repetition

defects in crystals : small defects in long-range order

0-dim violation of order : point-def

impurities

1-dim dislocation screw-dislocation

edge-dislocation

4.2 Versetzungen

Identifiziert durch Burgers-Vektor (?)

(Stufen-V. $\vec{b} \perp \vec{a}$, Schrauben-V. $\vec{b} \parallel \vec{a}$)

Regel für Versetzungen (ähnlich Kirchhoff-Regeln)

$$\vec{b}_1 + \vec{b}_2 + \vec{b}_3 = 0$$

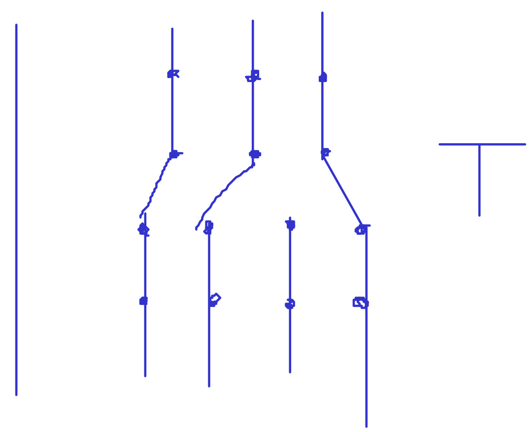
⇒ Versetzungen können erzeugt und vernichtet werden (paarweise)

Stabile Versetzungen:

– ⊥ T Dipol

Zusätzliche Ebene

– T ⊥ T ⊥ Multipol



⇒ verändern mechanische Eigenschaften

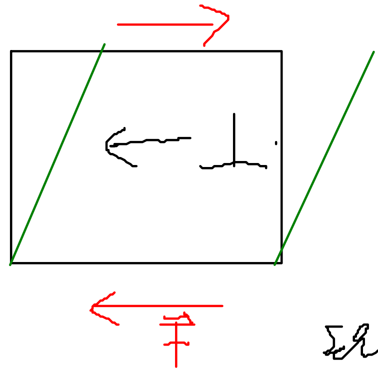
Versetzungen sind wichtig beim Wachstum von Kristallen

→ Wachstum beginnt an Kanten / Stufen bevorzugt ⇒ es kann ein Einkristall in bestimmte Richtung entstehen

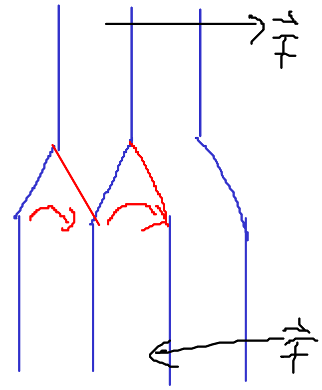
Bsp. Whiskers (lange, dünne Kristalle)

4.2.1 Plastische Deformation

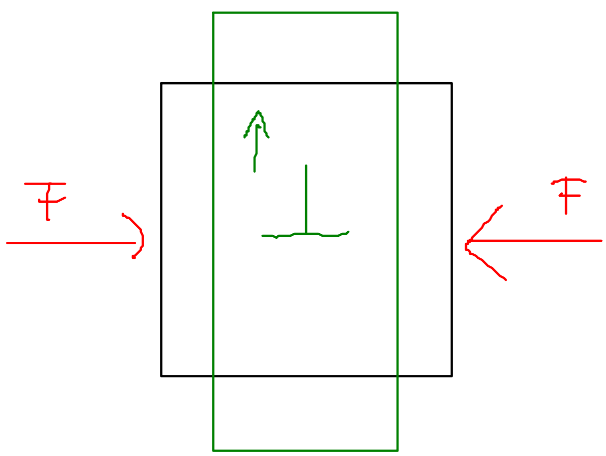
Differenzierung zwischen plastisch und elastisch



Schubspannung



Versetzung wandert nach links

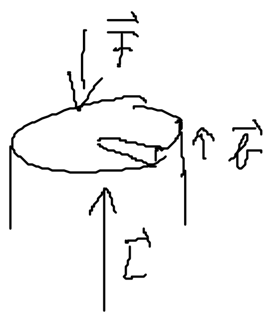


$\hat\sigma$ Verzerrungstensor, 3×3

$\vec b$ Versetzungsvektor
Burgers-Vekt.

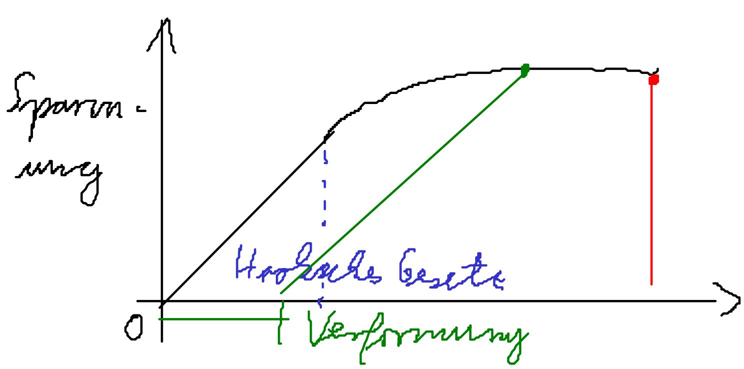
$\vec L$ Achse d. Kristalls (?)

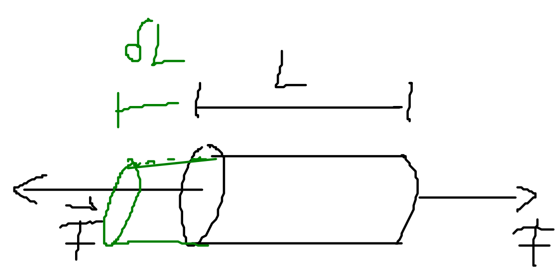
$$\Rightarrow \quad \vec F = (\hat\sigma \cdot \vec b) \times \vec L$$



für Schraubenversetzung
$\vec b \parallel \vec L$ ⇒ keine Versetzung bei Krafteinwirkung
⇒ hohe Stabilität

— Hookesches Gesetz





Dehnung $\frac{\delta L}{L}$

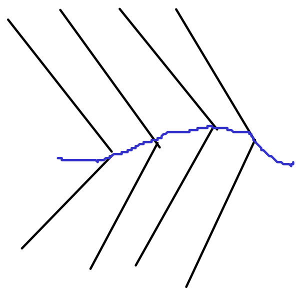
Verformung ist irreversibel, Versetzungen wandern so, dass der Stab länger wird

Zerstörung, Kristall kaputt

Harter oder Elastisch Metalle: Zahl der Versetzungen beeinflussen

4.3 2D Versetzungen

kleine Winkel / **Korngrenze**



Ebenen leicht zueinander gedreht

Stapelfehler **fcc – hcp**

Ebenen in Richtung $\underbrace{ABC}_{fcc}\ \underbrace{ABC}_{fcc}\ \underbrace{\underbrace{AB}_{hcp}\ \underbrace{AB}_{hcp}}_{\text{Stapelfehler}}\ \underbrace{ABC}_{fcc}\ \ldots$

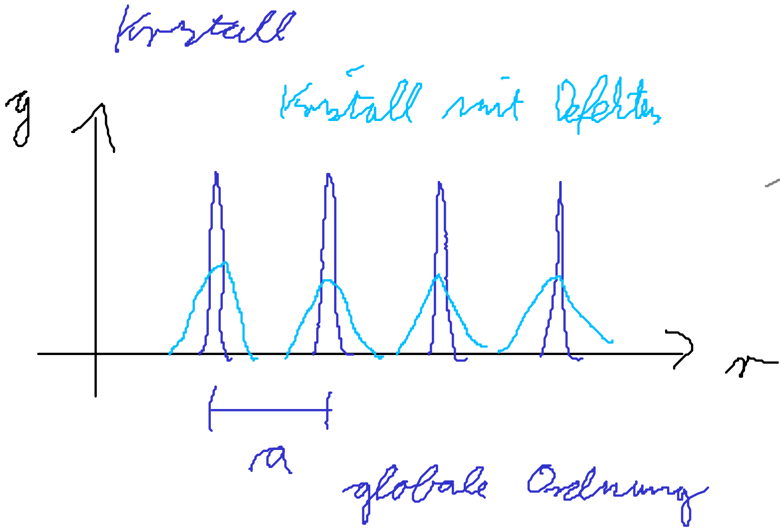
4.4 amorphe Materialien

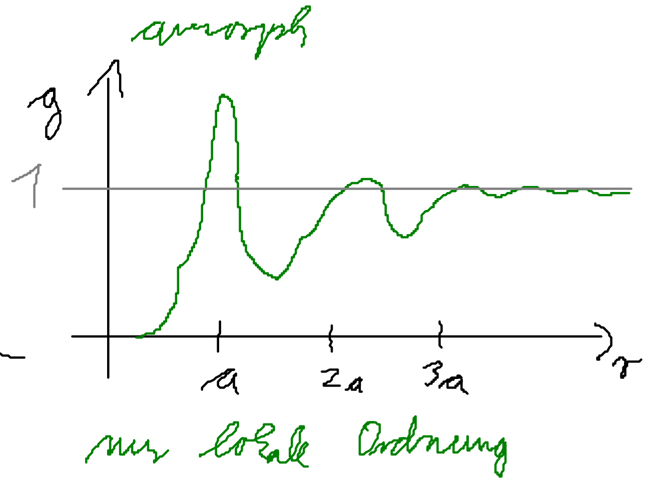
Paarverteilungsfunktion (Paarkorrelationsfunktion)

$g(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ – Wahrscheinlichkeit, im Abstand $|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$ ein Atom zu finden

$$= \frac{1}{n_0^2} \langle n(\vec{r}_1) - n(\vec{r}_2) \rangle$$

Gesamtzahl der Atome im Material





Bsp. Glas ist amorphes SiO_2

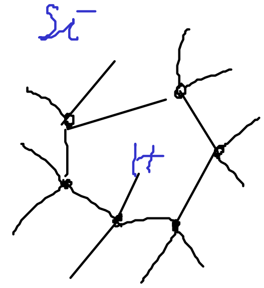
amorpher Zustand kann von allen Metallen erzeugt werden:

sehr schnelles abkühlen der flüssigen Phase

(z.B. magnet. Schicht auf Festplatten)

(oft wird "Glas" allgemein als Bezeichnung für amorphe Materialien verwendet)

Bsp amorphes Si



Si •

freie sp^2 - Bindung wird von H - Atom besetzt

6 elastische Eigenschaften

Beschreibung durch makroskopische Größen

Verformung $\vec{r} \longrightarrow \vec{r} + \vec{u}(\vec{r})$

└ Tensor-Rechnung benötigt

Freie Energie $F = \int d\vec{r}\, \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} E_{\alpha\beta\gamma\delta} \frac{\partial u_\alpha(\vec{r})}{\partial r_\beta} \cdot \frac{\partial u_\gamma(\vec{r})}{\partial r_\delta}$

Summe zählt doppelt

Tensor

$\alpha, \beta, \gamma, \delta \in x, y, z$

E hat 3^4 Komponenten $= 81$ Komponenten

(ist uns zu viel)

E muss symmetrisch sein unter vertauschen von

$$\alpha\beta \Longleftrightarrow \gamma\delta \quad \Rightarrow \quad 45 \text{ Komponenten}$$

E invariant unter Drehung

$$E_{\alpha\beta\gamma\delta} - E_{\beta\alpha\gamma\delta} - E_{\alpha\beta\delta\gamma} + E_{\beta\alpha\delta\gamma} = 0$$

$\Rightarrow$ 21 unabh. Komponenten

Dehnungs-Tensor (strain tensor)

$$[e] = \overleftrightarrow{e} = e_{\alpha\beta}$$

versch. Schreibweisen

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial r_\alpha}\right]$$

symmetrie

Bsp: $e_{xx} = \dfrac{\partial u_x}{\partial r_x}$

$$F = \sum_{\alpha\beta} \int d\vec{r}\, \frac{1}{2}\, \underbrace{e_{\alpha\beta}}_{\text{Dehnung}}\, \underbrace{\sigma_{\alpha\beta}}_{\text{"Kraft" = Spannungstensor}}$$

Spannungstensor

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta}\, e_{\gamma\delta}$$

$$\boxed{F \propto \frac{1}{2} k \underset{\overset{\updownarrow}{e^2}}{x^2}}$$

$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{1}{4}\left(E_{\alpha\beta\gamma\delta} + E_{\beta\alpha\gamma\delta} + E_{\alpha\beta\delta\gamma} + E_{\beta\alpha\delta\gamma}\right)$$

so viel zur formalen Beschreibung

für kubische Symmetrie

$$\rho\, \ddot{u}_\alpha(\vec{r}) = \underbrace{f_\alpha(\vec{r})}_{\text{Elastizitätskraft}} = \sum_\beta \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}(\vec{r})}{\partial r_\beta}$$

def. $C_{\alpha\alpha\alpha\alpha} = C_{11}$ $\quad C_{\alpha\alpha\beta\beta} = C_{12}$

$C_{\alpha\beta\alpha\beta} = C_{44}$

die 27 Komponenten lassen sich im kubischen Kristall auf 3 reduzieren (daher der ganze formale Kram)

für isotrope Materialien gilt auch noch

$C_{11} - C_{12} = C_{44}$ $\Rightarrow$ nur noch 2 Komponenten

(sog. Lamé-Konstanten)

$\lambda = C_{12}$ $\quad \mu = C_{44}$ $\quad / \; C_{11} = \mu + \lambda$

insgesamt erhält man für isotrope, kubische Kristalle

$$F = \frac{1}{2} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2)$$

$$+ \frac{1}{2} C_{44} (e_{xz}^2 + e_{zx}^2 + e_{xy}^2)$$

$$+ C_{12} (e_{yy} e_{zz} + e_{zz} e_{xx} + e_{xx} e_{yy})$$

Volumenkompression

$$e_{xx} = e_{yy} = e_{zz} = \frac{1}{3} \delta'$$

$$F = \frac{1}{6}\left(C_{11} + 2 C_{12}\right) \delta^2$$

elastische Module lassen sich ableiten

Kompressionsmodul B

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2 C_{12})$$ $\left(F = \frac{1}{2} B x^2\right.$, wie Hookesches Gesetz$\left.\right)$

$$= \frac{1}{3}(3\lambda + 2\mu)$$

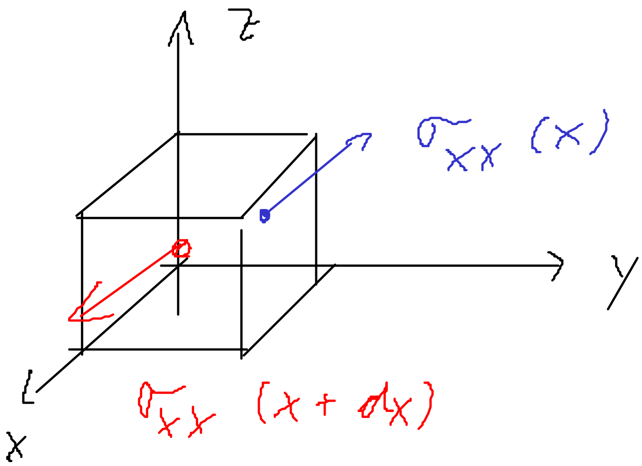
Kompressibilität $\varkappa$

$$\varkappa = \frac{1}{B} = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p}$$ (aus Thermodynamik)

Young - Modul (Modul E)

$$E = \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \sim \frac{\text{Spannung}}{\text{Dehnung}} = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu}$$

Schallwellen



$$dF_x = \left[\sigma_{xx}(x+dx) - \sigma_{xx}(x)\right] dy\,dz$$

$$= \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x}\, dx\, dy\, dz$$

$$= \rho \frac{d^2 u_x}{dt^2} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x}$$

$$m = \rho\, dx\, dy\, dz$$

$$\sigma_{xx} = C_{11}\, e_{xx} = C_{11} \frac{\partial u_x}{\partial x}$$

$$\Rightarrow \quad \rho \frac{d^2 u_x}{dt^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2}$$

$\Rightarrow$ Wellengleichung