

Contents

4	Strukturelle Defekte 0D,1D,2D	2
4.1	Ausgedehnte Defekte: 1D - Defekte	3
4.2	Einkristal: Mechanische Festigkeit	4
4.3	Plastische Deformationen	5
4.4	Amorphe Materialien	5

Chapter 4

Strukturelle Defekte 0D,1D,2D

0D-Defekte - Punktdefekte

A - Leerstelle (Schottky-Defekte) B - Zwischengitteratom C' - Interstitieller Fremdatom C'' - substitutioneller Fremdatom

A Leerstellen → Schottky-Defekte, z.B. $\text{NaCl} \oplus \leftrightarrow \ominus$ Die Zahl der Leerstellen (im thermischen Gleichgewicht)

$$N_L = \underbrace{\text{const}}_{N e^{\frac{S_L}{k_B}}} \cdot e^{-\frac{E_L}{k_B T}}$$

E_L ist die Energie die zur Erzeugung einer Leerstelle gebraucht wird. S_L ist die Schwingungsentropie einer Leerstelle. $\frac{S_L}{k_B} \approx 1$

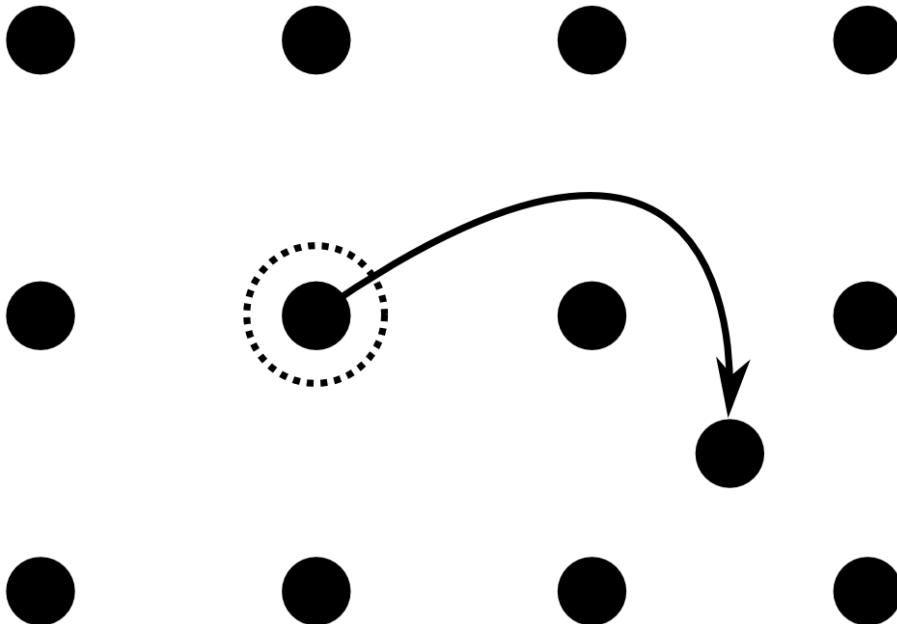
$$\left. \frac{N_L}{N} \right|_{1000K} \approx 10^{-5}; \quad \left. \frac{N_L}{N} \right|_{300K} \approx 10^{-17};$$

Volumenänderung bei höheren Temperaturen $T \rightarrow T_c : \frac{\Delta V(T)}{V} - 3 \frac{\Delta a}{a} \approx N_L(T)$ mit T_c -Temperatur-Schmelzpunkt.

Farbzentren (F-Zentren): NaCl: Cl- Leerstellen (e^-) gelb-braune Färbung

A Zwischengitteratome Zwischengitteratome sind starke Verzerrung des Gitters. In Ionenkristallen ist die Energie von Zwischengitteratome in der selben Ordnung wie die Leerstellen $E_{zw.} \propto E_L$

Frenkel-Defekt



C Fremdatome

C' interstitielle F.A. C'' substitutionelle F.A.

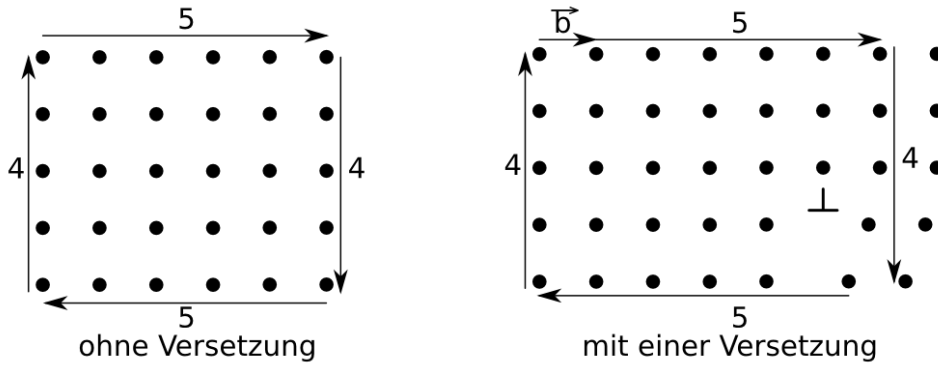
Si-Dotierung: z.B: $S_i^{4+} \rightarrow Ga^{3+}$, $S_i^{4+} \rightarrow P^{5+}$

Experimentelle Methoden:

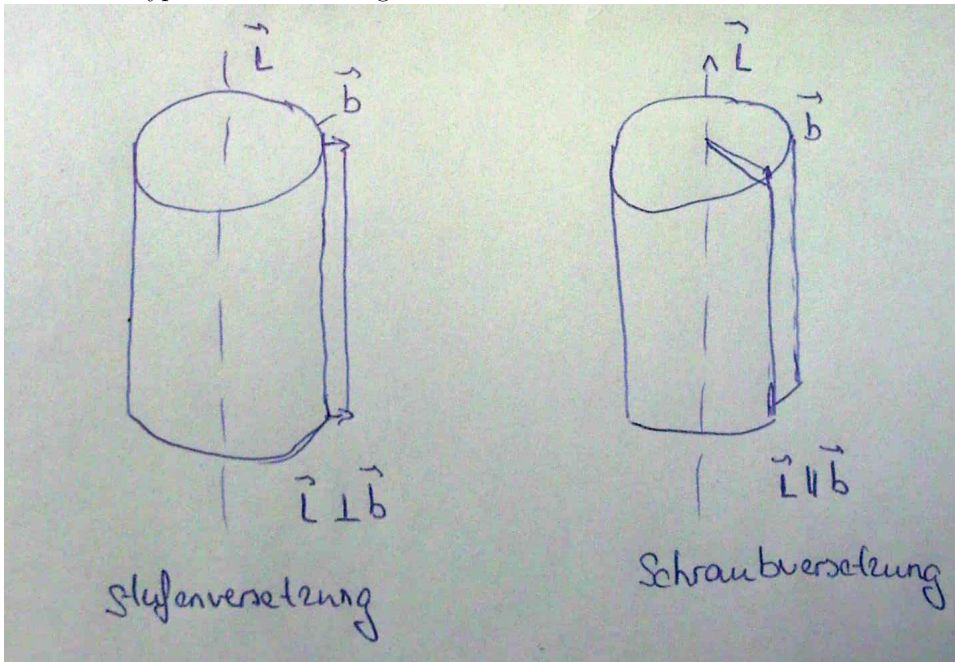
- ESP = Elektronenspinresonanz + Optik
- NMR = Kernspinresonanz + Optik

4.1 Ausgedehnte Defekte: 1D - Defekte

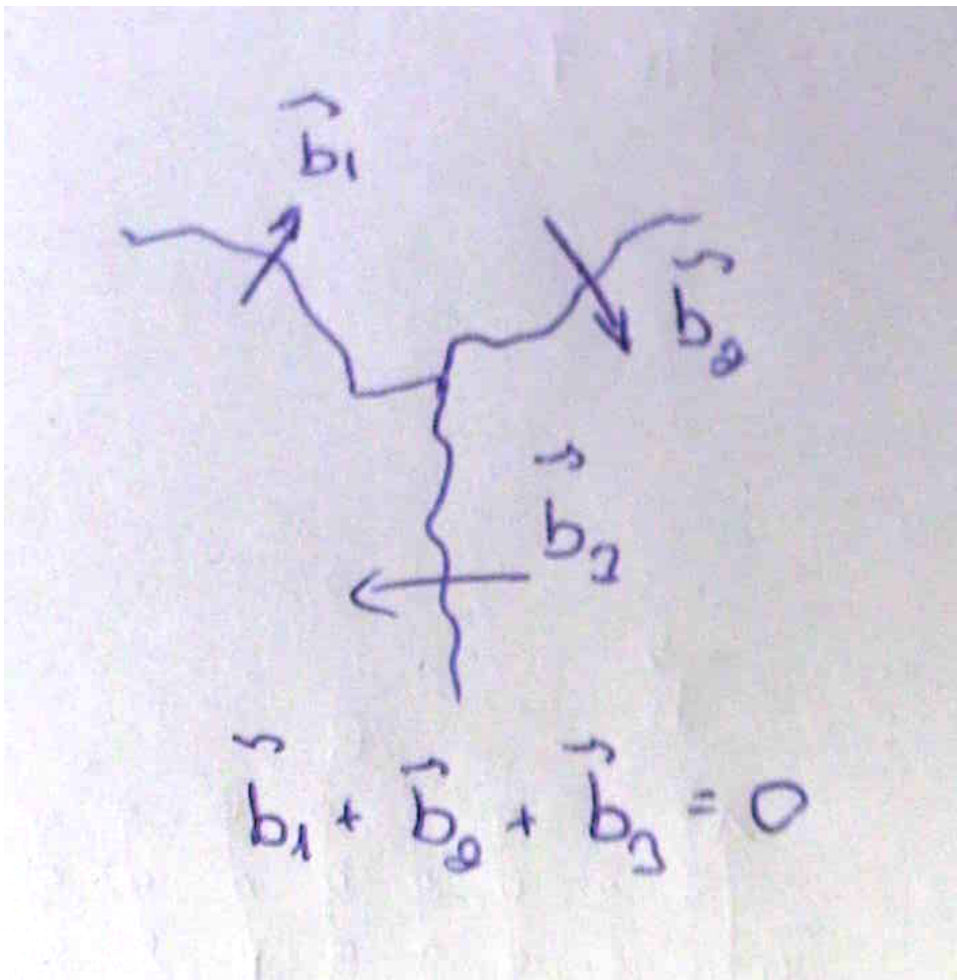
Versetzungen (engl. dislocations) sind für Mechanische Eigenschaften von Festkörpern verantwortlich.



\vec{b} - Burgers-Vektor \perp - Stufenversetzung
zwei Grundtypen von Versetzungen



Versetzungsknoten



$\vec{b}_1 + \vec{b}_2 + \vec{b}_3 = 0$ (ähnlich zu Kirchhoff).

$\perp\perp$ - Dipol

$\perp\perp\perp\perp\perp\perp$ - Multipols

Versetzungen: a) v. Oberfläche b) Versetzungsenergie

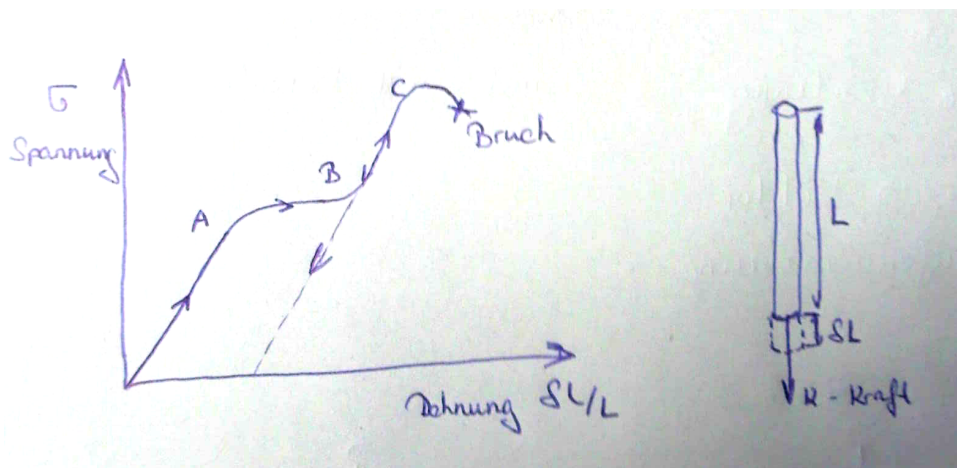
Experimentelle Beobachtung durch chemisches Ätzen von Probenoberflächen. (Beobachtung mit Rasterelektronenmikroskop SEM 1944).

Kristallwachstum (Whiskers) Plastische Deformationen

$$\vec{F} = (\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) \times \vec{L}$$

\vec{F} -Versetzungstensor

4.2 Einkristal: Mechanische Festigkeit



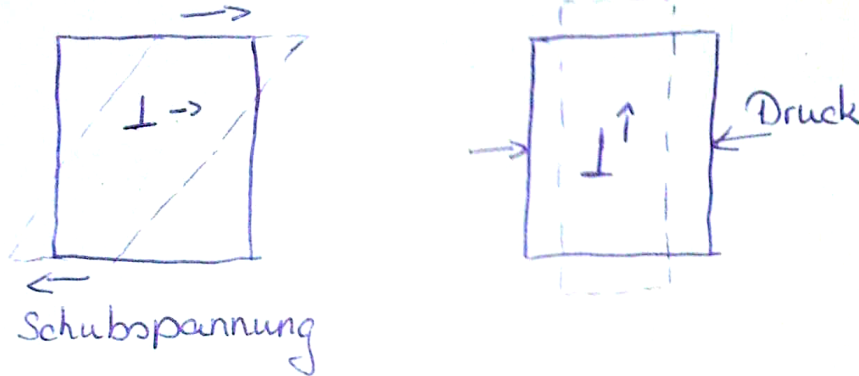
$$\sigma = \underbrace{E}_{\text{Elastizitätsmodul}} \frac{\delta L}{L}$$

Erst ist die Spannung proportional zur Dehnung (Hooksche Gesetz). Der Bereich zwischen A und B wird Dehnung größer ohne größer werden von Spannung. Hier finden Versetzungen statt.

A-B Plastische Deformation B-C Verfestigung

Einkristalle $\approx 10^2 - 10^5$ Versetzungen/ cm^2 Kalt verformte Metalle $\approx 10^{12}$ Versetzungen/ cm^2

4.3 Plastische Deformationen



$$\vec{F}(\sigma \cdot \vec{b}) \times \vec{L}$$

Whiskers (engl.) = Vibrisse (lange Stäbchen mit Versetzung)

2D Defekte: Korngrenzen = Bereiche zu Kristallite (Polykristalle)

Kleinwinkelkorngrenzen

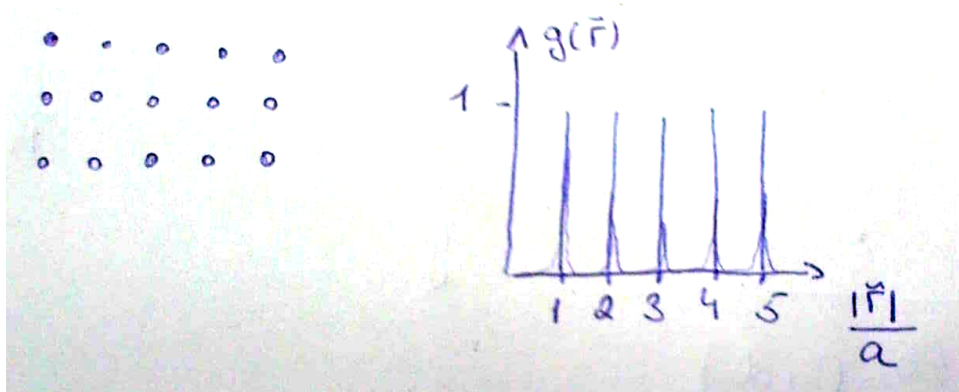


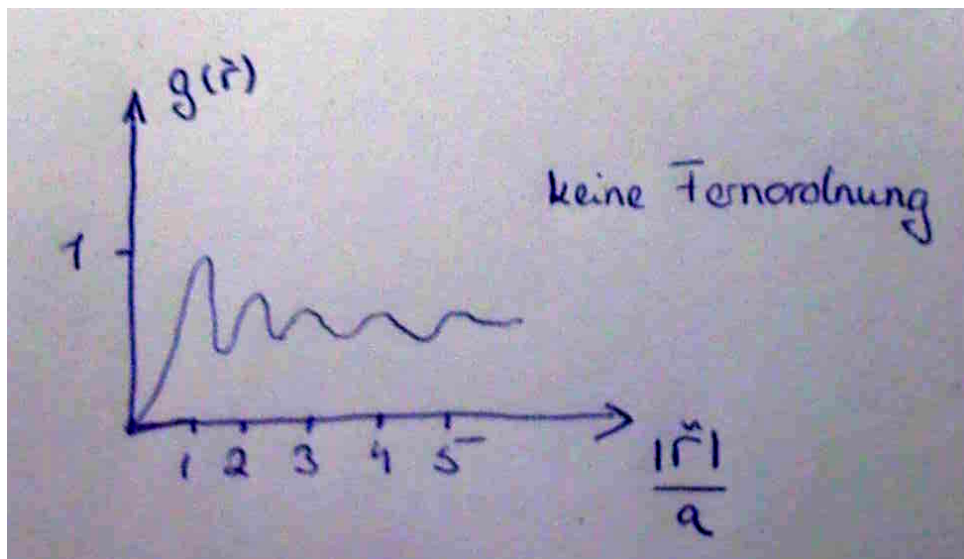
Stapelfehler: fcc und hcp A B C A B C—A B—A B—A B C...

4.4 Amorphe Materialien

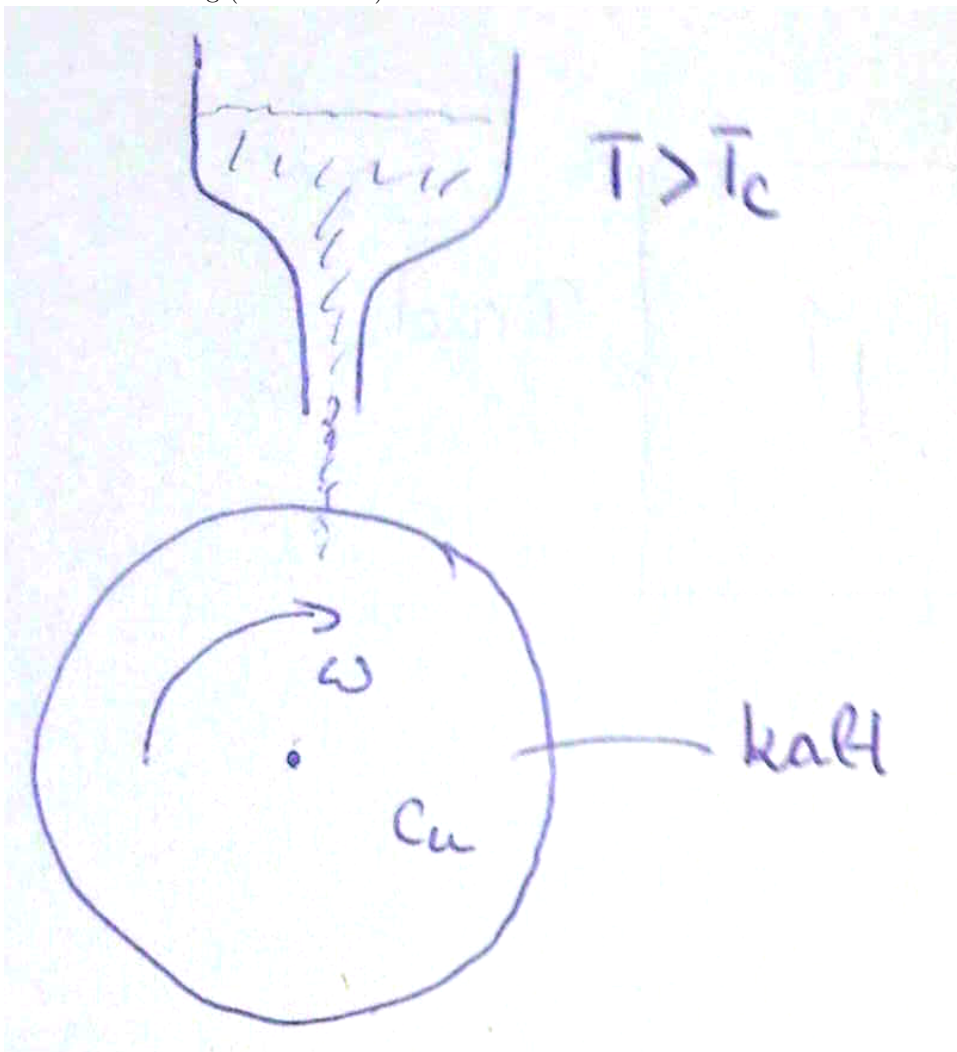
Paarverteilungsfunktion eine Atomsorte

$$g(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{n_0^2} \langle n(\vec{r}_1) \cdot n(\vec{r}_2) \rangle$$





Amorphe Festkörper
keine Fernordnung (metastabil)



Festplatten sind von amorphen magnetischen Material gemacht. In Flüssiger form wird das material auf eine rotierende disk getropft und erstarrt dort.

Anwendungen:

- Festplatten
- α -Si (Solarzellen)