**Дәріс 5.** Кристалдық құрылымдағы ақау түрлері. Атомдар қоспасының миграциясы.

Бірақ реал кристалдарда әрқашан кристалл торда ақаулар болады. Алдымен макро- және микроақауларды ажырату керек. Макроакаулар микроскоппен оңай көрінеді. Оларға кеуектер, сызаттар, жарықшақтар, қосымша заттардың бөтен бөліктері, жеке кристаллиттердің көзге көрінетің шекаралары – поликристалдың дәндері мысал бола алады.

Микроақауларға немесе ақауларға үш өлшемдерінің біреуі кристалл тор периодымен а=0,2-0,5 нм салыстыруға тұратын атомдық деңгейдегі ақаулар жатады.

Кристалл өрістің ақаулығын кристалл атомын бөгде қосымша атоммен орын басу және кристалдан атомды шығару нәтижесінде вакансияның түзілуімен көрсетуге болады. Ішкі кристалл өрісінің кез келген бұзылуы ақау болып табылады. Егер кристалда ақау көп болмаса, онда олар бір-бірінен алшақтау орналасады, яғни кристалл тор ақаулары бұл жағдайда локальданған. Кристалдағы ішкі өріс потенциалын бұл кезде U=U0+U’ түрінде көрсетуге болады, мұндa U0 – идеал кристалдың потенциалдық функциясы, U’- ақау жанындағы ойымдалған облыстағы нөлден өзгеше қосымша қосылғыш. Сондықтан тек осы облыста орналасқан электрондардың ғана энергетикалық күйлері өзгеріп, қатты дененің идеал зоналық құрылымына қосымша ойдымдық энергетикалық күйлердің түзілуіне алып келеді. егер ақаумен бірнеше осындай күйлер байланысқан болса, онда мұндай ойдымдық күйлер саны ақаулар санына тең не одан көп. Мысалы қосымша Fe атомдары +2 және +3 валентті бола алады, демек олар екі немесе үшзарядты иондар бола алады. Бұл қосымша Fe атомы да екі электрондық күйде бола алады дегенді білдіреді.

Ақауларға тән белгі – ойдымдық (локальдық) – энергетикалық деңгейлердің электрондармен байланысы. Бұл байланыс әртипті қатты денелерде әртүрлі. Зоналық құрылымында тыйым салынған зонасы жоқ металдарда қоспа атомдардың электрондық деңгейлері валенттік зонаның толған немесе бос бөлігіне барады. Бірінші жағдайда қоспа электрондар кристалдың негізгі атомының жалпыланған валенттік электрондар ұжымын толтырып, өздері тудырған қоспа атомдармен байланысын жоғалтады. Екінші жағдайда қоспа деңгейлер энергиялары бойынша валенттік зонаның соңғы толған деңгейінен жоғары орналасады, яғни олардың энергиясы Ферми деңгейінен жоғары жатады. Осылайша, металдарда ең ықтимал ақаулар электрондардан бос иондалған күйде болады.