

01;05.1

©1994

## О ПРИРОДЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ПРЕДЕЛА ТЕКУЧЕСТИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ С РАЗЛИЧНЫМ ТИПОМ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

*А. Ф. Шуров*

В исследованиях пластических свойств твердых тел в зависимости от уровня напряжений и скоростей деформирования различают два механизма движения дислокаций: в области малых напряжений определяющим является термофлуктуационное преодоление дислокациями барьеров Пайерлса и локальных центров закрепления (квазистатический механизм); в области высоких напряжений и больших скоростей главную роль в торможении дислокаций играет вязкое трение, обусловленное газом свободных электронов и фононов (динамический механизм). Роль электронной структуры в динамическом движении дислокаций исследована в ряде работ, например, [1].

На существование корреляционных связей между электронным строением и пластичностью металлов и ковалентных кристаллов обращали внимание многие авторы, например [2,3], однако роль электронов в процессах квазистатического движения дислокаций в рельефе Пайерлса еще не выяснена. В кратком обзоре по этому вопросу была высказана мысль об использовании параметра экранирования для установления связи между пластичностью и свойствами газа электронов в твердом теле [4].

Совместный анализ моделей Френкеля-Конторовой и Пайерлса, выполненный Зегером и Шиллером [5], для дислокации в приближении упругой струны с перегибами, перемещающейся в периодическом поле  $U(x)$  с периодом  $a$ , приводит к соотношению

$$U_0 = \frac{\sigma_p b a}{2\pi}, \quad (1)$$

где  $U_0 = E_1 - E_2$  — энергия (барьер) Пайерлса на единицу длины дислокации ( $E_1$  и  $E_2$  — энергии дислокации в положениях минимума и максимума потенциального рельефа),  $\sigma_p$  — напряжение Пайерлса,  $b$  — длина вектора Бюргерса,

$a$  — межатомное расстояние в направлении движения дислокации. Дальнейшее рассмотрение связи  $\sigma_p$  с электронной структурой кристалла основывается на предположении, что энергия  $U_0$  равна энергии перестройки атомов в ядре дислокации при ее консервативном движении сквозь решетку. Как известно [6], в ковалентных кристаллах при продвижении дислокации на одно межатомное расстояние должна быть разорвана как минимум одна связь. В металлах эта энергия будет определяться эффективным потенциалом межионного взаимодействия [7]. Запишем энергию перестройки атома в ядре дислокации в расчете на один ион через экранированное кулоновское взаимодействие между ионами:

$$U_0 = \frac{1}{2} \frac{Z^2 e^2}{a} \exp(-r_0/L), \quad (2)$$

где  $e$  — заряд электрона,  $Z$  — валентность иона,  $r_0$  — радиус ядра, равный примерно ширине дислокации;  $L$  — длина экранирования [8]: для классического электронного газа в ковалентных структурах

$$L = \left( \frac{4\pi e^2 n_0}{k_B T} \right)^{-1/2}, \quad (3)$$

для вырожденного электронного газа в металлах

$$L = [4\pi e^2 N(E_F)]^{-1/2} = \left[ \frac{6\pi e^2 n_0}{E_F} \right]^{-1/2}. \quad (4)$$

В формуле (4)  $n_0$  — концентрация электронов проводимости, в формуле (3)  $n_0$  — средняя локальная концентрация носителей.

Сравним формулы (1) и (2), пересчитаем  $U_0$  на межатомное расстояние  $a$ , положим  $a \approx b$ , энергия связи  $E_{св} \sim \sim Z^2 e^2 / 2a$  и теоретическая прочность  $\sigma_m \sim 2\pi E_{св} / b^3$ . Тогда окончательно получим

$$\sigma_p \sim \sigma_m \exp(-r_0/L). \quad (5)$$

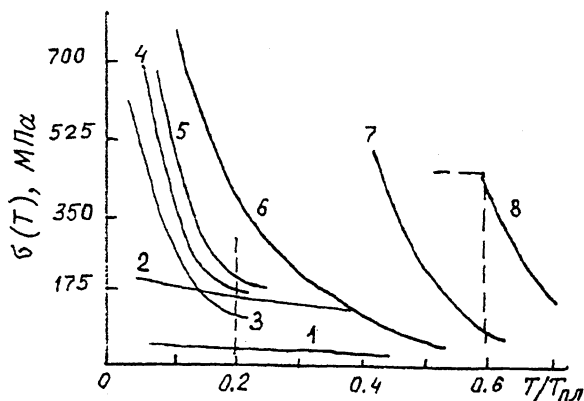
Будучи по сути эвристическим, соотношение (5) не представляет ценности с точки зрения конкретных расчетов параметров пластичности, однако оно позволяет выявить важные качественные закономерности. Из (5) следует, что основной характеристикой, коррелирующей с напряжением Пайерлса, является плотность состояний на уровне Ферми

Оценки по формуле (5) значений напряжений Пайерлса (отнесенные к  $G$ ) для кристаллов с различным типом связи. Для сравнения приведены экспериментальные данные из книги [6].

Тип кристалла, примеры	$L, \text{Å}$	$r_0, \text{Å}$	$\sigma_p/G$		Характер разрушения
			Формула (5)	Эксперимент [6]	
Простые металлы с ГКЦ структурой (Cu, Al, Ag)	0.6-1.0	$\sim 10$	$< 10^{-5}$	$< 10^{-5}$	Пластичный
Переходные металлы с ОЦК структурой (Cr, Fe, Mo, W)	0.8-1.5	3-5	$\sim 10^{-3}$	$\sim 5 \cdot 10^{-3}$	Малопластичный
Ковалентные кристаллы со структурой алмаза, сфалерита и др. (Si, Ge, ZnS, Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> )	100-300	2-5	от $10^{-1}$ до $10^0$	$\sim 10^0$	Хрупкий

*Примечание.* Для расчета величины  $L$  данные о концентрациях электронов взяты из [14]. Принято  $\sigma_m = G/10$ .

(или концентрация электронов проводимости). Общие закономерности изменения напряжения Пайерлса в зависимости от кристаллической и электронной структуры прослеживаются по данным таблицы. Именно связью напряжения Пайерлса с отношением  $r_0/L$  обуславливаются пластические свойства большинства кристаллических материалов. Прежде всего, оценки  $\sigma_p$  по формуле (5) хорошо согласуются с экспериментальными значениями, приведенными в [6]. Четко прослеживается зависимость величины  $\sigma_p$  от типа межатомной связи. В простых металлах при высокой концентрации электронов проводимости ( $n_0 \sim 10^{22} - 10^{23} \text{ см}^{-3}$ ), радиус экранирования примерно равен размеру металлических ионов, которые становятся нейтральными псевдоатомами и легко перестраиваются в ядре дислокации. Все это определяет величину  $\sigma_p$ , которая в этом случае оказывается малой. Ситуация становится иной в материалах с ковалентным характером связи. Концентрация электро-



1 — Cu, 2 — Ni, 3 — Fe, 4 — Mo, 5 — Cr, 6 — TiC, 7 — Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 8 — Si.

нов проводимости в таких кристаллах сильно зависит от температуры и при комнатных температурах составляет  $10^{13} - 10^{16} \text{ см}^{-3}$ . При таких концентрациях ионы решетки слабо экранируются, радиус экранирования составляет  $100-300 \text{ \AA}$ , а отношение  $r_0/L$  становится весьма малым, и таким образом повышает величину  $\sigma_p$ , приближая ее к теоретической прочности. В таких случаях ядро дислокации содержит трещину атомных размеров.

Переходные металлы с ОЦК структурой занимают промежуточное положение между простыми металлами и ковалентными кристаллами. В них межатомная связь характеризуется ковалентной компонентой и, кроме того, концентрация  $s$ -электронов меньше, чем в простых металлах. Соответственно и значения напряжений Пайерлса в них больше, чем в простых металлах.

Для металлов с ОЦК структурой и большинства материалов, в межатомной связи которых присутствует ковалентная компонента, температурнозависимую часть критического напряжения сдвига (или предела текучести для поликристаллов)  $\sigma(T)$  практически полностью определяют напряжения Пайерлса-Набарро [2,9].

Анализ кривых  $\sigma(T)$  на рисунке и зависимостей  $\sigma(T)$  из других литературных данных [9-11] показал, что по характеру температурной зависимости предела текучести все материалы могут быть условно разделены на три группы: первая группа — чистые металлы с ГЦК структурой, предел текучести которых практически не зависит от температуры; вторая группа — переходные металлы с ОЦК структурой, предел текучести которых ниже  $0.2T_{пл}$  начинает быстро воз-

растать; третья группа — ковалентные кристаллы, тугоплавкие соединения и оксидные керамики, пластические деформации у которых появляются при температурах  $0.5T_{пл}$  и выше. Различное проявление пластических деформаций у указанных групп материалов связано с их электронным строением, а именно с плотностью состояний на уровне Ферми или с температурной зависимостью концентрации электронов проводимости. Это вытекает непосредственно из соотношения (5). Электронный газ в чистых металлах\* является сильно вырожденным, в этом случае концентрация электронов проводимости от температуры практически не зависит, отношение  $r_0/L$  остается постоянным и величина  $\sigma(T)$  будет изменяться постольку, поскольку будет зависеть от температуры теоретическая прочность на сдвиг.

В переходных металлах имеется два типа электронов проводимости:  $s$ - и  $d$ -электроны [7]; так как в экранированной практически участвуют только  $s$ -электроны, то в тех металлах, у которых уровень Ферми находится в зоне  $d$ -резонанса, отношение  $r_0/L$  с изменением температуры будет также изменяться. Понижение концентрации  $s$ -электронов за счет  $s \rightleftharpoons d$  переходов в таких металлах (Cr, Ta, Nb) приведет к уменьшению  $r_0/L$  и быстрому росту  $\sigma(T)$ , что и наблюдается в эксперименте [2,10,11].

В ковалентных кристаллах (C, Si, Ge) и большинстве керамических материалов плотность состояний на уровне Ферми  $N(E_F)$  или нулевая, или очень низкая. Только при повышении температуры за счет межзонных переходов увеличивается концентрация электронов проводимости, что приводит к увеличению отношения  $r_0/L$  и к уменьшению  $\sigma(T)$ . Чем больше ширина запрещенной зоны  $E_g$ , тем большая тепловая энергия требуется для переброса электронов из валентной зоны в зону проводимости, и тем выше будет характеристическая температура  $t^*$ , ниже которой начинается быстрый рост величины  $\sigma(T)$ . Зависимость скорости дислокаций от ширины запрещенной зоны наблюдалась экспериментально для ряда полупроводниковых соединений. В работе [12] на серии нестехиометрических карбидов переходных металлов экспериментально установлено повышение твердости с уменьшением плотности состояний на уровне Ферми. Авторы этой работы связывают энергию активации движения дислокаций с величиной  $N(E_F)$ .

Пока не разработана электронная модель ядра дислокации типа модели Пайерлса или модели типа Френкеля-Конторовой, хотя отдельные попытки предпринимались [13].

\* К этой группе металлов относятся переходные металлы, у которых уровень Ферми лежит выше  $d$ -резонанса [7], например медь, никель и др.

## Список литературы

- [1] Каганов М.И., Кравченко В.Я., Нацик В.Д. // УФН. 1973. Т. 111. В. 4. С. 655-681.
- [2] Трефилов В.И., Мильман Ю.В., Фирстов С.А. Физические прочности тугоплавких металлов. Киев, 1975. 315 с.
- [3] Ларионов В.П., Семенов Я.С. Физические основы вязкохрупкого перехода низколегированных сталей и сплавов железа. Новосибирск, 1992. 170 с.
- [4] Шуров А.Ф. В кн.: Механика и физика разрушения хрупких материалов. Киев, 1990. С. 23-33.
- [5] Зегер А., Шиллер П. Перегибы на дислокациях и их влияние на внутреннее трение в кристаллах. В кн.: Физическая акустика / Под ред. У. Мэзона. Т. 3. Ч. А. М., 1968. С. 428-578.
- [6] Судзуки Т., Есинага Х., Такеути С. Динамика дислокаций и пластичность. М., 1989. 294 с.
- [7] Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М., 1968. 368 с.
- [8] Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М., 1974. 472 с.
- [9] Трефилов В.И., Фирстов С.А. Физика прочности и некоторые проблемы создания новых материалов. Киев, 1988. С. 34-50.
- [10] Вигли Д.А. Механические свойства материалов при низких температурах. М., 1974. 374 с.
- [11] Старцев В.И., Ильичев В.Я., Пустовалов В.В. Пластичность и прочность металлов и сплавов при низких температурах. М., 1975. 327 с.
- [12] Букатов В.Г., Соловьев Г.С. // Неорганические материалы. 1972. Т 8. В. 10. С. 1862-1863.
- [13] Teichler H. // Phys. Stat. Sol. 1967. Т. 23. С. 341-351.
- [14] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М., 1978. 791 с.

Нижегородский государственный  
университет им. Н.И. Лобачевского

Поступило в Редакцию  
5 июля 1994 г.