

# Дефекты в кристаллах

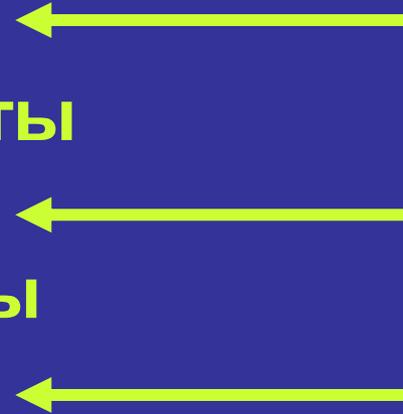
# Бесконечный кристалл с совершенным дальним порядком

0. Точечные дефекты

1. Линейные дефекты

2. Плоские дефекты

3. Квазикристаллы.  
Аморфные твердые тела



Дефекты

с дробной размерностью.

Фракталы

# 0. Точечные дефекты

Вакансии (vacancies)

Атомы внедрения ( )

Примесные атомы (impurity atoms)

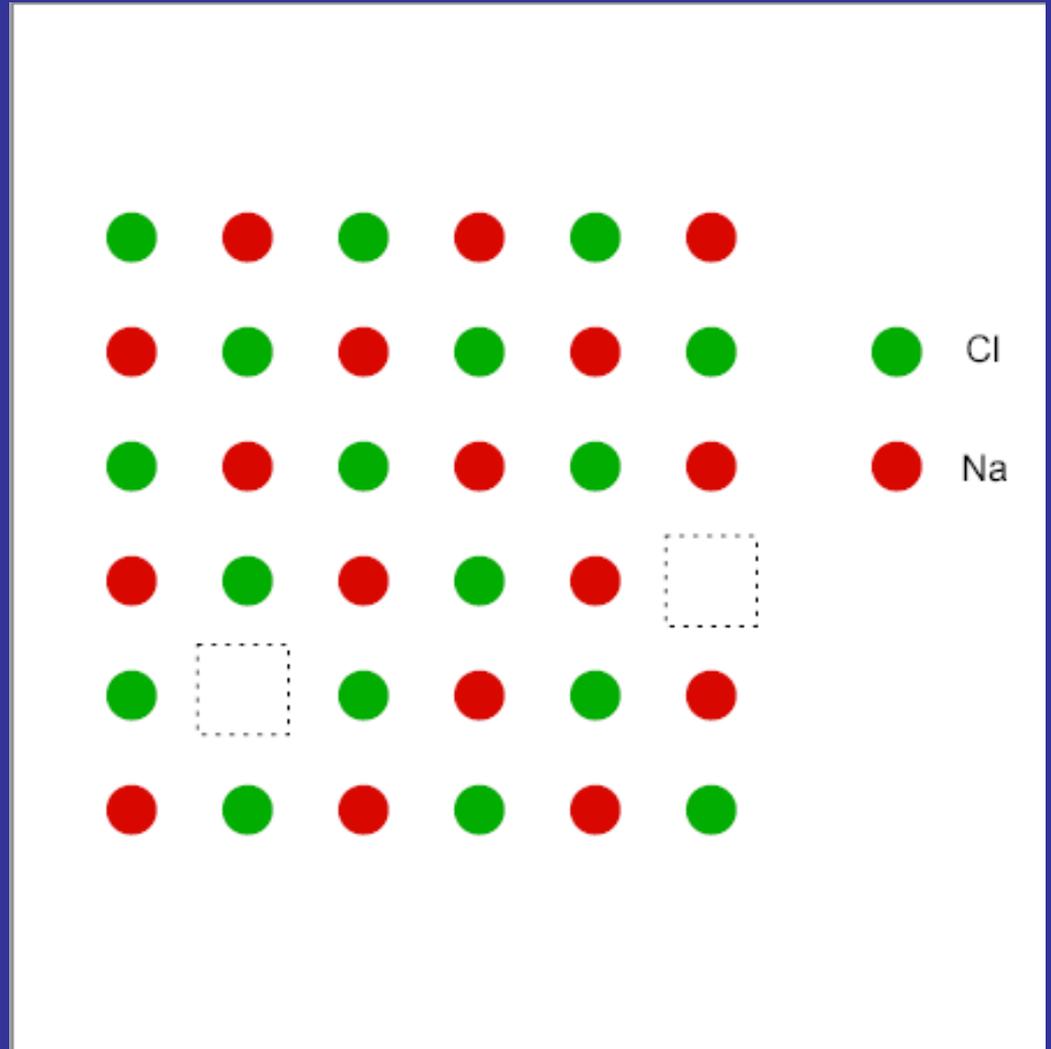
Изломы на дислокациях ( )

Изломы на ступенях внутренних и внешних  
границ раздела

Четверные стыки границ раздела

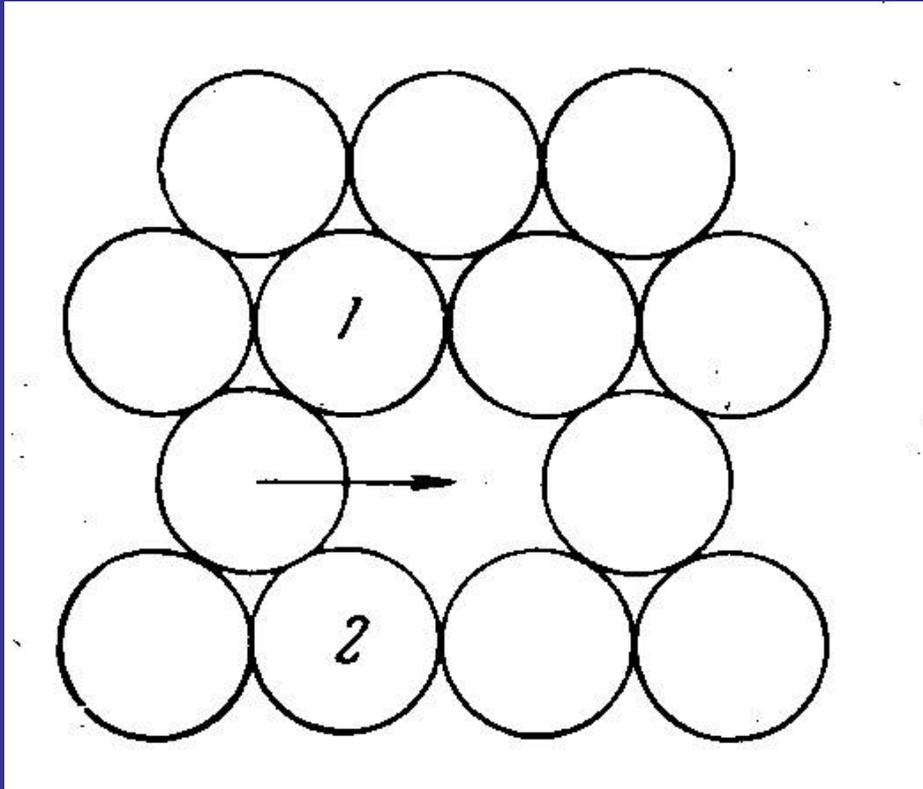
# Дефекты в кристаллах

# Вакансии в решетке

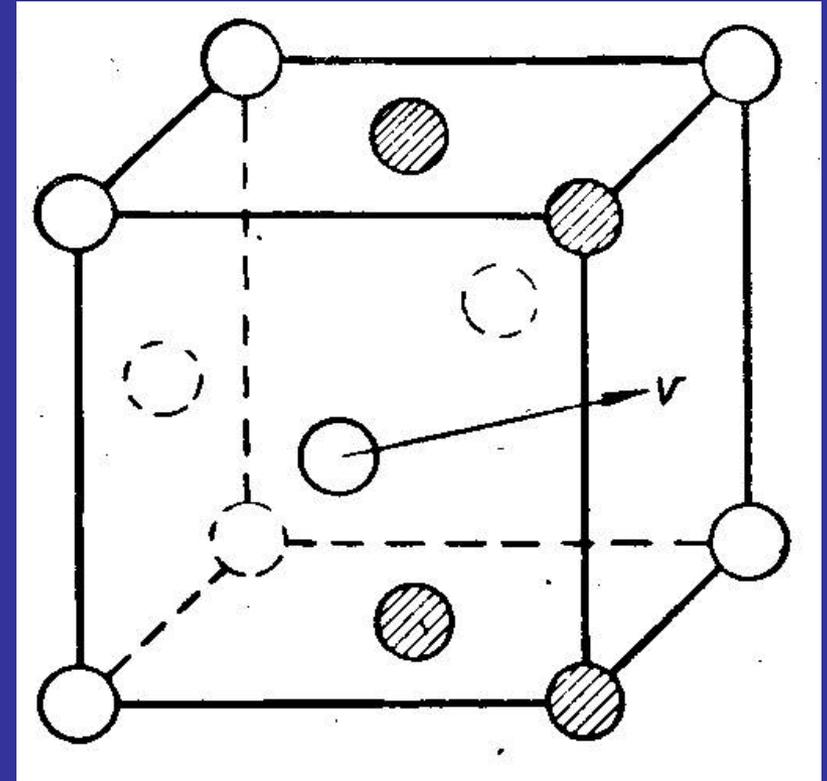


**Walter Hermann Schottky**  
1886-1976

# Перемещение атома в вакантный узел

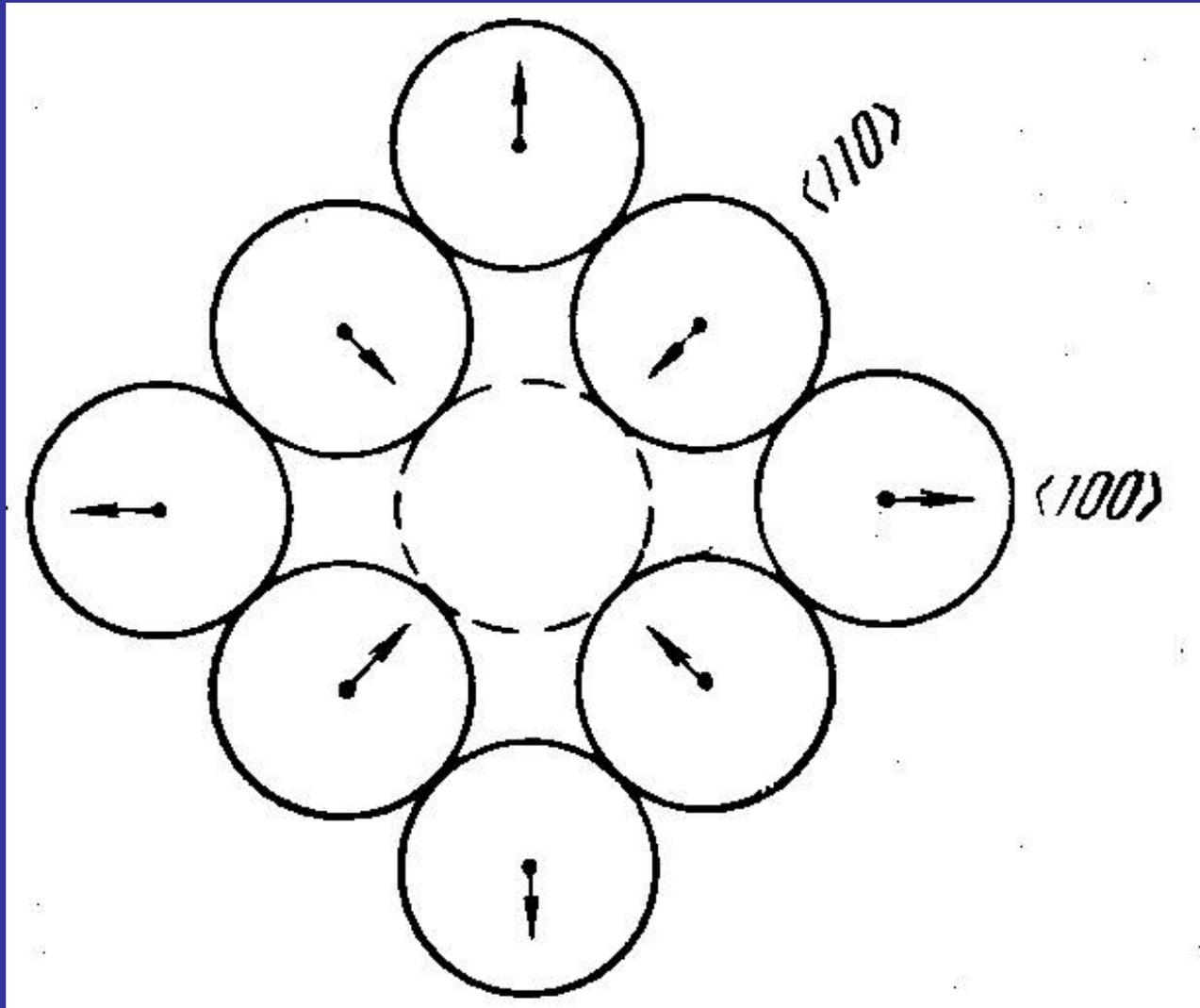


В слое плотной упаковки

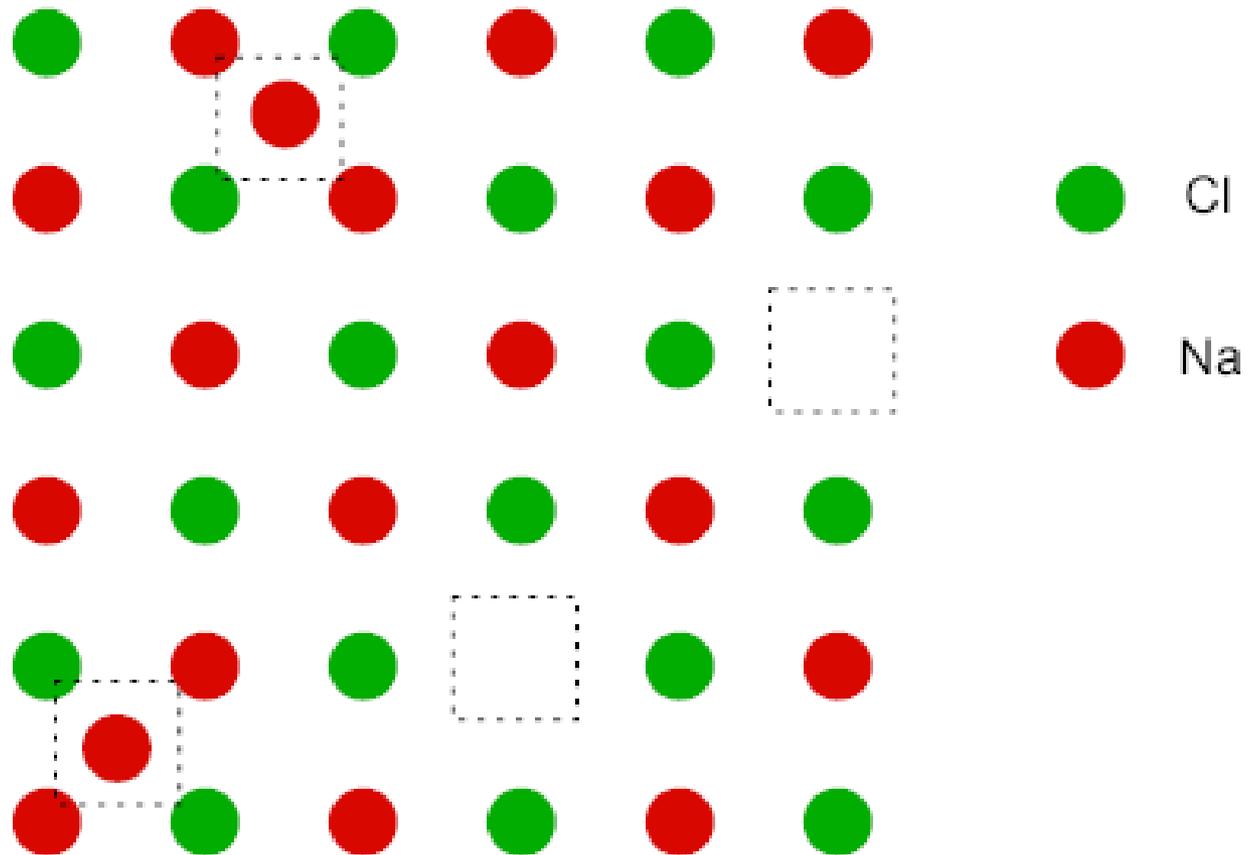


В ГЦК-решетке

# Направления смещения атомов вокруг вакансии в плоскости (100) ГЦК-решетки



# Межузельные атомы

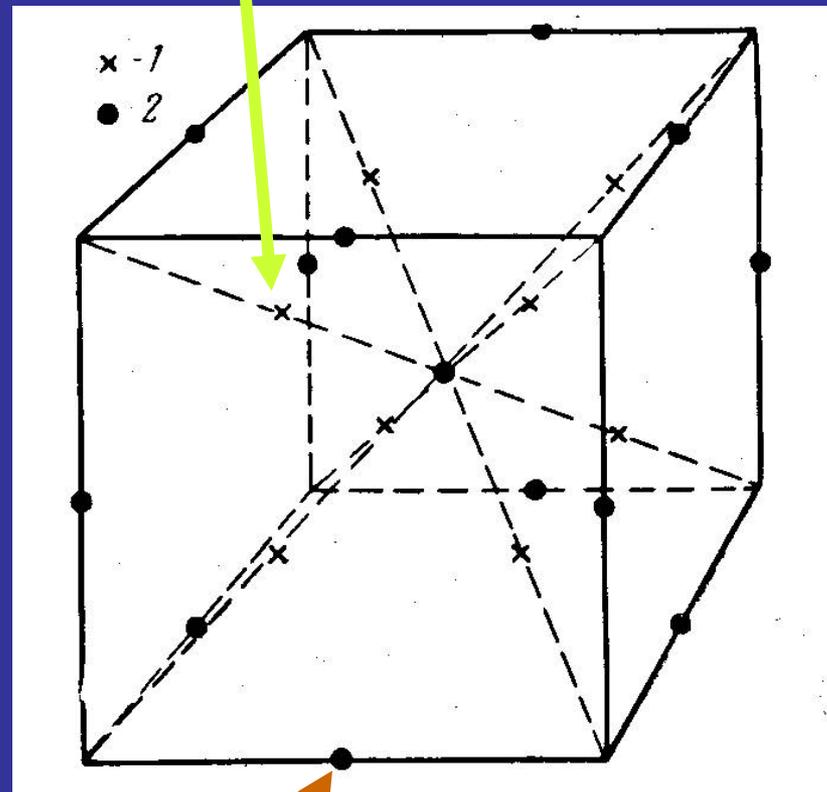
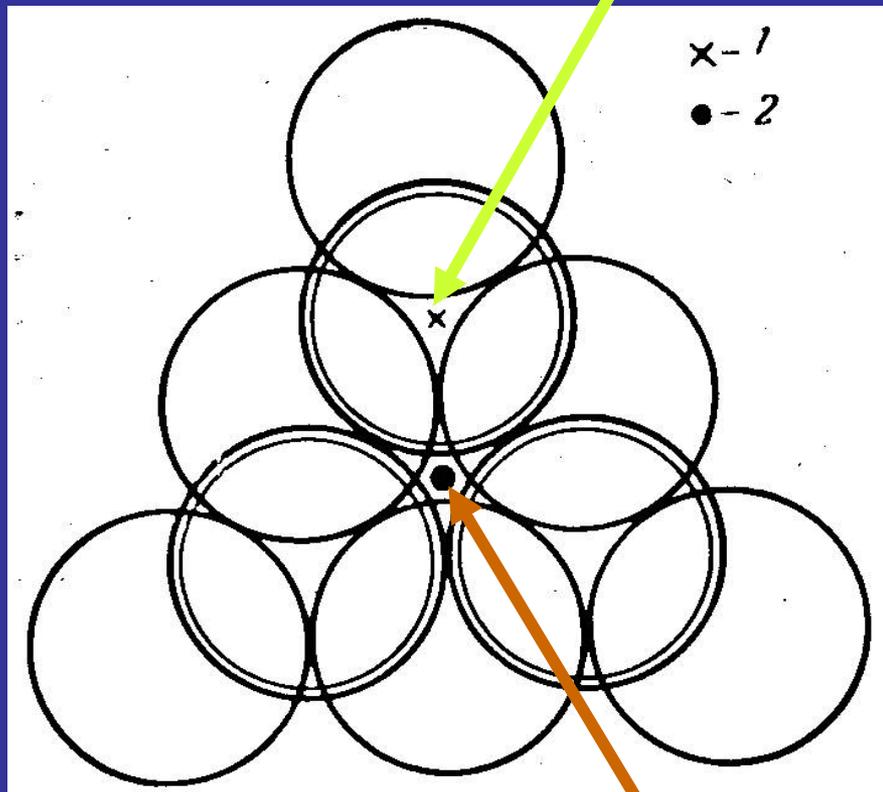


Яков Ильич Френкель  
1894-1952

Пара «вакансия-межузельный атом»  
называется дефектом Френкеля  
(1926)

# Тetra- и октаэдрические поры в ГЦК-решетке: места для атомов внедрения

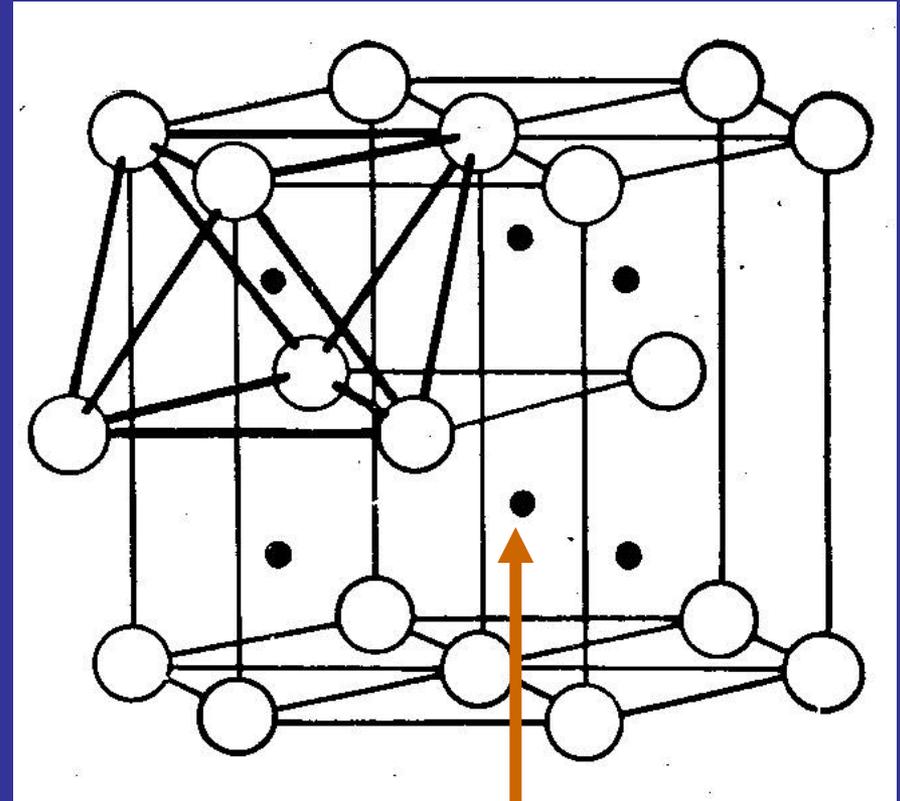
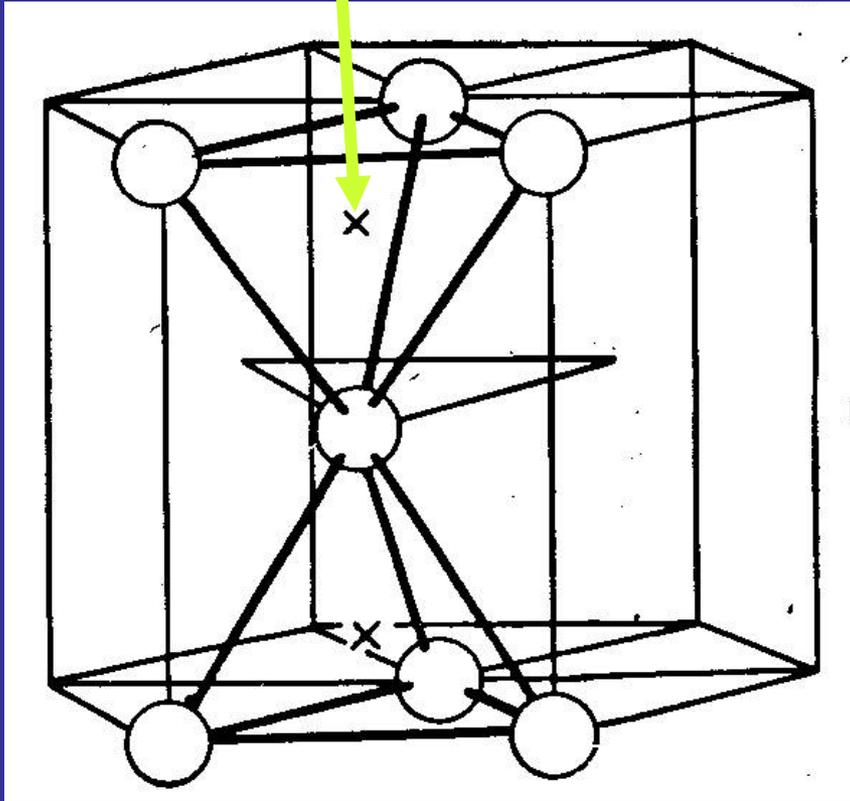
тетраэдрические поры



октаэдрические поры

# Тетра- и октаэдрические поры в ГПУ-решетке

тетраэдрические поры

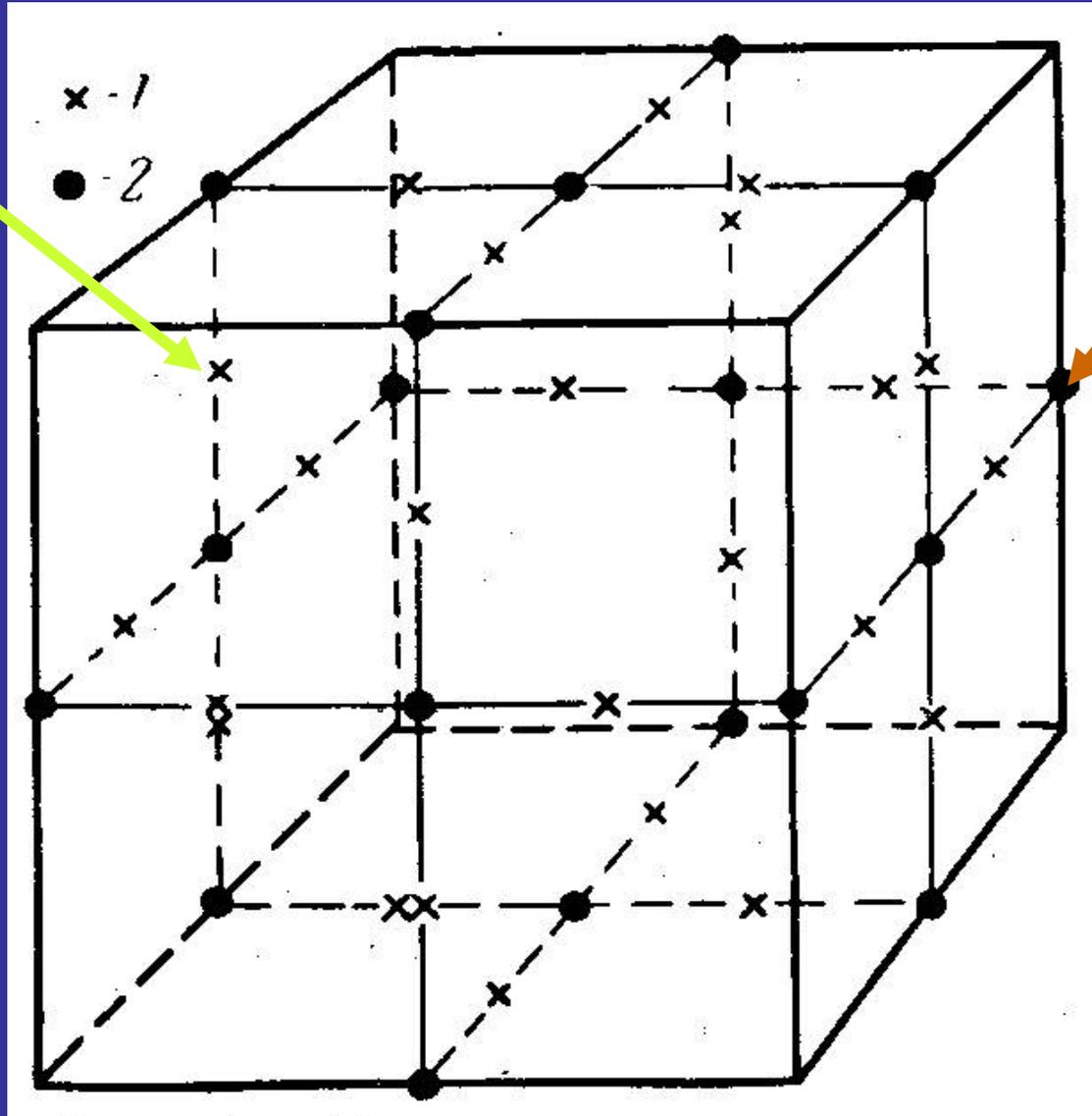


октаэдрические поры

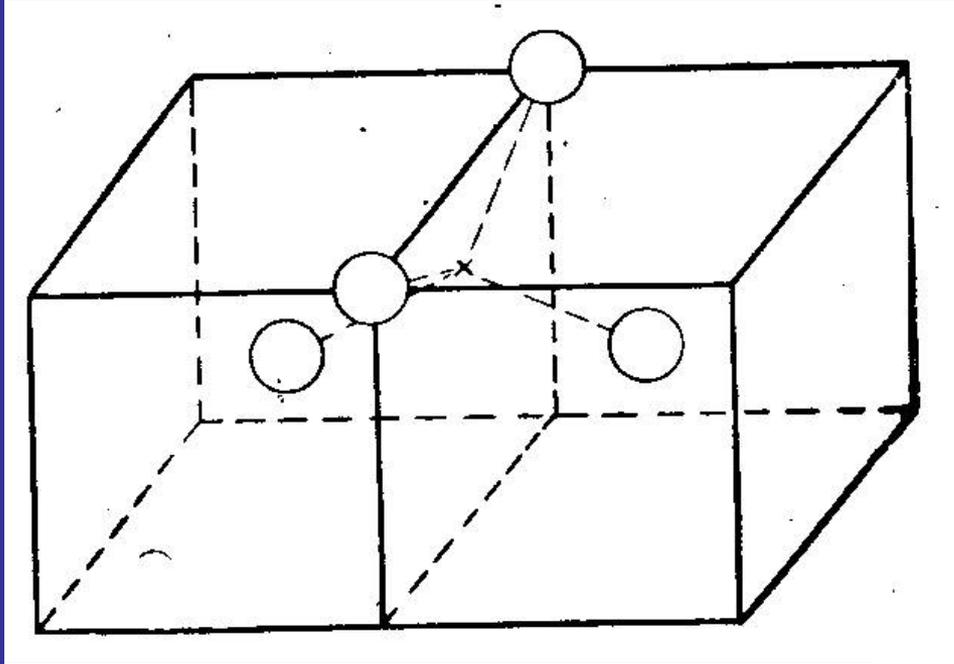
# Тетра- и октаэдрические поры в ОЦК-решетке

тетраэдрические поры

октаэдрические поры

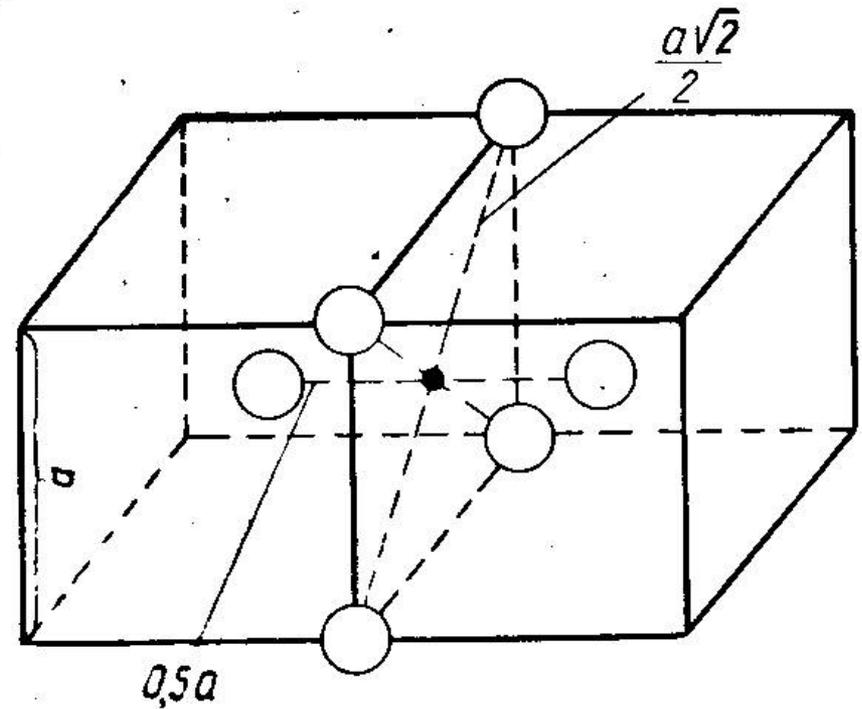


# Тетра- и октаэдрические поры в ОЦК-решетке



тетраэдрическая пора

октаэдрическая пора



# Равновесная концентрация вакансий

Заменяя всего лишь один атом на вакансию, мы увеличиваем число возможных структурных конфигураций с 1 до  $N$  (вакансия может находиться в любом из  $N$  узлов решетки). При увеличении числа вакансий резко возрастает число возможных способов размещения атомов по узлам решетки. Если в кристалле имеется  $N$  атомов и  $n$  вакансий, то число структурных конфигураций равно  $\frac{(N+n)!}{N!n!}$ . Из-за вакансий конфигурационная энтропия возрастает на

$$\Delta S = k \ln \frac{(N+n)!}{N!n!}. \quad (1)$$

Если энергию образования одной вакансии обозначить через  $E_0$ , то увеличение внутренней энергии кристалла  $\Delta U$  при образовании  $n$  вакансий будет равно  $nE_0$ . Тогда изменение свободной энергии при образовании вакансий

$$\Delta F = \Delta U - T \Delta S = nE_0 - kT \ln \frac{(N+n)!}{N!n!}.$$

Чтобы избавиться от факториалов, используем приближенную формулу Стирлинга:  $\ln x! = x \ln x - x$  (она очень точна при больших значениях  $x$ ). Тогда

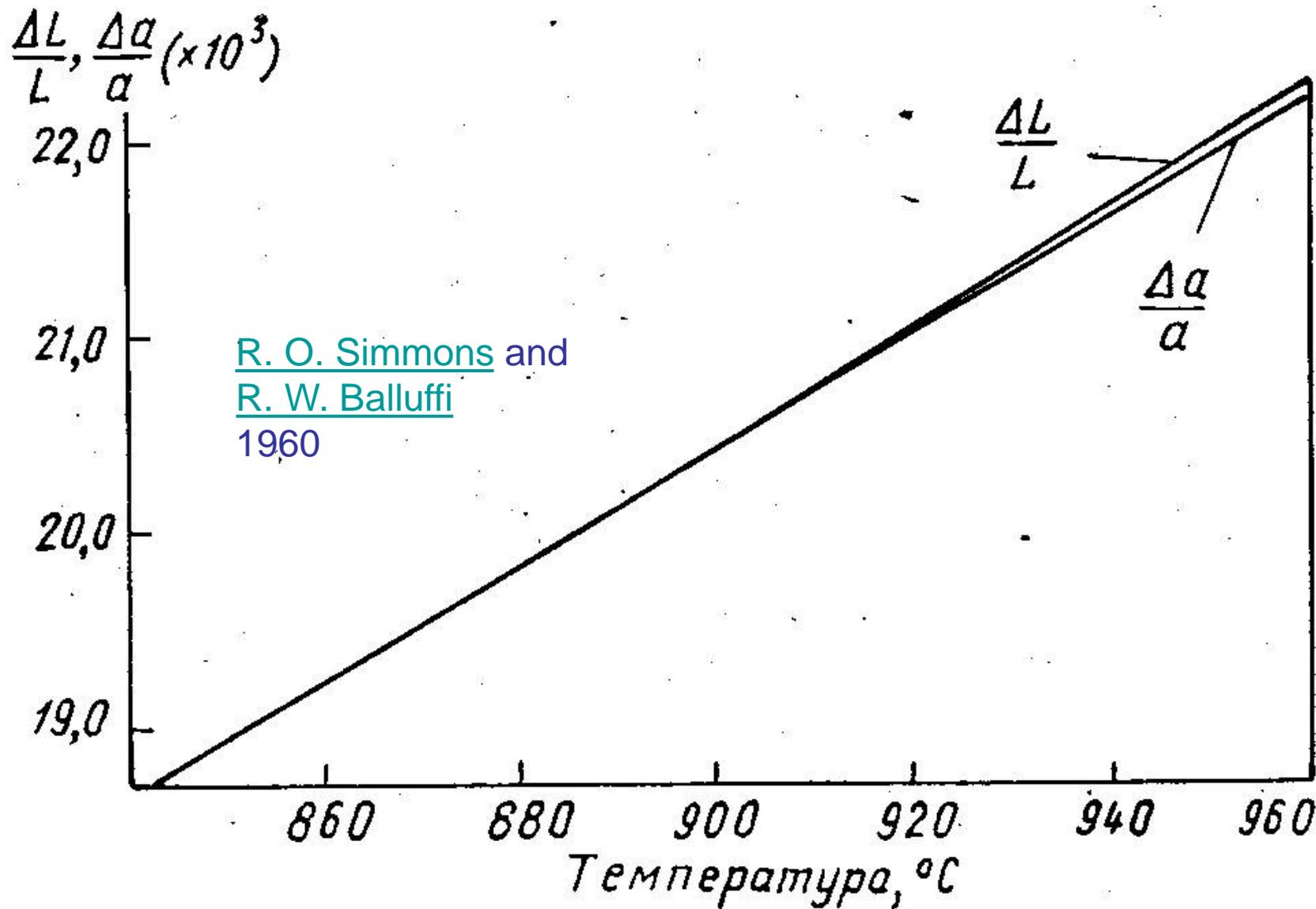
$$\Delta F = nE_0 - kT [(N+n) \ln (N+n) - N \ln N - n \ln n].$$

Теперь легко подсчитать равновесную концентрацию вакансий, приравняв к нулю первую производную от  $\Delta F$  по  $n$ :  $E_0 - kT [\ln (N+n) - \ln n] = 0$ . Отсюда получаем  $\frac{n}{N+n} = e^{\frac{-E_0}{kT}}$ . Так как  $N$  намного больше  $n$ , то можно написать

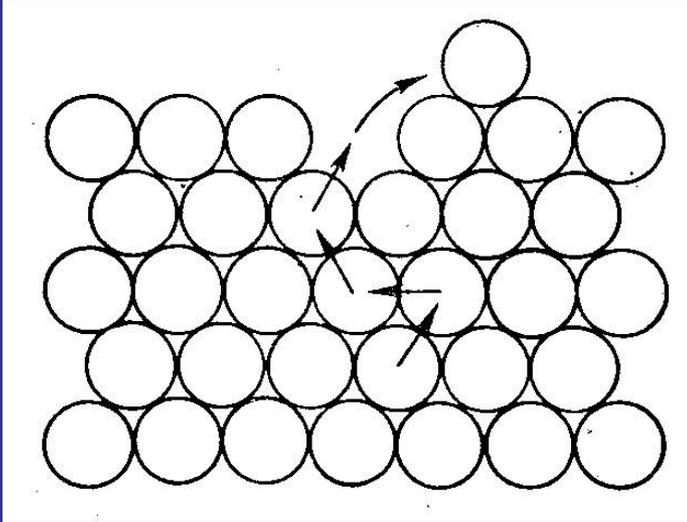
$$\frac{n}{N} = e^{\frac{-E_0}{kT}}, \quad (2)$$

где  $\frac{n}{N}$  и есть равновесная концентрация вакансий.

# Определение концентрации вакансий по удлинению образца (серебро)



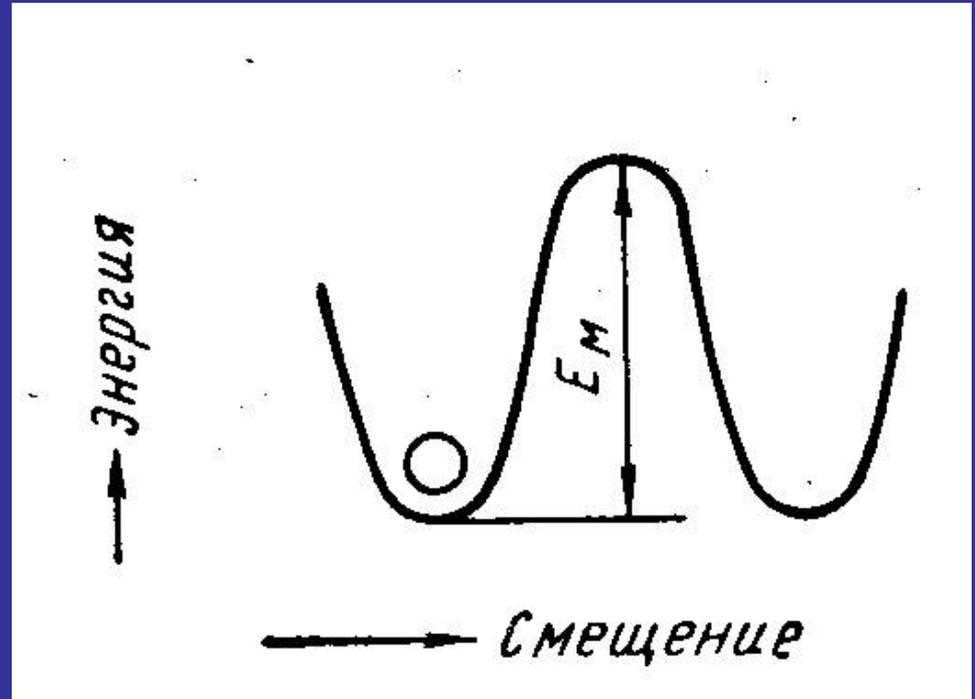
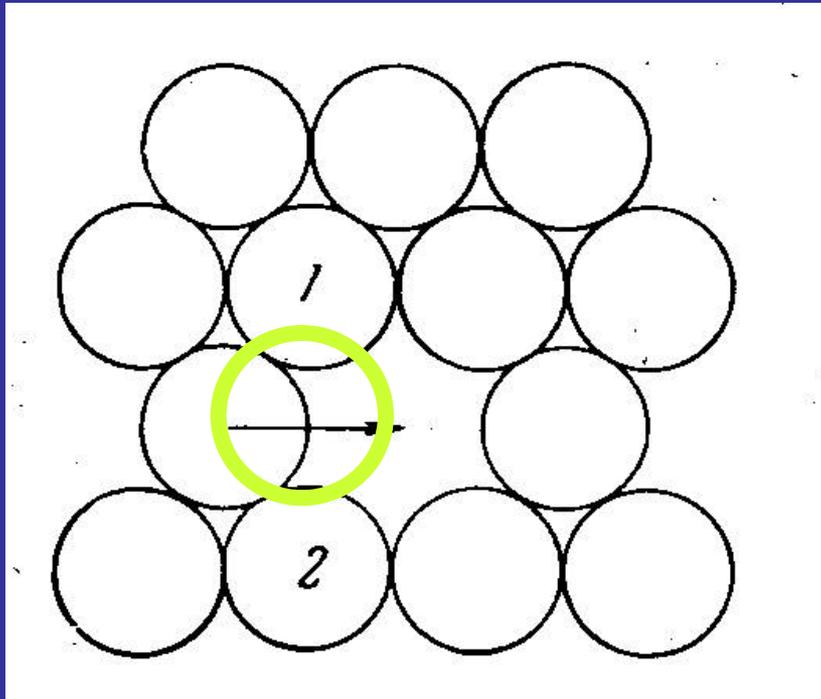
# Образование точечных дефектов. Источники и стоки



Механизм  
Шоттки

Другие  
механизмы...

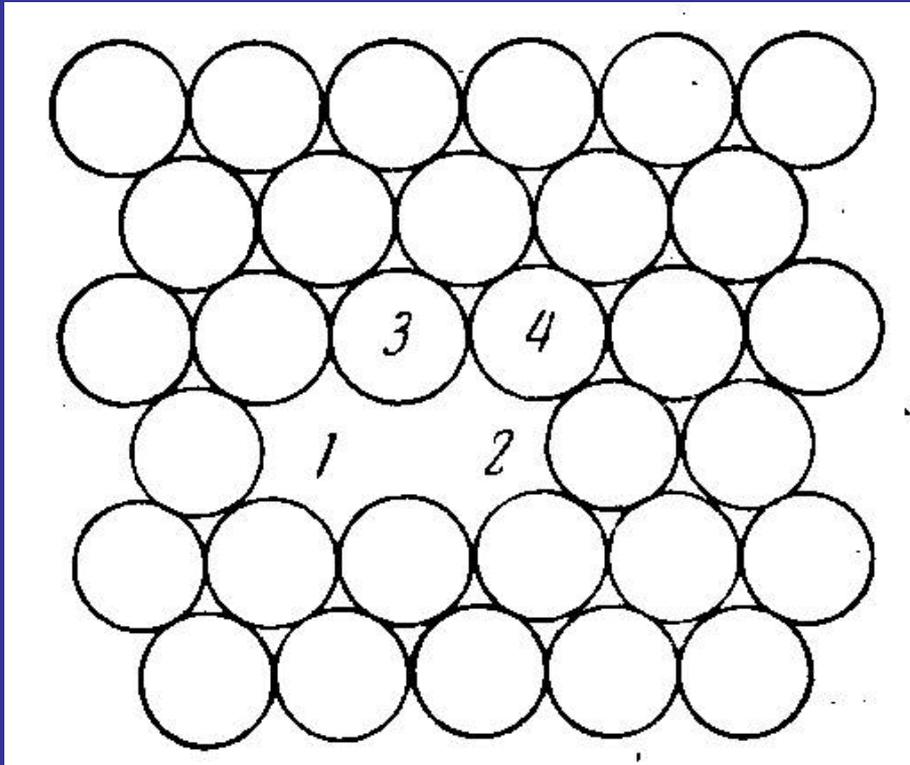
При перемещении в соседний узел атом преодолевает энергетический барьер



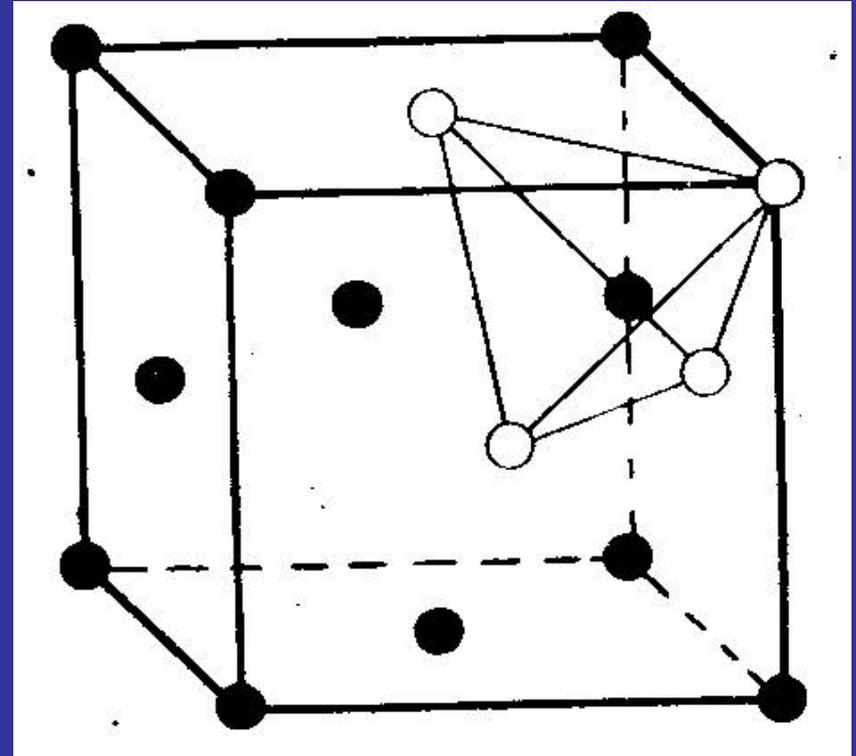
# Реакции точечных дефектов, электронные свойства точечных дефектов

**Механизм**

# Комбинации точечных дефектов

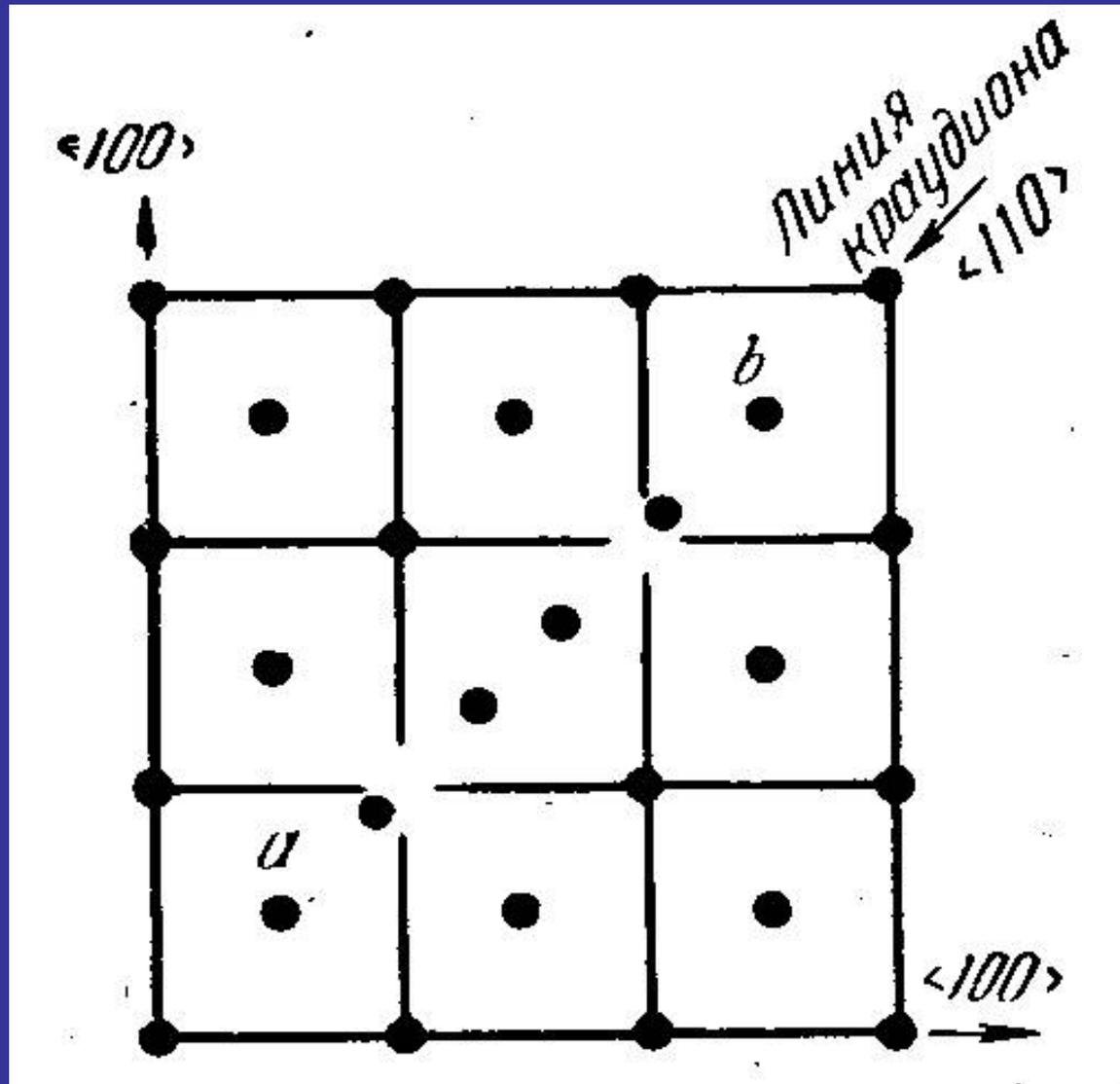


**Дивакансия  
в слое  
плотнейшей  
упаковки**



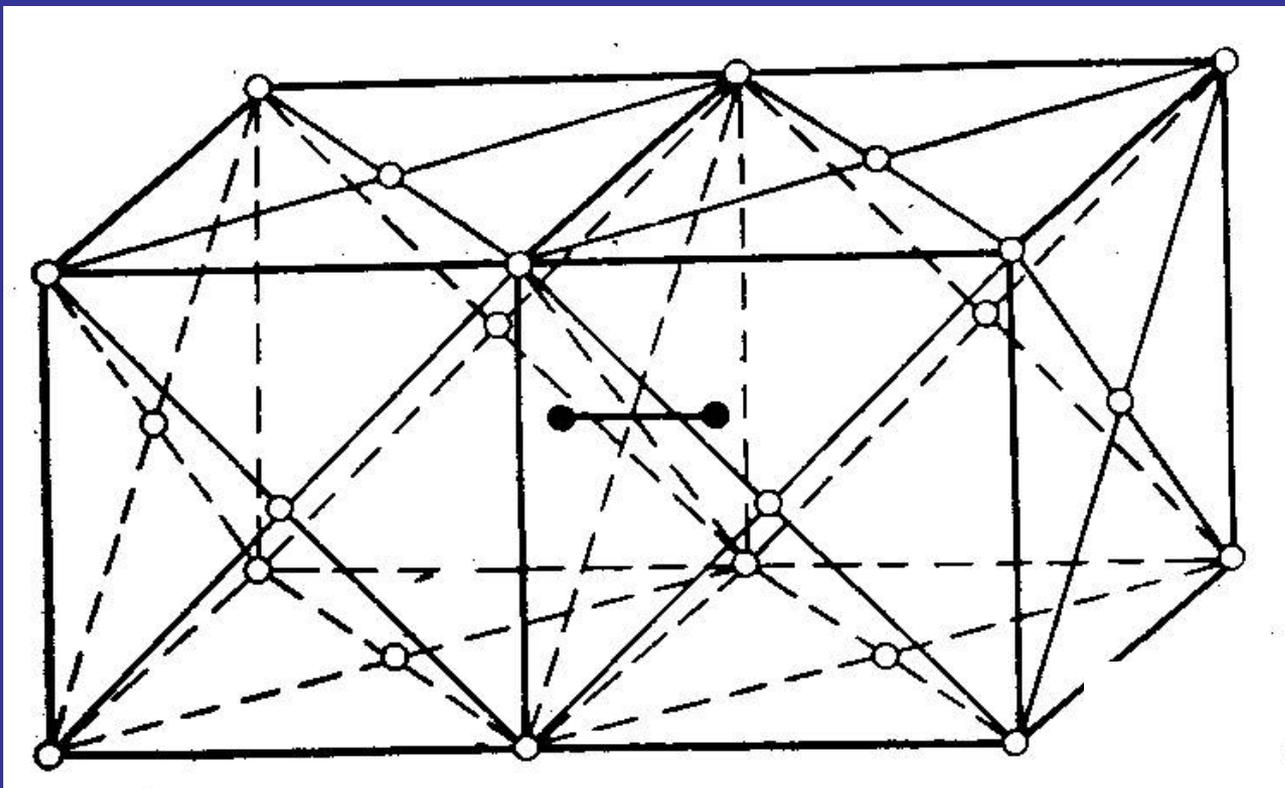
**Тетраэдр  
вакансий  
в ГЦК-решетке**

# Комбинации точечных дефектов



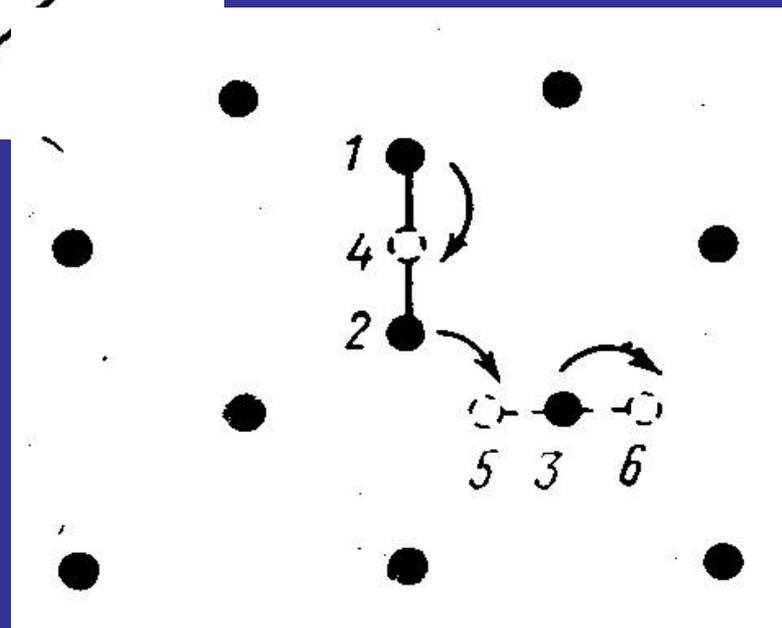
Краудион (110) в ГЦК-решетке

# Комбинации точечных дефектов

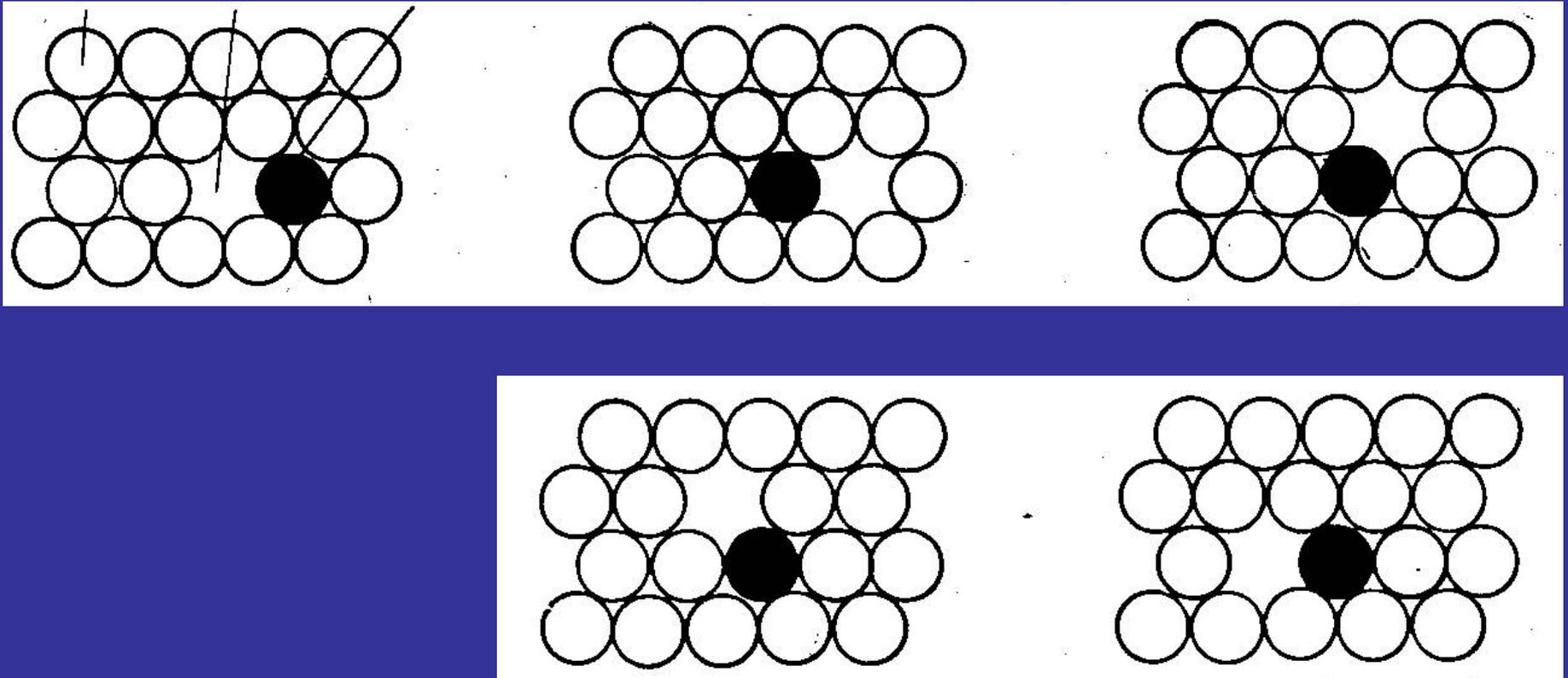


Гантель (100) в  
ГЦК-решетке из  
двух  
межузельных  
атомов

Миграция гантели  
из положения (1-2)  
в положение (5-6)



# Комбинации точечных дефектов



Миграция комплекса «вакансия – примесный атом»

# Дефекты в кристаллах

# 1. Линейные дефекты

## Дислокации

Ступени на внутренних и внешних границах раздела

Дислокации на внутренних границах раздела

Тройные стыки границ раздела

# Дефекты в кристаллах

Дислокации. Энергия дислокации. Переползание и скольжение. Пластическая деформация как результат движения дислокации.

Процессы

размножения дислокации, источники дислокации. Подвижность дислокации.

Механизмы движения.

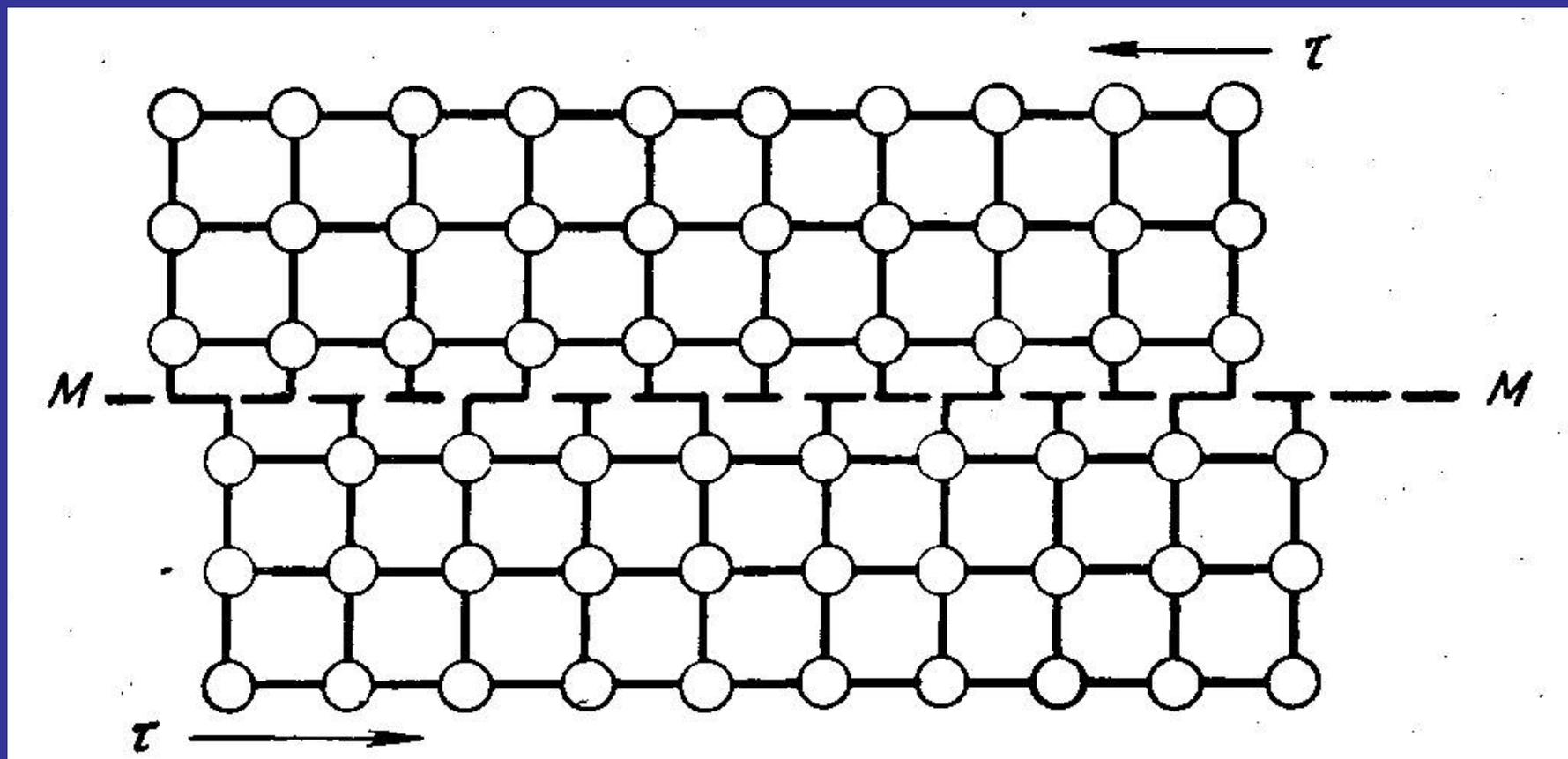
Геометрические характеристики дислокации. Упругие поля дислокации. Атомная

структура ядер дислокации. Частичные дислокации и дефекты упаковки.

Экспериментальные методы изучения дислокации.

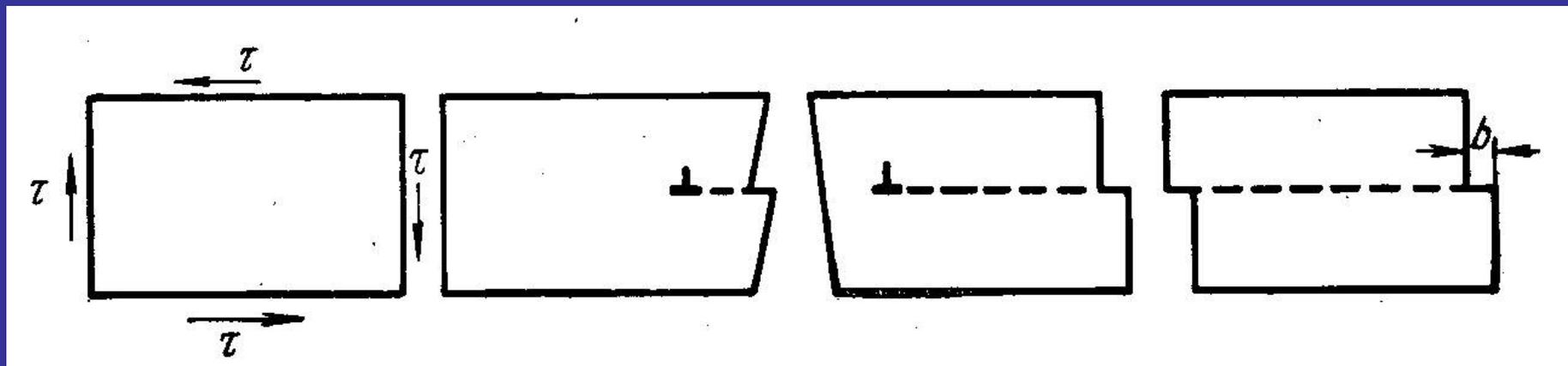
Влияние дислокации на физические свойства кристаллов (электрические, оптические, тепловые).

# Дислокация: линия незавершенного сдвига

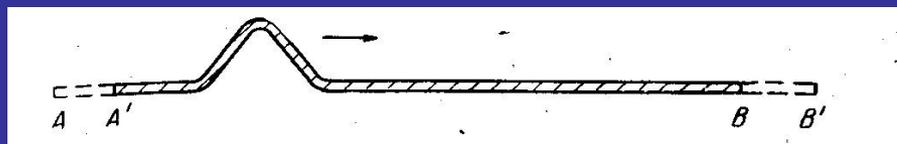


**Сдвинуть полкристалла целиком – энергетически очень невыгодно!**

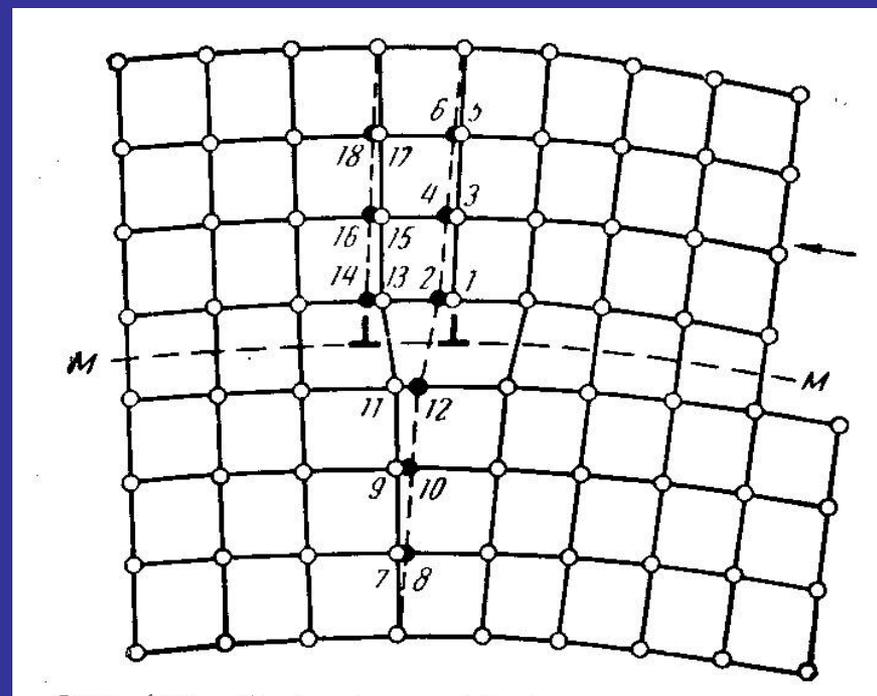
# Дислокация: линия незавершенного сдвига



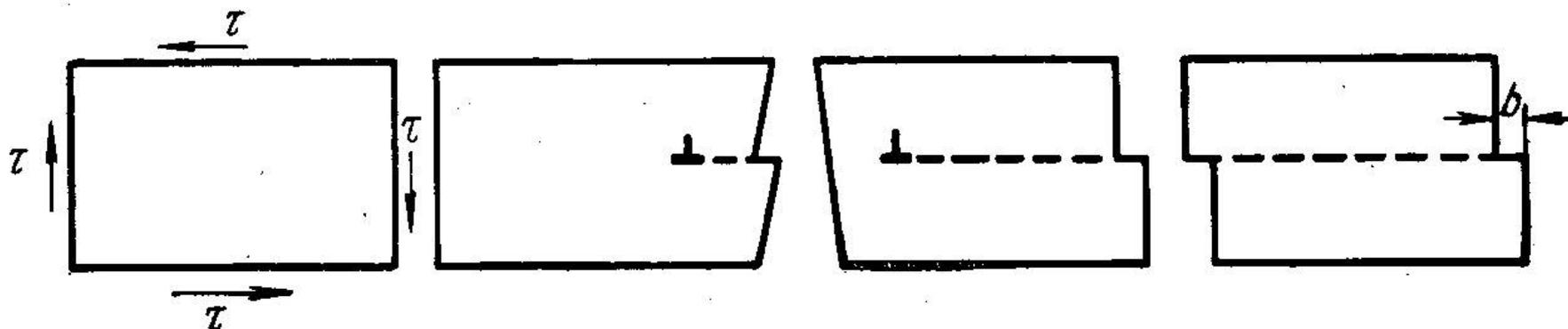
Поэтому сдвиг происходит постепенно ...



... как складка на ковре

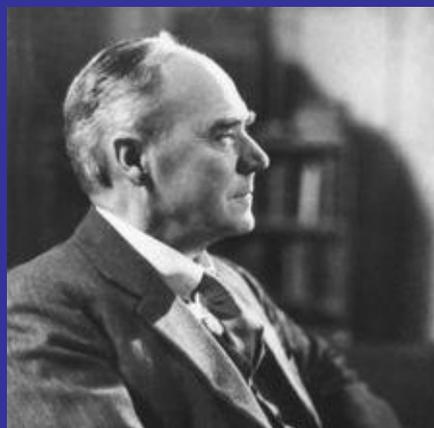


# Дислокация: линия незавершенного сдвига



Поэтому сдвиг происходит постепенно ...

1934 г.



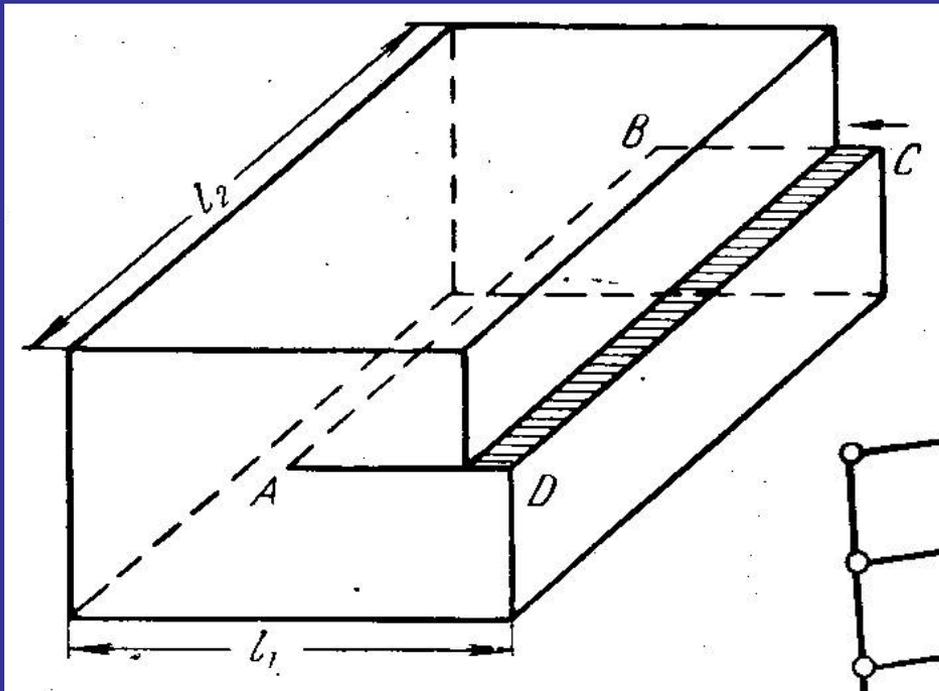
**Egon Orován**  
1902-1989



**Polányi Mihály**  
1891-1976

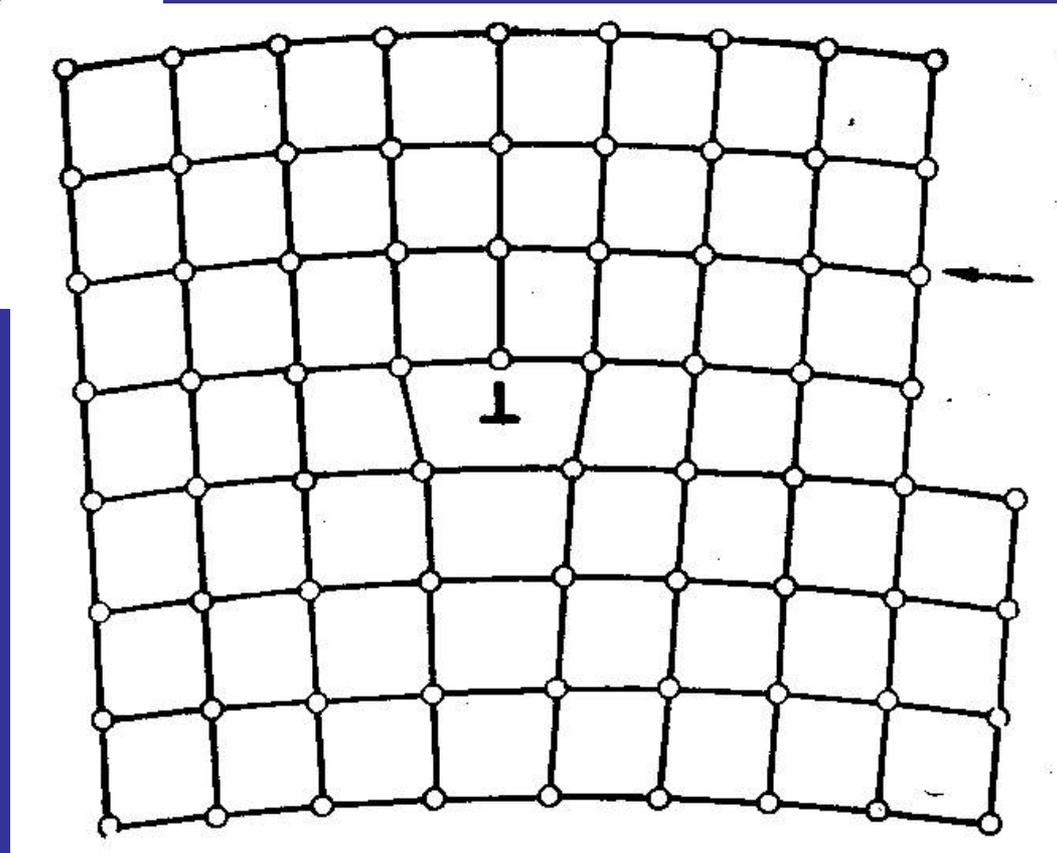
**Sir Geoffrey Ingram Taylor**  
1886-1975

# Краевая дислокация (edge dislocation)

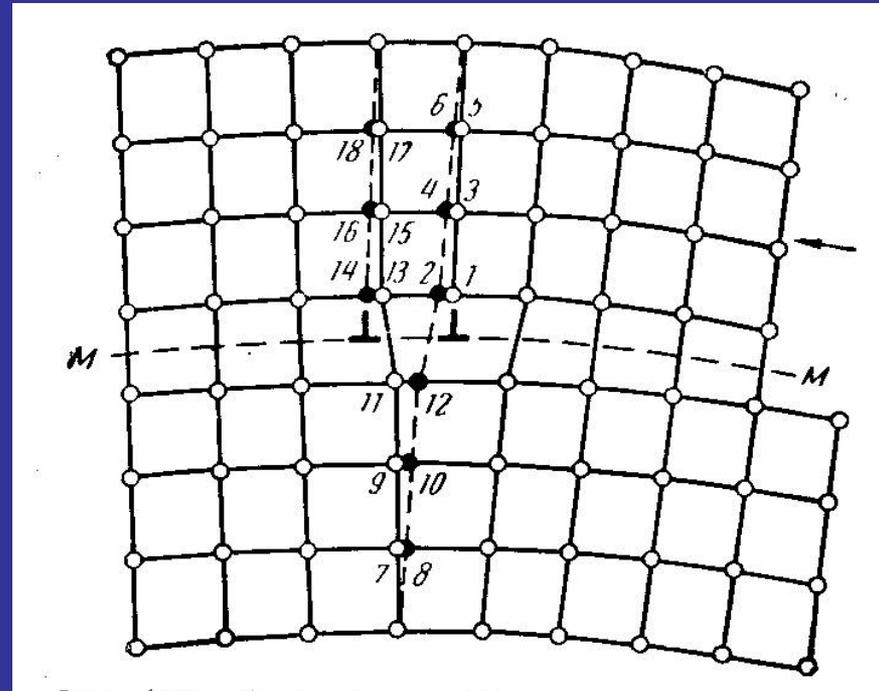
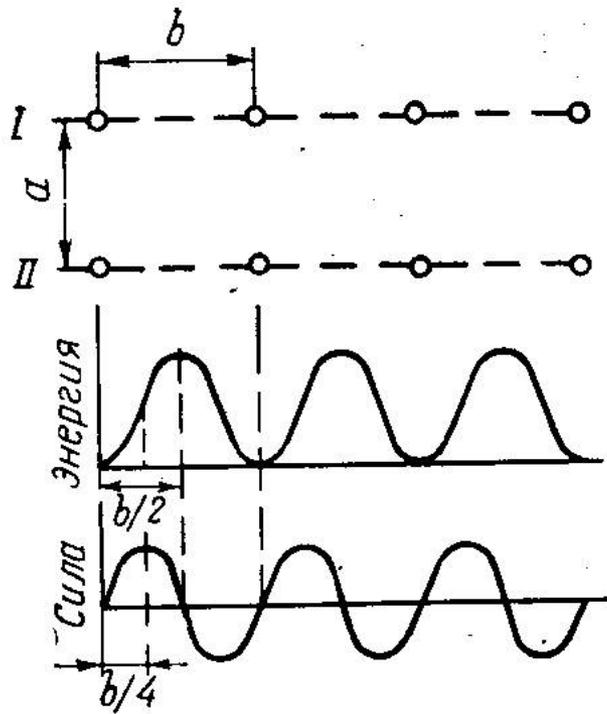
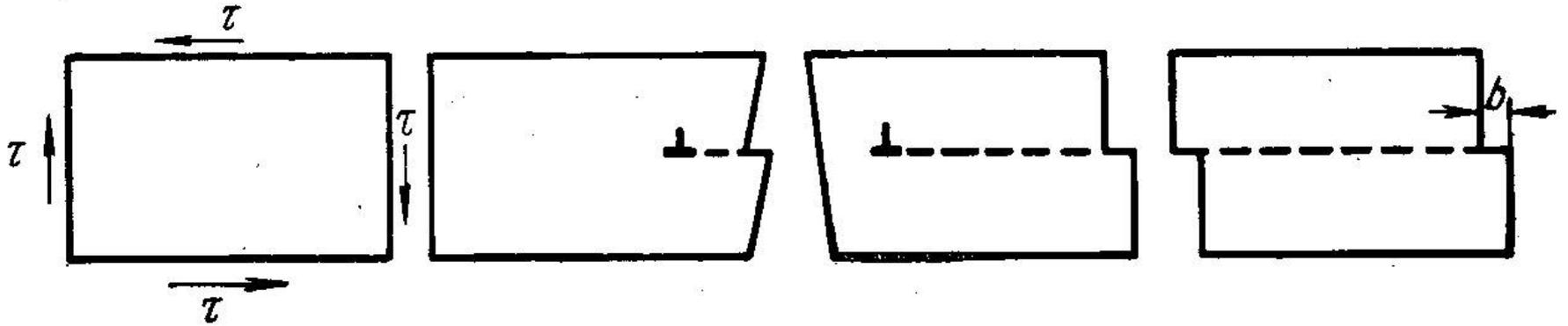


Вставленная  
экстраплоскость

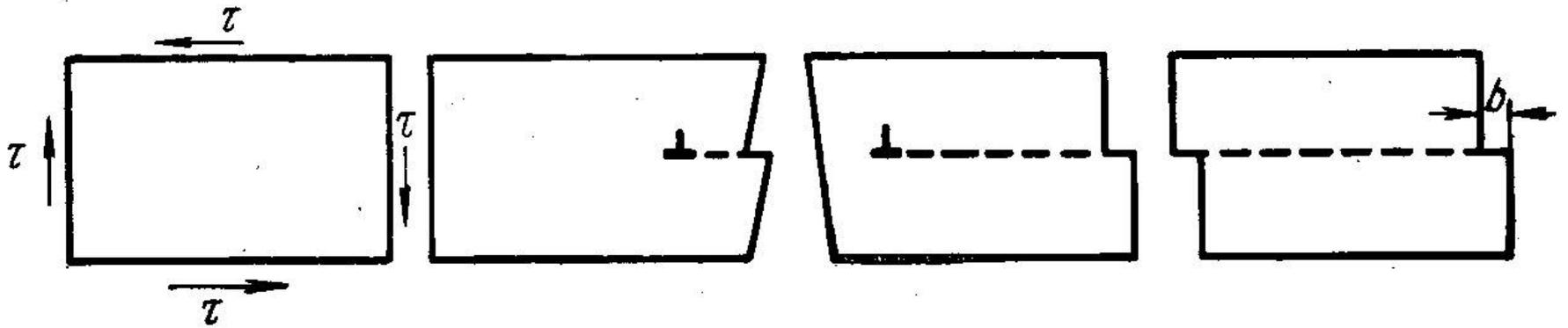
Сдвиг,  
создавший  
дислокацию



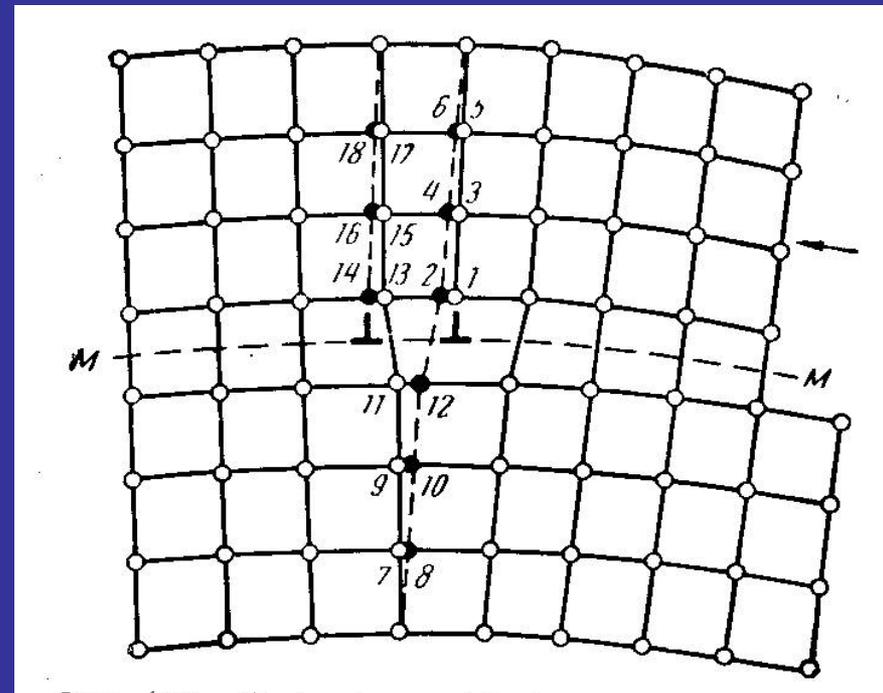
# Скольжение краевой дислокации (glide)



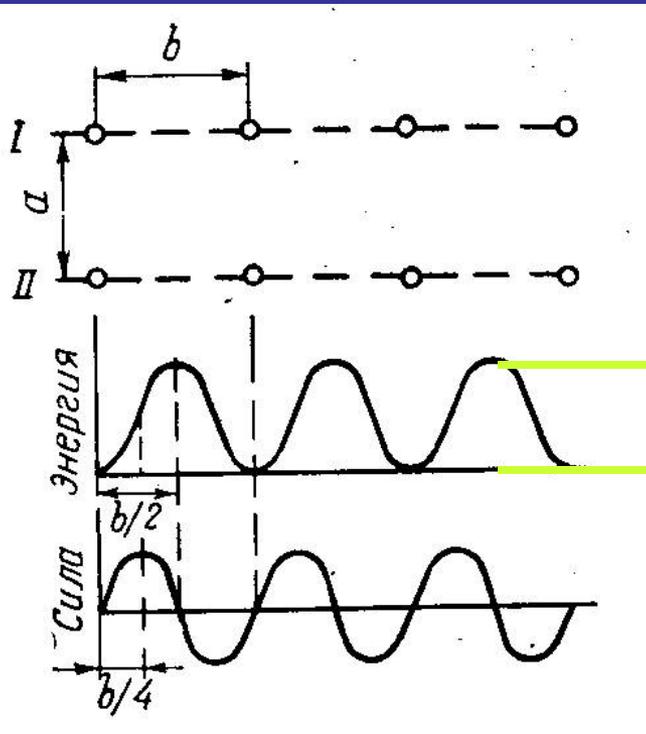
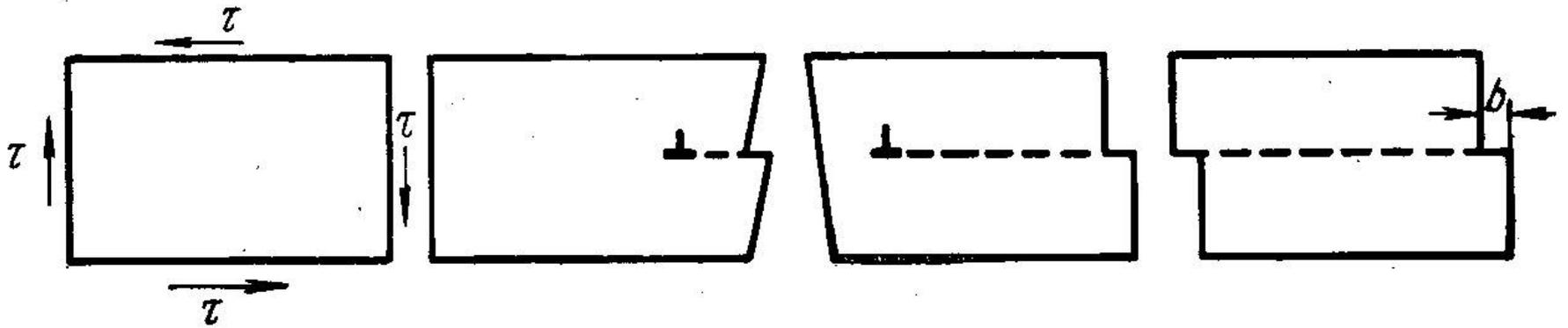
# Скольжение краевой дислокации



Нет диффузии: атомы  
смещаются на  
расстояние, меньшее  
межатомного



# Скольжение краевой дислокации

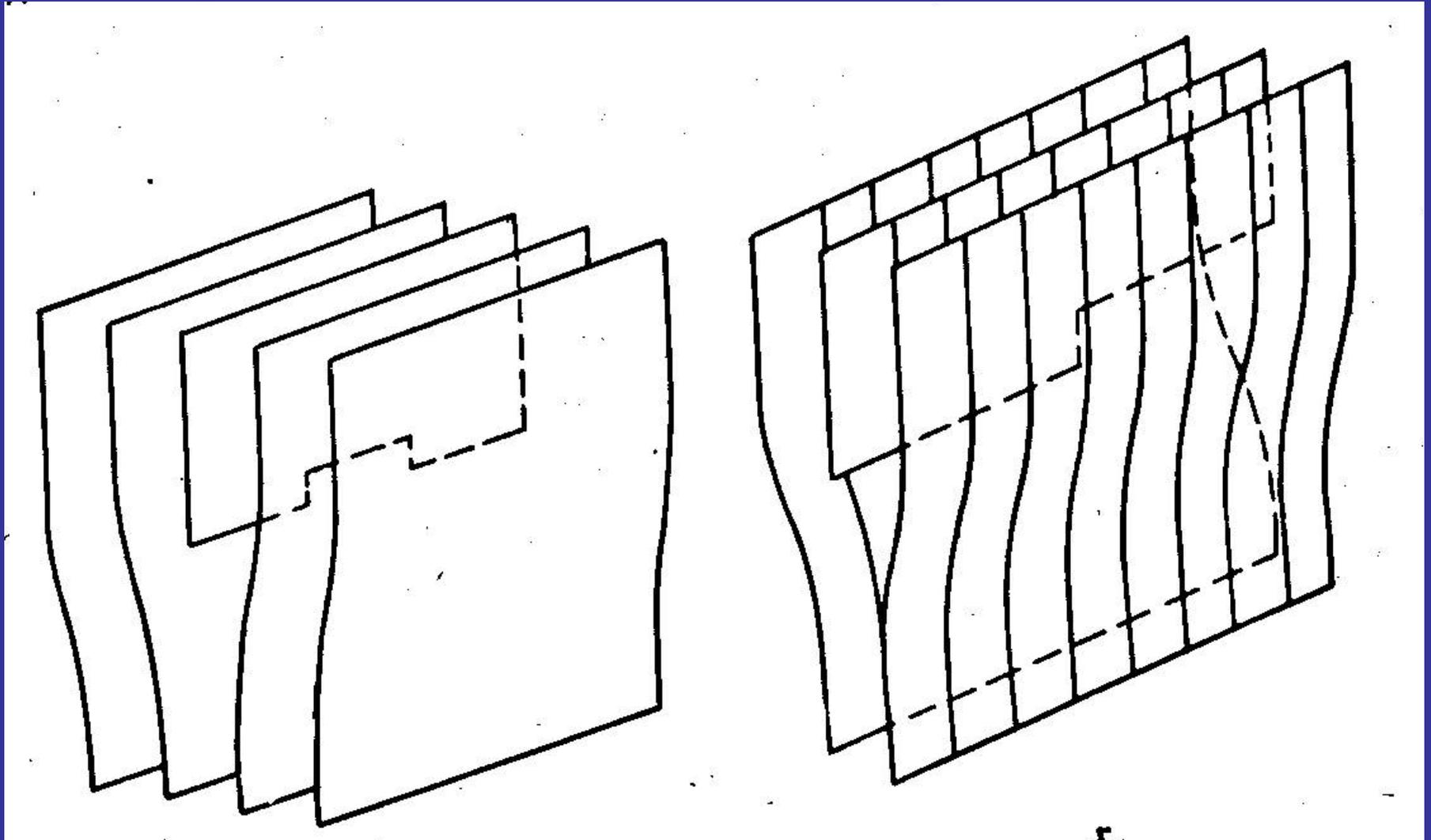


**Барьер Пайерлса:**  
в металлах он ниже,  
в диэлектриках - выше

Rudolf Ernst Peierls  
1907-1995



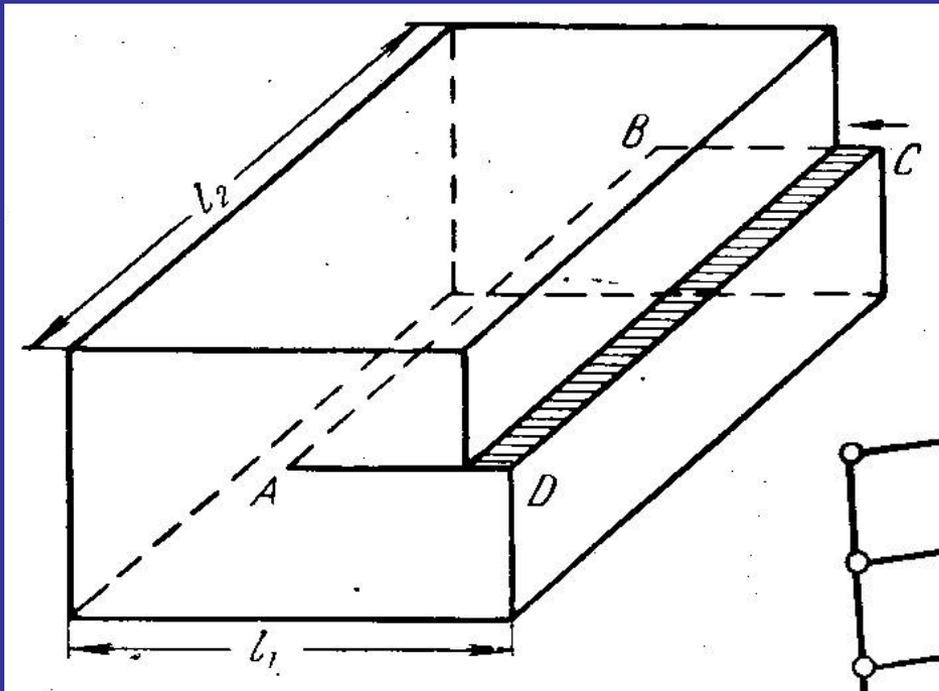
# Переползание краевой дислокации (climb)



Для смещения ступени (излома) нужна диффузия атомов и вакансий.

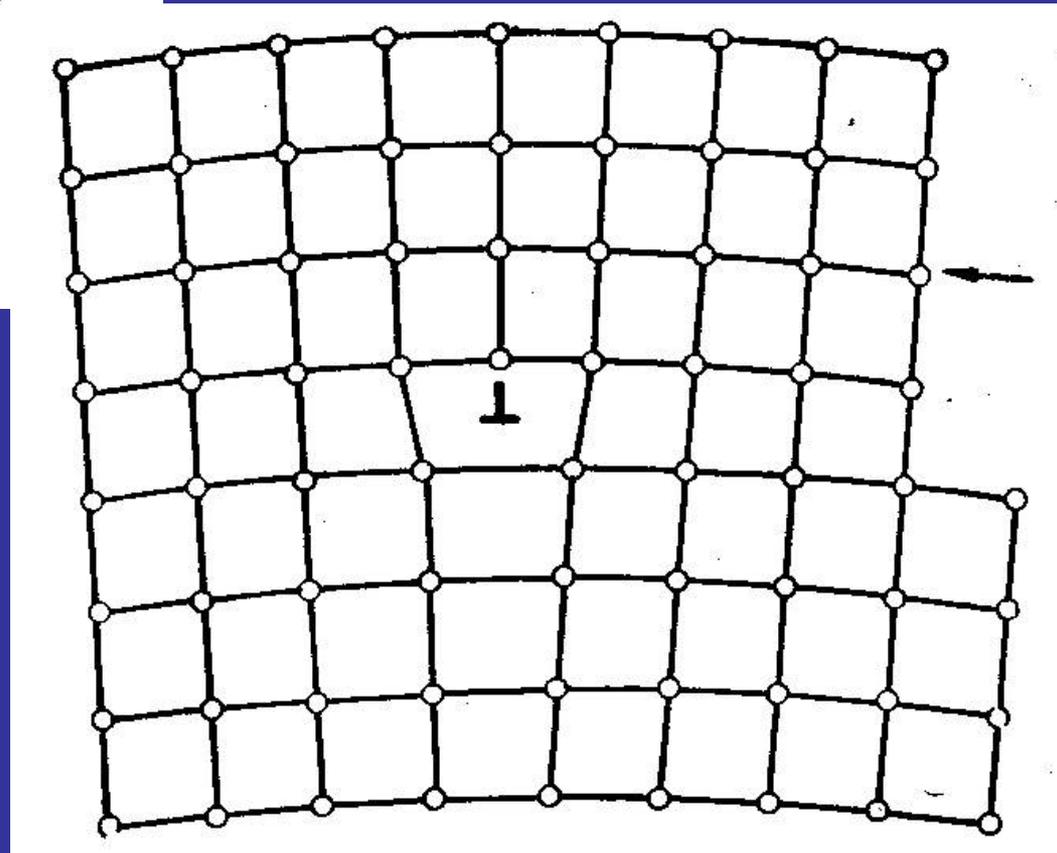
Дислокационные ступени (изломы) – источники (стоки) вакансий

# Краевая дислокация (edge dislocation)

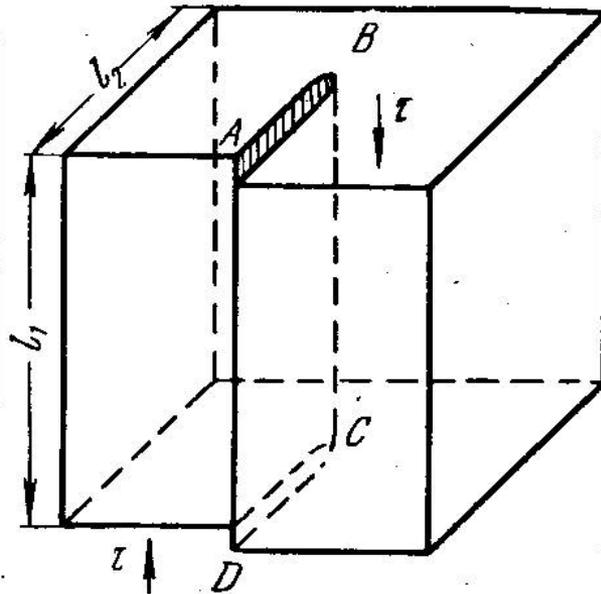
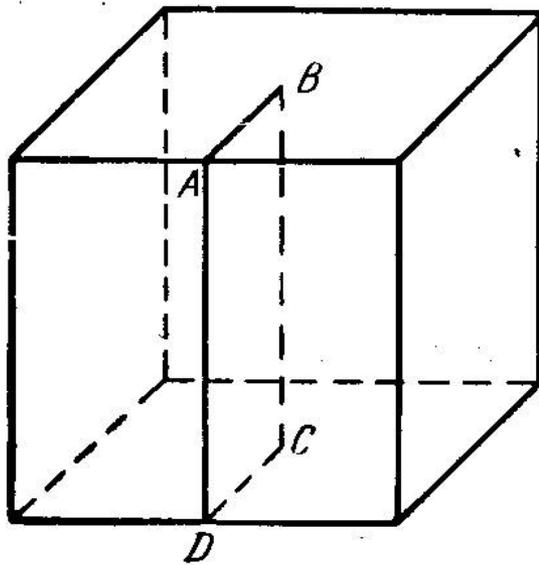


Вставленная  
экстраплоскость

Сдвиг,  
создавший  
краевую  
дислокацию

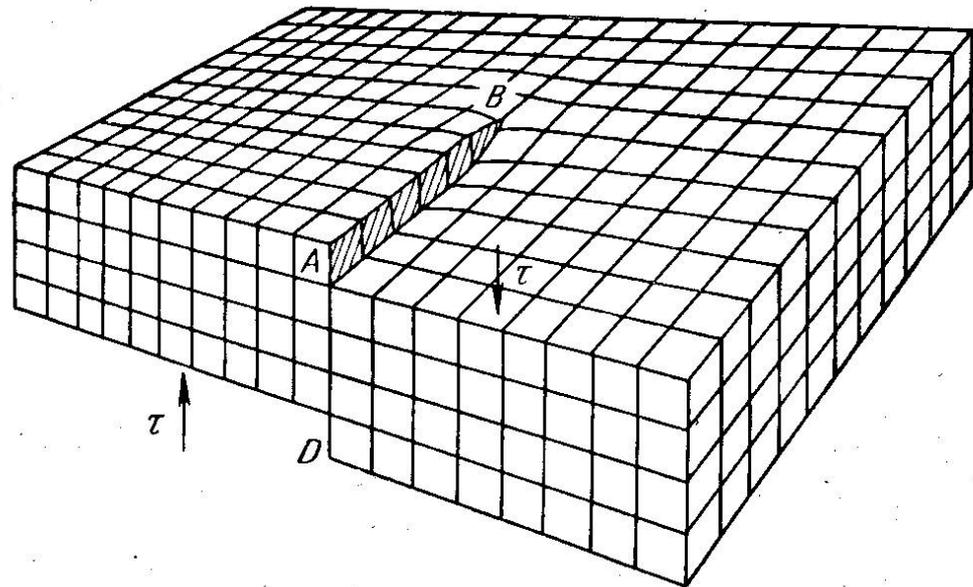


# Винтовая дислокация (screw dislocation)

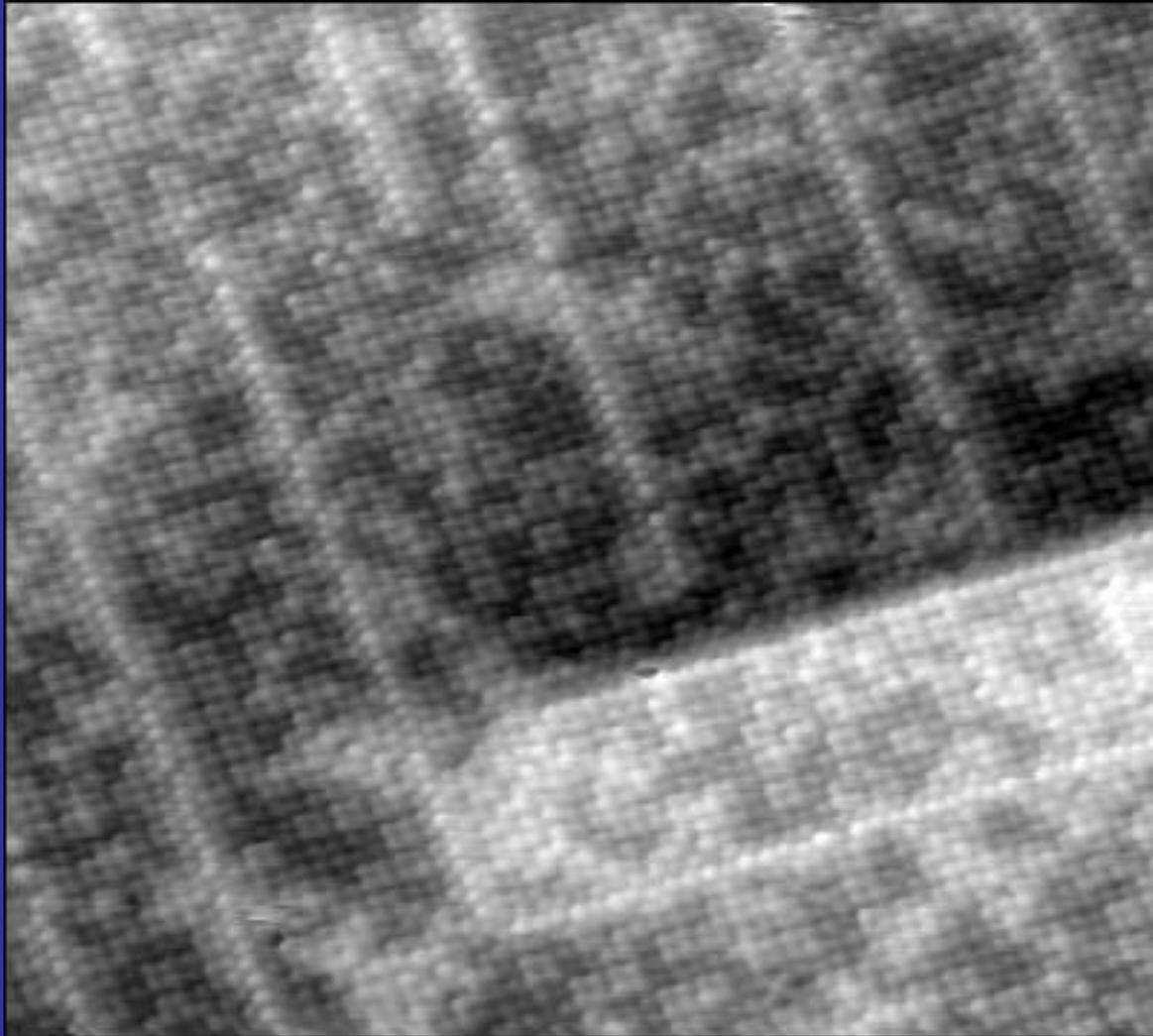


Сдвиг,  
создавший  
винтовую  
дислокацию

Кристалл с  
винтовой  
дислокацией

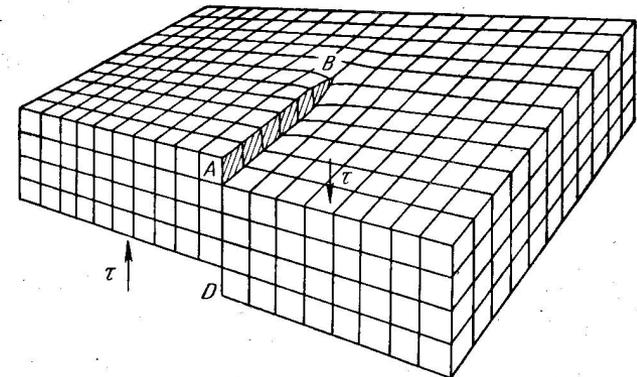


# Винтовая дислокация (screw dislocation)

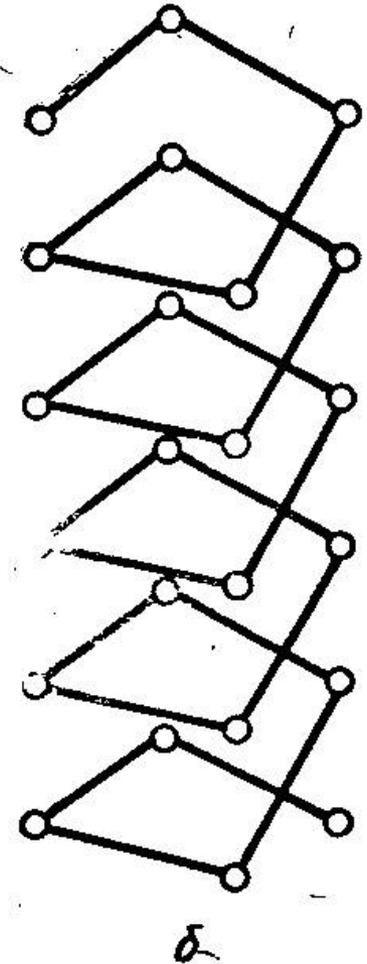
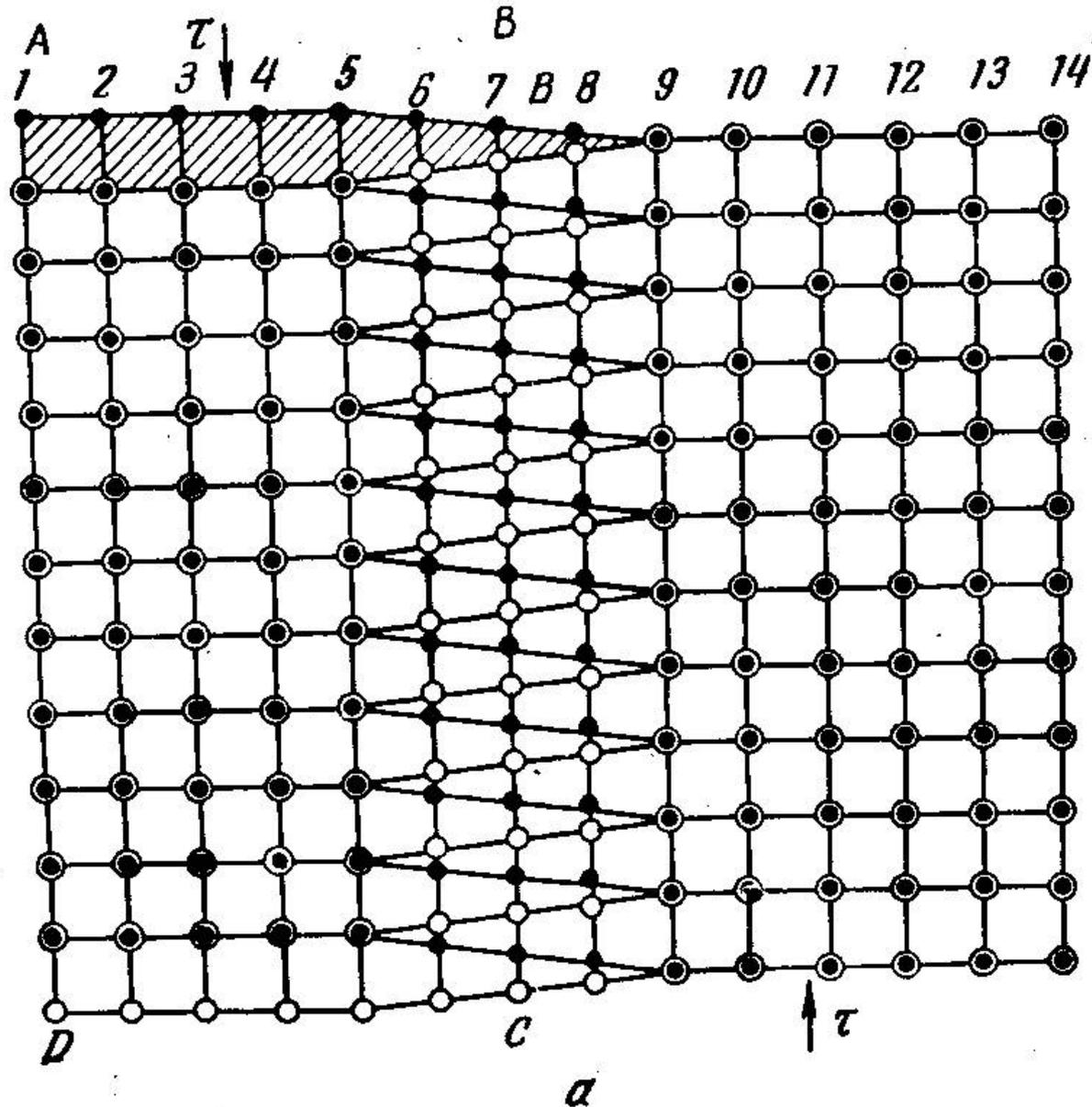


Institut für Allgemeine Physik, TU Wien

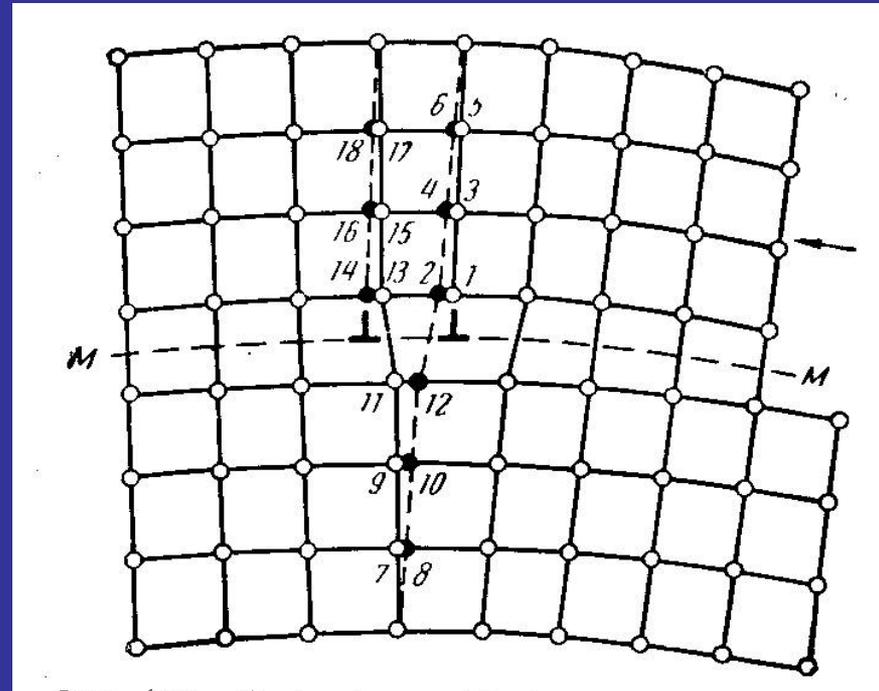
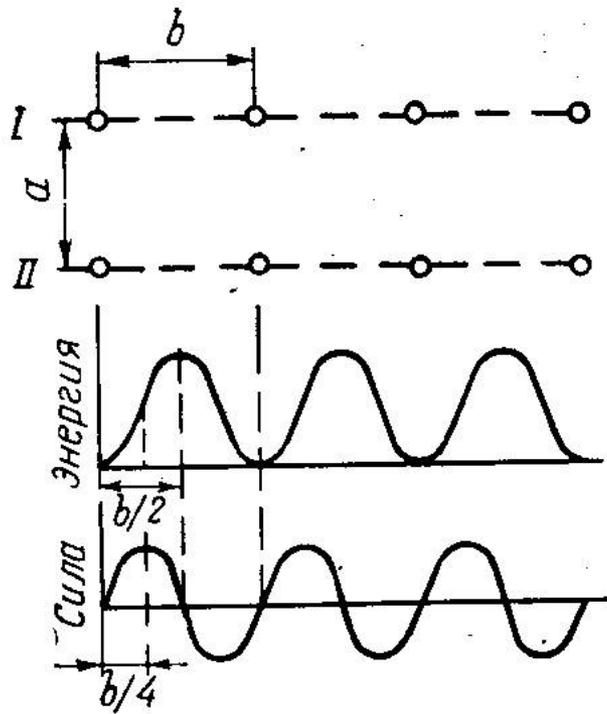
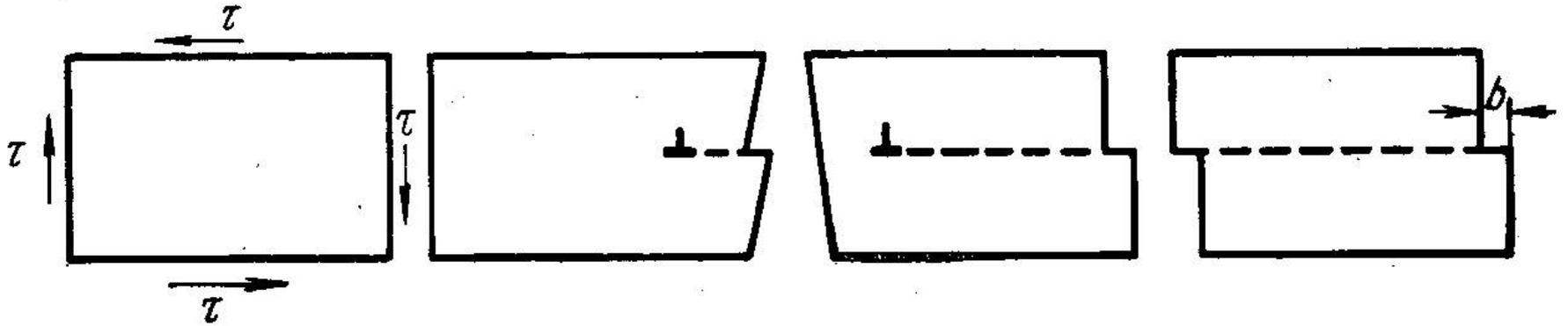
Кристалл с  
винтовой  
дислокацией



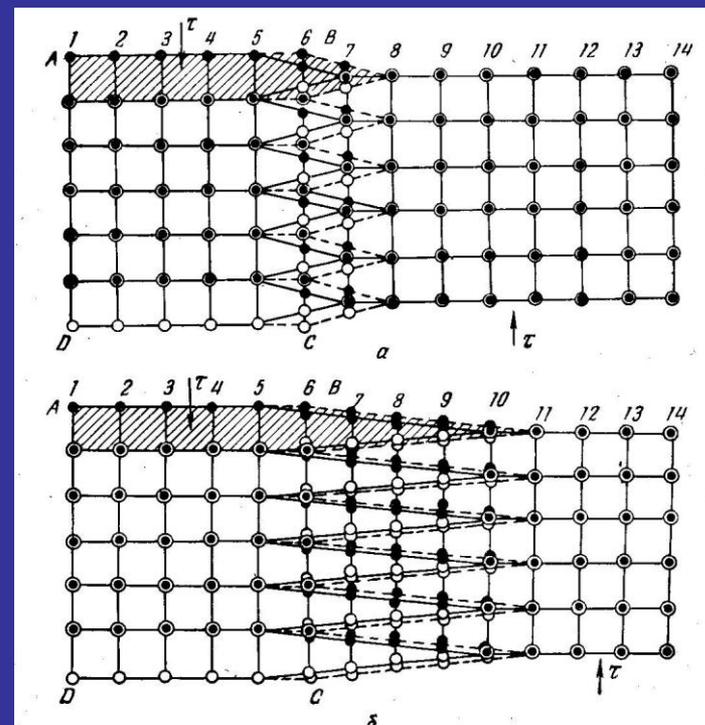
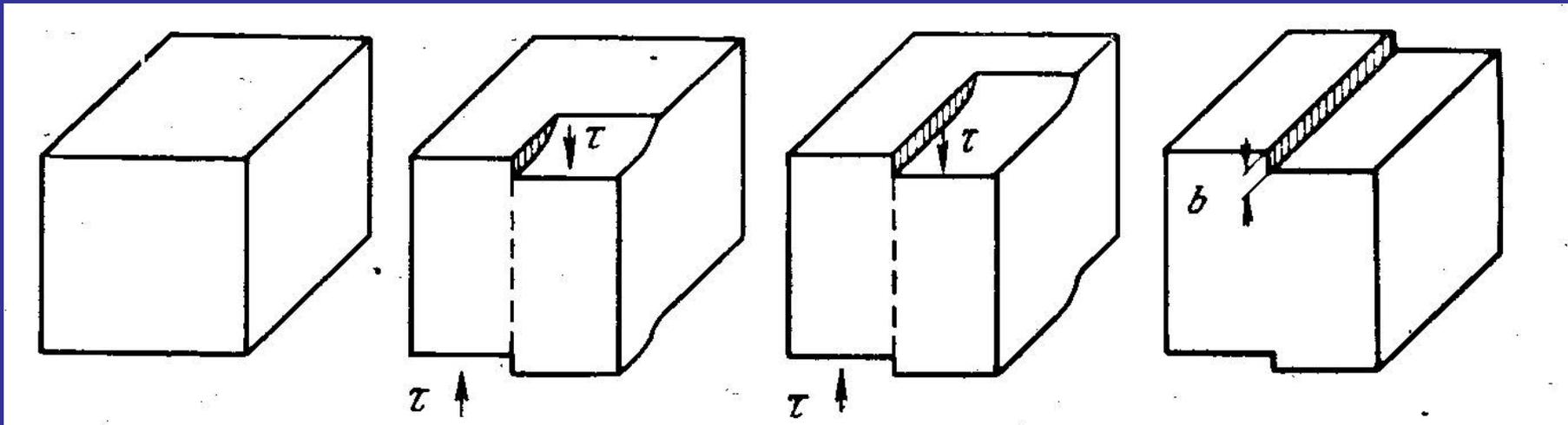
# Винтовая дислокация: расположение атомов



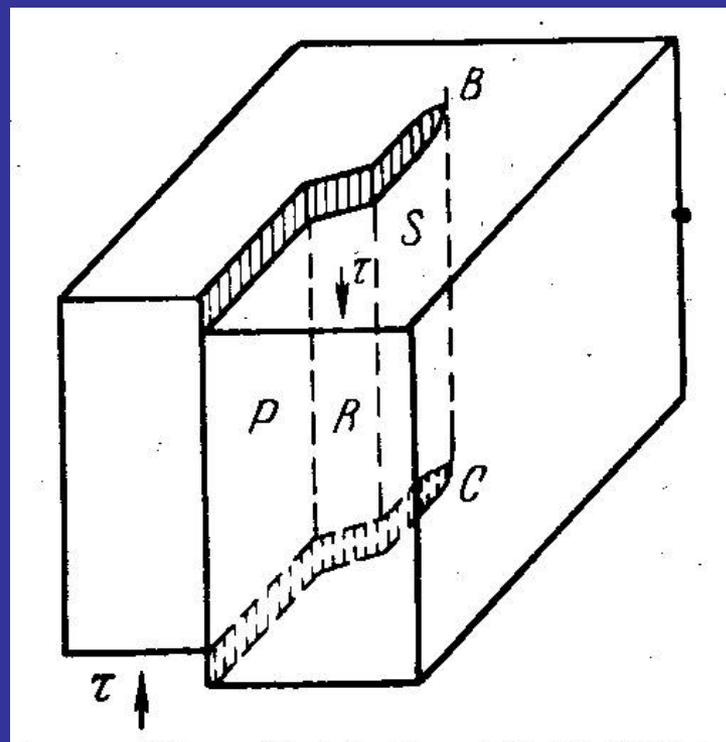
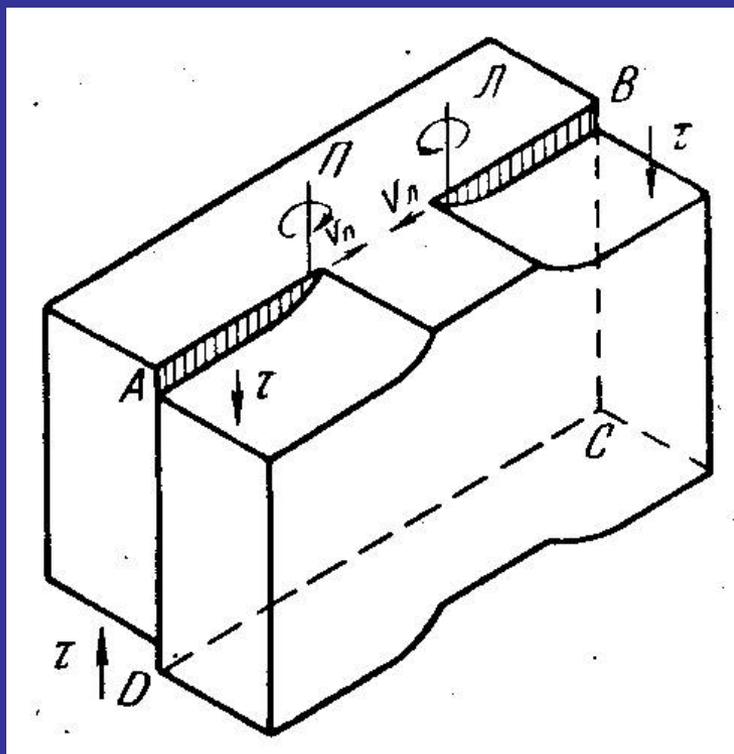
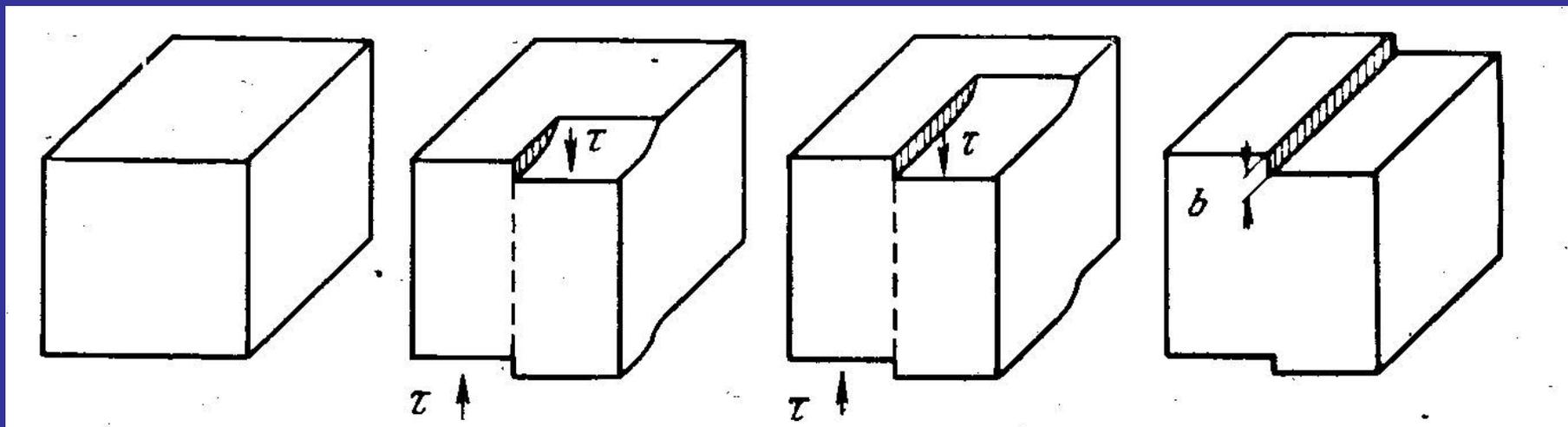
# Скольжение краевой дислокации (glide)



# Скольжение винтовой дислокации

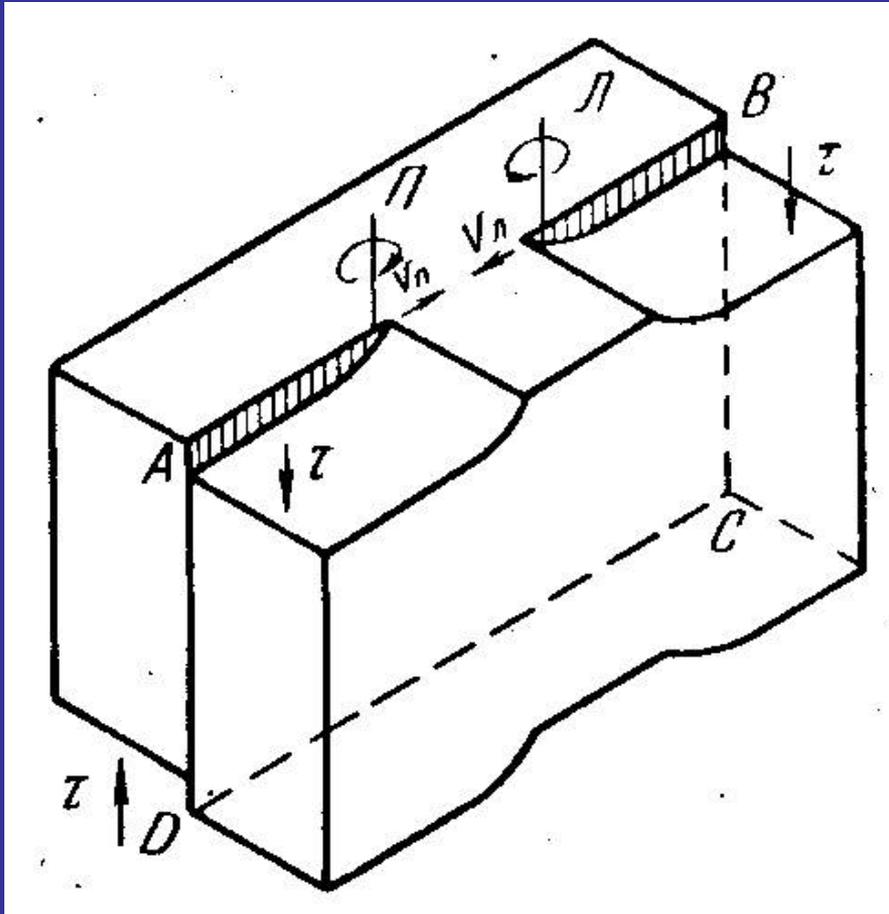


# Скольжение винтовой дислокации

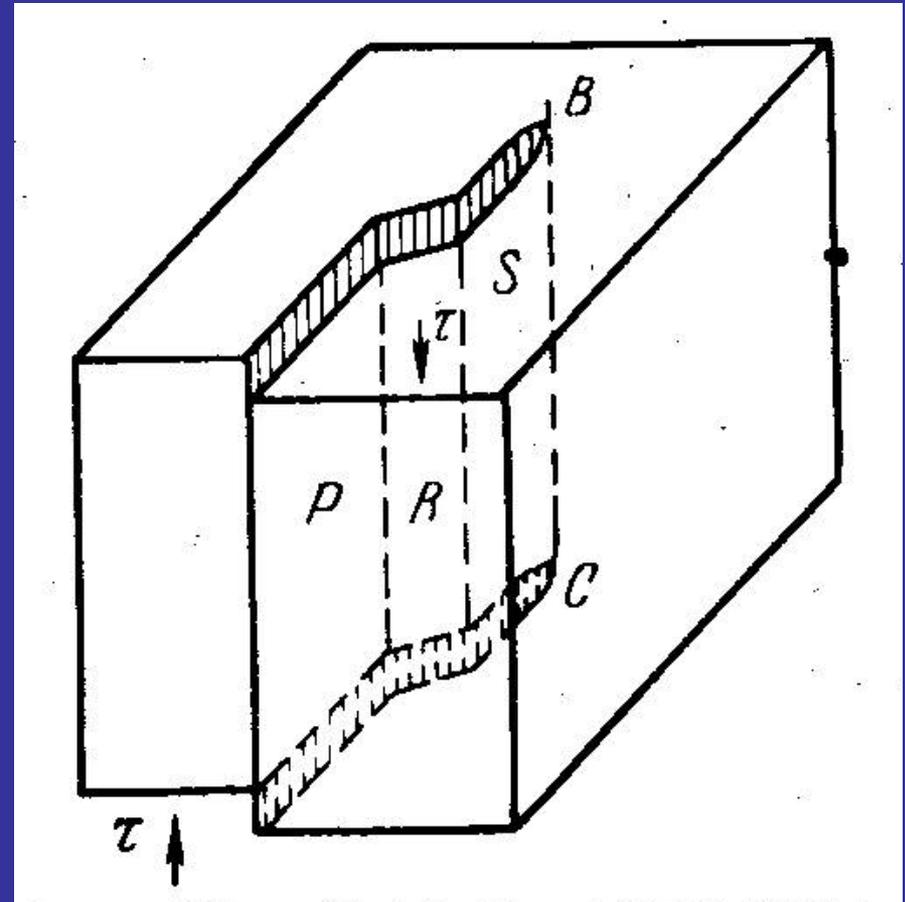


# Скольжение винтовой дислокации

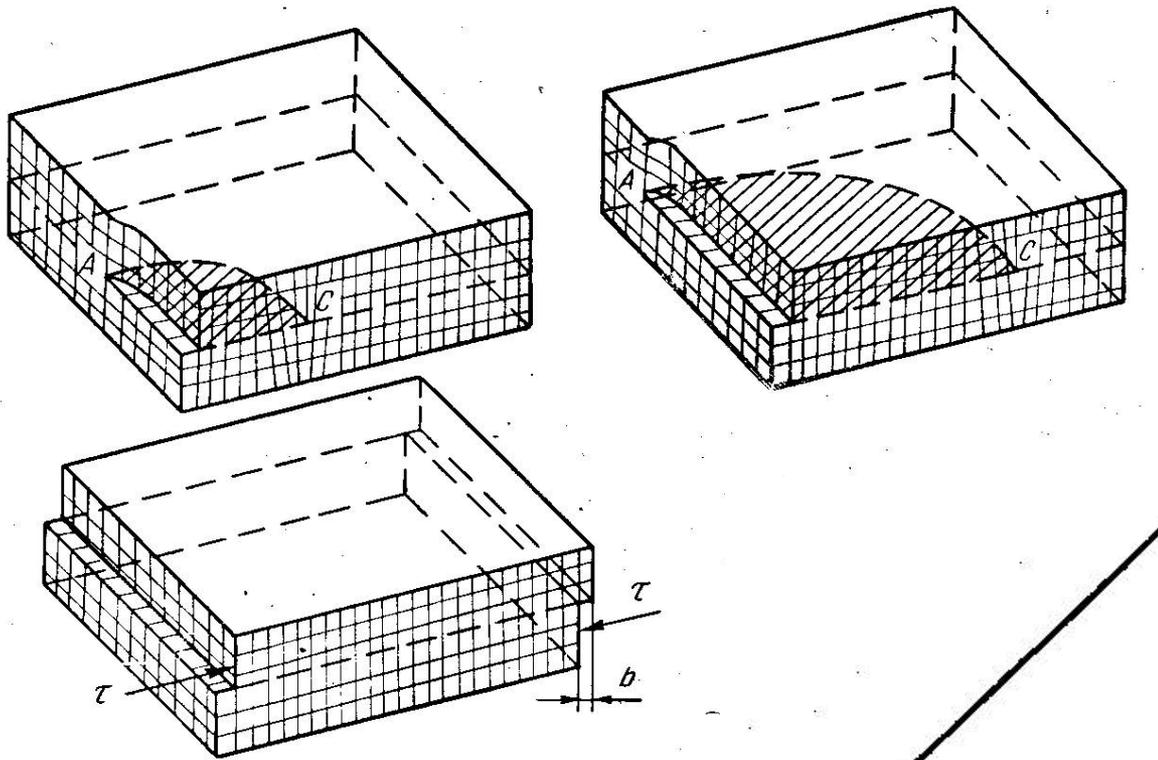
Две винтовых дислокации скользят навстречу друг другу



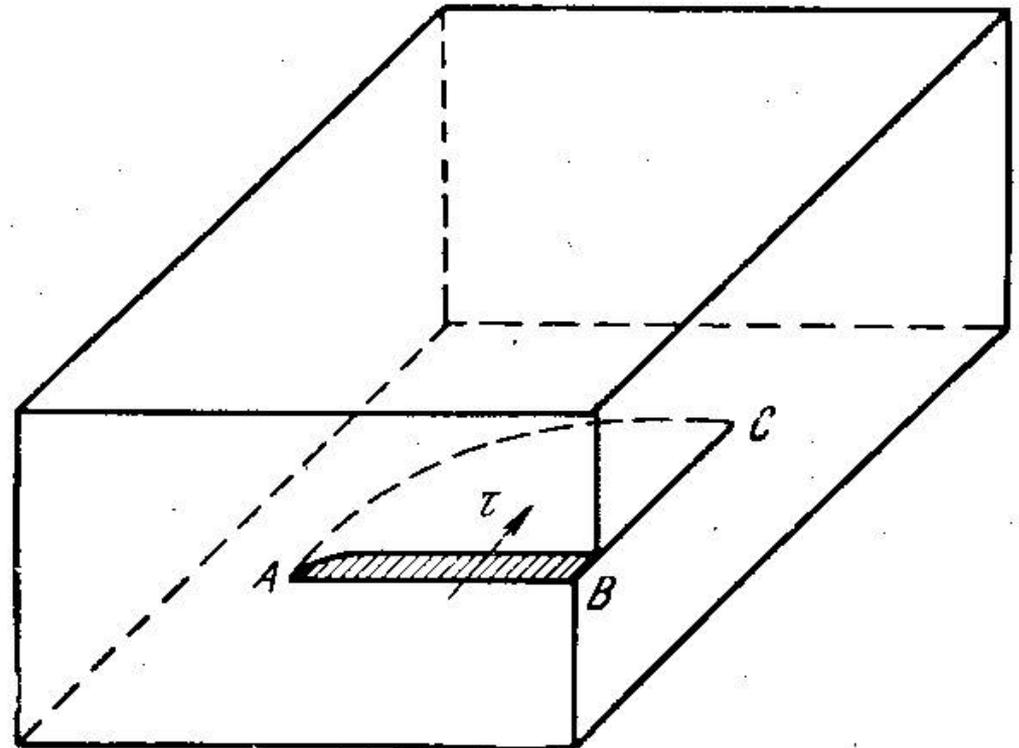
Двойное поперечное скольжение винтовой дислокации



# Смешанные дислокации

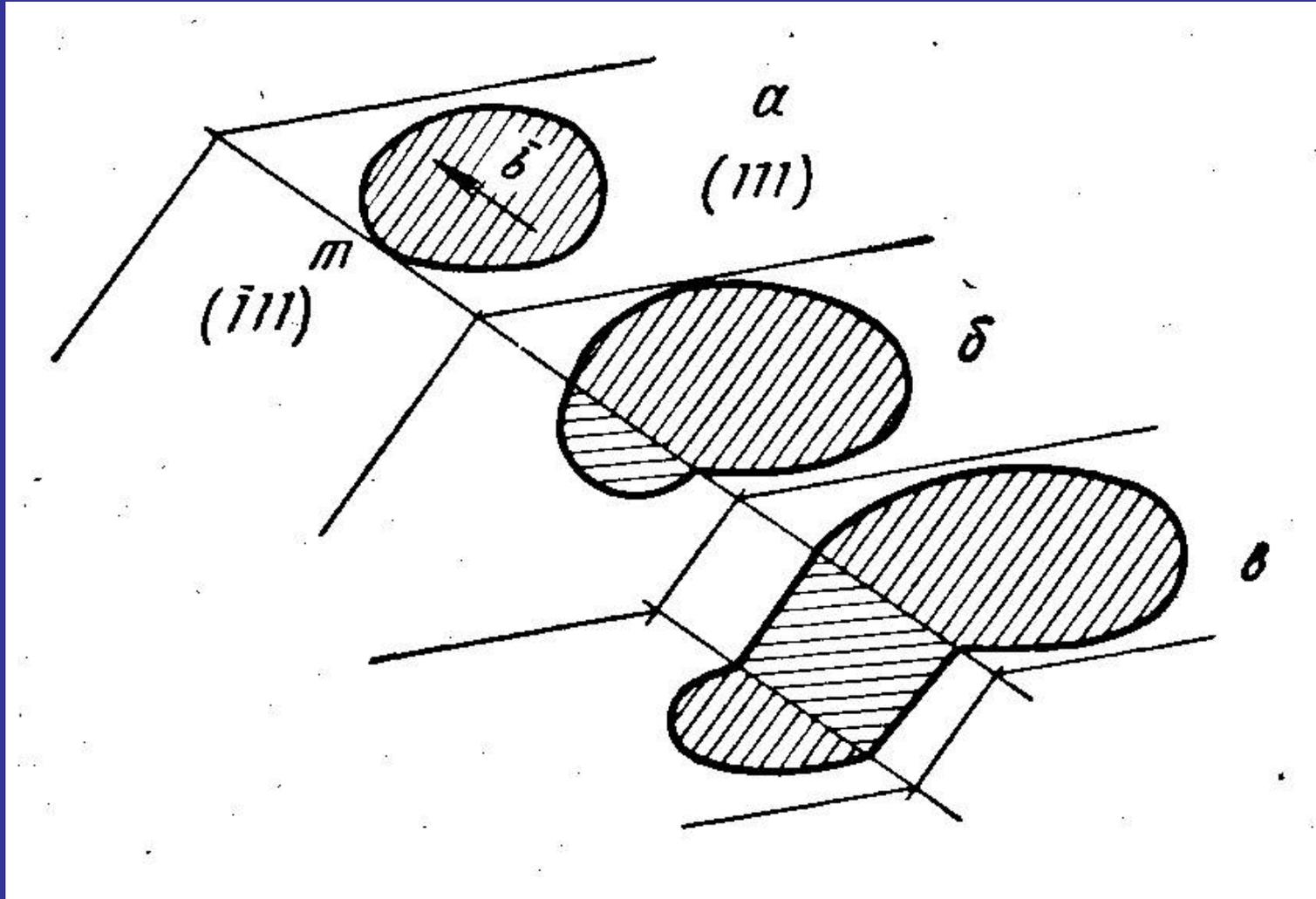


Скольжение  
смешанной  
дислокации через  
весь кристалл



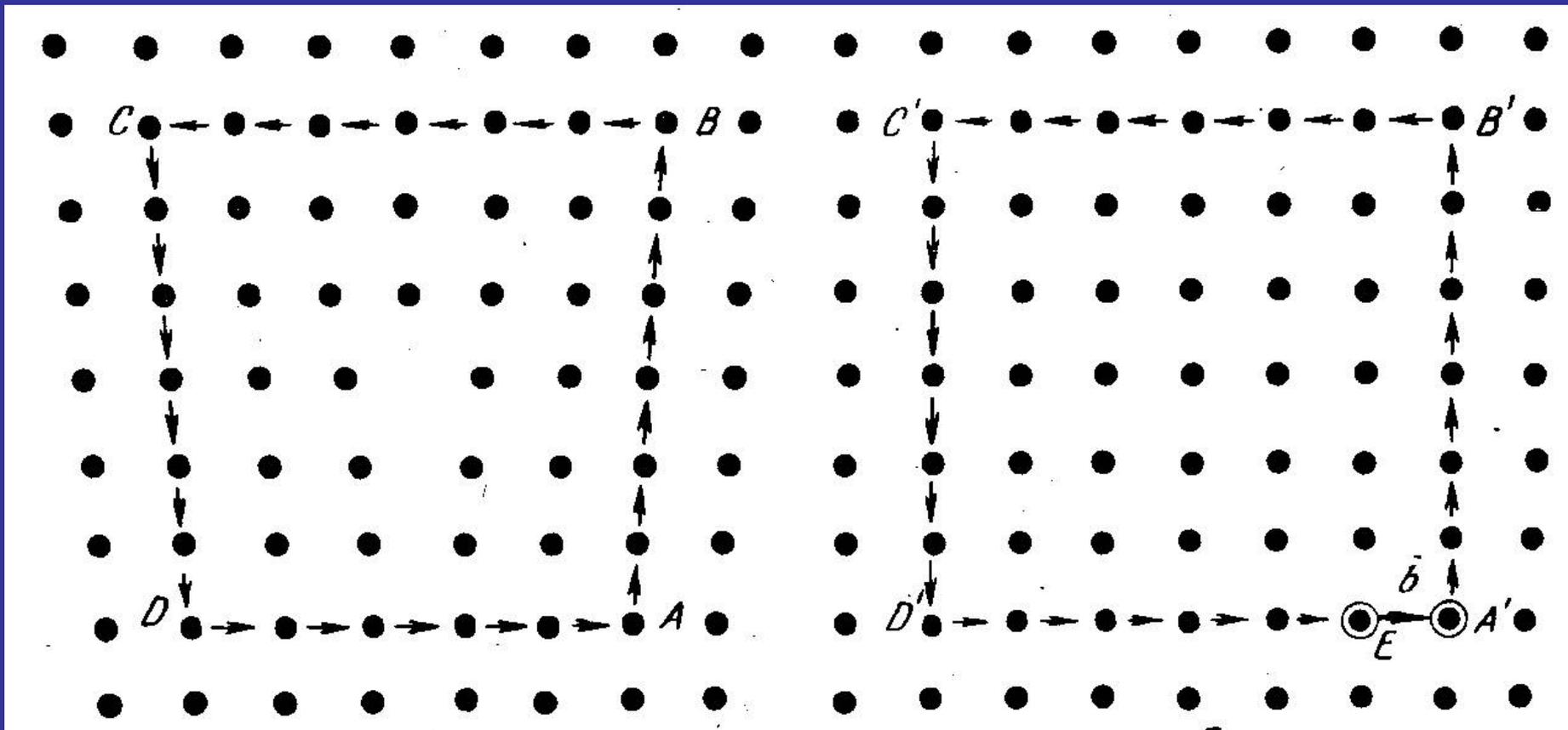
Сдвиг, создающий  
смешанную дислокацию

# Смешанные дислокации



Поперечное и двойное поперечное скольжение смешанной дислокации в ГЦК-решетке. Плоскость скольжения  $(111)$ .

# Вектор Бюргера краевой дислокации

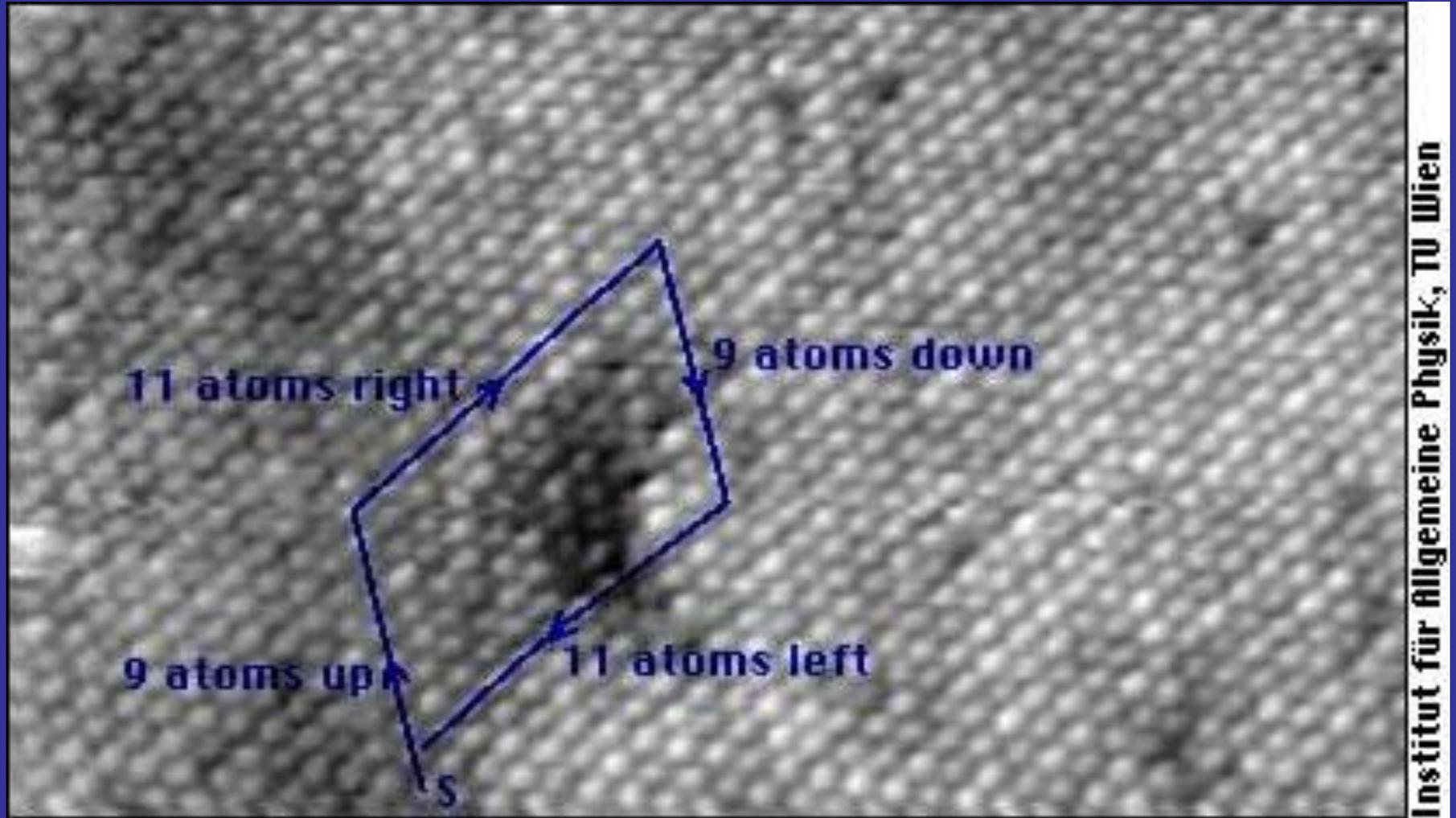


Контур Бюргера  
вокруг краевой  
дислокации

Эквивалентный контур в  
«неповрежденной» решетке  
и вектор Бюргера

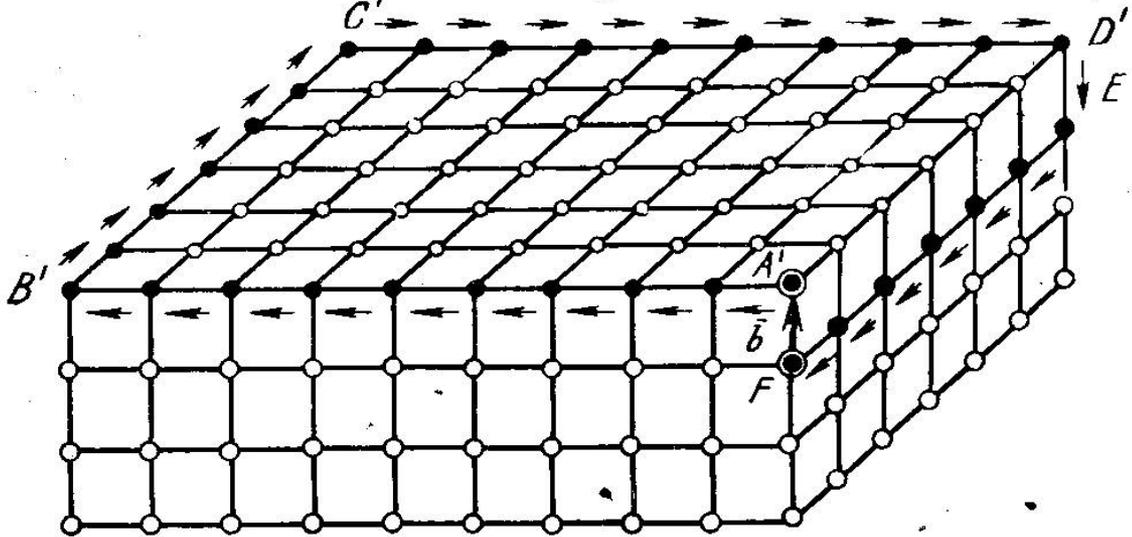
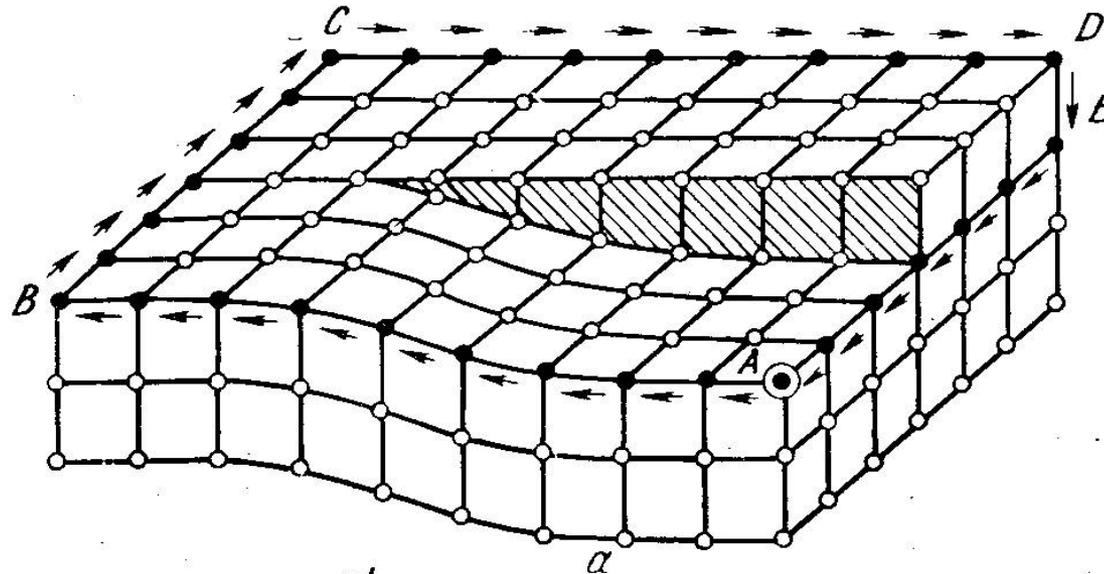
Вектор Бюргера перпендикулярен линии краевой дислокации

# Вектор Бюргерса краевой дислокации



# Вектор Бюргера винтовой дислокации

Контур Бюргера  
вокруг винтовой  
дислокации



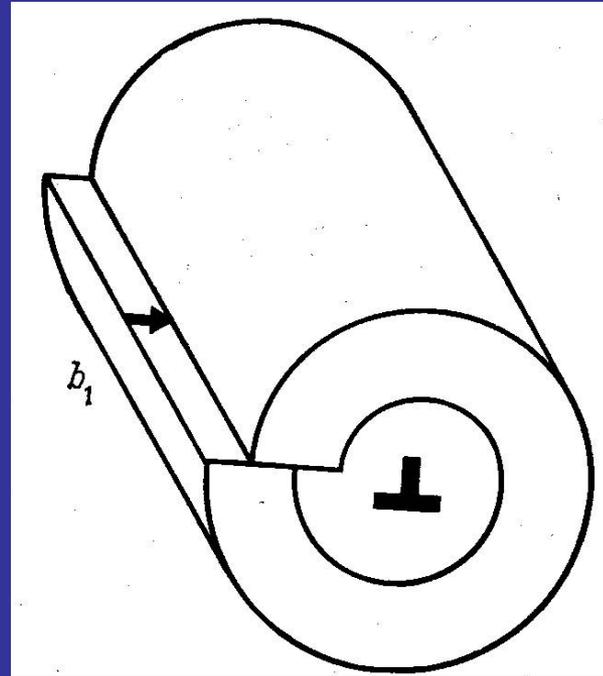
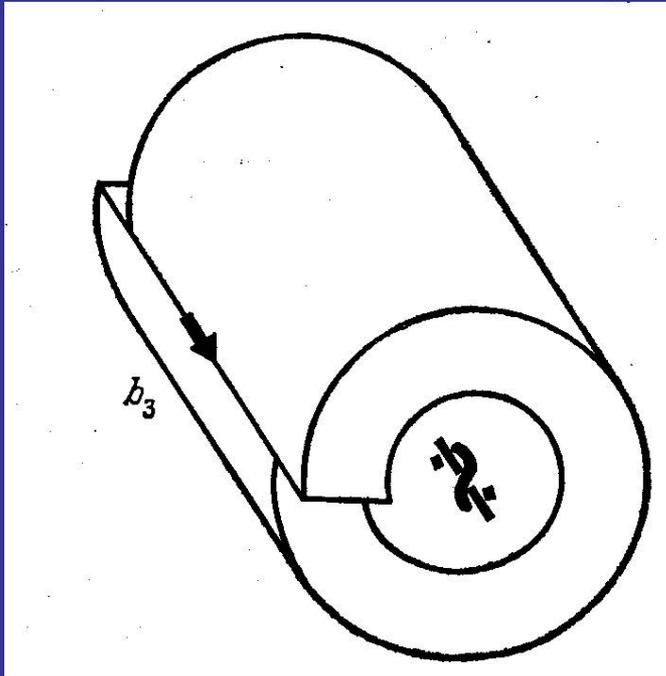
Эквивалентный  
контур в  
«неповрежденной»  
решетке и вектор  
Бюргера

Вектор Бюргера параллелен линии винтовой дислокации

# Упругие поля дислокаций



Vito Volterra  
1860-1940



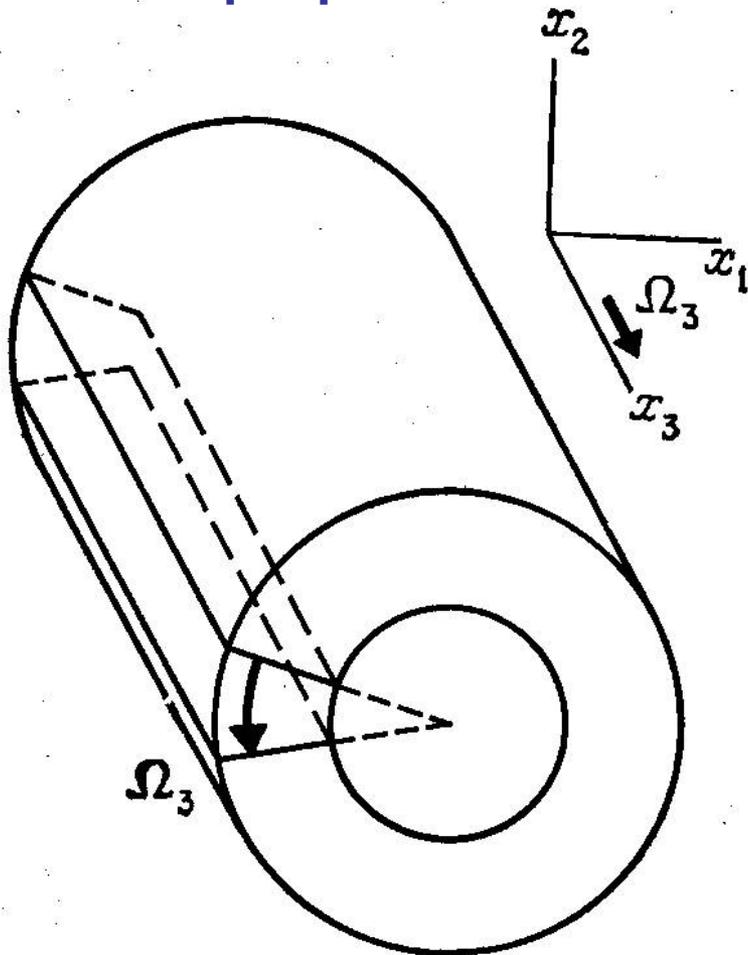
$$E_d = \frac{Gb^2l}{4\pi} \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right).$$

Энергия  
винтовой  
дислокации

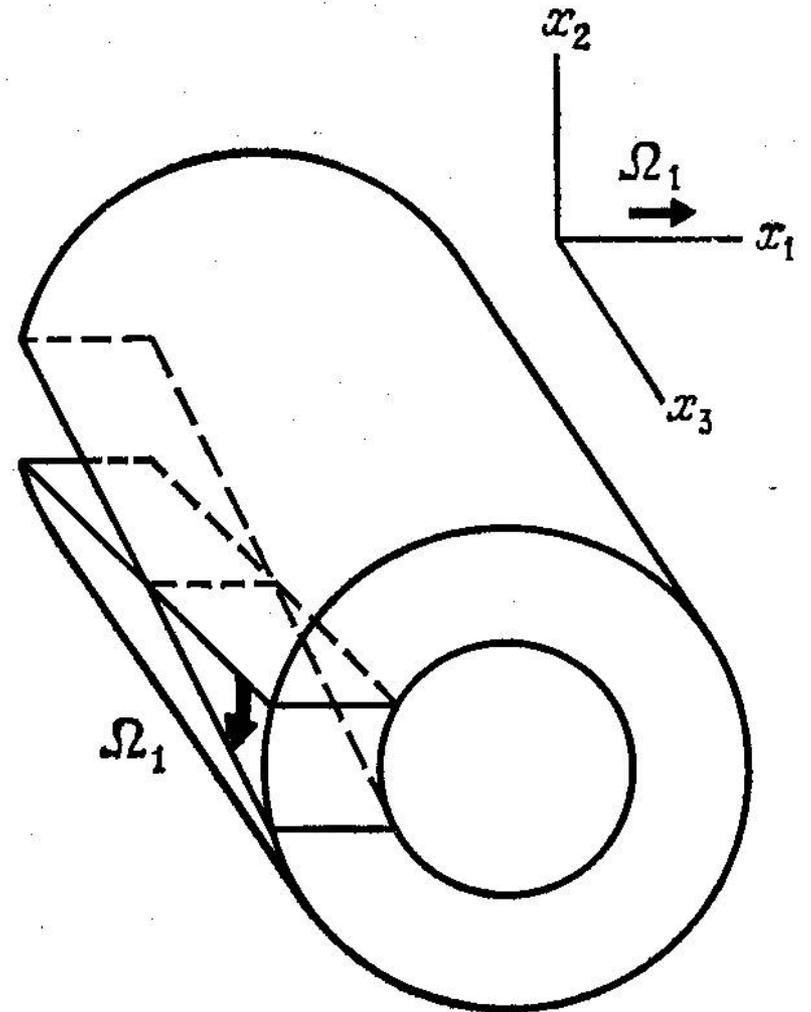
- $G$  — модуль сдвига;
- $b$  — вектор Бюргера дислокации;
- $l$  — ее длина;
- $r_0$  — радиус ядра дислокации (несколько межатомных расстояний);
- $r_1$  — расстояние, на которое распространяется упругая деформация от дислокации.

# Упругие поля дисклинаций

$\Omega$  - вектор Франка

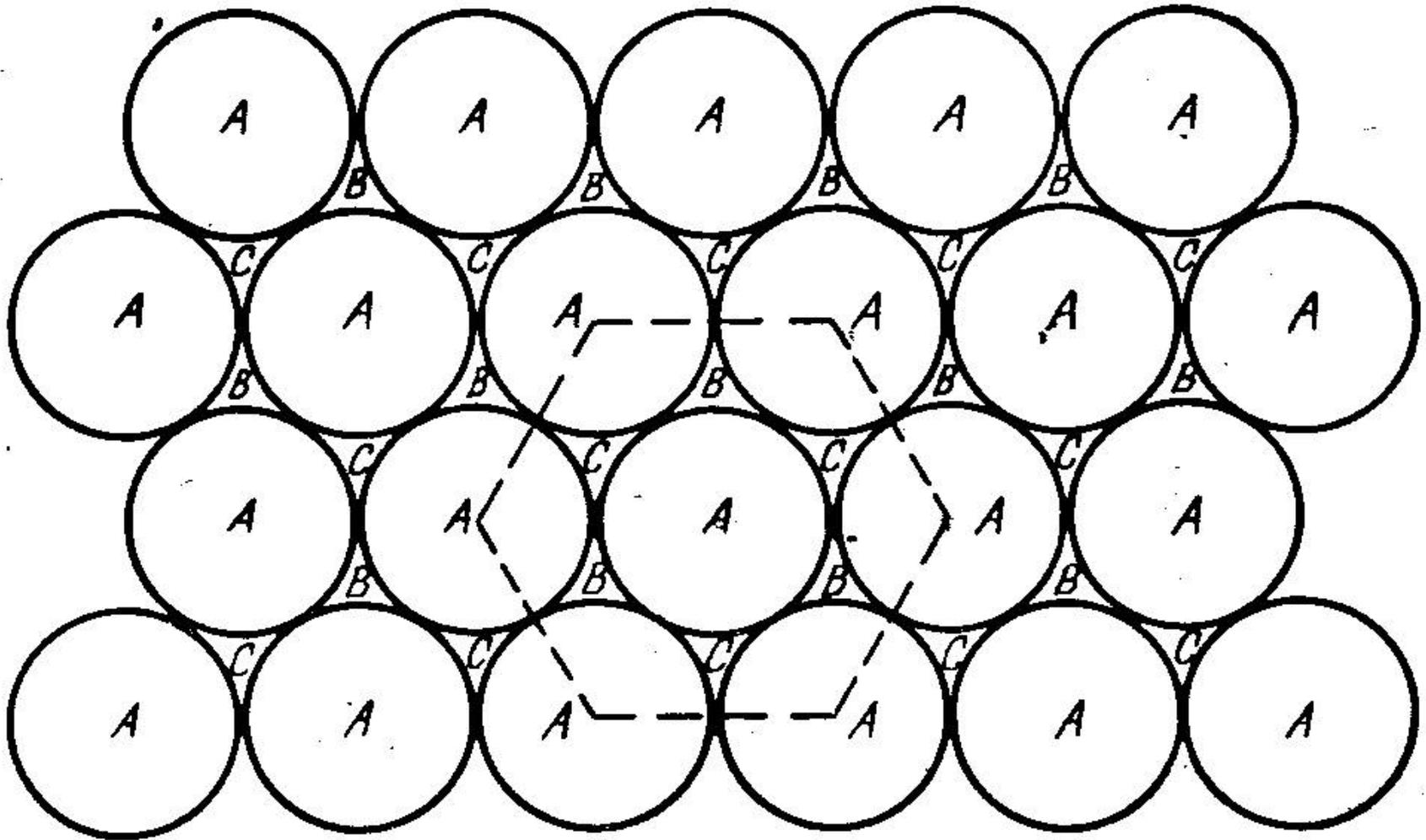


Клиновaя дисклинация



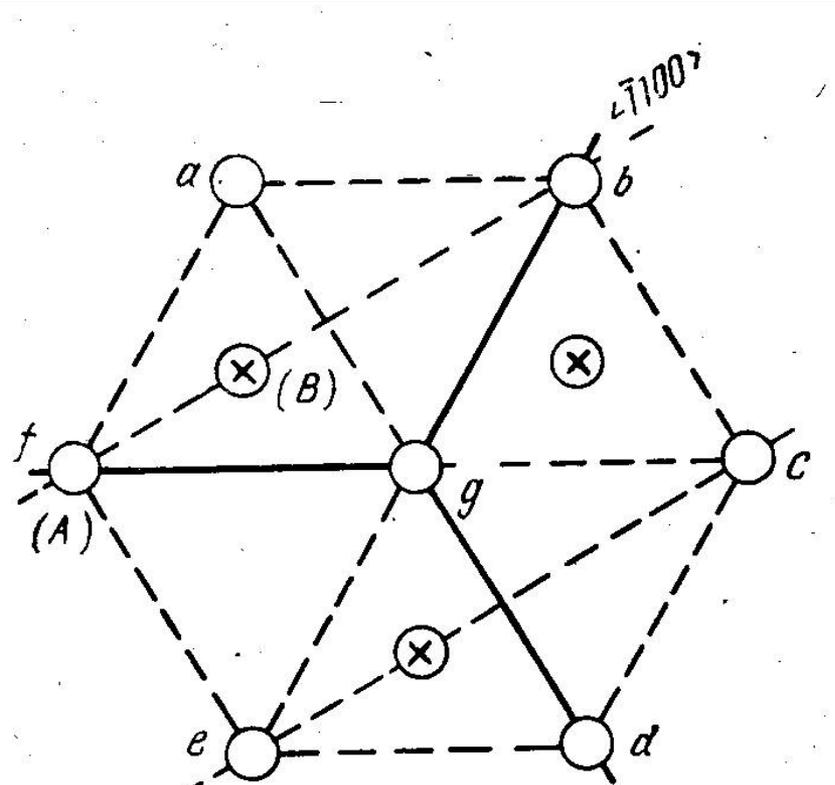
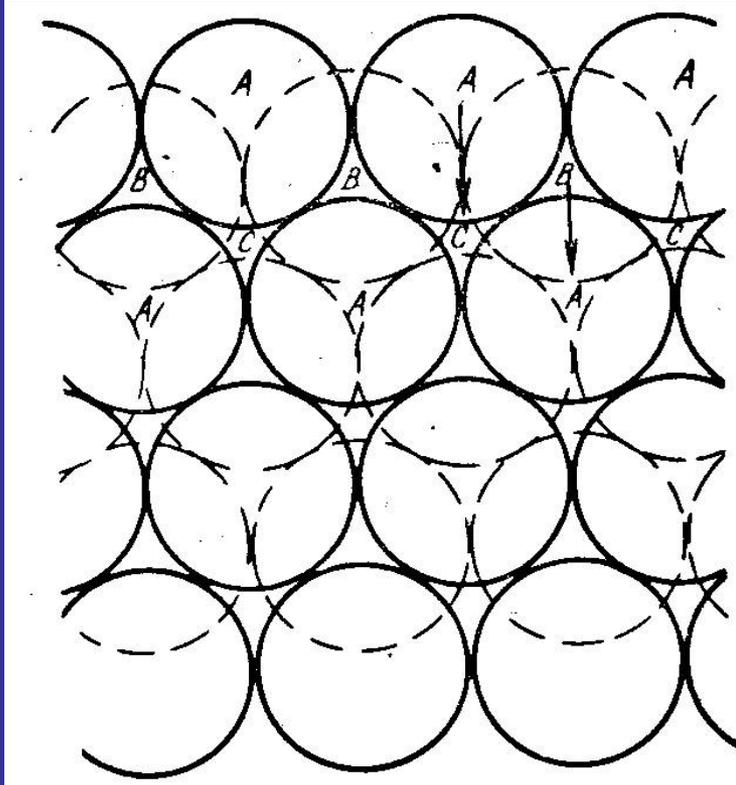
Дисклинация кручения

# Дефекты упаковки

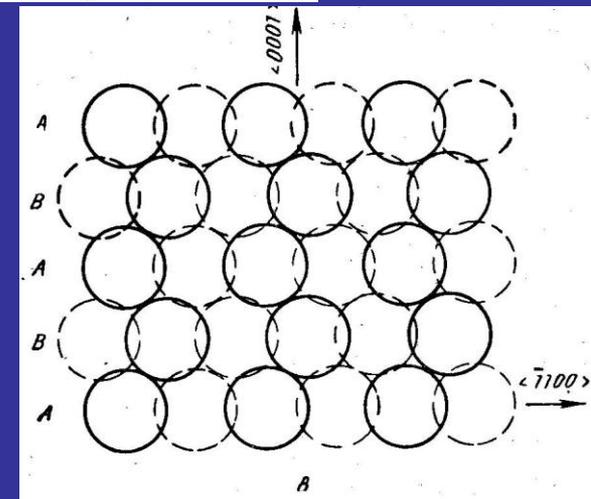


Слой плотнейшей упаковки атомов

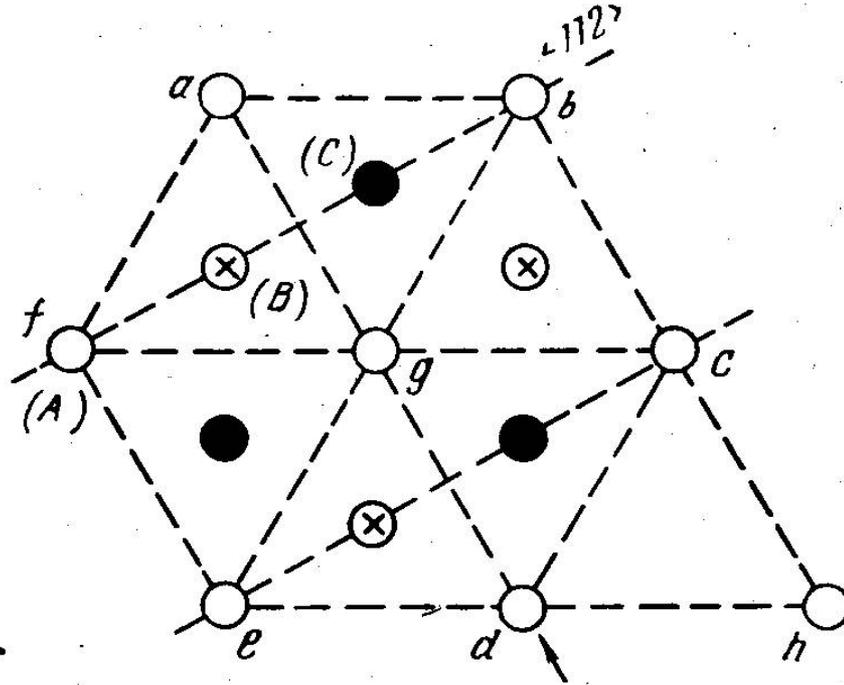
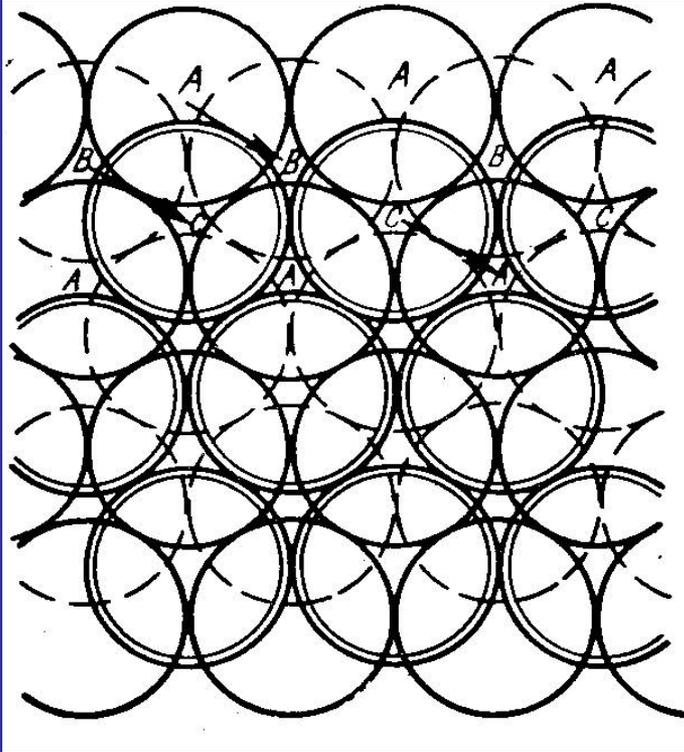
# Дефекты упаковки



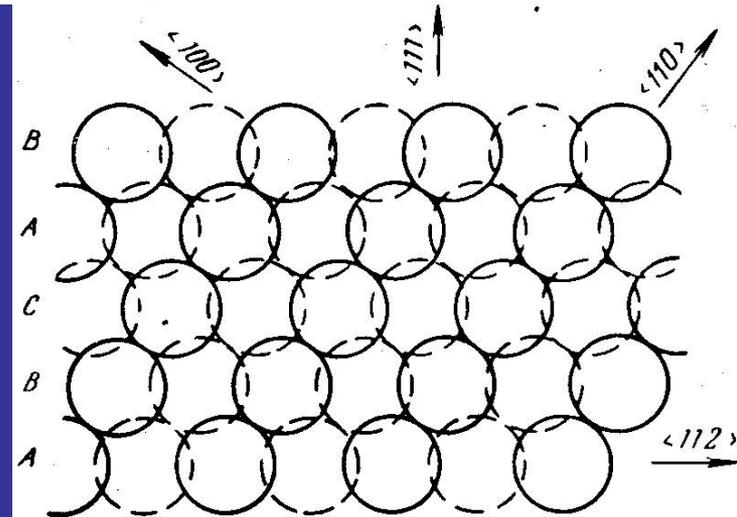
Гексагональная  
плотнейшая  
упаковка



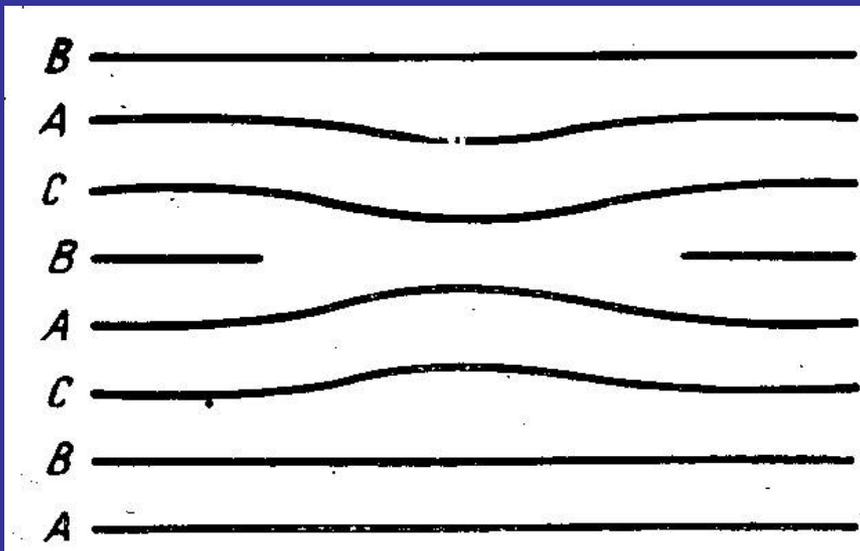
# Дефекты упаковки



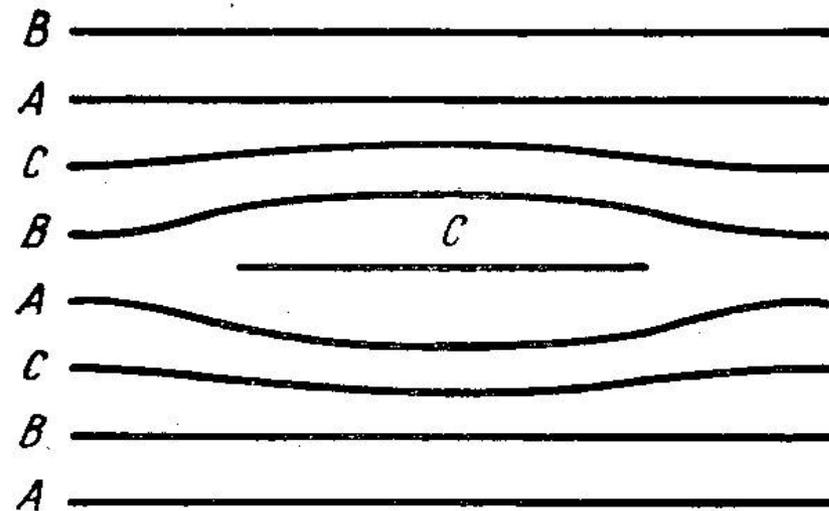
Кубическая  
плотнейшая  
упаковка



# Дефекты упаковки



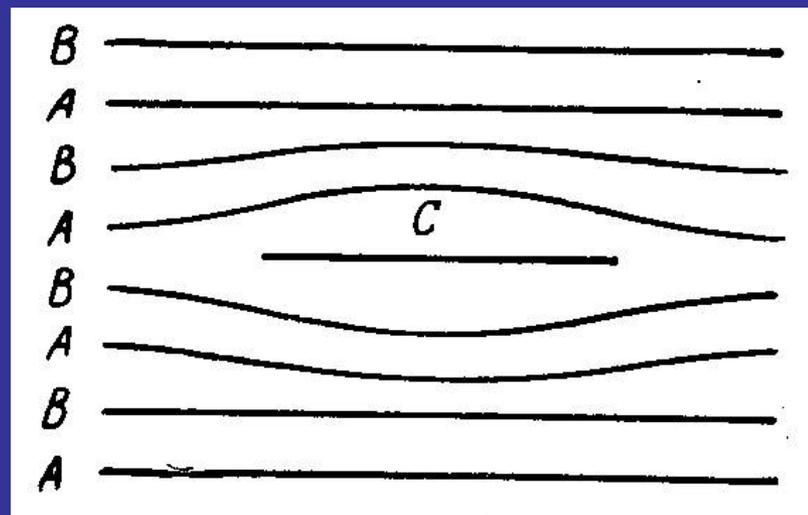
Дефект упаковки  
вычитания (ГЦК)



Дефект упаковки  
внедрения (ГЦК)

Вокруг дефекта –  
линия дислокации!!

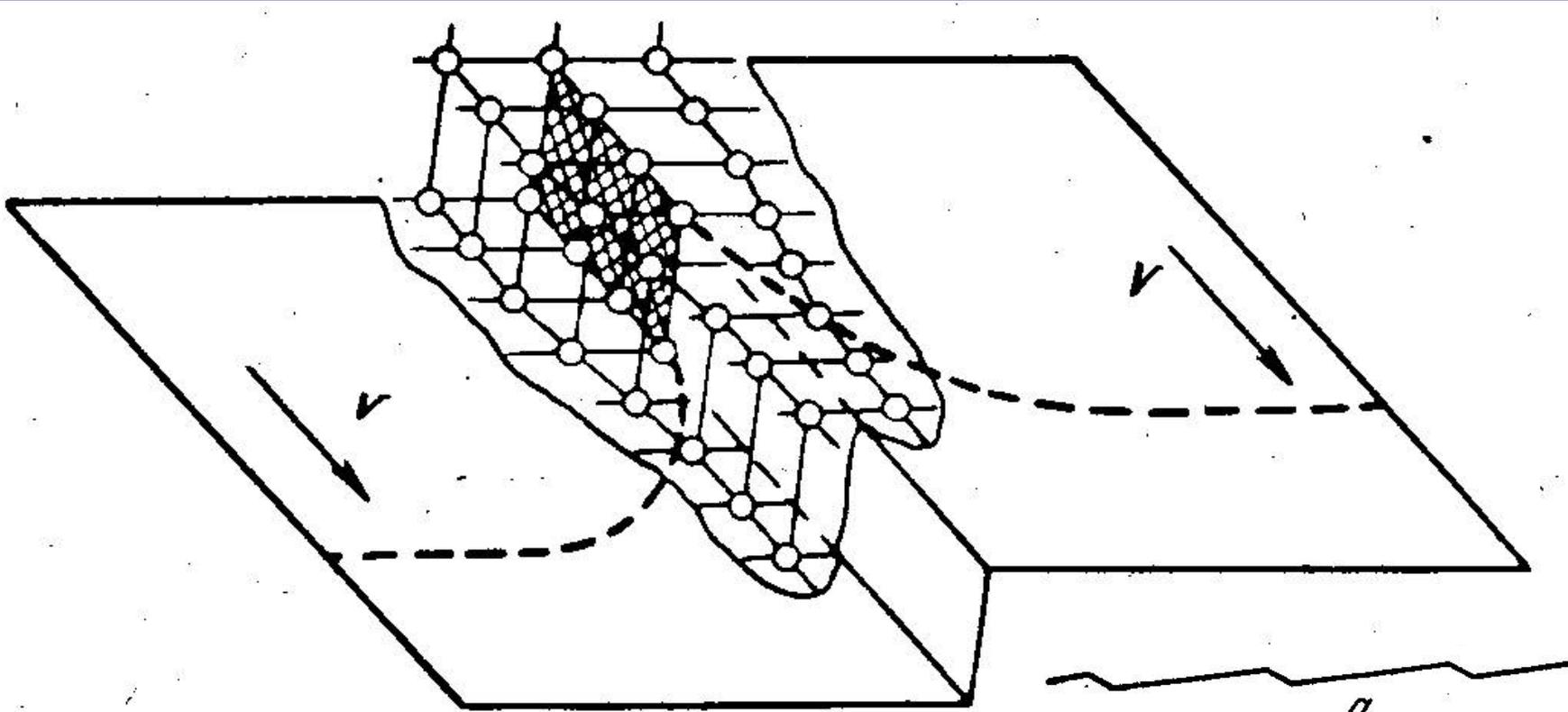
Дефект упаковки  
внедрения (ГПУ)



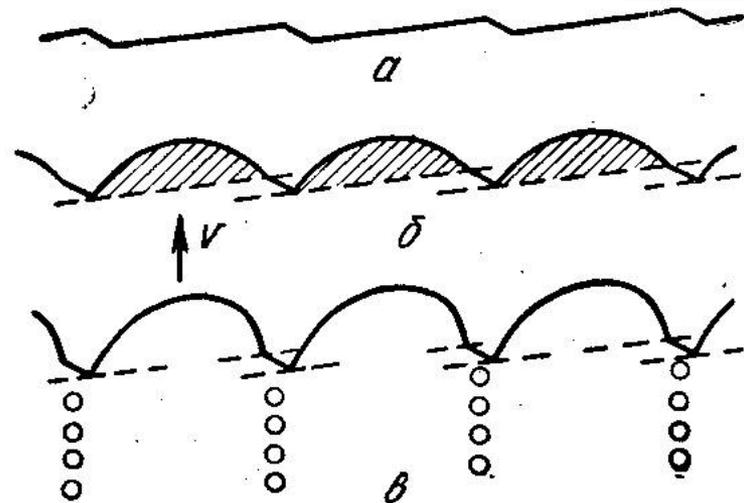
# Полные и частичные дислокации

Дефект упаковки  
внедрения (ГПУ)

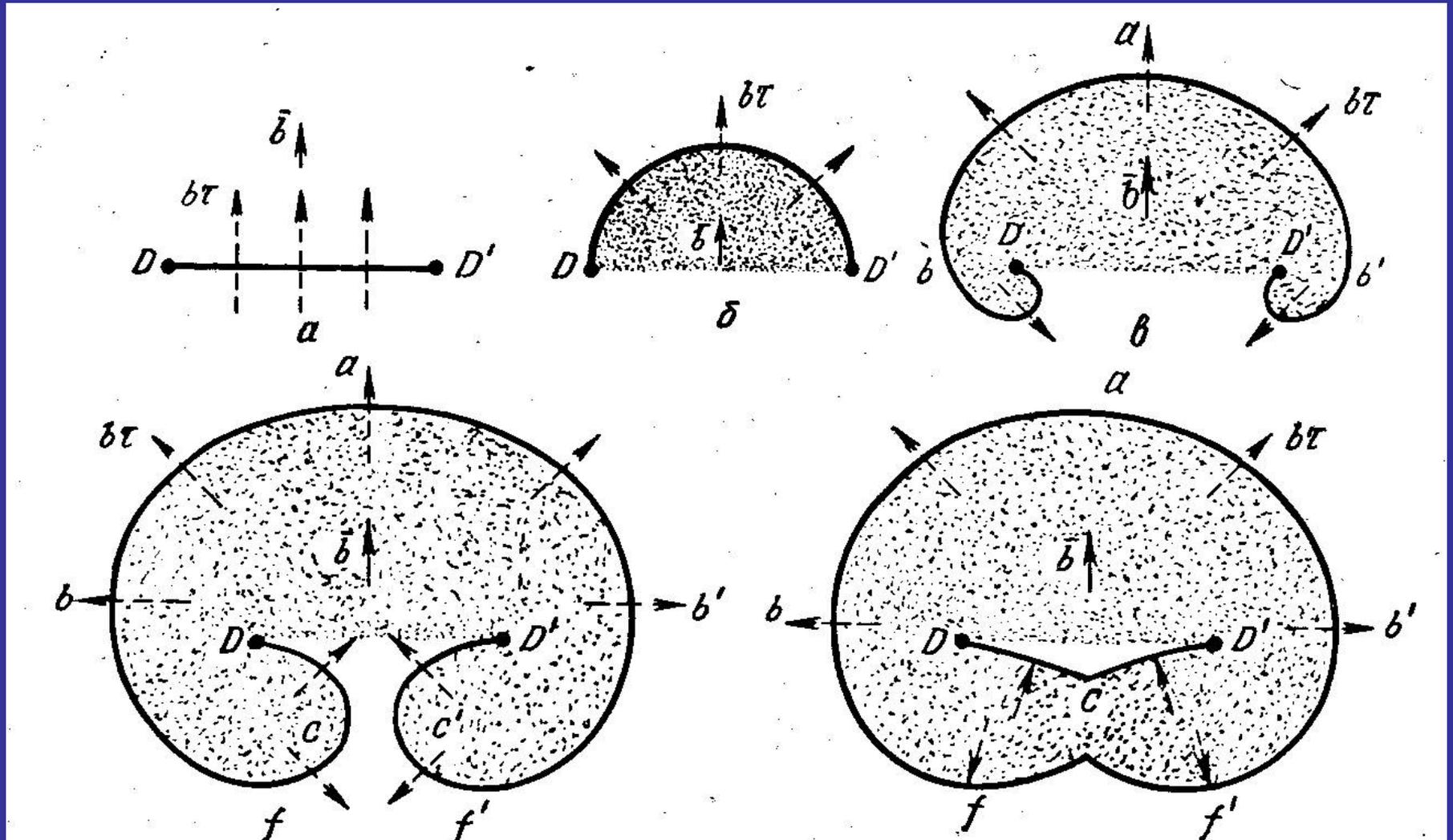
# Скольжение дислокаций с порогами: источник вакансий



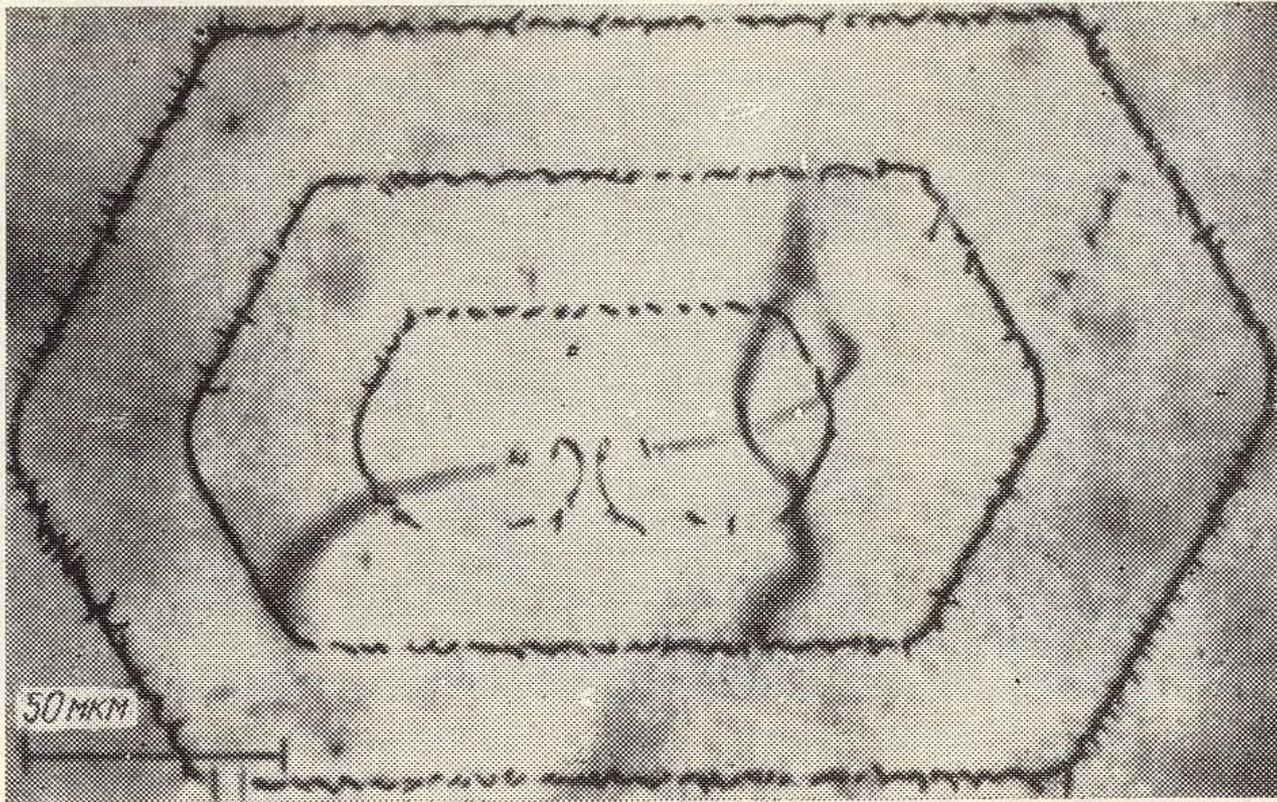
Скользящая винтовая  
дислокация с порогом (кусочек  
краевой дислокации)



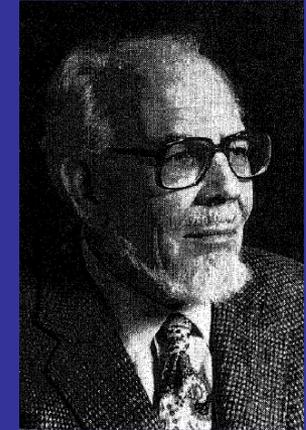
# Размножение дислокаций при пластической деформации: источник Франка-Рида



# Размножение дислокаций при пластической деформации: источник Франка-Рида



1950



Sir Frederick  
Charles Frank  
1911-1998

Thornton Read

**Рис. 136.** Дислокационные петли от источника Франка—Рида в пластинке кремния (Дэш). Для декорирования дислокаций выделениями меди кристалл кремния был нагрет в контакте с медью до  $900^{\circ}\text{C}$  и затем охлажден до  $20^{\circ}\text{C}$ . Снимок сделан в инфракрасном свете (ср. с рис. 108)

## 2. Плоские дефекты

Внешние поверхности

Внутренние поверхности раздела:

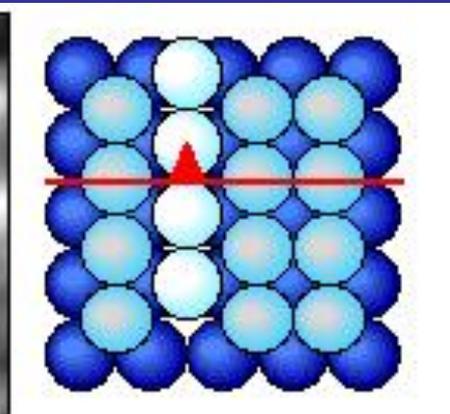
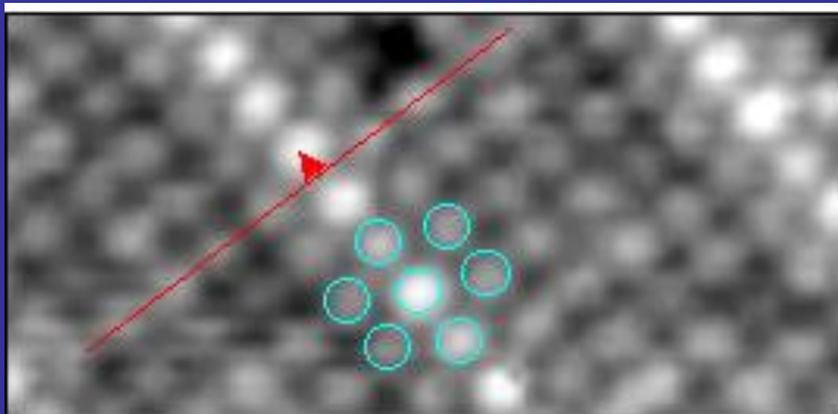
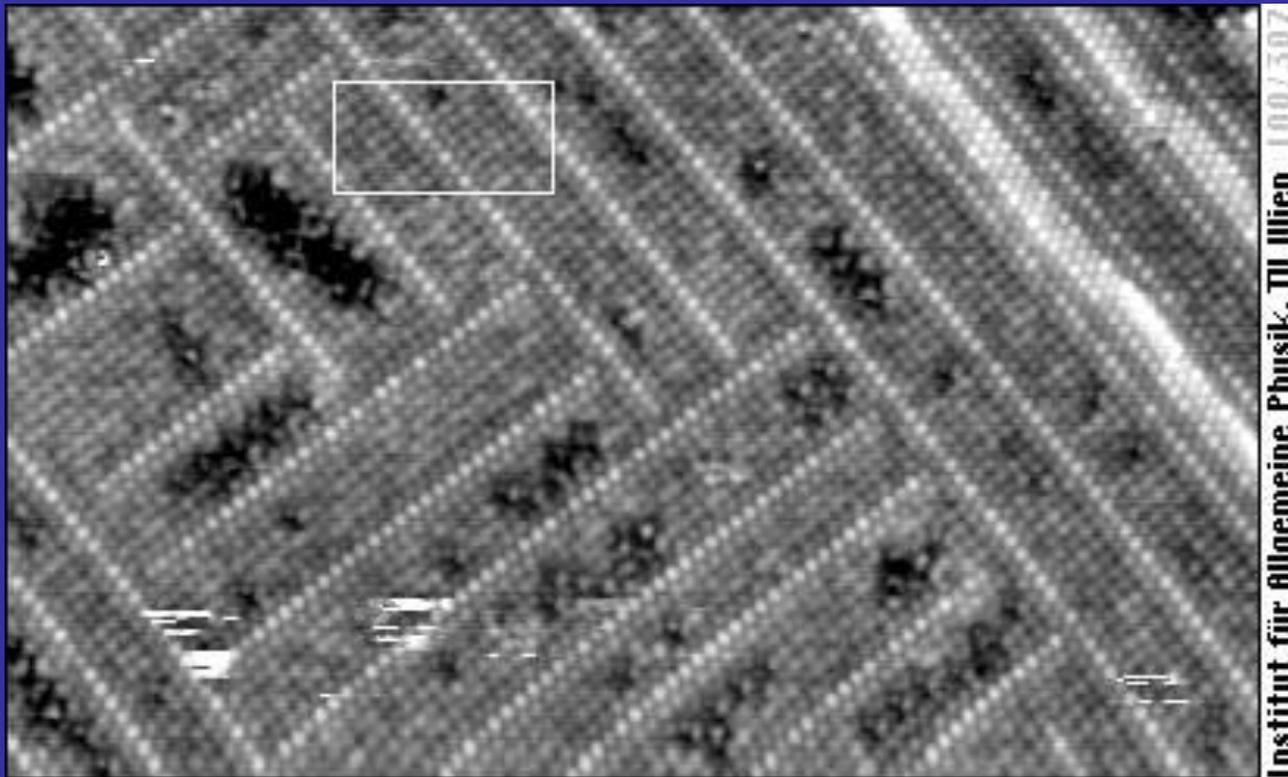
- границы зерен
- межфазные границы

## 2.1. Внешние поверхности

- Структура чистых поверхностей (ступени, ограничение-потеря огранки)
- Адсорбированные атомы (реконструкция поверхности, двумерные фазы)
- Многослойная адсорбция, тонкие поверхностные фазы, связь с явлениями смачивания

# Реконструкция поверхности

PtNi (100)



## 2.2. Внутренние поверхности раздела

- Вспомогательные решетки (0-решетка, РСУ, ПРН)
  - Малоугловые и высокоугловые границы, решеточные и зернограницные дислокации
    - Границы совпадения, специальные и неспециальные границы, ограничение-потеря огранки
- Однослойная и многослойная адсорбция, тонкие зернограницные фазы, связь с явлениями смачивания
  - Межфазные границы раздела