

## ДЕФЕКТЫ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Реальные кристаллы отличаются от идеализированной модели наличием достаточно многочисленных нарушений регулярного расположения атомов. Любое отклонение от периодической структуры кристалла называют *дефектом*. Дефекты структуры оказывают существенное, порой определяющее, влияние на свойства твердых тел. Такими структурно-чувствительными, т. е. зависящими от дефектов структуры, свойствами являются электропроводность, фотопроводимость, люминесценция, прочность и пластичность, окраска кристаллов и т. д. Процессы диффузии, роста кристаллов, рекристаллизации и ряд других можно удовлетворительно объяснить, исходя из предположения об их зависимости от дефектов. В настоящее время основные сведения о дефектах необходимы не только физикам, но также конструкторам и создателям приборов на основе твердых тел, занимающимся выращиванием совершенных монокристаллов, а также другим специалистам.

### 3.1. КЛАССИФИКАЦИЯ ДЕФЕКТОВ

Классификацию дефектов обычно осуществляют по чисто геометрическим признакам, а именно по числу измерений, в которых нарушения структуры кристалла простираются на расстояния, превышающие характерный параметр решетки. Выделяют четыре класса дефектов.

**Точечные (нульмерные) дефекты.** Само их название свидетельствует о том, что нарушения структуры локализованы в отдельных точках кристалла. Размеры указанных дефектов во всех трех измерениях не превышают одного или нескольких межатомных расстояний.

К точечным дефектам относят *вакансии* (вакантные узлы кристаллической решетки\*), атомы в междоузлиях, атомы примесей в узлах или междоузлиях, а также сочетания примесей—вакансия, примесь — примесь, двойные и тройные вакансии (ди- и тривакансии и др.).

**Линейные (одномерные) дефекты** характеризуются тем, что нарушения периодичности простираются в одном измерении на расстояния, много большие параметра решетки, тогда

---

\* Еще раз подчеркнем, что кристаллическая решетка и кристаллическая структура — понятия различные. Узел решетки не обязательно совпадает с атомом в кристалле; обязательным является только идентичность расположения атомов вокруг узла. Однако при описании дефектов, для простоты, обычно считают, что узлы решетки совпадают с материальными частицами.

как в двух других измерениях они не превышают нескольких параметров.

Линейными дефектами являются *дислокации, микротрещины*. Возможно также образование неустойчивых линейных дефектов из цепочек точечных дефектов.

**Поверхностные (двухмерные) дефекты** в двух измерениях имеют размеры, во много раз превышающие параметр решетки, а в третьем — несколько параметров.

Границы зерен и двойников, дефекты упаковки, межфазные границы, стенки доменов, а также поверхность кристалла представляют собой двухмерные дефекты.

**Объемные (трехмерные) дефекты** — это микропустоты и включения другой фазы. Они возникают обычно при выращивании кристаллов или в результате некоторых воздействий на кристалл. Так, например, наличие большого количества примесей в расплаве, из которого ведется кристаллизация, может привести к выпадению крупных частиц второй фазы.

Двухмерные дефекты также могут быть следствием наличия примесей в расплаве.

Дислокации возникают в результате пластической деформации кристалла в процессе роста или при последующих обработках.

Точечные дефекты могут появиться в твердых телах вследствие нагревания (*тепловые дефекты*), облучения быстрыми частицами (*радиационные дефекты*), отклонения состава химических соединений от стехиометрии (*стехиометрические дефекты*), пластической деформации.

### 3.2. ТЕПЛОВЫЕ ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ

Механизм возникновения термодинамически равновесных точечных дефектов впервые был предложен Я. И. Френкелем. Введенные им представления просты и наглядны.

В физике хорошо известно явление сублимации — испарения твердых тел. Над поверхностью твердых тел, так же как и над поверхностью жидкости, всегда существует «пар», состоящий из атомов данного вещества. Атомы, образующие поверхностный слой кристалла, могут вследствие нагревания приобретать кинетическую энергию, достаточную для того, чтобы оторваться от поверхности и перейти в окружающее пространство. Я. И. Френкель предположил, что такой отрыв может иметь место не только для поверхностных атомов, но и для атомов внутри кристалла. Действительно, согласно основным принципам статистической физики, даже в том случае, когда средняя кинетическая энергия атомов очень мала, в кристалле всегда найдется некоторое количество атомов, кинетическая энергия которых может быть очень велика; при этом в соответ-