

Дефектами кристалла называют нарушение трансляционной симметрии (идеальной периодичности кристаллической решетки).

Различают несколько разновидностей дефектов по размерности - числу измерений, в которых нарушения трехмерной периодичности простираются на макроскопические расстояния:

- нульмерные (точечные)
- □ одномерные (линейные)
- □ двумерные (плоские)
- □ трехмерные (объемные)

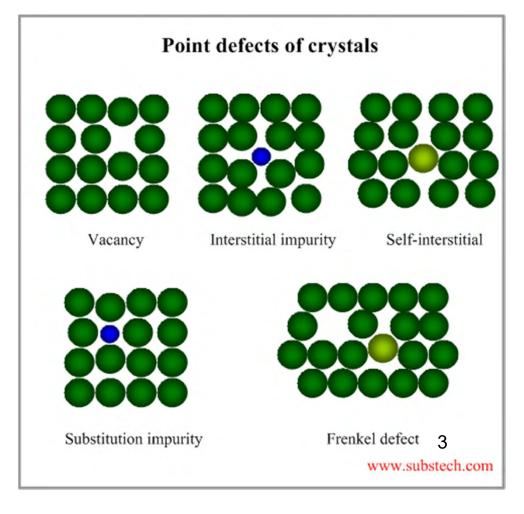


Дефекты в реальном кристалле можно разделить на химические примеси, нестехиометрию состава и собственно дефекты решетки.

Нульмерные дефекты.

К точечным дефектам кристалла относят все дефекты, которые связаны со смещением или заменой небольшой группы атомов (собственные точечные дефекты), а также с примесями.

Вакансия – свободный, незанятый атомом, узел кристаллической решетки





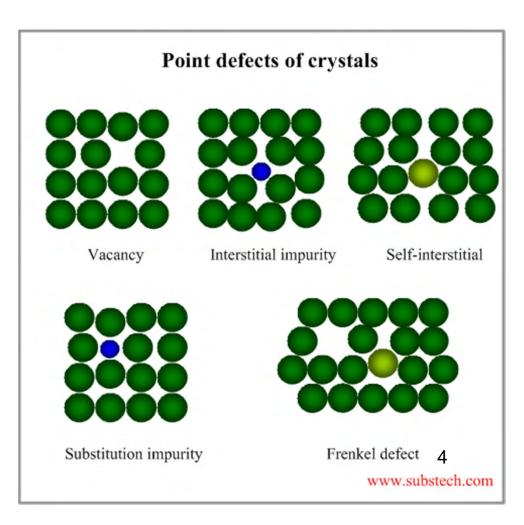
Нульмерные дефекты.

К точечным дефектам кристалла относят все дефекты, которые связаны со смещением или заменой небольшой группы атомов (собственные точечные дефекты), а также с примесями.

Примесный атом внедрения — атом примеси располагается в междоузлии кристаллической решетки.

Для металлов – водород, азот, углерод и кислород

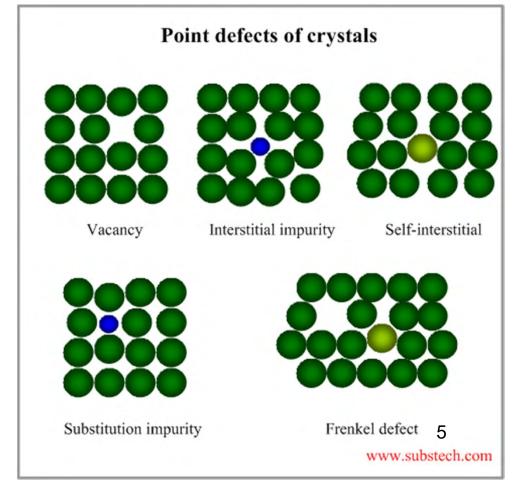




Нульмерные дефекты.

К точечным дефектам кристалла относят все дефекты, которые связаны со смещением или заменой небольшой группы атомов (собственные точечные дефекты), а также с примесями.

Собственный межузельный атом — атом основного элемента, находящийся в междоузельном положении элементарной ячейки.

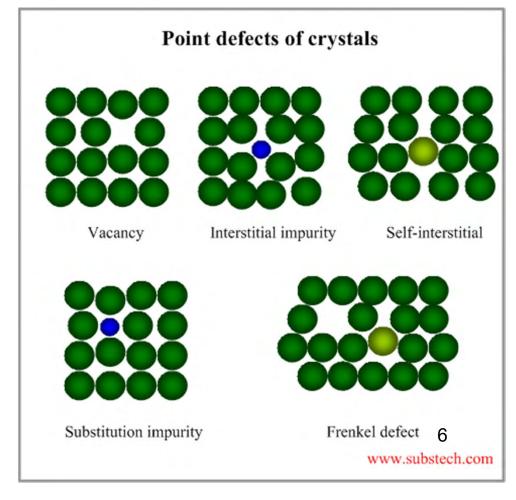




Нульмерные дефекты.

К точечным дефектам кристалла относят все дефекты, которые связаны со смещением или заменой небольшой группы атомов (собственные точечные дефекты), а также с примесями.

Примесный атом замещения — замена атома одного типа, атомом другого типа в узле кристаллической решетки.





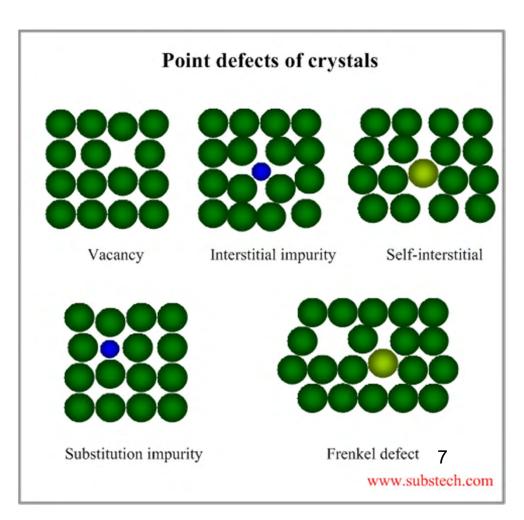
Нульмерные дефекты.

К точечным дефектам кристалла относят все дефекты, которые связаны со смещением или заменой небольшой группы атомов (собственные точечные дефекты), а также с примесями.

Дефект Френкеля – вакансия + собственный междоузельный атом.

В кристаллах часто наблюдаются комплексы, состоящие из нескольких точечных дефектов

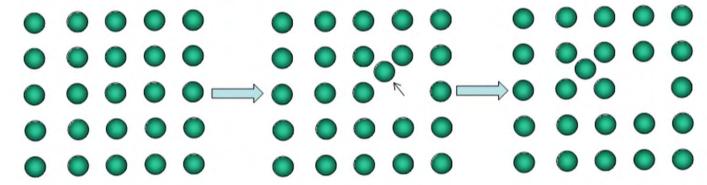


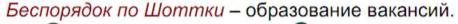


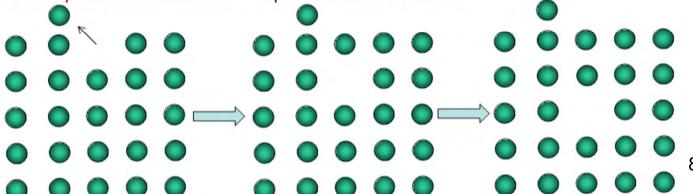
Нульмерные дефекты.

Тепловые точечные дефекты

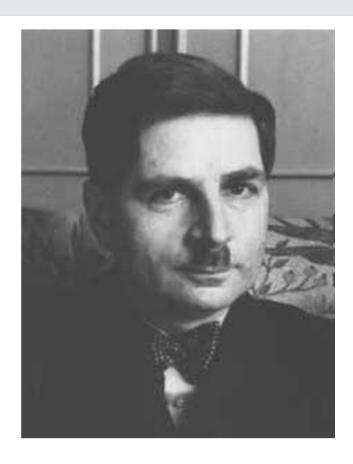
Беспорядок по Френкелю – образование вакансии и межузельного атома.











Вальтер Шоттки 1886-1976



Яков Ильич Френкель 1894-1952

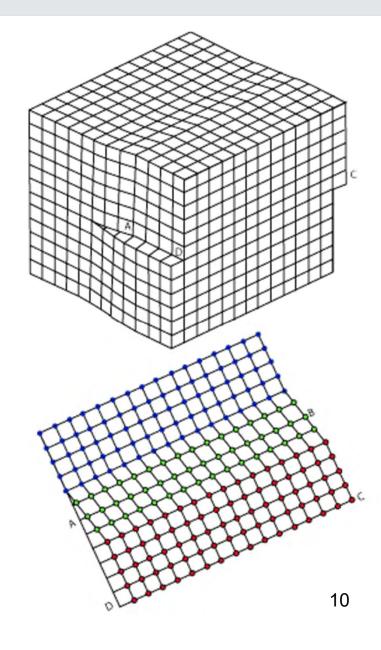


Одномерные дефекты.

В реальных кристаллах некоторые атомные плоскости могут обрываться. Края таких оборванных (лишних) плоскостей образуют краевые дислокации.

Существуют также винтовые дислокации, связанные с закручиванием атомных плоскостей в виде винтовой лестницы.

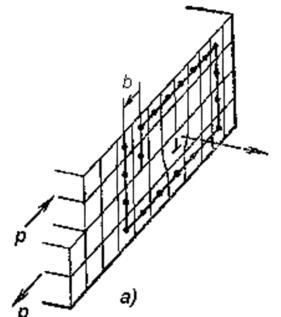
Иногда линейные дислокации образуются из скопления точечных дефектов, расположенных цепочками.

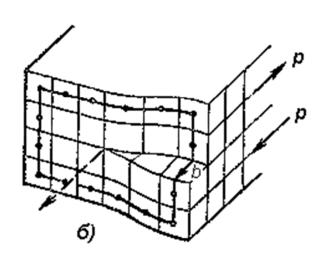




Одномерные дефекты.

В реальных кристаллах некоторые атомные плоскости могут обрываться. Края таких оборванных (лишних) плоскостей образуют краевые дислокации.

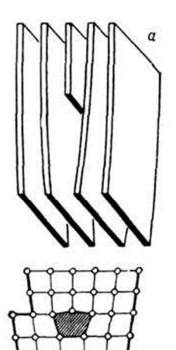


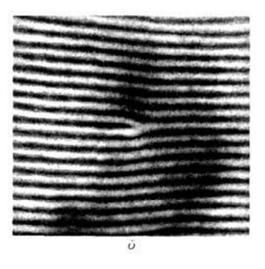


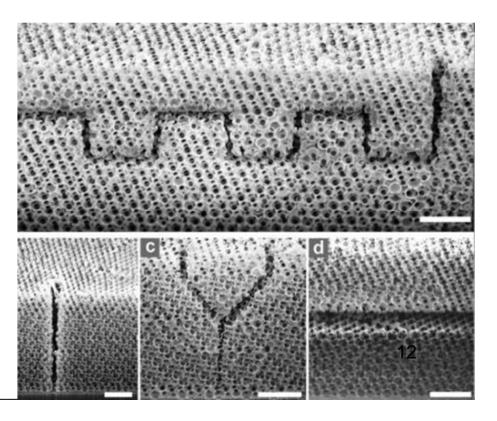


Одномерные дефекты.

В реальных кристаллах некоторые атомные плоскости могут обрываться. Края таких оборванных (лишних) плоскостей образуют краевые дислокации.

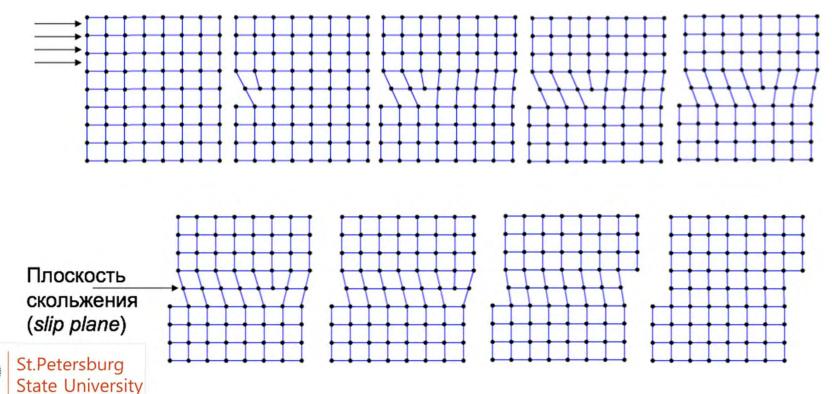






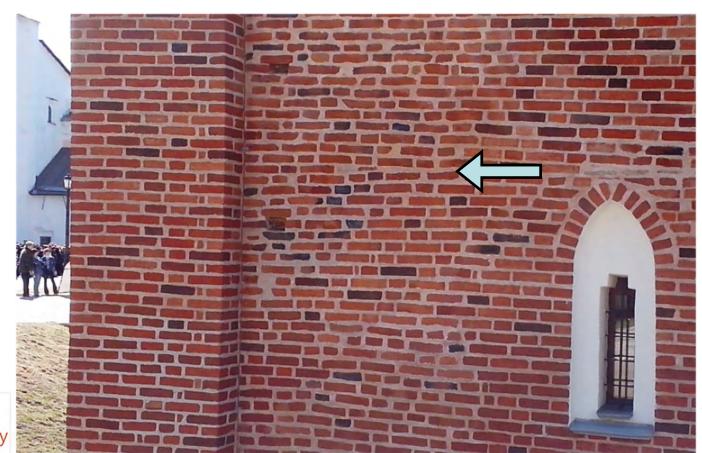
Одномерные дефекты.

Краевая дислокация - граница незавершенного сдвига



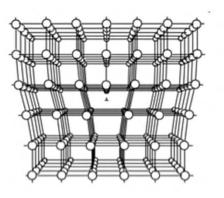
Одномерные дефекты

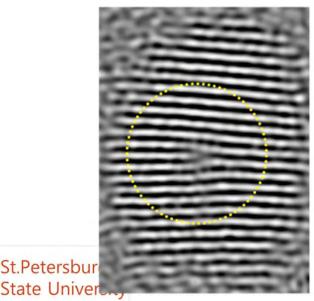
Краевая дислокация в кирпичной кладке Владычной (Грановитой) палаты в Новгороде (XV век)

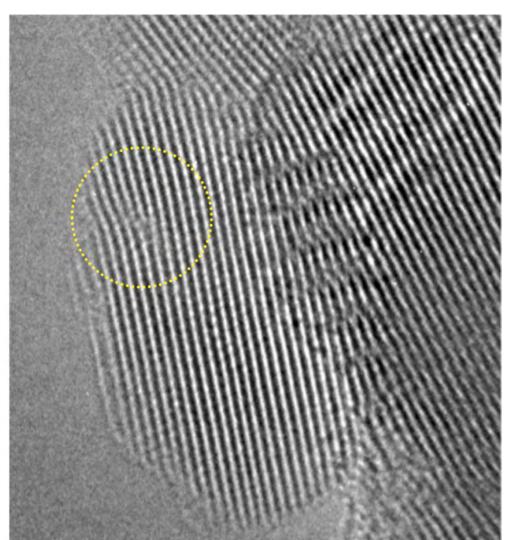


Одномерные дефекты

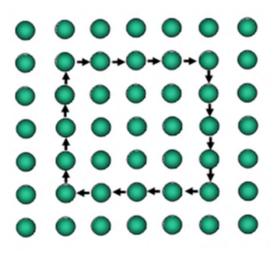
ZnO







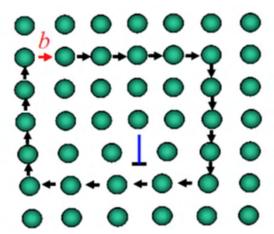
Одномерные дефекты

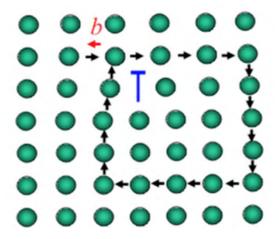


Контур Бюргерса – контур, построенный в реальном кристалле путем последовательного обхода дефекта от атома к атому в совершенной области кристалла. В идеальном кристалле конур Бюргерса всегда замкнут.

Дислокация – несовершенство кристаллической решетки, разрывающее контур Бюргерса.

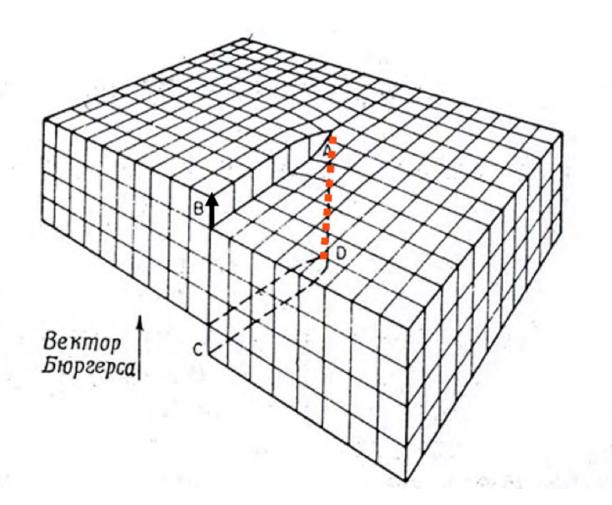
Вектор Бюргерса – вектор, соединяющий конечную и начальную точки контура Бюргерса. Вектор Бюргерса определяет меру искаженности кристаллической решетки, обусловленную присутствием в кристалле дислокации.





Одномерные дефекты

Винтовая дислокация в простой кубической решетке

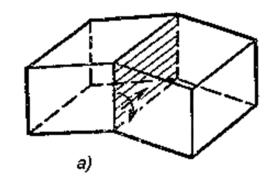


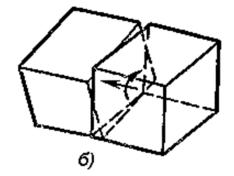


Двумерные дефекты.

Граница зерен - это поверхность, по обе стороны от которой кристаллические решетки различаются пространственной ориентацией. Эта поверхность является двумерным дефектом, имеющим значительные размеры в двух измерениях, а в третьем - его размер соизмерим с атомным.

Двумерными дефектами являются границы между участками кристалла, повёрнутыми на разные (малые) углы по отношению друг к другу; границы двойников.

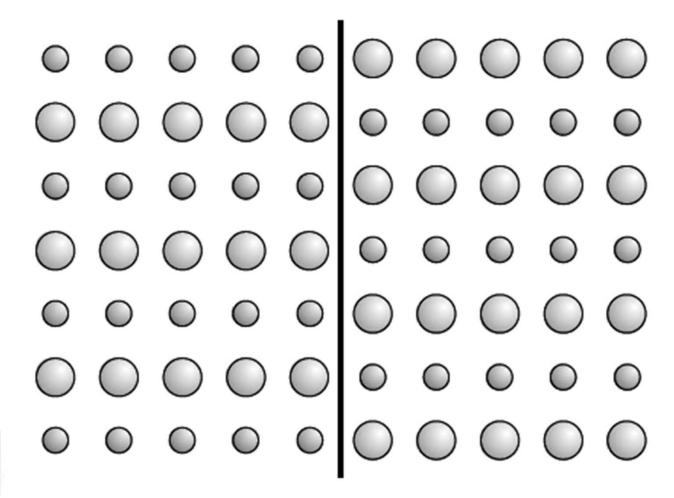






Двумерные дефекты.

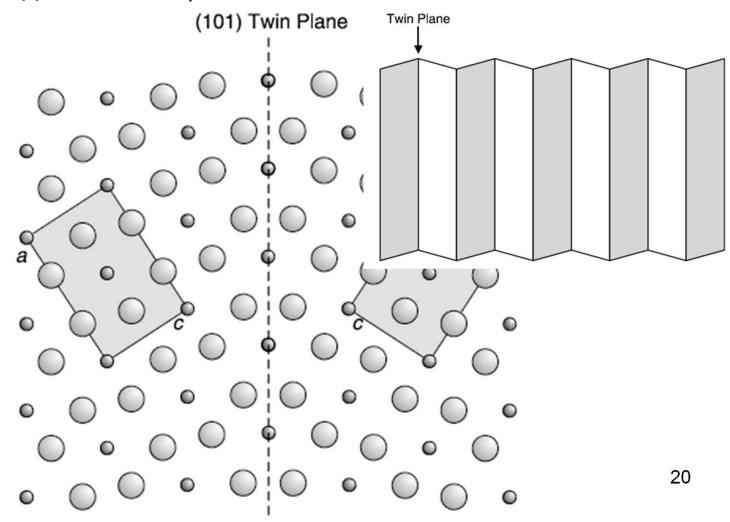
Антифазные границы





Двумерные дефекты.

Двойниковые границы





Двойникование кристаллов – это закономерное непараллельное срастание кристаллических индивидов одного минерала, связанных друг с другом осью или плоскостью симметрии, которых нет в одиночных

кристаллах.

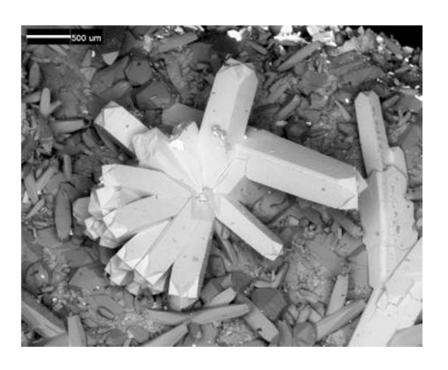






Помимо единичных индивидов минералы часто образуют сростки из двух или более кристаллов. В подобных сростках кристаллы имеют закономерную или неправильную взаимную ориентировку. В первом случае сростки называются двойниками, во втором - кристаллическими срастаниями или агрегатами.





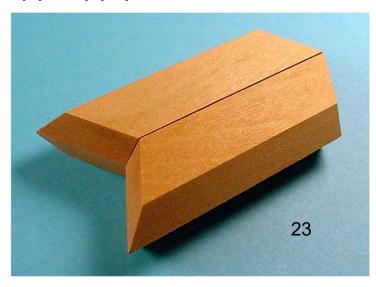


Среди двойниковых срастаний можно выделить три типа двойников:

- □ двойники срастания двойник, в котором составляющие его индивиды лишь соприкасаются и отделены друг от друга плоскостью срастания (титанит, кальцит ...)
- прорастания двойник, в котором отдельные индивиды взаимно проникают друг в друга (киноварь, пирит, ставролит ...)
- полисинтетические двойники сросток нескольких индивидов, плоскости срастания которых параллельны друг другу.



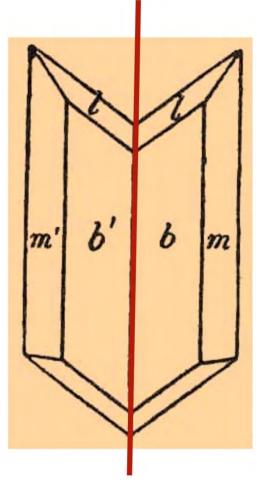




Двойники срастания



Японский двойник Кварц



«Ласточкин хвост»

Гипс

Двойникующее преобразование = отражение в плоскости

- 1. Четкие плоские границы соприкосновения субиндивидов;
- 2. Центры кристаллов лежат по разные стороны от плоскости.

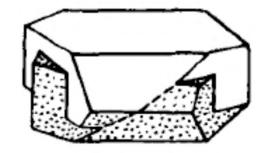


Двойники прорастания



Ставролит





Карлсбадский двойник Попевой шпат

Двойникующее преобразование = поворот вокруг оси

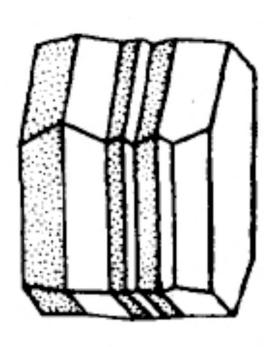
- 1. Границы соприкосновения субиндивидов не имеют четких очертаний;
- 2. Центры субиндивидов в полностью развитых двойниках совпадают.



Полисинтетические двойники

Многократные двойники





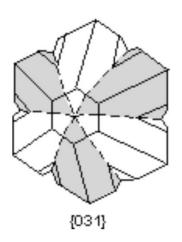
Плагиоклаз

Плоскости срастания параллельны



Круговые двойники





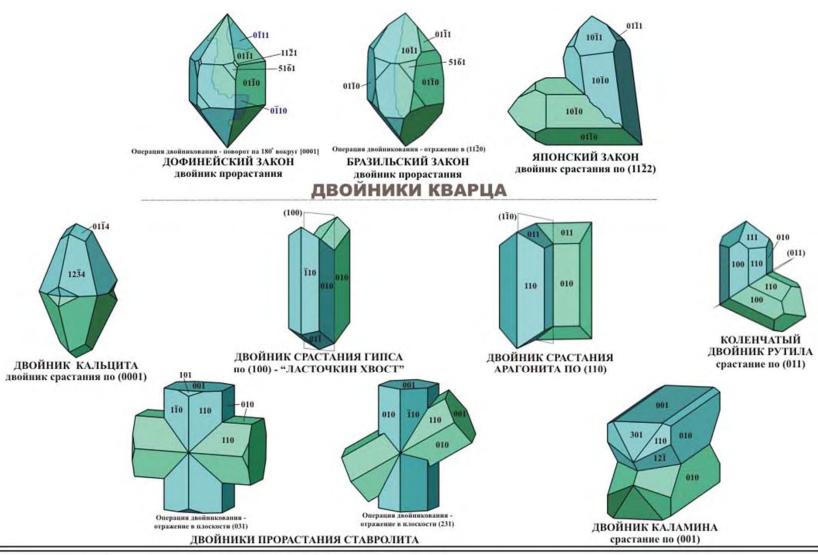
Хризоберилл $BeAl_2O_4$

Плоскости срастания не параллельны, но принадлежат одной зоне.

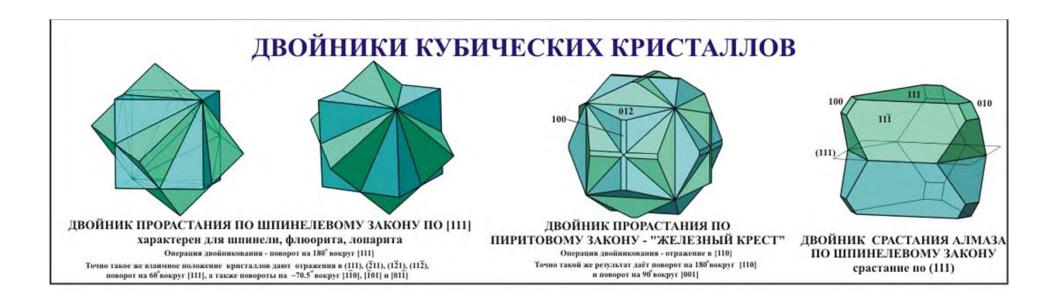








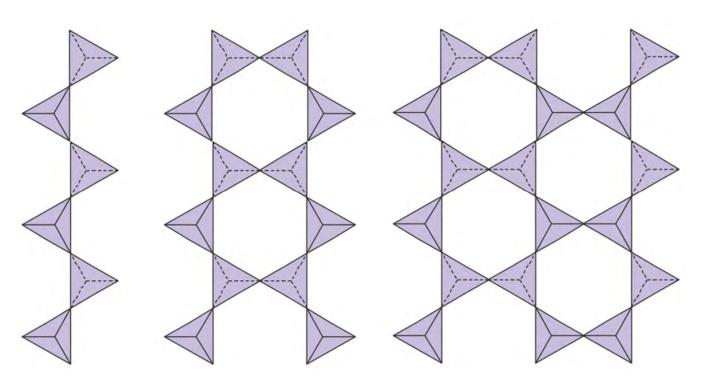






Полисоматизм или блоковый изоморфизм

Биопириболы – [от **био**тит, **пир**оксен и амф**ибол**; **biopyribole**] силикаты, занимающие промежуточное положение между пироксенами, амфиболами и слюдами. Частным случаем являются пириболы, к которым относятся только цепочечно-ленточные силикаты (без слюд).

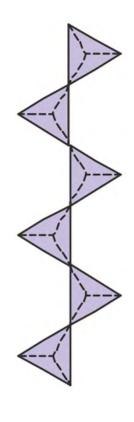


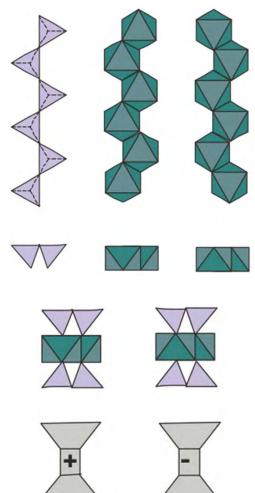


Полисоматизм или блоковый изоморфизм







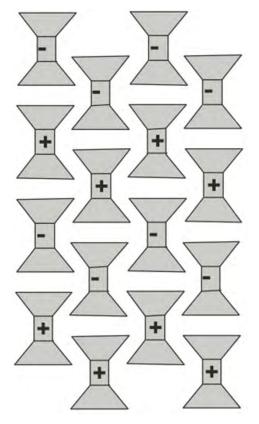




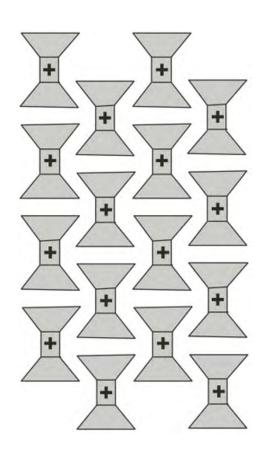
Полисоматизм или блоковый изоморфизм

Пироксены

Ромбические



энстатит $Mg_2[Si_2O_6]$

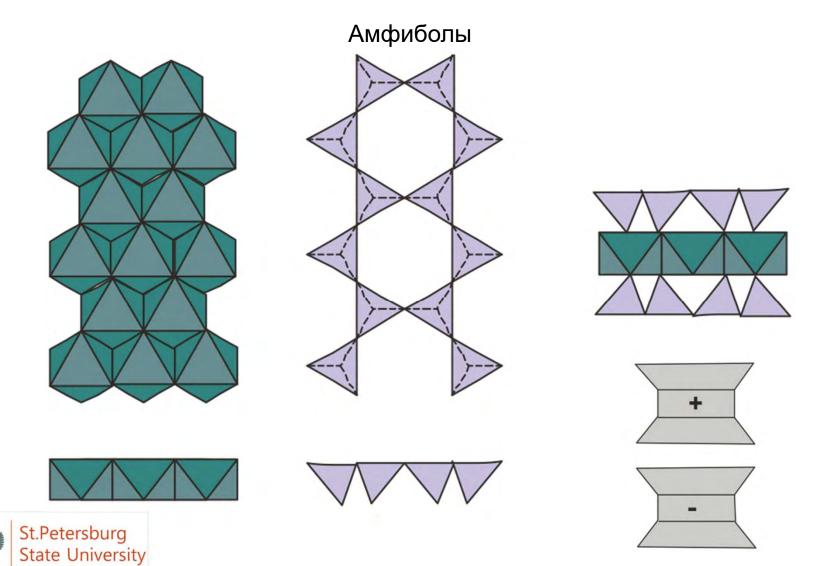


клиноэнстатит $Mg_2[Si_2O_6]$



Моноклинные

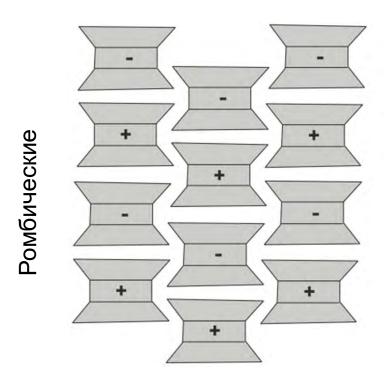
Полисоматизм или блоковый изоморфизм



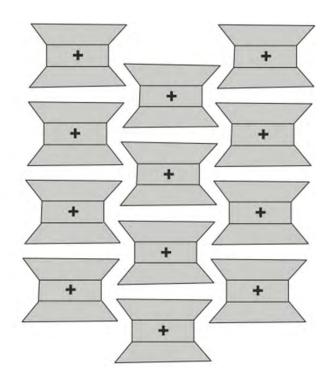
34

Полисоматизм или блоковый изоморфизм

Амфиболы





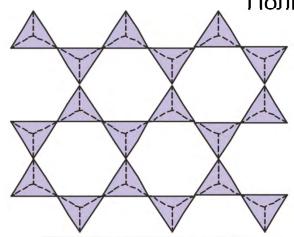


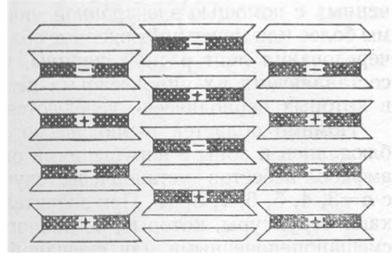
тремолит $Ca_2Mg_5[Si_4O_{22}](OH)_2$

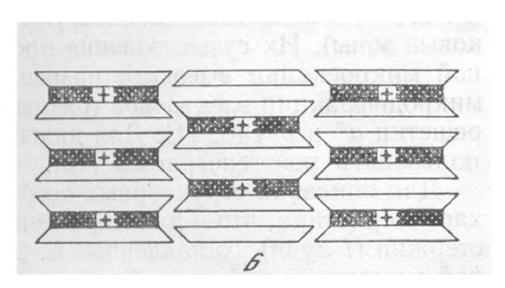


Моноклинные

Полисоматизм или блоковый изоморфизм



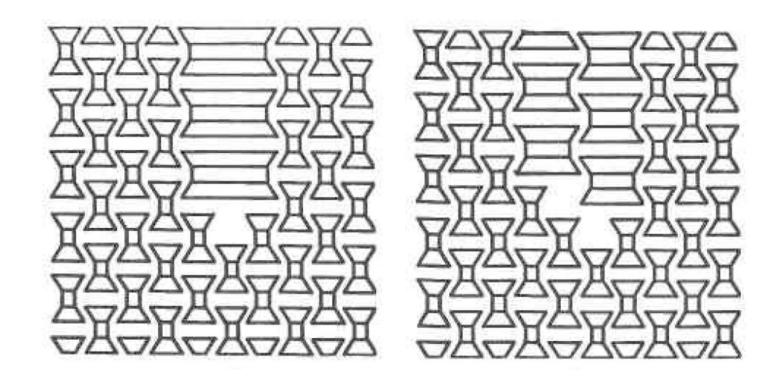






Джимтомпсонит / Клиноджимтомпсонит Mg₁₀[Si₁₂O₃₂](OH)₄ тройные цепочки

Полисоматические замещения в биопириболах





Трехмерные дефекты.

Объёмные дефекты. К ним относятся скопления вакансий, образующие поры, каналы и трещины; частицы, оседающие на различных дефектах (декорирующие), например пузырьки газов, пузырьки маточного раствора; скопления примесей в виде секторов и зон роста.

Происхождение — нарушение режимов роста кристалла, распад пересыщенного твердого раствора, загрязнение образцов. В некоторых случаях объемные дефекты специально вводят в материал, для модификации его физических свойств.



Образование скрученных кристаллов



Gwindel (от нем. «gewunden» - извилистый).

«Правые» кристаллы закручены по часовой стрелке, «левые» - против.

Угол поворота не фиксированный, некоторые кристаллы закручены на несколько градусов на сантиметр, другие почти плоские.



В среде кристаллизации всегда присутствую посторонние вещества – примеси. Иногда достаточно присутствия миллионной доли примеси в растворе, чтобы полностью остановить рост кристалла или изменить его форму.

Механизм заключается в адсорбции примесей на гранях. Основными критериями покрытия грани являются энергия адсорбции и концентрация примеси.

 $\theta = N_{\alpha}/N$ (θ – степень покрытия; N – число позиций доступных для адсорбции; N_{α} – число позиций занятых примесью);

 $\theta \sim c_{np} e^{U_{\alpha}/kT}$ (c_{np} – концентрация примеси в растворе; U_{α} – энергия адсорбции).

 U_{α} зависит от кристаллографической ориентировки, поэтому степень покрытия граней разных простых форм примесью различна.



Чаще всего торможение роста происходит для граней с меньшей ретикулярони плотностью (которые в обычной среде растут быстро и выклиниваются).

При данных обстоятельствах происходит нарушение закона Бравэ.

Так, например, кристаллы NaCl, растущие из чистых растворов в форме кубов $\{100\}$, в присутствии примеси мочевины $CO(NH_2)_2$ или $PbCl_2$ врастают в форме октаэдров $\{111\}$.

При очень большой энергии адсорбции примеси может нарушаться плоскогранность кристаллов: тормозящиеся примесью грани не доходят до ребер и вершин; грани становятся выпуклыми.

Например, округлые кристаллы алмаза.

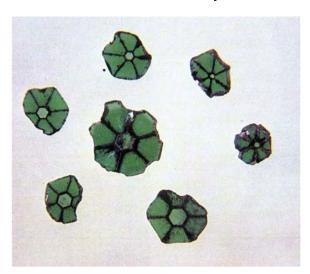


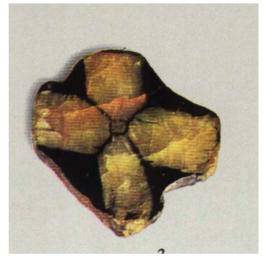




Примеси не только меняют облик кристалла, но и включаются в его объем при росте.

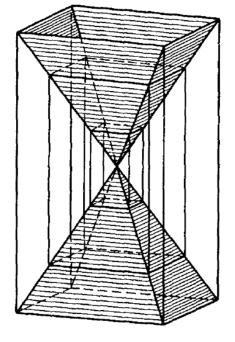
Чем выше энергия адсорбции примеси, тем больше ее входит в кристалл. А так как адсорбция кристаллографически избирательна, то коэффициент захвата будет отличаться (иногда даже на несколько порядков) для граней разных простых форм, что приводит к появлению в кристалле секторов с разным содержанием примесей. Такое явление называется секториальность.







Секториальная окраска изумруда и аметиста



Схожий тип примесной неоднородности – зональность.

Разный состав имеют хронологически разные участки кристалла.

Причины – либо изменение во времени состава среды кристаллизации, либо вариации скорости роста кристалла.

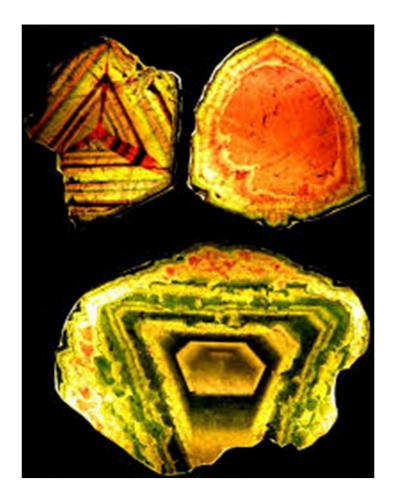
Если скорость роста падает во времени из-за исчерпания пересыщения, концентрация примеси будет непрерывно меняться от центра кристалла к периферии (трендовая зональность).

Если скорость роста колеблется во времени из-за перепадов термодинамических условий, то появляется колебательная или осцилляционная зональность.



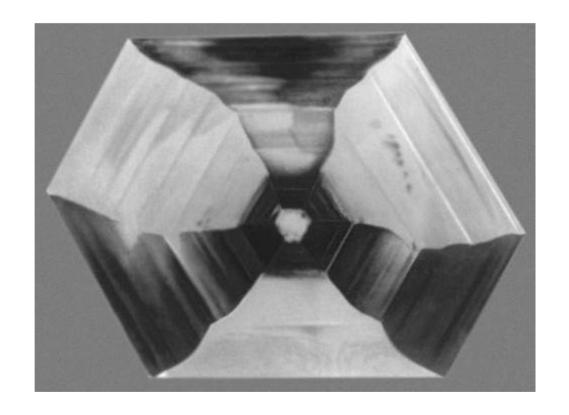
Зональное строение кристаллов турмалина.







Зональное и секториальное строение кристалла алюмокалиевых квасцов.





Состав кристалла всегда в большей или меньшей степени неоднороден, что будет сказываться на параметрах элементарной ячейки. В разных участках кристалла у ячеек будет разная метрика (гетерометрия).

К такому же эффекту может привести неоднородность температуры кристалла при росте из расплава.

Необходимость сопряжения разноразмерных блоков приведет к появлению внутренних напряжений, которые могут достигать очень больших значений (до 10⁹ Па).

Результатом внутренних напряжений является растрескивание кристалла во время или после роста, а также появление пластических дефектов (дислокации, блочность, двойникование).

