

Zur Vorlesung „Grundlagen der Materialwissenschaft“

Online-Lesehilfe 5: Der reale Kristall

Inhalt

Unterkapitel 4.1: Was sind Kristalldefekte?

- 4.1.1 Wozu braucht die ET&IT Kristalldefekte?
- 4.1.2 Die Zoologie der Kristalldefekte

Unterkapitel 4.2: Atomare Fehlstellen und Diffusion

- 4.2.1 Grundtypen und Konzentration
- 4.2.2 Diffusion mit atomaren Fehlstellen und Ficksche Gesetze
- 4.2.3 Random Walk und Diffusionslänge

Unterkapitel 4.3: Versetzungen, plastische Verformung und der Rest

- 4.3.1 Versetzungen und plastische Verformung
- 4.3.2 Die restlichen Defekte

Unterkapitel 4.4: Zusammenfassungen zu Kapitel 4

Unterkapitel 4.1: Was sind Kristalldefekte?

Der reale Kristall unterscheidet sich vom idealen hauptsächlich durch die Defekte (und auch dadurch, daß die Atome nicht in Ruhe sind, sondern in ständiger Bewegung). Dabei ist „Defekte“ ein sehr weit gefaßter Begriff. Bereits die Oberfläche ist ein Defekt, denn der ideale Kristall ist räumlich perfekt periodisch, d. h. unendlich ausgedehnt.

4.1.1 Wozu braucht die ET&IT Kristalldefekte?

Wir brauchen Materialien mit bestimmten, teils präzise definierten Eigenschaften, z. B. von Silizium. Das „Einstellen“ dieser Eigenschaften geschieht in einer Folge von Prozessen, was bedeutet, daß an den Materialien etwas geändert wird – nicht mehr alle Atome sind da, wo sie vorher waren, und also ist der Kristall nicht mehr ideal. Es gilt in voller Allgemeinheit:

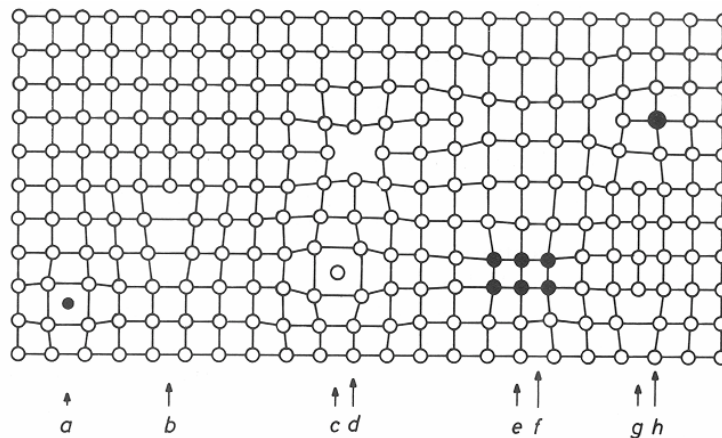
- Kristalldefekte bestimmen viele wichtige Eigenschaften der Materialien.
- Kristalldefekte kann man durch „Prozessieren“ leichter manipulieren als den Kristall.

Folgerung: Viele Materialeigenschaften werden durch *Manipulation der Defekte* eingestellt (Paradebeispiele: Leitfähigkeit der Halbleiter, Härte von Stahl).

4.1.2 Die Zoologie der Kristalldefekte

Einen Kristalldefekt erkennt man durch den Vergleich mit dem idealen Kristall: In Gedanken von einem Gitterpunkt aus angeschaut, würde man in einem perfekten Kristall die diversen Atome an den durch die Gitterpunkte und die kristallographische Basis präzise vorgegebenen Positionen sehen. Wenn alles exakt so ist, wie es im Idealfall sein sollte (wir ignorieren die Schwingungen der Atome und eventuelle elastische Verzerrungen), dann ist an der betrachteten Stelle bzw. direkt daneben kein Kristalldefekt. Wenn aber die für den Kristall typische Symmetrie lokal gestört ist, handelt es sich um einen Kristalldefekt.

Kristalldefekte werden nach ihrer „Ausdehnung“ bzw. Dimensionalität eingeteilt in null-, ein-, zwei- und dreidimensionale Defekte. Nulldimensionale Defekte sind **atomare Defekte** (auch „atomare Fehlstellen“, „Punktdefekte“ oder „Punktfehler“ genannt): fehlende oder zusätzliche Atome. **Stellen, an denen ein Atom fehlt, heißen Leerstellen – nicht „Löcher“!** (Hinweis: Der Begriff des Lochs ist für später reserviert, er wird erst im letzten Kapitel auftauchen.) Extra-Atome können fremde oder Eigen-Zwischengitteratome sein. Eindimensionale Defekte (auch **Liniendefekte** genannt) sind **Versetzungen**, von denen es diverse Arten gibt. Bei diesen gilt, daß die Symmetrie entlang einer Linie verletzt ist (wobei diese Linie nicht gerade verlaufen muß, sondern willkürlich gekrümmt oder in sich geschlossen sein kann). Zweidimensionale Defekte („**Flächendefekte**“ bzw. „flächenhafte Defekte“) verletzen dementsprechend die Symmetrie auf einer beliebig geformten Fläche. Typische Vertreter sind **Korngrenzen**, **Phasengrenzen**, **Stapelfehler** (zusätzliche oder fehlende atomare Lagen) und die Oberfläche. Dreidimensionale Defekte („**Volumendefekte**“) sind entweder **Ausscheidungen** oder **Hohlräume** (auch hier: nicht „Löcher“!). Zum Üben hier eine schematische Darstellung mit acht Defekten; alle vier Dimensionalitäten kommen vor. Die schwarz eingezeichneten Atome sind Fremdatome; lokale Verzerrungen werden dem jeweils verursachenden Defekt zugeschlagen.



Defekte unterschiedlicher Dimensionalität können auch in Kombination auftreten (ein solcher Typus ist in der Graphik bereits enthalten). Sehr häufig findet man z. B. Korngrenzen (2D), die mit atomaren Defekten (0D) „dekoriert“ sind; mancher „Dreck“ sammelt sich eben gern an bereits „geschädigten“ Stellen an. Defekte können auch miteinander wechselwirken, indem z. B. eine Ausscheidung bei Änderung der Temperatur interne mechanische Spannungen hervorruft, die dazu führen, daß sich Versetzungen bilden, weil atomare Bindungen abreißen.

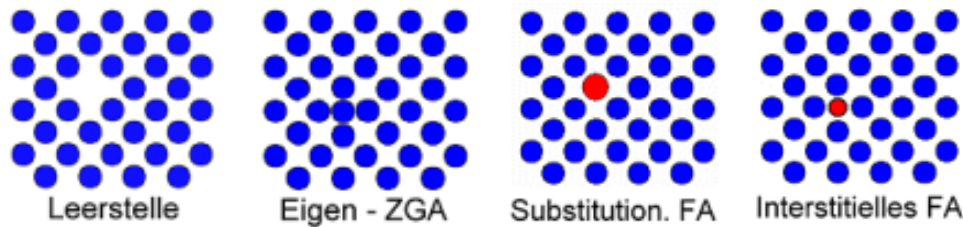
Unterkapitel 4.2: Atomare Fehlstellen und Diffusion

4.2.1 Grundtypen und Konzentration

Die atomaren Fehlstellen unterscheiden sich darin, ob sie „von innen“ (bzw. **intrinsisch**, d. h. nur von Atomen des Kristalls) oder „von außen“ (bzw. **extrinsisch**, d. h. von Fremdatomen) erzeugt wurden. Zu beiden Grundtypen gibt es zwei Unterarten. Die beiden Unterarten der intrinsischen Defekte sind die **Leerstelle** (engl. *vacancy*), abgekürzt mit *V* (kursiv, als Index die fehlende Atomsorte, z. B. V_{Si}), und das **Eigenzwischengitteratom** (Abk.: Eigen-ZGA; engl. *self-interstitial*, mit einem Index *i* am Atom, z. B. Si_i). Eigenzwischengitteratome sind in den meisten einfachen Kristallen (z. B. in allen Metallen) vollkommen unwichtig. Die einzige, sehr wichtige Ausnahme ist Silizium und vielleicht noch einige andere Halbleiter wie GaAs.

Die beiden Unterarten der extrinsischen Defekte sind das **substitutionelle** Fremdatom und das **interstitielle** Fremdatom. Im ersten Fall wird ein reguläres Atom des Kristalls durch ein

Fremdatom ersetzt, im zweiten Fall befindet sich ein Fremdatom irgendwo zwischen den regulären Gitterplätzen (wo es gerade paßt); man spricht von einem *Zwischengitterplatz*. (Zur Erinnerung: Bei vielen Kristallstrukturen gibt es noch freie Bereiche in der Einheitszelle.)



Das Vorhandensein atomarer Defekte kann in Form ihrer Dichte (Anzahl pro cm^3) oder einer Konzentration (relative Häufigkeit in Prozent oder in ppm oder ...) quantitativ angegeben werden. Fremdatome können bereits im Rohmaterial vorhanden sein, oder sie gelangen erst während der Bearbeitung hinein (absichtlich oder unabsichtlich). Dagegen sind die intrinsischen Defekte, wie es der Name schon sagt, intrinsisch vorhanden – aber wieso? *Was bringt einen Kristall dazu, sich spontan nichtideal zu verhalten?*

Die Einzelheiten dazu klären wir im nächsten Kapitel (Thermodynamik); der Befund dort ist, daß alle Kristalle bei endlichen Temperaturen „ein bißchen unordentlich sein möchten“ – weil nur das dem *thermodynamischen Gleichgewicht* entspricht. Für die im Gleichgewicht „automatisch“ vorhandenen *Vacancies* und *Interstitials* findet man quantitativ (in guter Näherung):

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

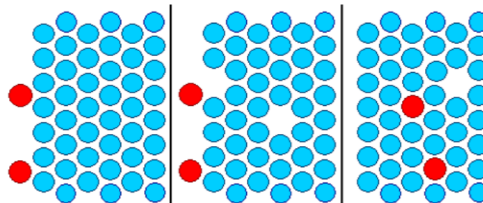
Hier bedeutet $n_{V,i}$ die Dichte (in cm^{-3}) der V. bzw. i. (eigentlich I.), N_0 ist die Dichte der Atome des idealen Kristalls, und E^F ist eine Energie, nämlich die für den betreffenden Defekt relevante Bildungsenergie (mithin fehlt dort noch der Index V,i); der Zusatz „F“ kommt vom englischen *formation*. Für Leerstellen beträgt E^F ca. 0,5...2 eV, für ZGA etwa 2...5 eV. Der Term $k_B T$ ist die bereits bekannte mittlere thermische Energie, **der gesamte Exponentialausdruck $\exp[-E/(k_B T)]$ heißt Boltzmannfaktor**; er kann von Fall zu Fall sehr unterschiedliche Energien E enthalten und wird uns noch sehr oft begegnen. Wie man sehr leicht sieht, führt er zu der auf dem 2. Übungsblatt behandelten Arrheniusdarstellung. (Denksportaufgabe: Welche Konstante folgt beim Boltzmannfaktor aus der Steigung der Arrheniusgeraden?)

Diese Formeln liefern eher geringe Konzentrationen an Leerstellen und Eigen-ZGA. Dennoch sind diese atomaren Defekte äußerst wichtig, denn sie haben eine Eigenschaft, die die Welt verändert: **Atomare Fehlstellen können sich im Gitter bewegen; sie diffundieren.** Die Diffusion von Atomen ist ein essentieller Mechanismus für die Veränderung von Materialeigenschaften, er kann gezielt zur Einstellung der gewünschten Eigenschaften genutzt werden.

4.2.2 Diffusion mit atomaren Fehlstellen und Ficksche Gesetze

Für die Herstellung elektronischer Bauelemente bzw. integrierter Schaltungen (engl. *Integrated circuit*, IC) aus Silizium müssen spezielle Fremdatome (typischerweise Bor und Phosphor) in Konzentrationen im ppm-Bereich in genau die richtigen Bereiche gelangen. Eine der beiden Sorten kann man bereits der Schmelze beifügen, aus der der Si-Einkristall gezogen wird; die andere Sorte muß von außen hineinwandern (oder kann per Ionenimplantation hineingeschossen werden, aber dabei zerschießt man immer auch die Kristallstruktur). Dazu werden sie auf die Oberfläche aufgebracht, anschließend wird der Kristall erhitzt. Das erzeugt ein paar mehr atomare Defekte, aber vor allem beschleunigt es die Diffusion. Die läuft zum Beispiel so:

Links ist die Ausgangssituation gezeigt. Zwei Phosphoratom (in Rot gezeigt) sitzen auf der Oberfläche und sollen ins Innere. Das geht erst, wenn mal eine Leerstelle „vorbeikommt“ (mittleres Bild). Das rechte Bild zeigt dann die Situation etwas später: Die beiden Atome sind etwas ins Innere gewandert, sitzen aber immer fest, bis mal wieder eine Leerstelle vorbeischaud! Das ist der **Leerstellenmechanismus der Diffusion**; nur darüber ist die Wanderung von Atomen auf Gitterplätzen möglich. Eine Leerstelle sitzt nicht immer am selben Platz, sondern „bewegt sich“ durch das Kristallgitter in völlig statistischer Weise, d. h. sie **diffundiert** – indem benachbarte Gitteratome mit ihr **in zufälliger Abfolge** den Platz wechseln.



Daraus folgt, daß die Diffusionsgeschwindigkeit, mit der sich ein substitutionelles Fremdatom in einem Gitter bewegen kann, im wesentlichen davon abhängt, wie hoch die Leerstellenkonzentration ist und wie schnell sich die Leerstellen bewegen. Die entscheidende Größe für den Leerstellenmechanismus ist die *Sprungrate* (oder -frequenz) r eines Atoms, sie gibt die (mittlere) Zahl von Platzwechseln Atom–Leerstelle pro Sekunde an.

Die **Diffusion von Zwischengitteratomen** kommt dagegen ohne Leerstellen aus. Dabei hüpfen die Atome direkt von einem Zwischengitterplatz zum nächsten. Interstitielle Fremdatome diffundieren deshalb häufig schneller als die substitutionellen. Auch für diesen Mechanismus gibt es Sprungraten; generell gilt: $r = \text{Zahl der „Sprungversuche“ pro Sekunde} \cdot \text{Wahrscheinlichkeit, daß es klappt}$. Die Zahl der „Sprungversuche“ ist die Vibrationsfrequenz der Atome um ihre Gleichgewichtsposition und beträgt größenordnungsmäßig $\nu_0 \approx 10^{13} \text{ Hz}$:

$$r = \underbrace{\nu_0}_{\text{Zahl der Anläufe / s}} \cdot \underbrace{\exp\left(-\frac{E_M}{k_B T}\right)}_{\text{Wahrscheinlichkeit, daß es klappt}}$$

E_M ist die Wanderungsenergie (von engl. *migration*), d. h. die Energiebarriere, die das Atom überwinden muß, um seinen Platz zu wechseln. Für hüpfende Atome aller Arten gilt exakt dieselbe Gleichung, nur die Wanderungsenergien sind spezifisch.

Die „Wahrscheinlichkeit, daß es klappt“, wird durch einen Boltzmannfaktor angegeben, und das ist kein Zufall: *Ganz generell gibt der Boltzmannfaktor* eines Systems aus vielen, sich nach der klassischen Physik verhaltenden Teilchen, die sich auf unterschiedlichen angeregten Zuständen mit Energien E_i oberhalb des Grundzustands E_0 befinden können, *die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß im thermodynamischen Gleichgewicht (= bei einer bestimmten Temperatur T) der Energiezustand E_i mit Teilchen besetzt ist*; dazu muß im Boltzmannfaktor die Differenz $E = E_i - E_0$ als Energiewert eingesetzt werden.

Wählt man für die Energie des Grundzustands (= niedrigste Energie) den Wert null, kann man den Boltzmannfaktor auch wie folgt ausdrücken: Die Zahl N_i der Teilchen bei der Energie E_i ist gegeben durch die **Boltzmannverteilung**

$$\frac{N_i}{N_0} = \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right)$$

Zurück zur Diffusion: Sie läßt sich makroskopisch mit den *Fickschen Gesetzen* beschreiben (benannt nach dem Physiologen [!] Adolf Fick). Das erste Ficksche Gesetz gibt den Diffusionsstrom an, der sich als Netto-Effekt aller zufälligen Teilchenbewegungen ergibt, wenn die Anfangsverteilung ungleichmäßig ist. Denn von dort aus, wo viele Teilchen starten, bewegen sich auch mehr in alle Richtungen los als von Nachbargebieten, wo weniger starten, so daß insgesamt die Differenz zwischen „viel“ und „wenig“ maßgeblich ist; sind überall gleich viele Teilchen, ändert sich deren Dichte $n(\underline{r}, t)$ durch die Diffusion nicht.

Die zu einem bestimmten Zeitpunkt vorhandene laterale Variation der Dichte wird durch ihre erste Ableitung nach den drei Raumkoordinaten angegeben, dementsprechend sind die drei Komponenten der Diffusionsstromdichte $\underline{j}$ zu diesen Ableitungen proportional:

$$j_x \sim \partial n / \partial x, \quad j_y \sim \partial n / \partial y, \quad j_z \sim \partial n / \partial z.$$

Insgesamt ist $\underline{j}$ also proportional zum Gradienten der Teilchendichte. Weil der Diffusionsstrom immer *von der höheren zur niedrigeren Dichte* fließt, der Gradient aber immer in Richtung des Anstiegs zeigt (also von geringer zu hoher Dichte), muß der Proportionalitätsfaktor negativ sein. Wird das Minuszeichen explizit hingeschrieben, ist die verbleibende Proportionalitätskonstante D positiv; man hat das **1. Ficksche Gesetz** vor sich:

$$\underline{j}_{\text{Diff}}(\underline{r}, t) = -D \nabla n(\underline{r}, t)$$

Die Konstante D heißt *Diffusionskoeffizient* des Teilchens. Sie ist durch die Eigenschaften des diffundierenden Teilchens und der Art des Gitters, in dem es sich bewegt, eindeutig gegeben und hängt stark von der Temperatur ab. Für fcc- und bcc-Gitter ist (mit der Gitterkonstante a):

$$D(T) = a^2 \cdot \tau(T) = a^2 \cdot \nu_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_M}{k_B T}\right) = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_M}{k_B T}\right)$$

Wegen des Diffusionsstroms kann sich mit der Zeit die Dichte an einem gegebenen Ort ändern. Weil die Teilchen durch die Diffusion nur umverteilt werden, gilt für den Diffusionsstrom die Kontinuitätsgleichung; sie besagt, daß die zeitliche Änderung der Teilchendichte in einem Raumbereich gleich der Differenz von Zu- und Abstrom für diesen Raumbereich ist. Eindimensional betrachtet, ist der Zustrom durch die Querschnittsfläche A in ein kleines Volumen V rund um den betrachteten Ort gegeben durch $j(x) \cdot A$. Weil das eine Teilchenanzahl pro Sekunde angibt, ändert sich die Dichte im betreffenden Volumen V pro Sekunde um $j(x) \cdot A / V$. Das Volumen sei $V = A \cdot dx$, der Abstrom findet also bei $x + dx$ statt und beträgt $j(x + dx) \cdot A$. Die aus der Differenz von Zu- und Abstrom resultierende Netto-Dichteänderung am gegebenen Ort beträgt

$$[j(x) \cdot A / V] - [j(x + dx) \cdot A / V] = [j(x) - j(x + dx)] \cdot A / (A \cdot dx) = -[j(x + dx) - j(x)] / dx.$$

Die linke Seite ist die Dichteänderung pro Zeit, $\partial n / \partial t$. Für hinreichend kleine dx ist die rechte Seite (modulo Minuszeichen) gerade die Ableitung von j nach x . Um zu einer dreidimensionalen Berechnung zu gelangen, genügt es, auf der rechten Seite analoge Beiträge von Zu- und Abströmen in y - und in z -Richtung hinzuzuaddieren, um die gesamte Dichteänderung pro Zeit in dem betrachteten Volumen zu erhalten. Die Summe der Ableitungen $\partial j_x / \partial x + \partial j_y / \partial y + \partial j_z / \partial z$ ist die Divergenz von $\underline{j}$, $\text{div } \underline{j}$, was auch als $\nabla \cdot \underline{j}$ geschrieben werden kann. Die **Kontinuitätsgleichung** lautet also: $\partial n / \partial t = -\text{div } \underline{j}$.

Wendet man die Kontinuitätsgleichung auf den Diffusionsstrom an, der nach dem 1. Fickschen Gesetz proportional zum Gradienten von n ist, erhält man das **2. Ficksche Gesetz** (wobei vorausgesetzt ist, daß D nicht vom Ort abhängt; die Minuszeichen heben sich gegenseitig auf):

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

Das „Dreieck“ auf der rechten Seite ist zwar der griechische Buchstabe Delta, es bedeutet hier aber keine Differenz, sondern bezeichnet den Laplace-Operator (Summe der zweiten partiellen Ableitungen nach allen drei Ortskoordinaten; in Kurzfassung: $\Delta = \nabla \cdot \nabla$). In anderen Worten: Kennen wir die Dichteverteilung der diffundierenden Teilchen zu einem bestimmten Zeitpunkt, können wir durch Lösen dieser Differentialgleichung das Diffusionsprofil der Teilchen, d. h. ihre Dichteverteilung im Raum, für jeden beliebigen Zeitpunkt berechnen.

Um diese partielle Differentialgleichung tatsächlich zu lösen, benötigt man noch Anfangs- und Randbedingungen. Letztere entscheiden darüber, ob eine reine Umverteilung aller Teilchen im Raum stattfindet (die von einer „**erschöpflichen Quelle**“ stammen), oder ob eine Änderung der Gesamtteilchenzahl eintritt, weil ein externer Zu- oder Abstrom vorhanden ist („**unerschöpfliche Quelle/Senke**“). (Denksportaufgabe: Wie müßte im letzteren Fall die Dichteverteilung $n(x)$ aussehen, damit ein konstanter Diffusionsstrom fließt, ohne daß sich aber das Dichteprofil dabei ändert? Welche Randbedingungen gehören dazu?)

4.2.3 Random Walk und Diffusionslänge

Die Fickschen Gesetze (1855 veröffentlicht) beziehen sich, wie schon gesagt, auf die *makroskopischen* Netto-Effekte der Diffusion. Erst Albert Einstein hat viele Jahre später den Zusammenhang mit den *mikroskopischen* Bewegungen einzelner Atome hergestellt. Der Kerngedanke dabei ist, daß die Bewegung zufällig ist, d. h. daß die einzelnen atomaren Sprünge in alle Richtungen *mit gleicher Wahrscheinlichkeit* erfolgen; einen solchen Vorgang nennt man Zufallsbewegung oder **Random Walk** (diese englische Bezeichnung ist allgemein üblich).

Das Konzept des Random Walks ist eine ganz allgemein anwendbare Modellvorstellung. Im Skript wird ein „paradigmatischer Volltrunkener“ betrachtet, der aus einer Kneipe kommt und durch die Gegend torkelt. Jeder Schritt führt ihn mit gleicher Wahrscheinlichkeit nach vorne oder hinten, nach rechts oder links. Wie weit kommt er auf diese Weise, d. h. in welchem mittleren Abstand $\langle |R| \rangle$ von der Kneipe finden wir die hilflose Person, nachdem sie N Schritte der (immer gleichen) Schrittweite a gemacht hat? (Die spitzen Klammern bei $\langle |R| \rangle$ geben an, daß der arithmetische Mittelwert der von ihnen eingeschlossenen Größe gebildet wird.)

Wir betrachten also alle (!) möglichen Positionen, die man nach N Torkelschritten erreichen kann; effektiv haben also sehr viele „paradigmatische Volltrunkene“ die Kneipe verlassen. Bei diesem „Experiment“ ist die Fragestellung sehr wichtig: Wegen der völligen Zufälligkeit der Einzelschritte verteilen sich all diese Personen völlig gleichmäßig in der Gegend, und würden wir einfach nach dem Ort $\langle R \rangle$ fragen, wo sie im Mittel landen, ist auch ohne Rechnung klar, daß die über alle gleichmäßig verteilten Endpositionen gemittelte Position die Kneipentür ist.

Wir haben aber nach der mittleren *Entfernung* $\langle |R| \rangle$ gefragt. Die Mathematik dazu sparen wir uns hier; jedenfalls stellt man fest, daß diese Frage nicht leicht zu beantworten ist. Statt dessen ist es viel einfacher, den mittleren quadratischen Abstand (= Mittelwert des Abstandsquadrats $|R|^2 = x^2 + y^2$) zu berechnen. Dafür findet man (in guter Näherung) $\langle |R|^2 \rangle = N \cdot a^2$. Dieses Ergebnis gilt auch für die atomaren Sprünge; dann ist a einfach die Gitterkonstante, und N ist die Sprungrate r mal der Zeitdauer τ des Diffusionsvorgangs. Von oben wissen wir bereits, daß in kubischen Kristallen $r = D / a^2$ gilt. Damit haben wir $\langle |R|^2 \rangle = N \cdot a^2 = r \cdot \tau \cdot a^2 = D \cdot \tau$.

Als Näherungswert für die **Diffusionslänge** L , d. h. für die mittlere Entfernung, nach der wir oben gefragt haben, definiert man die Wurzel aus dem mittleren quadratischen Abstand. Und

obwohl die gezeigte Rechnung nur für kubische Kristalle gilt, verwendet man als ganz allgemeine Näherungsformel für die Diffusionslänge den Ausdruck

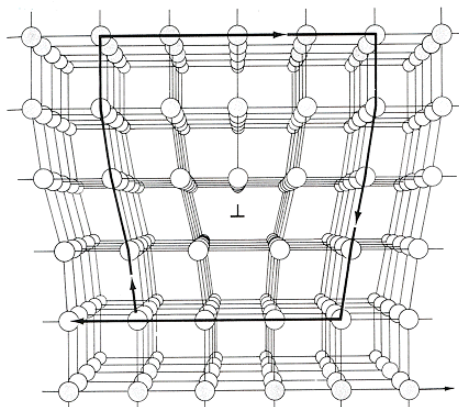
$$L \approx (D \cdot \tau)^{1/2}$$

Unterkapitel 4.3: Versetzungen, plastische Verformung und der Rest

Von den restlichen Kristalldefekten neben den atomaren Fehlstellen sind für die Elektronik hauptsächlich die Versetzungen relevant, denn sie können das Material komplett unbrauchbar machen. Um die Details der Auswirkungen von Defekten auf die Elektronik wird es aber erst am Ende des Semesters gehen. (Als Vorgeschmack darauf und zur Verdeutlichung der Relevanz habe ich ein illustrierendes Beispiel aus der Solarzellenforschung gezeigt.)

4.3.1 Versetzungen und plastische Verformung

Eine Versetzung ist ein 1D-Defekt, der schematisch vom Prinzip her so aussieht, wie hier im Zentrum der Skizze für eine Stufenversetzung gezeigt; später folgt eine transmissionselektronenmikroskopische Aufnahme (in Hochauflösung; Abkürzung: HR-TEM). Das Symbol des auf dem Kopf stehenden „T“ markiert das Ende einer zusätzlichen Atomlage. Entlang dieser Atomreihe ist die Symmetrie gestört, atomare Bindungen sind offengeblieben.



Eine Versetzung definiert eine Linie im Kristall und hat damit eine bestimmte Länge. Die Gesamtlänge aller in einem Kristall vorhandenen Versetzungen, bezogen auf das Kristallvolumen, ist die *Versetzungsdichte*, gemessen in cm pro cm³, d. h. in cm⁻². Die Versetzungsdichte in einem gegebenen Kristall ist eine wichtig Strukturgröße; sie beträgt typischerweise 0 cm⁻² bis etwa 10¹² cm⁻². (Denksportaufgabe: Was bedeutet ein Wert von 10¹⁰ cm⁻² anschaulich?)

Rein mechanisch gesehen, sind Versetzungen gut, wenn es darum geht, ein Material dauerhaft zu verformen. Es gilt: *Die plastische Verformung aller Kristalle (= aller Metalle) erfolgt ausschließlich durch die **Erzeugung** und **Bewegung** von Versetzungen*. Die Bewegung einer Versetzung durch den Kristall ist im Hyperskript am Beispiel einer Scherung gezeigt; der Nettoeffekt des Durchgangs einer Versetzung ist die Abgleitung der oberen Kristallhälfte relativ zur unteren um ungefähr eine Gitterkonstante bzw. einen Atomabstand. Damit ist klar, daß eine makroskopische Verformung mit einer enormen Zahl von Versetzungen einhergeht.

Für mikroelektronische Bauelemente auf der Basis von Silizium sind Versetzungen tödlich. Dagegen sind sie bei Silizium-Solarzellen zwar lästig, aber nicht kritisch; allerdings funktionieren die versetzungsfreien Solarzellen besser (Details dazu gleich). Solarzellen aus anderen Materialien reagieren weniger kritisch auf Versetzungen, und insbesondere Optoelektronik auf der Basis von GaN (Galliumnitrid) toleriert eine vergleichsweise hohe Versetzungsdichte – was sehr günstig ist, weil es praktisch nicht möglich ist, versetzungsfreies GaN herzustellen.

Im Vorgriff auf Kapitel 7 sei jetzt schon angemerkt, daß Ferromagnete in ihrem Magnetisierungsverhalten eine Hysteresekurve zeigen, deren Form stark von Versetzungen (und all den anderen Defekten) beeinflußt ist. Bei Metallen und Halbleitern erhöhen Defekte zudem den elektrischen Widerstand; daran werden wir uns im Kapitel 8 erinnern. (Im Kapitel 9 kommt das auch wieder vor, aber dieses Kapitel betrifft uns ja nicht mehr; Näheres dann in der Vorlesung „Elektronik“ von Prof. Kohlstedt.)

Nun zu unserer Exkursion in die Solarzellenforschung: Aus Copyrightgründen kopiere ich das betreffende Bildmaterial hier nicht ein, sondern zeige es Ihnen nur in der Originalveröffentlichung (J. Bauer et al., *Do lomer dislocations spoil high performance of mc-Si solar cells?*, Energy Procedia 77, 565–571 (2015), DOI: 10.1016/j.egypro.2015.07.081; J. Bauer et al., *Recombination at Lomer Dislocations in Multicrystalline Silicon for Solar Cells*, IEEE Journal of Photovoltaics 6, 100–110 (2016), DOI: 10.1109/JPHOTOV.2015.2494680; „DOI“ steht für „digital object identifier“ und kann unter <https://www.doi.org/> verwendet werden, um zu dem betreffenden Dokument zu gelangen). Dieses Beispiel zeigt auch, wie man die Stellen auf der atomaren Ebene findet, an denen die Stufenversetzung sitzt – was, von unserer makroskopischen Ebene aus betrachtet, der Suche nach der Stecknadel im Heuhaufen gleicht.

4.3.2 Die restlichen Defekte

Auf diesen Abschnitt gehe ich nicht näher ein; es geht darin um die Beeinflussung mechanischer Eigenschaften, unterschiedliche Stahlsorten und die Wechselwirkung von Defekten. Es genügt, wenn Sie selber einen flüchtigen Blick darauf werfen. Wichtig ist, daß Defekte, die sich durch einen Kristall bewegen, an anderen Defekten hängenbleiben können; etwas ähnliches wird in uns in Kapitel 7 bei den Hysteresekurven wieder begegnen.

Unterkapitel 4.4: Zusammenfassungen zu Kapitel 4

Die „Merkmale“ in 4.4.1 sind eine Kurzzusammenfassung dessen, was ich Ihnen hier präsentiert habe; das sollten Sie alles verstanden haben bzw. sollte es Ihnen sehr bekannt vorkommen. Falls es bislang nicht ganz direkt genau so ausgesprochen worden sein sollte: Die Mikroelektronik braucht versetzungsfreies Silizium! Aber die Herstellung komplett versetzungsfreier Si-Einkristalle ist eine hohe Kunst. – Worum es bei „Was man wissen muß“ unter 4.4.2 geht, erklärt sich von selbst.