

### 3. Defekter i kristaller

[AM 30, Kittel 18, 20 mm.]

I de två föregående kapitlen har vi beskrivit perfekta kristallers egenskaper. Kristaller är dock i verkligheten aldrig helt perfekta, utan de har ett antal **defekter** i sig. Mängden defekter kan variera enormt, i de bästa kristaller som tillverkas artificiellt kan den vara så låg som ungt.  $10 \times 10^{-9}$  defekter per atom, medan de högsta koncentrationerna kan vara flera procent defekter per atom. Om koncentrationen överstiger någon kritiskt gräns, kanske typiskt kring 1-10 %, amorfiseras eller smälter kristallen och man kan inte längre tala om kristalldefekter.

(Det är nog möjligt att definiera och tom. detektera experimentellt defekter också i amorfa material, men detta ämne är utanför denna kurs omfång).

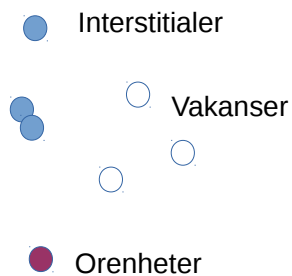
---

Defekter påverkar en stor mängd egenskaper i material. T.ex. beror ädelstenars färg, metallers hårdhets- och processerings- egenskaper och halvledares elektriska egenskaper nästan helt på beteendet av defekter i kristallerna.

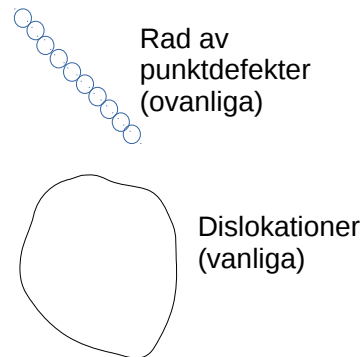
---

Defekter kan klassificeras bl.a. på basen av deras utsträckning i kristallen, dvs. i hur många dimensioner de är utspridda.

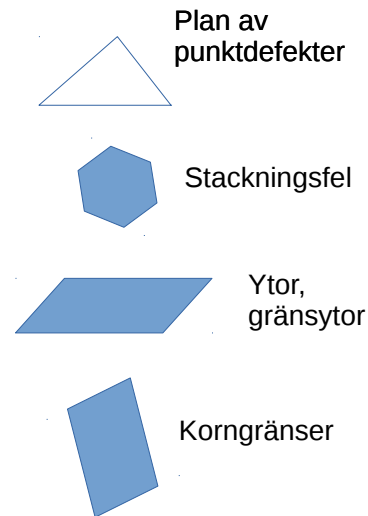
### 0D: Punktdefekter



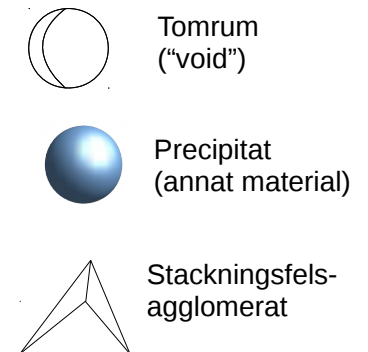
### 1D: Linjedefekter



### 2D: Ytdefekter



### 3D: Volymdefekter



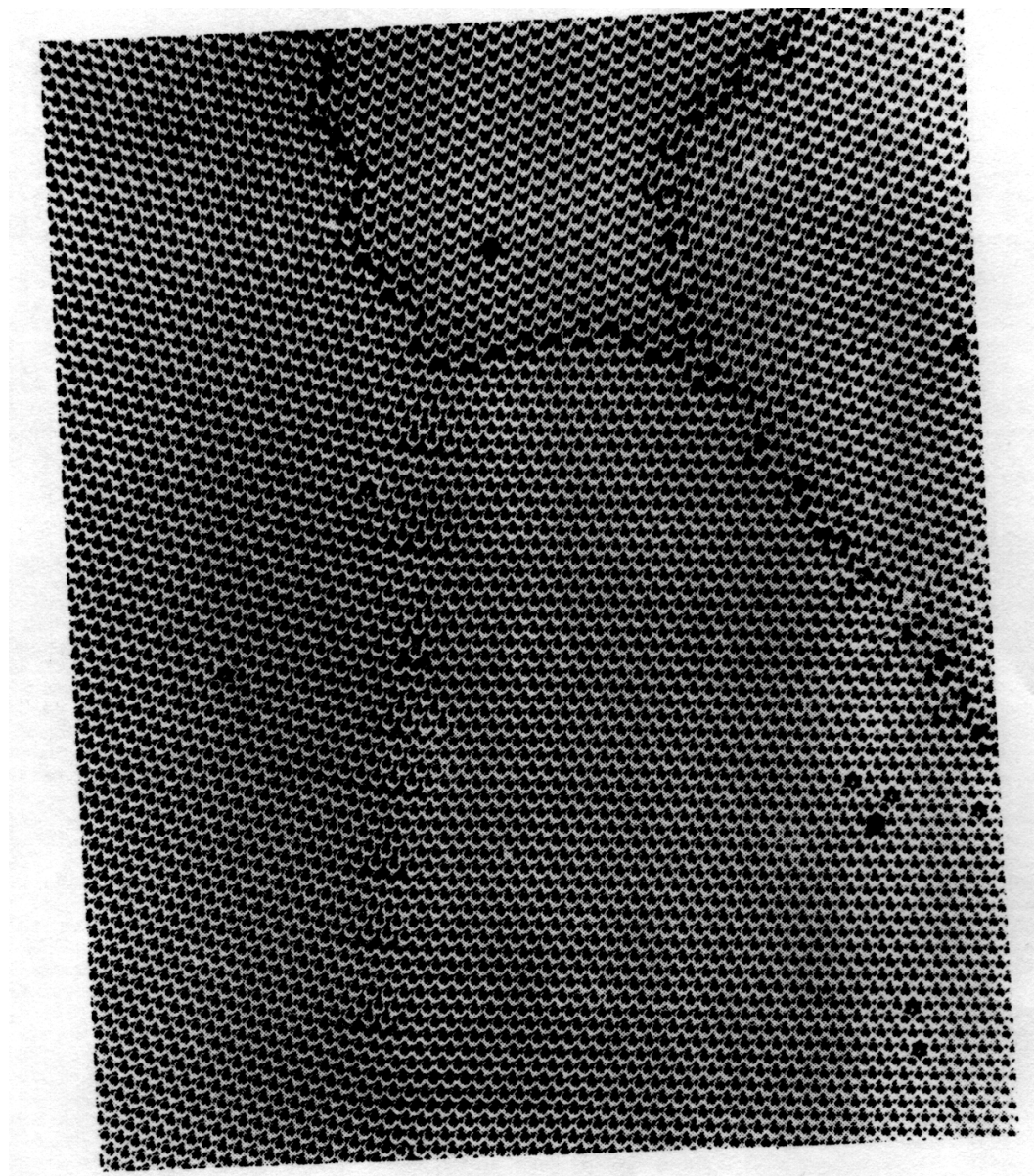
Den enklaste defekt-typen är **punktdefekter** eller 0-dimensionella defekter, som inte har någon utsträckning i en kristall utöver den kristallplats där de befinner sig.

Den följande typen är s.k. **linjedefekter**, som är 1-dimensionella objekt som bryter det perfekta

mönstret i kristallen. De kan vara t.ex. i formen av linjer, cirklar. Den viktigaste typen av en-dimensionella defekter är dislokationer.

---

I följande bild illustreras punktdefekter och linjedefekter i ett bad av såpbubblor. Man ser tydligt några vakanser, och linjedefekter som bildar gränssnitt mellan korn i kristallen. Korngränserna kan tolkas bestå av dislokationer i rad.



---

Den tredje typen av defekter är 2-dimensionella defekter, som kan kallas t.ex. **ytdefekter**. Dessa kan vara t.ex. ett plan av atomer som saknas i en kristall.

---

Den fjärde typen är 3-dimensionella defekter, **volymdefekter**. De kan vara t.ex. stora tomma volymer (tom. i makroskopiska mått) i en kristall, eller ett amorft område innanför en kristall.

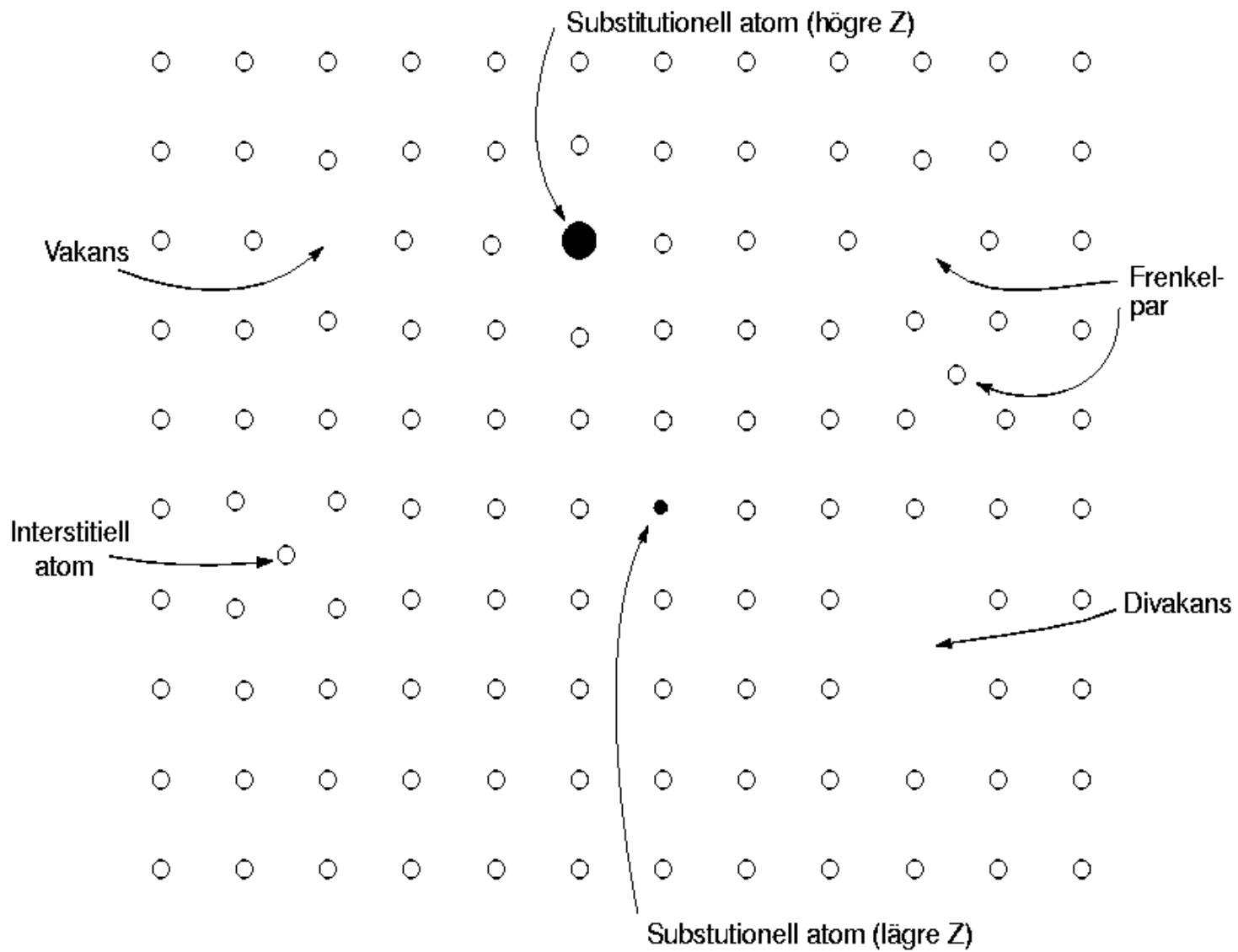
En viktig variant av dessa är samlingar av orenhetsatomer som klumpar ihop sig till en nano- eller mikrokluster. Dessa kallas **precipitat** (“precipitate”, “erkauma”) eller nuförtiden ofta **nanokluster** (inbäddad i materialet), och anses inte alltid vara en defekt, då de ofta har nyttiga egenskaper.

---

Ett annat sätt att klassificera defekter är enligt vilken atomtyp de har. Defekter som inte har några andra grundämnen i sig kallas **intrinsiska** defekter, medan defekter som innehåller orenhetsatomer kan kallas t.ex. orenhetsdefekter.

## 3.1. Punktdefekter

De enklaste punktdefekterna i ett monatomärt gitter kan beskrivas på följande sätt:

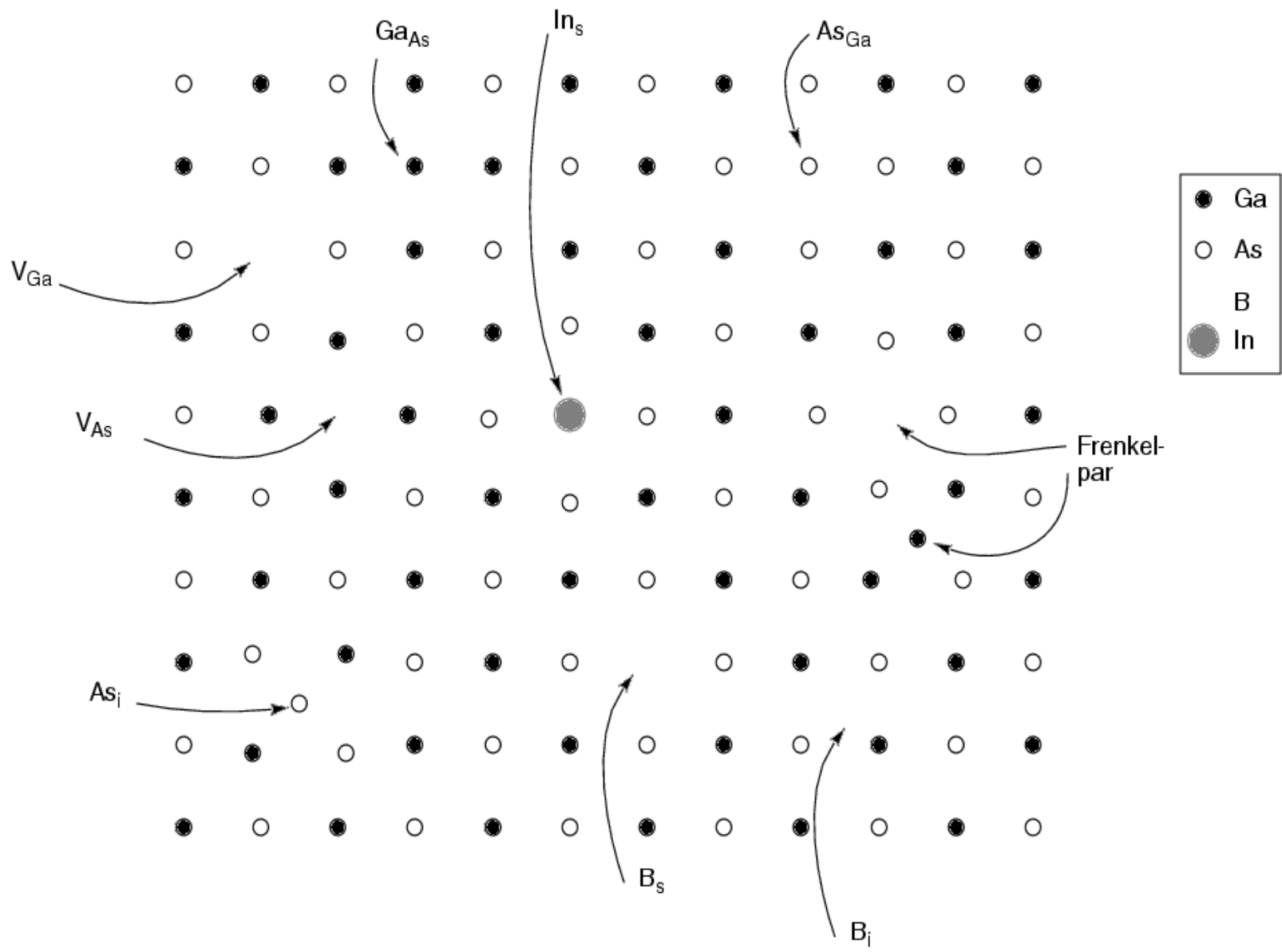


- vakans (även kallad Schottky-defekt)
- två vakanser bredvid varandra kallas en divakans, tre trivakans etc.
- interstitiell atom (kan vara samma eller olika atomtyp)
- orenheter på substitutionella platser
- Frenkel-par: vakans och interstitiell atom

---

Ifall vi betraktar en kristall som består av flera atomtyper, blir bilden redan lite mer komplicerad. Här är några schematiska exempel på defekter i en kristall som består av två atomtyper. För att göra exemplet mera konkret har defekterna betecknats som om kristallen vore GaAs, och orenheterna har getts atomtyper.





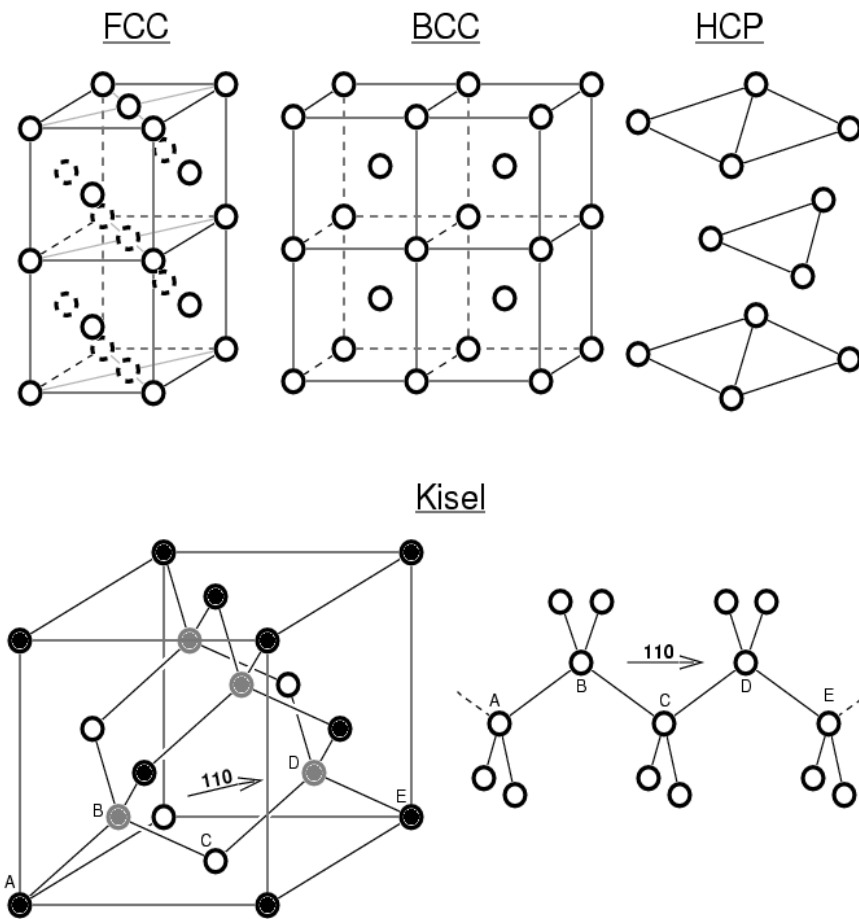
I bilden används en notation för defekterna som är tämligen vanlig inom halvledarfysiken, en variant av s.k. **Kröger-Vink notation**.

- vakanser finns nu i två olika typer beroende på om atomen saknas från en Ga- eller As-atomplats. Dessa betecknas  $V_{\text{Ga}}$  och  $V_{\text{As}}$
- Likaså kan interstitiella atomer åtskiljas på basen av atomtyp. En Ga-interstitiell atom kan betecknas t.ex.  $\text{Ga}_\text{I}$ ,  $I_{\text{Ga}}$ .
- Orenheter betecknas på olika sätt beroende på om de sitter på en gitterplats eller en interstitiell plats:  $B_\text{S}$  respektive  $B_\text{i}$
- Frenkelpar kan vara av Ga- eller As-typ.
- En helt ny, viktig defekttyp som inte förekommer i rena ämnen är de s.k. **“antisite”-defekterna**, på svenska förmodligen motplats-defekt. Detta är en defekt där en As-atom sitter på en Ga-gitterplats:  $\text{As}_{\text{Ga}}$  eller vice versa:  $\text{Ga}_{\text{As}}$
- Defekter kan vara laddade i alla icke-metalliska ämnen. Laddningstillståndet kan betecknas liknande som för atomer i joniska material, t.ex.  $V^{--}$  för en dubbelt negativt laddad vakans, eller  $B_\text{i}^+$  för en positivt laddad B-orenhet på interstitiell plats.
- (finns inte i videoföreläsningen): Defekttagglomerat där det finns flera bundna defekter av samma typ betecknas med siffer-underindex, t.ex. två bundna vakanser = **divakans** =  $V_2$ , fyra bundna interstitialer = tetrainterstitial =  $I_4$
- Defektreaktioner kan betecknas liknande som i kemi. T.ex. om en interstitial och en vakans kommer nära varandra och annihileras, betecknas det som  $I + V = 0$  (noll står alltså för perfekt kristall). Om en rörlig vakans möter en divakans och blir bunden med den, betecknas det med  $V + V_2 = V_3$  etc.

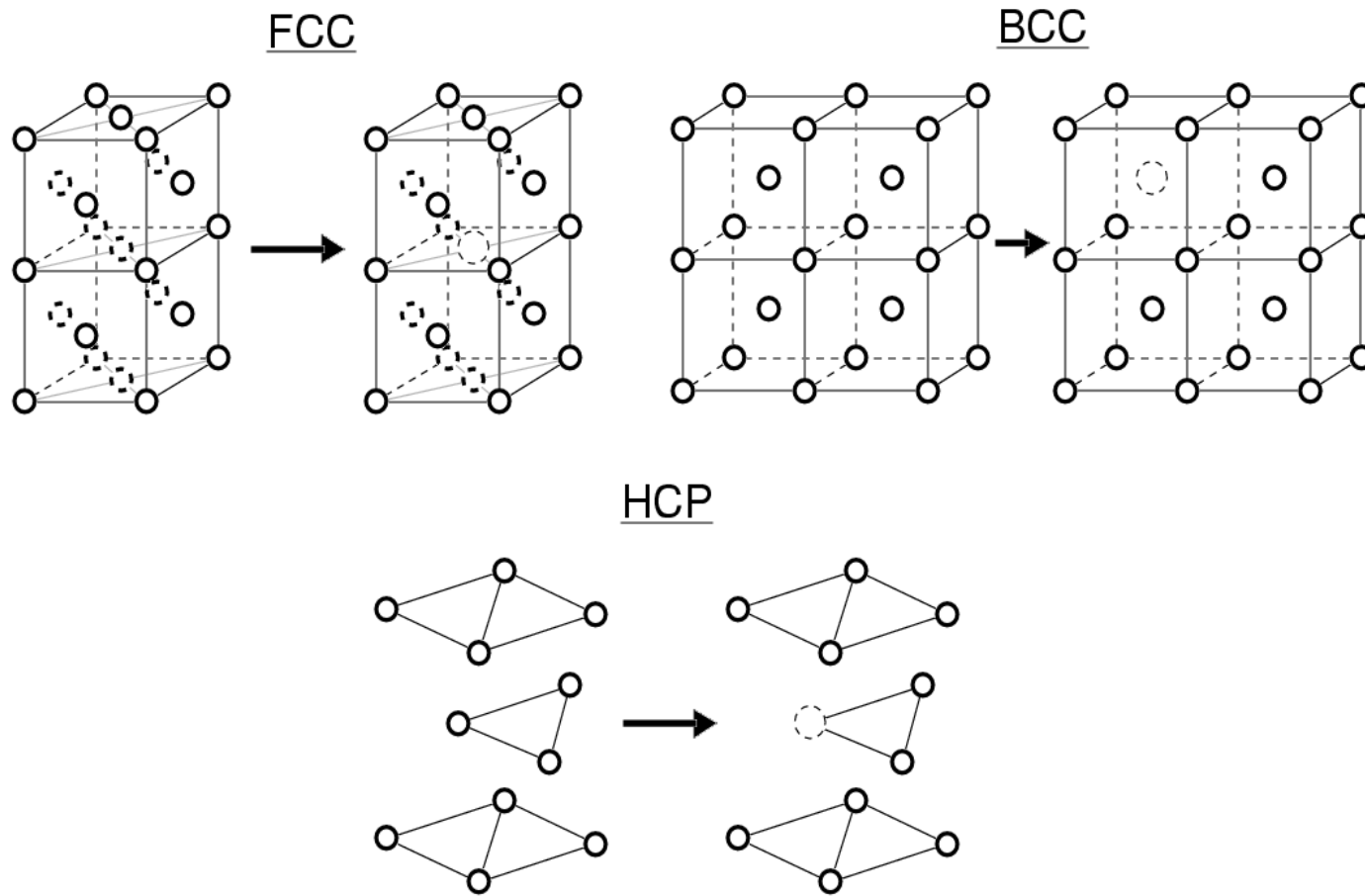
## 3.2. Viktiga exempel på intrinsiska punktdefekters struktur

Den exakta strukturen för t.o.m. enkla punktdefekter är inte nödvändigtvis så enkel som vad som visades i de schematiska bilderna ovan. I själva verket är strukturen inte ens känd i alltför många material, trots att defekternas egenskaper är av stor betydelse. Här visas strukturen för några av de bäst kända och viktigaste intrinsiska punktdefekterna.

De perfekta gittrena illustreras på följande sätt: (notera alltså att kisel-gittret betraktas längs med en  $\langle 110 \rangle$ -axel, vilket är lite klarare för att förstå defekternas struktur.

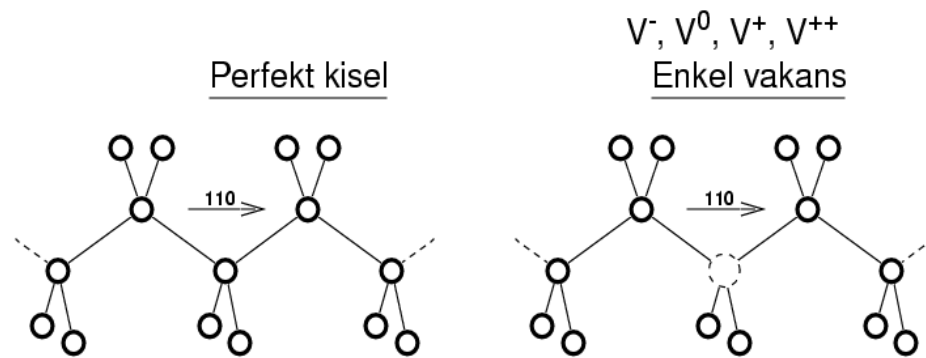


**Vakanser i metaller** har nästan utan undantag en enkel struktur: de är faktiskt helt enkelt tomma gitterplatser:

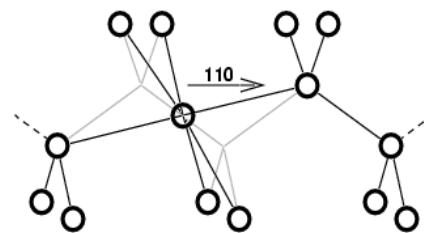


**Vakansen i kisel** kan redan vara mer komplicerad. Det är nämligen möjligt att laddnings-tillståndet hos vakansen (dvs. hur många elektroner är bundna till den tomma platsen) påverkar strukturen. De flesta laddningstillstånd har den enkla strukturen av en tom atomplats, men den senaste forskningsinformation tyder på att den dubbelt negativa vakansen (dvs. en tom plats som har två extra elektroner) kunde ha en s.k. splittad struktur. Dessutom kan omgivningen av vakansen ha olika struktur beroende på laddningstillståndet !

Notera dock att den sistnämnda strukturen är bara en teoretiskt förutsägelse: så länge det inte finns experimentella bevis måste den anses vara något hypotetisk.



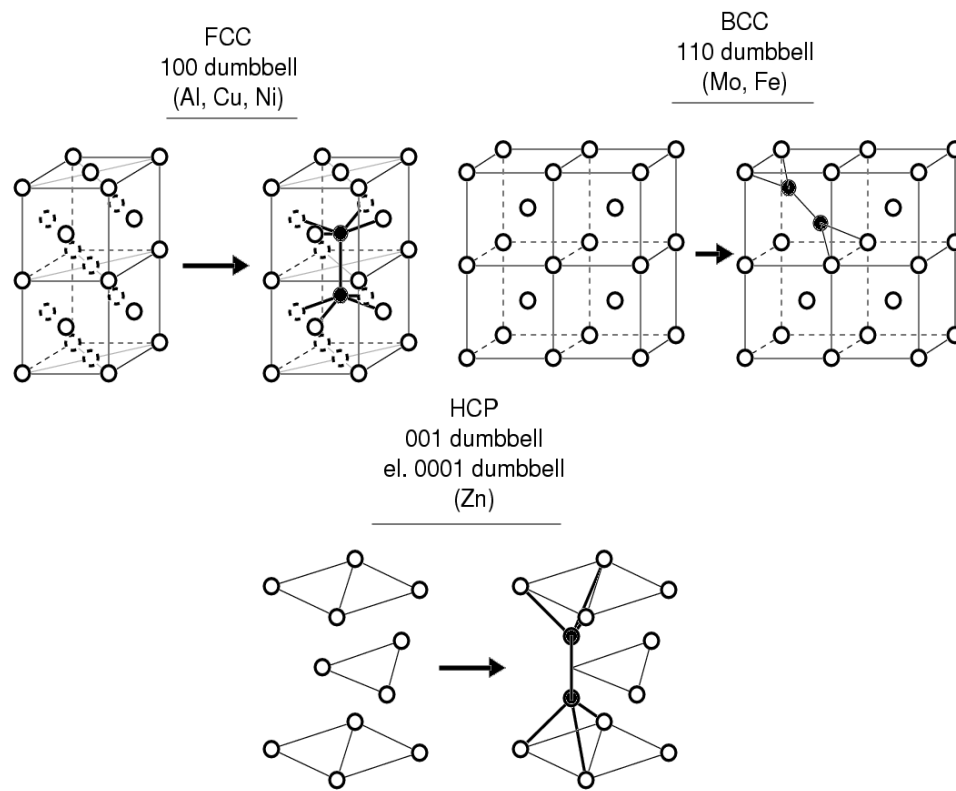
$V^{--}$  [Puska, PRB 1998]  
Delad vakans ?



**Interstitiella** atomers struktur i de vanligaste kristallstrukturerna är i själva verket sällan så enkla som i den schematiska bilden ovan, dvs. att den extra atomen skulle befinna sig mellan atomplatser. I själva verket är strukturen för den interstitiella atomen uppmätt bara i några metaller; i BCC- och HCP-metaller kan det hända att det finns flera olika strukturer, de som visas nedan är kända strukturer [Schilling, J. Nucl. Mater. 69&70 (1978) 465] De flesta strukturer som är uppmätta eller har starka teoretiska bevis för sig är s.k. delade strukturer, där två atomer delar på en gitterplats.

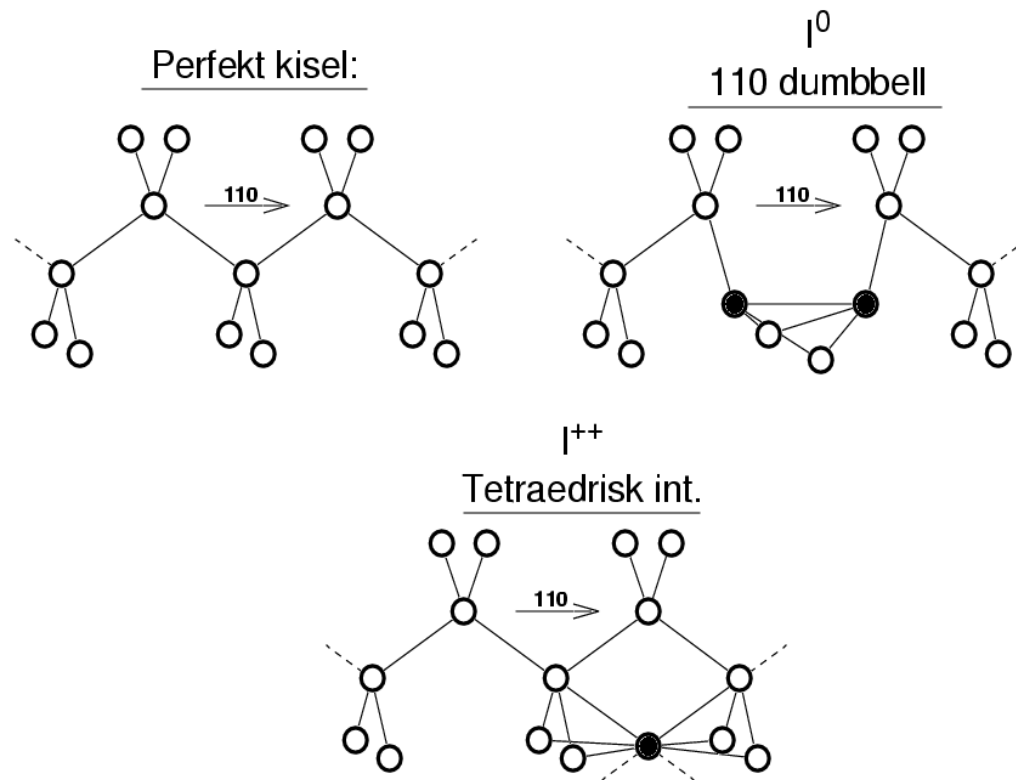
På engelska kallas de delade strukturerna för “dumbbell interstitials”, vilket kan översättas till hantel-interstitial, och betecknas med gitterriktningen som utgör axeln mellan de två extra atomerna:





I kisel blir livet än en gång invecklat. Den interstitiella atomen har (åtminstone) två olika strukturer beroende på laddningstillståndet. Den oladdade interstitiella atomen har en delad struktur i 110-riktningen, men strukturen är inte ens centrerad på gitterplatsen.

Den dubbelt positivt laddade interstitiella atomen har faktiskt en högsymmetrisk tetraedrisk struktur som ligger mitt emellan atomplatser. Den interstitiella atomen har hela 8 bindningar (!)



### 3.3. Enkla punktdefekters termodynamik

Betrakta en kristall med  $n$  vakanser och  $N$  atomer. Om vi antar att vakansernas antal är en *extensiv* termodynamisk variabel, dvs. proportionell mot antalet atomer  $N$ , kan vi i princip beräkna deras antal genom att minimera en termodynamisk potential. För ett system vid konstant tryck  $P$  är potentialen Gibbs fria energi,

$$G = U - TS + PV$$

Volymen av kristallen kommer helt enkelt nu att vara  $V = (N + n)\Omega$ , där  $\Omega$  är volymen per atom.

---

Vi kan i princip beräkna fria energin  $F_0(n) = U - TS_0$  för en bestämd konfiguration av  $n$  vakanser i kristallen. Om vi antar att antalet vakanser  $n \ll N$  kan denna antas vara oberoende av vakansernas konfiguration, och bara bero på deras antal. Men för att få den totala **konfigurationella** entropin  $S$  måste vi lägga till  $S_0$  hela antalet sätt med vilket  $n$  vakanser kan arrangeras bland de  $N + n$  atomplatserna. Antalet sätt att arrangera atomerna är

$$\binom{N + n}{n} = \frac{(N + n)!}{N!n!}$$

---

Ur definitionen på entropi [jfr. Mandl] får vi den konfigurationella entropin  $S^c$

$$S^c = k_B \ln \frac{(N+n)!}{N!n!}$$

och

$$G = F_0 - TS^c + P(N+n)\Omega$$

---

Genom att använda Stirlings ekvation  $\ln X! \approx X \ln X - X$  fås

$$\begin{aligned} S^c &= k_B(\ln(N+n)! - \ln N! - \ln n!) \\ &= k_B((N+n) \ln(N+n) - N - n - N \ln N + N - n \ln n + n) \\ &= k_B((N+n) \ln(N+n) - N \ln N - n \ln n) \end{aligned}$$

---

För att minimera funktionen  $G(n)$  söker vi punkten där  $\partial G/\partial n = 0$ . Nu är

$$\frac{\partial S^c}{\partial n} = k_B(\ln(N+n) + 1 - \ln n - 1) = k_B \ln \frac{N+n}{n} \approx k_B \ln \frac{N}{n}$$

då  $n \ll N$  och alltså

$$\frac{\partial G}{\partial n} = \frac{\partial F_0}{\partial n} + P\Omega - k_B T \ln \frac{N}{n}$$

\_\_\_\_\_

För  $\partial F_0 / \partial n$  kan vi göra en Taylor-approximation då  $n \ll N$ :

$$\frac{\partial F_0}{\partial n} = \left. \frac{\partial F_0}{\partial n} \right|_{n=0} = \varepsilon$$

där nu  $\varepsilon$  är oberoende av  $n$ .

\_\_\_\_\_

Genom att sätta  $\partial G / \partial n = 0$  fås nu alltså

$$0 = \varepsilon + P\Omega - k_b T \ln \frac{N}{n}$$

varur man kan lösa  $n$  och får

$$n = N e^{-(\varepsilon + P\Omega)/k_B T} \quad (1)$$

---

Men notera att här kan  $\varepsilon$  vara temperaturberoende. Om man skiljer på  $F_0$  i en temperatur-oberoende och en temperaturberoende del,  $F_0 = U_0 - TS$ , där  $U_0$  är gittrets jämviktsenergi, och  $S$  en entropi-term som kan innehålla t.ex. fononvibrationer kring defekten. Om nu vidare  $S$  är temperatur-oberoende, vilket nästan alltid är fallet, kan man skriva en defekts koncentration  $c = n/N$

$$c = g e^{S^f/k} e^{-(E^f + P\Omega)/k_B T} \quad (2)$$

där man betecknat

$$\frac{\partial U_0}{\partial n} = \left. \frac{\partial U_0}{\partial n} \right|_{n=0} = E^f$$

Här är  $g$  en geometrisk faktor som betecknar på hur många olika sätt en defekt kan arrangeras vid sin gitterplats. För vakanser i enkla metaller är  $g$  helt enkelt  $= 1$ .  $E^f$  kallas defektens formationsenergi och  $S^f$  dess formationsentropi. Detta  $E^f$  är alltså helt enkelt energiskillnaden som går åt till att skapa defekten i gittret.

---

Låt oss nu betrakta den tryckberoende termen. Vid normala tryck, säg av storleksordningen kbar

och mindre, kan vi lätt uppskatta termens storlek:

$$1 \text{ kbar} = 10^8 \text{ Pa} = 10^8 \frac{\text{J}}{\text{m}^3} = 6 \times 10^{-4} \frac{\text{eV}}{\text{\AA}^3}$$

För en typisk atomvolym  $\Omega \sim 10 \text{ \AA}^3$  fås nu  $P\Omega = 6 \text{ meV}$ . Men det är lätt att gissa att defekters formationsenergies  $E^f$  är av samma storleksordning som atomers kohesionsenergies eller kemiska bindningars energies, som är av storleksordningen eV. Alltså kommer den tryck-beroende termen att vara försvinnande liten i de allra flesta fall.

---

Då kan vi skriva defektkoncentrationen för normala tryck på följande sätt:

$$c = g e^{S^f/k} e^{-E^f/k_B T} \quad (3)$$

och alltså för vakanser helt enkelt

$$c = e^{S^f/k} e^{-E_v^f/k_B T} \quad (4)$$

---

Nu finns allt temperaturberoende hos defektkoncentrationen i formationsenergin  $E^f$ . För interstitiella

atomers koncentration kan man på liknande sätt härleda

$$c_i = g e^{S_i^f/k} e^{-E_i^f/k_B T} \quad (5)$$

och för att skapa Frenkelpar kan man visa att (förutsatt att  $g_v = 1$ )

$$c_{FP} = g_i^{1/2} e^{(S_i^f + S_v^f)/2k} e^{-(E_i^f + E_v^f)/2kT} \quad (6)$$

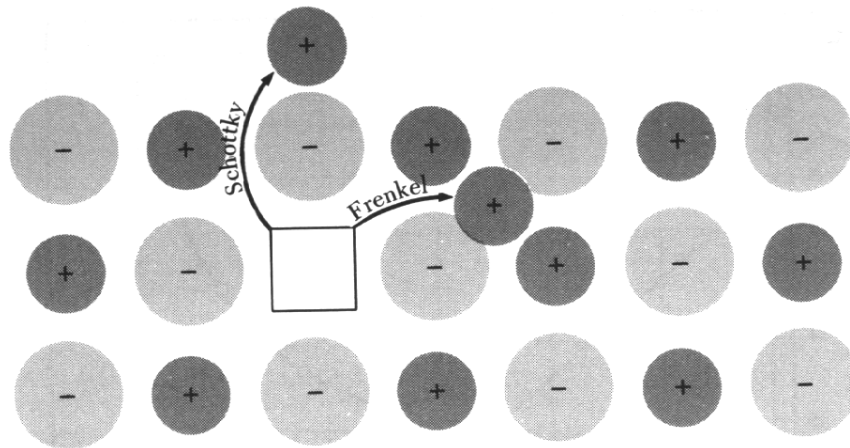
---

Den geometriska tolkningen av dessa termer är alltså följande. För en vakans är  $E_v^f$  helt enkelt energiskillnaden som går åt till att ta bort en atom från gittret till dess yta.  $E_i^f$  är på liknande sätt energin att skapa en interstitiell atom, och  $E_{FP}^f = (E_i^f + E_v^f)$  energin som går åt att skapa ett par av dessa. Faktorn  $1/2$  kommer från konfigurationsentropiberäkningen.

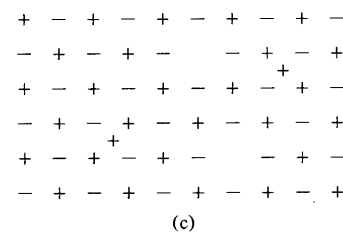
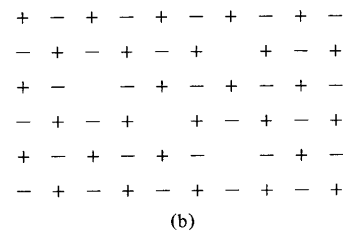
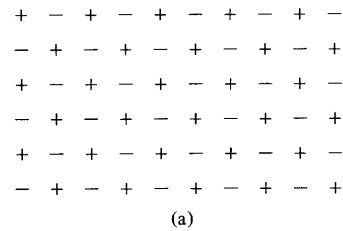
---

Nu kan man alltså skapa en vakans i kristallen på två olika sätt: den ena är att skapa ett Frenkel-par, den andra genom att skapa en vakans vid ytan:





I jonkristaller är det viktigt att bevara kristallens laddningsneutralitet. Detta kan göras på två huvudsakliga sätt: genom att skapa par av vakanser på positiva och negativa gitterplatser, eller genom att skapa Frenkel-defekter. I t.ex. alkalihalider (NaCl etc.) dominerar den förra typen, i silverhalider den senare.




---

I allmänhet är det lätt att övertyga sig om att formationsenergin för interstitiella atomer kommer åtminstone i tätt packade kristaller att vara betydligt högre än vakansens. Det är ju betydligt svårare att placera in en extra atom mellan redan tätt packade atomer, än att ta bort en atom.

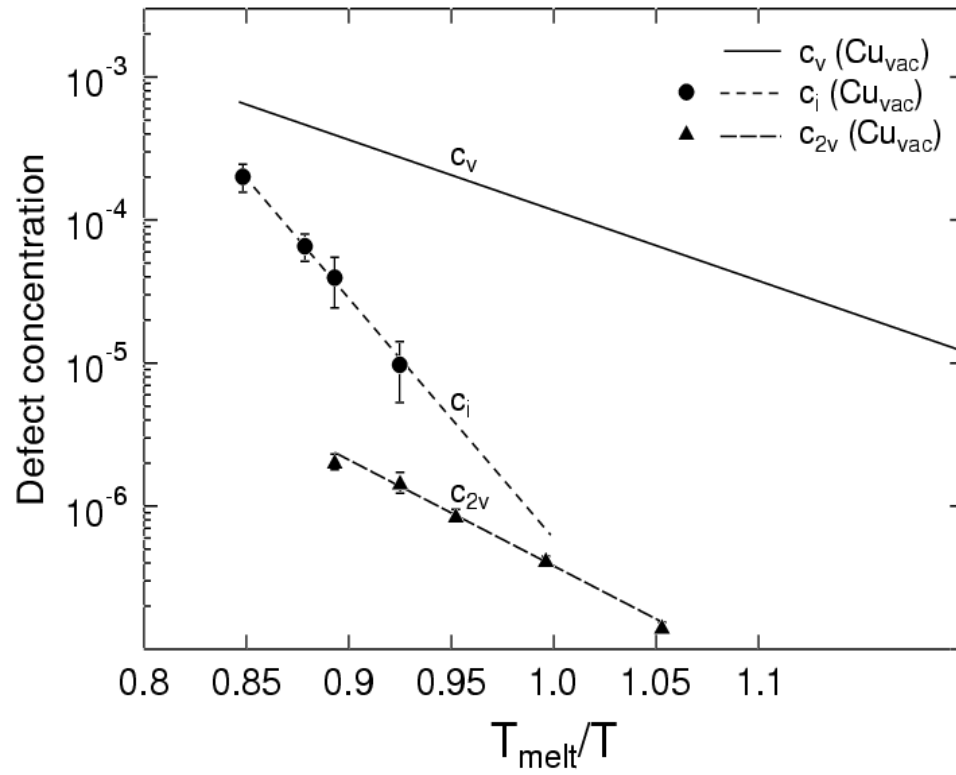
Experimentellt bevisar den s.k. Kirkendall-effekten att vakanser faktiskt är dominerande i de flesta material.

---

För FCC-metaller är typiska värden på formationsenergierna  $E_v^f \sim 1eV$  och  $E_i^f \sim 3 - 5eV$ . Formationsentropierna är typ  $S_v^f \sim 2k_B$  medan  $S_i^f$  är något kontroversiellt, men den senaste forskningsinformationen tyder på att den kan vara ganska hög,  $\sim 10k_B$ . Detta innebär att trots att vakanser, divakanser etc. dominerar vid låga temperaturer, är det möjligt att interstitiella atomers koncentration börjar vara jämförbar med divakansernas vid höga temperaturer.

---

En relativt färsk simuleringsstudie [Nordlund and Averback, Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 4201] ger t.ex. följande koncentrationer för defekter i koppar:



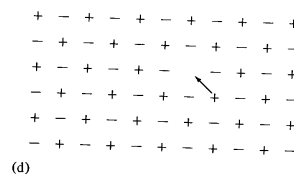
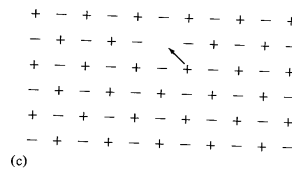
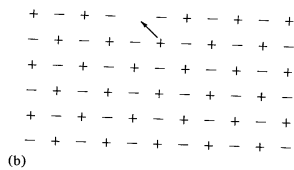
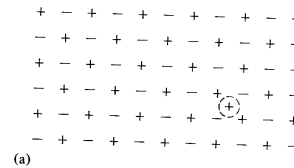
### 3.4. Effekter av punktdefekter

Vilka fysikaliska effekter kan då punktdefekter ha ? Det finns ett stort antal, men här ges bara några enkla exempel.

---

I **jonkristaller**, t.ex. NaCl, är alla elektroner mycket starkt bundna till atomerna i kristallen, och kan i praktiken inte leda elektricitet alls. Ändå kan man mäta en konduktivitet i dylika kristaller. Den är extremt låg, men nog mätbar.

Orsaken till konduktiviteten är att elektriciteten leds av vakanser! Kristallen har ju alltid en jämviktskoncentration av vakanser, som ges av ekv. 4, och det är relativt lätt för en vakans att byta gitterplats med en närliggande atom:



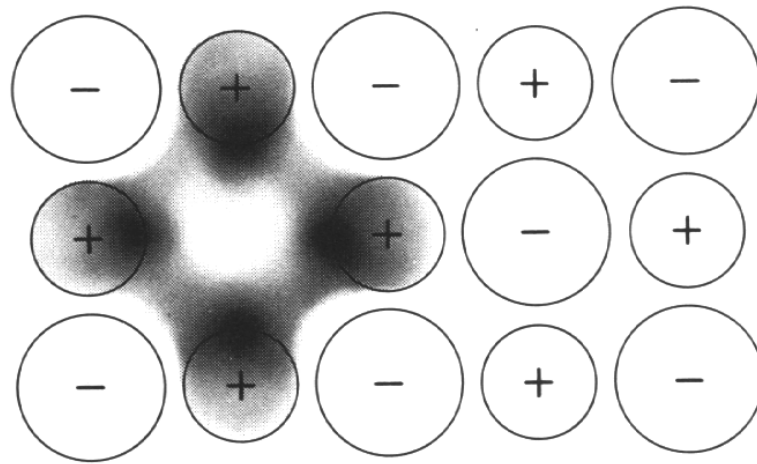
I jämvikt är vakansens rörelse naturligtvis i slumpmässig riktning, men då man i en konduktivitetsmätning lägger ett elfält över kristallen, kommer rörelsen av den positivt laddade jonen att ske mest fördelaktigt i riktningen av elfältet, och vakansens då i motsatt riktning. Detta kommer att leda till en svag konduktivitet av kristallen.

Ett klart bevis på att konduktiviteten faktiskt sker av vakanser är att dess temperaturoberoende har uppmätts att vara proportionell till  $e^{-1/T}$ . Vakansernas koncentration var ju just proportionell mot  $e^{-1/T}$  !

---

I jonkristaller har vakanser en annan viktig effekt. De ger nämligen **färg åt kristallen** !

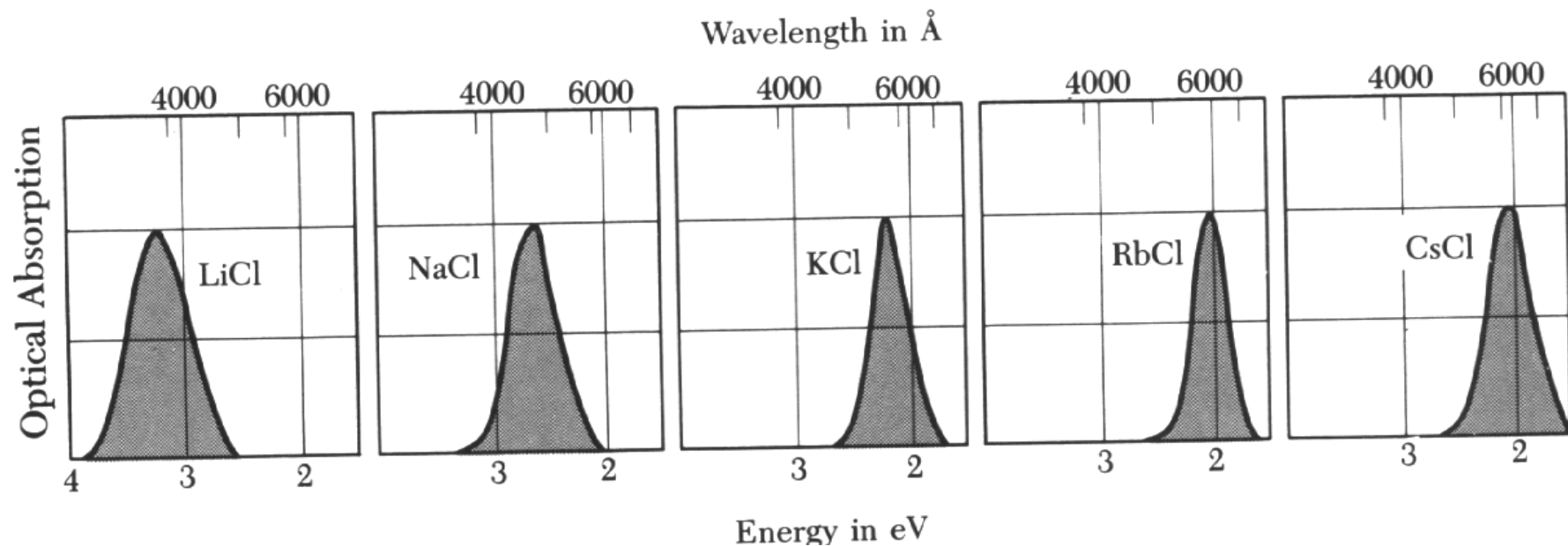
Om man nämligen betraktar en vakans på en negativt laddad plats i en jonisk kristall, måste man för att bevara laddningsneutralitet antingen ha orenheter eller interstitiella atomer i närheten, eller en extra elektron kring vakansen. Att skapa interstitiella atomer i en tätpackad kristall är relativt svårt. Om man t.ex. hettar upp kristallen måste vakansernas koncentration (4) öka, men då kan man inte heller med orenheter balansera vakanskoncentrationen. Det visar sig därför att det energetiskt mest fördelaktiga sättet att skapa laddningsneutralitet är att ha den extra elektronen i närheten. Den kan t.ex. vara spridd över grannatomerna till vakansen:



---

Denna elektron kan anses vara bunden till ett effektivt positivt laddat centrum, och det visar sig att den kommer att ha ett spektrum av energinivåer. En av dessa nivåer är ganska brett och ligger i det synliga ljusets område.





Alltså kommer nivån att påverka en genomskinlig kristalls absorption av strålning, och därmed ändra dess färg! P.g.a detta kallas denna typ av defekter allmänt **färgcentra** ("color centers"). Den typen som just diskuterades kallas för **F-centret** (från tyska Farbe) och det därtillhörande energibandet F-bandet.

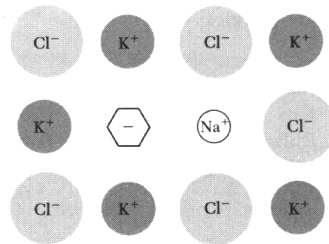
De flesta ädelstenars färg är faktiskt p.g.a. orenheter. T.ex. rent kvarts  $\text{SiO}_2$  är helt färglöst, men

med olika orenheter får den färg och kan bli en värdefull ädelsten. T.ex. Fe-orenheter gör kvarts till ädelstenarna ametist eller citrin, Ti rosa, osv.

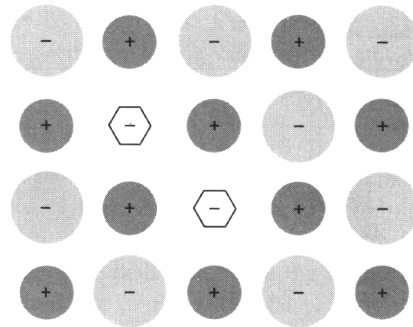
I bilden här rosa kvarts och ametist från naturen och citrin som en ädelsten.



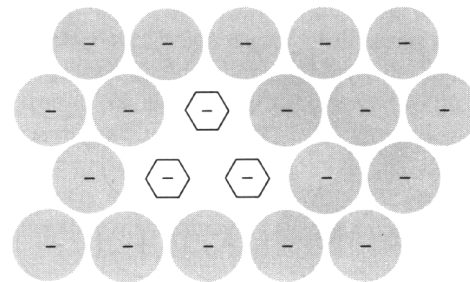
Det finns flera olika typer av centra. Några enkla illustreras i bilden nedan:



**Figure 9** An  $F_A$  center in KCl: one of the six  $K^+$  ions which bind an  $F$  center is replaced by another alkali ion, here  $Na^+$ .



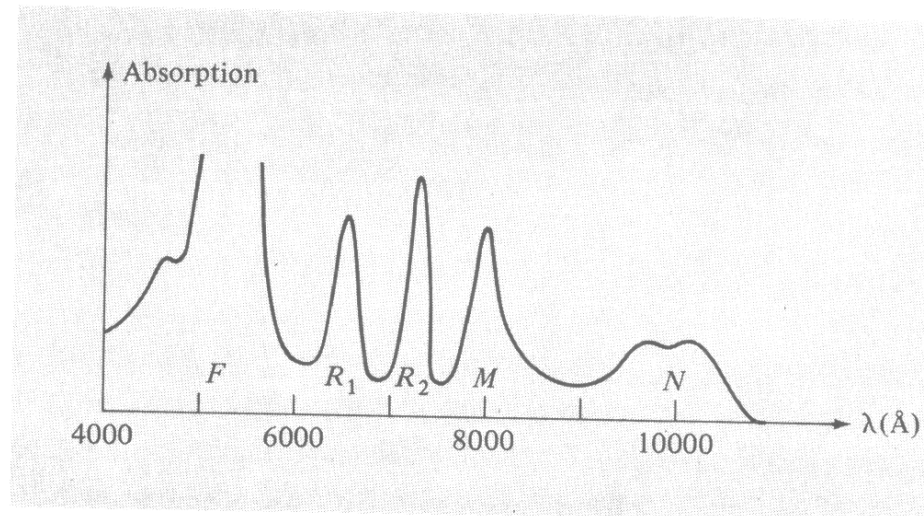
**Figure 10** An  $M$  center consists of two adjacent  $F$  centers.



**Figure 11** An  $R$  center consists of three adjacent  $F$  centers; that is, a group of three negative ion vacancies in a  $[111]$  plane of the NaCl structure, with three associated electrons.

$F_A$ -centret innehåller alltså en orenhet, medan  $M$  och  $R$ -centret är helt enkelt en divakans och en trivakans.

Olika centra har olika spektra, och tillsammans kommer de att ge ett absorptionspektrum med flera olika pikar:



I jonkristaller existerar ytterligare ett par komplexa elektronkonfigurationer, som har vissa likheter till defekter trots att de inte är egentliga fel i atom-konfigurationen Vi nämner begreppen här bara för att ge en ytlig bild av vad det är fråga om; mer information finns i Ashcroft-Mermin och Kittel.

---

**Polaroner** är extra elektroner i en kristall, som inte har samband med någon extra defekt i dem. Men de kommer att introducera en deformation av atomerna gittret, och denna deformation (som kan förstås som en polarisation) kommer att minska dess elektrostatiske energi.

---

En ännu mera subtil “defekt”-typ är helt enkelt en exciterad elektronnivå, som kan röra sig i en jonkristall. Dessa kallas **excitoner**.

---

I metaller kan de fria elektronerna anses bilda ett elektronplasma. En excitation (plasmaoskillation) i detta plasma kallas en **plasmon**.

---

Den kanske teknologiskt allra viktigaste effekten av punktdefekter är dock den av **orenheter i halvledare**, som nästan helt bestämmer deras elektriska egenskaper. T.ex. fungerar grundämnen med tre yttersta elektroner som B och Al i Si som acceptorer, dvs. de kan ta emot en elektron, och på motsvarande sätt grundämnen med fem yttersta elektroner som P och As i Si som donorer, dvs. de kan ge en elektron till gittret. Mera om deras inverkan på de elektriska egenskaperna diskuteras senare på kursen. Men här noterar vi att för att orenheterna skall fungera på önskat sätt som

donorer eller acceptorer, är det extremt viktigt att de intar substitutionella platser i kristallen, och att kristallen annars är av bra kvalitet (har lite intrinsiska defekter).

## 3.5. Dislokationer

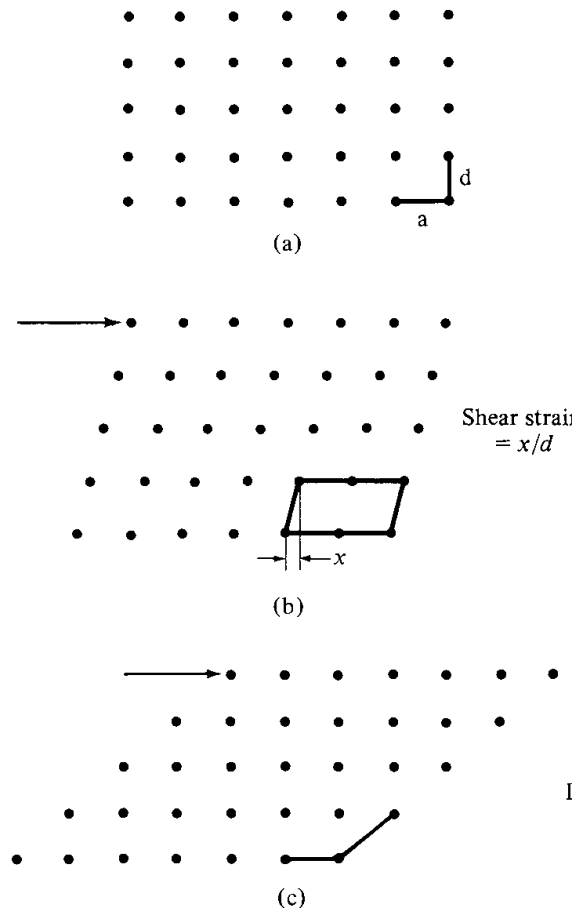
[Kittel 20]

Den allmännaste typen av linjedefekter är dislokationer. De enklaste dislokationerna kan förstås med att tänka sig att man sätter eller tar bort plan av atomer i en kristall, eller vrider delar av kristallen i förhållande till andra.

Namnet kommer från att en dislokation produceras om man “dislokerar” en del av en kristall i förhållande till en annan. Själva dislokationen är defekten där dislokationen börjar eller slutar.

---

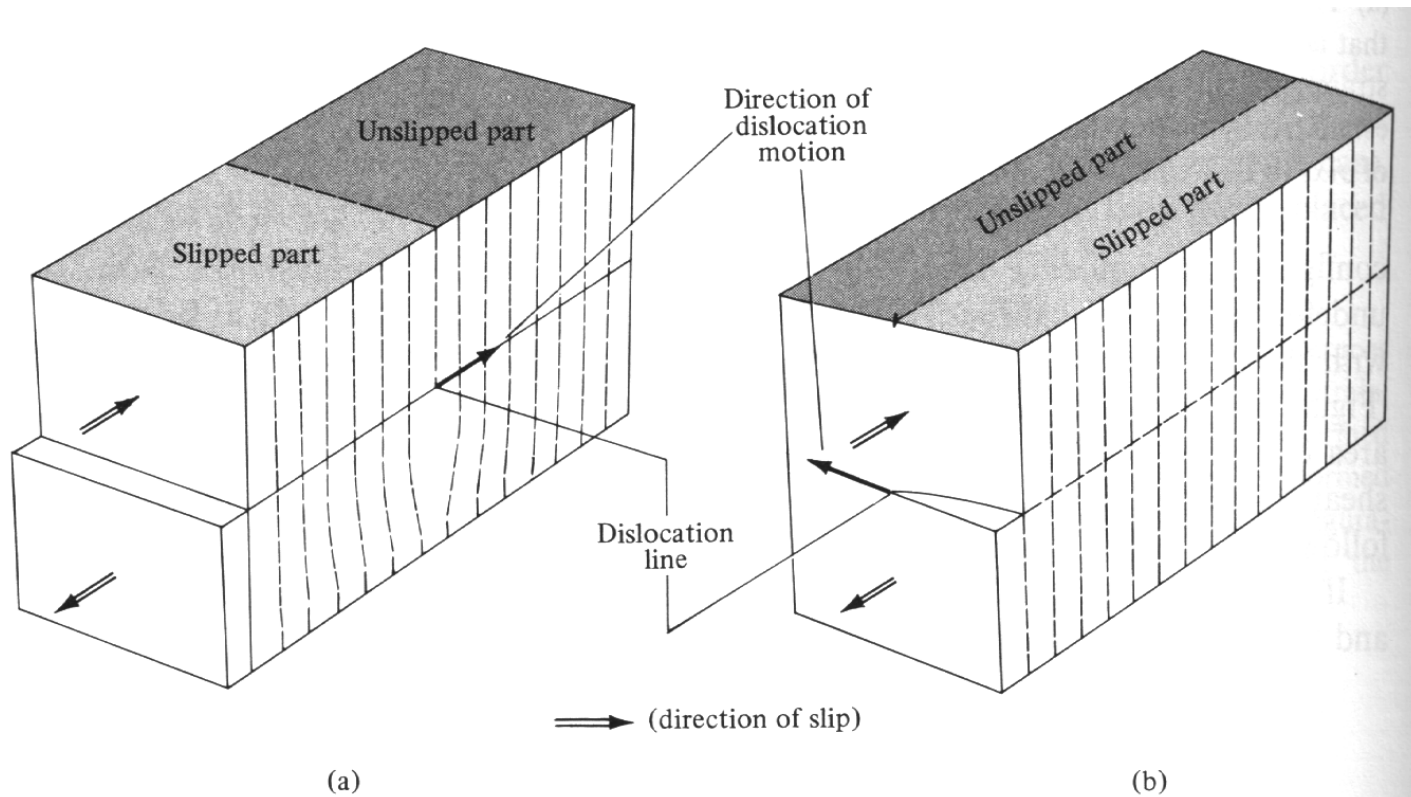
Betrakta t.ex. följande vridning (även kallat skjuv, “shear”) av kristallplan:



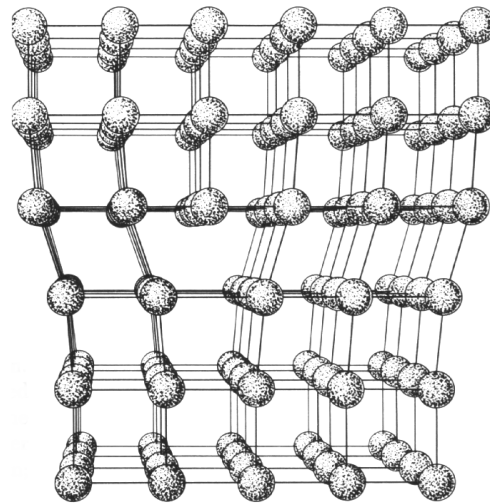
(a) är den perfekta strukturen. Vid fall (b) är kristallen klart deformerad, men i (c) är det lokala atomarrangemanget igen samma som i det ursprungliga gittret, och kristallen kan anses vara i jämvikt igen.



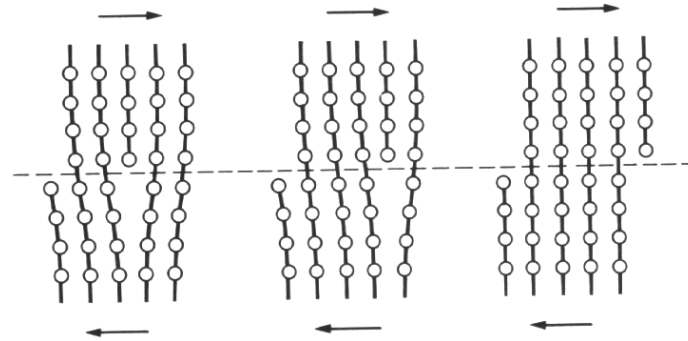
Men om man nu vrider enbart en del av en kristall, kommer det att bildas 1-dimensionella defekter vid den punkt där atomerna just håller på att förflyttas i förhållande till varann. De två enklaste sätten att göra denna operation är följande:



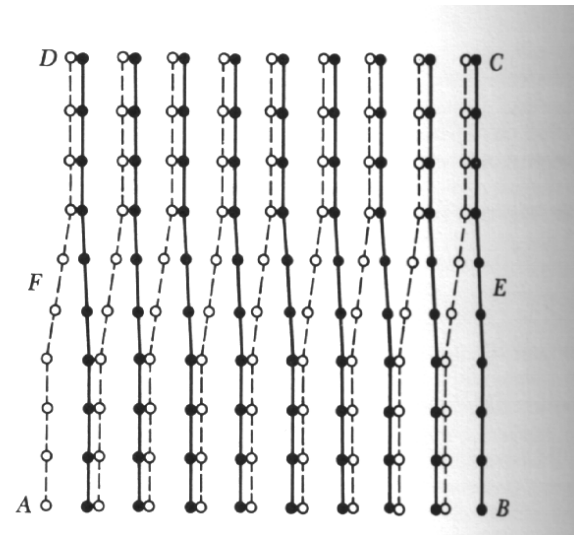
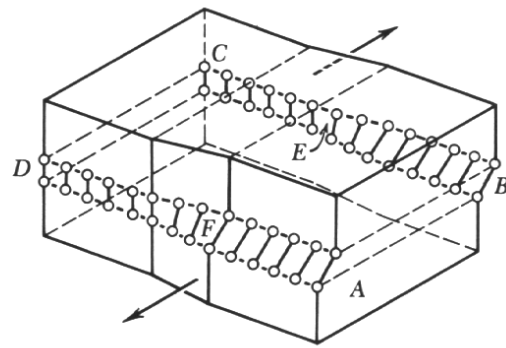
I fall (a) har man bildat en s.k. egg-dislokation (“edge dislocation”) Här har man alltså ett extra atomplan i en del av kristallen, som slutar abrupt, vid en “egg”:



Man noterar att atomstrukturen är starkt förvriden just där det ena atomplanet slutar, men nästan perfekt lite längre bort från den. Själva dislokationen definieras att existera just där som planet slutar, och bildar alltså en linje som följer planets riktning. Man ser också att det nu är lätt att flytta dislokationen vidare genom att låta atomplanen glida bredvid varann just vid dislokationen:

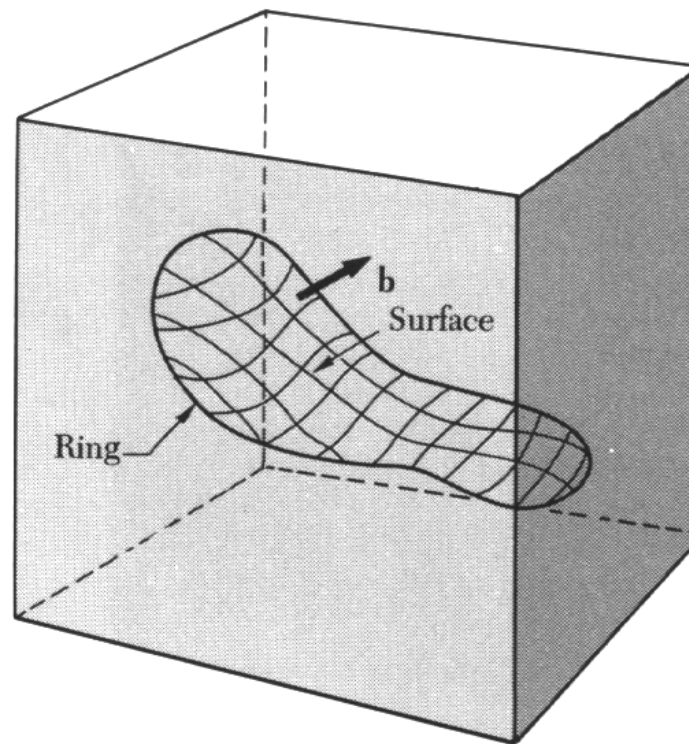


Den andra huvudtypen av dislokation, skruvdislokationen ("screw dislokation") kan man förstå om man tänker sig att man skulle skära med en kniv genom halva kristallen, och sedan vrida en del i förhållande till den andra:



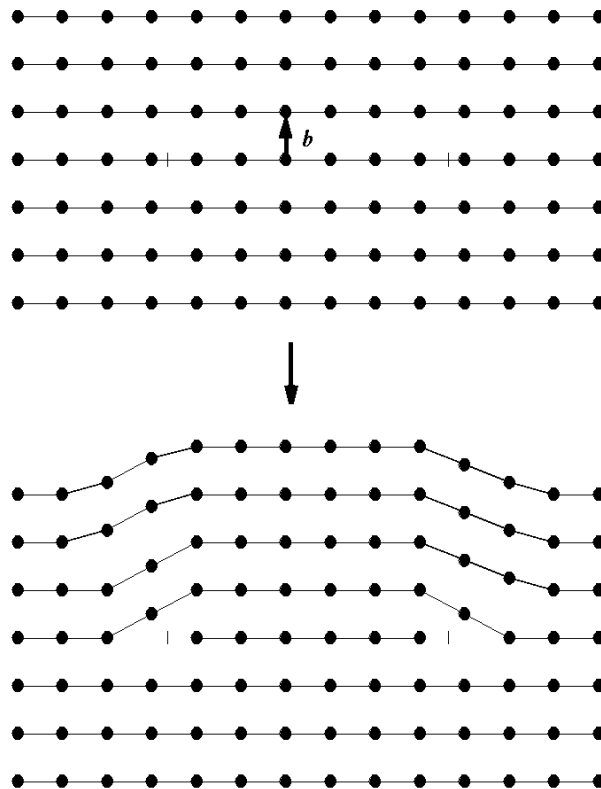
Namnet skruvdislokation kommer av att om man nu följer atomplanen just kring dislokationen, och går över från ett plan till ett annat en gång per varv, rör man sig längs med en spiral.

Helt allmänt behöver en dislokation ingalunda börja eller sluta vid en yta. Som ett tanke-experiment kan man skapa en allmän dislokation på följande sätt:



Välj en godtycklig yta i kristallen. Ta nu materialet på ena sidan kristallen, och förflytta den med ett avstånd  $b$ . Fyll sedan i det tomrum som skapades med nya atomer, eller ifall  $b$  är negativ, ta bort material som överlappar.

Ett enkelt exempel på operationen i 2D illustreras här:



Vektorn  $\mathbf{b}$  är **Burgers vektor**. Notera att kristallen långt borta från skärningsytan alltid är perfekt med undantag av en svag distortion (här i bilden verkar distortionen alldeles för stor p.g.a det lilla antalet atomer; verkliga dislokationer är oftast flera storleksordningar större).

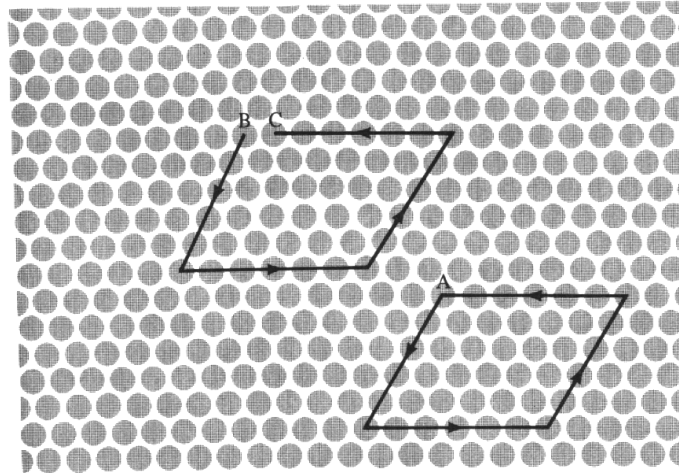
Om det tomrum som skapas fylls på det sättet att kristallstrukturen vid skärningsytan förblir perfekt

(som i den senare bilden), har man skapat en **perfekt dislokation** längs med ringen som omger ytan. I annat fall talar man om **partiella dislokationer**. P.g.a. att det uppenbart är energetiskt mest fördelaktigt att skapa perfekt kristall, är perfekta dislokationer de vanligaste och teknologiskt viktigaste.

---

För en allmän perfekt dislokation kan man lista ut Burgers vektor med följande operation. Betrakta först ett perfekt område i kristallen. Rita vektorer som följer atomplan så att de bildar en stängd kurva, och lägg i minnet hur många steg från en atom till en annan du rörde dig i en viss riktning.

Gör sedan samma steg kring dislokationen, så långt borta från den att atom-omgivningen är praktiskt taget perfekt. Nu kommer kurvan inte längre att vara stängd. Vektorn som nu krävs för att stänga kurvan är  $\mathbf{b}$  (dess tecken är godtyckligt).



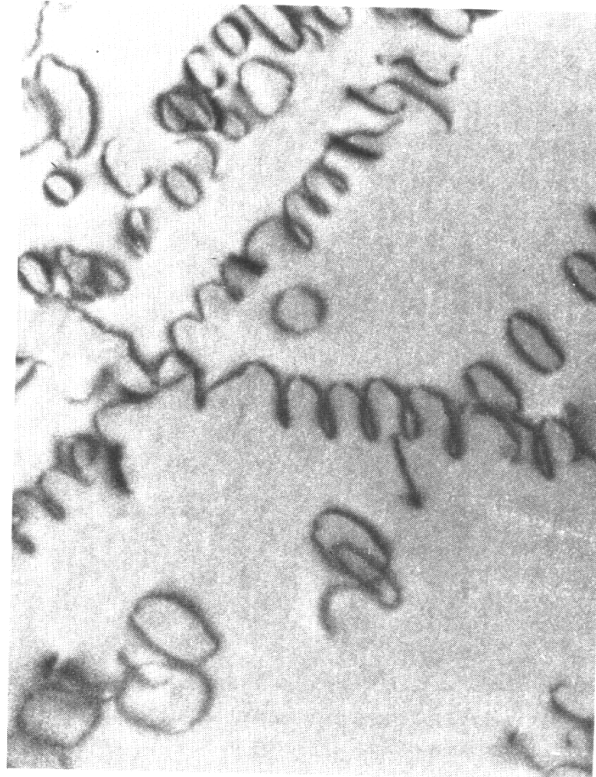
---

För en egg-dislokation är Burgers vektor vinkelrät mot dislokationen, medan den är parallell med en skruvdislokation. Om Burgers vektor-konstruktionen ger  $\mathbf{b} = 0$  är det *inte* fråga om en dislokation. T.ex. en rad av vakanser är inte en dislokation.

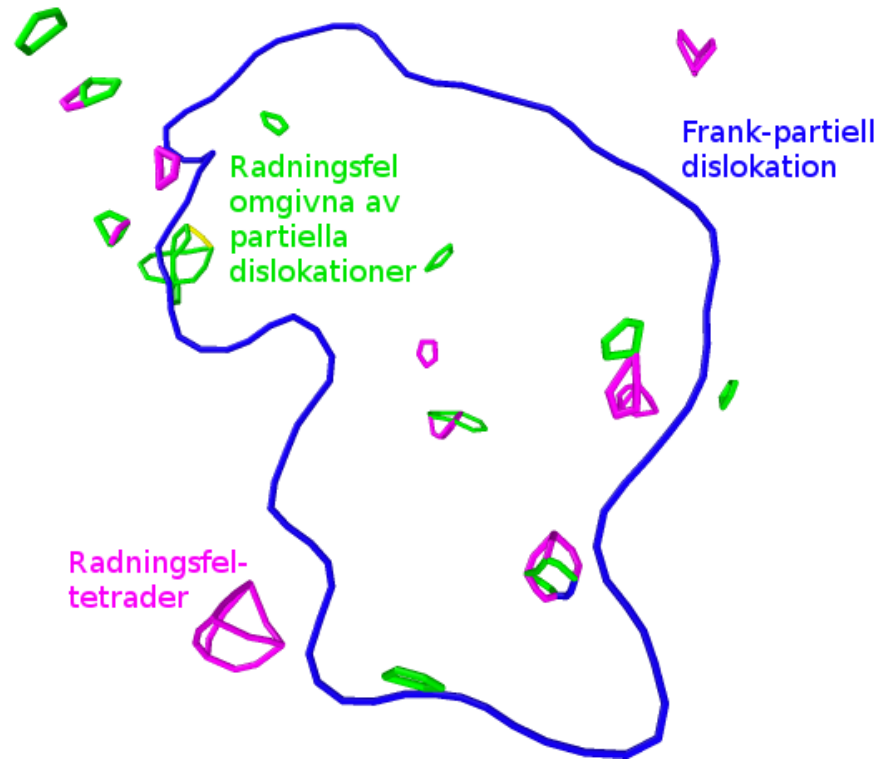
---

I praktiken är de flesta äkta dislokationer blandade dislokationer som har både egg- och skruvkaraktär vid olika segment. Deras storlek kan variera från några nanometer till makroskopiska längder. Här är ett exempel på några dislokationer i en Al-Mg-legering som har bildats med snabb nedkylning [Kittel].





Moderna datorsimuleringar visar också att bestrålade material kan ha komplicerade blandade dislokationsnätverk. Exemplet nedan är olika dislokationer som bildats i Ni under lång bestrålning (detaljerna är inte viktiga för denna kurs):



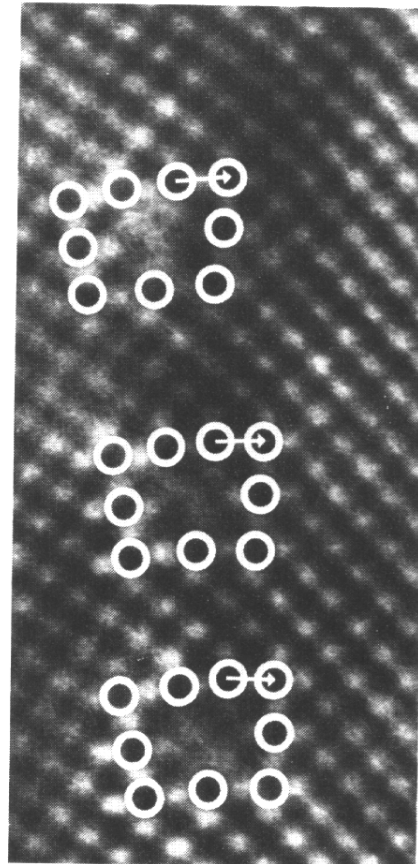
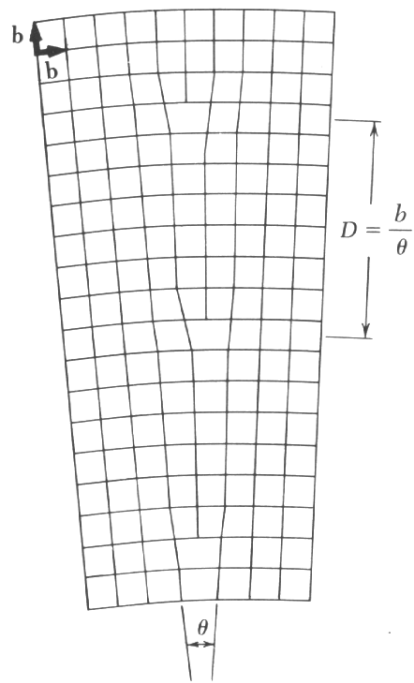
[E. Levo, F. Granberg, C. Fridlund, K. Nordlund, F. Djurabekova, submitted for publikation (2016)]

Dislokationer har ett viktigt samband med metallers hårdhet och hållfasthetslära, som vi kommer att behandla litet senare på kursen.

### 3.5.1. Små-vinkels korngränser

Med hjälp av dislokationer kan man också förstå små-vinkels korngränser. I vänstra bilden nedan visas atomplan vid en korngräns. De tre atomplanen som slutar/börjar vid korngränsen kan förstås som egg-dislokationer.

Bilden till höger visar en verklig korngräns, där de individuella atomerna är synliga. De vita cirklarna visar atomkolumners platser, och vektorerna Burger's vektor för dislokationerna.



### 3.5.2. Radningsfel (stacking faults)

En viktig typ av tvådimensionella defekter är s.k. “stacking faults”, radningsfel. Vi påminner oss om att en FCC-kristall kan bildas genom att placera tätt packade atomplan på varandra i ordningen ABCABCABC, och en HCP-kristall med packning av identiska plan i ordningen ABABAB. Nu är omgivningen av närmaste grannatomer den samma i de båda fallen, och energiskillnaden alltså ganska litet. Därför är det inte överraskande att man kan bilda en planär defekt lätt genom att ändra på packningsordningen i kristallen, så länge inte två likadana plan hamnar bredvid varann.

---

T.ex. i FCC-gittret kan man ändra

ABCABCABC

till

ABCABACABC

där alltså ett extra A-plan läggs in. Detta extra plan kan sträcka sig enda till ytan av kristallen, men ofta har de begränsad räckvidd. I så fall kan de anses utgöra en planär defekt som begränsas av en **partiell dislokation**.

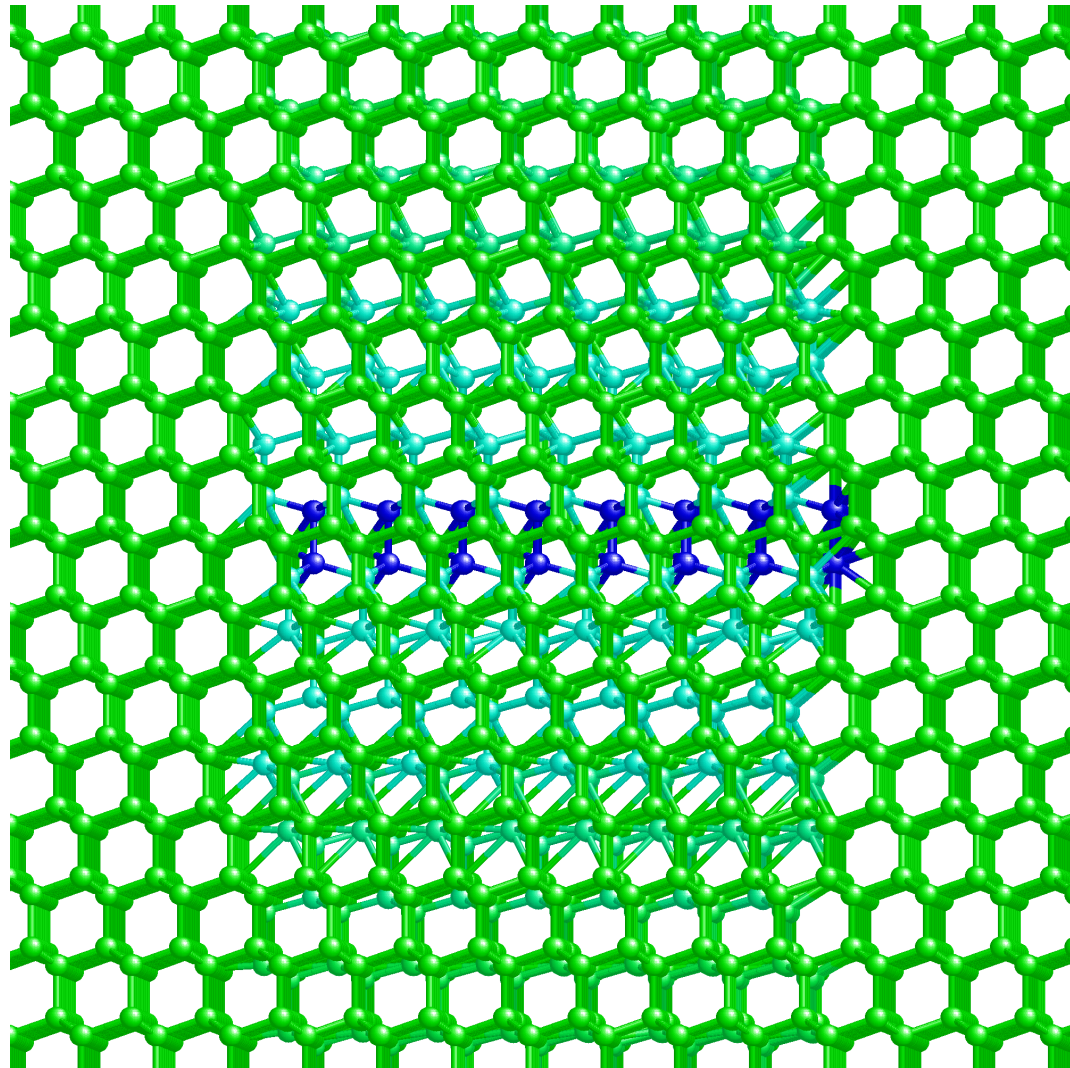
I.o.m. att diamantstrukturen kan anses vara två interpenetrerande FCC-gitter, kan man göra samma operation i kisel, förutsatt att man skapar två extra atomplan i stället för en:

AaBbCcAaBbCcAaBbCc

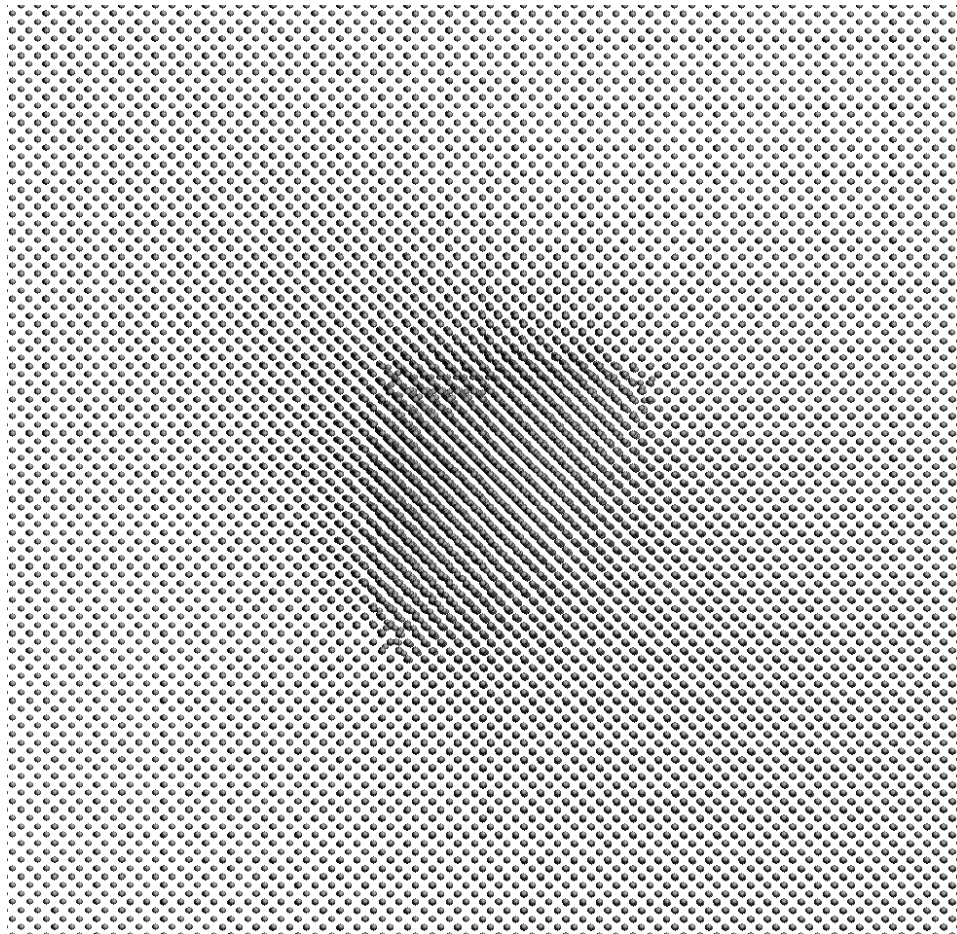
till

AaBbCcAaBbAaCcAaBbCc

En sådan defekt ser ut på följande sätt, före man relaxerat atomerna:



Efter relaxation kan ett stackningsfel t.ex. se följande ut (denna bild är sett uppifrån):



[För den som behöver kännedom om dislokationer i sitt arbete, lönar det sig att köpa boken Hirth and Lothe: Theory of dislocations, som är en mycket trevlig bok att läsa, men samtidigt också den kanoniska referensen i området]



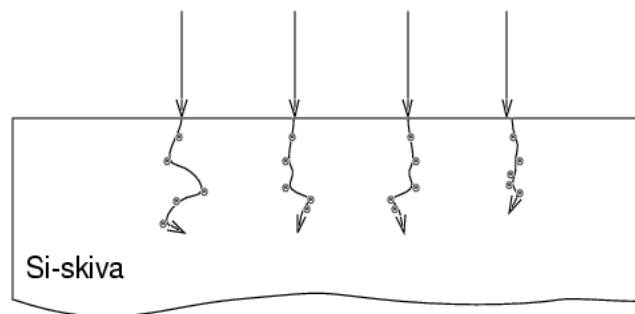
### 3.6. Exempel på teknologisk tillämpning

Ett exempel på var kännedom om defekttypen behövs är tillverkningen av datorchips. Bara vid den enkla processen där man implanterar t.ex. B i kisel för att få de önskade elektriska egenskaperna, uppstår s.g.s alla ovannämnda defekttypen, och några till. P.g.a. att förståelse om dessa processer är nödvändig för att kunna tillverka nästa generations chips pågår det intensiv forskning kring dessa defekters egenskaper.

Här följer en (förenklad) bild över vilka defekter som skapas och förintas bara under en enda bor-implantering och därpåföljande upphettning.

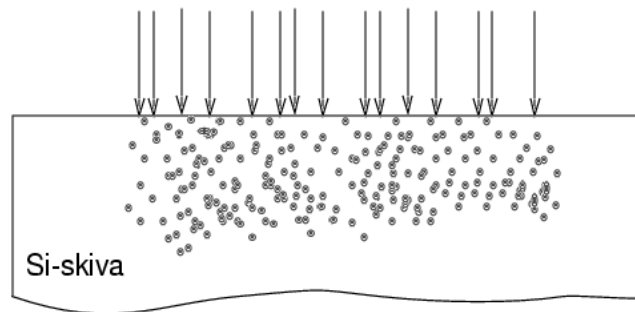
### 1. Implantering av B, början

- I det första skedet av implantering skapas **punktdefekter** och **små klustrar** i gittret lång ifrån varandra



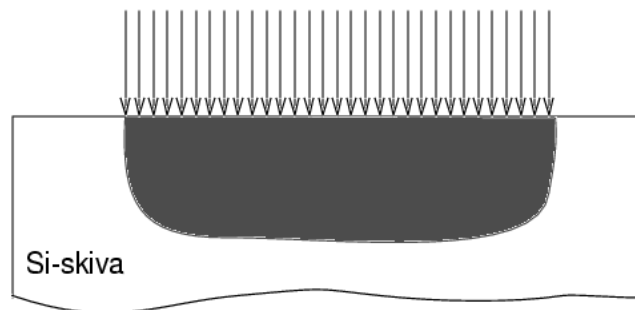
### 2. Implantering av B, efter en tid

- Efter en längre implantering har man skapat så mycket defekter att de börjar överlappa. Dessa defekter är stora och komplicerade **defektklustrar**.



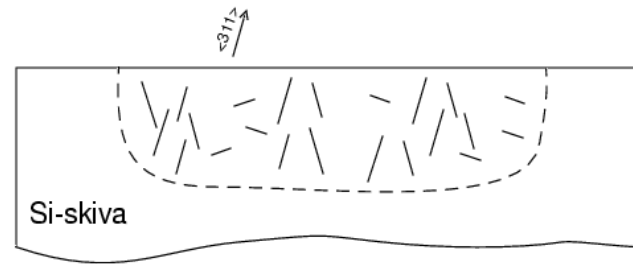
### 3. Implantering av B, till slut

- Då defektkoncentrationen blivit tillräckligt stort, kollapsar gittret i en helt **amorft fas** i det området dit B trängt in.



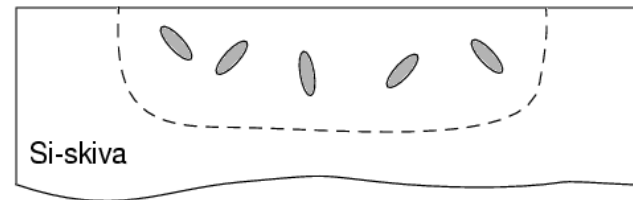
#### 4. Reparering av skador med upphettning, skede 1

- För att kretsen skulle fungera, måste man återkristallisera det amorfa området. Detta görs numera benom att hetta upp till ung. 1000 °C. Men detta sker stegvis. Först bildas främst 311-defekter som är linjeformiga interstitial-agglomerat



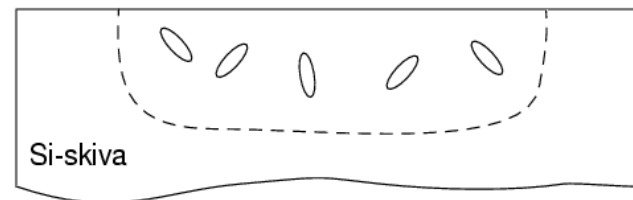
#### 5. Reparering av skador med upphettning, skede 2

- Efter mer upphettning "evaporerar" de interstitiella atomerna i 311-defekterna. En del försvinner till ytan (good business), andra bildar radningsdefekter (bad business).



#### 6. Reparering av skador med upphettning, skede 3

- Efter ännu mera upphettning glider radningsfelena till en perfekt gitterkonstruktion, så kvar blir bara perfekta dislokations-slingor. Dessa påverkar slutligen kretsens elektriska egenskaper så lite att man kan få chippet att fungera!



## Vad har du åtminstone lärt dig i detta kapitel?

- Du känner till huvudklassificeringen av defekter enligt dimensionalitet.
- Du känner till klassificeringen av de vanligaste punktdefekterna i kristaller.
- Du kan härleda enkla punktdefekters termodynamik.
- Du förstår egg- och skruvdislokationens struktur och begreppet Burgers vektor.