

**ПРОИСХОЖДЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ И КЛАСТЕРНАЯ МОДЕЛЬ ЖИДКОСТИ****В.И. Большаков, Г.М. Воробьев, Л.С. Кривуша, И.А. Тютерев, Н.А. Ротт***Приднепровская государственная академия строительства  
и архитектуры*

**Анализ последних исследований.** В научной и учебной литературе считается общепризнанным, что плотность дислокаций в реальных металлических кристаллах находится в пределах  $10^6 \dots 10^8 \text{ см}^{-2}$ .

Однако до настоящего времени отсутствует объяснение механизма образования дислокаций указанной выше плотности при кристаллизации.

В книге [1] описаны пять механизмов образования дислокаций.

Первый механизм связан с ростом кристаллов путем последовательного присоединения атомов к его поверхности с винтовой дислокацией, перпендикулярной к ней. Наличие такой дислокации обеспечивает постоянное присутствие ступеньки на поверхности растущего кристалла, что дает высокую скорость роста кристалла по сравнению с моделью кристаллического двумерного зародыша [2].

Согласно [1] «кристалл, содержащий винтовую дислокацию, представляет собой атомную поверхность, закрученную по спирали. Как же возникает такое закручивание? Известно, что, как правило, зарождение кристалла не самопроизвольное. Кристаллы зарождаются на готовой подложке, которой могут служить стенки изложницы и мельчайшие твердые частицы, взвешенные в расплаве. На поверхности таких подложек выходят винтовые дислокации, т.е. здесь имеются готовые ступеньки, к которым присоединяются атомы из кристаллизующегося расплава. Таким образом, винтовая дислокация как бы «прорастает» в образующийся кристалл».

С описанным выше механизмом образования винтовой дислокации в растущем кристалле нельзя полностью согласиться потому, что винтовая дислокация, как бы «прорастающая» из изложницы в образующийся кристалл, должна вызывать приваривание отливки к изложнице, что в литейном производстве не допускается. Кроме того, при такой модели кристаллизации каждому зерну, т.е. кристаллу отливки, соответствует одна винтовая дислокация, которая дает плотность дислокаций в металле со средним размером  $D$ , равную примерно  $\frac{D}{D^3}$ . При среднем размере зерна от 10 до 50 мкм плотность дислокаций получается равной:

$$\frac{50 \cdot 10^{-4}}{(50 \cdot 10^{-4})^3} = \frac{50 \cdot 10^{-4}}{10^{-12} \cdot 125000} = 10^8 \cdot \frac{1}{2500} = \frac{1}{25} \cdot 10^6 = 4 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2};$$

$$\frac{10 \cdot 10^{-4}}{10^3 \cdot 10^{12}} = \frac{10^8}{10^2} = 10^6 \text{ см}^{-2}.$$

Таким образом, описанный выше механизм для практически наблюдаемого интервала среднего размера зерен литых металлов дает значительно более низкую плотность, чем  $10^6 \dots 10^8 \text{ см}^{-2}$ . Далее предложенный механизм дает только винтовые дислокации, а в реальных кристаллах отливок присутствуют и винтовые, и краевые дислокации.

По второму механизму дислокации могут возникать при ориентированном нарастании кристалла на подложку, и чем больше несоответствие двух решеток, тем выше плотность эпитаксиальных дислокаций.

Однако эпитаксиальные дислокации могут возникать только на поверхности кристаллов, в то время как в подавляющем большинстве реальных кристаллов не наблюдается повышенной плотности дислокаций в приповерхностных слоях.

Третья причина возникновения дислокаций (за счет сегрегации примесных атомов) может иметь место только в сплавах, а трехмерная сетка дислокаций с плотностью  $10^6 \dots 10^8 \text{ см}^{-2}$  наблюдается как в сплавах, так и в чистых металлах.

Четвертый источник дислокаций, возникающих за счет захлопывания вакансионных дисков, наиболее вероятен в облуженных и закаленных металлах.

Описание пятого источника дислокаций мы посчитали целесообразным привести по книге [1]:

«Дислокации могут возникать во время кристаллизации из-за разных случайностей при росте кристаллов. Эти случайности приводят к образованию мозаичной структуры – кристалл состоит из субзерен (блоков), слегка взаимно разориентированных. Одна из возможных причин образования субзерна – изгиб очень «нежных» ветвей дендрита из-за конвенционных токов, градиента температуры и действия других факторов. Когда слегка разориентированные ветви одного дендрита срастаются, то на границе между ними возникают дислокации».

В этой цитате самым существенным, с нашей точки зрения, является второе предположение.

Блоки мозаики по теории дислокаций являются ячейками трехмерной сетки дислокаций, которой соответствует их плотность порядка  $10^6 \dots 10^8 \text{ см}^{-2}$ . И если блоки мозаики являются результатом случайностей при кристаллизации, то это равносильно признанию отсутствия механизма их возникновения. Блоки мозаики многократно наблюдались в кристаллах как сплавов, так и чистых металлов. Однако в чистых металлах не обнаруживаются дендриты, с которыми автор [1] связывает образование блоков.

**Актуальность проблемы.** Таким образом, можно констатировать, что в литературе отсутствует объяснение закономерностей образования трехмерной сетки дислокаций в реальных металлических кристаллах.

В связи с этим **целью настоящей работы** была разработка механизмов образования трехмерной сетки дислокаций при кристаллизации металлических расплавов.

**Постановка проблемы в общем виде.**

Для решения этой задачи была использована кластерная модель жидкости.

В данной работе под кластерами понимаем субмикрообъем жидкости, тепловые колебания атомов которой согласованы [3]. Согласованность тепловых колебаний атомов кластера должна вести, с нашей точки зрения, к повышенной упорядоченности расположения атомов в кластере, которая является отличительным признаком всех литературных характеристик кластеров [4]. Однако мы считаем, что кластер не может быть второй фазой в жидкой фазе. От неупорядоченной зоны жидкости кластер отличается только согласованным колебанием атомов. Взаимодействие кластеров может приводить к их разрушению или укрупнению, в зависимости от особенностей согласованных колебаний атомов в

кластерах. Изменение размеров кластеров может происходить при взаимодействии их с неупорядоченной зоной жидкости и между собой.

На рисунке 1 представлена модель взаимодействия двух кластеров, согласно которой возможно образование винтовой дислокации по границе соприкосновения двух кластеров типа границы кручения.

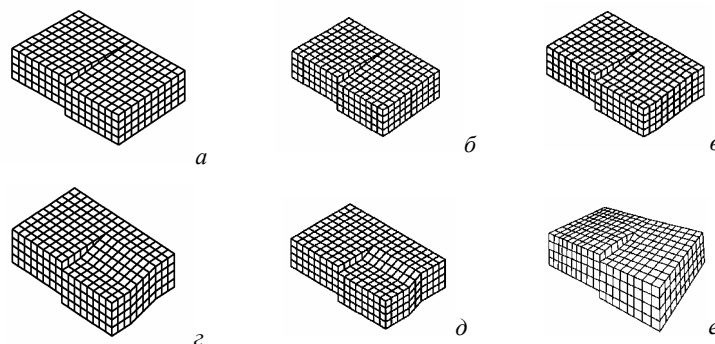


Рис. 1. Схема поэтапного образования винтовой дислокации.

Постепенная перестройка границы кручения может происходить за счет высокой температуры кристаллизации, характеризующейся интенсивным тепловым движением атомов.

Порядок перехода границы кручения может определяться первоначальными перемещениями тех атомов, которые смещены от положений в идеальной решетке на небольшое расстояние. Перемещение этих атомов способствует переходу более удаленных атомов. В результате этих переходов окончательно формируется винтовая дислокация. Движущей силой этих переходов должно быть уменьшение свободной энергии границы кручения.

Как следует из цитаты, приведенной выше, автор [1] рассматривал возможность образования винтовых дислокаций при возникновении кристаллов только извне; при росте кристаллов на подложке, содержащей винтовую дислокацию. Предлагаемый в настоящей работе механизм не требует наследования винтовых дислокаций подложки: внутренний источник винтовых дислокаций – это взаимодействие двух кластеров по границе кручений.

Преобразование двух соприкасающихся кластеров жидкости в зародыш кристаллизации может происходить в результате взаимодействия тепловых колебаний атомов этих кластеров, если эти колебания отличаются только фазой.

Если разность фаз колебаний атомов двух кластеров будет составлять порядка  $10^0$ , то при их соприкосновении возможно постепенное уменьшение амплитуды колебаний атомов. Это утверждение объясняется следующей моделью.

Допустим, имеется два грузика, подвешенных в одной точке на двух нитях. Если оттянуть эти два грузика на один и тот же угол, а затем один груз отпустить, дав возможность ему колебаться, а через небольшой промежуток времени отпустить второй грузик, то эти грузы столкнутся вблизи противоположной верхней точки отклонения колебаний. Это произойдет в момент движения вниз первого грузика после достижения им верхней точки. Перед столкновением второй грузик будет приближаться к верхней противоположной точке колебаний, а первый грузик будет удаляться от неё. Столкновение произойдет при небольших скоростях движения грузиков, движущихся в противоположных направлениях. После столкновения оба грузика будут колебаться с одинаковой фазой, но с уменьшенной амплитудой.

Поскольку уменьшение амплитуды колебаний атомов равносильно уменьшению температуры соприкасающихся кластеров, то это может привести к их переохлаждению, что является предпосылкой преобразования этих кластеров в зародыше кристаллизации.

Теплота, выделяющаяся при переходе соприкасающихся кластеров в зародыш кристаллизации, возможно, отводится к внешней поверхности жидкости электронным газом, так как именно он определяет теплопроводность металлов. Возможно, что часть атомов за счет выделившейся при столкновении энергии уходит в разупорядоченную зону жидкости.

При таком механизме образования зародыша кристаллизации исчезает проблема возникновения критического зародыша кристаллизации и необходимость возникновения очень больших флуктуаций плотности жидкости.

Выше упоминался механизм роста кристаллов с образованием вращающейся ступеньки вокруг винтовой дислокации. Однако автор [5] справедливо указывает, что на иллюстрациях, приводимых в качестве доказательства такого механизма, ступеньки имеют высоту, значительно превосходящую размер атома или молекулы. Эту трудность можно преодолеть, если предположить, что к растущей ступеньке грани кристалла присоединяются не атомы, а кластеры.

Чтобы при таком предположении полностью удовлетворить эксперимент, следует предположить, что ступенька вращается вокруг не одной дислокации, а относительно нескольких. Причем вектор Бюргерса всех этих дислокаций равен размеру кластера, так как высота ступеньки равна шагу винтовой поверхности. Поэтому для объяснения может быть использован механизм образования сравнительно большого количества одноименных близко расположенных винтовых дислокаций при контакте плоских поверхностей двух кластеров по типу, представленному на рисунке 1.

Винтовые дислокации могут возникать не только при образовании зародыша кристаллизации, но и в процессе роста кристалла.

При контакте поверхности кристалла с кластером последний может закрепиться на ней, превратившись в часть кристалла. Наиболее вероятно такое явление может произойти в том участке поверхности кристалла, где тепловые колебания его атомов будут совпадать по частоте с колебаниями атомов кластера, но с небольшой разностью фаз колебаний. В этом случае амплитуда колебаний атомов кластера уменьшится, и он может перейти в кристаллическое состояние. Если частоты кристалла и кластера не совпадают или разность фаз будет большой, то кластер, скорее всего, разрушится и перейдет в разупорядоченную зону.

Если площадь контакта поверхности кристалла и кластера будет иметь характер границы кручения, то она может превратиться в одну или несколько винтовых дислокаций, параллельных поверхности кристалла, и по такому механизму могут строиться винтовые отрезки трехмерной сетки дислокаций.

Краевые дислокации трехмерной дислокационной сетки могут возникать при взаимодействии кластеров с образованием границы наклона и переходом в зародыш кристаллизации (рис. 2).

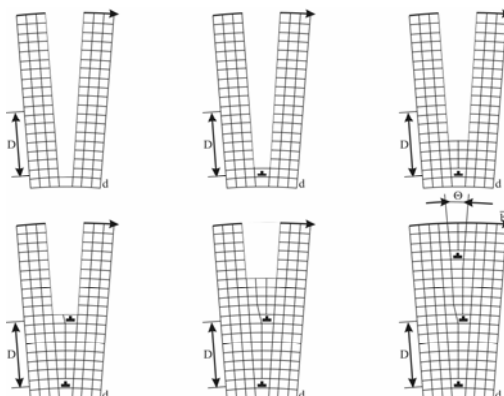


Рис. 2. Схема поэтапного образования краевой дислокации.

Возможно также присоединение кластера к поверхности растущего кристалла с образованием общей кристаллической решетки. При этом возможно присоединение кластера со ступенькой на поверхности, как показано на рисунке 3.

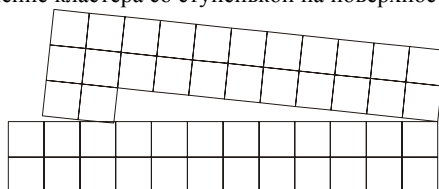


Рис. 3. Образование линейной дислокации при соприкосновении кластера со ступенькой на поверхности с плоской поверхностью кристалла.

Рост подобных фрагментов на поверхности кристалла внесет вклад в формирование краевой составляющей трехмерной сетки дислокаций. При этом будут возникать краевые дислокации, параллельные поверхности кристалла. На поверхности кристалла может произойти соприкосновение кластеров, один из которых имеет ступеньку (рис. 4).

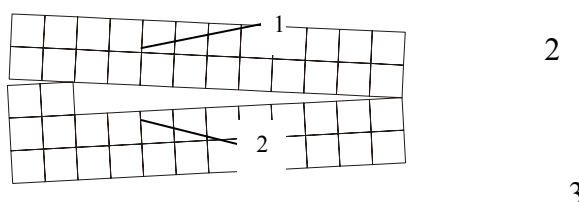


Рис. 4. Соприкосновение кластеров, один из которых имеет ступеньку:

- 1 – кластер с плоскими поверхностями;
- 2 – кластер с атомной ступенькой.

В этом случае при росте фрагмента кристалла из кластеров 1 и 2 возникнет дислокация, параллельная поверхности кристалла. Эта дислокация, как рассмотренные ранее, может искривиться в соответствии с особенностями роста кристаллов. Основная часть трехмерной сетки дислокаций должна образоваться в процессе роста кристалла. При росте закристаллизовавшихся кластеров, показанных на рисунке 4, с поворотом их кристаллической решетки по отношению к решетке кристалла вокруг оси, перпендикулярной к плоскости его соприкосновения с кластерами, возможно одновременное возникновение краевых и винтовых дислокаций.

Рост закристаллизовавшихся кластеров до размера блоков обеспечивает получение плотности дислокаций в соответствии с формулой:

$$\rho = \frac{3}{D^2},$$

где средний размер блоков:

при  $D = 10^{-4}$  см

при  $D = 10^{-5}$  см

при  $D = 5 \cdot 10^{-4}$  см

$\rho = 3 \cdot 10^8$  см<sup>-2</sup>;

$\rho = 3 \cdot 10^{10}$  см<sup>-2</sup>;

$\rho = \frac{3}{20} \cdot 10^8 \approx \frac{1}{8} \cdot 10^8 \approx 10^7$  см<sup>-2</sup>.

То есть предложенный механизм возникновения дислокаций позволяет получить среднюю плотность дислокаций порядка  $10^6 \dots 10^8$  см<sup>-2</sup>.

Из литературы [6] известно, что с увеличением скорости роста кристаллов увеличивается угол мозаичности его блоков, но уменьшаются их размеры.

Этот экспериментальный факт можно связывать с тем, что в этом случае появляется возможность кристаллизации кластеров с большим углом поворота его кристаллической решетки по отношению к решетке растущего кристалла и увеличение количества кластеров, способных кристаллизоваться на кристалле, как на подложке.

#### ВЫВОДЫ

1. Рассмотрены различные варианты возникновения дислокаций, приведенные в литературе.
2. Показано, что ни один из вариантов не может обеспечить формирования в реальных кристаллах трехмерной сетки дислокаций с плотностью  $10^6 \dots 10^8 \text{ см}^{-2}$  в равновесном состоянии.
3. Исходя из кластерной модели жидкости и определения кластера как субмикрообласти жидкости, в которой тепловые колебания атомов согласованы, предложены варианты возникновения дислокаций при кристаллизации жидкости с образованием трехмерной сетки дислокаций с общей плотностью дислокаций  $10^0 \dots 10^9 \text{ см}^{-2}$ .

#### Литература

1. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов: Учебное пособие для вузов. М.: Metallургия, 1983. – 232 с.
2. Уманский Я.С., Скаков Ю.А. Физика металлов. Атомное строение металлов и сплавов: Учебник для вузов. – М.: Атомиздат, 1987. – 352 с.
3. Большаков В.И., Воробьев Г.М., Кривуша Л.С., Тютчев И.А., Ротт Н.А. О кластерной модели строения металлических расплавов // Вісник Придніпровської державної академії будівництва та архітектури. – Днепропетровск: ПГАСА, 2008. – № 5. – С. 5 – 10.
4. Архаров В.И., Новохацкий И.А. Макрогетерогенное строение жидких металлов//Докл. АН СССР. – 1969. – № 5. – С. 1069.
5. Гаврилин В.И. Плавление и кристаллизация металлов и сплавов/Гос. ун-т. - Владимир. 2000. – 260 с.  
Гогоберидзе Д.Б. Некоторые объёмные дефекты кристаллических металлов и результаты их изучения. - Ленинград, ЛНГУ, 1952. – 196 с.