

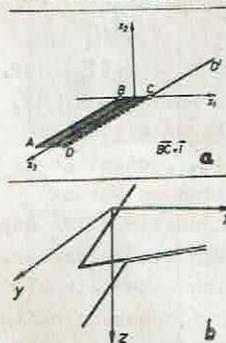
COMPUTERSIMULATION DES ELEKTRONENMIKROSKOPISCHEN
BEUGUNGSKONTRASTES VON VERSETZUNGSSPRÜNGEN

K. Scheerschmidt

Institut für Festkörperphysik und Elektronenmikroskopie
der Akademie der Wissenschaften der DDR, Halle (Saale)

Bei der Bewegung gleitfähiger Versetzungen entstehen unter geeigneten Voraussetzungen krummlinige Defektstrukturen, z.B. Versetzungssprünge - beim Schneiden von sogenannten Waldversetzungen - oder Dipole, die von einem Hindernis ausgehen und in die sich bewegende Versetzung umbiegen. Die Computersimulation des elektronenmikroskopischen Beugungskontrastes trägt zur exakten Identifizierung dieser Defekte bei, wobei es jedoch notwendig ist, nichtgeradlinige Versetzungen durch stückweise geradlinige Segmente zu approximieren.

Versetzungsdipole lassen sich bereits in einfacher Weise durch parallel verlaufende geradlinige Versetzungen behandeln. Eine Berechnung des Beugungskontrastes abgewinkelter Versetzungsbereiche ermöglicht die Winkelversetzung nach YOFFE /1/, bestehend aus zwei geradlinigen Segmenten, die einen beliebigen Winkel miteinander einschließen. Der Bereich eines Versetzungsdipols, der an einem Hindernis haftet, kann näherungsweise mit Hilfe eines halbunendlichen Versetzungsringes nach KROUPA



/2/ dargestellt werden. Der Kontrast eines Versetzungssprunges läßt sich (Abb.1) durch die Kombination eines KROUPA-Dipols (ABCD) mit einer geradlinigen Versetzung (DD') oder durch die Überlagerung zweier Winkelversetzungen nach YOFFE (Abb.1b) berechnen.

Abb.1

Abb.2 zeigt mit der Methode der Computersimulation berechnete Versetzungsdipole sowie Ausschnitte um die Durchstoßpunkte durch die Folienoberfläche. Die annähernd reinen Stufenversetzungen des Dipols haben eine geringe Neigung zur Folienoberfläche und liegen in (101)-Gleitebenen. Stabile Anordnungen sind gegeben, wenn beide Versetzungen in der gleichen Tiefe

(Abb.a,b) oder in Projektionsrichtung untereinander liegen (Abb.c,d). Die weiteren Bilddaten sind: Einstrahlrichtung $\vec{e}=[001]$, Beugungsreflex $\vec{g}=[200]$, Burgersvektor $\vec{b}=1/2[101]$, Richtungsvektoren $\vec{\xi}=\pm[1\bar{1}1]$, Foliendicke $t=6\xi_3$, Braggabweichung $w=0,5$, $\xi'_0/\xi_3=20$ und $\xi'_1/\xi_3=40$ mit ξ'_0 normale, ξ'_1 anomale Absorption, ξ_3 Extinktionslänge, Versetzungsabstand $l=0,4\xi_3$ (Abb.a,c) und $l=0,1\xi_3$ (Abb.b,d). Die Abb.3 stellt die in Abb. 2 gezeigten Dipole dar, wobei die Dipolversetzungen in einer Tiefe $t_0=1\xi_3$ in die beiden Arme der sich bewegenden Versetzungen umliegen. Eine bemerkenswerte Kontrasterscheinung ist der einseitig liegende Kontrastpunkt auf den Abbildungen b und d, der auch vorhanden bleibt, wenn der Kontrast des Dipols verschwindet (Abb.b unten mit $l=0,01\xi_3$).

Auf Abb.4a sind oben der Fall 2a, darunter der Fall 2b wiederholt. Dabei sind hier die Dipolversetzungen in einer Tiefe $t_0=1\xi_3$ miteinander verbunden. Abb.4b (oben: Hellfeld, unten: Dunkelfeld) entspricht Abb. 2d mit $w=0$. Es ist zu erkennen, daß die Verbindungselemente nur einen geringen Einfluß auf die Endbereiche des Dipolkontrastes ausüben. Abbildung c stellt eine gemischte Versetzung ($\vec{\xi}=[1\bar{1}1]$, $\xi'_0/\xi_3=10$, $\xi'_1/\xi_3=20$, $w=0$) mit einem Versetzungssprung ($t_0=2,5\xi_3$) dar, wobei auf der oberen Abbildung $l=0,2\xi_3$, darunter $l=0,05\xi_3$ gilt. Die Abb. d zeigt eine Schraubenversetzung mit einem oberflächenparallelen Sprung ($t_0=2\xi_3$, $l=0,4\xi_3$, oben: $\vec{g}\vec{b}=1$, unten: $\vec{g}\vec{b}=-1$). Die computersimulierten Abbildungen veranschaulichen, daß je nach gewählten Abbildungsbedingungen sehr unterschiedliche Bildkontraste entstehen. Man kann erkennen, daß bei Abständen unterhalb $0,1\xi_3$ unter üblichen Zweistrahlbedingungen in den genannten Fällen keine auflösbaren Abbildungen der Defektstrukturen möglich sind, daß aber mit Hilfe der Computersimulation von der Abbildung auf die Spezifik eines Kristalldefektes geschlossen werden kann.

/1/ P.Kroupa, phys.stat.sol. 9,27,1965

/2/ E.H.Yoffe, Phil.Mag. 5,161,1960

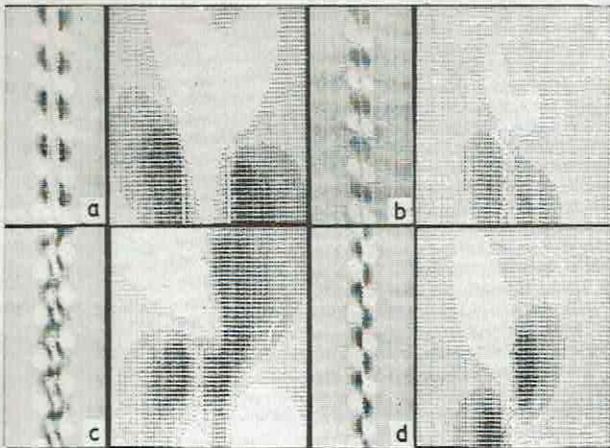


Abb. 2

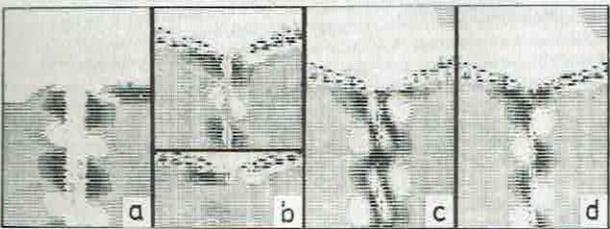


Abb. 3

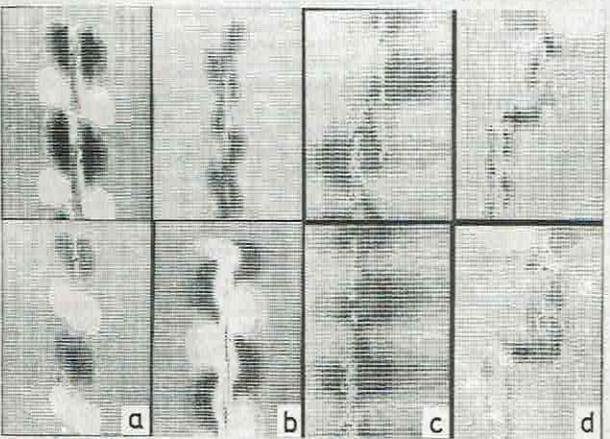


Abb. 4