

Рис. 3. 6. F -центр в щелочно-галогидном кристалле

лах. Простейший такой центр — F -центр*, изображен на рис. 3.6. Он представляет собой анионную вакансию, которая, имея эффективный положительный заряд, удерживает при себе свободный электрон. Этот электрон может появиться в кристалле, например, в результате ионизации избыточного атома щелочного металла. Такой F -центр вызывает появление полос поглощения в видимой области спектра. В результате этого бесцветный щелочно-галогидный

кристалл становится окрашенным.

Точечные дефекты в ионных кристаллах оказывают большое влияние на электропроводность. Электропроводность щелочно-галогидных кристаллов обусловлена движением заряженных точечных дефектов — вакансий, междоузельных собственных или примесных ионов. Поэтому ее называют ионной проводимостью. Изучение ионной проводимости позволяет получать информацию о концентрации и состоянии точечных дефектов.

3.5. РАДИАЦИОННЫЕ ДЕФЕКТЫ

Точечные дефекты, возникающие при облучении кристаллов быстрыми частицами (нейтронами, протонами, электронами), а также осколками деления ядер и ускоренными ионами, получили название *радиационных дефектов*. В отличие от тепловых радиационные точечные дефекты термодинамически неравновесны, так что после прекращения облучения состояние кристалла не является стационарным.

Рассмотрим механизм возникновения радиационных дефектов при облучении кристаллов нейтральными и заряженными быстрыми частицами. Прохождение частиц через кристалл сопровождается сложными процессами, среди которых основными являются следующие:

- 1) упругие столкновения быстрых частиц с ядрами атомов кристалла;
- 2) возбуждение электронных оболочек атомов кристалла и их ионизация;
- 3) ядерные превращения — переход части атомов в кристалле в радиоактивное состояние и превращение их после радиоактивного распада в примесные центры.

В зависимости от природы быстрых частиц, их энергии, а также от характера связи атомов и других свойств облучаемого кристалла одни процессы могут преобладать над другими.

* От немецкого die Favbe — цвет, окраска.

Для возникновения радиационных дефектов наибольшее значение имеют упругие столкновения быстрых частиц с атомами кристалла. Если энергия, переданная в результате упругого столкновения от движущейся частицы атому мишени, превышает некоторое значение, то атом мишени, выбитый из узла решетки, оставляя вакансию, движется через кристалл. Наименьшее значение энергии E_a , которую необходимо передать одному из атомов кристалла, чтобы он оказался в ближайшей междоузельной позиции, называют *пороговой энергией*. Если энергия, переданная атому быстрой частицей, меньше E_a , то смещения атома не происходит, а возникают лишь упругие волны, энергия которых переходит в энергию теплового движения атомов.

Опыт показывает, что E_a примерно в два-три раза больше энергии, необходимой для адиабатического перемещения атома из узла решетки в междоузлие. Так $E_a \approx 25$ эВ для большинства кристаллов, в которых энергия связи атомов составляет примерно 10 эВ. Каждый атом кристалла, получивший от быстрой частицы энергию $E > E_a$, может сместиться в междоузлие, в результате чего одновременно возникают вакансии и атом в междоузлии. При этом, если значение энергии смещенных атомов, называемых *атомами отдачи*, значительно превышает E_a , 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_a . Таким образом, возникает каскад атомных смещений (рис. 3.7).

Из рассмотренного механизма следует, что радиационные точечные дефекты в отличие от тепловых, всегда парные, т. е. это дефекты Френкеля.

Очевидно, что вдоль пути движущейся частицы образуется сильно разупорядоченная область (на рис. 3.7 очерчена пунктирной линией). Размеры и форма этой области зависят от энергии, массы и природы бомбардирующей частицы, массы атомов мишени, ее температуры и структуры кристалла. Образование каскада смещений, как и возникновение отдельного дефекта Френкеля, происходит за очень короткое время: 10^{-13} — 10^{-14} с. После этого происходит более длительный процесс релаксации, определяющий в конечном счете число и распределение образовавшихся дефектов, от которых зависят многие физические свойства твердого тела.

В очень упрощенной теории Кинчина — Пиза получено выра-

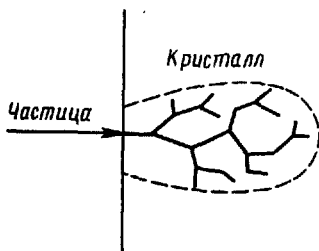


Рис. 3.7. Схематическое изображение каскада смещений.

жение для среднего числа смещенных атомов одним первичным атомом с энергией E_a :

$$v(E_a) = \frac{E_a}{2E_d}. \quad (3.29)$$

При выводе формулы (3.29) предполагалось, что атомы при соударениях ведут себя как твердые шары, столкновения рассматривались как изолированные акты упругого соударения двух частиц. Считалось также, что после столкновения оба атома могут участвовать в дальнейших столкновениях. Кроме того, в модели Кинчина—Пиза не учитываются какие-либо корреляции, связанные с периодическим расположением атомов в кристалле. Формула (3.29) справедлива для $E_a > 2E_d$.

Во многих твердых телах при комнатной или даже более низкой температуре первичные дефекты (вакансии и междоузельные атомы), мигрируя по кристаллу, могут аннигилировать путем рекомбинации, а также объединяться в более устойчивые вторичные дефекты. Окончательный состав дефектов, их концентрация и распределение по глубине мишени зависят от числа и распределения первоначально смещенных атомов, а также от природы кристалла.

При некоторых критических концентрациях радиационных дефектов кристаллическое состояние становится неустойчивым и происходит переход в аморфное состояние. Такой переход наиболее легко осуществляется в твердых телах с ковалентным типом связи.

3.6. ДИСЛОКАЦИИ

Представление о линейных дефектах — дислокациях — возникло в начале XX в. в результате работ В. Вольтерры и некоторых других исследователей, изучавших упругое поведение однородной изотропной среды.

Рассмотрим, например, резиновый цилиндр (рис. 3.8). Разрежем его вдоль плоскости S (рис. 3.8, а), сместим края разреза так, как показано на рис. 3.8, б или в, и склеим. Линия OO' , отделяющая область, где сдвиг произошел, от области, где сдвига не произошло, получила название *дислокации*.

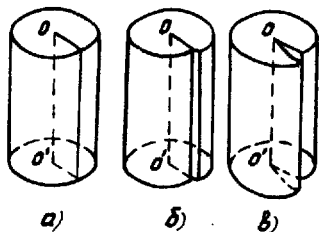


Рис. 3.8. Образование дислокационной линии в упругом цилиндре

В начале 30-х годов Д. Тейлор и другие предположили, что аналогичные дефекты мо-