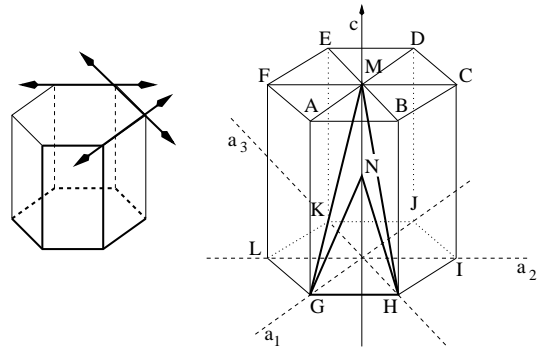


11.3.3 Hexagonal dichtest gepackte Struktur

Gleitrichtung: $b = \frac{a}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle$

Gleitebene: $\{0001\}$

Wobei aber auch die in der Abbildung rechts dargestellten Gleitebenen über der Basis $\{0001\}$, die Fläche des Prismas $\{10\bar{1}0\}$, sowie über die zwei pyramidalen Flächen $\{10\bar{1}2\}$ und $\{10\bar{1}1\}$ wie eingezeichnet möglich sind.



Kristallstruktur	Gleitebene	Gleitrichtung	Zahl der nicht parallelen Ebenen	Zahl der Gleitrichtungen pro Ebene	Anzahl der Gleitsysteme	
kfz	$\{111\}$	$\langle 1\bar{1}0 \rangle$	4	3	$12 = (4 \times 3)$	
krz	$\{110\}$	$\langle \bar{1}11 \rangle$	6	2	$12 = (6 \times 2)$	
	$\{112\}$	$\langle 11\bar{1} \rangle$	12	1	$12 = (12 \times 1)$	
	$\{123\}$	$\langle 11\bar{1} \rangle$	24	1	$24 = (24 \times 1)$	
hex	$\{0001\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	1	3	$3 = (1 \times 3)$	Basis
	$\{10\bar{1}0\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	3	1	$3 = (3 \times 1)$	Prisma
	$\{10\bar{1}1\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	6	1	$6 = (6 \times 1)$	Pyramide

Tabelle 11.4: Gleitsysteme der wichtigsten Kristallstrukturen.

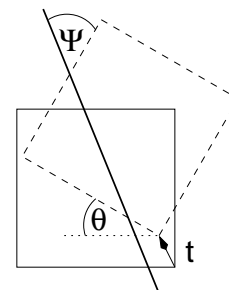
11.4 Korngrenzen

Die Korngrenze ist der am längsten bekannte und dennoch am wenigsten verstandene Gitterfehler. Eine Korngrenze ist leicht erklärt, sie trennt nämlich Bereiche unterschiedlicher Orientierung von ansonsten gleicher Kristallstruktur. Im Zweidimensionalen braucht man vier Parameter, um eine Korngrenze zu beschreiben

- im Dreidimensionalen sind es schon acht. Aus dieser Komplexität rührt auch der Mangel an Kenntnis über die Korngrenzen. Zur Beschreibung der Korngrenze benötigt man (in 2-dim.) den Winkel Θ , der zwischen der selben Orientierung zweier Körner liegt, den Winkel Ψ , der zwischen einem Korn und der Korngrenze eingeschlossen ist und einen Vektor \vec{t} , der die Verschiebung der beiden Körner relativ zueinander beschreibt.

Die Orientierungsbeziehung zwischen den Körnern wird durch eine reine Rotation beschrieben, wobei durch die Lage der Rotationsachse unterschiedliche Szenarien entstehen. Die Orientierungsbeziehung / Rotation wird anhand der Euler-Winkel beschrieben.

Kann im Dreidimensionalen einer der drei Euler-Winkel gleich Null gesetzt werden, so steht die Drehachse senkrecht zur Korngrenze. In diesem Fall spricht man von einer **Drehkorngrenze**. Im Allgemeinen sind jedoch alle drei Winkel ungleich Null und es handelt sich dann um eine **asymmetrische Kippkorngrenze**. Diese beiden Typen von Korngrenzen sind in Abbildung 11.34 dargestellt.



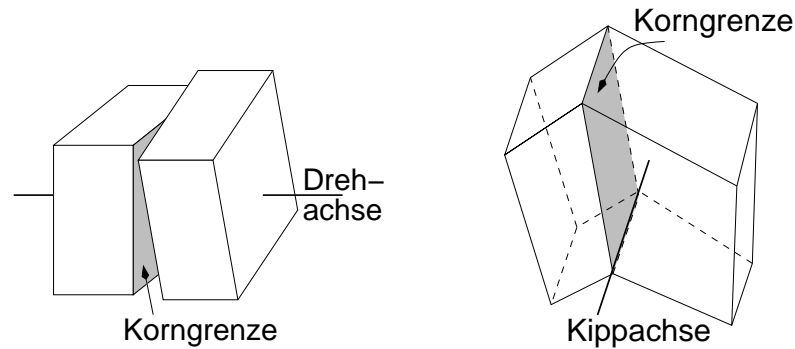


Abbildung 11.34: Drehkorngrenze (links) und Kippkorngrenze (rechts).

Korngrenzen, die parallel zur Drehachse liegen, werden also als Kippkorngrenzen bezeichnet. Liegen nun beide angrenzenden Gitter spiegelbildlich zueinander mit der Korngrenze als Spiegelebene (Fallen also die Korngrenze und die Symmetrieebene zusammen) so spricht man von einer **symmetrischen Kippkorngrenze**.

11.4.1 Struktur von Korngrenzen

Ist eine Korngrenze komplett aus der Aneinanderreihung von Versetzungen aufgebaut, so spricht man von einer **Kleinwinkel-Korngrenze**. In diesem Fall ist der Orientierungsunterschied zwischen den Körnern sehr klein. Symmetrische Kleinwinkel-Kippkorngrenzen werden lediglich von einer Schar von Versetzungen gebildet, wie es in Abbildung 11.35 zu sehen ist.

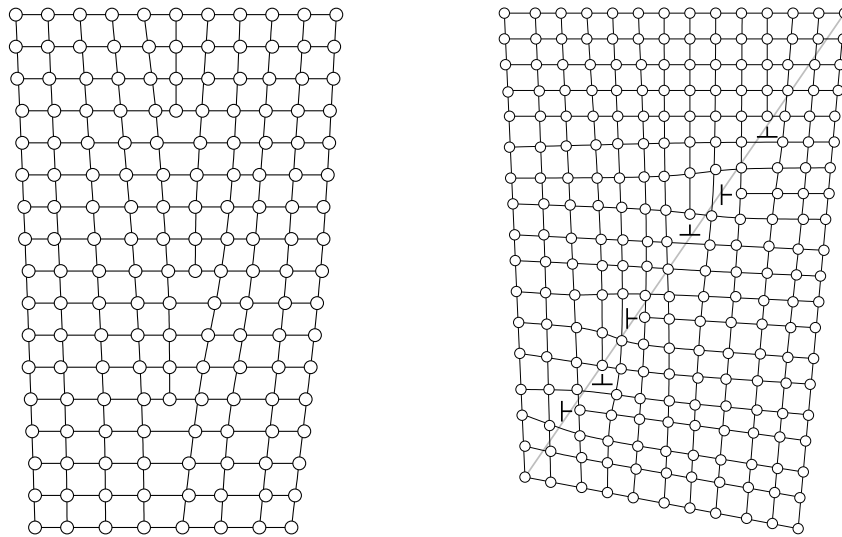
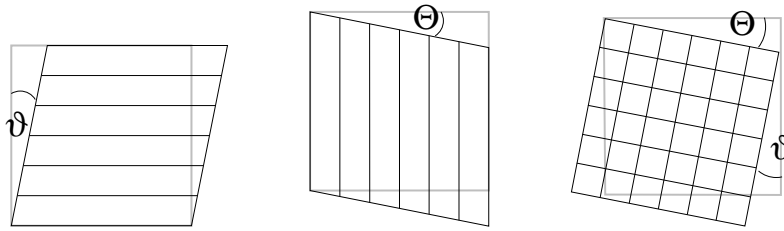


Abbildung 11.35: Eine Schar von Versetzungen bildet eine symmetrische Kleinwinkel-Kippkorngrenze (links), wohingegen zur Bildung einer asymmetrischen Kleinwinkel-Kippkorngrenze zwei Scharen von Versetzungen erforderlich sind (rechts).

Sind die Kippkorngrenzen hingegen unsymmetrisch, so werden mindestens zwei Scharen von Versetzungen benötigt, um diese zu bilden. Zusätzlich zu der geforderten Existenz dieser Scharen müssen die Burgers Vektoren der Scharen jeweils zueinander gleich orientiert, in Bezug auf die Burgers Vektoren der jeweils anderen Schar aber senkrecht liegen. Die Anzahl der Versetzungen der zweiten Schar nimmt mit der Abweichung von der symmetrischen Korngrenzlage zu.

Kleinwinkel Drehkorngrenzen werden durch mindestens zwei Scharen von Schraubenversetzungen gebildet. Dies kann man sich anschaulich so vorstellen, daß eine Schar von parallelen Schraubenversetzungen

eine Scherung erzeugt. Erst wenn es zu zwei zueinander senkrecht stehenden Scherungen kommt, wird eine Rotation=Drehung erzeugt.



Korngrenzen, deren Orientierungen um mehr als 15° voneinander abweichen, können nicht mehr ausschließlich durch Versetzungen gebildet werden, sie werden als **Großwinkel-Korngrenzen** bezeichnet. Die Struktur dieser Grenzen erscheint zunächst regellos. Prinzipiell ist jeder beliebige Winkel möglich, der den Orientierungsunterschied der beiden angrenzenden Körner beschreibt. In der Realität kommt es aber zu bevorzugten Winkellagen.

Wird nämlich eine Korngrenze aus einer Aneinanderreihung von Versetzungen gebildet, so bestimmt der diskrete Abstand der Versetzungen, der ja an das Kristallgitter gekoppelt ist, auch diskrete Winkel. Bei kleinen Winkeln ist der Burgers Vektor der Versetzung viel kleiner als der Abstand der Versetzungen ($\Theta \simeq b/D$), sodaß sich der Winkel quasi kontinuierlich ändert. Bei großen Winkeln wird der Orientierungsunterschied zwischen zwei aufeinanderfolgenden periodischen Versetzungsanordnungen beträchtlich. Kommt zum Beispiel eine Versetzung alle 4 Atomabstände vor ($D = 4b$), so ist $\Theta = 14,3^\circ$, bei $D = 3b$ ist $\Theta = 19,2^\circ$

ZUM NACHDENKEN:

- Welche Arten von Korngrenzen gibt es?
- Wie sind Kleinwinkelkorngrenzen aufgebaut?

Jede Abweichung von diesen Vorgaben an die Winkel und damit an das Gitter verursacht eine Gitterverzerrung, die mit einem Energieaufwand verbunden ist. Man kann daher davon ausgehen, daß die Korngrenze dann energetisch günstig und damit wahrscheinlicher anzutreffen ist, wenn die Atomlagen möglichst wenig von ihren idealen Positionen abweichen.

11.4.2 Das Koinzidenzgitter

Wenn beide Gitter an der Korngrenze ungestört, das heißt nicht elastisch verzerrt werden und darüber hinaus es die Orientierungsbeziehung erlaubt, daß sich einige Atomebenen beider Kristalle unverzerrt in die Korngrenze fortführen können, so spricht man von den Gitterpunkten, die beiden Gittern gleichzeitig angehören, als Koinzidenz(gitter)punkte. Da die Orientierungsbeziehung durch eine Rotation beschrieben wird, kann man untersuchen bei welchem Drehwinkel Koinzidenzpunkte auftreten. Ein einfaches Beispiel ist eine Rotation von $36,87^\circ$ um eine $\langle 100 \rangle$ -Achse im kubischen Gitter. Dies ist in Abbildung 11.36 gezeigt, wobei die Korngrenzebene senkrecht zur Papierebene steht.

Es handelt sich um eine Kippkorngrenze. An dieser Stelle sei angemerkt, daß sich der Winkel von $36,87^\circ$ in der Abbildung im Winkel α versteckt. Dieser beträgt $36,87^\circ + 90^\circ$ und charakterisiert aufgrund der 90° -Symmetrie des kubischen Gitters diese Rotation. Neben den Gitterpunkten der einzelnen Körner (\circ und ∇) auf jeder Seite der Korngrenze sind zusätzlich die Positionen eingezeichnet, bei denen die Gitter sich überschneiden würden, wenn man sie in den jeweils anderen Kristall fortsetzen würde können. Da also beide Gitter periodisch sind, müssen auch die Koinzidenzpunkte periodisch sein, das heißt sie spannen ebenfalls ein Gitter auf, das **Koinzidenzgitter** genannt wird. Die Elementarzelle ist natürlich größer als die des Gitters. Als Maß für die Größe der Koinzidenzgitterzelle oder die Dichte der Koinzidenzpunkte wird definiert:

$$\Sigma = \frac{\text{Volumen der Elementarzelle des Koinzidenzgitters}}{\text{Volumen der Elementarzelle des Kristallgitters}}$$

Für die gezeigte Rotation um $36,87^\circ$ ist $\Sigma = a(a\sqrt{5})^2/a^3 = 5$, das heißt jeder fünfte Gitterpunkt ist ein Koinzidenzpunkt. Das Volumen des Koinzidenzgitters ist nicht kubisch, wie das Kristallgitter, sondern

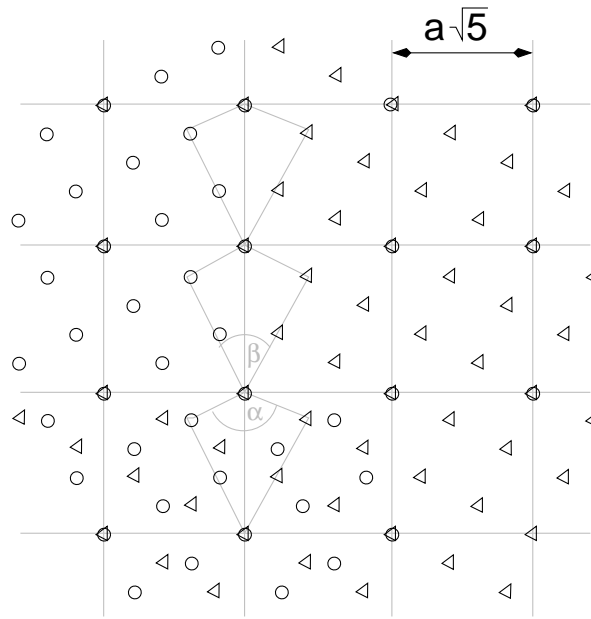


Abbildung 11.36: Gitter der benachbarten Körner und Koinzidenzgitter bei einem Orientierungsunterschied von 36.87° in Bezug auf eine Rotation um die $\langle 100 \rangle$ -Achse im kubischen Gitter.

setzt sich in Richtung der Korngrenze mit der Periode des Kristallgitters (a) fort, damit beträgt das Volumen der Elementarzelle: $a(a\sqrt{5})^2$.

Die Korngrenze ist nun aufgrund der Tatsache, daß Koinzidenzpunkte mit geringerer Energie verbunden sind, bemüht durch möglichst viele Koinzidenzpunkte zu verlaufen. Korngrenzen, die der Gestalt sind, daß die Orientierungsbeziehungen zwischen den Kristallen eine hohe Anzahl an Koinzidenzpunkten zuläßt nennt man Koinzidenzkorngrenzen. Je kleiner Σ (was immer ganzzahlig und ungerade sein muß) ist, um so besser ist die Korngrenze geordnet. Kleinwinkelkorngrenzen kann man mit $\Sigma = 1$ bezeichnen, da abgesehen von den Atomen am Versetzungskern jedes Atom ein Koinzidenzpunkt darstellt.

Zwillingsgrenzen haben $\Sigma = 3$ und das, obwohl jeder Gitterpunkt des einen Gitters an der Grenze auch Punkt des anderen Gitters ist. Im kubisch flächenzentrierten System ist dies einzusehen, da aufgrund der Stapelfolge eine Raumgitterkoinzidenz nur in jeder dritten Parallelebene zur kohärenten Zwillingsgrenze möglich ist.

Werden zwei identische, ineinander liegende Gitter symmetrisch gegeneinander gekippt (Drehung um eine Achse senkrecht zur Papierebene) bildet sich ein Koinzidenzgitter, wie es in Abbildung 11.37 dargestellt ist.

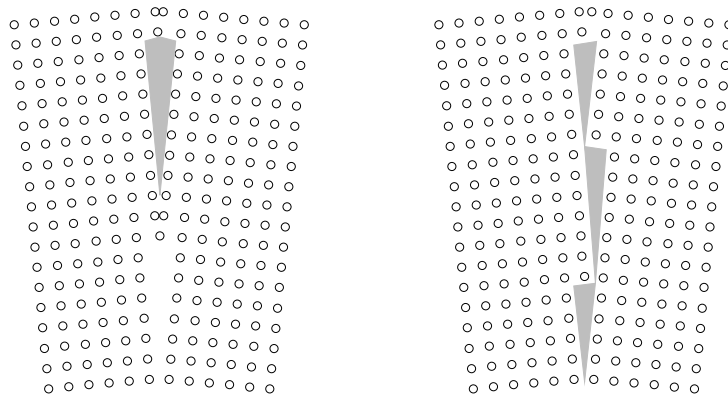


Abbildung 11.37: Zur Entstehung einer symmetrischen Kleinwinkel-Kippkorngrenze durch Drehung zweier identischer Kristalle.

Die Koinzidenzpunkte sind an der Überlappung von Atomen (Kreisen) beider Gitter zu erkennen. Die zugehörige Anordnung der entstehenden Doppelversetzungen (links in Abb. 11.37) relaxiert entlang der Grenze und es bildet sich die Struktur einer symmetrischen Kleinwinkel-Kippkorngränze. Damit ist eine streng periodische Versetzungsanordnung nichts Anderes als die relaxierte Struktur einer Koinzidenzkorngränze.

11.4.3 Korngränzenversetzungen

Koinzidenzgitter treten prinzipiell nur bei ganz wenigen bestimmten Rotationsbeziehungen auf. Bei noch so kleinen Abweichungen von diesen Rotationsbeziehungen geht die Koinzidenz verloren. Der Kristall wird, um seine Energie zu minimieren, versuchen diese Koinzidenz an möglichst vielen Stellen zu erhalten und Abweichungen von dieser idealen Passung in entsprechenden Störungen zu konzentrieren. Von Kleinwinkel-Korngränzen ist bekannt, daß diese Orientierungsunterschiede zwischen perfekten Kristallen durch Versetzungsanordnungen kompensiert werden. Demzufolge ist es nicht verwunderlich, wenn auch in Großwinkel-Korngränzen Versetzungen eingebaut werden, um das Koinzidenzgitter an möglichst vielen Stellen aufrecht zu erhalten.

Die in die Korngränze eingebauten Versetzungen müssen einen Burgers Vektor haben, der das Koinzidenzgitter nicht zerstört. Prinzipiell käme hierfür der Gittervektor des Koinzidenz- oder Kristallgitters in Betracht. Da aber die Energie der Versetzung mit b^2 zunimmt, sollte der Vektor möglichst klein sein, um die Korngränze energetisch nicht zu überladen. Es ist aber nicht nötig, daß die Koinzidenzpunkte an ihrem Ort erhalten werden, sondern lediglich, daß ihre Dichte erhalten bleibt, da diese für die Minimierung der Energie der Korngränze ausschlaggebend ist. Damit reichen sehr kleine Vektoren aus. Diejenigen Verschiebevektoren, die diese Bedingung erfüllen, spannen das sogenannte DSC-Gitter auf (DSC= engl.: displacement shift complete), ein Gitter, welches das größte Raster ist, das alle Gitterpunkte erfaßt.

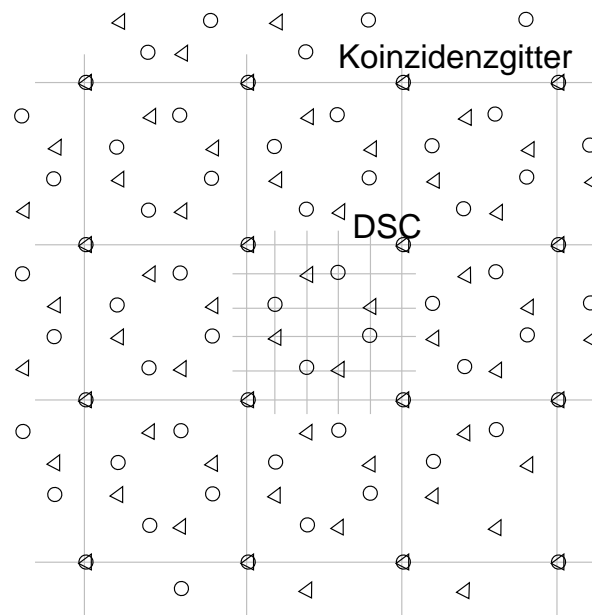


Abbildung 11.38: DSC-Gitter als Grundlage für die Burgers Vektoren des Koinzidenzgitters.

Diese Verschiebevektoren werden **sekundäre Korngränzenversetzungen** genannt, sie besitzen einen Vektor des DSC-Gitters als Burgers Vektor (im Gegensatz zu den Versetzungen, deren Burgers Vektor ein Kristallgittervektor ist). Diese sekundären Korngränzenversetzungen können sich nur in der Korngränze aufhalten, da ihre Burgers Vektoren keine Translationsvektoren des Kristallgitters sind und ihr Einbau in das Kristallgitter zur Zerstörung desselben führen würde.

Die sekundäre Korngränzenversetzung besitzt am Ort des Versetzungsatoms eine Stufe. Die Stufe ist eine Folge davon, daß mit der Einführung der Versetzung eine Verschiebung des Koinzidenzgitters verbunden

ist. Bewegt sich nun eine sekundäre Korngrenzenversetzung entlang der Korngrenze, so ist damit eine Bewegung der Korngrenze um eine Stufenhöhe verbunden. Darüber hinaus ist die Bewegung der Versetzung auch mit dem Abgleiten beider Kristallite verbunden. Die Bewegung der Korngrenzenversetzung verursacht daher sowohl das Gleiten, als auch Klettern der Korngrenze. Wenn der Burgers Vektor in der Korngrenzebene liegt, was in Sonderfällen der Fall ist, kann die sekundäre Korngrenzenversetzung vollständig durch Gleiten beweglich sein. Im Allgemeinen ist dies aber nicht der Fall und die Versetzung muß (auch) klettern.

In Abbildung 11.39 sind diese beiden Fälle dargestellt. Dort ist die Anordnung der Atome einer Korngrenzen-Stufenversetzung einer $\Sigma = 5$ Korngrenze im kfz Gitter gezeigt.

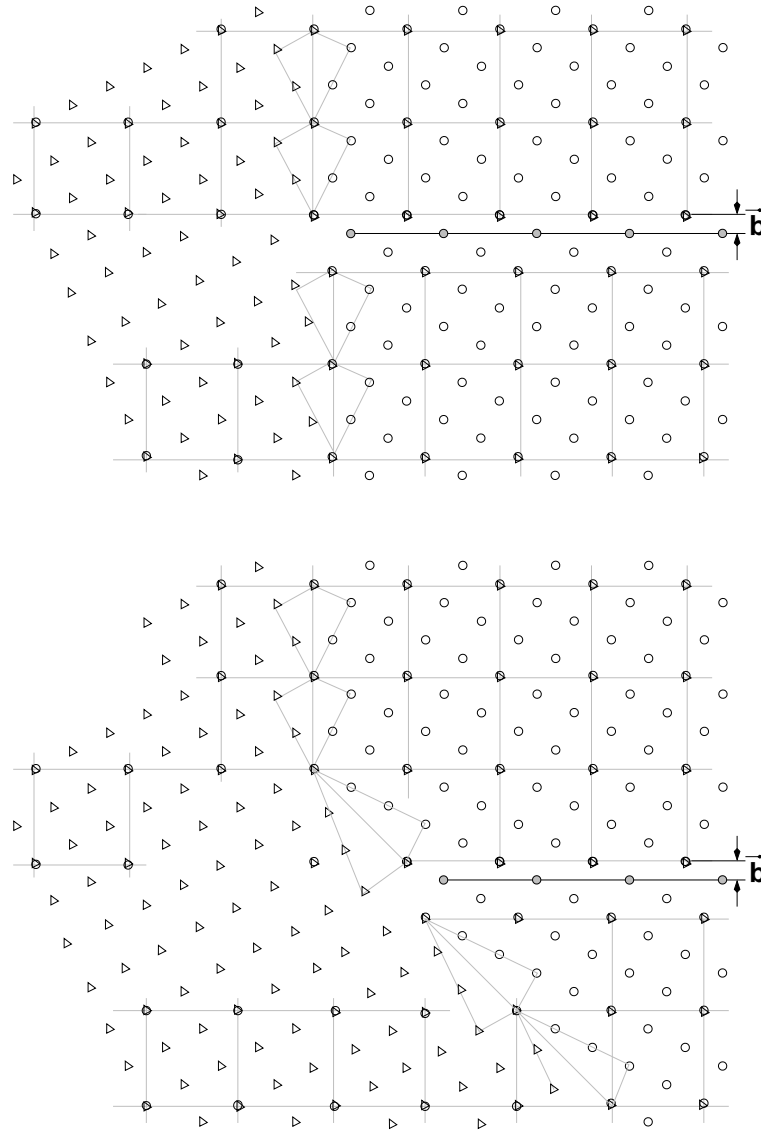


Abbildung 11.39: Korngrenzen-Stufenversetzung einer $\Sigma = 5$ Korngrenze im kfz Gitter mit $\vec{b} \parallel$ Korngrenze (oben) und \vec{b} geneigt zur Korngrenze (unten).

11.5 Phasengrenzflächen

Im Grunde genommen sind Phasengrenzen nichts Anderes als kompliziert strukturierte Korngrenzen. Aneinander angrenzende Kristallite können nun neben der anderen Orientierung auch noch eine andere

Kristallstruktur aufweisen. Es werden drei Typen von Phasengrenzflächen unterschieden:

- Die **kohärente Phasengrenzfläche** entsteht, wenn nur die Gitter beider Phasen gering verschiedene Gitterkonstanten aufweisen, aber die gleiche Orientierung haben. Bei der kohärenten Phasengrenzfläche setzen sich alle Gitterebenen hinter der Grenze fort.
- Die **teilkohärente Phasengrenzfläche** entsteht, wenn durch eine zunehmende Gitterfehlpassung, also einen zunehmenden Unterschied der Gitterparameter, der Einbau von (Stufen-) Versetzungen in die Grenzfläche energetisch bevorzugt wird. Diese Versetzungen kompensieren den mit der Fehlanpassung einhergehenden Anstieg der elastischen Energie. In diesem Fall setzen sich nicht alle Gitterlinien in der andere Phase, also hinter der Grenze, fort.
- Die **inkohärente Phasengrenzfläche** ist durch ein vollständiges Fehlen von gemeinsamen Gitterebenen beider Phasen gekennzeichnet. Dies ist für vollständig verschiedene Gitterstrukturen der Fall.

Wegen der komplizierten und im Detail noch ungeklärten Struktur der Phasengrenzflächen ist es oft unmöglich die Phasengrenzfläche anhand ihrem atomaren Aufbau zu beschreiben.

11.6 Ausscheidung und Dispersion

Die **Dispersion** ist definiert als eine feine Verteilung von inkohärenten Teilchen in einer Matrix (z. B. Al_2O_3 in Cu), wobei deren Grenzfläche mechanisch wirksam ist. Damit ist die dazugehörige Energie proportional zur Anzahl der Dispersoide und antiproportional zu deren Volumen.

Aufgrund von thermodynamischen Prozessen und in Verbindung mit dem zugrundeliegenden Phasendiagramm kommt es in Legierungen zu **Ausscheidungen** einzelner Komponenten wenn die maximale Löslichkeit dieser Komponente bei den gegebenen Randbedingungen (Temperatur, Druck, Konzentration...) überschritten ist. In der Regel sind die Ausscheidungen teilkohärent und weisen definierte Orientierungsbeziehungen mit der Matrix auf.

ZUM NACHDENKEN:

- Was ist eine Koinzidenzgitterlage?
- Warum muß der Bruggersvektor des Koinzidenzgitters kein Gittervektor des Kristallgitters sein?
- Wie sind Korngrenzen strukturiert und warum?
- Welche Phasengrenzflächen gibt es und wie sind sie strukturiert?