

Министерство образования и науки РФ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
**АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**  
**(ФГБОУ ВО «АмГУ»)**

**ДЕФЕКТЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ И НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ  
СИСТЕМАХ**

**Сборник учебно-методических материалов**

для направления подготовки:

03.04.01 – Прикладные математика и физика

Благовещенск 2017

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

*Составитель: Стукова Е.В.*

Дефекты в кристаллических и неупорядоченных системах: сборник учебно-методических материалов для направления подготовки 03.04.01 – Прикладные математика и физика. – Благовещенск: Амурский гос. ун-т, 2017.

© Амурский государственный университет, 2017

© Кафедра физики, 2017

© Стукова Е.В., составление

## **ВВЕДЕНИЕ**

В настоящее время в системе высшего образования значительно возрастает роль самостоятельной работы студентов. Это обусловлено переходом на новую систему высшего образования, в которой предусматривается формирование компетенций выпускника по различным направлениям деятельности.

Профессиональная деятельность выпускника предполагает умение осваивать новые направления профессиональной деятельности и принимать решения по текущим вопросам. Это значит, что студент должен быть готов к самообразованию в современных условиях быстрого обновления знаний.

Самостоятельная работа рассматривается как высшая форма учебной деятельности, которая носит интегральный характер и является формой самообразования. Самостоятельная работа выполняется под методическим руководством и контролем преподавателя. Основными целями самостоятельной работы являются: развитие познавательных способностей личности; развитие самостоятельности, ответственности, организованности, инициативы; развитие самостоятельного мышления и исследовательских умений. В процессе работы происходит закрепление и систематизация знаний, углубление теоретических знаний, развитие умений работать с различными источниками информации и как результат – освоения основных компетенций. Для успешной самостоятельной работы от студента требуется самостоятельность и самоконтроль. Самостоятельность позволит ответственно подойти к выполнению самостоятельной работы, организовать свою работу оптимальным образом, сознательно принимать нетрадиционные решения при выполнении заданий. Самоконтроль позволит студенту правильно распределить работу над учебным материалом и выполнять задания постепенно, избегая авральных ситуаций.

# 1 ОРГАНИЗАЦИЯ ЛЕКЦИОННЫХ ЗАНЯТИЙ

## *1.1 Общие рекомендации по организации работы на лекции*

В высшем учебном заведении лекция является важной формой учебного процесса и представляет собой в основном устное систематическое и последовательное изложение материала по какой-либо проблеме, методу, теме вопроса и т. д. Основные функции, которые осуществляет вузовская лекция – это информативная, ориентирующая и стимулирующая, методологическая, развивающая и воспитывающая, поскольку на лекции студенты получают глубокие и разносторонние знания, развивают свои творческие способности.

Лекции могут быть вводными, обзорными, тематическими (лекции по изучению нового материала), итоговыми. Вводные лекции подготавливают студента к восприятию данной дисциплины или ее раздела. На вводной лекции излагаются цели и задачи дисциплины, ее актуальность, практическая значимость, методы научного исследования и т.д. для того, чтобы дать целостное представление о дисциплине и вызывать интерес к предмету.

Тематические лекции посвящены глубоко осмысленному и методически подготовленному систематическому изложению содержания курса (дисциплины).

Итоговая лекция содержит основные идеи и выводы по курсу физики, выводы о достижении поставленных учебных целей.

На обзорных лекциях рассматриваются наиболее сложные, проблемные вопросы курса или новейшие достижения физики в данной области, что позволит установить взаимосвязь учебного материала с производством и новейшими научными достижениями.

Подготовка к самостоятельной работе над лекционным материалом должна начинаться на самой лекции. На лекции студент должен совместить два момента внимательно слушать лектора, прикладывая максимум усилий для понимания излагаемого материала и одновременно вести его осмысленную запись. И как бы внимательно студент не слушал лекцию, большая часть

информации вскоре после восприятия будет забыта. Поэтому при изучении дисциплины студентам рекомендуется составлять подробный конспект лекций, так как это обеспечивает полноценную систематизацию и структурирование материала, подлежащего изучению. Конспект лекций должен отражать специфику данного курса.

Очень важным является умение правильно конспектировать лекционный материал и работать с ним. Ниже приведены *рекомендации по конспектированию лекций и дальнейшей работе с записями*.

1. Конспект лекций должен быть в отдельной тетради. Ее нужно сделать удобной, практичной и полезной, ведь именно она является основным информативным источником при подготовке к различным отчетным занятиям, зачету. Возможно ее сочетание с записями по практическим занятиям, иллюстрирующим применение теоретических законов и соотношений в решении практических задач.

2. Конспект должен легко восприниматься зрительно (чтобы максимально использовать «зрительную» память), поэтому он должен быть аккуратным. Выделяйте заголовки, отделите один вопрос от другого, соблюдайте абзацы, подчеркните термины.

3. При прослушивании лекции обращайтесь внимание на интонацию лектора и вводные слова «таким образом», «итак», «необходимо отметить» и т.п., которыми он акцентирует наиболее важные моменты. Не забывайте пометить это при конспектировании.

4. Не пытайтесь записывать каждое слово лектора, иначе потеряете основную нить изложения и начнете писать автоматически, не вникая в смысл. Ненужно просить лектора несколько раз повторять одну и ту же фразу для того, чтобы успеть записать. Лекция не должна превращаться в своеобразный урок-диктант. Техника прочтения лекций преподавателем такова, что он повторяет свою мысль два-три раза. Постарайтесь вначале понять ее, а затем записать, используя сокращения. Конспектируйте только самое важное в рассматриваемом параграфе: формулировки определений и законов, выводы

основных уравнений и формул, то, что старается выделить лектор, на чем акцентирует внимание студентов. Старайтесь отфильтровывать и сжимать подаваемый материал. Научитесь в процессе лекции разбивать текст на смысловые части и заменять их содержание короткими фразами и формулировками. Более подробно записывайте основную информацию и кратко – дополнительную.

5. По возможности записи ведите своими словами, своими формулировками. Используйте общепринятую в данном разделе физики аббревиатуру и систему сокращений. Придумайте собственную систему сокращений, аббревиатур и символов, удобную только вам (но не забудьте сделать словарь, иначе существует угроза не расшифровать текст). Однако при дальнейшей работе с конспектом символы лучше заменить обычными словами для быстрого зрительного восприятия текста.

6. Конспектируя лекцию, надо оставлять поля, на которых позднее, при самостоятельной работе с конспектом, можно сделать дополнительные записи, отметить непонятные места. Полезно после каждой лекции оставлять одну страницу свободной, она потребуется при самостоятельной подготовке. Сюда можно будет занести дополнительную информацию по данной теме, полученную из других источников: чертежи, графики, схемы, и т.п.

7. После прослушивания лекции необходимо проработать и осмыслить полученный материал. Насколько эффективно студент это сделает, зависит и прочность усвоения знаний, и, соответственно, качество восприятия предстоящей лекции, так как он более целенаправленно будет её слушать. В процессе изучения лекционного материала рекомендуется использовать опорные конспекты, учебники и учебные пособия.

## ***1.2 Краткое содержание курса лекций***

Теория симметрии идеальных кристаллов и дефектообразование в реальных кристаллах и материалах

Элементы теории симметрии идеальных кристаллов. Порядок – беспорядок в мире атомов (молекул), ближний – дальний порядок, элементы порядка в

беспорядке и беспорядка в порядке, микроскопический и макроскопический порядок (беспорядок). Кристаллы. 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. Образование дефектов в реальных кристаллах. 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. Образование дефектов в материалах. Дефекты в сложных неорганических системах. Керамические материалы. Радиационные дефекты и пострadiационное упорядочение дефектов.

#### Неупорядоченные системы. Аморфное, стеклообразное состояние

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.). Аморфные вещества. Аморфное состояние Общие закономерности аморфизации и кристаллизации. Критическая скорость охлаждения 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.

Стеклообразное состояние вещества. Различие между аморфным и

стеклообразным состоянием.. Физические свойства, характерные только для стекол. Особенности структуры аморфных веществ. Общее координационное число  $z$ . Волновой вектор. Функция радиального распределения. Приведенная функция радиального распределения. Аналогия между структурой стёкол и структурой жидкостей. Теоретическое описание аморфных тел и стёкол. Топологический беспорядок в аморфных телах.

Теоретическое описание аморфных тел и стёкол. Радиус корреляции структуры  $R_c$ . Представления о существовании неоднородностей структуры. Микросталлитная теория строения стекла Лебедева. Топологический беспорядок в аморфных телах. Дисклинации. Модели Клемена, Садока, Лихачева. Модели Ривира, Нельсона, Сетны.

#### Аморфные металлические сплавы, твердые растворы и дефектообразование в них

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. 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. 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. Влияние аморфности металла на магнитное состояние в магнитных



структурах. Химический и структурный беспорядок. Флуктуации обменных взаимодействий. Переход «Кристалл – расплав - стекло». Стеклообразное состояние (определение), метод получения стекол, критерии стеклования, диаграммы переходов кристалл - расплав -стекло- (кристалл). Стеклообразные полупроводники. Пространственная неоднородность аморфных тел и стёкол. Плотность колебательных состояний

### Теория симметрии идеальных кристаллов и дефектообразование в реальных кристаллах и материалах

Некристаллические полупроводники. Топологически неупорядоченные полупроводники. Параметр порядка. Беспорядок в неупорядоченных телах. Топологические дефекты.

Причины упорядочения и разупорядочения. Неупорядоченные полупроводники. Критерии ближнего и дальнего порядка в кристаллах, причины порядочения 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 состояний, переход Андерсона, плотность состояний в примесной зоне. Топологически неупорядоченные полупроводниковые среды и модель границ неоднородностей. Масштаб неоднородностей в топологически неупорядоченных полупроводниковых средах и модель границ неоднородностей.

Методы получения неупорядоченных полупроводников, перспективы применения (пороговые переключатели, элементы памяти, солнечные элементы). Получение аморфных полупроводников. Аморфный кремний. Селен. Халькогенидные стекла. Жидкие полупроводники. Раствор, расплав, жидкий полупроводник, классификация переходов твердая фаза-жидкость, термодинамические характеристики перехода, изменение структуры ближнего прядка при переходе твердая фаза- жидкость, расплавы типа "Si",

"CdTe", химические примеси, ионные жидкости, методы исследования расплавов.

## **2 ОРГАНИЗАЦИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ**

### ***2.1 Общие рекомендации по подготовке к практическим занятиям***

Практические занятия по решению задач существенно дополняют лекции по предмету. В процессе анализа и решения задач студенты расширяют и углубляют знания, полученные из лекционного курса и учебников, учатся глубже понимать физические законы и формулы, разбираться в их особенностях, границах применения, приобретают умение применять общие закономерности к конкретным случаям. В процессе решения задач вырабатываются навыки вычислений, работы со справочной литературой, таблицами. Решение задач не только способствует закреплению знаний и тренировке в применении изучаемых законов, но и формирует особый стиль умственной деятельности, особый метод подхода к изучаемым явлениям.

Когда студенты решают задачи по определённой теме, очень важно, чтобы в результате знакомства с конкретными задачами они усвоили принципиальный подход к познанию достаточно широкого класса явлений. решение задач можно проводить по следующему общему плану (некоторые пункты плана могут выпадать в некоторых конкретных случаях), который надо продиктовать студентам:

- 1) прочесть внимательно условие задачи;
- 2) посмотреть, все ли термины в условиях задачи известны и понятны (если что-то неясно, следует обратиться к учебнику, просмотреть решения предыдущих задач, посоветоваться с преподавателем);
- 3) записать в сокращённом виде условие задачи (когда введены стандартные обозначения, легче вспоминать формулы, связывающие соответствующие величины, чётче видно, какие одной системе единиц и т.д.);
- 4) сделать чертёж, если это необходимо (делая чертёж, нужно стараться представить ситуацию в наиболее общем виде);
- 5) провести анализ задачи, определить её физический смысл (нужно чётко понимать, в чем будет заключаться решение задачи);

- 6) установить, какие физические законы и соотношения могут быть использованы при решении данной задачи;
- 7) составить уравнения, связывающие физические величины, которые характеризуют рассматриваемые явления с количественной стороны;
- 8) решить эти уравнения относительно неизвестных величин, получить ответ в общем виде. Прежде чем переходить к численным значениям, полезно провести анализ этого решения: он поможет вскрыть такие свойства рассматриваемого явления, которые не видны в численном ответе;
- 9) перевести количественные величины в общепринятую систему единиц (СИ), найти численный результат;
- 10) проанализировать полученный ответ, сделать вывод как изменяется искомая величина при изменении других величин, функцией которых она является, исследовать предельные случаи.

Приведенная последовательность действий при решении задач усваивается студентами, как правило, в ходе занятий, когда они на практике убеждаются в её целесообразности. Поэтому в конце занятия полезно подвести итог, сформулировать найденный алгоритм рассуждений. Заметим, впрочем, что не всегда может быть предложен алгоритм решения задачи.

## ***2.2 Примерные темы практических занятий***

1. «Теория симметрии идеальных кристаллов и дефектообразование в реальных кристаллах и материалах».

Задачи на применение теории групп и теории симметрии на примере известных упорядоченных структур неорганических кристаллических соединений. Рассмотрение физических следствий различных типов разупорядочения. Рассмотрение моделей, соответствующих композиционному и структурному беспорядку.

Задачи на исследования собственных состояний электрона в атомной решетке с узлами с предположением, что в узле находится дефект. Рассмотрение моделей несовершенств строения реальных кристаллов. Задачи определения характеристик в различных методах определения дефектов в

кристаллических структурах. Задачи на составление моделей дислокаций и дисклинаций.

## 2 «Неупорядоченные системы. Аморфное, стеклообразное состояние»

Рассмотрение прикладного аспекта изучения неупорядоченных структур (оптические стекла, аморфные металлические сплавы, аморфные полупроводники и др.) и их моделирование.

Задачи на определение характеристик процессов аморфизации и кристаллизации. Задачи на определение кинетических констант зародышеобразования и роста кристаллических фаз, прогнозирование возможности аморфизации.

Изучение физических свойств, характерных только для стекол, изучение особенностей структуры аморфных веществ.

Топологический беспорядок в аморфных телах. Изучение теоретического описания аморфных тел и стёкол. Радиус корреляции структуры  $R_c$ . Модели Клемена, Садока, Лихачева. Модели Ривира, Нельсона, Сетны.

## 3. «Аморфные металлические сплавы, твердые растворы и дефектообразование в них»

Моделирование структур аморфных металлических сплавов. Первая группа, вторая группа моделей. Модель Бернала. Допущения. Модели ХПУЖС, ХПУМС.

Задачи на определение структурных характеристик упорядоченных и неупорядоченных твердых растворов, исследование молекулярных комплексов в твердом растворе с нарушением ближнего порядка, электронных состояний молекулярных комплексов в упорядоченном и разупорядоченном твердом растворе.

Моделирование точечных, микроскопических, макроскопических дефектов. Анализ дефектов в аморфных сплавах с позиции анализа внутренних напряжений. Изучение химического и структурного беспорядка.

Изучение диаграмм переходов кристалл - расплав -стекло- (кристалл), задачи на определение структурных критериев стеклообразования,. Рассмотрение модели неправильной непрерывной сетки, полимерно – кристаллической модели.

#### 4. «Неупорядоченные полупроводники».

Исследование и моделирование некристаллических полупроводников, топологически неупорядоченных полупроводников. Определение параметров порядка, беспорядка в неупорядоченных телах.

Задачи на определение характеристик неупорядоченной конденсированной системы, изучение критерия электронной неупорядоченности.

Изучение растворов, расплавов, жидких полупроводников, переходов «твердая фаза – жидкость», задачи на определение термодинамических характеристик перехода, определение измененных характеристик структуры ближнего прядка при переходе «твердая фаза – жидкость».

### **3 ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ**

#### ***3.1 Общие рекомендации по организации внеаудиторной самостоятельной работы***

В высшей школе студент должен, прежде всего, сформировать потребность в знаниях и научиться учиться, приобрести навыки самостоятельной работы, необходимые для непрерывного самосовершенствования, развития профессиональных и интеллектуальных способностей.

Самостоятельная работа – это процесс активного, целенаправленного приобретения студентом новых для него знаний и умений без непосредственного участия преподавателей. Для успешной самостоятельной работы студент должен планировать свое время и за основу рекомендуется брать рабочую программу учебной дисциплины.

При организации самостоятельной работы следует взять за правило:

- учиться ежедневно, начиная с первого дня семестра, пропущенные дни будут потеряны безвозвратно;
- чтобы выполнить весь объем самостоятельной работы, необходимо заниматься по 3 – 5 часов ежедневно;
- начиная работу, надо выбрать что-нибудь среднее по трудности, затем перейти к более трудной работе, и напоследок оставить легкую часть, требующую не столько больших интеллектуальных усилий, сколько определенных моторных действий.

Виды заданий для внеаудиторной самостоятельной работы, их содержание и характер могут иметь вариативный и дифференциальный характер, учитывать специфику специальности, изучаемой дисциплины, индивидуальные особенности студента.

#### ***3.2 Работа с учебно-методическим и информационным обеспечением***

Важной составляющей самостоятельной внеаудиторной подготовки по всем типам занятий является работа с литературой. Умение работать с литературой означает: научиться осмысленно пользоваться учебно-

методическим и другим информационным обеспечением дисциплины. Для изучения дисциплины вся рекомендуемая литература подразделяется на основную и дополнительную и приводится в п. 10 рабочей программы дисциплины.

К основной литературе относятся источники, необходимые для полного и твердого усвоения учебного материала (учебники и учебные пособия). Поскольку в учебной литературе (учебниках) зачастую остаются неосвещенными современные проблемы, а также не находят отражения новые документы, события, явления, научные открытия последних лет, то рекомендуется для более углубленного изучения программного материала дополнительная литература.

Прежде чем приступить к чтению, необходимо запомнить или записать выходные данные издания: автор, название, издательство, год издания, название интересующих глав. Содержание (оглавление) дает представление о системе изложения ключевых положений всей публикации и помогает найти нужные сведения. Предисловие или введение книги поможет установить, на кого рассчитана данная публикация, какие задачи ставил перед собой автор, содержится краткая информация о содержании глав работы. Иногда полезно после этого посмотреть послесловие или заключение. Это помогает составить представление о степени достоверности или научности данной книги.

Изучение научной учебной и иной литературы требует ведения рабочих записей. Форма записей может быть весьма разнообразной: простой или развернутый план, тезисы, цитаты, конспект. Такие записи удлиняют процесс проработки, изучения книги, но способствуют ее лучшему осмыслению и усвоению, выработке навыков кратко и точно излагать материал. При изучении литературы особое внимание следует обращать на новые термины и понятия. Записи позволяют восстановить в памяти ранее прочитанный материал без дополнительного обращения к самой книге.



Процесс изучения дисциплины предполагает также активное использование информационных технологий при организации своей познавательной деятельности. Наличие огромного количества материалов в Сети и специализированных поисковых машин делает Интернет незаменимым средством при поиске информации в процессе обучения. Однако при использовании интернет ресурсов следует учитывать следующие рекомендации:

- необходимо критически относиться к информации;
- следует научиться обрабатывать большие объемы информации, представленные в источниках, уметь видеть сильные и слабые стороны, выделять из представленного материала наиболее существенную часть;
- необходимо избегать плагиата, поэтому, если текст источника остается
- без изменения, необходимо сделать ссылки на автора работы.