

## Вклад дислокационных ядер в рассеяние рентгеновских лучей кристаллами с дислокациями

© А.И. Дехтяр

Институт металлофизики Академии наук Украины,  
03680 Киев, Украина

E-mail: dekhlyar@imp.kiev.ua

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 10 октября 2000 г.)

С использованием решеточных функций Грина для описания статических смещений атомов оценен вклад дислокационных ядер в уширение узла обратной решетки, вызываемого дислокациями в кристалле. Показано, что этот вклад пропорционален экспериментально определяемой рентгеновским методом величине угла интегральной разориентировки дислокационной субструктуры и зависит от некоторых фундаментальных характеристик внутриатомного строения и конденсированного состояния.

Работа выполнена при финансовой поддержке Украинского научно-технологического центра (грант № 050).

В [1] установлено, что форма кривой распределения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей в азимутальном направлении изменяется с ростом угла интегральной разориентировки  $\delta$ , последовательно принимая вид гауссовского, лоренцовского и равномерного распределений. Этот угол пропорционален ширине распределения  $\delta q_{\perp}$ , которая соответствует размеру узла обратной решетки в азимутальном направлении. Наиболее простое соотношение для  $\delta$  при равномерном распределении получается в случае изогнутого кристалла, содержащего избыток дислокаций одного знака. В теории дифракции рентгеновских лучей неидеальными кристаллами для этого случая [2] это соотношение имеет вид

$$\delta \sim \delta q_{\perp} \sim a_L b Q L |\Delta n_{\alpha}|, \quad (1)$$

где  $a_L$  — геометрический фактор,  $b$  — модуль вектора Бюргера,  $Q$  — модуль дифракционного вектора,  $L$  — размер кристалла (или размер облучаемой области),  $\Delta n_{\alpha}$  — избыточная плотность дислокаций одного знака.

Основной вклад в экспериментально определенную интенсивность рассеяния рентгеновских лучей вносят области кристалла, удаленные от дислокаций [2]. Выражение (1) подтверждает этот закон. Однако в деформационных процессах при упрочнении существенную роль играют искаженные области кристалла, расположенные непосредственно вблизи дислокационных линий. Эти области вносят основной вклад в силы контактного взаимодействия между дислокациями, между дислокациями и точечными дефектами. Особенно это касается высокотемпературной ползучести, где такие взаимодействия определяют скорость деформации. Это тем более интересно, поскольку относительно недавно установлено фундаментальное соотношение между скоростью ползучести  $\dot{\epsilon}$  и экспериментально определенным углом интегральной разориентировки субструктуры  $\delta$  в виде  $\dot{\epsilon} \sim \delta^{-2}$  [3].

В связи с этим возникает необходимость определить вклад областей кристалла вблизи дислокаций в рассе-

яние рентгеновских лучей, несмотря на то что этот вклад будет несомненно на несколько порядков величины меньше вклада областей, удаленных от дислокаций. Термин "вблизи дислокаций" означает, что закон спадения статических смещений  $u$  с расстоянием  $r$  от центра дефекта в этой области должен отличаться от закона  $u \sim 1/r$ , характерного для больших расстояний от дислокаций [2]. В то же время он должен отличаться и от закона  $u \sim 1/r^2$ , характерного для точечных дефектов, который, вероятно, справедлив для дислокаций на расстоянии порядка  $0-1b$  от линии дислокации [2]. Поскольку закон спадения смещений с расстоянием  $u \sim 1/r^{3/2}$  определен в [2] как предельный для дефектов второго класса, которыми являются дислокации, то можно полагать, что этот закон справедлив вблизи дислокационных линий (на расстоянии порядка радиуса ядра дислокации  $r_0$ , который изменяется от  $b$  до нескольких  $b$ ).

К статическим смещениям в этой области применимо выражение с использованием решеточных функций Грина [2]

$$u_{si} = \sum_s \tilde{G}_{ss'ij} W_{s'tj}, \quad (2)$$

где  $\tilde{G}_{ss'ij}$  — функция Грина для идеального кристалла с одним атомом в ячейке, которая равна  $i$ -й компоненте смещения  $s$ -го атома под действием единичной внешней силы, приложенной к атому  $s'$  и направленной вдоль оси  $j$ . И хотя дислокации приводят к изменению силовых постоянных кристалла, можно ограничиться нулевым приближением, поскольку эти изменения достаточно малы.

Тогда дефект с центром в точке  $t$  действует на атомы кристалла  $s'$  с силами  $W_{s'tj}$ . Рассматривая эти силы как внешние и учитывая определение  $\tilde{G}_{ss'ij}$ , получаем, что смещение  $s$ -го атома, вызванное дефектом, сводится к сумме смещений, создаваемых полем сил, действующих на атомы  $s'$  вокруг дефекта, и описывается выражением (2).

В одноатомных кристаллах функцию Грина можно представить в виде суммы по нормальным координатам [2]

$$\tilde{G}_{ss'ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{p=1}^3 \frac{\mathbf{e}_{kp} \mathbf{e}_{kpj}}{M \omega_{kp}^2} \exp(i\mathbf{k} \mathbf{R}_{ss'}), \quad (3)$$

где  $N$  — число элементарных ячеек,  $\mathbf{e}_{kp}$  — поляризационные векторы,  $\omega_{kp}$  — частота нормальных колебаний,  $M$  — масса атома,  $\mathbf{R}_{ss'} = \mathbf{R}_{s'} - \mathbf{R}_s$ .

В приближении к проблеме рассеяния от областей кристалла, расположенных вблизи дислокаций, необходимо положить, что атомы  $s$  и  $s'$  расположены в области, ограниченной расстоянием  $r_0$  от линии дислокации. Выражение для интенсивности рассеяния в этих областях примет тогда вид [2]

$$I_1 = f^2 \sum_{ss'(r_0)} \exp(i\mathbf{q} \boldsymbol{\rho}) \exp[-T_1(\mathbf{R}_s^0, \boldsymbol{\rho})],$$

$$T_1 = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \sum_t [1 - \exp(i\mathbf{Q} \mathbf{u}_{ss't\alpha})], \quad (4)$$

где  $f^2$  — структурная амплитуда кристалла, не содержащего дефекты,  $c_{\alpha} = S_0 n_{\alpha}$ ,  $S_0$  — площадь, приходящаяся на одно возможное положение дислокации в перпендикулярной ей плоскости,  $n_{\alpha}$  — плотность дислокаций системы  $\alpha$ ,  $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{R}_{ss'}^0 = \mathbf{R}_s^0 - \mathbf{R}_{s'}^0$  ( $\mathbf{R}_s^0$  соответствует кристаллу без дефектов),  $\mathbf{u}_{ss't\alpha}$  — разность смещений:  $\mathbf{u}_{ss't\alpha} = \mathbf{u}_{st\alpha} - \mathbf{u}_{s't\alpha}$ .

Для рассматриваемого случая изогнутого кристалла  $S_0 = \pi r_0^2$  и  $c_{\alpha} = \pi r_0^2 \Delta n_{\alpha}$ , где  $\Delta n_{\alpha}$  — избыточная плотность дислокаций одного знака. Величина  $T_1$  является комплексной.

$$T_1 = T_1' + iT_1'' \quad (5)$$

Здесь мнимая часть ( $T_1''$ ) описывает распределение интенсивности в азимутальном направлении. Тогда, согласно (4),

$$T_1'' = - \sum_{\alpha} \pi r_0^2 \Delta n_{\alpha} \sum_t \sin(\mathbf{Q} \mathbf{u}_{ss't\alpha}). \quad (6)$$

В пределах дислокационных ядер (радиус которых не превышает одного десятка  $b$ ) можно считать, что разности смещений  $\mathbf{u}_{ss't\alpha}$  достаточно малы. Тогда  $\sin(\mathbf{Q} \mathbf{u}_{ss't\alpha}) \approx \mathbf{Q} \mathbf{u}_{ss't\alpha}$ , и последнее можно разложить по степеням  $\mathbf{Q} \mathbf{u}_{st\alpha}$  и ограничиться первым членом разложения:  $\mathbf{Q} \mathbf{u}_{ss't\alpha} \approx \mathbf{R}_{ss'}^0 \mathbf{q}_1 \frac{\partial}{\partial R_s^0} (\mathbf{Q} \mathbf{u}_{st\alpha})$ , где  $\mathbf{q}_1$  — единичный дифракционный вектор. При выборе отражений, для которых  $\mathbf{Q}$  приблизительно параллельно  $\mathbf{u}_{st\alpha}$ , имеем

$$\mathbf{Q} \mathbf{u}_{ss't\alpha} \approx Q \mathbf{R}_{ss'}^0 q_1 \frac{\partial}{\partial R_s^0} u_{st\alpha}. \quad (7)$$

Для упрощения будем проводить расчеты для случая одной системы дислокаций. Тогда получаем

$$T_1'' = -\pi r_0^2 \Delta n Q \mathbf{R}_{ss'}^0 \mathbf{q}_1 \frac{\partial}{\partial R_s^0} \sum_t u_{st}, \quad (8)$$

для краевых дислокаций [2] эта величина определяется выражением

$$T_1'' = R_s^0 \mathbf{A} \mathbf{R}_{ss'}^0, \quad (9)$$

где  $\mathbf{A}$  — вектор амплитуды рассеяния.

Из результатов теории следует, что интенсивность принимает заметную величину при тех значениях  $\mathbf{q}$ , для которых

$$\mathbf{q} - \mathbf{A} \mathbf{R}_s^0 = 0. \quad (10)$$

Вклад в азимутальную ширину распределения интенсивности рассеяния, обусловленный дислокационными ядрами, представляет собой вариацию величины  $\mathbf{q}$  в ядрах. Поскольку смещения  $u_{st}$  зависят от расстояния  $R_s^0$  от центра дислокации, то из (8)–(10) получаем

$$\delta q'_{\perp} = \frac{dq_{\perp}}{du_{st}} \delta u_{st} = -\pi r_0^2 \Delta n Q \frac{\partial}{\partial R_s^0} \sum_t \frac{du_{st}}{dR_s^0} \delta R_s^0. \quad (11)$$

Находя из (2) и (3) выражение для  $u_{st}$ , можно записать вклад дислокационных ядер  $\delta q'_{\perp}$  в общее уширение в виде

$$dq'_{\perp} = -\frac{\pi}{N} \Delta n Q r_0^2 \frac{\partial^2}{\partial (R_s^0)^2} \times \sum_t \sum_{s'} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{p=1}^3 \frac{\mathbf{e}_{kp} \mathbf{e}_{kpj}}{M \omega_{kp}^2} \exp(i\mathbf{k} \mathbf{R}_{ss'}^0) W_{s'tj} \delta R_s^0, \quad (12)$$

где максимальное значение  $R_s^0 = r_0/b$ .

Во-первых, заметим, что поляризационные векторы из соображения сохранения размерности должны входить в виде безразмерных величин  $e/b$ .

Во-вторых, в выражении (12) только  $\exp(i\mathbf{k} \mathbf{R}_{ss'}^0) W_{s'tj}$  зависит от  $R_s^0$ . Эту зависимость, как было показана выше, можно представить в виде

$$\exp(i\mathbf{k} \mathbf{R}_{ss'}^0) W_{s'tj} \cong C_1 R_s^{-3/2}, \quad (13)$$

где  $C_1$  — некоторая постоянная, не зависящая от  $R_s^0$ .

В-третьих,  $\delta R_s^0 = r_0/b$ .

В (12) можно провести простое суммирование. Этому благоприятствует малый размер дислокационных ядер и дискретный характер суммируемых величин. При суммировании предполагается, что переменная величина  $u_{st}$  заменяется некоторым средним значением, а затем вводится закон изменения  $u_{st}$  с расстоянием. В отличие от точного интегрирования можно ожидать ошибку не более 100%.

Для возможности суммирования по  $t$  будем рассматривать краевую дислокацию как набор точечных дефектов, каждый из которых имеет центром точку  $t$ . Каждая такая точка  $t$  отстоит от соседней на расстояние порядка  $b$  (точнее на расстояние между атомами в направлении линии дислокации). Смещения же атомов из своих узлов происходят в основном в плоскости, перпендикулярной линии дислокаций. Поэтому различие между одиночным объемным точечным дефектом и ”точечным” дефектом

из дислокационного набора состоит в том, что "дефект" в краевой дислокации вызывает смещение атомов только в перпендикулярной плоскости. Суммарный эффект для дислокации будет определяться количеством "точечных дефектов", приходящихся на длину дислокации, которое в рамках данного приближения будет равно  $L/b$ .

Из всего сказанного выше следует, что суммирование по  $s'$  определяет количество смещенных атомов для каждого "точечного дефекта". Тогда суммирование по  $s'$  даст множитель  $\pi N(r_0/b)^2$ .

Суммирование по  $\mathbf{k}$  необходимо проводить по особым точкам обратной решетки с учетом весовых вкладов. Используя результаты работы [4], находим, что для ОЦК и ГЦК кристаллических структур множитель, связанный с суммированием по  $\mathbf{k}$ , равен 4.59 и 4.41 соответственно. Этот результат ненамного отличается от значения сферического приближения:  $4\pi/3 \cong 4.19$ .

Суммирование по  $p$  для изотропного кристалла дает множитель 3.

Значение векторов поляризации можно оценить, исходя из диэлектрических свойств атома. Формула для вектора поляризации, согласно [5], имеет вид

$$\mathbf{e} = \frac{4\pi\varepsilon_\nu R_a^3 \mathbf{E}}{Z|e|}, \quad (14)$$

где  $\varepsilon_\nu$  — диэлектрическая постоянная вакуума,  $R_a$  — атомный радиус,  $\mathbf{E}$  — вектор напряженности внешнего электрического поля,  $Z$  — общее число электронов в атоме,  $|e|$  — заряд электрона.

Величина  $\mathbf{E} = \mathbf{F}/Z|e|$  в случае дислокации описывает электрическое поле, возникшее в результате смещения атомов. Это выражение можно переписать в виде  $\mathbf{E} = \mathbf{F}/Z|e| = W_c/Z|e|\mathbf{e}$ . Здесь  $W_c$  — энергия дислокационного ядра, приходящаяся на один атом. Для упрощения оценки можно положить, что  $i$ -я компонента вектора поляризации совпадает со значением вектора поляризации в направлении  $j$ :  $e_i = e_j = e$ .

Частоту нормальных колебаний можно определить следующим образом. Вблизи дислокационной линии смещения, вероятно, велики настолько, что межатомные расстояния становятся близкими к тем, которые характерны для жидкого или аморфного состояний. Это следует из следующих фактов. Во-первых, к дислокационному ядру неприменима линейная теория упругости и область ядра лучше всего представляется в виде сингулярности [6]. Во-вторых, скорость диффузии вдоль дислокационного ядра на 4–5 порядков величины больше, чем в объеме кристаллической решетки [7], что приближается к значениям скоростей диффузии в жидкости. Поэтому естественно предположить, что в дислокационном ядре максимально возможные частоты нормальных колебаний  $\omega_{kp}$  уже соответствуют не дебаевской температуре, как это имеет место для идеальной решетки, а температуре плавления  $T_m$ , т. е.  $\hbar\omega_{kp} = kT_m$ .

Энергия ядра дислокации, приходящаяся на один атом, равна [6]

$$W_c = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)}, \quad (15)$$

где  $G$  — модуль сдвига при температуре измерения угла разориентировки,  $\nu$  — коэффициент Пуассона.

Величину  $C_1$  можно найти из условия (13) при  $R_s^0 = r_0/b = 1$ . Положим  $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_{ss'}) \cong 1$ . Это предположение оправдано, поскольку самые заметные смещения, приводящие к размытию рефлексов, в случае краевых дислокаций можно регистрировать, когда волновой вектор  $\mathbf{k}$  перпендикулярен вектору  $\mathbf{R}_{ss'}$ . Тогда  $C_1$  определяется только силами межатомного взаимодействия  $W_{s'tj}$ . Поскольку  $R_s^0 = r_0/b = 1$ , эти силы можно рассчитать из принципа парного взаимодействия, выражение для энергии которого  $V_{s't}$  удобнее всего представить через псевдопотенциалы ионов  $w_0(q)$  при  $q = 2k'_F$  [8]

$$G_1 = W_{s't} = \frac{V_{s't}}{b} = \frac{18\pi z_e^2 [w_0(2k'_F)]^2 \cos(2k'_F b)}{bk'_F (2k'_F b)^3}. \quad (16)$$

Здесь  $z_e$  — число эффективно связующих электронов на атом [9],  $m$  — масса электрона,  $k'_F$  — радиус псевдосферы Ферми, заполненной почти свободными, эффективно связующими электронами  $z_e$  [9]

$$k'_F = \sqrt[3]{\frac{3\pi^2 z_e}{\Omega_0}} \cong \frac{1}{b} \sqrt[3]{18\pi z_e}, \quad (17)$$

где  $\Omega_0$  — атомный объем. Величина  $w_0(2k'_F)$  определяется следующим образом [8]:

$$w_0(2k'_F) = -\frac{C_2 \pi z_e}{\Omega_0 k'^2_F}, \quad (18)$$

где  $C_2$  — величина, равная отношению  $n^3/Z$ ,  $n$  — главное квантовое число почти свободных, эффективно связующих электронов. Последнее будет показано в работе, которая посвящена вопросам электронной структуры и межатомного взаимодействия в переходных металлах.

Значение  $\cos(2k'_F b)$  отрицательно и в большинстве случаев приближается к  $-1$ . Учитывая, что расчет (16) производился в атомных единицах, и подставляя значения  $k'_F$  и  $w_0(2k'_F)$ , выражение (16) можно записать в виде

$$C_1 = -2.43 \cdot 10^{-19} \frac{n^6 z_e}{\pi^2 Z^2 b}. \quad (19)$$

Подставляя (13) в выражение (12), используя результаты суммирования, проведя дифференцирование по  $R_s^0$  и заменяя  $R_s^0$  на  $r_0/b$  в (13), а также проведя подстановки всех определенных выше величин, получаем выражение для  $\delta q'_\perp$  в виде

$$\delta q'_\perp = 4.56 \cdot 10^{-19} \frac{\pi \varepsilon_\nu \hbar^2}{e^2 k^2} \Delta n L Q \left(\frac{r_0}{b}\right)^{3/2} \frac{z_e n^6 G b^3}{(1-\nu) Z^4 M T_m^2}. \quad (20)$$

Отношение размытия узла обратной решетки, обусловленного вкладом дислокационных ядер, к экспериментально наблюдаемому размытию, обусловленному дислокациями в кристалле, рассчитанное по формуле (21) для ряда металлов

Металл	$\delta q'_{\perp} / \delta q_{\perp}$
Cu	$1.1 \cdot 10^{-4}$
Ni	$3.0 \cdot 10^{-5}$
Ag	$1.4 \cdot 10^{-4}$
Mo	$2.6 \cdot 10^{-5}$
W	$3.4 \cdot 10^{-6}$
Nb	$3.1 \cdot 10^{-5}$
Ta	$5.0 \cdot 10^{-6}$

Подставляя (1) в (20) и учитывая численные значения фундаментальных констант, можно получить соотношение между  $\delta q'_{\perp}$  и измеряемой экспериментально  $\delta q_{\perp}$

$$\delta q'_{\perp} = 2.88 \cdot 10^{-14} \frac{z_e n^6}{Z^4 M a_L (1 - \nu) T_m^2} \left( \frac{r_0}{b} \right)^{3/2} \delta q_{\perp}. \quad (21)$$

Подставляя численные значения всех величин для конкретных кристаллов (например, для металлов из [10], для  $r_0/b$  из [9], для  $z_e$  из [11]) в (21), получаем, что значения  $\delta q'_{\perp}$  действительно составляют некоторую малую долю от экспериментально определенного размытия узла обратной решетки  $\delta q_{\perp}$  (см. таблицу).

Подытоживая полученные результаты, можно сделать вывод, что, во-первых, вклад ядер дислокаций в угол интегральной разориентировки субструктуры зависит от размера дислокационного ядра, или, что то же самое, от ширины расщепления дислокаций, поскольку между ними существует пропорциональность [6]. Во-вторых, этот вклад зависит от фундаментальных свойств металлов в конденсированном состоянии (температура плавления, упругие константы, параметр решетки, концентрация эффективно связующих электронов), а также от индивидуальных особенностей атома (масса атома, главное квантовое число внешних электронов, определяющих межатомное взаимодействие, количество электронов ионного остова).

## Список литературы

- [1] Л.В. Демченко, А.И. Дехтяр, В.А. Кононенко, К.П. Рябошапка. Металлофизика **11**, 4, 84 (1989).
- [2] М.А. Кривоглаз. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Наук. думка, Киев (1983). 408 с.
- [3] A.I. Dekhtyar, L.V. Demchenko. In: Tungsten, Refractory Metals and Alloys 4 Proceedings of the Fourth International Conference of Tungsten, Refractory Metals and Alloys / Ed. by A. Bose, R.J. Dowding. Metal Powder Industry Federation, Princeton, NJ (1998). P. 309.
- [4] R.A. Evarestov, V.P. Smirnov. Phys. Stat. Sol. **B119**, 9, 9 (1983).
- [5] Ч. Уэрт, Р. Томсон. Физика твердого тела. Мир, М. (1969). С. 399.

- [6] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [7] Р.Ф. Баллуффи. В кн.: Новости физики твердого тела. В. 2. Термически активируемые процессы в кристаллах. Мир, М. (1973). С. 42.
- [8] У. Харрисон. Псевдопотенциалы в теории металлов. Мир, М. (1968). 366 с.
- [9] А.И. Дехтяр, Г.Я. Козырский, В.А. Кононенко. ФТТ **20**, 4 964 (1978).
- [10] Структура и свойства металлов и сплавов. Справочник. Наук. думка, Киев (1987).
- [11] B. Rosenfeld. Acta Physica Polonica **31**, 1, 197 (1967).