

УДК 620.17.+537.311+548.736

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

В. Г. ГОВОРКОВ, Г. В. БЕРЕЖКОВА, Е. П. КОЗЛОВСКАЯ

О ВОЗМОЖНЫХ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЯХ В КРИСТАЛЛАХ α - Al_2O_3 С ПОВЫШЕНИЕМ ТЕМПЕРАТУРЫ

(Представлено академиком Н. В. Беловым 20 VI 1975)

При сопоставлении механических и электрических свойств монокристаллов α - Al_2O_3 обнаружена корреляция в изменении этих свойств с повышением температуры испытания*. При механических испытаниях монокристаллов α - Al_2O_3 наблюдаются три температурные области, различающиеся механизмами пластической деформации. В I области (до 900°C) пластическая деформация осуществляется двойникованием и скольжением по плоскостям призмы (^{1, 2}); во II области (до 1500°) деформация двойникованием наблюдается реже и происходит смена систем скольжения, преобладающим становится базисное скольжение (0001)

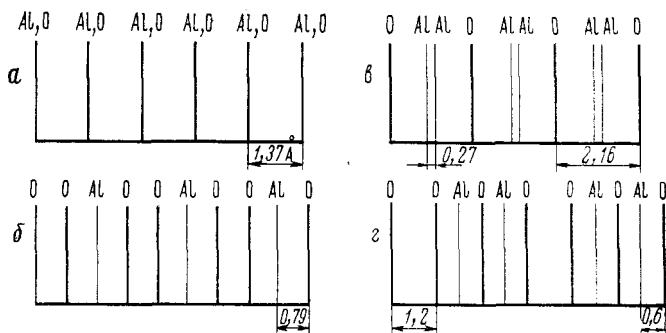


Рис. 1. Расстояние в Å между семействами параллельных плоскостей в монокристаллах α - Al_2O_3 : а — {1010}, б — {1120}, в — {0001}, г — {1511}

$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$. Энергия активации процесса пластической деформации в этой температурной области составляет 3,7—5,0 эв (³). Характерной особенностью пластической деформации III области (1500 — 2000°) является интенсивное переползание базисных дислокаций; преимущественной системой скольжения в этой области остается система (0001) $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$. Энергия активации процесса пластической деформации возрастает до 8,7 эв (³).

В температурной зависимости электропроводности кристаллов α - Al_2O_3 также наблюдаются три температурные области, различающиеся энергией активации и типом проводимости (⁴⁻⁸). В I области (до 900°) проводимость дырочная и энергия активации равна 1 эв; во II области (900 — 1400°) тип проводимости меняется на электронный и энергия активации возрастает

* Сравнение проведено на образцах, оптическая ось которых составляла 60° с осью образца.

до 2,5 эв; в III области (выше 1400°) энергия активации достигает 5 эв, что принимается за энергию активации собственной проводимости. Данные о температурной зависимости электропроводности свидетельствуют о росте при нагреве доли ковалентности связи в кристаллах корунда.

Следует отметить, что влияние примеси, изоморфно входящей в решетку, на механические и электрические свойства оказывается аналогичным: присутствие окиси хрома упрочняет кристаллы (9) и снижает его электропроводность (4, 8).

Подобие изменений механических и электрических свойств с повышением температуры указывает на тесную взаимосвязь механических свойств кристаллов $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с электронным состоянием решетки.

Из рассмотрения модели кристалла $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ следует, что расстояние между семействами плоскостей $\{10\bar{1}0\}$ является наибольшим (1,37 Å) (рис. 1а). Краевые дислокации, скользящие в этих плоскостях, обладают наименьшим для кристаллов $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ вектором Бюргерса (4,75 Å). Поэтому, исходя только из чисто геометрических соображений, можно понять, почему скольжение в кристаллах $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ начинается по этим плоскостям.

Для того чтобы объяснить смену плоскостей скольжения, происходящую при нагревании кристаллов $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, обратимся к рассмотрению базисных плоскостей (рис. 1б). Плоскости (0001) поочередно заняты ионами кислорода и алюминия, причем ионы алюминия, в отличие от ионов кислорода, не лежат строго в одной плоскости. Они поочередно смещены от этой плоскости в направлении $[0001]$, так что образуют два слоя, отстоящие один от другого на 0,27 Å. Аналогичные плоскости, параллельные плоскости (0001), в решетке $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ связаны наиболее прочно, поскольку при отрыве или смещении этих плоскостей происходит разрушение наибольшего числа связей в молекуле. Это подтверждается измерениями энергии разрушения кристаллов $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (10). По-видимому, по той же причине скольжение вдоль плоскости базиса при температурах, меньших 500° затруднено.

Активация ионов решетки при повышении температуры может приводить к смещению ионов под действием сил электростатического взаимодействия, поэтому можно ожидать, что при повышении температуры расстояние между слоями из ионов алюминия и кислорода будет сокращаться, а между слоями из ионов алюминия увеличиваться. Тогда при высоких температурах структуру кристаллов корунда можно представить как слоистую, состоящую из пачек, в каждую из которых входит два слоя ионов Al^{3+} и один слой O^{2-} (рис. 2). Базисное скольжение в этом случае может осуществляться перемещением таких пачек, причем смещение должно происходить вдоль плоскостей, занятых одноименно заряженными ионами алюминия. Естественно ожидать, что такие изменения структуры должны сопровождаться изменениями электрических свойств кристаллов.

Для выяснения механизмов пластической деформации при высоких температурах нельзя ограничиваться моделями дислокаций, построенными на основе структуры кристаллов, существующей при комнатной температуре, поскольку необходимо учитывать структурные изменения, происходящие при повышении температуры. Для более глубокого анализа процессов, происходящих в кристаллах при высоких температурах, необходимы экспериментальные данные о высокотемпературных модулях упругости, прецизионные измерения изменений параметров решетки и т. д.

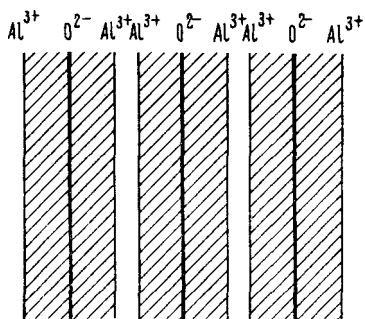


Рис. 2. Гипотетическая слоистая структура кристаллов $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ при высоких температурах

В заключение отметим, что данным сообщением авторы имели целью обратить внимание на существование корреляции в температурных изменениях механических и электрических свойств. Приводимое объяснение структурных изменений при повышении температуры является одной из возможных интерпретаций наблюдаемых эффектов.

Институт кристаллографии
им. А. В. Шубникова
Академии наук СССР
Москва

Поступило
4 V 1975

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ A. H. Heuer, *Phil. Mag.*, v. 13, 122, 379 (1966). ² В. Г. Говорков, Е. П. Козловская и др., *Кристаллография*, т. 17, № 3, 599 (1972). ³ В. Г. Говорков, *Сб. Рубин и сапфир*, М., 1974, стр. 194. ⁴ P. J. Narrop, R. H. Creamer, *Brit. J. Appl. Phys.*, 14, № 6, 335 (1963). ⁵ S. Dasgupta, J. Hart, *Brit. J. Appl. Phys.*, v. 16, № 5, 725 (1965). ⁶ S. Dasgupta, *Brit. J. Appl. Phys.*, v. 17, 267, № 2 (1966). ⁷ Г. М. Стулова, Ю. К. Шалабутов, *Физ. и техн. полупр. т. 1*, 1192 (1967). ⁸ И. А. Бурляев, Э. Б. Перчик и др., *ФТТ*, т. 11, № 5, 1414 (1969). ⁹ В. Г. Говорков, Н. Н. Воинова и др., *ФТТ*, т. 11, № 12, 3601 (1969). ¹⁰ S. M. Wiederhorn, *J. Am. Ceram. Soc.*, v. 52, № 9, 485 (1969).