

ätzen und der aufwendigen Röntgentopographie beobachtet werden. An Si [1], Ge [2] und GaAs [3] wurde vor einigen Jahren schon das Dekorationsverfahren mit metallischen Ausscheidungen erfolgreich angewandt. Analog dazu wurde diese Methode nun für InP entwickelt.

Im vorliegenden Beitrag werden die Präparation der Proben und Ergebnisse gezeigt. Auf die bis zu 2 mm dicken Proben wurde eine Cu-Schicht galvanisch abgeschieden. Die Lösung bestand aus einer gesättigten  $\text{CuSO}_4$ -Lösung, die im Verhältnis 1:2 mit Wasser verdünnt wurde. Die nachfolgende Temperung wurde 2 Stunden lang bei  $670^\circ\text{C}$  in einer Ar-Atmosphäre durchgeführt. Daraufhin wurden die Proben geläppt und poliert. Im Infrarotmikroskop konnten nun die Versetzungen als dunkle Linien im Durchlicht beobachtet werden.

Als Voraussetzung [3] für die Dekoration von Versetzungen während der Wärmebehandlung gelten aus der Versetzungstheorie die Cottrellwechselwirkung und die Fähigkeit der Versetzungen, als Leerstellenquelle zu wirken. Die verstärkte Diffusion und die bevorzugte Keimbildung der Partikel entlang den Versetzungen konnten als weitere Voraussetzungen qualitativ belegt werden.

Eine Übersicht von verschiedenen in einer InP-Scheibe gefundenen Versetzungstypen zeigt Abb. 1. Weitere Beispiele findet man in [4].

### Literatur

1. Dash, W. C.: 3. Appl. Phys. 27, 1193 (1956)
2. Amelincks, S.: *The direct Observation of Dislocations*, in: Solid State Physics Supplement 6 (1964)
3. Boltaks, B. I., Shishiyanu, F. S.: Sov. Phys.-Solid State 7, 822 (1965)
4. Müller, G., Rupp, R., Völk, J., Wolf, H., Blum, W.: wird veröffentlicht in J. Cryst. Growth (1985)
5. Dash, W. C.: 3. Appl. Phys. 30, 459 (1959)
6. Fiermans, L., Vennik, J.: Phys. Status Solidi 12, 277 (1965)

E. Kraka und D. Cremer (Institut für Theoretische Chemie der Universität Köln). **Die Konzentrationsverteilung der Elektronen im Molekül – Ein Schlüssel zur Bestimmung der molekularen Reaktivität.**

Der Begriff Elektronenkonzentration wird in der Kristallographie oft im Sinne einer Akkumulation von Elektronendichte gegenüber einer promolekularen Referenzdichte verwendet. Eine Konzentrationsbeschreibung mit Hilfe von Differenzdichten birgt jedoch das Problem der Definition einer geeigneten Referenzdichte in sich. Eine alternative und eindeutige Erfassung der Elektronenkonzentration bietet das Laplace-Feld  $\nabla^2 \rho(r)$  der Elektronen-

dichteverteilung  $\rho(r)$ . Eine wichtige Eigenschaft des Laplace-Feldes besteht darin, Konzentrationen des zugehörigen Skalarfeldes ohne Bezug auf ein Referenzfeld anzuzeigen [1]. Negative Werte von  $\nabla^2\rho(r)$  deuten eine Konzentration der Elektronendichte an, positive Werte eine Expansion.

In der Konzentrationsverteilung der Elektronen spiegelt sich die Schalenstruktur der Atome wider. In einem isolierten Atom mit isotrop gemittelter Elektronendichteverteilung verlaufen die Konturlinien des Laplace-Feldes konzentrisch zum Atomkern. Bei der Ausbildung einer Bindung wird die Konzentrationsverteilung der Elektronen, insbesondere in der Valenzschale, in Abhängigkeit von Größe und Elektronegativität des Bindungspartners verzerrt. Es bilden sich lokale Maxima im Bindungsbereich und im Bereich der einsamen Elektronenpaare aus, in Einklang mit bekannten chemischen Konzepten.

Aus der Konzentrationsverteilung der Elektronen im Molekül können chemische Eigenschaften wie z. B. die Reaktivität abgeleitet werden. Geht man davon aus, daß ein elektrophiler Angriff in einem molekularen Bereich mit großer Elektronenkonzentration, ein nucleophiler Angriff in einem molekularen Bereich mit geringer Elektronenkonzentration erfolgt, lassen sich diese Stellen direkt aus dem Konzentrationsbild der Elektronendichteverteilung eines Moleküls ablesen. Die Laplace-Konzentration im Bereich der einsamen Elektronenpaare erlaubt Rückschlüsse auf die Basizität eines Moleküls. Dieser Tatbestand wird am Beispiel von Stickstoffheterocyclen demonstriert.

### Literatur

1. Morse, P. M., Feshbach, H.: *Methods of Theoretical Physics*, Bd. 1, McGraw-Hill, New York 1953, S. 6

P. Kramer und R. Neri (Institut für Theoretische Physik der Universität Tübingen) **Nichtperiodische Quasi-Kristalle mit Ikosaeder-Symmetrie.**

In Kristallen mit translativer (periodischer) Ordnung sind nur Punktsymmetrien mit 2-, 3-, 4- und 6-zähligen Drehachsen möglich. Im November 1984 berichteten Shechtman [1] über eine Festkörper-Phase des Systems Al mit 14 at. % Mn, die bei Elektronenstreuung das Diffraktionsmuster der Ikosaeder-Punktgruppe mit fünfzähligen Drehachsen zeigt. Diese Phase wird von den Autoren als neuartige Orientierungsordnung langer Reichweite interpretiert. Quasi-Kristalle dieser Art lassen völlig neue physikalische Eigenschaften erwarten, wie von Levine und Steinhardt [2] erörtert wurde. Sie erfordern die Einführung neuer Begriffe und Ordnungstypen außerhalb des Rahmens der