

Definition eines geometrischen Korngrenzenwiderstandes
zur Quantifizierung der kristallographischen Fehlpassung
benachbarter Kornorientierungen

Dissertation

zur Erlangung des Grades des Doktors der Ingenieurwissenschaften der
Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät III Chemie, Pharmazie, Bio-
und Werkstoffwissenschaften der Universität des Saarlandes

von Dipl.-Phys. Alain Franz Knorr

Saarbrücken, 2014

2.5 Die Gleitsystemcharakteristik

Im Rahmen dieser Arbeit werden ausschließlich Materialien mit kubisch flächenzentrierter Kristallographie betrachtet. Im kfz-Gitter sind die $\{111\}$ -Ebenen am dichtesten gepackt und somit die Gleitebenen, während die $[110]$ -Richtungen die Gleitrichtungen darstellen. Die $\{111\}$ -Ebenenschar beinhaltet korrespondierend zur nachfolgenden Abbildung die vier Ebenen **K**, **L**, **M** und **N**, die zusammengenommen einen Tetraeder bilden. Man nennt diesen Vierflächner, dessen Kanten gerade die Gleitrichtungen repräsentieren auch Thompson-Tetraeder [Hirt82]¹⁵.

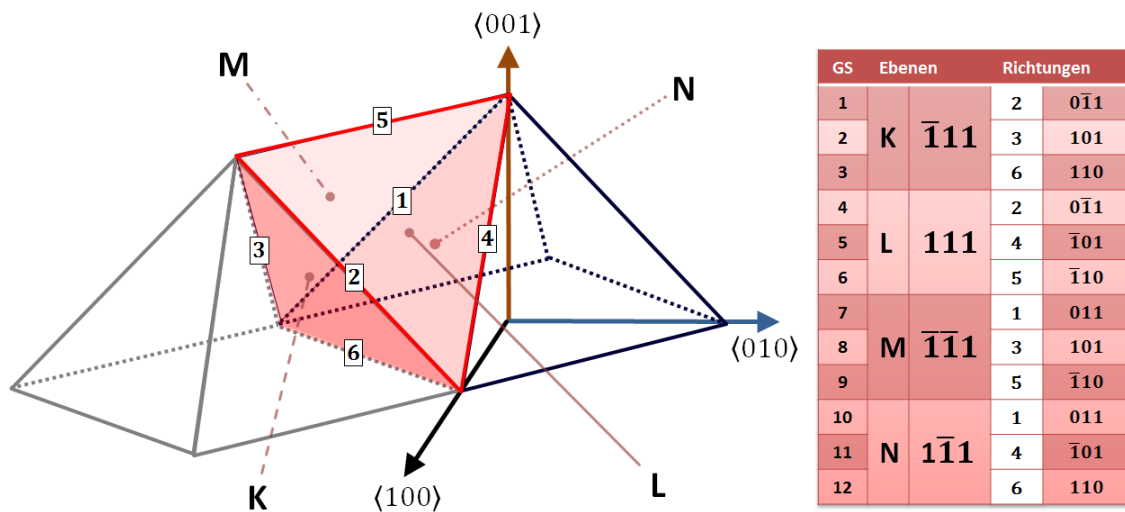


Abb. 2-18: Darstellung der Gleitsystemcharakteristik

Tabelle 2-3: Nomenklatur

Abb. 2-18 zeigt diesen Tetraeder zwischen zwei Pyramiden liegend, die ihrerseits jeweils als obere Hälften eines Oktaeders angesehen werden können. Diese Darstellung soll zeigen, dass die Tetraeder-Darstellung der Gleitsysteme äquivalent zur Oktaeder-Darstellung ist. D.h. die im Abschnitt 2.4 angestellten Symmetriebetrachtungen gelten unverändert auch für die Beschreibung der Gleitsysteme.

Ein Vorteil des Tetraeders liegt jedoch in der schematischen Visualisierung möglicher Versetzungsreaktionen. Denn die sogenannten vollständigen Versetzungen des Typs $\frac{a}{2}\langle 110 \rangle$ können unter Umständen wie folgt aufspalten:

$$\frac{a}{2}[\bar{1}01] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{1}12] + \frac{a}{6}[\bar{2}\bar{1}1] \quad (10)$$

$$\vec{N4} \rightarrow \vec{s11} + \vec{s12}$$

¹⁵ „Theory of Dislocations“ J.P. HIRTH AND J. LOTHE, Second Edition, Krieger Publishing Company Malabar, Florida (1982) S.319

Da die Energie eines Burgersvektors mit dessen Betragsquadrat skaliert, kann die Aufspaltung in zwei kürzere Versetzungen, die sogenannten Shockley-Partialversetzungen, unter Umständen zu einer Minimierung der Energie führen. Die beteiligten „Shockley Partials“ liegen in der gleichen Gleitebene wie die zugehörige vollständige Versetzung, wie die beiden folgenden Abbildungen veranschaulichen sollen.

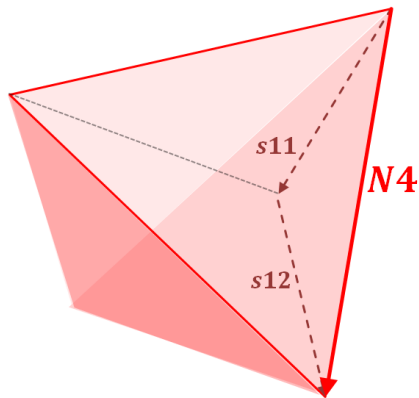


Abb. 2-19: Thompson Tetraeder mit der Versetzungsreaktion gemäß Gl.(10)

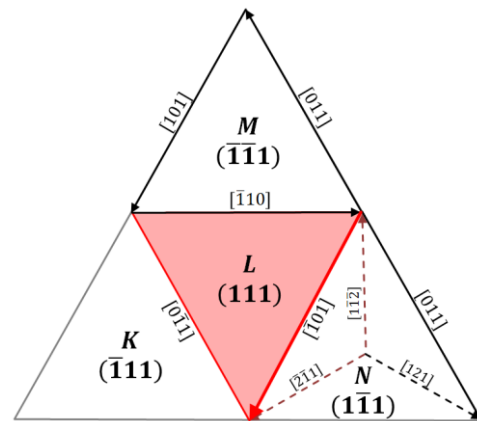


Abb. 2-20: Aufgefalteter Thompson Tetraeder

Da die „Partials“, wie der Name auch zum Ausdruck bringen soll, eben nicht vollständig sind im Sinne einer Translation, erzeugen sie somit einen Fehler in der Stapelfolge. D.h. die regulär im kfz-Gitter vorliegende Stapelfolge **A-B-C-A-B-C** bleibt bei einer Verschiebung um eine Partialversetzung nicht erhalten. Verschiebt man eine Kugel B nur partiell (gelber Pfeil), so fällt diese in eine Mulde der Kugel A Positionen (vgl. Abb. 2-21 und Abb. 2-22). Dadurch ändert sich die Stapelfolge zu **C-B-A-C-A-B-C**, d.h. die Stapel liegen nun spiegelbildlich zum in der Mitte liegenden C Stapel, wie es bei einem Zwilling der Fall ist.

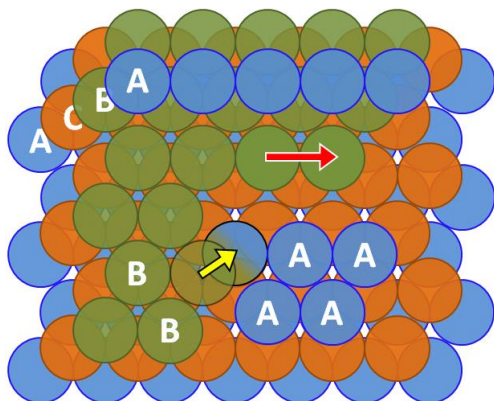


Abb. 2-21: Blick auf die (111)-Ebenen im kfz-Gitter (roter Pfeil: vollständige Versetzung, gelber Pfeil: Shockley Partialversetzung)

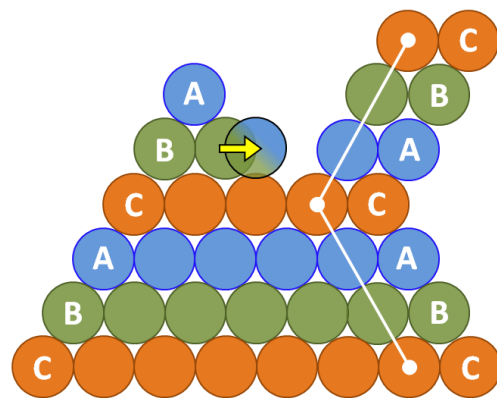


Abb. 2-22: Blick entlang der (111)-Ebenen (links: ungestörte Stapelfolge, rechts: gestörte Stapelfolge infolge eines Stapelfehlers)

Es gilt jedoch zu festzuhalten, dass eine Zwillingsene, wie zum Beispiel im Fall einer CSL- $\Sigma 3$ -Beziehung zunächst nur rein theoretischer Natur ist. Denn im realen Gefüge muss die Korngrenze nicht exakt entlang der Zwillingsene verlaufen, wie die folgende hochauflösende TEM-Aufnahme verdeutlichen soll.

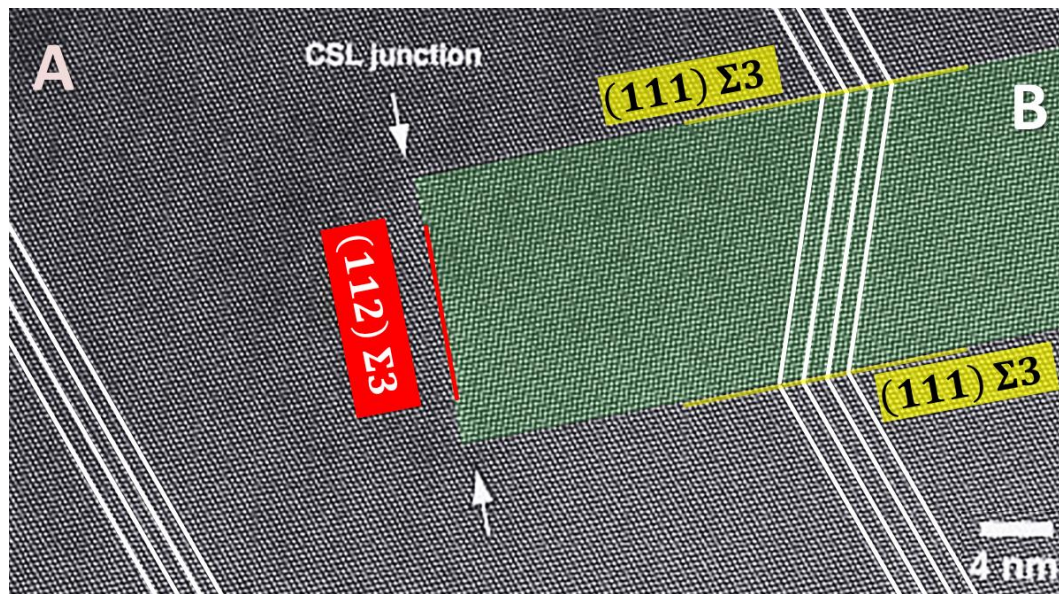


Abb. 2-23: HRTEM-Aufnahme einer (112) und (111) $\Sigma 3$ Korngrenze in polykristallinem Si [Saka07]¹⁶

Während die Korngrenze entlang der gelben Abschnitte kohärent zur Zwillingsene liegt, also somit eine tatsächliche Zwillingskorngrenze ist, verläuft die Korngrenze entlang der roten Linie keiner Zwillingsene und ist dort folglich inkohärent. Die energetischen und kristallographischen Konsequenzen dieser Konstellation werden später noch angesprochen. Zunächst soll lediglich auf den besonderen Aspekt der geometrischen Lage der Korngrenze hingewiesen werden. Da dieser Aspekt von entscheidender Bedeutung für die gesamten Betrachtungsweisen in dieser Arbeit ist, widmet sich der folgende Abschnitt der Darstellung und Erfassung der räumlichen Lage einer Korngrenze.

¹⁶ „Atomic Structure of Faceted $\Sigma 3$ CSL Grain Boundary in Silicon: HRTEM and Ab-initio Calculation“ N. SAKAGUCHI, H. ICHINOSE AND S. WATANABE, *Materials Transactions*, Vol. 48, No. 10 (2007) 2585-2589