Übungen zu den „Grundlagen der Materialwissenschaft“

Übung 6: Kristalldefekte und Diffusion

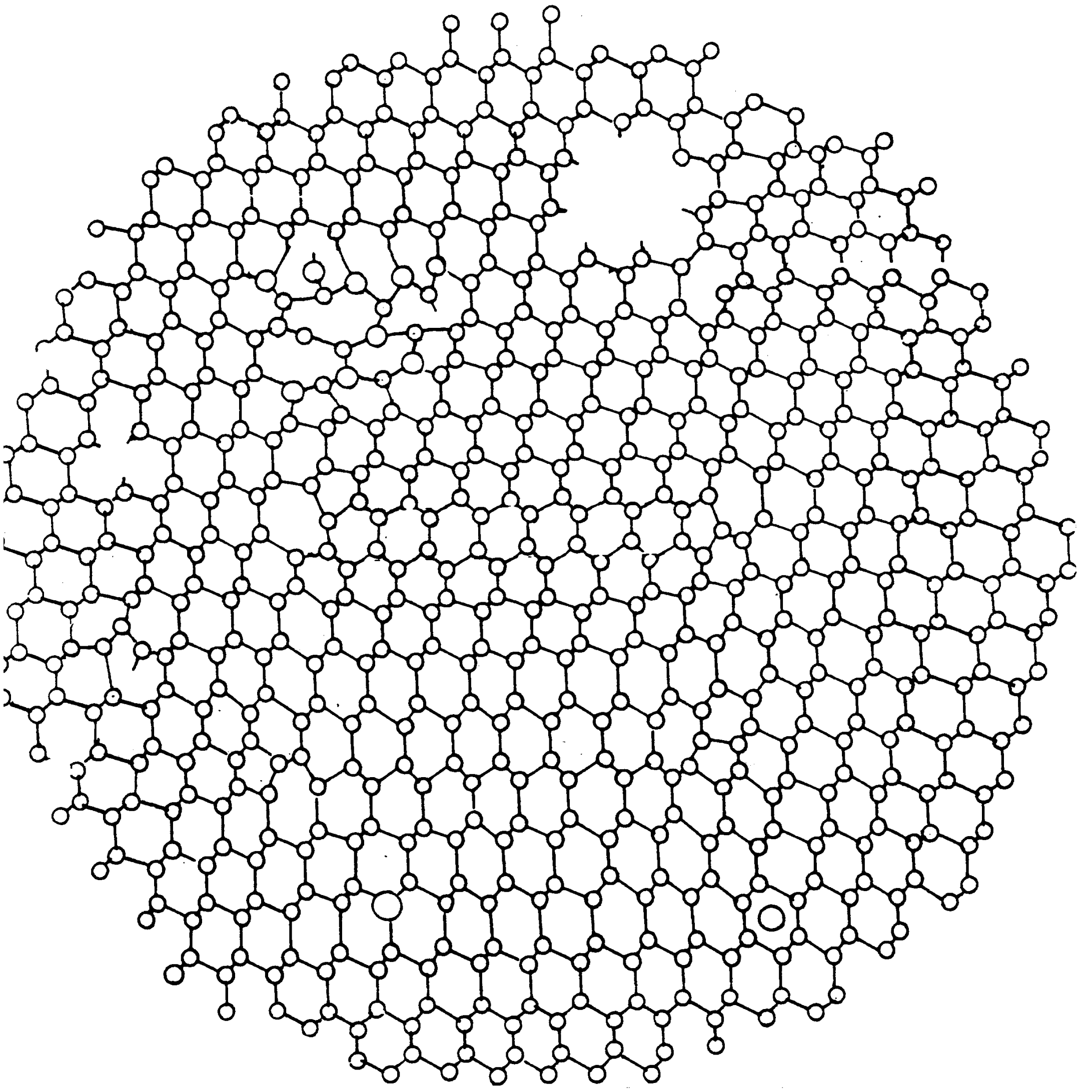
Aufgabe 12: Defekte im Diamantgitter

Die untenstehende Zeichnung zeigt einen {220}-Schnitt durch einen Siliziumkristall, der verschiedene Kristalldefekte (Gitterfehler) aufweist. (Hinweis: Siehe dazu die [110]-Projektion in Aufgabe 9 sowie die Anmerkung zu Zwischenebenen in Aufgabe 10.)

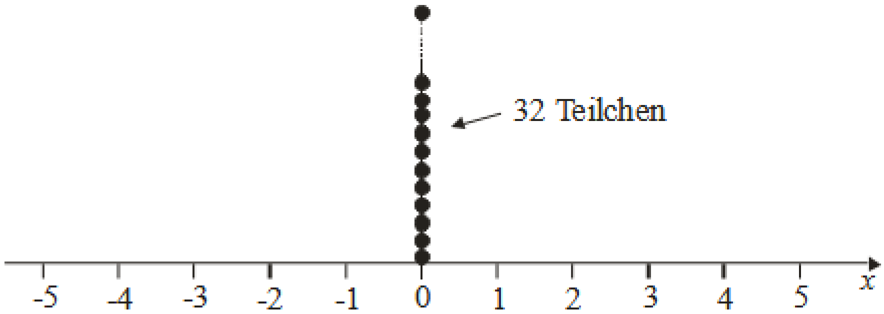
a) Warum ist das ein {220}-Schnitt und kein {110}-Schnitt? (Hinweis: Vergleichen Sie, welche der Atome man auf {110}- bzw. {220}-Ebenen findet – und welche nicht.)

b) Finden Sie eine Einheitszelle des Diamantgitters und markieren Sie sie.

c) Markieren und benennen Sie in der untenstehenden Zeichnung alle Gitterfehler, die Sie identifizieren können. (Hinweis: Es sind insgesamt 14 – oder?)



Aufgabe 13: Eindimensionaler „Random Walk“ bei erschöpflicher Quelle



Die Abbildung zeigt ein System, in dem sich 32 Teilchen an der Position $x = 0$ befinden. Die Teilchen sollen jetzt diffundieren, d. h. sie können sich eindimensional bewegen. Es handelt sich hier also um einen Diffusionsvorgang mit einer erschöpflichen Quelle (nur Umverteilung der diffundierenden Teilchen, keine Nachlieferung).

Für die Diffusion der Teilchen gelte folgendes: In jedem Zeitschritt Δt ändert sich ihre Position auf der x-Achse mit einer Wahrscheinlichkeit von $P = 0{,}5$ um $+1$, und mit einer Wahrscheinlichkeit von $P = 0{,}5$ ändert sich ihre Position um -1 („Random Walk“).

a) Simulieren Sie den ersten Zeitschritt Δt, d. h. bestimmen Sie für jedes Teilchen durch ein geeignetes Zufallsexperiment (z. B. Münzwurf, Würfeln, Computersimulation, ...), ob sich das Teilchen um $+1$ oder -1 auf der x-Achse bewegt, und notieren Sie die Position des Teilchens. Addieren Sie die Anzahl der Teilchen für die verschiedenen Positionen auf und tragen Sie diesen Wert in der ersten freien Zeile der Tabelle ein.

b) Nutzen Sie die in a) erhaltene Verteilung der Teilchen und führen Sie das Zufallsexperiment erneut für alle Teilchen aus. Somit ergibt sich die Verteilung der Teilchen nach zwei Zeitschritten ($t = 2\Delta t$). Notieren Sie wieder die Anzahl der Teilchen für die verschiedenen Positionen in der Tabelle.

c) Bestimmen Sie nach diesem Muster auch die Verteilungen für $t = 3\Delta t$, $t = 4\Delta t$ und $t = 5\Delta t$ und tragen Sie die Werte in die Tabelle ein.

	Anzahl der Teilchen bei										
x	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
$t = 0$	0	0	0	0	0	32	0	0	0	0	0
$t = \Delta t$											
$t = 2\Delta t$											
$t = 3\Delta t$											
$t = 4\Delta t$											
$t = 5\Delta t$											

d) Zeichnen Sie die Anzahl der Teilchen als Funktion der Position auf der x-Achse für die 6 verschiedenen Zeitpunkte.

e) Welche mathematische Funktion kann diese Verteilung in guter Näherung beschreiben (zumindest für die späteren Zeitpunkte)?

Aufgabe 14: Selbstdiffusion und Temperaturabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten

Betrachten Sie ein reales kristallines Material bei einer endlichen Temperatur $T > 0$ K.

a) Nennen Sie die zwei grundlegenden mikroskopischen Mechanismen der Selbstdiffusion von Atomen eines realen Kristalls. Warum sind die Mechanismen überhaupt möglich? Wie hängt das mit dem thermodynamischen Gleichgewicht des realen Kristalls zusammen?

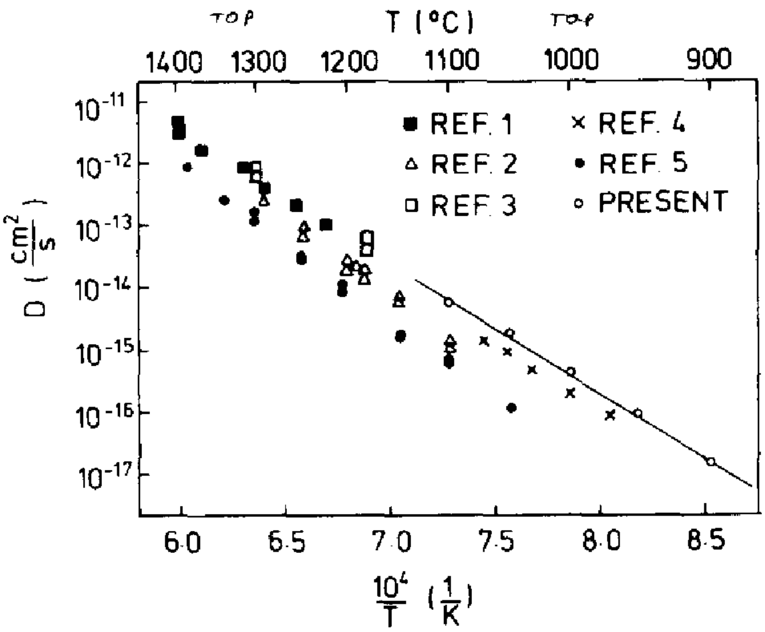
b) Fertigen Sie für jeden der beiden Selbst-Diffusions-Mechanismen eine Zeitreihe von drei beschrifteten Skizzen an, aus denen dessen Funktionsweise hervorgeht, und erläutern Sie die Funktionsweise des jeweiligen Mechanismus anhand dieser Skizzen.

Betrachten Sie ein Stück Silizium bei 1200 °C zu einem Zeitpunkt t_0.

c) Schätzen Sie einen Minimalwert für die Zeit Δt ab, nach der sich keines der Silizium-Atome mehr an dem Platz befindet, den es zum Zeitpunkt t_0 innehatte.

   Anleitung: Leiten Sie die Formel zur Abschätzung von Δt für den Fall ab, daß die Gesamtzahl der Sprünge als Minimalwert gleich der Gesamtzahl der Atome ist. Benutzen Sie zur Ermittlung der Sprungrate r die Formel aus der Vorlesung (Abschnitt 4.2.2): $D \approx a^2 r$. Ermitteln Sie den temperaturabhängigen Wert von D anhand der folgenden Graphik durch Extrapolation der Geraden, die zu den mit offenen Kreisen markierten Datenpunkten gehört.

d) Wie lange dauert dies (größenordnungsmäßig) bei Raumtemperatur (20 °C)?



Selbstdiffusionskoeffizient von Silizium. Aus: J. Hirvonen und A. Anttila, Applied Physics Letters **35**, 703–705 (1979), Abb. 2. Die darin zitierten Arbeiten sind:

Ref. 1: R.F. Peart, Physica Status Solidi **15**, K119–K122 (1966);
Ref. 2: R.N. Ghoshtagore, Physical Review Letters **16**, 890–892 (1966);
Ref. 3: J.M. Fairfield, B.J. Masters, Journal of Applied Physics **38**, 3148–3154 (1967);
Ref. 4: J.R. Sanders, P.S. Dobson, Journal of Materials Science **9**, 1987–1993 (1974);
Ref. 5: H.J. Mayer, H. Mehrer, K. Maier, in *Radiation Effects in Semiconductors*, hrsg. von N.B. Urli und J.W. Corbett (Institute of Physics, London, 1977), ab Seite 186.

Aufgabe 15: Lösung der Diffusionsgleichung

Die Diffusionsgleichung (2. Ficksches Gesetz) ist die Kontinuitätsgleichung des Diffusionsstroms.

a) Was bedeutet das (i) physikalisch bzw. (ii) mathematisch für die Lösungen bzw. die Lösbarkeit dieser Gleichung?

Auf die Oberfläche eines Silizium-Wafers werden Arsen-Atome aufgebracht, um das Silizium zu dotieren (= gezielt mit den Fremdatomen zu „verunreinigen"). Sei n die Dichte der Arsen-Atome und D der Diffusionskoeffizient (von Arsen in Silizium).

b) Zeigen Sie, daß die eindimensionale Diffusionsgleichung $\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} - D\frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} = 0$ (das ist das 2. Ficksche Gesetz) für die drei Bedingungen (i) $n(x, t = 0) = n_0$, (ii) $n(x = 0, t) = n_\infty$ und (iii) $n(x, t = \infty) = n_\infty$ im Bereich $x > 0$ die folgende Lösung besitzt:

$$n(x,t) = (n_\infty - n_0)\left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)\right] + n_0.$$

Hierbei sind $\frac{\partial n(x,t)}{\partial t}$ bzw. $\frac{\partial n(x,t)}{\partial x}$ jeweils die partielle Ableitung der Dichte n nach der Zeit t bzw. nach dem Ort x. Ferner ist „erf" die Fehlerfunktion (Gaußsches Fehlerintergral; siehe Hinweis I), n_0 ist die Arsen-Anfangsdichte im Silizium zum Zeitpunkt $t = 0$ (Konstante bzgl. des Ortes), und n_∞ ist die konstante Arsen-Dichte am Ort $x = 0$ zu allen Zeiten. Weil dies einer unerschöpflichen Quelle entspricht, ist das auch die Dichte an allen Orten nach unendlich langer Zeit. (Die beiden Aussagen über n_∞ sowie die über n_0 verifizieren Sie durch Ihre Rechnung!)

Hinweis I: $\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-y^2)\,\mathrm{d}y$

Hinweis II: $\int_0^\infty \exp(-y^2)\,\mathrm{d}y = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$

Hinweis III: $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[\int_a^{g(z)} f(y)\,\mathrm{d}y\right] = f(g(z)) \cdot g'(z)$

Das sich bei der Diffusion der Arsen-Atome einstellende Diffusionsprofil, d. h. die orts- und zeitabhängige Dichte $n(x,t)$ der Arsen-Atome, wird durch die in b) gegebene Lösung mathematisch beschrieben; die Quelle der Arsen-Atome befindet sich bei $x = 0$, der Silizium-Wafer befindet sich im Bereich $x > 0$.

c) Wie lange muß ein Silizium-Wafer mit $n_0 \approx 0$ in einem Ofen bei 1394 °C liegen, damit die Dichte der Arsen-Atome in einer Tiefe von 2 µm dem halben Wert an der Oberfläche (n_∞) entspricht? [Hinweise: $D_{1394\,°\mathrm{C}} \approx 5 \cdot 10^{-12}\,\frac{\mathrm{cm}^2}{\mathrm{s}}$, $\operatorname{erf}(0{,}5) \approx 0{,}5$]