

# 空位与缺陷

2019年3月5日 7:50

空位形成能	<p>晶体内的一个原子放在晶体的表面（不改变晶体的表面能）所需要的能量</p> <p>数值偏大，没有考虑空位周围原子松弛以及电子状态的影响（空位导致电子衍射，电阻增加）</p> <p>计算方法：</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1.自由电子理论计算空位形成能</li> <li>2.德拜温度或金属的熔点计算空位形成能</li> <li>3.原子对作用能来计算空位形成能（第一性原理）</li> </ol> <p>★形成能和结合能有密切关系——结合能愈大，熔点愈高、形成能也愈大</p> <p>空位引起的畸变较小，形成能计算中，电子能占主要地位，畸变能只引起附加的校正项。间隙原子的畸变能较大</p>	
空位形成能的测量方法	<p>常用原则：</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1.物理量<math>X \sim C_v</math>空位浓度，常用电阻作为测量量</li> <li>2.物理量与温度的关系</li> </ol> <ol style="list-style-type: none"> <li>1.点阵常数法 <ol style="list-style-type: none"> <li>1.测量点阵常数：<math>\frac{\Delta a}{a} \sim T</math></li> <li>2.试样的宏观尺寸：<math>\frac{\Delta L}{L} \sim T</math></li> </ol> </li> <li>2.淬火电阻法 <ol style="list-style-type: none"> <li>1.电阻率<math>\rho_T = \rho_0 + aN_v</math>，<math>a</math>为常数，<math>N_v</math>为空位数</li> <li>2.电阻率变化：<math>\Delta \rho = aN_v</math></li> </ol> </li> </ol>	
空位的平衡浓度	<p>原子的热运动使能量起伏，原子离开正常位置后产生空位同时自间隙原子可以和空位结合（杂质原子不能），说明可能存在一个平衡浓度。</p> <p>在某一温度下，平衡空位浓度的自由能最小</p> <p>空位仪器组态熵<math>\Delta S_c</math>和振动熵<math>\Delta S_f</math>的增加</p> <p>★<math>C_v = Ae^{-\frac{E_f}{kT}}</math>，热力学平衡下，空位的浓度（辐照损失不属于平衡）</p> $A = e^{\frac{\Delta S_f}{k}}$	
间隙原子平衡浓度	$C_i = ne^{-\frac{E_f^i}{kT}}$	

度	$n_i = n_0 \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)$	
双空位	<p>平衡关系: <math>AB \leftrightarrow A + B</math></p> <p>令<math>E_b</math>为空位对形成时释放的能量, <math>E_{2f} = 2E_f - E_b</math></p> <p><math>C_{vv} = ZA'e^{\frac{-E_{2f}}{kT}}</math>, <math>z</math>为配位数</p> <p><math>C_v</math></p>	
讨论	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. <math>T</math>上升, <math>C_v</math>增加, 以指数方式增加一般<math>A</math>在<math>1-10</math>之间</li> <li>2. 近熔点时<math>C_v \sim 10^{-3} - 10^{-4}</math>; (Cu, 300K <math>4 \times 10^{-5}</math>, 1350K <math>10^{-3}</math>)</li> <li>3. 间隙原子形成能较大约为<math>3-4</math>倍, 对应的平衡浓度非常小</li> <li>4. <math>T</math>降低, <math>C_{vv}</math>会增加, 结合能越大, 温度越低, 空位结合成双空位倾向增加</li> <li>★5. 空位是热力学平衡缺陷, 位错不是</li> </ol>	
点缺陷的移动	空位移动是基体原子的反向迁移	
迁移激活能的测量方法	<p>自扩散——空位机制 (驱动力——化学势)</p> <p>空位迁移激活能<math>\Delta U_m =</math>自扩散激活能<math>Q</math>-空位形成能<math>E_f</math></p> <p>分段等温退火法:</p> <p>电阻下降的速率决定与空位消失的速率</p> <p>方法: 测不同温度下<math>T_1, T_2</math>等温达到同样的电阻下降值所用</p> <p>间隙原子的迁移速率大于空位的迁移速率</p>	
平衡及非平衡点缺陷的产生	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. 平衡点缺陷</li> <li>2. 高温淬火</li> <li>3. 金属间化合物失配</li> <li>4. 辐照、高能粒子轰击</li> <li>5. 冷加工、范性变形 (再结晶温度以下的加工, 位错的攀移与点缺陷有关)</li> <li>6. 金属氧化</li> </ol>	