

四、晶体缺陷与表面的结构化学

在实际晶体或固体中一般总会存在偏离三维点阵周期性的结构缺陷，如点缺陷或线缺陷等。晶体表面也是一种缺陷。此外，表面上还会有台阶、扭结、堆垛层错等。一般说，晶（固）体内与缺陷对应的结构无序，寄居于占主导地位的主体有序结构之中。人们从体相结构的基础研究进一步向体相缺陷和表面结构研究进行扩展，是自 70 年代开始结构化学研究的一个重要趋向。其原因首先在于，晶体缺陷与表面本来就是影响各类材料、反应体系物理化学性能的不容忽视的结构层次。再者，各种先进实验手段的发展，已使在原子水平上深入研究晶体缺陷、表面结构与其体系性能间的联系成为现实。

作为材料科学前沿中最有代表性的含铜复氧化物高温超导的研究（梁敬魁《物理化学学报》，1991，7，246）业已表明，有若干类体相缺陷与超导电性质密切相关：氧原子空位或部分占有的缺位型缺陷；原子异常价态与正常价态（如 O^- 与 $O^=$ ， Cu^{3+} 与 Cu^{2+} 或 Cu^+ 与 Cu^{2+} ）在某些结构位置上形成的混合价统计原子；超导相中氧原子等可发生呼吸式振动与电荷振荡相匹配；铋系中存在的结构调制（可引起 Bi—O 反键带变窄和分裂，）其伴随的电荷调制可影响 CuO_2 面网中的空穴浓度。

由于近 10 至 20 年来，花样繁多的表面分析和结构表征技术的突飞猛进，大大推动了表面科学的进步。当前最引人瞩目的是下述三方面的工作。与固体表面吸附和复相催化相关的研究；分子有序组合膜功能体系的研究；

以分子束外延法制备厚度可控的混合晶体薄层（如在砷化镓基底上生长砷化镓铝）及进行掺杂，以制备有特殊光、电性能的固体（微）电子器件。