第九课：晶体的缺陷和点缺陷

Friday, October 25, 2019 10:36 AM

1. 理想晶体：具有完整的点阵结构的晶体是理想化的；
2. 晶体的缺陷：偏离理想点阵结构的部位称作晶体的缺陷或者晶体的不完整部位；
3. 缺陷的分类：
   a. 点缺陷：零维缺陷，偏离理想点阵结构的部位仅限在一个原子或几个原子的范围内。如：空位、间隙原子、杂质原子等；
   b. 线缺陷：一维缺陷，如：位错；
   c. 面缺陷：二维缺陷，如：固-固界面的晶界、相界、堆垛层错等以及晶体的外表面部位；
   d. 体缺陷：三维缺陷，如：空洞、夹杂物、包裹物等；
4. 其他分类方式：
   a. 电子缺陷：导带电子、价带空穴；
   b. 原生缺陷：晶体生长过程中产生的各种缺陷；
   c. 二次缺陷：晶体加工、热处理过程中产生的缺陷、完整晶体在高能粒子的辐射或轰击过程中产生的缺陷等；
   d. 微缺陷：点缺陷的缔合；
5. 点缺陷：
   a. 克文符号：以M晶体为例
      i. 表面原子：M_s；
      ii. 正常格点：M_M；
      iii. 点缺陷 $\begin{cases} \text{空位：}V_M; \\ \text{间隙原子：}M_i; \\ \text{替位杂质：}F_M; \\ \text{间隙杂质：}F_i; \end{cases}$
   b. 热缺陷(本征点缺陷)：一个在绝对零度时的理想单晶，在常温下，由于晶格热振动或外部电磁辐射而产生的点缺陷，可以是空位或(和)间隙原子；
   c. 热缺陷模型：
      i. 弗兰克缺陷模型：空位与间隙原子成对产生或消失；

$$M_M \leftrightarrow M_i + V_M, \qquad \text{平衡常数} K_1 = \frac{[M_i][V_M]}{[M_M]}$$

      ii. 肖特基缺陷：正常格点中的原子移动到晶体表面，只产生空位，而不会产生间隙原子；

$$M_M \leftrightarrow M_s + V_M, \qquad \text{平衡常数} K_2 = \frac{[M_s][V_M]}{[M_M]}$$

      iii. 第三种缺陷：表面原子进入晶体内部，成为间隙原子，只产生间隙原子，不会产生空位；

$$M_s \leftrightarrow M_i, \qquad \text{平衡常数} K_3 = \frac{[M_i]}{[M_s]}$$

      iv. 空位浓度：$[V_M] = \frac{[M_M]}{[M_s]}\left(\frac{K_1 K_2}{K_3}\right)^{\frac{1}{2}} = K_V(T)$；
      v.

作业待办：第四章习题；