

**Numerische Studien zur  
Rissausbreitung  
in dreidimensionalen  
komplexen Kristallstrukturen**

Diplomarbeit von  
Frohmut Rösch

Hauptberichter Prof. Dr. H.-R. Trebin  
Mitberichter Dr. Dr. R. Hilfer

Universität Stuttgart  
Institut für Theoretische und Angewandte Physik  
Juli 2003



Ich erkläre, dass ich die Arbeit selbständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe und dass alle Stellen, die dem Wortlaut oder dem Sinne nach anderen Werken entnommen sind, durch Angabe der Quellen als Entlehnung kenntlich gemacht worden sind.



# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Quasikristalle</b>	<b>3</b>
1.1 Beugungseigenschaften . . . . .	4
1.2 Definitionen . . . . .	4
1.3 Experimentelles . . . . .	5
1.4 Quasigitter und rationale Approximanten . . . . .	6
1.4.1 Streifenprojektionsformalismus . . . . .	6
1.4.2 Gridformalismus . . . . .	9
1.5 Tiling und Dekorationen . . . . .	11
1.5.1 Das Ammann-Kramer-Penrose-Tiling . . . . .	11
1.5.2 US-Dekoration . . . . .	11
1.5.3 TI-Dekoration . . . . .	13
1.5.4 Das binäre ikosaedrische Modell . . . . .	14
1.5.5 Vertexindizierung . . . . .	14
1.6 Cluster . . . . .	15
1.7 Oberflächen . . . . .	18
<b>2 Bruchmechanik</b>	<b>23</b>
2.1 Das Griffithkriterium . . . . .	24
2.2 Die linear elastische Theorie nach Irwin . . . . .	24
2.3 Spannungsverstärkung nach Inglis . . . . .	28
2.4 Rissausbreitung . . . . .	29
2.5 Die Yoffe Instabilität . . . . .	30
2.6 Atomistische Effekte . . . . .	31
2.6.1 Lattice Trapping . . . . .	31
2.6.2 Minimale Rissgeschwindigkeit . . . . .	33
2.6.3 Das Einstein Modell . . . . .	33
2.7 Sprödheit und Duktilität . . . . .	34
2.7.1 Versetzungen . . . . .	34
2.7.2 Risse und Versetzungen . . . . .	38
2.8 Quasikristalle . . . . .	41

<b>3</b>	<b>Molekulardynamik</b>	<b>43</b>
3.1	Bewegungsgleichungen . . . . .	43
3.2	Diskretisierung und Integrationsalgorithmus . . . . .	44
3.3	Statistische Mechanik . . . . .	45
3.4	Potentiale . . . . .	46
3.5	Die Methode der verbundenen Zellen . . . . .	48
3.6	Ränder . . . . .	48
3.7	Ensemble, Relaxationsalgorithmen, Risse . . . . .	49
3.7.1	Ensemble . . . . .	49
3.7.2	Relaxationsalgorithmen . . . . .	50
3.7.3	Risssimulationen . . . . .	50
<b>4</b>	<b>Visualisierung</b>	<b>53</b>
4.1	Volumen- und Atomdaten . . . . .	53
4.2	Risslippen . . . . .	55
4.3	Rissgeschwindigkeiten . . . . .	59
4.4	Bruchoberflächen . . . . .	59
4.5	Cluster . . . . .	60
4.6	Höhen-Höhen-Korrelationsfunktionen . . . . .	63
4.7	Bindungen . . . . .	65
<b>5</b>	<b>Simulationen und Ergebnisse</b>	<b>67</b>
5.1	Zeitschritt und Einsteinfrequenz . . . . .	67
5.2	Elastische Konstanten . . . . .	68
5.3	Ikosaedersymmetrie . . . . .	68
5.4	Bruchebenen . . . . .	70
5.5	Ausgangskonfigurationen . . . . .	72
5.6	Orientierungen . . . . .	74
5.7	Rissgeschwindigkeiten . . . . .	76
5.8	Bruchoberflächen . . . . .	77
5.9	Cluster . . . . .	85
5.10	Höhen-Höhen-Korrelationsfunktionen . . . . .	92
5.11	Bindungen . . . . .	98
<b>6</b>	<b>Diskussion</b>	<b>101</b>
	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>105</b>
	<b>A Lineare Elastizitätstheorie</b>	<b>107</b>
	<b>B Einheiten</b>	<b>111</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>113</b>

# Einleitung

Bis vor etwa zwanzig Jahren wurde angenommen, dass alle Kristallstrukturen periodisch aufgebaut sind. Die von Shechtman [76] 1984 veröffentlichten Elektronenbeugungsaufnahmen einer AlMn Legierung erregten großes Aufsehen, da sie mit dieser Annahme nicht vereinbar waren. Für periodische Kristalle sind nur bestimmte Drehsymmetrien erlaubt. Die erwähnten Beugungsaufnahmen ließen aber auf eine für periodische Kristalle verbotene ikosaedrische Symmetrie und eine weitreichende Ordnung schließen. Deshalb musste es sich bei der untersuchten Probe um eine neue Art von Material handeln, das nicht periodisch aufgebaut ist. Diese Materialien werden heutzutage als **Quasikristalle** bezeichnet. Quasikristalle zeigen neben dem geometrischen Aufbau, der sie von periodischen Kristallen unterscheidet, auch charakteristische mechanische und elektronische Eigenschaften.

Theoretisch lassen sich Quasikristalle als spezielle Anordnungen von mehreren Sorten von Zellen beschreiben. Gleiche Zellen werden in der vorliegenden Arbeit in derselben Weise mit Atomen besetzt. Durch das genannte Vorgehen ergibt sich wie bei periodischen Kristallen eine Anordnung der Atome in Ebenenstrukturen. Sowohl die Abfolge der Ebenen als auch die Abfolge der Atome in diesen Ebenen ist jedoch für ikosaedrische Quasikristalle nicht periodisch. Zudem existieren lokale Strukturen von Atomen, Cluster, die ebenfalls als Bausteine der Quasikristalle angesehen werden können. Es ist nun beispielsweise von Interesse, welchen Einfluss Ebenenstrukturen, Cluster und Symmetrieeigenschaften auf die mechanischen Eigenschaften der Quasikristalle haben.

Um dies zu klären, ist es notwendig, Vorgänge im Quasikristall auf atomarer Ebene zu verfolgen. Hierzu können numerische Simulationen dienen. In der vorliegenden Arbeit wurde die **Molekulardynamik** genutzt. Die Newtonschen Bewegungsgleichungen bestimmen dann die Bewegungen der Teilchen. Atomare Prozesse, die im realen Experiment nicht direkt zugänglich sind, lassen sich so anhand der Koordinaten der Teilchen zu verschiedenen Zeitpunkten direkt verfolgen.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung des Bruchverhaltens eines ikosaedrischen Modellquasikristalles mit Hilfe der Molekulardynamik. Hierbei ist zu klären, wie sich die Ebenenstrukturen und die Cluster auf die Form der Bruchoberfläche auswirken. Dazu werden in die Atomkonfigurationen Risse eingebaut. Danach wird die Probe belastet. Der dynamische Riss und die Bruchoberflächen werden anschließend untersucht. Da dreidimensionale

Simulationen enorme Datenmengen erzeugen und nur die physikalisch relevanten Daten von Interesse sind, kommt der Datenreduzierung und Datenauswahl eine wichtige Rolle zu. Hierzu müssen entsprechende Kriterien gefunden werden. Die **Visualisierung** dieser aufbereiteten Daten erleichtert dann die Erfassung der grundlegenden Aspekte der Simulationen.

Die vorliegende Arbeit gibt in Kapitel 1 einen Überblick über die Eigenschaften der Quasikristalle und ihren Aufbau. Die Generierung von Quasigittern mit Hilfe des Streifenprojektionsformalismus und des Gridformalismus wird besprochen. Anschließend werden Dekorationen eines ikosaedrischen Quasigitters, wie das in dieser Arbeit genutzte binäre ikosaedrische Modell, behandelt. Der Aufbau des in dieser Struktur vorkommenden Bergman-Clusters wird erläutert. Zudem werden Modelle und Experimente, die Oberflächen in Quasikristallen betreffen, präsentiert. In Kapitel 2 werden die Grundlagen der **Bruchmechanik**, wie das Griffithkriterium und die linear elastische Bruchmechanik vorgestellt. Außerdem wird auf den Einfluss der diskreten Natur der Materie auf Risse eingegangen. Da bei mechanischer Belastung neben Rissen Versetzungen eine Rolle spielen können, werden auch Theorien zum Einfluss von Versetzungen auf Risse wiedergegeben. Die Molekulardynamik wird in Kapitel 3 mit den in dieser Arbeit genutzten Gleichungen und Potentialen vorgestellt. Die für die Darstellung und Aufbereitung der Simulationsergebnisse entwickelten Methoden werden in Kapitel 4 behandelt. Mit ihrer Hilfe werden die Simulationen und Ergebnisse in Kapitel 5 dargestellt und in Kapitel 6 diskutiert. Eine Zusammenfassung schließt diese Arbeit ab.

# Kapitel 1

## Quasikristalle

Beugungsbilder kristalliner Festkörper äußern sich durch scharfe, diskrete Braggreflexe, während amorphe Materialien einen oder mehrere breite, unscharfe Ringe liefern. Der Aufbau des Gitters periodischer Kristalle erlaubt nur die kristallografischen Symmetrien. So sind beispielsweise fünfzählige Drehachsen nicht mit der geforderten Translationssymmetrie vereinbar (siehe hierzu Abbildung 1.1 links). Shechtman veröffentlichte 1984 Beugungsbilder (vgl. Abbildung 1.1 rechts, [76]), die auf eine fünfzählige Rotationssymmetrie des untersuchten Materials schließen lassen. Die zugrundeliegende Struktur muss aufgrund der scharfen Braggreflexe eine weitreichende Ordnung besitzen, weist aber eine nichtkristallografische Symmetrie auf. Es kann sich also weder um einen Kristall noch um ein amorphes Material handeln. Levine und Steinhardt [56] identifizierten die Struktur und nannten sie Quasikristall. Einen guten Überblick über Quasikristalle liefern [44, 47, 57, 78, 15].

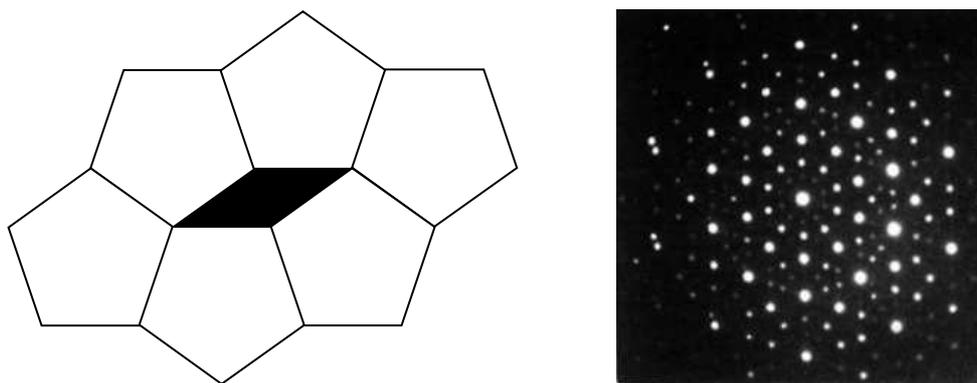


Abbildung 1.1: **Links:** Ein Gitter eines periodischen Kristalles kann keine fünfzählige Symmetrie besitzen. Diese Tatsache äußert sich auch darin, dass es nicht möglich ist, eine Ebene mit zusammenhängenden regelmäßigen Fünfecken überlappfrei auszufüllen. **Rechts:** Elektronenbeugungsbild von  $i\text{-AlMn}$  aus [76]. Das zehnzählige Beugungsbild lässt auf eine fünfzählige Rotationssymmetrie des untersuchten Materials schließen.

## 1.1 Beugungseigenschaften

Translationsgeordnete Strukturen können mit Hilfe ihrer Beugungseigenschaften definiert und identifiziert werden. Direkt experimentell zugänglich ist die Streuintensität  $I(\Delta\mathbf{k})$ , wobei  $\Delta\mathbf{k}$  die Differenz des Wellenvektors  $\mathbf{k}_d$  der detektierten und des Wellenvektors  $\mathbf{k}_e$  der einfallenden ebenen Welle ist. Die Streuintensität ist als Betragsquadrat der komplexen Streuamplitude  $S(\Delta\mathbf{k})$  gegeben:

$$I(\Delta\mathbf{k}) = |S(\Delta\mathbf{k})|^2. \quad (1.1)$$

Mit Hilfe der Dichtefunktion  $\rho(\mathbf{r})$  der Streuzentren lässt sich die Streuamplitude wie folgt ausdrücken:

$$S(\Delta\mathbf{k}) = \int d^3r \rho(\mathbf{r}) \exp(-i\Delta\mathbf{k}\mathbf{r}). \quad (1.2)$$

Lässt sich die Dichtefunktion als Fourierreihe schreiben, so nimmt  $S(\Delta\mathbf{k})$  folgende Form an:

$$S(\Delta\mathbf{k}) = \int \sum_{\mathbf{G}(\nu)} d^3r \tilde{\rho}(\mathbf{G}) \exp[i(\mathbf{G} - \Delta\mathbf{k})\mathbf{r}], \quad \mathbf{G} = \sum_i \nu_i \mathbf{g}_i, \quad \nu_i \in \mathbb{Z}. \quad (1.3)$$

$I(\Delta\mathbf{k})$  ist dann nur für die Bragg-Bedingung

$$\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G} \quad (1.4)$$

nicht vernachlässigbar. Die Streuintensität einer translationsgeordneten Struktur weist also diskrete Braggreflexe auf. Die Menge  $\{\mathbf{G}\}$  der Vektoren  $\mathbf{G}$  der Braggreflexe definiert das **reziproke Gitter**. Eine minimale Menge  $\{\mathbf{g}_i\}$  von Vektoren  $\mathbf{g}_i$ , deren Linearkombinationen mit ganzzahligen Koeffizienten  $\{\mathbf{G}\}$  liefert, nennt man **Basis des Gitters**. Die Anzahl der Vektoren der Basis wird **Rang des Gitters**  $R$  genannt. Die **Symmetrie des Gitters** wird durch die Gruppe der Punktoperationen<sup>1</sup>, die die Streuintensität  $I(\Delta\mathbf{k})$  nicht verändern, wiedergegeben.

## 1.2 Definitionen

Mit Hilfe des Ranges  $R$  des Gitters und der Dimension  $n$  des Ortsraumes lassen sich folgende Begriffe für die vorliegende Arbeit definieren:

- **Periodischer Kristall:** Ein  $n$ -dimensionaler periodischer Kristall ist eine translationsgeordnete Struktur, für die  $R = n$  gilt. Die Symmetrie des Gitters eines periodischen Kristalles gestattet nur ein-, zwei-, drei-, vier- oder sechszählige Drehachsen<sup>2</sup>.
- **Quasiperiodizität:** Eine Struktur ist quasiperiodisch, wenn die Indizierung diskreter Bragg-Reflexe nur für  $R > n$  möglich ist.

<sup>1</sup>Drehungen, Inversionen, Spiegelungen

<sup>2</sup>die kristallografisch erlaubten Symmetrieachsen

- **Quasikristall:** Eine quasiperiodische Struktur, die im Beugungsbild nichtkristallografische Symmetrien aufweist, nennt man Quasikristall.
- **Inkommensurabler Kristall:** Sind die auftretenden Symmetrien dagegen kristallografisch erlaubt, heißt die Struktur inkommensurabler Kristall.
- **Tiling:** Eine vollständige überlappfreie Ausfüllung des Raumes mit einer endlichen Anzahl von Objekten, den **Tiles**, nennt man Tiling.
- **Vertex:** Einen gemeinsamen Eckpunkt mehrerer Tiles bezeichnet man als Vertex.
- **Quasigitter:** Die Vertizes eines quasiperiodischen Tilings repräsentieren das Quasigitter.
- **Dekoration:** Die Besetzung des Gitters und des Quasigitters mit Atomen nennt man Dekoration. Im periodischen Kristall wird jeder Gitterpunkt gleichartig mit einer Basis von einem oder mehreren Atomen besetzt, so dass die Kristallstruktur durch das Gitter und die Basis bestimmt ist. Aus Dekorationen von Quasigittern kann man Quasikristalle erhalten.

### 1.3 Experimentelles

Die zwei wichtigen Untergruppen quasikristalliner Substanzen sind die **i-Phasen** und die **T-Phasen**. Die Symmetrie des Gitters der i-Phasen gibt die Symmetriegruppe des Ikosaeders wieder. Beispiele hierfür sind das von Shechtman entdeckte i-AlMn oder i-AlZnMg. T-Phasen bestehen aus zweidimensionalen quasiperiodischen Schichten, die in der dritten Dimension periodisch angeordnet sind. In dieser Richtung sind sie translationsinvariant. Bisher kennt man T-Phasen mit achtzähligen (oktagonale Quasikristalle), zehnzähligen (dekagonale Quasikristalle) und zwölfzähligen (dodekagonale Quasikristalle) Rotationsachsen. Eine Zusammenfassung bisher entdeckter Quasikristalle gibt Tsai [87]. Ternäre Quasikristalle weisen zusätzlich zu den nichtkristallografischen Symmetrien weitere Eigenschaften auf, die sie von konventionellen intermetallischen Verbindungen unterscheiden:

- **Elektrischer Widerstand:** Bei niedrigen Temperaturen (4 K) liegt der elektrische Widerstand etwa drei Größenordnungen über dem der metallischen Konstituenten. Erhöht man die Temperatur, nimmt der elektrische Widerstand ab. Dieser Trend ähnelt eher dem Verhalten eines Halbleiters als dem eines repräsentativen Metalles.
- **Wärmeleitfähigkeit:** Die Wärmeleitfähigkeit ist stark reduziert. Quasikristalle eignen sich somit zur Wärmedämmung.
- **Bruchverhalten:** Bis etwa 70% der Schmelztemperatur verhalten sich Quasikristalle spröde, oberhalb dieser Temperatur werden sie immer duktiler. Sie zeigen kaum Tendenz zur Verfestigung.

- **Adhäsion:** Quasikristalline Oberflächen zeigen eine geringere Adhäsion von polaren Flüssigkeiten als Oberflächen von Metallen oder Oxiden. Quasikristalline, kratzfeste Überzüge von Materialien sind bereits realisiert worden [79].

## 1.4 Quasigitter und rationale Approximanten

Wie in den Kapiteln 1.1 und 1.2 beschrieben, kann man den Begriff Quasikristall mit Hilfe des Ranges des Gitters und der Dimension des Ortsraumes definieren. Dies lässt sich darauf zurückführen, dass kristallografisch verbotene Symmetrien für Gitter höherer Dimension — **Hypergitter** — erlaubt sind. Beispielsweise zeigt das einfach kubische Gitter  $\mathbb{Z}^6$  Ikosaedersymmetrie<sup>3</sup>. Aus diesem Grund können Quasigitter aus Hypergittern gewonnen werden.

### 1.4.1 Streifenprojektionsformalismus

Der Streifenprojektionsformalismus erzeugt Quasigitter, indem Hypergitter auf Unterräume projiziert werden, die invariant unter den Punktgruppen des zu erzeugenden Quasigitters sind. Hierbei werden nur Punkte berücksichtigt, die sich innerhalb eines Auswahlstreifens  $S$  befinden.

Der  $r$ -dimensionale euklidische Vektorraum  $\mathbb{R}^r$  und die kanonische Orthonormalbasis  $\mathbf{e}_i$ ,  $i = 1, \dots, r$  seien gegeben. In einen beliebigen  $n$ -dimensionalen linearen Unterraum  $\mathbb{E}_{\parallel}$  des  $\mathbb{R}^r$  mit  $n < r$  werden die Gitterpunkte des  $\mathbb{Z}^r$  durch die orthogonale Projektion  $\pi_{\parallel}$  projiziert. Der zu  $\mathbb{E}_{\parallel}$  orthogonale  $(r - n)$ -dimensionale Untervektorraum des  $\mathbb{R}^r$  sei  $\mathbb{E}_{\perp}$ . Schneidet die Hyperebene  $\mathbb{E}_{\parallel}$  das Hypergitter irrational, dann liegt die Menge der projizierten Gitterpunkte  $\mathbf{P}$  dicht im **Parallelraum**  $\mathbb{E}_{\parallel}$ , andernfalls erhält man eine periodische Struktur [95]. Um zu einer diskreten quasiperiodischen Struktur zu gelangen, projiziert man deshalb Gitterpunkte innerhalb einer ausgewählten Teilmenge des  $\mathbb{R}^r$  auf eine Hyperebene  $\mathbb{E}_{\parallel}$ , die  $\mathbb{Z}^r$  irrational schneidet. Hierzu kann der **Auswahlstreifen**  $S$ , der durch das Verschieben des  $r$ -dimensionalen Einheitswürfels

$$W^r = \left\{ \sum_{i=1}^r \gamma_i \mathbf{e}_i : 0 \leq \gamma_i < 1 \right\} \quad (1.5)$$

entlang  $\mathbb{E}_{\parallel}$  entsteht, benutzt werden:

$$S = \{ \mathbf{a} + \mathbf{b} : \mathbf{a} \in \mathbb{E}_{\parallel} \wedge \mathbf{b} \in W^r \}. \quad (1.6)$$

Das Quasigitter  $Q$  erhält man nun durch Projektion der Gitterpunkte, die in  $S$  liegen<sup>4</sup>:

$$Q = \pi_{\parallel}(S \cap \mathbb{Z}^r). \quad (1.7)$$

<sup>3</sup>Ein Ikosaeder weist sechs fünfzählige, zehn dreizählige und fünfzehn zweizählige Symmetrieachsen auf.

<sup>4</sup>Um die Eckpunkte des  $r$ -dimensionalen Einheitswürfels eindeutig auf  $\mathbb{E}_{\parallel}$  zu projizieren, wird eigentlich ein Auswahlstreifen mit halboffenem Rand benötigt. Stattdessen verschiebt man das Gitter des  $\mathbb{R}^r$  infinitesimal in  $\mathbb{E}_{\perp}$ . Dies ist auch in Abbildung 1.2 berücksichtigt, der untere rechte Punkt des Einheitsquadrates wird projiziert, der obere linke jedoch nicht.

Die orthogonale Projektion  $\pi_{\perp}$  des  $r$ -dimensionalen Einheitswürfels  $W^r$  auf den **Orthogonalraum**  $\mathbb{E}_{\perp}$  liefert den **Akzeptanzbereich**  $A$ ,

$$A = \pi_{\perp}(W^r). \quad (1.8)$$

In Abbildung 1.2 ist der Streifenprojektionsformalismus für  $r = 2$  und  $n = 1$  veranschaulicht.  $\mathbb{E}_{\parallel}$  und  $\mathbb{E}_{\perp}$  sind damit eindimensional. Soll eine quasiperiodische Struktur generiert werden, darf  $\mathbb{E}_{\parallel}$  höchstens einen Gitterpunkt (die Gitterpunkte des  $\mathbb{Z}^2$  sind in Abbildung 1.2 als schwarze Punkte dargestellt) enthalten. Außerdem müssen  $\mathbb{E}_{\parallel}$  und  $\mathbb{E}_{\perp}$  in  $\mathbb{R}^2$  irrationale Steigungen besitzen. Das entlang  $\mathbb{E}_{\parallel}$  verschobene Einheitsquadrat (in Abbildung 1.2 gelb dargestellt) liefert den Auswahlstreifen  $S$  (in Abbildung 1.2 grün dargestellt). Der Akzeptanzbereich ist die orthogonale Projektion des Einheitsquadrates auf  $\mathbb{E}_{\perp}$  (in Abbildung 1.2 blau dargestellt). Nun werden alle Gitterpunkte, die sich im Auswahlstreifen befinden, orthogonal auf  $\mathbb{E}_{\parallel}$  projiziert (in Abbildung 1.2 als schwarze, dünne Striche dargestellt). Dies liefert das eindimensionale Quasigitter, dessen Punkte in Abbildung 1.2 als weiß gefüllte Kreise dargestellt sind. Diese Quasigitterpunkte bilden eine Sequenz von langen ( $L$ ) und kurzen ( $K$ ) Strecken, die die Projektion der Seiten des Einheitsquadrates auf  $\mathbb{E}_{\parallel}$  widerspiegeln. Sie stellen die Tiles des Quasigitters dar. Wählt man — wie in Abbildung 1.2 — als Steigung von  $\mathbb{E}_{\parallel}$  das inverse der goldenen Zahl  $\tau$  ( $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ ), so erhält man als Abfolge der Strecken  $L$  und  $K$  die **Fibonacci-Kette**. Das Längenverhältnis der Strecken  $L$  und  $K$  ergibt sich ebenfalls zu  $\tau$ . Die kurzen Abstände sind in Abbildung 1.2 durch dicke schwarze Striche gekennzeichnet.

Wählt man eine rationale Steigung des Auswahlstreifens, entsteht eine periodische Abfolge der projizierten Punkte. Allgemein entsteht ein Gitter mit einer Einheitszelle, die einen Ausschnitt des unendlich ausgedehnten Quasigitters darstellt. Diese Gitter werden als **rationale Approximanten** bezeichnet. Einen rationalen  $\frac{f_{n+1}}{f_n}$ -Approximanten der Fibonacci-Kette erhält man durch Näherung der Zahl  $\tau$  durch eine rationale Zahl  $\tau_n = \frac{f_{n+1}}{f_n}$ , wobei die  $f_n$  durch die Fibonacci-Folge<sup>5</sup> gegeben sind. In Abbildung 1.2 sind die Werte für die Steigung des Auswahlstreifens für die  $\frac{3}{2}$  -,  $\frac{5}{3}$  -,  $\frac{8}{5}$  - und  $\frac{13}{8}$  - Approximanten über die rot dargestellten Achsenabschnitte wiedergegeben. Die Sequenz, die sich zwischen dem Ursprung und dem in Abbildung 1.2 jeweils rot markierten Punkt befindet, wird dadurch periodisch wiederholt.

Eine Verschiebung der Gitterpunkte des  $\mathbb{Z}^r$  um  $\mathbf{u}$  kann in Anteile aus Parallel- und Orthogonalraum aufgeteilt werden:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_{\parallel} + \mathbf{u}_{\perp}, \quad \mathbf{u}_{\parallel} \in \mathbb{E}_{\parallel}, \quad \mathbf{u}_{\perp} \in \mathbb{E}_{\perp}. \quad (1.9)$$

Die Verschiebung  $\mathbf{u}_{\parallel}$  führt zu einer Translation des Quasigitters  $Q$  und wird **phononischer Anteil** der Verschiebung genannt. Der Effekt einer Verschiebung  $\mathbf{u}_{\perp}$  im Orthogonalraum soll anhand Abbildung 1.2 verdeutlicht werden. Werden die Gitterpunkte des  $\mathbb{Z}^2$  um  $\mathbf{u}_{\perp}$

---

<sup>5</sup>  $f_0 = 0, f_1 = 1, f_n = f_{n-1} + f_{n-2}$  für  $n > 1$

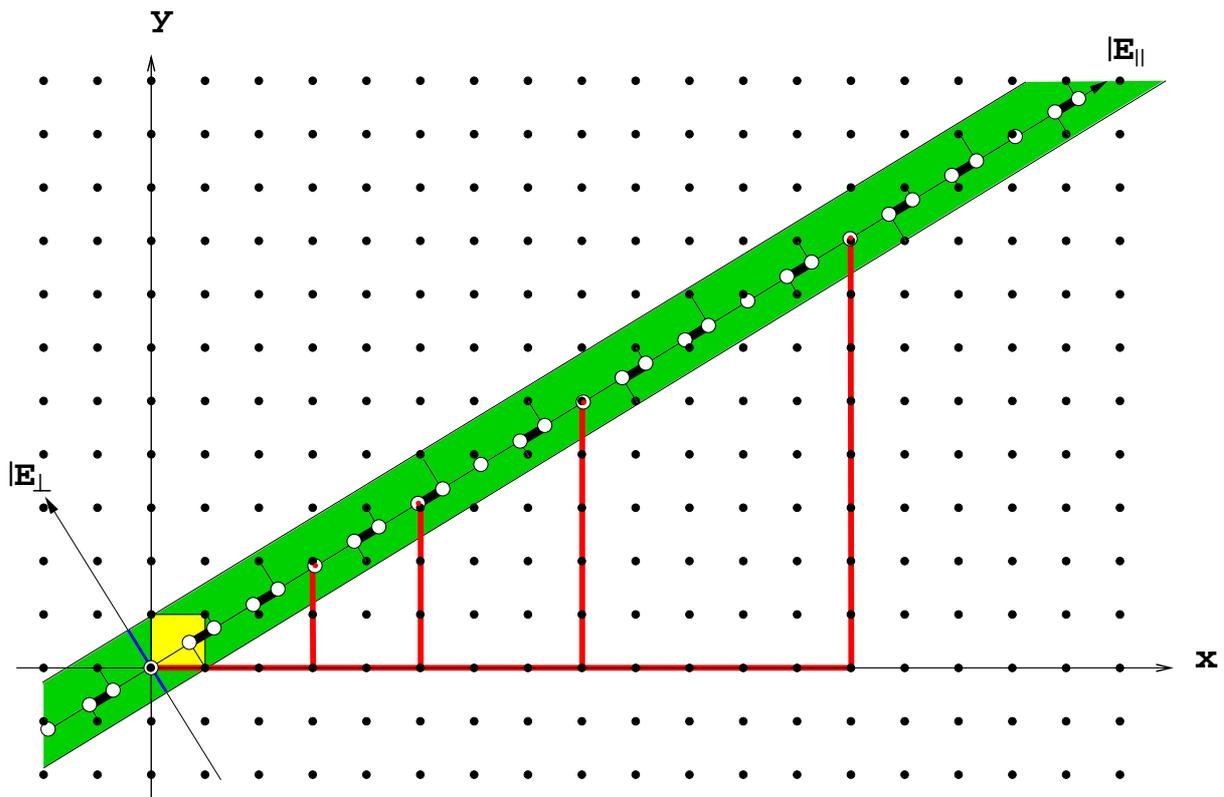


Abbildung 1.2: Der **Streifenprojektionsformalismus** für  $r = 2$  und  $n = 1$ . Dargestellt sind: Gitterpunkte des  $\mathbb{Z}^2$  (schwarze Punkte), Einheitsquadrat (gelb), Auswahlstreifen  $S$  (grün), Akzeptanzbereich (blau), orthogonale Projektion der Gitterpunkte (schwarze, dünne Striche), Quasigitterpunkte (weiß gefüllte Kreise), kurze Abstände  $K$  (dicke schwarze Striche), Steigung des Auswahlstreifens für rationale Approximanten (durch die rot gezeichneten Achsenabschnitte), periodisch durch den zugehörigen rationalen Approximanten wiederholte Sequenz (Sequenz zwischen Ursprung und jeweiligem rot markiertem Punkt). Diese Abbildung wird in Kapitel 1.4.1 erläutert.

verschoben, kann ein Gitterpunkt des  $\mathbb{Z}^2$  auf einer Seite den Auswahlstreifen verlassen, gleichzeitig tritt dann ein anderer Gitterpunkt auf der gegenüberliegenden Seite des Auswahlstreifens in diesen ein. Dies bewirkt eine Vertauschung der Abfolge der Strecken  $LK$  zu  $KL$  oder  $KL$  zu  $LK$ , einen **Flip**. Die Verschiebung  $\mathbf{u}_\perp$  wird als **phasonischer Anteil** der Verschiebung bezeichnet.

### 1.4.2 Gridformalismus

Der von de Bruijn [12] eingeführte Gridformalismus generiert ebenfalls Quasigitter und wird in dieser Arbeit zur numerischen Berechnung der Quasigitter bzw. deren rationaler Approximanten eingesetzt. Ein Vergleich des Grid- und Streifenprojektionsformalismus findet sich beispielsweise in [78].

Ein **g-Grid** ergibt sich als Menge der Schnittpunkte von  $g$  parallelen äquidistanten Geradenscharen im  $\mathbb{R}^2$  bzw. von  $g$  parallelen äquidistanten Ebenenscharen im  $\mathbb{R}^3$ . Die Normalenvektoren der  $g$  Ebenenscharen im  $\mathbb{R}^3$  bzw. der  $g$  Geradenscharen im  $\mathbb{R}^2$  heißen **Gridvektoren**  $\mathbf{g}_i$ . Die Ebenen- bzw. Geradenschargleichungen können somit niedergeschrieben werden:

$$\mathbf{g}_i^T \mathbf{x} - \alpha_i = \beta_i |\mathbf{g}_i|^2, \quad \alpha_i \in \mathbb{R}, \quad \beta_i \in \mathbb{Z}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.10)$$

Die  $\beta_i$  nummerieren die Ebenen bzw. Geraden der Ebenen- bzw. Geradenschar mit dem Normalenvektor  $\mathbf{g}_i$  ausgehend vom Koordinatenursprung durch. Hierbei kennzeichnet  $\beta_i = 0$  die vom Koordinatenursprung in Richtung  $\mathbf{g}_i$  zuerst auftretende Ebene bzw. Gerade. Die Ebenen bzw. Geraden haben den Abstand  $|\mathbf{g}_i|$ . Die  $\alpha_i$  geben den Abstand des Koordinatenursprunges von der Ebene bzw. Gerade  $\beta_i = 0$  multipliziert mit  $|\mathbf{g}_i|$  an. Durch das  $g$ -Grid wird der  $\mathbb{R}^2$  bzw. der  $\mathbb{R}^3$  in Zellen zerlegt. Dabei soll das Grid regulär sein, d.h. es dürfen sich nur genau zwei Geraden bzw. drei Ebenen in einem Punkt schneiden. Dies kann durch Anpassung der  $\alpha_i$  erreicht werden. Dann befindet sich jede Zelle für jede Gridvektorrichtung zwischen zwei Ebenen bzw. Geraden mit  $\beta_i = z_i$  und  $\beta_i = z_i - 1$ . Durch die zugehörigen  $g$  Werte  $z_i$  ist jede Zelle eindeutig charakterisiert. Jede Zelle im  $\mathbb{R}^2$  bzw.  $\mathbb{R}^3$  entspricht also einem Punkt im  $\mathbb{Z}^g$ . Jeder Zelle bzw. jedem zugehörigem Punkt im  $\mathbb{Z}^g$  wird nun durch die **Dualisierung**

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^g z_i \mathbf{g}_i \quad (1.11)$$

ein Punkt  $\mathbf{P}$  im  $\mathbb{R}^2$  bzw.  $\mathbb{R}^3$  zugeordnet. Die Menge dieser Punkte bildet ein zwei- bzw. dreidimensionales Quasigitter. Jede Zelle des Grids entspricht dann einem Punkt  $\mathbf{P}$  des Quasigitters und jeder Schnittpunkt des Grids einer Zelle (einem Tile) des Quasigitters. In Abbildung 1.3 sind ein 5-Grid (Pentagrid, Mitte) im  $\mathbb{R}^2$  und das daraus durch Dualisierung entstandene Quasigitter bzw. Tiling (rechts) dargestellt.

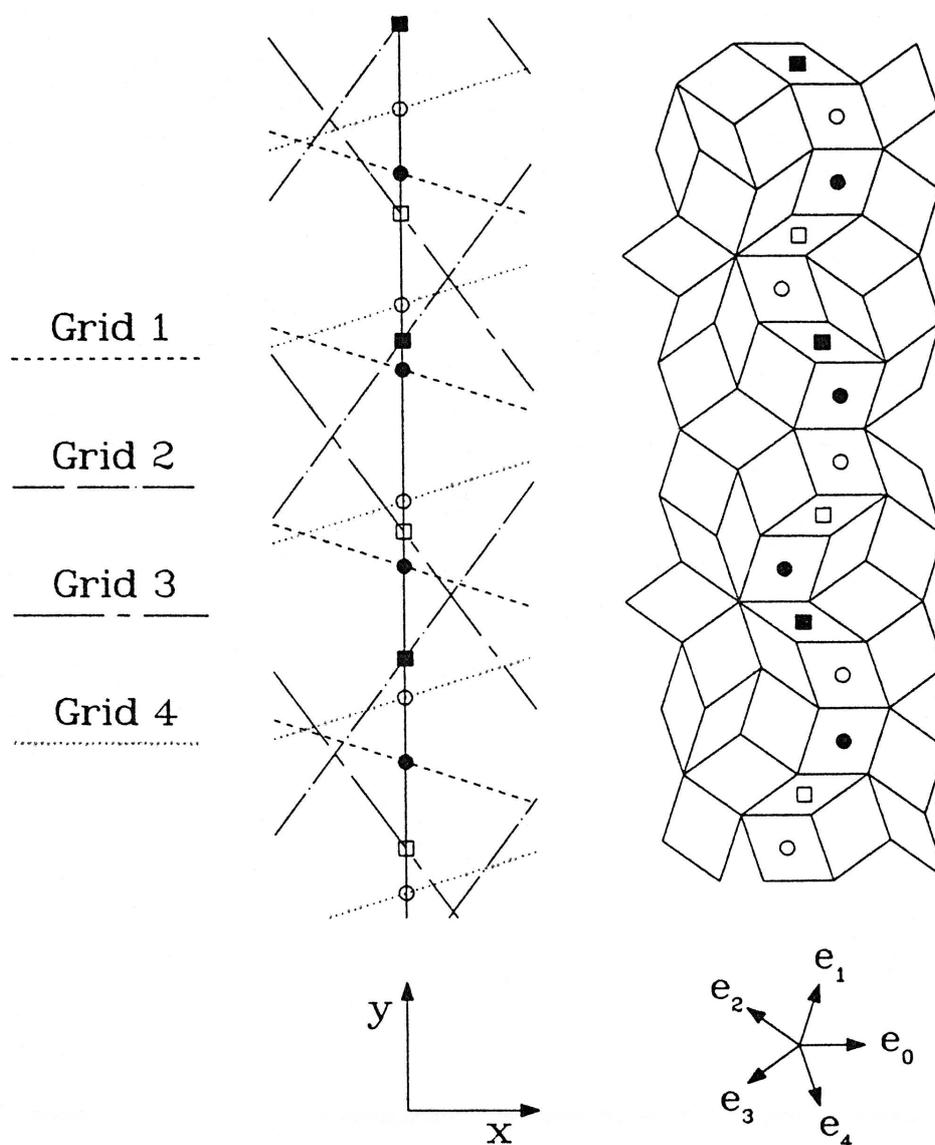


Abbildung 1.3: Der **Gridformalismus** im  $\mathbb{R}^2$  (aus [78], Seite 627). Dargestellt sind die mit Grid  $j$  ( $j = 0, \dots, 4$ ) benannten Geradenscharen (Legende links, Mitte) mit den zugehörigen Gridvektoren (hier  $e_j$  genannt,  $e_j = (\cos(2\pi j/5), \sin(2\pi j/5))^T$ , unten rechts) im  $\mathbb{R}^2$ , sowie das zugehörige 5-Grid (Pentagrid, vergrößert dargestellt, Mitte). Die eingezeichneten Kreise und Quadrate kennzeichnen Schnitte zweier Geraden (Mitte). Der Ausschnitt zeigt nur eine Gerade des Grids 0 (die vertikale durchgezogene Linie). Das durch Dualisierung entstandene Quasigitter (rechts) weist mit Kreisen und Punkten gekennzeichnete Tiles auf, diese entsprechen den in der Mitte gleich gekennzeichneten Geradenschnittpunkten. Der Gridformalismus wird in Kapitel 1.4.2 erklärt.

## 1.5 Tiling und Dekorationen

In Kapitel 1.4 wurde beschrieben, wie mit Hilfe des Streifenprojektionsformalismus oder des Gridformalismus Quasigitter erzeugt werden können. Im Folgenden werden das in den Simulationen genutzte Ammann-Kramer-Penrose-Tiling sowie mögliche Dekorationen des dazugehörigen Quasigitters beschreiben.

### 1.5.1 Das Ammann-Kramer-Penrose-Tiling

Das ikosaedrische **Ammann-Kramer-Penrose-Tiling** (AKPT) (siehe z.B. [58,50]) wurde von Levine und Steinhardt [56] als Modell für i-AMn vorgeschlagen. Die berechneten Beugungsbilder zeigten eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment von Shechtman [76]. Das AKPT kann mit Hilfe des Streifenprojektionsformalismus aus dem einfach kubischen, sechsdimensionalen Hypergitter  $\mathbb{Z}^6$  in  $\mathbb{R}^6$  erzeugt werden. Der Parallelraum und der Orthogonalraum sind dreidimensionale Unterräume des  $\mathbb{R}^6$  [50]. Der Akzeptanzbereich ist ein rhombisches Triakontaeder, das durch die Projektion des sechsdimensionalen Einheitswürfels auf den Orthogonalraum entsteht. Die in den Parallelraum projizierten Einheitsvektoren des  $\mathbb{Z}^6$  bilden eine ganzzahlige Basis des Quasigitters, so dass sich jeder Gitterpunkt als ganzzahlige Linearkombination dieser  $\mathbf{Q}_i$  schreiben lässt. Eine Darstellung der  $\{\mathbf{Q}_i\}$  ist:

$$\left\{ \left( \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ \frac{\sqrt{5}}{2}l \end{array} \right), \left( \begin{array}{c} l \\ 0 \\ \frac{1}{2}l \end{array} \right), \left( \begin{array}{c} l \cos \frac{2\pi}{5} \\ l \sin \frac{2\pi}{5} \\ \frac{1}{2}l \end{array} \right), \left( \begin{array}{c} l \cos \frac{4\pi}{5} \\ l \sin \frac{4\pi}{5} \\ \frac{1}{2}l \end{array} \right), \left( \begin{array}{c} l \cos \frac{6\pi}{5} \\ l \sin \frac{6\pi}{5} \\ \frac{1}{2}l \end{array} \right), \left( \begin{array}{c} l \cos \frac{8\pi}{5} \\ l \sin \frac{8\pi}{5} \\ \frac{1}{2}l \end{array} \right) \right\}. \quad (1.12)$$

Hierbei kennzeichnet  $l$  die Länge der Einheitszelle im  $\mathbb{Z}^6$ . Die Vektoren  $\mathbf{Q}_i$  zeigen in Richtung der Eckpunkte eines Ikosaeders. Ihre Länge beträgt  $\frac{\sqrt{5}}{2}l$ . In Abbildung 1.4 sind die  $\mathbf{Q}_i$  dargestellt. Als Tiles ergeben sich ein **prolates** und ein **oblates Rhomboeder**, die von je drei  $\mathbf{Q}_i$  aufgespannt werden und in zehn Orientierungen vorkommen. Die Winkel zwischen je zwei der drei Vektoren betragen  $63.43^\circ$  für das prolate und  $116.57^\circ$  für das oblate Rhomboeder. Die Rhomboeder sind in Abbildung 1.5 dargestellt.

### 1.5.2 US-Dekoration

Wird jeder Vertex des AKPT mit einem Atom besetzt, entsteht die **primitive monoatomare Dekoration**. Sie ist in Abbildung 1.6 dargestellt. Hierdurch ergeben sich jedoch für Atome auf den kurzen Raumdiagonalen der oblaten Rhomboeder ungünstig kleine Abstände. Dies führt dazu, dass diese Dekoration instabil ist und einem amorphen Endzustand zustrebt [71]. Nach Henley [31] treten zu kurze Abstände in gezackten Zehnerringen oder in Teilen dieser Ringe auf. Die oblaten Rhomboeder reihen sich mit der kurzen Diagonale entlang dieser Ringe aneinander. Zwischen die freien Lücken zweier oblater passen je zwei prolate Rhomboeder. Diese vier Rhomben haben genau einen gemeinsamen Vertex und formen ein rhombisches Dodekaeder. Um von der primitiven monoatomaren Dekoration zur US-Dekoration (engl.: unit sphere) zu gelangen, müssen Atome von diesem Vertex

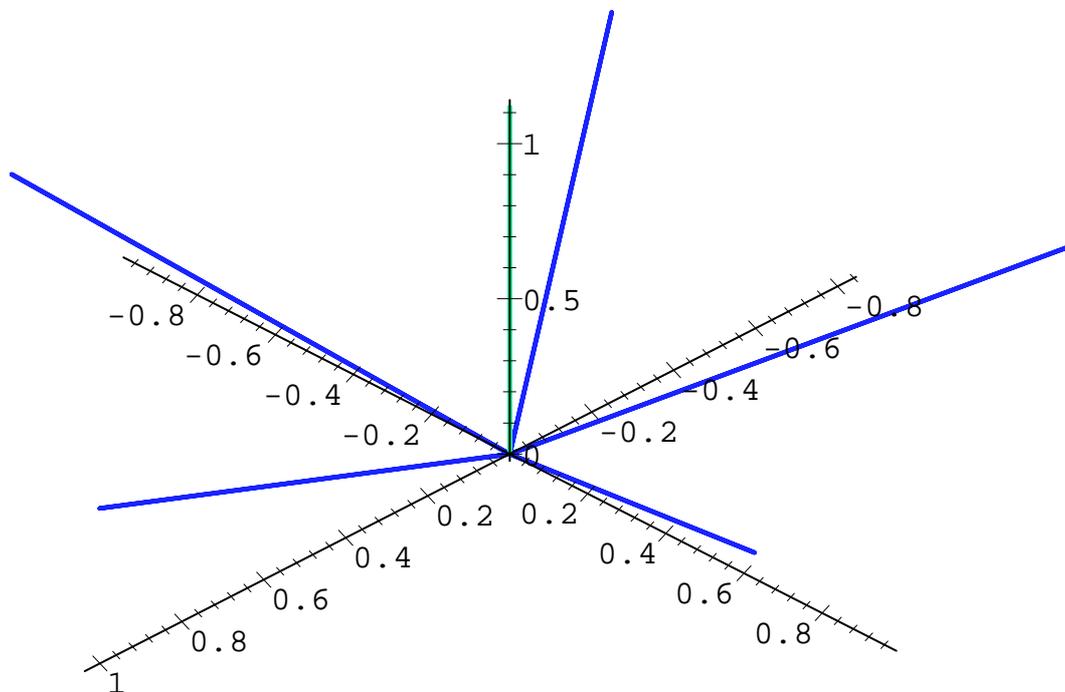


Abbildung 1.4: Die in den Parallelraum projizierten Einheitsvektoren des  $\mathbb{Z}^6$  bilden eine **ganzzahlige Basis des Quasigitters**, so dass sich jeder Gitterpunkt als ganzzahlige Linearkombination dieser  $\mathbf{Q}_i$  schreiben lässt. Hier ist die Wahl der  $\mathbf{Q}_i$  nach (1.12) für  $l = 1$  dargestellt. Der vordere linke blaue Strich entspricht dem zweiten Element der Menge in (1.12), die folgenden Vektoren sind — gegen den Uhrzeigersinn — ebenfalls als blaue Striche eingezeichnet. Das erste Element der Menge in (1.12) ist durch den grünen vertikalen Strich gekennzeichnet. Alle Endpunkte der blau abgebildeten Vektoren befinden sich in gleicher Höhe (dritte Komponente der Vektoren). Die Vektoren  $\mathbf{Q}_i$  zeigen damit in die Richtungen der Eckpunkte eines Ikosaeders.

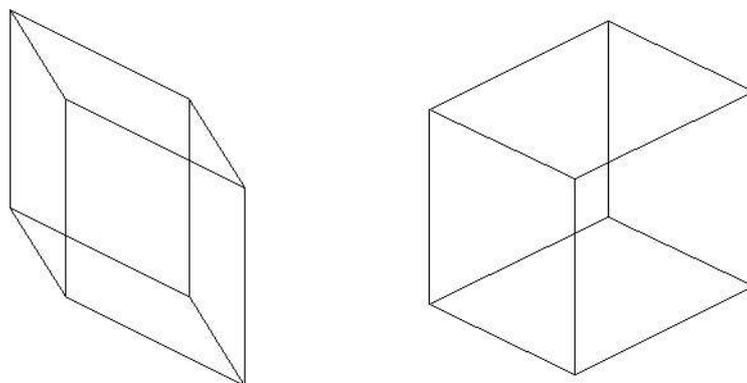


Abbildung 1.5: Die **Tiles des Ammann-Kramer-Penrose-Tiling** sind ein prolates (links) und ein oblates (rechts) Rhomboeder, die von je drei  $\mathbf{Q}_i$  (1.12) aufgespannt werden und in zehn Orientierungen vorkommen. Die Winkel zwischen je zwei der drei Vektoren betragen  $63.43^\circ$  für das prolates und  $116.57^\circ$  für das oblates Rhomboeder.

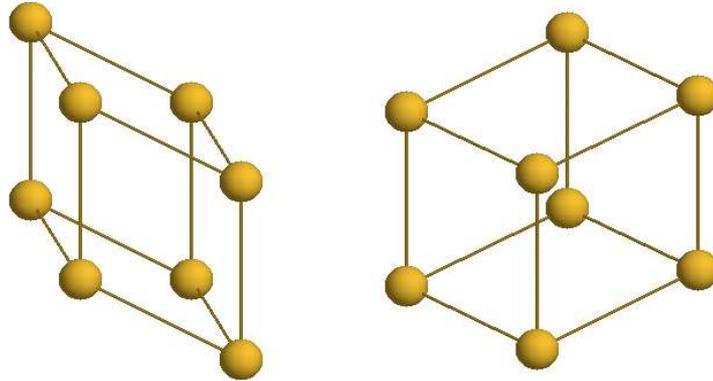


Abbildung 1.6: Die **primitive monoatomare Dekoration**, jeder Vertex des AKPT wird mit einem Atom besetzt. Diese Dekoration ist instabil. Die Atome sind verkleinert als gelbe Kugeln dargestellt.

entfernt werden. Dies ist in Abbildung 1.7 verdeutlicht. Diese Dekoration ist thermisch stabil [71], zeigt jedoch Instabilitäten gegenüber mechanischer Deformation [14].

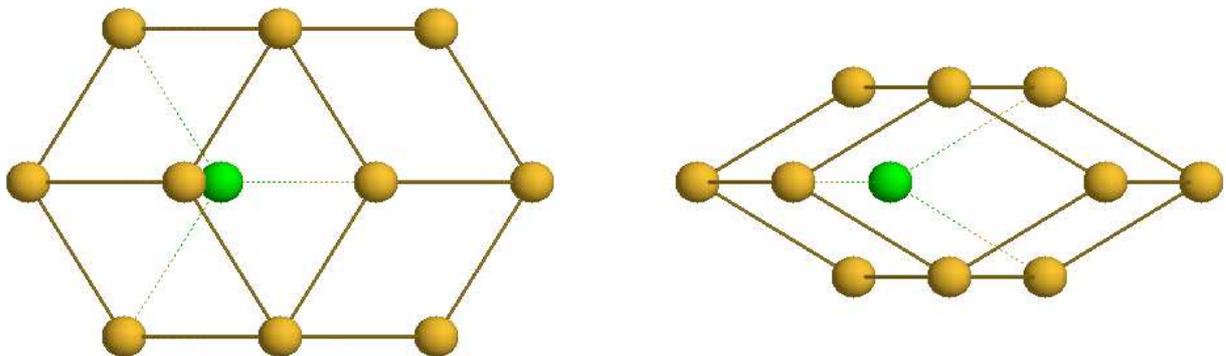


Abbildung 1.7: Das **rhombische Dodekaeder** (links von “oben”, rechts von “vorne”) entsteht aus zwei prolaten und zwei oblaten Rhomboedern. Um von der primitiven monoatomaren Dekoration zur US-Dekoration zu gelangen, müssen grün gekennzeichnete Atome entfernt werden. Die Atome sind verkleinert als Kugeln dargestellt.

### 1.5.3 TI-Dekoration

Die TI-Dekoration ist eine diatomare Dekoration. Die Ecken und Kantenmitten der Rhomboeder werden mit Atomen der Atomsorte A <sup>6</sup> dekoriert. In den prolaten Rhomboedern verbleiben daraufhin größere Lücken. Darum werden auf den langen Raumdiagonalen dieser Rhomboeder zwei Atome der Sorte B <sup>7</sup> platziert, so dass die Raumdiagonalen im Verhältnis  $\tau : 1 : \tau$  aufgeteilt werden. Dies ist in Abbildung 1.8 dargestellt. Die Stellen, an denen

<sup>6</sup>im Folgenden als Sorte oder Typ A bzw. 0 oder kleine, rote Kugeln gekennzeichnet

<sup>7</sup>im Folgenden als Sorte oder Typ B bzw. 1 oder große, blaue Kugeln gekennzeichnet

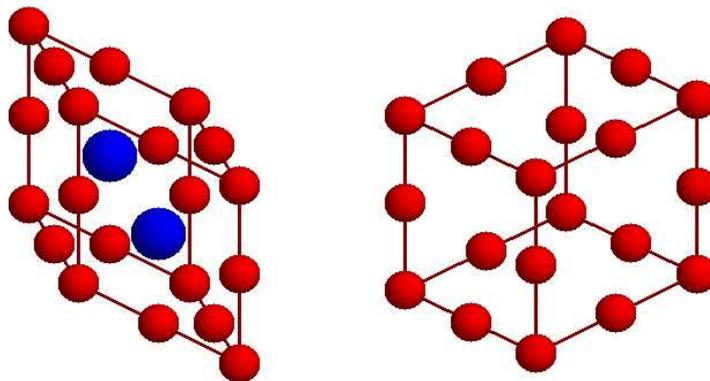


Abbildung 1.8: Die **TI-Dekoration**. Das prolate (links) und das oblate (rechts) Rhomboeder werden mit Atomen zweierlei Typs dekoriert. Die Atome des Typs A sind als kleine, rote Kugeln, die Atome des Typs B als große, blaue Kugeln dargestellt.

zwanzig prolate Rhomboeder einen gemeinsamen Vertex besitzen, nennt Henley twelve-fold-sites [31]. Dort entstehen an den Ecken abgeschnittene Ikosaeder (engl.: truncated icosahedra), die der Dekoration den Namen TI-Dekoration gegeben haben. Der kürzeste Abstand<sup>8</sup> zweier Atome der Sorte A (Abstand von der Ecke zur Kantenmitte eines Rhomboeders) wird in der vorliegenden Arbeit  $r_{qc}$  genannt.

#### 1.5.4 Das binäre ikosaedrische Modell

Eng verwandt mit der TI-Dekoration ist die 1986 von Henley und Elser vorgestellte Dekoration [33] des AKPT. Sie repräsentiert ein Strukturmodell für die ikosaedrische Phase<sup>9</sup> von  $(\text{Al}, \text{Zn})_{49}\text{Mg}_{32}$  und wird auch binäres ikosaedrisches Modell genannt. Atome der Sorte A entsprechen hierbei Al- und Zn-Atomen, Atome der Sorte B Mg-Atomen. Modifikationen gegenüber der TI-Dekoration werden wiederum im rhombischen Dodekaeder vorgenommen. Abbildung 1.9 zeigt das rhombische Dodekaeder vor diesen Veränderungen, Abbildung 1.11 danach. In Abbildung 1.10 wird das Entfernen und Verschieben der beteiligten Atome detailliert aufgezeigt. Das Atom am gemeinsamen Vertex der beteiligten vier Rhomboeder wird entfernt, die benachbarten vier Atome des Typs A in Atome des Typs B umgewandelt und so verschoben, dass die B Atome im rhombischen Dodekaeder eine hexagonale Bipyramide bilden (siehe Abbildung 1.10). Durch diese Umbesetzungen wird die Stöchiometrie von i-AlZnMg gut wiedergegeben und die Stabilität der Struktur erhöht [14].

#### 1.5.5 Vertexindizierung

Nach Henley [31] können alle auftretenden Vertizes des AKPT durch vier Zahlen  $(\alpha, \beta, \gamma)_p$  charakterisiert werden. Hierbei gibt  $\alpha$  die Anzahl der Kanten der Tiles (siehe Abbildung

<sup>8</sup>vgl. hierzu Kapitel 3.4 und Anhang B

<sup>9</sup>die ikosaedrische Phase wird durch folgende Stöchiometrie repräsentiert:  $(\text{Al}, \text{Zn})_{0.629}\text{Mg}_{0.371}$

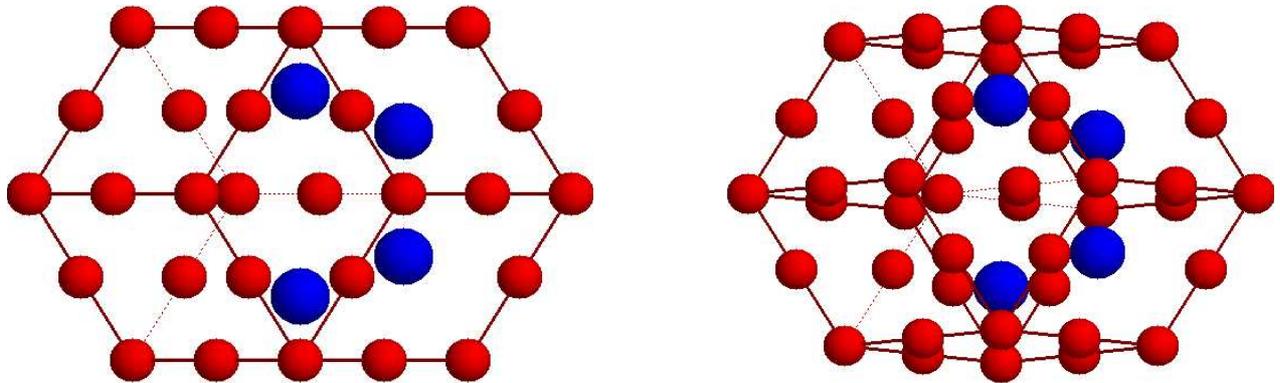


Abbildung 1.9: Das aus zwei prolaten und zwei oblaten Rhomboedern mit TI-Dekoration entstandene rhombische Dodekaeder (die rechte ist gegenüber der linken Teilabbildung leicht verkippt dargestellt). Die prolaten Rhomboeder liegen jeweils rechts oben und unten, die oblaten Rhomboeder links ober- und unterhalb des gemeinsamen Vertex. Die Atome des Typs A sind als kleine, rote Kugeln, die Atome des Typs B als große, blaue Kugeln dargestellt.

1.5) an, die sich im gemeinsamen Vertex treffen. Zusätzlich befinden sich ausgehend vom zu indizierenden Vertex im Abstand der kurzen Flächendiagonalen der Rhomboeder noch  $\beta$  Vertices. Weitere  $\gamma$  Vertices sind im Abstand der kurzen Raumdiagonale des oblaten Rhomboeders zu finden. Sind die drei Größen  $\alpha, \beta, \gamma$  nicht ausreichend zur eindeutigen Indizierung, gibt  $p$  die Anzahl der maximalen  $\beta$  Vertices um eine Kante an. Hierdurch werden 24 Vertextypen klassifiziert. Für die Kennzeichnung der atomaren Umgebungen des binären ikosaedrischen Modelles ist diese Beschreibung aufgrund der in Kapitel 1.5.4 beschriebenen Modifikationen nur bedingt geeignet. Allerdings beobachtete Schaaf [72] in Molekulardynamik-Simulationen, dass Versetzungsbewegungen nahe der  $(5, 6, 1)_4$  Vertices stark behindert wurden.

## 1.6 Cluster

Frank [22] stellte sich folgende Frage: „Auf wieviele Arten kann man zwölf Billiardkugeln in simultanen Kontakt mit einer zentralen Kugel bringen?“ Hierbei sollen Kombinationen als unterschiedlich gezählt werden, die nur unter Verlust eines Kontaktes zum zentralen Ball überführbar sind. Die Antwort ist drei. Sowohl kubisch flächenzentrierte, als auch hexagonal dicht gepackte Gitter weisen eine solche Anordnung auf. Die dritte Möglichkeit ist, die Kugeln auf den Eckpunkten eines Ikosaeders anzuordnen. Frank berechnete die Bindungsenergien dieser Cluster mit Hilfe von Lennard-Jones Paarpotentialen. Demnach hat die ikosaedrische Konfiguration eine um 8% niedrigere Bindungsenergie als die anderen beiden Packungsarten. Solche ikosaedrische Umgebungen sollten in Flüssigkeiten, (metallischen) Gläsern [81] und Quasikristallen auftreten. Eine detaillierte geometrische

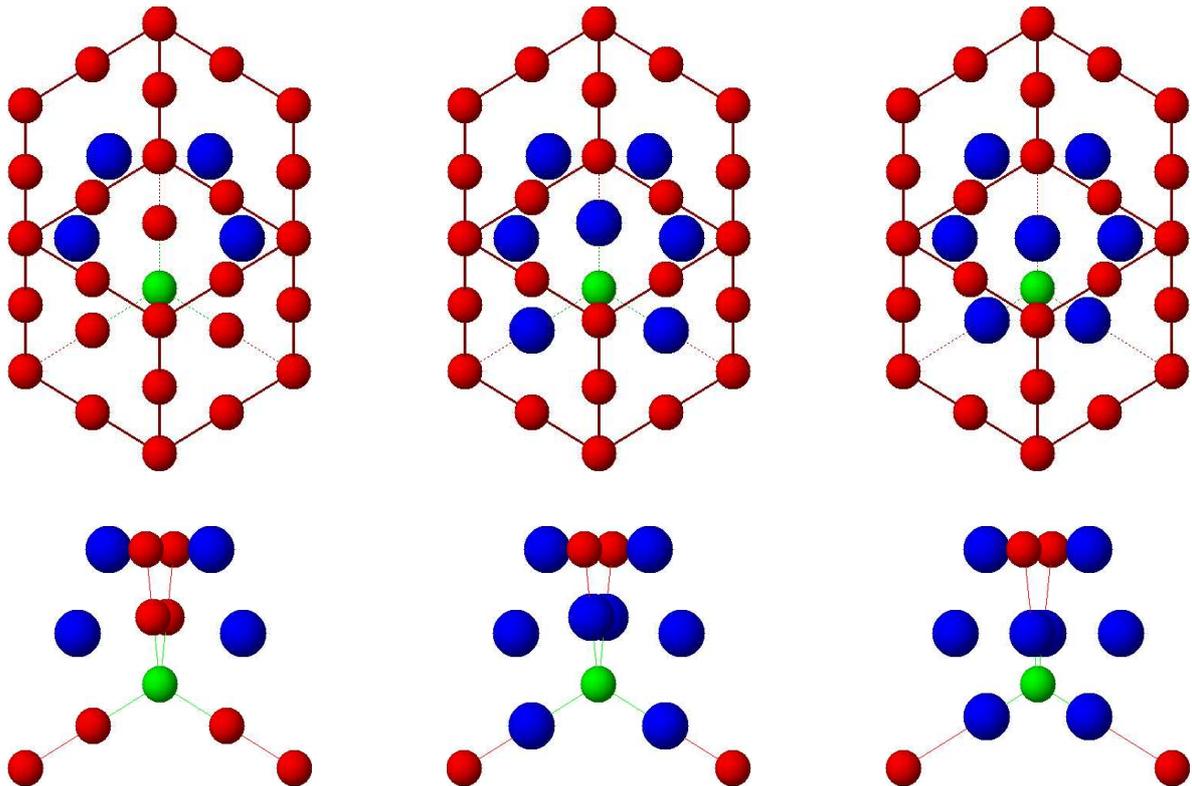


Abbildung 1.10: Die notwendigen Modifikationen der TI-Dekoration des rhombischen Dodekaeders, um zur Dekoration des binären ikosaedrischen Modells zu gelangen. Die Abbildung ist gegenüber den vorherigen Abbildungen aus Darstellungsgründen um  $90^\circ$  im Gegenuhrzeigersinn gedreht. Um diese Abbildungen mit Abbildung 1.9 zu vergleichen, muss diese Seite um  $90^\circ$  im Uhrzeigersinn gedreht werden. **Oben** ist jeweils das rhombische Dodekaeder, **unten** ein leicht gekippter Ausschnitt der Dekoration zu sehen. Die Atome des Typs A sind als kleine, rote Kugeln, die Atome des Typs B als große, blaue Kugeln dargestellt. Die linken Abbildungen entsprechen Abbildung 1.9. Der gemeinsame Vertex der vier Rhomboeder ist durch eine grüne Kugel gekennzeichnet. Dieses Vertexatom wird entfernt. Die mittleren Abbildungen zeigen die Umwandlung der benachbarten vier Atome des Typs A in Atome des Typs B. Diese Atome werden nun so verschoben, dass sie die Kante, auf der sie liegen, im Verhältnis  $1 : \tau$  teilen. In den rechten Abbildungen ist somit eine hexagonale Bipyramide entstanden, deren Eckpunkte mit Atomen des Typs B besetzt sind.

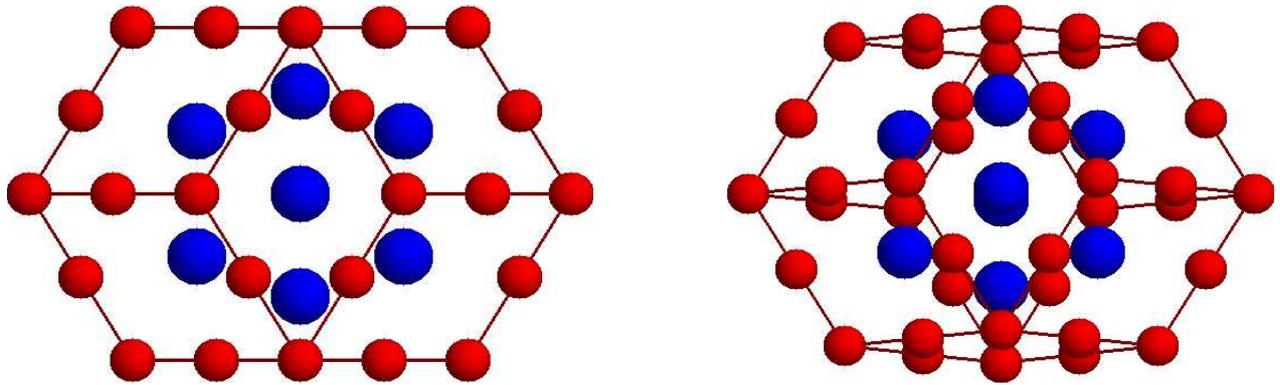


Abbildung 1.11: Das rhombische Dodekaeder (die rechte ist gegenüber der linken Teilabbildung leicht verkippt dargestellt) mit der Dekoration des binären ikosaedrischen Modells. Die Atome des Typs A sind als kleine, rote Kugeln, die Atome des Typs B als große, blaue Kugeln dargestellt.

Betrachtung sphärischer Packungen komplexer Legierungen lieferte Frank 1958 [23]. Schon in kristallinem  $(\text{Al,Zn})_{49}\text{Mg}_{32}$  sind Ikosaeder häufig auftretende Strukturen [7]. In der ikosaedrischen Phase entstehen **Bergman-Cluster**<sup>10</sup>, wenn  $20 - 2n$  prolata Rhomboeder und  $n$  rhombische Dodekaeder für  $n \in \{0, \dots, 10\}$  einen gemeinsamen Vertex besitzen. Um ein zentrales Atom der Sorte A (Al oder Zn) sind weitere zwölf Atome der Sorte A auf den Eckpunkten eines Ikosaeders angeordnet. Dann folgen zwanzig Atome der Sorte B (Mg) auf den Eckpunkten eines Dodekaeders und etwas weiter außen nochmals zwölf Atome der Sorte A auf den Eckpunkten eines Ikosaeders. Der Bergman-Cluster besteht somit aus 45 Atomen. Dies ist in Abbildung 1.12 dargestellt. Das Minimum des Lennard-Jones Paarpotentials<sup>11</sup> für Wechselwirkungen zwischen verschiedenartigen Atomsorten ist doppelt so tief gewählt, wie das für gleichartige Atomsorten. Dieses Minimum liegt zudem fast exakt bei dem Abstand, den die Atome der Sorte A mit den Atomen der Sorte B auf den beiden äußersten “Schalen” einnehmen. Somit könnte dieser Cluster durch die Potentialwahl zusätzlich gefestigt werden.

Nach Henley [32] kann man sich ikosaedrische Quasikristalle als aus stabilen Clustern aufgebautes Gerüst, das mit “Klebstoff”-Atomen aufgefüllt ist, vorstellen. Diese Vorstellung wird von Experimenten gestützt. Versetzungsbewegungen in Quasikristallen können

<sup>10</sup> Die in Abbildung 1.12 dargestellten Atome werden in der vorliegenden Arbeit als Bergman-Cluster bezeichnet. Die kristalline metallische Phase  $\text{Mg}_{32}(\text{Al,Zn})_{49}$  beschrieb Bergman [7] durch drei konzentrisch aufgebaute Gruppierungen von Atomen. Diese Komplexe bauen durch periodische Wiederholung die metallische Phase auf. Die ersten beiden Gruppierungen von Atomen sind mit der als Bergman-Cluster bezeichneten Struktur aus 45 Atomen identisch. Die dritte Gruppierung umfasst 72 Atome. Die Komplexe sind hierbei so gepackt, dass alle 72 Atome der äußersten Gruppierung in der kristallinen Phase mit anderen Komplexen dieser Art geteilt werden.

<sup>11</sup>siehe hierzu Kapitel 3.4

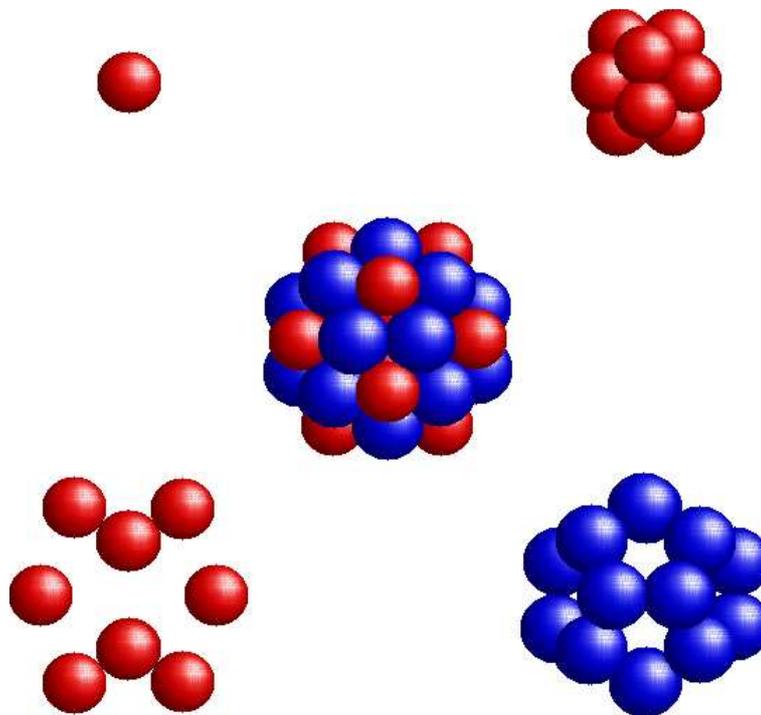


Abbildung 1.12: Der **Bergman-Cluster** ist in der Mitte der Darstellung abgebildet. Um ihn herum sind im Uhrzeigersinn die verschiedenen “Schalen” wiedergegeben. Um ein zentrales Atom der Sorte A (Al oder Zn; als kleine, rote Kugeln dargestellt) sind weitere zwölf Atome der Sorte A auf den Eckpunkten eines Ikosaeders angeordnet. Dann folgen zwanzig Atome der Sorte B (Mg; als große, blaue Kugeln dargestellt) auf den Eckpunkten eines Dodekaeders und zwölf Atome der Sorte A auf den Eckpunkten eines Ikosaeders.

als Cluster-Reibungsmechanismen beschrieben werden, siehe z.B. [61]. Oberflächen<sup>12</sup> von Quasikristallen weisen eine Rauigkeit auf, die Clustern zugeordnet wird. Zudem kann mit Hilfe dieser Vorstellung eine genäherte elektronische Struktur der Quasikristalle berechnet werden [46, 13, 45]. Die Ergebnisse liefern gute Erklärungen für die in Kapitel 1.3 wiedergegebenen experimentellen Eigenschaften. Darum können stabile Cluster als grundlegende Bausteine eines Quasikristalles angesehen werden, die auch dessen Eigenschaften mitbestimmen.

## 1.7 Oberflächen

Aufgrund der Quasiperiodizität gibt es in Quasikristallen Ebenenstrukturen [54], die hier als **Quasiebenen**<sup>13</sup> bezeichnet werden. Diese Tatsache wurde für theoretische Modelle

<sup>12</sup>siehe hierzu Kapitel 1.7

<sup>13</sup>Die in ikosaedrischen Quasikristallen vorkommenden Ebenenstrukturen besitzen andere Eigenschaften als die Ebenen in Kristallen. Weder die Abfolge der Ebenen, noch die Abfolge der Atome in einer Ebene

genutzt, die Oberflächen von Quasikristallen im thermischen Gleichgewicht beschreiben sollen [24, 34, 85, 86]. Thermische Diffusion sowie das Vorhandensein von Clustern wurde hierbei nicht berücksichtigt. Auf dieser Grundlage erfolgten auch Monte Carlo Simulationen [48, 49]. Oberflächen von Quasikristalliten nahe  $T = 0\text{K}$  beschreibt Ho [37] mit Hilfe der Wulff-Konstruktion. Diese benutzt eine polare grafische Darstellung der Oberflächenenergien, um die thermodynamisch stabile Oberflächenstruktur eines (Quasi-)Kristallites zu beschreiben (siehe hierzu [35]). Hierbei wurde für die Oberflächenenergie ein Verlauf entsprechend der Stapelung der Quasiebenen angenommen, der Einfluss der Cluster wurde vernachlässigt.

Yang [90] hingegen betrachtete nur Cluster und ordnete jeder Schnittfläche durch einen Cluster eine Energie zu. Die Quasiebenen wurden nur durch die Stapelung der Cluster berücksichtigt. Einen ähnlichen Weg beschreitet Lei [55], um die Oberflächen von Quasikristalliten bei  $T = 0\text{K}$  zu beschreiben.

Man erhält — dem angesetzten Modell entsprechend — entweder eine von Quasiebenen oder stabilen Clustern bestimmte Oberflächenstruktur. Experimente<sup>14</sup> zeigen jedoch, dass beide Eigenschaften für reale Oberflächen von Quasikristallen eine bedeutende Rolle spielen. Eine Abbildung der elektronischen Struktur<sup>15</sup> der Oberfläche liefert die Rastertunnelmikroskopie (STM). Mit Hilfe dieser Technik wurden Oberflächen der ikosaedrischen Phasen von AlPdMn [10, 16, 18, 17, 19, 74, 73, 75, 77] und AlCuFe [5, 9] untersucht. Obwohl die atomistischen Strukturen vom simulierten Modell abweichen, sollten dennoch grundlegende Aussagen vergleichbar sein. Problematisch für einen qualitativen Vergleich mit Rissoberflächen sind STM-Aufnahmen von gesputterten und anschließend aufgeheizten Proben. Diese experimentellen Maßnahmen sind zur Herstellung einer sauberen, sich im thermischen Gleichgewicht befindlichen Probe von Nutzen. Allerdings verändert das Sputtern die Oberfläche, und das Aufheizen führt zu Diffusion von Leerstellen und/oder Atomen an die Oberfläche. Ebert [16, 18] stellte gespaltene Oberflächen von ikosaedrischen Quasikristallen im Vakuum bei Raumtemperatur her und untersuchte sie direkt mit Hilfe der STM. Diese Aufnahmen sind in Abbildung 1.13 wiedergegeben. Sie sind auf einer nm-Skala rau. Diese Rauigkeit wird mit Mackay-Clustern (Durchmesser ca. 1 nm) in Verbindung gebracht [16]. Zumindest für Bruchebenen senkrecht zu zweizähligen Achsen ergeben die Experimente, dass die Symmetrie des Quasikristalles an der Oberfläche erhalten bleibt. Vor allem bei den aufgeheizten Proben zeigt sich eine ausgeprägte Ausbildung von Terrassen, deren Höhenunterschiede durch die zugrundeliegende Quasiebenenstruktur erklärt werden können. Die STM-Aufnahme aus Abbildung 1.14 zeigt zwei dieser Terrassen.

---

zeigen ein periodisches Verhalten. Hierdurch erklären sich lokale Inhomogenitäten und das vermehrte Vorhandensein von Clustern. Um dieser Tatsache Rechnung zu tragen, werden die Ebenenstrukturen in Quasikristallen hier Quasiebenen genannt.

<sup>14</sup>Die im Text beschriebenen experimentellen Ergebnisse der STM werden durch AFM, HRTEM, (dyn.) LEED und ESCA (XPS, UPS, AES) gestützt.

<sup>15</sup>Hierbei wird vermutlich keine atomare Auflösung erreicht, sondern es erfolgt eine Abbildung der elektronischen Struktur der Cluster, siehe Kapitel 1.6.

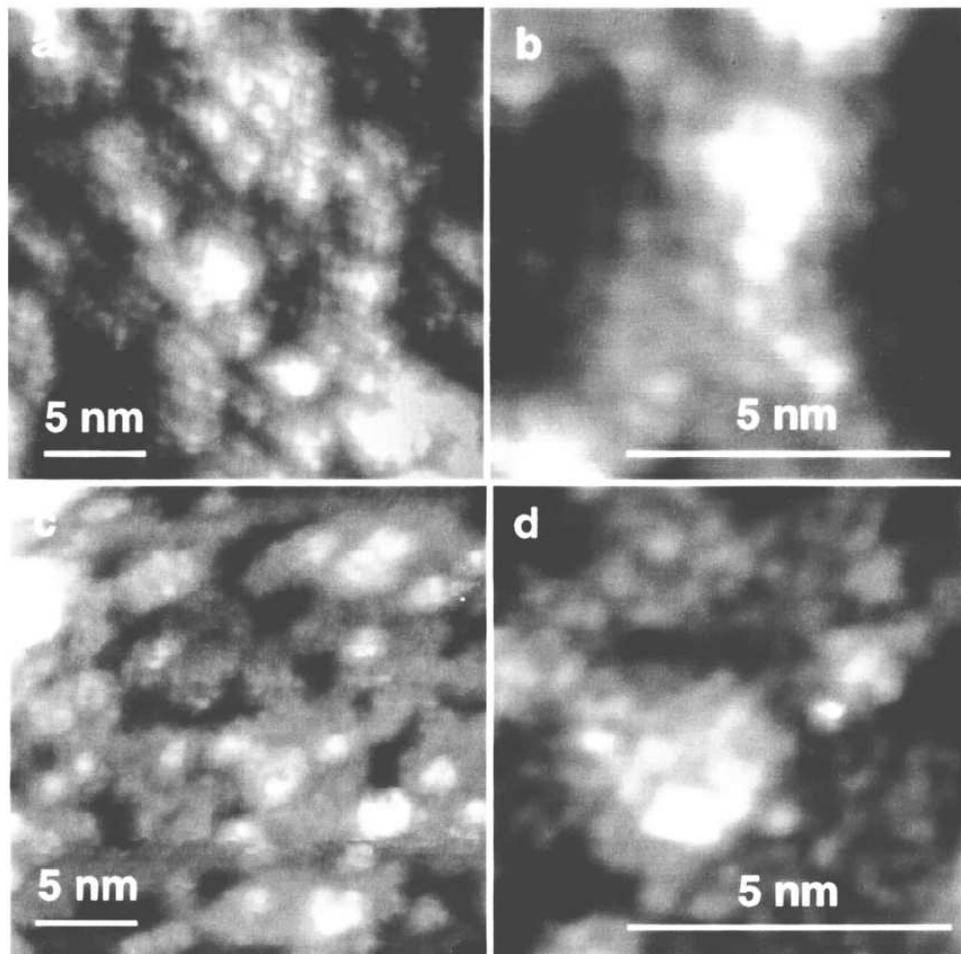


Abbildung 1.13: **STM-Aufnahmen** von  $i\text{-AlPdMn}$ , das bei Raumtemperatur im Vakuum gespalten wurde ([18] entnommen). (a) und (b) zeigen Oberflächen senkrecht zu einer zweizähligen Richtung, (c) und (d) Oberflächen senkrecht zu einer fünfzähligen Richtung.

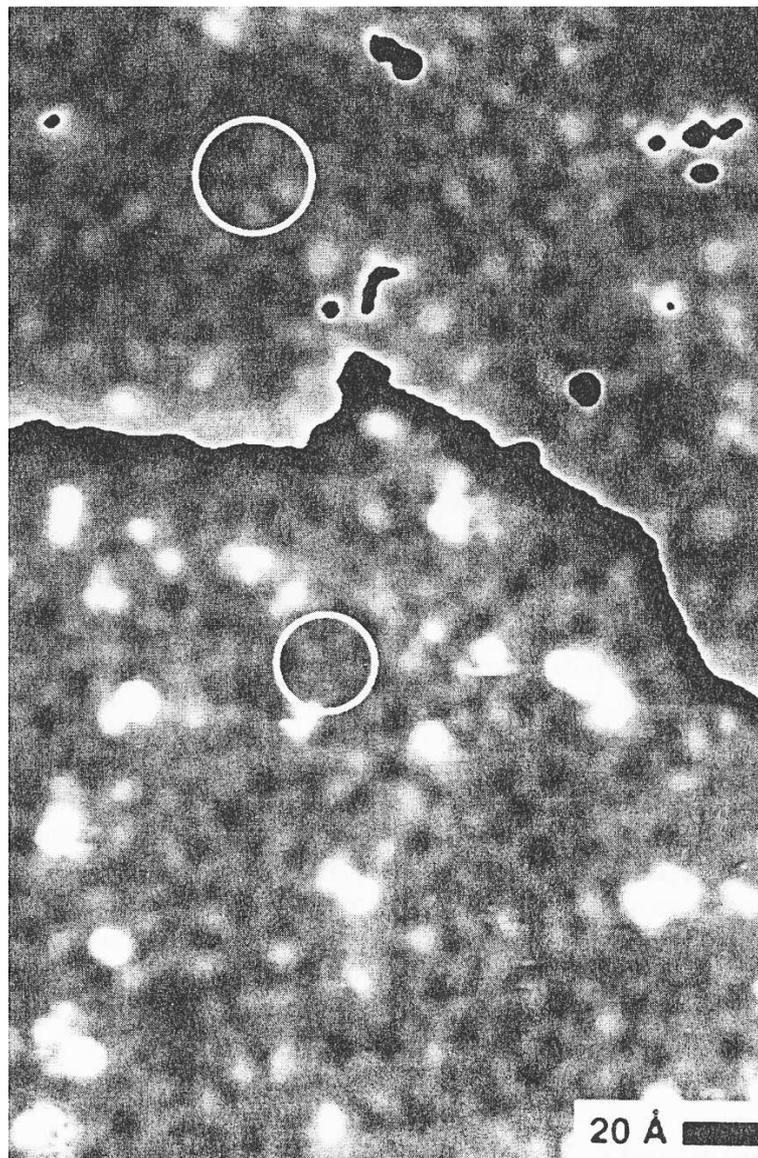


Abbildung 1.14: **STM-Aufnahme** zweier benachbarter Terrassen einer i-AlPdMn Oberfläche ([75] entnommen). Der Höhenunterschied beträgt etwa 4 Å. In den durch Kreisen markierten Regionen ist eine fünfzählige Symmetrie erkennbar. Die Stufe wurde durch weiße und schwarze Konturen hervorgehoben.



# Kapitel 2

## Bruchmechanik

Mechanische Eigenschaften von Materialien werden durch Ereignisse auf atomarer Ebene bestimmt. Versagt ein Material spröde, werden Bindungen zwischen Atomen gebrochen. Nichtsdestotrotz beruhen viele Theorien auf einem linear elastisch kontinuumsmechanischen Bild. Eine solche systematische Beschreibung erfolgte erst ab der ersten Hälfte des 20. Jahrhunderts, nachdem vermehrt durch Bruch verursachte technische Katastrophen auftraten, wie z.B. der Untergang der Titanic. An Ecken von Flugzeugfenstern bildeten sich Risse aus. Ungeeigneter Stahl führte zum Bruch von Schiffsrümpfen. Besonders anfällig hierfür waren amerikanische Liberty-Schiffe (vgl. Abbildung 2.1). Auch heute noch führt das Versagen von Materialien zu Tragödien, wie beispielsweise beim Absturz der Raumfähre Columbia. Einen Überblick über die Bruchmechanik liefern beispielsweise [83, 21].

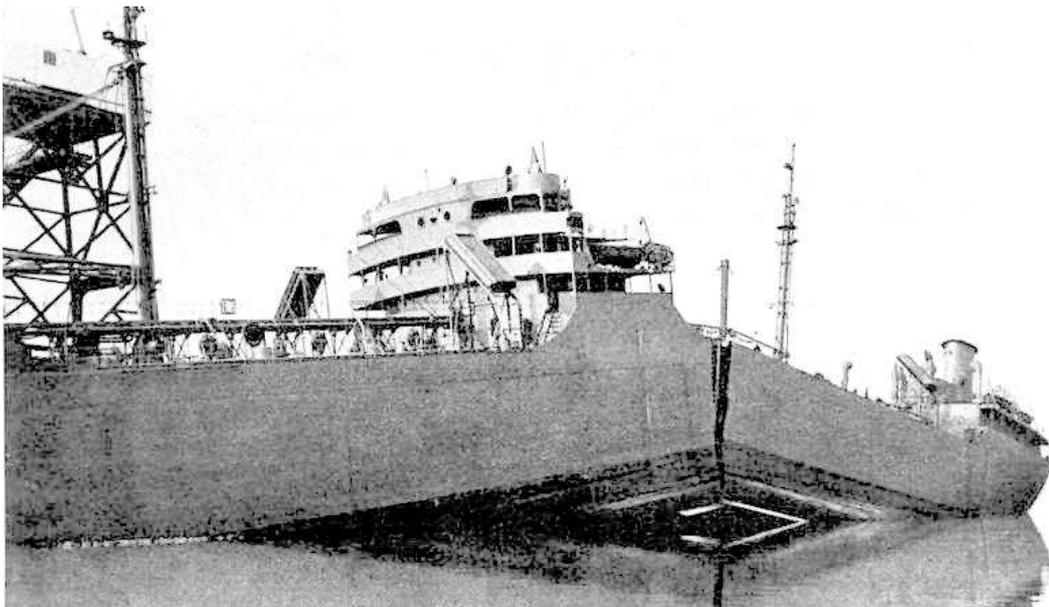


Abbildung 2.1: Der gebrochene Rumpf der S.S. Schenectady (siehe z.B. [102]).

## 2.1 Das Griffithkriterium

Breitet sich in einem Material ein Riss aus, so entstehen freie Oberflächen. Zur Erzeugung dieser Oberflächen muss Energie  $E_\gamma$  aufgebracht werden. Nach Griffith [25] ist Rissausbreitung nur möglich, wenn die Änderung der Differenz aus mechanischer Energie  $E_m$  und  $E_\gamma$  pro Breite  $b$  der Rissfront (vgl. Abbildung 2.2) für infinitesimalen Rissfortschritt  $dl$  positiv ist:

$$\frac{\partial}{\partial l} \left( \frac{E_m - E_\gamma}{b} \right) > 0. \quad (2.1)$$

Die Risslippe<sup>1</sup> in einem Material ist in Abbildung 2.2 schematisch dargestellt. Die durch Dehnung des Materials gespeicherte elastische Energie wird zum Brechen von Bindungen genutzt. Hierdurch entstehen eine obere und eine untere freie Oberfläche. Geht man davon aus, dass in weitem Abstand von der Rissfront die Auswirkungen auf den gedehnten und den durchgebrochenen Teil des Materials gering sind und vernachlässigt konkurrierende Prozesse oder Dissipation, kann man Gleichung 2.1 umformulieren. Die pro Oberfläche freigesetzte elastische Energie  $G$ , die sogenannte **Energiefreisetzungsrates**, muss größer als die Oberflächenenergie  $2\gamma$  der entstehenden freien Oberflächen sein:

$$G > 2\gamma. \quad (2.2)$$

Für die kritische Energiefreisetzungsrates  $G_{\text{krit}}$  gilt somit:

$$G_{\text{krit}} = 2\gamma. \quad (2.3)$$

Dies wird häufig als **Griffithkriterium** bezeichnet. Für  $G > G_{\text{krit}}$  ist ein Öffnen, für  $G < G_{\text{krit}}$  ein Schließen des Risses möglich.  $G = G_{\text{krit}}$  stellt ein instabiles Gleichgewicht dar.

## 2.2 Die linear elastische Theorie nach Irwin

Nach Irwin [43] kann jeder Belastungszustand eines Risses in **drei Grundmoden** zerlegt werden. Diese sind in Abbildung 2.3 dargestellt. Modus I führt zu einem Öffnungsbruch. Modus II entsteht bei Schubbelastung, Modus III bei Scherbelastung. In Anlehnung an die englischen Begriffe opening, sliding und tearing ergeben sich die deutschen Bezeichnungen als öffnend, gleitend und zerreißend. Da bei den Moden II und III die Bruchflächen nicht voneinander entfernt werden, sondern in Kontakt bleiben, hat Reibung zwischen diesen Flächen einen zusätzlichen Einfluss auf den Riss. Dieser wird in der hier vorgestellten Theorie nicht berücksichtigt. Die Rissimulationen in der vorliegenden Arbeit wurden mit Belastungen nach Modus I durchgeführt.

---

<sup>1</sup>Die obere und untere Bruchoberfläche, die an der Rissfront zusammenhängen — bzw. die diese Fläche begrenzenden Atome — wird im Folgenden als Risslippe bezeichnet.

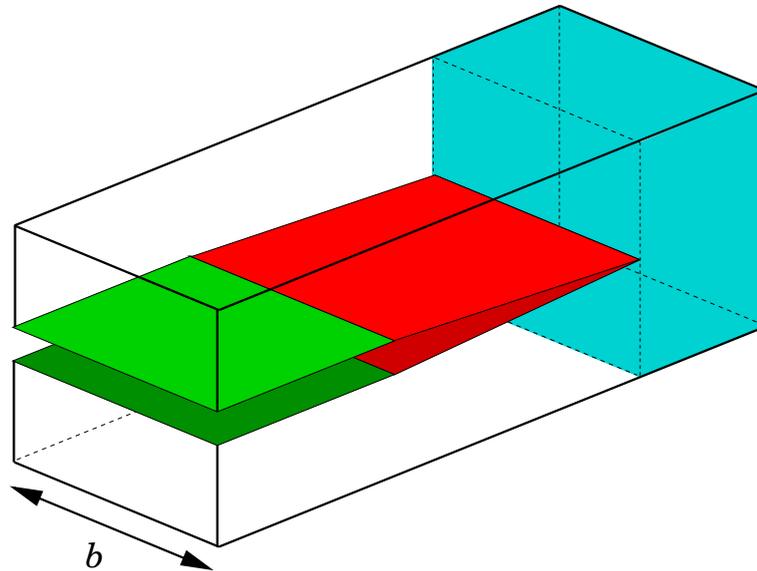


Abbildung 2.2: Schematisch dargestellt ist die Risslippe in einem Material, dessen Begrenzungen durch dicke Linien gekennzeichnet sind. Im türkis wiedergegebenen Gebiet ist durch Dehnung des Materials elastische Energie gespeichert. Diese dient dem Brechen von Bindungen. Im grün gekennzeichneten Gebiet sind eine obere und eine untere freie Oberfläche entstanden.

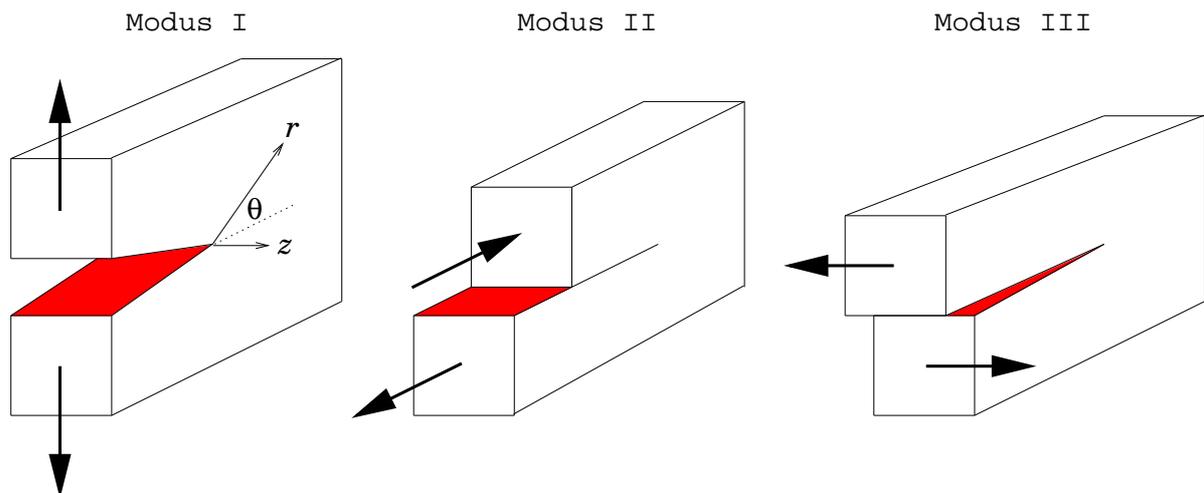


Abbildung 2.3: Die drei Grundmoden der Belastung eines Risses. Modus I führt zu einem Öffnungsbruch. Modus II ergibt sich für eine Schubbelastung, Modus III für eine Scherbelastung. Teile der Rissoberfläche sind rot gekennzeichnet. Die Pfeile zeigen die Richtungen der angelegten Spannungen an.

Die von Irwin berechneten Komponenten der Spannungstensoren  $T_{ij}$  und Verschiebungen  $u_i$  nehmen für den Modus  $m$  ( $m \in \{I, II, III\}$ ) für homogen isotrope Medien in Zylinderkoordinaten folgende Form an:

$$T_{ij}^m(r, \theta) = \frac{K^m}{\sqrt{r}} f_{ij}^m(\theta, \mu, \lambda), \quad (2.4)$$

$$u_i^m(r, \theta) = K^m \sqrt{r} g_i^m(\theta, \mu, \lambda). \quad (2.5)$$

Hierbei ist  $r$  der Abstand von der Risspitze und  $\theta$  der Winkel zwischen Rissebene und dem entsprechenden Ortsvektor  $\mathbf{r}$  (siehe Abbildung 2.3),  $\mu$  und  $\lambda$  sind die Laméschen Konstanten,  $i$  und  $j$  sind Elemente aus  $\{r, \theta, z\}$ . Die Koeffizienten  $f_{ij}^m$  und  $g_i^m$  hängen nur vom Winkel  $\theta$  und den Laméschen Konstanten ab. Die  $K^m$  heißen **Spannungsintensitätsfaktoren** der Moden  $m$ , sie sind linear in den von außen angelegten Spannungen und hängen zudem von der Proben-/Rissgeometrie ab. Die Energiefreisetzungsrate kann mit Hilfe der Spannungsintensitätsfaktoren ausgerechnet werden:

$$G = \sum_m h^m(\mu, \lambda) (K^m)^2. \quad (2.6)$$

Die Koeffizienten  $h^m$  hängen nur von  $\mu$  und  $\lambda$  ab, die Summe läuft über die beteiligten Moden. Eine Darstellung der Spannungs- und Verschiebungsfelder für die verschiedenen Moden bietet z.B. Thomson [83]. Die Gleichungen (2.4), (2.5) und (2.6) können aus den Formeln<sup>2</sup> für das lokale statische Gleichgewicht

$$f_i = \frac{\partial}{\partial x_j} T_{ij} = 0, \quad (2.7)$$

für das Hookesche Gesetz im isotrop homogenen Medium<sup>3</sup>

$$T_{ij} = 2\mu\epsilon_{ij} + \lambda\epsilon_{kk}\delta_{ij} \quad (2.8)$$

und für die Bedingungen für die Spannungen oder Verschiebungen an den Probenrändern abgeleitet werden.  $T_{ij}$  sind die Komponenten des Spannungstensors,  $f_i$  die Komponenten der Volumenkraftdichte. Eine Randbedingung wäre z.B., dass die Bruchoberfläche eine freie Oberfläche ist:

$$T_{ij}n_j = 0. \quad (2.9)$$

Hierbei sind  $n_j$  die Komponenten des Normalenvektors der freien Oberfläche. Zudem werden ebene Spannungs- oder ebene Dehnungszustände angesetzt<sup>4</sup>. Wenn die Dimension des Körpers in  $z$ -Richtung wesentlich kleiner als in den anderen Richtungen ist, kann ein **ebener Spannungszustand** angenommen werden. Das Spannungsfeld ist dann zwei-, das Verschiebungsfeld dreidimensional. Ist hingegen die Dimension des Körpers in  $z$ -Richtung wesentlich größer als in den anderen beiden Richtungen, kann ein **ebener Dehnungszustand** angenommen werden. Das Verschiebungsfeld ist hierbei zwei-, das Spannungsfeld dreidimensional. Dieses Vorgehen verdeutlicht Abbildung 2.4 für den Modus I.

<sup>2</sup>in kartesischen Koordinaten; für die folgenden Formeln gilt die Einsteinsche Summenkonvention

<sup>3</sup>mit  $\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i})$ , siehe Anhang A

<sup>4</sup>hierdurch reduziert sich das dreidimensionale auf ein quasi-zweidimensionales Problem

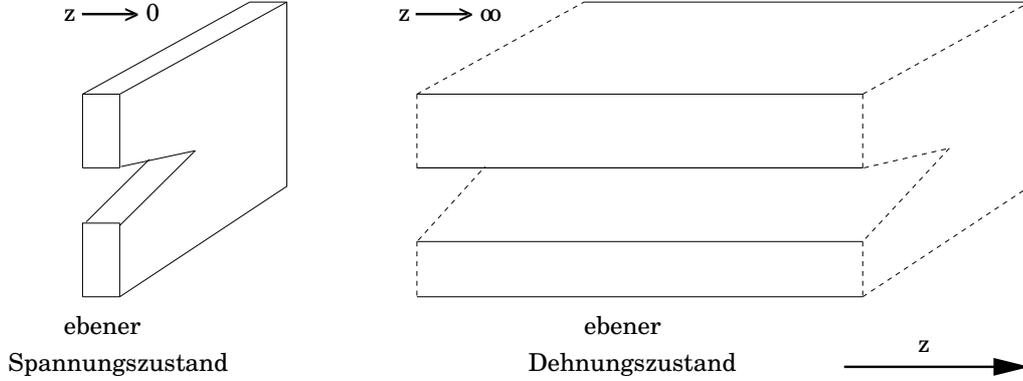


Abbildung 2.4: **Ebener Spannungszustand** und **ebener Dehnungszustand** für Modus I. Ist die Dimension des Körpers in  $z$ -Richtung wesentlich kleiner als in den anderen Richtungen, verschwinden die Spannungen in  $z$ -Richtung näherungsweise. Es liegt ein ebener Spannungszustand vor. Wenn dagegen die Dimension des Körpers in  $z$ -Richtung wesentlich größer als in den anderen beiden Richtungen ist, verschwinden die Verschiebungen in  $z$ -Richtung näherungsweise. Es liegt ein ebener Dehnungszustand vor.

Aufgrund periodischer Ränder<sup>5</sup> in  $z$ -Richtung gelten für die Simulationen dieser Arbeit näherungsweise die Gleichungen für **ebene Dehnungszustände im Modus I**:

$$T_{rr}^I = \frac{K^I}{\sqrt{2\pi r}} [\cos(\theta/2)(1 + \sin^2(\theta/2))], \quad (2.10)$$

$$T_{\theta\theta}^I = \frac{K^I}{\sqrt{2\pi r}} [\cos^3(\theta/2)], \quad (2.11)$$

$$T_{r\theta}^I = \frac{K^I}{\sqrt{2\pi r}} [\sin(\theta/2) \cos^2(\theta/2)], \quad (2.12)$$

$$T_{zz}^I = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)} (T_{rr}^I + T_{\theta\theta}^I), \quad (2.13)$$

$$T_{\theta z}^I = T_{rz}^I = 0, \quad (2.14)$$

$$G^I = \frac{1 - \nu^2(\lambda, \mu)}{E(\lambda, \mu)} (K^I)^2. \quad (2.15)$$

Für die Darstellung der Poissonzahl  $\nu$  und des Elastizitätsmoduls  $E$  durch die Laméschen Konstanten siehe Anhang A.  $K^I$  ist proportional zu der von außen angelegten Spannung. Die Komponenten des Spannungstensors aus den Gleichungen (2.10), (2.11) und (2.12) sind in Abbildung 2.5 als Funktion des Winkels  $\theta$  dargestellt.

<sup>5</sup>siehe Kapitel 3.6

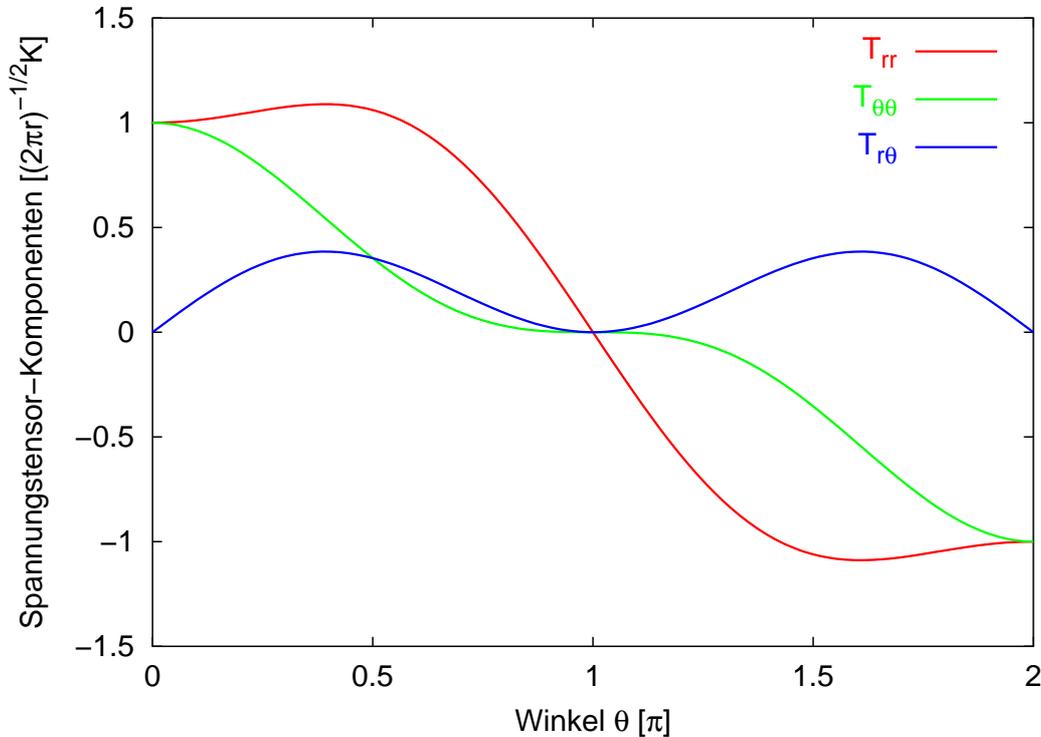


Abbildung 2.5: Die Komponenten des Spannungstensors in Einheiten von  $K^I/\sqrt{2\pi r}$  für den ebenen Dehnungszustand im Modus I. Die Kurven entsprechen den Gleichungen (2.10), (2.11) und (2.12) und sind in Abhängigkeit von  $\theta$  in Einheiten von  $\pi$  aufgetragen.

### 2.3 Spannungsverstärkung nach Inglis

Die Komponenten des Spannungstensor aus Kapitel 2.2 besitzen eine  $\frac{1}{\sqrt{r}}$  Singularität an der Rissspitze ( $r \rightarrow 0$ ). Die Spannungsintensitätsfaktoren, die ebenfalls in die Komponenten des Spannungstensors eingehen, charakterisieren die Stärke der Singularität im Spannungsfeld. Um diese Aussagen zu verdeutlichen, sind die von Inglis 1913 berechneten Gleichungen für ein statisches, elliptisches Loch in einem zweidimensionalen isotropen, linear elastischen Kontinuum hilfreich. Ein solches Loch ist in Abbildung 2.6 dargestellt. Die große Halbachse ist  $a$ , die kleine  $b$ . Am oberen und unteren Rand ist die Spannung  $\sigma_{\text{außen}}$  parallel zur kleinen Hauptachse angelegt. Die Lösung für die maximale Spannung enthält keine Singularität. Sie ergibt sich zu:

$$\sigma_{\max} = \sigma_{\text{außen}} \left( 1 + \frac{2a}{b} \right). \quad (2.16)$$

Mit Hilfe des Formalismus der konformen Abbildungen im zweidimensionalen Raum lassen sich Lösungen für beliebige Lochformen aus der Lösung für die Ellipse gewinnen. Für einen ebenen scharfen Riss folgt dann wie in Kapitel 2.2 eine  $\frac{1}{\sqrt{r}}$  Singularität an der Rissspitze. Ein endlicher Krümmungsradius des Risses verhindert somit die Singularität an der Rissspitze. Diese Tatsache wird von Mechanikern genutzt, um sich bildende Risse zu stoppen.

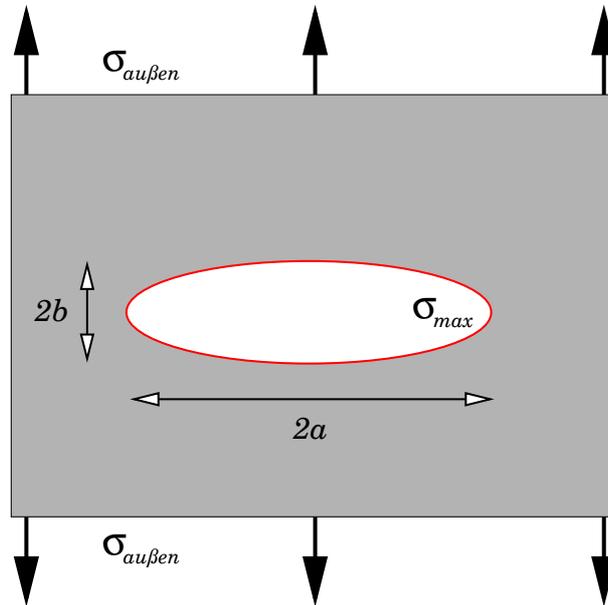


Abbildung 2.6: Ein statisches, **elliptisches Loch unter uniaxialem Zug nach Inglis**. Von außen ist die Spannung  $\sigma_{\text{au\ss en}}$  angelegt. An den Enden der großen Halbachsen nimmt die Spannung ihr Maximum an.

An der Risspitze bohren sie ein kleines Loch. Damit wird der minimale Krümmungsradius vergrößert und der Riss an der weiteren Ausbreitung gehindert.

Es ist zudem aus Gleichung (2.16) ersichtlich, dass die von außen angelegte Spannung um den Faktor  $1 + 2a/b$  verstärkt wird. Je länger und schmaler die Ellipse also wird, desto größer wird die Spannungsverstärkung.

## 2.4 Rissausbreitung

Die bis jetzt angegebenen Formeln gelten für statische Risse, bzw. sie zeigen auf, unter welchen Bedingungen sich ein Riss ausbreiten kann. Im dynamischen Fall der Rissausbreitung muss die kinetische Energie der beteiligten Teilchen bzw. Massen berücksichtigt werden. Diese tritt als zusätzlicher Term im Griffithkriterium (Gleichung (2.3)) in Erscheinung. Mott [65] gibt eine Abschätzung des Gebietes um den Riss, das bei der Berechnung dieser kinetischen Energie berücksichtigt werden muss. Diese Näherung liefert für die Rissgeschwindigkeit  $v_{\text{Riss}}$  folgende Formel:

$$v_{\text{Riss}} = v_{\text{max}} \left( 1 - \frac{l_0}{l} \right). \quad (2.17)$$

Hierbei ist  $l_0$  die Risslänge, ab der Rissausbreitung energetisch möglich wird<sup>6</sup>. Die aktuelle Länge des Risses ist  $l$ . Die Probengeometrie entspricht derjenigen aus Abbildung 2.6, wobei das Loch durch einen ebenen Riss der Länge  $l$  zu ersetzen ist. Der Riss wird also beschleunigen, bis er die maximale Rissgeschwindigkeit  $v_{\max}$  erreicht hat. Obwohl dieses Bild insgesamt zu einfach ist, zeigt es doch, dass eine **maximale Rissgeschwindigkeit** existieren muss. Da ein Riss einer starken Verformung einer freien Oberfläche entspricht, argumentierte Stroh [82], dass  $v_{\max}$  die Rayleigh-Geschwindigkeit<sup>7</sup>  $v_{\text{Rayleigh}}$  sein sollte,

$$v_{\max} = v_{\text{Rayleigh}}. \quad (2.19)$$

Dies ist die Geschwindigkeit, mit der sich Wellen auf einer freien Oberfläche ausbreiten.

Gleichung (2.17) erhält man auch als Näherung aus einer linear elastischen Rechnung nach Eshelby, Freund und Kostrov (siehe z.B. [21]) für den Modus I im ebenen Spannungszustand für einen ebenen scharfen Riss, der sich mit der Geschwindigkeit  $v_{\text{Riss}}$  bewegt. Eine weitere Konsequenz dieser Rechnung ist, dass sich **dynamische Spannungsintensitätsfaktoren** von statischen durch einen geschwindigkeitsabhängigen Faktor unterscheiden. Dieser führt dazu, dass für  $v_{\text{Riss}} \rightarrow v_{\text{Rayleigh}}$  die **dynamische Energiefreisetzungsrate** gegen null geht.

## 2.5 Die Yoffe Instabilität

Yoffe [91] berechnete 1951 die Komponente  $T_{\theta\theta}$  des Spannungstensors für den dynamischen Riss. Die statische Lösung für Modus I ist in Gleichung (2.11) wiedergegeben und in Abbildung 2.5 dargestellt.  $T_{\theta\theta}$  hat sein Maximum für  $\theta = 0$ . Da  $T_{\theta\theta}$  die Zugspannungskomponente in Zylinderkoordinaten darstellt, ist anzunehmen, dass der Riss dieser Richtung folgt. Für einen Riss mit konstanter Geschwindigkeit ab

$$v_{\text{Yoffe}} \approx 0.6v_{\text{T}} \quad (2.20)$$

verschiebt sich das Maximum von  $T_{\theta\theta}$  im Nahfeld der Risspitze zu Winkeln von  $\pm 60^\circ$ . Hierbei ist  $v_{\text{T}}$  die Ausbreitungsgeschwindigkeit transversaler elastischer Wellen. Demnach müsste für Rissgeschwindigkeiten, die größer als  $v_{\text{Yoffe}}$  sind, die Rissausbreitung instabil sein. Ein Verzweigen des Risses wird dann möglich. Dieser Effekt wurde experimentell jedoch bereits bei geringeren Geschwindigkeiten und kleineren Winkeln beobachtet.

---

<sup>6</sup>Hierbei sollte beachtet werden, dass  $l_0$  ebenfalls von  $v_{\text{Riss}}$  abhängen kann.

<sup>7</sup>Eine gute Näherung für  $v_{\text{Rayleigh}}$  ist [1]:

$$v_{\text{Rayleigh}} = \frac{0.862 + 1.14\nu}{1 + \nu} v_{\text{T}}. \quad (2.18)$$

Hierbei ist  $v_{\text{T}}$  die Ausbreitungsgeschwindigkeit transversaler elastischer Wellen und  $\nu$  die Poissonzahl (siehe Anhang A).

## 2.6 Atomistische Effekte

Wie bereits in der Einleitung erwähnt wurde, bestimmen Prozesse auf atomarer Ebene das mechanische Verhalten der Materie. Die atomistische Struktur bleibt in der kontinuumsmechanischen Behandlung der Bruchmechanik jedoch unberücksichtigt. Darum gibt es Effekte, die von ihr nicht erklärt werden können. Zudem sind bei der Bildung von Rissen die Voraussetzungen der linear elastischen Theorien nicht mehr gegeben. Das Brechen von Bindungen kann sicherlich nicht mehr durch ein linearisiertes Kraftgesetz wiedergegeben werden. Das Versagen jener Theorien in der Nähe der Rissfront zeigt sich auch durch das Vorhandensein der  $\sqrt{\frac{1}{r}}$  Singularitäten der Komponenten des Spannungstensors in Gleichung (2.4). Die diskrete Natur der Materie äußert sich zudem in physikalischen Größen, wie beispielsweise in der für den Rissfortschritt notwendigen Energie. Dies vergegenwärtigt Abbildung 2.7. Die als schwarze Scheiben gekennzeichneten Atome wechselwirken miteinander. Eine stark idealisierte Bruchbewegung ergibt sich, wenn man annimmt, dass die gesamte Bindungsenergie aufzuwenden ist, sobald man auf eine Bindung trifft. Die für den Rissfortschritt benötigte Energie weist dann bei jeder Bindung einen Sprung auf, wenn sie gegen die Rissposition aufgetragen wird. Zwischen den Bindungen bleibt die Energie näherungsweise konstant, was in Abbildung 2.7 unten links durch die grüne Kurve dargestellt ist. Das Resultat widerspricht dem kontinuumsmechanischen Bild nach Griffith. Dort führt eine konstante Oberflächenenergie zu einer linear ansteigenden Energie (im unteren linken Teilbild von Abbildung 2.7 in rot dargestellt). Ein realistischeres Modell, das die elastische Dehnung berücksichtigt, liefert die in Abbildung 2.7 blau eingezeichnete Kurve. Es zeigt sich somit, dass die diskrete Natur der Materie sowie die Wahl der Potentiale einen wesentlichen Einfluss in der Nähe der Rissfront auf den Riss haben. Dies äußert sich im “**Lattice Trapping**” und dem Vorhandensein einer **minimalen Rissgeschwindigkeit**.

### 2.6.1 Lattice Trapping

Thomson [84] berichtete 1971, dass aufgrund des diskreten Charakters eines Kristallgitters Risse in einem Bereich über- und unterhalb der Griffithlast stabil bleiben. Diesen Effekt nannte er “Lattice Trapping”. Er kann mit Hilfe der Oberflächenenergie verdeutlicht werden. Leitet man die in Abbildung 2.7 links unten wiedergegebene Energie nach der Rissposition ab und teilt dann durch die Probenbreite, erhält man die Oberflächenenergie (in Abbildung 2.7 unten rechts dargestellt). Sie ist im kontinuumsmechanischen Bild nach Griffith konstant. Für das Gitter ergeben sich jedoch Maxima  $\gamma_{\max}$  und Minima  $\gamma_{\min}$ , die einen Bereich definieren, in dem der Riss stabil ist. Die Maxima und Minima variieren mit dem angesetzten Potential bzw. Kraftgesetz. Da die Extrema hauptsächlich von den Bindungen abhängen, die sich in der Nähe der Rissfront befinden, ist das Lattice Trapping nicht auf Kristalle beschränkt. Konsequenzen des Lattice Trapping sind, dass sich verschiedene Ausbreitungsrichtungen des Risses in derselben Ebene unterschiedlich verhalten können und dass Risse nicht zwangsläufig zu Oberflächen mit niedrigster Energie führen müssen [28, 26].

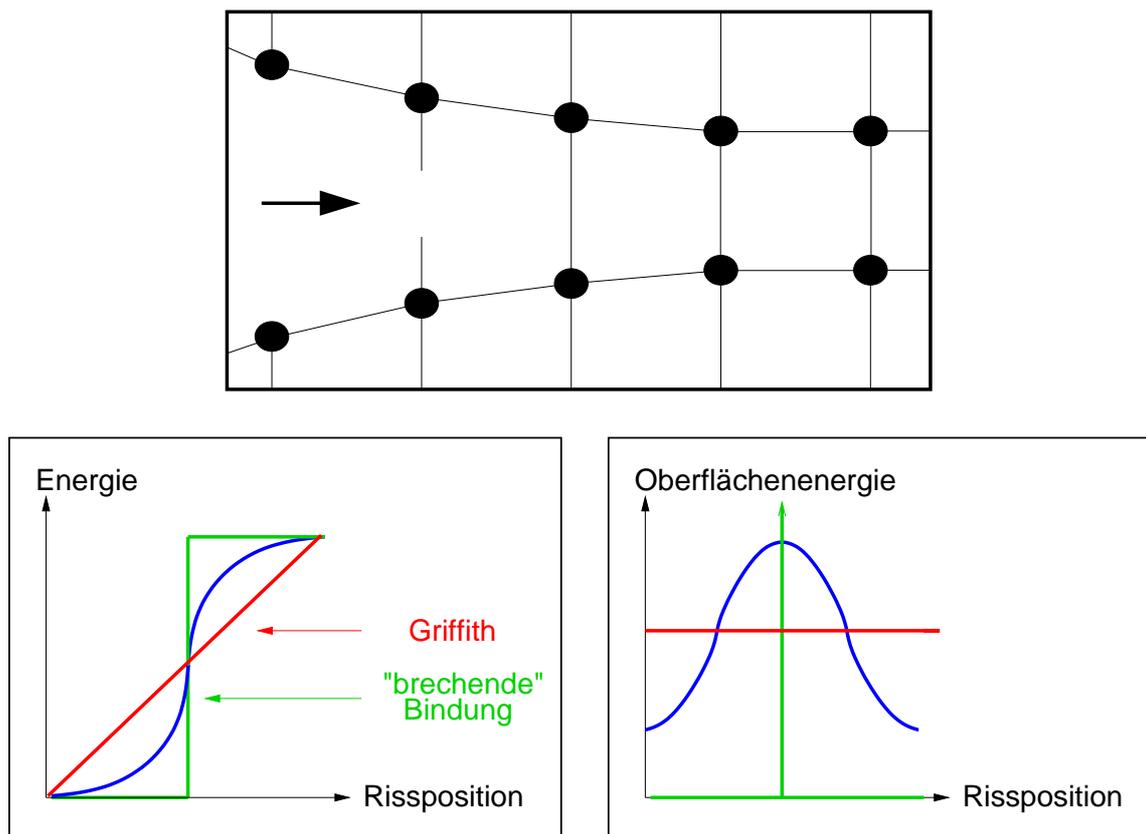


Abbildung 2.7: Der Einfluss der diskreten Natur der Materie auf die für den Rissfortschritt benötigte Energie. Oben sind die Atome als schwarze Scheiben wiedergegeben. Die Wechselwirkungen sind durch schwarze Linien angedeutet. Eine idealisierte brechende Bindung führt zu dem im linken unteren Teilbild in grün wiedergegebenen Verlauf der für den Rissfortschritt benötigten Energie. Nach Griffith führt eine konstante Oberflächenenergie zu einer linear ansteigenden Energie (links unten in rot dargestellt). Ein realistischeres Modell liefert die blau eingezeichnete Kurve. Leitet man die links unten wiedergegebene Energie nach der Rissposition ab und teilt dann durch die Probenbreite, erhält man die Oberflächenenergie (unten rechts dargestellt). Diese ist im kontinuumsmechanischen Bild nach Griffith (rot eingezeichnet) konstant. Für das idealisierte Gitter ergibt sich ein Delta-Peak (grün dargestellt). Das realistischeres Modell ergibt Maxima  $\gamma_{\max}$  und Minima  $\gamma_{\min}$ , die einen Bereich definieren, in dem der Riss stabil ist (blau eingezeichnet).

### 2.6.2 Minimale Rissgeschwindigkeit

Aus Molekulardynamiksimulationen<sup>8</sup> ergibt sich für die Rissgeschwindigkeiten ein verbotener Bereich. Unterhalb einer minimalen Rissgeschwindigkeit existieren keine Risse mit konstanter Ausbreitungsgeschwindigkeit. Marder [59] führt den verbotenen Geschwindigkeitsbereich auf “schnell brechende Bindungen” zurück. Der dynamische Rissfortschritt erzeugt eine Kaskade brechender Bindungen, wie in Abbildung 2.8 dargestellt. Bricht die Bindung zwischen zwei Atomen (in Abbildung 2.8 links grün und blau hervorgehoben), schwingen die Atome und emittieren Phononen. Damit wird die lokal gespeicherte Energie verringert. Um das Brechen der nächsten Bindung (rechtes Teilbild in Abbildung 2.8) zu gewährleisten, muss sich der Riss mindestens so schnell bewegen, dass die Abnahme der lokal gespeicherten Energie den Rissfortschritt nicht verhindert.

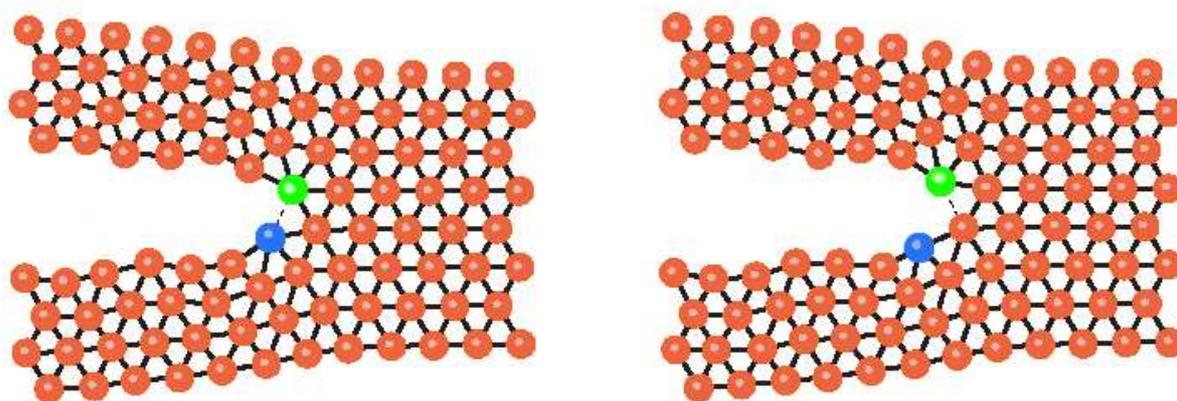


Abbildung 2.8: Der dynamische Rissfortschritt erzeugt eine Kaskade brechender Bindungen. Das ist jedoch nur möglich, wenn sich der Riss mindestens so schnell bewegt, dass die Energieabnahme durch Phononenemission den Rissfortschritt nicht verhindert. Die Abbildung ist [59] entnommen.

### 2.6.3 Das Einstein Modell

Holian [38] stellte 1996 ein minimales nichtlineares Modell — das “**Einstein ice-skater**” (EIS) Modell — für den Rissfortschritt in spröden Materialien vor. Hierzu benutzte er nur die Bewegung des Atoms an der Rissspitze. Das Modell wird durch Abbildung 2.9 verdeutlicht. Zwischen zwei dicht gepackten Ebenen (Linien in 2D, rot dargestellte Atome in Abbildung 2.9) kommt es zum Brechen von Bindungen. Diese Ereignisse sind zeitlich getrennt und definieren eine Zickzack-Bewegung zwischen den beiden Ebenen (Linien in 2D) von Atomen, die einem Schlittschuhlauf auf dem Eis ähnelt. Wenn eine Bindung bricht (in Abbildung 2.9 blau dargestellt), bewegt sich das Atom an der Rissspitze (2D, in Abbildung 2.9 als blaues Scheibchen mit schwarzem Rand dargestellt) ungefähr entlang der

<sup>8</sup>siehe Kapitel 3

Richtung der gebrochenen Bindung (in Abbildung 2.9 durch einen schwarzen Pfeil gekennzeichnet). Das andere Atom schwingt zu seiner Gleichgewichtsposition. Als Näherung wird nun die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Risses nur durch die Bewegung des Atoms an der Risspitze (das EIS-Atom) im Feld der sechs unbeweglichen Nachbaratome beschrieben. Bewegt sich das EIS-Atom entlang der alten Bindungsrichtung, wird bei genügender Dehnung nach einer gewissen Zeit eine weitere Bindung (in Abbildung 2.9 die Bindung zwischen EIS-Atom und Atom 1) gebrochen. Mit Hilfe von Paarpotentialen mit definiertem Bruchabstand kann aus diesem Modell die Rissgeschwindigkeit berechnet werden. Diese Rechnungen zeigen eine gute Übereinstimmung mit Molekulardynamiksimulationen. Das Lattice Trapping, sowie das qualitative Verhalten der Rissgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Dehnung (siehe hierzu auch [60]) ergeben sich direkt aus diesem einfachen Modell.

## 2.7 Sprödeheit und Duktilität

Bis zu diesem Kapitel wurde nur der spröde Bruch behandelt. Die im Material gespeicherte elastische Energie lieferte die zur Generierung von freien Oberflächen notwendige Energie. Bei dynamischen Rissen musste die kinetische Energie berücksichtigt werden. Eine konstante Energiefreisetzungsrates führte zu Rissen, die sich mit einer konstanten Geschwindigkeit bewegen können. Dissipation wurde in Kapitel 2.6.2 maximal in Form von Phononen berücksichtigt. Bei höheren Rissgeschwindigkeiten und äußeren Lasten konnte es zu Instabilitäten kommen. Risse können sich dann verzweigen, und die von der linearen Elastizitätstheorie vorausgesagte maximale Rissgeschwindigkeit kann nicht erreicht werden. Experimente zeigen, dass die Rissoberfläche dann rauer wird. Zudem ist es möglich, dass sich vor dem Riss Hohlräume bilden. Die Rauigkeit der Rissoberfläche wird experimentell in drei Regime unterteilt: Mirror (spiegelglatt), Mist (verschommen, rau) und Hackle (zerfetzt, extrem rau).

Die plastische Deformation steht in Konkurrenz zum spröden Bruch und kann bei hohen Lasten und Temperaturen auch in ansonsten spröden Materialien auftreten. Versetzungen behindern den Rissfortschritt auf dreierlei Weise. Sie dissipieren Energie, wenn sie vom Riss emittiert werden. Durch die Versetzung wird das Spannungsfeld an der Rissfront abgeschirmt. Außerdem kann die Versetzungsemission dazu führen, dass der Riss abstumpft<sup>9</sup>.

### 2.7.1 Versetzungen

Dieses Kapitel gibt in kurzer Form grundlegende Erkenntnisse der Versetzungstheorie wieder. Eine umfassende Behandlung findet sich beispielsweise in [36].

Legt man an einen Kristall eine äußere Spannung  $\sigma$  und misst dabei die auftretende Verzerung  $\epsilon$ , erhält man eine **Spannungs-Dehnungs-Beziehung**. Diese weist im Allgemeinen

---

<sup>9</sup>siehe hierzu Kapitel 2.3

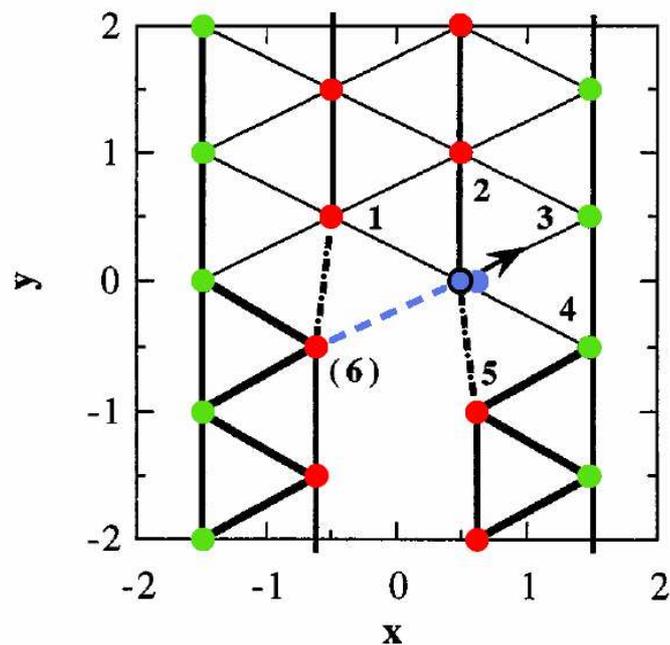


Abbildung 2.9: Ausgangskonfiguration eines Risses in einem Streifen eines Gitters aus Dreiecken, [38] entnommen. Die als grüne Scheibchen dargestellten Atome werden festgehalten, während die als rote Scheibchen dargestellten Atome frei beweglich sind. Dicke Linien kennzeichnen Bindungen mit dem Gleichgewichtsabstand. Strichpunktierte Linien zeigen schwach gedehnte Bindungen an. Dünne Linien stellen elastisch vorgedehnte Bindungen dar. Das **Einstein ice-skater** (EIS) Modell beschreibt als Näherung die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Risses nur durch die Bewegung des Atoms an der Risspitze (das als blaue Scheibchen mit schwarzem Rand dargestellte EIS-Atom) im Feld der sechs als unbeweglich angenommenen Nachbaratome. Die blau gestrichelt dargestellte Bindung ist soeben gebrochen. Das EIS-Atom bewegt sich ungefähr in Pfeilrichtung und dehnt dabei die Bindung zu Nachbar 1 bis zum Bruch. Danach nimmt es die blau eingezeichnete Gleichgewichtslage ein.

drei charakteristische Bereiche auf. Bei kleinen Verzerrungen ist die äußere Spannung proportional zur Verzerrung, dies ist der reversibel **elastische Bereich**. Ihm schließt sich der Bereich der **plastischen Verformung** an. Hierbei wachsen die Spannungen nicht mit der Dehnung und die Deformation ist irreversibel. Für noch größere Verzerrungen steigt die Spannung sehr stark an, bis das Material versagt. Ein Ausbleiben der **Verfestigung** nennt man **Superplastizität**. Die irreversible plastische Verformung von Kristallen wird durch Versetzungen bestimmt. Eine Art der Versetzung ist die **Stufenversetzung** (in Abbildung 2.10 im linken Teilbild dargestellt). Man kann sie sich durch einen **Volterra-Prozess** entstanden denken. Hierbei wird eine zusätzliche Halbebene von Atomen in eine Hälfte des Kristalls eingeschoben. Das eingeschobene Ende dieser Ebene definiert hierbei die **Versetzungslinie**. Durch Anlegen einer äußeren Spannung wandert sie durch den Kristall, die Versetzungen **gleiten**. Hiermit kann die charakteristische Spannungs-Dehnungs-Beziehung verstanden werden. Im elastischen Bereich bewirken kleine Auslenkungen der Atome aus ihren Gleichgewichtspositionen eine reversible Verformung, im irreversiblen Bereich kommt es zu plastischem Fließen durch Versetzungen. Im Verfestigungsbereich behindern sich die Versetzungen gegenseitig. Ein weiterer Typ der Versetzung ist die **Schraubversetzung** (in Abbildung 2.10 im rechten Teilbild dargestellt). Die Grenze zwischen abgeglittenem und nicht abgeglittenem Material liegt bei der Schraubversetzung parallel zur Gleitrichtung und nicht senkrecht dazu, wie bei der Stufenversetzung. Die Schraubversetzung transformiert aufeinanderfolgende Ebenen auf die Oberfläche einer Helix, wodurch sie ih-

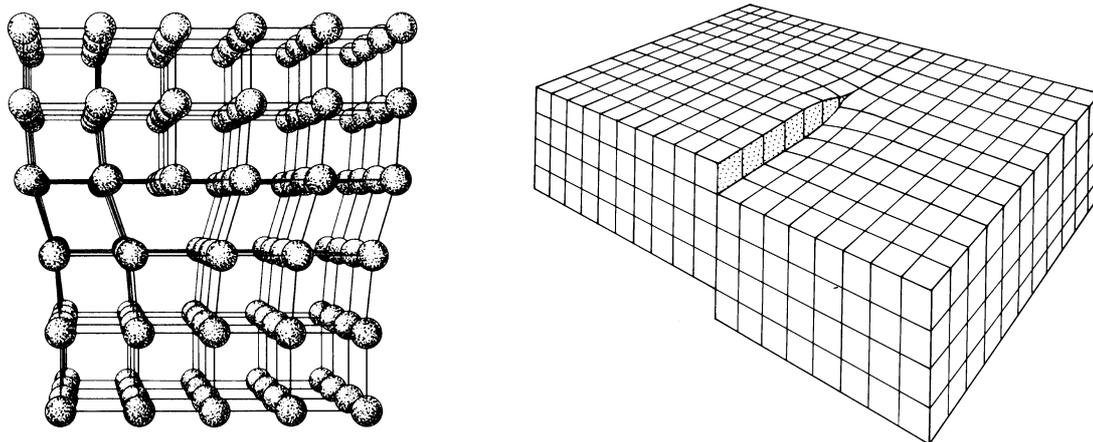


Abbildung 2.10: Man kann sich die **Stufenversetzung (linkes Teilbild)** durch Einschieben einer zusätzlichen Gitterebene in der oberen Hälfte des gezeigten Kristalls entstanden denken. Hierdurch werden die Atome in der oberen Kristallhälfte zusammengedrängt, die in der unteren Hälfte auseinandergezogen (aus [52]). Die **Schraubversetzung (rechtes Teilbild)** kann man sich als spiralförmige Anordnung von Gitterebenen vorstellen, auf denen nach einem Umlauf um die Versetzungslinie die nächste Ebene erreicht wird (aus [36]).

ren Namen erhalten hat. Andere Versetzungsformen kann man dadurch beschreiben, dass man einen Schnitt durch einen Kristall betrachtet, der durch eine beliebige geschlossene oder eine offene Kurve, die an den Kristalloberflächen endet, begrenzt wird. Nun verschiebt man das Material auf einer Seite dieser Fläche um einen Vektor  $\mathbf{b}$  relativ zur anderen Seite und entfernt bzw. fügt Material hinzu, so dass weder eine Überlappung noch eine Lücke entsteht. Fügt man das Material wieder zusammen und lässt es relaxieren, wird die sich einstellende Versetzung durch die Begrenzungslinie und den Vektor  $\mathbf{b}$ , den **Burgersvektor** bestimmt. Der Burgersvektor einer reinen Stufenversetzung ist senkrecht zur Versetzungslinie, derjenige einer reinen Schraubenversetzung dagegen parallel zur Versetzungslinie. Der Burgersvektor lässt sich<sup>10</sup> durch einen Burgersumlauf bestimmen. Das Umlaufintegral des Verschiebungsfeldes über eine geschlossene Kurve, die die Versetzungslinie umschließt, liefert hierbei den Burgersvektor. Hieraus folgt, dass sich Burgersvektoren additiv verhalten. Ist der Burgersvektor kein ganzzahliges Vielfaches einer Gittertranslation, handelt es sich um eine **Partialversetzung**.

Aus der linearen Elastizitätstheorie lassen sich die Komponenten des Spannungstensors für eine unendlich lange Stufenversetzung und eine Schraubenversetzung herleiten, für sie gelten:

$$T_{ij} \propto -\frac{b}{r}. \quad (2.21)$$

Der Betrag des Burgersvektors ist  $b$ , der Abstand von der Versetzungslinie  $r$ . Die elastische Energie pro Längeneinheit lässt sich ausrechnen, wenn man einen inneren und äußeren Abschneideradius definiert. Sie ist proportional zu  $b^2$ . Der die Versetzungslinie umschließende Bereich wird **Versetzungskern** genannt. Seine Energie kann durch atomistische Rechnungen bestimmt werden. Die in einem Kristall insgesamt auftretende Spannung setzt sich aus den Selbstspannungen der Versetzungen, aus äußeren und inneren Spannungen im Material zusammen. Freie Oberflächen können durch "Spiegelspannungen" (siehe Kapitel 2.7.2) berücksichtigt werden. Für das Gleiten einer Versetzung muss die atomistische Struktur des Versetzungskerns berücksichtigt werden. Ein solches Modell wurde von Peierls und Nabarro entwickelt. Der rein elastische Beitrag zur Kraft wird durch die Peach-Koehler-Gleichung beschrieben. Eine Bewegung senkrecht zur Gleitebene ist nicht konservativ und wird **klettern** genannt. Sie ist nur möglich, wenn Leerstellen vorhanden sind, und ist von diffusiver Natur.

**Versetzungen in ikosaedrischen Quasikristallen** lassen sich mit Hilfe eines sechsdimensionalen Burgersvektors beschreiben (siehe z.B. [89]). Dieser lässt sich in eine phasonische und eine phasonische Komponente zerlegen. Aufgrund der langen Relaxationszeiten der phasonischen Komponenten des Verzerrungsfeldes sollte die Beweglichkeit der Versetzungen in Quasikristallen geringer sein als in Kristallen. Die Versetzungsemission wird erschwert. Diese Tatsache vergegenwärtigt Abbildung 2.11. Die Verschiebung zweier

---

<sup>10</sup>eindeutig, wenn man festlegt, dass der Burgersvektor und die Versetzungslinie ein Rechtssystem bilden sollen

Kristallhälften gegeneinander hinterlässt einen perfekt rekonstruierten Kristall, während in einem Quasikristall aufgrund der quasiperiodischen Abfolge der Quasiebenen immer Stapelfehler entstehen.

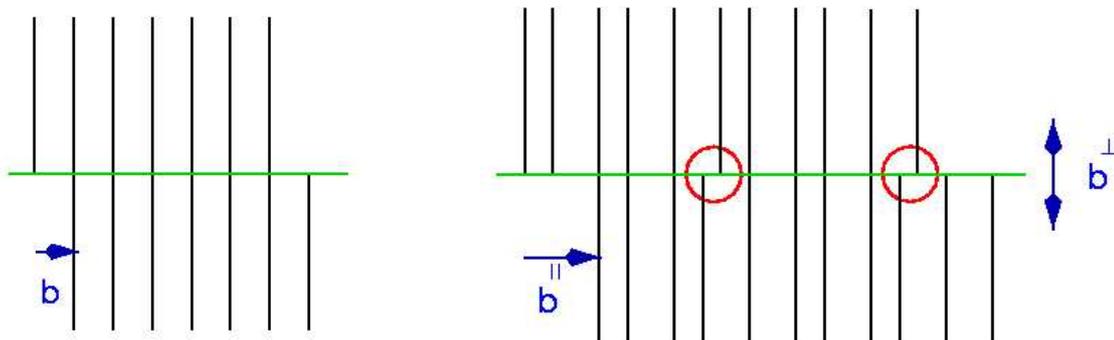


Abbildung 2.11: **Links:** Nach dem Gleitprozess ist aus einem Kristall wiederum ein perfekt rekonstruierter Kristall entstanden. **Rechts:** Ein Burgersvektor  $\mathbf{b}^{\parallel}$  im physikalischen Raum in einem Quasikristall führt zu einem Stapelfehler. Die Abbildung ist [72] entnommen. Linien kennzeichnen die (Quasi-)Ebenen. Die Orthogonalraumkomponente ist für die Dichte der rot markierten Phasonenflips (siehe Kapitel 1.4.1) verantwortlich. Die hierdurch mögliche Verschiebung der rot gekennzeichneten Bereiche durch Flips ist durch den Doppelpfeil wiedergegeben.

## 2.7.2 Risse und Versetzungen

Wie bereits in Kapitel 2.7.1 erwähnt, setzt sich die insgesamt auftretende Spannung aus den Selbstspannungen der Versetzungen sowie aus den äußeren und den inneren Spannungen im Material zusammen. Hierbei können Spannungsbeiträge auch durch ein Rissfeld verursacht werden. Freie Oberflächen können durch Spiegelspannungen berücksichtigt werden. Diese bewirken, dass die Orthogonalkomponenten der Spannung auf den freien Oberflächen verschwinden. Berechnet man so die Spannung in der Nähe einer Rissfront, zeigt sich, dass die Spannungsintensitätsfaktoren gegenüber einer Konfiguration ohne Versetzungen verringert werden können. Dieser Effekt wird **Abschirmung** (engl.: shielding) genannt.

Ist der Spannungsintensitätsfaktor an der Rissfront groß genug, um spröden Bruch zu initiieren, dann können die Scherspannungen dort ebenfalls im Bereich sein, um Versetzungsnukleation zu ermöglichen. Darum wird im Folgenden der Unterschied zwischen sprödem und duktilem Verhalten untersucht.

- Kelly [51] unterschied spröde und duktile Materialien anhand des Verhältnisses der vom Material maximal verkräfteten Zug- und Scherspannung. Ist dieses kleiner als

das Verhältnis der Zug- und Scherspannung an der Rissfront, versagt das Material nach Kelly spröde.

- **Rice und Thomson** [70] analysierten den Übergang zwischen sprödem und duktilem Verhalten mit Hilfe eines Versetzungsmodells. Sie berechneten die Kräfte zwischen einem Riss und einer Versetzung. Hierbei berücksichtigten sie die Kraft, die durch das Spannungsfeld des Risses auf die Versetzung wirkt, die durch die Spiegelspannung verursachte Kraft, sowie die durch die Entstehung einer Stufe an der Rissfront hervorgerufene Kraft. Hierdurch kommt der Abschneideradius des Kerns ins Spiel. Der Abstand einer Versetzung von einer Rissfront, bei der sich beide in einem instabilen Gleichgewicht befinden, kann nun bestimmt werden. Wenn dieser Abstand kleiner als der Abschneideradius ist, ist nach Rice spontane Versetzungsemission möglich. Ist der Abstand größer, muss zur Versetzungsemission eine Energiebarriere überwunden werden. Das Problem dieser Theorie besteht in der Bestimmung des Abschneideradius. Zur Bestätigung ihrer zweidimensionalen Rechnung berechneten Rice und Thomson anschließend die Energie einer von einem Riss emittierten Versetzungsschleife in einer elastischen dreidimensionalen Beschreibung. Sie erhielten hierbei auch zwei grundsätzlich verschiedene Bereiche. Einen, in dem Versetzungsemission spontan möglich ist, und einen, in dem eine Energiebarriere überwunden werden muss.
- **Rice** [69] umging das Problem des Abschneideradius mit Hilfe des Peierlskonzeptes. Hierzu setzte er ein periodisches Verhalten der Scherspannung mit der Verschiebung an. Als neuen Parameter erhielt er damit die **instabile Stapelenergie**  $\gamma_{us}$  (engl.: unstable stacking energy) pro Einheitsfläche. Diese charakterisiert den Widerstand gegen die Nukleation einer Versetzung und ist durch atomistische Rechnungen oder Simulationen zugänglich. Die Fläche unter einem Scherspannungs-Verschiebungsdiagramm vom Verschiebungsnullpunkt bis zur Verschiebung, bei der die Scherspannung wieder verschwindet, definiert  $\gamma_{us}$ . Die für eine Versetzungsnukleation kritischen Spannungsintensitätsfaktoren sind proportional zu  $\sqrt{\gamma_{us}}$ . Für einen Modus I Riss, für den die Versetzungsebene die Rissfront enthält (Fall c in Abbildung 2.12), leitete Rice folgende Ungleichung als Nukleationsbedingung ab:

$$\frac{\gamma}{\gamma_{us}} > S(\nu, \theta, \phi). \quad (2.22)$$

Hierbei ist  $\gamma$  die Oberflächenenergie und  $S$  eine Funktion, die vom Winkel  $\theta$  zwischen Bruch- und Versetzungsebene, vom Winkel  $90^\circ - \phi$  zwischen Burgersvektor und Richtung der Rissfront und von der Poissonzahl  $\nu$  abhängt. Allerdings ändert sich die Funktion  $S$  mit geringen Abweichungen vom Modus I. Das Verhältnis  $\frac{\gamma}{\gamma_{us}}$  wurde z.B. in [20] berechnet, und die Vorhersagen des Rice-Kriteriums mit Simulationsergebnissen verglichen.

Die Scherkomponente des Spannungstensors  $T_{r\theta}^I$  aus Gleichung (2.12) und Abbildung 2.5 hat ihr Maximum bei ungefähr  $70^\circ$ . Berücksichtigt man den Einfluss der Schubspannungs-

komponente, wird der für Versetzungsnukleation wahrscheinlichste Winkel etwas in Richtung kleinerer Winkel hin verschoben. Allerdings ist im Bereich von etwa  $30^\circ - 120^\circ$  ein breites Maximum der Scherspannung vorhanden. Ebenen mit niedrigen Werten von  $\gamma_{us}$  in diesem Steigungsintervall sind also mögliche Kandidaten für die Versetzungsnukleation im ebenen Dehnungszustand im Rissmodus I (siehe hierzu auch Abbildung 2.13). Der Übergang zwischen sprödem Bruch und duktilem Verhalten ist erreicht, wenn sich Versetzungen bilden und von der Rissfront entfernen können (siehe z.B. [27, 4]). Der Einfluss des Abstumpfens des Risses auf den spröde-duktilen Übergang wurde mit Hilfe einer Kontinuumsbeschreibung von Beltz [6] untersucht. Die Emission von Versetzungsschleifen von Rissen in Computersimulationen wurde erstmals von Zhou [92] beschrieben.

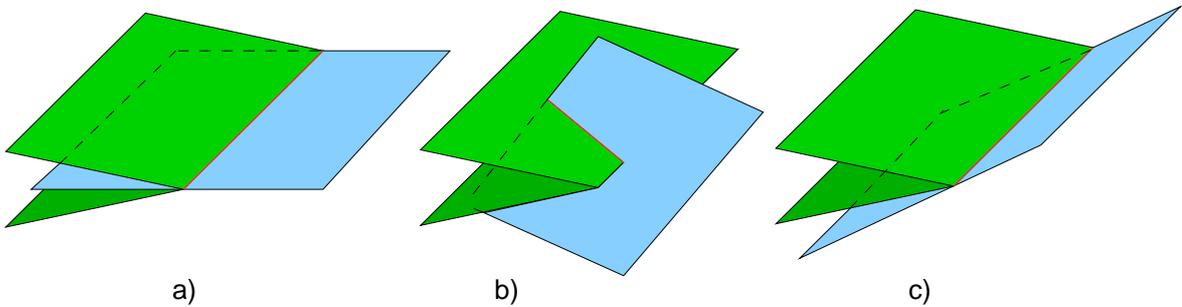


Abbildung 2.12: Mögliche Lagen der Versetzungsebene relativ zur Bruchebene: **a)** die Bruchebene fällt mit der Versetzungsebene zusammen (engl.: in-plane), **b)** die Versetzungsebene enthält die Rissfront nicht (engl.: oblique), **c)** die Versetzungsebene enthält die Rissfront (engl.: inclined). Die Risslippen sind grün dargestellt, die Versetzungsebenen hellblau.

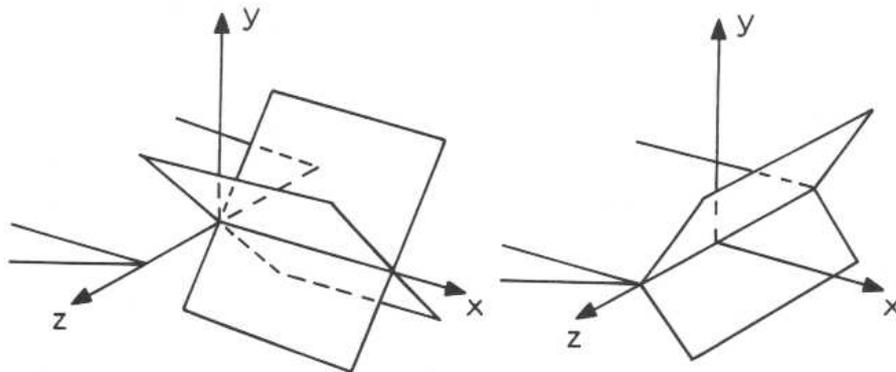


Abbildung 2.13: Lage der Ebenen mit maximaler Scherspannung in der Umgebung der Rissfront in der Rissebene (aus [8]). **Links:** ebener Spannungszustand, **rechts:** ebener Dehnungszustand. Die Rissfront liegt auf der  $z$ -Achse. Die Rissebene ist die  $x$ - $z$ -Ebene.

## 2.8 Quasikristalle

Versetzungsbewegungen in dem hier simulierten **dreidimensionalen** Quasikristall wurden numerisch von Schaaf [72] untersucht. Seine Berechnungen lieferten als mögliche Versetzungsebenen diejenigen, die senkrecht zu zweizähligen Achsen sind. Der zugehörige Burgersvektor wurde in eine zweizählige Richtung gewählt. Die nach Peierls-Nabarro eingebauten Versetzungen bewegten sich erst bei enorm hohen Spannungen. Darum sind Versetzungsemissionen von der Rissfront in Simulationen in diesem Modell unwahrscheinlich.

Numerische **zweidimensionale** Simulationen von Rissen in dekadonalen Quasikristallen wurden von Krul [53] durchgeführt (siehe auch [62, 63, 64]). Er beobachtete stabile Cluster (Zehneckringe) von Atomen, die vom Riss umlaufen wurden (siehe Abbildung 2.14). Damit war der Risspfad rau. Die Risspitze emittierte Versetzungen, denen der Riss folgte.

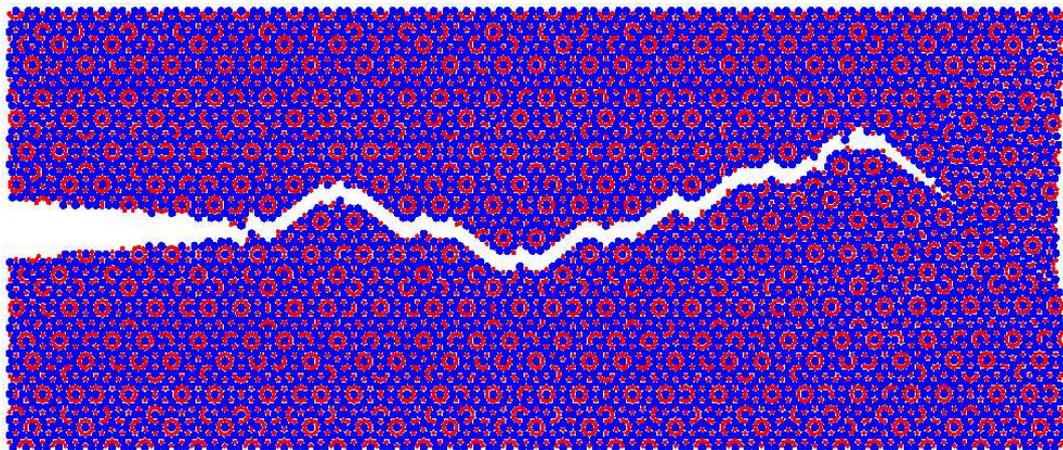


Abbildung 2.14: Endkonfiguration einer zweidimensionalen Rissimulation in einem dekadonalen Quasikristall ([53] entnommen). Es ergibt sich ein rauher Risspfad. Die Risspitze emittiert Versetzungen, denen der Riss folgt. Die Cluster (blaue Atome, die von zehn roten und zehn blauen Atomen umgeben sind) sind stabil.



# Kapitel 3

## Molekulardynamik

Reale Experimente und deren Auswertung sind die Grundlage der Naturwissenschaften. Die Ergebnisse dieser Experimente führen zu Modellen, welche die mathematische Beschreibung der Sachverhalte im Rahmen physikalischer Gesetze liefern. Mit Hilfe von Computersimulationen ist es möglich geworden, die Wirklichkeit auf dieser Modellebene nachzubilden. Die Molekulardynamik (MD) ist eine Methode, klassische Vielteilchensysteme zu untersuchen. Die Newtonschen Bewegungsgleichungen werden hierzu für jedes Teilchen integriert. Aus dieser mikroskopischen Beschreibung der Materie können mit Hilfe der statistischen Physik makroskopische thermodynamische Observablen bestimmt werden.

Einen detaillierten Überblick über die Molekulardynamik bieten [2,30]. Die in dieser Arbeit vorgestellten MD-Simulationen wurden mit dem Programmpaket IMD (ITAP Molekulare Dynamik [100,80]) durchgeführt.

### 3.1 Bewegungsgleichungen

Die Konfiguration eines klassischen Systems ist durch Ort und Impuls der  $N$  beteiligten Teilchen charakterisiert. Hierbei lässt sich im Rahmen der Born-Oppenheimer-Näherung der Hamiltonian des Systems als Funktion der Kernkoordinaten  $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)^T$  und der Kernmomente  $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)^T$  der einzelnen Teilchen  $i \in \{1, \dots, N\}$  schreiben. Die kinetische Energie eines atomaren Systems ergibt sich zu

$$K(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i^T \mathbf{p}_i / 2m_i. \quad (3.1)$$

Hierbei ist  $m_i$  die Masse des Teilchens  $i$ . Für die vorgestellten Simulationen gilt  $m_i=1$ . Werden nur Paarpotentiale behandelt, folgt für die potentielle Energie:

$$V(\mathbf{q}) = \sum_{i=1}^N \sum_{i>j} v(q_{ij}), \quad q_{ij} := |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|. \quad (3.2)$$

Für die Hamiltonsche Gleichung gilt:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = K(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}). \quad (3.3)$$

In Newtonscher Form in kartesischen Koordinaten lässt sich die Bewegungsgleichung für das  $i$ -te Teilchen in folgender Form niederschreiben:

$$m_i \ddot{\mathbf{q}}_i = \mathbf{f}_i. \quad (3.4)$$

Die Kraft  $\mathbf{f}_i$  auf das Atom  $i$  der Masse  $m_i$  ergibt sich aus:

$$\mathbf{f}_i = -\nabla_{\mathbf{q}_i} V(\mathbf{q}). \quad (3.5)$$

Mit Hilfe des Hamiltonformalismus lässt sich diese Differentialgleichung zweiter Ordnung in zwei Differentialgleichungen erster Ordnung umschreiben:

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \nabla_{\mathbf{p}_i} H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \nabla_{\mathbf{p}_i} K(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}, \quad (3.6)$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = -\nabla_{\mathbf{q}_i} H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = -\nabla_{\mathbf{q}_i} V(\mathbf{q}) = \mathbf{f}_i. \quad (3.7)$$

Zur Berechnung der Trajektorien müssen demnach entweder  $6N$  Differentialgleichungen erster oder  $3N$  Differentialgleichungen zweiter Ordnung numerisch gelöst werden.

## 3.2 Diskretisierung und Integrationsalgorithmus

Die Taylorentwicklung des Vektors  $\mathbf{r}$  der Positionen der  $N$  Teilchen zum Zeitpunkt  $t + \delta t$

$$\mathbf{r}(t + \delta t) = \mathbf{r}(t) + \delta t \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 \mathbf{a}(t) + \dots \quad (3.8)$$

und die Taylorentwicklungen des Vektors  $\mathbf{v}$  der Geschwindigkeiten der  $N$  Teilchen zu den Zeitpunkten  $t + \frac{1}{2} \delta t$  und  $t - \frac{1}{2} \delta t$

$$\mathbf{v}(t + \frac{1}{2} \delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2} \delta t \mathbf{a}(t) + \frac{1}{8} \delta t^2 \mathbf{b}(t) + \dots, \quad (3.9)$$

$$\mathbf{v}(t - \frac{1}{2} \delta t) = \mathbf{v}(t) - \frac{1}{2} \delta t \mathbf{a}(t) + \frac{1}{8} \delta t^2 \mathbf{b}(t) - \dots, \quad (3.10)$$

führen unter Vernachlässigung der Fehler in der Ordnung  $\delta t^4$  zu folgenden Ausdrücken für die Positionen  $\mathbf{r}(t + \delta t)$  und Geschwindigkeiten  $\mathbf{v}(t + \frac{1}{2} \delta t)$ :

$$\mathbf{v}(t + \frac{1}{2} \delta t) = \mathbf{v}(t - \frac{1}{2} \delta t) + \delta t \mathbf{a}(t), \quad (3.11)$$

$$\mathbf{r}(t + \delta t) = \mathbf{r}(t) - \delta t \mathbf{v}(t + \frac{1}{2} \delta t). \quad (3.12)$$

Hierbei ist  $\mathbf{a} = (\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_N)^T$  der Vektor der Beschleunigungen  $\mathbf{a}_i$  der  $N$  Teilchen, den man aus den Bewegungsgleichungen erhält. Die oben stehenden Gleichungen definieren den Leapfrog-Algorithmus, der in den durchgeführten Simulationen benutzt wurde. Die Positionen der Teilchen werden für die Zeitpunkte  $t, t + \delta t, t + 2\delta t, \dots$  berechnet. Die Geschwindigkeiten der Teilchen ergeben sich dagegen für die um einen Halbschritt verschobenen Zeitpunkte. Hieraus resultiert der Name Leapfrog (engl.: Bocksprung). Die Geschwindigkeiten für die Zeitpunkte  $t, t + \delta t, t + 2\delta t, \dots$  können jedoch nach

$$\mathbf{v}(t) = \frac{1}{2} \left( \mathbf{v}(t + \frac{1}{2}\delta t) + \mathbf{v}(t - \frac{1}{2}\delta t) \right) \quad (3.13)$$

berechnet werden.

Die Trajektorien der Atome werden also mit Hilfe der beschriebenen Diskretisierung in  $t$  durch simultane numerische Integration der Bewegungsgleichungen schrittweise berechnet.

### 3.3 Statistische Mechanik

Im thermodynamischen Gleichgewicht ist ein Zustand durch wenige makroskopische Variablen charakterisiert. Im einkomponentigen System sind dies z.B. die Anzahl der Atome  $N$ , die Temperatur  $T$  und der Druck  $P$ . Andere Größen können aus der Zustandsgleichung abgeleitet werden. Die mit Gleichgewichts-MD-Simulationen berechneten Werte  $\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)$  sind mikroskopische Größen. Aus ihnen können makroskopischen Observablen mit Hilfe der statistischen Physik gewonnen werden. Das Vielteilchensystem wird hierzu durch einen Punkt  $\Gamma(t) = (\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$  im  $6N$  dimensionalen Phasenraum repräsentiert.

Da jedes Experiment eine endliche Zeit in Anspruch nimmt, ist das Zeitmittel einer makroskopischen Größe  $G$  die zugängliche Messgröße:

$$\langle G \rangle_t = \langle G(\Gamma(t)) \rangle_t = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\int_0^\tau G(\Gamma(t)) dt}{\tau}. \quad (3.14)$$

Diese erhält man näherungsweise aus einer MD-Simulation, indem man über die  $Z$  Zeitschritte  $z$  der Simulation mittelt:

$$\langle G \rangle_{\text{MD}} = \frac{\sum_{z=1}^Z G(\Gamma(t(z)))}{Z}. \quad (3.15)$$

Konstante externe makroskopische Größen  $M$  beschränken  $\Gamma(t)$  auf Punkte, die auf der zugehörigen  $M = M_0$  Hyperebene liegen. Die Menge all dieser Punkte im Phasenraum definiert das Ensemble. Die Phasenraumdichte  $\rho_{\text{ens}}(\Gamma)$  ist so definiert, dass  $\rho_{\text{ens}}(\Gamma)d\Gamma$  die Wahrscheinlichkeit angibt, das System im Intervall  $[\Gamma, \Gamma + d\Gamma]$  des Phasenraums vorzufinden. Das Ensemblemittel definiert man wie folgt:

$$\langle G \rangle_{\text{ens}} = \int_{\text{Phasenraum}} \rho_{\text{ens}}(\Gamma) G(\Gamma) d\Gamma. \quad (3.16)$$

Ein System nennt man ergodisch, wenn es während seiner Zeitentwicklung alle Punkte des Ensembles durchläuft. Für ergodische Systeme entspricht das Zeitmittel dem Ergodenmittel. Bilden die mit Hilfe der MD berechneten Trajektorien eines ergodischen Systems die Phasenraumdicke  $\rho_{\text{ens}}$  richtig und vollständig innerhalb der Simulationszeit ab, kann eine thermodynamische Observable so aus  $\langle G \rangle_{\text{MD}}$  gut bestimmt werden.

### Einfache thermodynamische Mittelwerte

Die Temperatur und der Druck können mit Hilfe des Virialtheorems berechnet werden. Für atomare Systeme ergibt sich:

$$T = \frac{2 \langle K(\mathbf{p}) \rangle}{3Nk_{\text{B}}}, \quad (3.17)$$

$$P = \frac{Nk_{\text{B}}T + \langle \mathcal{V} \rangle}{V}, \quad \mathcal{V} = -\frac{1}{3} \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i^{\text{T}} \nabla_{\mathbf{q}_i} V(\mathbf{q}). \quad (3.18)$$

Hierbei ist  $\langle K(\mathbf{p}) \rangle$  der Mittelwert der kinetischen Energie,  $k_{\text{B}}$  die Boltzmannkonstante und  $\mathcal{V}$  das innere Virial.  $V(\mathbf{q})$  ist das Potential der zwischenatomaren Kräfte.

Eine momentane Temperatur, deren Mittelung  $\tau$  ergibt, lässt sich durch

$$T_{\text{mom}} := \frac{2K(\mathbf{p})}{3Nk_{\text{B}}} \quad (3.19)$$

definieren. Die Definition des momentanen Druckes ergibt sich analog zu:

$$P_{\text{mom}} := \frac{Nk_{\text{B}}T_{\text{mom}} + \mathcal{V}}{V}. \quad (3.20)$$

## 3.4 Potentiale

In den durchgeführten Simulationen wurden Lennard-Jones (LJ) 12-6 Paarpotentiale benutzt:

$$v_{\text{LJ}\alpha\beta}(q_{ij}) = \epsilon_{\alpha\beta} \left( \left( \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{q_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{q_{ij}} \right)^6 \right). \quad (3.21)$$

Hierbei sind  $\epsilon_{\alpha\beta}$  die Bindungsenergien und  $\sigma_{\alpha\beta}$  die Bindungslängen. Diese Werte hängen nur von den Atomtypen der beiden wechselwirkenden Atome ab,  $\alpha$  und  $\beta$  sind darum Indizes der Atomtypen. Da die Ausgangskonfigurationen des binären ikosaedrischen Modells Atome zweierlei Typs enthalten, benötigt man drei Potentiale. Diese beschreiben die Wechselwirkungen zwischen Atomen gleichen ( $v_{\text{LJ}00}$ ,  $v_{\text{LJ}11}$ ) und verschiedenen Typs ( $v_{\text{LJ}01} = v_{\text{LJ}10}$ ) mit dem Abstand  $q_{ij}$ .

Da das Potential für große Abstände  $q_{ij}$  schnell gegen Null strebt, kann es ab einem endlichen Abschneideradius  $r_{\text{co}}$  (engl.: cut off radius) auf Null gesetzt werden. Hierzu ist mit

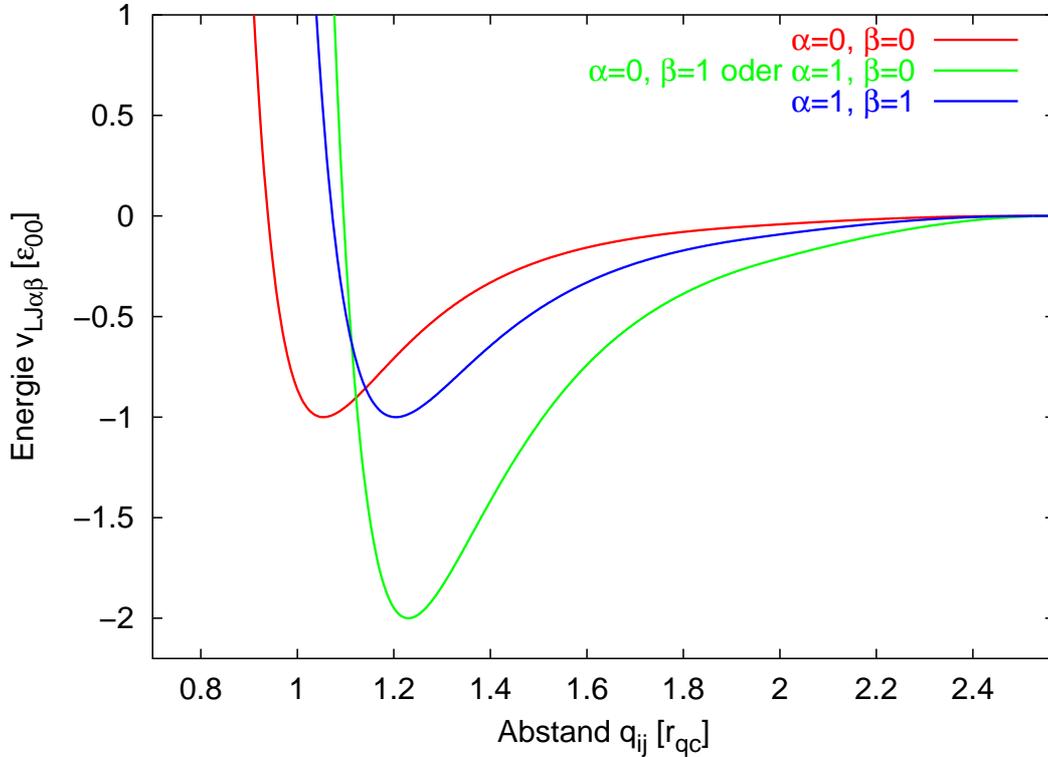


Abbildung 3.1: Die in den Simulationen zur Anwendung kommenden Lennard-Jones Paarpotentiale, vgl. (3.21). Diese gehen nach (3.2) in die Berechnung der potentiellen Energie ein. Aufgetragen ist die Energie  $v_{LJ\alpha\beta}$  gegen den Abstand  $q_{ij}$  zwischen den wechselwirkenden Atomen,  $\alpha$  und  $\beta$  sind Indizes der Atomtypen. Näheres zu den Einheiten ist Tabelle 3.1 und Kapitel 3.4 zu entnehmen.

einer Abschneidefunktion zu multiplizieren, die Stetigkeit und stetige Differenzierbarkeit am Abschneideradius gewährleistet. Damit verringert sich der Rechenaufwand, der mit  $r_{co}^3$  skaliert. Für die durchgeführten Simulationen gilt  $r_{co} = 2.57r_{qc}$ , wobei  $r_{qc}$  der kleinste Abstand zweier Atome des Typs 0 in der Ausgangskonfiguration ist. Die hier zur Anwendung kommenden Werte für die Potentialparameter  $\epsilon_{\alpha\beta}$  und  $\sigma_{\alpha\beta}$  sind in Tabelle 3.1 zusammengefasst. Die Einheitenwahl  $r_{qc} = 1$  und  $\epsilon_{00} = 1$  ist so aufzufassen, dass hierdurch reduzierte Energien  $E/\epsilon_{00}$  und reduzierten Längen  $L/r_{qc}$  eingeführt worden sind<sup>1</sup>. Künftig werden darum Energien in Einheiten von  $\epsilon_{00}$  und Längen in Einheiten von  $r_{qc}$  angegeben. Mit Hilfe der LJ Potentiale lassen sich Edelgase und einfache Flüssigkeiten gut beschreiben [88]. Da ein qualitatives, grundsätzliches Verständnis des simulierten Materials angestrebt wird, ist diese Modellpotentialwahl gerechtfertigt. Zudem können bestehende Simulationsergebnisse zu zweidimensionalen Rissimulationen (vgl. Kapitel 2.8) und dreidimensionalen Versetzungssimulationen [72] in Quasikristallen zum Vergleich herangezogen werden.

<sup>1</sup>vgl. hierzu Anhang B

$\alpha$	$\beta$	Bindungsenergie $\epsilon_{\alpha\beta}/\epsilon_{00}$	Bindungslänge $\sigma_{\alpha\beta}/r_{qc}$
0	0	1	1.055
0	1	2	1.229
1	0		
1	1	1	1.205

Tabelle 3.1: Die in den Simulationen genutzten Werte für die Bindungsenergien  $\epsilon_{\alpha\beta}$  und die Bindungslängen  $\sigma_{\alpha\beta}$  in Abhängigkeit von den Atomtypen  $\alpha, \beta$  für die Lennard-Jones Paarpotentiale (3.21).

### 3.5 Die Methode der verbundenen Zellen

Zur Berechnung der potentiellen Energie und der Kräfte müssen die Wechselwirkungen zwischen den Atomen für jeden Zeitschritt berechnet werden. Für ein Atom  $i$  reduziert sich durch die Einführung des Abschneideradius diese Berechnung auf die Atome, deren Abstand zum Atom  $i$  kleiner als dieser Radius ist. Um festzustellen, welche Atome sich in der Umgebung eines bestimmten Atoms  $i$  befinden, kommt die Methode der verbundenen Zellen (engl.: linked cell method [68]) zur Anwendung. Hierzu werden die Atome in quaderförmige Zellen eingeteilt. Die kleinste Kantenlänge muss hierbei größer als der Abschneideradius sein. Die Nachbaratome befinden sich dann in der Zelle des Atoms  $i$  oder in einer der 26 angrenzenden Zellen. Die Zellen müssen aktualisiert werden, um zu verhindern, dass Atome die Zellränder passieren.

### 3.6 Ränder

Im Gegensatz zu realen Materialien befinden sich bei heutigen Computersimulationen aufgrund der durch die Rechnerleistung begrenzten Atomzahl viele Atome an der Oberfläche der Probe, so dass der Behandlung der Ränder eine besondere Bedeutung zukommt. Hierbei existieren drei grundlegende Methoden die Ränder zu behandeln:

- **Freie Ränder:** Atome am Rand besitzen weniger Nachbarn als Atome im Probeninneren und besitzen dadurch eine höhere potentielle Energie. Durch Fluktuationen an der Oberfläche können Atome den Kontakt zur Probe verlieren und dadurch eventuell die Simulation stören.
- **Feste Ränder:** Die Bewegung der Randatome wird total unterbunden oder nur in bestimmten Richtungen eingeschränkt. Hält man sämtliche Atome fest, die einen Abstand zu den Rändern haben, der kleiner als der Abschneideradius ist, spüren die Atome im Inneren keinen direkten Einfluss des Randes mehr.
- **Periodische Ränder:** Setzt man die Probe periodisch fort, kann ein unendlich ausgedehntes Medium ohne Oberflächen simuliert werden. Ein Atom, das auf einer Seite

die Probe verlässt, tritt auf der gegenüberliegenden Seite wieder ein. Hierzu können aufgrund der notwendigen Periodizität keine Quasikristalle, sondern nur deren Approximanten benutzt werden.

## 3.7 Ensemble, Relaxationsalgorithmen, Risse

### 3.7.1 Ensemble

Physikalische Rahmenbedingungen geben die unabhängigen thermodynamischen Variablen vor. Das zugehörige Ensemble kann — wie im Folgenden beschrieben — in Computersimulationen realisiert werden.

- **Mikrokanonisches Ensemble:** Durch den in Kapitel 3.2 definierten Integrationsalgorithmus für die Newtonschen Bewegungsgleichungen bleiben die Energie  $E$ , die Teilchenzahl  $N$  und das Volumen  $V$  erhalten. Es liegt ein mikrokanonisches Ensemble  $(N, V, E)$  vor.
- **Kanonisches Ensemble:** Um zum kanonischen Ensemble  $(N, V, T)$  zu gelangen, muss ein Thermostat in die Bewegungsgleichungen (3.6),(3.7) implementiert werden [3, 66, 42, 41], der das angekoppelte Wärmebad simuliert:

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}, \quad (3.22)$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{f}_i - \xi \mathbf{p}_i. \quad (3.23)$$

Hierbei sollte sich  $\xi$  so ändern, dass die momentane Temperatur (3.19) auf den Wert  $T$  zustrebt. Dies kann durch

$$\dot{\xi} \propto (T_{\text{mom}} - T) \quad (3.24)$$

erreicht werden. Ist  $T_{\text{mom}} > T$  wird  $\dot{\xi} > 0$ . Dadurch nimmt  $\xi$  zu, bis es positiv wird. Gleichung (3.23) enthält nun einen Reibungsterm. Dadurch werden der Impuls der Teilchen und die momentane Temperatur verringert. Ist  $T_{\text{mom}} < T$  wirkt die Rückkopplung in die entgegengesetzte Richtung. Die kinetische Energie fluktuiert also um ihren Gleichgewichtswert.

- **Isotherm-isobares Ensemble:** Zusätzlich zum Thermostat muss nun auch ein Barostat eingesetzt werden [3, 66]. Dies führt dazu, dass skalierte Koordinaten in die Bewegungsgleichungen eingehen, um den momentanen Druck auf den Wert  $P$  zuzuführen:

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + \zeta \mathbf{q}_i, \quad (3.25)$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{f}_i - (\dot{\zeta} + \xi) \mathbf{p}_i. \quad (3.26)$$

Ähnlich wie in (3.24) kann  $\zeta$  mit (3.20) gewählt werden:

$$\dot{\zeta} \propto (P_{\text{mom}} - P)V/T. \quad (3.27)$$

### 3.7.2 Relaxationsalgorithmen

Die folgenden Relaxationsalgorithmen sind nützlich, um einen Zustand minimaler potentieller Energie zu erreichen. Dies wird durch Modifizierung der Gleichungen des mikrokanonischen Ensembles erreicht.

- **Mikrokonvergenz (MIK):** Vor jedem Integrationsschritt wird überprüft, ob das Skalarprodukt  $\mathbf{p}_i^T \mathbf{f}_i$  jedes Atomes  $i$  kleiner null ist. Ist dies der Fall, würde sich das Atom  $i$  vom lokalen Minimum der potentiellen Energie weiter entfernen. Um dem zu entgegen, wird  $\mathbf{p}_i = \mathbf{0}$  gesetzt. So wird sukzessive die kinetische Energie der Atome aus dem System entfernt, bis jedes Atom ein lokales Minimum der potentiellen Energie erreicht hat. Dies kann jedoch auch ein metastabiler Zustand sein.
- **Globale Konvergenz (GLOK):** Das globale Minimum der potentiellen Energie wird erreicht, indem man für  $\mathbf{p}^T \mathbf{f} < 0$   $\mathbf{p} = \mathbf{0}$  setzt. Hierbei sind  $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)^T$  und  $\mathbf{f} = (\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_N)^T$  aus den Vektoren der  $N$  Teilchen wie in Kapitel 3.1 zusammengesetzt.

### 3.7.3 Rissimulationen

Phononen, die von einem propagierenden Riss generiert werden, können an Oberflächen reflektiert werden und das Verhalten des Risses stören. Um dies zu verhindern, wird eine viskose Dämpfung [39] eingeführt, die vom Riss emittierte kurzweilige Phononen absorbieren soll. Die Probe, in der sich der Riss befindet (vgl. Abbildung 3.2), ist quaderförmig und hat die Seitenlängen  $L_x, L_y, L_z$ . Innerhalb eines elliptischen Zylinders mit der Mittellinie  $(x_0, y_0, t)^T$ ,  $t \in [0, L_z]$  und den Halbachsen  $l_x$  und  $l_y = l_x L_y / L_x$  gelten dieselben Gleichungen wie im mikrokanonischen Ensemble. Zum Rand hin wird die Dämpfung durch die elliptische Stadionfunktion  $d(x, y)$  ([93, 29], siehe Abbildung 3.3),

$$d(x, y) = \min \left[ 1, \max \left( 0, \frac{((x - x_0)/L_x)^2 + ((y - y_0)/L_y)^2 - (l_x/L_x)^2}{1/4 - (l_x/L_x)^2} \right) \right], \quad (3.28)$$

heraufgesetzt. Diese wird anschließend noch geglättet:

$$\delta(x, y) = \frac{1 + \sin(d\pi - \pi/2)}{2}. \quad (3.29)$$

Der Dämpfungsterm  $\eta$ ,

$$\eta = 2\omega_E \left( 1 - \frac{T_0}{\tau} \right) \delta(x, y), \quad (3.30)$$

sorgt dafür, dass

$$\tau = \frac{\sum_{i=1}^N \delta(x, y) m_i \mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i}{3k_B \sum_{i=1}^N \delta(x, y)} \quad (3.31)$$

einer vorgegebenen Temperatur  $T_0$  zustrebt.

Die Integrationsgleichungen haben damit folgende Form:

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}, \quad (3.32)$$

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{f}_i - \eta \mathbf{p}_i. \quad (3.33)$$

Die Einsteinfrequenz  $\omega_E$  ist die Frequenz, mit der ein Atom  $i$  im mittleren Kraftfeld seiner Nachbaratome in harmonischer Näherung schwingen würde:

$$\omega_E = \sqrt{\frac{\langle \mathbf{f}_i^T \mathbf{f}_i \rangle}{m_i^2 \langle \mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i \rangle}}. \quad (3.34)$$

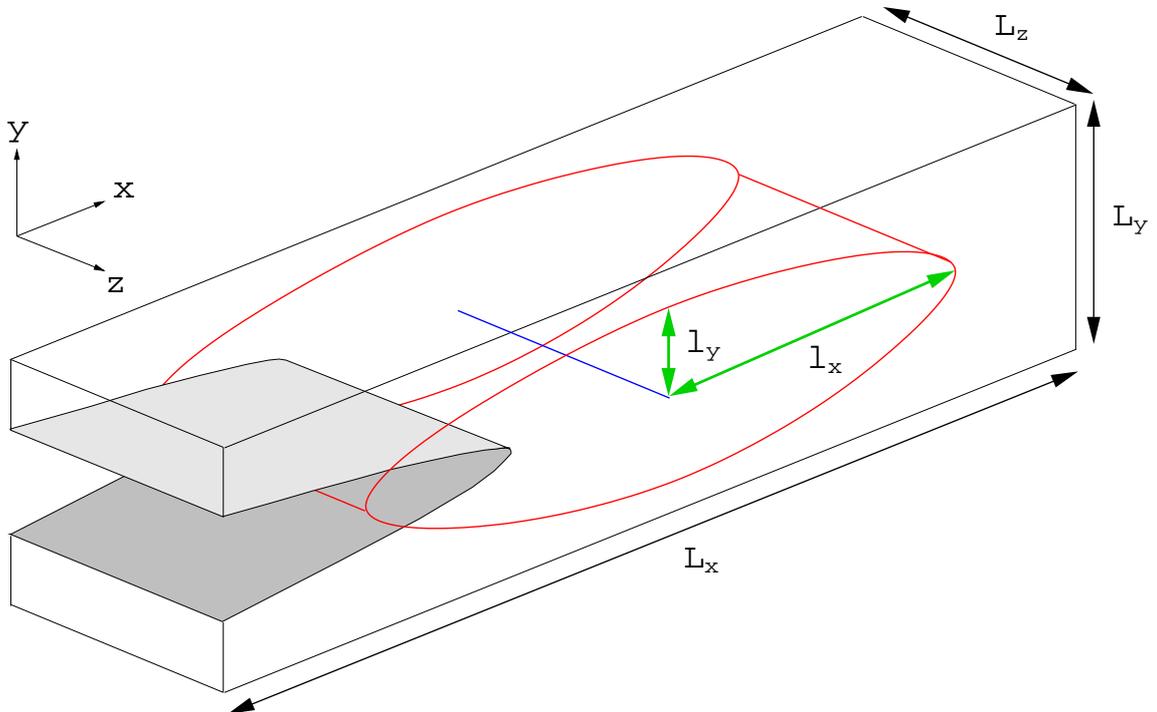


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der Probe, in der sich der Riss (die Rissoberfläche ist grau dargestellt) befindet. Die Probe ist quaderförmig und hat die Seitenlängen  $L_x, L_y, L_z$ . Innerhalb eines elliptischen Zylinders (in rot dargestellt) mit der Mittellinie (in blau dargestellt)  $(x_0, y_0, t)^T$ ,  $t \in [0, L_z]$  und den Halbachsen (in grün dargestellt)  $l_x$  und  $l_y = l_x L_y / L_x$  gelten dieselben Gleichungen wie im mikrokanonischen Ensemble.

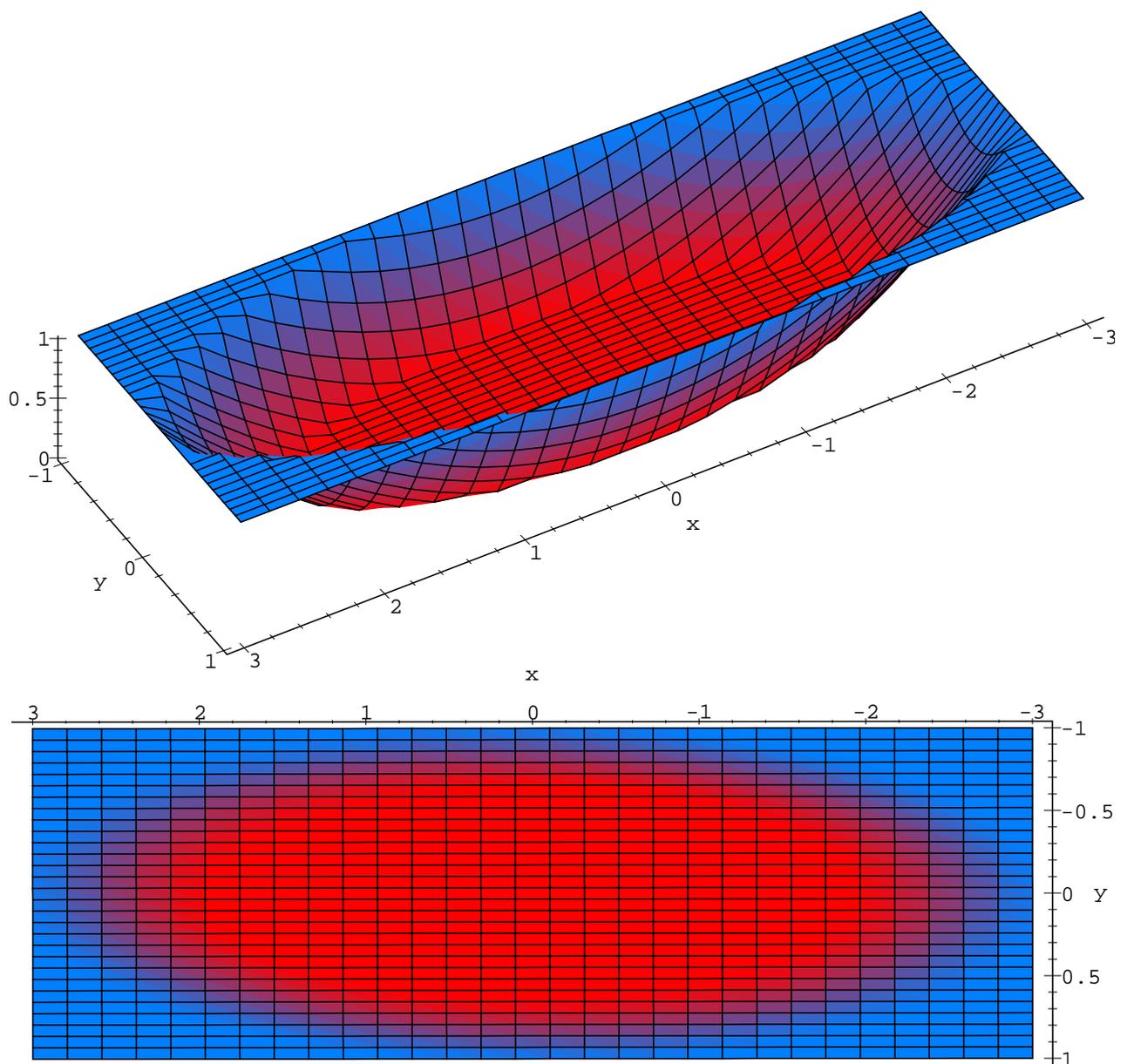


Abbildung 3.3: Die elliptische Stadionfunktion  $d(x, y)$  (3.28).

Der Wert  $d(x, y)$  ist farbkodiert, so dass  $d = 1$  blau und  $d = 0$  rot dargestellt ist.

Es wurden folgende Daten in (3.28) eingesetzt:  $L_x = 6, L_y = 2, l_x = 2$ .

# Kapitel 4

## Visualisierung

Um die Datenmengen zu reduzieren und die physikalisch relevanten Daten zu extrahieren ist die Einführung und Benutzung von Trenngrößen entscheidend. Vor allem bei dreidimensionalen Simulationen ist diese Vorgehensweise notwendig, um Defekte darzustellen. Der Visualisierung kommt hierbei nicht nur die Rolle der Datenaufbereitung zu, sondern sie ist von grundlegenderer Bedeutung. Sie erleichtert die Erfassung der physikalisch wichtigen Aspekte der Simulationen. Während einige Methoden direkt in das Molekulardynamik-Programm IMD (siehe Kapitel 3, [100]) implementiert wurden, beruhen andere auf der Auswertung<sup>1</sup> von End- und Ausgangskonfigurationen.

### 4.1 Volumen- und Atomdaten

Ergebnisse von Molekulardynamiksimulationen können als Volumen- oder Atomdaten ausgegeben werden. Die Berechnung der Verteilung einer skalaren Größe wie die der kinetischen Energiedichte erfolgt auf einem regulären Gitter. Die Daten können anschließend mit Hilfe eines Volumenrenderers dargestellt werden. Auf diese Weise ist in Abbildung 4.1 die kinetische Energiedichte eines dynamischen Risses farbkodiert wiedergegeben. Die von der Rissspitze emittierten Phononen sind ebenso sichtbar wie das in Kapitel 3.7.3 beschriebene Stadion. Die Abbildung verdeutlicht die Notwendigkeit der Einführung einer viskosen Dämpfung. Die Rissoberfläche sowie die Risslippe sind schlecht erkennbar, da Volumendaten nur eine kontinuierliche Verteilung einer lokal gemittelten Größe wiedergeben. Für die Wiedergabe mikroskopischer Prozesse sind Volumendaten darum ungeeignet. Stattdessen werden hierfür Atomdaten genutzt. Abbildung 4.2 zeigt eine Seitenansicht einer Risskonfiguration im binären ikosaedrischen Modell (siehe Kapitel 1.5.4). Die große Anzahl der dargestellten Atome behindert die Sicht auf die wesentlichen Details. Zudem erzeugt eine ständige Ausgabe aller Atomdaten enorme Datenmengen. Die Auswahl der physikalisch wichtigen Atome vermindert diese Datenmengen und erlaubt zudem die Darstellung der relevanten Prozesse. In periodischen Kristallen können Defekte visualisiert werden, indem

---

<sup>1</sup>Zur Darstellung der aufbereiteten Daten wurden folgende Programme genutzt: Covise [96], DX [97], Geomview [98], Gnuplot [99], Rasmol [101], Virvo [103].

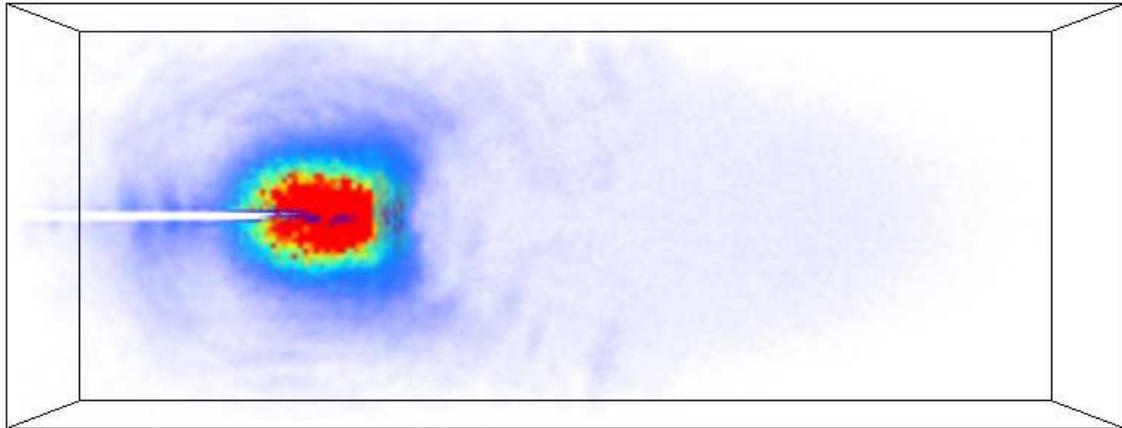


Abbildung 4.1: Visualisierung der kinetischen Energiedichte. Diese ist farbkodiert dargestellt. Blaue Stellen weisen eine geringere kinetische Energiedichte als rote Stellen auf. Der Riss bewegt sich von links nach rechts. Die schwarzen Linien repräsentieren die Proben Grenzen. Die von der Rissspitze emittierten Phononen sind deutlich sichtbar. Zudem ist das Stadium erkennbar, das in Kapitel 3.7.3 beschrieben wurde.

nur Atome dargestellt werden, deren potentielle Energie einen gewissen Schwellenwert überschreitet. In Quasikristallen hingegen variiert die potentielle Energie bereits in defektfreien Konfigurationen für verschiedene Atome. Darum müssen neue Kriterien gefunden werden.

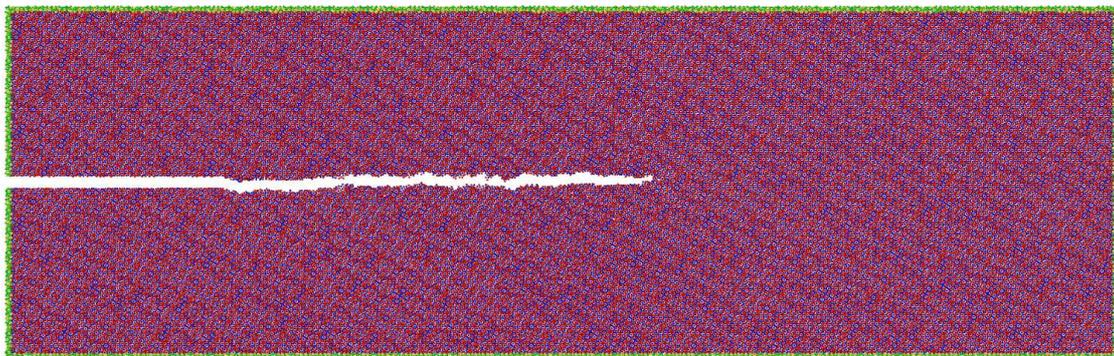


Abbildung 4.2: Seitenansicht einer Risskonfiguration im binären ikosaedrischen Modell. Die in Kapitel 1.5.4 beschriebenen Atome sind wiederum rot und blau wiedergegeben. Festgehaltene Randatome sind grün und gelb eingefärbt.

## 4.2 Risslippen

Zur Visualisierung der Risslippe ist die Kenntnis der Anzahl der nächsten Nachbarn für jedes Atom ausreichend. An der Risslippe ist die Zahl dieser Nachbarn deutlich reduziert. Um die Risslippe zu visualisieren, stellen wir nur Atome dar, deren Anzahl von Nachbarn bis zu einem gewissen Radius einen vorgegebenen Schwellenwert unterschreitet.

Um den Abschneideradius festzulegen, wurden für einen relaxierten Approximanten eines Quasikristalles zunächst Histogramme der Radialverteilungen berechnet. Diese sind in Abbildung 4.3 dargestellt. Als Abschneideradius für die nächsten Nachbarn wurde  $r_{\text{NN}} = 1.5r_{\text{qc}}$  gewählt. Für einen Approximanten mit 61846 Atomen wurden danach die

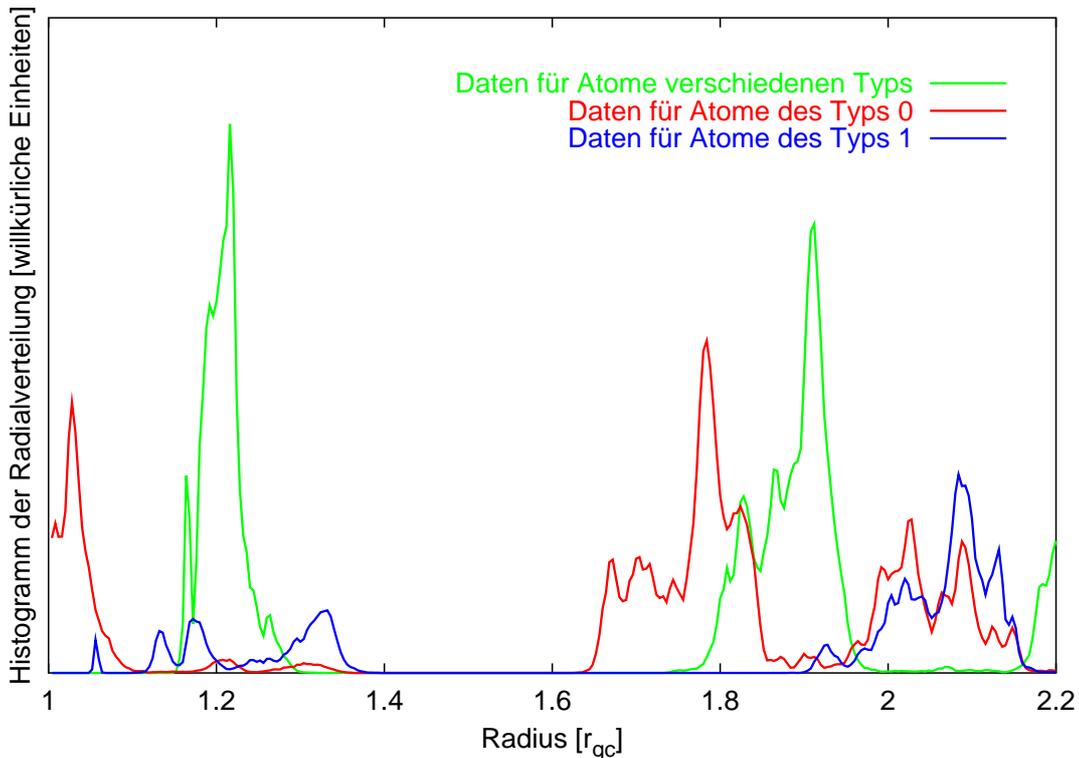


Abbildung 4.3: Histogramme der Radialverteilungen für Atome verschiedenen Typs (grün dargestellt), für Atome des Typs 0 (rot dargestellt) und für Atome des Typs 1 (blau dargestellt). Die Atomtypbezeichnungen werden in der Fußnote zu Kapitel 1.8 erklärt. Als Abschneideradius für die nächsten Nachbarn wurde  $r_{\text{NN}} = 1.5r_{\text{qc}}$  gewählt.

Anzahl der Nachbarn bestimmt. Dies zeigen die Abbildungen 4.4 und 4.5. In Abbildung 4.4 sind die Anzahl der Nachbarn unterschiedlichen Typs für Atome des Typs 0 gezeigt, in Abbildung 4.5 diejenigen für Atome des Typs 1. Atome des Typs 0 besitzen demnach 12 oder 13 nächste Nachbarn, Atome des Typs 1 zwischen 14 und 16 nächste Nachbarn. Atome, die sich in der Nähe eines Defektes befinden, weisen eine deutlich niedrigere Koordinationszahl auf. Durch Darstellung von Atomen des Typs 0, die innerhalb  $r_{\text{NN}}$  weniger als

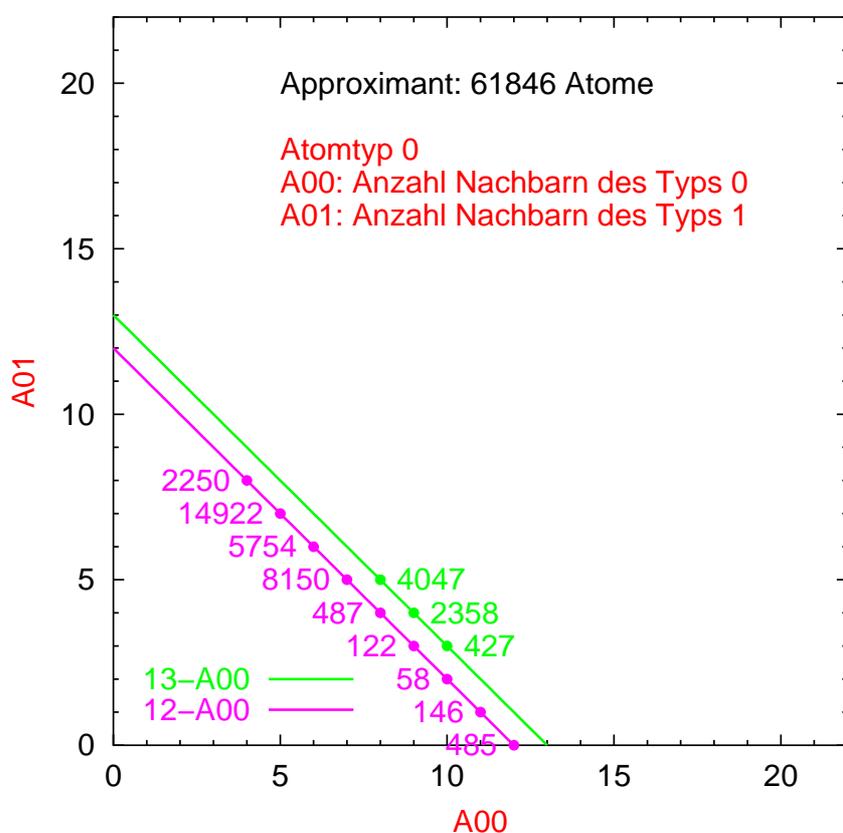


Abbildung 4.4: **Anzahl der Nachbarn für Atome des Typs 0.** A00 gibt die Anzahl der Nachbarn des Typs 0 für Atome des Typs 0 wieder, A01 gibt die Anzahl der Nachbarn des Typs 1 für Atome des Typs 0 wieder. Die Zahlen geben die Häufigkeit an. Zudem sind die Geraden 12-A00 und 13-A00 eingezeichnet. Atome des Typs 0 besitzen demnach 12 oder 13 nächste Nachbarn.

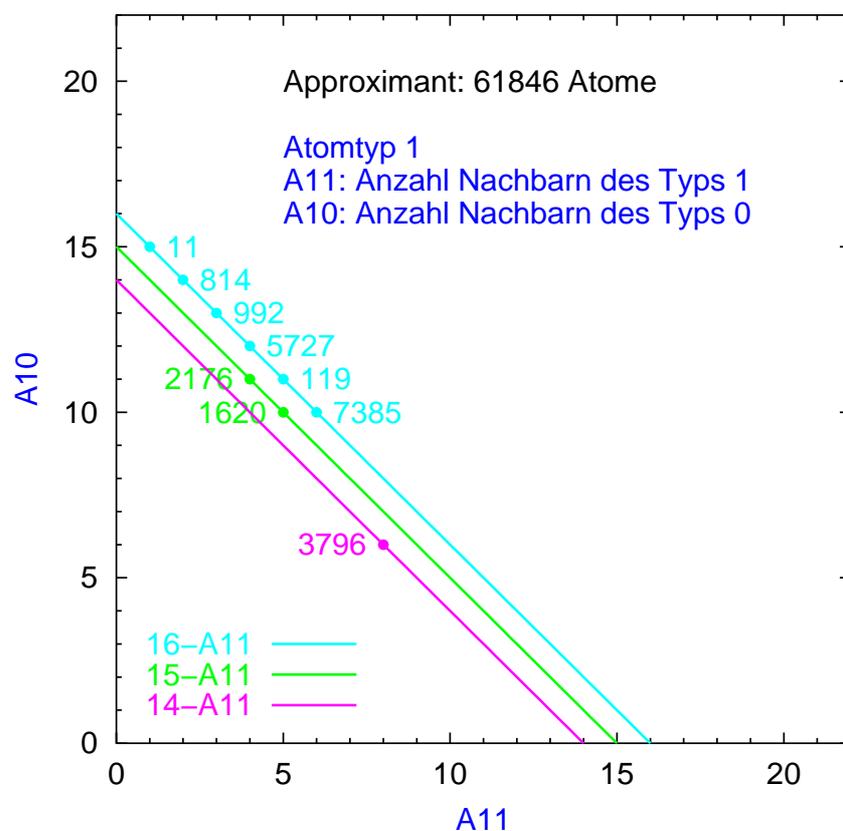


Abbildung 4.5: **Anzahl der Nachbarn für Atome des Typs 1.** A11 gibt die Anzahl der Nachbarn des Typs 1 für Atome des Typs 1 wieder, A10 gibt die Anzahl der Nachbarn des Typs 0 für Atome des Typs 1 wieder. Die Zahlen geben die Häufigkeit an. Zudem sind die Geraden 16-A11, 15-A11 und 14-A11 eingezeichnet. Atome des Typs 1 besitzen demnach zwischen 14 und 16 nächste Nachbarn.

12 Nachbarn und von Atomen des Typs 1, die innerhalb  $r_{\text{NN}}$  weniger als 14 Nachbarn besitzen, kann die Risslippe visualisiert werden. Dies ist in Abbildung 4.6 gezeigt. So kann die Anzahl der ausgegebenen Atomdaten um zwei bis drei Größenordnungen reduziert werden. Dies erlaubt es, derartige Dateien zur Verfolgung des dynamischen Verhaltens des Risses in kurzen Zeitintervallen abzuspeichern.

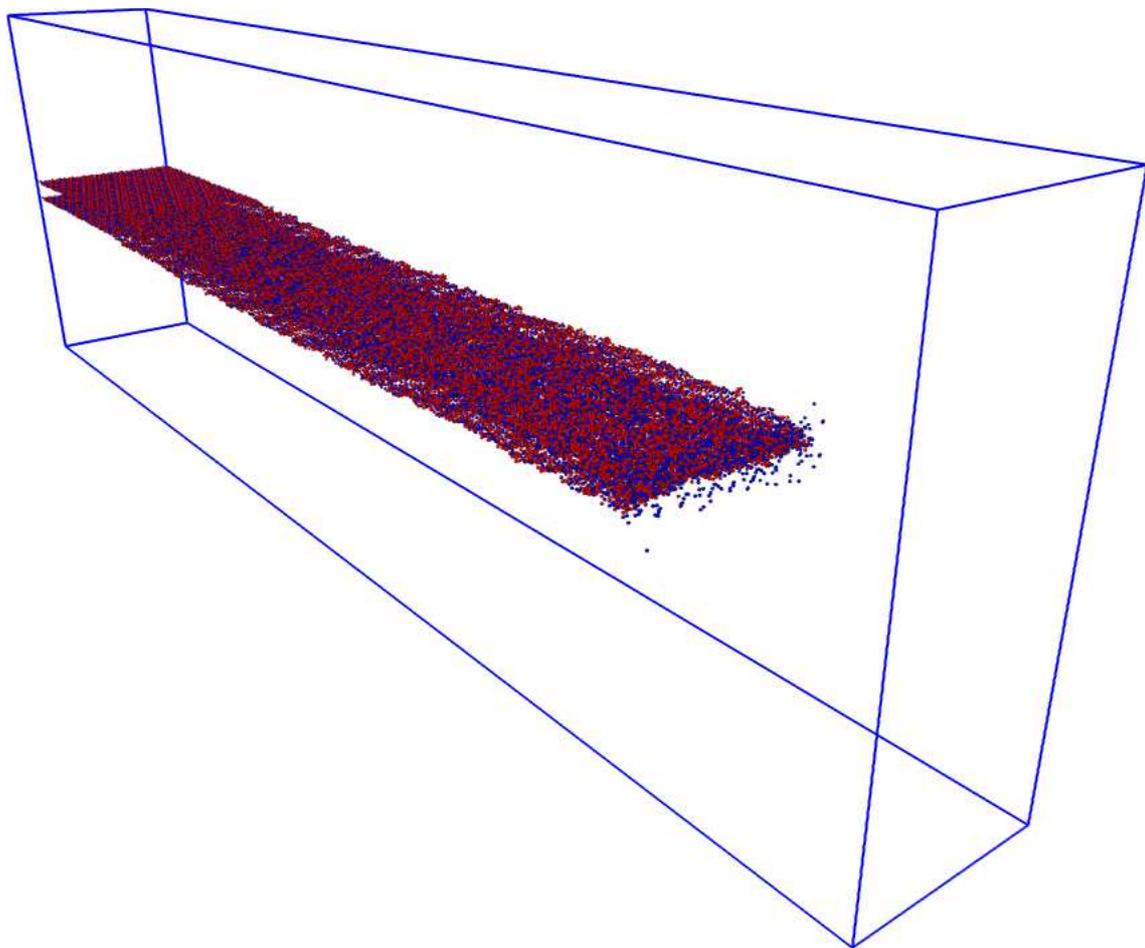


Abbildung 4.6: Darstellung von Atomen des Typs 0 (rot wiedergegeben), die innerhalb  $r_{\text{NN}}$  weniger als 12 Nachbarn und von Atomen des Typs 1 (blau wiedergegeben), die innerhalb  $r_{\text{NN}}$  weniger als 14 Nachbarn besitzen. Hierdurch wird die **Risslippe** visualisiert. Vor der Rissfront ist bereits aufgrund elastischer Dehnung bei einigen Atomen des Typs 1 die Nachbaranzahl reduziert. Diese werden darum ebenfalls dargestellt. Die blauen Linien zeigen die Probenkanten.

### 4.3 Rissgeschwindigkeiten

Durch die Auswertung der zeitlichen Abfolge der Risslippen lässt sich die mittlere Rissgeschwindigkeit bestimmen. Dies zeigt Abbildung 4.7. Sucht man für die Risslippe das zeitabhängige Maximum der Atomkoordinaten in Ausbreitungsrichtung, lässt sich hieraus die mittlere Rissgeschwindigkeit mit Hilfe einer Ausgleichsgerade ermitteln. Da vor der Rissfront zusätzliche Atome des Typs 1 in den Risslippendaten enthalten sind, wurden hierzu nur Atome des Typs 0 betrachtet.

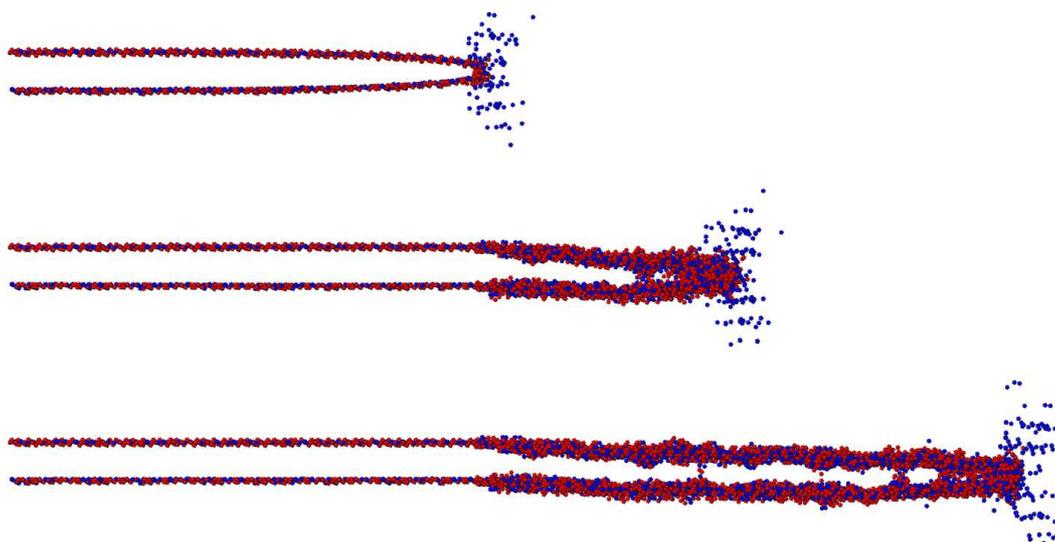


Abbildung 4.7: Seitenansichten einer Risslippe zu verschiedenen Zeitpunkten. Aus den Maxima der Atomkoordinaten der Atome des Typs 0 in Ausbreitungsrichtung lässt sich die mittlere Rissgeschwindigkeit bestimmen.

### 4.4 Bruchoberflächen

Um die Rissoberflächen darzustellen, müssen zunächst die Atome ober- und unterhalb des Risses voneinander getrennt werden. Aus Abbildung 4.2 ersieht man zwei Möglichkeiten dies zu tun. Zunächst kann aufgrund des leeren Raumes zwischen den Bruchhälften eine rein geometrische Trennung erfolgen. Hierzu wurden die Atome lokal nach der Höhe sortiert und dann zwischen dem größten Abstand voneinander separiert. Eine andere Möglichkeit dies zu tun, beruht auf den Verschiebungen zwischen Ausgangs- und Endzustand. Da zwischen oberer und unterer Bruchhälfte ein Leerraum entstanden ist, müssen sich die Atome oberhalb des Risses nach oben und die Atome unterhalb des Risses nach unten bewegt haben. Aufgrund dieses Verschiebungsverhaltens können die Bruchhälften unterschieden werden. Dieses Verfahren erweist sich (außerhalb der Umgebungen der festgehaltenen Randatome) als schneller und effektiver als das geometrische Trennungsverfahren. Zur Darstellung der

Oberfläche werden die Atome der Bruchoberflächen geometrisch abgetastet. Dies ist in Abbildung 4.8 dargestellt. Die Höhe einer Abtastkugel (in Abbildung 4.8 grün dargestellt) wird an äquidistanten Punkten so variiert, dass sie gerade die Kugeln der Oberfläche berührt. Der Radius der Kugel sowie der Abstand der Abtastpunkte kann variiert werden. Je kleiner dieser Abstand wird, umso besser wird die Oberfläche wiedergegeben. Im zweidimensionalen Beispiel aus Abbildung 4.8 ergibt sich die grün eingezeichnete Linie als Ergebnis der Abtastung. In drei Dimensionen folgt stattdessen die Höhe in Abhängigkeit von Gitterpunkten in der  $x$ - $z$ -Ebene. Man erhält anstelle der grünen Kurve eine entsprechende Fläche. Um einen direkten Eindruck von den Höhenverhältnissen zu erhalten, wurde die Höhe zusätzlich farbkodiert. Dies ist in Abbildung 4.9 gezeigt.

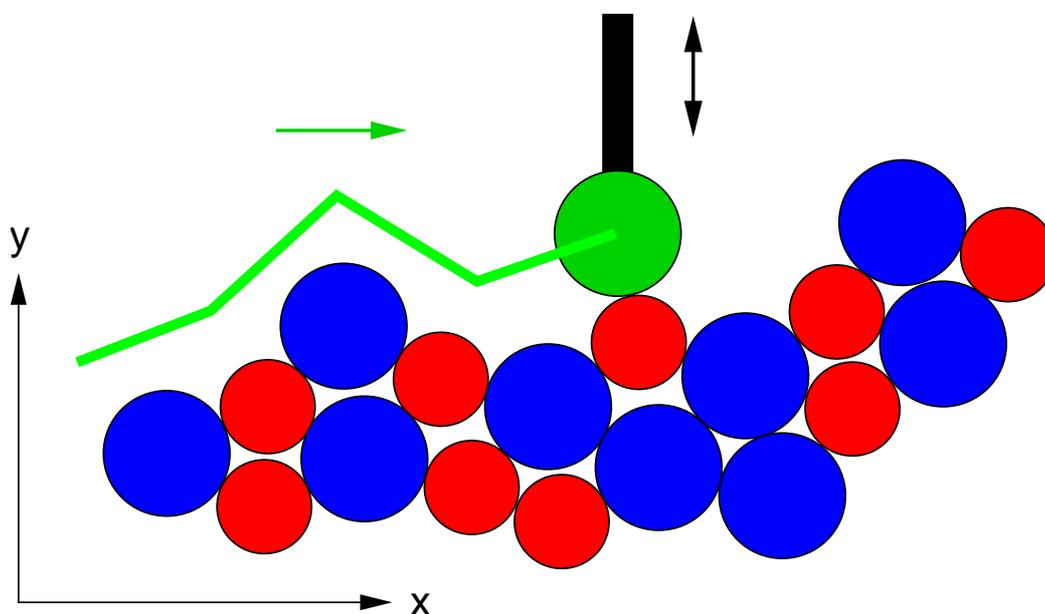


Abbildung 4.8: **Geometrische Abtastung der Bruchoberfläche** (zweidimensionales Beispiel). Die grüne Abtastkugel bewegt sich entlang der  $x$ -Achse (durch den grünen Pfeil dargestellt). An äquidistanten Punkten wird die Höhe der Kugel so reguliert (repräsentiert durch den schwarzen Doppelpfeil), bis sich die Kugeln berühren. Als Resultat erhält man die Abtasthöhe in Abhängigkeit eines äquidistanten Rasters. Dies zeigt die grüne Kurve.

## 4.5 Cluster

Um den Einfluss der Cluster (siehe Kapitel 1.6) zu untersuchen, müssen diese aus den Konfigurationen extrahiert und dargestellt werden. Die Clusterzentren sind hinreichend durch Atome des Typs 0 charakterisiert, die innerhalb  $r_{\text{NN}}$  12 Nachbaratome des Typs 0 aufweisen (siehe Abbildung 1.12). Der Radius eines nicht relaxierten Clusters entspricht einer Rhombenkante, also  $2r_{\text{qc}}$ . In relaxierten Atomdatensätzen erfasst man alle Clusteratome durch die Atome, die von den Clusterzentren einen kleineren Abstand als  $2.2r_{\text{qc}}$  haben

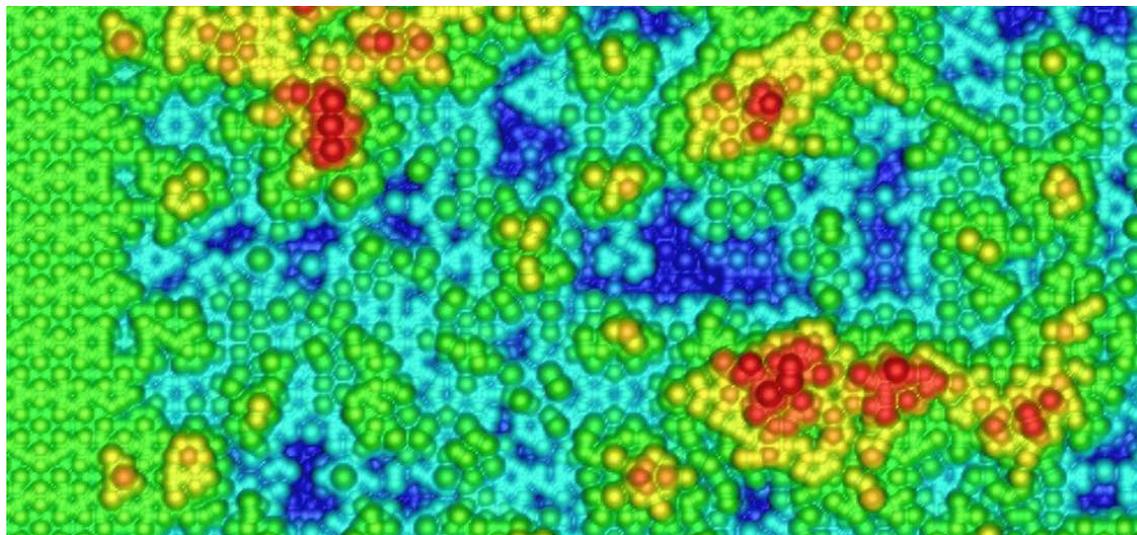


Abbildung 4.9: **Farbkodierte Darstellung der abgetasteten Bruchoberfläche** (Ausschnitt). Durch geometrische Abtastung der Oberfläche ergibt sich die Abtasthöhe in Abhängigkeit von Gitterpunkten in der  $x$ - $z$ -Ebene. Die Höhe ist in  $y$ -Richtung (diese zeigt aus der Zeichenebene heraus) aufgetragen und farbkodiert dargestellt. Mit zunehmender Höhe verändert sich die Farbe von Blau über Türkis, Grün und Gelb nach Rot.

(vgl. hierzu auch Abbildung 4.3). Diese Cluster können nun beispielsweise direkt zusammen mit der Risslippe gezeigt werden. Eine andere Möglichkeit besteht darin, die Cluster zusammen mit den geometrisch abgetasteten Oberflächen darzustellen. Stellt man nur die Bruchoberflächen und die Cluster in der relaxierten Ausgangskonfiguration dar, sieht man direkt, wo die Cluster durchbrochen wurden. Diese Vorgehensweise ist in Abbildung 4.10 veranschaulicht. Zunächst werden die Atompositionen der beiden Risshälften in der relaxierten Ausgangskonfiguration über die Atomnummern bestimmt. Dann werden die beiden Bruchoberflächen geometrisch abgetastet, wie in Kapitel 4.4 beschrieben. Nun werden die Cluster in der Probe identifiziert. Cluster mit einem Mittelpunkt oberhalb des Risses werden der oberen Risshälfte, die anderen Cluster der unteren Risshälfte zugeordnet. Nun werden alle anderen Atome entfernt. Übrig bleiben also nur noch die beiden abgetasteten Oberflächen und die zugehörigen Cluster. Aufgrund der beschriebenen Trennung werden für eine Auswertung stets beide Rissoberflächen mit ihren Clustern benötigt. Durchtrennte Cluster äußern sich nun durch blaue und rote Atome ober- bzw. unterhalb der abgetasteten Flächen. Ein Ausschnitt einer geometrisch abgetasteten Oberfläche zusammen mit den zugehörigen Clustern ist in Abbildung 4.11 gezeigt.

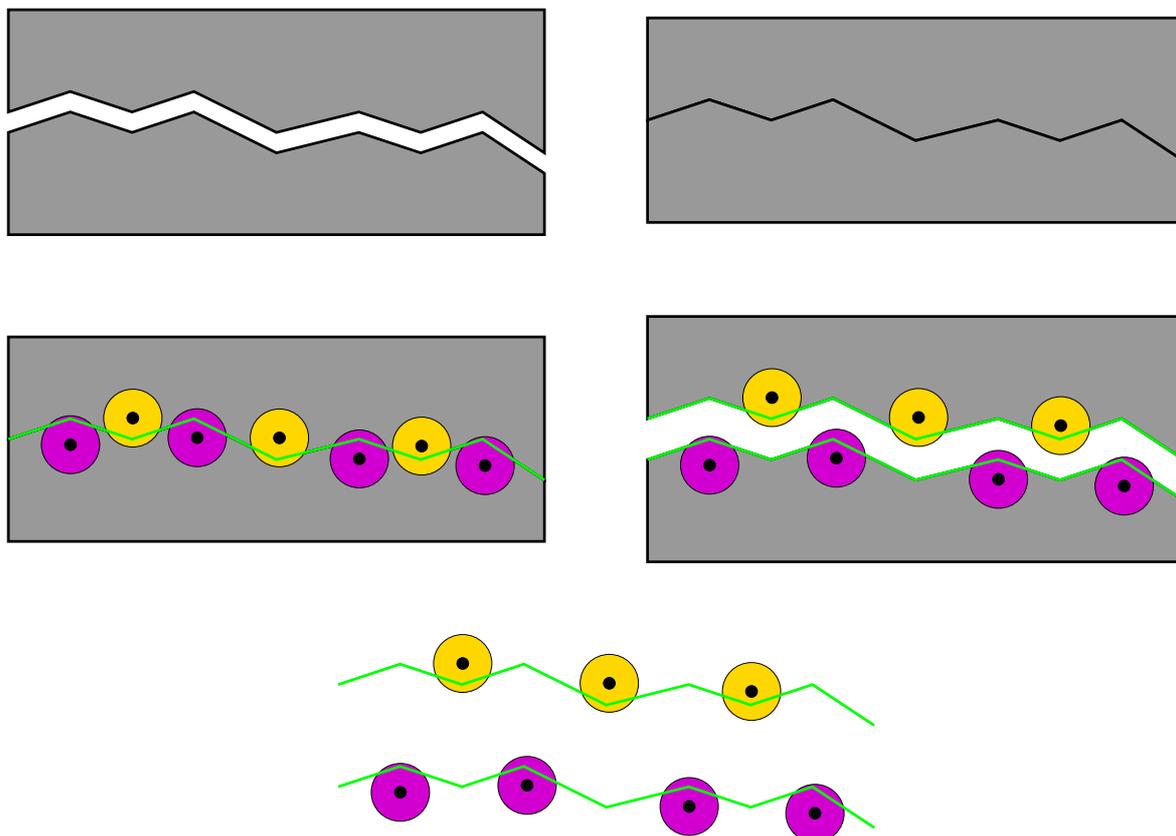


Abbildung 4.10: Visualisierung der Cluster zusammen mit den geometrisch abgetasteten Oberflächen. Links oben ist die durchbrochene Endkonfiguration der Probe wiedergegeben. Nun werden die Atompositionen der beiden Risshälften in der relaxierten Ausgangskonfiguration mit Hilfe der Atomnummern bestimmt. Dies ist rechts oben gezeigt. Daraufhin erfolgt eine geometrische Abtastung der oberen und unteren Rissoberfläche. Das Ergebnis dieser Abtastung ist jeweils als grüne Kurve dargestellt. Außerdem können die Cluster in der relaxierten Struktur — wie in Kapitel 4.5 beschrieben — identifiziert werden. So erklärt sich die mittlere linke Abbildung. In der mittleren rechten Abbildung wurden die Cluster, deren Mittelpunkt sich oberhalb des Risses befinden (gelb dargestellt), mitsamt der oberen Probenhälfte nach oben verschoben. Die anderen Cluster (violett dargestellt) verbleiben auf der unteren Probenhälfte. Entfernt man nun alle Atome, die zu keinem Cluster gehören, erhält man von den Rissoberflächen (grün dargestellt) durchtrennte Cluster. Dies zeigt das untere Bild. Betrachtet man die untere Rissoberfläche von oben und die obere Rissoberfläche von unten, sieht man direkt, wo die Cluster durchtrennt wurden. Aufgrund der beschriebenen Vorgehensweise benötigt man für eine Auswertung stets beide Rissoberflächen mit ihren Clustern.

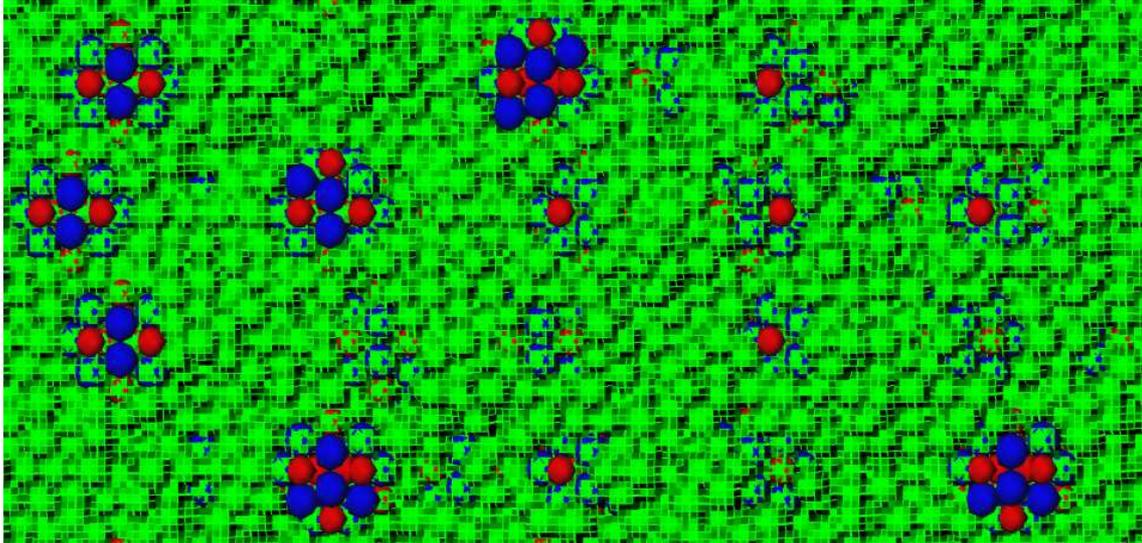


Abbildung 4.11: Ergebnis des in Abbildung 4.10 beschriebenen Vorgehens (Ausschnitt). Durchtrennte Cluster äußern sich durch blaue und rote Atome oberhalb der abgetasteten Fläche (grün dargestellt).

## 4.6 Höhen-Höhen-Korrelationsfunktionen

Um die abgetasteten Rissoberflächen genauer zu untersuchen, kann die folgende Höhen-Höhen-Korrelationsfunktion  $H$  genutzt werden:

$$H(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R} \in \ddot{U}} (y(\mathbf{R}) - y(\mathbf{R} - \mathbf{r}))^2. \quad (4.1)$$

Die durch geometrische Abtastung gewonnenen Höhen  $y(x, z)$  innerhalb eines Kreises in der  $x$ - $z$ -Ebene werden von denen in der  $x$ - $z$ -Ebene um  $\mathbf{r}$  verschobenen Höhen abgezogen und quadriert. Dies geschieht nur, wenn beide Höhen definiert sind, d.h. im Überlappbereich  $\ddot{U}$ . Durch die Anzahl  $N$  der hierbei berücksichtigten Gitterpunkte  $(x, z)$  wird dividiert. Hieraus erhält man den Wert der Höhen-Höhen-Korrelationsfunktion  $H$  für diesen Verschiebungsvektor  $\mathbf{r}$ . Die Berechnung ist nochmals in Abbildung 4.12 verdeutlicht. Kleine Werte  $H(\mathbf{r})$  bedeuten somit, dass das Höhenprofil in einer um  $\mathbf{r}$  verschobenen Konfiguration demjenigen in der unverschobenen Konfiguration stark ähnelt. Demnach ist  $H(\mathbf{r})$  ein gutes Maß für Symmetrien und Überstrukturen in der Bruchoberfläche. In Abbildung 4.13 sind die Werte  $H(\mathbf{r})$  farbkodiert für eine glatt durchschnittene Ebene senkrecht zu einer fünfzähligen Achse wiedergegeben. Gleiche Farben bedeuten gleiche  $H$ -Werte.

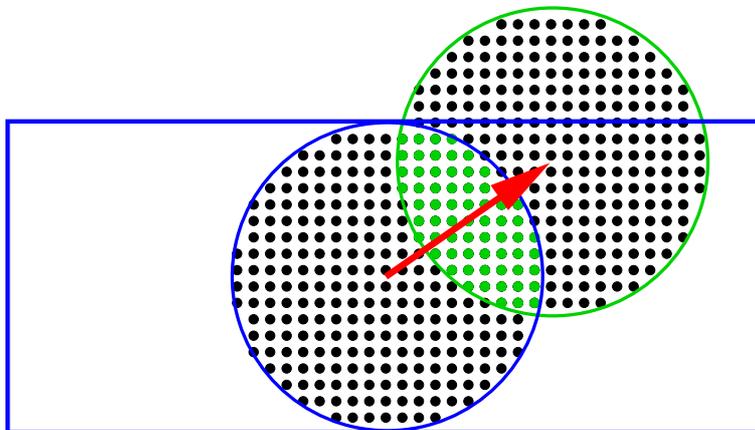


Abbildung 4.12: Berechnung der **Höhen-Höhen-Korrelationsfunktion**. Das blaue Rechteck symbolisiert eine Bruchoberfläche. Innerhalb des blau eingezeichneten Kreises sind die Gitterpunkte gekennzeichnet, an denen die Höhe mittels geometrischer Abtastung bestimmt wurde. Der Inhalt des blauen Kreises wird um den zweidimensionalen, rot dargestellten Gittervektor  $\mathbf{r}$  (in der  $x$ - $z$ -Ebene) verschoben. So erhält man den grünen Kreis. Im Überlappbereich  $\ddot{U}$  der beiden Kreise wird an den grün gekennzeichneten Stellen die quadrierte Differenz der Höhen  $y$  summiert. Zur Normierung wird durch die Anzahl  $N$  der grün dargestellten Gitterpunkte dividiert. Hierdurch erhält man die Höhen-Höhen-Korrelationsfunktion  $H$  für die Verschiebung  $\mathbf{r}$ :  $H(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R} \in \ddot{U}} (y(\mathbf{R}) - y(\mathbf{R} - \mathbf{r}))^2$ .

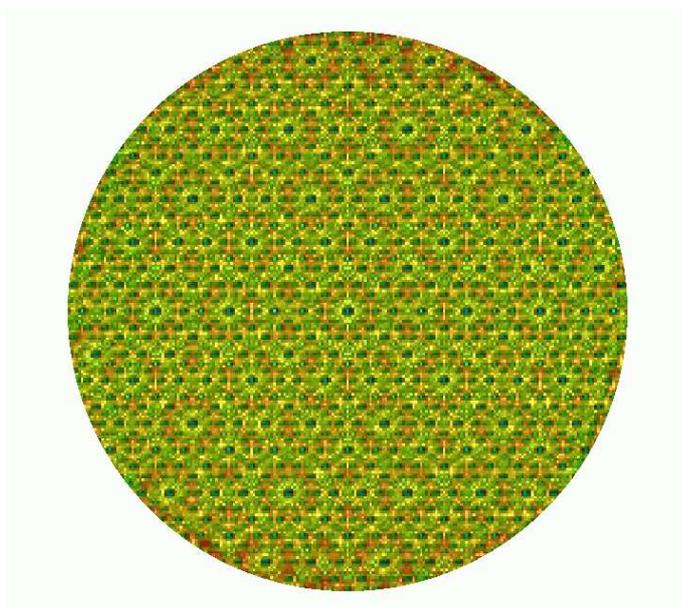


Abbildung 4.13: Farbkodierte Höhen-Höhen-Korrelationsfunktion  $H(\mathbf{r})$  für eine glatt durchschnittene Ebene senkrecht zu einer fünfzähligen Achse. Gleiche Farben bedeuten gleiche  $H$ -Werte. Die Symmetrie der Oberfläche zeigt sich in der Höhen-Höhen-Korrelationsfunktion.

## 4.7 Bindungen

Aus energetischen Gesichtspunkten sind die Anzahl und Richtungen der durchtrennten Bindungen<sup>2</sup> interessant. Die Vorgehensweise zur Zählung der Bindungen ist in Abbildung 4.14 wiedergegeben. Links oben ist eine Endkonfiguration mit Riss dargestellt. Links unten eine Konfiguration, die auf der vorgewählten Rissebene glatt durchtrennt wurde. Rechts wurden die Positionen der Atome dieser Konfigurationen in den relaxierten Ausgangszustand zurückversetzt. Außerdem wurden die Atomtypen 0 und 1 oberhalb des Risses in 2 und 3 umbenannt. Um nur Bindungen zwischen der oberen und der unteren Risshälfte

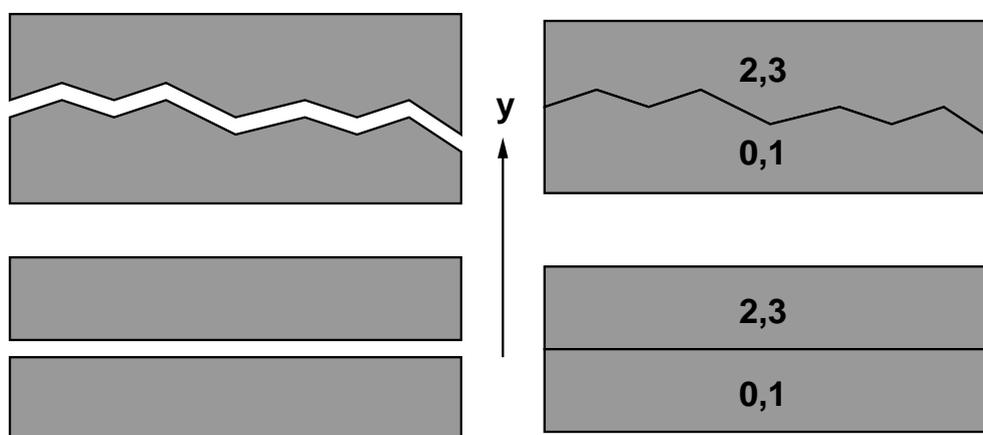


Abbildung 4.14: Dargestellt sind eine Endkonfiguration mit Riss (links oben) und eine Konfiguration, die auf der vorgewählten Rissebene glatt durchtrennt wurde (links unten). In der rechten Abbildung wurden die Positionen der Atome dieser Konfigurationen in den relaxierten Ausgangszustand zurückversetzt. Zudem sind die Atomtypen 0 und 1 oberhalb des Risses jeweils in 2 und 3 umbenannt worden. So können Bindungen zwischen der oberen und der unteren Risshälfte erfasst werden.

zu erfassen, wurde die Kraftroutine des MD-Programmes geändert. Erfolgt eine Kraftberechnung zwischen Atomtypen der oberen und unteren Risshälfte, werden die Bindungspartner mit Typnummer und Koordinaten sowie der Bindungsenergie ausgegeben. So kann beispielsweise die Anzahl der gebrochenen verschiedenartigen Bindungen in den beiden Konfigurationen verglichen werden. Die Bindungslänge erhält man aus der Differenz der ausgegebenen Atomkoordinaten. Diese ist auf nächste Nachbarabstände ( $< 1.5r_{qc}$ ) beschränkt. Da keine Bindungsrichtung ausgezeichnet ist, kann man diese so wählen, dass sie in positive  $y$ -Richtung zeigt. Unter Beachtung des Vorzeichens des Arcuscosinus können die so entstandenen Vektoren dann in Kugelkoordinaten ausgedrückt werden. Trägt man die Anzahl gebrochener Bindungen über  $\varphi$  und  $\vartheta$  ab, erhält man die Richtungsabhängigkeit der durchtrennten Bindungen. Dieses Vorgehen ist in Abbildung 4.15 gezeigt.

<sup>2</sup>Eine Bindung wird als gebrochen oder durchtrennt angesehen, wenn sich ein Bindungspartner oberhalb und einer unterhalb des Risses befindet.

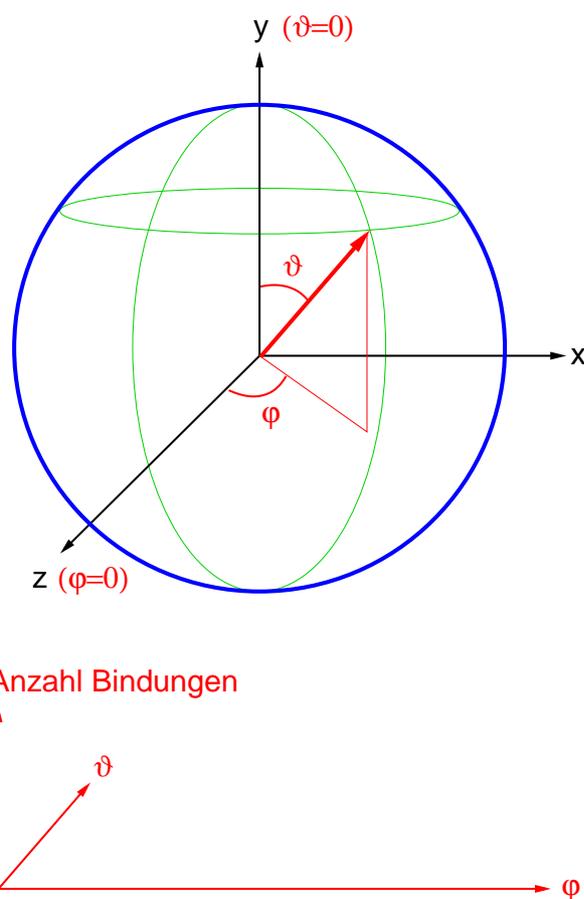


Abbildung 4.15: Die Bindungsrichtung der gebrochenen Bindungen wird so gewählt, dass sie in positive  $y$ -Richtung zeigt. Die so entstandenen Vektoren werden in Kugelkoordinaten umgerechnet. Dies ist in der oberen Abbildung gezeigt. Die Rissausbreitungsrichtung  $x$  entspricht hierbei  $\varphi = \vartheta = \pi/2$ . Trägt man die Anzahl der gebrochenen Bindungen über  $\varphi$  und  $\vartheta$  ab, erhält man die Richtungsabhängigkeit der durchtrennten Bindungen. Dies ist in der unteren Abbildung schematisch dargestellt.

# Kapitel 5

## Simulationen und Ergebnisse

Nachdem in Kapitel 3 die Methoden der Molekulardynamik (MD) für die durchgeführten Rissimulationen und in Kapitel 4 geeignete Visualisierungsmethoden präsentiert wurden, werden nun die Simulationen und ihre Ergebnisse vorgestellt.

### 5.1 Zeitschritt und Einsteinfrequenz

Um Molekulardynamiksimulationen durchführen zu können, muss zunächst der Zeitschritt  $\delta t$  aus Kapitel 3.2 festgelegt werden. Außerdem ist die in Gleichung (3.30) vorkommende Einsteinfrequenz  $\omega_E$  zu bestimmen.

Für die Festlegung des **Zeitschrittes** wird ein Approximant eines Quasikristalles im mikrokanonischen Ensemble von einer geringen vorgegebenen Anfangstemperatur aus relaxiert. Hierbei werden die zugehörigen Energiewerte der Probe für jeden Zeitschritt ausgegeben. Nun wird das Frequenzspektrum mit Hilfe der Fouriertransformation betrachtet. Verschwindet das Spektrum für große Frequenzen nicht, muss die Simulation mit einem kleineren Zeitschritt wiederholt werden, ansonsten kann über die höchste Frequenz  $\omega_{\max}$  der Zeitschritt festgelegt werden:

$$\delta t \approx \frac{1}{50} \left( \frac{2\pi}{\omega_{\max}} \right). \quad (5.1)$$

Für die Simulationen wurde folgender Zeitschritt gewählt:

$$\delta t^{\text{IMD}} = 0.002t_0. \quad (5.2)$$

Hierbei ist  $t_0$  die Einheit der Zeit in der MD-Simulation (siehe hierzu Anhang B).

Die **Einsteinfrequenz** ist durch Gleichung (3.34) gegeben. Sie ist die Frequenz, mit der ein Atom im mittleren Kraftfeld seiner Nachbaratome in harmonischer Näherung schwingen würde. Sie lässt sich nach Gleichung (3.34) aus der gemittelten Kraft und der Temperatur

berechnen. MD-Simulationen liefern:

$$\omega_E^{\text{IMD}} \approx 23t_0^{-1}. \quad (5.3)$$

## 5.2 Elastische Konstanten

Vernachlässigt man die Phonon-Phason-Kopplung in ikosaedrischen Quasikristallen (siehe hierzu [94]), kann man die lineare Elastizitätstheorie aus Anhang A direkt anwenden. Setzt man zunächst eine kubische Gittersymmetrie an, folgt die Existenz dreier unabhängiger elastischer Konstanten (siehe Anhang A). Um diese zu bestimmen, wurden drei unabhängige Verzerrungen folgender Form [40] benutzt:

$$\underline{\underline{\epsilon}}_i = \begin{pmatrix} e_{i,1} & e_{i,6}/2 & e_{i,5}/2 \\ e_{i,6}/2 & e_{i,2} & e_{i,4}/2 \\ e_{i,5}/2 & e_{i,4}/2 & e_{i,3} \end{pmatrix}, \quad i \in \{I, II, III\}. \quad (5.4)$$

Der erste Verzerrungstensor ist durch  $e_{I,1} = e_{I,2} = e_I$  und  $e_{I,3} = -2e_I$  gegeben, der zweite durch  $e_{II,1} = e_{II,2} = e_{II}$  und der dritte durch  $e_{III,6} = e_{III}$ . Nicht genannte Komponenten verschwinden. Für diese drei Relationen ergeben sich die drei elastischen Energiedichten  $E_{I,\text{elast}} = 3(C_{11} - C_{12})e_I^2$ ,  $E_{II,\text{elast}} = (C_{11} + C_{12})e_{II}^2$  und  $E_{III,\text{elast}} = \frac{1}{2}C_{44}e_{III}^2$ . Mit Hilfe der MD können nun über linear ansteigende  $e_i$  Parabeln an die ausgegebenen Energiewerte gefittet werden. Hieraus lassen sich die elastischen Moduln  $C_{ij}$  und die Anisotropiekonstante  $\tilde{A}$  bestimmen. Es ergibt sich:

$$C_{11} \approx 146 \frac{\epsilon_{00}}{r_{\text{qc}}^3}, \quad C_{12} \approx 67 \frac{\epsilon_{00}}{r_{\text{qc}}^3}, \quad C_{44} \approx 40 \frac{\epsilon_{00}}{r_{\text{qc}}^3}, \quad \tilde{A} \approx 1.0. \quad (5.5)$$

Die Fitfehler der Koeffizienten der elastischen Energiedichten lagen hierbei unter einem Prozent. Größere Fehlergrenzen entstehen, wenn man verschieden relaxierte Proben als Ausgangskonfigurationen benutzt. Die Fehler sollten hierbei jedoch unter zehn Prozent liegen. Die Absolutwerte sind aufgrund der angesetzten Modellpotentiale auch von geringerem Interesse. Wesentlich an obigen Ergebnissen ist vor allem, dass die Anisotropie eins ist. Der untersuchte ikosaedrische Modellquasikristall kann also sehr gut durch ein linear isotrop homogenes Medium beschrieben werden.

## 5.3 Ikosaedersymmetrie

Um die Ikosaedersymmetrie des betrachteten Quasikristalles zu verdeutlichen, ist in Abbildung 5.1 ein Ikosaeder dargestellt. Er wird durch 20 gleichseitige Dreiecke begrenzt. **Fünffählige Achsen** ergeben sich als Vektoren vom Mittelpunkt zu den Ecken des Ikosaeders (in Abbildung 5.1 blau dargestellt), **zweizählige Achsen** als Vektoren vom Mittelpunkt zu den Kantenmitten des Ikosaeders (in Abbildung 5.1 rot dargestellt). **Pseudozweizählige Achsen** stehen senkrecht auf zwei- und fünffähligen Achsen (in Abbildung

5.1 grün dargestellt). **Dreizählige Achsen** ergeben sich als Vektoren vom Mittelpunkt des Ikosaeders zu den Flächenmitten der gleichseitigen Dreiecke. Pseudo-zweizählige Achsen sind gegenüber dreizähligen Achsen um etwa  $10.8^\circ$  verkippt. Ebenen, senkrecht zu denen Beugungsbilder eine  $n$ -zählige Symmetrie aufweisen, werden kurz auch  $n$ -zählige Ebenen genannt.

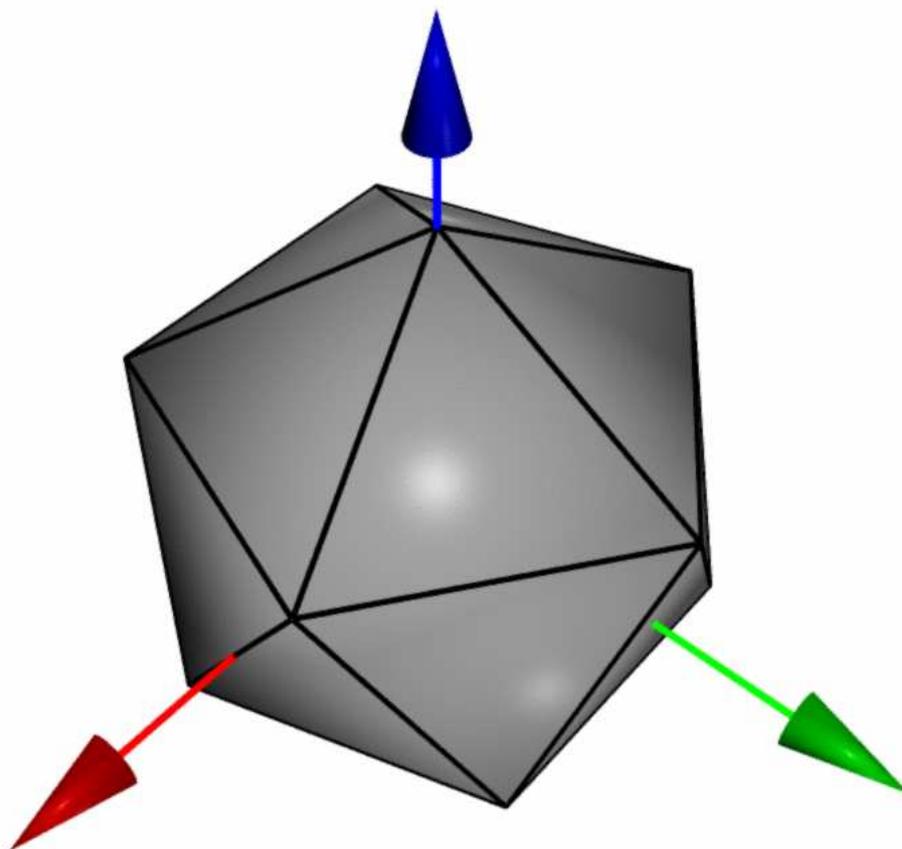


Abbildung 5.1: Ein **Ikosaeder** wird durch 20 gleichseitige Dreiecke begrenzt. Fünfzählige Achsen sind blau, zweizählige Achsen sind rot und pseudo-zweizählige Achsen sind grün dargestellt. Letztere sind dadurch definiert, dass sie senkrecht zu zwei- und fünfzähligen Achsen sind. Dreizählige Achsen ergeben sich als Vektoren vom Mittelpunkt des Ikosaeders zu den Flächenmitten der gleichseitigen Dreiecke, zweizählige Achsen als Vektoren vom Mittelpunkt zu den Kantenmitten des Ikosaeders und fünfzählige Achsen als Vektoren vom Mittelpunkt zu den Ecken des Ikosaeders.

## 5.4 Bruchebenen

Nachdem in Kapitel 1.4 die Generierung von Quasigittern und rationalen Approximanten erklärt und in Kapitel 1.5.4 die Dekoration im simulierten binären ikosaedrischen Modell vorgestellt wurde, muss nun die Frage beantwortet werden, wo der Riss einzubauen ist. Hierzu wurde ein Modellquasikristall senkrecht zu verschiedenen Achsen für verschiedene Höhen in Achsenrichtung durchschnitten und mit Hilfe der MD die zugehörige Oberflächenenergie berechnet. Dies ist in Abbildung 5.2 gezeigt. Schnitte senkrecht zu zweizähligen Achsen (in Abbildung 5.2 rot dargestellt) weisen an bestimmten Stellen die tiefsten Minima der Oberflächenenergie auf. Ähnlich tiefe Minima ergeben sich senkrecht zu fünfzähligen Achsen (in Abbildung 5.2 blau dargestellt). Die Oberflächenenergien senkrecht zu anderen Achsen zeigen keine so ausgeprägte Struktur von Minima und Maxima in den Energien.

Bei einer fest vorgegebenen kritischen Energiefreisetzungsrate ist nach Griffith (siehe Kapitel 2.1) Rissfortschritt in der Ebene am wahrscheinlichsten, in der die geringste Oberflächenenergie aufzuwenden ist. Demnach sind Ebenen mit minimalen Oberflächenenergien senkrecht zu zwei- und fünfzähligen Achsen bevorzugte Bruchebenen. In Abbildung

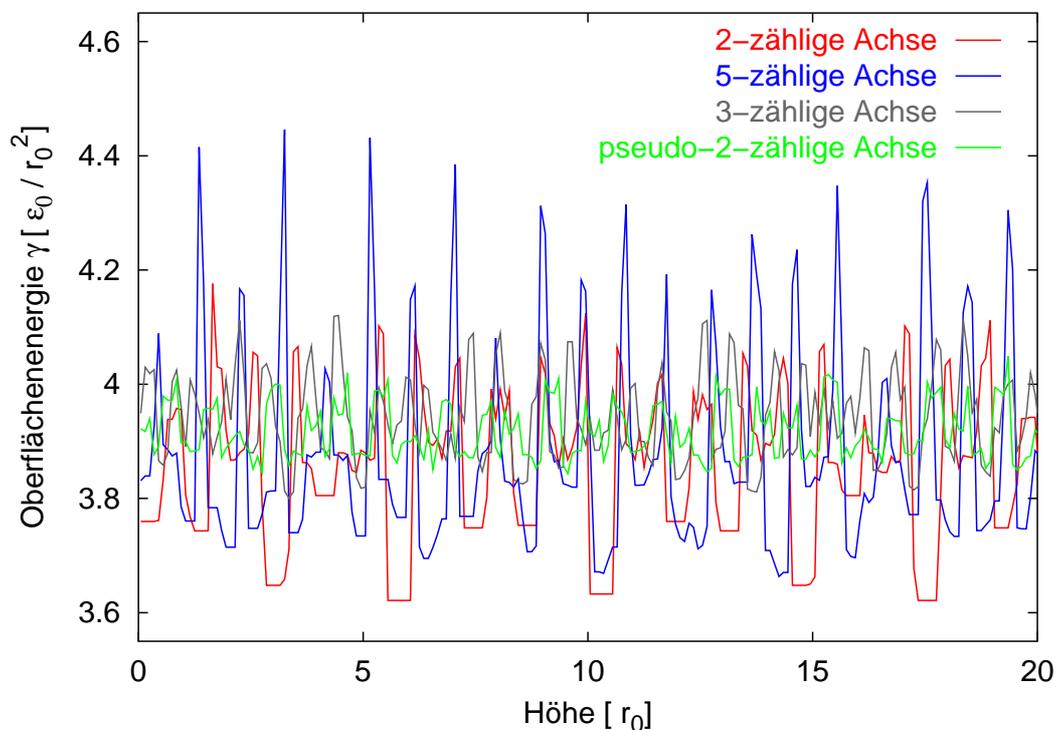


Abbildung 5.2: Der Verlauf der Oberflächenenergie für Schnitte senkrecht zu zwei-, fünf-, drei- und pseudo-zweizähligen Achsen. Senkrecht zur  $n$ -zähligen Achse in der jeweiligen Höhe  $h$  wurde die Probe durchtrennt. Anschließend wurde mit Hilfe der Molekulardynamik die zugehörige Oberflächenenergie bestimmt.

5.3 ist die Oberflächenenergie senkrecht zu einer zweizähligen Achse nochmals in rot eingezeichnet. Zudem ist das Histogramm der Atompositionen entlang dieser Achse in grün wiedergegeben. Es zeigt sich eine Ebenenstruktur mit Bereichen, in denen sich keine Atome befinden. Die Minima der Oberflächenenergie fallen mit diesen Bereichen zusammen. Die Oberflächenenergie weist also eine starke Abhängigkeit von der Ebenenstruktur des Quasikristalles auf.

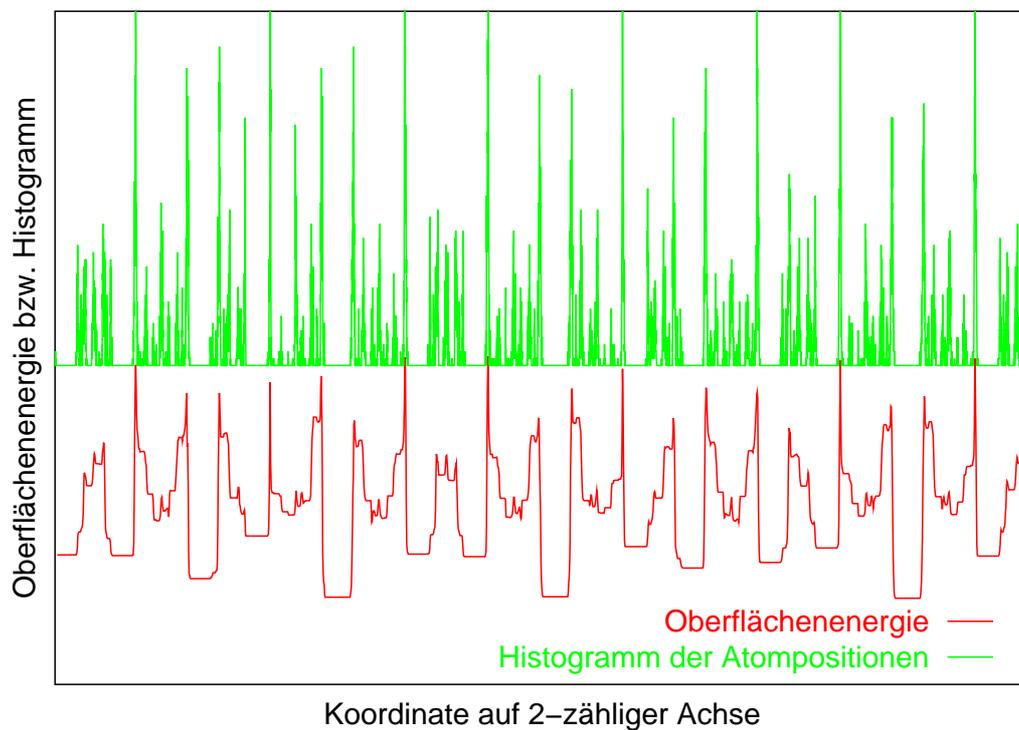


Abbildung 5.3: Einfluss der Ebenenstruktur des Quasikristalles auf die Oberflächenenergie. Die Oberflächenenergie senkrecht zu einer zweizähligen Achse aus Abbildung 5.2 ist hier nochmals in rot, das Histogramm der Atompositionen entlang dieser Achse in grün dargestellt.

## 5.5 Ausgangskonfigurationen

In Abbildung 5.4 ist gezeigt, wie man Ausgangskonfigurationen für die Rissimulationen erhält. Zunächst wird — wie in den Kapiteln 1.4 und 1.5.4 beschrieben — ein Approximant des Quasikristalles generiert. Aufgrund seiner Größe (vier bis fünf Millionen Atome) kann der Approximant in Bezug auf seine physikalischen Eigenschaften als Quasikristall angesehen werden, es können aber zudem periodische Ränder genutzt werden.

Nun verschiebt man eine Fläche minimaler Oberflächenenergie in die Mitte der Probe. Danach werden die Koordinaten so skaliert, dass der Druck minimal wird. Anschließend wird etwa 10 000 Zeitschritte mit globaler Konvergenz (siehe Kapitel 3.7.2) und periodischen Rändern in allen drei Raumrichtungen relaxiert. Die Atomtypen von Atomen, die einen kleineren Abstand als  $2.5r_{qc}$  von den  $x$ - $z$ - und  $y$ - $z$ -Randebenen haben, werden in virtuelle Typen umgewandelt (in Abbildung 5.4 blau gekennzeichnet). Hierdurch kann man sie in der Kraftberechnung wie zuvor berücksichtigen und gleichzeitig aufgrund ihres anderen Typs festhalten.

Durch elastische Dehnung in  $y$ -Richtung (in Abbildung 5.4 nach oben abgetragen) kann mit Hilfe der MD ermittelt werden, wann die zugehörige elastische Energiefreisetzungsrate der Oberflächenenergie der mittig eingebauten Sollrissfläche entspricht. Diese Dehnung wird für den Einbau eines elliptischen Risses (siehe hierzu Abbildung 5.5) übernommen. Er wird anschließend etwa 20 000 Schritte mit globaler Konvergenz und periodischen Rändern in  $z$ -Richtung (in Abbildung 5.4 senkrecht zur Zeichenebene) relaxiert.

Nun werden je 5 000 Schritte mit der relaxierten Probe mit Riss und der relaxierten Probe ohne Riss mit den Gleichungen aus Kapitel 3.7.3, einem Stadionfunktionswert von  $d = 1$  und einer vorgegebenen Temperatur  $T_0$ , die etwa dem  $10^{-4}$ -fachen der Schmelztemperatur entspricht, gerechnet. Durch Vergleich der Atompositionen in den beiden so erhaltenen (in Abbildung 5.4 rot gekennzeichneten) Konfigurationen gewinnt man das Verschiebungsfeld, das durch den Riss hervorgerufen wurde. Durch Skalierung dieses Verschiebungsfeldes ändert man nach Gleichung (2.5) den Spannungsintensitätsfaktor  $K$ . Da in diesen die von außen angelegte Spannung linear eingeht (siehe Kapitel 2.2), kann eine Skalierung des Verschiebungsfeldes als eine Erhöhung einer von außen angelegten Spannung um diesen Faktor interpretiert werden.

Der **reduzierte Spannungsintensitätsfaktor**  $k$  sei hier definiert als Verhältnis des Spannungsintensitätsfaktors  $K$  zum kritischen Spannungsintensitätsfaktors  $K_{\text{Griffith}}$  bei der Griffithlast (siehe Kapitel 2.1 und 2.2):

$$k = \frac{K}{K_{\text{Griffith}}}. \quad (5.6)$$

Durch Skalierung des errechneten Verschiebungsfeldes mit dem reduzierten Spannungsintensitätsfaktor  $k$  erhält man so die Ausgangskonfiguration für diesen  $k$ -Wert. Mit der

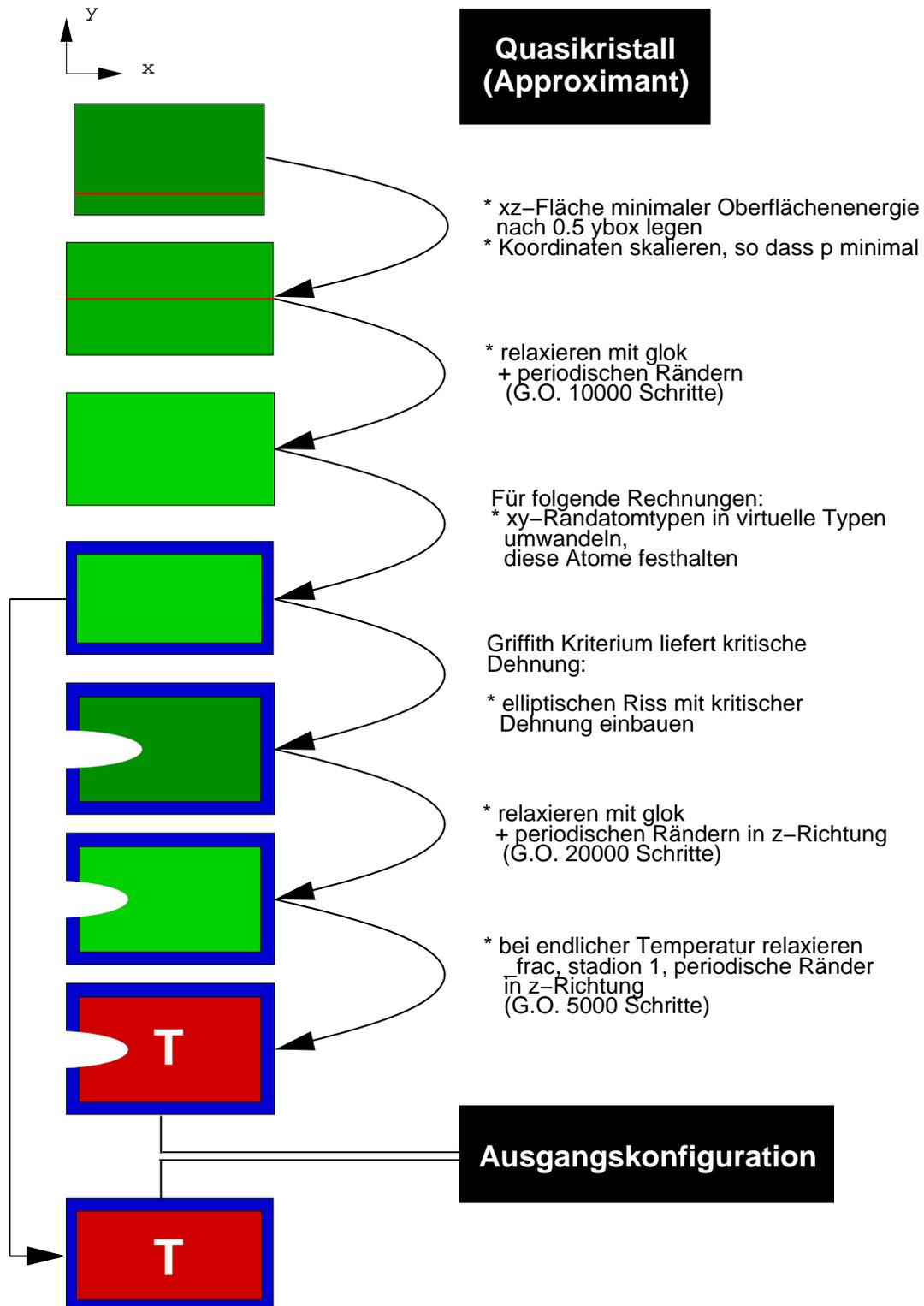


Abbildung 5.4: Schematisch dargestellte Abfolge der Simulationsschritte zur Generierung von Ausgangskonfigurationen für die Rissimulationen. Diese Abbildung wird in Kapitel 5.5 erläutert.

so gewonnenen Ausgangskonfiguration, den Gleichungen aus Kapitel 3.7.3, einem angepassten Stadion und periodischen Rändern in  $z$ -Richtung wird typischerweise etwa 60 000 Zeitschritte lang simuliert. Eine solche Rissimulation für einen  $k$ -Wert und eine Orientierung dauert auf Dual-Prozessor Athlon 1900+ PCs etwa zwei Wochen. Vor allem die Relaxationen wurden auch mit bis zu 96 Prozessoren parallel auf der Cray T3E gerechnet.

## 5.6 Orientierungen

Rissimulationen für verschiedene  $k$ -Werte senkrecht zu zwei-, fünf- und pseudo-zweizähligen Achsen wurden durchgeführt. Zudem wurden unterschiedliche Ausbreitungsrichtungen in Ebenen senkrecht zu zwei- und fünfzähligen Achsen untersucht. Hierzu wurden Approximanten des simulierten Quasikristalles generiert, deren Seitenlängen  $L_i, i \in \{x, y, z\}$  (siehe hierzu Abbildung 3.2) sich etwa wie folgt verhalten:

$$L_x : L_y : L_z \approx 450r_{\text{qc}} : 150r_{\text{qc}} : 70r_{\text{qc}}. \quad (5.7)$$

Hierurch erhält man Konfigurationen mit vier bis fünf Millionen Atomen. Diese mussten teilweise gedreht und verschoben werden, um die angestrebte Geometrie zu gewährleisten. Wurde kein Approximant einer passenden Größe gefunden, wurde der nächstgrößere Approximant relaxiert und ein entsprechender Teil ausgeschnitten. Das Anlegen periodischer Ränder in  $z$ -Richtung musste hierbei weiterhin möglich bleiben.

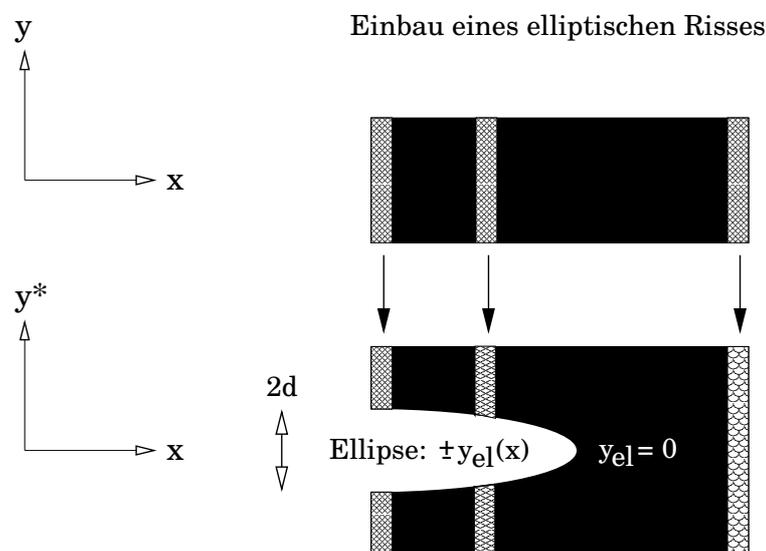
Um die gewählten Orientierungen zu repräsentieren, wird die Achse  $A$ , senkrecht zu der die Rissebene gewählt wurde, und die Rissausbreitungsrichtung  $R$  benutzt. Hiermit erklärt sich folgende Notation:

$$A_R. \quad (5.8)$$

Die vorgegebenen Rissebenen sind:

- Ebenen senkrecht zu einer zweizähligen Achse mit einer Rissausbreitungsrichtung in Richtung einer zweizähligen Achse ( $2_2$ ).
- Ebenen senkrecht zu einer zweizähligen Achse mit einer Rissausbreitungsrichtung in Richtung einer fünfzähligen Achse ( $2_5$ ).
- Ebenen senkrecht zu einer fünfzähligen Achse mit einer Rissausbreitungsrichtung in Richtung einer zweizähligen Achse ( $5_2$ ).
- Ebenen senkrecht zu einer fünfzähligen Achse mit einer Rissausbreitungsrichtung in Richtung einer pseudo-zweizähligen Achse ( $5_{p2}$ ).
- Ebenen senkrecht zu einer pseudo-zweizähligen Achse mit einer Rissausbreitungsrichtung in Richtung einer fünfzähligen Achse ( $p2_5$ ).

Die letzten beiden Rissebenen sollten nach Kapitel 2.7.2 für Versetzungsemission günstig orientiert sein.



$$y \geq 0 : \quad y^* = y + y_{el} + (d - y_{el}) \frac{y_{el} - y}{y_{el} - y_{\max}}$$

$$y < 0 : \quad y^* = y - y_{el} - (d - y_{el}) \frac{y_{el} + y}{y_{el} - y_{\max}}$$

Abbildung 5.5: Einbau eines elliptischen Risses mit kritischer Dehnung. Das angesetzte Verschiebungsfeld genügt innerhalb der markierten Streifen der linearen Elastizitätstheorie. Am linken Rand sind die markierten Stellen völlig relaxiert, am rechten Rand maximal linear elastisch gedehnt. Die entsprechenden Gleichungen für den eingebauten Riss sind ebenfalls wiedergegeben. Um ein realistisches Verschiebungsfeld des Risses zu erhalten, wird der eingebaute Riss mit globaler Konvergenz relaxiert.

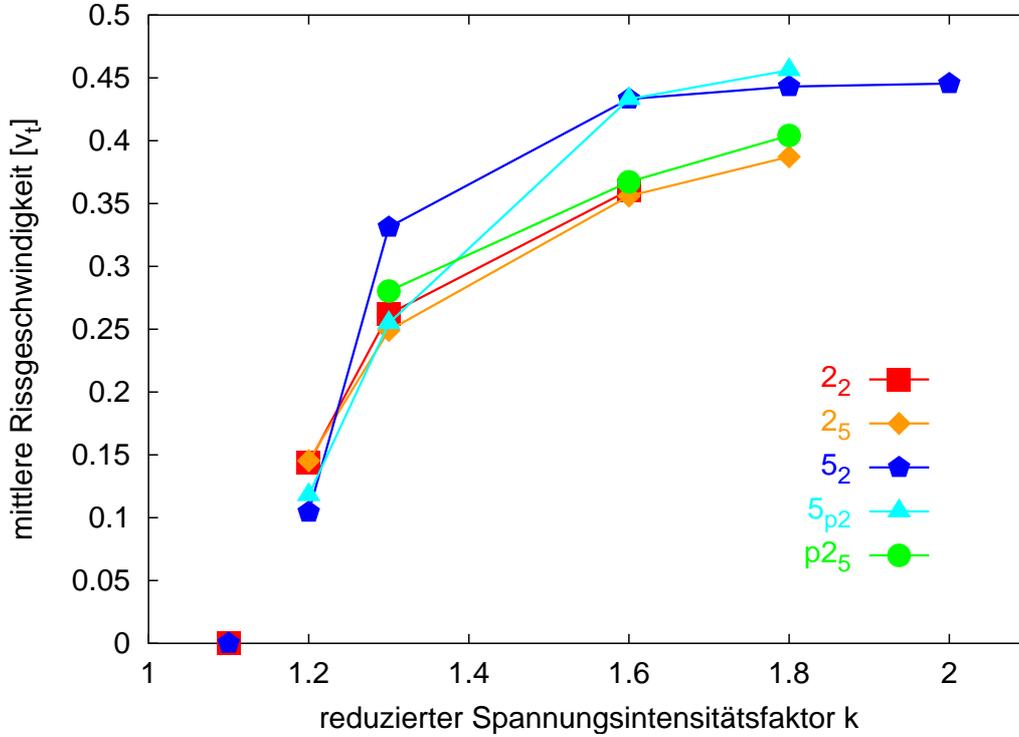


Abbildung 5.6: Abhängigkeit der mittleren Rissgeschwindigkeit vom reduzierten Spannungsintensitätsfaktor  $k$  für verschiedene Orientierungen des Quasikristalles. Die Rissgeschwindigkeit ist in Einheiten der Ausbreitungsgeschwindigkeit der transversalen Wellen des linear elastischen Kontinuums angegeben. Die Notation für die Orientierungen der Proben wird in Kapitel 5.6 erklärt, die Abbildung in Kapitel 5.7 erläutert.

## 5.7 Rissgeschwindigkeiten

Wie in Kapitel 4.3 beschrieben, kann mit Hilfe der Risslippen die mittlere Rissgeschwindigkeit ermittelt werden. Hierzu wurde im Zeitintervall<sup>1</sup>  $20t_0$  bis  $100t_0$  für die Maxima der  $x$ -Koordinaten der Risslippenatome des Typs 0 eine Ausgleichsgerade bestimmt. Für die in Kapitel 5.6 beschriebenen Orientierungen ergeben sich die in Abbildung 5.6 eingezeichneten Abhängigkeiten der Rissgeschwindigkeit vom reduzierten Spannungsintensitätsfaktor  $k$ . Für die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Transversalwellen des linear elastischen Kontinuums ergibt sich nach Kapitel 5.2 und Anhang A:

$$v_T = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \approx 6.5 \frac{r_{qc}}{t_0}. \quad (5.9)$$

Durch die Berechnung von  $v_T$  mit Hilfe von  $C_{44}$  gelten für die Fehlergrenzen von  $v_T$  die Aussagen von Kapitel 5.2. Die Ausgleichsgeraden zur Ermittlung der mittleren Rissge-

<sup>1</sup>Zu Beginn der Simulation soll gelten:  $t = 0t_0$ .

schwindigkeit ergeben eine Ungenauigkeit für die mittlere Rissgeschwindigkeit von maximal 2 Prozent des Absolutwertes. Durch die Definition der Griffithlast für  $k = 1$  entsteht für  $k$  ein zusätzlicher Fehler von ca.  $\pm 0.1$ , da die Griffithlast vom Relaxationszustand der Ausgangskonfiguration abhängt. Aufgrund der angesetzten Potentiale ist — wie bereits in Kapitel 5.2 angeführt — vor allem das qualitative Verhalten der Rissgeschwindigkeit von Interesse. Unterhalb von etwa  $k = 1.2$  wurde keine Rissausbreitung beobachtet. Es existiert zudem eine minimale Rissausbreitungsgeschwindigkeit

$$v_{\text{Riss.min}} \approx 0.1v_{\text{T}}. \quad (5.10)$$

D.h. Risse breiten sich mindestens mit dieser Geschwindigkeit aus. Außerdem ergibt sich eine maximale Rissgeschwindigkeit

$$v_{\text{Riss.max}} \approx 0.45v_{\text{T}}, \quad (5.11)$$

oberhalb derer keine Rissausbreitung möglich ist. Es zeigt sich demnach das in den Kapiteln 2.4, 2.5 und 2.6 beschriebene Verhalten der Rissgeschwindigkeit auch in den hier durchgeführten Simulationen. Die ermittelten Werte der Rissgeschwindigkeiten sind im erlaubten Geschwindigkeitsbereich für jede Orientierung in Abbildung 5.6 durch farbige Linien verbunden.

## 5.8 Bruchoberflächen

An den Rändern reflektierte Phononen können störenden Einfluss auf die Rissoberfläche und den Rissfortschritt haben, weshalb in Kapitel 3.7.3 die Stadiondämpfung eingeführt wurde. Aus der Geschwindigkeit der longitudinalen Wellen des linear elastischen Kontinuums und der Probengröße lässt sich abschätzen, dass reflektierte Phononen die Rissfront etwa nach 6 000 Zeitschritten wieder erreichen würden, gäbe es keine Dämpfung. In dieser Zeit wäre der Riss für  $k = 1.3$  nur etwa  $20r_{\text{qc}}$  vorangekommen. Die durchgeführten Rissimulationen dauern typischerweise zehnmal so lang. Die Rissoberflächen sind dementsprechend für  $k = 1.3$  etwa  $200r_{\text{qc}}$  lang.

Die Bruchoberflächen für die verschiedenen Orientierungen und reduzierten Spannungsintensitätsfaktoren wurden, wie in Kapitel 4.4 beschrieben, abgetastet und sind in den folgenden Abbildungen 5.7 - 5.11 dargestellt. Die Ausbreitungsrichtung des Risses — die  $x$ -Richtung — verläuft von oben nach unten. Die Höhe ist derart farbkodiert, dass hohe Bereiche ( $\geq +2r_{\text{qc}}$ ) rot und tiefe Bereiche ( $\leq -2r_{\text{qc}}$ ) blau erscheinen. Die mittlere Höhe ( $0r_{\text{qc}}$ ) ist in grün wiedergegeben. Die Längeneinheiten sind auf der  $x$ - und der  $z$ -Achse durch schwarze Striche im Abstand  $10r_{\text{qc}}$  gekennzeichnet. Die jeweils linken Teilabbildungen zeigen die Bruchoberflächen für  $k = 1.3$ , die rechten Teilabbildungen die Bruchoberflächen für  $k = 1.6$ . Für alle Orientierungen und  $k$ -Werte ist ein gleichgroßer Ausschnitt der Bruchoberfläche dargestellt. Der als ebene Fläche eingebaute Riss ist am oberen Rand in der jeweiligen Abbildung deutlich sichtbar.

Die MD-Simulationen liefern für den dynamischen Rissfortschritt auf Clusterdimensionen raue Bruchoberflächen. Außerdem erscheinen die Bruchoberflächen für  $k = 1.6$  rauer als für  $k = 1.3$ . Es zeigen sich zudem Strukturen in den Bruchoberflächen, die bestimmte Richtungen und Winkel auszeichnen. Jene wurden mit Hilfe der Höhen-Höhen-Korrelationsfunktionen (siehe Kapitel 5.10) näher untersucht.

Die geringere Rissgeschwindigkeit für  $k = 1.3$  gegenüber  $k = 1.6$  für dieselbe Orientierung (siehe Kapitel 5.7) äußert sich im unteren Bereich der linken Teilabbildungen der Abbildungen 5.8 bis 5.11 durch die undurchbrochenen, rot gekennzeichneten Bereiche.

Die Abbildungen 5.7 und 5.8 zeigen Bruchoberflächen senkrecht zu zweizähligen Achsen, die Abbildungen 5.9 und 5.10 Bruchoberflächen senkrecht zu fünfzähligen Achsen. Es ist festzustellen, dass sich deutliche Unterschiede für die verschiedenen Ausbreitungsrichtungen in derselben Ebene ergeben. Während in Abbildung 5.7 Höhenstrukturen in einem Winkel von  $\approx \pm 32^\circ$  — gemessen von der Rissausbreitungsrichtung aus — zu sehen sind, ist in Abbildung 5.8 nur einer dieser Winkel ausgebildet. Abbildung 5.9 zeigt relativ ebene Bruchflächen mit geringer Rauigkeit, während in Abbildung 5.10 deutliche Stufen in der Bruchoberfläche für  $k = 1.3$  erkennbar sind. Dieses Stufenverhalten (siehe hierzu auch Abbildung 5.12) ergibt sich nur für geringe Lasten in der genannten Orientierung.

Die Bruchoberflächen — bzw. die Oberflächen der Stufen — weisen für Orientierungen senkrecht zu den zwei- und fünfzähligen Achsen eine konstante mittlere Höhe auf. Das ist für Bruchebenen senkrecht zu pseudo-zweizähligen Achsen (siehe Abbildung 5.11) nicht der Fall. Die Rissausbreitung erfolgte für alle Orientierungen spröde. Emission von Versetzungen konnte nicht beobachtet werden.

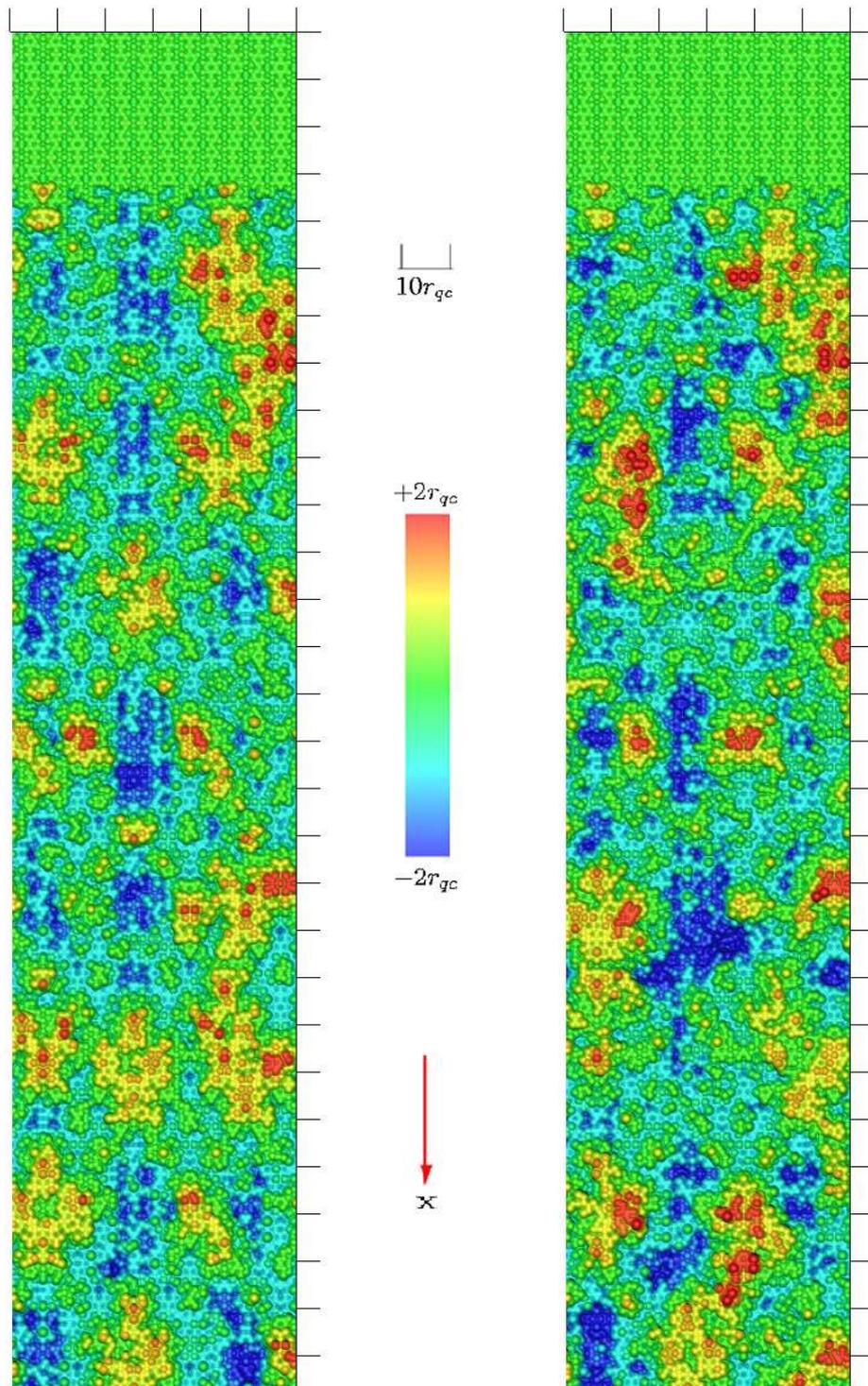


Abbildung 5.7: **Links:**  $2_2, k = 1.3$ . **Rechts:**  $2_2, k = 1.6$ .

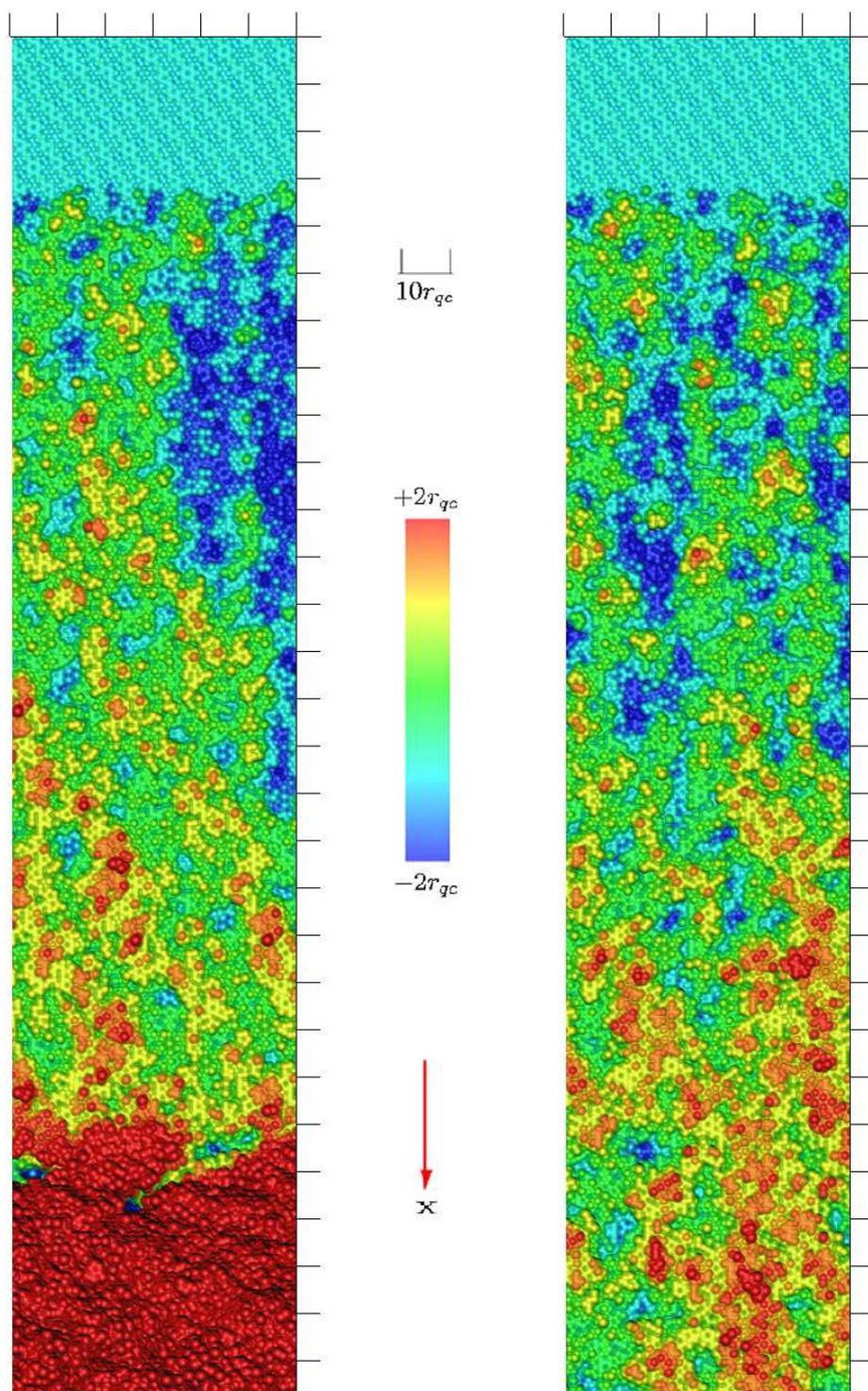
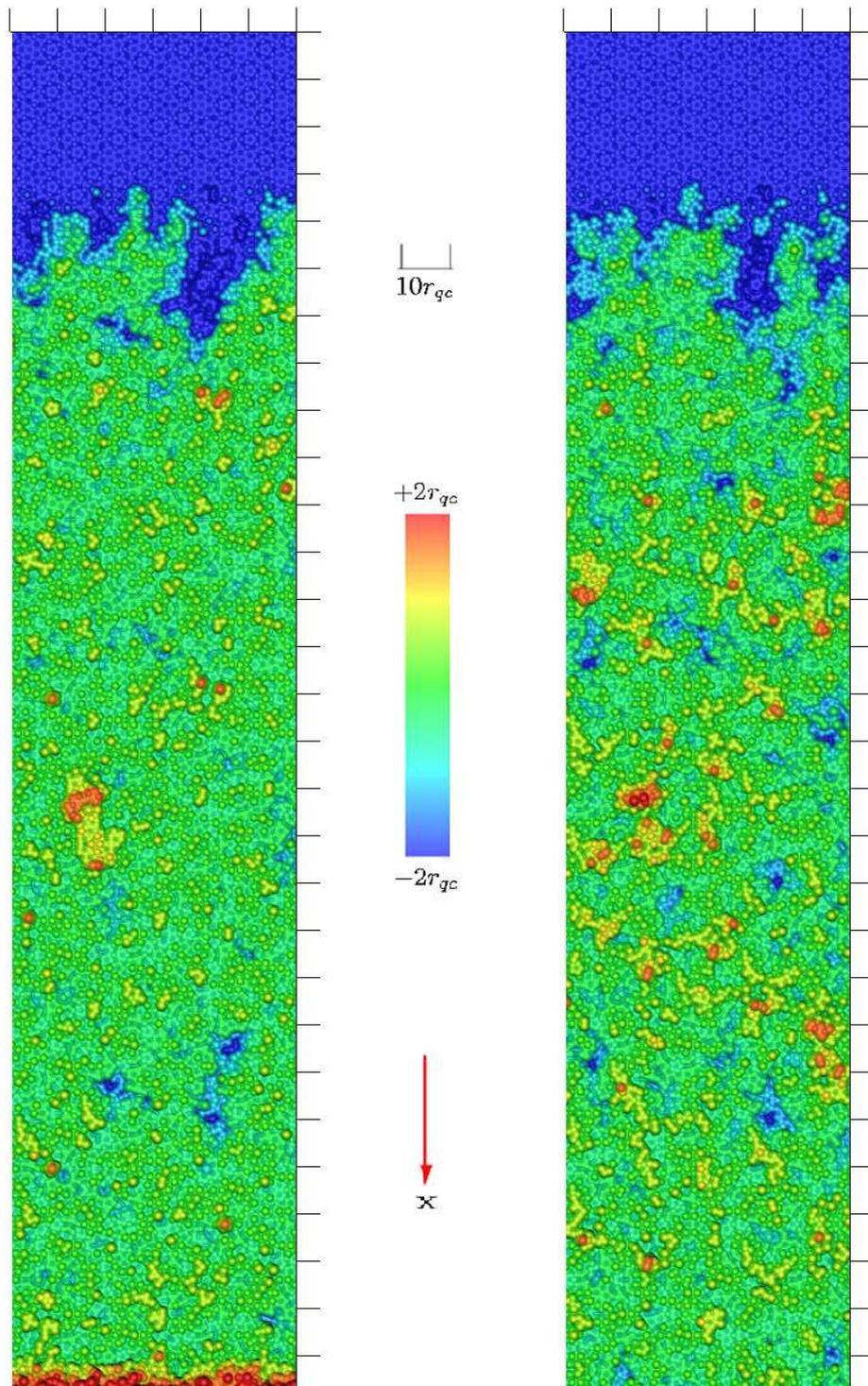


Abbildung 5.8: **Links:**  $2_5, k = 1.3$ . **Rechts:**  $2_5, k = 1.6$ .

Abbildung 5.9: **Links:**  $5_2$ ,  $k = 1.3$ . **Rechts:**  $5_2$ ,  $k = 1.6$ .

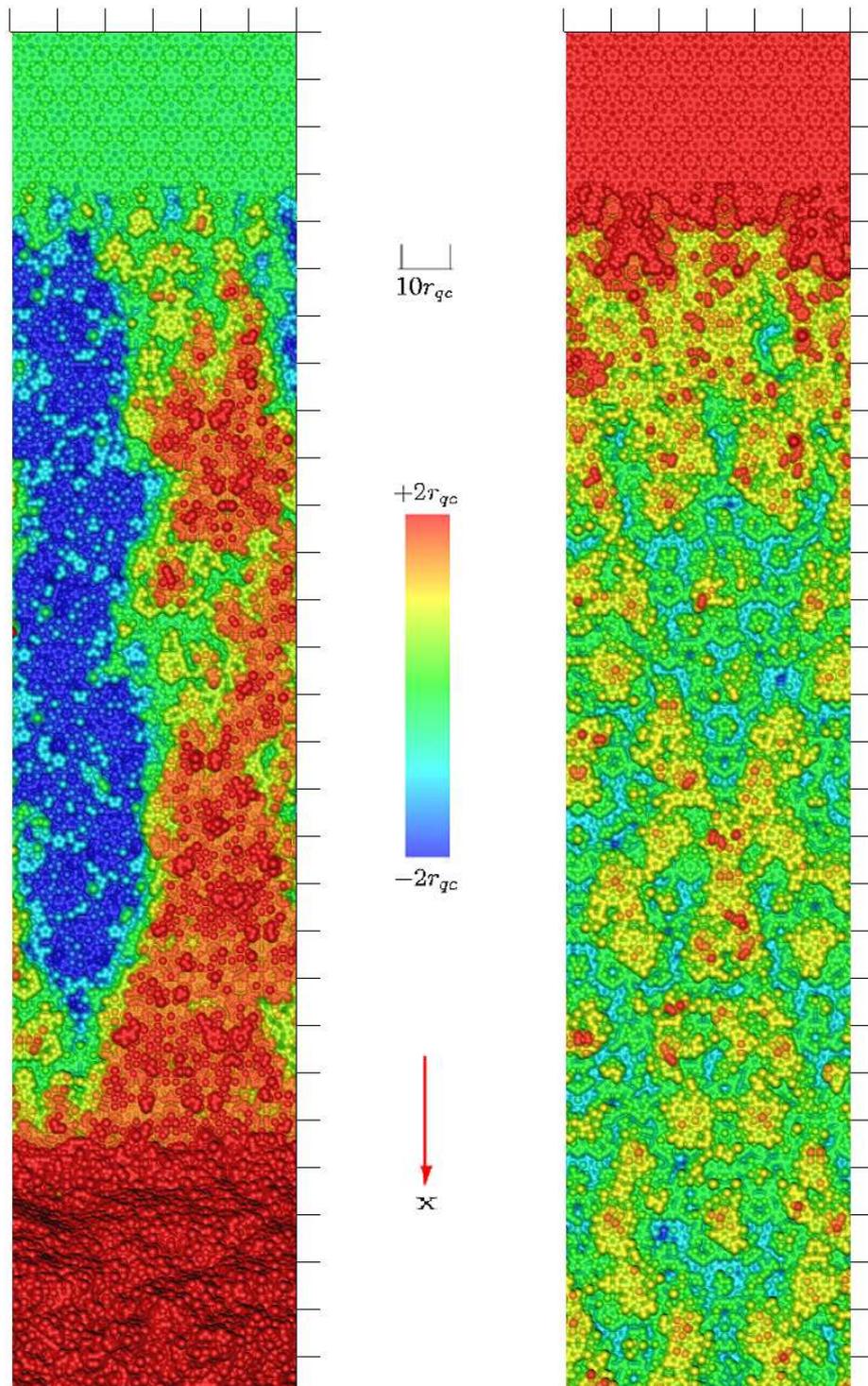
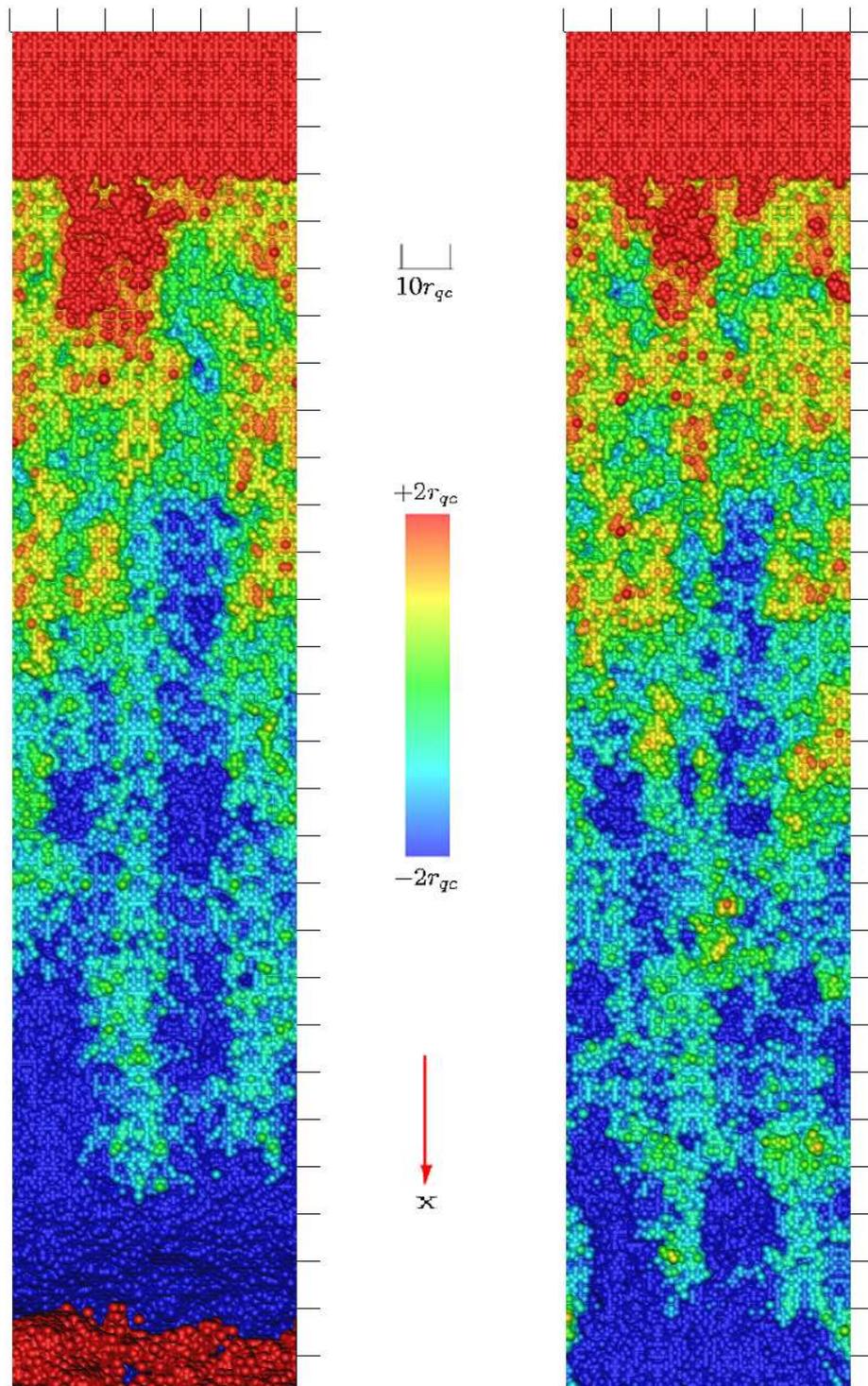


Abbildung 5.10: **Links:**  $5_{p2}, k = 1.3$ . **Rechts:**  $5_{p2}, k = 1.6$ .

Abbildung 5.11: **Links:**  $p2_5, k = 1.3$ . **Rechts:**  $p2_5, k = 1.6$ .

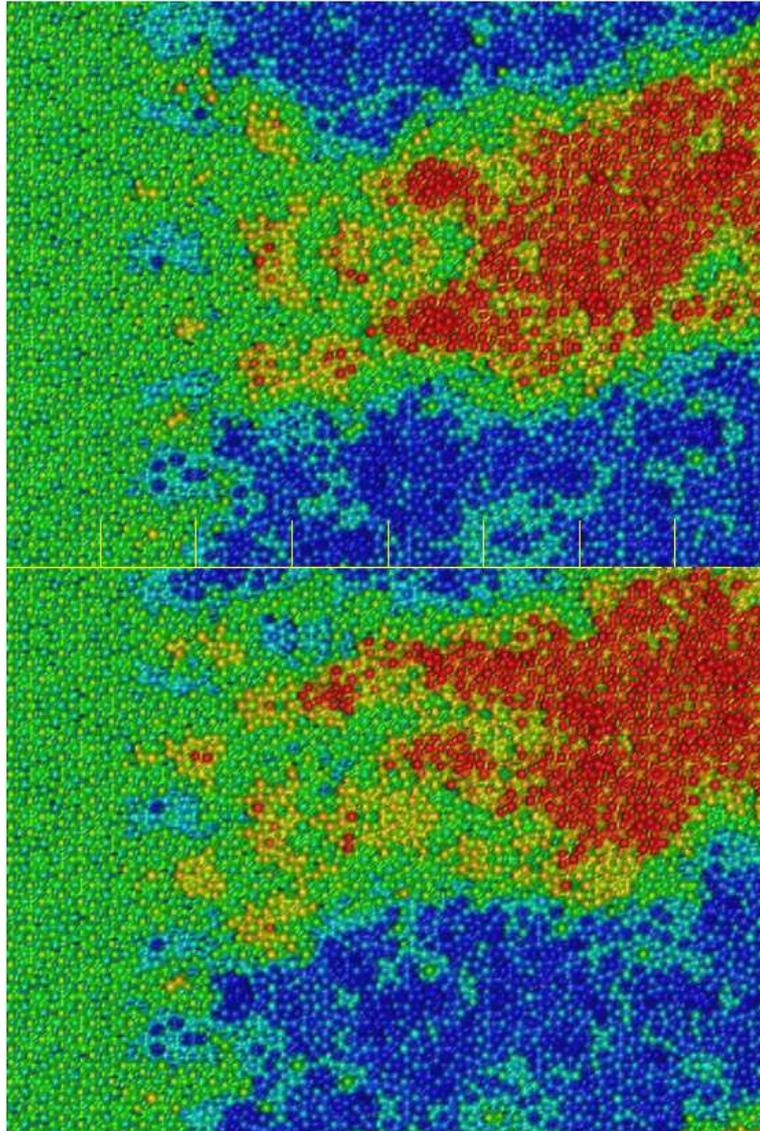


Abbildung 5.12: Ausschnitte aus zwei Bruchoberflächen mit der Orientierung  $5_{p2}$ . **Oben:**  $k = 1.2$ , **unten:**  $k = 1.3$ . Es zeigen sich für beide  $k$ -Werte Stufen in der Bruchoberfläche. Charakteristisch und für beide Oberflächen gleich ist der von den Stufen eingeschlossene Winkel von ca.  $36^\circ$ . Die Orte, an denen sich die Stufen bilden, sind jedoch unterschiedlich. Die gelben Striche sind im Abstand  $10r_{qc}$  in Rissausbreitungsrichtung eingezeichnet.

## 5.9 Cluster

Um den Einfluss der Cluster auf die Bruchoberfläche zu untersuchen, wurden zunächst die Clusteratome auf die Risslippe gesetzt. Dies ist in Abbildung 5.13 dargestellt. In der unteren Teilabbildung, die den unteren Teil der Risslippe mit den Bergman-Clustern darstellt, sind auf der Bruchoberfläche deutlich (gelb und grün dargestellte) Clusteratome zu sehen. Die Cluster sind also durchtrennt worden. Für eine genauere Untersuchung wurde die Methode aus Kapitel 4.5 angewandt. Hierzu sind in den Abbildungen 5.15 - 5.24 nur noch die Clusteratome und die abgetasteten oberen und unteren Bruchoberflächen dargestellt. Je zwei Abbildungen mit derselben Orientierung aber unterschiedlichen  $k$ -Werten befinden sich auf einer Seite. Für jede Abbildung gilt das Koordinatensystem aus Abbildung 5.14. Für eine Bewertung der Abbildungen muss berücksichtigt werden, wieviele Clustermittelpunkte sich im Höhenintervall  $\pm 2r_{qc}$  um die Höhe des eingebauten Risses befinden. Jene Anzahl von Clustern ist für Bruchebenen senkrecht zu zwei- und pseudo-zweizähligen Achsen größer als für Bruchebenen senkrecht zu fünfzähligen Achsen.

Die Ausbreitungsrichtung des Risses verläuft von links nach rechts. Im jeweils links eingezeichneten Gebiet wurde der elliptische Riss eingebaut. Man erkennt, dass bereits durch diesen Einbau Cluster durchschnitten wurden. Ein Umgehen aller Cluster durch einen ebenen Schnitt scheint also nicht möglich zu sein.

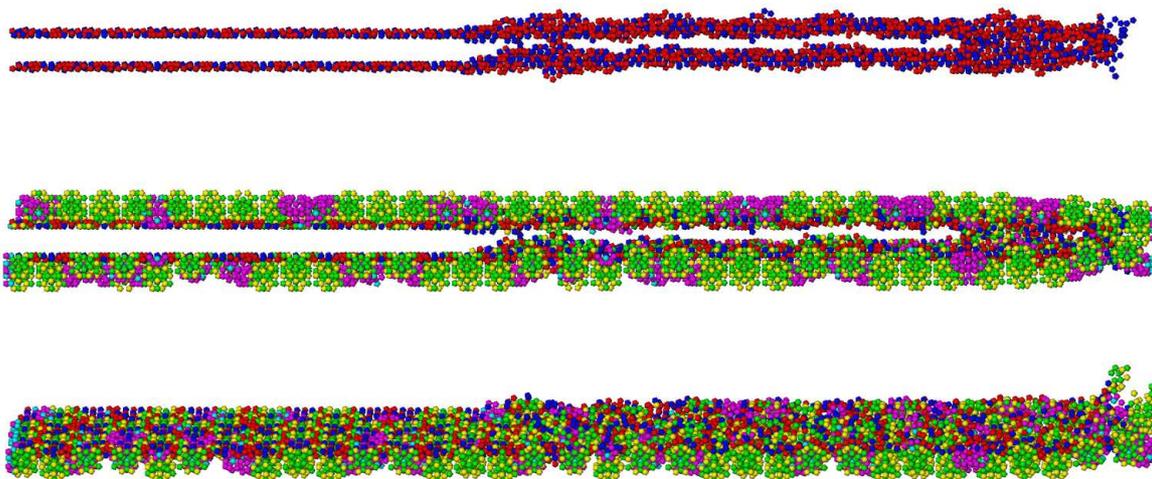


Abbildung 5.13: Kleinere Probe mit der Orientierung  $2_2$ . **Oben:** Risslippe. **Mitte:** Risslippe mit den Bergman-Clustern. Die Clusteratome sind gelb und grün dargestellt. Stark gebundene Atome mit ihren Umgebungen sind zudem violett und türkis wiedergegeben. **Unten:** Gegenüber den obigen Abbildungen leicht verkippt dargestellter unterer Teil der Risslippe mit den Bergman-Clustern.

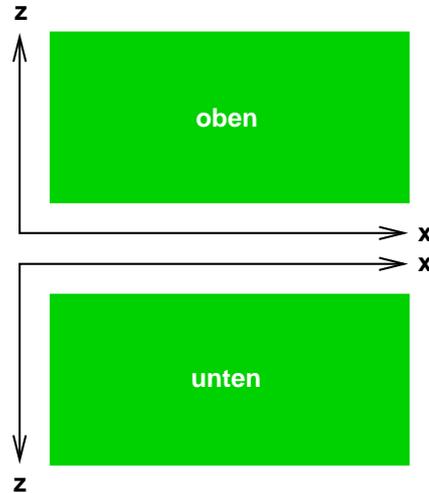


Abbildung 5.14: Koordinatensystem für die in den Abbildungen 5.15 bis 5.24 dargestellten, von den abgetasteten Bruchoberflächen durchtrennten Cluster.

Die MD-Simulationen zeigen, dass auch durch den Riss Cluster durchtrennt werden. Durch die Abbildungen 5.19 und 5.20 wird besonders deutlich, dass dies jedoch auf andere Weise und weniger häufig als beim ebenen Schnitt geschieht. Eine quantitative Auswertung weist dies nach. Das Verhältnis der durchtrennten Cluster für  $k = 1.3$  und für den ebenen Schnitt variiert für die simulierten Orientierungen zwischen etwa 0.46 und 0.73. Ordnet man jedem Cluster eine entsprechende Schnittfläche<sup>2</sup> zu und addiert diese, ergibt sich auch für das Verhältnis der Schnittflächen für alle Orientierungen ein Wert der kleiner als eins ist. Sowohl die Anzahl der durchtrennten Cluster als auch die Summe ihre Schnittflächen ist also für den dynamischen Riss kleiner als für die geometrische Trennung. Aus den Abbildungen 5.15 - 5.24 ist zudem direkt ersichtlich, dass sich die Lagen der Schnittflächen für die beiden Trennungsarten unterscheiden, und dass für  $k = 1.6$  mehr Cluster geschnitten werden können als für  $k = 1.3$ .

In Abbildung 5.25 sind die Risslippenatome in blau und rot, die äußeren Clusteratome in gelb und grün dargestellt. Die dreizehn inneren Clusteratome (das Zentralatom und die Atome auf dem inneren Ikosaeder) sind violett gekennzeichnet. Die Blickrichtung ist entlang der Rissausbreitungsrichtung gewählt. Dargestellt ist ein Schnitt senkrecht zu dieser Richtung für  $k = 1.3$  und die Orientierung  $5_{p2}$ . Die beiden inneren Clusterschalen aus Abbildung 1.12 werden weniger häufig als die gesamten Cluster durch die Bruchfläche durchtrennt. Zu sehen ist auch, dass sich die meisten Clustermittelpunkte zwischen den durch die Stufen gebildeten Terrassen befinden.

Es zeigt sich also ein Einfluss der Cluster auf die Bruchoberflächen. Er ist jedoch nicht so ausgeprägt wie in den in Kapitel 2.8 vorgestellten Rissimulationen in zweidimensionalen Modellquasikristallen.

<sup>2</sup>Hierzu wird jeder Cluster als Kugel mit Radius  $2.2r_{qc}$  idealisiert.

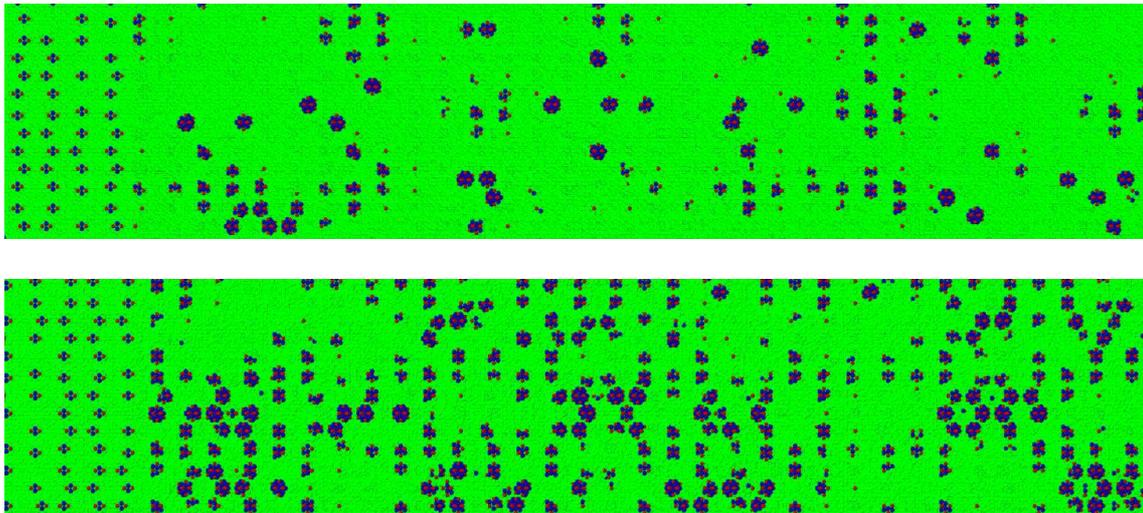


Abbildung 5.15: Obere und untere Bruchoberfläche für  $2_2, k = 1.3$  mit Clustern.

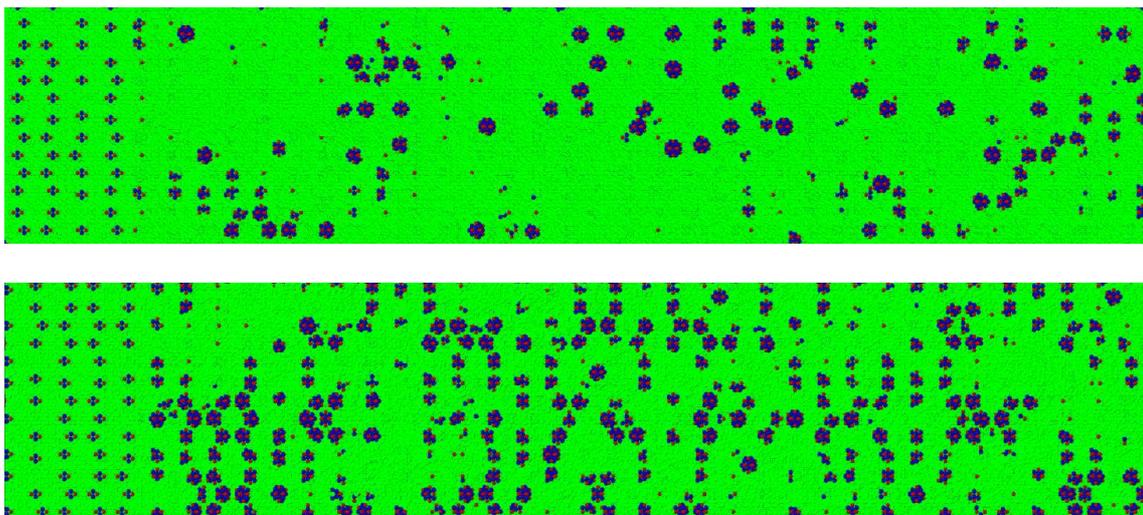


Abbildung 5.16: Obere und untere Bruchoberfläche für  $2_2, k = 1.6$  mit Clustern.

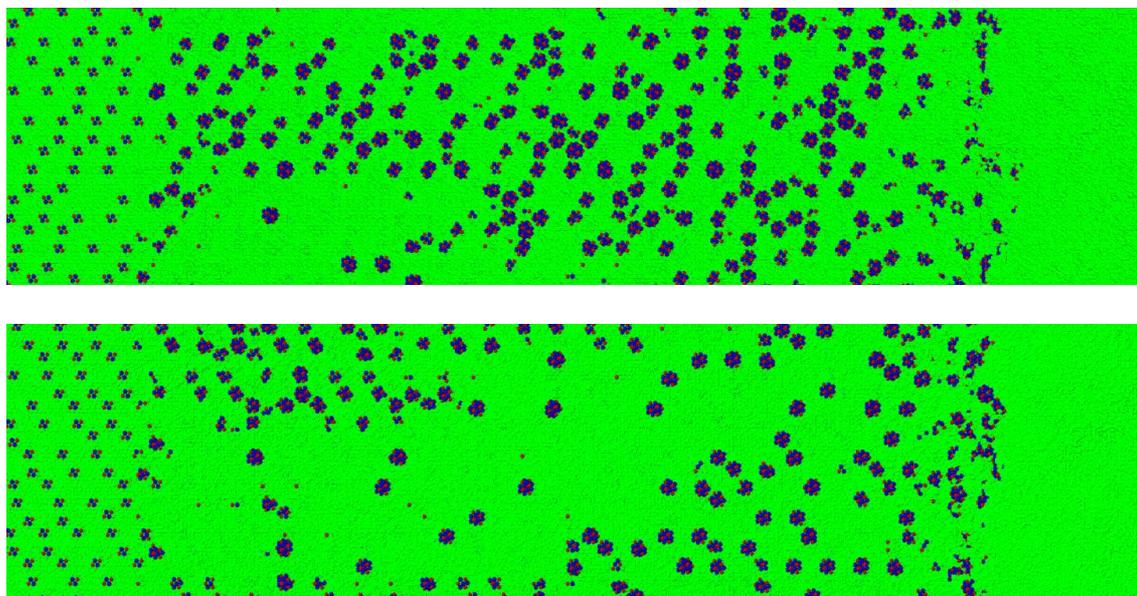


Abbildung 5.17: Obere und untere Bruchoberfläche für  $2_5, k = 1.3$  mit Clustern.

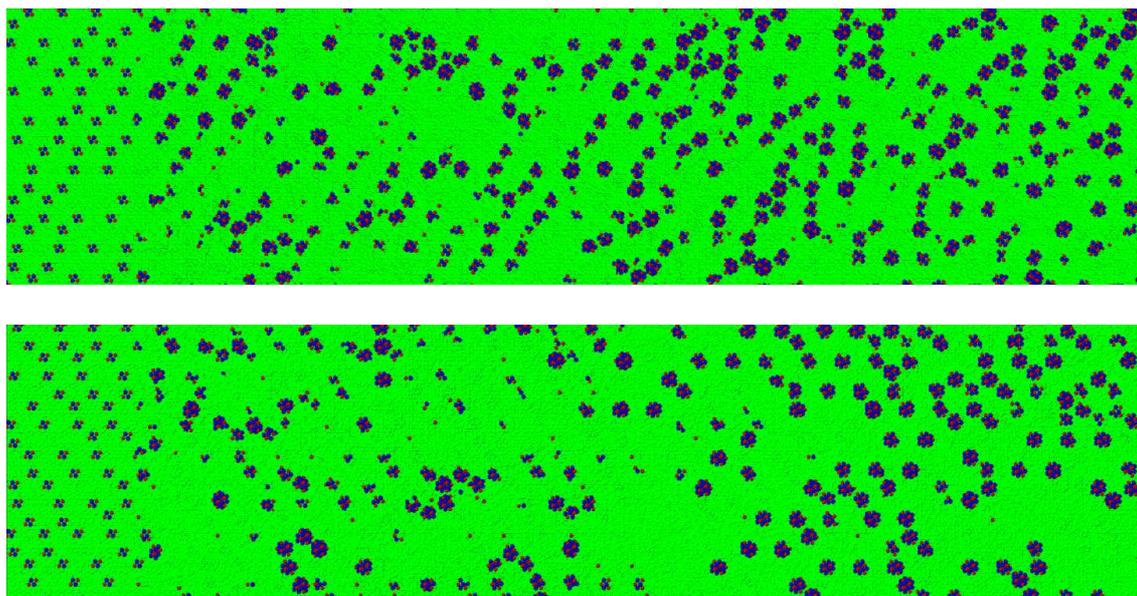


Abbildung 5.18: Obere und untere Bruchoberfläche für  $2_5, k = 1.6$  mit Clustern.

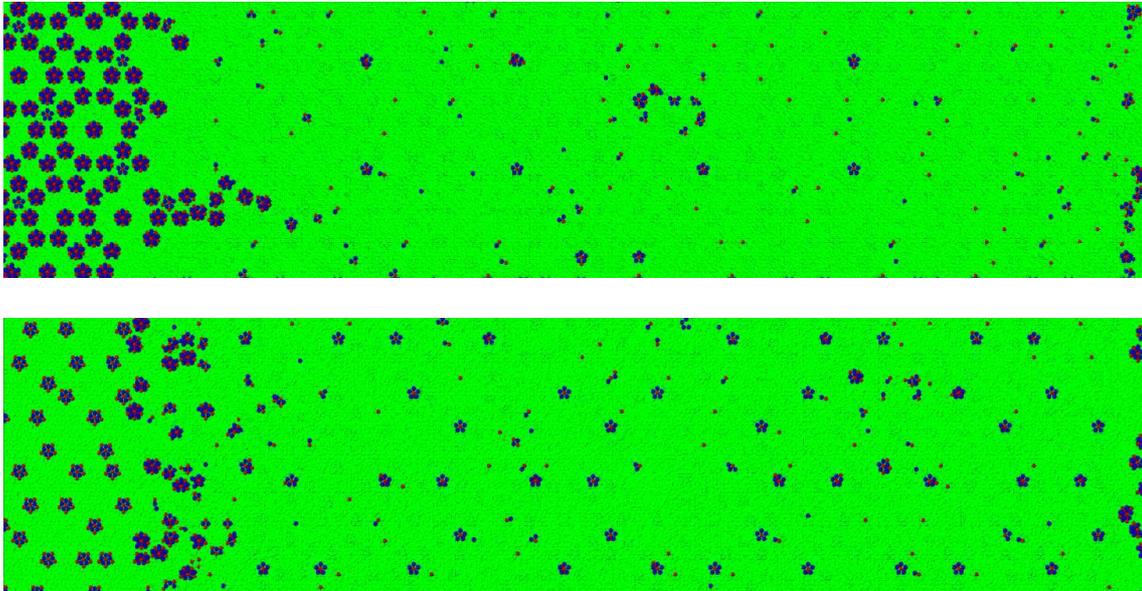


Abbildung 5.19: Obere und untere Bruchoberfläche für  $5_2, k = 1.3$  mit Clustern.

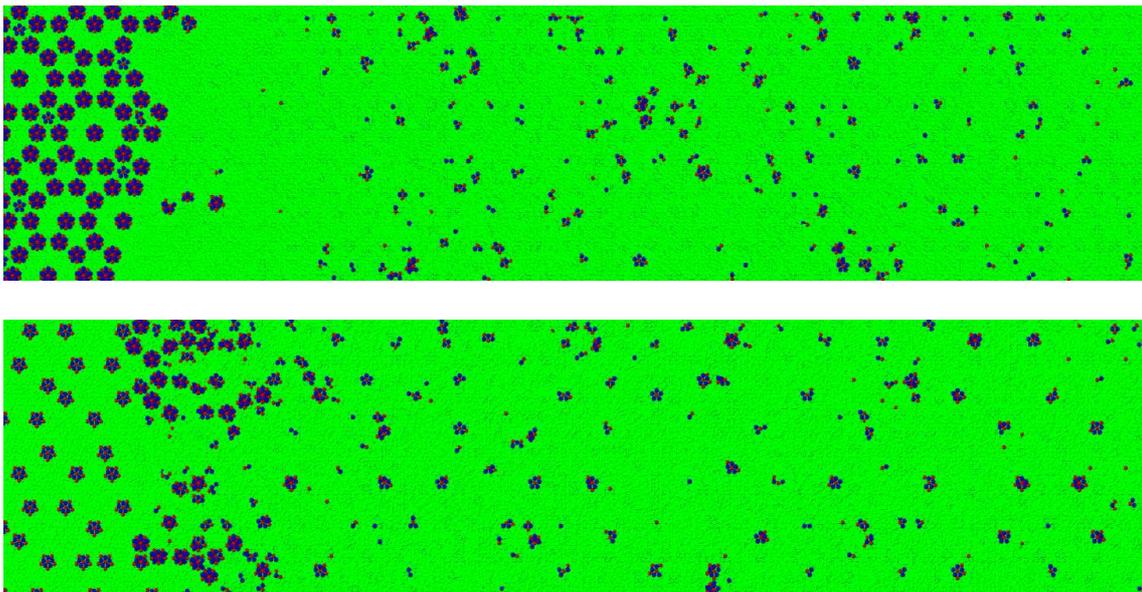


Abbildung 5.20: Obere und untere Bruchoberfläche für  $5_2, k = 1.6$  mit Clustern.

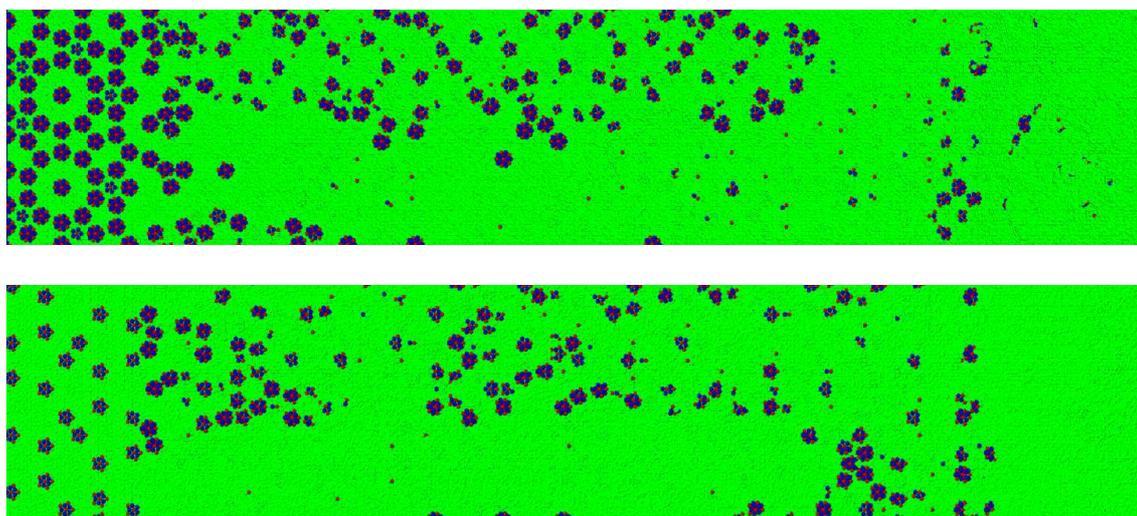


Abbildung 5.21: Obere und untere Bruchoberfläche für  $5_{p2}, k = 1.3$  mit Clustern.

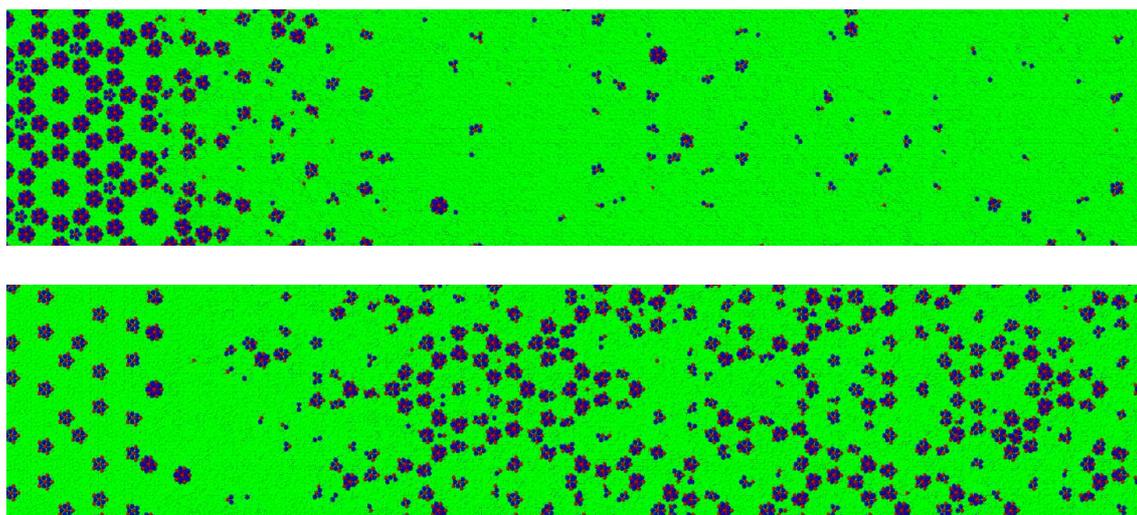


Abbildung 5.22: Obere und untere Bruchoberfläche für  $5_{p2}, k = 1.6$  mit Clustern.

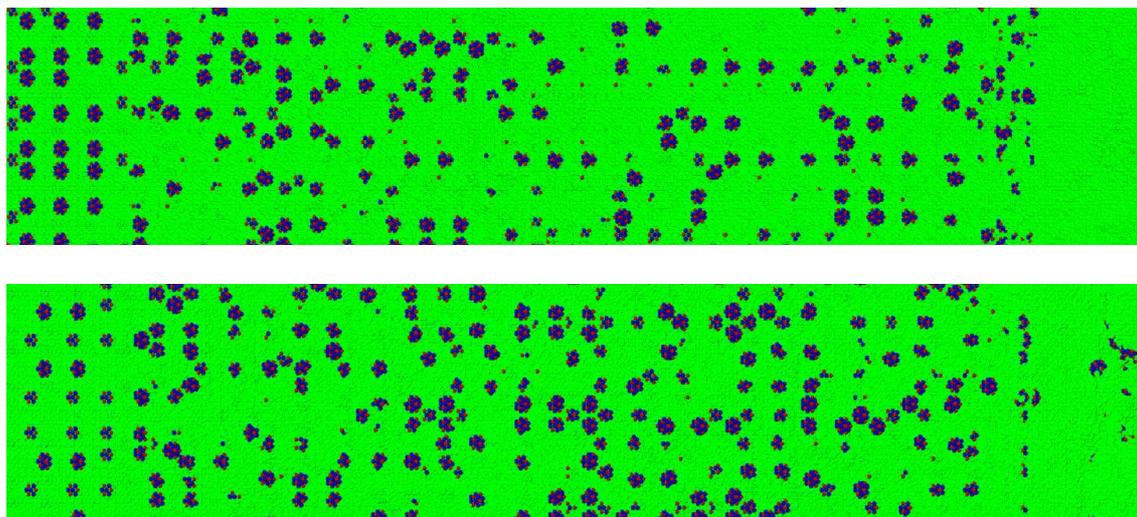


Abbildung 5.23: Obere und untere Bruchoberfläche für  $p_{2_5}, k = 1.3$  mit Clustern.

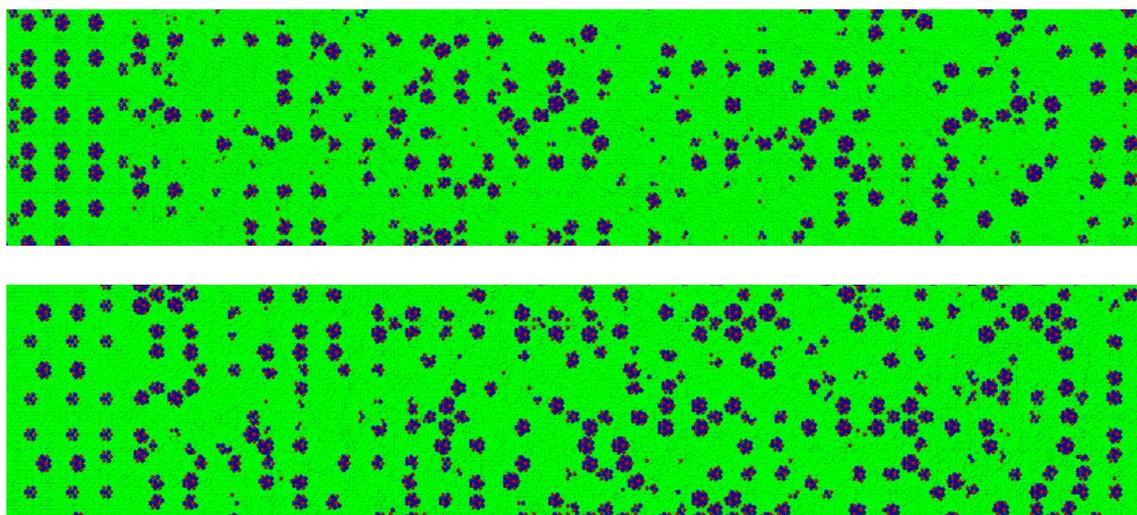


Abbildung 5.24: Obere und untere Bruchoberfläche für  $p_{2_5}, k = 1.6$  mit Clustern.

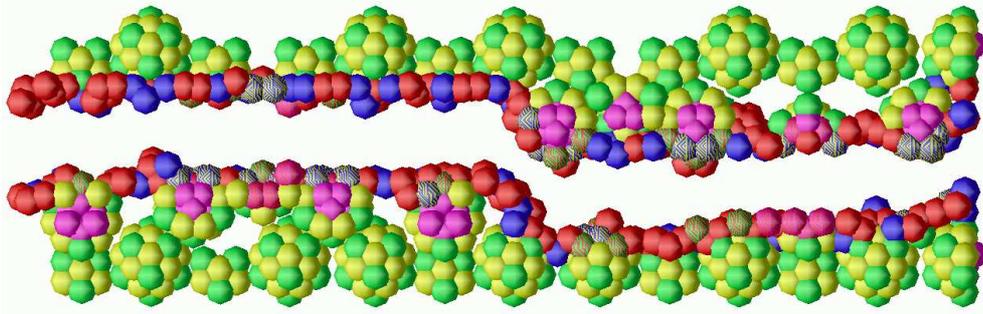


Abbildung 5.25: Schnitt senkrecht zur Rissausbreitungsrichtung für  $k = 1.3$  und die Orientierung  $5_{p2}$ . Die Zuordnung der durch Kugeln dargestellten Atome zu den Farben wird in Kapitel 5.9 erläutert. Neben den Atomen der Risslippe sind die Cluster eingezeichnet.

## 5.10 Höhen-Höhen-Korrelationsfunktionen

Zur weiteren Untersuchung der Bruchoberflächen sind in den Abbildungen 5.26 bis 5.30 Höhen-Höhen-Korrelationsfunktionen für die Bruchoberflächen aus Kapitel 5.8 dargestellt. Sie wurden wie in Kapitel 4.6 beschrieben berechnet. Die Schrittweite hierfür ist  $0.2r_{qc}$ , die Abtastkugel ist so groß wie die blau dargestellten Atome. Die  $H$ -Werte sind in allen Abbildungen für einen direkten Vergleich im selben Bereich farbkodiert. Kleine  $H$ -Werte sind blau, größere rot dargestellt. Außerdem entsprechen die Orientierungen der folgenden Abbildungen denen aus Kapitel 5.8.

Die dezentralen<sup>3</sup> Strukturen in den Korrelationsfunktionen für die Orientierungen senkrecht zu zweizähligen Achsen lassen auf eine Zweizähligkeit der Bruchoberfläche schließen. In Abbildung 5.26 sind Winkel von  $\pm 32^\circ$  zur Vertikalen für  $k = 1.3$  deutlich, für  $k = 1.6$  weniger deutlich erkennbar. Die Ungenauigkeit der Winkelmessung liegt bei etwa  $\pm 2^\circ$ . Für die Orientierung  $2_5$  (Abbildung 5.27) ist nur einer dieser Winkel — für den kleineren  $k$ -Wert wieder besser — mit ebenfalls etwa  $32^\circ$  zu sehen. Für die weniger rau erscheinende Bruchoberfläche der Orientierung  $5_2$  ergeben sich auch kleinere  $H$ -Werte. Die fünfzählige Orientierung zeigt sich in schwacher Form in der zugehörigen Korrelationsfunktion. Da die Bruchoberfläche der Orientierung  $5_{p2}$  für  $k = 1.3$  Stufen aufweist, nimmt die Korrelationsfunktion auch große, von diesen Stufen dominierte Werte an. Für  $k = 1.6$  in derselben Orientierung kann eine schwach fünfzählige Struktur<sup>4</sup>, die von einer zweizähligen überlagert ist, in der Höhen-Höhen-Korrelationsfunktion beobachtet werden. Es zeigen sich Winkel von  $\pm 18^\circ$  zur Vertikalen. Dies sind auch die Winkel zwischen den Stufen für  $k = 1.3$  in derselben Orientierung (siehe Abbildungen 5.10 und 5.12). Die Korrelationsfunktionen für die Orientierung  $p2_5$  nehmen aufgrund einer sich stetig abwärts bewegenden Bruchoberfläche (siehe Abbildung 5.11) insgesamt große Werte an. Ausgezeichnet scheint hier nur die Vertikale — die Rissausbreitungsrichtung — zu sein.

<sup>3</sup>Es ist zu beachten, dass bereits die Definition von  $H$  zu einer zweizähligen Symmetrie führt.

<sup>4</sup>Diese äußert sich auch in der Winkelkorrelationsfunktion  $W(n) = \sum (H(r, \varphi + \frac{2\pi}{n}) - H(r, \varphi))^2$ .

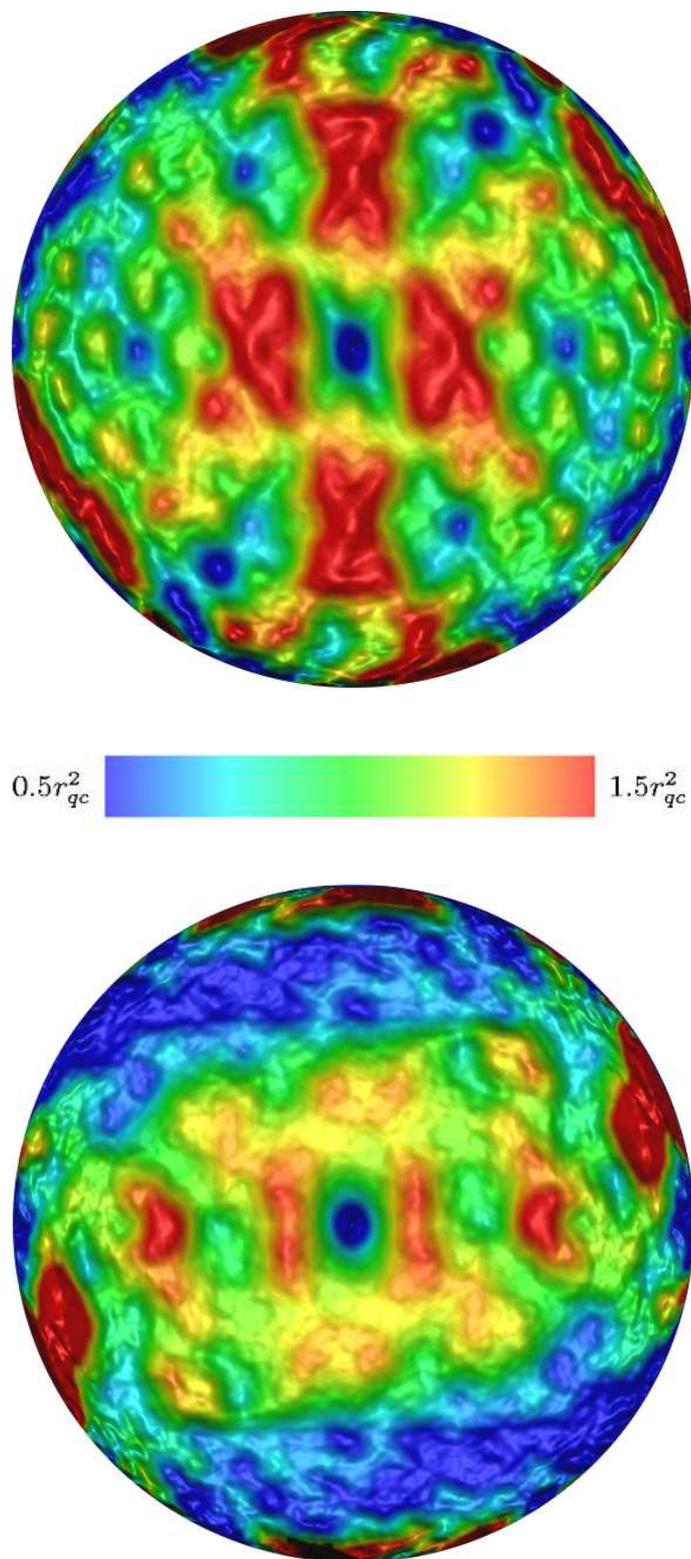


Abbildung 5.26: **Oben:**  $H$  für  $2_2, k = 1.3$ . **Unten:**  $H$  für  $2_2, k = 1.6$ .

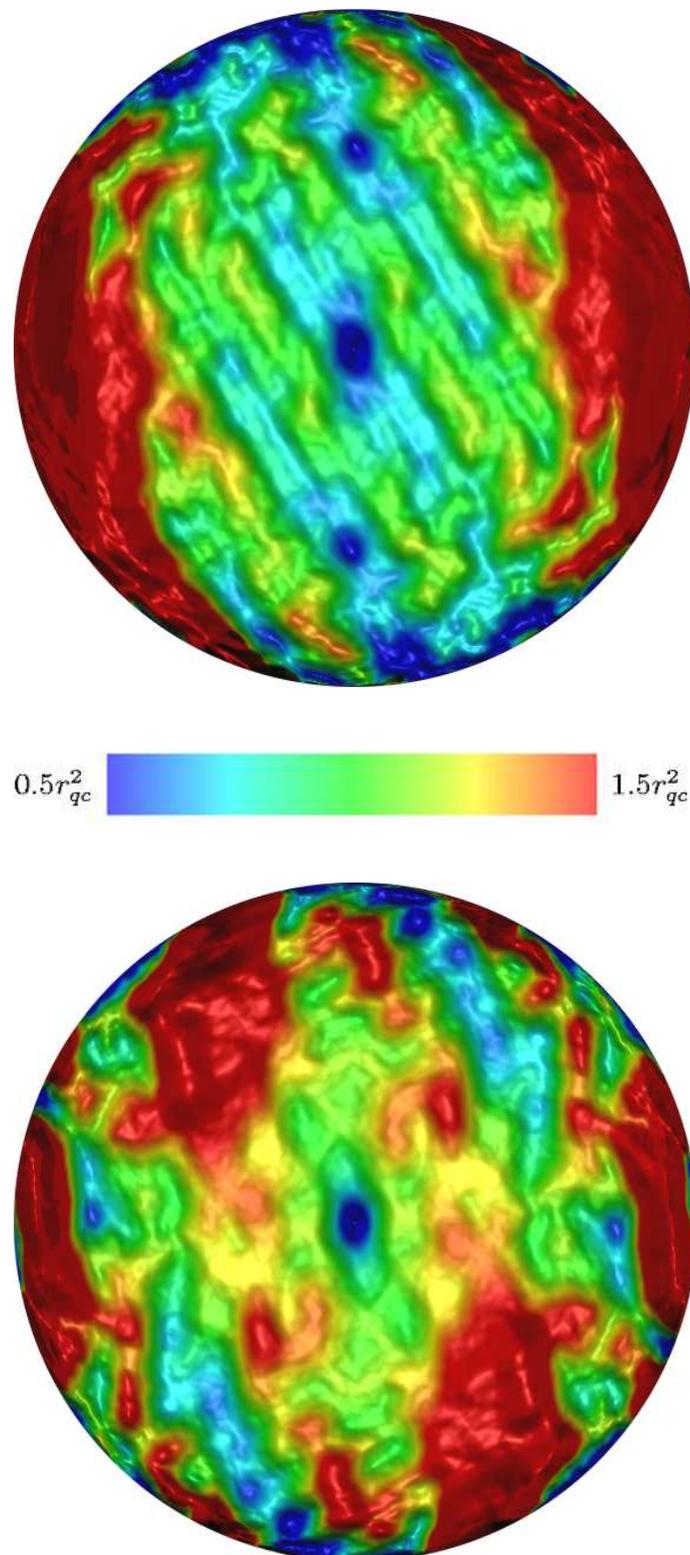


Abbildung 5.27: **Oben:**  $H$  für  $2_5, k = 1.3$ . **Unten:**  $H$  für  $2_5, k = 1.6$ .

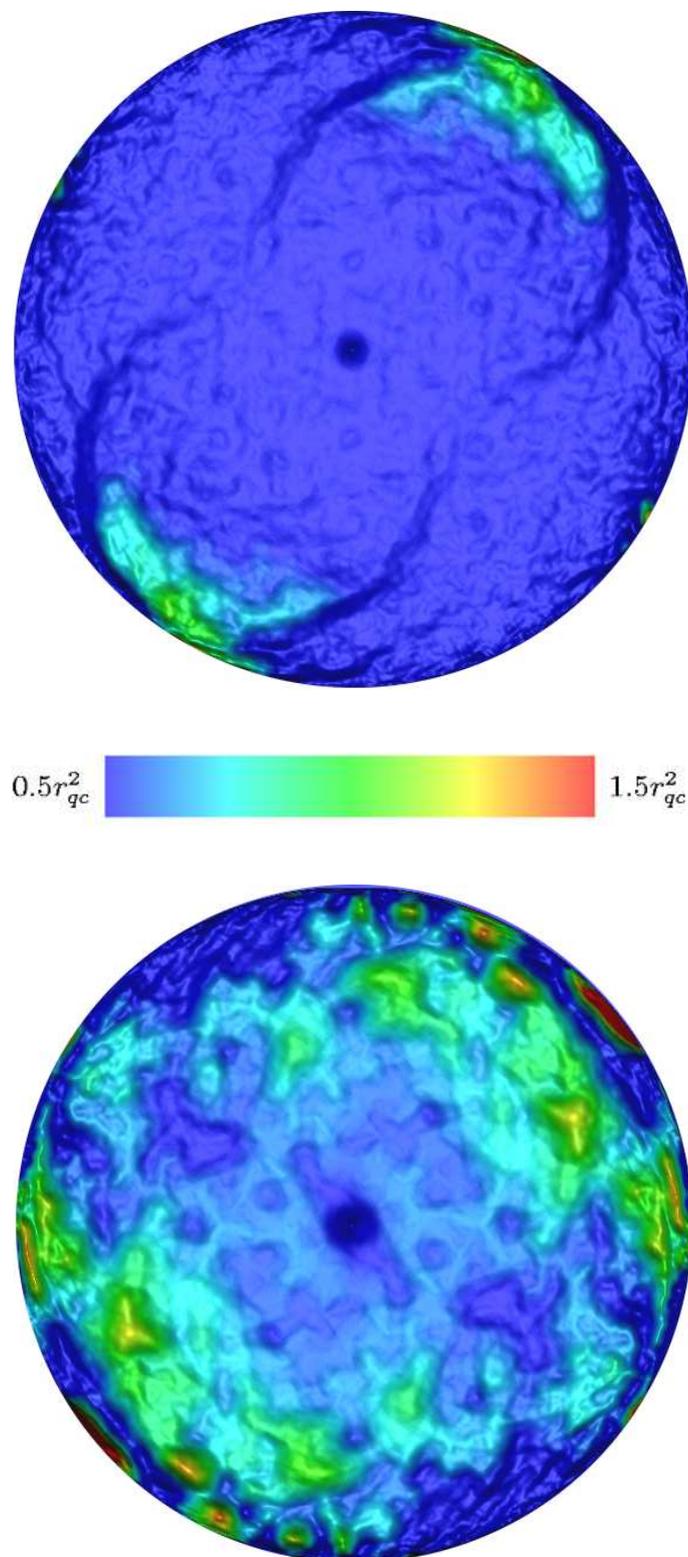


Abbildung 5.28: **Oben:**  $H$  für  $\mathfrak{v}_2, k = 1.3$ . **Unten:**  $H$  für  $\mathfrak{v}_2, k = 1.6$ .

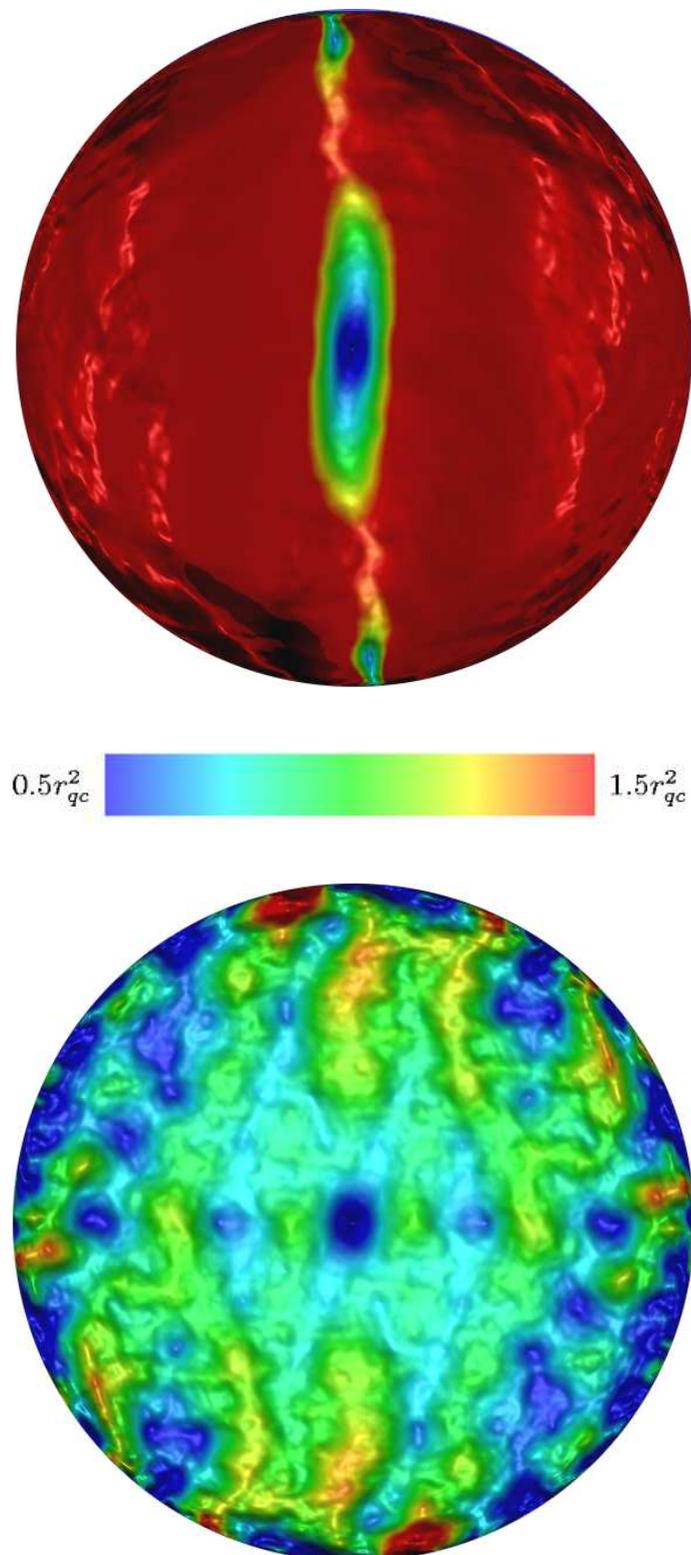


Abbildung 5.29: **Oben:**  $H$  für  $\mathfrak{S}_{p2}, k = 1.3$ . **Unten:**  $H$  für  $\mathfrak{S}_{p2}, k = 1.6$ .

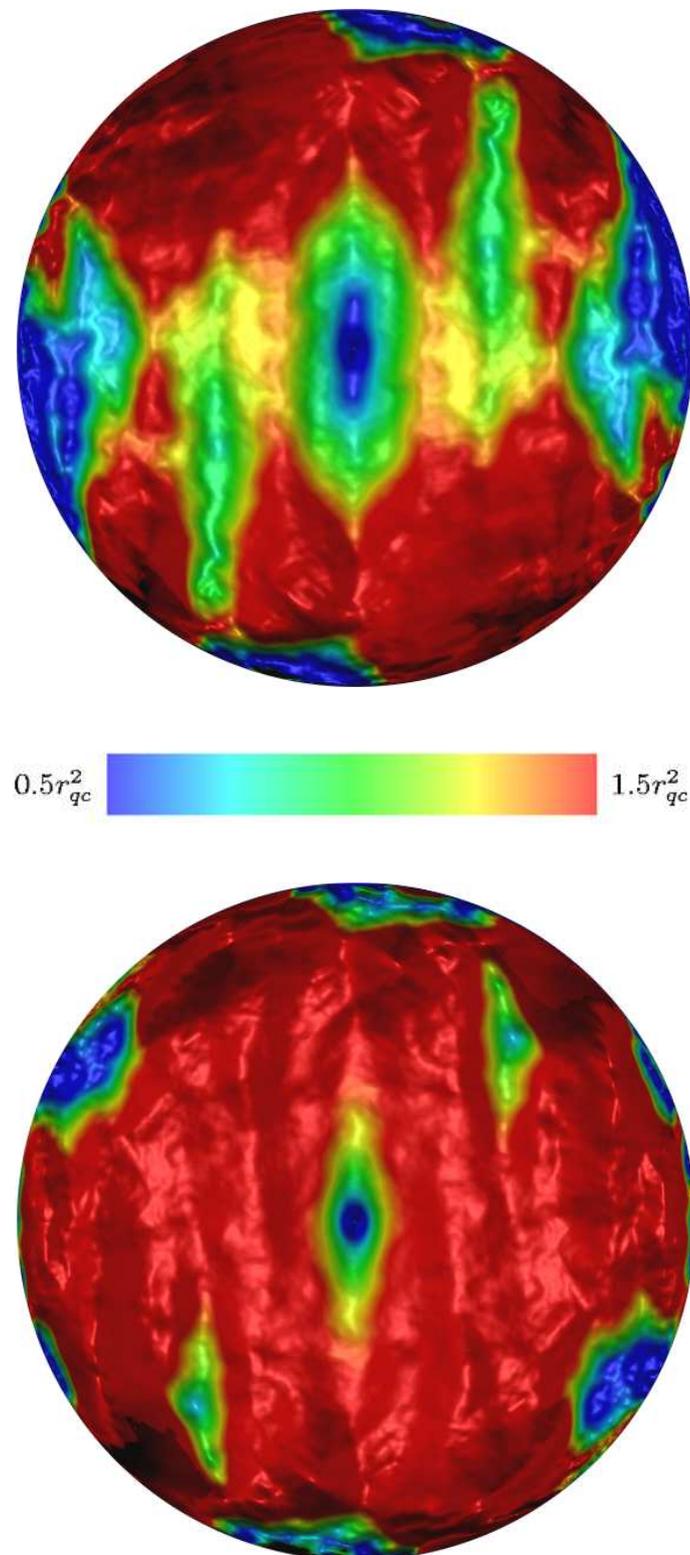


Abbildung 5.30: **Oben:**  $H$  für  $p_{2_5}, k = 1.3$ . **Unten:**  $H$  für  $p_{2_5}, k = 1.6$ .

## 5.11 Bindungen

Wie in Kapitel 4.7 beschrieben, wurden die gebrochenen Bindungen für die Endkonfiguration mit Riss und für eine auf der vorgewählten Rissebene glatt durchtrennte Konfiguration für einen gleich groß gewählten Ausschnitt bestimmt. Die Ergebnisse für die simulierten Orientierungen zeigt Tabelle 5.1. In der ersten Spalte ist die Orientierung und die Art der Probe wiedergegeben. Die zweite Spalte gibt die Anzahl der gebrochenen Bindungen zwischen den verschiedenen Sorten von Atomen an. Bindungen zwischen Atomen des Typs 0 sind mit 00, Bindungen zwischen Atomen des Typs 1 mit 11 und Bindungen zwischen Atomen verschiedenen Typs mit 01 gekennzeichnet. In Spalte drei ist das Verhältnis dieser drei Größen, in Spalte vier die Summe aller gebrochenen Bindungen eingetragen.

Ersichtlich ist, dass für alle Orientierungen durch den Riss mehr Bindungen durchtrennt wurden als durch den ebenen glatten Schnitt. Zudem hat sich das Verhältnis der Anzahl der verschiedenen gebrochenen Bindungen verändert. Die aufgrund der Potentialwahl stärkeren Bindungen zwischen Atomen unterschiedlichen Typs wurden relativ zur Anzahl der 11-Bindungen erniedrigt, absolut gesehen wurden jedoch mehr dieser Bindungen durch den Riss durchtrennt. Das Verhältnis der durchtrennten Bindungen ist für die verschiedenen Orientierungen für die Konfigurationen mit Riss sehr ähnlich. Dass insgesamt mehr Bindungen durch die Risse als durch die ebenen Schnitte gebrochen wurden, und dass sich gleichzeitig das Verhältnis der Anzahl der verschiedenen gebrochenen Bindungen geändert hat, führt zu einer geringeren mittleren Energie pro gebrochener Bindung für die Konfigurationen mit Riss. Neben der Anzahl sind auch die Richtungen der gebrochenen Bindungen von Interesse. Abbildung 5.31 folgt der in Abbildung 4.15 wiedergegebenen Darstellungsweise. Die nach rechts oben verlaufenden Achse ist die  $\varphi$ -, die nach links oben verlaufende Achse die  $\vartheta$ -Achse. Über diesen Achsen ist farbig die Anzahl gebrochener Bindungen

Probe	00	01	11	Verhältnis	Gesamt
$2_2$ , durchschnitt	3 545	10 127	3 401	1.0 : 3.0 : 1	17 073
$2_2$ , $k = 1.3$	5 761	10 850	4 320	1.3 : 2.5 : 1	20 931
$2_5$ , durchschnitt	3 520	10 097	3 454	1.0 : 2.9 : 1	17 071
$2_5$ , $k = 1.3$	5 891	10 938	4 252	1.4 : 2.6 : 1	21 081
$5_2$ , durchschnitt	5 740	9 222	2 980	1.9 : 3.1 : 1	17 942
$5_2$ , $k = 1.3$	5 558	10 042	3 816	1.5 : 2.6 : 1	19 416
$5_{p2}$ , durchschnitt	5 776	9 181	2 970	1.9 : 3.1 : 1	17 927
$5_{p2}$ , $k = 1.3$	5 968	10 535	3 998	1.5 : 2.6 : 1	20 501
$p2_5$ , durchschnitt	4 529	10 591	3 404	1.3 : 3.1 : 1	18 524
$p2_5$ , $k = 1.3$	5 924	11 071	4 184	1.4 : 2.6 : 1	21 179

Tabelle 5.1: Gebrochene Bindungen für unterschiedliche Orientierungen für Endkonfigurationen mit Rissen und für glatt durchschnittene Proben. Die Einträge werden in Kapitel 5.11 erläutert.

zwischen Atomen verschiedenen Typs dargestellt. Die obere Teilabbildung stellt die Anzahl gebrochener Bindungen in Abhängigkeit von  $\varphi$  und  $\vartheta$  für eine eben durchschnittenen Probe, die untere für eine Konfiguration mit Riss für die Orientierung  $5_2$  dar. Die mit Pfeilen gekennzeichneten Peaks entsprechen sich.

Es zeigt sich, dass die Änderung der Anzahl durchtrennter Bindungen für den Riss gegenüber dem glatten Schnitt im Wesentlichen nur durch den Winkel  $\vartheta$  — den Winkel zur Flächennormale der glatten Schnittfläche — bestimmt wird. Für die in Abbildung 5.31 gezeigte Orientierung werden für  $\vartheta \approx 50^\circ$  in der Konfiguration mit Riss deutlich weniger Bindungen als in der glatt durchschnittenen Probe gebrochen. Diese Art der Bindung kommt auch im Bergman-Cluster aus Abbildung 1.12 zwischen den blauen Atomen und den roten Atomen des inneren Ikosaeders vor.

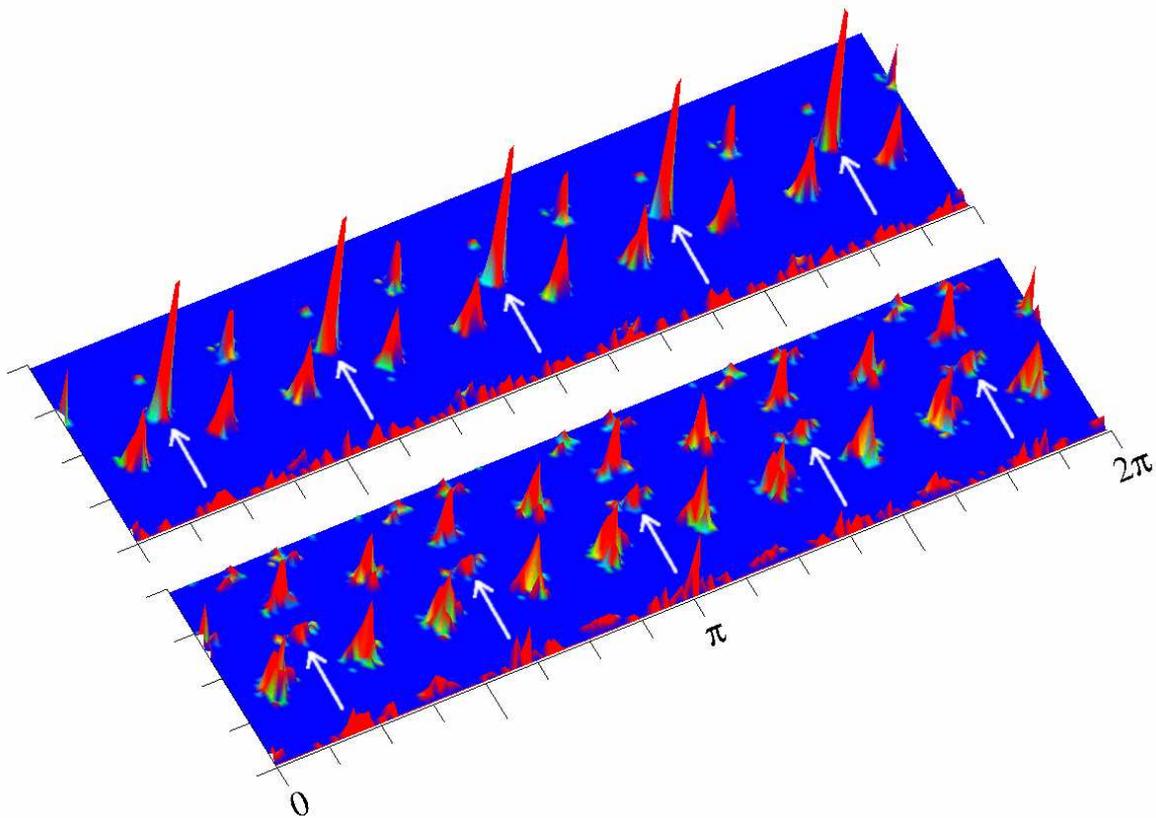


Abbildung 5.31: Gebrochene Bindungen zwischen Atomen verschiedenen Typs in Abhängigkeit von  $\varphi$  und  $\vartheta$  für eine eben durchschnittenen Probe (oben) und eine Konfiguration mit Riss (unten) für die Orientierung  $5_2$ . Der Strichabstand beträgt  $\pi/8$ . Lange Striche kennzeichnen  $\varphi = \pi/2$  und  $3\pi/2$ .



# Kapitel 6

## Diskussion

Die in Kapitel 5 wiedergegebenen Simulationsergebnisse zeigen, dass die Bruchoberflächen im untersuchten Modellquasikristall eine mittlere konstante Höhe für Bruchebenen senkrecht zu zwei- und fünfzähligen Achsen aufweisen. Zusätzlich sind die Bruchoberflächen auf Clusterdimensionen rau. Während die Ebenenstruktur des Quasikristalles eine Erklärung für die mittlere konstante Höhe der Oberflächen liefert, kann die Rauigkeit den Clustern zugeschrieben werden. Sie werden jedoch nicht vollständig vom Riss umlaufen.

Außerdem sind durch Winkel dominierte Texturen in den Bruchoberflächen erkennbar, und Bruchoberflächen für verschiedene Ausbreitungsrichtungen in derselben Bruchebene weisen deutliche Unterschiede auf. Das kann mit Hilfe der Struktur des Quasikristalles und dessen Symmetrieeigenschaften verstanden werden. Besonders deutlich wird dies in Abbildung 5.8. In der im oberen Teil der Abbildung eingebauten ebenen Rissoberfläche zeigt sich bereits der gleiche Winkel, der auch für den dynamischen Riss eine Rolle spielt. Während nach Griffith die über die gesamte Oberfläche gemittelte Oberflächenenergie betrachtet wurde, wurde schon in Abbildung 2.7 durch atomistische Betrachtungen deutlich, dass diese lokal variieren kann. Solche lokalen Inhomogenitäten können für die Orientierung  $5_{p2}$  für niedrige  $k$ -Werte sogar zur Stufenbildung führen. Zur Charakterisierung der Winkel können die Symmetrieachsen des Ikosaeders dienen. Betrachtet man den Ikosaeder in der Orientierung der entsprechenden Probe und die in einer zur Bruchoberfläche parallelen Ebene enthaltenen zwei- und fünfzähligen Achsen, erkennt man, dass die kleinsten von diesen Vektoren mit der Rissausbreitungsrichtung gebildeten Winkel in der Bruchoberfläche beobachtbar sind (siehe hierzu Abbildung 6.1). Für die simulierten Orientierungen sind dies die folgenden Winkel<sup>1</sup>:

$2_2$	$2_5$	$5_2$	$5_{p2}$	$p2_5$
$(0^\circ), \pm 31.72^\circ$	$(0^\circ), +31.72^\circ, -58.28^\circ$	$(0^\circ), \pm 36^\circ$	$\pm 18^\circ$	$(0^\circ), \pm 90^\circ$

Warum gerade die kleinsten (nichtverschwindenden) Winkel eine Rolle spielen, soll Abbildung 6.2 für die Terrasse aus Abbildung 5.10 verdeutlichen. Die zusätzliche Stufe (in

---

<sup>1</sup>Die von der Rissausbreitungsrichtung aus gegen den Uhrzeigersinn gemessenen Winkel erhalten ein positives Vorzeichen.

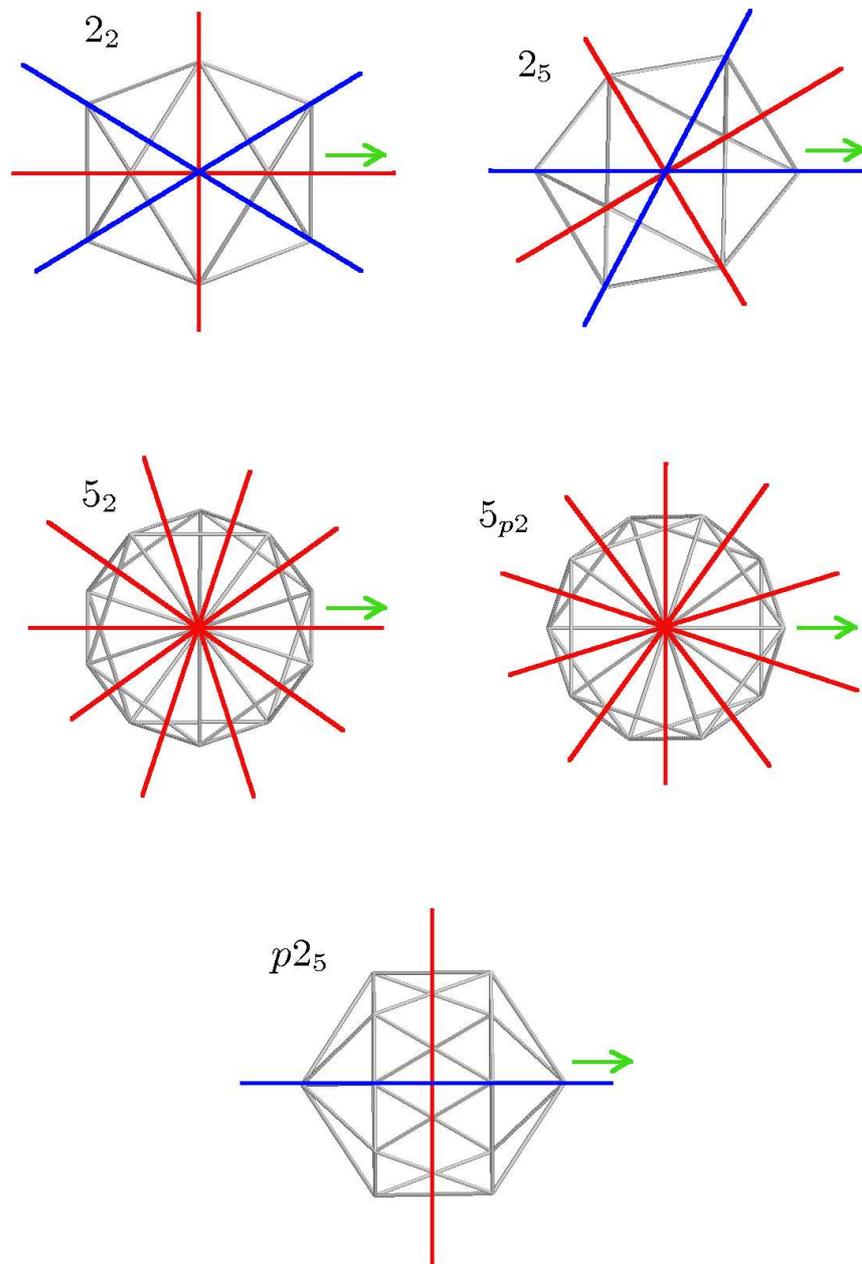


Abbildung 6.1: Orientierungen des Ikosaeders für die verschieden orientierten Proben. Die Rissausbreitungsrichtung  $R$  ( $x$ -Richtung) ist jeweils durch den grünen Pfeil angedeutet. Die Blickrichtung ist entgegen der Flächennormalen der jeweils vorgewählten Bruchebene ( $-y$ -Richtung). Die Achse  $A$  aus der Notation  $A_R$  zeigt also aus der Zeichenebene heraus. Zweizählige Achsen sind rot, fünfzählige Achsen sind blau eingezeichnet.

Abbildung 6.2 in grün wiedergegeben) in der Bruchoberfläche vergrößert diese und erhöht die Anzahl durchbrochener Bindungen. Für einen Rissfortschritt  $\Delta x$  in Rissausbreitungsrichtung ist insgesamt mehr Energie aufzuwenden. Durch die in Abbildung 6.2 rot dargestellten Vierecke wird deutlich, dass diese zusätzliche Energie mit zunehmendem Winkel größer wird.

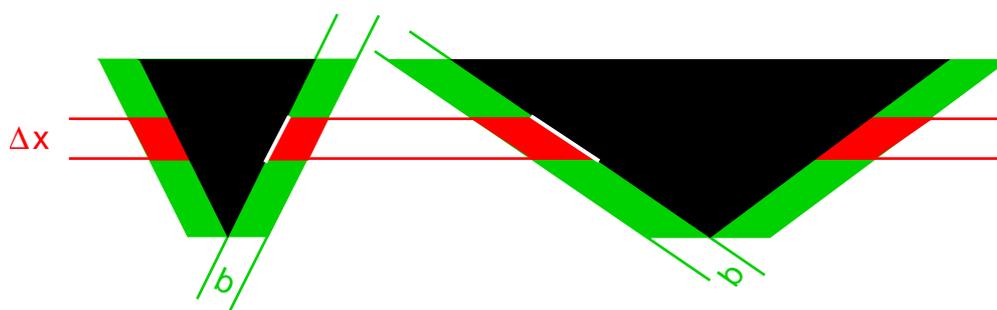


Abbildung 6.2: Für größer werdende Terrassenwinkel wird auch die für den Rissfortschritt benötigte Energie vergrößert. Dies ist hier stark vereinfacht dargestellt. Die Fläche der roten Dreiecke ergibt sich nach der Formel Grundseite (weiß eingezeichnete Strecke) mal Höhe (Breite  $b$  des grünen Streifens). Sie wird für zunehmende Winkel größer.

Eine einfache Überlegung für die brechenden Bindungen führt zu Abbildung 6.3. Zieht man oben und unten an der hellblau gekennzeichneten Probe werden Atome näherungsweise nur nach oben und unten verschoben. Hierdurch wird die grün eingezeichnete Bindung gedehnt (nun in rot dargestellt). Die Verlängerung der Bindung hängt demnach nur vom Winkel  $\vartheta$  ab. Allerdings folgt hieraus auch, dass die Bindungen für  $\vartheta = 0^\circ$  am leichtesten gebrochen werden. Diese Aussage ist in dieser stark vereinfachten Version durch die Simulationen so nicht zu bestätigen. Vor allem das in Kapitel 5.11 beschriebene Verhalten, dass unter speziellen Winkeln  $\vartheta$  weniger Bindungen als in glatt durchtrennten Proben gebrochen werden, kann so nicht erklärt werden. Dies zeigt, dass die Betrachtung einzelner Bindungen nicht zu einer qualitativen Beschreibung der Simulationsergebnisse ausreicht. Die nähere Umgebung der Atome hat also einen wichtigen Einfluss darauf, welche Bindungen gebrochen werden.

In Abbildung 1.13 wurden bereits STM-Aufnahmen von *i*-AlPdMn gezeigt. Die Abbildung für eine Bruchoberfläche senkrecht zu einer zweizähligen Achse ist in Abbildung 6.4 erneut rechts wiedergegeben. Zudem ist links die simulierte Bruchoberfläche für die Orientierung  $2_2$  abgebildet. Die Höhe wurde für einen besseren Vergleich in schwarzweiß dargestellt. Der Abstand der Striche ist wiederum  $10r_{qc}$ . Nach Anhang B sind die Oberflächen damit etwa im gleichen Maßstab dargestellt. Es zeigt sich eine gute qualitative Übereinstimmung der beobachteten Bruchoberflächen, obwohl die Cluster in *i*-AlPdMn und im untersuchten Modellquasikristall nicht übereinstimmen, einfache Modellpotentiale zur Anwendung kamen und der Vergleich einer geometrisch abgetasteten Bruchoberfläche mit einer STM-Aufnahme nur näherungsweise möglich ist.

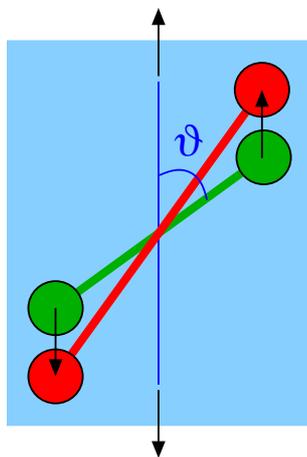


Abbildung 6.3: Bindungsverlängerung in Abhängigkeit von der Orientierung der Bindung. Für eine einzelne Bindung ergibt sich für  $\vartheta = 0^\circ$  die größte Dehnung.

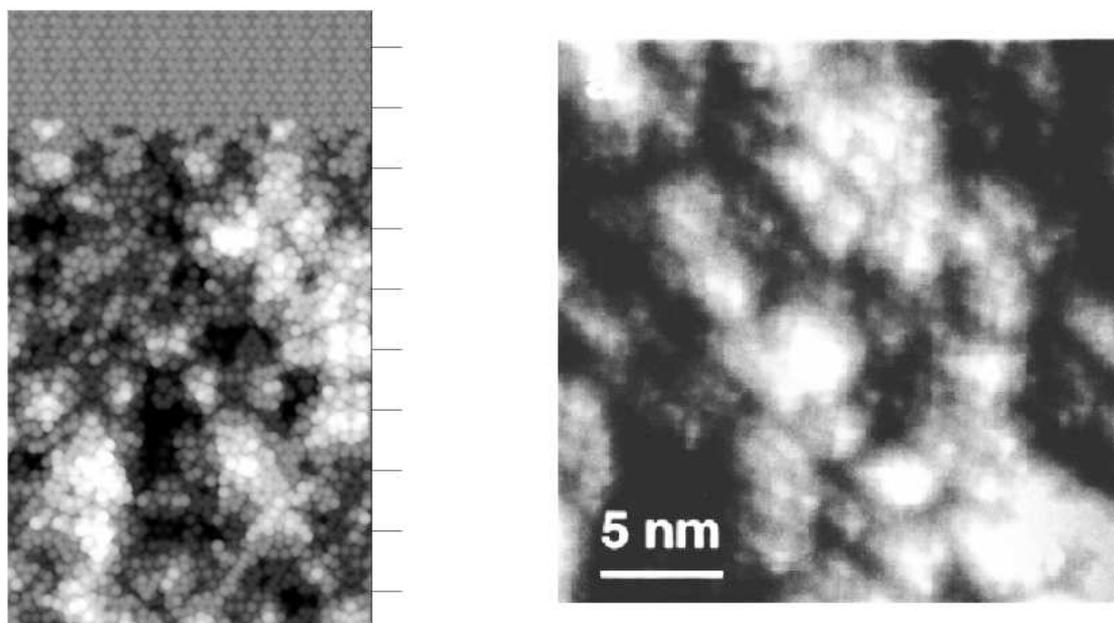


Abbildung 6.4: **Simulation und Experiment.** Gezeigt sind Bruchoberflächen senkrecht zu zweizähligen Achsen. In der linken Abbildung (Simulation) ist im oberen Bereich der eben eingebaute Riss, darunter die simulierte Bruchoberfläche zu sehen. Die rechte Abbildung (Experiment) zeigt eine STM-Aufnahme einer Bruchoberfläche in i-AlPdMn [18].

# Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde die Rissausbreitung in dreidimensionalen ikosaedrischen Modellquasikristallen mit Hilfe numerischer Simulationen untersucht. Zunächst wurden hierzu die Ebenenstruktur des Quasikristalles analysiert und mögliche Spaltebenen mit geringer Oberflächenenergie ermittelt. Anschließend wurden Risse dementsprechend in verschieden orientierte Proben eingebaut und im Modus I belastet. Mit Hilfe der Molekulardynamik wurde dann der dynamische Riss bei tiefen Temperaturen simuliert.

Zur Visualisierung der Simulationsergebnisse wurden geeignete Werkzeuge geschaffen. Die Atome an den Bruchoberflächen werden aufgrund ihrer reduzierten Anzahl von nächsten Nachbarn dargestellt. Die Rissgeschwindigkeiten können aus diesen Daten ebenfalls ermittelt werden. Die Bruchoberflächen wurden geometrisch abgetastet und die Höhen farbkodiert dargestellt. Um den Einfluss der Cluster auf den dynamischen Riss zu klären, wurden diese in die relaxierte Ausgangskonfiguration zurückübersetzt und zusammen mit den abgetasteten Bruchoberflächen dargestellt. So kann direkt untersucht werden, wie die Cluster durchtrennt werden. Die Höhen-Höhen-Korrelationsfunktion gibt Aufschluss über die in den Bruchoberflächen vorhandenen Symmetrien und Überstrukturen. Die Anzahl und Richtungen der durchtrennten Bindungen zwischen nächsten Nachbarn wurden bestimmt.

Ein zentrales Ergebnis der vorliegenden Arbeit ist, dass die Rissausbreitung spröde erfolgt. Plastische Verformung konnte nicht beobachtet werden. Weiterhin sind die Bruchoberflächen auf den Dimensionen des Bergman-Clusters rau. Die Cluster werden vom Riss jedoch nicht vollständig umlaufen. Senkrecht zu zwei- und fünfzähligen Achsen ergeben sich Bruchoberflächen mit einer konstanten mittleren Höhe. Dies lässt sich durch die Ebenenstruktur des Quasikristalles erklären. Die Rauigkeit kann den Clustern zugeordnet werden. Ein weiteres wichtiges Resultat der Simulationen ist, dass sich für unterschiedliche Ausbreitungsrichtungen in derselben Ebene eine deutliche Anisotropie zeigt. So sind in Bruchebenen senkrecht zu fünfzähligen Achsen für eine Rissausbreitungsrichtung entlang einer pseudo-zweizähligen Achse Stufen zu sehen, entlang einer zweizähligen Achse jedoch nicht. Diese Anisotropie äußert sich auch in den Winkeln der Texturen in den Bruchoberflächen. Mit Hilfe der Bruchoberflächen und der Höhen-Höhen-Korrelationsfunktionen konnten diese Winkel bestimmt und der entsprechenden Orientierung über die Ikosaedersymmetrie zugeordnet werden. Die Rotationssymmetrie der Bruchoberflächen und die oben

angesprochenen Winkel äußern sich in den Höhen-Höhen-Korrelationsfunktionen. Die Rissgeschwindigkeiten weisen einen erlaubten Geschwindigkeitsbereich zwischen  $\approx 0.1v_T$  und  $\approx 0.45v_T$  auf. Hierbei ist  $v_T$  die Geschwindigkeit der Transversalwellen in linear elastischer Näherung. Unterhalb eines Spannungsintensitätsfaktors von etwa  $1.2 K_{\text{Griffith}}$ , wobei  $K_{\text{Griffith}}$  der kritische Spannungsintensitätsfaktor bei der Griffithlast ist, wurde keine Rissausbreitung beobachtet. Ein Vergleich der Anzahl der gebrochenen Bindungen für glatt entlang den ermittelten Spaltebenen durchschnittene Proben mit den Risskonfigurationen ergibt, dass durch den Riss mehr Bindungen durchtrennt wurden. Zudem gibt es Bindungen mit bestimmten Orientierungen, die weniger häufig gebrochen werden.

Die geometrisch abgetasteten Oberflächen zeigen eine gute qualitative Übereinstimmung mit Rastertunnelmikroskopieaufnahmen von Bruchoberflächen von i-AlPdMn.

Eine Untersuchung des Quasikristalles mit anderen Potentialen könnte klären, welche Bruchigenschaften durch die Struktur und welche durch die Potentiale verursacht werden. Neben vergleichenden Rechnungen mit gleich tiefen Lennard-Jones Modellpotentialen bieten sich hierzu Embedded-Atom-Method Potentiale [11] an. Diese berücksichtigen über die lokale Elektronenkonzentration auch Mehrkörperwechselwirkungen. Die Mechanismen der Rissausbreitung könnten zudem auch bei höheren Temperaturen untersucht werden. Hierbei wäre zu klären, ob, wie und wann es zu einem Übergang von sprödem zu duktilem Verhalten kommt. Naheliegend ist es auch, Risse in strukturell komplexen Legierungsphasen zu simulieren. Sie besitzen sehr große Einheitszellen, die mehrere hundert Atome beinhalten können. Deshalb werden die für die Rissausbreitung wichtigen Größen auch durch globulare Strukturen, wie Cluster, und nicht durch die Translationssymmetrie bestimmt. Insofern sind diese Phasen mit den Quasikristallen vergleichbar. Numerische Rissimulationen in diesen Strukturen könnten somit einen weiteren Aufschluss über den Einfluss von Clustern und Ebenenstrukturen auf die Bruchoberfläche geben.

# Anhang A

## Lineare Elastizitätstheorie

Die **Kontinuumsmechanik** beschreibt mechanische Vorgänge durch ein Kontinuum im dreidimensionalen euklidischen Raum auf der Basis der Prinzipien der klassischen Mechanik. Hierdurch werden makroskopische Phänomene erklärt. Die diskrete atomistische Natur der Materie wird ignoriert. Die Konstituenten des Kontinuums heißen materielle Punkte, eine zusammenhängende kompakte Menge materieller Punkte nennt man Körper  $B$ . Das Bezugssystem ist ein dreidimensionales rechtwinkliges kartesisches Koordinatensystem. Grundlegende Voraussetzungen der Theorie sind, dass die charakteristischen Längen wesentlich größer als die Abstände der Konstituenten sein müssen, und dass die Energieänderung pro Teilchen wesentlich kleiner als die entsprechende Bindungsenergie ist.

Für einen festen Ausgangszeitpunkt wird die Referenzkonfiguration des Körpers festgelegt. Wenn elastische oder plastische Eigenschaften von Interesse sind, sollte es sich bei dieser Konfiguration um einen Zustand ohne Spannungen oder Dehnungen handeln. Die **materiellen oder Lagrangeschen Koordinaten**  $\xi$  kennzeichnen jeden materiellen Punkt und geben die Lage zur Referenzzeit an. Die **Eulerkoordinaten**  $\mathbf{x}$  stimmen zum Referenzzeitpunkt mit den materiellen Koordinaten überein, verändern sich jedoch mit der Zeit. Als **Verschiebungsvektor**  $\mathbf{u}$  bezeichnet man die Lageänderung eines materiellen Punktes zwischen Referenz- und aktueller Konfiguration:

$$\mathbf{u}(\xi, t) = \mathbf{x}(\xi, t) - \xi. \quad (\text{A.1})$$

Weder Translationen  $\mathbf{u} = \mathbf{konst.}$  noch Rotationen ändern die elastische Energie des Körpers. Darum definieren<sup>1</sup> wir den **Greenschen Verzerrungstensor** als symmetrischen Anteil des Verschiebungsgradienten:

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right). \quad (\text{A.2})$$

---

<sup>1</sup>mit dieser Definition sind Dehnungstensor und Verschiebungsfeld miteinander verträglich, d.h. es gilt  $\text{ink } \underline{\underline{\epsilon}} = \underline{\underline{0}}$ .

Dieser Anteil stellt die elastische Dehnung dar. Die auf einen Körper wirkende Kraft  $\mathbf{K}$  setzt sich additiv aus Volumenkraft und Oberflächenkraft zusammen:

$$\mathbf{K} = \int_B \mathbf{k} dV + \int_{\partial B} \mathbf{t} dA. \quad (\text{A.3})$$

Hierbei ist  $\mathbf{k}$  die Volumenkraftdichte und  $\mathbf{t}$  die Oberflächenkraftdichte bzw. der Spannungsvektor. Dieser hängt nicht nur vom Ort und von der Zeit, sondern auch von der Richtung des Flächenelements  $d\mathbf{A}$  ab. Der **Cauchysche Spannungstensor**  $\underline{\underline{\mathbf{T}}}$  ist so definiert, dass gilt<sup>2</sup>

$$t_i = T_{ik} n_k. \quad (\text{A.4})$$

Der Normalenvektor des Flächenelementes  $d\mathbf{A}$  des Eulerschen Schnittes ist  $\mathbf{n}$ .  $T_{ik}$  sind die Komponenten des Spannungstensors. Sie geben die elastischen Spannungen wieder, die auf einen Körper wirken. Die Drehimpulserhaltung bewirkt, dass der Spannungstensor symmetrisch ist. Betrachtet man die Kinetik eines Körpers, folgt mit Hilfe des Reynoldsschen Transporttheorems

$$\rho \frac{Dv_i}{Dt} = k_i + \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j}. \quad (\text{A.5})$$

Die Geschwindigkeiten  $\mathbf{v}(\boldsymbol{\xi}, t)$  der materiellen Punkte  $\boldsymbol{\xi}$  ergeben sich aus der materiellen Ableitung  $\frac{D}{Dt} \mathbf{x} = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}, t)$ ,  $\rho$  ist die Massendichte. Gleichung (A.5) ist die grundlegende Bewegungsgleichung der Kontinuumsmechanik.

Die bisherigen Gleichungen sind für alle Materialien gültig, sie können die Antwort eines Körpers auf eine Belastung jedoch nicht vorhersagen. Aus den Deformationen folgt der Verzerrungstensor, aus den Spannungen der Spannungstensor. Es fehlt ein **Materialgesetz**, d.h. ein Zusammenhang zwischen Spannungs- und Verzerrungstensor. Innerhalb der **linearen Elastizitätstheorie** wird Lokalität in Zeit und Raum vorausgesetzt. D.h. die Zustände sollen nicht von der Vorgeschichte abhängen, und die Spannungen sind nur Funktionen von den Dehnungen am selben Ort. Außerdem sollen die Zusammenhänge linear und homogen sein. Hieraus folgt das **Hookesche Gesetz**:

$$T_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl}. \quad (\text{A.6})$$

$C_{ijkl}$  sind die 81 Komponenten des Tensors der elastischen Moduln. Die elastische Energiedichte ergibt sich<sup>3</sup> zu:

$$E_{\text{elast}} = \frac{1}{2} \epsilon_{ij} C_{ijkl} \epsilon_{kl}. \quad (\text{A.7})$$

Die Zahl der unabhängigen Komponenten des Tensors der elastischen Moduln reduziert sich aufgrund der Symmetrie des Spannungstensors und des Verzerrungstensors, sowie der Tatsache, dass die Deformationsenergie eine Zustandsfunktion ist, auf maximal 21 unabhängige Konstanten. Isotrope Medien besitzen zwei unabhängige elastische Konstanten,

<sup>2</sup>für die folgenden Formeln gilt die Einsteinsche Summenkonvention

<sup>3</sup>aus der Entwicklung um den spannungsfreien Referenzzustand mit Energieminimum

die Laméschen Konstanten  $\lambda$  und  $\mu$ . Für sie nimmt das Hookesche Gesetz folgende einfache Form an:

$$T_{ij} = 2\mu\epsilon_{ij} + \lambda\epsilon_{kk}\delta_{ij}. \quad (\text{A.8})$$

Neben den Laméschen Konstanten sind noch andere elastische Konstanten gebräuchlich. Die Beziehungen zwischen Kombinationen dieser verschiedenen Konstanten sind in Tabelle A.1 wiedergegeben.

Für Kristalle mit **kubischer Gittersymmetrie** ergeben sich drei unabhängige Konstanten. In der Voigt-Notation (siehe hierzu Tabelle A.2) lautet das Hookesche Gesetz für diese Kristalle:

$$\begin{pmatrix} T_{xx} \\ T_{yy} \\ T_{zz} \\ T_{xy} \\ T_{yz} \\ T_{zx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

Im isotropen Fall gilt:

$$\mu = C_{44} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}), \quad \lambda = C_{12}. \quad (\text{A.10})$$

Für den kubischen Fall ist der Anisotropiefaktor

$$\tilde{A} = \frac{C_{44}}{(C_{11} - C_{12})/2} \quad (\text{A.11})$$

ungleich eins.

Gleichung (A.5) kann in linearer Näherung in zwei Differentialgleichungen separiert werden. Für verschwindende Volumenkräftdichten ergeben sich zwei Lösungen in Form von ebenen Wellen. Dies sind die **Longitudinal- und Transversalwellen** des linear elastisch isotropen Kontinuums. Ihre Ausbreitungsgeschwindigkeiten ergeben sich zu:

$$v_L = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} \quad (\text{A.12})$$

und

$$v_T = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}. \quad (\text{A.13})$$

	$E, \nu$	$E, \mu$	$\lambda, \mu$
$\lambda$	$\frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$	$\frac{\mu(E-2\mu)}{3\mu-E}$	$\lambda$
$\mu$	$\frac{E}{2(1+\nu)}$	$\mu$	$\mu$
$E$	$E$	$E$	$\frac{\mu(3\lambda+2\mu)}{\lambda+\mu}$
$\nu$	$\nu$	$\frac{E-2\mu}{2\mu}$	$\frac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}$

Tabelle A.1: Umrechnungstabelle für die verschiedenen elastischen Konstanten für isotrope Medien ([1] entnommen).

$ij$	11	22	33	23=32	31=13	12=21
$k$	1	2	3	4	5	6

Tabelle A.2: Die Indizierung nach Voigt. Zur Vereinfachung der Indizierung der elastischen Moduln wird jedes Indexpaar  $ij$ , dessen Vertauschung nichts ändert, durch eine Zahl  $k$  nach obigem Schema ([67] entnommen) ersetzt.

# Anhang B

## Einheiten

Durch die in den Molekulardynamik-Gleichungen verwendeten Einheiten  $r_{\text{qc}}^{\text{IMD}} = 1$  und  $\epsilon_{00}^{\text{IMD}} = 1$  sind reduzierte Energien  $E/\epsilon_{00}$  und reduzierten Längen  $L/r_{\text{qc}}$  eingeführt worden. Die Wahl von  $m^{\text{IMD}} = 1$  für Atome der Sorte A und B stellt eine zusätzliche Vereinfachung der Realität dar. Nimmt man  $m_{\text{A}} \approx m_{\text{B}} \approx m_0$  an, so kann  $m/m_0$  ebenfalls als reduzierte Masse betrachtet werden:

$$-\nabla_{\mathbf{x}} V(\mathbf{x}) = m \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial t^2} \iff -\nabla_{\frac{\mathbf{x}}{r_{\text{qc}}}} \left( \frac{V^*\left(\frac{\mathbf{x}}{r_{\text{qc}}}\right)}{\epsilon_{00}} \right) = \frac{m}{m_0} \frac{\partial^2 \left(\frac{\mathbf{x}}{r_{\text{qc}}}\right)}{\partial \left(\frac{t}{t_0}\right)^2}, \quad V^*\left(\frac{\mathbf{x}}{r_{\text{qc}}}\right) = V(\mathbf{x}). \quad (\text{B.1})$$

Hieraus folgt:

$$t_0 = r_{\text{qc}} \sqrt{\frac{m_0}{\epsilon_{00}}}. \quad (\text{B.2})$$

Um nun einen Eindruck von den Zeiteinheiten der Molekulardynamik-Simulationen zu gewinnen, müssen plausible Größen eingesetzt werden.

- **Abstände:** Nach Henley [33] gilt  $r_{\text{qc}} \approx 2.57 \text{ \AA}$ . Die Ionenradien ( $r_{\text{A}} \approx 1.4 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{B}} \approx 1.6 \text{ \AA}$ ) stimmen sehr gut mit den in [52] angegebenen Werten der Ionenradien für 12-er Koordination überein.
- **Potentialtiefe:** Die in [52] angegebenen Werte für die Bindungsenergien  $E_{\text{Al}} \approx 3.39 \text{ eV/Atom}$ ,  $E_{\text{Zn}} \approx 1.35 \text{ eV/Atom}$  und  $E_{\text{Mg}} \approx 1.51 \text{ eV/Atom}$  können zumindest als Richtwerte für den Quasikristall herangezogen werden. Typische Paarpotentiale haben ebenfalls Potentialtiefen in der Größenordnung eV.
- **Masse(n):** Die relativen Atommassen können dem Periodensystem der Elemente entnommen werden. Allerdings wurde oben vorausgesetzt:  $m_{\text{A}} \approx m_{\text{B}} \approx m_0$ , so dass auch die Masse nur näherungsweise in Gleichung (B.1) eingehen kann.

Als Ergebnis erhält man als ungefähre

$$\text{Größenordnung von } t_0: \quad 10^{-13} \text{ s}. \quad (\text{B.3})$$



# Literaturverzeichnis

- [1] *Achenbach, J. D.. Wave Propagation in Elastic Solids*, Band 16 von *Applied Mathematics and Mechanics*. North-Holland [1973].
- [2] *Allen, M. P. und Tildesley, D. J.. Computer Simulation of Liquids*. Oxford Science Publications [1987].
- [3] *Andersen, H. C..* “Molecular dynamics simulation at constant pressure and/or temperature.” *J. Comput. Phys.*, 72(4):2384–2393 [1979].
- [4] *Argon, A. S..* “Mechanics and physics of brittle to ductile transitions in fracture.” *Journal of Engineering Materials and Technology*, 123(1):1–11 [January 2001].
- [5] *Becker, R. S.; Kortan, A. Refik; Thiel, F. A.; und Chen, H. S..* “Scanning tunneling microscopy of decagonal and icosahedral quasicrystals.” *J. Vac. Sci. Technol. B*, 9(2):867–873 [1991].
- [6] *Beltz, G. E.; Lipkin, D. M.; und Fischer, L. L..* “Role of crack blunting in ductile versus brittle response of crystalline materials.” *Phys. Rev. Lett.*, 82(22):4468–4471 [1999].
- [7] *Bergman, G.; Waugh, J. L. T.; und Pauling, L..* “The crystal structure of the metallic phase  $\text{Mg}_{32}(\text{Al,Zn})_{49}$ .” *Acta Crystallogr.*, 10:254–259 [1957].
- [8] *Broek, D.. Elementary engineering fracture mechanics*. Noordhoff International Publishing, Leyden [1974].
- [9] *Cai, T.; Shi, F.; Shen, Z.; Gierer, M.; Goldman, A. I.; Kramer, M. J.; Jenks, C. J.; Lograsso, T. A.; Delaney, D. W.; Thiel, P. A.; und Hove, M. A. Van.* “Structural aspects of the fivefold quasicrystalline Al-Cu-Fe surface from STM and dynamical LEED studies.” *Surf. Sci.*, 495(1-2):19–34 [2001].
- [10] *Cappello, G.; Chevrier, J.; Schmithüsen, F.; Stierle, A.; Formoso, V.; Comin, F.; de Boissieu, M.; Boudard, M.; Lograsso, T.; Jenks, C.; und Delaney, D..* “Morphological evolution of the fivefold surface of i-AlPdMn quasicrystals.” *Phys. Rev. B*, 65:245405 [2002].

- [11] *Daw, Murray S. und Baskes, M. I.* “Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals.” *Phys. Rev. Lett.*, 50(17):1285–1288 [April 1983].
- [12] *de Bruijn, N. G.* “Algebraic theory of Penrose’s non-periodic tilings of the plane.” *Nederl. Akad. Wetensch. Proceedings of Ser. A*, 43:39–66 [1981].
- [13] *de Laissardière, G. Trambly und Mayou, D.* “Clusters and localization of electrons in quasicrystals.” *Phys. Rev. B*, 55(5):2890–2893 [1997].
- [14] *Dilger, C.* *Versetzungsbewegungen in dreidimensionalen Quasikristallen*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart [1995].
- [15] *Dubois, Jean-Marie.* “Quasicrystals.” *J. Phys. Cond. Mat.*, 13(34):7753–7762 [2001].
- [16] *Ebert, P.; Feuerbacher, M.; Tamura, N.; Wollgarten, M.; und Urban, K.* “Evidence for a Cluster-Based Structure of AlPdMn Single Quasicrystals.” *Phys. Rev. Lett.*, 77(18):3827–3830 [1996].
- [17] *Ebert, P.; Kluge, F.; Grushko, B.; und Urban, K.* “Evolution of the composition and structure of cleaved and heat-treated icosahedral Al-Pd-Mn quasicrystal surfaces.” *Phys. Rev. B*, 60(2):874–880 [1999].
- [18] *Ebert, P.; Yue, F.; und Urban, K.* “Surface structures of cleaved icosahedral Al-Pd-Mn single quasicrystals after heat treatment.” *Phys. Rev. B*, 57(5):2821–2825 [1998].
- [19] *Ebert, P.; Yurechko, M.; Kluge, F.; Cai, T.; Grushko, B.; Thiel, P. A.; und Urban, K.* “Surface structure of Al-Pd-Mn quasicrystals: Existence of supersaturated bulk vacancy concentrations.” *Phys. Rev. B*, 67(2):4208 [2003].
- [20] *Farkas, D.* “Atomistic studies of intrinsic crack-tip plasticity.” *Mater. Res. Bull.*, 25(5):35–38 [2000].
- [21] *Fineberg, J. und Marder, M.* “Instability in dynamic fracture.” *Phys. Rep.*, 313(1):1–108 [1999].
- [22] *Frank, F. C.* “Supercooling of liquids.” *Proceedings of R. Society London Ser. A*, 215(1120):43–46 [1952].
- [23] *Frank, F. C. und Kaspar, J. S.* “Complex alloy structures regarded as sphere packings.” *Acta Crystallogr.*, 11:184 [1958].
- [24] *Garg, A. und Levine, D.* “Faceting and roughening in quasicrystals.” *Phys. Rev. Lett.*, 59(15):1683–1686 [1987].
- [25] *Griffith, A. A.* “The phenomena of rupture and flow in solids.” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A*, 221:163–198 [1921].

- [26] Gumbsch, P.. “Brittle Fracture Processes Modelled on the Atomic Scale.” *Z. Metallk.*, (87):341–348 [1996].
- [27] Gumbsch, P.. “Modelling brittle and semi-brittle fracture processes.” *Mater. Sci. Eng. A*, 319-321:1–7 [2001].
- [28] Gumbsch, Peter und Cannon, Rowland M.. “Atomistic aspects of brittle fracture.” *Mater. Res. Bull.*, 25(5):15–20 [2000].
- [29] Gumbsch, Peter; Holian, B. L.; und Zhou, S. J.. “Molecular dynamics investigation of dynamic crack stability.” *Phys. Rev. B*, 55(6):3445–3455 [1997].
- [30] Haberlandt, R.; Fritzsche, S.; Peinel, G.; und Heinzinger, K.. *Molekulardynamik - Grundlagen und Anwendungen*. Friedrich Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft [1995].
- [31] Henley, C. L.. “Sphere packings and local environments in Penrose tilings.” *Phys. Rev. B*, 34(2):797–816 [1986].
- [32] Henley, C. L.. “Cell geometry for cluster-based quasicrystal models.” *Phys. Rev. B*, 43(1):993–1020 [1991].
- [33] Henley, C. L. und Elser, V.. “Quasicrystal structure of  $(\text{Al}, \text{Zn})_{49}\text{Mg}_{32}$ .” *Phil. Mag. B*, 53(3):L59 L66 [1986].
- [34] Henley, C. L. und Lipowsky, R.. “Interface roughening in two-dimensional quasicrystals.” *Phys. Rev. Lett.*, 59(15):1679–1682 [1987].
- [35] Herring, C.. “Some theorems on the free energies of crystal surfaces.” *Phys. Rev.*, 82(1):87–93 [1951].
- [36] Hirth, J. P. und Lothe, J.. *Theory of dislocations*. J. Wiley and Sons, New York [1982].
- [37] Ho, T. L.; Jaszczak, J. A.; Li, Y. H.; und Saam, W. F.. “Faceting in bond-oriented glasses and quasicrystals.” *Phys. Rev. Lett.*, 59(10):1116–1119 [1987].
- [38] Holian, B. L.; Blumenfeld, R.; und Gumbsch, P.. “An einstein model of brittle crack propagation.” *Phys. Rev. Lett.*, 78(1):78–81 [1997].
- [39] Holian, B. L. und Ravelo, R.. “Fracture simulations using large-scale molecular dynamics.” *Phys. Rev. B*, 51(17):11275–11288 [1995].
- [40] Hong, S. und Fu, C. L.. “Phase stability and elastic moduli of  $\text{Cr}_2\text{Nb}$  by first-principles calculations.” *Interm.*, 7(1):5–9 [1999].
- [41] Hoover, W. G.. “Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions.” *Phys. Rev. A*, 31(3):1695–1697 [1985].

- [42] Hoover, W. G.; Ladd, A. J. C.; und Moran, B.. “High-Strain-Rate Plastic Flow Studied via Nonequilibrium Molecular Dynamics.” *Phys. Rev. Lett.*, 48(26):1818–1820 [1982].
- [43] Irwin, G. R.. Band VI: Elasticity and plasticity, Seiten 551–590. Springer-Verlag [1958].
- [44] Janot, C.. *Quasicrystals: A Primer*. Clarendon Press, Oxford [1994].
- [45] Janot, C.. “Atomic clusters, local isomorphism, and recurrently localized states in quasicrystals.” *J. Phys. Cond. Mat.*, 9:1493–1508 [1997].
- [46] Janot, C. und de Boissieu, M.. “Quasicrystals as a hierarchy of clusters.” *Phys. Rev. Lett.*, 72(11):1674–1677 [1994].
- [47] Jarić, M. V.. *Introduction to Quasicrystals*. Academic Press, Incorporated [1988].
- [48] Jaszczak, J. A.; Saam, W. F.; und Yang, B.. “Ideal quasicrystal facets: A Monte Carlo study.” *Phys. Rev. B*, 39(13):9289–9295 [1989].
- [49] Jaszczak, J. A.; Saam, W. F.; und Yang, B.. “Growth and dynamical roughening of ideal quasicrystal facets.” *Phys. Rev. B*, 41(10):6864–6869 [1990].
- [50] Katz, A. und Duneau, M.. “Quasiperiodic patterns and icosahedral symmetry.” *J. Phys. France*, 47:181–196 [1986].
- [51] Kelly, A.; Tyson, W. R.; und Cottrell, A. H.. “Ductile and brittle crystals.” *Phil. Mag.*, 15:567–586 [1967].
- [52] Kittel, C.. *Einführung in die Festkörperphysik*. R. Oldenbourg Verlag, 11. Auflage [1996].
- [53] Krul, Felix. *Molekulardynamik-Simulationen von Rissen in ebenen Quasikristallen*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart [1996].
- [54] Kupke, T.; Trebin, H. R.; und Hoffmann, S.. “Planes and rows in quasilattices.” *Journal Non-Cryst. Sol.*, **153,154**:196–200 [1993].
- [55] Lei, T. und Henley, C. L.. “Equilibrium faceting shape of quasicrystals at low temperatures: cluster model.” *Phil. Mag. B*, 63(3):677–685 [1991].
- [56] Levine, D. und Steinhardt, P. J.. “Quasicrystals: a new class of ordered structures.” *Phys. Rev. Lett.*, 53(26):2477–2480 [1984].
- [57] Levine, Dov und Steinhardt, Paul J.. “Quasicrystals. I. Definition and Structure.” *Phys. Rev. B*, 34:596–616 [July 1986].

- [58] Mackay, A. L.. “Crystallography and the penrose pattern.” *Physica*, **114A**:609–613 [1982].
- [59] Marder, M.. “Molecular Dynamics of cracks.” *Comp. Sc. Eng.*, 1(5):48–55 [1999].
- [60] Marder, M. und Gross, S.. “Origin of crack tip instabilities.” *J. Mech. Phys. Solids*, 43(1):1–48 [1995].
- [61] Messerschmidt, U.; Bartsch, M.; Feuerbacher, M.; Geyer, B.; und Urban, K.. “Friction mechanism of dislocation motion in icosahedral Al-Pd-Mn quasicrystals.” *Phil. Mag. A*, 79(9):2123–2135 [1999].
- [62] Mikulla, R.; Krul, F.; Gumbsch, P.; und Trebin, H.-R.. “Numerical simulations of dislocation motion and crack propagation in quasicrystals.” In A. I. Goldman; D. J. Sordelet; P. A. Thiel; und J. M. Dubois, Herausgeber, *New horizons in quasicrystals: Research and applications*, Seiten 200–207. World Scientific [1997].
- [63] Mikulla, R.; Stadler, J.; Gumbsch, P.; und Trebin, H.-R.. “Molecular Dynamics Simulations of Crack Propagation in Quasicrystals.” In S. Takeuchi und T. Fujiwara, Herausgeber, *Proceedings of the 6th International Conference on Quasicrystals*, Seiten 485–492. World Scientific [1997].
- [64] Mikulla, R.; Stadler, J.; Krul, F.; Trebin, H.-R.; und Gumbsch, P.. “Crack Propagation in Quasicrystals.” *Phys. Rev. Lett.*, 81(15):3163–3166 [1998].
- [65] Mott, N. F.. “Fracture of metals: Theoretical considerations.” *Engineering*, 165:16–18 [1948].
- [66] Nosé, S.. *Molecular dynamics at constant temperature and pressure*, Seiten 21–41. Kluwer Academic Publishers [1991]. Computer Simulation in Materials Science.
- [67] Paufler, P. und Schulze, G. E. R.. *Physikalische Grundlagen mechanischer Festkörpereigenschaften*. Reihe Wissenschaft. F. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft, Braunschweig [1978].
- [68] Quentrec, B.. “New Method for Searching of Neighbors in Molecular Dynamics Computations.” *J. Comput. Phys.*, 13:430–432 [1973].
- [69] Rice, J. R.. “Dislocation nucleation from a crack tip: an analysis based on the peierls concept.” *J. Mech. Phys. Solids*, 40(2):239–271 [1992].
- [70] Rice, J. R. und Thomson, R.. “Ductile versus brittle behaviour of crystals.” *Phil. Mag. A*, 73(1):73–97 [1974].
- [71] Roth, Johannes. *Thermodynamische Stabilität von Quasikristallen und der Einfluß von Frenkeldefekten*.. Doktorarbeit, Universität Stuttgart [February 1992].

- [72] *Schaaf, G.* *Numerical simulation of dislocation motion in icosahedral quasicrystals.* Doktorarbeit, Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart [2002].
- [73] *Schaub, T. M.; Bürgler, D. E.; Güntherodt, H.-J.; und Suck, J.-B.* “Investigation of the icosahedral quasicrystal  $\text{Al}_{68}\text{Pd}_{23}\text{Mn}_9$  by LEED and STM.” *Z. Phys. B*, 96(1):93–96 [1994].
- [74] *Schaub, T. M.; Bürgler, D. E.; Güntherodt, H.-J.; und Suck, J. B.* “Quasicrystalline structure of icosahedral  $\text{Al}_{68}\text{Pd}_{23}\text{Mn}_9$  resolved by scanning tunneling microscopy.” *Phys. Rev. Lett.*, 73(9):1255–1258 [1994].
- [75] *Schaub, T. M.; Bürgler, D. E.; Güntherodt, H.-J.; Suck, J. B.; und Audier, M.* “The surface structure of icosahedral  $\text{Al}_{68}\text{Pd}_{23}\text{Mn}_9$  measured by STM and LEED.” *Applied Physics A*, 61(5):491–501 [1995].
- [76] *Shechtman, D.; Blech, I.; Gratias, D.; und Cahn, J. W.* “Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry.” *Phys. Rev. Lett.*, 53(20):1951–1953 [1984].
- [77] *Shen, Z.; Stoldt, C. R.; Jenks, C. J.; Lograsso, T. A.; und Thiel, P. A.* “Fine structure on flat surfaces of quasicrystalline Al-Pd-Mn.” *Phys. Rev. B*, 60(21):14688–14694 [1999].
- [78] *Socular, Joshua E. S. und Steinhardt, Paul J.* “Quasicrystals. II. Unit-cell configurations.” *Phys. Rev. B*, 34:617–647 [July 1986].
- [79] *Sordelet, D. J.; Widener, S. D.; Tang, Y.; und Besser, M. F.* “Characterization of a commercially produced Al-Cu-Fe-Cr quasicrystalline coating.” *Mater. Sci. Eng. A*, 294-296:834–837 [2000].
- [80] *Stadler, J.; Mikulla, R.; und Trebin, H.-R.* “IMD: a software package for molecular dynamics studies on parallel computers.” *Int. J. Mod. Phys. C*, 8(5):1131–1140 [1997].
- [81] *Steinhardt, P. J.; Nelson, D. R.; und Ronchetti, M.* “Bond-orientational order in liquids and glasses.” *Phys. Rev. B*, 28(2):784–805 [July 1983].
- [82] *Stroh, A. N.* “A theory of the fracture of metals.” *Advances in Physics*, 6(24):418–465 [1957].
- [83] *Thomson, R.* “Physics of fracture.” *Solid State Physics*, 39:1–129 [1986].
- [84] *Thomson, R.; Hsieh, C.; und Rana, V.* “Lattice trapping of fracture cracks.” *J. Appl. Phys.*, 42(8):3154–3160 [1971].

- [85] Toner, J.. "Growth and kinetic roughening of quasicrystals and other incommensurate systems." *Phys. Rev. Lett.*, 64(8):930–933 [1990].
- [86] Toner, J.. "Simple model of kinetic roughening of quasicrystalline surfaces." *Phys. Rev. B*, 43(1):915–928 [1991].
- [87] Tsai, A. P.. "Back to the future - an account discovery of stable quasicrystals." *Acc. Chem. Res.*, 36(1):31–38 [2003].
- [88] Verlet, L.. "Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules." *Phys. Rev.*, 159(1):98–103 [1967].
- [89] Wollgarten, M. und Urban, K.. *Dislocations and plasticity of quasicrystals*, Seiten 535–548. Les éditions de physique, Les Ulis [1994].
- [90] Yang, Wenge; Urban, Knut; und Feuerbacher, Michael. "Cluster structure and low-energy planes in icosahedral Al-Pd-Mn quasicrystals." *Journal of Alloys and Compounds*, 342(1-2):164–168 [2002].
- [91] Yoffe, E. H.. "The moving Griffith crack." *Phil. Mag.*, 42(2):739–750 [1951].
- [92] Zhou, S. J.; Beazley, D. M.; Lomdahl, P. S.; und Holian, B. L.. "Large-scale Molecular Dynamics simulations of three-dimensional ductile failure." *Phys. Rev. Lett.*, 78(3):479–482 [1997].
- [93] Zhou, S. J.; Lomdahl, P. S.; Thomson, R.; und Holian, B. L.. "Dynamic crack processes via molecular dynamics." *Phys. Rev. Lett.*, 76(13):2318–2321 [1996].
- [94] Zhu, W.-J. und Henley, C. L.. "Phonon-phason coupling in icosahedral quasicrystals." *Europhys. Lett.*, 46(6):748–754 [1999].
- [95] Zoglauer, Thomas. "Methoden zur Konstruktion quasikristalliner Strukturen." *Wissenschaftliche Arbeit für das Lehramt an Gymnasien, Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart* [1986].
- [96] [ <http://www.hlrs.de/organization/vis/covise/> ].
- [97] [ <http://www.research.ibm.com/dx/> ].
- [98] [ <http://www.geomview.org/> ].
- [99] [ <http://www.gnuplot.info/> ].
- [100] [ <http://www.itap.physik.uni-stuttgart.de/~imd/> ].
- [101] [ <http://www.rasmol.org/> ].
- [102] [ [http://www.twi.co.uk/j32k/protected/band\\_13/oilgas\\_caseup31.html](http://www.twi.co.uk/j32k/protected/band_13/oilgas_caseup31.html) ].
- [103] [ <http://www.hlrs.de/organization/vis/people/schulze/virvo/> ].



# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Vor allem möchte ich Herrn Prof. Dr. H.-R. Trebin für die freundliche Aufnahme an seinem Institut meinen Dank aussprechen.

Herrn Dr. Dr. R. Hilfer danke ich für die Übernahme des Mitberichtes.

Bei Christoph Rudhart und Dr. Johannes Roth bedanke ich mich für ihre freundliche Unterstützung und für die Betreuung meiner Arbeit.

Dr. Franz Gähler, dem Verantwortlichen für das Programmpaket IMD, möchte ich ebenfalls herzlich danken.

Mein Dank gilt allen Mitarbeitern und dem Sekretariat des Institutes für Theoretische und Angewandte Physik für die stets zuvorkommende Hilfsbereitschaft und die angenehme Arbeitsatmosphäre.

Meinen Eltern gebührt mein ganz besonderer Dank. Ihnen ist diese Arbeit gewidmet.