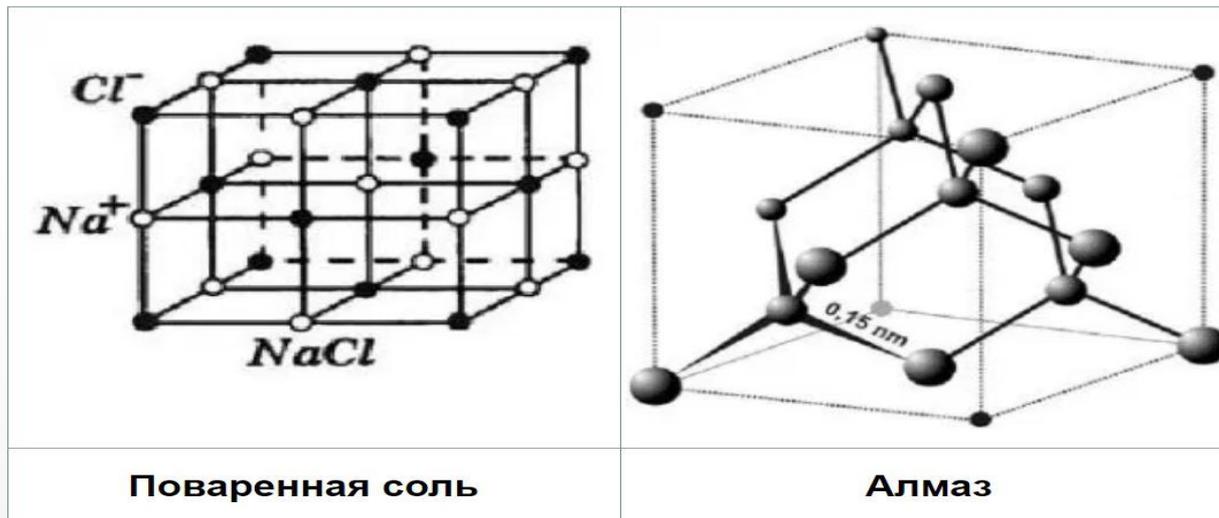


Идеальные и реальные кристаллы

Кристалл — это твердое состояние вещества. Он имеет определенную форму и определенное количество граней вследствие расположения своих атомов.

Кристаллами называются все твердые тела, в которых слагающие их частицы (атомы, ионы, молекулы) расположены строго закономерно наподобие узлов пространственных решеток.

Ниже приводится схематическое изображение кристаллических решеток поваренной соли и алмаза:



ВИДЫ И ТИПЫ КРИСТАЛЛОВ

Идеальные кристаллы – это математическая абстракция, используемая учеными для описания свойств настоящих кристаллов. Характерными признаками идеального кристалла являются гладкие грани, строгий дальний порядок, определенная симметрия кристаллической решетки и прочие характерные для кристалла параметры.

Реальные кристаллы – это те кристаллы, с которыми мы сталкиваемся в реальной жизни. Они имеют различные примеси, которые могут понижать симметрию кристаллической решетки, шероховатые грани, могут иметь не правильную форму, дефекты оптических свойств (если кристалл прозрачный). Но есть одно свойство, которое присуще как идеальному, так и реальному кристаллам — это дальний порядок, правило, по которому атомы располагаются в кристаллической решетке.

Еще одним критерием деления кристаллов на виды является их происхождение. По этому критерию кристаллы делятся на природные (естественные) и искусственные (выращенные человеком).

Примеры идеальных кристаллов



Примеры реальных кристаллов



Дефекты структуры реальных кристаллов

- Классификация дефектов:
- Идеальная периодичность структуры нарушается прежде всего тепловыми колебаниями атомов и изменением электронной плотности. Амплитуда колебаний тем больше, чем сильнее нагрето вещество. Так, при температурах плавления она достигает 10–15% от межуатомных расстояний. Увеличение амплитуды колебаний приводит к росту колебательной составляющей энергии частиц за счет поглощения тепла и, как следствие, к появлению так называемых структурных дефектов.
- Дефекты классифицируют по геометрическому признаку (т. е. по числу измерений, в которых нарушения структуры простираются на расстояния, превышающие параметр решетки в данном направлении) на четыре группы: точечные, линейные, поверхностные, объемные.
- Точечные (нульмерные) дефекты
- Линейные (одномерные) дефекты
- Поверхностные (двухмерные) дефекты
- Объемные (трехмерные) дефекты

Точечные (нульмерные) дефекты

Точечные (нульмерные) дефекты – нарушения кристаллической структуры в изолированных друг от друга точках, размеры которых по всем координатам сравнимы с межузельными расстояниями. Это вакансии, атомы примесей, межузельные атомы, дефекты по Френкелю и по Шоттки.

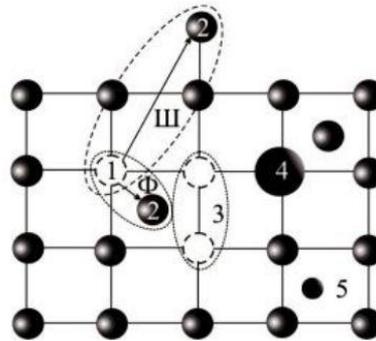


Рис. 1.21. Основные типы точечных дефектов в однокомпонентном кристалле:
1 – вакансия; 2 – собственный межузельный атом; 3 – бивакансия; 4 – атом замещения; 5 – атом внедрения; Ф – дефект по Френкелю;
Ш – дефект по Шоттки

Линейные (одномерные) дефекты

дефекты

- Линейные (одномерные) дефекты – нарушения периодичности кристаллической структуры в одном измерении, простирающиеся вдоль некоторой линии на расстояние, сравнимое с размером кристалла. При этом поперечный размер не превышает одного или нескольких параметров решетки. К этой группе дефектов относятся краевые и винтовые дислокации.

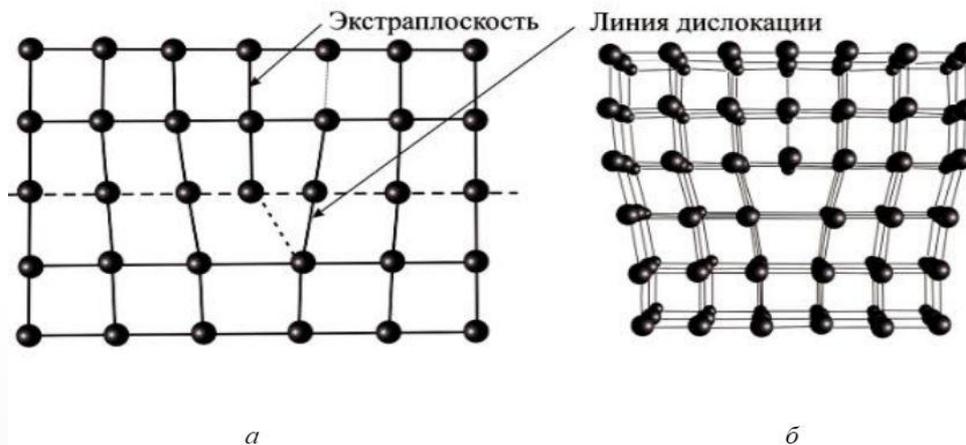


Рис. 12. Краевая дислокация в кристалле с кубической структурой:
а – поперечное сечение к кристалла; *б* – объемное изображение

Поверхностные (двухмерные) дефекты

- Поверхностные (двухмерные) дефекты имеют макроскопическую протяженность, соизмеримую с размерами кристалла, одновременно в двух измерениях: границы зерен (блоков), двойников, межфазные границы, дефекты упаковки и внешние поверхности кристалла.

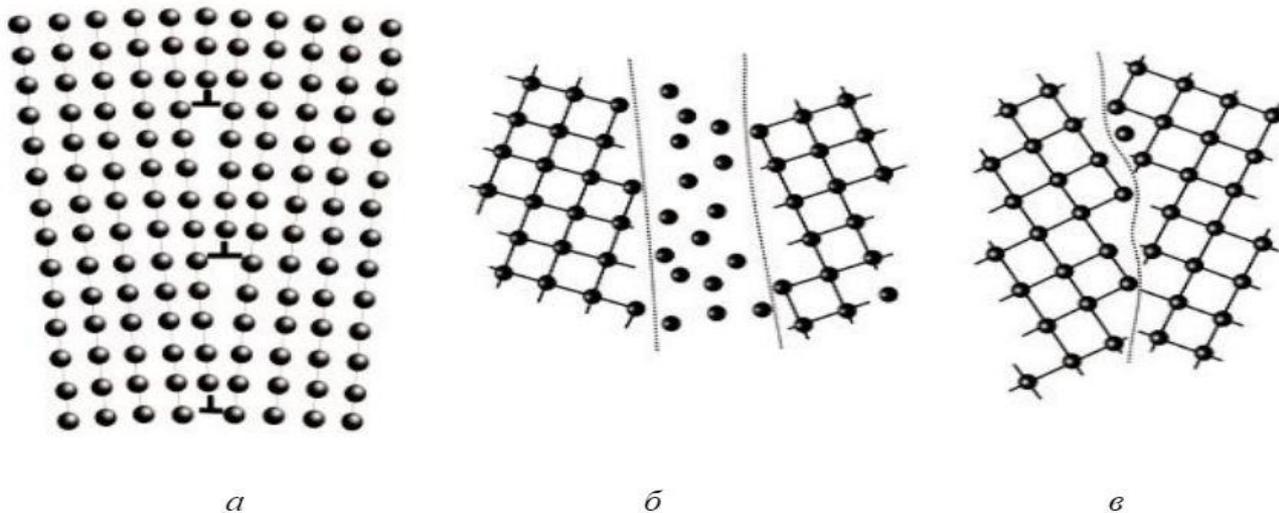


Рис. 1.25. Строение малоугловых (а) и большеугловых (б,в) границ зерен

Объемные (трехмерные) дефекты

- Объемные (трехмерные) дефекты макроскопического масштаба – трещины, полости и включения инородной фазы.

Образование дефектов структуры кристаллов

- Дефекты возникают вследствие нарушения правильности расположения частиц, которые в свою очередь слагают структуру реальных кристаллов. То есть любое отклонение от их идеальной структуры ведет к дефектности в кристаллах. Их разнообразие, а также взаимодействие между собой приводит к многообразию структурных несовершенств кристалла.

Образование дефектов структуры кристаллов

- Две основные причины возникновения дефектов в кристаллах.
- Первая обусловлена тепловым движением частиц, формирующих кристалл. С повышением температуры твердого тела энергия такого движения растет, поэтому возрастает и вероятность образования подобного рода дефектов, обычно называемых собственными или тепловыми. Другой вид дефектов связан с наличием в структуре вещества тех или иных примесей. Иначе, абсолютно химически чистых веществ не существует. Однако влияние примесей на свойства вещества может быть незначительным, и тогда их присутствием пренебрегают. Когда присутствующие примеси существенно изменяют свойства твердого тела, говорят о дефектах химического состава кристалла или примесных дефектах.
- Дефекты в кристаллах могут возникать и как следствие воздействия на них внешних механических нагрузок. Так, при необратимом растяжении кристалла наступает его пластическая деформация, при которой в материале возникают плоскости скольжения с наибольшим сдвигом. За счет механических нагрузок в кристалле могут возникать трещины и другие макродефекты.

Типы дефектов

- 0-мерные (уровень отдельных частиц, влияние оказывается на отдельные ряды или плоскости)
- 1-мерные (линейные дефекты, влияние оказывается на отдельные плоскости или границы объемов всего кристалла)
- 2-мерные (плоскостные дефекты, границы объемов с разными свойствами)
- 3-мерные (отдельные макроскопические дефекты объема)

0-мерные

- Вакансия - Отсутствие частицы на положенном месте решетки
- Междоузельная частица - Присутствие частицы собственного вещества в пустом пространстве между узлами
- Дефект по Френкелю - Перемещение собственной частицы из узла в междоузельное пространство решетки
- Дефект по Шоттки - Перемещение пары разноименно заряженных собственных частиц из узлов без образования междоузельной дислокации (в ионных соединениях)
- Примесь замещения - Частица примесного вещества заменила частицу собственного вещества в узле решетки
- Примесь внедрения - Частица примесного вещества попала в пространство между узлами решетки

1-мерные

- Продольная дислокация - Отсутствие части плоскости, ее место огибается соседними плоскостями
- Винтовая дислокация - Частичный сдвиг плоскостей в продольном направлении при сохранении связи между ними
- Дисклинация - Вклинивание дополнительной части решетки, приводит к скручиванию плоскостей в конусы

2-мерные

- Границы зерен - Поверхность столкновения множества зон роста с различным взаимным положением решеток, решетки не соединены
- Перегиб - Множество продольных дислокаций в пределах нескольких соседних плоскостей
- Кручение - Множество винтовых дислокаций в пределах нескольких соседних плоскостей
- Дефект упаковки - Множество вакансий в одной плоскости, приводит к нарушению порядка следования слоев, иногда частичному
- Двойниковая граница - Поверхность столкновения зон роста с зеркально-симметричным положением решеток, решетки объединены перешейком или общими частицами
- Межфазная граница - Поверхность столкновения зон роста с обратным порядком расположения частиц или слоев, решетки не соединены
- "Ступеньки" - Появление над ровным поверхностным слоем кристалла дополнительного, имеющего меньшую площадь

3-мерные

- Трещины - Разрыв решетки в больших масштабах
- Поры - Локальный разрыв решетки
- Включения - Внедрение пузырьков и макроскопических примесей

Влияние дефектов

- Присутствие любых дефектов приводит к увеличению энергии решетки по сравнению с идеальной. На макроуровне такие изменения могут иметь совершенно необычные последствия.
- Дислокации и дисклинации увеличивают хрупкость материала при кратковременном сильном воздействии, но в то же время придают ему твердость и способность выдерживать длительные нагрузки. Присутствие макропримесей дает обратный эффект.
- Примеси внедрения и вакансии сильно влияют на электрическую и магнитную проницаемости вещества, поляризационные свойства, вызывают появление окраски, явления сегнето-, пьезо- и пирозлектричества. Например, примеси некоторых веществ превращают кремний в полупроводник, а кристаллы прозрачного корунда - в рубины и сапфиры.