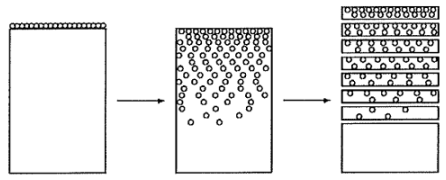


## H6: roosterdefecten

### 6.1 inleiding

tracer experiment	<p>radioactieven worden gedetecteerd wanneer ze vervallen            &gt; sturen hoogenergetische straling uit            &gt; we traceren dit volgens:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1: dunne laag van radioactieve atomen aangebracht op een kristal              &gt; atomen in dunne laag zijn van zelfde soort als atomen vh kristal</li> <li>2: kristal met dunne laag wordt op hoge temp verwarmd</li> <li>3: dunne laag wordt stapsgewijs vh kristal verwijderd              &gt; atoomlaag per atoomlaag</li> <li>4: meet de radioactiviteit van elke laag              &gt; bereken met de halfwaardetijd vd tracer en de tijd die sinds de afzetting is verstreken, hoeveel traceratomen zich in de laag bevinden              &gt; concentratieprofiel vh radioactief isotoop wordt bepaald</li> </ol> <p>&gt;&gt; tracer atomen diffunderen in het materiaal</p> 
roosterdefecten	<p>= verschijnsel waarbij dichtste stapeling niet wordt nagegaan            &gt; in een kristal zitten altijd enkele atomen/ionen niet exact op de juiste positie            &gt; deze defecten geven eigenschappen die een 'perfect' kristal niet zou hebben</p>
types roosterdefecten	<ol style="list-style-type: none"> <li>1: puntdefecten: vacatures, interstitiëlen en vreemde atomen/ionen</li> <li>2: lijnfecten/dislocaties</li> <li>3: oppervlak</li> </ol>

### 6.2 puntdefecten: vacatures en interstitiëlen

#### 6.2.1 evenwichtsaantal vacatures in een mono-atomair kristal

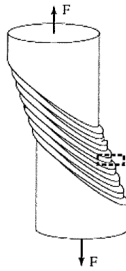
def: vacatures	= onbezette roosterplaatsen
def: interstitiëlen	<p>= atomen/ionen op een plaats die geen roosterplaats is</p> <p>&gt;&gt; bestaan hiervan maakt diffusie mogelijk</p>
bewijs bestaan vacatures	<p>bekijk een schikking van atomen A            &gt; de entropie van dit systeem is gegeven door:  <math display="block">S = k \ln W</math>            met k de cte van Boltzmann en W de aantal mogelijke schikkingen</p> <p>We willen zien of vacatures thermodynamisch verantwoord zijn            &gt; bekijk N roosterplaatsen, waar n atomen worden weggehaald            &gt; deze atomen worden op het opp vh kristal geplaatst            &gt; er zijn nu n+N roosterplaatsen            &gt; de vrije energie is:  <math display="block">F = U - TS = U</math>            aangezien voor deze situatie W=1 en dus de entropie nul bedraagt            &gt; na het aanmaken vd vacatures is de vrije energie:  <math display="block">F' = U + n\Delta E_v - kT \ln W</math>            waarbij <math>W = C_{N+n}^n = \frac{(N+n)!}{n!N!}</math>            met <math>\Delta E_v</math> = energie nodig om een vacature te vormen</p>

bewijs bestaan vacatures	<p>we kunnen <math>\ln W</math> berekenen als:</p> $\ln W = \ln C_{N+n}^n = \ln \left[ \frac{(N+n)!}{n!N!} \right] = \ln [(N+n)!] - \ln [n!] - \ln [N!]$ <p>met de benaderingsformule van Sterling kan dit genoteerd worden als:</p> $\ln W = (N+n) \ln(N+n) - (N+n) - n \ln n + n - N \ln N + N$ $= (N+n) \ln(N+n) - n \ln n - N \ln N$ <p>dus:</p> $F' = U + n\Delta E_v - kT [(N+n) \ln(N+n) - n \ln n - N \ln N]$ <p>de vrije energieverandering <math>\Delta F = F' - F</math> per roosterplaats is dan:</p> $\Delta F/N = x\Delta E_v - kT \left[ \ln(1+x) + x \ln \left( \frac{1+x}{x} \right) \right]$ <p>met <math>x = n/N</math></p> <p>&gt; bij cte temp heeft deze functie een minimum bij een negatieve waarde van vrij energie  maw: een bepaalde hoeveelheid vacatures leidt tot lagere vrije energie  &gt; de evenwichtsconcentratie aan vacatures wordt op basis van dit minimum berekend:</p> $\frac{\partial \Delta F}{\partial n} = \Delta E_v - kT \ln \frac{n+N}{n} = 0$ $\ln \frac{n}{N+n} = -\frac{\Delta E_v}{kT}$ $\frac{n}{n+N} = e^{-\Delta E_v/kT}$ <p>als <math>n \ll N</math> <math>\frac{n}{N} = e^{-\Delta E_v/kT}</math></p> <p>&gt;&gt; hiermee kunnen we een schatting van aantal vacatures maken</p> <div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="text-align: center;"> <p>A A A A A A A A</p> <p>A A A A A A A A</p> <p>A A A A A A A A</p> <p>(a)</p> </div> <div style="text-align: center;"> <p>A A</p> <p>A A A A</p> <p>A A A A</p> <p>(b)</p> </div> </div>
evenwichtsconcentratie van interstitiëlen	<p><math>n_i</math> atomen worden uit de bulk van kristal weggenomen  ie: er worden <math>n_i</math> vacatures gemaakt  &gt; er zijn <math>N!/((N-n_i)!n_i!)</math> keuzemogelijkheden  &gt; deze <math>n_i</math> worden dan op <math>N_i</math> interstitiële posities geplaatst  &gt; er zijn <math>N_i!/((N_i-n_i)!n_i!)</math> manieren om dit te doen  &gt; met <math>\Delta E_{fr}</math> de energie om een Frenkel-paar te maken wordt de uitdrukking:</p> $\frac{n_i}{\sqrt{NN_i}} = e^{-\Delta E_{fr}/2kT}$ <p>de verhouding vacatures tov interstitiëlen is dan:</p> $\frac{n/N}{n_i/N_i} = \frac{n}{n_i} = \exp \left[ \left( \frac{\Delta E_{fi}}{2} - \Delta E_v \right) / kT \right]$
<b>6.2.2 puntdefecten in verbindingen</b>	
puntdefecten in verbindingen	<p>In verbindingen is de concentratie aan vacatures typisch veel hoger  &gt; echter: er moet altijd elektroneutraliteit zijn  &gt; wordt verzekerd door <math>e^-</math> of ionen die verschillende valentietoestanden hebben</p> <p>vb: in AB-type zoals NaCl moet het aantal kationvacatures gelijk zijn aan het aantal anionvacatures en dergelijke paren worden dan</p> $\frac{n}{N} \propto e^{-\Delta E_p/2kT}$ <p>met <math>\Delta E_p</math> de vormingsenergie voor een defectenpaar</p> <p>verder: elk tweewaardig ion geeft aanleiding tot een vacature</p>

## 6.3 dislocaties

### 6.3.1 glijding

glijding



bij vervorming van kristal hebben we een plastisch en elastisch gebied:

- > plastisch = omkeerbaar
- elastisch = onomkeerbaar

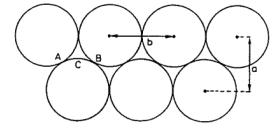
Nu: glijdlijnen zijn treden die op het oppervlak van kristal verschijnen bij plastische vervorming

- > aantal vergroot naarmate de vervorming vergroot
- > parallel aan elkaar, gescheiden door de volgende set glijdlijnen
- > glijding gebeurt in een welbepaalde kristallografische richting
- nl: die van dichtstgestapelde richting waarvoor de component van F het grootst is

glijding theoretisch

beschouw twee aanliggende (001)-vlakken die we de glijdvlakken noemen

- > de afstand ertussen is  $a$
- de afstand tss de atomen in één vlak is  $b$



verplaats het bovenste vlak een afstand  $x$  tov het onderste

- > kracht moet uitgeoefend worden
- > zorgt voor een schuifspanning  $\sigma$ :

$$\Delta y = \frac{1}{\mu} \sigma \cdot y_0$$

met  $\sigma = F/A$  de schuifspanning en  $\mu$  = glijmodulus

Nu: de betrekking tss  $\sigma$  en  $x$  heeft een periodiek karakter

- >  $\sigma$  moet nul worden voor  $x=0, b/2, b, \dots$
- > stabiele en labiele evenwichtsposities komen hiermee overeen
- > het verband wordt gegeven door:

$$\sigma = \sigma_m \sin(2\pi x/b)$$

en dus voor kleine verplaatsingen:

$$\sigma \approx \sigma_m 2\pi x/b$$

uit de definitie van glijmodulus geldt er:

$$x = \frac{1}{\mu} \sigma a$$

uit de combinatie van deze twee vgl'n kunnen we  $\sigma_A$  berekenen:

$$\sigma_A = \frac{b}{a} \frac{\mu}{2\pi}$$

>> bij ruwe benadering kunnen we stellen dat  $a=b$

- > dan is de glijsterkte gelijk aan de glijmodulus gedeeld door  $2\pi$

### 6.3.2 definitie van de types dislocaties

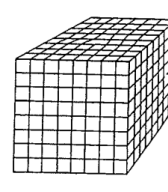
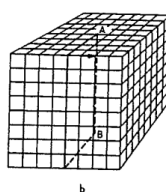
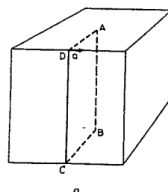
types dislocaties

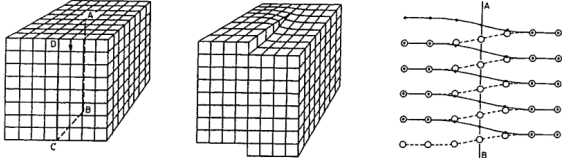
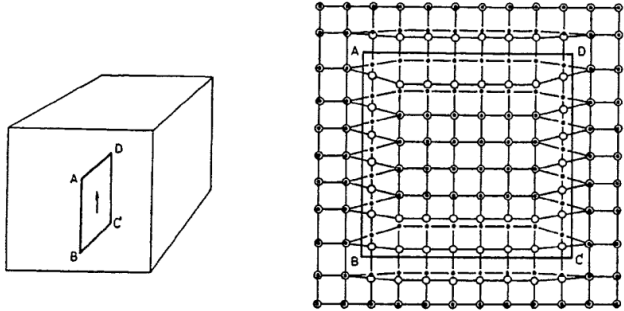
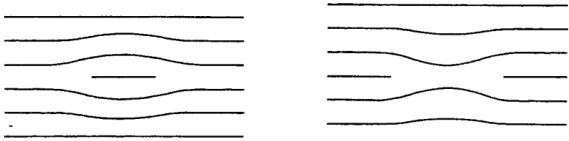
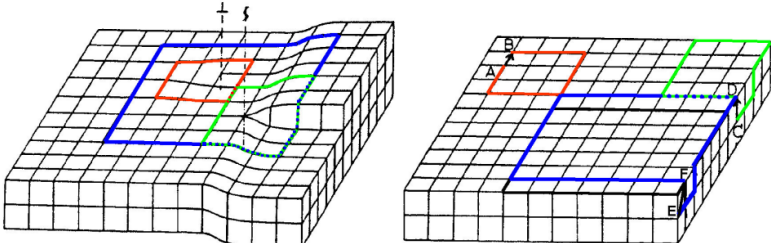
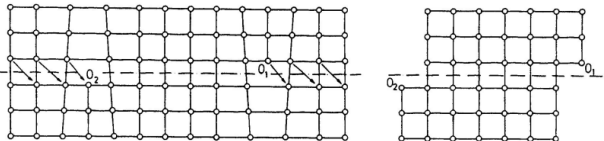
- 1: randdislocaties
- 2: schroefdislocaties
- 3: dislocatiering
- 4: prismatische dislocatiering

1: randdislocaties

bekijk een kristal opgebouwd uit elementaire kubusjes met zijde  $a$

- > maak een snede ABCD volgens een netvlak
- > verplaats het rechterdeel van snede over een afstand  $a$
- > er ontstaat een spie in de materie
- > er is een half vlak aanwezig in de materie
- > noem deze lijn de dislocatielijn

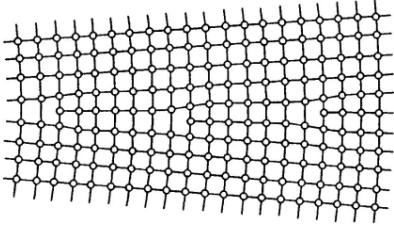


2: schroefdislocatie	<p>neem opnieuw ABCD          &gt; verplaats beide helften tov elkaar          &gt; dit vormt één schroefoppervlak</p> 
3: dislocatiering	<p>Neem ABCD volledig in het kristal gelegen          &gt; voer een verplaatsing uit zoals in de afbeelding          &gt; wordt begrensd door twee schroef- en twee randdislocaties</p> 
4: prismatische dislocatiering	<p>dislocatiering waarbij de verplaatsing ipv parallel aan ABCD, loodrecht wordt uitgevoerd</p> 
<b>6.3.3 Burgers-circuit en Burgersvector</b>	
Burgersvectoren	<p>Bekijk een kristal met schroef- en randdislocaties          &gt; we tekenen gesloten circuits rond elk van hen en één rond beide          &gt; indien deze circuits op een identieke manier in een perfect kristal herhaald worden dan zijn ze niet meer gesloten</p> <p>We moeten vectoren toevoegen om de circuits volledig te maken: <math>\vec{CD}</math> en <math>\vec{EF} = \vec{AB} + \vec{CD}</math>          &gt; noem deze vectoren Burgersvectoren          &gt; staat: - loodrecht op de dislocatielijn ve randdislocatie                    - evenwijdig aan de dislocatielijn ve schroefdislocatie          &gt; indien de dislocatielijn schuin staat tov de dislocatielijn          Dan kan deze ontbonden worden in rand- en schroefdislocatie componenten</p> 
<b>6.3.4 beweging door glijding</b>	
herordening van atomen	<p>bekijk twee randdislocaties in <math>O_1</math> en <math>O_2</math>          &gt; stand vd dislocatielijn is een labiel evenwicht          &gt; wanneer dit wordt verbroken herordenen de atomen zich              ie: de dislocatielijn beweegt en wordt uit het kristal verdreven          &gt; er komen treden op het opp</p> <p>De beweging vd dislocatielijn is progressief          ie: op ieder ogenblik vd beweging bewegen maar een beperkt aantal atomen over een kleine afstand</p> <p>Verder: glijding is enkel mogelijk in vlakken waarin de Burgersvector gelegen is</p> 

### 6.3.5 aantonen van dislocaties

etsen	Bekijk een rooster met een dislocatie > op die plaats zullen etsmiddelen sneller aangetast worden dan op andere plaatsen > er ontstaan etsputten > bekijk deze etsputten en je vindt de dislocaties
belang dislocatiedichtheid	Bekijk halfgeleiders > dislocaties hebben negatieve invloed op de elektrische eigenschappen vd halfgeleider dislocaties bevorderen het diffunderen vd onzuiverheden

### 6.3.6 korrelgrenzen

korrelgrenzen	<p>bekijk twee kubisch primitieve roosters die over een hoek <math>\theta</math> gedraaid zijn tov elkaar</p> <p>&gt; we kunnen een continue verbinding maken tss de roosters</p> <p>&gt; doe dit via evenwijdig gespatieerde randdislocaties</p> <p>Zei D de afstand tss twee opeenvolgende dislocaties</p> <p>&gt; dan geldt voor kleine hoeken <math>\theta = D/b</math>, met b de burgersvector</p> 
---------------	--

### 6.3.7 de oorsprong van dislocaties

oorsprong van dislocaties	dislocaties in een kristal zijn niet in thermodynamisch evenwicht > het is dus mogelijk om een perfect kristal te vormen > vb: <i>whiskers</i> = kristallen met doorsnede $1\mu\text{m}$ en lengte van enkele cm echter: het aanraken vh kristal kan al genoeg zijn om dislocaties op te wekken
---------------------------	--