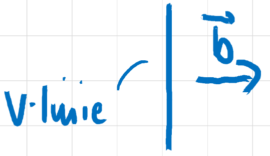
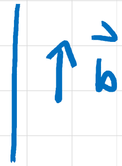
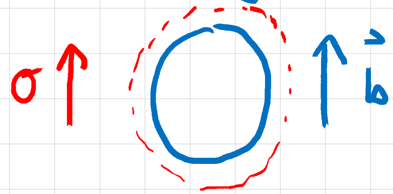
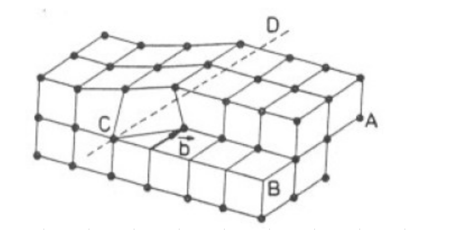
- $\sigma_c << G$, Gleitebenen $\Rightarrow$ plastische Verformung $<$ nicht durch Abscheren von Ebenen / wandern von V. auf Gleitebenen
- Stufen v. — Schraubenv — V ring

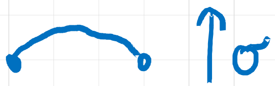




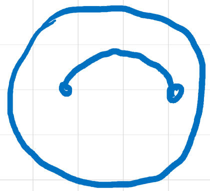




- $V_{el} \sim b^2 \Rightarrow \vec{b}$ hat minimale Länge, kompatibel mit Kristallstruktur
- Frank-Read Quelle



$\Rightarrow$

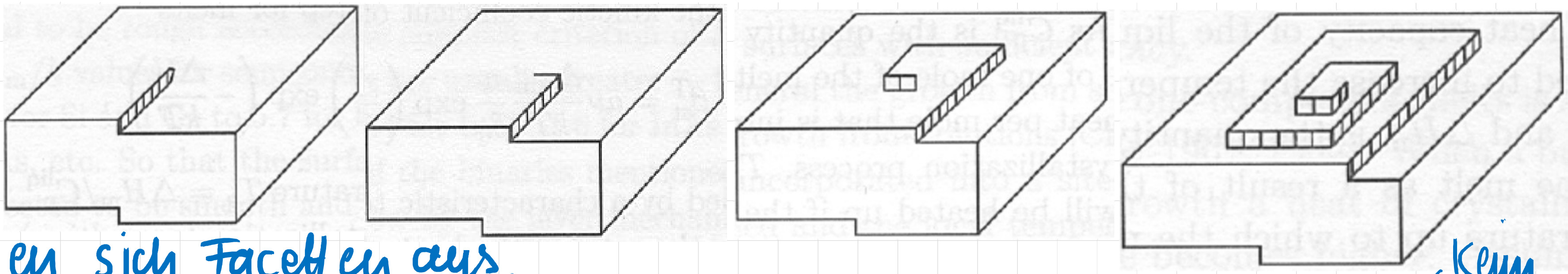


$\sigma_c \approx \frac{2 G \cdot b}{L}$

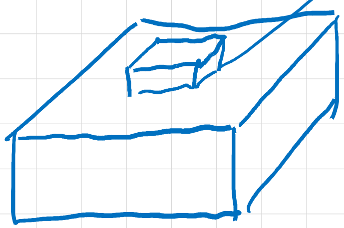
- wenig Ven $\rightarrow \sigma_c$ klein, leichte Verformung
- viele Ven $\rightarrow$ Versetzungsreaktion, V verankerung $\Rightarrow \sigma_c$ groß, Versprödung

Metall — Keramik

Kristallwachstum

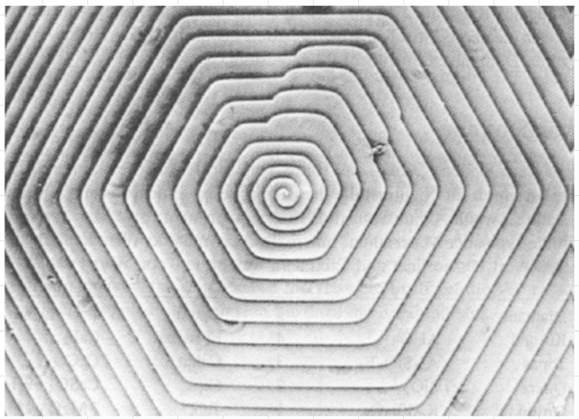


Beim Kristallwachstum bilden sich Facetten aus.

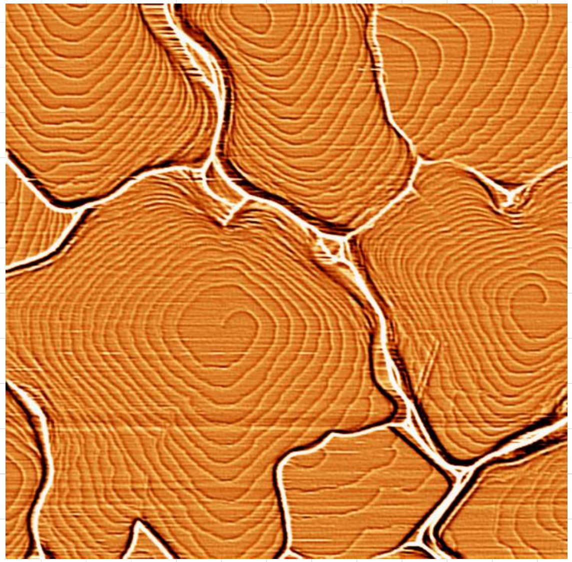


Um das Wachstum auf einer perfekten Facette fortzusetzen, muss ein zweidimensionaler Keim gebildet werden. Dazu ist Keimbildungsarbeit nötig. Die berechnete Unterkühlung der Schmelze notwendig zur Bildung eines Keims war früher stets viel zu groß. Lösung durch Frank 1949: In Anwesenheit von Schraubenversetzungsdurchstoßpunkten ist keine Keimbildung nötig. Es bilden sich Wachstumsspiralen

SiC-Wachstumsspirale



Wachstumsspiralen in einer polykristallinen Perylenschicht



3 Beugung

Um die Beugung von elektromagnetischen Wellen oder Materiewellen an Kristallen angemessen zu beschreiben, müssen wir uns mit dem Begriff des reziproken Gitters beschäftigen, d.h. mit dem Raum der Wellenvektoren, die mit dem Gitter verträglich sind.

3.1 Das reziproke Gitter

Für einen 1D - Kristall mit primitiver Translation $\underline{a}$ können wir eine beliebige gitterperiodische Funktion $f(x) = f(x + ma)$ $m \in \mathbb{Z}$ als Fourierreihe darstellen: $f(x) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} f_n \, e^{i n \frac{2\pi}{a} \cdot x}$

Also als Linearkombination ebener Wellen mit Wellenvektoren $k_n = n \frac{2\pi}{a}$

Die Entwicklungskoeffizienten f_n sind

$$f_n = \frac{1}{a} \int_0^a f(x)\, e^{-in\frac{2\pi}{a}x}\, dx$$

Ganz analog können wir für eine 3D-gitterperiodische Funktion $f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$ wo $\vec{R}$ eine beliebige Gittertranslation ist, schreiben

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}}\, e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

und Fourierkoeffizienten $f_{\vec{G}} = \frac{1}{V_{Zelle}} \int_{V_{Zelle}} f(\vec{r})\, e^{-i\vec{G}\vec{r}}\, d^3r$

Wegen der Gitterperiodizität $f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R})$ muss gelten

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}}\, e^{i\vec{G}\vec{r}} = \sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}} \cdot \underbrace{e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}}} = f(\vec{r}+\vec{R})$$

und zwar für alle $\vec{R}$ $\Rightarrow$ $e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1$ für alle $\vec{R}$ und jedes $\vec{G}$

Wir definieren die Menge aller Vektoren $\vec{G}$, die die Bedingung

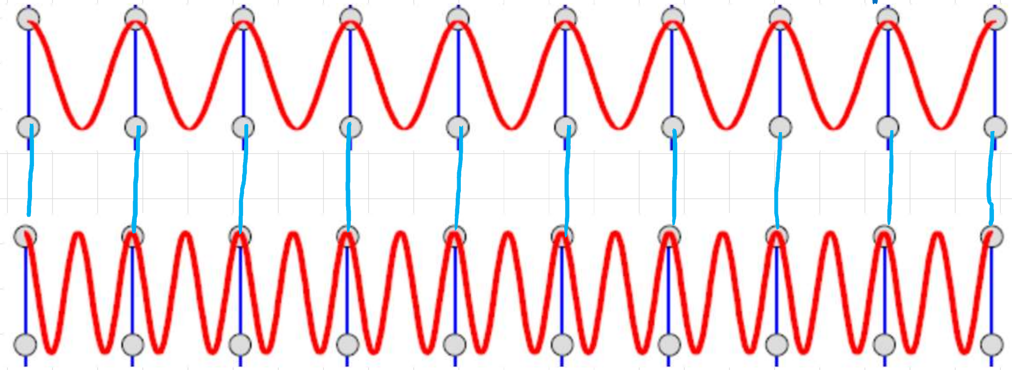
$$\boxed{e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1}$$

für alle $\vec{R}$ eines Bravais Gitters erfüllen, als das zu diesem Gitter reziproke Gitter. Nur zu diesen Vektoren $\vec{G}$ gibt es Fourierkoeffizienten.

Die Vektoren $\vec{G}$ sind Wellenvektoren, die auf allen Gitterpunkten die gleiche Phase haben. $e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1 \Rightarrow \vec{G}\cdot\vec{R} = n\cdot 2\pi \quad n\in\mathbb{Z}$

BSP: 2 Wellen mit Wellenvektoren aus dem reziproken Gitter des einfach kubischen Gitters $\lambda = a$, $k = \frac{2\pi}{a}$

$\lambda = \frac{a}{2}$, $k = \frac{4\pi}{a}$



Satz:

Die Vektoren $\vec{G}$ des reziproken Gitters lassen sich als

$$\vec{G} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 \vec{b}_3 \qquad k_i \in \mathbb{Z}$$

darstellen, d.h. das reziproke Gitter ist ein Bravais Gitter

Beweis: Definiere

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{2\pi}{V_{Zelle}} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_{Zelle}} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1); \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_{Zelle}} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)$$

Da $\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \vec{a}_3 (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)$ ist

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \qquad i,j = 1,2,3$$

Sei nun $\vec{G}$ ein beliebiger Vektor $\vec{G} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 \vec{b}_3$
und $\vec{R}$ ein beliebiger Vektor $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ des Bravais Gitters
dann ist

$$\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi \underbrace{\left(k_1 \cdot n_1 + k_2 n_2 + k_3 n_3 \right)}_{\in \mathbb{Z}}$$

$\in \mathbb{Z}$ da k_i und $n_i \in \mathbb{Z}$

Also $e^{i \vec{G} \cdot \vec{R}} = 1$ und $\vec{G}$ ist Vektor des reziproken Gitters.

Das zu einem reziproken Gitter reziproke Gitter ist das Originalgitter!

Denn reziprokes Gitter zu $\vec{G}$ ist Menge aller $\tilde{\vec{R}}$ mit

$$e^{i\tilde{\vec{R}}\vec{G}} = 1 \quad \text{für alle } \vec{G}$$

Das gilt für alle $\vec{R}$. Also $\vec{R} \subset \tilde{\vec{R}}$. Gäbe es einen Vektor $\vec{r} \in \tilde{\vec{R}} \wedge \vec{r} \notin \vec{R}$

dann wäre $\vec{r} = x_1 \vec{a}_1 + x_2 \vec{a}_2 + x_3 \vec{a}_3$ mit einem $x_i \notin \mathbb{Z}$

Dann wäre $e^{i\vec{r}\vec{b}_i} = e^{i2\pi x_i} \neq 1$

<u>Beispiel</u>: Einfach kubisches Gitter $\vec{a}_1 = a\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}$; $\vec{a}_2 = a\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}$; $\vec{a}_3 = a\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$

primitive Translation des rez. Gitters:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_{Zelle}}\left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right) = \frac{2\pi}{a^3} a^2 \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}; \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

Reziprokes Gitter zu sc-Gitter ist sc Gitter!