

Лекция 2

Тема Лекции: Дефекты кристаллического строения

к.ф.-м.н., PhD, ассоциированный профессор
Тулегенова Аида Тулегенкызы

Цель лекции:

Сформировать представление о строении реальных металлов, видах и роли дефектов кристаллической решётки, их влиянии на физические, механические и технологические свойства металлов.

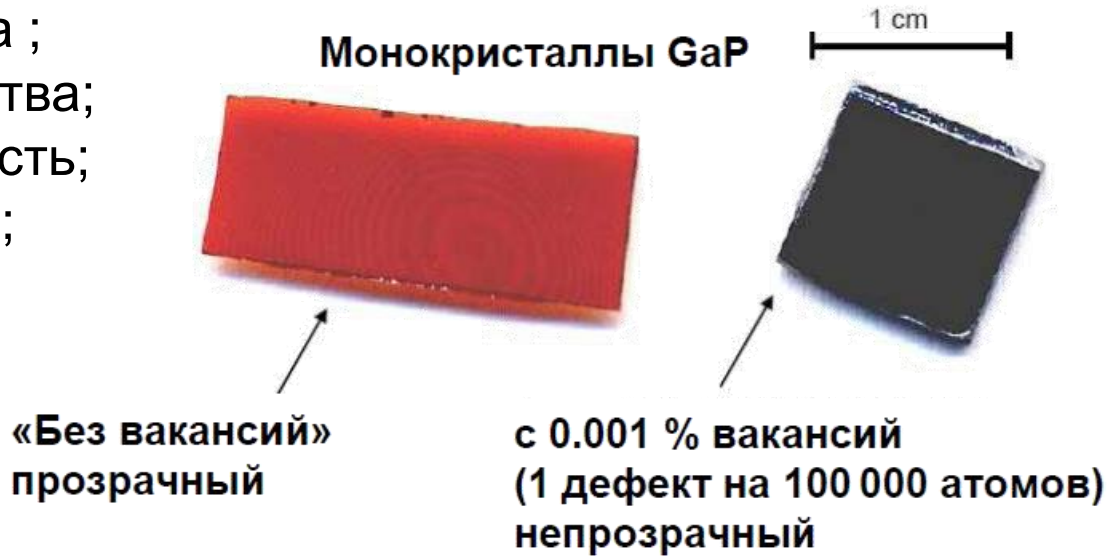
Основные вопросы:

1.Понятие о реальной структуре металлов.
2.Классификация дефектов кристаллического строения.
3.Точечные, линейные, поверхностные и объёмные дефекты.
4.Влияние дефектов на свойства металлов.
5.Методы исследования дефектной структуры.

Актуальность

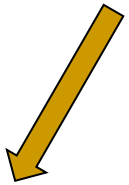
Многие физические свойства зависят от дефектной структуры или полностью определяются наличием дефектов:

- тип и величина проводимости;
- цвет;
- прозрачность;
- оптические свойства ;
- механические свойства;
- химическая активность;
- магнитные свойства;
- температурные;
- диффузионные.

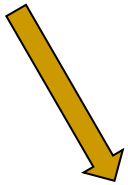


Дефекты, типы дефектов

Дефекты в кристаллах (от лат. defectus — недостаток, изъян), нарушения периодичности кристаллической структуры в реальных монокристаллах.



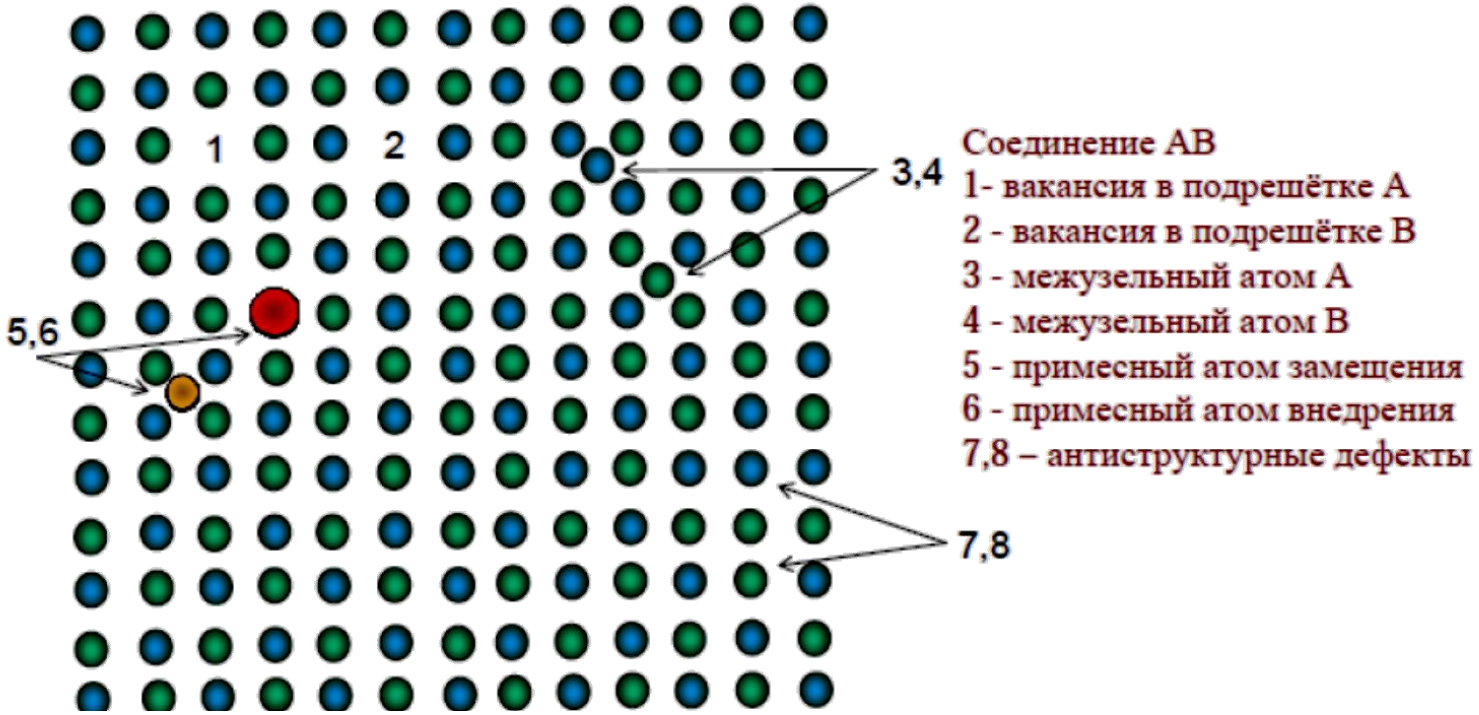
Примесные
обусловлены присутствием чужеродных атомов или молекул.



Собственные
возникают в связи с влиянием температуры, механических, радиационных и других видов воздействия на твердую фазу.

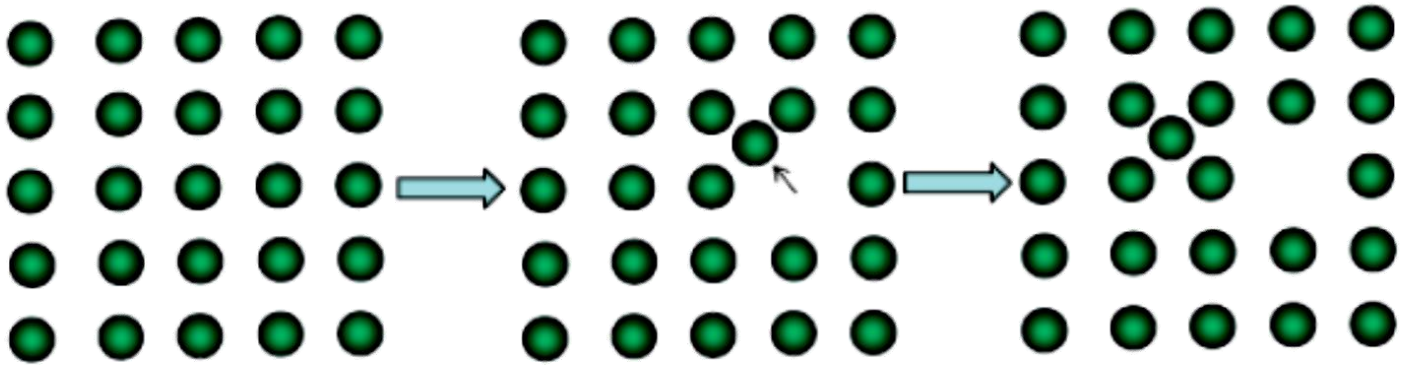
Точечные дефекты

Малы во всех измерениях, их размеры по всем направлениям не превышают нескольких атомных диаметров. Они состоят из одного атома (если это атом примеси) или дефектной позиции (если кристалл не содержит примесных атомов).

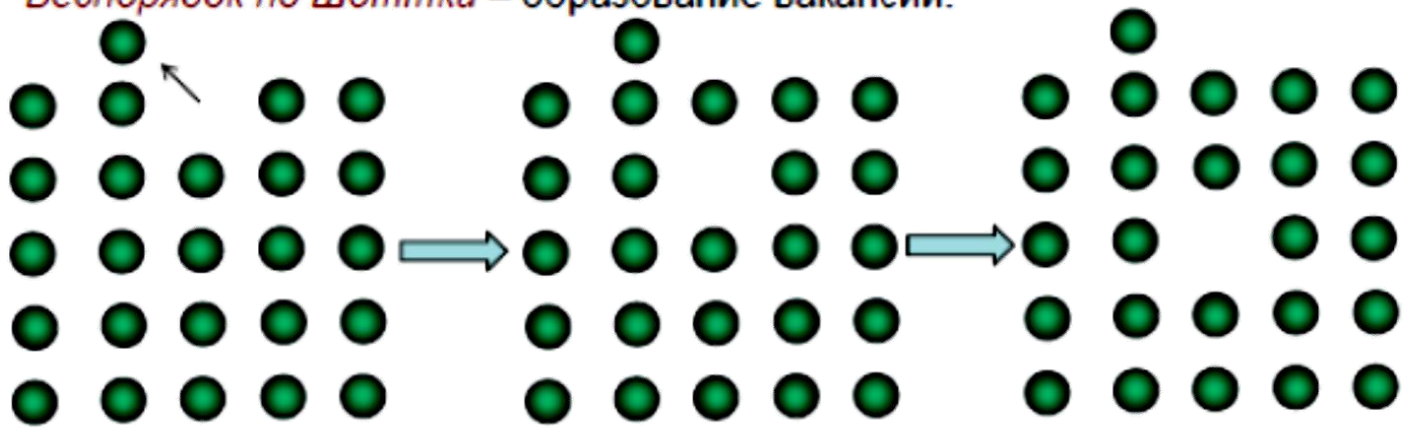


Точечные дефекты

Беспорядок по Френкелю – образование вакансии и межузельного атома.



Беспорядок по Шоттки – образование вакансий.



Точечные дефекты

Разновидности дефектов в соответствии с причинами их образования:

- *Тепловые дефекты* - обмен кристалла теплом с внешней средой приводит к образованию вакансий и межузельных атомов в результате тепловых флуктуаций. При 0 К тепловых дефектов нет, максимальная концентрация тепловых дефектов наблюдается вблизи температуры плавления.

- *Дефекты нестехиометрии и дефекты, обусловленные присутствием примесных атомов*. Обмен кристалла веществом с внешней средой приводит к изменению химического состава кристалла. Отклонение химического состава от стехиометрического приводит к образованию вакансий и межузельных атомов – дефектов нестехиометрии.

Точечные дефекты

Разновидности дефектов в соответствии с причинами их образования:

- *Электронные дефекты.* При 0 К все электроны локализованы на атомах и химических связях между соседними атомами. При повышении температуры некоторые электроны изменяют своё связанное положение, становятся свободными, и кристалл становится проводящим.

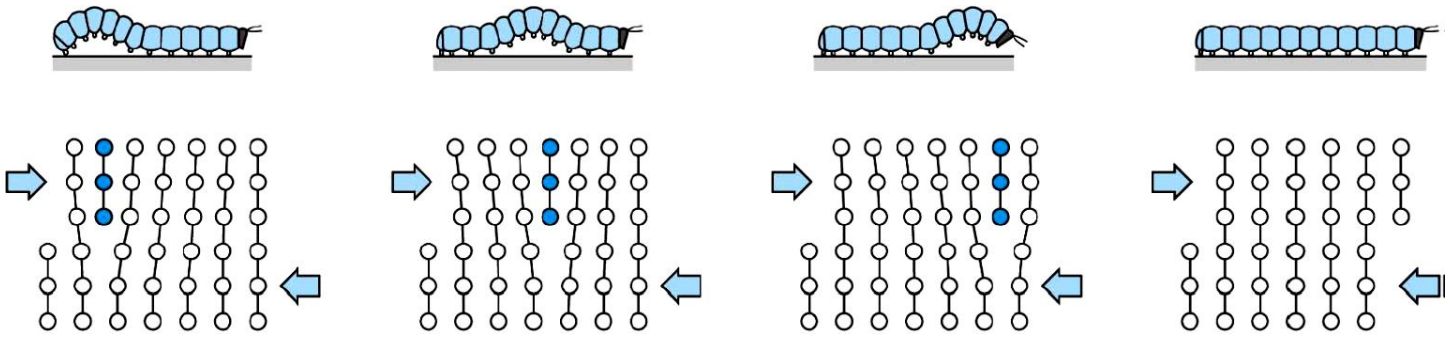
- *Антиструктурные дефекты*. Для многих двух- и более компонентых кристаллов характерно изменение способа расположения частиц в решётке при изменении температуры. Такие процессы называются переходами типа порядок-беспорядок. Предельным случаем беспорядка является произвольное распределение различным атомов по позициям, которые при низких температурах (наличие порядка) предназначены определённому типу атомов.

Линейные дефекты

Это нарушение линейной последовательности узлов решетки, вдоль которой обрывается периодичность структуры.

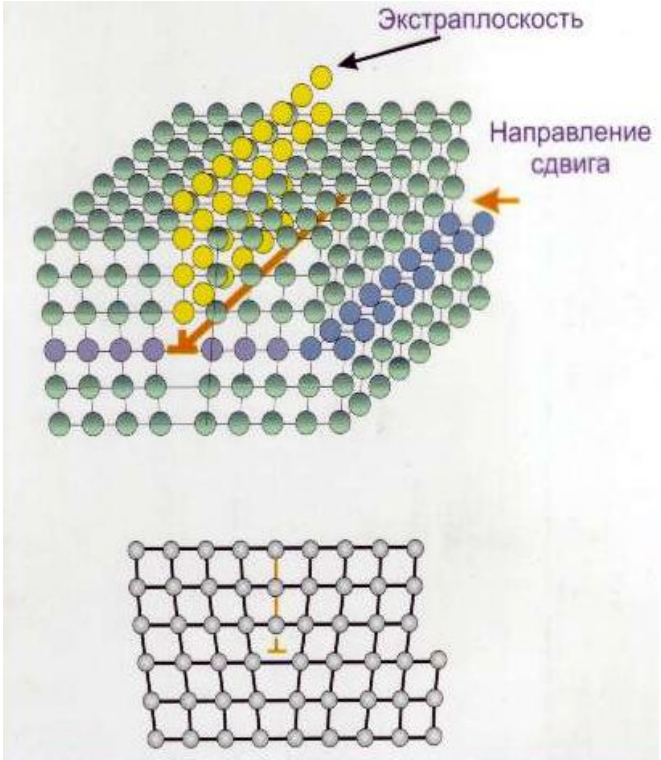
К линейным дефектам относят дислокации, микротрещины, неустойчивые образования в виде цепочки точечных дефектов.

Дислокации возникают при пластической деформации кристаллов и при их дальнейшей механической обработке.



Линейные дефекты: краевая дислокация

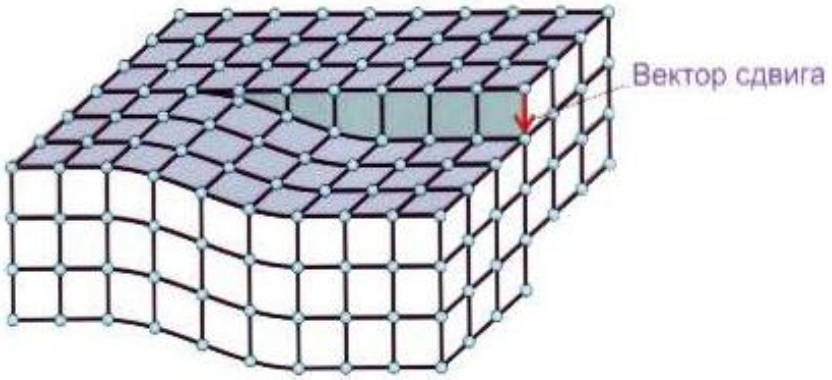
Краевая дислокация представляет собой локализованное искажение кристаллической решетки, вызванное наличием в ней «лишней» атомной полуплоскости или экстраплоскости.

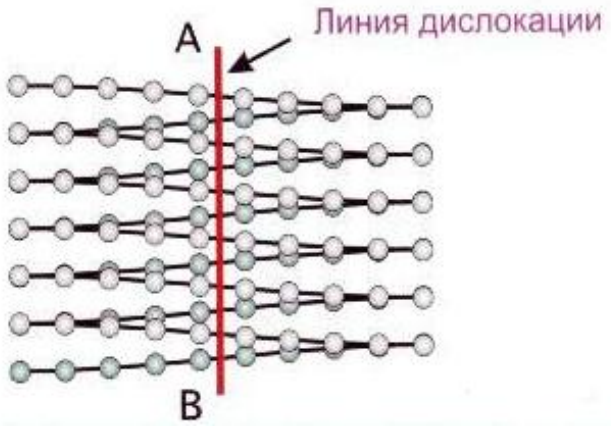


В плоскости, перпендикулярной дислокационной линии, область рассматриваемого несовершенства имеет весьма малые размеры – примерно от 2 до 10 атомных диаметров.

Линейные дефекты: винтовая дислокация

Винтовая дислокация возникает за счет сдвига одной части кристалла по отношению к другой параллельно вектору сдвига. Вокруг оси винтовой дислокации также располагается область наиболее искаженного участка кристаллической решетки размером в несколько межатомных расстояний.





Плотность дислокаций

Дислокации образуются уже при кристаллизации металлов, а также в ходе пластической деформации и фазовых превращений. Плотность дислокаций может достигать большой величины.

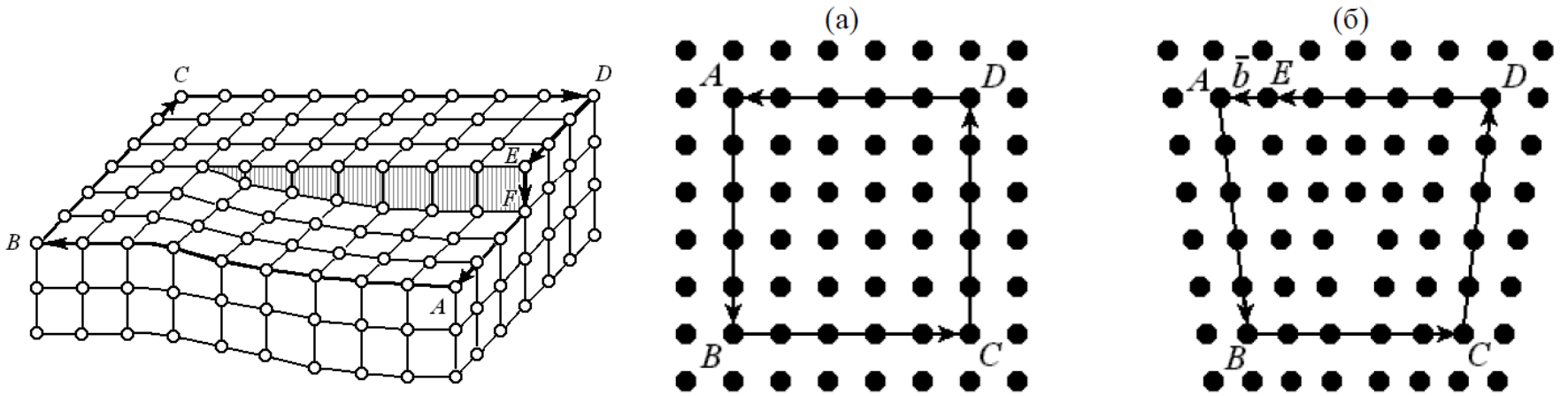
Под *плотностью дислокаций* ρ обычно понимают суммарную длину дислокаций $\sum l$, приходящуюся на единицу объема V кристалла: $\rho = \sum l / V$.

Таким образом, размерность плотности дислокаций ρ: см/см^3, или см$^{-2}$. Для отожженных металлов плотность дислокаций составляет величину 10^6–10^3 см$^{-2}$, после холодной деформации она увеличивается до 10^{11}–10^{12} см$^{-2}$, что соответствует примерно 1 млн километров дислокаций в 1 см^3.

Вектор и контур Бюргерса

Назовем *областью хорошего кристалла* любую область реального кристалла, где можно установить однозначное соответствие с идеальным кристаллом, а где такого соответствия установить нельзя, – *областью плохого кристалла*.

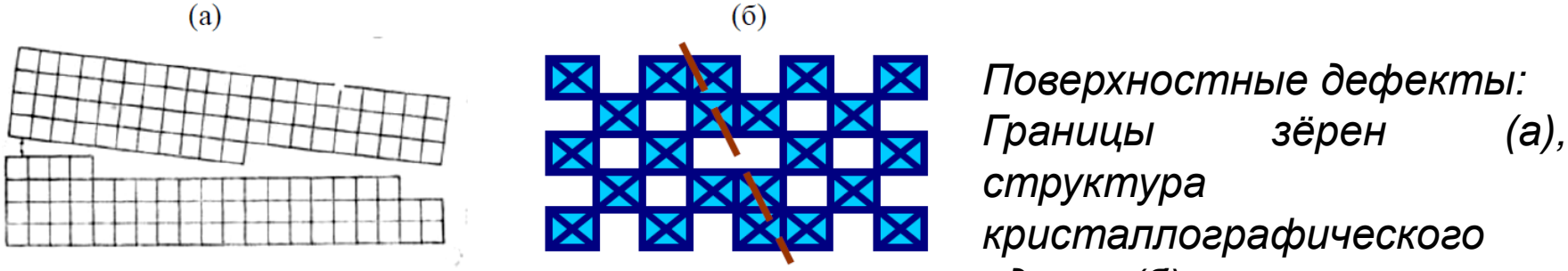
Контуром Бюргерса называют замкнутый контур произвольной формы, построенный в реальном кристалле так, что от атома к атому переходят последовательно, не выходя из области хорошего кристалла.



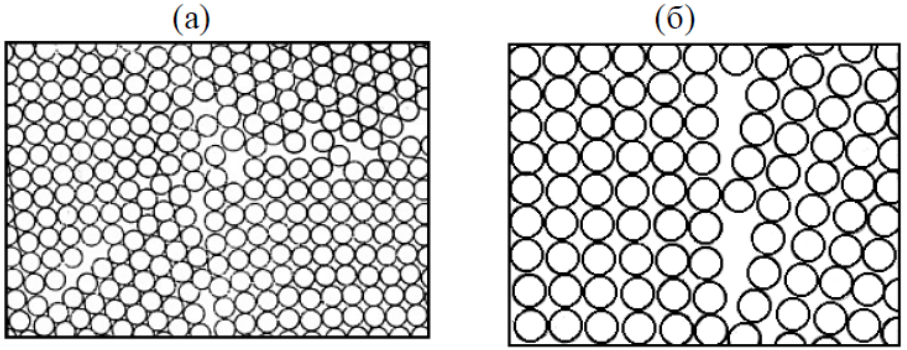
Вектор Бюргерса в совершенном кристалле (а) и кристалле, имеющем линейный дефект (б)

Поверхностные дефекты

К ним относятся границы зёрен, кристаллических двойников, дефекты упаковки, а также поверхность самого кристалла.

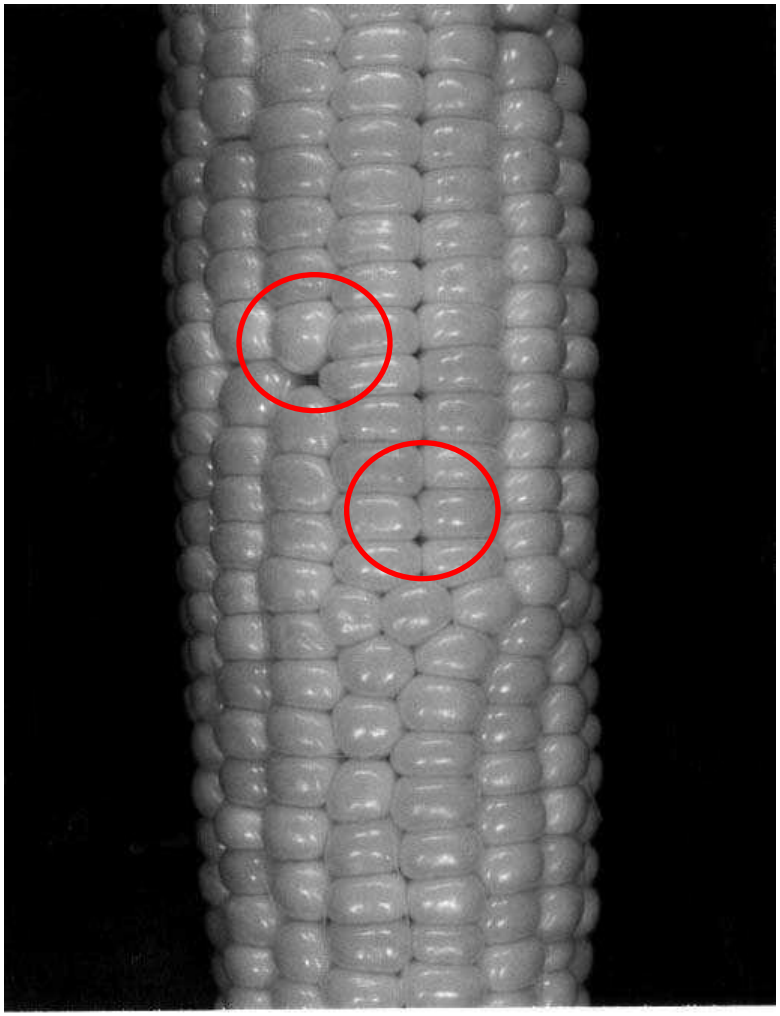


Поверхностные дефекты: Границы зёрен (а), структура кристаллографического сдвига (б)



Границы зёрен: модель высокоугловой (а) и малоугловой границы (б)

Поверхностные дефекты



Объёмные дефекты

Такие дефекты обычно возникают при быстром росте кристаллов из раствора или расплава, содержащего большое количество примесей. Они могут также образовываться путём кооперирования дефектов меньшей размерности, например, дислокаций, или агрегации примесных атомов. Основные разновидности – поры и трещины.





Объёмные дефекты

По происхождению полости объёмные дефекты подразделяют на:

- *структурные* – это дефекты, которые возникают в результате эволюционного развития других дефектов, уже существующих в решетке – точечных или линейных. Развиваются вследствие внешнего воздействия (например, механического, теплового) или же из-за внутренних возмущений решетки (полиморфные реакции, фазовые превращения).

- *технологические* – это несплошности, появление которых целиком обусловлено особенностями осуществления технологических операций – например, прессованием порошковых материалов, кристаллизацией.

Объёмные дефекты

Условная градация объемных дефектов основана на их *размерном соотношении* и существующих *способах обнаружения*:

- *макроскопические несплошности* – это трехмерные полости размером примерно в 1 мм и более, которые могут быть обнаружены методами макроскопического наблюдения (визуально или с помощью рентгеновской дефектоскопии).

- *микроскопические несплошности* – это полости меньшего размера (несколько микрометров), они наблюдаются на шлифах с помощью метода световой микроскопии.

- *субмикронесплошности* – отличаются очень малыми размерами (измеряются в нанометрах).

Выводы лекции:

Реальная структура металлов: Реальные кристаллы всегда содержат отклонения от идеального периодического строения, что определяет разницу между теоретической и реальной прочностью металлов.

Классификация дефектов: По геометрическому признаку дефекты кристаллической решётки делятся на точечные (вакансии, межузельные и примесные атомы), линейные (дислокации), поверхностные (границы зёрен и блоков) и объёмные (поры, трещины, включения).

Влияние на свойства: Дислокации и границы зёрен управляют пластической деформацией и прочностью (механизм упрочнения), тогда как точечные дефекты влияют на диффузию, электросопротивление и теплопроводность.

Методы исследования: Для анализа дефектной структуры применяются оптическая и электронная микроскопия (ПЭМ, РЭМ), рентгеноструктурный анализ, а также методы измерения электросопротивления и плотности.

Вопросы для контроля изучаемого материала:

1. Чем отличаются идеальные и реальные кристаллы?
2. Какие бывают точечные дефекты и как они влияют на свойства вещества?
3. В чём разница между краевой и винтовой дислокацией?
4. Что называют границей зёрен и какие процессы с ней связаны?
5. Как дефекты влияют на механические и электрические свойства материалов?

Список литературных источников:

1. Соколова Т. Н. Физика конденсированного состояния. — М.: Лань, 2020.
2. Китаев В. П. Физика твёрдого тела. — М.: Физматлит, 2021.
3. Капустин А. П. Кристаллография, минералогия и физика твёрдого тела. — М.: МИСиС, 2020.
4. Kittel, C. Introduction to Solid State Physics. — Wiley, 2022.
5. Ashcroft, N. W., Mermin, N. D. Solid State Physics. — Cengage, 2019.