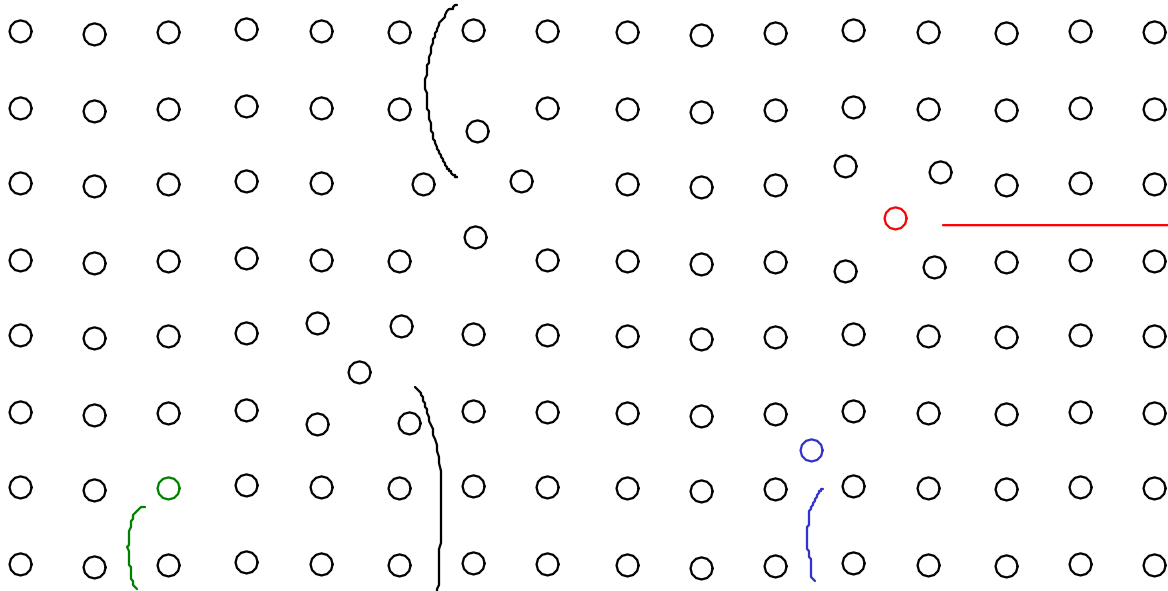


4 Defekte in Kristallen

4.1 0D Defekte → Punktdefekte

- Leerstelle (vacancies)
- Zwischengitteratome (interstitial atoms)
- Fremdatome (impurities)

Leerstelle, verformt Gitter



Fremdatom
verformt Gitter

Fremdatom
auf Gitterplatz
substitutionelle
Fremdatome

Zwischengitter-
atom
verformt Gitter

Fremdatom, kleineren
verformt Gitter nicht
interstitielle Fremdatome

4.1.1 Leerstelle:

Schottky-Defekt:

bei ionischen Kristallen meist paarweise Defekte



Die Zahl der Leerstellen hängt von der Temperatur ab. (⇒ Thermodynamik)

$$N_L = \underbrace{\text{const.}} \cdot \exp\left(-\frac{E_L}{kT}\right)$$

$$E_L \approx 7 \text{ eV}$$

Energie der Leerstelle

$N \cdot \exp\left(\frac{S_L}{k_B}\right)$
Zahl der Atome im Kristall

S_L Entropie einer
Leerstelle, $\frac{S_L}{k_B} \approx 0,5 \dots 5$

$$\frac{N_L}{N} \Big|_{2000\text{K}} \sim 10^{-5}$$

$$\frac{N_L}{N} \Big|_{300\text{K}} \sim 10^{-17}$$

Bei Schmelztemperatur $T \rightarrow T_c$
kann man Zahl der Defekte messen

$$N_L(T) \approx \frac{\Delta V}{V} - 3 \frac{\Delta a}{a}$$

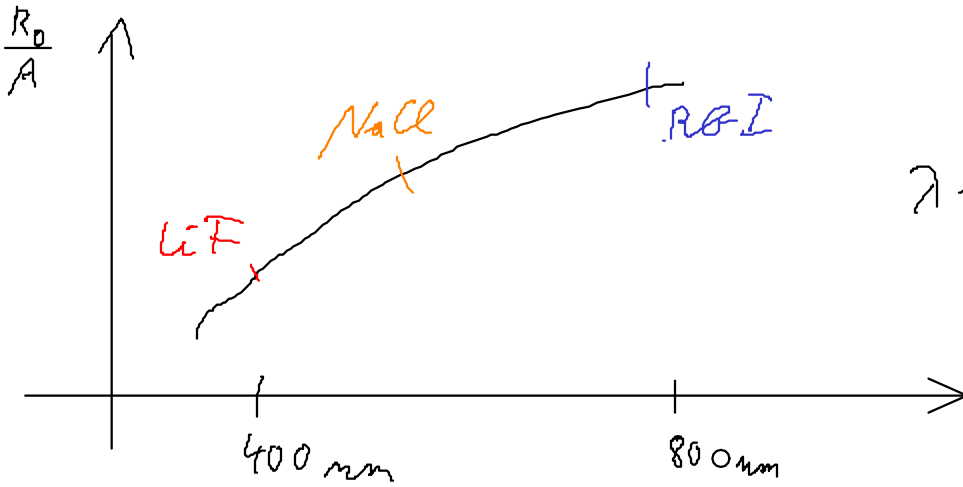
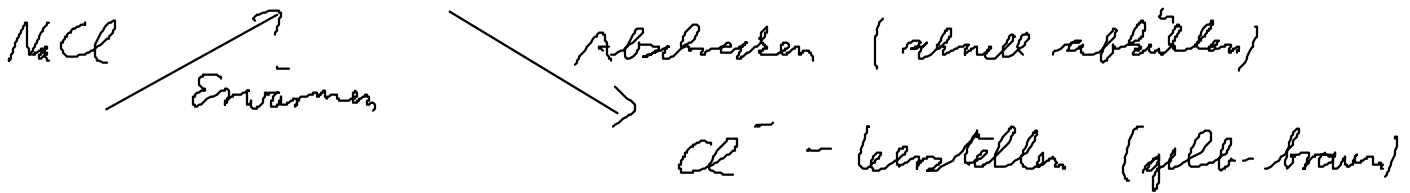
Volumenänderung

Änderung der Gitterkonstante

Farbzentren (F-Zentren)

Hauptsächl. in ionischen Kristallen

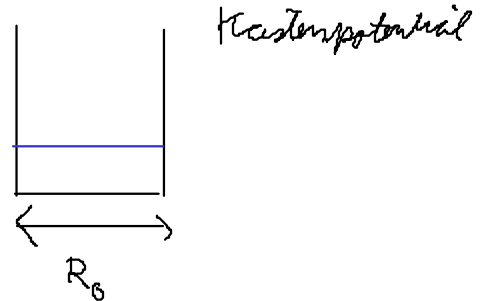
(Alkalihalogenidkristalle, NaCl, KCl, CsI)



$$\lambda \sim A R_0^2$$

$$\Delta E = \frac{1}{R_0^2}$$

\Rightarrow opt. Anregung von Elektronen in Kristallpotential



4.7.2 Zwischengitteratome

Ionenkristalle $E_{zw} \sim E_L$

\Rightarrow Leerstelle + Zwischengitteratom (= d. Neutral)
Frenkel-Defekte

4.7.3 Fremdatome

z.B. — Kohlenstoff in Stahl:

$$r_C = 0,77 \text{ \AA}$$

$$r_{Fe} = 1,74 \text{ \AA}$$

Stahl = 98% Fe + 2% C

\Rightarrow interstitielle Fremdatome

— Messing: Cu + Zn, bis zu 35% Zn

$$r_{Cu} = 1,23 \text{ \AA}$$

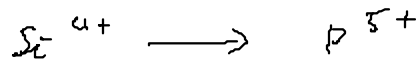
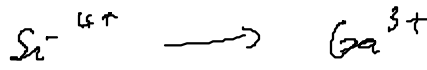
$$r_{Zn} = 1,33 \text{ \AA}$$

\Rightarrow substitutionelle Fremdatome

— Indiumantimonid

$\gamma\text{-InSb}$

— Si - Dotierungen



Experimentelle Methoden zum Auffinden von Defekten

— ESR

Elektronenspinresonanz

(electron spin resonance)

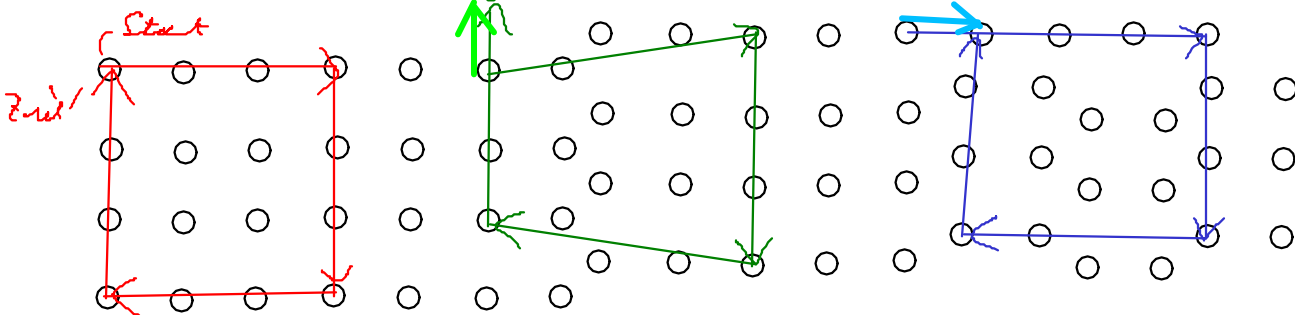
— NMR

Kernspinresonanz

— optische Eigenschaften

4.2 TD

Versetzungen (dislocations)



ideale Kristall: Start = Ziel

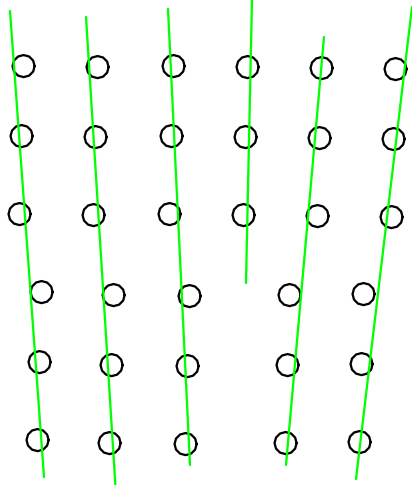
defekt: Start \neq Ziel

Versetzung

Burgers - Vektor



oder

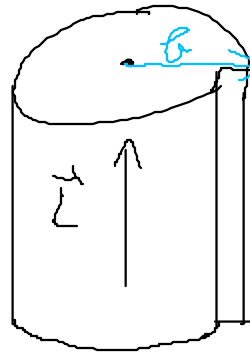


Schraubenversetzung

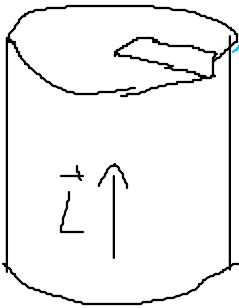
screw dislocation

Stufenversetzung

edge dislocation



$$\vec{L} \perp \vec{b}$$

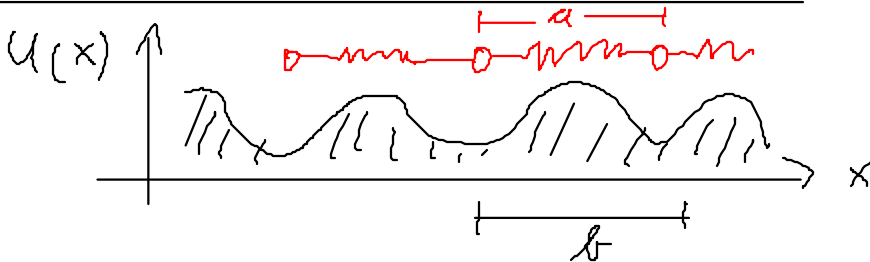


$$\vec{L} \parallel \vec{b}$$

Topologische Defekte

Einkristalle $\rightarrow 10^3 - 10^5$ $\frac{\text{Versetzungen}}{\text{cm}^2}$
an der Oberfläche

Frankel - Kontorowa - Modell



$$U \approx 1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{b}\right)$$

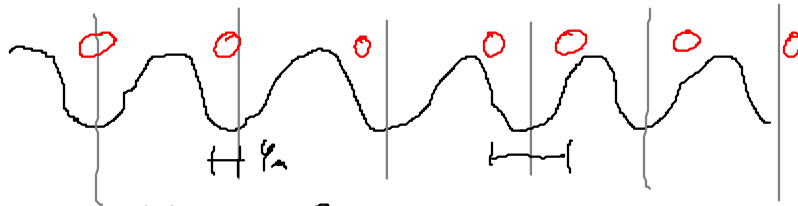
$\langle a \rangle = b \Rightarrow$ Inkompatibilität

(incompatibility)

$$\langle a \rangle \neq b \quad \frac{|\langle a \rangle - b|}{b}$$

$n-1$ n $n+1$

Federkonstante \mathcal{H}



$$\varphi_n = X_n - n a$$

$$\mathcal{L} \sin(\varphi_n) = \mathcal{H} (\varphi_n - \varphi_{n-1}) - \mathcal{H} (\varphi_{n+1} - \varphi_n)$$

$$\varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1} \approx \varphi'' \propto \sin \varphi_n$$

↳ sine-Gordon

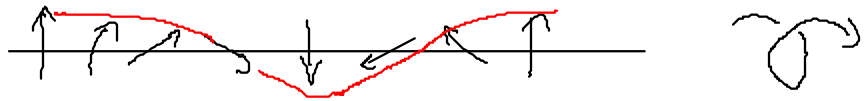
dyn - Teil fehlt noch, schreibe daher

$$\varphi'' - \dot{\varphi}^2 = \sin \varphi$$

Bsp. Pendelkette



ein Defekt



oder

