

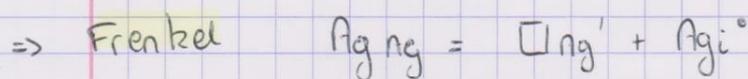
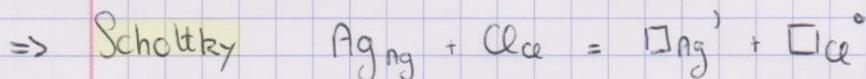
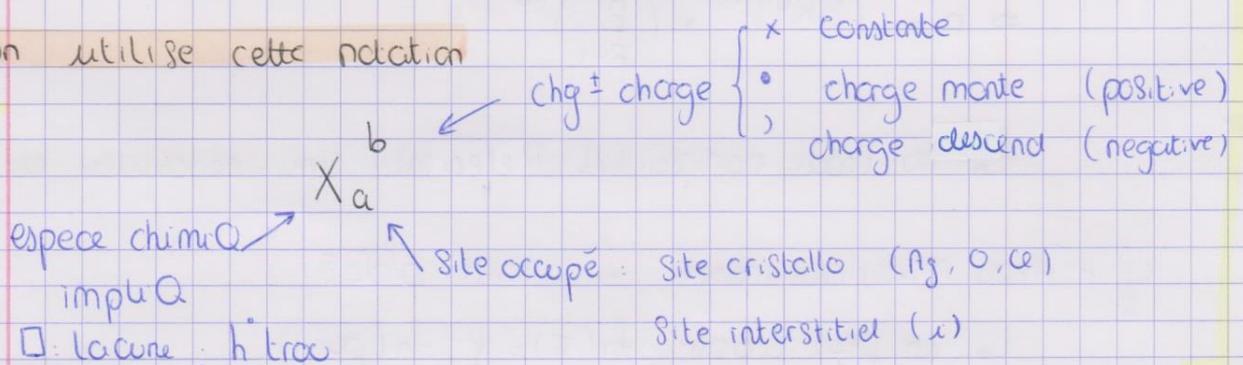
Formalisme de Kröger-Vink

* Kröger et Vink ont mis au point un formalisme pour pouvoir décrire les défauts dans les cristaux vers 1930

* Il a pour avantage de ne décrire que les changements par rapport au cristal parfait

- la nature des liaisons n'importe pas
- s'affranchit de problème de charges parfois.

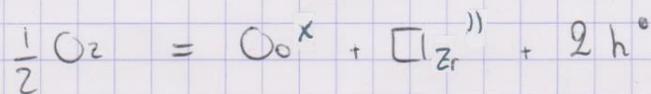
* On utilise cette notation



* On peut utiliser la loi d'action de masse avec ce formalisme

- il faut conserver la charge et le nombre de site

* Exemple : oxydation ZrO_2 (Casati p 365)



$$a \text{ l'eq } K^\circ = \frac{a(O_o^\times) \cdot a(\square_{Zr}'') \cdot a(h^\bullet)^2}{(p_{O_2}/p^\circ)^{1/2}}$$

* il est difficile de définir des activités, mais on fait des approx

• $a(\text{O}_2) = 1$ (solvent)

• $a(\text{Zr}^{4+}) = [\text{Zr}^{4+}] = n/2$

• $a(\text{h}^\circ) = n$

$$\Rightarrow K^\circ = \frac{n^3}{3 \sqrt{\frac{p_{\text{O}_2}}{p^\circ}}}$$

$$\Rightarrow n = (3K^\circ)^{1/3} \times \left(\frac{p^\circ}{p_{\text{O}_2}}\right)^{1/6}$$

↳ les trous conduisent le courant : semi-conducteur de type n

cf H. Peta matériaux inorganiques + casaldit p 365

↳ on peut tracer $\ln(\sigma) = f(\ln(p_{\text{O}_2}))$.