



Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна
Фізичний факультет



Кафедра фізики кристаллов

Дефекты в кристаллах

Лекция

Идеальный кристалл

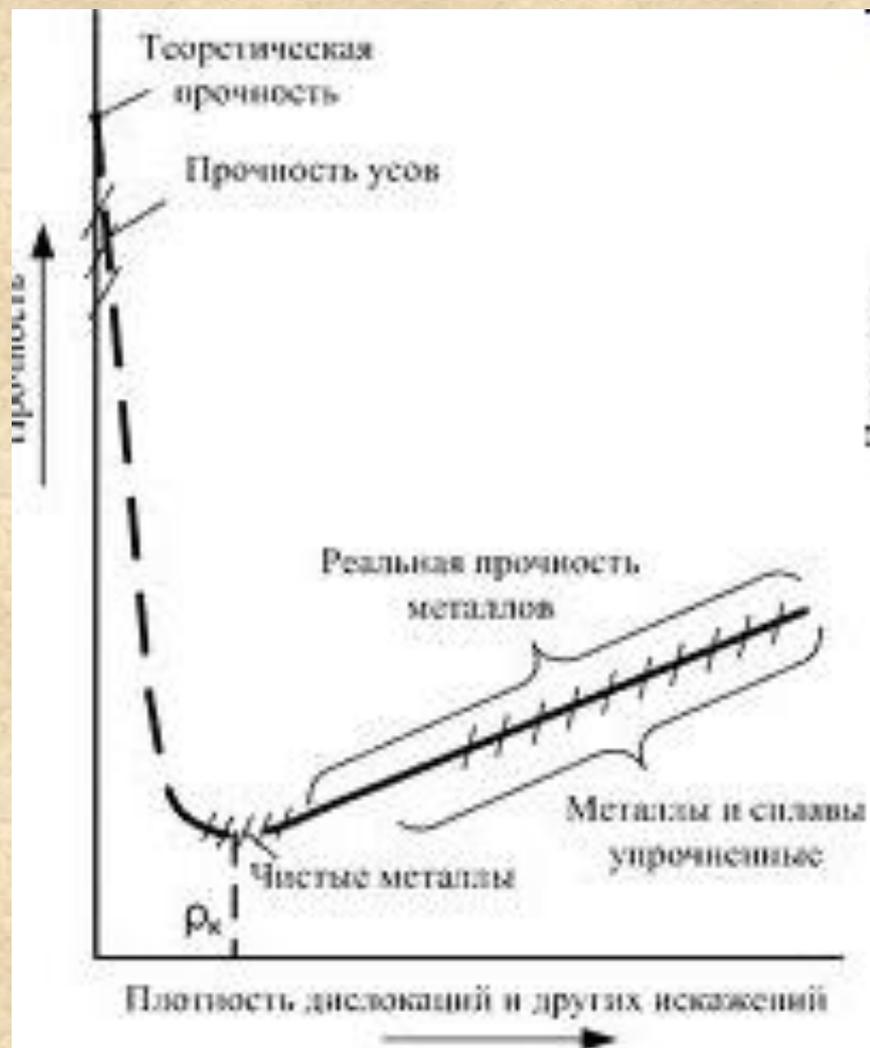
Идеальный кристалл = ансамбль большого числа одинаковых частиц (атомов, молекул, ионов и др.), упакованных в регулярную решетку (двух- или трехмерную), заполняющую всё пространство (объем или поверхность). Микроскопические характеристики произвольной точки внутри кристалла точно воспроизводятся во всех точках, координаты которых инвариантны при операциях трансляции.

При $T > 0$ К кристаллы всегда содержат небольшое число дефектов, соответствующее минимуму потенциальной энергии.

Дополнительные дефекты вносятся при различных воздействиях:

- нагреве
- деформации
- облучении частицами и др.

В какой степени дефекты влияют на свойства кристаллов?



- Все свойства кристаллов в значительной степени определяются характером дефектов кристаллической решетки.

Классификация дефектов

Точечные	0D
Линейные	1D
Двумерные	2D
Объемные	3D

Любые отклонения от периодической структуры кристалла называются дефектами.

Классификация дефектов

точечные

искажения решетки кристалла сосредоточены в окрестностях одного узла

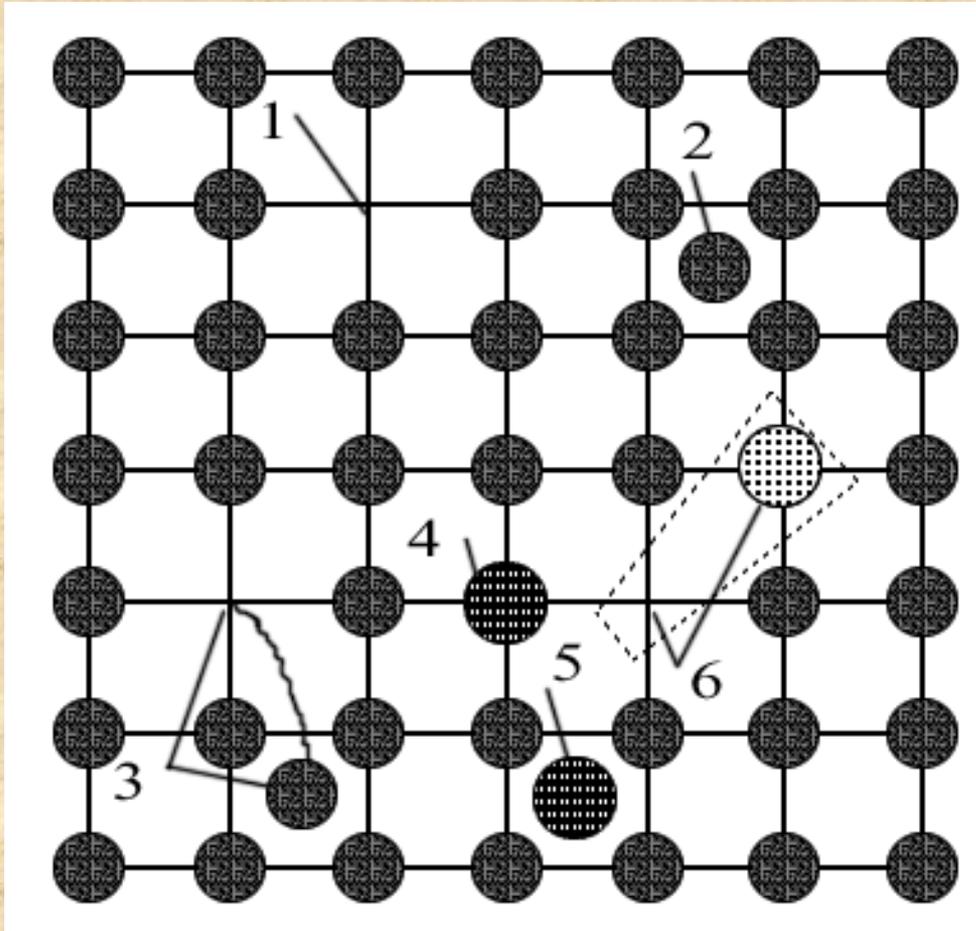
локализованы на расстояниях порядка межатомного

протяженные

Линейные (дислокации),
плоскостные (межфазные границы)
объемные (поры, трещины)

размеры существенно превышают величину межатомного расстояния

Точечные дефекты



1 - вакансия;

2 - межузельный атом;

3 - дефект по Френкелю;

4 - примесный атом замещения;

5 - примесный атом внедрения;

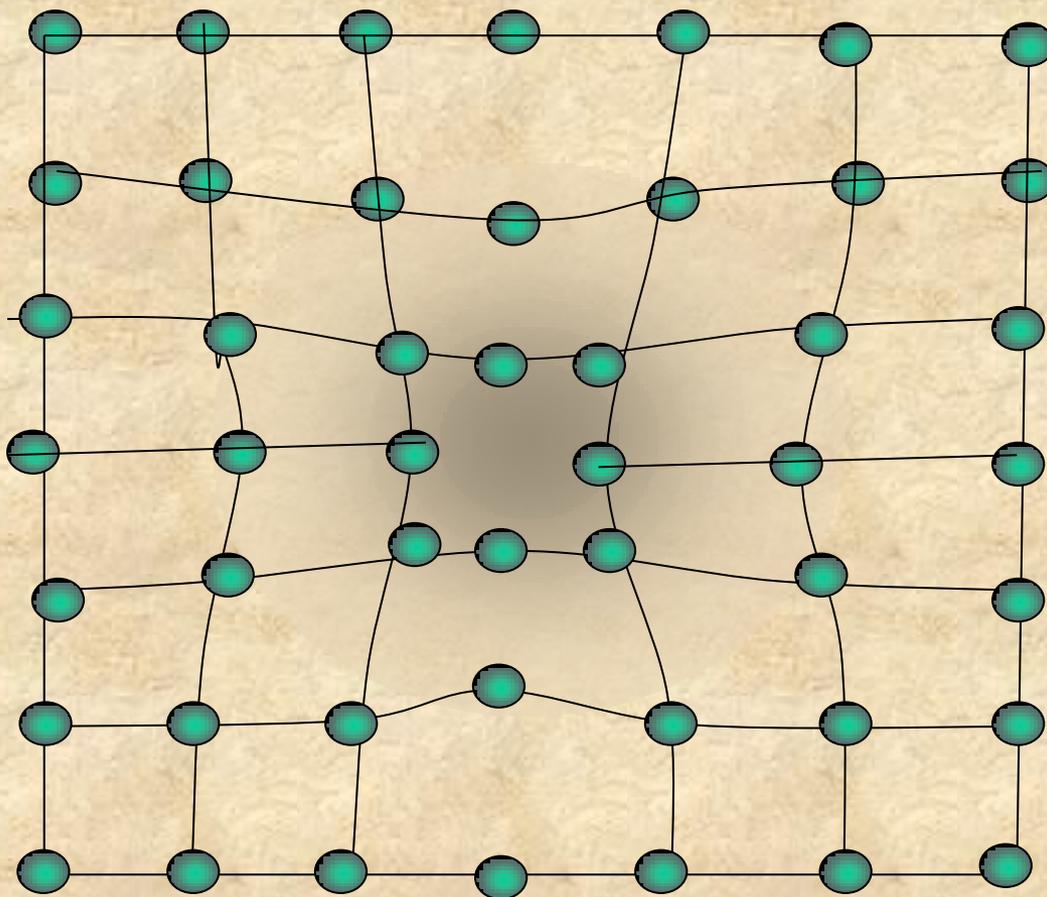
6 - атом замещения

Вакансия



Пузырьковая модель

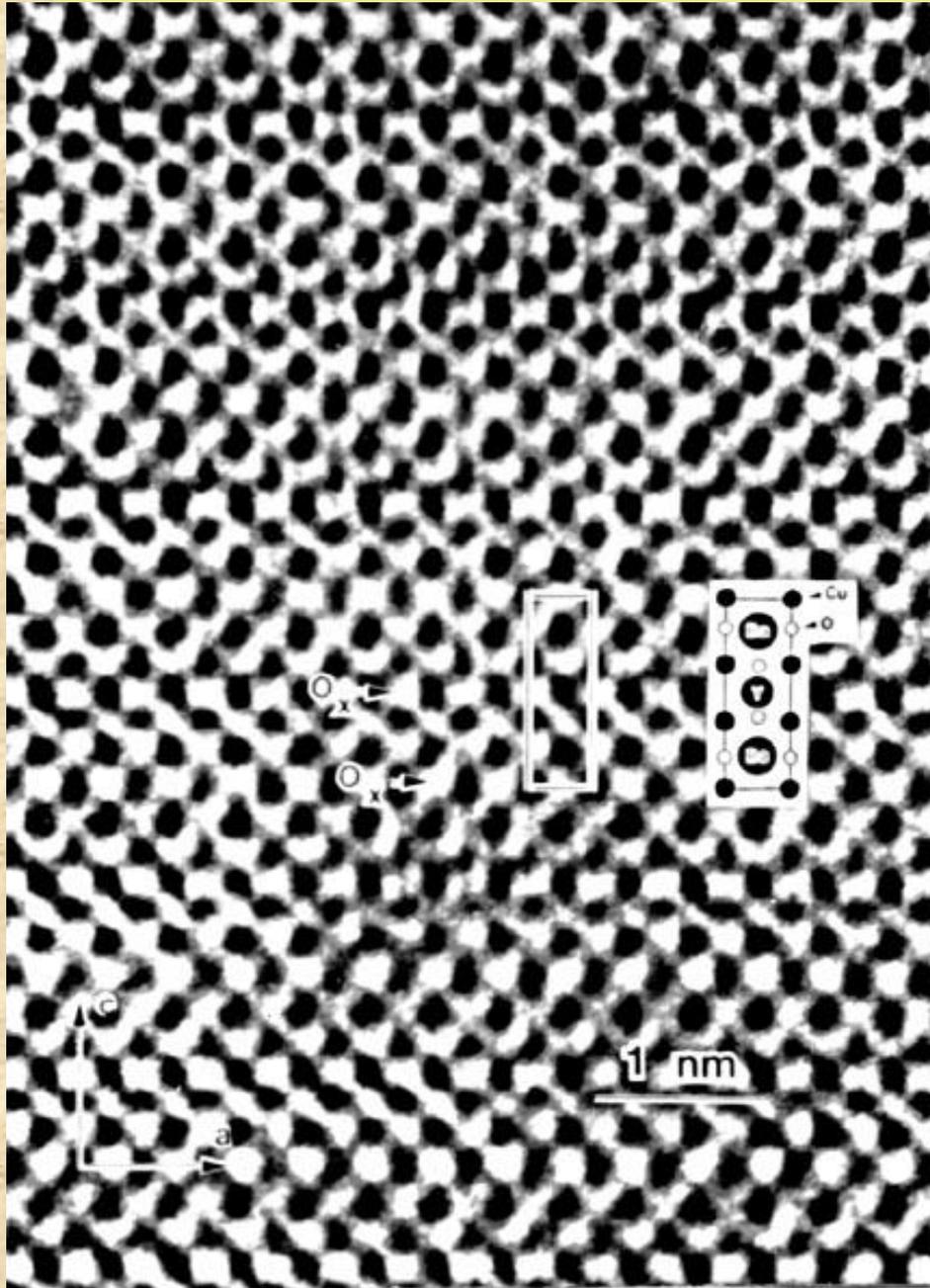
Вакансия



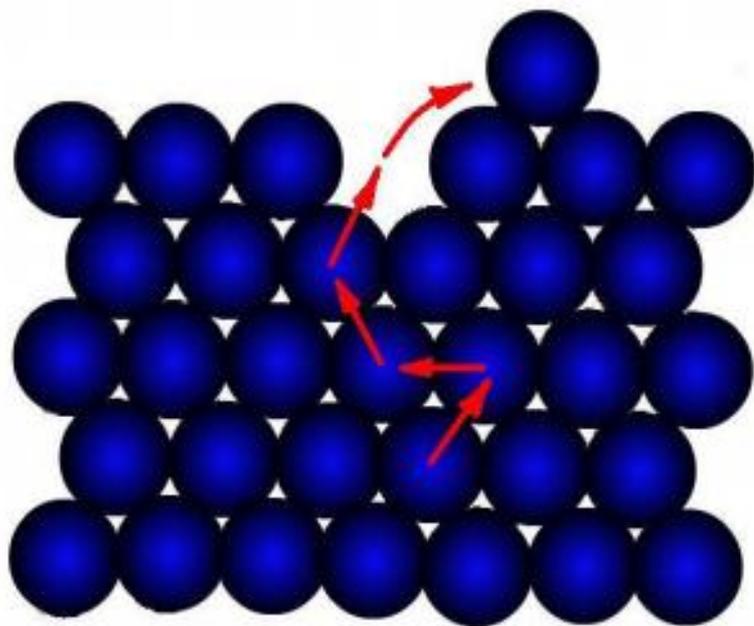
Вакансия

Электронная микроскопия

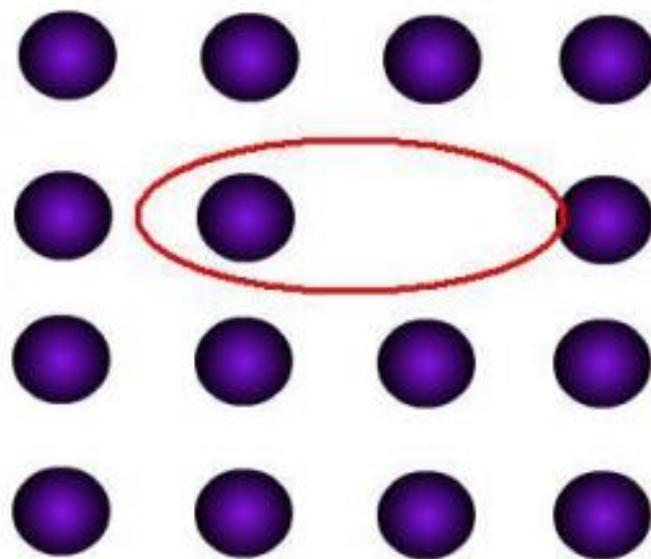
Изображение структуры монокристалла $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.74}$ вдоль направления оси b . На вставке показана проекция модели структуры. Светлые пятна обозначенные O_x указывают положения вакансий кислорода.



По-Шоттки – атом из узла кристаллической решетки перемещен на поверхность

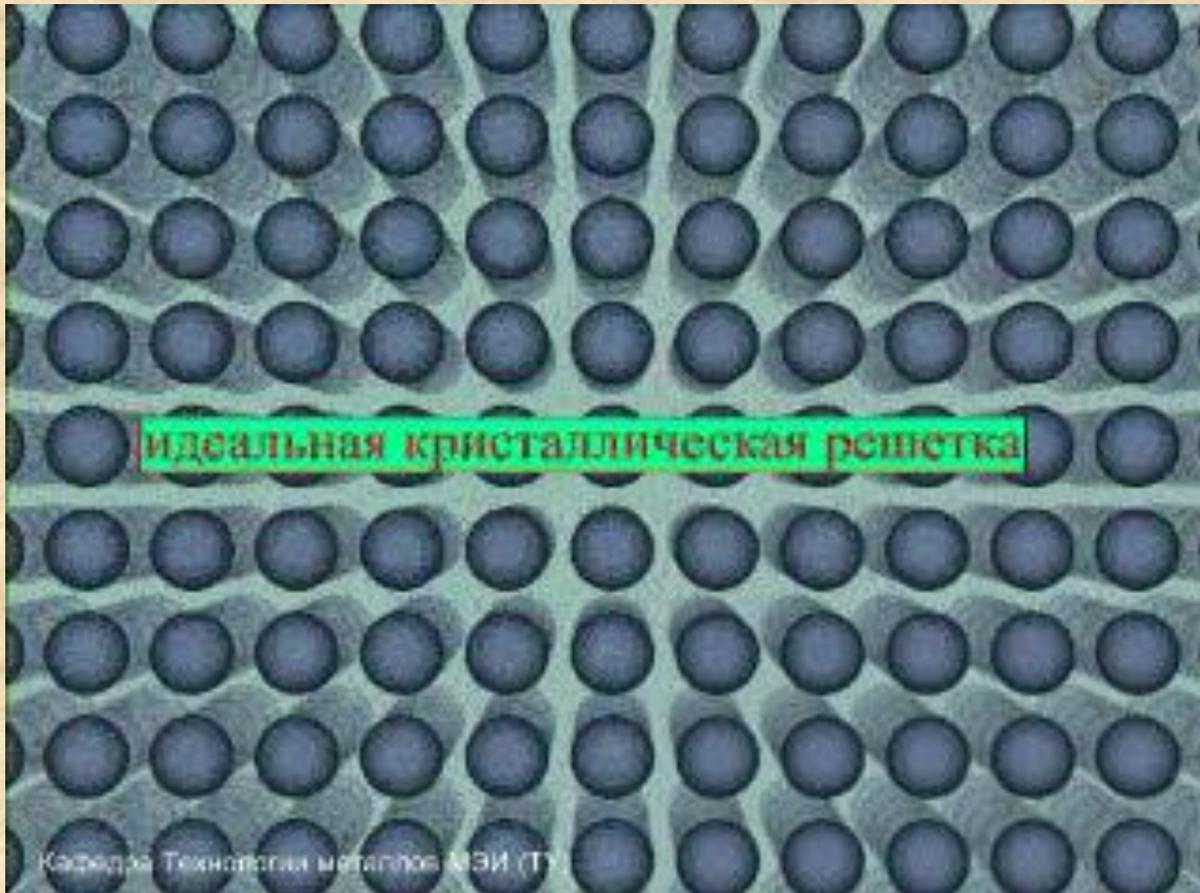


по механизму Шоттки

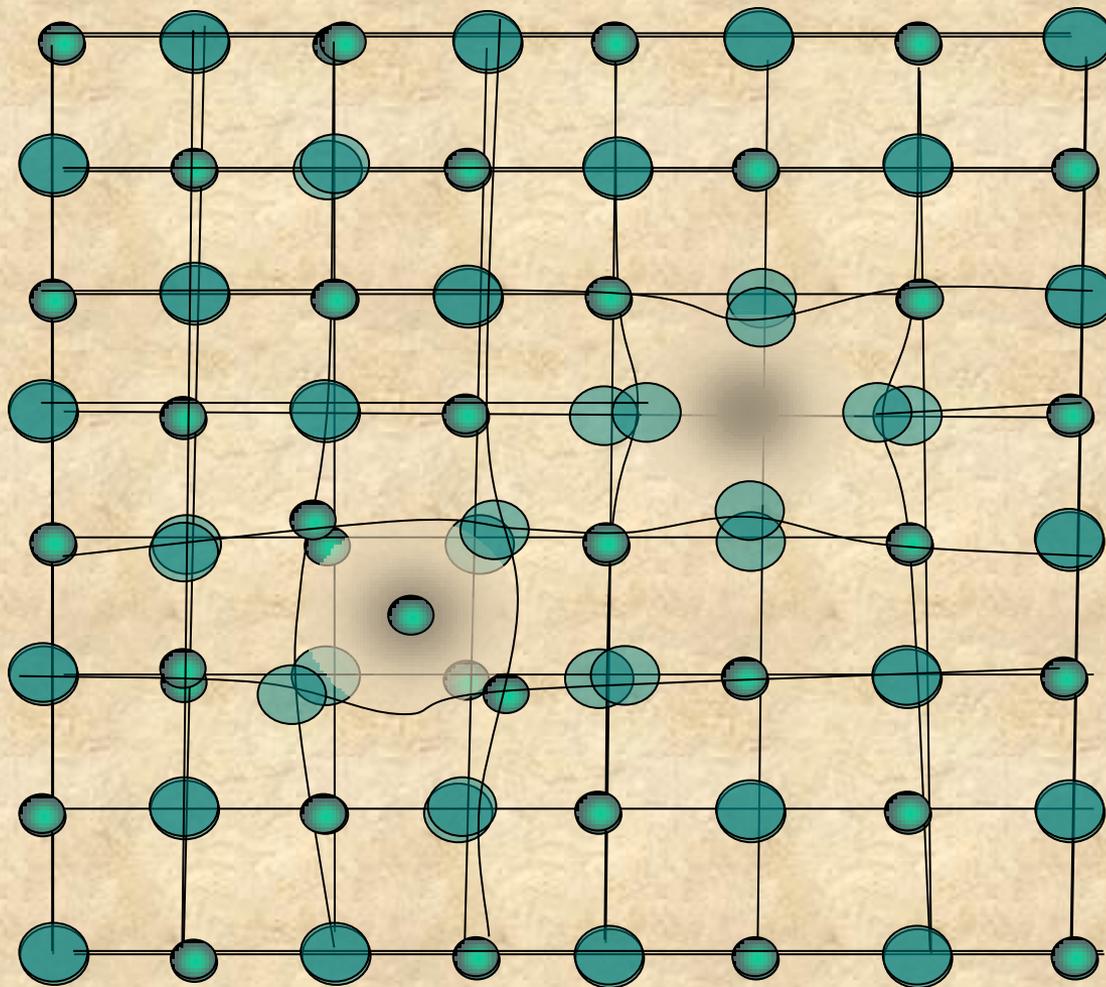


по Френкелю

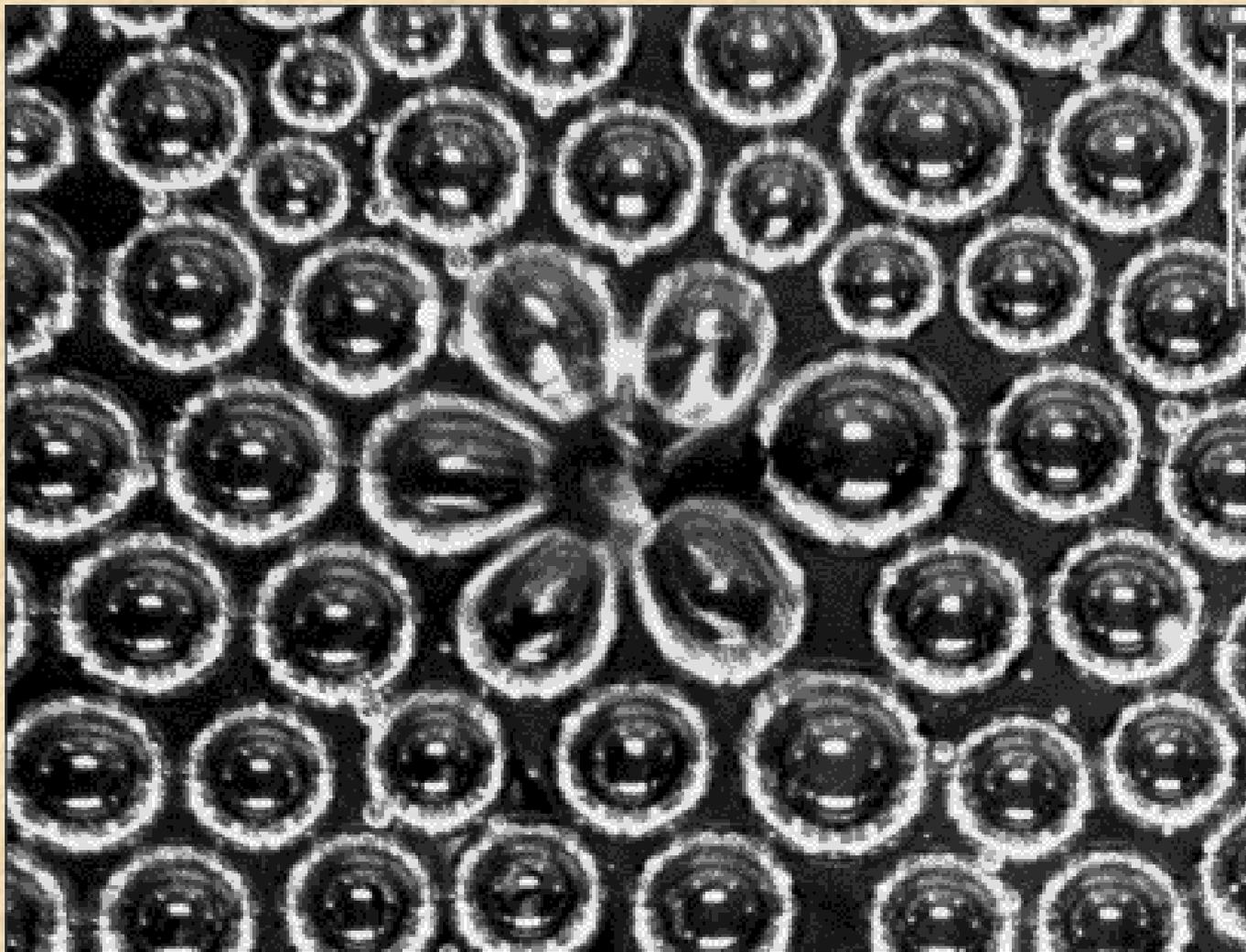
Схема образования пары: вакансия-междоузельный атом



По-Френкелю – атом из узла перемещен в
межузельное положение



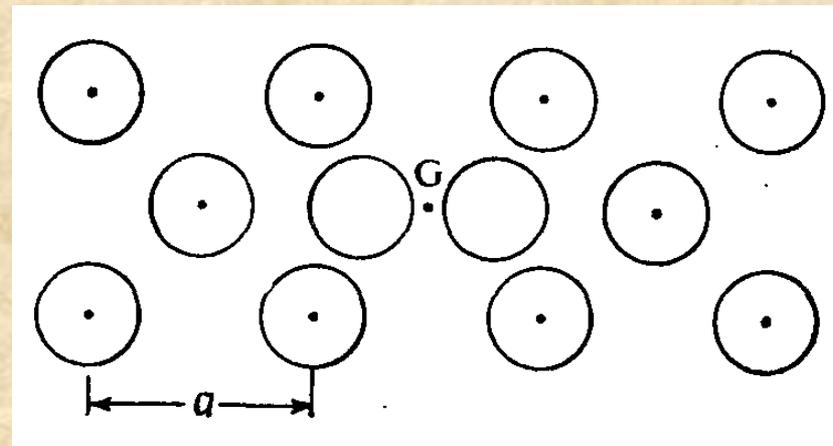
Какие дефекты?



Линейные дефекты

• **Краудион** - расщепленная конфигурация межузельного атома

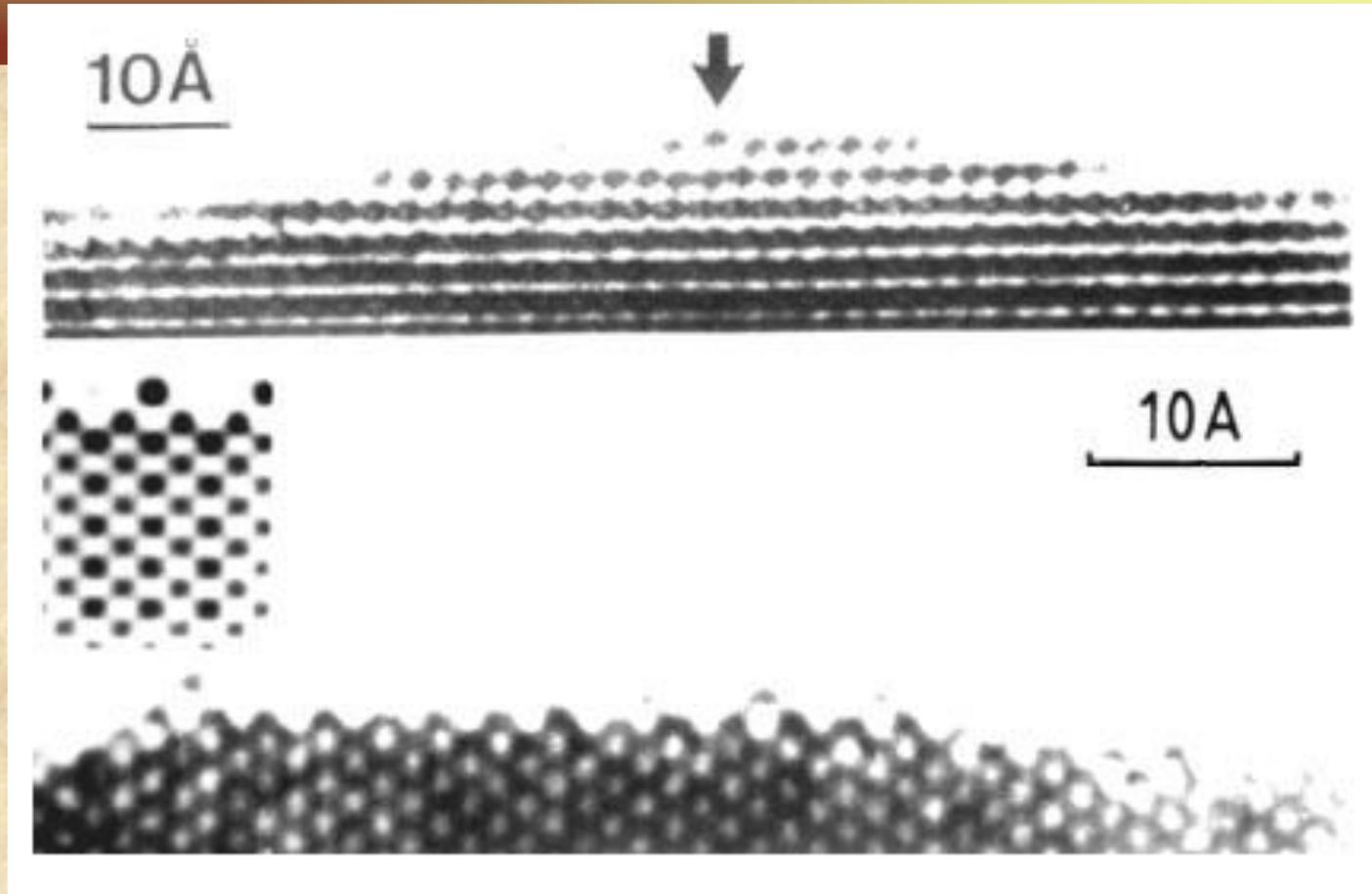
• **Дислокации.**



Поверхностные (плоские) дефекты

- *Внешняя поверхность кристалла*
- *Границы зерен и субзерен.*

Поверхностные дефекты



Электронномикроскопическое изображение поверхности (111) золота. Видны ступеньки на поверхности, стрелкой отмечена поверхностная дислокация Шокли;

Поверхностные дефекты

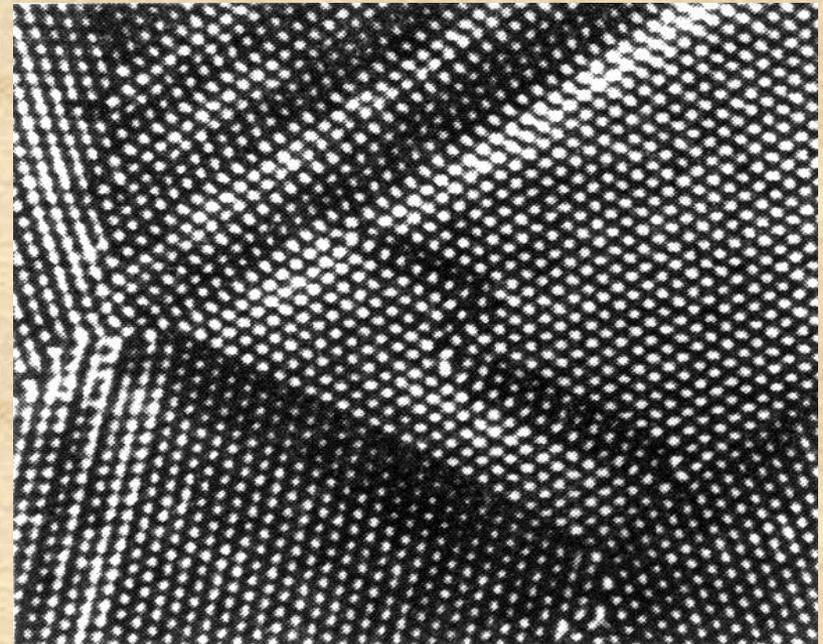
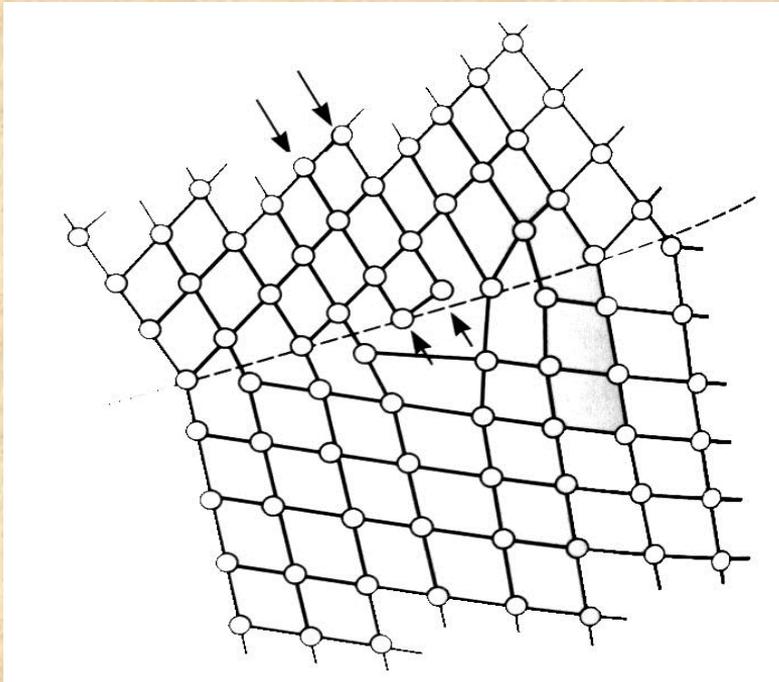
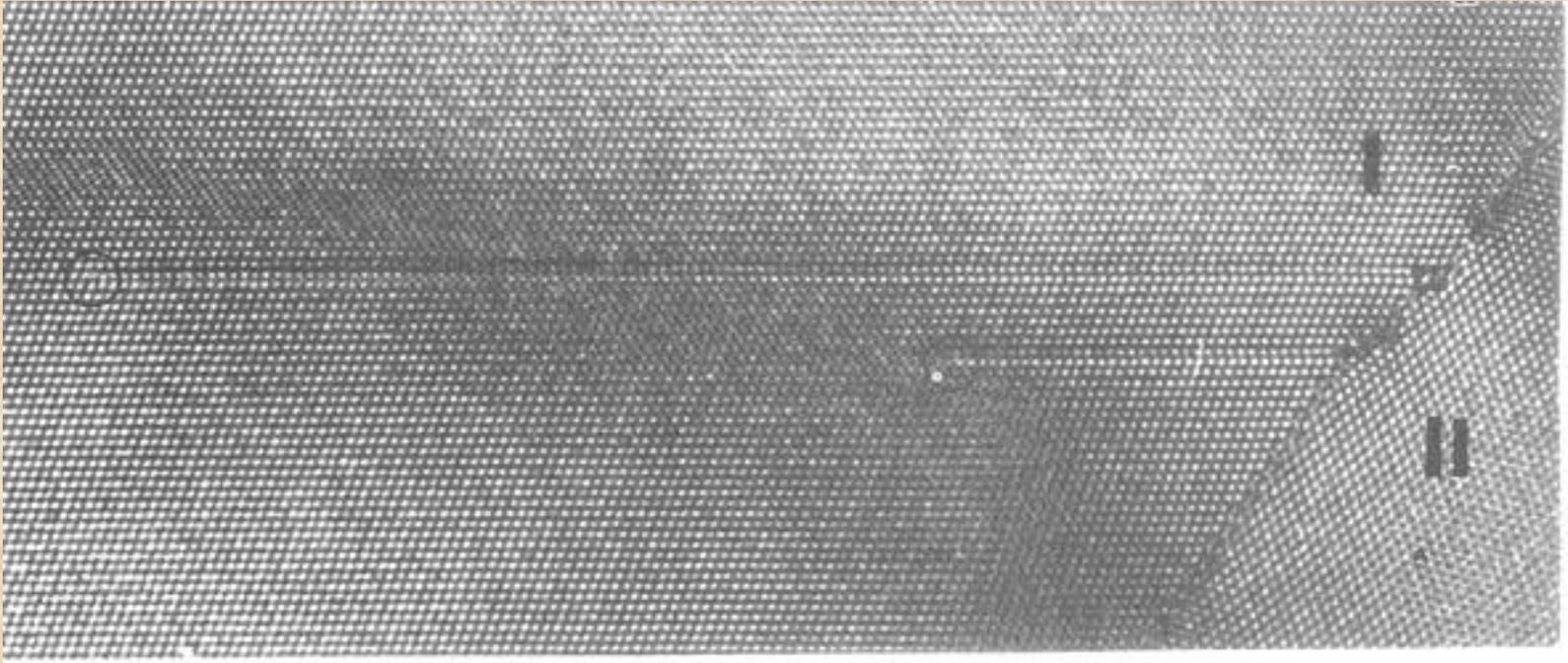


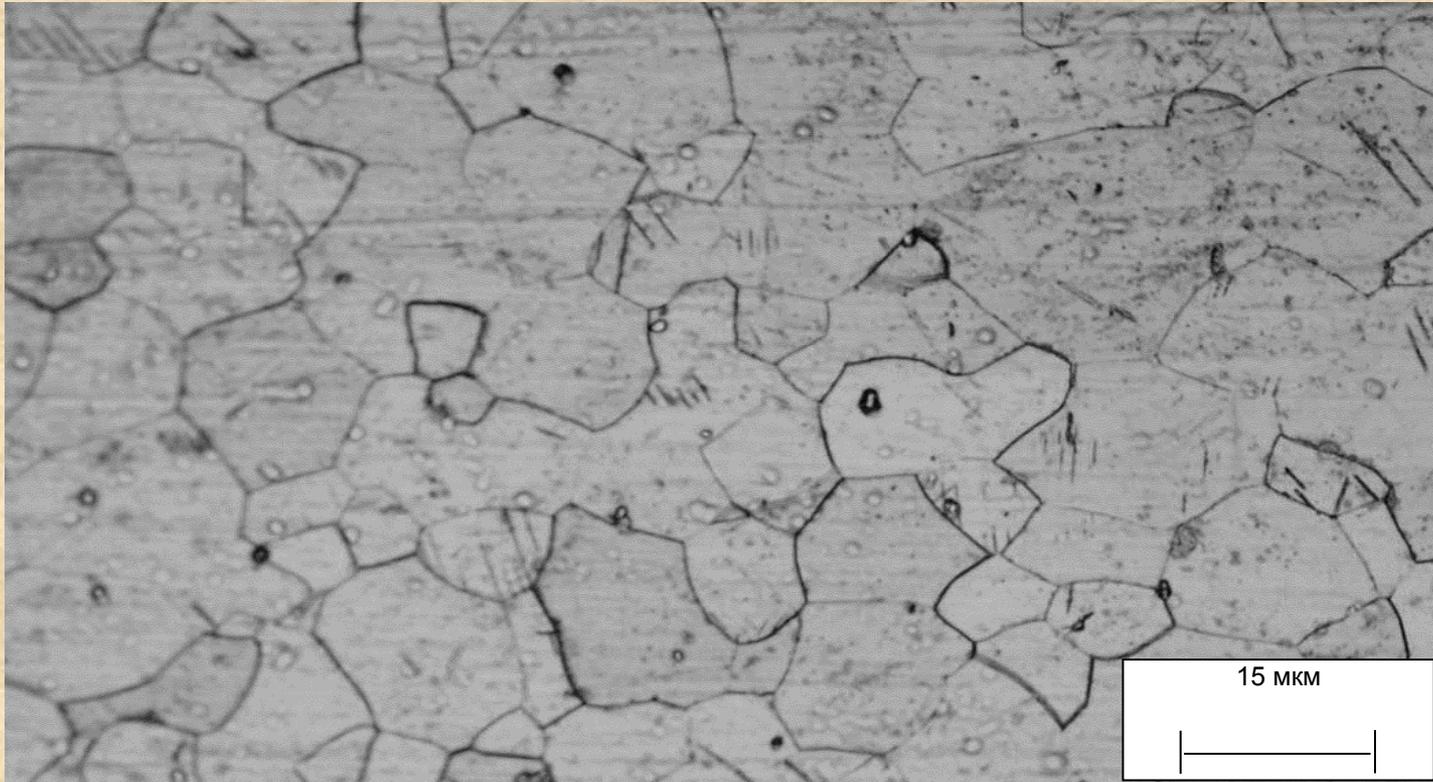
Схема и изображение в атомно-силовом микроскопе границы зерен

Поверхностные дефекты



изображение в атомно-силовом микроскопе границы зерен
и испускание дислокаций

Поверхностные дефекты



границы зерен

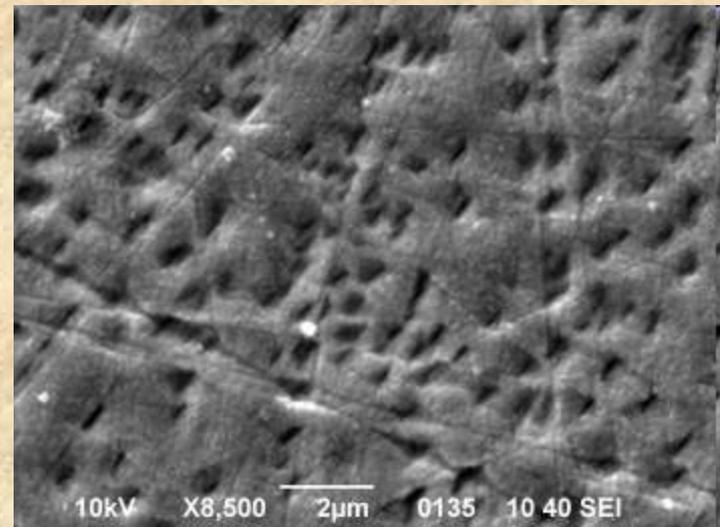
Объемные (трехмерные) дефекты

- *Включения посторонней фазы*
- *Пустоты (поры)*
- *Трещины.*

Объемные (трехмерные) дефекты

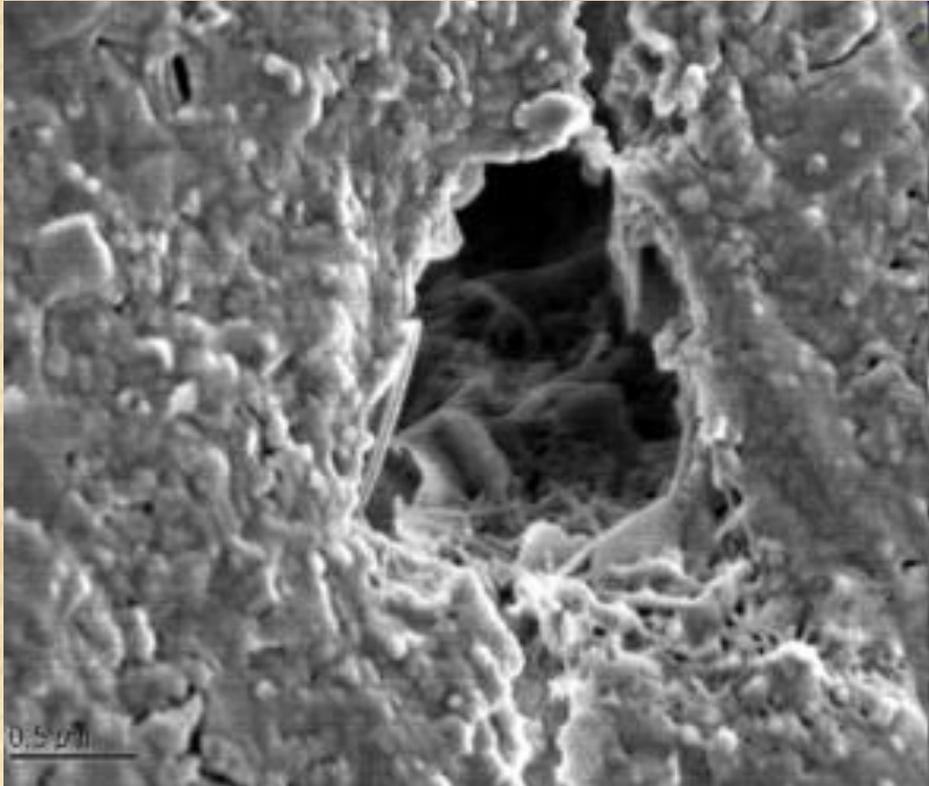


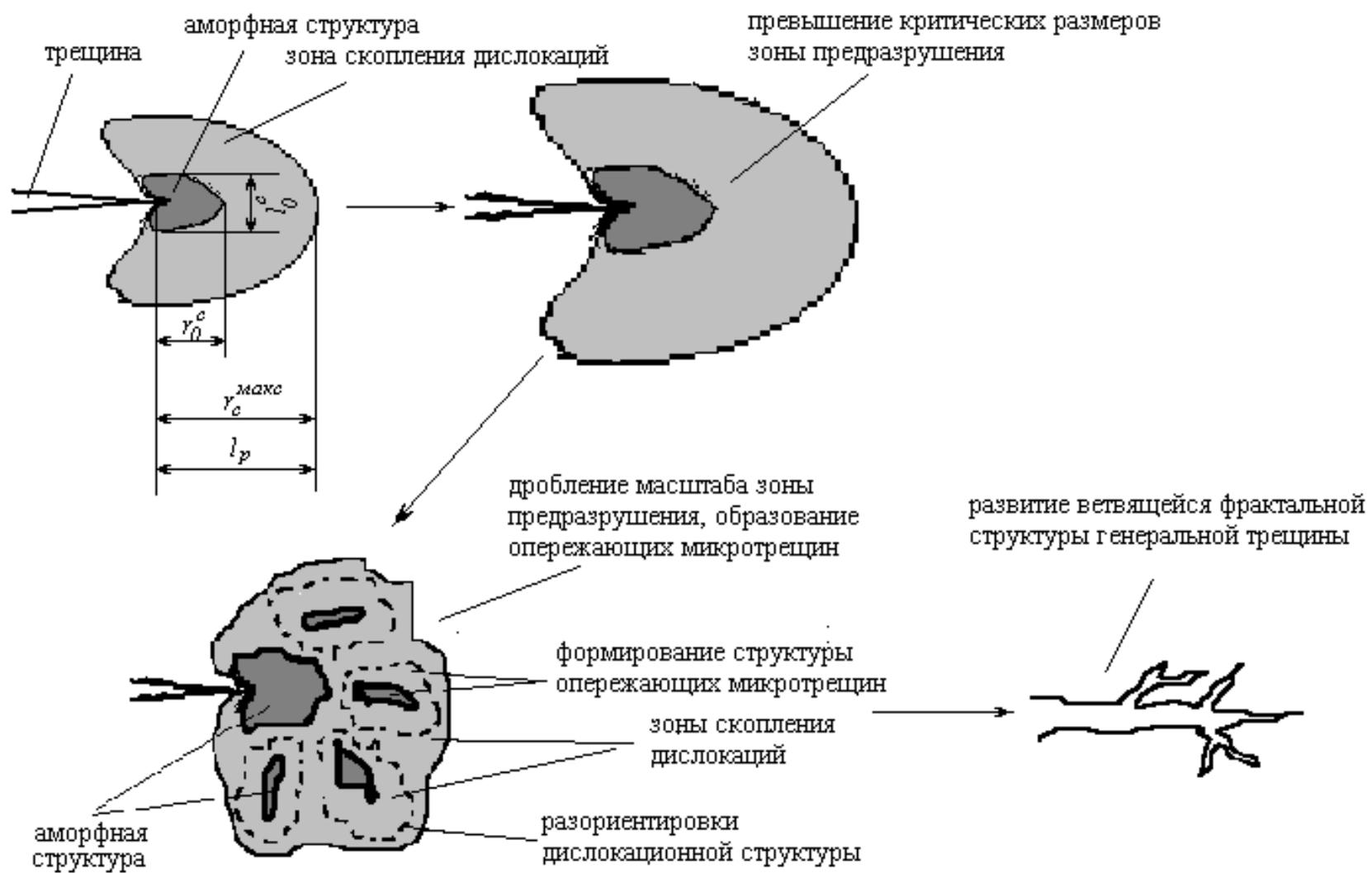
Фотография газо-термического покрытия с порами

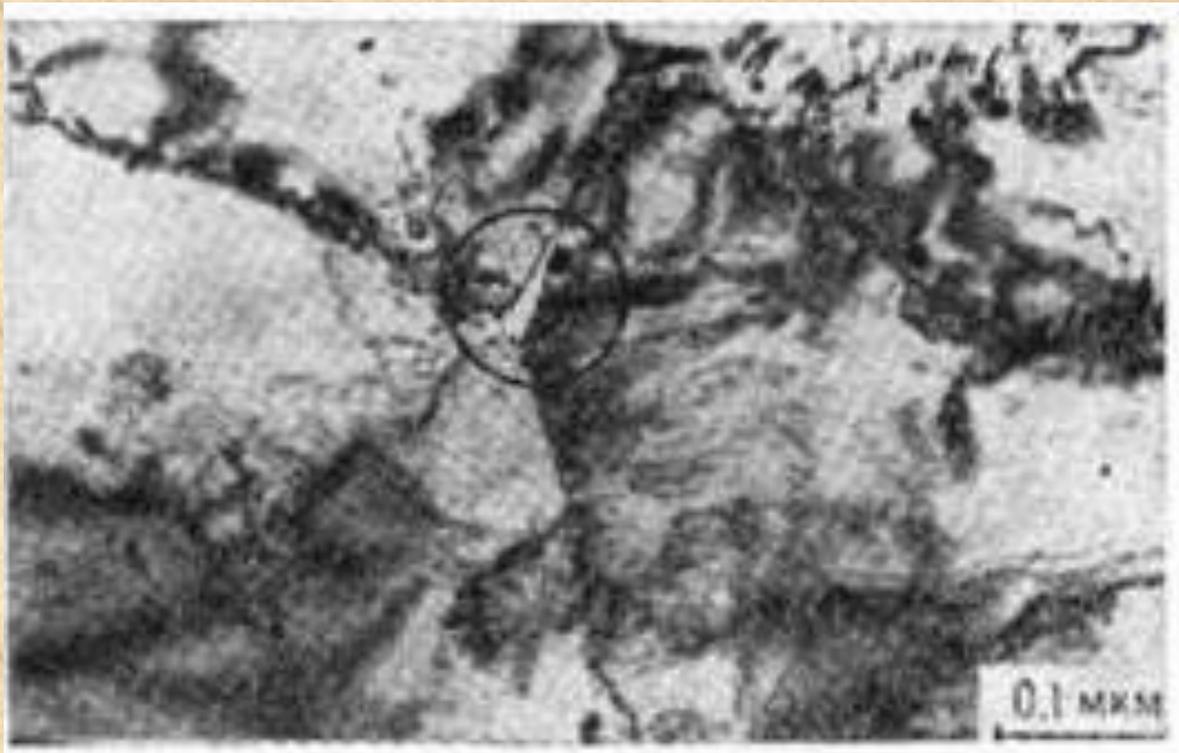


Массивы пор в фосвиде индия

Объемные (трехмерные) дефекты







Зародышевая микротрещина (в кружке) в пластически деформированном кристалле Мо.

МЕХАНИЗМЫ ОБРАЗОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ

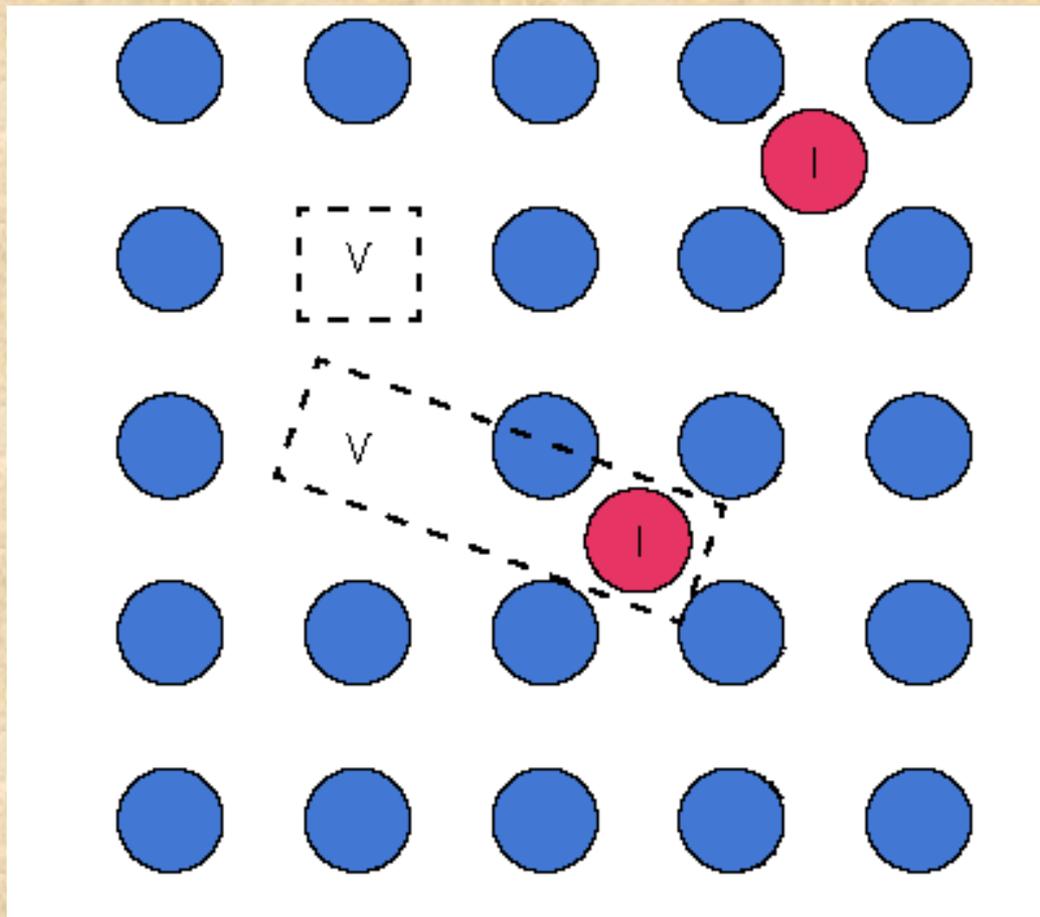
- Введение дефектов в процессе роста кристаллов
- Термофлуктуационные дефекты
- Радиационные дефекты
- Дефектообразование в полупроводниках при импульсном лазерном облучении

ДЕФЕКТЫ В КРИСТАЛЛАХ

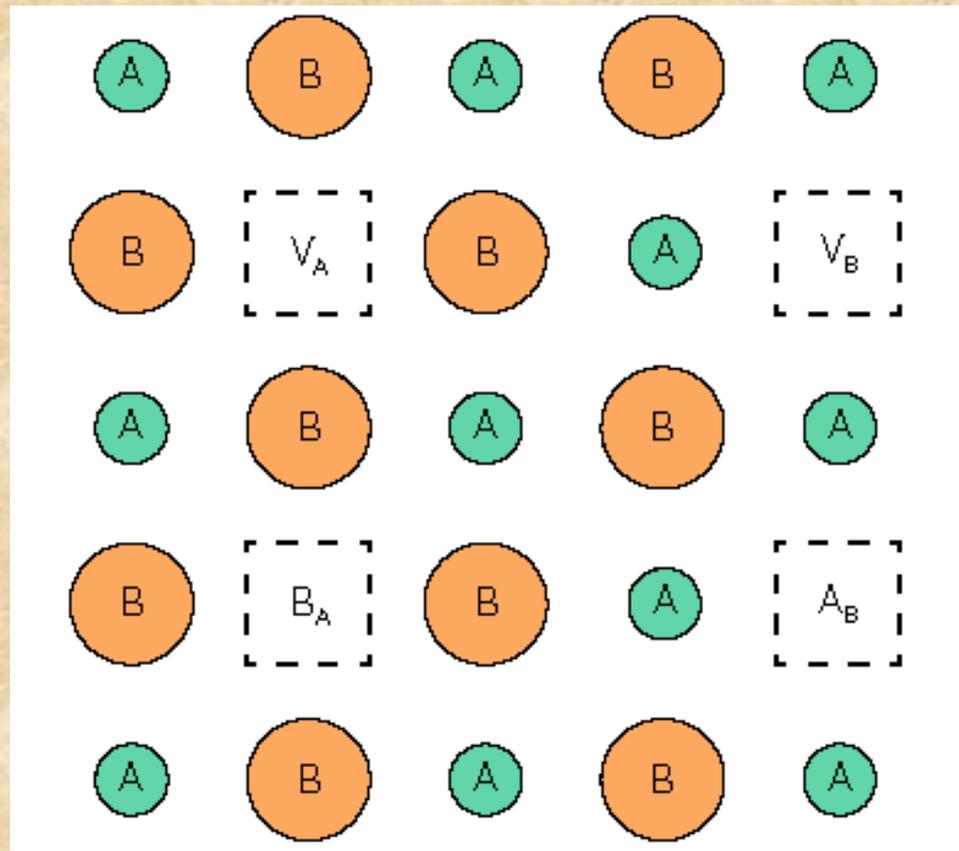
- В 1926 г. А. Ф. Иоффе высказал мысль, что электропроводность ионных кристаллов, наблюдающаяся даже при невысоких температурах, может быть обусловлена ионами, срывающимися при тепловых колебаниях из нормальных узлов решетки.

- Эту точку зрения далее развил и количественно обосновал Я. И. Френкель. Согласно Френкелю в отдельных узлах решетки может отсутствовать атом (ион), перешедший из соответствующего узла решетки в междоузлие.

• При этом в решетке образуются два дефекта: междоузельный атом (ион) и вакансия (место, откуда атом ушел в междоузлие). Такую «пару» принято называть дефектом по Френкелю.



Собственные дефекты в кристаллической решетке одноатомного кристалла.
V-вакансия, I-междоузельный атом,
V-I-пара Френкеля.



Кристалл, состоящий из атомов двух типов: А и В.

Вакансии в двух подрешетках V_A и V_B ,
 междоузельные атомы I_A , I_B .

