

Дефекты в кристаллах

Классы дефектов:

1. точечные (нуль-мерные) дефекты;
2. линейные (одномерные) дефекты;
3. поверхностные (двумерные) дефекты;
4. объемные (трехмерные) дефекты.

1. Точечные дефекты

- *вакансии* (вакантные узлы кристаллической решетки), или *дефекты Шоттки*;
- *междоузельные атомы* (атом основного вещества, перемещенный из узла в позицию между узлами), или *дефекты Френкеля*;
- *чужеродные атомы внедрения*;
- *чужеродные атомы замещения* (сочетание примесей и вакансий).

1.1. Неравновесные и равновесные дефекты

- Вакансии и междоузельные атомы появляются в кристалле при любой температуре выше $T = 0$ К из-за тепловых колебаний атомов (*тепловые или равновесные дефекты*).
- В результате облучения или других внешних воздействий (радиация, пластическая деформация и др.) могут возникать *неравновесные точечные дефекты*.
- При отклонении от стехиометрического состава могут возникать *стехиометрические дефекты*.
- В ионных и ковалентных кристаллах точечные дефекты электрически активны и могут служить *донорами* или *акцепторами электронов*, что создает в кристалле определенный *тип проводимости*.

1.2. Вакансии (дефекты Шоттки)

- Вакансия образуется за счет *диффузии*.
- Образование междоузельного атома в плотноупакованных структурах требует значительно больше энергии, чем образование вакансии, поэтому *в металлах основными точечными дефектами являются вакансии*.
- Вакансии могут быть двойными, тройными и образовывать группы.

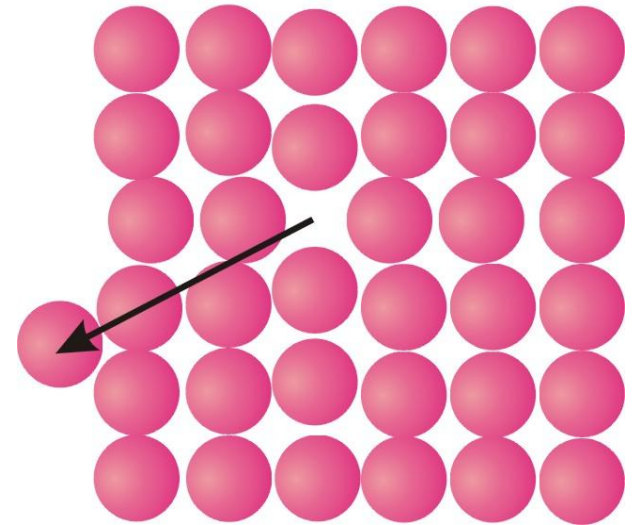


Рис. 1. Образование вакансии

1.3. Дефекты Френкеля

- Дефекты по Френкелю (рис. 2) образуются парами: вакансия + междоузельный атом, когда какой-либо атом в результате *флуктуаций* приобретает кинетическую энергию выше средней.
- **Флуктуации** - случайные отклонения физических величин от их средних значений.

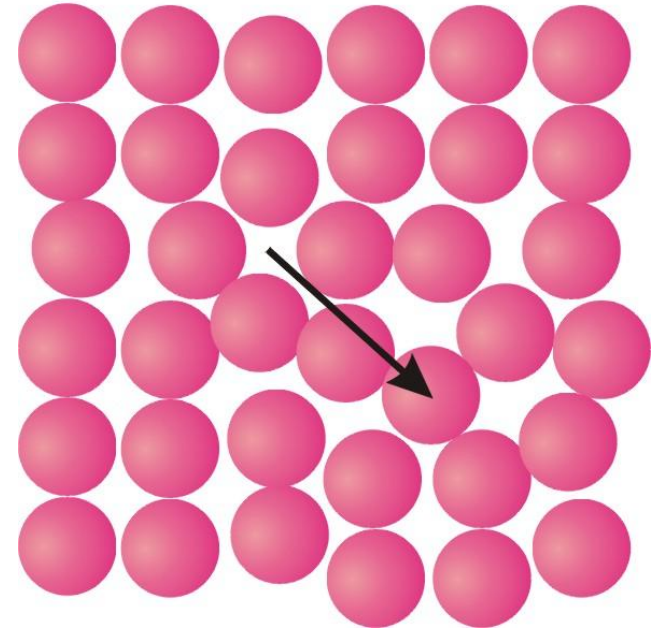


Рис. 2. Образование вакансии и междоузельного атома

1.4. Чужеродные атомы внедрения

- Примесные атомы внедрения (рис. 3) возникают в процессе кристаллизации или диффузии примеси с поверхности.

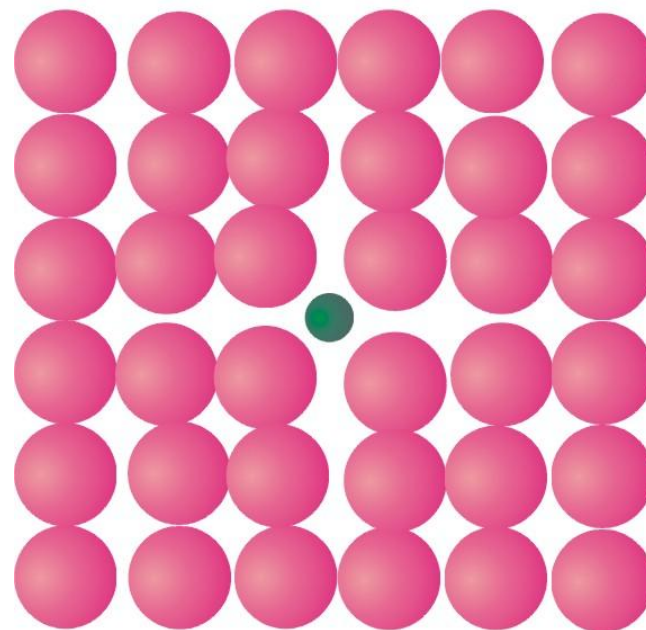


Рис. 3. Примесный атом внедрения

1.5. Чужеродные атомы замещения

- Примесные атомы замещения (рис. 4), представляют собой сумму двух дефектов: вакансии и атома примеси.
- Такой дефект может образоваться при захвате примеси в процессе кристаллизации или при совместной диффузии вакансии и атома примеси.

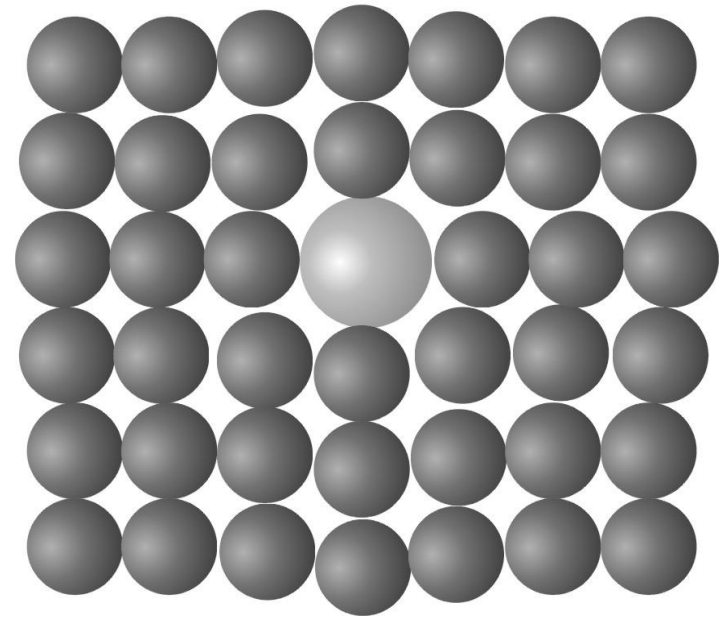


Рис. 4. Примесный атом замещения

2. Линейные дефекты

- краевые дислокации;
- винтовые дислокации;
- смешанные дислокации;
- микротрещины;
- ряды вакансий и междоузельных атомов.

2.1. Краевая дислокация

- **Краевая дислокация** представляет собой локализованное искажение кристаллической решетки, вызванное наличием в ней лишней атомной полуплоскости (**экстраплоскости**). Если экстраплоскость находится в верхней части кристалла, то дислокацию называют **положительной** и обозначают $\perp$, и наоборот – если в нижней.
- В краевой дислокации **линия дислокации** OO' , отделяющая неподвижную область от сдвинутой, перпендикулярна вектору сдвига τ и вектору Бюргерса b .

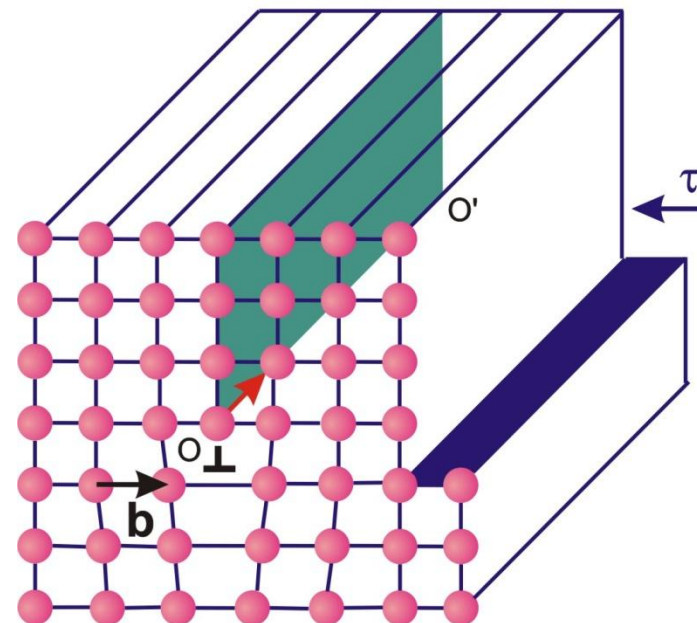


Рис. 5. Краевая дислокация

Экстраплоскость выделена зеленым цветом, а плоскость скольжения – синим.

2.2. Винтовая дислокация

- При образовании **винтовой дислокации** (рис. 6), линия дислокации (красная) параллельна вектору сдвига τ . Если представить кристалл состоящим из одной атомной плоскости, то винтовая дислокация будет подобна винтовой лестнице. Если винтовая дислокация образована по часовой стрелке, то ее называют **правой**, а если против часовой стрелки – **левой**.

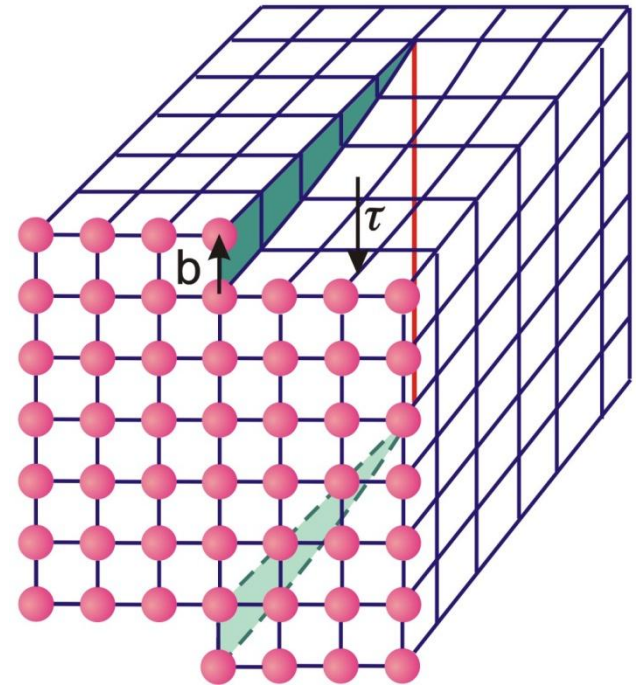


Рис. 6. Винтовая дислокация
 b – вектор Бюргерса;
экстраплоскость показана
зеленым цветом.

2.3. Вектор Бюргерса

- Энергия искажения кристаллической решетки – одна из важнейших характеристик дислокации любого типа. Критерием этого искажения служит *вектор Бюргерса*, который получается, если обойти замкнутый контур в идеальном кристалле, а затем повторить его в реальном, заключив дислокацию внутри контура. Вектор, необходимый для замыкания такого контура в реальном кристалле, и называется *вектором Бюргерса*.
- Вектор Бюргерса для контура, замыкающегося вокруг нескольких дислокаций, равен сумме векторов Бюргерса отдельных дислокаций. Вектор Бюргерса краевой дислокации перпендикулярен ее линии, а для винтовой дислокации – параллелен.

2.4. Смешанная дислокация

- Между предельными типами краевой и винтовой дислокации возможны любые промежуточные, в которых линия дислокации не обязательно прямая: она может представлять собой плоскую или пространственную кривую.
- Например, в случае смешанной дислокации можно рассмотреть перемещение лишь части атомов в плоскости скольжения (рис. 7).

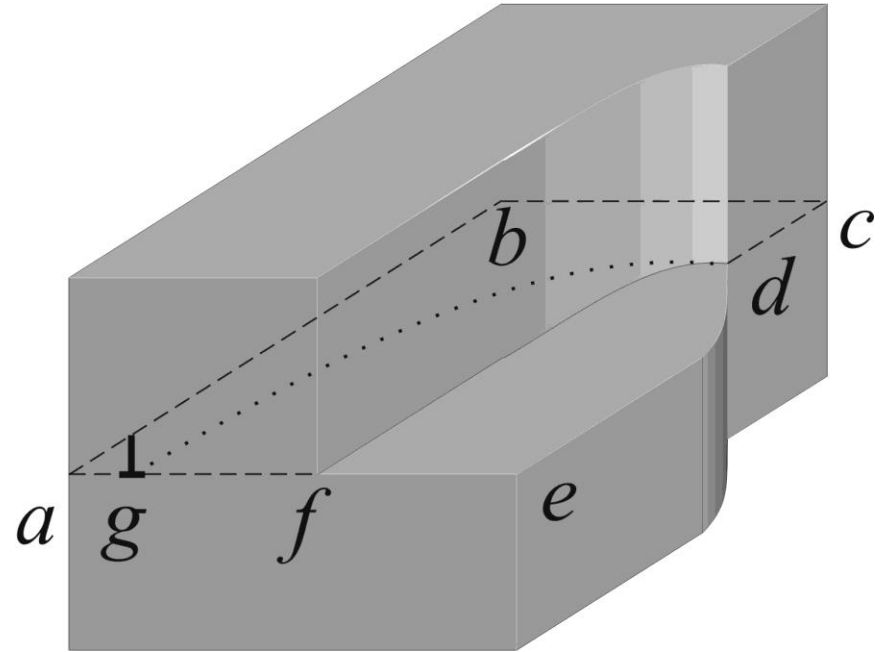


Рис. 7. Смешанная дислокация $abcdef$ – плоскость скольжения (сдвига); gd – линия дислокации

2.5. Образование дислокаций

- Дислокации появляются при кристаллизации и деформации кристалла, например, за счет сдвига или схлопывания вакансионных полостей. Дислокационные линии не обрываются внутри кристалла, они выходят на его поверхность, заканчиваются на других дислокациях или образуют замкнутые *дислокационные петли*. Дислокации, как и другие дефекты, участвуют в *фазовых превращениях, рекристаллизации*, служат готовыми центрами при выпадении второй фазы из *твердого раствора*.
- Как и другие дефекты, дислокации изменяют физико-химические и механические свойства кристалла.

3. Поверхностные дефекты

- границы между зернами (*большеугловые*);
- границы между *субзернами* (*малоугловые*);
- *дефекты упаковки*;
- *границы двойников и доменов*;
- *антифазные границы*;
- поверхность кристалла.

3.1. Равновесные границы

3.1.1. Большеугловые

- Поликристалл состоит из большого числа зерен с различно ориентированными кристаллическими решетками.
- *Межзеренные границы* (МЗГ) называют *большеугловыми*, так как кристаллографические направления в соседних зернах образуют углы, достигающие десятков градусов.
- *Большеугловые границы* представляют собой переходный слой шириной 1÷5 нм. В нем нарушена правильность расположения атомов, имеются скопления дислокаций (периодические сетки зёрнограничных дислокаций с малыми векторами Бюргерса), повышена концентрация примесей.

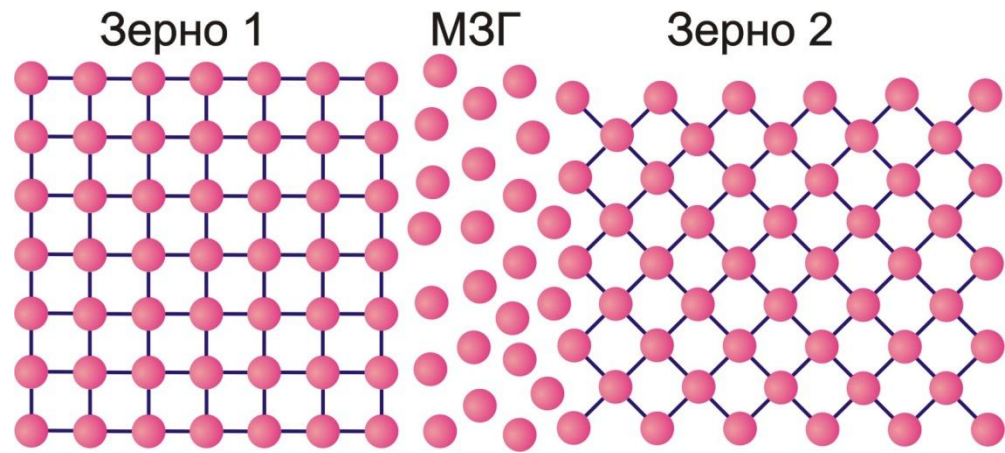


Рис. 8. Большеугловая граница

3.1.2. Малоугловые границы

- Каждое зерно состоит из отдельных *субзерен*, образующих *субструктуру*.
- Субзерна разориентированы относительно друг друга от нескольких долей до единиц градусов ($< 5^\circ$) – так возникают *малоугловые границы*, состоящие из совокупности решёточных дислокаций (рис. 9).

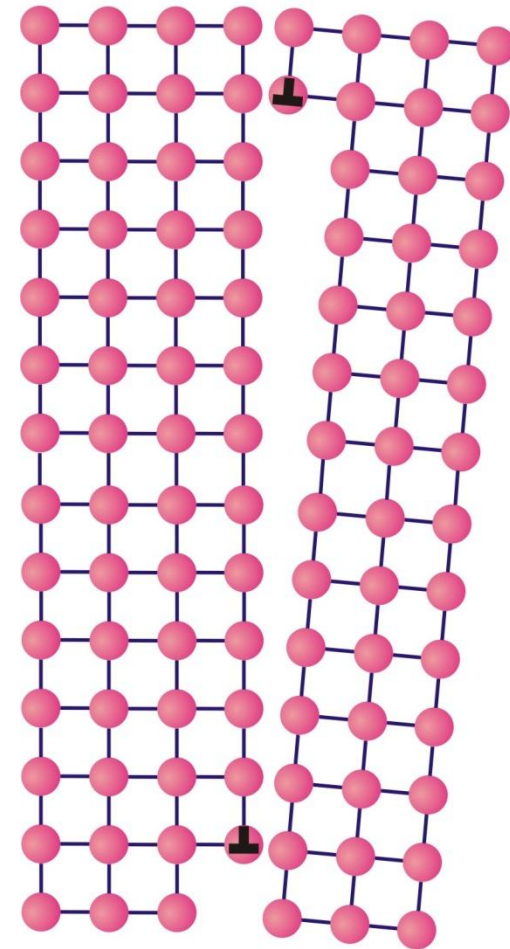
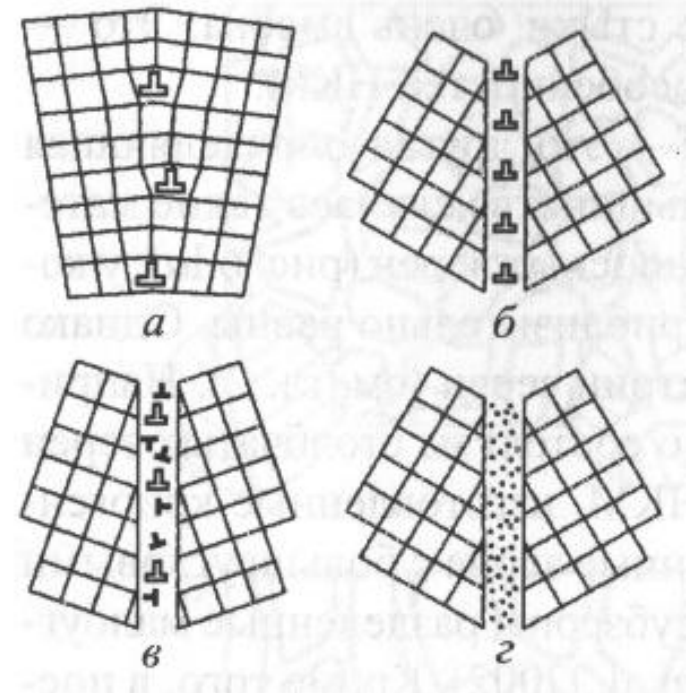


Рис. 9. Малоугловая граница

3.3. Неравновесные границы зёрен

- Равновесные границы:
 - а) малоугловая
 - б) большеугловая граница.
- **Неравновесные** границы:
 - в) **кристаллическая** (формируется в крупнозернистых материалах при высокой степени деформации, когда границы зёрен поглощают решёточные дислокации, и состоит из собственных зёрнограничных дислокаций и внешних – возникших в результате расщепления поглощённых решёточных дислокаций и других дефектов);
 - г) **аморфная** (характерна для керамических материалов, в которых химический состав МЗГ отличается от состава смежных зёрен).



[Коч К. и др. Конструкционные нанокристаллические материалы. Научные основы и приложения. М.: Физматлит, 2012. 448 с.]

3.3. Границы двойников

- **Двойникование** – образование в монокристалле областей с измененной ориентацией кристаллической структуры при помощи зеркального отражения структуры материнского кристалла (матрицы) в определенной плоскости – **плоскости двойникования** (рис. 10), поворота вокруг кристаллографической оси – **оси двойникования** либо другого преобразования симметрии.
- Матрицу и двойниковое образование называют **двойником**. Он может образоваться при кристаллизации, деформации кристалла или при фазовом превращении.

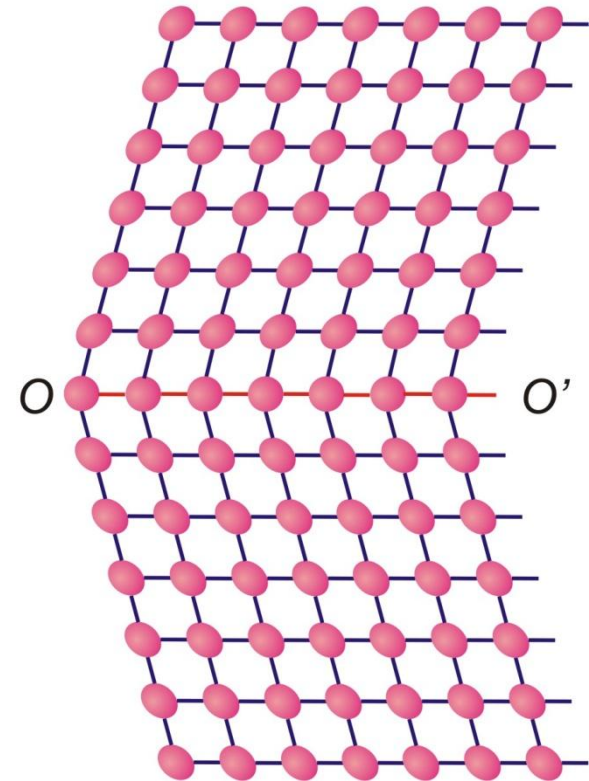
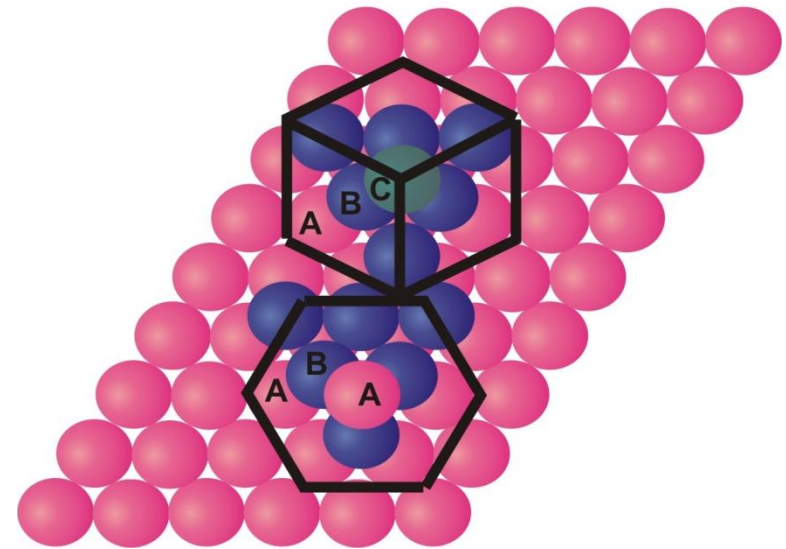


Рис. 10. Схема
двойникования

Красной прямой показана
плоскость двойникования

3.4. Дефекты упаковки

- **Дефекты упаковки** представляют собой часть атомной плоскости, ограниченную дислокациями, в пределах которой нарушен нормальный порядок чередования слоев. Например, в плотноупакованных сплавах с ГЦК-решеткой (см. рис. 11) слои чередуются в порядке $ABCAVCAB...$, а при прохождении через дефект упаковки слои чередуются в последовательности $ABCVSABV...$. Чередование слоев $BCBC...$ характерно для ГПУ-решетки.
- Таким образом, подобный дефект представляет собой как бы тонкую прослойку с ГПУ-решеткой в ГЦК-решетке.



- Рис. 11. Модели плотной шаровой упаковки

3.5. Частичные дислокации

- Дефекты упаковки связаны с *частичными* или *неполными дислокациями*. Дислокации, рассмотренные выше, называют *совершенными (полными)*, или *единичными*. Вектор Бюргерса полной дислокации может быть разложен по базисным векторам решетки. Вектор Бюргерса единичной дислокации равен вектору решетки. Единичная дислокация, естественно, является полной. Решетки кристалла по обе стороны полной дислокации совпадают. **Вектор Бюргерса частичной дислокации меньше вектора решетки. Поэтому частичная дислокация соединяет несовпадающие решетки.**

4. Объемные дефекты

- Объемные дефекты представляют собой либо **микropустоты**, либо **включения** другой фазы.

5. Дефекты в аморфных телах

- В аморфных телах отсутствуют такие дефекты структуры, свойственные кристаллическому состоянию, как дислокации и межзеренные границы. Даже вакансии в аморфных телах имеют другую форму и размеры. Они похожи на пустоты чечевицеобразной формы и носят название **вакансионноподобных дефектов**. Эти пустоты имеют вид узких щелей, и в них не может разместиться атом. Наличие таких дефектов сильно затрудняет диффузию через аморфные слои.
- Таким образом, неупорядоченная структура аморфных материалов определяет особенности механических, электрических, магнитных и диффузионных свойств.

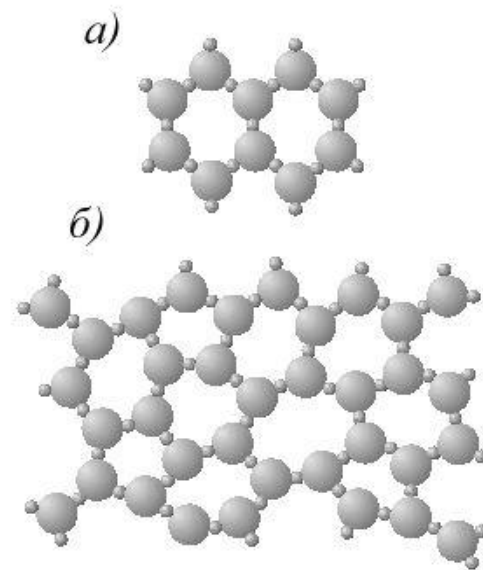


Рис. 12. Различие в строении:
а – кристаллических и *б* –
аморфных тел