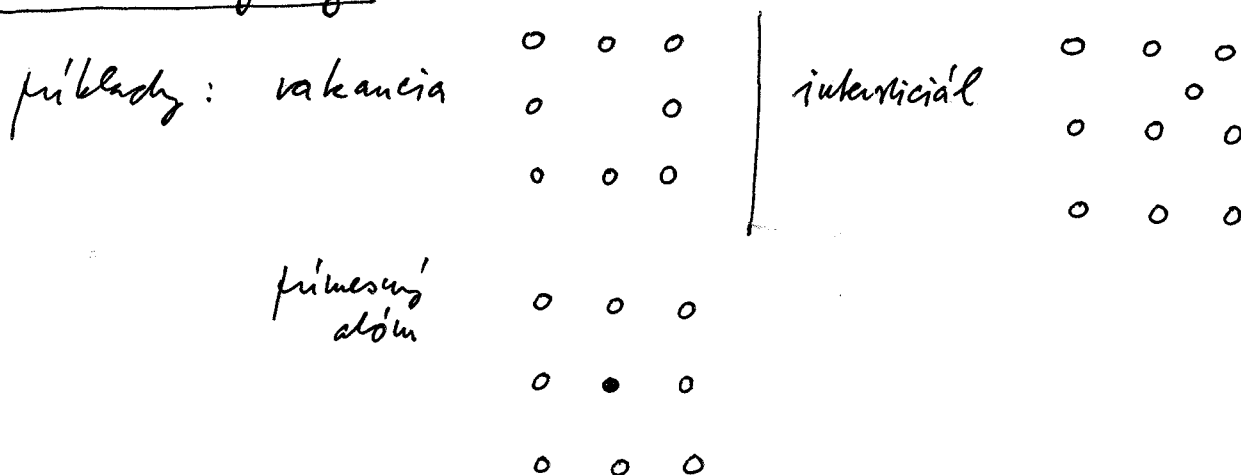


DEFEKTY V KRYŠTÁLOCH

A. "Bodové" defekty



Pri konečnej teplote existuje v rovnovážnom kryštále konečná koncentrácia defektov. Dôkaz: uvažujme kryštál s N atómami a n bodovými poruchami, predpoklad: $n \ll N$.

voľná energia $F(n) = n \cdot \Delta - T \cdot S(n)$ $\Delta =$ energia defektu

$S(n) = \ln \binom{N}{n} =$ konfiguračná entropia defektov; $\binom{N}{n} = \frac{N!}{(N-n)! n!}$

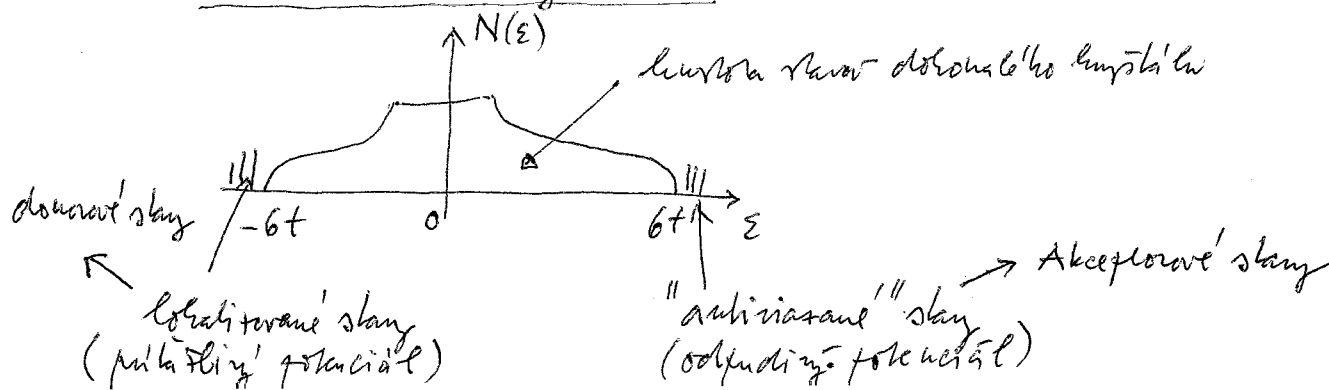
Stirling: $\ln N! \approx N \ln N - N \rightarrow S(n) \approx n \ln \frac{N}{n}$

Teda $F(n) = n \Delta - n T \ln \frac{N}{n}$

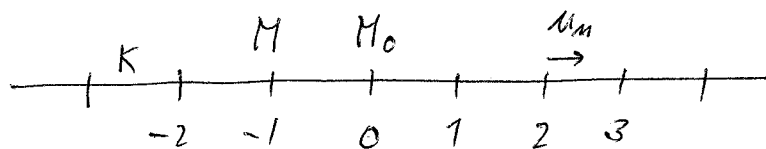
minimalizácia $\frac{\partial F}{\partial n} \stackrel{!}{=} 0 \rightarrow \frac{n}{N} \approx e^{-\Delta/T}$ rovnovážna koncentrácia defektov

Dôsledky bodových defektov:

1. vznik lokalizovaných stavov



iny' pu'klad: lokalitované slony fondu



v bode 0 p'imeru' at'om s hmotnost'ou M_0

polybne rovnice: pre $n=0$: $M_0 \ddot{u}_0 = -K(2u_0 - u_{-1} - u_1)$ (1)

$n \neq 0$: $M \ddot{u}_n = -K(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$ (2)

Ansatz pre lokalitované riešenie:

$n \geq 0$: $u_n = (-1)^n e^{-kna - i\omega t}$

$u_{-n} = (-1)^n e^{-kna - i\omega t}$

Po dosadení do rovnice (1,2): $\omega^2 = \frac{2K}{M_0} (1 + e^{-ka})$ (3)

$\omega^2 = \frac{2K}{M} (1 + \cosh ka)$ (4)

otvorené $x = e^{ka}$; rovnice (3,4):

$$x^2 + 2\left(1 - \frac{M}{M_0}\right)x + \left(1 - \frac{2M}{M_0}\right) = 0 \rightarrow \boxed{e^{ka} = \frac{2M}{M_0} - 1}$$

(možné iba pre $\underline{M_0 \leq M}$)

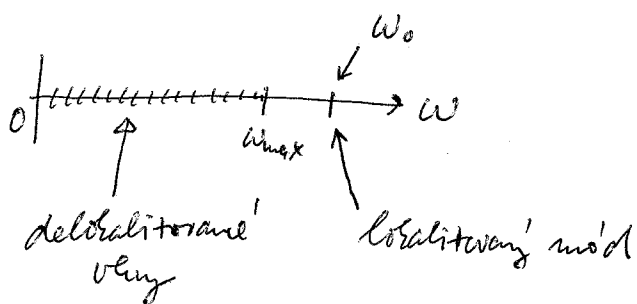
dosadením do (3,4):

frekvencia lokalitovaného módu

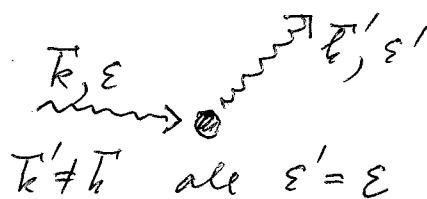
$$\boxed{\omega_0 = \frac{\omega_{max}}{\sqrt{1-\delta^2}}}$$

kde $\delta = 1 - \frac{M_0}{M}$

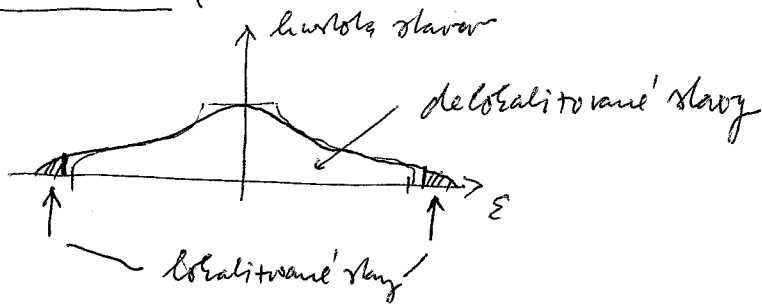
$\omega_{max} = \sqrt{\frac{4K}{M}}$... maximálna frekvencia dokonalej siete



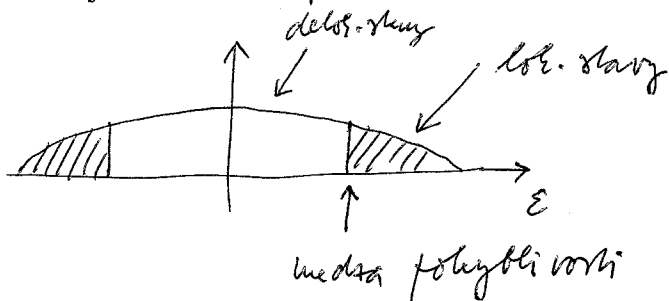
2. dôsledok: rozptyl delokalizovaných vln na defektoch



1. dôsledok (dĺžka vlny s bodom 1):



pri vytváraní neusporiadanosti:

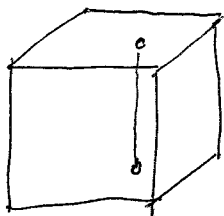


existuje kritická hustota
neusporiadanosti, pri ktorej
má veľký stav lokalizované!
(Anderson)

B. Čiarové formuly

Príklad: dislokácie → ovplyvňujú mechanické
vlastnosti (plastické)

odhad rovnovážnej koncentrácie:



energia dislokácie: $\epsilon_1 N^{1/3}$

entropia n dislokácií: $S = k_B \ln \binom{N^{2/3}}{n}$

(vyberáme n bodov z kovej strany kocky)

kryštál s N atómami

$$\rightarrow F(n) = \epsilon_1 N^{1/3} n - n T \ln \frac{N^{2/3}}{n} \rightarrow \boxed{n \approx N^{2/3} e^{-\frac{\epsilon_1 N^{1/3}}{T}}} \rightarrow 0$$

Teda v rovnováhe by kryštál nemal obsahovať dislokácie!

Prečo ich obsahuje? Dôsledok nerovnovážneho procesu pri raste kryštálov!

C. Plošné formuly → vlnové "formuly"

konkretne: počet kryštálov → veľký nevyhnutne
existujú

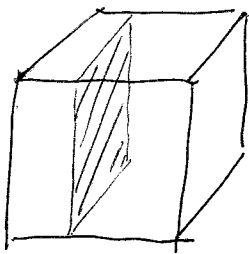
polukryštál: sada rôznych veľkostí monokryštálových častí



typický rozmer častí: $d \sim 1 \mu m$

na dĺžkach $l \gg d$ sa polukryštál správa ako izotropné
kontinuum

odhad rovnovážnej koncentrácie vnútorných porach:



N atómov

$$\text{energia} = \varepsilon_2 N^{2/3} \cdot n \quad \leftarrow \text{počet porach}$$

$$\text{entropia} = k_B \ln \left(\frac{N^{1/3}}{n} \right)$$

$$F(n) = \varepsilon_2 N^{2/3} n - k_B n T \ln \frac{N^{1/3}}{n}$$

$$\frac{\partial F}{\partial n} = 0 \rightarrow \boxed{n \approx N^{1/3} e^{-\frac{\varepsilon_2 N^{2/3}}{T}}} \rightarrow 0$$

Teda v rovnováhe siet vnútorných porach. Ich počet: nerovnovážne rastové procesy.

Koncentráciu dislokácií aj počet rín možno zistiť z hľadiska kľúčovej blízkej kľúčovej teórie, kedy sa defekty skutočne pohybujú.

E. Povrchové napätie

Uvažujme jednoduchý kubický kryštál $N^{1/3} \times N^{1/3} \times N^{1/3}$ atómov.

energia najbližších susedov udeľ je $-\varepsilon_B$.

celková energia kryštálu s porovnaním do rádu $N^{2/3}$:

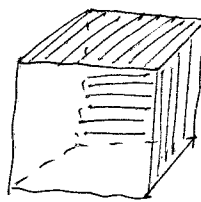
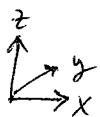
$$E = -3N\varepsilon_B + 3N^{2/3}\varepsilon_B$$

↓
možno písať v tvare

$$E = eV + \gamma S$$

V = objem

S = povrch



Nasledujú: každý atóm interaguje s 3 susedmi v smeroch $+x, +y, +z$. Atómy na vyšrafovaných plochách však majú iba 2 susedov.

$$e = -\frac{3\varepsilon_B}{a^3} = \text{objemová hustota energie}$$

$$\gamma = \frac{\varepsilon_B}{2a^2} = \frac{1}{6} |e| a = \text{plošná hustota energie} \\ = \text{povrchové napätie}$$

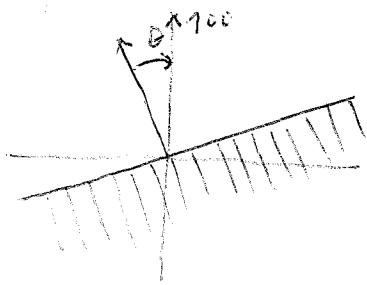
Terapias, i toľko kontinuum: γ ustáviť od orientácie porach
kryštál: γ ustáviť od orientácie porach

ROVNOVAŽENI TVAR KRISTA'LOV

1) Smerova' t'ivrtost' - porcelat'ho nap'et' $\gamma(\vec{n})$

$\vec{n}$ = norma k porcelu

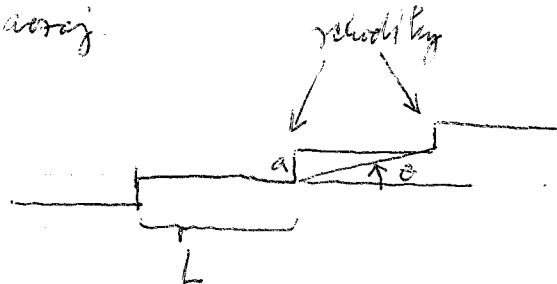
ob'ito u'ytva'eny'et' m'erus v kv'it'k'li, j' r'az'ne neanal'yz'ny'et'



Napr.

uk'ot'e'me: $\gamma(\theta) = \gamma_{100} + \alpha/|\theta|$

Napr'ej.

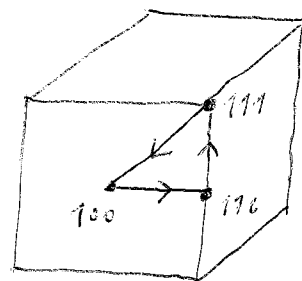
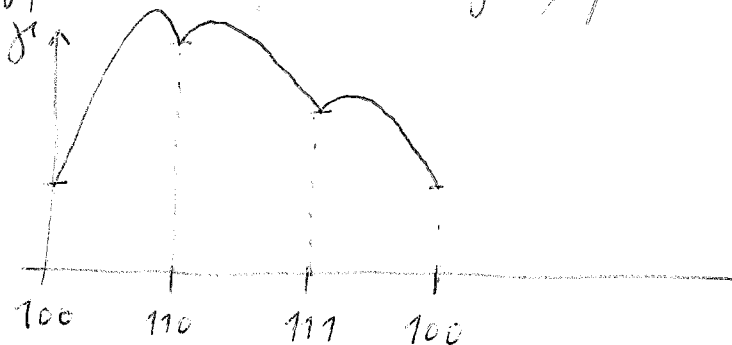


$$\theta \approx \frac{a}{L} \quad (L \gg a)$$

K'az'ny'et' relativ'ny'et' p'it'at' energ'iu F na j'ednost'ku ot'v'et'ny'et' sh'oz'm

$$\rightarrow \gamma(\theta) = \gamma_{100} + \frac{F}{L} = \gamma_{100} + \frac{F}{a} \frac{a}{L} \rightarrow \alpha = \frac{F}{a}$$

Typ'ich'ny'et' m'erus' t'ivrtost' $\gamma(\theta)$ p'ri kv'it'ny'et' kv'it'k'li:



2) Rovnovazhny'et' tvar krystal'ov $\rightarrow$ o'z'ach'ivame, $\vec{n}$ kv'it'k'li porcelat'ov
z' k'one'ny'et'ho p'it'at' sh'oz'm o'ri'ent'irov'ny'et'
vo u'ytva'eny'et' m'erus'et'
(napr. 100, 110, 111 p'ri kv'it'ny'et' kv'it'k'li)

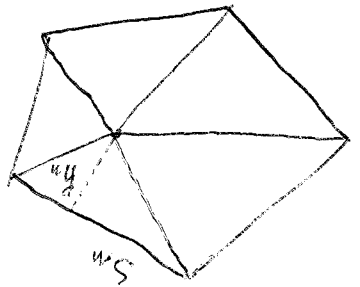
Wichtige Zahlen & Symbole V , v (Volumen & Geschwindigkeit)
 & verwandte & verwandte Parameter:

$$V = V_S + V_G$$

Fixe $V, T \rightarrow$ unimodale F
 Für feste V, T $dV = -dV_G$

$$dF = -P_S dV_S - P_G dV_G + \sum \mu_n dS_n$$

$$(1) dF = (P_G - P_S) dV_S + \sum \mu_n dS_n$$



$$V_S = \frac{1}{3} \int_0^{S_n} S_n^2 dS_n \approx \int_0^{S_n} S_n dS_n$$

$$dV_S = \frac{1}{3} \sum (S_n^2 dS_n + S_n dS_n^2)$$

die Änderung $dV_S = \sum S_n dS_n$

$$(2) dV_S = \frac{1}{2} \sum S_n^2 dS_n$$

Vermutlich $dF = 0$.

Dann (2) oder (1). Bitte

$$dF = \sum \left[(P_G - P_S) \frac{S_n^2}{2} + \mu_n \right] dS_n = 0$$

und $dV = 0$ für Änderung nach dS_n .

$$(P_G - P_S) \frac{S_n^2}{2} + \mu_n = 0$$

$$dP = P_S - P_G$$

$$k_m = \frac{2 \mu_m}{dP}$$

$$\frac{k_m}{j_m} = \text{const}$$

Erklärung: $\rightarrow$ für feste V, T (unimodale F)
 für feste V, T (unimodale F)