

VORLESUNG MATERIALWISSENSCHAFTEN

138.016

Ernst Bauer
Christoph Eisenmenger-Sittner
Josef Fidler

Institut für Festkörperphysik, TU Wien

17. Okt. 2007

Vorlesungsinhalt

1) Kristallstrukturen

*Translationsgitter, Punktsymmetrien, Kristallklassen
Symmetrie, Einfache Kristallstrukturen, Bindungen,
Defekte, Gefüge, Reziprokes Gitter*

2) Beugung und Strukturbestimmung

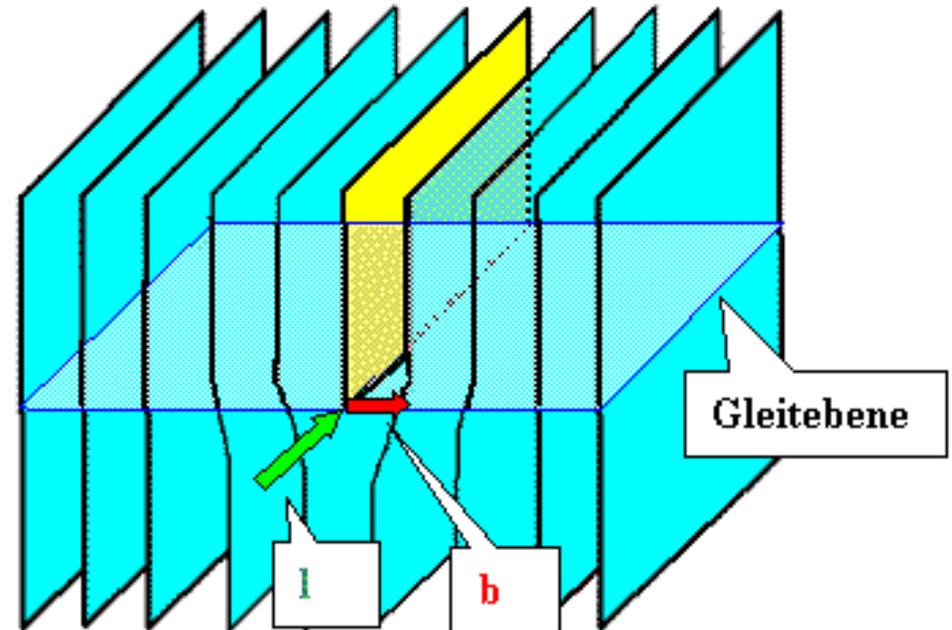
*Braggsche Beugung, Elastische Streuung, Streuung am
einzelnen Atom, Beugung an periodischen Strukturen,
Grundlagen der Strukturanalyse, Experimentelle
Grundbegriffe, Röntgenbeugung, Elektronen- und
Neutronenstreuung*

3) Mehrstoffsysteme

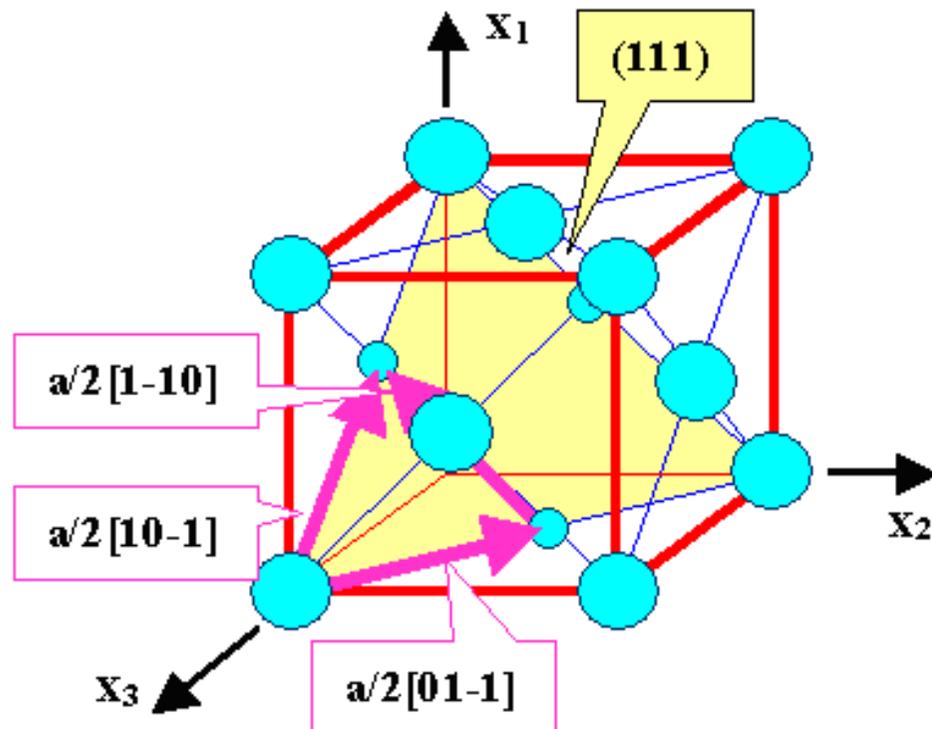
4) Makroskopische Eigenschaften von Festkörpern, und Grenzflächen und ihre Bestimmung

Gleitebene einer Versetzung

- Jede Versetzung hat eine **Gleitebene**; sie wird aufgespannt durch *Linien-* und *Burgers*vektor. Die Illustration zeigt dies für den einfachen Fall einer reinen Stufenversetzung
- Versetzungen sind *nur* auf ihrer Gleitebene relativ leicht beweglich.
- Bei reinen **Schraubenversetzungen** sind Burgersvektor und Linenvektor parallel - damit kann jede Ebene eine Gleitebene sein.



Gleitsysteme - fcc

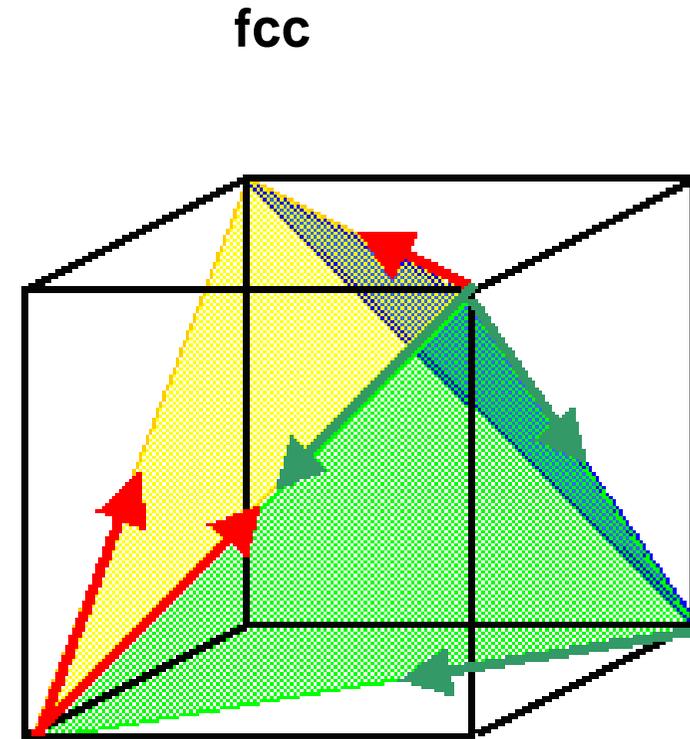


	fcc	bcc	hcp
Dichtest gepackte Ebenen	{111}		
Anzahl	4 (111), (-111), (1-11), (-1-11)		
Kürzestmöglicher b Vektor	$a/2\langle 110 \rangle$		
Anzahl pro Gleitebene	3 Auf (111): $a/2[1-10]$, $a/2[10-1]$, $a/2[01-1]$		
Anzahl Gleitsysteme	12 (= 3 · 4)		

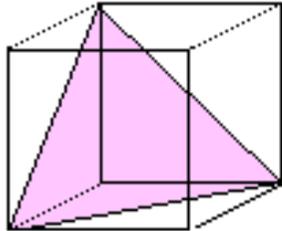
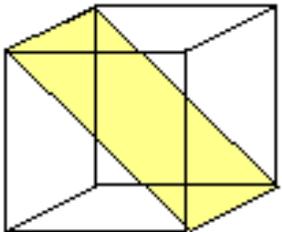
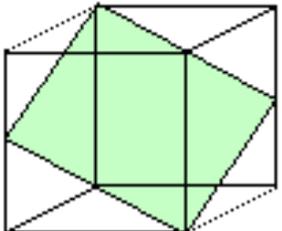
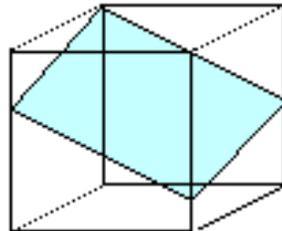
Übungsbeispiel

Gleitsysteme

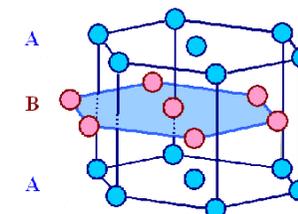
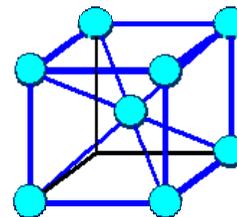
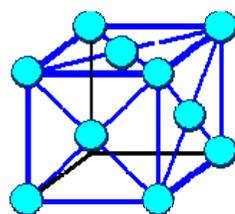
- *Bevorzugte* Burgersvektoren sind die *kürzest möglichen Gittervektoren*, und *bevorzugte* Gleitebenen sind die *dichtest gepackten Ebenen*.
- Damit gibt es eine vom Kristalltyp abhängige bestimmte Zahl an möglichen **Abgleitungen**, d.h. der Verschiebung eines Teils eines Kristalls relativ zu einem andern gekennzeichnet durch die *Ebene* auf der die Verschiebung stattfindet und die *Richtung* der Verschiebung auf dieser Ebene.

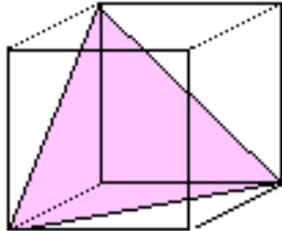
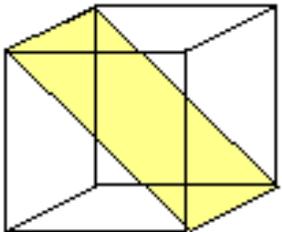
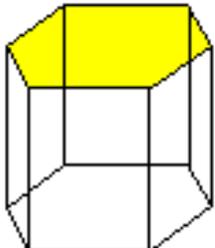
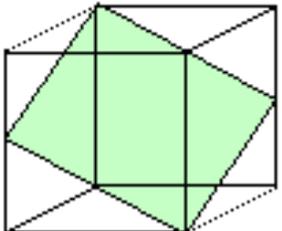
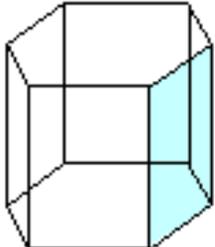
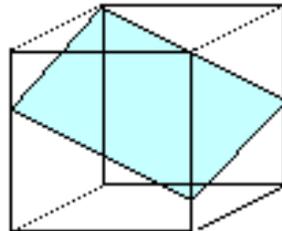
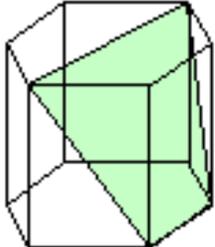


Mehrere $\{111\}$ Ebenen sind erkennbar. Außerdem wird klar, dass jeder mögliche Burgersvektor zu *zwei* Gleitebenen gehört.

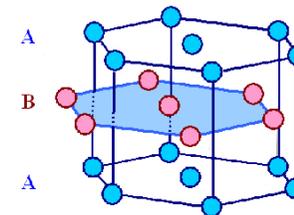
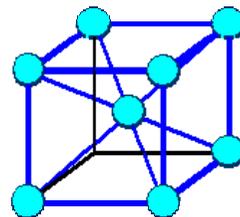
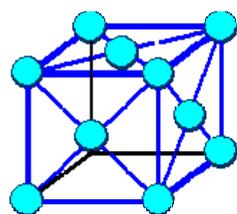
	fcc	bcc		hcp	
Dichtest gepackte Ebenen	$\{111\}$ 	$\{110\}$ 	a- Fe, W, Mo, b-Messing		
		$\{211\}$ 	a- Fe, W, Mo, Na		
		$\{321\}$ 	a- Fe, K		

Bemerkungen	Keine anderen Ebenen haben ähnlich hohe Packungsdichten.	Die {110} Ebene ist zwar am dichtesten gepackt, aber die beiden anderen sind ähnlich. Die {211} Ebene enthält Stapelfehler (falls vorhanden). Alle Ebenen enthalten den <111> Typ Burgersvektor
Anzahl	4 (111), (-111), (1-11), (-1-11)	{110}: 6 {211}: 12 {321}: 24
Kürzestmöglicher <u>b</u> Vektor	$a/2\langle 110 \rangle$	$a/2\langle 111 \rangle$
Anzahl pro Gleitebene	3 Auf (111): $a/2[110]$,	{110}: 3 {211}: 1 {321}: 1
Anzahl Gleitsysteme	12 (= 3 · 4)	{110}: 12 = 6 · 2 {211}: 12 = 12 · 1 {321}: 24 = 24 · 1



	fcc	bcc		hcp	
Dichtest gepackte Ebenen	$\{111\}$ 	$\{110\}$ 	a- Fe, W, Mo, b-Messing	$\{0001\}$ 	Cd, Zn, Mg, Be, Al ₂ O ₃
		$\{211\}$ 	a- Fe, W, Mo, Na	$\{10-10\}$ 	Ti, Zr
		$\{321\}$ 	a- Fe, K	$\{10-11\}$ 	Ti, Mg (selten)

Bemerkungen	Keine anderen Ebenen haben ähnlich hohe Packungsdichten.	Die {110} Ebene ist zwar am dichtesten gepackt, aber die beiden anderen sind ähnlich. Die {211} Ebene enthält Stapelfehler (falls vorhanden). Alle Ebenen enthalten den <111> Typ Burgersvektor	Man spricht von "Basis"-, "Prismen"- und "Pyramiden"gleitung. Ohne Gleitung auf einer Nicht-Basisebene <u>keine allgemeine Verformung!</u>
Anzahl	4 (111), (-111), (1-11), (-1-11)	{110}: 6 {211}: 12 {321}: 24	{0001}: 1 {10-10}: 3 {10-11}: 6
Kürzestmöglicher b Vektor	$a/2\langle 110 \rangle$	$a/2\langle 111 \rangle$	$1/3\langle 11-20 \rangle$
Anzahl pro Gleitebene	3 Auf (111): $a/2[110]$,	{110}: 2 {211}: 1 {321}: 1	{0001}: 3 {10-10}: 1 {10-11}: 1
Anzahl Gleitsysteme	12 (= 3 · 4)	{110}: 12 = 6 · 2 {211}: 12 = 12 · 1 {321}: 24 = 24 · 1	{0001}: 3 = 1 · 3 {10-10}: 3 = 3 · 1 {10-11}: 6 = 6 · 1



Gleitsysteme und plastische Verformung

- Viele Gleitsysteme in einem Kristall bedeuten, dass es relativ einfach ist in jede gewünschte Richtung Abgleitung zu produzieren. Entweder ist eines der Gleitsysteme bereits zufällig richtig orientiert, oder man muss einige Gleitsysteme kombinieren.
- Ein allgemeiner Satz der Topologie sagt, dass man mindestens **5** unabhängige Gleitsysteme braucht, um jede *beliebige* Verformung durch geeignete Überlagerungen von Abgleitungen auf den verfügbaren Ebenen zu erhalten. Schon hier wird also klar, warum hexagonale Metalle, insbesondere **Mg**, **Zn** und **Co**, vergleichsweise schwer verformbar sind, während die **fcc** Metalle leicht verformen und deshalb "weich" erscheinen.

Versetzungsenergie

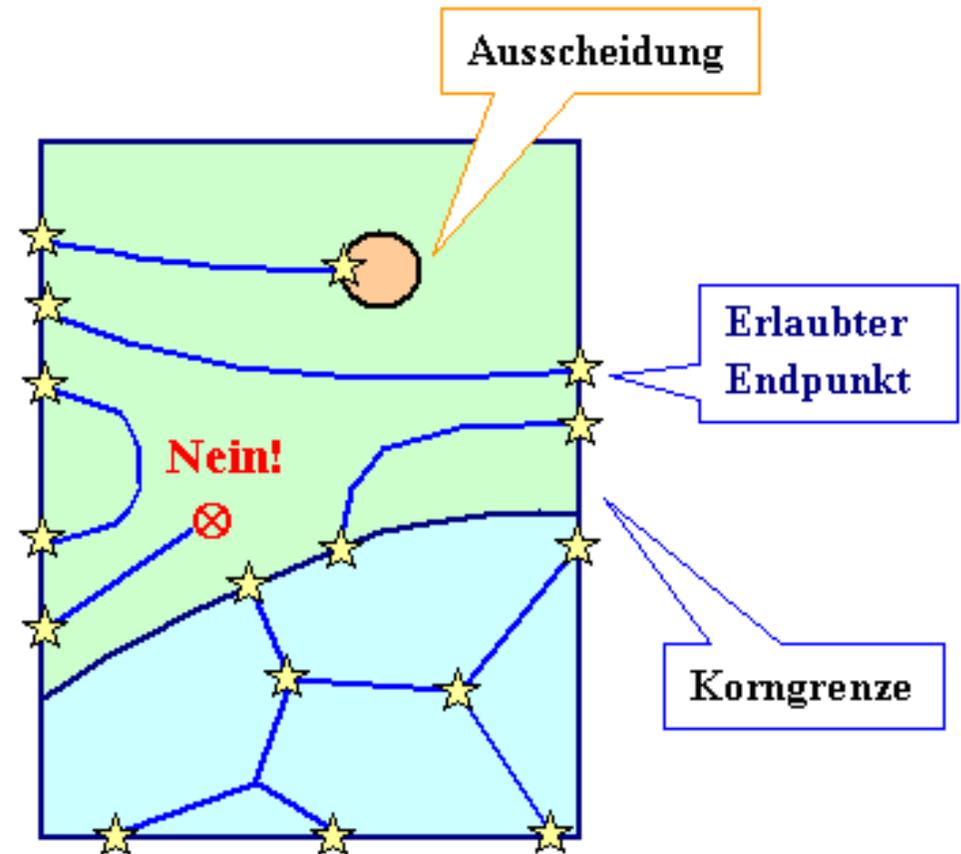
- Eine Versetzung hat eine Energie pro Längeneinheit, genannt **Linienenergie**:

$$E_{VS} \approx G \cdot b^2 \quad , \quad \text{mit } G \text{ als Schubmodul}$$

- Falls der Kristall seine Versetzungen nicht verschwinden lassen kann, wird er ein metastabiles Gleichgewicht mit *minimierter* Versetzungsenergie anstreben
- Der Burgersvektor hat immer den *kleinsten möglichen* Wert der für Translationsvektoren des Gitters zugelassen ist. (Wegen $[\underline{\mathbf{b}}_1 + \underline{\mathbf{b}}_2]^2 > \underline{\mathbf{b}}_1^2 + \underline{\mathbf{b}}_2^2$, d.h. größere Burgersvektoren dissoziieren in kleinere).
- Die Versetzung verläuft möglichst *gerade*, d.h. minimiert die Länge - sie verhält sich wie ein gespanntes Gummiband.
- Die Versetzung dreht sich so, dass sie möglichst viel *Schrauben*charakter hat.

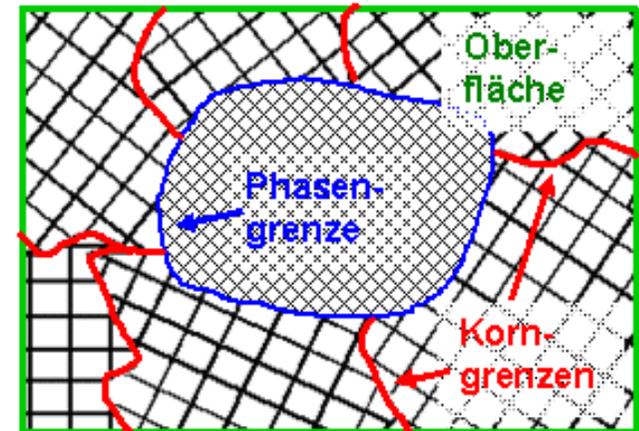
Versetzungsknoten

- Die Versetzungsknoten des Versetzungsnetzwerks sind häufig unbeweglich – das erklärt, warum die Versetzungen den Kristall nicht verlassen können.
- Mechanische Spannungen üben *Kräfte* auf Versetzungen aus, wobei nur die Komponente in der Gleitebene senkrecht zur Versetzungslinie wichtig ist, da nur sie zu einer *Versetzungsbewegung* führt.



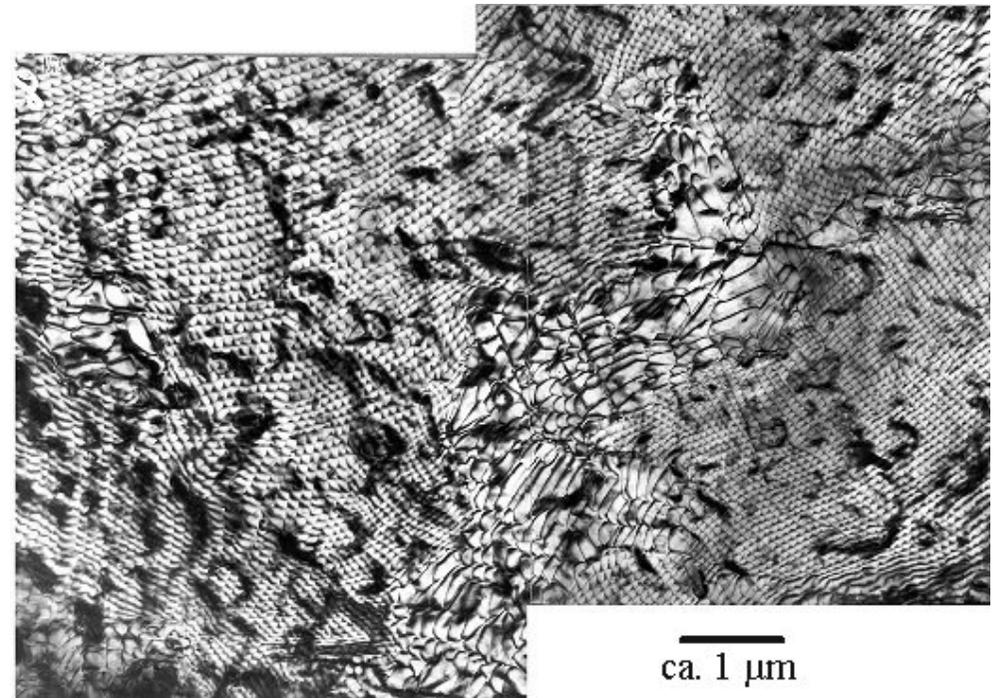
Flächenhafte Defekte

- **Phasengrenze:**
Grenzfläche zwischen zwei verschiedenen (im Sprachgebrauch i.d.R. festen) Körpern
- **Korngrenze:**
Grenzfläche zwischen identischen, aber zueinander beliebig orientierten Kristallen.
- **Stapelfehler:**
Grenzfläche zwischen zwei identischen und sehr speziell zueinander orientierten Kristallen.
- **Antiphasengrenze:**
Stapelfehler in der Überstruktur
- **Zwillingsgrenze:**



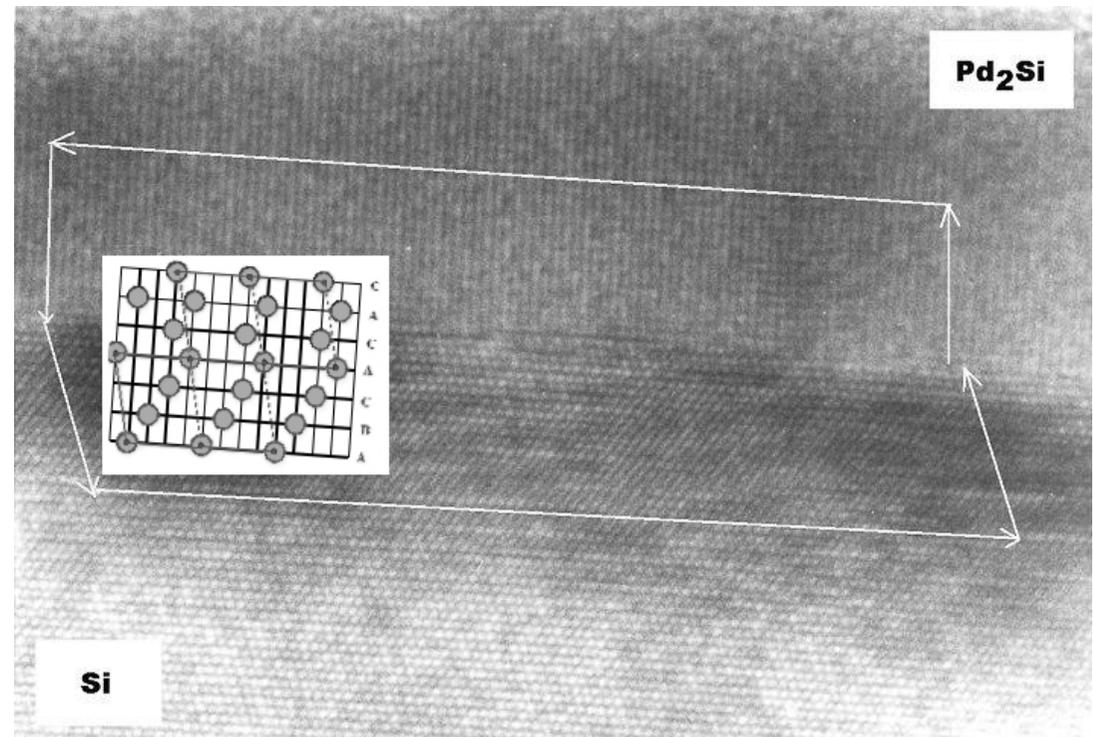
Feinstruktur von Phasengrenzen I

- Phasengrenze zwischen einkristallinem Silizium und Nickeldisilizid (**Si - NiSi₂**)
- Hier stoßen zwei kubische Gitter mit verschiedener Basis und leicht verschiedenen Gitterkonstanten in derselben Kristallorientierung (hier **{111}**) "**epitaxial**" aufeinander. In der Phasengrenze bildet sich ein dichtes Netzwerk von so genannten "**Misfit-Versetzungen**"



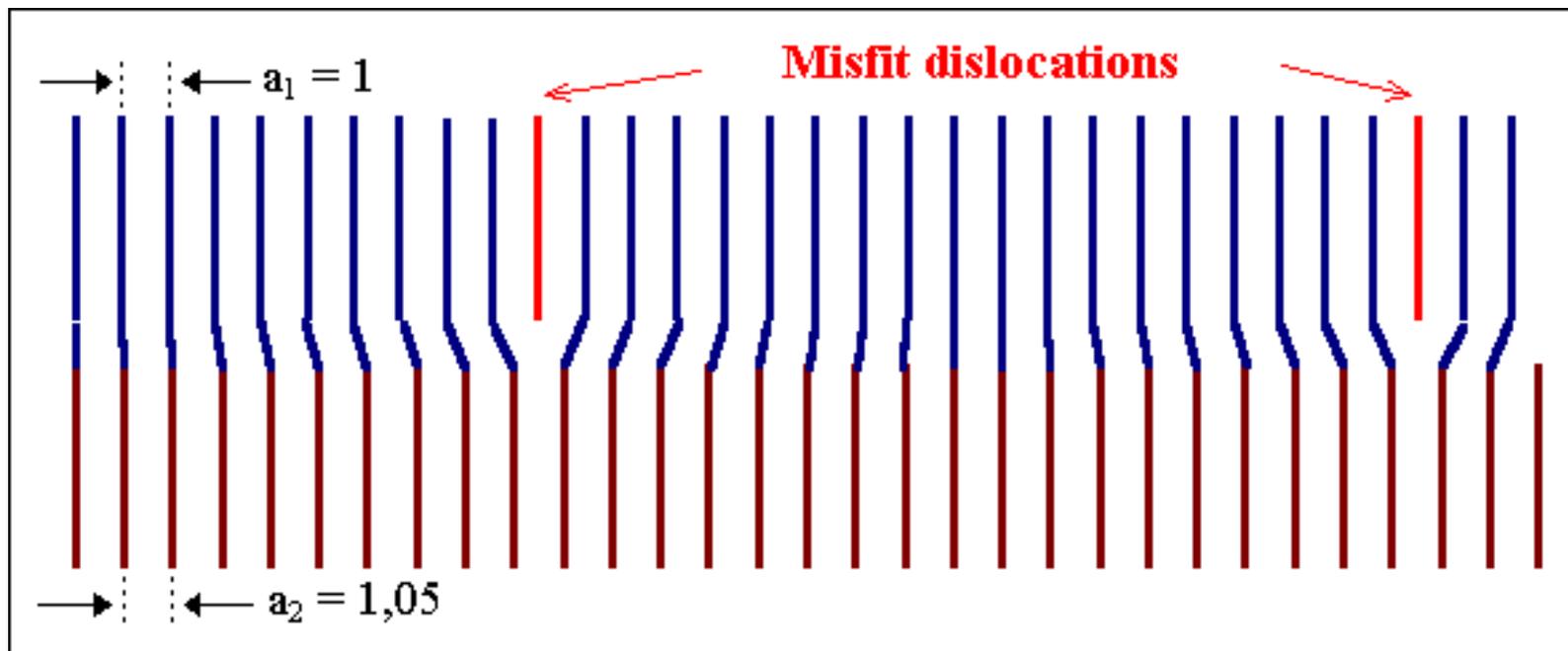
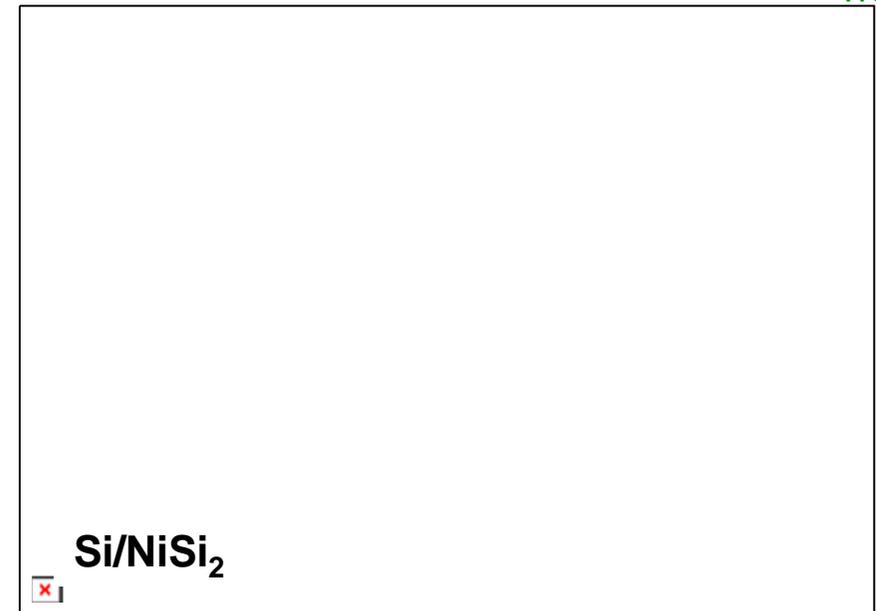
Feinstruktur von Phasengrenzen II

- Phasengrenze **Si - PdSi₂**.
- Hier stößt das *kubische* **Si** - Gitter (oben; in $\langle 110 \rangle$ - Projektion) auf das *hexagonale* Gitter des **PdSi₂** (unten); ein einfaches Modell der Grenzfläche ist im Einsatz gezeigt.
- Obwohl die Atome fast sichtbar sind, bleibt die genaue Struktur der Phasengrenze in diesem Bild noch unklar. Mit weiteren Bildern lässt sich aber herausfinden, dass auch hier Misfit Versetzungen in sehr hoher Dichte in die Grenzfläche eingebaut sind.



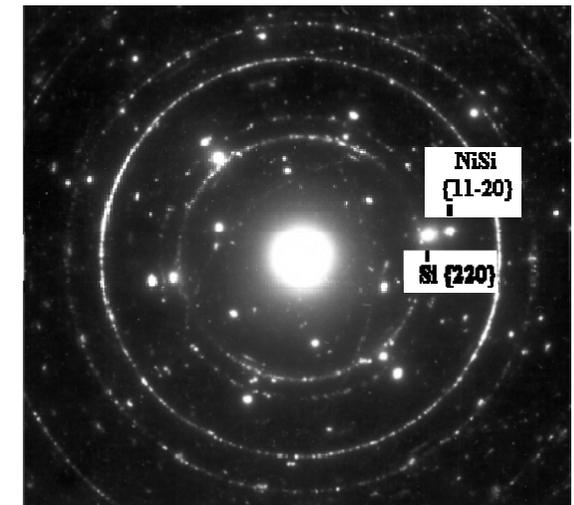
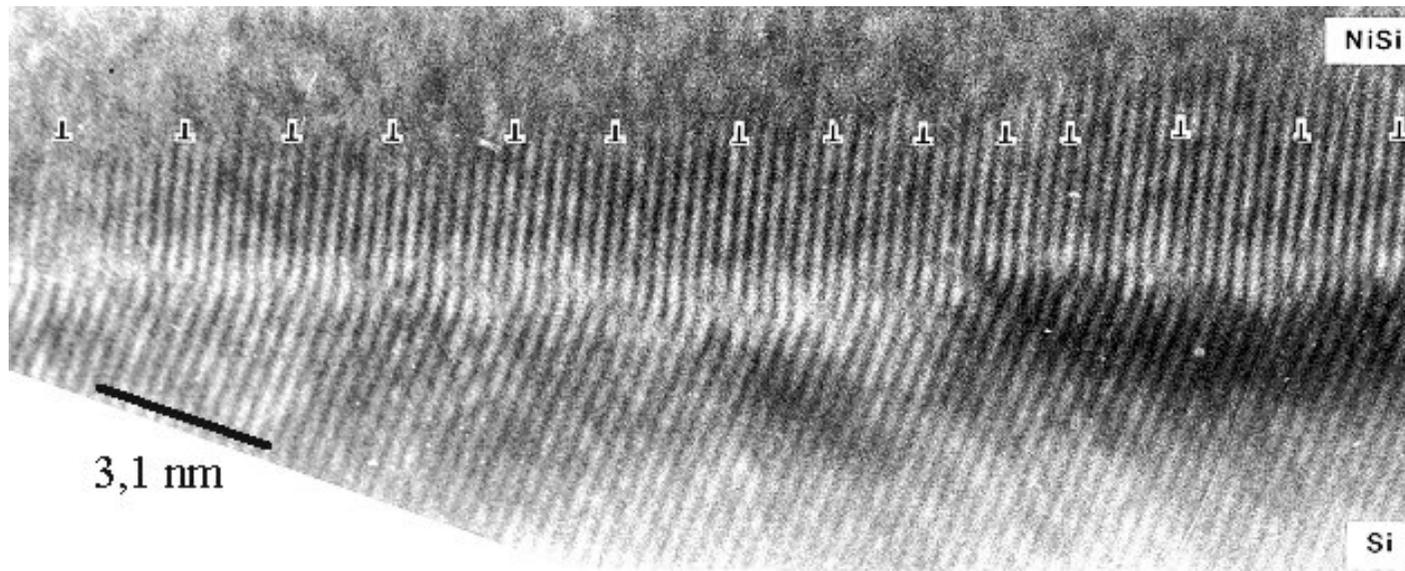
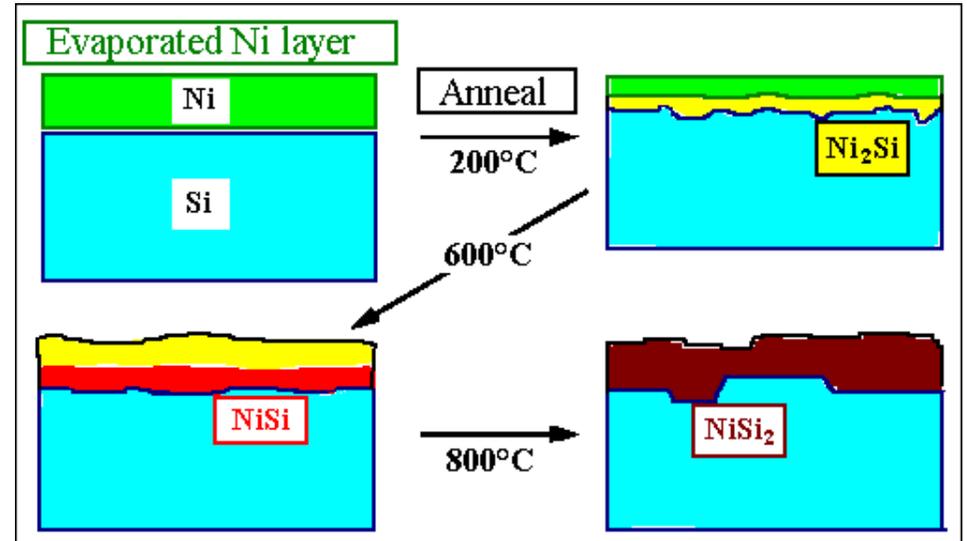
Misfit-Versetzungen

- Misfit-Versetzungen kompensieren den Gitterkonstantenunterschied an der Phasengrenze



Beispiel: „Ni-silicides“

- Abscheidung von **Ni** auf **Si** (entweder in a **{100}** or **{111}** Orientierung) und Wärmebehandlung

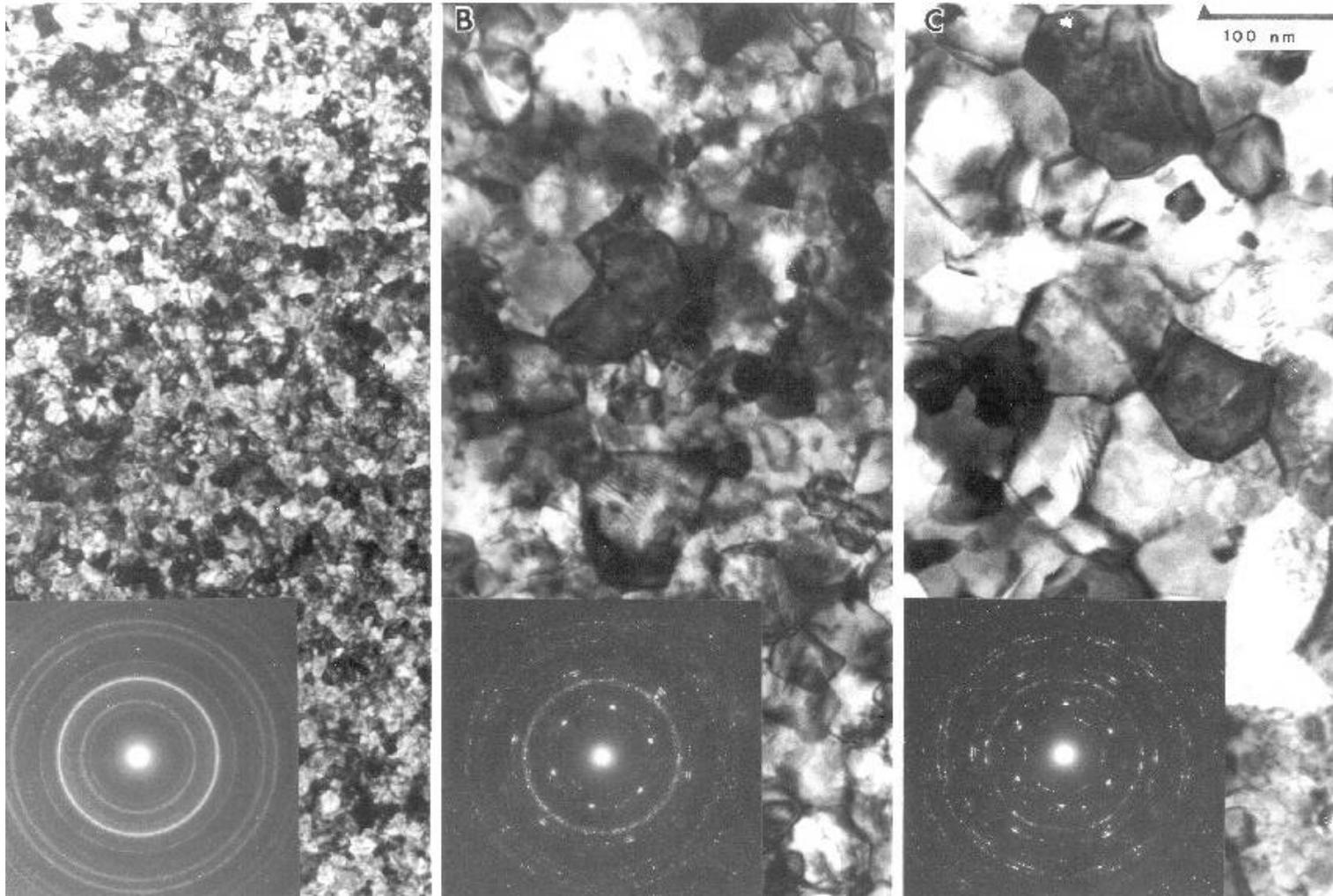


Korngrenzen

- Korngrenzen sind per definitionem die (meist beherrschenden) Defekte in **Polykristallen**, während sie - ebenfalls per definitionem - in **Einkristallen** nicht vorkommen.
- Fast alle natürlicherweise vorkommenden Kristalle sind Polykristalle
- Einkristalle sind selten und dann oft kostbar; man denke an die Edelsteine.



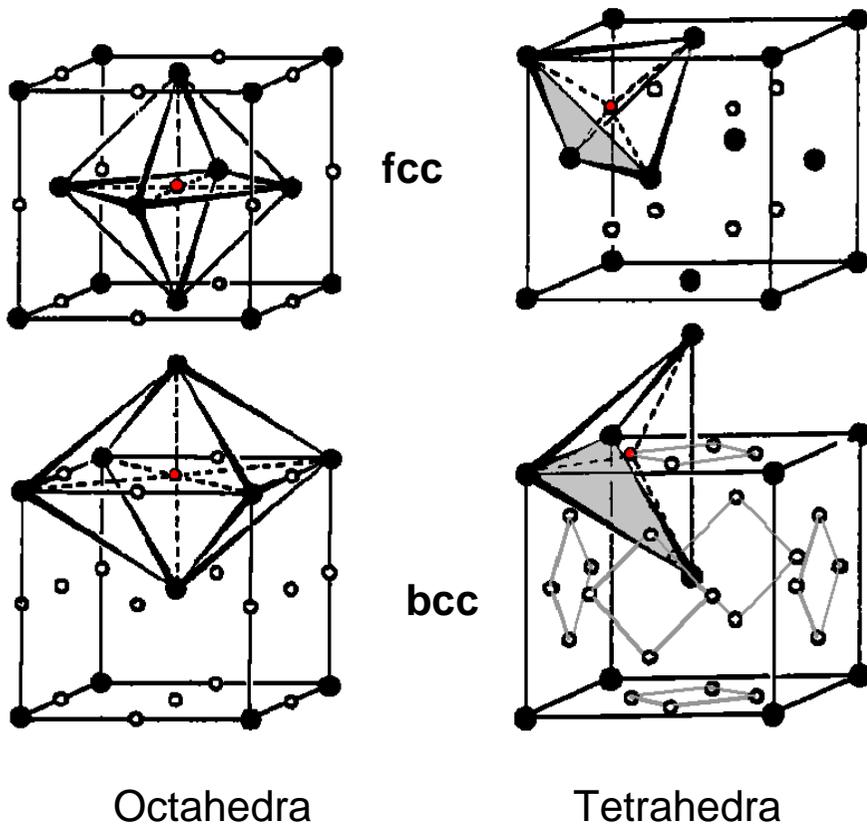
Beispiel: PtSi Film



Temperatur →

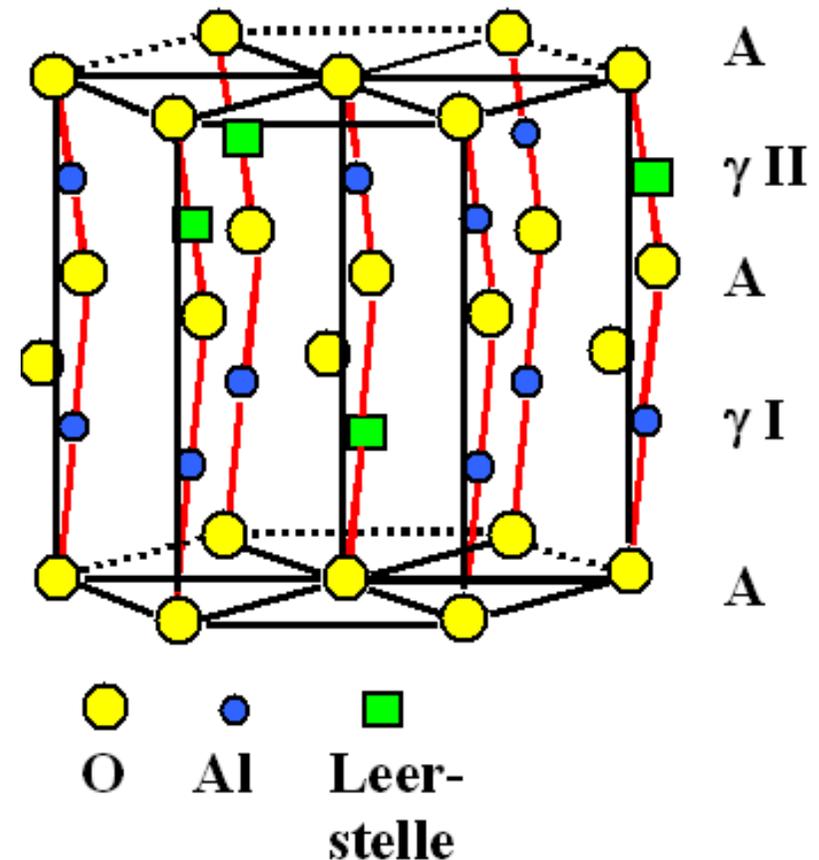
Einkristalle (Beispiel: Diamant)

- Wieso wohl sind es *Oktaeder* und keine *Wüfel*, wo sie doch *kubische* Symmetrie haben?

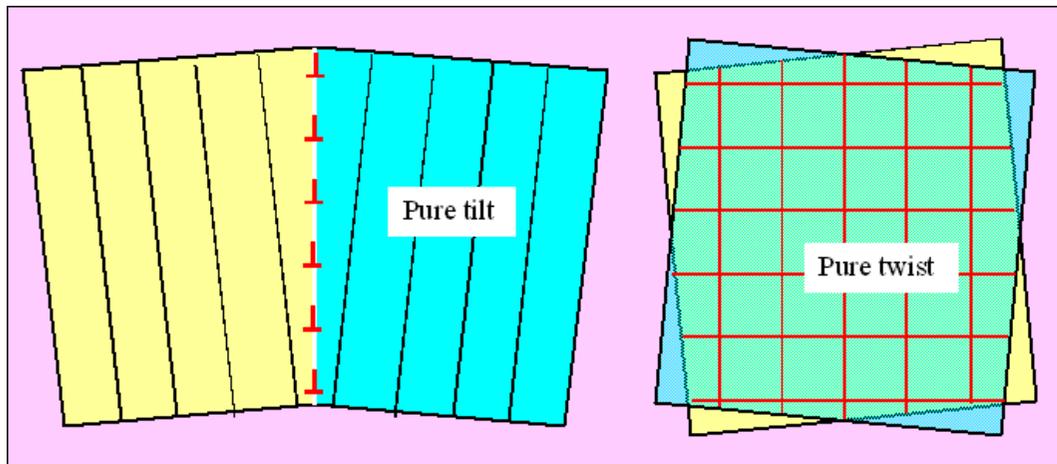
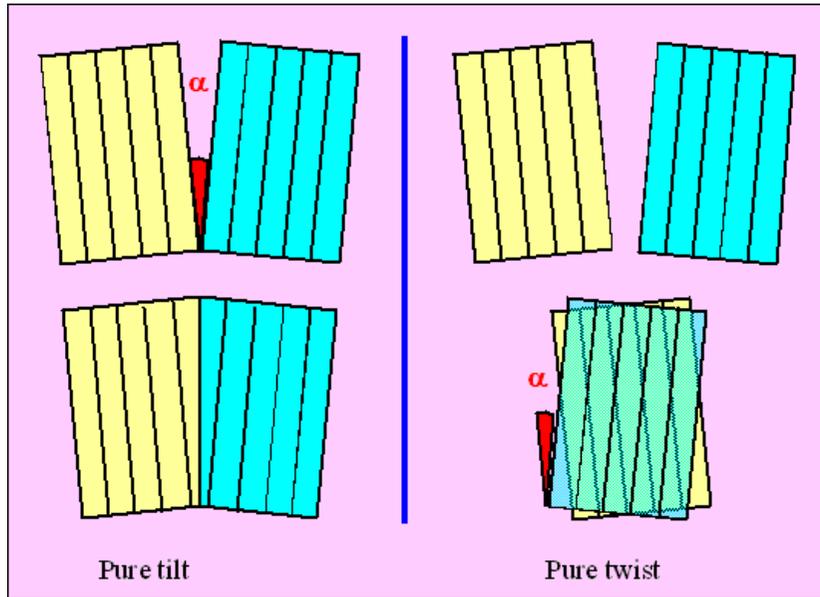


Einkristalle (Beispiel: Korund)

- Ein indisches Wort für das schlichte trigonale Mineral Al_2O_3 , d.h. Aluminiumoxid, gern benutzt als Schleifmittel und auf Schmirgelpapier, da ziemlich hart (Härte nach Mohs = **9**). Dann aber meist mit **Fe** verunreinigt und trüb.
- Anderweitig saubere Einkristalle mit etwas **Cr** oder **Ti** oder Magnetit (Fe_3O_4) nennt man **Rubin** (rot) bzw. **Saphir** (blau).

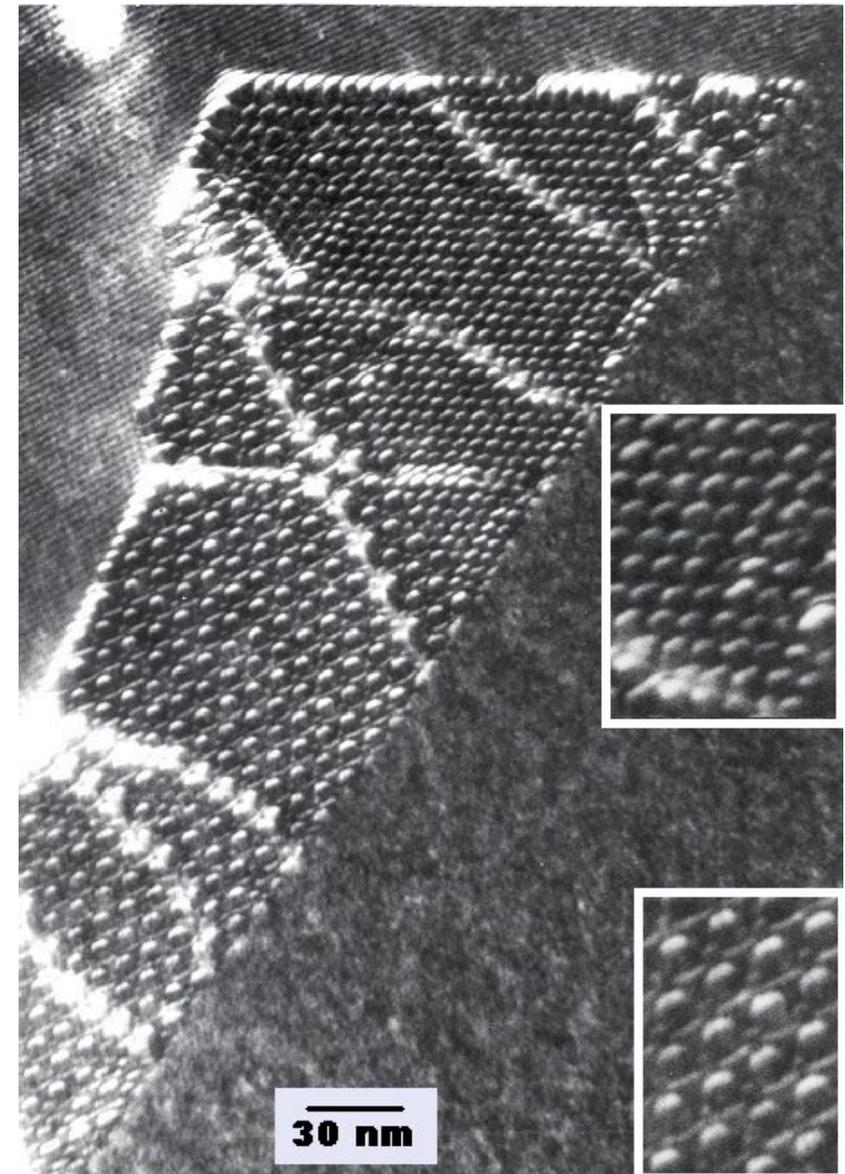


Kleinwinkelkorngrenze



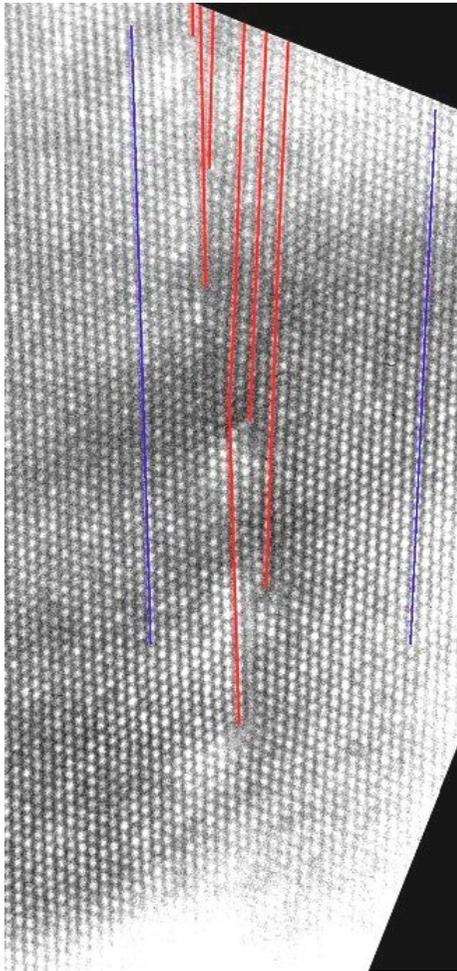
Stufen VS

Schrauben VS



Si

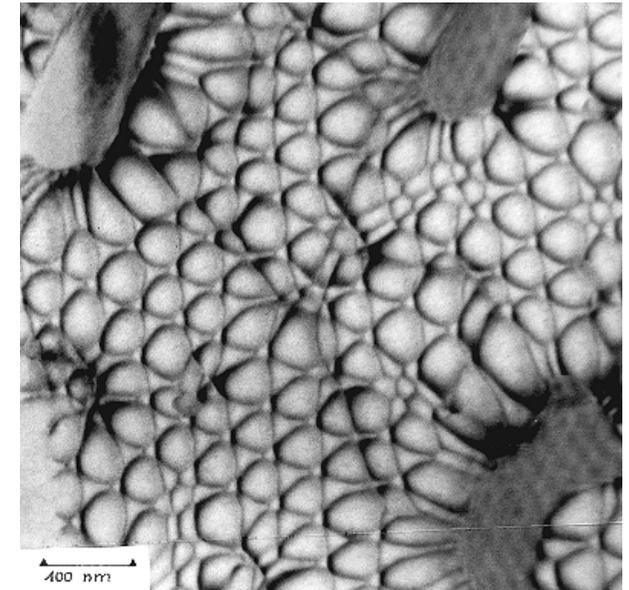
Beispiel: Kleinwinkelkorngrenzen in Si



Stufen VS



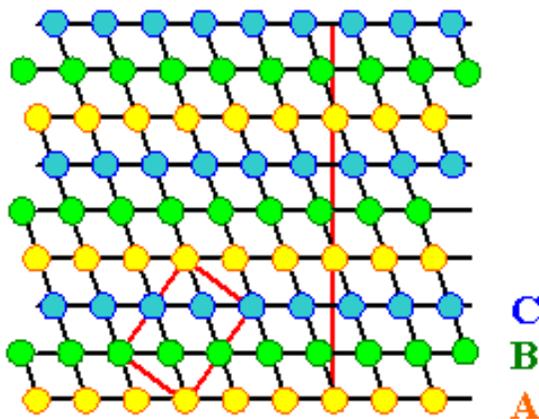
Schrauben VS
(leichte Drehung der $\{100\}$ Ebenen)



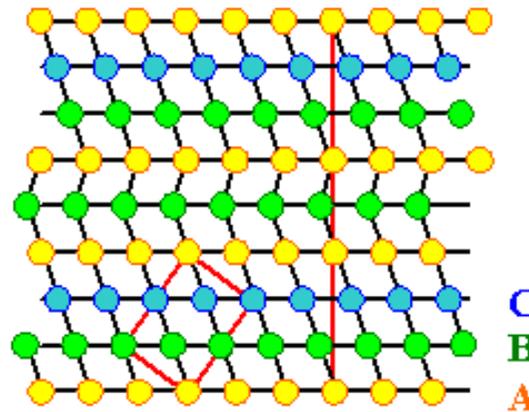
Komplexe KW Korngrenze

Stapelfehler

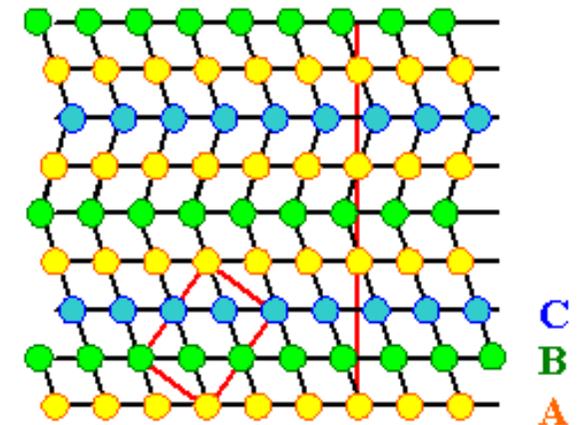
- Stapelfehler entstehen in unserer prinzipiellen Definition, wenn man zwei durch ihre Stapelfolge definierten Kristalle entlang einer Grenzfläche so zusammensetzt, dass beide Kristalle zwar exakt gleich orientiert sind, an der Nahtstelle aber die Stapelfolge nicht stimmt.
- die Stapelfolge **ABCABCABC...** definiert den **fcc** - Kristall
- **Intrinsisch** oder **extrinsisch** Stapelfehler unterscheiden sich genannt, je nachdem ob eine Ebene fehlt oder zuviel ist



Das perfekt fcc - Gitter
in $\langle 110 \rangle$ Projektion

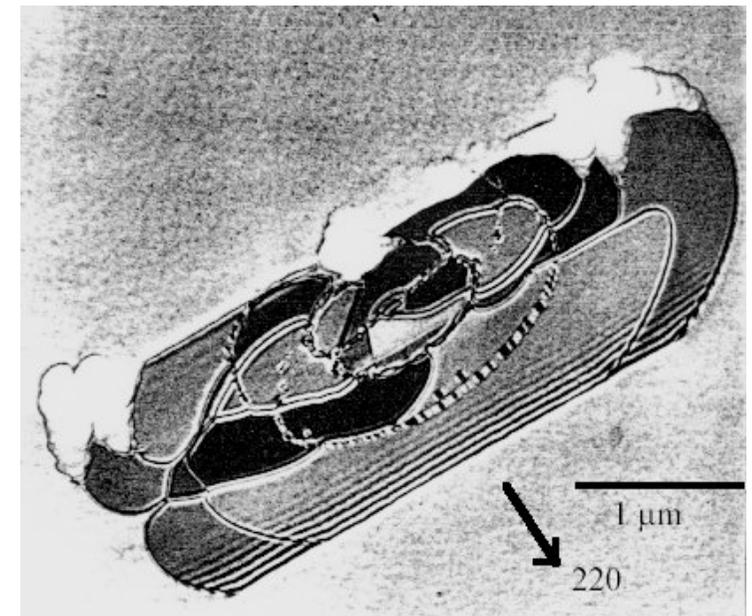
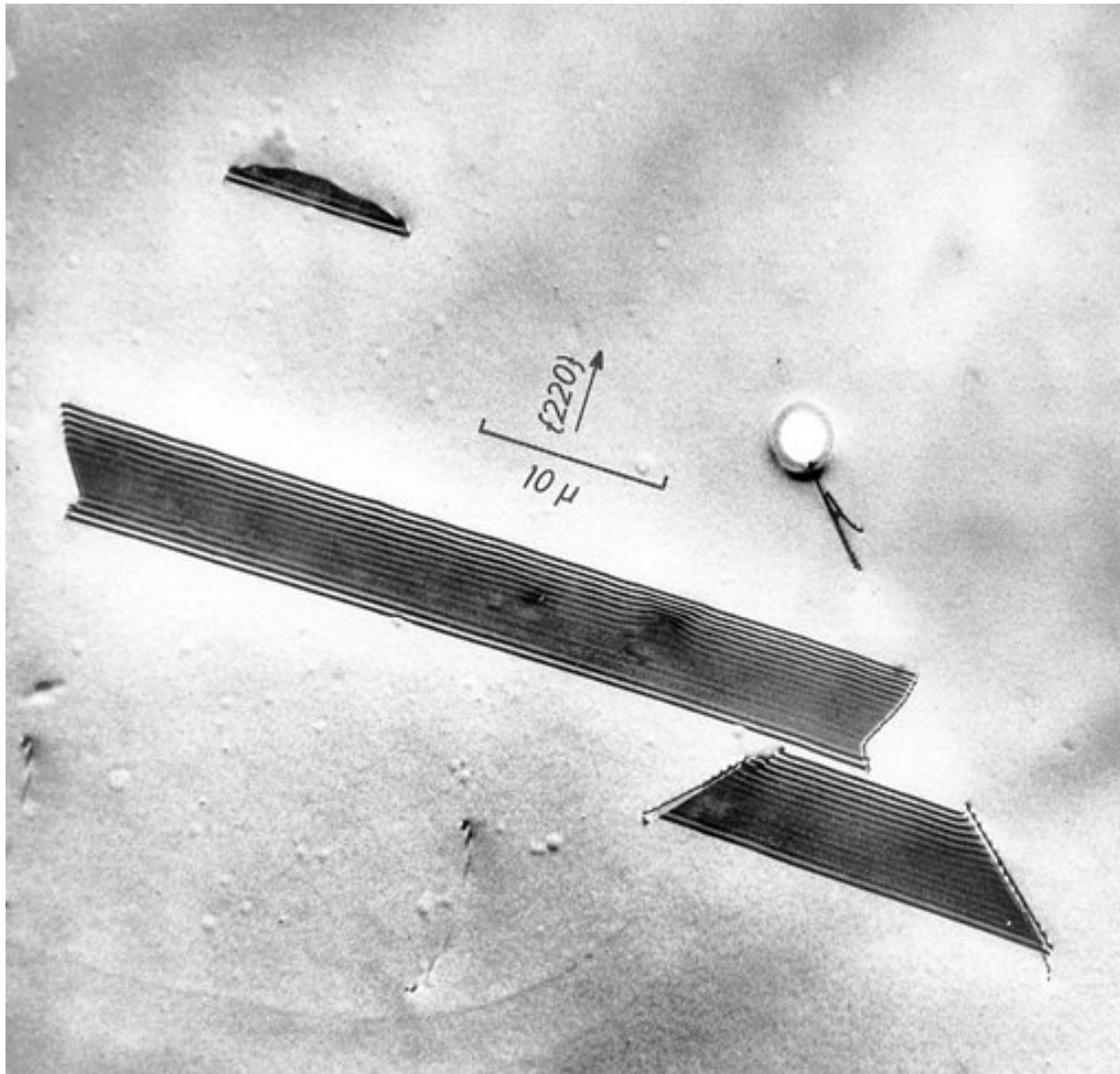


C - Ebene fehlt \rightarrow
intrinsischer Stapelfehler



A - Ebene ist zusätzlich \rightarrow
extrinsischer Stapelfehler

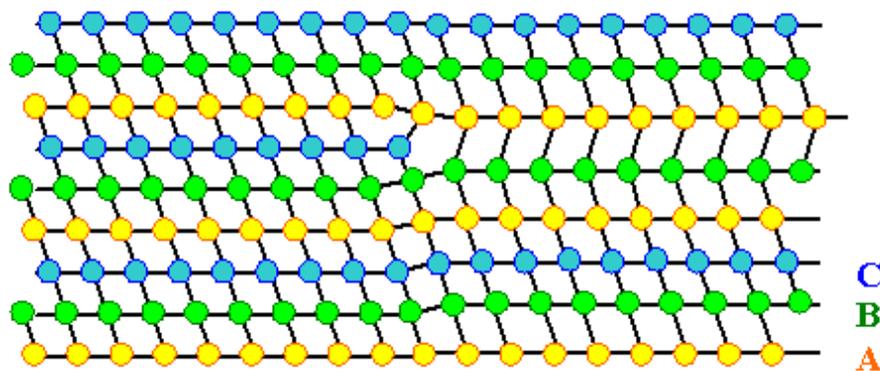
Beispiel: Stapelfehler in Si



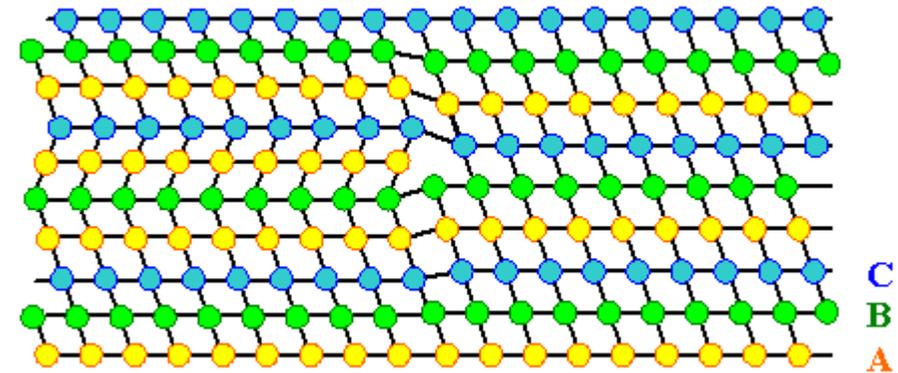
„oxidation induced stacking faults in **Si**“

Partialversetzungen

- *Stapelfehler* enden an inneren oder äußeren Oberflächen oder sind durch *eindimensionale Defekte (= Partial VS)* begrenzt



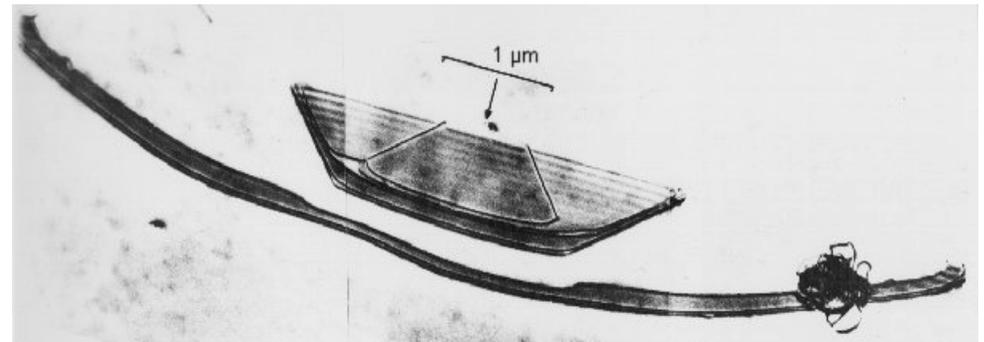
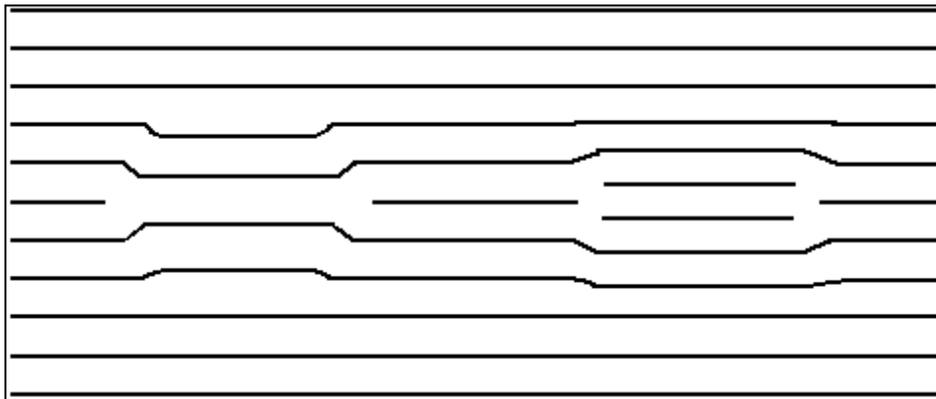
intrinsischer Stapelfehler
Die **C** - Ebene fehlt im rechten Teil



extrinsischer Stapelfehler
Eine **A** - Ebene ist im linken Teil
zusätzlich enthalten

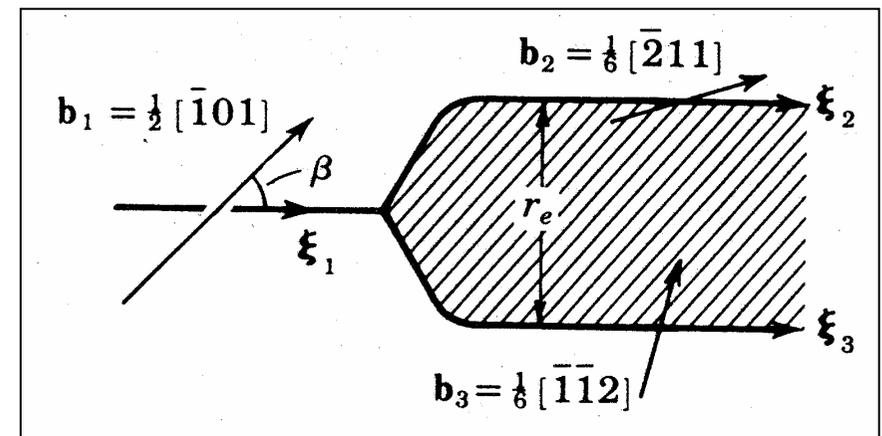
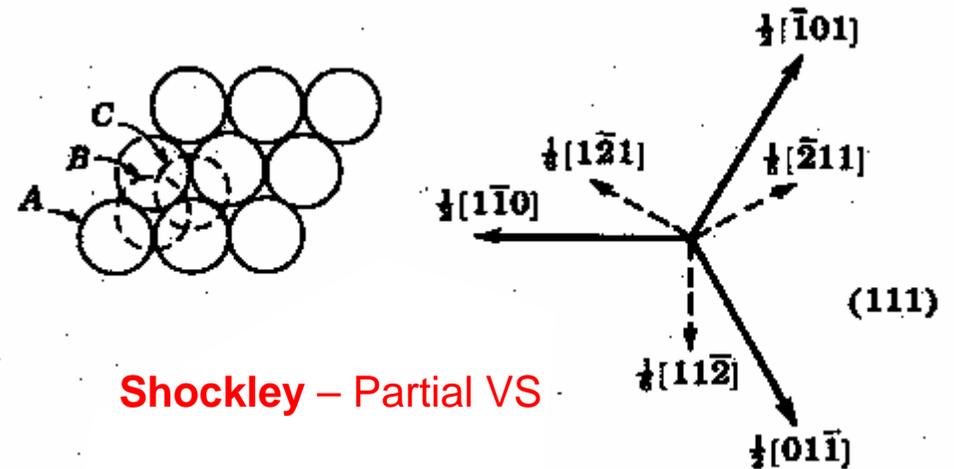
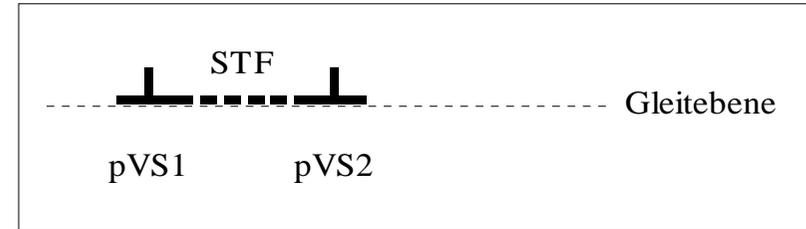
Stapelfehler und atomare Fehlstellen (AF)

- Stapelfehler in **fcc** - Kristallen (inkl. Berandung durch eine Partialversetzung) können durch *Agglomeration von Leerstellen* oder *Eigenzwischengitteratomen* auf $\{111\}$ - Ebenen entstehen
- *Leerstellenagglomeration auf einer $\{111\}$ - Ebene entspricht dem Herausnehmen einer Ebene, es wird ein **intrinsischer** Stapelfehler erzeugt.*
- *Die Agglomeration von Zwischengitteratomen auf einer $\{111\}$ - Ebene schiebt eine zusätzliche Ebene ein, es entsteht ein **extrinsischer** Stapelfehler.*

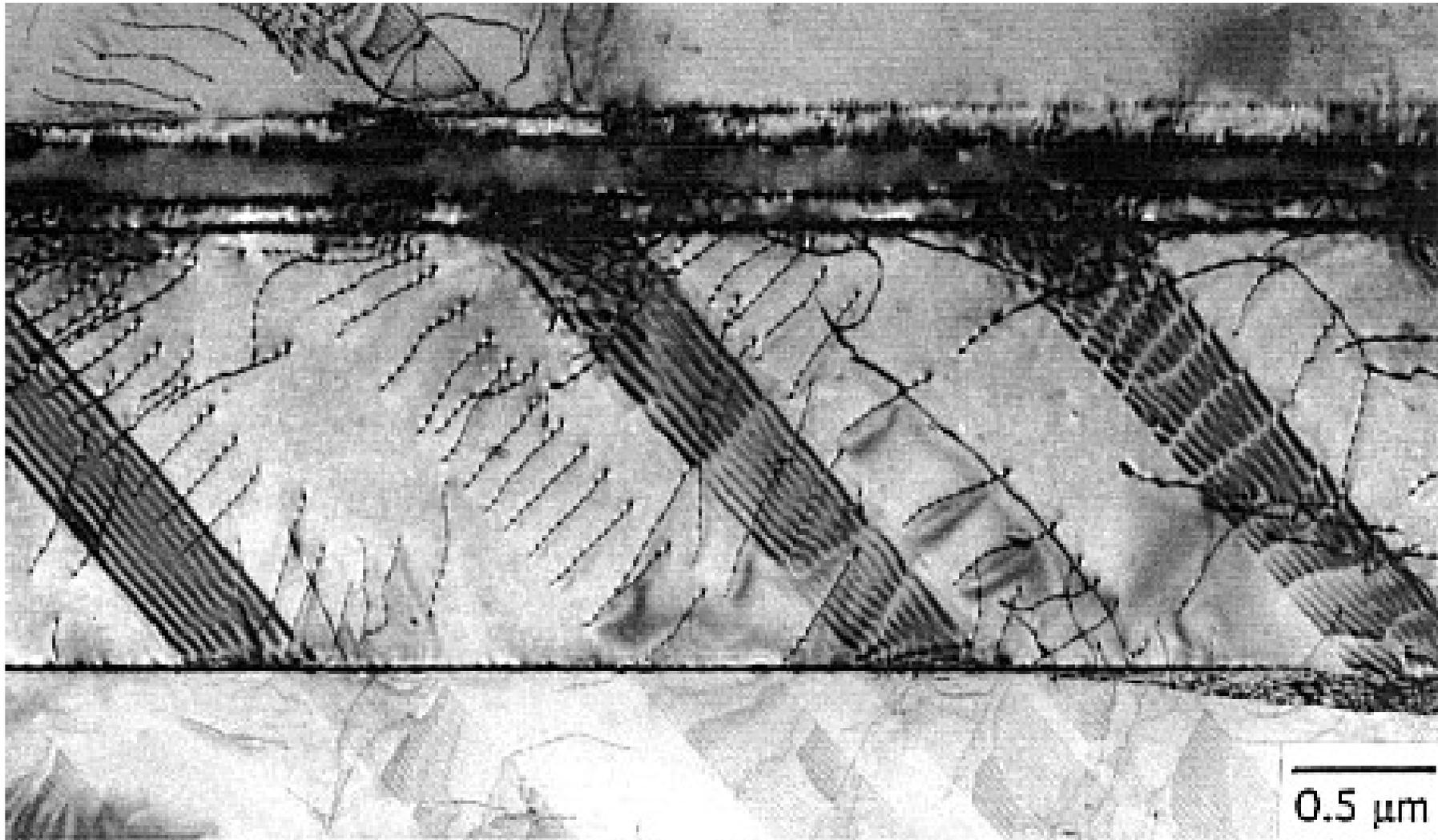


Stapelfehler in fcc

- Stapelfehler in dichtestgepackten Kristallen sind *sehr prominente* Defekte, die sehr häufig auftreten und oft nur schwer zu vermeiden sind.
- Stapelfehler und Versetzungen sind insbesondere in **fcc** Kristallen oft zu etwas neuem kombiniert (einer "*aufgespaltenen Versetzung*").
- Ohne auf Einzelheiten einzugehen, soll doch angemerkt werden, dass die Eigenschaften der Stapelfehler damit sehr stark die Versetzungsmechanik und damit die plastische Verformbarkeit dieser Materialien beeinflusst.



Beispiel: TiAl



Antiphasengrenzen (STF in geordneter Überstruktur)

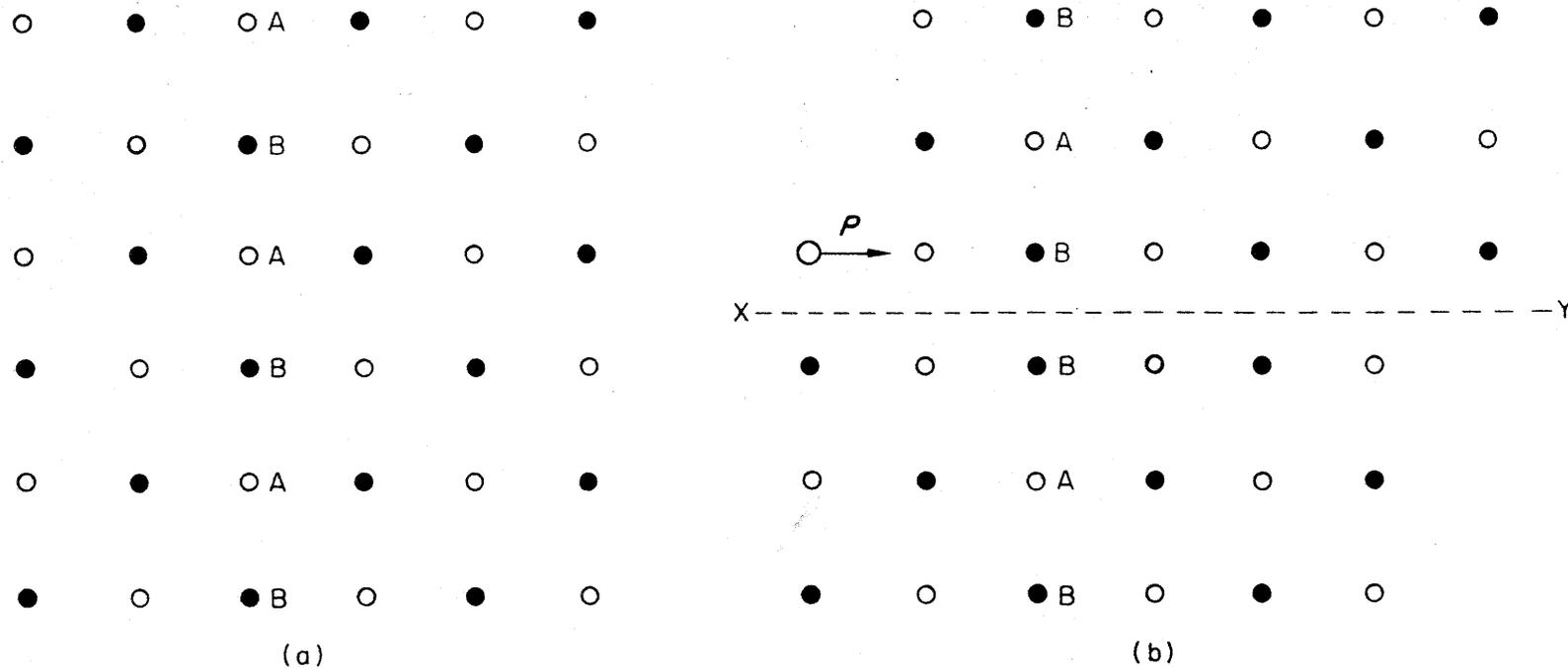
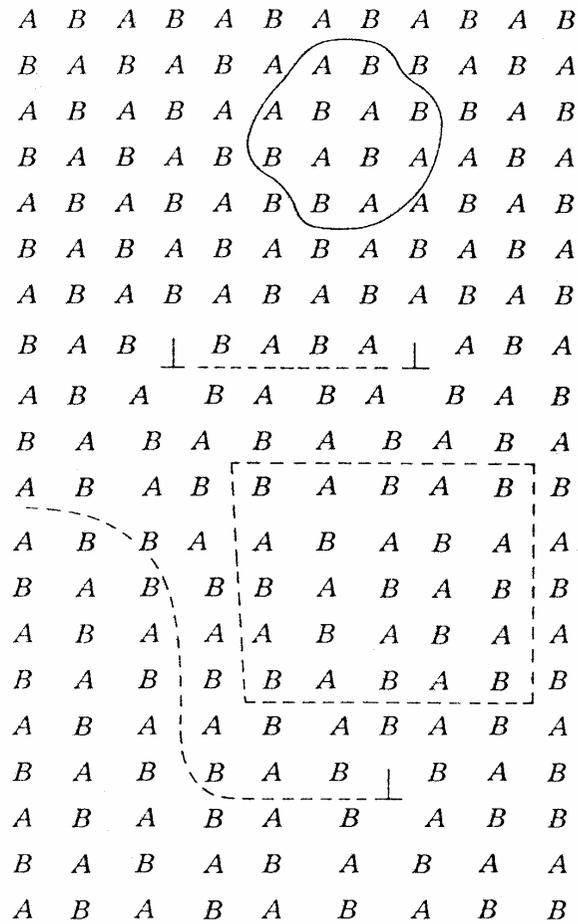
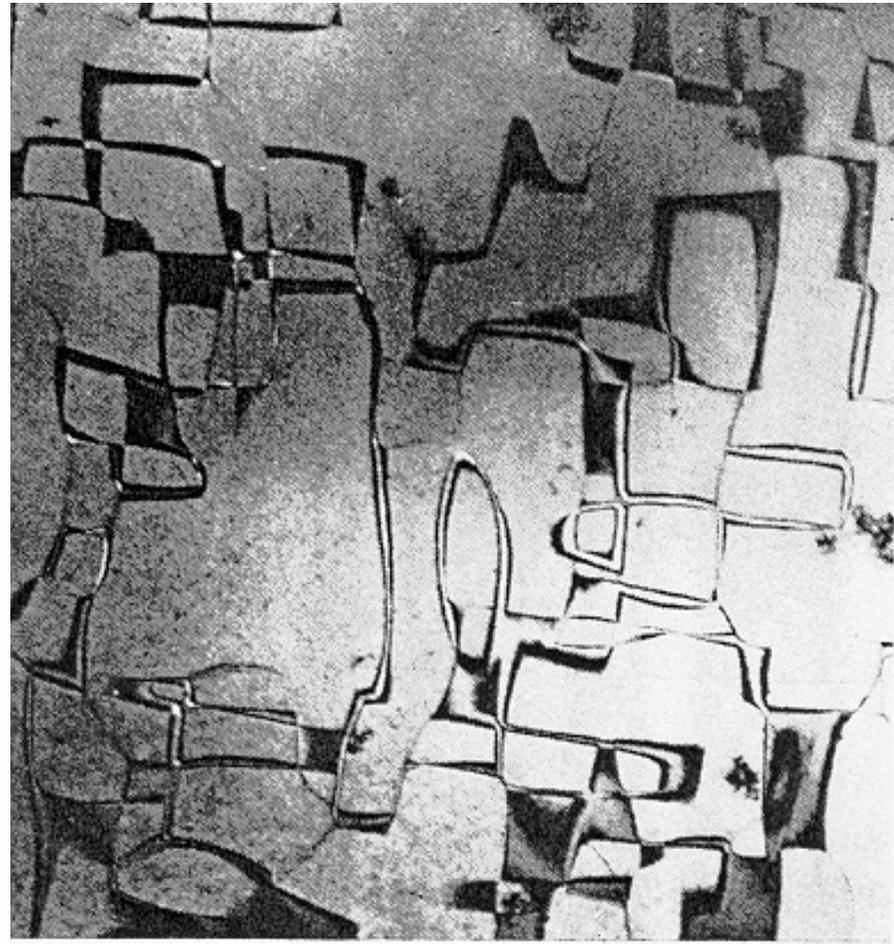


Figure 3.33 An array of A and B atoms (a) perfect, (b) sheared through P to create an antiphase domain boundary (APB) XY. (c) BF and (d) CDF images of growth APB in ordered Fe_3Al using a (100) superlattice reflection. (e) An image of the same area with a (200) fundamental reflection. (f) An APB in TiO_2 showing the influence on the image of a change in thickness along XY. (g) A closed loop of APB in TiO_2 . (h) Overlapping APB in TiO_2



(a)

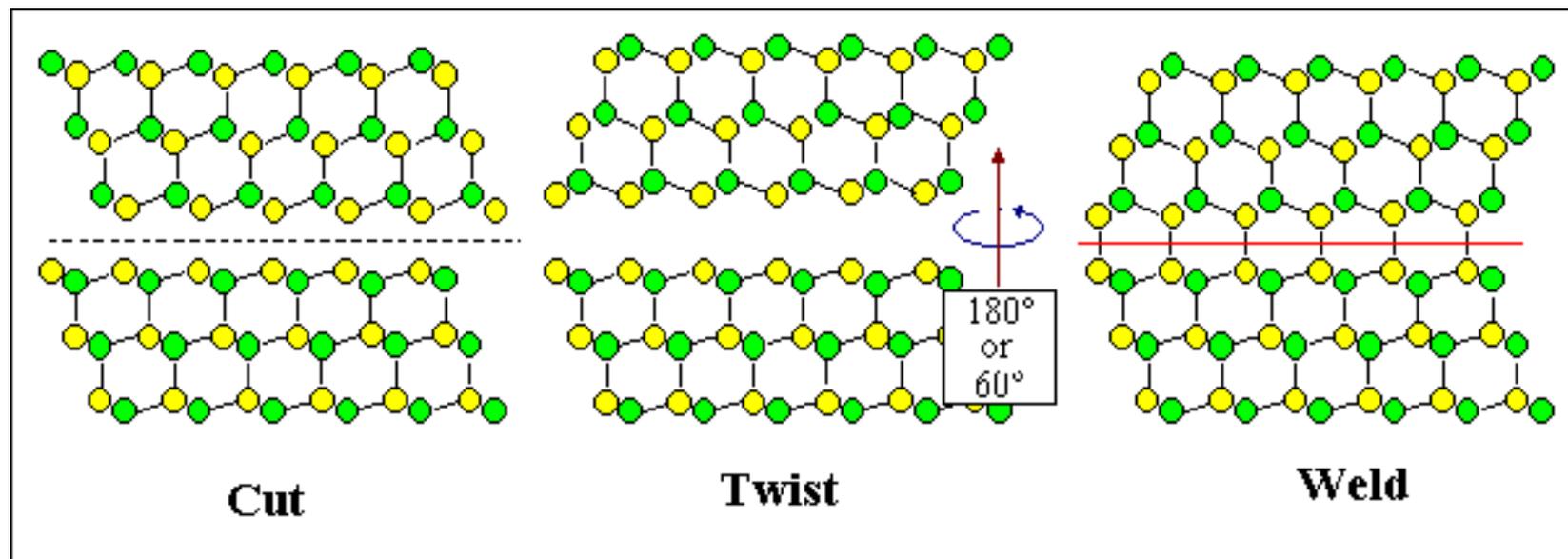
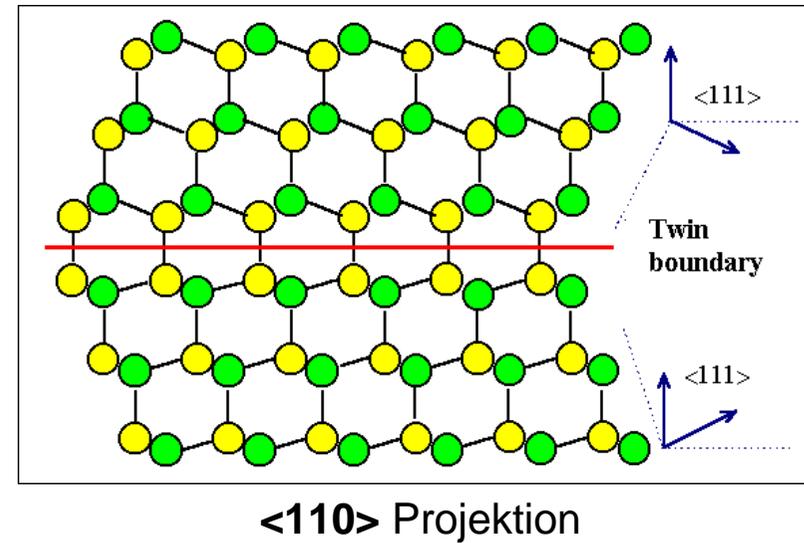


(b)

Fig. 11-31. (a) A two-dimensional ordered structure with two superlattice domains completely bounded by a curved and by a straight-sided antiphase boundary. Two antiphase boundaries bounded by dislocations are also shown. (b) Actual antiphase boundaries in Cu_3Au , [001] foil orientation, 70,000X. [M. J. Marcinkowski and L. Zwell, *Acta Met.*, **11**: 373 (1963).]

Zwillingsgrenze

- Tritt häufig in Si (Diamantgitter) und fcc Kristallen auf.

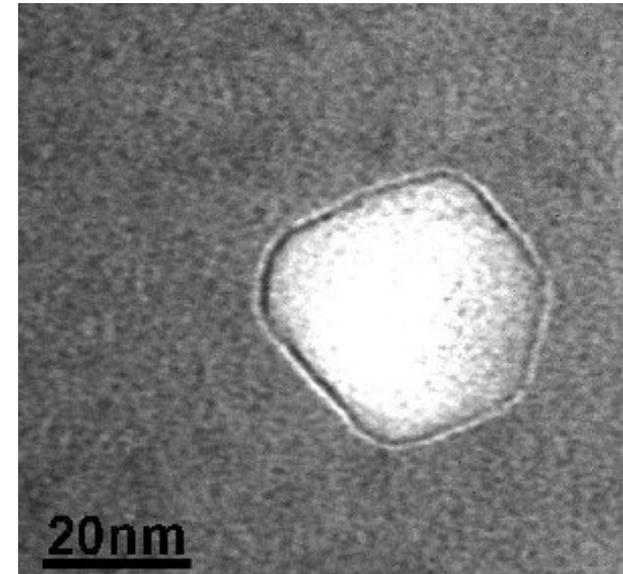


Dreidimensionale Defekte

- *Dreidimensionale* Defekte sind notwendigerweise von *zweidimensionalen* Defekten begrenzt.
- *Dreidimensionale* Defekte können durch Diffusion und Zusammenlagerung (= Agglomeration, "clustern") von *nulldimensionalen* Defekten entstehen.
- Treffen sich viele Leerstellen an einem Platz, entsteht ein **Void**. Auch hier ist der dreidimensionale Defekt durch den zweidimensionalen Defekt "Oberfläche" begrenzt, die obigen Überlegungen treffen voll zu.
- Selbstverständlich können auch substitutionelle oder interstitielle Fremdatome per Diffusion agglomerieren; es resultiert eine **Ausscheidung**.

Beispiel: Void in GaAs

- Es ist durch die Agglomeration von Leerstellen entstanden, die wiederum an der Diffusion von **Zn** Atomen im **GaAs** beteiligt waren.
- Das Void ist **facettiert**, d.h. nicht rund sondern mit relativ gut ausgeprägten ebenen Seitenflächen, die kristallographischen Ebenen mit kleiner Oberflächenenergie
- Voids entstehen z.B. direkt bei der Herstellung, insbesondere beim **Sintern** von Keramiken, durch die Zusammenballung vieler Leerstellen, durch den Aufstau vieler Versetzungen (das gibt dann Mikrorisse), durch die Agglomeration von ins Gitter (als extrinsische atomare Defekte) eingebaute Gasatome (vor allem Wasserstoff; führt ebenfalls zu Mikrorissen) und insbesondere durch Bestrahlung eines Kristalls mit Teilchen aller Art.

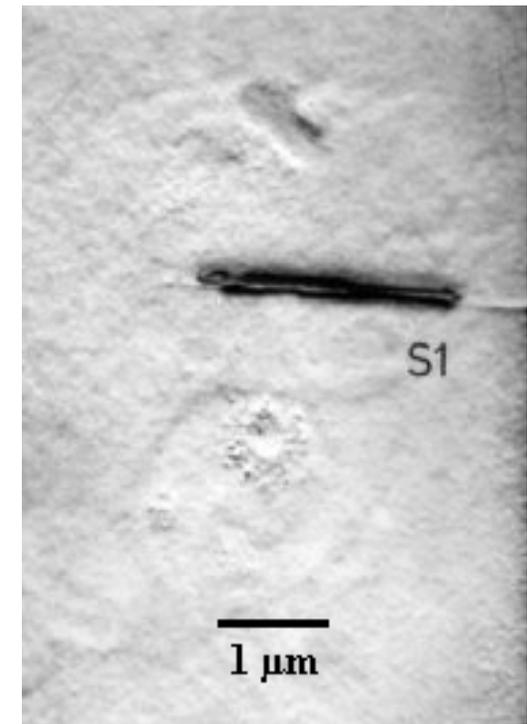
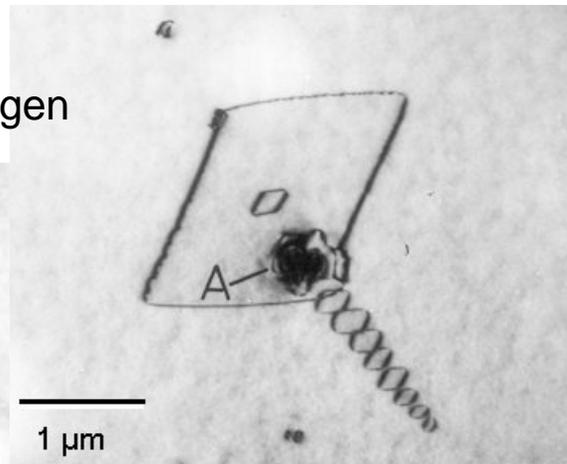
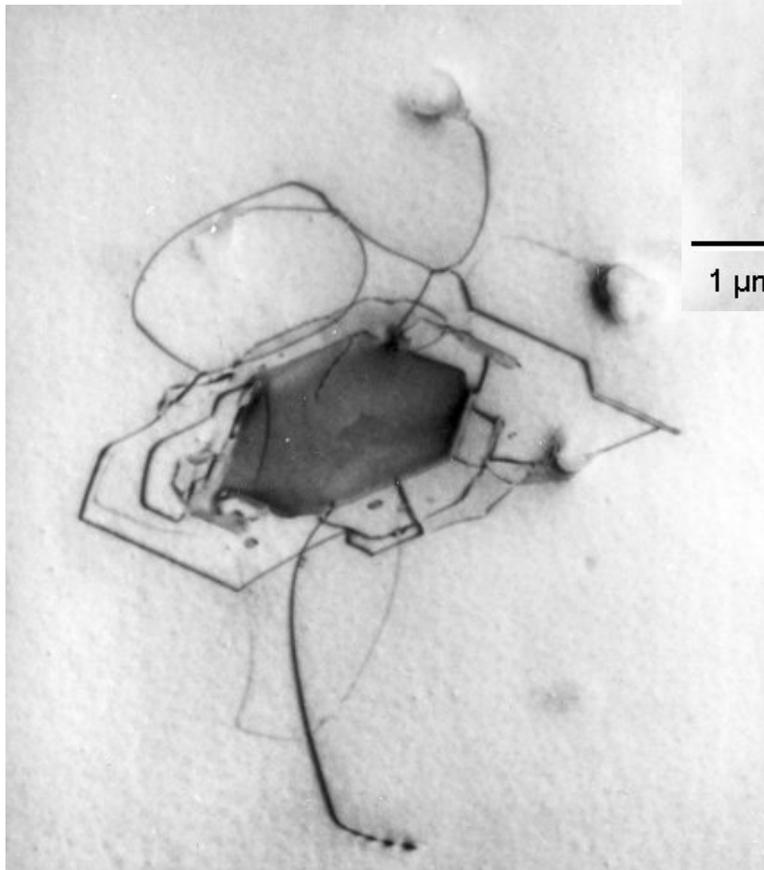


Ausscheidungen, (engl. "*precipitate*")

- Ausscheidungen sind einfach *vollständig in die Matrix des Wirtskristalls eingebettete andere Phasen*, sozusagen gefüllte Voids.
- In der Regel unterstellt man mit dem Wort "Ausscheidung", dass sie sich im Kristall erst gebildet hat, z.B. durch Diffusion und Agglomeration von Fremdatomen beim Abkühlen. In anderen Worten: direkt nach dem Erstarren einer Schmelze sind Ausscheidungen noch nicht vorhanden.
- In den Kristall eingebettete Teilchen, die schon *immer da waren* (weil sie z. B. schon in der Metallschmelze herumschwammen und beim Erstarren einfach in das Kristallgitter eingebaut wurden), heißen eher **Dispersionspartikel**.
- Ausscheidungen können also wachsen und schrumpfen - je nachdem, ob die beteiligten Atome zur Ausscheidung hin- oder von ihr wegdiffundieren.

Beispiel: Ausscheidungen in Si

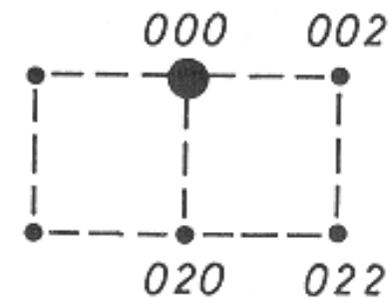
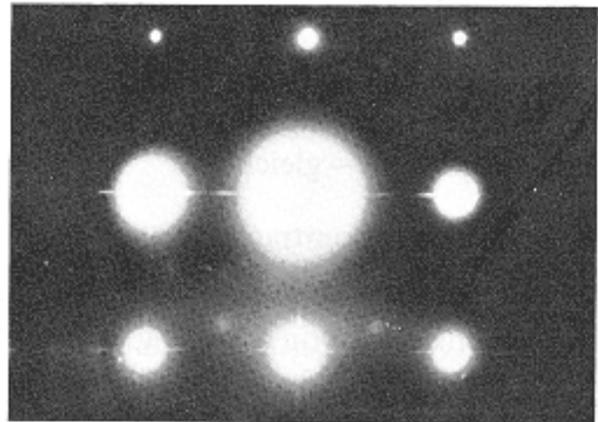
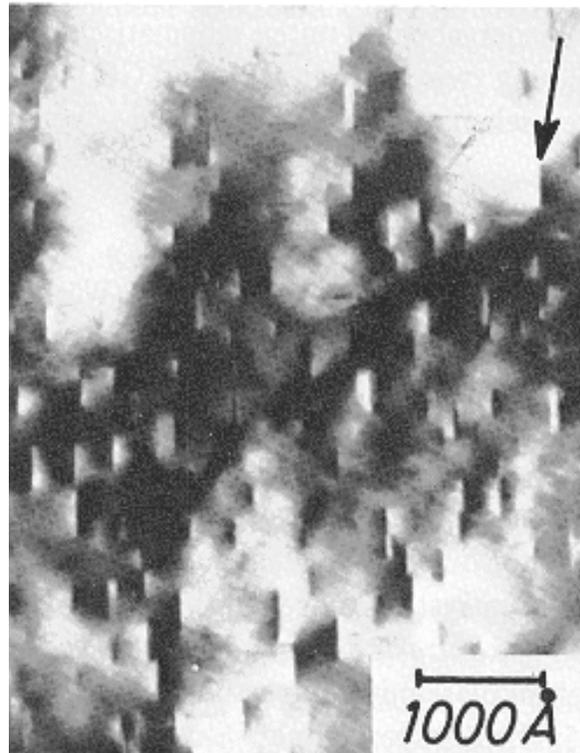
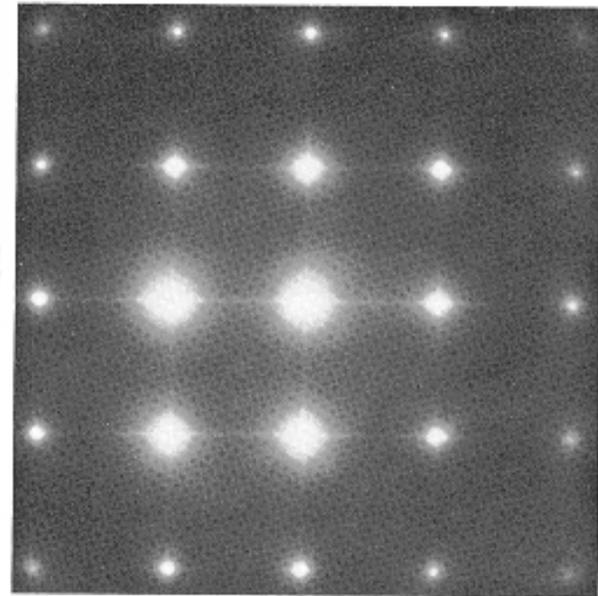
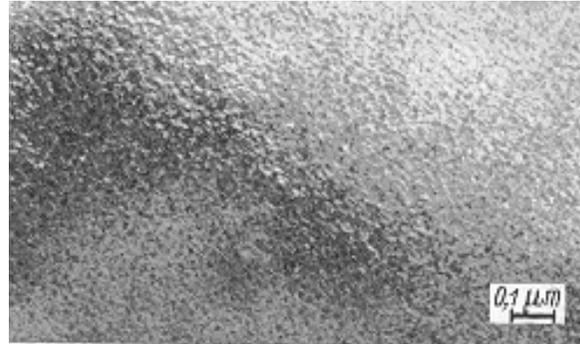
plättchenförmige SiO_2 Ausscheidungen



nadelförmige FeSi_2 Ausscheidung

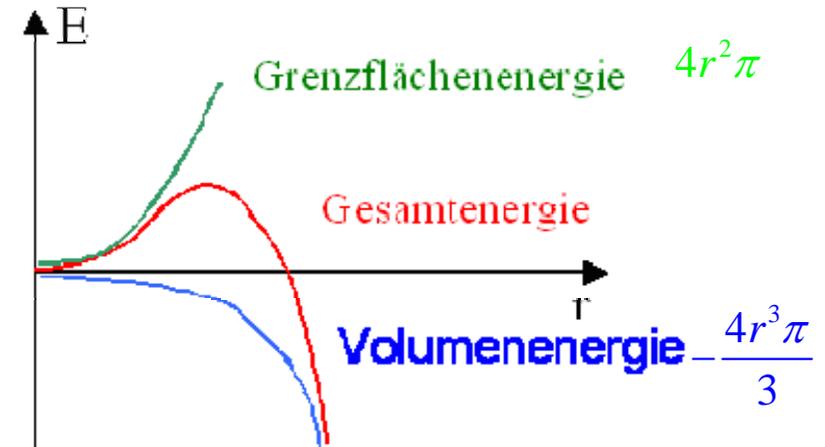
Guinier-Preston-Zonen in einer Al-4 % Cu-Legierung.

- a) GPI-Zonen, nach Lösungsglühung 2 h 160 °C ausgelagert. 40 000 X. Beugungsbild: kontinuierliche streaks [17].
- b) GPII-Zonen, nach Lösungsglühung 2,5 h 190 °C ausgelagert. 120 000 X. Beugungsbild: unterbrochene streaks [18].



Dreidimensionale Defekte und AF

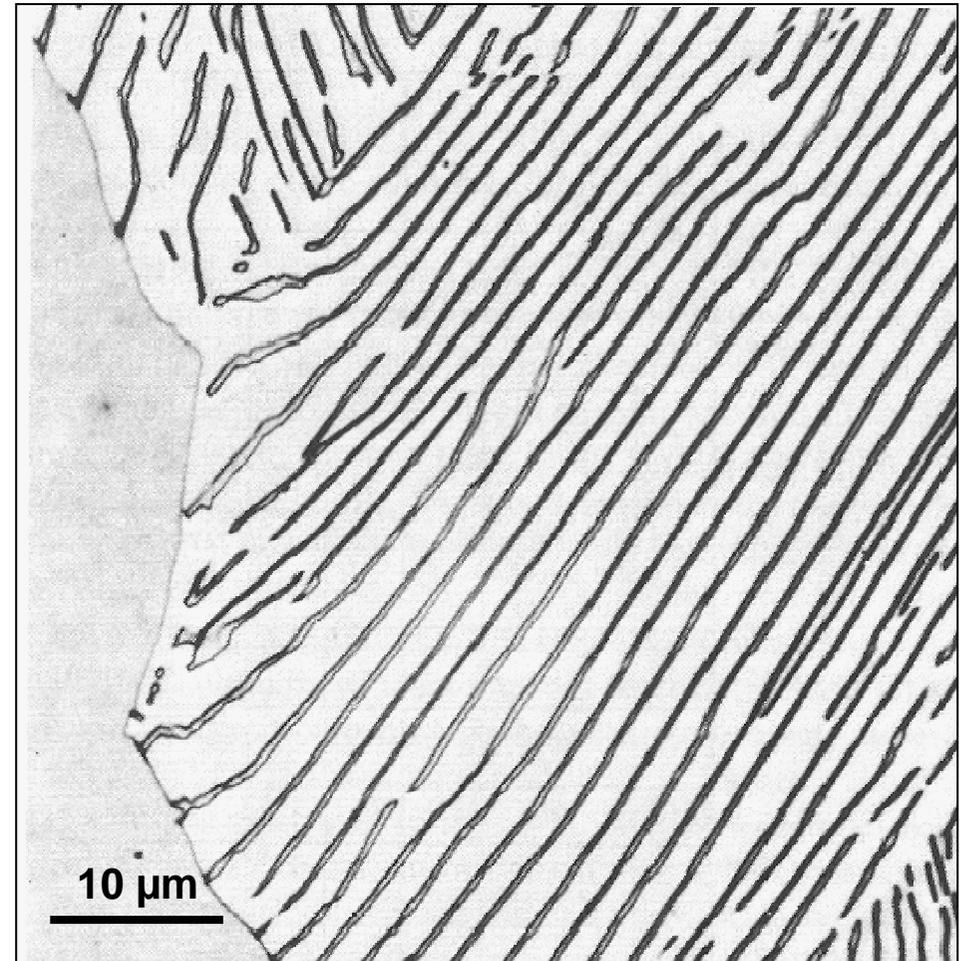
- *Dreidimensionale* Defekte sind notwendigerweise von *zweidimensionalen* Defekten begrenzt.



- Dies bedeutet, dass bei der Bildung einer Ausscheidung die Energie *immer* erst anwächst, bevor sie abnimmt!
- Der energetisch günstigere Zustand kann damit nur durch Überwinden einer **Energiebarriere** erreicht werden, es bedarf einer **Nukleation**, einer **Keimbildung** der Ausscheidung, bevor durch Wachstum der Ausscheidung immer mehr Energie gewonnen werden kann, so dass das Wachstum "von alleine" abläuft.

Das Gefüge

- Die Gesamtheit aller strukturellen Besonderheiten eines Materials bezeichnen wir als das **Gefüge** des Materials.
- Aussagen wie "polykristallin - einkristallin", "einphasig - mehrphasig", "grobkörnig - feinkörnig" sind Aussagen über das Gefüge.



„Perlit“ Gefüge

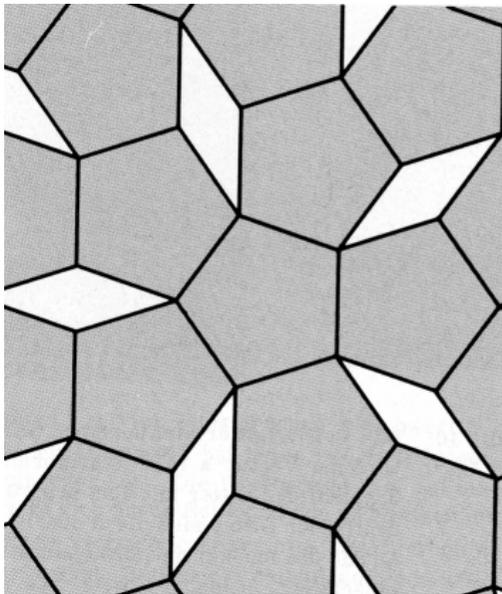
Korngrenze

Fe_3C (Zementit) in $\alpha\text{-Fe}$ (Ferrit) Matrix

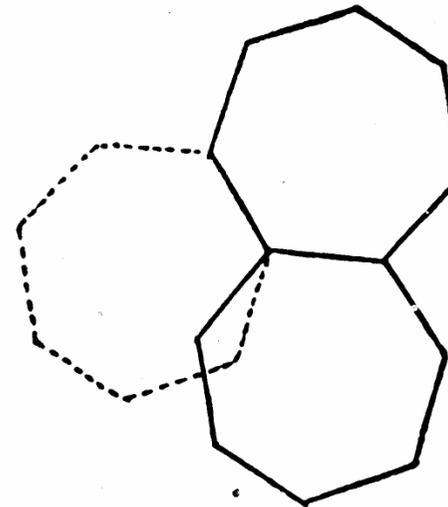
Quasikristalle

<http://www.wissenschaft-online.de/spektrum/projekt/quasi.htm>

- In jedem Textbuch der Kristallographie oder Festkörperphysik, das etwas näher auf die Symmetrien in Kristallen eingeht, wird hervorgehoben, dass es zwar **1-**, **2-**, **3-**, **4-** und **6-**zählige Drehachsen gibt, aber keine **5-** und **7-** zähligen, da es *unmöglich ist die Ebene mit gleichseitigen Fünfecken (Siebenecken) vollständig zu bedecken*.



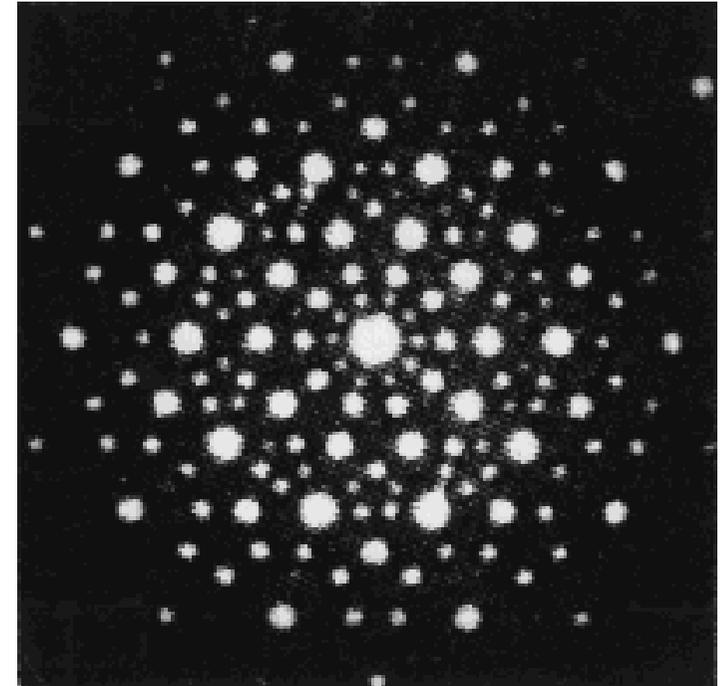
5-zählige Rotationssymmetrie,
keine Translationssymmetrie



Kepplers Beweis (1619) für die Unmöglichkeit
einer 7-zählige Gittersymmetrie

Quasikristalle

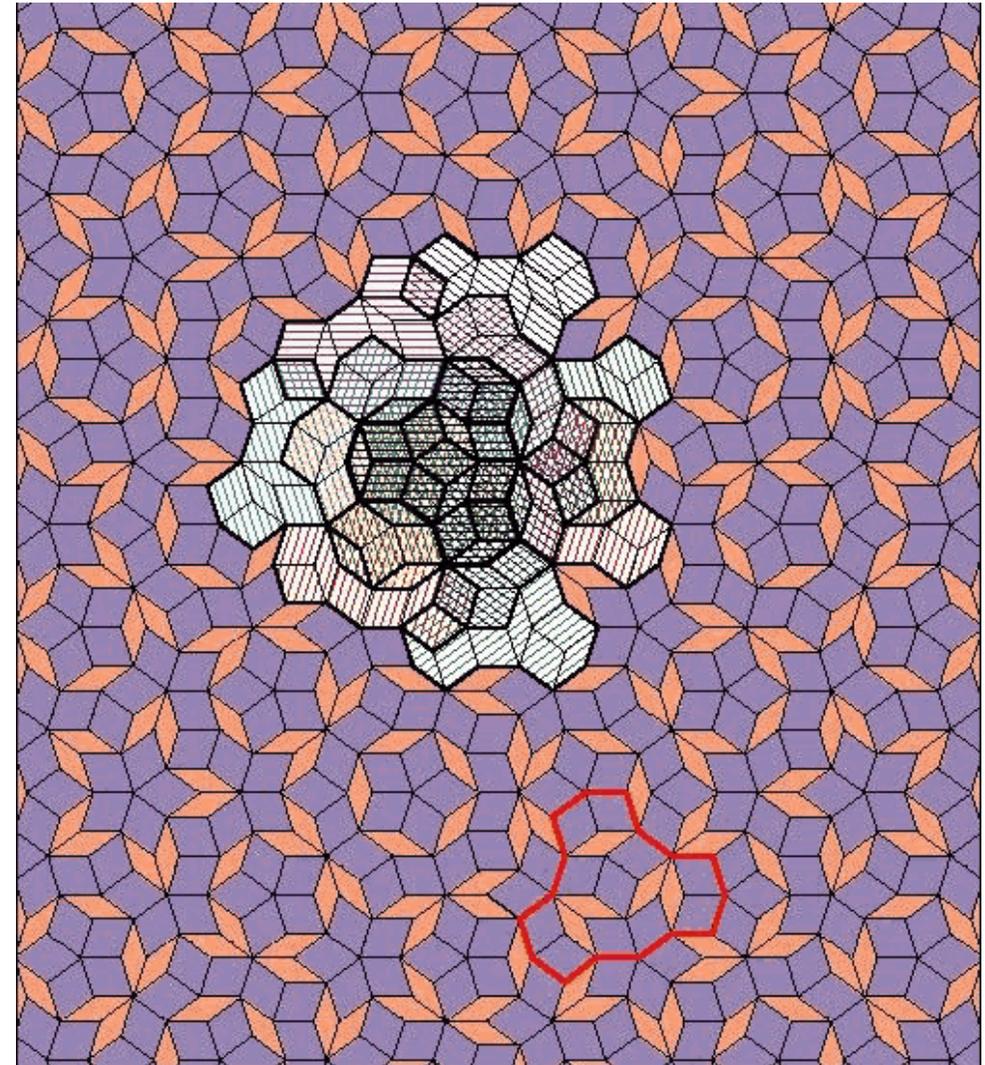
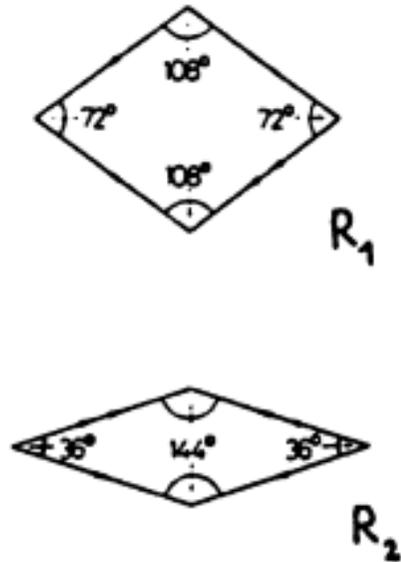
- **1984** wurde von Dan **Shechtman** eine **Al - Mn** Legierung gefunden wurde, das sich in vielen Experimenten wie ein Kristall mit einer **5-**zähligen Symmetrie verhält, dh. die konventionellen Regeln der Kristallographie **nicht** befolgte - aber trotzdem definitiv nicht amorph war.
- Die gängigste Theorie ist, dass sich die Atome der Legierung an den Vertices eines dreidimensionalen **Penrose-Musters** befinden, womit sich das fünfzählige Beugungsbild erklären lässt. Verschiedene andere Erscheinungen bei der Untersuchung lassen sich jedoch mit dem Penrose-Modell nicht erklären,



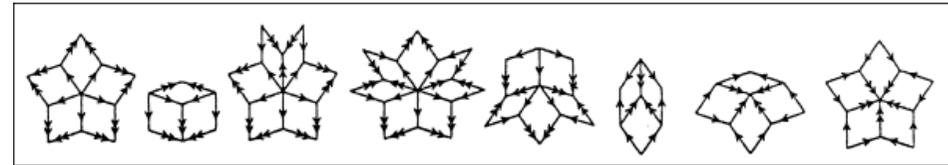
Quasikristalle

- **1974 Roger Penrose** von der Universität Oxford und zeigte, dass man mit *zwei* Fliesen auskommen kann - einem dicken und einem dünnen Rhombus – eine Fläche vollständig auszufüllen

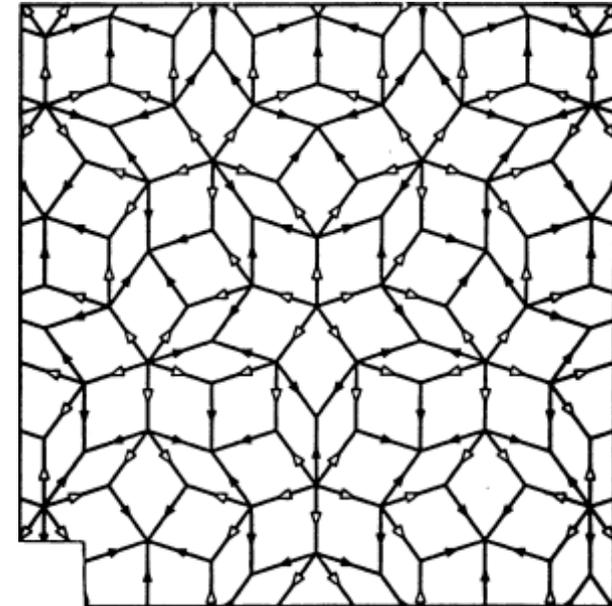
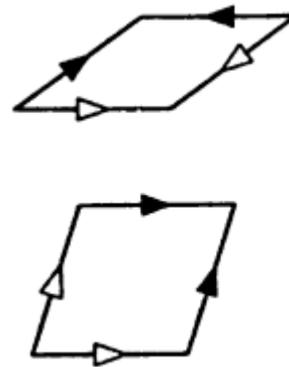
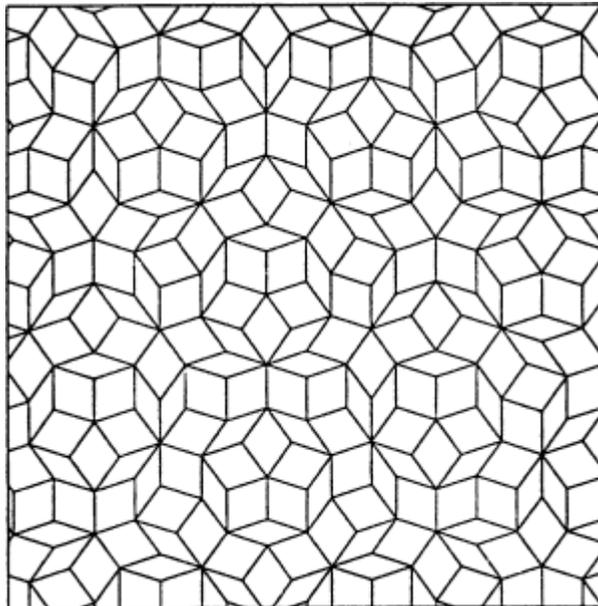
„Penrose Fliesen“.



Quasikristalle



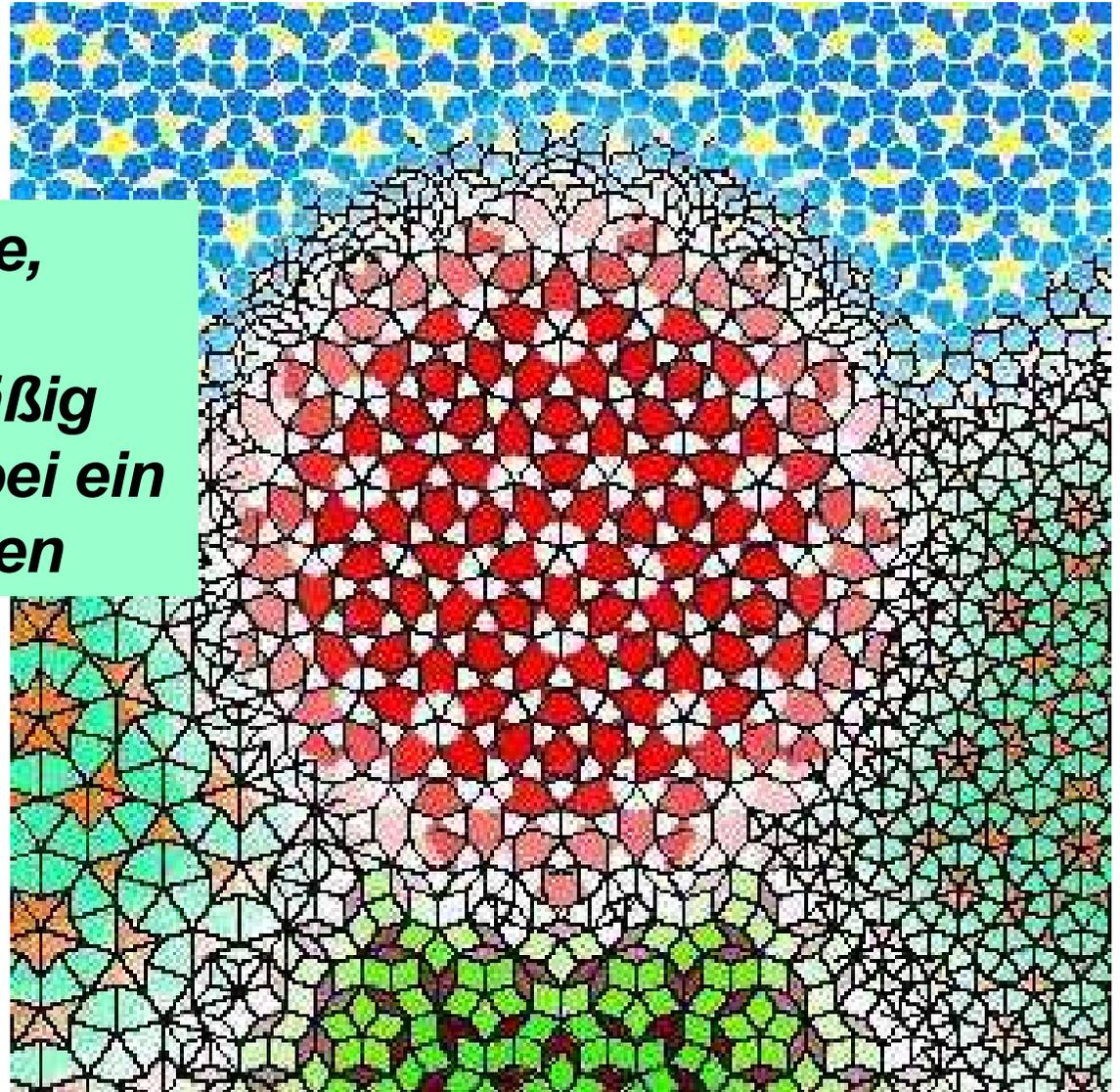
genau acht verschiedene Vertexkonfigurationen



- Beim **Penrose-Muster** werden die Kanten der beiden Rhomben mit Pfeilen dekoriert. Man verwendet entweder Doppel- und Einfachpfeile oder ausgefüllte und hohle Pfeile.
- Neue Tiles werden nun immer so hinzugefügt, wie es die Orientierung der Pfeile zulässt: Pfeile in benachbarten Tiles müssen gleichartig sein und in die gleiche Richtung zeigen. Solche Anlegeregeln heißen **matching rules**.

Quasikristalle

Quasikristalle sind Kristalle, die Symmetrien aufweisen und wo die Atome regelmäßig angeordnet sind, ohne dabei ein periodisches Gitter zu bilden



Quasikristalle - Heutiger Stand der Forschung

- Man kennt heute eine ganze Reihe von Legierungssystemen (über 60, die meisten auf der Basis von Aluminium oder Titan), die eine oder mehrere quasikristalline Phasen mit 5-, 8-, 10- oder 12-zähliger Symmetrie bilden können.
- Die Mehrheit dieser Phasen ist metastabil, d. h. sie gehen bei höheren Temperaturen in periodisch kristalline Phasen über.
- Die Herstellung beruht in diesem Fall auf schnellen Abschreckverfahren. Inzwischen hat man auch einige Legierungen hergestellt, in denen stabile quasikristalline Phasen existieren. Aus Legierungen wie AlCuCo oder AlCuFe lassen sich mit klassischen Kristallzuchtverfahren Ein-Quasikristalle von mehreren Zentimetern Größe direkt aus der Schmelze ziehen.

Reziprokes Gitter

- Reziproke Gittervektoren $\underline{\mathbf{G}}_{hkl}$ werden formal definiert als Translationsvektoren im *reziproken Gitter*. Das reziproke Gitter ist in eineindeutiger Weise aus einem beliebigen Raumgitter mit den Basisvektoren $\underline{\mathbf{a}}_i$ konstruierbar; seine Basisvektoren $\underline{\mathbf{g}}_i$ sind (im dreidimensionalen) gegeben durch:
- Das reziproke Gitter ist die *Fouriertransformierte* des Ortsgitters. Es hat wichtige Eigenschaften:
 - steht senkrecht auf der Ebene des Raumgitters mit dem Miller Indizes (hkl)
 - die Länge von $\underline{\mathbf{G}}_{hkl}$ ist proportional zum *reziproken* Abstand der Netzebenen d_{hkl} .
 - das Skalarprodukt zwischen einem beliebigen Translationsvektor $\underline{\mathbf{T}}$ des Raumgitters und einem beliebigen Translationsvektor des zugehörigen reziproken Gitters ist immer (mit $n = 0, 1, 2, 3, \dots$).

$$\underline{\mathbf{g}}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{V}$$

$$\underline{\mathbf{g}}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{V}$$

$$\underline{\mathbf{g}}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{V}$$

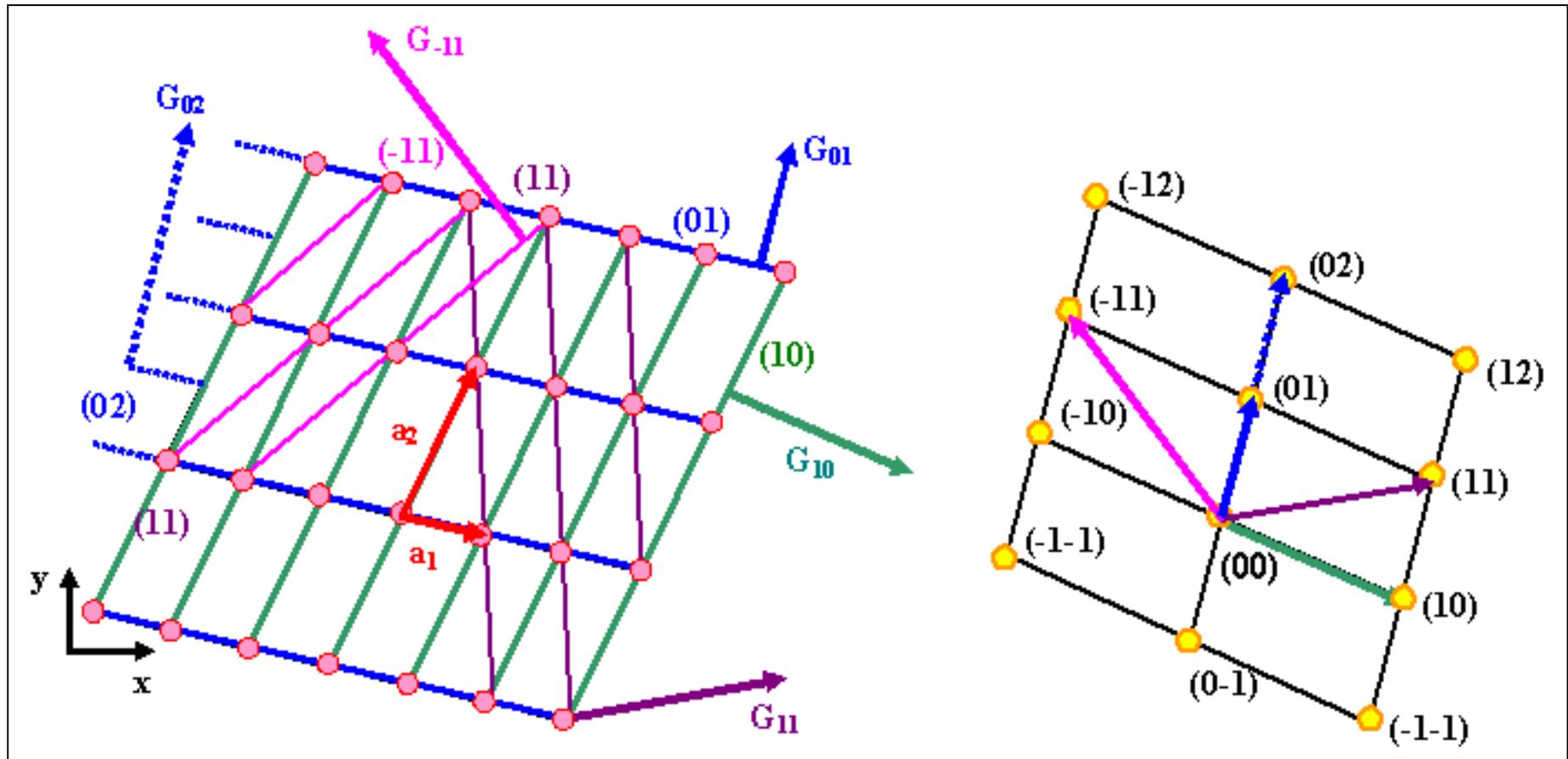
$$\underline{\mathbf{G}}_{hkl} = h \cdot \underline{\mathbf{g}}_1 + k \cdot \underline{\mathbf{g}}_2 + l \cdot \underline{\mathbf{g}}_3$$

$$|\underline{\mathbf{G}}_{hkl}| = 2\pi/d_{hkl}$$

$$\underline{\mathbf{G}} \times \underline{\mathbf{T}} = 2\pi n$$

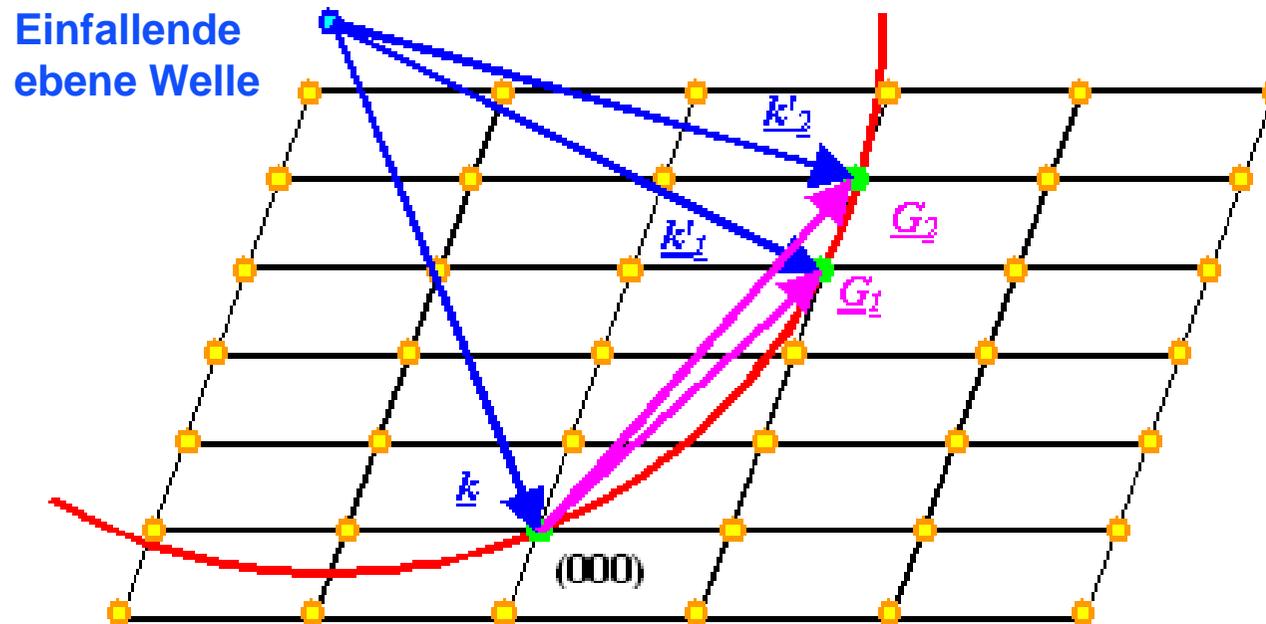
$$\mathbf{a}_i \times \mathbf{g}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

Reziprokes Gitter / geometrische Konstruktion



Ewaldkugel Konstruktion

- alle Ebenen, deren reziproke Gitterpunkte von der Ewaldkugel geschnitten werden, erfüllen die Bragg -Bedingung.
Jeder Punkt im reziproken Gitter steht für eine Ebenenschar des Raumgitters!
- Die ganze Konstruktion ergibt die möglichen \underline{k}' Werte.



$$\mathbf{k}'_i - \mathbf{k} = \mathbf{G}_i$$