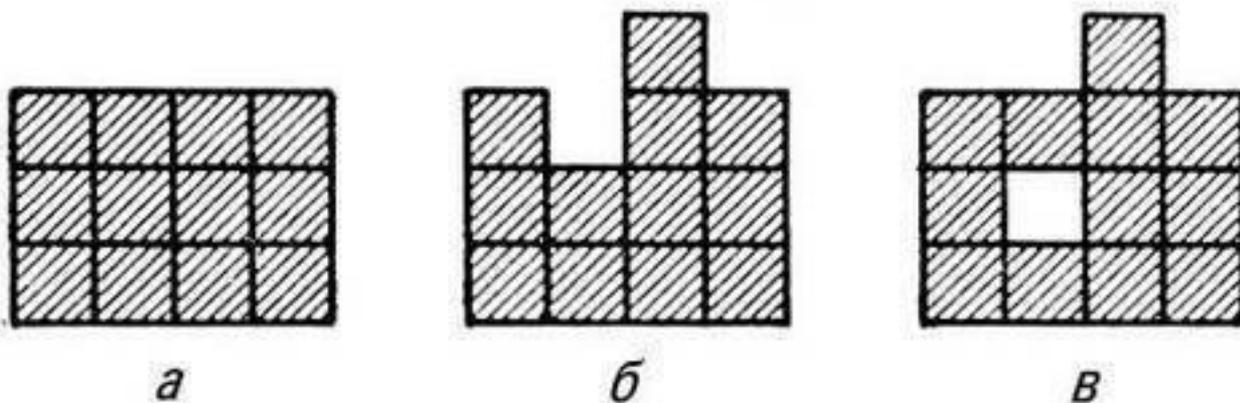




Точечные дефекты в кристаллах

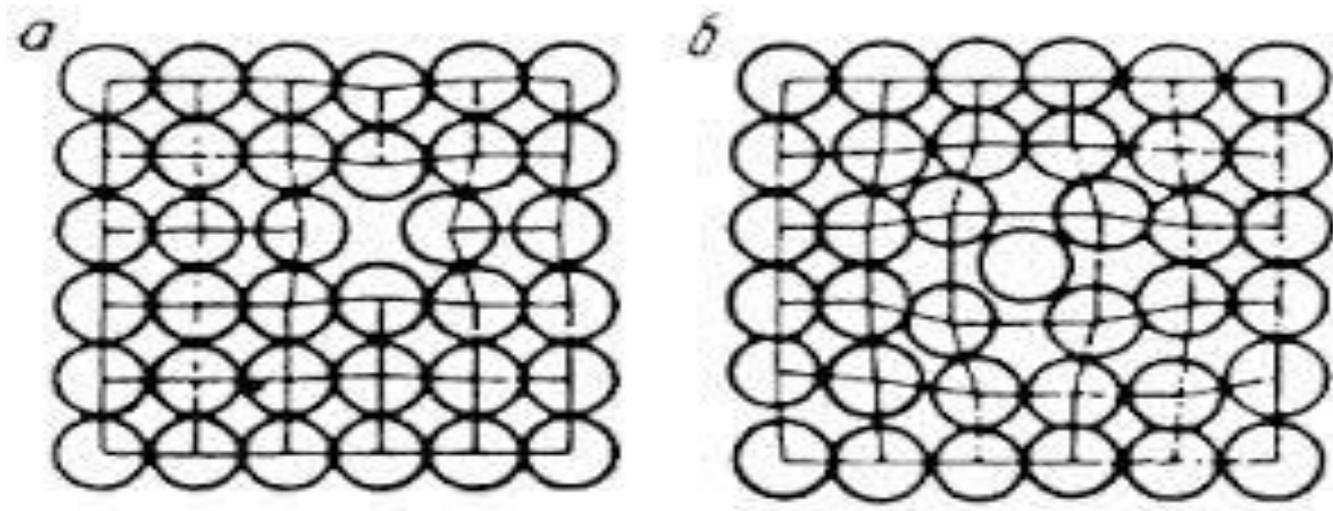
Точечные дефекты в кристаллах

- **Дефектами** кристалла называют всякое нарушение трансляционной симметрии кристалла — идеальной периодичности кристаллической решётки.



Виды точечных дефектов

- **Вакансия** (от лат. *vacans* — пустующий, свободный) — дефект кристалла, представляющий собой узел, в котором отсутствует атом (ион).
- **Междоузельный атом** — точечный дефект кристаллической решётки, атом, который занимает промежуточное положение между узлами решётки.



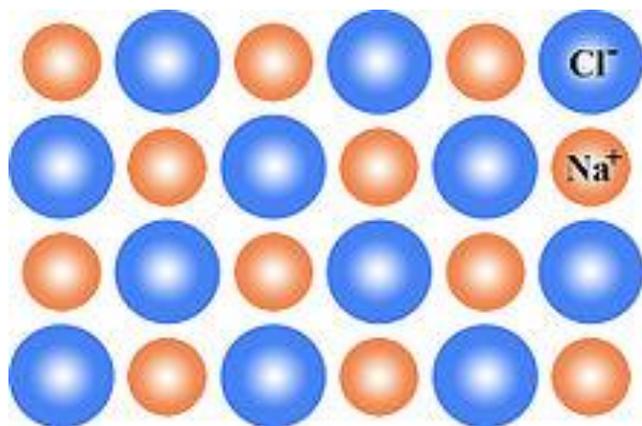
а) вакансия; б) межузельный атом

- **Яков Ильич Фрэнкель** (29 января (10 февраля) 1894, Ростов-на-Дону — 23 января 1952, Ленинград) — советский учёный, физик-теоретик. Он стал автором первого курса теоретической физики в СССР. За свои научные достижения он был избран членом-корреспондентом Академии наук СССР в 1929 году.
- В 1926 году вышла работа Я. И. Френкеля, в которой им была разработана теория движения атомов и ионов в кристаллах и введено представление о новом типе дефектов кристаллической решётки, за которыми в литературе закрепилось наименование «*дефектов по Френкелю*».
- В 1931 и 1936 годах опубликовал работы, в которых предсказал существование экситонов в полупроводниках, ввёл сам термин экситоны, и разработал для него теорию.

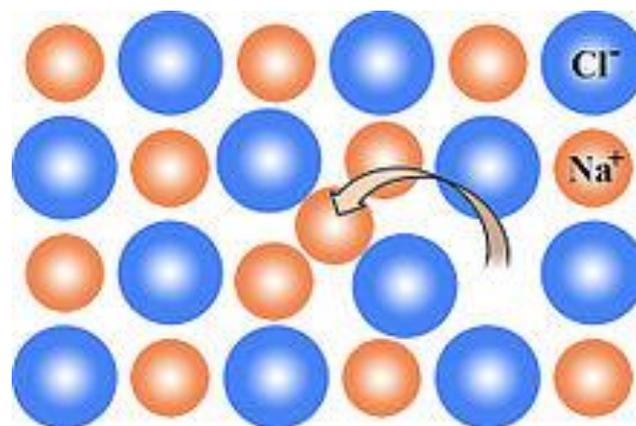


Виды точечных дефектов

Дефект по Френкелю - точечный дефект кристалла, представляющий собой пару, состоящую из вакансии и междоузельного атома (иона).



Бездефектный кристалл NaCl



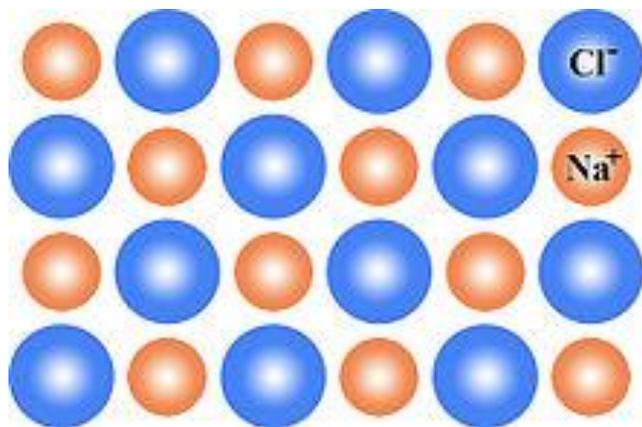
Вакансия Na⁺ — дефект по Френкелю

- **Вальтер Герман Шоттки** (нем. Walter Hermann Schottky; 23 июля 1886, Цюрих, Швейцария — 4 марта 1976, Прецфельд, Западная Германия) — немецкий физик, который в 1915 году изобрёл электронную лампу с экранирующей сеткой и в 1919 тетрод.
- В 1924 году он, совместно с Э. Герлахом изобрёл электродинамический микрофон ленточного типа.
- В 1935 году разработал новые представления о механизме образования вакансий атомов в кристаллах. Получающиеся таким способом дефекты в литературе именуют «дефектами по Шоттки».
- В 1938 Шоттки сформулировал теорию, предсказывающую *эффект Шоттки*, сейчас используемый в диодах Шоттки.

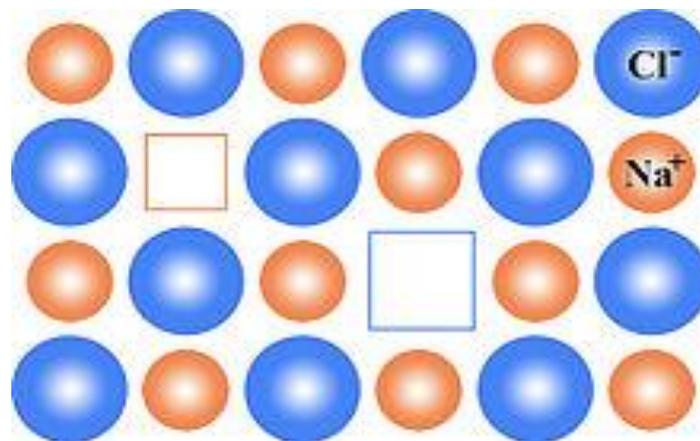


Виды точечных дефектов

- **Дефект по Шоттки** — вакансия атома (иона) в кристаллической решётке, один из видов точечных дефектов в кристаллах, от дефекта по Френкелю отличается тем, что его образование не сопровождается возникновением междоузельного атома (иона)



Бездефектный кристалл
NaCl



Две вакансии противоположных
знаков — дефект по Шоттки

Образование точечных дефектов

- *Точечные дефекты* в кристалле образуются в процессе *роста, пластической деформации* или *термообработки*.

Количество дефектов

- Вакансии всегда присутствуют в кристалле, находящемся в состоянии теплового равновесия. Количество дефектов по Шоттки, соответствующее температуре кристалла, можно оценить с помощью формулы:

$$n = N \exp\left(-\frac{W_i}{2k_B T}\right)$$

где N — число ионов, W_i — энергия, необходимая для удаления одного иона из узла кристаллической решётки, k — постоянная Больцмана. При $E \sim 1$ эВ и $T \sim 1000$ К из формулы следует $n/N \sim 10^{-5}$.

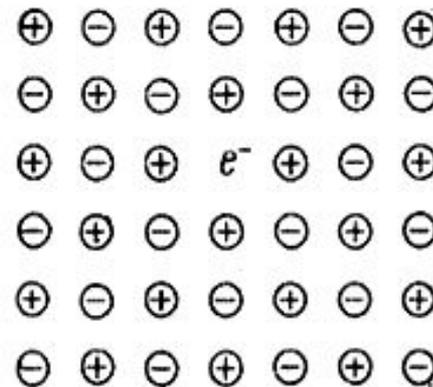
- Для оценки количества пар дефектов Френкеля служит другая формула:

$$n = \sqrt{Nm} \exp\left(-\frac{W_1}{2k_B T}\right)$$

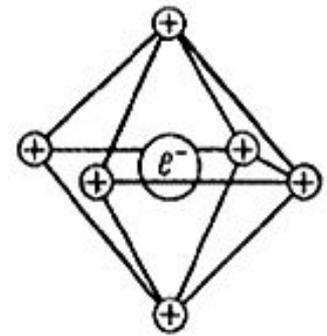
где N и m — концентрации узлов и междоузельных положений соответственно, а W — энергия, необходимая для перемещения атома из узла решётки в междоузлие.

Центры окраски

- **Центрами окраски** называются комплексы точечных дефектов, обладающие собственной частотой поглощения света и соответственно изменяющие окраску кристалла.



a)



b)

Схема (a) и модель (б) F-центра

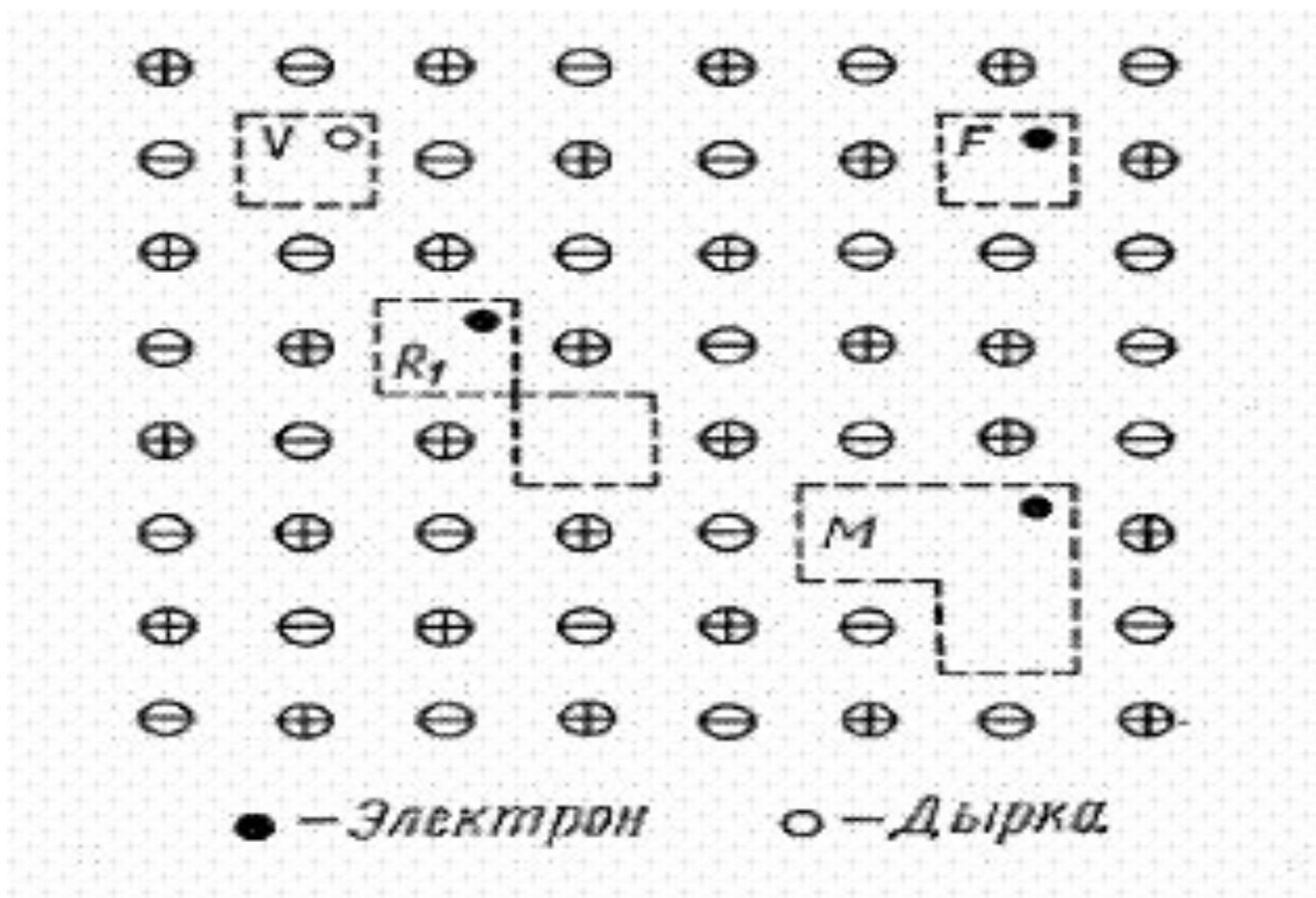


Схема нескольких центров окраски в структуре типа NaCl

Влияние точечных дефектов на свойства кристаллов

- Плотность материала уменьшается при возрастании концентрации вакансий.
- Диффузия
- Очень велико влияние точечных дефектов на электропроводность кристалла
- Ионная проводимость

Список литературы

- 1. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. Т.2. М. :Мир, 1979
- 2. Зиненко В.И., Сорокин Б.П., Турчин П.П., М.: Издательство Физико-математической литературы, 2001
- 3. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978
- 4. Маделунг О. Теория твердого тела. М.: Наука, 1980
- 5. Штремель М. А. Прочность сплавов. Ч. I. Дефекты решетки. М., 1982
- 6. Павлов П. В., Хохлов А. Ф. Физика твердого тела. — М.: Высшая школа, 2000. — 494 с



**Спасибо за
внимание!**