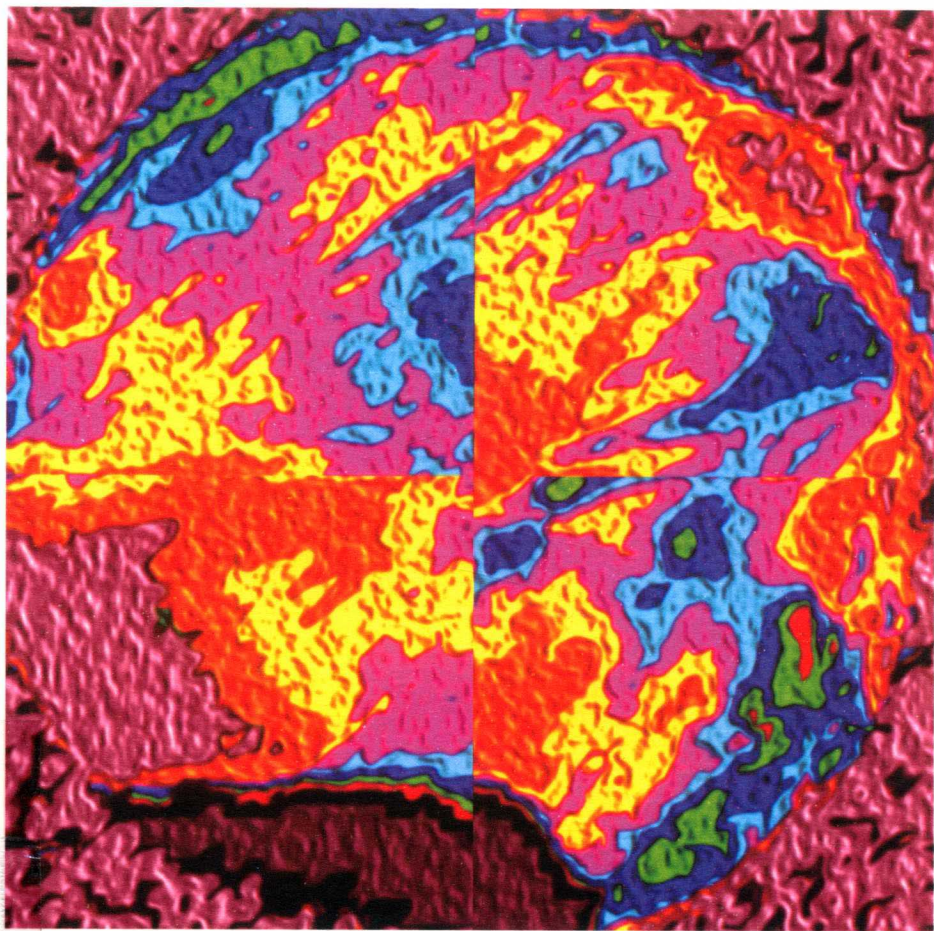


晶体制备研究

On Research of Crystal Synthesis

施尔畏 / 著



 科学出版社

晶体制备研究

On Research of Crystal Synthesis

施尔畏 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

晶体是粒子在三维空间中作周期性排列而构成的物体。在工业时代,晶体的人工制备展现了智力劳动创造的知识、技术与物质结合所产生的巨大力量。晶体又是一类具有特定使用性能的基础材料,在现代高技术发展中扮演着举足轻重的角色。本书表述了作者在长期实践中形成的对晶体制备研究若干重要问题的一些认识,其中包括:晶体制备研究在晶体研究体系结构中的地位;晶体制备研究范式的演进与发展;晶体制备研究相关基础知识的来源及其局限性;晶体制备研究的认知链条,以及因观测之外客体的存在所产生的容许性描述问题;晶体制备研究活动的基本规律、产出形式及状态评价的方法;晶体制备过程的能量守恒、质量守恒以及“遗传发育”问题等。在本书的末尾,作者对未来晶体制备研究的活动形态进行了一些展望。

本书可供从事晶体研究的科技人员参考,也可供从事相关领域研究的科技人员及研究生阅读。

图书在版编目(CIP)数据

晶体制备研究 / 施尔畏著. — 北京: 科学出版社, 2019.1

ISBN 978-7-03-059333-7

I. ①晶… II. ①施… III. ①晶体-制备-研究 IV. ①O78

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 249321 号

责任编辑: 林 鹏 杨 震 顾英利 / 责任校对: 张怡君

责任印制: 肖 兴 / 封面设计: 黄华斌

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2019 年 1 月第 一 版 开本: 720 × 1000 1/16

2019 年 1 月第一次印刷 印张: 15 1/2

字数: 260 000

定价: 128.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

PREFACE

前言

每个周一，无论阴雨绵绵的冬日，还是烈日高照的夏天，都是我和课题组的小伙子们期待和忙碌的日子。这一天，我们将依次在分处两个地方的实验室里，从晶体制备技术系统中取出历时两周之久方才制得的晶体。当看到晶莹剔透的晶体时，我们会为之欢呼；当看到满是缺陷的晶体时，我们会心烦意乱，需要彼此给予安慰和鼓励。在我们的课题组，还有若干制备时间长达一个月的晶体制备技术系统，也许大部分人无法体会我们——晶体制备研究者——的工作节奏和喜怒哀乐。在晶体制备研究者的心中，晶体不再是一种冰冷的无生命物体，它有着自己的生成条件，有着自己的遗传法则，有着自己的形貌特征，还有自己的应用特性。随着与晶体“相伴”时间的增加，晶体将会“嵌入”研究者的灵魂，使人暮想朝思，也会使人食不甘味，更让人愿意为它付出毕生的精力。

我们在一起的时候，时常会谈及与晶体制备研究相关的问题。例如，我们用怎样的方法与途径来选择晶体制备研究的对象——目标晶体。目标晶体的选择只是个人的喜好，还是从研究论文、专题报告、学术交流中获取信息的分析结果，或者是来自用户、市场的需求？进一步的问题是，谁的用户，市场在哪里？它们是稳定、持续产生与发展的吗？

又如，除了试错法之外，晶体制备研究还有什么方法？是否存在这样的可能：无论是否引入数学建模、计算模拟、统计分析、机器学习等手段，试错法将永远是晶体制备研究基本的、甚至唯一的方法？由此引出了晶体制备研究的研究范式问题。晶体制备研究将继续沿用经验主义为主的研究范式，还是跨越到理论主义为主的研究范式，或者会陷入实证主义为

主的研究范式。进一步说，未来的晶体制备研究活动将会是什么模样呢？晶体制备研究乃至晶体研究如何迎接科学技术会聚时代的到来？

再如，晶体制备研究的科技哲学是什么？对于晶体制备研究而言，科技哲学的价值并不在于它能够对我们所遇到的具体问题给出确定的答案，况且我们无法知道哪些答案是准确的，而在于它能够拓展我们认识可观测或无法观测的现象的思路，丰富我们的想象力，减少我们随经验的增多而产生的教条式自信，使我们的思想从无形的禁锢中解放出来。今天，我们不缺少关于晶体制备研究的教科书，不缺少国内外名牌大学相关课程的课件，不缺少集市式的大型学术会议，缺少的是关于科技哲学的深入研究、平等讨论、真诚质疑和自由争辩。

还有，支撑晶体制备研究的资金来自哪里？相关资金的配置方案是由政府部门逐级审批确定的，或是由科学共同体中那些并不从事晶体特性研究、晶体制备研究或晶体应用研究的科学家们确定的，或是由那些把晶体与陶瓷或玻璃混淆起来、把块状晶体与结构生物学研究中培养的微米量级结晶体等同起来的学术权威确定的，或是由那些心中没有战略、只是追求近期利益的企业家们确定的？眼见着周边有一些难度很大但潜在应用范围广阔的晶体制备研究课题、一些代表着未来的研究发展方向因资金短缺而倒在了现行考核制度的“刀斧”之下，心中的痛楚与无奈也许少有人能够真切地感受。

我试图通过本书给出自己多年来对晶体制备研究基本问题的思考和不确定回答。请读者千万不要把本书视为一本资料收集完整、专业逻辑清晰、表达叙述严谨、文风格式规矩的晶体专业教科书。晶体制备不是固定的、有穷的、一目了然的，而是充满了矛盾与问题。在本书中，我基于上述的认识，采用非专业性、或者说非典型性的体系结构和形式，表述自己的不确定回答。我真诚地希望对这些问题感兴趣的读者，能够透过这些不确定的回答，思考更广泛、更深刻的问题，从不确定性中去获得知识，认识规律，追求真理，争取心灵的自由。毫无疑问，本书存在许多不足之处，还有些概念或提法与经典教科书相悖。我真诚地希望读者提出批评，予以指正。

施尔畏

2018年5月12日

CONTENTS

目 录

前言

第一章 晶体研究的层次结构和研究范式 / 1

- 1.1 晶体和晶体研究的基本定义 / 1
- 1.2 现代晶体研究的层次结构 / 8
- 1.3 关于晶体的特性研究 / 12
- 1.4 关于晶体的制备研究 / 15
- 1.5 关于晶体的应用研究 / 19
- 1.6 晶体制备研究的具体问题、共性问题与基本问题 / 23
- 1.7 晶体制备研究的研究范式 / 28

参考文献 / 36

第二章 晶体制备研究知识基础 / 39

- 2.1 矿物学和结晶学的基础性地位 / 39
- 2.2 化学在晶体制备研究中的应用 / 44
- 2.3 热力学在晶体制备研究中的应用 / 48

- 2.4 经典物理学在晶体制备研究中的应用 / 56
- 2.5 化学工程理论与方法学在晶体制备研究中的应用 / 63
- 参考文献 / 68

第三章 晶体制备研究的认知过程 / 71

- 3.1 感觉材料和感知的知识 / 71
- 3.2 描述的知识、相对真理与理论 / 78
- 3.3 晶体制备研究的正向认知和逆向认知相互作用 / 83
- 3.4 观测之外的客体 / 88
- 3.5 如何获得关于观测之外客体的容许的描述 / 96
- 参考文献 / 103

第四章 晶体制备研究的运动规律 / 105

- 4.1 阶段论 / 105
- 4.2 与科学研究活动相关的阶段模型 / 107
- 4.3 晶体制备研究的运动规律 / 112
- 4.4 晶体制备研究的产出形式 / 121
- 4.5 晶体制备研究活动状态的评价 / 125
- 参考文献 / 131

第五章 晶体制备过程的能量守恒问题 / 133

- 5.1 讨论晶体制备过程能量守恒问题的出发点 / 133
- 5.2 坍塌下降技术系统的能量守恒问题 / 138
- 5.3 水热技术系统的能量守恒问题 / 141
- 5.4 高温熔体提拉技术系统的能量守恒问题 / 144

5.5 物理气相输运技术系统的能量守恒问题 / 147

5.6 化学气相输运技术系统的能量守恒问题 / 153

5.7 关于温度梯度 / 157

参考文献 / 164

第六章 籽晶与生长界面 / 165

6.1 籽晶的作用 / 165

6.2 对晶体制备过程的再认识 / 174

6.3 晶体“基因”的变异 / 178

6.4 生长界面的形态 / 189

参考文献 / 202

第七章 未来的晶体研究实验室 / 203

7.1 晶体研究在科技格局中的位置 / 203

7.2 晶体研究的现实挑战 / 207

7.3 未来晶体研究的发展趋势 / 211

7.4 晶体研究的人工智能 / 220

参考文献 / 226

索引 / 228

后记 / 231

晶体研究的层次结构 和研究范式

1.1 晶体和晶体研究的基本定义

◆ 晶体的价值

晶体是一类非常奇妙的物体,它是如此精致与完美,可让人爱不释手,更使人感悟到“造就”晶体的自然或人工之力的伟大。

在漫长的农业社会,晶体是稀罕之物,用晶体加工而成的物件只是王公贵族们为体现地位和尊严而佩戴的饰品,或藏匿的传世珍品。而在工业化的时代,晶体是一类具有特定性能的材料,用晶体制作而成的器件更是用途迥异的技术商品。在许多场合,我们可轻而易举地找到晶体存在的踪迹,发现晶体扮演关键角色的证据。面向未来,我们可自信地说,作为一种基础性材料,晶体在高技术发展中的地位是无法撼动的。

图1.1给出了一块硼酸氧钙钇 $[\text{YCa}_4\text{O}(\text{BO}_3)_3, \text{YCOB}]$ 晶体元件照片。该晶块从一个坩埚下降技术系统制备的晶锭中切取,几何尺寸为 $60\text{mm} \times 50\text{mm} \times 50\text{mm}$,质量为782g。从图可看到,这个晶块晶莹剔透,

用肉眼观察不到内部存在任何结晶缺陷，可谓完美无瑕。这是截至2017年年底公开的文献报道中尺寸最大的人工制备的硼酸氧钙钇晶体材料。

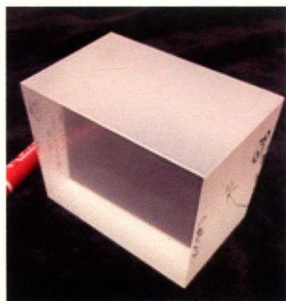


图 1.1 硼酸氧钙钇 [$\text{YCa}_4\text{O}(\text{BO}_3)_3$, YCOB] 晶体元件的照片。硼酸氧钙钇晶体具有优异的非线性光学特性和高温压电特性。该晶块从一个坩埚下降技术系统制备的晶锭中切取，几何尺寸为 $60\text{mm} \times 50\text{mm} \times 50\text{mm}$ ，质量为 782g ，是截至 2017 年年底公开的文献报道中尺寸最大的人工硼酸氧钙钇晶体材料

（照片提供者：涂小牛）

图1.2给出了采用高温熔体提拉技术制备的高纯硅(Si)单晶晶锭照片。2010年，我去日本索尼公司(SONY)九州工厂参观，在门厅中看到了这个直径为300mm、长度为215cm、质量为307kg、纯度达99.99999999%的特大晶锭，拍摄了这张照片。在现代半导体工业中，高纯且近无结晶缺陷的硅单晶晶圆是最重要的基础材料，用来加工制造这类晶圆的硅单晶晶锭则是当今高温熔体提拉技术最高水准的代表。

图 1.2 在日本索尼公司(SONY)九州工厂门厅陈列的高纯硅(Si)单晶晶锭照片。这个晶锭是日本三菱住友材料公司2004年6月采用特制的超大型高温熔体提拉技术系统制备的。晶锭的直径为300mm(约12in)，长度为215cm，质量为307kg，纯度为99.99999999%

（摄影：施尔畏）



关于晶体的研究起步于文艺复兴时期。16世纪至18世纪期间，晶体是地质学家研究的对象，晶体的概念也局限于天然的结晶态矿物。进入19世纪后，随着化学、物理学等基础性学科快速发展，晶体不但是地质学家、结晶学家的研究对象，也成为化学家和物理学家的研究对象。这个时期，关于晶体的研究与其他科学研究领域之间的界面趋于清晰，自身的研究内涵也逐渐完整。

20世纪中叶是晶体研究真正成为独立科学研究领域的起端。此后，晶体研究进入了发展的“快车道”：人工制备晶体迅速成为这个领域的主体；X射线衍射技术和电子衍射技术提供了检测晶体精细结构的有效手段；经典物理学、化学与结晶学融合在一起，形成了这个领域的知识基

础；现代电力电子技术、自动控制技术、精密制造技术及计算机技术给这个领域的发展带来了巨大的“红利”；特别重要的是，先进制造技术——如半导体技术、通信技术、激光技术、传感技术等——为这个领域的发展提供了强大的驱动力。

如今，在晶体制备研究方面，人们不但能够创造与自然界成矿条件相同或相似的环境，制备出可在自然界找到对应结晶态矿物的晶体，而且能够在应用目标的牵引下，按照自己的意愿，创造更加完美的制备技术系统，形成更加极端的工艺技术环境，制备出自自然界中不存在的新型晶体。

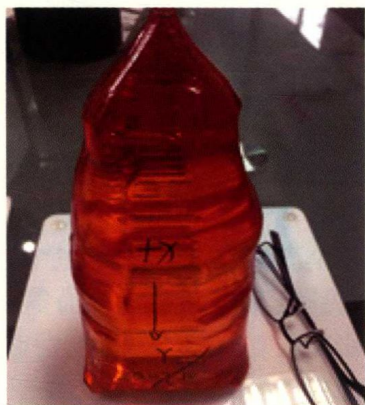
◆ 晶体的结晶学定义

根据经典结晶学的观点，晶体是由许许多多多个粒子按照确定的化学规则、在三维空间中作周期性排列而成的块状物体。构成晶体的粒子可以是原子或离子，也可以是分子或分子聚集体；这些粒子可通过离子键或共价键连接在一起，也可通过金属键或分子间作用力连接在一起。

经典结晶学定义的晶体具有确定的几何形态。在高温熔体提拉技术系统、溶液制备技术系统或水热技术系统中制备的晶体，常常显露生长速度相对较慢的晶面。图1.3是一个采用高温熔体提拉技术制得的硅酸镱镧 ($\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$) 晶锭的照片。从图可看到，由于生长速度相对较慢的晶面显露，导致晶锭呈现轴对称的结晶形态；在晶锭显露的+X(110)面上，存在因制备过程中对生长界面温度进行细微调整而成的生长面（即生长条纹）。

图 1.3 采用高温熔体提拉技术制备的硅酸镱镧 ($\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$) 晶锭的照片。该晶锭的质量为 4.1kg，长度为 168mm，直径的最大值为 82mm。从图可看到在晶锭显露的 +X(110) 面上，形成了因制备过程中对结晶界面的温度进行细微调整而成的生长面（即生长条纹）

（照片提供者：熊开南）



采用坩埚下降技术系统或物理（化学）气相输运法技术系统制备晶体时，晶体的几何形态是由诸如坩埚的制备组件确定的。以坩埚下降技术系统为例，如果使用圆柱形贵金属坩埚，所得晶锭必然呈圆柱状；如

果使用矩形柱状贵金属坩埚, 所得晶锭必然呈矩形柱状。

在晶体自然显露的晶面上, 可能出现因工艺技术条件波动而成的“小面”或生长丘, 还可能出现内部结晶缺陷的露头点, 它们构成了该晶面的形貌。晶体的几何形态与显露晶面的形貌被统称为晶体的结晶形貌。与经典矿物学和结晶化学的研究方法类似, 对晶体结晶形貌的观察与分析, 仍然是晶体研究的一个内容。

◆ 晶体概念的延展

在当代科学技术研究体系中, 晶体这个概念已经远远跨出了经典结晶学定义的范畴。例如, 在现代生物研究领域里, 许多研究者正努力合成微尺度的结晶态物质, 剖析它们的精细结构, 探寻这些物质与生物体功能之间的关系。图1.4^[1]给出了在美国航天飞机或俄罗斯“和平号”空间站上制备的蛋白质结晶体的照片。在纳米研究领域, 许多研究者创造更加精巧的技术装备, 在更为苛刻的工艺技术条件下, 实现不同粒子按照一定规则在一维或二维纳米尺度内有序排列。在这些研究者的视野里, 这些结晶态物质都被称为晶体。



图 1.4 在美国航天飞机或俄罗斯“和平号”空间站上制备的蛋白质结晶体的照片。遗憾的是, 该图没有给出这些结晶体尺度的标尺。与许多其他类型的分子一样, 当溶解蛋白质的溶液成为过饱和溶液时, 蛋白质结晶体就会从溶液析出。在这样的情况下, 单个蛋白质分子能够被“塞”入一个重复阵列之中, 并以非共价键的方式结合在一起。蛋白质结晶体可被用于解析其分子结构的结构生物学研究之中, 或者用于不同的工业及生物技术领域

(图片来源: 文献 [1])

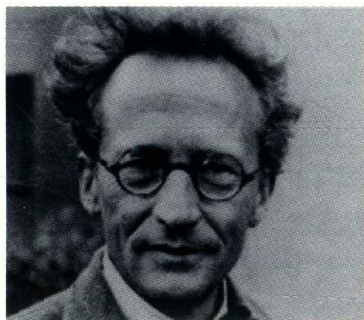
杰出的奥地利物理学家、现代量子理论的奠基人之一 **E. Schrödinger** (见图1.5^[2]) 把经典结晶学定义的晶体称为**周期性晶体**, 而把有机化学家研究的复杂分子、生物学家研究的活细胞染色体纤丝等复杂分子称为**非周期性晶体**。

他说道, “迄今为止, 我们在物理学中只处理过周期性晶体。在一位谦卑的物理学家看来, 周期性晶体已经非常有趣和复杂了, 它们构成了最有吸引力和最复杂的物质结构之一, 由于这些结构, 无生命的自

然已使物理学家费尽心思了”；“然而，与非周期性晶体相比，周期性晶体是相当简单与乏味的。两者在结构上的差别就如同一张是反复出现同一种图案的普通壁纸，而另一幅则是技艺精湛的刺绣，它显示的绝非单调的重复，而是那位大师绘制的一幅精致的、有条理的、富含意义的图案。”^[3]

图 1.5 E. Schrödinger (1887 ~ 1961)，奥地利物理学家，诺贝尔物理学奖获得者。他在量子理论领域取得了大量的基础性研究成果，奠定了波动力学的基础，创立了 Schrödinger 方程

(图片来源：文献[2])



需要指出的是，本书仅讨论属于经典结晶学范畴的晶体。

◆ “晶体生长”与“晶体制备”的差异

在许多场合，人们把晶体制备和晶体生长这两个词混淆在一起。然而，晶体制备与晶体生长的涵义是有差别的。

晶体生长这个词，强调的是晶体在适宜的环境与条件下从小变大的过程。这里所说的晶体，既可指天然晶体，也可指人工制备的晶体；这里所说的过程，既可指特定地质成矿条件下结晶态物质逐渐发育和形成的过程，也可指人为创造的工艺技术条件下晶体从小变大的过程。

晶体制备这个词，强调研究者在应用目标的牵引下，按照自身意愿，集成相关技术，构建技术系统，创制工艺环境，制取所需要的晶体。

在晶体制备过程中，研究者是主体，晶体是研究对象，晶体制备技术系统是研究平台，也是劳动工具。在这个过程中，晶体既是在研究平台上人的智慧、劳动通过劳动工具与物质相互作用的结果，也是低有序度物质在外部能量作用下实现向高有序度物质转变的结果。按照人的主观意愿主动地制备晶体，是人改造物质世界的又一项创举。

正因如此，在本书的一些章节中，晶体生长这个词被刻意回避，或者代之以晶体制备。这是本书与其他关于晶体研究的教科书的一个有别之处。

◆ “晶体特性”与“晶体性质”的差异

一般地说,晶体具有两类性质。第一类性质是晶体的本征性质,例如,不同的晶体有不同的密度、硬度、对光的吸收与折射等;第二类性质是晶体对外加物理场做出的响应,当外加物理场被撤除后,这类性质也随之消失。为了这两类性质在以后章节的讨论中被清晰地区别开来,第一类性质被特别地称为**晶体性质**,第二类性质相应地被称为**晶体特性**。

晶体除了按照结构或化学组成的差异进行分类之外,也可按照它们特性的差异进行分类。例如:

——有一些晶体在高速粒子的作用下发出荧光,这种特性通常被称为晶体的闪烁特性,相应地,具有这种特性的晶体被称为闪烁晶体;

——有一些晶体的表面在外加机械力的作用下可产生异号束缚电荷,这种特性通常被称为晶体的压电特性,相应地,具有这种特性的晶体被称为压电晶体;

——有一些晶体在外加电场作用下发生极化,极化的方向随外加电场改变而改变,这种特性通常被称为晶体的铁电特性,相应地,具有这种特性的晶体被称为铁电晶体;

——有一些晶体在外加电场中或特定波长的激光照射下产生载流子(电子与空穴),这种特性通常被称为晶体的半导体特性,相应地,具有这种特性的晶体被称为半导体晶体;

——有一些晶体在光学谐振腔中能够把外部输入的能量转变为高度平行的单色激光,这种特性通常被称为晶体的激光特性,相应地,具有这种特性的晶体被称为激光晶体。

本质上,晶体的特性是其内部处于晶格格位上的粒子及其外层电子的状态在外加物理场作用下发生变化的宏观统计结果。因此,晶体的特性都能用可精确测量的宏观物理量来表达。

◆ 晶体特性与其化学组成及其结构的关系

晶体的特性不是孤立的,它与晶体的化学组成和结构有着直接的关系。化学组成相同的晶体,可有不同的结构,这是晶体的同质异构现象;结构相同的晶体,可有不同的化学组成,这是晶体的同构异质现象。晶体的同质异构和同构异质现象像一对孪生兄弟,一方面增加了晶体研究

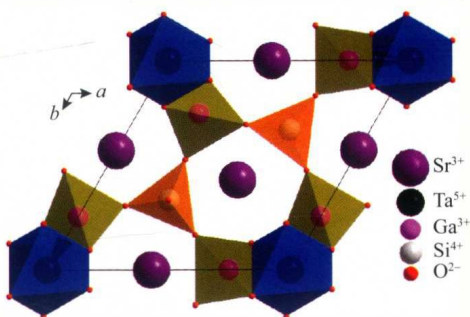
的复杂程度，另一方面又为调控晶体特性提供了技术途径。例如，对于某种具有特定结构的晶体，在深刻认识它的结构、化学组成与特性之间关系的基础上，采用有目的地替换晶体内部部分处于晶格格位上的粒子的途径，能够调节晶体某个特征结构参数，从而调整晶体的某项特性。

图1.6给出了这样一个研究案例：在化学式为 $A_3BC_3D_2O_{14}$ 的四元氧化物晶体中，如果A格位被锶（Sr）离子占据，B格位被钽（Ta）离子占据，C格位被镓（Ga）离子占据，D格位被硅（Si）离子占据，就构成硅酸镓钽锶（ $Sr_2TaGa_2Si_2O_{14}$ ，STGS）晶体。图1.6是这种晶体一个晶胞的结构示意图。通过调节占据A、B、C格位的阳离子种类，可调节晶体的压电性能，进而形成一个数目繁多的新型压电晶体家族。这个压电晶体家族包括硅酸铝钽钙（ $Ca_3TaAl_3Si_2O_{14}$ ，CTAS）晶体、硅酸铝铌钙（ $Ca_3NbAl_3Si_2O_{14}$ ，CNAS）晶体、硅酸铝钽锶（ $Sr_3TaAl_3Si_2O_{14}$ ，STAS）晶体和硅酸铝铌锶（ $Sr_3NbAl_3Si_2O_{14}$ ，SNAS）晶体，图1.3所示的硅酸镓钽（ $La_3Ga_5SiO_{14}$ ，LGS）晶体也是它们的“至亲”。

图 1.6 化学式为 $A_3BC_3D_2O_{14}$ 的晶体

是一类结构复杂、化学组成多样的四元氧化物压电晶体。在这类晶体中，存在A、B、C、D四种不同的阳离子格位，其中A位离子位于由八个阴离子构成的十面体的中心位置；B位离子位于由六个阴离子构成的八面体的中心位置；C位离子和D位离子位于由四个阴离子构成的四面体的中心位置。这四种格位可由不同的阳离子占据。A位可由钙（Ca）、锶（Sr）与钡（Ba）的离子占据；B位可由铝（Al）、镓（Ga）、

锌（Zn）、钽（Ta）、铌（Nb）等的离子占据；C位可由镓（Ga）、锗（Ge）、铝（Al）、铁（Fe）的离子占据；D位可由硅（Si）、锗（Ge）离子占据。图为A位由锶离子、B位由钽离子、C位由镓离子、D位由硅离子占据所构成的硅酸镓钽锶（ $Sr_2TaGa_2Si_2O_{14}$ ，STGS）晶体晶胞在 axb 平面上投影的示意图。当D位离子为硅离子时， $A_3BC_3Si_2O_{14}$ 晶体的压电性能与A位、B位和C位离子的种类密切相关。根据压电性能最优与经济性原则，使用第一性原理方计算模拟方法，可得出这类晶体的化学组成、结构参数与压电特性之间的关系，预测硅酸铝钽钙（ $Ca_3TaAl_3Si_2O_{14}$ ，CTAS）晶体、硅酸铝铌钙（ $Ca_3NbAl_3Si_2O_{14}$ ，CNAS）晶体、硅酸铝钽锶（ $Sr_3TaAl_3Si_2O_{14}$ ，STAS）晶体和硅酸铝铌锶（ $Sr_3NbAl_3Si_2O_{14}$ ，SNAS）晶体是有重要应用前景的新型压电晶体^[4]



◆ 晶体特性与结晶缺陷的关系

在人工制备的晶体中，或多或少都会存在某种形式的结晶缺陷，绝

对完美无瑕的晶体实际上是不存在的。采用不同类型的技术系统制得的晶体,可形成特有的结晶缺陷。例如,在坩埚下降技术系统制得的晶体中,往往存在被称为包裹体的结晶缺陷;在物理气相输运技术系统制得的晶体中,容易形成与生长界面推移方向平行的、被称为微管道的结晶缺陷。

在同一个晶体中,不同类型的结晶缺陷可能形成关联;一种结晶缺陷的形成将诱发甚至加剧另一种结晶缺陷的形成。例如,在物理气相输运技术系统制得的碳化硅晶体中,微管道结晶缺陷更多地富集在多型共生缺陷的边缘区域。

晶体的特性与其内部的结晶缺陷也有直接的关系。结晶缺陷的存在,必然干扰、弱化甚至破坏晶体对外加物理场作用的响应。例如,对于高温熔体提拉技术系统制备的硅单晶晶锭及由此加工而成的晶圆,位错等结晶缺陷的存在将导致它们的半导体特性的下降;对于物理气相输运技术系统制备的碳化硅(SiC)晶锭及由此加工而成的晶圆,微管道等结晶缺陷的存在也将导致它们的半导体特性的下降。因此,研究晶体结晶缺陷的类型、分布、形成机制及其对晶体特性的影响,是晶体研究的一个重要方面。

1.2 现代晶体研究的层次结构

◆ 近代晶体研究和现代晶体研究的分水岭

关于晶体的研究从成形至今已有一百多年的历史。19世纪末至20世纪初,在欧洲工业化国家里,关于晶体的研究活动是分散的,许多研究工作是化学家和物理学家研究工作的自然延伸,总体上是由个人的兴趣爱好驱动的。在这个时期,不存在与晶体研究相关的建制化安排,更不存在完整的晶体研究体系。

第二次世界大战彻底改变了全球科学技术研究的活动形态与组织方式。战争期间,相关国家的经济活动和科学研究活动都被纳入了战时动员与政府管制的轨道;军事工业机器的超负荷运行,给包括晶体研究在内的科学研究创造了前所未有的巨大需求,给晶体研究注入了强大的发展动力。在美国、苏联及另一些欧洲国家,晶体研究——包括关于晶体

的特性、制备与应用研究——取得了超出想象的发展。水晶晶体在军用通信电子器件中的重要应用及其因需求刺激而生的人工制备，是这个时期晶体研究快速发展的典型案例。

20世纪50年代，世界经济进入了全面繁荣的时期。与此同时，冷战铁幕轰然降落下来，带来了东、西方阵营空前激烈的军备竞赛。在产业技术和军用技术快速发展的双重刺激下，在大额公共财政资金的投入下，晶体研究从此彻底走上了以体系化、建制化、多样化和专业分工为主要特征的发展道路。

在晶体研究的发展历程上，第二次世界大战是一个分水岭。如果第二次世界大战爆发之前全球范围内对晶体的研究被称为近代的晶体研究，那么，第二次世界大战结束之后至今关于晶体的研究可被称为现代的晶体研究。

◆ 现代晶体研究的层次结构

在许多材料科学与工程专业教科书中，材料科学与工程学科被定义为“研究各种材料的化学组成与结构、性能、制备技术和应用之间关系”的学科^①。人们常用一个四面体来表示材料科学与工程学科的层次结构(hierarchical architecture)：在这个四面体里，四个端点分别表示“材料化学组成与结构”“材料性能”“材料制备工艺技术”“材料应用”四个亚领域；连接这四个端点的六条连线表示对这四个亚领域之间关系的研究。

长期以来，人们以相同的思路来表示现代晶体研究的层次结构。例如，晶体研究领域也可用一个四面体来表示，四面体的四个端点分别表示“晶体的化学组成与结构研究”“晶体性质和特性研究”“晶体制备研究”“晶体应用研究”四个亚领域；连接四个端点的六根连线也分别表示对这四个亚领域之间关系的研究。

① 根据国务院学位委员会学科评议组颁布的《授予博士、硕士学位和培养研究生的学科、专业目录》，材料科学与工程(Materials Science and Engineering, MSE)是属于工学学科门类的一级学科。它下设三个二级学科，分别是材料物理与化学、材料学和材料加工工程，主要专业方向有金属材料、无机非金属材料、高分子材料、耐磨材料、表面强化和材料加工工程。见：www.moe.edu.cn。按照学科分级分类的方法，无机非金属材料专业方向被分为结构陶瓷研究、功能陶瓷研究、人工晶体研究、特种玻璃研究、无机涂层研究五个次级专业方向。