第七课：晶核的生长理论

Sunday, March 1, 2020 07:50

1. Kossel模型生长：
   a. 生长特征：二维成核，侧向扩展，层状生长；
   b. 硅完美晶体生长技术：低温成核，高温生长；
2. Kossel模型要求：
   a. 二维核生长需要克服由棱边能作用产生的位垒，气象或溶液生长要求：过饱和度25%以上；
   b. 生长不连续；
3. Frank生长模型(非完整突变光滑面生长模型)：又名螺旋生长模型
   a. Frank模型适用：缺陷晶体，光滑界面；
   b. 特点：侧向扩展，层状生长，有自然台阶，不需要二维成核，连续生长，生长速度快；
   c. 模型要点：
      i. 螺位错在晶面露头；
      ii. 产生一高度等于晶面间距的台阶；
      iii. 提供无穷尽的台阶源；
      iv. 不需要光滑界面生长的二维突变成核；
   d. 模型认为晶体是理想不完整的，其中必然会存在一定数量的位错；
   e. 意义：不只限于由螺旋位错的生长过程，实际上代表了在生长过程中由自然台阶不需要二维成核的一大类晶体的生长情况；
4. 杰克逊界面平衡结构理论：
   a. 相变潜热：相变过程中释放或吸收的热；
   b. 粗糙面：晶体相约占50%；
   c. 光滑面：晶体相占0%或100%；
   d. 杰克逊晶体生长机制：取决于晶体界面结构，由热力学条件和晶体种类决定；
5. 杰克逊界面平衡理论假设：
   a. 单原子系统，简立方，只考虑表面层和界面层中原子与原子的相互作用(双层界面，单层模型)；
   b. 生长界面为单原子层，且界面的原子层内晶相与流体相原子都位于晶格位置；
   c. 只考虑晶体-晶体的原子间相互作用；
   d. 晶体和流体两相，单位质量的V,U,S不同，x(指晶体相原子占比)不同，自由能G(x)也不同；
   e. 原子按统计学分布，与温度无关；
   f. 杰克逊体系吉布斯自由能的变化：
      i. 内能变化：

$$\Delta U = \Delta U_0 + \Delta U_1$$

其中，

垂直键能，设垂直键总数为y_0：

$$\Delta U_0 = -2y_0\left(\frac{L_0}{V}\right)N_A$$

水平键能，设水平键总数为y_1：

$$\Delta U_1 = -y_1\left(\frac{L_0}{V}\right)\left(\frac{N_A}{N}\right)N$$

$\Delta U_1 = -y_1 \left(\frac{}{v}\right)\left(\frac{}{N}\right) N_A$

因此，

$$\Delta U = -2L_0\left(\frac{y_0}{v}\right)N_A - L_0\left(\frac{y_1}{v}\right)\left(\frac{N_A}{N}\right)N_A$$

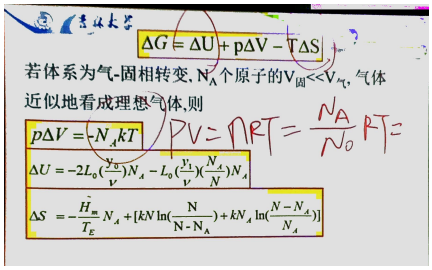
$$\Delta S = \Delta S_0 + \Delta S_1$$

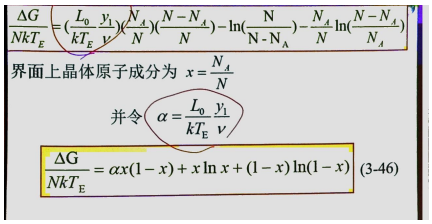
ii. 熵变化：

$$\Delta S = \Delta S_0 + \Delta S_1$$

ΔS_0由无序流体原子转变成有序晶体原子减少的的熵；

ΔS_1熵增；





g. 杰克逊因子：

$$\alpha = \frac{L_0}{kT_E}\cdot\frac{y_1}{v}$$

i. 界面相变熵(杰克逊因子)；

ii. 物质相变熵$\frac{L_0}{kT_E}$：决定物质的本性；

iii. 取向因子$\frac{y_1}{v}$：取决于晶体结构和界面的取向，反映晶体的各向异性：