

Ақаулар

Орындаған: Мирзахметова Н.

Мұхтар Қ.

Тобы: 110-14

Қабылдаған: Налтаев А.

Кристалл торларының ақаулары

Ақаулар – кристалдардың периодтық құрылымының өзгеруі. Нақты кристалдардың идеалды модельден айырмашылығы атомдардың жүйелі орналасуының бұзылуында болып табылады. Ақаулар 4 типке бөлінеді.

Нүктелік ақаулар – қатты денелерде қыздырылу нәтижесінде (жылулық ақаулар), жылдам бөлшектерді сәулелендіру (радиациялық ақаулар), химиялық қоспаның стехиометриядан ауытқуы (стехиометриялық ақаулар) пластикалық деформацияда пайда болады. (Шотки ақауы, Френкель ақауы)

Сызықтық (бір өлшемді) ақаулар – периодтық бұзылуы бір рет өлшегенде торлық өлшемдерінің арақашықтығы үлкен параметрлерге созылып жатады, ал қалған екі өлшемде параметрлерін өзгертпейді.

Сызықтық ақауларға: дислокация, микросызаттар жатады.

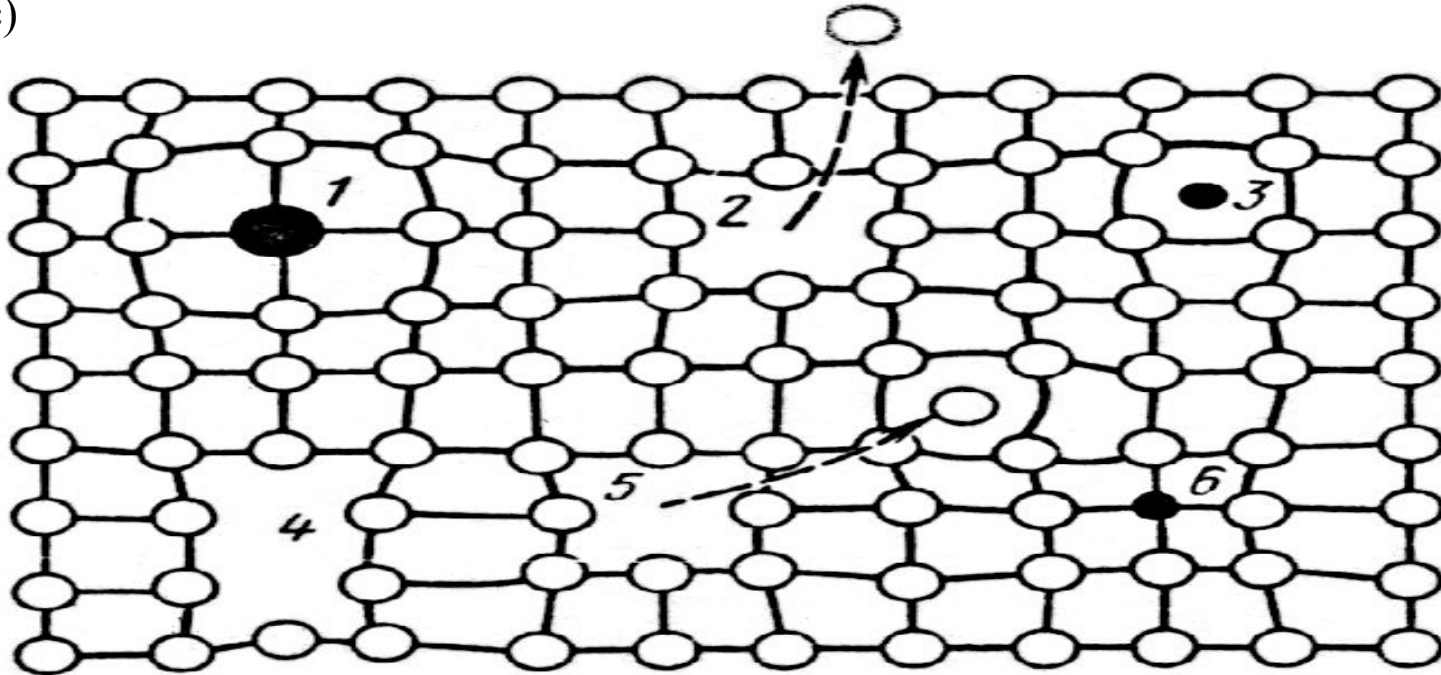
Көлемді (үш өлшемді) ақаулар – бұлар микробостықтар және басқа фазалардың қосылуы. Олар кристалдардың өсуінен немесе кристалға әсерлердің нәтижесінен пайда болады. Мысалға, балқытылу кезінде үлкен сандар кристаллизация түзіп, екінші фазаның үлкен бөлшегінің түсуіне алып келеді. (Границ зерен және)

Беттік ақаулар. Беттік ақауларға – кристалдардың сыртқы беті, микрокристалдар мен субкристалдардың (бірнеше блоктан тұратын ірі бөлшектер) шекаралары, жазық дислокациялардағы (БЦК және ГТ торларындағы) атомдардың орналасу ретінің бұзылуы жатады. (микробостықтар,)

Нүктелік ақаулар

Кристалдардың құрылымының бұзылуы әрбір жайылмайтын нүктесінде болады. Бұндай ақаулардың өлшемдері үш өлшемде де бір немесе бірнеше атомаралық арақашықтығы шамадан асырылмайды.

Нүктелік ақауларға вакансиялар, орын басу және түйінаралық кірме атомдары жатады (2.5- с)



1-кірмелі алмасу атомдары;

2,4 – вакансиялар;

3 – кірме ену атомы;

5 – вакансия және
түйінаралық ақау;

6 – алмасу және ену
атомдары

Френкельдің ақаулары

Егер атомдардың орташа кинетикалық энергиясы өте аз болса, онда кристалда атомдардың саны аз болады; егер кинетикалық энергиясы өте көп болса, онда атомдардың саны да көп болады. Бұндай жағдайда тордың түйініндегі атомдар өздерінің теңбе-тең қалпын жоғалтады. Кристалдар араласып, энергиясын басқа атомдарға береді де, жаңа тепе-теңдік жағдайға ие болады. Егер жақынырақ орналасқан торлардың түйіндері бос болмаса, онда тек қана түйіндерде орналасады. Қалған бос тор атомдары **вакансия** деп аталады. Түйінаралық атомдардың жиынтығы ретіндегі нүктелік ақауларды және вакансияларды

Френкельдің ақаулары деп атайды

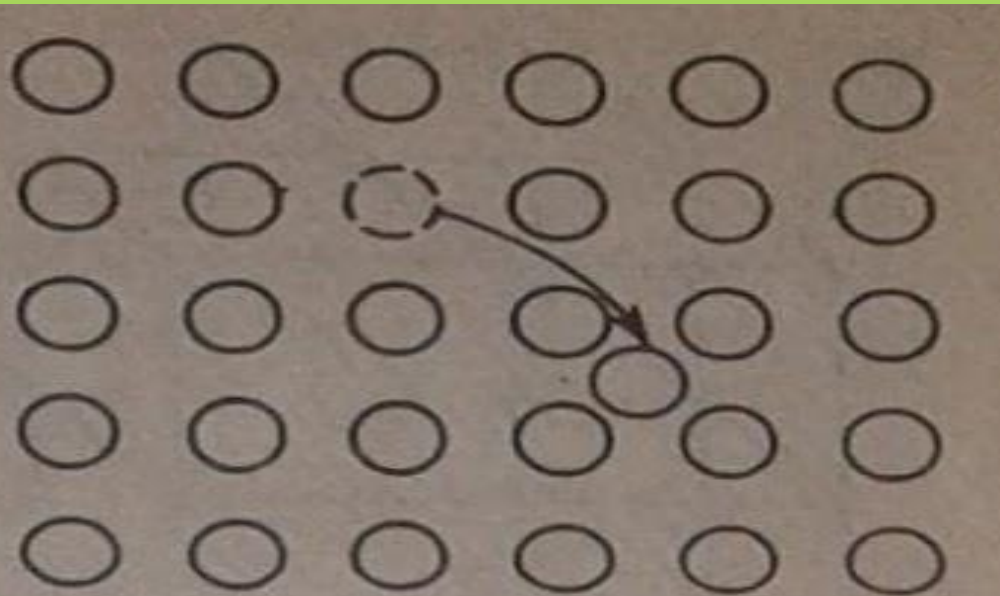


Рис. 3.1. Дефект по Френкелю

Тығыз жинақталған атомдарға қарағанда, атомаралық кристалдарда Френкельдің жұптық ақаулары оңай пайда болады. Соңғы түйінаралық атомдарда қарапайым тілмен айтқанда, орын жоқ болады. Френкельдің ақауы 1-типтегі кристалдарға – алмаз бен тұздардың құрылымы жатады, ал 2-типтегі кристалдарға – тығыз жинақталған металдар жатады.

Түйінаралық атомдардың араласуы иондық байланысының құрылымы аралық күйден тығыз жинақталған металдар мен жартылай өткізгіштердің ковалентті байланысына ауысады. Тордың геометриясы оларға біраз кеңістік қалдырады, иондар жиі жағдайда көлемі бойынша ажыратылады, нәтижесінде жинақ тығыз жинақталады. Сондықтан түйінаралық атомдар иондық байланыс кезінде бір деңгейден екіншіге өткенде қатты өзгереді.

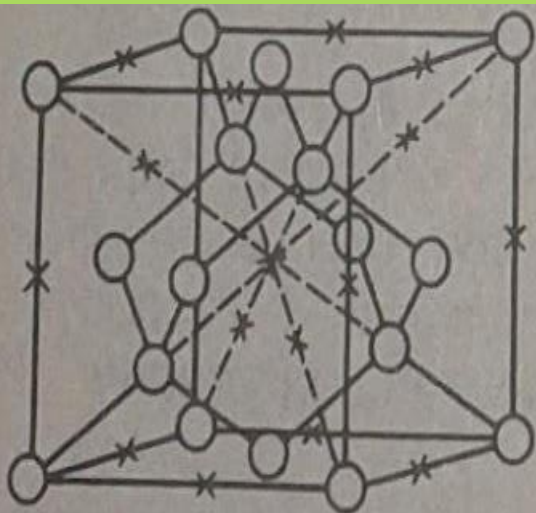


Рис. 3.4. Расположение тетраэдрических междоузлий в структуре алмаза:
x — междоузлие; o — атом

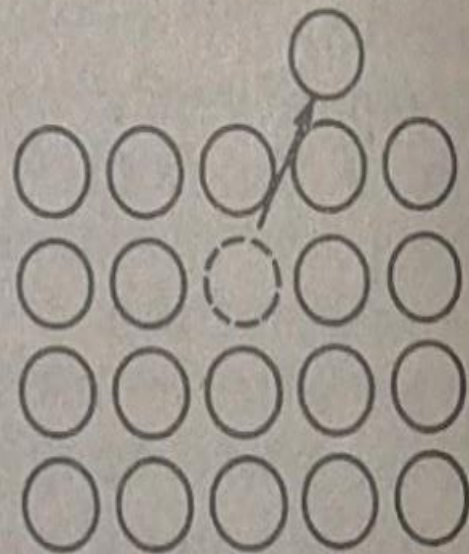


Рис. 3.5. Дефект по Шоттки

Френкельдің жұпты ақауларынан басқа кристалдарда В.Шотткидің (5-сурет) қарастырған біртекті нүктелік ақаулары – **вакансия** болады. **Шоттки ақаулары** көп жағдайда кристалдарда атомдардың тығыз жинағында, яғни түйінаралық атомдар қиын және энергетикалық пайдасыз жағдайда кездеседі. Бұндай кристалдардағы ақаулардың процесі келесі жағдайда орындалады. Атомдардың біраз бөлігі жылулық қозғалыстың нәтижесінде үстіңгі қабаттан «бөлшектік» диссоциацияға өтеді, яғни олар кристалдың бетіне шығады (5-сурет). Содан кейін пайда болған ақаулар кристалдың көлеміне өтеді.

Масса тұрақты болған жағдайда Шоттки ақаулары көлемінің өсуіне байланысты кристалдың тығыздығын азайтады.

Френкельдің ақаулары пайда болған жағдайда тығыздық өзгермегендіктен, кристалдың көлемі өзгермейді. Тығыздықтың өлшемінің нәтижесі бойынша таза сілтілі – галоидты кристалдар үшін Шоттки ақаулары, ал таза күміс галогендік кристалдары үшін – Френкель ақаулары доменді болып табылатыны көрсетілген.

Энтропиямен байланысқан ақаулар концентрациясы
Түйіні бар бос орын кешендерінің концентрация қоспалары үшін мына формуланы қолданамыз.

$$S = k_B \ln W,$$

Энтропиямен байланысқан ақаулар концентрациясы

k_B -Больцман тұрақтысы

W -термодинамикалық ықтималдылық, жүйенің күйін жүзеге асырудың саны.

$$\frac{C}{I_0 - C} = z V \exp\left(-\frac{E_c}{k_B T}\right).$$

- C және I_0 - канцентрация кешендері және атом қоспалары, атом өрнектері
- Z - атом қоспасының координаталық саны
- E_c – бос рындағы атомдар қоспасының энергиясы

Сызықтық ақаулар.

- Сызықтық ақауларға дислокациялар мен түйінаралық атомдардың тізбектері жатады. Олардың өлшемдері бір бағытта микрокристалдың (түйіршіктің) өлшеміндей, ал қалған екі бағытта бірнеше атомаралық қашықтыққа тең.
- Жалпы анықтама бойынша **дислокация** деп- кристалл ішіндегі сырғу зонасының шекарасын көрсететін сызықтық ақауды айтады. Мұндай шекара сырғу жазықтығының деформация жүріп өткен бөлігін әлі деформация басталмаған бөлігінен бөліп тұрады.

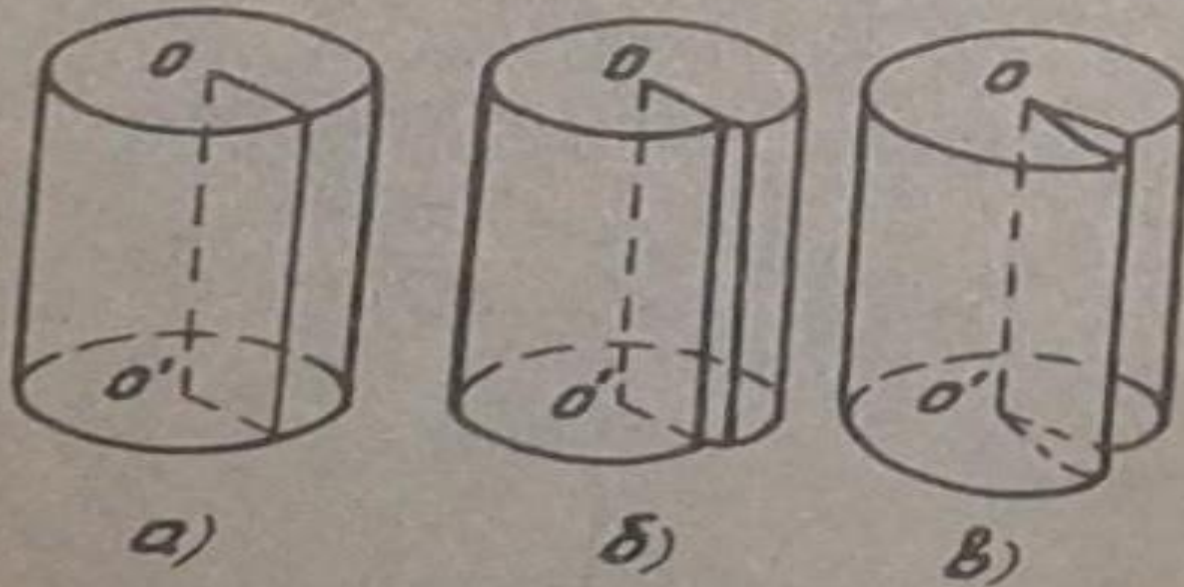
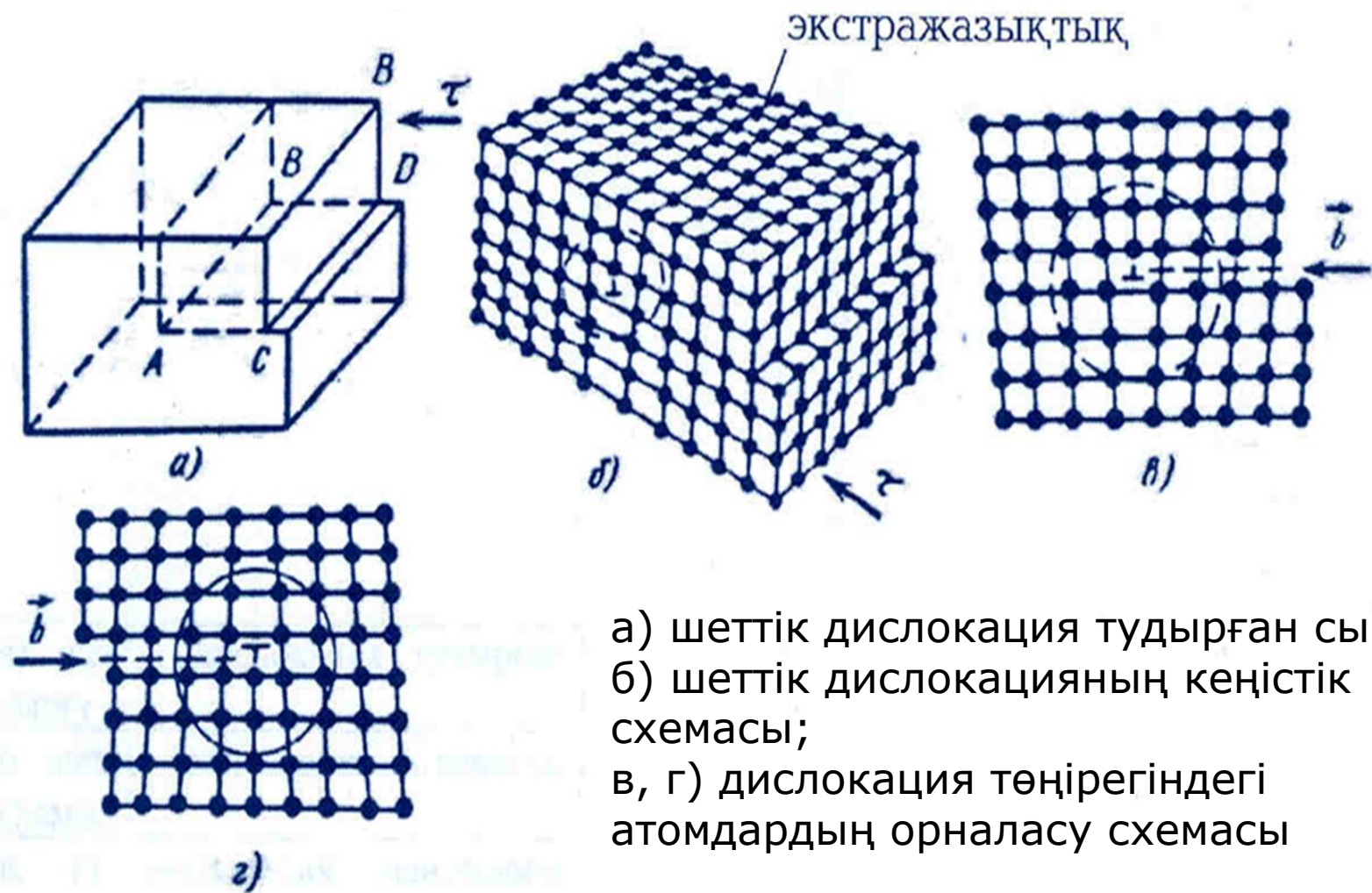


Рис. 3.8. Образование дислокационной линии в упругом цилиндре

Сызықтық ақаулардың ерекше және маңызды түрлеріне **шеттік** және **бұрандалық** дислокациялар жатады

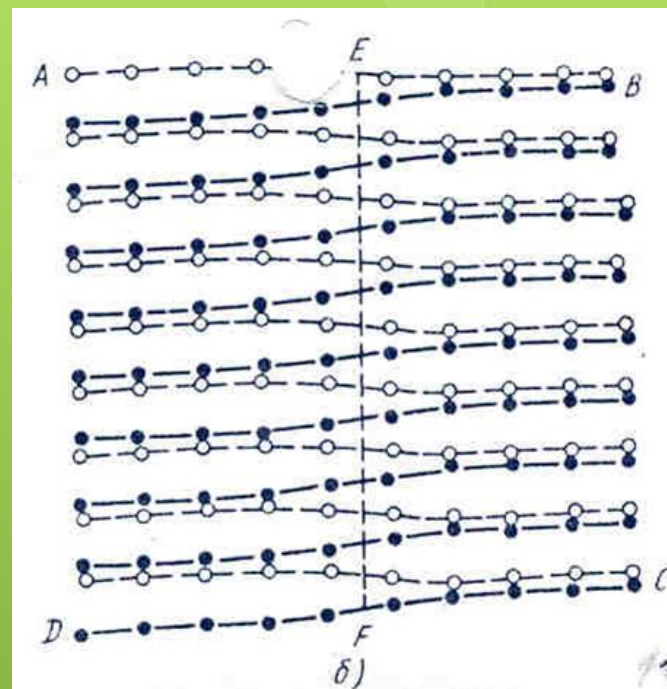
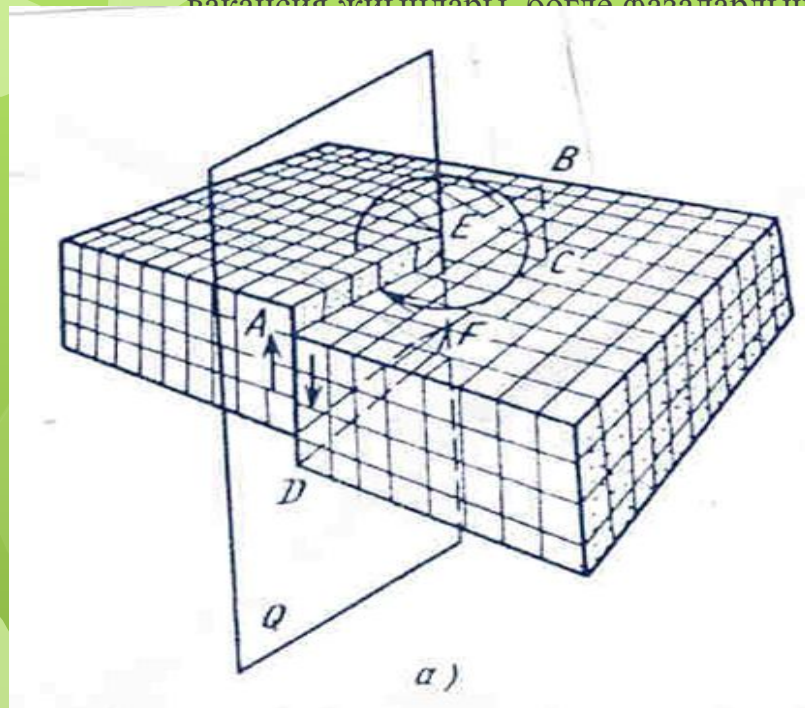
Шеттік дислокациялар. Тәжірибелер бойынша кез келген жеке микросталдың ішінде бірнеше толық емес (демек түйіршіктің бір бетінен екінші бетіне жетпейтін) атомдық



- а) шеттік дислокация тудырған сырғу
- б) шеттік дислокацияның кеңістік схемасы;
- в, г) дислокация төңірегіндегі атомдардың орналасу схемасы

Бұрандалық дислокация

Бұрандалық дислокация – баспалдақтары жоқ бұралған сатыға ұқсас бір ғана атомдық жазықтықтан пайда болады. Көлемдік ақауларға қуыстар мен каналдарды жасайтын рокингерлер, бөгде фазалардың кірігуі дислокациялар мен өсу аймақтарында



а) Q – жазықтығының бойындағы толық емес сырғудан пайда болған EF дислокациясы;

б) бұрандалы дислокация аймағындағы атомдардың орналасуы.

Дислокация тығыздығының өлшем бірлігі, см^{-2} : $P = L/U$.



Источник дислокации

Франк и Рид обнаружили, что отрезок дислокации типа AB , расположенный в плоскости скольжения, может действовать как источник неограниченного числа дислокаций. Под действием внешнего напряжения τ дислокация начинает выгибаться в плоскости скольжения и занимает положение 1 (см. рис. 3.28) (если бы концы отрезка были свободными, то дислокация ста-

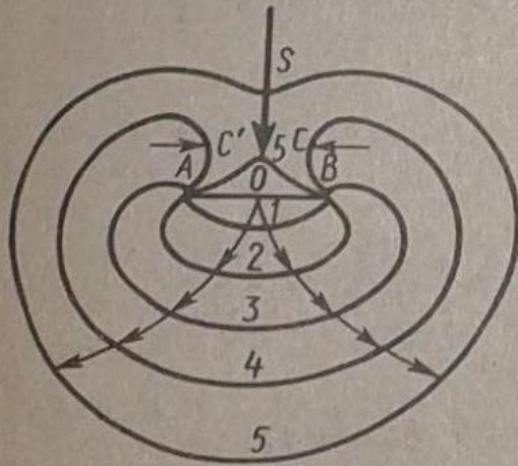


Рис. 3.28. Источник Франка-Рида

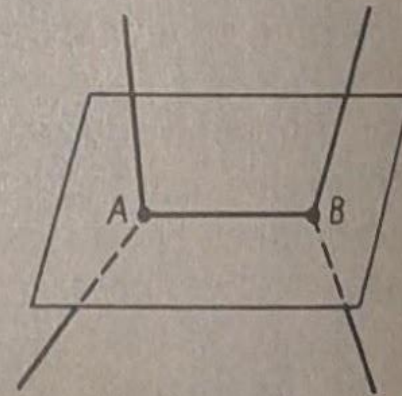


Рис. 3.29. Отрезок дислокации AB с закрепленными концами

Беттік ақаулар.

Беттік ақауларға – кристалдардың сыртқы беті, микрокристалдар мен субкристалдардың (бірнеше блоктан тұратын ірі бөлшектер) шекаралары, жазық дислокациялардағы (БЦК және ГТ торларындағы) атомдардың орналасу ретінің бұзылуы жатады. Кристалл атомдарының ретпен орналасуы бұзылған шекараларында кристалдың қалыңдығынан жұқалтаң (5...10 атом диаметріндей) келетін беттік зона пайда болуы мүмкін. Мұндай ақаулар **беттік ақауға** жатады.

Радиациялық ақау

Кристалдардың тез сәулелену жиілігінен пайда болатын нүктелік ақаулар, ядроларды бөлгенде пайда болатын жарықтар мен иондардың жылдамдықтары радиациялық ақаулар деп аталады.

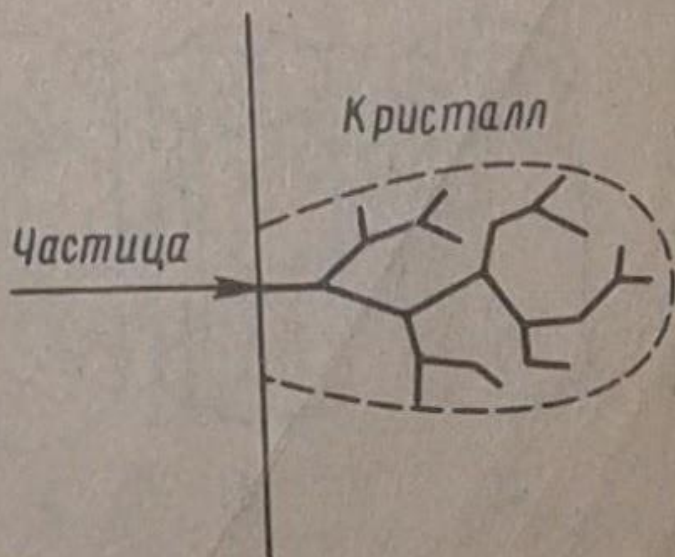


Рис. 3.7. Схематическое изображение каскада смещений,

Радиациялық ақауды бейтарап және зарядталған бөлшектермен кристалды қатты денені сәулелендіру жағдайын қарастырайық.

Бөлшектердің кристалды денеден өтуі өте күрделі жағдайда қарастырылады. Оларға:

1) бөлшектер мен кристалды дененің атом ядроларының серпімді соқтығысуы.

2) кристалдағы атомның электронды қабықшасының қозуы және оның иондалуы

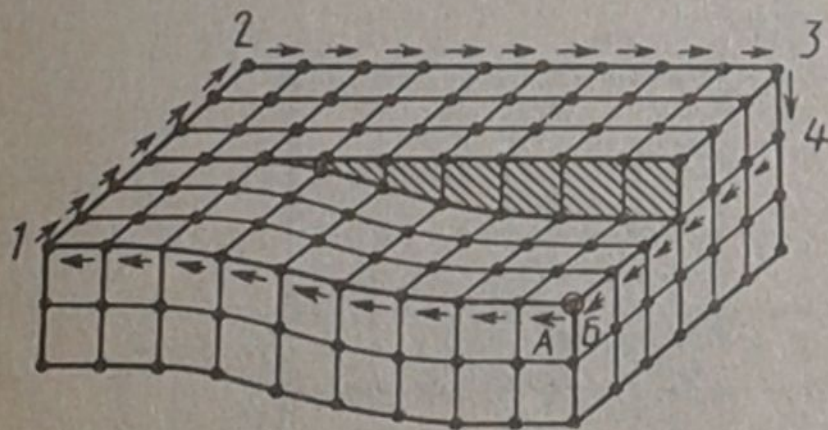
3) ядролық айналу – бөлшек атомдарының кристалға өтуі арқылы радиациялық ақау жағдайына келуі және радиациялық ыдырауға айналуы.

Кристаллдардың атомдары мен жылдам жиіліктерінің қатты соқтығысулары радиациялық ақаулардың пайда болуына себепкер болады. Радиациялық нүктелік ақаулардың жылулықтардан ерекшелігі, олар үнемі жұпты болады, оларды Френкель ақаулары деп атайды.

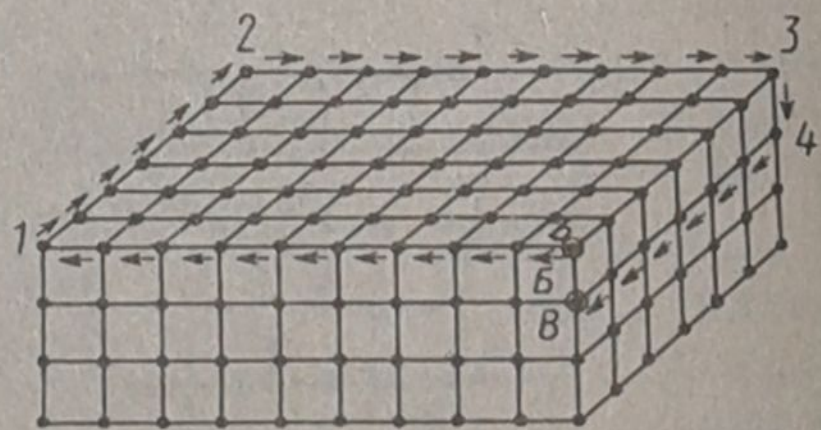
Бюргерс векторы

Егер дислокация мен $\vec{b}_1$ Бюргерс векторы кристалл ішінде бірнеше дислокация мен Бюргерс векторларына $\vec{b}_2, \vec{b}_3, \dots, \vec{b}_n$ бөлінсе онда, келесі өрнек орындалады :

$$\vec{b}_1 = \vec{b}_2 + \vec{b}_3 + \dots + \vec{b}_n; \quad \sum_{i=1}^n b_i = 0$$



а)



б)

Рис. 3.14. Контур Бюргерса винтовой дислокации: а — реальный, б — идеальный кристалл.

Егер шынайы кристалды қатты денеде контур дислокацияның айналасында жүргізілсе (3,12а сурет) , онда осыған сәйкес келетін контур идеалды (мінсіз) кристалды қатты денеде ашық болады (3,12б сурет). Онда осы контурдың ашық жерін жабу үшін $\vec{b}$, вектормен толықтырамыз (3,12 б сурет). Осы $\vec{b}$, векторы Бюргерс векторы деп аталады.

Бюргерс векторының бағытын екі тәсілмен, анықтауға болады.

1. Егер дислокация оң бағытта қозғалса (барлық жерде) онда Бюргерс контурының айналуы бұrandаның оң бағыттағы қозғалысымен сәйкес келеді.
2. Егер Бюргерс векторы соңғы В нүктесінен бастапқы А нүктесіне бағытталса (3,12б сурет) онда дислокацияның оң қозғалысы i бірлік векторының бағытына сәйкес келеді, яғни дислокация сызығына қатысты болады.



Гук заңына сәйкес: $\tau = k \sin \frac{2\pi x}{b}$, $\sin \frac{2\pi x}{b} \approx \frac{2\pi x}{b}$,

$$\tau = k \frac{2\pi x}{b}, \quad \tau = G \frac{x}{a}, \quad k \frac{2\pi x}{b} = G \frac{x}{a}, \quad k = \frac{b}{a} \frac{G}{2\pi}, \quad x = \frac{b}{4},$$

$$\tau_{\text{теор}} = \frac{b}{a} \frac{G}{2\pi}.$$

$$\tau_{\text{теор}} \approx \frac{G}{10};$$

$$\tau_{\text{теор}} \approx \frac{G}{30};$$

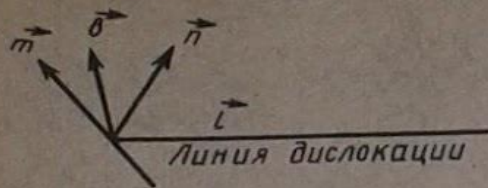


Рис. 3.19. Движение дислокации

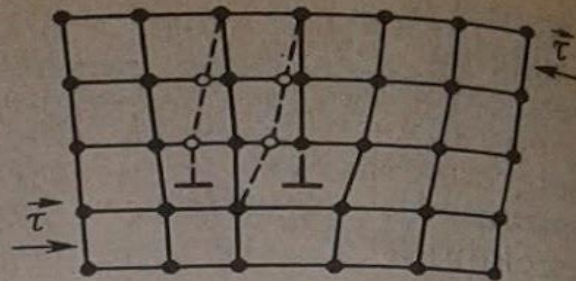


Рис. 3.20. Перемещение дислокации на одно межатомное расстояние путем скольжения

Расчет показывает, что для того, чтобы сдвинуть дислокацию, необходимо касательное напряжение

$$\tau = \frac{2G}{1-\nu} \exp \left[-\frac{2\pi b}{a(1-\nu)} \right]. \quad (3.41)$$

Здесь ν — коэффициент Пуассона; остальные обозначения те

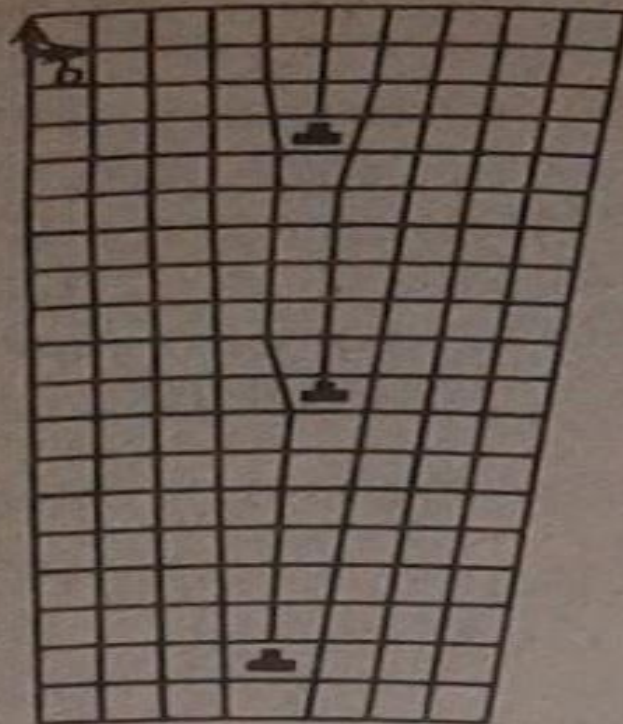


Рис. 3.32. Граница зерен с малым углом разориентации