

Лекция 7. Ақаулардың түрлері

Лекцияның мақсаты: Радиациялық әсер нәтижесінде қатты денелерде пайда болатын құрылымдық ақаулардың физикалық табиғатын, түрлерін және олардың қасиеттерін түсіндіру. Радиациялық ақаулардың түзілу механизмдерін және материалдардың қасиеттеріне әсерін қарастыру.

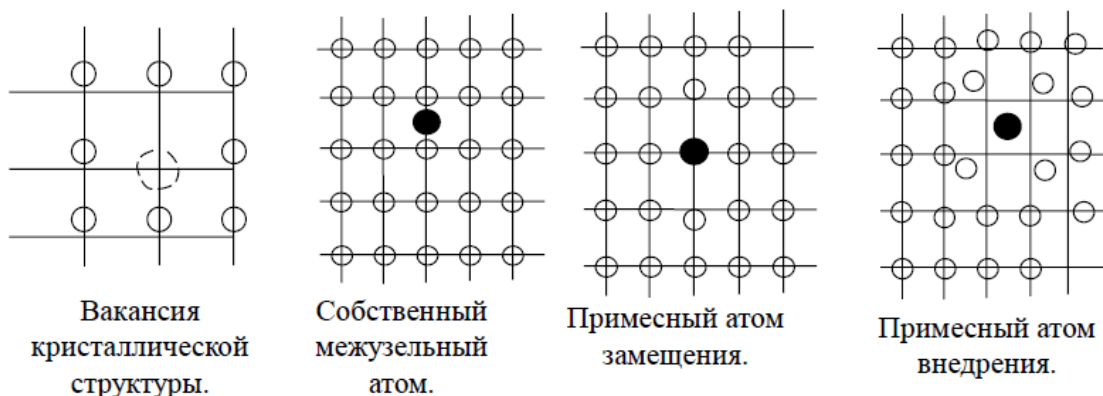
Негізгі сұрақтар

1. Ақаулар ұғымы және олардың түрлері (нүктелік, сызықтық, көлемдік).
2. Вакансия және түйінаралық атомдардың түзілу механизмі.
3. Френкель және Шоттки ақаулары.
4. Радиациялық әсердің материал құрылымына ықпалы.
5. Электрондық және иондық радиациялық ақаулар.
6. Экситондар және бояу (F-) орталықтары.

Қысқаша мазмұны

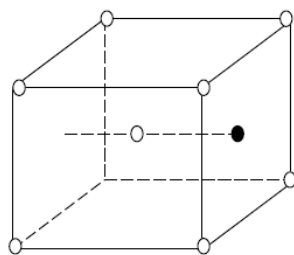
Кристалл торының түйінінен атомның ығысуы вакансия немесе түйінаралық атом (ТАА) пайда болуына әкеледі. Бұл ақаулар кристалдық тордың серпімді өрісінде деформация тудырады және материалдың физикалық қасиеттерін өзгертеді. **Вакансия** — атомның өз орнынан кетуінен туындайтын бос орын, ал ТАА — атомның көршілес түйін арасына орналасуы.

Вакансия мен түйінаралық атомның жұбы **Френкель жұбы** деп аталады. Ал егер катион мен анион бірдей мөлшерде кристалдан шығып кетсе, онда бұл **Шоттки ақауы** деп аталады. Бұл ақаулардың түзілу энергиясы вакансия үшін шамамен 1–1.2 эВ, ал ТАА үшін 2–3 эВ. Нүктелік ақаулардың тепе-теңдік концентрациясы температурамен экспоненциалды түрде артады: $c = \exp(-E_0 / kT)$. Мұнда E_0 – түзілу энергиясы, k – Больцман тұрақтысы, T – абсолют температура.

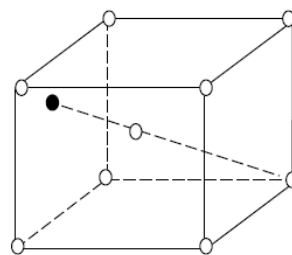


Сурет 1. Френкель және Шоттки бойынша нүктелік ақаулардың түзілуі

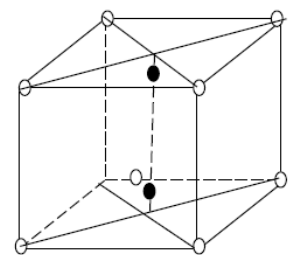
Кристалл торында нүктелік ақаулардың болуы оның айтарлықтай ығысуын тудырады оларды қоршап тұрған көрші атомдар бос орын жағдайында ақаулар бағыты бойынша қалыпты орындарынан ығысады. Мұндай ығысулар оң болып саналады. Егер орын ауыстырулар ТАА немесе қоспа атомдары жағдайында ақаулардан алыс бағытта орын алса, онда мұндай орын ауыстырулар теріс деп аталады. Оң және теріс құрамдас бөліктерге ие анағұрлым күрделі орын ауыстыруларды да байқауға болады. Бұл ығысулардың мәндері атомаралық қашықтықтармен тор параметрі мен салыстырғанда айтарлықтай аз.



Смещение
в сторону грани



Смещение
в сторону узла



Смещение
между гранями

Бұл орын ауыстыруларды есептеу үшін кристалдық тордың атомдарының бір бірімен әрекеттесуінің белгілі бір сипаты деп аталатын Борн мен Майер енгізген атомаралық әрекеттесу потенциалы.

- Нүктелік ақаулардың тағы бір маңызды параметрі олардың миграциялық энергиясы немесе миграциялық белсендіру энергиясы болып табылады.
- Белгілі бір жағдайларда бос орындар мен ТАА өте жоғары қозғалқыштыққа ие бірыңғай вакансиялардың қозғалысы атомның бос орынға ең жақын орналасқан орнына жай ауысуы секіруі есебінен жүзеге асырылады.
- Бірыңғай ТАА қозғалысы күрделі процесс Оған көптеген көрші атомдар қатысады Вакансия немесе ТАА биіктігі E_m қандай да бір потенциалдық кедергіні t өтеп беру яғни бос орын және ТАА үшін *седла нүктесі* деп аталатын кейбір аралық позиция бар.

Радиациялық ақаулар түрлері:

Нүктелік ақаулар

- Вакансия ионның немесе атомның кристал түйінінде болмауы (Вакансияның заряды кеткен ионның зарядына тең және қарама қарсы болады);
- Түйінаралық ион (атом) кристалда түйінаралық кеңістікте орын алады;
- Френкель бойынша ақаулар түйінарасындағы екі жұп нүктелік ақау вакансия и түйінаралық ион;
- Шоттки бойынша ақау ионды кристалдағы заряды қарама қарсы екі вакансиялар, екі жұп нүктелік ақаулар;
- Вакансиялар мен атомдардың агрегаты - кәуек түзетін көптеген вакансиялардың жиынтығы, атомдар (иондар) жиынтығы. Оның фазасы басқа болуы мүмкін, мысалы ионды кристалдағы металлдың микроқоспасы;
- Күрделі араласқан ақаулар, олардың кристалдық тор ақауларының жиынтығы болып табылады, сонымен қатар кристалға арнайы енгізілген қоспа атомдары немесе иондары болуы мүмкін

Бақылау сұрақтары

1. Радиациялық ақаулардың негізгі түрлерін атаңыз.
2. Вакансия және түйінаралық атом дегеніміз не?
3. Френкель және Шоттки ақауларының айырмашылығы неде?
4. Радиациялық ақаулардың түзілу себептері қандай?
5. Экситон дегеніміз не және оның түрлері қандай?
6. F-орталықтар қалай түзіледі және олардың рөлі қандай?

Ұсынылатын әдебиеттер

1. Бекбосынов Б.Б. Радиациялық физика негіздері. – Алматы: ҚазҰУ, 2016.

Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті. Қатты дене физикасы және жаңа материалдар технологиясы кафедрасы. Физика техникалық факультеті.
Радиациялық материалтану пәні. Мархабаева А.А.

2. Черепанов В.В. Радиационное материаловедение. – М.: Энергоатомиздат, 2002.
3. Knoll G.F. Radiation Detection and Measurement. – Wiley, 2010.
4. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Том 5. – М.: Наука, 2007.



Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университеті
Факультет: физика-техникалық
Қатты дене және бейсызық физика кафедрасы

Радияциялық ақаулар

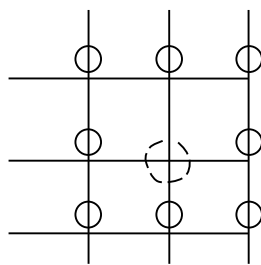
Ақаулардың түрлері: нүктелік, сызықтық және көлемді.
Ақаулардың жиынтығы

Мархабаева А.А

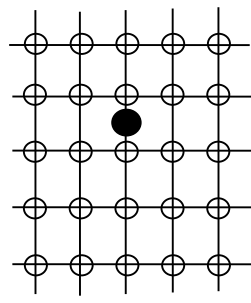
Ежелден бері адамдар металдардың беріктілігін қаттылығын арттыру үшін күйдіру немесе тез салқындату сияқты әдістер қолданып келеді. Кейін материалдардың қасиетін олардың микроскопиялық құрылымы анықтайтындығы белгілі болды. 20 – шы жылдардың басында ғана Э. Резерфордтың атом құрылымы, М. Лауэ дифракция және кванттық физика жаңалықтары ашылғаннан кейін металдардың электрондық құрылымы және *ақаулар туралы ғылым* дами бастады. Я.Френкель және А.Иоффе физикаға нүктелік элементар ақаулар ұғымын енгізді. Оны кемтіктер деп атаған. Қазіргі ғылыми атауы вакансия. Металдар туралы ғылым дамып, кеңейген сайын пластикалық деформацияның дислокациялық теориясы дами бастады, т.б. пластикалық деформация механизмі. Оның негізінде дислокация (D) сырғанау жазықтығындағы металдың ығысқан аймағын жылжымаған аймақтан бөлетін сызық болып табылады. Бұл теорияның негізін салушы ағылшын физигі Дж.Тейлор болды.

Бірақ дислокация теориясы үшін ең іргелі нәрсе Бюргерстің қатты дене физикасына оның атымен аталған дислокацияның ең маңызды сипаттамасы — *Бюргерс векторы* ұғымын енгізуі болды. Нүктелік ақаулар мен дислокациялардың болуы туралы бұл идеялар шын мәнінде ақаулар туралы ғылымның бастапқы нүктесі болды. Осыдан кейін нүктелік ақаулар мен дислокациялардың бар екендігі туралы тікелей эксперименттік дәлелдерді алу үшін 20 жылдан астам уақыт қажет болды. Бұл жерде нүктелік ақауларға қатысты американдық ғалым Мюллерге және дислокацияның суретін алған электронды микроскопияны ойлап тапқан Хиршке тиесілі. Ал Мюллерге далалық-иондық микроскоптың өнертабысының авторы тиесілі. Кейіннен интерстициалды атомдар — краудиондар тізбектерінің әсерінен металдың пішінін өзгерту теориясы жасалды.

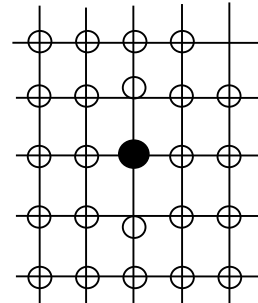
Кристалл торының түйінінде атомның болмауы ақаулардың ең қарапайым және сонымен бірге ең көп таралған және маңызды түрі болып табылады. Ол **бос орын (fr.vacance)** деп аталады. Кристалл торының түйіндері арасында орналасқан атом **түйінаралық атом** (ТАА) деп аталады. Бос немесе түйіңнарадағы қоспа атомдары да кристалдағы нүктелік ақаулар болып табылады. Зарядтары ұқсамайтын екі заряд қосылса, ортақ заряд жойылады, сол сияқты ТАА мен бос орынның қосылуы осы екі жұп ақаудың жойылуына әкеледі. Бұл кезде оларды **аннигиляцияланады** деп атайды. Егер бос орын өз атомының тор орнынан ығысуынан пайда болса, онда бұл жұп Френкель жұбы немесе **Френкель жұбының ақаулары** деп аталады.



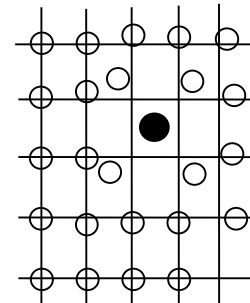
Вакансия
кристаллической
структуры.



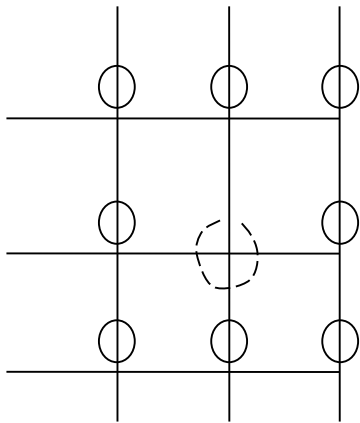
Собственный
межузельный
атом.



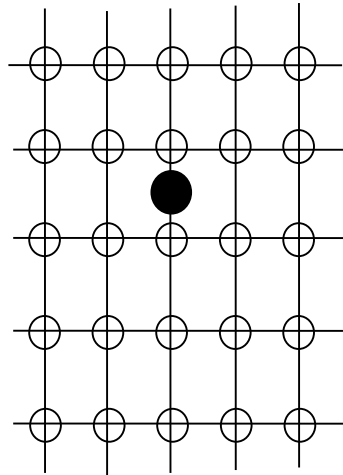
Примесный атом
замещения.



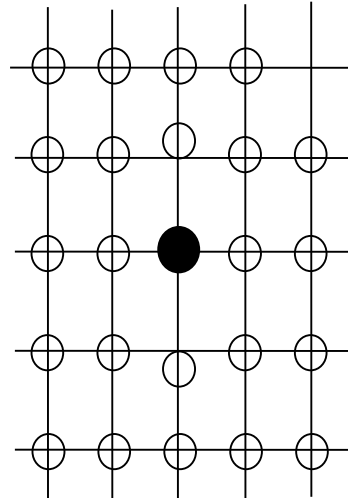
Примесный атом
внедрения.



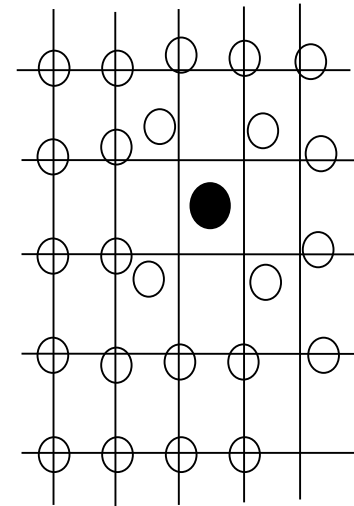
Вакансия
кристаллической
структуры.



Собственный
межузельный атом.

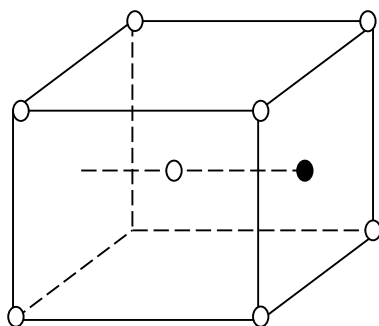


Примесный атом
замещения.

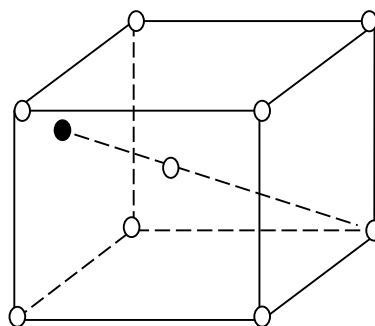


Примесный атом
внедрения.

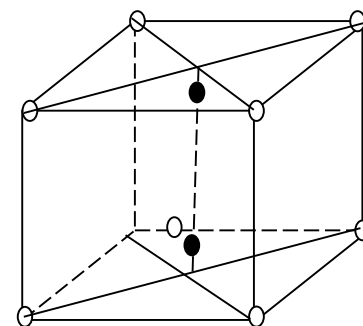
Кристалл торында нүктелік ақаулардың болуы оның айтарлықтай **ығысуын** тудырады: оларды қоршап тұрған көрші атомдар бос орын жағдайында ақаулар бағыты бойынша қалыпты орындарынан ығысады. Мұндай ығысулар оң болып саналады. Егер орын ауыстырулар ТАА немесе қоспа атомдары жағдайында ақаулардан алыс бағытта орын алса, онда мұндай орын ауыстырулар теріс деп аталады. Оң және теріс құрамдас бөліктерге ие анағұрлым күрделі орын ауыстыруларды да байқауға болады. Бұл ығысулардың мәндері атомаралық қашықтықтармен - тор параметрімен салыстырғанда айтарлықтай аз.



Смещение
в сторону грани



Смещение
в сторону узла



Смещение
между гранями

- Бұл орын ауыстыруларды есептеу үшін кристалдық тордың атомдарының бір-бірімен әрекеттесуінің белгілі бір сипаты деп аталатын. Борн мен Майер енгізген атомаралық әрекеттесу потенциалы.
- Нүктелік ақаулардың маңызды параметрі олардың **түзілу энергиясы** **EO** болып табылады. Ол бос орын пайда болған жағдайда ионның көлемнен бетке немесе ТАА түзілу кезінде металл бетінен көлемге ауысуы нәтижесінде кристалдық тордың энергиясының өзгеруіне тең.
- Бұл операциялардың нәтижесі екі жағдайда да жалпы электронды жүйенің өзгеруі болып табылады. Ол өткізгіш электрондардың энергиясының өзгеруін, сондай-ақ байланысқан электрондардың тебілу энергиясының өзгеруін қамтиды. Бұл өзгерістердің қосындысы нүктелік ақаудың пайда болу энергиясы болып табылады. Бос орын үшін ол $\sim 1-1,2$ эВ. Түйінаралық атомдар үшін $-2-3$ эВ.

- Нүктелік ақаулардың тағы бір маңызды параметрі олардың **миграциялық энергиясы** немесе миграциялық белсендіру энергиясы болып табылады.
- Белгілі бір жағдайларда бос орындар мен ТАА өте жоғары қозғалқыштыққа ие. Бірыңғай вакансиялардың қозғалысы атомның бос орынға ең жақын орналасқан орнына жай ауысуы (секіруі) есебінен жүзеге асырылады.
- Бірыңғай ТАА қозғалысы күрделі процесс. Оған көптеген көрші атомдар қатысады. Вакансия немесе ТАА биіктігі E_m қандай да бір потенциалдық кедергіні төтеп беру, яғни бос орын және ТАА үшін **седла нүктесі** деп аталатын кейбір аралық позиция бар.

- Құрамында нүктелік ақаулары бар кристалдың ең аз бос энергиясының шартына сүйене отырып, олардың концентрациясын бағалауға болады, немесе

$$c = A \cdot \exp\left(-E_0^B / KT\right)$$

РАДИАЦИЯЛЫҚ АҚАУЛАР

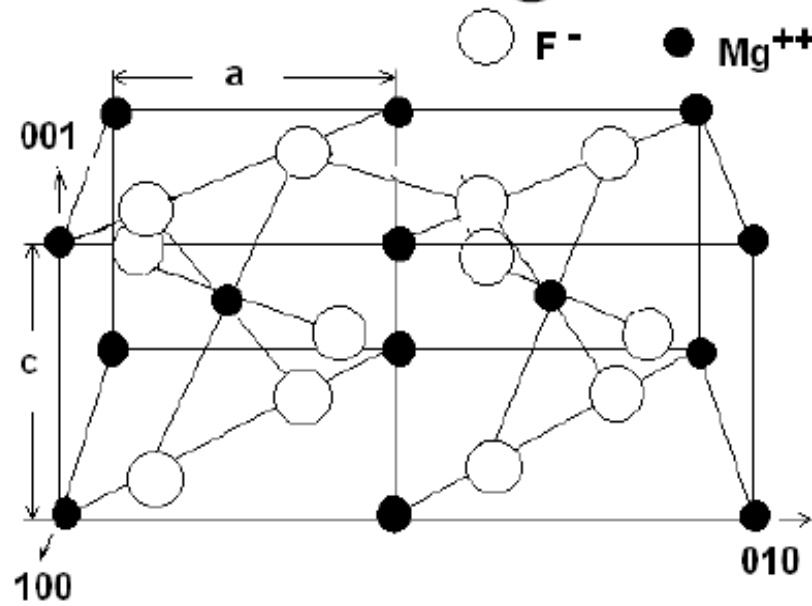
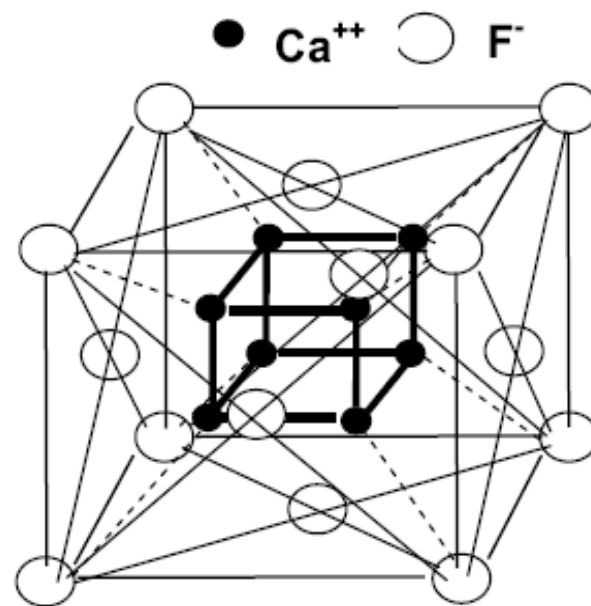
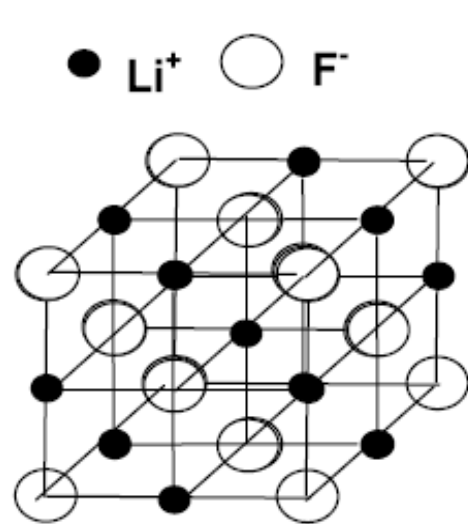
- **Радиациялық ақаулар** – сәулелену нәтижесінде пайда болатын кристалдық құрылым ақаулары. Жалпы радиация нәтижесінде пайда болатын ақауларды келесі түрлерге бөлуге болады:
- **Электрондық ақаулар:**
- Зонадағы электрондар мен кемтіктер (еркін және зоналық электрондар мен кемтіктер) энергия мен заряд тасымалдайды;
- Кристалл арқылы қозғала отырып экситондар (бір-бірімен байланысқан электрон кемтік жұптар) энергия тасымалдайды;
- Зонаралық ауысу қозу кезінде электрон – кемтік жұптары пайда болады, олар екіге бөлініп бір бірімен кездескенде рекомбинацияланады;

РАДИАЦИЯЛЫҚ АҚАУЛАР

- **Нүктелік ақаулар:**
- **Вакансия** – ионның (атомның) кристал түйінінде болмауы. Вакансияның заряды кеткен ионның зарядына тең және қарама қарсы болады;
- **Түйінаралық ион (атом)** кристалда түйінаралық кеңістікте орын алады;
- **Френкель бойынша ақаулар** – түйінарасындағы екі жұп нүктелік ақау – вакансия и түйінаралық ион (атом);
- **Шоттки бойынша ақау** – ионды кристалдағы заряды қарама қарсы екі вакансиялар, екі жұп нүктелік ақаулар;
- **Вакансиялар мен атомдардың (иондар) агрегаты** – кәуек түзетін көптеген вакансиялардың жиынтығы, атомдар (иондар) жиынтығы; Оның фазасы басқа болуы мүмкін, мысалы ионды кристалдағы металлдың микроқоспасы;
- **Күрделі араласқан ақаулар**, олардың кристалдық тор ақауларының жиынтығы болып табылады, сонымен қатар кристалға арнайы енгізілген қоспа атомдары немесе иондары болуы мүмкін;

РАДИАЦИЯЛЫҚ АҚАУЛАР

- **Сызықтық және кеңістіктік (пространственные) ақаулар:**
- Дислокациялар: сызықтық немесе жарты жазықтықтар (полуплоскости), жазықтықтардың бір біріне қатысты майысуы жатады;
- Кристалдардың шекарасы мен түңіндері;



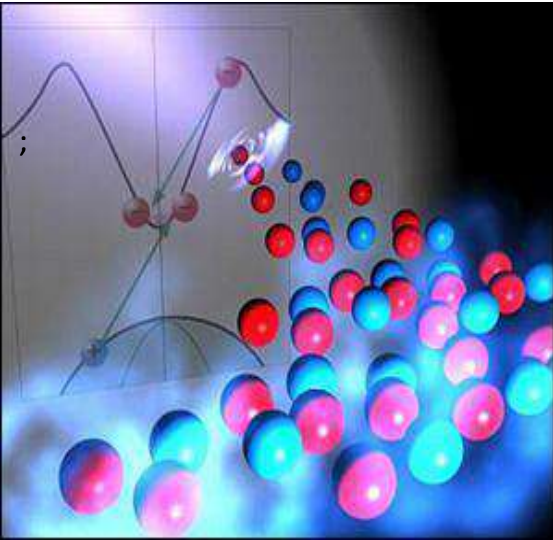
РАДИАЦИЯЛЫҚ АҚАУЛАР

- Құрылымы бойынша: өздік (құрылымға тек идеала кристалдың ақаулары кіреді), қоспалы (құрылымға торға арнайы енгізген иондар, атомдар, агрегаттар кіреді) және комбинерленген (құрылымына өздік және қоспалы болады);
- Заряды бойынша: электрондық (орналасу орнына қатысты теріс заряд болса) және кемтіктік (орналасу орнына қатысты оң заряд болса) болып бөлінеді;
- Ата тегі (происхождение) бойынша: бірінші ретті (радиацияның бірінші акті әсерінен пайда болған ақаулар) және екінші ретті (бірінші ретті ақаулардың бір бірімен әсерлесу нәтижесінде пайда болған ақаулар);

РАДИАЦИЯЛЫҚ АҚАУЛАР

- Қазіргі уақытта сілтілік галоидты және сілтілік жердік металдарда зертелінген радиациялық ақаулардың келесі түрлері белгілі:
- Кристалл атомдарының ионизация процесі кезінде пайда болатын электронды-кемтік жұптары. Олар заряд тасымалдай отырып, бір бірімен байланысқан немесе байланыспаған болуы мүмкін;
- Жоғары қозғалтқыштық қасиеті бар және суммарлы заряды нейтраль электрон кемтік жұбы —**ЭКСИТОН**;
- **f** — **центр**, анионды вакансия мен қармап алған электроннан тұрады. Вакансия екіге бөлінеді: анионды және катионды: егер вакансия орнында оң ион орналасса анионды, теріс болса катионды

Экситондар



- **Экситондар** – диэлектриктерде және жартылайөткізгіштердегі электрондық қозу болып табылатын квазибөлшек. Латын тілінен аударғанда excite -`қоздырамын` дегенді білдіреді. Кристалдағы электрон мен кемтік бір –бірімен кулондық байланыса отырып, жұп түзеді – экситон. Байланысуына байланысты экситондардың екі түрі болады:



Френкель экситондары- байланысу радиусы кіші (атомаралық қашықтықтан аспайды) байланысқан экситондар

$$a_3 < a_0$$



Ванье-Мотта экситондары - байланысу радиусы үлкен (бірнеше атомаралық қашықтық) еркін экситондар.

$$a_3 > a_0$$

- Еркін экситондарын сутегі тектес электрон мен кемтіктің байланысы ретінде қарастыруға болады, сондық олардың байланыс энергиясы бордың сутегі атомы үшін арналған формулаларымен көрсетіледі.

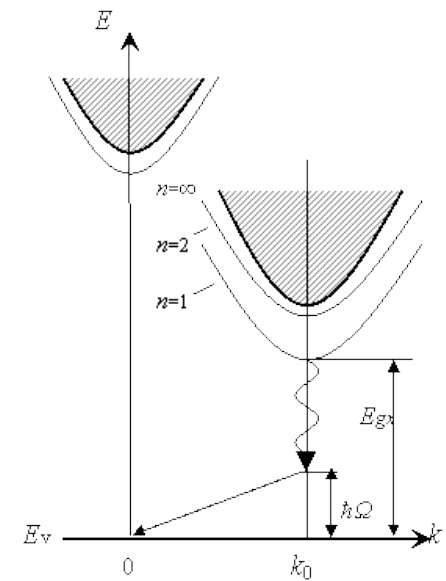
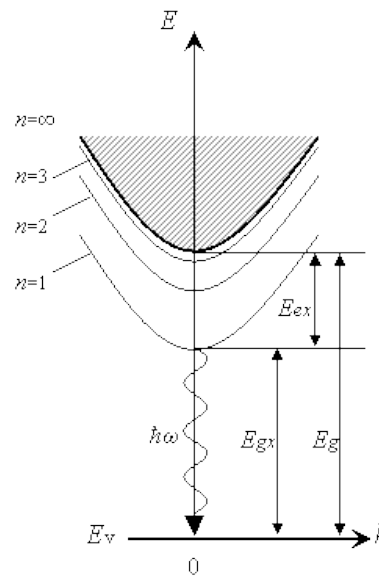
$$E_n = - \frac{m_r e^4}{8 \cdot (\epsilon_r \epsilon_0 \hbar)^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$r = \frac{m_0}{m_r} \frac{1}{\epsilon_r} a_B$$

$$E(k) = E_g + E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2 \cdot M} = E_g - \frac{m_r e^4}{8 \cdot (\epsilon_r \epsilon_0 \hbar)^2} \cdot \frac{1}{n^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2 \cdot M}$$

Экситондарды түзуге арналған минималды энергия **экситонды тыйым салу зонасы** деп аталады.

$$E_{gx} = E_g - E_{ex}$$



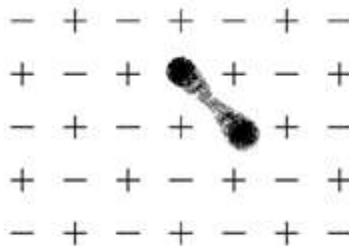
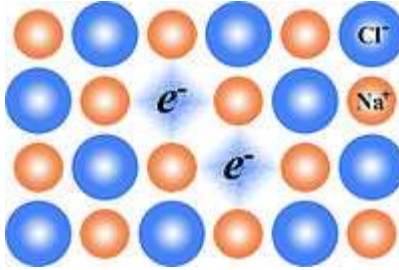
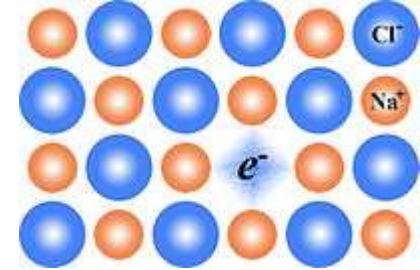
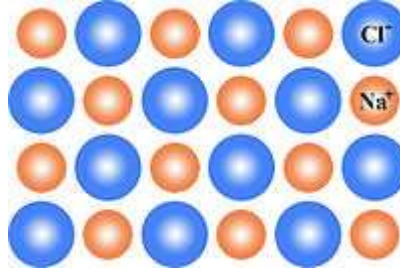
- Төмендегі суреттен көріп отырғандай экситондардың күйден оптикалық ауысу үшін энергияның және квазимпульстің сақталу заңы орындалу керек:

$$\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2 \cdot M} + E_g + E_n$$

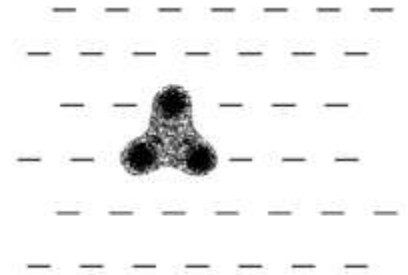
$$\hbar k_{\text{фот}} = \hbar k$$

F – центр

- Оларды жалпы бояу центрі (центры окраски) деп атайды. Ең алғаш рет бояу центрін сілтілік галогидты кристалдарды зерттей отырып, 1933 ж неміс физигі Р. В. Поль зерттеген болатын. Алынған центрлерді F – центр (неміс тілінен *Farbe* — түс, бояу және *Zentrum* — центр) деп атаған. Зерттеулер нәтижеінде **F – центр** электронды қармап алған галогеннің теріс ионының вакансиясынан тұратыны белгілі болды.



а



б