

Piezoelektrische Potentialfelder um Stufenversetzungen beliebiger Richtung in piezoelektrischen Kristallen mit elastischer Isotropie

Von L. MERTEN

Philips Zentrallaboratorium GmbH, Aachen

(Z. Naturforschg. 19 a, 1161—1169 [1964]; eingegangen am 16. Mai 1964)

Versetzungslinien in piezoelektrischen Kristallen sind auf Grund des Piezoeffekts im allgemeinen von elektrischen Potentialen umgeben. Diese besitzen unter der Voraussetzung elastischer Isotropie eine sehr einfache und allgemeine Gestalt: Für Stufenversetzungen, auf die sich die folgende Arbeit speziell bezieht, ergibt sich für beliebige Richtungen der Versetzungslinien (unter Ausschluß des Versetzungskerns) ein nur winkelabhängiges Potential der Form $V = A_2 \cos 2\varphi + A_4 \cos 4\varphi$, mit einer etwaigen zusätzlichen Phasenverschiebung in den Kosinusgliedern ($A_2, A_4 = \text{const}$; r, φ : Polarkoordinaten in den Ebenen \perp zur Versetzungslinie). Nur für wenige Richtungen hoher Symmetrie verschwinden die Potentiale auf Grund der Kristallsymmetrie ($A_2 = A_4 = 0$). Für piezoelektrische kubische Kristalle und hexagonale der Klasse C_{6v} werden diese Ausnahmerichtungen angegeben. Zu diesen Klassen gehören insbesondere die technisch wichtigen Kristalle mit Zinkblende- und Wurtzitstruktur.

Für die Kristalle CdS, CdSe und ZnO (Wurtzitstruktur) werden für einige charakteristische Versetzungen auch die numerischen Werte der Potentiale berechnet. Sie sind so groß, daß vor allem bei tieferen Temperaturen ein beträchtlicher Einfluß auf elektronische und optische Prozesse im Kristall zu erwarten ist.

1. Einleitung

In einer vorhergehenden Arbeit¹ wurde gezeigt, daß Versetzungen in piezoelektrischen Kristallen im allgemeinen von einem durch den Piezoeffekt bedingten elektrischen Feld umgeben sind, den Versetzungen entlang verlaufen Potentialwälle und -gräben. Wir nennen sie im folgenden auch kurz piezoelektrische Felder bzw. Potentiale der Versetzungen. In² wurde ein allgemeiner Ausdruck für die piezoelektrischen Potentiale um gerade Schraubenversetzungen beliebiger Richtung in piezoelektrischen Kristallen mit (nahezu) elastischer Isotropie hergeleitet.

Es ist nun von vornherein zu erwarten, daß ähnlich wie für Schraubenversetzungen³ sich auch für gerade Stufenversetzungen ein sehr allgemeiner Ausdruck für die piezoelektrischen Potentiale angeben läßt. Dies zu bestätigen, ist der Gegenstand der folgenden Untersuchungen, wobei wie in² vorausgesetzt sei, daß der Kristall sich (nahezu) elastisch isotrop verhalte. Dabei sind alle auf Grund der Stabilitätskriterien zugelassenen Richtungen einzuschließen. Um aber die Stabilitätsfragen hier nicht im einzelnen diskutieren zu müssen, werden wir im fol-

genden sogar beliebige Richtungen zulassen, so daß nachträglich für die jeweils betrachteten Kristalle noch zu untersuchen bleibt, in welchen dieser Richtungen überhaupt stabile Versetzungen möglich sind. Dabei ist wieder von besonderem Interesse, ob auch Ausnahmerichtungen mit identisch verschwindendem Potential existieren.

Das Ergebnis ist relativ einfach. Das Potential läßt sich unter Ausschluß des Versetzungskerns stets in der Form schreiben

$$V = A_2 \cos 2(\varphi - \varphi_2) + A_4 \cos 4(\varphi - \varphi_4). \quad (1,1)$$

r, φ bedeuten Polarkoordinaten in der Ebene senkrecht zur Versetzungslinie. Die Abhängigkeit von der Richtung und der Symmetrie des piezoelektrischen Tensors der jeweils betrachteten Kristallklasse drücken sich lediglich in der Größe der für jede Versetzung konstanten Faktoren A_2 und A_4 und in den festen Winkeln φ_2 und φ_4 aus. Auch die Ausnahmerichtungen ($A_2 = A_4 = 0$) der Versetzungslinien lassen sich aus der allgemeinen Darstellung der Faktoren A_2 und A_4 durch die Richtungskosinus und die piezoelektrischen Konstanten für alle Kristallklassen relativ leicht ablesen. Wie gezeigt wird, sind dies

¹ L. MERTEN, a) Phys. kondens. Materie 2, 53 [1964]; b) 2, 66 [1964].

² L. MERTEN, Z. Naturforschg. 19 a, 788 [1964].

³ Um das Gemeinsame in den einander entsprechenden Ergebnissen für Schraubenversetzungen² und Stufenversetzungen auch äußerlich deutlich in Erscheinung treten zu

lassen und um andererseits die vorliegende Arbeit auch getrennt von² lesbar zu machen, wurde die Formulierung des folgenden Textes bis auf den zusätzlichen Abschnitt 4 sehr eng derjenigen von² angepaßt und der Text dementsprechend nicht durch zusätzliche Hinweise auf² zu kürzen versucht.



für piezoelektrische kubische Kristalle (fehlendes Symmetriezentrum: Klassen T und T_d), zu denen z. B. die technisch wichtigen Kristalle ZnS, GaAs (Raumgruppe T_d^2)⁴ gehören, nur die Richtungen der kubischen Achsen mit beliebig senkrecht hierzu liegenden BURGERS-Vektoren. Für hexagonale Kristalle der Klasse C_{6v} , zu denen z. B. die technisch ebenfalls wichtigen Kristalle CdS, CdSe, ZnO (Raumgruppe C_{6v}^4)⁴ gehören, ist die einzige Ausnahmerrichtung die Richtung der c -Achse, mit wieder beliebig senkrecht hierzu liegenden BURGERS-Vektoren.

Für einige charakteristische Versetzungen in der hexagonalen Basisebene der drei letztgenannten Verbindungen werden auch die numerischen Werte (Abschnitt 4) der Potentiale berechnet.

2. Darstellung der piezoelektrischen Potentiale um Stufenversetzungen bei elastischer Isotropie

Das Verzerrungsfeld einer geraden Stufenversetzung in elastisch isotropen Kristallen lässt sich bei Vernachlässigung von Randeffüssen darstellen durch (vgl. Anm.⁵, S. 534, oder Anm.⁶, S. 115)

$$\varepsilon_{11} = B \frac{y}{r^2} \left\{ -\frac{3x^2+y^2}{r^2} + 2\nu \right\}, \quad (a)$$

$$\varepsilon_{22} = B \frac{y}{r^2} \left\{ \frac{x^2-y^2}{r^2} + 2\nu \right\}, \quad (b)$$

$$\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} = B \frac{x}{r^2} \frac{x^2-y^2}{r^2} \quad (c)$$

$$\text{mit } B \equiv \frac{b}{4\pi} \frac{1}{1-\nu}. \quad (d) \quad (2,1)$$

Dabei wurde die z -Achse des Koordinatensystems wieder in Richtung der Versetzungsleitung gelegt, die x -Achse jetzt in Richtung des BURGERS-Vektors; die Indizes 1, 2, 3 beziehen sich wie üblich der Reihe

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ -\frac{y}{r^2} \frac{3x^2+y^2}{r^2} \right\} &= \frac{1}{r^2} \frac{6x^3y-2xy^3}{r^4} \\ \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{y}{r^2} \frac{x^2-y^2}{r^2} \right\} &= \frac{1}{r^2} \frac{-2x^3y+6xy^3}{r^4} \\ \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{y}{r^2} \right\} &= -\frac{1}{r^2} \frac{2xy}{r^2} \end{aligned}$$

⁴ Hier sind nur Kristalle mit bekannten und relativ großen piezoelektrischen Konstanten angegeben. Für die drei letztgenannten trifft die Voraussetzung der elastischen Isotropie (vgl. z. B. ^{13-16, 19}) relativ gut zu, für die genannten kubischen dagegen schlecht.

⁵ A. SEEBER, Theorie der Gitterfehlstellen, im Handbuch der Physik, Band VII, Teil I, Verlag Springer, Berlin-Göttingen-Heidelberg 1955.

nach auf die x -, y -, z -Achse. b bedeutet den Betrag des BURGERS-Vektors, ν die Poisson-Zahl.

Die zugehörige Dichte ϱ' der Polarisationsladungen wird allgemein gegeben durch [vgl. ¹, Gl. (1,4)]

$$\varrho' = - \sum_{\alpha} \sum_{\beta\gamma} e'_{\alpha,\beta\gamma} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \varepsilon_{\beta\gamma} \quad (\alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3), \quad (2,2)$$

worin die $e'_{\alpha,\beta\gamma}$ die Komponenten des piezoelektrischen Tensors bedeuten. Hiermit ergibt sich schließlich das gesuchte Potentialfeld V aus der Poisson-Gleichung (bei Abwesenheit freier Ladungen, insbesondere also von Elektronen und Löchern; ε : dielektrische Konstante)

$$\Delta V = - (4\pi/\varepsilon) \varrho'. \quad (2,3)$$

Die piezoelektrischen Konstanten $e'_{\alpha,\beta\gamma}$ in (2,2) sind bei Benutzung der Ausdrücke (2,1) ebenfalls auf das der Versetzung angepaßte Koordinatensystem zu beziehen, außerdem ist dann natürlich zu setzen: $x_1 = x$; $x_2 = y$; $x_3 = z$. Da mit diesen $e'_{\alpha,\beta\gamma}$ sich die folgenden allgemeinen Ergebnisse direkt gewinnen lassen, ist es zweckmäßig, letztere erst nachträglich (Abschnitt 3) durch die auf die jeweiligen Kristallachsen bezogenen $e_{\alpha,\beta\gamma}$ auszudrücken. – Beim Einsetzen von (2,1) sieht man nun sofort, daß in (2,2) höchstens sechs Glieder auftreten, nämlich diejenigen, deren zugehörige piezoelektrische Konstanten die hinteren Indexpaare 11, 22, 12 (= 21) enthalten, also

$$\begin{aligned} e'_{1,11}, e'_{1,22}, e'_{1,12} (&= e'_{1,21}), \\ e'_{2,22}, e'_{2,11}, e'_{2,12} (&= e'_{2,21}). \end{aligned} \quad (2,2a)$$

Wie für alle geraden Versetzungen scheiden dabei Glieder mit der Ziffer 3 als ersten Index der piezoelektrischen Konstanten aus, da die Ausdrücke von der Koordinate z , nach der abgeleitet wird, unabhängig sind. Beachtet man noch, daß

$$= \frac{1}{r^2} (\sin 2\varphi + \sin 4\varphi), \quad (a)$$

$$= \frac{1}{r^2} (\sin 2\varphi - \sin 4\varphi), \quad (b)$$

$$= -\frac{1}{r^2} \sin 2\varphi, \quad (c)$$

⁶ W. T. READ, Dislocations in Crystals, McGraw-Hill, New York-Toronto-London 1953. – In dieser Arbeit sowie in ⁵ ist nur das Spannungsfeld explizit angegeben. Man gewinnt aber hieraus sofort die Gl. (2,1) unter Benutzung der Dehnungs-Spannungs-Beziehungen oder direkt aus den angegebenen Ausdrücken für die Verschiebungen.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{x}{r^2} \frac{x^2 - y^2}{r^2} \right\} = \frac{1}{r^2} \frac{-x^4 + 6x^2y^2 - y^4}{r^4} = -\frac{1}{r^2} \cos 4\varphi, \quad (d)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left\{ -\frac{y}{r^2} \frac{3x^2 + y^2}{r^2} \right\} = \frac{1}{r^2} \frac{-3x^4 + 6x^2y^2 + y^4}{r^4} = -\frac{1}{r^2} (2 \cos 2\varphi + \cos 4\varphi), \quad (e) \quad (2,4)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{y}{r^2} \frac{x^2 - y^2}{r^2} \right\} = \frac{1}{r^2} \frac{x^4 - 6x^2y^2 + y^4}{r^4} = \frac{1}{r^2} \cos 4\varphi, \quad (f)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{y}{r^2} \right\} = \frac{1}{r^2} \frac{x^2 - y^2}{r^2} = \frac{1}{r^2} \cos 2\varphi, \quad (g)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{x}{r^2} \frac{x^2 - y^2}{r^2} \right\} = \frac{1}{r^2} \frac{-6x^3y + 2xy^3}{r^4} = -\frac{1}{r^2} (\sin 2\varphi + \sin 4\varphi), \quad (h)$$

so folgt also: $\varrho' = \frac{1}{r^2} [\alpha_2 \cos 2\varphi + \beta_2 \sin 2\varphi + \alpha_4 \cos 4\varphi + \beta_4 \sin 4\varphi] \quad (2,5)$

mit $\alpha_2 = B\{2(1-\nu)e'_{2,11} - 2\nu e'_{2,22}\}, \quad \beta_2 = B\{-(1-2\nu)(e'_{1,11} + e'_{1,22}) + 2e'_{2,12}\}, \quad (a), (b)$

$$\alpha_4 = B\{e'_{2,11} - e'_{2,22} + 2e'_{1,21}\}, \quad \beta_4 = B\{-e'_{1,11} + e'_{1,22} + 2e'_{2,12}\}. \quad (c), (d)$$

Wie man sieht, tritt ein winkelunabhängiges Glied der Form α_0/r^2 nicht auf. Dies ist auch allgemein für Polarisationsladungen zu verlangen, da das Auftreten eines solchen Gliedes ja eine mittlere Ladung positiven oder negativen Vorzeichens bedeuten würde, während natürlich der Mittelwert von Polarisationsladungen, hier gemittelt über das ganze Versetzungsgebiet, stets Null sein muß.

Führt man jetzt noch $a_2 \equiv \sqrt{\alpha_2^2 + \beta_2^2}$ und $a_4 \equiv \sqrt{\alpha_4^2 + \beta_4^2}$ (2,6a)

ein und definiert φ_2 und φ_4 durch

$$\cos 2\varphi_2 \equiv \alpha_2/a_2 \quad \text{bzw.} \quad \cos 4\varphi_4 \equiv \alpha_4/a_4, \quad \sin 2\varphi_2 \equiv \beta_2/a_2 \quad \text{bzw.} \quad \sin 4\varphi_4 \equiv \beta_4/a_4, \quad (2,6b)$$

so lässt sich (2,5) auch in der Form schreiben

$$\varrho' = \frac{1}{r^2} [a_2 \cos 2(\varphi - \varphi_2) + a_4 \cos 4(\varphi - \varphi_4)]. \quad (2,7)$$

Hiermit ergibt sich schließlich für das Potential V im ganzen Versetzungsgebiet aus der Poisson-Gleichung (2,3), wobei wieder die besonderen Verhältnisse im Versetzungskern und Randeinflüsse am äußeren Rande unberücksichtigt bleiben:

$$V = A_2 \cos 2(\varphi - \varphi_2) + A_4 \cos 4(\varphi - \varphi_4) \quad \text{mit} \quad A_2 = (\pi/\varkappa) a_2 \quad \text{und} \quad A_4 = (\pi/4\varkappa) a_4. \quad (2,8)$$

Wir haben also das Ergebnis: Der unter der Voraussetzung der elastischen (und dielektrischen) Isotropie allgemeinsten Ausdruck für das Potential V um gerade Stufenversetzungen ist von der Form (1,1). Gegenüber den Schraubenversetzungen ist dabei dem Linien-Quadrupol-Potential $A_2 \cos 2\varphi$ noch ein Linien-Oktupol-Potential $A_4 \cos 4\varphi$ mit einer etwaigen zusätzlichen Phasenverschiebung überlagert.

3. Darstellung der Faktoren A_2 und A_4 für piezoelektrische kubische und hexagonale Kristalle (der Klasse C_{6v}) mit Angabe der Ausnahmerichtungen

Um A_2 und A_4 (bzw. a_2 und a_4) in Abhängigkeit von der Richtung darzustellen, hat man jetzt die sechs auf die Versetzungen bezogenen piezoelektrischen Konstanten $e'_{\alpha,\beta\gamma}$ in Gl. (2,5) bzw. (2,7) durch die gewöhnlich benutzten, auf die Kristallachsen bezogenen Konstanten $e_{\alpha,\beta\gamma}$ auszudrücken. Wie in ², Abschn. 3, sei die Richtung der Versetzungslinie (z -Achse) durch ihre Richtungskosinus $c_{31} = \cos \alpha$, $c_{32} = \cos \beta$, $c_{33} = \cos \gamma$ in bezug auf die Kristallachsen (x_1 , x_2 , x_3) festgelegt. Gegenüber den Schraubenversetzungen hat man hier aber zusätzlich noch die Richtung des BURGERS-Vektors (x -Achse) festzulegen. Hierzu benutzen wir den EULERSchen Winkel Φ , welcher den Winkel zwischen der x -Achse und der Schnittgeraden der xy -Ebene mit der x_2x_3 -Ebene (Knotenlinie) bestimmt. Dann lautet der Transformationstensor ⁷ (3,1):

⁷ Die Matrix C ergibt sich aus der Matrix A ², Gl. (3,2), nach $C = T \cdot A$ mit $T \equiv \begin{pmatrix} \cos \Phi & \sin \Phi & 0 \\ -\sin \Phi & \cos \Phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$; für $\Phi=0$ ist $C=A$.

$$C \equiv (c_{\alpha\beta}) \equiv \begin{pmatrix} \frac{1}{n} \begin{cases} -\cos \Phi \cos \beta \\ -\sin \Phi \cos \alpha \cos \gamma \end{cases}, & \frac{1}{n} \begin{cases} \cos \Phi \cos \alpha \\ -\sin \Phi \cos \beta \cos \gamma \end{cases}, & \frac{1}{n} \sin \Phi (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta) \\ \frac{1}{n} \begin{cases} \sin \Phi \cos \beta \\ -\cos \Phi \cos \alpha \cos \gamma \end{cases}, & \frac{1}{n} \begin{cases} -\sin \Phi \cos \alpha \\ -\cos \Phi \cos \beta \cos \gamma \end{cases}, & \frac{1}{n} \cos \Phi (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta) \\ \cos \alpha & \cos \beta & \cos \gamma \end{pmatrix} \quad (3,1)$$

mit

$$n \equiv \sqrt{\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta} \quad (3,1a)$$

oder, wenn man durch Einführung der zwei weiteren EULERSchen Winkel ψ (Winkel zwischen der Knotenlinie und der x_1 -Achse) und $\vartheta \equiv \gamma$ (Winkel zwischen der z - und x_3 -Achse) gemäß $\cos \alpha = \sin \psi \sin \vartheta$, $\cos \beta = -\cos \psi \sin \vartheta$ ($n = \sin \vartheta$) zu einer sehr häufig benutzten Darstellungsform übergeht (vgl. z. B. ⁸, S. 158, bzw. ⁹, S. 59) :

$$C = \begin{pmatrix} \cos \Phi \cos \psi & \cos \Phi \sin \psi & \sin \Phi \sin \vartheta \\ -\sin \Phi \sin \psi \cos \vartheta & +\sin \Phi \cos \psi \cos \vartheta & \sin \Phi \sin \vartheta \\ -\sin \Phi \cos \psi & -\sin \Phi \sin \psi & \cos \Phi \sin \vartheta \\ -\cos \Phi \sin \psi \cos \vartheta & +\cos \Phi \cos \psi \cos \vartheta & \cos \Phi \sin \vartheta \\ \sin \psi \sin \vartheta & -\cos \psi \sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix}. \quad (3,1b)$$

Als Komponenten eines Tensors dritter Stufe transformieren sich die piezoelektrischen Konstanten nach [vgl. z. B. ¹⁰, S. 111, Gl. (5)]

$$e'_{\alpha\beta\gamma} = \sum_{\lambda\mu\nu} c_{\alpha\lambda} c_{\beta\mu} c_{\gamma\nu} e_{\lambda\mu\nu}. \quad (3,2)$$

Für kubische Kristalle und weiter unten für hexagonale Kristalle der Klasse C_{6v} seien die sich ergebenden Ausdrücke jetzt explizit angegeben.

Für kubische piezoelektrische Kristalle sind nur die piezoelektrischen Konstanten

$$e_{1,23} = e_{1,32} = e_{2,31} = e_{2,13} = e_{3,12} = e_{3,21} (\equiv e_{14}) \quad (3,3)$$

von Null verschieden. Daher treten in (3,2) jeweils sechs, z. Tl. übereinstimmende Summanden auf (alle Kombinationen der Ziffer 1, 2, 3 als hintere Indizes der je drei Faktoren $c_{\alpha\beta}$) :

$$\begin{aligned} e'_{1,11} &= 6 c_{11} c_{12} c_{13} e_{14}, \\ \left. \begin{aligned} e'_{1,22} \\ e'_{2,12} \end{aligned} \right\} &= 2 (c_{11} c_{22} c_{23} + c_{12} c_{23} c_{21} + c_{13} c_{21} c_{22}) e_{14}, \\ e'_{2,22} &= 6 c_{21} c_{22} c_{23} e_{14}, \\ \left. \begin{aligned} e'_{2,11} \\ e'_{1,21} \end{aligned} \right\} &= 2 (c_{21} c_{12} c_{13} + c_{22} c_{13} c_{11} + c_{23} c_{11} c_{12}) e_{14}. \end{aligned} \quad (3,4)$$

Hier sei darauf verzichtet, die $c_{\alpha\beta}$ in der Gestalt (3,1) explizit einzusetzen, da die Ausdrücke dann etwas lang und wenig übersichtlich werden.

⁸ E. MADELUNG, Die mathematischen Hilfsmittel des Physikers, Springer-Verlag, Berlin 1950.

⁹ R. ZÜRMÜHL, Matrizen und ihre technischen Anwendungen, Springer-Verlag, Berlin 1961. Die dort angegebene Matrix ist die Transponierte zu C .

¹⁰ J. F. NYE, Physical Properties of Crystals, Clarendon Press, Oxford 1957.

¹¹ $\sin \Phi = 0$, $\sin \vartheta \neq 0$ ist unter der zusätzlichen Annahme $c_{11} \neq 0$, $c_{12} \neq 0$ nicht möglich, da dann aus dem Verschwinden des Faktors $c_{11} c_{12} c_{13}$ im Ausdruck für $e'_{2,11}$

Aus den Formeln (3,4) in Verbindung mit (2,8) lassen sich bei Kenntnis von b , z , v , e_{14} die piezoelektrischen Potentiale für jede vorgegebene Richtung der Versetzungsleitung und des BURGERS-Vektors berechnen.

Hier interessieren, wie erwähnt, insbesondere die Ausnahmerichtungen mit $a_2 = A_2 = 0$ und $a_4 = A_4 = 0$. Letzteres gilt offenbar genau dann, wenn α_2 und β_2 , α_4 und β_4 [Gl. (2,5)] gleichzeitig verschwinden. Nun verlangt aber das Verschwinden z. B. von α_2 und α_4 insbesondere $e'_{2,11} = 0$, von β_2 und β_4 insbesondere $e'_{1,11} = 0$. Die letztere Bedingung verlangt weiter nach (3,4) die Erfüllung wenigstens einer der drei Gleichungen: $c_{11} = 0$; $c_{12} = 0$; $c_{13} = 0$. Da für kubische Kristalle die drei Kristallachsen gleichberechtigt sind, dürfen wir willkürlich annehmen $c_{13} = \sin \Phi \sin \vartheta = 0$, d. h. $\sin \Phi = 0$ und/oder $\sin \vartheta = 0$. Schließen wir $\sin \Phi = 0$, $\sin \vartheta \neq 0$ (vgl. Anm. ¹¹) aus, so bedeutet dies also, daß z - und x_3 -Achse zusammenfallen ($\vartheta = 0^\circ$ oder 180°). Mit $\sin \vartheta = 0$ folgt dann ebenfalls $c_{23} = 0$. Nach (3,4) verschwinden dann aber auch alle restlichen $e'_{\alpha\beta\gamma}$ unabhängig von der Lage des BURGERS-Vektors (Winkel Φ) in der Ebene senkrecht zur z -Achse, d. h. $a_2 = A_2 = a_4 = A_4 = 0$. Denkt man sich die kubischen Achsen jetzt noch zyklisch vertauscht, so folgt also das Ergebnis:

sofort folgen würde $c_{23} = \cos \Phi \sin \vartheta = 0$, also wegen $\cos \Phi = \pm 1$ ebenfalls $\sin \vartheta = 0$. Wäre andererseits neben $c_{13} = 0$ zusätzlich entweder $c_{11} = 0$ oder $c_{12} = 0$ (das heißt $\cos \psi = 0$ bzw. $\sin \psi = 0$), so würde aus dem Verschwinden des Faktors im Ausdruck für $e'_{1,22} = e'_{2,12}$ folgen:

$$\begin{aligned} c_{12} c_{23} c_{21} &= \pm \sin \vartheta \cos \vartheta = 0, \\ \text{bzw. } c_{11} c_{22} c_{33} &= \pm \cos \vartheta \sin \vartheta = 0, \end{aligned}$$

also auch $\sin \vartheta = 0$ oder $\cos \vartheta = 0$. Diese Fälle sind aber in dem oben formulierten Ergebnis bereits enthalten.

Unter den geraden Stufenversetzungen in piezoelektrischen Kristallen mit kubischer Symmetrie sind frei von piezoelektrischen Potentialen nur die Versetzungen entlang von {001}-Richtungen [mit BURGERS-Vektoren beliebig in der (001)-Ebene].

Zweitens seien jetzt hexagonale Kristalle der Klasse C_{6v} behandelt. Bei diesen existieren drei voneinander unabhängige piezoelektrische Konstanten (vgl. z. B. ¹⁰, S. 300; in Klammern in Voigtscher

Als Verknüpfungsgleichungen der $e'_{\alpha,\beta\gamma}$ mit den $e_{i,u\gamma}$ erhält man wieder nach (3,2) :

$$\begin{aligned} e'_{1,11} &= c_{13}^3 e_{33} + c_{13}(c_{11}^2 + c_{22}^2)(e_{31} + 2e_{15}), \\ e'_{1,22} &= c_{13}c_{23}^2 e_{33} + c_{13}(c_{21}^2 + c_{22}^2)e_{31} + 2c_{23}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})e_{15}, \\ e'_{1,12} &= c_{13}^2 c_{23} e_{33} + c_{13}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})e_{31} + [c_{13}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22}) + c_{23}(c_{11}^2 + c_{22}^2)]e_{15}, \\ e'_{2,22} &= c_{23}^3 e_{33} + c_{23}(c_{21}^2 + c_{22}^2)(e_{31} + 2e_{15}), \\ e'_{2,11} &= c_{13}^2 c_{23} e_{33} + c_{23}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})e_{31} + 2c_{13}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})e_{15}, \\ e'_{2,12} &= c_{13}c_{23}^2 e_{33} + c_{23}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})e_{31} + [c_{13}(c_{21}^2 + c_{22}^2) + c_{23}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})]e_{15}. \end{aligned} \quad (3,6)$$

Ausnahmerichtungen liegen wieder dann und nur dann vor, wenn $a_2 = a_4 = 0$, d. h. $\alpha_2 = \beta_2 = \alpha_4 = \beta_4 = 0$. Da e_{33} , e_{31} , e_{15} als voneinander unabhängig zu betrachten sind, muß nach Einsetzen von (3,6) in (2,5) jeder der Faktoren zu den drei piezoelektrischen Konstanten verschwinden, also z. B. in dem Ausdruck für $e'_{1,11}$ der Faktor c_{13}^3 zu e_{33} , d. h. $c_{13} = \sin \Phi \sin \vartheta = 0$. Schließen wir $\sin \Phi = 0$, $\sin \vartheta \neq 0$ (vgl. ¹²) wieder aus, so bedeutet $\sin \vartheta = 0$, daß die einzige Ausnahmerichtung diejenige ist, wenn z -Achse und x_3 -Achse zusammenfallen. Aus $\sin \vartheta = 0$ folgt nun ebenfalls $c_{23} = 0$, womit alle $e'_{\alpha,\beta\gamma}$ nach (2,5) wieder verschwinden, unabhängig von der Lage des BURGERS-Vektors in der Ebene senkrecht zur z -Achse, d. h. $a_2 = A_2 = a_4 = A_4 = 0$. Dies läßt sich zusammenfassen in dem Ergebnis:

Unter den geraden Stufenversetzungen in hexagonalen Kristallen (der Klasse C_{6v}) sind frei von piezoelektrischen Potentialen nur die Versetzungen entlang der c -Achse [mit BURGERS-Vektoren beliebig in der (001)-Ebene].

Wie in einem Anhang gezeigt wird, sind diese Ergebnisse nicht an die Voraussetzungen der elastischen Isotropie gebunden, gelten also allgemein.

Wie man aus dem Vergleich mit den Ausnahmerichtungen für Schraubenversetzungen ² sieht, gibt

¹² Die Annahme $\sin \Phi = 0$, $\sin \vartheta \neq 0$ würde hier z. B. mit dem Verschwinden des Faktors zu e_{33} in dem Ausdruck für $e'_{2,22}$, nämlich mit $c_{23} = \cos \Phi \sin \vartheta = 0$, nicht verträglich sein.

Indizierung) :

$$\begin{aligned} e_{3,33} (\equiv e_{33}) &= e_{3,11} = e_{3,22} (\equiv e_{31}), \\ e_{1,13} = e_{1,31} &= e_{2,23} = e_{2,32} (\equiv e_{15}). \end{aligned} \quad (3,5)$$

Zu dieser Klasse gehören z. B. die Kristalle mit Wurtzitstruktur, darunter die erwähnten, technisch wichtigen Kristalle CdS, CdSe, ZnO, für die im folgenden Abschnitt auch die piezoelektrischen Potentiale um einige charakteristische Versetzungen numerisch berechnet werden.

Als Verknüpfungsgleichungen der $e'_{\alpha,\beta\gamma}$ mit den $e_{i,u\gamma}$ erhält man wieder nach (3,2) :

$$\begin{aligned} e'_{1,11} &= c_{13}^3 e_{33} + c_{13}(c_{11}^2 + c_{22}^2)(e_{31} + 2e_{15}), \\ e'_{1,22} &= c_{13}c_{23}^2 e_{33} + c_{13}(c_{21}^2 + c_{22}^2)e_{31} + 2c_{23}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})e_{15}, \\ e'_{1,12} &= c_{13}^2 c_{23} e_{33} + c_{13}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})e_{31} + [c_{13}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22}) + c_{23}(c_{11}^2 + c_{22}^2)]e_{15}, \\ e'_{2,22} &= c_{23}^3 e_{33} + c_{23}(c_{21}^2 + c_{22}^2)(e_{31} + 2e_{15}), \\ e'_{2,11} &= c_{13}^2 c_{23} e_{33} + c_{23}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})e_{31} + 2c_{13}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})e_{15}, \\ e'_{2,12} &= c_{13}c_{23}^2 e_{33} + c_{23}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})e_{31} + [c_{13}(c_{21}^2 + c_{22}^2) + c_{23}(c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})]e_{15}. \end{aligned} \quad (3,6)$$

es bei kubischen Kristallen keine Ausnahmerichtungen, für die sowohl die piezoelektrischen Potentiale einer Stufen- als auch einer Schraubenversetzung verschwinden. In den hexagonalen Kristallen (der Klasse C_{6v}) trifft dies nur für die Richtung der c -Achse zu. Versetzungen mit gemischtem Schrauben- und Stufencharakter sind also hiernach zumindest in piezoelektrischen kubischen Kristallen immer von piezoelektrischen Potentialen umgeben.

4. Numerische Werte der piezoelektrischen Potentiale um einige charakteristische Versetzungen in CdS, CdSe und ZnO

Falls die Potentialwälle und -gräben genügend hoch bzw. tief sind und zudem mit hoher Versetzungsdichte ebenfalls sehr dicht liegen, so hat man vor allem bei tieferen Temperaturen einen erheblichen Einfluß auf elektronische und vermutlich auch optische Prozesse im Kristall zu erwarten. Daher interessiert zunächst besonders, welche Größenordnungen der Potentiale sich für Versetzungen in einigen wichtigen piezoelektrischen Kristallen ergeben. Als Beispiel sollen deshalb einige charakteristische Versetzungen in den Kristallen CdS, CdSe und ZnO (Wurtzitstruktur: C_{6v}^4), die als Photoleiter und Phosphore größere technische Bedeutung besitzen und zugleich einen relativ großen Piezoeffekt zeigen, betrachtet werden. Wie Tab. 1 zeigt, sind auch die

	CdS		CdSe	ZnO
	vgl. Anm. a ₁	vgl. Anm. a ₂	vgl. Anm. b	vgl. Anm. c
c_{11}	9,07 (8,96)*	8,1 (7,9)*	7,41 (7,55)*	20,97 (20,7)*
c_{33}	9,38 (8,96)	8,0 (7,9)	8,36 (7,55)	21,09 (20,7)
c_{12}	5,81 (5,46)	4,9 (4,9)	4,52 (4,23)	12,11 (11,3)
c_{13}	5,10 (5,46)	4,8 (4,9)	3,93 (4,23)	10,51 (11,3)
c_{44}	1,50 (1,75)	1,43 (1,5)	1,32 (1,66)	4,25 (4,7)
λ^*	5,46	4,9	4,23	11,3
μ^*	1,75	1,5	1,66	4,7
ν^*	0,38	0,38	0,36	0,35
e_{33}	13,2	10,7	10,41	46,5
e_{31}	-7,32	-4,8	-4,80	-8,5
e_{15}	-6,30	-6,1	-4,14	-14,9 ± 2,1
α_{11}	9,02	—	9,33	—
α_{33}	9,53	—	10,20	—
$\alpha = \alpha_M$	9,28	—	9,77	8,5

Tab. 1. Elektro-elastische Konstanten von CdS, CdSe und ZnO.

Elastische Konstanten c_{ij} in 10^{11} dyn/cm², piezoelektrische Konstanten e_{ij} in 10^4 el.-stat. cgs/cm².

Anm. *: Bei der Bestimmung der LAMÉSchen Konstanten λ und μ als Mittelwerte der fünf elastischen Konstanten bleibt die Art und Weise der Mittelwertbildung natürlich etwas willkürlich: In der Tabelle wurde λ als arithmetischer Mittelwert von c_{12} , c_{13} gebildet, μ von c_{44} , $\frac{1}{2}(c_{33}-c_{13})$, $\frac{1}{2}(c_{11}-c_{12})$. Die in Klammern hinzugefügten Werte bedeuten die aus λ und μ (elastisch isotropes Modell) zurückberechneten elastischen Konstanten ($c_{11}=c_{33}=\lambda+2\mu!$). — Die Poisson-Zahl ν ergibt sich aus den LAMÉSchen Konstanten nach $\nu=\lambda/2(\lambda+\mu)$.

Anm. a: Für CdS liegen inzwischen unabhängige Messungen verschiedener Autoren vor, deren Meßwerte aber z. Tl. sehr streuen (elastische Konstanten nach ^{13–16}, piezoelektrische Konstanten nach ^{13, 17, 18}). Um den Einfluß dieser Streuung auf die piezoelektrischen Potentiale mit zu berücksichtigen, wurden zur Berechnung zwei Sätze der elektro-elastischen Konstanten benutzt, nach Anm. a₁ und Anm. a₂, wobei die Werte nach Anm. a₁ vermutlich etwas genauer sind.

Anm. a₁: Elektro-elastische Konstanten nach ¹³.

Anm. a₂: Elastische Konstanten nach ¹⁴, die piezoelektrischen Konstanten e_{hj} wurden nach $e_{hj} = \sum_i d_{hi} c_{ij}$ mit den

c_{ij} nach ¹⁴ und den d_{hi} nach ¹⁷ berechnet, mit Ausnahme der Konstante d_{31} , für die wieder der Wert nach ¹³ benutzt wurde, da zwischen den d_{31} -Werten beider Autoren eine relativ große Differenz besteht, wobei derjenige nach ¹³ etwas zuverlässiger erscheint. Für α wurde $\alpha=9,28$ wie in Anm. a₁ benutzt.

Anm. b: Elektro-elastische Konstanten nach ¹³.

Anm. c: Elastische Konstanten nach ¹⁹, dielektrische Konstante nach ²⁰. Die piezoelektrischen Konstanten e_{hj} wurden mit den c_{ij} nach ¹⁹ und den d_{hi} nach ¹⁷ berechnet. Die in Tab. 1 angegebene Unsicherheit in e_{15} entspricht der Unsicherheit in d_{15} .

benötigten Materialkonstanten dieser Verbindungen inzwischen sämtlich bekannt. Da zudem die Voraussetzung der elastischen Isotropie für diese Kristalle relativ gut zutrifft, werden auch die Fehler in den piezoelektrischen Potentialen überall klein bleiben (geschätzter relativer Fehler überall < 5%).

In Kristallen, die wie die betrachteten aus hexagonal-dichtesten Kugelpackungen aufgebaut sind, ist im allgemeinen die hexagonale Basisebene eine bevorzugte Gleitebene. Die einzigen BURGERS-Vektoren in dieser Ebene, zu denen stabile Versetzungen gehören, sind diejenigen entlang der a -Achsen, nämlich $b=a\langle 11\cdot0\rangle$ mit der Länge a (vgl. Abb. 1).

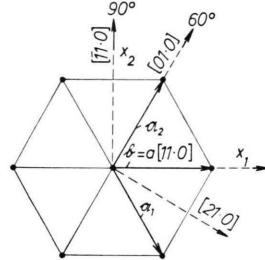


Abb. 1. Richtungen der Versetzungslien und des BURGERS-Vektors in der hexagonalen Basisebene (a_1, a_2 : Basisvektoren).

Eine reine Stufenversetzung (90° -Versetzung) liegt vor, wenn die Versetzungslinie (z -Achse) z. B. in $\langle\bar{1}\bar{1}\cdot0\rangle$ -Richtung verläuft. Da die z -Achse jetzt mit der x_2 -Achse der Kristallachsen, die x -Achse mit der x_1 -Achse, die y -Achse schließlich mit der (negativen) c -Achse (= x_3 -Achse) zusammenfällt, hat man beim Übergang von den gestrichenen piezoelektrischen Konstanten zu den ungestrichenen nur die Indizes 2 und 3 zu vertauschen (mit zusätzlichem Minuszeichen beim Übergang $2 \rightarrow 3$). Es gilt also für die $e'_{\alpha,\beta\gamma}$ in (2,5):

$$\begin{aligned} e'_{1,11} &= e_{1,11} = 0, & e'_{2,11} &= -e_{3,11} = -e_{31}, \\ e'_{1,22} &= e_{1,33} = 0, & e'_{2,22} &= -e_{3,33} = -e_{33}, \\ e'_{2,12} &= e_{3,13} = 0, & e'_{1,21} &= -e_{1,31} = -e_{15}. \end{aligned} \quad (4,1)$$

¹³ D. BERLINCOURT, H. JAFFE u. L. R. SHIOZAWA, Phys. Rev. **129**, 1009 [1963].

¹⁴ E. GUTSCHE, Naturwiss. **23**, 66 [1958]; phys. stat. sol. **1**, 30 [1961].

¹⁵ H. McSKIMIN, T. BATEMAN u. A. HUTSON, J. Acoust. Soc. Amer. **33**, 856 [1961].

¹⁶ D. BOLEF, N. MELAMED u. M. MENES, J. Phys. Chem. Solids **17**, 143 [1960].

¹⁷ A. R. HUTSON, Phys. Rev. Lett. **4**, 505 [1960].

¹⁸ T. TANAKA u. S. TANAKA, J. Phys. Soc., Japan **15**, 726 [1960].

¹⁹ T. B. BATEMAN, J. Appl. Phys. **33**, 3309 [1962].

²⁰ A. R. HUTSON u. T. S. BENEDICT, zitiert in Solid State Physics, Academic Press, New York 1961, Bd. 8, S. 195.

	CdS		CdSe		ZnO	
	90°	60°	90°	60°	90°	60°
A_2 in V	± 0,103 (0,076)*	± 0,089 (0,066)*	± 0,070	± 0,061	± 0,20	± 0,17
A_4 in V	± 0,044 (0,038)	± 0,038 (0,033)	± 0,030	± 0,026	± 0,09	± 0,08**
$V_1 = A_2 + A_4$ in V	± 0,147 (0,114)	± 0,127 (0,099)	± 0,100	± 0,087	± 0,29	± 0,25
$V_2 = -A_4(1 + A_2^2/8A_4^2)$ in V	± 0,074 (0,057)	± 0,064 (0,049)	± 0,057	± 0,044	± 0,14	± 0,12

* Die Zahlenwerte in Klammern für CdS sind mit den Daten aus der zweiten Spalte von Tab. 1 berechnet.

** Die Ungenauigkeit in dem Meßwert zu d_{15} von ZnO bedingt eine Unsicherheit nur in A_4 von ± 0,005 V.

Tab. 2. Zahlenwerte der Koeffizienten A_2 und A_4 für 90°- und 60°-Versetzungen mit $b=a\langle 11\cdot 0 \rangle$ in der hexagonalen Basisebene von CdS, CdSe und ZnO. Die unteren Vorzeichen beziehen sich jeweils auf entsprechende Versetzungen mit entgegengesetztem BURGERS-Vektor.

Die Faktoren A_2 und A_4 in (2,8) lauten folglich [mit B nach Gl. (2,1d)]:

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{\pi}{\varkappa} a_2 = \frac{\pi B}{\varkappa} \{ -2(1-\nu) e_{31} + 2\nu e_{33} \}, \\ A_4 &= \frac{\pi}{4\varkappa} a_4 = \frac{\pi B}{4\varkappa} \{ -e_{31} + e_{33} - 2e_{15} \}, \quad (4,2) \\ (\beta_2 &= \beta_4 = 0, \quad \varphi_2 = \varphi_4 = 0). \end{aligned}$$

Die mit den Daten aus Tab. 1 berechneten Zahlenwerte für A_2 und A_4 sind in Tab. 2 zusammengestellt.

In der zweiten Unterspalte sind jeweils die entsprechenden Werte für sogenannte 60°-Versetzungen in der hexagonalen Basisebene aufgeführt, die in den Kristallen mit Wurtzitstruktur als ebenfalls häufige Versetzungen zu erwarten sind. Da der Schraubenanteil dieser gemischten Versetzung nach den Ergebnissen des Abschnitts 3 nicht zum piezoelektrischen Potential beiträgt, andererseits sich die Ausdrücke für den Stufenanteil einer φ° -Versetzung aus denjenigen für die reine Stufenversetzung durch Ersetzen von nur b durch $b \cdot \sin \varphi$ ergeben, vermindern sich die piezoelektrischen Potentiale der 60°-Versetzungen, also insbesondere A_2 und A_4 , ebenfalls um den Faktor $\sin 60^\circ = 0,866$ gegenüber den betrachteten reinen Stufenversetzungen.

In Abb. 2 ist das Potential speziell einer 60°-Versetzung in CdS für einen vollen Umlauf um die Versetzungslinie dargestellt. – In der dritten und vierten Zeile der Tab. 2 sind schließlich die absoluten Extrema

$$V_1 = A_1 + A_2 \quad (4,3a)$$

$$\text{und } V_2 = -A_4(1 + A_2^2/8A_4^2) \quad (\text{s. Anm. } 21) \quad (4,3b)$$

²¹ Die Bedingung der verschwindenden ersten Ableitung von V nach φ führt auf $\sin 2\varphi = -(2A_4/A_2) \cdot \sin 4\varphi = -(4A_4/A_2) \cdot \sin 2\varphi \cos 2\varphi$,

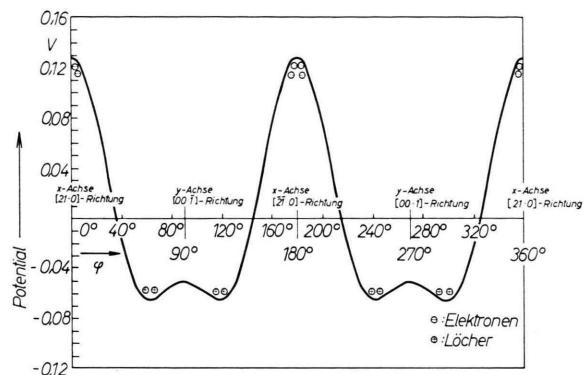


Abb. 2. Piezoelektrisches Potential um eine 60°-Versetzung in der hexagonalen Basisebene von CdS. Die Richtungsangaben beziehen sich auf eine in [01·0]-Richtung verlaufende Versetzung.

der Potentiale angegeben. Die erstgenannten Extrema werden auf den Ebenen $\varphi = 0^\circ, 180^\circ$, die zweiten unter der hier erfüllten Voraussetzung $|A_2| < 4|A_4|$ auf den Ebenen mit $\cos 2\varphi = -A_2/4A_4$ (s. Anm. ²¹) angenommen. Bei genügend tiefen Temperaturen werden sich, wie in Abb. 2 angedeutet, die quasifreien Elektronen bzw. Löcher auf diesen Ebenen und in ihrer unmittelbaren Nachbarschaft anhäufen. Für die betrachteten Versetzungen müßte sich dies schon bei Zimmertemperatur bemerkbar machen, da für alle drei behandelten Verbindungen $e|V_1|$ bzw. $e|V_2| > kT_{300\text{ K}} (\approx 0,025 \text{ eV})$.

Schließlich seien noch reine Stufenversetzungen in der hexagonalen Basisebene mit BURGERS-Vektor $b=c\langle 00\cdot 1 \rangle$ in Richtung der c -Achse betrachtet, die nach den Stabilitätskriterien (vgl. z. B. ⁵, S. 485

woraus sich für $\sin 2\varphi \neq 0$ und $|A_2| < 4|A_4|$ die Lösung $\cos 2\varphi = -(A_2/4A_4)$ ergibt. Einsetzen in (2,8) mit $\varphi_2=\varphi_4=0$ ergibt (4,3b).

unten) ebenfalls stabil sind. Nach experimentellen Befunden an CdS²² sind dies sogar relativ häufige Versetzungen. Die Versetzungslinie verläuft nach diesen Untersuchungen z. B. entlang einer *a*-Achse. Da sich die piezoelektrischen Konstanten aber bei einer Drehung der Versetzungslinie (*z*-Achse) in der hexagonalen Basisebene nicht ändern, besitzen alle diese Versetzungen unabhängig von ihrer Richtung dieselben, im folgenden angegebenen Potentiale.

Da die *z*-Achse jetzt z. B. mit der *a*-Achse (= x_1 -Achse) der Kristallachsen, die *x*-Achse mit der *c*-Achse (= x_3 -Achse), die *y*-Achse mit der (negativen) x_2 -Achse zusammenfällt, sind bei der Transformation der piezoelektrischen Konstanten jetzt die Indizes 1 und 3 zu vertauschen und für jeden Index 2 ein Minuszeichen zuzufügen:

$$\begin{aligned} e'_{1,11} &= e_{3,33} = e_{33}, & e'_{2,11} &= -e_{2,33} = 0, \\ e'_{1,22} &= e_{3,11} = e_{31}, & e'_{2,22} &= -e_{2,22} = 0, \\ e'_{2,12} &= e_{2,32} = e_{15}, & e'_{1,21} &= -e_{3,23} = 0. \end{aligned} \quad (4,4)$$

Von den Faktoren in Gl. (2,5) treten also nur β_2 und β_4 auf; nach Einsetzen von (4,4) folgt daher für die Koeffizienten A_2 und A_4 in (2,8):

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{\pi}{\varkappa} \beta_2 = \frac{\pi B}{\varkappa} \{ -(1-2\nu)(e_{33} + e_{31}) + 2e_{15} \}, \\ A_4 &= \frac{\pi}{4\varkappa} \beta_4 = \frac{\pi B}{4\varkappa} \{ -e_{33} + e_{31} + 2e_{15} \}, \\ &\quad (2\varphi_2 = \mp 90^\circ; \quad 4\varphi_4 = \mp 90^\circ). \end{aligned} \quad (4,5)$$

Die mit den Werten aus Tab. 1 berechneten A_2 und A_4 sind wieder zusammen mit den Extremwerten V_1 und V_2 [nach (4,3)] in Tab. 3 zusammengestellt. Während die Ausdrücke für A_2 sich von denjenigen in (4,2) unterscheiden, stimmen diejeni-

	CdS	CdSe	ZnO
A_2 in V	$\mp 0,122$	$\mp 0,083$	$\mp 0,29^*$
A_4 in V	$\mp 0,072$	$\mp 0,049$	$\mp 0,15^*$
$V_1 = A_2 + A_4$ in V	$\mp 0,194$	$\mp 0,132$	$\mp 0,44$
$V_2 = -A_4 \left(1 + \frac{A_2^2}{8A_4^2} \right)$ in V	$\pm 0,098$	$\pm 0,067$	$\pm 0,22$

Tab. 3. Zahlenwerte der Koeffizienten A_2 und A_4 für Stufenversetzungen mit $b=c\langle 00\cdot1 \rangle$ in der hexagonalen Basisebene von CdS, CdSe und ZnO. Die unteren Vorzeichen beziehen sich jeweils auf entsprechende Versetzungen mit entgegengesetzt gerichtetem BURGERS-Vektor.

* Die Ungenauigkeit in dem Meßwert zu d_{15} von ZnO bedingt eine Unsicherheit in A_2 von $\pm 0,03$ V und in A_4 von $\pm 0,01$ V.

²² W. MÖHLING, H. PEIBST u. L. HILDISCH, phys. stat. sol. **5**, 101 [1964]. — W. MÖHLING u. H. THIEL, phys. stat. sol. **2**, 1105 [1962].

gen für A_4 formal überein. Wegen des längeren BURGERS-Vektors sind natürlich die numerischen Werte auch von A_4 hier größer.

Auf die möglichen Einflüsse der behandelten piezoelektrischen Potentiale auf elektronische und optische Prozesse in den behandelten Kristallen sei an dieser Stelle nicht ausführlich eingegangen. Es sei lediglich bemerkt, daß die Form der Potentiale den Gedanken nahelegt, daß die zugehörigen Versetzungen als Rekombinationszentren (oder sprachlich besser: Rekombinationslinien) wirken können. Befinden sich nämlich (bei tiefen Temperaturen) die Elektronen in einer engen Umgebung der Orte maximalen Potentials, die Löcher der Orte minimalen Potentials (vgl. z. B. wieder Abb. 2), so sollten Tunnelprozesse der Ladungsträger von diesen Orten in die Gebiete mit Potentialen entgegengesetzten Vorzeichens und als Folge Rekombinationsprozesse immer wahrscheinlicher werden, je näher sich die Ladungsträger an der Versetzungslinie befinden. Falls der Rekombinationsprozeß strahlend verläuft, so müßte die Energie der dabei ausgestrahlten Lichtquanten ungefähr $h\nu = E_g - e|V_1| - e|V_2|$ betragen, wenn E_g den Bandabstand bezeichnet.

Wir hoffen, auf die mehr quantitative Behandlung dieser und anderer Einflüsse der piezoelektrischen Potentiale auf quasi-freie Ladungsträger an anderer Stelle zurückkommen zu können.

Anhang

Es wird gezeigt:

Die unter der Voraussetzung der elastischen Isotropie erhaltenen Ausnahmerichtungen ($V=0$) für Versetzungslinien gerader Stufenversetzungen, nämlich die $\langle 001 \rangle$ -Richtungen für kubische bzw. die $\langle 00\cdot1 \rangle$ -Richtung für hexagonale Kristalle (der Klasse C_{6v}), bleiben Ausnahmerichtungen, auch wenn der Theorie die volle Symmetrie der elastischen Eigenschaften zugrunde gelegt wird.

Der Beweis ergibt sich ohne Rechnung sofort wie folgt: Für Stufenversetzungen in den genannten Richtungen der Versetzungslinien treten wieder höchstens die folgenden Komponenten des Verzerrungstensors auf:

$$\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, \varepsilon_{12} = \varepsilon_{21}.$$

Dies folgt z. B. sofort aus der Tatsache, daß auch nur die entsprechenden Spannungskomponenten

$$\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{12} = \sigma_{21}$$

²³ Y. T. CHOU, J. Appl. Phys. **34**, 429 [1963].

aufreten [vgl. z. B. CHOU²³, S. 429, Gl. (3)], wenn man bei der Umrechnung die spezielle Symmetrie des (reziproken) HOOKEschen Tensors für kubische bzw. hexagonale Kristalle (vgl. z. B. NYE¹⁰, S. 300/301) in der Spannungs-Dehnungs-Beziehung berücksichtigt. Überdies wird noch $\epsilon_{33}=0$ (ebener Verzerrungszustand), was z. B. aus der speziellen Gestalt von σ_{33} direkt folgt [vgl. z. B. wieder CHOU²³, S. 429, Gl. (3)]. Bezuglich der restlichen Verzerrungskomponenten sieht man nun aber sofort, daß bei den kubischen Kristallen nach Gl. (3,3) allein $\epsilon_{12}=\epsilon_{21}$, bei den hexagonalen nach

Gl. (3,5) allein ϵ_{11} und ϵ_{22} mit piezoelektrischen Konstanten verknüpft sind (die gestrichenen piezoelektrischen Konstanten sind natürlich hier mit den ungestrichenen identisch). Diese piezoelektrischen Konstanten besitzen aber alle die Ziffer 3 als ersten Index, d. h. die zugehörigen Verzerrungskomponenten werden bei der Bildung von ϱ' [nach Gl. (2,2)] nach der Koordinate $z=x_3$ abgeleitet, von der sie gar nicht abhängen. Also bleibt $\varrho' \equiv 0$ und damit $V \equiv 0$, womit die Behauptung bereits bewiesen ist.

Einfluß der spontanen Emission auf das Einschwingverhalten von Lasern*

Von DIETER RÖSS

Mitteilung aus dem Zentral-Laboratorium der Siemens & Halske AG- München

(Z. Naturforsch. **19 a**, 1169—1177 [1964]; eingegangen am 26. Juni 1964)

In ausgesprochenen Multimode-Lasern ist die spontane Emission pro Mode gegenüber der stimulierten Emission nicht vernachlässigbar klein. Der zusätzliche Inversionsabbau durch verstärkte spontane Emission führt zu einem gegenüber dem Einmoden-Laser veränderten Einschwingverhalten. Mit wachsender Modenzahl wird die Relaxationsschwingung zunehmend gedämpft. Je nach der Modenzahl kann die Dämpfung mit wachsender Pumpleistung oder Resonatorgüte zu- oder abnehmen. Das Einschwingverhalten kann durch eine einfache Modifikation der bekannten Bilanzgleichungen beschrieben werden. Wir geben numerische Lösungen und Näherungsgleichungen an.

Die Ergebnisse der Rechnung werden durch Beobachtungen an Rubin-Multimode-Lasern in Form von totalreflektierenden Ringen bestätigt. Bei niedriger Pumprate ist der Einfluß der spontanen Emission auf das Einschwingverhalten auch in Einmode-Lasern nicht zu vernachlässigen. Hier beobachtet man eine verkürzte Dämpfungszeit in der Nähe der Schwellenergie.

I. Problemstellung

Die Abmessungen optischer Resonatoren für Laser-Oszillatoren sind im allgemeinen groß gegen die Wellenlänge der erregten Schwingungen. In ihrem Volumen sind daher viele Moden gleichzeitig existenzfähig. In den gebräuchlichen Resonatoren vom FABRY-PÉROT-Typ mit ebenen¹ oder gekrümmten² Spiegeln wird eine Modenselektion dadurch erreicht, daß die Reflexions- und Beugungsverluste verschiedener Moden unterschiedlich groß sind. Entgegen der ursprünglichen Erwartung³ hat sich jedoch gezeigt, daß in einem solchen modenselektiven Resonator nicht nur der Mode höchster Güte mit merklicher Leistung erregt wird, sondern daß durch spek-

tral selektive Prozesse^{4—6} eine Koexistenz von vielen Moden möglich ist.

In Kugeln⁷, Ringen^{8,9}, Quadern oder anderen Körpern mit polierten Oberflächen¹⁰ kann im Inneren entstehendes Licht durch Totalreflektion gefangen werden. Die Güte solcher Resonatoren ist für eine sehr große Zahl von Moden annähernd gleich. Kleine Unterschiede in der Güte idealer totalreflektierender Resonatoren für verschiedene Moden werden bei realen Lasern durch Verluste im Inneren der Materialien, wie z. B. durch die starken Streuverluste von Rubin¹¹, ausgeglichen. Es ist daher damit zu rechnen, daß ein merklicher Bruchteil aller Moden an der Lichtlawine der stimulierten Emission teilnimmt. Eine Kondensation in einzelne Moden wird

* Auszugsweise vorgetragen auf der Frühjahrstagung der Physikalischen Gesellschaft Würtemberg/Pfalz in Karlsruhe, März 1964.

¹ A. G. FOX u. TINGYE LI, Bell Syst. Techn. J. **40**, 453 [1961].

² G. D. BOYD u. J. P. GORDON, Bell Syst. Techn. J. **40**, 480 [1961].

³ W. G. WAGNER u. G. BIRNBAUM, J. Appl. Phys. **32**, 1185 [1961].

⁴ W. R. BENNET, Phys. Rev. **126**, 580 [1962].

⁵ H. HAKEN u. H. SAUERMANN, Z. Phys. **173**, 261 [1963].

⁶ C. L. TANG, H. STATZ u. G. DE MARS, J. Appl. Phys. **34**, 2289 [1963].

⁷ C. G. B. GARRET, W. KAISER u. W. L. BOND, Phys. Rev. **124**, 1807 [1961].

⁸ D. RÖSS, Proc. IEEE **51**, 468 [1963].

⁹ P. WALSH u. G. KEMENY, J. Appl. Phys. **34**, 956 [1963].

¹⁰ D. RÖSS, Vortrag auf der Frühjahrstagung der Physikalischen Gesellschaft in Bayern, Erlangen, März 1963.

¹¹ W. KAISER u. M. J. KECK, J. Appl. Phys. **33**, 762 [1962].