

Министерство образования и науки РФ
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ГОУВПО «АмГУ»)

Дефекты в кристаллических и неупорядоченных структурах

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДИСЦИПЛИНЫ

по направлению подготовки *010600.68 – «Прикладные математика и физика»*

Утвержден на заседании кафедры физического материаловедения и
лазерных технологий «___» _____ 201_г.,

(протокол № __ от _____ 201__)

Зав. кафедрой

_____ Е.С.Астапова

Печатается по решению
редакционно-издательского совета
инженерно-физического факультета
Амурского государственного
университета

Е. С. Астапова (составитель)

Учебно-методический комплекс дисциплины «Дефекты в кристаллических и неупорядоченных структурах» для обучающихся очной формы по магистерской программе 010900.68 – Прикладные математика и физика.

Благовещенск: Амурский гос. ун-т, 2011 г.

Рецензент:

Ланкин С. В., зав. кафедрой общей физики Благовещенского государственного педагогического университета, доктор физико-математических наук, профессор

© Амурский государственный университет, 2011

ВВЕДЕНИЕ

Занятия по дисциплине «Дефекты в кристаллических и неупорядоченных структурах» ведутся в соответствии с рабочей программой, составленной на основании государственного образовательного стандарта и авторских разработок. На освоение дисциплины отводится 66 часов, из них: 32 часа лекций, 34 часа самостоятельной работы студентов. Дисциплину изучают обучающиеся по магистерской программе 1 года обучения в десятом семестре, по данной дисциплине сдается экзамен в десятом семестре.

ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью курса является знакомство с основами физики дефектов в кристаллических и неупорядоченных структурах, типах неупорядоченных материалов, особенностях их электронных спектров, физических характеристик, поведения дефектов и химических примесей в неупорядоченных структурах.

Программа составлена на основании государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования.

Преподавание курса связано с другими курсами государственного образовательного стандарта: высшая математика, физика конденсированного состояния, квантовая механика, кристаллография и физика кристаллов, химия, основы рентгеноструктурного анализа и др.

По завершению обучения дисциплиной студент должен:

знать

- основные понятия физики дефектов,
- представления об упорядоченных и неупорядоченных системах и их физических моделях,
- атомные и электронные критерии неупорядоченности,
- основы перехода «порядок – беспорядок – порядок»,
- конкретные типы неупорядоченных твердых растворов, сплавов, композиционных, полупроводниковых и др. материалов, особенности распределения дефектов в них,
- основные законы внутреннего строения кристаллов, главнейшие типы кристаллических структур и их связь с химическим составом веществ и кристаллохимическими особенностями их элементов, типы дефектов в кристаллических телах,
- процессы и изменение свойств материалов в зависимости от типов дефектов и пр.

уметь

- описывать вероятно возможные дефекты в материалах,

- грамотно описывать строение кристаллов и неупорядоченных систем, используя знания по точечной и пространственной симметрии и теории дефектов, необходимые для правильной интерпретации результатов самостоятельной научной деятельности и понимания специальной литературы и т.п.

При определении оценки знаний студентов во время экзамена преподаватели руководствуются следующими критериями:

Критерии оценки при сдаче экзамена

К сдаче экзамена допускаются обучающиеся, посетившие лекционные занятия данного курса. При наличии пропусков темы пропущенных занятий должны быть отработаны. Программные вопросы к экзамену доводятся до сведения обучающихся за месяц до экзамена.

При определении итоговой оценки знаний студента учитывается активность и текущая успеваемость студента в течение семестра по данному предмету.

Безупречным считается ответ, в котором правильно, ясно и подробно изложен теоретический материал по теоретическим вопросам.

Ответ оценивается на «отлично»

при безупречном выполнении заданий билета;

при правильных ответах на теоретические вопросы билета и дополнительные вопросы.

Ответ оценивается на «хорошо»

при полном выполнении заданий билета;

при правильных ответах на теоретические вопросы с незначительными неточностями, исправленными в устной беседе.

Ответ оценивается на «удовлетворительно»

при выполнении заданий билета, при кратких пояснениях каждого пункта билета;

при правильных ответах на теоретические вопросы,

возможны неоднократные неточности в ответах, которые исправляются при дополнительной беседе с уточняющими вопросами.

Ответ оценивается на «неудовлетворительно»

при невыполнении заданий билета

или при кратких пояснениях каждого пункта билета со значительными ошибками;

СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

ЛЕКЦИОННЫЙ КУРС (10 семестр, 32 часа)

1. Порядок – беспорядок в мире атомов (молекул), ближний – дальний порядок, элементы порядка в беспорядке и беспорядка в порядке, микроскопический и макроскопический порядок (беспорядок). Кристаллы. Исторические сведения об исследовании кристаллических структур. Операции и элементы симметрии конечных фигур. Точечные группы симметрии. Групповые аксиомы. Применение теории групп и теории симметрии на примере упорядоченной структуры группы 32. Типы элементарных ячеек. Обозначения по Шенфлису, Браве, Герману-Могену.

(2 часа)

2. Несовершенства строения реальных кристаллов. Дефекты в кристаллических структурах. Классификация собственных дефектов (нульмерные, линейные, двумерные, объемные), равновесие точечных дефектов, вакансии Шоттки, вакансии Френкеля, причины образования дефектов (отклонение состава от стехиометрического при выращивании, термическая обработка, пластическая деформация, высокоэнергетическое радиационное воздействие), пересыщение кристалла дефектами. Несовершенства строения реальных кристаллов. Дислокации и дисклинации. Типы и различные подходы в описании дефектов.

(2 часа)

3. Общая характеристика неупорядоченных систем. Работы Займана, Иоффе, Регеля, Андерсена, Мота, посвященные неупорядоченным системам. Прикладной аспект изучения неупорядоченных структур (оптические стекла, аморфные металлические сплавы, аморфные полупроводники и др.). Аморфное состояние. Общие закономерности аморфизации и кристаллизации. Критическая скорость охлаждения.

(2 часа)

4. Исследования металлических расплавов Ульманом. Причины перехода жидкости в аморфное состояние. Зависимость величины энтальпии H от температуры при различных скоростях охлаждения. Возможность аморфизации в зависимости от кинетических констант зародышеобразования и роста кристаллических фаз.

(2 часа)

5. Различие между аморфным и стеклообразным состоянием. Примеры веществ в стеклообразном состоянии. Физические свойства, характерные только для стекол. Особенности структуры аморфных веществ. Общее координационное число z . Анализ кривых $I(k)$, $Q(k)$, $\rho(r)$. Интерференционная функция амплитуды $I(k)$. Волновой вектор. Функция радиального распределения. Приведенная функция радиального распределения. Аналогия между структурой стёкол и структурой жидкостей.

(2 часа)

6. Сегнетоэлектрики. Структура. Дефекты в сегнетоэлектриках. Мезопористые наноматериалы и дефекты в них. Дефекты в сложных неорганических системах. Керамические материалы. Радиационные дефекты и пострadiационное упорядочение дефектов.

(2 часа)

7.Аморфные металлические сплавы. Методы получения. Классификация аморфных металлических сплавов. Схема устройства для получения АМС путем закалки из жидкого состояния. Условия получения ленты АМС при комнатной температуре. Модели структуры АМС. Первая группа, вторая группа моделей. Модель Бернала. Допущения. Модели ХПУЖС, ХПУМС. Структурная релаксация. (2 часа)

8.Типы твердых растворов (замещения, внедрения, вычитания), условия образования растворов, локальная координация (модель случайных ковалентных связей, модель химически упорядоченной сетки), приближение виртуального кристалла, упорядоченный и неупорядоченный раствор, молекулярные комплексы в твердом растворе с нарушением ближнего порядка, электронные состояния молекулярных комплексов в упорядоченном и разупорядоченном твердом растворе. (2 часа)

9.Дефекты в аморфных металлических сплавах. Внутренние и внешние дефекты. Точечные, микроскопические, макроскопические дефекты. Источники формирования дефектов. Вопрос о наличии дислокаций в аморфной структуре. Анализ дефектов в аморфных сплавах с позиции анализа внутренних напряжений. (2 часа)

10. Влияние аморфности металла на магнитное состояние в магнитных структурах. Химический и структурный беспорядок. Флуктуации обменных взаимодействий. (2 часа)

11. Стеклообразное состояние (определение), метод получения стекол, критерии стеклования, диаграммы переходов кристалл - расплав -стекло- (кристалл), структурный критерий стеклообразования, стекла типа "Ge" и "Se", структура стекол (модель неправильной непрерывной сетки (В. Захариасен, 1932 г.), полимерно – кристаллическая модель (А.А. Лебедев), электронная структура стекол (модели КФО, МД, КФО-МД). Стеклообразные полупроводники. (2 часа)

12. Некристаллические полупроводники. Топологически неупорядоченные полупроводники. Параметр порядка. Беспорядок в неупорядоченных телах. Исследования А. И. Губанова, С. Александера. Топологические дефекты. (2 часа)

13. Неупорядоченные полупроводники. Критерии ближнего и дальнего порядка в кристаллах, причины упорядочения и разупорядочения, определение неупорядоченной конденсированной системы, критерий электронной неупорядоченности, одномерные модели кристалла: периодический потенциал (модель Кронига – Пенни), непериодический потенциал (модели Лившица и Андерсона); критерии локализованного и нелокализованного (распространенного) состояний, переход Андерсона, плотность состояний в примесной зоне. (2 часа)

14. Теоретическое описание аморфных тел и стёкол. Радиус корреляции структуры R_c . Представления о существовании неоднородностей структуры. Микроструктурная теория

строения стекла Лебедева. Топологический беспорядок в аморфных телах. Дисклинации. Модели Клемена, Садока, Лихачева. Модели Ривира, Нельсона, Сетны. Использование дисклинаций для преодоления противоречия между минимизацией локальной энергии и наиболее плотного заполнения пространства. Масштаб неоднородностей в топологически неупорядоченных полупроводниковых средах и модель границ неоднородностей. Пространственная неоднородность аморфных тел и стёкол. Плотность колебательных состояний.

(2 часа)

15. Методы получения неупорядоченных полупроводников, перспективы применения (пороговые переключатели, элементы памяти, солнечные элементы). Получение аморфных полупроводников. Аморфный кремний. Селен. Халькогенидные стекла. (2 часа)

16. Жидкие полупроводники. Раствор, расплав, жидкий полупроводник, классификация переходов твердая фаза-жидкость, термодинамические характеристики перехода, изменение структуры ближнего порядка при переходе твердая фаза- жидкость, расплавы типа "Si", "CdTe", химические примеси, ионные жидкости, методы исследования расплавов.

(2 часа)

САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ (34 часа)

1. Самостоятельное освоение теоретического материала по вопросам, относящимся к микроскопическому и макроскопическому порядку, теории симметрии, математическому аппарату, применяемому для описания кристаллических и неупорядоченных структур и дефектов в них (2 часа)

2. Изучение теоретического материала по строению реальных кристаллов, классификации дефектов, причин образования дефектов, процессов пересыщения кристалла дефектами. Освоение знаниями по несовершенствам строения реальных кристаллов, теории дислокаций и дисклинаций, типам и различным подходам в описании дефектов. (2 часа)

3. Самостоятельное освоение теоретического материала по неупорядоченным системам по трудам Займана, Иоффе, Регеля, Андерсена, Мота, изучение неупорядоченных структур, таких как оптические стекла, аморфные металлические сплавы, аморфные полупроводники и др. и дефектов в них в прикладном аспекте, изучение аморфного состояния, общих закономерностей аморфизации и кристаллизации. (2 часа)

4. Изучение трудов Ульмана по металлическим расплавам. Освоение причин перехода жидкости в аморфное состояние, зависимости величины энтальпии H от температуры при различных скоростях охлаждения. Изучение возможности аморфизации в зависимости от кинетических констант зародышеобразования и роста кристаллических фаз. (2 часа)

5. Изучение различий между аморфным и стеклообразным состоянием, физических свойств, характерных только для стекол, особенностей структуры аморфных веществ, физических характеристик и функциональных зависимостей с учетом дефектности структур. Анализ и выявление возможной аналогии между структурой стёкол и структурой жидкостей.

(2 часа)

6. Самостоятельное освоение теоретического материала по сегнетоэлектрикам. Изучение структуры, дефектообразования в сегнетоэлектриках, изучение научных трудов по мезопористым наноматериалам и дефектам в них, трудов по дефектам в сложных неорганических системах, в том числе по радиационным дефектам и пострадиационному упорядочению дефектов в керамических материалах..

(2 часа)

7. Изучение трудов по структуре, классификации, методам получения, образованию дефектов и свойствам аморфных металлических сплавов. Изучение моделей структуры аморфных металлических сплавов.

(2 часа)

8. Самостоятельное освоение теоретического материала по твердым растворам: типам, условиям образования растворов, различным моделям локальной координации (модель случайных ковалентных связей, модель химически упорядоченной сетки и др.). Изучение упорядоченных и неупорядоченных растворов, молекулярных комплексов в твердом растворе с нарушением ближнего порядка, электронных состояний молекулярных комплексов в упорядоченном и разупорядоченном твердом растворе.

(2 часа)

9. Изучение научных трудов по дефектам в аморфных металлических сплавах: внутренних и внешних; микроскопических и макроскопических. Исследования по вопросам источников формирования дефектов, наличия и образования дислокаций в аморфной структуре.

(2 часа)

10. Изучение влияния аморфности металла на магнитное состояние в магнитных структурах. Изучение научных трудов по исследованию химического и структурного беспорядка, флуктуаций обменных взаимодействий.

(2 часа)

11. Самостоятельное изучение трудов по стеклообразному состоянию вещества, методам получения стекол, изучение физико-химических основ переходов кристалл - расплав -стекло- (кристалл), структурных критериев стеклообразования, структуры стекол (модель неправильной непрерывной сетки, полимерно – кристаллическая модель, электронной структуры стекол (модели КФО, МД, КФО-МД).

(2 часа)

12. Самостоятельное изучение некристаллических полупроводников. Топологически неупорядоченные полупроводники. Параметр порядка. Беспорядок в неупорядоченных телах. Исследования А. И. Губанова, С. Александера. Топологические дефекты.

(2 часа)

13. Изучение трудов по неупорядоченным полупроводникам. Критерии ближнего и дальнего порядка в кристаллах, причины упорядочения и разупорядочения, определение неупорядоченной конденсированной системы, критерий электронной неупорядоченности.

(2 часа)

14. Изучение трудов, посвященных одномерным моделям кристалла: периодический потенциал (модель Кронига – Пенни), непериодический потенциал (модели Лившица и Андерсона); критерии локализованного и нелокализованного (распространенного) состояний, переход Андерсона, плотность состояний в примесной зоне.

(2 часа)

15. Изучение трудов, посвященных описанию аморфных тел и стёкол. Радиус корреляции структуры R_c . Представления о существовании неоднородностей структуры. Микроструктурная теория строения стекла Лебедева. Топологический беспорядок в аморфных телах. Дисциплинации. Модели Клемена, Садока, Лихачева. Модели Ривира, Нельсона, Сетны. Использование дисциплинаций для преодоления противоречия между минимизацией локальной энергии и наиболее плотного заполнения пространства. Масштаб неоднородностей в топологически неупорядоченных полупроводниковых средах и модель границ неоднородностей. Пространственная неоднородность аморфных тел и стёкол. Плотность колебательных состояний.

(2 часа)

16. Самостоятельное изучение методов получения неупорядоченных полупроводников, перспективы применения (пороговые переключатели, элементы памяти, солнечные элементы). Получение аморфных полупроводников. Аморфный кремний. Селен. Халькогенидные стекла.

(2 часа)

17. Жидкие полупроводники. Раствор, расплав, жидкий полупроводник, классификация переходов твердая фаза-жидкость, термодинамические характеристики перехода, изменение структуры ближнего порядка при переходе твердая фаза- жидкость, расплавы типа "Si", "CdTe", химические примеси, ионные жидкости, методы исследования расплавов.

(2 часа)

ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ

1. Порядок – беспорядок в мире атомов (молекул), ближний – дальний порядок, элементы порядка в беспорядке и беспорядка в порядке, микроскопический и макроскопический порядок (беспорядок). Кристаллы.

2. Исторические сведения об исследовании кристаллических структур. Операции и элементы симметрии конечных фигур. Точечные группы симметрии. Групповые аксиомы. Применение теории групп и теории симметрии на примере упорядоченной структуры группы 32. Типы элементарных ячеек. Обозначения по Шенфлису, Браве, Герману-Могену.

3. Несовершенства строения реальных кристаллов. Дефекты в кристаллических структурах. Классификация собственных дефектов (нульмерные, линейные, двумерные, объемные), равновесие точечных дефектов, вакансии Шоттки, вакансии Френкеля, причины образования дефектов (отклонение состава от стехиометрического при выращивании, термическая обработка, пластическая деформация, высокоэнергетическое радиационное воздействие), пересыщение кристалла дефектами.

4. Несовершенства строения реальных кристаллов. Дислокации и дисклинации. Типы и различные подходы в описании дефектов.

5. Общая характеристика неупорядоченных систем. Работы Займана, Иоффе, Регеля, Андерсена, Мота, посвященные неупорядоченным системам. Прикладной аспект изучения неупорядоченных структур (оптические стекла, аморфные металлические сплавы, аморфные полупроводники и др.).

6. Аморфное состояние Общие закономерности аморфизации и кристаллизации. Критическая скорость охлаждения.

7. Исследования металлических расплавов Ульманом. Причины перехода жидкости в аморфное состояние. Зависимость величины энтальпии H от температуры при различных скоростях охлаждения. Возможность аморфизации в зависимости от кинетических констант зародышеобразования и роста кристаллических фаз.

8. Различие между аморфным и стеклообразным состоянием. Примеры веществ в стеклообразном состоянии. Физические свойства, характерные только для стекол.

9. Особенности структуры аморфных веществ. Общее координационное число z . Анализ кривых $I(k)$, $Q(k)$, $\rho(r)$. Интерференционная функция амплитуды $I(k)$. Волновой вектор. Функция радиального распределения. Приведенная функция радиального распределения. Аналогия между структурой стёкол и структурой жидкостей.

10. Сегнетоэлектрики. Структура. Дефекты в сегнетоэлектриках. Мезопористые наноматериалы и дефекты в них.

11. Дефекты в сложных неорганических системах. Керамические материалы. Радиационные дефекты и пострadiационное упорядочение дефектов.

12. Аморфные металлические сплавы. Методы получения. Классификация аморфных металлических сплавов. Схема устройства для получения АМС путем закалки из жидкого состояния. Условия получения ленты АМС при комнатной температуре. Модели структуры АМС. Первая группа, вторая группа моделей. Модель Бернала. Допущения. Модели ХПУЖС, ХПУМС. Структурная релаксация.

13. Типы твердых растворов (замещения, внедрения, вычитания), условия образования растворов, локальная координация (модель случайных ковалентных связей, модель химически

упорядоченной сетки), приближение виртуального кристалла, упорядоченный и неупорядоченный раствор, молекулярные комплексы в твердом растворе с нарушением ближнего порядка, электронные состояния молекулярных комплексов в упорядоченном и разупорядоченном твердом растворе.

14. Дефекты в аморфных металлических сплавах. Внутренние и внешние дефекты. Точечные, микроскопические, макроскопические дефекты. Источники формирования дефектов. Вопрос о наличии дислокаций в аморфной структуре.

15. Анализ дефектов в аморфных сплавах с позиции анализа внутренних напряжений.

16. Влияние аморфности металла на магнитное состояние в магнитных структурах. Химический и структурный беспорядок. Флуктуации обменных взаимодействий.

17. Стеклообразное состояние (определение), метод получения стекол, критерии стеклования, диаграммы переходов кристалл - расплав -стекло- (кристалл), структурный критерий стеклообразования, стекла типа "Ge" и "Se", структура стекол (модель неправильной непрерывной сетки (В. Захариасен, 1932 г.), полимерно – кристаллическая модель (А.А. Лебедев), электронная структура стекол (модели КФО, МД, КФО-МД). Стеклообразные полупроводники.

18. Некристаллические полупроводники. Топологически неупорядоченные полупроводники. Параметр порядка. Беспорядок в неупорядоченных телах. Исследования А. И. Губанова, С. Александера. Топологические дефекты.

19. Неупорядоченные полупроводники. Критерии ближнего и дальнего порядка в кристаллах, причины упорядочения и разупорядочения, определение неупорядоченной конденсированной системы, критерий электронной неупорядоченности, одномерные модели кристалла: периодический потенциал (модель Кронига – Пенни), непериодический потенциал (модели Лившица и Андерсона); критерии локализованного и нелокализованного (распространенного) состояний, переход Андерсона, плотность состояний в примесной зоне.

20. Теоретическому описанию аморфных тел и стёкол. Радиус корреляции структуры R_c . Представления о существовании неоднородностей структуры. Микроструктурная теория строения стекла Лебедева.

21. Топологический беспорядок в аморфных телах. Дисклинации. Модели Клемена, Садока, Лихачева. Модели Ривира, Нельсона, Сетны. Использование дисклинаций для преодоления противоречия между минимизацией локальной энергии и наиболее плотного заполнения пространства.

22. Масштаб неоднородностей в топологически неупорядоченных полупроводниковых средах и модель границ неоднородностей. Пространственная неоднородность аморфных тел и стёкол. Плотность колебательных состояний.

23. Методы получения неупорядоченных полупроводников, перспективы применения (пороговые переключатели, элементы памяти, солнечные элементы). Получение аморфных полупроводников. Аморфный кремний. Селен. Халькогенидные стекла.

24. Жидкие полупроводники. Раствор, расплав, жидкий полупроводник, классификация переходов твердая фаза-жидкость, термодинамические характеристики перехода, изменение структуры ближнего порядка при переходе твердая фаза- жидкость, расплавы типа "Si", "CdTe", химические примеси, ионные жидкости, методы исследования расплавов.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Структура и свойства неупорядоченных твердых тел. А. Л. Петров, А. А. Гаврилюк, С. М. Зубрицкий. Иркутск. 2004. 70 с.
2. Введение в теорию неупорядоченных систем. Кособукин В. А. Санкт-Петербург. 2000. 63 с.
3. Материалы и элементы электронной техники. Юзова В. А., Шелованова Г. Н., Комогорцев С. В. Красноярск. 2007. 35 с.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем. Лифшиц И. М.. М.:Наука. 1987. 552 с.
2. Дефекты в кристаллах. Ван Бюрен. М. 1962. 584 с.
3. Основы кристаллофизики. Ю.И.Сиротин, М.П.Шаскольская. М: Наука. 2000.
4. Основы кристаллографии. Е. С. Астапова. Учебное пособие. Благовещенск. 2005. 91 с.

ПЕРЕЧЕНЬ НАГЛЯДНЫХ И ДРУГИХ ПОСОБИЙ

1. WWW-MINCRYST Crystallographic and Crystallochemical Database for Mineral and their Structural Analogues. database.iem.ac.ru/mincryst
2. Международная рентгенометрическая картотека JPCDS-ASTM.
3. Структурные модели неорганических соединений.
4. База структурных данных для неорганических соединений.. ICSD (Inorganic Crystal Structure) Database, <http://193.49.43.4/dif/icsd/>

ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА ОБУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Коллекции кристаллов природных соединений всех основных типов, классов, групп.

Рентгеновский дифрактометр общего назначения ДРОН-3М.

2. Банк рентгенометрических данных.
3. Персональные компьютеры.

Содержание

<i>ВВЕДЕНИЕ</i>	3
Цели и задачи дисциплины	3
Критерии оценки при сдаче экзамена	4
Содержание дисциплины. Лекционный курс	5
Самостоятельная работа студентов	7
Вопросы к экзамену	9
Учебно-методические материалы	12
Основная литература	12
Дополнительная литература	12
Перечень наглядных и других пособий	12
Технические средства обучения дисциплине	13
Учебно-методическая карта дисциплины	14