

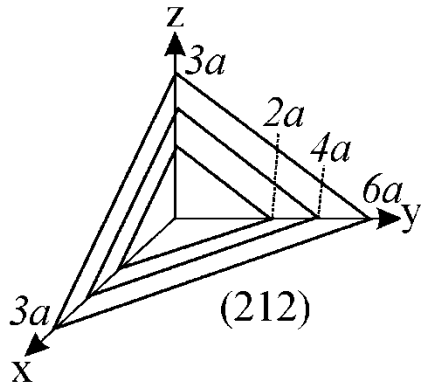
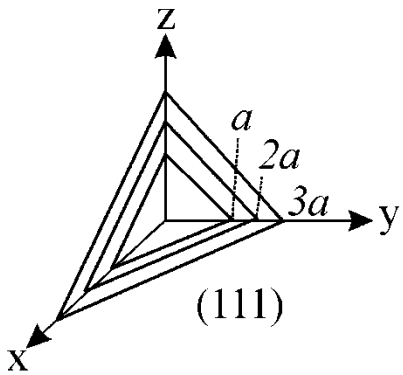
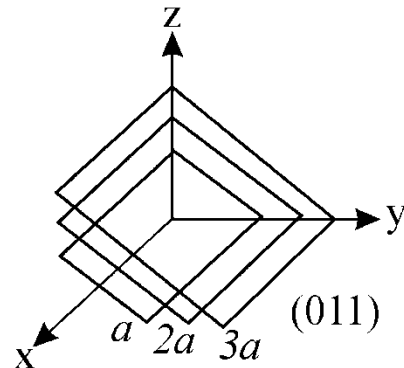
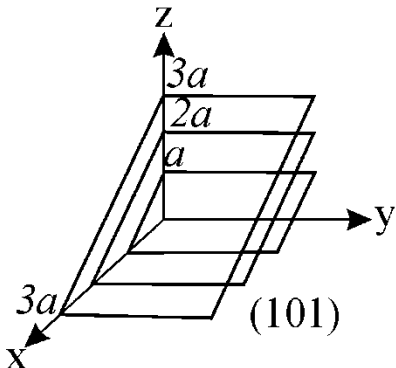
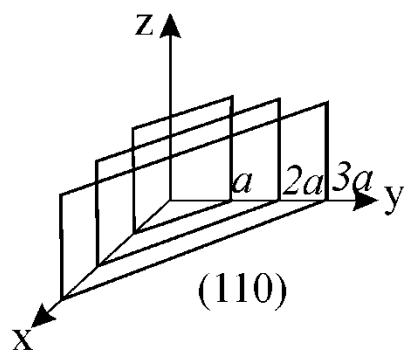
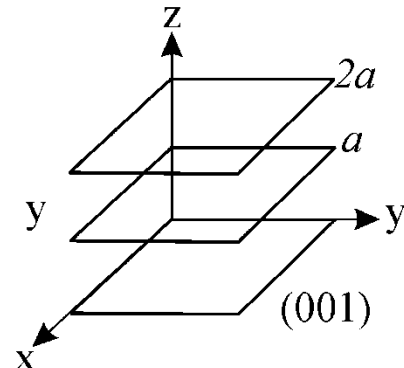
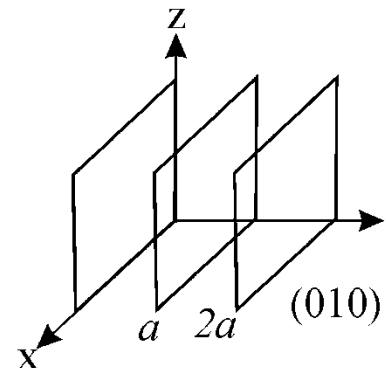
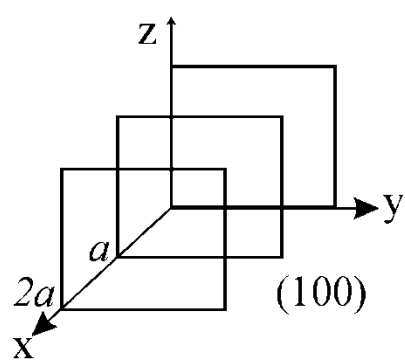
A decorative graphic on the left side of the slide consists of several overlapping squares in various shades of blue and purple, arranged in a stepped pattern. A horizontal bar at the top of the slide transitions from dark blue on the left to light blue on the right.

ПОВЕДЕНИЕ МАТЕРИАЛОВ В СИЛЬНЫХ ПОЛЯХ

ЛЕКЦИЯ № 5

ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛОВ

- Виды атомных дефектов и их локальные электронные состояния.
- Дефекты по Френкелю, Шоттки и центры их окраски.
- Распределение электронов и дырок в реальных материалах. Плотность состояний в запрещенной зоне.
- Линейные, плоскостные и объемные дефекты.
- Макродефекты и фазы внедрения. Атомы на поверхности.



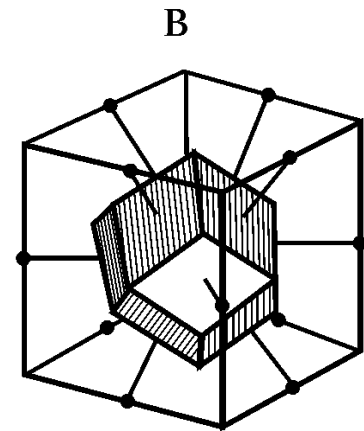
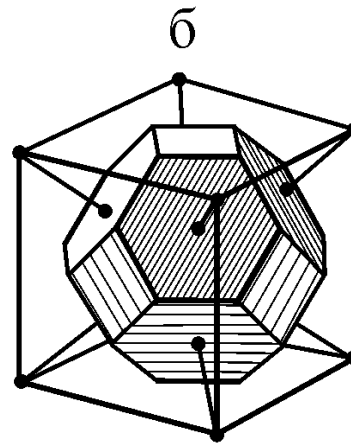
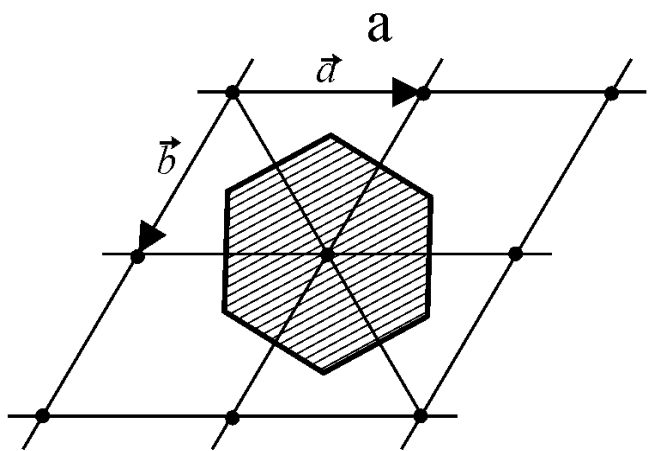
Межплоскостное расстояние **d** между плоскостями (hkl) семейства для кубических кристаллов с периодом решетки **a**:

$$d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

ЯЧЕЙКА ВАГНЕРА-ЗЕЙТЦА

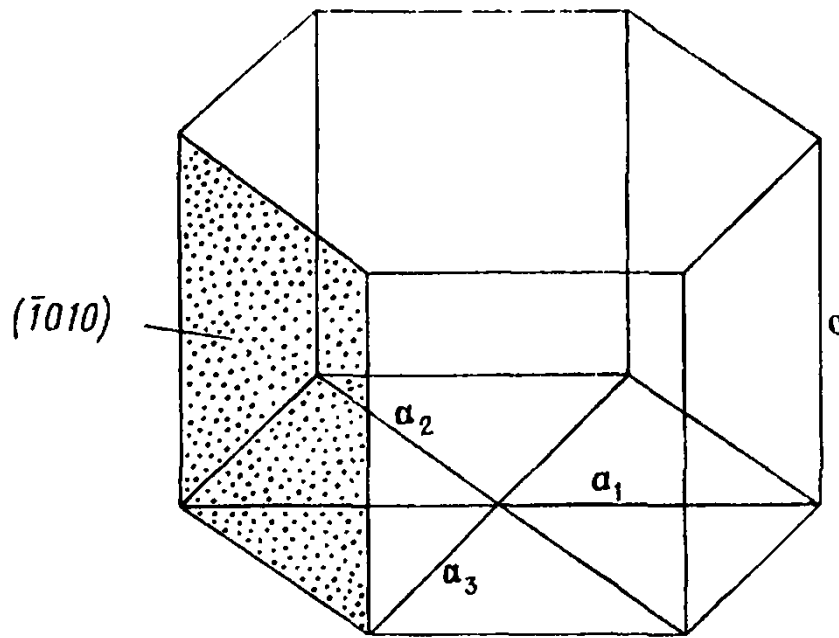
Построение

- Выбирается произвольный узел решетки Бравэ и соединяется со всеми ближайшими соседними узлами.
- Через середины этих отрезков проводим перпендикулярные отрезкам плоскости.
- Ограниченная плоскостями область наименьшего объема будет являться ячейкой Вагнера — Зейтца.



а – двумерный случай (заштрихованная область),
б – для объемноцентрированной кубической ячейки,
в – для гранецентрированной кубической ячейки

Наиболее естественная элементарная ячейка для гексагональных и тригональных кристаллов



Набор четырех индексов Миллера, представляющих собой обратные значения координат точек пересечения плоскости с осями a_1 , a_2 , a_3 и с осью c

Основные параметры кристаллических решеток : *период решетки; атомный радиус; энергия решетки; координационное число; базис и коэффициент компактности решетки.*

Период решетки – расстояние между центрами двух соседних атомов, ионов в элементарной ячейке решетки.

Энергия кристаллической решетки – энергия, выделяющаяся при образовании кристалла из ионов, атомов или других частиц, образующих кристалл, когда исходное состояние этих частиц газообразное (температура плавления, модуль упругости, прочность, твердость).

Базисом решетки называется количество атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку решетки.

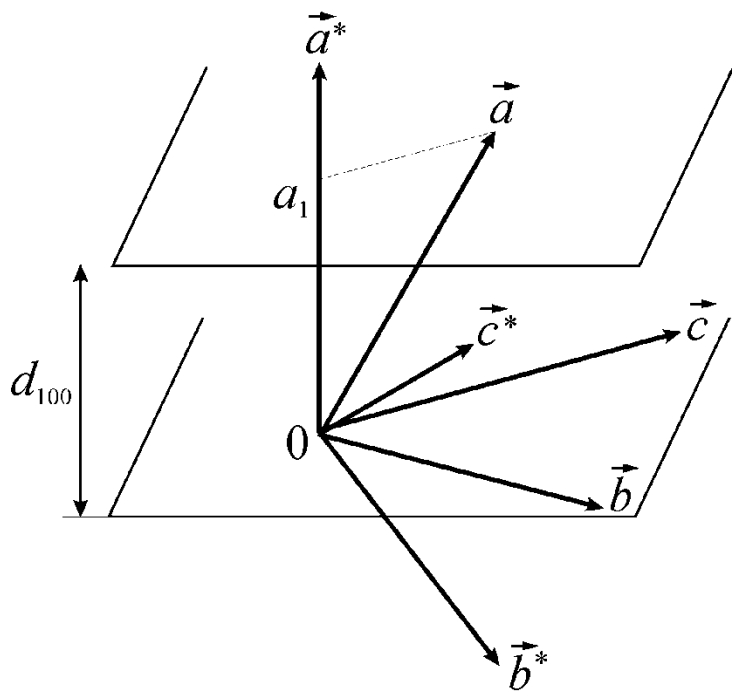
Коэффициент компактности η решетки определяется отношением объема, занимаемого атомами V_a , ко всему объему решетки V_p , т. е. $\eta = V_a / V_p$.

Кубическая и гексагональная плотная упаковка – $\eta = 74,04 \%$, $n = 12$

Кубическая объемноцентрированная структура – $\eta = 68,1 \%$, $n = 8$

ОБРАТНАЯ РЕШЕТКА

Обратная решетка представляет собой удобную абстракцию, позволяющую математически просто описать условия протекания того или иного явления в твердом кристаллическом теле.



Семейство плоскостей, параллельных векторам \vec{b} и \vec{c} (плоскости (100), можно изобразить точкой на конце вектора \vec{a}^* , перпендикулярного к этим плоскостям.

Длина этого вектора = величине, обратной соответствующему межплоскостному расстоянию

$$d_{100} = |Oa_1|$$

Длина вектора \vec{a}^* - из условия:

$$a^* \cdot |Oa_1| = 1$$

$$(\vec{a} \vec{a}) = 1; \quad (\vec{a} \vec{b}) = 0; \quad (\vec{a} \vec{c}) = 0$$

$$(\vec{b} \vec{a}) = 0; \quad (\vec{b} \vec{b}) = 1; \quad (\vec{b} \vec{c}) = 0;$$

$$(\vec{c} \vec{a}) = 0; \quad (\vec{c} \vec{b}) = 0; \quad (\vec{c} \vec{c}) = 1.$$

ОБРАТНАЯ РЕШЕТКА

По аналогии с прямой кристаллической решеткой можем теперь определить нормаль к плоскости (hkl) как *точку* в элементарной ячейке, заданной векторами \underline{a}^* , \underline{b}^* и \underline{c}^* , где

$$\underline{a}^* = 2\pi \cdot \frac{[\underline{b} \times \underline{c}]}{\underline{a} \cdot [\underline{b} \times \underline{c}]} \quad \text{ортогонален к } \underline{b} \text{ и } \underline{c}$$

$$\underline{b}^* = 2\pi \cdot \frac{[\underline{c} \times \underline{a}]}{\underline{a} \cdot [\underline{b} \times \underline{c}]} \quad \text{ортогонален к } \underline{c} \text{ и } \underline{a}$$

$$\underline{c}^* = 2\pi \cdot \frac{[\underline{a} \times \underline{b}]}{\underline{a} \cdot [\underline{b} \times \underline{c}]} \quad \text{ортогонален к } \underline{a} \text{ и } \underline{b}$$

Из этих определений следует, что:

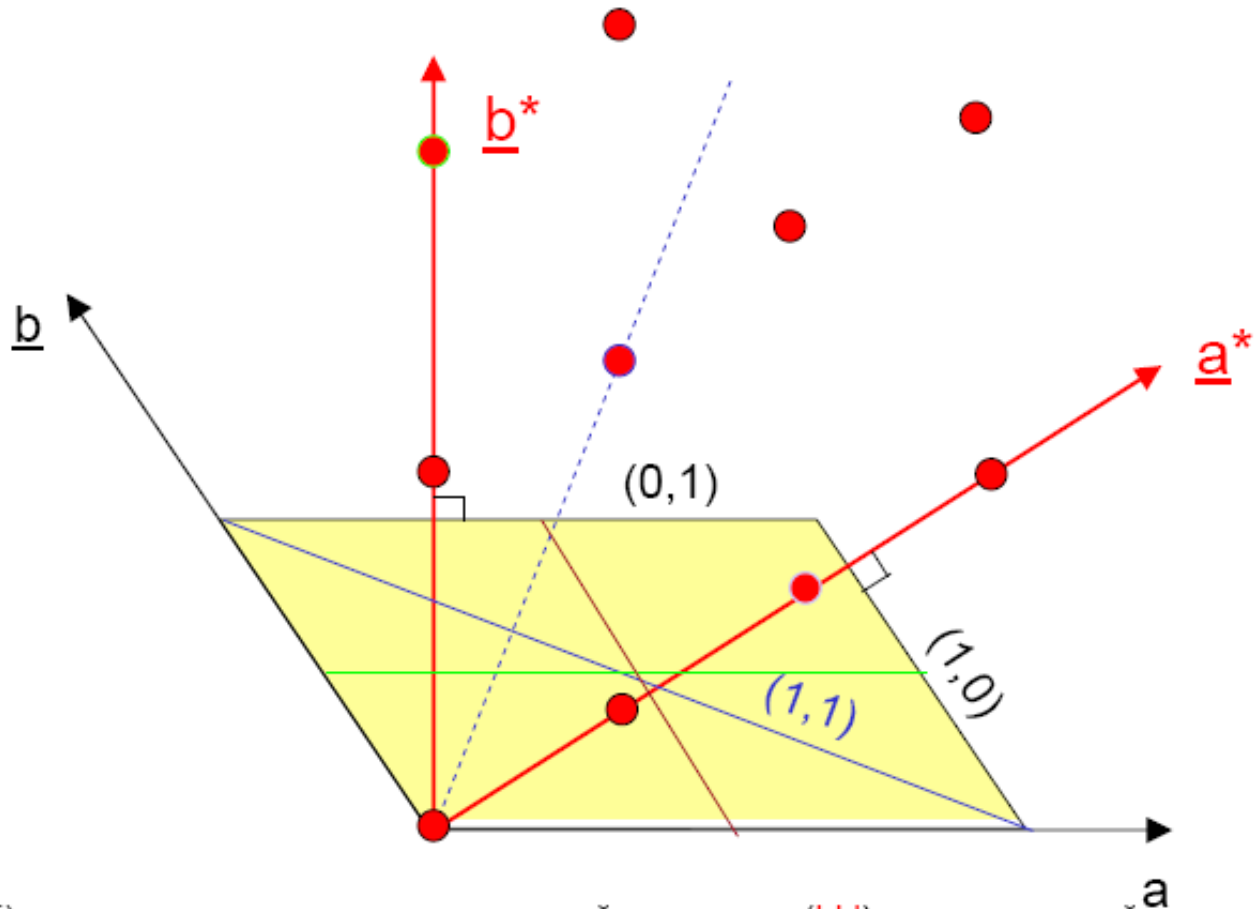
$$\underline{a}^* \cdot \underline{b} = 0 \quad \underline{a}^* \cdot \underline{c} = 0 \quad \underline{a}^* \cdot \underline{a} = 2\pi$$

$$\underline{b}^* \cdot \underline{c} = 0 \quad \underline{b}^* \cdot \underline{a} = 0 \quad \underline{b}^* \cdot \underline{b} = 2\pi$$

$$\underline{c}^* \cdot \underline{a} = 0 \quad \underline{c}^* \cdot \underline{b} = 0 \quad \underline{c}^* \cdot \underline{c} = 2\pi$$

Решетка, построенная на элементарных векторах трансляций \underline{a}^* , \underline{b}^* и \underline{c}^* , называется **Обратной Решеткой**, а \underline{a}^* , \underline{b}^* и \underline{c}^* *векторами обратной решетки*

ПОСТРОЕНИЕ ОБРАТНОЙ РЕШЕТКИ

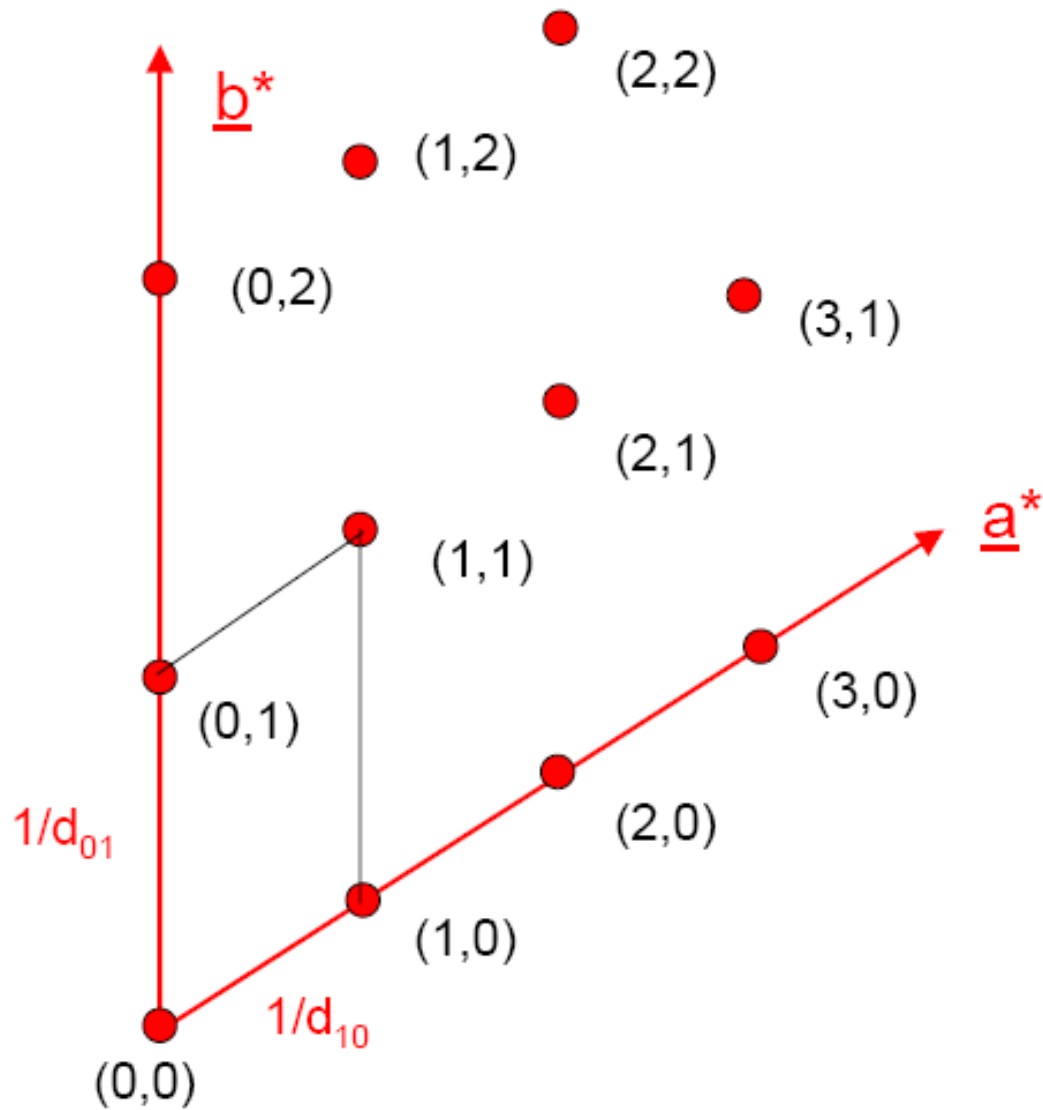


(i) проводим перпендикуляр к каждой плоскости (hkl) из узла прямой решетки, выбранного как начало координат

(ii) На линии перпендикуляра ставим точку на расстоянии $1/d_{hkl}$ от начала координат

Таким образом, кристаллографические плоскости могут быть заданы как набор точек в обратном пространстве

ПОСТРОЕНИЕ ОБРАТНОЙ РЕШЕТКИ



ДИФРАКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Методы дифракционного анализа структуры

Рентгенография

при прохождении через кристалл взаимодействует с электронными оболочками атомов, и дифракционная картина отражает распределение электронной плотности ρ в веществе $\rho(x, y, z)$

$$\lambda = (0.7-3) \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

Электроннография

электроны таких энергий, что они взаимодействуют не с электронными оболочками, а с электростатическим полем атома

$$\lambda = (3-6) \cdot 10^{-12} \text{ м}$$

Нейтроннография

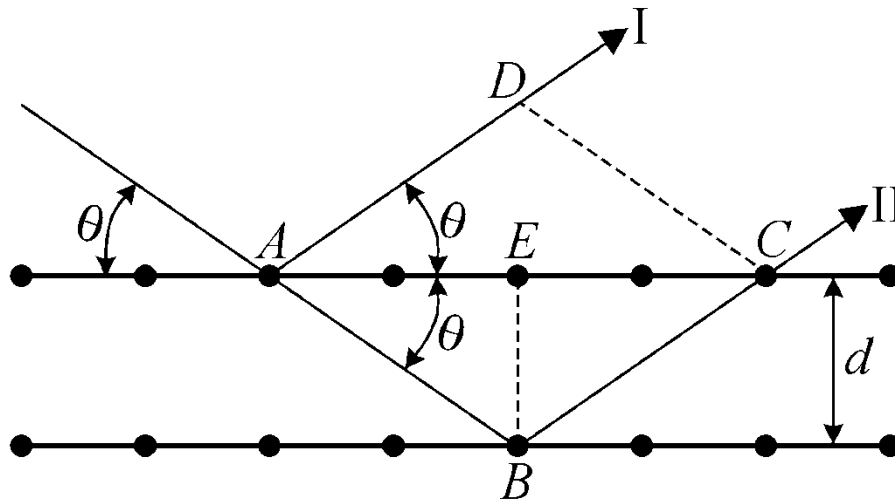
нейтроны взаимодействуют с дельтаобразным потенциалом ядерных сил

$$\lambda = 10^{-10} \text{ м}$$

ДИФРАКЦИЯ РЕНГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КРИСТАЛЛАХ

Процесс поглощения энергии падающего излучения и отдачи этой энергии при испускании сферической волны той же длины называется **когерентным рассеянием** падающего излучения.

Энергия излучения рассеивается в разных направлениях с различной интенсивностью. Вид картины рассеяния будет зависеть от сорта атомов, расстояний между ними, частоты падающего излучения и ряда других факторов.



Разность хода отраженных лучей I и II $\Delta = (AB + BC) - AD$

Условие возникновения интерференционного максимума
(закон Вульфа–Брэггов):

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

ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛОВ

Дефекты структуры — нарушения периодичности и равновесия.

Структурно-чувствительные свойства кристаллов: *ионная* и *полупроводниковая электропроводность*, *фотопроводимость*, *люминесценция*, *прочность* и *пластичность*, *окраска* и ряд других свойств.

Структурно-чувствительны (зависят от дефектов структуры): процессы *роста кристаллов*, *рекристаллизации*, *пластической деформации*, *диффузии*.

Фонон — квант энергии колебаний кристаллической решетки назван.

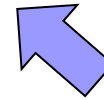
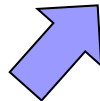
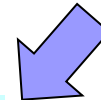
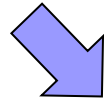
Изменение
расстояний
частицы до
ближайших
соседей

Смещение атома
(иона) из узла в
междоузлие

**Дефекты
структуры**

Отсутствие атома
(иона) в каком-
либо узле решетки

Временное местное нарушениями
структуры, вызванное видимым,
рентгеновским и γ -излучениями, потоком α -
частиц или нейтронов



ТИПЫ АТОМНЫХ ДЕФЕКТОВ РЕШЕТКИ

Точечные (нульмерные) дефекты	Во всех трех измерениях не превышают одного или нескольких межуатомных расстояний	Вакансии, атомы в междоузлиях	Нагревание, облучение быстрыми частицами
		Примесные атомы, ди- и тривакансии	
Линейные (одномерные) дефекты	Протяженные в одном измерении (на расстояния, сравнимые с размером кристалла)	Краевые и винтовые дислокации, микротрещины	Пластическая деформация кристалла в процессе роста и при последующих обработках
Поверхностные (двумерные) дефекты	Простираются в двух измерениях на расстояния, сравнимые с размером кристалла	Плоскости двойникования, границы зерен и блоков, стенки доменов, дефекты упаковки, поверхность кристалла	
Объемные (трехмерные) дефекты		Микропустоты, поры, частицы другой фазы, включения	

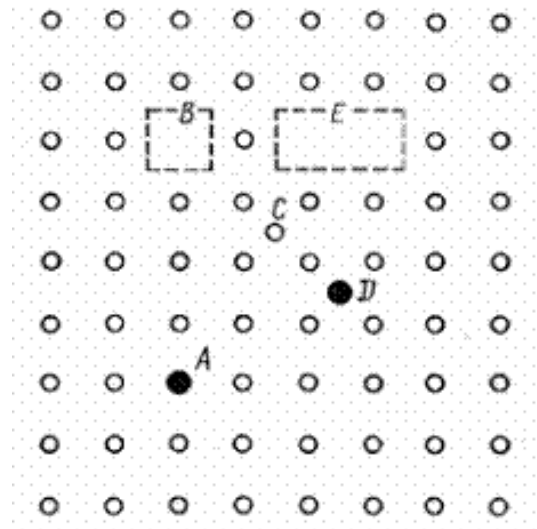
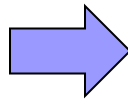
ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ (0-МЕРНЫЕ)

Точечный дефект – нарушение кристаллической структуры, размеры которого во всех трех измерениях сравнимы с одним или несколькими межузельными расстояниями.

Вакансии — отсутствие атома или иона в узле кристаллической решетки

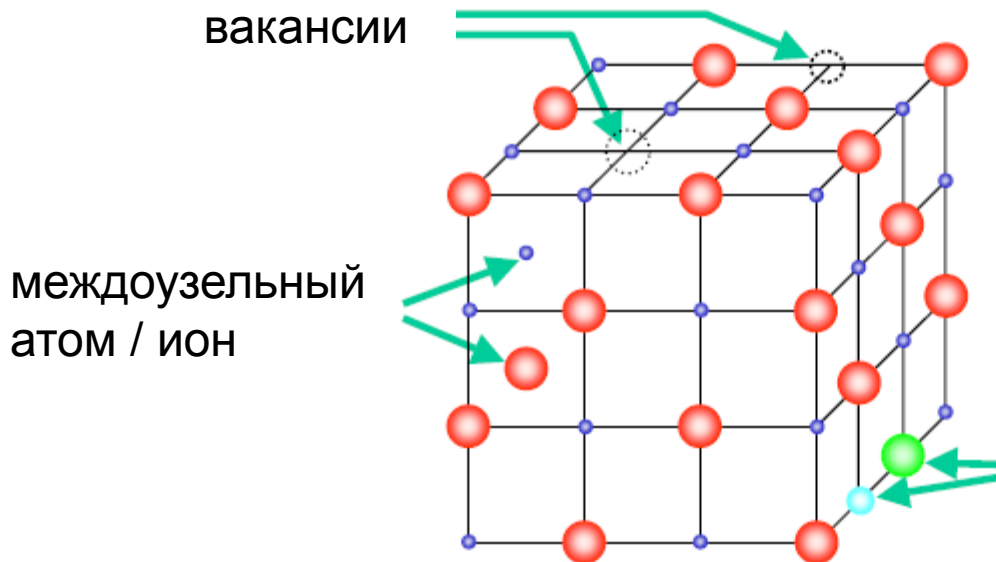
Внедренные, или межузельные, атомы или ионы, располагающиеся на незаконном месте между узлами

Основные типы
дефектов в
кристаллической
решетке



ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ (0-МЕРНЫЕ)

дефекты в атомной / ионной решетке



электронные дефекты

- электроны (e)
- дырки (h)

Энергия образования одной вакансии в кристалле германия 2 эВ, в кремнии— 2,3 эВ.

Точечные дефекты в твердых телах связаны с электрическими свойствами (полупроводники)

Чтобы образовать вакансию в кристалле германия, нужно разорвать четыре связи тетраэдрического окружения атома, на каждую из которых приходится энергия порядка 0,5 эВ.

Примеси замещения заменяют частицы основного вещества в узлах решетки. Они внедряются в решетку тем легче, чем ближе атомные (ионные) радиусы примесного и основного вещества.

Примеси внедрения занимают междоузлия и притом тем легче, чем больше объем пространства между атомами

Как в **примесном**, так и в **стехиометрическом** кристалле вакансии и внедренные атомы могут возникать при росте кристалла, в ходе пластической деформации или термической обработки, при диффузии, в результате радиационного воздействия.

Энергия образования одной вакансии имеет порядок **электрон-вольта** ($1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$), для внедренного атома — несколько электрон-вольт.

Вакансии могут объединяться в дивакансии, тривакансии, вакансионные тетраэдры. Скопления многих вакансий — **кластеры** (cluster (англ.) — пучок, гроздь) — образуют **поры, пустоты**.

Междоузельные атомы могут объединяться в гантель, в линейную конфигурацию **кроддион** — (crowd (англ.) — толпа) или же собираться в пластины.

Для меди (ГЦК-структура) при комнатной температуре энергия образования (эВ) составляет:

Для одиночной вакансии	~0,9– 1,0
Для междоузельного объемно-центрированного атома	2,4
Для гантели вдоль $\langle 100 \rangle$	2,7 – 2,8
Для гантели $\langle 111 \rangle$	4,1

Упругие смещения в области, окружающей точечный дефект, ***убывают пропорционально $1/r^3$*** , где r —расстояние от дефекта.

Точечные дефекты могут двигаться через кристалл, взаимодействовать друг с другом и с другими дефектами. Встречаясь друг с другом, вакансии и междоузельный атом могут ***аннигилировать***.

Для каждой температуры может быть такая концентрация точечных дефектов, при которой затрата энергии на образование точечных дефектов компенсируется приростом энтропии, т. е. сохраняется условие минимума внутренней энергии и кристалл остается в состоянии термодинамического равновесия.

Равновесная концентрация точечных дефектов зависит от температуры:

$$(n/N) \sim e^{-E/(kT)},$$

где N — общее число атомов в единице объема кристалла,

n — число дефектов в том же объеме,

E — энергия активации дефекта, равная работе его образования,

k — постоянная Больцмана.

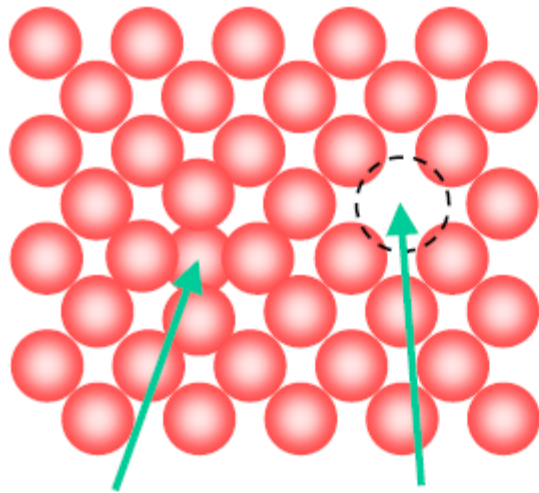
В ионных и полупроводниковых кристаллах точечные дефекты обладают электрическими зарядами: внедренный катион положителен, внедренный анион отрицателен.

Условие *электронейтральности* обеспечивается образованием равного количества положительно и отрицательно заряженных дефектов, или образованием сложных дефектов, или образованием свободных электронов или их вакансий («дырок»).

ДЕФЕКТЫ ПО ФРЕНКЕЛЮ

Точечные дефекты в виде совокупности атомов в междоузлиях и вакансий называют дефектами по Френкелю.

Парные дефекты по Френкелю



атом /ион в
междоузлии

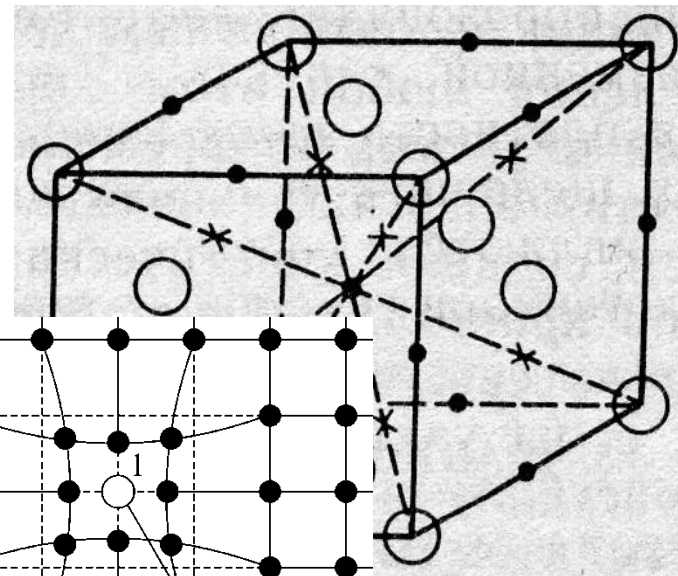
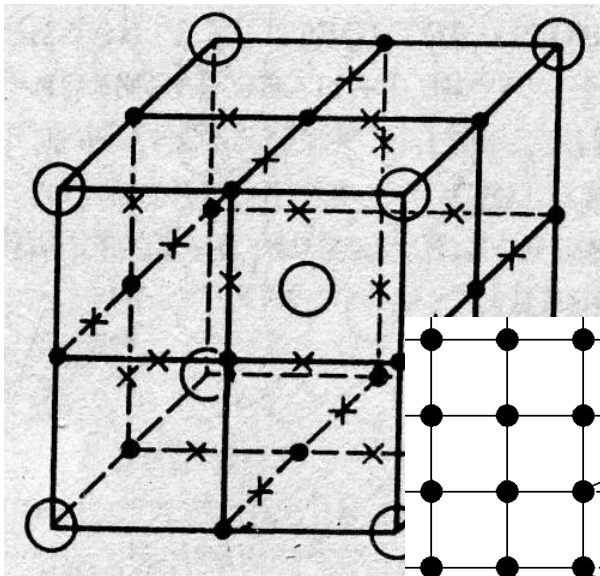
вакансия

Равновесная концентрация дефектов в кристалле зависит от температуры:

$$N_v = N \cdot \exp\left(-\frac{Q_v}{kT}\right)$$

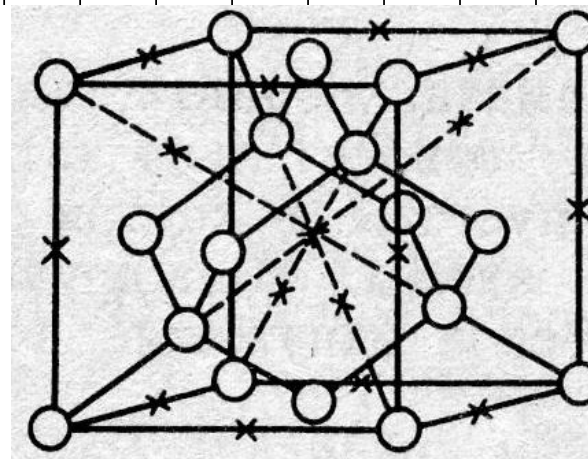
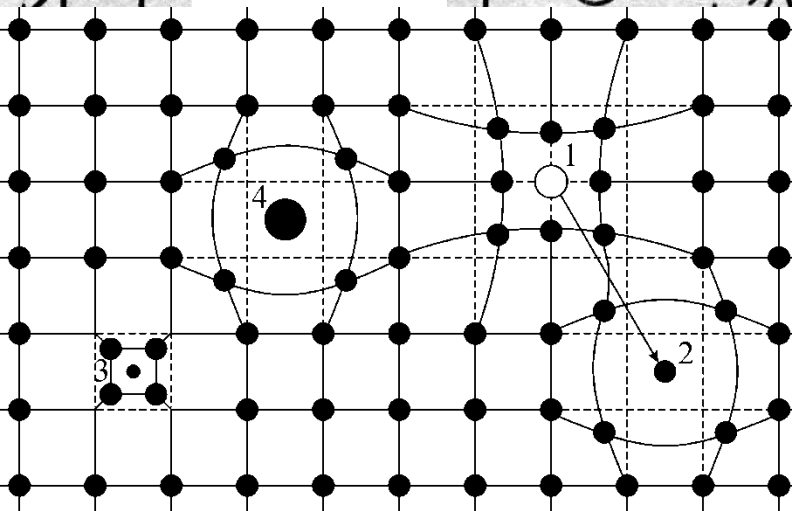
- N_v : число вакансий
 N : число узлов решетки
 Q_v : энергия образования дефекта
 T : термодинамическая температура
 k : Постоянная Больцмана
 $k = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J /atom}\cdot\text{K}$
or $8,62 \times 10^{-5} \text{ eV /atom}\cdot\text{K}$

interstitial sites can only be occupied by small atoms / ions



Расположение между
ГЦК-решет
x – тетраэдрич
o – октаэдрич

междоузлий в
сетке:
ические;
ические

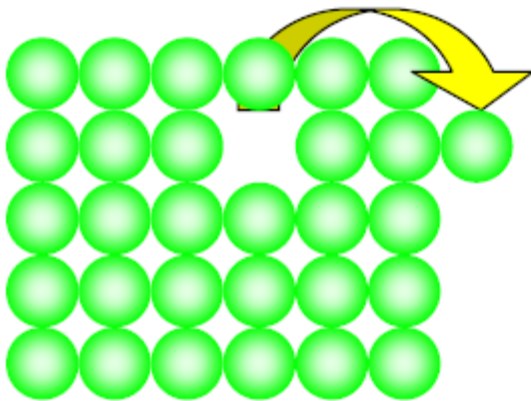


Расположение тетраэдрических
междоузлий в структуре алмаза:
x – междоузлие;
o – атом

ДЕФЕКТЫ ПО ШОТТКИ

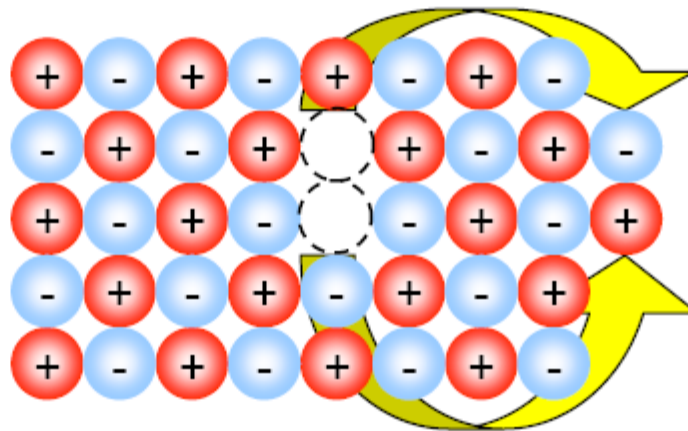
Обычно встречаются в кристаллах с плотной упаковкой атомов, где образование междоузельных атомов затруднено и энергетически не выгодно.

- ковалентный кристалл: вакансия



$$N_s = N \cdot e^{\left(\frac{-Q_s}{kT}\right)}$$

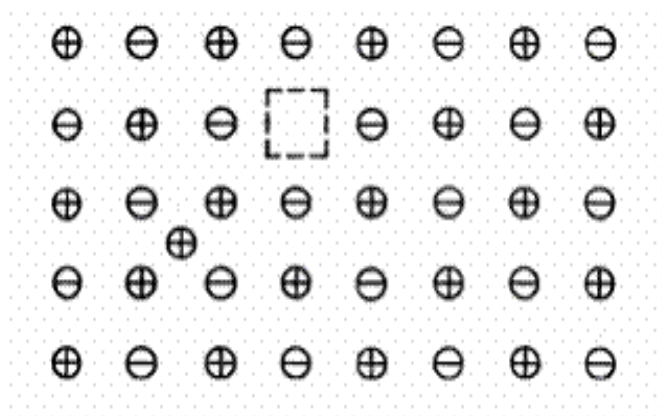
- Ионный кристалл: пара вакансий



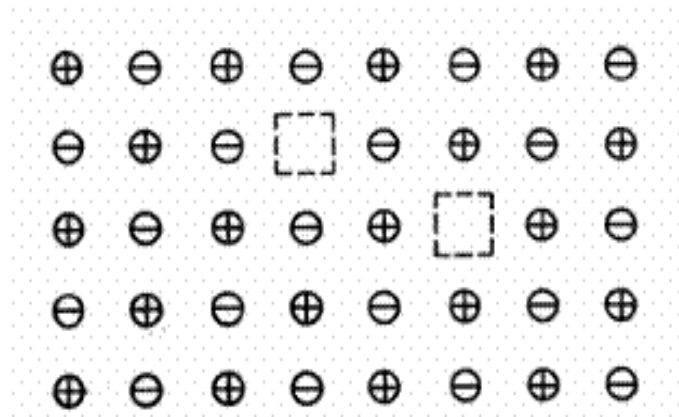
$$N_s^- = N_s^+ = N \cdot e^{\left(\frac{-Q_s}{2kT}\right)}$$

N_s : number of vacancies
 N : number of lattice sites
 Q_s : activation energy
 T : absolute temperature in kelvins
 k : Boltzmann's constant

Образование дефектов по Шоттки уменьшает плотность кристалла, поскольку атом, образовавший вакансию, диффундирует на поверхность кристалла (часто в ЦГК)



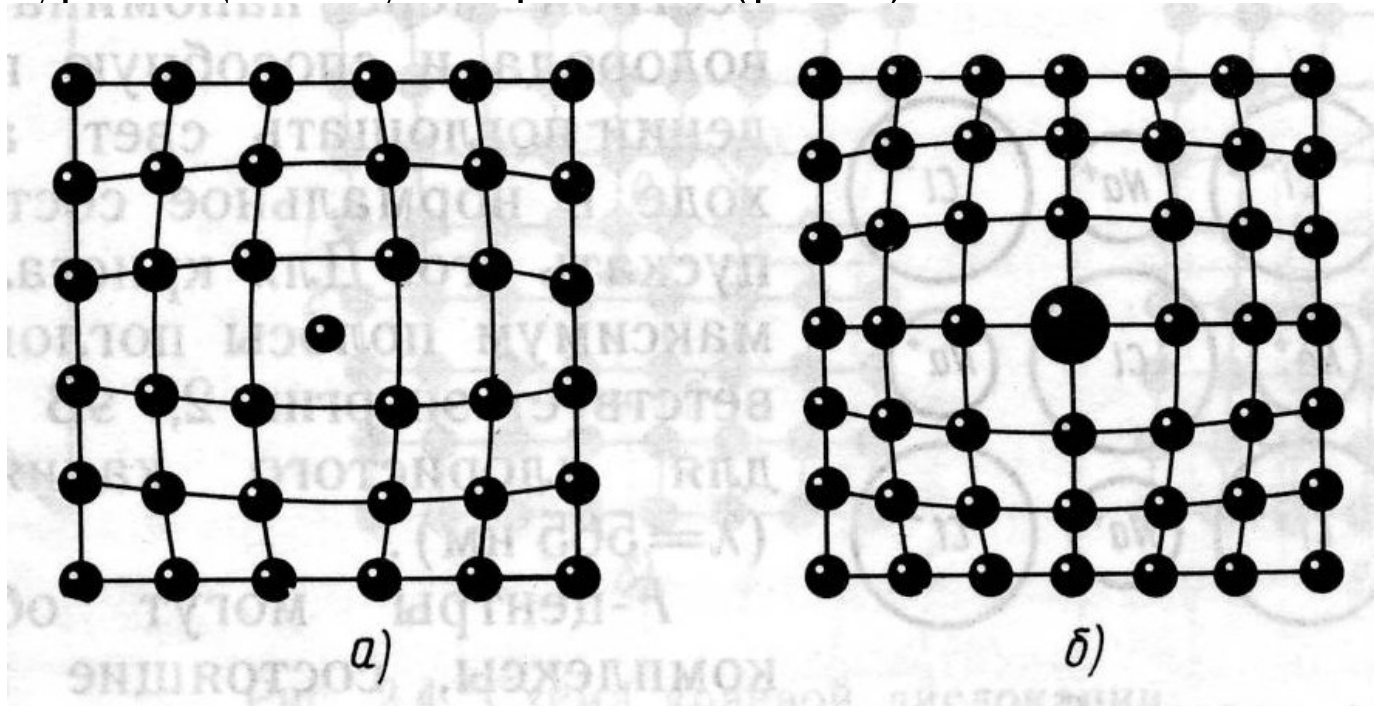
Дефекты Шоттки в
структуре типа NaCl



Дефекты Френкеля в
структуре типа NaCl

ПРИМЕСИ

Процесс растворения состоит в том, что примесные атомы внедряются в промежутки между атомами кристалла (рис. *a*) или замещают часть этих атомов, размещаясь в узлах решетки (рис. *б*).



Примесные атомы внедрения (а) и замещения (б)

ЦЕНТРЫ ОКРАСКИ

Окраска обусловлена появлением в кристаллах особых точечных дефектов — **центров окраски**, поглощающих свет в видимой области спектра.

Возникновение *F*-центра (состоит из анионной вакансии, которая удерживает при себе свободный электрон):

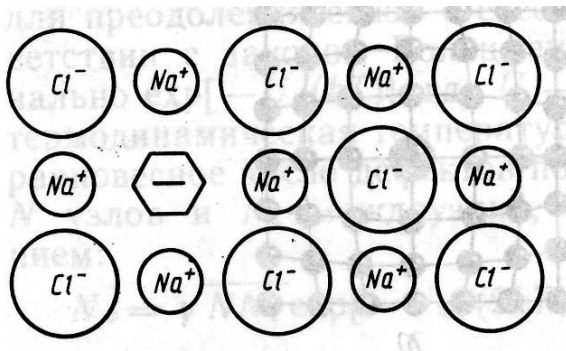


Схема модели F-центра
(анионная вакансия,
захватившая электрон)

При нагревании NaCl в парах натрия в кристалле возникает избыточное количество атомов Na, концентрация которых может достигать $10^{16}-10^{19}$ см⁻³. Нарушение стехиометрии приводит к возникновению анионных вакансий и появлению вокруг них нескомпенсированного положительного заряда катионов. Положительно заряженный центр захватывает свободный электрон ионизированных атомов натрия, образуя систему, способную при возбуждении поглощать свет, а при переходе в нормальное состояние – испускать его.

Длины волн (нм) для F-полос поглощения нескольких кристаллов:

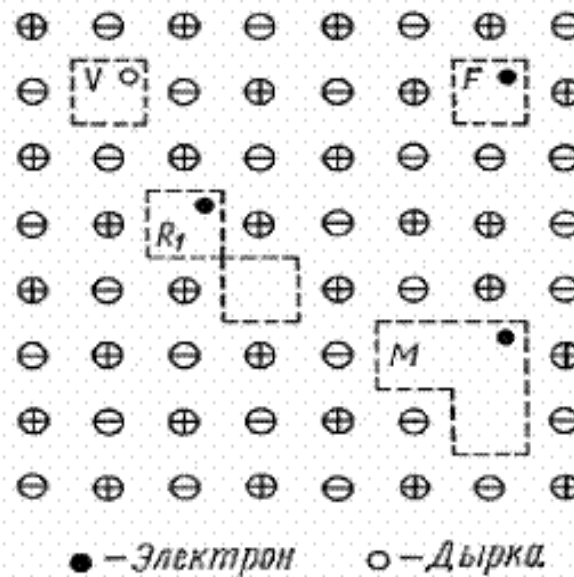
NaCl	NaBr	KCl	KI	RbCl
465	540	563	685	624

Модели некоторых центров окраски в щелочно-галогидных кристаллах:

V-центр, состоящий из катионной вакансии и дырки;

R₁-центр, представляющий собой F-центр + анионная вакансия, или, что то же самое, две анионные вакансии + электрон;

M-центр, т. е. F-центр + анионная и катионная вакансии.



Схемы нескольких центров окраски в структуре типа NaCl

ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

Плотность материала уменьшается при возрастании концентрации вакансий.

Диффузия в кристаллах осуществляется так, что диффундирующий атом движется в определенном направлении путем перескоков в вакантные места решетки; этот же процесс можно рассматривать как дрейф вакансий в противоположном направлении. Внедренные атомы и вакансии деформируют решетку, поэтому для образования вакансии рядом с внедренным атомом — собственным или примесным — требуется меньшая энергия, чем для образования ее в любом другом участке кристалла; именно поэтому вакансия взаимодействует с диффундирующим атомом.

Очень велико влияние *точечных дефектов* на электропроводность кристалла.

Ионная проводимость в кристаллах определяется движением заряженных точечных дефектов — вакансий, междоузельных собственных или примесных ионов.

ОБРАЗОВАНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ

Точечные дефекты в кристалле образуются в процессе *роста*, *пластической деформации* или *термообработки*.

РАДИАЦИОННЫЕ ДЕФЕКТЫ

1. Смещение электронов и ионизация атомов, из-за чего в кристалле создается неравновесное распределение зарядов. После снятия воздействия равновесие зарядов постепенно восстанавливается. Характеристическое время перехода от неравновесного распределения зарядов в кристалле к равновесному определяется соотношением

$$\tau = \epsilon / \sigma,$$

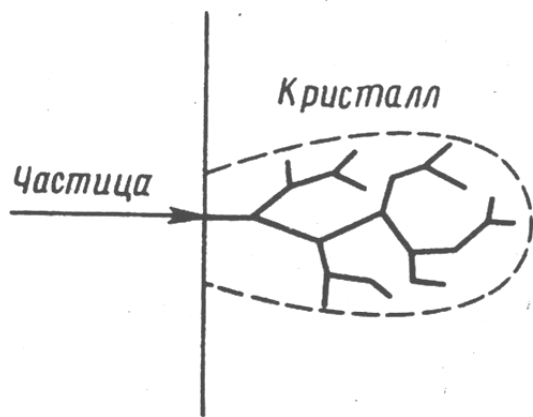
где ϵ – диэлектрическая проницаемость, σ – проводимость материала.

2. Смещение частиц из их положений равновесия.

3. Образование продуктов ядерных реакций, т. е. появление в кристалле атомов, отличных от атомов основного вещества.

4. Тепловые клинья и клинья смещения.

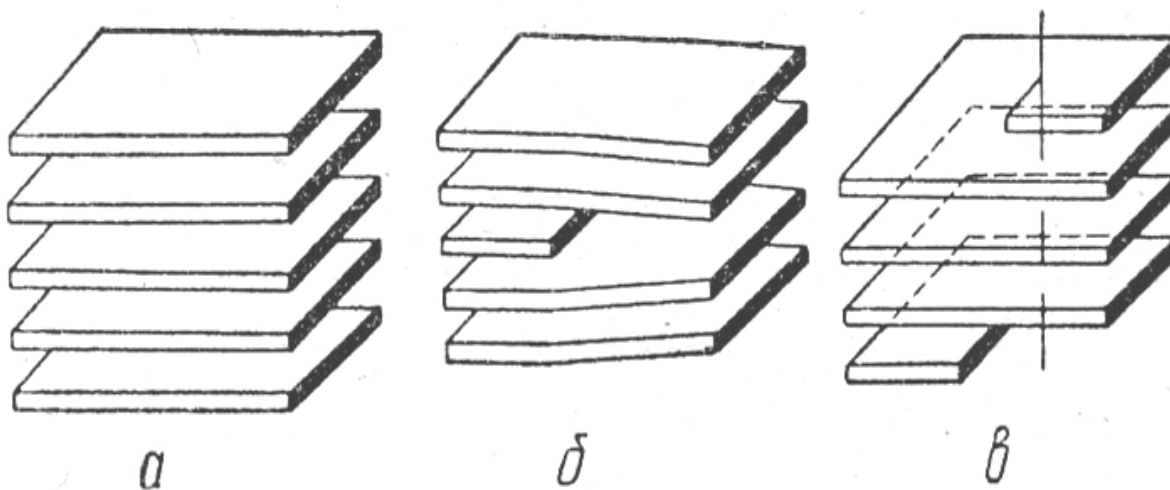
Каждый атом кристалла, получивший от быстрой частицы энергию $E > E_d$, может сместиться в междоузлие, в результате чего одновременно возникают вакансии и атом в междоузлии. При этом, если значение энергии смещенных атомов (*атомов отдачи*), значительно превышает E_d , то эти первичные атомы отдачи могут, в свою очередь, создавать вторичные атомы отдачи, вторичные – третичные и т. д. до тех пор, пока энергия смещенных атомов не приблизится к пороговому значению E_d . Таким образом, возникает каскад атомных смещений.



Схематическое изображение
каскада смещений

ЛИНЕЙНЫЕ ДЕФЕКТЫ

К линейным дефектам относят *краевые* и *винтовые дислокации*.



Строение идеального кристалла (а) в виде семейства параллельных плоскостей, краевая дислокация (б) – если одна из плоскостей обрывается в кристалле, винтовая дислокация (в) – атомная плоскость, закрученная по винтовой линии

КРАЕВЫЕ ДИСЛОКАЦИИ

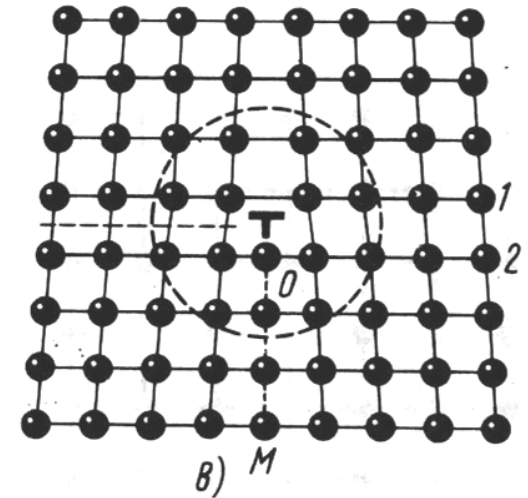
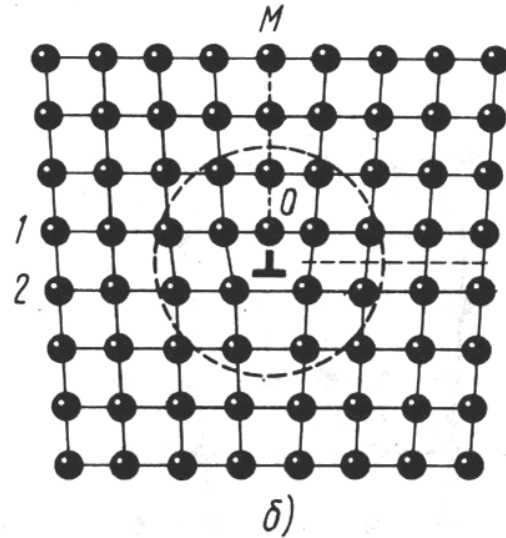
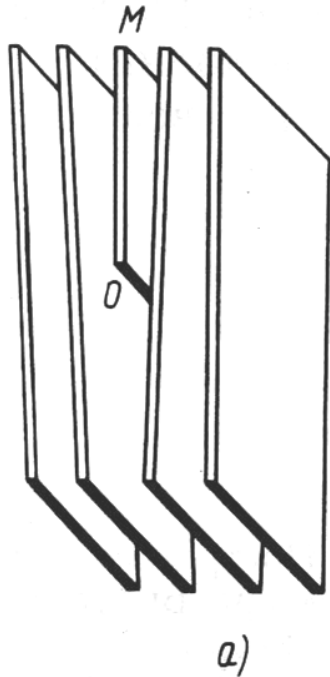
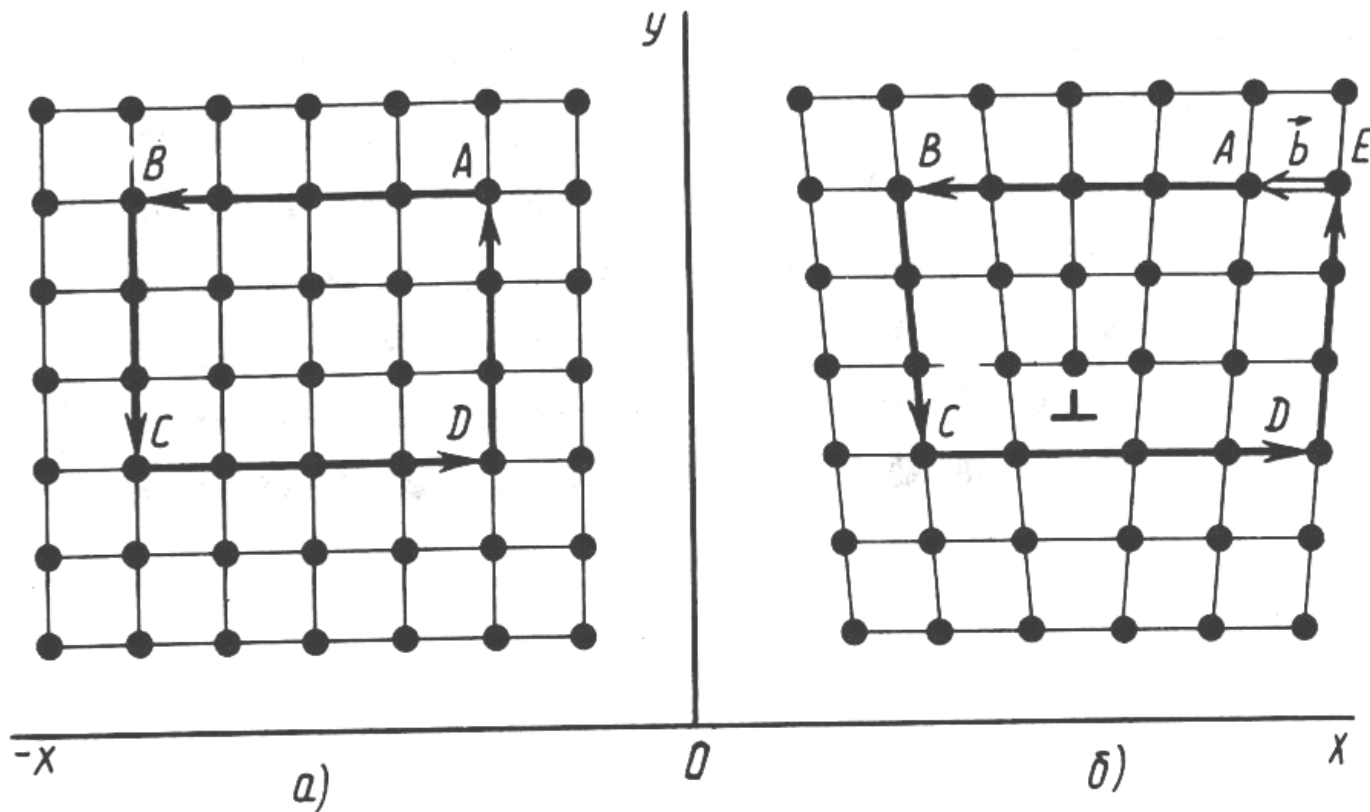


Схема краевой дислокации:

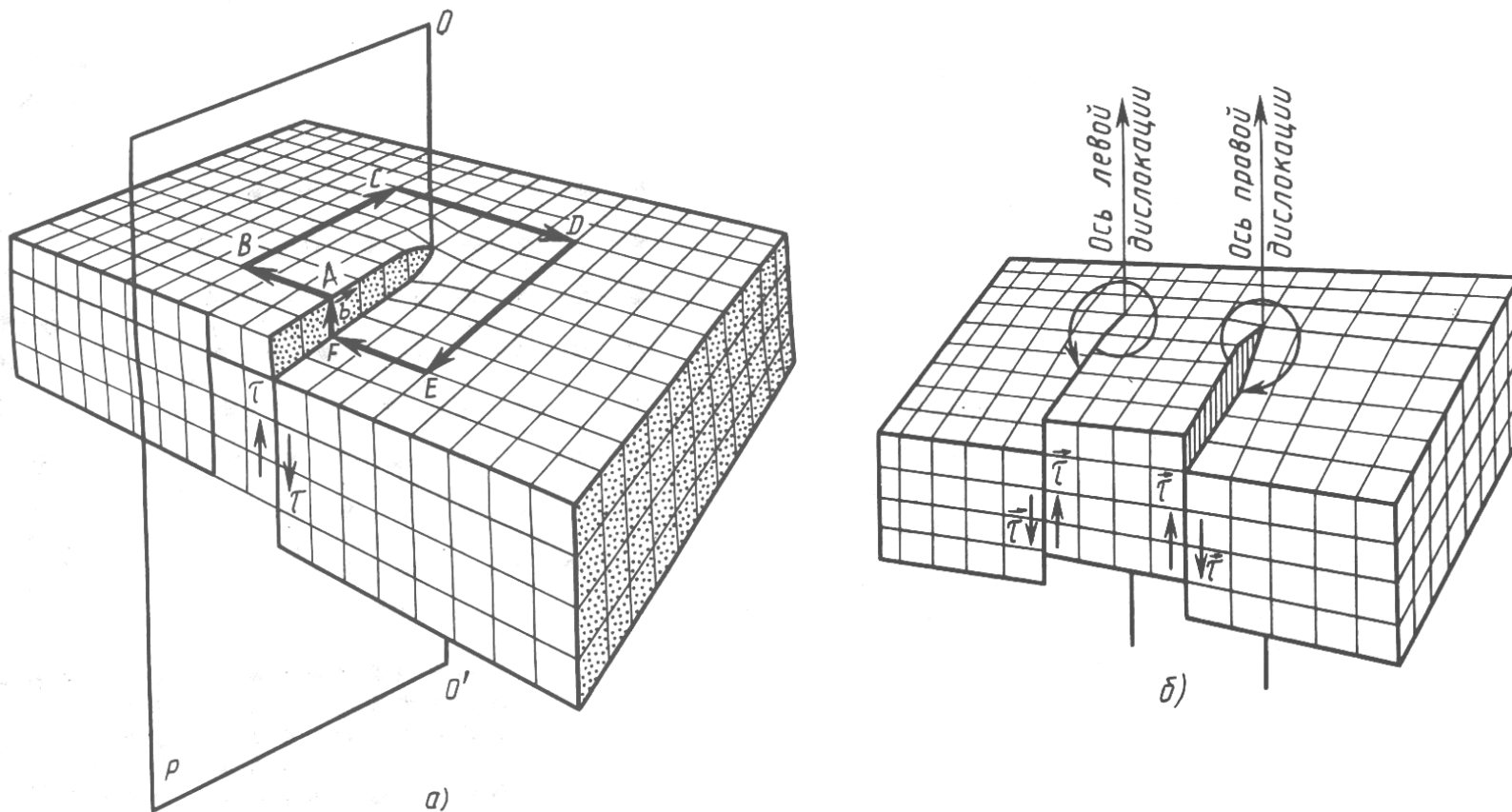
а – край плоскости М, обрывающийся внутри кристалла, образует краевую дислокацию; б – расположение атомов у центра О положительной дислокации; в – то же, у центра отрицательной дислокации. Пунктиром обозначена область, охваченная дислокацией.

КОНТУР И ВЕКТОР БЮРГЕРСА



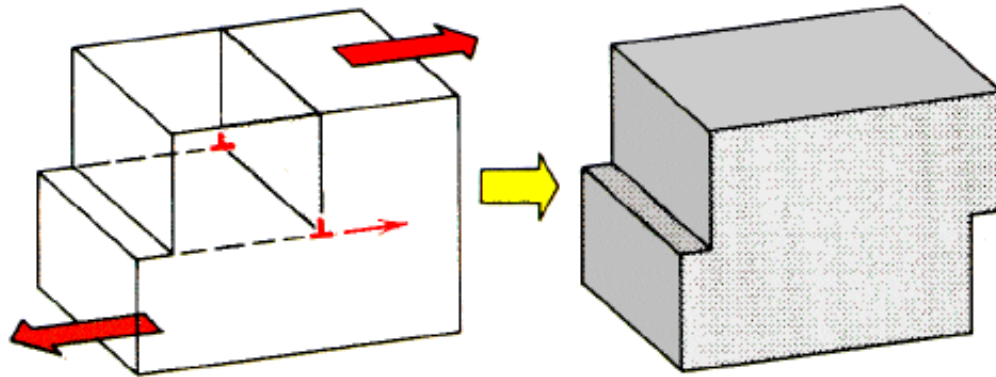
Построение контура и вектора Бюргерса: а) – контур Бюргерса ABCDA для области кристалла, не содержащей краевой дислокации; б) – контур Бюргерса ABCDE для области кристалла, содержащей краевую дислокацию; \vec{b} – вектор Бюргерса


ВИНТОВЫЕ ДИСЛОКАЦИИ



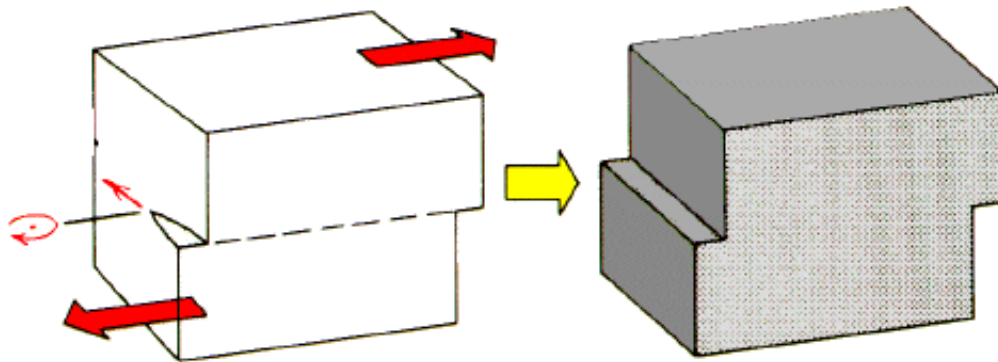
Контур Бюргера ABCDEF и вектор Бюргера b для винтовой дислокации (а); \bar{b} – правая и левая винтовые дислокации


КРАЕВЫЕ И ВИНТОВЫЕ ДИСЛОКАЦИИ



edge-dislocation 

dislocation line motion (\rightarrow)
parallel to the applied
shear stress τ

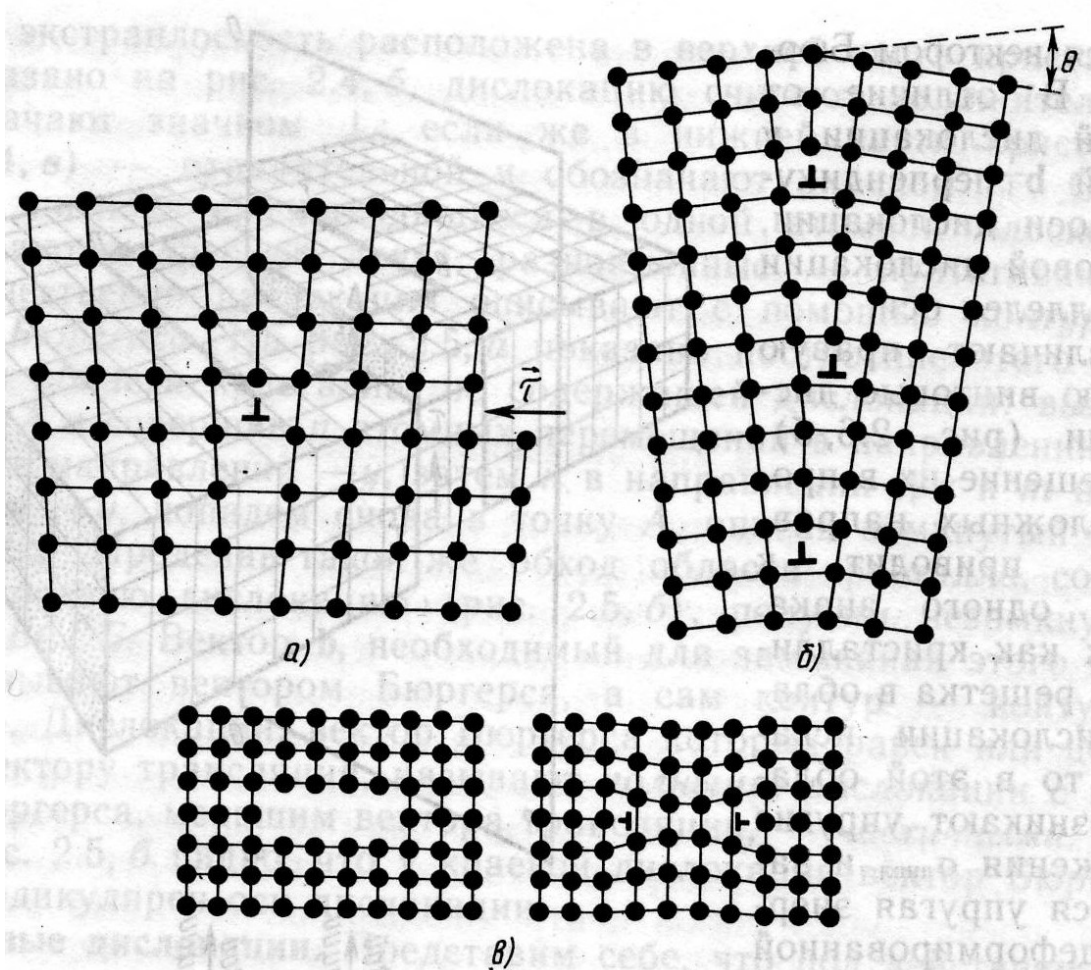


screw-dislocation 

dislocation line motion (\rightarrow)
perpendicular to the applied
shear stress τ

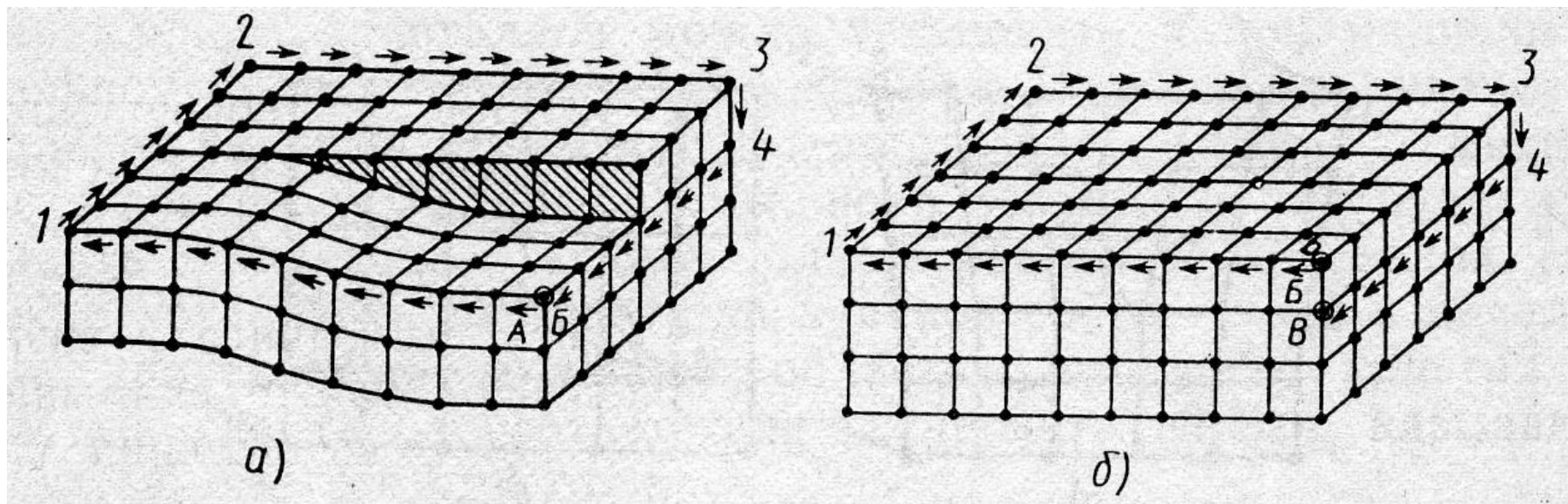


ВОЗНИКНОВЕНИ ДИСЛОКАЦИЙ В КРИСТАЛЛЕ



а – при пластической деформации (сдвиге одной части решетки относительно другой под действием касательных напряжений τ); **б** – на границах блоков монокристаллов и зерен поликристалла (θ – угол между блоками); **в** – при «захлопывании» вакансий

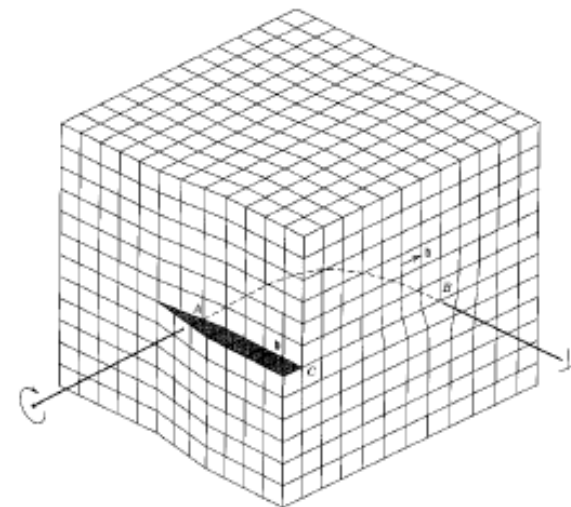
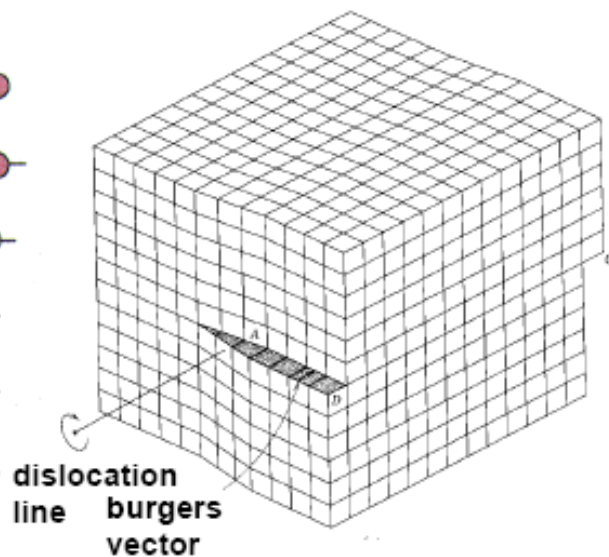
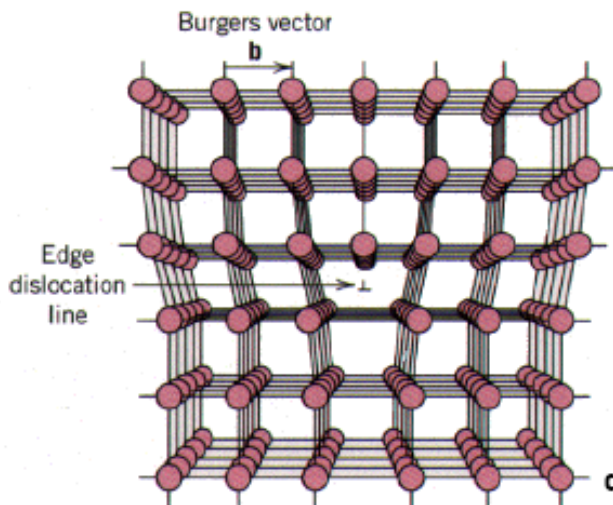
ПОСТРОЕНИЕ ВЕКТОРА БЮРГЕРСА ДЛЯ ВИНТОВОЙ ДИСЛОКАЦИИ



Контур Бюргерса винтовой дислокации:

а – реальный, б – идеальный кристалл

РАЗНЫЕ ТИПЫ ДИСЛОКАЦИЙ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ



edge-dislocation



screw-dislocation

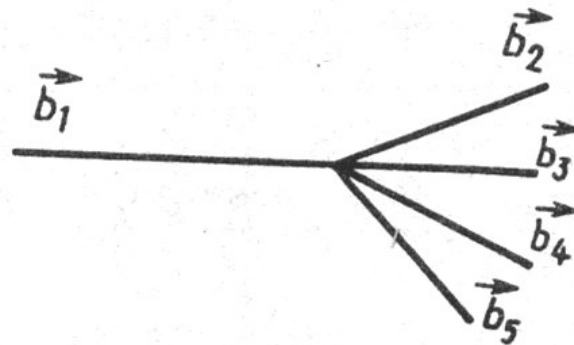


mixed type

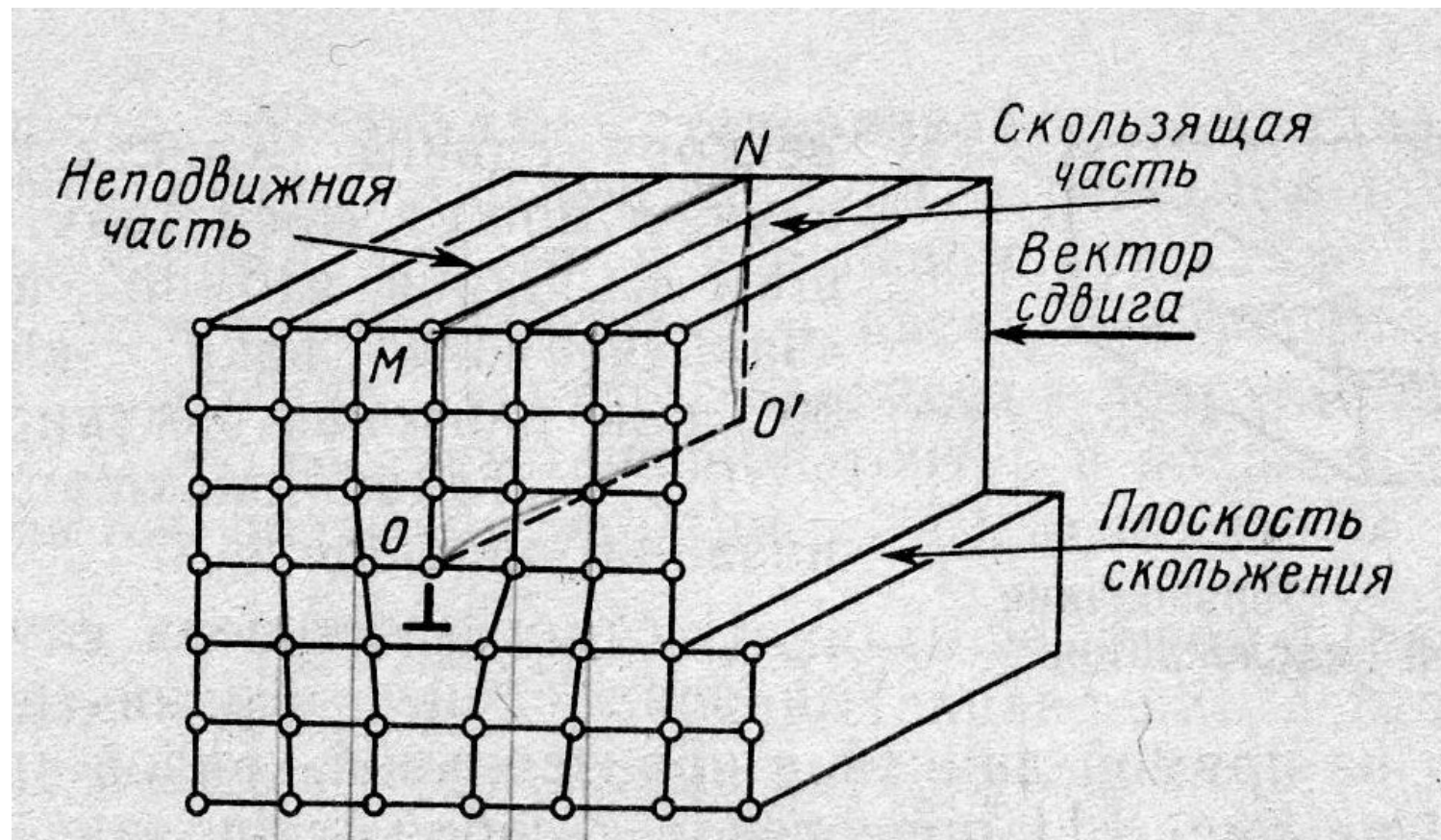
Вектор Бюргерса для контура, замыкающегося вокруг нескольких дислокаций, равен сумме векторов Бюргерса отдельных дислокаций.

Если дислокация с вектором Бюргерса \mathbf{b}_1 разделяется внутри кристалла на несколько дислокаций с векторами Бюргерса $\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, \dots, \mathbf{b}_n$, то обязательно выполняется условие:

$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3 + \dots + \mathbf{b}_n.$$

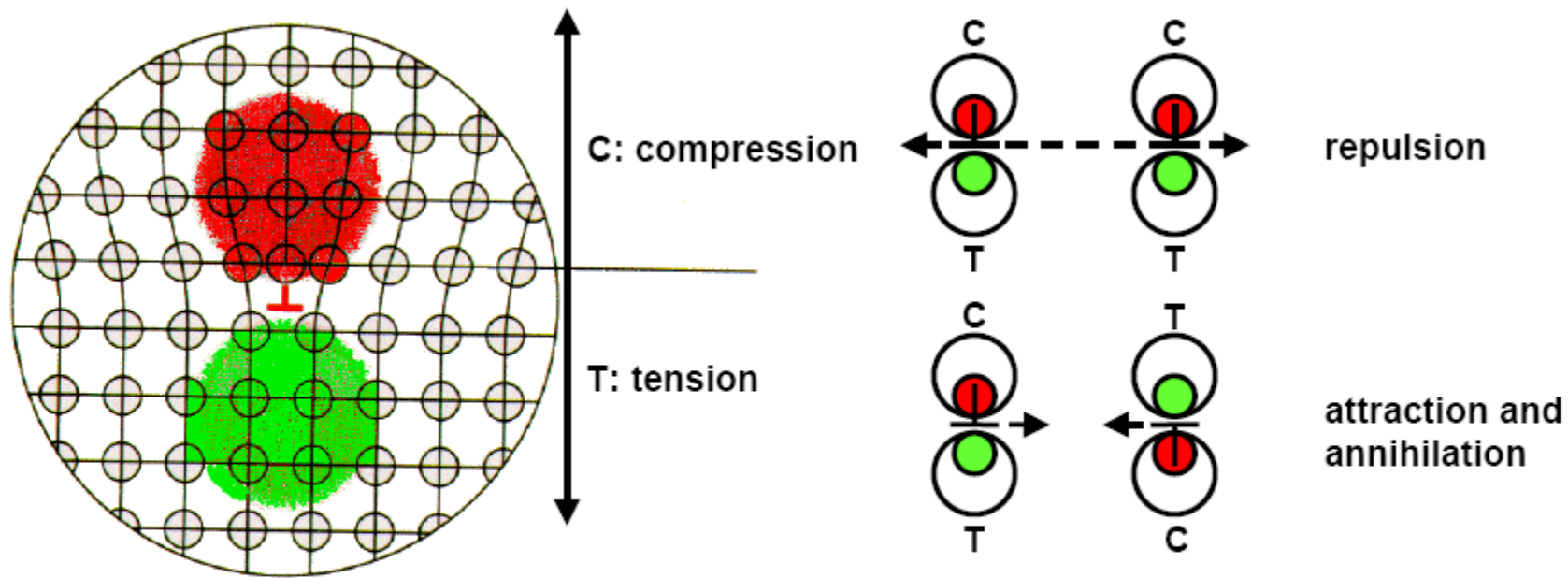


Дислокационный узел



Краевая дислокация OO' , возникшая в результате сдвига

ЛИНЕЙНЫЕ ДЕФЕКТЫ: СВОЙСТВА ДИСЛОКАЦИЙ



regions of compression and tension located around an edge dislocation

interactions between edge dislocations

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИСЛОКАЦИЙ С ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

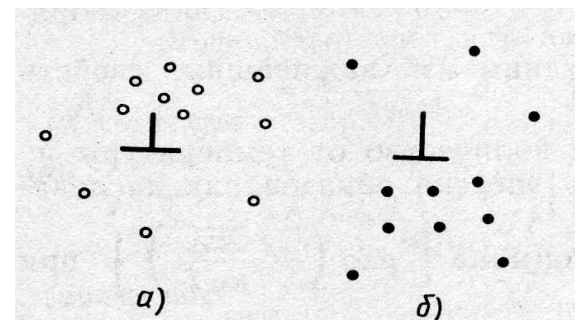
Междоузельный атом является сильным центром отталкивания и вызывает в решетке **напряжение сжатия**.

Вакансия является относительно сильным центром **растяжения**, т. к. окружающие атомы смещаются по направлению к ней.

Области сжатия и растяжения существуют и вокруг краевых дислокаций

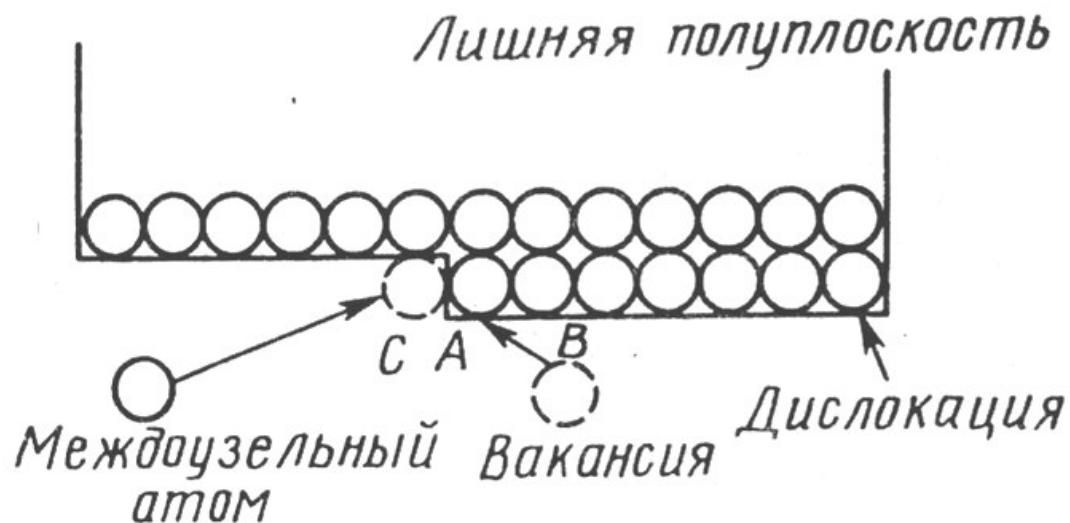
Поэтому между дислокациями, имеющими краевую компоненту, и точечными дефектами возникает упругое взаимодействие. Междоузельные атомы и вакансии притягиваются к дислокации.

В области растяжения возникает повышенная концентрация междоузельных атомов и пониженная концентрация вакансий, а в области сжатия — наоборот.



Распределение вакансий (а) и междоузельных атомов (б) вокруг краевой дислокации

Результат взаимодействия физических точечных дефектов (вакансий и междоузельных атомов) с дислокациями – их **аннигиляция** на дислокации.

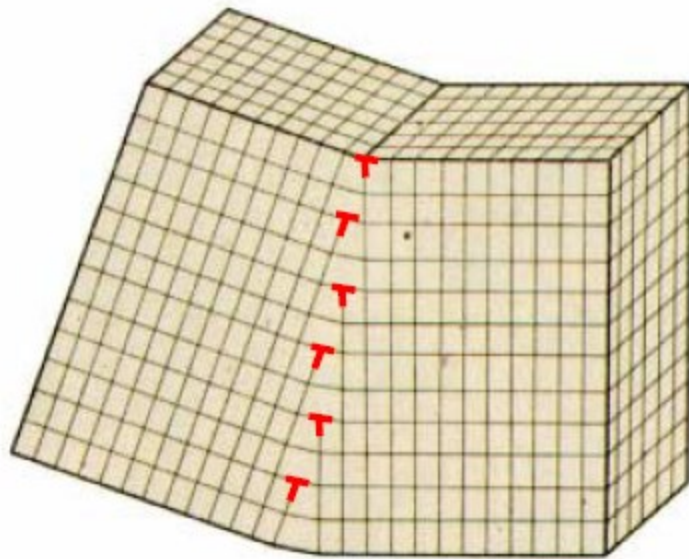


Поглощение точечных дефектов ступенькой краевой дислокации

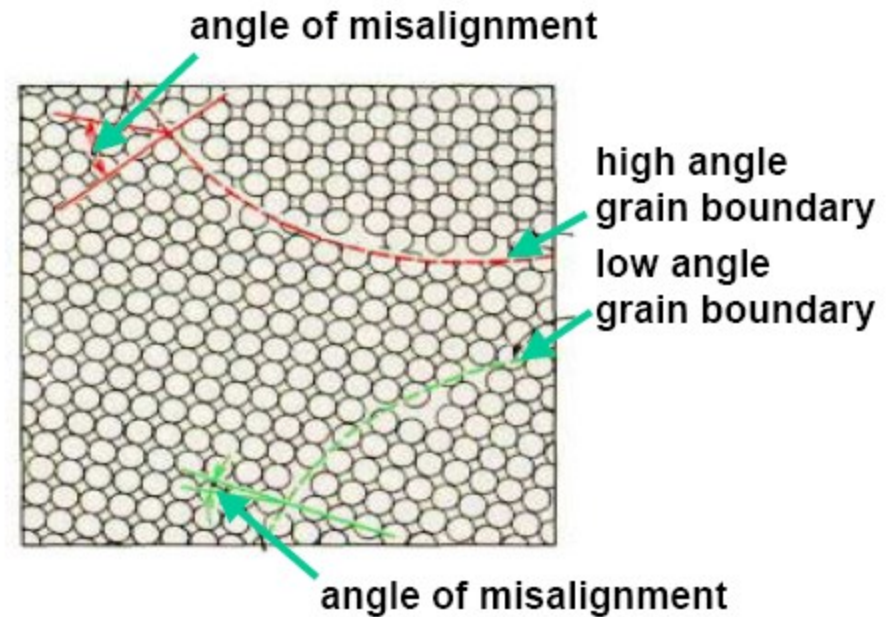
ПОВЕРХНОСТНЫЕ ДЕФЕКТЫ

- Свободные поверхности.
- Границы.
- Дефекты упаковки

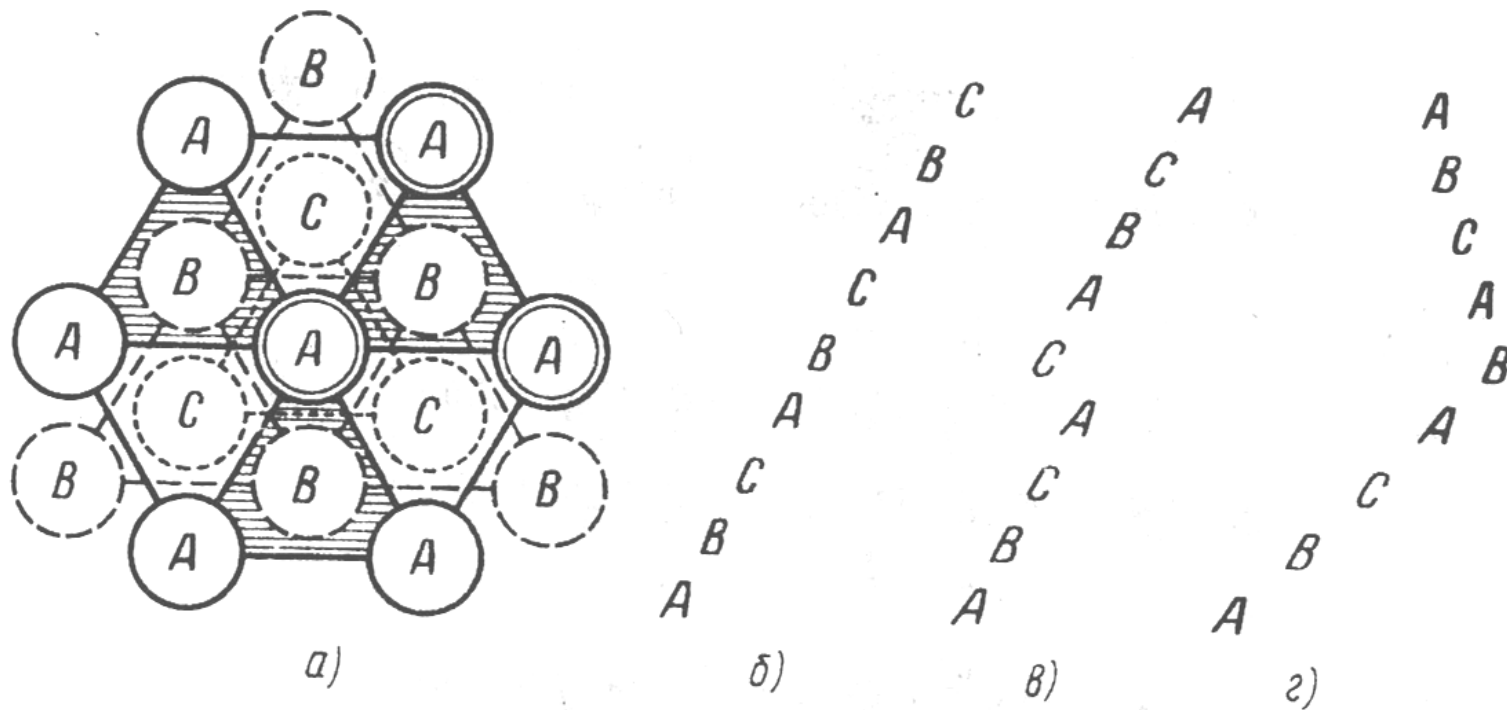
Interfacial Defects (2-dim.): Grain boundaries



grain boundary:
periodic ordering of dislocations

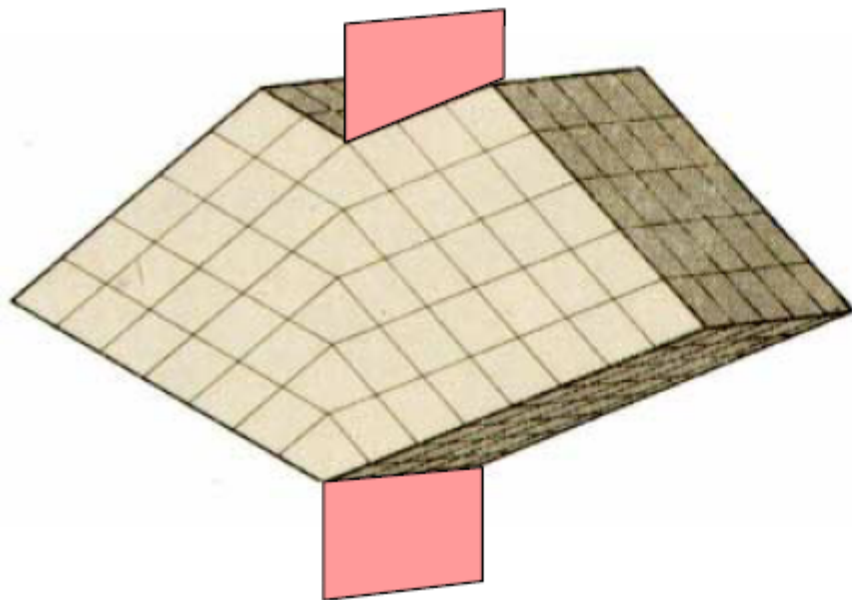


ДЕФЕКТЫ УПАКОВКИ



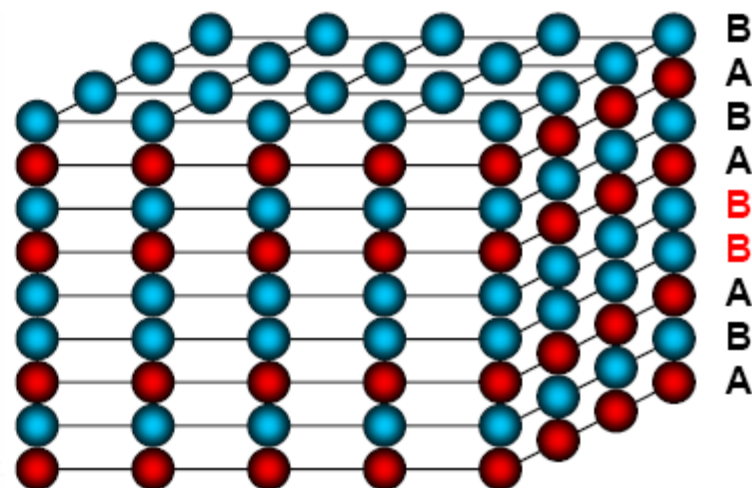
а, б – нормальная последовательность упаковки атомных плоскостей (111) ГЦК-решетки; в – дефект упаковки типа вычитания; г – дефект упаковки, приводящий к двойникованию

Interfacial Defects (2-dim.): Twins and Stacking Faults



twin boundary:

grain boundary with atoms located
in mirror image positions



stacking fault:

interruption of stacking sequence