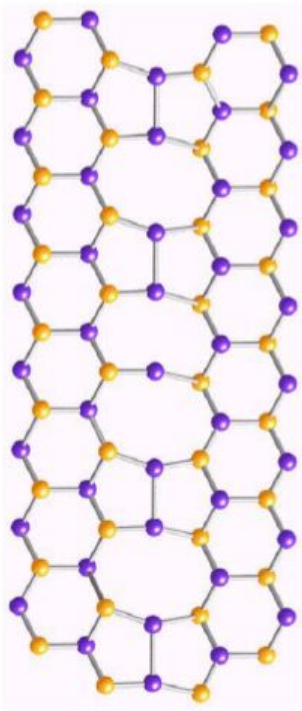


Физика реального кристалла

1. Вводная лекция

Профессор Б.И.Островский

`ostr@cea.ru`

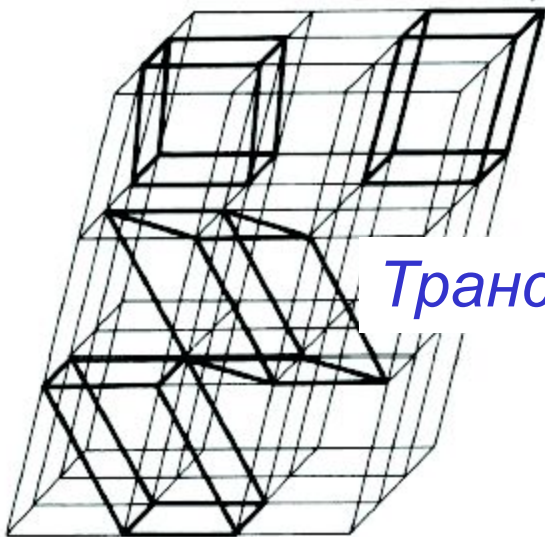


Цель курса

- изучение структуры и свойств кристаллов, содержащих различного рода дефекты;
- термодинамика **точечных дефектов**, их влияние на оптические и диэлектрические свойства кристаллов;
- **линейные дефекты - дислокации**, типы дислокаций в кристаллах, дислокационные реакции;
- **напряжения**, создаваемые дислокациями в кристаллах, **энергия дислокаций**, взаимодействие дислокаций друг с другом и с точечными дефектами;
- движение дислокаций, **пластическая деформация в кристаллах**, размножение дислокаций, активационные барьеры и стопоры, прочность кристаллов;
- основы современных методов исследования и контроля дефектов в кристаллах.

Кристаллические решетки

- *crystallus*, lat. quartz
- **Long-range order**, infinite periodic arrangement of atoms (ideal crystal)
- **Translation symmetry**:
 $\mathbf{T} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}$, operation which transforms an arbitrary lattice point into another
- $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ lattice vectors; the shortest ones: **primitive lattice vectors**



Трансляционная инвариантность решетки

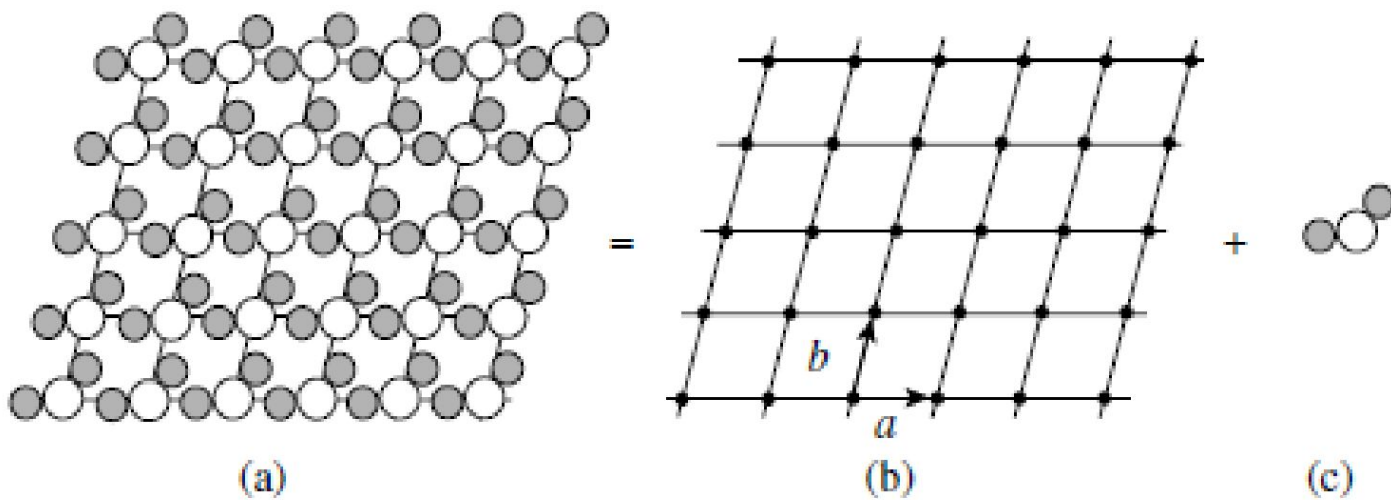
Дальний порядок

Different choices of a primitive unit cell
in the Bravais lattice

[Weißmantel, Haman 1989]

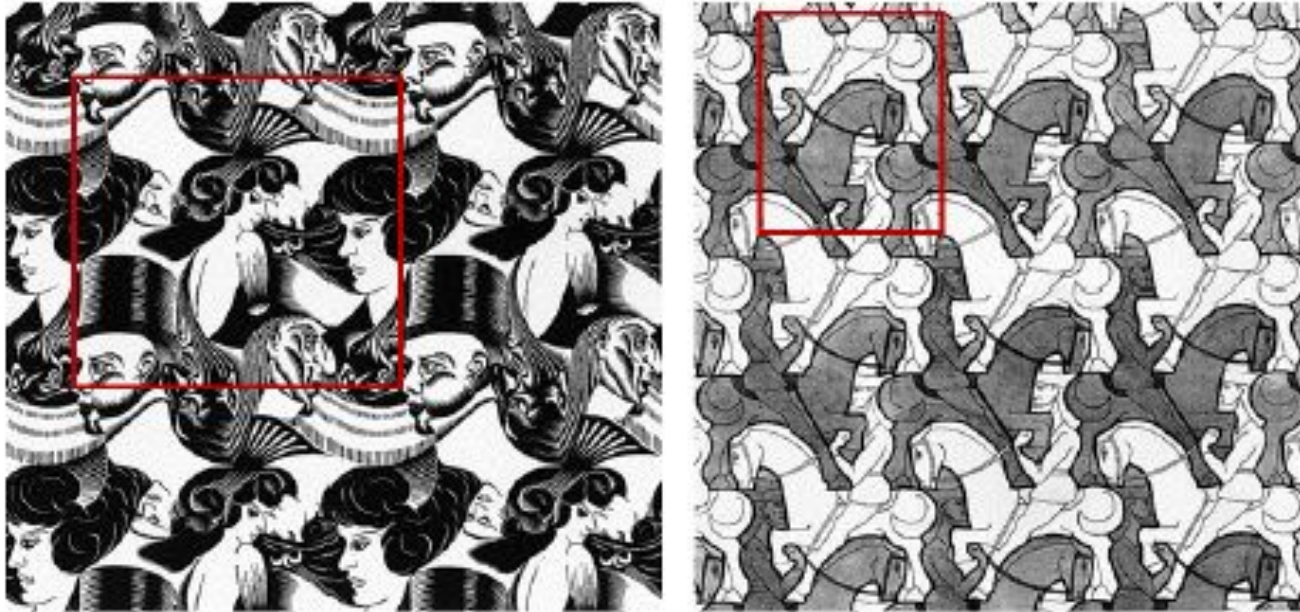
Кристаллическая структура = решетка + базис

Базис – один или несколько атомов или молекула



(a) A two-dimensional (2D) crystal consisting of two types of atoms (white and gray). (b) The 2D lattice is specified by two repeat vectors $\mathbf{a}$ and $\mathbf{b}$. (c) The basis contains three atoms.

Трансляционная симметрия



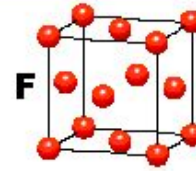
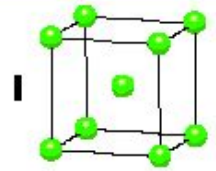
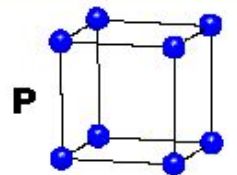
- *Lattice: infinite array of points in space; all points have identical surroundings*
- *Crystal structure: Associate each lattice point with one or more atoms*

Кристаллические решетки

CUBIC

$$a = b = c$$

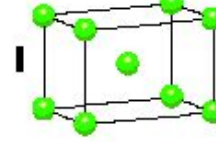
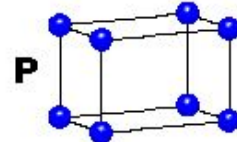
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$

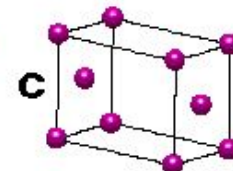
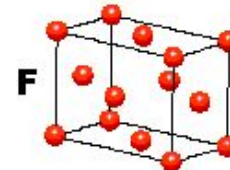
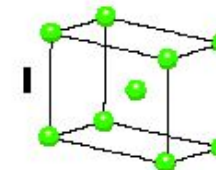
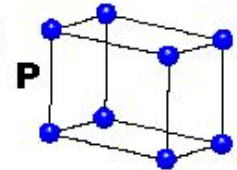
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

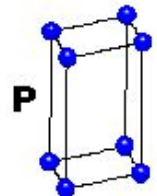


HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

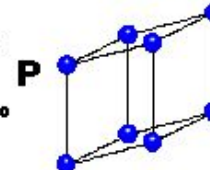
$$\gamma = 120^\circ$$



TRIGONAL

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

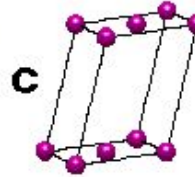
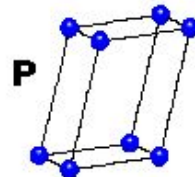


MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

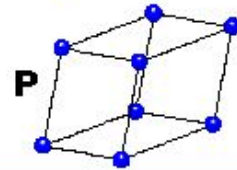
$$\beta \neq 120^\circ$$



TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



4 Types of Unit Cell

P = Primitive

I = Body-Centred

F = Face-Centred

C = Side-Centred

+

7 Crystal Classes

→ 14 Bravais Lattices

Связи в атомах и молекулах

- Ionic bonds



Coloumb interaction between oppositely charged ions

- Covalent bonds



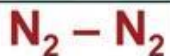
Shared valence electrons
(strength depends on distance)

- Metallic Bonds

See HB notes

Delocalised electrons spreading over the entire crystal

- Van der Waals bond



Dipole-dipole attraction
(fluctuating dipoles,
1/1000 strength of covalent bonds)

Межатомные (межмолекулярные) силы



van der Waals	$< 4 \times 10^4$ J/mol
Metallic	$1 - 8.3 \times 10^5$ J/mol
Covalent	$5.2 \times 10^5 - 1.3 \times 10^6$ J/mol
Ionic	$6.3 \times 10^5 - 1.5 \times 10^6$ J/mol

Оценки энергий взаимодействия (в СГС):

Ионные кристаллы - электростатическая энергия взаимодействия зарядов на расстоянии $2 \text{ \AA} = 2 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ (NaCl - 2.8 \AA)

$$E = e^2/r = (4.8 \cdot 10^{-10})^2 / 2 \cdot 10^{-8} \approx 10^{-11} \text{ эрг} \approx 6 \text{ эВ} \quad (1 \text{ эВ} \approx 1.6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг})$$

Металлическая связь - энергия электрона, заключенного в «ящик» со стороной $a = 2 \text{ \AA}$ ($k = \pi/a$, волновое число)

$$E = E_k = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m \approx (10^{-27})^2 10 / (2 \cdot 10^{-8})^2 10^{-27} \approx 10^{-11} \text{ эрг} \approx 6 \text{ эВ}$$

Таблица констант, перевод единиц СИ в СГС, символы соотношений

Авогадро постоянная: $N_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ моль}^{-1}$.

Больцмана постоянная: $k_B = 1,381 \times 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1} = 1,381 \times 10^{-16} \text{ эрг} \cdot \text{град}^{-1}$.

Элементарный заряд: $e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ Кл} = 4,803 \times 10^{-10} \text{ СГСЭ}$.

Планка постоянная: $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} = 6,626 \times 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}$.

Электрическая постоянная: $\epsilon_0 = 8,854 \times 10^{-12} \text{ Кл}^2 \cdot \text{Дж}^{-1} \text{ J} \cdot \text{м}^{-1} = 1 \text{ ед. СГСЭ}$.

$1 \text{ эВ} = 1,602 \times 10^{-12} \text{ эрг} = 1,602 \times 10^{-19} \text{ Дж}$.

$1 k_B T = 4,12 \times 10^{-14} \text{ эрг} = 4,12 \times 10^{-21} \text{ Дж} \approx \frac{1}{40} \text{ эВ}$ при $T = 298 \text{ К}$.

$1 \text{ кал} = 4,1868 \text{ Дж}$.

$1 = 23.042 \text{ ккал/моль} = 96,472 \text{ кДж/моль}$.

$1 \text{ Дж} = 10^7 \text{ эрг} = 0,2388 \text{ кал} = 6.242 \times 10^{18} \text{ эВ}$.

Электрический заряд: $1 \text{ ед. СГСЭ} = 3.336 \times 10^{-10} \text{ Кл}$.

$1 \text{ дин} = 10^{-5} \text{ Н}$.

$1 \text{ дин/см} = 1 \text{ эрг/см}^2 = 1 \text{ мН/м} = 1 \text{ мДж/м}^2$.

Электрический дипольный момент: $\text{Д} = \text{дебай}$;

$1 \text{ Д} = 10^{-18} \text{ ед. СГСЭ} \times \text{см} = 3,336 \times 10^{-20} \text{ Кл} \times \text{см}$.

Давление, напряжение: $\text{Па} = \text{паскаль}$

$1 \text{ Па} = 1 \text{ Н/м}^2 = 10 \text{ дин/см}^2$.

Дефекты решетки

Идеальный кристалл - бесконечный кристалл, атомы в покое, химически чистый

Совершенный кристалл - тепловые колебания решетки (фононы), электронные возбуждения, квазичастицы: экситоны, поляроны, магноны и т.д.; внутренние поля и деформации

Несовершенный (реальный) кристалл - поверхности, дефекты различной размерности (от нулевой до трехмерной)

Дефекты в кристаллах - устойчивые нарушения правильного расположения атомов или ионов в узлах кристаллической решетки

Классификация дефектов по их размерности

Классификацию дефектов решетки удобно проводить по чисто геометрическому признаку - по числу измерений, в которых нарушения совершенного строения кристалла простираются на макроскопические расстояния.

Нульмерные (точечные) дефекты — вакантные узлы решетки, атомы в междоузлиях, атомы в узлах «чужой» подрешетки, примесные атомы в различных положениях и т. д.

Одномерные (линейные) дефекты — цепочки точечных дефектов, а также дислокации — специфические дефекты, нарушающие правильное чередование атомных плоскостей.

Двухмерные (поверхностные) дефекты — поверхность кристалла, дефекты упаковки — неправильно уложенные слои атомов, границы блоков, зерен, двойников, доменов и т. д.

Трехмерные (объемные) дефекты — поры, включения, выделения и другие макроскопические образования.

Влияние дефектов на свойства кристаллов

Дефекты определяют многие свойства материалов - **так называемые, структурно чувствительные свойства**. В частности, к ним относятся проводимость полупроводников и ионных кристаллов. Многие изделия современной технологии зависят от условий диффузии в твердом состоянии, и, следовательно, от концентрации точечных дефектов.

Дефекты играют важную роль, например, в следующих приложениях:

Residual resistivity, conductivity in semiconductors, diffusion of impurity atoms, most mechanical properties around plastic deformation, optical and optoelectronic properties;

Crystal growth, recrystallization, phase changes.

Corrosion - a particularly badly understood part of defect science.

Reliability of products, lifetimes of minority carriers in semiconductors, and lifetime of products (e.g. chips).

Think of electromigration, cracks in steel, hydrogen embrittlement.

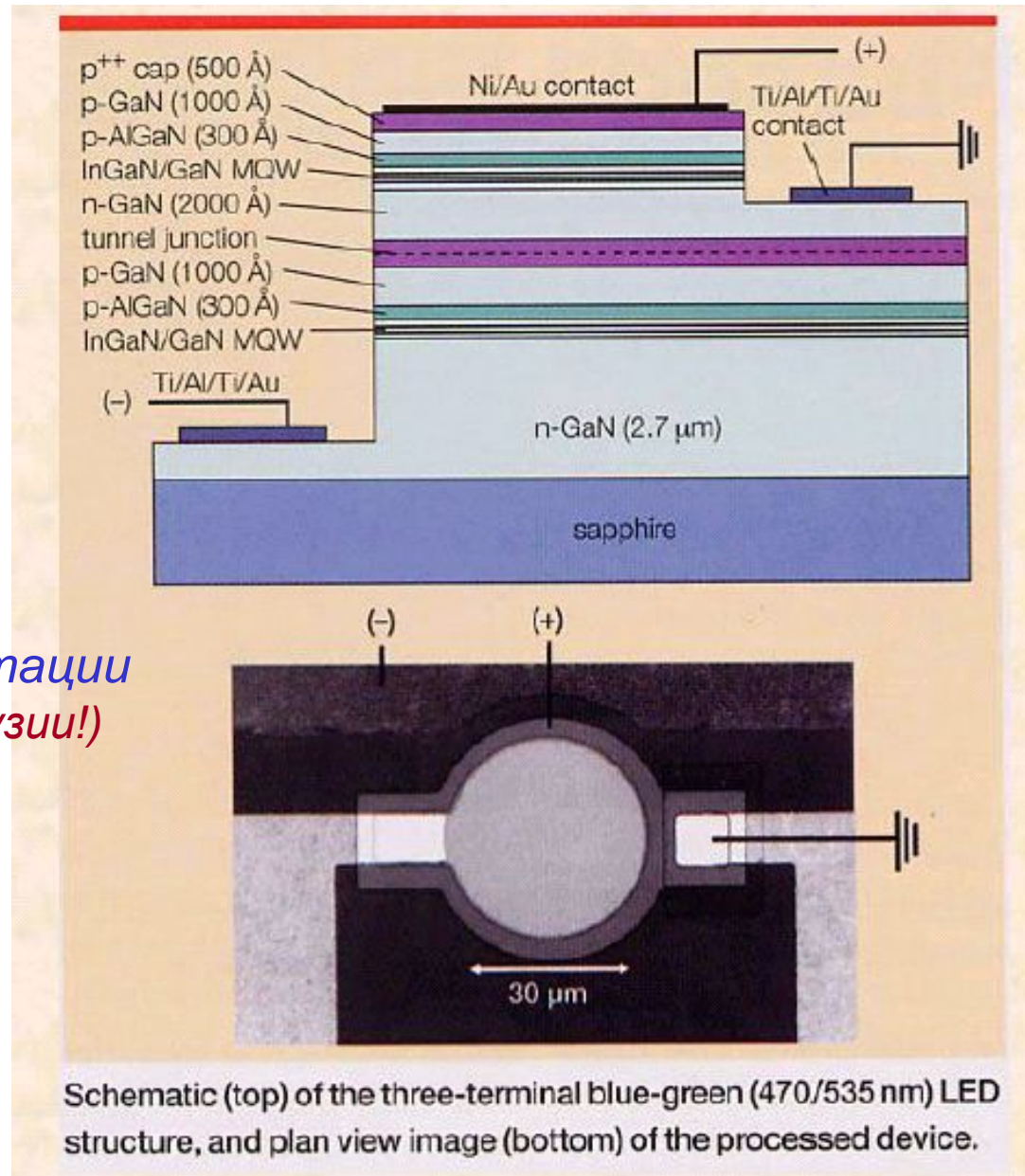
Properties of quantum systems (superconductors, quantum Hall effect)

Evolution of life (defects in **DNA** "crystals")

Значительная часть мировой технологии связана с манипуляциями дефектами. Сюда относятся вся индустрия, связанная с ковкой, штамповкой металлов, включая производство автомобилей, вооружений, а также полупроводниковая промышленность и многое другое.



Полупроводниковая гетероструктура - LED

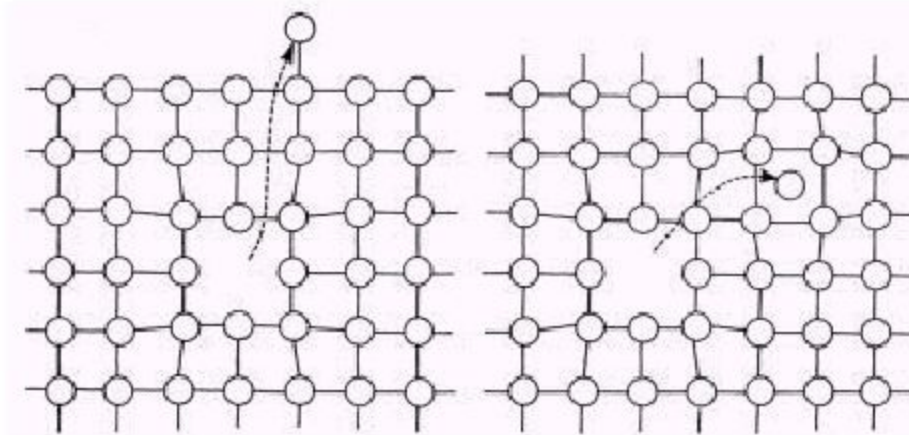


Использование
ионной имплантации
(контроль диффузии!)

Точечные дефекты: вакансии и межузельные атомы

2.1. Вакансии и межузельные атомы. *Вакансии*, т. е. незанятые узлы решетки, и *межузельные атомы*, т. е. атомы, внедренные в междоузлия, являются дефектами-антиподами: аннигиляция вакансии и межузельного атома восстанавливает правильность кристаллической решетки. Энергия образования вакансии определяется работой по переносу атома из узла решетки на поверхность кристалла и оказывается обычно порядка электронвольта. Энергия образования межузельного атома определяется работой по переносу атома с поверхности кристалла в междоузлие и достигает нескольких электрон-вольт

Вакансии

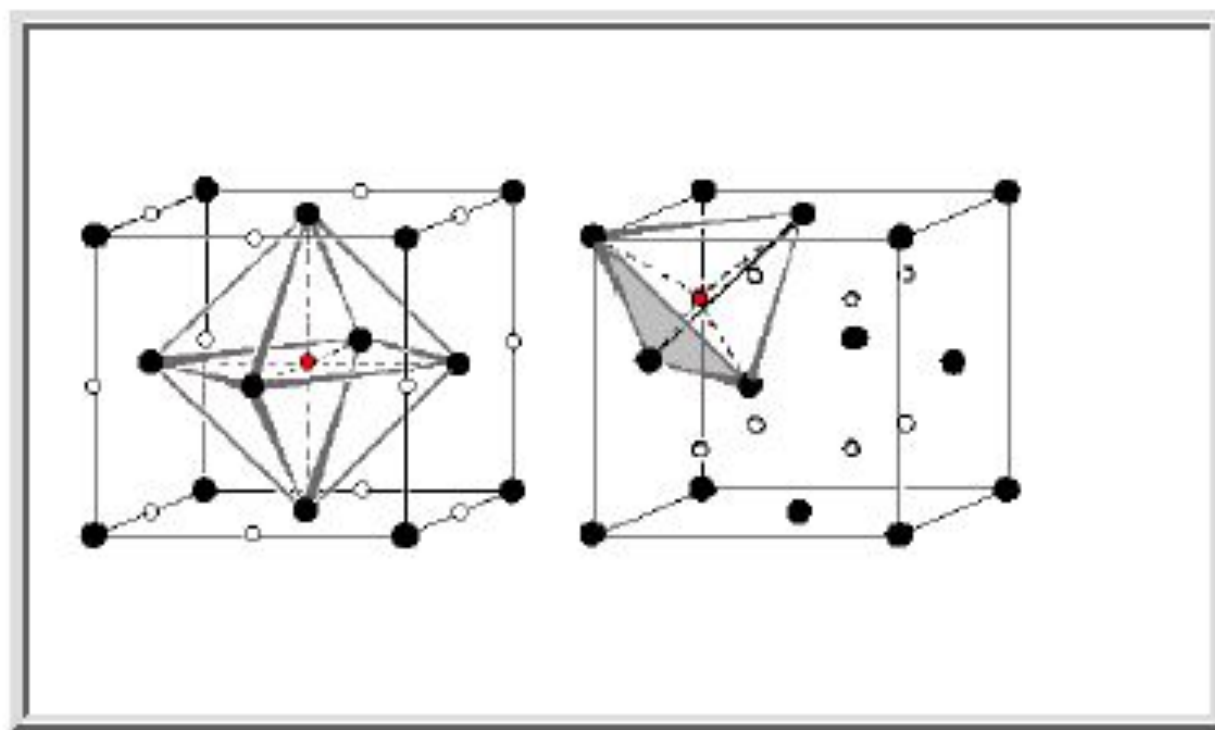


Дефект Шоттки

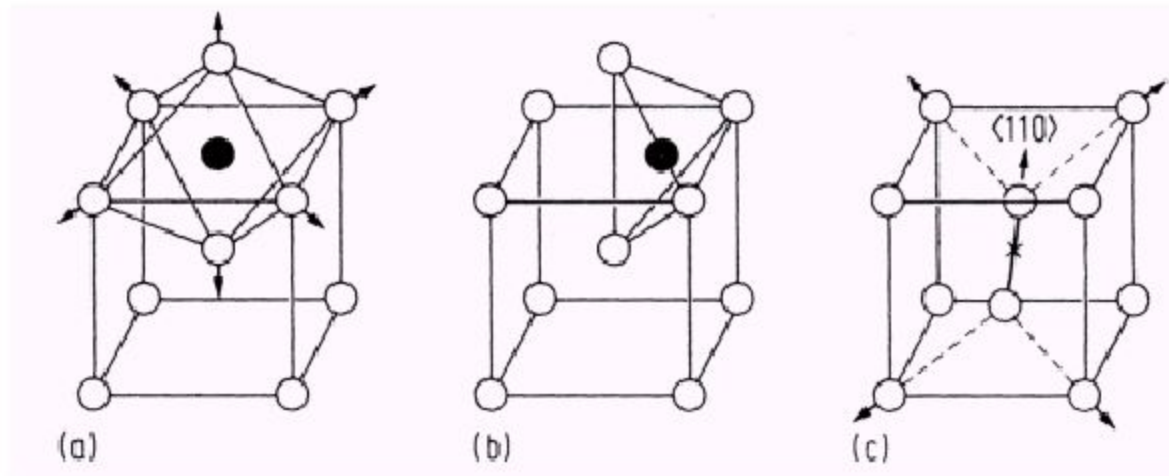
*Дефект Френкеля
(Френкелевская пара)*

- note: relaxation of lattice at vacancy
- vacancies:
 - dominating defect at high temperature
 - most important (primary) irradiation defect
 - generated during plastic deformation (but often not stable)
- in compounds and intermetallic phases: two different types of vacancies with different properties

*Тетраэдрические и октаэдрические
пустоты в гранецентрированном
кубическом кристалле*



Межузельные атомы в объемноцентрированном кубическом кристалле



- a) and b) interstitial in octahedral and tetrahedral position in a bcc crystal (bcc... body centered cubic)
- c) interstitial as dumbbell (deutsch: Hantel)

- interstitial atoms are often small (e.g. B, C, N, O in metals)
- often built-in in octahedral position (C in Fe): lattice distortion leads to increased hardness
- H is always built-in as interstitial

Термодинамика образования точечных дефектов

Возможность существования дефектов со столь высокой энергией в условиях термодинамического равновесия объясняется тем, что образование точечных дефектов намного повышает энтропию кристалла. Из кристалла, содержащего N одинаковых атомов, можно удалить n атомов

$$C_N^n = \frac{N!}{n! (N - n)!}$$

различными способами. По формуле Больцмана соответствующее приращение конфигурационной энтропии равно

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

Если энергия образования одного дефекта равна E , то образование n дефектов при температуре T изменяет свободную энергию кристалла на

$$\Delta F = nE - T\Delta S. \quad (2)$$

Равновесная концентрация точечных дефектов

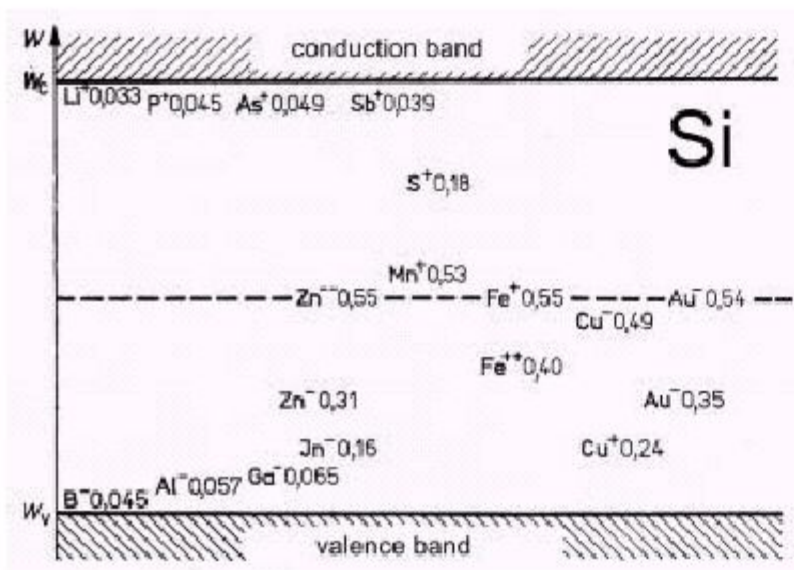
$$c = n/N \approx e^{-E/kT}$$

Для меди, например, энергия образования вакансии составляет около 1 эв, а межузельного атома — 3,4 эв. По формуле (3) концентрация вакансий при температуре плавления ($T = 1356^\circ \text{ K}$) должна достигать $2 \cdot 10^{-4}$, а межузельных атомов — всего $2 \cdot 10^{-13}$.

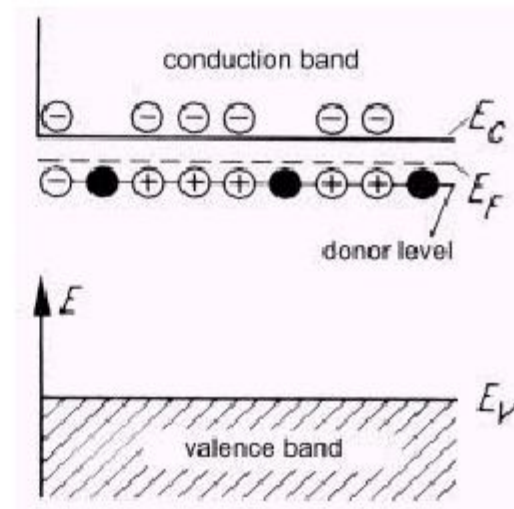
$$k_B T = 1.4 \cdot 10^{-16} \text{ эрг/K } 1200 \text{ K} = 1.6 \cdot 10^{-13} \text{ эрг} \approx 10^{-1} \text{ эв} \quad \longrightarrow \quad e^{-10}$$

Примесные состояния

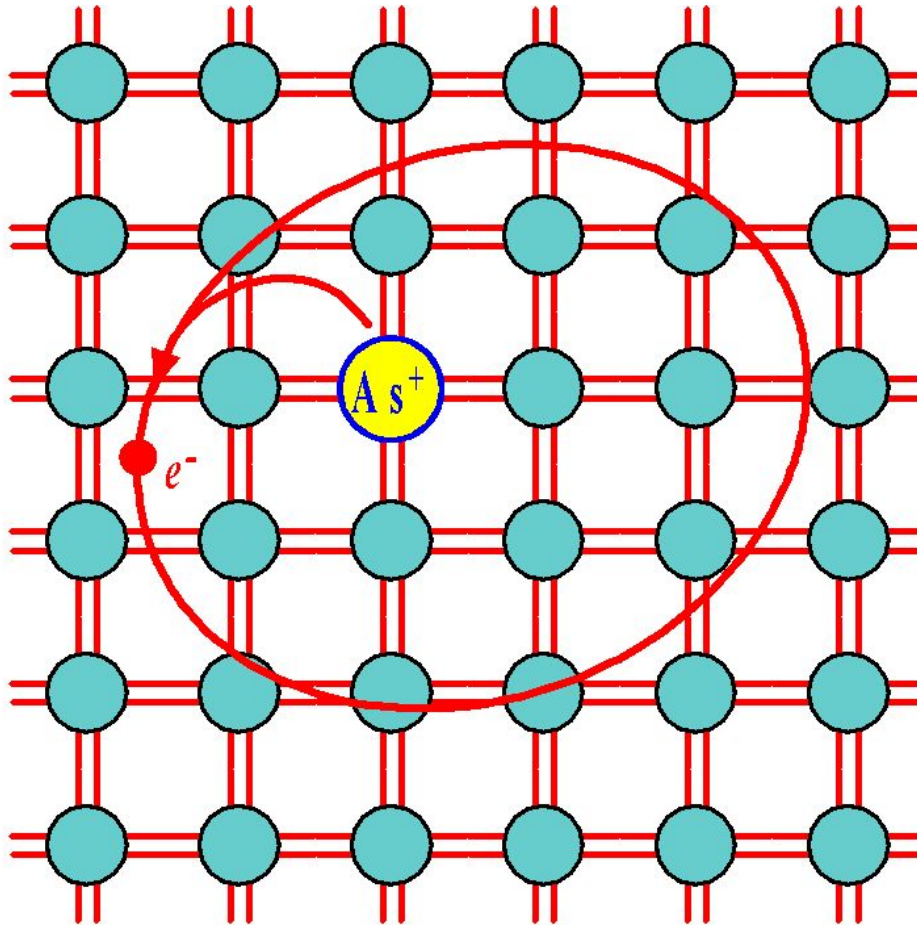
- important defect in semiconductors (but also in metals, remember C in Fe)
- intentionally used as dopants for the generation of carriers in high-resistive material (Si, GaAs)
- important acceptors: B in Si; Zn C in GaAs
- important donors: P and As in Si Te, Si in GaAs



dopant levels in Si



effect of a donor dopant



$$E \approx E_b/\epsilon^2$$

$$\epsilon \approx 10$$

Arsenic doped Si crystal. The four valence electrons of As allow it to bond just like Si but the fifth electron is left orbiting the As site. The energy required to release to free fifth-electron into the CB is very small.

ОКРАСКА КРИСТАЛЛОВ

Кристаллы, которые можно отнести к классу диэлектриков, при комнатной температуре обычно прозрачны. Пластинка такого монокристалла толщиной порядка 1 см кажется прозрачной на глаз, однако лишь в редких случаях ее прозрачность близка к прозрачности стекла. Прозрачность кристаллов обуславливается отсутствием в них сильных электронных или колебательных переходов в видимой области спектра электромагнитных волн от 7400 до 3600 Å, что соответствует интервалу энергий от 1,7 до 3,5 эВ. Рассмотрим коротко происхождение окраски, которая присуща некоторым типичным представителям твердых тел. Заметим попутно, что если поглощение света твердым телом невелико, то окраска, которую имеет порошок, состоящий из мелких кристаллов, целиком обусловлена рассеянным в нем светом.

ЦЕНТРЫ ОКРАСКИ

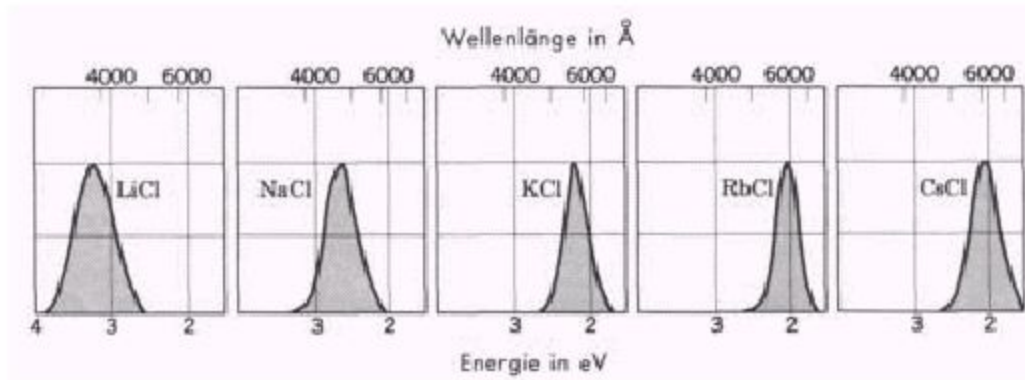
Чистые щелочно-галогидные кристаллы прозрачны в видимой области спектра. Окраска кристалла может быть вызвана несколькими способами:

- а) введением химических примесей;
- б) введением избыточного по сравнению со стехиометрическим составом количества ионов металла (можно нагреть кристалл в парах щелочного металла и затем быстро его охладить, — кристалл NaCl , нагреваемый в парах Na , становится желтым; кристалл KCl , нагреваемый в парах K , становится красным);
- в) облучением рентгеновскими и γ -лучами, бомбардировкой нейтронами и электронами;
- г) электролизом.

Центром окраски называется дефект кристаллической решетки, который поглощает видимый свет. Обычная вакансия не приводит к окрашиванию щелочно-галогидного кристалла, хотя и влияет на поглощение в ультрафиолетовой области спектра.

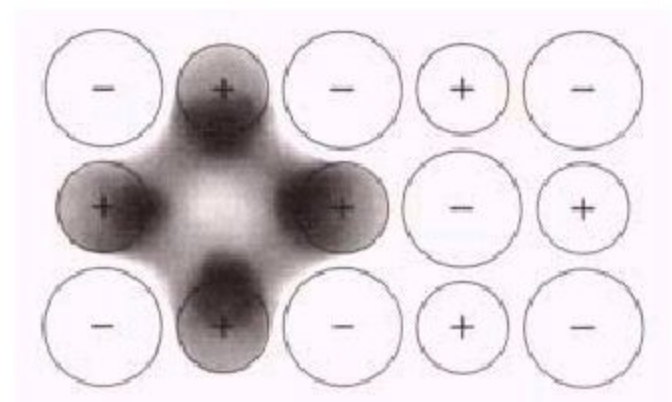
Центры окраски

- alkali halogenides (NaCl, KCl, ...) are clear and transparent
- coloring is obtained by point defects: **color centers**
- possible defects: chemical impurities, excess metallic ions (e.g. Na^+ in NaCl), and



so-called F-bands: optical absorption as function of wave length; a part of optical spectrum is cut, so the crystal appears colored

- the simple anion vacancy with a bound electron is the *F*-center (absorption in UV region)
- absorption: electric dipole transition to a bound excited state of the defect
- missing anion acts as positive charge and binds a valence electron (which was delocalized before)



Линейные дефекты: дислокации

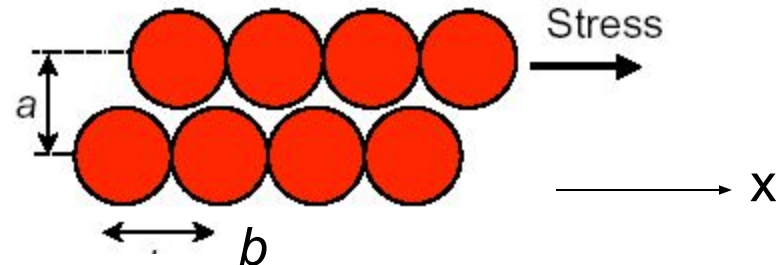
Лат. dislocatio - смещение, перемещение

Пластическая деформация кристаллов

- Existence of **dislocations** as line defects deduced as early as in the 1930ies (Orowan, Polanyi, Taylor independently in 1934)
- Important contributions 1930–50 by Dehlinger, Seitz, Burgers, Cottrell, Frank, ...
- Strong evidence for dislocations: comparison of theoretical and experimental shear stress (Frenkel)

Periodic shearing force to move the top atomic row:

$$\tau(x) = A \sin \frac{2\pi}{b} x$$



Для малых сдвиговых деформаций, $\varepsilon = x/a$, справедлив

закон Гука: $T = G\varepsilon = Gx/a$. При этом $T(x) \approx A2\pi x/b$

Max. τ is **theoretical critical shear stress**:

$$A = \frac{G b}{2\pi a} \quad i. e. \quad A \approx G/2\pi$$

Experimentally:

$$10^{-4} \text{ to } 10^{-8} G$$

Динамический деформационный эксперимент - растяжение образца с постоянной скоростью

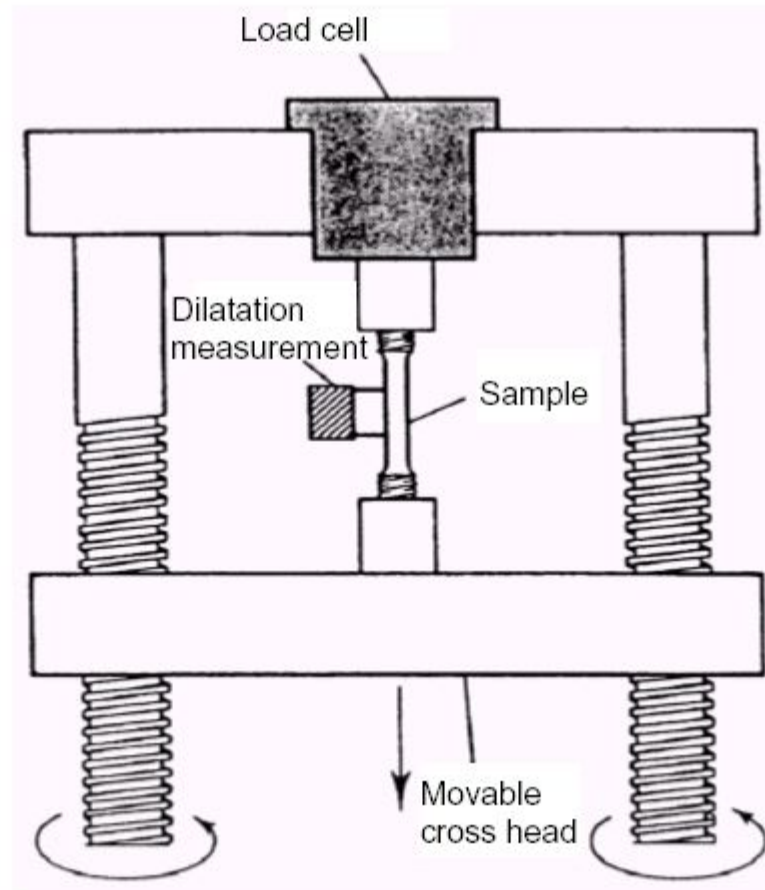
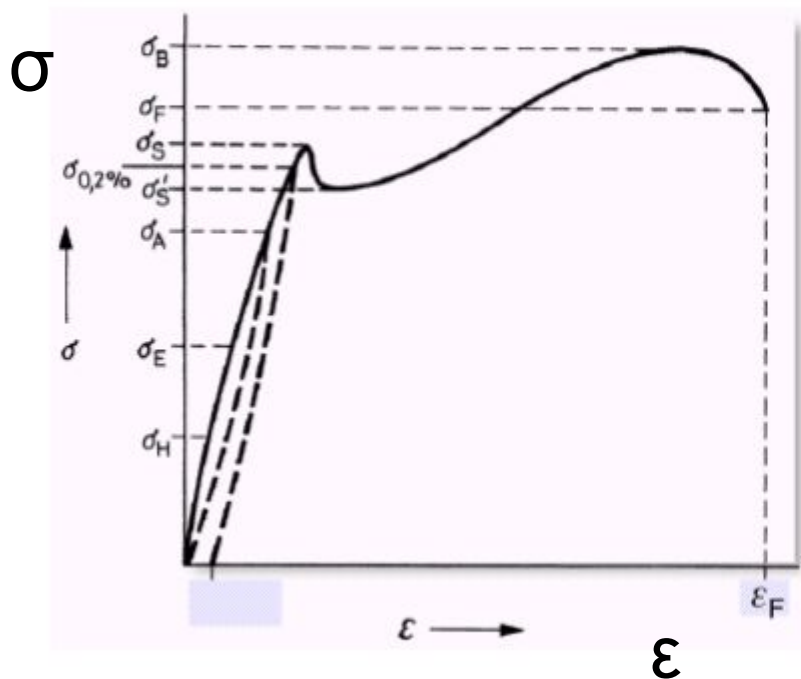


Диаграмма напряжение - деформация



$$\epsilon = \frac{\Delta l}{l_0} = \frac{l}{l_0} - 1$$

$$\sigma = \frac{F}{A_0}$$

Определение порога
текучести

Plot of the applied stress versus the strain or elongation

Типы дислокаций:

Краевые дислокации - *Edge Dislocation:*

A portion of an extra plane of atoms

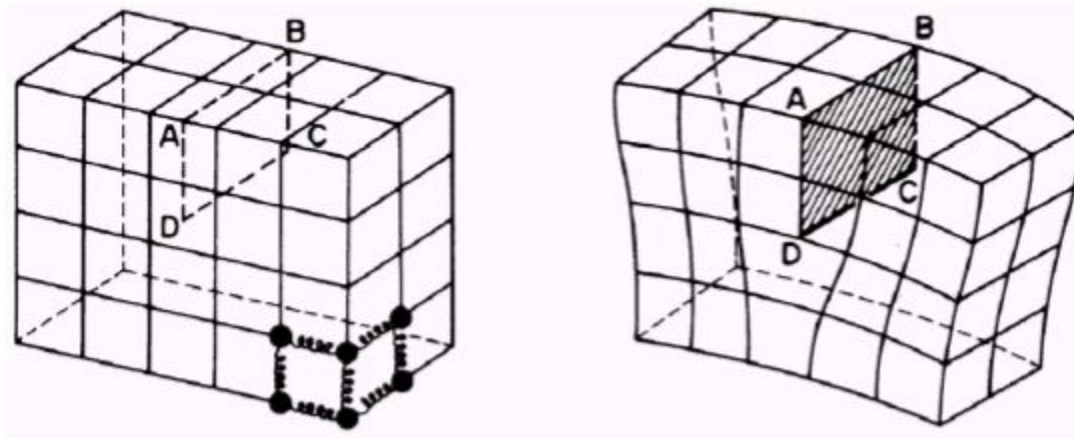
Винтовые дислокации - *Screw Dislocation:*

Helical atomic displacement around a
line extending through the crystal

Смешанные дислокации - *Mixed Dislocation:*

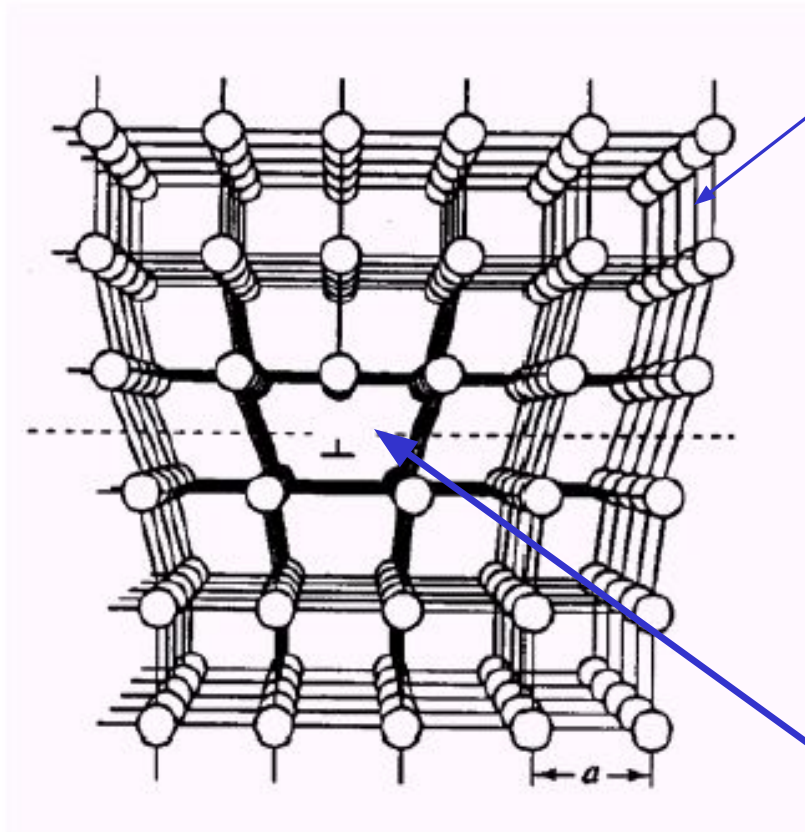
Some edge, some screw nature

Геометрия дислокаций



Создание напряженного состояния в месте внедрения дополнительной полуплоскости

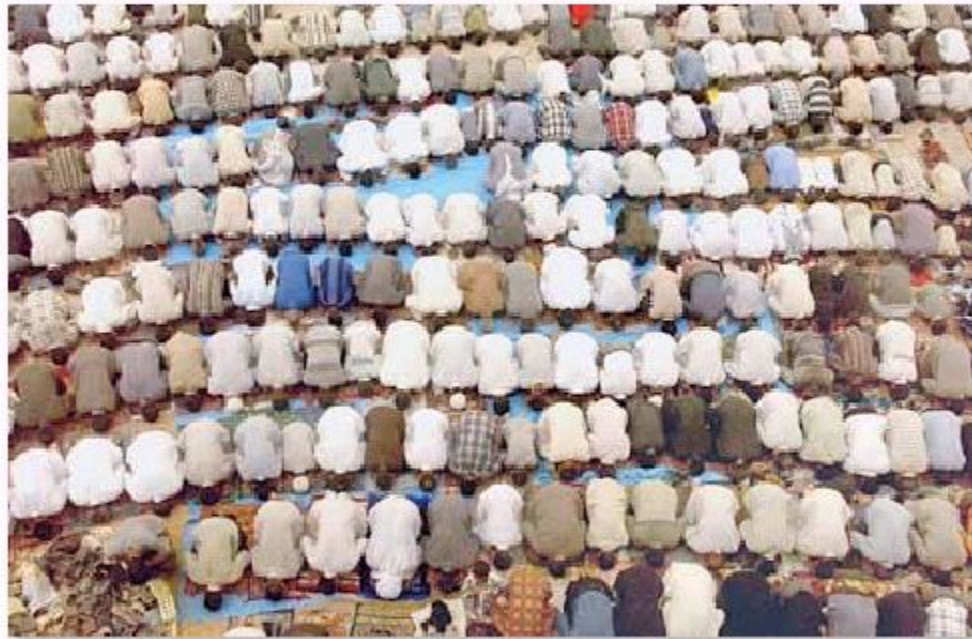
Краевая дислокация



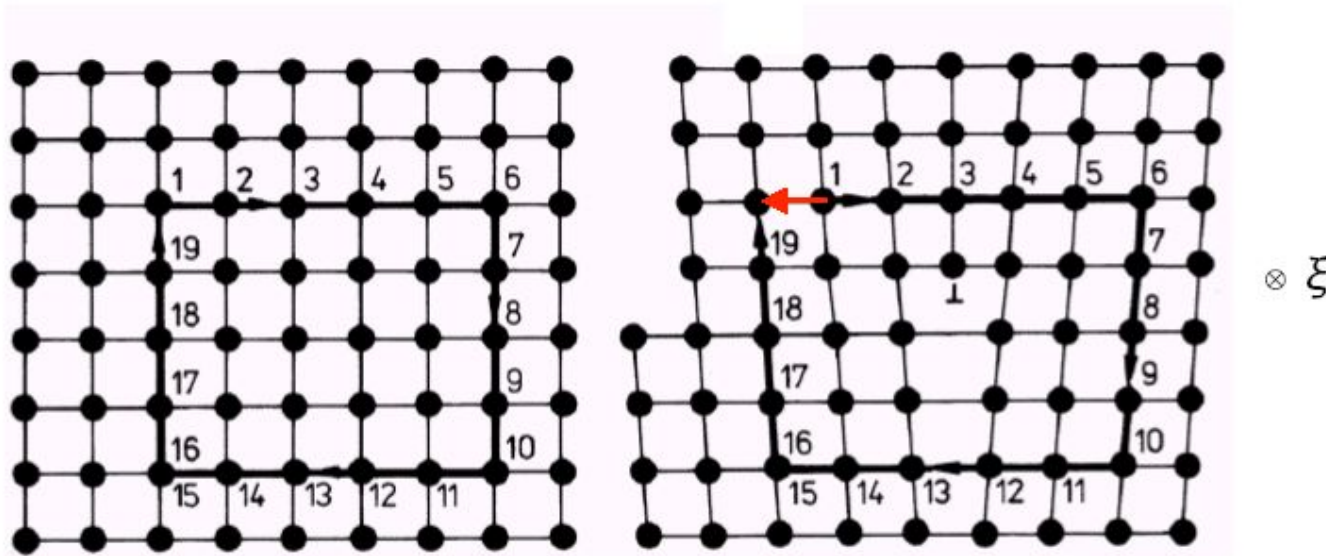
Слабые, упругие
искажения идеальной
решетки - «хороший
материал»

Ядро дислокации (??)
- сильные искажения решетки

Schiites



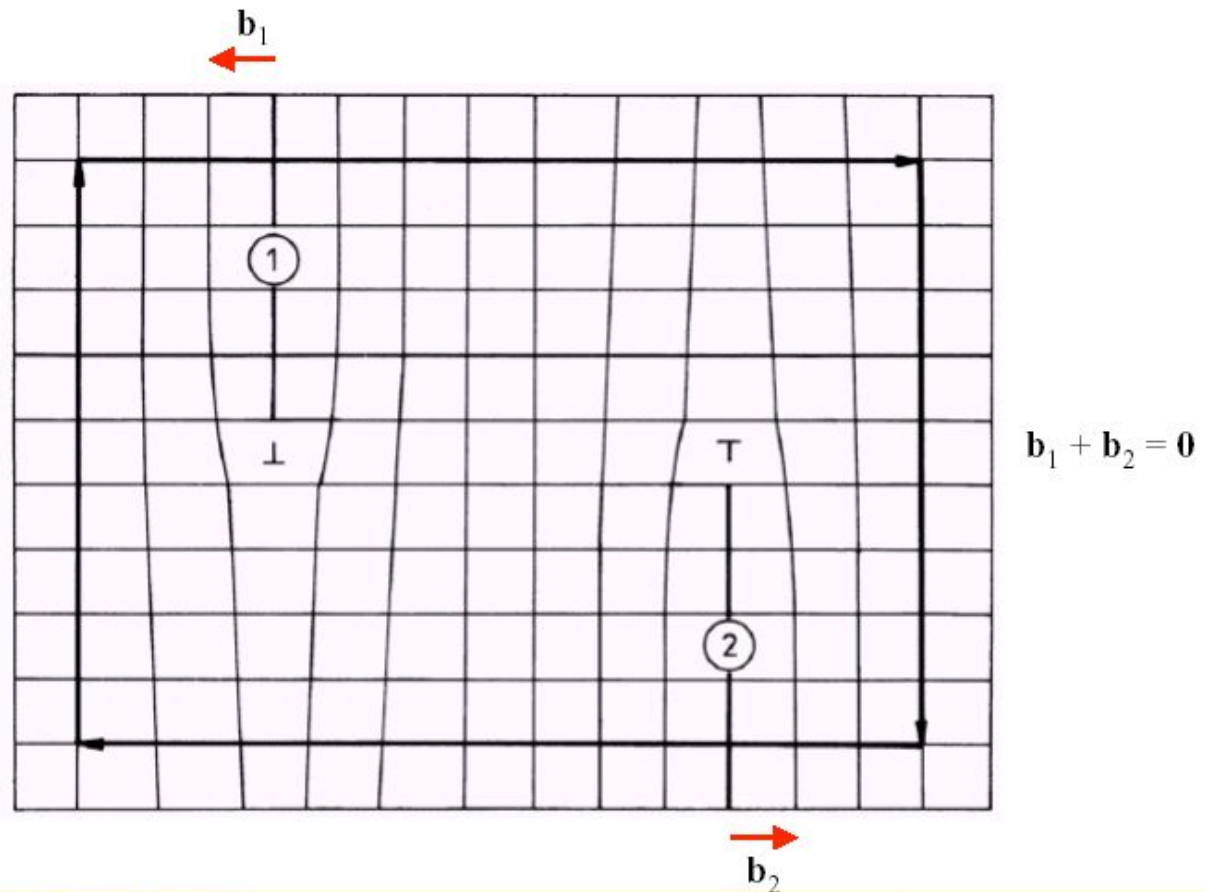
Контур Бюргерса



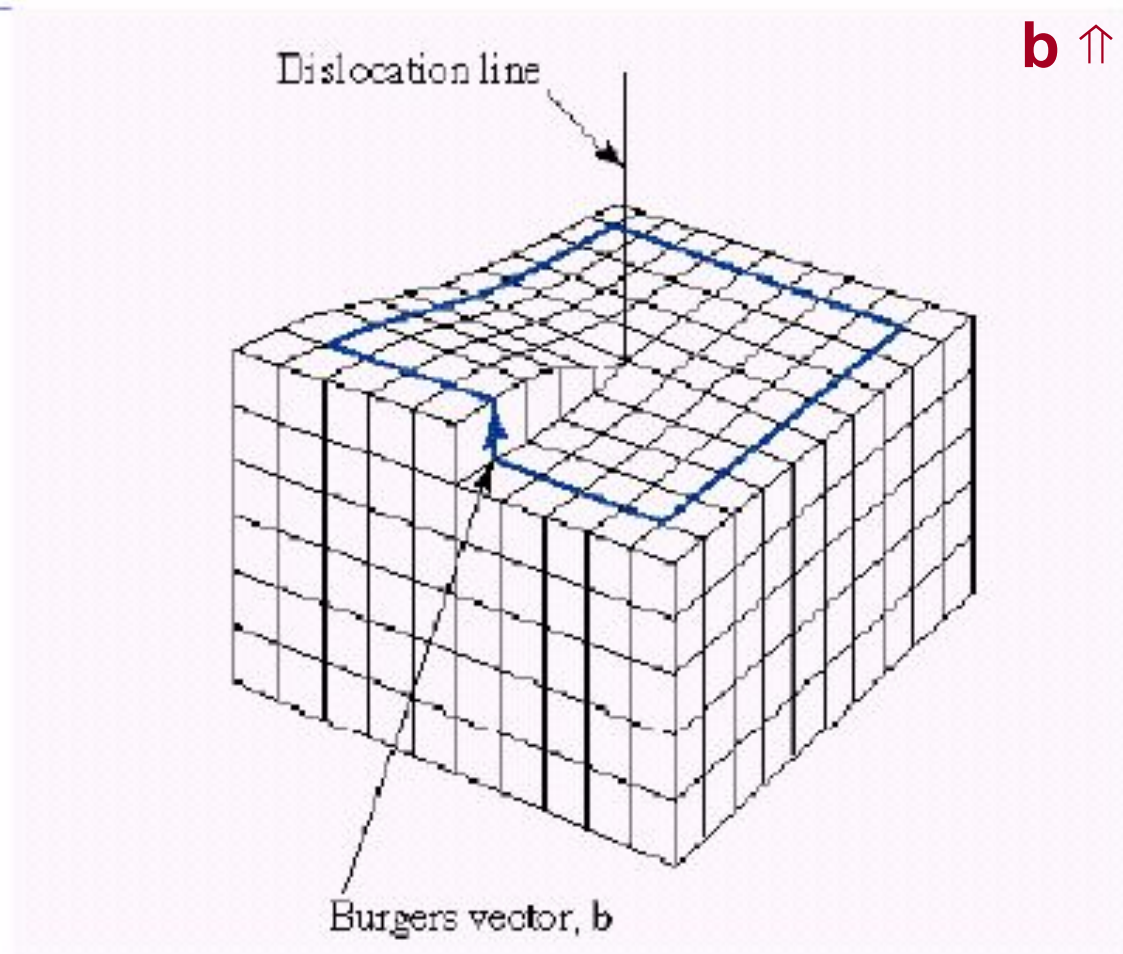
Вектор Бюргерса $\mathbf{b}$ $1 \rightarrow 19$

$\mathbf{b} \perp \xi$

Annihilation of dislocations with opposite Burgers vectors

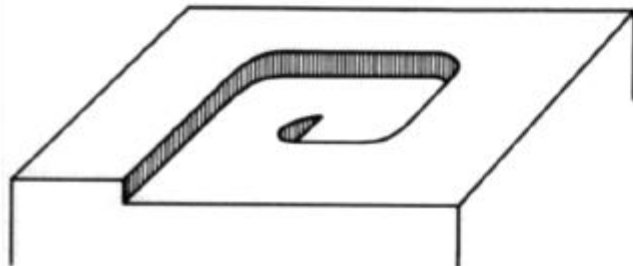
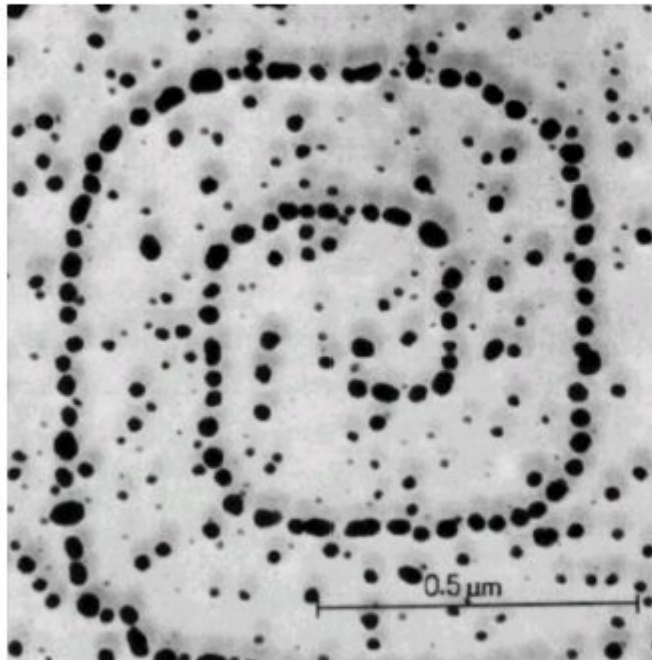


Винтовая дислокация



Спиральный рост кристаллов

Growth spirals



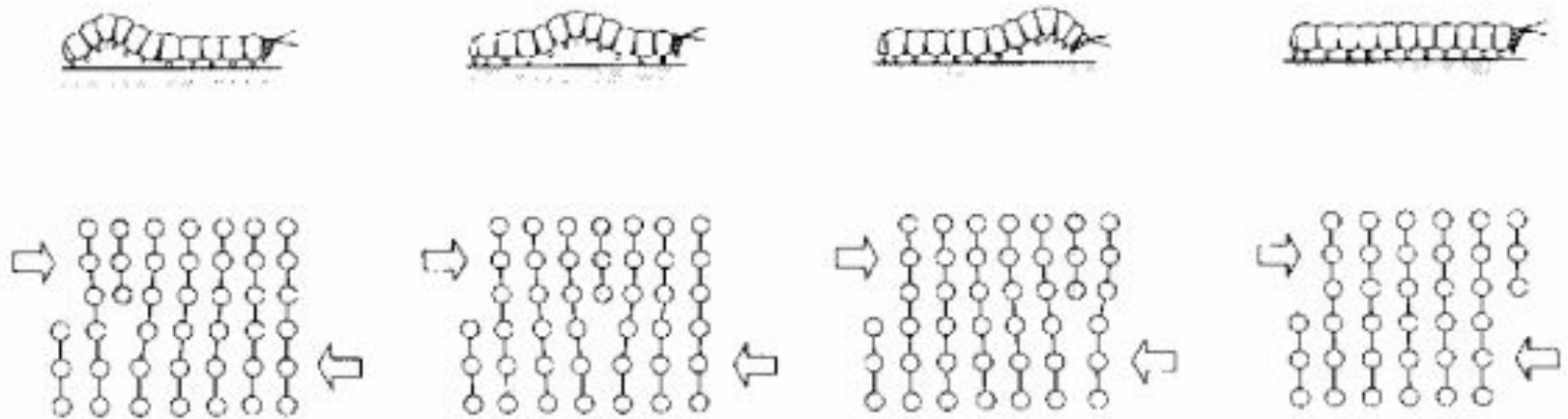
Decoration of a spiral monoatomic step on a KBr surface by evaporation of Ag. The growth spiral is caused by the presence of a screw dislocation.

[Bethge *et al.* 1987]

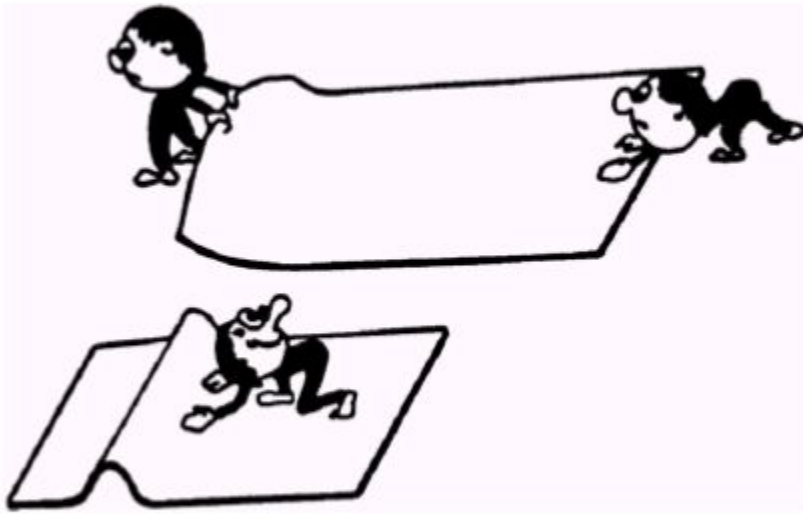
*Движение дислокаций является
основным механизмом пластической
деформации кристаллов*

исключения: нитевидные кристаллы, углеродные нанотрубки

- *Dislocations make slip 1000 times easier, which is why metals deform easily*
- *Slip of atom planes over each other due to deformation occurs one atom row at a time, analogous to caterpillar motion or moving a pile of bricks one at a time*



Dislocation concept



[E. Weber]

*Распространение одиночной
волны - солитон*

Исторический экскурс

Выплавка и ковка металлов

The smelting and forging of metals marks the beginning of civilization - the *art* of working metals was for thousands of years the major "high tech" industry of our ancestors.

- Trial and error over this period of time lead to an astonishing degree of perfection, as can be seen all around us and in many museums. In the state museum of **Schleswig-Holstein** in **Schleswig**, you may admire the damascene blades of our **Viking** ancestors.
- Two kinds of iron or steel were welded together and forged into a sword in an extremely complicated way; the process took several weeks of an expert smith's time. All this toil was necessary if you wanted a sword with better properties than those of the ingredients. The damascene technology, shrouded in mystery, was needed because the vikings didn't know a thing about defects in crystals - exactly like the Romans, Greek, Japanese (india) Indians, and everbody else in those times.

Меч катана

Япония,
период Эдо, 1676

Мастер Цуда
Сукэхиро,

Сталь, ковка
Длина клинка
97.5 см



Кузнечное дело, по сути - искусство манипуляции плотностью дислокаций, и, что даже более важно, умение влиять на скорость их движения по решетке.

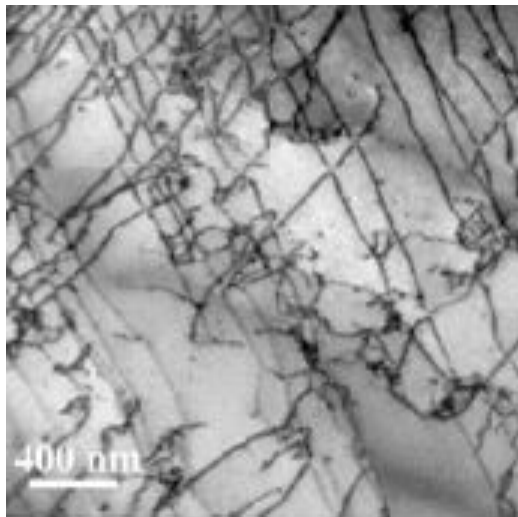
“ Изобретение “ дислокаций

Exactly *why* metals could be plastically deformed, and *why* the plastic deformation properties could be changed to a very large degree by forging (and magic?) without changing the chemical composition, was a mystery for thousands of years.

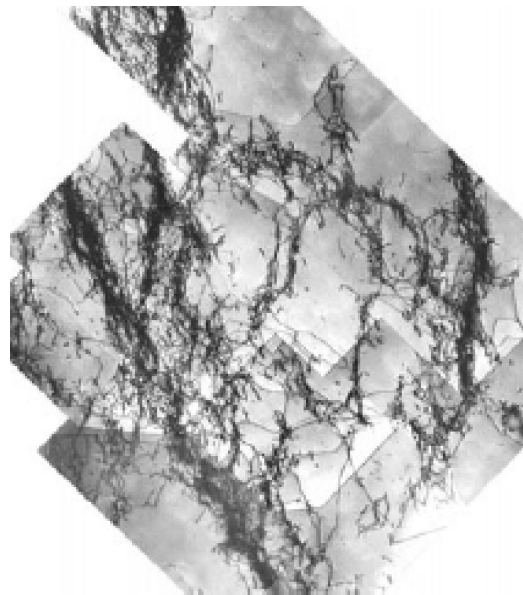
- No explanation was offered before 1934, when **Taylor**, **Orowan** and **Polyani** discovered (or invented?) independently the **dislocation**.

TEM - 1949 (!)

transmission electron microscopy



(a)

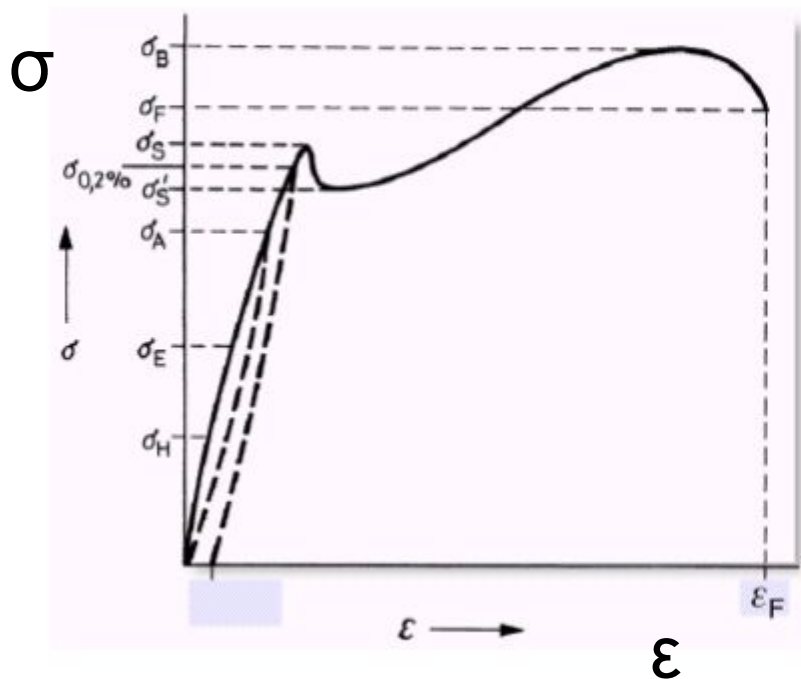


(b)

(a) TEM picture of dislocation structure in single crystal BCC molybdenum deformed at temperature 278K.

(b) Dislocations formed bundles (braids) in single crystal copper deformed at 77K.

Диаграмма напряжение - деформация



$$\epsilon = \frac{\Delta l}{l_0} = \frac{l}{l_0} - 1$$

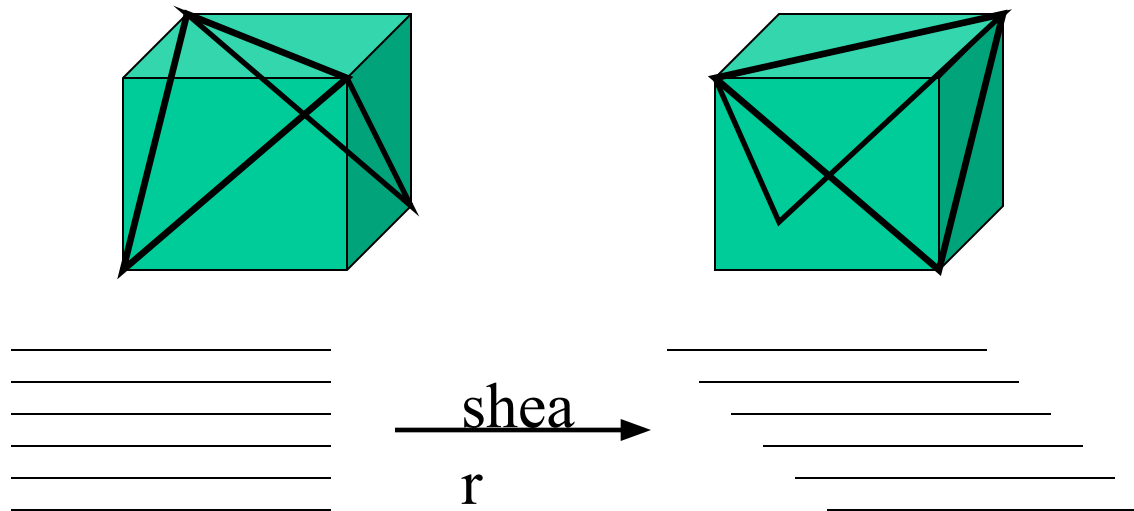
$$\sigma = \frac{F}{A_0}$$

Определение порога
текучести

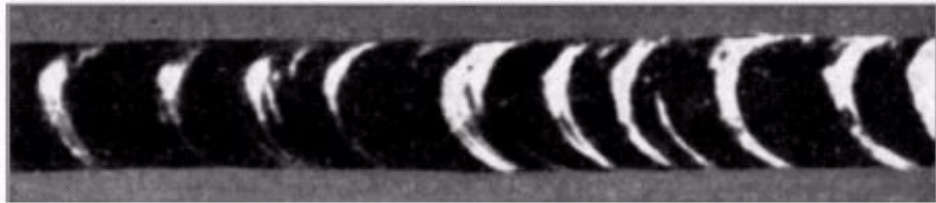
Plot of the applied stress versus the strain or elongation

Плоскости скольжения в кристаллах

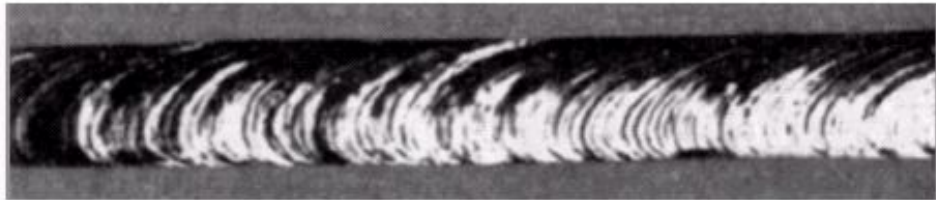
- Three common crystal structures in metals:
 - Face centered cubic (fcc): ABCABC... packing: Ni, Cu, Ag, Al, Au
 - Hexagonal close packed (hcp): ABABAB ... packing: Mg, Zn, Co, Ti
 - Body centered cubic (bcc): Fe, Cr, W, Ta, Mo
- Easy for close packed planes to slide over each other: **slip planes (plays an important role in determining deformation & strength)**



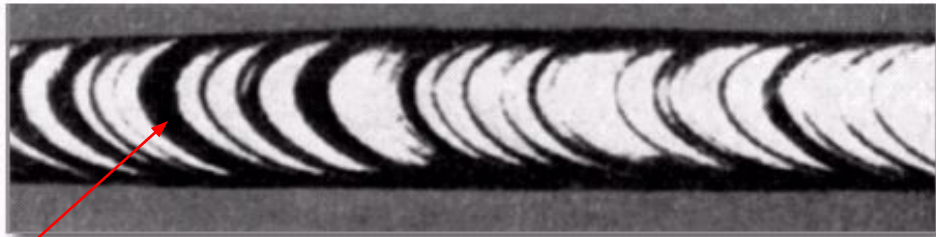
Эксперимент на растяжение



β -tin



Bismuth



Zinc

Macroscopic effects of dislocation motion in single crystalline metals plastically deformed in a tensile test

[Kleber 1990]

Плоскости скольжения

Совершенные кристаллы (?)



A silicon ingot is a single crystal of Si. Within the bulk of the crystal, the atoms are arranged on a well-defined periodical lattice. The crystal structure is that of **diamond**.

Плотность дислокаций
 $\approx 10^2 \text{ cm}^{-2}$

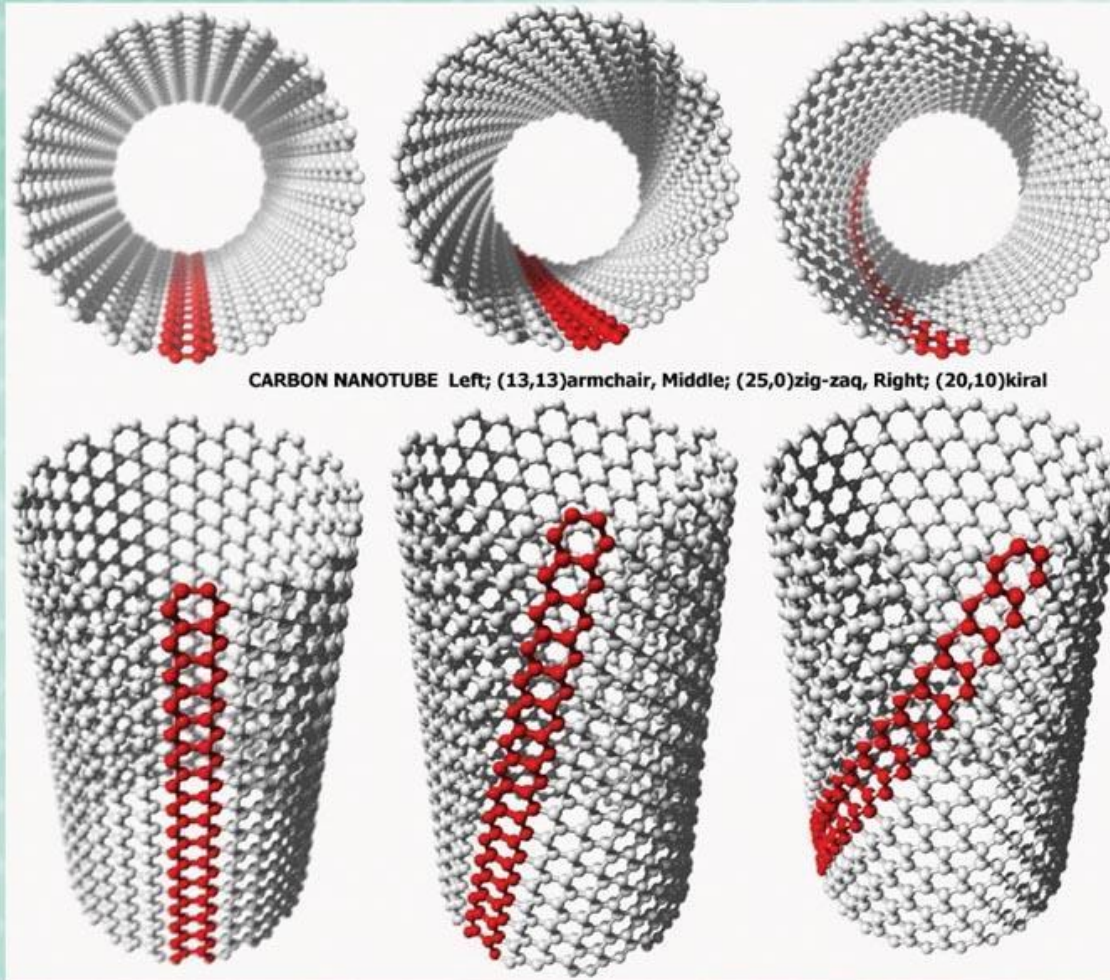
Typical numbers in well annealed metals 10^6 to 10^8 cm^{-2} ,
in semiconductors 10 to 10^5 cm^{-2} .

After plastic deformation 10^{12} cm^{-2} and above

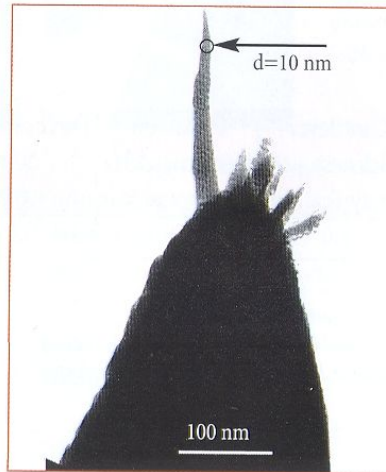
Углеродные нанотрубки – идеальный кристалл?



Peter Bøggild, MIC 2003



AFM Super Sharp Diamond-like Carbon Tips



Super sharp diamond-like carbon (DLC) tips* with typical curvature radius 1nm are extremely useful for obtaining high resolution on objects with sizes of several nanometers. DLC tips have very long lifetime due to the high material durability. To guarantee 20 nm working length of DLC tips TEM is used. 10% from total number of probes in the batch are selected for testing. At least 80% of those probes should have the only DLC tip which length is exceeded by 20nm others DLC tips on the same probe. In this case the whole batch is considered as passed the TEM test.

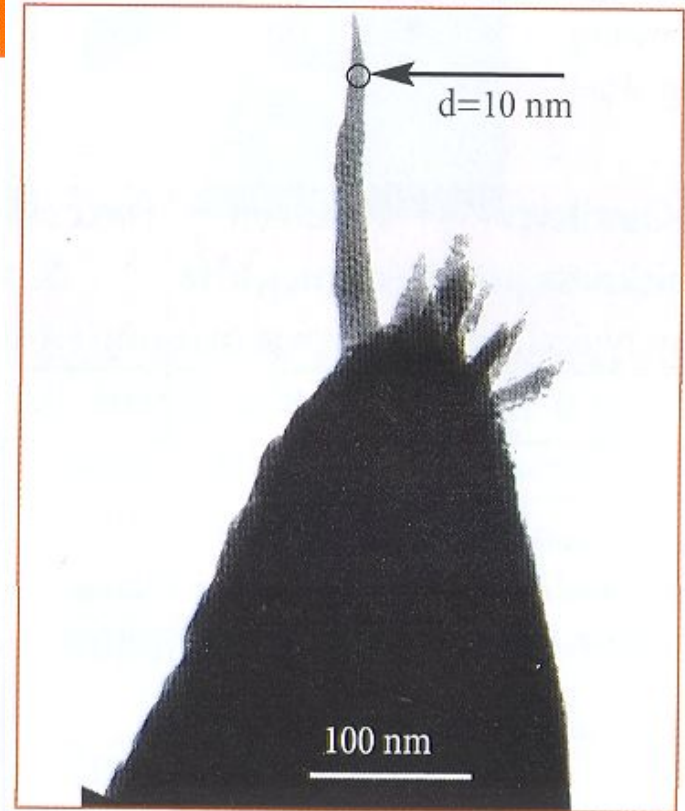
DLC tip specification:

Material - diamond-like carbon

Curvature radius — 1-3nm.

Working length — $\geq 20\text{nm}$

Probe series for growing - NSG01, NSG10**



whiskers – усы (нитевидные кристаллы)

Наблюдение дислокаций

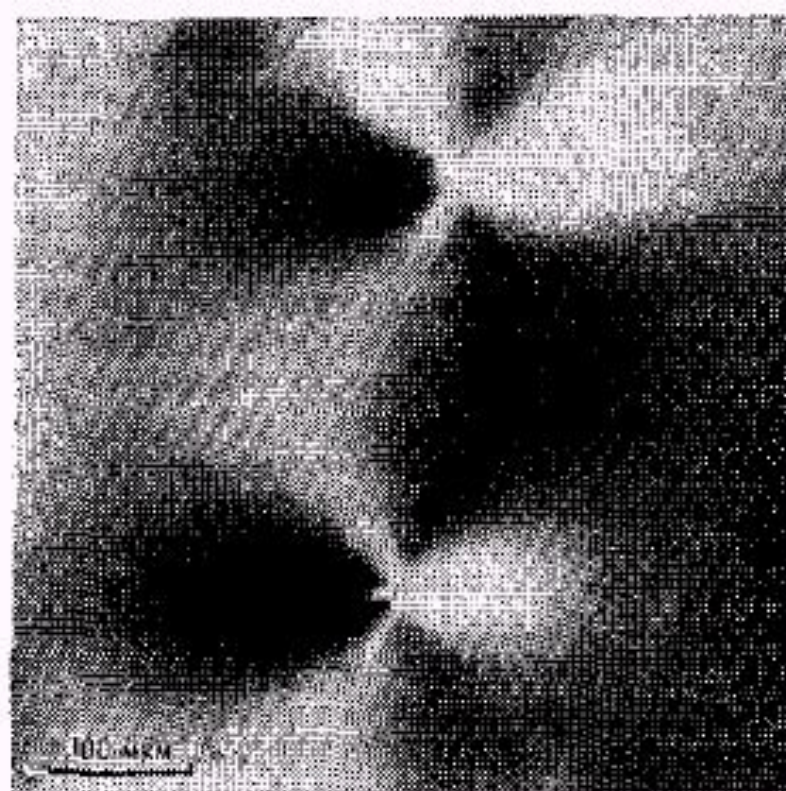
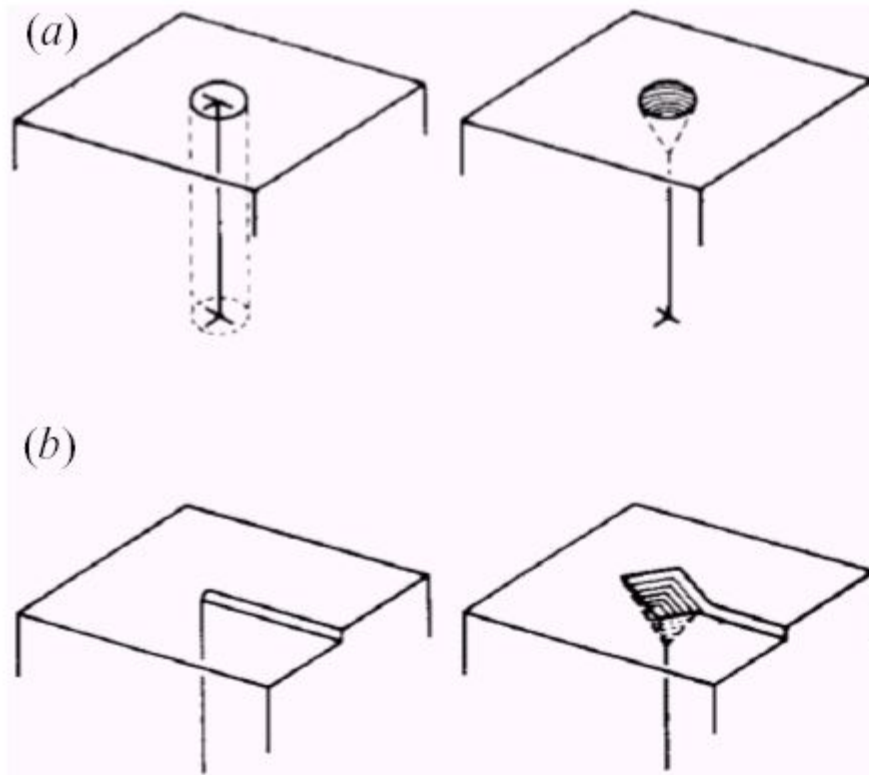


Рис. 3. Поля упругих напряжений вокруг краевых дислокаций в кристалле Si, выявленные по наблюдению фотоупругости; *линии дислокации перпендикулярны плоскости рисунка.*

Дислокационные ямки травления



Formation of etch pits at the intersection of dislocations with the surface.

(a) The cylinder around an edge dislocation represents the region with different chemical and physical properties.

(b) A conical pit forms due to preferential removal of atoms from the imperfect region. Emergent site of a screw dislocation. The pit forms due to the chemical resolution as a reverse process to crystal growth.

[Hull:93]

Избирательное травление

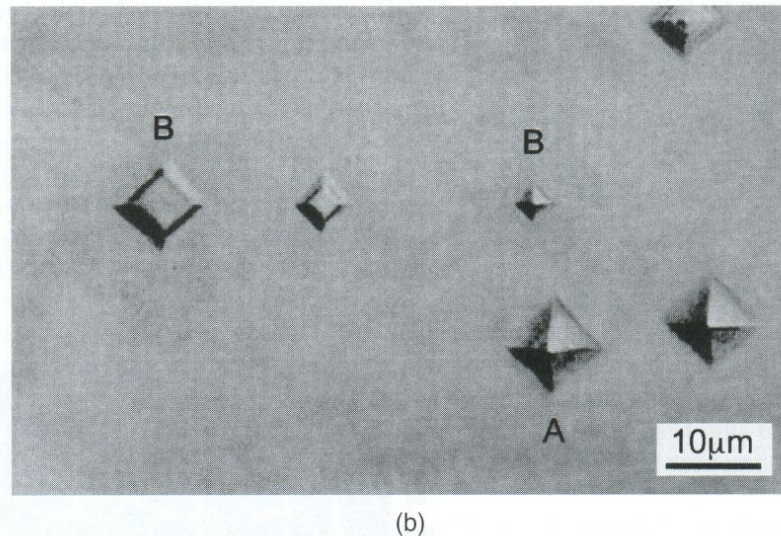
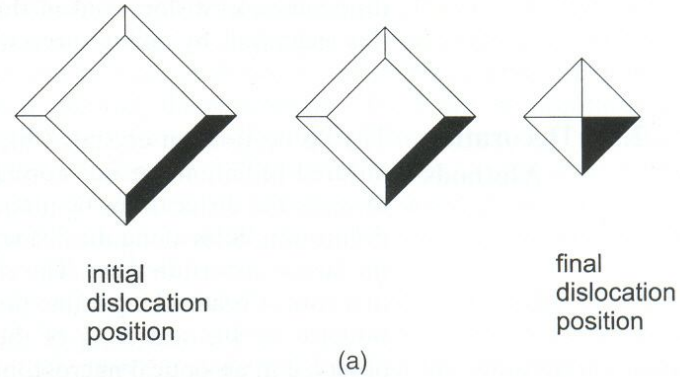


Figure 2.4 Etch pits produced on a lithium fluoride crystal. The crystal has been etched three times. The dislocation at *A* has not moved between each etching treatment and a large pyramid-shaped pit has formed. The dislocation revealed by the three pits *B* moved between etching treatments to the positions indicated by the pits. Subsequent etching of a pit after the dislocation has moved produces a flat bottom pit. (From Gilman and Johnston (1957), *Dislocations and Mechanical Properties of Crystals*, p. 116, Wiley.)

Декорирование

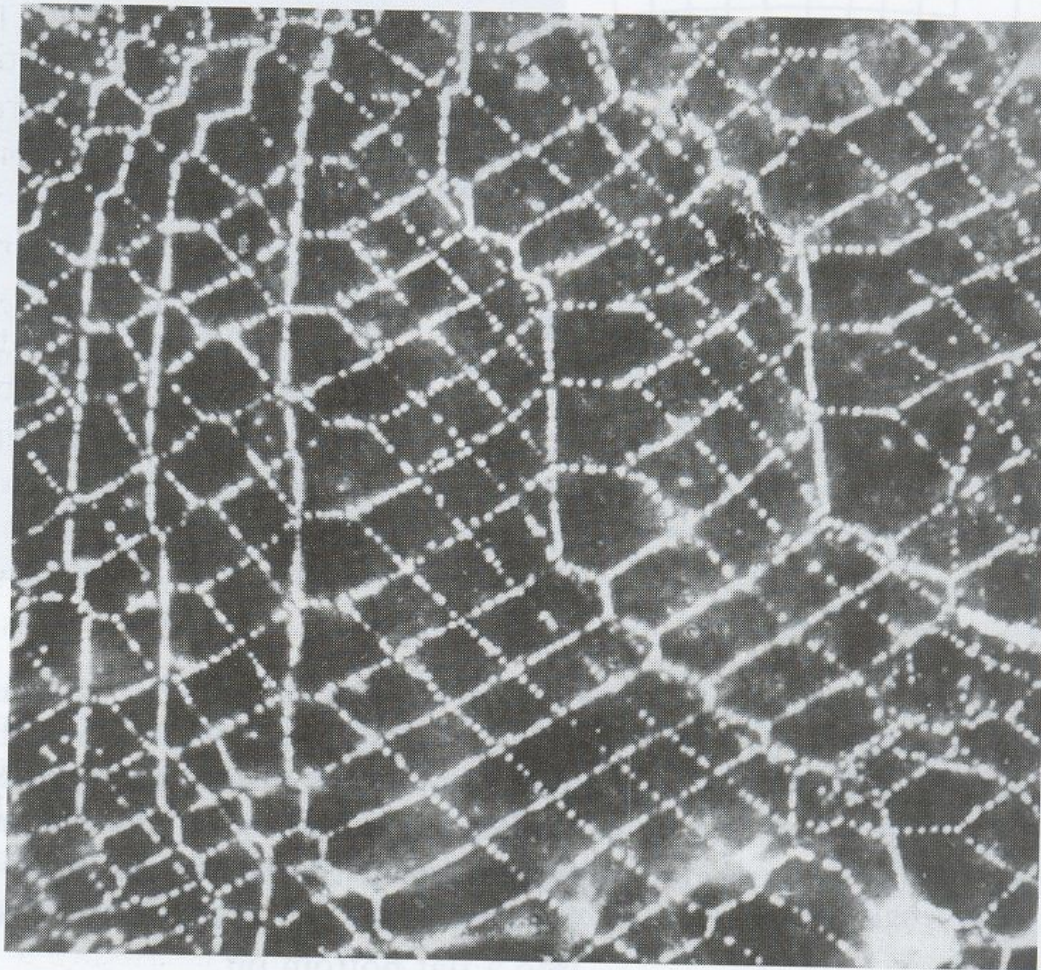
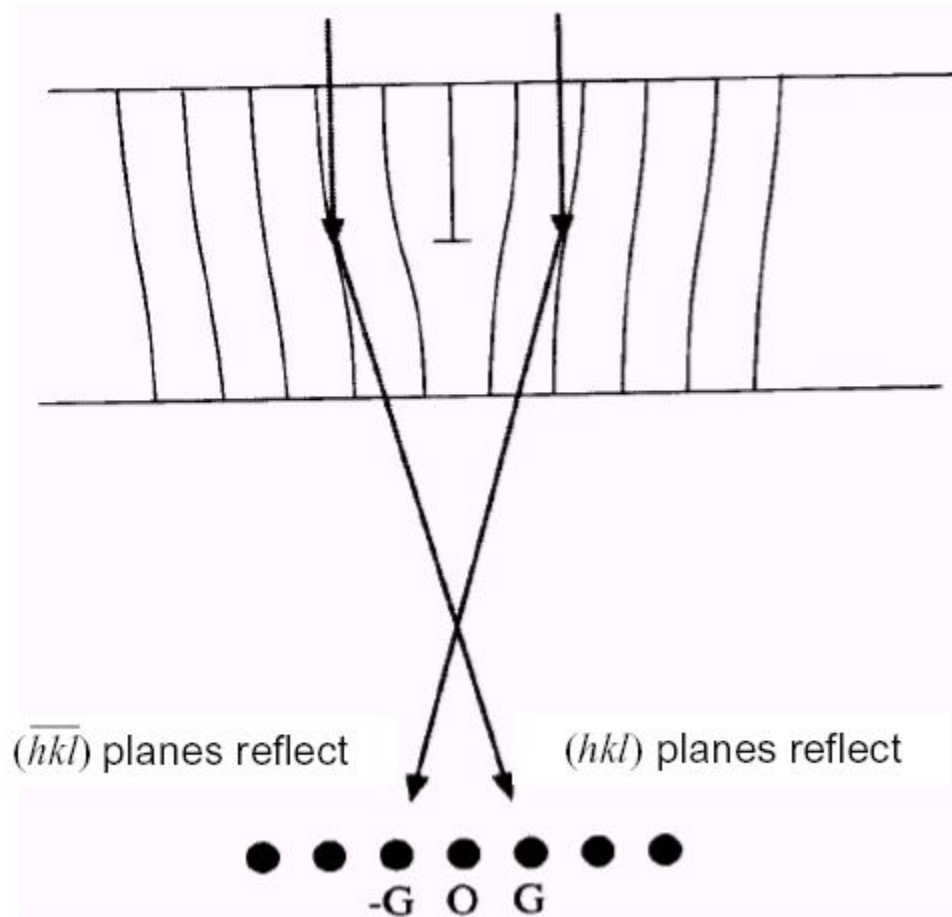


Figure 2.5 A thin crystal of KCl examined in an optical microscope. Particles of silver have precipitated on the dislocations, which are in the form of a network. Only part of the network is in focus. (From Amelinckx, *Acta Metall.* **6**, 34, 1958.)

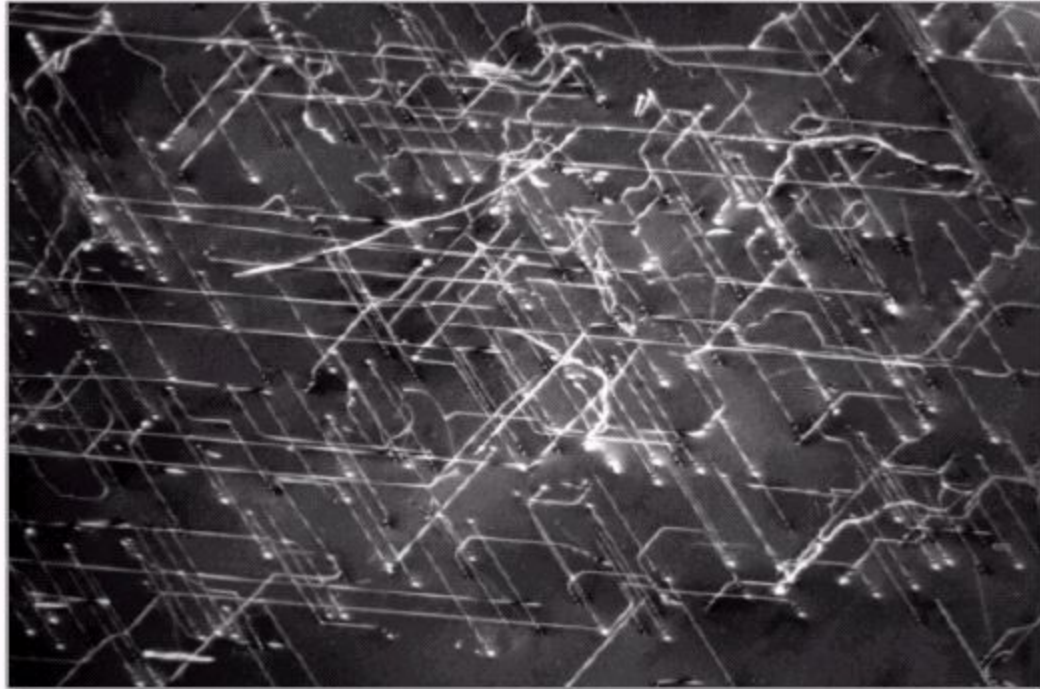
Dislocation imaging in TEM



TEM - transmission electron microscopy

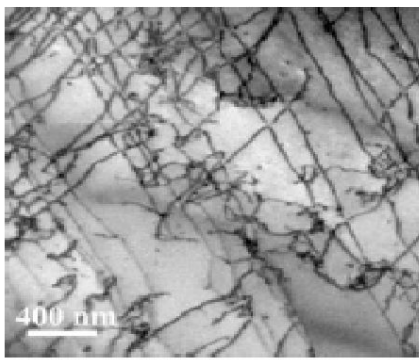
Электронная микроскопия на просвет

For a samples slightly tilted out of the Bragg position, only the lattice planes bended near the dislocations fulfil the Bragg condition.



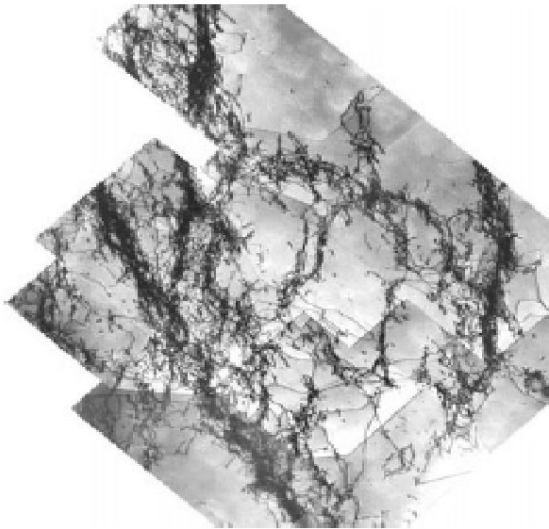
1 μm

TEM image of dislocations in silicon plastically deformed in a single-slip orientation up to a strain of 2 %



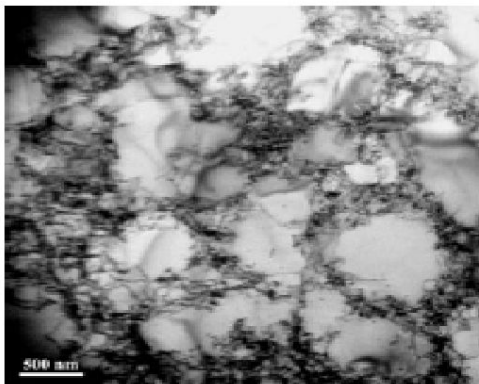
(a)

(a) A TEM picture of dislocation structure in pure single crystal BCC molybdenum deformed at temperature 278K (courtesy of L. L. Hsiung).



(b)

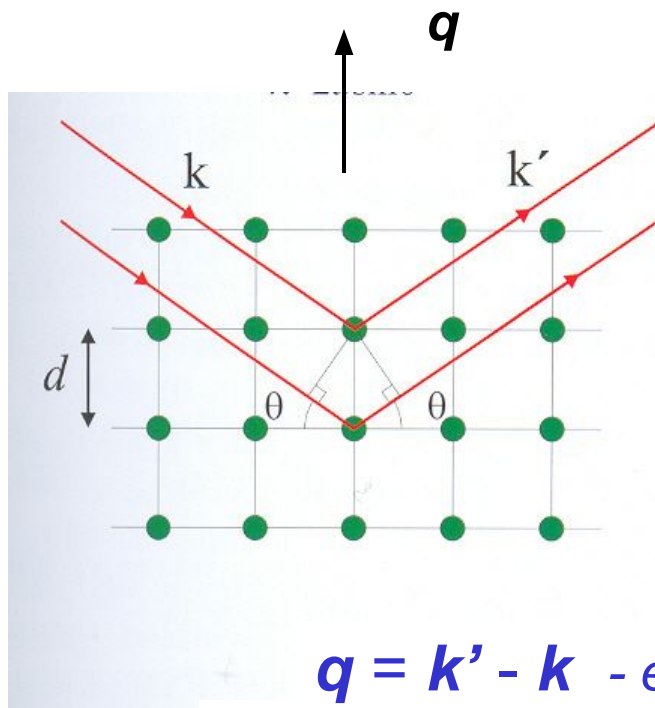
(b) Dislocations formed bundles (braids) in single crystal copper deformed at 77K



(c)

(c) Dislocation structure formed in single crystal BCC molybdenum deformed at temperature 500K (courtesy of L. L. Hsiung). The dark regions contain a high density of entangled dislocations lines that can no longer be distinguished individually.

Дифракция рентгеновских лучей (электронов, нейтронов) на периодических структурах



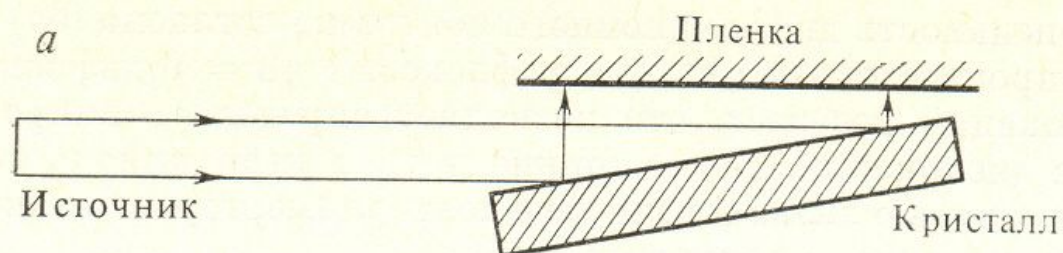
$$2d \sin\theta = n\lambda$$

Закон Вульфа-Брэгга

$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ - вектор рассеяния

$\mathbf{q} = \mathbf{G}$ - геометрическое условие дифракции;
 $\mathbf{G}$ - вектор обратной решетки

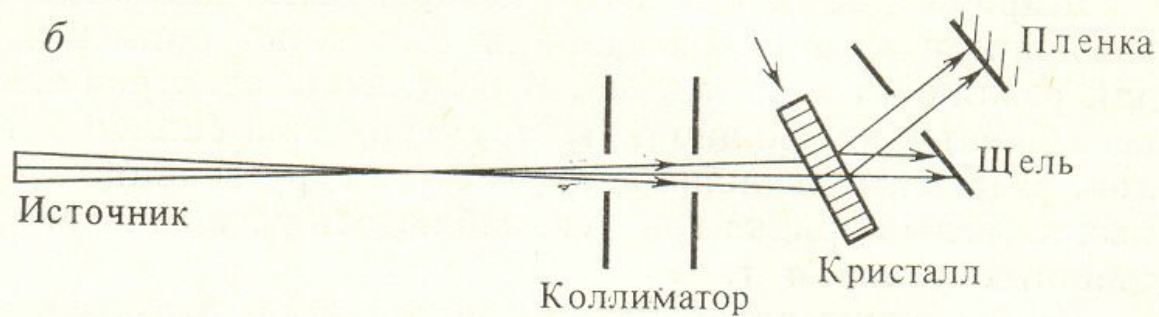
Рентгеновская топография



Основные методы рентгеновской топографии

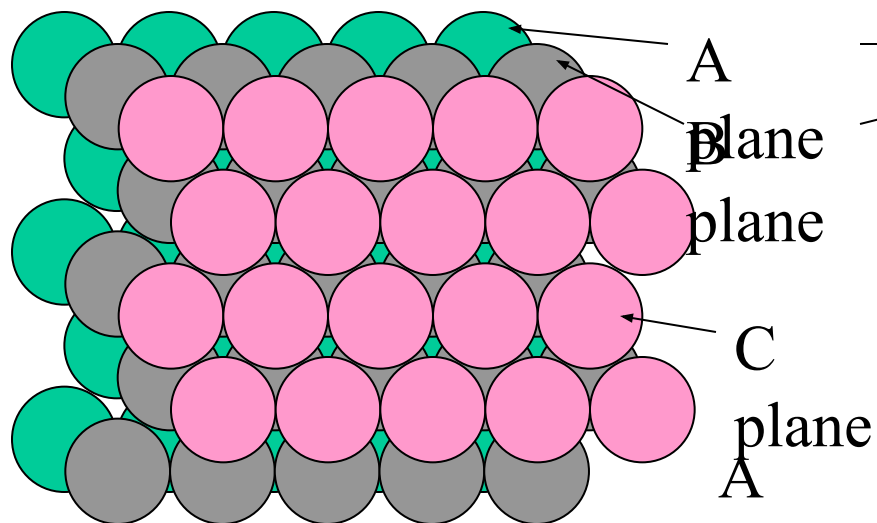
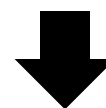
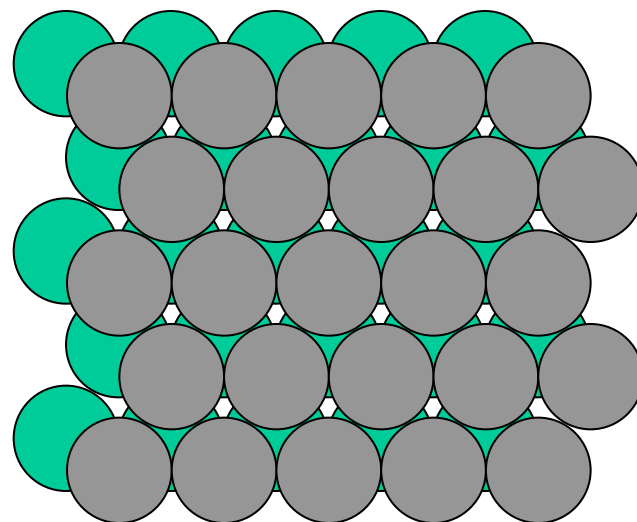
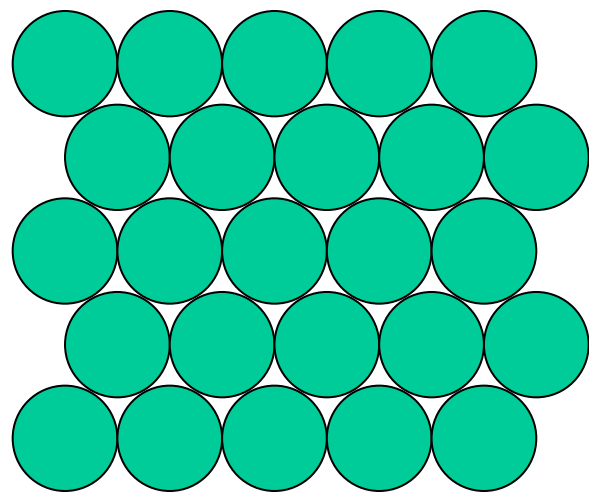
a — метод Берга—Баррета;

б — метод Ланга



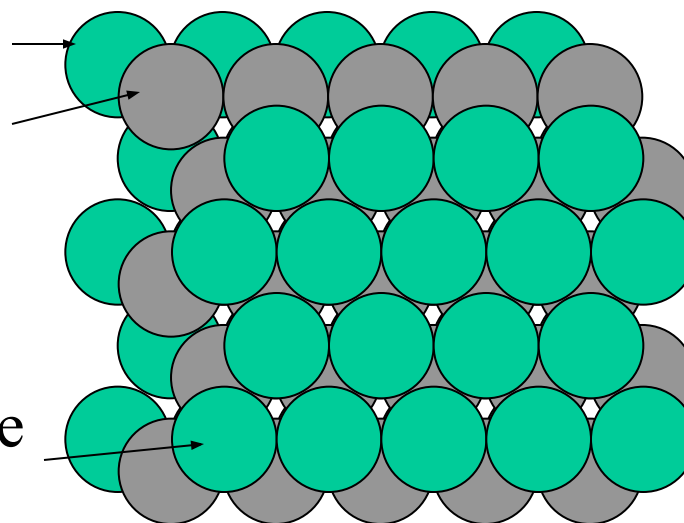
Двумерные дефекты

Плотная упаковка в кристаллах



...ABCABCABC...

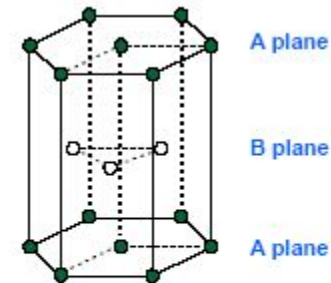
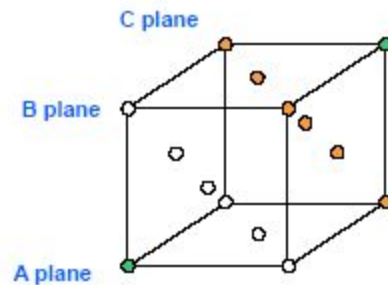
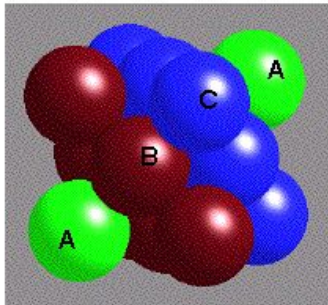
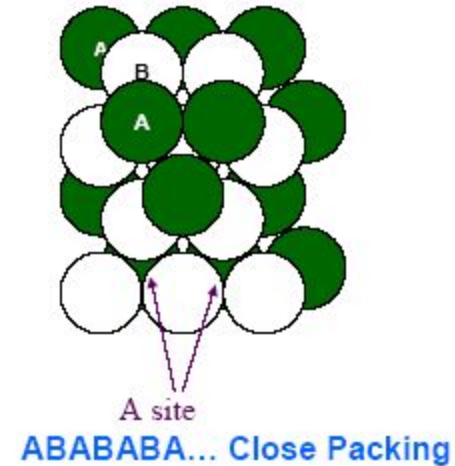
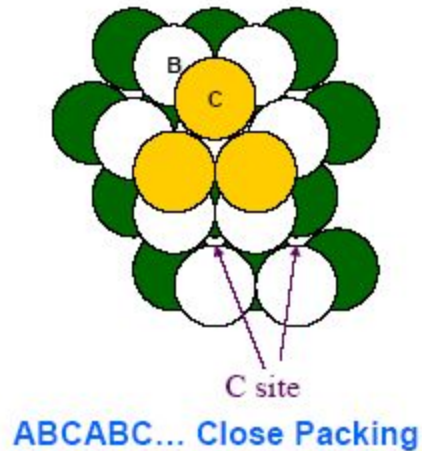
1 i



...ABABAB...

1 i

Структуры с плотной упаковкой



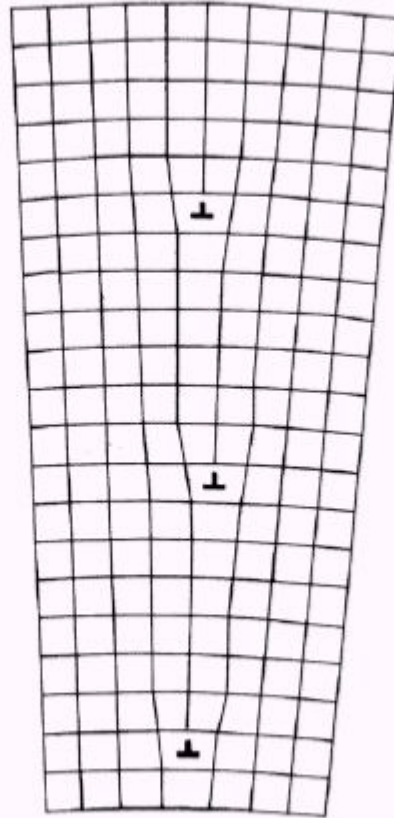
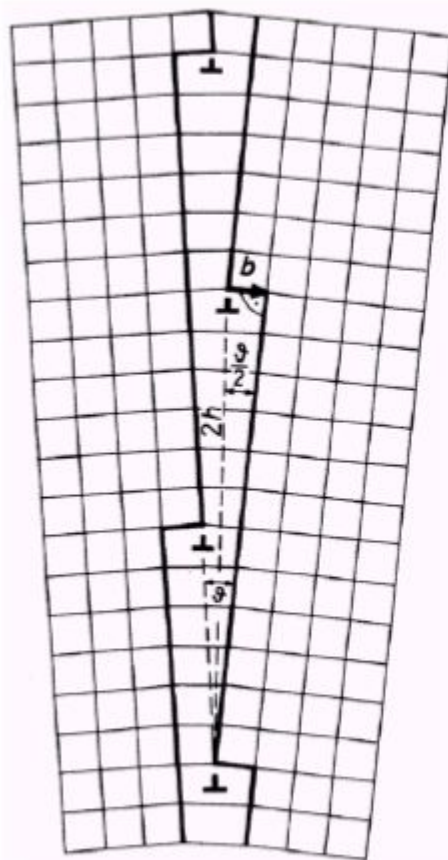
- *Face centered cubic (fcc): ABCABC... packing: Ni, Cu, Ag, Al, Au*
- *Hexagonal close packed (hcp): ABABAB ... packing: Mg, Zn, Co, Ti*

(FCC)

Дефекты упаковки

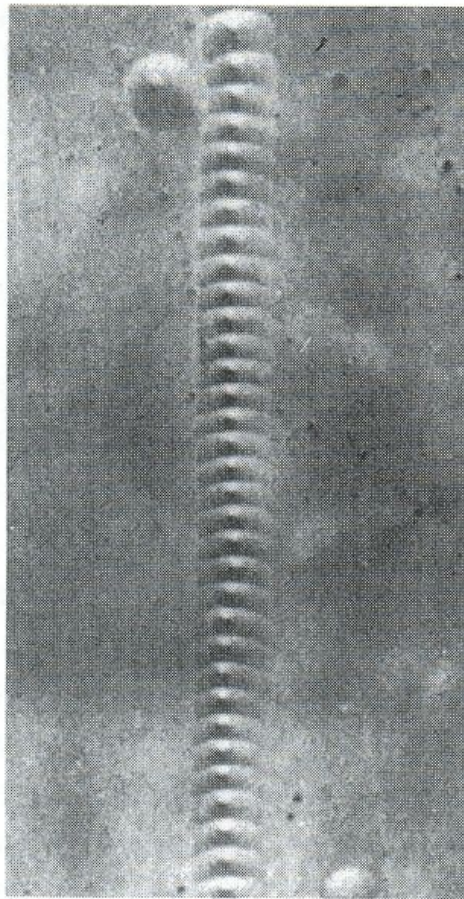
В идеальных кристаллах все плотноупакованные слои (плоскости) расположены в строгом порядке, образуя периодич. последовательности. Однако в реальных кристаллах часто (особенно при пластич. деформации, фазовых переходах или в процессе роста) возникают ошибки в расположении слоёв, напр. вместо последовательности $ABCABC\dots$ может образоваться последовательность $ABCBCABC\dots$; здесь из периодич. структуры удалена одна из плоскостей типа A , такой дефект наз. Д. у. в ы ч и т а н и я. Обратный случай, когда в последовательность плоскостей вставляется лишняя плоскость, называется Д. у. в н е д р е н и я ($ABC A \uparrow C \cdot BCABC\dots$) или двойным Д. у. (можно считать, что изъято две плоскости). В гексагональной двухслойной упаковке простой Д. у. выглядит как $A \underline{B} A \uparrow C A B\dots$, двойной Д. у. — как $A \underline{B} A \uparrow C \uparrow B C B\dots$

Малоугловая граница зерен

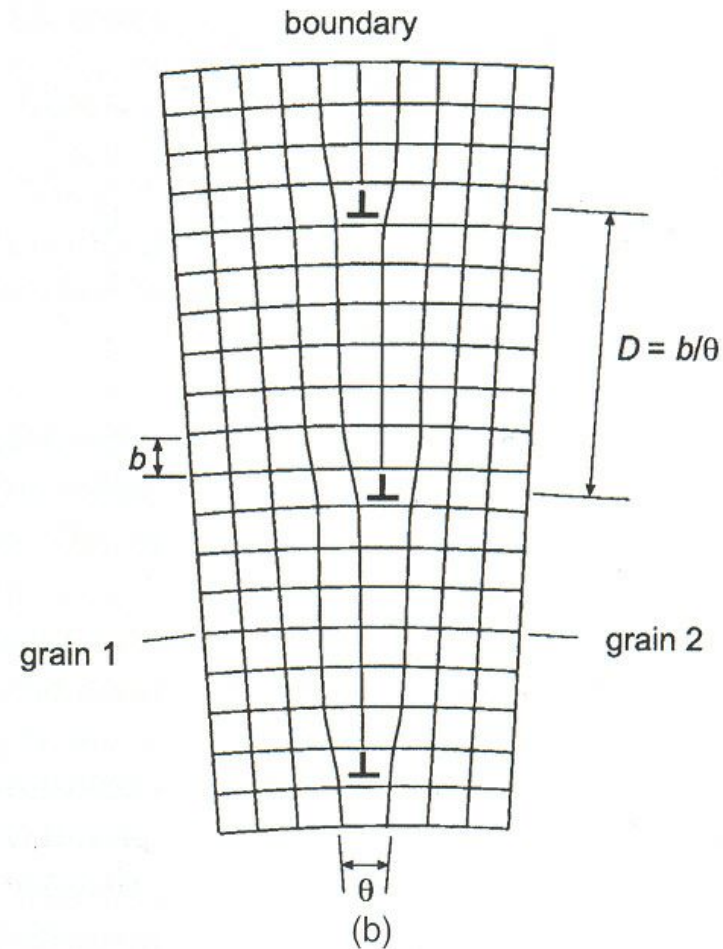


Symmetrical tilt boundary
before and after elastic
relaxation

- Tilt axis $\parallel$ edge dislocations
- $\sin \theta/2 = b/2h$
- Short-range order only
disturbed in the dislocation
cores



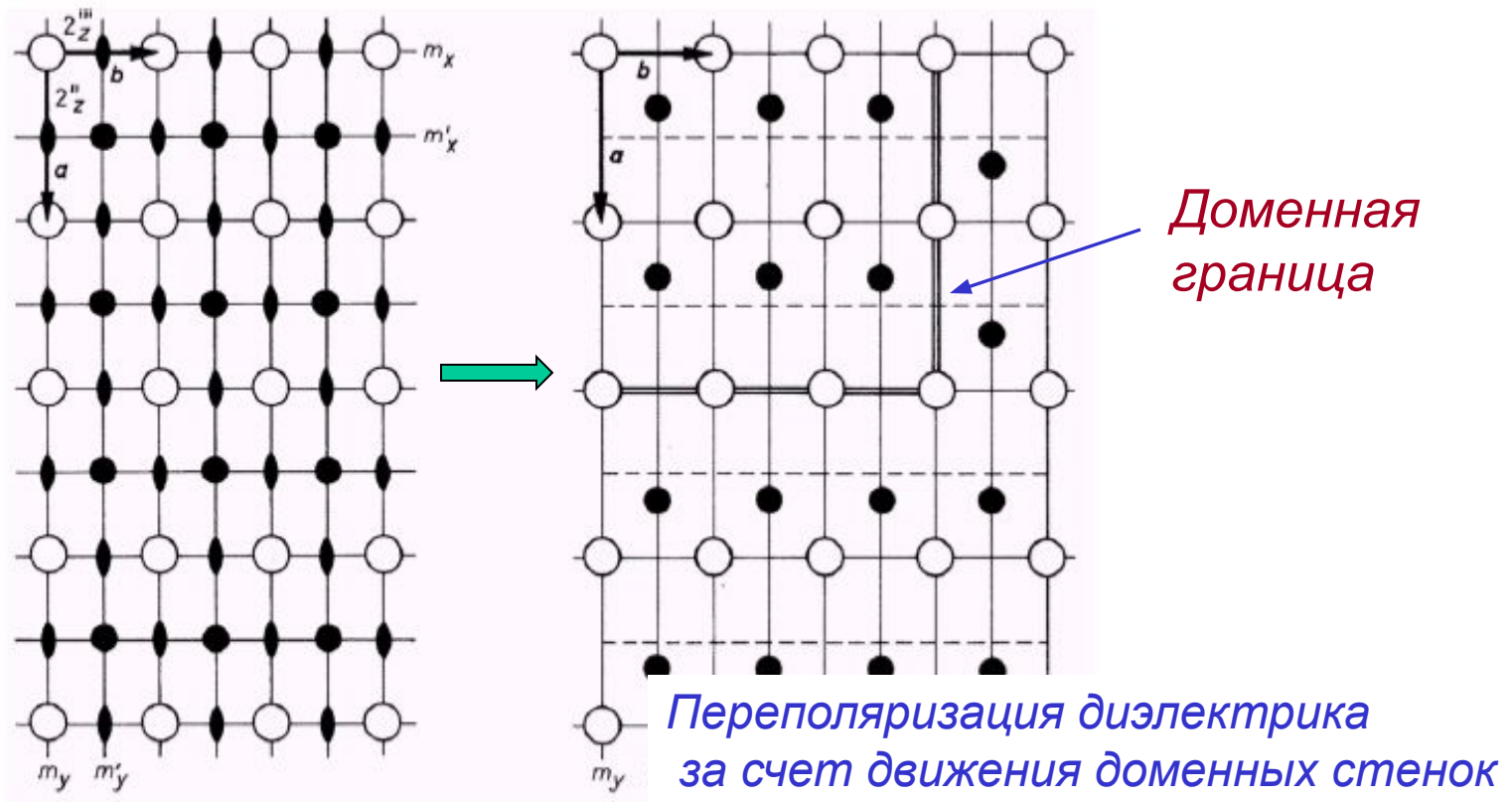
(a)



(b)

Figure 2.3 (a) A row of etch pits formed at the boundary between two germanium crystals. The etch pits are uniformly spaced. (b) Diagrammatic representation of the arrangement of dislocations in the boundary revealed by the etch pits in (a). This is a symmetrical pure tilt boundary which consists of a vertical array of edge dislocations with parallel Burgers vectors of the same sign. (After Vogel, Pfann, Corey and Thomas, *Physical Review* **90**, 489, 1953.)

Фазовый переход из centrosymmetric в полярную структуру с образованием доменов



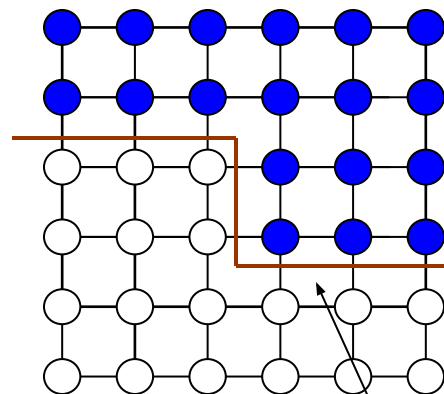
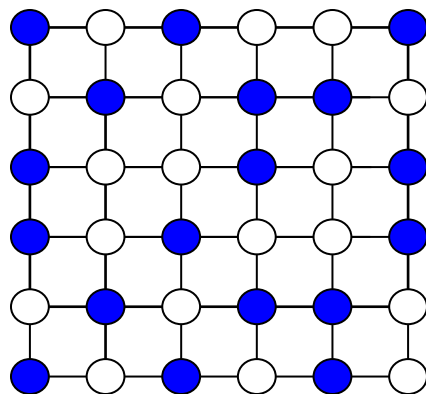
Phase transition with the formation of domains. Symmetry elements such as two-fold axes and mirror planes are indicated. The transition leads to a reduction in symmetry. The domain boundary is indicated by the double line in the right-hand figure.

Магнитные системы

Спины «вверх»



«вниз»



Доменная
граница

парамагнетик $T > T_c$
 $\langle \mu \rangle = 0$, ближний порядок

ферромагнетик $T < T_c$
 $\langle \mu \rangle \neq 0$, дальний порядок

Трехмерные (объемные) дефекты

*Поры, трещины, примесные скопления, включения,
выделения новой фазы и т.д.*

Нарушения сплошности кристалла

Точечные дефекты и дислокации осуществляют не только пластическую деформацию кристалла. Их скопления являются зародышами нарушений сплошности, которые при подходящих условиях могут превратиться в растущие трещины, приводящие к разрушению образца. Поэтому микроскопические нарушения сплошности следует рассматривать как элементы дефектной структуры кристалла, а процесс разрушения — как одну из стадий эволюции дефектной структуры.

Зарождение и рост трещин → разрушение кристалла

Упрочнение в сплавах

*(одно из важнейших достижений
современной цивилизации)*

*Увеличение порога текучести таких металлов
как **Al** , **Cu**, **Ni** в сто и более раз за счет правильного
выбора легирующих элементов и оптимизации
термической обработки !*

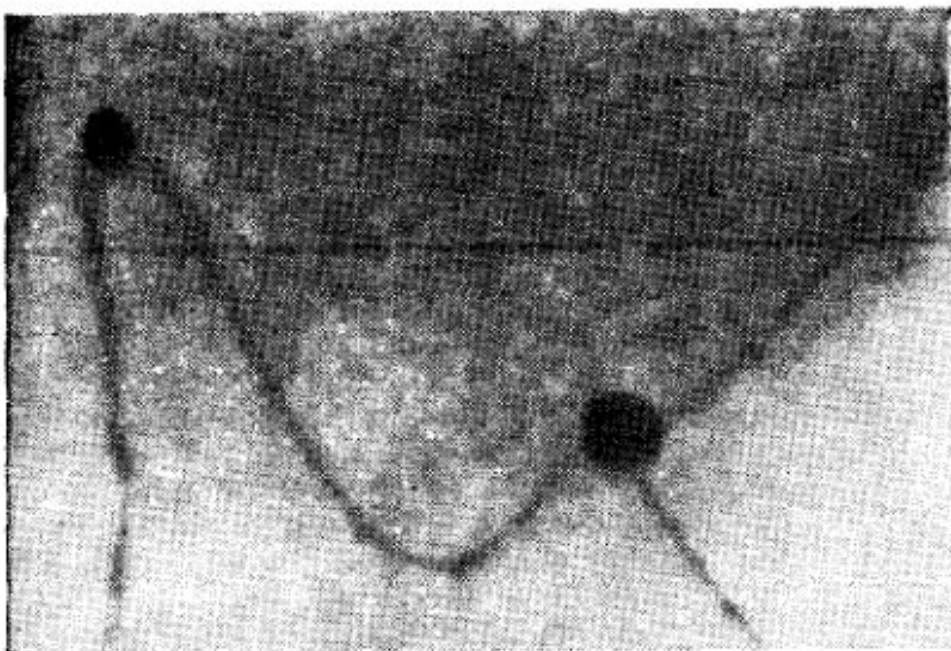


Рис. 20.20. Дислокации, закрепленные атомами примеси в MgO . (Электронно-микроскопическая фотография Томаса и Уошберна.)

мелких частиц другой фазы. Этот процесс имеет место при твердении стали, когда частицы карбида железа выпадают в железе, или при твердении алюминия, где выпадают частицы Al_2Cu . Случай закрепления дислокаций атомами примеси показан на рис. 20.20.

Египетские пирамиды – $\text{Cu} + \text{Sb}$

Рекомендуемая литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. - Статистическая физика, часть 1, М: Наука 1990.
2. В.Л. Инденбом, А.Н. Орлов - Физическая теория пластичности и прочности, УФН, т.76, вып. 3, стр. 557-591, 1962.
3. Ж. Фридель - Дислокации, М: Мир, 1967.
4. Современная кристаллография, под ред. Б.К.Вайнштейна, т. 2, гл. 5, М.: Наука, 1979.
5. Дж. Хирт, И. Лоте - Теория дислокаций, М.: Атомиздат, 1972.
6. Д.М. Васильев, Физическая кристаллография, М.: Металлургия, 1972.
7. Ч. Киттель - Введение в физику твердого тела, М.: Наука, 1978, гл. 19, 20.
8. Келли А., Гровс Г. - Кристаллография и дефекты в кристаллах, М., 1974.
9. Орлов А.Н. - Введение в теорию дефектов в кристаллах, М. 1983.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. - Теория упругости, М: Наука 1987.
11. Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела, т. 2, гл.30, М.: Мир, 1989
12. М. Клеман, О.Д. Лаврентович - Основы физики частично упорядоченных сред, М: Физматлит, 2007.