

Дефекты структуры кристаллов

Всякий реальный кристалл не имеет совершенной структуры и обладает рядом нарушений идеальной пространственной решетки, которые называются дефектами в кристаллах.

Дефекты в кристаллах подразделяют на:

Точечные
(нуль-
мерные)

линейные
(одномерные
)

поверхностн
ые
(двумерные)

объемные
(трехмерные)

1. Точечные (нуль-мерные) дефекты.

- К точечным дефектам относят вакансии (вакантные узлы кристаллической решетки), атомы в междоузлиях, атомы примесей в узлах или междоузлиях, а также сочетания примесь - вакансия, примесь - примесь, двойные и тройные вакансии.
- Точечные дефекты могут появиться в твердых телах вследствие нагревания (тепловые дефекты), облучения быстрыми частицами (радиационные дефекты), отклонения состава химических соединений от стехиометрии (стехиометрические дефекты), пластической деформации

дефекты.

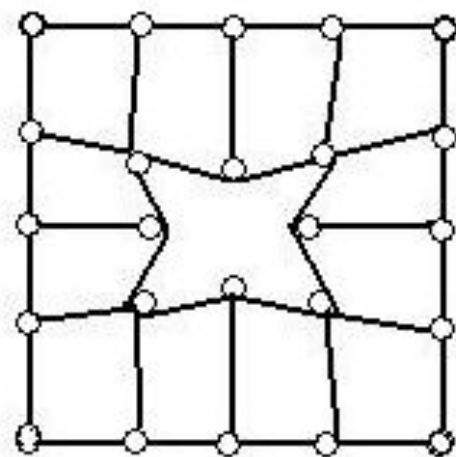
Само их название свидетельствует о том, что нарушения структуры локализованы в отдельных точках кристалла.

Размеры указанных дефектов во всех трех измерениях не превышают одного или нескольких межатомных

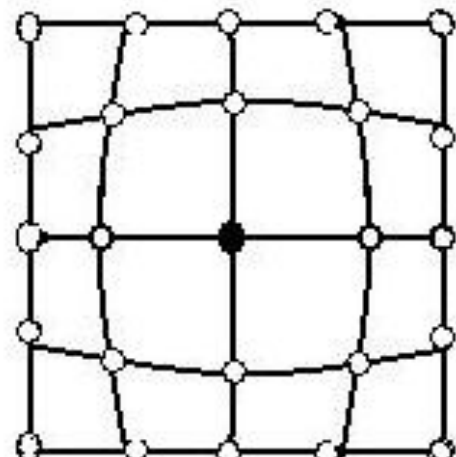
Вследствие образования точечных дефектов увеличивается энтропия (беспорядок) кристалла, из-за чего при достаточно высокой температуре в значительной мере компенсируется затрата энергии на образование дефекта.

Точечные дефекты могут двигаться через кристалл, взаимодействовать друг с другом и другими дефектами. Встречаясь друг с другом, вакансии и междоузельный атом могут аннигилировать.

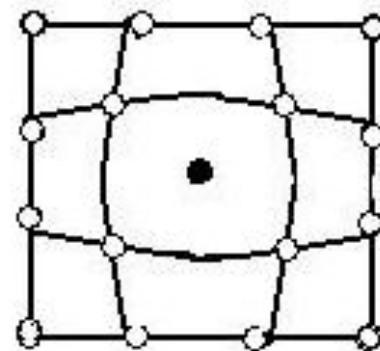
Аннигиляция — реакция превращения частицы и античастицы при их столкновении в какие-либо иные частицы, отличные от исходных.



а



б



в

Рис. 6 Схемы точечных дефектов в кристаллах.

Линейными дефектами являются дислокации, микротрещины. Дислокации возникают в результате пластической деформации кристалла в процессе роста или при последующих обработках.

Возможно также образование неустойчивых линейных дефектов из цепочек точечных дефектов.

Линейные дефекты имеют атомные размеры в двух измерениях, а в третьем - они значительно больше размера, который может быть соизмерим с длиной кристалла

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 .

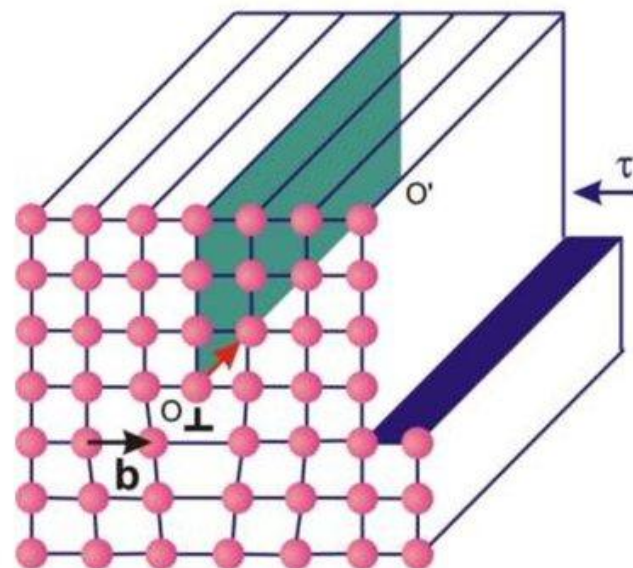


Рис. 5. Краевая дислокация

Экстраплоскость выделена **зеленым** цветом, а плоскость скольжения – **синим**.

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**.

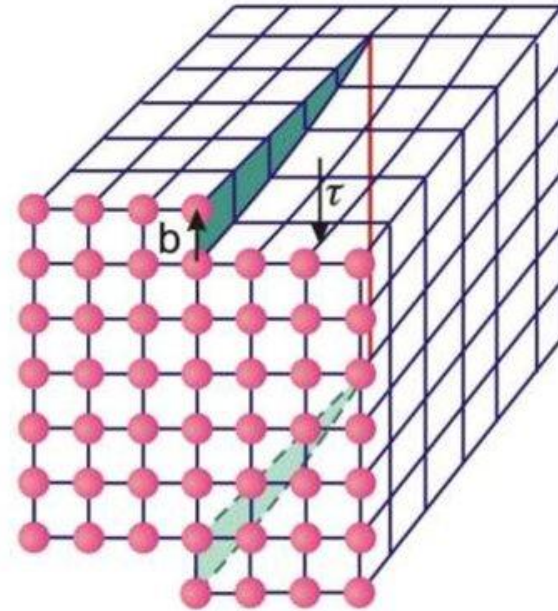


Рис. 6. Винтовая дислокация

b – вектор Бюргерса; экстраплоскость показана **зеленым** цветом.

Поверхностные (двухмерные) дефекты в двух измерениях имеют размеры, во много раз превышающие параметр решетки, а в третьем - несколько параметров.

Двухмерные дефекты могут быть следствием наличия примесей в расплаве.

Двумерные дефекты: Границы зерен и двойников, дефекты упаковки, межфазные границы, стенки доменов, а также поверхность кристалла.

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.

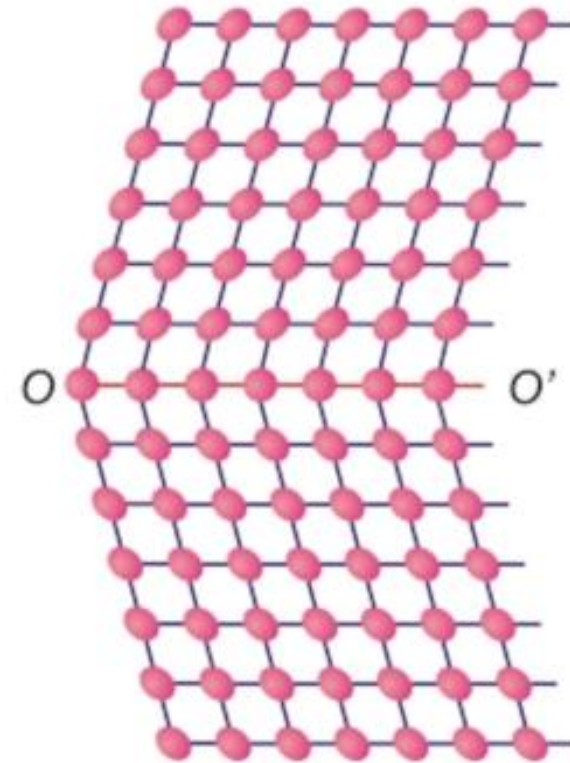
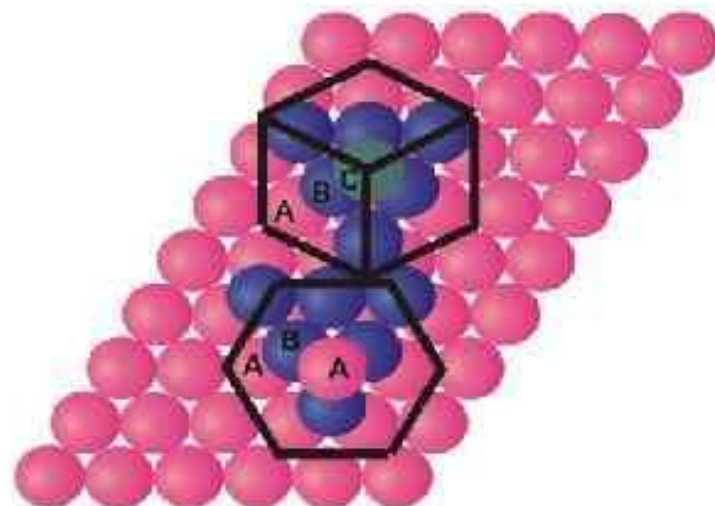


Рис. 10. Схема двойникования

Красной прямой показана плоскость двойникования

Дефекты упаковки

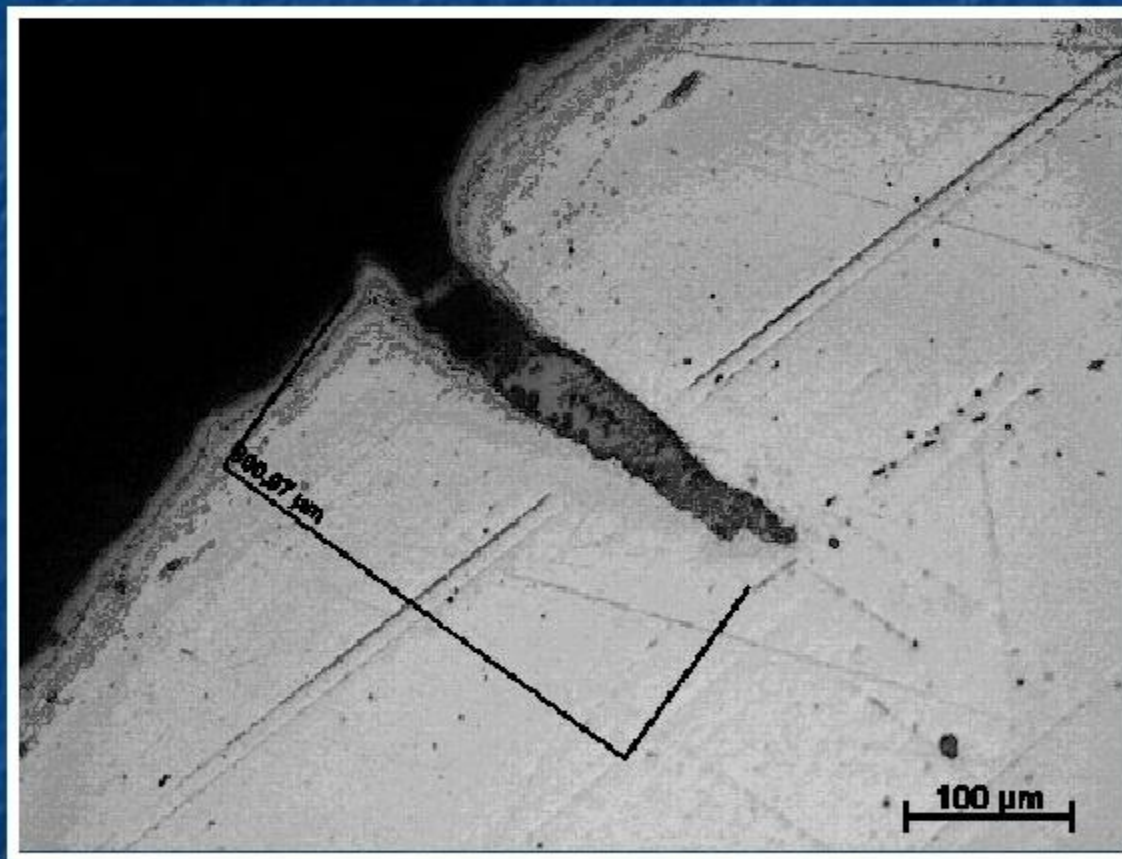
- *Дефекты упаковки* представляют собой часть атомной плоскости, ограниченную дислокациями, в пределах которой нарушен нормальный порядок чередования слоев. Например, в плотноупакованных сплавах с ГЦК-решеткой (см. рис. 11) слои чередуются в порядке *ABCABCAB...*, а при прохождении через дефект упаковки слои чередуются в последовательности *ABCBCABC...* 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

Объемные (трехмерные) дефекты - это микропустоты и включения другой фазы. Они возникают обычно при выращивании кристаллов или в результате некоторых воздействий на кристалл. Так, например, наличие большого количества примесей в расплаве, из которого ведется кристаллизация, может привести к выпадению крупных частиц второй фазы.

Объёмные дефекты



Неметаллические включения – места зарождения трещин

Объёмные дефекты



- Неметаллические включения