

пряжение σ на расстоянии r от точечного Д. мощности C , определяемой разностью объёмов Д. — включения и полости в кристалле, в к-рую он вставлен, равно:

$$\sigma \sim GC/r^3, \quad (1)$$

т. е. спадает с r сравнительно быстро. В отличие от этого, упругое поле дислокации

$$\sigma \sim Gb/r \quad (2)$$

является дальнедействующим. Для поверхностных Д. σ спадает с r быстрее; так, для малоугловой дислокац. границы при $r > h$ (h — расстояние между дислокациями):

$$\sigma \approx \frac{Gbr}{h^2} e^{-2\pi r/h}. \quad (3)$$

Избыточный объём. При образовании точечных Д. после перенесения лишнего атома в кристалл (или удаления атома из узла) окружающие Д. атомы и все последующие атомы вплоть до поверхности кристалла смещаются (релаксируют) в положения с мин. энергией (ближайшие атомы вокруг вакансии сдвигаются к ней, междоузельный атом, наоборот, расталкивает окружающие атомы). В результате объём кристалла изменяется на ΔV . Напр., для вакансии $\Delta V = -(0,3-0,6)\Omega$, для междоузельного атома в конфигурации гантели $\Delta V = (1,7-2,2)\Omega$, где Ω — атомный объём для недостающего атома.

Для дислокации в линейной теории упругости $\Delta V = 0$, т. к. для винтовой дислокации диагональные компоненты тензора напряжений $\sigma_{ii} = 0$, а для краевой дислокации сжатие решётки по одну сторону от плоскости скольжения точно скомпенсировано растяжением по др. сторону от неё. Учёт структуры ядра дислокации и нелинейных эффектов в теории упругости показывает, что дислокация вызывает расширение решётки ΔV на атомную плоскость, перпендикулярную оси дислокации, порядка Ω . Изменение объёма ΔV в случае поверхностных Д. соответствует увеличению локального межплоскостного расстояния на 10—20%.

Структура ядра Д. определяется структурой кристаллич. решётки. Среди точечных Д. резко различающимися атомными конфигурациями обладают междоузельные атомы. Они могут занимать междоузлия разл. симметрии (окта- и тетраэдрические в кубич. решётках), образовывать с одним из атомов решётки «гантели» разной ориентации либо обладать конфигурацией *краудиона*.

Ядру дислокации с вектором Бюргерса \mathbf{b} бывает энергетически выгодно расширяться на неск. частичных дислокаций с векторами Бюргерса \mathbf{b}_i ($\mathbf{b} = \sum \mathbf{b}_i$), соединённых полосками из дефектов упаковки, к-рые лежат в плоскости скольжения или расположены под углом к ней. Особенно сложной бывает конфигурация ядра расцеплённой дислокации в объёмноцентриров. кубических и гексагональных кристаллах, а также в кристаллах с *элементарной ячейкой*, содержащей много атомов разных сортов.

Зарядовое состояние Д. Удаление иона при образовании вакансии, замещение иона примесным атомом иной валентности, внесение «лишнего» атома при образовании междоузельного атома, смещение ионных островов при образовании дислокаций и поверхностных Д. вызывают появление нескомпенсиров. зарядов на Д. В металлах эти заряды в значит. мере экранируются путём перераспределения электронов проводимости. Однако экранировка оказывается неполной и вакансии имеют небольшой отрицат., а междоузельные атомы — положит. заряды. В случае краевой дислокации неполное экранирование ионного заряда, вызванного нелинейным увеличением объёма ΔV , вызывает появление результирующего заряда $\sim 0,1 e$ на атомную плоскость (e — заряд электрона). В металлич. *поликристаллах* неполное экранирование вызывает также появление отрицат. заряда на границах зёрен.

В неметаллич. кристаллах точечные Д. имеют в заперщённой зоне локальные энергетич. уровни, к-рые

могут быть либо пустыми (если они лежат выше уровня Ферми), либо заполненными одним или неск. электронами. В результате возникает множество центров, определяющих оптич., электр. и др. свойства ионных и полупроводниковых кристаллов (см., напр., *Центры окраски*).

В ионных кристаллах с заряженными точечными Д. электронейтральность обеспечивается тем, что Д. образуют пары — либо вакансии и междоузельный ион (дефекты Френкеля), либо 2 вакансии противоположного заряда (дефекты Шоттки), либо 2 междоузельных иона (антипод дефекта Шоттки). Ядро дислокации в ионных кристаллах обычно не несёт результирующего заряда, т. к. на оси дислокации в плоскости скольжения равноимённые ионы, как правило, чередуются. Однако на ступеньках это чередование нарушено и ступеньки на дислокации несут заряд, равный, напр., в кристаллах типа $\text{NaCl} \pm e/2$, так что эффективный линейный заряд дислокации определяется линейной плотностью ступенек (а также адсорбированными дислокацией заряженными точечными Д.) и может доходить до $0,1 e$ на 1 атомную плоскость. В ядре краевых дислокаций в полупроводниковых кристаллах с решёткой алмаза имеются цепочки ненавязанных связей (ловушки). При захвате электронов ловушками дислокации также приобретают заряд.

Подвижность Д. Движение точечных Д. по кристаллу происходит путём термически активированных атомных перестроек, характеризуемых энергией активации (миграции) U_m . Она варьируется обычно от 0,1 эВ (междоузельные атомы) до 1—2 эВ (вакансии). Исключением является безактивационное движение гантелей, динамич. краудионов и капалированных атомов под действием импульса, переданному атому при столкновении с быстрой частицей или в ударной волне (см. *Каналирование заряженных частиц*).

Скольжение дислокаций происходит под действием механ. напряжений σ . При $\sigma \leq 0,01 G$ скорость дислокации определяется термически активированным преодолением разл. препятствий и равна:

$$v \approx v_0 \exp[-U_m(\sigma)/kT],$$

где v_0 — пропорц. площади, «заметаемой» дислокац. сегментом после преодоления препятствия, а энергия активации U_m зависит от вида препятствия. При больших σ скорость дислокации определяется динамич. торможением, обусловленным взаимодействием с фононами и электронами проводимости: $v = \sigma/V(T)$, где V — т. н. константа торможения, равная при комнатной температуре 10^{-4} — 10^{-3} (пуаз). Т. н. переполнение дислокации определяется механ. и осмотич. силами (вторая зависит от концентрации точечных Д.) и лимитируется диффузионным переносом массы к дислокации или от неё.

Миграция поверхностных Д. (границ зёрен) по нормали к поверхности обычно термически активирована и связана с перестройкой (поворотом) небольших групп атомов. При двойниковании и бездиффузионных фазовых превращениях Д. перемещается за счёт скольжения двойникующих или межфазных дислокаций, образующих уступы на границе.

Образование Д. и их наблюдение. Механизмы образования точечных Д.: смещение атома из узла в результате механ. воздействий, напр. в связи с соударением с быстрой частицей (см. *Радиационные дефекты*); перемещение ступенек на движущихся дислокациях; термоактивиров. зарождение Д. на внеш. поверхности кристалла, на дислокациях и поверхностных Д. внутри кристалла; рождение пар Френкеля при аннигиляции экситонов в неметаллич. кристаллах.

Зарождению дислокаций происходит при слиянии точечных Д., в процессе *кристаллизации*, при облучении быстрыми частицами и др. Образование поверхностных Д. связано с эпитаксиальной кристаллизацией,