigma_{13} \sin \theta \cos \theta - \sigma_{22} \sin \theta \cos \theta + \sigma_{12} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta).$$

5.10. Упруго изотропное тело, обладающее модулем Юнга E и коэффициентом Пуассона ν , упруго деформируется растягивающим напряжением. Определите его дилатацию, т. е. изменение объема, отнесенное к единице объема. Модуль объемного сжатия твердого тела определяется как $K = -P/\Delta$, где Δ — дилатация, создаваемая напряжением, у которого компонента гидростатического давления равна P . Покажите, что $K = E/3(1 - 2\nu)$.

5.11. В кубическом кристалле постоянная упругой жесткости c_{44} по определению представляет собой модуль сдвига, относящийся к сдвигу по плоскости $\{001\}$ в направлении $\langle 001 \rangle$. Покажите, что тот же самый модуль c_{44} относится к сдвигу по плоскости куба в любом направлении.

5.12. Покажите, что в кубическом кристалле модуль сдвига, относящийся к сдвигу по плоскости $\{110\}$ в направлении $\langle 1\bar{1}0 \rangle$, равен $1/2(c_{11} - c_{12})$. (Указание. Рассмотрите главные деформации для сдвига по $\{110\}$ в направлении $\langle 1\bar{1}0 \rangle$.)

5.13. В монокристалле модуль Юнга для заданного кристаллографического направления определяется (когда в этом направлении приложено растягивающее напряжение) как отношение напряжения к деформации растяжения в том же направлении. Покажите, что в кубическом кристалле обратная величина модуля Юнга равна

$$1/E = s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - 1/2s_{44})(a_{11}^2 a_{12}^2 + a_{11}^2 a_{13}^2 + a_{12}^2 a_{13}^2),$$

где a_{11}, a_{12} и a_{13} — косинусы углов между данным направлением и осями координат Ox_1, Ox_2, Ox_3 соответственно. (Указание. Преобразуйте компоненту упругой податливости s_{1111} к новым осям координат, проведя ось Ox'_1 параллельно данному направлению. Будьте очень осторожны, заменяя в тензоре податливостей соответствующие компоненты в сокращенной записи.)

5.14. На основании соображений симметрии выведите форму матрицы упругих постоянных ромбического кристалла, выбрав оси параллельно кристаллографическим осям. Сверьте ваш результат с табл. 5.2.

5.15. Рассмотрите сферу радиуса R_0 , подвергнутую однородному простому сдвигу на величину s . Покажите, что она преобразуется в эллипсоид с главными полуосями R_1, R_2, R_3 , причем

$$\begin{aligned} \frac{R_1^2}{R_0^2} &= \frac{2}{2+s^2-s\sqrt{s^2+4}}, \\ \frac{R_2^2}{R_0^2} &= \frac{2}{2+s^2+s\sqrt{s^2+4}}, \\ R_3^2 &= R_0^2, \end{aligned}$$

а угол θ между наибольшей осью и направлением сдвига равен

$$\theta = \arctg \left[\frac{-s + \sqrt{s^2+4}}{2} \right].$$

5.16. Выпишите выражения для модуля Юнга, измеренного в направлении $[100]$ в кубическом кристалле, если измерение производится в следующих условиях: а) одноосное растяжение вдоль $[100]$; б) одноосное растяжение вдоль $[100]$, причем не допускаются деформации вдоль $[010]$ или $[001]$; в) растяжение вдоль двух осей $[100]$ и $[010]$, причем не допускается деформация вдоль $[001]$; г) растяжение вдоль трех осей.

5.17. Рассматривая кубический кристалл, подвергаемый некоторым простым типам деформации, например простому растяжению параллельно оси куба, простому сдвигу по грани куба параллельно ребру куба, растяжению параллельно ребру куба без поперечного сокращения, выведите соотношения между c_{ij} и s_{ij} [уравнение (5.51)].

ЛИТЕРАТУРА

1. Nye J. F., *Physical Properties of Crystals*, Oxford, 1957; имеется перевод: Най Дж. Ф., *Физические свойства кристаллов*, изд-во «Мир», 1968.
2. Huntington H. B., *Solid State Phys.*, 7, 243 (1958); имеется перевод: УФН, 74, 2, 302, 461 (1961).
3. Waldorf D. L., Alers G. A., *J. Appl. Phys.*, 33, 3266 (1962).
4. Lord A. E., Beshers D. N., *J. Appl. Phys.*, 36, 1620 (1965).
5. Daniels W. B., *Phys. Rev.*, 119, 1246 (1960).
6. Carrol K. J., *Bull. Am. Phys. Soc.*, 7, 123 (1962).
7. Bolef D. I., *J. Appl. Phys.*, 32, 100 (1961).
8. Chung D. H., *Phil. Mag.* 8, 833 (1963).
9. Gilman J. J., Roberts B. W., *J. Appl. Phys.* 32, 1405 (1961).
10. Waterman P. C., *Phys. Rev.*, 113, 1240 (1959).
11. Smith J. F., Arbogast C. L., *J. Appl. Phys.*, 31, 99 (1960).
12. Spence G. B., *Proceedings of the Fifth Conference on Carbon*, vol. 2, 531, Pergamon Press, 1961.
13. Garland C. W., Silverman J., *Phys. Rev.*, 119, 1218 (1960).
14. Fisher E. S., Renken C. J., *Phys. Rev.*, 135A, 482 (1964).
15. Shepard M. L., Smith J. F., *J. Appl. Phys.*, 36, 1447 (1965).
16. Bateman T. B., *J. Appl. Phys.*, 33, 3309 (1962).
17. Hearmon R. F. S., *Acta Cryst.*, 10, 121 (1957).

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ЧТЕНИЯ

1. Nye J. F., *Physical Properties of Crystals*, Oxford, 1957; имеется перевод: Най Дж. Ф., *Физические свойства кристаллов*, изд-во «Мир», 1968.
2. Love A. E. H., *The Mathematical Theory of Elasticity*, Dover, 1944; имеется перевод: Ляв А., *Математическая теория упругости*, ГОНТИ, М.—Л., 1935.
3. Jaeger J. C., *Elasticity, Fracture and Flow*, Methuen, 1962.
4. Huntington H. B., *The Elastic Constants of Crystals*, *Solid State Physics*, 7, 213 (1958); имеется перевод: УФН, 74, 2, 302, 461 (1961).
5. Hearmon R. F. S., *Equations for Transforming Elastic and Piezoelectric Constant of Crystals*, *Acta Cryst.*, 10, 121 (1957).
6. Simmons G., *Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties*, Southern Methodist Univ. Press, Dallas, 1966.
- 7*. Хоникомб Р., *Пластическая деформация металлов*, изд-во «Мир», 1972.
- 8*. Набарро Ф. Р. Н., Базинский В. С., Холт Д. Б., *Пластичность чистых монокристаллов*, изд-во «Металлургия», 1968.

Глава 6

Скольжение

6.1. Трансляционное скольжение

Основное различие между твердым телом и жидкостью заключается в том, что жидкость не может постоянно сопротивляться тем малым силам, которые стремятся изменить ее форму, но не приводят к изменению объема. Это сдвиговые или касательные силы. Твердое тело может оказывать сопротивление этим силам, если они малы. Но если к кристаллу приложены большие сдвиговые силы, то кристалл будет течь, т. е. пластически деформироваться. Иначе говоря, если сдвиговые напряжения достаточно велики и прилагаются достаточно долго, то форма кристалла будет постепенно меняться.

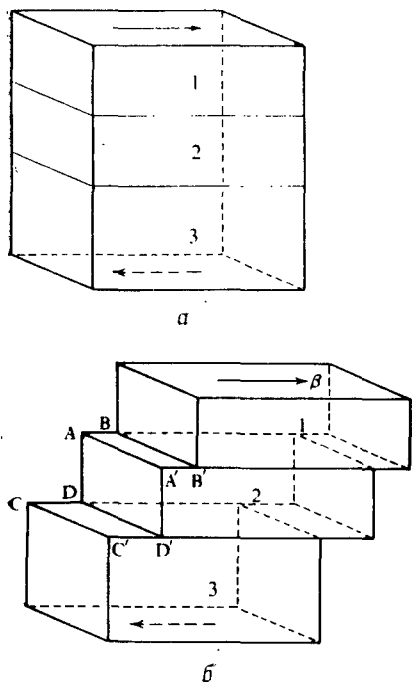
Все кристаллы пластически текут при достаточно высоких температурах. Кристаллы многих металлов, щелочно-галогидных соединений и некоторых неметаллов, например графит или кристаллы инертных газов, пластически текут при очень низких температурах, иногда вблизи абсолютного нуля. Эти температуры значительно ниже тех, при которых за время эксперимента могла бы происходить диффузия атомов. При низких температурах пластическое течение кристаллов осуществляется путем процесса скольжения ¹⁾.

Скольжение — это трансляция одной части кристалла по отношению к другой без изменения объема. Трансляция обычно происходит по определенной кристаллографической плоскости и в определенном кристаллографическом направлении.

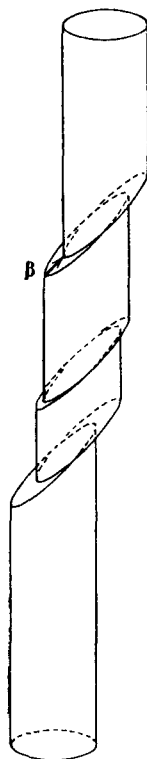
Схема процесса скольжения приведена на фиг. 6.1. Если к кристаллу приложено напряжение слишком малое, чтобы

¹⁾ Приведенные примеры относятся к кристаллам, в которых скольжение наблюдается при обычных давлениях порядка 1 атм или меньше. Кристаллы, в которых не наблюдается скольжения, являются хрупкими; они разрушаются под действием достаточно больших сил. Хрупкость и противоположная ей вязкость — свойства не абсолютные и зависят от типа напряжения, в частности от гидростатического давления. При достаточно большом гидростатическом давлении приложенное сдвиговое напряжение всегда может вызвать скольжение в кристалле. Например, в кристаллах сапфира можно вызвать скольжение при комнатной температуре под давлением 25 000 атм. При высоких температурах постепенная деформация в кристалле может происходить путем диффузии.

вызвать пластическое скольжение, то кристалл деформируется упруго, а если при этом напряжение распределено по кристаллу равномерно, то деформация кристалла будет однородной (фиг. 6.1, а). Рассматривая изменение формы, вызванное скольжением, мы будем пренебрегать упругой деформацией. На фиг. 6.1, б видно, как выглядит кристалл после того, как произошло скольжение



Ф и г. 6.1. Схема кристаллографического скольжения.
а — до деформации; б — после деформации.



Ф и г. 6.2. Схема скольжения, происходящего в направлении β в кристаллическом стержне с круглым сечением.

в направлении β по плоскости, показанной на фигуре. Сравнивая фиг. 6.1, а и б, видим, что форма кристалла изменилась, а объем остался постоянным; неизменной осталась и ориентация решетки. Две половины кристалла по обе стороны от плоскости скольжения сохранили идентичную ориентацию.

Скольжение было открыто впервые в 1867 г. Рёшем, который обнаружил ступеньки на поверхности кристалла каменной соли. На фиг. 6.1, б видно, что на поверхности кристалла, претерпев-

шего скольжение, образовались ступеньки $AA'B'B$ и $CC'D'D$. В оптический микроскоп эти ступеньки обычно видны как линии и их называют *линиями скольжения*, следуя Юингу и Розенхайну, которые в 1899 г. впервые обстоятельно описали линии скольжения на многих металлических кристаллах. Самые тщательные измерения не обнаруживают никаких изменений кристаллографической ориентировки частей кристалла по обе стороны от линии скольжения, а также изменения кристаллической структуры, когда одна из частей кристалла скользит по другой. Совершенно очевидно, что трансляция первого участка кристалла по отношению ко второму или второго участка кристалла по отношению к третьему и т. д. должна равняться *целому числу векторов трансляций* решетки. Поэтому такой процесс часто называют *трансляционным скольжением*.

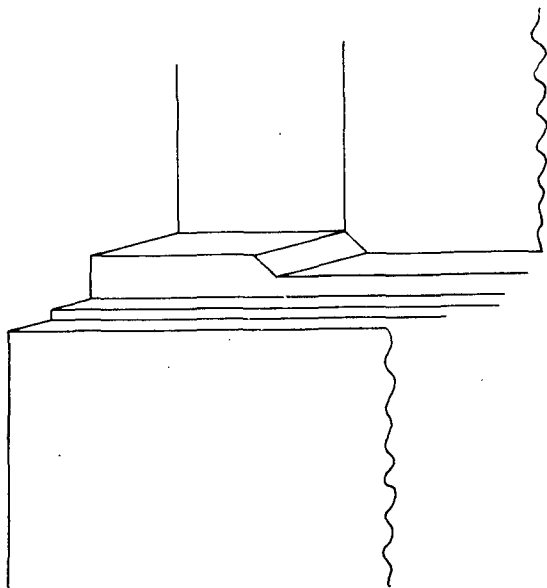
Линии скольжения легко увидеть в микроскоп, а иногда их удастся наблюдать и невооруженным глазом, так как единичный шаг трансляционного скольжения может быть больше 1 мкм (10^{-4} см), что соответствует передвижению на несколько тысяч параметров решетки. Скольжение в кристалле происходит чаще всего по хорошо развитым кристаллографическим плоскостям с малыми индексами и притом всегда в определенном кристаллографическом направлении; эти плоскости называются *плоскостями скольжения* или плоскостями сдвига, а направления — *направлениями скольжения*.

Индексы плоскости скольжения в кристалле легко определить, анализируя направления следов плоскостей скольжения на двух (или больше) отшлифованных или полированных гранях кристалла, которые пересекаются под известным углом; этот способ анализа пересекающихся плоскостей изложен в разд. 2.3. Направление скольжения определять несколько труднее. Из фиг. 6.2 ясно, что высота следов скольжения на поверхности кристалла максимальна на тех гранях кристалла, которые перпендикулярны направлению скольжения, а на гранях, параллельных направлению скольжения, ступеньки скольжения не заметны¹⁾. Один из методов для отыскания направления скольжения заключается в том, чтобы наблюдать, на каких гранях кристалла линии скольжения развиты слабее или на какой грани они совсем исчезают. Направление скольжения должно быть параллельно этой плоскости; его легко идентифицировать, поскольку оно должно лежать также и в плоскости скольжения. Конечно, направление,

¹⁾ Если грань кристалла, параллельная направлению скольжения, совершенно гладкая и чистая, то скольжение не оставляет никаких следов на этой грани. Практически на гранях кристалла всегда есть грязь или продукты коррозии, из-за которых образуется поверхностная пленка. При скольжении эта пленка разрывается, а тогда и на гранях, параллельных направлению скольжения, наблюдаются какие-нибудь эффекты, вызванные скольжением.

в котором произошло скольжение, можно определить еще и путем точного измерения изменений формы кристалла. Этот метод применяется, в частности, для металлических кристаллов, которые могут претерпевать значительное скольжение без разрушения (см. разд. 6.4).

В очень редких случаях ступеньки скольжения на кристаллах бывают столь высокими, что их можно наблюдать невооруженным



Фиг. 6.3. Схема тонкой структуры линий скольжения, наблюдаемой в электронном микроскопе.

глазом. В электронный микроскоп видно, что и у этих ступенек, и у тех, которые в оптический микроскоп кажутся едиными ступеньками, на самом деле имеется сложная тонкая структура из более тонких ступенек (фиг. 6.3).

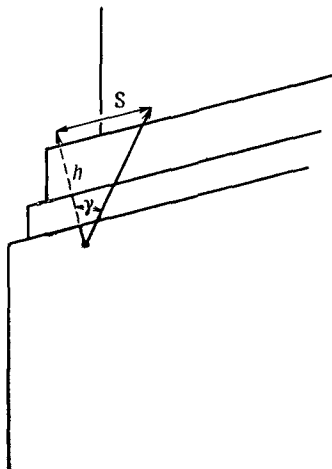
За меру величины скольжения в кристалле принимают макроскопическую величину, усредненную по объему кристалла, содержащего много индивидуальных ступенек скольжения. Если s — относительное смещение в направлении скольжения двух плоскостей, параллельных плоскости скольжения и отстоящих друг от друга на расстояние h , измеренное по нормали к плоскости скольжения (фиг. 6.4), то деформация кристаллографического сдвига α определяется как

$$\alpha = s/h,$$

где $\alpha = \operatorname{tg} \gamma$ на фиг. 6.4. Когда α очень мала, то ее можно записать через компоненты чистого тензора деформаций ε_{ij} . Если x_1 — направление скольжения, а x_3 — нормаль к плоскости скольжения, то

$$\alpha = 2\varepsilon_{13} = 2\varepsilon_{31},$$

что равняется техническому скалывающему напряжению $\gamma_{13} = \gamma_{31}$. Если объем кристалла достаточно велик, так что дефор-



Фиг. 6.4. К определению кристаллографического сдвига.

мацию можно считать однородной, то α удастся выразить через компоненты тензора ε_{ij} , а именно $\alpha = \varepsilon_{13}$ (см. разд. 5.3).

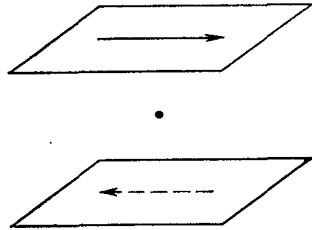
6.2. Элементы скольжения

Элементами скольжения кристалла называются направление скольжения и плоскость скольжения. Иногда их называют еще и направлением сдвига и плоскостью сдвига. Плоскость скольжения и лежащее в ней направление скольжения вместе образуют *систему скольжения*.

Деформация, которая происходит при скольжении, представляет собой простой сдвиг, так что по отношению к центру кристалла относительные смещения неизбежно центросимметричны (фиг. 6.5). Поэтому единичный сдвиг по системе скольжения, например по плоскости скольжения с единичной нормалью \mathbf{n} и по направлению скольжения, нормальному к \mathbf{n} , например β , создает такую же деформацию, как и скольжение по плоскости с нормалью $-\mathbf{n}$ в направлении $-\beta$. Кратность плоскостей и направлений скольжения зависит от точечной группы кристалла. Независимости от точечной группы кристалла характер процесса скольжения для опреде-

ления кратности систем скольжения нужно пользоваться понятием класса Лауэ.

Если заданы направление скольжения и плоскость скольжения, т. е. определенная система скольжения, то во всех кристаллах с симметрией, более высокой, чем триклинная, как правило, должно быть по несколько систем скольжения, потому что плоскости и направления скольжения повторяются элементами симметрии точечной группы кристалла. Все те сочетания плоскостей



Ф и г. 6.5. Смещения, симметричные относительно центра инверсии.

и направлений скольжения, которые получаются из одной заданной плоскости скольжения и одного направления скольжения с помощью преобразований симметрии, свойственных точечной группе кристалла, называются *семейством систем скольжения*.

Заданная система скольжения, например n , β , способна действовать либо в положительном, либо в отрицательном направлении, так что по плоскости с нормалью n в направлении β скольжение может происходить в сторону положительных или отрицательных значений β . Конечно, деформация, созданная скольжением в направлении β , будет обратной к деформации, которая создана скольжением в направлении $-\beta$. Скольжение в этих двух направлениях будет *кристаллографически эквивалентным*, только если выполнено одно из нескольких условий, перечисленных ниже:

- четная ось симметрии (двойная, четверная, шестерная) параллельна n ;
- плоскость симметрии параллельна плоскости скольжения, т. е. ось $\bar{2}$ параллельна n ;
- направление β параллельно четной оси симметрии;
- плоскость симметрии нормальна к β , т. е. направление β параллельно оси $\bar{2}$.

Из табл. 2.1 следует, что если к точечной группе добавить центр симметрии, то выполнение условия а) включает в себя выполнение условия б), и соответственно, если выполняется условие в), значит, удовлетворяется и условие г). Если же не выполняется ни одно из перечисленных условий, то тогда скольжения в направлениях β или $-\beta$ в одной и той же плоскости кристаллографически не идентичны и нельзя ожидать, что они обязательно

будут происходить под действием одного и того же скалывающего напряжения. Ниже рассматриваются некоторые примеры.

В кристаллах каменной соли NaCl скольжение происходит по плоскостям $\{110\}$ в направлениях $\langle 1\bar{1}0 \rangle$. Это кристаллы кубические, точечная группа симметрии $m\bar{3}m$. Всего имеется 12 нормалей к плоскостям скольжения, т. е. 12 полюсов плоскостей $\{110\}$. В каждой плоскости скольжения есть по два направления скольжения, и в каждом из них может быть скольжение в одну и в другую сторону, например $[1\bar{1}0]$ и $[\bar{1}10]$ в плоскости (110) . Поэтому всего в семействе $\{111\}$ $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ надо рассматривать 24 системы скольжения. Поскольку процесс скольжения centrosимметричен, эти 24 системы скольжения сводятся к 12 системам, которые дают различные значения компонент тензора e_{ij} , определяющего деформацию (положительные и отрицательные значения одной и той же компоненты при этом считаются разными). В этой точечной группе удовлетворяются все условия от а) до г), поэтому изменение направления скольжения на обратное дает кристаллографически эквивалентные эффекты. Итак, всего имеется 12 физически различных систем скольжения (разные значения e_{ij}), но, поскольку изменение направления скольжения на обратное приводит к кристаллографически эквивалентным эффектам, мы рассматриваем системы скольжения как способные действовать в положительном и отрицательном направлениях. Поэтому мы считаем, что в этом случае в семействе $\{110\}$ $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ имеется шесть различных систем скольжения.

В табл. 6.1 приведены элементы скольжения некоторых кристаллов. За немногими исключениями, направление скольжения параллельно вектору кратчайшей трансляции решетки Бравэ. Так обстоит дело даже и тогда, когда вектор кратчайшей трансляции значительно больше, чем межатомное расстояние, как, например, в висмуте. Это правило очень легко объяснить, если учесть имеющиеся в кристалле дислокации (разд. 8.1), потому что скольжение всегда происходит путем движения дислокаций. В простых кристаллических структурах при низких температурах плоскости скольжения обычно параллельны плоскостям наиболее плотной упаковки атомов в кристалле, но есть много исключений из этого правила. Кроме того, часто у кристалла имеется несколько кристаллографически различных плоскостей скольжения, например в магнии, где наблюдается скольжение по плоскостям $\{0001\}$, $\{1010\}$, $\{10\bar{1}1\}$. Во многих кристаллах при умеренных температурах направление скольжения остается фиксированным, а плоскостью скольжения может быть любая плоскость, проходящая через данное направление скольжения; такой тип скольжения называется *карандашным* или *волнистым* скольжением. В этом случае плоскостью скольжения может служить любая плоскость,

Элементы скольжения в кристаллах
(при комнатной температуре и атмосферном давлении, если нет специальной оговорки в примечаниях)

Тип структуры и примеры	Класс симметрии	Тип решетки	Направление скольжения	Плоскость скольжения	Примечания
Г. ц. к.-металлы и твердые растворы: Al, Cu, α -(Cu—Zn)	$m\bar{3}m$	F	$\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$	$\{111\}$	
Алмаз: C, Ge, Si	$m\bar{3}m$	F	$\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$	$\{111\}$	При температурах выше $0,5 T_{пл}$
О. ц. к.-металлы: Fe, Nb, Ta, W, Na, K	$m\bar{3}m$	I	$\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$	$\{110\}$	Преобладающая система. Часто волнистое скольжение
			$\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$	$\{\bar{2}\bar{1}1\}^1$	
			$\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$	$\{123\}^1$	При высоких гомологических температурах
Каменная соль: NaCl, LiF, MgO, NaF, AgCl, NH ₄ I, KI, UN, LiCl, LiBr, KCl, NaBr, RbCl, KBr, NaI, AgBr	$m\bar{3}m$	F	$\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$	$\{110\}$	
TiC, UC	$m\bar{3}m$	F	$\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$	$\{111\}$	При высоких температурах
PbS, PbTe	$m\bar{3}m$	F	$\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ $\langle 001 \rangle$	$\{001\}$ $\{110\}$	$\langle 001 \rangle$ для PbS не достоверно
Хлористый цезий: CsBr, NH ₄ Cl, NH ₄ Br, Tl(Br, I), LiTl, MgTl, AuZn, AuCd	$m\bar{3}m$	P	$\langle 001 \rangle$	$\{110\}$	
β -CuZn	$m\bar{3}m$	P	$\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$	$\{110\}$	
Флюорит: CaF ₂ , UO ₂	$m\bar{3}m$	F	$\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$	$\{001\}$ $\{110\}$ $\{111\}$	При высоких температурах То же

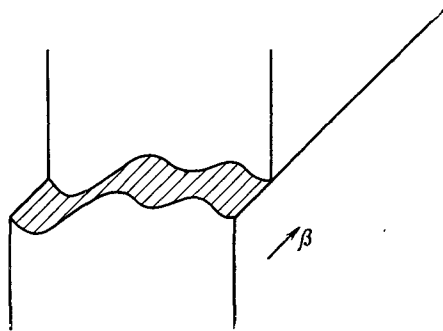
Тип структуры и примеры	Класс симметрии	Тип решетки	Направление скольжения	Плоскость скольжения	Примечания
$\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$	$\bar{3}m$	<i>R</i>	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$ $\langle 10\bar{1}2 \rangle$	(0001) {10 $\bar{1}$ 0} {10 $\bar{1}$ 1}	Выше 1000° С То же Выше 1200° С. Индексы относятся к трижды примитивной гексагональной ячейке (см. стр. 138)
Графит	<i>6/mmm</i>	<i>P</i>	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	(0001)	
Г. п. у. -металлы: Zn, Cd, Mg	<i>6/mmm</i>	<i>P</i>	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	(0001) {10 $\bar{1}$ 1} {10 $\bar{1}$ 0} {11 $\bar{2}$ 3} ¹⁾	Преобладающая система
Ti, Zr	<i>6/mmm</i>	<i>P</i>	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	{10 $\bar{1}$ 0} {10 $\bar{1}$ 1} {0001}	Преобладающая система У Zr скольжение только по {10 $\bar{1}$ 0}
Be, AgMg	<i>6/mmm</i>	<i>P</i>	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	{0001} {10 $\bar{1}$ 0}	Преобладающая система
Te	32	<i>P</i>	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	{10 $\bar{1}$ 0}	
Ga	<i>mmm</i>	<i>A</i>	[010] [010] <011	(001) (102) {011} ¹⁾	
Сфалерит: $\alpha\text{-ZnS}$, InSb	$\bar{4}3m$	<i>F</i>	$\langle 11\bar{1}0 \rangle$	{111}	Для $\alpha\text{-ZnS}$ направление скольжения не достоверно
$\beta\text{-Sn}$	<i>4/mmm</i>	<i>I</i>	$\langle 001 \rangle$ $\langle 10\bar{1} \rangle$	{110} {100} {101} ¹⁾ {121} ¹⁾	Встречается редко » »
Рутил: TiO ₂	<i>4/mmm</i>	<i>P</i>	$\langle 10\bar{1} \rangle$ $\langle 001 \rangle$	{101} ¹⁾ {110}	
Bi	$\bar{3}m$	<i>R</i>	$\langle 10\bar{1} \rangle$	(111)	Примитивная ячейка

Продолжение табл. 6.1

Тип структуры и примеры	Класс симметрии	Тип решетки	Направление скольжения	Плоскость скольжения	Примечания
Hg	$\bar{3}m$	<i>R</i>	$\langle 0\bar{1}1 \rangle$ $\langle 100 \rangle$	(100) (100) ¹⁾	Примитивная ячейка
α -U	<i>mmm</i>	<i>C</i>	[100] [100] [1 $\bar{1}0$]	(010) (001) (110)	Встречается редко
Шпинель: Al ₂ O ₃ — —MgO	<i>m\bar{3}m</i>	<i>F</i>	$\langle 1\bar{1}0 \rangle$	{111} {110}	В нестехиометрических кристаллах (за исключением Al ₂ O ₃) преобладающей плоскостью скольжения служит {110}

1) В этих системах прямое и обратное направления скольжения кристаллографически не эквивалентны.

принадлежащая зоне, осью которой является направление скольжения (фиг. 6.6). Тогда на всех гранях кристалла, кроме тех, которые параллельны направлению скольжения, следы скольжения выглядят иррациональными.



Ф и г. 6.6. Схема карандашного, или волнистого, скольжения.

В кристаллах можно встретить все типы скольжения от очень хорошо развитых плоскостей скольжения до волнистого скольжения. Например, в хлористом натрии при температурах ниже 200° С плоскостью скольжения служит точно {110} и следы

скольжения на всех гранях кристалла выглядят совершенно прямолинейными. Выше температур порядка 250° С скольжение в NaCl может осуществляться по любой из граней, принадлежащих зоне $\langle 110 \rangle$. Для кристаллов, у которых обнаруживается волнистое скольжение, при низких температурах наблюдаются хорошо образованные плоскости скольжения, перечисленные в табл. 6.1.

В табл. 6.1 указано много случаев, когда скольжение в данной кристаллографической плоскости в каком-то направлении кристаллографически не эквивалентно скольжению в обратном направлении. Типичным примером может служить скольжение по $\langle 111 \rangle$ в плоскостях $\{11\bar{2}\}$ в объемноцентрированных кубических металлах. Имеется 24 плоскости типа $\{11\bar{2}\}$. Каждая плоскость содержит по два направления, например в плоскости $(11\bar{2})$ направления $[111]$ и $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, так что всего имеется 48 систем скольжения. Из-за centrosимметричной природы скольжения их число сокращается до 24. Не удовлетворяется ни одно из условий а)—г), приведенных в этом разделе, и поэтому, строго говоря, имеется два кристаллографически различных семейства систем скольжения, каждое из которых содержит по двенадцать членов.

Как видно из табл. 6.1, для того чтобы определить плоскости и направления скольжения кристалла, недостаточно знать только структуру кристалла. У многих щелочно-галогидных кристаллов со структурой типа NaCl скольжение происходит по $\{110\}\langle 1\bar{1}0 \rangle$, но у PbS и PbTe, имеющих такую же структуру, система скольжения иная, а у карбида титана структура та же, но скольжение происходит, как в гранецентрированных кубических металлах. Во всех металлах с плотнейшей гексагональной упаковкой скольжение чаще всего наблюдается в направлении $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, но плоскость скольжения в разных металлах различна (табл. 6.2), причем это

Таблица 6.2

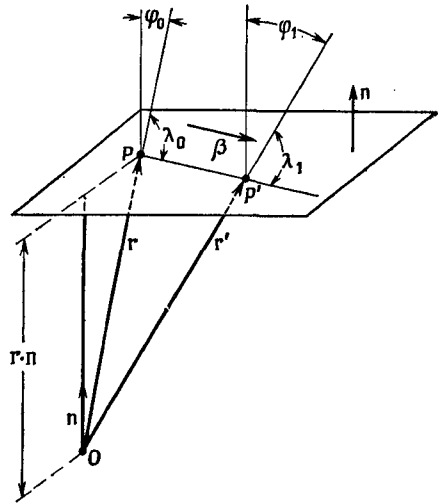
Преобладающие плоскости скольжения гексагональных металлов

Металл	c/a	Преобладающая плоскость скольжения	Металл	c/a	Преобладающая плоскость скольжения
Cd	1,886	(0001)	Zr	1,593	$(10\bar{1}0)$
Zn	1,856	(0001)	Ti	1,587	$(10\bar{1}0)$
Co	1,628	(0001)	Пф	1,581	$(10\bar{1}0)$
Mg	1,624	(0001)	Y	1,571	$(10\bar{1}0)$
Re	1,615	(0001)	Be	1,568	(0001)
Tl	1,598	—			

нельзя объяснить только изменением отношения c/a . Очевидно, плоскости скольжения, а в некоторой степени и направления скольжения зависят от типа межатомных связей в кристалле.

6.3. Независимые системы скольжения

Изменение формы кристалла, обусловленное скольжением, представляет собой простой сдвиг (разд. 5.3). Рассмотрим в кристалле точку P (фиг. 6.7), отстоящую на расстояние r от начала



Фиг. 6.7. К расчету изменения формы кристалла при скольжении.

координат O . Допустим, что скольжение происходит по плоскости с единичной нормалью n в направлении единичного вектора β , причем P перемещается в точку P' , отстоящую на r' от начала координат. Тогда

$$PP' = r' - r = \alpha (r \cdot n) \beta$$

или

$$r' = r + \alpha (r \cdot n) \beta, \quad (6.1)$$

где α — величина деформации, обусловленной кристаллографическим скольжением.

Если деформация α мала, то можно записать компоненты тензора e_{ij} и тензора чистой деформации ϵ_{ij} , отнесенные к осям координат (x_1, x_2, x_3) , описывающие деформацию. Из уравнений (5.9) имеем, например,

$$e_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1} (r' - r) = \frac{\partial}{\partial x_1} \alpha (r \cdot n) \beta_1. \quad (6.2)$$

Если напишем

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= x_1 \mathbf{i} + x_2 \mathbf{j} + x_3 \mathbf{k}, \\ \mathbf{n} &= n_1 \mathbf{i} + n_2 \mathbf{j} + n_3 \mathbf{k}, \\ \boldsymbol{\beta} &= \beta_1 \mathbf{i} + \beta_2 \mathbf{j} + \beta_3 \mathbf{k}, \end{aligned}$$

то уравнение (6.2) примет вид

$$\begin{aligned} e_{11} &= \frac{\partial}{\partial x_1} \alpha (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}) \beta_1 = \alpha \frac{\partial}{\partial x_1} [(x_1 \mathbf{i} + x_2 \mathbf{j} + x_3 \mathbf{k}) (n_1 \mathbf{i} + n_2 \mathbf{j} + n_3 \mathbf{k})] \beta_1 = \\ &= \alpha \frac{\partial}{\partial x_1} (x_1 n_1 + x_2 n_2 + x_3 n_3) \beta_1 = \alpha n_1 \beta_1. \end{aligned}$$

Аналогично компоненты типа e_{23} определяются как

$$e_{23} = \frac{\partial u_2}{\partial x_3} = \frac{\partial}{\partial x_3} \alpha (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}) \beta_2$$

или

$$e_{23} = \alpha n_3 \beta_2.$$

Таким образом, тензор e_{ij} , определяющий эту деформацию, имеет компоненты

$$e_{ij} = \begin{pmatrix} \alpha n_1 \beta_1 & \alpha n_2 \beta_1 & \alpha n_3 \beta_1 \\ \alpha n_1 \beta_2 & \alpha n_2 \beta_2 & \alpha n_3 \beta_2 \\ \alpha n_1 \beta_3 & \alpha n_2 \beta_3 & \alpha n_3 \beta_3 \end{pmatrix}. \quad (6.3)$$

Этот тензор содержит тензор чистого сдвига ϵ_{ij} и, кроме того, описывает вращение, вызванное скольжением. Поскольку скольжение соответствует простому сдвигу, эта деформация происходит без изменения объема. Что это именно так, видно по тензору (6.3), потому что из-за ортогональности \mathbf{n} и $\boldsymbol{\beta}$ диагональные члены тензора в сумме дают нуль, т. е.

$$\alpha n_1 \beta_1 + \alpha n_2 \beta_2 + \alpha n_3 \beta_3 = 0 = e_{11} + e_{22} + e_{33}.$$

Уравнение (6.3) можно разложить на симметричный тензор, описывающий чистый сдвиг, вызванный скольжением, и на тензор, описывающий вращение. На основании формул разд. 5.2 чистый сдвиг равен

$$\epsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \alpha n_1 \beta_1 & (\alpha/2) (n_1 \beta_2 + n_2 \beta_1) & (\alpha/2) (n_1 \beta_3 + n_3 \beta_1) \\ (\alpha/2) (n_1 \beta_2 + n_2 \beta_1) & \alpha n_2 \beta_2 & (\alpha/2) (n_3 \beta_2 + n_2 \beta_3) \\ (\alpha/2) (n_1 \beta_3 + n_3 \beta_1) & (\alpha/2) (n_3 \beta_2 + n_2 \beta_3) & \alpha n_3 \beta_3 \end{pmatrix}, \quad (6.4)$$

а вращение

$$\omega_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & (\alpha/2) (n_2 \beta_1 - n_1 \beta_2) & (\alpha/2) (n_3 \beta_1 - n_1 \beta_3) \\ -(\alpha/2) (n_2 \beta_1 - n_1 \beta_2) & 0 & (\alpha/2) (n_3 \beta_2 - n_2 \beta_3) \\ -(\alpha/2) (n_3 \beta_1 - n_1 \beta_3) & -(\alpha/2) (n_3 \beta_2 - n_2 \beta_3) & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.5)$$

Смысл уравнений (6.4) и (6.5) становится ясным, если выбрать оси координат так, чтобы ось x_1 была параллельна нормали \mathbf{n} к плоскости скольжения, а β параллелен оси x_2 ; тогда уравнения (6.3)—(6.5) сведутся к

$$e_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

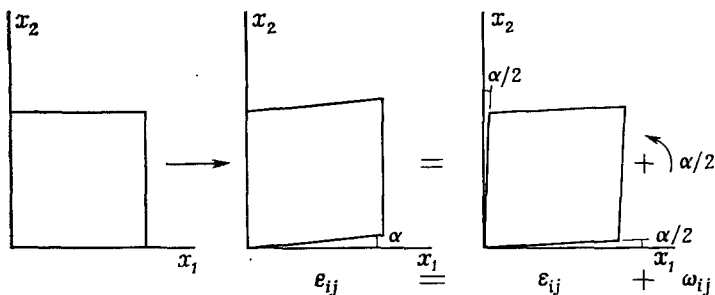
$$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \alpha/2 & 0 \\ \alpha/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

и

$$\omega_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha/2 & 0 \\ \alpha/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

что соответствует сдвигу, показанному на фиг. 6.8.

Физически различные системы скольжения, принадлежащие одному и тому же семейству, могут привести к одинаковым чистым



Ф и г. 6.8. Малая деформация простого сдвига e_{ij} эквивалентна чистому сдвигу ε_{ij} плюс вращение ω_{ij} .

деформациям. Рассмотрим, например, скольжение на величину α в кубическом кристалле по системе (011) $[0\bar{1}1]$. Если оси координат параллельны кристаллографическим осям кубического кристалла, то

$$\mathbf{n} = 0\mathbf{i} + (1/\sqrt{2})\mathbf{j} + (1/\sqrt{2})\mathbf{k},$$

$$\beta = 0\mathbf{i} - (1/\sqrt{2})\mathbf{j} + (1/\sqrt{2})\mathbf{k}.$$

Отсюда по (6.4)

$$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha/2 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha/2 \end{pmatrix}, \quad (6.6)$$

а из (6.5)

$$\omega_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha/2 \\ 0 & \alpha/2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.7)$$

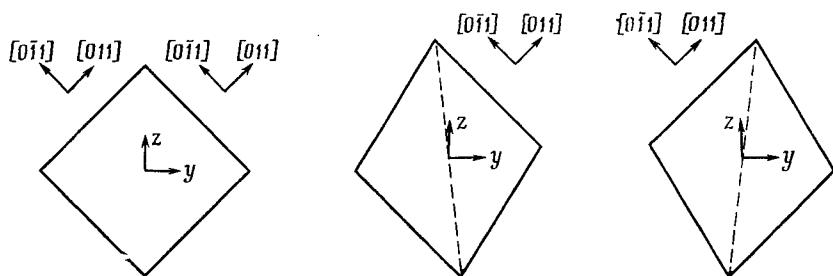
Рассматривая скольжение на ту же величину α по системе (011) [011], ортогональной к первой системе, получим

$$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha/2 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha/2 \end{pmatrix}$$

и

$$\omega_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha/2 \\ 0 & -\alpha/2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Итак, каждая из этих двух физически различных систем производит одинаковую чистую деформацию, но противоположные

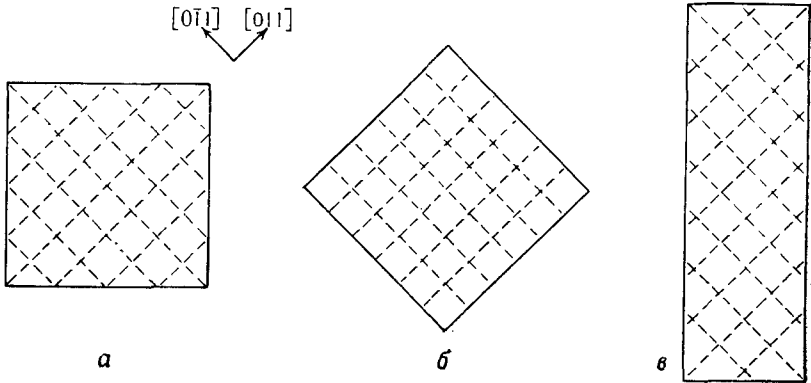


Фиг. 6.9. Различные системы скольжения, принадлежащие одному семейству, создают одинаковый чистый сдвиг.

вращения жесткого тела (фиг. 6.9). Очевидно, что скольжение на ту же величину по системе (011) [011], т. е. именно перемена направления скольжения на обратное, в последнем случае могла бы вызвать чистую деформацию, противоположную скольжению по системе (011) [011], но то же самое вращение. Поскольку в отсутствие каких-либо ограничений скольжение происходит совершенно без деформации решетки кристалла, так что решетка не претерпевает ни чистого сдвига, ни вращения, очень важно понимать, что одновременный сдвиг *более чем по одной системе скольжения* может либо вызвать чистую деформацию кристалла без изменения ориентировки решетки, либо, наоборот, повернуть весь кристалл без изменения ориентировки решетки (фиг. 6.10). Для того чтобы эти две операции могли иметь место, нужно, чтобы линии сколь-

жения, соответствующие этим разным системам скольжения, взаимно пересекались; возможно это или нет, зависит от особенностей индивидуальных дислокаций (см. гл. 8).

Физически различные системы скольжения могут вызвать одинаковую чистую деформацию; мы только что видели пример этого. В кубическом кристалле скольжение по $(011) [\bar{0}\bar{1}1]$ и по



Ф и г. 6.10. Схемы чистого сдвига и поворота решетки кубического кристалла.

Кристалл, претерпевающий скольжение на одинаковые величины по системам $(0\bar{1}1)[011]$ и $(011) [\bar{0}\bar{1}1]$ (схема а), испытывает в пространстве поворот в положении, показанное на схеме б, без чистой деформации или поворота кристаллической решетки. Если происходят одинаковые сдвиги по системам $(0\bar{1}1) [\bar{0}\bar{1}1]$ и $(011) [\bar{0}\bar{1}1]$ (а), то ни кристалл, ни решетка не испытывают поворотов, но результатом является чистый сдвиг, приводящий к конфигурации, показанной на схеме в.

$(0\bar{1}1) [011]$ дает один и тот же тензор чистой деформации, определяемый уравнением (6.6). Скольжение по $(110) [\bar{1}\bar{1}0]$ на величину γ в кубическом кристалле создает чистую деформацию

$$\begin{pmatrix} -\gamma/2 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.8)$$

Таким образом, эта система скольжения производит чистую деформацию, которую нельзя получить скольжением по какой-либо из систем $(011) [\bar{0}\bar{1}1]$ или $(0\bar{1}1) [011]$. Системы скольжения, которые создают разные чистые деформации, называются *независимыми*. Общую чистую деформацию в кристалле можно получить путем скольжения, если в этом кристалле возможно скольжение по пяти независимым системам скольжения. Почему требуются именно пять систем, видно из следующего рассуждения. Пластическая деформация путем скольжения в кристалле происходит

без изменения объема, так что описывающий ее тензор чистой деформации всегда обладает тем свойством, что

$$\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = 0. \quad (6.9)$$

Поэтому только две из компонент ε_{11} , ε_{22} , ε_{33} можно выбрать произвольно, а третья всегда фиксирована условием (6.9). Поскольку тензор чистой деформации симметричен, $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$, и поэтому имеется как раз пять компонент, которые можно выбрать произвольно в качестве компонент деформации общего тензора чистой деформации при сохранении объема. Скольжение по какой-либо одной системе может изменить только одну компоненту тензора чистой деформации независимо от ее влияния на остальные системы, так что необходимо располагать пятью независимыми системами скольжения, чтобы при скольжении могла получиться любая общая чистая деформация.

Система скольжения считается независимой от других таких же систем, если чистую деформацию, которая может получиться при действии этой системы, нельзя получить путем комбинирования подходящих величин скольжения по остальным системам. Мы видели, что в кубическом кристалле системы скольжения (011) $[0\bar{1}1]$ и (110) $[\bar{1}10]$ оказываются независимыми. Система (101) $[\bar{1}01]$ не является независимой от этих двух. Это легко увидеть, если выписать полностью все компоненты чистой деформации, отнесенные к одним и тем же кубическим осям, для скольжения на величину α по (011) $[0\bar{1}1]$, γ по (110) $[\bar{1}10]$ и β по (101) $[\bar{1}01]$. Это будут

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha/2 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha/2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\gamma/2 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\beta/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta/2 \end{pmatrix}.$$

Очевидно, если взять величины скольжения по первым двум системам так, что α будет равно γ ; и выбрать такое расположение, чтобы α равнялась β , то чистая деформация, вызванная последней системой, может удвоиться при надлежащей комбинации скольжения по первым двум системам.

Поскольку пять независимых систем скольжения создают общую чистую деформацию (без изменения объема), то становится очевидным, что кристалл не может обладать больше чем пятью системами, независимыми в этом смысле. Число независимых систем скольжения, вызванных действием всех членов данного семейства, представлено в табл. 6.3 для некоторых наиболее симметричных кристаллов.

При карандашном скольжении направление скольжения сохраняется фиксированным, но плоскость скольжения может быть

Таблица 6.3

Независимые системы скольжения в кристаллах

Система	Класс	Число независимых систем скольжения	Система	Класс	Число независимых систем скольжения
$\langle \bar{1}10 \rangle \{111\}$	$m\bar{3}m$	5	$\langle \bar{1}10 \rangle \{001\}$	$m\bar{3}m$	3
$\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle \{110\}$	$m\bar{3}m$	5	$\langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle \{0001\}$	$6/mmm$	2
$\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle \{110\}$	$m\bar{3}m$	2	$\langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle \{10\bar{1}0\}$	$6/mmm$	2
$\langle 101 \rangle \{101\}$	$4/mmm$	4	$\langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle \{1011\}$	$6/mmm$	4
$\langle 001 \rangle \{110\}$	$m\bar{3}m$	3	$\langle \bar{1}\bar{1}23 \rangle \{1122\}$	$6/mmm$	5

любая плоскость, принадлежащая зоне, осью которой служит направление скольжения. Легко видеть (см. задачу 6.6), что при этом сдвиг в заданном направлении скольжения может создать две независимые компоненты тензора чистой деформации.

Чтобы формально решить, будут ли члены данного семейства или данной серии семейств систем скольжения вместе обеспечивать пять независимых систем скольжения, можно поступать следующим образом. Выберем ортогональные оси координат и, используя уравнения (6.4), выпишем компоненты тензора чистой деформации, который получается при произвольной величине скольжения по данной системе. Обозначим эти компоненты $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_{12}, \epsilon_{13}, \epsilon_{23}$. Сделаем то же самое для четырех остальных систем скольжения, относим тензор деформации к тем же осям. Наконец, поскольку три компоненты деформации растяжения не независимы друг от друга, образуем детерминант из пяти строк и пяти столбцов из величин $\epsilon_1 - \epsilon_3, \epsilon_2 - \epsilon_3, \epsilon_{12}, \epsilon_{13}, \epsilon_{23}$ для каждой из этих систем. Если значение этого детерминанта не равно нулю, то пять выбранных систем скольжения не зависят друг от друга, поскольку детерминант должен обратиться в нуль, если какой-нибудь из его рядов можно выразить как линейную комбинацию других рядов. Если в кристалле скольжение происходит только по такому семейству систем скольжения, в котором нет пяти независимых членов, тогда имеются направления, в которых нельзя сжать или растянуть кристалл, т. е. такие ориентировки скалывающего напряжения, которые не могут вызвать скольжение. Их легко найти из уравнений (6.12) и (6.13) следующего параграфа (см. примечание на стр. 224).

Если поликристалл, т. е. тело, состоящее из большого числа индивидуальных кристаллов (или зерен) с произвольной кристаллографической ориентировкой, деформируется путем скольжения внутри каждого зерна, так что на границах не возникают поры, тогда изменения формы любого зерна должны согласовыв-

ваться с изменениями форм соседних зерен и формы всего тела как целого. Если у зерна есть пять независимых систем скольжения в том смысле, как мы только что определили, то это зерно при скольжении может претерпеть общее произвольное изменение формы. Часто считают, что этому условию должны подчиняться все зерна, чтобы поликристалл был способен к большим пластическим изменениям формы внутри зерен путем скольжения, но без образования внутренних полостей. Это условие называют *условием Мизеса*. В процессе деформации поликристалла путем скольжения индивидуальные зерна стеснены своими соседями, поэтому часто наблюдаются повороты кристаллической решетки.

Относительную роль вращения решетки можно оценить, если предположить, что каждое зерно поликристалла испытывает одинаковую малую деформацию e_{ij} , так что деформация всего тела как целого однородна ¹⁾. Мы подразделяем малую деформацию e_{ij} на чистый сдвиг и вращение:

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

Как чистый сдвиг ε_{ij} , так и вращение ω_{ij} в каждом зерне должны быть одинаковыми. Если действуют пять независимых систем скольжения, то в каждом зерне могут возникнуть одинаковые ε_{ij} . В общем случае это не создаст одинакового вращения в каждом зерне, но из-за стесняющего действия соседних зерен всегда можно добавить вращение жесткого тела как целого, которое поворачивает решетку, так что полное вращение, определяемое как

$$\omega_{ij} = \omega_{ij, \text{скольж}} + \omega_{ij, \text{решетки}},$$

одинаково для всех зерен. Поэтому каждое зерно испытывает поворот решетки, который вносит вклад в общую деформацию. В этом рассуждении предполагается, что каждое зерно может вращаться свободно. Так это или не так, можно решить, рассмотрев условия на границах между зернами.

6.4. Большие деформации

В опытах по скольжению монокристалл исследуемого вещества часто растягивается или сжимается вдоль заданного направления (фиг. 6.11). Скалывающее напряжение на плоскости скольжения и его компоненту в направлении скольжения (так называемое критическое скалывающее напряжение) легко найти, меняя оси координат тензора приложенного напряжения (см. задачу 6.12). Но еще проще это вывести из фиг. 6.11. Если сила F приложена

¹⁾ В реальном кристалле деформация каждого кристаллического зерна может быть неоднородной. Рентгеноструктурные исследования отдельных зерен показывают, что это на самом деле так.

к кристаллу с поперечным сечением A_0 , то растягивающее напряжение, параллельное F , равно $\sigma = F/A$. Компонента силы F в направлении скольжения, составляющая с ней угол λ_0 , равна $F \cos \lambda_0$. Если угол между F и нормалью к плоскости скольжения равен φ_0 , то эта сила действует на площадь $A_0/\cos \varphi_0$ и искомая компонента скальвающего напряжения τ равна

$$\tau = F \cos \lambda_0 / (A_0 / \cos \varphi_0) = \sigma \cos \varphi_0 \cos \lambda_0. \quad (6.10)$$

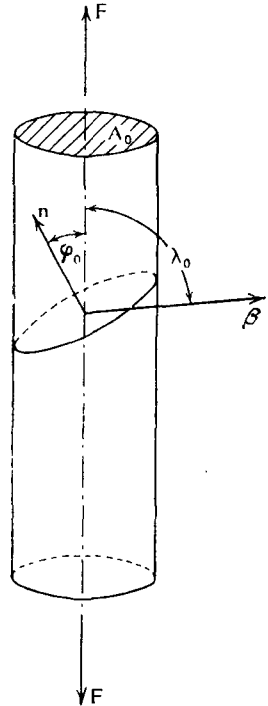
Напряжение, нормальное к рассматриваемой плоскости скольжения, равно

$$\sigma_n = F \cos \varphi_0 / (A_0 / \cos \varphi_0) = \sigma \cos^2 \varphi_0. \quad (6.11)$$

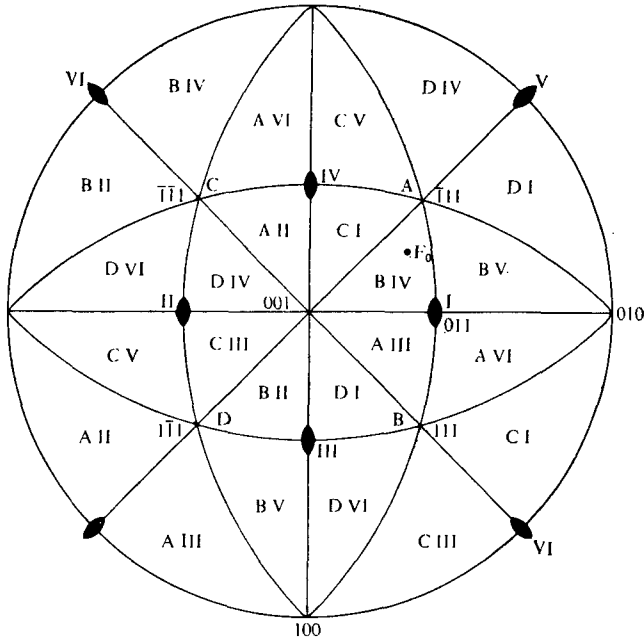
Полезно обратить внимание на то, что на фиг. 6.11 направления F , n и β не обязательно лежат в одной плоскости, так что лишь в частном случае $\varphi_0 = (90^\circ - \lambda_0)$.

Из формулы (6.10) можно вычислить критическое скальвающее напряжение по любой системе скольжения. С достаточно хорошим приближением можно сказать, что если кристалл подвергнут возрастающему растягивающему или сжимающему нагружению, как на фиг. 6.11, то скольжение всегда начинается в той системе скольжения, в которой критическое скальвающее напряжение наибольшее. Хуже выполняется то условие, что в данном чистом кристалле при данной температуре скольжение начинается лишь тогда, когда компонента скальвающего напряжения достигает некоторой определенной критической величины. Этому условию, т. е. так называемому *закону критического скальвающего напряжения*, довольно хорошо подчиняются кристаллы металлов, у которых плотность дислокаций обычно велика (см. гл. 7). В неметаллических кристаллах критическое скальвающее напряжение, при котором начинается скольжение, столь сильно зависит от предыстории кристалла, что это правило в общем случае неприменимо.

Из формулы (6.10) можно найти именно ту систему скольжения, в которой при заданной ориентировке F по отношению к кристаллографическим осям компонента скальвающего напряжения имеет наибольшее значение. Определить, для которого



Фиг. 6.11. К объяснению закона критического скальвающего напряжения.



Фиг. 6.12а. Стандартная стереографическая проекция г. ц. к.-металлического кристалла, претерпевающего скольжение по $\{111\} \langle \bar{1}10 \rangle$.

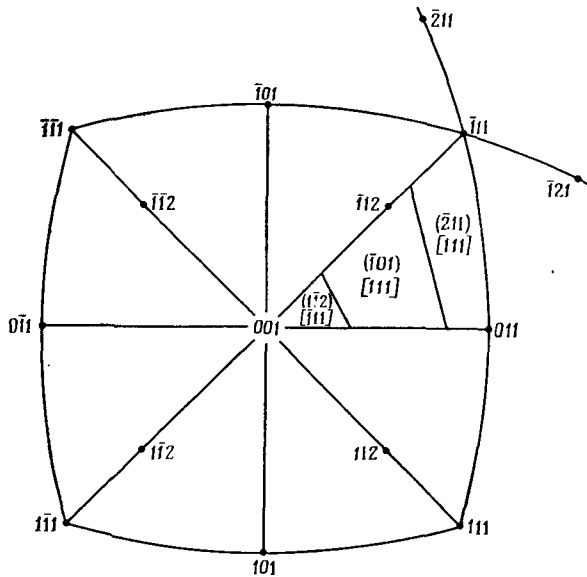
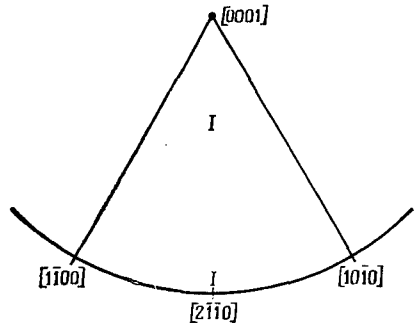
Показаны специфические системы скольжения с максимальными компонентами скалывающего напряжения для любой ориентации оси растяжения.

из членов семейства систем скольжения компонента скалывающего напряжения наибольшая, удобно на стереографической проекции. На фиг. 6.12а изображена стереографическая проекция кубического кристалла. Если это гранецентрированный кубический кристалл, то точечная группа симметрии $m\bar{3}m$, и скольжение происходит по системе $\{110\} \langle 110 \rangle$. Имеется 12 физически различных систем скольжения. Пусть F — направление силы, вызывающей одноосную деформацию кристалла, причем направление F отметим на стереографической проекции, например, как F_0 на фиг. 6.12а.

Частная система скольжения с наибольшей компонентой скалывающего напряжения указывается на проекции буквенным обозначением того элементарного треугольника, в который попадает F_0 . Например, для случая, показанного на фиг. 6.12а, этот треугольник обозначен BIV: это означает, что скольжение начнется по плоскости октаэдра B, т. е. (111), в направлении IV, т. е. $[1\bar{0}1]$. Если F_0 попадает на границу элементарного треуголь-

Фиг. 6.126. Единичный треугольник стандартной стереографической проекции гексагонального кристалла точечной группы $6/m\bar{3}m$ с системой скольжения $(0001) \langle 11\bar{2}0 \rangle$.

Показаны направления скольжения с максимальными компонентами скалывающего напряжения.



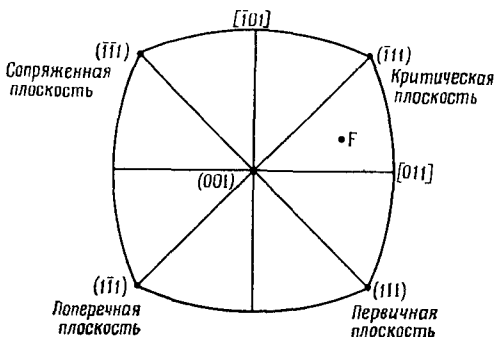
Фиг. 6.12в. Стандартная стереографическая проекция для о.ц.к.-кристалла с системами скольжения $\{1\bar{1}0\} \langle 111 \rangle$ и $\{11\bar{2}\} \langle 111 \rangle$.

Видны те области одного единичного треугольника, в которых максимальны компоненты скалывающих напряжений по равным системам скольжения.

ника, тогда, очевидно, в нескольких системах скольжения напряжения одинаковы (см. задачу 6.8). Такие же схемы для некоторых других обычных систем скольжения приведены на фиг. 6.126 и 6.12в; они читаются так же, как фиг. 6.12а. Исходя из данных табл. 6.1, можно сделать существенный вывод о том, что в кристаллах со структурой типа NaCl, у которых скольжение происходит

по системе $\{110\} \langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$, напряжения всегда одинаковы, по крайней мере в двух системах скольжения.

Гранецентрированные кубические металлы изучены весьма подробно. Даже для кристаллов, у которых ориентация F_0 очень близка к центру элементарного треугольника, наблюдается незначительное скольжение по системам, отличающимся от тех, в которых напряжения наибольшие. Поскольку плоскость скольжения в системе скольжения наблюдается легко, эти системы обычно определяют только по их плоскостям скольжения. Плоскость



Фиг. 6.13. Соотношение между первичной и сопряженными системами скольжения.

скольжения системы с наибольшими напряжениями называют *первичной плоскостью скольжения*, а названия остальных систем скольжения приведены на фиг. 6.13. Для кубических кристаллов с системой скольжения $\{111\} \langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ Диль (Diehl) установил простое правило определения первичной системы скольжения для случая, когда направление F находится в одном из элементарных треугольников, показанных на фиг. 6.12а: зеркальное отражение полюса $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ данного треугольника противоположной стороной треугольника дает направление скольжения, а зеркальное отражение полюса $\{111\}$ того же треугольника противоположной стороной дает нормаль к плоскости скольжения.

Возьмем к фиг. 6.11. Если по данной системе скольжения происходит сдвиг на малую величину $d\alpha$, то длина кристалла возрастает в направлении действия силы F на величину dl , равную

$$dl = l \cos \varphi_0 \cos \lambda_0 d\alpha, \quad (6.12)$$

где $d\alpha$ — приращение деформации кристаллографического сдвига, а l — начальная длина кристалла¹⁾. Если e — удлинение

¹⁾ Полезно обратить внимание на идентичность геометрических ориентационных факторов в (6.12) и (6.13). Так получается, очевидно, когда приложенная сила не создает критического скалывающего напряжения по заданной системе скольжения, потому что $\cos \varphi_0$ или $\cos \lambda_0$ равны нулю, если безразлич-

(малое), параллельное F и производимое сдвигом $d\alpha$, то $e = dl/l$, и поэтому из формулы (6.12) следует, что

$$e = d\alpha \cos \varphi_0 \cos \lambda_0. \quad (6.13)$$

Относительное смещение частей кристалла параллельно β означает, что, по мере того как кристалл удлиняется, оба его конца взаимно сдвигаются в направлении, поперечном по отношению к приложенной силе F . Этот эффект не очень существен для очень малых деформаций, но его необходимо принимать во внимание, когда минералы сильно деформируются путем сжатия (например, при гидростатическом давлении) или металлические кристаллы подвергаются большим растяжениям. При сжатии можно воспрепятствовать боковому сдвигу концов кристалла с помощью трения, а при растяжении концы кристаллов обычно сплющиваются и кристаллы принимают такую форму, как показано на фиг. 6.14. Если же из-за граничных условий точка A' должна располагаться в O' выше O , тогда скольжение будет происходить только по указанной системе, а кристаллическая решетка будет поворачиваться по отношению к направлению OO' . Из фиг. 6.14 видно, что удлинение e кристалла равно $(l - l_0)/l$, так что из треугольника OAA' получаем

$$l/l_0 = 1 + e = \sin \lambda_0 / \sin \lambda, \quad (6.14)$$

а из треугольников NAO , $NA'O$

$$l/l_0 = \cos \varphi_0 / \cos \varphi, \quad (6.15)$$

где λ_0 и φ_0 — начальные значения углов λ и φ . Кристаллографический сдвиг α определяется выражением $AA'/l_0 \cos \varphi_0$, а $AA' = l \cos \lambda - l_0 \cos \lambda_0$; таким образом,

$$\alpha = [(1 + e) \cos \lambda - \cos \lambda_0] / \cos \varphi_0 = \cos \lambda / \cos \varphi - \cos \lambda_0 / \cos \varphi_0, \quad (6.16)$$

и критическое скалывающее напряжение равно

$$\tau = (F/A) \cos \varphi \cos \lambda = (F \cos \varphi / A) \{1 - [\sin^2 \lambda_0 / (1 + e)^2]\}^{1/2}.$$

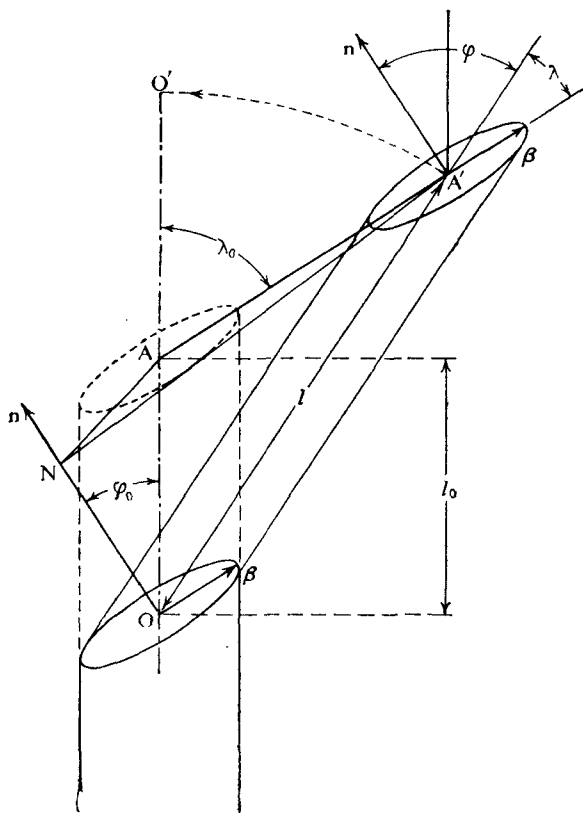
Из фиг. 6.14 видно, что в процессе деформации площадь плоскости скольжения остается постоянной (если не считать очень малых изменений, связанных с образованием ступенек скольжения), поэтому величина $A/\cos \varphi$ не меняется и последнее урав-

но, которая из этих систем скольжения действует. Некоторые из ориентировок приложенной силы F дают нулевые значения для τ в формуле (6.10) или для dl в выражении (6.12), если у кристалла нет пяти независимых систем скольжения.

нение можно записать как

$$\tau = (F \cos \varphi_0) / A_0 [1 - (l_0/l)^2 \sin^2 \lambda_0]^{1/2}. \quad (6.17)$$

В процессе деформации величина λ уменьшается, и поэтому для данной силы F величина компоненты скальвующего напряжения растет. Формулы (6.14)–(6.16) можно вывести также



Ф и г. 6.14. К расчету изменения ориентировки кристалла при скольжении.

и непосредственно из уравнения (6.1) и фиг. 6.7. Это полезно сделать потому, что с помощью векторных формул особенно удобно описывать деформацию сжатия. Из фиг. 6.7 видно, что при скольжении на величину α вектор \mathbf{r} переходит в \mathbf{r}' , т. е.

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \alpha (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}) \boldsymbol{\beta}. \quad (6.1)$$

Если вектор \mathbf{r} выбрать так, чтобы он был параллелен оси растяжения при $\alpha = 0$, тогда \mathbf{r}' соответствует оси растяжения после деформации путем кристаллографического сдвига α :

$$l/l_0 = 1 + e = |\mathbf{r}'| / |\mathbf{r}|;$$

\mathbf{n} есть единичный вектор нормали к плоскости скольжения, так что

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= (\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n}) / |\mathbf{r}'| = [(\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}) + \alpha (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}) \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n}] (1 / |\mathbf{r}'|) = \\ &= (l_0 \cos \varphi_0) / l, \end{aligned}$$

поскольку $\cos \varphi_0 = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}) / |\mathbf{r}|$ и $\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n} = 0$. Таким образом, мы получаем равенство (6.15). Кроме того,

$$|\mathbf{r}' \times \boldsymbol{\beta}| = |\mathbf{r}'| \sin \lambda,$$

поскольку $\boldsymbol{\beta}$ — единичный вектор. Из (6.4) имеем $\mathbf{r}' \times \boldsymbol{\beta} = \mathbf{r} \times \boldsymbol{\beta}$, поскольку $\boldsymbol{\beta} \times \boldsymbol{\beta} = 0$, и, значит,

$$l/l_0 = \sin \lambda_0 / \sin \lambda,$$

т. е. мы пришли к равенству (6.14). Наконец, если обе стороны соотношения (6.1) скалярно умножить на $\boldsymbol{\beta}$, то получим

$$l \cos \lambda = l_0 \cos \lambda_0 + \alpha l_0 \cos \varphi_0$$

и, воспользовавшись (6.15),

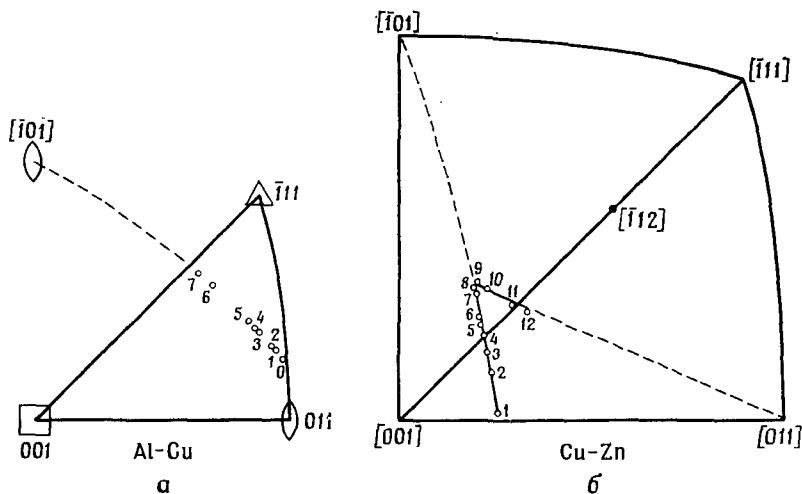
$$\alpha = \cos \lambda / \cos \varphi - \cos \lambda_0 / \cos \varphi_0,$$

т. е. формулу (6.16).

Если в опыте используется длинный тонкий кристалл, как на фиг. 6.11, то можно измерить и нанести на стереографическую проекцию изменение ориентировки по отношению к оси кристалла; его легче рассматривать, чем эквивалентное изменение оси кристалла по отношению к оси растяжения. Изменение ориентировки заключается в том, что ось растяжения поворачивается вокруг направления скольжения; это можно использовать, чтобы определить направление сдвига. На фиг. 6.15, а приведен реальный пример для кристалла г. ц. к.-металла. Когда полюс оси растяжения на этой фигуре достигает дуги большого круга, соединяющей полюса (001) и (111) и являющейся плоскостью зеркального отражения, компоненты скалывающих напряжений по двум системам скольжения становятся одинаковыми и скольжение может происходить по обеим системам одновременно. Когда действуют одновременно две системы скольжения, говорят, что происходит *двойное (сдвоенное) скольжение*.

В гранецентрированных кубических металлах во многих случаях кристалл продолжает скользить по первичной системе скольжения и после того, как ориентировка оси растяжения достигает плоскости зеркального отражения. В этом случае полюс

оси растяжения «заходит» в соседний единичный треугольник, так что скольжение идет уже не по той системе, в которой действуют номинально наивысшие напряжения. Такой пример показан на фиг. 6.15, б. После того как прошел некоторый сдвиг по этой добавочной первичной системе, внезапно начинает действовать сопряженная система скольжения, и дальше идет уже скольжение по этой системе, сопровождаемое иногда «заходом» в сопряженную систему (фиг. 6.15, б). Когда ось растяжения достигает полюса



Фиг. 6.15. Изменения ориентировки г.д.к.-металлического кристалла при скольжении.

Цифрами указаны последовательно определенные кристаллографические ориентировки (по Зеегеру, *Handbuch der Physik*, Bd. VII/2, Springer Verlag).

{112} — на фиг. 6.15, б это $(\bar{1}12)$, — дальше ориентировка уже не может меняться при условии, что каждая система скольжения вносит одинаковый вклад в деформацию.

В процессе испытаний на сжатие ориентировка кристаллической решетки тоже меняется. Этот случай проще всего рассмотреть с помощью векторных формул. Сначала используем формулу (6.1), чтобы найти, как при сдвиге меняется данная площадка с нормалью \mathbf{m} . Пусть \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 будут два любых непараллельных вектора, лежащих в этой плоскости. Запишем $\mathbf{m} = \mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2$. Преобразуем теперь каждый из векторов \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 по (6.1), чтобы получить \mathbf{r}'_1 и \mathbf{r}'_2 . Тогда новый вектор \mathbf{m}' , определяющий \mathbf{m} , после деформации кристаллографического сдвига на величину α равен $\mathbf{m}' = \mathbf{r}'_1 \times \mathbf{r}'_2$. Подставляя \mathbf{r}'_1 и \mathbf{r}'_2 из уравнения (6.1), получим

$$\begin{aligned} \mathbf{m}' &= [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] + \alpha (\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{n}) \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{r}_2 - \alpha (\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{n}) \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{r}_1 = \\ &= \mathbf{m} + \alpha \boldsymbol{\beta} \times [(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{n}) \mathbf{r}_2 - (\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{n}) \mathbf{r}_1]. \end{aligned}$$

Вспомнив формулу двойного векторного произведения (приложение 2), преобразуем это уравнение:

$$\mathbf{m}' = \mathbf{m} + \alpha \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{n} \times [\mathbf{r}_2 \times \mathbf{r}_1],$$

т. е.

$$\mathbf{m}' = \mathbf{m} - \alpha \boldsymbol{\beta} \times [\mathbf{n} \times \mathbf{m}]. \quad (6.18)$$

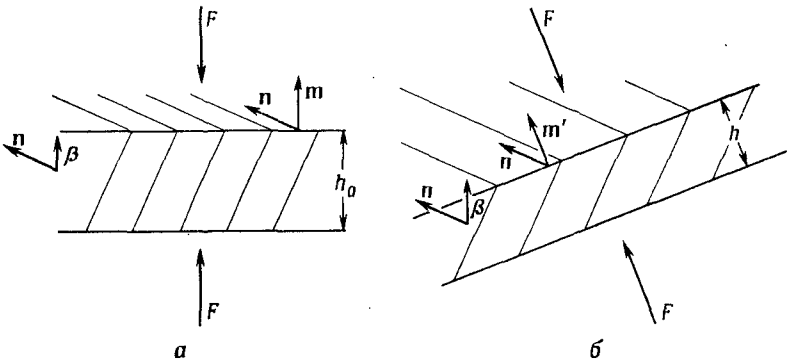
Воспользовавшись снова формулой двойного векторного произведения, получим окончательное выражение

$$\mathbf{m}' = \mathbf{m} - \alpha [(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{m}) \mathbf{n} - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n} \mathbf{m}]$$

или

$$\mathbf{m}' = \mathbf{m} - \alpha (\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{m}) \mathbf{n}, \quad (6.19)$$

поскольку $(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n}) = 0$. Из формул (6.18) и (6.19) видно, что любая плоскость движется к своему конечному положению, так что



Ф и г. 6.16. Сжатие тонкой кристаллической пластинки между двумя плоскостями.

нормаль к ней всегда лежит в плоскости, в которой лежат начальное положение этой нормали и нормали \mathbf{n} к плоскости скольжения.

Рассмотрим теперь случай сжатия тонкого кристалла между плоскими пластинами (фиг. 6.16). Примем ограничение, заключающееся в том, что плоскость, которая сначала была нормальна к оси растяжения, должна в процессе деформации сохранять свою ориентировку по отношению к направлению действующего напряжения. Чтобы значения α в процессе сжатия оставались положительными, предположим, что скольжение происходит в направлении $-\boldsymbol{\beta}$ (фиг. 6.16); тогда формула (6.19) принимает вид

$$\mathbf{m}' = \mathbf{m} + \alpha (\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{m}) \mathbf{n}. \quad (6.20)$$

Согласно (6.20), нормаль к плоскости скольжения тогда приближается к нормали к сжимающим пластинам путем поворота

вокруг оси, параллельной линии пересечения плоскости скольжения со сжимающими пластинами (фиг. 6.16, б). Если исходная толщина кристалла равна h_0 , то в процессе сжатия она уменьшается до величины h , так что

$$h_0/h = |\mathbf{m}'| / |\mathbf{m}|, \quad (6.21)$$

потому что объем кристалла должен оставаться неизменным. С учетом принятого нами ограничения изменение ориентировки кристаллической решетки будет таким, что нормаль к плоскости скольжения поворачивается по направлению к оси сжатия. Если исходный и конечный углы между направлением сжатия и нормалью к плоскости скольжения после сдвига α обозначить как φ_0 и φ , а соответствующие значения углов между осью сжатия и направлением скольжения как λ_0 и λ , то из (6.20) получим $\mathbf{m}' \cdot \boldsymbol{\beta} = \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\beta}$, поскольку $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\beta} = 0$. Таким образом,

$$h_0/h = \cos \lambda_0 / \cos \lambda. \quad (6.22)$$

Кроме того, по (6.20)

$$\mathbf{m}' \times \mathbf{n} = \mathbf{m} \times \mathbf{n},$$

а значит,

$$h_0/h = \sin \varphi_0 / \sin \varphi. \quad (6.23)$$

Находя модули обеих частей равенства (6.20), получим

$$|\mathbf{m}'|^2 = |\mathbf{m}|^2 + 2\alpha |\mathbf{m}|^2 \cos \varphi_0 \cos \lambda_0 + \alpha^2 |\mathbf{m}|^2 \cos^2 \lambda_0$$

и, воспользовавшись равенством (6.21), имеем

$$(h_0/h)^2 = 1 + 2\alpha \cos \varphi_0 \cos \lambda_0 + \alpha^2 \cos^2 \lambda_0.$$

Образую произведение $\mathbf{m}' \cdot \mathbf{n} = \mathbf{m} \cdot \mathbf{n} + \alpha (\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{m})$ и используя формулы (6.21) и (6.22), получаем

$$\alpha = \cos \varphi / \cos \lambda - \cos \varphi_0 / \cos \lambda_0. \quad (6.24)$$

Таким образом, критическое скалывающее напряжение τ оказывается равным

$$\tau = (F/A) \cos \varphi \cos \lambda = (F/A) (h/h_0) \cos \lambda_0 \times \\ \times [1 - (h/h_0)^2 \sin^2 \varphi_0]^{1/2}.$$

Поскольку $\lambda_0 h_0 = Ah$, это можно записать как

$$\tau = (F/A_0) (h/h_0)^2 \cos \lambda_0 [1 - (h/h_0)^2 \sin^2 \varphi_0]^{1/2}. \quad (6.25)$$

При сжатии нормаль к плоскости скольжения приближается к направлению сжатия, так что, например, на фиг. 6.12а F_0 будет приближаться к полюсу (111), пока не дойдет до границы между [001] и [011], после чего в системах BIV и AIII будут действовать одинаковые напряжения и стабильной ориентировкой станет [011].

Формулы для изменения ориентировки кристаллической решетки по отношению к направлению приложенной силы для случая *двойного скольжения* как при сжатии, так и при растяжении даны Боуэном и Кристианом [3].

В процессе двойного скольжения ориентировка кристаллической решетки по отношению к растягивающей силе меняется, пока приложенная сила симметрично связана с обеими системами скольжения. Так, например, при растяжении г. ц. к.-металлов направления $\langle 112 \rangle$ представляют собой устойчивые ориентировки, расположенные посередине между двумя направлениями $\langle 110 \rangle$.

Задачи

6.1. Точечная группа α -ZnS — $\bar{4}3m$.

а) Есть ли у α -ZnS центр симметрии? Примем, что плоскостями скольжения являются плоскости $\{111\}$, а направления скольжения $\langle 1\bar{1}0 \rangle$.

б) Будет ли скольжение в направлении $\langle 11\bar{0} \rangle$ кристаллографически эквивалентным скольжению в направлении $\langle \bar{1}10 \rangle$?

6.2. В процессе сдвига смещения поверхностей кристалла центросимметричны. Используйте это представление и фиг. 6.5, чтобы вывести условия а) — г), приведенные на стр. 207.

6.3. Сколько имеется физически различных систем скольжения у кубического кристалла (например, г. ц. к.-металла), относящегося к точечной группе $m\bar{3}m$, в котором происходит скольжение по $\{111\}$ в направлениях $\langle 1\bar{1}0 \rangle$? Вдоль каких направлений нужно прикладывать напряжение к такому кристаллу при одноосном растяжении, если критическое скалывающее напряжение одинаково: а) по восьми системам, б) по шести системам и в) по четырем системам скольжения?

6.4. Из табл. 6.1 и 3.2 найдите отношение кратчайшего периода решетки в направлении скольжения к кратчайшему межатомному расстоянию для висмута.

6.5. Найдите число независимых систем скольжения для кубического кристалла CsVg с системой скольжения $\{110\}$ $\langle 001 \rangle$. Сколькими независимыми системами скольжения обладает такой кристалл, если происходит карандашное скольжение по тем же направлениям скольжения?

6.6. В кубическом кристалле происходит скольжение на величину α по плоскости (011) в направлении $[0\bar{1}1]$. За оси координат приняты кристаллографические оси кубического кристалла.

а) Выпишите компоненты тензора чистой деформации.

б) Выпишите компоненты тензора чистой деформации, если скольжение на величину α' происходит в том же направлении $[0\bar{1}1]$, но по плоскости (100) .

в) Сколько компонент тензора чистой деформации в этих двух системах могут меняться независимо друг от друга?

г) Если бы α' всегда равнялось постоянной доле от α , т. е. $\alpha' = k\alpha$, то каков был бы ответ на вопрос в)?

д) Воспользуйтесь полученными результатами, чтобы доказать в общем виде, что если в кристалле происходит карандашное скольжение, то сдвиг в заданном направлении может создать две независимые компоненты тензора чистого сдвига.

6.7. Можно ли представить себе три направления скольжения, которые, действуя совместно, не будут подчиняться следующему условию:

Если происходит карандашное скольжение, то в общем случае в кристалле обязательно должно быть только три некопланарных направления скольжения, для того чтобы общая деформация оказалась возможной.

6.8. Медь обладает кубической структурой типа $Fm\bar{3}m$, а скольжение в ней происходит по $\{111\}$ $\langle\bar{1}\bar{1}0\rangle$. Начертите стереографическую проекцию кристалла меди и укажите на ней компоненты системы скольжения. Какие системы скольжения (s) будут действовать, если осью растяжения является: а) $[123]$, б) $[113]$, в) $[122]$?

6.9. Каменная соль — кубический кристалл со структурой $Fm\bar{3}m$, система скольжения у нее $\{110\}$ $\langle\bar{1}\bar{1}0\rangle$. Какие системы будут действовать, если осью растяжения служит: а) $[123]$, б) $[213]$, в) $[013]$?

6.10. Окись магния — кубический кристалл со структурой типа $NaCl$ и системой скольжения $\{110\}$ $\langle\bar{1}\bar{1}0\rangle$.

а) Перечислите направления, для которых приложение сжимающей или растягивающей силы не приведет к скольжению.

б) Может ли кристалл пластически скручиваться вокруг $[100]$?

в) Перечислите те же направления, что и в а) для случая графита; элементы скольжения графита см. в табл. 6.1.

6.11. В гл. 5 при анализе деформации считалось, что деформация однородная или бесконечно малая. Между тем, когда происходит скольжение, в некоторых объемах кристалла деформации достаточно велики. Не будут ли указанные ограничения делать недействительным анализ разд. 6.3, в котором показано, что для общей деформации необходимы пять независимых систем скольжения?

6.12. На тетрагональный кристалл действует растягивающее напряжение σ вдоль $[100]$ и сдвиговое напряжение τ по (100) вдоль $[010]$.

а) Выпишите компоненты тензора напряжений, отнесенные к кристаллографическим осям.

б) Найдите сдвиговое напряжение по (110) в направлении $[\bar{1}\bar{1}0]$, изменив оси тензора напряжений.

в) Таким же способом найдите растягивающее напряжение, нормальное к (110) .

6.13. Выведите формулу (6.12).

6.14. К монокристаллу цинка, у которого скольжение происходит по (0001) в направлениях $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, приложено растягивающее напряжение, направление которого составляет угол 45° с $[11\bar{2}0]$ и угол 60° с нормалью к (0001) .

а) По каким направлениям будет начинаться скольжение?

б) Вычислите критическое скалывающее напряжение для цинка, если скольжение в цинке начинается, когда растягивающее напряжение достигает величины $2,4 \cdot 10^7$ дина \cdot см $^{-2}$;

6.15. В меди система скольжения $\{111\}$ $\langle\bar{1}\bar{1}0\rangle$. Цилиндрический монокристалл меди длиной 10 см растягивают вдоль $[\bar{1}23]$.

а) В какой системе скольжения критическое скалывающее напряжение будет наибольшим?

Образец растягивают до тех пор, пока ось растяжения доходит до симметричного положения, где критические скалывающие напряжения одинаковы для двух систем скольжения.

б) Каковы эти две системы?

в) Какова ориентация оси растяжения на этой стадии?

г) Какова новая длина образца?

6.16. Обсудите следующее утверждение:

В общем случае малое изменение формы образца можно описать как чистую деформацию и поворот. Если объем тела сохраняется неизменным, то у тензора чистой деформации пять, а у тензора чистого вращения три неза-

висимые компоненты. Поэтому, чтобы описать изменение формы монокристалльного зерна внутри поликристалла, нужно иметь восемь независимых величин. Отсюда следует, что в общем случае в каждом зерне поликристалла, подвергнутого общему формоизменению, должно действовать по восемь систем скольжения.

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ЧТЕНИЯ

1. Schmid E., Boas W., *Plasticity of Crystals*, Hughes F. A. and Co., London, 1950; имеется перевод первого издания: Шмид Е., Боас В., *Пластичность кристаллов*, в особенности металлических, ОНТИ, М.—Л., 1938.
2. McGregor Tegart W. J., *Elements of Mechanical Metallurgy*, Macmillan, 1966.
3. Bowen D. K., Christian W., *The Calculation of Shear Strain for Double Glide in Tension and Compression*, *Phil. Mag.*, **12**, 369 (1965). Для тех, кто знаком с матричными методами, общие соотношения между величиной скольжения и изменением макроскопического облика кристалла даны в следующей работе: Chin G. Y., Thurston R. W., Nesbit E. A., *Finite Deformation due to Crystallographic Slip*, *Trans. АИММЕ*, **236**, 69 (1966).
4. Groves G. W., Kelly A., *Independent Slip Systems in Crystals*, *Phil. Mag.*, **8**, 877 (1963).
- 5*. Хоникомб Р., *Пластическая деформация металлов*, изд-во «Мир», 1972.
- 6*. Некоторые вопросы физики пластичности кристаллов (сборник статей под редакцией М. В. Класен-Неклюдовой), *Итоги науки*, сер. Физ.-мат. науки, № 3, 1960.
- 7*. Набарро Ф. Р. Н., Базинский З. С., Холт Д. Б., *Пластичность чистых монокристаллов*, изд-во «Металлургия», 1967.

Глава 7

Дислокации

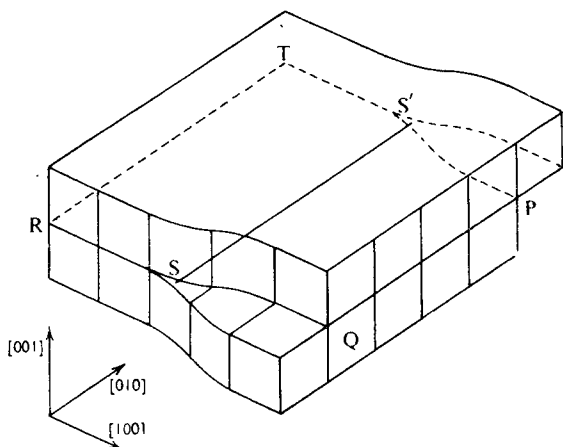
7.1. Введение

В гл. 6 изучался макроскопический аспект геометрии скольжения. Геометрические соотношения адекватно описываются моделью кристаллических блоков, жестко скользящих друг по другу. Если скольжение происходит в реальном кристалле, то все атомы, лежащие выше плоскости скольжения, не могут двигаться одновременно над атомами нижней плоскости. В каждый данный момент времени лишь некоторые атомы переместились в новое положение, между тем как остальные еще не сдвинулись, так что смещение верхней половины кристалла относительно нижней постепенно меняется вдоль плоскости скольжения. Линии в плоскости скольжения, отделяющие области, в которых скольжение произошло, от областей, где его еще не было, называются *дислокациями*. Это простейшее определение дислокации. Позднее мы увидим, что к определению понятия дислокации можно прийти и другим путем.

Для иллюстрации рассмотрим в кристалле с примитивной кубической решеткой плоскость, в которой каждый узел решетки занят одним атомом. На фиг. 7.1 показан блок, вырезанный из такого кристалла по граням, параллельным плоскостям $\{100\}$. Видна плоскость скольжения (001) , обозначенная на рисунке буквами $PQRT$, по скольжение в направлении $[010]$ произошло только в области $PQSS'$. Очевидно, что решетка кристалла искажена, особенно вблизи линии дислокации SS' . Искажение решетки тем меньше, чем меньше величина сдвига по $PQSS'$. На фиг. 7.1 смещение той части кристалла, которая находится над плоскостью $PQSS'$, равно вектору $[010]$ ¹⁾, т. е. наименьшему смещению, которое может произойти в плоскости $PQSS'$ без нарушения кристаллической структуры.

¹⁾ Это характерный вектор решетки, который записывают с помощью его компонент по кристаллографическим осям координат. Например, вектор $[pqr]$ — это вектор, направленный от какого-то узла решетки к узлу, достигаемому при перемещении на расстояние, равное p параметров кристаллической решетки вдоль кристаллографической оси x , q параметров вдоль оси y и r параметров вдоль оси z . В кубических кристаллах в эту запись вектора часто вводят еще параметр решетки a , хотя это не обязательно. Так, вектор $[010]$ часто записывают как $a[010]$, показывая тем самым, что его компоненты вдоль осей x , y и z равны соответственно 0 , a и 0 .

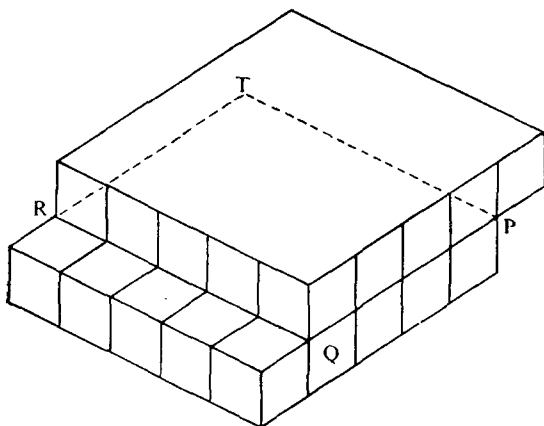
По всей области $PQSS'$ (за исключением небольшого числа атомов на самой линии дислокации SS') это смещение равняется постоянной векторной величине, и именно этот вектор характеризует дислокацию. Когда дислокация движется по кристаллу, неизменным остается характеризующий ее вектор смещения. Эта характеристическая величина называется *вектором Бюргера дислокации*. Когда дислокация SS' на фиг. 7.1 движется по кристаллу справа налево, область, в которой произошло смещение,



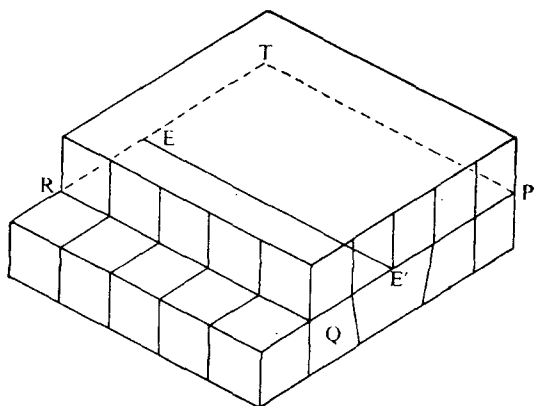
Ф и г. 7.1. Винтовая дислокация в примитивной кубической решетке.

увеличивается, а когда эта дислокация достигает поверхности RT , весь кристалл оказывается сдвинутым вдоль $[010]$, как показано на фиг. 7.2. Дислокация может изменить свою ориентацию, но при этом ее вектор Бюргера не изменится.

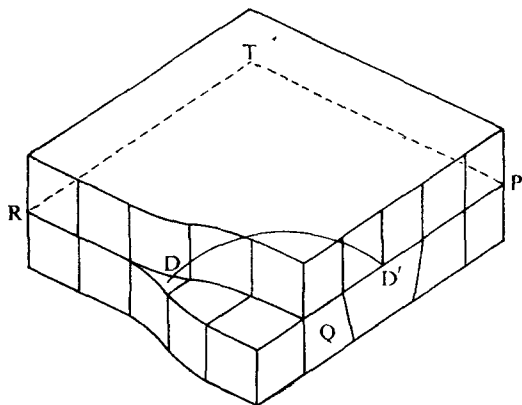
На фиг. 7.3 показан результат поворота дислокации SS' в плоскости скольжения на прямой угол. В новом положении EE' дислокация имеет тот же характерный для нее вектор смещения $[010]$, причем теперь в кристалле произошел сдвиг на ту же величину $[010]$ вдоль $QREE'$, а на участке $PTEE'$ нет сдвига. Дислокация, линия которой перпендикулярна вектору Бюргера, как, например, EE' , называется *краевой дислокацией*, а такая дислокация, как SS' , которая параллельна вектору Бюргера, называется *винтовой дислокацией*. В общем случае дислокация может составлять любые углы с вектором Бюргера и может быть криволинейной, как DD' на фиг. 7.4. В точке D' дислокация имеет краевую ориентацию, а в точке D — винтовую. На остальных участках у дислокации есть обе компоненты (краевая и винтовая), и она называется *смешанной дислокацией*.



Ф и г. 7.2. Сдвиг, создающий краевую дислокацию.

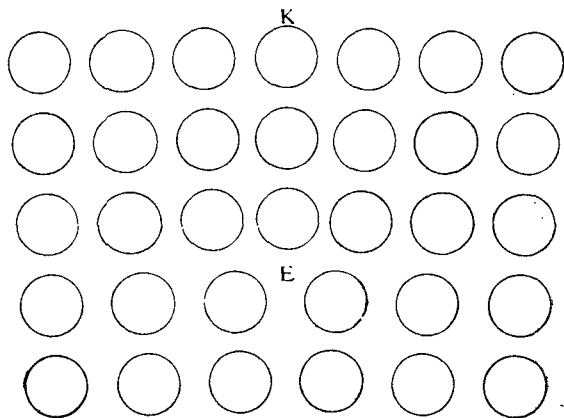


и г. 7.3. Краевая дислокация в примитивной кубической решетке.



Ф и г. 7.4. Сдвиг, создающий смешанную дислокацию.

Происхождение названий краевой и винтовой дислокаций станет яснее, если рассмотреть положения атомов вокруг дислокации. Положения атомов вблизи дислокации нельзя рассчитать точно, не имея детального представления о законах силового взаимодействия между атомами; правда, в некоторых случаях эти атомы можно наблюдать на поверхности кристалла с помощью ионного проектора. Пока достаточно знать, что имеется некоторый беспорядок в расположениях атомов, как показано на фиг. 7.5



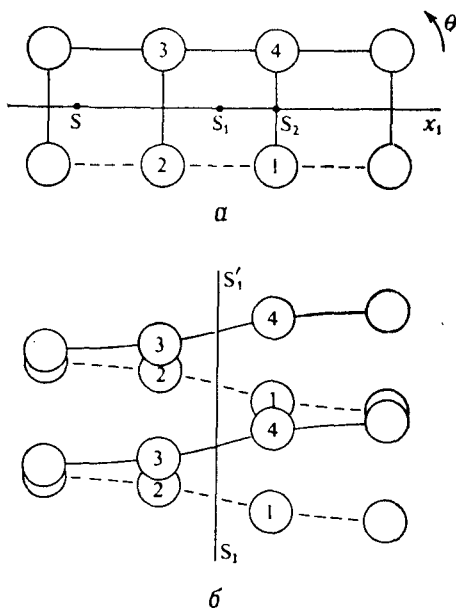
Ф и г. 7.5. Положение атомов вокруг краевой дислокации.

и 7.6. На фиг. 7.5 представлено положение атомов в плоскости, перпендикулярной краевой дислокации EE' из фиг. 7.3. Над плоскостью скольжения имеется незавершенная полуплоскость KE , или экстраплоскость, состоящая из атомов. Край экстраплоскости совпадает с дислокацией, из-за чего она и названа *краевой дислокацией*. На аналогичной схеме в плоскости, перпендикулярной винтовой дислокации, искажений решетки не видно, так как в этом случае смещения атомов параллельны линии дислокации (фиг. 7.6, а). Положения атомов в атомных плоскостях непосредственно над и под плоскостью скольжения для случая винтовой дислокации видны на фиг. 7.6, б. Винтовая компонента возникает в связи с тем, что серия последовательных плоскостей атомов, перпендикулярных линии дислокации, превращается в присутствии дислокации в единую спиральную поверхность или винтовую лестницу.

Это станет очевидным, если на фиг. 7.1 попытаться двигаться вокруг дислокации по этим плоскостям: при таком обходе плоскость чертежа фиг. 7.6 будет пересекаться последовательно в точках 1, 2, 3, 4 и т. д.

В кристаллах, даже не подвергавшихся пластической деформации, всегда имеется множество дислокаций. Типичная суммарная длина линий дислокаций в 1 см^3 кристалла (*плотность дислокаций*) обычно имеет порядок 10^6 см^{-2} , причем эта величина может изменяться в весьма широких пределах ¹⁾.

До сих пор мы рассматривали только дислокации, возникающие в результате скольжения и лежащие в плоскости скольжения. Это ограничение не обязательное. В действительности дислокации



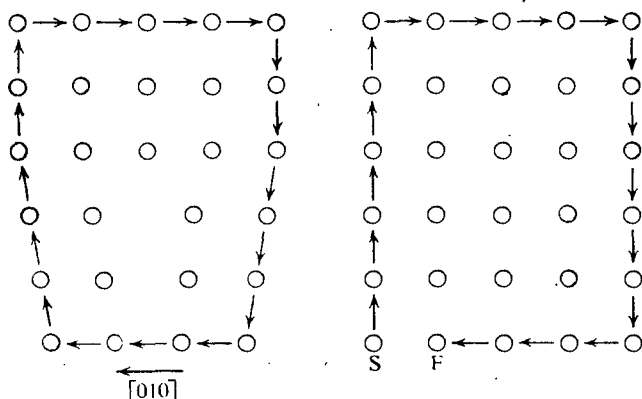
Ф и г. 7.6. Витовая дислокация в простом кубическом кристалле, наблюдаемая вдоль линии дислокации $S_1 S_1'(a)$ и перпендикулярно линии дислокации $S_1 S_1'(b)$.

могут быть созданы не только скольжением, но и другими процессами, с примерами которых мы встретимся в разд. 7.2. Поэтому дадим общий метод описания вектора Бюргерса — этого характеристического смещения, которое определяет дислокацию в кристалле. Чаще всего поступают так: сначала проводят вокруг данной дислокации замкнутый контур — так называемый контур Бюргерса. Этот контур составляется из последовательных трансляций, проведенных от одного узла решетки к ближайшему соседнему узлу, от него опять в ближайшем соседе и так вплоть до возвращения (с другой стороны) к узлу, от которого начинали. Этот контур полагается проводить в «хорошем» материале, т. е. в той области кристалла, в которой, даже если она и деформиро-

¹⁾ Плотность дислокаций определяют как общую протяженность линий дислокаций в единице объема или (что почти то же) как число линий дислокаций, пересекающих единичную площадку в кристалле. — *Прим. ред.*

вана, каждый вектор трансляции можно однозначно отождествить с таким же вектором в идеально совершенном кристалле такой же структуры. Если это существенно необходимое условие выполнено, то проводим соответствующий контур из точно таких же векторов в совершенном кристалле; если этот контур оказывается незамкнутым, тогда в реальном кристалле внутри данного контура действительно имеется дислокация.

Нетрудно показать, что если наш контур оказался незамкнутым, то замкнуть его можно с помощью вектора решетки. Тот вектор решетки, который нужен, чтобы замкнуть контур в идеальном кристалле, определяют как вектор Бюргерса дислокации.



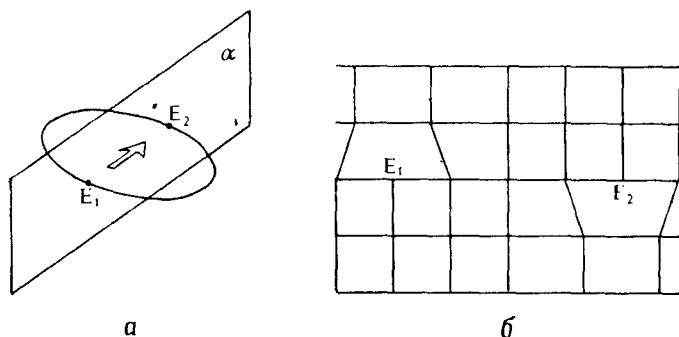
Ф и г. 7.7. Контур Бюргерса вокруг краевой дислокации.

Дислокация, которую мы сейчас рассматривали, должна иметь вектор Бюргерса, равный вектору трансляции решетки Бравэ; такая дислокация называется *полной дислокацией*. Этот метод определения вектора Бюргерса показан на фиг. 7.7. Контур из 17 последовательных шагов в реальном кристалле отвечает в совершенном кристалле такая же конфигурация, которая оказывается незамкнутой. Чтобы замкнуть контур в совершенном кристалле, нужен вектор $[010]$. Это и есть вектор Бюргерса.

Знак вектора Бюргерса будем определять, пользуясь условным правилом FS/RH¹⁾. В соответствии с этим правилом сперва приписываем дислокации некое направление. После этого можно выбрать правостороннее направление обхода контура Бюргерса по отношению к линии дислокации (записывается в этом обозна-

¹⁾ FS — начальные буквы английских слов Finish Start — конечная и начальная точки; RH — начальные буквы слов Right Hand — правая рука. В русской литературе эти обозначения не применяются, а правило FS/RH иногда называют «правилом конец — начало по правому винту». — *Прим. ред.*

чении как RH)¹⁾. Для случая, изображенного на фиг. 7.7, принято, что линия дислокации уходит за плоскость чертежа. Тогда вектор Бюргерса в совершенном кристалле должен идти в направлении от конечной точки к начальной, т. е. от F к S (записывается FS), см. фиг. 7.7²⁾. Если направление линии дислокации изменить на противоположное, вектор Бюргерса также изменит направление на обратное, поэтому желательно придерживаться некоторых условных правил в выборе направления дислокации.



Фиг. 7.8.

a — замкнутая дислокационная петля в плоскости скольжения; b — две краевые дислокации противоположного знака в одной и той же плоскости скольжения.

Рассмотрим, например, замкнутую дислокационную петлю в плоскости скольжения (фиг. 7.8, a).

Допустим, что внутри этой петли верхняя половина кристалла сдвинулась по отношению к нижней его половине вдоль плоскости (010), как указано стрелкой. Тогда положение атомов в плоскости (100) — плоскости α на фиг. 7.8, a — будет таким, как это показано на фиг. 7.8, b . Краевые дислокации в E_1 и E_2 уничтожат друг друга, если они сойдутся в одной точке (их экстраплоскости сольются); поэтому их принято считать краевыми дислокациями противоположного знака. Если считать направление линии дислокации в точках E_1 и E_2 одинаковым, так что в точке E_1 она уходит

¹⁾ Некоторыми авторами используется обратное условие SF/RH . О том, в каких случаях пользуются первым условием, а в каких — вторым, см. работу [1].

²⁾ Относительно выбора знака вектора Бюргерса не существует единого мнения. Иногда пользуются и обратным определением контура Бюргерса, а именно замкнутый контур проводят в совершенном кристалле, а сравниваемый с ним контур, который оказывается незамкнутым, проводят в кристалле с дислокацией. Величина вектора Бюргерса получается такой же, как и в приведенном выше определении, но с противоположным знаком. Поэтому при чтении литературы нужно внимательно следить за правилом определения вектора Бюргерса. — Прим. ред.

за плоскость чертежа, то у векторов Бюргерса в точках E_1 и E_2 будут разные знаки. Если же рассматривать всю петлю в целом, то логичнее написать непрерывной линией петли один и тот же знак вектора Бюргерса. Тогда, если в точке E_1 линия дислокации уходит за плоскость чертежа, то в точке E_2 нужно полагать ее направленной от плоскости чертежа к наблюдателю. Если теперь провести контуры Бюргерса вокруг линии дислокации около E_1 и E_2 в соответствии с правилом правого винта, то знаки векторов Бюргерса у E_1 и E_2 получатся одинаковыми. Этот второй способ определения вектора Бюргерса подчеркивает тот факт, что скачок смещений, измеряемый вектором Бюргерса, сохраняется неизменным на всем протяжении линии дислокации. Так получается потому, что при передвижении контура Бюргерса вдоль линии дислокации он должен оставаться все время в «хорошем» материале.

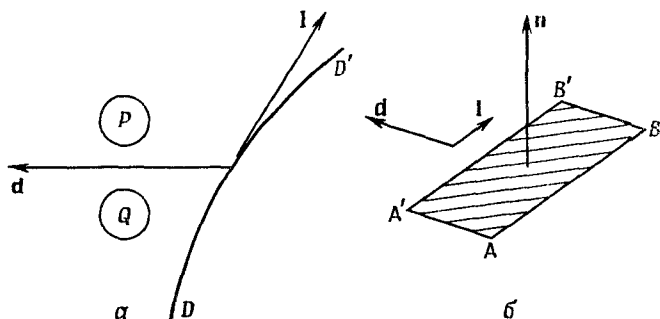
Принцип сохранения вектора Бюргерса является общим принципом. Из него следует, что линия дислокации не может обрываться внутри кристалла. Она должна или выходить на поверхность, или образовывать замкнутую петлю, или встречаться с другими дислокациями. Точка, в которой встречаются линии дислокаций, называется *дислокационным узлом*. Неизменность вектора Бюргерса в последнем случае можно доказать следующим образом. Если все линии дислокаций считать направленными от узла, то сумма векторов Бюргерса всех дислокаций должна равняться нулю. Это дислокационная аналогия правила Кирхгофа для постоянства электрического тока в разветвленных цепях проводников.

7.2. Движение дислокаций

Мы видели, что движение дислокации по плоскости скольжения вызывает изменения в области, в которой произошло скольжение. В настоящем разделе дается общее описание движения дислокаций.

Рассмотрим два соседних атома P и Q в узлах решетки в плоскости, которую замечает дислокация DD' при своем движении (фиг. 7.9, *a*). Допустим, что дислокация проходит между P и Q так, что она движется внутри контура Бюргерса, частью которого является путь от P к Q . Тогда соответствующий контур в идеальном кристалле окажется незамкнутым, а чтобы замкнуть его, придется добавить отрезок, равный вектору Бюргерса \mathbf{b} . Так обстоит дело при смещении P по отношению к Q в реальном кристалле (но при относительном смещении какой-нибудь другой соседней пары атомов в контуре Бюргерса положение иное, потому что через них можно провести контур Бюргерса, который не содержит дислокацию до или после ее движения).

При определении знака относительного смещения надо проявлять осторожность. Определим положительное направление \vec{QP} через векторное произведение $\mathbf{l} \times \mathbf{d}$ (фиг. 7.9, б); иначе говоря, направив \mathbf{l} , \mathbf{d} и \vec{QP} связаны между собой как правая тройка осей координат x , y , z . Здесь \mathbf{l} — вектор, параллельный линии дислокации, которым пользуются при определении вектора Бюргера по рассмотренному правилу FS/RH, \mathbf{d} — вектор, соответствующий направлению движения дислокации. Если принять



Ф и г. 7.9.

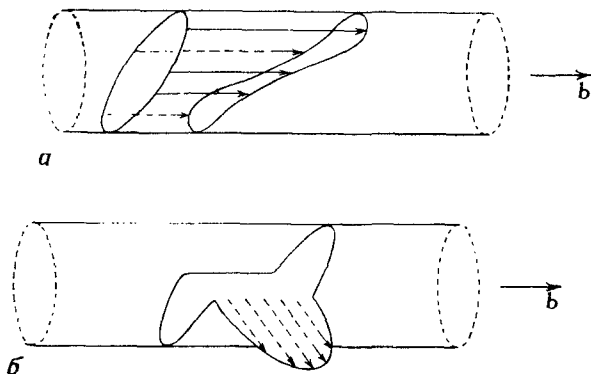
а — дислокация DD' , движущаяся в направлении стрелки d , проходит между атомами P и Q ; б — к определению знака вектора Бюргера.

эти определения, то смещение атома P на положительной стороне по отношению к атому Q на отрицательной стороне равняется $+\mathbf{b}$, если дислокация, как показано, проходит между P и Q . Этим результатом мы воспользуемся, чтобы изучить относительное смещение материала по обе стороны от поверхности, которую замечает дислокация при своем движении.

Допустим, что сегмент линии дислокации AB передвигается в положение $A'B'$, замечая плоскую поверхность с единичной нормалью \mathbf{n} . Согласно только что принятому определению, знак \mathbf{n} обуславливается знаком векторного произведения $\mathbf{l} \times \mathbf{d}$ (фиг. 7.9, б). Атомы над площадкой $ABB'A'$ смещаются на \mathbf{b} по отношению к атомам, находящимся под ней. Если скалярное произведение $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}$ положительно, то атомы над плоскостью отодвигаются от атомов под плоскостью, в результате чего образуется пбра, объем которой равен $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}$ на единицу площади, замечаемой дислокацией. Если $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n} < 0$, то для движения дислокации требуется перенос избыточного материала объемом $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}$ на единицу площади. Если $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n} \neq 0$, движение дислокации сопровождается диффузией, в результате которой при $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n} > 0$ атомы подходят, заполняя пбру, или же при $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n} < 0$ избыточные атомы уходят. Такое движение дислокации называется *переползанием*. Происхождение этого

названия можно понять из фиг. 7.5. Если удалить атомы с края экстраплоскости, то краевая дислокация на фиг. 7.5 переползает из своей плоскости скольжения в соседнюю, вышележащую. В результате добавления атомов к краю экстраплоскости происходит ее переползание на нижележащую плоскость скольжения.

Скольжение дислокации — это движение, не сопровождающееся переносом материала, т. е. движение, для которого $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n} = 0$. Поверхность скольжения определяется поэтому как поверхность, содержащая линию дислокации, нормаль к которой везде



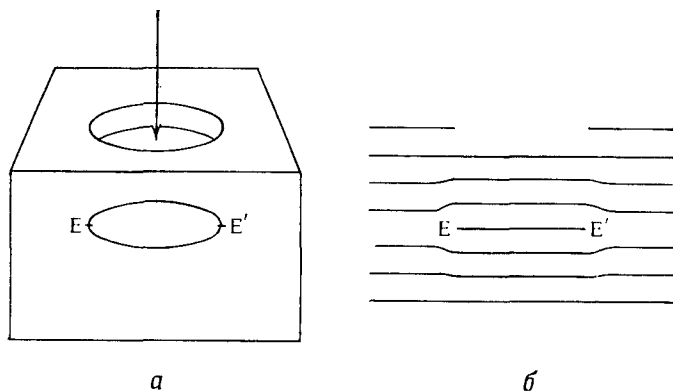
Фиг. 7.10.

a — дислокационная петля может скользить так, что не меняется проекция ее площади на плоскость, нормальную к вектору Бюргерса (она движется по поверхности цилиндра); *б* — винтовой сегмент петли может уйти с поверхности этого цилиндра, но площадь ее проекции не меняется.

перпендикулярна вектору Бюргерса этой дислокации. Для прямолинейной краевой дислокации эта поверхность является просто плоскостью скольжения. Для винтовой дислокации условию $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n} = 0$ удовлетворяет любая плоскость, проходящая через линию дислокации. Для замкнутой дислокационной петли поверхность скольжения представляет собой цилиндр. Поверхность этого цилиндра образована линиями, параллельными вектору Бюргерса, проходящими через все точки на линии дислокации (фиг. 7.10, *a*). Скольжение дислокационной петли не ограничивается поверхностью этого цилиндра, потому что если у нее есть какие-либо винтовые компоненты, то они могут скользить по любой плоскости; но площадь проекции петли на плоскость, нормальную к оси цилиндра, остается постоянной (фиг. 7.10, *б*). Эта площадь равна нулю для петли, расположенной в плоскости скольжения (фиг. 7.8, *a*). Если эта площадь не равна нулю, то петля называется *призматической*. Частный случай ее — чисто краевая дислокационная петля. Она может образоваться в результате призматиче-

ского вдавливания (фиг. 7.11); такая петля имеет вид круглого диска из избыточных атомов в плоскости петли. Если у вектора Бюргера знак обратный, то петля представляет собой диск из отсутствующих атомов; она может образоваться путем объединения вакансий в вакансионный диск.

Когда дислокация движется путем скольжения, не требуется ни подвода, ни отвода лишних атомов. В этом существенное отличие



Фиг. 7.11.

а — образование призматической дислокационной петли путем вдавливания; *б* — сечение, нормальное к плоскости этой петли, проведенное через точки *E* и *E'*.

скольжения от переползания, и это приводит нас к предположению, что дислокации скользят гораздо быстрее, чем переползают. Для разных кристаллографических плоскостей легкость скольжения может быть весьма различной, и может оказаться, что для какой-то одной кристаллографической плоскости она настолько легче, что практически скольжение ограничивается именно этой плоскостью.

7.3. Сила, действующая на дислокацию

В разд. 7.1 мы видели, что когда дислокация движется по плоскости скольжения, соскользнувшая часть площади плоскости скольжения растет или уменьшается, смотря по тому, каково направление движения. Например, пусть силы, действующие в направлении скольжения, приложены к верхней поверхности кристалла в направлении SS' на фиг. 7.1 и к нижней поверхности в направлении $S'S$, причем сила, действующая на единицу площади этих поверхностей, равна σ . Пусть дислокация единичной длины движется влево под действием силы σdx , проходит путь b и заметает площадку dx на плоскости скольжения. Совершаемая

при этом работа равна

$$dw = \sigma b dx. \quad (7.1)$$

Этим результатом можно воспользоваться, чтобы определить силу ¹⁾, действующую на единицу длины линии дислокации в направлении Ox :

$$F = -\frac{dE}{dx}, \quad (7.2)$$

где E — энергия системы, включающей в себя кристалл и то нагрузочное устройство, которое действует на него. Попробуем найти работу, производимую силами, действующими на поверхности взаимно смещающихся плоскостей скольжения, когда дислокация проходит расстояние dx . Величина этой работы, очевидно, равна тоже $\sigma b dx$, т. е. работе внешних приложенных сил, но с обратным знаком. Эта работа, совершаемая на плоскости скольжения, рассеивается, как и работа скользящих поверхностей при трении. Работа совершается за счет энергии того устройства, со стороны которого на кристалл действуют силы и которое поэтому теряет энергию, равную

$$-dE = dw = \sigma b dx. \quad (7.3)$$

Подставляя формулу (7.2) в (7.3), получаем величину силы F :

$$F = \sigma b. \quad (7.4)$$

Это определение силы, действующей на дислокацию, можно распространить на общий случай дислокации, движущейся в любом направлении в кристалле под действием внутренних или внешних сил. Для этого воспользуемся результатом предыдущего раздела, согласно которому если движущийся сегмент линии дислокации заметает некую площадь на внутренней поверхности, то материал по одну сторону от этой поверхности смещается на b относительно материала по другую сторону от нее. Представим себе, что кристалл подрезан по этой поверхности. Сила, действующая на одну из поверхностей надреза, рассчитывается из напряжения, действующего на кристалл, а затем вычисляется работа этой силы в процессе смещения кристалла, причем вторая поверхность считается неподвижной.

Дислокация вынуждена двигаться в таком направлении, что эта работа оказывается отрицательной. В отсутствие внешних сил внутренняя энергия кристалла будет тогда убывать (умень-

¹⁾ Введение понятия «силы», действующей на линии дислокации, — это всего лишь способ описания тенденции дислокационной конфигурации к движению через кристалл. Не существует физической силы, действующей на дислокацию, в таком смысле, как, например, сила, которая тащит стержень с помощью привязанной к нему натянутой веревки.

шаются внутренние напряжения), а величина силы, действующей на дислокацию, определяется по уменьшению энергии кристалла при перемещении дислокации на единичное расстояние. Если дислокацию движет сила, приложенная извне, то потеря энергии компенсируется работой внешних сил и энергия самого кристалла не меняется. Чтобы определить силу, действующую на дислокацию, нужно рассмотреть потери энергии системы, куда входит нагрузочное устройство, со стороны которого действует сила, и записать соответствующие уравнения.

Воспользовавшись правилом знаков из разд. 7.2, запишем силу F , действующую на единицу площади поверхности отрицательной стороны нашего сечения (см. разд. 5.4):

$$F_i = \sigma_{ij}n_j \quad (7.5)$$

или в векторном обозначении

$$\mathbf{F} = \sigma \mathbf{n}. \quad (7.6)$$

С этой силой действует материал, находящийся на положительной стороне поверхности надреза. Здесь σ — напряжение, а \mathbf{n} — единичный вектор нормали к нашей поверхности. Знак \mathbf{n} определяется векторным произведением $\mathbf{l} \times \mathbf{d}$, где \mathbf{l} — единичный вектор, параллельный линии дислокации, а \mathbf{d} — единичный вектор в направлении движения дислокации (фиг. 7.9). Не нарушая общности, можем выбрать \mathbf{d} перпендикулярным \mathbf{l} , поскольку при любом движении дислокации вдоль ее линии заметаемая ею площадь равна нулю. Поэтому

$$\mathbf{n} = \mathbf{l} \times \mathbf{d}. \quad (7.7)$$

При движении дислокации поверхность, ограничивающая отрицательную сторону сечения, смещается на $-\mathbf{b}$, если противоположная сторона сечения остается в покое, так что работа, совершаемая в кристалле, оказывается равной

$$w = -(\sigma \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{b}. \quad (7.8)$$

Так как σ — симметричный тензор, это равенство можно записать как

$$w = -(\sigma \cdot \mathbf{b}) \cdot \mathbf{n}. \quad (7.9)$$

Уменьшение энергии равно этой величине с обратным знаком, т. е.

$$-w = (\sigma \cdot \mathbf{b}) (\mathbf{l} \times \mathbf{d})$$

или, если воспользоваться теоремой о смешанном скалярном произведении векторов (приложение 2),

$$-w = (\sigma \cdot \mathbf{b}) \times \mathbf{l} \cdot \mathbf{d}. \quad (7.10)$$

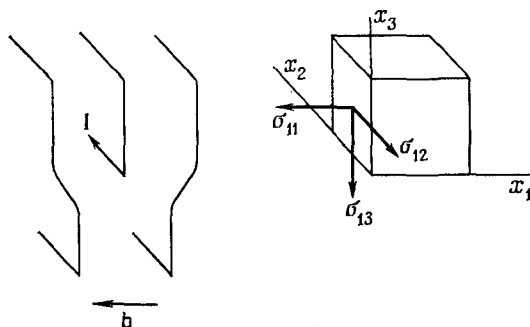
Запишем теперь работу, которая совершается в кристалле, когда дислокация единичной длины перемещается на единичное расстояние:

$$-w = \mathbf{F} \cdot \mathbf{d}, \quad (7.11)$$

где \mathbf{d} — единичный вектор в направлении движения. Отсюда получаем силу \mathbf{F} , действующую на единицу длины дислокации:

$$\mathbf{F} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \times \mathbf{l}. \quad (7.12)$$

Выражение $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}$ представляет собой силу, действующую на площадку величиной b в плоскости, нормальной вектору Бюргера. Поскольку \mathbf{l} — единичный вектор, параллельный линии дислокации, эта сила всегда нормальна к линии дислокации.



Фиг. 7.12. К определению силы, действующей на дислокацию.

В качестве примера применения этой формулы рассмотрим на фиг. 7.12 краевую дислокацию, находящуюся в области, в которой действует напряжение $\boldsymbol{\sigma}$. Это напряжение может создаваться силами, действующими извне, или же локальными внутренними напряжениями¹⁾. Допустим, что дислокация движется вдоль оси x_2 , а ее вектор Бюргера направлен вдоль оси $-x_1$. Усилие, действующее на поверхность, внешней нормалью к которой является \mathbf{b} , будет результирующей компонент, создаваемых напряжениями σ_{11} , σ_{12} и σ_{13} (фиг. 7.12). Компонента $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}$, обусловленная напряжением σ_{12} , параллельна \mathbf{l} и поэтому не вносит вклада в произведение $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) \times \mathbf{l}$. Компонента σ_{11} создает усилие в направлении \mathbf{b} и компоненту силы, действующей на дислокацию, направленную вниз и по величине равную $\sigma_{11}b$. Если σ_{11} отрицательна, то сила, действующая на дислокацию, направлена вверх. Тем самым подтверждается интуитивное представление о том, что сжимающее напряжение стремится выдавить экстраплоскость

¹⁾ Внутреннее или собственное напряжение — это напряжение, существующее в кристалле, на который не действуют внешние силы.

из кристалла, а растягивающее напряжение будет втягивать ее в кристалл. Компонента силы, нормальная к плоскости скольжения, называется силой переползания. Сила, создающая скольжение, действует в плоскости скольжения; в этом случае она задается компонентой $\sigma_1 z$. Величина этой силы на единицу длины дислокации равна $\sigma_1 zb$, а направлена она вдоль Ox_1 . Иногда бывает важно знать только силу, создающую скольжение, т. е. компоненту действующей силы по плоскости скольжения. Как видно из формулы (7.8), для любой дислокации эта компонента просто в b раз больше компоненты напряжения, действующего в плоскости скольжения в направлении скольжения.

Когда краевая дислокация переползает под действием какого-либо напряжения, образуется или бор, или скопление избыточного материала. Интуитивно ясно, что переползание прекратится, если избыточный материал накапливается или если бор не заполняется. Это приводит к представлению о действии на дислокацию «химической» силы, обусловленной, например, отсутствием атомов в некоторых узлах решетки вблизи дислокации. Для понимания этого вопроса нужно немного забежать вперед. В гл. 9 будет показано, что находящийся в равновесии кристалл содержит некоторое количество узлов решетки, не занятых атомами, так называемых вакансий. Чтобы определить химическую силу, найдем сначала равновесную концентрацию вакансий в присутствии краевой дислокации, находящейся под напряжением. Если концентрация вакансий достигла равновесного значения, то у дислокации не будет тенденции к генерированию или поглощению вакансий путем переползания, поэтому можно считать, что химическая сила равна и противоположна по величине той силе, которая создается напряжением.

Предположим, что когда вакансия создается путем добавления атома из решетки к краю экстраплоскости краевой дислокации, отрезок αb дислокации переползает на βb . Здесь α и β — константы порядка единицы, зависящие от структуры кристалла. Тогда, если рождается вакансия, напряжение, действующее с силой переползания F на единицу длины, совершает работу W , равную ¹⁾

$$W = F\alpha\beta b^2. \quad (7.13)$$

Следовательно, равновесная концентрация вакансий растет от ее значения C_0 в отсутствие силы переползания ²⁾ до величины

$$C = C_0 \exp(F\alpha\beta b^2/kT). \quad (7.14)$$

¹⁾ Мы здесь пренебрегаем работой, которую совершают гидростатические компоненты напряжения, когда объем кристалла меняется в результате того, что из него уходит атом. Об этом эффекте см. статью Уиртмана [2].

²⁾ См. гл. 9, разд. 1.

Химическую (т. е. осмотическую) силу, равную и противоположную F , создаваемую концентрацией C вакансий, определяем как

$$-F = - (kT/\alpha\beta b^2) \ln (C/C_0). \quad (7.15)$$

В отсутствие напряжения концентрация C , не равная C_0 , создает химическую силу, которая не уравнивается силой, создаваемой напряжением. Величина этой силы определяется равенством (7.15). В этом случае дислокация на фиг. 7.12 будет перемещаться вверх, если $C/C_0 > 1$, т. е. если есть «пересыщения» вакансиями.

Интересно сравнить величину «химического напряжения» F/b с величиной типичного механического напряжения. Подставляя $\alpha = \beta = 1$, $\mu b^3 \approx 5 \text{ эВ}^2$, где μ — модуль сдвига, $kT \approx \approx 1/40 \text{ эВ}$ при комнатной температуре, получаем

$$F/b \sim (\mu/200) \ln (C/C_0). \quad (7.16)$$

Многие кристаллы способны выдержать напряжение не больше, чем $\mu/200$, поэтому совсем незначительные пересыщения, даже те, что создаются закалкой от температур, близких к температуре плавления, могут вызвать рост небольших призматических петель. Это наблюдалось, например, в алюминии.

7.4. Искажения в кристалле, содержащем дислокации

Посмотрим теперь, как искажается структура кристалла, если в нем есть дислокация. Это необходимо знать для разбора таких вопросов, как взаимодействие дислокаций друг с другом и с прочими дефектами решетки. Непосредственный путь для решения этого вопроса — это исследование упругого континуума, содержащего дислокацию. Если для континуума с дислокацией найдено удовлетворительное решение, то затем атомам в кристалле можно приписать те же смещения, какие испытывают соответственные точки континуума. В качестве первого приближения можно считать континуум упруго изотропным.

Для винтовой дислокации в изотропном континууме эта задача достаточно проста, и верное решение можно получить интуитивным приближением. Будем считать, что в любой точке смещение параллельно дислокации. Из-за радиальной симметрии этой конфигурации полное смещение b должно быть одинаковым на круговом пути вокруг дислокации. Поэтому можно полагать, что смещение u_z равно

$$u_z = b\theta/2\pi. \quad (7.17)$$

Если мысленно распрямить круговой путь на радиальном расстоянии r от дислокации, как на фиг. 7.13, то сдвиговая дефор-

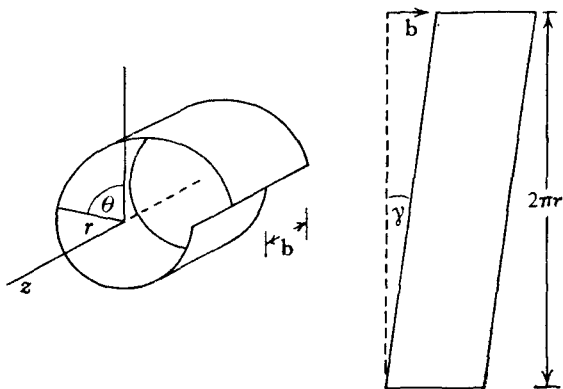
мация получится равной

$$\gamma_{z\theta} = b/2\pi r. \quad (7.18)$$

Компонента напряжения, отличная от нуля, здесь представляет собой соответствующее касательное напряжение, которое по закону Гука равно

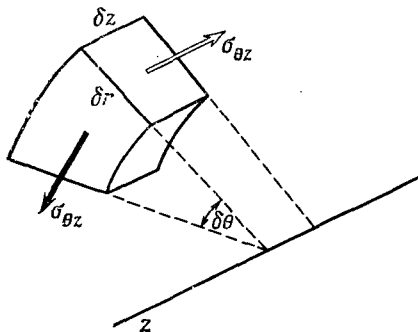
$$\sigma_{z\theta} = \sigma_{\theta z} = \mu b/2\pi r. \quad (7.19)$$

Остается только проверить, что напряжения, вычисляемые по формуле (7.19), таковы, что любая область тела, содержащего дислокацию, находится в равновесии. Из-за того, что напряжение



Ф и г. 7.13. Деформация, создаваемая винтовой дислокацией, параллельной оси z .

$\sigma_{z\theta}$ не зависит ни от z , ни от θ , на противоположные грани любого малого элемента на фиг. 7.14 действуют равные и противоположные



Ф и г. 7.14. Напряжения, создаваемые винтовой дислокацией, параллельной оси z .

ные силы, так что весь элемент находится в равновесии. Кроме того, σ_{zr} , $\sigma_{\theta r}$ и σ_{rr} везде равны нулю, поэтому на поверхность цилиндра вокруг дислокации силы не действуют. Трудность заключается в том, что касательное напряжение, определяемое

уравнением (7.18), стремится к бесконечности при r , стремящемся к нулю. Поскольку закон Гука верен лишь для малых деформаций, принято исключать из решения область радиусом $r \sim 5b$, где деформации слишком велики. Материал внутри такой цилиндрической поверхности называется *ядром дислокации*. Поверхность ядра по существу является граничной поверхностью упругого тела. Силы, с которыми материал ядра действует на точки этой граничной поверхности, определить невозможно, но известно, что ни в каком направлении не действуют ни суммарные силы, ни пары сил. Этому условию отвечает уравнение (7.19), которое определяет цилиндрическую поверхность, совершенно свободную от действия сил. Поэтому уравнения (7.17) и (7.19) дают достаточно надежные значения смещений и напряжений на расстояниях, больших чем $5b$, от линии винтовой дислокации в бесконечно длинном изотропном цилиндре. Для конечного цилиндра со свободными концами решение приходится изменить так, чтобы исключить действия пары сил, создаваемых напряжением σ_{θ} на торцевых поверхностях.

Смещения вокруг других дислокаций можно отыскать примерно таким же путем¹⁾. Ищется функция смещения, которая дает требуемый скачок смещений на контуре вокруг дислокации и, кроме того, удовлетворяет уравнению равновесия. Для дислокации, расположенной вдоль оси x_3 , получаются три уравнения в декартовых координатах:

$$\frac{\partial \sigma_{i1}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{i2}}{\partial x_2} = 0 \quad (i = 1, 2, 3). \quad (7.20)$$

Напряжение σ_{ij} можно выразить по закону Гука через производные от компонент смещений u_1, u_2, u_3 (разд. 5.5). Так как напряжения и деформации, заданные любым смещением, имеющим требуемую прерывность, становятся на линии дислокации бесконечными, необходимо, чтобы цилиндр из материала, содержащего дислокацию, находился в равновесии или, иначе говоря, чтобы сила, действующая на поверхность ядра, обращалась в нуль.

Для краевой дислокации в изотропной среде решение сложнее, чем для винтовой. Если линия дислокации параллельна оси x_3 , а вектор Бюргера параллелен x_1 , то искомое смещение равно

$$u_1 = \frac{b}{2\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{x_2}{x_1} + \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \frac{x_1 x_2}{x_1^2 + x_2^2} \right), \quad (7.21a)$$

$$u_2 = \frac{b}{2\pi} \left[-\frac{\mu}{2(\lambda + 2\mu)} \log(x_1^2 + x_2^2) + \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \frac{x_2^2}{x_1^2 + x_2^2} \right]. \quad (7.21b)$$

Здесь λ — постоянная Ламе (разд. 5.5). Первый член в уравнении (7.21a) такой же, как в уравнении для винтовой дислокации:

¹⁾ Дальнейший текст в этом разделе рассчитан на более подготовленного читателя; при первом чтении книги его можно опустить.

он обеспечивает на круговом пути необходимым скачком непрерывности на u_1 , равный вектору Бюргерса b . Первый член в выражении для u_2 , т. е. смещение, нормальное к плоскости скольжения, нужен для того, чтобы могли удовлетвориться уравнения равновесия (7.20). Вторые члены в уравнениях (7.21) необходимы, чтобы в ядре дислокации силы обратились в нуль. Из фиг. 7.5 видно, какая конфигурация получается, когда эти смещения накладываются на квадратную сетку узлов в плоскости x_1x_2 . Чтобы получить фиг. 7.5, в уравнения (7.21) были подставлены упругие постоянные вольфрама, который с достаточно хорошим приближением можно считать изотропным.

Из смещений (7.21) можно вычислить напряжения

$$\begin{aligned}\sigma_{11} &= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_2(3x_1^2 + x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2}, \\ \sigma_{22} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_2(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2}, \\ \sigma_{33} &= \nu(\sigma_{11} + \sigma_{22}), \\ \sigma_{12} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2};\end{aligned}\tag{7.22}$$

здесь ν — коэффициент Пуассона¹⁾.

Вольфрам и алюминий — особые кристаллы, они почти изотропны в отношении упругости. Для большинства кристаллов, чтобы рассчитать точные значения положений атомов вне ядра дислокации, нужно знать истинные упругие постоянные кристалла, а не усредненные значения, характерные для изотропных свойств поликристалла данного материала. Это значит, что, выводя уравнения смещения из уравнений (7.20), надо пользоваться законом Гука в его обобщенном виде. Как правило, при этом в уравнениях (7.20) надо учитывать все девять членов типа $\partial^2 u_i / \partial x_\alpha \partial x_\beta$ ($i = 1, 2, 3$; $\alpha, \beta = 1, 2$). До сих пор решить удалось те случаи, где число членов сокращается благодаря симметрии. Для этого требуется не только высокая симметрия кристаллической структуры, но еще и линии дислокаций в кристалле должны располагаться по некоторым особым направлениям, например вдоль оси симметрии второго порядка. В литературе имеются полные решения для краевой дислокации вдоль $\langle 001 \rangle$ и винтовой дислокации, нормальной плоскости симметрии в кубическом кристалле, а также для дислокации, находящейся в базисной плоскости гексагонального кристалла [3].

¹⁾ Напряжения и деформации от смешанной дислокации в изотропной среде, линия которой составляет с ее вектором Бюргерса угол θ , можно получить, просто складывая напряжения и деформации, создаваемые винтовой дислокацией с вектором Бюргерса $b \cos \theta$ и краевой дислокацией с вектором Бюргерса $b \sin \theta$. Так получается потому, что члены в выражениях для полей напряжений краевой и винтовой компонент не зависят друг от друга.

Простейший случай — это винтовая дислокация, нормальная плоскости симметрии. Если линия дислокации параллельна оси x_3 , то упругие постоянные c'_{44} , c'_{55} , c'_{24} , c'_{25} , c'_{34} , c'_{35} , c'_{46} и c'_{56} обращаются в нуль (см. табл. 5.2; штрихами отмечены постоянные, которые относятся к осям координат, отличающимся от обычных кристаллографических осей). В этом случае смещение равно

$$u_3 = (b/2\pi) \operatorname{arctg} [(x_2 - hx_1)/\alpha x_1], \quad (7.23)$$

где

$$\alpha = (c'_{44}c'_{55} - c'^2_{45})^{1/2}/c'_{55}, \quad h = c'_{45}/c'_{55}.$$

Для винтовой дислокации вдоль $\langle 110 \rangle$ в г. ц. к.-кристалле формула (7.23) принимает вид

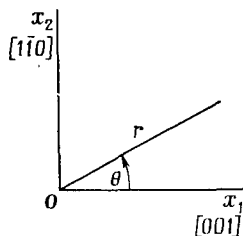
$$u_3 = (b/2\pi) \operatorname{arctg} (A^{1/2}x_2/x_1). \quad (7.24)$$

Оси x_1 и x_2 выбраны здесь, как показано на фиг. 7.15; A — фактор анизотропии, который, согласно (5.54), равен

$$A = 2c_{44}/(c_{11} - c_{12}).$$

Фактор анизотропии нарушает радиальную симметрию смещения, которая иначе была бы такой же, как в изотропной среде. Если

Ф и г. 7.15. К определению смещений, создаваемых винтовой дислокацией.



$A > 1$, как в г. ц. к.-металлах, то деформация сдвига будет наибольшей на плоскостях $\{110\}$; если же $A < 1$, как в случае щелочно-галогидных кристаллов или некоторых о. ц. к.-металлов, то деформация наибольшая на плоскостях $\{100\}$. Из-за того, что величина модуля сдвига зависит от ориентировки, приходится, помимо напряжения $\sigma_{z\theta}$, отвечающего изотропному случаю и выражающегося соотношением

$$\sigma_{z\theta} = c_{44} b/2\pi A^{1/2} r, \quad (7.25)$$

дополнительно вводить напряжение сдвига σ_{zr} :

$$\sigma_{zr} = [c_{44} b (1 - A) \sin \theta \cos \theta] / [2\pi A^{1/2} r (\cos^2 \theta + A \sin^2 \theta)] \quad (7.26)$$

7.5. Положения атомов около дислокации

Хотя смещения атомов вокруг дислокации в кристалле и можно описывать, пользуясь решениями для дислокации в упругом континууме, для атомов, близких к дислокации, значения этих смещений оказываются не верными, потому что в этой области деформации велики и уже нельзя пользоваться приближением упругого континуума. Чтобы определить смещения атомов в области ядра дислокации, нужно точно знать силы, действующие между этими атомами. Поскольку эти силы неизвестны, придется ограничиться качественными рассуждениями.

Сначала рассмотрим простую кубическую решетку и будем считать, что смещения вокруг винтовой дислокации определяются формулой

$$u_z = b\theta/2\pi.$$

Если линия дислокации расположена так же, как на фиг. 7.6, а угол θ отсчитывается против часовой стрелки от линии zx_1 , т. е. от следа плоскости, по которой скользит винтовая дислокация, то смещения атомов, отмеченных цифрами от 1 до 4, будут равны соответственно

$$b/8, 3b/8, 5b/8, 7b/8.$$

Смещение на плоскости скольжения zx_1 составляет

$$\Delta u = b - b\theta/\pi. \quad (7.27)$$

Слева, достаточно далеко от дислокации ($\theta = \pi$), смещение на плоскости скольжения равно нулю, а справа, там, где $\theta = 0$, относительное смещение равно b . Формула (7.27) принимает вид

$$\Delta u = b - (b/\pi) \arctg(b/2x_1) = b - (b/\pi) [\pi/2 - \arctg(2x_1/b)]$$

или

$$\Delta u = b/2 + (b/\pi) \arctg(2x_1/b). \quad (7.28)$$

График этой функции приведен на фиг. 7.16. Участок вдоль плоскости скольжения, на котором это смещение составляет от $1/4$ до $3/4$ своего экстремального значения, называется *шириной дислокации* на этой плоскости. На фиг. 7.16 ширина дислокации равна b . Интуитивно можно полагать, что в реальном кристалле ширина дислокации больше, чем это значение.

Допустим теперь, что мы удвоили ширину дислокации, заставив Δu меняться в зависимости от x_1 по закону

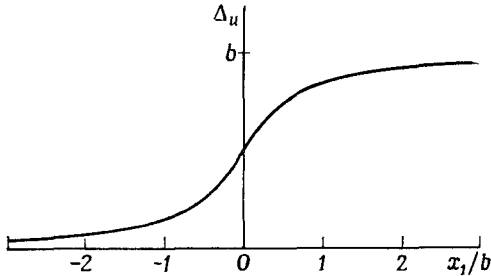
$$\Delta u = b/2 + (b/\pi) \arctg(x_1/b). \quad (7.29)$$

Это равносильно тому, чтобы считать, что смещения атомов определены симметричным решением (7.17), а сами атомы образуют

тетрагональную решетку, причем расстояние между плоскостями скольжения вдвое больше, чем межатомное расстояние на самой плоскости. Тогда смещения атомов от 1-го до 4-го будут приблизительно равны

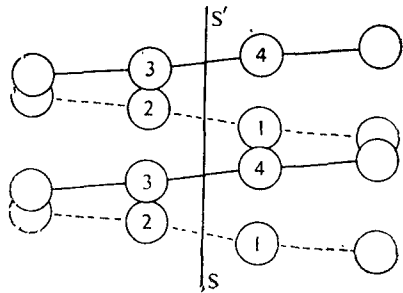
$$b/6, \quad b/3, \quad 2b/3, \quad 5b/6.$$

Такая расширенная дислокация изображена на фиг. 7.17. Сдвиговая деформация в связях 1—4 и 2—3 вдвое больше деформации



Ф и г. 7.16. График функции (7.28).

связей 1—2 и 3—4. Подобная ситуация может встретиться в реальном кристалле, если связи между плоскостями скольжения слабее, чем связи между атомами в самой плоскости скольжения.



Ф и г. 7.17. Винтовая дислокация, ширина которой вдвое больше, чем у дислокации на фиг. 7.6.

В модели дислокации Пайерлса особо учтены связи, через которые проходит плоскость скольжения. В этой модели кристалл мысленно разделяют на две половины по плоскости скольжения, причем каждая из половин рассматривается как упругий континуум. Атомная структура принимается во внимание только на плоскости скольжения, где два полукристалла соприкасаются. Считается, что между рядами атомов непосредственно над плоскостью скольжения и под ней действует сила, подчиняющаяся периодическому закону. Для простоты принимается синусоидальный закон:

$$\sigma = (b\mu/2\pi a) \sin (2\pi\Delta u/b). \quad (7.30)$$

Расстояние между атомами в плоскости скольжения равно b , а между плоскостями скольжения a , так что сдвиг связей между двумя рядами атомов на плоскости скольжения равен $\Delta u/a$. Равенство (7.30) сводится тогда к закону Гука для малых деформаций (малые значения Δu). Деформируя упругие полукристаллы, а затем соединяя их по плоскости скольжения, создаем дислокацию. Возвращающая сила, действующая между сдвинутыми рядами атомов, согласно уравнению (7.30), стремится сузить дислокацию. Внутренние силы, обусловленные упругими деформациями кристалла, стремятся ее расширить. Равновесие достигается при некотором определенном распределении смещений. Может образоваться либо краевая, либо винтовая дислокация, хотя эта модель по существу больше подходит для краевой дислокации, у которой велики сдвиговые деформации вдоль единственной плоскости скольжения.

Смещения на плоскости скольжения, обусловленные винтовой дислокацией Пайерлса, такие же, как и для упругого континуума [формулы (7.17) и (7.28)], т. е.

$$\Delta u = b/2 + (b/\pi) \operatorname{arctg}(2x_1/a). \quad (7.31)$$

Смещения для краевой дислокации Пайерлса отличаются от упругой краевой дислокации и оказываются равными

$$\Delta u = b/2 + (b/\pi) \operatorname{arctg}[2x_1(1 - \nu)/a]. \quad (7.32)$$

Краевая дислокация Пайерлса шире винтовой в $1/(1 - \nu)$ раз, где ν — коэффициент Пуассона. По мере того как ν растет до своего наибольшего значения, равного 0,5, сопротивление материала упругому сдвигу уменьшается по сравнению с его сопротивлением поперечному расширению. Поэтому возрастание ширины краевой дислокации при увеличении ν согласуется с качественным представлением об атомах как о жестких шарах, легко скользящих один по другому. Тогда сжатие в атомной экстраплоскости будет выталкивать дислокацию из ее плоскости скольжения. Если в плоскости скольжения действуют жесткие направленные связи, то их сопротивление сдвигу будет сужать дислокацию. Такими направленными связями обладают ковалентные кристаллы, например кремний.

Положение атомов в ядре дислокации существенно влияет еще на одну важную величину, а именно на силу, необходимую для старта движения дислокации в решетке, которую можно считать совершенной (если исключить наличие данной дислокации). При движении дислокации меняются смещения вокруг нее; в общем случае меняется и энергия, сосредоточенная в ее ядре.

В результате на дислокацию действует сила

$$F_x = -\frac{dE}{dx}, \quad (7.33)$$

где E — энергия, обусловленная наличием дислокации.

Максимальное значение этой силы называется *силой Пайерлса*, поскольку Пайерлс первым исследовал ее на модели краевой дислокации. Примененный им метод можно вкратце пояснить с помощью фиг. 7.6, где буквой S обозначена винтовая дислокация Пайерлса. Для любого положения S на плоскости Sx_1 (фиг. 7.6, a) можно воспользоваться равенством (7.31), чтобы приписать определенные смещения каждому атому. Энергию, сосредоточенную в связях 2—3, 1—4, действующих на плоскостях скольжения, можно затем суммировать, считая ее функцией положения дислокации. Суммарная энергия E' оказывается минимальной для положения S_1 и максимальной для положения S_2 (фиг. 7.6, a); в последнем положении существенный вклад вносит сильно деформированная связь 1—4. Можно показать, что в промежуточном положении производная dE'/dx_1 имеет максимальное значение, равное

$$\frac{dE'}{dx_1} = F_{\Pi} \approx \mu \exp\left(-\frac{\pi a}{b}\right). \quad (7.34)$$

Количественное значение этого результата невелико из-за искусственности модели, и на самом деле она дает слишком большое значение силы, необходимой, чтобы началось движение дислокации, например, в г. ц. к.-металле. Не противоречит физическому смыслу уменьшение F_{Π} при убывании параметра a , который в этой модели эквивалентен ширине дислокации. Когда дислокация становится уже, изменение смещения при ее движении затрагивает меньшее число атомов. Когда ширина дислокации очень мала, немногим атомам в ее ядре приходится совершать большие прыжки, чтобы она могла продвинуться на одно межатомное расстояние: энергетический барьер при этом может оказаться слишком большим.

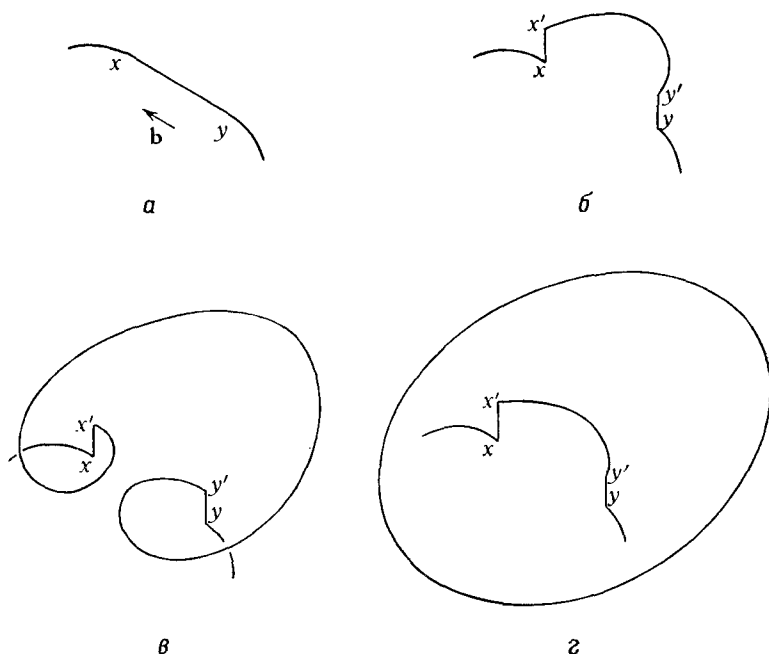
7.6. Взаимодействие дислокаций

Когда кристалл пластически деформируется, некоторые из дислокаций исчезают, выходя на его поверхность. Одновременно должно происходить и пополнение дислокаций: в типичных случаях деформация порядка 10% увеличивает плотность дислокаций до 10^8 или 10^9 см $^{-2}$ (плотность дислокаций определяется как суммарная длина линий дислокаций в 1 см 3 кристалла¹). По мере возрастания плотности дислокаций все более существенным стано-

¹) См. примечание редактора на стр. 238.— *Прим. ред.*

вится их взаимодействие. Растет, например, напряжение, необходимое для пластического деформирования кристалла, и его зависимость от сил взаимодействия между дислокациями становится более существенной, чем от напряжения, необходимого, чтобы двигать изолированную дислокацию.

Простой источник возможного размножения дислокаций был предложен Франком и Ридом. Чтобы он мог действовать, нужно



Ф и г. 7.18. Размножение дислокаций.

только, чтобы дислокация в плоскости скольжения была закреплена в двух точках. На фиг. 7.18 дислокация закреплена в точках x' , y' , где она уходит из своей плоскости. Из фиг. 7.18, а и б видно, что такая конфигурация может получиться, если выповой сегмент xy дислокации выскальзывает из исходной плоскости скольжения α и переходит в положение $x'y'$. Это пазывается *поперечным скольжением*. Нетрудно видеть, что сегмент xy , переходя в плоскость, параллельную α , может генерировать некое количество расширяющихся петель, исходящих из точек x' и y' как из центров. Такой вариант источника Франка — Рида был предложен Кёлером. Он дает возможность скольжению распространяться вширь по единственной активной плоскости скольжения, и поэтому им можно объяснить часто наблюдаемые *полосы*

скольжения, представляющие собой набор очень близко расположенных параллельных плоскостей, по которым прошло скольжение (фиг. 6.3).

Если образуются полосы скольжения или даже если скольжение более размытое, то дислокации в почти параллельных плоскостях скольжения иногда подходят совсем близко друг к другу. Тогда поле напряжений одной дислокации будет действовать на другую дислокацию с силой, вычисляемой по формуле (7.12), в которую вместо σ подставим напряжение, создаваемое первой дислокацией в том месте, где находится вторая дислокация. Рассмотрим вкратце два частных случая, а именно параллельные винтовые и параллельные краевые дислокации. При этом будем считать, что среда упруго изотропна.

Между параллельными краевыми дислокациями, находящимися на расстоянии r друг от друга, действует центральная сила

$$F = \mu b^2 / 2\pi r. \quad (7.35)$$

Эта сила рассчитывается на единицу длины линии дислокации и является силой отталкивания, если винтовые дислокации одноименны, т. е. их поля напряжений усиливают друг друга. Если же они противоположны по знаку, так что при встрече дислокаций их поля напряжений уничтожаются, то эта сила действует как сила притяжения. Положения равновесия не существует.

В противоположность этому у параллельных краевых дислокаций есть два положения равновесия, если говорить о компоненте силы в плоскости скольжения. Это единственная компонента, которая может заставить дислокацию двигаться при низких температурах: ведь краевой дислокации приходится совершать переползание, чтобы выйти из своей плоскости скольжения. Величину этой силы на единицу длины линии дислокации можно вывести из уравнения (7.22). Выразить ее удобнее в полярных координатах; тогда она приобретает следующий вид:

$$F_g = \{\mu b^2 / [2\pi (1 - \nu) r]\} \cos \theta (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta). \quad (7.36)$$

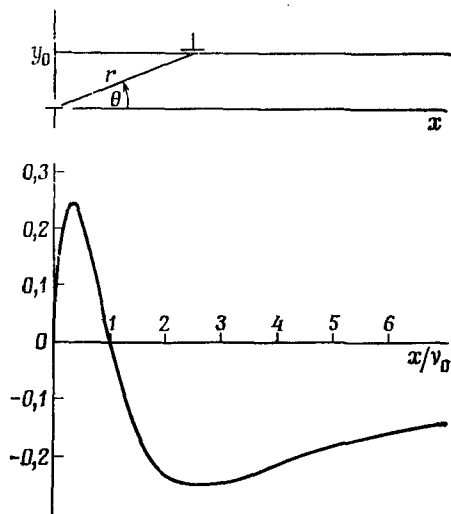
Угол θ показан на фиг. 7.19, которая представляет собой график функции (7.36) для краевых дислокаций противоположного знака. Угол $\theta = \pi/2$ определяет положения неустойчивого равновесия, а углы θ , равные $\pi/4$ и $3\pi/4$, — положение устойчивого равновесия. Чтобы обе параллельные краевые дислокации могли двигаться по параллельным плоскостям скольжения, отстоящим друг от друга на расстояние y , необходима сила F_m на единицу длины линии дислокации, равная

$$F_m = \mu b^2 / [8\pi (1 - \nu) y]. \quad (7.37)$$

Поскольку типичные значения пределов текучести лежат в интервале 10^{-3} — 10^{-4} μ , можно полагать, что краевые дислока-

ции противоположного знака располагаются очень близко друг к другу, если они находятся в плоскостях скольжения, отстоящих друг от друга на несколько сотен ангстрем или меньше. Действительно, в деформированных кристаллах часто наблюдаются пары близких дислокаций противоположного знака; они называются *дислокационными диполями*.

Силы взаимодействия одинаковых краевых дислокаций равны по величине, но противоположны по знаку силам взаимодействия



Ф и г. 7.19. Сила взаимодействия между параллельными краевыми дислокациями в параллельных плоскостях скольжения, отстоящих друг от друга на расстояние y_0 .

По оси ординат отложена сила в единицах $\mu b^2/2\pi(1-\nu)$.

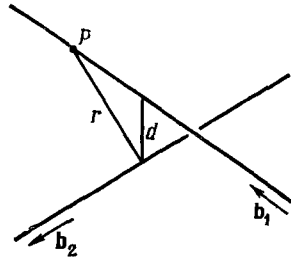
между разноименными дислокациями. Поэтому устойчивое равновесие наступает при $\theta = \pi/2$. Для двух одинаковых краевых дислокаций менее вероятен захват их друг другом, чем для разноименных, потому что приложенное напряжение двигает обе дислокации в одну сторону. Тем не менее если возможно переползание, то при $\theta = \pi/2$ возникает равновесная конфигурация. Компонента силы, нормальной к плоскости скольжения, т. е. силы переползания, равняется

$$F_c = \{\mu b^2/[2\pi(1-\nu)r]\} \sin\theta(1+2\cos^2\theta). \quad (7.38)$$

Эта сила действует для всех θ как сила притяжения между разноименными и как сила отталкивания между одноименными краевыми дислокациями. Если температура достаточно высока, так что возможно переползание дислокаций, то разноименные краевые дислокации из разных плоскостей скольжения взаимно аннигилируют, между тем как оставшиеся избыточные краевые дислокации одного знака выстраиваются в стенки, перпендикулярные плоскости скольжения. Это явление называется *полигонизацией*.

Упругое взаимодействие двух дислокаций в анизотропной среде может очень сильно отличаться от соответствующего взаимодействия в изотропной среде. Например, в меди две параллельные винтовые дислокации, расположенные вдоль $\langle 110 \rangle$ в одной и той же плоскости скольжения $\{111\}$, действуют друг на друга с силами, которые направлены от плоскости скольжения наружу, из-за скалывающего напряжения σ_{zz} , определяемого формулой (7.25). Подставляя в (7.25) соответствующие константы, получаем, что компонента силы, нормальной к плоскости скольжения, составляет

Ф и г. 7.20. Ортогональные краевые дислокации; расстояние между ними, отсчитываемое по перпендикуляру, равно d .



не менее 0,6 от силы притяжения или отталкивания в плоскости скольжения; если бы кристалл меди был упруго изотропным, то существовала бы только эта единственная компонента силы.

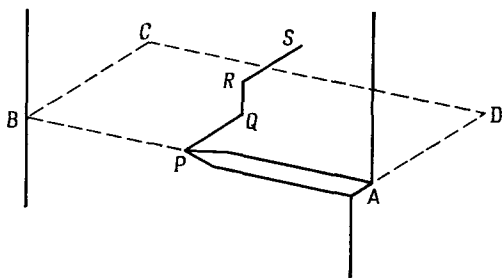
Дислокации в пересекающихся плоскостях скольжения тоже действуют друг на друга с силами, которые обусловлены их полями напряжений. Например, поле напряжений винтовой дислокации в изотропной среде действует на перпендикулярную к ней винтовую дислокацию с силой, равной

$$F = (\mu b_1 b_2 / 2\pi) (d/r^2), \quad (7.39)$$

где F — сила на единицу длины в точке P ортогональной винтовой дислокации, изображенной на фиг. 7.20. Направление F нормально к направлению обеих дислокаций. Знак силы можно проверить, сравнивая скалывающие напряжения, создаваемые каждой винтовой дислокацией на середине кратчайшего отрезка между ними (на фиг. 7.20 длина отрезка равна d). Две винтовые дислокации притягиваются, если их поля напряжений взаимно уничтожаются, и отталкиваются, если они взаимно усиливаются.

Дислокации в пересекающихся плоскостях скольжения взаимодействуют по-иному, если они пререзают друг друга. Так как материал по одну сторону от поверхности, заметаемой движущейся дислокацией, смещается на вектор Бюргера по отношению к материалу с другой стороны, каждая из дислокаций приобретает лишний уступ, по величине и направлению равный вектору Бюргера второй дислокации. Если оказывается, что этот добавочный уступ лежит в той плоскости, по которой уже прошла оставшаяся

часть дислокации, то он называется *перезгибом* (kink). Перегиб может сразу исчезнуть в процессе скольжения. Если уступ лежит не в той же плоскости, то он называется *ступенькой* (jog)¹⁾. Когда пересекаются две ортогональные краевые дислокации, на каждой из них образуется ступенька в виде сегмента краевой дислокации. Ступенька такого типа показана на фиг. 7.21, где знак винтовой дислокации можно определить по выступу, который она образует на поверхности кристалла. Если дислокация



Фиг. 7.21. Перегиб (кинк) на линии дислокации.

со ступенькой $PQRS$ движется как единое целое по направлению к AD , то ступенька QR вынуждена переползти; при внимательном рассмотрении фиг. 7.21 видно, что при этом образуется пара, объем которой равен отрезку QR , умноженному на b и на пройденное расстояние. Эта пара имеет вид хвоста или шлейфа из вакансий. Если $PQRS$ движется в противоположную сторону, к BC , то образуется хвост из межузельных атомов.

Третий способ взаимодействия двух пересекающихся дислокаций — это их реакции, сопровождающиеся рождением новой дислокации. Этот процесс подробно рассматривается в следующей главе.

Задачи

7.1. Винтовая дислокация с вектором Бюргерса \mathbf{b} проходит через кристалл, встречая его переднюю и заднюю поверхности под углом 90° . Сохраняя свою ориентацию, она движется так, что ее концы описывают кольцевые пути, а вся линия дислокации описывает цилиндрическую поверхность. Какая деформация создается при n оборотах этой дислокации?

¹⁾ Английское слово «kink» переводит также как излом (на линии дислокации), уступ (на ступеньке на поверхности кристалла), сброс (в линии скольжения); см. словарь терминов по теории дефектов в кристаллах, рекомендованный Ленинградским семинаром по теории дислокаций [4*], а также дополнения в книгах [5*] и [8*], рекомендованных для дополнительного чтения. — Прим. ред.

7.2. Покажите, каким образом на чисто краевой дислокационной петле, такой, как на фиг. 7.11, могут образоваться витовые сегменты, когда конфигурация дислокации изменяется в результате скольжения. Покажите, кроме того, что краевая дислокационная петля может стать источником скольжения по любой плоскости, в которой лежит ее вектор Бюргера.

7.3. Краевая дислокация в кристалле NaCl параллельна $[001]$, а ее вектор Бюргера равен $\frac{1}{2} [110]$. Вычислите объем материала (на 1 см длины линии дислокации), который нужно добавить к краю экстраплоскости этой дислокации или убрать с него, если дислокация продвигается на 10^{-4} см в направлении $[100]$.

7.4. Краевая дислокация в кристалле NaCl параллельна $[001]$, а ее вектор Бюргера равен $\frac{1}{2} [110]$. Вычислите силу, с которой действует на дислокацию одноосное растягивающее напряжение, параллельное а) $[100]$, б) $[111]$.

7.5. Вектор Бюргера винтовой дислокации в кристалле AgCl равен $\frac{1}{2} [110]$. Если эта дислокация может скользить одинаково легко по любой плоскости, то по какой же из плоскостей произойдет скольжение под действием растягивающего напряжения, параллельного а) $[100]$, б) $[111]$?

7.6. Винтовая дислокация параллельна оси изотропного цилиндра радиусом R . Если поле напряжений задано уравнением (7.19), то существуют силы, действующие на торцевые поверхности этого цилиндра. Выведите выражение для пары сил, действующих на этот цилиндр. [Для свободного цилиндра поле напряжений задается формулой (7.19), не точно, так как должен быть еще один член, не существенный вблизи линии дислокации, соответствующий кручению цилиндра и нейтрализующий пару сил, рассчитанных только по (7.19).]

7.7. Из уравнений (7.21) или (7.22) и (5.63) найдите деформацию в точке непосредственно над или под краевой дислокацией ($x_1 = 0$). Вычислите всесторонние растяжения в точках, находящихся на $5b$ выше или ниже краевой дислокации в алюминии.

7.8. Начертите схему плоскости, нормальной краевой дислокации в анизотропной среде. Укажите на этой плоскости линии, на которых одна из компонент σ_{11} , σ_{22} или σ_{12} обращается в нуль (дислокация параллельна оси x_3 , а ее вектор Бюргера параллелен оси Ox_1). Укажите знаки напряжений в разных участках плоскости.

7.9. Рассмотрите винтовую дислокацию в г. ц. к.-кристалле, параллельную $[110]$. Покажите с помощью формулы (7.24), что на равных расстояниях от дислокации скалывающее напряжение на плоскости $(1\bar{1}0)$, проходящей через дислокацию, в A раз больше скалывающего напряжения на плоскости (001) , тоже проходящей через дислокацию; при этом $A = 2c_{44}/(c_{11} - c_{12})$.

7.10. Выведите выражение для ширины винтовой дислокации, расположенной на плоскости (001) параллельно $[110]$ в кристалле хлористого натрия. Считайте, что ко всем атомам вокруг дислокации применимо решение для смещений в упругом континууме, т. е. формула (7.24).

7.11. Кубический кристалл растягивают в направлении $[100]$. Его деформация создается краевыми дислокациями, параллельными $[001]$ и скользящими по плоскостям (110) и $(\bar{1}\bar{1}0)$. Если плотность этих дислокаций равна ρ , величина вектора Бюргера каждой из них b и их средняя скорость \bar{V} , определите скорость возрастания деформации растяжения кристалла [равную $(1/l)(dl/dt)$, где l — длина кристалла].

7.12. Проанализируйте взаимодействие между двумя краевыми дислокациями, линии которых параллельны друг другу, а векторы Бюргера ортогональны. Определите все положения равновесия по отношению к действующим силам и укажите, когда равновесие устойчивое, неустойчивое или безразличное.

7.13. Имеется две бесконечно длинные ортогональные винтовые дислокации с векторами Бюргера b_1 и b_2 . Рассчитайте величину всей силы, с которой вторая из дислокаций действует на первую.

7.14. В кристалле хлористого натрия растягивающее напряжение, параллельное [100], заставляет двигаться навстречу друг другу две ортогональные винтовые дислокации с векторами Бюргерса $\frac{1}{2}$ [110] и $\frac{1}{2}$ [$\bar{1}\bar{1}$ 0]. Покажите, что если дислокации продолжают двигаться под действием приложенного напряжения, то на каждой из них образуется ступенька, которая создает дефект упаковки типа внедрения.

7.15. Каково минимальное количество дислокаций с векторами Бюргерса, равными наименьшим векторам трансляций решетки, которые могут встретиться в дислокационном узле? Ответ дать для конкретных кристаллов: а) о. ц. к.-железа, б) алмаза, в) цинка, г) хлористого цезия. При каких условиях такой узел будет скользящим?

ЛИТЕРАТУРА

1. De Wit R., *Acta Met.*, **13**, 1210 (1965).
2. Weertman J., *Phil. Mag.*, **11**, 1217 (1965).
3. Eshelby J. D., Read W. T., Shockley W., *Acta Met.*, **1**, 251 (1953);
Chou Y. T., Eshelby J. D., *J. Mech. Phys. Solids*, **10**, 27 (1962).
- *. УФН, **64**, 789 (1958).

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ЧТЕНИЯ

1. Read W. T., *Dislocations in Crystals*, McGraw-Hill, 1953; имеется перевод: Рид В. Т., *Дислокации в кристаллах*, Металлургиздат, М., 1957.
2. Cottrell A. N., *Dislocations and Plastic Flow in Crystals*, Oxford, 1953; имеется перевод: Коттрелл А. Х., *Дислокации и пластическое течение в кристаллах*, Металлургиздат, М., 1958.
3. Weertman J., Weertman J. R., *Elementary Dislocation Theory*, Macmillan, 1964.
4. Eshelby J. D., Read W. T., Shockley W., *Anisotropic Elasticity with Applications to Dislocation Theory*, *Acta Met.*, **1**, 251 (1953).
- 5*. Ван-Бюрен Х. Г., *Дефекты в кристаллах*, ИЛ, 1960.
- 6*. Новиков И. И., *Дефекты кристаллической решетки металлов*, Metallurgizdat, М., 1968.
- 7*. Хирт Дж., Лоте И., *Теория дислокаций*, Атомиздат, М., 1972.
- 8*. Фридель Ж., *Дислокации*, изд-во «Мир», М., 1967.
- 9*. Кульман-Вильсдорф Д., *Дислокации*, в книге: *Физическое металловедение*, под ред. Р. Кана, т. 3, стр. 9—36, изд-во «Мир», М., 1968.
- 10*. Халл Д., *Введение в дислокации*, Атомиздат, М., 1968.

Дислокации в кристаллах

8.1. Упругая энергия дислокации

В упруго деформированной области вокруг линии дислокации сосредоточена значительная упругая энергия. Величина этой энергии на единицу объема всегда равна половине произведения модуля упругости на квадрат деформации [ср. с формулой (5.40)]. Так как деформация в данной точке пропорциональна величине вектора Бюргера дислокации b , полная упругая энергия будет пропорциональна b^2 . Абсолютную величину этой упругой энергии можно вычислить двумя способами.

По первому способу ищем энергию в малом элементе объема и интегрируем. Для винтовой дислокации интегрирование производится по цилиндрической оболочке радиусом r и толщиной dr , потому что скалывающее напряжение γ внутри такой оболочки постоянно [формула (7.18)]:

$$\gamma = b/2\pi r.$$

Предполагается, что среда упруго изотропная. Тогда упругая энергия на единицу длины равна

$$dE = (1/2\mu\gamma^2) 2\pi r dr, \quad (8.1)$$

а упругая энергия на единицу длины дислокации в области от радиуса ядра дислокации r_0 до радиуса R равна ¹⁾

$$E = \int_{r_0}^R (\mu b^2/4\pi r) dr$$

или

$$E = (\mu b^2/4\pi) \ln (R/r_0). \quad (8.2)$$

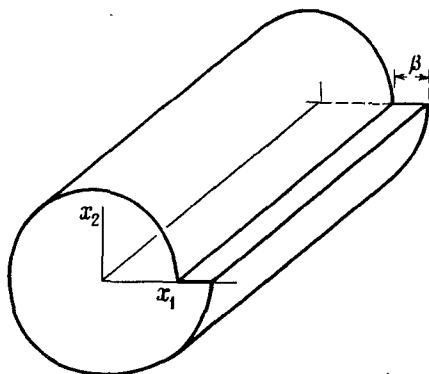
Упругую энергию краевой дислокации легче вычислить вторым способом. Создадим в первоначально недеформированном материале дислокацию: сначала произведем в материале надрез от поверхности до того места, где будет линия дислокации, а затем приложим к надрезу силы, которые вызовут относительное смещение двух

¹⁾ Строго говоря, в выражение (8.2) нужно вводить поправку на релаксацию напряжений на свободных концах цилиндрической поверхности. Но из-за недостоверности значения r_0 эта поправка несущественна.

его половин на величину b . Тогда работа этих сил должна равняться упругой энергии, сосредоточенной вокруг получившейся дислокации. По мере относительного смещения обеих сторон разреза вектор Бюргерса постепенно растет от нуля до b . Работа, которую надо затратить, чтобы увеличить вектор Бюргерса от β до $\beta + d\beta$, на единицу длины дислокации равна

$$dW = F(\beta) d\beta, \quad (8.3)$$

где $F(\beta)$ — сила, действующая на одну из сторон разреза в направлении β . Эта сила определяется полем напряжения дислокации



Фиг. 8.1. Разрез и смещение, приводящие к образованию краевой дислокации в сплошной среде.

на поверхности разреза. Для краевой дислокации, которая получится, если разрезать цилиндр радиусом R по плоскости скольжения (фиг. 8.1), эта сила равна

$$F = \int_{r_0}^R \sigma_{12} dx_1. \quad (8.4)$$

Преимущество этого метода, особенно при сложных полях напряжений, заключается в том, что здесь не надо интегрировать по объему, а учитываются только напряжения на плоскости. Из уравнений (7.22), подставляя $x_2 = 0$ и вектор Бюргерса, равный β , имеем

$$\sigma_{12} = \mu\beta/[2\pi(1-\nu)x_1], \quad (8.5)$$

откуда следует, что

$$F = [\mu\beta/2\pi(1-\nu)] \ln(R/r_0). \quad (8.6)$$

Упругая энергия на единицу длины получается равной

$$E = W = \int_0^b F d\beta, \quad (8.7)$$

или

$$E = [\mu b^2/4\pi (1 - \nu)] \ln (R/r_0). \quad (8.8)$$

В изотропной среде упругая энергия у краевой дислокации больше, чем у винтовой в $1/(1 - \nu)$ раз. Для алюминия $\nu = 0,34$, т. е. энергия краевой дислокации в 1,5 раза больше, чем винтовой; для вольфрама $\nu = 0,17$, т. е. отношение этих величин составляет всего лишь 1,2.

Деформация, создаваемая смешанной дислокацией, у которой вектор Бюргерса направлен под углом θ к линии дислокации, равна сумме деформаций, вызванных краевой и винтовой дислокациями с векторами Бюргерса $b \sin \theta$ и $b \cos \theta$ соответственно. Поэтому упругая энергия смешанной дислокации равняется

$$E = (Kb^2/4\pi) \ln (R/r_0), \quad (8.9)$$

где

$$K = [\mu/(1 - \nu)] \sin^2 \theta + \mu \cos^2 \theta.$$

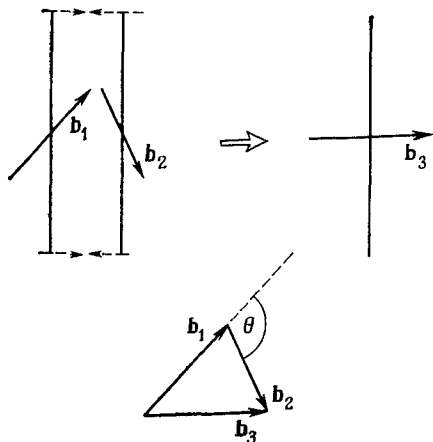
Чтобы грубо оценить абсолютную величину упругой энергии дислокации, достаточно рассмотреть выражение (8.2):

$$E = (\mu b^2/4\pi) \ln (R/r_0).$$

Трудность применения этой формулы заключается в том, что при увеличении R упругая энергия возрастает бесконечно. В реальном кристалле R ограничено поверхностью кристалла или, еще вероятнее, другими дислокациями. К счастью, величина E не очень чувствительна к тому, какое значение выбрано для R . Для алюминия, который в первом приближении можно считать упруго изотропным, $\mu = 2,8 \cdot 10^{11}$ дина \cdot см $^{-2}$, $b = 2,9 \cdot 10^{-8}$ см, $r_0 = 5b$. Упругая энергия дислокации на единицу длины оказывается равной $1,24 \cdot 10^{-4}$ эрг \cdot см $^{-1}$, если принять R равным 1 мкм, или $2,95 \cdot 10^{-4}$ эрг \cdot см $^{-1}$, если принять R равным 1 см. Значение 2 эрг \cdot см $^{-1}$ соответствует энергии в 3,6 эВ на элемент линии дислокации, равный по длине одному периоду решетки. Эта энергия достаточно велика, чтобы кристалл, содержащий дислокацию, никогда не находился в термодинамическом равновесии. Даже при высоких температурах энтропия, вводимая дислокацией, совсем немного уменьшает энергию кристалла, так что свободная энергия кристалла обычного размера, содержащего дислокации, всегда больше, чем у идеального кристалла.

Чтобы получить полную энергию дислокации, надо к той энергии, которая вычисляется по уравнению (8.9), добавить энергию, сосредоточенную внутри ядра дислокации. Энергию ядра дислокации можно приближенно оценить разными способами, но все они дают одинаковый порядок величины, а именно $\mu b^3/10$ на период решетки. Для алюминия это будет 0,7 эВ на период решетки, т. е. гораздо меньше, чем энергия, сосредоточенная

вне ядра дислокации. В реальном кристалле существенный вклад энергии ядра определяется не столько ее величиной, сколько тем, что эта величина меняется, когда дислокация движется через кристалл. Если энергия ядра резко возрастает, когда дислокация уходит из положения минимума энергии, то ощущается сильное сопротивление ее движению (разд. 7.5). Две дислокации всегда могут объединиться, образовав одну, как показано на фиг. 8.2. С точки зрения геометрии это всегда возможно. Если такая реакция слияния происходит, то вектор Бюргерса результирующей



Фиг. 8.2. К объяснению правила Франка.

дислокации \mathbf{b}_3 представляет собой просто геометрическую сумму векторов Бюргерса дислокаций, вступающих в реакцию

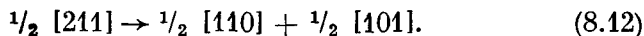
$$\mathbf{b}_3 = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2. \quad (8.10)$$

Чтобы определить, будет ли такая реакция энергетически выгодной, нужно сравнить энергию кристалла, содержащего дислокацию с вектором Бюргерса \mathbf{b}_3 , и энергию кристалла, содержащего две удаленные друг от друга дислокации с векторами Бюргерса \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 . Первую из них можно записать как $K_3 b_3^2$, а последние — как $K_1 b_1^2$ и $K_2 b_2^2$. Хотя из уравнения (8.9) видно, что константы K_1 , K_2 и K_3 зависят от углов между линиями дислокаций и их векторами Бюргерса, все же разность между $K_3 b_3^2$ и $(K_1 b_1^2 + K_2 b_2^2)$ обычно столь велика, что знак разности $K_3 b_3^2 - (K_1 b_1^2 + K_2 b_2^2)$ не изменится, если принять $K_1 = K_2 = K_3$. Поэтому очевидно, что достаточно проверить знак $b_3^2 - (b_1^2 + b_2^2)$, чтобы определить, приведет ли реакция слияния двух дислокаций с образованием третьей к уменьшению энергии. Упругая энергия кристалла уменьшится, если

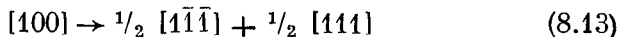
$$b_3^2 < (b_1^2 + b_2^2) \quad (8.11)$$

Это условие, называемое *правилом Франка*, позволяет просто проверить, возможна ли реакция слияния двух дислокаций. Правило Франка можно выразить и через угол θ между двумя векторами \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 (фиг. 8.2). Если $\theta < 90^\circ$, реакция не произойдет, а если $\theta > 90^\circ$, дислокации будут притягиваться и между ними произойдет реакция. Этим же правилом можно воспользоваться для решения обратного вопроса: будет ли устойчивой дислокация с вектором Бюргерса \mathbf{b}_3 ? Если имеются два вектора решетки, сумма которых равна \mathbf{b}_3 , а угол между ними $\theta < 90^\circ$, то может произойти реакция диссоциации, т. е. дислокация разделится на две дислокации с векторами Бюргерса, равными таким векторам. Это правило лучше всего выполняется, когда θ сильно отличается от 90° .

Из правила устойчивости по Франку следует, что большинство дислокаций, у которых векторы Бюргерса не равны кратчайшим векторам решетки, оказываются неустойчивыми. Например, дислокация с вектором Бюргерса $\frac{1}{2} \langle 211 \rangle$ в г. ц. к.-кристалле будет распадаться на две дислокации типа $\frac{1}{2} \langle 011 \rangle$:



Тем не менее иногда оказывается, что дислокация, у которой вектор Бюргерса больше, чем кратчайший вектор решетки, не может самопроизвольно распадаться. Примером может служить дислокация $[100]$ в о. ц. к.-кристалле. Хотя у дислокации $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$ энергия меньше, но из правила Франка следует, что реакции



не произойдет, и другие геометрически возможные реакции тоже окажутся энергетически невыгодными.

В табл. 8.1 приведены векторы Бюргерса стабильных дислокаций в различных решетках. Сюда не включены недостоверные случаи, когда вектор Бюргерса является суммой двух ортогональных векторов ($\theta = 90^\circ$).

Тот факт, что дислокации с наименьшими векторами Бюргерса обладают наименьшей упругой энергией, хорошо согласуется с тем, что наблюдаемое направление скольжения всегда оказывается кратчайшим вектором трансляции в решетке кристалла (табл. 6.4). Интересно выяснить, будут ли наблюдаемые плоскости скольжения отвечать плоскостям, на которых дислокации с минимальным вектором Бюргерса имеют наименьшую упругую энергию, если принять во внимание упругую анизотропию кристалла. Для дислокации в анизотропной среде упругая энергия на единицу длины равна

$$E = (K' b^2 / 4\pi) \ln (R/r_0), \quad (8.14)$$

Устойчивые дислокации в некоторых решетках Браве

Решетка	Вектор Бюргерса	Число эквивалентных векторов	Квадрат вектора Бюргерса
Простая кубическая	$\langle 100 \rangle$	6	a^2
О. ц. к.	$1/2 \langle 111 \rangle$	8	$3a^2/4$
	$\langle 100 \rangle$	6	a^2
Г. ц. к.	$1/2 \langle 110 \rangle$	12	$a^2/2$
Гексагональная	$1/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle$	6	a^2
	$\langle 0001 \rangle$	2	c^2
Ромбоэдрическая, $\alpha < 90^\circ$	$\langle 100 \rangle$	6	a^2
	$\langle 1\bar{1}0 \rangle$	6	$4a^2 \sin^2(\alpha/2)$
	$\langle 1\bar{1}1 \rangle$	6	$a^2 [1 + 4 \sin^2(\alpha/2)]$
Ромбоэдрическая, $\alpha > 90^\circ$	$\langle 100 \rangle$	6	a^2
	$\langle 110 \rangle$	6	$4a^2 \cos^2(\alpha/2)$
	$\langle 111 \rangle$	2	$9a^2 [1 - (4/3) \sin^2(\alpha/2)]$
Простая тетрагональная	$\langle 100 \rangle$	4	a^2
	$\langle 001 \rangle$	2	c^2
Объемноцентрированная тетрагональная, $c/a < \sqrt{2}$	$1/2 \langle 111 \rangle$	8	$a^2/2 + c^2/4$
	$\langle 100 \rangle$	4	a^2
	$\langle 001 \rangle$	2	c^2
Объемноцентрированная тетрагональная, $c/a > \sqrt{2}$	$1/2 \langle 111 \rangle$	8	$a^2/2 + c^2/4$
	$\langle 100 \rangle$	4	a^2

где K' зависит от постоянных упругости. Формен [1] вычислил множитель K' для ряда случаев. Например, в меди у краевой дислокации с вектором Бюргерса $1/2 \langle 110 \rangle$, когда она находится в плоскости $\{110\}$, упругая энергия меньше ($K = 0,645 \cdot 10^{12}$ дин·см⁻²), чем когда она лежит в плоскости $\{111\}$ ($K' = 0,745 \cdot 10^{12}$ дин·см⁻²). Так как наблюдаемой плоскостью скольжения является $\{111\}$, действующую плоскость скольжения определяет, очевидно, не только упругая энергия. Для объяснения выбора плоскости скольжения нужно принять во внимание атомную структуру кристалла (см. также разд. 6.1).

Из-за того что линия дислокации обладает некоторой энергией на единицу длины, она стремится уменьшить свою длину; иначе говоря, вдоль линии дислокации действует некое натяжение.

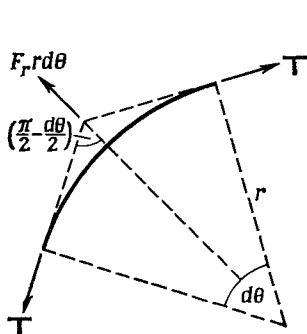
Точно определить это линейное натяжение нелегко, потому что упругая энергия не концентрируется на самой линии дислокации, а содержится в ее дальнедействующем поле напряжений. Рассмотрим круглую дислокационную петлю, которая стремится сократить свой размер. Чтобы петля не стянулась, нужно приложить радиальную силу F_r , которая задается условием, что изменение энергии при бесконечно малом сокращении петли должно стремиться к нулю. Поэтому

$$F_r 2\pi r dr = E 2\pi dr \quad (8.15)$$

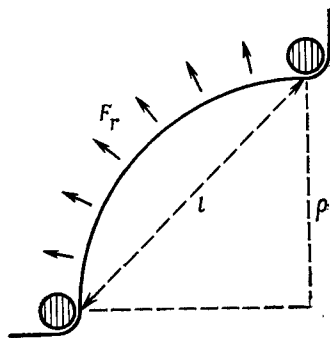
или

$$F_r = E/r,$$

где E — энергия на единицу длины дислокационной петли. Так как деформации, вызванные противоположными сторонами петли,



Фиг. 8.3. К расчету силы линейного натяжения дислокации.



Фиг. 8.4. К расчету напряжений проталкивания дислокации между препятствиями.

взаимно уничтожаются, на расстояниях, больших по сравнению с r_1 , мы можем приблизительно определить E , подставляя $R = r$ в уравнение (8.2):

$$E \simeq (\mu b^2/4\pi) \ln (r/r_0). \quad (8.16)$$

Рассматривая малый сегмент нашей петли (фиг. 8.3), мы видим, что для сохранения его в равновесии нужно приложить к концам сегмента силы натяжения T , которые можно определить, приравняв нулю сумму радиальных сил

$$2T \sin (d\theta/2) = F_r r d\theta. \quad (8.17)$$

Из равенств (8.15) и (8.17) следует, что

$$T = E. \quad (8.18)$$

Воспользовавшись формулой (8.16), можем обобщить этот результат: линейное натяжение дислокации, изогнутой на радиус

кривизны ρ , приближенно равно

$$T \simeq (\mu b^2/4\pi) \ln(\rho/\rho_0). \quad (8.19)$$

Подставляя в (8.19) $\rho \simeq 500r_0$, получаем значение $T = 0,5\mu b^2$, которым часто пользуются для грубой оценки величины линейного натяжения дислокации.

На фиг. 8.4 показан расчет напряжений, необходимых для проталкивания дислокации между препятствиями, расположенными на расстояниях l друг от друга. Касательное напряжение τ на плоскости скольжения, параллельное вектору Бюргерса, создает радиальные силы, действующие на дислокацию. Из формулы (7.4) имеем

$$F_r = \tau b. \quad (8.20)$$

Из равенств (8.15) и (8.18), если радиус кривизны дислокации равен ρ , получаем

$$\tau = T/b\rho \quad (8.21)$$

или, подставляя $T = 0,5\mu b^2$,

$$\tau = 0,5\mu b^2/\rho. \quad (8.22)$$

Минимальное значение ρ в случае, когда линия дислокации изогнута как полуокружность, равно $0,5l$. Поэтому напряжение, необходимое для того, чтобы дислокация могла протолкнуться через препятствия, равно

$$\tau \simeq \mu b/l. \quad (8.23)$$

Это же напряжение требуется для ввода в действие источника Франка — Рида, у которого расстояние между закрепленными точками равно l .

Из формулы (8.19) можно получить интересные следствия, если учесть, что упругая энергия дислокации меняется в зависимости от угла θ между линией дислокации и ее вектором Бюргерса. [Для изотропной среды это изменение дается соотношением (8.9).] Поэтому если рассматривать равновесие изолированного сегмента дислокации, то, чтобы воспрепятствовать его сокращению, надо не только к концам сегмента прикладывать силу E , но, кроме того, должна быть приложена пара сил Γ (на единицу длины), которая не дает сегменту повернуться, стремясь к ориентации с наименьшей энергией.

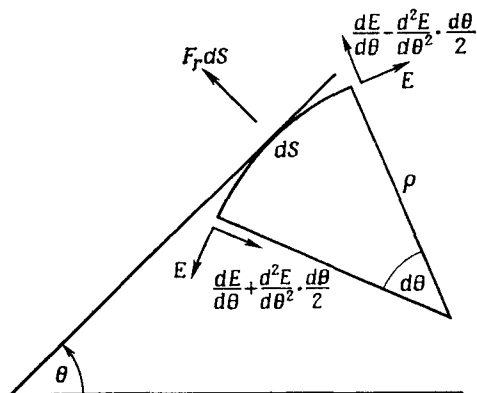
Значение момента пары сил Γ можно найти, рассматривая поворот дислокационного сегмента на бесконечно малый угол $d\theta$ от равновесного положения. Полагая изменение энергии равным нулю, имеем

$$\Gamma d\theta - dE = 0$$

или

$$\Gamma = dE/d\theta. \quad (8.24)$$

Если дислокация изгибается на бесконечно малый угол $d\theta$, действующая на нее пара сил меняется на $(d^2E/d\theta^2) d\theta$ в расчете на единицу длины линии дислокации. В результате, как видно из фиг. 8.5, на концы изогнутого сегмента действуют неуравно-



Фиг. 8.5. Силы, действующие на изогнутый сегмент дислокации.

вешивающиеся радиальные силы и суммарная радиальная сила на единицу длины, необходимая для того, чтобы распрямить дислокацию, получается равной

$$F_r ds = E d\theta + (d^2E/d\theta^2) d\theta$$

или

$$F_r = E/\rho + (1/\rho) (d^2E/d\theta^2). \quad (8.25)$$

Если линейное натяжение T задано равенством

$$F_r = T/\rho, \quad (8.26)$$

то из соотношения (8.25) получим

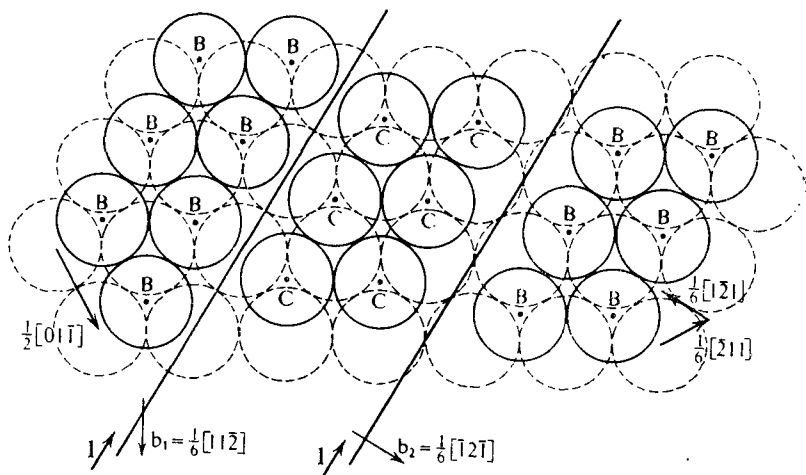
$$T = E + (d^2E/d\theta^2). \quad (8.27)$$

Из подстановки (8.9) в (8.27) вытекает, что винтовая дислокация оказывается более жесткой, чем краевая, хотя у краевой упругая энергия значительно больше. Физический смысл этого заключается в том, что при изгибе винтовой дислокации у нее появляются краевые компоненты, т. е. относительно высокая энергия. Например, в алюминии винтовая дислокация в четыре раза жестче, чем краевая.

8.2. Дефекты упаковки и частичные дислокации

До сих пор мы считали, что наименьшими векторами Бюргерса в кристаллах, которыми могут обладать дислокации, являются только кратчайшие векторы трансляций решетки. Хотя такие дислокации могли бы понизить свою упругую энергию путем

реакции расщепления на две дислокации с меньшими векторами Бюргера, но при этом в структуре кристалла возникнет дефект, у которого в общем случае упругая энергия велика. Однако в некоторых частных случаях энергия такого дефекта относительно мала. Тогда дислокация и в самом деле расщепляется на две дислокации, которые, разделяясь и раздвигаясь, оставляют между собой плоский дефект. Такие дислокации называются *частичными*. Взаимное отталкивание частичных дислокаций, вызванное их полями напряжений, убывает по мере того, как они удаляются друг от друга, а сила притяжения, вызванная поверхностным



Ф и г. 8.6. Дислокация на плоскости $\{111\}$ г. ц. к.-металла, расщепившаяся на две частичные дислокации Шокли.

натяжением плоского дефекта, остается постоянной. Поэтому в конце концов дислокации останавливаются на некотором равновесном расстоянии, где уравниваются силы притяжения и силы отталкивания.

Установлено, что дислокации типа $\langle 110 \rangle$ в некоторых г. ц. к.-металлах разделяются на частичные дислокации в плоскости скольжения $\{111\}$. Дефект, находящийся между этими частичными дислокациями, представляет собой нарушение последовательности упаковки плоскостей $\{111\}$, причем относительные положения атомов, являющихся ближайшими соседями, не меняются. Образование такого *дефекта упаковки* лучше всего показать на модели из слоев плотно упакованных шаров, положенных один на другой (разд. 3.2). Если верхний слой шаров сдвинуть на $a/6 \langle 211 \rangle$ относительно нижнего, то возникает так называемый *дефект упаковки типа внедрения* (фиг. 8.6). Например, если

второй блок ABC в последовательности $ABCABC$ соскальзывает по отношению к первому, то получается последовательность $ABCBCA\dots$. В области дефекта последовательность слоев теперь будет $BCBC$, т. е. образуется прослойка плотно упакованной гексагональной структуры. Такой дефект получается, когда дислокация $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$ расщепляется на две дислокации $\frac{1}{6} \langle 211 \rangle$, которые называются *частичными дислокациями Шокли*:

$$\frac{1}{2} [011] \rightarrow \frac{1}{6} [11\bar{2}] + \frac{1}{6} [\bar{1}2\bar{1}]. \quad (8.28)$$

На фиг. 8.6 показан узор расположения атомов в плоскости скольжения (111) около 60-градусной дислокации с вектором Бюргера $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$, которая разделилась на две частичные дислокации Шокли. (Для простоты чертежа частичные дислокации изображены очень узкими; в реальном кристалле они должны быть шире.)

Расстояние, на которое разошлись частичные дислокации Шокли, зависит от энергии γ дефекта упаковки между ними; эта энергия рассчитывается на единицу площади. Дефект упаковки стягивает частичные дислокации силой γ на единицу длины дислокации, так что равновесное расстояние r определяется условием

$$G/r = \gamma, \quad (8.29)$$

из которого можно вычислить фактор упругого отталкивания. Если считать среду упруго изотропной, то винтовая компонента первой частичной дислокации $b_1 \cos \theta_1$ создает на плоскости скольжения тангенциальное напряжение

$$\sigma_{23} = (\mu b_1 \cos \theta_1) / 2\pi r, \quad (8.30)$$

причем ось Ox_2 нормальна к плоскости скольжения, а ось Ox_3 параллельна линии дислокации. Согласно уравнению (7.22), краевая компонента той же дислокации создает тангенциальное напряжение, равное

$$\sigma_{12} = (\mu b_1 \sin \theta_1) / [2\pi(1 - \nu) r]. \quad (8.31)$$

Компонента усилия, действующего в плоскости скольжения в направлении вектора Бюргера второй частичной дислокации, равна¹⁾

$$\tau = \sigma_{23} \cos \theta_2 + \sigma_{12} \sin \theta_2. \quad (8.32)$$

Как показано в разд. 7.3 предыдущей главы, $G = \tau b_2$, поэтому

$$G = [(\mu b_1 b_2) / 2\pi] [\cos \theta_1 \cos \theta_2 + (\sin \theta_1 \sin \theta_2) / (1 - \nu)]. \quad (8.33)$$

¹⁾ Необходимо обратить внимание на то, чтобы углы θ_1 и θ_2 между линиями частичных дислокаций и их векторами Бюргера отсчитывались в одном и том же направлении.

Подставляя в это соотношение типичные значения констант, получаем, что частичные дислокации расходятся на расстояние порядка 100 \AA , только если энергия дефекта упаковки не превышает $\sim 10 \text{ эрг}\cdot\text{см}^{-2}$. У большинства г. ц. к.-металлов и сплавов энергия дефекта упаковки выше, чем это значение, поэтому расстояние между частичными дислокациями в них нельзя разрешить даже с помощью электронного микроскопа.

Следующие разделы этой главы посвящены описанию дислокаций в конкретных кристаллических структурах.

8.3. Дислокации в г.ц.к.-металлах

В г. ц. к.-металлах направлением скольжения служит $\langle 110 \rangle$, потому что кратчайший вектор решетки равен $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$. Плоскость скольжения $\{111\}$ — это плоскость, на которой «полная» дислокация с вектором Бюргерса $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$ может разделиться на две частичные дислокации Шокли, как показано в разд. 8.2. Ширина расщепления двух частичных дислокаций определяется энергией дефекта упаковки между ними. Чем меньше энергия дефекта упаковки, тем дальше расходятся частичные дислокации и тем строже должно быть связано скольжение с плоскостью $\{111\}$. Поэтому энергия дефекта упаковки является очень важной физической характеристикой; к сожалению, точное измерение ее крайне сложно. Некоторые значения энергии дефекта упаковки приведены в табл. 8.2.

Таблица 8.2

Энергии дефектов упаковки
г. ц. к.-металлов

Металл	Энергия дефекта упаковки, $\text{эрг}\cdot\text{см}^{-2}$	Источник
Ag	21	[2]
Al	135	[3]
Au	52	[4]
Cu	85	[5]
Ni	240	[3]

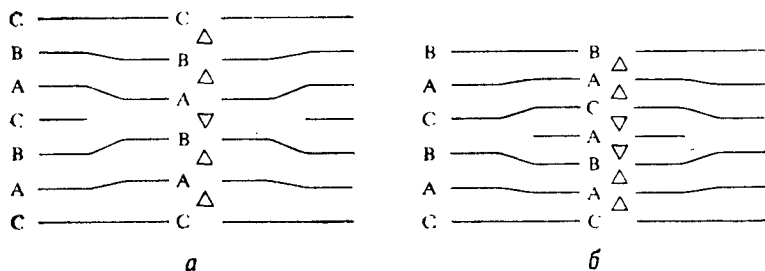
Образование дефекта упаковки при скольжении лучше всего показать на модели жестких шаров (фиг. 8.6). На этой модели видно, что самый легкий способ скольжения — это зигзагообразный путь от лунки к лунке по поверхности $\{111\}$ вдоль направленный $\langle 112 \rangle$ в ту или другую сторону; при этом перекатывание одного шара по другому наименьшее: смещения вдоль $\langle 112 \rangle$

попеременно создают или удаляют дефект упаковки. Рассматривая эту модель, можно прийти к неправильному заключению, что на плоскостях $\{111\}$ может существовать лишь один тип дефектов упаковки. В частности, на первый взгляд кажется, что невозможен дефект упаковки, который получится, если поменять местами две частичные дислокации на фиг. 8.6, потому что тогда при движении лидирующей дислокации получилась бы последовательность $A - A$ с большим перекатыванием шаров. Ошибочность этого заключения станет ясной, если распространить необходимые смещения на две последовательные плоскости $\{111\}$. Например, если начать в идеальном кристалле от позиции дислокации слева на фиг. 8.6, то смещение на $\frac{1}{6} [211]$ всех шаров над нижним слоем на плоскости $\{111\}$ вправо от этой позиции, а затем смещение на $\frac{1}{6} [121]$ всех шаров над следующим слоем $\{111\}$ создают в целом смещение $\frac{1}{6} [112]$, не нарушая соотношений между ближайшими соседями. Частичная дислокация формально состоит из двух частичных дислокаций Шокли $\frac{1}{6} [211]$ и $\frac{1}{6} [121]$ на соседних плоскостях, но от единичной дислокации Шокли она отличается только по структуре своего ядра.

Поэтому, распространяя смещения на две плоскости, можно сделать частичную дислокацию Шокли $\frac{1}{6} [112]$ лидирующей частичной дислокацией для скольжения слева направо на фиг. 8.6. Если порядок чередования частичных дислокаций меняется, происходит именно то, что эти дислокации оказываются разделенными «двойным» дефектом упаковки, так называемым *дефектом типа вычитания*. Энергия этого дефекта упаковки должна быть несколько выше, чем энергия дефекта упаковки типа внедрения (единичного). Значит, можно полагать, что форма расщепления, показанная на фиг. 8.6, будет встречаться чаще.

Структуры дефектов упаковки типа внедрения и типа вычитания удобно различать с помощью обозначений, введенных Франком. Если плотно упакованная плоскость расположена над нижней плоскостью как пара в последовательности $ABC \dots$, то упаковку этой плоскости обозначают треугольником Δ . Если же плоскость упакована так, что к лежащей под ней плоскости она относится как пара в последовательности $BAC \dots$, то ее упаковку обозначают перевернутым треугольником ∇ (читается «набла»). Эти символы взяты из последовательности укладки шаров; они показывают ориентировку лунок между шарами, на которые укладываются шары следующего слоя. В этих обозначениях г. ц. к.-структура записывается как $\Delta \Delta \Delta \Delta$, а г. п. у.-структура — как $\Delta \nabla \Delta \nabla$. Дефект упаковки типа внедрения обозначается как $\Delta \Delta \nabla \Delta \Delta \Delta$, а дефект упаковки типа вычитания — как $\Delta \Delta \nabla \nabla \Delta \Delta$; тем самым подчеркивается, что дефект вычитания эквивалентен двум дефектам типа внедрения на соседних плоскостях.

Дефект упаковки можно получить не только путем скольжения по плотно упакованным плоскостям. Из фиг. 8.7, а видно, что дефект упаковки типа внедрения получится, если удалить часть слоя атомов $\{111\}$, так что образовавшаяся щель сразу захлопывается без сдвига, параллельного плоскости $\{111\}$. На самом деле это может произойти, когда избыточные вакансии, собираясь на каком-то участке экстраплоскостей $\{111\}$, порождают дефект упаковки типа вычитания, как показано на фиг. 8.7, б. Оба дефекта упаковки на фиг. 8.7 ограничены частичными дислокациями, у которых векторы Бюргера нормальны плоскостям



Ф и г. 8.7.

а — вакансионная петля с дефектом упаковки в г.д.к.-металле [показаны следы плоскостей (111) в плоскости, нормальной к петле]; б — петля из избыточных атомов.

$\{111\}$, а по величине равны расстояниям между этими плоскостями, т. е. $\frac{1}{3} \langle 111 \rangle$. В отличие от частичных дислокаций Шокли эти частичные дислокации могут скользить только по поверхностям, нормальным обычным плоскостям скольжения $\{111\}$; если такое скольжение происходит, то скользящая частичная дислокация оставляет за собой дефект упаковки с высокой энергией. Такие дислокации называются *частичными дислокациями Франка* или, из-за их неспособности к движению, *сидячими дислокациями Франка*.

Хотя дефект упаковки должен быть ограничен частичными дислокациями или же должен выходить на поверхность, теперь совершенно очевидно, что вектор Бюргера частичной дислокации определяется не только типом дефекта упаковки. В данном случае к вектору Бюргера частичной дислокации можно добавить любой вектор решетки, что не изменит дефект. Например, дефект упаковки типа внедрения на плоскости (111), ограниченный частичной дислокацией Шокли $\frac{1}{6} [11\bar{2}]$, с таким же успехом может быть ограничен двумя другими частичными дислокациями Шокли: $\frac{1}{6} [\bar{2}11]$ или $\frac{1}{6} [1\bar{2}1]$, т. е.

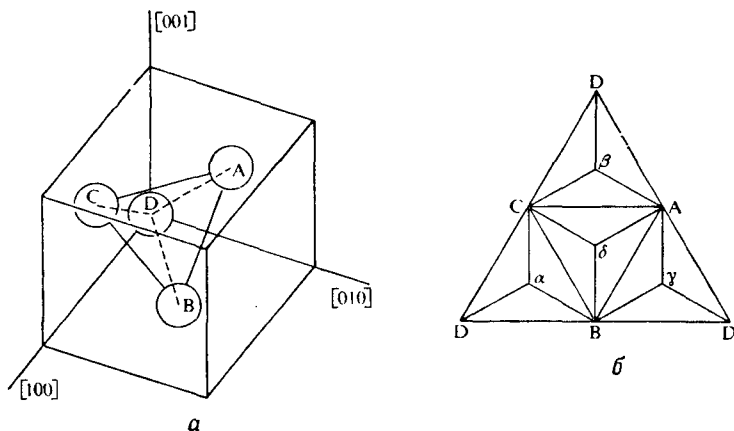
$$\frac{1}{6} [\bar{2}11] = \frac{1}{6} [11\bar{2}] + \frac{1}{2} [\bar{1}01], \quad (8.34)$$

$$\frac{1}{6} [1\bar{2}1] = \frac{1}{6} [11\bar{2}] + \frac{1}{2} [0\bar{1}1] \quad (8.35)$$

или же частичной дислокацией Франка с вектором Бюргерса $\frac{1}{3} [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$:

$$\frac{1}{3} [\bar{1}\bar{1}\bar{1}] = \frac{1}{6} [11\bar{2}] + \frac{1}{2} [\bar{1}\bar{1}0]. \quad (8.36)$$

Прежде чем приступить к рассмотрению реакций между дислокациями в г. ц. к.-кристаллах металлов, полезно ввести представление о так называемом *тетраэдре Томпсона*. Этот тетраэдр дает возможность наглядно изобразить разные векторы Бюргерса на четырех плоскостях $\{111\}$, которые выбраны так, что они образуют четыре грани тетраэдра. На фиг. 8.8, а показан этот



Ф и г. 8.8. Тетраэдр Томпсона [6].

тетраэдр, а на фиг. 8.8, б — развертка граней тетраэдра, начинающаяся от вершины *D*. Обозначение разных точек, взятое из статьи Томпсона, является общепринятым ¹⁾. Ребро тетраэдра, например *CB*, соответствует вектору Бюргерса полной дислокации $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$. Векторы, обозначаемые сочетанием греческих и латинских букв, например δC , соответствуют частичным дислокациям Шокли, если латинские и греческие буквы не одинаковы; если же они одинаковы, то, например, γC означает частичную дислокацию Франка.

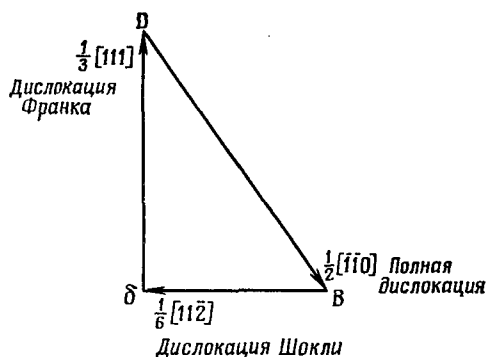
Реакция между частичной дислокацией Франка, частичной дислокацией Шокли и полной дислокацией, описываемая формулой (8.36), в обозначениях Томпсона записывается как

$$\delta D = \delta B + BD.$$

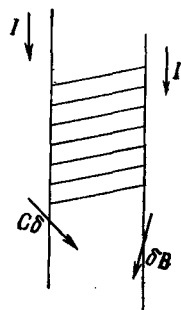
Соотношение между векторами Бюргерса этих трех дислокаций показано на фиг. 8.9. Эта реакция очень интересна: дефект упаковки

¹⁾ Можно также пользоваться зеркальным изображением тетраэдра, показанного на фиг. 8.8, а.

ки внутри вакансионной петли на фиг. 8.7, а можно удалить, если дислокация Франка расщепляется, согласно (8.36), а затем ее шокли-компонента стягивается и уничтожается путем скольжения в плоскости петли. Тем самым дефект упаковки уничтожается за счет возрастания упругой энергии, вызванного ростом вектора Бюргера этой петли от $\frac{1}{3} [111]$ до $\frac{1}{2} [\bar{1}\bar{1}0]$. Сравнивая энергии петли с дефектом упаковки и петли без дефекта, нужно принять во внимание сокращение бездефектной петли, когда она путем скольжения переходит в плоскость $(\bar{1}\bar{1}0)$, нормальную к ее вектору Бюргера. Бездефектная петля более выгодна, если



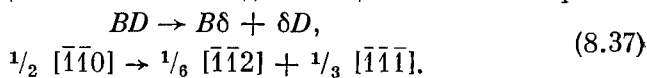
Фиг. 8.9. Соотношение между векторами Бюргера при расщеплении полной дислокации в г. ц. к.-решетке на частичную дислокацию Шокли и частичную дислокацию Франка.



Фиг. 7.10. Расщепление полной дислокации на частичные; обозначения Томпсона.

энергия дефекта упаковки высока или если сама петля велика, потому что энергия, выигрываемая при разрушении петли, пропорциональна площади бездефектной петли, между тем как избыточная упругая энергия приблизительно пропорциональна ее периметру.

Другое проявление этой реакции — возможная диссоциация полной дислокации на частичные дислокации Шокли и Франка:



Поскольку векторы Бюргера этих двух частичных дислокаций ортогональны и поскольку между ними должен был бы образоваться дефект упаковки, такая диссоциация обычно не возникает. Она может происходить в особых случаях, например когда шокли-компоненты от двух членов полного дислокационного диполя взаимно аннигилируют, оставляя за собой диполь Франка. Эта реакция является просто обратной реакцией уничтожения дефекта упаковки в призматической петле, о чем шла речь выше.

Чтобы определить знак вектора Бюргерса дислокации, записанной в обозначениях Томпсона, необходимо ввести условие, по которому смещение путем скольжения, обозначаемому, например, δC , приписывается определенный знак. Введем это условие.

Знак смещения, обозначенного δC , определяется следующим образом. Наблюдатель смотрит на плоскость скольжения ABC из положения вне тетраэдра, т. е. так, что вершина D уходит от него (фиг. 8.8, *a*). Тогда атомы над плоскостью скольжения ABC , ближайшей к наблюдателю, смещаются на δC . Обращаясь к структуре кристалла, видим, что сдвиги δA , δB и δC создают дефект типа внедрения, а сдвиги $A\delta$, $B\delta$ и $C\delta$ — дефект типа вычитания. Реакцию диссоциации полной дислокации CB на частичные дислокации Шокли на грани ABC можно записать как



Векторы Бюргерса частичных дислокаций в томпсоновских обозначениях будут тогда такими, как на фиг. 8.10, если соблюдать условие правого обхода FS/RH ¹⁾. Векторы линий дислокаций выбраны так, что они направлены на странице сверху вниз, т. е. наблюдатель смотрит в сторону отрицательных значений; это сделано для того, чтобы фигура соответствовала логике записи выражения (8.38). Если изменить порядок частичных дислокаций на обратный, то между ними образуется дефект типа вычитания.

В дислокационных реакциях важен порядок чередования частичных дислокаций Шокли. Единственная реакция между полными дислокациями, которая достоверно приводит к уменьшению энергии, это реакция типа

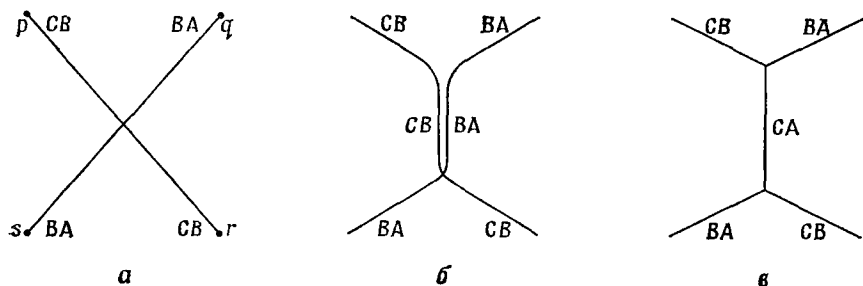


Если дислокации с векторами Бюргерса BA и CB встречаются на их общей плоскости скольжения, то они вступают в реакцию на некотором протяжении, так что образуется два дислокационных узла (фиг. 8.11). Из фиг. 8.12 видно, что структуры таких узлов различны вследствие последовательности чередования частичных дислокаций Шокли (предполагается, что имеются только дефекты типа внедрения). Например, в нержавеющей стали наблюдалось чередование растянутых и стянутых узлов.

Реакция типа (8.39) может произойти и в том случае, когда дислокации находятся в разных плоскостях скольжения. Пусть, например, дислокации CB и BA лежат в плоскостях, соответственно противоположащих вершинам A и C , а линии этих дислокаций параллельны пересечению плоскостей BD и дислокации движутся навстречу друг другу. Подобная ситуация может наблюдаться на поздних стадиях деформации растяжения кристалла

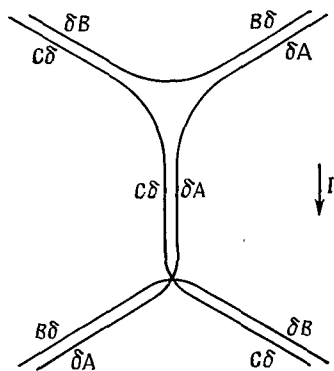
¹⁾ См. примечание редактора на стр. 239.— *Прим. ред.*

при пересечении первичного и сопряженного скольжения (раздел 6.4). Если эти две дислокации расщепляются на частичные дислокации Шокли, как показано на фиг. 8.13, и если перед тем,



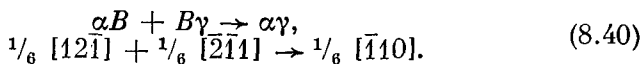
Ф и г. 8.11. Реакция двух дислокаций на их общей плоскости скольжения. Предполагается, что дислокации застопорены в точках p , q , r и s .

как они сойдутся, их дефекты упаковки образуют между собой острый угол (70°), то головные частичные дислокации αB и $B\gamma$



Ф и г. 8.12. Та же реакция, что на фиг. 8.11, но с расщеплением на частичные дислокации.

будут вступать в реакцию, образуя новую частичную дислокацию вдоль BD :

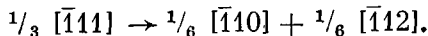


Краевая дислокация $\alpha\gamma$ называется *вершинной дислокацией*; она соединяет два дефекта упаковки на уступе подобно тому, как металлический прут удерживает ковер на соседних ступеньках лестницы¹⁾. Вся эта конфигурация называется *барьером*

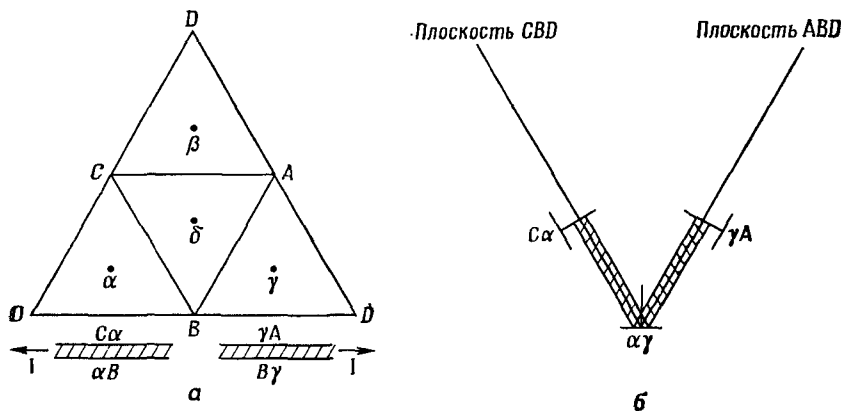
¹⁾ Английское название вершинной дислокации *stair-rod dislocation* буквально означает металлический прут, удерживающий ковер на ступеньках лестницы.— *Прим. ред.*

Ломер — Коттрелла. Она не может скользить и поэтому представляет существенное препятствие для других дислокаций.

Вершинная дислокация типа $\alpha\gamma$ может еще получиться при диссоциации частичной дислокации Фрэнка:



Эта реакция позволяет объяснить, как образуются маленькие тетраэдры дефектов упаковки, которые наблюдаются, если золото закалить от температур, близких к его температуре плавления,

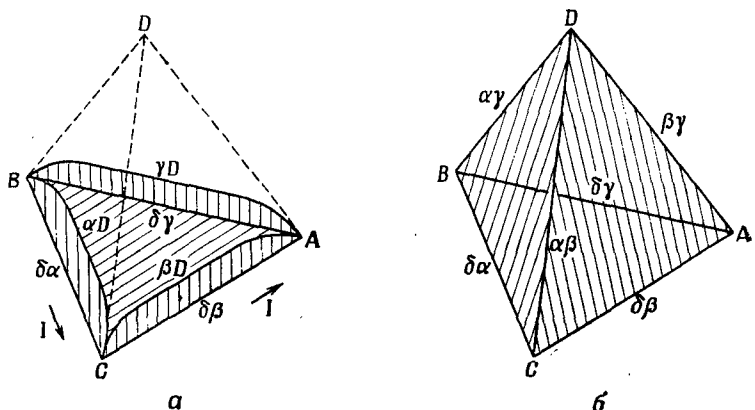


Ф и г. 8.13. Барьер Ломер — Коттрелла.

до комнатной температуры, а затем подвергать старению при 100°C ¹⁾. Допустим, что избыточные вакансии, которые образовались при закалке, сначала образуют петлю Фрэнка, как на фиг. 8.7, а. Пусть петля будет треугольной, а ее стороны АВ, ВС, СА направлены вдоль $\langle 110 \rangle$. Каждая из этих сторон может затем диссоциировать по разным плоскостям $\{111\}$, как показано на фиг. 8.14. Образующиеся при этом дислокации Шокли притягиваются друг к другу и вступают в реакцию на пересечениях плоскостей $\{111\}$, образуя вершинные дислокации. В конечном результате образуется тетраэдр, грани которого являются дефектами упаковки типа внедрения, а ребра — вершинными дислокациями. Каждое ребро этого тетраэдра представляет собой как раз двугранный угол барьера Ломер — Коттрелла. Образование такого тетраэдра понижает упругую энергию за счет добавочной энергии дефектов упаковки.

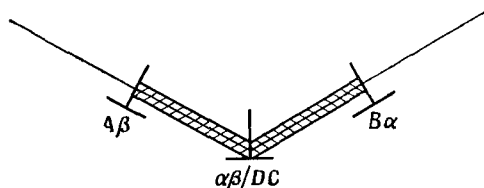
¹⁾ Старение — это выдержка при невысокой температуре в течение времени, достаточного для того, чтобы в структуре материала произошли некоторые изменения.

Дислокация $\frac{1}{6} \langle 110 \rangle$ — это только одна из четырех возможных устойчивых вершинных дислокаций. Другие дислокации, образующие барьер с острым углом, можно вывести, добавляя векторы решетки к $\frac{1}{6} [110]$. Единственный результат, который по правилу



Ф и г. 8.14. Образование тетраэдра дефектов упаковки из вакансионной петли Франка.

Франка оказывается устойчивым, — это дислокация $\frac{1}{3} [\bar{1}\bar{1}0]$, образующаяся при добавлении дислокации $\frac{1}{2} [\bar{1}\bar{1}0]$. Одним из интересных случаев, когда образуется барьер из дефектов упаковки, встречающихся под тупым углом, является реакция лидирующих



Ф и г. 8.15. Барьер Хирта.

частичных дислокаций, а именно дислокации BD на плоскости, противоположной вершине A , и AC на плоскости, противоположной вершине B :

$$\begin{aligned} BD &\rightarrow B\alpha + \alpha D, \\ AC &\rightarrow A\beta + \beta C, \end{aligned} \quad (8.42)$$

$$\frac{1}{6} [\bar{2}\bar{1}\bar{1}] + \frac{1}{6} [\bar{2}\bar{1}\bar{1}] \rightarrow \frac{1}{3} [0\bar{1}0]. \quad (8.43)$$

Результирующая конфигурация, показанная на фиг. 8.15, называется барьером Хирта. В обозначениях Томпсона реакция (8.43)

записывается как

$$\alpha D + \beta C \rightarrow \alpha\beta/DC. \quad (8.44)$$

Вектор $1/3 [010]$, обозначаемый как $\alpha\beta/DC$, направлен вдоль линии, соединяющей точку на середине отрезка $\alpha\beta$ с точкой, делящей пополам отрезок DC ; величина вектора равна удвоенной величине расстояния между этими точками. Некоторые свойства дислокаций в г. ц. к.-металлах сведены в табл. 8.3

Таблица 8.3

Дислокации в г. ц. к.-металлах

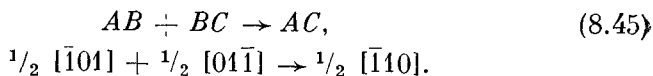
Название дислокации	Вектор Бюргерса b		Относительная величина b^2
	индексы	обозначения Томпсона	
Полная	$1/2 \langle 110 \rangle$	AB	1
Шокли	$1/6 \langle 211 \rangle$	$A\delta$	$1/3$
Франка	$1/3 \langle 111 \rangle$	$A\alpha$	$2/3$
Вершинная Томпсона	$1/6 \langle 110 \rangle$	$\alpha\delta$	$1/9$
Остроугольная вершинная	$1/3 \langle 110 \rangle$	—	$4/9$
Вершинная с тупым углом	$1/3 \langle 100 \rangle$	$\delta\alpha CB$	$2/9$
Вершинная с тупым углом	$1/6 \langle 310 \rangle$	—	$5/9$

8.4. Дислокации в кристаллах со структурой каменной соли

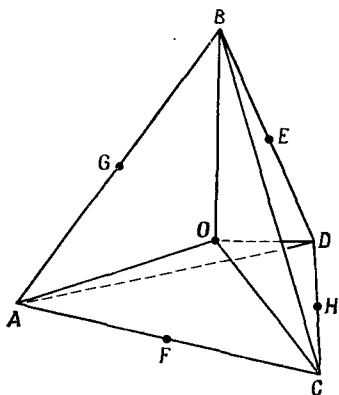
Как и следует ожидать (см. табл. 8.1), в кристаллах со структурой типа каменной соли NaCl наблюдаются дислокации с вектором Бюргерса $1/2 \langle 110 \rangle$. Плоскостями скольжения обычно, но не всегда, служат плоскости $\{110\}$.

Если рассматривать скольжение по $\{110\}$, то невозможно найти дефект упаковки, который обладал бы малой энергией и мог бы считаться промежуточной стадией непрямого сдвига на $1/2 \langle 110 \rangle$. Поэтому нельзя ожидать, чтобы дислокация $1/2 \langle 110 \rangle$ расщепилась на частичные дислокации по $\{110\}$. Тот факт, что достаточно рассматривать только полные дислокации, существенно упрощает анализ дислокационных реакций. Соотношение между векторами Бюргерса $\langle 110 \rangle$ и плоскостями скольжения $\{110\}$ показано на фиг. 8.16, аналогичной тетраэдру Томпсона. Как видно из этой фигуры, каждый вектор Бюргерса лежит только в одной плоскости скольжения (например, AC лежит только в плоскости OAC) и каждая плоскость скольжения содержит только один вектор Бюргерса,

(например, плоскость OAC содержит только вектор AC). В отличие от системы скольжения г. ц. к.-металлов такое одноплачное соответствие существенно упрощает изучение дислокационных реакций. И в самом деле, в этой структуре возможна лишь одна дислокационная реакция, а именно реакция между дислокациями в плоскостях, пересекающихся под углом 60° :



Если вступающие в реакцию дислокации AB и BC ограничены своими плоскостями скольжения, то линия результирующей дислокации AC проходит вдоль линии пересечения этих плоскостей



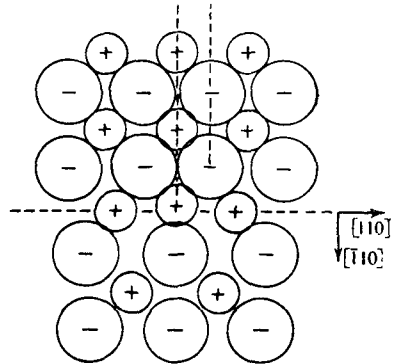
Фиг. 8.16. Соотношение между плоскостями и направлениями скольжения при скольжении по системам $\{110\}$ $\langle\bar{1}\bar{1}0\rangle$ или $\{110\}$ $\langle\bar{1}\bar{1}\bar{1}\rangle$ в г. ц. к.-решетке.

Точка O лежит в центре тетраэдра $ABCD$, ребра которого параллельны направлениям $\langle 110 \rangle$. Плоскости OAB , OAC и т. д. являются плоскостями $\{110\}$, а направления OA , OB , OC , OD — направлениями $\langle 111 \rangle$.

скольжения OB . Так как OB — это направление $\langle 111 \rangle$, плоскость скольжения результирующей дислокации будет $\{211\}$, и поэтому она очень мало подвижна при низких температурах. В кристаллах LiF при комнатной температуре дислокации на одной плоскости блокируют скольжение на другой плоскости, которая пересекается с первой под углом 60° . Эта блокировка столь эффективна, что напряжение сдвига, необходимое для ввода в действие пересекающихся систем скольжения после 1%-ной сдвиговой деформации, примерно в 15 раз больше напряжения, необходимого для активации первой системы [7].

Взаимодействия между дислокациями в структуре каменной соли проще, чем в г. ц. к.-металлах, но у них есть очень интересная особенность: дислокации в структуре каменной соли могут быть *электрически заряженными*. Краевая дислокация по $\{110\}$ имеет «экстраплоскость», состоящую из слоя ионов Na^+ и слоя ионов Cl^- (фиг. 8.17). Этот слой «молекул» $NaCl$ выделен на фигуре 8.18. Его край является линией дислокации, на которой имеется множество ступенек. В точке A лишний анион разделяет две

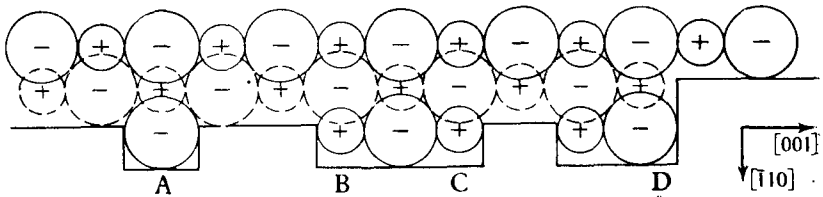
ступеньки. Отрезок *BC* обладает зарядом $+e$, поэтому каждой из ступенек *B* или *C* нужно приписать заряд $e/2$. «Целая» ступенька *D* не заряжена. Это тип ступеньки, которая образуется при пересечении с ортогональной винтовой дислокацией; заряженные



Ф и г. 8.17. Краевая дислокация в NaCl.

Плоскость скольжения и два слоя ионов, составляющих экстраплоскость, изображены пунктиром.

ступеньки типа *B* или *C* можно назвать полуступеньками или диффузионными ступеньками, потому что они образуются, когда отдельный ион подходит к краю экстраплоскости или уходит от него. Очевидно, максимальный заряд линии дислокации в целом



Ф и г. 8.18. Отдельный слой ионов в структуре NaCl.

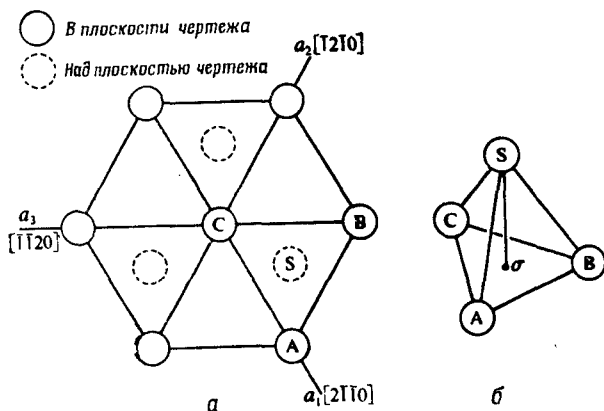
Показано образование заряженных ступенек на линии дислокации.

может достичь значения $e/2$ в расчете на одно межатомное расстояние. Линия дислокации может зарядиться, если она действует как источник или как сток вакансий (разд. 9.1). Так, из-за того, что при высокой температуре для образования единичной катионной вакансии в NaCl нужна меньшая энергия, чем для анионной вакансии, то либо поверхность кристалла, либо краевая дислокация будут генерировать катионные вакансии до тех пор, пока их эмиссия не затормозится возникающим электрическим полем. При этом сама дислокация или поверхность кристалла приобретает положительный электрический заряд, который уравнивается соседними вакансиями катионов. Наоборот, в примесном кристалле дислокации могут заряжаться отрицательно, чтобы

частично компенсировать избыточный положительный заряд двухвалентных катионных примесей, например Ca^{2+} . При низких температурах влияние примесей может существенно изменить свойства дислокации.

8.5. Дислокации в гексагональных металлах

По аналогии с г. ц. к.-металлами плоскостью скольжения гексагональных металлов должна быть наиболее плотно упакованная плоскость базиса (0001), а вектором Бюргера скользящей дислокации должен быть вектор \mathbf{a} гексагональной решетки, равный $\frac{1}{3} [1\bar{1}20]$; кроме того, следует ожидать, что эта дислокация

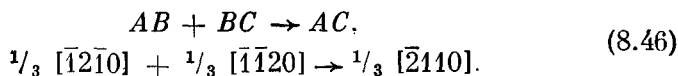


Ф и г. 8.19. Атомы и векторы решетки в гексагональном металле.

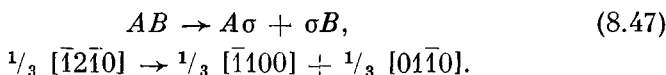
будет еще расщепляться на две частичные дислокации $\frac{1}{3} \langle 10\bar{1}0 \rangle$, аналогичные частичным дислокациям Шокли. Но эта аналогия не совсем полная, потому что иногда действуют другие плоскости скольжения и другие направления скольжения (табл. 6.2). Не упуская этого из виду, рассмотрим сначала дислокации в плоскости базиса, образующиеся при скольжении или при объединении точечных дефектов.

Так как три вектора сдвига $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ копланарны, в результате реакции между скользящими дислокациями может образоваться только дислокационная сетка в плоскости базиса.

Эта реакция имеет вид (обозначения поясняются на фиг. 8.19)



Расщепление полной дислокации тоже можно показать на фигуре 8.19:



Частичные дислокации $A\sigma$ и σB , аналогичные частичным дислокациям Шокли, разделены тонкой прослойкой г. ц. к.-упаковки. Последовательность $ABABAB$ меняется на $ABACBCB$ или, в обозначениях Франка, $\Delta \nabla \Delta \nabla \Delta \nabla$ меняется на $\Delta \nabla \nabla \nabla \Delta \nabla$. Последовательность частичных дислокаций на соседних базисных плоскостях должна меняться, т. е. на одной плоскости это будет $A\sigma - \sigma B$, а на следующей $\sigma B - A\sigma$. Это противоположно расщеплению дислокаций в г. ц. к.-металле, где последовательность частичных дислокаций Шокли должна быть всегда одной и той же. Если должен получаться дефект упаковки одного и того же типа.

В металлах, у которых c/a мало, дислокации $\frac{1}{3} \langle \bar{2}110 \rangle$ довольно легко расщепляются по плоскости призмы $\{1010\}$, а расщепление по плоскости базиса невелико. Например, в цирконии и титане скольжение по плоскостям призмы идет гораздо легче, чем по плоскости базиса. Интересно заметить, что реакция $AB + BC \rightarrow AC$ между дислокациями в плоскости призмы не может создать сильный барьер, потому что дислокация, образующаяся на пересечении двух плоскостей призмы в ходе этой реакции, всегда ориентирована так, что она может скользить по третьей из плоскостей призмы.

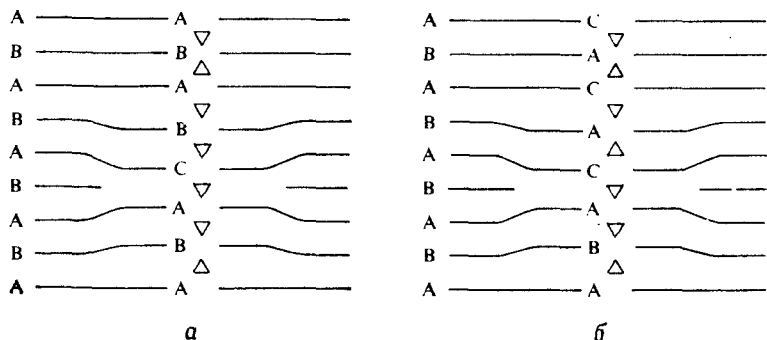
В настоящее время мы не располагаем еще достоверными значениями энергии дефекта упаковки, хотя известно, что, например, у Co эта энергия, по-видимому, мала — порядка $20 \text{ эрг} \cdot \text{см}^{-2}$ при комнатной температуре (при $420^\circ C$ кобальт переходит в г. ц. к.-структуру, см. разд. 11.2). Дефекты упаковки, которые наблюдались, например, в цинке, вероятно, были результатом конденсации точечных дефектов. Ниже мы покажем, что такой дефект отличается от дефекта, получающегося при расщеплении $\frac{1}{3} \langle 1120 \rangle$ -дислокации.

Когда на плоскости базиса собирается диск из вакансий, по его периметру образуется призматическая дислокационная петля. Если этот диск толщиной в одну вакансию и если нет чередования укладки $A - A$, то петля может рождать дефект одним из двух способов: либо единственный базисный слой, либо же весь кристалл по одну сторону от призматической петли должны сдвинуться на вектор типа $A\sigma$. Эти две возможности показаны на фиг. 8.20. В случае а) единственный слой может сдвинуться из позиции A в позицию C путем прохождения частичных дислокаций $A\sigma$ противоположного знака по обе стороны от него. Вектор Бюргерса призматической дислокации остается равным $\frac{1}{2} [0001]$ (σS на фигуре 8.19) за счет дефекта упаковки, который является тройным, если

говорить о числе нарушений укладки ближайших соседей. В случае б) проходит единственная частичная дислокация $A\sigma$, так что петля служит границей единичного дефекта упаковки, а ее вектор Бюргера возрастает до AS согласно реакции

$$\frac{1}{3} [\bar{1}100] + \frac{1}{2} [0001] \rightarrow \frac{1}{6} [\bar{2}203]. \quad (8.48)$$

Такие же рассуждения применимы к петлям с дефектами упаковки, получающимися из дисков избыточных атомов. Единичный

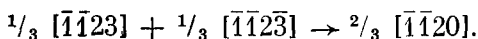
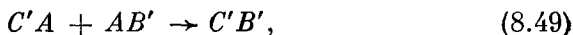


Ф и г. 8.20. Две возможные структуры для вакансионной петли в гексагональном металле.

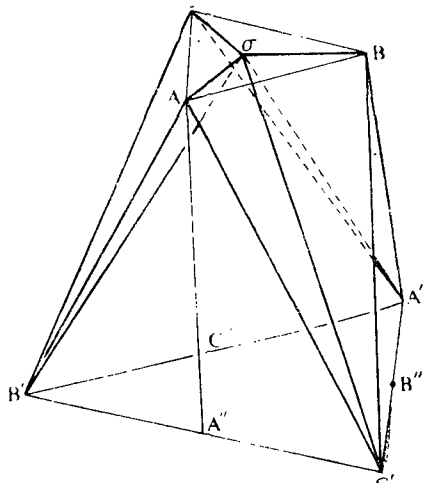
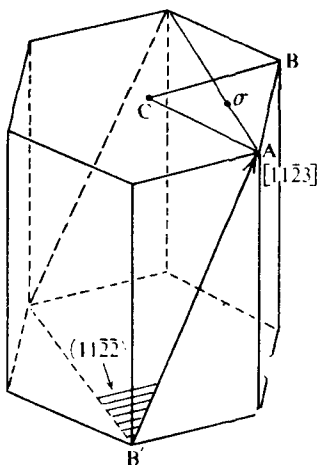
дефект упаковки наблюдался в цинке; его энергия должна быть лишь немного меньше, чем у двойного дефекта, получающегося путем расщепления скользящей дислокации.

Более своеобразна система скольжения $\{11\bar{2}\} \langle 11\bar{2}\rangle$, которая называется *пирамидальным скольжением второго рода*. Замечательной особенностью ее является большая величина вектора сдвига $\frac{1}{3} \langle 11\bar{2}\rangle$, равного сумме вектора c и вектора a . Еще большего удивления заслуживает тот факт, что эта система действует (причем только наряду с базисным скольжением) в цинке и кадмии, у которых отношения c/a наибольшие. Плоскость скольжения и векторы скольжения этой системы в гексагональной ячейке показаны на фиг. 8.21. Каждая плоскость скольжения содержит один вектор скольжения, и каждый вектор скольжения лежит в одной плоскости скольжения. На фиг. 8.22 соотношения между шестью плоскостями скольжения и шестью векторами Бюргера показаны с помощью поверхности, аналогичной тому тетраэдру, которым изображались такие же соотношения в структуре каменной соли (фиг. 8.16). Дислокационные реакции в этой системе легко описать, разлагая каждый из векторов $\frac{1}{3} \langle 11\bar{2}\rangle$ на его компоненты c и a . Компоненты c либо складываются, либо обращаются в пульт; если $c > a$, то энергия возрастает, когда они скла-

дываются, и уменьшается, когда они обращаются в нуль независимо от величины компоненты **a**. Соответственно трем возможным комбинациям компонент **a** при с-компонентах, обращающихся в нуль, возможны три реакции. Реакция энергетически наименее выгодна, если **a**-компоненты одинаковы:



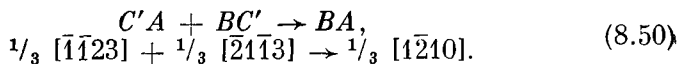
Продукт этой реакции $C'B'$ образуется вдоль линии $A\sigma$ в плоскости базиса и может сразу же разделиться на две полные дисло-



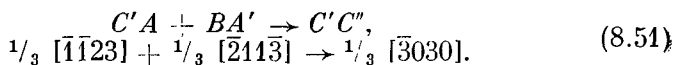
Фиг. 8.21. Система скольжения $\{11\bar{2}\bar{2}\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ в гексагональном кристалле.

Фиг. 8.22. Соотношение между плоскостями и направлениями скольжения в системе $\{11\bar{2}\bar{2}\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$ в гексагональном кристалле.

кации $\frac{1}{3} [\bar{1}\bar{1}20]$. Энергетически самой выгодной реакцией является

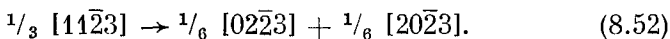


Как видно из фиг. 8.22, продукт этой реакции BA образуется вдоль линии $C'\sigma$, так что он может оказаться неподвижным и стать препятствием для других дислокаций. Увидеть на фиг. 8.22 результат третьей реакции труднее. Эта реакция протекает следующим образом:



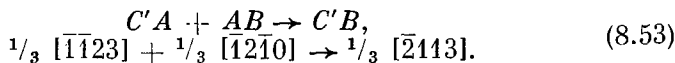
Ее продукт $C'C''$ должен расщепляться на две a -дислокации $AC + BC$, однако, поскольку их линии не лежат в плоскости базиса, они могут оказаться неподвижными.

Можно предположить, что дислокация $\langle 11\bar{2}3 \rangle$ сама разделится на частичные дислокации типа AS (фиг. 8.19 и 8.22):

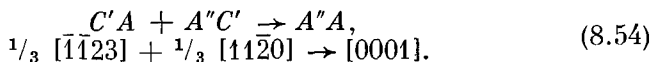


Однако у нас нет оснований считать, что дефект, который при этом должен образоваться на плоскости $\{11\bar{2}2\}$, обладает малой энергией. Кроме того, винтовые дислокации $\frac{1}{3} [11\bar{2}3]$ в цинке и кадмии часто перемещаются путем поперечного скольжения, что свидетельствует об отсутствии расщепления.

Между дислокациями в базисной плоскости и дислокациями в плоскости пирамиды второго рода могут протекать две реакции. Первая из них представляет собой просто перестройку реакции (8.50):



Результирующая дислокация расположена вдоль $A\sigma$, т. е. выходит из плоскости пирамидального скольжения $C'\sigma B$. Поэтому она может оказаться дислокационным барьером. Вторая реакция — это просто аннигиляция a -компоненты пирамидального скольжения:



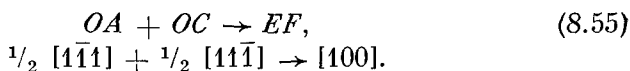
Экстраплоскость результирующей дислокации $A''A$ состоит из двух базисных слоев атомов. Можно представлять себе, что они стремятся расклинивать базисную плоскость, которая является также и плоскостью спайности. В этом отношении такая реакция сходна с той, которая создает дислокацию $\langle 100 \rangle$ в о. ц. к.-металлах (разд. 8.6).

8.6. Дислокации в о.ц.к.-кристаллах

Как и следует ожидать, наблюдаемая скользящая дислокация в о. ц. к.-металле имеет вектор Бюргера $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$. Значительно менее достоверна плоскость, по которой предпочитает скользить эта дислокация (см. табл. 6.1). На первых порах мы будем предполагать, что скольжение происходит по $\{110\}$ легче, чем по другим плоскостям зоны $\langle 111 \rangle$.

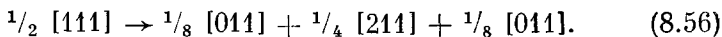
Соотношение между векторами Бюргера $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$ и плоскостями скольжения $\{110\}$ можно показать на той же схеме, которой мы пользовались для структуры каменной соли (фиг. 8.16). Из нее видно, что любые два вектора Бюргера образуют между собой

углы либо $70^{\circ}32'$, либо $109^{\circ}28'$. В последнем случае происходит дислокационная реакция



Направление линии результирующей дислокации, а значит, и ее характер зависят от плоскостей скольжения реагирующих дислокаций. Если вступающие в реакцию дислокации находятся в одной и той же плоскости скольжения, тогда и у результирующей дислокации плоскость скольжения, конечно, будет той же самой. Если они находятся на таких плоскостях, как AOB и AOC , пересекающихся под углом 60° вдоль $\langle 111 \rangle$, то результирующая дислокация, образуемая вдоль линии пересечения, будет еще способна скользить по плоскости $\{110\}$. Но если реагирующие дислокации находятся на ортогональных плоскостях, например AOD и COB , то результирующая дислокация будет расположена вдоль $\langle 001 \rangle$, как GH на фиг. 8.16. В этом случае она представляет собой краевую дислокацию с плоскостью скольжения $\{100\}$. Экстраплоскость этой дислокации параллельна обычной плоскости спайности о. ц. к.-кристалла; было высказано предположение, что трещина в кристалле может возникать как продолжение этой экстраплоскости [8].

Тот факт, что скольжение в о. ц. к.-кристаллах не очень строго ограничено какой-либо одной плоскостью, убедительно свидетельствует в пользу того, что при расщеплении дислокации $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$ на частичные дислокации ширина дефекта упаковки не может быть большой. Тем не менее возникновение таких дефектов упаковки вполне можно допустить. Рассмотрим плоскости $\{110\}$ в модели этой структуры, построенной из жестких шаров (фигура 8.23). Стрелка, исходящая из точки P , указывает естественный путь, по которому шары верхнего слоя скользят по нижнему слою. Это соответствует диссоциации



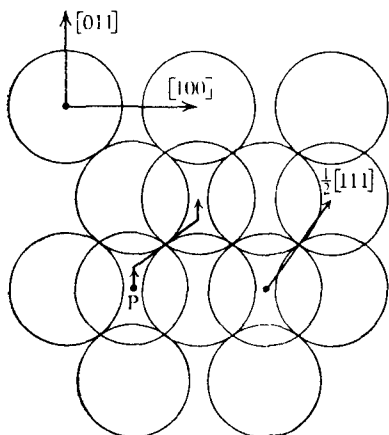
Дефект, который образуется по обе стороны от дислокации $\frac{1}{4} [211]$, вполне допустим в построенной из жестких шаров структуре, потому что он приводит к более плотной упаковке (по этой причине он может оказаться существенным при мартенситном превращении о. ц. к.-структуры в г. п. у.-структуру, см. разд. 11.8). Дислокация $\frac{1}{8} [011]$, которая создает этот дефект, переводит шар P из положения над шаром в лунку. Однако соотношения между ближайшими соседями нарушаются, и поэтому энергия такого дефекта должна быть относительно высокой; видимо, по этой причине его никогда не наблюдали в о. ц. к.-металлах ¹⁾.

¹⁾ Вычисления показывают, что нет метастабильных положений с дефектами упаковки ни для плоскостей $\{110\}$, ни для $\{211\}$, см. [9].

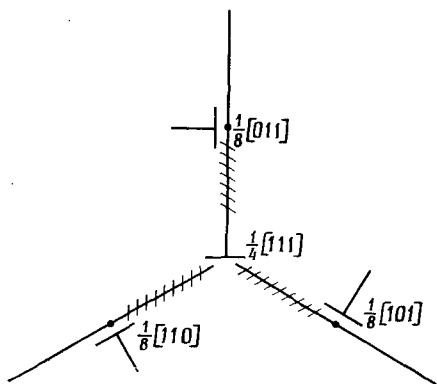
Если возможно расщепление по $\{110\}$, тогда винтовая дислокация расщепляется весьма оригинально. Так как винтовая дислокация параллельна своему вектору Бюргера $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$, она лежит на пересечении трех плоскостей $\{110\}$ (фиг. 8.16) и может уменьшить свою энергию путем расщепления одновременно по всем трем плоскостям:

$$\frac{1}{2} [111] \rightarrow \frac{1}{4} [111] + \frac{1}{8} [011] + \frac{1}{8} [101] + \frac{1}{8} [110]. \quad (8.57)$$

Результирующая конфигурация изображена на фиг. 8.24. Прежде чем такая винтовая дислокация сможет скользить по какой-нибудь из плоскостей, ей придется стянуться под действием приложенного напряжения.



Фиг. 8.23. Строение плоскостей $\{110\}$ в о.ц.к.-структуре.



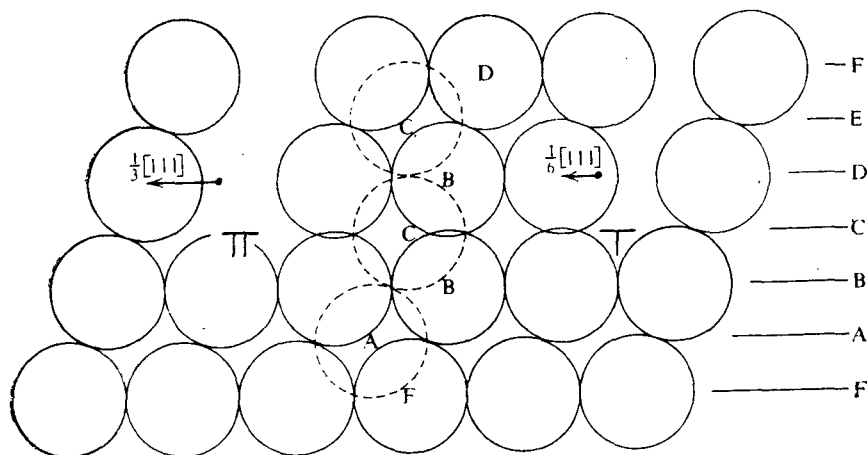
Фиг. 8.24. Конфигурация, возникающая при расщеплении винтовой дислокации в о.ц.к.-структуре.

На мысль о разных типах дефектов упаковки наводит двойникование, наблюдаемое по плоскостям $\{211\}$. Как будет показано в гл. 10, о.ц.к.-двойник может образоваться при смещении дислокации $\frac{1}{6} \langle 111 \rangle$ по соседним плоскостям $\{211\}$. Если энергия двойниковой границы $\{211\}$ не слишком высока, то можно предположить, что энергия дефекта упаковки, созданного смещением единственной дислокации $\frac{1}{6} \langle 111 \rangle$, тоже будет небольшой, так что у дислокации $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$ имеется возможность расщепиться в плоскости $\{211\}$ следующим образом:

$$\frac{1}{2} [111] \rightarrow \frac{1}{3} [111] + \frac{1}{6} [111]. \quad (8.58)$$

Этот дефект легче проиллюстрировать с помощью сечения плоскостью $\{110\}$, нормальной к плоскости дефекта и содержащей вектор смещения, чем с помощью схемы плоскостей $\{211\}$, потому что

нужно уложить одну над другой не менее шести плоскостей $\{211\}$, прежде чем седьмая окажется непосредственно над первой. Это и сделано на фиг. 8.25, на которой показано, как последовательность укладки $ABCDEF$ преобразуется в дефектную после-



Ф и г. 8.25. Последовательное смещение слоев, приводящее к образованию дефекта упаковки в о.д.к.-структуре.

довательность $ABCBCDE \dots$. Чтобы получить такой дефект упаковки, порядок двух частичных дислокаций $\frac{1}{3}[111]$ и $\frac{1}{6}[111]$ должен быть строго определенным; если поменять их порядок, образуется совсем иной дефект упаковки.

Таблица 8.4

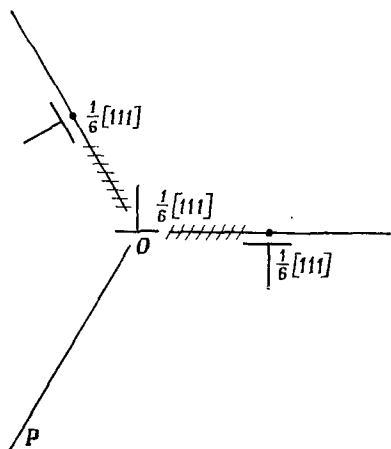
Энергии дефектов упаковки $[111]$

Элемент	$E_{\text{макс}}$, эрг·см ⁻²
Li	81
K	26
Nb	537
Fe	939
Mo	1450

К сожалению, мы не знаем величины энергии дефекта упаковки по $\{211\}$. Было бы неправильным говорить о расщеплении, если энергия дефекта упаковки столь велика, что вычисленная ширина расщепления будет порядка межатомного расстояния. В табл. 8.4 приведены некоторые предельные значения энергии дефектов упаковки, вычисленные на основе ширины расщепления на частичные дислокации, равной одному межатомному расстоянию, для случая, когда краевая дислокация расщепляется в плоскости $\{211\}$.

Допуская, что расщепление в $\{211\}$ возможно, интересно посмотреть, как расщепляется винтовая дислокация. Она лежит в трех различных плоскостях $\{211\}$ и может понизить свою энергию

путем расщепления по двум из них, как на фиг. 8.26. С точки зрения чистой геометрии допустимо расщепление по всем трем плоскостям $\{211\}$, но если рассмотреть силы, действующие на каждую из частичных дислокаций, легко показать, что, после того



Фиг. 8.26. Расщепление винтовой дислокации по трем плоскостям $\{211\}$.

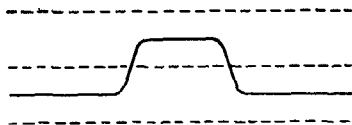
как она расщепилась на две, центральная частичная дислокация в точке O не будет двигаться вдоль OP , т. е. вдоль третьей из плоскостей $\{211\}$, если не приложено внешнее напряжение $[10]$.

8.7. Дислокации в некоторых ковалентных кристаллах

В кристаллах алмаза, германия и кремния между атомами действуют жесткие направленные ковалентные связи (см. фигуру 3.1, е). В этих кристаллах при низких температурах дислокации неподвижны, потому что барьер Пайерлса высок; иначе говоря, энергия дислокации существенно зависит от ее положения в кристалле. Интенсивное скольжение происходит только при повышенных температурах: в германии и кремнии — выше 0,6 от абсолютной температуры плавления. Плоскостью скольжения тогда является $\{111\}$, а направлением скольжения $\langle 1\bar{1}0 \rangle$.

Представим себе, как может происходить это скольжение. Дислокация располагается по возможности в положении, отвечающем низкой энергии, — по-видимому, вдоль некоторых особых кристаллографических направлений. Она продвигается, когда с помощью термической активации малый отрезок линии дислокации преодолевает энергетический барьер и переваливается в следующую энергетическую яму (фиг. 8.27). Связывающий сегмент, который возвышается над энергетическим горбом, называется *перегибом* (kink); от ступеньки (jog) на линии дислокации перегиб

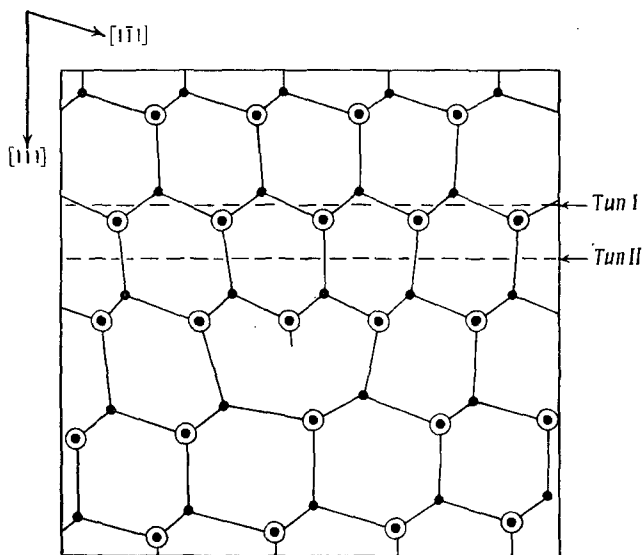
отличается тем, что весь он лежит в плоскости скольжения (разд. 7.6). Перегибы могут скользить порознь, довольно легко, и, когда они скользят, дислокация продвигается на путь, равный расстоянию между потенциальными ямами.



Ф и г. 8.27. Двойной перегиб на линии дислокации.

Пунктирными линиями изображены положения высокой энергии для дислокации.

Дислокацию, расположенную в плоскости $\{111\}$ под углом 60° к ее вектору Бюргерса $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$, легче всего изобразить в проекции на плоскость $\{10\bar{1}\}$, нормальную к дислокации, как это сде-



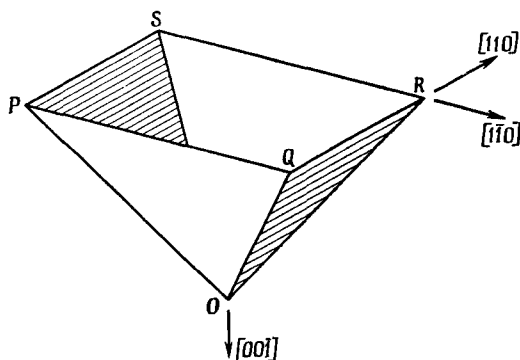
Ф и г. 8.28. 60-градусная дислокация в структуре сфалерита.

Структура 60-градусной дислокации в германии такая же, за исключением того, что в нем все атомы одинаковы.

лапо на фиг. 8.28. Этот же чертеж годится и для структуры сфалерита (цинковой обманки ZnS). Имеется два типа возможных плоскостей скольжения $\{111\}$ — тип I и тип II. На чертеже изображена 60-градусная дислокация, у которой экстраплоскость кон-

чается на плоскости скольжения типа II, где она разрывает меньшее число связей. Приходящаяся на каждый атом одна разорванная связь называется *болтающейся связью*. Интуитивно кажется, что скольжение должно происходить по далеко отстоящим друг от друга плоскостям типа II путем движения дислокаций, таких, как на фиг. 8.28. Однако ситуация осложняется, если учесть еще расщепление на частичные дислокации.

На плоскости {111} могут иметься дефекты упаковки, которые не нарушают тетраэдрических связей и которые совершенно аналогичны дефектам упаковки типа внедрения и типа вычитания



Ф и г. 8.29. Дефект упаковки в тонкой пленке кремния.

Точка O находится на нижней поверхности пленки, а точки P , Q , R и S — на верхней поверхности. OP , OQ , OR и OS — вершинные дислокации.

в г. ц. к.-металлах. Последовательность укладки в совершенном кристалле можно записать как $a \alpha b \beta c \gamma a \alpha \dots$ (разд. 3.4 и 3.5). В этой последовательности двойной атомный слой $a - \alpha$ можно рассматривать как единичный и обозначить его A . Плоскости типа I разделяют двойные атомные слои, упакованные в г. ц. к.-последовательности $ABCA \dots$. Когда частичная дислокация Шокли $\frac{1}{6} \langle 211 \rangle$ проходит по плоскости типа I, то образуется дефект упаковки типа внедрения; если же две разные частичные дислокации Шокли проходят по соседним плоскостям типа I, то образуется дефект вычитания. Дислокация $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$ может расщепиться на частичные дислокации на плоскости типа I:

$$\frac{1}{2} [01\bar{1}] = \frac{1}{6} [11\bar{2}] + \frac{1}{6} [\bar{1}2\bar{1}] \quad (8.59)$$

Не установлено, расщепляются ли движущиеся дислокации на частичные; если расщепляются, то плоскостью скольжения предпочтительно будет плоскость типа I.

Большое разнообразие дефектов упаковки было обнаружено в плечках Si, выращенных эпитаксиально из газовой фазы [12].

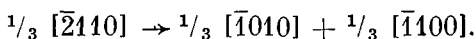
Дефекты, происходящие от нарушений на подложке, разрастаются вдоль пленки и иногда соединяются вместе, образуя объемные фигуры. На фиг. 8.29 видна часть октаэдрического дефекта упаковки в пленке, плоскость которой параллельна $\{100\}$. Грани этого полуоктаэдра представляют собой попеременно дефект упаковки типа внедрения и дефект типа вычитания, соединенные вершинной дислокацией $\frac{1}{6} \langle 110 \rangle$. Конфигурацию у вершины можно вывести из барьера Ломер — Коттрелла (фиг. 8.13), заставив одну из частичных дислокаций Шокли этого барьера скользить к другой стороне вершинной дислокации.

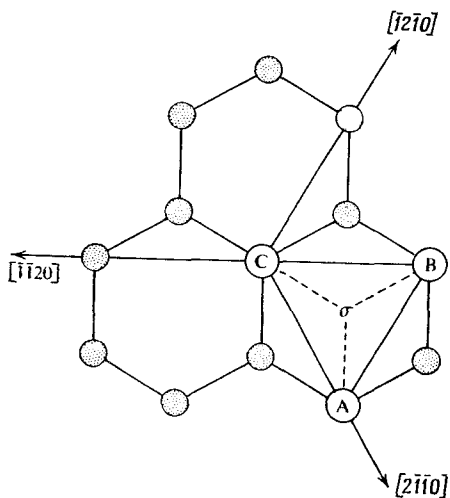
Еще одна структура с тетраэдрическими связями — это структура вюрцита, т. е. ZnS с гексагональной упаковкой *ABAB . . .*. В сфалерите дефекты упаковки представляют собой тонкие прослойки вюрцитной структуры. Наоборот, в вюрците могут встречаться дефекты упаковки, представляющие собой тонкие прослойки сфалеритной структуры и совершенно аналогичные дефектам упаковки в гексагональном металле.

В нитриде алюминия, обладающем такой же структурой, дислокации расщепляются широко, а энергия дефекта упаковки составляет всего лишь около $5 \text{ эрг} \cdot \text{см}^{-2}$ [13].

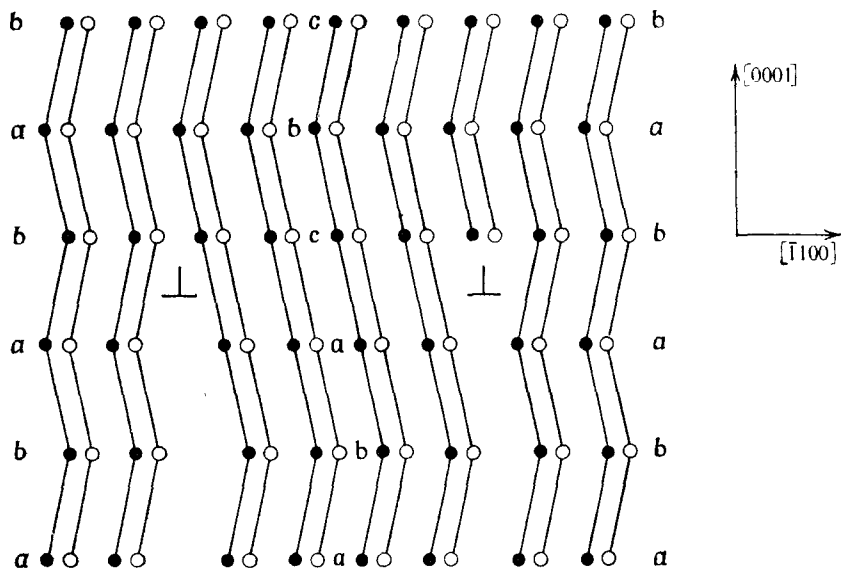
Ни у вюрцита, ни у сфалерита нет центра симметрии; интересным следствием этого оказывается, что в этих структурах у дислокаций противоположного знака различно строение ядра. Допустим, что 60° -градусная дислокация, например в InSb, обладающем структурой сфалерита, всегда лежит в плоскости типа II (фигура 8.28). Тогда ее экстраплоскость кончается либо на атоме Sb, либо на атоме In, смотря по тому, идет ли она сверху вниз или снизу вверх в кристалле. Поэтому дислокацию противоположного знака можно назвать «индиевой» или «сурьмяной» дислокацией, и из-за разных структур ядер у них будут совсем разные напряжения Пайерлса.

Кристаллы с тетраэдрическими связями содержат трехмерные сетки прочных связей, но во многих кристаллах атомы связаны друг с другом прочно только внутри слоев, а между слоями силы относительно слабы. Примером может служить графит. В плоскости базиса дислокации и дефекты упаковки в графите совершенно такие же, как в гексагональных металлах. Для них можно воспользоваться фиг. 8.19. На фиг. 8.30 показаны эти соотношения в структуре графита. Из-за слабых связей между слоями энергии трех основных типов дефектов упаковки, описанных в разд. 8.5, очень малы. Один из этих дефектов получается при диссоциации полной дислокации по схеме



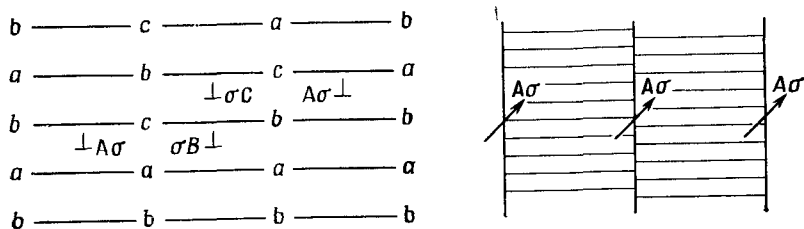


Ф и г. 8.30. Атомы и векторы
решетки в базисной плоскости
графита.



Ф и г. 8.31. Расщепленная 60-градусная дислокация в структуре графита.
Атомы ● в плоскости чертежа; ○ над плоскостью чертежа.

Непосредственные измерения [14] ширины расщепления между частичными дислокациями $\frac{1}{3} \langle 1010 \rangle$ показали, что энергия этого дефекта составляет всего лишь $0,5 \text{ эрг} \cdot \text{см}^{-2}$. На фиг. 8.31 расщепленная 60-градусная дислокация показана сбоку; виден слой ромбоэдрической упаковки у дефекта. Хотя скользящие дислокации строго ограничены только плоскостями базиса, реакции между ними несколько сложнее, чем можно было бы ожидать с первого взгляда. Эти сложности являются результатом широкого



Ф и г. 8.32. Двойная полоса дефекта упаковки, возникающая в результате расщепления частичных дислокаций в структуре графита.

расщепления частичных дислокаций и того факта, что из-за этого широкого расщепления индивидуальные частичные дислокации на соседних плоскостях могут вступать в реакции друг с другом. В качестве примера рассмотрим реакцию между дислокациями AB и AC , которые взаимно отталкивались бы, если бы не расщепление. Допустим, что они лежат на соседних плоскостях, так что AB расщепляется на $A\sigma + \sigma B$, тогда AC должна расщепляться на $\sigma C + A\sigma$. Если расщепившиеся дислокации заставить сближаться, AB слева, а AC справа, то частичные дислокации σB и σC находят одна на другую и происходит реакция

$$\sigma B + \sigma C \rightarrow A\sigma. \tag{8.61}$$

В результате появляется стабильная двойная полоса, изображенная на фиг. 8.32. Геометрию дислокации для многих других кристаллических структур можно проанализировать так же детально, как мы это сделали здесь для нескольких характерных структур. Будем надеяться, что читатель достаточно овладел основными принципами, чтобы суметь разобрать любой случай, с каким ему доведется встретиться.

Задачи

8.1. В о. ц. к.-металле две дислокации с векторами Бюргерса $[111]$ и $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ вступают в реакцию на некотором отрезке (как на фиг. 8.11). Если реагирующие дислокации застопорены в точках p, q, r и s , которые расположены в вершинах квадрата со стороной L , оцените длину дислокации, образующей-

ся в результате этой реакции (изменением энергии дислокации при перемене ориентации ее линии пренебречь).

8.2. Дислокация протискивается между малыми частичками другой фазы, которые располагаются вдоль одной прямой на расстояниях l друг от друга. Определите силу, действующую на каждую частичку, как функцию касательного напряжения σ , действующего на плоскости скольжения дислокации параллельно вектору Бюргерса \mathbf{b} , и оцените максимальную силу, которая может действовать на каждую частичку.

8.3. Пользуясь правилом Франка, рассмотрите реакции между устойчивыми полными дислокациями в объемноцентрированном тетрагональном кристалле. Разберите, как влияет на эти реакции величина отношения c/a .

8.4. Сравните количества атомов, у которых нарушено ближайшее окружение (т. е. окружение стало таким, как у атома в г. п. у.-структуре вместо атома в г. п. к.-структуре) для дефектов упаковки типа внедрения и типа вычитания в г. п. к.-металлах. Какая структура образуется, если обе частичные дислокации Шокли в барьере Ломера — Коттрелла заставить скользить к противоположным сторонам вершинной дислокации?

8.5. Сколько различных барьеров Ломера — Коттрелла может образоваться, если считать, что одна из дислокаций, создающих этот барьер, соответствует лишь одной определенной плоскости скольжения и одному направлению скольжения? Для системы скольжения (111) $\bar{1}01$ приведите векторы Бюргерса каждой частичной дислокации во всех возможных барьерах Ломера — Коттрелла.

8.6. Если концентрация вакансий в алюминии при его температуре плавления составляет $9,4 \cdot 10^{-4}$ и если после закалки алюминия от температуры плавления вакансии конденсируются в диски на плотно упакованных плоскостях и образуют петли Франка, определите плотность создающихся дислокаций при радиусе петель а) 50 \AA и б) 500 \AA .

8.7. Считая среду упруго изотропной, рассчитайте ширину расщепления на частичные дислокации Шокли для винтовой дислокации в Ag, Al и Au. Пользуйтесь значениями энергий дефектов упаковки, приведенными в табл. 8.2. Считайте для Ag $\mu = 2,8 \cdot 10^{11} \text{ дин} \cdot \text{см}^{-2}$, $\nu = 0,38$; для Al $\mu = 2,6 \cdot 10^{11} \text{ дин} \cdot \text{см}^{-2}$, $\nu = 0,34$; для Au $\mu = 2,8 \cdot 10^{11} \text{ дин} \cdot \text{см}^{-2}$, $\nu = 0,42$.

8.8. Для первых четырех решеток, перечисленных в табл. 8.1, найдите векторы Бюргерса тех дислокаций, устойчивость которых по правилу Франка маловероятна, т. е. дислокаций, которые могли бы диссоциировать на две полные дислокации с взаимно перпендикулярными векторами Бюргерса.

8.9. Допустим, что винтовая дислокация в о. п. к.-металле расщепляется по схеме

$$\frac{1}{2} [111] \rightarrow \frac{1}{6} [111] + \frac{1}{6} [111] + \frac{1}{6} [411]$$

и две из частичных дислокаций $\frac{1}{6} [111]$ расходятся по двум плоскостям $\{211\}$, оставляя третью частичную дислокацию лежащей на линии пересечения этих плоскостей (фиг. 8.26). Определите ширину расщепления этих частичных дислокаций, когда они находятся в равновесии на плоскости $\{211\}$; энергию определять через энергию γ дефекта упаковки на $\{211\}$. Покажите, что третья частичная дислокация не будет выталкиваться на третью из плоскостей $\{211\}$. Считайте упругость изотропной.

8.10. Сульфид свинца PbS обладает такой же структурой, как NaCl, но система скольжения у него не $\{011\} \langle 0\bar{1}1 \rangle$, а $\{100\} \langle 011 \rangle$.

а) Сравните дислокационные реакции, которые могут происходить в результате скольжения в PbS, с реакциями в NaCl.

б) Нарисуйте схематично структуру края экстраплоскости краевой дислокации в PbS.

8.11. Опишите дислокационные петли, которые могут получиться в диске в результате скопления межузельных атомов в диски, параллельные плоскости базиса. Опишите также дислокационные петли, которые могут образо-

ваться в графите при скоплении вакансий в диски, параллельные плоскости базиса.

8.12. Спроектируйте структуру кремния на плоскость $(10\bar{1})$ и покажите на этой проекции структуру дефектов упаковки типа вычитания и типа внедрения в кремнии.

8.13. Покажите, как могут взаимодействовать две растянутые дислокационные полосы (т. е. дислокации, которые расщепились на две широко разошедшиеся частичные дислокации) на двух ближайших соседних базисных плоскостях в графите, чтобы образовалась трехкратная полоска.

8.14. Сплав 50 ат. % Cu — 50 ат. % Zn содержит дислокации с векторами Бюргерса $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$. Затем в сплаве проходит упорядочение, так что образуется сверхструктура $L2$. Опишите эффект скольжения дислокации $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$ по $\langle \bar{1}10 \rangle$ и дислокации $\langle 100 \rangle$ по $\{010\}$ после того, как произошло упорядочение. На основании ваших результатов, как вы представляете себе взаимодействие двух идентичных дислокаций $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$ в этом упорядоченном сплаве?

8.15. Пользуясь правилом, что наблюдаемое направление скольжения является направлением кратчайшего вектора трансляции решетки, найдите направления скольжения а) ртути, б) висмута. Сравните ваши результаты с табл. 6.1. Выполняется ли это правило?

ЛИТЕРАТУРА

1. Foreman A. J. E., Dislocation Energies in Anisotropic Crystals, *Acta Met.*, 3, 322 (1955).
2. Segall R. L., Clarebrough L. M., *Phil. Mag.*, 9, 865 (1964).
3. Dobson P. S., Goodhew P. J., Smallman R. E., *Phil. Mag.*, 16, 9 (1967).
4. Dillamore I. L., Smallman R. E., *Phil. Mag.*, 12, 191 (1965).
5. Howie A., Swann P. R., исправления см.: Brown L. M., *Phil. Mag.*, 10, 441 (1964).
6. Thompson W., *Proc. Phys. Soc.*, 66B, 481 (1953).
7. Alden T. H., Extreme Latent Hardening in Compressed Lithium Fluoride Crystals, *Acta Met.*, 11, 1103 (1963).
8. Cottrell A. H., Theory of Brittle Fracture in Steel and Similar Metals, *Trans. AIME*, 212, 192 (1958).
9. Vitek V., Intrinsic Stacking Faults in Body-Centered Cubic Crystals, *Phil. Mag.*, 18, 773 (1968).
10. Sleswyk A. W., $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$ Screw Dislocations and the Nucleation of $\{112\} \langle 111 \rangle$ Twins in the b.c.c. Lattice, *Phil. Mag.*, 8, 1467 (1963).
11. Teutonico L., *Acta Met.*, 13, 105 (1965).
12. Booker G. R., Crystallographic Imperfections in Silicon, *Disc. Farad. Soc.*, 38, 298 (1964).
13. Delavignette P., Kirkpatrick H. B., Amelinckx S., Dislocations and Stacking Faults in Aluminium Nitride, *J. Appl. Phys.*, 32, 1098 (1961).
14. Baker C., Chou Y. T., Kelly A., The Stacking Fault Energy of Graphite, *Phil. Mag.*, 6, 1305 (1961).

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ЧТЕНИЯ

1. Amelinckx S., The Direct Observation of Dislocations, Acad. Press, 1964; имеется перевод: Амелинкс С., Методы прямого наблюдения дислокаций, изд-во «Мир», 1968.

2. Read W. T., *Dislocations in Crystals*, McGraw-Hill, 1953; имеется перевод: Рид В. Т., *Дислокации в кристаллах*, Metallurgizdat, M., 1957.
3. Weertman J., Weertman J. R., *Elementary Dislocation Theory*, Macmillan, 1964.
4. Hirth J., Lothe I., *Theory of Dislocations*, McGraw-Hill, 1968; имеется перевод: Хирт Дж., Лоте И., *Теория дислокаций*, Атомиздат, М., 1972.
5. Nabarro F. R. N., *Theory of Crystal Dislocations*, Oxford, 1967.
- 6*. Коттрелл А. Х., *Дислокации и пластическое течение в кристаллах*, Metallurgizdat, M., 1960.
- 7*. Ван Бюрен Х. Г., *Дефекты в кристаллах*, ИЛ, 1960.
- 8*. Инденбом В. Л., Статья «Дислокации в кристаллах», *Физический энциклопедический словарь*, т. I, М., 1961.
- 9*. Сб. «Динамика дислокаций», Харьков, 1968.
- 10*. Новиков И. И., *Дефекты кристаллической решетки металлов*, Metallurgizdat, M., 1968.
- 11*. Ньюкирк Дж. Б., Вершик Дж. Х., *Прямые методы исследования дефектов в кристаллах*, изд-во «Мир», 1965.
- 12*. Сб. «Несовершенства в кристаллах полупроводников», изд-во Metallurgizdat, M., 1964.
- 13*. Горелик С. С., Дашевский М. Я., *Материаловедение полупроводников и металловедение*, изд-во «Металлургия», М., 1973.

Точечные дефекты

9.1. Введение

Нарушения в кристалле, которые (если не считать связанных с ними упругих деформаций) простираются в любом направлении не больше чем на несколько межатомных расстояний, называются *точечными дефектами*. Хотя атомы примеси в растворе можно считать точечными дефектами, мы будем заниматься в основном структурными точечными дефектами. Существует два элементарных типа таких дефектов. Первый из них это *вакансия*, представляющая собой узел атомной решетки, в котором нет атома. Второй — это малая область кристалла, содержащая *избыточный атом*. Его называют межузельным атомом и при этом исходят из представления о том, что лишний атом как бы втиснулся между двумя узлами.

Две основные особенности отличают точечный дефект от дислокации и от двумерного дефекта, например от поверхности кристалла. Первая особенность заключается в том, что точечные дефекты трудно наблюдать непосредственно; обнаруживать и изучать их приходится в основном по тому влиянию, которое они оказывают на физические свойства кристалла. Вторая особенность заключается в том, что концентрация точечных дефектов может быть значительной даже в кристалле, находящемся в термодинамическом равновесии. Дислокации и поверхности раздела всегда повышают свободную энергию кристалла, а введение некоторого количества точечных дефектов в кристалл, в остальном идеальный, понижает его свободную энергию до минимального значения. Так получается благодаря увеличению энтропии, обусловленному наличием в кристалле множества положений, в которых могут находиться точечные дефекты.

Эта конфигурационная энтропия записывается как

$$S = k \ln W, \quad (9.1)$$

где k — постоянная Больцмана ($k = 1,38 \cdot 10^{-16}$ эрг·град $^{-1}$ = $8,68 \cdot 10^5$ эВ·град $^{-1}$), а W — число различных расположений точечных дефектов по N узлам решетки.

Если n дефектов распределены между N узлами решетки, то число этих расположений равно $N(N-1) \dots (N-n+1)$, если каждый дефект отличается от других. Если же все дефекты

одинаковы, то n меток, необходимых для того, чтобы отличать их друг от друга, можно распределить $n!$ способами.

Очевидно, что

$$Wn! = N(N-1) \dots (N-n+1). \quad (9.2)$$

Преобразуя уравнение (9.2) так, чтобы удобно было воспользоваться приближением Стирлинга ($\ln x! \simeq \ln x - x$ для больших x), имеем

$$W = N!/(N-n)! n!. \quad (9.3)$$

Из формулы (9.1)

$$S = k [N \ln N - (N-n) \ln (N-n) - n \ln n]. \quad (9.4)$$

Если присутствие одного дефекта повышает внутреннюю энергию кристалла на E_f , то изменение свободной энергии кристалла, содержащего n одинаковых дефектов при температуре T К, равно

$$\Delta F = nE_f - T(S + nS'). \quad (9.5)$$

Здесь предполагается, что n/N столь мало, что дефекты не взаимодействуют друг с другом. Добавочный энтропийный член nS' в формуле (9.5) отражает то обстоятельство, что каждый дефект может добавить кристаллу некую энтропию S' благодаря влиянию на колебания соседних с ним атомов. Число дефектов n_e , обуславливающее минимальную свободную энергию, получим, если положим $d\Delta F/dn = 0$, что даст

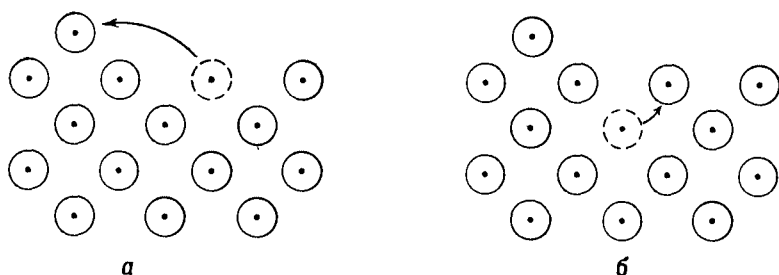
$$n_e/(N - n_e) = \exp(S'/k) \exp(-E_f/kT). \quad (9.6)$$

Если рассматриваемый дефект является вакансией, тогда разность $N - n_e$ есть просто число атомов в кристалле. Поскольку на самом деле $n_e \ll N$, уравнение (9.6) можно записать в виде

$$n_e/N = \exp(S'/k) \exp(-E_f/kT). \quad (9.7)$$

В г. ц. к.-металлах S'/k близко к единице, так что относительная концентрация вакансий n_e/N в основном определяется выражением $\exp(-E_f/kT)$. Например, в г. ц. к.-металлах Cu, Ag и Au энергия образования вакансий E_f приблизительно равна 1 эВ, из чего следует, что при температурах, близких к температуре плавления, относительные концентрации вакансий достигают порядка 10^{-4} . Эти вакансии могут образовываться на поверхностях раздела, на границах зерен или на линиях дислокаций. Атом, перескакивающий на поверхность кристалла или на границу зерна, оставляет за собой вакантный узел, в который может перескочить атом из более глубоких положений, так что вакансия образуется в глубине кристалла (фиг. 9.1). Точно так же вакантное положение может остаться, если атом перескочит на край экстраплоскости краевой дислокации.

Если атом, находящийся внутри кристалла, перескочит в межузельное положение, то одновременно образуются и вакансия и вакансия и межузельный атом. Такой дефект называется *дефектом Френкеля*. В равновесных г. ц. к.-металлах дефекты Френкеля не встречаются в заметных концентрациях из-за того, что межузельный атом значительно повышает внутреннюю энергию кристалла. Но для других кристаллов повышение внутренней энергии не столь сильно; например, в кристаллах AgCl и AgBr при температурах,



Ф и г. 9.1. Поверхность кристалла, действующая как источник для вакансий.

близких к плавлению, атомная концентрация Ag в межузельных позициях (по отношению к общему числу атомов) достигает порядка 10^{-3} и 10^{-2} соответственно.

Поскольку энергия образования точечных дефектов определяет их концентрацию в кристалле, находящемся в равновесном состоянии, полезно уметь вычислять эту величину. К сожалению, такая задача оказывается весьма сложной, тогда как грубая оценка не представляет больших трудностей. Например, энергию, необходимую для образования вакансий, очень приближенно можно оценить следующим образом. Допустим, что энергию сцепления кристалла можно определить примерно как сумму энергий взаимодействия соответствующих пар атомов. Начав с какого-нибудь атома, мы суммируем энергии его связей с каждым из его соседей. Такое же суммирование повторяем для второго атома и т. д. Окончательная сумма в целом даст удвоенную энергию сцепления кристалла, потому что энергия каждой связи сосчитана дважды. Если каждый атом идентично обладает связями с суммарной энергией $2E_c$, то энергия сцепления, приходящаяся на один атом, равна E_c . Чтобы образовать вакансию, удалим какой-нибудь атом из глубины и затем перенесем его на поверхность кристалла. Первый из этих этапов разрушает связи с энергией $2E_c$, а второй преобразует половину (в среднем) этих связей, оставляя E_c как энергию, необходимую для образования вакансии.

Эта оценка очень неточная, потому что не учтена возможность того, что вблизи вакантного узла изменяются энергии связей

между атомами. На самом деле, если какой-то атом удален, окружающие его ядра будут смещаться, а электроны — перераспределяться так, чтобы высвободилась энергия. Следовательно, из E_c надо вычесть энергию релаксации R :

$$E_f = E_c - R. \quad (9.8)$$

Значение R по порядку величины такое же, как E_c , но вычислять его очень трудно. Поэтому точное значение энергии образования дефекта E_f также трудно получить. Однако было произведено несколько тщательных вычислений энергии образования вакансии в меди (см., например, [1]); полученные результаты во всех случаях, в согласии с экспериментальными данными, группируются около значения 1 эВ. Вычисления энергии образования межузельных дефектов дают значительно более высокое значение порядка 3 эВ, что согласуется с отсутствием данных, подтверждающих существование межузельных дефектов в г. ц. к.-металлах в равновесном состоянии при высоких температурах.

Точечные дефекты с высокой энергией образования могут встречаться в кристаллах, находящихся в неравновесном состоянии. Как вакансии, так и межузельные атомы образуются под действием радиации, которая может выбивать атомы из их нормальных положений, так что смещенный атом оставляет за собой вакансию, а сам становится межузельным дефектом. Пластическая деформация тоже может создавать как вакансии, так и межузельные атомы при взаимодействии дислокаций друг с другом (см. разд. 7.6).

Способность кристалла сохранять точечные дефекты, образовавшиеся тем или иным способом, зависит от подвижности этих дефектов в кристалле, поскольку дефект, не находящийся в равновесии и обладающий большой подвижностью, быстро исчезнет. На поверхности кристалла или на границе зерна, или на дислокации точечные дефекты, соединяясь с другими точечными дефектами, могут разрушаться. Подвижность дефекта, находящегося в равновесии, тоже является существенной характеристикой, поскольку атомы могут перемещаться сквозь кристалл путем движения равновесных точечных дефектов. Например, самодиффузия в г. ц. к.-металлах происходит путем движения вакансий.

Подвижность дефекта зависит от того, насколько возрастает свободная энергия кристалла, когда дефект проходит через положение максимальной энергии на пути от одного равновесного положения к другому. Частота, с которой дефект перескакивает в новое положение, определяется соотношением

$$\nu = \nu_0 \exp(S_M/k) \exp(-E_M/kT), \quad (9.9)$$

где ν_0 — «частота попыток», т. е. частота колебаний дефекта в надлежащем направлении. Возрастание свободной энергии рас-

ходуется на возрастание энтропии S_M и на возрастание внутренней энергии E_M . В табл. 9.1 дано число скачков в секунду для разных значений энергии миграции E_M в предположении, что $\nu_0 \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$ и $\exp(S_M/k) \sim 1$ (это разумное предположение, например, для вакансии в г. ц. к.-металле).

Таблица 9.1

Оценка числа скачков γ в секунду для точечного дефекта с энергией миграции E_M

E_M	Температура, К			
	77	300	773	1273
0,1	$3,2 \cdot 10^6$	$2,1 \cdot 10^{11}$	$2,2 \cdot 10^{12}$	$4,0 \cdot 10^{12}$
0,5	$\ll 1$	$4,6 \cdot 10^7$	$5,8 \cdot 10^9$	$1,1 \cdot 10^{11}$
1,0	$\ll 1$	$\ll 1$	$3,4 \cdot 10^6$	$1,2 \cdot 10^9$
2,0	$\ll 1$	$\ll 1$	1,1	$1,4 \cdot 10^5$

Энергию миграции дефекта вычислить еще труднее, чем энергию его образования. Если точечный дефект, например вакансия в г. ц. к.-металлах, обуславливает самодиффузию, то энергию миграции можно получить непосредственно из измерений скоростей самодиффузии. Коэффициент самодиффузии в равновесном г. ц. к.-металле пропорционален равновесной концентрации вакансий и их подвижности, так что энергия активации самодиффузии E_{SD} равна

$$E_{SD} = E_f + E_M. \quad (9.10)$$

Подставляя в (9.10) вычисленное значение E_f , получаем, что энергия миграции вакансии в меди составляет около 1 эВ. Из табл. 9.1 можно видеть, что при комнатной температуре подвижность вакансий в меди незначительна. Энергия миграции межузельного атома в меди очень мала; по некоторым вычислениям можно судить, что ее значение не больше 0,1 эВ. Если эта оценка верна, то изолированный межузельный атом в меди настолько подвижен, что он не может сохраняться при комнатной температуре, потому что, обладая энергией миграции порядка 0,1—0,5 эВ, может за секунду пройти макроскопические расстояния.

9.2. Точечные дефекты в ионных кристаллах

До сих пор примеры точечных дефектов приводились для г. ц. к.-металлов. Точечные дефекты широко изучались также и в щелочно-галогидных кристаллах. Здесь есть дополнительные сложности, например то обстоятельство, что дефекты могут быть анионными или катионными. Предположим, что энергия образо-

вания для катионной вакансии E^+ меньше, чем для анионной вакансии E^- , как это на самом деле и имеет место для хлористого натрия. Когда кристалл приходит в равновесное состояние при высокой температуре, в нем сначала будет образовываться больше катионных вакансий, чем анионных; вакансии эти образуются на линиях дислокаций. Тем самым создается электрическое поле, препятствующее дальнейшему стоку катионных вакансий и облегчающее образование анионных вакансий. В равновесном состоянии кристалл будет содержать почти одинаковые количества n тех и других вакансий. Можно вывести уравнение, аналогичное уравнению (9.7), а именно:

$$n/N = \exp [(S^+ + S^-)/2] \exp [-(E^+ - E^-)/2kT], \quad (9.11)$$

где N — число узлов решетки (равное числу пар ионов). Дефект, состоящий из анионной и катионной вакансий (причем каждая из них существует порознь), называется *дефектом Шоттки*. В хлористом натрии вблизи температуры плавления относительная концентрация дефектов Шоттки достигает 10^{-4} , а из температурной зависимости ее следует, что $(E^+ + E^-) = 2,7$ эВ (см. табл. 9.3).

Причина появления дефектов Шоттки в хлористом натрии заключается в том, что они повышают энтропию кристалла. Ионные кристаллы часто содержат точечные дефекты, причем причины появления этих дефектов различны. Например, кристаллы окиси железа, обладающего структурой типа хлористого натрия, часто содержат довольно большую концентрацию катионных вакансий. Это результат того, что часть железа всегда находится в трехвалентном состоянии. Избыточный кислород, связанный с трехвалентными ионами железа, размещается в подрешетке, образуя нормальной ионами кислорода, так что некоторые катионные узлы остаются не занятыми. В этом случае присутствие точечных дефектов является следствием отклонения от стехиометрического состава FeO ¹⁾. Если состав отвечает формуле Fe_xO , то концентрация катионных вакансий равна $(1 - x)$, а поскольку x может доходить до 0,9, то концентрация вакансий гораздо больше, чем была бы равновесная концентрация дефектов Шоттки в стехиометрическом кристалле. К образованию точечных дефектов в ионном кристалле может привести еще и наличие примеси. Так, хлористый натрий, содержащий небольшое количество двухвалентных примесных катионов, например Ca^{2+} , содержит такое же количество вакантных катионных узлов, которые компенсируют избыточный положительный заряд, созданный ионами Ca^{2+} .

¹⁾ Точечные дефекты, обусловленные нестехиометричностью, могут встречаться и в металлических системах. Например, избыточные атомы алюминия в сверхструктуре NiAl (структурный тип CsCl) встраиваются в Al-подрешетку, оставляя вакантные узлы в подрешетке Ni.

Хотя чистые щелочно-галогидные кристаллы обычно отвечают точно стехиометрическому составу, можно создать в кристалле избыток катионов, нагревая его в парах щелочного металла.

Избыточные катионы располагаются при этом в узлах нормальной катионной подрешетки, а некоторые анионные узлы остаются вакантными. Электроны, которые обеспечивают электрическую нейтральность кристалла, связываются с анионными вакансиями.

Если электромагнитные волны видимого диапазона частот проходят сквозь кристалл, то возбуждение этих электронов вызывает поглощение волн и кристалл приобретает окраску, например, хлористый натрий становится желтовато-коричневым. Анионная вакансия, захватившая электрон, называется F-центром (от немецкого слова Farbe — цвет). Радиационное воздействие тоже создает F-центры в щелочно-галогидных кристаллах, но одновременно создаются и разные другие дефекты, так что облученный кристалл отличается по цвету от кристалла, нагревавшегося в парах щелочного металла.

9.3. Комплексы точечных дефектов

Если межузельный атом и вакансия, образованная этим атомом, соединяются вместе, то они понижают внутреннюю энергию кристалла, так как при их аннигиляции восстанавливается локальное совершенство кристалла. Даже дефекты, которые не являются взаимодополняющими, часто могут соединяться друг с другом, понижая при этом внутреннюю энергию кристалла. Например, если удаляется атом, соседствующий с вакансией в г. ц. к.-металле, так что образуется вторая вакансия, то число связей, которые при этом надо разорвать, будет на одну меньше, чем число связей, разрываемых при образовании второй вакансии в изолированном положении. Поэтому для образования дивакансии требуется меньше энергии, чем для образования двух изолированных вакансий, причем разность этих энергий равна понижению внутренней энергии, получаемому при объединении двух вакансий. Эту энергию определяют как энергию связи двух таких вакансий. Например, энергия связи пары вакансий в золоте, как оказывается, составляет около 0,3 эВ (табл. 9.4).

Энергию образования дивакансии в общем виде можно записать как $(2E_f - E_b)$, где E_f — энергия образования единичной вакансии, а E_b — энергия связи. Равновесная концентрация дивакансии n_2 изменяется по закону

$$n_2 \sim \exp [-(2E_f - E_b)/kT]. \quad (9.12)$$

Отсюда, используя (9.7), получаем, что равновесные числа вакансий и дивакансий (соответственно n_1 и n_2) в кристалле, состоящем

из N атомных узлов, связаны друг с другом соотношением

$$n_1^2/n_2N = q \exp(-E_b/kT). \quad (9.13)$$

Число q зависит от энтропий образования этих дефектов и от числа возможных положений дивакансий в кристалле, имеющем N атомных узлов. Из соотношений (9.13) и (9.7) имеем

$$n_1/n_2 = q \exp(-S'/k) \exp[(E_f - E_b)/kT]. \quad (9.14)$$

Поскольку $E_f > E_b$, отношение числа единичных вакансий к числу дивакансий растет по мере понижения температуры. В г. ц. к.-металле даже при температурах, близких к температуре плавления, по-видимому, не более $1/5$ общего числа вакансий связано в дивакансии.

Формула (9.14) относится к кристаллу, находящемуся в равновесном состоянии. Когда температура кристалла понижается, может оказаться, что удастся сохранить «локальное» равновесие между вакансиями и дивакансиями, между тем как общее число вакантных узлов n_T невозможно уменьшить из-за недостатка близлежащих стоков вакансий, например дислокаций. В этом случае по-прежнему выполняется условие (9.13), а также равенство

$$n_1 + 2n_2 = n_T. \quad (9.15)$$

Деля (9.15) на (9.13), получаем

$$n_2/n_1 + 2(n_2/n_1)^2 = (n_T/Nq) \exp(E_b/kT). \quad (9.16)$$

При этих условиях отношение числа единичных вакансий к числу дивакансий уменьшается при понижении температуры. Так получается потому, что фиксированное число вакантных узлов имеет большую энергию и большую энтропию, когда вакансии являются одиночными, чем когда они образуют дивакансии.

И межузельные атомы и вакансии, оказавшиеся при низких температурах избыточными по отношению к их равновесной концентрации, могут объединяться в комплексы из двух и более дефектов. В конце концов такой комплекс может вырасти настолько, что его можно будет наблюдать в электронный микроскоп; примерами служат призматическая дислокационная петля или, в случае вакансий в г. ц. к.-металле, тетраэдр дефектов упаковки (фиг. 8.14). На промежуточных стадиях, когда скопление содержит лишь несколько дефектов, невозможно наблюдать его непосредственно и трудно определить теоретически, какую из возможных конфигураций пужно выбрать. Наличие или отсутствие данной конфигурации зависит от того, сколь легко она зарождается.

9.4. Конфигурации точечных дефектов

Непосредственно наблюдать положение атомов вокруг точечного дефекта удастся лишь в очень специфических условиях, достигаемых только в ионном проекторе. Этот прибор позволяет получать изображения индивидуальных атомов на поверхности (сильно напряженной) и дает возможность непосредственно видеть вакансии, образующиеся при ионной бомбардировке этой поверхности. В общем же случае приходится ограничиваться косвенными опытами или теоретическими рассуждениями.

С точки зрения теории есть существенное различие между конфигурациями точечных дефектов у вакансий и межузельных атомов. Основные конфигурации вакансий известны, а конфигурации межузельных атомов пока не достоверны. В случае вакансии требуется определить только смещения атомов вокруг незанятого узла. В случае межузельного дефекта избыточный атом может разместиться в любом из множества неэквивалентных положений в кристалле. Поэтому приходится сравнивать несколько различных конфигураций, чтобы оценить, у какой из них энергия наименьшая.

Энергия кристалла, содержащего дефект, составленный из двух межузельных атомов, рассчитывается при этом как сумма энергий взаимодействия двух атомов. Чтобы описать зависимость этой энергии ψ от расстояния между двумя атомами r , выбирают какую-нибудь простую функцию, например функцию Морза

$$\psi = D [\exp \{-2\alpha (r - r_0)\} - 2\exp \{-\alpha (r - r_0)\}]. \quad (9.17)$$

Здесь D — энергия диссоциации пары атомов, а r_0 — их равновесное расстояние. Постоянную α можно определить по упругой сжимаемости кристалла. В других работах используется потенциал отталкивания по Борну — Майеру

$$\psi = A \exp \{-B (r - r_0)/r_0\}. \quad (9.18)$$

Наряду с давлением, которое нужно приложить к поверхностям кристалла, чтобы удержать атомы на местах, определяют конфигурации с минимальной энергией, пробуя суммировать такие энергии пар атомов для множества различных конфигураций. Авторы некоторых вычислений отмечают, что они исходят из неточных оценок энергии кристалла, но более точные оценки недоступны.

Рассчитанные величины смещений вокруг вакансии приведены в табл. 9.2. Атомы из самой ближайшей координационной сферы смещаются по направлению к вакансии, а атомы из следующей сферы — от нее. Необходимо напомнить, что обратный знак может быть только следствием принятой модели и что в реальном кристалле, возможно, дело обстоит и не так. В о. ц. к.-металлах

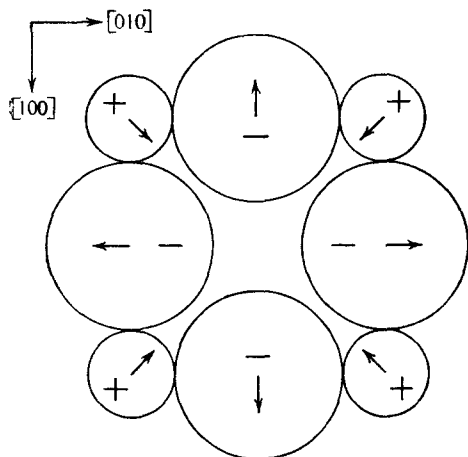
Таблица 9.2

Релаксационные смещения вокруг вакансии, выраженные в процентах нормального расстояния от вакантного узла [2]¹⁾

Металл	Координационная сфера		Металл	Координационная сфера	
	1	2		1	2
Pb	1,42	-0,43	Fe	6,07	-2,12
Ni	2,14	-0,39	Ba	7,85	-2,70
Cu	2,24	-0,40	Na	10,80	-3,14
Ca	2,73	-0,41			

1) Знак плюс означает смещение по направлению к вакансии.

эти релаксационные сдвиги значительно больше, чем в г. ц. к.-металлах. Можно полагать, что в «совершенном» металле, например в меди, где ядра атомов находятся близко друг к другу, релаксационные смещения будут малыми, потому что направленные



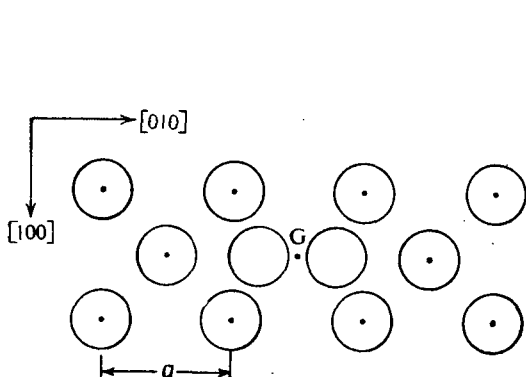
Ф и г. 9.2. Плоскость $\{100\}$ NaCl. Показаны направления смещений ионов вокруг вакансии иона Na^+ .

к вакансии смещения атомов из ближайшей к ней координационной сферы очень быстро затормаживаются силами взаимного отталкивания самих атомов этой сферы.

Форму смещений вокруг вакансий в кристалле хлористого натрия можно вывести, рассматривая действующие при этом электрические заряды. Вакансия положительного иона, действующая как локальный недостаток положительного заряда, притягивает к себе окружающие катионы и отталкивает анионы, находящиеся в следующей координационной сфере (фиг. 9.2). Согласно

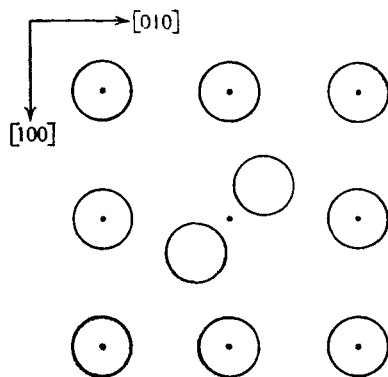
Мотту и Литтлону [3], в хлористом натрии ближайшие к вакансии иона натрия анионы смещаются от центра на $0,07d$, где d — расстояние между ионами (равное половине параметра решетки). Ионы не только смещаются как целое, но еще и сами деформируются и поляризуются электрическим полем решетки.

Результаты вычислений энергий конфигураций межузельных атомов в металлах несколько неожиданны. Интуитивно следовало бы ожидать, что лишний атом в г. ц. к.-металле должен занять



Ф и г. 9.3. Гипотетическая расщепленная конфигурация межузельного атома в г. ц. к.-металле.

Плоскость чертежа совпадает с $\{001\}$.



Ф и г. 9.4. Гипотетическая расщепленная конфигурация межузельного атома в о. ц. к.-металле.

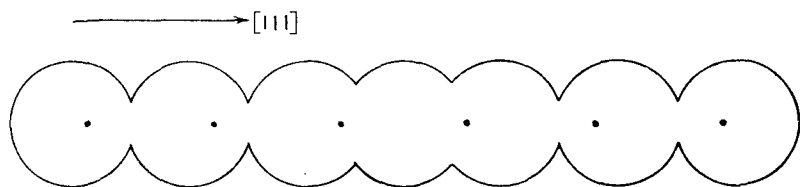
Плоскость чертежа совпадает с $\{001\}$.

центр элементарного куба, где он был бы окружен атомами, расположенными по вершинам октаэдра. На шариковой модели такой структуры видно, что эта октаэдрическая пустота оказывается наибольшей из всех пустот (см. разд. 3.2). Однако, согласно расчету [4], энергия ниже у менее симметричной конфигурации, показанной на фиг. 9.3. Здесь два атома смещены из своих нормальных положений в решетке, каждый на $0,3a$ вдоль $a \langle 100 \rangle$, где a — параметр решетки. Выигрыш в энергии при этом «расщеплении» межузельных атомов мал, но, во всяком случае, нельзя не считать с возможностью появления такой конфигурации.

В о. ц. к.-металле наиболее выгодным положением для избыточного атома также, очевидно, является октаэдрическая пустота в центре ребра или грани элементарного куба, но расчет показывает, что наименьшей энергией обладает конфигурация, «расщепленная» вдоль $\langle 110 \rangle$ и изображенная на фиг. 9.4 [5].

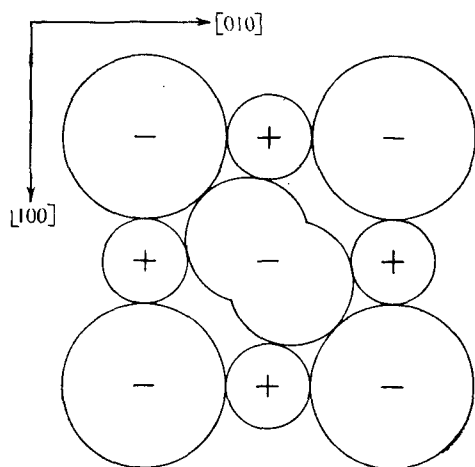
Предполагается, что межузельный дефект, аналогичный описанной выше расщепленной конфигурации, встречается в щелочных о. ц. к.-металлах. В этой конфигурации лишний атом расположен в плотно упакованном ряду $\langle 111 \rangle$ таким образом, что на участке,

нормально занятом пятью атомами, уместается шесть атомов. Для такого дефекта (фиг. 9.5) Панет [6] ввел название *краудион*. Существование краудионов до сих пор не подтвердилось¹⁾.



Ф и г. 9.5. Краудион в щелочном металле (по Панету) [6]. Ряд атомов совпадает с $\langle 111 \rangle$, а точками отмечены узлы решетки.

В щелочно-галогидных кристаллах, подвергавшихся действию ионизирующего облучения при очень низких температурах, встречается дефект, похожий на краудион. В хлористом натрии этот



Ф и г. 9.6. *H*-центр в кристалле NaCl.

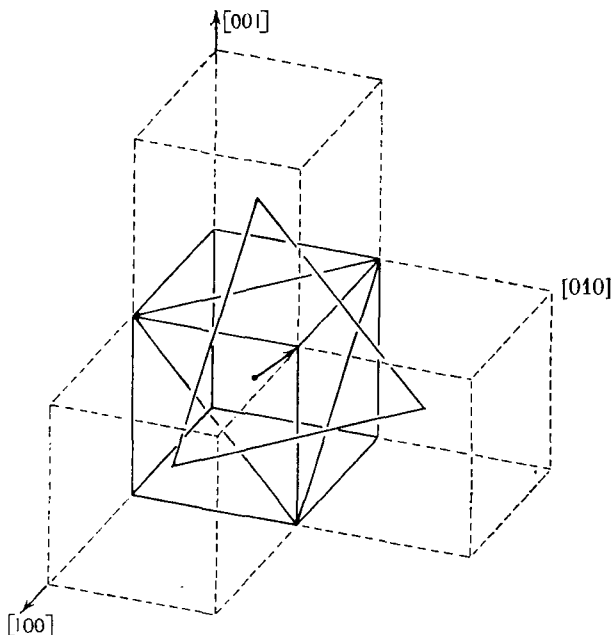
Плоскость чертежа совпадает с $\{001\}$. Релаксационные смещения не показаны.

дефект, называемый *H*-центром, состоит из атома хлора, расположившегося в плотно упакованном ряду $\langle 110 \rangle$ из ионов хлора Cl^- (фиг. 9.6). Наличие такого дефекта надежно подтверждается на опыте благодаря его электронным свойствам.

В процессе движения точечного дефекта от одного положения равновесия к другому электронная конфигурация дефекта меняется. Получающееся при этом возрастание внутренней энергии определяет частоту передвижения согласно формуле (9.9). Точно

¹⁾ В настоящее время существование краудионов показано на опыте, см., например, работу В. Н. Рожанского и др. [7*]. — *Прим. ред.*

вычислить такие изменения трудно, но можно привести некоторые интересные качественные наблюдения. Например, в о. ц. к.-металле движущаяся вакансия должна преодолеть два положения максимальной энергии, прежде чем достигнет нового положения равновесия. Это показано на фиг. 9.7; из приведенной схемы видно, что атом, который меняется своим местом с вакансией, должен протиснуться поочередно через центры двух атомных

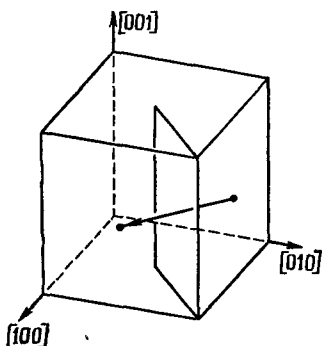


Ф и г. 9.7. Путь атома, перескакивающего в ближайший вакантный узел в о.ц.к.-кристалле.

треугольников. Между этими двумя треугольниками у атома есть немного больше места, так что локальный минимум энергии получается в точке, отвечающей середине того расстояния, на которое атом перескакивает. (На фиг. 9.7 не учтены смещения ближайших к вакансии атомов из их нормальных положений, что недопустимо для щелочных металлов, где такие релаксационные смещения могут оказаться большими.) Если вакансия движется в г. ц. к.-металле, замещающий ее атом должен пройти только через единственный прямоугольник из атомов (фиг. 9.8). На модели плотно упакованных шаров, которая годится для такого «совершенного» металла, как медь, можно видеть, что этот прямоугольник вынужден расширяться, чтобы атом мог сквозь него протиснуться.

Можно полагать, что, когда весь этот прямоугольник расширится, конфигурация в средней точке пути атома будет отвечать наибольшей энергии.

Есть два основных возможных способа передвижения межузельного дефекта, состоящего просто из одного лишнего атома, расположенного между двумя атомами в их нормальных положениях. Лишний атом может или перескакивать в соседнее эквивалентное междоузлие, или замещать атом, занимающий нормаль-



Ф и г. 9.8. Путь атома, перескакивающего в ближайший вакантный узел в г.ц.к.-кристалле.

ное положение, а этот атом в свою очередь перескакивает в соседнее междоузлие. Подобный механизм перемещения называется межузельным скачком. Полагают, что таков механизм передвижения межузельного иона Ag^+ сквозь кристалл AgBr .

Можно предположить, что подвижность несимметричного дефекта должна быть анизотропной. Например, краудион (фиг. 9.5) должен передвигаться в направлении своей оси очень легко путем ряда весьма малых атомных сдвигов. Подвижность более простых дефектов может оказаться анизотропной из-за кристаллографической анизотропии. Например, в графите (фиг. 3.1, *e*) вакансиям легче двигаться по слою сильно связанных атомов углерода в плоскости базиса, чем от одного такого слоя к другому.

9.5. Опыты с равновесными точечными дефектами

Есть разные способы введения точечных дефектов в кристалл. Наилучший метод разделения дефектов — это нагревание кристалла до температуры, при которой его точечные дефекты будут находиться в равновесии. Тогда в кристалле может присутствовать множество точечных дефектов только одного типа с достаточно малой энергией образования. При низких температурах точечные дефекты могут создаваться облучением или пластическим деформированием кристалла. У обоих этих методов есть тот недостаток, что они вводят множество дефектов разных типов, влияние которых на кристалл и друг на друга трудно разделить. Это относится

в первую очередь к тем случаям, когда дефекты изучаются с помощью какого-либо свойства кристалла, в котором один тип дефектов не отличается от другого; особенно интересны опыты, позволяющие до какой-то степени выявить такие различия.

Наиболее достоверные результаты получены в опытах при высоких температурах с кристаллами, содержащими равновесные количества точечных дефектов.

Такого типа опыты провели Симмонс и Баллуффи [8], измерявшие изменение параметра решетки и длины стержней из г. ц. к.-металлов в зависимости от их температуры. Принцип опыта заключается в следующем: всякий раз как рождается вакансия, когда атом перескакивает на поверхность кристалла, на границу зерна или на дислокацию, в металле высвобождается один незанятый атомом узел. Объем металла должен был бы при этом возрастать на величину объема одного атома в совершенном кристалле, если бы не то обстоятельство, что атомы вокруг вакансии слегка сдвигаются со своих нормальных положений в узлах решетки. Эта релаксация распространяется к поверхности кристалла как упругий сдвиг, который заставляет поверхность кристалла двигаться в сторону сжатия. Поэтому полное изменение объема, получающееся при добавлении n вакансий к N атомам, равно

$$\Delta V/V = n/N + (\Delta V/V)_e, \quad (9.19)$$

где $(\Delta V/V)_e$ — изменение объема, вызванное упругим сдвигом. Оказывается, что измеренное с помощью рентгеновских лучей изменение параметра решетки, которое является следствием упругого сдвига, вызванного равномерно распределенными точечными дефектами, как раз равно тому, какое получилось бы при равномерном расширении $(\Delta V/V)_e$. Значит, изменение параметра решетки $\Delta a/a$ равно

$$\Delta a/a = (1/3) (\Delta V/V)_e. \quad (9.20)$$

Малое относительное изменение длины стержня $\Delta L/L$ равно

$$\Delta L/L = (1/3) (\Delta V/V).$$

Из соотношений (9.19) и (9.20) имеем

$$\Delta L/L = n/3N + \Delta a/a.$$

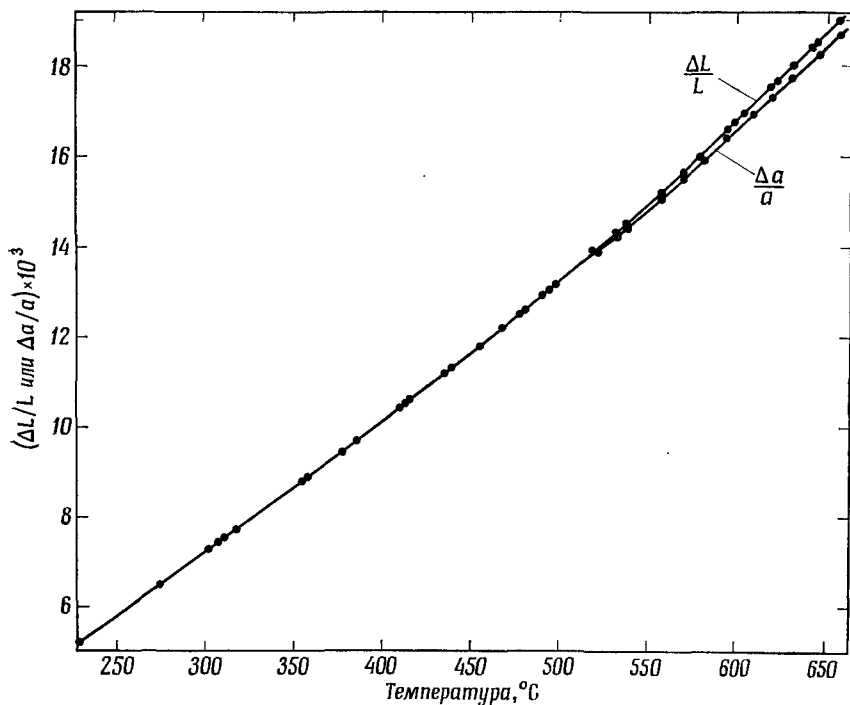
Окончательно получаем

$$n/N = 3 (\Delta L/L - \Delta a/a). \quad (9.21)$$

Из фиг. 9.9 видно, как по мере повышения температуры и генерирования вакансий увеличивается разность между относительными изменениями длины и параметра решетки алюминиевого стержня. Несмотря на то что здесь требуются очень точные измерения, в таких опытах все же удалось непосредственно измерить

равновесную концентрацию вакансий в нескольких г. ц. к.-металлах; полученные значения приведены в табл. 9.3.

Формулой (9.21), очевидно, можно пользоваться, чтобы описывать влияния тех дефектов, появление которых увеличивает или



Ф и г. 9.9. Экспериментальные данные Симмонса и Баллуффи [8] по температурной зависимости изменений параметров решетки и линейных размеров кристаллов серебра (чистота 99,999%).

уменьшает число атомных узлов. Если добавлено ΔN узлов, то

$$\Delta N/N = 3 (\Delta L/L - \Delta a/a). \quad (9.22)$$

Генерация внедренного атома на поверхности кристалла, на границе зерна или на дислокации нарушает один атомный узел, поэтому, если преобладающими точечными дефектами будут межузельные атомы, измеренное значение $\Delta L/L - \Delta a/a$ будет отрицательным.

Для исследования равновесных точечных дефектов был использован также метод, основанный на измерениях электропроводности. Этот метод удобнее применять к ионным кристаллам, чем к металлам, потому что вся проводимость ионного кристалла

Таблица 9.3

Относительное число вакантных узлов n/N
в равновесном состоянии
при температуре плавления

Материал	n/N при температуре плавления	Метод	Источник
Au	$7,2 \cdot 10^{-4}$	Измерение длины стержня и параметра решетки	[8]
Ag	$1,7 \cdot 10^{-4}$	То же	[9]
Cu	$1,9 \cdot 10^{-4}$	» »	[10]
Al	$9,4 \cdot 10^{-4}$	» »	[11]
Pb	$2 \cdot 10^{-4}$	» »	[12]
Na	$7,5 \cdot 10^{-4}$	» »	[13]
NaCl	$2,8 \cdot 10^{-4}$	Измерение электропроводности	[14]
KCl	$1,6 \cdot 10^{-4}$	То же	[14]

может быть обусловлена его заряженными точечными дефектами; между тем как у металла рассеяние электронов точечными дефектами обуславливает лишь малую долю высокотемпературного сопротивления. Например, проводимость NaCl при высоких температурах обусловлена дефектами Шоттки. Если электрическое поле напряженностью $1 \text{ В} \cdot \text{см}^{-1}$ заставляет вакансии натрия и хлора двигаться со скоростями μ^+ и $\mu^- \text{ см} \cdot \text{с}^{-1}$ соответственно, то электропроводность, обусловленная дефектами Шоттки, концентрация которых в 1 см^3 равна c , будет

$$K = c(\mu^+ + \mu^-) e, \quad (9.23)$$

где e — заряд электрона. По-видимому, во всех галогенидах щелочных металлов, за исключением солей цезия, катионные вакансии подвижнее анионных. Подвижность ионов хлора в NaCl определяется путем измерения количества вещества, переносимого к аноду и катоду при пропускании тока через кристалл NaCl. Как оказывается, доля тока, переносимого ионами натрия, движущимися к катоду (число переноса ионов Na^+), близка к единице. Следовательно, равенство (9.23) приближенно можно записать в виде

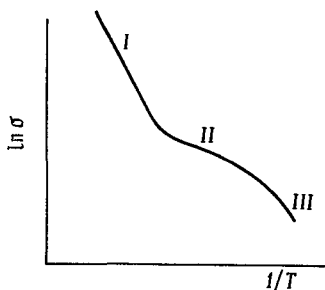
$$K = c\mu^+ e. \quad (9.24)$$

Если известна подвижность μ^+ , то проводимость K непосредственно служит мерой концентрации дефектов Шоттки. Подвижность μ^+ можно определить по проводимости кристалла, содержащего заданную концентрацию c_i примеси двухвалентных ионов, например Cd^{2+} . Введение двухвалентного катиона приводит к обра-

зованию вакансии иона натрия, и общее число этих вакансий может значительно превысить равновесное число вакансий в чистом кристалле. Проводимость тогда станет равной

$$K = c_i \mu^+ e. \quad (9.25)$$

Формулой (9.25) можно пользоваться, только если температура достаточно низка. Это объясняется тем, что равновесная концентрация дефектов Шоттки должна быть мала по сравнению с c_i , но достаточно высока, чтобы немногие вакансии ионов натрия



Фиг. 9.10. Температурная зависимость электропроводности кристалла NaCl с небольшой добавкой катионной примеси (доля катионов составляет примерно 10^{-4}).

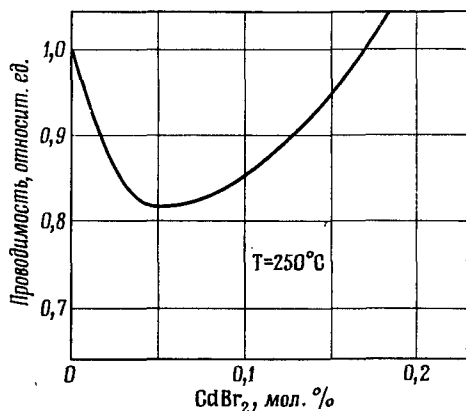
были бы связаны с двухвалентными ионами, притягивающими их из-за противоположного знака электрических зарядов. На фиг. 9.10 схематически показано, как меняется в зависимости от температуры проводимость кристалла, содержащего малое количество примесей. В области I, где много дефектов Шоттки, проводимость почти такая, как в чистом кристалле. Наклон прямой здесь дает энергию активации E_I , в которую входит как энергия образования дефекта Шоттки $(E^+ + E^-)/2$, так и энергетический барьер для движения катионной вакансии, который влияет на подвижность μ^+ :

$$E_I = E_M^+ + (1/2) (E^+ + E^-). \quad (9.26)$$

В области II проводимость контролируется катионными вакансиями, появившимися из-за наличия двухвалентной примеси, и в этой области наклон прямой дает только E_M^+ . При дальнейшем понижении температуры в области III проводимость падает еще круче, что обусловлено ассоциацией катионных вакансий и примесных ионов, а может быть, объединением дефектов в еще более крупные скопления.

Наглядным примером опытов, в которых по проводимости можно разделить типы дефектов, могут служить измерения, проведенные на кристаллах AgBr с примесью CdBr₂. При введении ионов Cd²⁺ проводимость AgBr сначала падает, а затем при дальнейшем повышении содержания кадмия проходит через минимум

(фиг. 9.14). Это странное поведение можно объяснить, предположив, что в чистом кристалле AgBr носителями тока являются в основном межузельные ионы Ag^+ . Вакансии ионов Ag^+ , которые



Ф и г. 9.14. Влияние добавок CdBr_2 на электропроводность AgBr [15].

вводятся двухвалентными ионами Cd^{2+} , уничтожают некоторое количество межузельных ионов Ag^+ , но если их концентрация достаточно высока, то они сами переносят столько электрических зарядов, что эта потеря восполняется.

9.6. Опыты на закаленных металлах

Самые очевидные доказательства существования равновесных точечных дефектов следуют из измерений при температурах, близких к температурам плавления. Немало данных получено и путем измерений на закаленных металлах. Если охлаждать металл достаточно быстро, то можно «заморозить» точечные дефекты при низких температурах, при которых их гораздо легче изучать. Однако здесь возникает практическая трудность: если закалку производить недостаточно быстро, то на ее начальной стадии меняется общее число дефектов, тогда как слишком быстрая закалка создает резкие температурные градиенты, приводящие к возникновению пластической деформации или к разрушению. В связи с этим эксперименты с закалкой ограничиваются обычно металлами, поскольку чувствительность к тепловому удару у металлов, как правило, меньше, чем у неметаллов.

Из свойств закаленных металлов чаще всего изучают электросопротивление. Его можно измерять быстро и точно, но, к сожалению, результаты этих измерений не позволяют выявить различия между дефектами разных типов, потому что все они вносят свой вклад в электросопротивление металла. В обычных опытах тонкую металлическую проволочку закалывают в соляном

растворе или в жидком гелии, где она охлаждается со скоростью 10^4 или 10^5 град·с⁻¹.

Измерения при температуре жидкого гелия имеют то преимущество, что здесь сопротивление идеального кристалла становится весьма малым и основная часть измеряемого сопротивления обусловлена дефектами, тогда как при комнатной температуре увеличение сопротивления, вызванное закалочными дефектами, составляет лишь несколько процентов. Энергию активации легко рассчитать, измеряя величины сопротивлений для металла, закаленного от разных температур, и подставляя их в равенство

$$\Delta\rho = A \exp(-E/kT), \quad (9.27)$$

где $\Delta\rho$ — измеренный прирост сопротивления после закалки от температуры T . Если считать, что прирост сопротивления вызван дефектами только одного типа и прямо пропорционален их концентрации, то энергию активации E в уравнении (9.27) можно отождествить с энергией образования этих дефектов.

Такие измерения проводились преимущественно на г. ц. к.-металлах, где преобладающим типом дефектов почти наверняка являются вакансии. Опыты по закалке о. ц. к.-металлов редко дают успешный результат отчасти из-за того, что эти металлы легко захватывают примеси. Считается, что в о. ц. к.-металлах отношение энергии образования вакансии к энергии ее движения велико, а поэтому при закалке довольно трудно сохранить реальную концентрацию вакансий. Тем не менее для о. ц. к.-металлов все же были получены некоторые результаты; они включены в табл. 9.4.

Большинство данных по энергии движения вакансий, приведенных в табл. 9.4, получено из измерений скорости возврата электрического сопротивления к его нормальному значению при повторном нагреве закаленного металла. Лишь только достигается температура, при которой становится возможной миграция точечных дефектов, их концентрация понижается до равновесного значения, потому что дефекты объединяются с другими точечными дефектами или аннигилируют на стоках, например на поверхности кристалла или на дислокациях. Возврат электросопротивления можно проследить разными способами. При изохронном отжиге образец нагревают до нескольких последовательно возрастающих температур с постоянной скоростью или в течение короткого фиксированного времени; при изотермическом отжиге возврат идет при постоянной температуре. Еще один метод заключается в том, что в процессе изотермического отжига внезапно резко повышают температуру (фиг. 9.12).

Энергию активации можно определить, подставляя в уравнение

$$(\rho/dt)_1/(\rho/dt)_2 = \exp[-(E_M/k)(1/T_1 - 1/T_2)] \quad (9.28)$$

Таблица 9.4

Энергии образования E_f и миграции E_M вакансионных дефектов в металлах и энергии активации для самодиффузии E_{SD}

V_1 — единичная вакансия, V_2 — дивакансия,
 E_b — энергия связи дивакансий (ориентировочные значения)

Материалы	Дефект	E_f , эВ	Источник	E_M , эВ	Источник	E_{SD}	Источник
Ag	V_1 V_2	1,1 $E_b=0,38$	[16] [16]	0,83 0,57	[16] [16]	1,91	[17]
Al	V_1 V_2	0,76 $E_b=0,17$	[18] [21]	0,65 0,5	[19] [21]	1,4	[20]
Au	V_1 V_2	0,98 $E_b=0,3$	[22] [24]	0,82 0,7	[22] [24]	1,81	[23]
Cu	V_1 V_2	1,14	[25]	1,08 0,71	[26] [25]	2,04	[27]
Ni	V_1	1,4	[28]	1,5	[29]	2,7	[30]
Pt	V_1	1,51	[31]	1,38	[31]	2,89	[32]
Na	V_1	0,42	[33]			0,45	[34]
Mo	$V_1?$	2,5	[35]			4,0	[36]
W	$V_1?$	3,3	[37]	1,93	[37]	5,23	[38]
Mg	$V_1?$	0,89	[39]	0,52	[39]	1,39	[40]
Sn	$V_1?$	0,51	[41]	0,68	[41]	1,04	[42]

отношение скоростей возврата в точку, где пересекаются кривые температурной зависимости для двух температур T_1 и T_2 .

Уравнение (9.28) легко вывести для случая, когда возврат обусловлен единым термически активированным механизмом, например диффузией вакансий к стокам; тогда

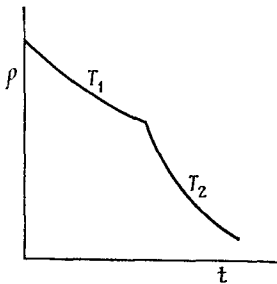
$$dc/dt = f(c) \exp(-E_M/kT)$$

и

$$d\rho/dt \sim dc/dt. \quad (9.29)$$

Функция $f(c)$ зависит от типа и числа стоков. Лучше определять энергию активации E_M по способу внезапного изменения температуры, а не путем сопоставления зависимостей, снятых при различных температурах, из-за большей вероятности того, что функция $f(c)$ остается неизменной.

К сожалению, есть основания сомневаться в том, что процесс возврата в общем случае обусловлен единым механизмом. Если



Ф и г. 9.12. Изменение электросопротивления закаленного металла в процессе двухстадийного отжига (вторая стадия характеризуется резким подъемом температуры от T_1 до T_2).

концентрация вакансий не ниже некоторого трудно определяемого значения, то в процессе возврата изолированные вакансии объединяются друг с другом, образуя дивакансии или еще большие скопления. Тогда процесс возврата может стать сложным, состоящим как из объединения вакансий, дивакансий и, быть может, больших скоплений друг с другом, так и из аннигиляции некоторых дефектов на стоках.

В таком случае экспериментально определенную энергию активации трудно интерпретировать. Критерием для интерпретации результатов по о. ц. к.-металлам является то, что энергия движения E_M изолированной вакансии должна подчиняться соотношению (9.10), т. е.

$$E_f + E_M = E_{SD}.$$

Это равенство основывается на предположении, что самодиффузия в о. ц. к.-металле осуществляется путем перемещения равновесных вакансий металла. Расхождения с формулой (9.10) привели к тому, что некоторые результаты объясняют движением дивакансий; при этом получают весьма ориентировочные значения энергий связи дивакансий и энергий движения дивакансий, приведенные в табл. 9.4.

9.7. Радиационные дефекты

Металлы довольно резко отличаются от неметаллов по легкости образования дефектов решетки под действием облучения. В металлах точечные дефекты создаются лишь теми частицами, которые способны непосредственно выбивать атомы из их нормальных положений в решетке. Излучение, только возбуждающее электроны, не создает дефектов решетки, за исключением того случая, когда возбужденные электроны сами могут смещать атомы, как это имеет место при возбуждении электронов γ -лучами. В противоположность этому во многих неметаллах ионизирующие излучения, например рентгеновские лучи, создают сильные повреждения. Это объясняется большим постоянством электронного возбуждения в неметаллах. В частности, в NaCl, облученном рентгеновскими лучами, ион хлора может приобрести положительный заряд путем потери двух своих электронов. Это ненормальное состояние может существовать достаточно долго, так что ион хлора переместится в межузельное положение из своего положения, ставшего энергетически невыгодным (механизм Варли).

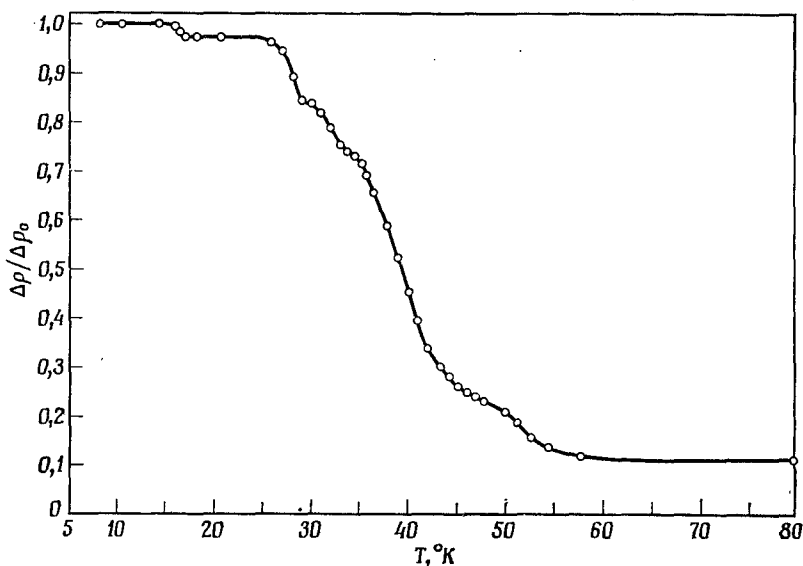
Поскольку смещенный атом оставляет за собой вакансию, облучение обычно создает одинаковые количества вакансий и межузельных атомов. Метод создания только межузельных атомов заключается в том, что поверхность материала бомбардируют ионами аргона, слишком медленными, чтобы проникнуть внутрь, но достаточно быстрыми, чтобы выбить атомы в межузельные положения [43]. Межузельный атом может быть создан на некоторой глубине путем обменных соударений, при которых атом, выбитый с поверхности, меняется местом с соседним атомом, расположенным глубже, а тот — со следующим и т. д., пока в конце концов атом, энергия которого недостаточна для замещения соседнего атома, не перейдет в междоузлие. Этот процесс легче всего идет вдоль плотно упакованного ряда атомов. Ввести межузельные атомы этим методом удается (даже с помощью обменных соударений) лишь на глубину около 100 Å.

Быстрые нейтроны создают радиационные повреждения, равномерно распределенные по всему образцу (обычного размера). Между соударениями они пробегают расстояние в несколько сантиметров, поэтому, когда происходит головное столкновение, выбитый атом смещается так сильно, что он пробегает большое расстояние (до нескольких тысяч параметров решетки) и сам смещает сотни других атомов. Большинство смещений происходит в конце пути этого «первичного смещения», где они образуют область очень больших смещений, так называемый *клин смещения*. В результате обменных соударений межузельные атомы концентрируются, вероятно, во внешних областях клина, а вакансии накапливаются в его центре.

Более равномерное распределение пар вакансии — межузельный атом можно получить, облучая металлическую фольгу электронами, энергии которых хватает лишь на то, чтобы сместить один атом. Максимальная энергия, которую электрон с энергией E может передать атому массы M , равна

$$E_{\text{макс}} = 2E(E + 2mc^2)/Mc^2, \quad (9.30)$$

где m — масса покоя электрона, а c — скорость света. Для большинства металлов энергия, которую нужно сообщить атому, чтобы его сместить, лежит между 20 и 40 эВ. Сравнение с энергией,



Фиг. 9.13. Изохронный возврат в облученной электронами меди, содержащей дефекты Френкеля (относительная концентрация дефектов порядка 10^{-6}) [44].

вычисляемой по формуле (9.30), показывает, что электроны с энергией 1 МэВ в общем случае могут сместить один или два атома.

Хотя природа повреждений, создаваемых при низких температурах электронами с энергией 1 МэВ, сравнительно проста, эти повреждения трудно удалить путем отжига. Особенностью здесь является то, что возврат в значительной степени протекает уже при очень низкой температуре. На фиг. 9.13 показан изохронный возврат электрического сопротивления меди, облученной электронами в температурном интервале 10—80 К. Это так называемая 1-я стадия возврата; в ней отчетливо различаются пять подстадий. Малое избыточное сопротивление, остающееся к концу 1-й под-

стадии, исчезает при последовательно повышающихся температурах в течение трех последующих подстадий. В меди, облученной нейтронами, возврат происходит в общем так же, только добавляется еще пятая подстадия. Нельзя точно ответить на вопрос о том, какими механизмами обусловлены эти разные стадии, но, по-видимому, некоторая часть первой из них представляет собой самоаннигиляцию соединившихся пар вакансия — межузельный атом. Пятая подстадия, вероятно, включает уничтожение призматических дислокационных петель, возникающих из скоплений сходных дефектов. Такие петли обычно наблюдаются в электронном микроскопе на любом сильно облученном материале.

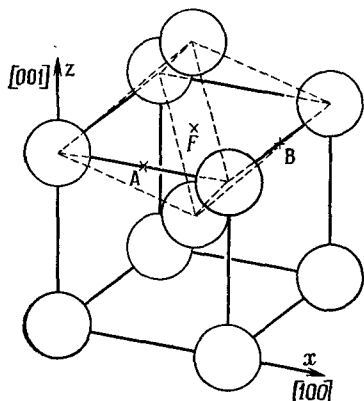
9.8. Неупругость и симметрия точечных дефектов

Конфигурация атомов вокруг точечного дефекта может быть такова, что нужно точно указывать ее ориентировку по отношению к кристаллографическим осям. Например, межузельный дефект, центр которого находится в точке G с координатами $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ на фиг. 9.3, может располагаться вдоль любого из трех направлений $\langle 100 \rangle$. На фиг. 9.3 он вытянут вдоль $[010]$. Эти три возможные ориентировки кристаллографически эквивалентны. Свободные энергии всех кристаллографически эквивалентных конфигураций обычно одинаковы, но если на кристалл действует внешнее напряжение, то эти энергии могут стать разными. Тогда дефекты будут стремиться переориентироваться так, чтобы возросло число дефектов с меньшей энергией. Может ли напряжение выделить различные ориентировки дефекта или не может, это зависит от симметрии конфигурации дефекта. Поэтому опыты, которые обнаруживают переориентацию дефектов под действием напряжения, способны выявить различные конфигурации дефектов.

Наиболее известным примером переориентации дефектов, вызванной напряжением, является перераспределение межузельных атомов углерода (или атомов азота), присутствующих как примесь в железе. Каждый атом углерода находится в центре сплюсченного октаэдра из атомов железа, как, например, в узле F на фиг. 9.14. Симметрия расположения атомов вокруг F такова, что точечная группа симметрии в узле F есть $4/m\bar{3}m$, т. е. узел F имеет тетрагональную симметрию. В узле F ось симметрии 4-го порядка параллельна оси z . Узлы A и B являются положениями, эквивалентными F в элементарной ячейке, и тоже обладают точечными группами симметрии $4/m\bar{3}m$, но их оси симметрии 4-го порядка параллельны соответственно осям x и y .

Это легко обнаружить, если нарисовать ориентации сплюсченных октаэдров, образованных атомами железа, которые являются соответственно соседями узлов A и B . В каждом из этих узлов два атома железа, самые близкие к атомам углерода, лежат вдоль

оси 4-го порядка, поэтому можно ожидать, что атом углерода расталкивает их. Следовательно, если растягивающее напряжение приложено вдоль z -оси, то энергия атома, находящегося в междоузлии F , меньше, чем в междоузлиях A или B . Поэтому некоторые из атомов углерода будут перепрыгивать из положений A и B



Фиг. 9.14. Междузельные положения в железе, занятые атомами С или N. Штриховыми линиями показан сплюснутый октаэдр атомов железа, окружающих узел F .

в положения F , вызывая тем самым рост растягивающего напряжения в направлении z . Скорость этого процесса зависит от частоты перескоков атомов углерода. Если убрать внешнее напряжение, то распределение атомов углерода будет стремиться снова к беспорядочному, поскольку F -положения больше не являются предпочтительными; в результате деформация снова становится равной нулю. Если приложить растягивающее напряжение не вдоль $\langle 001 \rangle$, а вдоль $\langle 111 \rangle$, то три положения A , B и F , расположенные симметрично по отношению к этой оси растяжения, останутся энергетически равноценными и дополнительного сдвига не возникает.

Деформация, зависящая от времени, но обратимая, называется неупругой. Если неупругая деформация ε_a под действием малого постоянного напряжения σ вызвана единственным простым процессом, например, описанным выше, то оказывается, что ε_a растет во времени по закону

$$d\varepsilon_a/dt = (1/\tau) (\varepsilon_a^\infty - \varepsilon_a). \quad (9.31)$$

Из этого соотношения следует, что в конечном счете деформация стремится к значению ε_a^∞ . Величина ε_a^∞ пропорциональна приложенному напряжению, так что можно записать

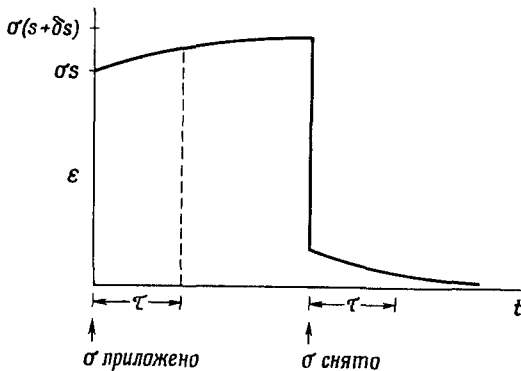
$$\varepsilon_a^\infty = \sigma \delta_s. \quad (9.32)$$

Постоянная δ_s называется *релаксацией податливости*, а величина τ , имеющая размерность времени, называется *временем релаксации* при постоянном напряжении. Если неупругая деформация

вызвана движением отдельных атомов, то время релаксации пропорционально времени, за которое атом делает один скачок. Интегрируя уравнение (9.31) и добавляя мгновенный упругий сдвиг, получаем

$$\text{Полная деформация} = \sigma s + \sigma \delta s \{1 - \exp(-t/\tau)\}, \quad (9.33)$$

где s — упругая податливость. Обычно s по крайней мере на порядок больше, чем δs . Ход этого процесса показан на фиг. 9.15.



Ф и г. 9.15. Влияние релаксации на сдвиг, вызванный постоянным напряжением σ .

Неупругую деформацию в кристалле часто можно обнаружить на опыте по вязкому торможению, которое она оказывает на любые механические колебания кристалла, в результате чего они затухают. Этот эффект называется затуханием или *внутренним трением*. При определенной частоте величина затухания колебаний максимальна. Если эта частота очень велика, то у неупругой деформации не хватает времени, чтобы проявиться, и затухания нет. С другой стороны, если период колебаний (величина, обратная частоте) очень велик по сравнению со временем релаксации τ , определяемым по формуле (9.31) или (9.33), то у неупругой деформации достаточно времени для достижения своего полного значения, определяемого равенством (9.32), и поэтому для данных конкретных колебаний ее нельзя отличить от упругой деформации. В этом случае тоже нет затухания. Можно показать, что максимальное затухание наблюдается, если период колебаний сравним со временем релаксации или же если он равен $2\pi\tau$.

Влияние приложенного напряжения на распределение точечных дефектов по различным ориентировкам зависит от деформации, которую эти дефекты создают в кристалле. Если макроскопическая деформация, обусловленная дисперсией дефектов какой-либо данной ориентации, такова, что приложенные к кристаллу

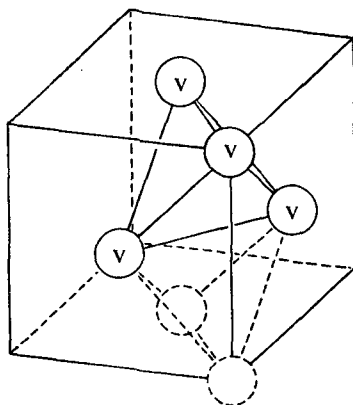
силы совершают работу, когда происходит эта деформация, то эта ориентировка будет благоприятной по сравнению с ориентациями, создающими деформации, при которых внешние силы не совершают работу. Если случится так, что две разные ориентации создадут одинаковые деформации (конечно, отнесенные к фиксированным осям координат), то их нельзя отличить одну от другой с помощью приложенного напряжения любого вида. Что касается напряжения, которое может быть создано дефектом, то оно не совсем произвольно: оно должно быть совместимо с симметрией самого дефекта.

Понятие симметрии дефекта определяется следующим образом. Чтобы представить себе точечную группу операций симметрии в центре дефекта¹⁾, рассмотрим бесконечный кристалл, содержащий единственный дефект. Найденная таким образом группа элементов симметрии определяет симметрию кристалла, содержащего дефект; для краткости будем называть ее *симметрией дефекта*. Очевидно, что однородная макроскопическая деформация, обусловленная равномерно распределенными дефектами данной ориентации, не может быть менее симметричной, чем сам дефект, поскольку симметрия дефекта ограничена смещениями окружающих его атомов, а эти смещения в свою очередь определяют деформацию. Однако симметрия деформации может быть и выше, чем симметрия дефекта. Однородная деформация сама по себе центросимметрична (разд. 5.2), поэтому, например, деформация, обусловленная равномерно рассеянными парами катионная вакансия — анионная вакансия в ионном кристалле, должна быть центросимметричной, хотя сам по себе этот дефект не имеет центра симметрии.

Ограничения типов деформации, которые могут быть созданы дефектом каждой данной симметрии, можно найти, пользуясь табл. 4.2, если вместо «кристаллографическая система» читать «система дефекта». Например, из этой таблицы можно видеть, что единственным типом характеристической поверхности деформации, согласующимся с кубической симметрией, является сфера (т. е. чистое расширение). Поэтому дефект кубической симметрии никак не может быть причиной неупругости под действием однородного напряжения, поскольку характеристическая поверхность его напряжения одинакова для всех ориентаций. Для иллюстрации этого на фиг. 9.16 изображен дефект кубической симметрии — гипотетическая тетравакансия в г. ц. к.-металле. Его симметрия $\bar{4}3m$, и у него может быть две различные ориентации (на фиг. 9.16

¹⁾ Центр дефекта, если его положение не является очевидным, можно определить как ту точку внутри объема дефекта, в которой число операций симметрии максимально. Большую помощь окажут таблицы пространственных групп, например Интернациональные таблицы по рентгеновской кристаллографии; в них перечислены точечные группы симметрии для разных позиций в элементарной ячейке.

одна из них показана сплошными линиями, а вторая — штриховыми). Относительные количества этих двух ориентаций не могут меняться в результате действия какого-то приложенного напряжения. Примером дефекта более низкой симметрии может служить атом углерода в железе, симметрия которого соответствует симметрии узла типа F на фиг. 9.14, если полагать, что смещения



Ф и г. 9.16. Гипотетическая тетравакансия в г. ц. к.-металле.

Штриховыми линиями показаны возможные ориентации вакансионного тетраэдра.

окружающих атомов железа соответствуют симметрии этого узла. В этом случае точечная группа симметрии дефекта $4/m\bar{3}m$ тетрагональная. Характеристической поверхностью напряжения, совместимой с тетрагональным дефектом, является поверхность вращения вокруг оси симметрии 4-го порядка в дефекте (см. табл. 4.2). Показанные на фиг. 9.14 три ориентации межузельного углерода (F , A и B) различаются по своим ориентировкам по отношению к оси 4-го порядка, поэтому в общем случае приложенное напряжение создаст между ними различия.

Будет ли влияние приложенного напряжения зависеть от ориентации дефектов, каждая из которых создает различные деформации, зависит от того, насколько различна величина работы, которую совершает в кристалле это напряжение, в каждом отдельном случае. Иногда в результате соответствующего исследования можно выбрать частный вид напряжения, которое не может изменить ориентацию дефекта. Здесь уместно привести уже упоминавшийся пример отсутствия эффекта неупругости для растягивающего напряжения, приложенного в направлении $\langle 111 \rangle$ в кристалле железа, содержащем межузельные атомы углерода. Новик и Геллер [45] составили таблицы «правил отбора», по которым можно решить, будет ли наблюдаться эффект неупругости при действии данного растягивающего напряжения в кристалле, содержащем дефект данной симметрии.

Задачи

9.1. Зная, что энергия активации самодиффузии в меди равна 2,04 эВ, а энергия активации миграции вакансий равна 1,08 эВ, определите отношение равновесной концентрации вакансий при 1000° С к равновесной концентрации вакансий при 500°С.

9.2. Экспериментальные определения относительной концентрации вакансий в меди дали значения $8 \cdot 10^{-6}$ при 980° С и $16 \cdot 10^{-6}$ при 1060°С. По этим данным рассчитайте энергию образования и энтропию образования вакансий в меди.

9.3. Сравните концентрацию вакансий положительного иона в кристалле NaCl с примесью 10^{-4} молярных долей CaCl₂ с равновесной концентрацией в чистом кристалле NaCl при 400° С. Энергия образования дефекта Шоттки $E^+ + E^-$ равна 2,12 эВ, а концентрация дефектов Шоттки при температуре плавления 800° С равна $2,8 \cdot 10^{-4}$.

9.4. У кристалла закиси железа Fe_xO постоянная решетки $a = 4,30 \text{ \AA}$, а плотность равна $5,72 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$. Каков состав кристалла (т. е. значение x в формуле Fe_xO)? Четко определите ваши предположения о структуре этого кристалла.

9.5. Симмонс и Балдуффи наблюдали, что если стержень из серебра нагревается до температуры плавления, то относительное увеличение длины стержня превышает относительное увеличение его параметра решетки в $5,6 \cdot 10^{-5}$ раз. Предполагая, что единственными имеющимися дефектами являются изолированные вакансии, и принимая энтропию образования вакансий равной $1,5 k$, вычислите энергию образования вакансии E_f .

Если бы наряду с вакансиями присутствовали и дивакансии в количестве $1/10$ числа вакансий, то какова была бы ошибка в значении E_f , вычисленном в предположении о том, что имеются только одиночные вакансии?

9.6. Допустим, что дивакансия в г. ц. к.-металле состоит из двух соседних вакантных узлов. Определите число возможных положений дивакансии в одной элементарной ячейке г. ц. к.-решетки. Далее покажите, что при равновесии число дивакансий, приходящихся на число узлов решетки, равно

$$n_2/N = 6 \exp \left[- (2E_f - E_D)/kT \right].$$

Преобретите энтропией, которую дивакансия может внести в кристалл вследствие оказываемого ею влияния на колебания окружающих атомов.

9.7. Кристалл золота охлаждается от температуры плавления до 500° С. Вычислите отношение числа вакансий к числу дивакансий в кристалле при 500° С сначала в предположении, что поддерживается полное равновесие, а затем в предположении, что суммарное число вакантных узлов остается постоянным, но вакансии и дивакансии достигают равновесия между собой. Примите энергию образования вакансии равной 0,98 эВ, энергию связи дивакансии равной 0,3 эВ и отношение числа вакансий к числу дивакансий при температуре плавления 1063° С равным 20.

9.8. Рассмотрим атом в плотно упакованном гексагональном металле, перескакивающий в ближайший к нему вакантный узел. Сколько может быть существенно различных типов прыжков? В каждом из случаев нарисуйте схему кольца из соседних атомов, через которое атом должен протиснуться по пути к вакантному узлу, и сравните его с прямоугольником из атомов, через который приходится протискиваться, когда атом перескакивает в ближайший вакантный узел в г. ц. к.-металле (фиг. 9.8).

9.9. Какова самая удобная позиция для межузельных атомов в кристалле германия или кремния? Начертите и опишите схему кольца из атомов, через которое должен пройти межузельный атом, перемещающийся из такого положения в ближайшее положение такого же типа.

9.10. Стержень из золота нагревается до температуры плавления, при которой концентрация вакансий составляет $7,2 \cdot 10^{-4}$ от числа узлов решетки. Затем этот стержень закалывают так, что все вакансии, генерированные при температуре плавления, оказываются захваченными в металле. Если отжигать этот стержень при постоянной, чуть более высокой температуре, то наблюдается сокращение его размеров по мере уменьшения концентрации вакансий до ее равновесного, очень низкого значения. Если величина всего сжатия равна $1,1 \cdot 10^{-4}$, то какова будет величина изменения параметра решетки в процессе этого отжига?

9.11. Какова точечная группа симметрии перечисленных ниже дефектов:
а) пары вакансий, состоящей из анионной вакансии и ближайшей катионной вакансии в NaCl?

б) пары вакансий, состоящей из ближайших вакантных узлов в о. ц. к.-металле?

Для каждого из этих случаев определите то направление растягивающего напряжения, которое не внесет никакой неупругой деформации, связанной с наличием этого дефекта.

9.12. Какова кратность общей формы для точечной группы:

а) о. ц. к.-кристалла?

б) межузельного атома углерода в железе?

Каково соотношение между числом ориентаций, возможных для точечного дефекта, и кратностью общей формы для точечных групп кристалла и дефекта?

9.13. Если в кристалл окиси тория ThO_2 (структура флюорита) вводится примесь кальция, то ионы Ca^{2+} занимают положения ионов Th^{4+} , а недостаток положительных зарядов компенсируется вакансиями ионов O^{2-} . Считается, что ион Ca^{2+} и вакансия иона O^{2-} в ближайших соседних узлах связаны в пару. Определите:

а) число различных ориентаций такой пары;

б) ориентировки, которые можно различить с помощью электрического поля, приложенного вдоль [100];

в) ориентировки, которые можно различить с помощью растягивающего напряжения, приложенного в направлении [110].

ЛИТЕРАТУРА

1. Huntington H. B., Seitz F., Mechanism for Self-Diffusion in Metallic Copper, *Phys. Rev.*, **61**, 315 (1942).
2. Girafalco L. A., Weizer V. J., *J. Phys. Chem. Solids*, **12**, 260 (1960).
3. Mott N. F., Littleton M. J., Conduction in Polar Crystals, *Trans. Farad. Soc.*, **34**, 485 (1938).
4. Johnson R. A., Brown E., Point Defects in Copper, *Phys. Rev.*, **127**, 446 (1962).
5. Johnson R. A., Interstitials and Vacancies in α -Iron, *Phys. Rev.*, **134A**, 1329 (1966).
6. Paneth H. R., The Mechanism of Self-Diffusion in Alkali Metals, *Phys. Rev.*, **80**, 708 (1950).
- 7*. Рожанский В. Н., Назарова М. П., Светлов И. Л., Калашникова Л. К., *Phys. status solidi*, **41**, 59 (1970).
8. Simmons R. O., Balluffi R. W., Measurements on the Equilibrium Concentration of Lattice Defects in Gold, *Phys. Rev.*, **125**, 862 (1962).
9. Simmons R. O., Balluffi R. W., *Phys. Rev.*, **119**, 600 (1960).
10. Simmons R. O., Balluffi R. W., *Phys. Rev.*, **129**, 1533 (1963).
11. Simmons R. O., Balluffi R. V., *Phys. Rev.*, **117**, 52 (1960).
12. D'Heurle F. M., Feder R., Nowick A. S., *J. Phys. Soc. Japan*, **18**, Suppl., 184 (1963).

13. Feder R., Chrabnau H. P., *Phys. Rev.*, **149**, 464 (1966).
14. Dreyfus R. W., Nowick A. S., *J. Appl. Phys.*, **33**, Suppl., 473 (1962).
15. Tetlow J., *Ann. Phys.*, **6**, 68 (1949).
16. Doyama M., Koehler J. S., *Phys. Rev.*, **127**, 21 (1962).
17. Tomizuka C. T., Sonder E., *Phys. Rev.*, **103**, 1182 (1956).
18. Panseri C., Federighi T., *Phil. Mag.*, **3**, 1123 (1958).
19. DeSorbo W., Turnbull D., *Phys. Rev.*, **115**, 560 (1959).
20. Spokas J. J., Slichter C. P., *Phys. Rev.*, **113**, 1462 (1959).
21. Doyama M., Koehler J. S., *Phys. Rev.*, **134**, A522 (1964).
22. Bauerle J. E., Koehler J. S., *Phys. Rev.*, **107**, 1493 (1957).
23. Makin S. M., Bowe A. H., Le Claire A. D., *Proc. Phys. Soc., Lond.*, **70**, 545 (1957).
24. Kauffman J. W., Meshii M., *Lattice Defects in Quenched Metals*, Ed. Cotteril et al., Acad. Press, 1965.
25. Wright P., Evans J. H., *Phil. Mag.*, **13**, 521 (1966).
26. Remsteiner F., Lampert G., Seeger A., Schüle W., *Phys. Stat. Solidi*, **8**, 863 (1965).
27. Kuper A., Letaw H., Slifkin L., Tomizuka C. T., *Phys. Rev.*, **98**, 1870 (1955).
28. Nakamura J., *J. Phys. Soc. Japan*, **16**, 2167 (1961).
29. Schumacher D., Schüle W., Seeger A., *Z. Naturforsch.*, **17a**, 228 (1962).
30. Burgess O., Smoluchowski R., *J. Appl. Phys.*, **26**, 491 (1955).
31. Jackson J. J., *Lattice Defects in Quenched Metals*, Ed. Cotteril et al., Acad. Press, 1965.
32. Cattaneo F., Germagnoli E., Grasso F., *Phil. Mag.*, **7**, 1373 (1962).
33. Feder R., Chrabnau H. P., *Phys. Rev.*, **149**, 464 (1966).
34. Nachtrieb N. H., Catalano E., Weil J. A., *J. Chem. Phys.*, **20**, 1185 (1952).
35. Meakin J. D., Lawley A., Koo R. C., *Appl. Phys. Letters*, **5**, 133 (1964).
36. Askill J., Tomlin D. H., *Phil. Mag.*, **8**, 997 (1963).
37. Schultz H., *Acta Met.*, **12**, 761 (1964).
38. Danneberg W., *Metall.*, **15**, 977 (1961).
39. Beevers C. J., *Acta Met.*, **11**, 1029 (1963).
40. Shewmon P. G., Rhines F. N., *J. Metals*, **6**, 1024 (1954).
41. DeSorbo W., *J. Phys. Chem. Solids*, **15**, 7 (1960).
42. Klokholm E., Meakin J. D., *Bull. Am. Phys. Soc.*, **4**, 171 (1959).
43. Bowden P., Crandon D. G., *The Generation of Dislocations in Metals by Low Energy Ion Bombardment*, *Phil. Mag.*, **8**, 935 (1963).
44. Corbett J. W., Smith R. B., Walker R. M., *Phys. Rev.*, **114**, 1452 (1959).
45. Nowick A. S., Heller W. R., *Dielectric and Anelastic Relaxation of Crystals Containing Point Defects*, *Adv. Phys.*, **14**, 101 (1965).

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ЧТЕНИЯ

1. Damask A. C., Dienes G. I., *Point Defects in Metals*, Gordon a. Breach, 1963; имеется перевод: Дамаск А., Динс Дж., *Точечные дефекты в металлах*, изд-во «Мир», 1966.
2. Mott N. F., Gurney R. W., *Electronic Processes in Ionic Crystals*, Oxford, 1948; имеется перевод: Мотт Н. Ф., Герни Р. В., *Электронные процессы в ионных кристаллах*, ИЛ, 1950.
3. Girafalko L. A., *Atomic Migration in Crystals*, Blaisdell, New York, 1964.
4. Cotterill R. M. K., Doyama M., Jackson J. J., Meshii M. (Editors), *Lattice Defects in Quenched Metals*, Acad. Press, 1965.
5. Vineyard C. H., *Introduction to Radiation Defects in Inorganic Solids*, *Disc. Farad. Soc.*, **31** (1961).
- 6*. Сб. Вакансии и точечные дефекты, ИЛ, 1961.
- 7*. Конобеевский С. Т., *Действие облучения на материалы*, Атомиздат, 1967.
- 8*. Джин-Ичи Такамура, *Точечные дефекты*, в книге: *Физическое металловедение*, под ред. Кана, вып. 3, изд-во «Мир», 1968, стр. 87—138.

Двойникование

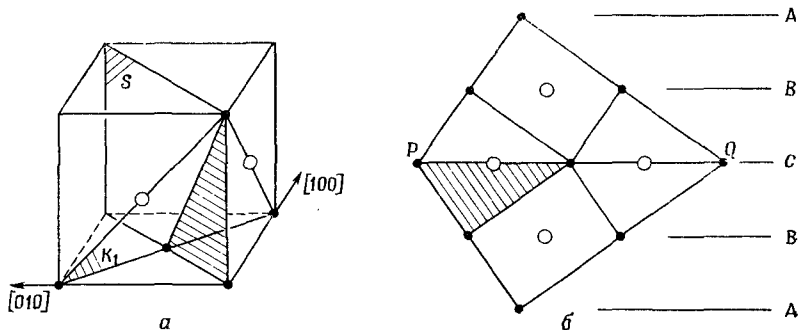
10.1. Введение

Когда кристалл состоит из частей, которые ориентированы друг относительно друга в соответствии с каким-нибудь законом симметрии, говорят, что кристалл *сдвойникован*. Наиболее часто встречающийся, но далеко не единственный закон симметрии при двойниковании состоит в том, что кристаллическая структура одной из частей кристалла является зеркальным отражением кристаллической структуры другой части. Кристаллографическая плоскость, которая служит плоскостью зеркального отражения, называется *плоскостью двойникования* или *двойниковой плоскостью*, а плоскость контакта между двумя частями двойника называется *композиционной плоскостью*; композиционная плоскость, как правило, совпадает с двойниковой плоскостью.

Сдвойникованные кристаллы часто получаются во время роста как из паров, так и в жидкой или твердой фазе. Однако можно сдвойниковать и уже выращенный монокристалл — путем механической деформации. Сдвойникованные кристаллы часто встречаются среди природных минералов, и не всегда ясно, возникли эти двойники во время роста или обусловлены деформацией. В данной главе мы будем иметь дело главным образом с деформационными, или механическими, двойниками, но важно понимать, что механическое двойникование представляет лишь одну сторону общего явления двойникования.

В качестве одного из наиболее простых примеров двойникования, которое может быть осуществлено различными способами, можно рассмотреть двойникование в г. ц. к.-металлах. В этом случае закон симметрии, связывающий различно ориентированные части кристалла, состоит в том, что одна часть кристалла является *зеркальным отражением* другой в плоскости (111). Поскольку плоскостью контакта между частями такого двойника обычно бывает сама плоскость (111), строение двойника можно представить, как показано на фиг. 10.1, б: структуры частей двойника являются зеркальными отражениями друг друга в плоскости контакта. Можно видеть, что взаимное расположение ближайших соседей на границе остается таким же, как в исходном кристалле, но в последовательности укладки плоскостей (111) наблюдается изменение, а именно последовательность *ABC ABC . . .* переходит

в $ABCBA$. . . Естественно предположить, что такое нарушение нормального порядка укладки плоскостей (111) может произойти в процессе роста кристалла. Экспериментальные данные свидетельствуют, что образование двойников роста — процесс, очень чувствительный к условиям роста. В г. ц. к.-кристаллах, выращиваемых из расплава, двойники образуются не очень часто, однако в пленках золота, получаемых осаждением из газовой фазы, а также в слоях меди, получаемых электроосаждением, всегда содержится множество двойников, причем в обоих случаях



Фиг. 10.1. Двойникование в г. ц. к.-металлах.

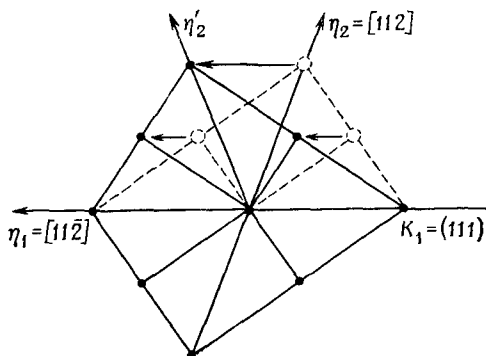
a — кубическая элементарная ячейка; b — строение двойника в проекции на плоскость $\{110\}$.

Черными кружками показаны некоторые атомы, лежащие на b в плоскости чертежа; светлые кружки отвечают атомам, лежащим на b выше или ниже плоскости чертежа. Плоскость сдвига S на b совпадает с плоскостью чертежа; K_1 — плоскость двойникования (и композиционная плоскость двойника) (PQ на b). Заштрихованы на a и b соответственные треугольники. Буквы A, B, C характеризуют последовательность укладки плоскостей (111) вдоль $[111]$.

чем больше скорость осаждения, тем выше плотность двойников. Сдвойникованные зерна часто находят в поликристаллах меди или α -латуни, подвергавшихся холодной обработке с последующим отжигом с целью рекристаллизации¹⁾. В рекристаллизованном материале встречаются ламели (пластинки) с прямолинейными боковыми сторонами, имеющие двойниковую ориентацию по отношению к остальной части зерна; они называются *двойниками отжига*, и их можно рассматривать как двойники, возникающие во время роста кристалла в твердой фазе. Интересно, что в алюминии двойники роста встречаются редко. Это может быть обусловлено высокой энергией двойниковой границы в алюминии.

¹⁾ Когда пластически деформированный материал нагревается до температуры, при которой может происходить самодиффузия, среди деформированных зерен зарождаются новые зерна, не имеющие внутренних напряжений; далее они растут, поглощая деформированные зерна. Этот процесс называется *рекристаллизацией*.

Из фиг. 10.2 видно, что сдвойникованный кристалл можно получить путем однородного сдвига части монокристалла. Отсюда сразу же следует, что образование двойников может служить одним из механизмов пластической деформации. На самом деле в г. ц. к.-металлах такой механизм наблюдается не очень часто; это связано с тем, что в них относительно легко осуществляется скольжение. Однако двойникование все же часто наблюдается в кристаллах Cu, Ag и Au во время последних стадий испытаний



Ф и г. 10.2. Образование двойника под действием сдвига. Штриховыми линиями очерчены детали структуры над композиционной плоскостью до сдвига.

на растяжение при низких температурах; было обнаружено также, что в Cu двойникование происходит под действием ударных нагрузок при обычных температурах.

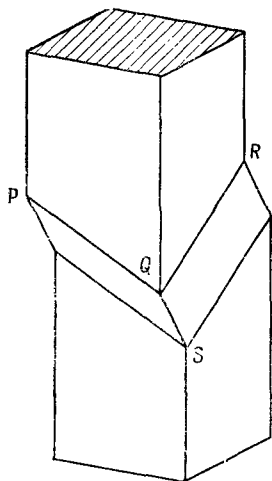
На фиг. 10.2 показаны минимальные перемещения атомов, необходимые для перевода кристалла в двойниковое положение. Смещение верхней части исходного монокристалла на $\frac{1}{6} [11\bar{2}]$ приводит к образованию дефекта упаковки. Если такое же (относительно предыдущего слоя) смещение произойдет в каждом последующем слое (111), получится двойник. Тот же результат получится при прохождении частичной дислокации с вектором Бюргера $\frac{1}{6} [11\bar{2}]$ в каждой плоскости (111), расположенной выше композиционной плоскости. Геометрия механического двойникования будет описана более подробно в следующем разделе.

10.2. Описание механического двойникования

При пластической деформации, происходящей в результате скольжения, кристаллическая структура деформированной области сохраняет прежнюю ориентацию. При деформации двойникованием кристаллическая структура сдвойникованной области остается неизменной, но кристаллографическая ориентация ее относительно исходного кристалла изменяется. Макроскопическое исследование показывает, что деформированные области, приняв-

шие двойниковую ориентации относительно исходного кристалла, представляют собой ламели (пластинки), которые претерпели *простой однородный сдвиг*. Прежде чем продолжать дальнейшее рассмотрение, будет полезно сказать несколько слов о различных способах, с помощью которых можно описывать механическое двойникование.

Во-первых, можно описывать изменение формы той области, которая становится двойниковой ламелью. Это чисто макроскопи-



Ф и г. 10.3. Изменение формы образца в результате образования двойниковой ламели.

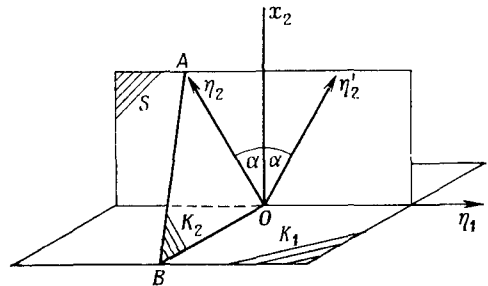
Линии PQ и QR отвечают следам плоскости K_1 , которая остается инвариантной при сдвиге; величину и направление сдвига можно определить по величине и направлению линии QS .

ческое описание дает элементы простого сдвига. Поверхность раздела между двойником и матрицей является плоскостью, которая остается неизменной при сдвиге: она не искажается и не поворачивается. Направление и величину сдвига в идеальном случае можно получить, определяя величину и направления смещений (обусловленных образованием ламели) каких-либо двух поверхностей кристалла (фиг. 10.3).

Далее, можно описывать соотношение между кристаллографическими ориентациями решеток в двойниковой ламели и в матрице. При этом можно определить, будет ли однородный простой сдвиг, найденный по изменению формы кристалла, адекватно описывать переориентацию решетки, если предположить, что происходит сдвиг узлов решетки Бравэ. Оказывается, что очень часто такое описание является вполне адекватным. Это привело к широкому распространению *формального* описания механических двойников на основе простого сдвига решетки Бравэ; ниже мы рассмотрим этот способ подробнее, в частности для того, чтобы ознакомиться с используемыми при описании механических двой-

ников обозначениями, которые возникли на базе именно такого подхода.

Последний, наиболее детальный способ заключается в том, что описываются перемещения атомов в процессе двойникования. В отличие от первых двух методов, основанных на изменениях формы и ориентации, это описание в настоящее время не является однозначным. Дальнейшее рассмотрение этого способа мы отложим до обсуждения конкретных примеров, но можно заранее подчеркнуть, что простой сдвиг позиций, занимаемых атомами (в отли-



Фиг. 10.4. Формальное описание двойникования.

Элементы двойникования: K_1 — плоскость двойникования; S — плоскость сдвига; η_1 — направление сдвига; K_2 — вторая неискаженная плоскость; η_2 — ось основной зоны.

чие от сдвига узлов решетки), не всегда способен обеспечить все перемещения атомов, которые необходимы для образования двойника.

Ограничив себя в данный момент проблемой сдвига в решетке Бравэ, зададим следующий вопрос: можно ли осуществить однородный простой сдвиг в решетке Бравэ таким образом, чтобы изменить ее ориентацию, но не ее структуру?

Геометрия простого сдвига показана на фиг. 10.4. Все узлы решетки, расположенные сверху от плоскости K_1 , смещаются в направлении η_1 на величину u_1 , пропорциональную их расстоянию от K_1 . Таким образом,

$$u_1 = g x_2, \tag{10.1}$$

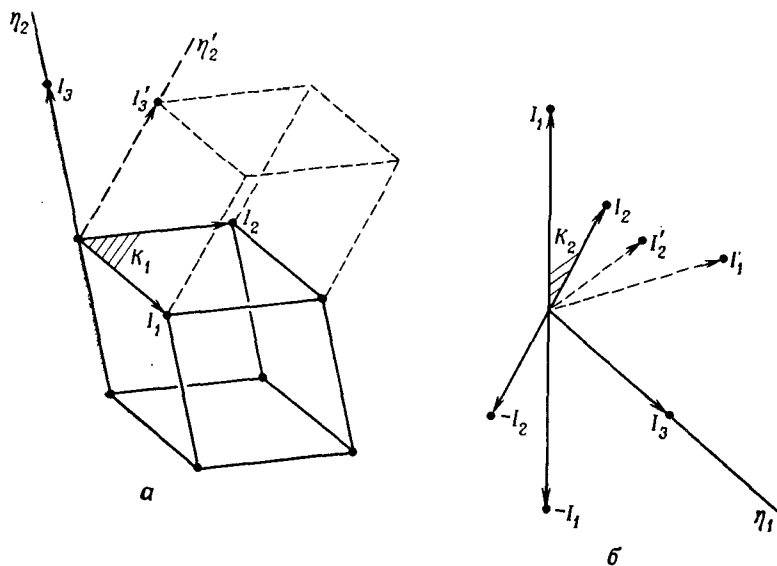
где g — мощность простого сдвига. Плоскость, содержащая η_1 и перпендикулярная K_1 , называется *плоскостью сдвига* S . Можно видеть, что длина вектора, параллельного η_2 на плоскости S , не изменится после сдвига, если угол α , который он образует с нормалью к K_1 , дается выражением

$$g = 2 \operatorname{tg} \alpha. \tag{10.2}$$

Очевидно, что все векторы в той плоскости, проходящей через η_2 , которая перпендикулярна S , остаются неизменными по длине, хотя и поворачиваются на некоторый угол. Эта плоскость (AOB на фиг. 10.4) обычно обозначается K_2 и называется *второй неискаженной плоскостью* или *вторым круговым сечением*. Плоскость

K_1 не искажается и не поворачивается; она называется *плоскостью двойникования*.

До сих пор мы не указывали, являются ли элементы K_1 , K_2 , η_1 , η_2 рациональными, т. е. проходят они через определенные семейства узлов решетки Бравэ или нет. Поскольку в результате процесса двойникования изменяется лишь ориентация решетки, но структура решетки должна остаться неизменной, с точки



Ф и г. 10.5. Двойники 1-го (а) и 2-го (б) рода.

Вектор I_1 под действием сдвига переходит в I'_1 , а I_2 — в I'_2 . Векторы I'_1 и I'_2 переводятся в $-I_1$ и $-I_2$ соответственно при повороте на 180° вокруг η_1 .

зрения рациональности или иррациональности элементов двойникования здесь возможны два случая. В первом случае K_1 является рациональной плоскостью. Следовательно, мы можем выбрать два вектора решетки I_1 и I_2 , лежащие в плоскости K_1 (фиг. 10.5). Сдвиг не влияет на эти векторы. Если η_2 тоже рациональный вектор, то имеется третий вектор решетки I_3 , параллельный η_2 , длина которого остается неизменной, если он переводится в положение I'_3 . Поскольку $-I_3$ также является вектором решетки (решетка всегда центросимметрична), можно видеть, что новая элементарная ячейка, образованная векторами I_1 , I_2 и I_3 , является зеркальным отражением в плоскости K_1 ячейки, образованной векторами I_1 , I_2 и $-I_3$ в решетке, не подвергавшейся сдвигу. Если эта ячейка является одной из возможных примитивных элементарных ячеек решетки, то вся решетка при сдвиге сохра-

няется неизменной. Если она не является примитивной элементарной ячейкой, то в результате сдвига сохраняется только сверхструктура, образованная частью узлов решетки. Двойники, у которых элементы сдвига K_1 и η_2 являются рациональными элементами решетки, а K_2 и η_1 — иррациональными, называются *двойниками 1-го рода* или *двойниками отражения*.

Вторая возможность показана на фиг. 10.5, б. Теперь η_1 и K_2 — рациональные элементы решетки, а K_1 и η_2 — нет. Выберем на плоскости K_2 два рациональных вектора решетки I_1 и I_2 , а в качестве третьего вектора возьмем вектор I_3 , параллельный рациональному в данном случае направлению η_1 . Эти три вектора образуют ячейку, сторонами которой после сдвига будут I'_1, I'_2, I'_3 . Эта ячейка связана с ячейкой $-I_1, -I_2, I_3$ в решетке, не подвергавшейся сдвигу, поворотом на 180° вокруг η_1 . Такие двойники называются *двойниками 2-го рода* или *двойниками вращения*¹⁾. Очень часто бывает, что все четыре элемента (K_1, K_2, η_1 и η_2) являются рациональными; тогда рассмотренные два типа двойников сливаются в один. Подобные двойники называются *смешанными* или *вырожденными*; именно такого типа двойники обычно встречаются в высоко симметричных кристаллических структурах.

В кубической решетке возможны только вырожденные двойники. Чтобы доказать это, рассмотрим двойник 1-го рода, у которого K_1 и η_2 рациональны. В кубической решетке нормаль к рациональной плоскости сама является рациональным вектором решетки, так что если K_1 рациональна, то плоскость сдвига S также рациональна, поскольку в ней лежат два рациональных направления, а именно η_2 и нормаль к плоскости K_1 . Следовательно, и направление η_1 , лежащее на пересечении двух рациональных плоскостей K_1 и S , также является рациональным. Наконец, плоскость K_2 тоже рациональна, потому что она содержит два рациональных направления: η_2 и нормаль к S . Аналогичное доказательство можно привести для случая рациональных K_2 и η_1 , т. е. для двойников второго рода.

В ромбической модификации урана могут возникнуть механические двойники нескольких типов; среди них имеются двойники 1-го рода с $K_1 = (112)$ и $\eta_2 = [312]$ и двойники 2-го рода с $K_2 = (112)$ и $\eta_1 = [312]$. В этом случае оказывается, что элементы двойникования K_1 и K_2 обоих двойников взаимозаменяемы. Подобные двойники называются *сопряженными* или *обратными*. Кристаллография таких двойников различна, но абсолютная величина сдвига у них одна и та же, потому что угол между K_1 и K_2 в обоих случаях один и тот же.

¹⁾ Они называются также осевыми или аксиальными двойниками.—
Прим. перев.

Группа узлов решетки, которые образуют плоскость, будет образовывать плоскость и после того, как в решетке произойдет двойниковый сдвиг (разд. 5.3), но (за исключением отдельных особых случаев) расположение узлов решетки в этой плоскости изменится. Следовательно, эта плоскость после сдвига становится кристаллографической плоскостью иного рода, чем до сдвига, так что ее миллеровские индексы изменятся. Полезно уметь записывать новые миллеровские индексы в общем случае. Уравнения преобразования индексов при двойниковании были впервые выведены Мюгге [1]; мы приведем их без доказательства:

$$\begin{aligned} h' &= 2H(Uh + Vk + Wl) - h(UH + VK + WL), \\ k' &= 2K(Uh + Vk + Wl) - k(UH + VK + WL), \\ l' &= 2L(Uh + Vk + Wl) - l(UH + VK + WL), \end{aligned} \quad (10.3)$$

где (hkl) — миллеровские индексы плоскости до двойникования, а $(h'k'l')$ — после двойникования. Значения h' , k' и l' , получаемые из уравнений (10.3), могут содержать общий множитель, который должен быть исключен. В случае двойников 1-го рода (HKL) — это индексы K_1 , а $[UVW]$ — индексы η_2 . Эти уравнения применимы и к двойникам 2-го рода; тогда (HKL) — индексы K_2 , а $[UVW]$ — индексы η_1 . Индексы $(h'k'l')$, конечно, относятся к обычным кристаллографическим осям в системе координат двойника¹⁾; в общем случае эти оси не являются направлениями, в которые преобразуются исходные кристаллографические оси после двойникового сдвига.

Уравнения преобразования индексов направления $[UVW]$ при двойниковании имеют аналогичный вид:

$$\begin{aligned} u' &= 2U(Hu + Kv + Lw) - u(HU + KV + LW), \\ v' &= 2V(Hu + Kv + Lw) - v(HU + KV + LW), \\ w' &= 2W(Hu + Kv + Lw) - w(HU + KV + LW). \end{aligned} \quad (10.4)$$

Уравнения преобразования индексов плоскостей и направлений при двойниковании можно использовать, чтобы проанализировать, как меняются форма и расположение дефекта под действием двойникования, если предполагать, что атомы, образующие дефект, перемещаются только вследствие двойникового сдвига. Для сокращенной записи уравнений преобразования в конкретных случаях используется матрица преобразования [приложения 1 (разд. А.1) и 4]. Например, в случае двойников в г. ц. к.-кристалле

¹⁾ В случае двойников 1-го рода эти оси являются отражениями осей матрицы в K_1 ; в двойниках 2-го рода они получаются из осей матрицы поворотом на 180° вокруг η_1 .

с $K_1 = (111)$ и $\eta_2 = [112]$ можно написать

$$\begin{pmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix}, \quad (10.5)$$

а матрица преобразования Q имеет вид

$$Q = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Теперь легко найти особые плоскости и направления, индексы которых не меняются, если относить их к обычным кристаллографическим осям в двойнике. Например, в двойниках 1-го рода неизменной остается плоскость K_1 , а также любая плоскость зоны η_2 , потому что все они содержат по два вектора решетки, которые не изменяются при сдвиге, а именно η_2 и вектор, соответствующий пересечению плоскости этой зоны с K_1 . Этот результат непосредственно следует из уравнений (10.3).

10.3. Примеры двойниковых структур

а. Г. ц. к.-металлы. Выше уже описывалась структура двойника в г. ц. к.-металле (фиг. 10.1). Исследование пластинчатых механических двойников в Ag и Cu показало, что как макроскопический сдвиг, так и переориентация решетки двойника по плоскости (111) описываются сдвигом на 0,707 в направлении $[11\bar{2}]$. Подобное соответствие не вполне тривиально, потому что такую же переориентацию решетки можно получить в результате сдвига удвоенной величины (т. е. 1,414) в обратном направлении. Для сдвига на 0,707 элементами двойникования будут

$$K_1 = (111), \quad \eta_1 = [11\bar{2}], \quad K_2 = (11\bar{1}), \quad \eta_2 = [112].$$

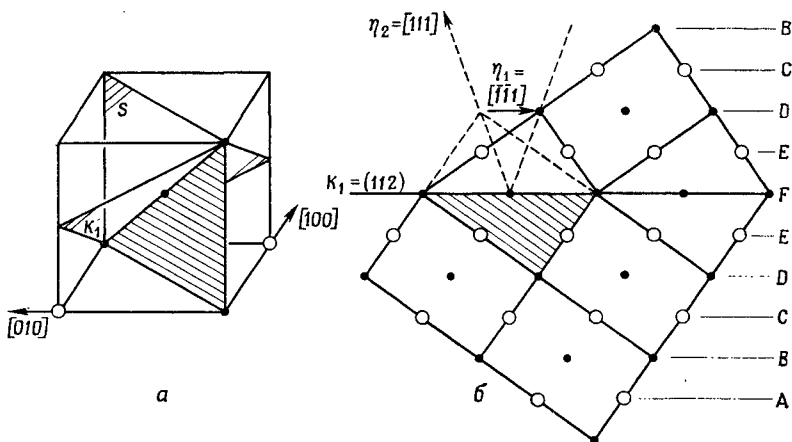
Эти элементы показаны на фиг. 10.2. Поскольку в структуре г. ц. к.-металла по одному атому расположено в каждом узле решетки Бравэ, атомные перемещения проще всего описать тем же сдвигом. Это равноценно смещению каждого двойникованного слоя (111) на $\frac{1}{6} [11\bar{2}]$ относительно нижележащего слоя. В этом примере один и тот же простой сдвиг описывает и макроскопическое изменение формы, и переориентацию решетки, и наиболее правдоподобные перемещения атомов, необходимые для осуществления двойникования.

б. О. ц. к.-металлы. Во многих переходных металлах с о. ц. к.-структурой, например в Fe, V, Nb, двойникование играет довольно важную роль в процессах деформации. Двойникованию способствуют (в отличие от скольжения) низкие температуры и высокие

скорости деформации. По-видимому, важную роль играет чистота; например, было обнаружено, что наличие $2 \cdot 10^{-2}\%$ С в ниобии подавляет двойникование при 77 К. Некоторые сплавы, представляющие собой твердые растворы, например $\text{Mo} + 30 \text{ вес.}\% \text{ Re}$, двойниваются гораздо легче, чем чистые металлы. В них обычно наблюдаются двойники только одного типа со следующими элементами двойникования:

$$K_1 = (112), \quad \eta_1 = [\bar{1}\bar{1}\bar{1}], \quad K_2 = (11\bar{2}), \quad \eta_2 = [111],$$

а величина двойникового сдвига равна 0,707. Этот двойник изображен схематически на фиг. 10.6. Как и в случае г. ц. к.-металлов,



Фиг. 10.6. Двойникование в о. ц. к.-металлах.

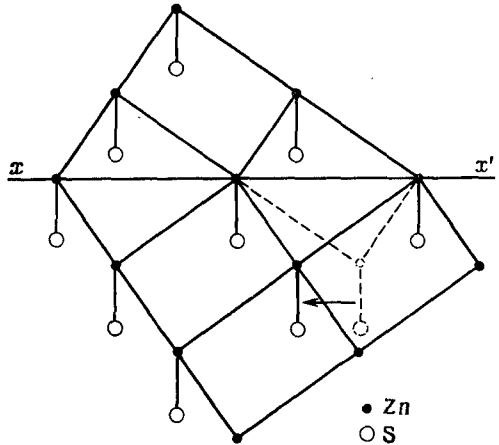
а — элементарная ячейка о.ц.к.-структуры; б — проекция атомной структуры двойника на плоскость (110) .

Обозначения те же, что и на фиг. 10.1. Буквы А, В, С, D, Е, F характеризуют последовательность укладки плоскостей (112) вдоль направления $[112]$. K_1 — плоскость двойникования (и композиционная плоскость двойника).

было подтверждено, что макроскопическое изменение формы согласуется с изменением, предсказанным по элементам двойникования [2]. Перемещения атомов, описываемые этим сдвигом, вполне допустимы. Они соответствуют сдвигу на $\frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ в последовательных плоскостях (112) . При образовании о. ц. к.-структуры из горизонтальных слоев (112) структура начинает повторяться после укладки шести слоев, начиная с седьмого, т. е. последовательность упаковки может быть записана как $ABCDEFAB \dots$. Прохождение одной частичной дислокации с вектором Бюргерса $\frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ дает дефект упаковки типа $ABCDEFEFAB \dots$ (разд. 8.6). Вопрос об энергии таких дефектов изучен плохо, однако известно, что она не настолько низка, чтобы обеспечить образование растянутых дислокаций, которые можно

было бы легко наблюдать в электронном микроскопе. Прохождение частичных дислокаций с вектором Бюргерса $\frac{1}{6} [\bar{1}\bar{1}1]$ в каждой из последовательных плоскостей (112) дало бы двойниковую последовательность упаковки плоскостей: $ABCDEFEDCBAF \dots$

в. Сфалерит (цинковая обманка). Обратимся теперь к структурам, у которых на каждый узел решетки приходится больше

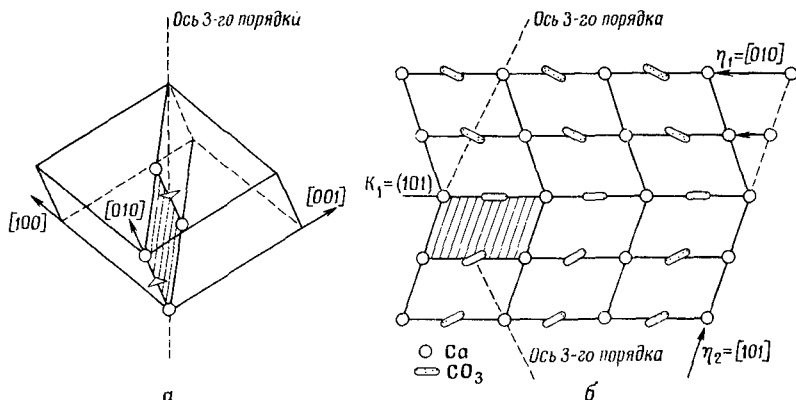


Ф и г. 10.7. Двойникование в сфалерите.

чем по одному атому. Интересный пример представляет двойникование в сфалерите (кубическая модификация ZnS). Сфалерит характеризуется г. ц. к.-решеткой; с каждым узлом решетки связаны два атома: Zn в позициях $(0, 0, 0)$ и S в позициях $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ (фиг. 3.10). Атомы Zn и S лежат во взаимопроникающих г. ц. к.-подрешетках, и двойники в этой структуре очень сходны с двойниками в г. ц. к.-металлах. Предполагаемое строение граничной поверхности между сдвойникованным кристаллом и матрицей показано на фиг. 10.7. Из сравнения с фиг. 10.1 вытекает, что двойниковый сдвиг в обоих случаях одинаков, а именно $K_1 = (111)$, $\eta_1 = [211]$, $K_2 = (\bar{1}\bar{1}1)$, $\eta_2 = [2\bar{1}\bar{1}]$. Этим сдвигом можно было бы описать движение атомов Zn , выбрав в качестве исходной плоскости плоскость xx' . Однако этот сдвиг не переведет атомы S в правильные позиции. Простейший способ получения необходимого смещения атомов состоит в приложении двойникового сдвига к слоям $Zn-S$. Каждый такой двойной слой состоит из двух слоев: слоя атомов Zn и слоя атомов S , причем все слои параллельны плоскости (111), а атомы S лежат по вертикали непосредственно под атомами Zn .

На фиг. 10.7 атомы Zn и S , лежащие в одних и тех же двойных слоях, соединены вертикальными черточками. Можно видеть, что структура сфалерита в отличие от г. ц. к.-решетки не отражается

зеркально в плоскости K_1 . В зеркально отраженной структуре направление $[111]$ в двойнике перевернулось бы на $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$; в нецентросимметричных структурах эти направления кристаллографически неэквивалентны. Экспериментальные данные показывают, что изменения полярности при двойниковании в сфалерите не происходит и что структуры двойника и матрицы связаны поворотом на 180° вокруг нормали к K_1 , как это видно на фиг. 10.7 [3]. Структуру переходной области можно описать как дефект упаковки двойных слоев $Zn - S$. Последовательность укладки этих слоев



Фиг. 10.8. Двойникование в кальците.
Обозначения те же, что на фиг. 10.1.

в сфалерите такая же, как и последовательность укладки плотноупакованных плоскостей в г. ц. к.-металлах, а именно $ABC\ ABC \dots$. В двойнике эта последовательность укладки меняется на обратную: $ABC/VACVA \dots$, при этом на двойниковой границе возникает область толщиной в три (двойных) слоя, в которой последовательность укладки слоев соответствует наблюдаемой в структуре юрцита: $BCB \dots$.

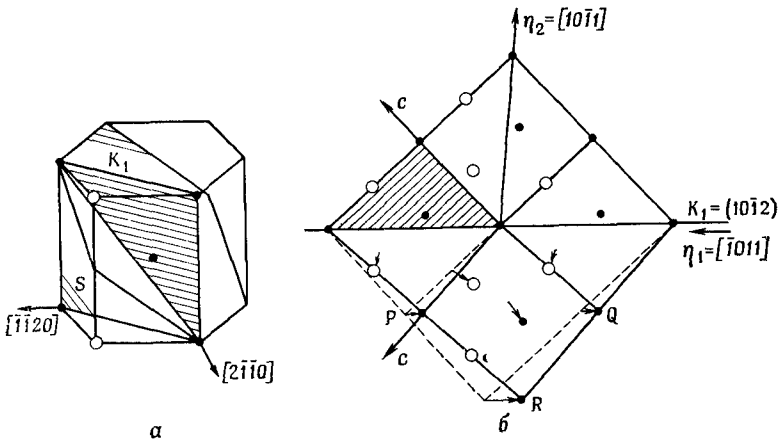
г. Кальцит. Механическое двойникование в кристаллах кальцита известно давно, и его очень легко осуществить. Например, большие куски кристалла ромбоэдрической формы, полученного выкалыванием по плоскостям спайности, можно сдвойниковать, нажимая лезвием ножа на ребро кристалла. Если в качестве элементарной ячейки выбран ромбоэдр спайности (фиг. 3.15), элементы двойникового сдвига имеют вид

$$K_1 = (101), \quad K_2 = (010), \quad \eta_1 = [010], \quad \eta_2 = [101],$$

а величина сдвига равна $0,694$. Структура двойника в кальците показана схематически на фиг. 10.8. Двойниковый сдвиг переводит ионы Ca^{2+} и центры групп CO_3^{2-} в положения, отвечающие их

правильным позициям в двойнике, однако ориентация треугольных групп CO_3 оказывается при этом неправильной. Для завершения реконструкции кристалла в двойник каждая группа CO_3 должна повернуться на угол $52,5^\circ$ вокруг оси, проходящей через центр группы перпендикулярно плоскости сдвига.

д. **Гексагональные металлы.** Двойникование в гексагональных металлах имеет огромное техническое значение, потому что наличие всего одной системы плоскостей скольжения в этих металлах делает двойникование необходимым компонентом их пластической



Ф и г. 10.9. Двойникование по $(10\bar{1}2)$ в цирконии.
Обозначения те же, что на фиг. 10.1.

деформации. Было обнаружено много типов двойникования; тип двойникования до некоторой степени зависит от величины осевого отношения c/a металла (см. табл. 10.1). В общем случае чем меньше c/a , тем больше способов двойникования.

Все гексагональные металлы двойникуются по закону

$$K_1 = (10\bar{1}2), \quad \eta_1 = [\bar{1}011], \quad K_2 = (10\bar{1}\bar{2}), \quad \eta_2 = [10\bar{1}\bar{1}].$$

Величина и направление сдвига меняются в зависимости от величины c/a , но всегда величина сдвига относительно невелика: она лежит в пределах от 0,175 для Cd ($c/a = 1,89$) до $-0,199$ для Be ($c/a = 1,57$). На фиг. 10.9 и 10.10 показаны структуры двойников по плоскости $(10\bar{1}2)$ в Zr и в Zn соответственно. Направление сдвига в Zn противоположно направлению сдвига в Zr . Можно видеть, что в данном случае описать смещение атомов с помощью двойникового сдвига невозможно и вообще нет какого-либо очевидного простого способа такого описания. Стрелки, изображенные на чертеже, соединяют первоначальные позиции атомов с бли-

Элементы двойникования различных кристаллов 1)

Материал	Решетка	K_1	η_1	K_2	η_2	Величина сдвига g
Fe, V, Nb, W, Mo, Cr	О. ц. к.	112	$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$	112	111	0,707
Cu, Ag, Au	Г. ц. к.	111	$\bar{1}\bar{1}\bar{2}$	$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$	112	0,707
Cd	Гекс., $c/a = 1,886$	$10\bar{1}\bar{2}$	$\bar{1}011$	$10\bar{1}\bar{2}$	$10\bar{1}1$	0,171
Zn	Гекс., $c/a = 1,856$	$10\bar{1}\bar{2}$	$\bar{1}011$	$10\bar{1}\bar{2}$	$10\bar{1}1$	0,140
Co	Гекс., $c/a = 1,623$	$10\bar{1}\bar{2}$	$\bar{1}011$	$10\bar{1}\bar{2}$	$10\bar{1}1$	-0,130
Mg	Гекс., $c/a = 1,623$	$11\bar{2}1$	$11\bar{2}\bar{6}$	0001	$11\bar{2}0$	0,614
		$10\bar{1}\bar{2}$	$\bar{1}011$	$10\bar{1}\bar{2}$	$10\bar{1}1$	-0,130
		$10\bar{1}1$	$\bar{1}012$	$\bar{1}013$	$30\bar{3}2$	0,137
Re 2)	Гекс., $c/a = 1,615$	$11\bar{2}1$	$11\bar{2}\bar{6}$	0001	$11\bar{2}0$	0,621
Zr	Гекс., $c/a = 1,592$	$10\bar{1}\bar{2}$	$\bar{1}011$	$10\bar{1}\bar{2}$	$10\bar{1}1$	-0,169
		$11\bar{2}1$	$11\bar{2}\bar{6}$	0001	$11\bar{2}0$	0,63
		$11\bar{2}2$	$\bar{1}\bar{1}23$	$11\bar{2}4$	$\bar{2}\bar{2}4\bar{3}$	0,225
Ti	Гекс., $c/a = 1,587$	$10\bar{1}\bar{2}$	$\bar{1}011$	$10\bar{1}\bar{2}$	$10\bar{1}1$	-0,175
		$11\bar{2}2$	$\bar{1}\bar{1}23$	$11\bar{2}4$	$\bar{2}\bar{2}4\bar{3}$	0,218
Be	Гекс., $c/a = 1,568$	$10\bar{1}\bar{2}$	$\bar{1}011$	$10\bar{1}\bar{2}$	$10\bar{1}1$	-0,199
Графит	Гекс.	$11\bar{2}1$	$\bar{1}\bar{1}26$	0001	$11\bar{2}0$	0,367
Кальцит, CaCO_3	Триг. 3)	101	010	010	101	0,694
Сапфир 4), Al_2O_3	Триг. 5)	$10\bar{1}1$	$\bar{1}012$	$\bar{1}012$	$10\bar{1}1$	0,202
Bi	Триг. 3)	101	010	010	101	0,118
β -Sn	Тетраг. о. ц., I	301	$\bar{1}03$	$\bar{1}01$	101	0,119
In	Тетраг.	101	$10\bar{1}$	$\bar{1}01$	101	0,150
U	Ромбич., C	130	$3\bar{1}0$	$\bar{1}10$	110	0,299
		Иррац.	312	112	Иррац.	0,228
		112	Иррац.	Иррац.	312	0,228
		121	»	»	311	0,329
Плагиоклазы (полевые шпаты)						
$\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$	Трикл. P	010	»	»	010	0,151
$\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$	Трикл. P	Иррац.	010	010	Иррац.	0,151

1) Большая часть приведенных в таблице данных взята из работ, указанных в списке дополнительной литературы в конце главы. Для упрощения индексы плоскостей и направлений даны без скобок.

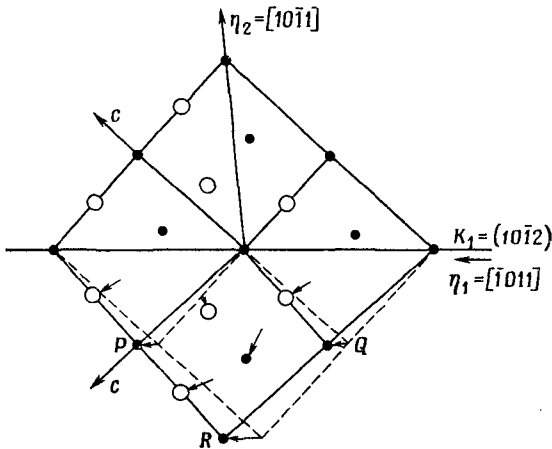
2) Данные взяты из работы [5].

3) Индицирование — в морфологической установке (элементарная ячейка — ромбоэдр спайности); см. стр. 141.

4) Данные взяты из работы [6].

5) Индицирование — как в табл. 6.1.

жайшими к ним атомами в двойнике. Однако доказательства, свидетельствующие о том, что атомы действительно в процессе сдвига перемещаются по этим путям, отсутствуют. На фиг. 10.9 только атомы, располагающиеся в точках P , Q и R , переводятся двойниковым сдвигом в положения, соответствующие их позициям в двойнике. Смещение, которое должно быть добавлено к двойниковому сдвигу, чтобы обеспечить перемещение атома в нужное



Ф и г. 10.10. Двойникование по $(10\bar{1}2)$ в цинке.

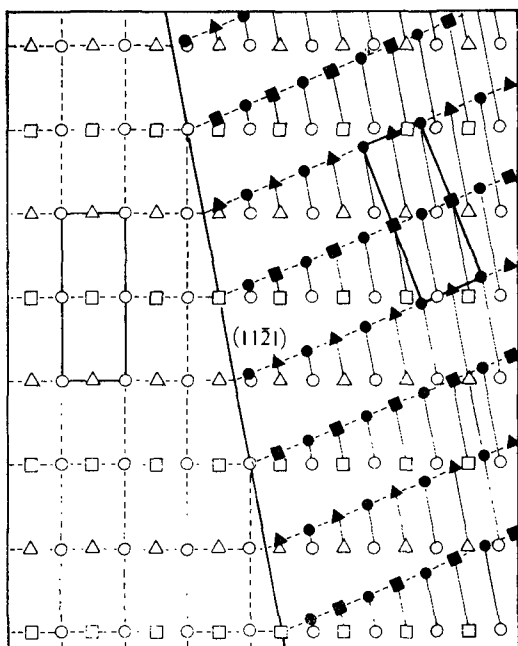
● атомы в плоскости чертежа; ○ атомы, расположенные выше или ниже плоскости чертежа.

положение в двойниковом кристалле, обычно называется *перегруппировкой* (перетасовкой). Если предполагаемые перемещения атомов формально разделить на перемещения под действием двойникового сдвига и перемещения в процессе последующей перегруппировки, то пути атомов в процессе перегруппировки будут зависеть от конкретного положения плоскости K_1 , выбранной нами в качестве исходной плоскости сдвига. Таким образом, ясно, что точная физическая картина процессов, происходящих при двойниковании в гексагональных металлах, пока еще отсутствует.

е. Графит. Двойникование в графите прекрасно иллюстрирует те различия, которые существуют между двойниковым сдвигом, как методом описания макроскопического изменения формы и переориентации решетки, с одной стороны, и соответствующим физическому смыслу описанию движения атомов в процессе двойникования — с другой. Элементами двойникования в графите служат

$$K_1 = (11\bar{2}1), \quad \eta_1 = [\bar{1}\bar{1}26], \quad K_2 = (0001), \quad \eta_2 = [11\bar{2}0],$$

а удельный сдвиг равен 0,367. Как показано на фиг. 10.11, под действием двойникового сдвига воссоздается только решетка Бравэ, но не кристаллическая структура графита. Поэтому, если бы описание перемещений атомов основывалось на использовании двойникового сдвига, потребовалось бы ввести дополнительные атомные перегруппировки. Кроме того, любое описание способа образования двойника, основанное на движении дислокаций

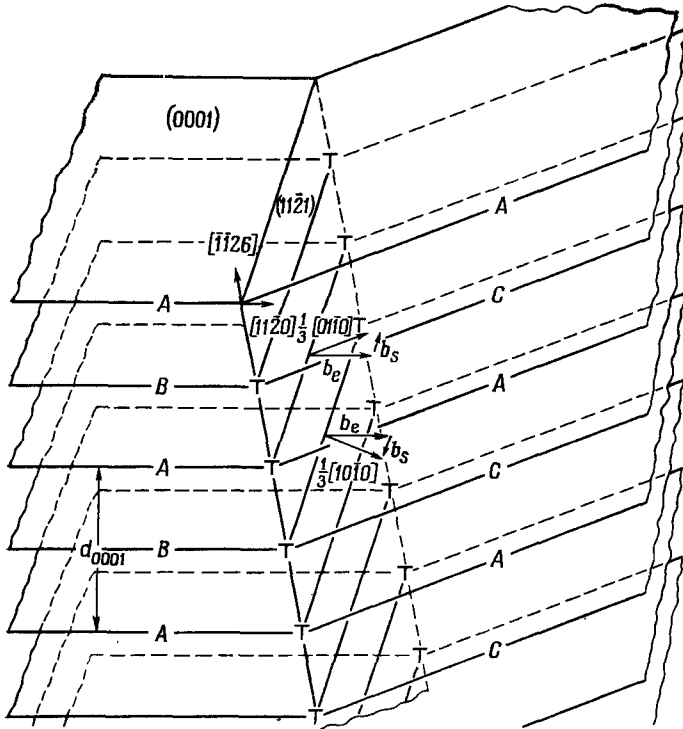


Фиг. 10.11. Двойникование в графите [4].

Проекция на плоскость $(1\bar{1}00)$. Светлые кружки, квадратики, треугольники отвечают положениям атомов в структуре графита до сдвига, черные — после сдвига. Видно, что в результате сдвига получается новая структура, т. е. для того чтобы получить реальную структуру двойника, необходимы дополнительные перегруппировки атомов (перетасовки). ●, ○ в плоскости чертежа; ■, □ под плоскостью чертежа; ▲, △ над плоскостью чертежа.

в плоскостях $(11\bar{2}1)$, не было бы удовлетворительным, поскольку оно должно сопровождаться разрывом очень прочных связей между атомами в плоскости базиса. Эти затруднения изящно разрешаются в модели, основанной на сдвиге в плоскостях базиса $\{0001\}$. Смещения атомов в двойнике графита полностью можно описать с помощью попеременного сдвига последовательных плоскостей $\{0001\}$ на $1/3 [10\bar{1}0]$ и на $1/3 [0110]$, если предположить, что этот процесс сопровождается, кроме того, соответствующим поворотом плоскости как жесткого целого. Известно, что в плоскостях бази-

са в графите имеются частичные дислокации с такими векторами Бюргерса. Стенка из этих чередующихся частичных дислокаций на границе раздела матрица — двойник образует границу наклона, которая обеспечивает требуемый поворот плоскостей (0001) (разд. 12.2). Боковой рост двойниковой ламели может происходить



Фиг. 10.12. Образование двойника в графите в результате прохождения частичных дислокаций в каждой из последовательных плоскостей базиса (0001) [4].

путем скольжения такой стенки частичных дислокаций внутрь матрицы. Этим убедительно объясняются экспериментально наблюдаемые движения двойников в графите; рассматриваемая модель показана на фиг. 10.12.

10.4. Элементы двойникования

Элементы двойникования различных кристаллов представлены в табл. 10.1. Обычно необходимо бывает определять экспериментально только некоторые из элементов двойникования, например

K_1 , η_1 и величину сдвига или же K_1 и η_2 . Остальные элементы можно затем найти из геометрии простого сдвига (фиг. 10.3). Для плагиоклазов кристаллическая структура сдвойниковапной области кристалла не может быть совершенно идентичной структуре матрицы. Случаи такого рода, возможно, следовало бы рассматривать как псевдодвойники или даже относить их к мартенситным превращениям (разд. 11.1).

Из табл. 10.1 можно видеть, что кристаллы с одинаковой структурой имеют тенденцию двойниковаться по одинаковому закону. Причины, по которым реализуется тот или иной закон двойниковаия в конкретных случаях, не вполне понятны. Из разд. 10.2 видно, что число возможностей, из которых можно выбирать, огромно. Чтобы определить двойниковый сдвиг, который полностью воссоздает решетку, можно выбрать любые три вектора решетки, которые образуют примитивную элементарную ячейку, и из них выбрать два, которые определяют плоскость K_1 (в двойниках 1-го рода) или K_2 (в двойниках 2-го рода). Обычно в качестве критерия выбора используется минимальная величина сдвига, так как при этом уменьшается длина траекторий атомов, перемещение которых необходимо для образования двойника. На первый взгляд этот критерий не очень надежен, так как сдвиги, приводимые в табл. 10.1, охватывают широкий интервал значений и в некоторых случаях имеют очень большую величину. Однако если мы внимательно рассмотрим все способы, возможные для данной структуры, то увидим, что критерий минимального сдвига действительно эффективен [7]. Согласно этому критерию, в двойниках 1-го рода и в вырожденных двойниках легче всего осуществляется двойниковаие по плоскостям низких индексов. Причину этого легко понять из фиг. 10.13. Чем выше индексы плоскости K_1 , тем меньше расстояние между плоскостями K_1 . Так как вектор I_3 , параллельный η_2 , не может быть меньше наименьшего вектора решетки, угол, который он образует с плоскостью K_1 , должен уменьшаться с уменьшением расстояния между плоскостями K_1 . Это означает, что сдвиг должен увеличиваться. Точнее, если вектор I_3 определяет узел решетки в n -й плоскости K_1 , расположенной выше 0, а d — расстояние между плоскостями K_1 , то

$$I_3^2 = (nd)^2 + [(1/2)(gnd)]^2, \quad (10.6)$$

где g — удельный сдвиг. Если обозначить наименьший вектор решетки через E , то

$$I_3^2 \geq E^2 \quad (10.7)$$

и

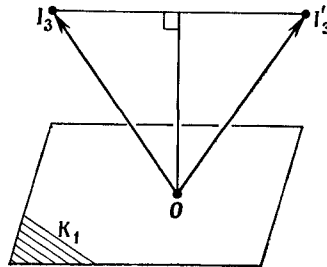
$$(g^2 + 4)/E^2 \geq 4/n^2d^2.$$

В качестве иллюстрации применения этого неравенства рассмотрим двойниковаие в о. ц. к.-решетке. Любой двойник в ку-

бической решетке должен быть вырожденным, следовательно, η_2 — рациональное направление и можно использовать чертеж, приведенный на фиг. 10.13. Полагая $E^2 = 3a^2/4$, где a — период решетки, и отыскивая двойники с $g \leq 1$, получаем

$$3a^2/n^2d^2 \leq 5. \quad (10.8)$$

Воссоздание всей решетки или значительной ее доли обеспечивается только в том случае, если n мало. Для $n = 1$ решения



Фиг. 10.13. К выводу возможных элементов двойникования.

отсутствуют. Для $n = 2$ неравенству (10.8) удовлетворяют плоскости (110), (100) и (112). Например,

$$d_{100} = a/2, \quad (10.9)$$

так что при $n = 2$

$$3a^2/n^2d_{100}^2 = 3. \quad (10.10)$$

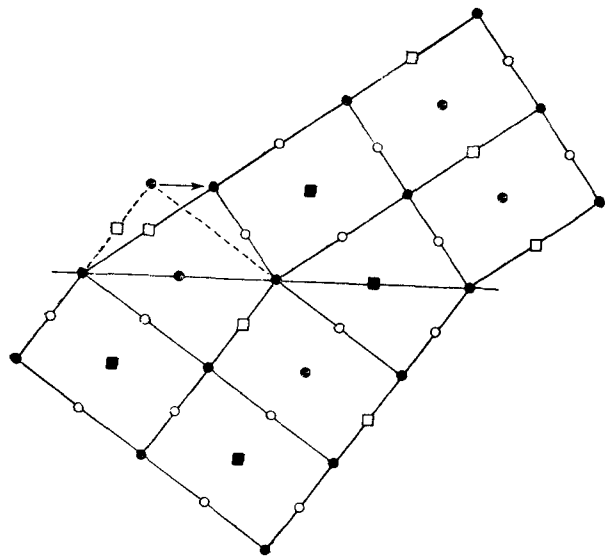
Однако плоскости (100) и (110) приходится отбросить, так как они являются зеркальными плоскостями симметрии в данной решетке (т. е. $g = 0$). Остается плоскость (112). Ее и выберем в качестве плоскости K_1 .

Направление сдвига в плоскости K_1 можно найти, построив проекцию кристаллической структуры на плоскость K_1 и выбрав наименьшую трансляцию, необходимую для того, чтобы плоскость K_1 играла роль зеркальной плоскости симметрии. Это дает $\eta_1 = [1\bar{1}1]$ и структуру двойника, изображенную на фиг. 10.6.

В случае структур, в которых на каждый узел решетки приходится больше чем по одному атому, например в гексагональных металлах, перемещение всех атомов двойника не удастся описать двойниковым сдвигом. Тем не менее в некоторых случаях выбор способа двойникования можно рационализировать и здесь, рассматривая однородный сдвиг небольших групп атомов. Отыскивается сдвиг, который имеет небольшую величину и требует лишь небольших допустимых перегруппировок атомов для завершения реконструкции в двойниковую структуру уже после сдвига. Этот сдвиг затем отождествляется с двойниковым сдвигом. Некоторые перегруппировки всегда вероятнее других; например, вращение ради-

калов CO_3 в кальците, несомненно, процесс, более вероятный с физической точки зрения, чем перегруппировки с разрушением радикала CO_3 .

Существование в магнии весьма необычных типов двойникования, например полос, параллельных $\{30\bar{3}4\}$, возможно, объясняется действием не одного, а нескольких простых типов двойникования в одной и той же области кристалла. Правда, прямых



Ф и г. 10.14. Двойникование (или «псевдодвойникование») в упорядоченном сплаве Fe_3Be .

Проекция на плоскость сдвига. Плоскость двойникования K_1 перпендикулярна плоскости чертежа.

Атомы в плоскости чертежа: ● Fe, ■ Be; атомы выше или ниже плоскости чертежа: ○ Fe, □ Be.

доказательств такой интерпретации нет, хотя во многих металлах наблюдались области дважды сдвойникованные в местах, где одна двойниковая ламель пересекается другой.

Относительная роль механического двойникования как способа деформации может изменяться и при добавлении примесей. Выше мы уже упоминали сплавы $\text{Mo} - \text{Re}$; в качестве другого примера можно привести Be в Fe . Сплавы, содержащие 15—30% Be , закаленные из области твердого раствора, деформируются почти исключительно путем двойникования даже при малых скоростях деформации. В этих сплавах наблюдается и еще один интересный эффект. При составе Fe_3Be может образовываться упорядоченная структура (табл. 3.3). Фиг. 10.14 показывает обычный для о. ц. к.-металлов двойниковый сдвиг в этой струк-

туре; видно, что структура двойника отличается от структуры матрицы. В структуре Fe_3Be как ближайшими, так и вторыми ближайшими соседями атомов Be являются атомы Fe , тогда как в результате двойникового сдвига у каждого атома Be появляются в качестве ближайших соседей два атома Be . Такой сдвиг, вероятно, следовало бы называть псевдодвойниковым ввиду изменения структуры. Энергия, выигрываемая при восстановлении прежней структуры, обеспечивает движущую силу обратного сдвига. Было обнаружено, что в некоторых кристаллах после снятия действующей нагрузки может наблюдаться «раздвойникование» даже при деформациях величиной до 10% [8].

10.5. Морфология механических двойников

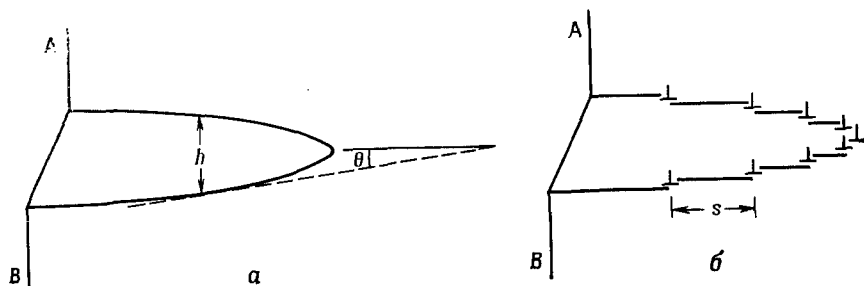
Когда кристалл деформируется двойникованием, сдвойникованные области обычно имеют форму пластин, параллельных плоскости K_1 . Иногда пластины бывают очень тонкими и двойник представляет собой прослойку (ламель), грани которой строго параллельны плоскости K_1 . Это особенно характерно для неметаллов, например для кальцита или графита, в которых прослойки толщиной всего в несколько микрон могут проходить через весь кристалл. Аналогичным образом двойникуется и железо, в котором образуются так называемые полосы Неймана. Определяя ориентацию следов пересечения какой-либо ламели с двумя различными поверхностями кристалла, получим ориентацию двойниковой плоскости K_1 , так что этот элемент двойникования экспериментально определить легче всего.

Возникновение совершенных ламелей, по-видимому, связано с трудностью деформирования матрицы путем скольжения. В металлах, которые легко деформируются скольжением, обычно возникают относительно короткие двойниковые пластины с довольно неправильной поверхностью раздела. В кальците двойники становятся короче, толще и принимают менее правильную форму при высоких температурах, когда возможно скольжение. Если жесткий двойник находится в абсолютно жесткой матрице и если он повсюду жестко связан с этой матрицей, то единственно возможной поверхностью раздела будет неискаженная плоскость K_1 . Двойник будет тогда пластиной, параллельной K_1 , простирающейся через всю матрицу. (Возможностью пересечения двойников друг с другом мы пока пренебрежем.) Для двойника любой другой формы матрица должна приспособливаться к изменению формы сдвойникованной области. При этом малая аккомодация может быть достигнута путем упругой деформации. Тогда пластина конечных размеров должна по краям сужаться в клин и принимать липзообразную форму. Поле упругих напряжений может быть представлено соответствующим рядом дислокаций, как показано

на фиг. 10.15. Вектор Бюргерса b и вертикальное расстояние между дислокациями d определяются двойниковым сдвигом g :

$$g = b/d. \quad (10.11)$$

Например, соответствующая модель для г. ц. к.-двойника состоит из частичных двойникующих дислокаций с вектором Бюргерса $\frac{1}{6} [11\bar{2}]$, лежащих в каждой плоскости (111). Поверхность раздела между двойником и матрицей не содержит дислокаций, когда она параллельна плоскости двойникования K_1 , и называется в этом



Фиг. 10.15.

a — двойниковая ламель, пересекающая поверхность AB ; b — дислокационная модель такой ламелли.

случае когерентной двойниковой границы. Когда граница отклоняется от K_1 , она становится некогерентной и ее наклон определяется расстоянием между дислокациями в плоскости K_1 . Толщина двойниковой пластины h в какой-либо точке дается выражением

$$h = nd, \quad (10.12)$$

где n — число дислокаций между рассматриваемой точкой и кончиком двойниковой пластины. Наклон θ поверхности раздела к плоскости двойникования дается, следовательно, формулой

$$\operatorname{tg} \theta = d/s, \quad (10.13)$$

где s — расстояние между дислокациями в плоскости этой поверхности раздела. Если двойниковая пластина тонкая и заостренная, поле напряжений на расстояниях от пластины, больших по сравнению с ее толщиной, будет адекватно представляться скоплением дислокаций, располагающихся в одной плоскости. Эта модель показана на фиг. 10.16. Напряжение сдвига, обусловленное скоплением n винтовых дислокаций, на достаточно больших расстояниях от головы скопления дается выражением

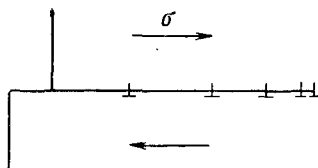
$$\sigma = \mu nb/2\pi r. \quad (10.14)$$

Из формул (10.11) и (10.12) получаем

$$\sigma = \mu hg / 2\pi r.$$

Произведение hg определяет величину напряжений аккомодации и соответствующих деформаций как в данном случае, так и в более общем случае смешанных дислокаций, когда возникают деформации как растяжения, так и сдвига. В вершине двойника, который был блокирован каким-либо препятствием, напряжение

Ф и г. 10.16. Дислокационная модель тонкой двойниковой ламели.



растяжения может стать столь большим, что образуется трещина. Трещины подобного рода наблюдались в о. ц. к.-металлах, в которых g довольно велико ($\sim 0,707$).

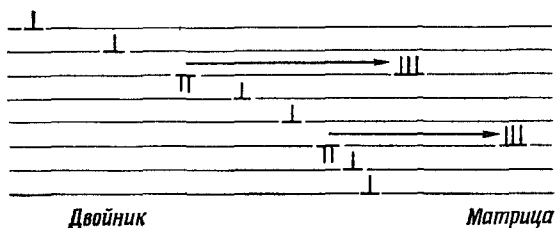
Если в кристалле нет сил внутреннего трения, препятствующих движению дислокаций (фиг. 10.16), то дислокации после снятия нагрузки будут уходить обратно на поверхность кристалла. Такое явление наблюдалось в кальците, где малые двойники, зарождающиеся под действием сосредоточенной нагрузки, исчезают после снятия нагрузки.

Это явление называется *упругим двойникованием*. Однако, как правило, двойникование является процессом необратимым, и двойники остаются в кристалле после разгрузки. Причина такого поведения часто заключается в том, что происходит аккомодация путем скольжения, которая приводит к снятию напряжений на краях двойника или, в соответствии с моделью двойника, показанной на фиг. 10.16, — к нейтрализации результирующего вектора Бюргера скопления дислокаций. При этих условиях возможно образование двойниковых пластин с тупыми краями совершенно неправильной формы. Интересная особенность аккомодации скольжением в о. ц. к.-металлах заключается в том, что скольжение иногда концентрируется в области, располагающейся далеко впереди двойниковой пластины. Модель этого процесса, развитая Слизвиком [9], показана на фиг. 10.17. Каждая третья двойникообразующая дислокация в некогерентной части двойниковой границы расщепляется на полную скользящую дислокацию и на частичную дислокацию. Полные дислокации, называемые дислокациями-эмиссарами (или дислокациями опережения двойникования)¹⁾, могут скользить впереди двойника, перенося двой-

¹⁾ Их называют также *испущенными* дислокациями. — Прим. перев.

никовый сдвиг макроскопически, но не вызывая двойникования в решетке. Дальнейшее поле напряжений двойниковой границы тем самым полностью снимается, как можно видеть из того факта, что векторы Бюргерса ее дислокаций в сумме равны нулю.

При пересечении двух двойниковых ламелей обычно требуется аккомодация скольжением. Лишь в редких случаях необходимая аккомодация может обеспечиваться одним только двойникованием.



Ф и г. 10.17. Дислокации-эмиссары.

Дислокации с одиночными вертикальными хвостиками — это двойникующие частичные дислокации типа $\frac{1}{6} [\bar{1}\bar{1}1]$; с тройными хвостиками — полные дислокации с вектором Бюргерса $\frac{1}{2} [\bar{1}\bar{1}1]$; с двойными хвостиками — частичные дислокации типа $\frac{1}{3} [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$.

Это возможно, в частности, в о. ц. к.-металлах, потому что для каждого направления сдвига типа $[111]$ имеется три плоскости K_1 типа $\{211\}$.

Иногда образуются зигзагообразные ламели, состоящие, например, поочередно из двойников с $K_1 = (211)$ и $K_1 = (121)$ с общим направлением $\eta_1 = [111]$.

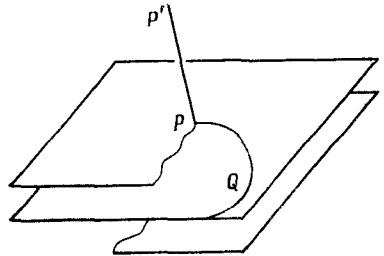
Детальные дислокационные механизмы зарождения и роста двойниковой ламели основываются главным образом на идее, которая может быть проиллюстрирована с помощью фиг. 10.18. Дислокация PQ имеет такой вектор Бюргерса, что в результате ее скольжения в последовательных плоскостях, параллельных двойниковой плоскости K_1 , образуется двойник. Этот эффект достигается с помощью пересекающей плоскости двойникования дислокации PP' , вектор Бюргерса которой имеет компоненту, перпендикулярную плоскости двойникования и равную расстоянию между этими плоскостями. Двойниковые плоскости, следовательно, закручиваются в единую спиральную наклонную плоскость, по которой скользит двойнивающая дислокация PQ . Дислокация PP' , вокруг которой закручивается дислокация PQ , называется *полюсной* дислокацией. В г. ц. к.-кристалле PP' может быть дислокацией Шокли αC на плоскости ACD , тогда как PQ — частичная дислокация Шокли αC , скользящая в плоскости BCD (разд. 8.3). Частичная дислокация Шокли может образоваться

в результате реакции расщепления AC в плоскости BCD :



Частичная дислокация Франка $A\alpha$ не может скользить в плоскости двойникования BCD , и, таким образом, только αC закручивается вокруг полюсной дислокации.

При определении общей деформации кристалла, обусловленной образованием в нем двойников, требуется известная осторожность. Наибольшая деформация, которая может быть получена



Ф и г. 10.18. Полюсный механизм роста двойника.

от одного двойника, равна, конечно, двойниковому сдвигу, создающемуся, когда кристалл двойниковается по всей своей длине. Однако иногда можно получить неограниченную величину деформации за счет многократного двойникования. Например, если часть г. ц. к.-двойниковой ламели с элементами двойникования $K_1 = (111)$ и $\eta_1 = [11\bar{2}]$ вновь двойниковается по той же плоскости (111) , но с другим направлением сдвига $[12\bar{1}]$, то ориентация дважды сдвойникованной области становится такой же, как и исходной матрицы, тогда как двойниковые сдвиги, складываясь, дают смещение, эквивалентное смещению скольжением на $1/2 [01\bar{1}]$. В принципе в результате подобных многократных двойниковых сдвигов можно получить очень большую деформацию.

При испытаниях на растяжение образование двойниковых ламелей будет вносить вклад в общее удлинение образца, если ось растяжения лежит в секторе, определяемом направлением η_1 и нормалью к K_1 (фиг. 10.4), или, иными словами, если компонента напряжения сдвига в двойниковой плоскости, параллельная направлению двойникового сдвига η_1 , будет положительной. Необходимо отметить, что это условие не равнозначно тому, что ось образца удлиняется при превращении всего образца в двойник $[10]$, потому что в двойниковой области любой вектор, первоначально лежащий в секторе, отвечающем тупому углу между плоскостями K_2 и K_1 , удлиняется, тогда как укорачиваются только векторы, лежащие в секторе, соответствующем острому углу $(\pi/2 - \alpha)$ (фиг. 10.4). Когда ось растяжения лежит в секторе угла α .

между K_2 и плоскостью, перпендикулярной η_1 , образование двойниковой ламели затруднено, даже несмотря на то, что растягивающее усилие продолжало бы действовать на кристалл и после того, как тот стал полностью сдвоенным.

Задачи

10.1. Один из способов описания взаимной ориентации сдвоенной области и матрицы в двойниках 1-го рода заключается в определении угла поворота решетки сдвоенного индивида вокруг оси, лежащей в плоскости двойникового сдвига K_1 перпендикулярно направлению сдвига η_1 . Определите величину угла поворота в случае двойника в г. ц. к.-металле.

10.2. Начертите план плоскости K_1 в г. ц. к.-металле, показывающий два слоя атомов, и укажите позиции атомов в третьем слое в нормальной структуре до и после сдвига этого атомного слоя с образованием первого слоя двойника.

10.3. Прделайте то же для случая двойника в о. ц. к.-металле.

10.4. Двойник в о.ц.к.-металле имеет следующие элементы двойникова-ния: $K_1 = (112)$, $\eta_1 = [\bar{1}\bar{1}1]$.

а) Определите миллеровские индексы плоскостей, в которые преобразуются под действием двойникового сдвига следующие кристаллографические плоскости: (001), (010), (100).

б) Выведите матрицу преобразования индексов плоскостей и определите плоскость, в которую переходит плоскость (101).

10.5. Покажите, что если кристаллографические оси выбрать не обычным способом, а так, чтобы Ox и Oy лежали в плоскости двойникового сдвига K_1 двойника 1-го рода, а ось Oz была параллельна направлению η_2 , то преобразование индексов любой плоскости при двойниковании будет определяться следующими выражениями: $h' = -h$; $k' = -k$; $l' = l$.

10.6. а) Какие кристаллографические направления останутся направлениями того же типа после того, как решетка претерпела двойниковый сдвиг первого рода?

б) Определите, в какие кристаллографические направления переходят направления [001], [010] и [100] решетки о. ц. к.-металла под действием двойникового сдвига с элементами $K_1 = (112)$, $\eta_2 = [111]$.

в) Напишите матрицу преобразования направлений и определите направление, в которое переходит направление $[1\bar{1}\bar{1}]$.

10.7. В кристаллах германия были обнаружены двойниковые ламели, параллельные плоскостям $\{111\}$. Начертите возможную структуру такого двойника.

10.8. Определите угол между осями s сдвоенной области и матрицы в двойнике магния по плоскости $(10\bar{1}2)$ (см. табл. 10.1).

10.9. Исходя из предположения, что гексагональные металлы могут деформироваться только путем скольжения по плоскостям базиса или двойниванием по $(10\bar{1}2)$ (что, конечно, неверно), разбейте все гексагональные металлы на две группы: 1) металлы, которые могут удлиняться, но не могут сжиматься в направлении, параллельном оси s , и 2) металлы, которые могут быть сжаты, но не могут удлиняться в этом направлении.

10.10. Является ли наблюдаемый в случае г.ц.к.-металлов способ двойникового сдвига, которому соответствует наименьшая величина сдвига (при котором решетка полностью воссоздается в результате сдвига)?

10.11. Сплав Cu — Au, содержащий равные количества атомов меди и золота, имеет сверхструктуру, в которой плоскости (001) поочередно состоят

из атомов меди и золота. Покажите, что прохождение дислокации с вектором Бюргера $\frac{1}{2} [101]$ (индексы относятся к г. д. к.-решетке неупорядоченной структуры) в последовательных плоскостях (101) приводит к образованию двойниковой сверхструктуры, причем плоскостью двойникования служит (101).

10.12. Поверхность кристалла цинка является плоскостью базиса (0001). Пусть эта поверхность пересекается двойниковой ламелью с плоскостями двойникования $\{0\bar{1}12\}$ (см. табл. 10.1). Под каким углом будет наклонена поверхность ламели относительно поверхности матрицы? Какое объяснение можно предложить, если оказалось, что экспериментально измеренный угол наклона меньше ожидаемого?

10.13. Монокристалл железа имеет форму стержня. Плоскость (112) (которая является также композиционной плоскостью двойникования в железе) расположена под углом 30° к оси стержня, которая лежит в плоскости, определяемой полюсом (112) и направлением $[\bar{1}11]$. Кристалл в процессе испытания на растяжение деформируется двойникованием по (112) на $\frac{1}{3}$ своей длины. Каково будет удлинение кристалла, если считать, что концы его могут свободно двигаться в боковых направлениях (т. е. ось растяжения не поворачивается в несдвоенной части кристалла)?

10.14. Кристаллы цинка двойниваются путем сдвига по плоскости (10 $\bar{1}2$) в направлении $[10\bar{1}1]$. Начертите расположение атомов в плоскости (12 $\bar{1}0$) на участке, охватывающем несколько элементарных ячеек. Эта плоскость перпендикулярна плоскости (10 $\bar{1}2$) и параллельна направлению сдвига. Проведите на чертеже след одной из плоскостей (10 $\bar{1}2$). Предположите, что часть вашего чертежа, расположенная по одну сторону от следа плоскости (10 $\bar{1}2$), представляет кристалл-матрицу. Передвиньте атомы, расположенные в узлах решетки по другую сторону от следа плоскости (10 $\bar{1}2$), в узлы решетки двойника, получающегося в результате отражения структуры в плоскости (10 $\bar{1}2$). Найдите графически величину сдвига, соответствующего такому отражению, и покажите аналитически, что она равна $(c^2/a^2 - 3) (a/c\sqrt{3})$. Особое внимание обратите на следующий момент: тот же сдвиг, приложенный к атомам, расположенным первоначально в позициях $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$, не будет приводить к точному воспроизведению структуры: потребуются дополнительные перемещения этих атомов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Mügge O., *Neues Jahrb. Mineral. Geol.*, **11**, 98 (1889).
2. Paxton H. W., Experimental Verification of the Twin System in α -Iron, *Acta Met.*, **1**, 141 (1953).
3. Buerger M. J., The Plastic Deformation of the Minerals, *Amer. Mineralogist*, **13**, 35 (1928).
4. Freise E. J., Kelly A., *Proc. Roy. Soc.*, A264, 269 (1961).
5. Jeffery R. A., Smith E., *Phil. Mag.*, **13**, 1163 (1966).
6. Heuer A. H., *Phil. Mag.*, **13**, 379 (1966).
7. Jaswon M. A., Dove D. B., The Crystallography of Deformation Twinning, *Acta Cryst.*, **13**, 232 (1960).
8. Bolling G. F., Richman R. H., Continual Mechanical Twinning, *Acta Met.*, **13**, 709 (1965).
9. Slesweek A. W., Emissary Dislocations: Theory and Experiments on the Propagation of Deformation Twins in α -Iron, *Acta Met.*, **10**, 705 (1962).
10. Frank F. C., Thompson N., On Deformation by Twinning, *Acta Met.*, **3**, 30 (1955).

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ЧТЕНИЯ

1. Reed-Hill R. E., Hirth J. P., Rogers H. C., eds., Deformation Twinning, Metallurgical Soc. Conf., vol. 25, Gordon a. Breech, New York, 1965.
2. Pabst A., Transformation of Indices in Twin Gliding, *Bull. Geol. Soc. Amer.*, **66**, 897 (1955).
3. Cahn R. W., Twinned Crystals, *Adv. Phys.*, **3**, 363 (1954).
- 4*. Классен-Неклюдова М. В., Механическое двойникование кристаллов, Изд-во АН СССР, М., 1960.
- 5*. Старцев В. И., сб. «Физика деформационного упрочнения монокристаллов», изд-во «Наукова думка», Киев, 1972.

Мартенситные превращения

11.1. Введение

Если сталь подвергнута закалке от температуры, скажем, 950°C , при которой она представляет собой аустенит (т. е. гранецентрированную кубическую фазу), она внезапно превращается в очень твердую объемноцентрированную тетрагональную фазу, называемую мартенситом. Вследствие огромного технического значения, которое имеет этот переход, он подвергался всестороннему изучению. Две его наиболее поразительные особенности присущи, кроме того, многим другим превращениям, которые в соответствии с этим называются в настоящее время мартенситными. Упомянутые особенности таковы: во-первых, превращение происходит очень быстро, а это означает, что оно не связано с диффузией атомов на сколько-нибудь значительные расстояния; во-вторых, в процессе превращения происходит изменение формы кристалла или области, претерпевающей превращение. Превращение аустенита в мартенсит начинается при некоторой температуре M_s , которая понижается с повышением содержания углерода в стали. Когда сталь подвергается закалке при температуре ниже M_s , некоторая доля ее почти мгновенно превращается в мартенсит, однако затем количество образующегося мартенсита растет со временем очень медленно до тех пор, пока не произойдет дальнейшее снижение температуры. Изменение формы области, претерпевающей превращение, можно легко обнаружить по искажению поверхности исследуемого образца. Тот факт, что в процессе превращения происходит изменение формы, имеет очень важное значение, поскольку означает, что атомы железа в процессе превращения перемещаются закономерным способом, образуя новую кристаллическую структуру.

Некоторые фазовые превращения характеризуются только одной из упомянутых особенностей; например, если охлаждать сплав $\text{Cu} - 24 \text{ ат. \% Ga}$ с умеренной скоростью, он превращается из о. ц. к.-фазы в гексагональную фазу того же состава. В процессе этого превращения через о. ц. к.-фазу быстро перемещается резкая граница раздела, оставляя за собой материал с новой структурой. Ясно, что при этом не происходит диффузии атомов на большие расстояния, однако не наблюдается и изменения формы. Это заставляет предполагать, что новая структура возникает не в ре-

зультате закономерных перемещений атомов, а путем миграции атомов через разупорядоченную поверхность раздела самым нерегулярным образом. Этот вывод подтверждается тем фактом, что отдельные зерна новой фазы могут проходить через межзеренные границы старой фазы, при этом новое зерно имеет единую ориентацию структуры, несмотря на самую различную, случайную ориентацию старых зерен. Такие превращения отличаются и от мартенситных, и от превращений, контролируемых диффузией¹⁾.

Помимо подобных бездиффузионных превращений, существуют превращения, которые контролируются диффузией, что не позволяет отнести их к мартенситным, но сопровождаются макроскопическим изменением формы, как в случае сплава Cu — 4 вес. % Be. Высокотемпературная г. ц. к.-фаза этого сплава может быть сохранена при комнатной температуре путем закалки. В процессе старения сплава происходит выделение обогащенной бериллием фазы. В результате изменения формы, сопровождающего это выделение, кристалл сплава может претерпеть очень сильные искажения.

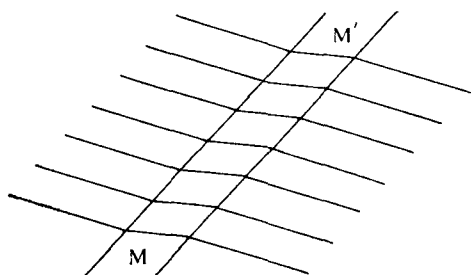
В данной главе мы ограничимся рассмотрением мартенситных превращений, т. е. бездиффузионных превращений, сопровождающихся изменением формы. При этом мы будем обсуждать только кристаллографические аспекты таких превращений.

11.2. Кристаллографические особенности мартенситных превращений

Кристалл, частично претерпевший мартенситное превращение, нередко имеет такой же вид, как кристалл, содержащий двойники (фото 10.А). Следы пересечения пластин новой фазы с поверхностью образуют линии, которые располагаются вдоль небольшого числа вполне определенных направлений. Поверхность пластины обычно бывает наклонена относительно исходной поверхности образца совершенно так же, как в случае двойниковых ламелей. Даже так называемый «хруст», характерный для механического двойникования (например, кристаллов олова), можно услышать и во время мартенситного превращения. Эти факты заставляют предполагать, что кристаллография мартенситных превращений имеет много общего с кристаллографией механического двойникования. В соответствии с этим возникает вопрос: существует ли такой простой однородный сдвиг, который превращает решетку старой фазы в решетку новой фазы? Экспериментальные данные

¹⁾ Они иногда называются *массивными* превращениями, но, к сожалению, термин «массивные» используется некоторыми авторами для обозначения определенного типа мартенситных превращений, в которых мартенситная фаза имеет форму блоков, а не тонких пластин.

показывают, что в большинстве случаев, включая превращения в сталях, для описания изменений, происходящих в решетке, требуется более сложная деформация, нежели простой сдвиг. Кристаллографическая теория мартенситных превращений имеет дело с отысканием правдоподобных деформаций, которые способны переводить узлы решетки старой фазы (все или только некоторые из них) в положения, в которых они образуют новую решетку (всю или только часть ее). Найденная деформация должна быть совместима с наблюдаемыми особенностями превращения, которые мы сейчас рассмотрим более подробно.



Фиг. 11.1. Изменение направления царапин на поверхности образца при пересечении мартенситной пластины MM' .

Предположим, что кристалл претерпел частичное превращение и что области, претерпевшие превращение, имеют форму пластин (что в действительности часто имеет место).

Параметром, легче всего поддающимся определению, является ориентация плоскости, соответствующей границам пластины; индексы этой плоскости обычно выражаются в системе координат матрицы (т. е. аустенитной фазы). Эта плоскость называется *габитусной* плоскостью; ее находят так же, как композиционную плоскость двойникования (см. фиг. 10.3). Соотношение между ориентацией исходной решетки и решетки пластины мартенсита можно найти, сопоставляя рентгенограммы обеих фаз.

Наиболее трудно поддающейся определению величиной является макроскопическая деформация, претерпеваемая материалом в пластине. Для оценки этой деформации можно использовать контрольные линии — метки, которыми могут служить, например, ребра образца (как на фиг. 10.3), царапины на поверхности или существующие на поверхности матрицы линии скольжения. На фиг. 11.1 показана типичная картина излома царапин при переходе через границы пластины с матрицей. Прямолинейность царапин на поверхности пластины свидетельствует о том, что деформация является однородной, по крайней мере в макроскопическом масштабе. Тот факт, что линии на поверхности матрицы остаются прямыми при приближении к пластине, показывает, что в матрице вокруг пластины отсутствует неоднородная деформация.

Это в свою очередь означает, что пластина заняла свое теперешнее положение не путем поворота, ибо это привело бы к сильной деформации матрицы. Непрерывность царапин при переходе через границы пластины с матрицей означает, что поверхность раздела, или габитусная плоскость, не искажена. Если бы она была искажена, царапины на границе не стыковались бы друг с другом.

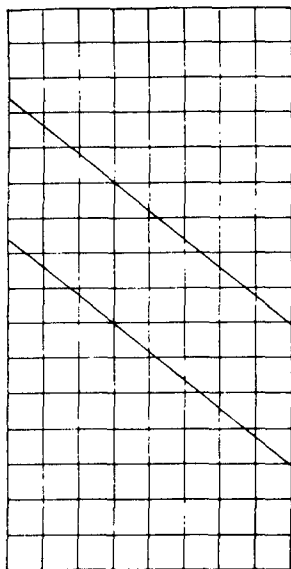
Плоскость, которая в процессе превращения не претерпевает поворота и остается неискаженной, называется *инвариантной плоскостью*. Деформацию, под действием которой некоторая плоскость не претерпевает поворота и остается неискаженной, можно описывать с помощью следующего выражения:

$$\mathbf{u} = \mathbf{d}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{h}),$$

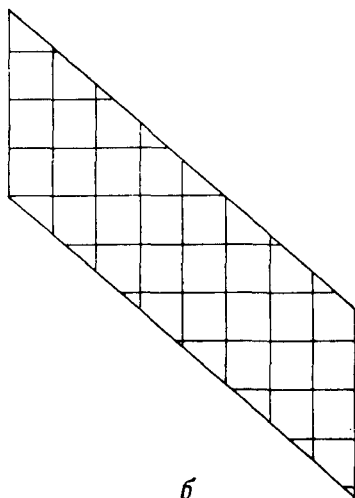
где \mathbf{u} — смещение конца вектора \mathbf{r} ; \mathbf{h} — единичный вектор, перпендикулярный инвариантной плоскости, а \mathbf{d} — некоторый постоянный вектор, параллельный направлению смещения. Величина $\mathbf{r} \cdot \mathbf{h}$ представляет собой расстояние (по нормали) от конца вектора \mathbf{r} до инвариантной плоскости, проходящей через начало координат. Когда \mathbf{d} параллелен инвариантной плоскости, деформация представляет собой простой сдвиг. Этот особый случай показан на фиг. 6.7 (стр. 243). В общем случае деформацию с инвариантной плоскостью можно разложить на простой сдвиг, описываемый компонентой \mathbf{d} , перпендикулярной \mathbf{h} , и на растяжение или сжатие в направлении, перпендикулярном инвариантной плоскости, которое описывается компонентой \mathbf{d} , параллельной \mathbf{h} . Для экспериментального определения величины и направления \mathbf{d} требуются по крайней мере две параллельные линии — метки.

Хотя точных измерений макроскопической деформации в мартенситных пластинах произведено сравнительно мало и мартенситная фаза не всегда образуется в виде хорошо ограненных, правильной формы пластин, обычно предполагается, что характеристическая деформация в толстых образцах по крайней мере приблизительно представляет собой деформацию с инвариантной плоскостью. В пользу этого предположения свидетельствует и такой факт: когда деформация подобного типа происходит в очень тонкой пластине, которая внедрена в матрицу, сама матрица не должна претерпевать деформации, обусловленной деформацией пластины, или, другими словами, не возникает никаких затруднений, связанных с *аккомодацией* деформации, за исключением краев пластины.

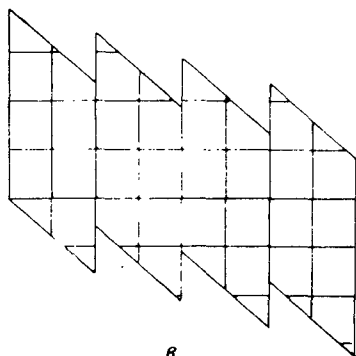
Условившись, что макроскопическая деформация — это такая деформация, при которой габитусная плоскость остается инвариантной, зададим теперь вопрос: будет ли такая деформация, примененная однородно к узлам решетки матрицы (аустенита), переводить эту решетку в решетку мартенсита? Ответ обычно гласит: нет, не будет. Отсюда с неизбежностью следует вывод, что дефор-



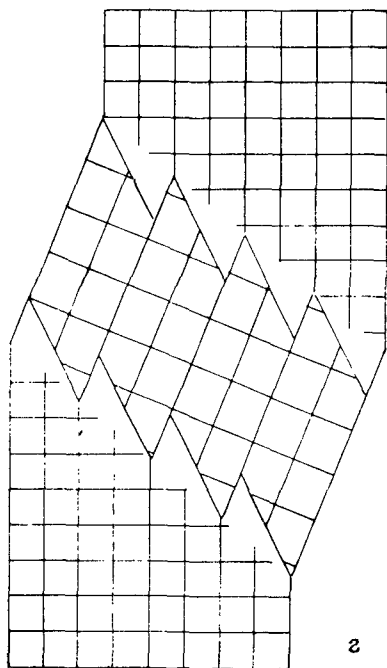
a



b



в



г

Ф и г. 11.2. Изменение формы пластины и решетки при мартенситном превращении.

a — квадратная решетка с выделенной в ней пластиной; *b* — в результате деформации решетка внутри пластины становится прямоугольной, а края пластины удлиняются; *в* — в результате скольжения края пластины укорачиваются, так что наблюдается макроскопическое сжатие пластины и исходной фазы, как показано на *г*.

мация решетки это не то же самое, что макроскопическая деформация. Следовательно, наблюдаемая деформация является однородной только в макроскопическом масштабе; на микроскопическом уровне она должна быть неоднородной. В некоторых случаях эту неоднородность можно наблюдать непосредственно, как, например, когда мартенситная пластина заметно *издвойникова* *внутри*. В других случаях неоднородный характер деформации обнаружить труднее. Когда тип неоднородности не известен, при теоретическом рассмотрении прежде всего находят наиболее подходящую однородную деформацию, которая будет трансформировать решетку матрицы в решетку мартенсита, и затем подбирают *дополнительную деформацию* (типа сдвига или двойникования), которая сохраняет решетку мартенсита, но изменяет макроскопическую деформацию, приводя ее в соответствие с наблюдаемой на опыте деформацией с инвариантной плоскостью. Этот подход иллюстрируется на двумерной схеме на фиг. 11.2. Для подтверждения правильности теории необходимо, чтобы окончательная макроскопическая деформация, выбранная описанным выше способом, была идентична наблюдаемой деформации и чтобы на основе теории можно было правильно предсказывать ориентационное соотношение между решетками мартенсита и матрицы.

Ограничения такой теории очевидны. Действительные пути атомов эта теория не предсказывает: она предсказывает только окончательные позиции атомов, если даны исходные. В принципе это предсказание может быть проверено непосредственно: или атомы в конце концов-таки попадают в эти указанные позиции, или нет. На практике теорию можно проверить только косвенным способом, в типичном случае — по ориентации габитусной плоскости и ориентационному соотношению между решетками исходной и мартенситной фаз. При этом не исключается возможность того, что с наблюдаемыми особенностями превращения могут быть совместимы также некоторые другие типы деформаций, основанные на иных постулатах. Абсолютной гарантии того, что этот путь превращения является единственным, не имеется.

Общие соображения, высказанные в данном разделе, иллюстрируются ниже на базе более детального обсуждения ряда конкретных превращений. Самый важный случай — это, конечно, мартенситное превращение в сталях, однако из-за сложности этого превращения легче начать рассмотрение деталей кристаллографической теории с других случаев. Именно это соображение обусловило выбор тех превращений, которые будут рассмотрены в трех следующих разделах; однако раздел о превращениях в сталях можно читать и отдельно без всяких затруднений.

11.3. Мартенситное превращение в кобальте

При высоких температурах кобальт имеет г. ц. к.-структуру; при охлаждении он (при 420°C) переходит в г. п. у.-структуру. Кристаллография этого превращения особенно проста, так как в данном случае происходит просто изменение последовательности укладки плотноупакованных плоскостей: $ABCABC \dots$ переходит в $ABABAB \dots$. Это изменение может быть получено в результате прохождения частичных дислокаций с вектором Бюргерса $\frac{1}{6} \langle 211 \rangle$ по каждой второй из плоскостей $\{111\}$. Если каждое смещение на $\frac{1}{6} \langle 211 \rangle$ происходит в одном и том же направлении $\langle 211 \rangle$, тогда будет происходить накопление макроскопического простого сдвига g , величина которого определяется выражением

$$|\frac{1}{6} \langle 211 \rangle| = g 2d_{\{111\}}. \quad (11.1)$$

Здесь $d_{\{111\}}$ — расстояние между плоскостями $\{111\}$; следовательно,

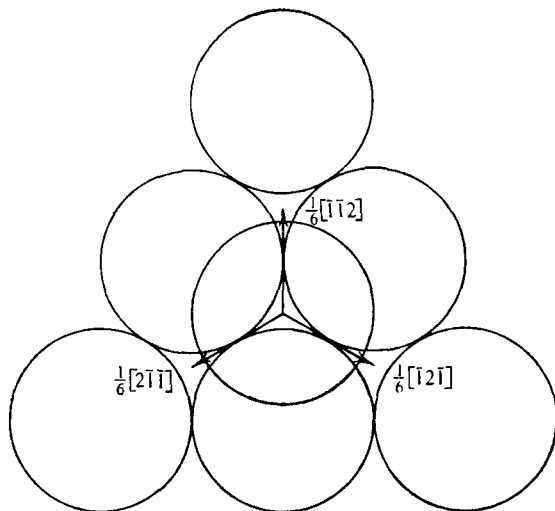
$$g = \sqrt{2}/4. \quad (11.2)$$

Простой сдвиг в плоскости $\{111\}$ оставляет эту плоскость инвариантной, поэтому естественно ожидать, что именно плоскость $\{111\}$ будет габитусной плоскостью.

Интересно посмотреть, как можно описать полученный результат на более формальной основе. Ясно, что никакая однородная деформация, приложенная к атомам, не может превратить г. ц. к.-структуру в г. п. у.-структуру, поскольку в г. ц. к.-структуре атомы лежат во всех узлах пространственной решетки, тогда как в г. п. у.-структуре в узлах решетки лежит только половина всех атомов. Любой однородный сдвиг г. ц. к.-структуры будет порождать новую решетку, в которой на каждый узел по-прежнему будет приходиться по одному атому. Однако гомогенный сдвиг величиной $\sqrt{2}/4$ в направлении $\langle 211 \rangle$ в плоскости $\{111\}$ все-таки порождает необходимую г. п. у.-решетку из половины узлов г. ц. к.-решетки. Для завершения же изменения структуры необходимы дополнительные перемещения атомов, не производящие изменения формы.

Экспериментальному исследованию этого превращения мешает трудность наблюдения частично трансформированных кристаллов кобальта. После превращения на поверхности образцов наблюдаются полосы, параллельные следам плоскостей $\{111\}$; это заставляет думать, что, как и следовало ожидать, габитусной плоскостью является $\{111\}$. Температуру превращения кобальта можно понизить, легируя его никелем, так что некоторое количество кубической фазы может сохраняться даже при комнатной температуре. На таких образцах плотноупакованные плоскости и направления в обеих фазах параллельны друг другу с высокой точностью (выше $\pm 0,5^\circ$) [1]. Однако изменение формы носит очень неза-

кономерный характер, и хорошо образованные макроскопические участки поверхности, имеющие наклон относительно матрицы, наблюдаются редко. Это можно объяснить исходя из предположения о том, что смещение в направлении $\langle 211 \rangle$ может фактически происходить в трех различных направлениях $\langle 211 \rangle$, лежащих



Фиг. 11.3. Возможные направления смещений типа $\frac{1}{6}\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$ в плоскости $\{111\}$ г. ц. к.-кристалла.

в данной плоскости $\{111\}$, как показано на фиг. 11.3. Если в целом эти три направления работают поровну, тогда макроскопический сдвиг может и вовсе отсутствовать.

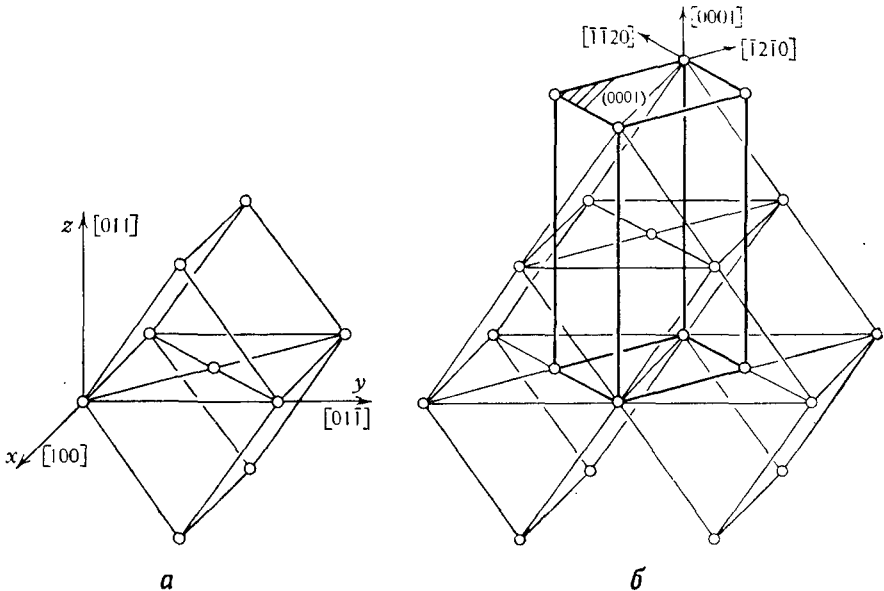
Наблюдали, что переход г. ц. к.-кобальта в г. п. у.-кобальт сопровождается очень незначительным уменьшением объема. Выраженное в долях исходного объема это уменьшение равняется $-3,6 \cdot 10^{-3}$. Отсюда следует, что одно только скольжение частичных дислокаций $\frac{1}{6}\langle 211 \rangle$ не может привести к полному завершению превращения, так как оно не обеспечивает это изменение объема.

11.4. Мартенситное превращение в цирконии

Цирконий и титан оба претерпевают превращение из высокотемпературной о. ц. к.-фазы (β) в г. п. у.-структуру (α). Аналогичное превращение имеет место и в литии при температуре около 70 К.

Первым делом при рассмотрении этих превращений мы сравним решетки о. ц. к.- и г. п. у.-фаз, чтобы подобрать небольшую деформацию, которая будет превращать одну решетку в другую. На фигуре 11.4 показана о. ц. к.-решетка с выделенной в ней искаженной гексагональной ячейкой. Плоскость $(011)_\beta$ образует базисную пло-

скость искаженной гексагональной ячейки, а плотноупакованные направления $\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$, лежащие в этой плоскости, соответствуют плотноупакованным направлениям $\langle 11\bar{2}0 \rangle_\alpha$. Это дает только четыре из шести направлений $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ в гексагональной решетке. Остальные два направления $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ получаются из ребра о. ц. к.-ячейки, т. е. из направлений $[100]$ и $\bar{[100]}$ на фиг. 11.4. В случае



Ф и г. 11.4. Соответствие решеток о. ц. к.- и гексагональной структур.

a — элементарная ячейка о.ц.к.-решетки, ориентированная таким образом, что плоскость (011) располагается горизонтально; *б* — элементарная ячейка искаженной гексагональной структуры, выделенная в о.ц.к.-решетке, ориентированной, как на фиг. 11.4, *a*.

циркония размеры такой гексагональной ячейки могут быть приведены в соответствие с параметрами α -фазы путем сжатия о. ц. к.-решетки приблизительно на 10% вдоль направления $[100]_\beta$, которое превращается в $[2\bar{1}\bar{1}0]_\alpha$, расширения на 10% вдоль $[011]_\beta$, которое превращается в $[01\bar{1}0]_\alpha$, и расширения на 2% вдоль $[011]_\beta$, которое превращается в $[0001]_\alpha$. Эту деформацию мы будем называть чистой деформацией решетки (S_{ij}). Если направления $[100]_\beta$, $[011]_\beta$ и $[011]_\beta$ мы выберем в качестве осей x , y и z соответственно, матрица этой деформации будет иметь вид

$$S = \{S_{ij}\} = \begin{pmatrix} -0,10 & 0 & 0 \\ 0 & 0,10 & 0 \\ 0 & 0 & 0,02 \end{pmatrix}. \quad (11.3)$$

Единственным оправданием выбора данного конкретного соответствия между о. ц. к.- и г. п. у.-решетками (фиг. 11.4) в качестве основы для теории мартенситного превращения в цирконии служит то, что деформация **S**, описываемая выражением (11.3), очень мала. В принципе можно постулировать любое число других соответствий, потому что в качестве исходной можно выбрать любую ячейку о. ц. к.-решетки, содержащую два узла, и деформировать ее таким образом, чтобы узлы, расположенные по ее вершинам, образовали одну из возможных элементарных ячеек гексагональной решетки. (Поскольку в о. ц. к.-структуре приходится один атом на узел решетки, а в г. п. у.-структуре — два, чтобы завершить переделку структуры половина атомов должна перегруппироваться уже после однородной деформации решетки.) На практике все соответствия, за исключением немногих, очень маловероятны вследствие больших деформаций, которые требуются для их осуществления, и наиболее вероятное соответствие выбрать довольно легко. Соответствие между решетками удобно представить с помощью матрицы **C**. Если $[pqr]$ — вектор исходной решетки, который становится вектором $[uvw]$ в решетке, претерпевшей превращение ¹⁾, тогда [см. приложения 1 (разд. А1.4) и 4]

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \mathbf{C} \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix}, \quad (11.4)$$

где **C** — квадратная матрица третьего порядка. Заменяя по очереди вектор $[pqr]$ на $[100]$, $[010]$ и $[001]$, мы увидим, что столбцы матрицы **C** являются соответственно векторами, в которые эти координатные векторы превращаются в трансформированной решетке. Для соответствия, показанного на фиг. 11.4, имеем

$$\mathbf{C} = \{C_{ij}\} = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & -1/2 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad (11.5)$$

причем векторы гексагональной решетки записаны в трехиндексной системе обозначений.

Следующий (после выбора соответствия решеток) шаг состоит в сравнении деформации, которую предсказывает это соответствие, с деформацией, фактически наблюдаемой в трансформированной области кристалла. Действие чистой деформации решетки можно проиллюстрировать, рассмотрев, как она будет деформировать кристалл сферической формы. Любая однородная деформация превращает сферу в эллипсоид (см. разд. 5.3).

¹⁾ Индексы вектора $[pqr]$ записываются в системе координат исходной решетки, а вектора $[uvw]$ — в системе координат решетки мартенсита.

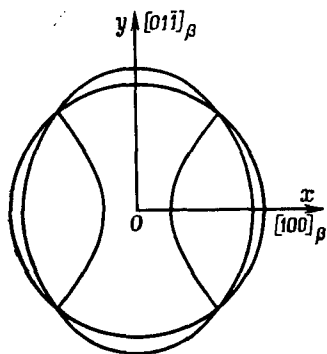
Единичная сфера из о. ц. к.-циркония, ориентированная, как показано на фиг. 11.5, и деформированная согласно выбранному выше соответствию решеток, превращается в эллипсоид, описываемый следующей формулой:

$$(x^2/0,90^2) + (y^2/1,10^2) + (z^2/1,02^2) = 1. \quad (11.6)$$

Все векторы, длина которых остается неизменной после деформации, определяются пересечением этого эллипсоида с исходной сферой, т. е. с поверхностью

$$x^2 + y^2 + z^2 = 1. \quad (11.7)$$

Кривая, по которой происходит это пересечение, показана на фиг. 11.5 в проекции на плоскость xy . Векторы, проведенные

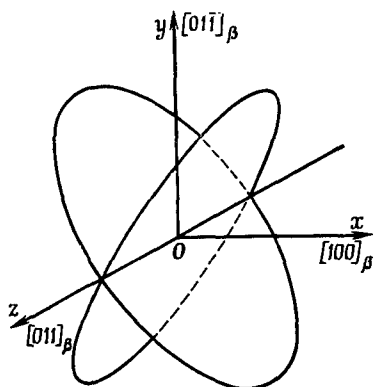


Ф и г. 11.5. Суперпозиция сечений сферы из циркония и эллипсоида, получающегося из этой сферы под действием чистой деформации решетки.

Сечения перпендикулярны $[011]_{\beta}$.

из начала координат к точкам этой линии, определяют конус эллиптического сечения, а не плоскость. Однако в случае реальных превращений, как правило, наблюдается, что все-таки одна плоскость остается неискаженной в макроскопическом масштабе, а именно габитусная плоскость. В общей теории следующий шаг состоит в формальном добавлении некоторой деформации скольжением или двойникованием, которая, конечно, оставляет решетку неизменной, но изменяет макродеформацию таким образом, чтобы получилась одна плоскость, которая не искажается в макромасштабе.

В случае циркония деформация вдоль $[011]_{\beta}$ очень мала: всего 2%, поэтому вполне допустим приближенный подход. Если бы эта главная деформация была равна нулю, сфера и эллипсоид



Ф и г. 11.6. Плоскости, остающиеся в решетке циркония неискаженными при действии деформации S' .

касались бы друг друга на оси z и векторы неизменившейся длины лежали бы в двух плоскостях, как показано на фиг. 11.6. Фактически необходимое и достаточное условие того, чтобы имелась неискаженная плоскость, сводится к тому, чтобы одна из главных деформаций равнялась нулю, а две другие имели противоположные знаки. Поскольку это условие в цирконии почти выполняется, величина скольжения или двойнирования, которую необходимо добавить к чистой деформации решетки, чтобы получить деформацию с неискаженной плоскостью, очень мала и грубое согласие с наблюдаемыми особенностями превращения можно получить, приняв, что деформацией, соответствующей преобразованию решетки, будет деформация S'_{ij} , матрица которой имеет вид

$$S' = \{S'_{ij}\} = \begin{pmatrix} -0,1 & 0 & 0 \\ 0 & 0,1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (11.8)$$

Это было бы верно, если бы вектор решетки $[011]_B$ был по длине в точности равен параметру c гексагональной решетки. Деформации $\epsilon_x = -0,1$ и $\epsilon_y = 0,1$ действительно переводят плоскость $(011)_B$ в базисную плоскость гексагональной ячейки. Поскольку ϵ_x и ϵ_y равны (и малы) по величине и противоположны по знаку, деформация S' близка к чистому сдвигу (разд. 5.3). Теперь если добавить к чистому сдвигу соответствующий поворот, то полный эффект будет эквивалентен простому сдвигу. Плоскость, в которой происходит этот простой сдвиг, не поворачивается и не искажается, так что эта плоскость должна быть габитусной плоскостью. В нашем случае, поскольку величина чистого сдвига мала, величина поворота мала и в зависимости от знака поворота плоскость, по которой происходит простой сдвиг, близка к одной из плоскостей, лежащих под углом 45° к плоскости $(100)_B$ и содержащих направление $[011]_B$.

Для большей точности необходимо принимать во внимание поворот. Фиг. 11.7 показывает влияние деформации S' на сферу, на которую мы смотрим вдоль оси z (что соответствует фиг. 11.5). Хотя плоскости OQ , OP не искажены деформацией, они повернулись из своих первоначальных позиций OQ' , OP' . Следовательно, чтобы получить не только неискаженную, но и неповернутую габитусную плоскость, к чистой деформации решетки S' необходимо добавить поворот вокруг оси z , возвращающий одну из этих плоскостей в ее исходное положение (например, OQ в OQ'). *Полная деформация решетки* будет тогда деформацией с инвариантной плоскостью, и ее можно будет отождествить с непосредственно наблюдаемой деформацией.

Выберем плоскость, проходящую через OQ' , в качестве габитусной плоскости (фиг. 11.7) и рассчитаем угол между этой плоскостью

и направлением $[100]_{\beta}$, которое параллельно оси x . Пусть Q' будет точкой (x, y) . Координаты Q тогда можно определить, добавив смещение \underline{u} , обусловленное деформацией S' . Для этого пользуются произведением матриц:

$$\begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{pmatrix} = S' \begin{pmatrix} x \\ y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11.9)$$

откуда

$$\begin{aligned} u_x &= -0,1 x, \\ u_y &= 0,1 y. \end{aligned} \quad (11.10)$$

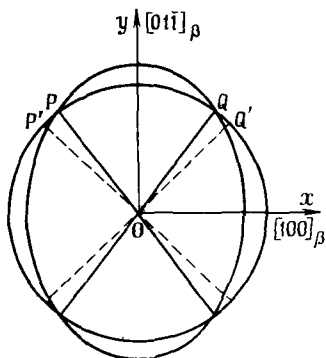
Следовательно, точка Q имеет координаты $(0,9 x; 1,1 y)$. Отношение x/y можно теперь получить из условия $OQ' = OQ$, т. е.

$$x^2 + y^2 = (0,9 x)^2 + (1,1 y)^2.$$

Отсюда

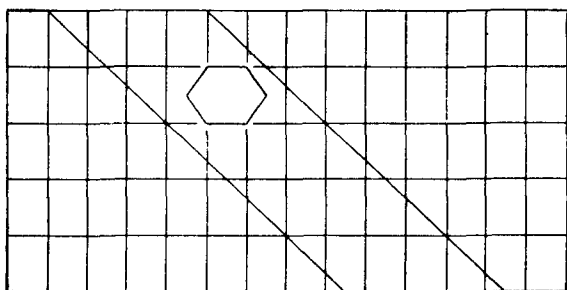
$$x/y = 1,05.$$

Таким образом, габитусная плоскость образует угол $\text{arctg } 1,05 \simeq \simeq 46^{1/2} \circ$ с плоскостью куба β -фазы $(100)_{\beta}$ и содержит направление $[011]_{\beta}$, которое становится осью c α -фазы (гексагонального мартенсита). Это не рациональная плоскость решетки β -фазы. Стоит

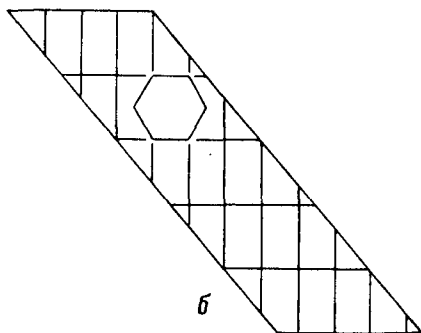


Ф и г. 11.7. Поворот неискаженных плоскостей в результате деформации S' .

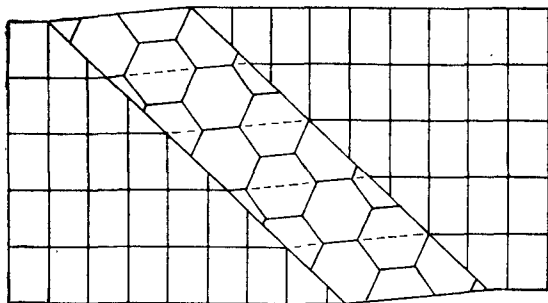
заметить, что, даже когда не требуется добавлять скольжение или двойникование к деформации решетки, чтобы получить инвариантную плоскость, все равно габитусная плоскость в общем случае не будет рациональной плоскостью. Другая возможная габитусная плоскость, проходящая на фиг. 11.7 через OP' , кристаллографически эквивалентна габитусной плоскости, проходящей через OQ' , потому что плоскость, перпендикулярная оси x , является зеркальной плоскостью симметрии.



a



b



v

Ф и г. 11.8. Геометрическая схема возникновения мартенситной пластины в титане или цирконии.

a — о.ц.к.-решетка в проекции (011) с выделенной в ней областью, соответствующей будущей мартенситной пластине; б — изменение структуры под действием деформации решетки, которое приводит к превращению плоскости {011} о.ц.к.-структуры в плоскость базиса гексагональной структуры; в — схема, иллюстрирующая возможное сопряжение структур матрицы и трансформированной пластины после поворота пластины на небольшой угол.

В действительности чистая деформация и поворот решетки происходят одновременно, а не в две отдельные стадии, показанные на фигуре.

Ориентационное соотношение между мартенситом и матрицей можно определить из соответствия решеток и полной деформации решетки, т. е. чистой деформации S' и последующего поворота, который возвращает OQ обратно в OQ' . Поскольку ось поворота перпендикулярна плоскости $(011)_\beta$, которая становится плоскостью базиса мартенсита, эти две плоскости — $(011)_\beta$ и $(0001)_\alpha$ — остаются строго параллельны друг другу. Поворот отклоняет направление $[100]_\beta$ приблизительно на 3° от направления $[2\bar{1}\bar{1}0]_\alpha$, которому оно отвечает в решетке α -фазы. Соответствующие плотноупакованные направления, т. е. $\langle 111 \rangle_\beta$ и $\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle_\alpha$, расходятся приблизительно на $2^{1/2}^\circ$.

Образование пластины мартенсита под действием одной только деформации решетки схематически показано на фиг. 11.8.

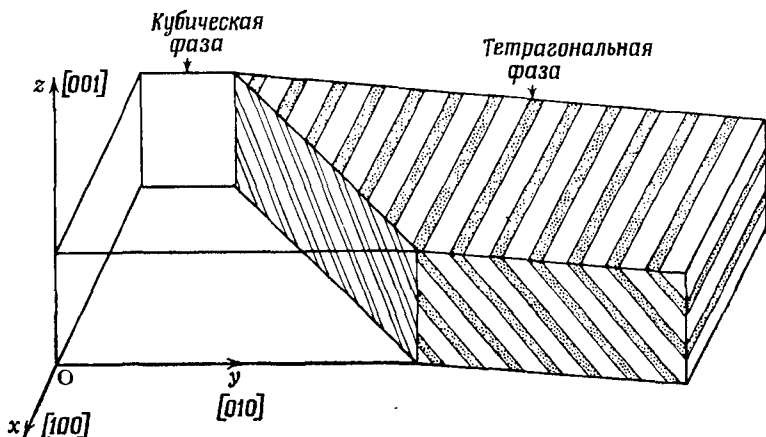
Ориентационное соотношение было найдено экспериментально при исследовании ограненных кристаллов, выращенных разложением иодида [2]. Внешняя симметрия этих кристаллов выявляет ориентацию высокотемпературной фазы β , которая не может быть сохранена при комнатной температуре. Этим способом были исследованы кристаллы титана и циркония; результаты для них практически одинаковы. Плотноупакованные плоскости $(0001)_\alpha$ и $\{011\}_\beta$ и направления плотнейшей упаковки $\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle_\alpha$ и $\langle 111 \rangle_\beta$ всегда были параллельны друг другу с точностью до $1-2^\circ$. На поверхности кристаллов при комнатной температуре были обнаружены группы параллельных полос. Если предположить, что эти полосы являются следами габитусных плоскостей, они показывают, что габитусные плоскости всегда почти перпендикулярны плоскости базиса решетки α -фазы, как и было предсказано выше. Что касается конкретных данных, то имелись сообщения о габитусных плоскостях, близких к $\{\bar{4}3\bar{3}\}_\beta$. Все эти результаты удовлетворительно согласуются с предсказаниями приближенной теории, описанной выше.

11.5. Мартенситные превращения в сплавах индий — таллий

Структуру индия можно представить как гранецентрированную тетрагональную (г. ц. т.) (разд. 3.3) с отношением осей $c/a = 1,08$. Сплавление с таллием уменьшает отношение c/a , пока при 23 ат. % таллия структура твердого раствора не становится г. ц. к. Отношение c/a уменьшается также с ростом температуры, и в области 20 ат. % Tl мартенситное превращение г. ц. к. \rightarrow г. ц. т. происходит (при охлаждении) при 60°C .

Это превращение интересно по двум причинам. Во-первых, г. ц. т.-фаза состоит из параллельных связанных между собой двойникованием пластин и легко показать, как эта неоднородность дает макроскопически неискаженную габитусную плоскость, кото-

рая не может быть получена одной только однородной деформацией решетки. Во-вторых, можно сделать так, что единая поверхность раздела между г. ц. к.- и г. ц. т.-областями будет обратимо перемещаться через кристалл [3]. Теоретический способ отыскания единственной макроскопически неискаженной и неповернутой плоскости — поверхности раздела между фазами — может быть применен в этом случае с большой уверенностью в успехе. Кристалл, претерпевший частичное превращение, изображен на фиг. 11.9.



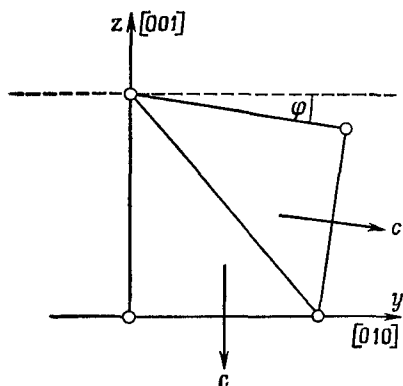
Фиг. 11.9. Кристалл сплава In — Tl, претерпевший частичное превращение. Темные и светлые прослойки в области, претерпевшей превращение (тетрагональная фаза), соответствуют ламеллям, связанным друг с другом двойниковым соотношением.

Г. ц. к.- и г. ц. т.-решетки сплавов In — Tl настолько близки по параметрам, что выбор соответствия решеток очевиден. Г. ц. т.-решетка сплава In с 20,7 ат.% Tl при температуре перехода получается из г. ц. к.-решетки расширением вдоль одного из направлений $\langle 001 \rangle$ на $2/3\%$ и сжатием по другим двум на $1/3\%$. Чистая деформация решетки в координатных осях кристалла выражается матрицей

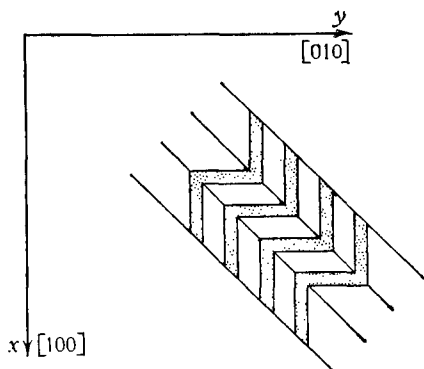
$$S = \{S_{ij}\} = \begin{pmatrix} -\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 2\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon \end{pmatrix}, \quad (11.11)$$

где $\varepsilon = 0,003$, а ось z тетрагональной решетки выбрана вдоль оси y . Ввиду малой величины главных деформаций основные особенности этого превращения можно понять на основе упрощенного подхода.

Однородная деформация \mathbf{S} не дает неискаженную плоскость. Пересечение единичной сферы с эллипсоидом, в который эта сфера превращается после деформации \mathbf{S} , дает конус в качестве геометрического места векторов, не изменивших своей длины. Однако макроскопически неискаженная плоскость может и существовать, потому что образующаяся мартенситная фаза фактически не однородна, но состоит из ламелей, которые сдвойникованы относительно друг друга. Двойниковое соотношение между ними показано на фиг. 11.10. Оно может возникнуть, если в двух соседних сдвой-



Фиг. 11.10. Схема, иллюстрирующая взаимную кристаллографическую ориентацию двойниковых ламелей, изображенных на фиг. 11.9.



Фиг. 11.11. Три параллельные мартенситные пластины, в которых чередуются области с деформациями (сдвигом) противоположных знаков.

никованных областях в ось c мартенситной фазы превратятся две различные оси куба исходной фазы. Если $\mathbf{S}_1 = (-\epsilon, -\epsilon, 2\epsilon)$, а $\mathbf{S}_2 = (-\epsilon, 2\epsilon, -\epsilon)$, тогда \mathbf{S}_1 и \mathbf{S}_2 дадут две связанные двойниковым соотношением области, показанные на фиг. 11.10 (не считая небольшого поворота одной области относительно другой на угол $\varphi \approx 3\epsilon$: поскольку величина ϵ очень мала, этим поворотом можно пренебречь). Макроскопическая деформация $\bar{\mathbf{S}}$, обусловленная наличием областей 1 и 2, составляющих долю общего объема x и $(1 - x)$ соответственно, равна тогда

$$\bar{\mathbf{S}} = x\mathbf{S}_1 + (1 - x)\mathbf{S}_2 \tag{11.12}$$

или

$$\bar{\mathbf{S}} = (-\epsilon, 2\epsilon - 3\epsilon x, -\epsilon + 3\epsilon x). \tag{11.13}$$

Если $x = 1/3$, $\bar{\mathbf{S}}$ становится равной $(-\epsilon, \epsilon, 0)$. Одна из главных макроскопических деформаций равна теперь нулю, а две другие имеют противоположные знаки, т. е. удовлетворяется условие

возникновения неискаженной плоскости (аналогичное решение получается при $x = 2/3$). Фактически, поскольку величина ϵ очень мала, макроскопическая деформация $\bar{S} = (-\epsilon, \epsilon, 0)$ очень близка к деформации типа чистого сдвига; после добавления небольшого поворота эта деформация становится эквивалентной простому сдвигу по плоскости, проходящей под углом почти 45° к осям Ox и Oy (см. разд. 5.3). Габитусная плоскость будет параллельна плоскости, по которой происходит этот простой сдвиг; другими словами, она очень близка или к (110) , или к $(\bar{1}\bar{1}0)$. Габитусная плоскость $(\bar{1}\bar{1}0)$ показана на фиг. 11.9.

Отметим одну особенность, которая имеет важные последствия: данная габитусная плоскость может быть инвариантной плоскостью при любой из двух противоположных макроскопических деформаций. Так, плоскость $(\bar{1}\bar{1}0)$, помимо того, что служит габитусной плоскостью для мартенситной пластины, макроскопическая деформация которой описывается выражением $(-\epsilon, \epsilon, 0)$, как мы видели выше, может также служить в качестве габитусной плоскости для пластины, которая внутренне издвойникова по плоскости (101) и которая, следовательно, претерпела макроскопическую деформацию $(\epsilon, -\epsilon, 0)$. Ясно, что, укладывая по очереди эти параллельные пластины, имеющие противоположные деформации, можно получить некоторый объем мартенситной фазы, внутри которого средняя деформация равна нулю (фиг. 11.11). Экспериментальными наблюдениями установлено, что превращение часто происходит путем роста такой пачки мартенситных пластин в матрице, причем внутри пластин чередуются двойники двух различных типов, как показано на фиг. 11.11.

Хотя изложенная выше теория не является точной, она ясно показывает, каким образом сдвиг, который сохраняет решетку (в данном случае двойниковый сдвиг), может давать макроскопически неискаженную плоскость, по которой происходит стыковка с нетрансформированной матрицей. Поскольку величина ϵ мала, габитусная плоскость, определенная на основании точных расчетов, всего лишь на $1/2^\circ$ отклоняется от $\{110\}$, а тетрагональные оси с точностью до 2° параллельны осям куба.

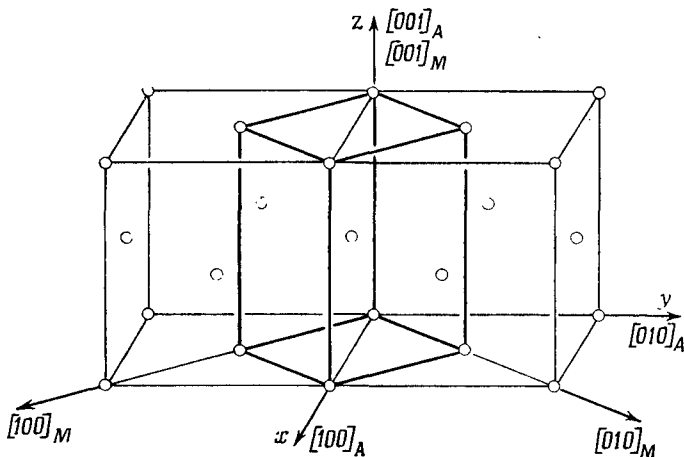
В теории не уточняется абсолютная толщина двойниковых ламелей. Чем тоньше двойники, тем точнее согласование решеток на поверхности раздела. Для двойников средней толщины h упругие деформации величиной ϵ будут простирались от поверхности раздела на расстояние порядка h , давая энергию межфазной поверхности раздела, пропорциональную $\epsilon^2 h$. Тенденция к понижению поверхностной энергии поверхностей раздела за счет уменьшения h , по-видимому, ограничивается избыточной объемной энергией мартенсита, обусловленной энергией двойниковых границ γ , которая имеет порядок γ/h на единицу объема. Полная

энергия будет минимальной при некотором конечном расстоянии между ламелями.

Интересное влияние оказывает на превращение приложенное извне напряжение. Например, можно видеть, что растяжение вдоль оси y будет благоприятствовать превращению того конкретного типа, который показан на фиг. 11.9, потому что при этом увеличивается длина кристалла в направлении Oy . Температура начала превращения M_s увеличивается при приложении напряжения растяжения, так что при испытаниях на растяжение, проводимых при температуре чуть выше нормальной температуры M_s , при некотором критическом напряжении может начаться деформация, обусловленная мартенситным превращением. После того как нагрузка удаляется, превращение происходит в обратном направлении.

11.6. Мартенситные превращения в сталях

Исследование мартенситных явлений всегда стимулировалось огромной практической важностью мартенсита в сталях. Мартенситные превращения в сталях и сами по себе представляют множество проблем благодаря своей сложности и громадному разнообразию особенностей их протекания в сталях различного состава.



Ф и г. 11.12. Г. ц. к.-решетка с выделенной в ней о. ц. 1. ячейкой (по Э. Бейну [4]).

Особенность, которая является основной для теории всех форм тетрагонального мартенсита в сталях, — это соответствие решеток, на наличие которого впервые указал Бейн в 1924 г. [4]. Оно изображено на фиг. 11.12, которая показывает, каким обра-

зом может быть выведена о. ц. т.-решетка (объемноцентрированная тетрагональная) из г. ц. к.-решетки. Матрица преобразования индексов кристаллографических направлений C в случае выбора оси c , как на фиг. 11.12, имеет вид

$$C = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (11.14)$$

Матрица преобразования индексов для кристаллографических плоскостей K определяется как

$$\begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix}_M = K \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix}_A, \quad (11.15)$$

причем индексы M и A означают мартенсит (о. ц. т.) и аустенит (г. ц. к.) соответственно. Подставляя по очереди $(100)_A$, $(010)_A$ и $(001)_A$ вместо $(hkl)_A$ и определяя с помощью фиг. 11.12, каким плоскостям $(HKL)_M$ решетки мартенсита они соответствуют, получаем

$$K = 1/2 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \quad (11.16)$$

Тетрагональность (т. е. величина отклонения отношения осей c/a от единицы) о. ц. т.-решетки, изображенной на фиг. 11.12, значительно больше, чем тетрагональность мартенсита. Чтобы получить правильные значения параметров решетки мартенсита, необходимо сжать направление $[001]$ приблизительно на 20%, а плоскость (001) подвергнуть однородному растяжению на ~12%. Эта чистая деформация решетки, отнесенная к A - или M -осям, может быть записана матрицей

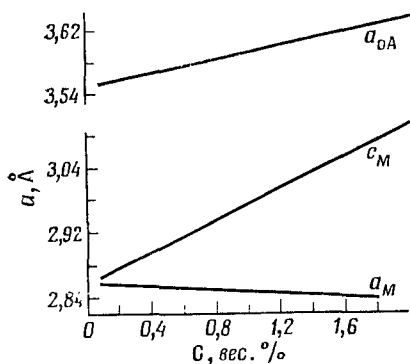
$$B = \{B_{ij}\} = \begin{pmatrix} \eta_1 & 0 & 0 \\ 0 & \eta_1 & 0 \\ 0 & 0 & \eta_3 \end{pmatrix}. \quad (11.17)$$

Если обозначить периоды решетки аустенита через a_0 , а мартенсита через c и a , то будем иметь

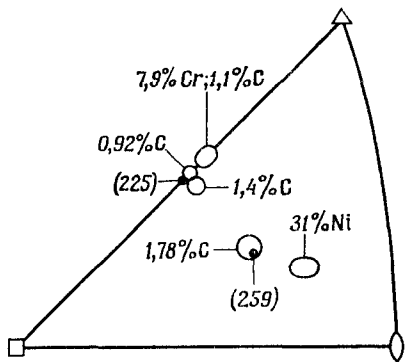
$$\eta_1 = (a \sqrt{2}/a_0) - 1 \approx 0,12, \quad \eta_3 = (c/a_0) - 1 \approx -0,20.$$

Точные значения этих главных деформаций зависят от содержания углерода в стали, которое влияет на тетрагональность мартенсита, как показано на фиг. 11.13.

Увеличение отношения c/a с увеличением содержания углерода происходит совершенно так, как можно было ожидать на основании предполагаемого Бейном соответствия решеток и того факта, что атомы С в аустените занимают октаэдрические междуузлия типа $(0, 0, \frac{1}{2})_A$ (разд. 3.2). Если атомы углерода будут захватываться этими позициями во время превращения, они будут препятствовать сжатию вдоль $[001]$. Для того чтобы понять, каким образом возникает тетрагональность, рассмотрим бейновское соответствие между г. ц. к.- и о. ц. к. ($c/a = 1$)-решетками. Вспом-



Ф и г. 11.13. Изменение периодов решеток аустенита и мартенсита в зависимости от содержания углерода в стали [5].



Ф и г. 11.14. Положение полюсов, соответствующих габитусным плоскостям мартенсита, в случае различных сталей.

ним, что все октаэдрические междуузлия г. ц. к.-решетки в о. ц. к.-решетке соответствуют междуузлиям (имеющим теперь форму различно ориентированных сплюснутых октаэдров) всего лишь одного из трех возможных типов, т. е. позициям одного из трех типов на фиг. 9.14: F , A или B . Если $[001]_M$ на фиг. 9.14 соответствует $[001]_A$, тогда октаэдрические междуузлия г. ц. к.-решетки отвечают позициям F -типа; если $[010]_M$ соответствует $[010]_A$, тогда они отвечают позициям B -типа; наконец, если $[100]_M$ соответствует $[100]_A$, тогда они отвечают позициям A -типа. В результате атомы углерода, которые в аустените распределены беспорядочно, в области, претерпевшей превращение, будут расширять решетку в одном конкретном направлении и обеспечивать тем самым ее тетрагональность.

Деформация B будет превращать единичную сферу в эллипсоид вида

$$x^2/(1 + \eta_1)^2 + y^2/(1 + \eta_2)^2 + z^2/(1 + \eta_3)^2 = 1. \quad (11.18)$$

Все векторы, длина которых не изменяется под действием B ,

лежат на конусе, который определяется пересечением этого эллипсоида с единичной сферой. Поскольку предполагается, что при изменении формы области, претерпевшей превращение, одна плоскость остается макроскопически неизменной и не поворачивается, обеспечивая структурное сопряжение с матрицей, задача состоит в отыскании дополнительной деформации, которая будет обеспечивать наличие такой плоскости при инвариантной решетке. Все главные деформации, составляющие \mathbf{B} , довольно велики, так что приближенный подход в данном случае не годится. Первые успешные детальные теории были разработаны Векслером, Либерманом и Ридом [6], а также Боулзом и Маккензи [7]. Хотя принципы их теории очень просты, математические детали довольно сложны и мы не будем их воспроизводить ¹⁾.

На фиг. 11.14 на стереографической проекции показано положение полюсов, соответствующих экспериментально определенным габитусным плоскостям мартенситных пластин в различных сталях; как видно, во всех случаях положению этих полюсов отвечают конечные области, а не точка, потому что в сталях даже одного состава реальная габитусная плоскость может слегка менять свое положение. Общая для всех случаев особенность ориентационных соотношений состоит в том, что плотноупакованные плоскости $\{111\}$ аустенита и $\{110\}$ мартенсита всегда приблизительно параллельны. Параллельные между собой направления, лежащие в этих плоскостях, могут быть, однако, различными в разных случаях; как правило, ориентационное соотношение варьирует от $\langle 110 \rangle_A \parallel \langle 111 \rangle_M$ (соотношение Курдюмова — Закса) до $\langle 211 \rangle_A \parallel \langle 110 \rangle_M$ (соотношение Нишиямы).

Хорошо известны мартенситы с габитусной плоскостью, близкой к $\{259\}$. Они встречаются в сплавах $\text{Fe} - \text{Ni} - \text{C}$ и $\text{Fe} - \text{Ni}$, а также в сталях со сравнительно высоким содержанием углерода. Их габитусные и ориентационные соотношения можно пред-

¹⁾ Мартенситные превращения изучали главным образом советские ученые (школа С. С. Штейнберга и школа акад. Г. В. Курдюмова). Н. Я. Смельяков, Г. В. Курдюмов и Н. Т. Гудцов в 1927 г. показали, что мартенсит является раствором углерода в железе с тетрагональной объемноцентрированной решеткой, близкой к решетке $\alpha\text{-Fe}$. Степень тетрагональности зависит от содержания углерода. Кроме сталей, мартенситное превращение обнаружено в ряде чистых металлов, во многих сплавах, в неорганических и органических соединениях. В 1940 г. Гренигер и Трайяпо [13*] суммировали уже известные особенности мартенситного превращения и показали, что они отличаются от более изученных реакций зарождения и роста при фазовых превращениях. Г. В. Курдюмовым была сформулирована общая теория мартенситных превращений, в которой изложены термодинамические основы процесса, предложено объяснение многих особенностей мартенситного превращения и предсказаны новые явления [14*]. Наиболее полные представления о кристаллической структуре мартенсита даны тоже Г. В. Курдюмовым [15*]. — *Прим. перев.*

сказать довольно хорошо исходя из предположения, что деформация сдвигом при инвариантной решетке, которая добавляется к бейповской деформации, происходит в направлении $\langle 111 \rangle_M$ плоскости $\{121\}_M$, которая получается из $\{110\}_A$. Такой сдвиг соответствует двойникованию в о. ц. к.-кристалле, и Векслер, Либерман и Рид, а также Боулз и Маккензи высказали предположение, что мартенситная пластина здесь состоит из пачки связанных двойниковым соотношением более мелких пластинок. Исследованиями в оптическом микроскопе это не удавалось подтвердить, но когда оказалось возможным исследовать такие стали в электронном микроскопе, были обнаружены соответствующие ряды очень тонких двойников [8], что явилось триумфом формальной кристаллографической теории.

Для того чтобы объяснить возникновение пластин, габитусная плоскость которых сильно отклоняется от $\{259\}_A$, а также чтобы объяснить довольно широкий разброс отклонений даже в тех случаях, когда габитусная плоскость близка к $\{259\}_A$, данная теория нуждается в некоторой модификации. Один из возможных подходов заключается в постулировании сдвига при инвариантной решетке, отличного от $\{121\} \langle 111 \rangle_M$, который оказывается подходящим в случае внутренне сдвойникового мартенсита. Это предположение, без сомнения, является разумным в случае тех сплавов, в которых наблюдаются несдвойникованные мартенситные пластины. В эту категорию, по-видимому, попадают сплавы с относительно высокой температурой M_s (с более низким содержанием Ni или С).

Особые затруднения возникают при рассмотрении мартенситов, габитусная плоскость которых близка к $\{225\}_A$. Эта габитусная плоскость, возможно, возникает в результате сдвига с инвариантной решеткой, который в процессе образования пластины меняет свою природу, например из двойникового превращается в сдвиг скольжением. Имеются экспериментальные данные, свидетельствующие о том, что такое изменение действительно может происходить, и была сделана попытка учесть эту возможность в строгой кристаллографической теории [9].

11.7. Мартенситные превращения в сплавах меди

Несколько сплавов меди, а именно Cu — Al, Cu — Sn, Cu — Ga и Cu — Zn, в определенном интервале составов ведут себя очень сходно. В каждом случае существует высокотемпературная фаза β , которая является объемноцентрированной кубической. При медленном охлаждении о. ц. к.-фаза распадается на две фазы; при сравнительно быстром охлаждении происходит изменение структуры β -фазы без изменения состава, но также и без измене-

ния формы. При очень быстром охлаждении β -фаза претерпевает мартенситное превращение. Мартенсит имеет плотноупакованную структуру, которая практически является или кубической, или — в интервале составов, отвечающих низкому содержанию меди, — гексагональной. Причины, по которым мы говорим, что образующиеся в этих сплавах мартенситные фазы только практически имеют г. ц. к.- или г. п. у.-структуру, довольно интересны. Первая из них состоит в том, что обычно в этих сплавах перед превращением наблюдается упорядочение, так что соответствующий порядок воспроизводится и в мартенсите (сплавы в системе Cu — Zn, называемые β -латунью, отличаются от остальных сплавов тем, что имеют упорядоченную структуру типа CsCl, а не Fe₃Si). Второе осложнение, из-за которого структура этих сплавов лишь практически является г. ц. к.- или г. п. у.-структурой, состоит в том, что мартенситные пластины содержат большое количество дефектов упаковки. Их можно наблюдать в электронном микроскопе [10]; влияние этих дефектов на дифракционную картину показывает, что один дефект упаковки приходится приблизительно на каждые три плотноупакованные плоскости, причем все они описываются одним и тем же смещением $\frac{1}{6} \langle 211 \rangle$. Утверждение, что смещения, дающие дефекты упаковки, обеспечивают неискаженную неповоротную плоскость, которая образует грань мартенситной пластины, может быть проверено с помощью формальной кристаллографической теории.

Соответствие решеток предполагается обратным бейновскому соответствию, а в качестве дополнительной деформации выбирается сдвиг по плоскости $\{111\}_M$ в направлении $\langle 211 \rangle_M$. Эти предположения приводят к габитусной плоскости, близкой к $\{133\}_\beta$ (действительно наблюдаемой на опыте), и к плотности дефектов упаковки, близкой к наблюдаемой.

Пластины г. п. у.-мартенсита сплавов Cu — Al, Cu — Ga и Cu — Sn внутренне издвойникованы, дефекты упаковки в них отсутствуют. Здесь снова формальная кристаллографическая теория хорошо согласуется с наблюдениями.

11.8. Мартенситные превращения в неметаллах

О мартенситных превращениях в неметаллах можно сказать очень мало. Имеется много примеров быстрого изменения структуры, происходящего при определенной температуре, однако морфология этого изменения тщательно исследовалась лишь в очень немногих случаях. Между тем без этих чрезвычайно важных наблюдений трудно решить, является ли превращение мартенситным или нет.

Одно из превращений, для которого имеются исследования морфологии, — это превращение в ZrO₂. Решетка ZrO₂ — моно-

клинная при низких температурах и тетрагональная выше 1100 °С. Когда моноклинная фаза нагревается под микроскопом, можно наблюдать, как при температуре около 1100 °С на поверхности внезапно появляются полосы [11]. Образующаяся тетрагональная фаза имеет микроструктуру, типичную для мартенсита. Это превращение, как и обратное, протекающее при охлаждении, имеет важное техническое значение, потому что оно приводит к разрушению изделий из ZrO_2 и тем самым ограничивает использование этого в других отношениях прекрасного жаростойкого материала (температура плавления 2680 °С) в чистом состоянии.

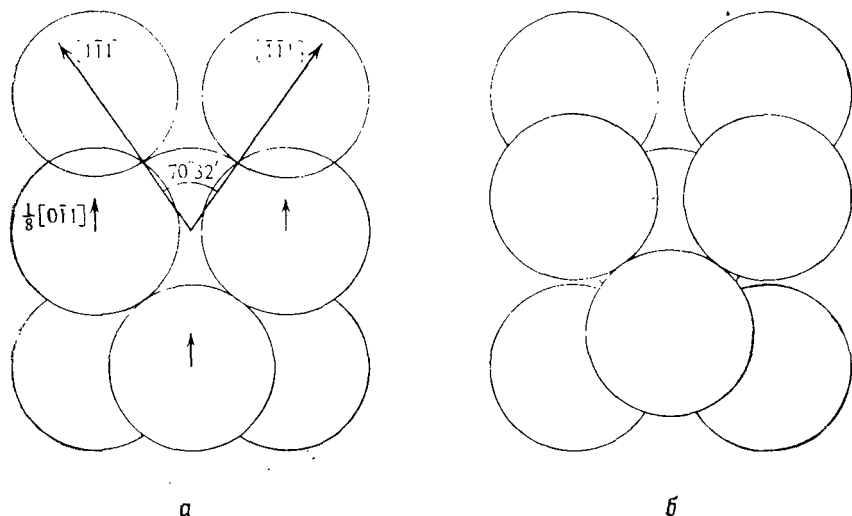
Важное техническое значение имеет также превращение, которое происходит при температуре Кюри в таком широко известном сегнетоэлектрическом материале, как титанат бария. При температурах выше 120 °С титанат бария имеет почти кубическую структуру типа перовскита (фиг. 3.10), а от 120 °С до комнатной он имеет тетрагональную структуру, характеризующуюся спонтанной электрической поляризацией в направлении оси c . В этом сегнетоэлектрическом состоянии кристалл $BaTiO_3$ имеет доменную структуру, которая часто сходна со структурой тетрагональной фазы $In - Tl$ (фиг. 11.9). В такой структуре имеются пачки двойниковых ламелей; индивидуальные ламели представляют собой отдельные сегнетоэлектрические домены. Направление поляризации лежит вдоль оси c и потому при переходе через двойниковую границу поворачивается приблизительно на 90°.

В минералогии используется термин *вытеснение* для описания изменений в структуре, которые, вероятно, являются мартенситными. Например, если структурное изменение в силикате может происходить за счет небольшого искажения каркаса из связей $Si - O$, говорят, что происходит превращение путем вытеснения. Наоборот, если новая структура может быть получена только в результате разрыва и перестройки связей $Si - O$, превращение называется *реконструктивным*.

11.9. Кристаллографические аспекты зарождения и роста мартенсита

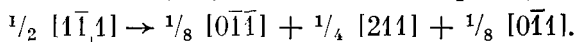
Зарождение и рост мартенситной пластины, конечно, являются сложным процессом, протекающим в несколько отдельных стадий. Перемещения атомов, которые приводят к образованию зародыша мартенсита, вероятно, определяются природой дефекта, на котором образуется этот зародыш. По мере роста зародыша должна происходить непрерывная аккомодация напряжений, возникающих в матрице в результате изменения его размеров и формы. Можно себе представить, что на какой-то стадии сопротивление матрицы вынуждает зародыш претерпеть гетерогенную деформацию путем скольжения, двойникования или за счет образования

дефектов упаковки, что позволит новой фазе расти далее в виде пластины, на гранях которой имеет место макроскопическое соответствие решеток матрицы и новой фазы. Те особые места, в которых происходит образование зародышей, могут иметь расположение атомов, сходное с расположением, характерным для новой фазы. Очевидным примером являются дефекты упаковки в г. ц. к.-кобальте, поскольку в области дефекта последовательность укладки плотноупакованных атомных плоскостей отвечает гексагональной фазе. Естественно предположить, что аналогичные места зарождения новой фазы существуют и в других структурах.



Фиг. 11.15. Плоскость (011) о. ц. к.-металла до (а) и после (б) смещения верхнего слоя атомов на $\frac{1}{8} [0\bar{1}1]$.

Так, можно предположить, что местами, в которых начинается превращение о. ц. к.-металла в г. ц. к.- или г. п. у.-структуру, могут служить дефекты упаковки в плоскостях $\{011\}$. На фигуре 11.15 показаны два атомных слоя (011) о. ц. к.-кристалла. Если атомы верхнего слоя сдвинуть на $\frac{1}{8} [0\bar{1}1]$ относительно позиций, соответствующих центрам треугольных промежутков между атомами нижележащего слоя, взаимное расположение атомов этих двух слоев станет более близким к расположению, характерному для укладки плотноупакованных плоскостей г. ц. к.- или г. п. у.-структур. Предполагается, что такое смещение может дать дислокация с обычным вектором Бюргерса $\frac{1}{2} [1\bar{1}1]$ при расщеплении в плоскости (011) в соответствии с реакцией (8.57):



Другой путь рассуждений приводит к идее о том, что особое значение для зарождения плотноупакованной структуры из о. ц. к.-структуры имеет сдвиг в системе $\{011\}\langle 0\bar{1}1\rangle$. Из фиг. 11.15 видно, что о. ц. к.-структура, построенная из жестких шаров, вероятно, не оказывала бы сопротивления сдвигу $\{011\}\langle 0\bar{1}1\rangle$. Шары верхнего слоя (011) располагаются над седловыми точками; такая конфигурация неустойчива, потому что легчайший толчок в направлении $\langle 0\bar{1}1\rangle$ будет сталкивать их в позиции, показанные на фиг. 11.15, б. Таким образом, о. ц. к.-структура из жестких шаров будет механически неустойчивой системой. Устойчивость реального о. ц. к.-кристалла в отношении сдвига $\{011\}\langle 0\bar{1}1\rangle$ определяется упругой константой $(c_{11} - c_{12})/2$, а отношение $(c_{11} - c_{12})/2$ к c_{44} является мерой его устойчивости относительно перехода в плотноупакованную структуру. В качестве примера кристалла со структурой CsCl, который превращается в плотноупакованную структуру, можно назвать β -латунь, для которой $(c_{11} - c_{12})/2c_{44} = 1/18$ при комнатной температуре. Абсолютное значение $(c_{11} - c_{12})/2$ низко: $0,093 \cdot 10^{12}$ дин/см² и уменьшается с падением температуры, т. е. при температуре превращения M_s сопротивление о. ц. к.-решетки сдвигу $\{011\}\langle 0\bar{1}1\rangle$ очень мало, что и приводит к переходу в плотноупакованную структуру [12].

После того как произошло зарождение, мартенситная фаза обычно развивается в виде пластины. Рост пластины в боковых направлениях, как правило, происходит очень быстро: скорость роста может составлять заметную долю скорости звука. В общем случае сопряжение граней пластины с нетрансформированной матрицей наблюдается в макроскопическом масштабе. Локальные искажения могут быть представлены рядами дислокаций на поверхности раздела, дальнедействующие поля напряжений которых исчезающе малы. По мере утолщения пластины скольжение этих дислокаций приводит к деформации скольжением, образованию дефектов упаковки или двойникованию, которые в сочетании с искажением решетки обуславливают хорошее (в среднем) согласование решеток на границе раздела. Конечно, наличие этих дислокаций не решает полностью проблему аккомодации пластины конечных размеров в нетрансформированном материале. Имеется еще сдвиг по плоскости, параллельной поверхности раздела, в связи с чем возникает проблема аккомодации изменения формы на краях пластины. Давление со стороны матрицы приводит к тому, что края пластины становятся заостренными, совсем как в случае двойниковой ламели (фиг. 10.15). Кроме того, в общем случае происходит расширение или сжатие кристалла в направлении, перпендикулярном граням пластины, которое также должно быть аккомодировано.

Если деформации, обусловленные сдвигом и растяжением, малы, аккомодация может быть достигнута за счет упругой деформации пластины и матрицы. В этом случае пластина может находиться в равновесии с матрицей; при этом даже небольшое падение температуры будет вызывать рост пластины за счет того, что обусловленное этим падением температуры изменение химической свободной энергии окажется достаточным, чтобы превысить энергию поля упругой деформации, тогда как небольшое повышение температуры приведет к тому, что поле упругой деформации будет сжимать пластину. Это явление аналогично упругому двойникованию, и мартенсит такого типа называется *термоупругим*. Однако чаще, как в сталях, деформации слишком велики, чтобы допустить упругую аккомодацию, и имеет место пластическая деформация. Поскольку в процессе пластической деформации происходит рассеяние энергии, а не запасание, рост пластины перестает быть обратимым. Кроме того, искажения решетки матрицы, обусловленные пластической деформацией, могут задерживать дальнейшее превращение частично трансформированного материала.

Другой путь частичной аккомодации деформации в одной пластине состоит в зарождении рядом с этой пластиной другой пластины с иной деформацией. Этот эффект приводит к характерному зигзагообразному расположению мартенситных пластин в сталях с высоким содержанием углерода. Если пластины одного типа зарождаются чаще, чем другого, развивается своего рода цепная реакция, которая может превратить значительную часть всего кристалла в совершенно фантастический пейзаж. В случае сплавов In — Tl пластины с одним и тем же габитусом могут претерпевать деформации двух различных типов, которые представляют собой (по крайней мере приблизительно) равные и противоположные сдвиги. Пачка чередующихся пластин, характеризующихся сдвигом противоположного типа, образует область, в которой общая деформация равна нулю. Естественно, что такая область может иметь границы произвольной ориентации.

В качестве краткого заключительного замечания можно сказать, что многие особенности кристаллографии мартенситного превращения могут быть поняты на основе взаимодействия двух факторов. Первый — это тенденция к превращению путем такой деформации решетки, при которой в небольших областях исходного кристалла наиболее простым путем происходит превращение решетки исходной фазы в решетку мартенсита. Второй фактор — это воздействие, оказываемое на претерпевшую превращение область конечных размеров со стороны окружающей ее среды.

Задачи

11.1. Монокристалл г. ц. к.-кобальта претерпевает мартенситное превращение в гексагональную фазу.

а) Сколько различных ориентаций монокристалла г. п. у.-кобальта можно получить в результате такого превращения?

б) Если обратное превращение — из г. п. у.-фазы в г. ц. к.-фазу — также является мартенситным, сколько ориентаций г. ц. к.-фазы может быть получено из одного зерна гексагональной фазы?

в) Если превращение г. ц. к.-кристалла будет происходить с помощью полюсного механизма (разд. 10.5, фиг. 10.18), какого типа должна быть полюсная дислокация, обеспечивающая это превращение?

11.2. Покажите, что если кристалл последовательно подвергается двум различным деформациям, обеим с инвариантной плоскостью, то в кристалле всегда остается по крайней мере одно направление, которое не испытывает поворота и не изменяется по длине, и плоскость, которая не испытывает поворота.

11.3. а) Какое число различных векторов решетки может превращаться в ось с гексагональной элементарной ячейки при мартенситном превращении о. ц. к.-титана в г. п. у.-фазу?

б) Равно ли это число числу различных ориентаций, которые может принимать г. п. у.-фаза, получающаяся из монокристалла о. ц. к.-фазы?

в) Выведите матричное уравнение для преобразования индексов плоскостей в случае соответствия решеток, показанного на фиг. 11.4 (см. приложение 4).

11.4. С помощью деформации решетки S , описываемой формулой (11.3), можно получить простую гексагональную решетку из половины узлов о. ц. к.-решетки. Опишите, как надо перегруппировать атомы, располагающиеся в остальных узлах о. ц. к.-решетки, чтобы разместить их в соответствующих позициях г. п. у.-структуры.

11.5. а) Докажите, что атомы, располагающиеся в плоскости (011) о. ц. к.-металла, могут быть переведены в позиции, отвечающие плотноупакованной конфигурации, путем деформации кристалла сжатием на 10% вдоль $[100]$ с одновременным растяжением на 10% вдоль $[0\bar{1}1]$.

б) Чему равно отношение осей c/a гексагональной элементарной ячейки структуры, которая получается из о. ц. к.-решетки под действием только этих двух деформаций? Сравните это значение с величиной отношения c/a в цирконии.

11.6. Пусть кристалл сплава $In - Tl$, имеющего кубическую структуру, претерпевает частичное превращение мартенситного типа, принимая вид, показанный на фиг. 11.9.

а) Рассчитайте приблизительно угол, который должен получиться между поверхностью (100) исходного кристалла и поверхностью области, претерпевшей превращение, исходя из предположения, что чистая деформация решетки представляет собой растяжение на 0,6% вдоль той оси куба, которая превращается в ось с тетрагональной структуры, и сжатие на 0,3% вдоль двух других осей куба.

б) Чему равна деформация растяжением в направлении Oy , которая может быть получена при данном способе превращения? Насколько может возрасти эта деформация, если двойниковые границы в тетрагональной фазе будут подвижны?

11.7. При превращении сплава $In - Tl$ из кубической фазы в тетрагональную границы раздела между кубической фазой и областью внутренне двойникованной тетрагональной фазы имеют ориентацию $\{110\}$ (в кубической фазе).

Сколько различных границ раздела могут ограничивать: а) область с данной двойниковой структурой; б) область, в которой более толстая из двух двойниковых ламелей содержит данную ось с, скажем параллельную направ-

лению [001] в кубической фазе; в) область, в которой каждая из двойниковых ламелей содержит данную ось c , скажем параллельную направлению [001] кубической фазы?

11.8. Начертите атомную структуру плоскостей, перпендикулярных Ox и Oz на фиг. 11.9 в участках, где они пересекаются габитусной плоскостью мартенситной пластины. Укажите вид локальных искажений и покажите, каким образом происходит уничтожение макроскопического искажения в обеих плоскостях.

11.9. Бейповское соответствие решеток при мартенситном превращении в стали требует деформации решетки, которая определяется уравнением (11.17), с главными компонентами η_1 , η_2 и η_3 (см. также фиг. 11.12.) Покажите, что, когда конус векторов, которые не изменяются по длине под действием этой деформации, определяется начальным положением векторов, тогда угол φ_i между образующей конуса и его осью определяется выражением

$$\operatorname{tg} \varphi_i = [(-2\eta_3 - \eta_3^2)/(2\eta_1 + \eta_1^2)]^{1/2}.$$

Покажите, что, когда конус определяется положением этих векторов после приложения деформации, угол φ_f между образующей и осью будет определяться выражением

$$\operatorname{tg} \varphi_f = [(1 + \eta_1)/(1 + \eta_3)] \operatorname{tg} \varphi_i.$$

Рассчитайте приблизительно значения углов φ_i и φ_f .

11.10. Покажите, что соответствие решеток для превращений о. ц. к. \rightarrow г. ц. к. (бейповское соответствие) и о. ц. к. \rightarrow г. п. у. (например, в цирконии) в обоих случаях можно рассматривать как особый случай соответствия, отвечающего превращению о. ц. к.-структуры в ромбическую. Выведите матрицу преобразования индексов направлений, отвечающую этому соответствию (приложение 4).

ЛИТЕРАТУРА

1. Gaunt P., Christian J. W., The Cubic-Hexagonal Transformation in Single Crystals of Cobalt and Cobalt-Nickel Alloys, *Acta Met.*, 7, 529 (1959).
2. Burgers W. G., On the Process of Transition of the Cubic Body Centred Modification into the Hexagonal Close Packed Modification of Zirconium, *Physica*, 1, 561 (1934);
Gaunt P., Christian J. W., The Crystallography of the $\beta - \alpha$ Transformation in Zirconium and in two Titanium-Molybdenum Alloys, *Acta Met.*, 7, 534 (1959).
3. Burkart M. W., Read T. A., Diffusionless Transformation in the Indium-Thallium System, *Trans. AIME*, 197, 1516 (1953).
4. Bain E. C., *Trans. AIME*, 70, 25 (1924).
5. Roberts C. S., *Trans. AIME*, 197, 203 (1953).
6. Wechsler M. S., Lieberman D. S., Read T. A., On the Theory of the Formation of Martensite, *Trans. AIME*, 197, 1503 (1953).
7. Bowles J. S., Mackenzie J. K., The Crystallography of Martensite Transformations, *Acta Met.*, 2, 224 (1954).
8. Kelly P. M., Nutting J., The Morphology of Martensite, *J. Iron Steel Inst.*, 197, 199 (1961).
9. Lieberman D. S., The Phenomenological Theory of Composite Martensite, *Acta Met.*, 14, 1723 (1966).
10. Warlimont H., Microstructure, Crystal Structure and Mechanical Properties of Martensite Phases in Copper Alloys, в книге: Physical Properties of Martensite and Bainite, Iron a. Steel Inst., 1965.
11. Fehrenbacher L. L., Jacobson L. A., Metallographic Observation of the

- Monoclinic-Tetragonal Phase Transformation in ZrO_2 , *J. Amer. Ceram. Soc.*, 48, 157 (1965).
12. Robertson W. D., в книге: Physical Properties of Martensite and Bainite, Iron a. Steel Inst., 1965, p. 26.
- 13*. Greninger A. B., Triano A. R., Crystallography of Austenitic Decomposition, *Trans. АИММЕ*, 140, 307 (1940).
- 14*. Курдюмов Г. В., *ЖТФ*, 18, 999 (1948).
- 15*. Курдюмов Г. В., *ФММ*, 22, вып. 5, 752 (1966).

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ЧТЕНИЯ

1. Bilby B. A., Christian J. W., The Crystallography of Martensitic Transformations, *J. Iron a. Steel Inst.*, 197, 122 (1961).
2. Wayman C. M., Introduction to the Crystallography of Martensitic Transformations, Macmillan, 1964.
3. Lieberman D. S., Martensitic Transformations and Determination of the Inhomogeneous Deformation, *Acta Met.*, 6, 680 (1958).
4. Greninger A. B., Triano A. R., Crystallography of Austenitic Decomposition, *Trans. АИММЕ*, 140, 307 (1940).
- 5*. Штейнберг С. С., Термическая обработка стали, Избр. статьи, М. — Свердлов., 1950.
- 6*. Курдюмов Г. В., Явления закалки и отпуска стали, М., 1960.
- 7*. Проблемы металловедения и физика металлов (сб. трудов, № 7), М., 1962; Труды ЦНИИ черной металлургии, вып. 26.
- 8*. Лившиц Б. Г., Физические свойства металлов и сплавов, Машгиз, 1956.
- 9*. Гуляев А. П., Металловедение, изд-во «Металлургия», 1969.

Поверхности раздела в кристаллах

12.1. Структура поверхностей и свободная поверхностная энергия

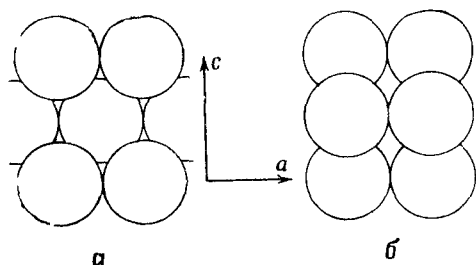
В каждом реальном кристалле обязательно есть хотя бы одно несовершенство — его поверхность. Поверхность, параллельную какой-либо из основных кристаллографических плоскостей, легко себе представить как гладкий слой из атомов, имеющий такой же атомный узор, как и на параллельных ему плоскостях внутри кристалла; однако расстояние между ним и соседним слоем будет немного отличаться от межплоскостных расстояний внутри кристалла. Эта простая картина, по-видимому, вполне достоверна в случае металлов. В то же время весьма вероятно, что в кристаллах с жестко направленными связями, например в кремнии, расположение атомов в наружных слоях существенно изменено по сравнению с объемом кристалла. О реальной атомной структуре поверхностей кристалла известно очень немного, поэтому мы ограничимся в основном обсуждением некоторых простых геометрических моделей.

Формально можно выделить плоскую поверхность, ориентированную параллельно любой данной рациональной плоскости, если удалить все атомы, центры которых лежат по одну сторону от такой плоскости, взятой внутри кристалла. В кристаллических структурах, у которых на каждый узел решетки приходится по одному атому, точная локализация места, где находится определяющая плоскость, не может повлиять на структуру поверхности, потому что все атомы имеют одинаковое окружение. Но в тех кристаллах, у которых на узел решетки приходится больше чем по одному атому, структура поверхности может зависеть от месторасположения плоскости. Например, поверхность $\{111\}$ в кристалле NaCl будет состоять либо из слоя ионов Na^+ , либо из слоя ионов Cl^- , смотря по тому, где располагается определяющая плоскость или с какой стороны удалены атомы. То же относится в этой структуре ко всем поверхностям $\{hkl\}$ с нечетными h , k и l .

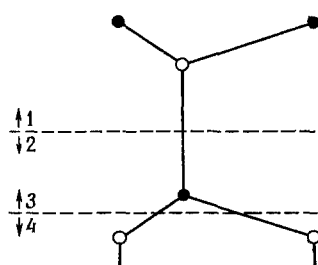
Так же обстоит дело с некоторыми поверхностями гексагональных плотноупакованных металлов. На фиг. 12.1 показан пример плоскости $(10\bar{1}0)$. Из фиг. 12.2 видно, что в вюрцитите имеется четыре типа плоскостей, параллельных плоскости $\{0001\}$. Интересно отметить, что какие бы две плоскости из этих четырех типов ни представляли внешние поверхности кристалла,

структура их должна быть разной (из-за отсутствия центра симметрии).

У атомов на поверхности не хватает части соседей. Поскольку химические связи атома с его соседями вносят отрицательный вклад в энергию кристалла, наличие поверхности можно приписать некий положительный вклад. Представим себе, что внутри кристалла разорваны атомные связи на одной из плоскостей и таким образом созданы две идентичные поверхности. Тогда поверхностная энергия равна половине энергии разорванных связей (при этом предполагается, что энергии оставшихся связей не изменились).



Ф и г. 12.1. Две последовательно чередующиеся плоские сетки поверхности $\{10\bar{1}0\}$ гексагонального металла, параллельной плоскости чертежа.



Ф и г. 12.2. Четыре последовательно чередующихся слоя поверхности (0001) вюрцита.

Поверхность нормальна плоскости чертежа и пересекается с ней по одной из пунктирных линий.

Представлением о разорванных связях удобно пользоваться при оценке того, как изменяется величина поверхностной энергии при отклонении ориентации поверхности от плоскости с низкими индексами.

Представим себе, что поверхность $\{111\}$ г. ц. к.-металла поворачивается на малый угол θ вокруг направления $\langle 1\bar{1}0 \rangle$. Из фигуры 12.3 видно, что на ней тогда появляются ступеньки, число которых ρ на единицу длины равно

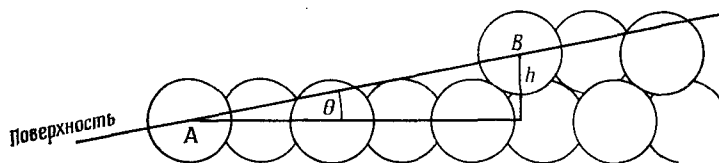
$$\rho = (\sin \theta)/h, \quad (12.1)$$

где h — расстояние между плоскостями решетки $\{111\}$. Если угол θ оказывается таким, что точки A и B на фиг. 12.3 попадают в центры атомов, то расстояния между этими ступеньками могут оказаться одинаковыми; в случае некоторых рационально ориентированных поверхностей ступеньки будут образовывать группы и одинаковыми будут лишь расстояния между такими группами. Если же поверхность иррациональна, то расположение ступенек будет беспорядочным. У атома на ступеньке не хватает большего числа соседей, т. е. разорвано больше связей, чем у атома на плоской поверхности $\{111\}$. Поэтому если расстояния между

ступеньками столь велики, что они не взаимодействуют друг с другом, ступеньки вносят добавочную энергию, пропорциональную их числу. Если каждая ступенька вносит энергию β на единицу длины, то суммарная энергия поверхности на единицу площади равна

$$E = E_0 \cos \theta + \beta \sin |\theta|/h, \quad (12.2)$$

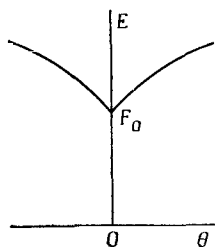
где E_0 — энергия поверхности $\{111\}$, приходящаяся на единичную площадку. Таким образом, поверхностная энергия растет



Ф и г. 12.3. Ступеньки с малым углом θ на плоскости $\{111\}$ г. ц. к.-металла, нормальной плоскости чертежа.

по мере того, как увеличивается угол отклонения поверхности от ориентации с малыми индексами (в обратную сторону). Зависимость энергии E от угла θ имеет форму кривой с острым минимумом; в точке минимума $dE/d\theta$ скачком меняется от $-\beta/h$ до $+\beta/h$ (фиг. 12.4).

Те же рассуждения можно применить к малому повороту поверхности $\{111\}$ вокруг любой другой оси. Фактически эти минимумы существуют на трехмерном графике зависимости поверхностной энергии от ориентировки. Такие графики удобно представлять в виде полярных диаграмм, на которых поверхностная энергия изображается нормальным к поверхности вектором, по длине пропорциональным величине энергии этой поверхности.



Ф и г. 12.4. График зависимости энергии поверхности E от угла θ , характеризующего отклонение от рациональной кристаллографической плоскости с малыми индексами.

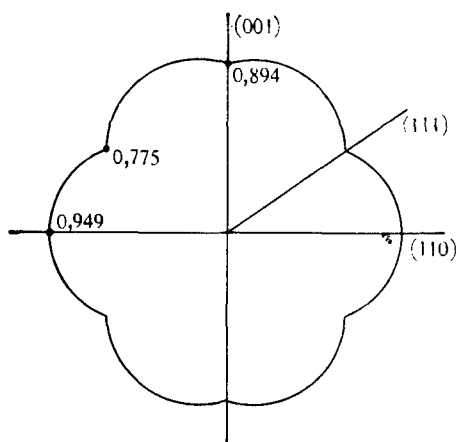
Очевидно, на такой диаграмме будет несколько минимумов, соответствующих ориентировкам плоскостей с малыми индексами.

Энергия поверхности тесно связана с ее свободной поверхностной энергией. Последняя определяется как работа разрушения

единицы площади поверхности. Свободная поверхностная энергия γ равна

$$\gamma = E - TS. \quad (12.3)$$

В этом выражении обычно более важную роль играет величина E , но и энтропийный член TS может оказаться существенным. Например, ступеньки на поверхности, слегка отклоняющейся от ориентации плоскости с малыми индексами, вносят configura-



Ф и г. 12.5. Сечение плоскостью $\{110\}$ полярной диаграммы свободной поверхностной энергии г. ц. к.-металла.

Абсолютные значения величин поверхностного натяжения взяты из статьи [1]. За единицу принято поверхностное натяжение плоскости $\{210\}$.

дионную энтропию из-за того, что они могут встречаться чаще или реже, и прямолинейность их может быть разной. Поэтому при небольших температурах минимумы на графике свободной поверхностной энергии будут не такими острыми, как на графике суммарной энергии (например, на фиг. 12.4), а для плоскостей с высокими индексами минимумы могут и совсем исчезнуть.

Полярная диаграмма свободной поверхностной энергии γ называется иногда γ -диаграммой. На фиг. 12.5 приведено сечение плоскостью $\{110\}$ γ -диаграммы г. ц. к.-металла, рассчитанной на основании простой модели связей с ближайшими соседями.

Физический смысл свободной поверхностной энергии твердого тела можно уяснить из описания опыта, с помощью которого эта энергия измеряется. Очень тонкая проволока нагружается при температуре, близкой к ее температуре плавления. Измеряя скорость растяжения как функцию нагрузки, находят значение той нагрузки W , которая как раз уравнивает стремление проволоки уменьшить свою свободную энергию путем сокраще-

ния размеров. Рассматривая бесконечно малое приращение длины dx при таком равновесии, т. е. условие «нулевой ползучести», получаем

$$\gamma dA - W dx + \gamma_b dA_b = 0. \quad (12.4)$$

В этом уравнении γdA — приращение свободной энергии, вызванное образованием площадки dA новой поверхности (фиг. 12.6). Член $\gamma_b dA_b$ представляет собой изменение свободной энергии, обусловленное изменением dA_b площади поверхности раздела между зернами в поликристаллической проволоке. В целом формула (12.4) выражает условие минимума свободной энергии всей системы. Важно отметить, что длина проволоки должна меняться путем течения при постоянном объеме в отсутствие трения, а не за счет упругой деформации, так что приращение площади поверхности dA соответствует образованию новой поверхности, а не растяжению старой. Для проволоки радиусом r , содержащей n поперечных границ между зернами на единицу длины (фиг. 12.6), условие (12.4) дает

$$\gamma = W/\pi r + \gamma_b n r. \quad (12.5)$$

Если энергия границ зерна γ_b неизвестна, подстановка расчетных значений в формулу (12.5) не сильно влияет на точность значения γ . Формула (12.5) дает величину свободной поверхностной энергии, усредненную по разным ориентациям плоскостей, соответствующих наружной поверхности проволоки.

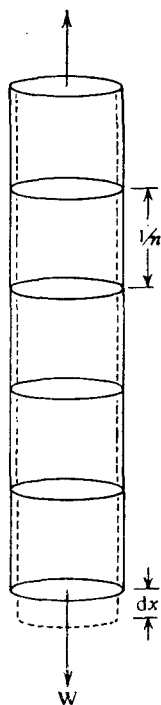
В табл. 12.1 приведены некоторые значения свободной поверхностной энергии, измеренные этим и другими методами. Для многих хрупких кристаллов свободную поверхностную энергию плоскостей спайности можно найти, определяя силу, необходимую для того, чтобы расщепить предварительно надколотый кристалл удобной формы, как показано на фиг.

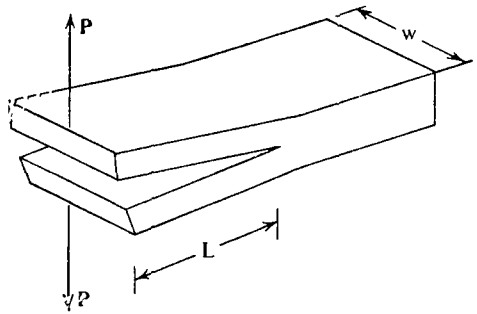
Фиг. 12.6. Схема определения свободной поверхностной энергии по методу нулевой ползучести.

12.7. Критическая нагрузка P_c определяется из условия баланса энергий

$$2P_c dy = dE + 2\gamma w dL, \quad (12.6)$$

где dy — расстояние, на которое расходятся точки приложения нагрузок P , а dE — приращение упругой энергии кристалла. Обе





Фиг. 12.7. Схема определения свободной поверхностной энергии по методу раскалывания по плоскости спайности.

Таблица 12.1

Свободные поверхностные энергии кристаллов

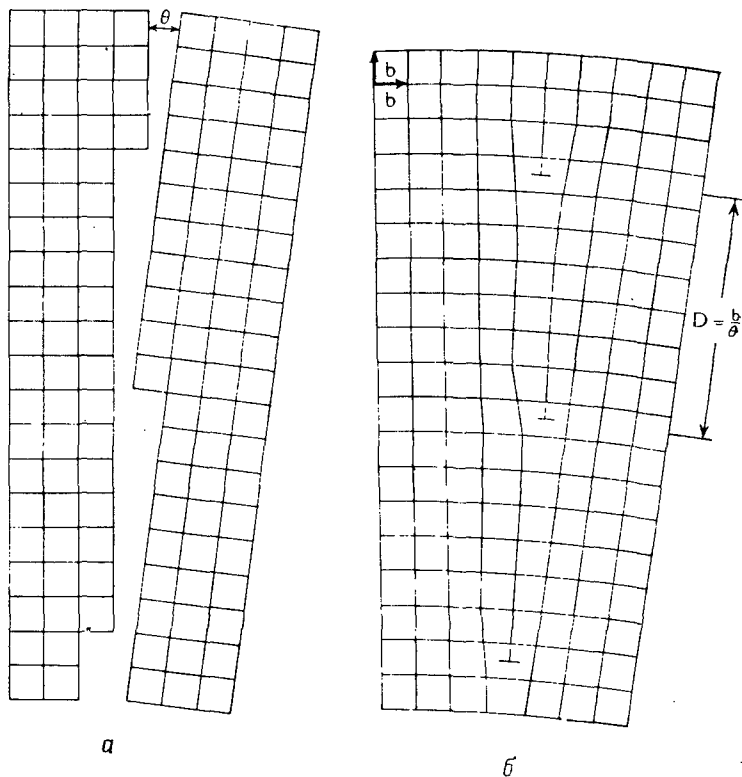
Кристалл	Поверхность	Среда	Температура, К	Поверхностное натяжение, эрг·см ⁻²	Метод	Источник
Ag	Усредненная	Гелий	1200	1140±90	Нулевая ползучесть	[2]
Au	То же	»	1300	1400±65	То же	[2]
Cu	» »	Вакуум	1250	1650	» »	[3]
CaF ₂	(111)	Жидкий азот	77	450	Раскол по спайности	[4]
Кальцит	(10 $\bar{1}0$)	То же	77	230	То же	[4]
Fe (δ)	Усредненная	Аргон	1700	1950±200	Нулевая ползучесть	[5]
Fe—3% Si	(100)	Жидкий водород	14	1360	Раскол по спайности	[4]
KCl	(100)	Воздух	298	110±5	То же	[6]
LiF	(100)	Жидкий азот	77	340	» »	[4]
MgO	(100)	Воздух	298	1150±80	» »	[7]
	(100)	Вакуум	77	1280	» »	[8]
Mo	Усредненная	Аргон	2623	1960	Нулевая ползучесть	[9]
NaCl	(100)	Вакуум	77	283±30	Раскол по спайности	[8]
	(100)	Жидкий азот	77	317±30	То же	[8]
Nb	Усредненная	Вакуум	2520	2100	Нулевая ползучесть	[10]
Ni	То же	Аргон		1725	То же	[11]
Si	(111)	Жидкий азот	77	1240	Раскол по спайности	[4]
Sn	Усредненная	Вакуум	490	685	Нулевая ползучесть	[12]
Zn	(0001)	Жидкий азот	77	105	Раскол по спайности	[4]

эти величины dy и dE отвечают бесконечно малому удлинению dL трещины при постоянной нагрузке P . Этим условием можно пользоваться, только если приложенная сила P не совершает работы пластического деформирования по мере роста трещины.

12.2. Структура и энергия границ зерен

Кристаллические твердые тела чаще встречаются в виде поликристаллов, т. е. агрегатов из произвольно ориентированных монокристалльных зерен. Даже монокристалл обычно содержит так называемые субзерна или блоки, т. е. слегка разориентированные области.

Простейший тип границы между зернами — это *симметричная граница наклона*, или *наклонная (малоугловая) граница*, на которой два зерна, по разные стороны от границы, симметрично повернуты вокруг оси, лежащей в плоскости границы. На фиг. 12.8



Фиг. 12.8. Малоугловая симметричная граница наклона в простой кубической решетке.

Граница перпендикулярна плоскости чертежа (по В. Т. Риду [13]).

изображена граница наклона в простой кубической структуре. Такая граница может образоваться при соединении двух кристаллов, поверхности которых повернуты относительно грани куба на малые углы $+\theta/2$ и $-\theta/2$ вокруг направления $\langle 100 \rangle$. Когда две такие поверхности стыкуются, существующие на них ступеньки образуют краевые дислокации с вектором Бюргерса, равным высоте ступеньки. Подставляя $h = b$ в формулу (12.1), получаем число дислокаций на единицу длины ступеньки

$$1/d = (2 \sin \theta/2)/b \quad (12.7)$$

или, если угол разориентировки θ мал,

$$1/d \approx \theta/b. \quad (12.8)$$

Эта граница представляет собой «полигонизационную стенку» из дислокаций типа описанных в разд. 7.6. Шокли и Рид [14] вычислили энергию такой конфигурации, считая, что она находится в бесконечной среде с модулем сдвига μ и коэффициентом Пуассона ν . По их расчетам энергия такой границы на единицу площади равна

$$E = E_0 \theta (A_0 - \ln \theta), \quad (12.9)$$

где

$$E_0 = \mu b / [4\pi (1 - \nu)],$$

а

$$A_0 = 1 + \ln [b / (2\pi r_0)].$$

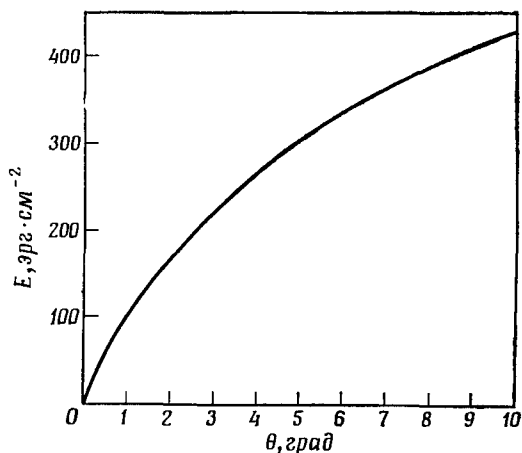
Длина r_0 в соотношении (12.9) связана с энергией ядра отдельной дислокации в границе. Определить ее можно на том основании, что интегрирование выражения для упругой деформации, такого, как уравнение (8.1), в пределах от нуля до радиуса r_0 дает суммарную энергию дислокации с учетом энергии ядра. Большая энергия ядра уменьшает r_0 и повышает A_0 . Согласно уравнению (12.8), для малых θ плотность дислокаций в границе равна θ/b , поэтому первый член в уравнении (12.9) зависит от суммарной энергии ядер дислокаций, отнесенной к единице площади границы. Во второй член входит упругая энергия границы. Напряжения, обусловленные дислокациями, в значительной мере компенсируют друг друга на расстояниях от границы, превышающих расстояние θ/b между отдельными дислокациями в границе. Упругая энергия внутри цилиндра радиусом b/θ , окружающего краевую дислокацию с радиусом ядра r_c , равна

$$E = \{ \mu b^2 / [4\pi (1 - \nu)] \} \ln (b/\theta r_c),$$

чем и определяется второй член в формуле (12.9).

Формулой (12.9) можно пользоваться только для границ с малым углом наклона θ , в которых ядра дислокаций не пере-

крываются. Измерения свободной энергии границ наклона в меди показали, что для углов, больших примерно 8° , энергия границы превышает значения, предсказываемые уравнением (12.9); для меньших углов это уравнение хорошо выполняется. (Можно ожидать, что энтропийный член в выражении для свободной энергии малоугловой границы будет мал по сравнению со всей энергией, поэтому эту энергию можно отождествить со свободной энергией.)



Фиг. 12.9. Зависимость энергии наклонной (малоугловой) границы от угла наклона, вычисленная по уравнению (12.9).

Принято, что величина $E_0 = 1450$ эрг см⁻² (для меди), а $A_0 = 0$.

График уравнения (12.9) приведен на фиг. 12.9. При $\theta = 0$, где граница исчезает, минимум очень острый: $dE/d\theta$ стремится к бесконечности при $\theta = 0$. Минимумы на графике поверхностной энергии обычно бывают не очень острыми, потому что энергия поверхностных ступенек всегда локализована у ступеньки и ограничена по величине; когда же такие изолированные ступеньки стыкуются друг с другом при соединении двух кристаллов, так что образуется дислокация на границе зерна, то возникают дальнедействующие поля напряжений. Физический смысл того, что энергия границы наклона растет столь круто по мере возрастания угла разориентировки от нулевого значения, заключается в том, что при больших расстояниях между дислокациями поля напряжений каждой отдельной дислокации простираются на довольно значительное расстояние. По мере того как угол разориентировки продолжает расти, возрастание энергии замедляется, потому что при сближении дислокаций их поля напряжений накладываются друг на друга и компенсируются.

На графике энергии границы зерна должны существовать менее глубокие минимумы при тех углах наклона, при которых дислокации распределены равномерно ¹⁾. Строгий вывод уравнения (12.9) основывается на предположении о равномерном распределении дислокаций. В простой кубической решетке это возможно, очевидно, *только* если угол θ удовлетворяет условию

$$\operatorname{ctg}(\theta/2) = 2n, \quad (12.10)$$

где n — целое число. Например, если $\operatorname{ctg}(\theta/2) = 14$, то каждая седьмая плоскость куба обрывается на дислокации. Чтобы слегка увеличить угол наклона на $\delta\theta$, нужно уменьшить расстояние между дислокациями до шести межплоскостных расстояний. Допустим, что исходное расстояние между дислокациями d , а уменьшение этого расстояния, если бы дислокации могли распределяться равномерно, равно δd . Тогда *истинное* расстояние между дислокациями окажется равным

$$D = (b/\delta d) d, \quad (12.11)$$

а для малых θ , поскольку $d \approx b/\theta$,

$$D \approx b\theta/\delta\theta. \quad (12.12)$$

Если, наоборот, угол наклона уменьшается, это же уравнение дает расстояние между дислокациями, возникающими на стыке каждой восьмерки плоскостей. По сравнению с расстоянием между дислокациями в малоугловой границе с углом разориентировки $\delta\theta$ это расстояние меньше в θ раз ($\theta < 1$). Из сопоставления уравнений (12.12) и (12.18) можно видеть, что избыточная упругая энергия, обусловленная увеличением или уменьшением угла наклона на $\delta\theta$, грубо говоря, такая же, как энергия границы с углом $\delta\theta$, состоящей из дислокаций с малым вектором Бюргерса $b\theta$, т. е.

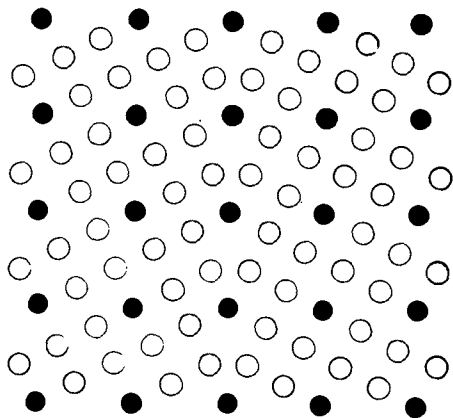
$$\Delta E \sim -E_0\theta \delta\theta \ln \delta\theta. \quad (12.13)$$

Из этого выражения видно, что на графике энергии должен существовать неглубокий, но очень острый минимум при некотором частном значении угла θ , так как $d\Delta E/d(\delta\theta)$ обращается в бесконечность при $\delta\theta \rightarrow 0$. Физический смысл здесь заключается в том, что любое нарушение закономерной структуры границы создает весьма дальнедействующие поля напряжений, особенно если эти нарушения отстоят далеко друг от друга.

Можно ожидать, что острые минимумы на графике энергии появятся и при некоторых больших значениях угла наклона. Например, когда $\operatorname{ctg}(\theta/2) = 2$ (т. е. $\theta = 53^\circ$), граничная поверх-

¹⁾ Большинство этих минимумов очень неглубоки и представляют интерес с точки зрения теории, но не практики.

ность будет иметь очень правильное строение, как показано на фиг. 12.10. Плоскость этой границы является плоскостью $\{210\}$ каждого из зерен; можно представить себе, что одно из зерен повернуто по отношению к другому в двойниковое положение с $K_1 = (210)$. (Согласно определению двойника, приведенному в разд. 10.2, любую симметричную границу наклона можно описать как двойниковую границу, если на ней стыкуются поверхности одинаковой ориентировки, например в простой кубической решетке поверхности, для которых $\text{ctg}(\theta/2) = m/n$, где m и n — целые



Ф и г. 12.10. Наклонная граница с хорошим совпадением.

Граница перпендикулярна плоскости чертежа. Темными кружками изображены атомы, расположенные в узлах, общих для решеток обоих зерен (по П. Г. Шьюмону [15]).

числа.) Так как атомы на двойниковой границе принадлежат решеткам обоих зерен, можно полагать, что энергия границы будет очень малой, если плотность атомов на этой границе высока, т. е. если K_1 представляет собой плоскость с малыми индексами. Так как (210) — это наиболее плотно упакованная двойниковая плоскость, возможная в простой кубической решетке при направлении оси наклона вдоль $[100]$, именно здесь, т. е. при угле $\theta = 53^\circ$, должен быть самый глубокий минимум на энергетической полярной диаграмме.

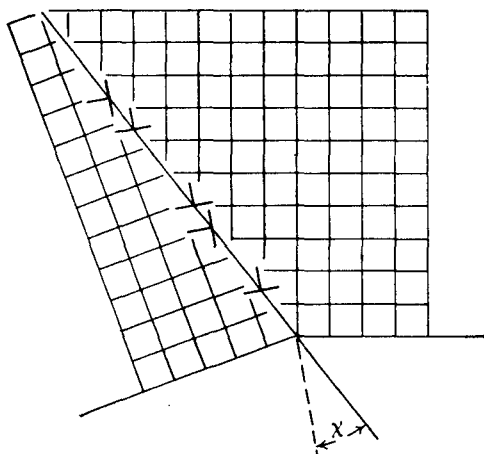
Нельзя не отметить, что при измерениях свободной энергии наклонных границ $[100]$ в меди не обнаружены минимумы, соответствующие углам двойникования. Быть может, это просто потому, что они слишком мелки — не более 10% максимальной энергии.

Симметричная граница наклона — это особый случай наклонной границы. Ее можно характеризовать осью наклона и единственным значением угла θ . В общем случае у границы зерен имеется *пять степеней свободы*. Иначе говоря, чтобы определить границу, надо задать пять чисел. Например, чтобы указать, как перевести решетку одного зерна в положение, в котором она будет параллельна решетке другого зерна, требуется два числа, определяющих ось вращения, одно число, дающее угол поворота,

и еще два, указывающих ориентировку границы по отношению к одному из зерен.

Рассмотрим, что получится, если изменить ориентировку границы зерен в простом кубическом кристалле; будем при этом считать, что осью вращения одного зерна по отношению к другому служит направление $\langle 100 \rangle$.

Если повернуть границу наклона на фиг. 12.8 вокруг оси наклона, то симметрия ориентировки нарушится. На фиг. 12.11



Ф и г. 12.11. Несимметричная наклонная граница.

показан результат поворота на угол χ : возникли краевые дислокации, экстраплоскости которых нормальны к экстраплоскостям исходного ряда дислокаций. Можно показать [14], что плотность этих новых дислокаций равна

$$\rho_x = (2/b) \sin |\chi| \sin (\theta/2), \quad (12.14)$$

а плотность исходных дислокаций уменьшилась и стала равной

$$\rho_y = (2/b) \cos \chi \sin (\theta/2). \quad (12.15)$$

Эти новые дислокации должны резко увеличить энергию границы, особенно при малых значениях χ , потому что вначале они отстоят друг от друга достаточно далеко, а значит, создают дальнотействующие поля напряжений. Шокли и Рид [14] показали, что энергия такой границы тоже описывается уравнением типа (12.9), т. е.

$$E = E'_0 \theta (A - \ln \theta), \quad (12.16)$$

но теперь

$$E'_0 = \{ \mu b / [4\pi (1 - \nu)] \} (\cos \chi + \sin |\chi|),$$

$$A = A_0 - (1/2) \sin 2|\chi| - [\sin |\chi| \ln (\sin |\chi|) + \cos \chi \ln (\cos \chi)] / (\sin |\chi| + \cos \chi).$$

Согласно этому уравнению, симметричной ориентировке $\chi = 0$ действительно должен отвечать острый минимум.

Качественно такие же энергетические минимумы должны отвечать и большеугловым наклонным границам, которые соответствуют двойниковым плоскостям; дело в том, что поворот такой границы, выводящий ее из симметричного положения, расстраивает хорошее совпадение атомов в ней.

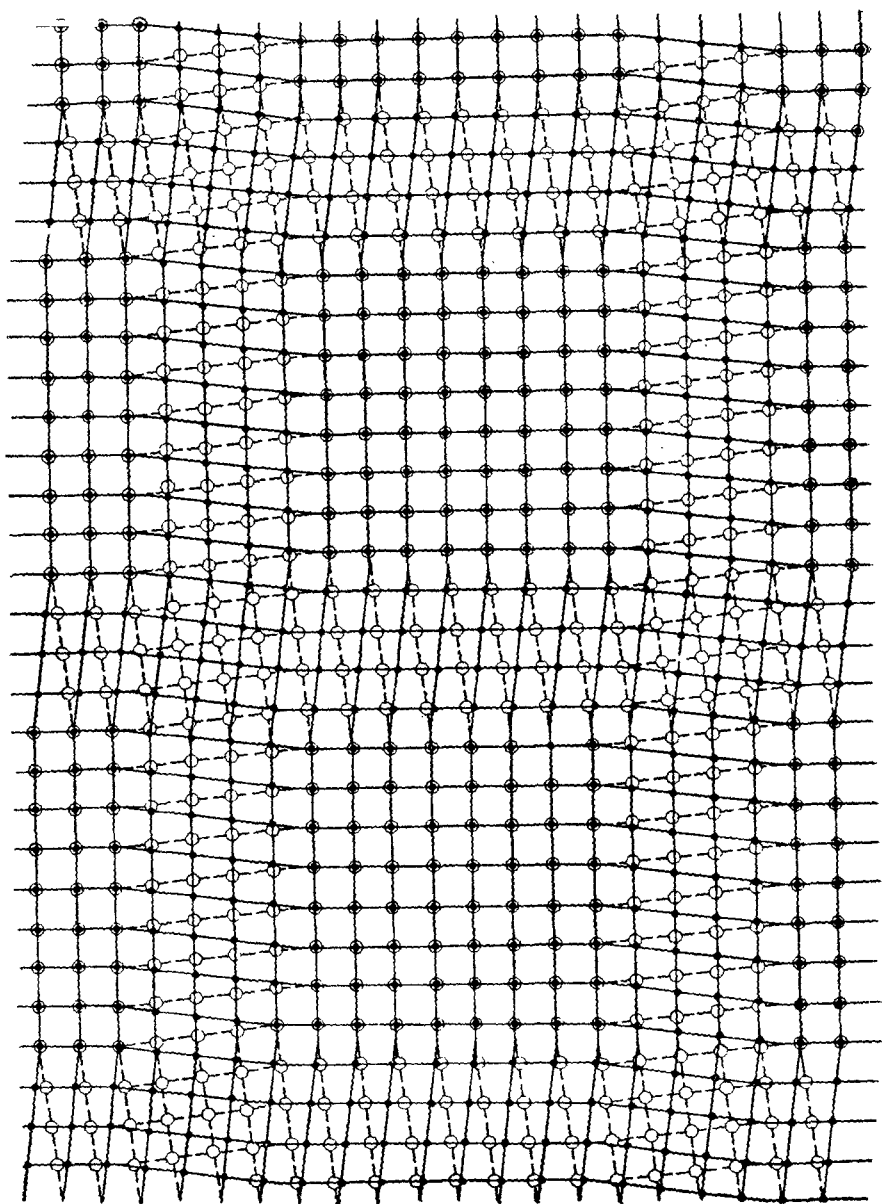
Еще сильнее меняется структура границы, когда наклонная граница, показанная на фиг. 12.8, поворачивается (в пределах 90°) вокруг оси, лежащей в плоскости границы и перпендикулярной оси наклона. Тогда граница оказывается перпендикулярной оси $\langle 100 \rangle$, вокруг которой два зерна повернуты по отношению друг к другу. Такая граница называется *границей кручения* или *скрученной границей*. Как видно из фиг. 12.12, она состоит из сетки винтовых дислокаций. Деформация, создаваемая каждой из двух ортогональных систем винтовых дислокаций, такова, что чисто сдвиговые ее компоненты компенсируются такими же компонентами второй системы на больших расстояниях от границы, а вращательные компоненты суммируются с вращательными компонентами второй системы и создают необходимый поворот зерен.

Определим плотность дислокаций, обеспечивающих закручивание на угол θ . Для этого выберем некую промежуточную решетку, из которой можно вывести оба зерна поворотами на углы $\theta/2$ и $-\theta/2$. На фиг. 12.13 ось вращения проходит через точку O .

Выберем вектор \vec{OA} , лежащий в плоскости границы между зернами, которая образована системой дислокаций в промежуточной решетке. Эта система дислокаций и создает требуемые повороты.

Проведем замкнутый контур Бюргерса от A к O в зерне 1 и от O к A в зерне 2; поскольку \vec{OA} пересекает дислокации, проведенный контур окружает эти дислокации, и, значит, контур, проведенный в эталонной решетке, окажется не замкнутым (разд. 7.1). Выберем эту эталонную решетку параллельной нашей промежуточной решетке; путь в ней, соответствующий пути от A к O в зерне 1, можно найти, поворачивая зерно 1 обратно на угол $\theta/2$ так, чтобы поставить его параллельно исходной решетке. В результате точка начала отсчета переходит в $a^{(2)}$ (фиг. 12.13). Обратный поворот зерна 2 переводит конечную точку контура в $a^{(1)}$. Тогда контур окажется разорванным, причем величина разрыва равна отрезку $a^{(1)} a^{(2)}$, т. е.

$$|\mathbf{B}| = 2 |\vec{OA}| \sin (\theta/2). \quad (12.17)$$

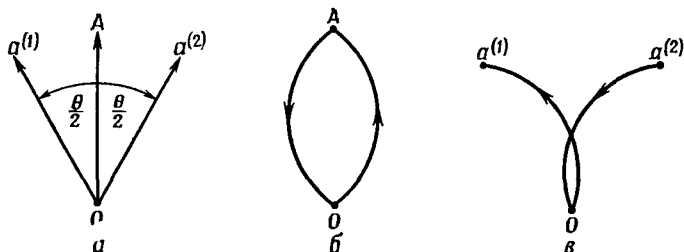


Ф и г. 12.12. Скрученная граница в простой кубической решетке.
Граница параллельна плоскости чертежа (по В. Т. Риду [13]).

Вектор \mathbf{B} равен сумме векторов Бюргерса всех дислокаций, пересекаемых вектором \vec{OA} .

Если провести \vec{OA} параллельно ряду $\langle 100 \rangle$ промежуточной решетки, то число пересекаемых им винтовых $\langle 010 \rangle$ -дислокаций на единицу длины составит

$$\rho = (2 \sin \theta/2)/b. \quad (12.18)$$



Фиг. 12.13.

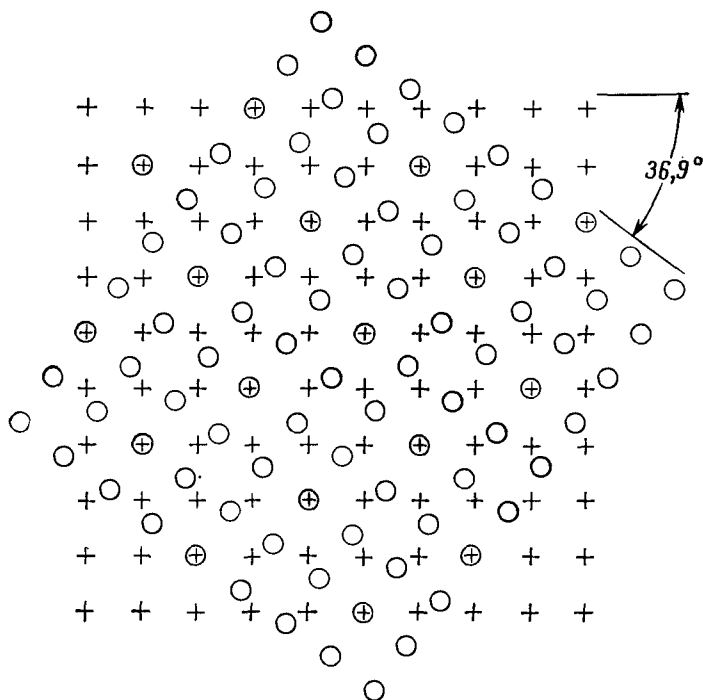
a — возникновение зерен 1 и 2 путем поворотов в противоположные стороны на угол $\theta/2$; b — контур Бюргерса, проведенный черз оба зерна; c — соответствующий контур в неискаженной решетке.

Это как раз равно плотности дислокаций в симметричной границе наклона с тем же углом. Для малого угла θ расстояние между дислокациями d составляет опять

$$d \approx b/\theta. \quad (12.19)$$

Энергия скрученной границы растет при возрастании угла кручения в общем так же, как растет энергия наклонной границы при увеличении угла наклона. Минимумы энергии границы кручения должны отвечать тем углам кручения, при которых наблюдается более или менее хорошее соответствие атомов на границе. Например, поворот на 53° вокруг $[100]$, при котором в симметричной наклонной границе в простой кубической решетке наблюдается хорошее соответствие, создает границу кручения, перпендикулярную $[100]$, в которой атомы соседних зерен тоже хорошо стыкуются друг с другом. Это показано на фиг. 12.14, где атомы, лежащие в узлах решетки одного зерна, обозначены кружками, а атомы второго — крестиками. Сетка из узлов решетки, принадлежащих обоим зернам на фиг. 12.14, и такая же сетка из совпадающих узлов решетки, лежащих на соответствующей границе наклона (фиг. 12.10), представляют собой одну из плоскостей единой для обоих зерен *решетки совпадения*, или *когерентной решетки*.

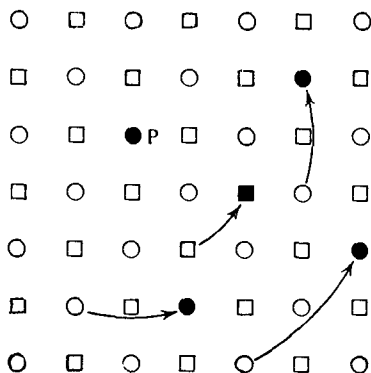
На фиг. 12.14 две решетки наложены друг на друга с относительным поворотом. Решетка совпадения — это решетка, которая образована узлами, находящимися точно друг на другом. При



Ф и г. 12.14. Скрученная граница с хорошим совпадением в простой кубической решетке.

Граница параллельна плоскости чертежа (по П. Г. Шьюмону [15]).

повороте кубического кристалла вокруг [100] на 53° , или, проще, на 37° , совпадает пятая часть узлов. Это относится не только к простой кубической, но и к г. ц. к.- и о. ц. к.-решеткам; на фиг. 12.15 показана о. ц. тетрагональная решетка узлов совпаде-



Ф и г. 12.15. Часть решетки совпадения, получающейся в г. ц. к.-решетке путем поворота на $36,9^\circ$ вокруг оси [001], проходящей через точку P_1 .

Плоскость чертежа совпадает с плоскостью (001).

○ в плоскости; □ над плоскостью.

ния, получившаяся из г. ц. к.-решетки. Плоскость наибольшей плотности совпадающих узлов решетки здесь является плоскостью {110} когерентной решетки или плоскостью {210} в любой из г. ц. к.-решеток. В табл. 12.2 приведены характеристики еще некоторых когерентных решеток, получающихся при повороте

Таблица 12.2

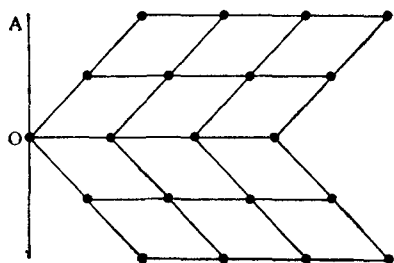
Характеристики некоторых решеток совпадения
в г. ц. к.- и о. ц. к.-кристаллах [16]

Доля узлов решетки в решетке совпадения	Вращения, приводящие к образованию решетки совпадения		Наиболее плотно упакованная плоскость решетки совпадения в символах исходной решетки	
	ось	угол	г. ц. к.	о. ц. к.
1 : 3	110	70,5	111	112
	111	60		
	210	131,8		
	211	180		
	311	146,4		
1 : 5	100	36,9	210	310
	210	180		
	211	101,6		
	221	143,1		
	310	180		
	311	154,2		
	331	95,7		
1 : 7	111	38,2	123	123
	210	73,4		
	211	135,6		
	310	115,4		
	320	149		
	321	180		
	331	110,9		

кубических решеток вокруг основных кристаллографических направлений. Из-за симметрии каждую когерентную решетку можно получить несколькими различными поворотами. Границу зерен, которая состоит из узлов, принадлежащих решеткам обоих зерен, можно получить, выбрав любую плоскость когерентной решетки и убрав одну из составляющих решеток с одной стороны от этой плоскости, а вторую с другой стороны. Таким образом когерентная решетка удобна для классификации различных границ, соответствующих хорошей стыковке зерен, если есть разные эквивалентные ориентационные соотношения, при которых получается одна и та же когерентная решетка. Согласование решеток зерен будет хорошим только в том случае, если у когерентной решетки доста-

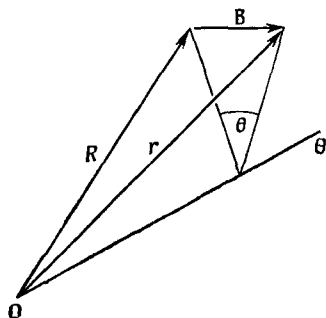
точно велика плотность узлов, а ориентировка границы отвечает одной из основных плоскостей этой решетки совпадения.

Возможность классификации границ, соответствующих хорошему согласованию зерен, на основе когерентной решетки является следствием симметрии кристалла. В кристаллах низкой симметрии такой подход возможен не всегда. Например, на фиг. 12.16 изображена двойниковая граница, соответствующая точному согласованию решеток двух зерен в моноклинном кристалле. Ориента-



Фиг. 12.16. Двойниковая граница в моноклинной решетке.

Граница перпендикулярна плоскости чертежа.



Фиг. 12.17. К выводу формулы (12.21).

ционное соотношение между решетками можно описать в данном случае как поворот на π вокруг нормали к двойниковой плоскости OA . Однако в общем случае направление OA иррационально и решетка из когерентных узлов не существует.

Метод определения плотности дислокаций в скрученной границе можно использовать для описания границ любого типа. Любую границу между зернами можно получить, задавая некое расположение дислокаций в так называемой материнской решетке. Суммарный вектор Бюргера дислокаций, пересекаемых вектором \mathbf{R} , лежащим в этой границе, равен

$$\mathbf{B} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1. \quad (12.20)$$

Векторы \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 — векторы, получающиеся из \mathbf{R} путем поворотов, равных по величине и противоположных по знаку поворотам, которые требуются, чтобы из исходной решетки получились зерна 1 и 2. (Знак меняется потому, что речь идет о разрыве контура в хорошей решетке, которая параллельна исходной решетке.) В реальном кристалле нужно брать вектор \mathbf{B} для дислокаций, возможных в данной структуре. Для малых вращений, величина и направление которых заданы вектором θ , этот вектор равен

$$\mathbf{B} = \mathbf{R} \times \theta, \quad (12.21)$$

что с очевидностью следует из фиг. 12.17¹⁾. Хотя для любой межзеренной границы можно отыскать ряд дислокаций, который даст надлежащие ориентационные соотношения, такой ряд не имеет физического смысла, если дислокации в нем не отстоят столь далеко, что структуры их ядер не перекрываются. Связать свойства отдельных дислокаций со свойствами межзеренной границы удается только, если нет такого перекрытия.

12.3. Стыки границ

Стыки поверхностей раздела получаются, например, когда граница выходит на поверхность или когда внутри поликристалла три зерна соприкасаются друг с другом. Наблюдая равновесные положения поверхностей раздела на таких стыках, можно получить некоторые сведения об относительных величинах свободных энергий поверхностей или об изменении этих энергий в зависимости от ориентации поверхностей.

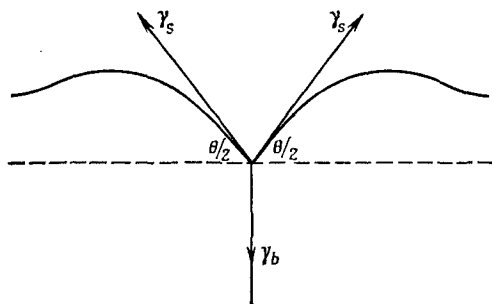
Равновесную конфигурацию установить легко, если энергия каждой из пересекающихся поверхностей не зависит от ориентации. Каждая граница, стремясь уменьшить свою площадь, действует на стык с некоторой силой, пока сумма сил не станет равной нулю. Когда межзеренная граница пересекает внешнюю поверхность, она как бы втягивает эту поверхность, образуя канавку, пока ее собственное натяжение не уравнивается поверхностным натяжением (при условии, что температура достаточно высока для того, чтобы обеспечить подвижность атомов, необходимую для достижения равновесной конфигурации: для образования канавки материал должен переместиться от места пересечения в стороны, образуя навалы, как показано на фиг. 12.18).

Симметричную равновесную конфигурацию, показанную на фиг. 12.18, можно получить следующим образом. Рассмотрим бесконечно малое смещение стыка в направлении, параллельном границе зерен. Суммарное изменение свободной энергии, соответствующее этому отклонению от равновесия, должно равняться нулю. Если единица длины стыка смещается на dx , то площадь

¹⁾ Если θ велико, то вращение нельзя описать одним вектором и уравнение (12.21) переходит в

$$\mathbf{B} = (\mathbf{R} \times \mathbf{I}) 2 \sin \theta/2,$$

где \mathbf{I} — единичный вектор в промежуточной решетке (исходная решетка), так что зерно 1 получается из исходной решетки путем поворота вокруг направления \mathbf{I} на угол $-\theta/2$, а зерно 2 — поворотом на угол $+\theta/2$. Значения \mathbf{B} и \mathbf{R} такие же, как для очень малых θ , т. е. \mathbf{B} и \mathbf{R} определены в исходной решетке. (см., например, [17]; этот анализ впервые проделал Франк).



Ф и г. 12.18. Поперечное сечение канавки па границе зерен.

границы между зернами уменьшается на dx , а площадь поверхности увеличивается на $2 dx \sin \theta/2$. Отсюда

$$-\gamma_b dx + 2\gamma_s dx \sin \theta/2 = 0$$

или

$$\gamma_b = 2\gamma_s \sin \theta/2. \quad (12.22)$$

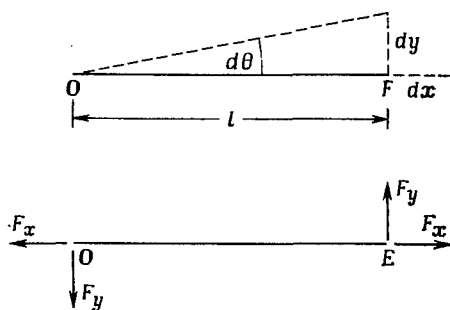
Здесь γ_b — энергия границы зерен, а γ_s — свободная поверхностная энергия. Равенство (12.22) можно получить еще и из условия баланса сил натяжений, действующих на стык со стороны рассматриваемых поверхностей раздела; отсюда следует, что величины этих натяжений равны γ_b и γ_s . Отношение γ_b/γ_s для ряда материалов найдено по измерениям углов канавок между границами зерен. В табл. 12.3 приведены некоторые из этих значений, а также значения γ_b , полученные из отношения γ_b/γ_s по независимым измерениям γ_s .

Таблица 12.3

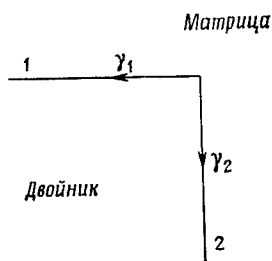
Энергии высокоугловых межзеренных границ

Металл	Температура, °К	γ_{gb}/γ_s	γ_{gb} (используя γ_s из табл. 12.1)	Метод	Источник
Fe (δ)	1500	0,24	470	Канавки	[18]
Fe (γ)	1100	0,40	780	»	[19]
Cu	850	0,37	610	»	[19]
Au	850	0,25	350	»	[19]
Ni	1350	0,40	690	»	[19]
Nb	2250	0,36	760	»	[19]
Sn	213	0,235	160	»	[19]
NaCl	~600	—	266±20%	См. [17]	[20]
LiF	~600	—	398±20%	См. [17]	[20]

К сожалению, предположение о том, что свободные энергии поверхностей раздела не зависят от их ориентации, в общем случае неверно. Если участок поверхности может понизить свою свободную энергию путем поворота, приводящего к другой ориентации, то для предотвращения этого поворота к участку должна быть приложена пара сил. В результате в условии баланса сил у места стыка появляются так называемые члены с вращающими моментами.



Фиг. 12.19. Сегмент OE на поверхности раздела удерживается в равновесии силами F_x , F_y .



Фиг. 12.20. Две границы одного двойника, встречающиеся под прямым углом.

Силы, которые надо было бы приложить к краям сегмента подвижной поверхности, чтобы удержать его в равновесии, определяются условием минимума свободной энергии, т. е.

$$dG = 0,$$

где dG — изменение свободной энергии системы, отвечающее бесконечно малому отклонению от положения равновесия. Рассматривая приращение dx поверхности длиной l (фиг. 12.19), получаем

$$-F_x dx + \gamma dx = 0,$$

откуда

$$F_x = \gamma. \quad (12.23)$$

Рассматривая смещение dy , получаем

$$-F_y dy + l (d\gamma/d\theta) d\theta = 0,$$

а так как $dy \approx l d\theta$, то

$$F_y = d\gamma/d\theta. \quad (12.24)$$

Силу F_x надо приложить к концам данной границы, чтобы предотвратить сокращение ее длины, а силу F_y — чтобы предотвратить ее поворот, приводящий к ориентировке с меньшей энергией. Если, например, точка E представляет собой стык поверхностей

раздела, то граница OE действует на этот стык с силами, равными и противоположными F_x и F_y .

Если ориентация поверхности соответствует острому минимуму на графике зависимости свободной энергии от ориентации, при переходе через который $d\gamma/d\theta$ резко меняется, например, от $-\alpha$ до $+\alpha$, то ситуация становится неопределенной. Чтобы предотвратить вращение границы, в этом случае не требуется никакой силы F_y , потому что любой поворот из положения минимума повышает энергию границы. И действительно, можно прилагать любую силу F_y величиной от $-\alpha$ до $+\alpha$, не вызывая поворота границы.

Наличие таких особых ориентаций границ, которым соответствуют острые минимумы на графиках ориентационной зависимости поверхностной энергии, может привести к необычным конфигурациям. К примеру, на фиг. 12.20 изображены две границы одного и того же двойника, встречающиеся под прямым углом. Можно предположить, что обе границы представляют собой границы особого положения; например, граница 1 может быть двойниковой плоскостью K_1 , так что находящиеся на ней атомы являются общими для решеток двойника и матрицы, а граница 2 может быть какой-нибудь другой плоскостью хорошего сопряжения типа описанных выше границ наклона (фиг. 12.10) или кручения (фиг. 12.15). В случае такой конфигурации можно лишь сказать, что натяжение границы 2 недостаточно велико, чтобы вывести границу 1 из ее особой ориентировки:

$$\gamma_2 < d\gamma_1/d\theta \quad (12.25)$$

и аналогично

$$\gamma_1 < d\gamma_2/d\theta. \quad (12.26)$$

Здесь в обоих случаях $d\gamma/d\theta$ — это величина наклона кривой свободной энергии границы (в функции угла поворота θ вокруг оси, параллельной линии пересечения границ 1 и 2) в точке острого минимума.

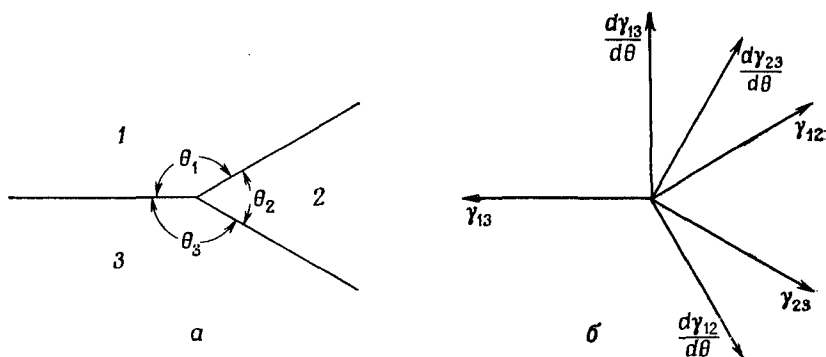
Случай стыка трех границ показан на фиг. 12.21. Если считать, что ни одна из стыкующихся границ не находится в особой ориентации, можно вывести два уравнения равновесия, рассматривая два бесконечно малых смещения места стыка в двух взаимно перпендикулярных направлениях и записывая условие того, что результирующее изменение свободной энергии должно равняться нулю. Такие же условия легко записать исходя из векторной диаграммы сил, приведенной на фиг. 12.21, б. На этой диаграмме отложены силы, действующие на стык со стороны границ (иначе говоря, это силы, противоположные по знаку силам F_x и F_y на фиг. 12.19, которые являются силами, действующими на границу). Часто бывает удобнее воспользоваться тремя симметричными уравнениями, из которых только два являются независимыми. Эти уравнения можно получить, приравняв нулю суммы компонентов всех

сил по направлениям трех поверхностей раздела:

$$\begin{aligned} \gamma_{13} + \gamma_{12} \cos \theta_1 + \gamma_{23} \cos \theta_3 - \frac{d\gamma_{12}}{d\theta} \sin \theta_1 + \frac{d\gamma_{23}}{d\theta} \sin \theta_3 &= 0, \\ \gamma_{12} + \gamma_{23} \cos \theta_2 + \gamma_{13} \cos \theta_1 - \frac{d\gamma_{23}}{d\theta} \sin \theta_2 + \frac{d\gamma_{13}}{d\theta} \sin \theta_1 &= 0, \quad (12.27) \\ \gamma_{23} + \gamma_{13} \cos \theta_3 + \gamma_{12} \cos \theta_2 - \frac{d\gamma_{13}}{d\theta} \sin \theta_3 + \frac{d\gamma_{12}}{d\theta} \sin \theta_2 &= 0. \end{aligned}$$

Приведенные уравнения впервые были выведены Херрингом [21].

Возвращаясь к случаю границы зерен, пересекающей внешнюю поверхность, видим, что если имеются существенные неизвестные



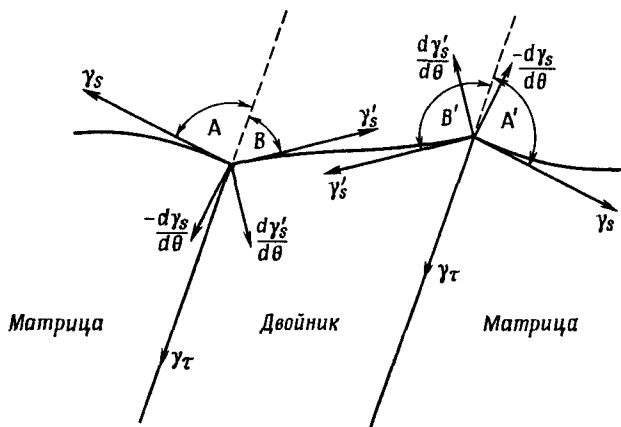
Ф и г. 12.21. Стык поверхностей раздела между тремя зернами.

Каждая из поверхностей нормальна к плоскости чертежа. *a* — геометрия расположения поверхностей; *б* — схема действующих сил. Знак $d\theta$ считается положительным при поворотах границ по часовой стрелке.

члены с вращающимися моментами $d\gamma/d\theta$, то в общем случае невозможно найти отношение энергии границ зерен к поверхностной энергии на основании измерения углов на одном-единственном стыке. Однако для частного случая пересечения двойниковой пластинки с внешней поверхностью г. ц. к.-кристалла можно упростить уравнения (12.27).

Упрощение становится возможным благодаря различной значимости разных членов. Энергия двойниковой границы $\{111\}$, видимо, будет малой; фактически она может быть даже меньше члена $d\gamma_s/d\theta$, обусловленного анизотропией свободной поверхностной энергии. В результате вращающий момент, действующий на стык между двойниковой границей и внешней поверхностью, может превысить натяжение двойниковой границы, что приведет к образованию холмика на внешней поверхности, как показано на фиг. 12.22. Появление холмика вместо канавки убедительно свидетельствует о наличии вращающего момента, возникающего

из-за стремления поверхности занять более благоприятную ориентировку. Из-за того что двойниковая граница сама соответствует особой ориентации, отвечающей минимуму свободной энергии, можно применять лишь одно из уравнений (12.27), а именно то, в котором нет членов с вращающим моментом для двойниковой границы. Иными словами, условие равновесия можно писать



Ф и г. 12.22. Канавки на двойниковых границах (вид сбоку).

только для сил, действующих параллельно двойниковой границе. Для двух стыков на фиг. 12.22 получаем соответственно

$$\gamma_r = \gamma_s \cos A + \gamma'_s \cos B + \frac{d\gamma_s}{d\theta} \sin A - \frac{d\gamma'_s}{d\theta} \sin B \quad (12.28)$$

и

$$\gamma_r = \gamma_s \cos A' + \gamma'_s \cos B' - \frac{d\gamma_s}{d\theta} \sin A' + \frac{d\gamma'_s}{d\theta} \sin B'.$$

Складывая уравнения (12.28) и считая, что $\gamma_s \approx \gamma'_s$, получаем

$$2\gamma_r = \gamma_s (\cos A + \cos A' + \cos B + \cos B') + \frac{d\gamma_s}{d\theta} (\sin A - \sin A') + \frac{d\gamma'_s}{d\theta} (\sin B' - \sin B).$$

Заметим, что $A + A' \approx 180^\circ$, $B + B' \approx 180^\circ$, поэтому $\sin A - \sin A'$ и $\sin B - \sin B'$ — величины малые. Так как $d\gamma_s/d\theta$ и $d\gamma'_s/d\theta$ хотя и больше, чем γ_r , но намного меньше, чем γ_s , можно написать

$$2\gamma_r \approx \gamma_s (\cos A + \cos A' + \cos B + \cos B'). \quad (12.29)$$

Отсюда можно найти отношение свободных энергий двойниковой границы и внешней поверхности γ_r/γ_s . Микура [22] первый вос-

пользовался этим способом, для того чтобы измерить свободные энергии двойниковых границ (зная поверхностные энергии) и наглядно представить анизотропию свободной поверхностной энергии в г. ц. к.-металле. Основные его выводы заключаются в том, что свободная энергия границы двойника по {111} в г. ц. к.-металле очень мала по сравнению со свободной поверхностной энергией и что при изменении ориентации свободная поверхностная энергия меняется не более чем на 10%. Если только поверхности достаточно чисты, то наиболее плотно упакованная поверхность {111} обладает наименьшей свободной энергией, как и следовало ожидать. Некоторые значения свободных энергий двойниковых границ приведены в табл. 12.4.

Таблица 12.4

Свободные энергии двойниковых границ

Металл	Температура, °C	Атмосфера	γ_r/γ_s	γ_r/γ_g	γ_r , эрг·см ⁻¹	Источник
Ag	900	Воздух	0,0051		1,8	[23]
Co	1290	Вакуум	0,0069			[24]
Cu(OFHC) ¹⁾	1000	H ₂	0,027±0,01		47	[25]
Cu (очень чистая)	1000	H ₂	0,007		12,2	[25]
Cu	950			0,045	28	[19]
Ni	1000	Вакуум	0,015±0,005		26	[26]
Pt	1080	»	0,053		150	[24]
Pb	220	—	—	0,05	10	[19]

¹⁾ OFHC (Oxygen Free High Conductivity) — бескислородная медь высокой электропроводности.— Прим. перев.

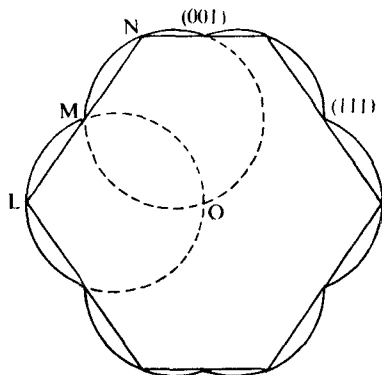
12.4. Формы кристаллов и зерен

Форма кристалла обычно является следствием условий, в которых он рос, а иногда определяется его спайностью. Однако должна существовать его равновесная форма, которую на самом деле могут принимать только небольшие свободно растущие кристаллы или небольшие пустоты внутри кристалла. Эта форма определяется свободной поверхностной энергией и должна удовлетворять условию минимума суммарной свободной энергии, т. е.

$$\int_A \gamma dA = \min. \quad (12.30)$$

Если свободная поверхностная энергия изотропна, то равновесная форма представляет собой сферу, так как при этом площадь ее поверхности при заданном объеме минимальна. Если свободная

поверхностная энергия для разных ориентировок различна, то равновесную форму можно определить по полярным γ -диаграммам на основании теоремы Вульфа ¹⁾, которую мы приведем без доказательства ²⁾. Равновесная форма кристалла должна представлять собой поверхность, соответствующую внутренней огибающей плоскостей, нормальных к векторам, которыми изображаются свободные поверхностные энергии на полярной γ -диаграмме, и проведенных через концы этих векторов («плоскости Вульфа»).



Фиг. 12.23. Равновесная форма кристалла («форма Вульфа») на полярной диаграмме свободной поверхностной энергии, которая была изображена на фиг. 12.5.

Если на полярной (векторной) γ -диаграмме есть достаточно глубокие острые минимумы, то равновесная форма будет многогранником. Это иллюстрирует фиг. 12.23 для гипотетического случая полярной γ -диаграммы г. ц. к.-металла, уже приводившейся на фиг. 12.5. Если минимумы выражены не очень резко, то равновесная форма может иметь закругленные участки, хотя все-таки у нее должны быть и плоские грани, отвечающие ориентациям энергетических минимумов. Вопрос о том, будет ли на равновесной форме возникать поверхность данной ориентировки, можно решать с помощью построения Херринга [27].

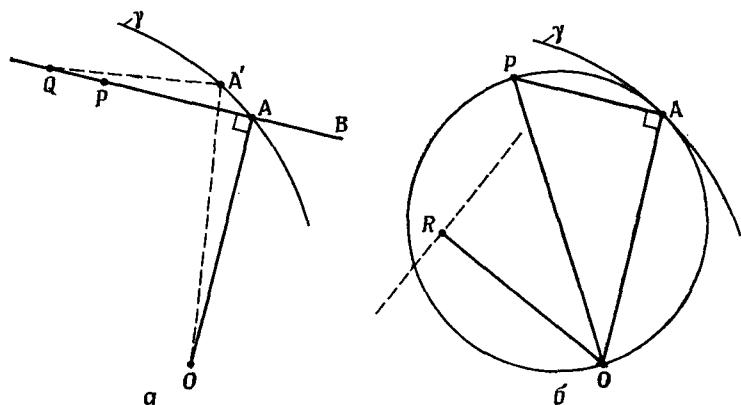
Рассмотрим некое направление OA на фиг. 12.24. Точка O — центр полярной диаграммы поверхностной энергии γ ³⁾; на участке около A кривая является гладкой. Допустим, что нормальная к OA поверхность принадлежит равновесной форме, определяемой по теореме Вульфа. Тогда она должна существовать на том участке этой равновесной формы, который касается плоскости Вульфа AB . В каком месте плоскости AB расположен этот участок? Ответ на этот вопрос получим, рассмотрев точки в окрестности A , напри-

¹⁾ См. статью Вульф Ю. В. [37*], перепечатанную в книге [38*]. — *Прим. ред.*

²⁾ Обсуждение доказательства теоремы Вульфа см. в [26], гл. 2.

³⁾ В построении Херринга предполагается, что γ — непрерывно меняющаяся функция направления в пространстве. — *Прим. ред.*

мер A' . Эти точки представляют собой свободные энергии поверхностей, слегка разориентированных относительно той поверхности, чья свободная энергия представлена точкой A . Поэтому на равновесной форме Вульфа эти поверхности должны появляться вблизи точки, в которой поверхность равновесной формы нормальна радиусу-вектору OA . По мере того как точки A' , A'' , ... подходят все ближе и ближе к A , соответствующие им плоскости Вульфа



Фиг. 12.24. Построение Херринга [27].

должны касаться равновесной формы Вульфа в точках, все более близких к той точке, в которой ее касается плоскость Вульфа, соответствующая точке A .

Плоскость, нормальная к OA' , пересекает AB по прямой линии, проходящей через точку Q . По мере того как разные точки A' , A'' , ..., расположенные в окрестности точки A , будут приближаться к A , линии пересечения их плоскостей Вульфа будут стремиться к пересечению в некоторой, общей для всех, точке, скажем точке P . Если на равновесной форме имеется поверхность, перпендикулярная OA , то она проходит через точку P . Но в двумерном случае геометрическое место точек, определяемых тем свойством, что все нормали к их радиусам-векторам пересекаются в одной точке P' , является окружностью, проходящей через центр полярной диаграммы O и через точку P' , причем линия OP' является диаметром этой окружности (диаметр окружности опирается на угол 90° с вершиной в любой точке окружности).

Такой же результат можно получить и для трехмерного случая, откуда следует, что векторная диаграмма поверхностной энергии γ в точке A касается сферы, для которой линия OP является диаметром (фиг. 12.24, б). Отсюда непосредственно вытекает очень важное следствие. Рассмотрим любое другое направление.

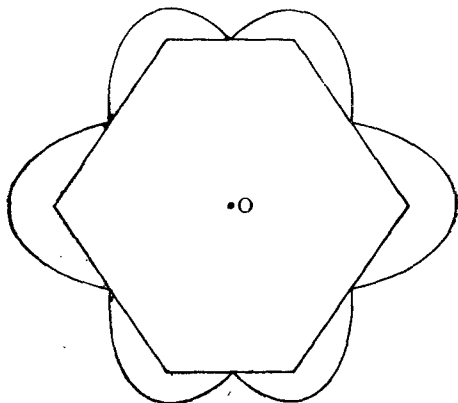
проходящее через точку O . Если оно пересекает векторную γ -диаграмму внутри сферы, диаметром которой является OP , например в точке R , то его плоскость Вульфа будет отсекал точку P , т. е. в этом случае точка P не может лежать на вписанной поверхности, касательной к плоскостям Вульфа. Очевидно, грань, нормальная OA , не может появиться на равновесной форме, если векторная γ -диаграмма в каком-либо месте проходит внутри сферы, проходящей через O и касательной к γ -диаграмме в точке A . Если, напротив, γ -диаграмма повсюду оказывается лежащей вне этой касательной сферы, то подходы к точке P не могут быть отсечены и поверхность, нормальная OA , должна появиться на равновесной форме. Из таких соображений следует, что ориентация, которой на γ -диаграмме соответствует острый минимум, появится на равновесной форме Вульфа тогда и только тогда, когда сфера, диаметром которой служит отрезок прямой, проведенной через точку O и точку минимума, лежит целиком внутри γ -диаграммы.

Интересен частный случай, когда γ -диаграмма совпадает с частью касательной сферы. Такая ситуация для двумерного случая показана на фиг. 12.23. Здесь сечение γ -диаграммы состоит из окружностей, проходящих через начало координат; на рисунке изображены две такие окружности. OL — диаметр окружности LMO , так что все плоскости Вульфа, отвечающие точкам γ -диаграммы на участке $L \rightarrow M$, касаются равновесной формы в вершине L . Точно так же ON — диаметр окружности OMN , и все плоскости Вульфа, отвечающие точкам γ -диаграммы на участке $M \rightarrow N$, касаются равновесной формы в вершине N . Получается, что все плоскости Вульфа, отвечающие различным точкам γ -диаграммы, касаются той или иной вершины этой двумерной равновесной формы, так что, строго говоря, на ней появляются поверхности всех ориентировок, хотя протяженными могут быть лишь поверхности, отвечающие тем ориентациям, которым на графике поверхностной энергии отвечают острые минимумы (например, поверхность $\{111\}$ на участке LN), а другие поверхности теснятся у вершины, например у N . Если точки минимумов на фиг. 12.23 остаются неподвижными, а остальная часть γ -диаграммы расширяется, как на фиг. 12.25, то равновесная форма останется такой же, но теперь плоскости Вульфа, отвечающие точкам общего положения, не будут касаться ее даже и в вершине. Это различие имеет некоторое значение в связи с возникновением гранок в процессе термического травления, о котором речь пойдет ниже.

В действительности кристалл произвольной формы и обычных размеров никогда не достигает равновесной формы, потому что для этого потребовалось бы существенное перераспределение материала, а связанный с этим выигрыш в энергии незначителен. Более вероятно, что энергия поверхности кристалла будет понижаться в результате перестройки поверхности путем относительно малых

перемещений атомов в конфигурацию, состоящую из малых участков, ориентация которых соответствует меньшей энергии. Этот процесс называется *термическим ограничением* (фиг. 12.26).

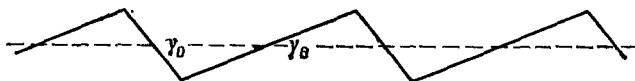
Херринг показал, что поверхность, ориентировка которой не соответствует равновесной форме, всегда может понизить свою



Фиг. 12.25. Та же равновесная форма, что и на фиг. 12.23, но полученная из другой полярной диаграммы свободной поверхностной энергии.

суммарную свободную поверхностную энергию путем ограничения. Поверхность, параллельная плоскости Вульфа, которая касается равновесной формы, не может понизить свою энергию таким путем, даже если эта плоскость касается только вершины равновесной формы, как на фиг. 12.23.

Кристаллы редко имеют равновесную форму. Гораздо чаще их форма является следствием условий роста. Если скорость роста



Фиг. 12.26. Поверхность, уменьшившая свою энергию в результате того, что она разбилась на фasetки, одни из которых соответствуют плоскостям с малыми индексами и с небольшим поверхностным натяжением γ_0 .

Поверхность нормальна плоскости чертежа.

кристалла определяется только скоростью, с которой атомы могут встраиваться в его поверхность, то скорость продвижения поверхности зависит только от ее кристаллографической ориентировки. Таким образом, форма кристалла соли, растущего из водного раствора, может определяться просто относительными скоростями роста его граней. Грани, растущие быстрее, будут постепенно исчезать: останутся лишь те грани, которые растут медленнее. Стабильную форму роста кристалла можно вывести из полярной

диаграммы скоростей роста с помощью такого же построения, какое применялось для вывода равновесной формы. Таким образом, утверждение, аналогичное теореме Вульфа, состоит в том, что на кристалле образуются преимущественно те грани, которые растут с наименьшей из возможных скоростей.

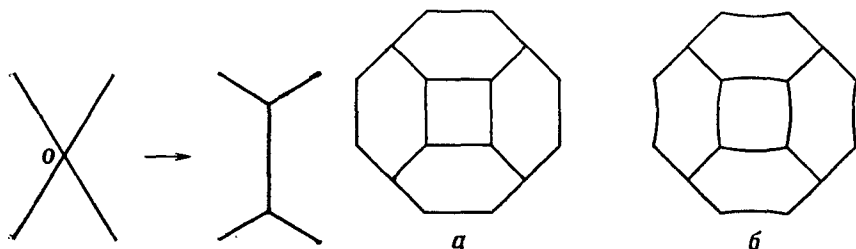
Однако, как правило, скорость продвижения поверхности растущего кристалла зависит не только от ее ориентировки. Часто скорость роста контролируется скоростью подвода материала или скоростью отвода тепла. При этих условиях нередко образуются нестабильные формы роста с заострениями или с «дендритной» морфологией (см. фото 12Б). Дендриты часто наблюдаются при росте кристалла из жидкой фазы, а иногда и при превращениях в твердой фазе.

Чтобы показать, как может происходить нарушение стабильности роста, рассмотрим, например, плоскую поверхность кристалла, растущего в пересыщенном растворе. Допустим, что скорость роста контролируется только скоростью диффузии растворенных атомов к растущей поверхности. Тогда должен существовать градиент концентрации от значения, соответствующего определенному пересыщению (в растворе), до равновесной концентрации (у поверхности кристалла). Если же случайно начнет развиваться какой-то выступ, то у его вершины градиент концентрации должен стать больше, потому что выступ внедряется в область более высокой концентрации раствора. Возрастание градиента концентрации приводит к увеличению скорости диффузии к выступу и усиливает его рост. Этому противодействует поверхностное натяжение, которое стремится разравнивать выступ и вызывает поток раствора от выступа в стороны. Если выступ не слишком острый, то он будет постепенно увеличиваться в объеме. Превращение выступов в острия, образование новых выступов на этих остриях и т. д. приводят к развитию дендрита. Нередко из-за влияния кристаллографических факторов ветви дендритов имеют кристаллографическую ориентацию.

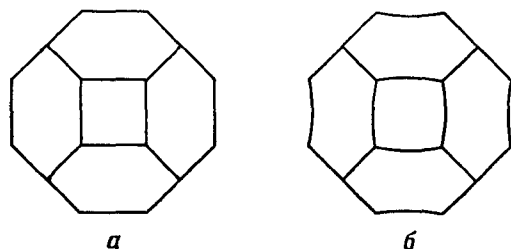
Расположение зерен в поликристалле часто бывает весьма сходно с расположением пузырей в пене. Поэтому можно предполагать, что расположение зерен зависит от поверхностного натяжения на границах зерен, подобно тому как расположение и форма пузырей в пене зависят от поверхностного натяжения жидкости между ними. В этой аналогии не учитывается анизотропия свободной поверхностной энергии. Таким образом, форма зерен определяется двумя факторами: во-первых, зерна должны полностью заполнять пространство и, во-вторых, силы поверхностного натяжения межзеренных границ должны полностью уравновешиваться на ребрах и вершинах зерен.

По этим причинам могут образовываться только ребра, вдоль которых встречаются три границы, и только вершины, у которых

встречаются четыре ребра, потому что в случае других стыков межзеренных границ имеется возможность сокращения площади границ за счет образования других, более выгодных конфигураций, как, например, показано на фиг. 12.27. (На самом деле в поликристаллах в отличие от пены встречаются и необычные стыки, по-видимому, из-за некоторой анизотропии поверхностной энергии межзеренных границ.) Многогранники, которые могут быть уложены так, чтобы они полностью заполняли пространство, —



Фиг. 12.27. Нестабильность четырех поверхностей раздела, пересекающихся по прямой линии, нормальной плоскости чертежа в точке O .



Фиг. 12.28 (по Кельвину [28]).
 a — кубооктаэдр; b — искаженный кубооктаэдр, удовлетворяющий условию равновесия сил поверхностного натяжения на всех стыках.

это кубооктаэдры, фиг. 12.28, a . Однако такие многогранники, полностью заполняя пространство, не удовлетворяют второму условию, согласно которому должно наблюдаться уравновешивание сил поверхностного натяжения на их ребрах и вершинах. Как показал Кельвин, для того чтобы конфигурация, в которой три грани кубооктаэдра встречаются под углом 120° , а четыре ребра — под углом $109^\circ 28'$, была устойчивой, каждая шестиугольная грань должна быть сложным образом искривленной, как показано на фиг. 12.28, b .

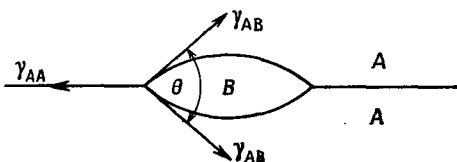
Конечно, ни в пене, ни в поликристалле никогда не достигается идеально правильной укладки одинаковых искаженных кубооктаэдров. Зерна разнообразны по размерам, по числу и форме граней. Однако в среднем их свойства близки к свойствам кубооктаэдров. Например, число граней на одно зерно в среднем близко к 14, а среднее число ребер, приходящихся на одну грань, близко к $5\frac{1}{7}$. Грани с пятью ребрами встречаются чаще, чем какие-либо другие грани [29].

В пене, если у пузыря число граней меньше среднего, граням этого пузыря приходится выгибаться, так чтобы углы между ними увеличивались, стремясь к 120° . Чтобы обеспечить это выгибание, газ в пузырьке должен находиться под большим давлением, чем газ в соседних пузырях. Если газ может диффундиро-

вать сквозь стенки пузыря, он будет вытекать и пузырь будет опадать. Исчезновение таких пузырей увеличивает средний размер остальных пузырей. В поликристаллах при повышенных температурах тоже происходит рост зерен. Стремление искривленных границ зерен сокращать свою площадь при сохранении в то же время равновесия сил поверхностного натяжения на ребрах заставляет их мигрировать к своему центру кривизны.

12.5. Границы раздела между разными фазами

Границы раздела между двумя различными кристаллами можно характеризовать, описывая (как и в случае границ зерен) ориентационные соотношения между решетками обоих кристаллов и ориентировку самой границы. Так же как для границ зерен, имеются



Ф и г. 12.29. Поверхность раздела трех фаз.

особые ориентировки, например двойниковые границы, особые ориентационные соотношения могут существовать и для поверхностей раздела между двумя кристаллами; подобно границам между зернами с большим углом разориентировки, имеются различные типы поверхностей раздела между произвольно ориентированными кристаллами.

Свободную энергию произвольной межфазной границы, как и в случае энергии границ зерен, можно определить по углам между поверхностями раздела в двухфазной системе. На фиг. 12.29 показана частица фазы *B*, расположенная на границе зерен фазы *A*. Если предположить, что межфазная граничная энергия не зависит от ориентировки (т. е. пренебречь членами, содержащими крутильные моменты), то «двугранный угол» θ определится формулой, сходной с формулой (12.22), а именно

$$\cos(\theta/2) = \gamma_{AA}/2\gamma_{AB}. \quad (12.31)$$

Некоторые результаты, полученные на основе измерений таких двугранных углов, приведены в табл. 12.5. Из этих данных следует, что поверхностные натяжения произвольных межфазных границ слабо отличаются от натяжений большеугловых межзеренных границ в тех же системах, хотя часто они оказываются немного меньше их.

Таблица 12.5

Относительные значения энергий произвольных межфазных границ

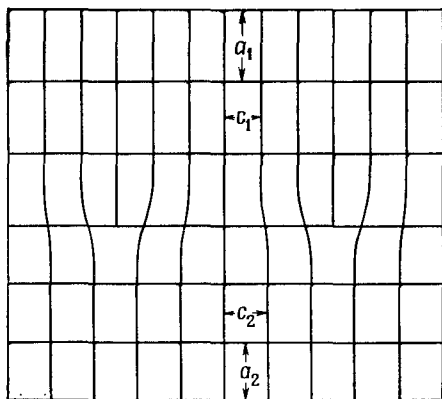
Система	Температура, °C	Фаза А	Фаза В	γ_{AB}/γ_{AA}	γ_{AB}/γ_{BB}	Источник
Fe—C	825	α (о. ц. к.) 0,01% C	γ (г. ц. к.) 0,22% C	$0,93 \pm 0,02$	$0,90 \pm 0,02$	[30]
Fe—Cu	825 1000	α (о. ц. к.) γ (г. ц. к.)	Cu Cu	0,74 0,61	0,86 0,87	[31]
Cu—Zn	700	α (г. ц. к.)	β (о. ц. к.)	0,83	1,00	[34]
Cu—Sn	750	α (г. ц. к.)	β (о. ц. к.)	0,76	0,93	[31]
NaCl—NaF	600	NaCl	NaF	0,90	0,78	[32]
NaCl—LiF	600	NaCl	LiF	1,13	0,76	[32]
NaCl—NaI	550	NaCl	NaI	1,08	0,78	[32]
LiF—CsCl	550	LiF	CsCl	1,38	0,65	[32]

Полной противоположностью произвольной межфазной границе является граница между двумя кристаллами, у которых атомы разные, но структуры идентичные, так что границы любой ориентации между параллельными кристаллами полностью когерентны. Такая ситуация имеет место, например, при старении пересыщенных твердых растворов серебра в алюминии, в котором образуются частицы выделений (преципитаты). Атомы собираются в маленькие сферические скопления в непрерывной г. к. ц.-решетке.

В качестве другого примера можно привести случай, когда кристаллические структуры выделения и матрицы различны, но у них имеется общая сверхструктура. Например, магниевый феррит $MgFe_2O_4$ имеет г. ц. к.-сверхрешетку из ионов кислорода, которая почти идентична решетке MgO (разд. 3.6). Маленькие частицы преципитатов $MgFe_2O_4$ внутри MgO сохраняют сверхрешетку из ионов кислорода, а межфазная поверхность раздела, проходящая через ионы кислорода, например по $\{111\}$, является общей для обеих структур.

Еще одна возможность заключается в том, что обе кристаллические структуры обладают только одной общей плоскостью. Например, плотноупакованные плоскости г. ц. к.- и г. п. у.-кристаллов точно совпадают, если межатомные расстояния равны; таковы, например, соотношения при мартенситном превращении в кобальте. В общем случае, конечно, невозможно найти две идентичные плоскости в двух разных кристаллических структурах, и поверхность раздела между двумя произвольно выбранными кристаллами не может быть когерентной.

Обычно даже соответственные плоскости двух близких по структуре кристаллов совпадают только приблизительно. Полное совпадение может быть достигнуто с помощью однородной упругой деформации или же несоответствие может локализоваться на дислокациях. Поверхность раздела, в которой небольшое несоответствие компенсируется сеткой дислокаций, называется *частично когерентной границей*; она аналогична малоугловой межзеренной границе. Различие этих дислокационных конфигураций заключается в том, что у малоугловой границы напряжения на больших



Ф и г. 12.30. Поверхность раздела между двумя ромбическими кристаллами.

Поверхность нормальна плоскости черчена.

расстояниях всегда обращаются в нуль, а у частично когерентной границы (если бы она располагалась в одной однородной среде) всегда есть дальнедействующие напряжения.

Истинную деформацию между парой различных кристаллов можно себе представить как результирующую однородной упругой деформации, которая обеспечивает точное совпадение атомных структур на границе, и деформации, создаваемой рядом дислокаций, причем обе эти деформации становятся исчезающе малыми на больших расстояниях от поверхности раздела. Например, на фиг. 12.30 изображен случай одномерного несоответствия на границе раздела между двумя ромбическими кристаллами. Можно считать, что граница эта возникла следующим образом: сначала верхний кристалл растянули в направлении c , чтобы получилось хорошее совпадение, а потом ввели параллельные краевые дислокации, которые уничтожили эту деформацию на больших расстояниях, но зато создали локальные области несоответствия на границе раздела.

Число экстраплоскостей, которые приходится разместить в верхнем кристалле на единице длины, равно

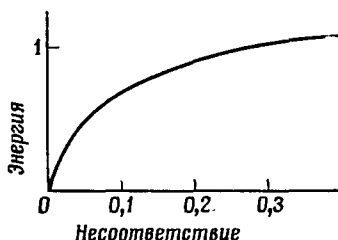
$$\rho = 1/c_1 - 1/c_2. \quad (12.32)$$

Следовательно, расстояние между дислокациями $p = p^{-1}$ составляет

$$p = c_1 c_2 / (c_2 - c_1). \quad (12.33)$$

Размер малых частиц преципитатов, выделяющихся из твердых растворов, может оказаться гораздо меньше, чем расстояние между дислокациями, определяемое формулой (12.33). В таком случае частица будет полностью когерентной, а несоответствие будет приводить к появлению упругой «когерентной деформации».

Величина $(c_2 - c_1)/c_1$ называется несоответствием. Если несоответствие достигает 10%, расстояние между дислокациями на фиг. 12.30 составляет всего лишь десяток параметров решетки.



Фиг. 12.31. Энергия границы между двумя большими кристаллами с одинаковыми упругими постоянными (типа показанной на фиг. 12.30) (по Ван-дер-Мерве [34]).

Тогда области ядер дислокаций начинают перекрываться и, используя такой ряд дислокаций, уже нельзя вычислять положения атомов и энергию границы на основе теории упругости.

Если несоответствие мало, энергию границы можно рассчитать. Ее зависимость от величины несоответствия весьма сходна с зависимостью энергии малоугловой межзеренной границы от величины ее угла наклона или угла кручения. Для границы между фазами, у которых упругие свойства одинаковы, Брукс [33] получил соотношение

$$E = \{ \mu b \delta / [4\pi (1 - \nu)] \} (A_0 - \ln \delta); \quad (12.34)$$

здесь δ — величина несоответствия, а значение A_0 такое же, как в формуле (12.9). На фиг. 12.31 приведен график этой зависимости, полученный Ван-дер-Мерве с учетом энергии ядра дислокации на основе модели Пайерлса, т. е. предположения о том, что между атомами по обе стороны от границы действуют силы, изменяющиеся по синусоидальному закону (разд. 7.5). Для несоответствий, превышающих примерно 0,1 (10%), энергия, запасенная в силах связей между атомами по обе стороны от границы, больше энергии, запасенной в обеих упругих средах.

В реальных материалах простой случай несоответствия в одном направлении встретить труднее, чем случай двумерного несоответствия, где требуется не один, а по крайней мере два ряда дисло-

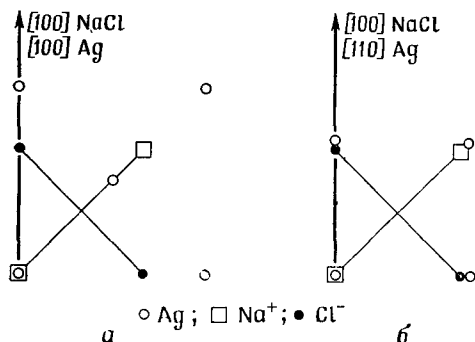
каций для ликвидации этого несоответствия. Например, несоответствие в направлении b в ромбическом кристалле на фиг. 12.30 может быть уничтожено рядом краевых дислокаций, ортогональных к тому ряду, который вызван несоответствием в направлении c . Квадратная сетка такого типа наблюдалась в гранях пластинок UC_2 , выделившихся в матрице UC [35]. UC имеет структуру $NaCl$; квадратная сетка атомов U в плоскостях $\{100\}$ почти совпадает с сеткой атомов U в плоскости (001) UC_2 , обладающего о. ц. к. структурой. Квадратная сетка краевых дислокаций восполняет малое несоответствие граней (001) пластинок UC_2 , которые выделяются по плоскостям куба UC . Теория межфазных границ имеет значение не только для фазовых превращений, но особенно для явления эпитаксиального нарастания, т. е. роста одного кристалла на поверхности другого с определенными ориентационными соотношениями. Самые первые исследования этого явления относились к росту из растворов, где, например, один щелочно-галоидный кристалл нарастает на поверхности другого такого же кристалла, продолжая его ориентацию. Для таких случаев оказалось, что эпитаксия ограничена кристаллами, у которых различие параметров решетки меньше $\sim 15\%$. В настоящее время чаще изучается эпитаксиальный рост тонких кристаллических пленок при конденсации из паров. Если кристаллические структуры пленки и подложки различаются лишь на небольшую часть параметра в одном направлении, лежащем в поверхности раздела, то такой ряд дислокаций, как на фиг. 12.30, может полностью возместить несоответствие. Если пленка очень тонкая, то упругая энергия этого ряда будет относительно незначительной по сравнению с энергией несоответствия на поверхности раздела. Однако для подсчета энергии этого ряда все же можно пользоваться моделью Ван-дер-Мерве, в которой предполагается, что между атомами на поверхности раздела действует синусоидальный силовой закон.

Раньше считалось, что эпитаксия ограничена кристаллами с одинаковыми типами сил связи и с малыми несоответствиями в плоскости границы, но теперь известно и много других примеров. Некоторые типы ориентационных соотношений при эпитаксиальном росте приведены в табл. 12.6. Из нее можно видеть, что г. ц. к.-металлы эпитаксиально нарастают на поверхностях скола слюды и что они могут эпитаксиально конденсироваться на нагретой каменной соли даже при несоответствиях, достигающих до 38% . Недостоверность предсказаний, основанных только на геометрическом соответствии, демонстрируется эпитаксией Ag на плоскостях (001) кристалла $NaCl$. Если плоскость (001) Ag параллельна плоскости (001) $NaCl$, а направление $[011]$ Ag ориентируется параллельно $[001]$ $NaCl$, то несоответствие атомных узлов может составлять всего лишь 3% . Однако на практике наблюдается

Эпитаксия г. ц. к.-металлов [36]

Подложка	Металлы	Температура, °С	Ориентационные соотношения				Несоответствие, %
			параллельные плоскости		параллельные направления		
			подложка	металл	подложка	металл	
NaCl	Ni	370	(001)	(001)	[100]	[100]	38
	Cu	300					36
	Ag	150					28
	Au	400					28
MoS ₂	Ni	≥ 120	(0001)	(111)	[10 $\bar{1}$ 0]	[$\bar{1}$ 10]	6
	Cu	≥ 50					3
	Ag	≥ 20					9
	Au	≥ 80					9
Слюда	Ag	150	(001)	(111)	[100]	[$\bar{1}$ 10] или [2 $\bar{1}$ 1]	44
		250		(001)	[100]	[100]	21
	Au	450		(111)	[100]	[$\bar{1}$ 10] или [2 $\bar{1}$ 1]	44

эпитаксия, при которой направление [001] Ag параллельно направлению [001] NaCl (фиг. 12.32). По-видимому, полное понимание



Ф и г. 12.32. Эпитаксия Ag на грани (001) NaCl.

а — наблюдаемые ориентационные соотношения; б — ориентационные соотношения с небольшим несоответствием.

ориентационных соотношений при эпитаксии зависит от того, как происходит процесс образования зародышей осадка на подложке.

Задачи

12.1. Нарисуйте структуру или структуры поверхностей в гексагональном плотноупакованном металле: а) (10 $\bar{1}$ 2); б) (11 $\bar{2}$ 2).

12.2. а) Покажите, что если дислокация с вектором Бюргерса \mathbf{b} выходит на грань с единичной нормалью \mathbf{n} , то на грани появляется ступенька высотой

$n \cdot b$ (высота измеряется вдоль нормали к поверхности). Покажите, что эту ступеньку нельзя удалить путем испарения кристалла (за исключением частных случаев).

б) Запишите формулу для высоты ступеньки, выразив ее через расстояние между плоскостями решетки, параллельными данной грани. Примените эту формулу к дислокации с вектором Бюргерса $a/2$ [110] в кристалле с г. ц. к.-решеткой для случаев, когда дислокация выходит на грани (111), (211), (100), (110).

12.3. Согласно исследованиям Маккензи, Мура и Николаса [1], если поверхностная энергия г. ц. к.-металла определяется по числу разрываемых связей между ближайшими соседями, то энергия плоскости $\{hkl\}$ связана с энергией плоскости $\{210\}$ уравнением

$$\gamma_{hkl} = \gamma_{210} \cos \theta,$$

причем θ — угол между плоскостью $\{hkl\}$ и ближайшей к ней плоскостью $\{210\}$. Покажите, что полярная диаграмма Вульфа для этой модели состоит из сферических участков, диаметрами которых служат векторы, представляющие собой значения поверхностных энергий граней $\{210\}$, и нарисуйте сечение этой диаграммы для плоскостей зоны [001], причем значения поверхностных энергий для плоскостей с малыми индексами выразите через γ_{210} .

12.4. Серебряная проволока радиусом $6,5 \cdot 10^{-3}$ см, деформированная растяжением при повышенной температуре, стала медленно сокращаться, когда напряжение стало равным $1,4 \cdot 10^5$ дин·см⁻², и растягиваться почти с той же скоростью, когда напряжение увеличили до $1,7 \cdot 10^5$ дин·см⁻². Проволока содержит 60 границ зерен на единицу длины проволоки, причем границы проходят попеременно проволоки.

а) Оцените свободную поверхностную энергию проволоки.

б) Считайте, что свободная энергия границ зерен составляет $1/3$ свободной поверхностной энергии. Какая ошибка получится, если пренебречь влиянием границ зерен? Существенна ли эта ошибка?

12.5. Выведите простое выражение для энергии малоугловой наклонной границы между двумя кристаллами через угол наклона и (изотропные) упругие свойства материала. Используйте это выражение, чтобы исследовать:

а) будут ли две параллельные границы одинакового типа притягиваться или отталкиваться?

б) как меняется энергия границы с заданным углом, если число дислокаций в границе уменьшается, а их векторы Бюргерса увеличиваются?

12.6. Рассмотрите малоугловую наклонную границу, образованную стенкой краевых дислокаций, соответствующих одной из преобладающих систем скольжения, в каждом из перечисляемых ниже материалов: а) NaCl, б) Al, в) Zn. Нарисуйте структуры этой границы на плоскости, нормальной к линиям краевых дислокаций, проиндицируйте плоскость границы и ось наклона и запишите формулу для угла наклона, связав его с расстоянием между дислокациями в малоугловой границе.

12.7. В графите встречаются сдвойникованные области, в которых двойник и матрица повернуты по отношению друг к другу примерно на $20 \frac{1}{2}^\circ$ вокруг оси типа $\langle 1100 \rangle$. Отношение осевых параметров в графите $c/a = 2,72$. Исследуйте дислокационную структуру двойниковой границы и найдите простейшие структуры, описываемые а) полными, б) частичными дислокациями.

12.8. Начертите и определите структуры решеток совпадения, получающихся в о. ц. к.-решетке при повороте на $36,9^\circ$ вокруг оси $\langle 100 \rangle$.

12.9. Двойниковая пластинка в г. ц. к.-металле пересекает поверхность металла под углом 90° . После отжига вдоль стыка одной из двойниковых границ с поверхностью наблюдается холмик, а вдоль другой — канавка. Если свободная энергия двойниковой границы составляет $1/20$ свободной поверхностной энергии, то какое различие можно ожидать между углом у дна канавки

и углом у вершины холмика? Тщательно оговорите все допущения в вашем расчете.

12.10. Если в жидкости имеется пузырек, то его радиус кривизны r связан с избыточным давлением p внутри пузырька и свободной поверхностной энергией жидкости γ известным соотношением:

$$p = 2\gamma/r.$$

Если применять эту формулу без оговорок к материалу, у которого поверхностная энергия анизотропна (например, к пузырьку газа в кристалле при повышенной температуре), то получится, что при ориентировке, отвечающей наибольшей свободной поверхностной энергии, радиус кривизны, а значит, и размер самого пузырька будут наибольшими. Это противоречит требованию о минимуме свободной энергии, а значит, приводит к форме, существенно отличающейся от равновесной формы Вульфа. Как разрешить этот кажущийся парадокс?

12.11. Поверхность кристалла отклонена на 10° от плоскости с малыми индексамн. После отжига наблюдается, что эта плоскость разбивается на ступеньки, у которых одна плоскость является плоскостью с малыми индексамн, а ориентировка второй произвольна. Пусть свободные энергии исходной поверхности и второй из плоскостей ступеньки обе равны γ , а угол между обеими плоскостями ступеньки равен 26° ; определите свободную энергию плоскости с малыми индексамн и эффективную свободную энергию той поверхности, которая разбилась на ступеньки (т. е. свободную энергию на единицу площади исходной поверхности). Принимаем, что свободная энергия произвольно ориентированных плоскостей ступенек не меняется, если эта плоскость меняет ориентировку.

12.12. Плоскость спайности слюды содержит ионы калия в вершинах сетки из равносторонних треугольников (т. е. как и в плотноупакованной сетке). Расстояние между ионами K^+ составляет $5,2 \text{ \AA}$. Нарисуйте, как совпадают атомы, если на эту поверхность эпитаксиально осаждается серебро, причем плотноупакованная плоскость серебра параллельна плоскости спайности слюды, а направление $\langle 112 \rangle$ серебра параллельно направлению плотнейшей упаковки ионов K^+ . Рассчитайте величину несоответствия в этом направлении. Покажите, что при таком ориентационном соотношении серебро может эпитаксиально нарастать в одной из двух двойниковых ориентировок. Если осадок серебра образует изолированные островки с поверхностями $\{111\}$, то нарисуйте очертания островков для обеих форм осадка.

12.13. Два г. ц. к.-кристалла повернуты по отношению друг к другу на $1/2^\circ$ вокруг оси $[1\bar{1}\bar{2}]$. Параметр решетки $a = 4 \text{ \AA}$. Если граница между ними представляет собой симметричную наклонную границу, состоящую из краевых дислокаций, а угол наклона равен $1/2^\circ$, то:

- укажите, что представляет собой плоскость границы;
- какова суммарная длина дислокаций на единицу площади этой границы?
- вычислите угол, при котором индивидуальные дислокации, составляющие границу, становятся неразличимыми;
- покажите, что эти дислокации устойчивы по отношению к любым смещениям в плоскости скольжения.

ЛИТЕРАТУРА

- Mackenzie J. K., Moore A. J. W., Nicolas J. F., *J. Phys. Solids*, **23**, 185 (1962).
- Funk E. R., Udin H., Wulff J., *J. Metals*, **3**, 1206 (1951).

3. Udin H., Shaler A. J., Wulff J., *Trans. AIME*, **185**, 186 (1949); исправления см. в работе: Udin H., *J. Metals*, **3**, 63 (1951).
4. Gilman J. J., *J. Appl. Phys.*, **31**, 2208 (1960).
5. Price A. T., Holl H. A., Greenough A. P., *Acta Met.*, **12**, 49 (1964).
6. Westwood A. R. C., Hitch T. T., *J. Appl. Phys.*, **39**, 3085 (1963).
7. Westwood A. R. C., Goldheim D., *J. Appl. Phys.*, **34**, 3335 (1963).
8. Gutshall P. L., Cross G. E., *J. Appl. Phys.*, **36**, 2459 (1965).
9. Allen B. C., *Trans. AIME*, **236**, 903 (1966).
10. Radcliffe S. V., *J. Less Common Metals*, **3**, 360 (1961).
11. Hayward E. R., Greenough A. P., *I. Inst. Metals*, **88**, 217 (1959).
12. Greenhill E. B., McDonald S. R., *Nature, Lond.*, **171**, 37 (1953).
13. Read W. T., *Dislocations in Crystals*, McGraw-Hill, 1953; имеется перевод: Рид В. Т., *Дислокации в кристаллах*, Металлургиздат, 1957.
14. Read W. T., Shockley Ir. W., *Dislocations Models of Crystal Grain Boundaries*, *Phys. Rev.*, **78**, 275 (1950).
15. Shewmon P. G., *Recrystallization, Grain Growth and Textures*, ASM, 1961, p. 165.
16. Brandon D. G., Ralph B., Rananathan S., Wald M. S., *Acta Met.*, **12**, 813 (1964).
17. Bollman W., *Disc. Farad. Soc.*, **38**, 26 (1964).
18. Price A. T., Holl H. A., Greenough A. P., *Acta Met.*, **12**, 49 (1964).
19. Inman M. C., Tipler H. R., *Met. Revs.*, **8**, 105 (1963).
20. Spitzer D. P., *J. Phys. Chem.*, **66**, 31 (1962).
21. Herring C., *The Physics of Powder Metallurgy*, Ed. Kingston W. E., Mc Graw-Hill, New York, 1951.
22. Mykura H., *The Variation of the Surface Tension of Nickel with Crystallographic Orientation*, *Acta Met.*, **9**, 570 (1961).
23. Read G., McLean M., *Acta Met.*, **12**, 401 (1964).
24. McLean M., Mykura H., *Phil. Mag.*, **14**, 1191 (1966).
25. Robertson W. M., Shewmon P. G., *Trans. AIME*, **224**, 804 (1962).
26. Mullins W. W., *Metal Surfaces, Structure and Kinetics*, ASM, 1962, Ch. 2.
27. Herring C., *Some Theorems on the Free Energies of Crystal Surfaces*, *Phys. Rev.*, **82**, 87 (1951).
28. Kelvin, *Mathematical and Physical Papers*, vol. V, Cambridge, 1911, p. 297.
29. Smith C. S., *Grain Shapes*, в книге: *Metal Interfaces*, ASM, 1952.
30. Gjostein N. A., Doman H. A., Aaronson H. I., Eichen E., *Ford Scientific Laboratory Report*.
31. Smith C. S., *Met. Revs.*, **9**, 1 (1964).
32. Spitzer D. P., *J. Phys. Chem.*, **66**, 31 (1962).
33. Brookes H., *Theory of Internal Boundaries*, в книге: *Metal Interfaces*, ASM, 1952.
34. Van der Merwe J. H., *J. Appl. Phys.*, **34**, 123 (1963).
35. Whittion L. W., *Transmission Electron Microscopy of Uranium Monocarbide*, *J. Nucl. Materials*, **12**, 115 (1964).
36. Pashley D. W., *Adv. Phys.*, **5**, 174 (1956).
- 37*. Вульф Ю. В., О капиллярной теории формы кристаллов, *Ж. русск. физ.-хим. общества, т. физ.*, **48**, 337 (1916).
- 38*. Вульф Ю. В., *Исследования работы по кристаллографии и кристаллофизике*, ГТТИ, М.—Л., 1952. стр. 121—131.

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ЧТЕНИЯ

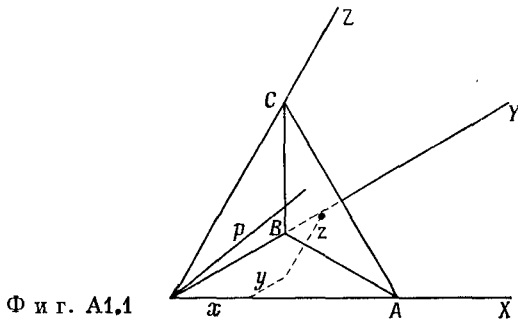
1. Nicholas J. F., *An Atlas of Models of Crystal Surfaces*, Gordon a. Breach, 1965.
2. Shewmon P. G., Robertson W. M., *Variations of Surface Tension with Orientations*, в книге: *Metal Surfaces*, ASM, 1962.

3. Read W. T., Shockley W., Dislocation Models of Crystal Grain Boundaries, *Phys. Rev.*, 78, 275 (1950).
4. Mullins W. W., Solid Surface Morphologies Governed by Capillarity, в книге: *Metal Surfaces*, ASM, 1962.
5. Smith C. S., Grain Shapes, в книге: *Metal Interfaces*, ASM, 1952.
6. Pashley D. W., The Study of Epitaxy in Thin Surface Films, *Adv. Phys.*, 5, 174 (1956).
7. Mykura H., *Solid Surfaces and Interfaces*, Routledge a. Kegan Paul (London), Dover (New York), 1966.
- 8*. Маклин Д., Границы зерен в металлах, ГНТИ, М., 1960.
- 9*. Коттрелл А. Х., Дислокации и пластическое течение в кристаллах, Металлургиздат, М., 1958.
- 10*. Горелик С. С., Рекристаллизация металлов и сплавов, изд-во «Металлургия», М., 1967.
- 11*. Палатник Л. С., Шапиров И. И., Эпитаксиальные пленки изд-во «Наука», М., 1971.

Кристаллографические вычисления

A1.1. Координатная геометрия

Плоскость на фиг. A1.1 пересекает оси X , Y , Z соответственно в точках A , B , C . Эти оси необязательно ортогональны; x , y , z — координаты точки на плоскости, а p — перпендикуляр к этой



Ф и г. A1.1

плоскости, проведенный из начала координат, образующий с осями координат углы α , β , γ . Из чертежа видно, что

$$p = x \cos \alpha + y \cos \beta + z \cos \gamma \quad (\text{A1.1})$$

или

$$1 = x/(p/\cos \alpha) + y/(p/\cos \beta) + z/(p/\cos \gamma). \quad (\text{A1.2})$$

Очевидно,

$$A \cos \alpha = B \cos \beta = C \cos \gamma = p, \quad (\text{A1.3})$$

поэтому уравнение плоскости имеет вид

$$x/A + y/B + z/C = 1, \quad (\text{A1.4})$$

а уравнение плоскости, параллельной данной, но проходящей через начало координат, будет

$$x/A + y/B + z/C = 0. \quad (\text{A1.5})$$

Кристаллографическая плоскость с миллеровскими индексами (hkl) отсекает на осях координат отрезки, пропорциональные a/h , b/k , c/l , поэтому из соотношения (A1.3) непосредственно следует,

что

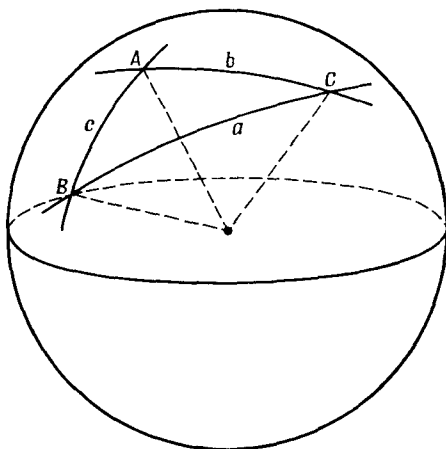
$$(a/h) \cos \alpha = (b/k) \cos \beta = (c/l) \cos \gamma, \quad (\text{A1.6})$$

где α , β , γ — углы между нормалью к плоскости с индексами (hkl) и координатными осями кристалла. Уравнение (A1.6) справедливо для всех кристаллографических систем. Оно называется уравнением нормали. В кристаллах с ортогональными осями координат всегда справедливо соотношение

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1.$$

A1.2. Решение сферических треугольников

Сферический треугольник — это треугольник на поверхности сферы, стороны которого образованы большими кругами (фиг. A1.2). Стороны такого треугольника измеряются центральными углами,



Ф и г. A1.2

которые стягиваются этими дугами. Любой сферический треугольник можно решить, если известна любая тройка его сторон или углов при вершинах. Сумма трех углов сферического треугольника не может быть меньше 180° .

В каждом сферическом треугольнике выполняются следующие соотношения между его углами A , B , C и противоположными сторонами a , b , c (фиг. A1.2):

$$\sin A/\sin a = \sin B/\sin b = \sin C/\sin c, \quad (\text{A1.7})$$

$$\cos a = \cos b \cos c + \sin b \sin c \cos A, \quad (\text{A1.8})$$

$$\cos A = -\cos B \cos C + \sin B \sin C \cos a. \quad (\text{A1.9})$$

Естественно, такие же соотношения существуют между $\cos b$, $\cos c$, $\cos B$ и $\cos C$.

Если одна из сторон или углов такого треугольника представляет собой прямой угол, то эти соотношения существенно упрощаются и все параметры треугольника можно определить по двум известным сторонам или углам. Например, если угол C прямой, то уравнение для $\cos c$, аналогичное уравнению (A1.8), принимает вид

$$\cos c = \cos a \cos b, \tag{A1.10}$$

а уравнение для $\cos C$, аналогичное уравнению (A1.9), имеет вид

$$\cos c = \operatorname{ctg} A \operatorname{ctg} B = \operatorname{tg} (90^\circ - A) \operatorname{tg} (90^\circ - B). \tag{A1.11}$$

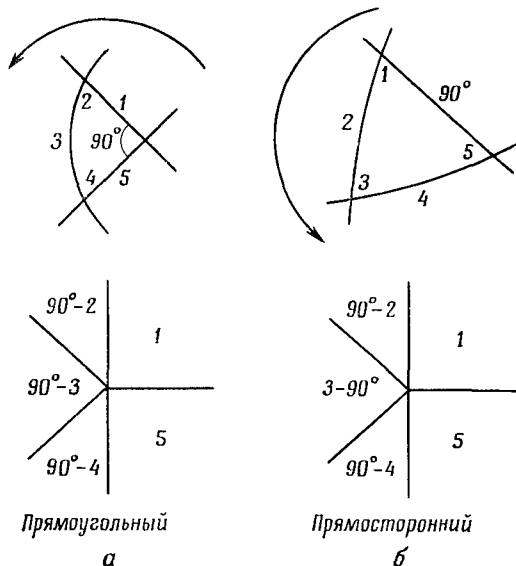
Если c — прямой угол, то соответственно получаем

$$\cos C = -\operatorname{ctg} a \operatorname{ctg} b = -\operatorname{tg} (90^\circ - a) \operatorname{tg} (90^\circ - b) \tag{A1.12}$$

и

$$\cos C = -\cos A \cos B. \tag{A1.13}$$

Сферический треугольник, у которого одна из сторон или один из углов равны прямому углу, называется треугольником Непера.

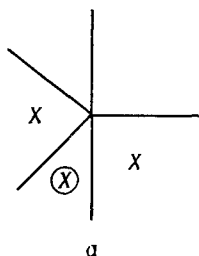


Ф и г. А1.3

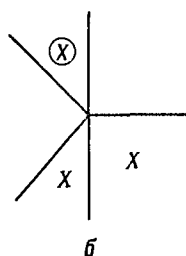
Для любого треугольника Непера удобно пользоваться двумя мнемоническими правилами решения, следующими из (A1.10) — (A1.13). Эти правила иллюстрируются чертежами на фиг. А1.3, а и б. На верхних чертежах показаны пять элементов прямоугольного треугольника, пронумерованные по порядку, начиная от прямого угла. На каждом из нижних чертежей те же цифры (пред-

ставляющие теперь величины сторон или углов треугольника в градусах) указаны на схеме, разбитой на пять участков.

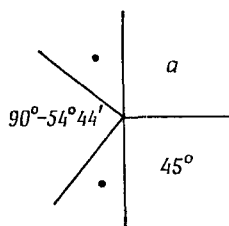
Для того чтобы решить любой неперовский треугольник, надо знать, кроме прямого угла, еще две величины. Две известные величины и любую искомую неизвестную всегда можно сгруппировать так, чтобы либо все три находились в прилежащих участках



Ф и г. А1.4



Ф и г. А1.5



этой схемы — как на фиг. А1.4, а, где показано одно из возможных прилежащих расположений, — или же так, чтобы три величины (одна неизвестная и две известные) образовывали так называемую противолежащую конфигурацию, пример которой показан на фиг. А1.4, б.

Для облегчения запоминания формул решения прямоугольных или равносторонних сферических треугольников можно воспользоваться следующими правилами:

Синус средней части равен произведению	{	тангенсов прилежащих частей
		или косинусов противолежащих частей.

Средняя часть, обведенная кружком на каждом из рисунков фиг. А1.4, означает для прилежащего расположения среднюю величину, а для противолежащего расположения величину, противолежащую двум остальным.

В качестве примера на применение правила Непера рассмотрим треугольник, изображенный на фиг. 1.17, б, у которого угол при вершине B прямой; допустим, что нам известны только стороны $b = 54^{\circ}44'$ и $c = 45^{\circ}$. Чтобы найти a , воспользуемся схемой типа фиг. А1.5, из которой следует

$$\sin(90^{\circ} - 54^{\circ}44') = \cos a \cos 45^{\circ}$$

или

$$\cos a = \sin 35^{\circ}16' / \cos 45^{\circ}$$

и окончательно

$$a = 35^{\circ}16'.$$

A1.3. Отношение синусов

Для кристаллографических вычислений, о которых шла речь в разд. A2.2, очень удобно пользоваться еще отношением синусов или так называемым ангармоническим отношением для плоскостей одной и той же зоны.

Рассмотрим четыре плоскости кристалла P_1, P_2, P_3, P_4 и обозначим угол между плоскостями P_1 и P_2 как θ_{12} , угол между P_1 и P_3 как θ_{13} и т. д. Если все эти плоскости принадлежат одной и той же кристаллографической зоне и ни одна из них не параллельна другой, то отношение

$$(\sin \theta_{12} / \sin \theta_{13}) / (\sin \theta_{42} / \sin \theta_{43})$$

легко вычислить по индексам этих плоскостей. В кристаллографических вычислениях удобно пользоваться этим отношением синусов, чтобы находить угол между гранями с известными индексами или остальные грани той же зоны, или же чтобы паходить индексы грани по углам между ней и другими гранями той же зоны. Пусть грань P_1 имеет индексы $(h_1 k_1 l_1)$, грань P_2 — индексы $(h_2 k_2 l_2)$ и т. д. Воспользуемся правилом из разд. 1.3 [уравнение (1.9)] и найдем индексы оси зоны $[UVW]$, в которой лежат грани P_1 и P_2 :

$$U = k_1 l_2 - l_1 k_2, \quad V = l_1 h_2 - l_2 h_1, \quad W = h_1 k_2 - h_2 k_1.$$

Так как эти индексы зоны выводятся из индексов граней P_1 и P_2 , обозначим их как U_{12}, V_{12} и W_{12} ; по аналогии обозначим через U_{23}, V_{23}, W_{23} индексы оси зоны, выведенной по граням P_2 и P_3 . Если принять эти обозначения, то отношение синусов запишется в виде

$$\frac{(\sin \theta_{12} / \sin \theta_{13})}{(\sin \theta_{42} / \sin \theta_{43})} = \frac{(U_{12} / U_{13})}{(U_{42} / U_{43})} = \frac{(V_{12} / V_{13})}{(V_{42} / V_{43})} = \frac{(W_{12} / W_{13})}{(W_{42} / W_{43})}. \quad (A1.14)$$

Покажем на примере, как пользоваться уравнением (A1.14). На фиг. A1.6 изображена часть стереографической проекции кристалла, на которой нанесены проекции четырех граней, принадлежащих одной зоне, и значения углов между ними. Требуется найти индексы грани P_1 по известным индексам остальных трех граней. Если обозначить индексы грани P_1 как (hkl) , то получим

$$\frac{(\sin \theta_{12} / \sin \theta_{13})}{(\sin \theta_{42} / \sin \theta_{43})} = \frac{(\sin 16^\circ 42' / \sin 68^\circ 35')}{(\sin 103^\circ 46' / \sin 51^\circ 53')} = \frac{(0,2874 / 0,9311)}{(0,9713 / 0,7870)} = 0,25 = \frac{1}{4}.$$

Если индексы грани P_1 (hkl) , а грани P_2 (121) , то, составляя индексы оси зоны по правилу, приведенному на стр. 23, имеем

$$U_{12} = k - 2l, \quad V_{12} = l - h, \quad W_{12} = 2h - k$$

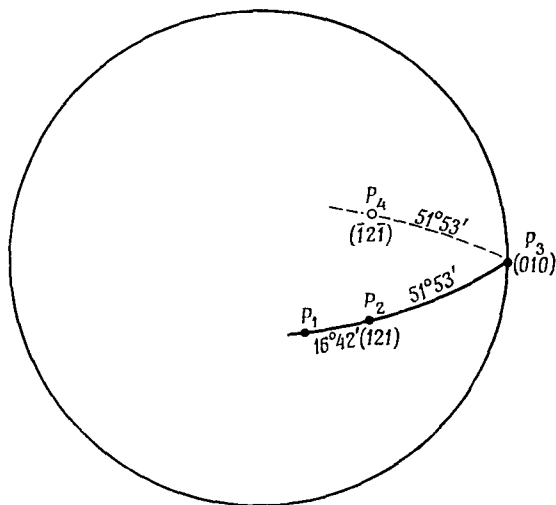
и аналогично

$$\begin{aligned} U_{13} &= \bar{l}, & V_{13} &= 0, & W_{13} &= h, \\ U_{42} &= 4, & V_{42} &= 0, & W_{42} &= \bar{4}, \\ U_{43} &= 1, & V_{43} &= 0, & W_{43} &= \bar{1}. \end{aligned}$$

Подставляя все эти значения в уравнение (A1.14), получаем

$$\frac{1}{4} = \frac{(k-2l)\bar{l}}{4/1} = \frac{(l-h)/0}{0/0} = \frac{(2h-k)/h}{\bar{4}/1}.$$

Из этих уравнений находим $l = h = k$, т. е. определяем, что грань P_1 имеет индексы (111).



Фиг. А1.6

Заметим, что формулой (A1.14) можно пользоваться для любой кристаллографической системы. Она является следствием решетчатого строения кристаллов и легко доказывается на основании свойств обратной решетки (разд. А2.2).

А1.4. Матрицы

Матрица — это совокупность величин, очень удобная для записи системы уравнений в компактной форме и их решения. Возьмем, например, уравнения (5.15), связывающие координаты (x'_1, x'_2, x'_3) точки в однородно деформированном теле с ее координатами (x_1, x_2, x_3) до деформации

$$x'_1 = (1 + e_{11})x_1 + e_{12}x_2 + e_{13}x_3,$$

$$x'_2 = e_{21}x_1 + (1 + e_{22})x_2 + e_{23}x_3,$$

$$x'_3 = e_{31}x_1 + e_{32}x_2 + (1 + e_{33})x_3.$$

Матрицу D определяем как следующую совокупность коэффициентов:

$$D = \begin{pmatrix} 1 + e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & 1 + e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & 1 + e_{33} \end{pmatrix}. \quad (A1.15)$$

Уравнения (5.15) можно теперь записать в виде

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \quad (A1.16)$$

если принять следующее условие умножения столбца (x_1, x_2, x_3) на матрицу D . Первый шаг заключается в том, чтобы умножить каждый член в первом ряду матрицы на соответствующий член в столбце (x_1, x_2, x_3) и сложить эти произведения. Это легко запомнить как «первый из ряда на первый из столбца плюс второй из ряда на второй из столбца, плюс третий из ряда на третий из столбца». Полученная сумма представляет собой систему, равную первому члену в результирующем столбце x'_1 , которая дает первое из уравнений (5.15). Второе и третье из этих уравнений получают-ся таким же образом из второго и третьего рядов матрицы. Теперь уравнения (5.15) можно записать еще компактнее:

$$x' = Dx. \quad (A1.17)$$

При такой записи подразумевается, что прежде чем производить перемножение, векторы x и x' , определяющие два положения точки, будут представлены в виде столбцов. Почему компоненты вектора удобно записывать в виде столбца, станет ясно, если мы вспомним, что означает произведение двух матриц. Поясним это на следующем примере. Рассмотрим тело, испытывающее последовательно две однородные деформации. В результате первой деформации точка x переходит в x' , т. е.

$$x' = D_1x, \quad (A1.18)$$

где D_1 — матрица, представляющая первую деформацию. Вторая деформация переводит точку x' в x'' , т. е.

$$x'' = D_2x', \quad (A1.19)$$

где D_2 — матрица, представляющая вторую деформацию. Из уравнения (A1.18) следует, что

$$x'' = D_2D_1x. \quad (A1.20)$$

Если выписать полностью уравнения (A1.18) и (A1.19), то станет очевидным, что уравнения (A1.20), описывающие результат дей-

ствия двух деформаций, можно записать в виде

$$x'' = R x, \quad (A1.21)$$

где $R = (D_2 D_1)$ — матрица, члены которой получаются следующим образом. Член в i -м ряду j -го столбца матрицы R получается, если перемножить каждый член i -го ряда левой матрицы D_2 на соответствующий член j -го столбца правой матрицы D_1 и сложить все эти произведения. Например, если

$$D_1 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, \quad D_2 = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix}$$

и

$$R = D_2 D_1 = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \end{pmatrix},$$

то $r_{11} = b_{11}a_{11} + b_{12}a_{21} + b_{13}a_{31}$, или в общем виде

$$r_{ij} = b_{i1}a_{1j} + b_{i2}a_{2j} + b_{i3}a_{3j}. \quad (A1.22)$$

Такое комбинирование рядов левой матрицы со столбцами правой матрицы приводит нас к общему определению операции перемножения двух матриц. Эту операцию можно произвести с любыми двумя совокупностями чисел, если число столбцов левой совокупности равно числу рядов правой совокупности. Умножение вектора на матрицу, как в уравнении (A1.17), можно рассматривать как частный случай, причем вектор представлен матрицей из трех рядов и одного столбца [т. е. так называемая (3×1) -матрица].

Необходимо подчеркнуть, что при таком определении умножения левую и правую матрицы нельзя менять местами, потому что в общем случае

$$D_1 D_2 \neq D_2 D_1.$$

В нашем примере искажение, создаваемое двумя последовательными большими деформациями, в общем случае зависит от того, какова их последовательность.

Возвращаясь к уравнению (5.15), обсуждавшемуся в начале этого раздела, мы видим, что его можно записать в виде

$$x' = I x + S x, \quad (A1.23)$$

где

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad S = \begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{pmatrix}.$$

Записывая уравнение (A1.23) как

$$\mathbf{x}' = (\mathbf{I} + \mathbf{S})\mathbf{x},$$

и сравнивая эту запись с исходной:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{D}\mathbf{x},$$

видим, что $\mathbf{D} = \mathbf{I} + \mathbf{S}$. В этом случае, как и в общем случае, две матрицы складываются друг с другом путем простого сложения соответствующих членов этих двух совокупностей. Матрица \mathbf{I} , определенная выше, обладает тем частным свойством, что

$$\mathbf{I}\mathbf{A} = \mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{I}, \quad (\text{A1.24})$$

где \mathbf{A} — некая матрица 3×3 . Поэтому \mathbf{I} называется единичной матрицей. Единичная ($n \times n$)-матрица определяется точно так же. Пусть задана некая квадратная ($n \times n$)-матрица \mathbf{B} . Если можем найти другую матрицу, которая, будучи умноженной на некую другую ($n \times n$)-матрицу \mathbf{B} , дает единичную матрицу, то мы говорим, что нашли инверсную или обратную \mathbf{B} -матрицу, которая записывается как \mathbf{B}^{-1} . Так, например,

$$\mathbf{B}^{-1}\mathbf{B} = \mathbf{I} = \mathbf{B}\mathbf{B}^{-1}. \quad (\text{A1.25})$$

Например, обратной матрице, представляющей однородную деформацию, будет матрица, представляющая «противоположную» деформацию, которая возвращает тело в его исходное, недеформированное состояние.

В качестве другого примера рассмотрим закон Гука [уравнение (5.36)]. Шесть его уравнений, выражающих связь между компонентами напряжения и деформации, можно записать в матричной форме

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \mathbf{C} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix}, \quad (\text{A1.26})$$

где \mathbf{C} есть (6×6)-матрица коэффициентов жесткости. Уравнение (A1.26) можно записать еще более компактно:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}\boldsymbol{\varepsilon} \quad (\text{A1.27})$$

причем подразумевается, что $\boldsymbol{\sigma}$ и $\boldsymbol{\varepsilon}$ — это $(6) \times (1)$ -матрицы. Закон Гука теперь можно записать в форме

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{S}\boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{A1.28})$$

где \mathbf{S} — это (6×6) -матрица упругих податливостей. Матрица \mathbf{S} на самом деле обратна матрице \mathbf{C} , потому что, умножая обе части уравнения (A1.27) на \mathbf{C}^{-1} , получаем

$$\mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{I}\boldsymbol{\varepsilon}$$

или

$$\mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\varepsilon}.$$

Поэтому

$$\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{S}. \quad (\text{A1.29})$$

Очевидно, что совместное решение представленных системой (A1.26) шести уравнений для определения $\boldsymbol{\varepsilon}$ через $\boldsymbol{\sigma}$ эквивалентно нахождению матрицы, обратной \mathbf{C} .

Систему из совместных шести уравнений с шестью неизвестными в общем случае решить можно, так что матрицу, обратную квадратной матрице, в общем случае тоже можно найти. Однако если одно из этих уравнений оказывается просто линейной комбинацией нескольких остальных, то имеется лишь $n - 1$ различных уравнений и решение становится невозможным. Отсюда следует, что не существует матрицы, обратной данной, если у нее один из рядов является линейной комбинацией других рядов. Можно показать, что это верно и для случая, когда между столбцами существует линейное соотношение. Такая матрица называется *сингулярной*.

Пример подобной матрицы имеется в гл. 6. Там показано, что деформация, создаваемая пятью одновременно действующими системами скольжения, выражается через величины скольжения по каждой из этих пяти систем $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ следующим образом:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} - \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{22} - \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \end{pmatrix}. \quad (\text{A1.30})$$

При этом члены в матрице \mathbf{A} представляют собой геометрические факторы, зависящие от ориентации систем скольжения. Это можно записать более компактно в виде

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}. \quad (\text{A1.31})$$

Если существует матрица, обратная \mathbf{A} , то можно записать

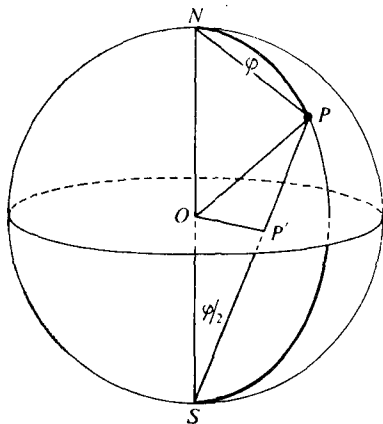
$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\varepsilon}. \quad (\text{A1.32})$$

Уравнение (A1.32) позволяет вычислять величины скольжения, необходимого, чтобы получить любую деформацию. Если матри-

ца A сингулярна, то уравнение (A1.32) нельзя написать, т. е. некоторые деформации нельзя получить. Это соответствует пяти системам скольжения, не независимым друг от друга.

A1.5. Доказательство свойств стереографической проекции

Пусть на фиг. A1.7 R — радиус сферы проекции, S — точка на проекции, а N — диаметрально противоположная ей точка. Полюс любой точки на сфере обозначаем буквой P , а угол NOP



Ф и г. A1.7

принимая равным φ . Угол NPS прямой, потому что NS — диаметр сферы. Значит, расстояние SP равно $2R \cos \varphi/2$, поскольку угол $O\hat{S}P = 1/2 N\hat{O}P$. Точка P' является стереографической проекцией точки P . У треугольника SOP' угол при вершине O прямой. Поэтому отрезок SP' равен $R \sec \varphi/2$. Произведение отрезков SP и SP' составляет

$$SP \cdot SP' = 2R^2. \tag{A1.33}$$

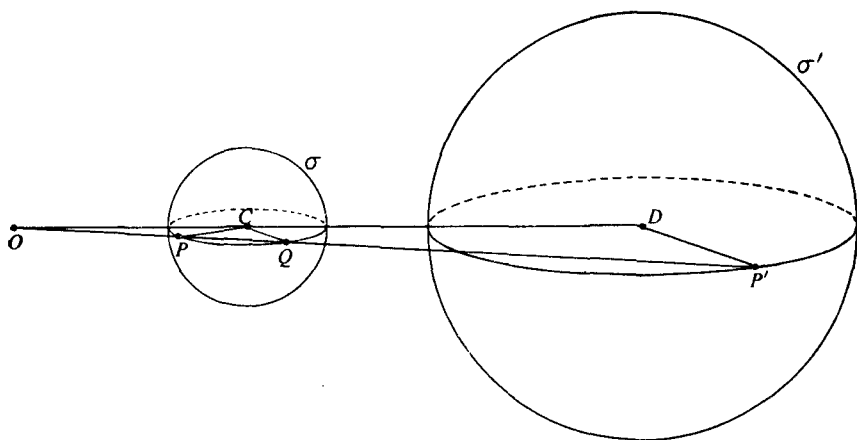
Это произведение не зависит от угла φ и является поэтому постоянным для всех полюсов P на поверхности сферы проекции. О любом полюсе P и его стереографической проекции P' можно сказать, что они инверсно преобразуются друг в друга, потому что их расстояния от фиксированной точки (S) связаны между собой уравнением (A1.33).

Геометрия этого преобразования путем инверсии разработана Магнусом в 1831 г. Формальное определение геометрии инверсии следующее. Если задана фиксированная сфера радиусом k с центром в точке O , мы определяем точку, инверсную к точке P (кроме точки O), как точку P' на радиусе OP , расстояние которой от

центра O удовлетворяет уравнению

$$OP \cdot OP' = k^2. \quad (\text{A1.34})$$

Очевидно, точка P в свою очередь является точкой, инверсной точке P' , а точка O сингулярна. Сравнивая это определение с нашим определением для стереографической проекции, видим, что все полюса P на сфере проекций и их стереографические проекции P' таковы, что P и P' инверсны друг другу на сфере, проведенной радиусом $\sqrt{2}R$ из центра S на фиг. A1.7. Сфера инверсии не нарисована на фиг. A1.7. Большое значение стереографической

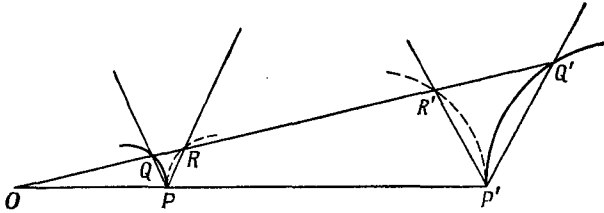


Ф и г. A1.8

проекции для кристаллографии вытекает из следующих особенностей геометрии преобразования инверсии. Все сферы преобразуются в сферы (или плоскости), а поэтому все круги, т. е. сечения сфер, преобразуются в круги или прямые линии. Углы преобразуются в углы той же величины. Поэтому на стереографической проекции сохраняются угловые соотношения. Эти свойства доказываются ниже. Математики определяют стереографическую проекцию как инверсию, которая приводит точки плоскости в однозначное соответствие с точками на поверхности сферы, а мы разбираем частный случай, когда центр сферы инверсии S на фиг. A1.7 и радиус сферы инверсии выбраны так, что все точки на поверхности сферы проекций инверсно преобразуются в точки, лежащие на диаметральной плоскости сферы проекций. Эта плоскость и есть плоскость стереографической проекции, которой мы пользуемся в настоящей книге.

Докажем, что сфера инверсно переходит в сферу. Пусть P будет некая точка на сфере σ с центром в C . Требуется доказать, что инверсия σ приведет тоже к сфере. Пусть на фиг. A1.8 точка O

будет центром сферы инверсии, а k — ее радиусом (сфера инверсии на фиг. А1.8 не показана). Соединим точки P и O и продолжим PO до пересечения со сферой σ в точке Q . Произведение $OP \cdot OQ$ не зависит от положения P на сфере ¹⁾. Положим, что произведение $OP \cdot OQ$ равно p . Проведем линию OC и найдем на ней точку D , определяемую отношением $OD/OC = k^2/p$. Проведем сферу σ' из центра D радиусом $(k^2/p) \cdot CP$, т. е. сферу радиусом в (k^2/p) раз



Ф и г. А1.9

большим, чем радиус сферы σ . Начертим радиус этой сферы DP' на плоскости OCD и из точки P проведем параллельный отрезок CQ . Соединим точки O и P . Так как

$$DP'/QC = (k^2/p) (CP/QC) = k^2/p = OD/OC,$$

треугольники OQC и $OP'D$ подобны, а поэтому OP и OP' лежат на одной прямой. Отсюда непосредственно следует, что точка P инверсна по отношению к точке P' , потому что

$$OP'/OQ = OD/OC = k^2/p$$

и

$$OQ = p/OP,$$

следовательно, $OP \cdot OP' = k^2$. Как отмечалось выше, P представляет собой произвольную точку на σ . Это говорит о том, что сфера σ инверсно преобразуется в сферу σ' . Поскольку любой круг можно рассматривать как пересечение двух сфер, мы одновременно показали, что все круги инверсно преобразуются в круги. Надо заметить, что если сфера σ проходит через точку O , то σ' оказывается плоскостью (сфера бесконечного радиуса), а круг, проходящий через O , инверсно преобразуется в прямую линию. Полезно также обратить внимание на то, что точка D не обязательно будет инверсной по отношению к C .

На основании геометрии инверсии легко показать, что на стереографической проекции сохраняются угловые соотношения,

¹⁾ Это свойство следует из теоремы Эвклида III.37 о круге: если из точки вне круга проведены секущая и касательная, то прямоугольник, стороны которого равны длине секущей и ее части вне круга, равен квадрату, построенному на касательной.

т. е. угол между двумя пересекающимися кривыми на сфере проекции таков же, как угол между проекциями этих двух кривых. Чтобы доказать, что угол между двумя кривыми равен углу между инверсными отображениями тех же кривых, поступим следующим образом. Пусть O на фиг. А1.9 будет центр инверсии, P и P' — точки пересечения двух нар кривых. Проведем через точку O прямую $OQRR'Q'$, пересекающую две заданные кривые в точках Q и R , а их инверсные отображения в точках Q' и R' .

Так как $OQ \cdot OQ' = OP \cdot OP' = OR \cdot OR'$, то $PQQ'P'$ и $PRR'P'$ представляют собой циклические четырехугольники. Следовательно,

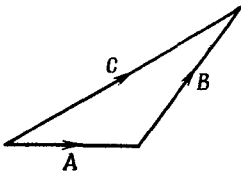
$$\widehat{OPQ} = \widehat{OQ'P'} \quad \text{и} \quad \widehat{OPR} = \widehat{OR'P'} \quad \text{и} \quad \widehat{QPR} = \widehat{Q'P'R'}.$$

Если прямую OQ провести достаточно близко к OP , то разность между этими двумя углами и углом между двумя парами кривых можно сделать сколь угодно малой. Тем самым теорема доказана.

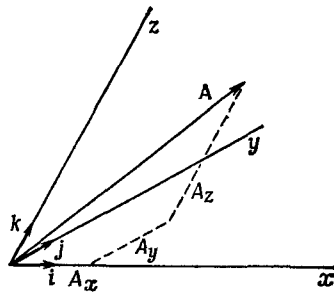
Векторная алгебра и обратная решетка

А2.1. Векторная алгебра

Вектор — это величина, характеризующаяся не только числовым значением, но и направлением. Чтобы задать вектор, нужно указать обе эти характеристики. Чтобы сложить два вектора A и B , мы можем представить их величину и направление отрезками. Каждый из этих отрезков представляет собой некоторое смещение (фиг. А2.1), а их сумма дает результирующее смещение. Так,



Ф и г. А2.1



Ф и г. А2.2

например, отрезок C на фиг. А2.1 эквивалентен смещениям A и B , произведенным последовательно. Поэтому мы можем написать

$$\mathbf{C} = \mathbf{A} + \mathbf{B}, \quad (\text{А2.1})$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{C} - \mathbf{A}. \quad (\text{А2.2})$$

Таким образом, перемена знака вектора эквивалентна перемене его направления. Заметим, что для уравнений типа (А2.2) выбор начала координат не имеет значения. Вектор обозначается жирным шрифтом, например \mathbf{A} , а его абсолютная величина без указания направления — простым шрифтом A или же знаком $|\mathbf{A}|$.

Единичный вектор — это вектор единичной величины в заданном направлении. Так, если \mathbf{i} — единичный вектор в направлении \mathbf{A} , то

$$\mathbf{A} = \mathbf{i} |\mathbf{A}| = iA. \quad (\text{А2.3})$$

Если \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} — единичные векторы в направлениях трех координатных осей x , y , z , не обязательно ортогональных, и если A_x , A_y , A_z — компоненты вектора \mathbf{A} по этим трем осям, то (фиг. А2.2)

$$\mathbf{A} = A_x \mathbf{i} + A_y \mathbf{j} + A_z \mathbf{k}. \quad (\text{A2.4})$$

Скалярное произведение векторов

Скалярное произведение двух векторов \mathbf{A} и \mathbf{B} — это скаляр, равный по величине произведению абсолютных величин \mathbf{A} и \mathbf{B} на косинус угла между их направлениями. Скалярное произведение обозначается $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$. Таким образом,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = AB \cos \theta, \quad (\text{A2.5})$$

где θ — угол между векторами \mathbf{A} и \mathbf{B} . Поскольку $\cos(2\pi - \theta) = \cos \theta$, безразлично, как отсчитывать θ — от \mathbf{A} к \mathbf{B} или от \mathbf{B} к \mathbf{A} . Из (A2.5) следует, что скалярное произведение коммутативно, т. е. $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$. Если θ — угол между направлениями векторов \mathbf{A} и \mathbf{B} , то

$$\cos \theta = \frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}}{|\mathbf{A}| \cdot |\mathbf{B}|}. \quad (\text{A2.6})$$

Скалярное произведение $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ эквивалентно проекции \mathbf{A} на направление \mathbf{B} , умноженной на абсолютное значение \mathbf{B} . Если \mathbf{n} — единичный вектор, то $\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}$ — проекция вектора \mathbf{A} на направление вектора \mathbf{n} . Если \mathbf{A} — единичный вектор, то его проекции на оси координат эквивалентны направляющим косинусам. Скалярное произведение вектора на самого себя всегда равно квадрату абсолютной величины этого вектора. Для ортогональных осей координат это дает

$$|\mathbf{A}|^2 = A_x^2 + A_y^2 + A_z^2. \quad (\text{A2.7})$$

Пусть A_x , A_y , A_z и B_x , B_y , B_z — компоненты векторов \mathbf{A} и \mathbf{B} в некоторой системе осей координат. Тогда из (A2.4) следует

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = (A_x \mathbf{i} + A_y \mathbf{j} + A_z \mathbf{k}) \cdot (B_x \mathbf{i} + B_y \mathbf{j} + B_z \mathbf{k}). \quad (\text{A2.8})$$

Скалярное произведение векторов дистрибутивно, т. е. произведение вектора на алгебраическую сумму векторов равно сумме произведений на отдельные слагаемые.

Если \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} — взаимно перпендикулярные единичные векторы, т. е. если оси координат ортогональны, то

$$\mathbf{i} \cdot \mathbf{i} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{j} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = 1, \quad (\text{A2.9})$$

$$\mathbf{i} \cdot \mathbf{j} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{i} = 0, \quad (\text{A2.10})$$

и, таким образом, уравнение (A2.8) преобразуется в

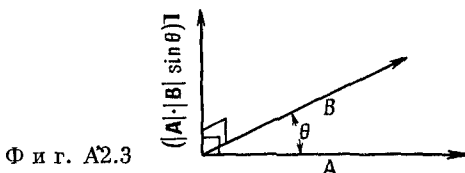
$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z. \quad (\text{A2.11})$$

Если $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$ и $\alpha_2, \beta_2, \gamma_2$ — углы, образуемые соответственно векторами **A** и **B** с ортогональными осями координат, то из уравнений (A2.6), (A2.7) и (A2.10) следует, что косинус угла между векторами **A** и **B** равен

$$\cos \theta = \cos \alpha_1 \cos \alpha_2 + \cos \beta_1 \cos \beta_2 + \cos \gamma_1 \cos \gamma_2. \quad (\text{A2.12})$$

Векторное произведение векторов

Векторное произведение двух векторов **A** и **B** — это вектор, равный $(|\mathbf{A}| \cdot |\mathbf{B}| \sin \theta) \mathbf{I}$, где **I** — единичный вектор, перпендикулярный плоскости, в которой лежат оба вектора **A** и **B**. Направление векторного произведения определяется тем, что правый поворот вокруг направления **I** на угол θ переводит **A** в **B**, причем θ — угол между **A** и **B**, меньший 180° (фиг. A2.3). Векторное произведение **A** и **B** обозначается символом $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ ¹⁾. Из определения



Ф и г. A2.3

векторного произведения следует, что по абсолютной величине $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ равно площади параллелограмма, построенного на векторах **A** и **B**, и что

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = -\mathbf{B} \times \mathbf{A}. \quad (\text{A2.13})$$

Если два вектора параллельны, их векторное произведение равно нулю, потому что $\theta = 0$. Если они взаимно перпендикулярны, то абсолютное значение векторного произведения равно произведению абсолютных величин этих векторов. Таким образом, если выбрана прямоугольная система осей координат, то

$$\begin{aligned} \mathbf{i} \times \mathbf{i} &= \mathbf{j} \times \mathbf{j} = \mathbf{k} \times \mathbf{k} = 0, \\ \mathbf{i} \times \mathbf{j} &= \mathbf{k}, \quad \mathbf{j} \times \mathbf{k} = \mathbf{i}, \quad \mathbf{k} \times \mathbf{i} = \mathbf{j}, \\ \mathbf{j} \times \mathbf{i} &= -\mathbf{k}, \quad \mathbf{k} \times \mathbf{j} = -\mathbf{i}, \quad \mathbf{i} \times \mathbf{k} = -\mathbf{j}. \end{aligned} \quad (\text{A2.14})$$

Воспользовавшись этими соотношениями, находим компоненты векторного произведения $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \times \mathbf{B} &= (A_x \mathbf{i} + A_y \mathbf{j} + A_z \mathbf{k}) \times (B_x \mathbf{i} + B_y \mathbf{j} + B_z \mathbf{k}) = \\ &= \mathbf{i} (A_y B_z - A_z B_y) + \mathbf{j} (A_z B_x - A_x B_z) + \\ &\quad + \mathbf{k} (A_x B_y - A_y B_x). \end{aligned} \quad (\text{A2.15})$$

¹⁾ В английской литературе для векторного произведения иногда применяются также обозначения $[\mathbf{A} \times \mathbf{B}]$; $\mathbf{A} \wedge \mathbf{B}$; \mathbf{A}, \mathbf{B} . — Прим. ред.

Обратим внимание на перемену знака коэффициентов при j . Величины, на которые здесь умножаются единичные векторы i, j, k , представляют собой компоненты векторного произведения $A \times B$ по данным осям координат. Соотношение (A2.15) легко запомнить, выписав его в форме детерминанта

$$A \times B \begin{vmatrix} i & j & k \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix}. \quad (\text{A2.16})$$

Выражение $A \cdot (B \times C)$ представляет собой скаляр и называется *смешанным (векторно-скалярным) произведением*. Если выписать компоненты $(B \times C)$, воспользовавшись уравнением (A2.15), а затем (A2.8), то получим

$$A \cdot (B \times C) = A_x (B_y C_z - B_z C_y) + A_y (B_z C_x - B_x C_z) + \\ + A_z (B_x C_y - B_y C_x),$$

так что

$$A \cdot (B \times C) = \begin{vmatrix} A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \\ C_x & C_y & C_z \end{vmatrix}. \quad (\text{A2.17})$$

Смешанное произведение $A \cdot (B \times C)$ соответствует объему параллелепипеда, построенного на векторах A, B и C . Необходимо отметить, что изменение циклического порядка векторов в векторно-скалярном произведении приведет к изменению знака этого произведения. Так, например,

$$A \cdot (B \times C) = C \cdot (A \times B) = B \cdot (C \times A) = \\ = -A \cdot (C \times B) = -C \cdot (B \times A) = -B \cdot (A \times C).$$

Выражение $A \times (B \times C)$ есть вектор, который называется *двойным векторным произведением*. Этот вектор лежит в плоскости, содержащей векторы B и C . Выписав выражения для компонент векторного произведения $A \times (B \times C)$, найдем, что

$$A \times (B \times C) = B (A \cdot C) - C (A \cdot B). \quad (\text{A2.18})$$

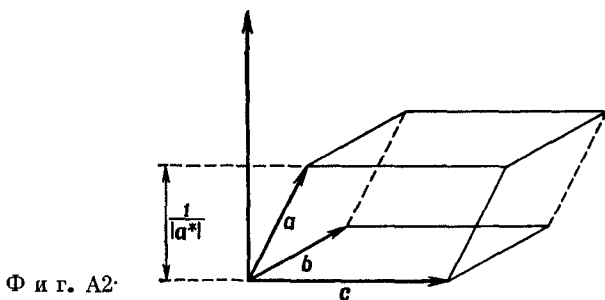
Следует отметить, что $A \times (B \times C)$ не равно $(A \times B) \times C$, поэтому последовательность перемножения необходимо указывать скобками.

A2.2. Обратная решетка

При таких операциях, как вычисление угла между двумя плоскостями с заданными индексами или преобразование индексов плоскости или направления при переходе от одной элементарной ячейки к другой, часто бывает весьма удобно воспользоваться

представлением о так называемой обратной решетке. Это представление сначала было введено для возможности суммирования рентгеновских отражений в решетке, а затем оказалось чрезвычайно полезным в теории дифракции и в вопросах поведения электронов в кристаллах. Введем формальное представление об обратной решетке, а затем покажем возможности ее применения на примере вывода некоторых общих формул.

Пусть у нас есть кристаллическая решетка; выберем в ней примитивную ячейку и обозначим векторы трансляции \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} .



Определим теперь три вектора, обратных \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , и назовем их \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* . Запишем определяющие условия:

$$\mathbf{a}^* = \frac{\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}; \quad \mathbf{b}^* = \frac{\mathbf{c} \cdot \mathbf{a}}{\mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a})}; \quad \mathbf{c}^* = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})}. \quad (\text{A2.19})$$

Из этих определений видно, что вектор \mathbf{a}^* нормален к плоскости, содержащей \mathbf{b} и \mathbf{c} , а его величина равна обратному значению межплоскостного расстояния для плоскостей с индексами Миллера (100) в реальной (прямой) решетке (фиг. А2.4). Векторы \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* выбирают так, чтобы они определяли примитивную элементарную ячейку решетки, которая является обратной по отношению к реальной кристаллической решетке с векторами \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , соответствующими ребрам элементарной ячейки. Если векторы \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* найдены из соотношений (А2.19), то по ним можно построить обратную решетку. Возможность применения обратной решетки определяется следующими ее свойствами:

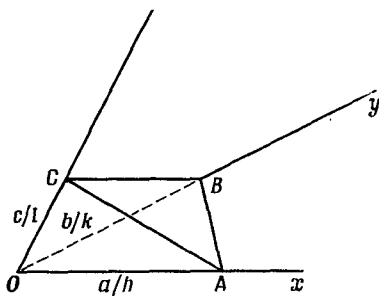
1) Вектор обратной решетки

$$\mathbf{r}^* = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$$

является нормалью к плоскостям с индексами Миллера (hkl) в прямой решетке. Поэтому если h , k , l — заданные малые целые числа, то определяемые ими векторы \mathbf{r}^* (hkl) представляют собой нормали к плоскостям с этими малыми индексами.

2) Абсолютная величина \mathbf{r}^* , т. е. $|\mathbf{r}^*|$, равна обратной величине значения межплоскостного расстояния для плоскостей с индексами Миллера (hkl) в прямой решетке.

Чтобы доказать эти два утверждения, заметим, что из определений векторов \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* следует, что $\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a} = 1$, $\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b} = 1$ и $\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{c} = 1$, но $\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{a} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{a} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{b} = 0$. Приведенные выше два свойства вектора \mathbf{r}^* (hkl) являются простыми следствиями этих определений. На фиг. A2.5 ABC — плоскость



Фиг. A2.5

с индексами (hkl) в прямой решетке. Вектор $(\mathbf{a}/h - \mathbf{b}/k)$ представляет собой линию BA в этой плоскости, а вектор $(\mathbf{a}/h - \mathbf{c}/l)$ — линию CA в той же плоскости. Если вектор \mathbf{r}^* нормален к плоскости ABC , то он должен быть нормален к AB и к CA , которые не являются параллельными направлениям в плоскости ABC . Скалярное произведение \mathbf{r}^* на каждый из этих двух векторов должно равняться нулю. Очевидно, это так и есть, потому что, например,

$$\begin{aligned} \mathbf{r}^* \cdot (\mathbf{a}/h - \mathbf{b}/k) &= (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) \cdot (\mathbf{a}/h - \mathbf{b}/k) = \\ &= (h/h) \mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* - (k/k) \mathbf{b} \cdot \mathbf{b}^* = 0. \end{aligned}$$

Тем самым доказано свойство (1).

Свойство 2) докажем, заметив, что расстояние между плоскостями с индексами (hkl) в решетке равно проекции \mathbf{a}/h на нормаль к этим плоскостям. Согласно 1), единичный вектор нормали к этим плоскостям равен \mathbf{r}^*/r^* . Поэтому межплоскостное расстояние d_{hkl} для этих плоскостей оказывается равным

$$d_{hkl} = \frac{\mathbf{a}}{h} \cdot \frac{\mathbf{r}^*}{|\mathbf{r}^*|} = \frac{h\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^*}{h|\mathbf{r}^*|} = \frac{1}{|\mathbf{r}^*|}.$$

Теперь мы можем воспользоваться свойствами основных векторов обратной решетки, чтобы доказать ряд полезных положений, которые ранее выводились более сложным способом.

Плоскость (hkl) принадлежит к зоне uvw , только если выполняется условие

$$hu + kv + lw = 0. \quad (\text{A2.20})$$

Но это значит, что если (hkl) принадлежит указанной зоне, то вектор $\mathbf{r}^*(hkl)$ должен быть нормален к $[uvw]$, т. е.

$$(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) \cdot (u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}) = 0,$$

или

$$hua^* \cdot \mathbf{a} + kvb^* \cdot \mathbf{b} + lwc^* \cdot \mathbf{c} = 0,$$

т. е.

$$hu + kv + lw = 0.$$

Чтобы найти индексы оси зоны, общей для двух плоскостей с индексами $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$, если искомая ось имеет индексы $[uvw]$, полагаем

$$uh_1 + vk_1 + wl_1 = 0 = uh_2 + vk_2 + wl_2,$$

откуда

$$u : v : w = (k_1l_2 - k_2l_1) : (l_1h_2 - l_2h_1) : (h_1k_2 - h_2k_1). \quad (\text{A2.21})$$

Три плоскости $(h_1k_1l_1)$, $(h_2k_2l_2)$, $(h_3k_3l_3)$ принадлежат к одной зоне, если соответствующие векторы обратной решетки лежат в одной плоскости. Обозначим соответствующие векторы обратной решетки \mathbf{r}_1^* , \mathbf{r}_2^* , \mathbf{r}_3^* . Если они лежат в одной плоскости, значит, объем построенного на них параллелепипеда равен нулю, т. е. $\mathbf{r}_1^* \cdot (\mathbf{r}_2^* \times \mathbf{r}_3^*) = 0$.

Согласно уравнению (A2.17),

$$\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{vmatrix} = 0. \quad (\text{A2.22})$$

Чтобы ясно представлять себе, как расположены узлы решетки и атомы в ее плоскостях, необходимо знать условие, при котором данный узел решетки, например отстоящий от начала координат на $\mathbf{r} = (u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c})$, принадлежит к данной плоскости решетки (hkl) .

Если \mathbf{r} принадлежит к p -й от начала координат плоскости с индексами (hkl) , то проекция \mathbf{r} на нормаль к плоскостям решетки (hkl) должна равняться расстоянию между этими плоскостями, умноженному на p , т. е.

$$\mathbf{r} \cdot \frac{\mathbf{r}^*(hkl)}{|\mathbf{r}^*(hkl)|} = \frac{p}{|\mathbf{r}^*(hkl)|}.$$

Отсюда, перемножая, получим

$$hu + kv + lw = p. \quad (\text{A2.23})$$

Угол между двумя семействами плоскостей с миллеровскими индексами $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$ должен равняться углу ϕ между двумя векторами обратной решетки

$$\mathbf{r}_1^* = h_1\mathbf{a}^* + k_1\mathbf{b}^* + l_1\mathbf{c}^* \quad \text{и} \quad \mathbf{r}_2^* = h_2\mathbf{a}^* + k_2\mathbf{b}^* + l_2\mathbf{c}^*.$$

Искомый угол φ определится из равенства

$$\mathbf{r}_1^* \cdot \mathbf{r}_2^* = |\mathbf{r}_1^*| \cdot |\mathbf{r}_2^*| \cos \varphi,$$

откуда следует, что

$$\cos \varphi = d_1 d_2 (h_1 \mathbf{a}^* + k_1 \mathbf{b}^* + l_1 \mathbf{c}^*) \cdot (h_2 \mathbf{a}^* + k_2 \mathbf{b}^* + l_2 \mathbf{c}^*), \quad (\text{A2.24})$$

где d_1 и d_2 — соответствующие межплоскостные расстояния для данных плоскостей.

Межплоскостные расстояния в решетке можно определить из соотношения

$$1/d_{hkl} = \mathbf{r}^* (hkl) = h \mathbf{a}^* + k \mathbf{b}^* + l \mathbf{c}^*. \quad (\text{A2.25})$$

В приложении 3 даны выражения (A2.24) и (A2.25) в развернутом виде для разных кристаллографических систем.

С помощью обратной решетки легко доказывается и отношение синусов, формула (A1.14). Если $P_1 (h_1 k_1 l_1)$, $P_2 (h_2 k_2 l_2)$, $P_3 (h_3 k_3 l_3)$ и $P_4 (h_4 k_4 l_4)$ — четыре плоскости, принадлежащие одной зоне, и если \mathbf{r}_1^* , \mathbf{r}_2^* , \mathbf{r}_3^* , \mathbf{r}_4^* — векторы обратной решетки, нормальные $(h_1 k_1 l_1)$, $(h_2 k_2 l_2)$ и т. п., так что

$$\mathbf{r}_1^* = h_1 \mathbf{a}^* + k_1 \mathbf{b}^* + l_1 \mathbf{c}^* \text{ и т. д.,}$$

то

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1^* \times \mathbf{r}_2^* &= (h_1 \mathbf{a}^* + k_1 \mathbf{b}^* + l_1 \mathbf{c}^*) \times (h_2 \mathbf{a}^* + k_2 \mathbf{b}^* + l_2 \mathbf{c}^*) = \\ &= (k_1 l_2 - k_2 l_1) (\mathbf{b}^* \times \mathbf{c}^*) + (l_1 h_2 - l_2 h_1) (\mathbf{c}^* \times \mathbf{a}^*) + \\ &+ (h_1 k_2 - h_2 k_1) (\mathbf{a}^* \times \mathbf{b}^*) = |\mathbf{r}_1^*| |\mathbf{r}_2^*| \sin \theta_{12} \mathbf{z}, \end{aligned} \quad (\text{A2.26})$$

где \mathbf{z} — единичный вектор, параллельный оси той зоны, к которой принадлежат P_1, P_2, P_3, P_4 . Если \mathbf{r}_1^* , \mathbf{r}_2^* , \mathbf{r}_3^* , \mathbf{r}_4^* — векторы обратной решетки, нормальные $(h_1 k_1 l_1)$, $(h_2 k_2 l_2)$ и т. п.,

то

$$|\mathbf{r}_1^*| |\mathbf{r}_2^*| \sin \theta_{12} \mathbf{z} \cdot \mathbf{a} = (k_1 l_2 - k_2 l_1) (\mathbf{b}^* \times \mathbf{c}^*) \cdot \mathbf{a} = U_{12} V_r,$$

где V_r — объем элементарной ячейки обратной решетки. Это равенство является следствием условий

$$(\mathbf{c}^* \times \mathbf{a}^*) \cdot \mathbf{a}^* = (\mathbf{a}^* \times \mathbf{b}^*) \cdot \mathbf{a}^* = 0.$$

Аналогично из векторного произведения $\mathbf{r}_1^* \times \mathbf{r}_2^*$ находим

$$|\mathbf{r}_1^*| |\mathbf{r}_3^*| \sin \theta_{13} \mathbf{z} \cdot \mathbf{a}^* = U_{13} V_r.$$

Если найдены такие же выражения для θ_{42} и θ_{43} , то тем самым непосредственно доказывается справедливость формул (A1.14).

Межплоскостные расстояния и углы между плоскостями

А3.1. Межплоскостные расстояния

По определению две соседние плоскости с индексами (hkl) отсекают на кристаллографических осях отрезки na/h , nb/k , nc/l и $(n+1)a/h$, $(n+1)b/k$, $(n+1)c/l$ соответственно, где n — целое число. Межплоскостное расстояние d_{hkl} , т. е. расстояние между двумя соседними плоскостями, измеренное по перпендикуляру к ним, как оказывается, равно обратной величине соответствующего вектора обратной решетки [формула (А2.25)], т. е.

$$d_{hkl} = \frac{1}{|ha^* + kb^* + lc^*|}. \quad (\text{А3.1})$$

Очевидно,

$$\begin{aligned} (ha^* + kb^* + lc^*)^2 &= (ha^* + kb^* + lc^*) \cdot (ha^* + kb^* + lc^*) = \\ &= h^2a^{*2} + k^2b^{*2} + l^2c^{*2} + 2klb^* \cdot c^* + \\ &+ 2lhc^* \cdot a^* + 2hka^* \cdot b^* = h^2a^{*2} + k^2b^{*2} + l^2c^{*2} + \\ &+ 2klb^*c^* \cos \alpha^* + 2lhc^*a^* \cos \beta^* + 2hka^*b^* \cos \gamma^*, \end{aligned} \quad (\text{А3.2})$$

где α^* — угол между векторами обратной решетки b^* и c^* ; β^* — угол между c^* и a^* ; γ^* — угол между a^* и b^* . Искомое межплоскостное расстояние можно выразить через параметры прямой решетки, если подставить значения a^* , b^* , c^* из соотношений (А2.19) и значения α^* , β^* , γ^* из следующих уравнений:

$$\begin{aligned} \cos \alpha^* &= \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}, \\ \cos \beta^* &= \frac{\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta}{\sin \alpha \sin \gamma}, \\ \cos \gamma^* &= \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta}. \end{aligned} \quad (\text{А3.3})$$

Уравнения (А3.3) можно считать частным видом уравнений (А1.8). Во всех кристаллографических системах, кроме триклинной, их можно упростить следующим образом:

Моноклинная. Поскольку

$$\alpha^* = \alpha = 90^\circ, \quad \gamma^* = \gamma = 90^\circ,$$

то

$$d_{hkl}^2 = \frac{1}{h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2lhc^* a^* \cos \beta^*},$$

где

$$\beta^* = 180 - \beta, \quad a^* = 1/a \sin \beta, \quad b^* = 1/b, \quad c^* = 1/c \sin \beta.$$

Ромбическая. Поскольку

$$\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ,$$

то

$$d_{hkl}^2 = \frac{1}{h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2}},$$

где

$$a^* = 1/a, \quad b^* = 1/b, \quad c^* = 1/c.$$

Тригональная. Поскольку

$$\alpha^* = \beta^* = \gamma^*, \quad a^* = b^* = c^*,$$

то

$$d_{hkl}^2 = \frac{1}{[h^2 + k^2 + l^2 + 2(kl + lh + hk) \cos \alpha^*] a^{*2}},$$

где

$$\cos(\alpha^*/2) = \frac{1}{2 \cos(\alpha/2)}, \quad a^* = \frac{1}{a \sin \alpha \sin \alpha^*}.$$

Тетрагональная. Поскольку

$$\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ, \quad a^* = b^*,$$

то

$$d_{hkl}^2 = \frac{1}{(h^2 + k^2) a^{*2} + l^2 c^{*2}},$$

где

$$a^* = 1/a, \quad c^* = 1/c.$$

Гексагональная. Поскольку

$$\alpha^* = \beta^* = 90^\circ, \quad \gamma^* = 60^\circ, \quad a^* = b^*,$$

то

$$d_{hkl}^2 = \frac{1}{(h^2 + k^2 + hk) a^{*2} + l^2 c^{*2}},$$

где

$$a^* = 2/(a\sqrt{3}), \quad c^* = 1/c.$$

Кубическая. Поскольку

$$\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ, \quad a^* = b^* = c^*,$$

то

$$d_{hkl}^2 = \frac{1}{(h^2 + k^2 + l^2) a^{*2}},$$

где

$$a^* = 1/a.$$

Нужно отметить, что значение d_{hkl} , которое получается из уравнения (A3.1), равняется расстоянию между плоскостями, отсекающими на кристаллографических осях отрезки na/h , nb/k , nc/l и $(n+1)a/h$, $(n+1)b/k$, $(n+1)c/l$, независимо от того, совпадают ли эти плоскости с плоскими сетками кристаллической решетки. Это расстояние отсчитывается по перпендикуляру к плоскостям. Если h , k и l — целые числа, не имеющие общего множителя, то они представляют собой миллеровские индексы плоской сетки. Расстояние между соседними плоскими сетками с миллеровскими индексами (hkl) в семействе этих параллельных плоскостей, образующих решетку, дается уравнением (A3.1), если решетка Бравэ примитивна, т. е. если векторы a , b и c определяют ячейку, которая содержит только один узел решетки. Если элементарная ячейка решетки Бравэ объемноцентрирована, гранецентрирована или базоцентрирована, то по уравнению (A3.1) может получиться удвоенное значение межплоскостного расстояния, смотря по тому, каковы значения h , k и l . Если элементарная ячейка объемноцентрирована, то уравнение (A3.1) дает удвоенное значение межплоскостного расстояния, когда сумма $(h+k+l)$ представляет собой число нечетное. Например, нетрудно видеть, что расстояние между плоскостями решетки с миллеровскими индексами (100) в о. ц. к.-решетке равно половине значения d_{100} , которое получается из уравнения (A3.1). Поэтому правило для вычисления истинных межплоскостных расстояний в о. ц. к. (I)-решетке по уравнению (A3.1) заключается в том, чтобы удваивать миллеровские индексы всякий раз, когда $(h+k+l)$ оказывается нечетным. В гранецентрированной (F) решетке то же правило заключается в том, чтобы удвоить миллеровские индексы, если либо h , либо k , либо l являются четными, потому что межплоскостные расстояния получаются равными половине d_{hkl} для всех плоскостей решетки, за исключением тех, у которых h , k и l нечетные. При этом нуль считается четным числом. Для ячейки, центрированной, например, по грани (001) , то же правило требует удвоить миллеровские индексы, если $(h+k)$ — четное число.

A3.2. Межплоскостные углы

Выше было показано, что угол между двумя плоскостями решетки равен углу между соответствующими векторами обратной решетки [см. уравнение (A2.24)]. Это приводит к следующей общей формуле для угла φ между плоскостями (hkl) и $(h'k'l')$:

$$\cos \varphi = d_{hkl} d_{h'k'l'} \{ hh' a^{*2} + kk' b^{*2} + ll' c^{*2} + (kl' + lk') b^* c^* \cos \alpha^* + \\ + (hl' + lh') a^* c^* \cos \beta^* + (hk' + kh') a^* b^* \cos \gamma^* \}, \quad (A3.4)$$

Межплоскостные углы в кубических кристаллах (из международных таблиц по рентгеновской кристаллографии)

	100	110	111	210	211	221	310	311
100	90°0'	45°0' 90°0'	54°44'	26°34' 63°26' 90°0'	35°16' 65°54'	48°11' 70°32'	18°26' 71°34' 90°0'	25°14' 72°27'
110	45°0' 90°0'	60°0' 90°0'	35°16' 90°0'	18°26' 50°46' 71°34'	30°0' 54°44' 73°13' 90°0'	19°28' 45°0' 76°22' 90°0'	26°34' 47°52' 63°26' 77°5'	31°29' 64°46' 90°0'
111	54°44'	35°16' 90°0'	70°32'	39°14' 75°2'	19°28' 61°52' 90°0'	15°48' 54°44' 78°54'	43°5' 68°35'	29°30' 58°31' 79°58'
210	26°34' 63°26' 90°0'	18°26' 50°46' 71°34'	39°14' 75°2'	36°52' 53°8' 66°25' 78°28' 90°0'	24°6' 43°5' 56°47' 79°29' 90°0'	26°34' 41°49' 53°24' 63°26' 72°39' 90°0'	8°8' 31°57' 45°0' 64°54' 73°34' 81°52'	19°17' 47°36' 66°8' 82°15'

211	35°16' 65°54'	30°0' 54°44' 73°13' 90°0'	19°28' 61°52' 90°0'	24°6' 43°5' 56°47' 79°29' 90°0'	33°33' 48°11' 60°0' 70°32' 80°24'	17°43' 35°16' 47°7' 65°54' 74°12' 82°11'	25°21' 49°48' 58°55' 75°2' 82°35'	10°2' 42°24' 60°30' 75°45' 90°0'
221	48°11' 70°32'	19°28' 45°0' 76°22' 90°0'	15°48' 54°44' 78°54'	26°34' 41°49' 53°24' 63°26' 72°39' 90°0'	17°43' 35°16' 47°7' 65°54' 74°12' 82°11'	27°16' 38°57' 58°12' 83°37' 90°0'	32°31' 42°27' 58°12' 65°4' 83°57'	25°14' 45°17' 59°50' 72°27' 84°14'
310	18°26' 71°34' 90°0'	26°34' 47°52' 63°26' 77°5'	43°5' 68°35'	8°8' 31°57' 45°0' 64°54' 73°34' 81°52'	25°21' 49°48' 58°55' 75°2' 82°35'	32°31' 42°27' 58°12' 65°4' 83°57'	25°51' 36°52' 53°8' 72°33' 84°16' 90°0'	17°33' 40°17' 55°6' 67°35' 79°0' 90°0'
341	25°14' 72°27'	31°29' 64°46' 90°0'	29°30' 58°31' 79°58'	19°17' 47°36' 66°8' 82°15'	10°2' 42°24' 60°30' 75°45' 90°0'	25°14' 45°17' 59°50' 72°27' 84°14'	17°33' 40°17' 55°6' 67°35' 79°0' 90°0'	35°6' 50°29' 62°58' 84°47'

где d_{hkl} задается уравнениями (А3.1) и (А3.2). Во всех кристаллографических системах, кроме триклинной, эти формулы существенно упрощаются. Мы выпишем здесь формулы только для кубической и гексагональной систем.

Гексагональная:

$$\cos \varphi = d_{hkl} d_{h'k'l'} \{ [hh' + kk' + 1/2(hk' + kh')] a^{*2} + ll' c^{*2} \},$$

где

$$a^* = 2/(a\sqrt{3}), \quad c^* = 1/c.$$

Кубическая:

$$\cos \varphi = \frac{hh' + kk' + ll'}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \sqrt{h'^2 + k'^2 + l'^2}}.$$

Значения некоторых межплоскостных углов в кубических кристаллах приведены в табл. А3.1.

Значения межплоскостных углов для металлов Mg, Zn и Cd даны в статье Салковица [*Trans. АИММЕ*, 191, 64 (1951)], а для рения — в статье Фенга [*J. Less Common Metals*, 4, 103 (1962)]. Значения отношений c/a для различных тетрагональных кристаллов приведены Чериным [*Trans. АИММЕ*, 239, 927 (1967)], для олова и индия — Чандрасекаром и Вилом [*Trans. АИММЕ*, 221, 202 (1961)] и для галлия — Вильсоном [*Trans. АИММЕ*, 224, 1293 (1962)].

Преобразование индексов при перемене выбора элементарной ячейки

А4.1. Преобразование индексов плоскости

Иногда при изучении кристаллов по различным соображениям оказывается удобным выбрать иную элементарную ячейку кристалла. Поэтому надо знать, как преобразуются миллеровские индексы плоскости или направления при перемене элементарной ячейки. В настоящем приложении мы получим формулы преобразования и рассмотрим примеры их использования, а также с помощью обратной решетки покажем применимость этих формул в общем случае. Формулами можно пользоваться и не читая доказательств.

Пусть (hkl) — индексы семейства плоскостей решетки, отнесенные к элементарной ячейке, построенной на векторах трансляции \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , такую ячейку в дальнейшем мы будем называть «старой» ячейкой. Нам надо найти индексы того же семейства плоскостей, отнесенные к «новой» ячейке, построенной на векторах трансляции \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} .

Выразим \mathbf{A} , \mathbf{B} и \mathbf{C} через \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , т. е. запишем

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= s_{11}\mathbf{a} + s_{12}\mathbf{b} + s_{13}\mathbf{c}, \\ \mathbf{B} &= s_{21}\mathbf{a} + s_{22}\mathbf{b} + s_{23}\mathbf{c}, \\ \mathbf{C} &= s_{31}\mathbf{a} + s_{32}\mathbf{b} + s_{33}\mathbf{c}. \end{aligned} \tag{A4.1}$$

Тогда (HKL) можно выразить через (hkl) следующим образом:

$$\begin{aligned} H &= s_{11}h + s_{12}k + s_{13}l, \\ K &= s_{21}h + s_{22}k + s_{23}l, \\ L &= s_{31}h + s_{32}k + s_{33}l. \end{aligned} \tag{A4.2}$$

Это можно записать в матричной форме

$$\begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix}. \tag{A4.3}$$

Правило перемножения правой части здесь таково: «умножить первый ряд на первый член столбца, сложить со вторым рядом, умноженным на второй член столбца, далее прибавить третий ряд, умноженный на третий член столбца».

Если надо выразить (hkl) через (HKL) , т. е. старые индексы через новые, то сначала придется выразить векторы старой ячейки \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} через новые:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= t_{11}\mathbf{A} + t_{12}\mathbf{B} + t_{13}\mathbf{C}, \\ \mathbf{b} &= t_{21}\mathbf{A} + t_{22}\mathbf{B} + t_{23}\mathbf{C}, \\ \mathbf{c} &= t_{31}\mathbf{A} + t_{32}\mathbf{B} + t_{33}\mathbf{C}, \end{aligned} \quad (\text{A4.4})$$

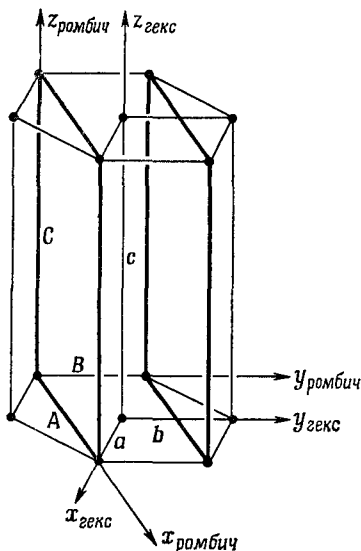
а затем получаем выражение для (hkl) через новые индексы:

$$\begin{aligned} h &= t_{11}H + t_{12}K + t_{13}L, \\ k &= t_{21}H + t_{22}K + t_{23}L, \\ l &= t_{31}H + t_{32}K + t_{33}L \end{aligned} \quad (\text{A4.5})$$

или в матричной форме

$$\begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix}. \quad (\text{A4.6})$$

Как пользоваться уравнениями (A4.2) и (A4.5), можно пояснить на примере. Для гексагональных кристаллов часто удобно



Ф и г. А4.1

выбрать ромбоэдрическую ячейку (фиг. А4.1); иногда ее называют ортогексагональной. У обычной гексагональной ячейки ребрами служат векторы \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , как показано на рисунке, а новая ромбоэдрическая ячейка построена на ребрах \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} . Из чертежа видно,

что

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= 2 \cdot \mathbf{a} + 1 \cdot \mathbf{b} + 0 \cdot \mathbf{c}, \\ \mathbf{B} &= 0 \cdot \mathbf{a} + 1 \cdot \mathbf{b} + 0 \cdot \mathbf{c}, \\ \mathbf{C} &= 0 \cdot \mathbf{a} + 0 \cdot \mathbf{b} + 1 \cdot \mathbf{c}. \end{aligned} \quad (\text{A4.7})$$

Если (hkl) — миллеровские индексы плоскости, отнесенные к гексагональной ячейке, а (HKL) — индексы той же плоскости, отнесенные к ромбической ячейке, то, сравнивая уравнения (A4.2) и (A4.7), имеем

$$\begin{aligned} H &= 2h + k, \\ K &= k, \\ L &= l. \end{aligned}$$

Матрица этого преобразования имеет вид

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Если мы хотим записать (hkl) через (HKL) , то должны сначала выразить \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , через \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} , т. е. (фиг. A4.1)

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= \frac{1}{2} \mathbf{A} - \frac{1}{2} \mathbf{B} + 0 \cdot \mathbf{C}, \\ \mathbf{b} &= 0 \cdot \mathbf{A} + 1 \cdot \mathbf{B} + 0 \cdot \mathbf{C}, \\ \mathbf{c} &= 0 \cdot \mathbf{A} + 0 \cdot \mathbf{B} + 1 \cdot \mathbf{C}, \end{aligned} \quad (\text{A4.8})$$

откуда следует

$$\begin{aligned} h &= \frac{1}{2} (H - K), \\ k &= K, \\ l &= L. \end{aligned}$$

Матрица для записи (hkl) через (HKL) имеет вид

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

A4.2. Преобразование индексов направлений

Индексы направлений преобразуются следующим образом. Пусть $[uvw]$ — индексы заданного направления, относящиеся к старой элементарной ячейке, построенной на векторах \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , а $[UVW]$ — индексы того же направления, относящиеся к ячейке, построенной на векторах \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} . Если выразить каждый из векторов \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} через \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} по формулам (A4.1), а каждый из векто-

ров \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} — через \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} по соотношениям (A4.4), то получим

$$\begin{pmatrix} U \\ V \\ W \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{21} & t_{31} \\ t_{12} & t_{22} & t_{32} \\ t_{13} & t_{23} & t_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \quad (\text{A4.9})$$

и, обратно,

$$\begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{21} & s_{31} \\ s_{12} & s_{22} & s_{32} \\ s_{13} & s_{23} & s_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \\ W \end{pmatrix}. \quad (\text{A4.10})$$

Формулы (A4.9) и (A4.10) служат не только для преобразования векторов, т. е. направлений (символов оси зоны), но и для преобразования координат позиций в тех же двух элементарных ячейках.

Нужно обратить особое внимание на позиции всех s и всех t в формулах (A4.2), (A4.5) и в формулах (A4.9), (A4.10). Когда переходим от плоскостей к направлениям, то меняются местами не только матрицы перехода от «старых» к «новым», но и столбцы с рядами.

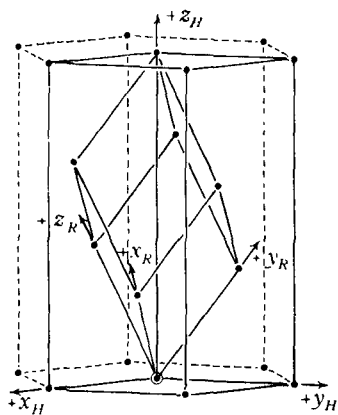
Если V_1 — объем ячейки, построенной на векторах \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , а V_2 — объем ячейки, построенной на векторах \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} , тогда объемы этих двух ячеек относятся друг к другу как детерминанты:

$$V_1 : V_2 = 1 : \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{bmatrix} : 1. \quad (\text{A4.11})$$

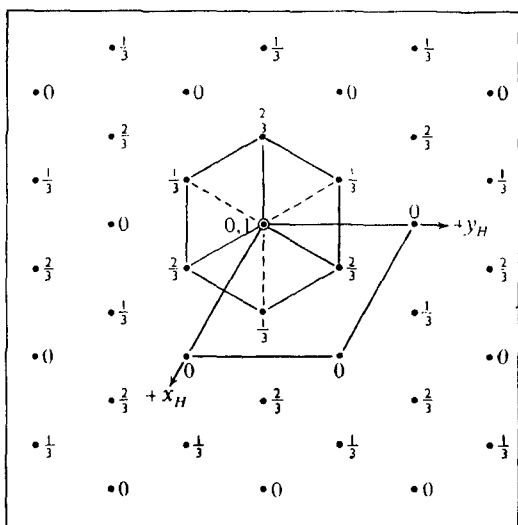
А4.3. Преобразование ромбоэдрических и гексагональных индексов

Разберем еще один пример преобразования индексов, а именно соотношение между ромбоэдрической и гексагональной ячейками в кристаллах тригональной системы. Тригональный кристалл можно описывать либо тригональной примитивной элементарной ячейкой (фиг. 1.19, л), либо ячейкой формы, показанной на фиг. 1.19, к. Гексагональный кристалл должен обладать примитивной элементарной ячейкой, показанной на фиг. 1.19, к. Воспользуемся гексагональной системой осей для описания кристалла, имеющего истинную ромбоэдрическую ячейку Бравэ; тогда если выбрать наименьшую элементарную ячейку, то наименьшая гексагональная ячейка будет трижды примитивна. Рассмотрим этот случай. Ромбоэдрические оси можно расположить двумя разными способами по отношению к соответствующим гексагональным осям. Это показано на фиг. А4.2, а — г.

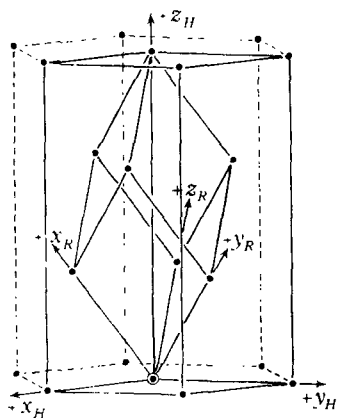
Рассмотрим «лицевую» установку с ромбоэдрической ячейкой, построенной на векторах \mathbf{a}_R , \mathbf{b}_R , \mathbf{c}_R , и будем полагать, что гексагональная ячейка построена на векторах \mathbf{a}_H , \mathbf{b}_H , \mathbf{c}_H . Пусть индексы некоторой плоскости в гексагональной ячейке будут (HKL) ,



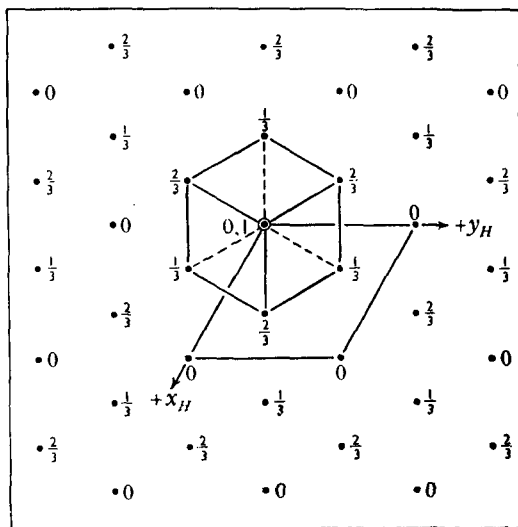
a



б



в



г

Ф и г. А4.2

а индексы той же плоскости в ромбоэдрической ячейке (hkl) . Выражая векторы гексагональной ячейки через ромбоэдрические, имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_H &= 1 \cdot \mathbf{a}_R + (-1) \cdot \mathbf{b}_R + 0 \cdot \mathbf{c}_R, \\ \mathbf{b}_H &= 0 \cdot \mathbf{a}_R + 1 \cdot \mathbf{b}_R + (-1) \cdot \mathbf{c}_R, \\ \mathbf{c}_H &= 1 \cdot \mathbf{a}_R + 1 \cdot \mathbf{b}_R + 1 \cdot \mathbf{c}_R. \end{aligned} \quad (\text{A4.12})$$

Воспользовавшись уравнениями (A4.2) или (A4.3), получаем отсюда уравнение матрицы преобразования для индексов плоскостей

$$\begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 1 & \bar{1} \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix}. \quad (\text{A4.13})$$

Так, например, $(10\bar{1})_R = (110)_H$, а $(20\bar{1})_R = (211)_H$. Обратное преобразование получим, если выразим \mathbf{a}_R , \mathbf{b}_R , \mathbf{c}_R через \mathbf{a}_H , \mathbf{b}_H , \mathbf{c}_H , т. е.

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_R &= 2/3 \cdot \mathbf{a}_H + 1/3 \cdot \mathbf{b}_H + 1/3 \cdot \mathbf{c}_H, \\ \mathbf{b}_R &= -1/3 \cdot \mathbf{a}_H + 1/3 \cdot \mathbf{b}_H + 1/3 \cdot \mathbf{c}_H, \\ \mathbf{c}_R &= -1/3 \cdot \mathbf{a}_H - 2/3 \cdot \mathbf{b}_H + 1/3 \cdot \mathbf{c}_H. \end{aligned} \quad (\text{A4.14})$$

Следовательно, матрица преобразования будет иметь вид

$$\begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2/3 & 1/3 & 1/3 \\ -1/3 & 1/3 & 1/3 \\ -1/3 & -2/3 & 1/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix}. \quad (\text{A4.15})$$

Так, например, подставляя $H = 1$, $K = 1$, $L = 1$, получим $h = 2/3$, $k = 1/3$, $l = -1/3$, значит, $(111)_H = (2\bar{1}\bar{1})_R$.

Матрицы преобразования направлений от (uvw) , записанных в ромбоэдрической решетке, к $[UVW]$ в гексагональной решетке можно вывести из (A4.15), поменяв местами ряды и столбцы. Получаем

$$\begin{pmatrix} U \\ V \\ W \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2/3 & -1/3 & -1/3 \\ 1/3 & 1/3 & -2/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}. \quad (\text{A4.16})$$

Так, например, $[111]_R = [001]_H$, а $[110]_R$ дает $U = 1/3$, $V = 2/3$, $W = 2/3$, т. е. $[122]_H$.

Обратное преобразование, которое дает $[uvw]$ из $[UVW]$, выполняется с помощью уравнения

$$\begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ \bar{1} & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \\ W \end{pmatrix}. \quad (\text{A4.17})$$

Матрицы преобразований индексов плоскостей и направлений от гексагональной ячейки к «вывернутой на изнанку» ромбоэдрической ячейке можно вывести из фиг. А4.2, *в* и *г*.

А4.4. Доказательство уравнений преобразования

Воспользуемся обозначениями, введенными в предыдущих разделах этого приложения. Для ячейки, построенной на векторах трансляций \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , обратной будет ячейка с векторами \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* , которые связаны с векторами \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} уравнениями типа (А2.19). Ячейке с векторами трансляций \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} соответствует обратная ячейка с векторами \mathbf{A}^* , \mathbf{B}^* , \mathbf{C}^* .

Каждый узел обратной решетки отвечает плоскости в прямом пространстве, поэтому он должен отстоять на одно и то же расстояние от начала координат независимо от выбора элементарной ячейки. Поэтому

$$h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* = H\mathbf{A}^* + K\mathbf{B}^* + L\mathbf{C}^*. \quad (\text{А4.18})$$

Умножив каждую из частей этого уравнения скалярно сначала на \mathbf{A} , затем на \mathbf{B} и на \mathbf{C} , получим

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) &= H, \\ \mathbf{B} \cdot (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) &= K, \\ \mathbf{C} \cdot (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) &= L. \end{aligned} \quad (\text{А4.19})$$

Подставим теперь значение \mathbf{A} из уравнения (А4.1) в первое из уравнений (А4.19) и выполним скалярное умножение. Получаем

$$H = s_{11}h + s_{12}k + s_{13}l.$$

Повторяя ту же операцию для \mathbf{B} и \mathbf{C} , получим такие же выражения для K и L , т. е. придем к уравнениям (А4.2). Чтобы получить уравнения (А4.5), сначала умножим скалярно обе части уравнения (А4.18) на \mathbf{a} , затем на \mathbf{b} и на \mathbf{c} , а дальше произведем аналогичную подстановку для \mathbf{A}^* , \mathbf{B}^* и \mathbf{C}^* .

Чтобы доказать соотношения (А4.9) и (А4.10), заметим, что направления должны оставаться неизменными, независимо от выбора элементарной ячейки, а поэтому

$$u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c} = U\mathbf{A} + V\mathbf{B} + W\mathbf{C}. \quad (\text{А4.20})$$

Чтобы получить выражения для u в уравнениях (А4.10), умножим скалярно обе части уравнения (А4.20) на \mathbf{a}^* , что даст

$$\begin{aligned} u &= (U\mathbf{A} + V\mathbf{B} + W\mathbf{C}) \cdot \mathbf{a}^* = \\ &= \{U(s_{11}\mathbf{a} + s_{12}\mathbf{b} + s_{13}\mathbf{c}) + V(s_{21}\mathbf{a} + s_{22}\mathbf{b} + s_{23}\mathbf{c}) + \\ &\quad + W(s_{31}\mathbf{a} + s_{32}\mathbf{b} + s_{33}\mathbf{c})\} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) / [\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})]. \end{aligned}$$

Выполняя указанное в правой части умножение, получим

$$u = Us_{11} + Vs_{21} + Ws_{31}.$$

Аналогичным путем можно получить и остальные уравнения (А4.10) и (А4.9).

Кристаллические структуры элементов и соединений

Таблица А5.1

**Кристаллические структуры, межатомные расстояния
и ионные радиусы элементов (при комнатной температуре)**

Атомный номер	Элемент	Структура	Кратчайшее расстояние между атомами	Ион	Ионный радиус 1)
1	2	3	4	5	6
1	H	—	—	H ⁻	1,54
3	Li	О. ц. к.	3,04	Li ⁺	0,60
4	Be	Г. п. у.	2,24	Be ²⁺	0,31
5	B	Тригон.	1,71	—	—
6	C (графит)	Гексаг.	1,42	—	—
	C (алмаз)	Кубич.	1,54	—	—
8	O	—	—	O ²⁻	1,40
9	F	—	—	F ⁻	1,36
11	Na	О. ц. к.	3,71	Na ⁺	0,95
12	Mg	Г. п. у.	3,21	Mg ²⁺	0,65
13	Al	Г. ц. к.	2,86	Al ³⁺	0,50
14	Si	Кубич. (алмазн.)	2,35	Si ⁴⁺	0,41
15	P (черный)	Ромбич.	2,17	—	—
16	S	Ромбич.	2,12	S ²⁻	1,84
17	Cl	—	—	Cl ⁻	1,81
19	K	О. ц. к.	4,63	K ⁺	1,33
20	Ca	Г. ц. к.	3,94	Ca ²⁺	0,99
21	Sc	Г. ц. к.	3,21	Sc ³⁺	0,81
22	Ti	Г. п. у.	2,95	Ti ³⁺	0,76
				Ti ⁴⁺	0,68
23	V	О. ц. к.	2,63	V ²⁺	0,88
				V ³⁺	0,74
				V ⁴⁺	0,60
24	Cr	О. ц. к.	2,50	Cr ²⁺	0,84
				Cr ³⁺	0,63
				Cr ⁴⁺	0,56
25	Mn	Кубич.	2,24	Mn ²⁺	0,80
				Mn ³⁺	0,66
				Mn ⁴⁺	0,54
26	Fe	О. ц. к.	2,48	Fe ²⁺	0,80
				Fe ³⁺	0,64
27	Co	Г. п. у.	2,51	Co ²⁺	0,72
				Co ³⁺	0,63
28	Ni	Г. ц. к.	2,49	Ni ²⁺	0,69
				Ni ³⁺	0,62
29	Cu	Г. ц. к.	2,56	Cu ⁺	0,96
30	Zn	Г. п. у.	2,66	Zn ²⁺	0,74

Продолжение табл. А5.1

Атомный номер	Элемент	Структура	Кратчайшее расстояние между атомами	Ион	Ионный радиус ¹⁾
1	2	3	4	5	6
31	Ga	Ромбич.	2,44	Ga ³⁺	0,62
32	Ge	Кубич. (алмазн.)	2,45	Ge ⁴⁺	0,53
33	As	Тригон.	2,90	—	—
34	Se	Гексаг.	2,32	Se ²⁻	1,98
35	Br	—	—	Br ⁻	1,95
37	Rb	О. ц. к.	4,90	Rb ⁺	1,48
38	Sr	Г. ц. к.	4,30	Sr ²⁺	1,13
39	Y	Г. п. у.	3,62	Y ³⁺	0,93
40	Zr	Г. п. у.	3,20	Zr ⁴⁺	0,80
41	Nb	О. ц. к.	2,86	—	—
42	Mo	О. ц. к.	2,72	—	—
43	Tc	Г. п. у.	2,70	—	—
44	Ru	Г. п. у.	2,65	Ru ⁴⁺	0,63
45	Rh	Г. ц. к.	2,69	Rh ³⁺	0,68
46	Pd	Г. ц. к.	2,75	Pd ²⁺	0,80
				Pd ⁴⁺	0,65
47	Ag	Г. ц. к.	2,89	Ag ⁺	1,26
48	Cd	Г. п. у.	2,98	Cd ²⁺	0,97
49	In	Тетраг.	3,25	In ³⁺	0,81
50	Sn (белое)	Тетраг.	3,02	Sn ⁴⁺	0,71
51	Sb	Тригон.	2,90	—	—
52	Te	Гексаг.	2,87	Te ²⁻	2,21
53	I	Ромбич.	2,71	I ⁻	2,86
55	Cs	О. ц. к.	5,25	Cs ⁺	1,69
56	Ba	О. ц. к.	4,35	Ba ²⁺	1,35
57	La	Г. п. у.	3,75	La ³⁺	1,15
58	Ce	Г. ц. к.	3,65	Ce ³⁺	1,02
59	Pr	Гексаг.	3,64	Pr ³⁺	1,00
60	Nd	Гексаг.	3,66	Nd ³⁺	0,99
63	Eu	О. ц. к.	3,96	Eu ³⁺	0,97
64	Gd	Г. п. у.	3,56	Gd ³⁺	0,97
65	Tb	Г. п. у.	3,53	Tb ³⁺	1,00
66	Dy	Г. п. у.	3,50	Dy ³⁺	0,99
67	Ho	Г. п. у.	3,52	Ho ³⁺	0,97
68	Er	Г. п. у.	3,55	Er ³⁺	0,96
69	Tm	Г. п. у.	3,48	Tm ³⁺	0,95
70	Yb	Г. ц. к.	3,87	Yb ³⁺	0,94
71	Lu	Г. п. у.	3,46	Lu ³⁺	0,93
72	Hf	Г. п. у.	3,16	Hf ⁴⁺	0,78
73	Ta	О. ц. к.	2,86	—	—
74	W	О. ц. к.	2,74	W ⁴⁺	0,66
75	Re	Г. п. у.	2,74	Re ⁴⁺	0,72
76	Os	Г. п. у.	2,68	Os ⁴⁺	0,65
77	Ir	Г. ц. к.	2,71	Ir ⁴⁺	0,64
78	Pt	Г. ц. к.	2,77	Pt ⁴⁺	0,65
79	Au	Г. ц. к.	2,88	Au ⁺	1,37

Продолжение табл. А5.1

Атомный номер	Элемент	Структура	Кратчайшее расстояние между атомами	Ион	Ионный радиус ¹⁾
1	2	3	4	5	6
80	Hg	Тригон.	3,00	Hg ²⁺	1,10
81	Tl	Г. п. у.	3,41	Tl ⁺	1,44
82	Pb	Г. ц. к.	3,49	Tl ³⁺	0,95
				Pb ²⁺	1,21
				Pb ⁴⁺	0,80
83	Bi	Тригон.	3,11	—	—
84	Po	Примит. кубич.	3,35	—	—
89	Ac	Г. ц. к.	3,75	Ac ³⁺	1,11
90	Th	Г. ц. к.	3,60	Th ³⁺	1,08
				Th ⁴⁺	0,95
91	Pa	О. ц. тетрагон.	3,21	Pa ³⁺	1,06
				Pa ⁴⁺	0,91
92	U	Ромбич.	2,77	U ³⁺	1,04
				U ⁴⁺	0,89
93	Np	Ромбич.	2,60	Np ³⁺	1,02
				Np ⁴⁺	0,88
94	Pu	Моноклин.	3,28	Pu ³⁺	1,01
				Pu ⁴⁺	0,86

1) Радиус иона зависит от числа окружающих его противоположно заряженных ионов, иными словами: от координационного числа. Значения, приведенные в этой таблице, относятся к иону с координационным числом 6. В структурах с координационным числом 4 этот радиус надо уменьшить примерно на 7%, с координационным числом 8 — увеличить на 3% и с координационным числом 12 — уменьшить на 12%.

Таблица А5.2

Кристаллы со структурой хлористого натрия¹⁾

Кристалл	$a_0, \text{Å}$	Кристалл	$a_0, \text{Å}$
<i>Антимониды</i>		<i>Арсениды</i>	
CeSb	6,40	CeAs	6,06
LaSb	6,47	LaAs	6,13
ScSb	5,86	ScAs	5,49
SnSb	6,13	SnAs	5,68
ThSb	6,32	ThAs	5,97
USb	6,19	UAs	5,77

1) Данные в табл. А5.2 — А5.8 взяты из более подробных таблиц в книге: Wyckoff R. G., Crystal Structures, Intersci., New York, 1963.

Продолжение табл. А5.2

Кристалл	a_0 , Å	Кристалл	a_0 , Å
<i>Бориды</i>		ScN	4,44
ZrB	4,65	TiN	4,23
<i>Бромиды</i>		UN	4,88
AgBr	5,77	VN	4,13
KBr	6,60	ZrN	4,61
LiBr	5,50	<i>Оксиды</i>	
NaBr	5,97	BaO	5,52
RbBr	6,85	CaO	4,81
<i>Карбиды</i>		CdO	4,70
HfC	4,46	CoO	4,27
NbC	4,47	FeO	4,28—4,31
TaC	4,45	MgO	4,21
TiC	4,32	MnO	4,45
UC	4,96	NbO	4,21
VC	4,18	NiO	4,17
ZrC	4,68	SrO	5,16
<i>Хлориды</i>		TaO	4,42—4,44
AgCl	5,55	TiO	4,18
KCl	6,29	UO	4,92
LiCl	5,13	ZrO	4,62
NaCl	5,64	<i>Фосфиды</i>	
RbCl	6,58	CeP	5,90
<i>Цианиды</i>		LaP	6,01
KCN	6,53	ThP	5,82
NaCN	5,89	UP	5,59
RbCN	6,82	ZrP	5,27
<i>Фториды</i>		<i>Селениды</i>	
AgF	4,92	BaSe	6,60
CsF	6,01	CaSe	5,91
KF	5,35	CeSe	5,98
LiF	4,03	LaSe	6,06
NaF	4,62	MgSe	5,45
RbF	5,64	MnSe	5,45
<i>Гидриды</i>		PbSe	6,12
CsH	6,38	SnSe	6,02
KH	5,70	SrSe	6,23
LiH	4,08	ThSe	5,87
NaH	4,88	USe	5,75
RbH	6,04	<i>Сульфиды</i>	
<i>Иодиды</i>		BaS	6,39
KI	7,07	CaS	5,69
LiI	6,00	CeS	5,78
NH ₄ I	7,26	LaS	5,84
NaI	6,47	MgS	5,20
RbI	7,34	MnS	4,45
<i>Нитриды</i>		PbS	5,94
CeN	5,01	SrS	6,02
CrN	4,14	ThS	5,68
LaN	5,30	US	5,48
NbN	4,70	ZrS	5,25

Продолжение табл. А5.2

Кристалл	a_0 , Å	Кристалл	a_0 , Å
<i>Теллуриды</i>		LaTe	6,41
BaTe	6,99	PbTe	6,45
BiTe	6,47	SnTe	6,31
CaTe	6,34	SrTe	6,47
CeTe	6,35	UTe	6,16

Таблица А5.3

Кристаллы со структурой хлористого цезия

Кристалл	a_0 , Å	Кристалл	a_0 , Å	Кристалл	a_0 , Å
AgCd	3,33	CsBr	4,29	TlBr	3,97
AgMg	3,28	CsCl	4,12	TlCl	3,83
CuBe	2,70	CsCN	4,25	TlCN	3,82
CuZn	2,94	CsI	4,57	TlI	4,20

Таблица А5.4

Кристаллы со структурой сфалерита

Кристалл	a , Å	Кристалл	a , Å	Кристалл	a , Å
AgI	6,47	CuF	4,26	InAs	6,04
BN	3,62	CuI	6,04	InP	5,87
BeS	4,85	GaAs	5,65	InSb	6,48
BeSe	5,07	GaP	5,45	SiC	4,35
BeTe	5,54	GaSb	6,12	ZnS	5,41
CdS	5,82	HgS	5,85	ZnSe	5,67
CuBr	5,69	HgSe	6,08	ZnTe	6,09
CuCl	5,40	HgTe	6,43		

Таблица А5.5

Кристаллы со структурой вюрцита

Кристалл	a , Å	c , Å	Кристалл	a , Å	c , Å
AgI	4,58	7,49	BeO	2,70	4,38
AlN	3,11	4,98	CdS	4,14	6,75

Продолжение табл. А5.5

Кристалл	a, Å	c, Å	Кристалл	a, Å	c, Å
CdSe	4,30	7,02	ZnO	3,25	5,21
NH ₄ F	4,39	7,02	ZnS	3,81	6,23
SiC	3,08	5,05	ZnSe	3,98	6,53
TaN	3,05	4,94	ZnTe	4,27	6,99

Таблица А5.6

Кристаллы со структурой никельарсенида

Кристалл	a, Å	c, Å	Кристалл	a, Å	c, Å
CoS	3,37	5,16	MnTe	4,14	6,70
CoSb	3,87	5,19	NiAs	3,60	5,01
CoSe	3,63	5,30	NiSb	3,94	5,14
CoTe	3,89	5,36	NiSe	3,66	5,36
CrS	3,45	5,75	NiSn	4,05	5,12
CrSb	4,11	5,44	NiTe	3,96	5,35
CrSe	3,88	6,02	PtB ¹⁾	3,36	4,06
FeS	3,44	5,88	PtBi	4,31	5,49
FeSb	4,06	5,13	PtSb	4,13	5,47
FeSe	3,64	5,96	PtSn	4,10	5,43
FeTe	3,80	5,65	VP	3,18	6,22
MnAs	3,71	5,69	VS	3,36	5,81
MnBi	4,30	6,12	VSe	3,58	5,98
MnSb	4,12	5,78	VTe	3,94	6,13

1) Структура антиникельарсенида.

Таблица А5.7

Кристаллы со структурой флюорита

Кристалл	a, Å	Кристалл	a, Å	Кристалл	a, Å
BaCl ₂	7,34	CeH ₂	5,59	K ₂ S	7,39
BaF ₂	6,20	CeO ₂	5,41	K ₂ Se	7,68
Be ₂ B	4,67	CoSi ₂	5,36	K ₂ Te	8,15
Be ₂ C	4,33	IlfO ₂	5,12	Li ₂ O	4,62
CaF ₂	5,46	HgF ₂	5,54	Li ₂ S	5,71
CdF ₂	5,39	K ₂ O	6,44	Li ₂ Se	6,01

Продолжение табл. А5.7

Кристалл	a , Å	Кристалл	a , Å	Кристалл	a , Å
Li ₂ Te	6,50	NbH ₂	4,56	SrF ₂	5,80
Na ₂ O	5,55	NiSi ₂	5,39	ThO ₂	5,60
Na ₂ S	6,53	Rb ₂ O	6,74	UO ₂	5,47
Na ₂ Se	6,81	Rb ₂ S	7,65	ZrO ₂	5,07
Na ₂ Te	7,31	SrCl ₂	6,98		

Таблица А5.8

Кристаллы со структурой рутила

Кристалл	a_0 , Å	c_0 , Å	Кристалл	a_0 , Å	c_0 , Å
CoF ₂	4,70	3,18	NbO ₂	4,77	2,96
FeF ₂	4,70	3,31	PbO ₂	4,95	3,38
GeO ₂	4,40	2,86	SnO ₂	4,74	3,19
MgF ₂	4,62	3,05	TaO ₂	4,71	3,06
MnF ₂	4,87	3,31	TiO ₂	4,59	2,96
MnO ₂	4,40	2,87	WO ₂	4,86	2,77
MoO ₂	4,86	2,79	ZnF ₂	4,70	3,13

ОТВЕТЫ К ЗАДАЧАМ

Глава 1

- 1.2. а) См. фиг. 3.11;
б) на ячейку приходится две формульные единицы;
в) и г) четыре атома кислорода на расстояниях
 $\sqrt{2a^2(1/2 - u)^2 + c^2/4} \approx 1,94 \text{ \AA}$ и два атома кислорода
на расстояниях $\sqrt{2}ua \approx 2 \text{ \AA}$.
- 1.3. а) I ; б) P ; в) I .
- 1.5. а) Символ оси зоны $[\bar{1}\bar{1}0]$, к этой зоне принадлежат еще грани
 (111) $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$;
в) $a/\sqrt{2}$;
г) $70^\circ 32'$ или $109^\circ 28'$ ($= 180^\circ - 70^\circ 32'$).
- 1.6. а) 90° ; б) $40^\circ 44'$.
- 1.7. а) Символ зоны $[\bar{2}11]$ или $[11\bar{2}]$;
б) угол равен $35^\circ 16'$.
- 1.8. а) $c/a = 90,985$;
б) $31^\circ 25'$.
- 1.9. См. табл. 1.2.
- 1.10. а) Нет; б) нет.
- 1.11. См. фиг. 2.42.
- 1.12. См. фиг. 1.28 и А4.2.
- 1.13. См. фиг. 2.42.

Глава 2

- 2.2. Примерно 18 тыс. км.
- 2.3. б) $(001) \wedge (011) = 62^\circ 15'$, $(100) \wedge (110) = 39^\circ 03'$;
в) формы $\{111\}$ и $\{11\bar{3}\}$ — общие, остальные простые формы — частные.
- 2.5. б) $\bar{3}m$, 32, ромбоэдр является общей формой для класса $\bar{3}$;
в) центр симметрии есть в классах $\bar{3}$ и $\bar{3}m$.
- 2.6. б) Центр симметрии есть в классах $4/m$ и $4/m\bar{3}m$;
в) закрытые общие формы есть в классах $4/m\bar{3}m$, 422 , $\bar{4}2m$,
 $4/m$ и $\bar{4}$.
- 2.8. Индексы грани (122) .
- 2.9. Индексы грани (302) , угол $72^\circ 05'$. Индексы оси зоны $[\bar{2}\bar{2}3]$,
угол 90° .

- 2.10. Октаэдр мог бы принадлежать к классам $m\bar{3}$, 432 , $m\bar{3}m$; тетраэдр — к классам $2\bar{3}$ и $\bar{4}3m$; тетрагонтриоктаэдр — к классам $m\bar{3}$, 432 , $m\bar{3}m$.
- 2.11. Последовательно: тригональная, ромбическая, моноклинная, тетрагональная.
- 2.12. Угол $32^\circ 06'$, грань $(1\bar{2}11)$.
- 2.13. Индексы грани $(21\bar{3}4)$.
- 2.14. $a : b : c = 0,6900 : 1 : 0,4124$; $\beta = 99^\circ 18'$.
- 2.15. $c/a = 0,8543$.
- 2.16. а) $mm2$, 222 , m , 2 ; б) 222 , 2 .
- 2.17. Матрица преобразования

$$\begin{pmatrix} 0 & -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & -1/2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

- в) Объем гексагональной ячейки составляет $3/4$ объема кубической ячейки;
- г) $(112) \equiv (1\bar{1}08)$; $(100) \equiv (01\bar{1}2)$; $(110) \equiv (11\bar{2}0)$.

Глава 3

- 3.2. а) $\bar{4}3m$; б) $m\bar{3}m$; в) $\bar{4}3m$; г) $3m$; д) $\bar{3}m$; е) $\bar{6}m2$.
- 3.3. а) $a/\sqrt{3}$; б) $a/(2\sqrt{3})$.
- 3.6. Если бы параметр u был равен $0,250$, получилась бы простая кубическая решетка.
- 3.7. б) $\beta A \beta \alpha \beta \alpha \beta A \beta$;
в) координаты центра симметрии $(1/3, 1/6, 1/4)$;
г) атом Мо в положении $\pm (1/3, 1/6, 1/4)$. Атомы S в положениях $\pm (1/3, 1/6, -1/4 + z)$ и $\pm (1/3, 1/6, -1/4 - z)$.
- 3.8. б) На элементарную ячейку приходится одна формульная единица; в) $2,94 \text{ \AA}$, $3,26 \text{ \AA}$, $2,83 \text{ \AA}$, $2,55 \text{ \AA}$; г) $5,53 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$.
- 3.9. Твердый раствор внедрения.
- 3.10. Плотность вакансий по железу или межузельных атомов $4,6 \cdot 10^{21}/\text{см}^3$.

Глава 4

- 4.1. D_{12} — это поток атомов в направлении оси 1 при градиенте концентрации, параллельном оси 2 и равном единице.
- 4.2. Нет, потому что они не преобразуются по уравнению (4.18) при перемене осей координат.
- 4.3. $\begin{pmatrix} 12 & 5 & 0 \\ 5 & 7 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$

$$4.5. \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & 0 \\ -s_{12} & s_{11} & 0 \\ 0 & 0 & s_{33} \end{pmatrix}$$

4.7. а)

$$\begin{matrix} Ox_1 & Ox_2 & Ox_3 \\ Ox'_1 & \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ Ox'_2 & \\ Ox'_3 & \end{matrix}$$

$$б) \begin{pmatrix} 25 & 0 & 0 \\ 0 & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{pmatrix} \times 10^6, \text{ ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1};$$

г) под углом 30° к x'_1 ; $\rho = 22,75 \cdot 10^6 \text{ ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$. Под углом 60° к x'_1 ; $\rho = 18,25 \cdot 10^6 \text{ ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$;

е) результирующий вектор плотности тока составляет с осью x'_1 угол 48° .

Глава 5

$$5.2. \begin{pmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & -e & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -e & 0 \\ -e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$5.3. \begin{pmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & -ve & 0 \\ 0 & 0 & -ve \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} e/2(1-v) & -e/2(1+v) & 0 \\ -e/2(1+v) & e/2(1+v) & 0 \\ 0 & 0 & -ve \end{pmatrix}.$$

5.6. $\sigma/2$.

5.16.

$$а) \frac{1}{s_{11}}, \quad б) \frac{s_{11} + s_{12}}{s_{11}^2 + s_{11}s_{12} - 2s_{12}^2}, \\ в) \frac{s_{11}}{s_{11}^2 + s_{11}s_{12} - 2s_{12}^2}, \quad г) \frac{1}{s_{11} + 2s_{12}}.$$

Глава 6

- 6.1. а) В точечной группе $\bar{4}3m$ центра симметрии нет;
 б) в группе $\bar{4}3m$ скольжение вдоль $[\bar{1}10]$ не эквивалентно скольжению вдоль $[\bar{1}\bar{1}0]$.
- 6.3. Для семейства $\{111\}$ ($\bar{1}\bar{1}0$) в группе $m\bar{3}m$ имеется 24 различных системы скольжения; а) $\langle 100 \rangle$; б) $\langle 111 \rangle$; в) $\langle 101 \rangle$.
- 6.4. 1,46.

6.5. Для CsBr число независимых систем скольжения $\{110\}$ $\langle 110 \rangle$ равно 3; при карандашном скольжении по тем же направлениям число систем скольжения не меняется.

6.6. а) Тензор чистой деформации при скольжении на величину α по (011) в направлении $[0\bar{1}\bar{1}]$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha \end{pmatrix};$$

б) $\begin{pmatrix} 0 & \alpha'/2 & -\alpha'/2 \\ \alpha'/2 & 0 & 0 \\ -\alpha'/2 & 0 & 0 \end{pmatrix};$

в) 2; г) одна.

6.7. В кристалле, принадлежащем одной из трех ортогональных систем (кубическая, тетрагональная, ромбическая), этими направлениями являются $[100]$, $[010]$, $[001]$.

6.8. а) $(\bar{1}11)$ $[101]$; б) $(\bar{1}11)$ $[101]$ и $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ $[011]$; в) $(\bar{1}11)$ $[101]$ и (111) $[110]$.

6.9. а) (101) $[\bar{1}01]$ и $(\bar{1}01)$ $[101]$; б) (011) $[0\bar{1}\bar{1}]$ и $(0\bar{1}\bar{1})$ $[011]$; в) (101) $[\bar{1}01]$ и $(\bar{1}01)$ $[101]$.

6.10. а) $\langle 111 \rangle$; б) нет; в) $\langle 0001 \rangle$ и $(uv\bar{t}0)$.

6.12. а) $\begin{pmatrix} \sigma & \tau & 0 \\ \tau & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$

б) $\sigma/2$; в) $(-\tau \div \sigma/2)$.

6.14. а) $[\bar{1}\bar{2}\bar{1}0]$; б) $8,3 \cdot 10^6$ дина \cdot см $^{-2}$.

6.15. а) $(111)[\bar{1}01]$; б) (111) $[\bar{1}01]$ и $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ $[011]$; в) $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$; г) 13,1 см.

Глава 7

7.3. $2,82 \cdot 10^{-12}$ см 3 .

7.4. а) $2 \cdot 10^{-8}$ дина \cdot см $^{-1}$; б) в направлении $[111]$ сила равна нулю.

7.5. а) $(1\bar{1}0)$; б) (001) .

7.6. Пара сил = $(\mu b/2)(R^2 - r_0^2)$.

7.7. $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = -\mu b/[2\pi x_2(\lambda + 2\mu)]$; дилатация = $\pm 0,0153$.

7.10. Ширина винтовой дислокации равна $a/2A^{1/2}$, где a — параметр решетки.

7.11. $(1/l)(dl/dt) = (1/2)\rho b v$.

7.13. Сила взаимодействия между винтовыми дислокациями равна $\mu b_1 b_2/2$.

7.15. а) 4; б) 3; в) 3; г) 4.

Глава 8

- 8.1. $L/10$.
 8.2. $\sigma b l$; μb^2 .
 8.4. Образуется дефект уаковки типа внедрения.
 8.5. Два.
 8.6. а) $1,6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-1}$; б) $1,6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-1}$.
 8.7. $20,5 \text{ \AA}$; $2,5 \text{ \AA}$; $7,6 \text{ \AA}$.
 8.8. Простая кубическая решетка: $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$; о. ц. к. таких дислокаций нет; г. ц. к.: $\langle 100 \rangle$; гексагональная: $1/3 \langle 11\bar{2}3 \rangle$.
 8.9. $3\mu b^2/4\mu\gamma$.
 8.14. Одинаковые дислокации $1/2 \langle 111 \rangle$ будут образовывать пары.

Глава 9

- 9.1. 24,5.
 9.2. 1,25 эВ, 2,1 ккал/°К.
 9.3. Концентрация в примесном кристалле в 300 раз больше, чем в чистом кристалле.
 9.4. $x = 0,94$.
 9.5. 1,09 эВ, истинное $E_f = 1,11 \text{ эВ}$.
 9.6. 24.
 9.7. 1440,4.
 9.8. 2.
 9.10. Относительное увеличение $= 1,3 \cdot 10^{-4}$.
 9.11. а) $4m\bar{m}$; б) $\bar{3}m$.
 а) Растягивающее напряжение по $\langle 111 \rangle$; б) растягивающее напряжение по $\langle 100 \rangle$.
 9.12. а) 48; б) 16, число ориентировок равно отношению кратностей.
 9.13. а) 8; группу ориентировок $[111] [\bar{1}\bar{1}\bar{1}] [11\bar{1}] [1\bar{1}\bar{1}]$ можно отличить от $[\bar{1}11]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$;
 в) 4 ориентировки, лежащие в плоскости $(1\bar{1}0)$ можно отличить от остальных четырех.

Глава 10

- 10.1. $70^\circ 32'$.
 10.4. а) Плоскости (001) , (010) и (100) под действием двойникового сдвига преобразуются в плоскости (110) , $(1\bar{1}2)$ и $(\bar{1}12)$; б) матрица преобразования индексов плоскостей имеет вид

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 1 \\ 1 & \bar{1} & 1 \\ 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Плоскость (101) переходит в плоскость (011). При этом считается, что оси координат отразились в плоскости симметрии K_1 .

- 10.6. б) Индексы новых направлений $[110]$, $[1\bar{1}1]$, $[\bar{1}11]$; в) матрица преобразования

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 2 \\ 1 & \bar{1} & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Направление $[1\bar{1}1]$ перейдет в направление $[010]$, если считать, что оси координат отразились в K_1 .

- 10.8. $93^\circ 44'$.

- 10.9. При $c/a > \sqrt{3}$ металлы сжимаются, а при $c/a < \sqrt{3}$ удлиняются в направлении оси c .

- 10.10. Да.

- 10.12. 4° .

- 10.13. 10%.

Глава 11

- 11.1. а) 4 ориентации г. п. у.-кобальта;
б) 2 (двойниковые) ориентации г. ц. к.-фазы;
в) у дислокации компонента вектора Бюргерса b , нормальная плоскости (111), должна равняться $2a/\sqrt{3}$.
- 11.3. а) 12 векторов $\langle 110 \rangle$; б) да; в) матрица преобразования имеет вид

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1/2 & -1/2 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

- 11.5. $c/a = 1,57$.

- 11.6. а) Угол равен $11'$; б) деформация равна 0,003.

- 11.7. а) 2; б) 4; в) 6.

- 11.10. Матрица преобразования

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & -1/2 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Глава 12.

- 12.2. б) Высота ступеньки равна, соответственно, 1, 3, 1 или 2 межатомных расстояния.

- 12.3. $\gamma_{(001)} = 0,894 \gamma_{(210)}$; $\gamma_{(111)} = 0,775 \gamma_{(210)}$; $\gamma_{(110)} = 0,949 \gamma_{(210)}$.

- 12.4. а) $1160 \text{ эрг} \cdot \text{см}^{-2}$; б) ошибка составляет 15%.
- 12.5. а) Границы будут притягиваться;
 б) энергия возрастает в $b^2 \ln b$ раз.
- 12.6. Плоскость границы: а) $\{110\}$; б) $\{110\}$; в) $\{11\bar{2}0\}$. Ось наклона: а) $\langle 001 \rangle$; б) $\langle 211 \rangle$; в) $\langle \bar{1}100 \rangle$.
 Угол наклона: а) $2 \arcsin \frac{a}{2\sqrt{2d}}$; б) $2 \arcsin \frac{a}{2\sqrt{2d}}$;
 в) $2 \arcsin \frac{2}{ad}$.
- 12.7. См. работу Freise E. J., Kelly A., *Proc. Roy. Soc. A264*, 269 (1961).
- 12.9. Различие значений углов в радианах по порядку величины равно отношению энергии двойниковой границы к свободной поверхностной энергии.
- 12.11. Эффективная свободная поверхностная энергия равна $0,96\gamma$.
- 12.13. а) $\{110\}$; б) $3,1 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$; в) $\sim 8^\circ$.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Аккомодация** двойникового сдвига 357
 — мартенсита 368, 392
Аллотропия 117
Алмаза структура 118, 128
 — — дислокации в ней 296, 297
Алюминий, вакансии 319
 — двойники 338
Алюминия нитрид, структура и дислокации 299
 — окись, структура 138
Анизотропия упругая 190—195
Антиникельбарсенид, структура 134
Антифазные границы доменов 145
Антифлюоритная структура 135
Атомные диаметры 141
Аустенит 365, 367, 368
- Бария** титанат 389
Барьер Ломер — Коттрелла 283
 — Пайерлса 255
 — Хирта 284
Бейна соответствие 383, 385
Ближний порядок 145
Больцмана постоянная 305
Борна — Майера потенциал 313
Борнитрид, структура 118, 129
Бравэ решетки 38—51
 — элементарные ячейки 40
Бюргера вектор 235, 238—241
 — контур 235, 238—241
- Вакансии**, источники 305
 — образование 306—307
 — равновесная концентрация 321
 — релаксация вокруг них 307, 308
 — скопления 309, 313
 — энергия миграции 325
 — — образования 306—308, 325
 — — связи 306, 307
Вакансионные петли в гексагональных металлах 289
 — — — г. ц. к.-металлах 283
- Варли** механизм 327
Вейсса закон см. Правило зон Вейсса
Вектор, определение 451
 — преобразование компонент 151—154
Векторное произведение векторов 453
Винтовая дислокация 235
 — — напряжения и деформации 249, 261
 — — нормальная к плоскости симметрии 253
 — — энергия 265
Винтовые оси симметрии 100, 102
Висмут, скольжение в нем 208, 210
 — структура 130, 131
Внутреннее трение 331
Вращение, обусловленное скольжением 214—220
 — решетки при деформации растяжения 225
 — — — — сжатия 228
Вращения не собственные 73
Вульфа сетка 66—72
 — теорема 421
Вюрцит, дефекты упаковки 299
 — дислокации 299
Вюрцит, структура 119, 133
- Габитусная** плоскость 367, 371, 376, 379, 382
Гексагональная система 38, 87—91, 169
 — ячейка 40, 48
 — — для тригональных кристаллов 93
Гексагональные кристаллы, отношение осей 125
 — — упругие постоянные 195—196
Гексагональные металлы, двойникование 349
 — — двойниковый сдвиг 345, 350
 — — дефекты упаковки 390
 — — дислокации 288

- Гексагональные металлы, скольжение 212, 223
 — — структура 125
 Германий, дислокации 296
 — структура 128
 Гидростатическое давление 186
 Главные деформации 176
 — компоненты тензора 159
 — напряжения 183
 — оси тензора 159, 165
 Гномоническая проекция 56
 Голоэдриа 81
 Гранецентрированные кубические (г. ц. к.) металлы, вакансии 318, 325, 333
 — — — — двойники 337, 345
 — — — — дефект упаковки 267, 281
 — — — — дислокации 276
 — — — — межузельные атомы 306, 307, 312
 Гранецентрированные кубические (г. ц. к.) металлы, поверхностная энергия 397, 399
 — — — — скольжение 222, 227, 228
 — — — — структура 117—124
 — — — — энергия дефекта упаковки 276
 Границы зерен 402—414
 — — дислокации в них 403
 — — кручения 408, 409, 411
 — — наклонные 402, 406
 — — свободная энергия 415
 — — степени свободы 406
 Графит, двойники 351, 352, 357
 — дефекты упаковки 299
 — дислокации 299
 — структура 118, 119
 Группы пространственные 100—112
 Гука закон 187
- Дальний порядок 145
 Двойники 337
 — сложные 343
 — отжига 338
 — 1-го и 2-го рода 343
 — роста 337
 Двойникование упругое 359
 Двойникования плоскость 337, 342, 360
 — элементы 350, 353, 361
 Двойниковые границы 358, 413, 420
 — прослойки (ламели) 340, 353, 357, 361, 382
 Двойное скольжение 227, 231
 Двумерные пространственные группы 104—107
- Двух сечений метод анализа (анализ по двум проекциям) 70, 204
 Девиатор напряжения 186
 Дендриты 425
 Дефекты упаковки 273—276
 — — в гексагональных металлах 276
 — — в о. ц. к.-металлах 292—296
 — — типа внедрения 274, 277, 278, 298
 — — — вычитания 277, 298
 Дефектов упаковки тетраэдры 283
 Дефект Френкеля 307
 — Шоттки 310, 321
 Дефектная структура 132
 Деформации тензор 176, 177
 — эллипсоид 178
 Деформационное двойникование 357
 Деформация бесконечно малая 173—177
 — большая 220
 — главная 176
 — макроскопическая 368, 381
 — неупругая 330
 — однородная 177, 381
 — полная 331, 376
 — чистая 176, 217
 Диада 158
 Дилатация 176
 Диля правило 224
 Дислоки дислокационные 260
 Дислокации в анизотропной среде 253, 261, 269
 — — гексагональных металлах 288—292
 — — г. ц. к.-металлах 269, 274, 276—285
 — — вершинные 282, 285
 — — винтовые см. Винтовая дислокация
 — — в ковалентных кристаллах 296—301
 — — о. ц. к.-металлах 292—296
 — — движение 241, 244
 — — двойникующие 346, 352, 353
 — — заряженные 286—288
 — — краевые см. Краевая дислокация
 — — линейное натяжение 270
 — — Пайерлса 255
 — — переползание 242
 — — пересечение 261—262
 — — плотность 238, 408
 — — полные 239, 359
 — — полюсные 360
 — — призматические 243
 — — размножение 258
 — — расщепление 274, 281

- Дислокации реакции 268, 269
 — сидячие 278
 — силы взаимодействия 259
 — — действующие на дислокацию 244—249
 — скольжение 242
 — скопление 358
 — смешанные см. Смешанная дислокация
 — устойчивость 269
 — устойчивые (таблица) 270
 — Франка частичные 278, 361
 — частичные 273
 — ширина 254
 — Шокли частичные 275, 360
 — энергия 265, 269
 — ядро см. Ядро дислокации
 Дислокационная петля 271
 Дислокационный узел 241
 Дислокационные реакции 268, 269
 Домены 144
- Железа окись**, структура 132, 135
Железные сплавы, мартенсит 383—386
Железо, внутреннее трение 330
 — двойники 345, 350
Жесткость упругая 187—198
- Закон Гаюи** 21
 — Гука 187
 — зон Вейсса см. Правило зон Вейсса
 — кратных отношений 21
 — критического скалывающего напряжения 220
 — постоянства углов 7, 18
 — рациональных индексов 21
Зеркальная симметрия 26
Зеркального отражения плоскость 26, 32, 337
Зеркально-поворотные оси симметрии 73
Зерно 402, 420
Зигзагообразный двойник 360
Зоны 22
- Изотропная упругость** 196
Инвариантная плоскость 368, 382
Инверсионные оси симметрии 73
Инверсии центр 26, 73
Индий, структура 127
Индий-галлиевые сплавы, превращения в них 379
- Индия** антимионид, дислокации 299
Ионные радиусы 472—478
- Кадмий бромистый**, проводимость 323
Кальций фтористый см. Флюорит
Кальцит, двойники 348, 357
 — структура 140
Каменная соль см. Натрий хлористый
Карандашное скольжение см. Скольжение карандашное
Касситерит, структура 135
Класс голоэдрический 81
 — симметрии 75, 78, 102
Кобальт, мартенситные превращения 371
 — — — влияние никеля 371
Когерентная граница 358
Компактности коэффициент 120
Комплексы точечных дефектов 311, 312
Композиционная плоскость 337
Координационное число 12, 117, 128, 134, 141
Корунд, структура 138
Косинусы направляющие 151, 152
Коси условие 198
Краевая дислокация 235
 — — напряжения 243, 252
 — — перемещение 251
 — — энергия 266
Кратность простой формы 79
Краудион 316
Кремний, дефекты упаковки 298, 299
 — дислокации 296
 — структура 128
Кристаллографические системы 37, 38
Критического скалывающего напряжения закон 220
Кручения границы см. Границы кручения
Кубическая плотнейшая упаковка 136
 — система 48, 84—87, 169
Кубический кристалл, стереографическая проекция 86
 — — углы между плоскостями 462—463
Курдюмова — Закса соотношение 386
- Ламе постоянные** 197, 251
Лауэ классы 99, 169, 207
Ломер — Коттрелла барьер 283

- Мартенсит в стали, тетрагональность 365
 — габитусная плоскость 367
 — зарождение 365, 389
 — ориентационные соотношения 370, 379
 Мартенситное превращение в индий-галлиевых сплавах 379
 — — — кобальте 371
 — — — медных сплавах 387, 388
 — — — неметаллах 388
 — — — сталях 365, 383—387
 — — — цирконии 372, 278
 — — вызванное напряжением 391
 — — термоупругое 392
 Матрицы 442—447
 — преобразования 384
 Медно-галлиевые сплавы 365, 387, 388
 Медные сплавы, мартенситные превращения 387, 388
 Медь, двойники 345, 350
 Медь — золото, упорядочение 144
 Межатомные расстояния 141, 472—478
 Межфазные границы 427—432
 Мизеса условие 220
 Миллера индексы 18
 — — преобразование 465
 Миллера—Бравэ индексы 88, 94
 Молибдена дисульфид, эпитаксия 432
 Момент вращающий 416
 Моноклинная система 42, 95—97
 Морза функция 313
 Мышьяк, структура 130, 131

 Наклона граница см. Граница наклона
 Направление, индексы 21, 84, 89
 — плотноупакованное 120
 Напряжение 180
 — гидростатическое 186
 — главное 183
 — девиаторная часть 186
 — сдвига 185
 Натрий хлористый, дислокации 285
 — — примеси двухвалентных катионов 310, 322
 — — проводимость, 310, 321, 322
 — — структура 118, 131
 — — точечные дефекты 309, 316, 321
 Независимые системы скольжения 217—220
 Неймана полосы 357
 — принцип 169

 Нейтронное облучение 327
 Немой индекс 155, 156
 Непера треугольник 439
 Несобственные вращения 75
 Неупругость 329, 332—334
 Никельарсенид, структура 119, 134
 Нишиямы соотношение 386
 Нулевая полужесткость 400

 Обратная решетка 451, 454—458
 Обращенная шпинелевая структура 139
 Объемноцентрированные кубические (о. ц. к.) металлы, вакансии 313, 314
 — — — двойники 345—347
 — — — дефекты упаковки 292
 — — — дислокации 292
 — — — мартенситные превращения 365, 373, 387
 — — — скольжение 212, 223
 Октаэдрические пустоты 137
 Олово, структура 128
 Оси кристалла 15, 38
 — — выбор 15
 — — симметрии 26, 30—31, 73
 — — винтовые 100, 102
 — — зеркально-поворотные 73
 — — инверсионные 73
 — — их сочетания 33, 37
 О. ц. к.-структура, ее устойчивость 391

 Пайерлса барьер 257
 Пара сил, действующих на дислокацию 272
 Перегиб 262, 296
 Переползание 242
 Перовскит, структура 119, 139
 Плоскость двойника 337, 341, 343, 349, 350
 — инвариантная 368
 — симметрии 26, 72
 — скольжения 224
 — — поперечного 224
 — скользящего отражения 100
 — — — алмазная 104
 Плотнейшая упаковка 120—123
 Поверхностная энергия 396—402
 — — полярная диаграмма 399
 Поворотная симметрия 25, 33
 Податливость 331
 — соотношение с жесткостью 187—188
 — упругая см. Упругая податливость

- Полигонизация 260
 Полиморфизм 117
 Поликристалл 402
 — деформация скольжения 219—220
 — упругость 195
 Полюс на проекции 55, 57, 58
 Полюсный механизм роста двойника 360, 361
 Поперечное скольжение см. Скольжение поперечное
 Порядок ближний и дальний 145
 Постоянства углов закон см. Закон постоянства углов
 Правило девятки 188
 — Диля 224
 — зон Вейса 23, 82
 — Франка 269
 — Эйнштейна 155
 — FS/RH 239, 281
 Преобразование индексов при двойниковании 344
 — — перемене ячейки 465
 Пространственные группы 100—112
 — решетки 15, 38—51
 Пуассона коэффициент 196
 Пустоты, их заполнение 122, 124, 125
 — октаэдрические 137, 315
 — тетраэдрические 137
 Равновесная концентрация вакансий 321
 — — точечных дефектов
 — форма кристалла 421
 Радиационные дефекты 327
 Растяжение 172, 178
 Рациональная плоскость 22, 377
 — прямая 22
 Рациональных индексов закон 21
 Рекристаллизация 338
 Релаксация 331
 Решетка 15, 38
 — базоцентрированная моноклиновая 42
 — — ромбическая 44
 — Бравэ 38—51
 — вращение в опытах по растяжению 216
 — гексагональная 46, 125
 — гранцентрированная кубическая 50
 — — ромбическая 43, 45
 — ее вектор 21
 — когерентная 410, 412
 — межплоскостные расстояния 459
 — — углы 461
 — моноклиновая 42
 — направление в ней 21, 22
 Решетка объемноцентрированная кубическая 50
 — — ромбическая 44
 — — тетрагональная 43
 — параметры 15
 — плоскость 17
 — совпадения см. Когерентная граница
 — тетрагональная 42
 — тригональная 46
 Ромбическая система 38, 43, 78—83
 Ромбоэдрическая система 38, 91—95
 Ртуть, структура 118, 127
 Рутил, структура 119, 135
 Самодиффузия 308, 325
 Сапфир см. Корунд
 Сверхструктура 144, 145
 Сдвиг 172
 — величина при двойниковании 354—356
 — простой 179, 340
 — чистый 175, 178—179
 Сдвига модуль 196
 Сетка плоская 14
 Симметрии операторы 24
 — элементы 14, 24
 — — их ограничение 26
 Симметрия дефекта 332
 — макроскопическая 72
 Симонса — Баллуфи опыт 319
 Синусов отношение 441
 Системы кристаллографические 37, 38
 Скалярное произведение векторов 452
 — — тройное 454
 Скольжение 202—231
 — двойное (сдвоенное) см. Двойное скольжение
 — карандашное 208, 218
 — кристаллографическое 205, 292
 — пирамидальное 290
 — поперечное 258
 Скольжения линии 204
 — плоскость и направление 204—206
 — — первичная 224
 — полосы 258
 — семейство 206
 — системы 206, 213—230
 — ступеньки 204
 — элементы в кристалле 209—211
 Скользящего отражения плоскость 100
 Слюда, эпитаксия на ней 432
 Смешанная дислокация 235

- Смешанная дислокация, ее энергия 257
- Совпадение решеток 410—412
- Спайность 141, 400
- Стереографическая проекция 55—112, 447
- — ее поворот 67
- Стехиометрия 310, 311
- Стирлинга приближение 306
- Ступеньки на дислокациях 262
- — — заряженные 286, 297
- Сурьма, структура 130, 131
- Сфалерит, двойники 347
- дислокации 297
- структура 119, 132
- Сферические треугольники, решение 438
- Твердые растворы 142—147
- — внедрения 142
- — замещения 142
- — упорядоченные 144, 146
- Тензор 150—171
- антисимметричный 155
- второго ранга 151
- — — ограничения, налагаемые симметрией 163
- — — преобразование компонент 156—158
- главные компоненты 159
- — — оси 159—163
- ранг 150—158
- симметричный 158, 159
- Термическое ограничение 424
- Тетравакансия 333
- Тетрагональная система 42, 83, 84, 169
- Тетраэдрические пустоты 137
- Течение пластическое 202
- Титан, мартенситное превращение 378
- скольжение 289
- Томпсона тетраэдр 279
- Точечные группы 72—112
- — (таблица) 76, 77
- Точечные дефекты, конфигурации 313
- — образование 305, 307, 309
- — подвижность 308, 321
- — равновесная концентрация 307, 322
- — симметрия 329, 332
- — энергия образования 305, 310, 325
- Трансляционная симметрия 15, 24, 38
- Тригональная система 38, 46, 91—95, 169
- Трижды примитивная ячейка 48
- Триклинная система 38, 97, 98, 170
- Углерод, атомы внедрения в железе 330, 365, 462
- Углы между плоскостями в решетке 462
- Узлы дислокационные 241
- — в г. ц. к.-металлах 281
- — растянутые и стяннутые 281
- Упаковка плотнейшая 120—126, 135—141
- Упаковки дефект см. Дефект упаковки
- Упорядоченные твердые растворы 144, 146
- Упругая жесткость 187
- податливость 187
- энергия см. Энергия упругая
- Упругие постоянные 187
- — гексагональных кристаллов 195
- — кубических кристаллов 192
- — матрица 190
- — ограничения, налагаемые симметрией 188—198
- Упругое двойникование 359
- Уран, двойники 350
- Устойчивые дислокации (таблица) 270
- Флюорит, структура см. Кальций фтористый
- Форма кристалла 79, 420
- — общая 79
- — частная 80, 108, 109
- — равновесная 421
- Франка правило 269
- частичная дислокация 278
- Франка — Рида источник 258, 272
- Френкеля дефект см. Дефект Френкеля
- Характеристическая поверхность 165, 166—170
- — свойство радиуса-вектора и нормали 171
- Херринга уравнения 418
- Химическая сила, действие на дислокации 248—249
- Хирта барьер 284
- Хлористое серебро, точечные дефекты 307, 323

- Цезий хлористый, структура 16,
118, 132
 Центр симметрии 25
 Центры окраски 311, 316
 Цинк, двойникование 351
 Цинковая обманка см. Сфалерит
 Цирконий, двойникование 349
 — мартенсит 372, 378
 — скольжение 289
 Циркония окись 388
- Частично когерентные границы 429
 Частичные дислокации 278, 280, 288
- Шокли частичные дислокации 275,
360
 Шоттки дефект 310, 321
 Шпинель, структура 119, 139
 — обращенная 139
- Щелочногалоидные кристаллы, ди-
 слокации 285—288
 — — скольжение 212
 — — точечные дефекты 309—311
- Эйнштейна правило 155
 Электропроводности тензор 151, 153,
160
 Электропроводность ионных кри-
 сталлов 321—323
 Электросопротивление закаленных
 металлов 323
 — облученной меди 328
 Элементарная ячейка 13, 15, 40
 — — не примитивная 33
 Эnantиморфизм 72
 Эnantиморфные классы симметрии
 99
 Энергия образования вакансий 306,
398, 325
 — уругая 189
 Энтропия, обусловленная точечными
 дефектами 305, 306
 Эпитаксия 431, 432
- Юнга модуль 196
- Ядро дислокации 251
 — — энергия 267, 268, 403

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора	5
Предисловие авторов	9

Часть I. СОВЕРШЕННЫЕ КРИСТАЛЛЫ

Глава 1. Геометрия решетки	11
1.1. Элементарная ячейка	11
1.2. Плоскости и направления в решетке	17
1.3. Зоны и правило зон	22
1.4. Элементы симметрии	24
1.5. Ограничения, накладываемые на элементы симметрии	26
1.6. Возможные сочетания элементов поворотной симметрии	33
1.7. Кристаллографические системы	37
1.8. Пространственные решетки (решетки Бравэ)	38
<i>Задачи</i>	51

Глава 2. Стереографическая проекция и точечные группы	55
1.2. Основные понятия	55
2.2. Построение проекций	60
2.3. Построения с помощью сетки Вульфа	66
2.4. Элементы макроскопической симметрии	72
2.5. Ромбическая (орторомбическая) система	78
2.6. Тетрагональная система	83
2.7. Кубическая система	84
2.8. Гексагональная система	87
2.9. Тригональная (ромбоэдрическая) система	91
2.10. Моноклинная система	95
2.11. Триклинная система	97
2.12. Эnantиморфные классы кристаллов	99
2.13. Классы Лауэ	99
2.14. Пространственные группы	99
<i>Задачи</i>	112

Глава 3. Кристаллические структуры	116
3.1. Введение	116
3.2. Наиболее распространенные структуры металлов	117
3.3. Родственные металлические структуры	127
3.4. Другие элементы	128
3.5. Соединения	131
3.6. Плотная упаковка	135
3.7. Межатомные расстояния	141
3.8. Твердые растворы	142
<i>Задачи</i>	147

Глава 4. Тензоры	150
4.1. Природа и свойства тензоров	150
4.2. Преобразование компонент вектора	151
4.3. Немой индекс (индекс суммирования)	155
4.4. Преобразование компонент тензора второго ранга	156
4.5. Определение тензора	158
4.6. Тензор, отнесенный к главным осям	159
4.7. Ограничения, налагаемые симметрией кристалла	163
4.8. Характеристическая поверхность	166
<i>Задачи</i>	170
 Часть II. НЕСОВЕРШЕННЫЕ КРИСТАЛЛЫ 	
Глава 5. Напряжения, деформации и упругость	172
5.1. Деформации (введение)	172
5.2. Бесконечно малая деформация	173
5.3. Однородная деформация	177
5.4. Напряжение	180
5.5. Упругость кристаллов	187
<i>Задачи</i>	198
Глава 6. Скольжение	202
6.1. Трансляционное скольжение	202
6.2. Элементы скольжения	206
6.3. Независимые системы скольжения	213
6.4. Большие деформации	220
<i>Задачи</i>	231
Глава 7. Дислокации	234
7.1. Введение	234
7.2. Движение дислокаций	241
7.3. Сила, действующая на дислокацию	244
7.4. Искажения в кристалле, содержащем дислокацию	249
7.5. Положение атомов около дислокации	254
7.6. Взаимодействие дислокаций	257
<i>Задачи</i>	262
Глава 8. Дислокации в кристаллах	265
8.1. Упругая энергия дислокации	265
8.2. Дефекты упаковки и частичные дислокации	273
8.3. Дислокации в г. ц. к.-металлах	276
8.4. Дислокации в кристаллах со структурой каменной соли	285
8.5. Дислокации в гексагональных металлах	288
8.6. Дислокации в о.ц.к.-кристаллах	292
8.7. Дислокации в некоторых ковалентных кристаллах	296
<i>Задачи</i>	301

Глава 9. Точечные дефекты	305
9.1. Введение	305
9.2. Точечные дефекты в ионных кристаллах	309
9.3. Комплексы точечных дефектов	311
9.4. Конфигурации точечных дефектов	313
9.5. Опыты с равновесными точечными дефектами	318
9.6. Опыты на закаленных металлах	323
9.7. Радиационные дефекты	327
9.8. Неупругость и симметрия точечных дефектов	329
<i>Задачи</i>	334
Глава 10. Двойникование	337
10.1. Введение	337
10.2. Описание механического двойникования	339
10.3. Примеры двойниковых структур	345
10.4. Элементы двойникования	353
10.5. Морфология механических двойников	357
<i>Задачи</i>	362
Глава 11. Мартенситные превращения	365
11.1. Введение	365
11.2. Кристаллографические особенности мартенситных превращений	366
11.3. Мартенситное превращение в кобальте	371
11.4. Мартенситное превращение в цирконии	372
11.5. Мартенситные превращения в сплавах индий — таллий	379
11.6. Мартенситные превращения в сталях	383
11.7. Мартенситные превращения в сплавах меди	387
11.8. Мартенситные превращения в неметаллах	388
11.9. Кристаллографические аспекты зарождения и роста мартенсита	389
<i>Задачи</i>	393
Глава 12. Поверхности раздела в кристаллах	396
12.1. Структура поверхностей и свободная поверхностная энергия	396
12.2. Структура и энергия границ зерен	402
12.3. Стыки границ	414
12.4. Формы кристаллов и зерен	420
12.5. Границы раздела между разными фазами	427
<i>Задачи</i>	432
Приложение 1. Кристаллографические вычисления	437
A1.1. Координатная геометрия	437
A1.2. Решение сферических треугольников	438
A1.3. Отношение синусов	441
A1.4. Матрицы	442
A1.5. Доказательство свойств стереографической проекции	447
Приложение 2. Векторная алгебра и обратная решетка	451
A2.1. Векторная алгебра	451
A2.2. Обратная решетка	454

Приложение 3. Межплоскостные расстояния и углы между плоскостями	459
А3.1. Межплоскостные расстояния	459
А3.2. Межплоскостные углы	461
Приложение 4. Преобразование индексов при перемене выбора элементарной ячейки	465
А4.1. Преобразование индексов плоскости	465
А4.2. Преобразование индексов направлений	467
А4.3. Преобразование ромбоэдрических и гексагональных индексов	468
А4.4. Доказательство уравнений преобразования	471
Приложение 5. Кристаллические] структуры элементов и соединений	472
Ответы к задачам	479
Предметный указатель	486

УВАЖАЕМЫЙ ЧИТАТЕЛЬ!

Ваши замечания о содержании книги, ее оформлении, качестве перевода и другие просим присылать по адресу:
129820, Москва, И-110, ГСП, 1-й Рижский пер., 2,
издательство «Мир».

А. Келли, Г. Гровс

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И ДЕФЕКТЫ В КРИСТАЛЛАХ

Редактор В. С. Хангулова

Художник А. Ясинский

Художественный редактор Ю. С. Урманчев

Технический редактор Ф. Х. Третьякова. Корректор И. С. Соколова

Сдано в набор 21/IX-1973 г. Подписано к печати 25/I-1974 г.

Бумага тип. № 2 60×90^{1/16}=15,75 бум. л. 31,50 печ. л., в т/ч 4 вкл.

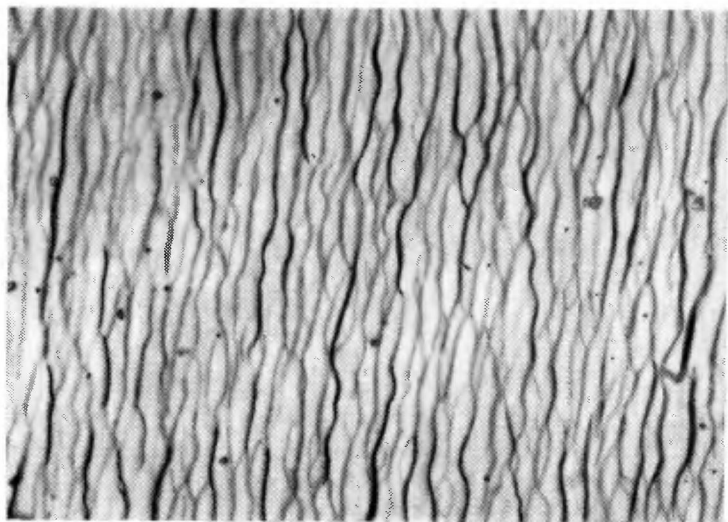
Уч.-изд. [л. 30,22 Изд. № 20/7176 Цена 2 р. 64 к. Зак. 01221

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР», Москва, 1-й Рижский пер., 2

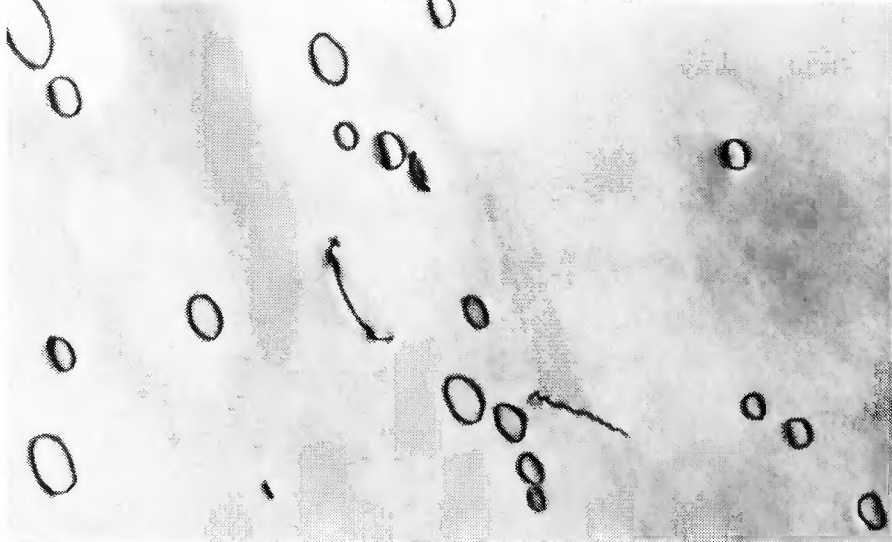
Ордена Трудового Красного знамени Московская типография № 7
«Искра революции» Союзполиграфпрома при Государственном комитете
Совета Министров СССР по делам издательств, полиграфии и книжной
торговли. Москва К-1, Трехпрудный пер., 9



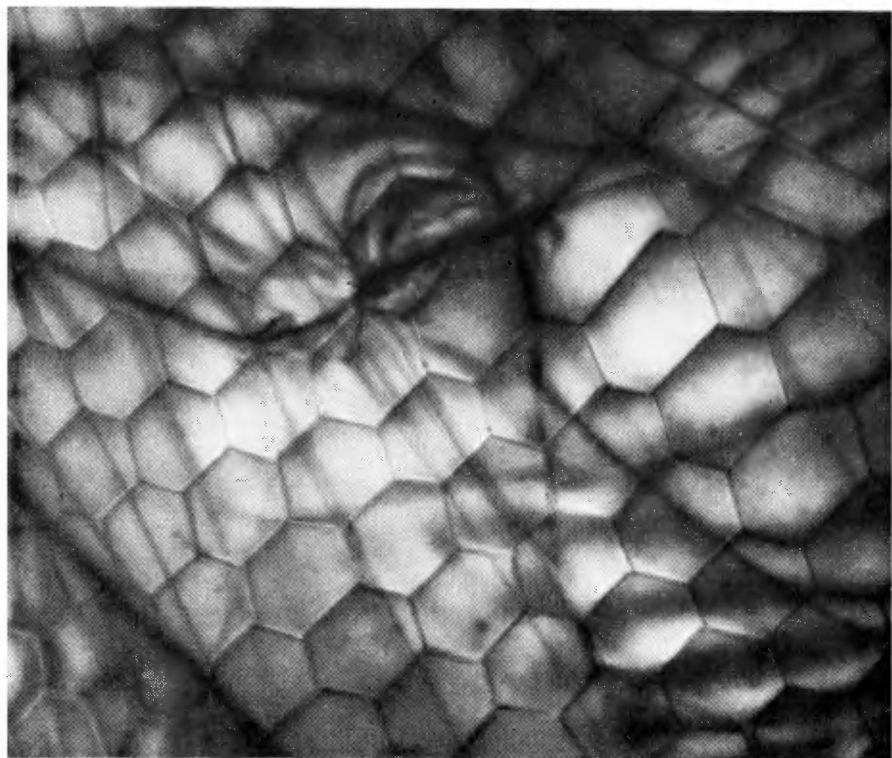
6А. Скопления линий скольжения в сплаве $\text{Cu} - \text{Ni}$. $\times 600$ (Р. А. Фоксгал).



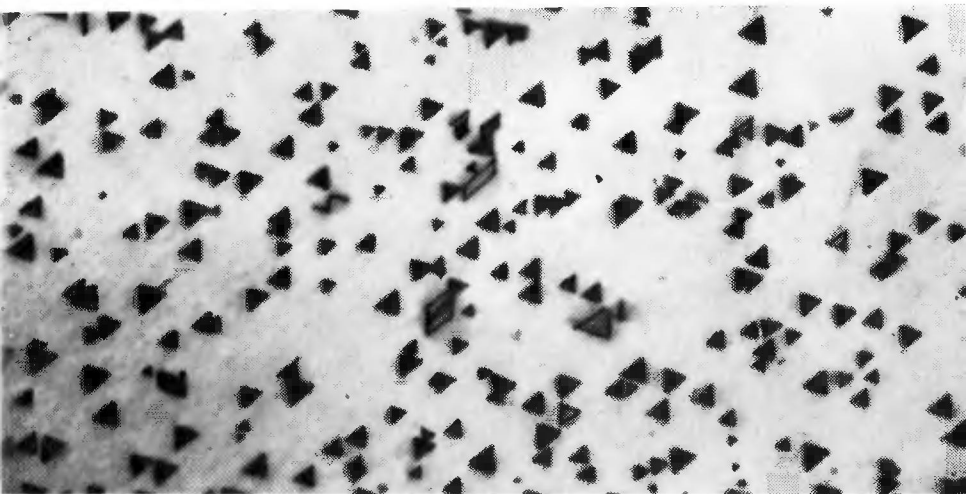
6Б. Волнистое скольжение в ниобии. $\times 750$ (М. С. Дьюсберри).



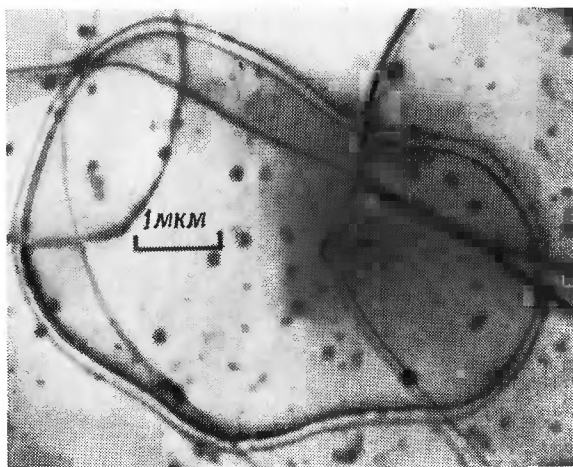
7А. Петли краевых дислокаций в кристалле окиси магния. $\times 20\,000$.



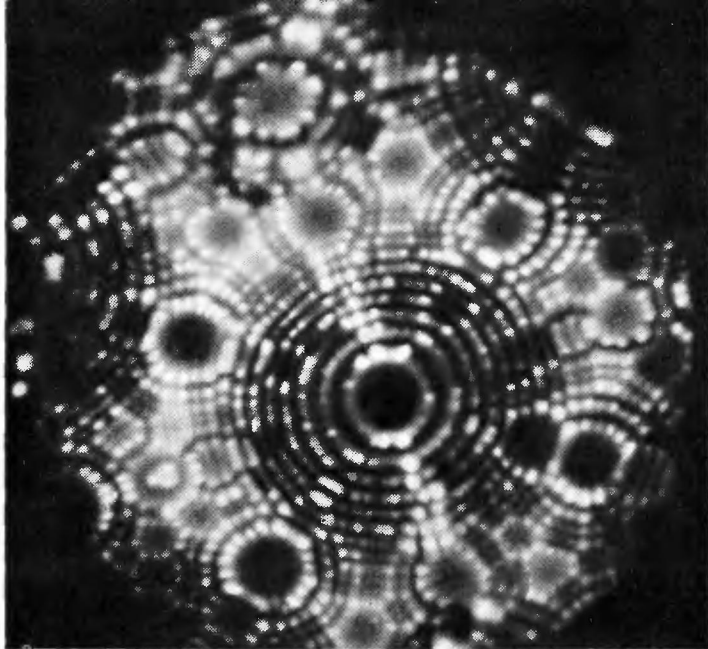
7Б. Дислокационная сетка в кристалле нитрида бора. $\times 20\,000$.



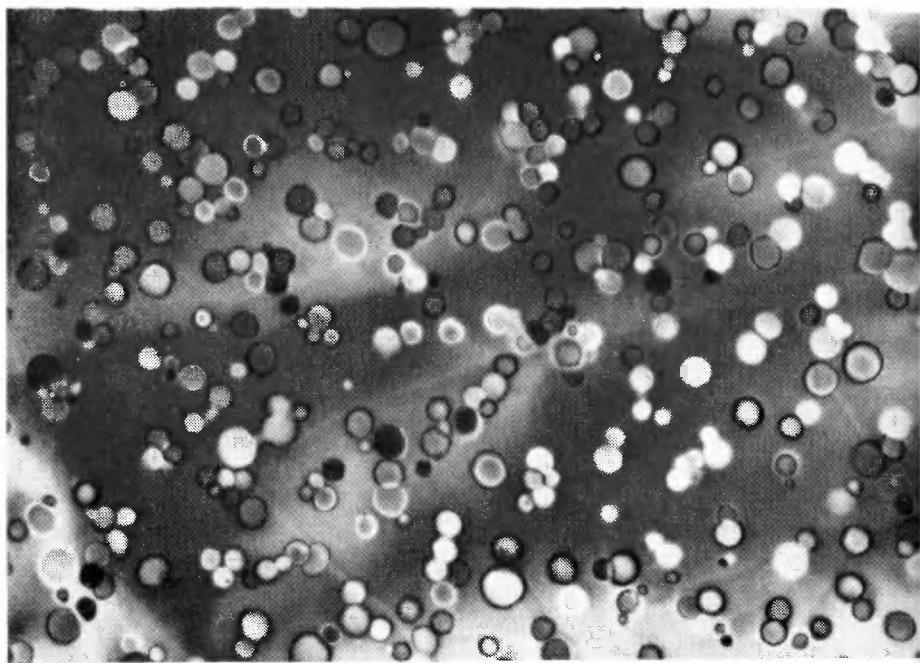
8А. Тетраэдры дефектов упаковки в закаленном золоте. $\times 40\,000$
(М. Дж. Уилан).



8Б. Дислокационная петля в графите
(видно расщепление на частичные дислокации).



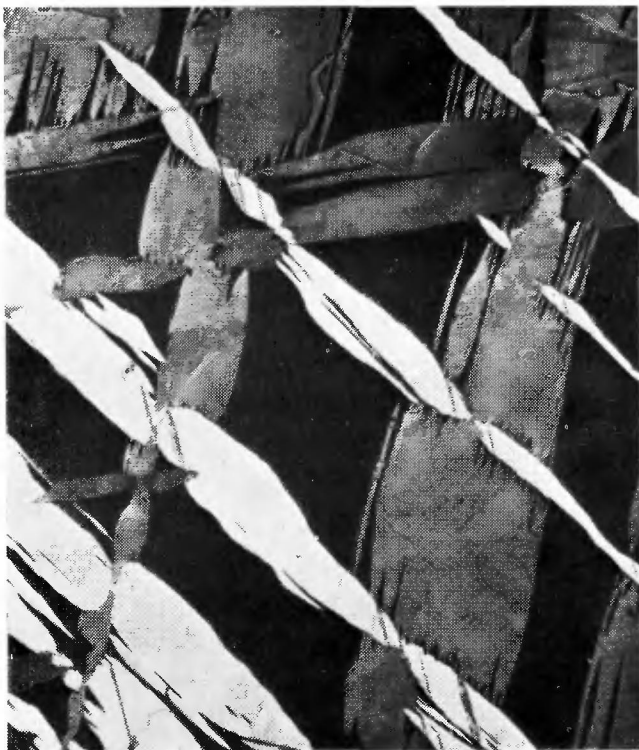
9А. Острие вольфрамовой иглы, сфотографированное в ионном микроскопе (Д. А. Смит).



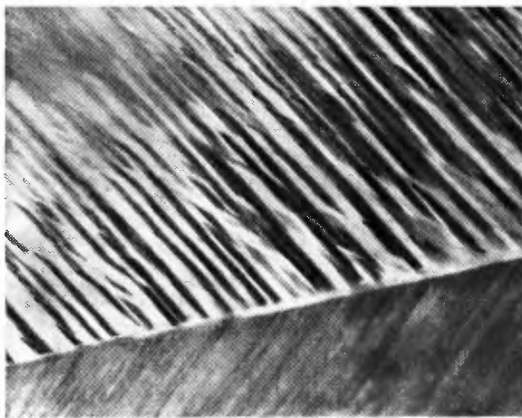
9Б. Дислокационные петли в графите при скоплении точечных дефектов, возникших под действием нейтронного облучения. $\times 35\,000$ (Р. М. Майер).



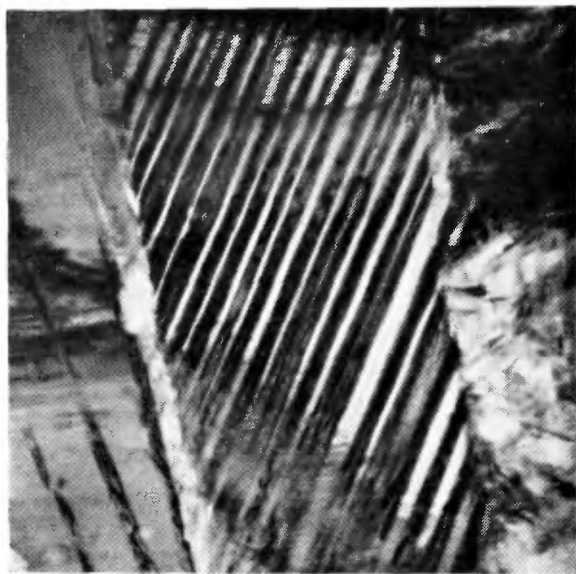
10А. Двойниковые ламели в деформированном олово. $\times 180$ (Н. А. Боучер).



10Б. Двойниковые ламели в деформированном сплаве Вi — 5% Sb. $\times 130$
(У. С. Куунс и Э. Э. Ундервуд).



11А. Край внутренне
сдвойникованной
мартенситной пластинки
в стали с 24% Ni
(0,5% С). $\times 30\,000$
(М. Г. Узле).



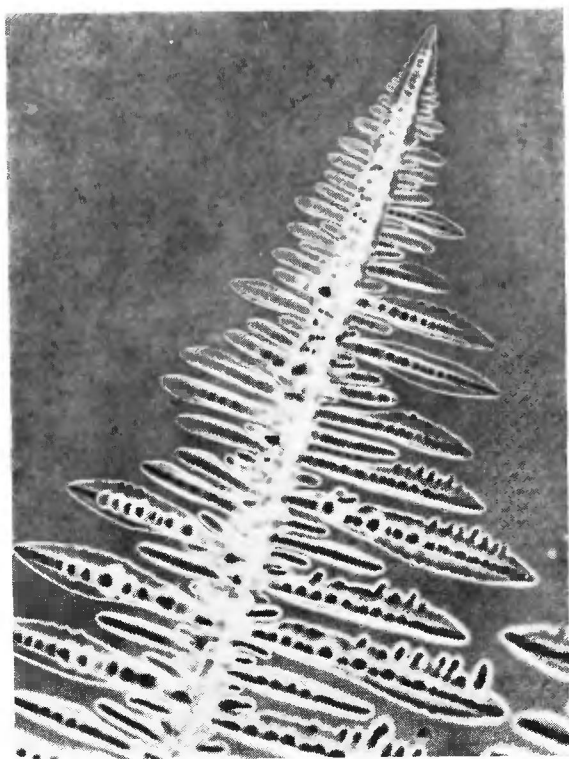
11Б. Двойниковая
мартенситная ламель
в сплаве Ti — Nb. $\times 30\,000$
(У. А. Соффа).



11В. Зигзагообразный
мартенсит в стали
с 24% Ni (0,5% С). $\times 12\,000$
(М. Г. Узле).



12А. Межграницные дислокации в пластинчатых выделениях в сплаве Al — Cu. $\times 90\,000$ (Л. Г. Бонар).



12Б. Дендриты кристаллизующегося циклогексанола. $\times 60$ (Дж. Д. Хант)



12В. Фотография (получена в ионном микроскопе) большеугловой границы между зернами (указана стрелкой) в сплаве W — 5% Re (Д. А. Смит).