

## 4.2.1 Beziehungen zwischen Defekten

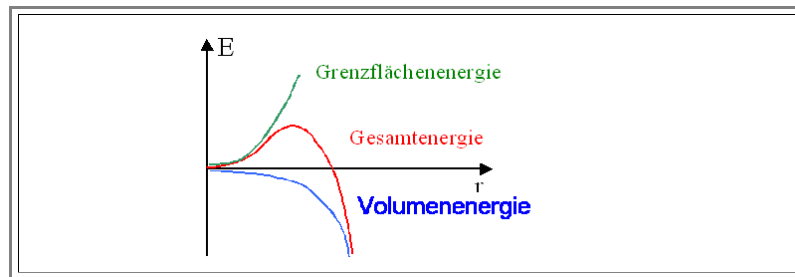
### 4.2.1 Allgemeines

#### Dreidimensionale Defekte und atomare Fehlstellen

Die verschiedenen Defekttypen sind nicht unabhängig voneinander, sondern stehen in vielfältiger und dynamischer Beziehung zueinander. Dazu einige Beispiele, die sofort einleuchten und die im vorherigen Kapitel schon angeklungen sind:

**Dreidimensionale** Defekte sind notwendigerweise von **zweidimensionalen** Defekten begrenzt, denn ihre Oberfläche ist per definitionem eine Phasengrenze. Das hat sofortige weitreichende Konsequenzen:

- Die **Gesamtenergie** des dreidimensionalen Defekts ist immer gegeben durch die Energie die im Defektvolumen steckt **plus** der Energie der Phasengrenze.
- Die Energie des Volumens kann man als Nettobilanz in einem Energievergleich auffassen: **x** Frematome sind statistisch im Gitter verteilt **oder** in einer Ausscheidung konzentriert. Bei tiefen Temperaturen ist i.d.R. die Ausscheidung günstiger, die Volumenenergiebilanz ist dann negativ. Die Gesamtenergie des Kristalls sinkt also wenn sich die Verunreinigungen ausscheiden; für kugelförmige Ausscheidungen mit Radius  $r$  nimmt sie also mit  $-\text{const} \cdot \frac{4}{3}\pi r^3$  ab.
- Die Energie der Phasengrenzfläche ist aber **immer** positiv, ihr Anteil an der Gesamtenergie wächst dementsprechend mit  $\gamma \cdot 4\pi r^2$ . Graphisch sieht das **immer** so aus:

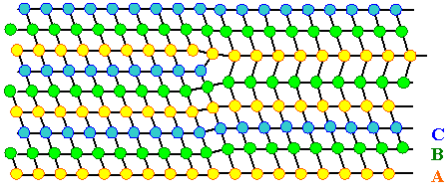
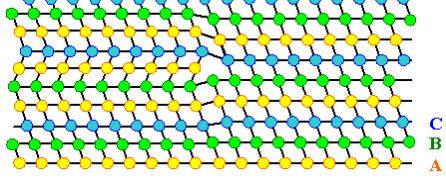


- Die mit  $r^3$  abnehmende Volumenenergie "gewinnt" mit wachsendem Radius **immer** gegenüber der mit  $r^2$  wachsenden Oberflächenenergie. Aber für **kleine** Radien ist die Grenzflächenenergie der bestimmende Term.
- Dies bedeutet, daß bei der Bildung einer Ausscheidung die Energie **immer** erst anwächst, bevor sie abnimmt! Der energetisch günstigere Zustand kann damit nur durch Überwinden einer **Energiebarriere** erreicht werden, es bedarf einer **Nukleation**, einer **Keimbildung** der Ausscheidung, bevor durch Wachstum der Ausscheidung immer mehr Energie gewonnen werden kann, so daß das Wachstum "von alleine" abläuft.
- So einfach ist das Konzept einer Energiebarriere und der **ungeheuer wichtige** Prozeß der Keimbildung zu verstehen!
- Dreidimensionale** Defekte können aber auch durch Diffusion und Zusammenlagerung (= Agglomeration, "clustern") von **nulldimensionalen** Defekten entstehen.
- Treffen sich viele Leerstellen an einem Platz, entsteht ein **Void**, das leuchtet sofort ein. Auch hier ist der dreidimensionale Defekt durch den zweidimensionalen Defekt "Oberfläche" begrenzt, die obigen Überlegungen treffen voll zu.
- Selbstverständlich können auch substitutionelle oder interstitielle Fremdatome per Diffusion agglomerieren; es resultiert eine **Ausscheidung**.

#### Zweidimensionale Defekte und eindimensionale Defekte

Etwas weniger einleuchtend als obige Beziehungen ist die folgende Aussage: **Stapelfehler** enden an inneren oder äußeren Oberflächen **oder** sind durch **eindimensionale** Defekte (= Versetzungen) begrenzt.

- Um das zu verstehen, denken wir uns die beiden Stapelfehlertypen wieder durch das **vorhergehende Rezept** konstruiert: Aufschneiden, Ebene wegnehmen oder zufügen, dann wieder zusammensetzen. Aber jetzt schneiden wir nur in einen Teil des Kristalls. Dann entstehen folgende Defekte in kompletter Analogie zu den im vorherigen Unterkapitel gezeigten Bildern:

	<p>Die <b>C</b> - Ebene fehlt im rechten Teil, wir haben einen <b>intrinsischen</b> Stapelfehler. Er wird offenbar von einer Stufenversetzung berandet</p>
	<p>Eine <b>A</b> - Ebene ist im linken Teil zusätzlich enthalten, wir haben einen <b>extrinsischen</b> Stapelfehler</p>
<p>Beide Stapelfehler sehen ziemlich ähnlich aus, sind aber verschieden - genau hinschauen! Sie sind längs der Schnittlinie durch einen eindimensionalen Defekt berandet - eine Art Stufenversetzung.</p>	

Gezeigt sind [dieselben Bilder](#), die schon im vorhergehenden [Unterkapitel 4.1.5](#) die Stapelfehler illustrierten; nur im Sinn des obigen Rezepts weitergezeichnet. Die Berandung der Stapelfehler sieht sehr nach einer Stufenversetzung aus. Der zugehörige eindimensionale Defekt ist auch eine (Stufen)versetzung, aber keine richtige oder **vollständige Versetzung**, sondern eine sogenannte **Partialversetzung**.

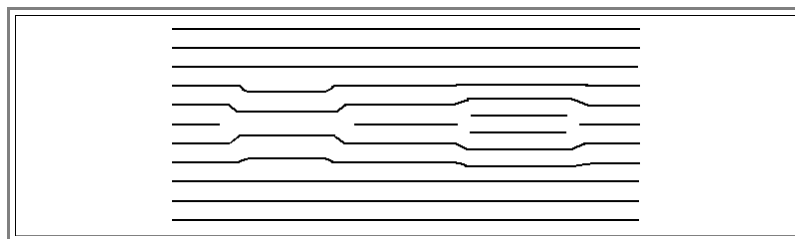
- Der Burgersvektor dieser Partialversetzungen ist nämlich *kein* Translationsvektor des Gitters! Würde man im obigen Bild einen Umlauf machen, der einem Burgersumlauf entspricht, findet man  $\mathbf{b} = \mathbf{a}/3\langle 111 \rangle$  als Burgersvektor der Partialversetzung, also *keinen* Translationsvektor.
- Einfacher erhält man dieses Ergebnis, wenn man das [Volterra Rezept](#) anwendet (Schneiden, Verschieben um  $\mathbf{a}/3\langle 111 \rangle$ , Material einfüllen oder entnehmen, zusammenfügen, feststellen, dass die Schnittflächen nicht "passen", den resultierenden Stapelfehler, wenn man's trotzdem tut, in Kauf nehmen). Partialversetzungen mit diesem Burgersvektor heißen allgemein auch **Frank - Versetzungen**.
- Um das ganze noch etwas zu verkomplizieren, sei nur zur Illustration noch hinzugefügt: Ein Stapelfehler kann auch noch durch eine andere Sorte von Partialversetzungen berandet werden, durch sogenannte **Shockley - Versetzungen** mit den Burgersvektor  $\mathbf{a}/6\langle 112 \rangle$ .
- Wer das genauer wissen möchte, betätigt den [Link](#).

## Stapelfehler und atomare Fehlstellen

Wir ahnen schon die nächste Beziehung: Stapelfehler in **fcc** - Kristallen (inkl. Berandung durch eine Franksche Partialversetzung) können durch *Agglomeration von Leerstellen oder Eigenzwischengitteratomen* auf  $\{111\}$  - Ebenen entstehen.

- Leerstellenagglomeration auf einer  $\{111\}$  - Ebene entspricht dem Herausnehmen einer Ebene, es wird ein *intrinsischer Stapelfehler* erzeugt.
- Die Agglomeration von Zwischengitteratomen auf einer  $\{111\}$  - Ebene schiebt eine zusätzliche Ebene ein, es entsteht ein *extrinsischer Stapelfehler*.

In der Realität ist dieser Prozeß nicht selten; es entsteht i.d.R. ein kleines Leerstellen- bzw. Zwischengitteratomscheibchen; ein Querschnitt sieht so aus:



- Links ein "Leerstellenring"; rechts ein Zwischengitteratomring.

## Versetzungen und atomare Fehlstellen

- Die Beziehung zwischen Versetzungen und atomaren Fehlstellen ist die Grundlage der **Metallurgie**.
  - Aus relativ weichen reinen Metallen wird durch "Verunreinigen" oder Legierung das harte Gebrauchsmetall.
  - Weiches Schmiedeeisen und ein bißchen Kohlenstoff macht harten Stahl - allerdings mit noch tausend Tricks drumherum; wenn man den alten [Schmiedegeschichten](#) glaubt.
- Es ist ganz einfach - im Prinzip.
  - Versetzungsbewegung macht plastische Verformung, und das geht umso einfacher ("weiches Material"), je leichter es ist, die Versetzungen zu bewegen.
  - Atomare Fehlstellen aller Arten (und die von ihnen stammenden Ausscheidungen) behindern die Versetzungsbewegung, das Material wird härter.
- Allerdings sollte man die Versetzungsbewegung nicht ganz unmöglich machen - denn dann ist das Material **spröde**, und das ist auch nicht gut.
  - Denn ein Schwert sollte sich weder verbiegen ("weich"), noch brechen ("spröde"), sondern allenfalls ein bißchen elastisch biegen oder etwas eindellen.

- Jetzt wollen wir es genug sein lassen. Wir ahnen, daß es weitere Beziehungen gibt (z. B. zwischen Versetzungen und Korngrenzen). Statt weitere Beispiele zu betrachten, nehmen wir nur einen Merksatz mit, der sehr große Bedeutung hat

**Defekte sind oft korreliert und treten gemeinsam auf.  
Aus "kleinen" Defekten können "große" Defekte entstehen**

- Der letzte Satz wird und wurde in der Halbleitertechnik oft leidvoll erfahren: Aus einer Handvoll Fremdatome, die atomar verteilt niemand stören würden, entwickeln sich wenn man Pech hat, massive Defekte, die das Bauelement "killen". Statt Umsatz produziert man Abfall. Einige Beispiele dazu im [Link](#).
- Zum Schluß noch eine kleine Illustration gekoppelt mit einer Übung

### Übung 4.2-3

Defekte finden, identifizieren und Varianten diskutieren

- Und dann selbstredend noch der "Multiple Choice test";

### Fragebogen

Multiple Choice Fragen zu 4.2