

**MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU****Računske vežbe****5. DEFEKTI U KRISTALIMA****TEORIJSKI PREGLED**

Osnovni principi kristalografije, važe samo za kristalografske strukture, koje su geometrijski potpuno pravilne. Takvu strukturu imaju samo idealni kristali. Idealni ili perfektni kristal je kristal bez nečistoća u kome su izgrađivači pravilno raspoređeni i zauzimaju samo mesta koja su određena tipom kristalne rešetke. U tehničkoj praksi nema idealnih kristala, tako da se srećemo sa realnim kristalima, u čijoj kristalnoj građi se pojavljuju različita odstupanja - defekti kristalne rešetke. U nastavku će biti data **klasifikacija defekata** u kristalima.

## 1. Tačkasti defekti

- a) elektronski (elektroni u provodnoj i šupljine u valentnoj zoni)
- b) atomski (vakancije, intersticije i strani atomi)

## 2. Linijski defekti

- a) ivične dislokacije
- b) zavojne dislokacije

## 3. Površinski defekti

- a) granice zrna
- b) greške pakovanja ravni

## 4. Zapreminski defekti

- a) otvorena poroznost
- b) zatvorena poroznost

Tačkasti defekti se nazivaju termodinamičkim defektima jer oni uvek postoje u kristalu na temperaturama iznad apsolutne nule. Ovi defekti povećavaju stabilnost kristala, kroz povećanje entropije sistema i za svaku temperaturu postoji ravnotežna koncentracija tačkastih defekata. **Atomski tačkasti** defekti u strukturi mogu biti oblika (slika 1): **vakancija** (upražnjenih mesta u rešetki), **intersticija** (atoma popune- atom se smesti u prostor između osnovnih izgrađivača) i stranih atoma zamene (**supstitucija**). Koncentracija vakancija izražava se kao:

$$n_v = N \exp\left(-\frac{\Delta U_v}{kT}\right)$$

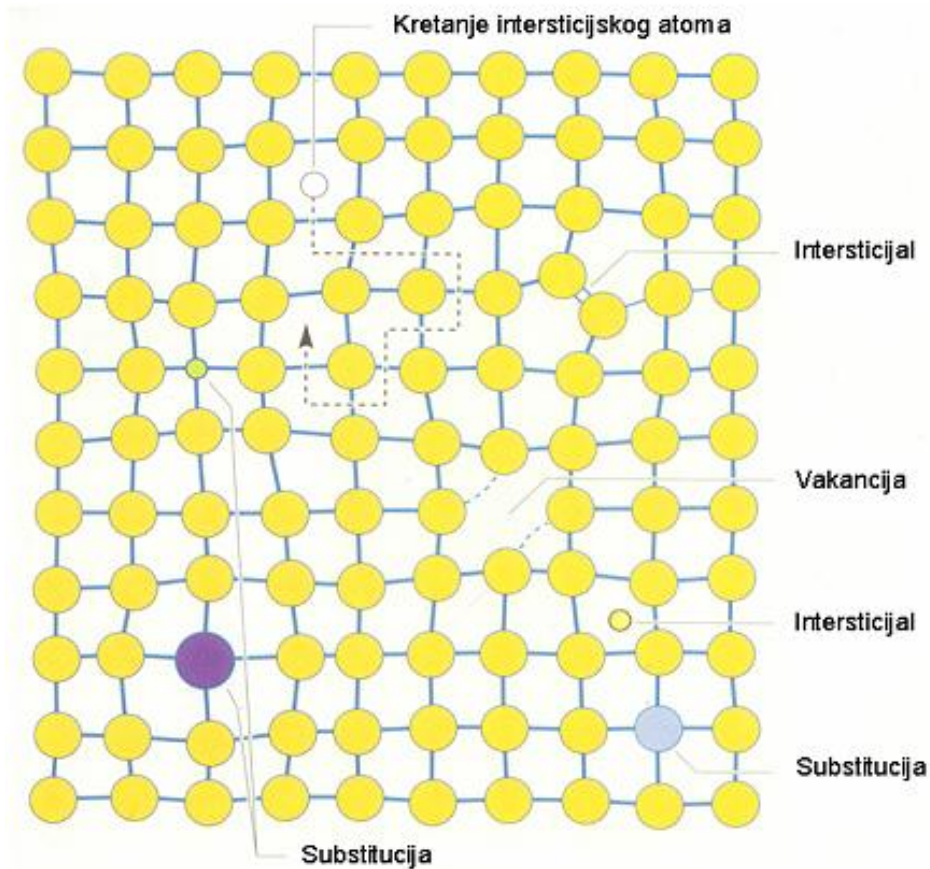
dok je koncentracija intersticija:

$$n_i = \sqrt{NN'} \exp\left(-\frac{\Delta U_i}{kT}\right)$$

gde su  $U_v$  – energija formiranja vakancija,  $U_i$  – energija formiranja intersticija,  $N$  – broj regularnih mesta u kristalu,  $N'$  – broj intersticijskih mesta u kristalu.

## MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU

## Računske vežbe



Slika 1. Ilustracija atomskih tačkastih defekata

Atomski defekti u jonskim kristalima mogu biti Šotkijevog i Frenkeljevog tipa (slika 2). Šotkijev tip defekata nastaje kada dođe do upražnjenja mesta (formiranja vakancija) jednog anjona (-) i jednog katjona (+) u jonskom kristalu, tako da se zadržava uslov elektroneutralnosti. Može se pisati: **Katjon-vakancija + Anjon-vakancija = Šotkijev defekt**. Koncentracija Šotkijevih defekata je:

$$n_s = N \exp\left(-\frac{\Delta U_s}{2kT}\right)$$

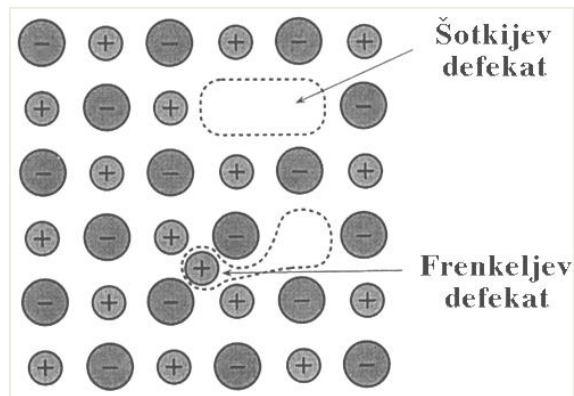
gde je  $\Delta U_s$  – energija formiranja Šotkijevog defekta,  $N$  – broj regularnih mesta u kristalu. Frenkeljev tip defekata nastaje kada se na jednom mestu u jonskom kristalu pojavi vakancija, tj. upražnjeno mesto katojna (+) i istovremeno pojavi intersticija, tj. taj katojn koji je ostavio prazno mesto se smesti između osnovnih katojna. Može se pisati: **Katjon-vakancija + Katjon-intersticija = Frenkeljev defekt**. Koncentracija Frenkeljevih defekata je:

$$n_f = \sqrt{N \cdot N'} \exp\left(-\frac{\Delta U_f}{2kT}\right)$$

gde je  $\Delta U_f$  – energija formiranja Frenkeljevih defekata,  $N'$  – broj intersticijskih mesta u kristalu.

## MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU

## Računske vežbe



Slika 2. Ilustracija atomskih defekata u jonskim kristalima

Jednodimenzionalne greške u kristalu (**dislokacije**) nastaju nagomilavanjem niza tačkastih defekata, formira se dodatna ravan smeštena između redovnih vertikalnih ravni. Dislokacije predstavljaju linijske defekte i u zavisnosti od dislokacione linije postoje: ivični i zavojni defekti. **Površinski defekti** nastaju na mestima gde se spajaju zrna u kristalu (granice zrna), a pod površinskim defektima se ubrajaju i greške pakovanja ravni. **Zapreminski defekti** predstavljaju prazna mesta u zapremini materijala i utiču na poroznost materijala (primer: mehurići vazduha).

**ZADATAK 1.** Koncentracija Šotkijevog tipa defekata u poluprovodniku PbSe na  $T=300\text{K}$  iznosi  $6.3 \cdot 10^{25} \text{m}^{-3}$ . Izračunati energiju stvaranja defekata ako je gustina kristala  $d=8.15 \cdot 10^3 \text{kg/m}^3$  a molekulska masa  $M=286$ .

*Rešenje:*

Koncentracija Šotkijevih defekata je:

$$n_s = N \exp\left(-\frac{\Delta U_s}{2kT}\right)$$

tako da se za energiju stvaranja Šotkijevih defekata dobija:

$$\Delta U_s = -2kT \ln \frac{n_s}{N} = 2kT \ln \frac{N}{n_s}$$

Iz izraza za gustinu kristala dobijamo broj regularnih mesta u kristalu:

$$d = \frac{n_i \cdot M}{V \cdot N_A} = N \frac{M}{N_A} \quad \Rightarrow \quad N = \frac{d \cdot N_A}{M}$$

Konačno se zamenom brojnih vrednosti dobija:

**MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU****Računske vežbe**

$$\Delta U_s = 2kT \ln \frac{d \cdot N_A}{n_s \cdot M}$$

$$\Delta U_s = 2 \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \cdot 300 \text{ K} \ln \frac{8.15 \cdot 10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 6.02 \cdot 10^{26} \frac{1}{\text{kmol}}}{6.3 \cdot 10^{25} \frac{1}{\text{m}^3} \cdot 286 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}}$$

$$\Delta U_s = 0.29 \text{ eV}$$

**ZADATAK 2.** Na 10°C ispod temperature topljenja aluminijuma 0.08% atomskih mesta je upražnjeno, a na 441.6°C upražnjeno je 0.01% mesta.

- Izračunati energiju formiranja vakancije.
- Izračunati temperaturu topljenja aluminijuma.

*Rešenje:*

Važi da je:

$$T_1 = T_{\text{top}} - 10 \text{ K}; \quad \frac{n_{v1}}{N} = 0.08\% = 8 \cdot 10^{-4}$$

$$T_2 = 441.6^\circ \text{ C} = 714.6 \text{ K}; \quad \frac{n_{v2}}{N} = 1 \cdot 10^{-4}$$

- Na osnovu izraza za koncentraciju vakancija:

$$n_v = N \cdot \exp\left(-\frac{\Delta U_v}{kT}\right)$$

Energija formiranja vakancija je:

$$\Delta U_v = kT_2 \cdot \ln \frac{N}{n_{v2}} = 9.08 \cdot 10^{-20} \text{ J} = 0.57 \text{ eV}.$$

- Za temperaturu topljenja aluminijuma dobija se:

$$T = T_1 \Rightarrow \frac{n_{v1}}{N} = \exp\left(-\frac{\Delta U_v}{k(T_{\text{top}} - 10 \text{ K})}\right)$$

$$\Rightarrow T_{\text{top}} = \frac{\Delta U_v}{k \cdot \ln \frac{N}{n_{v1}}} + 10 \text{ K} = 932.7 \text{ K} \approx 660^\circ \text{ C}$$