

## 4.4 Zusammenfassungen zu Kapitel 4

### 4.4.1 Merkpunkte zu Kapitel 4 "Realer Kristall und defektbedingte Eigenschaften"

#### Defekte sind wichtig!

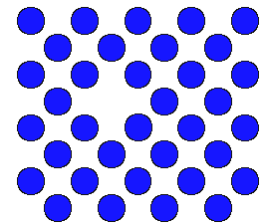
- Viele Eigenschaften sind sensitiv auf Defekte.
- Defekte erlauben Prozessieren.

#### Nulldimensionale Defekte

(oder "Punktdefekte", "Punktfehler", atomare Defekte)

Defekt hat kleinstmögliche Ausdehnung = "*null*", d.h. atomare Dimensionen.

- Fehlendes Atom = Leerstelle
- Extra-Atome, eigene oder fremde

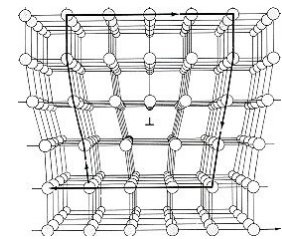


Beispiel: Leerstelle

#### Eindimensionale Defekte

(oder "Versetzungen", "Liniendefekte")

Entlang einer *Linie* (die nicht gerade verlaufen muß, sondern willkürlich gekrümmt oder in sich geschlossen sein kann) ist die *Symmetrie* verletzt.



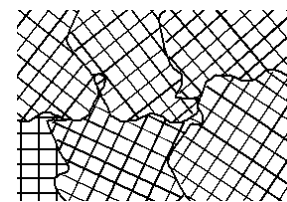
Beispiel: Versetzung

#### Zweidimensionale Defekte

(oder "Flächendefekte")

Auf einer *Fläche* (beliebig gekrümmt) ist an jedem Punkt die Symmetrie verletzt – die Teile rechts und links passen nicht zusammen.

- Korngrenzen
- Phasengrenzen
- Stapelfehler



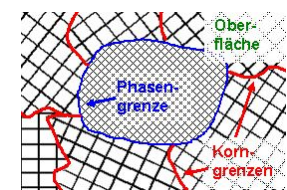
Beispiel: Korngrenzen

#### Dreidimensionale Defekte

(oder "Volumendefekte")

In einem beliebigen *Volumen* liegt an jedem Punkt eine andere Symmetrie vor.

- Ausscheidungen
- "Hohlräume" (= Voids)



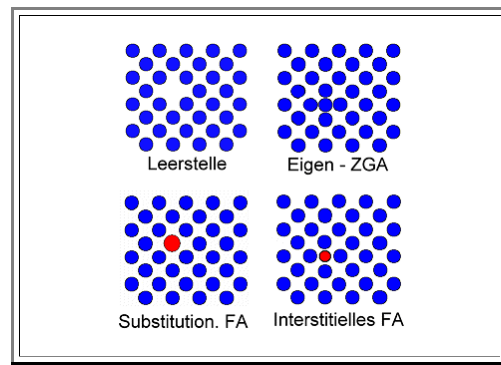
Beispiel: Ausscheidung im Polykristall

Es gibt vier Grundtypen atomarer Fehlstellen:

- Die *intrinsischen* Fehlstellen Leerstelle (**V**) und Eigen-Zwischengitteratom (**ZGA** oder **i**) sind im *thermodynamischen Gleichgewicht* immer vorhanden mit der Dichte  $n_{V,i}$  oder der Konzentration (relative Häufigkeit)  $c_{V,i}$ :

$$n_{V,i} = N_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_{V,i}^F}{k_B T}\right)$$

$$c_{V,i} = \frac{n_{V,i}}{N_0} = \exp\left(-\frac{E_{V,i}^F}{k_B T}\right)$$



Die Konzentration steigt also exponentiell mit der Temperatur.

- Typische Bildungsenergien  $E_{V,i}^F$  sind im Bereich von **1 eV**.
- Merken:**  $(k_B T)_{RT} = 1/40 \text{ eV}$ .

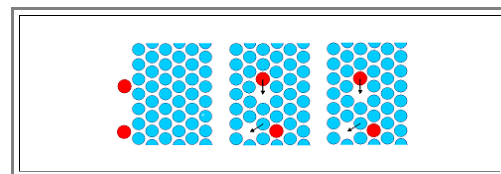
**Leerstellen:**  $E_{V,i}^F \approx (0,5 - 2) \text{ eV}$

**ZGA:**  $E_{V,i}^F \approx (2 - 5) \text{ eV}$

Die Konzentration der *extrinsischen* AFs ist i.d.R. durch das Ausgangsmaterial bedingt. Sie liegen dann in *Über*- oder *Untersättigung* vor

Atomare Fehlstellen sind beweglich. Sie können im Kristall *diffundieren*.

- Intrinsische und extrinsische **ZGA** diffundieren *direkt* durch Sprünge auf äquivalente Nachbarpositionen.
- Leerstellen diffundieren durch Sprünge der Nachbaratome in die Leerstelle.
- Substitutionelle Fremdatome diffundieren über einen *Leerstellenmechanismus*  $\Rightarrow$



Diffusion ist eine Grundtechnologie, insbesondere für Halbleitertechnik.

Entscheidend ist die Sprungrate  $r$ .

- $\nu_0$  = Schwingungsfrequenz der Atome im Kristall  $\approx 10^{13} \text{ Hz}$

**Wesentliche Erkenntnis:** Boltzmannfaktor  $\exp[-E/(k_B T)] = \text{Wahrscheinlichkeit}$ , dass ein Teilchen (eines Ensembles mit der Temperatur  $T$ ) die Energie  $E$  "hat".

$$r = \nu_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_M}{k_B T}\right)$$

**Zahl der Anläufe / s**      **Wahrscheinlichkeit, dass es klappt**

Makroskopische **Diffusionsströme**  $j$  (= Teilchen pro s und  $\text{cm}^2$ ) werden durch Konzentrationsgradienten  $\nabla c$  getrieben.

- 1. **Ficksches Gesetz** koppelt Ströme und Gradienten.
- Diffusionskoeffizient**  $D$  beschreibt Teilcheneigenschaften ( $a$  = Gitterkonstante). Typische **Wanderungsenergien**  $E_M$  ( $M$  = "migration") sind im Bereich von **1 eV**.
- 2. **Ficksches Gesetz** beschreibt die zeitliche Änderung der Konzentration.

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \cdot \left( \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} \right) = D \cdot \Delta n$$

$$j_x \propto - \frac{\partial n(x,y,z)}{\partial x}$$

$$j(t) = -D \cdot \nabla n(t)$$

$$D(T) = a^2 \cdot \nu(T) = a^2 \cdot \nu_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_M}{k_B T}\right)$$

$$= D_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_M}{k_B T}\right)$$

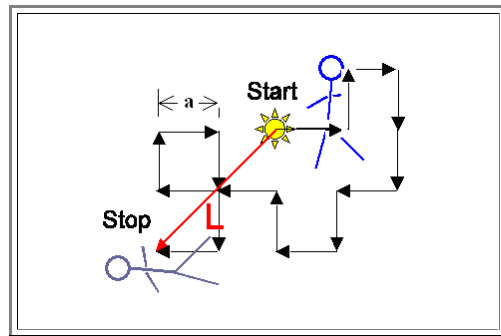
- Diffusionsströme **geladener** Teilchen sind **elektrische** Ströme!

Diffundierende Teilchen machen einen "**random walk**":

- Zwischen Schrittweite (meist  $\approx$  Gitterkonstante  $a$ ), Zahl der Schritte  $N$ , Diffusionskoeffizient  $D$ , "Laufzeit"  $\tau$  und der **Diffusionslänge**  $L$  gibt es einfache Zusammenhänge:

$$L^2 = a^2 N$$

$$L = (D \cdot \tau)^{1/2}$$



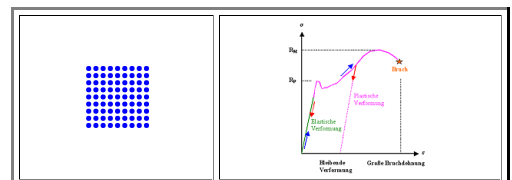
- Die letzte der beiden Gleichungen muss man wissen!

Praktisch alle Kristalle enthalten Versetzungen in einer Dichte

$$\rho = \frac{\text{Gesamtlänge Versetzungen}}{\text{Volumen Kristall}}$$

- "Gute" **Einkristalle** (Labor):  $\rho \approx (10^3 \text{ bis } 10^5) \text{ cm}^{-2}$ .
- Normale Kristalle** inkl. Polykristalle:  $\rho \approx (10^5 \text{ bis } 10^9) \text{ cm}^{-2}$
- Stark verformte Kristalle**:  $\rho$  bis  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

**Die plastische Verformung aller Kristalle (= aller Metalle) erfolgt ausschließlich durch die Erzeugung und Bewegung von Versetzungen**



Materialentwicklung Strukturwerkstoffe (Stahl, Alukarosserie, Turbinenschaufeln, ...) ⇒

- Ohne Versetzungen keine Metallurgie!
- Mit Versetzungen Probleme bei elektronischen Eigenschaften.

Mikroelektronik braucht versetzungsfreies Silizium!

- Herstellung *komplett versetzungsfreier* **Si**-Einkristalle ist eine hohe Kunst!

**Metalltechnik =  
Beeinflussung der  
Erzeugung und  
Bewegung  
von Versetzungen  
durch andere Defekte**